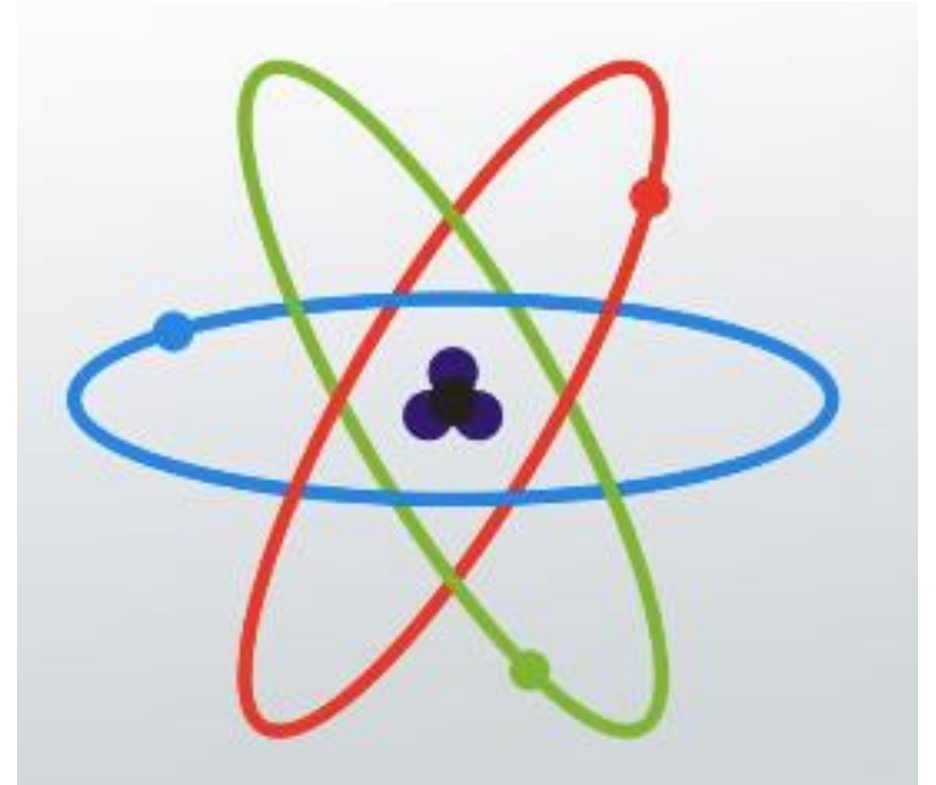


Το Άτομο-Χημικός Δεσμός και Δομή

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



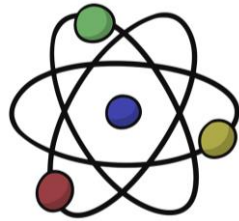
Εκπαιδευτικά αντικείμενα

- 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

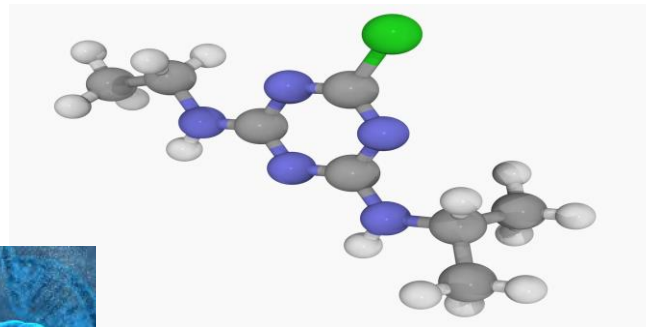
Η σπουδαιότητα των αρχών της Χημείας

Ουσιώδεις ιδιότητες για την μελέτη της

✓ ανόργανης



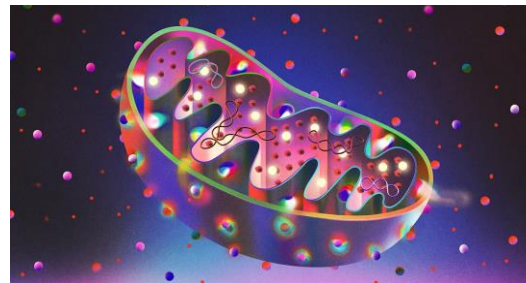
✓ οργανικής χημείας



✓ βιοχημείας



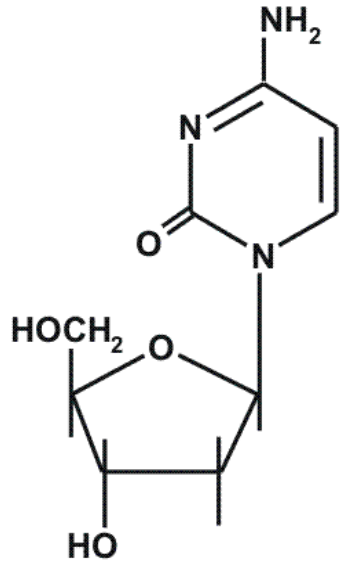
✓ βιολογίας \ (επιστήμες ζωής)



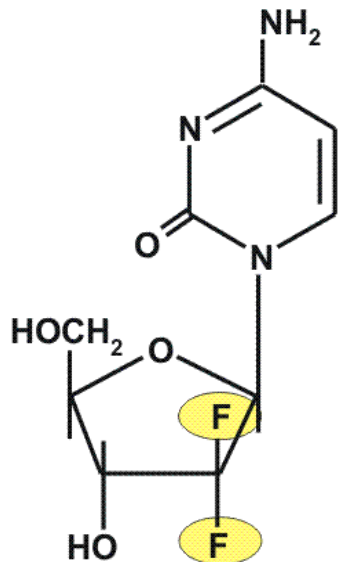
Η σπουδαιότητα των αρχών της Χημείας

Ατομική θεωρία Περιοδικός πίνακας Δεσμοί Μοριακή δομή	Βασικές ιδιότητες της ύλης
Θερμοδυναμική	εάν θα γίνει η αντίδραση
Χημική ισορροπία	ποια η κατεύθυνση της αντίδρασης
Κινητική	πόσο γρήγορη είναι η αντίδραση
Οξέα-βάσεις	οι αντιδράσεις εμπίπτουν σε οξεοβασική κατάλυση
Οξειδοαναγωγή	αντιδράσεις μεταβολής της κατάστασης οξειδώσεως
Στοιχεία μεταπτώσεως	μοναδικές ιδιότητες

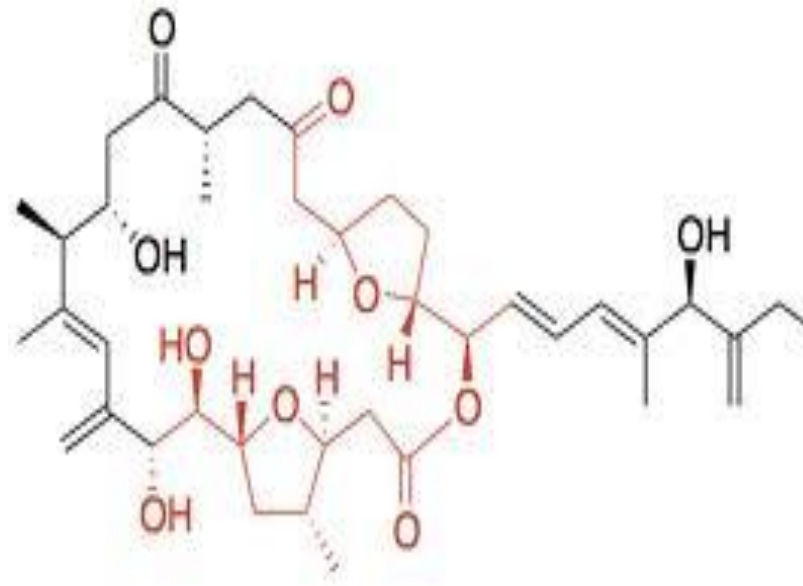
Η σημασία της χημείας στο σχεδιασμό φαρμάκων



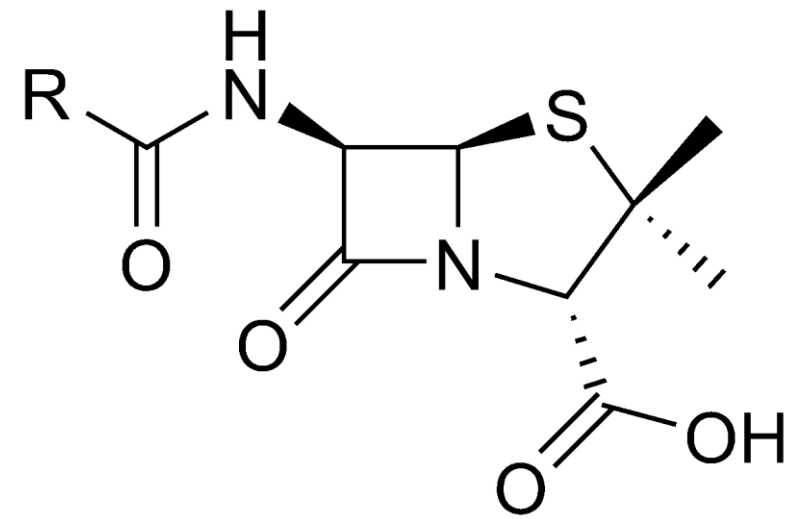
Dé-oxy-cytidine



Gemcitabine



amphidinolide C



Το Άτομο

Η συμπεριφορά του μικροσκοπικού σωματιδίου

- ✓ Τα ηλεκτρόνια είναι ιδιαίτερα μικροσκοπικά (μάζα $1,836 \times 10^{-31}$ < πρωτονίου)
- ✓ Η συμπεριφορά των ηλεκτρονίων καθορίζει κατά μεγάλο μέρος την συμπεριφορά των ατόμων
- ✓ Η απευθείας παρατήρηση των ηλεκτρονίων στο άτομο είναι αδύνατη, το ηλεκτρόνιο είναι τόσο μικρό που η παρατήρηση μεταβάλλει την συμπεριφορά του

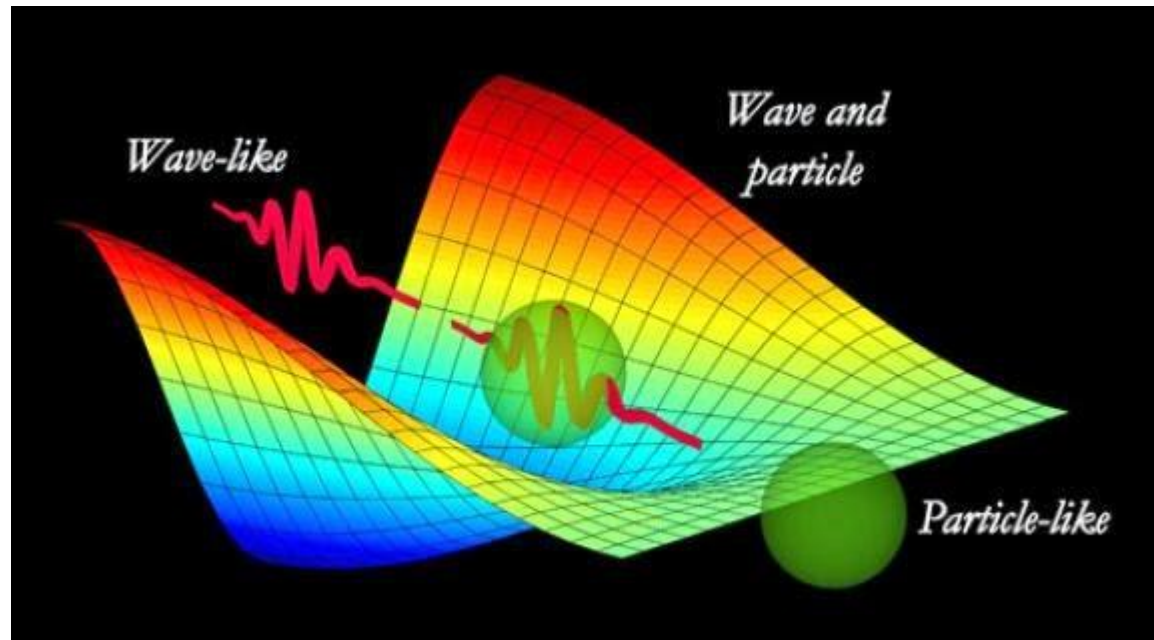
Ο απόλυτα μικρός κόσμος του ηλεκτρονίου είναι διαφορετικός από τον μεγάλο κόσμο που είμαστε συνηθισμένοι

Το κβαντο-μηχανικό μοντέλο του ατόμου

- Εξηγεί τον τρόπο ύπαρξης των ηλεκτρονίων και συμπεριφοράς στα άτομα
- Μας βοηθά να κατανοήσουμε και να προβλέψουμε τις ιδιότητες των ατόμων που σχετίζονται άμεσα με την συμπεριφορά των ηλεκτρονίων
 - ✓ Γιατί μερικά στοιχεία είναι μέταλλα ενώ άλλα είναι αμέταλλα
 - ✓ Γιατί μερικά στοιχεία προσλαμβάνουν $1 e$ σχηματίζοντας ένα ανιόν ενώ άλλα προσλαμβάνουν $2 e$
 - ✓ Γιατί μερικά στοιχεία είναι πολύ δραστικά ενώ άλλα είναι αδρανή
 - ✓ Καθώς και άλλα Περιοδικά μοτίβα που παρατηρούμε στις ιδιότητες των στοιχείων

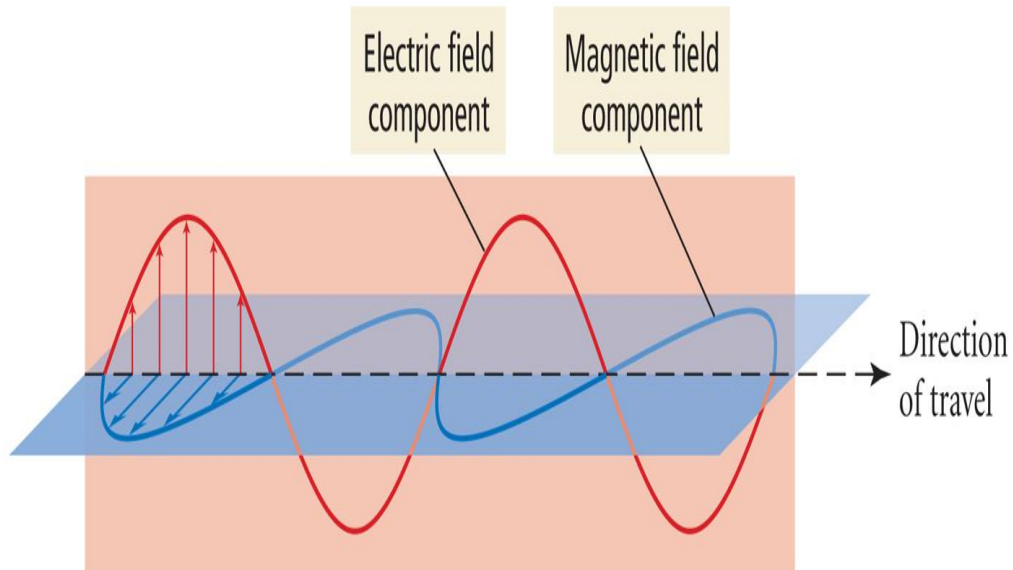
Η φύση του φωτός

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



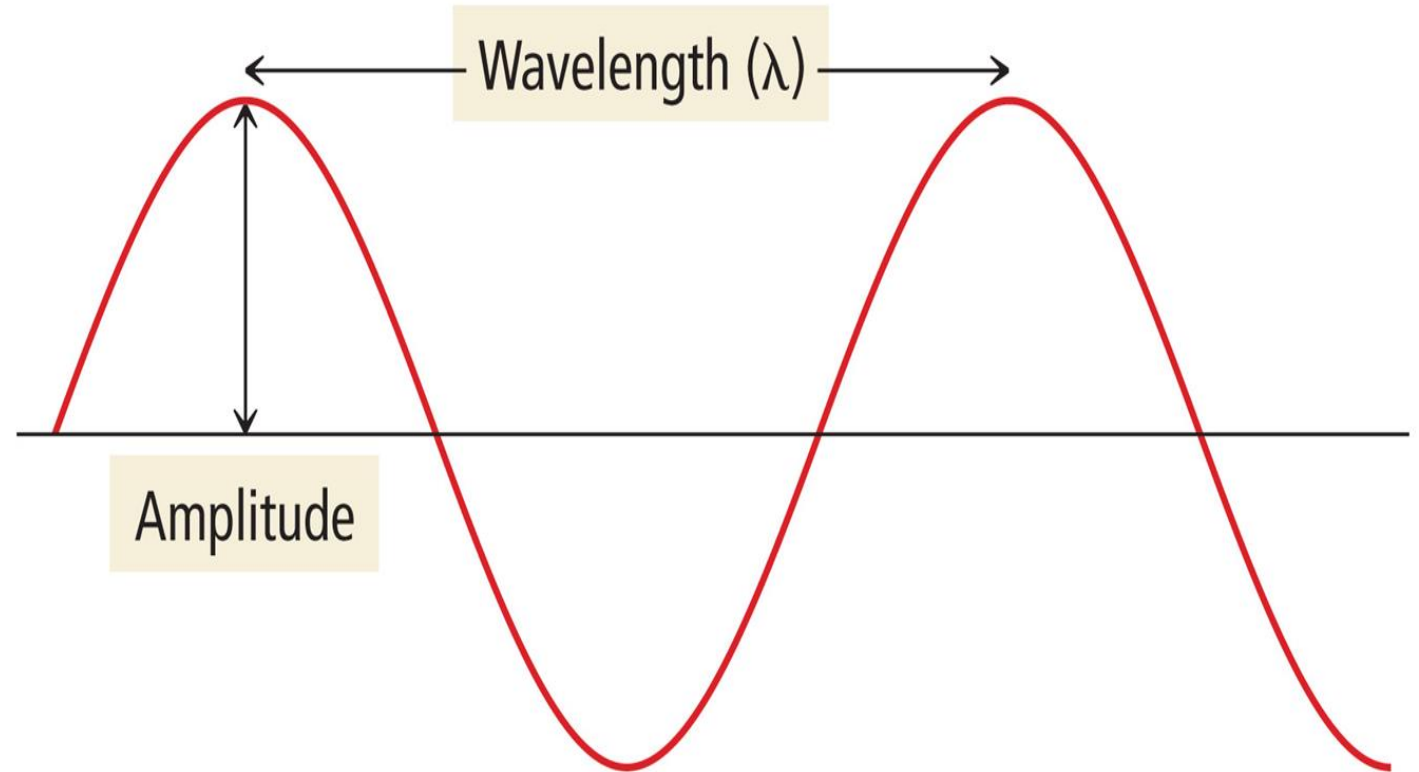
Η Κυματική Φύση του Φωτός

- Το φως είναι μια μορφή ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας δηλδ ενέργεια ενσωματωμένη σε ταλαντευόμενα ηλεκτρικά και μαγνητικά πεδία
- Αποτελείται από κάθετα κύματα ταλάντωσης, το ένα ηλεκτρικού πεδίου και το άλλο μαγνητικού πεδίου
- Όλα τα ηλεκτρομαγνητικά κύματα κινούνται στο χώρο με την ίδια σταθερή ταχύτητα 3.00×10^8 m/s στο κενό = η ταχύτητα του φωτός c



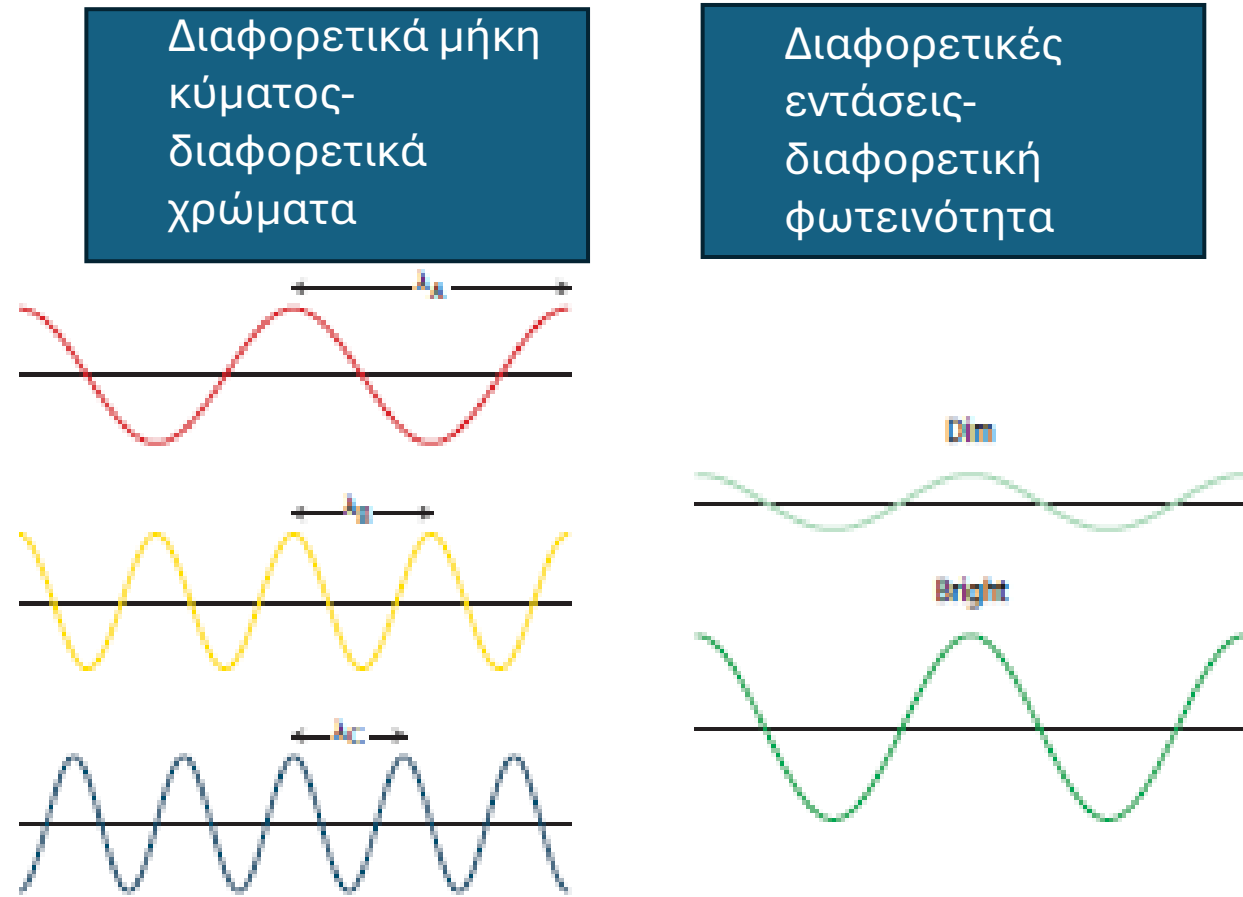
Τα Χαρακτηριστικά του ηλεκτρομαγνητικού κύματος (1)

- Το **εύρος** είναι το κάθετο ύψος του κύματος, η απόσταση από τον κόμβο στην κορυφή
- Το εύρος είναι το μέτρο του κατά πόσο έντονο είναι το φως –όσο μεγαλύτερο το πλάτος τόσο φωτεινότερο το φως (μεγαλύτερη ένταση)
- 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)

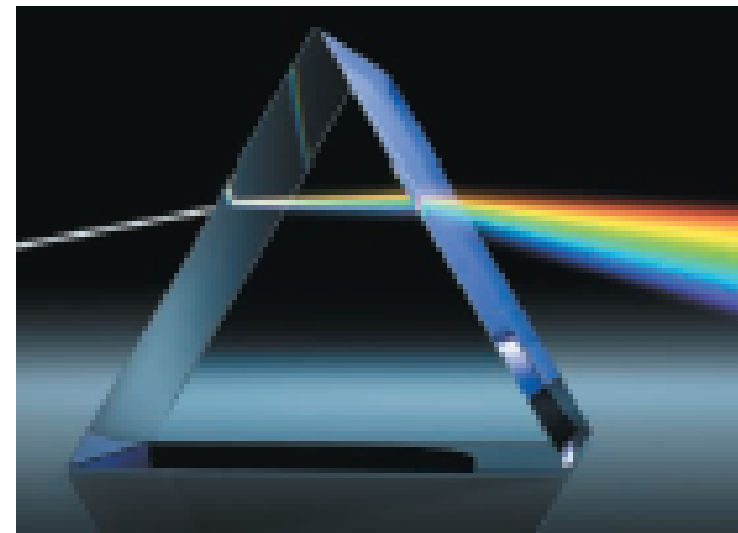
- Η **συχνότητα, (ν)** ο αριθμός των κύκλων (ή κορυφών κυμάτων) που περνούν σε κάποιο σημείο σε κάποιο χρόνο
 - ✓ αριθμός των κυμάτων = αριθμός των κύκλων
 - ✓ Μονάδες είναι hertz, (Hz) ή cycles/s = s^{-1}
 - ✓ $1 \text{ Hz} = 1 \text{ s}^{-1}$
- Η **ολική ενέργεια** είναι ανάλογη με το **εύρος** και 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
 - ✓ $v=c/\lambda$

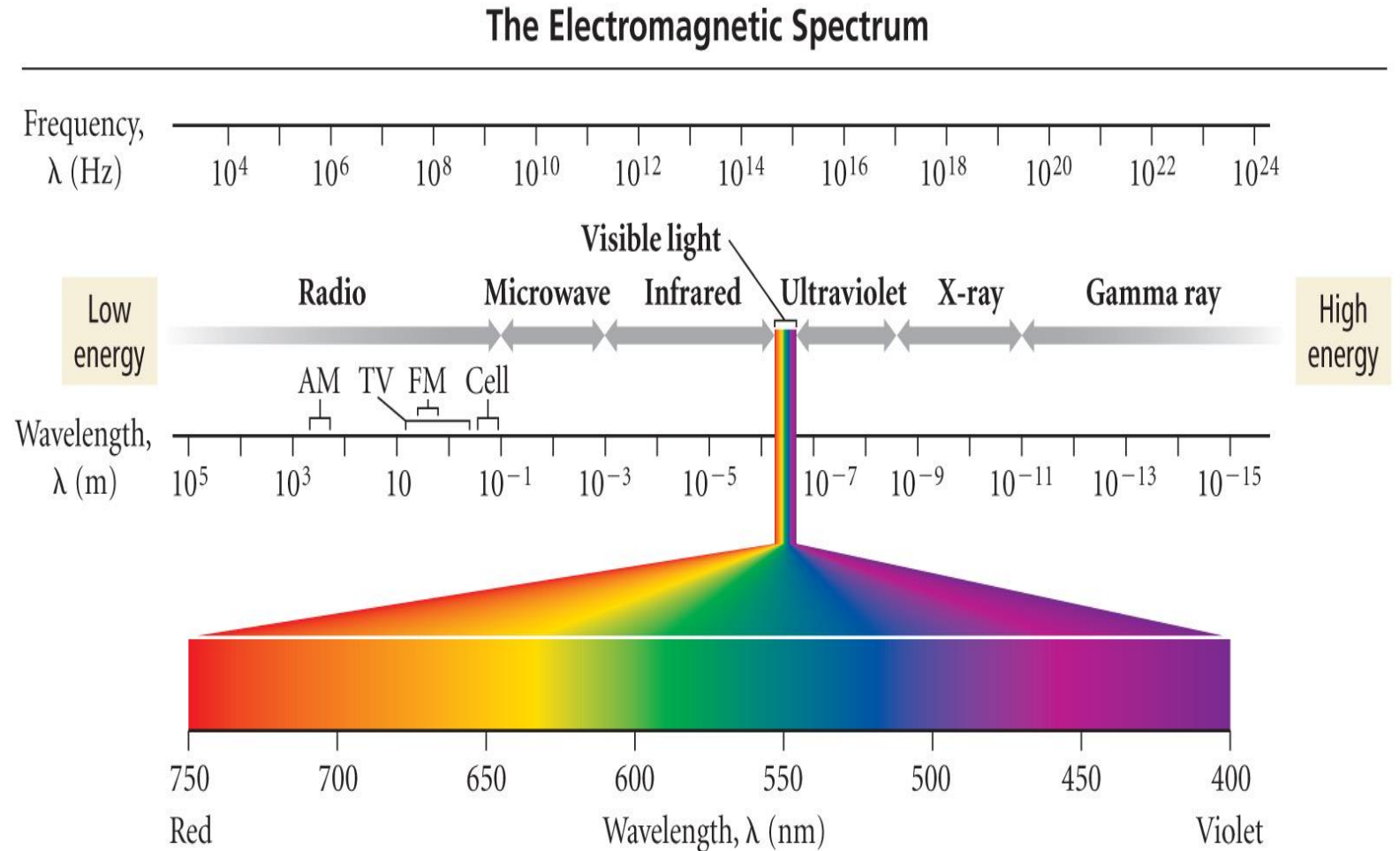
Το ορατό φως

- 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
- Όταν ένα αντικείμενο απορροφά κάποια μήκη κύματος του λευκού φωτός ενώ αντανακλά άλλα, φαίνεται έγχρωμο
 - ✓ το παρατηρούμενο χρώμα είναι το χρώμα που αντανακλάται



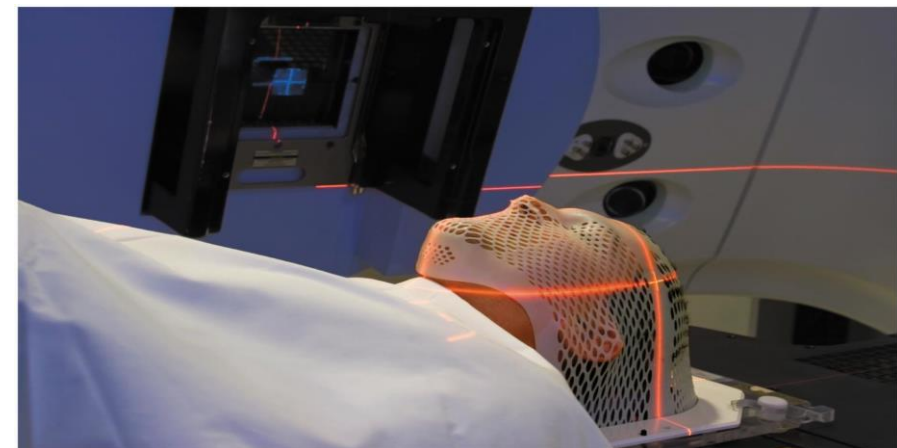
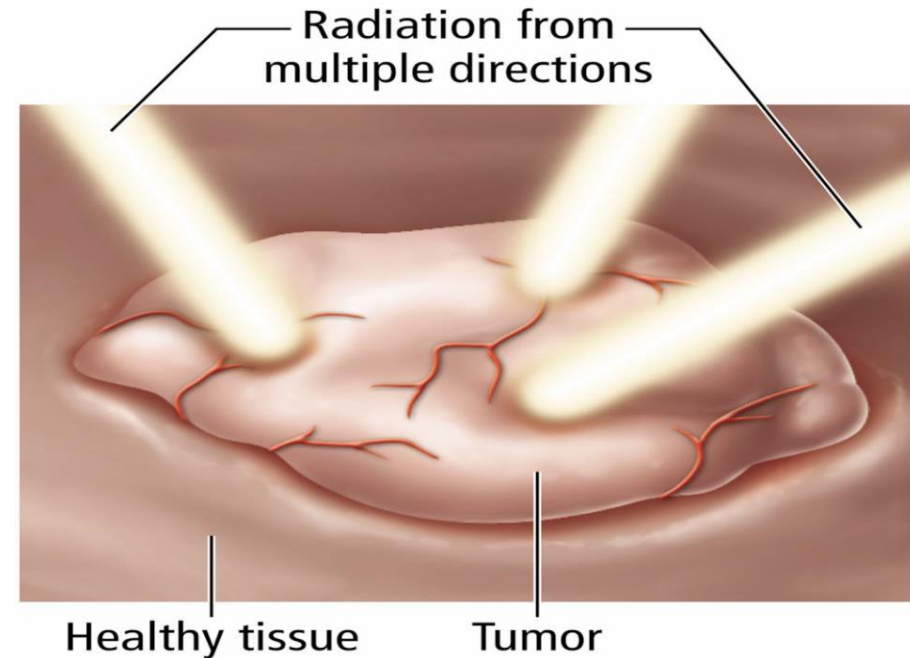
Το Ηλεκτρομαγνητικό Φάσμα

- Το ορατό φώς αποτελεί μόνο ένα μικρό μέρος των μηκών του φωτός –καλούμενο **ηλεκτρομαγνητικό φάσμα**
- Μικρό μήκος κύματος (μεγάλη συχνότητα) φωτός έχει μεγάλη ενέργεια
 - ✓ Τα ραδιοκύματα έχουν την μικρότερη ενέργεια
 - ✓ Οι ακτίνες γ του φωτός έχουν την υψηλότερη ενέργεια
- Η υψηλής ενέργειας ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία μπορεί δυνητικά να βλάψει τα βιολογικά μόρια-Ιονίζουσα ακτινοβολία



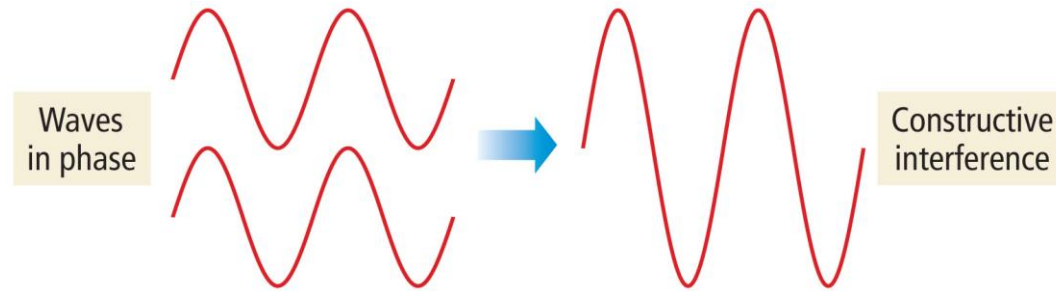
Ακτινοθεραπεία για καρκίνο

- 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. Η ιονίζουσα ακτινοβολία καταστρέφει τα μόρια εντός των κυττάρων του όγκου που μεταφέρουν γενετικές πληροφορίες-πληροφορίες απαραίτητες για το κύτταρο να αναπτυχθεί και να διαιρεθεί.

