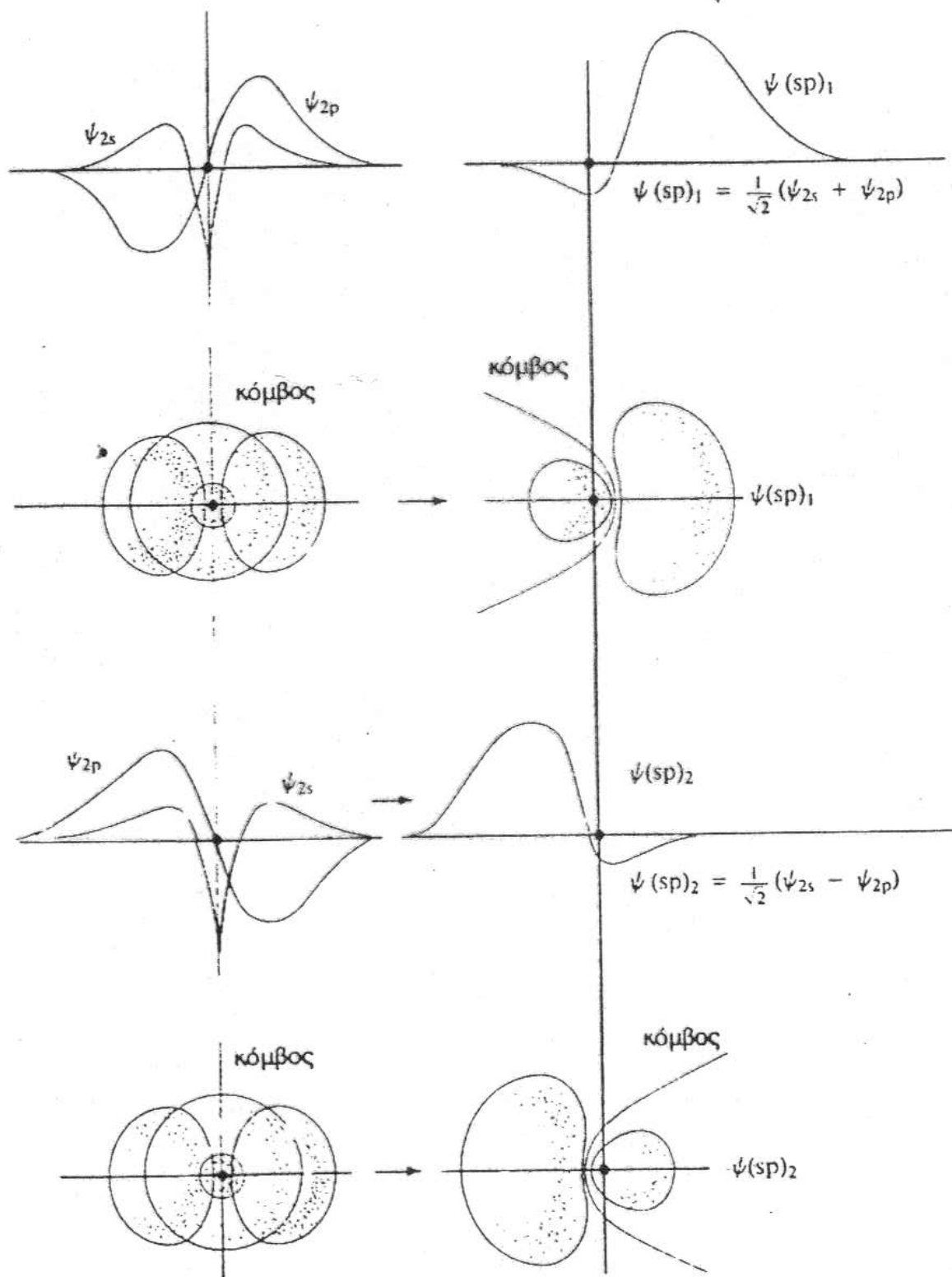
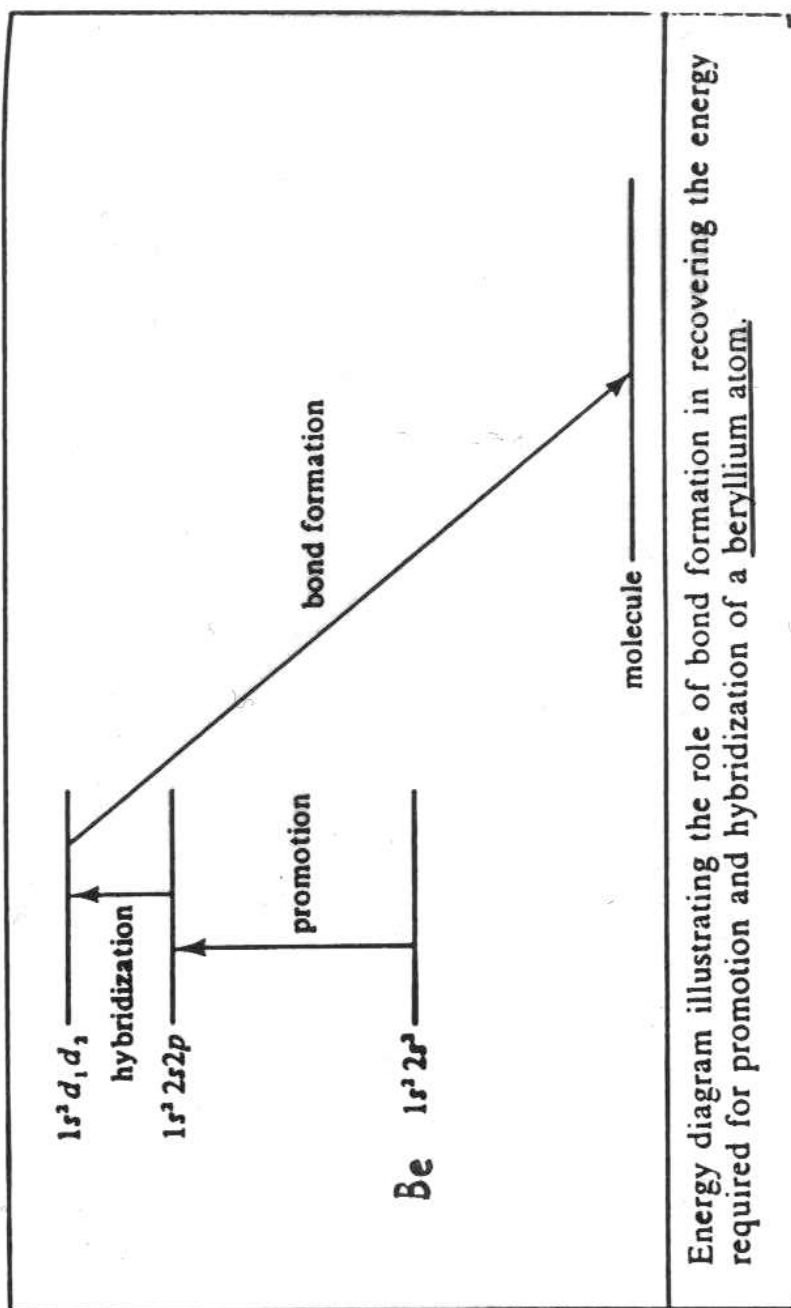
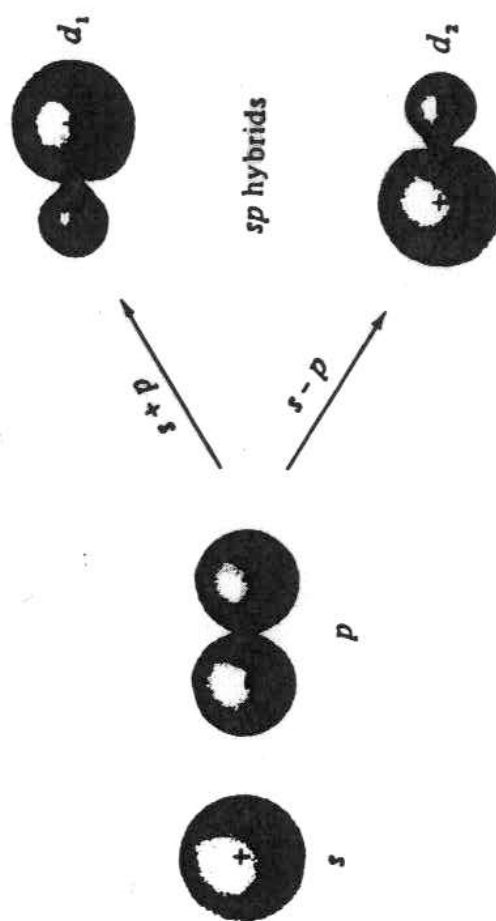


