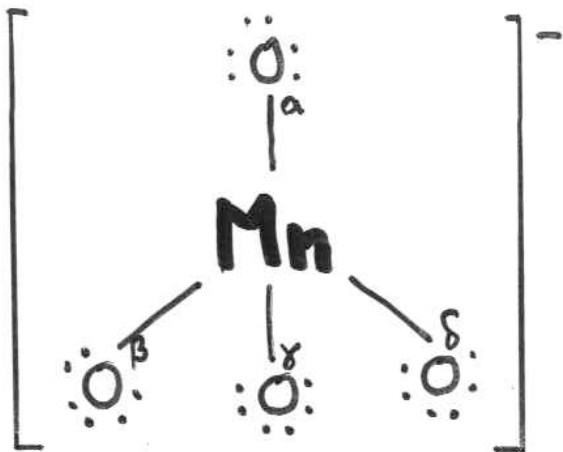


ΤΥΠΙΚΟ ΦΟΡΤΙΟ



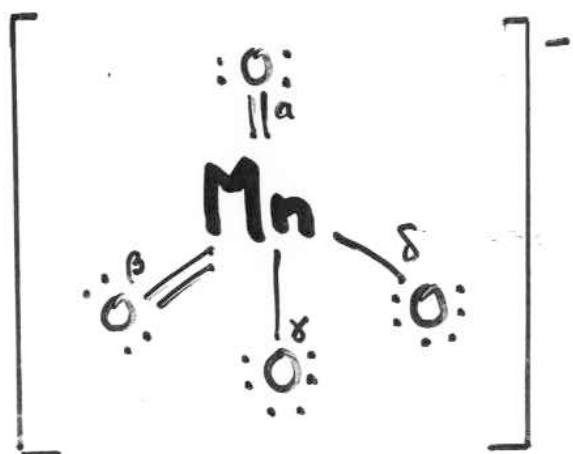
$$\text{Mn} \rightarrow 7 - 4 - \phi = +3$$

$$\text{O}_a \rightarrow 6 - 1 - 6 = -1$$

$$\text{O}_\beta \rightarrow 6 - 1 - 6 = -1$$

$$\text{O}_\gamma \rightarrow 6 - 1 - 6 = -1$$

$$\text{O}_\delta \rightarrow 6 - 1 - 6 = -1$$



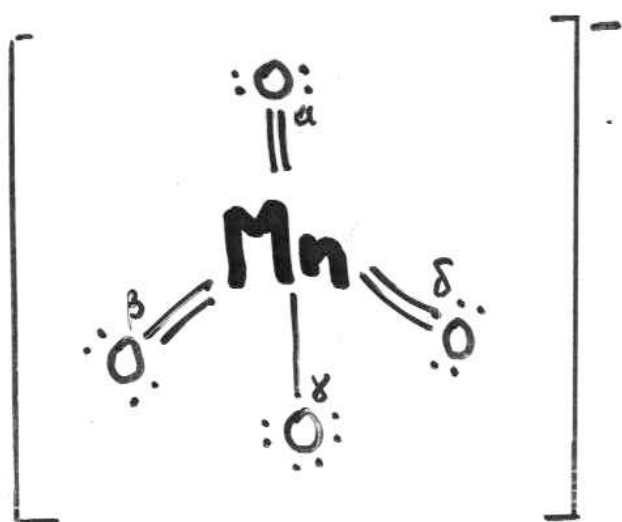
$$\text{Mn} \rightarrow 7 - 6 - \phi = +1$$

$$\text{O}_a \rightarrow 6 - 2 - 4 = \phi$$

$$\text{O}_\beta \rightarrow 6 - 2 - 4 = \phi$$

$$\text{O}_\gamma \rightarrow 6 - 1 - 6 = -1$$

$$\text{O}_\delta \rightarrow 6 - 1 - 6 = -1$$



$$\text{Mn} \rightarrow 7 - 7 - \phi = \phi$$

$$\text{O}_a \rightarrow 6 - 2 - 4 = \phi$$

$$\text{O}_\beta \rightarrow 6 - 2 - 4 = \phi$$

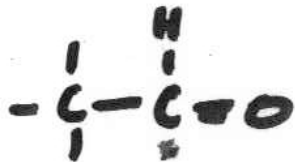
$$\text{O}_\gamma \rightarrow 6 - 1 - 6 = -1$$

$$\text{O}_\delta \rightarrow 6 - 2 - 4 = \phi$$

"Αν ένα άτομο συνδέεται με δύο ή περισσότερα άτομα διαφορετικής ηλεκτραρνητικότητας, ο αριθμός οξείδωσης (Α.Ο.) εκτιμάται από το αλγεβρικό άθροισμα των επί μέρους Α.Ο.

