

Για την περιγραφή του ομοιοπολικού δεσμού, έχουν διατυπωθεί ποικίλες κβαντομηχανικές θεωρίες, καθεμιά από τις οποίες στηρίζεται σε ορισμένη σειρά παραδοχών. Οι κυριότερες είναι:

ΘΕΩΡΙΑ ΔΕΣΜΟΥ ΣΘΕΝΟΥΣ:

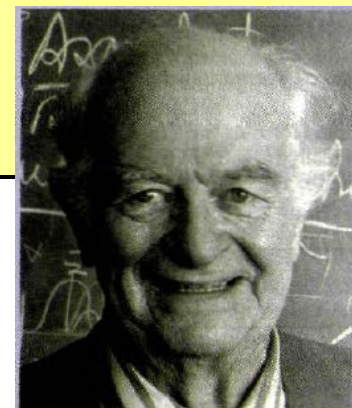
- 1) Ο ομοιοπολικός δεσμός σχηματίζεται από επικάλυψη ατομικών τροχιακών της στιβάδας σθένους 2 ατόμων.
- 2) Τα δύο τροχιακά που επικαλύπτονται περιέχουν από ένα μονήρες ηλεκτρόνιο. Τα δύο αυτά ηλεκτρόνια έχουν αντιπαράλληλα spin.
- 3) Όσο μεγαλύτερη η επικάλυψη των ατομικών τροχιακών, τόσο ισχυρότερος ο ομοιοπολικός δεσμός που σχηματίζεται.

ΘΕΩΡΙΑ ΜΟΡΙΑΚΩΝ ΤΡΟΧΙΑΚΩΝ:

- 1) Τα Μ.Τ. προκύπτουν από επικάλυψη Α.Τ.
(Μάλιστα από χ Α.Τ. προκύπτουν χ Μ.Τ.
- 2) Τα Μ.Τ. περιγράφουν περιοχές του χώρου στις οποίες υπάρχει μεγάλη πιθανότητα να βρεθούν ηλεκτρόνια
- 3) Τα Μ.Τ. έχουν καθορισμένο σχήμα, μέγεθος και ενέργεια.
- 4) Υπάρχουν 2 είδη τροχιακών

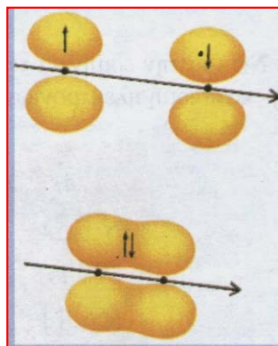
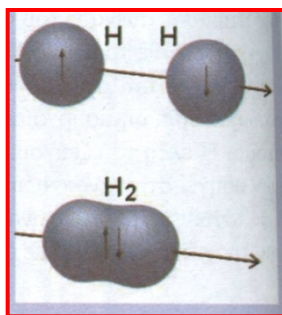
ΑΝΤΙΔΕΣΜΙΚΑ

ΔΕΣΜΙΚΑ ($\uparrow$ Ενέργεια)



Linus Pauling (1901- 1994)

Τα Μ.Τ. περιβάλλουν δύο πυρήνες ενώ τα Α.Τ. περιβάλλουν ένα πυρήνα.

