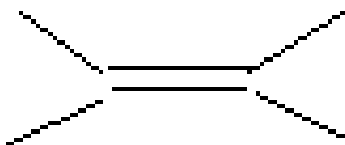
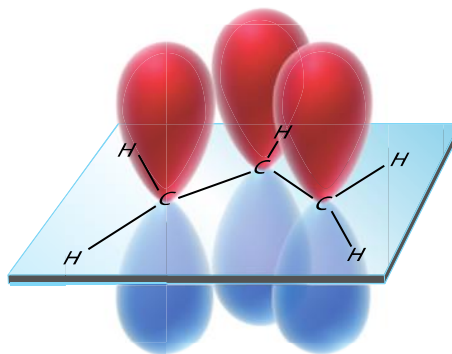
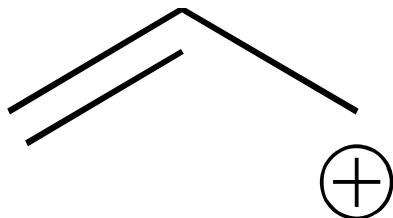


Εισαγωγή στον Συντονισμό

Στις σκελετικές δομές μια γραμμή μεταξύ ατόμων αναπαριστά ένα ζεύγος δεσμικών ηλεκτρονίων (ανά ένα από κάθε άτομο C).



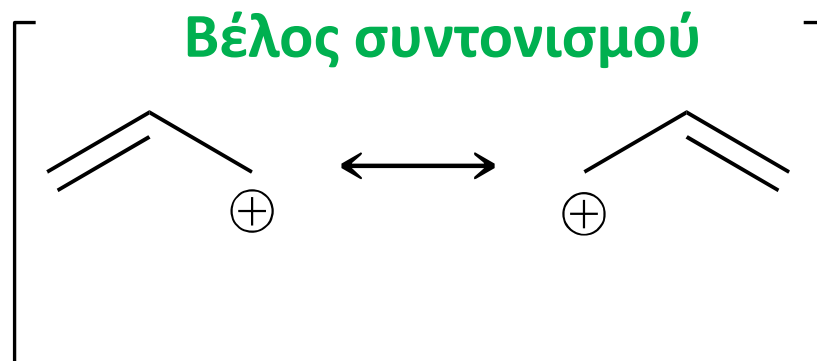
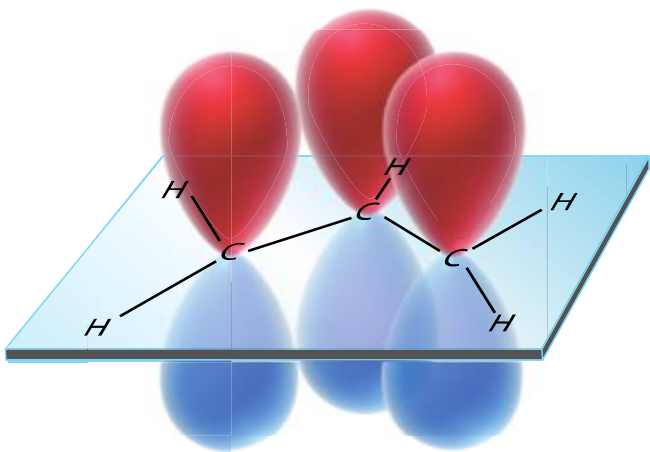
Σε άλλες περιπτώσεις η σκελετική δομή είναι ανεπαρκής στην αναπαράσταση της δομής του συστήματος.



Στο **αλλυλικό καρβοκατιόν** ο στερικός αριθμός είναι 3 και καθένα από τα τρία άτομα άνθρακα είναι sp^2 υβριδισμένα.

Όλα τα άτομα άνθρακα διαθέτουν p τροχιακά, που μπορούν να επικαλυφθούν.

Και τα τρία επικαλυπτόμενα p τροχιακά επιτρέπουν στα ηλεκτρόνια να βρίσκονται σε όλη την επικαλυπτόμενη περιοχή ταυτόχρονα (**ΣΥΝΤΟΝΙΣΜΟΣ**).

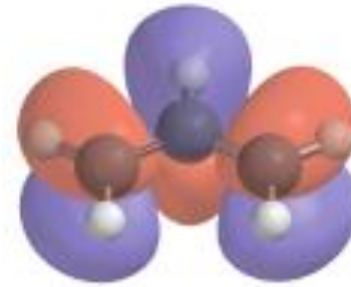


Οι αγκύλες υποδηλώνουν ότι η πραγματική δομή είναι κάτι ενδιάμεσο μεταξύ των δύο δομών συντονισμού.

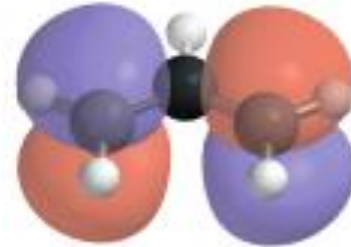
Τα ηλεκτρόνια π μπορούν να υπάρχουν και στις δύο πλευρές του μορίου, οπότε μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε δύο δομές συντονισμού για να αναπαραστήσουμε τη δομή.