Θεωρείται ότι ΑΥΞΑΝΕΙ κατά μία μονάδα για κάθε ηλεκτρόνιο που συνεισφέρει βί δεσμό με ΠΙΟ ΗΛΕΚΤΡΑΡΝΗΤΙΚΟ άτομο.

Θεωρείται ότι ΕΛΑΤΤΟΥΤΑΙ κατά μία μονάδα για κάθε ηλεκτρόνιο που συνεισφέρει βί δεσμό με ΛΙΓΩΤΕΡΟ ΗΛΕΚΤΡΑΡΝΗΤΙΚΟ άτομο.

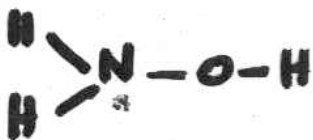


Ο *C θεωρείται ότι συνεισφέρει: 2 ε στο δεσμό με το πιο ηλεκτραρνητικό οξυγόνο.

1 ε στο δεσμό με το λιγότερο του ηλεκτραρνητικό υδρογόνο.

0 ε στο δεσμό με τον αϊδρακα.

$$\{+2\} + \{-1\} + \{0\} = +1.$$



Το *N θεωρείται ότι συνεισφέρει:

1 ε στο δεσμό με το πιο ηλεκτραρνητικό οξυγόνο.

ανά 1 ε στους δεσμούς με τα λιγότερα του ηλεκτραρνητικά υδρογόνα.

$$\{+1\} + 2\{-1\} = -1.$$

ΣΥΜΒΑΤΙΚΟΙ ΚΑΝΟΝΕΣ ΠΡΟΣΔΙΟΡΙΣΜΟΥ ΑΡΙΘΜΟΥ ΟΞΕΙΔΩΣΕΩΣ

1. Το υδρογόνο έχει $A.O = +1$
Στα υδρίδια των μετάλλων των αλκαλίων και
αλκαλικών γαιών έχει $A.O = -1$
(π.χ. LiH , CaH_2)
2. Το οξυγόνο έχει $A.O = -2$
Στα υπεροξείδια έχει $A.O = -1$
(π.χ. H_2O_2 , Na_2O_2)
Στο F_2O έχει $A.O = +2$.
3. Το φθόριο έχει $A.O = -1$
4. Το αλγεβρικό άθροισμα των $A.O.$ των στοι-
χείων σε μία ένωση ισούται με μηδέν.

ΜΕΡΙΚΕΣ ΤΙΜΕΣ

ΗΛΕΚΤΡΑΡΗΗΤΙΚΟΤΗΤΑΣ

H
2,1

Li	Be	B	C	N	O	F
1	1,5	2,0	2,5	3,0	3,5	4,0

Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl
0,9	1,2	1,5	1,8	2,1	2,5	3,0

K
0,8

1. Για τις έτεροπολικές ενώσεις ο αριθμός οξειδώσεως (Α.Ο) είναι το πραγματικό φορτίο που έχει το κάθε ιόν.

π.χ. NaCl

Α.Ο_{Νατρίου} = +1 Α.Ο_{χλωρίου} = -1

2. Για τις ομοιοπολικές ενώσεις

π.χ. H_2O

Θεωρούμε ότι το κοινό ζεύγος των ηλεκτρονίων ανήκει εξ ολοκλήρου στο χλώριο που είναι πιο ηλεκτραρνητικό από το υδρογόνο

Το χλώριο θα αποκτήσει φαινομενικό φορτίο -1 και το υδρογόνο θα αποκτήσει φαινομενικό φορτίο +1.

3. Για τις ομοιοπολικές ενώσεις

π.χ. Cl_2

Δίν θεωρούμε ότι φορτίζεται κάποιο από τα άτομα του χλωρίου.