Μαθηματική επεξεργασία των 2s και 2p ατομικών τροχιακών προς σχηματισμό των δύο sp υβριδικών τροχιακών

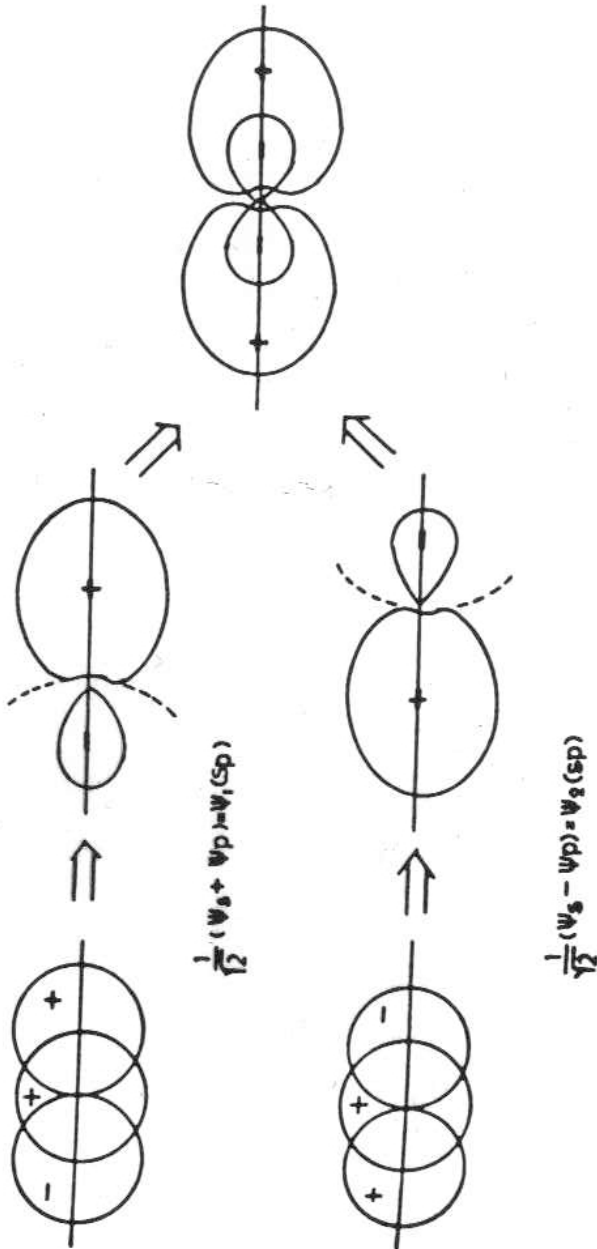




Energy diagram illustrating the role of bond formation in recovering the energy required for promotion and hybridization of a beryllium atom.



Mixing an s and a p orbital on the same atom to form digonal or sp hybrid orbitals.