Από την άποψη ενός μοριακού τροχιακού, όταν τα ΤΡΙΑ μη υβριδικά p τροχιακά επικαλύπτονται, σχηματίζονται ΤΡΙΑ νέα Μοριακά Τροχιακά.

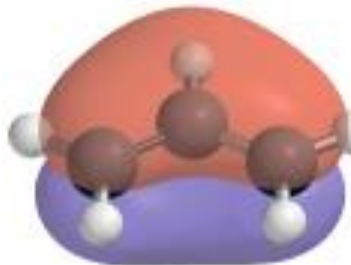
Τα δύο π ηλεκτρόνια βρίσκονται στα μοριακά τροχιακά του αλλυλικού καρβοκατιόντος.



Αντι-
δεσμικό
MO



Μη
δεσμικό
MO



Δεσμικό
MO

Ο συντονισμός καθιστά ένα μόριο ΠΙΟ σταθερό Απεντοπισμός των ηλεκτρονίων

Τα ηλεκτρόνια υπάρχουν σε τροχιακά που εκτείνονται σε μεγαλύτερη απόσταση παρέχοντας στα ηλεκτρόνια μεγαλύτερη ελευθερία μειώνοντας τις απώσεις.

Τα ηλεκτρόνια περνούν το χρόνο κοντά σε πολλούς πυρήνες ταυτόχρονα μεγιστοποιώντας τις έλξεις.

Απεντοπισμός του φορτίου

Το φορτίο διαχέεται σε περισσότερα του ενός άτομα. Τα προκύπτοντα μερικά φορτία είναι πιο σταθερά από το πλήρες φορτίο.



$\delta+$

$\delta+$

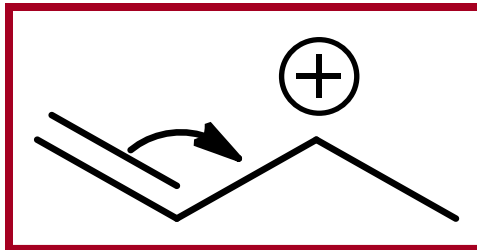
υβρίδιο συντονισμού

Κυρτά Βέλη

Τα κυρτά βέλη χρησιμοποιούμε γενικά για να δείξουν τη μετακίνηση ηλεκτρονίων.

Τα κυρτά βέλη γενικά δείχνουν τη ροή ζευγών ηλεκτρονίων

- Το βέλος ξεκινά από εκεί όπου βρίσκονται τα ηλεκτρόνια.
- Το βέλος καταλήγει εκεί όπου θα βρεθούν τα ηλεκτρόνια μετά τη μετακίνησή τους.



Κανόνες χρήσης κυρτών βελών για δομές ΣΥΝΤΟΝΙΣΜΟ

- Να αποφεύγεται η διάσπαση των απλών δεσμών



Οι δομές συντονισμού περιέχουν τα ίδια άτομα.

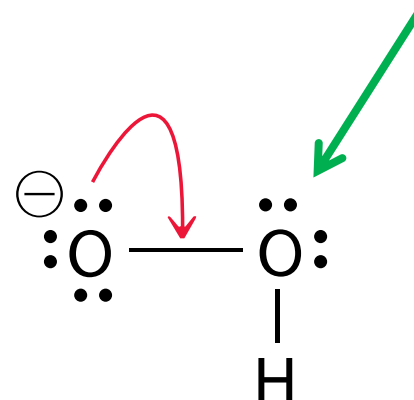
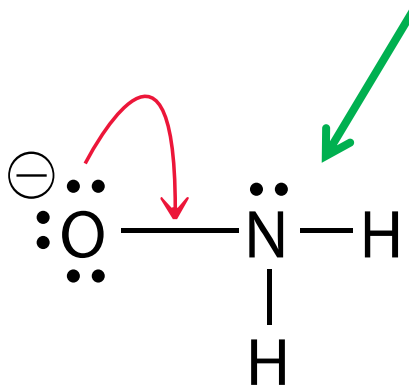
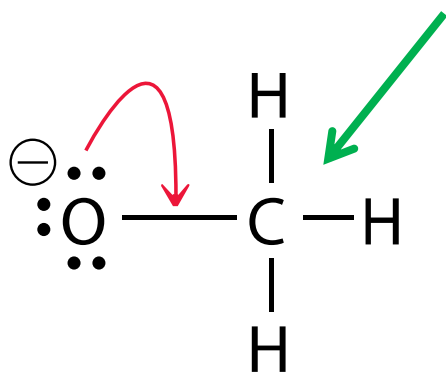
Οι απλοί δεσμοί μπορούν να διασπαστούν, αλλά ΟΧΙ στο ΣΥΝΤΟΝΙΣΜΟ

