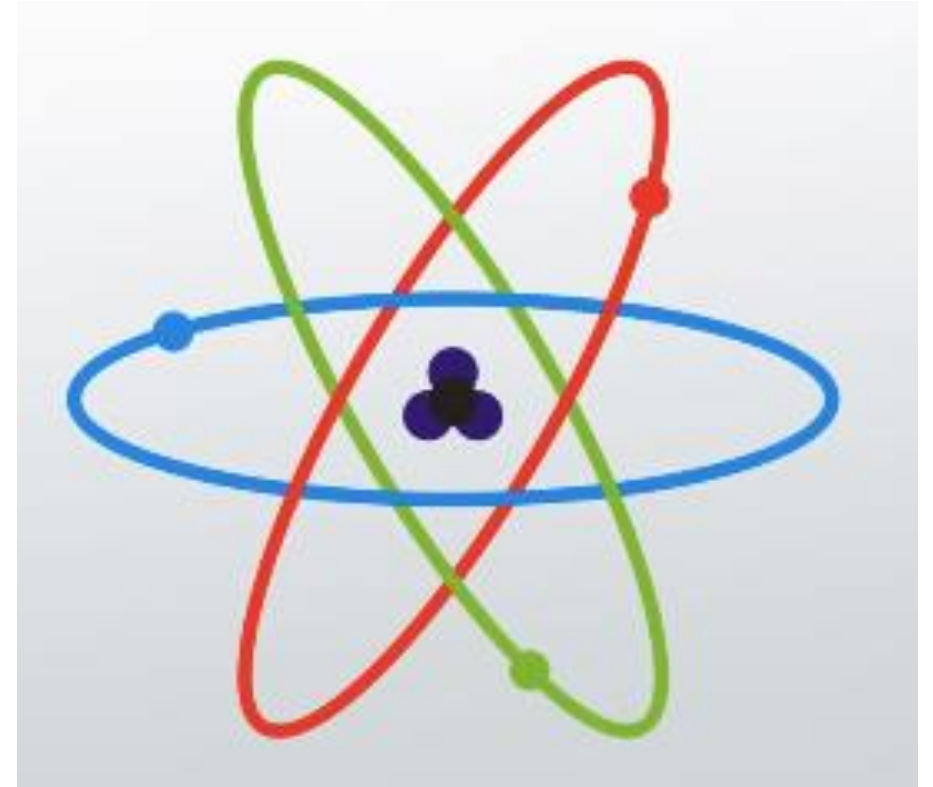


Το Άτομο-Χημικός Δεσμός και Δομή

Αρετή Στρατή, MSc, PhD
Επίκουρη Καθηγήτρια
Ιατρική Σχολή Αθηνών
ΕΚΠΑ

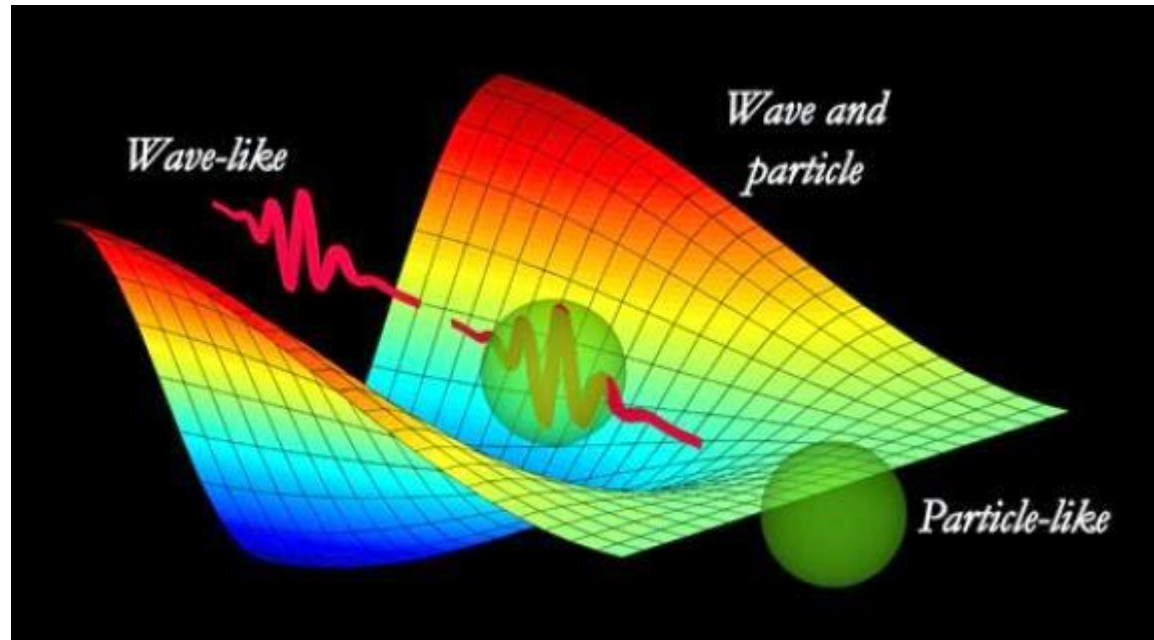


Εκπαιδευτικά αντικείμενα

- Κβαντομηχανική
- Ατομική φασματοσκοπία
- Το μοντέλο του Bohr
- Αρχή της αβεβαιότητας
- Σχήματα ατομικών τροχιακών
- Εισαγωγή στις δομές Lewis (συνοπτικά)
- Ιοντικοί και ομοιοπολικοί δεσμοί
- Τα σχήματα των μορίων: Θεωρία VSEPR
- Θεωρία δεσμού σθένους και υβριδισμός
- Μοριακή γεωμετρία

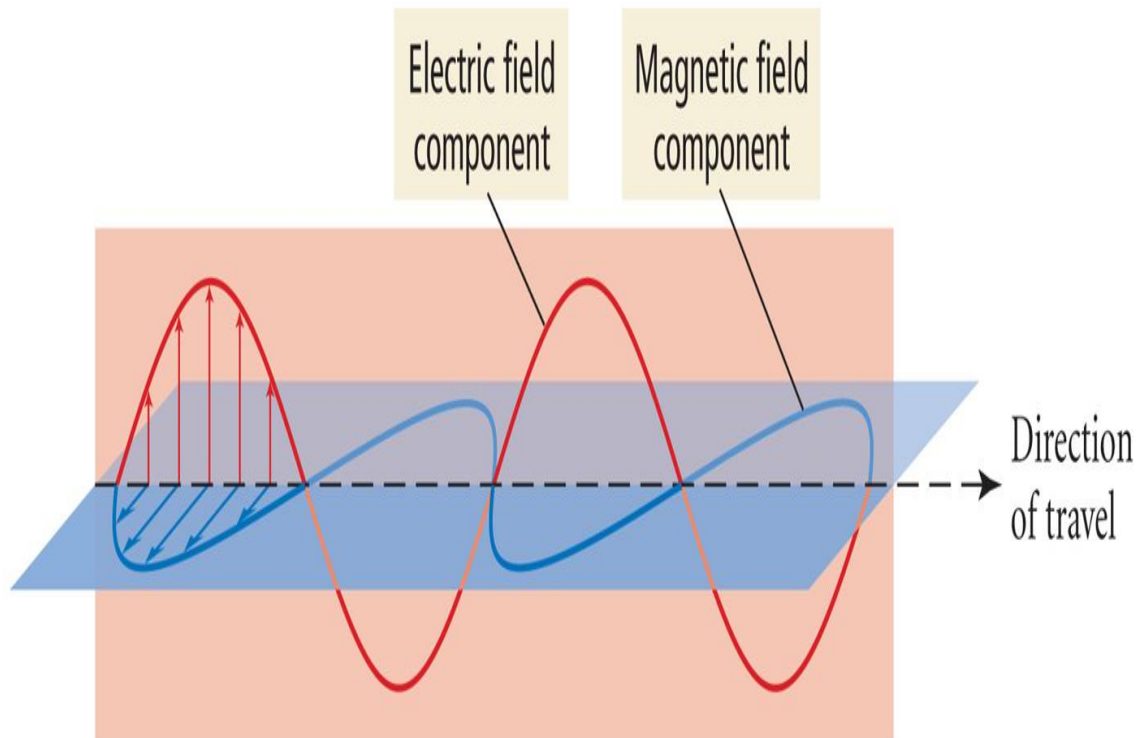
Η φύση του φωτός

- Για να κατανοήσουμε όμως την συμπεριφορά του ηλεκτρονίου πρέπει να γνωρίζουμε βασικά στοιχεία Κυματικής
- Το φώς έχει μερικά κοινά χαρακτηριστικά με τα ηλεκτρόνια
- Κυματοσωματιδιακός δυϊσμός του φωτός



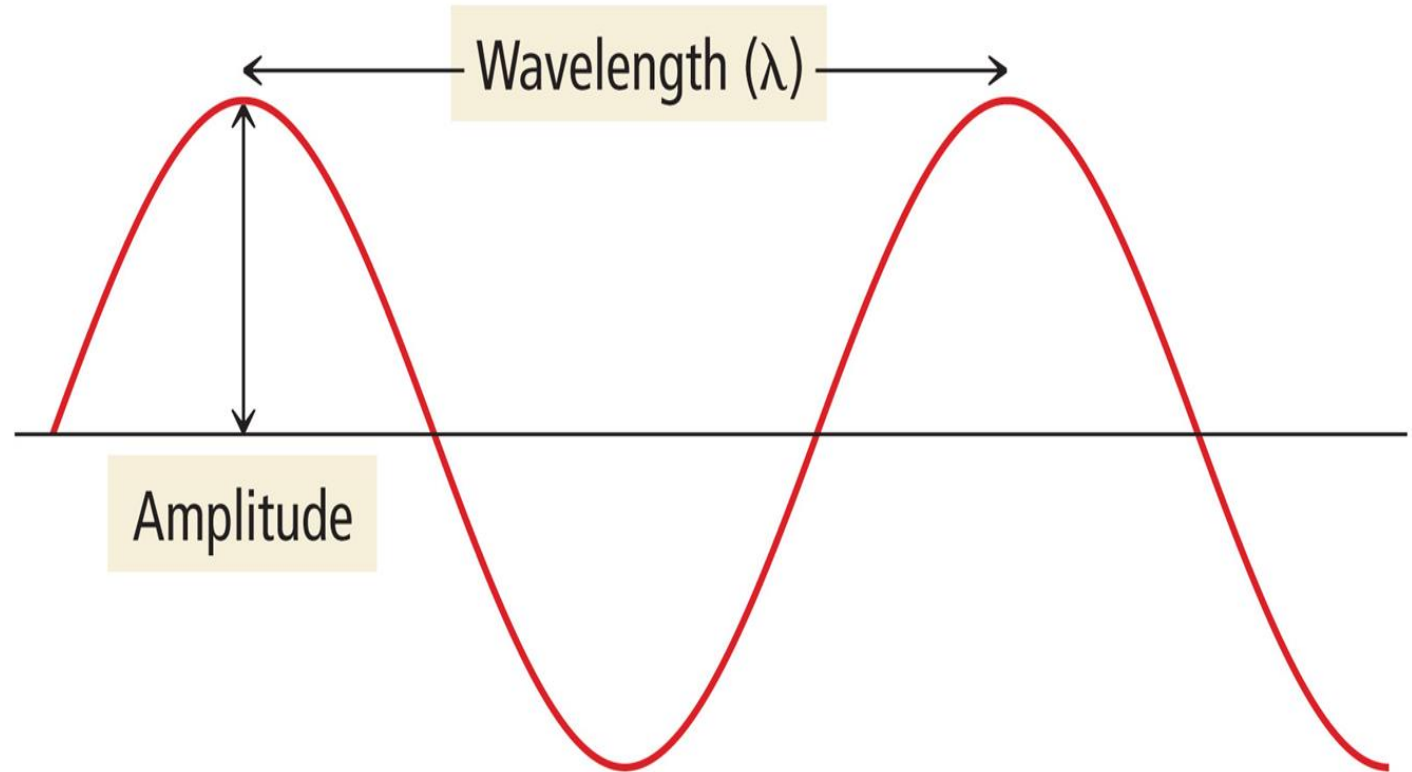
Η Κυματική Φύση του Φωτός

- Το φως είναι μια μορφή ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας δηλ ενέργεια ενσωματωμένη σε ταλαντευόμενα ηλεκτρικά και μαγνητικά πεδία



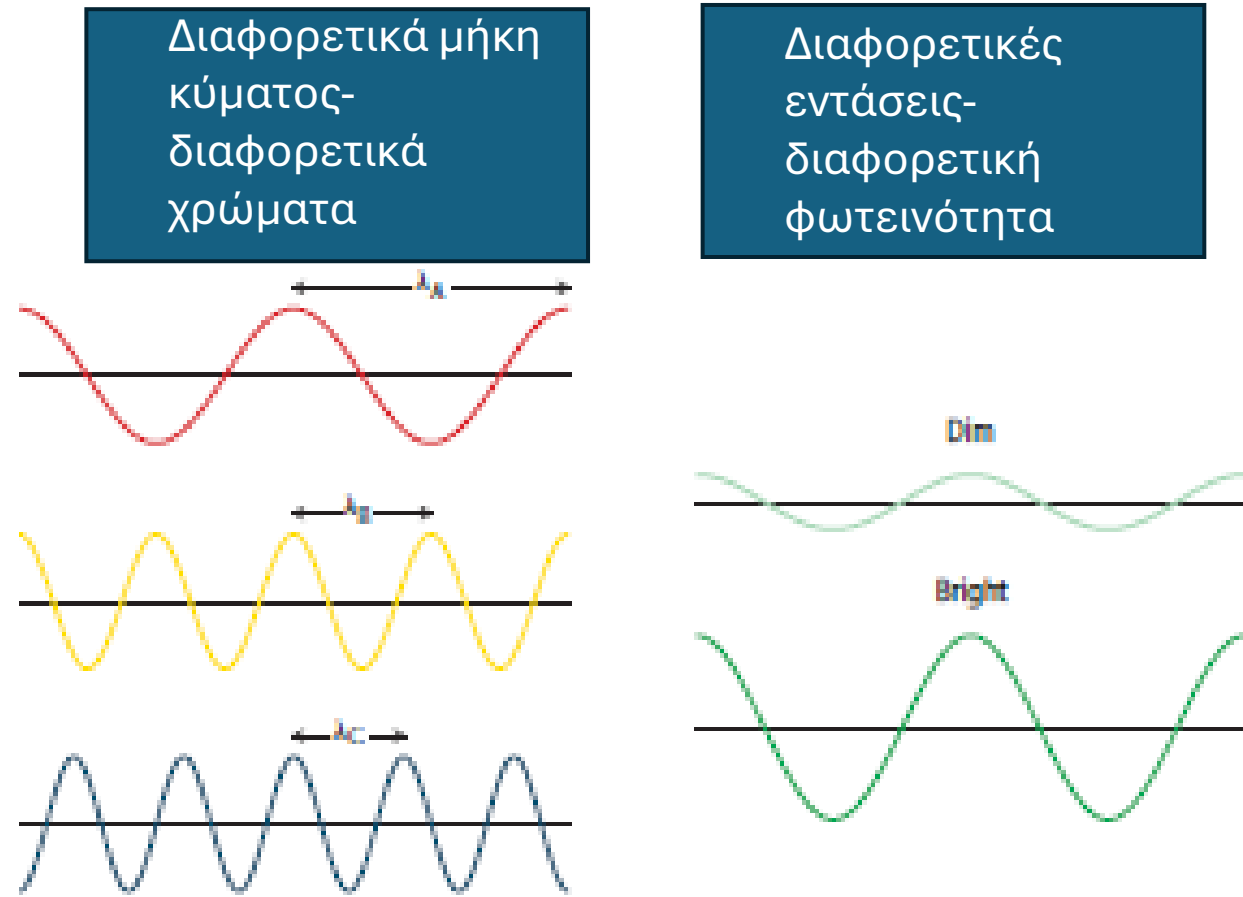
Τα Χαρακτηριστικά του ηλεκτρομαγνητικού κύματος (1)

- Το **εύρος** είναι το κάθετο ύψος του κύματος, η απόσταση από τον κόμβο στην κορυφή
- Το **μήκος λ** είναι μέτρο της απόστασης που καλύπτεται από το κύμα. Η απόσταση από μια κορυφή στην άλλη



Μήκος κύματος και ένταση

- Τα μήκη κυμάτων και οι εντάσεις είναι ανεξάρτητες ιδιότητες
- Το μήκος κύματος καθορίζει το χρώμα του
- Η ένταση καθορίζει τη φωτεινότητα του



Τα Χαρακτηριστικά του ηλεκτρομαγνητικού κύματος (2)

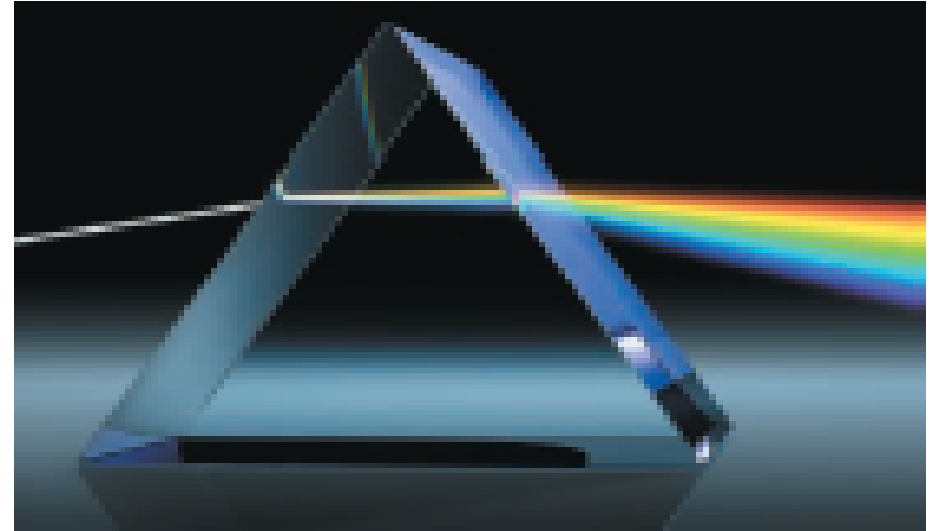
- Η **συχνότητα, (ν)** ο αριθμός των κύκλων (ή κορυφών κυμάτων) που περνούν σε κάποιο σημείο σε κάποιο χρόνο
 - ✓ αριθμός των κυμάτων = αριθμός των κύκλων
 - ✓ Μονάδες είναι hertz, (Hz) ή cycles/s = s^{-1}
 - ✓ $1 \text{ Hz} = 1 \text{ s}^{-1}$
- Η **ολική ενέργεια** είναι ανάλογη με το **εύρος** και την **συχνότητα** των κυμάτων
 - ✓ Όσο μεγαλύτερο το εύρος του κύματος, τόσο μεγαλύτερη ένταση έχει
 - ✓ Όσο πιο συχνά τα κύματα προσκρούουν τόσο μεγαλύτερη είναι η ένταση

Η Σχέση μεταξύ Μήκους Κύματος και Συχνότητας

- Η συχνότητα ενός κύματος είναι ευθέως ανάλογη με την ταχύτητα με την οποία ταξιδεύει το κύμα
- Για κύματα που διαδίδονται με την ίδια ταχύτητα, όσο μικρότερο το μήκος τόσο πιο συχνά περνούν
- Αυτό σημαίνει ότι το **μήκος και η συχνότητα** των ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων είναι **αντιστρόφως ανάλογα**
 - ✓ Εφόσον η ταχύτητα του φωτός είναι σταθερή ισχύει
 - ✓ $v=c/\lambda$

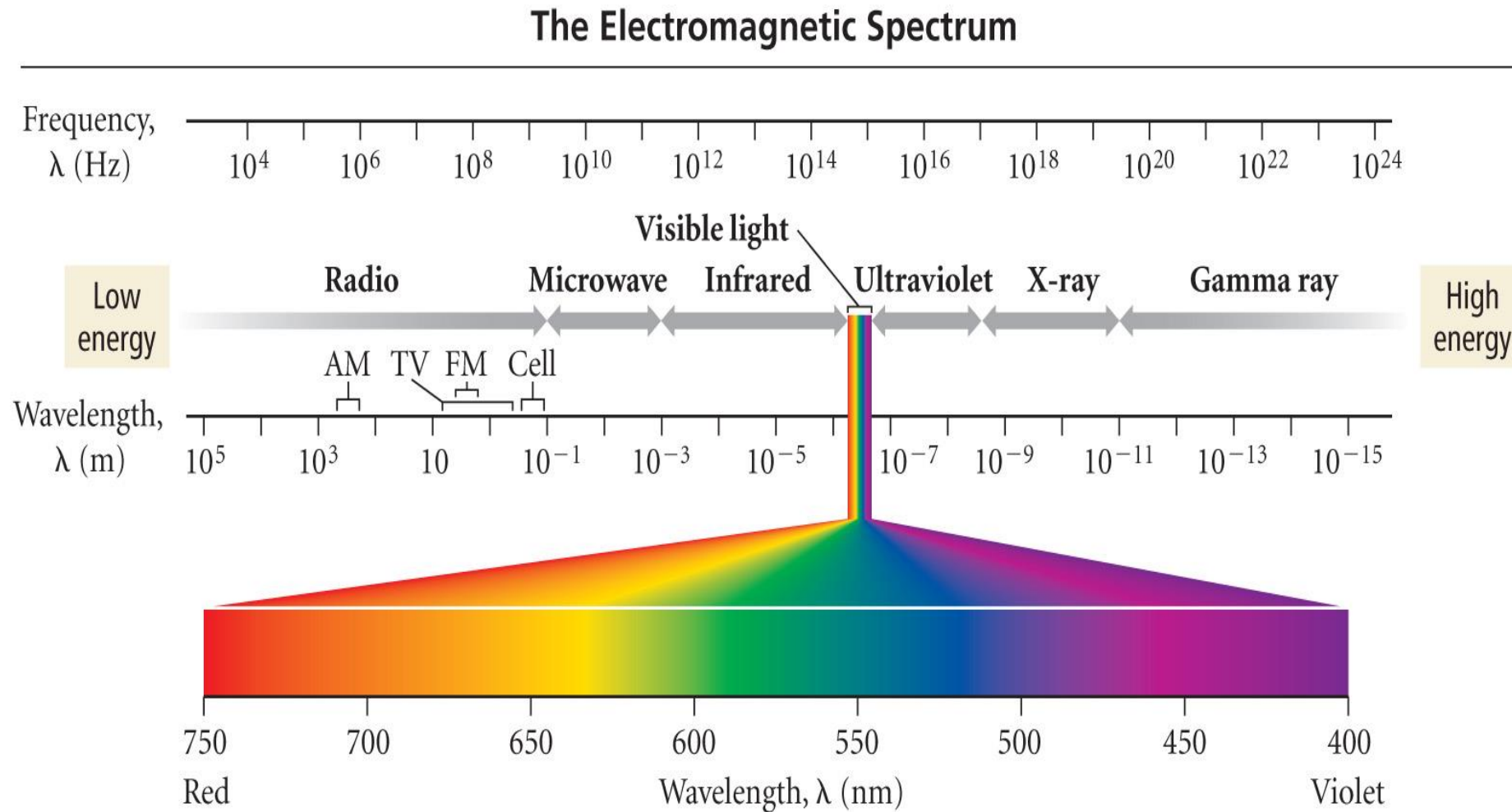
Το ορατό φως

- Το χρώμα του φωτός καθορίζεται από το μήκος κύματός του
 - ✓ Ή την συχνότητα
- Το λευκό φως παρέχει ένα φάσμα μηκών κύματος και επομένως ένα φάσμα χρωμάτων
Κόκκινο**Πορτοκαλί****Κίτρινο****Πράσινο****Κυανό****Βιολετί**
- Η ποικιλία των μηκών κύματος στο λευκό φως είναι υπεύθυνη για το πως αντιλαμβανόμαστε τα χρώματα στα αντικείμενα



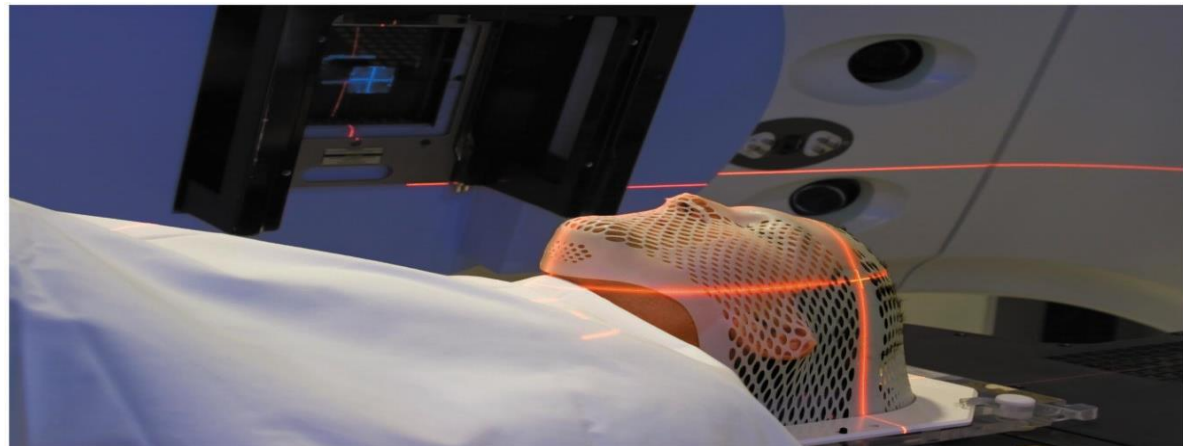
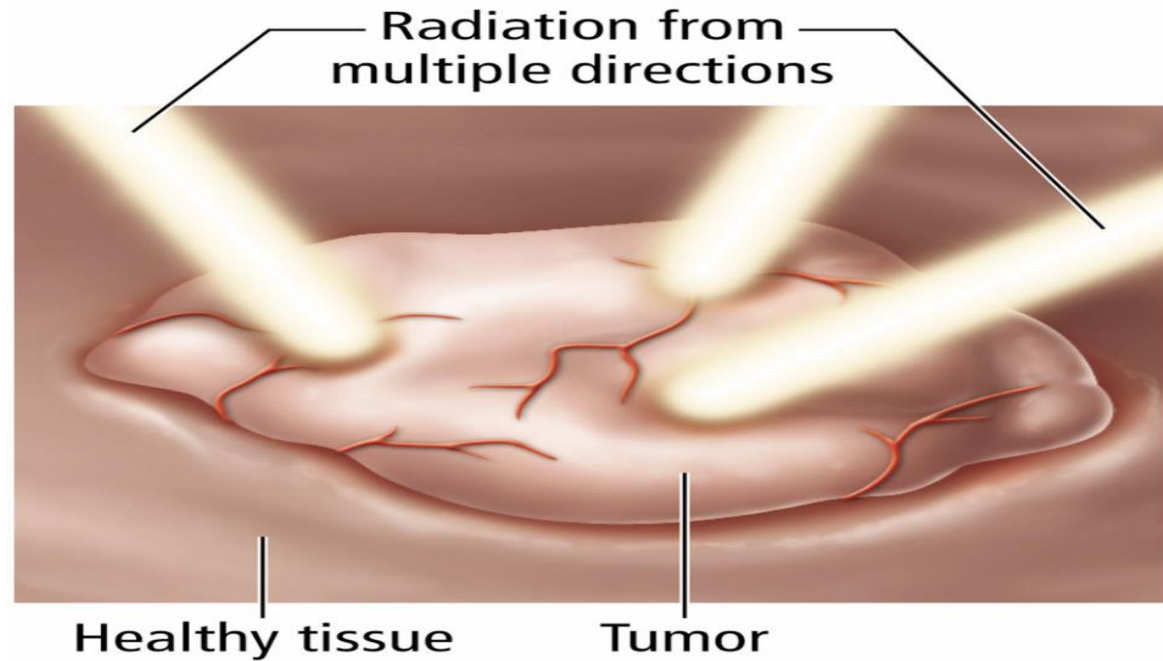
Το Ηλεκτρομαγνητικό Φάσμα

- Το ορατό φώς αποτελεί μόνο ένα μικρό μέρος των μηκών του φωτός –καλούμενο **ηλεκτρομαγνητικό φάσμα**



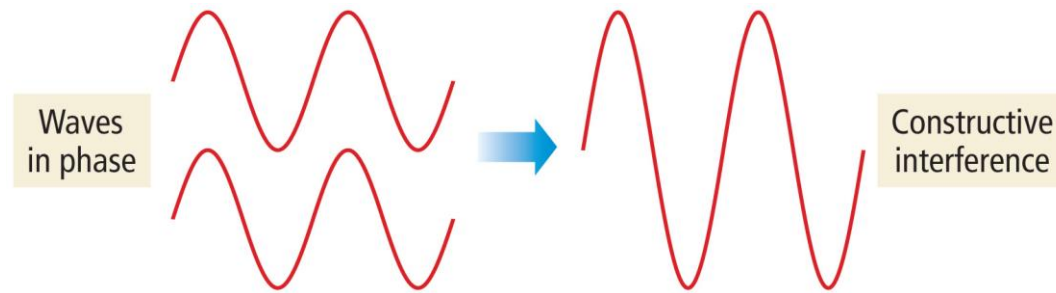
Ακτινοθεραπεία για καρκίνο

- Όταν η ιονίζουσα ακτινοβολία αλληλεπιδρά με βιολογικά μόρια, αυτή μπορεί να τα αλλάξει μόνιμα ή ακόμη και να τα καταστρέψει.
- Στην ακτινοθεραπεία οι ακτίνες Χ ή ακτίνες γάμμα στοχεύουν τους καρκινικούς όγκους.