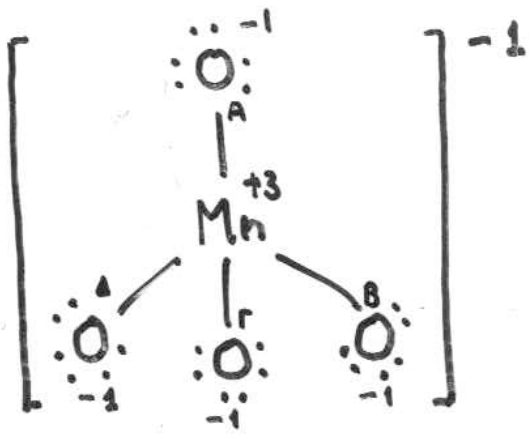
Ο Α.Ο. σε κάθε άτομο χλωρίου είναι 0.

ΑΡΙΘΜΟΣ ΘΗΙΔΡΕΣΗΣ

→ Παράμετρος που προβάλλει τον ΙΟΝΤΙΚΟ χαρακτήρα του δεσμού.

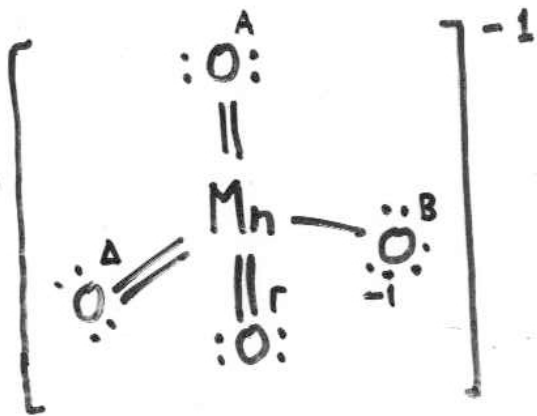
“Αριθμός θηίδωσης” είναι το ΦΑΙΝΟΜΕΝΙΚΟ ΦΟΡΤΙΟ που αποκτά το άτομο στις ομοιοπολικές ενώσεις ή το ΠΡΑΧΜΑΤΙΚΟ φορτίο στις ΙΟΝΤΙΚΕΣ, αν οι δεσμοί θεωρηθούν ΤΕΛΕΙΑ ΙΟΝΤΙΚΟΙ.

Είναι δηλαδή το φορτίο που αποκτά το άτομο αν τα ΚΟΙΝΑ ζεύγη ηλεκτρονίων αποδοθούν στο πιο ηλεκτραρνητικό άτομο.



$$\text{Mn} \rightarrow 7 - 4 - \phi = +3$$

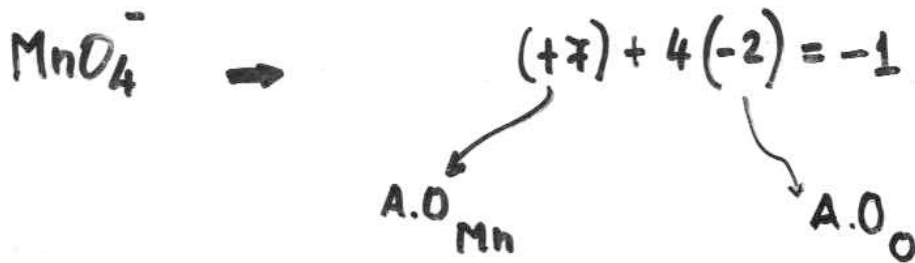
$$\text{O}_{\text{A,B,C,D}} \rightarrow 6 - 1 - 6 = -1$$



$$\text{Mn} \rightarrow 7 - 7 - \phi = \phi$$

$$\text{O}_{\text{A,C,D}} \rightarrow 6 - 2 - 4 = \phi$$

$$\text{O}_{\text{B}} \rightarrow 6 - 1 - 6 = -1$$



ΤΥΠΙΚΟ ΦΟΡΤΙΟ

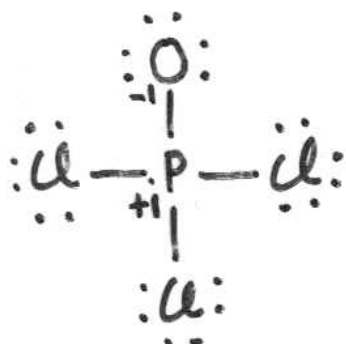
"Προεχχιστική" μέθοδος κατανομής των φορτίων σε ένα μόριο ή ιόν

→ Γίνεται μελέτη - διερεύνηση Τοπικών φορτίων που να μπορούν να επισημασθούν σε όρισμένα μέρη του μορίου, με το αλγεβρικό άθροισμα ίσο με "μηδέν".