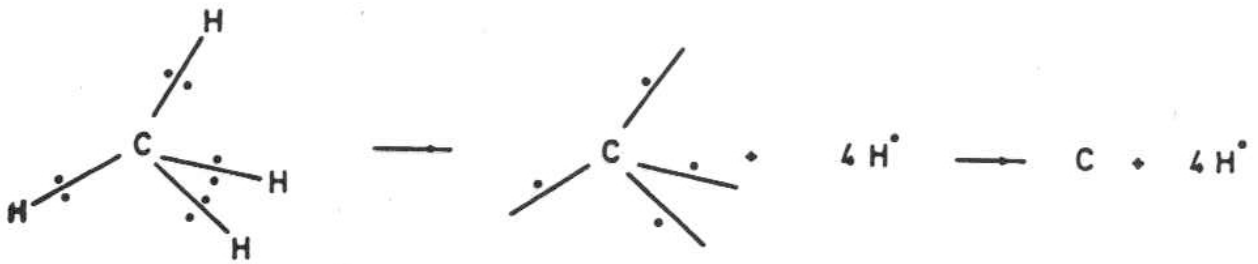


Σχηματική παράσταση «κατασκευής» υβριδικών τροχιακών sp.

- Είναι σημαντικό να κατανοήσουμε ότι ο υβριδισμός δεν είναι ένα φυσικό φαινόμενο, αλλά μια μαθηματική επεξεργασία (πρόσθεση ή αφαίρεση) ατομικών τροχιακών που οδηγεί στην περίπτωση του sp υβριδισμού σε δύο sp υβριδικά τροχιακά που περιγράφονται από τις εξισώσεις:

$$\Psi_1(sp) = 1/\sqrt{2}(\Psi_{2s} + \Psi_{2pz})$$

$$\Psi_2(sp) = 1/\sqrt{2}(\Psi_{2s} - \Psi_{2pz})$$

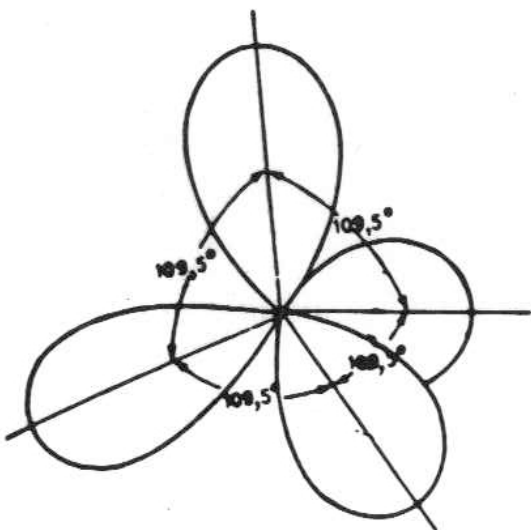


Μεθάνιο

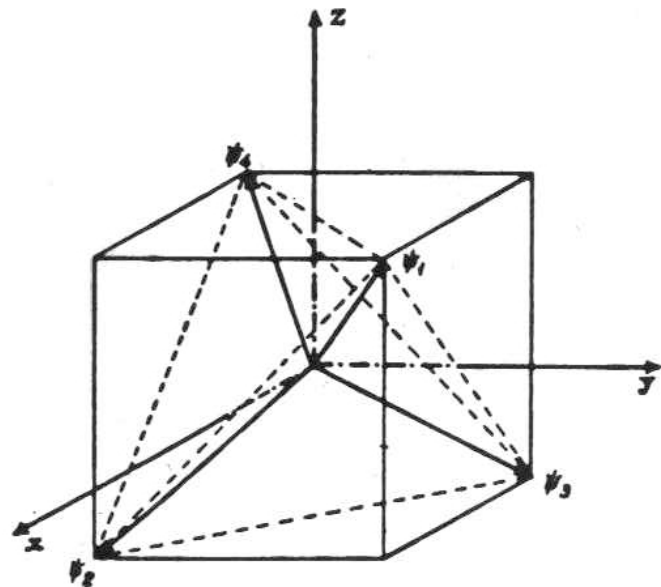
κατάσταση σθένους
ατόμου άνθρακα

θεμελιώδης
κατάσταση

θεμελιώδης
κατάσταση

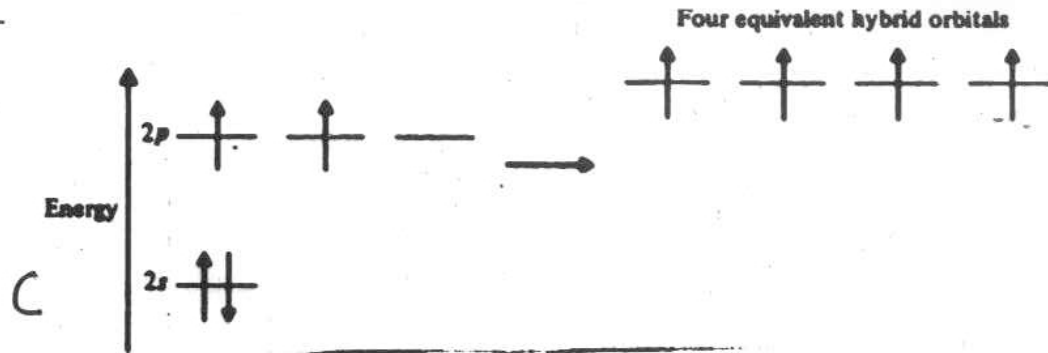


(α)

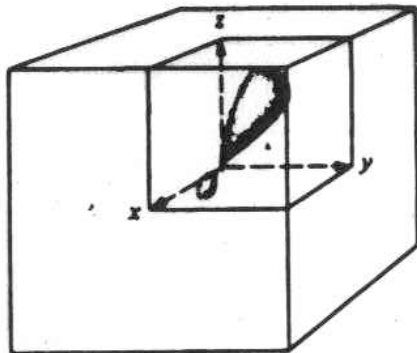
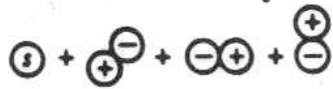


(β)