Ο συντονισμός αφορά ηλεκτρόνια που υπάρχουν σε επικαλυπτόμενα p τροχιακά, ενώ τα ηλεκτρόνια των απλών δεσμών υπάρχουν σε επικαλυπτόμενα sp , sp^2 , ή sp^3 (σ δεσμοί) τροχιακά

- Να μην υπερβούν ποτέ την οκτάδα ηλεκτρονίων τα στοιχεία της 2^{ης} περιόδου (B, C, N, O, F) (ΚΑΝΟΝΑΣ ΟΚΤΑΔΑΣ)

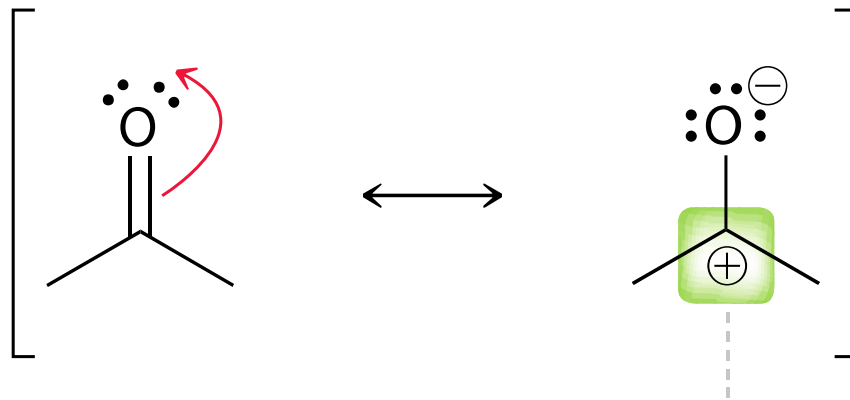
Τα άτομα στη 2^η περίοδο μπορούν να έχουν μόνο τέσσερα τροχιακά 2^{ου} ενεργειακού επιπέδου κρατώντας κατά μέγιστο 8 ηλεκτρόνια

Παραδείγματα βελών που παραβιάζουν τον κανόνα αυτό:



Λανθασμένο βέλος Λανθασμένο βέλος Λανθασμένο βέλος

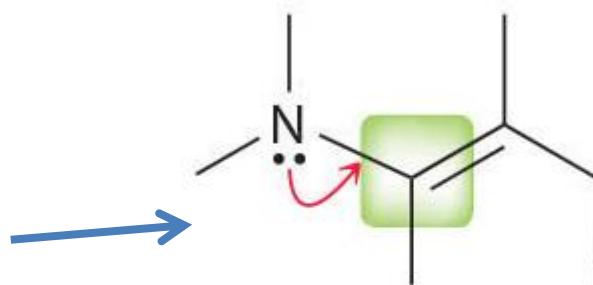
Τα στοιχεία της 2^{ης} περιόδου (B, C, N, O, F), αν και σπάνια, κάποιες φορές θα έχουν ΛΙΓΟΤΕΡΑ από οκτώ ηλεκτρόνια. Δεν είναι παραβίαση του κανόνα της οκτάδας το αν ένα στοιχείο έχει λιγότερα από 8 ηλεκτρόνια.



Αυτό το άτομο άνθρακα
δεν διαθέτει οκτάδα

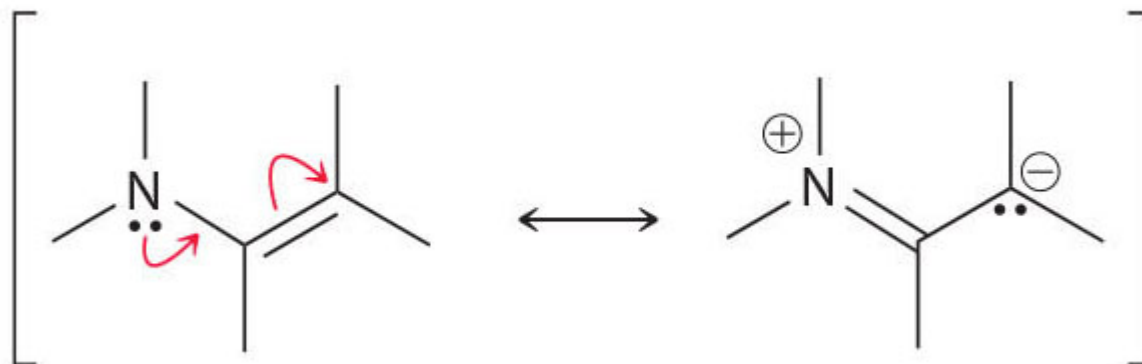
Όταν χρησιμοποιούνται κυρτά βέλη δεν πρέπει να παραβιάζεται κάποιος κανόνας.

Παραβιάζεται ο κανόνας της οκτάδας.