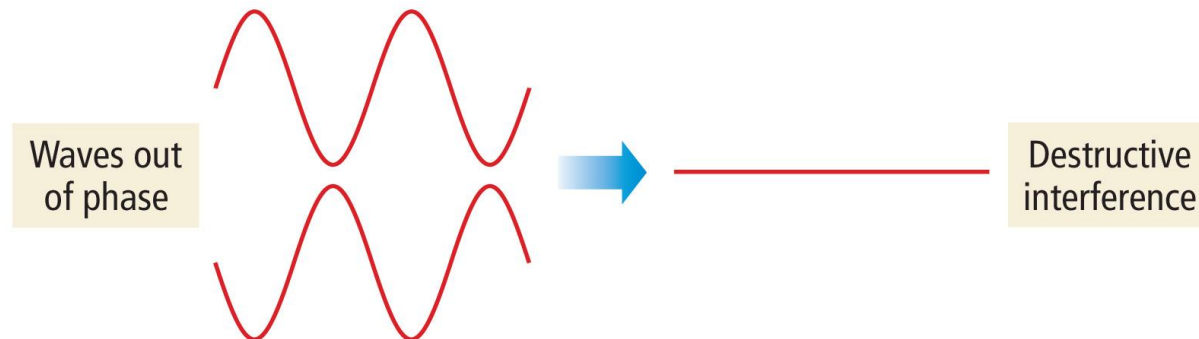


Συμβολή κυμάτων

- 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**

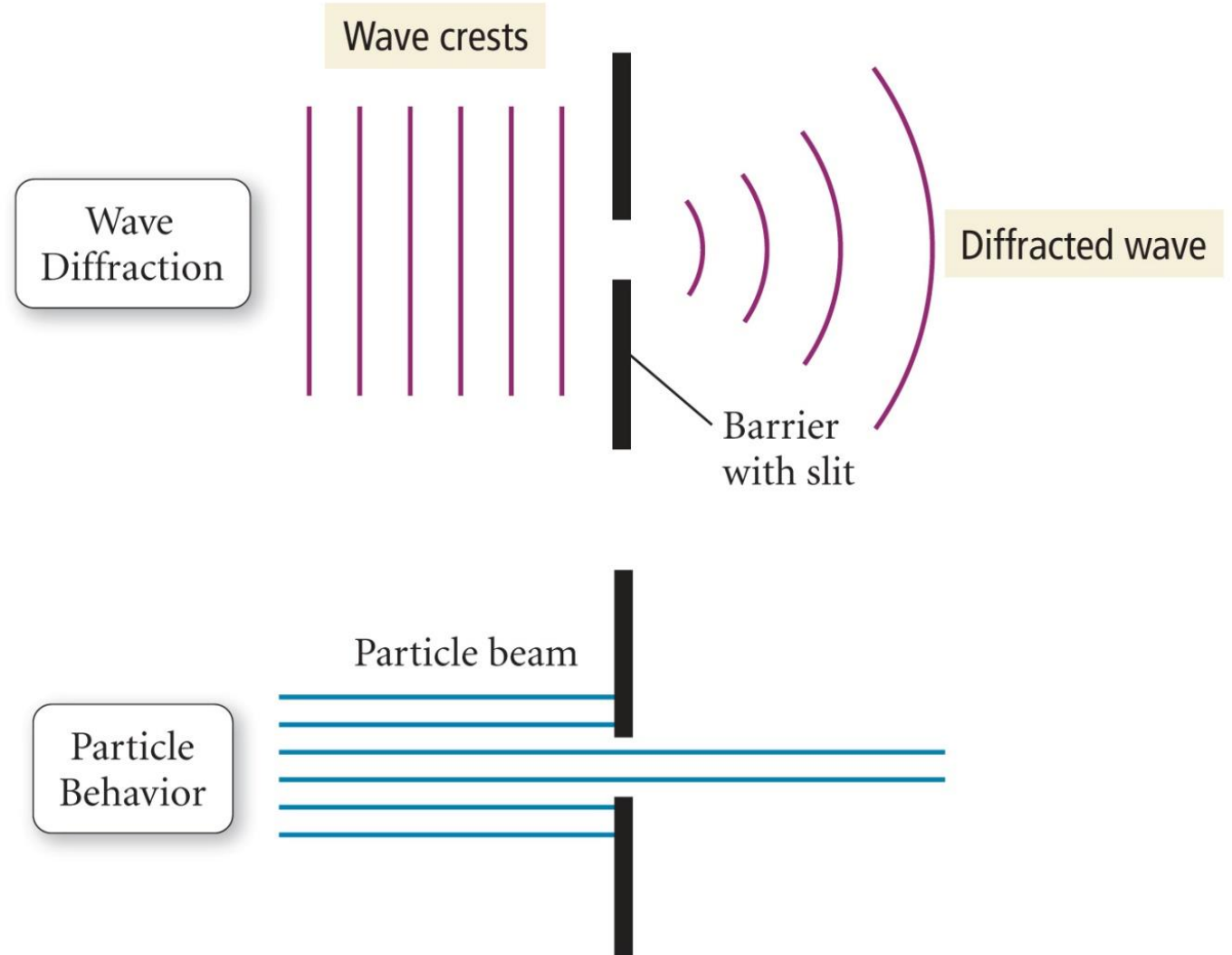


- Όταν τα κύματα αλληλεπιδρούν και εξουδετερώνονται – αυτό καλείται αποικοδομητική (καταστρεπτική) συμβολή
 - Τα κύματα είναι **εκτός φάσεως**



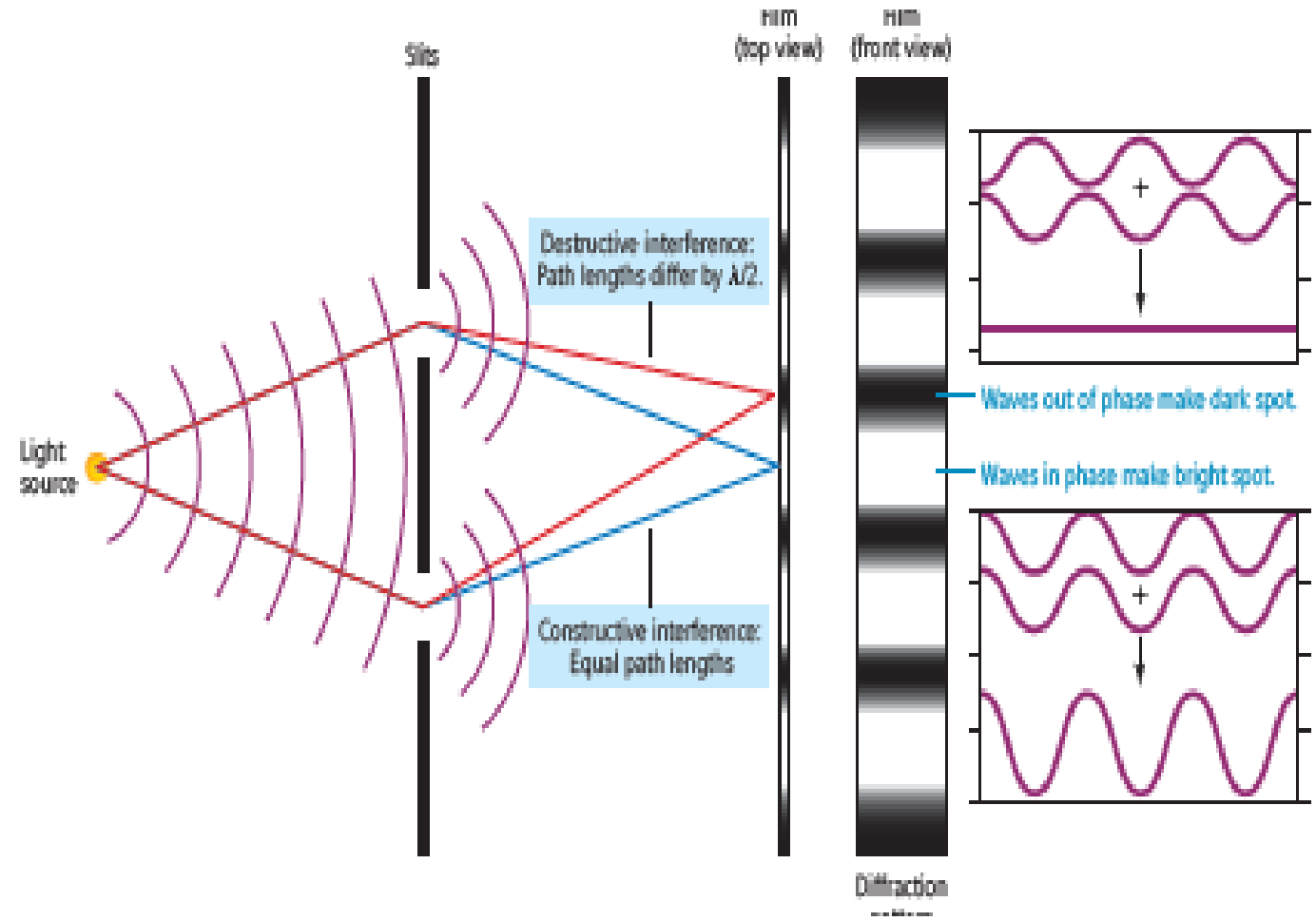
Περίθλαση κυμάτων

- Όταν τα διαδιδόμενα κύματα συναντούν ένα εμπόδιο ή άνοιγμα σε ένα φράγμα που είναι του ίδιου μεγέθους με το μήκος κύματος, κάμπτονται γύρω από αυτό - αυτό καλείται περίθλαση. Τα μετακινούμενα σωματίδια δεν υφίστανται περίθλαση



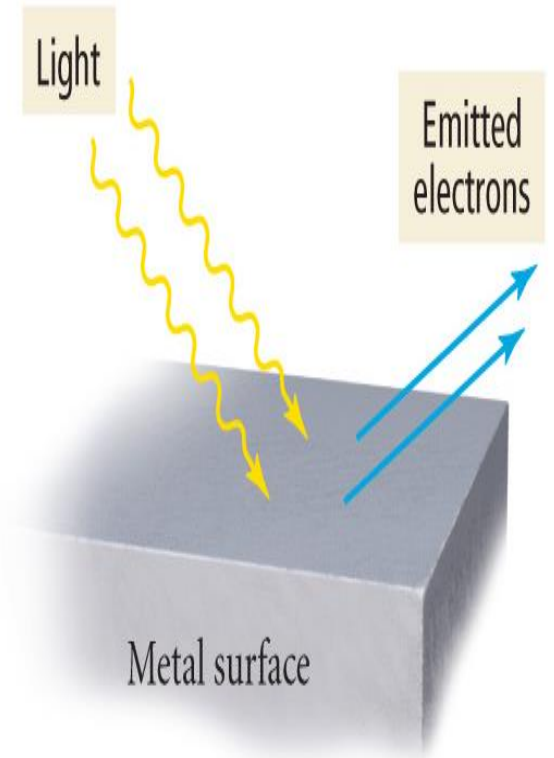
Μοτίβο συμβολής κυμάτων

- Η περίθλαση του φωτός μέσω δύο σχισμών που διαχωρίζονται από μια απόσταση συγκρινόμενη με το μήκος κύματος έχει ως αποτέλεσμα ένα μοτίβο συμβολής των κυμάτων που υπέστησαν περίθλαση
- Ένα μοτίβο συμβολής είναι ένα χαρακτηριστικό όλων των κυμάτων του φωτός



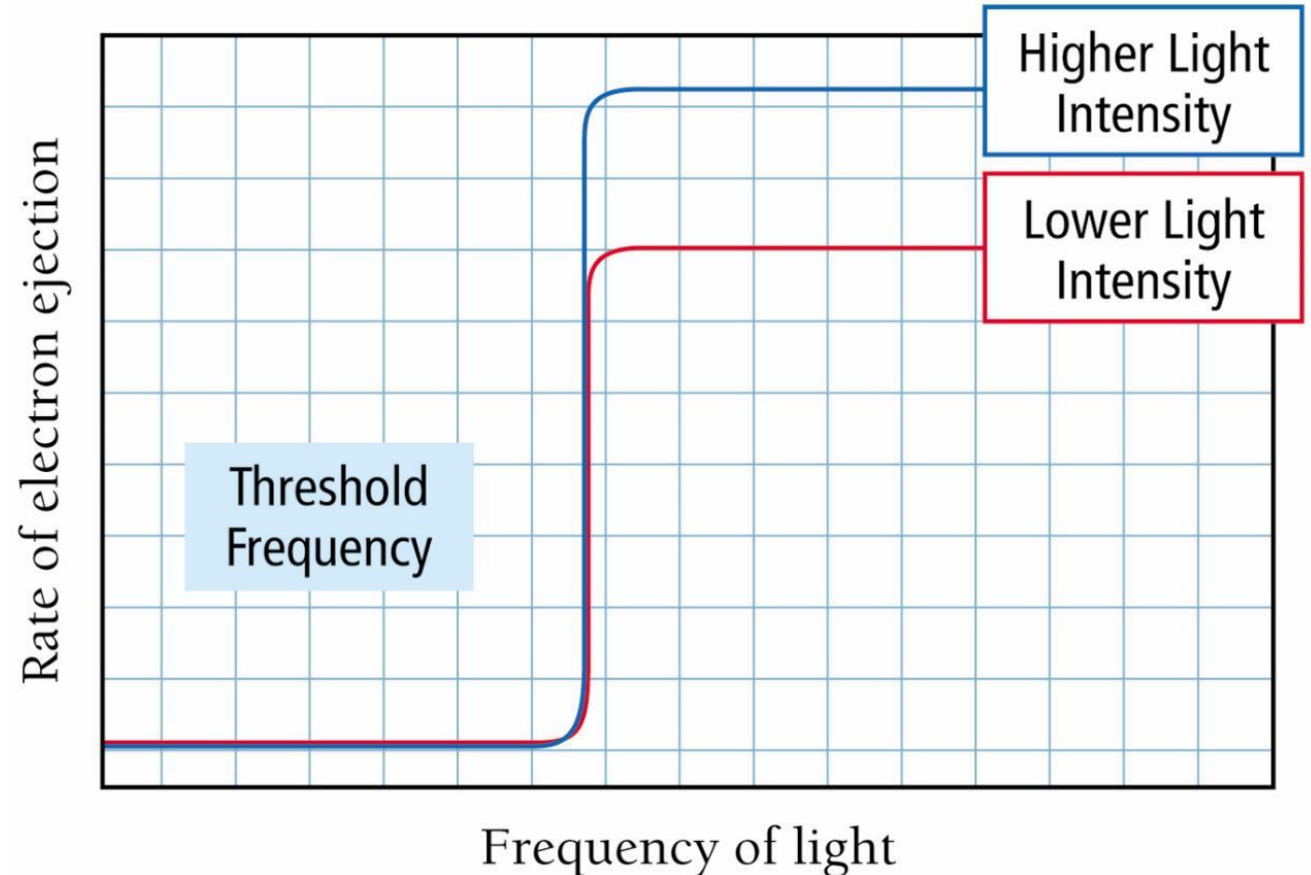
Το Φωτοηλεκτρικό Φαινόμενο

- Πολλά μέταλλα εκπέμπουν ηλεκτρόνια όταν το φως προσκρούει στην επιφάνειά τους
 - Αυτό ονομάζεται φωτοηλεκτρικό φαινόμενο
- Η κλασική κυματική θεωρία απέδωσε αυτό το φαινόμενο στην ενέργεια του φωτός που μεταφέρθηκε στο ηλεκτρόνιο
- Σύμφωνα με αυτή την θεωρία, εάν το μήκος κύματος του φωτός γίνεται βραχύτερο ή η ένταση γίνεται φωτεινότερη, περισσότερα ηλεκτρόνια εξωθούνται
 - ✓ Υπενθύμιση: Σχέση ενέργειας –πλάτους-συχνότητας? Ανάλογη με το πλάτος και την συχνότητα
 - ✓ Εάν το φως είναι αμυδρό, χρειάζεται κάποιος χρόνος πριν την εκπομπή των ηλεκτρονίων
 - ✓ Για να δοθεί χρόνος στα ηλεκτρόνια να απορροφήσουν αρκετή ενέργεια



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



Η επεξήγηση από τον Einstein

- Ο Einstein εισηγήθηκε ότι η ενέργεια του φωτός μεταφέρθηκε στα άτομα υπό την μορφή δέσμης- πακέτων, που ονομάστηκαν κβάντα ή φωτόνια
- Η ενέργεια ενός φωτονίου φωτός ήταν ευθέως ανάλογη με την συχνότητά του
 - ✓ Αντιστρόφως ανάλογη με το μήκος κύματος
 - ✓ Η σταθερά αναλογίας ονομάζεται σταθερά του **Planck (h)** με τιμή $6.626 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$

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

Η ορμή του φωτονίου

- Εάν το φως είναι μια δέσμη σωματιδίων, το καθένα από αυτά τα σωματίδια πρέπει να έχει μια ορμή. Χρησιμοποιώντας διάφορες εξισώσεις κίνησης ο Einstein έδειξε ότι ένα φωτόνιο έχει ορμή p παρόλο που έχει σχεδόν μηδενική μάζα!

$$p = h\nu/c \text{ και εφόσον } c = \nu\lambda \quad \mathbf{p = h/\lambda}$$

- Η παρατήρηση της ορμής του φωτονίου (Arthur Compton, 1927 Nobel Prize) αποτελεί άλλη μια μαρτυρία για την σωματιδιακή συμπεριφορά του φωτός

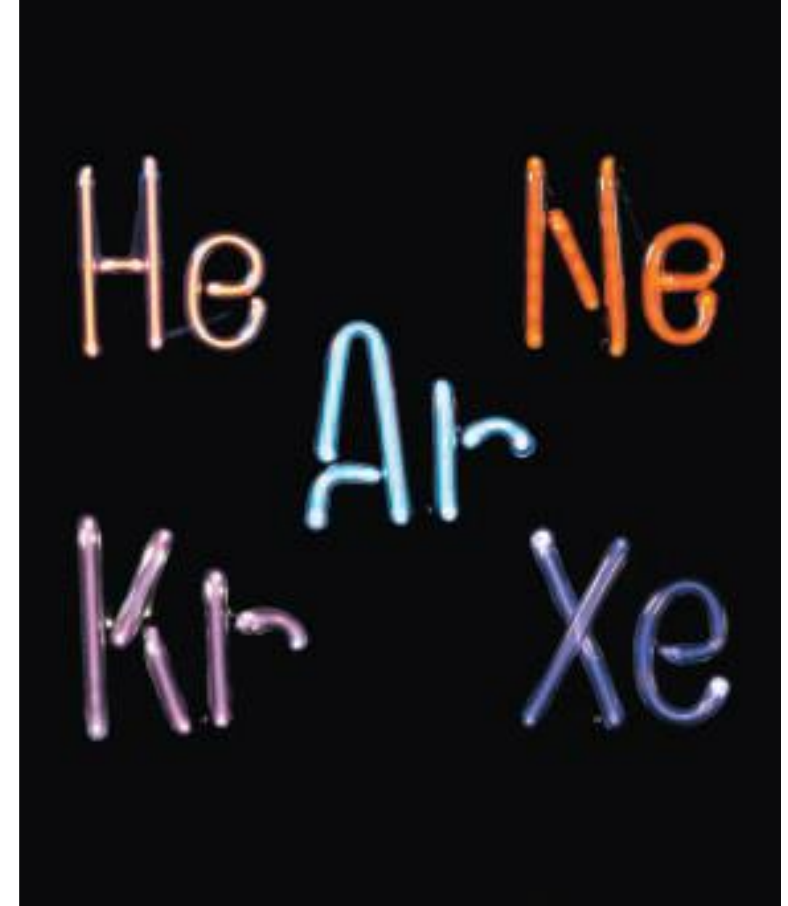
Τα αποσπώμενα ηλεκτρόνια

- 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

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

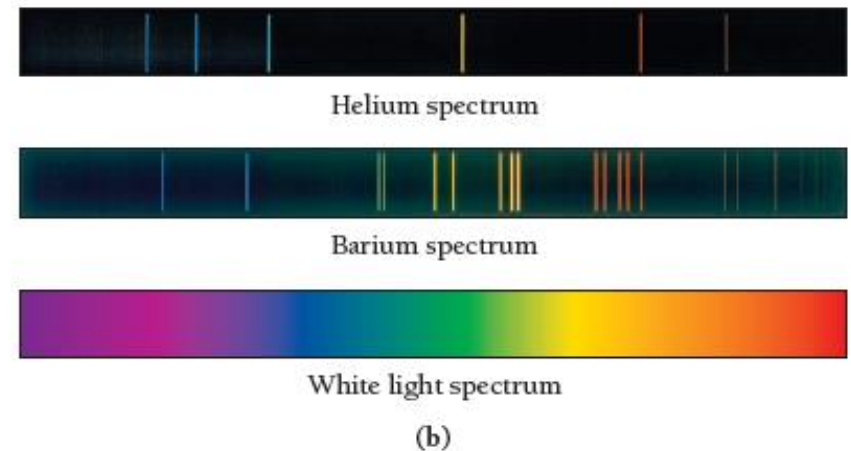
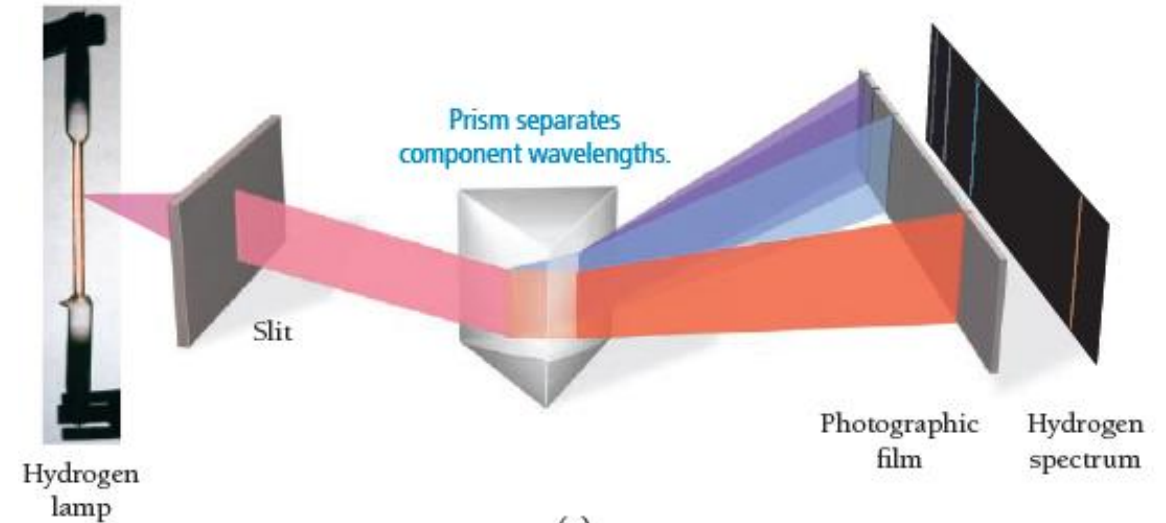
Ατομική φασματοσκοπία

- Η μελέτη της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας που απορροφάται και εκπέμπεται από τα άτομα.
- Τα άτομα κάθε στοιχείου εκπέμπουν φως χαρακτηριστικού χρώματος. Τα άτομα του υδραργύρου, για παράδειγμα, εκπέμπουν φως που φαίνεται μπλε, τα άτομα του ηλίου εκπέμπουν φως που φαίνεται ιώδες, και τα άτομα υδρογόνου εκπέμπουν φως που φαίνεται κοκκινωπό.



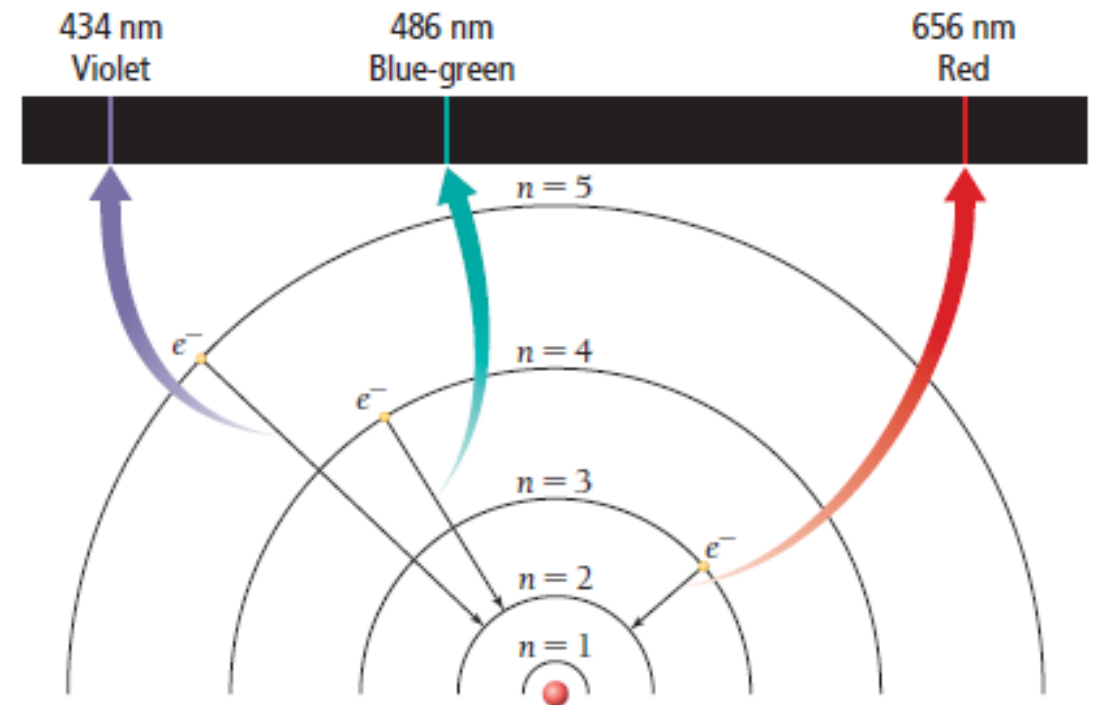
Φάσματα έκπομπης

- 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 φάσμα εκπομπής ενός συγκεκριμένου στοιχείου είναι πάντα το ίδιο
- Το φάσμα του λευκού φωτός είναι συνεχές
- Τα φάσματα εκπομπής του υδρογόνου, του ηλίου και του βαρίου δεν είναι συνεχή



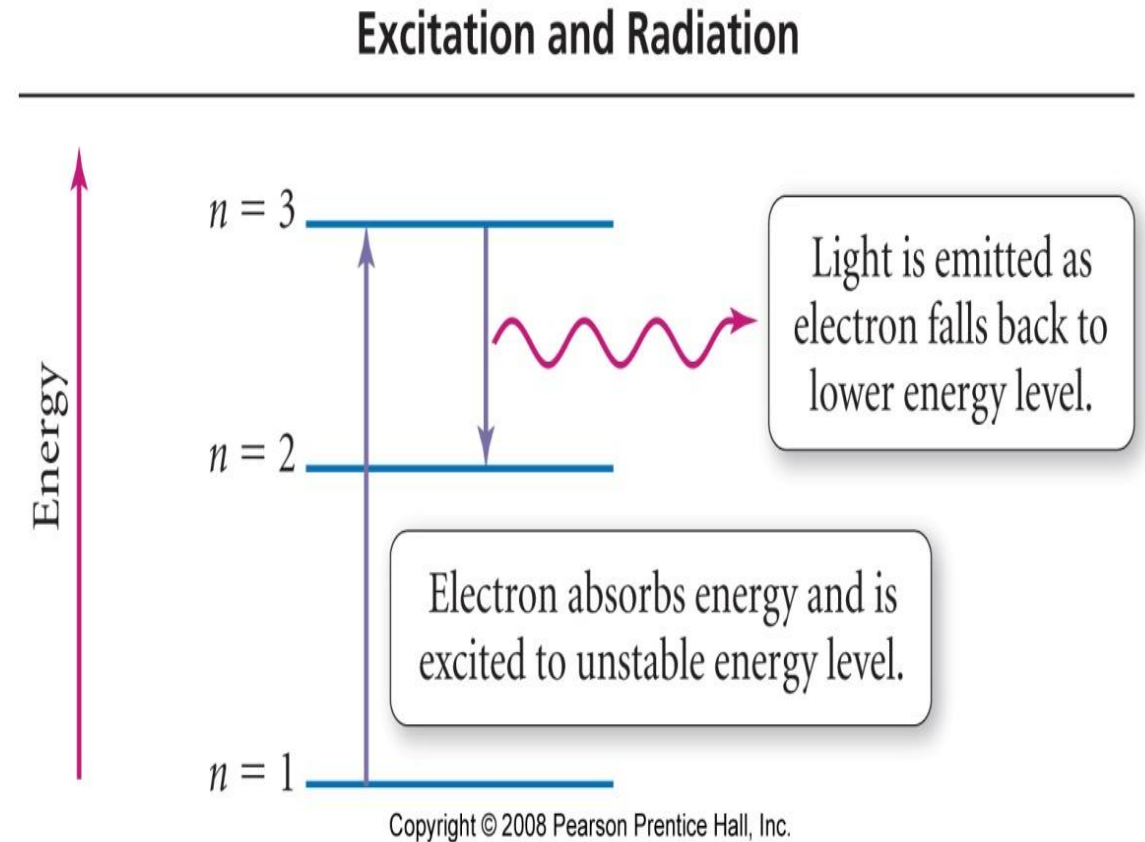
Το μοντέλο του Bohr

- Ο Δανός φυσικός Niels Bohr (1885-1962) προσπάθησε να αναπτύξει ένα μοντέλο για να εξηγήσει το ατομικό φάσμα του υδρογόνου.
- το ηλεκτρόνιο κινείται γύρω από τον πυρήνα σε κυκλική τροχιά - οι τροχιές του Μπορ υπάρχουν μόνο σε συγκεκριμένες, σταθερές αποστάσεις από τον πυρήνα.
- Η ενέργεια κάθε τροχιάς Bohr είναι επίσης σταθερή, ή κβαντισμένη, διαθέτουν «μια ιδιότυπη, μηχανικά ανεξήγητη, σταθερότητα».
- Ένα ηλεκτρόνιο που περιφέρεται γύρω από τον πυρήνα σε στάσιμη κατάσταση δεν εκπέμπει ακτινοβολία. Μόνο όταν ένα ηλεκτρόνιο μεταπηδά, ή κάνει μια μετάβαση, από μια στάσιμη κατάσταση σε μια άλλη, εκπέμπεται ή απορροφάται ακτινοβολία



Ηλεκτρονικές Μεταπτώσεις

- Για μια μετάβαση σε υψηλότερη ενεργειακή κατάσταση, το ηλεκτρόνιο πρέπει να προσλάβει το κατάλληλο ποσό ενέργειας που αντιστοιχεί στην διαφορά ενέργειας μεταξύ τελικής και αρχικής κατάστασης
- Ηλεκτρόνια σε υψηλές ενεργειακές καταστάσεις είναι ασταθή και τείνουν να αποβάλλουν ενέργεια και μεταπίπτουν σε χαμηλότερες ενεργειακές καταστάσεις
 - ✓ Ενέργεια απελευθερώνεται ως φωτόνιο φωτός
- Κάθε γραμμή στο φάσμα εκπομπής αντιστοιχεί στην διαφορά ενέργειας μεταξύ των δύο ενεργειακών καταστάσεων



Η ύλη ως κύμα

1924 Louis de Broglie (PhD thesis και 1929 Nobel Prize!)

- Οδηγήθηκε στο συλλογισμό ότι καθώς το φως έχει κυματικές και σωματιδιακές ιδιότητες, η ύλη (ηλεκτρόνια) πρέπει να έχει και σωματιδιακές και κυματικές ιδιότητες Χρησιμοποιώντας την ιδέα του Einstein ότι η ορμή ενός φωτονίου είναι $(p) = h/\lambda$, ο de Broglie πρότεινε:

Μήκος κύματος ενός σωματιδίου = $\lambda = h/p$ **h = η σταθερά του Planck**

m = μάζα του σωματιδίου

v = ταχύτητα του σωματιδίου

mv = γραμμική ορμή (p) επομένως $\lambda = h/(mv)$

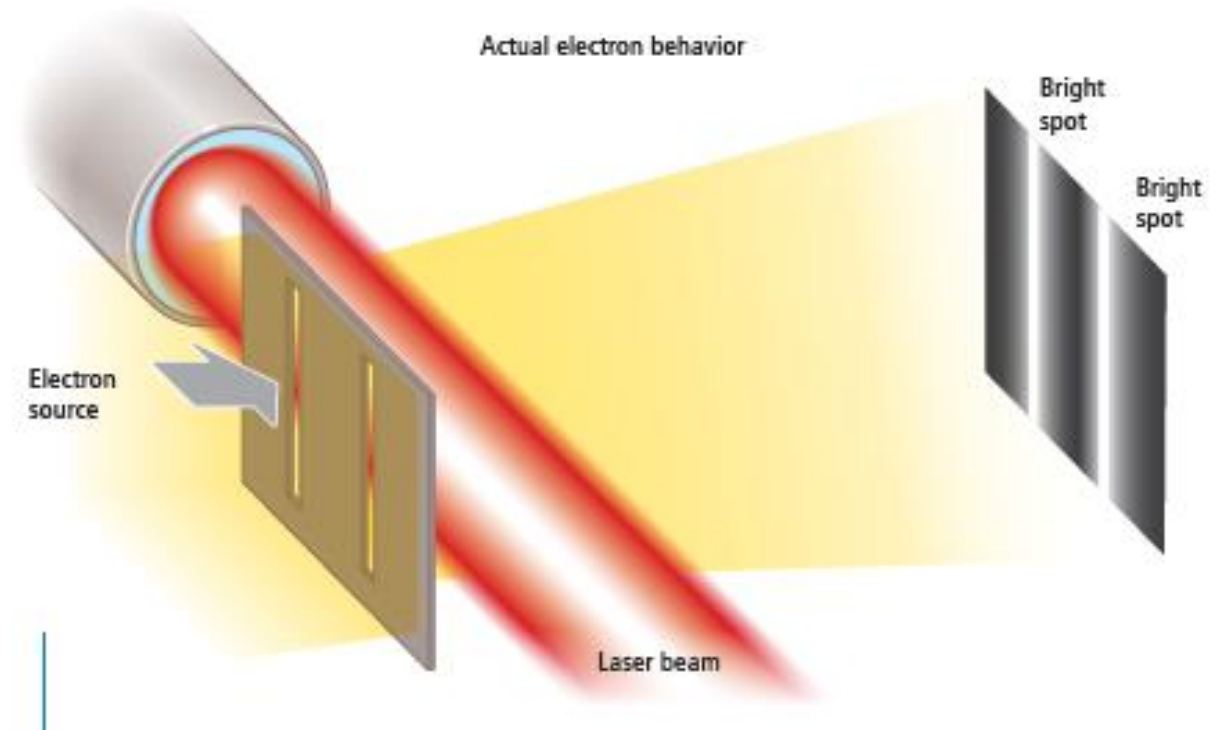
Αρα το μήκος κύματος de Broglie για τη κυματική ύλη είναι

$\lambda = h/p = h/(mv)$

Η Κυματική και σωματιδιακή φύση του ηλεκτρονίου

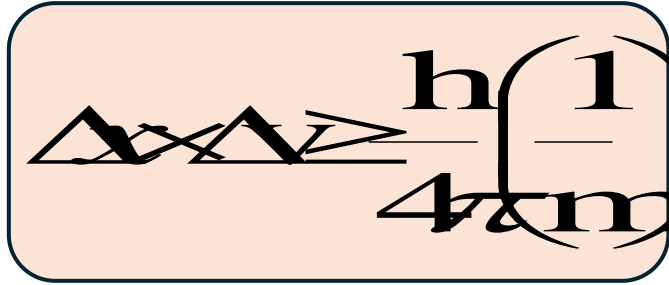
P. A. M. Dirac (1902–1984)

“Υπάρχει ένα όριο μεταξύ της δυνατότητας λεπτομερούς παρατήρησης και του μεγέθους της διαταραχής που συνοδεύει την παρατήρηση - ένα όριο που είναι εγγενές της φύσης των πραγμάτων και δεν μπορεί ποτέ να ξεπεραστεί είτε από βελτιωμένη τεχνική είτε από αυξημένες δεξιότητες από την πλευρά του παρατηρητή.”