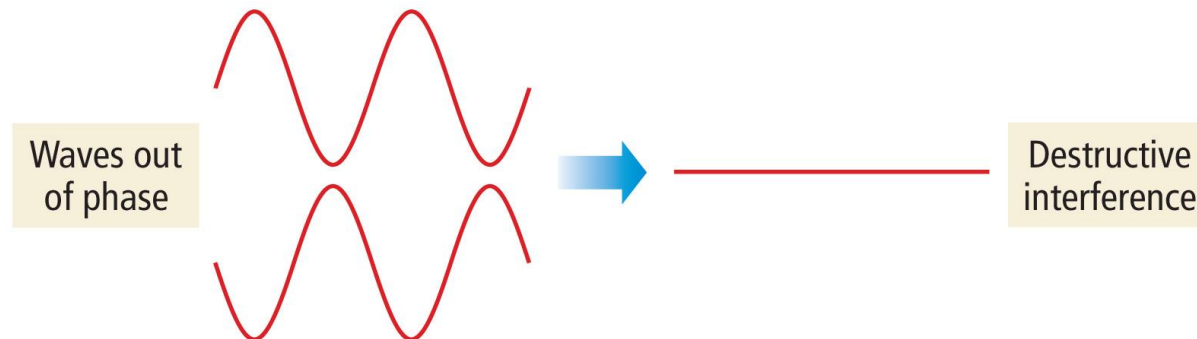


Συμβολή κυμάτων

- Η αλληλεπίδραση μεταξύ των κυμάτων καλείται **συμβολή**
- Όταν τα κύματα αλληλεπιδρούν για να προστεθούν ώστε να δημιουργηθεί ένα μεγαλύτερο κύμα –αυτό καλείται ενισχυτική συμβολή
 - Τα κύματα είναι **σε φάση**

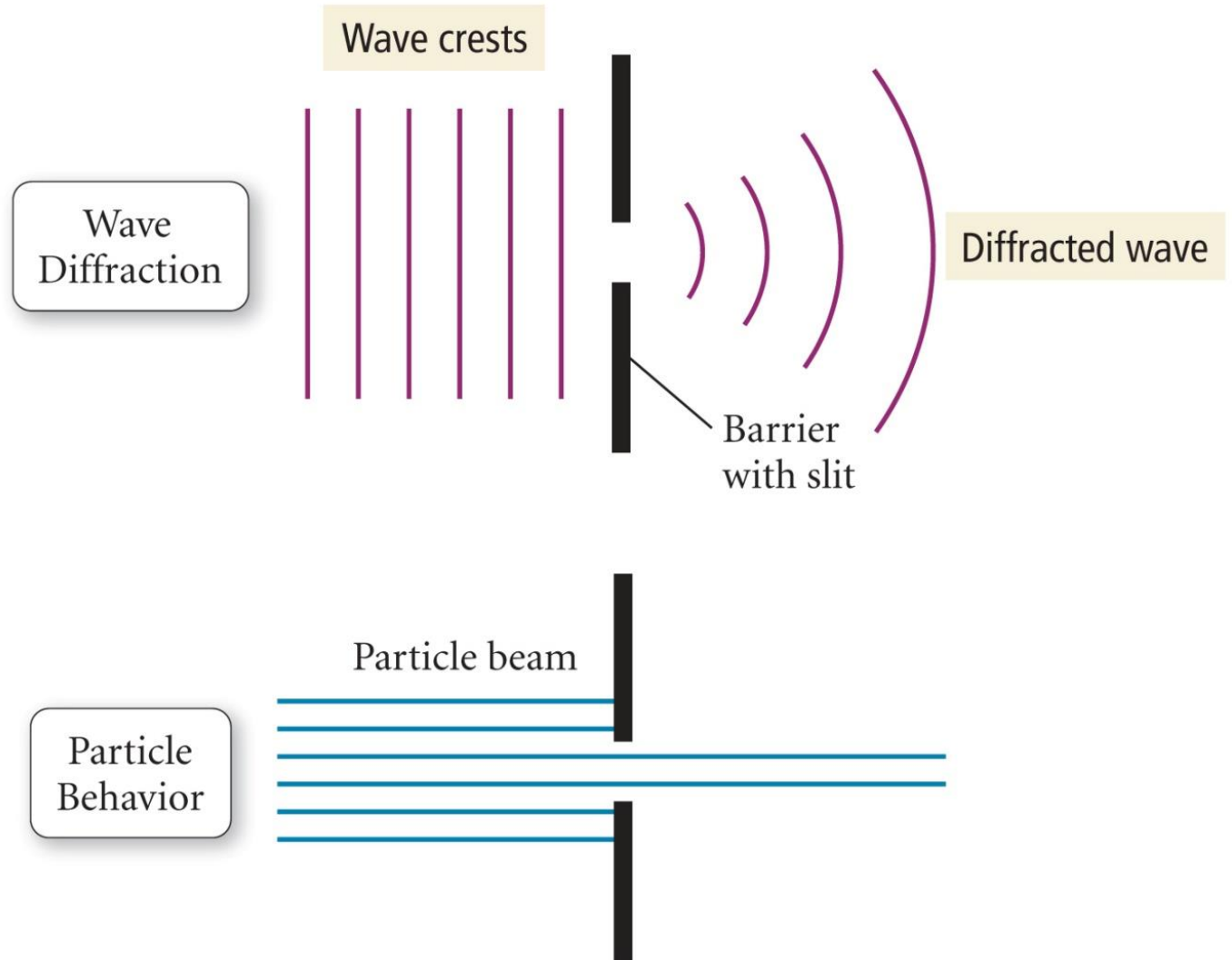


- Όταν τα κύματα αλληλεπιδρούν και εξουδετερώνονται –αυτό καλείται αποικοδομητική (καταστρεπτική) συμβολή
 - Τα κύματα είναι **εκτός φάσεως**



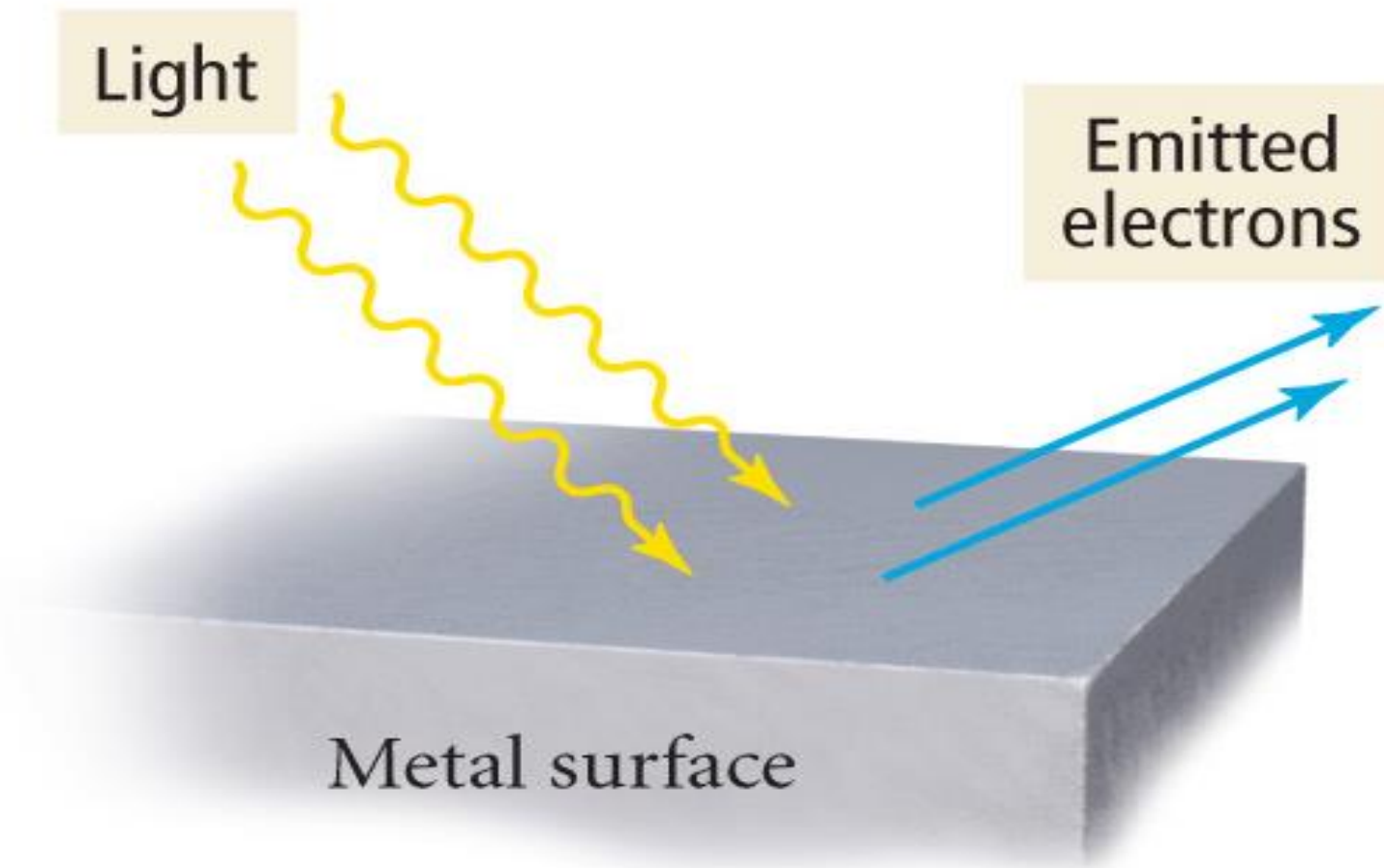
Περίθλαση κυμάτων

➤ Όταν τα διαδιδόμενα κύματα συναντούν ένα εμπόδιο ή άνοιγμα σε ένα φράγμα που είναι του ιδίου μεγέθους με το μήκος κύματος, κάμπτονται γύρω από αυτό - αυτό καλείται περίθλαση.



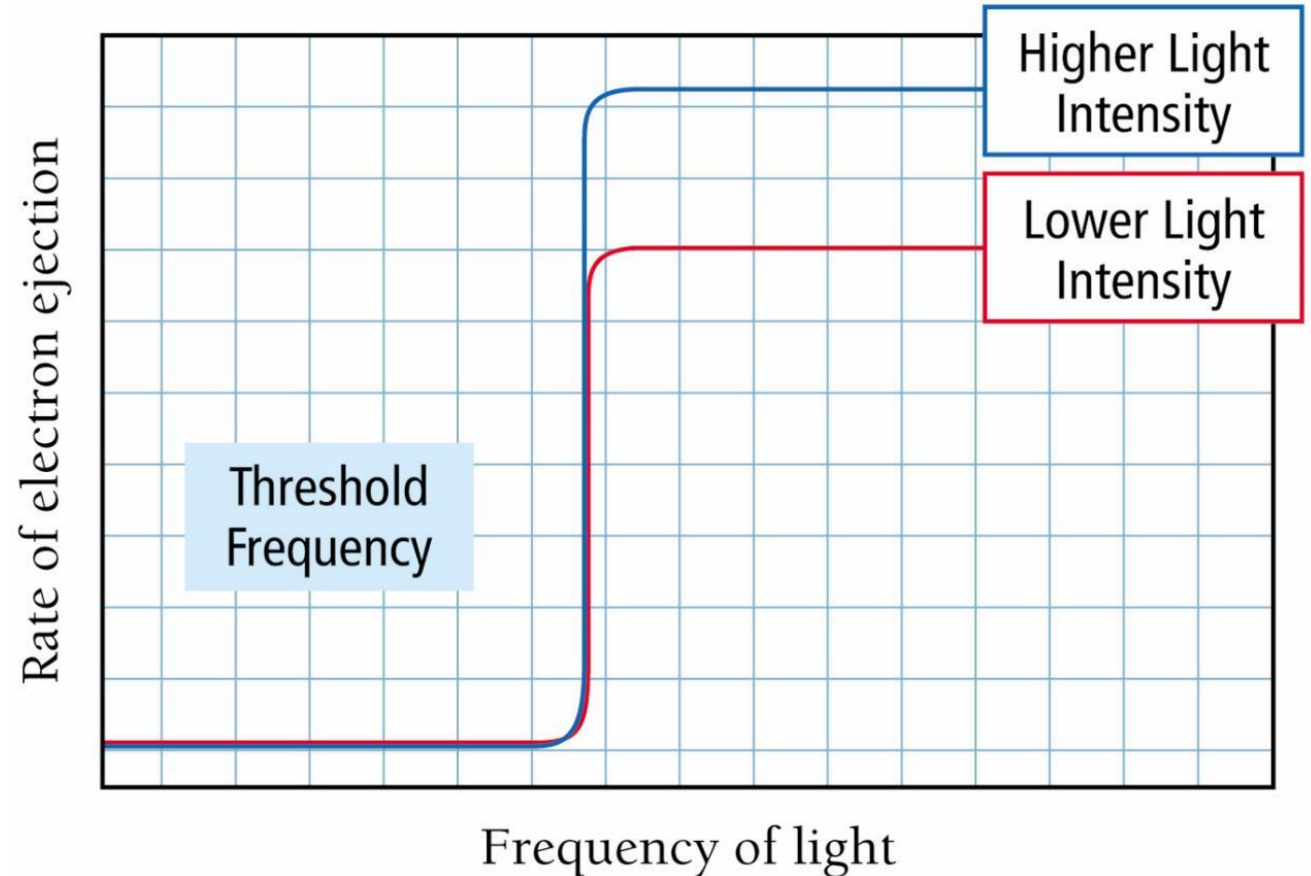
Το Φωτοηλεκτρικό Φαινόμενο

- Πολλά μέταλλα εκπέμπουν ηλεκτρόνια όταν το φως προσκρούει στην επιφάνειά τους



Ρυθμός εκπομπής e-

- Το φως που χρησιμοποιήθηκε για την εκτόπιση ηλεκτρονίων έχει μια συχνότητα κατωφλίου κάτω από την οποία δεν εκπέμπονταν ηλεκτρόνια από το μέταλλο
- Το φως χαμηλής συχνότητας δεν εκτοξεύει e- ανεξάρτητα από την ένταση ή τη διάρκεια του
- Το φως υψηλής συχνότητας εκτοξεύει ηλεκτρόνια ακόμα και αν η ένταση του είναι χαμηλή



$$E = h\nu = \frac{h \cdot c}{\lambda}$$

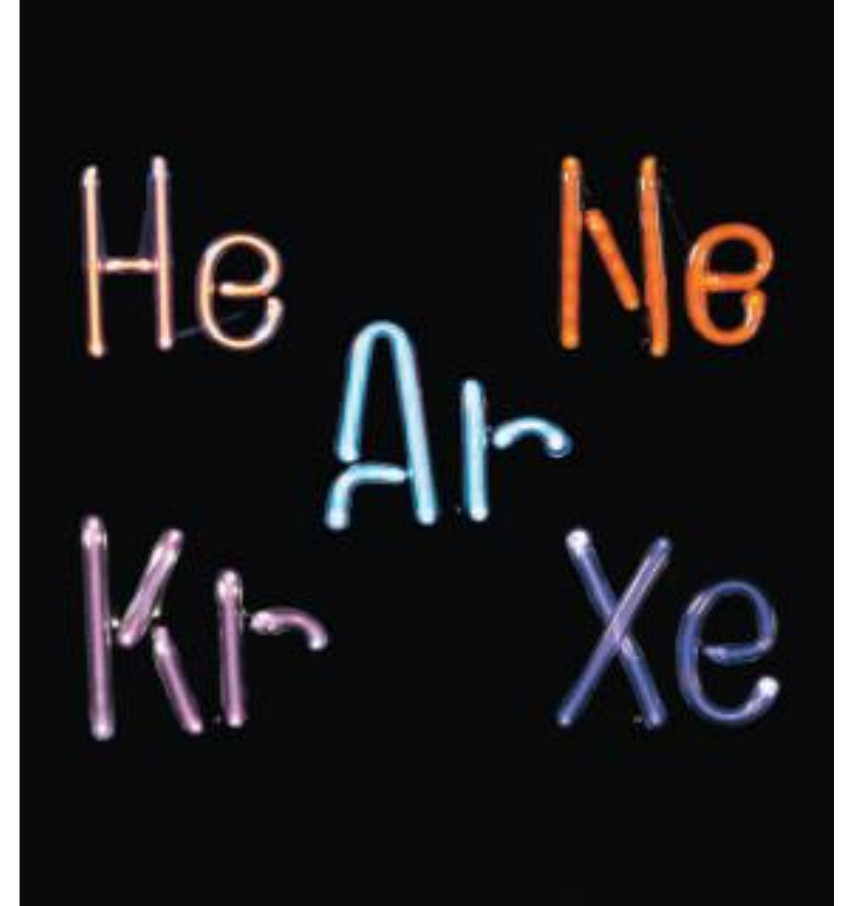
Τα αποσπώμενα ηλεκτρόνια

- 1 φωτόνιο στο κατώφλι συχνότητας έχει ακριβώς την απαιτούμενη ενέργεια για να εγκαταλείψει το ηλεκτρόνιο το άτομο
 - ✓ Ενέργεια πρόσδεσης, Φ ($h\nu = \Phi$)
- Για μεγαλύτερες συχνότητες το ηλεκτρόνιο απορροφά περισσότερη ενέργεια από την απαιτούμενη για να φύγει
- Αυτή η πλεονάζουσα ενέργεια μετατρέπεται σε κινητική ενέργεια του εξωθούμενου ηλεκτρονίου

$$\begin{aligned}\text{Κινητική ενέργεια} &= E_{\text{φωτονίου}} - E_{\text{πρόσδεσης}} \\ \text{KE} &= h\nu - \Phi\end{aligned}$$

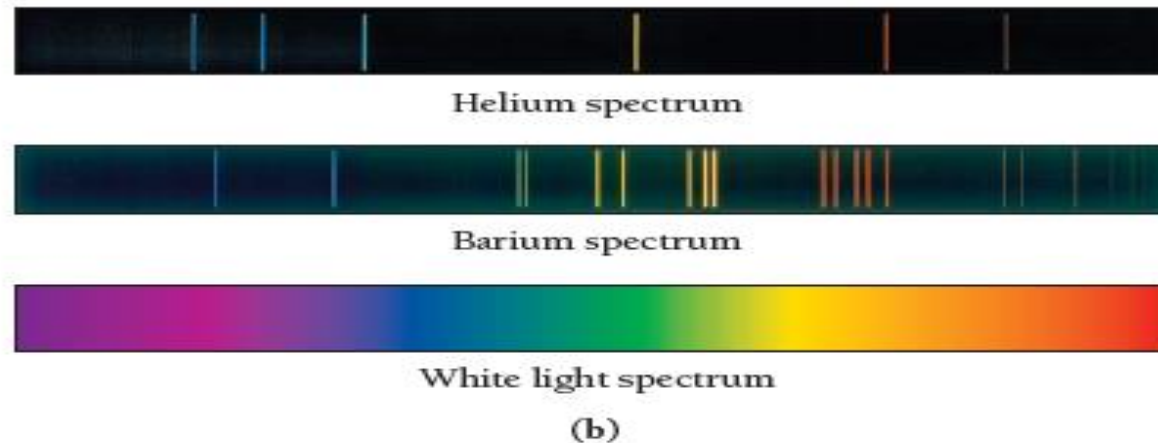
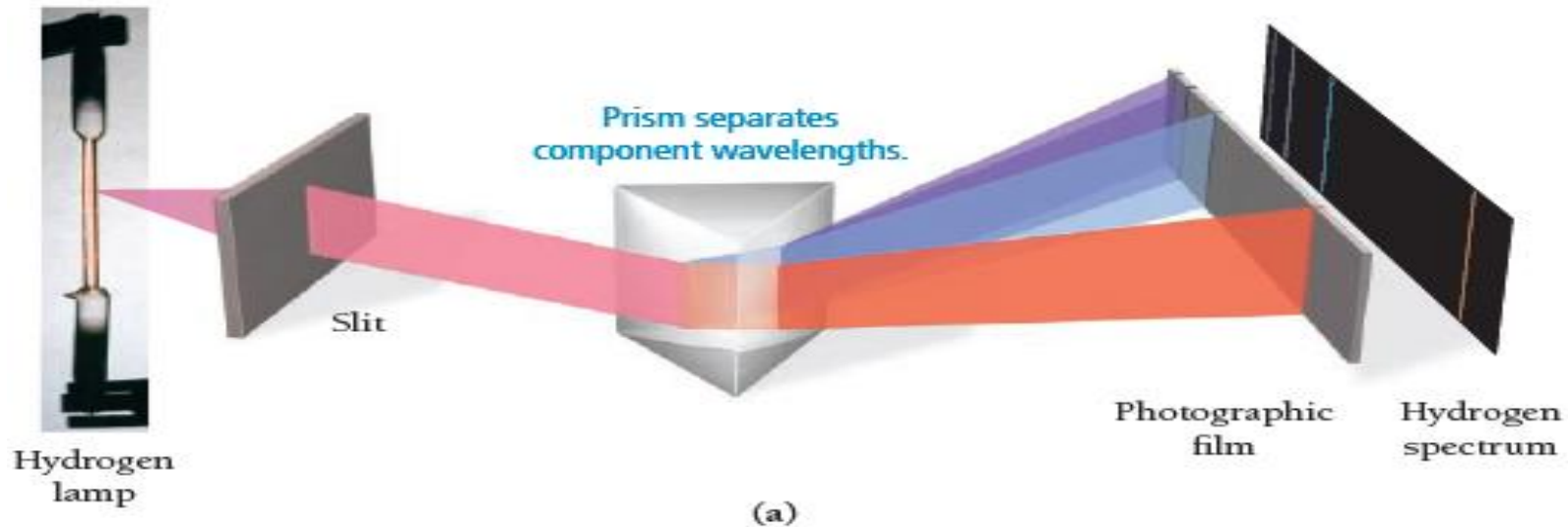
Ατομική φασματοσκοπία

- Η μελέτη της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας που απορροφάται και εκπέμπεται από τα άτομα.
- Τα άτομα κάθε στοιχείου εκπέμπουν φως χαρακτηριστικού χρώματος.

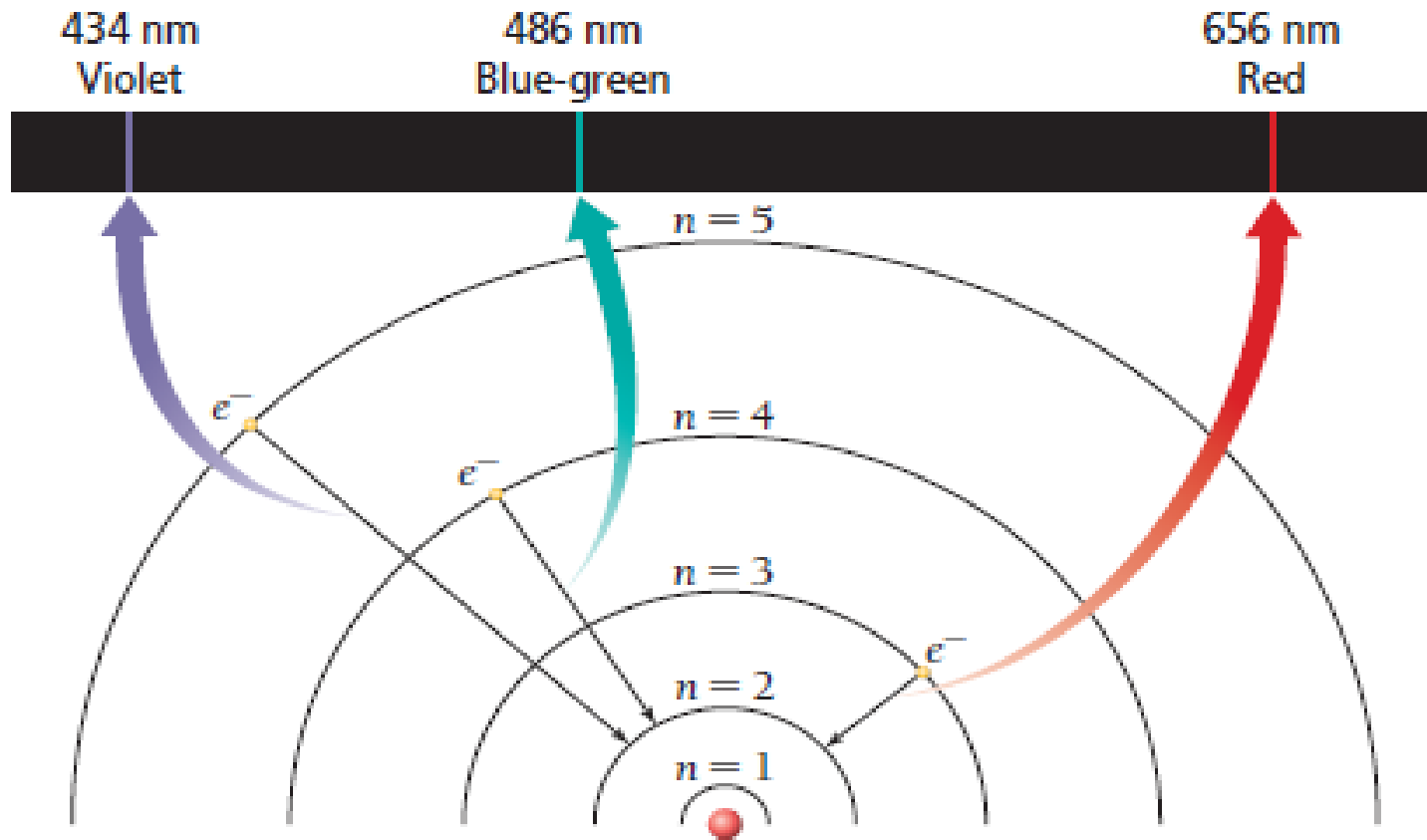


Φάσματα έκπομης

- Το φως που εκπέμπεται από ένα στοιχείο μόλις θερμανθεί μπορεί να διαχωριστεί στα συστατικά του μήκη κύματος μέσω της διέλευσης του από ένα πρίσμα

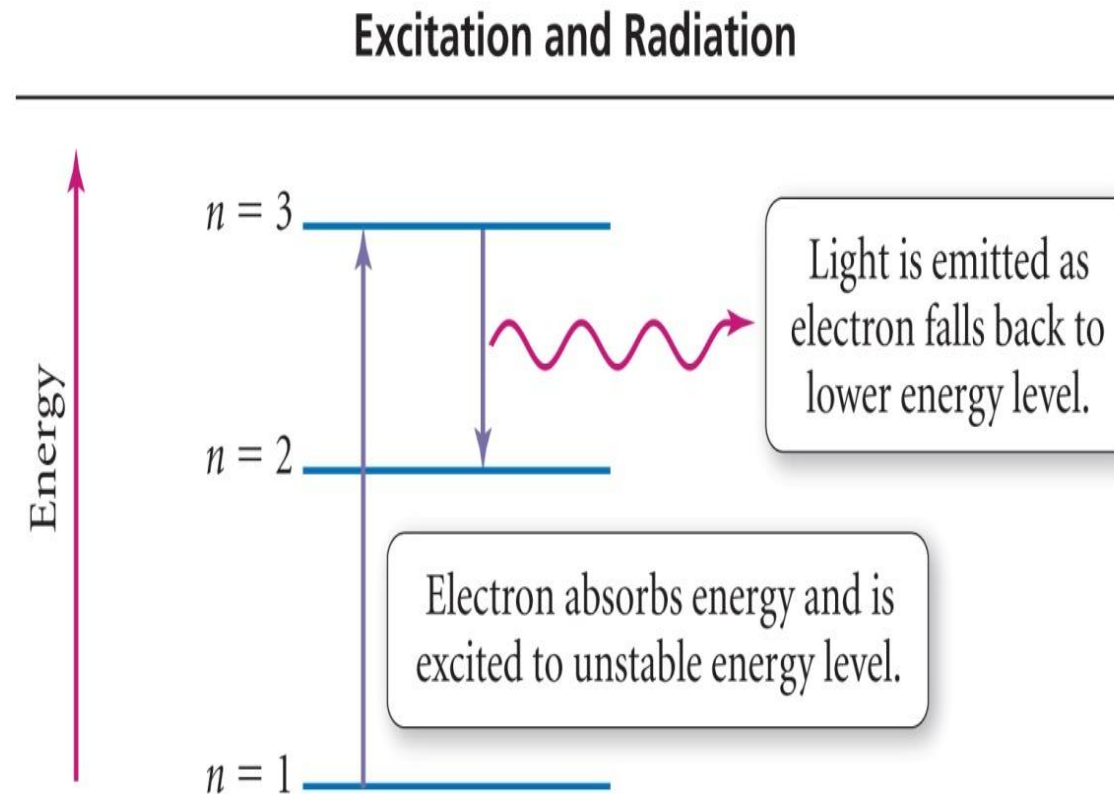


Το μοντέλο του Bohr

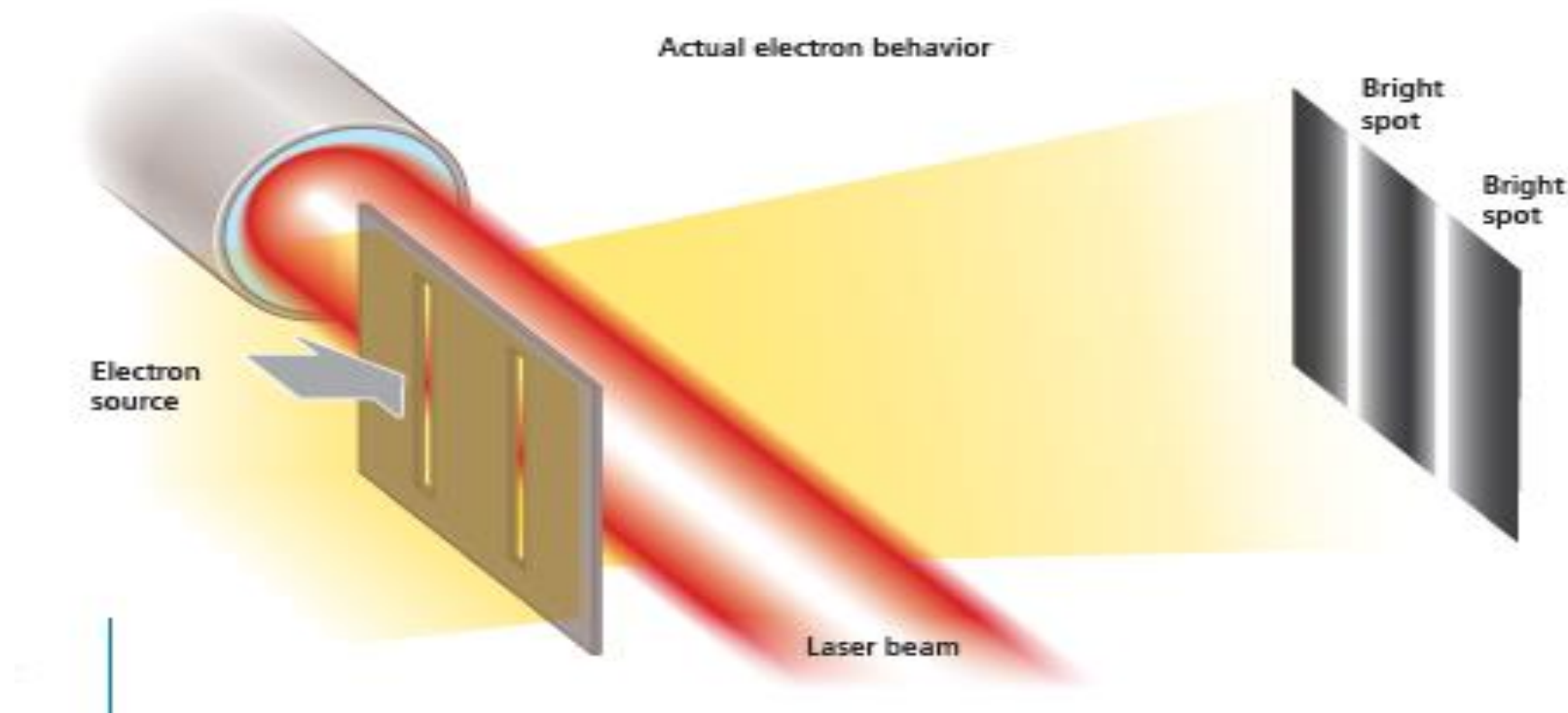


Ηλεκτρονικές Μεταπτώσεις

- Κάθε γραμμή στο φάσμα εκπομπής αντιστοιχεί στην διαφορά ενέργειας μεταξύ των δύο ενεργειακών καταστάσεων