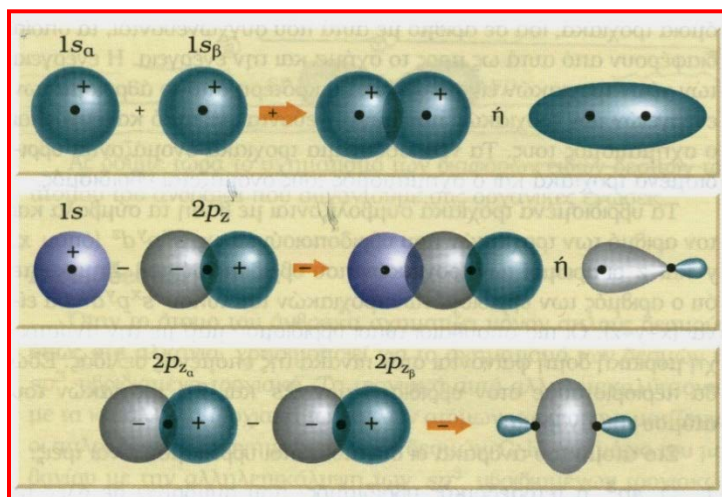


ΕΡΩΤΗΣΕΙΣ ΚΑΤΑΝΟΗΣΗΣ

1. Ποια ατομικά τροχιακά θα χρησιμοποιήσουν τα εξής άτομα για να σχηματίσουν δεσμό με άλλα στοιχεία ; Α) ${}_9\text{F}$, Β) ${}_8\text{O}$, Γ) ${}_{15}\text{P}$.

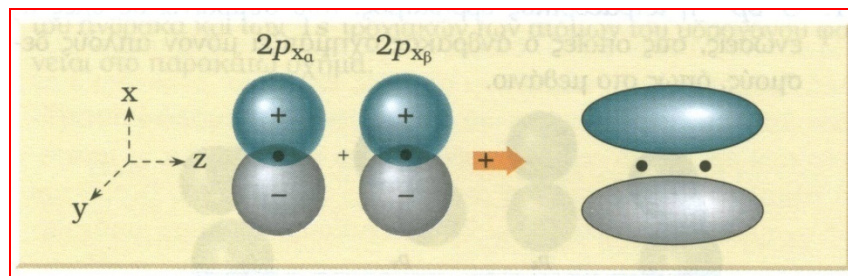
ΔΕΣΜΟΣ σ : Σχηματίζεται από την επικάλυψη ενός S ατομικού τροχιακού με άλλο τροχιακό, ή μεταξύ δύο p τροχιακών με αξονική όμως επικάλυψη.

Είναι **ΙΣΧΥΡΟΣ** δεσμός λόγω μεγαλύτερης επικάλυψης των ατομικών τροχιακών.



ΔΕΣΜΟΣ π : Σχηματίζεται με πλευρική επικάλυψη p ατομικών τροχιακών.

Είναι **ΑΣΘΕΝΕΣΤΕΡΟΣ** του σ δεσμός, λόγω μικρότερης επικάλυψης των ατομικών τροχιακών.

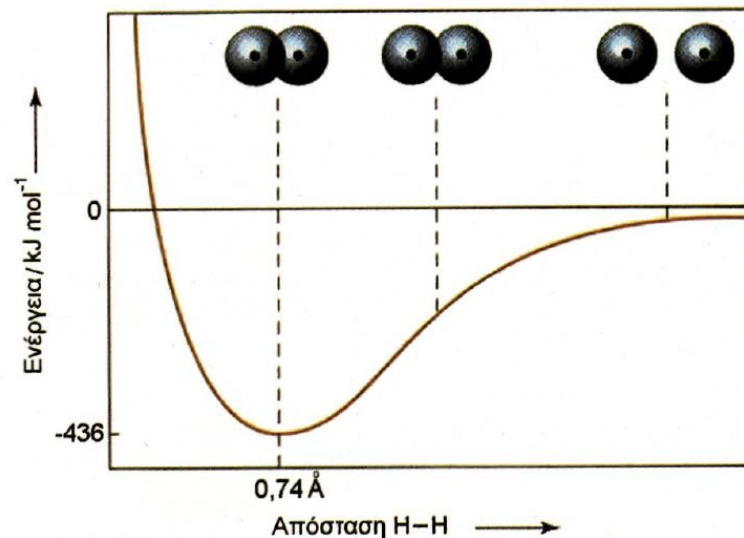


1. Τα S ατομικά τροχιακά δεν μετέχουν σε π δεσμούς.