T.Φ. → (Αριθμός ομάδας π.π) - (αριθμός δεσμών) -
- (αριθμός μη κοινών e)

Φωσφορυλοχλωρίδιο

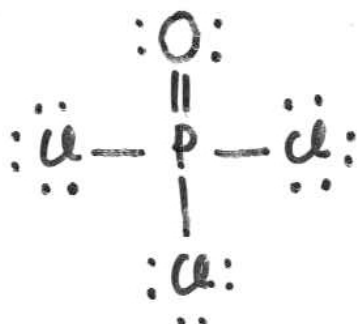
$OPCl_3$



$$O \rightarrow 6 - 1 - 6 = -1$$

$$P \rightarrow 5 - 4 - 0 = +1$$

$$Cl \rightarrow 7 - 1 - 6 = 0$$



$$O \rightarrow 6 - 2 - 4 = 0$$

$$P \rightarrow 5 - 5 - 0 = 0$$

$$Cl \rightarrow 7 - 1 - 6 = 0$$

→ Παράμετρος που προβάλλει τον ομοιοπολικό χαρακτήρα του δεσμού.

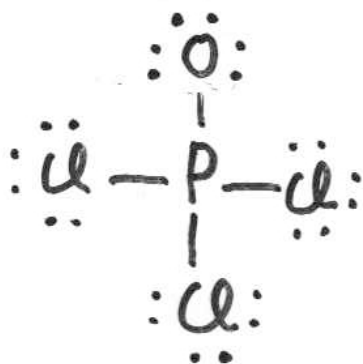
Το τυπικό φορτίο του ατόμου που εξετάζουμε
 δίδεται από τη σχέση:

$$(\text{αριθμός ομάδας π.π.}) - (\text{αριθμός δεσμών}) -$$

$$- (\text{αριθμός μη κοινών } \bar{e})$$

.....

POCl_3 φωσφορυλοχλωρίδιο.

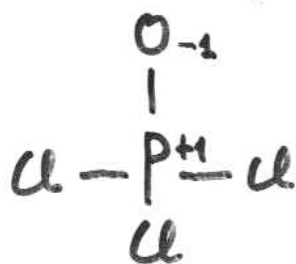


T. φ

$$\text{O} \Rightarrow 6 - 1 - 6 = -1$$

$$\text{P} \Rightarrow 5 - 4 - 0 = +1$$

$$\text{Cl} \Rightarrow 7 - 1 - 6 = 0$$



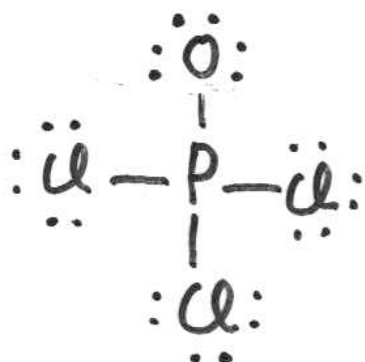
Το τυπικό φορτίο του ατόμου που εξετάζουμε
 δίδεται από τη σχέση:

$$(\text{αριθμός ομάδας π.π.}) - (\text{αριθμός δεσμών}) -$$

$$- (\text{αριθμός μη κοινών } \bar{e})$$

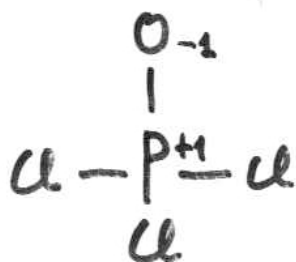
.....

POCl_3 φωσφορυλοχλωρίδιο.



T. φ

$$\begin{array}{l}
 \text{O} \Rightarrow 6 - 1 - 6 = -1 \\
 \text{P} \Rightarrow 5 - 4 - 0 = +1 \\
 \text{Cl} \Rightarrow 7 - 1 - 6 = 0
 \end{array}$$



Αν και στο σύνολο το μόριο είναι ουδέτερο, ενδιαφέρον παρουσιάζει η διερεύνηση ύπαρξης τοπικών φορτίων, που να μπορούν να εντοπιστούν σε ορισμένα μέρη του μορίου, με το αλγεβρικό άθροισμα ίσο με μηδέν. Στα ιόντα το αλγεβρικό άθροισμα ίσους με το φορτίο του ιόντος.