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

Η Αρχή της Αβεβαιότητας

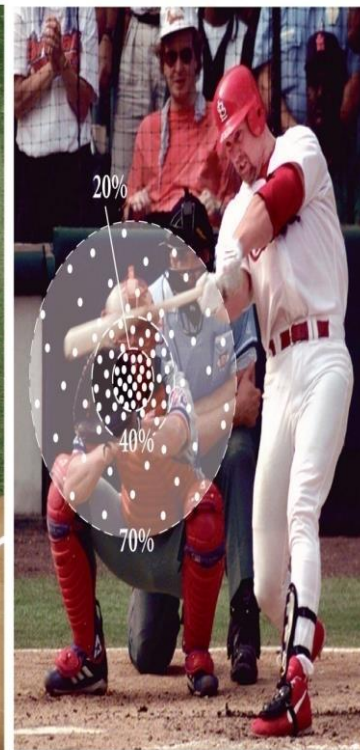
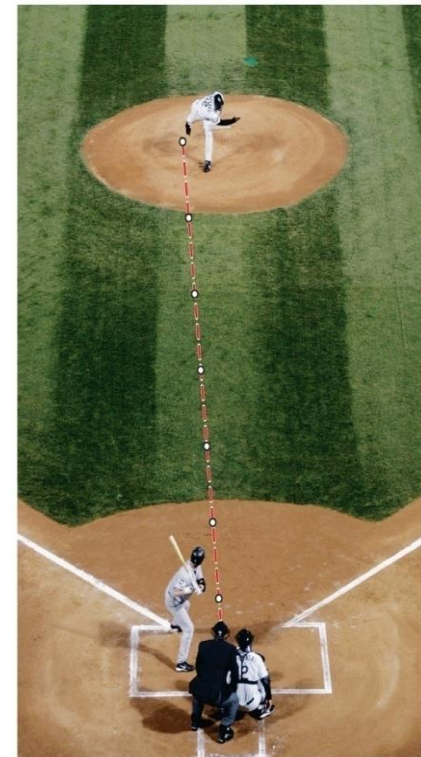
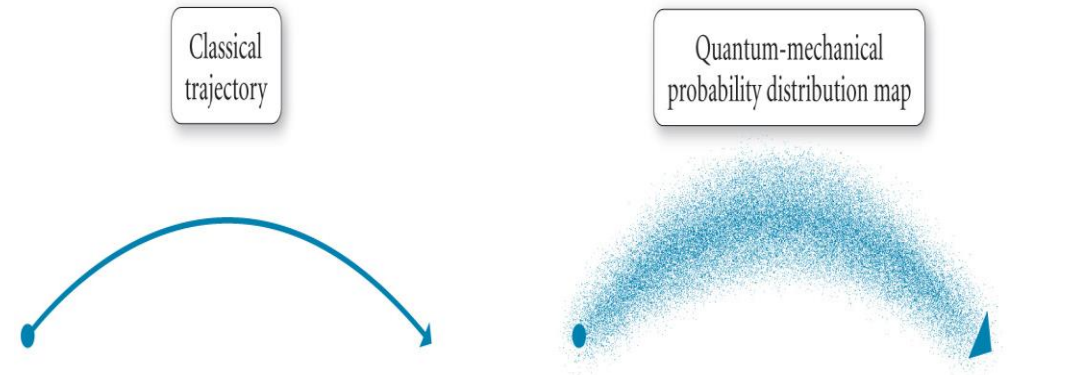


Werner Heisenberg (1901-1976)

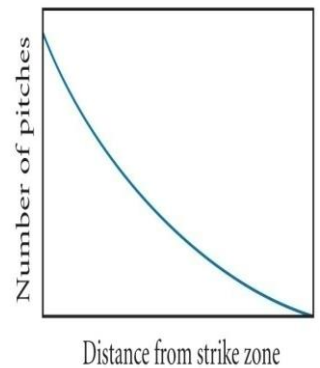
- Ο Heisenberg όρισε ότι το γινόμενο των αβεβαιοτήτων σε αμφότερες την θέση και την ταχύτητα ενός σωματιδίου είναι αντιστρόφως ανάλογο της μάζας του
 - ✓ $x =$ θέση, $\Delta x =$ αβεβαιότητα της θέσης
 - ✓ $v =$ ταχύτητα, $\Delta v =$ αβεβαιότητα της ταχύτητας
 - ✓ $m =$ μάζα
- Αυτό σημαίνει ότι όσο περισσότερο με ακρίβεια γνωρίζουμε την θέση ενός μικρού σωματιδίου όπως του ηλεκτρονίου, τόσο λιγότερα γνωρίζουμε για την ταχύτητά του
 - ✓ Και αντιστρόφως

Προσδιοριστία vs. Απροσδιοριστία

- Σύμφωνα με την κλασική φυσική, τα σωματίδια κινούνται σε μια οδό που καθορίζεται από την ταχύτητα του σωματιδίου, την θέση και από τις δυνάμεις που επιδρούν σε αυτό
 - ✓ **προσδιοριστία = καθορισμένο, προβλέψιμο μέλλον**
- Επειδή δεν μπορούμε να γνωρίζουμε αμφότερες την θέση και την ταχύτητα ενός ηλεκτρονίου, δεν μπορούμε να προβλέψουμε την πορεία-οδό που θα ακολουθήσει
 - ✓ **απροσδιοριστία = μη καθορισμένο μέλλον, μπορεί να προβλεφθεί πιθανότητα**
- Το καλύτερο που μπορούμε να κάνουμε είναι να περιγράψουμε την πιθανότητα να βρεθεί ένα ηλεκτρόνιο σε κάποια περιοχή με την χρήση στατιστικών συναρτήσεων



The Quantum-Mechanical Strike Zone



Η Εξίσωση schrödinger

- Τα μικροσκοπικά σωματίδια, όπως τα ηλεκτρόνια στο περιβάλλον τους δεν υπακούουν στις κλασσικές εξισώσεις κίνησης. Τα ηλεκτρόνια πρέπει να επεξεργασθούν ως κύματα για να περιγραφεί η συμπεριφορά τους
- Το 1927 ο Erwin Schrödinger έγραψε μια εξίσωση της κίνησης σωματιδίων (όπως των ηλεκτρονίων) που εξηγεί την τις κυματικές τους ιδιότητες

Η εξίσωση Schrödinger $\hat{H}\Psi = E\Psi$

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

✓ Που προστίθενται για την κβαντοποίηση της ενέργειας του ηλεκτρονίου

➤ Κάθε τροχιακό καθορίζεται από τρεις σχετιζόμενους κβαντικούς αριθμούς:

✓ n , ο κύριος κβαντικός αριθμός

✓ l , ο γωνιακός κβαντικός αριθμός

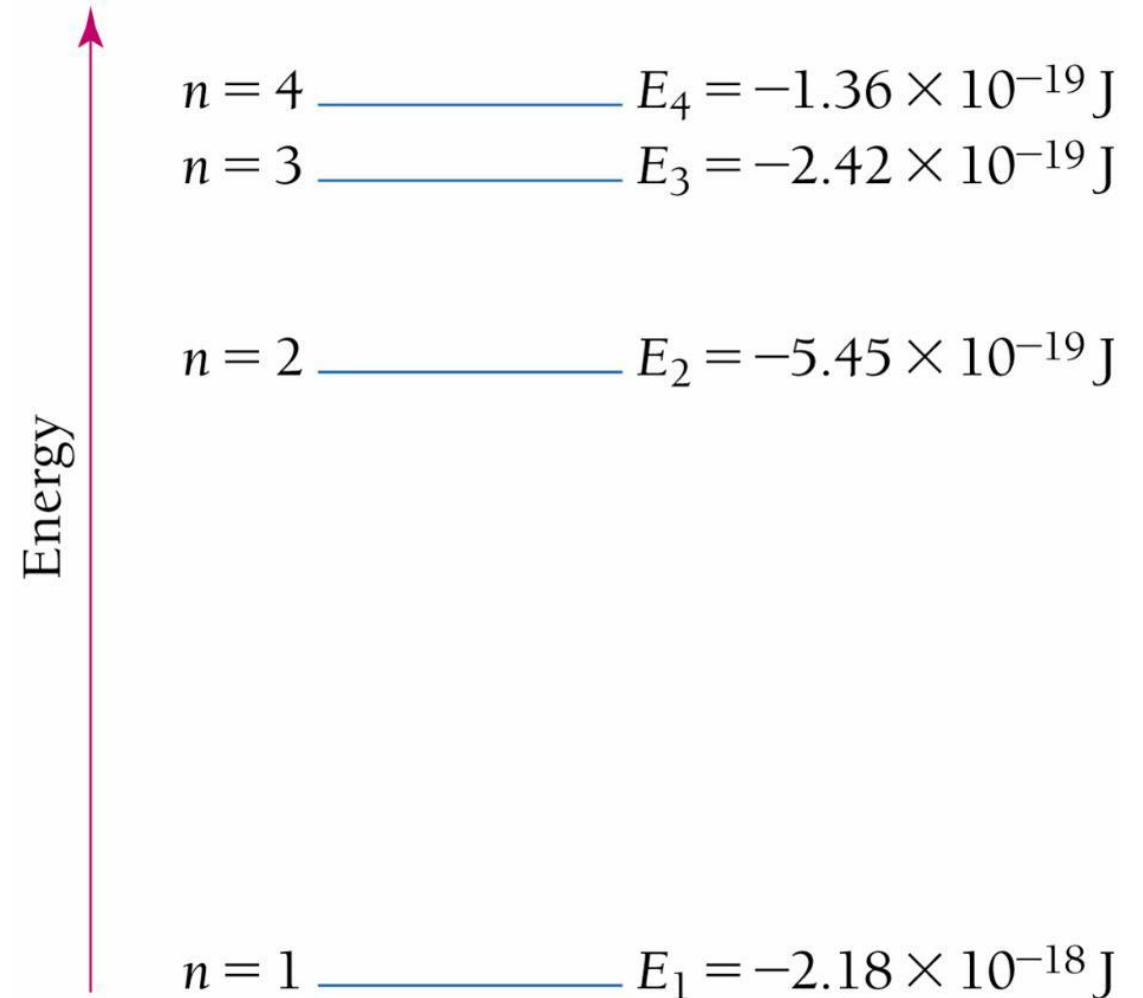
✓ m_l , ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός. Όλοι αυτοί οι κβαντικοί αριθμοί έχουν ακέραιες τιμές.

✓ 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, ...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)

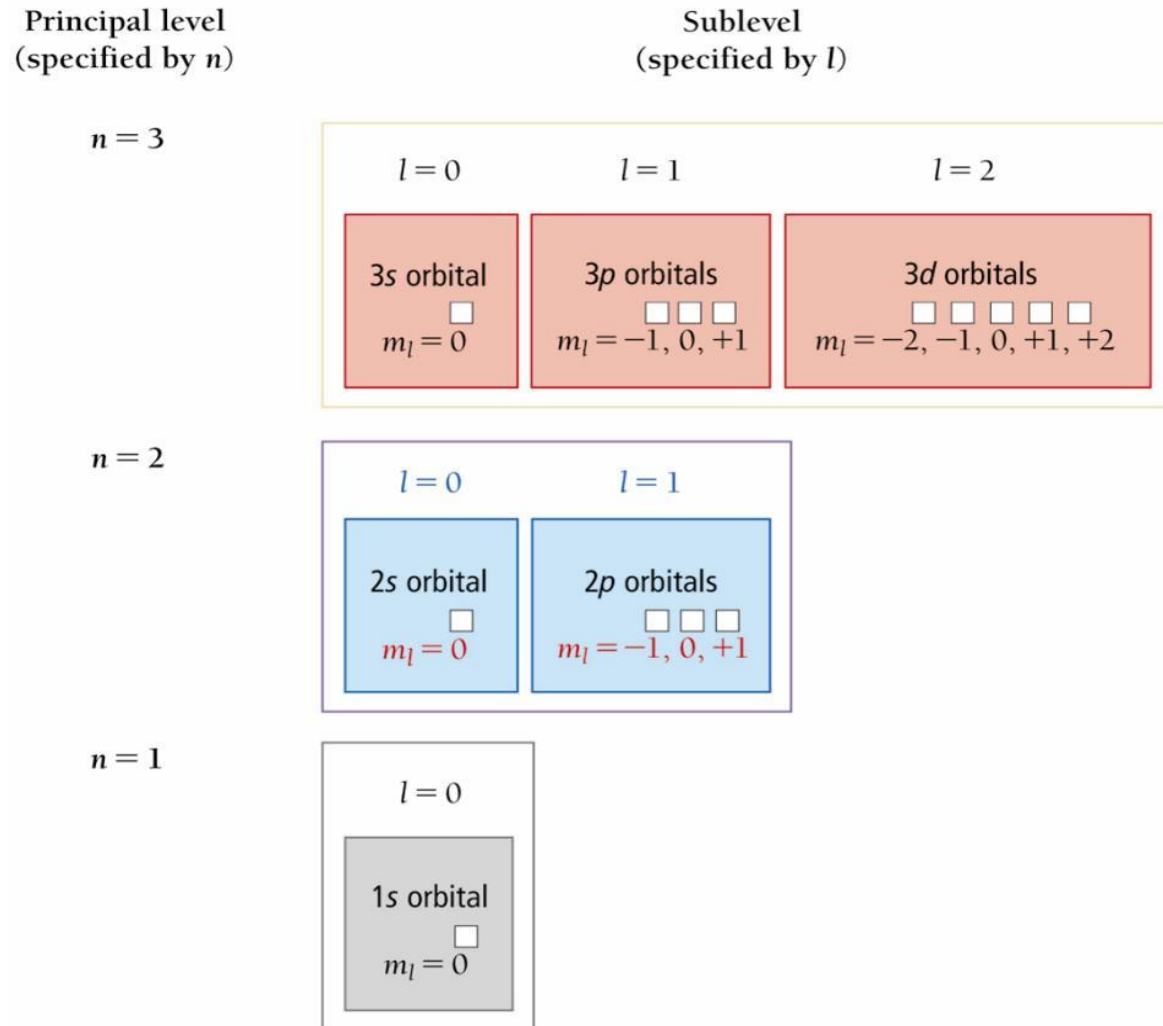
- Ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός είναι ένας ακέραιος αριθμός που καθορίζει τον προσανατολισμό του τροχιακού.
- Οι πιθανές τιμές του m_l είναι οι ακέραιες τιμές (συμπεριλαμβανομένου του μηδενός) που κυμαίνονται από $-l$ έως $+l$. Για παράδειγμα, εάν $l = 0$, τότε η μόνη πιθανή τιμή του m_l είναι το 0- 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 ($m_s = +\frac{1}{2}$) και σπιν προς τα κάτω ($m_s = -\frac{1}{2}$).

Τα τροχιακά στις 3 πρώτες στιβάδες

- Κάθε ειδικός συνδυασμός των τριών πρώτων κβαντικών αριθμών (n , l και m_l) προσδιορίζει ένα ατομικό τροχιακό.
- π.χ το τροχιακό με $n = 1$, $l = 0$ και $m_l = 0$ είναι γνωστό ως τροχιακό 1s. Το 1 στο 1s είναι η τιμή του n , και το s καθορίζει ότι $l = 0$. Υπάρχει μόνο ένα τροχιακό 1s σε ένα άτομο και η τιμή του m_l είναι μηδέν.
- Τα τροχιακά με την ίδια τιμή του n βρίσκονται στην ίδια κύρια στιβάδα (ή φλοιό).
- Τα τροχιακά με την ίδια τιμή του n και του l λέγεται ότι βρίσκονται στο ίδιο υποστιβάδα (ή υποφλοιό).

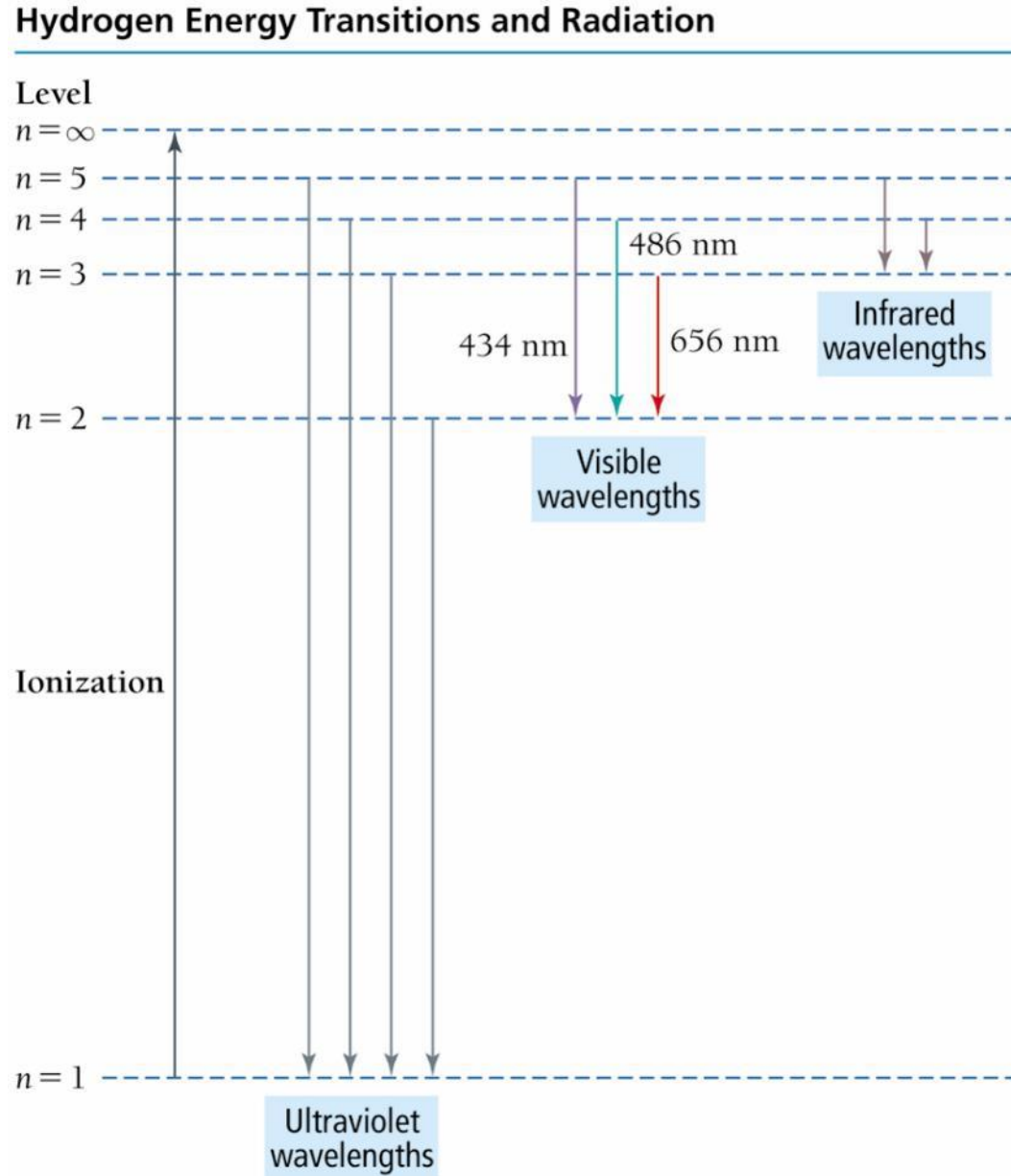


Πρόβλεψη του Φάσματος του Υδρογόνου

- Τα μήκη κύματος των γραμμών στο φάσμα εκπομπής του υδρογόνου μπορούν να προβλεφθούν με τον υπολογισμό της διαφοράς ενέργειας μεταξύ των δύο καταστάσεων
- Για ένα ηλεκτρόνιο σε ενεργειακή κατάσταση n , υπάρχουν $(n - 1)$ ενεργειακές καταστάσεις που μπορεί να μεταπηδήσει, επομένως $(n - 1)$ γραμμές μπορεί να δημιουργήσει
- Αμφότερα τα μοντέλα του Bohr και τα Κβαντομηχανικά μπορούν να προβλέψουν αυτές τις γραμμές με μεγάλη ακρίβεια

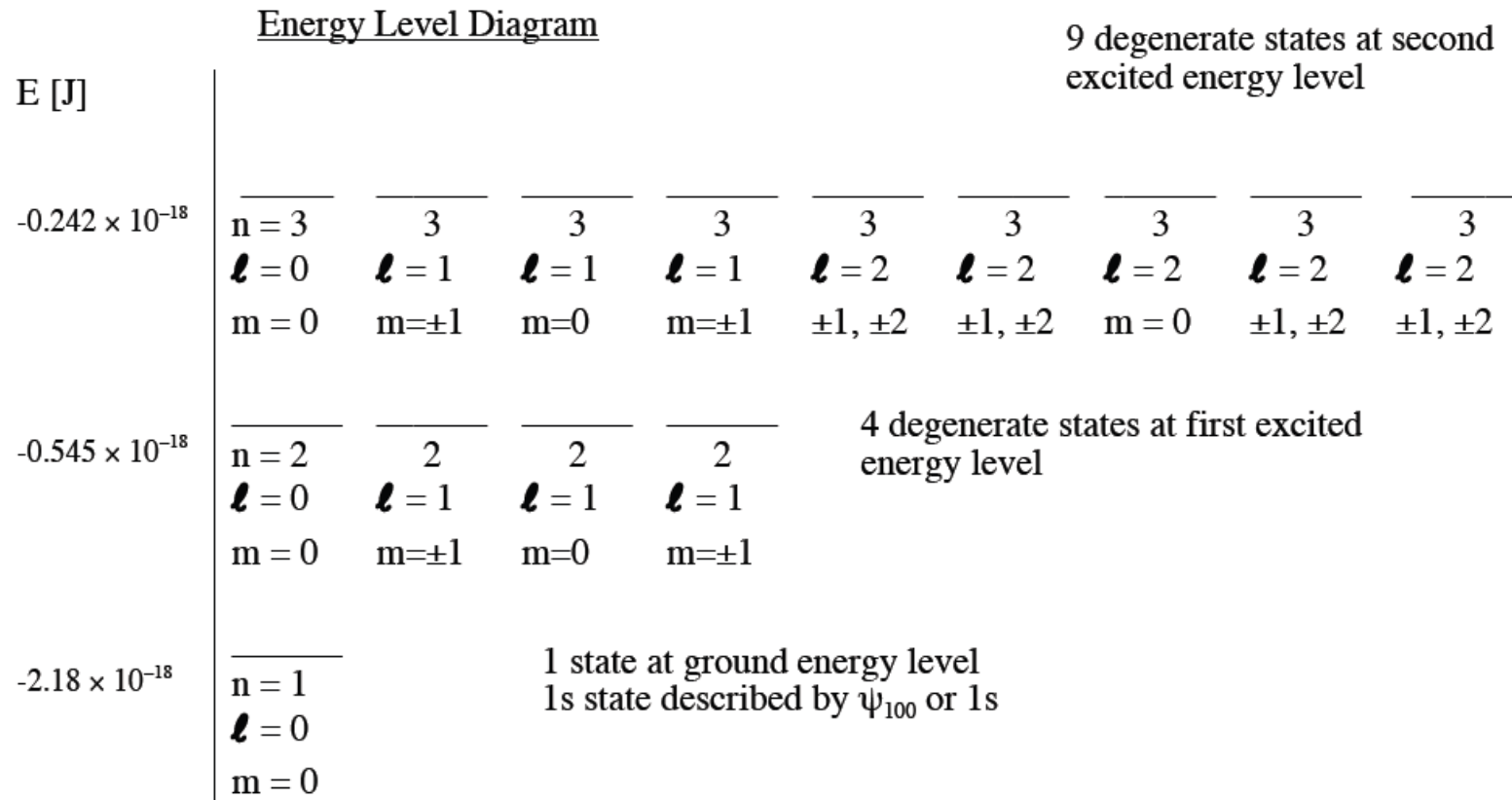
$$E_n = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}$$
$$\frac{hc}{\lambda} = E_2 - E_1 = -\frac{13.6 \text{ eV}}{2^2} - \left(-\frac{13.6 \text{ eV}}{1^2}\right)$$
$$\frac{hc}{\lambda} = 10.2 \text{ eV}$$
$$\lambda = \frac{hc}{10.2 \text{ eV}} = 97.3 \text{ nm}$$

Ενεργειακές Μεταπτώσεις του Υδρογόνου



Εκφυλισμένα τροχιακά

- Για οποιαδήποτε κύριο κβαντικό αριθμό n , υπάρχουν n^2 εκφυλισμένα τροχιακά για το υδρογόνο H (ή για οποιαδήποτε άλλο άτομο με 1 ηλεκτρόνιο)

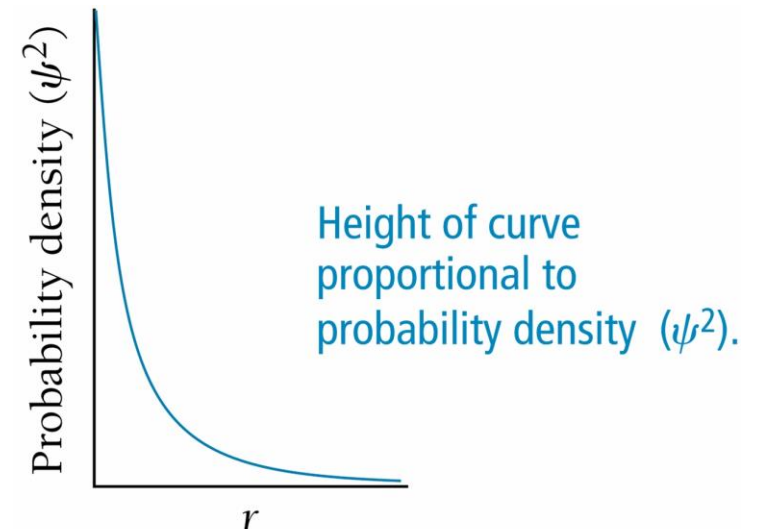
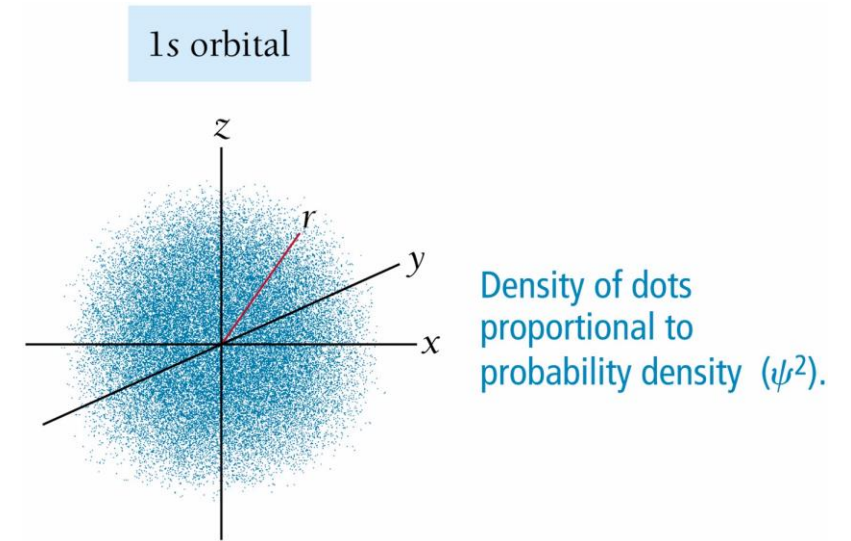


Το τροχιακό 1s

- 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



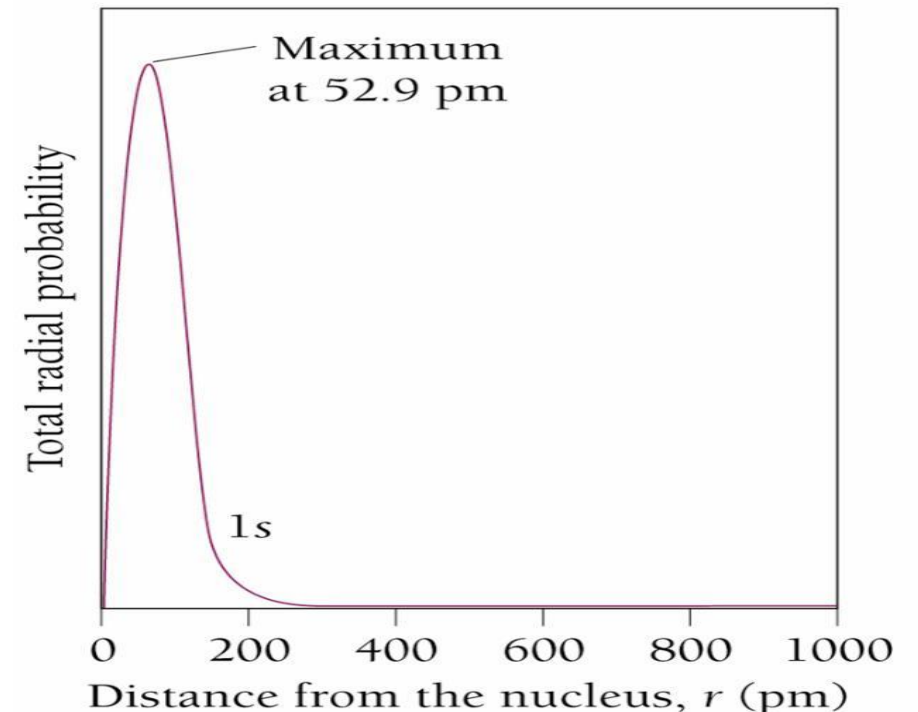
Ολική ακτινική πιθανότητα

- 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) = $\frac{\text{πιθανότητα}}{\text{μοναδα όγκου}}$ x όγκος σε στιβάδα r

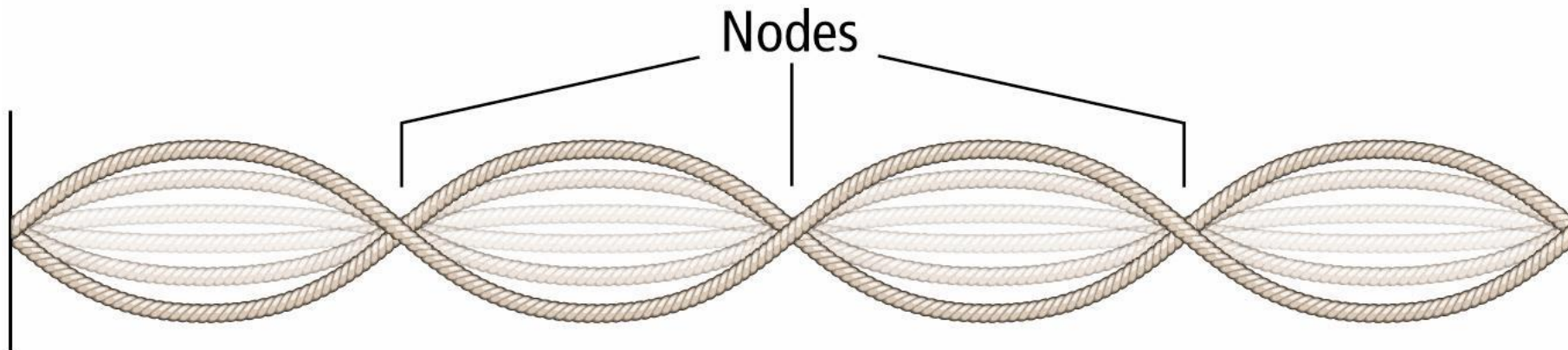
- Η συνάρτηση ακτινικής κατανομής αντιπροσωπεύει, όχι την πυκνότητα πιθανότητας σε ένα σημείο r , αλλά τη ολική πιθανότητα σε μια ακτίνα r .
- Το σχήμα της συνάρτησης ακτινικής κατανομής είναι το αποτέλεσμα του πολλαπλασιασμού δύο συναρτήσεων με αντίθετες τάσεις στο r . Οι δύο συναρτήσεις είναι:
 1. Της πυκνότητας πιθανότητας (Ψ^2), η οποία είναι η πιθανότητα ανά μονάδα όγκου και μειώνεται όσο αυξάνεται το r - και
 2. ο όγκος της λεπτής στοιβάδας, η οποία αυξάνεται όσο αυξάνεται το r .