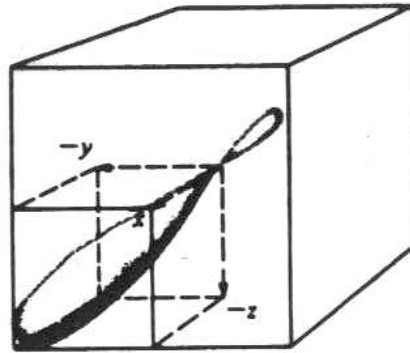
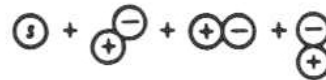
(α) Σκαριφήματα των τεσσάρων sp^3 υβριδικών τροχιακών, που προκύπτουν από ανάμιξη ενός s και τριών p τροχιακών. (β) Εάν τα ψ_{2p_x} , ψ_{2p_y} , ψ_{2p_z} του άνθρακα θεωρηθούν ως ανύσματα με κατευθύνσεις κατά τους θετικούς άξονες x , y και z αντίστοιχα, η συνισταμένη τους είναι η ψ_1 , που έχει την ίδια κατεύθυνση με τη ψ_1 (sp^3). Η ανάμιξη του s τροχιακού δεν επηρεάζει την κατεύθυνση. Τα ψ_2 , ψ_3 και ψ_4 λαμβάνονται με παρόμοιο τρόπο. Οι τέσσερις συνισταμένες διατάσσονται τετραεδρικά.



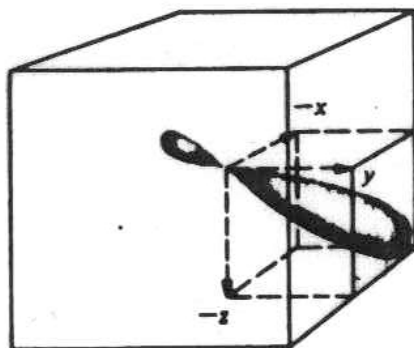
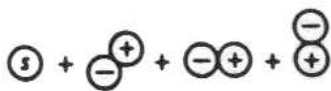
$$\frac{1}{2}(s + p_x + p_y + p_z)$$



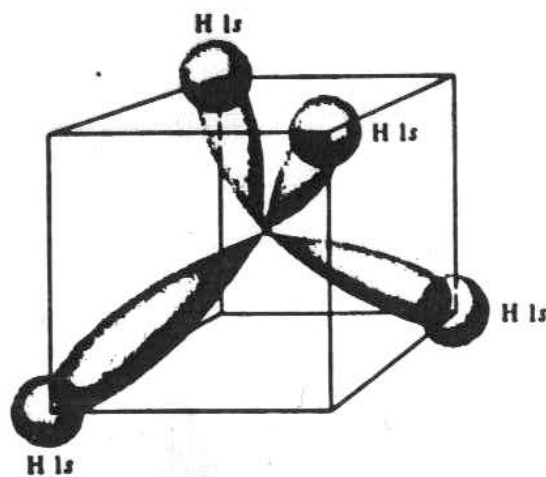
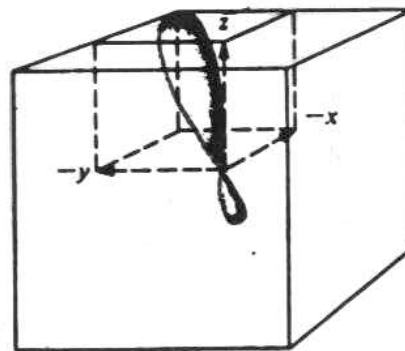
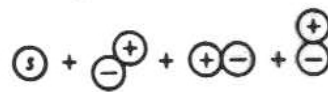
$$\frac{1}{2}(s + p_x - p_y - p_z)$$