.....
Μια προεχχιστική μέθοδος κατανομής των φορτίων σε ένα μόριο ή ιόν είναι η μέθοδος των τυπικών φορτίων



$$(1) \Rightarrow 2 \times \phi + 8 \times 3 = 24 \bar{e}$$

$$(2) \Rightarrow S = 6 \bar{e} \quad O = 2 \times 6 \bar{e} = 12 \bar{e}$$

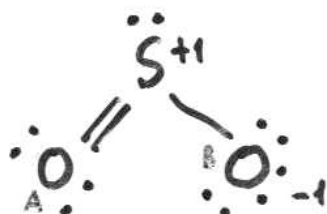
$$\text{Σύνολο} = 6 \bar{e} + 12 \bar{e} = 18 \bar{e}.$$

$$(3) \Rightarrow (1) - (2) = 24 \bar{e} - 18 \bar{e} = 6 \bar{e}$$

$$(4) \Rightarrow \frac{(3)}{2} = \frac{6 \bar{e}}{2} = 3 \text{ σημιοπολητικοί δεσμοί}$$

$$(5) \Rightarrow (2) - (3) = 18 \bar{e} - 6 \bar{e} = 12 \bar{e}.$$

(6)



$$S = 6 - 3 - 2 = +1$$

$$O_A = 6 - 2 - 4 = 0$$

$$O_B = 6 - 1 - 6 = -1$$

ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΩΝ ΤΥΠΩΝ κατά LEWIS

(1) Προσδιορίζεται ο αριθμός των ηλεκτρονίων που απαιτούνται από κάθε άτομο για να αποκτήσει - το άτομο - τη δομή εύχενου αερίου.

Ο αριθμός αυτός δίδεται από τις σχέσεις:

(α) $2 \times$ αριθμός ατόμων H

(β) $8 \times$ αριθμός ολκκ των νηολοίτων οιοιχίων.

Ο συνολικός αριθμός είναι: $1(\alpha) + 1(\beta)$

(2) Βρίσκω τον αριθμό των ηλεκτρονίων σθένος των ατόμων.

(3) Η διαφορά των βημάτων (1), (2) { δηλ. (1) - (2) } μάτ δίνει τον αριθμό των ηλεκτρονίων που θα μοιραστούν μεταξύ των ατόμων.

(4) Το $\frac{1}{2}$ του αριθμού των βημάτων (3) μάτ δίνει τον αριθμό των ομοιοπολικών δεσμών στον τελικό τύπο.

(5) Ο αριθμός των ηλεκτρονίων που δεν συμμετέχει στον ομοιοπολικό δεσμό είναι:

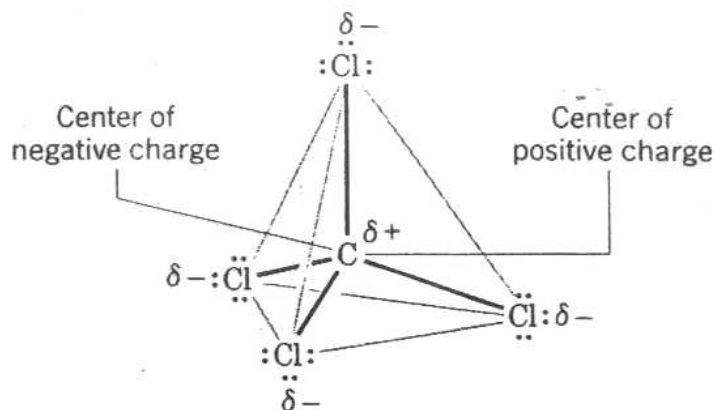
(αριθμός e των βημάτων (2)) - (αριθμός e των βημάτων (3))

(6) Σημκίνω το Τ.Φ. κάθε ατόμου στον ηλεκτρονικό τύπο.