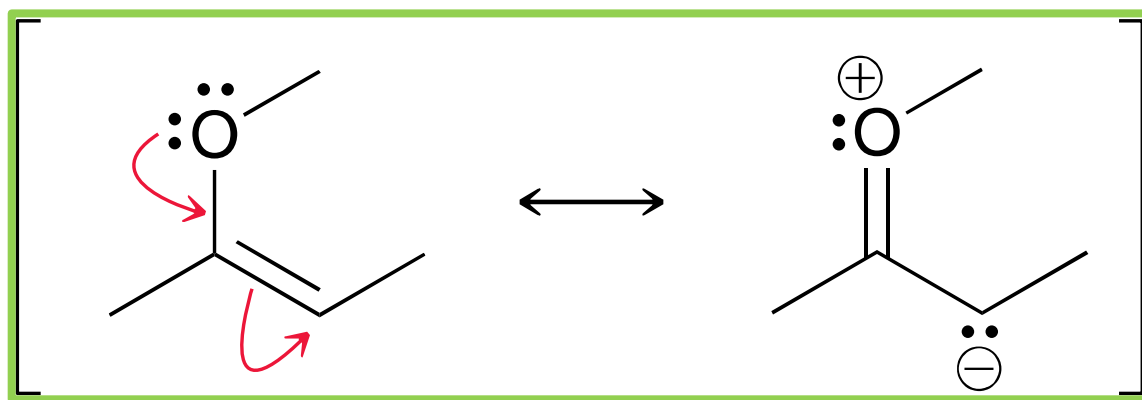
Αυτό το άτομο άνθρακα δεν μπορεί να σχηματίσει πέμπτο δεσμό

Προσθέτοντας 2^ο βέλος αίρεται η παραβίαση:



Τυπικά Φορτία στο Συντονισμό

- Τα τυπικά φορτία πρέπει να φαίνονται στο Συντονισμό.
- Όταν χρησιμοποιούνται κυρτά βέλη για ναδειχθεί ο ΣΥΝΤΟΝΙΣΜΟΣ, συχνά οι δομές θα φέρουν ένα τυπικό φορτίο το οποίο πρέπει να αναγράφεται.
- Στο συντονισμό (**δεν μετακινούνται τα ηλεκτρόνια**), τα βέλη δείχνουν πώς αν μετακινηθούν τα ηλεκτρόνια θα δημιουργηθεί μια άλλη δομή συντονισμού.
- Τα βέλη δείχνουν την κατεύθυνση ροής του φορτίου.

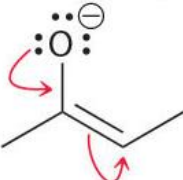
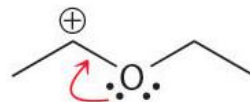
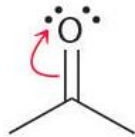


Το συνολικό φορτίο πρέπει να είναι ίδιο σ'όλες τις δομές συντονισμού.

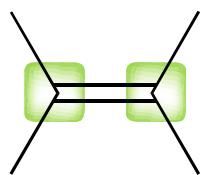
Σχεδίαση Δομών Συντονισμού μέσω Αναγνώρισης Προτύπων Δομικών Τμημάτων

Υπάρχουν 5 κύρια πρότυπα δεσμών στα οποία λαμβάνει χώρα συντονισμός.

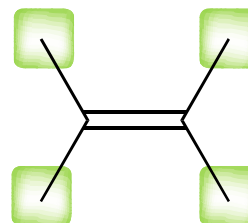
1. Αλληλυικά μονήρη ζεύγη ηλεκτρονίων
2. Αλληλυικό θετικό φορτίο
3. Μονήρες ζεύγος ηλεκτρονίων δίπλα σε ένα θετικό φορτίο
4. Ο π δεσμός μεταξύ δύο ατόμων με διαφορετική ηλεκτραρνητικότητα
5. Συζυγιακοί π δεσμοί μέσα σε έναν δακτύλιο

Αλληλυικό μονήρες ζεύγος  Δύο κυρτά βέλη	Αλληλυικό θετικό φορτίο  Ένα κυρτό βέλος	Μονήρες ζεύγος δίπλα σε θετικό φορτίο  Ένα κυρτό βέλος	π δεσμός μεταξύ δύο ατόμων διαφορετικής ηλεκτραρνητικότητας  Ένα κυρτό βέλος	Συζυγιακοί π δεσμοί μέσα σε δακτύλιο  Τρία κυρτά βέλη
---	---	---	---	--

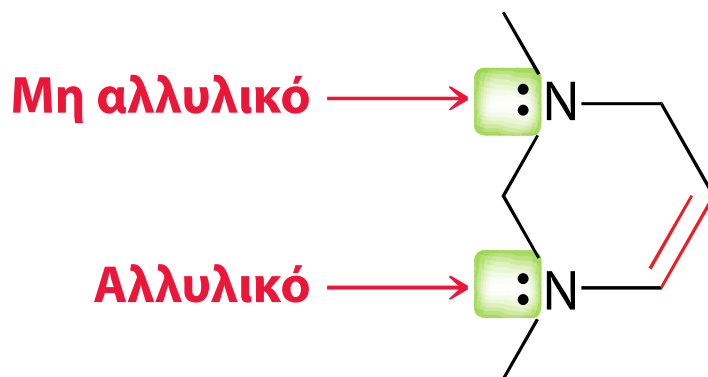
Οι όροι βινυλικός ή αλλυλικός αναφέρονται σε θέσεις άμεσα συνδεδεμένες με ένα διπλό δεσμό $C=C$ ή με ένα άτομο μακριά (αλλά γειτονικά) από ένα διπλό δεσμό $C=C$.