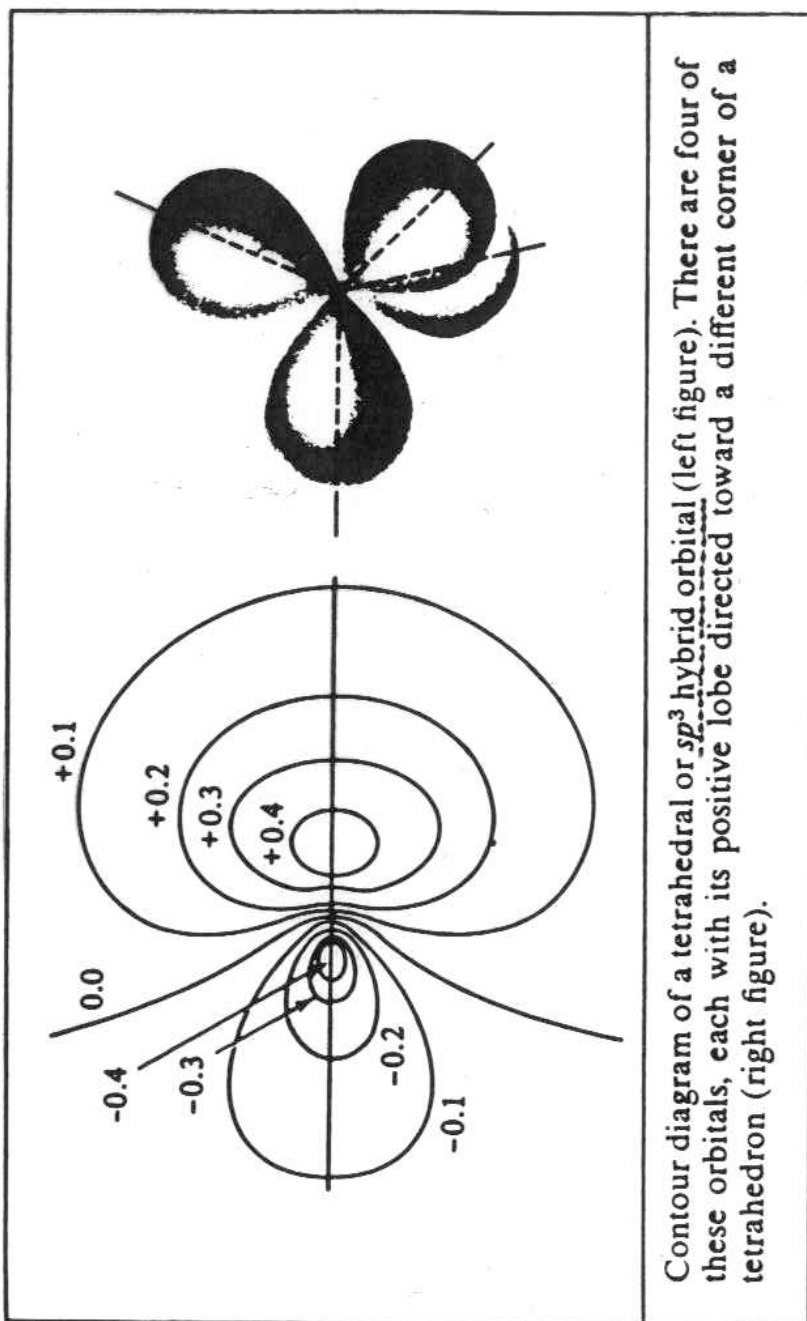


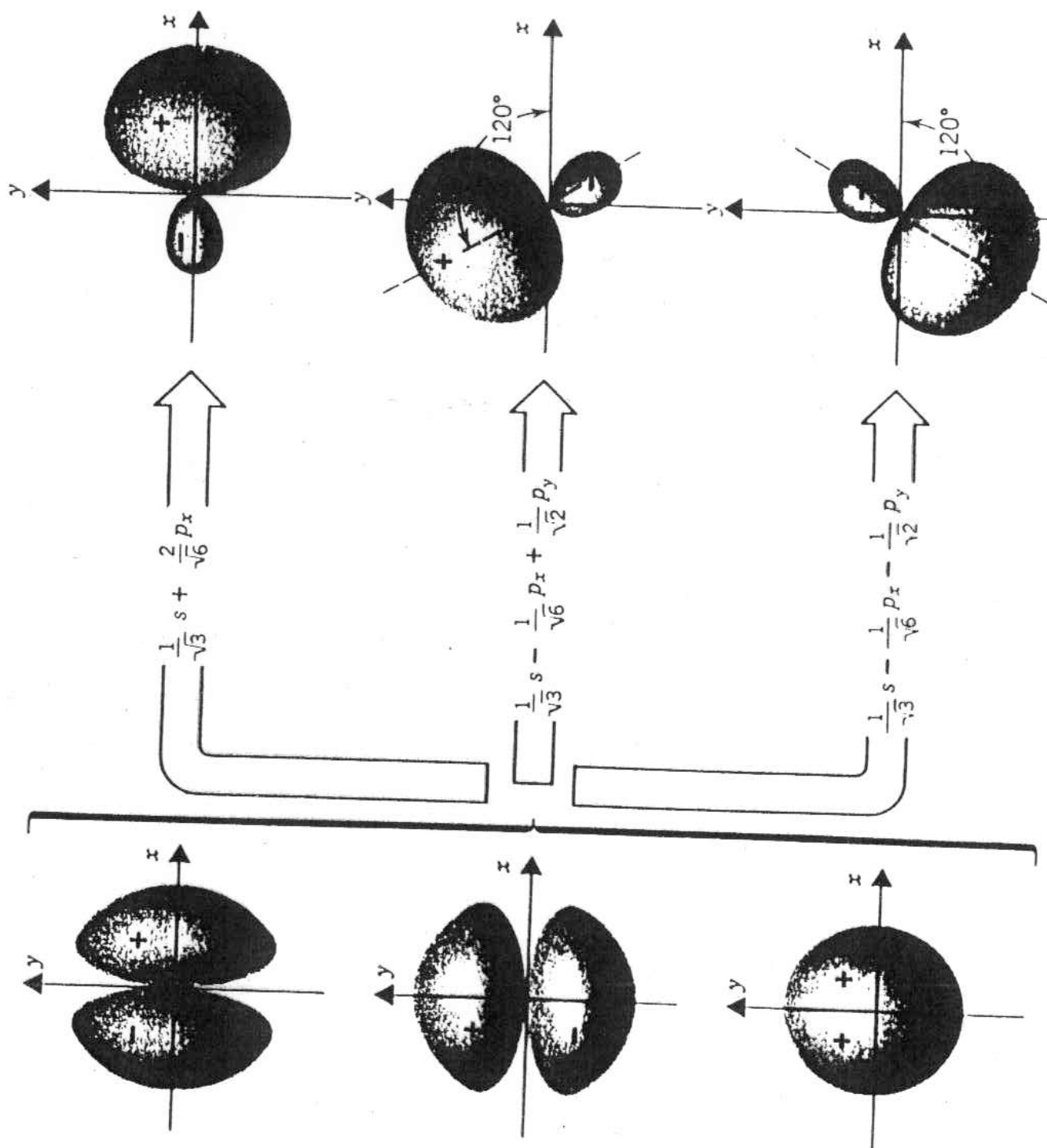
$$\frac{1}{2}(s - p_x + p_y - p_z)$$



$$\frac{1}{2}(s - p_x - p_y + p_z)$$







The formation of three equivalent sp^3 hybrid orbitals.

ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΙ

$$\Psi_1 (sp^3) = \frac{1}{2} (\Psi_{2s} + \Psi_{2p_x} + \Psi_{2p_y} + \Psi_{2p_z})$$

$$\Psi_2 (sp^3) = \frac{1}{2} (\Psi_{2s} + \Psi_{2p_x} - \Psi_{2p_y} - \Psi_{2p_z})$$

$$\Psi_3 (sp^3) = \frac{1}{2} (\Psi_{2s} - \Psi_{2p_x} + \Psi_{2p_y} - \Psi_{2p_z})$$

$$\Psi_4 (sp^3) = \frac{1}{2} (\Psi_{2s} - \Psi_{2p_x} - \Psi_{2p_y} + \Psi_{2p_z})$$