1s Radial Distribution Function



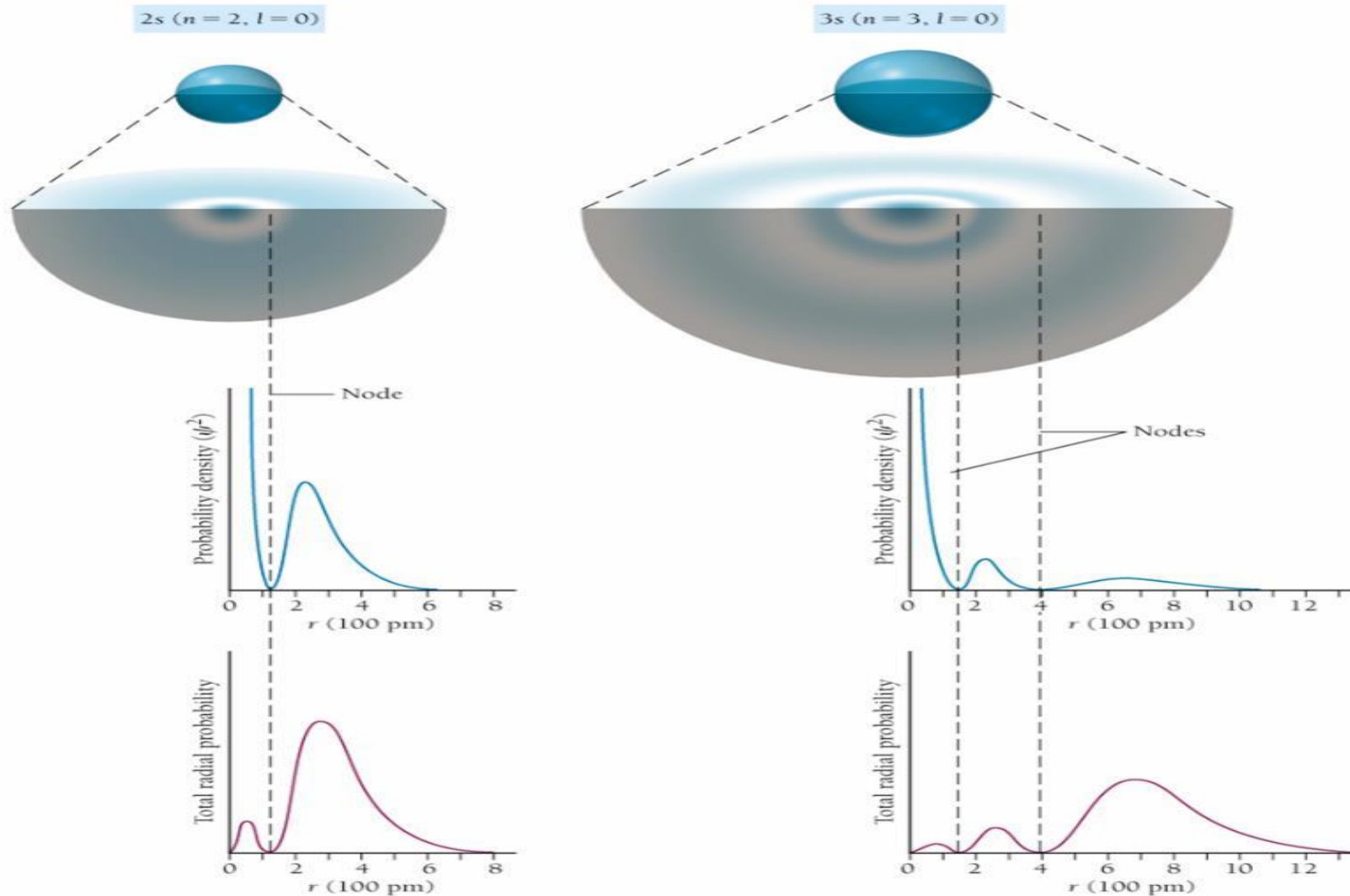
Η έννοια του κόμβου

- 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.
- Μπορούμε να δούμε τους κόμβους σε ένα τροχιακό πιο καθαρά κοιτάζοντας σε μια εγκάρσια τομή διαμέσου του τροχιακού.
- Διαγράμματα πιθανότητας πυκνότητας και της ακτινικής συνάρτησης κατανομής ως συνάρτηση του r αποκαλύπτουν την παρουσία των κόμβων.
- Η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε έναν κόμβο είναι μηδέν.
- Γενικά ένα τροχιακό έχει $n - 1 - l$ ακτινικούς κόμβους

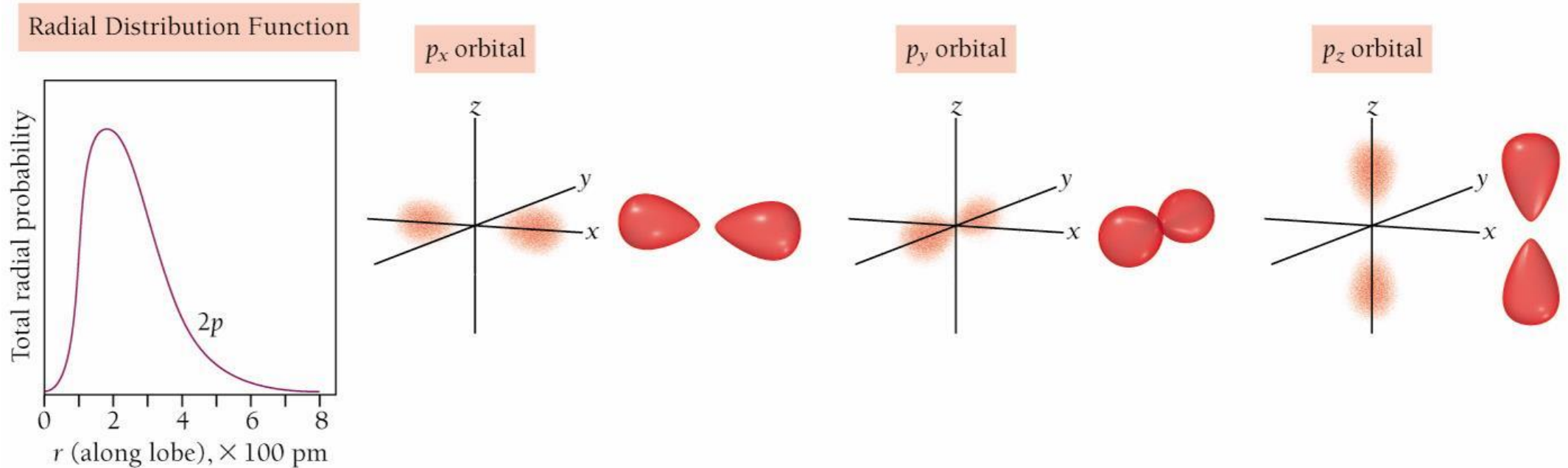


Οι πιθανότητες πυκνότητας και οι συναρτήσεις ακτινικής κατανομής για τα τροχιακά 2s και 3s

The 2s and 3s Orbitals



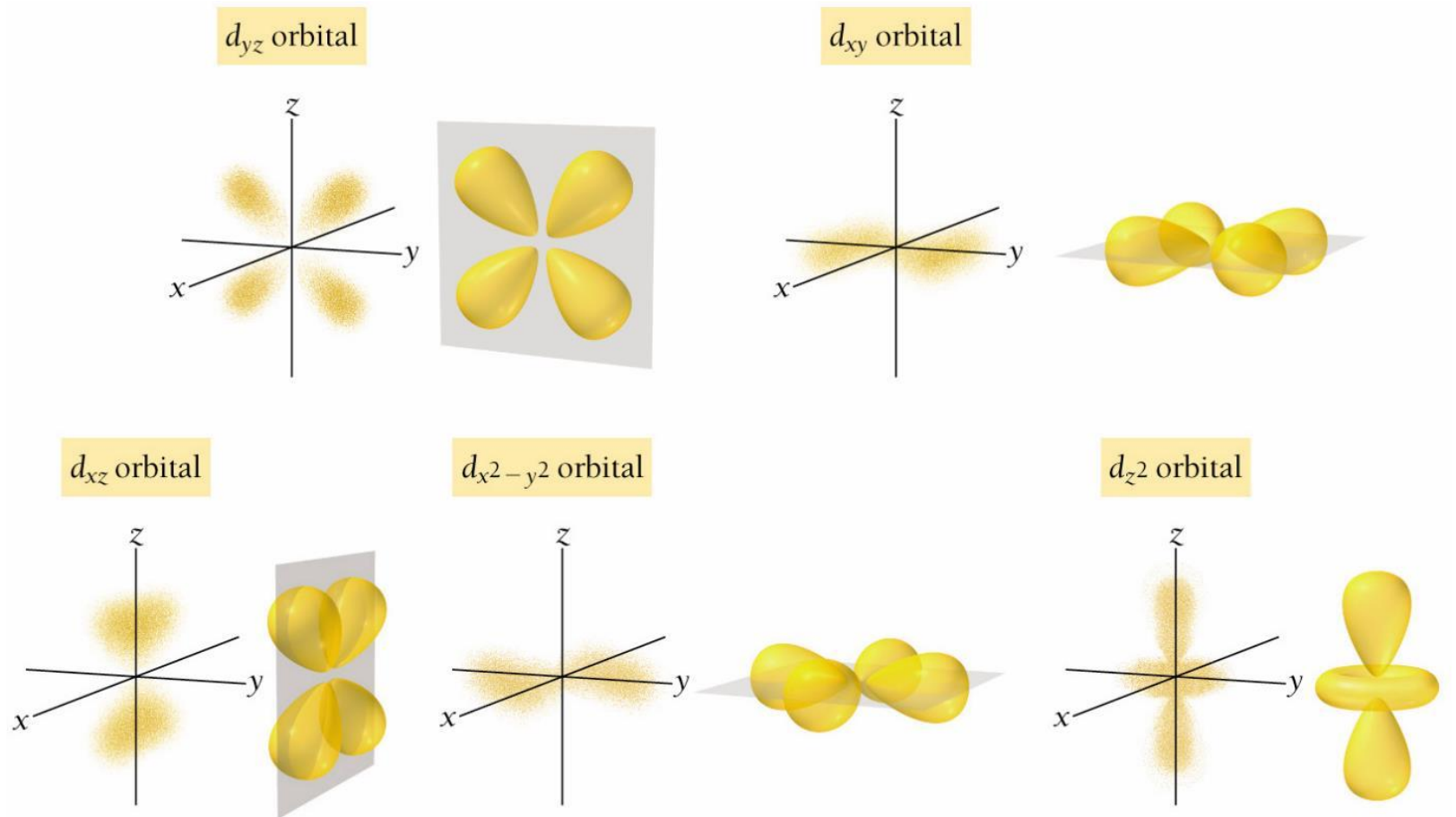
Τροχιακά p



- Κάθε κύρια στιβάδα με $n = 2$ ή μεγαλύτερο περιέχει τρία p τροχιακά ($m_l = -1, 0, +1$).
- Τα p τροχιακά έχουν δύο λοβούς ηλεκτρονικής πυκνότητας σε κάθε πλευρά του πυρήνα και έναν κόμβο που βρίσκεται στον πυρήνα.
- Τα τρία τροχιακά p διαφέρουν μόνο ως προς τον προσανατολισμό τους και είναι ορθογώνια (αμοιβαία κάθετα) μεταξύ τους.
- Είναι βολικό να ορίσουμε ένα σύστημα αξόνων x, y και z και στη συνέχεια να ονομάσουμε κάθε τροχιακό p ως p_x , p_y , και p_z .

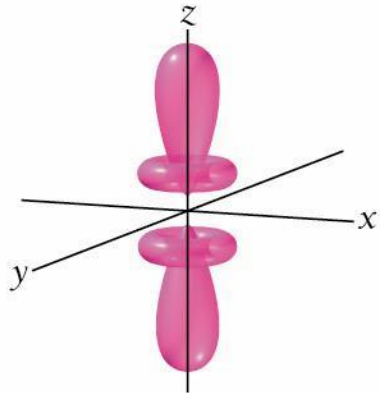
Τροχιακά d

- Κάθε κύρια στιβάδα με $n = 3$ ή μεγαλύτερο περιέχει πέντε d τροχιακά ($ml = -2, -1, 0, +1, +2$).
- Τέσσερα από αυτά τα τροχιακά έχουν σχήμα τριφυλλιού, με τέσσερις λοβούς ηλεκτρονικής πυκνότητας γύρω από τον πυρήνα και δύο κάθετα κομβικά επίπεδα.

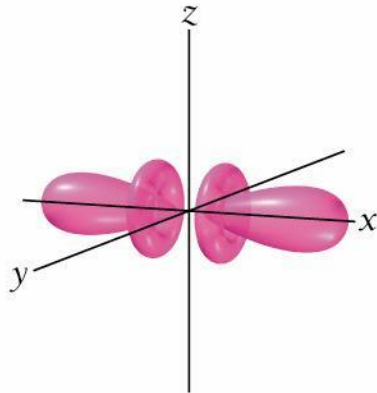


Τροχιακά f

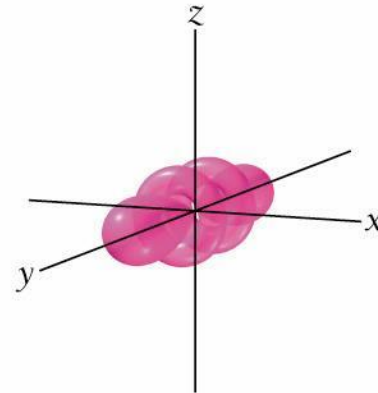
$f_{z^3 - \frac{3}{5}zr^2}$ orbital



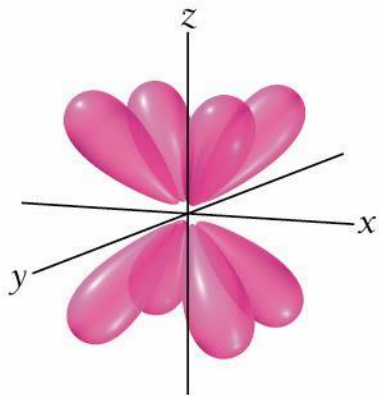
$f_{x^3 - \frac{3}{5}xr^2}$ orbital



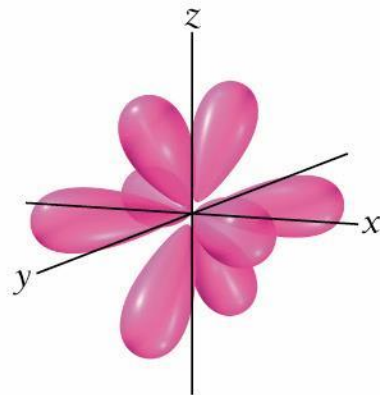
$f_{y^3 - \frac{3}{5}yr^2}$ orbital



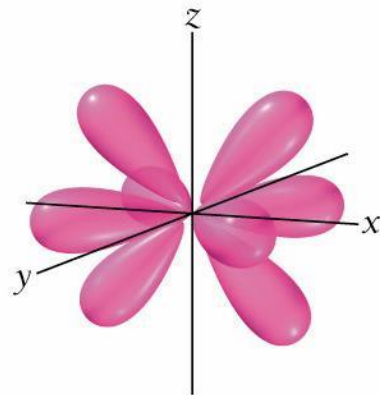
f_{xyz} orbital



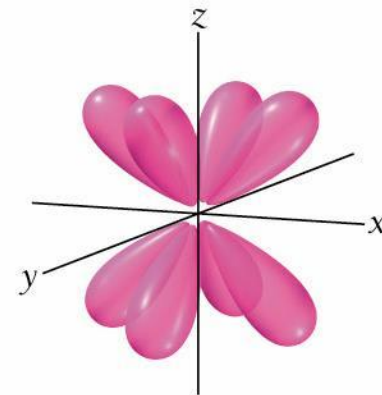
$f_{y(x^2 - z^2)}$ orbital



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



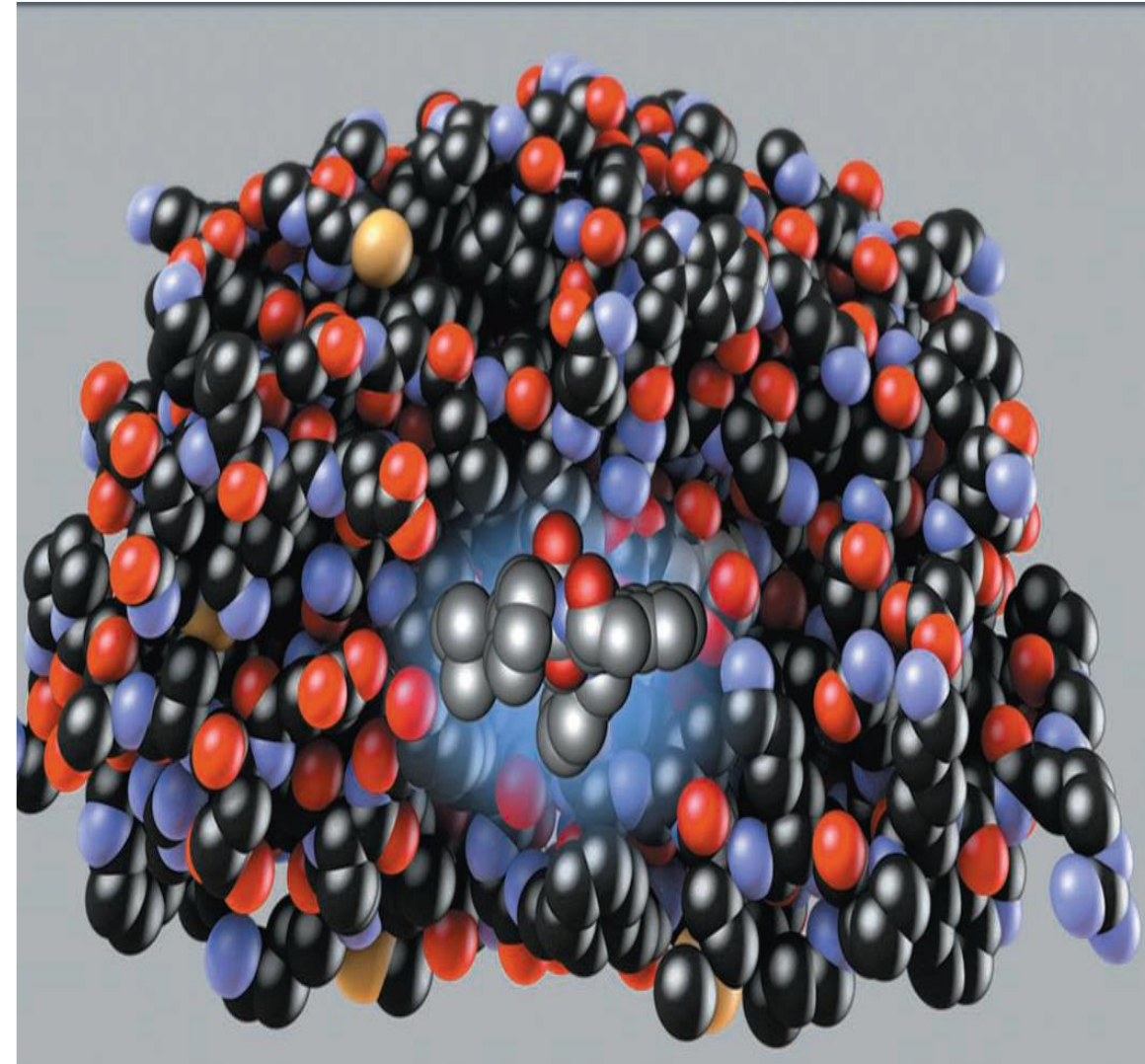
$f_{z(x^2 - y^2)}$ orbital



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.
- Με τη γνώση της δομής της πρωτεάσης του HIV, οι φαρμακευτικές εταιρείες ξεκίνησαν τη δημιουργία ενός μορίου που θα μπορούσε να απενεργοποιήσει την HIV-πρωτεάση κολλώντας στο λειτουργικό μέρος του μορίου, που ονομάζεται ενεργό κέντρο.
- Για να σχεδιάσουν ένα τέτοιο μόριο (αναστολείς πρωτεάσης), οι ερευνητές χρησιμοποίησαν τις **θεωρίες δεσμού - μοντέλα** που προβλέπουν πώς τα άτομα συνδέονται μεταξύ τους για να σχηματίσουν μόρια.



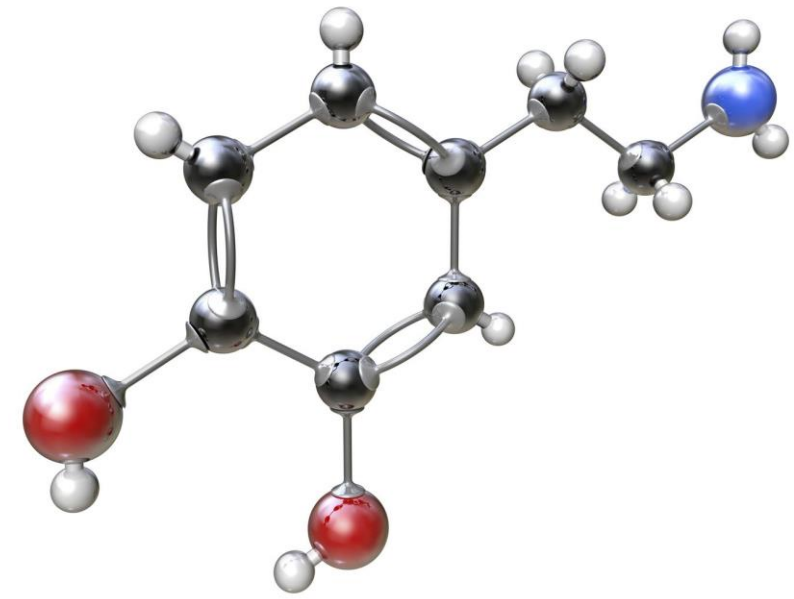
Θεωρίες δεσμού

- Εξηγούν πώς συνδέονται τα άτομα μεταξύ τους για να σχηματίσουν μόρια.
- Εξηγούν γιατί ορισμένοι συνδυασμοί ατόμων είναι σταθεροί και άλλοι όχι.
- Οι θεωρίες δεσμών εξηγούν γιατί το επιτραπέζιο αλάτι είναι NaCl και όχι NaCl_2 και γιατί το νερό είναι H_2O και όχι H_3O .
- 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:** τα ηλεκτρόνια σθένους αναπαρίστανται ως κουκκίδες, και σχεδιάζουμε δομές ηλεκτρονίων-κουκκίδων Lewis (ή απλά δομές Lewis) για να αναπαραστήσουμε τα μόρια. Προβλέπει αν ένα συγκεκριμένο σύνολο ατόμων θα σχηματίσει ένα σταθερό μόριο και με τι θα μοιάζει.



G. N. Lewis

Γιατί εμφανίστηκαν οι χημικοί δεσμοί?



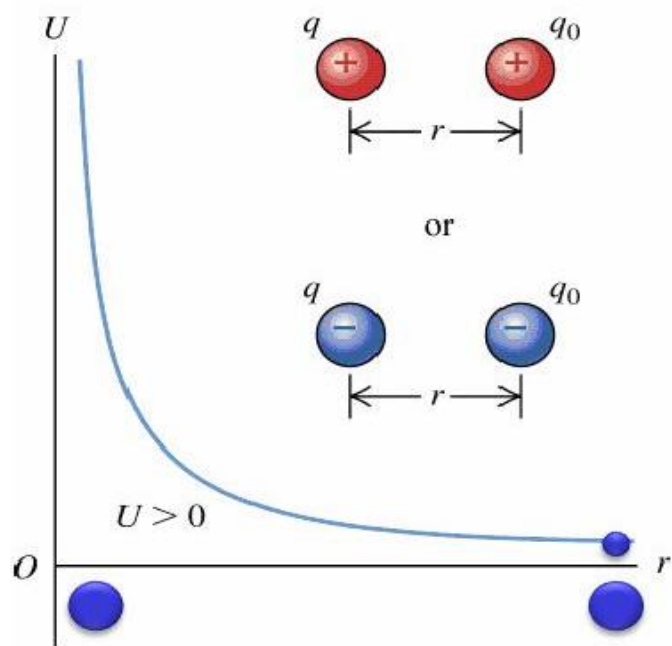
- Αν δεν υπήρχαν: Μόνο 91 είδη ουσιών
- *Οι χημικοί δεσμοί σχηματίζονται επειδή χαμηλώνουν την δυναμική ενέργεια μεταξύ των φορτισμένων σωματιδίων που συνιστούν τα άτομα*

Δυναμική ενέργεια δύο φορτισμένων σωματιδίων

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

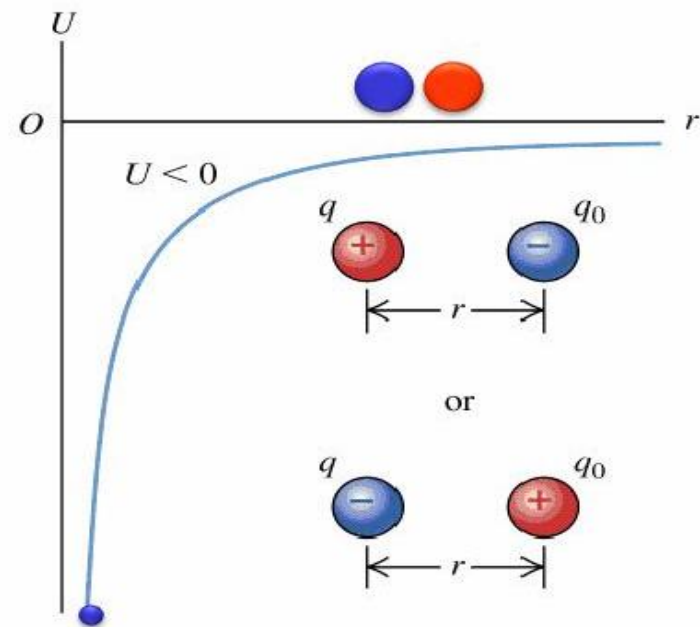
- ϵ_0 είναι μια σταθερά ($\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} \text{ C}^2/\text{J}\cdot\text{m}$)
- **Άπωση:** σε ομώνυμα φορτία η δυναμική ενέργεια είναι θετική και μειώνεται καθώς τα σωματίδια απομακρύνονται (αύξηση r)
- **Έλξη:** σε ετερόνυμα φορτία η δυναμική ενέργεια είναι αρνητική και γίνεται πιο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



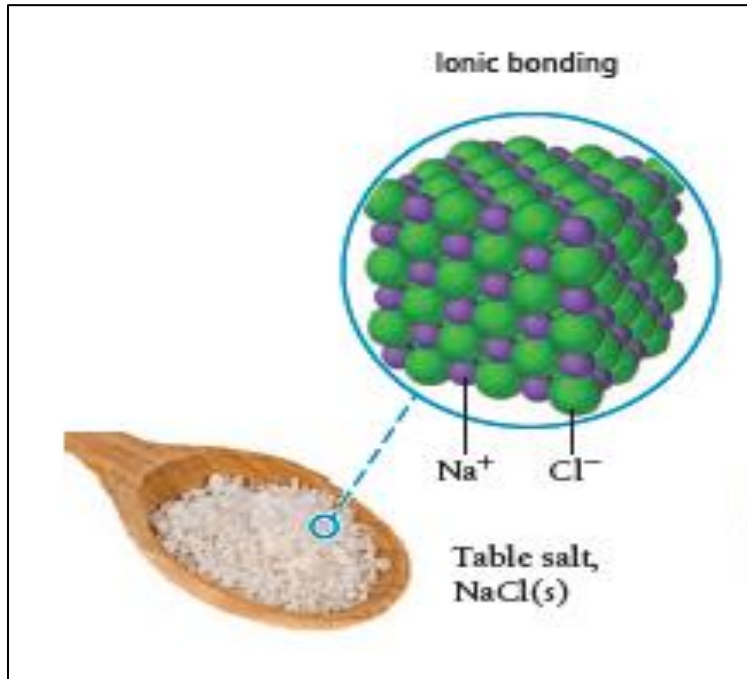
(b) q, q_0 have opposite signs

Η έλξη μεταξύ των **ετερώνυμων** φορτισμένων σωματιδίων αυξάνεται καθώς τα σωματίδια πλησιάζουν μεταξύ τους. Όσο πιο κοντά φέρονται η δυναμική ενέργεια του συστήματος περαιτέρω μειώνεται. Η E έχει - πρόσημο και γίνεται ακόμη περισσότερο αρνητική καθώς τα αντίθετα φορτισμένα σωματίδια έλκονται και πλησιάζουν πολύ μεταξύ τους.

Χημικός δεσμός

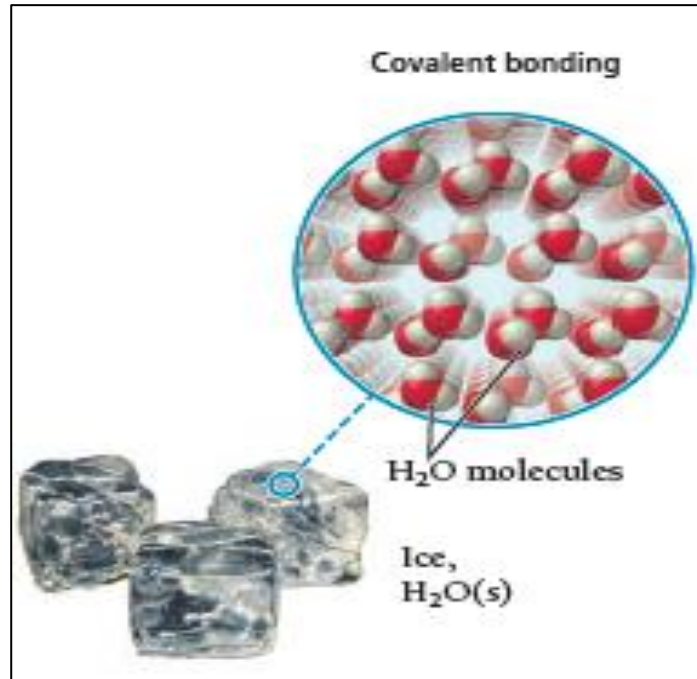
- Ένας χημικός δεσμός σχηματίζεται όταν η δυναμική ενέργεια των συνδεδεμένων ατόμων είναι μικρότερη από την δυναμική ενέργεια των επιμέρους ατόμων
- Οι αλληλεπιδράσεις:
 - Άπωση πυρήνα-πυρήνα
 - Άπωση ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου
 - Έλξη πυρήνα-ηλεκτρονίου

Τύποι δεσμών



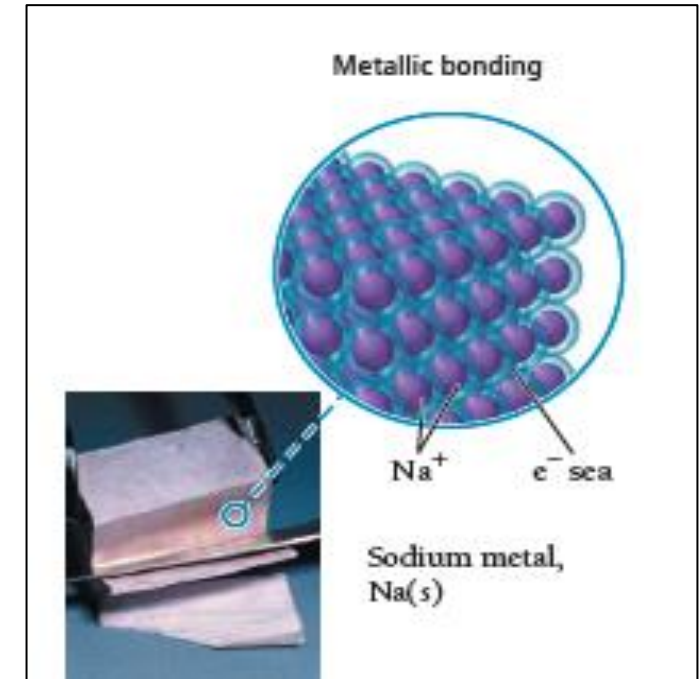
Ιοντικός δεσμός

- Μέταλλα με αμέταλλα
- Μεταφέρονται ηλεκτρόνια



Ομοιοπολικός δεσμός

- Αμέταλλα με αμέταλλα
- Μοιράζονται ηλεκτρόνια



Μεταλικός δεσμός

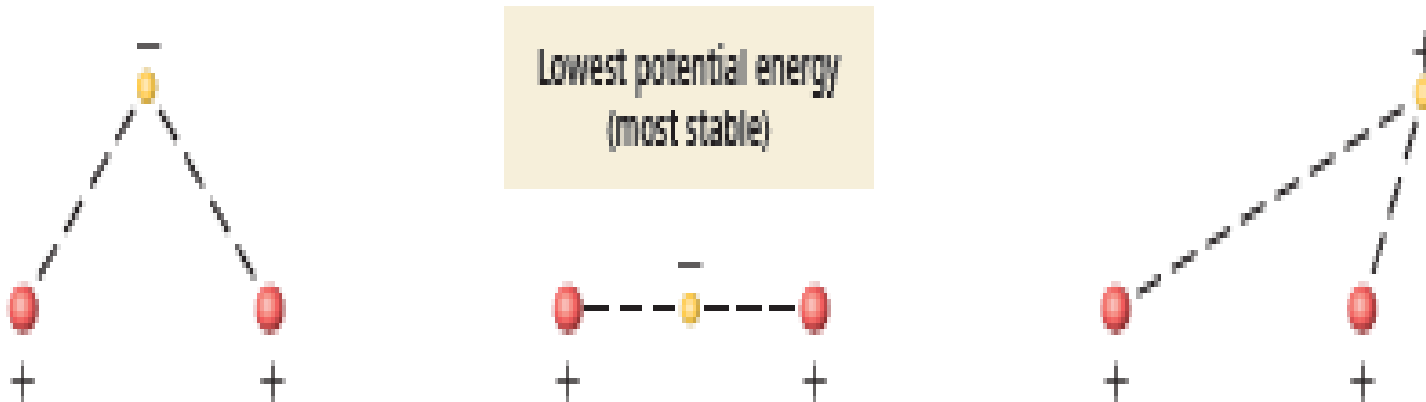
- Μέταλλα με μέταλλα
- Συγκεντρώνονται ηλεκτρόνια