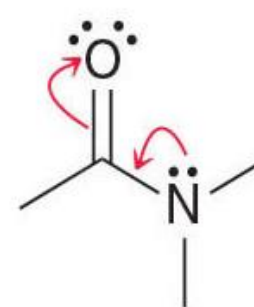
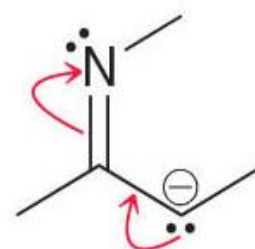
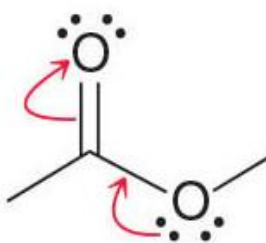
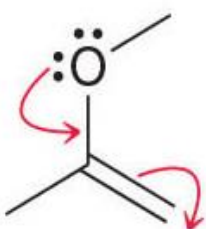
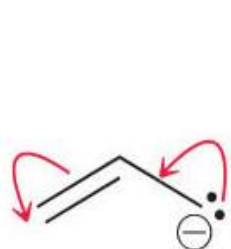
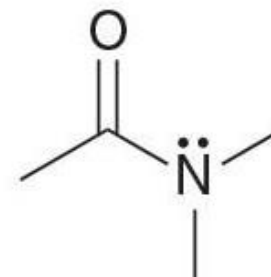
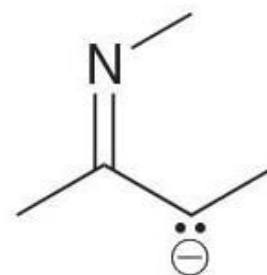
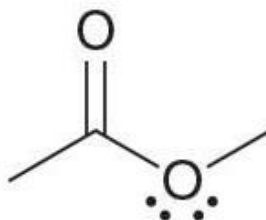
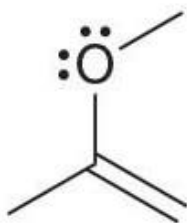
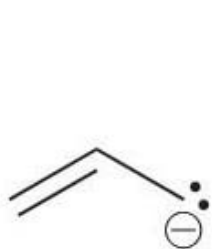
Βινυλικές θέσεις