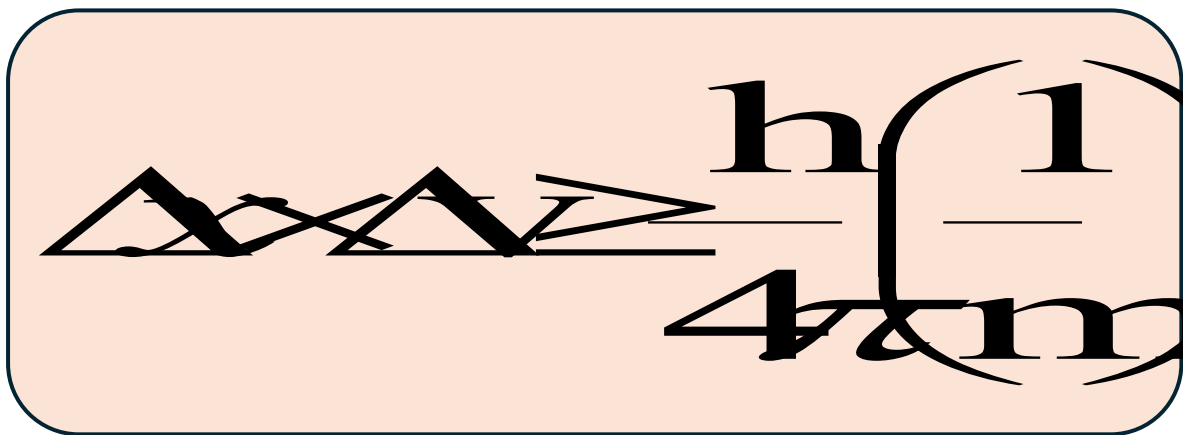


Η Κυματική και σωματιδιακή φύση του ηλεκτρονίου



- Η κυματική φύση και σωματιδιακή φύση του ηλεκτρονίου θεωρούνται συμπληρωματικές ιδιότητες. Οι συμπληρωματικές ιδιότητες αλληλοαποκλείονται

Η Αρχή της Αβεβαιότητας



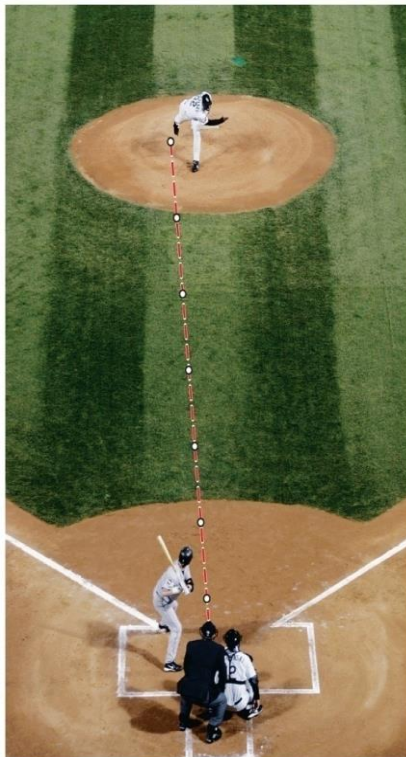
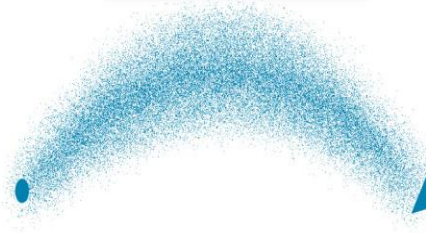
Werner Heisenberg (1901-1976)

- Ο Heisenberg όρισε ότι το γινόμενο των αβεβαιοτήτων σε αμφοότερες την θέση και την ταχύτητα ενός σωματιδίου είναι αντιστρόφως ανάλογο της μάζας του
- ✓ x = θέση, Δx = αβεβαιότητα της θέσης
 - ✓ v = ταχύτητα, Δv = αβεβαιότητα της ταχύτητας
 - ✓ m = μάζα

Προσδιοριστία vs. Απροσδιοριστία

Classical
trajectory

Quantum-mechanical
probability distribution map

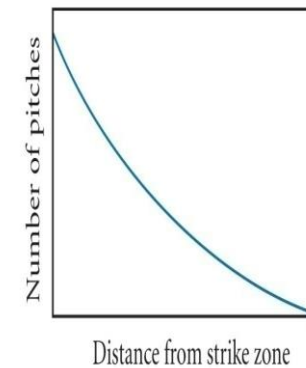


Copyright © 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.



Copyright © 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

The Quantum-Mechanical
Strike Zone



Η έννοια του τροχιακού

➤ Διαγράμματα κατανομής πιθανότητας

Που είναι πιο πιθανο να βρεθεί το ηλεκτρόνιο ενός ατόμου. Κάθε ηλεκτρόνιο ενός ατόμου βρίσκεται σε ένα ορισμένο τροχιακό.

➤ το μέγεθος, το σχήμα και ο προσανατολισμός στον χώρο ενός τροχιακού καθορίζεται από τρεις ακέραιους όρους

➤ Κάθε τροχιακό καθορίζεται από τρεις σχετιζόμενους κβαντικούς αριθμούς:

✓ n , ο κύριος κβαντικός αριθμός

✓ l , ο γωνιακός κβαντικός αριθμός

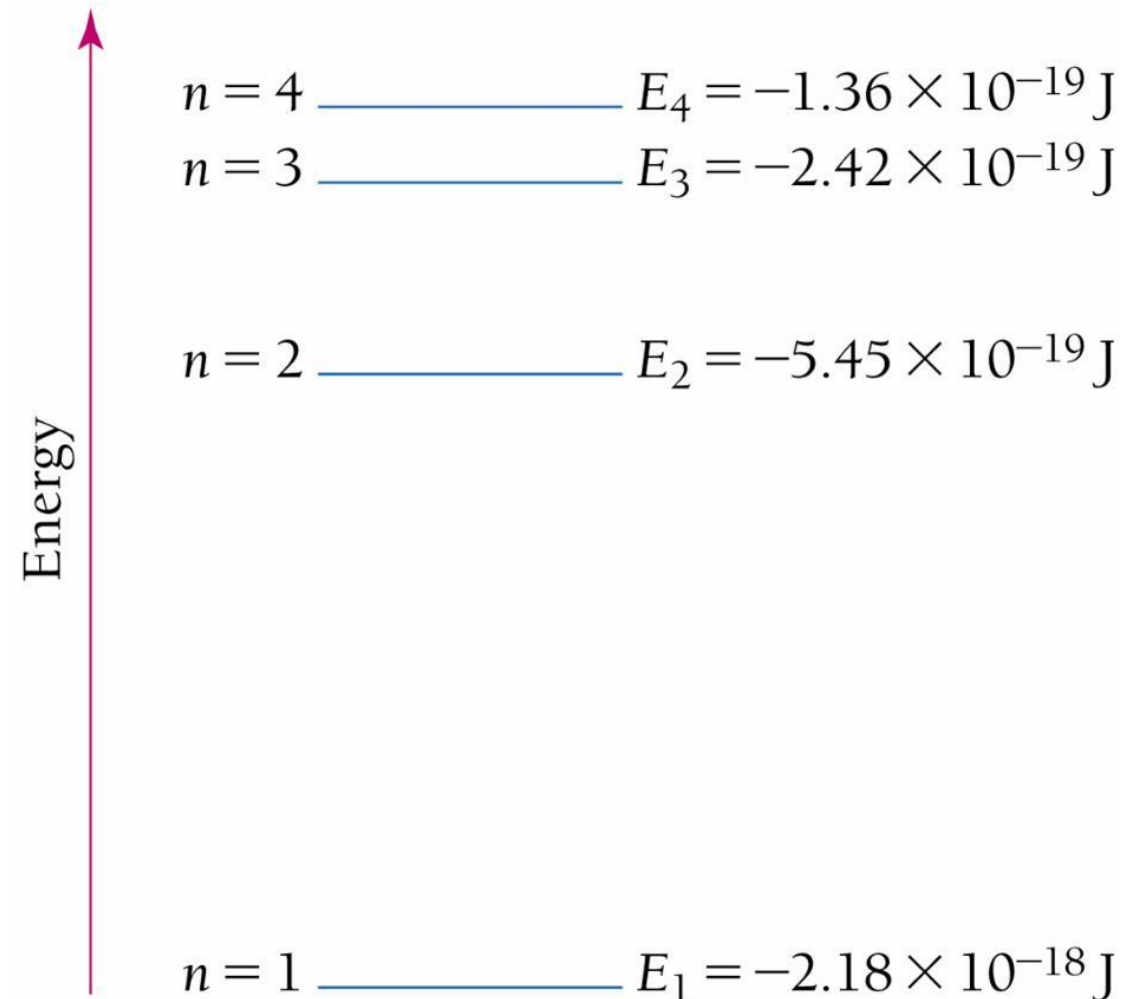
✓ m_l , ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός. Όλοι αυτοί οι κβαντικοί αριθμοί έχουν ακέραιες τιμές.

✓ Ένας τέταρτος κβαντικός αριθμός, ο m_s , ο κβαντικός αριθμός σπιν, καθορίζει τον προσανατολισμό του σπιν του ηλεκτρονίου.

Ο κύριος κβαντικός αριθμός (n)

- Ο βασικός κβαντικός αριθμός είναι ένας ακέραιος αριθμός που καθορίζει το συνολικό μέγεθος και την ενέργεια ενός τροχιακού.
- Οι πιθανές τιμές του είναι $n = 1, 2, 3, \dots$ κ.ο.κ.
- Για το άτομο του υδρογόνου, η ενέργεια ενός ηλεκτρονίου σε τροχιακό με κβαντικό αριθμό n δίνεται από την εξίσωση:

$$E_n = -2.18 \times 10^{-18} \text{ J} \left(\frac{1}{n^2} \right), (n=1, 2, 3)$$



Ο γωνιακός κβαντικός αριθμός (l)

- Ο γωνιακός κβαντικός αριθμός είναι ένας ακέραιος αριθμός που καθορίζει το σχήμα του τροχιακού. Οι πιθανές τιμές του l είναι $0, 1, 2, \dots, n - 1$.

Value of l	Letter Designation
$l = 0$	s
$l = 1$	p
$l = 2$	d
$l = 3$	f

Ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός (m_l)

- Ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός είναι ένας ακέραιος αριθμός που καθορίζει τον προσανατολισμό του τροχιακού.
- Οι πιθανές τιμές του m_l είναι οι ακέραιες τιμές (συμπεριλαμβανομένου του μηδενός) που κυμαίνονται από $-l$ έως $+l$. Για παράδειγμα, εάν $l = 0$, τότε η μόνη πιθανή τιμή του m_l είναι το 0-αν $l = 1$, οι πιθανές τιμές του m_l είναι -1 , 0 και $+1$.

Ο κβαντικός αριθμός Spin (m_s)

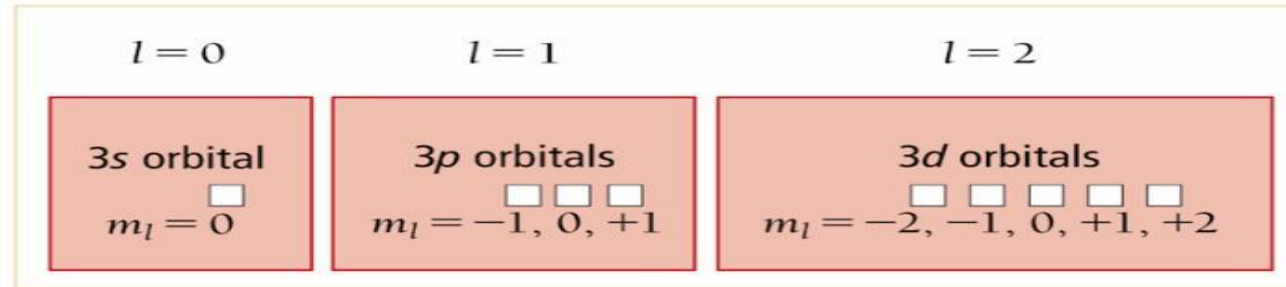
- Ο κβαντικός αριθμός σπιν προσδιορίζει τον προσανατολισμό του σπιν του ηλεκτρονίου.
- Ένα ηλεκτρόνιο δεν έχει περισσότερο ή λιγότερο σπιν από ένα άλλο - όλα τα ηλεκτρόνια έχουν την ίδια ποσότητα σπιν.
- Ο προσανατολισμός του σπιν του ηλεκτρονίου είναι κβαντισμένος, με δύο μόνο δυνατότητες: σπιν προς τα πάνω ($m_s = +1/2$) και σπιν προς τα κάτω ($m_s = -1/2$).

Τα τροχιακά στις 3 πρώτες στοιβάδες

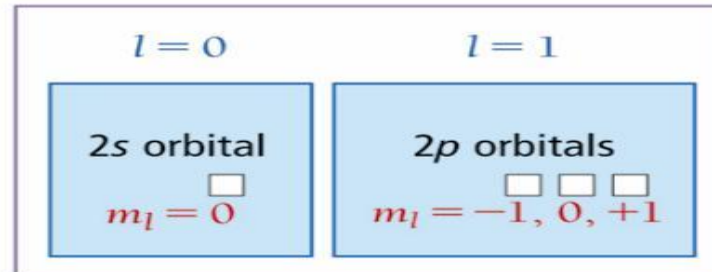
Principal level
(specified by n)

Sublevel
(specified by l)

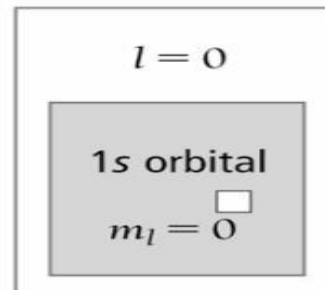
$n = 3$



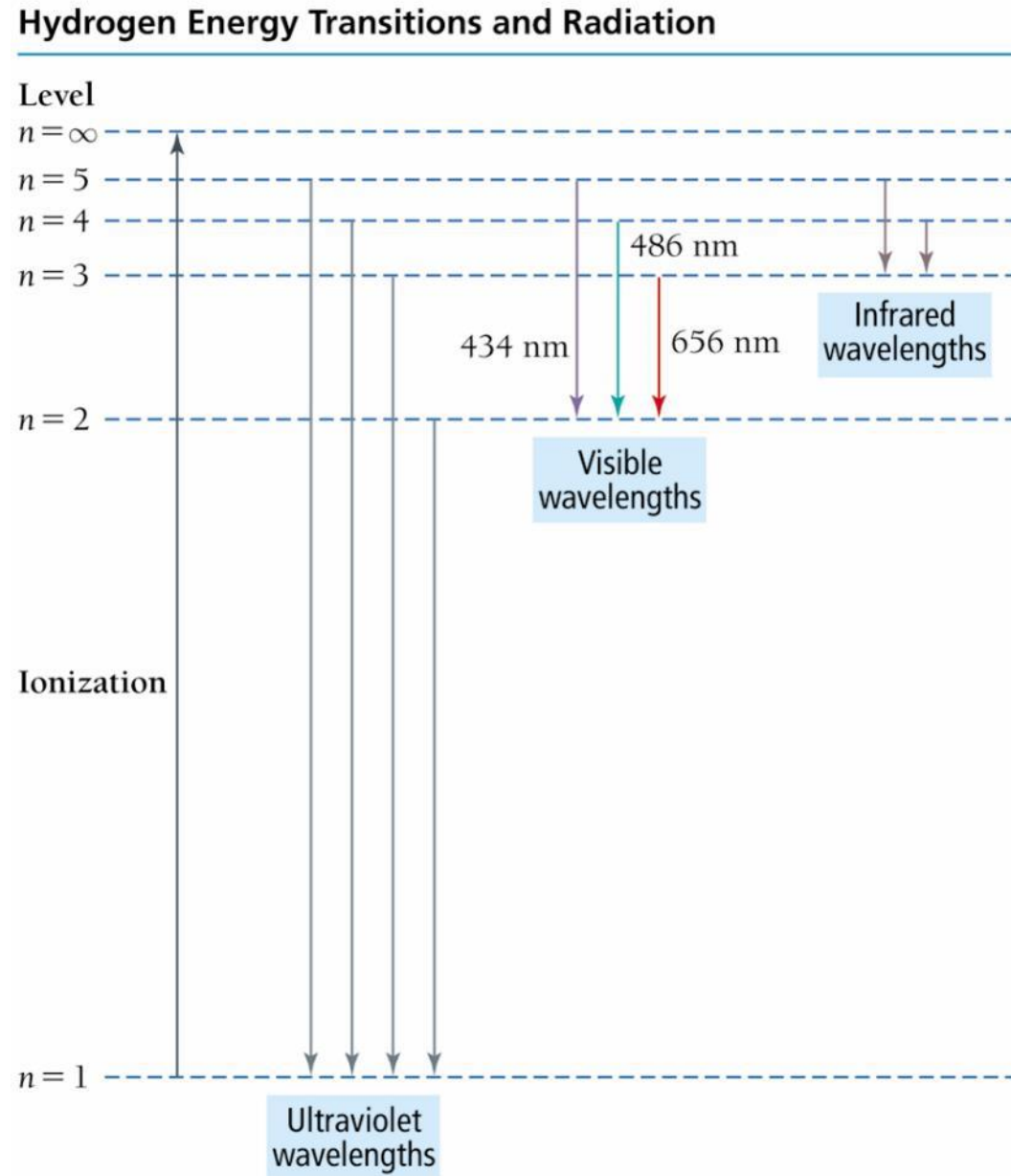
$n = 2$



$n = 1$



Ενεργειακές Μεταπτώσεις του Υδρογόνου

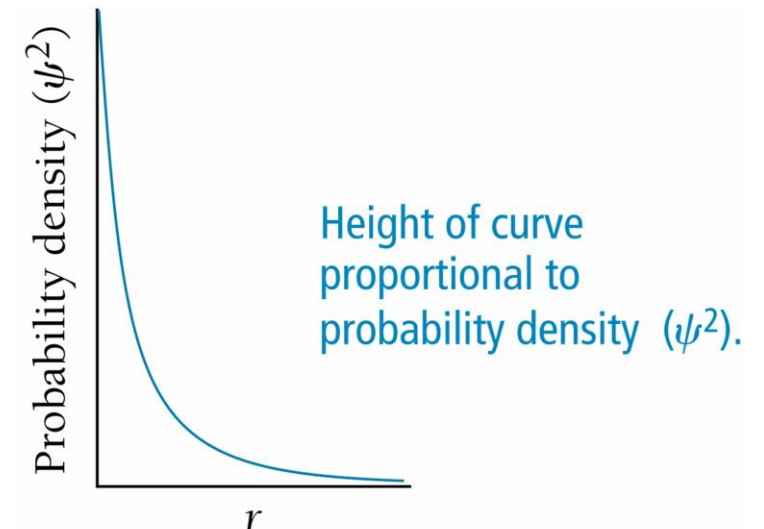
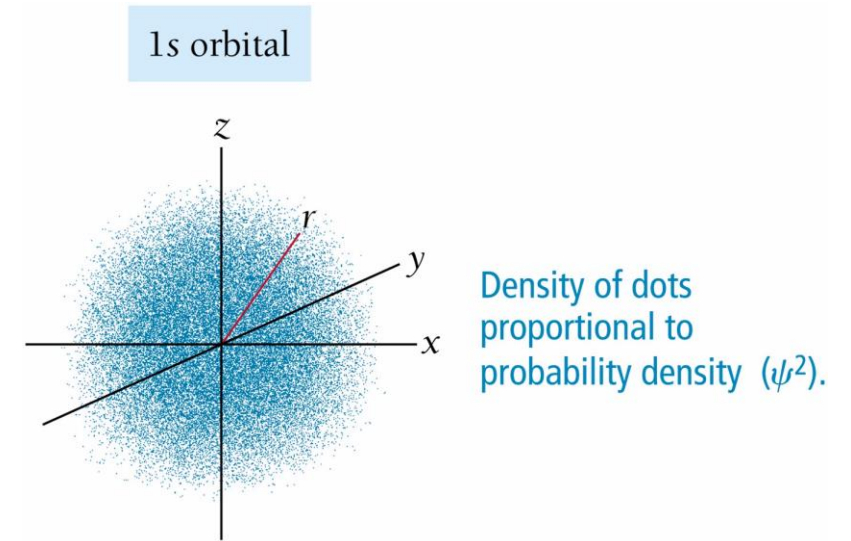


Το τροχιακό 1s

- Το τροχιακό με τη χαμηλότερη ενέργεια είναι το σφαιρικά συμμετρικό τροχιακό 1s
- Τρισδιάστατη απεικόνιση της κυματοσυνάρτησης στο τετράγωνο (Ψ^2), η οποία αντιπροσωπεύει την πυκνότητα πιθανότητας, την πιθανότητα (ανά μονάδα όγκου) να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε ένα σημείο του χώρου

$$\Psi^2 = \text{πιθανότητα πυκνότητας} = \frac{\text{πιθανότητα}}{\text{μοναδα όγκου}}$$

- Το μέγεθος του ψ^2 σε αυτό το διάγραμμα είναι ανάλογο με την πυκνότητα των κουκκίδων

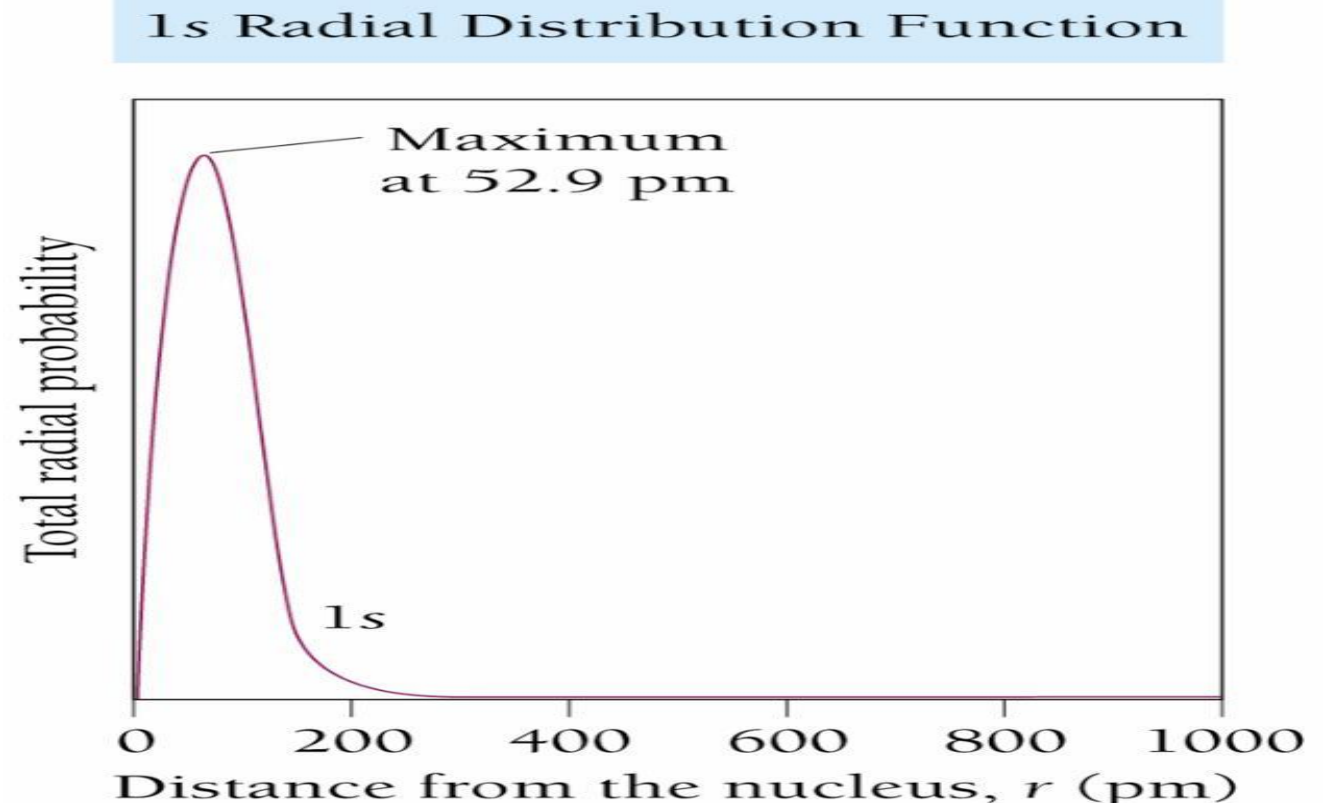


Ολική ακτινική πιθανότητα

- Η συνάρτηση ακτινικής κατανομής αντιπροσωπεύει τη συνολική πιθανότητα εύρεσης του ηλεκτρονίου μέσα σε μια λεπτή σφαιρική στιβάδα σε απόσταση r από τον πυρήνα

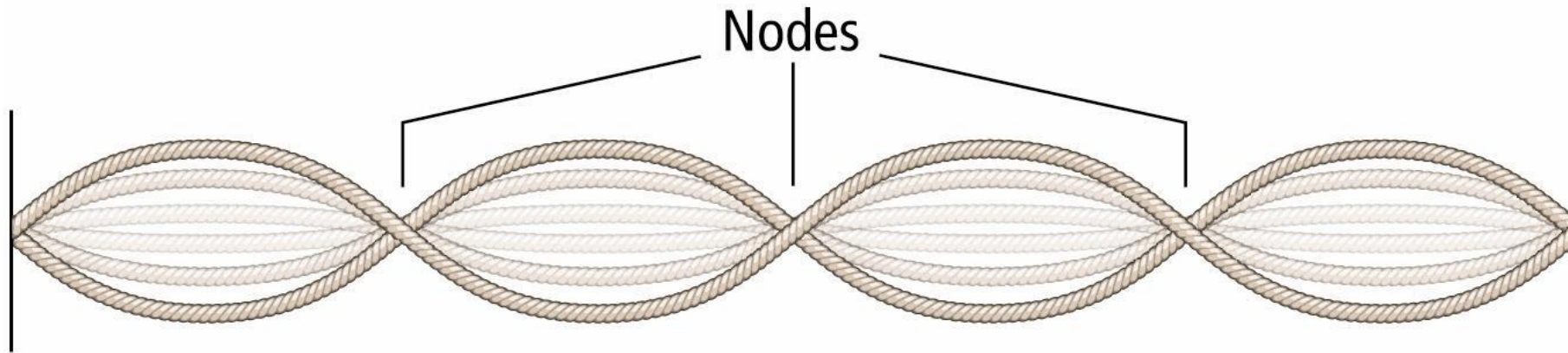
Ολική ακτινική πιθανότητα (με γνωστό r) = $\frac{\text{πιθανότητα}}{\text{μοναδα όγκου}} \times \text{όγκος σε στιβάδα } r$

1. Της πυκνότητας πιθανότητας (Ψ^2), η οποία είναι η πιθανότητα ανά μονάδα όγκου και μειώνεται όσο αυξάνεται το r - και
1. ο όγκος της λεπτής στοιβάδας, η οποία αυξάνεται όσο αυξάνεται το r .