Ιοντικός δεσμός

- Όταν ένα μέταλλο δημιουργεί δεσμό με ένα αμέταλλο μεταφέρει ένα ή περισσότερα ηλεκτρόνια στο αμέταλλο
 - Τα μέταλλα έχουν χαμηλές ενέργειες ιονισμού, άρα εύκολο να απομακρυνθεί ένα ηλεκτρόνιο
 - Τα αμέταλλα έχουν μεγάλες ηλεκτρονικές συγγένειες άρα επιθυμητή η προσθήκη ηλεκτρονίων
- Το άτομο του μετάλλου γίνεται το κατιόν και το άτομο του αμετάλλου το ανιόν
- Τα αντίθετα φορτισμένα ιόντα έλκονται το ένα από το άλλο μειώνοντας τη συνολική τους δυναμική ενέργεια

Ομοιοπολικός δεσμός

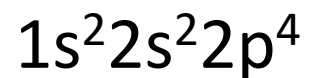
- Χαρακτηρίζονται από συγκεκριμένη κατεύθυνση
- Τα αμέταλλα έχουν σχετικά μεγάλες ενέργειες ιονισμού, επομένως είναι δύσκολο να απομακρυνθούν ηλεκτρόνια από αυτά
- Όταν ένα αμέταλλο σχηματίσει δεσμό με ένα άλλο αμέταλλο κανένα άτομο δε μεταφέρει ηλεκτρόνια στο άλλο. Αντίθετα ορισμένα ηλεκτρόνια διαμοιράζονται μεταξύ δύο δεσμικά συνδεόμενων ατόμων
- Τα μοιραζόμενα ηλεκτρόνια συγκρατούν τα άτομα μεταξύ τους, ελκύοντας τους πυρήνες αμφοτέρων των ατόμων



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

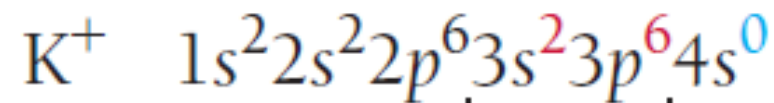
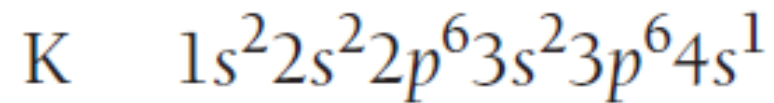
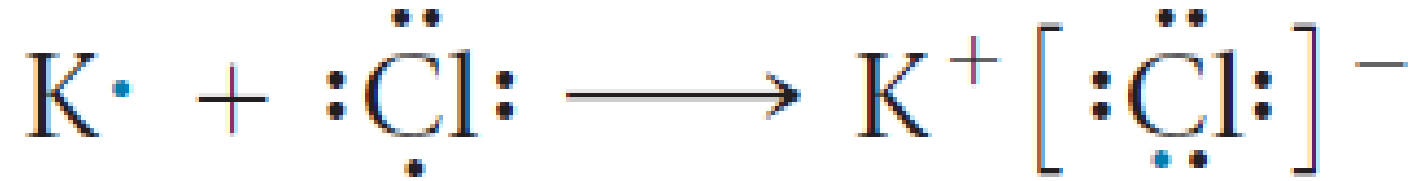


Άτομα με 8 ηλεκτρόνια σθένους έχουν οκτώ κουκίδες, μια **οκτάδα**

Θεωρία Lewis

- Ένας χημικός δεσμός είναι το μοίρασμα ή η μεταφορά ηλεκτρονίων για την επίτευξη σταθερών ηλεκτρονιακών διαμορφώσεων για δεσμικά συνδεδεμένα άτομα του δεσμού.
- Αν τα ηλεκτρόνια μεταφέρονται, όπως συμβαίνει μεταξύ ενός μετάλλου και ενός αμετάλλου, ο δεσμός είναι ιοντικός δεσμός.
- Εάν τα ηλεκτρόνια διαμοιράζονται, όπως συμβαίνει μεταξύ δύο αμετάλλων, ο δεσμός είναι ομοιοπολικός δεσμός.
- Κανόνας της οκτάδας: η σταθερή διαμόρφωση είναι συνήθως οκτώ ηλεκτρόνια στην εξωτερική στοιβάδα
- Δε λαμβάνει υπόψη έλξεις και τις απωθήσεις μεταξύ ηλεκτρονίων και πυρήνων σε γειτονικά άτομα.
- Οι ενεργειακές μεταβολές που συμβαίνουν εξαιτίας αυτών των αλληλεπιδράσεων είναι κεντρικές κατά τη δημιουργία χημικών δεσμών, ωστόσο το μοντέλο Lewis τις αγνοεί επειδή ο υπολογισμός αυτών των ενεργειακών μεταβολών είναι εξαιρετικά περίπλοκος.
- Η θεωρία του Lewis χρησιμοποιεί τον απλό κανόνα της οκτάδας, μια πρακτική προσέγγιση που προβλέπει με ακρίβεια αυτό που βλέπουμε στη φύση για ένα μεγάλο αριθμό ενώσεων

Ιοντικός Δεσμός και Μεταφορά ηλεκτρονίου

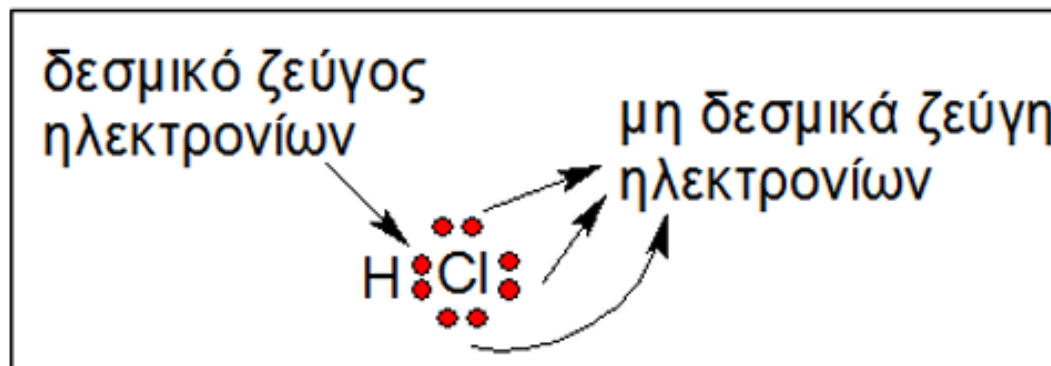


Octet in previous level

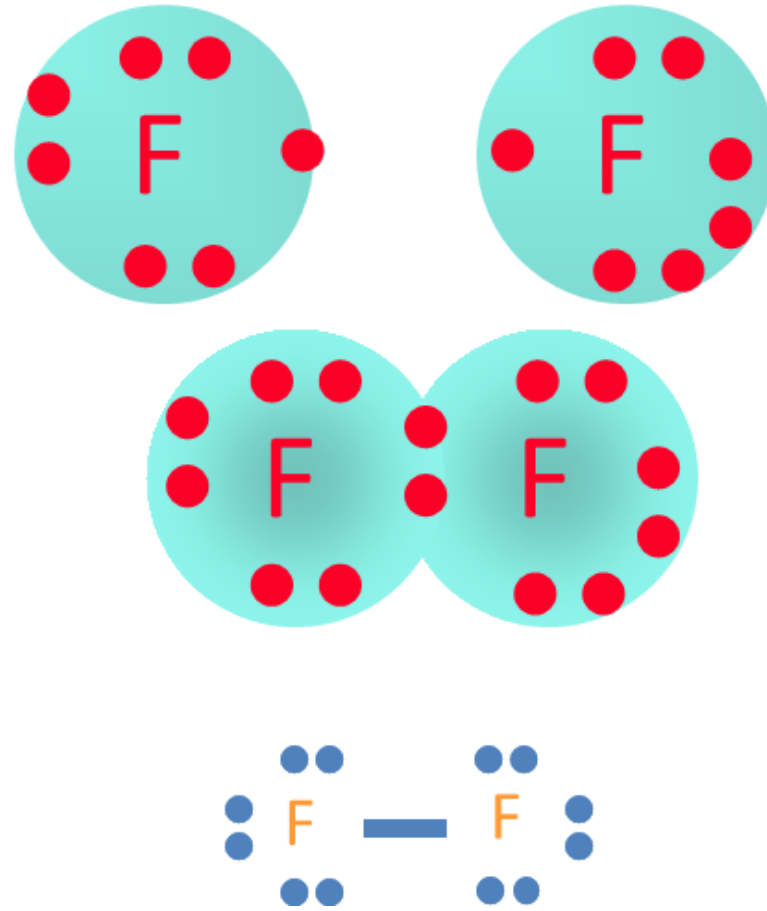
Ομοιοπολικός Δεσμός:

Δεσμικά ηλεκτρόνια και μονήρη ζεύγη ηλεκτρονίων

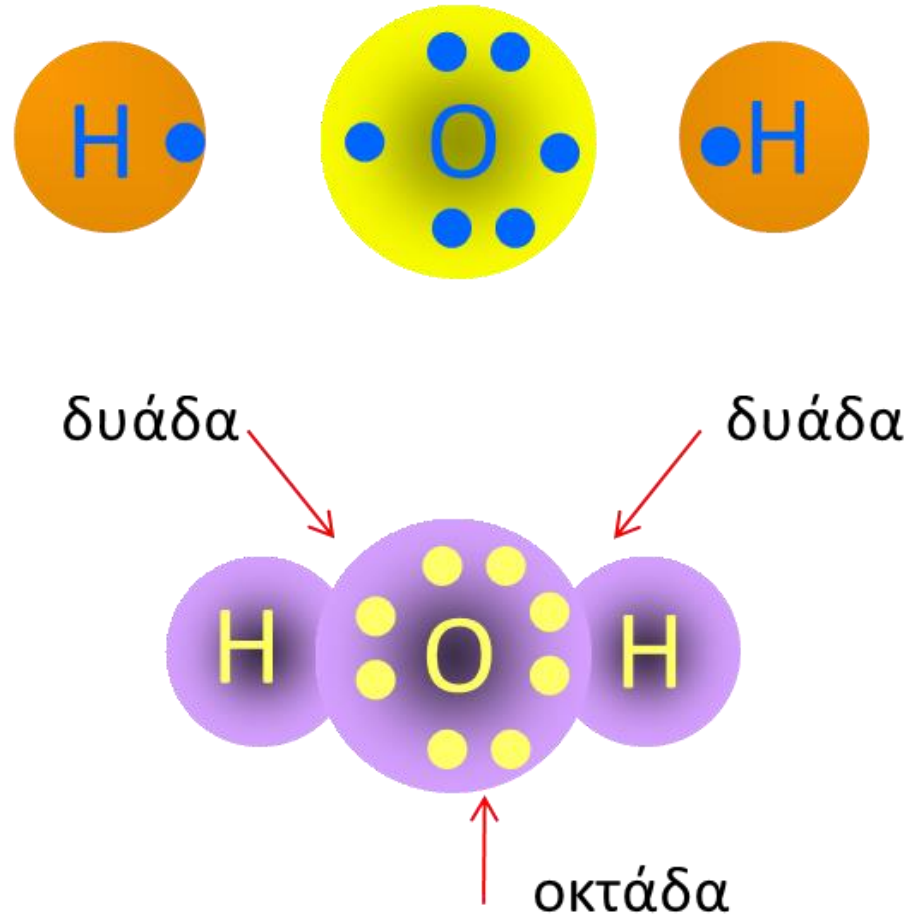
- Με τον ομοιοπολικό δεσμό τα άτομα διαμοιράζονται τα ζεύγη ηλεκτρονίων για να επιτύχουν μια «οκτάδα»
- Ένα ζεύγος ηλεκτρονίων που διαμοιράζεται μεταξύ 2 ατόμων λέγεται δεσμικό ζεύγος
- Ένα ζεύγος που συνδέεται με ένα μόνο άτομο (δεν εμπλέκεται σε δεσμό) ονομάζεται μονήρες ζεύγος.



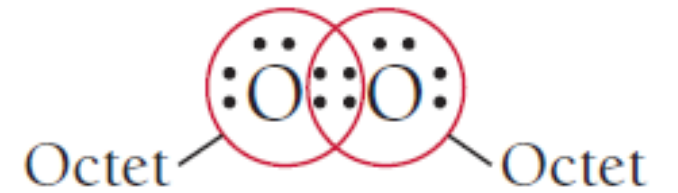
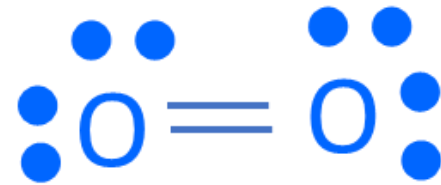
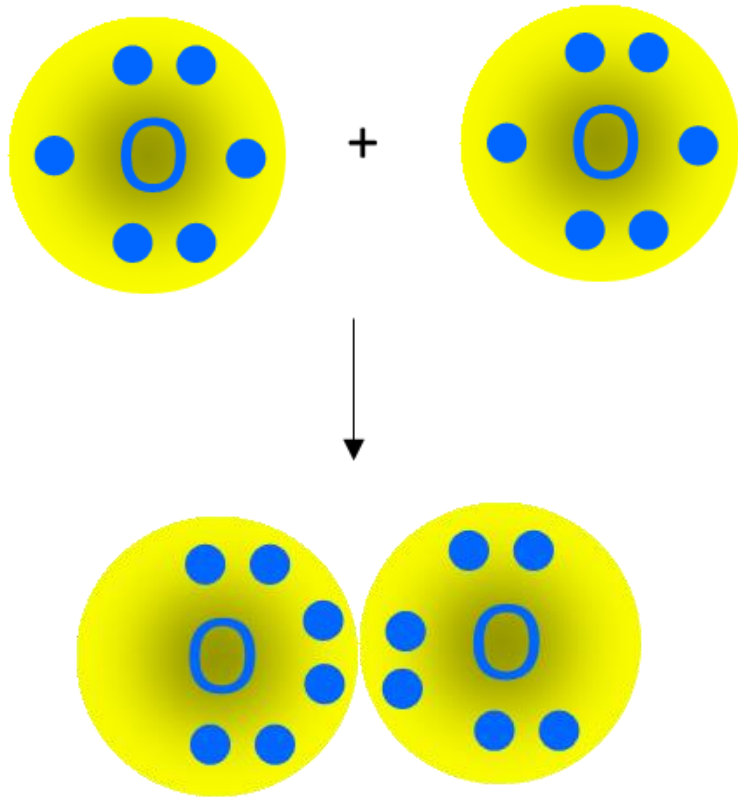
Απλοί Ομοιοπολικοί δεσμοί (1/2)



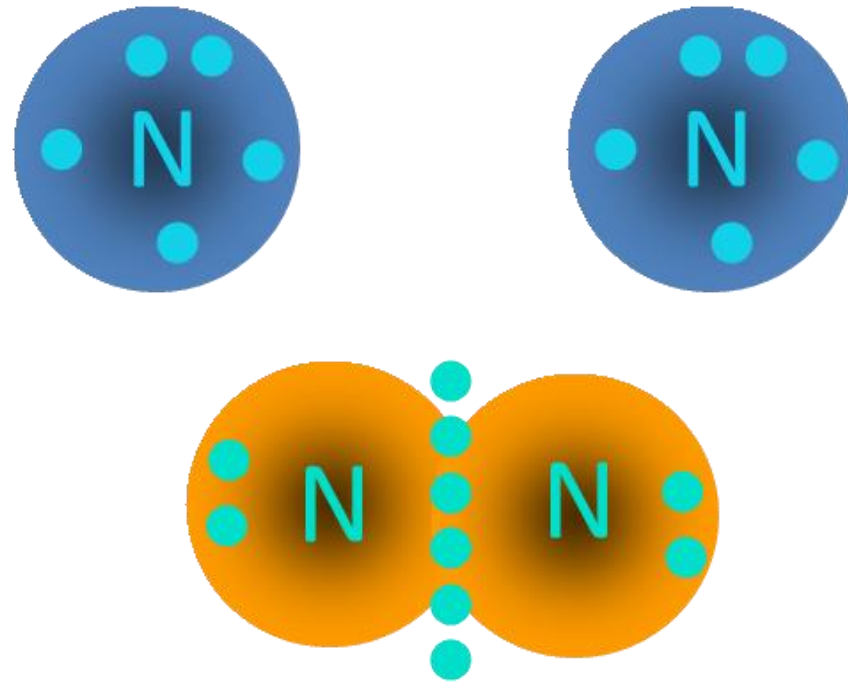
Απλοί Ομοιοπολικοί δεσμοί (2/2)



Διπλοί ομοιοπολικοί δεσμοί



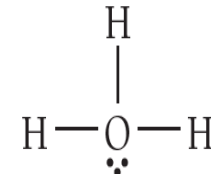
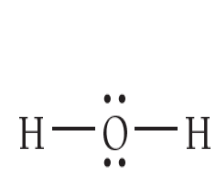
Τριπλός Ομοιοπολικός Δεσμός



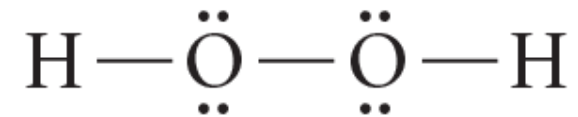
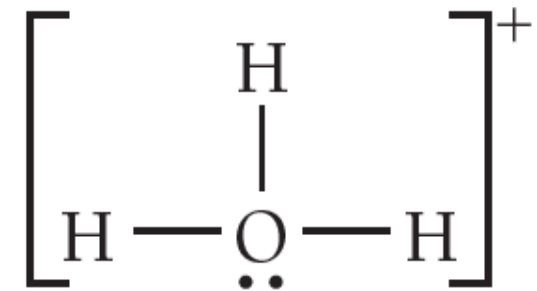
Ομοιοπολικός Δεσμός

Προβλέψεις από την Θεωρία κατά Lewis

- Η θεωρία κατά Lewis μας επιτρέπει να προβλέψουμε τους τύπους των μορίων
- Κάθε δεσμός συνδέει μόνο ένα ειδικό ζεύγος ατόμων
- Η θεωρία κατά Lewis προβλέπει ότι κάποιοι συνδυασμοί είναι πιο σταθεροί ενώ άλλοι όχι
 - Επειδή οι σταθεροί συνδυασμοί δημιουργούν «οκτάδες»
- Επίσης η θεωρία κατά Lewis δείχνει ότι οι ομοιοπολικοί δεσμοί έχουν ιδιαίτερο προσανατολισμό
 - Τα μοιραζόμενα ηλεκτρόνια είναι πιο σταθερά μεταξύ των συνδεόμενων ατόμων
 - Αυτό έχει ως αποτέλεσμα τον σχηματισμό μορίων και όχι μια διάταξη

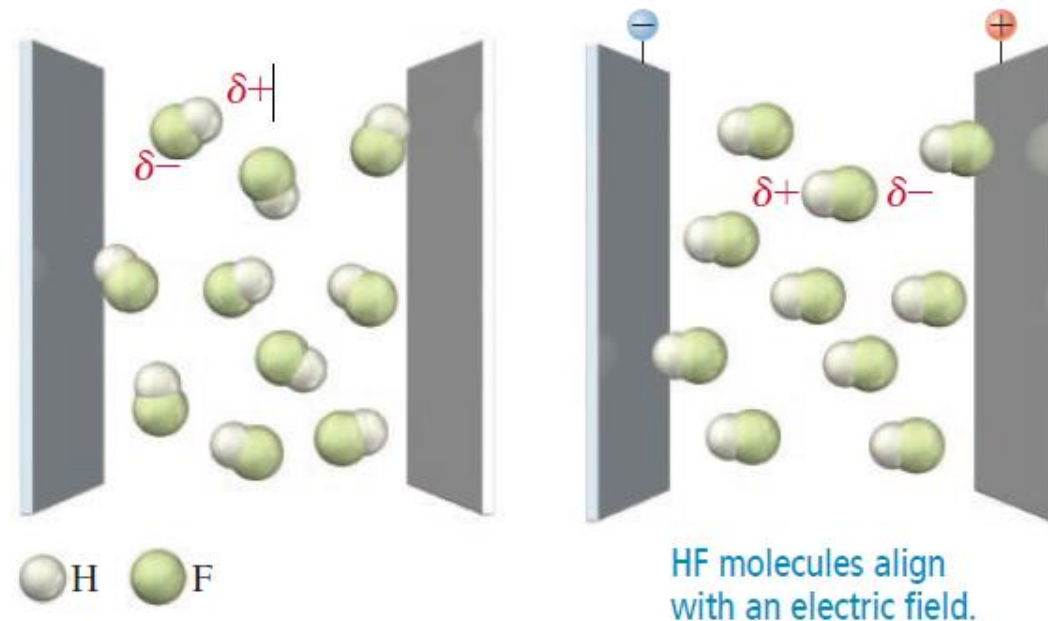
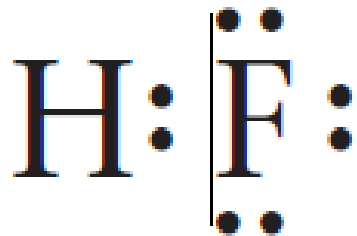


Oxygen has nine electrons
(one electron beyond an octet)



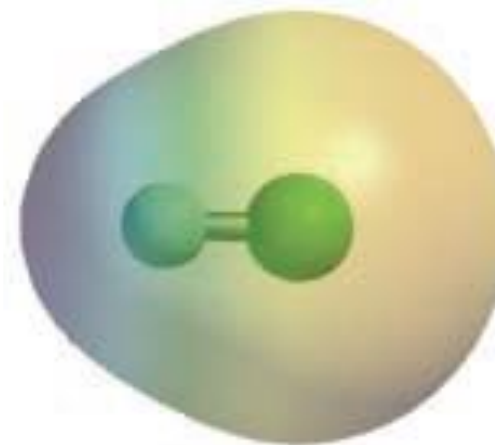
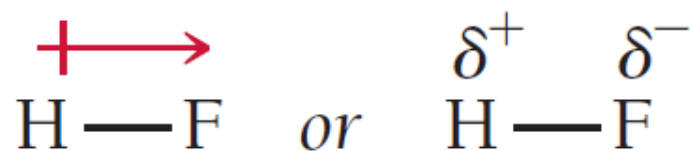
Πολικότητα Δεσμού

- Η ομοιοπολική σύνδεση μεταξύ ανομοίων ατόμων έχει ως αποτέλεσμα το άνισο μοίρασμα των ηλεκτρονίων
 - Το ένα άτομο τραβά τα ηλεκτρόνια πλησιέστερα προς την πλευρά του
 - Το ένα άκρο του δεσμού έχει μεγαλύτερη ηλεκτρονική πυκνότητα από το άλλο

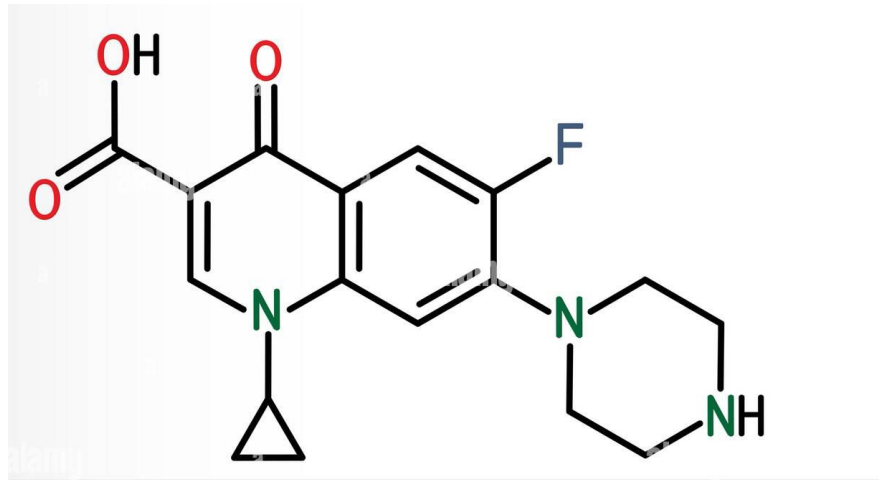


Πολικός Ομοιοπολικός Δεσμός

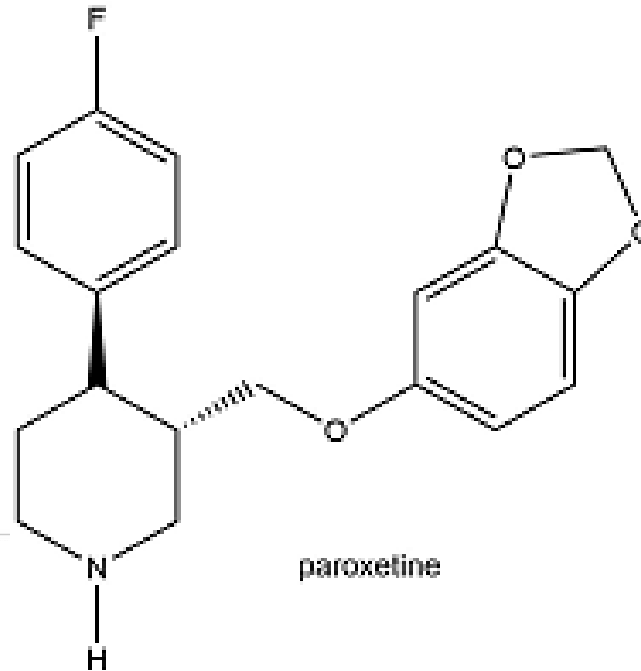
- Το άκρο με την μεγαλύτερη ηλεκτρονική πυκνότητα αποκτά ένα μερικό αρνητικό φορτίο (δ^-)
- Το άκρο με το έλλειμμα ηλεκτρονίων αποκτά ένα μερικό θετικό φορτίο (δ^+)
- Άνισος διαμοιρασμός ηλεκτρονίων
- Πολικός δεσμός



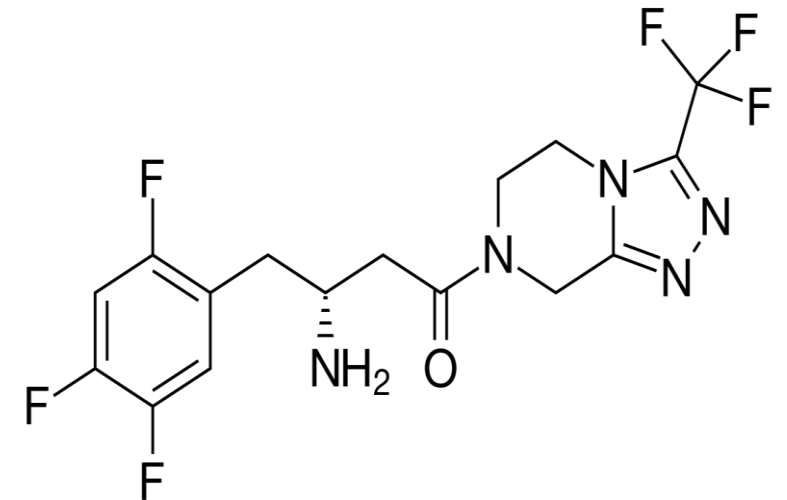
Ο Ρόλος της ηλεκτραρνητικότητας στον Σχεδιασμό Φαρμάκων



antibiotic



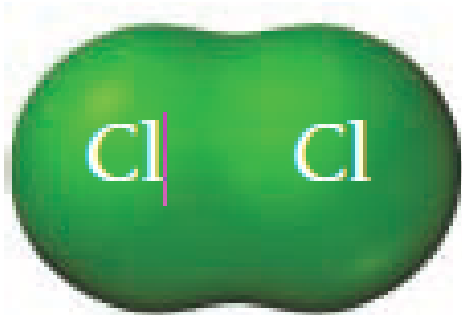
anti-depressant



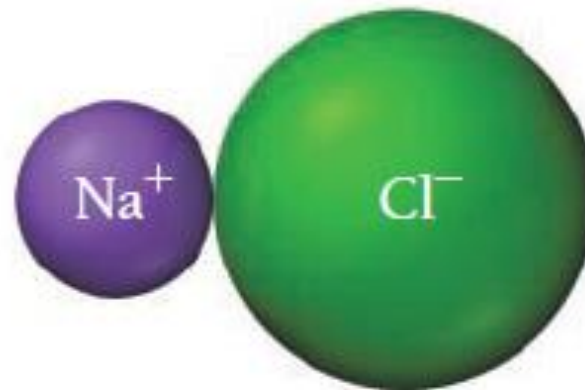
anti-diabetic

Βαθμός πολικότητας

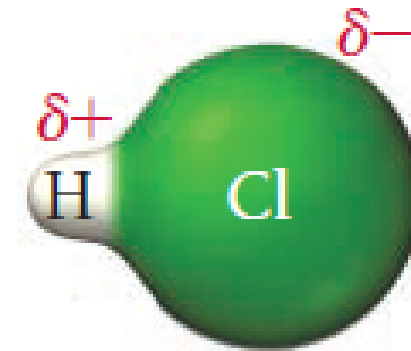
- Εξαρτάται από τη διαφορά ηλεκτραρνητικότητας μεταξύ των δύο ατόμων του δεσμού. Όσο μεγαλύτερη είναι η διαφορά ηλεκτραρνητικότητας, τόσο πιο πολικός είναι ο δεσμός
- Εάν δύο άτομα με ίδια ηλεκτραρνητικότητα σχηματίζουν έναν ομοιοπολικό δεσμό, μοιράζονται εξίσου τα ηλεκτρόνια και ο δεσμός είναι καθαρά ομοιοπολικός ή μη πολικός.