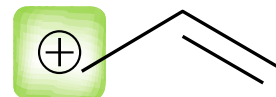
Αλλυλικές θέσεις



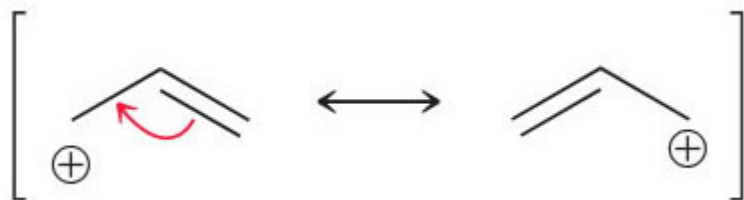
1. Αλλυλικά μονήρη ζεύγη ηλεκτρονίων



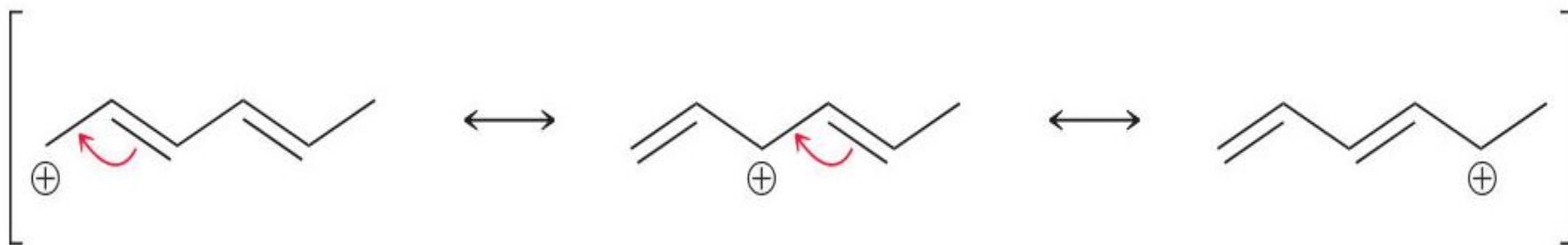
2. Αλλυλικό θετικό φορτίο



Αλλυλικό θετικό φορτίο

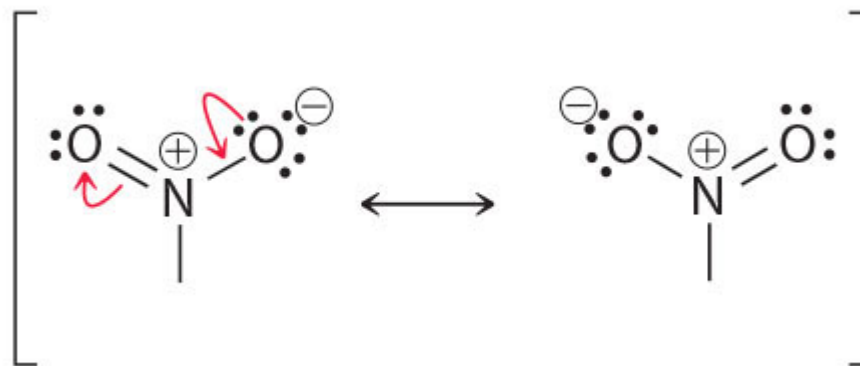
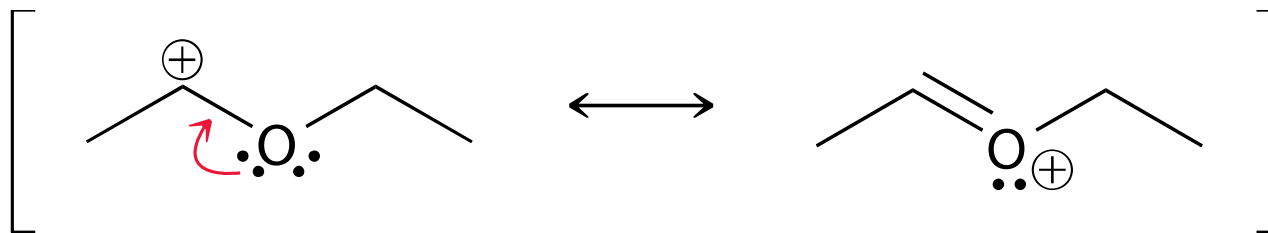
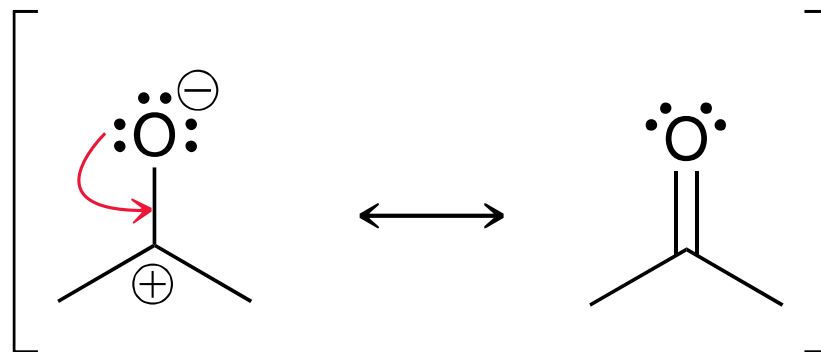


Στα **συζυγιακά** συστήματα μετατοπίζονται ένας ένας οι διπλοί δεσμοί.

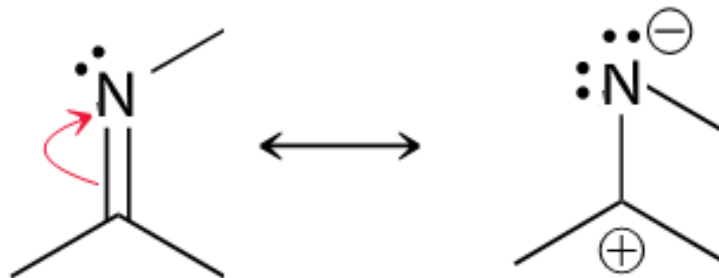
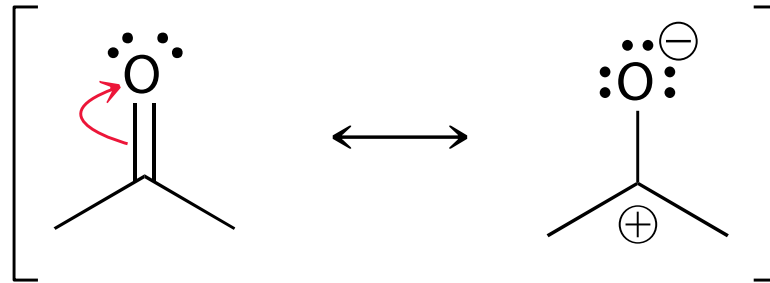


Η ουρά ενός κυρτού βέλους δεν τοποθετείται πάνω σε ένα θετικό φορτίο.

3. Μονήρες ζεύγος δίπλα σε θετικό φορτίο.