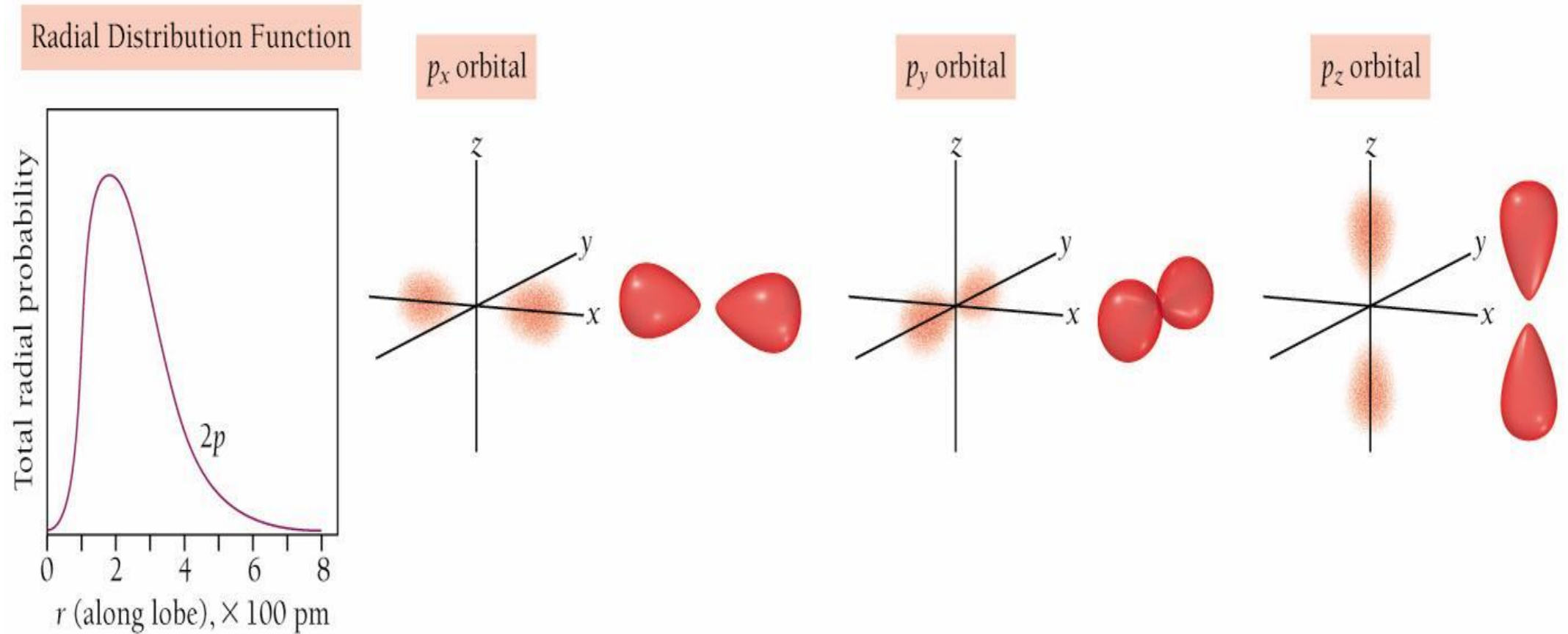


Η έννοια του κόμβου

- Ένας κόμβος είναι ένα σημείο όπου η κυματοσυνάρτηση (ψ), και επομένως η πυκνότητα πιθανότητας (ψ^2) και η συνάρτηση ακτινικής κατανομής, διέρχονται από το μηδέν.
- Η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε έναν κόμβο είναι μηδέν.
- Γενικά ένα τροχιακό έχει $n - 1$ ακτινικούς κόμβους



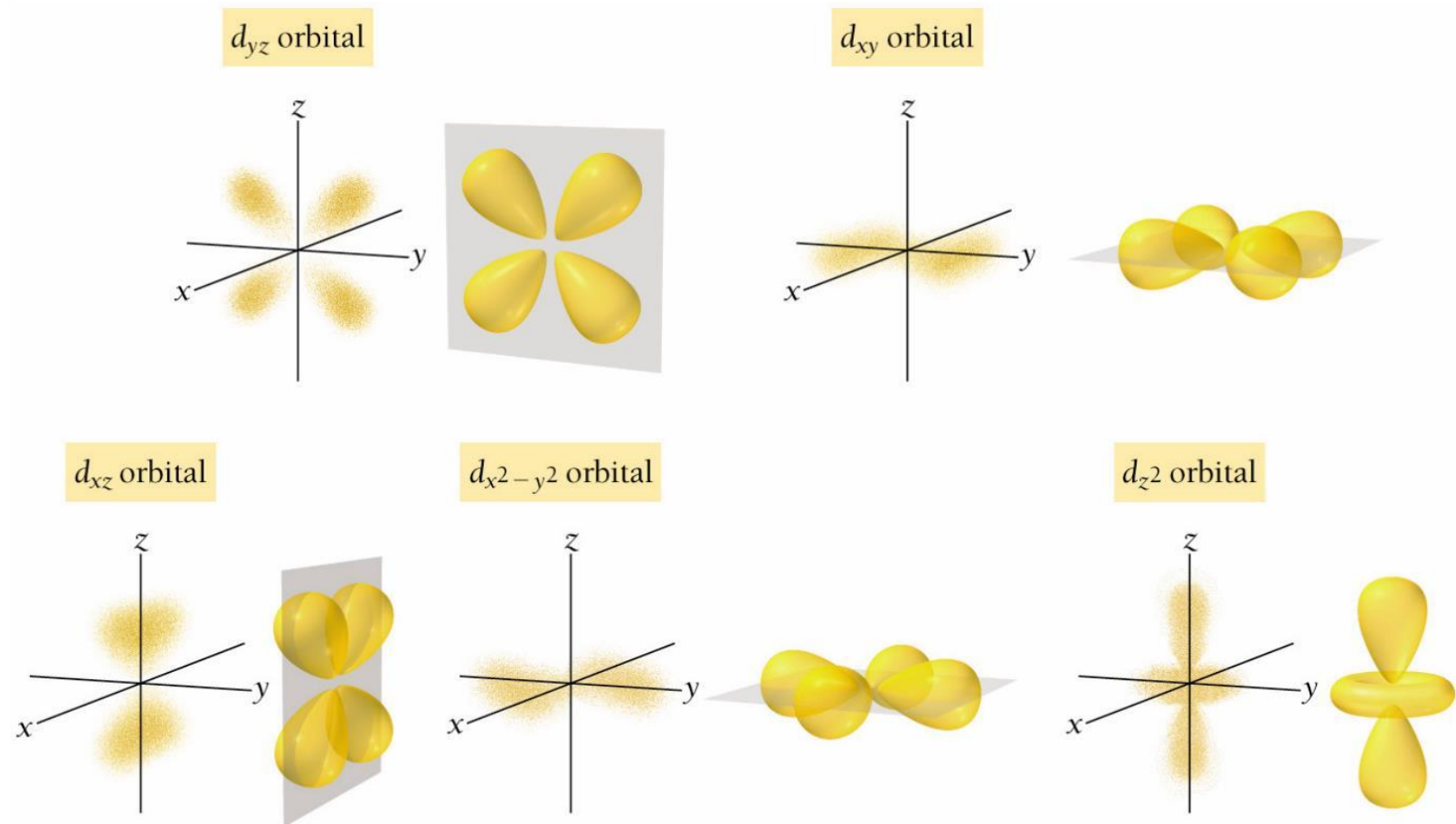
Τροχιακά p



- Κάθε κύρια στιβάδα με $n = 2$ ή μεγαλύτερο περιέχει τρία p τροχιακά ($m_l = -1, 0, +1$).

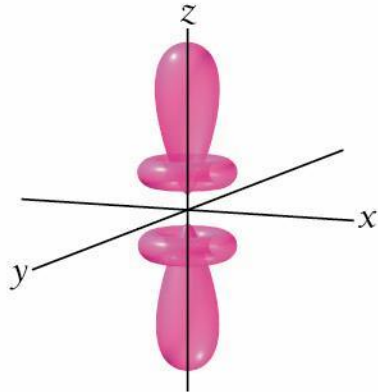
Τροχιακά d

- Κάθε κύρια στιβάδα με $n = 3$ ή μεγαλύτερο περιέχει πέντε d τροχιακά ($m_l = -2, -1, 0, +1, +2$).

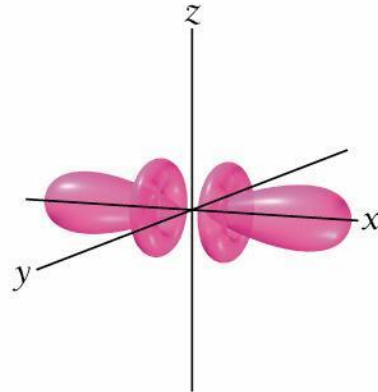


Τροχιακά f

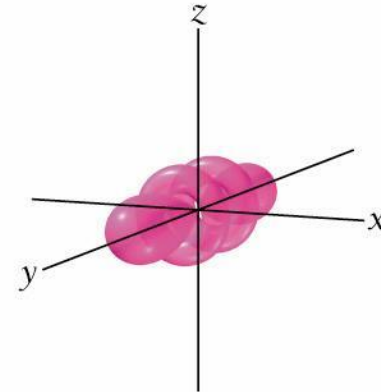
$f_{z^3 - \frac{3}{5}zr^2}$ orbital



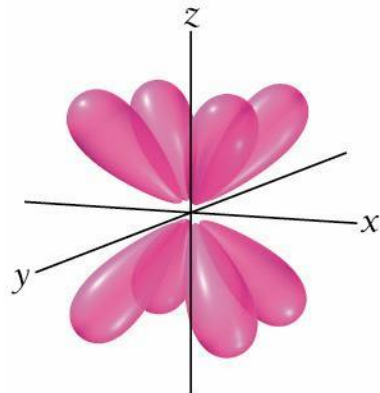
$f_{x^3 - \frac{3}{5}xr^2}$ orbital



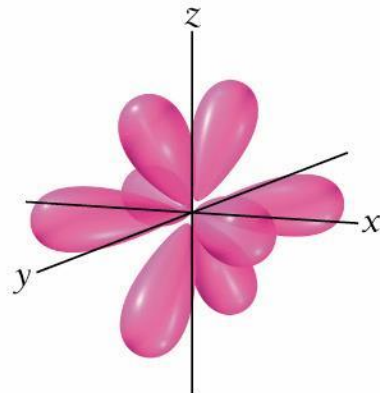
$f_{y^3 - \frac{3}{5}yr^2}$ orbital



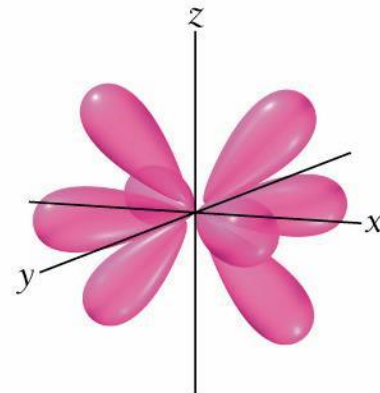
f_{xyz} orbital



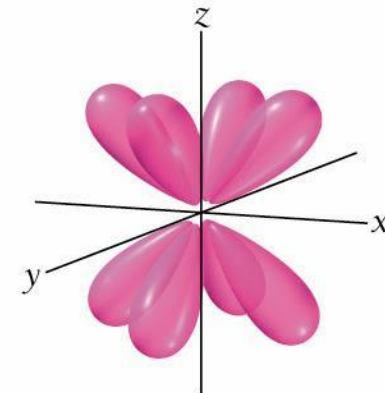
$f_{y(x^2 - z^2)}$ orbital



$f_{x(z^2 - y^2)}$ orbital



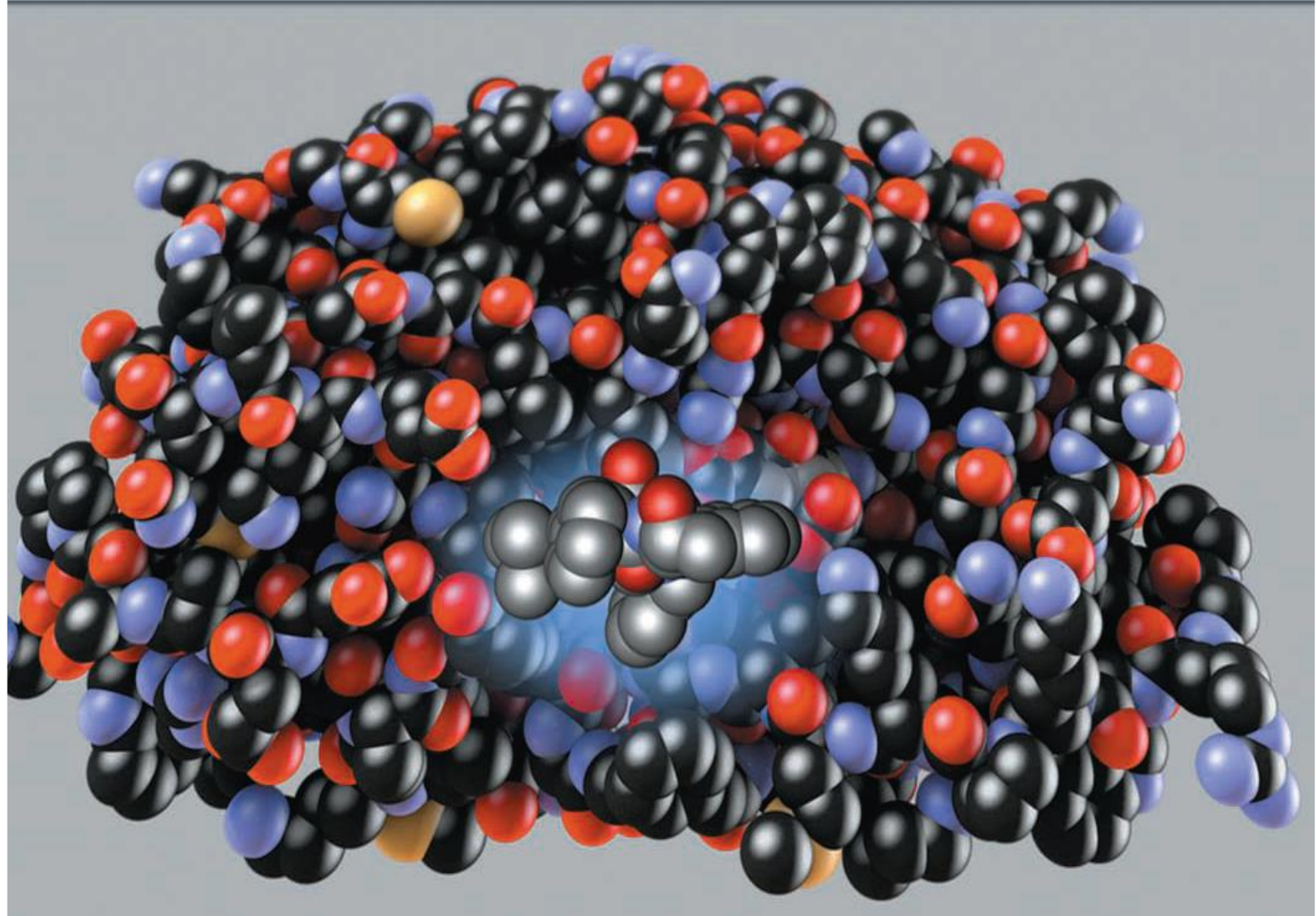
$f_{z(x^2 - y^2)}$ orbital



Χημικός Δεσμός και Δομή

Μοντέλα δεσμών και Φάρμακα για το AIDS

- Καθορισμός δομής της HIV-πρωτεάσης
- Η HIV-πρωτεάση είναι μια πρωτεΐνη που συντίθεται από τον ιό της ανθρώπινης ανοσοανεπάρκειας (HIV).
- Προκαλεί επίκτητη σύνδρομο ανοσοανεπάρκειας ή AIDS.
- **Θεωρίες δεσμού - μοντέλα**



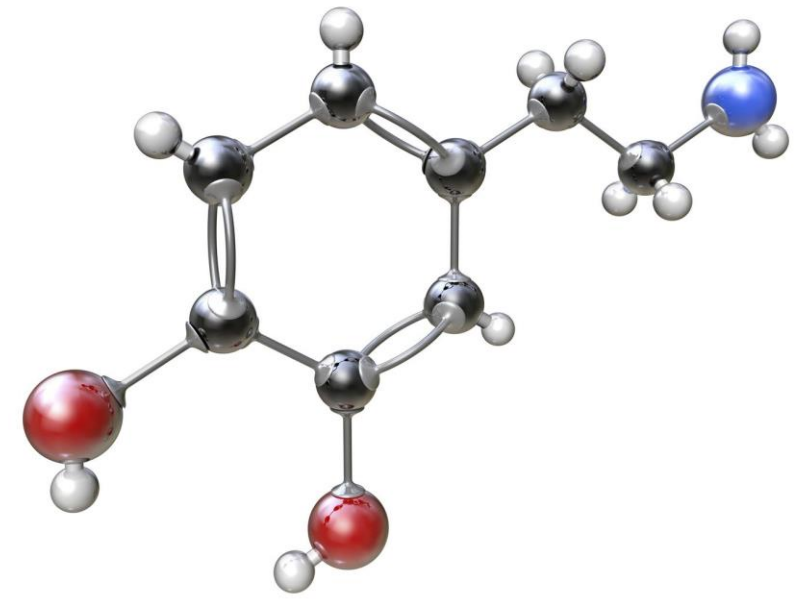
Θεωρίες δεσμού

- Εξηγούν πώς συνδέονται τα άτομα μεταξύ τους για να σχηματίσουν μόρια.
- Οι θεωρίες δεσμών προβλέπουν επίσης τα σχήματα των μορίων τα οποία με τη σειρά τους καθορίζουν πολλές από τις φυσικές και χημικές ιδιότητες των ενώσεων.
- **Μοντέλο Lewis**



G. N. Lewis

Γιατί εμφανίστηκαν οι χημικοί δεσμοί?



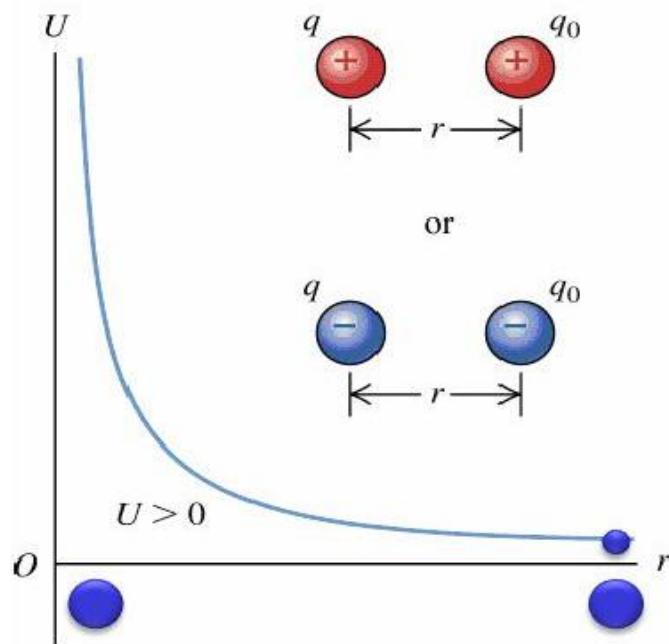
- Αν δεν υπήρχαν: Μόνο 91 είδη ουσιών
- *Οι χημικοί δεσμοί σχηματίζονται επειδή χαμηλώνουν την δυναμική ενέργεια μεταξύ των φορτισμένων σωματιδίων που συνιστούν τα άτομα*

Δυναμική ενέργεια δύο φορτισμένων σωματιδίων

$$E = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r}$$

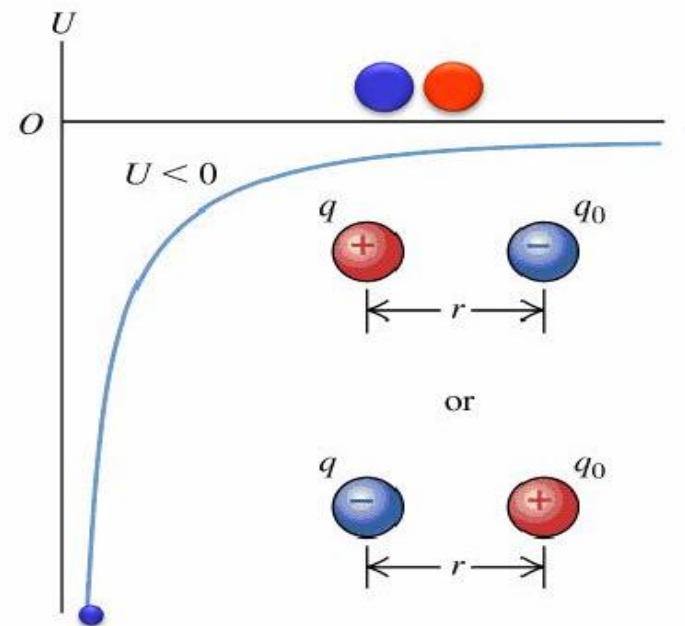
- ϵ_0 είναι μια σταθερά ($\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} \text{ C}^2/\text{J}\cdot\text{m}$)
- **Άπωση:** σε ομώνυμα φορτία η δυναμική ενέργεια είναι θετική και μειώνεται καθώς τα σωματίδια απομακρύνονται (αύξηση r)
- **Έλξη:** σε ετερόνυμα φορτία η δυναμική ενέργεια είναι αρνητική και γίνεται πιο αρνητική καθώς τα σωματίδια πλησιάζουν περισσότερο μεταξύ τους (μείωση r)

Όσο περισσότερο αρνητική η δυναμική ενέργεια, το σύστημα γίνεται περισσότερο σταθερό



(a) q, q_0 have same sign

Η άπωση μεταξύ **ομώνυμων** φορτίων αυξάνεται καθώς τα φορτισμένα σωματίδια πλησιάζουν. Όσο πιο κοντά φέρονται τόσο πρόσθετη ενέργεια απαιτείται.



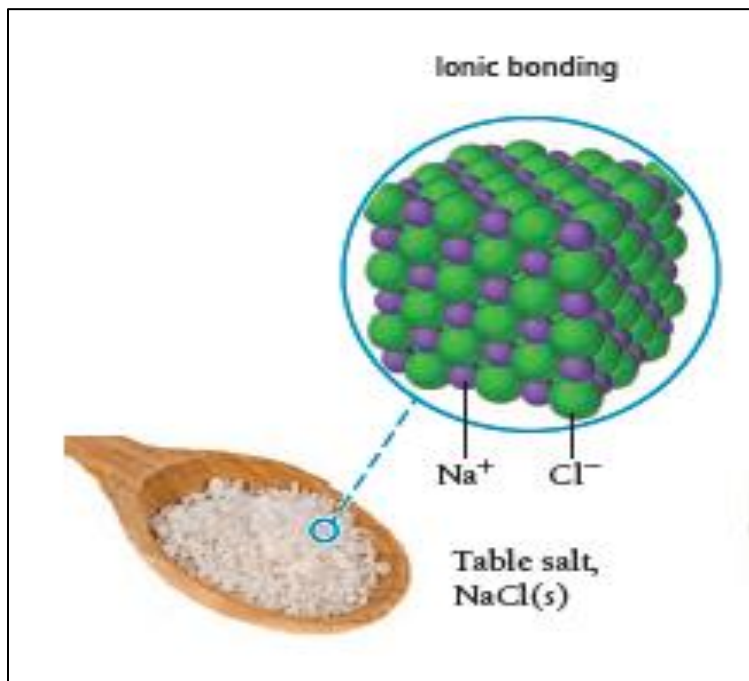
(b) q, q_0 have opposite signs

Η έλξη μεταξύ των **ετερώνυμων** φορτισμένων σωματιδίων αυξάνεται καθώς τα σωματίδια πλησιάζουν μεταξύ τους.

Χημικός δεσμός

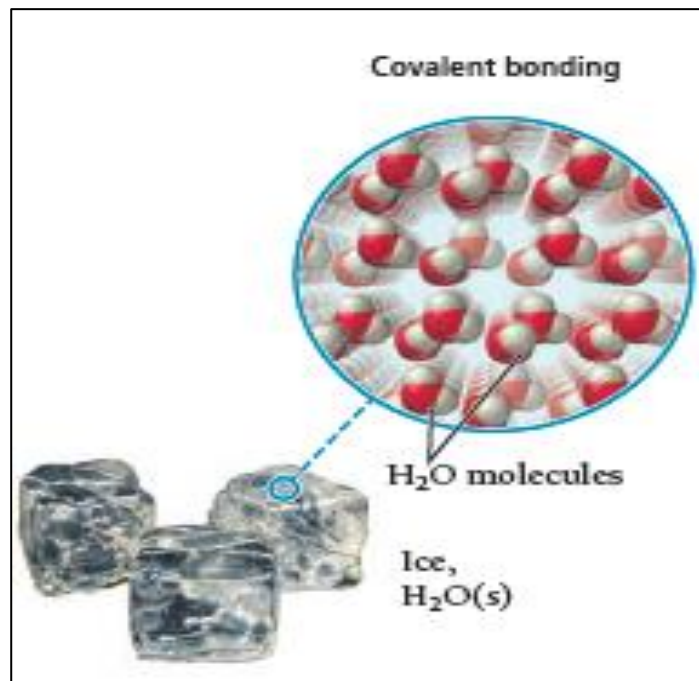
- Ένας χημικός δεσμός σχηματίζεται όταν η δυναμική ενέργεια των συνδεδεμένων ατόμων είναι μικρότερη από την δυναμική ενέργεια των επιμέρους ατόμων
- Οι αλληλεπιδράσεις:
 - Άπωση πυρήνα-πυρήνα
 - Άπωση ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου
 - Έλξη πυρήνα-ηλεκτρονίου

Τύποι δεσμών



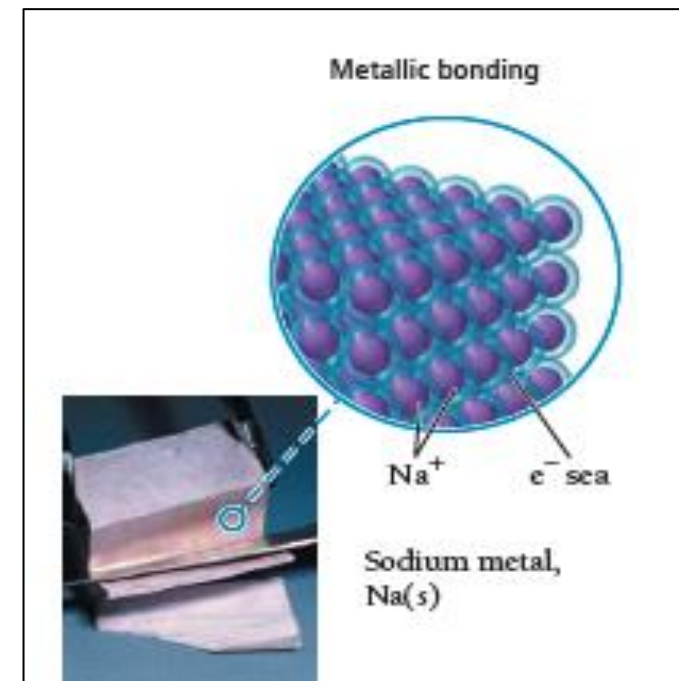
Ιοντικός δεσμός

- Μέταλλα με αμέταλλα
- Μεταφέρονται ηλεκτρόνια



Ομοιοπολικός δεσμός

- Αμέταλλα με αμέταλλα
- Μοιράζονται ηλεκτρόνια



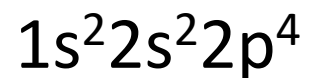
Μεταλικός δεσμός

- Μέταλλα με μέταλλα
- Συγκεντρώνονται ηλεκτρόνια

Αναπαράσταση ηλεκτρονίων σθένους με κουκίδες

- Ηλεκτρόνια σθένους: ηλεκτρόνια που βρίσκονται στο εξωτερικό επίπεδο βασικής ενέργειας, συγκρατούνται χαλαρά, μεταφορά ή μοίρασμα ηλεκτρονίων
- Δομή Lewis: τα ηλεκτρόνια σθένους αναπαρίστώνται ως κουκίδες που περιβάλλουν το σύμβολο του στοιχείου

Ηλεκτρονική διαμόρφωση οξυγόνου



6 ηλεκτρόνια σθένους

Δομή Lewis



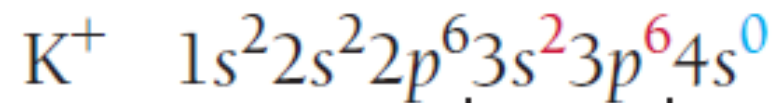
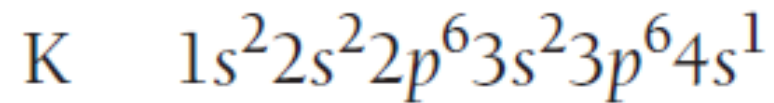
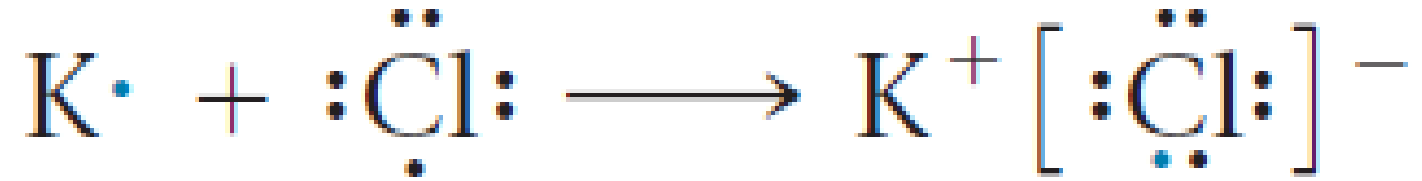
6 κουκίδες που αναπαριστούν τα ηλεκτρόνια σθένους

Δομές Lewis



Άτομα με 8 ηλεκτρόνια σθένους έχουν οκτώ κουκίδες, μια **οκτάδα**

Ιοντικός Δεσμός και Μεταφορά ηλεκτρονίου

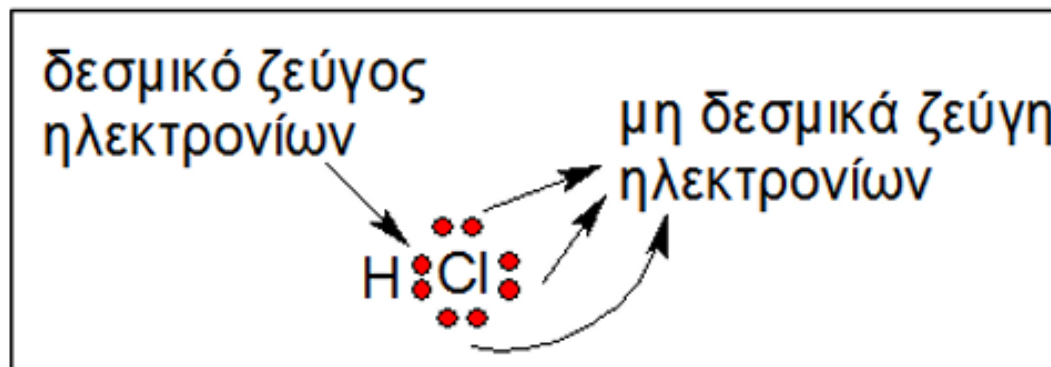


Octet in previous level

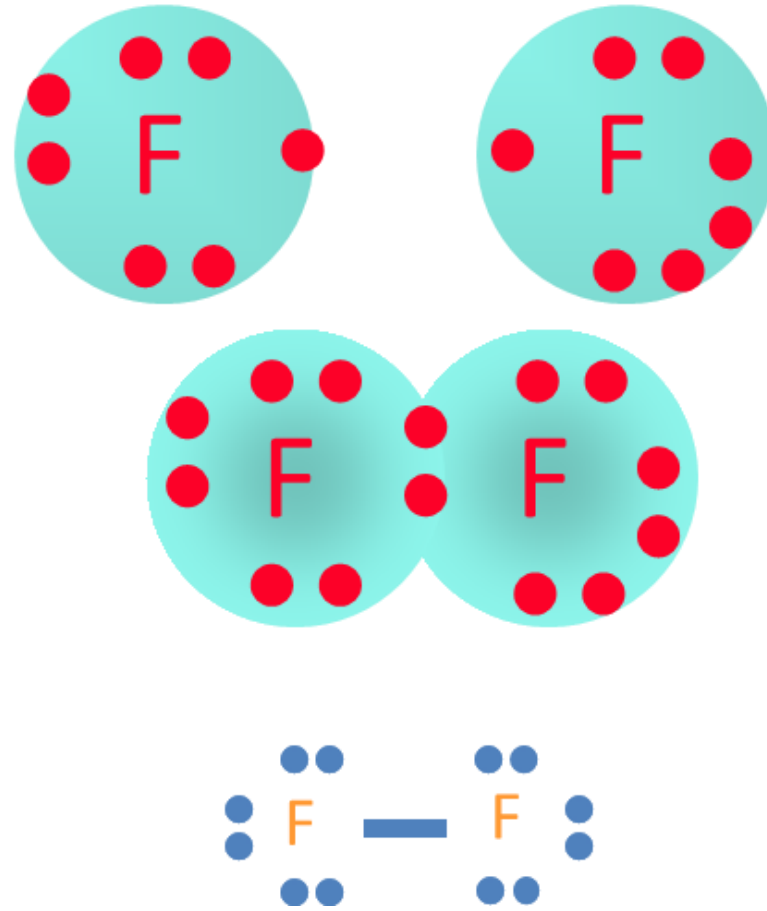
Ομοιοπολικός Δεσμός:

Δεσμικά ηλεκτρόνια και μονήρη ζεύγη ηλεκτρονίων

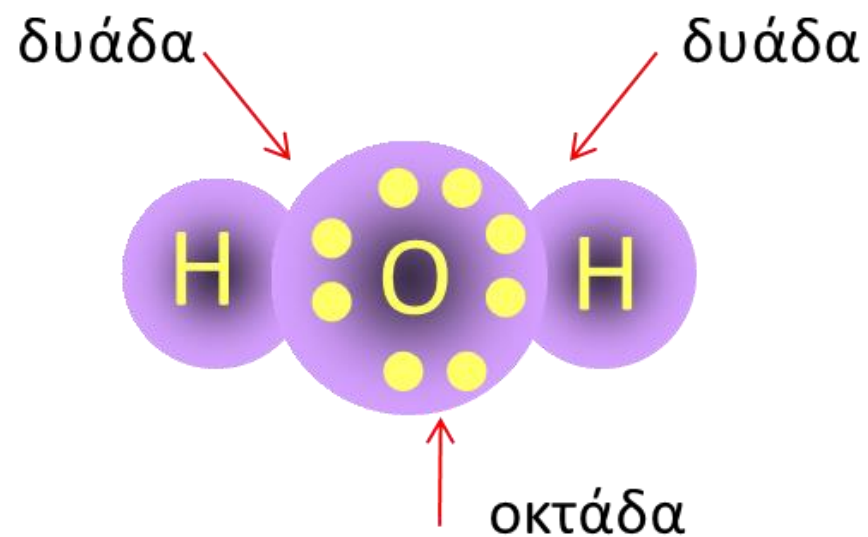
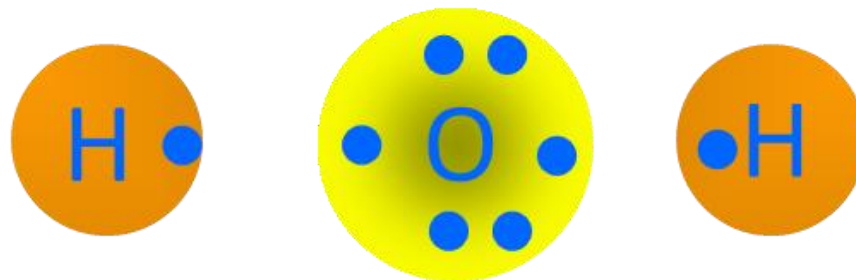
- Με τον ομοιοπολικό δεσμό τα άτομα διαμοιράζονται τα ζεύγη ηλεκτρονίων για να επιτύχουν μια «οκτάδα»
- Ένα ζεύγος ηλεκτρονίων που διαμοιράζεται μεταξύ 2 ατόμων λέγεται δεσμικό ζεύγος
- Ένα ζεύγος που συνδέεται με ένα μόνο άτομο (δεν εμπλέκεται σε δεσμό) ονομάζεται μονήρες ζεύγος.