Ομοιοπολικός δεσμος

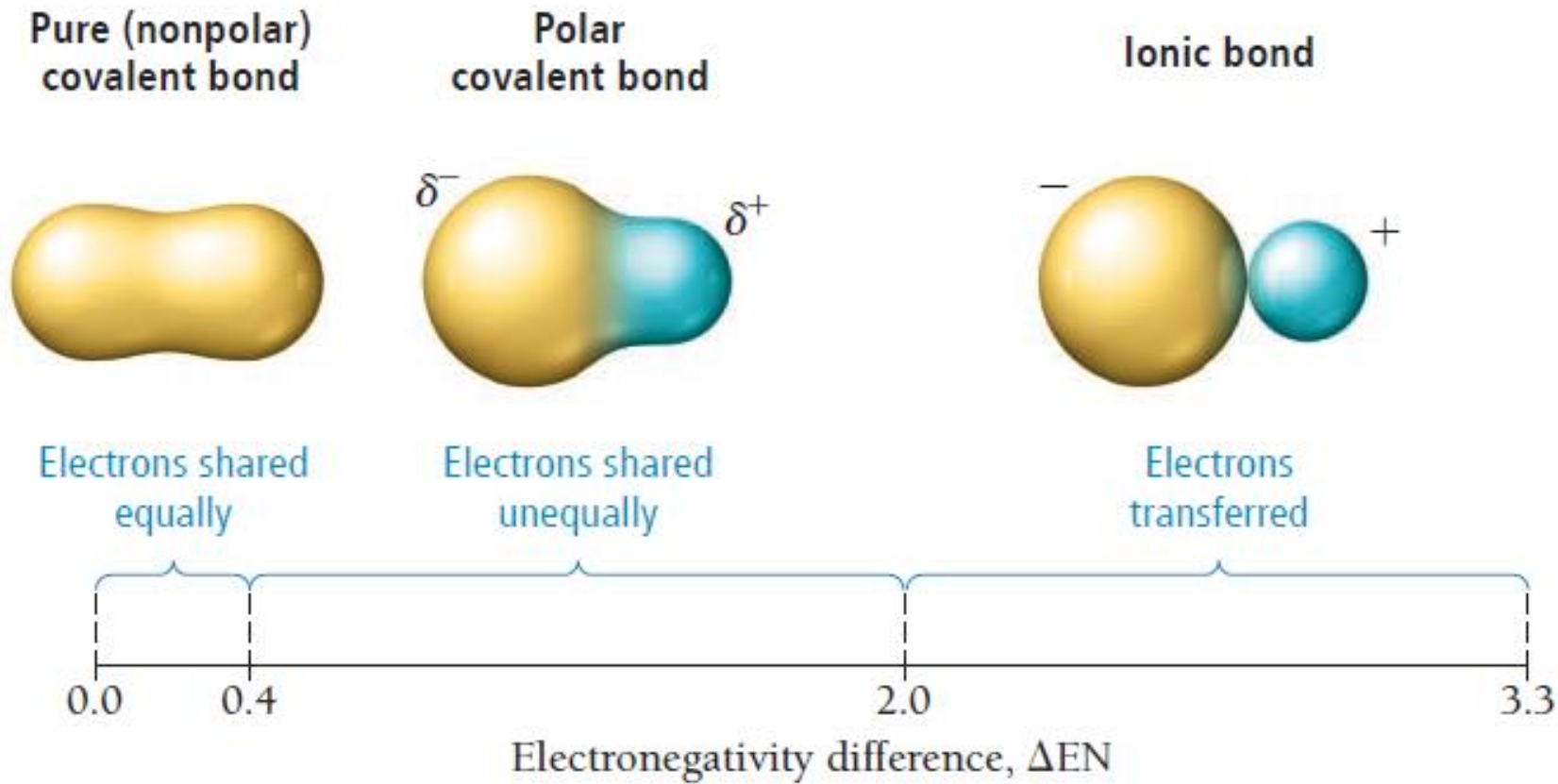


Ιοντικός δεσμος



Πολικός Ομοιοπολικός δεσμος

Διαφορά ηλεκτραρνητικότητας και τύπος δεσμού



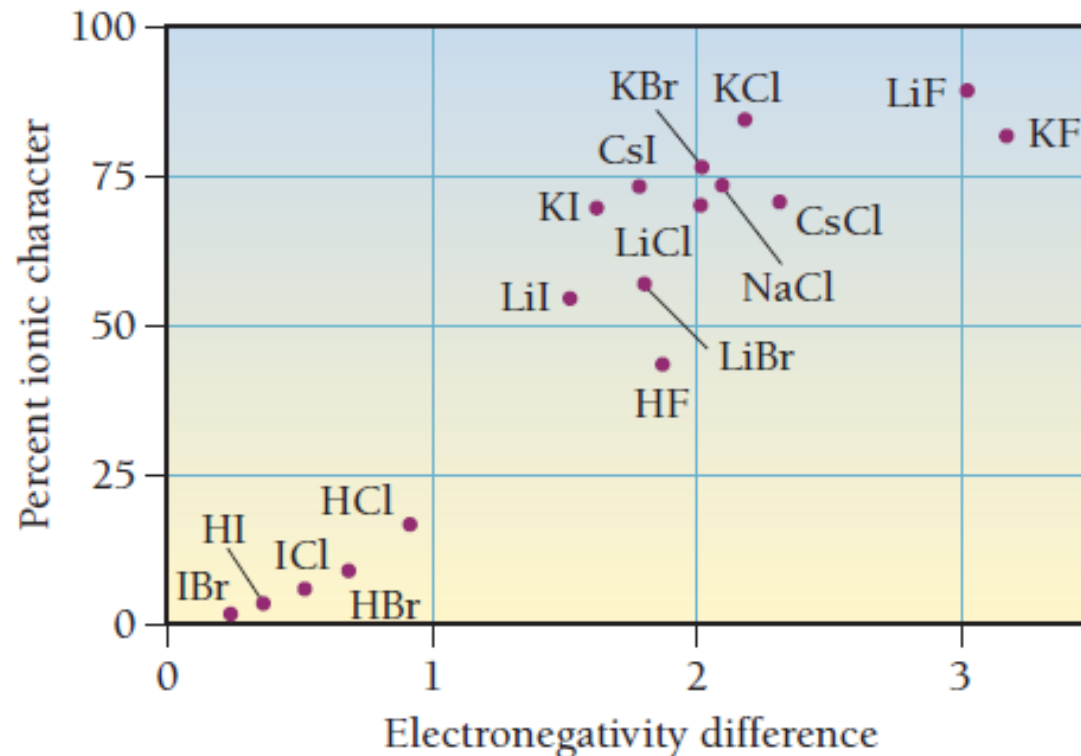
Διπολική ροπή δεσμού

- 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

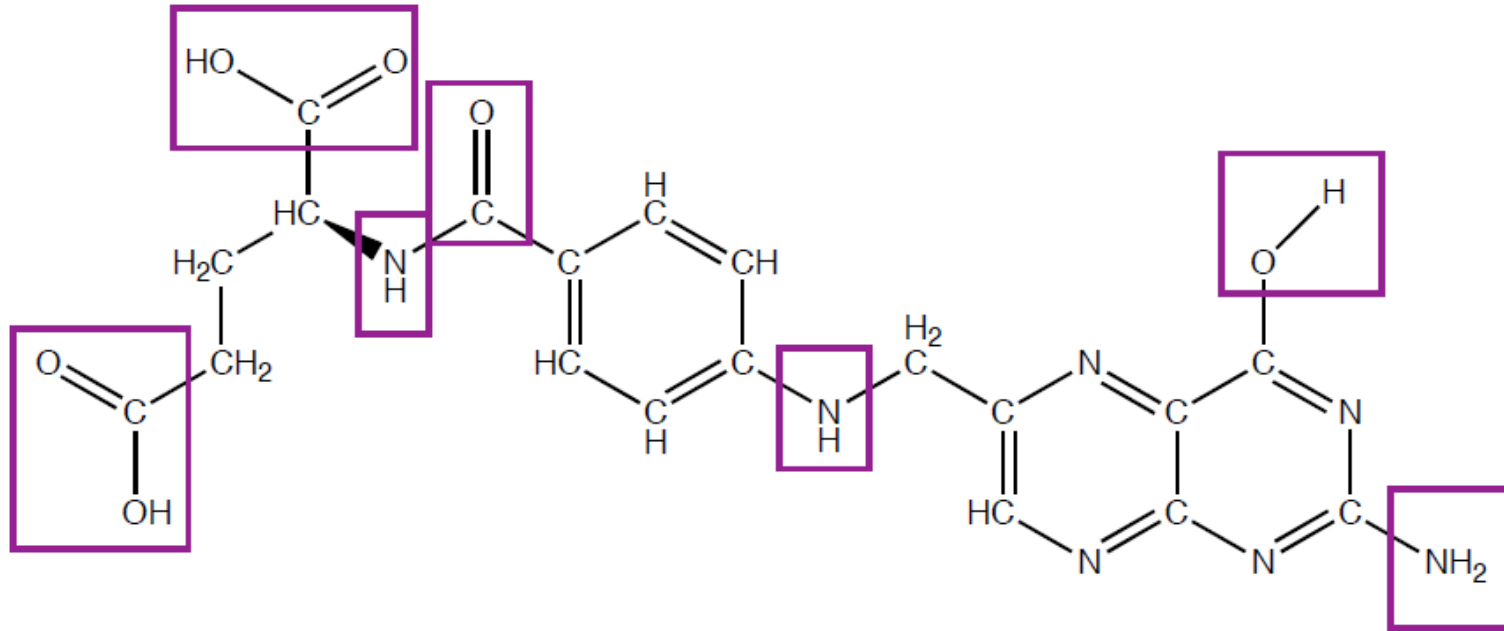
Molecule	ΔEN	Dipole Moment (D)
Cl ₂	0	0
ClF	1.0	0.88
HF	1.9	1.82
LiF	3.0	6.33

Βαθμός μεταφοράς ηλεκτρονίου

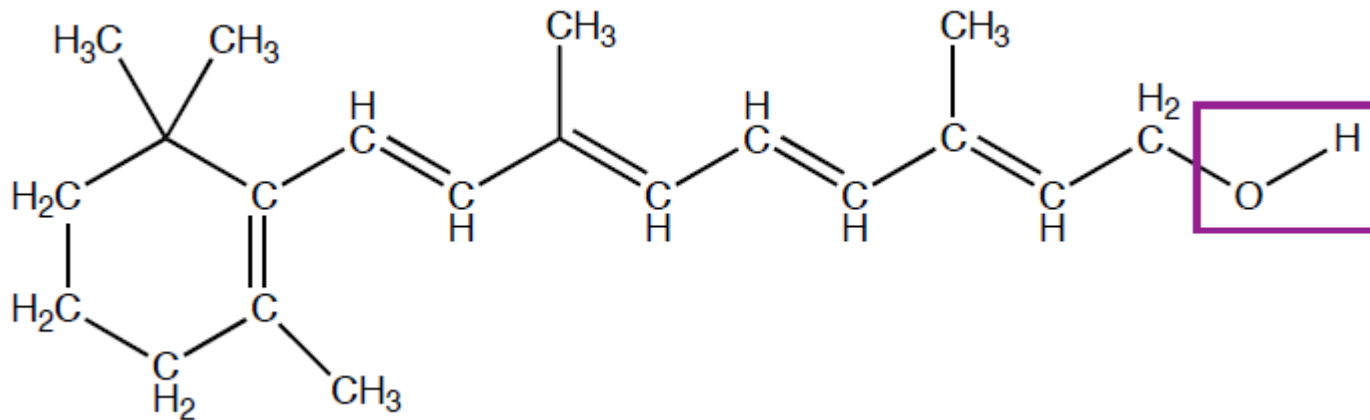
$$\text{Εκατοστιαίος ιοντικός χαρακτήρας} = \frac{\text{Μετρηθείσα διπολική ροπή δεσμού}}{\text{Διπολική ροπή αν το ηλεκτρόνιο μεταφέρεται πλήρως}} \times 100$$



Ποσοτικοποίηση πολικών ομάδων στη βιταμίνη Α, βιταμίνη Β9

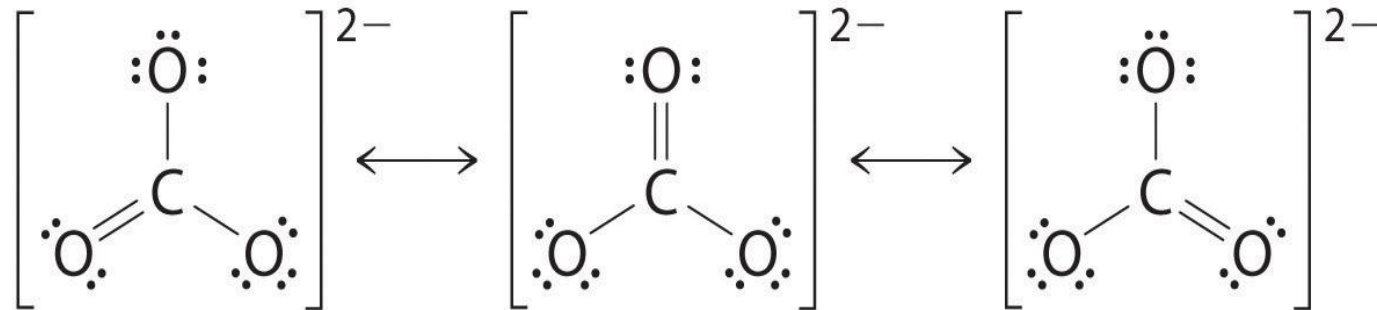


$$\chi_H = 2.2$$
$$\chi_C = 2.6$$
$$\chi_N = 3.0$$
$$\chi_O = 3.4$$

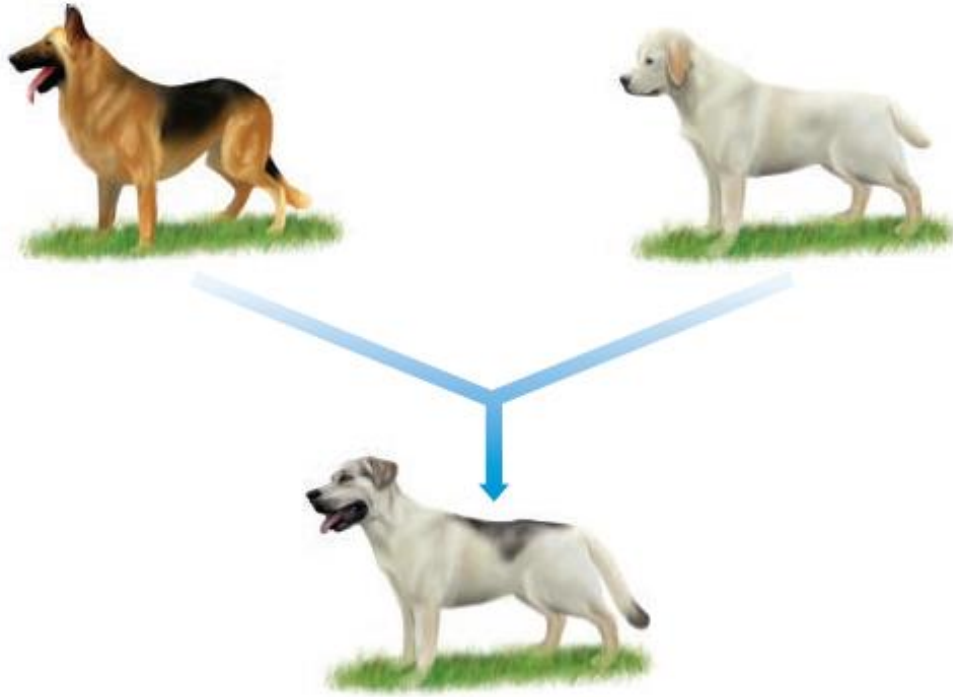


Συντονισμός

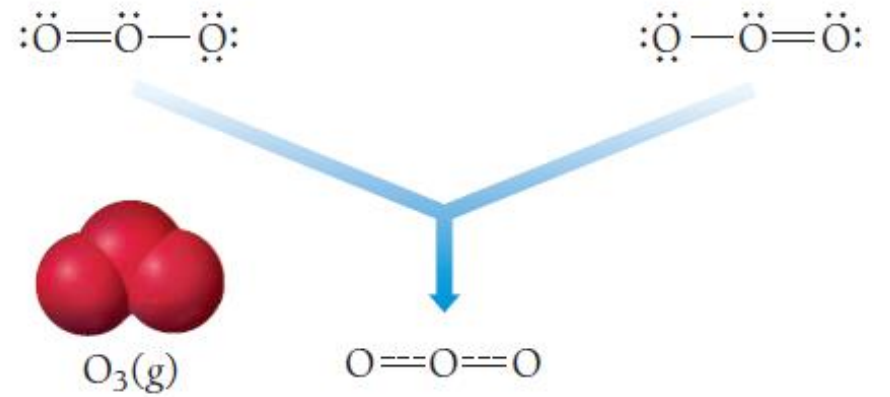
- Όταν υπάρχουν περισσότερες από μία δομές κατά Lewis σε ένα μόριο που διαφέρουν μόνον στην θέση των ηλεκτρονίων, αυτές οι δομές καλούνται δομές συντονισμού
- Η πραγματική είναι ένας συνδυασμός των δομών συντονισμού – ένα υβρίδιο συντονισμού
 - Δεν συντονίζεται μεταξύ των δύο μορφών, αν και συχνά το σχεδιάζουμε κατ' αυτό τον τρόπο
- Αναζητούμε πολλαπλούς δεσμούς ή μονήρη ζεύγη



Υβριδισμός



Υβρίδιο



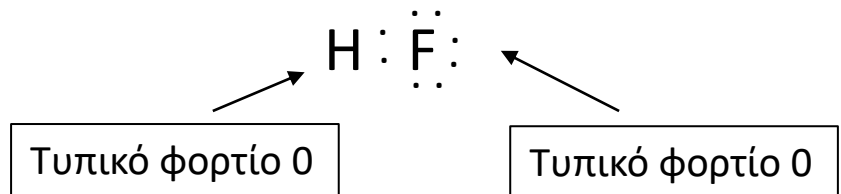
Υβρίδιο δομής συντονισμού

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.
- Το τυπικό φορτίο ενός ατόμου σε μια δομή Lewis είναι το φορτίο που θα είχε αν όλα τα δεσμικά ηλεκτρόνια διαμοιράζονταν εξίσου μεταξύ των δεσμικά συνδεόμενων ατόμων.
- Το τυπικό φορτίο είναι το υπολογιζόμενο φορτίο για ένα άτομο εάν αγνοήσουμε εντελώς τις επιδράσεις της ηλεκτραρνητικότητας



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

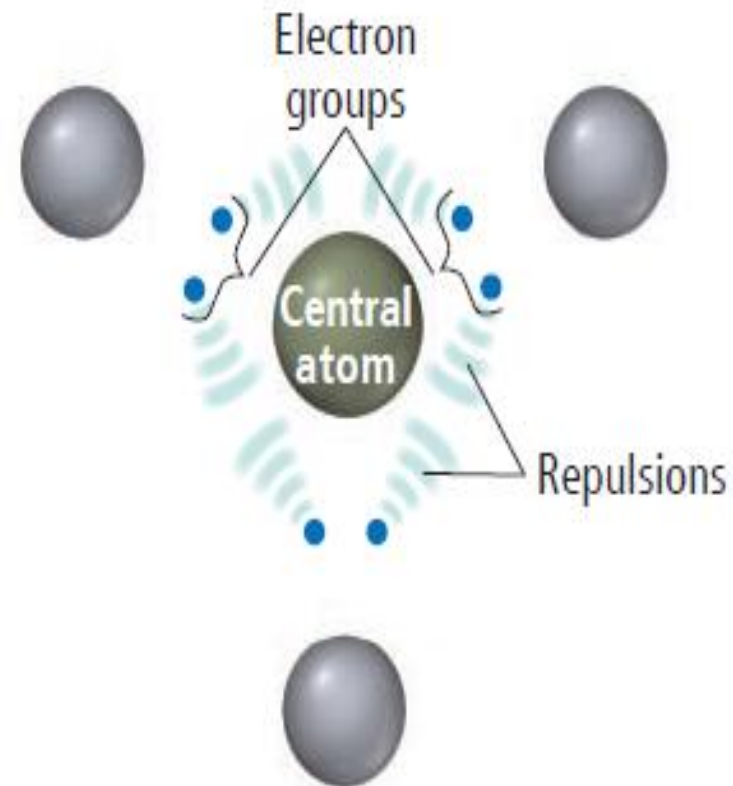
	Structure A			Structure B		
	H	— C ≡	N:	H	— N ≡	C:
number of valence e ⁻	1	4	5	1	5	4
-number of nonbonding e ⁻	-0	-0	-2	-0	-0	-2
- $\frac{1}{2}$ (number of bonding e ⁻)	$-\frac{1}{2}(2)$	$-\frac{1}{2}(8)$	$-\frac{1}{2}(6)$	$-\frac{1}{2}(2)$	$-\frac{1}{2}(8)$	$-\frac{1}{2}(6)$
Formal charge	0	0	0	0	+1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

Κανόνες για τον εκτίμηση της σταθερότητας των δομών συντονισμού

1. Όσο μεγαλύτερος ο αριθμός των ομοιοπολικών δεσμών, τόσο μεγαλύτερη σταθερότητα δεδομένου ότι περισσότερα άτομα θα έχουν πλήρεις οκτάδες.
2. Η δομή με τον ελάχιστο αριθμό τυπικών φορτίων είναι η πιο σταθερή
3. Η δομή με τον ελάχιστο διαχωρισμό τυπικού φορτίου είναι η πιο σταθερή
4. Μια δομή με ένα αρνητικό φορτίο στο πιο ηλεκτραρνητικό άτομο θα είναι η πιο σταθερή
5. Θετικά φορτία στο λιγότερο ηλεκτραρνητικό άτομο (το πιο ηλεκτροθετικό) καθιστούν την δομή πιο σταθερή
6. Δομές συντονισμού που είναι ισοδύναμες δεν διαφέρουν στην σταθερότητα και συνεισφέρουν εξίσου (πχ βενζόλιο)

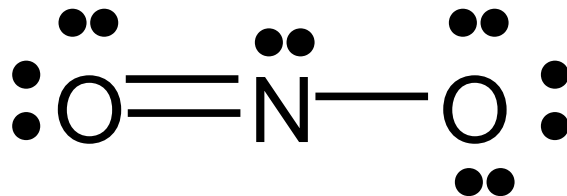
Η θεωρία VSEPR (valence shell electron pair repulsion)

- 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.
- Οι ομάδες ηλεκτρονίων έλκονται επίσης από τον πυρήνα, αλλά η θεωρία VSEPR επικεντρώνεται στις απωθήσεις.
- Σύμφωνα με τη θεωρία VSEPR, οι απωθήσεις μεταξύ ομάδων ηλεκτρονίων στο εσωτερικό ατόμων ενός μορίου καθορίζουν τη γεωμετρία του μορίου.
- Η προτιμώμενη γεωμετρία ενός μορίου είναι αυτή στην οποία οι ομάδες ηλεκτρονίων έχουν τη μέγιστη δυνατή απόσταση (και επομένως την ελάχιστη ενέργεια).
- Για τα μόρια που έχουν μόνο ένα εσωτερικό άτομο (το κεντρικό άτομο), η μοριακή γεωμετρία εξαρτάται από δύο παράγοντες:
 1. τον αριθμό των ομάδων ηλεκτρονίων γύρω από το κεντρικό άτομο
 2. πόσες από αυτές τις ομάδες ηλεκτρονίων είναι δεσμικές ομάδες δεσμών και πόσες είναι μονήρη ζεύγη.



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

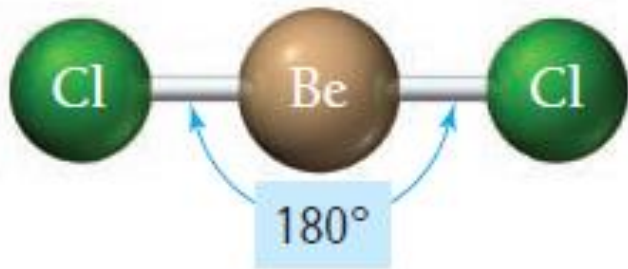
Γεωμετρία των Ηλεκτρονικών Ομάδων

- Υπάρχουν 5 βασικές διευθετήσεις των ηλεκτρονικών ομάδων γύρω από ένα κεντρικό άτομο
 - Βασίζεται στο maximum των 6 δεσμικών ηλεκτρονικών ομάδων
 - Αν και μπορεί να υπάρχουν περισσότερες από 6 σε πολύ μεγάλα άτομα, αυτό είναι πολύ σπάνιο
- Κάθε μια από αυτές τις 5 βασικές διευθετήσεις αποτελεί μια διαφορετική ηλεκτρονική γεωμετρία

Για να είναι το μοριακό σχήμα και οι γωνίες δεσμού ένα «τέλειο» γεωμετρικό σχήμα, όλες οι ηλεκτρονικές ομάδες πρέπει να είναι δεσμοί και όλοι οι δεσμοί να είναι ισοδύναμοι
- Για τα μόρια που επιδεικνύουν συντονισμό, ανεξάρτητα ποια δομή χρησιμοποιείται – η ηλεκτρονική γεωμετρία θα είναι η ίδια

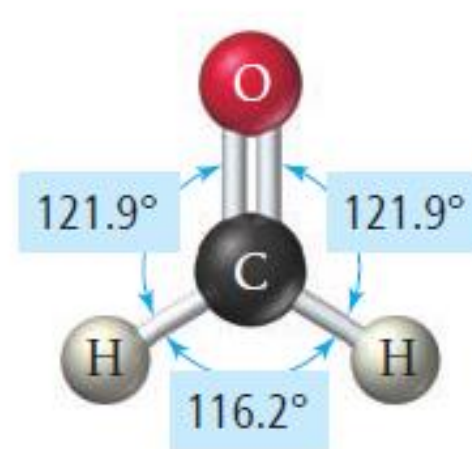
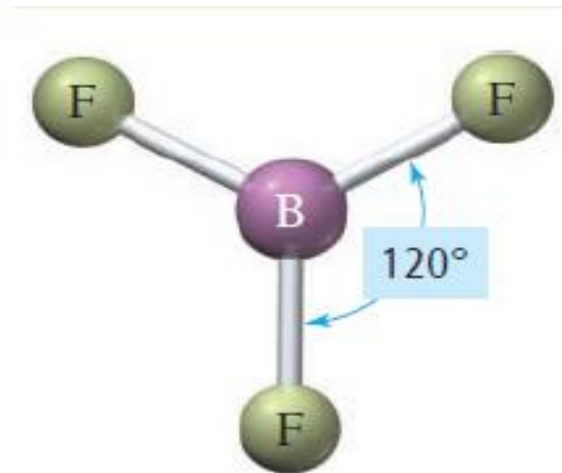
Δύο ομάδες ηλεκτρονίων: Γραμμική Γεωμετρία

- Όταν υπάρχουν δύο ομάδες ηλεκτρονίων γύρω από το κεντρικό άτομο, θα καταλαμβάνουν θέσεις εκ διαμέτρου αντίθετες γύρω από το κεντρικό άτομο
- Η γεωμετρία του BeCl_2 καθορίζεται από την άπωση μεταξύ αυτών των δύο ομάδων ηλεκτρονίων, η οποία μπορεί να μεγιστοποιήσει την απόσταση μεταξύ τους, υποθέτοντας μια κλίση 180° ή γραμμική γεωμετρία.
- Η ίδια γεωμετρία παρατηρείται σε όλα τα μόρια που έχουν δύο ομάδες ηλεκτρονίων (και όχι μονήρη ζεύγη)
- Σύμφωνα με τη θεωρία VSEPR, οι δύο διπλοί δεσμοί απωθούνται μεταξύ τους (όπως ακριβώς και οι δύο απλοί δεσμοί στο BeCl_2 απωθούνται μεταξύ τους), με αποτέλεσμα να προκύπτει γραμμική γεωμετρία για το CO_2 .



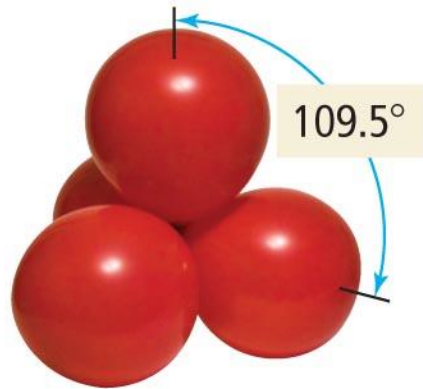
Τρεις ομάδες ηλεκτρονίων: Τριγωνική Επίπεδη γεωμετρία

- Τρεις ομάδες ηλεκτρονίων μπορούν να μεγιστοποιήσουν το διαχωρισμό τους υποθέτοντας γωνίες δεσμών 120° σε ένα επίπεδο - μια τριγωνική επίπεδη γεωμετρία.
- Ο διπλός δεσμός περιέχει μεγαλύτερη ηλεκτρονιακή πυκνότητα από τον απλό δεσμό και επομένως ασκεί ελαφρώς μεγαλύτερη άπωση στους απλούς δεσμούς.
- Γενικά, διαφορετικοί τύποι ομάδων ηλεκτρονίων ασκούν ελαφρώς διαφορετικές απώσεις - οι γωνίες των δεσμών αντανακλούν αυτές τις διαφορές.

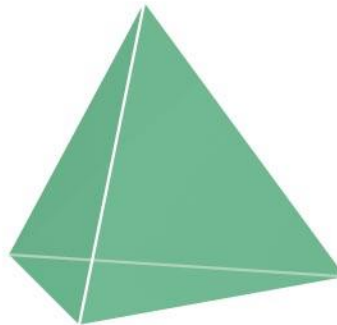


Τέσσερις ομάδες ηλεκτρονίων: Τετραεδρική γεωμετρία

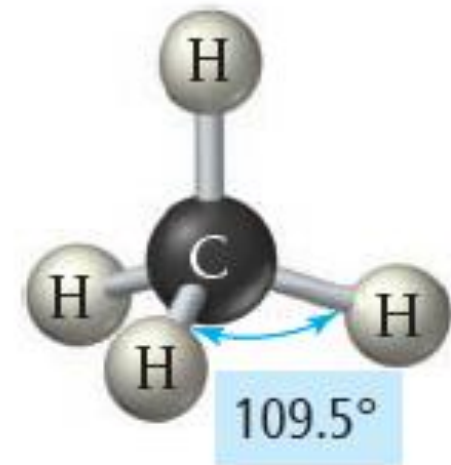
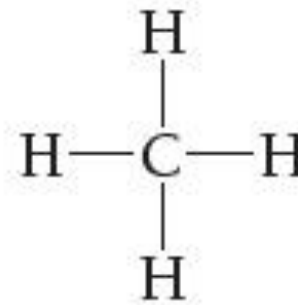
- Τετραεδρική γεωμετρία με γωνίες $109,5^\circ$
- Οι απώσεις μεταξύ των τεσσάρων ομάδων ηλεκτρονίων στους δεσμούς C-H αναγκάζουν το μόριο να λάβει τετραεδρικό σχήμα, μέγιστος διαχωρισμός μεταξύ των ομάδων



Tetrahedral geometry

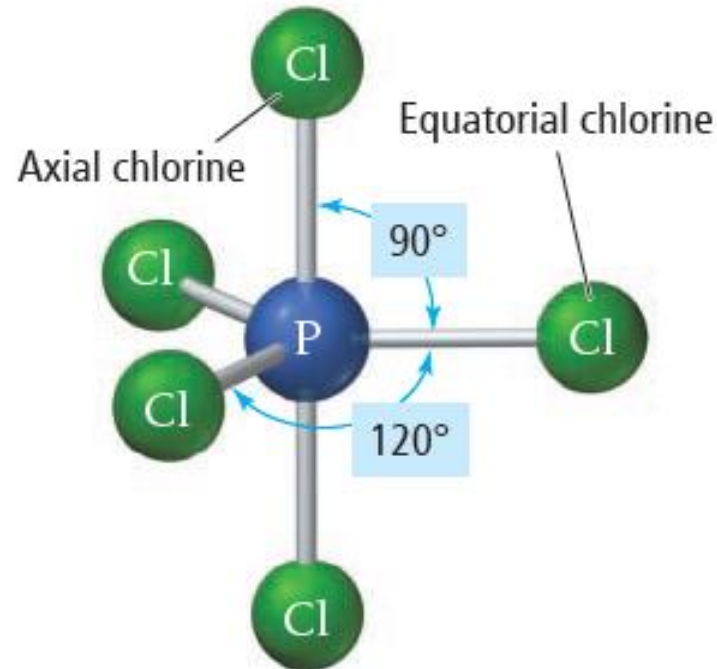
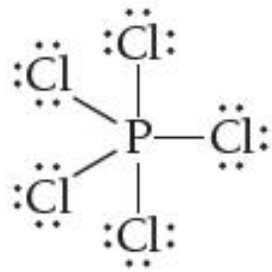


Tetrahedron



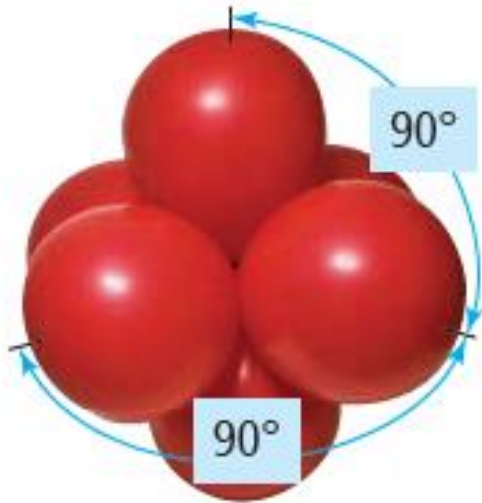
Πέντε ομάδες ηλεκτρονίων: γεωμετρία τριγωνικής διπυραμίδας

- 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

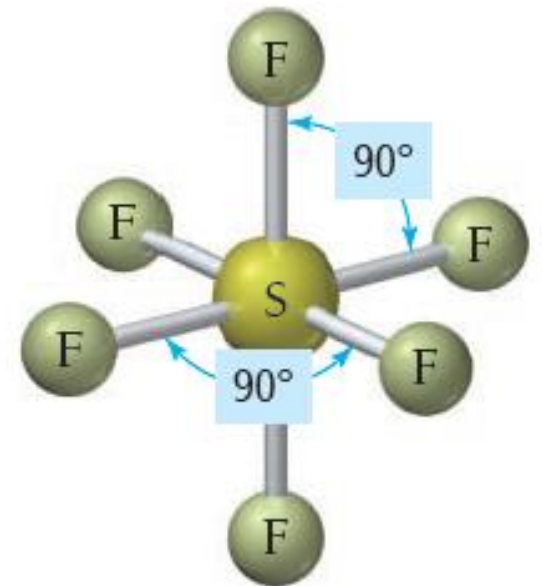
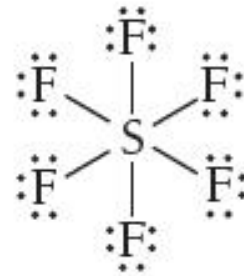
- Τέσσερις από τις ομάδες βρίσκονται σε ένα επίπεδο, με μια ομάδα πάνω από το επίπεδο και μία ομάδα κάτω από αυτό. Οι γωνίες σε αυτή τη γεωμετρία είναι όλες 90° .



Octahedral geometry

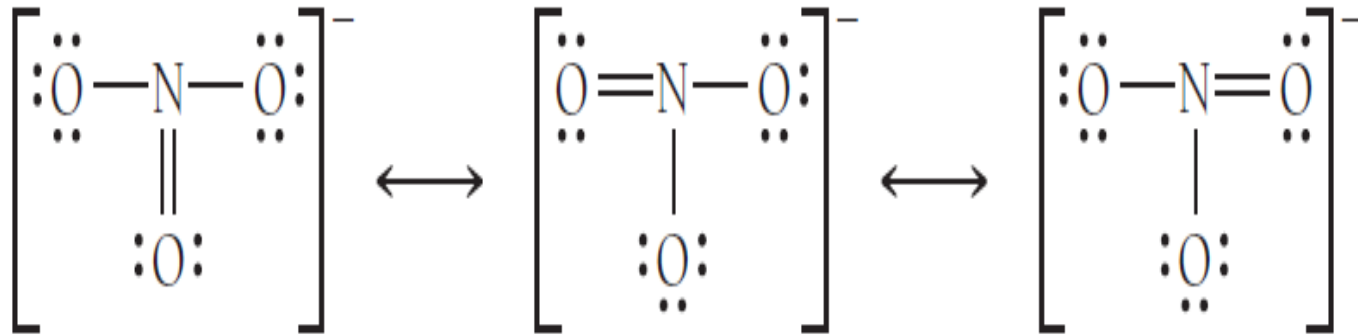


Octahedron

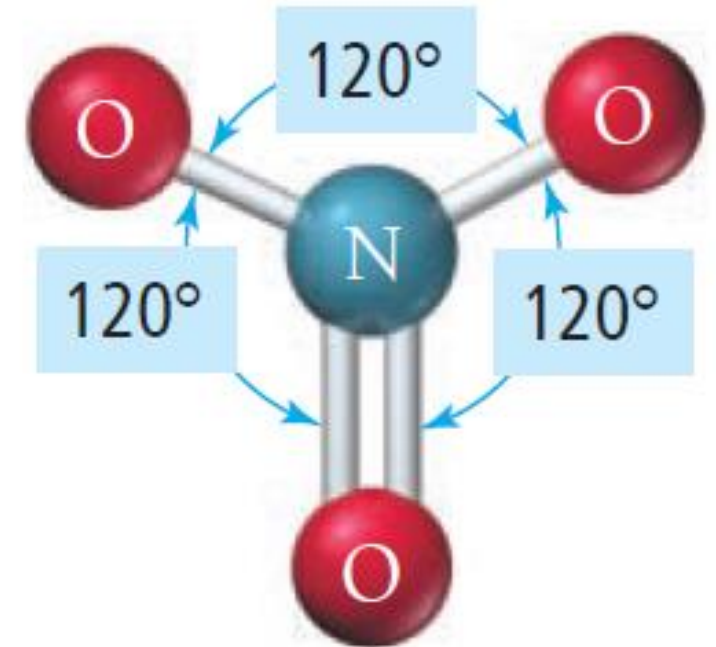


Μοριακή γεωμετρία του NO₃⁻

- Το άτομο του αζώτου έχει τρεις ομάδες ηλεκτρονίων: δύο απλούς δεσμούς και έναν διπλό δεσμό.



- Η ηλεκτρονική γεωμετρία που ελαχιστοποιεί τις απώσεις μεταξύ τριών ομάδων είναι η τριγωνική επίπεδη γεωμετρία
- Οι τρεις δεσμοί είναι ισοδύναμοι (λόγω των δομών συντονισμού), οπότε ο καθένας τους ασκεί την ίδια άπωση στους άλλους δύο και το μόριο έχει τρεις ίσες γωνίες δεσμών 120°.