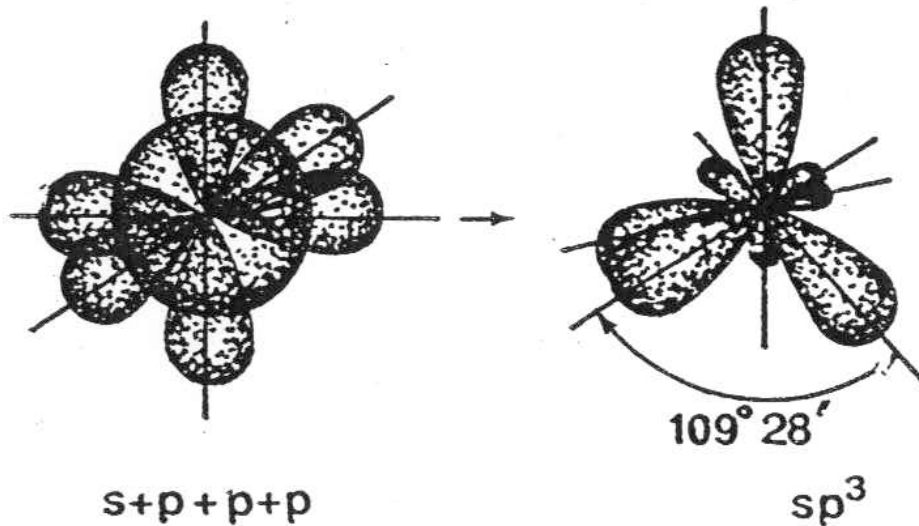
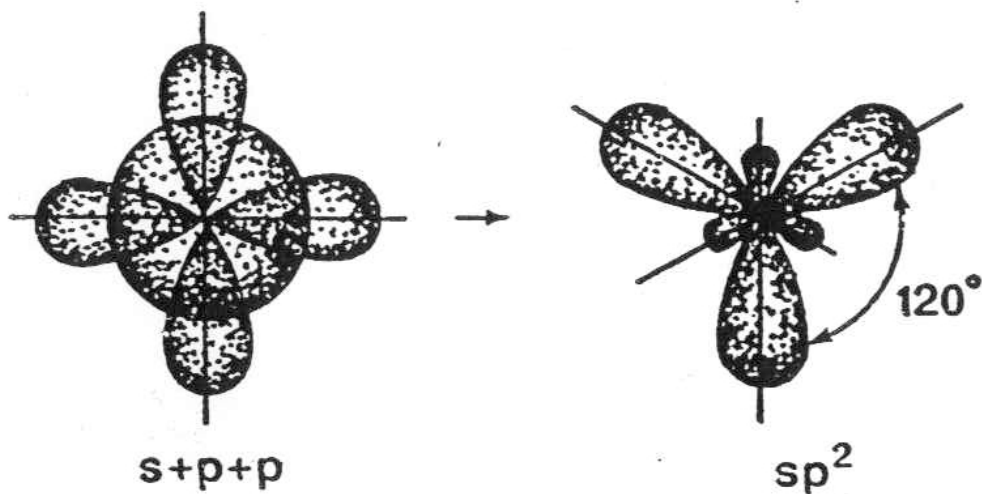
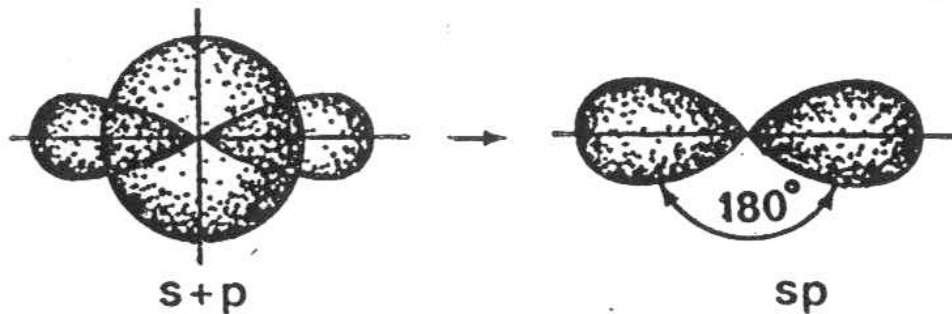
$$\Psi_1 (sp^2) = \frac{1}{\sqrt{3}} (2s) + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} (2p_x)$$

$$\Psi_2 (sp^2) = \frac{1}{\sqrt{3}} (2s) - \frac{1}{\sqrt{6}} (2p_x) + \frac{1}{\sqrt{2}} (2p_y)$$

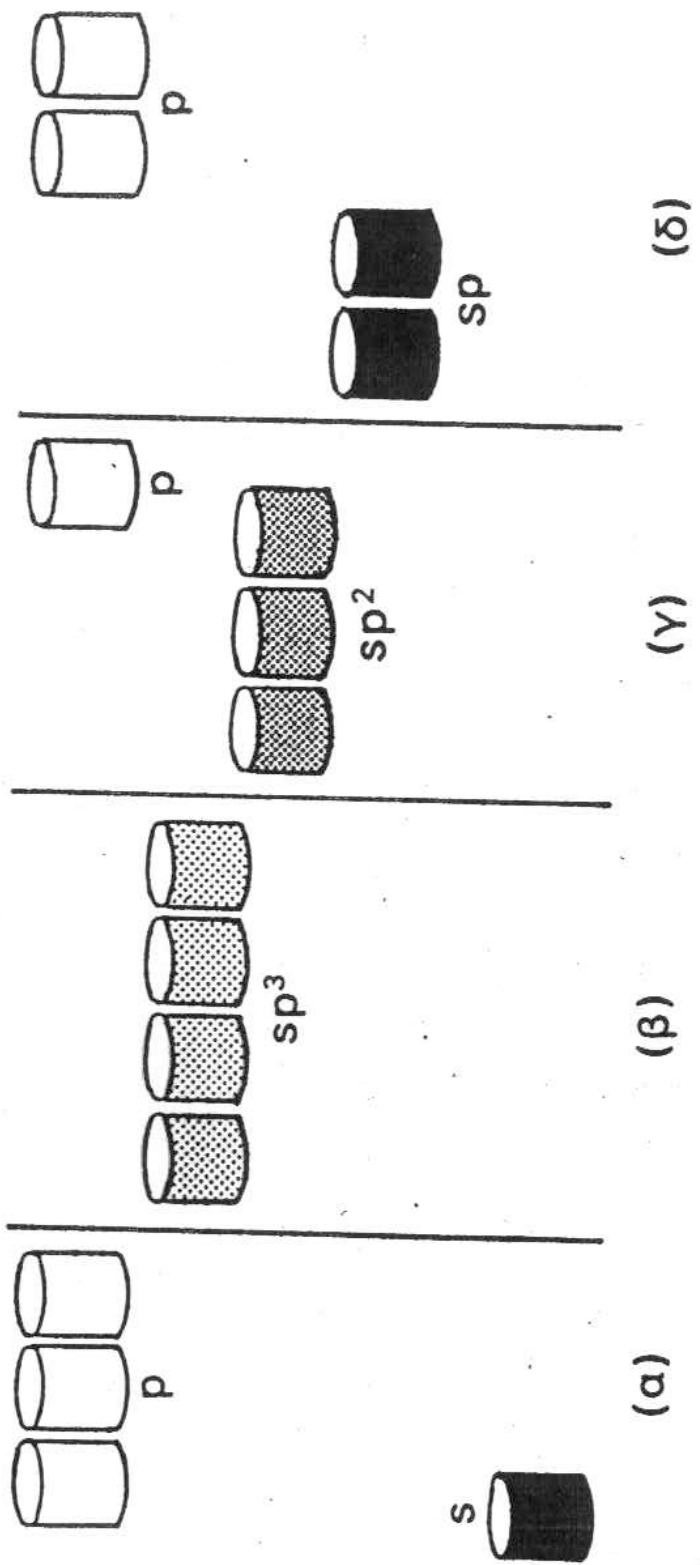
$$\Psi_3 (sp^2) = \frac{1}{\sqrt{3}} (2s) - \frac{1}{\sqrt{6}} (2p_x) - \frac{1}{\sqrt{2}} (2p_y)$$