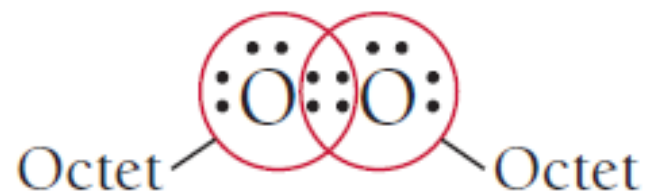
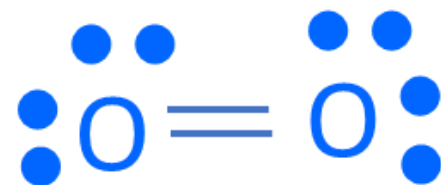
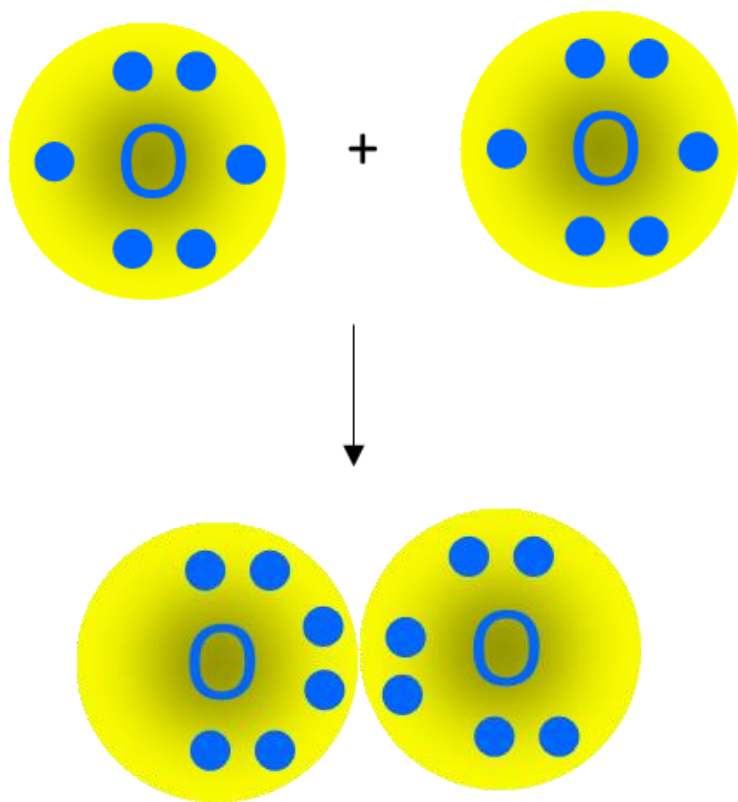
Απλοί Ομοιοπολικοί δεσμοί (1/2)



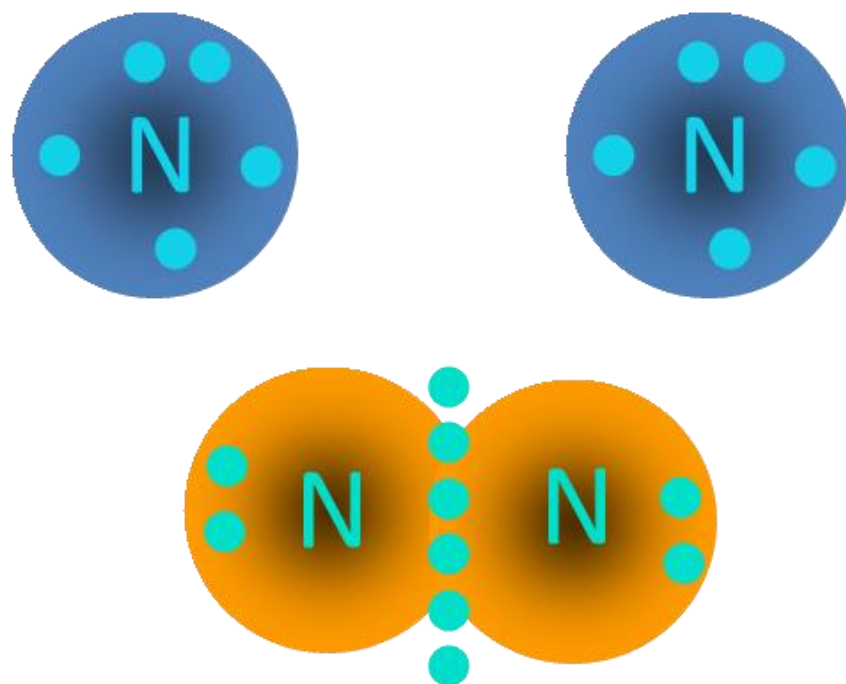
Απλοί Ομοιοπολικοί δεσμοί (2/2)



Διπλοί ομοιοπολικοί δεσμοί

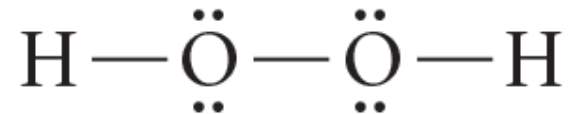
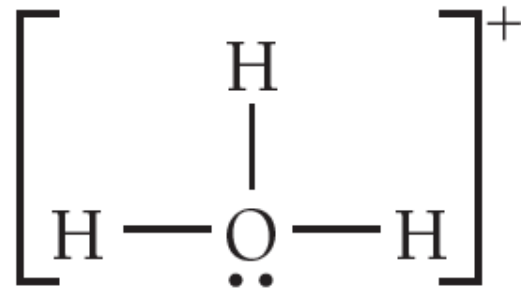
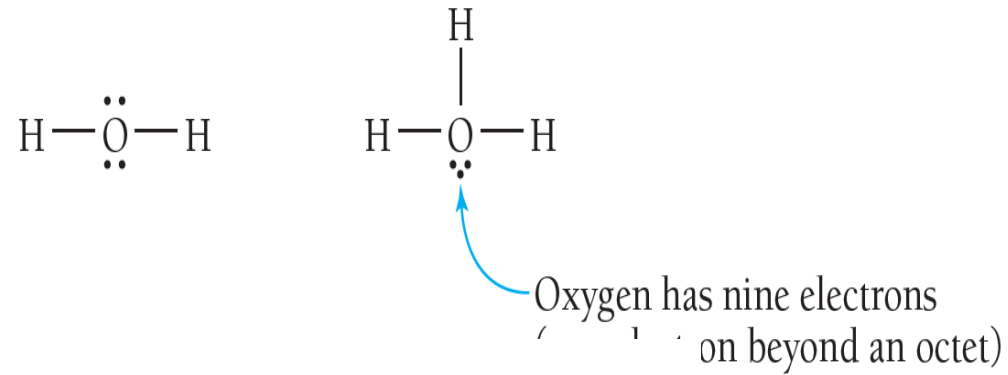


Τριπλός Ομοιοπολικός Δεσμός



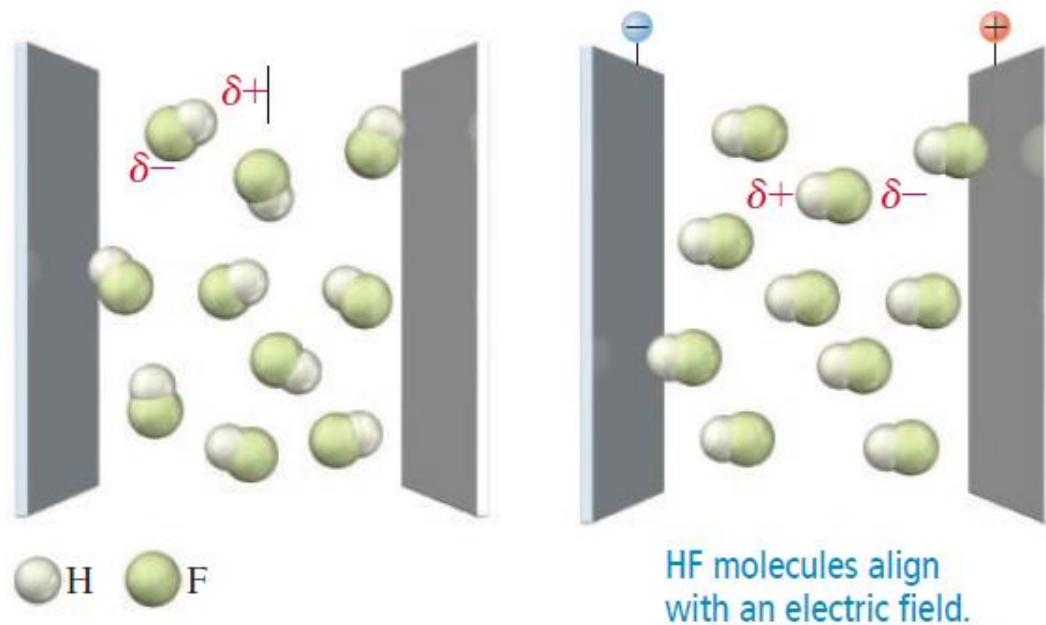
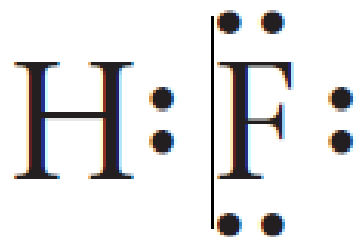
Ομοιοπολικός Δεσμός

Προβλέψεις από την Θεωρία κατά Lewis



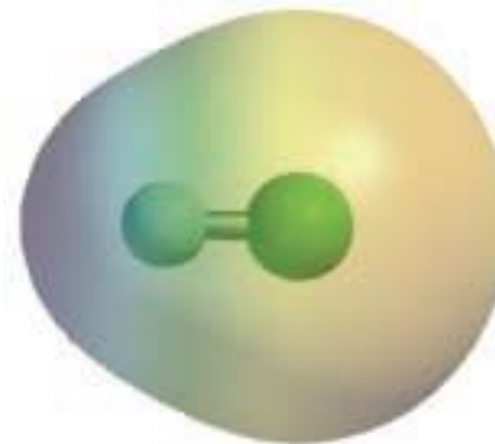
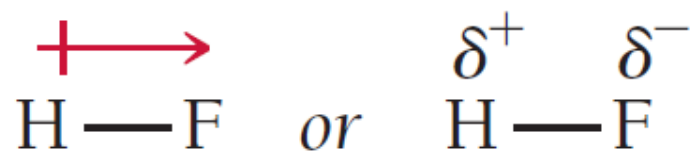
Πολικότητα Δεσμού

- Η ομοιοπολική σύνδεση μεταξύ ανομοίων ατόμων έχει ως αποτέλεσμα το άνισο μοίρασμα των ηλεκτρονίων



Πολικός Ομοιοπολικός Δεσμός

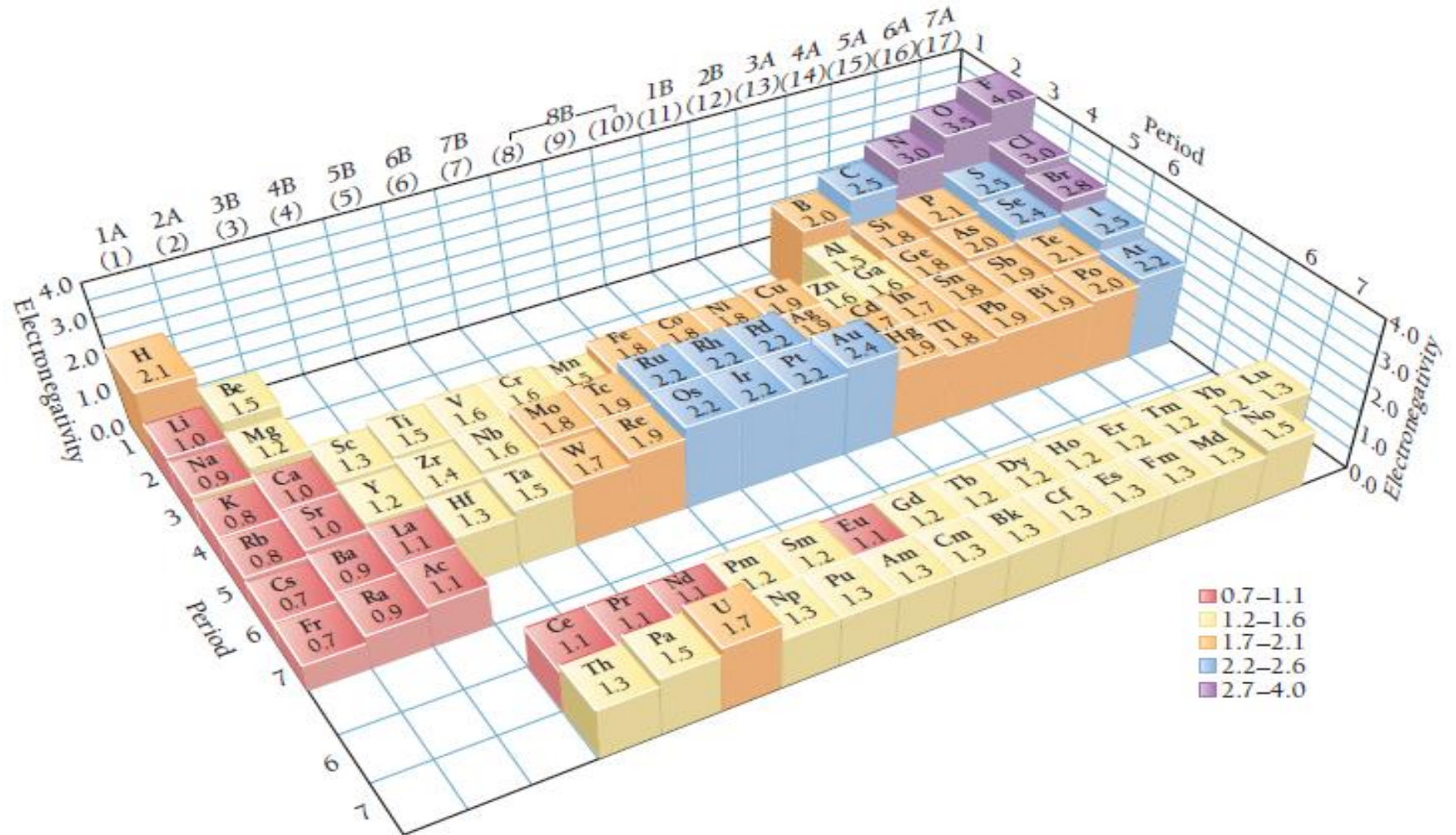
- Το άκρο με την μεγαλύτερη ηλεκτρονική πυκνότητα αποκτά ένα μερικό αρνητικό φορτίο (δ^-)
- Το άκρο με το έλλειμμα ηλεκτρονίων αποκτά ένα μερικό θετικό φορτίο (δ^+)
- Άνισος διαμοιρασμός ηλεκτρονίων
- Πολικός δεσμός



Ηλεκτραρνητικότητα

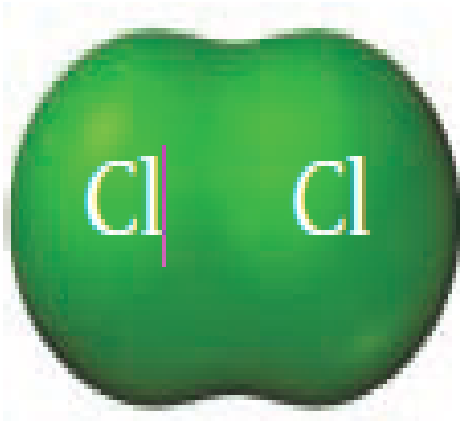
Η ικανότητα ενός ατόμου να έλκει e^- προς την πλευρά του σε ένα χημικό δεσμό

- Η ηλεκτραρνητικότητα σχετίζεται αντίστροφα με το μέγεθος του ατόμου-όσο μεγαλύτερο είναι το άτομο, τόσο μικρότερη είναι η ικανότητα να έλκει ηλεκτρόνια σε έναν χημικό δεσμό.

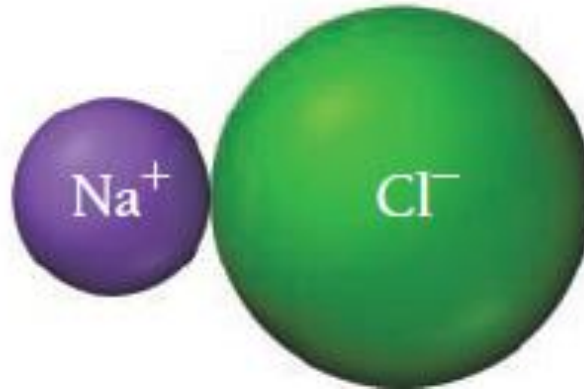


Βαθμός πολικότητας

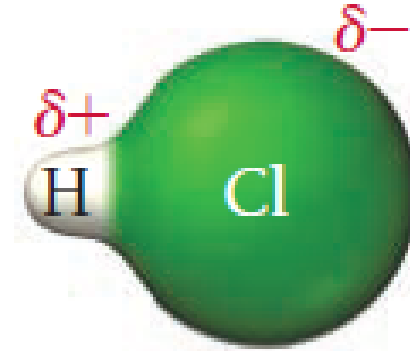
- Εξαρτάται από το διαφορά ηλεκτραρνητικότητας μεταξύ των δύο ατόμων του δεσμού.



Ομοιοπολικός δεσμος

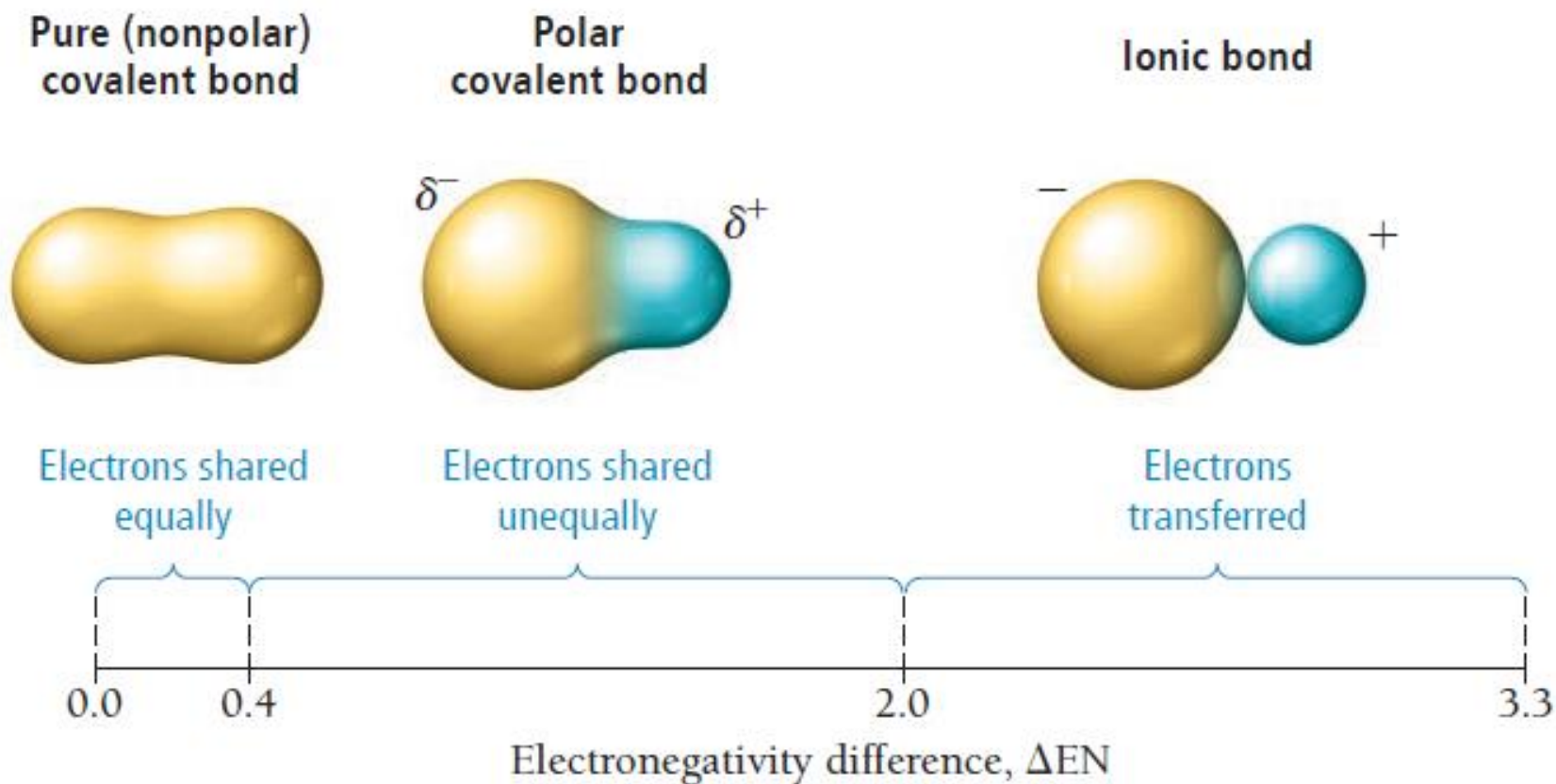


Ιοντικός δεσμος



Πολικός Ομοιοπολικός δεσμος

Διαφορά ηλεκτραρνητικότητας και τύπος δεσμού



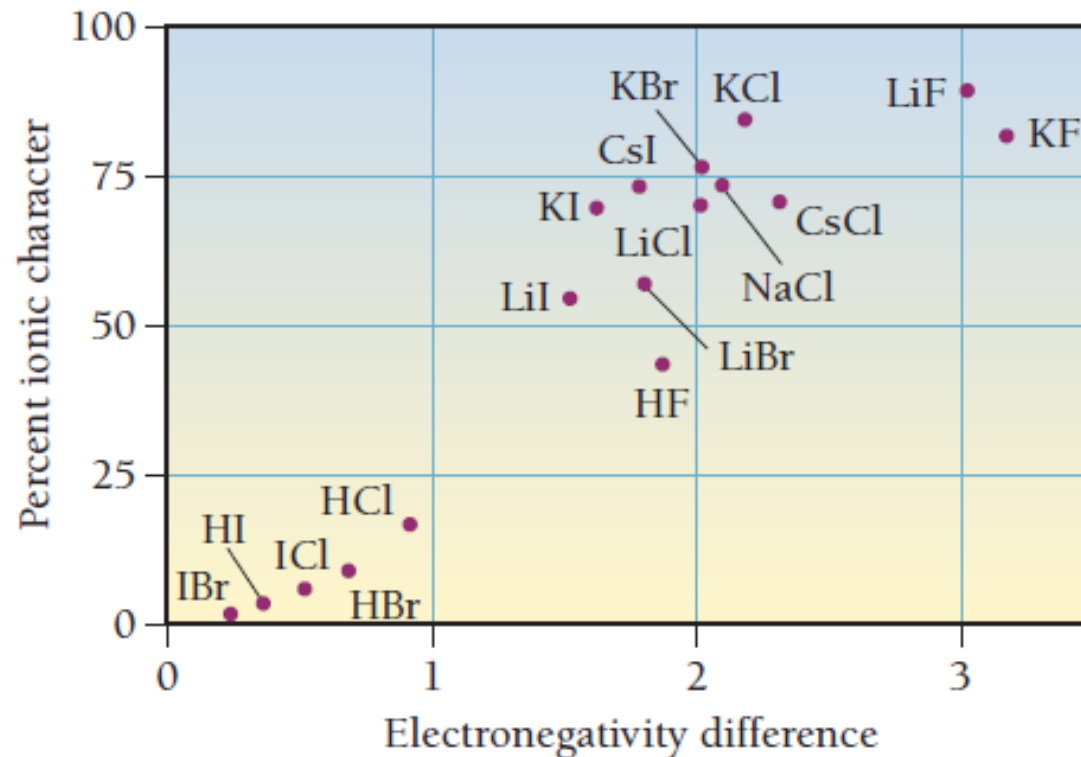
Διπολική ροπή δεσμού

- Η διπολική ροπή (μ) είναι ένας ποσοτικός τρόπος για να περιγραφεί η πολικότητα ενός δεσμού
- Εμφανίζεται οποιαδήποτε στιγμή υπάρχει διαχωρισμός αρνητικού θετικού φορτίου
 - Το μέγεθος της διπολικής ροπής δημιουργείται με το διαχωρισμό δύο σωματιδίων ίσων αλλά αντίθετων φορτίων q σε απόσταση r
 - $\mu = (q)(r)$
 - Μετράται σε Debyes, D
- Ένα δίπολο είναι ένα υλικό με θετικά και αρνητικά φορτισμένα άκρα

Molecule	ΔEN	Dipole Moment (D)
Cl_2	0	0
ClF	1.0	0.88
HF	1.9	1.82
LiF	3.0	6.33

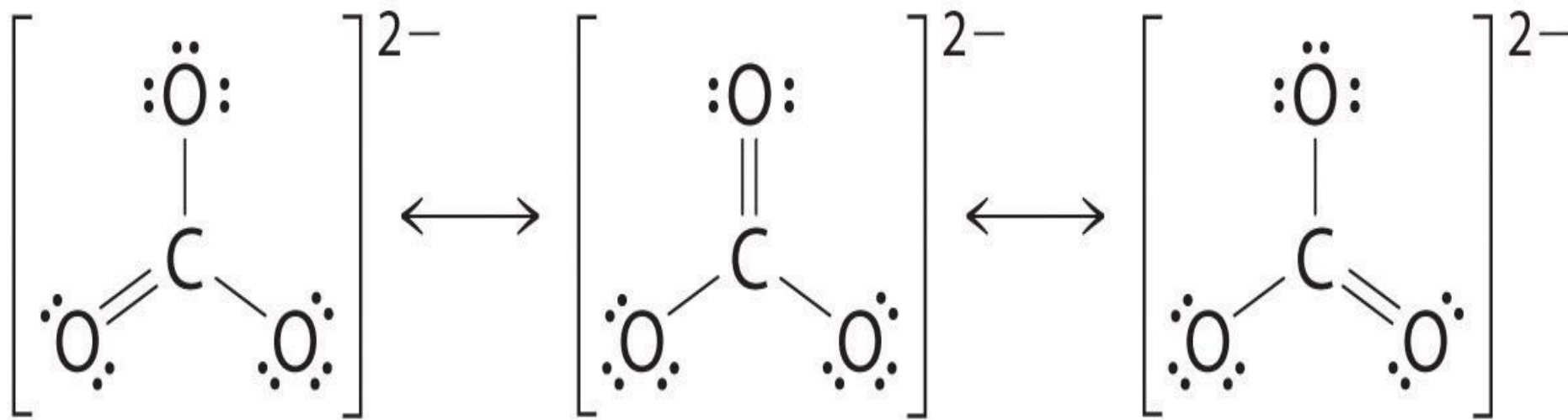
Βαθμός μεταφοράς ηλεκτρονίου

$$\text{Εκατοστιαίος ιοντικός χαρακτήρας} = \frac{\text{Μετρηθείσα διπολική ροπή δεσμού}}{\text{Διπολική ροπή αν το ηλεκτρόνιο μεταφέρεται πλήρως}} \times 100$$



Συντονισμός

- Όταν υπάρχουν περισσότερες από μία δομές κατά Lewis σε ένα μόριο που διαφέρουν μόνον στην θέση των ηλεκτρονίων, αυτές οι δομές καλούνται δομές συντονισμού

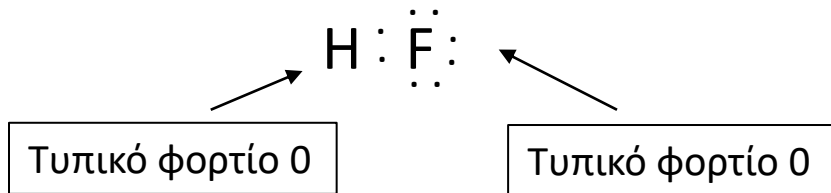


Απεντόπιση και Κανόνες για τις δομές συντονισμού

1. Κάθε δομή συντονισμού ακολουθεί τους κανόνες αναγραφής των δομών Lewis.
2. Ο υβριδισμός της δομής πρέπει να παραμένει ο ίδιος.
3. Ο σκελετός της δομής δεν μπορεί να μεταβληθεί. Μόνο τα ηλεκτρόνια μετακινούνται.
4. Οι δομές συντονισμού πρέπει να έχουν τον ίδιο αριθμό μονήρων ζευγών.
5. Οι δομές συντονισμού θα πρέπει να έχουν τον ίδιο αριθμό ηλεκτρονίων, δεν προσθέτουμε ή αφαιρούμε ηλεκτρόνια (ελέγχουμε τον αριθμό ηλεκτρονίων απλά μετρώντας τα).