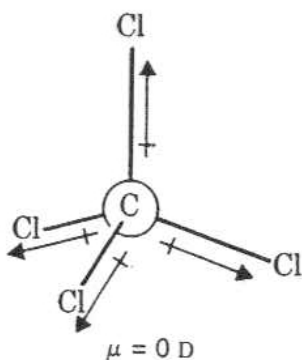
Τ.Φ = (αριθμός ομάδας) - (αριθμός δεσμών) - (αριθμός μη κοινών e)

Dipole moments of some
simple molecules

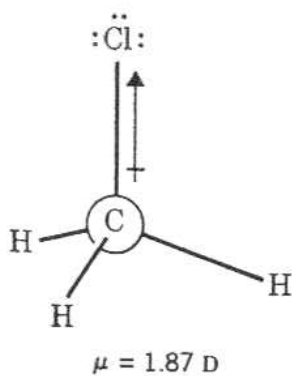
FORMULA	μ (D)	FORMULA	μ (D)
H ₂	0	CH ₄	0
Cl ₂	0	CH ₃ Cl	1.87
HF	1.91	CH ₂ Cl ₂	1.55
HCl	1.08	CHCl ₃	1.02
HBr	0.80	CCl ₄	0
HI	0.42	NH ₃	1.47
BF ₃	0	NF ₃	0.24
CO ₂	0	H ₂ O	1.85



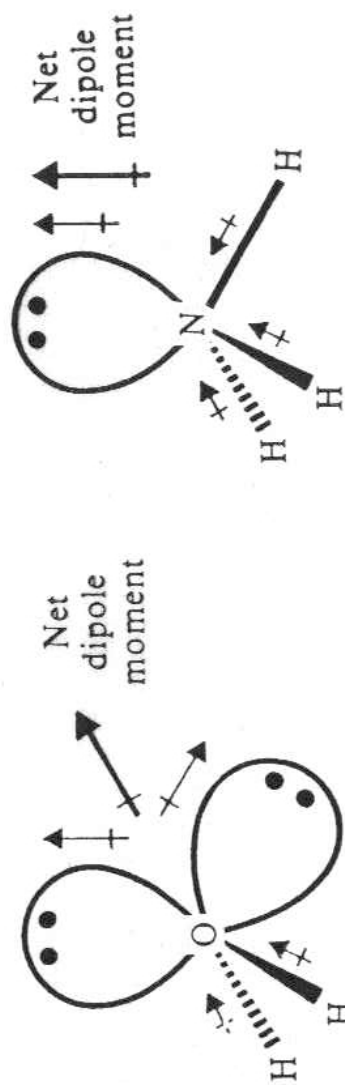
Charge distribution in carbon tetrachloride.



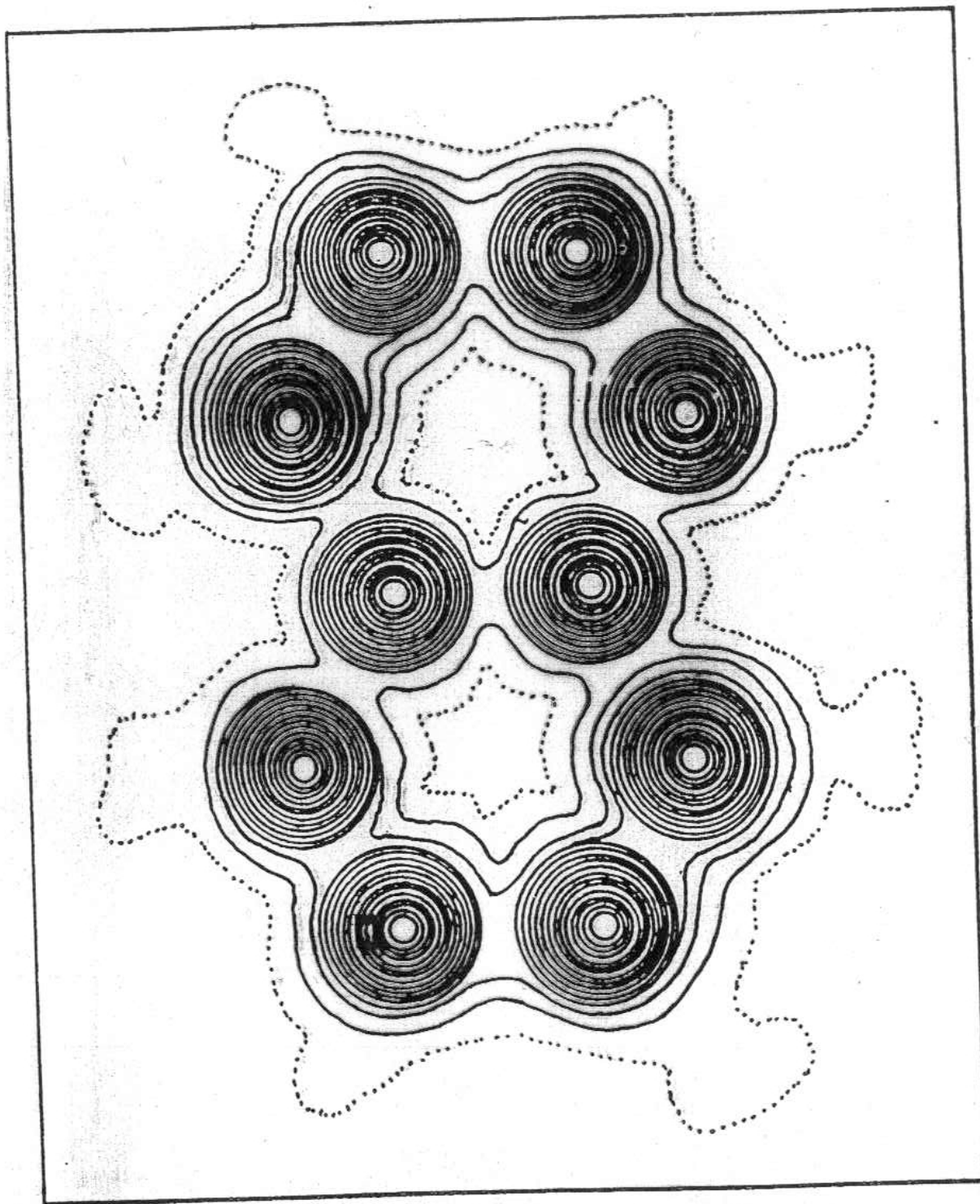
A tetrahedral orientation of equal bond moments causes their effects to cancel.