Παράγοντες που επηρεάζουν τη μοριακή γεωμετρία

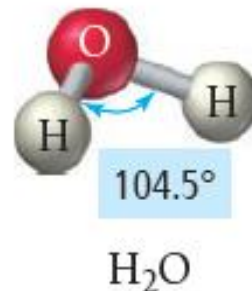
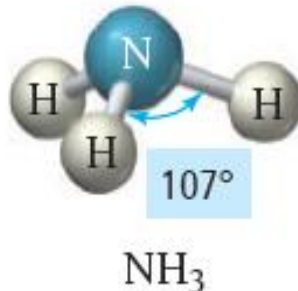
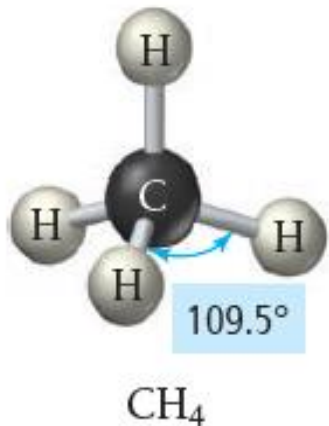
- Η πραγματική γεωμετρία του μορίου μπορεί να είναι διαφορετική από την ηλεκτρονική γεωμετρία
- Όταν οι ηλεκτρονικές ομάδες είναι προσαρτημένες σε άτομα διαφορετικού μεγέθους, ή όταν ο δεσμός με το ένα άτομο είναι διαφορετικός από τον δεσμό με το άλλο, αυτό θα επηρεάσει την μοριακή γεωμετρία γύρω από το κεντρικό άτομο
- Τα μονήρη ζεύγη επίσης επηρεάζουν την μοριακή γεωμετρία
 - Καταλαμβάνουν χώρο στο κεντρικό άτομο, αλλά «δεν βλέπονται» ως σημεία στην μοριακή γεωμετρία

Η επίδραση των μονήρων ζευγών

- Τα μονήρη ζεύγη «καταλαμβάνουν περισσότερο χώρο» στο κεντρικό άτομο
 - Επειδή η ηλεκτρονική τους πυκνότητα είναι αποκλειστικά στο κεντρικό άτομο απότι να είναι μοιρασμένη όπως συμβαίνει με τις δεσμικές ηλεκτρονικές ομάδες
- Τα σχετικά μεγέθη των αλληλεπιδράσεων των απωστικών δυνάμεων είναι

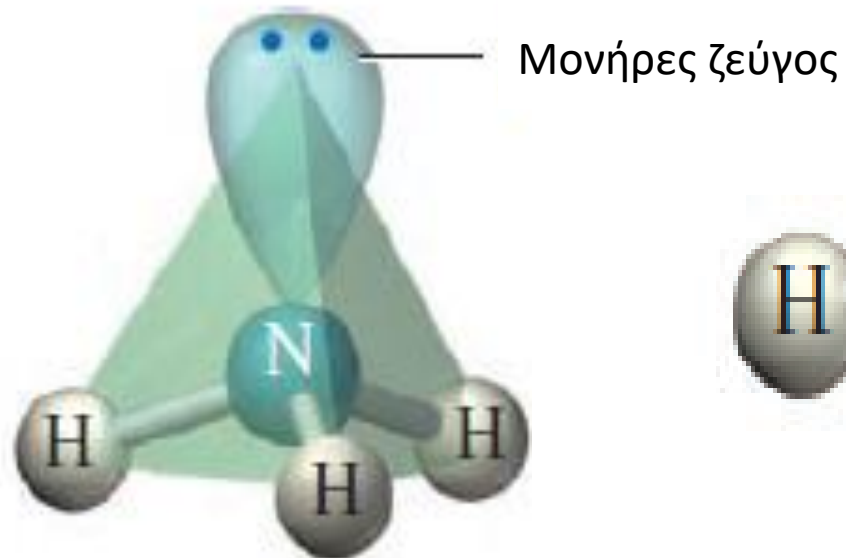
Μονήρες ζεύγος – Μονήρες ζεύγος > Μονήρες ζεύγος – Δεσμικό ζεύγος > Δεσμικό ζεύγος – Δεσμικό ζεύγος

- Αυτό επηρεάζει τις γωνίες δεσμού, καθιστώντας τις γωνίες δεσμικού ζεύγους-δεσμικού ζεύγους μικρότερες από τις αναμενόμενες
- Οι γωνίες των δεσμών γίνονται προοδευτικά μικρότερες καθώς ο αριθμός των μονήρων ζευγών στο κεντρικό άτομο αυξάνεται από μηδέν στο CH_4 σε ένα στην NH_3 σε δύο στο H_2O .



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.

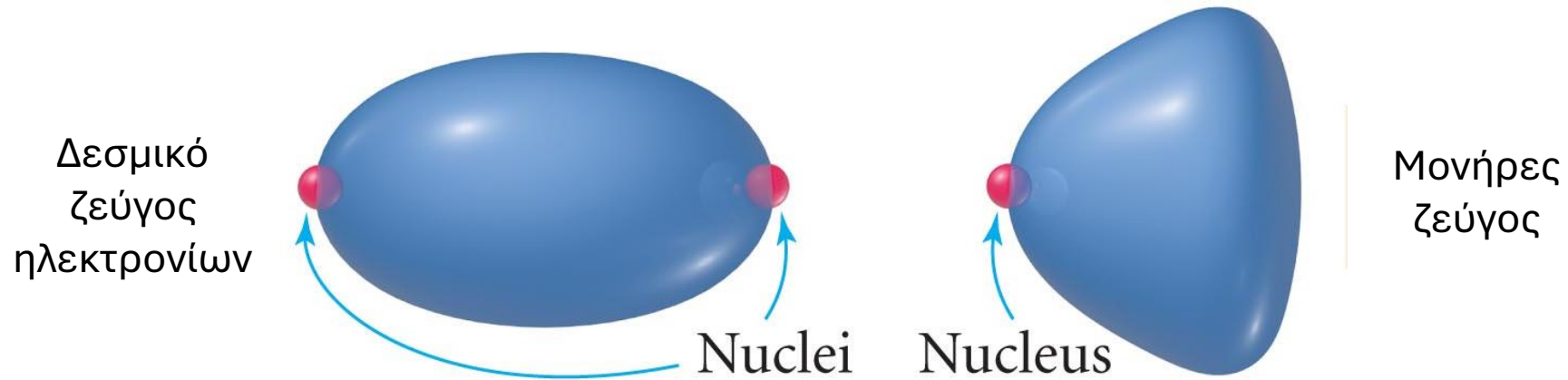


Ηλεκτρονική γεωμετρία:
Τετραεδρική



Μοριακή γεωμετρία:
Τριγωνική πυραμιδική

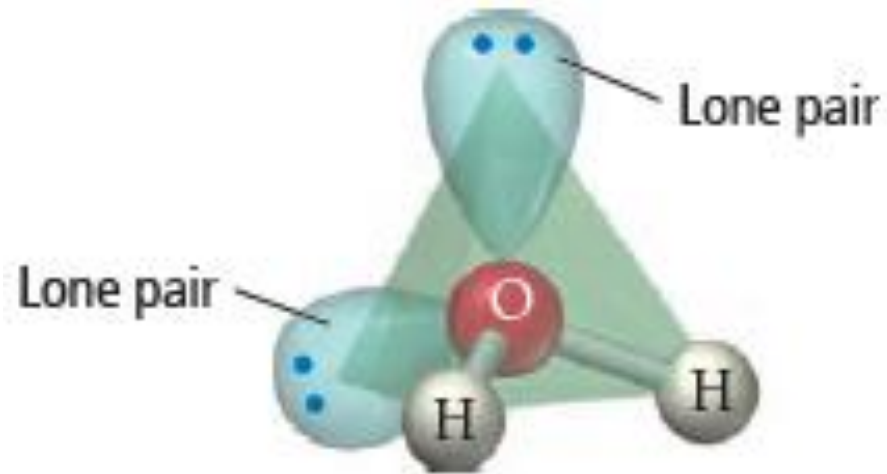
Μη δεσμικά ζεύγη ηλεκτρονίων έναντι δεσμικών ζεύγων ηλεκτρονίων



- 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

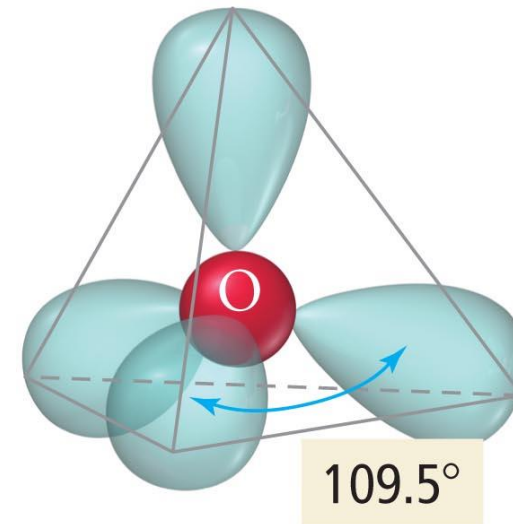
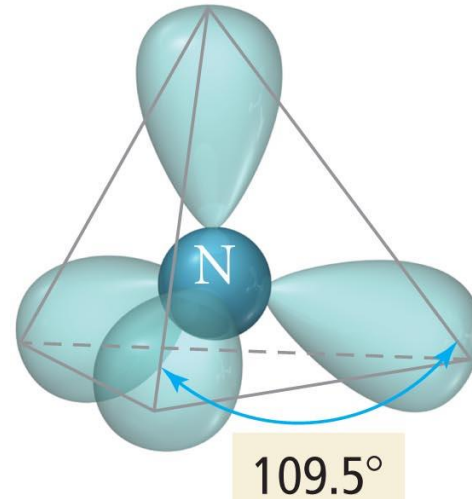


Κεκαμμένη μοριακή γεωμετρία

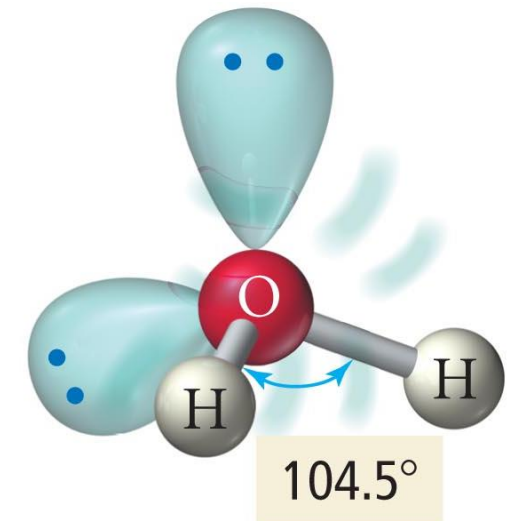
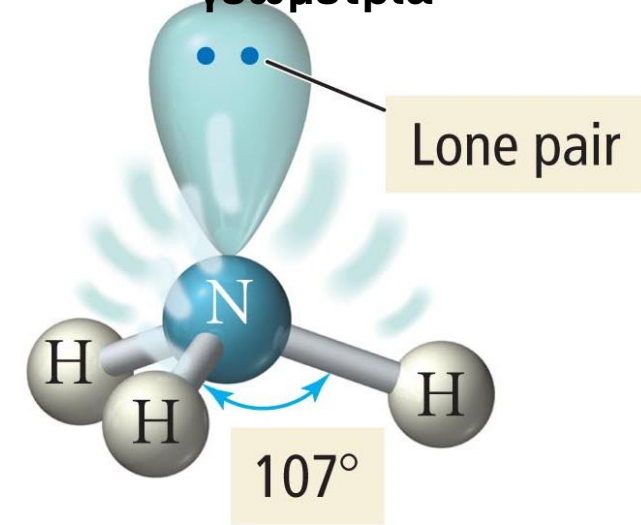
Αλλαγή της γωνίας δεσμού από τα μονήρη ζεύγη

- 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

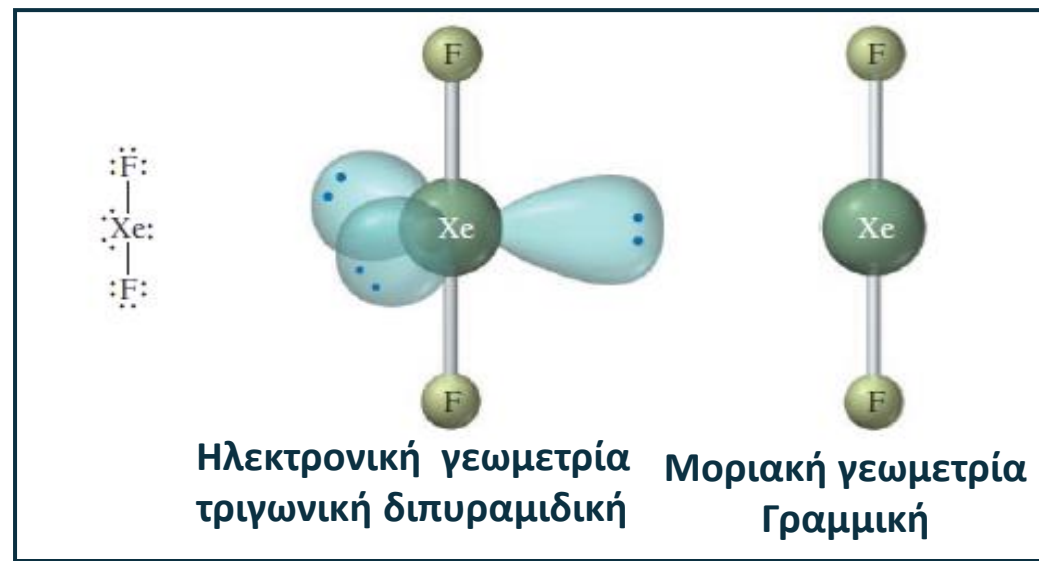
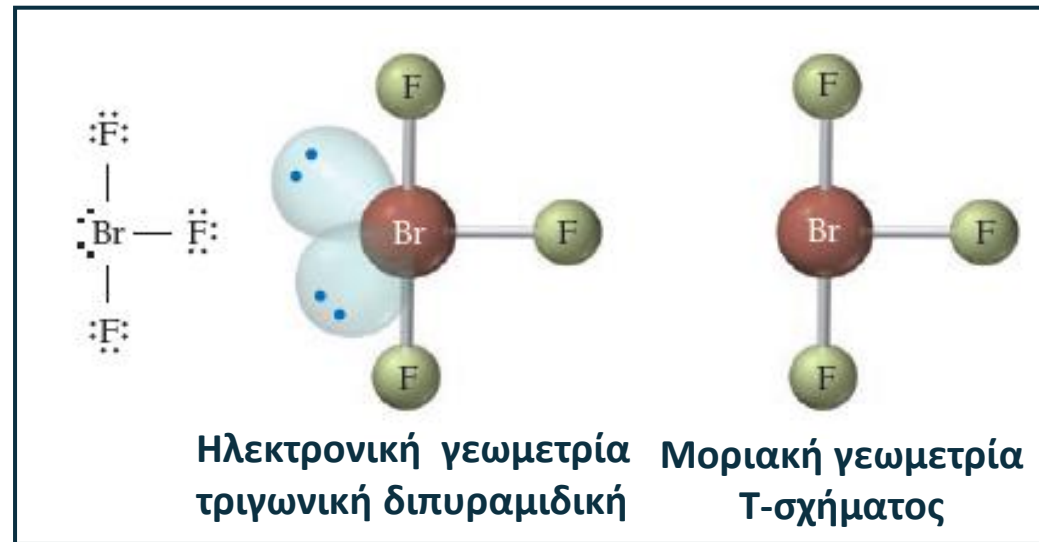
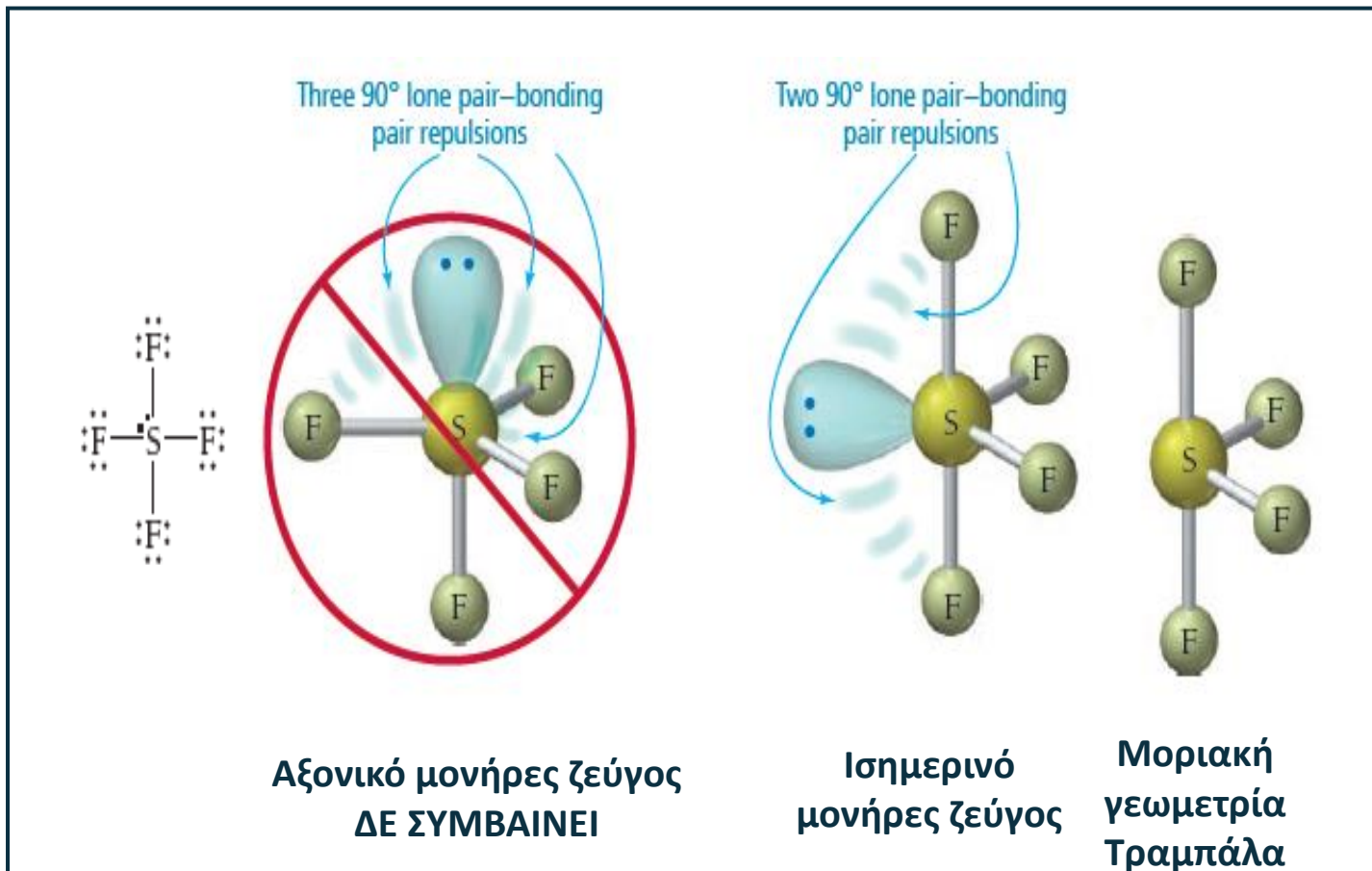


Πραγματική μοριακή γεωμετρία



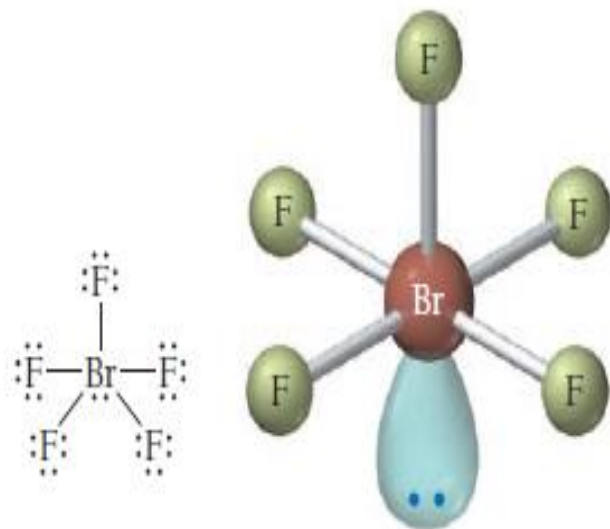
Πέντε ομάδες ηλεκτρονίων με μονήρη ζεύγη

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

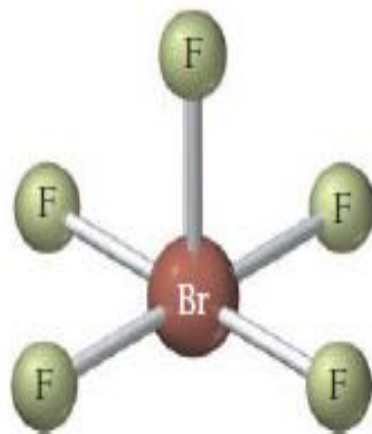


Έξι ομάδες ηλεκτρονίων με μονήρη ζεύγη

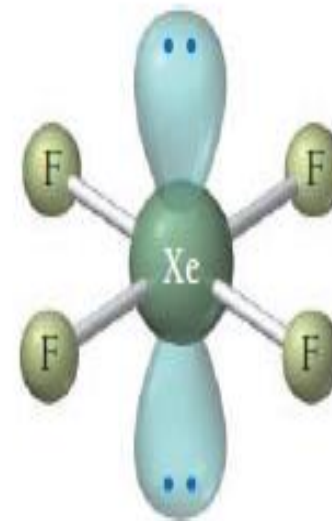
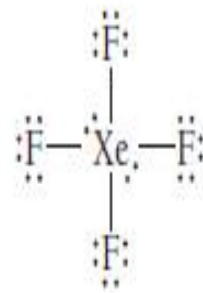
Η ηλεκτρονική γεωμετρία, λόγω των έξι ομάδων ηλεκτρονίων, είναι οκταεδρική



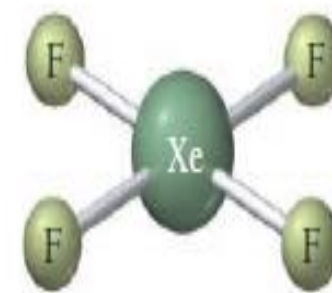
Ηλεκτρονική γεωμετρία
οκταεδρική



Μοριακή γεωμετρία
Τετραγωνική
πυραμιδική


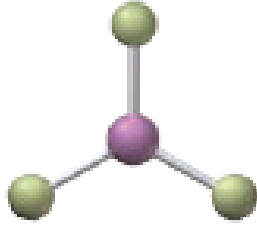

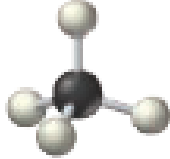




Ηλεκτρονική γεωμετρία
οκταεδρική



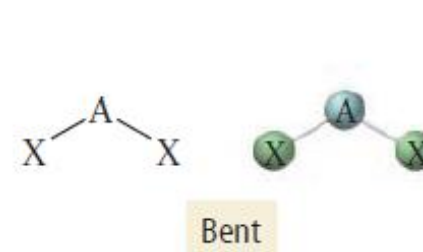
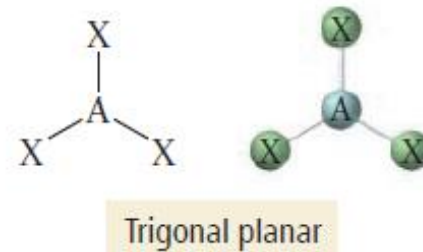
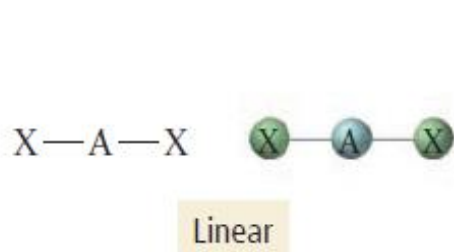
Μοριακή γεωμετρία
Επίπεδη Τετραγωνική

Ηλεκτρονικές και μοριακές γεωμετρίες

Electron Groups*	Bonding Groups	Lone Pairs	Electron Geometry	Molecular Geometry	Approximate Bond Angles		Example
2	2	0	Linear	Linear	180°	$:\ddot{\text{O}}=\text{C}=\ddot{\text{O}}:$	
3	3	0	Trigonal planar	Trigonal planar	120°	$\begin{array}{c} :\ddot{\text{F}}: \\ \\ :\ddot{\text{F}}-\text{B}-\ddot{\text{F}}: \\ \\ :\ddot{\text{F}}: \end{array}$	
3	2	1	Trigonal planar	Bent	<120°	$:\ddot{\text{O}}=\ddot{\text{S}}-\ddot{\text{O}}:$	
4	4	0	Tetrahedral	Tetrahedral	109.5°	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$	
4	3	1	Tetrahedral	Trigonal pyramidal	<109.5°	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\ddot{\text{N}}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$	
4	2	2	Tetrahedral	Bent	<109.5°	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\ddot{\text{O}}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$	

Παραδείγματα μοριακών γεωμετριών

Συμβολισμοί των δεσμών που υποδεικνύουν τρισδιάστατες δομές σε δισδιάστατο χαρτί.



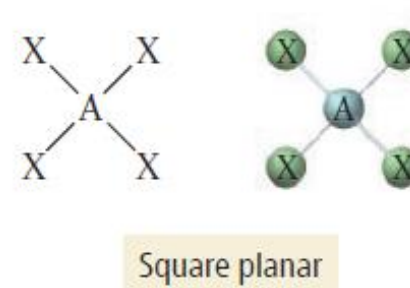
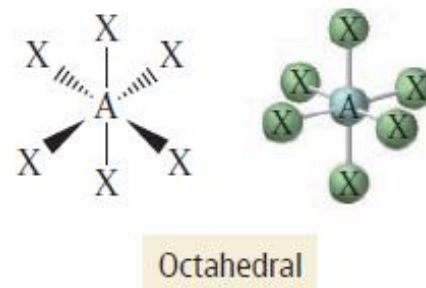
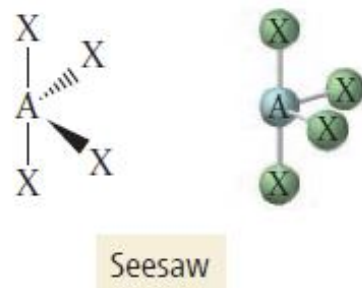
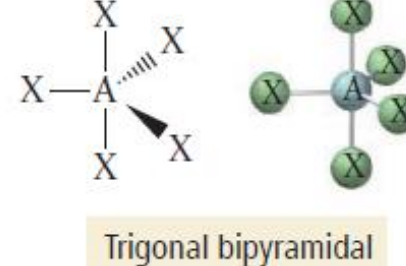
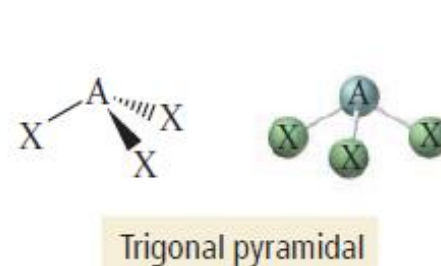
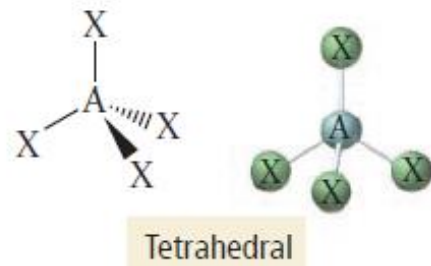
—
Ευθεία γραμμή
Δεσμός στο
επίπεδο του
χαρτιού



—
Διακεκομμένη
σφήνα
Δεσμός που
εισέρχεται μέσα
στο χαρτί

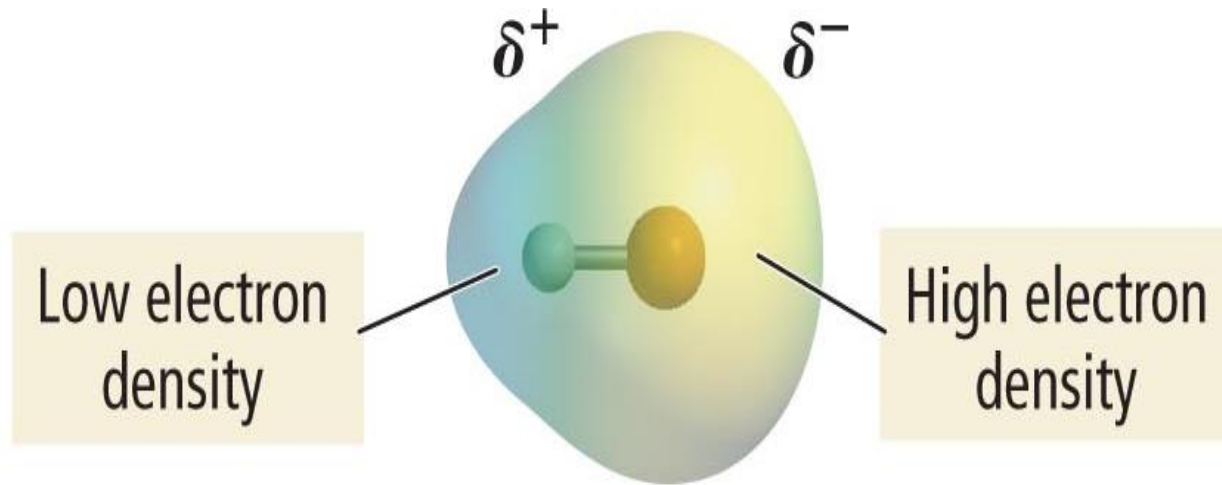
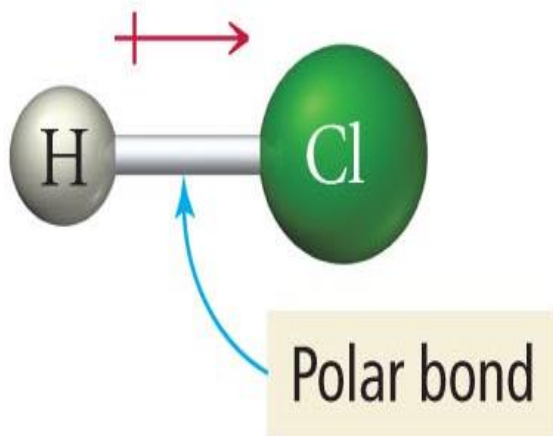


—
Συμπαγής
σφήνα
Δεσμός που
εξέρχεται από το
χαρτί



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.

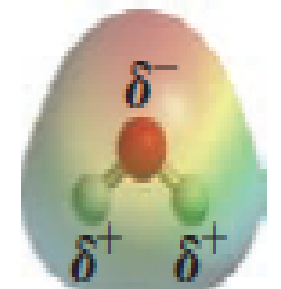
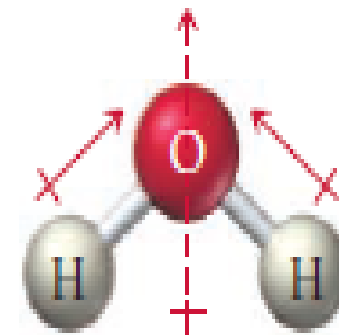
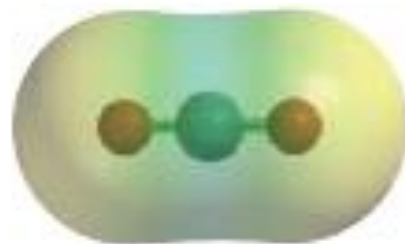


Πολικότητα των μορίων και διπολική ροπή

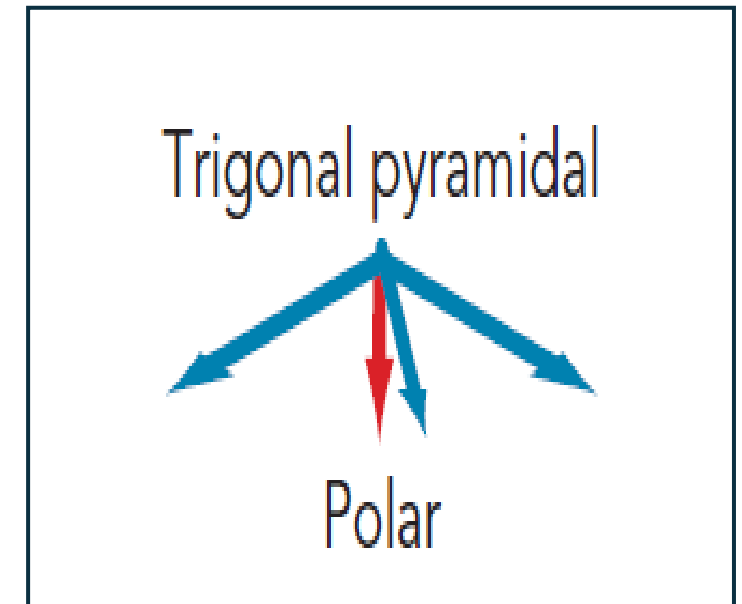
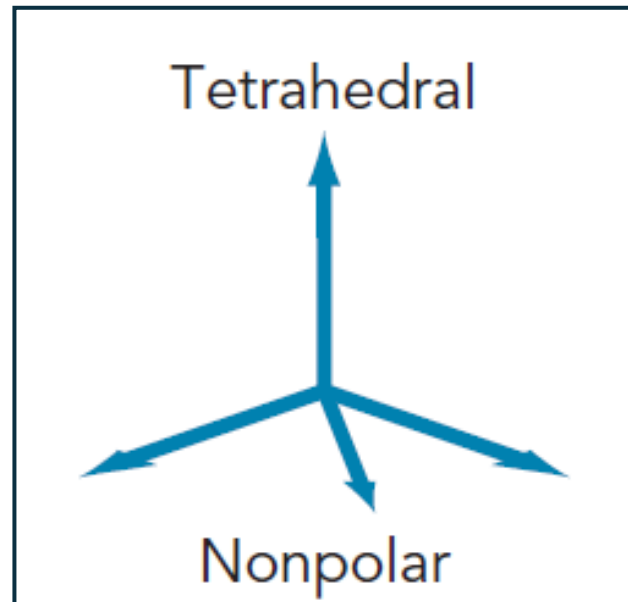
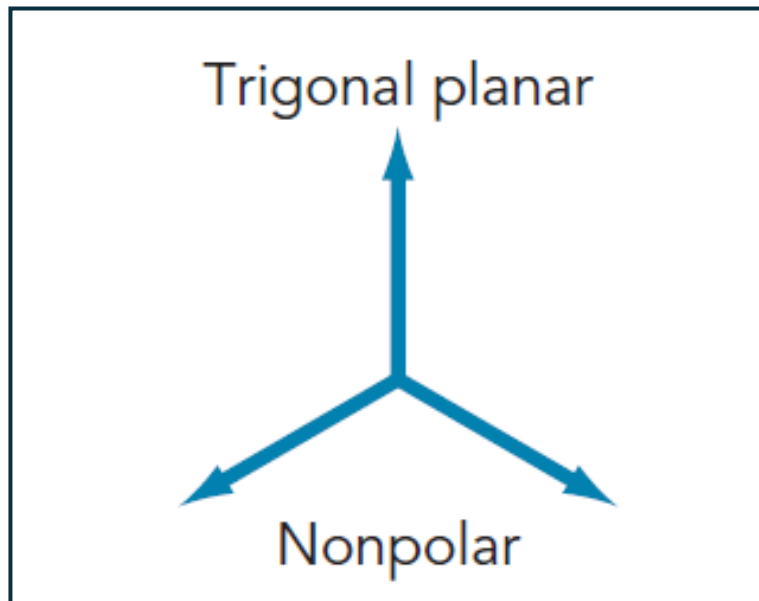
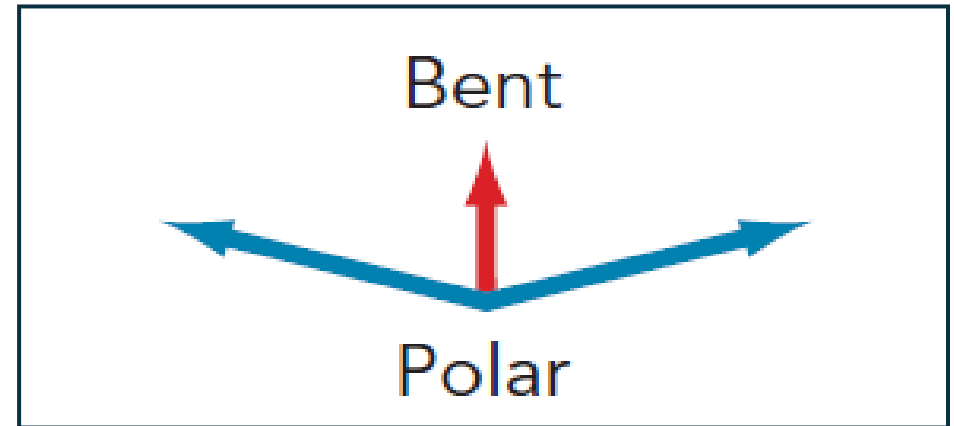
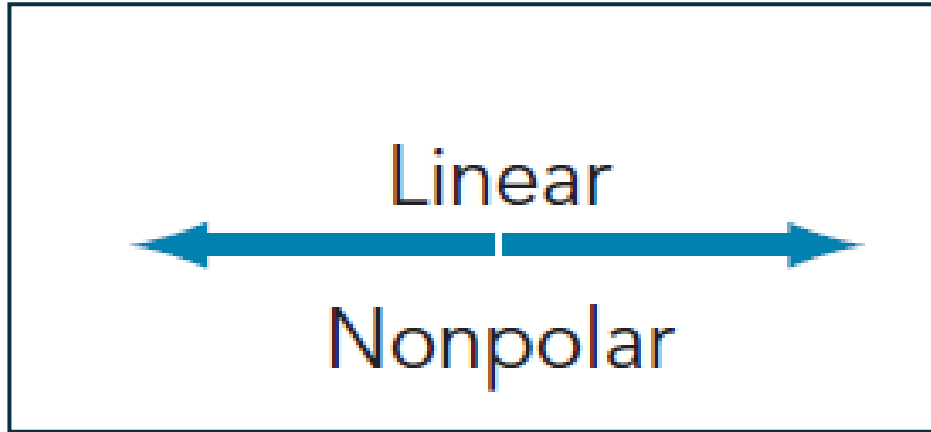
Στα πολυατομικά μόρια, η παρουσία πολικών δεσμών μπορεί να έχει ή να μην έχει ως αποτέλεσμα ένα πολικό μόριο, ανάλογα με τη μοριακή γεωμετρία.