Τυπικό φορτίο

- Το τυπικό φορτίο είναι ένα πλασματικό φορτίο που αποδίδεται σε κάθε άτομο σε μια δομή Lewis και βοηθάει να διακρίνουμε μεταξύ ανταγωνιστικών δομών Lewis.



Τυπικό φορτίο = αριθμός ηλεκτρονίων σθένους - (αριθμός ηλεκτρονίων μονήρων ζεύγων + $\frac{1}{2}$ αριθμός δεσμικών ηλεκτρονίων)

$$\text{Τυπικό φορτίο F} = 7 - [6 + \frac{1}{2} * (2)] = 0$$

Αριθμός
ηλεκτρονίων
σθένους για το F

Αριθμός ηλεκτρονίων
που έχει το F στη δομή
Lewis

$$\text{Τυπικό φορτίο H} = 1 - [0 + \frac{1}{2} * (2)] = 0$$

Αριθμός
ηλεκτρονίων
σθένους για το H

Αριθμός ηλεκτρονίων
που έχει το H στη δομή
Lewis

Κανόνες για τον υπολογισμό των τυπικών φορτίων

Η έννοια του τυπικού φορτίου είναι χρήσιμη επειδή μπορεί να μας βοηθήσει να διακρίνουμε μεταξύ ανταγωνιστικών σκελετικών δομών ή ανταγωνιστικών δομών συντονισμού.

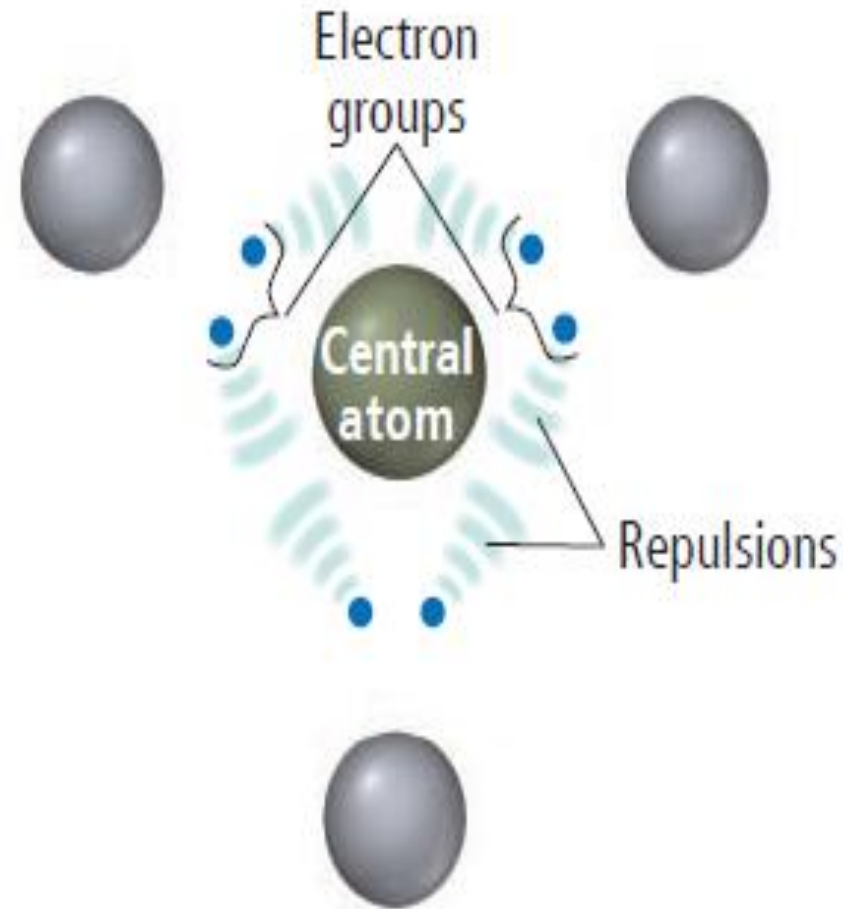
Γενικά, όταν υπολογίζουμε τα τυπικά φορτία, ισχύουν οι ακόλουθοι τέσσερις κανόνες:

1. Το άθροισμα όλων των τυπικών φορτίων σε ένα ουδέτερο μόριο πρέπει να είναι μηδέν.
2. Το άθροισμα όλων των τυπικών φορτίων σε ένα ιόν πρέπει να είναι ίσο με το φορτίο του ιόντος.
3. Τα μικρά (ή μηδενικά) τυπικά φορτία σε ξεχωριστά άτομα είναι καλύτερα από τα μεγάλα.
4. Όταν το τυπικό φορτίο δεν μπορεί να αποφευχθεί, το αρνητικό τυπικό φορτίο πρέπει να βρίσκεται στο πιο ηλεκτραρνητικό άτομο

	Structure A				Structure B			
	H	—	C ≡	N:	H	—	N ≡	C:
number of valence e [−]	1		4	5	1		5	4
−number of nonbonding e [−]	−0		−0	−2	−0		−0	−2
− $\frac{1}{2}$ (number of bonding e [−])	− $\frac{1}{2}$ (2)		− $\frac{1}{2}$ (8)	− $\frac{1}{2}$ (6)	− $\frac{1}{2}$ (2)		− $\frac{1}{2}$ (8)	− $\frac{1}{2}$ (6)
Formal charge	0		0	0	0		+1	−1

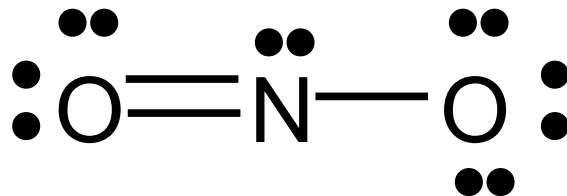
Η θεωρία VSEPR (valence shell electron pair repulsion)

- Η θεωρία άπωσης ηλεκτρονικών ζευγών στοιβάδας σθένους (VSEPR) βασίζεται στην απλή ιδέα ότι οι ομάδες ηλεκτρονίων - τις οποίες ορίζουμε ως μονήρη ζεύγη, απλούς δεσμούς, πολλαπλούς δεσμούς, και ακόμη και μεμονωμένα ηλεκτρόνια, απωθούνται μεταξύ τους μέσω δυνάμεων Coulomb.



Ομάδες Ηλεκτρονίων

- Δομή κατά Lewis προβλέπει τον αριθμό των ηλεκτρονικών ζευγών σθένους γύρω από τα κεντρικά άτομα
- Κάθε μονήρες ζεύγος ηλεκτρονίων αποτελεί μια ομάδα ηλεκτρονίων σε ένα κεντρικό άτομο
- Κάθε δεσμός αποτελεί μια ομάδα ηλεκτρονίων σε ένα κεντρικό άτομο
 - Ανεξάρτητα εάν είναι απλός, διπλός, ή τριπλός



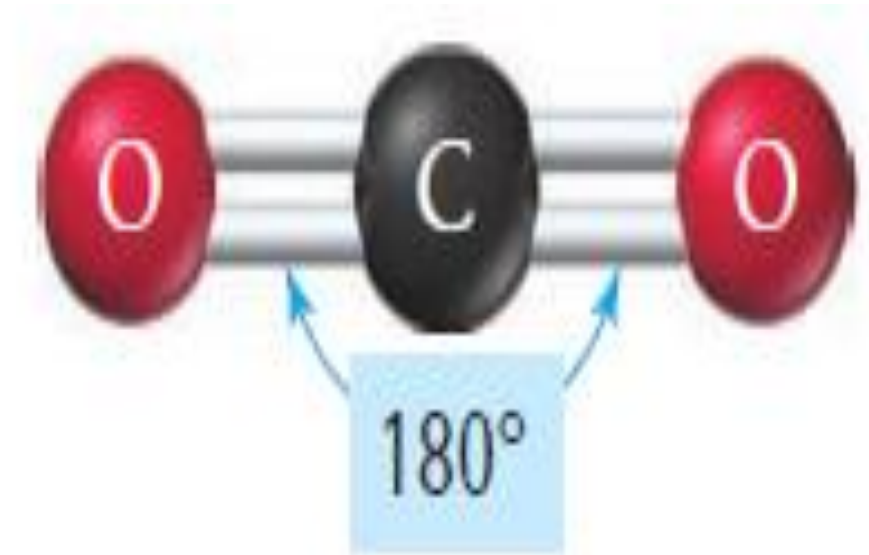
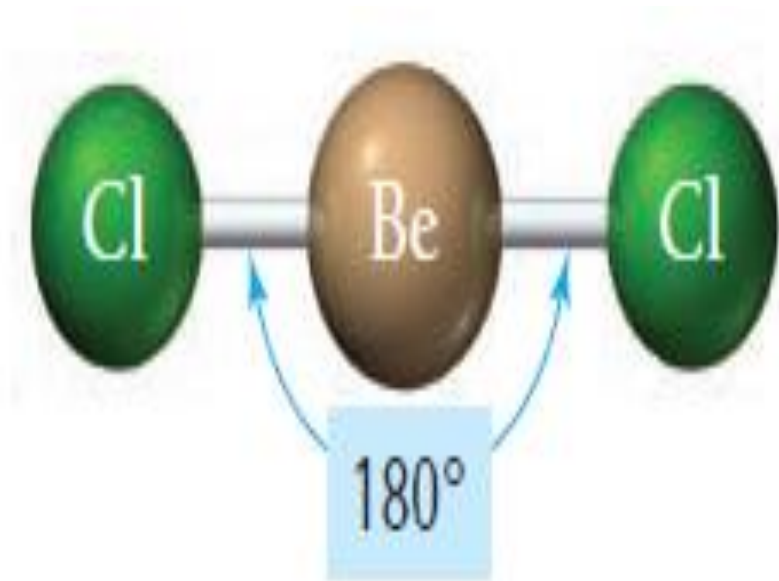
Υπαρχουν τρεις ομάδες ηλεκτρονίων στο N

Ένα μονήρες ζεύγος

Ένας απλός δεσμός

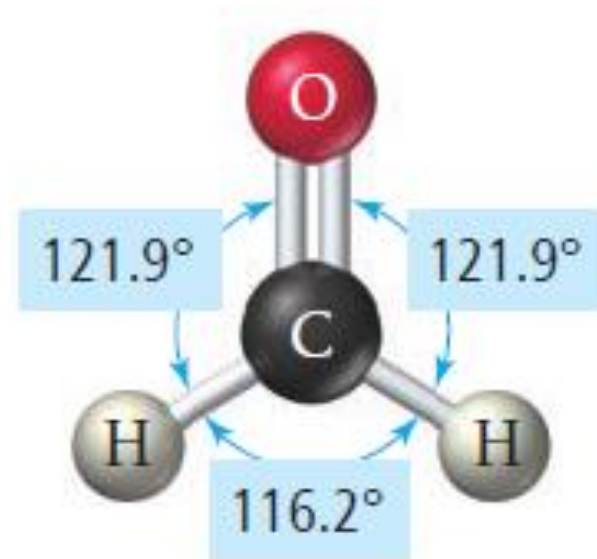
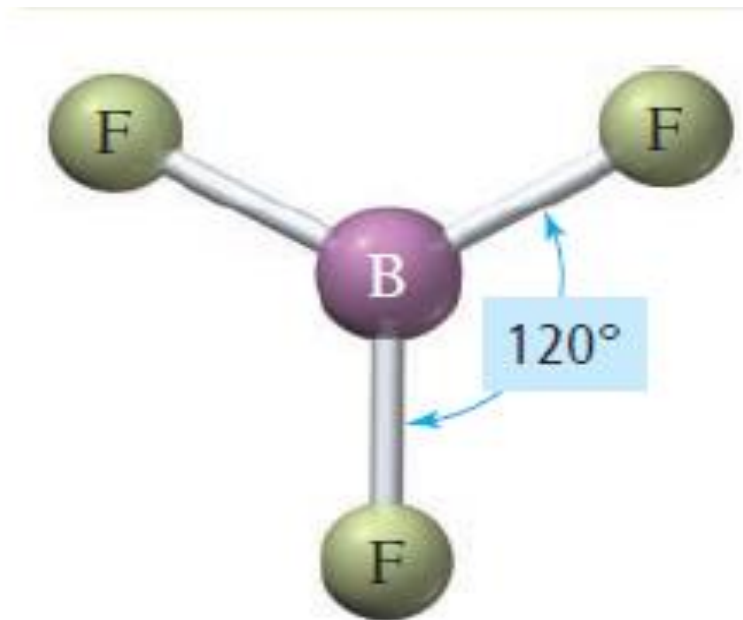
Ένας διπλός δεσμός

Δύο ομάδες ηλεκτρονίων: Γραμμική Γεωμετρία



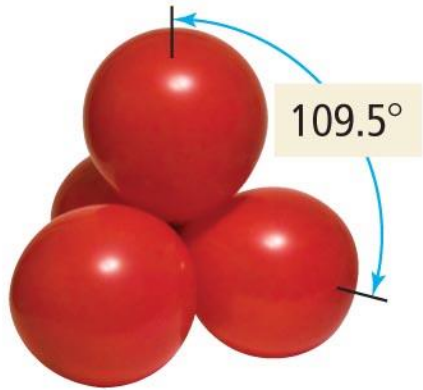
Τρεις ομάδες ηλεκτρονίων: Τριγωνική Επίπεδη γεωμετρία

- Τρεις ομάδες ηλεκτρονίων μπορούν να μεγιστοποιήσουν το διαχωρισμό τους υποθέτοντας γωνίες δεσμών 120° σε ένα επίπεδο - μια τριγωνική επίπεδη γεωμετρία.

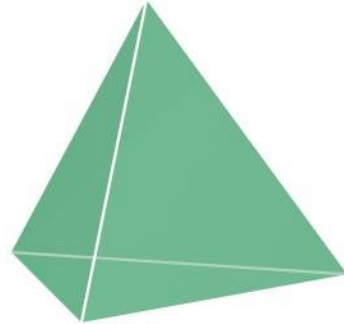


Τέσσερις ομάδες ηλεκτρονίων: Τετραεδρική γεωμετρία

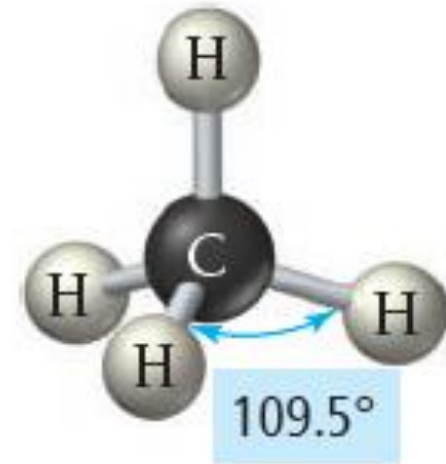
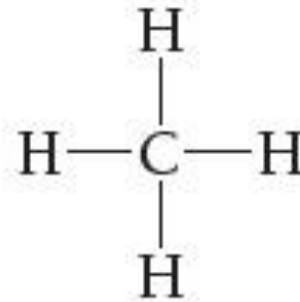
- Τετραεδρική γεωμετρία με γωνίες $109,5^\circ$



Tetrahedral geometry

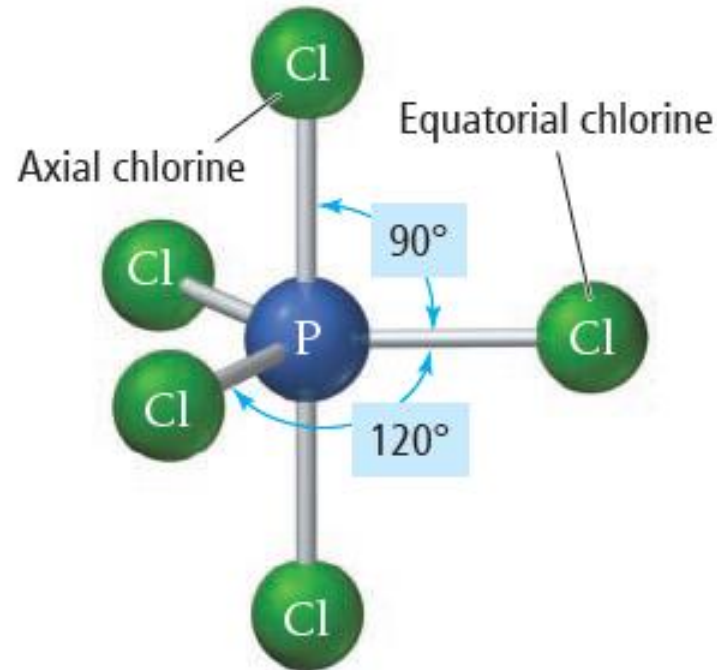
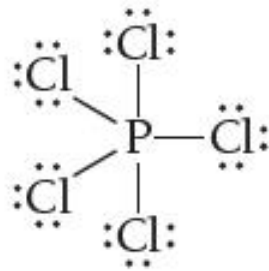


Tetrahedron



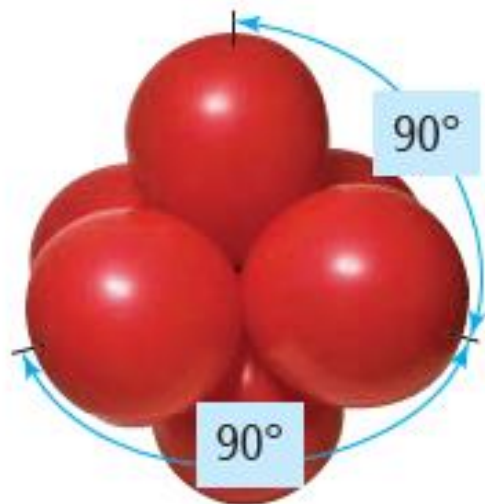
Πέντε ομάδες ηλεκτρονίων: γεωμετρία τριγωνικής διπυραμίδας

- Οι γωνίες μεταξύ των ισημερινών θέσεων (οι τρεις δεσμοί στο τριγωνικό επίπεδο) είναι 120° , ενώ η γωνία μεταξύ των αξονικών θέσεων (οι δύο δεσμοί σε κάθε πλευρά του τριγωνικού επιπέδου) και του τριγωνικού επιπέδου είναι 90° .



Έξι ομάδες ηλεκτρονίων: Οκταεδρική γεωμετρία

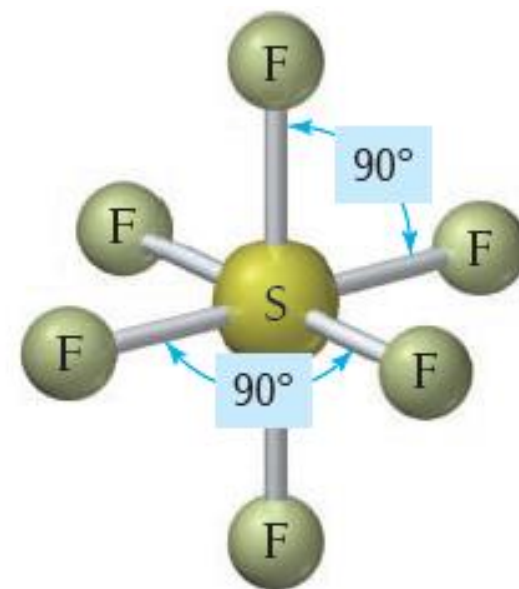
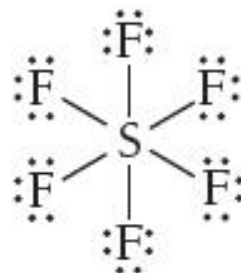
- Τέσσερις από τις ομάδες βρίσκονται σε ένα επίπεδο, με μια ομάδα πάνω από το επίπεδο και μία ομάδα κάτω από αυτό. Οι γωνίες σε αυτή τη γεωμετρία είναι όλες 90° .



Octahedral geometry



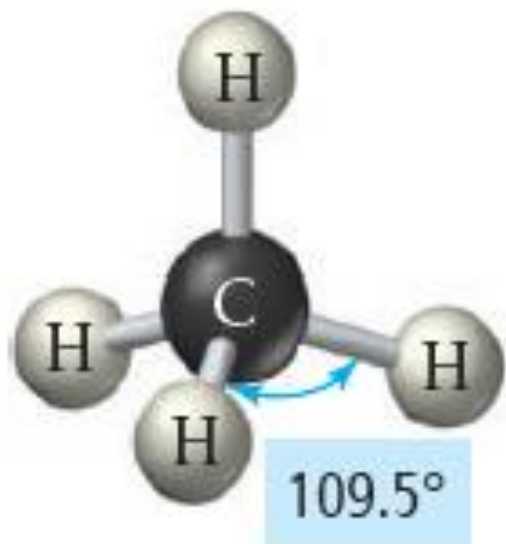
Octahedron



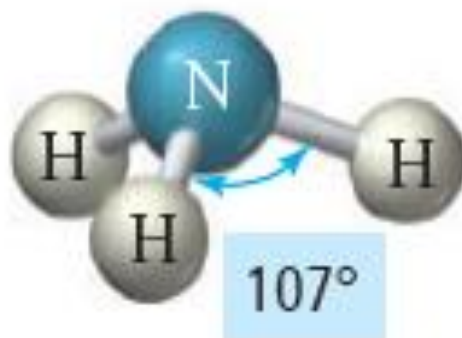
Η επίδραση των μονήρων ζευγών

- Τα μονήρη ζεύγη «καταλαμβάνουν περισσότερο χώρο» στο κεντρικό άτομο
- Τα σχετικά μεγέθη των αλληλεπιδράσεων των απωστικών δυνάμεων είναι

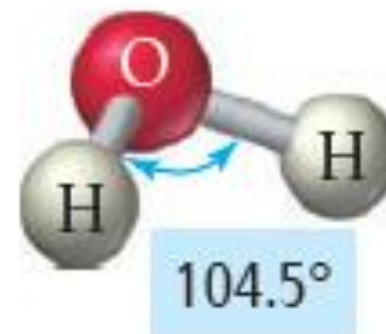
Μονήρες ζεύγος – Μονήρες ζεύγος > Μονήρες ζεύγος – Δεσμικό ζεύγος > Δεσμικό ζεύγος – Δεσμικό ζεύγος



CH₄



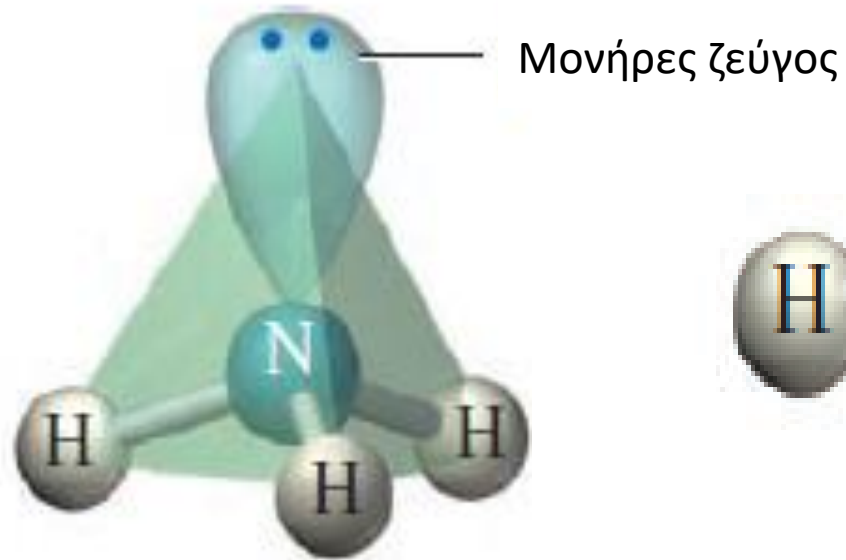
NH₃



H₂O

Τέσσερις ομάδες ηλεκτρονίων με μονήρη ζεύγη

- Η ηλεκτρονική γεωμετρία και η μοριακή γεωμετρία είναι διαφορετικές, αλλά σχετίζονται.
- Το μονήρες ζεύγος ασκεί την επιρροή του στα δεσμικά ζεύγη δεσμών.

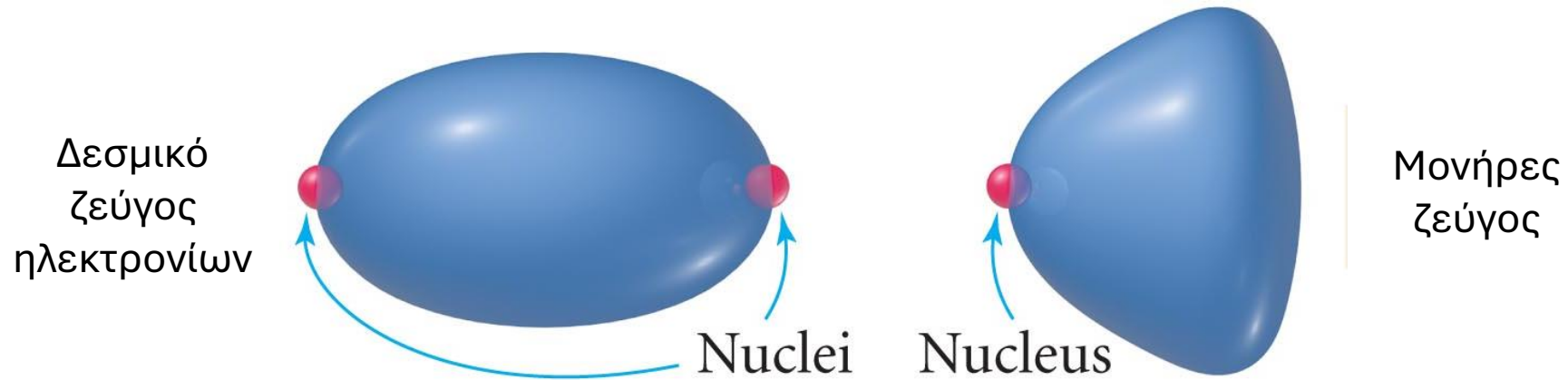


Ηλεκτρονιακή γεωμετρία:
Τετραεδρική



Μοριακή γεωμετρία:
Τριγωνική πυραμιδική

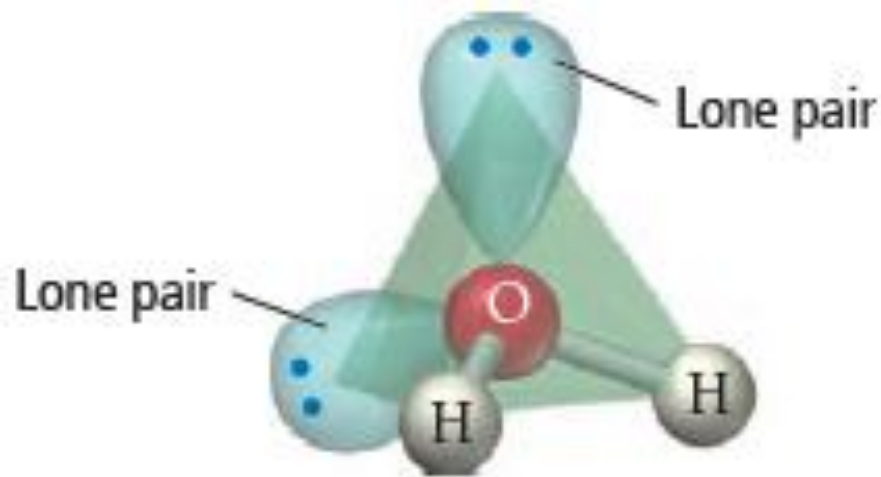
Μη δεσμικά ζεύγη ηλεκτρονίων έναντι δεσμικών ζεύγων ηλεκτρονίων



- Τα δεσμικά ηλεκτρόνια διαμοιράζονται στα δύο άτομα, έτσι μέρος του αρνητικού φορτίου απομακρύνεται από το κεντρικό άτομο
- Τα μη δεσμικά ηλεκτρόνια εντοπίζονται στο κεντρικό άτομο, επομένως η περιοχή του αρνητικού φορτίου καταλαμβάνει περισσότερο χώρο

Κεκαμμένη Μοριακή γεωμετρία

- Η ηλεκτρονική γεωμετρία είναι τετραεδρική (δύο δεσμικά ζεύγη και δύο μονήρη ζεύγη), αλλά η μοριακή γεωμετρία είναι κεκαμμένη.
- Οι γωνίες δεσμών στο H_2O είναι μικρότερες ($104,5^\circ$) από τις ιδανικές τετραεδρικές γωνίες δεσμών.