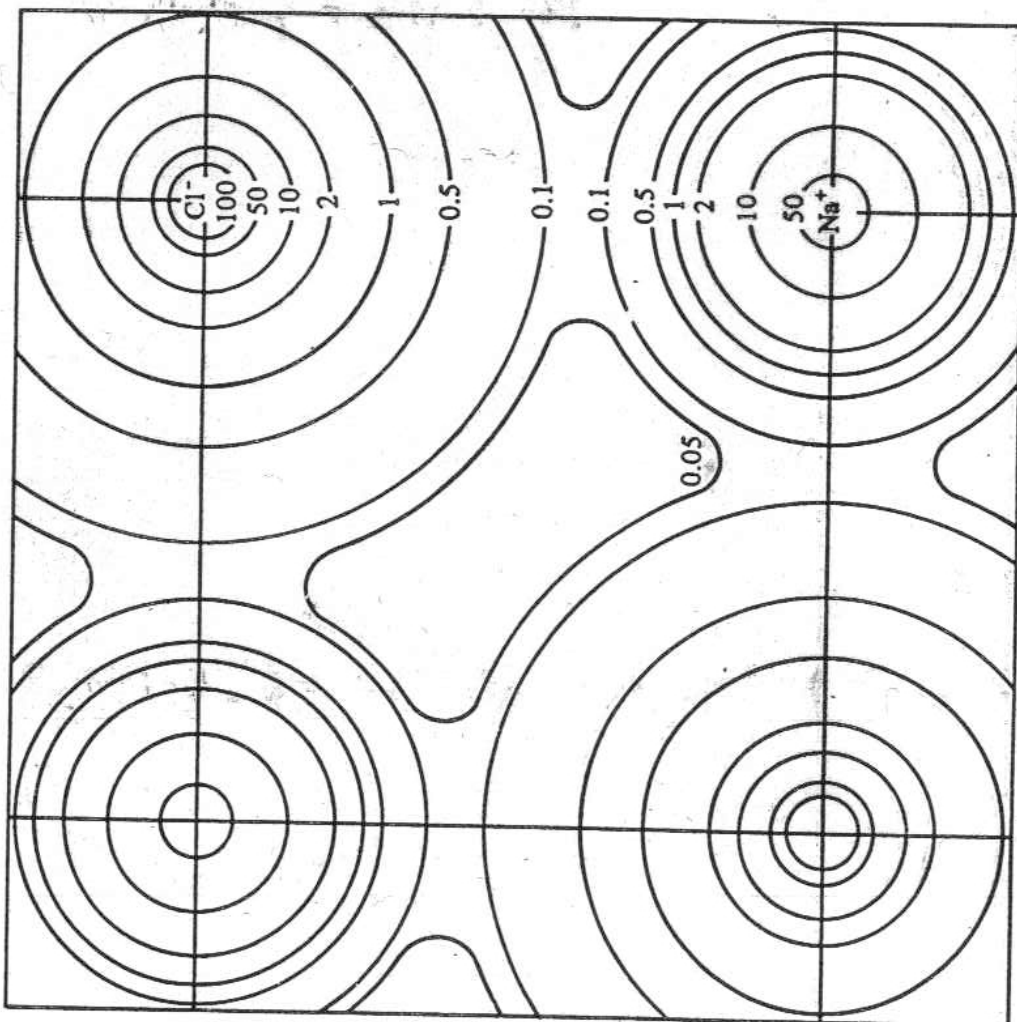
The dipole moment of chloromethane arises mainly from the highly polar carbon-chlorine bond.