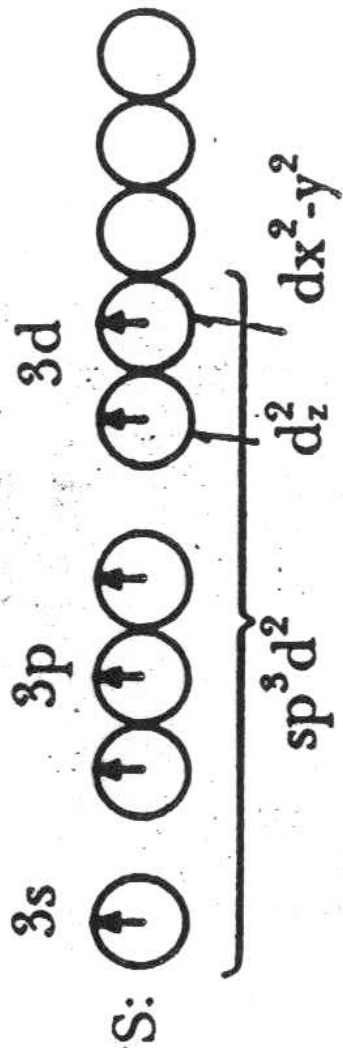
$$\Psi_1 (sp) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_s + \Psi_{p_z})$$

$$\Psi_2 (sp) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_s - \Psi_{p_z})$$

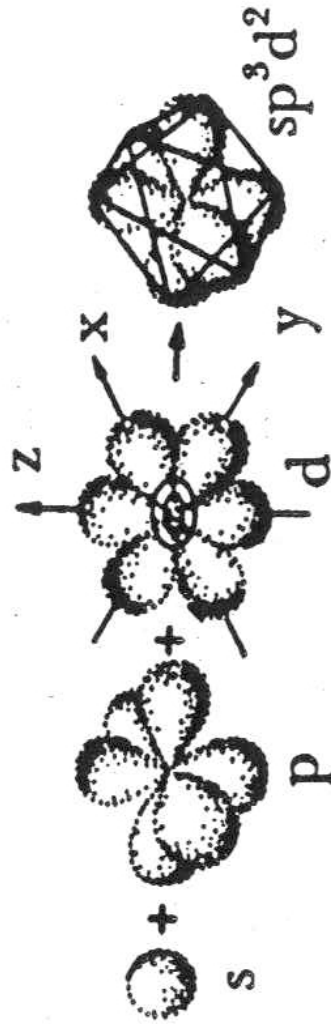


Υβριδιώσεις sp , sp^2 και sp^3





(α)



Μερικοί τύποι υβριδισμού και αντίστοιχες γεωμετρίες

Υβριδικά τροχιακά	Γεωμετρία	Γωνίες δεσμών
sp	Γραμμική	180°
sp ²	Τριγωνική	120°
sp ³	Τετραεδρική	109,5°
dsp ²	Επίπεδη τετραγωνική	90°
dsp ³	Τριγωνική διπυραμιδική, ή Τετραγωνική πυραμιδική	90°, 120° >90°, <90°
d ² sp ³	Οκταεδρική	90°

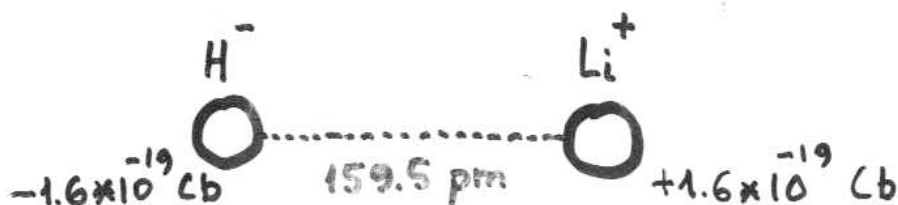
Peter Joseph Wilhelm Debye
(1884-1966)

- Γεννήθηκε στο Μάαστριχτ της Ολλανδίας.
- Ph.D στο Πανεπιστήμιο της Μονάχου (1910).
- Καθηγητής φυσικής στο Πανεπιστήμιο: Ζεύξης
Βερολίνου, Göttingen, Αγγλίας και
Βερολίνου.
- Καθηγητής χημείας στο Πανεπιστήμιο Cornell
(1936-1966).
- Βραβείο Nobel (1936)



Η διπολική ροπή μετράται συνήθως σε Debyes προς τιμή του ολλανδού επιστήμονα **P. Debye** (1884-1966). Ο Debye τιμήθηκε με το βραβείο Nobel Χημείας το 1936 για τις ερευνητικές του εργασίες σχετικά με τη ηλεκτρική διπολική ροπή, τις ακτίνες Χ και τη σκέδαση του φωτός από τα αέρια.