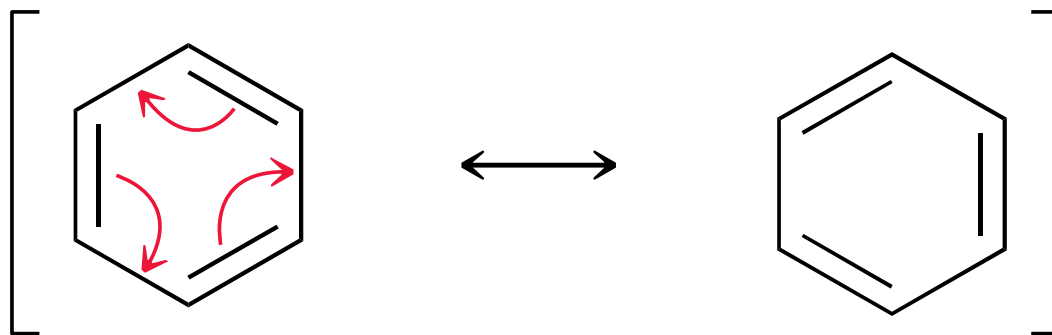
4. Δεσμός π μεταξύ ατόμων διαφορετικής ηλεκτραρνητικότητας.
Τα π ηλεκτρόνια θα έλκονται περισσότερο προς το πιο ηλεκτραρνητικό άτομο.



5. Συζυγιακοί π δεσμοί μέσα σε ένα δακτύλιο.

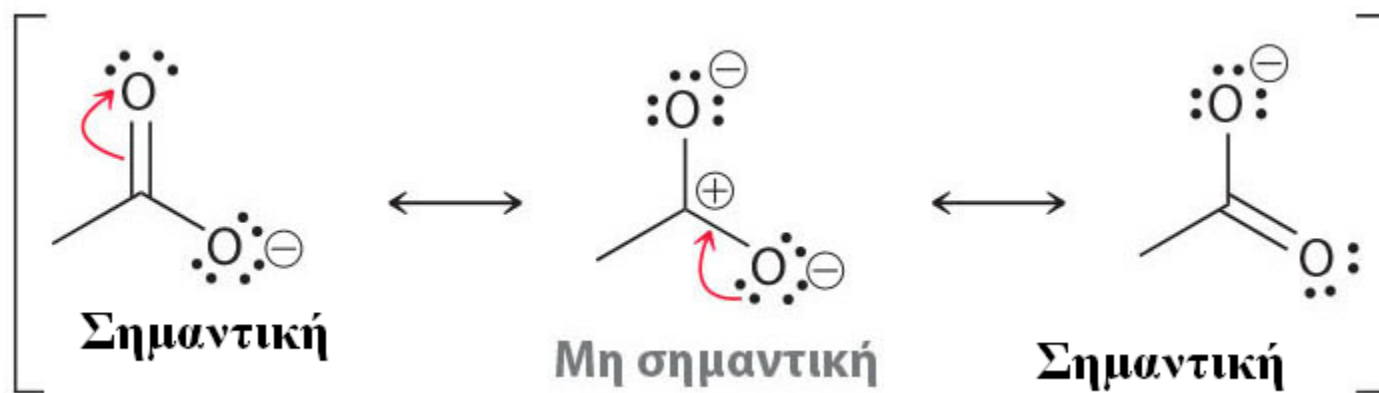
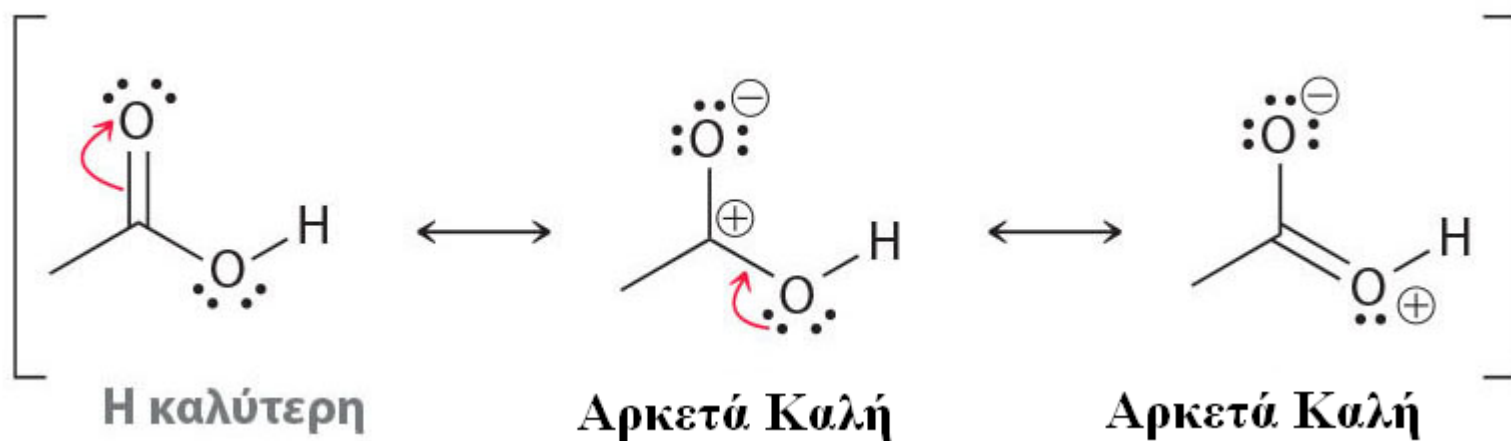
Κάθε άτομο, μέρος ενός δακτυλίου, ΠΡΕΠΕΙ να έχει ένα p τροχιακό το οποίο να μπορεί να επικαλυφθεί με τα γειτονικά του.