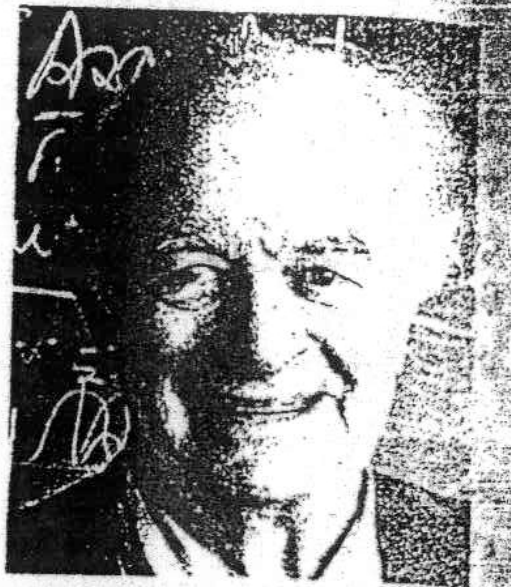
Bond moments and the resulting dipole moment of water and ammonia.



3.13 Διάγραμμα, που εμφανίζει την κατανομή της ηλεκτρονικής πυκνότητας στο μόριο του ναφθαλινίου



Electron density contours in sodium chloride. Numbers indicate the electron density (electrons $\text{\AA}^{-3} = 10^{-6}$ electrons pm^{-3}) along each contour line. The "boundary" of each ion is defined as the minimum in electron density between the ions. The internuclear distance is 281 pm ($= 2.81 \text{ \AA}$). [Modified from Schoknecht, G. Z. Naturforsch. 1957, 12A, 983. Reproduced with permission.]



. Ο Pauling (1901- 1994) Αμερικανός χημικός μηχανικός θεωρείται μια από τις μεγαλύτερες μορφές τον 20^ο αιώνα.. Εισηγήθηκε μεταξύ άλλων την έννοια της ηλεκτραρνητικότητας, της μεσομέρειας και του υβριδισμού των ατομικών τροχιακών. Συσχέτισε την ηλεκτρονιακή δομή με τις μαγνητικές ιδιότητες των στοιχείων μεταπτώσεως. Ανακάλυψε την ελικοειδή δομή που έχει η πολυπεπτιδική αλυσίδα των πρωτεϊνών. Το σύγγραμμα του « Η φύση του χημικού δεσμού και η δομή των μορίων και κρυστάλλων» αποτελεί ένα από τα σημαντικότερα κείμενα χημείας, που έχουν γραφεί ποτέ. Για την προσφορά του αυτή τιμήθηκε το 1954 με το βραβείο Νόμπελ χημείας, ενώ το 1962 του απονεμήθηκε το βραβείο Νόμπελ ειρήνης ως αναγνώριση για την προσπάθεια του υπέρ της ένταξης των πυρηνικών οπλοστασίων κάτω από διεθνή έλεγχο και της διακοπής των πυρηνικών δοκιμών.

Υβριδισμός (hybridization) είναι ο γραμμικός συνδυασμός (πρόσθεση ή αφαίρεση) ατομικών τροχιακών προς δημιουργία νέων ισότιμων ατομικών τροχιακών (υβριδικών τροχιακών).