Τετραεδρική ηλεκτρονική γεωμετρία

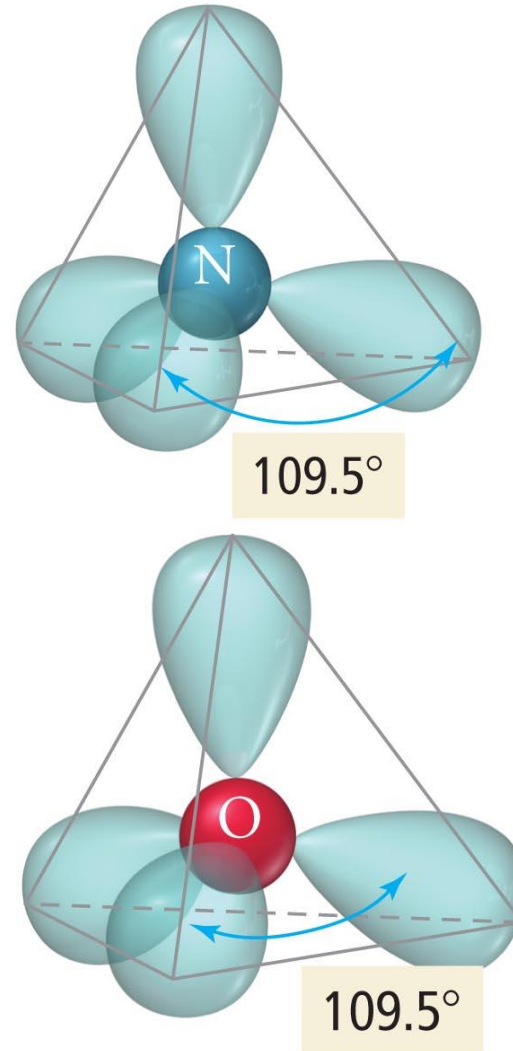


Κεκαμμένη μοριακή γεωμετρία

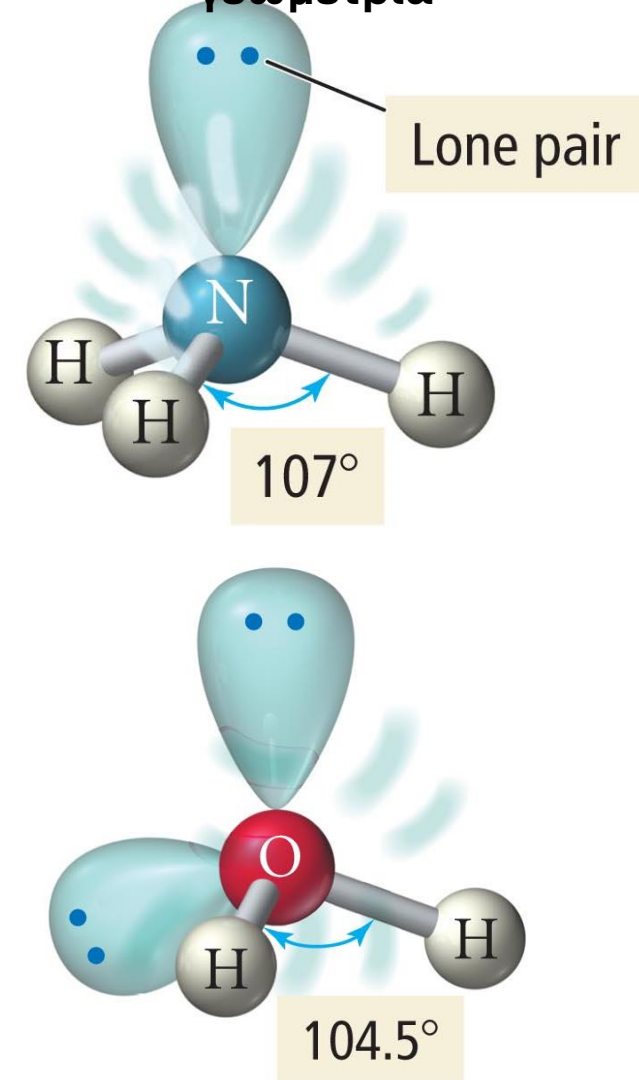
Αλλαγή της γωνίας δεσμού από τα μονήρη ζεύγη

- Η γωνία δεσμού στο H_2O είναι ακόμη μικρότερη από εκείνη της NH_3 , επειδή το H_2O διαθέτει δύο μονήρη ζεύγη ηλεκτρονίων στο κεντρικό άτομο οξυγόνου.
- Τα μονήρη ζεύγη συμπιέζουν τη γωνία δεσμού του H_2O σε μεγαλύτερο βαθμό από ό,τι στην NH_3 .

Ιδανική τετραεδρική γεωμετρία

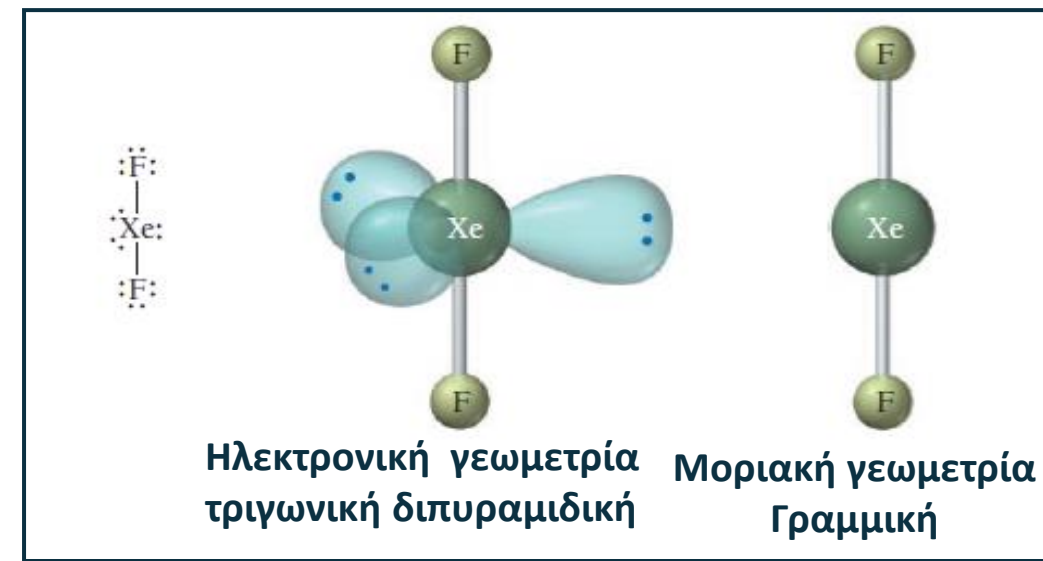
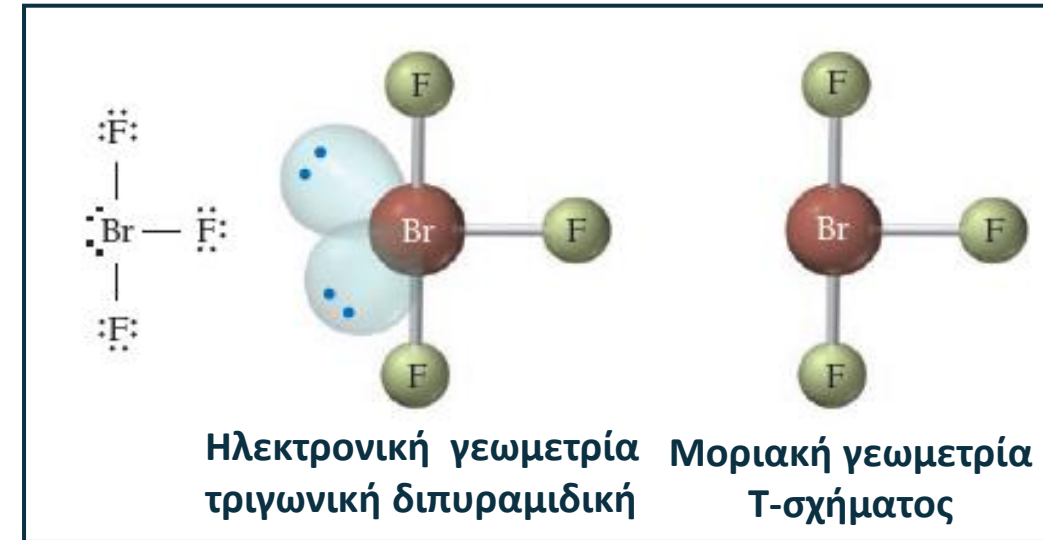
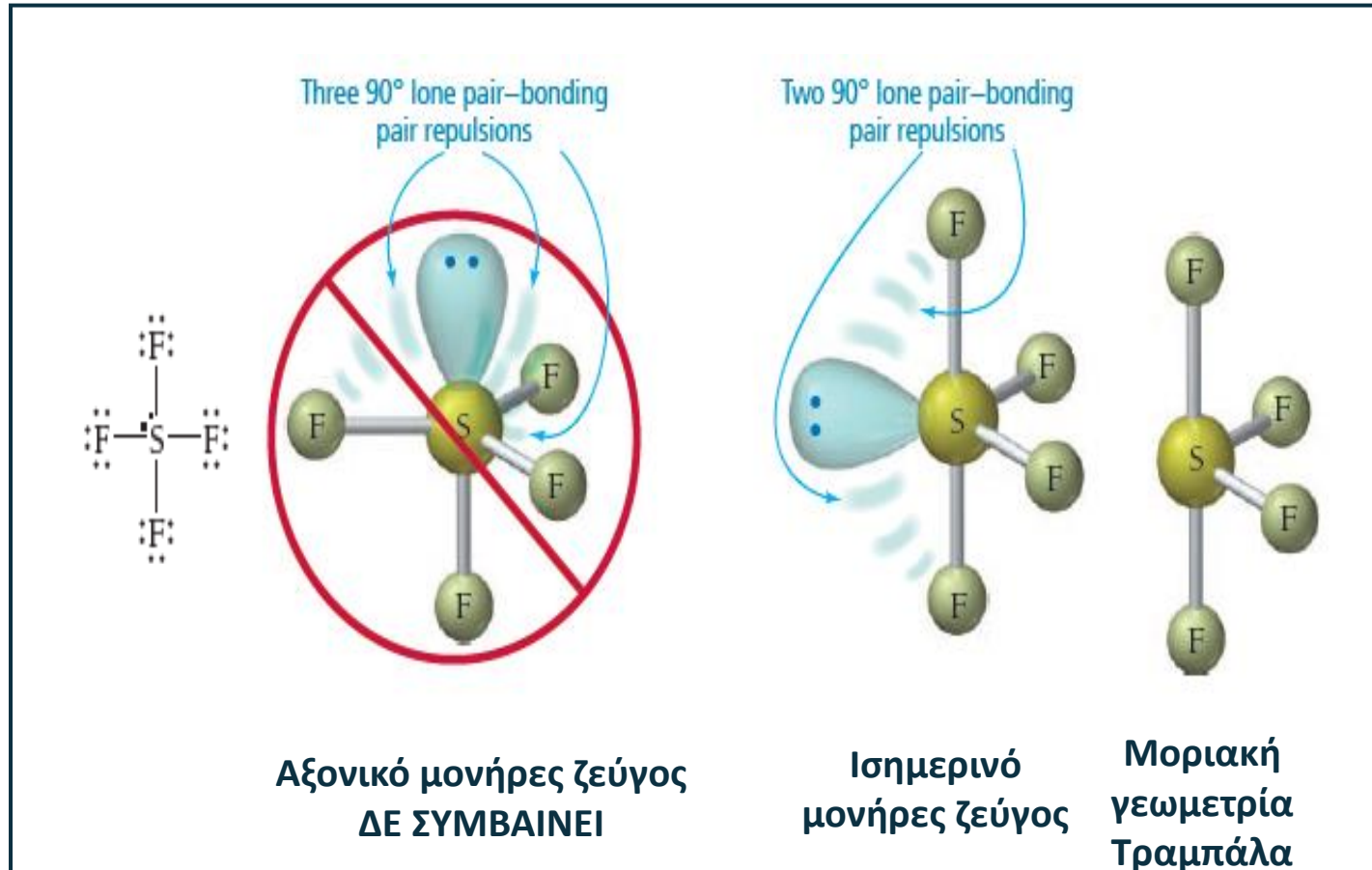


Πραγματική μοριακή γεωμετρία



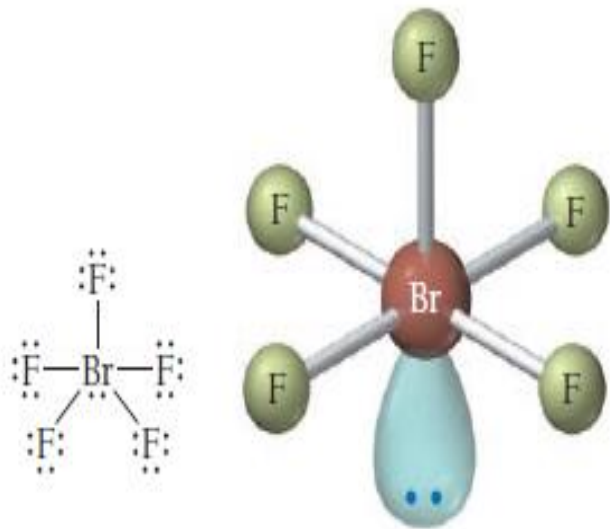
Πέντε ομάδες ηλεκτρονίων με μονήρη ζεύγη

Η ηλεκτρονική γεωμετρία, λόγω των πέντε ομάδων ηλεκτρονίων, είναι τριγωνική διπυραμιδική

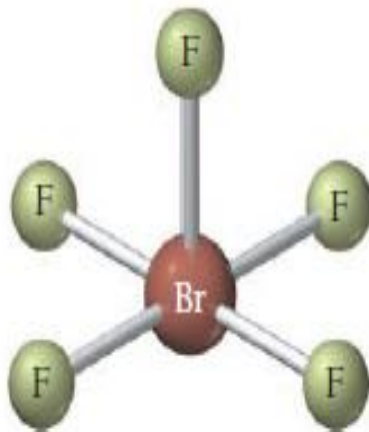


Έξι ομάδες ηλεκτρονίων με μονήρη ζεύγη

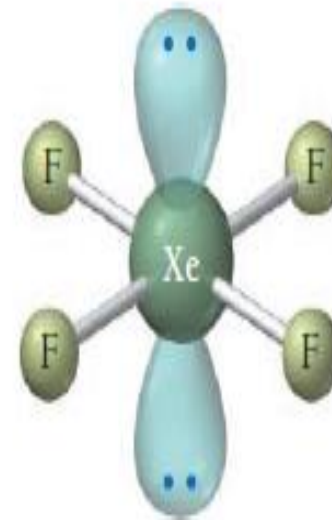
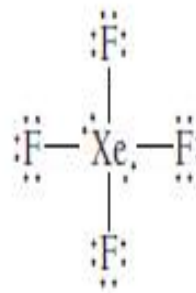
Η ηλεκτρονική γεωμετρία, λόγω των έξι ομάδων ηλεκτρονίων, είναι οκταεδρική



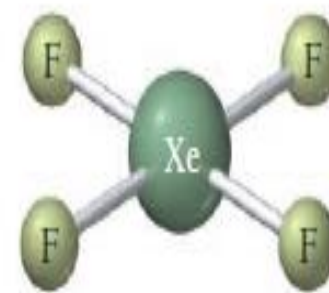
Ηλεκτρονική γεωμετρία
οκταεδρική



Μοριακή γεωμετρία
Τετραγωνική
πυραμидική



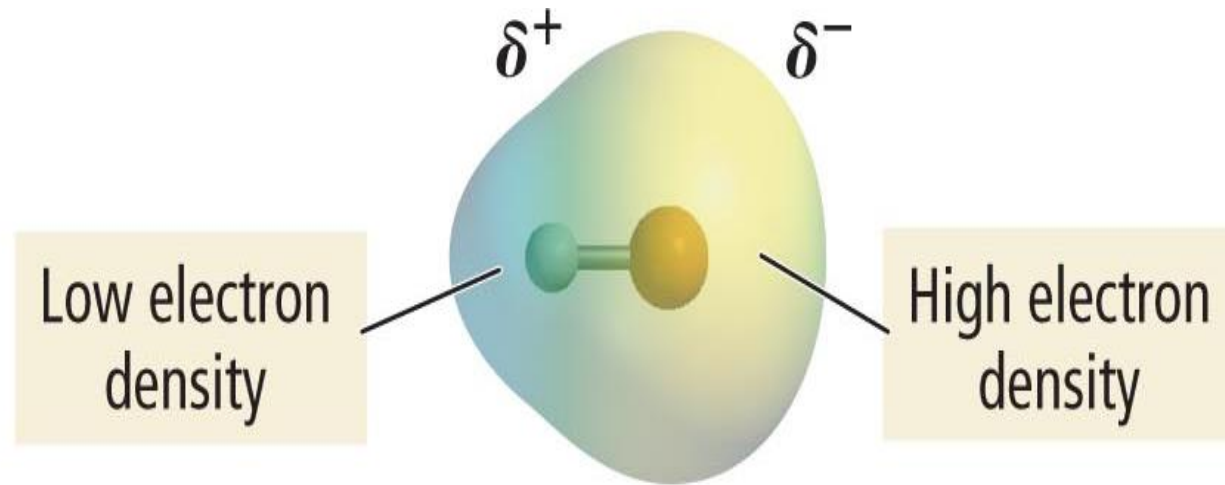
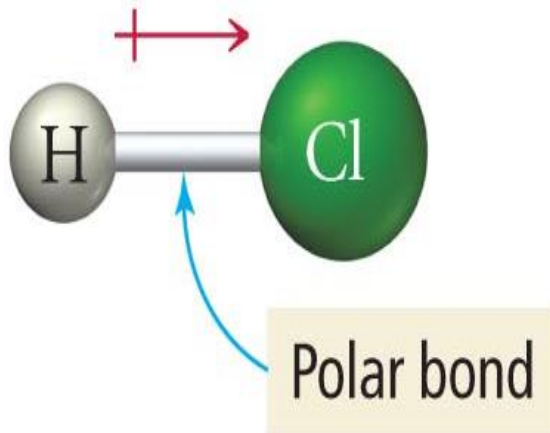
Ηλεκτρονική γεωμετρία
οκταεδρική



Μοριακή γεωμετρία
Επίπεδη Τετραγωνική

Μοριακή πολικότητα

- Ολόκληρα μόρια μπορούν να πολικά, ανάλογα με το σχήμα τους και τη φύση των δεσμών τους.
- Η ηλεκτρονική πυκνότητα είναι μεγαλύτερη γύρω από το πιο ηλεκτραρνητικό άτομο, οπότε το ίδιο το μόριο είναι πολικό.
- Αν ο δεσμός σε ένα διατομικό μόριο είναι μη πολικός, το μόριο στο σύνολό του είναι μη πολικό.

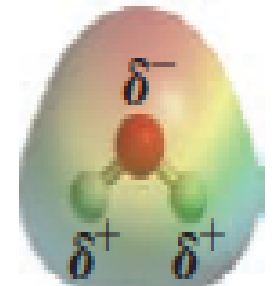
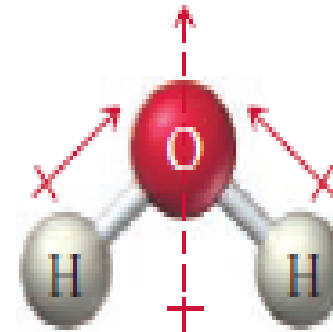
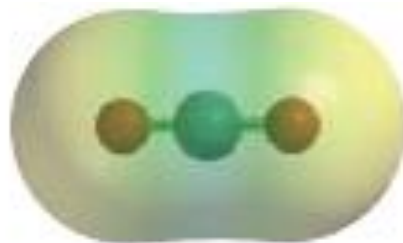


Πολικότητα των μορίων και διπολική ροπή

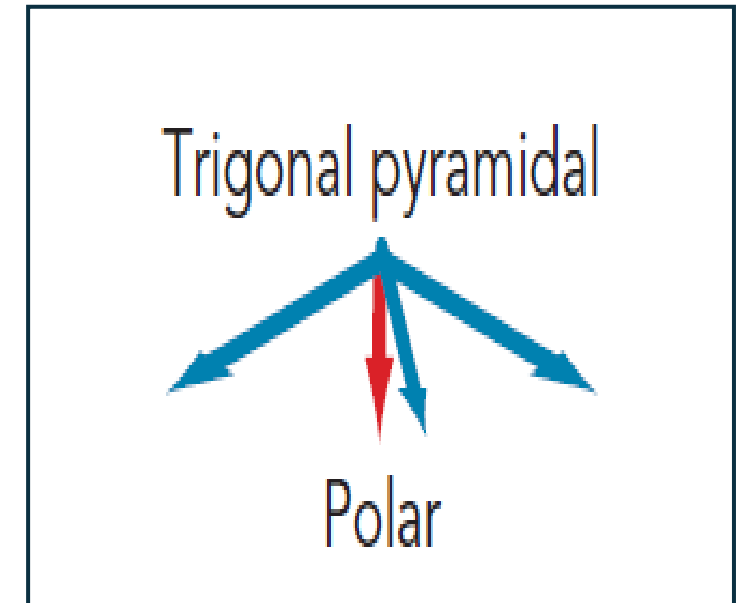
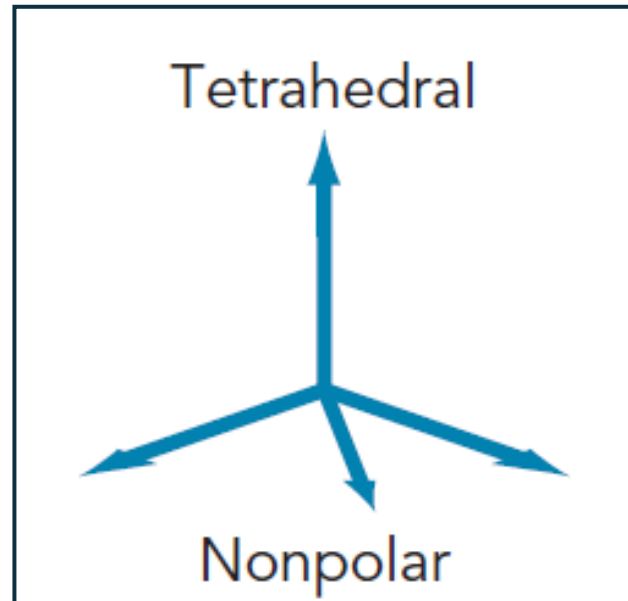
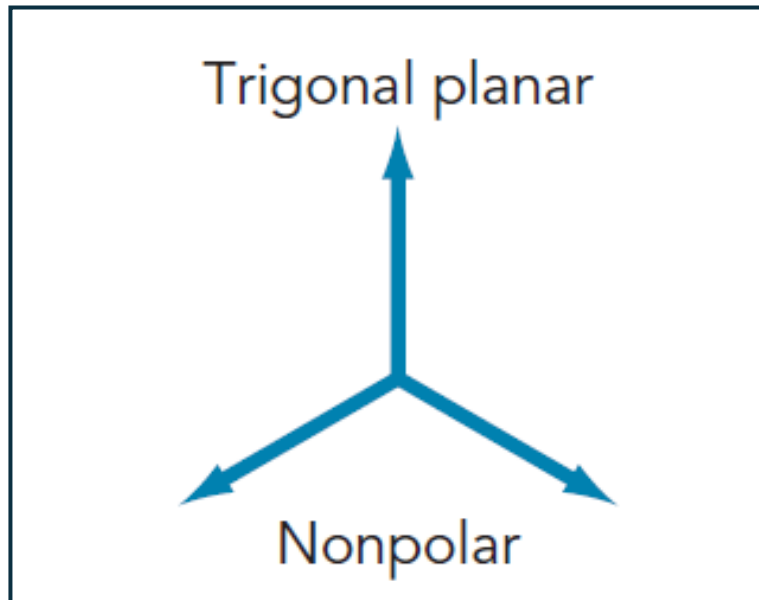
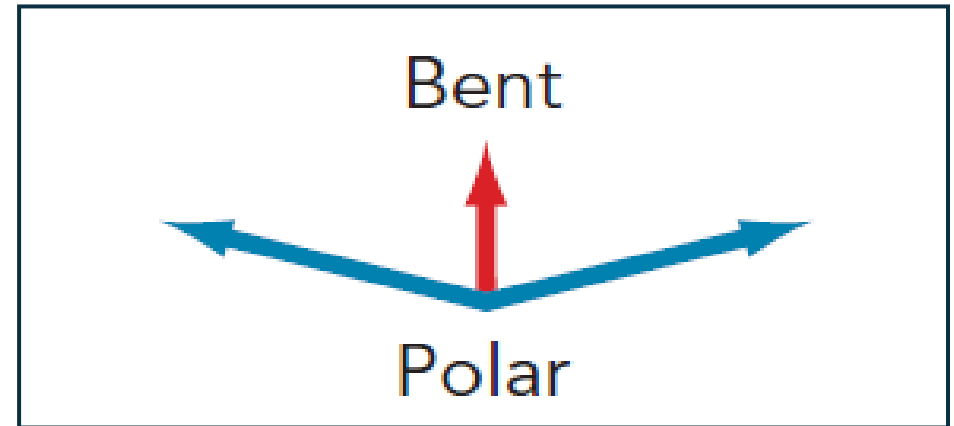
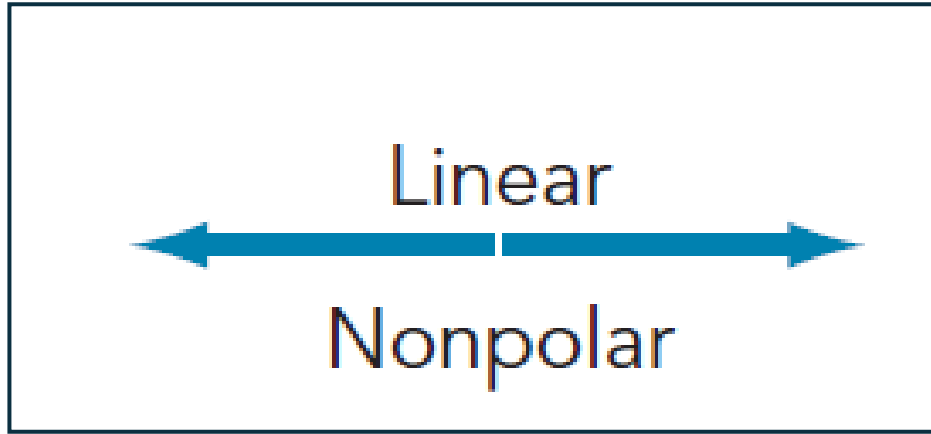
Στα πολυατομικά μόρια, η παρουσία πολικών δεσμών μπορεί να έχει ή να μην έχει ως αποτέλεσμα ένα πολικό μόριο, ανάλογα με τη μοριακή γεωμετρία.

Εάν η μοριακή γεωμετρία είναι τέτοια ώστε οι διπολικές ροπές των επιμέρους πολικών δεσμών αλληλοεξουδετερώνονται (δηλαδή αθροίζουν στο μηδέν), τότε το μόριο είναι **μη πολικό**

Εάν η μοριακή γεωμετρία είναι τέτοια που οι διπολικές ροπές των επιμέρους πολικών δεσμών αθροίζουν σε μια καθαρή διπολική ροπή, τότε το μόριο είναι **πολικό**.