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**.



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

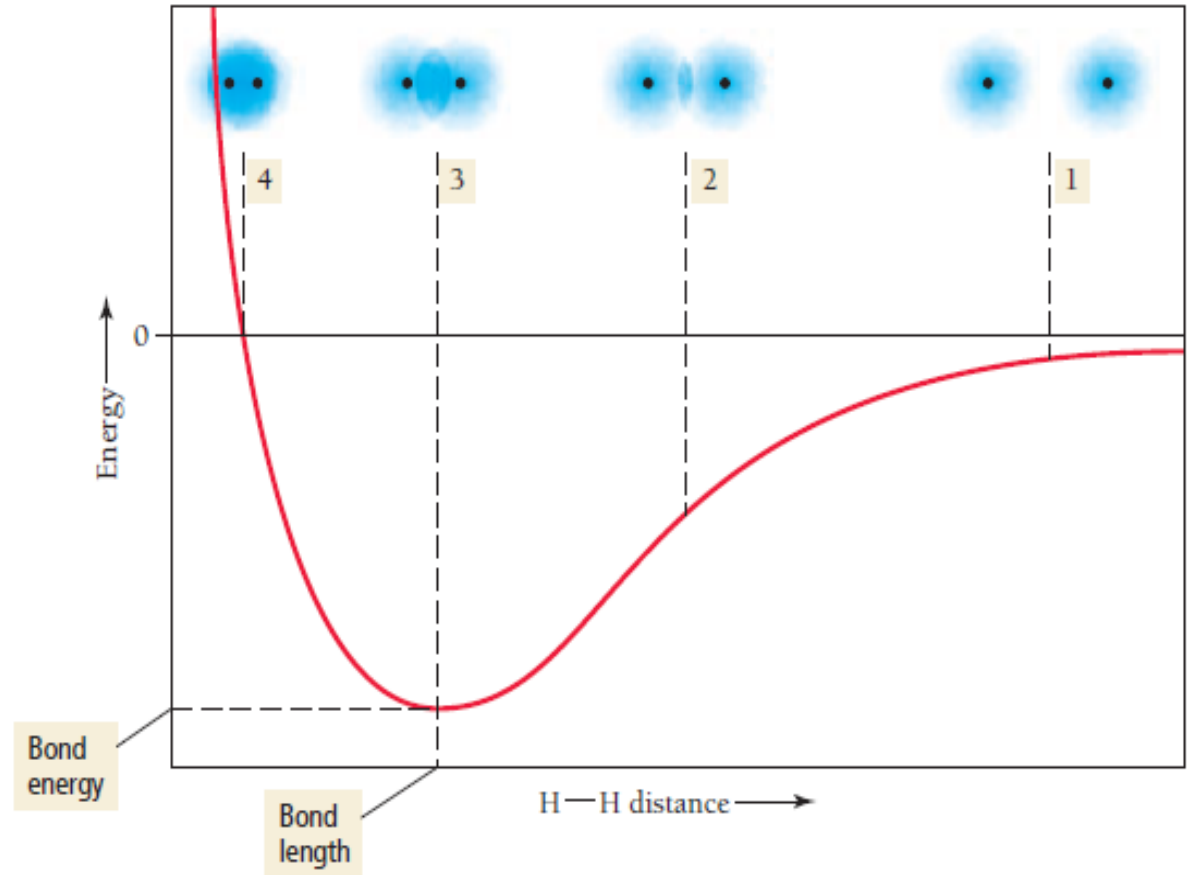


Θεωρία Δεσμού Σθένους

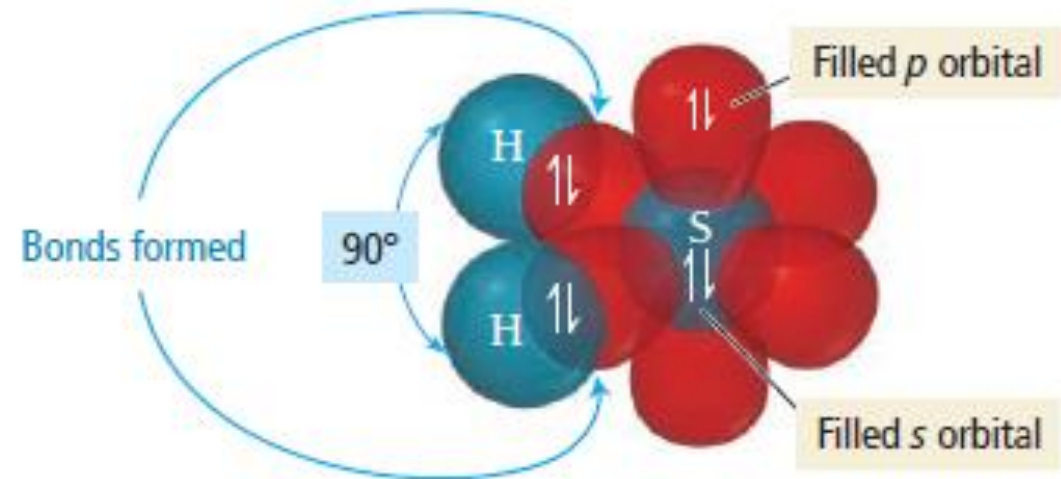
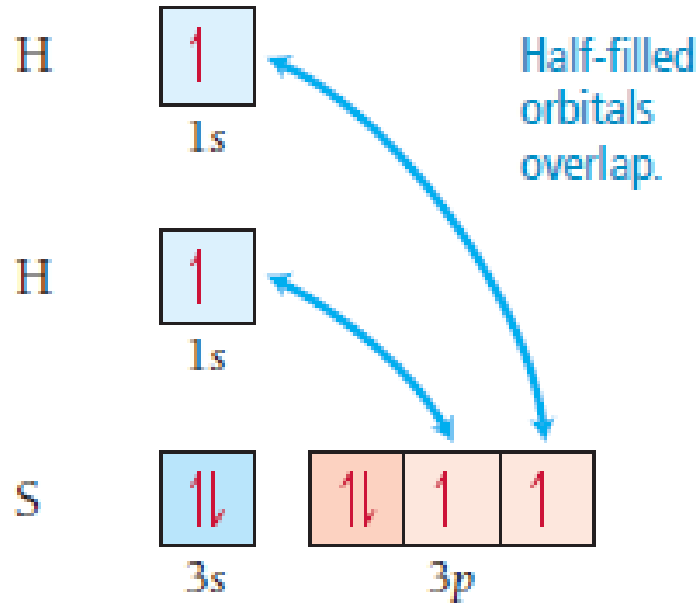
- Τα ηλεκτρόνια βρίσκονται σε κβαντομηχανικά τροχιακά που εντοπίζονται σε ξεχωριστά άτομα.
- s, p, d και f ατομικά τροχιακά, υβριδισμένα ατομικά τροχιακά (μίξη ή συνδυασμός δύο ή περισσότερων πρότυπων ατομικών τροχιακών)
- Οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ 2 ατόμων επηρεάζουν τις ενέργειες των ηλεκτρονίων στα ατομικά τροχιακά.
- Εάν η ενέργεια του συστήματος μειώνεται λόγω των αλληλεπιδράσεων, τότε σχηματίζεται ένας χημικός δεσμός.

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.



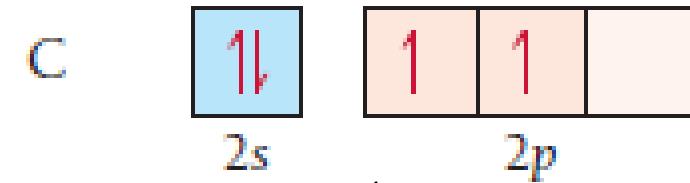
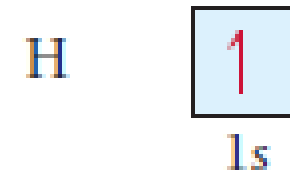
Εφαρμογή της θεωρίας δεσμού σθένους



- 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.

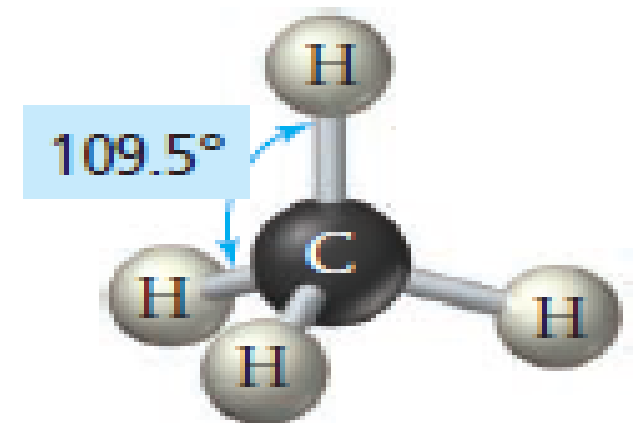
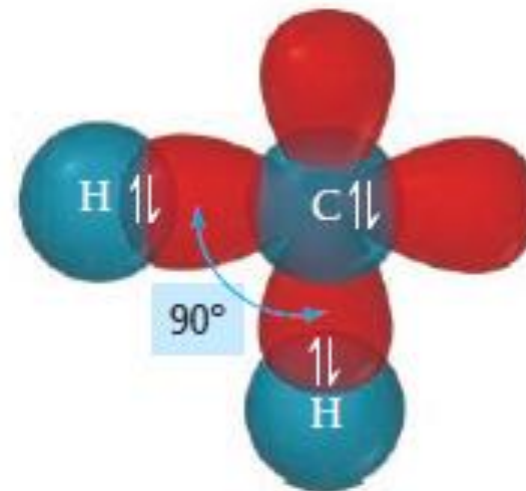
Υβριδισμός τροχιακών

- 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.



Θεωρητική πρόβλεψη

Παρατηρούμενη πραγματικότητα

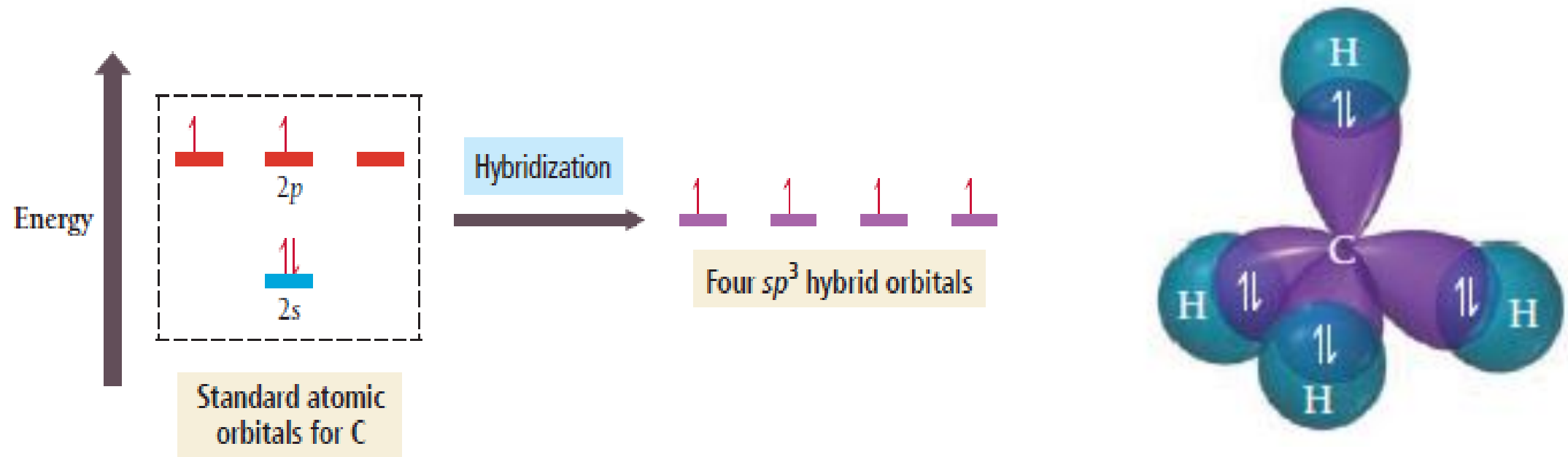


Γενικές παραδοχές σχετικά με τον υβριδισμό

- Ο αριθμός των προστιθέμενων πρότυπων ατομικών τροχιακών ισούται πάντα με τον αριθμό των υβριδικών τροχιακών που σχηματίζονται. Ο συνολικός αριθμός των τροχιακών διατηρείται.
- Οι συγκεκριμένοι συνδυασμοί πρότυπων ατομικών τροχιακών καθορίζουν το σχήμα και την ενέργεια των υβριδικών τροχιακών που σχηματίζονται.
- Ο τύπος υβριδισμού που πραγματοποιείται είναι αυτός που παράγει τη χαμηλότερη συνολική ενέργεια για το μόριο.

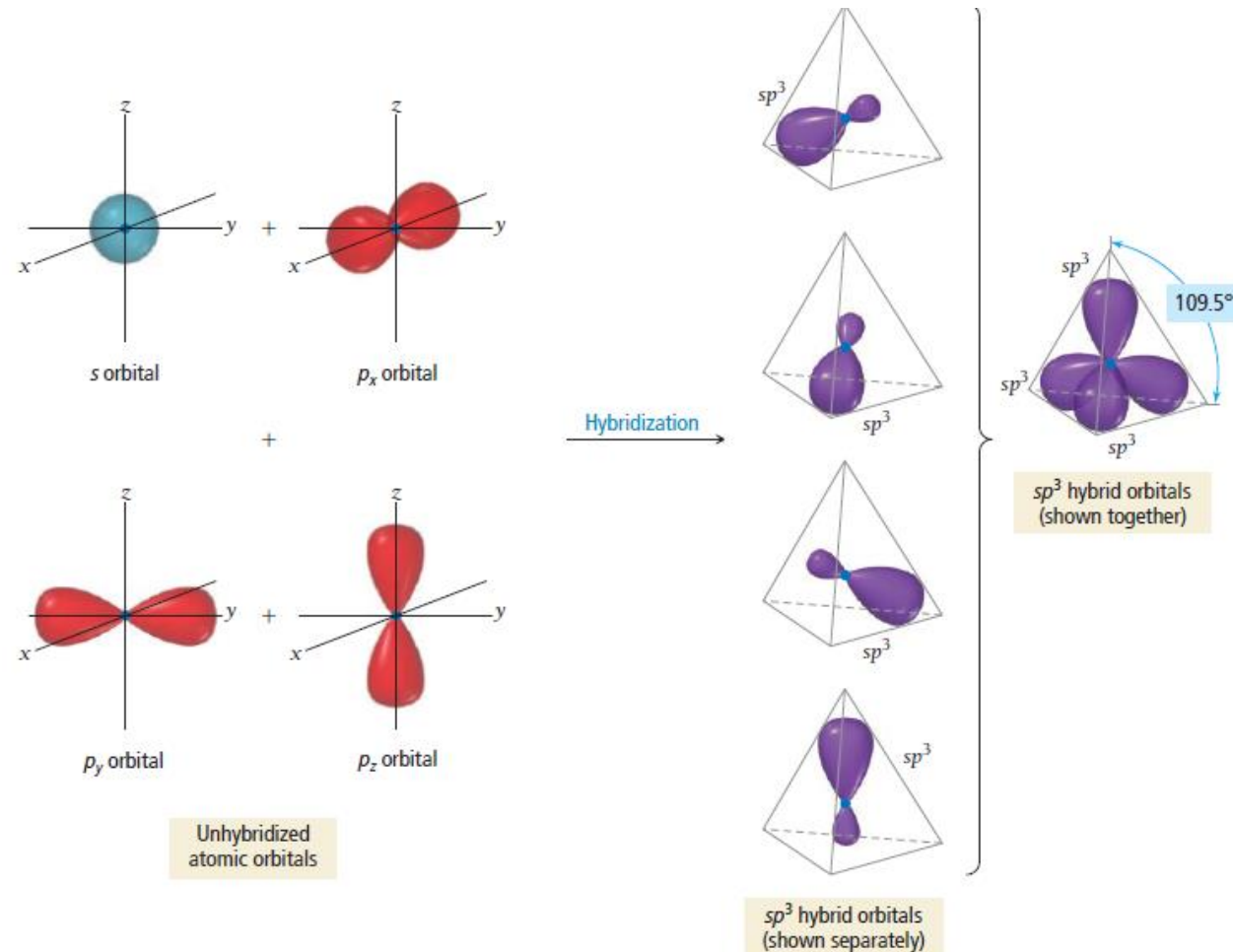
Υβριδισμός sp^3

- 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

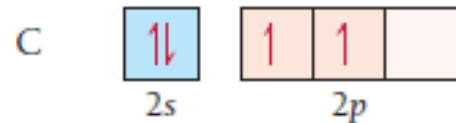
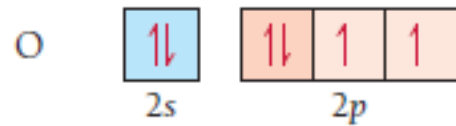
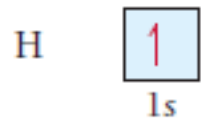
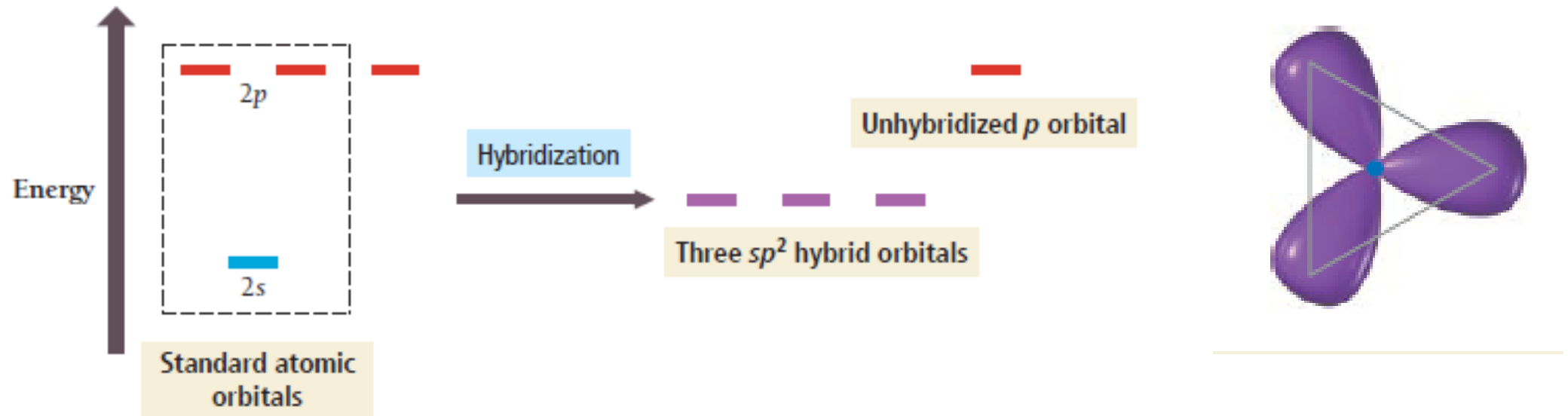


Σχηματισμός υβριδικών τροχιακών sp^3

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

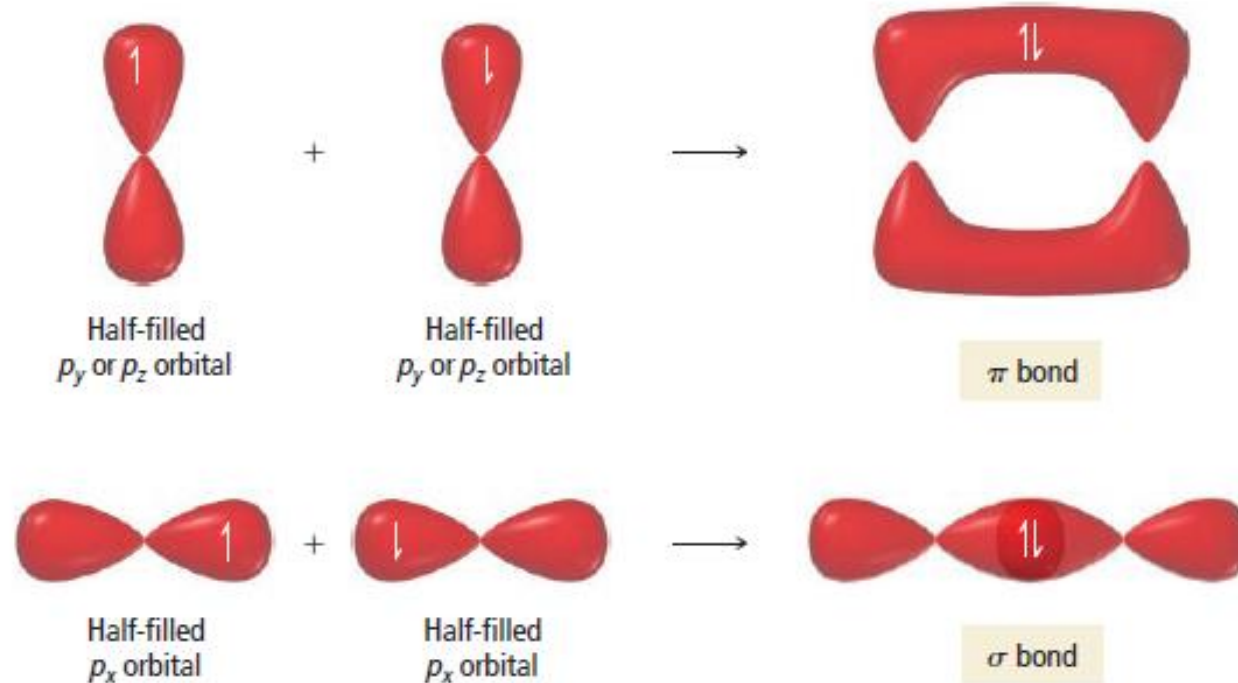


Υβριδισμός sp^2



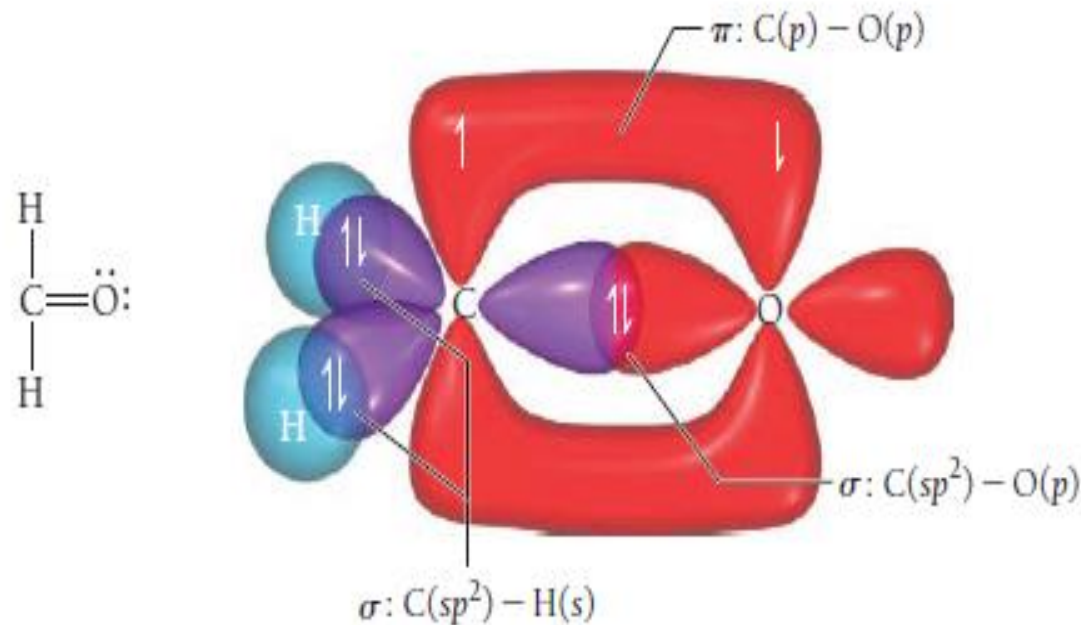
Δεσμοί Σίγμα (σ) και Πι (π)

- 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



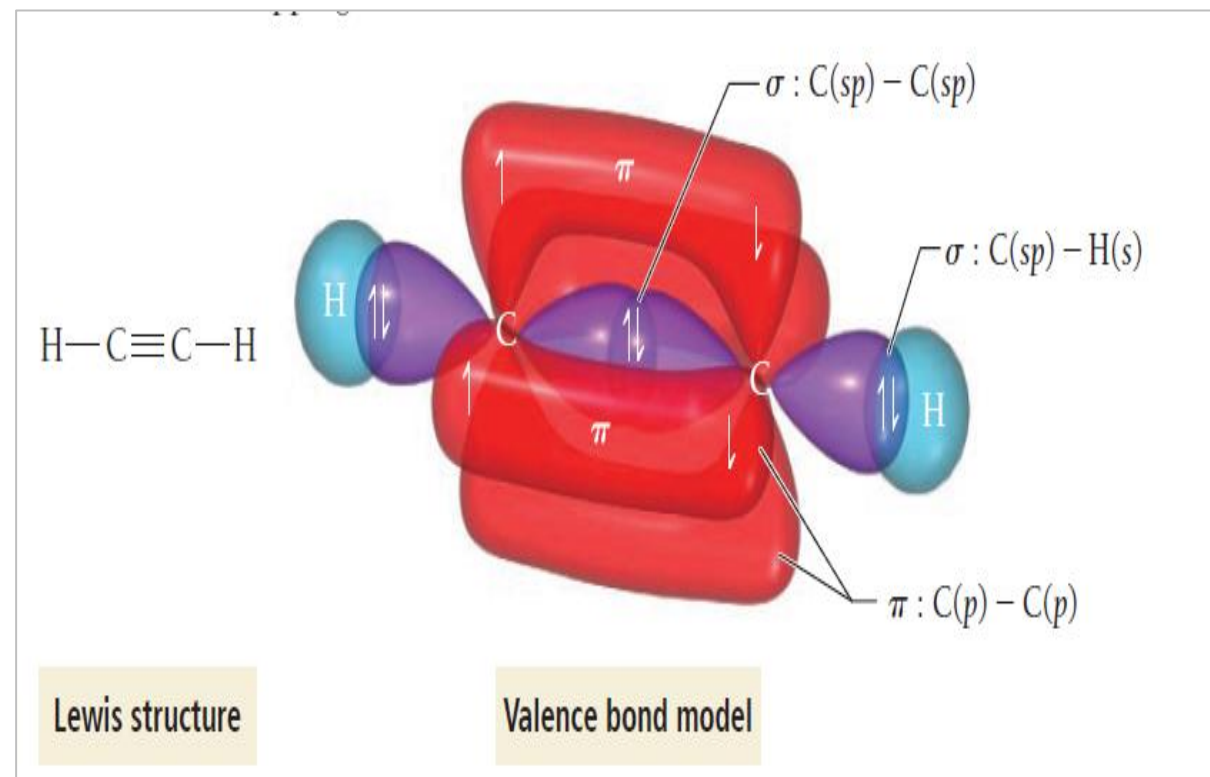
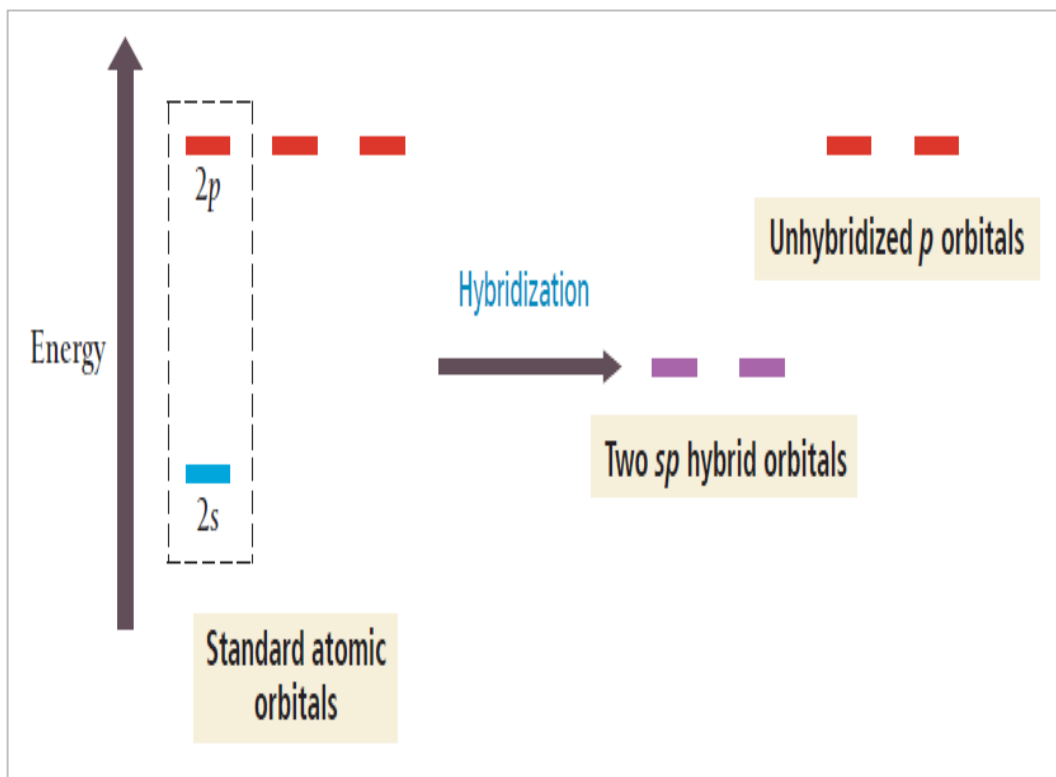
Δομή Lewis και μοντέλο δεσμών σθένους για το H_2CO

- Ένας διπλός δεσμός στο μοντέλο Lewis αντιστοιχεί πάντα σε έναν δεσμό σ και έναν δεσμό π στη θεωρία δεσμών σθένους.
- Οι δεσμοί π είναι ασθενέστεροι από τους σ , επειδή η επικάλυψη των τροχιακών από πλευρά σε πλευρά τείνει να είναι λιγότερο αποτελεσματική από ό,τι από άκρη σε άκρη.
- Τα υβριδικά τροχιακά επικαλύπτονται για τον σχηματισμό ενός σ δεσμού.
- Τα μη υβριδοποιημένα p τροχιακά επικαλύπτονται για τον σχηματισμό ενός π δεσμού.
- Ο δεσμός π σε ένα διπλό δεσμό είναι γενικά ευκολότερο να σπάσει από τον δεσμό σ .



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).