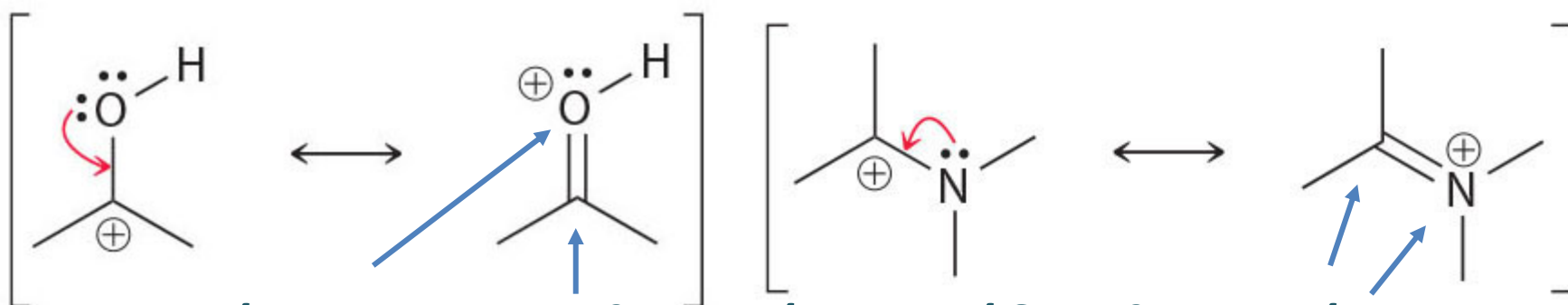
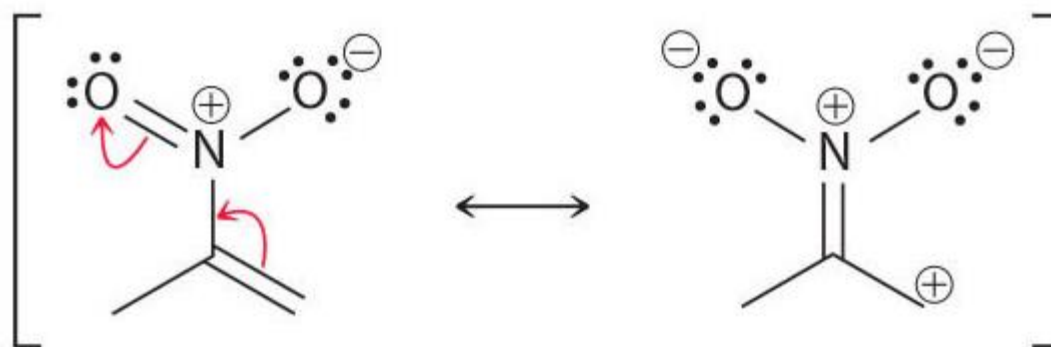
Τα ηλεκτρόνια μπορεί να δείχνονται ότι κινούνται δεξιόστροφα ή αριστερόστροφα.



Εκτίμηση της Σχετικής Βαρύτητας των Δομών Συντονισμού

- Ελαχιστοποίηση των φορτίων. Το τυπικό φορτίο γενικά ΜΕΙΩΝΕΙ τη σταθερότητα, ειδικά ένα φορτίο +1 σε ένα ηλεκτραρνητικό άτομο ή -1 σε ένα χαμηλής ηλεκτραρνητικότητας άτομο.
- ΟΙ ΠΛΗΡΕΙΣ ΟΚΤΑΔΕΣ ΑΥΞΑΝΟΥΝ τη σταθερότητα. Ηλεκτραρνητικά άτομα (N, O, Cl) μπορούν να φέρουν θετικό φορτίο μόνο όταν συμπληρώνουν οκτάδα ηλεκτρονίων.
- Να αποφεύγεται η σχεδίαση δομών συντονισμού με αντίθετα φορτία σε δύο άτομα άνθρακα.
- Καλό είναι όλα τα άτομα να συμπληρώνουν οκτάδα ηλεκτρονίων.





Άτομα με συμπληρωμένες οκτάδες ηλεκτρονίων.