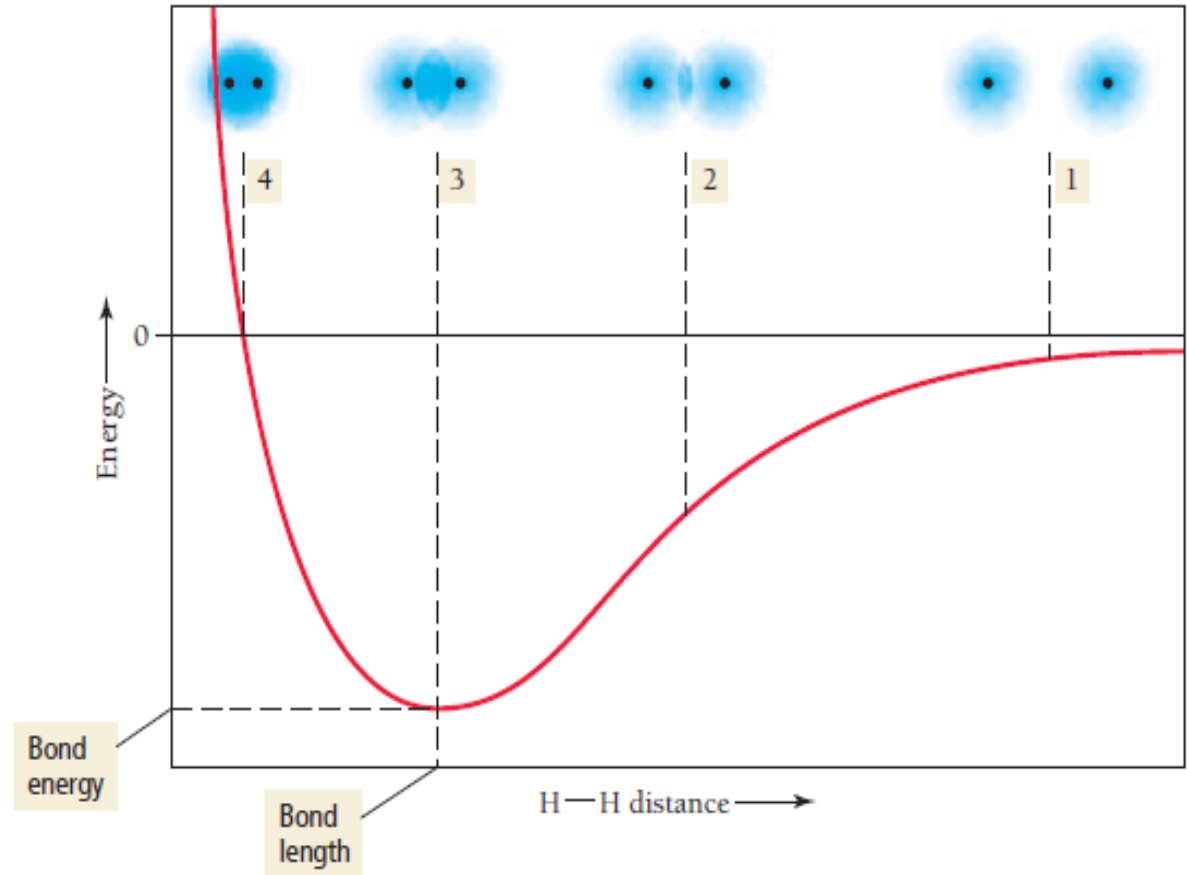


Συνήθεις περιπτώσεις πρόσθεσης διπολικών ροπών για τον καθορισμό αν ένα μόριο είναι πολικό

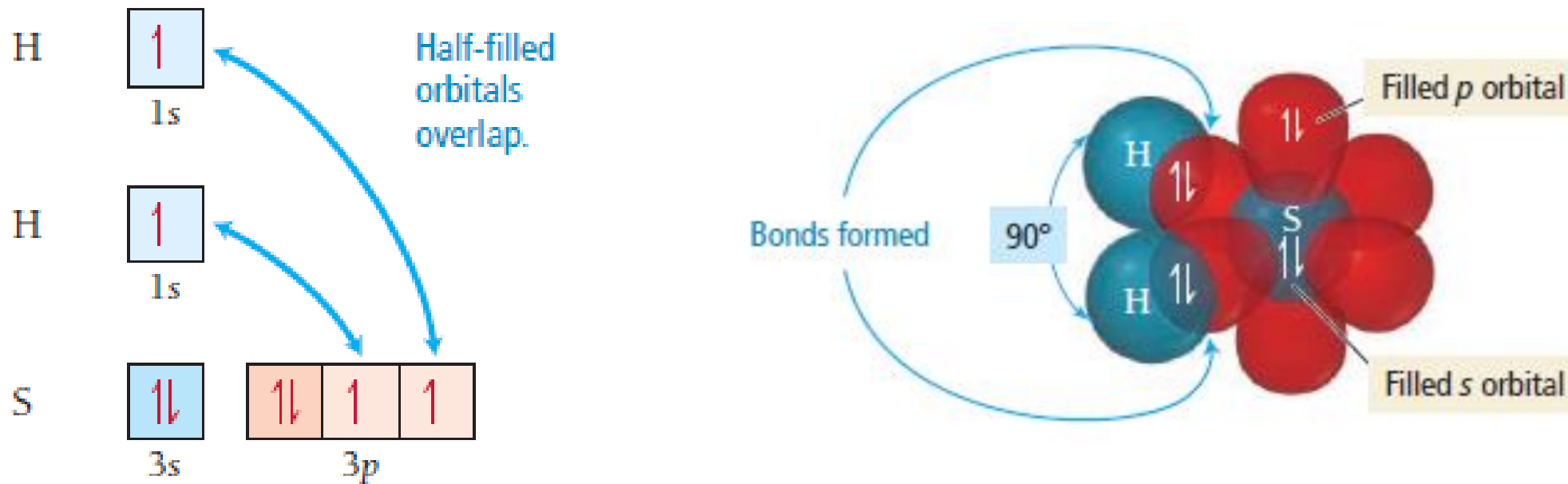


Ενέργεια αλληλεπίδρασης για το H₂

- Τα δύο ατομικά τροχιακά 1s έχουν σημαντική επικάλυψη και τα ηλεκτρόνια βρίσκονται στην ενδοπυρηνική περιοχή όπου μπορούν να αλληλεπιδράσουν με τους δύο πυρήνες
- Η ελάχιστη E αλληλεπίδρασης είναι το μήκος δεσμού ισορροπίας.
- Η τιμή της E αλληλεπίδρασης στην απόσταση ισορροπίας του δεσμού είναι η E του δεσμού.



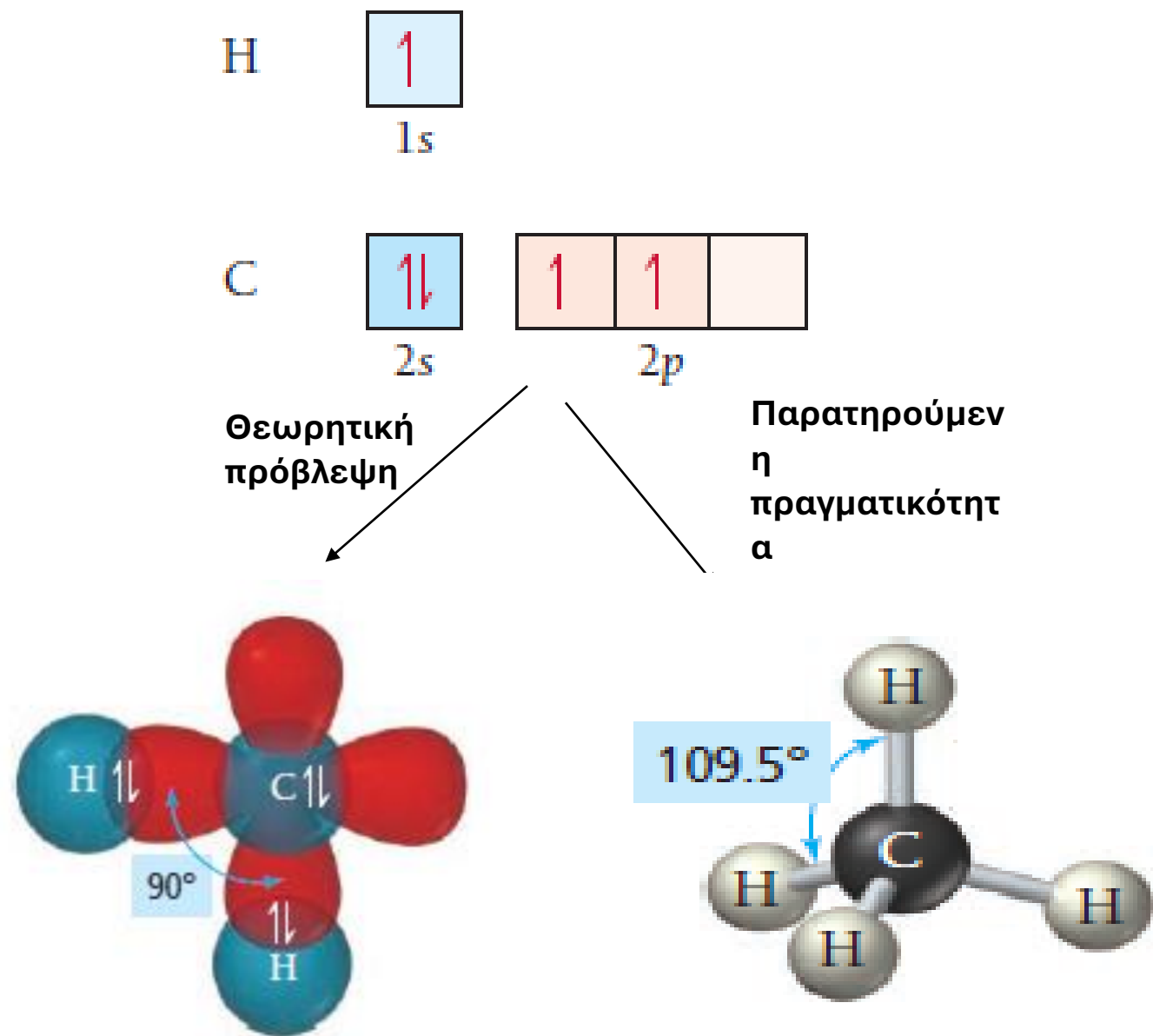
Εφαρμογή της θεωρίας δεσμού σθένους



- Τα ήμι-συμπληρωμένα τροχιακά σε κάθε άτομο υδρογόνου επικαλύπτονται με τα δύο ήμι-συμπληρωμένα τροχιακά του ατόμου του θείου, σχηματίζοντας δύο χημικούς δεσμούς
- Εντός ενός δεσμού, τα ηλεκτρόνια έχουν συζευγμένο spin (το ένα μισό βέλος δείχνει προς τα πάνω και το άλλο προς τα κάτω).
- Τα μονήρη ζεύγη ηλεκτρονίων στα συμπληρωμένα τροχιακά s και p του θείου, δεν εμπλέκονται στο δεσμό.

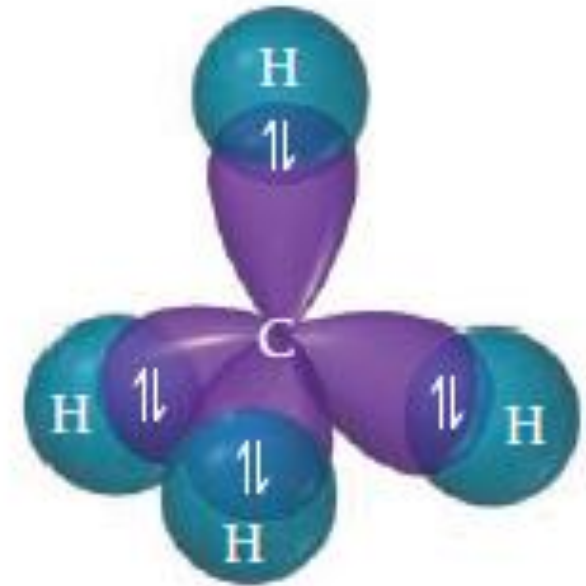
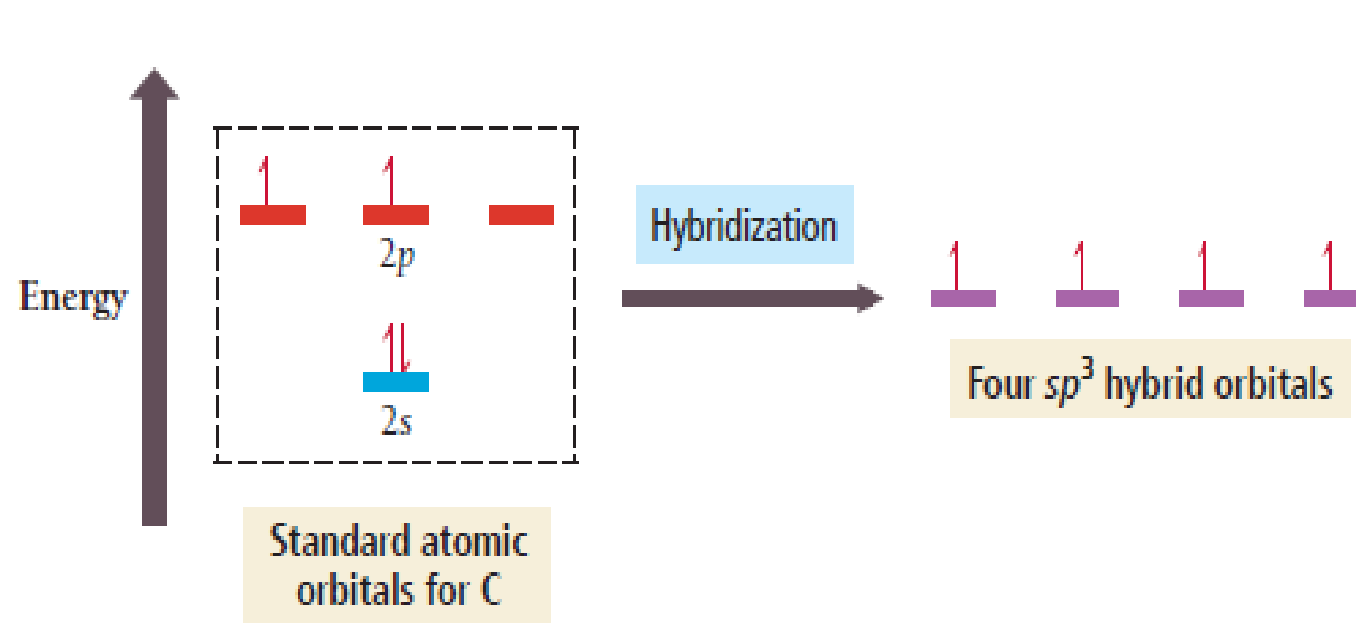
Υβριδισμός τροχιακών

- Με βάση τον υβριδισμό τα τροχιακά σε ένα μόριο δεν είναι απαραίτητα τα ίδια με τα τροχιακά σε ένα άτομο.
- Ο υβριδισμός είναι μια μαθηματική διαδικασία κατά την οποία τα πρότυπα ατομικά τροχιακά συνδυάζονται για να σχηματίσουν νέα ατομικά τροχιακά που ονομάζονται υβριδικά τροχιακά
- Τα υβριδικά τροχιακά εξακολουθούν να εντοπίζονται σε ξεχωριστά άτομα, αλλά τα σχήματα και οι ενέργειές τους διαφέρουν από εκείνα των πρότυπων ατομικών τροχιακών.



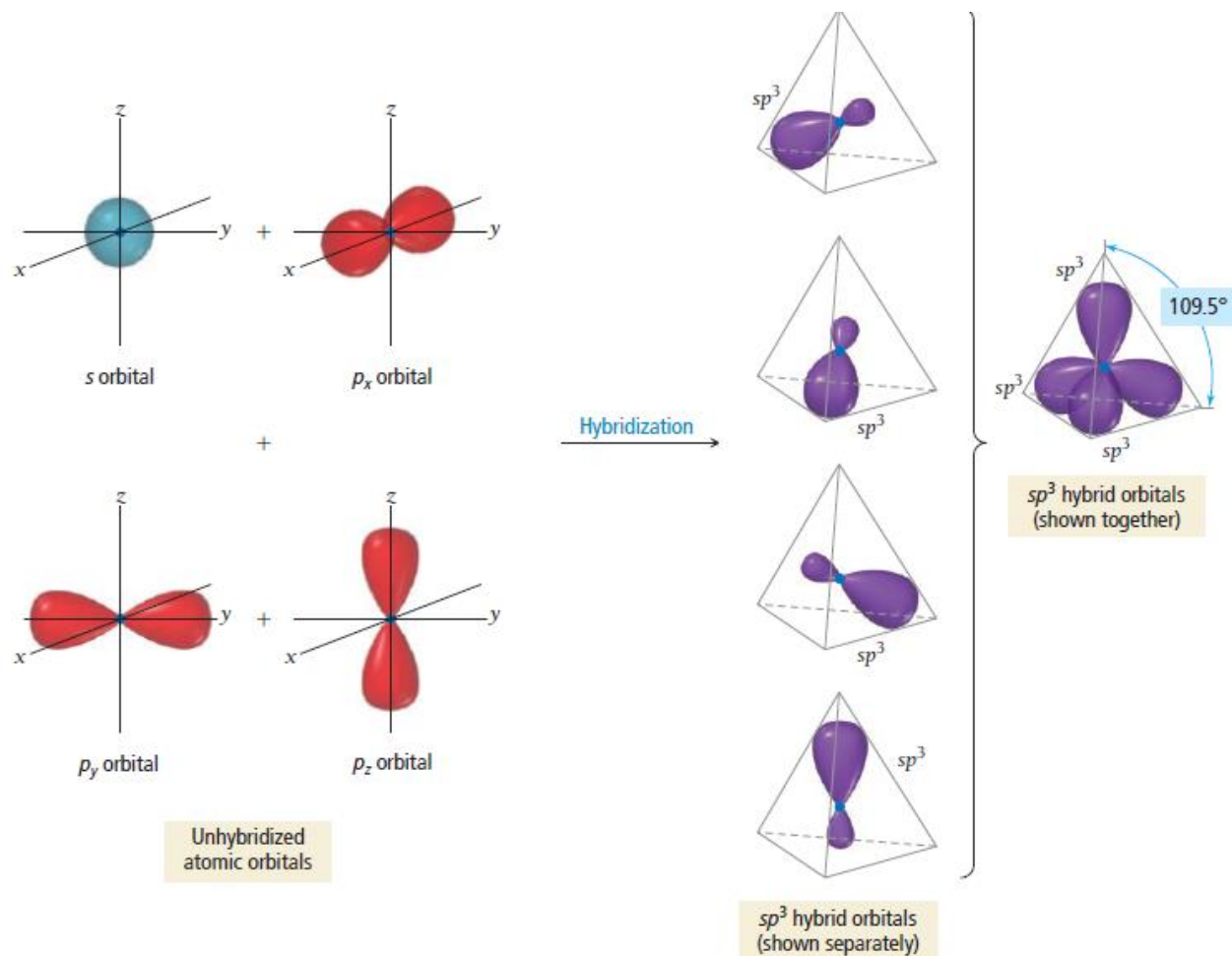
Υβριδισμός sp^3

- Ο συμβολισμός sp^3 υποδηλώνει ότι τα υβριδικά τροχιακά είναι μίγμα ενός τροχιακού s και τριών p
- Τα υβριδικά τροχιακά έχουν την ίδια ενέργεια - είναι εκφυλισμένα.
- Ο άνθρακας έχει τέσσερα μισογεμάτα τροχιακά και μπορεί να σχηματίσει τέσσερις δεσμούς με τέσσερα άτομα υδρογόνου

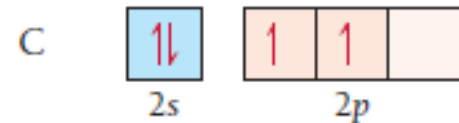
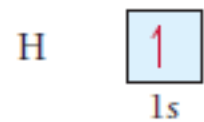
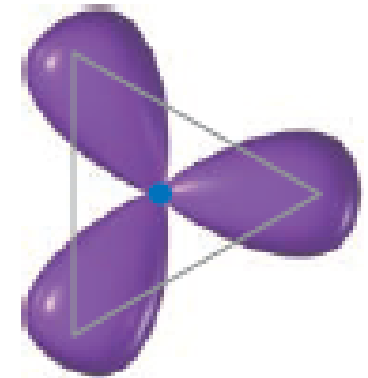
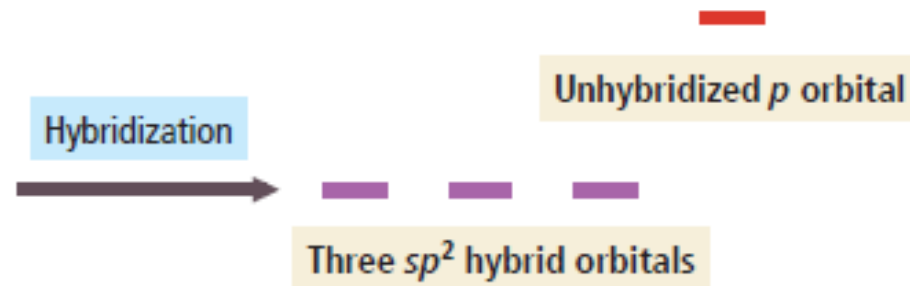
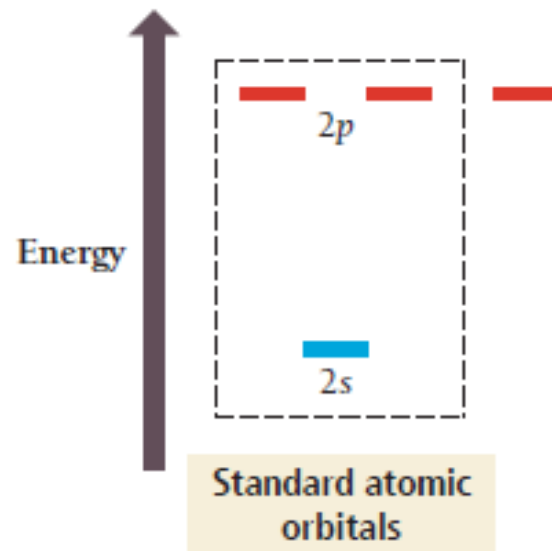


Σχηματισμός υβριδικών τροχιακών sp^3

Τα τέσσερα υβριδικά τροχιακά διατάσσονται σε τετραεδρική γεωμετρία με γωνίες $109,5^\circ$ μεταξύ τους.

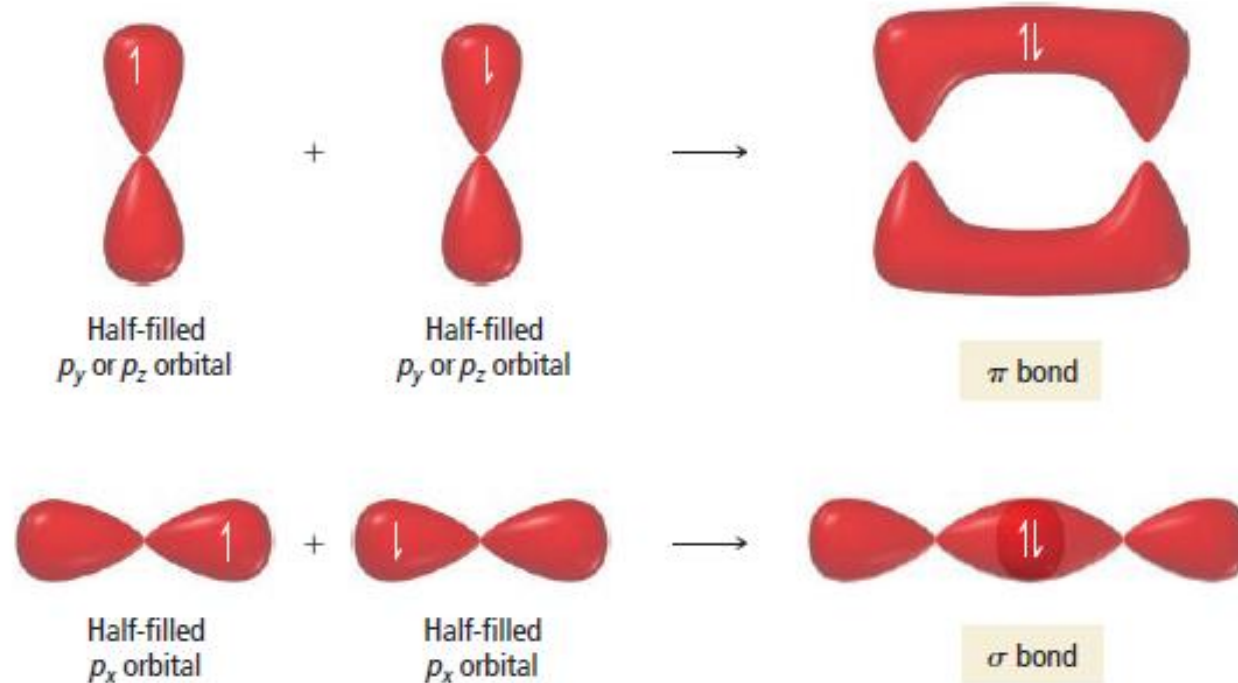


Υβριδισμός sp^2



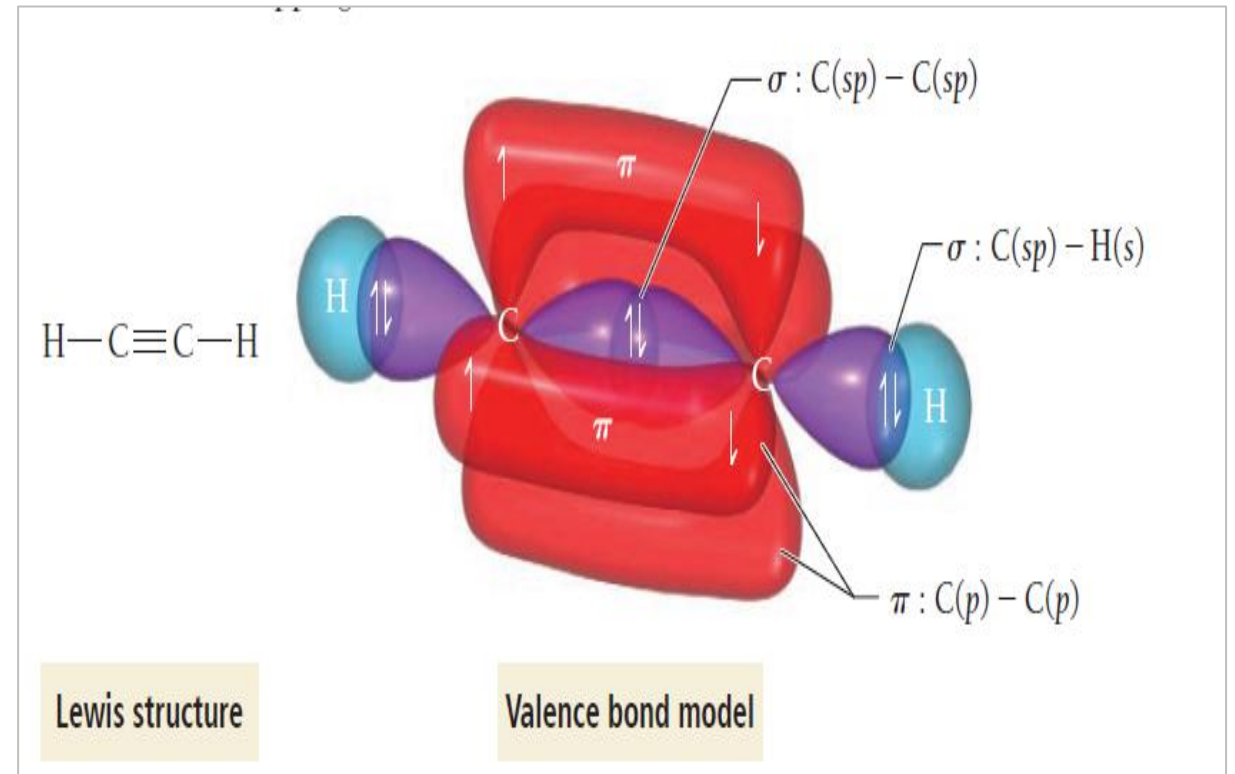
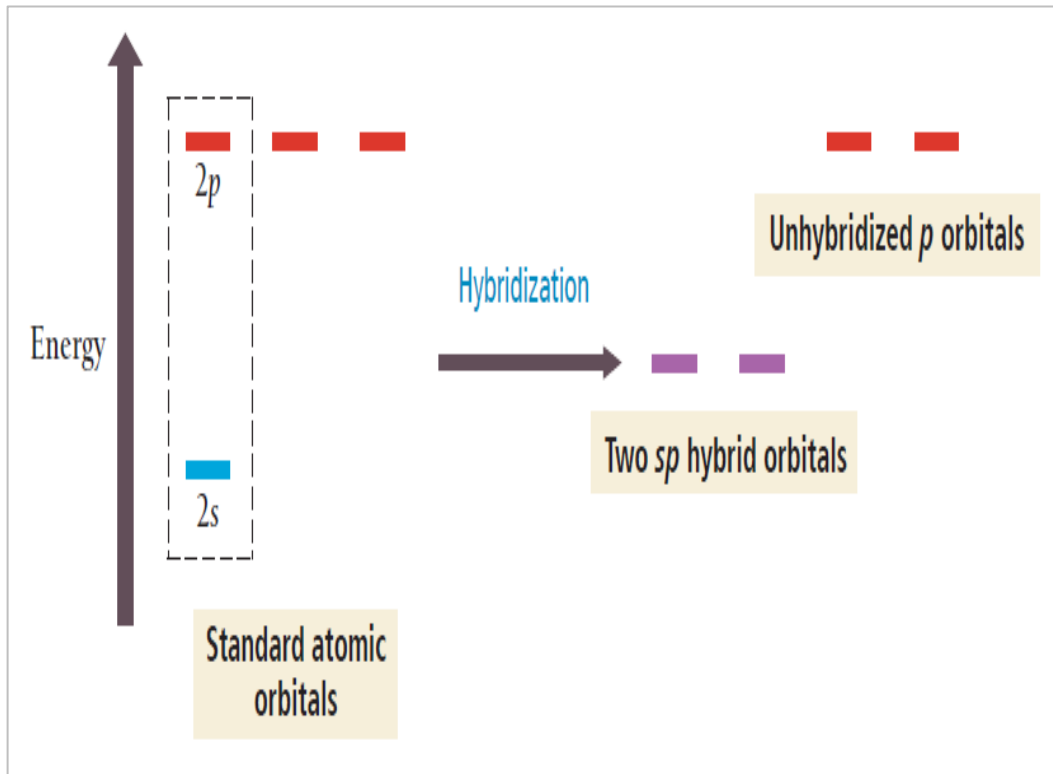
Δεσμοί Σίγμα (σ) και Πι (π)

- Όταν τα τροχιακά p επικαλύπτονται πλευρικά ο δεσμός που προκύπτει είναι ένας δεσμός πι (π) και η πυκνότητα των ηλεκτρονίων είναι πάνω και κάτω από τον ενδοπυρηνικό άξονα.
- Όταν τα τροχιακά επικαλύπτονται από άκρη σε άκρη, κατά μήκος ο προκύπτων δεσμός είναι δεσμός σίγμα (σ).
- Οι σ δεσμοί είναι ισχυρότεροι από τους π δεσμούς



Υβριδισμός sp

- Η υβριδοποίηση ενός s και ενός p τροχιακού οδηγεί σε δύο υβριδικά τροχιακά sp και δύο μη υβριδικά τροχιακά p
- Γραμμικό σχήμα, γωνία δεσμού 180°
- Κάθε άτομο άνθρακα έχει τέσσερα ήμι-συμπληρωμένα τροχιακά και μπορεί να σχηματίσει δεσμό με ένα άτομο υδρογόνου και έναν τριπλό δεσμό με τον άλλο άνθρακα



Εκπαιδευτικοί στόχοι

- Τι πληροφορίες μου δίνει το κβαντο-μηχανικό μοντέλο του ατόμου
- Τα Χαρακτηριστικά του ηλεκτρομαγνητικού κύματος
- Τι είναι Φωτοηλεκτρικό Φαινόμενο
- Τι είναι το τροχιακό?
- Που βασίζεται η αρχή της αβεβαιότητας?
- Γραφή δομών Lewis για μοριακές ενώσεις, γραφή δομών συντονισμού
- Υπολογισμός τυπικού φορτίου
- Ποιες είναι οι γεωμετρίες των διαφορετικών ηλεκτρονικών ομάδων
- Να μπορώ να προβλέψω τη μοριακή γεωμετρία ενός μορίου
- Τι πληροφορίες μου δίνει η δομή Lewis σε σχέση με το μοντέλο δεσμών σθένους
- Διαμορφώσεις διαφορετικών υβριδισμών

Προτεινόμενη βιβλιογραφία

1. Αρχές Χημείας-Μοριακή Προσέγγιση. Tro J. Nivaldo.
Κεφάλαια 7, 9 (9.1-9.8)-10 (10.1-10.7).