Στις περισσότερες περιπτώσεις ο χημικός δεσμός αποτελεί ενδιάμεση κατάσταση μεταξύ του καθαρά ομοιοπολικού δεσμού που αναπτύσσεται μεταξύ ομοιοπυρηνικών ατόμων (π.χ. Cl₂) και του καθαρά ιοντικού δεσμού που αναπτύσσεται μεταξύ ενός μετάλλου πολύ χαμηλής ενέργειας ιοντισμού και ενός αμέταλλου υψηλής ηλεκτρονιοσυγγένειας (π.χ. KF). Οι ενδιάμεσοι αυτοί δεσμοί ιοντικού-ομοιοπολικού χαρακτήρα μπορούν να θεωρηθούν ότι προέρχονται είτε από καθαρά ιοντικούς με παραμόρφωση των ιόντων, είτε από καθαρά ομοιοπολικούς δεσμούς με πόλωση.



Η διπολική ροπή $\mu = e \cdot r$

$$= 1.60 \times 10^{-19} \text{ C} \times 159.5 \times 10^{-12} \text{ m} = 2.555 \times 10^{-29} \text{ C} \cdot \text{m}$$

Η πειραματική τιμή $\mu = 1.963 \times 10^{-29} \text{ C} \cdot \text{m}$
 ($1 \text{ D} = 3.336 \times 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$)

$\delta = \delta''$ ιοντικός χαρακτήρας της ένωσης

$$\mu = \delta \cdot e \cdot r$$

$\delta = 0 \Rightarrow$ ο δεσμός "καθαρά" ομοιοπολικός

$\delta = 1 \Rightarrow$ ο δεσμός "καθαρά" ιοντικός

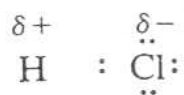
$$\delta = \frac{\mu}{e \cdot r}$$

Για το LiH $\Rightarrow \delta = \frac{1.963 \times 10^{-29} \text{ C} \cdot \text{m}}{1.60 \times 10^{-19} \text{ C} \times 159.5 \times 10^{-12} \text{ m}} = 0.77$

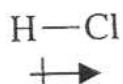
Άρα: δ ιοντικός χαρακτήρας της ένωσης LiH είναι 77%

δ ομοιοπολικός χαρακτήρας της ένωσης LiH είναι 23%





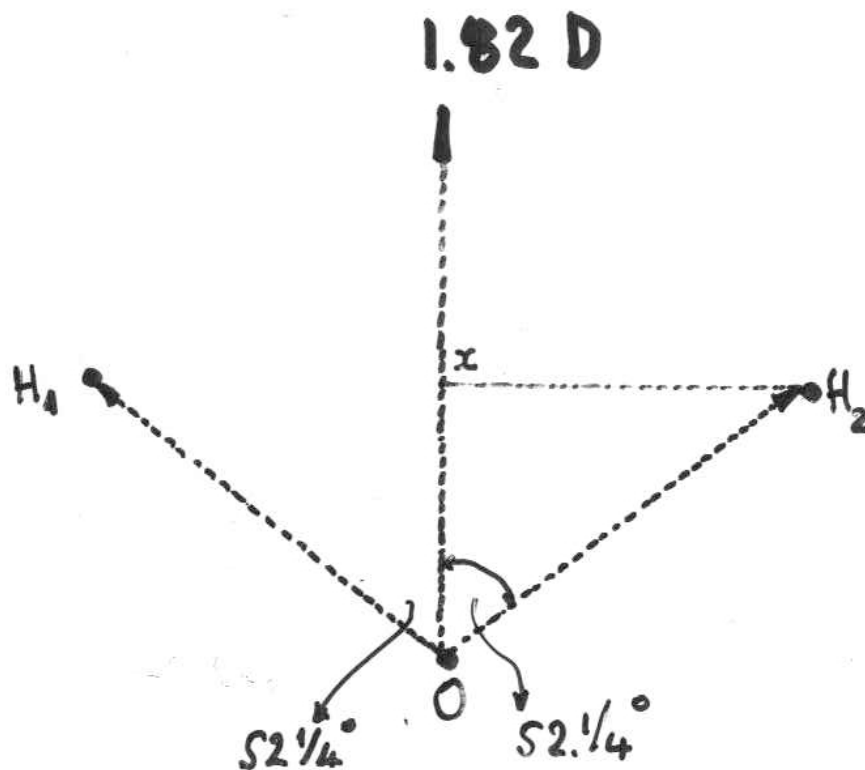
A dipole



Dipole moment = charge (in esu) \times distance (in cm)

$$\mu = e \times d$$

The charges are typically on the order of 10^{-10} esu and the distances are on the order of 10^{-8} cm. Dipole moments, therefore, are typically on the order of 10^{-18} esu cm. For convenience, this unit, 1×10^{-18} esu cm, is defined as one **debye**



$$\hat{HOH} = 104.5^\circ$$

$$Ox = (OH_2) \cos 52\frac{1}{4}^\circ$$

$$\begin{aligned} \Downarrow \\ (OH_2) &= \frac{Ox}{\cos 52\frac{1}{4}^\circ} = \frac{\frac{1.82}{2} D}{0.612} = \\ &= \frac{1.82 D}{1.224} = 1.49 D \end{aligned}$$

ΑΡΙΘΜΟΣ ΘΗΛΩΣΗΣ

→ Παράμετρος που προβάλλει τον ΙΟΝΤΙΚΟ χαρακτήρα του δεσμού.

"Αριθμός θηλώσης" είναι το ΦΑΙΝΟΜΕΝΙΚΟ ΦΟΡΤΙΟ που αποκτά το άτομο στις ομοιοπολικές ενώσεις ή το ΠΡΑΧΜΑΤΙΚΟ φορτίο στις ιοντικές, αν οι δεσμοί θεωρηθούν ΤΕΛΕΙΑ ΙΟΝΤΙΚΟΙ.

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