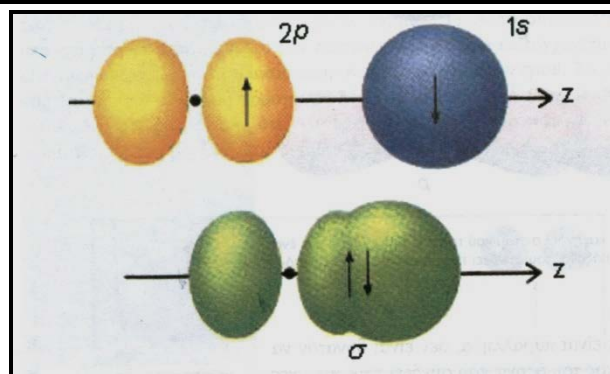
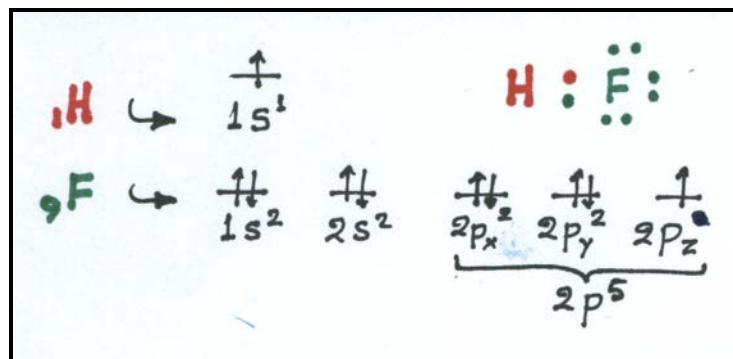
2. Δεσμός π μπορεί να δημιουργηθεί μόνο μετά από το σχηματισμό σ δεσμού.

3. Ο απλός δεσμός είναι πάντοτε σ . Ο διπλός δεσμός αποτελείται από $1\sigma + 1\pi$. Ο τριπλός δεσμός αποτελείται από $1\sigma + 2\pi$.

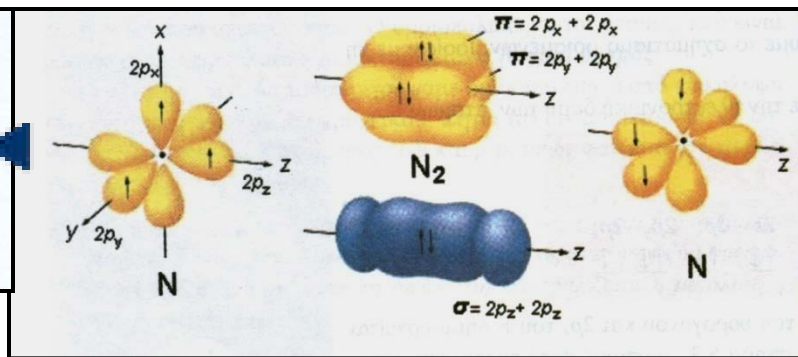
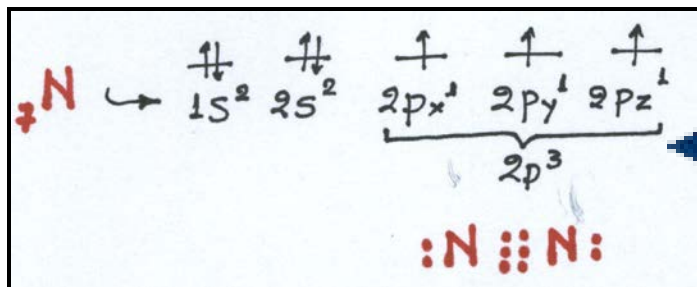
ΜΗΚΟΣ ΔΕΣΜΟΥ: Η απόσταση μεταξύ 2 πυρήνων η οποία αντιστοιχεί στην ελάχιστη δυνατή ενέργεια του συστήματος.



ΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΣ ΑΠΛΟΥ ΔΕΣΜΟΥ ΣΤΟ HF (απλός ομοιοπολικός δεσμός σ)



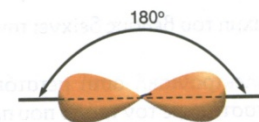
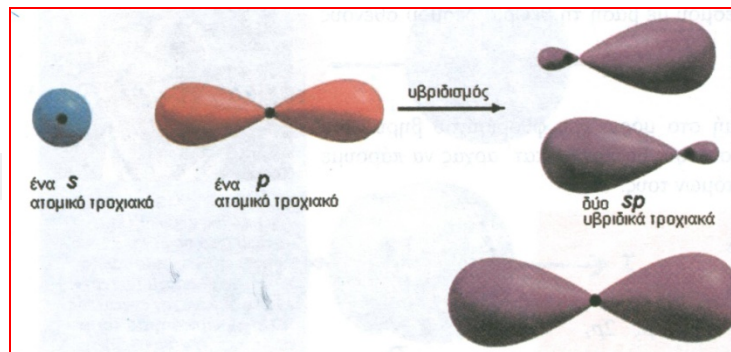
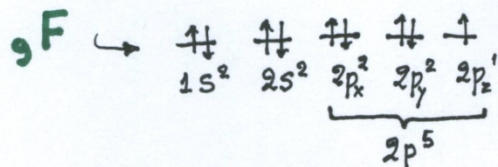
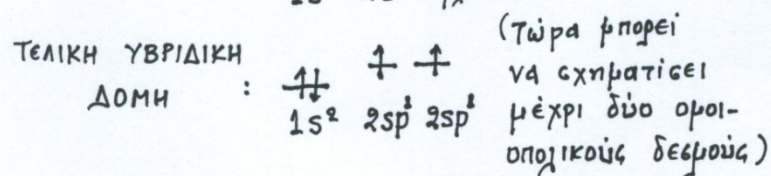
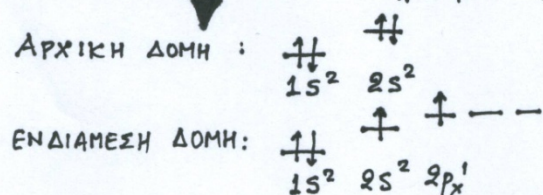
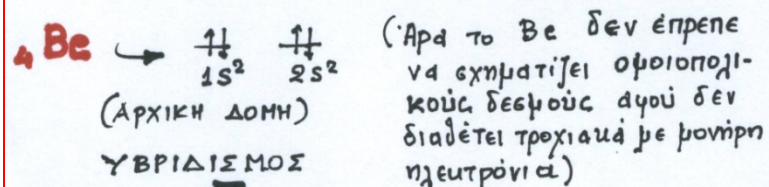
Δεσμός σχηματίζεται με επικάλυψη του 1s τροχιακού του H και του 2pz τροχιακού του F.

ΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΣ ΤΡΙΠΛΟΥ ΔΕΣΜΟΥ ΣΤΟ N₂. (1σ και 2π ομοιοπολικοί δεσμοί)

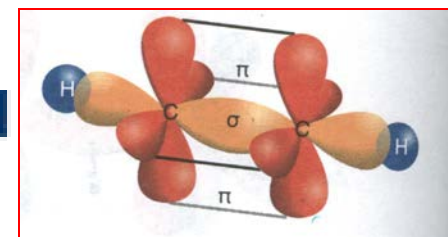
Δεσμός σχηματίζεται με επικάλυψη των τροχιακών 2px, 2py, 2pz από κάθε άτομο N

ΕΡΩΤΗΣΕΙΣ ΚΑΤΑΝΟΗΣΗΣ

2. Ποια ατομικά τροχιακά θα επικαλυφθούν μεταξύ τους για να σχηματίσουν δεσμό τα στοιχεία: $_{17}\text{Cl}$ και $_{1}\text{H}$;
3. Ποια ατομικά τροχιακά θα επικαλυφθούν μεταξύ τους για να σχηματίσουν δεσμό τα στοιχεία: $_{16}\text{S}$ και $_{1}\text{H}$;
4. Πόσοι δεσμοί σ και πόσοι π υπάρχουν στις ενώσεις: α) Προπένιο, β) Μεθανάλη, γ) Αιθανικό οξύ.

ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ sp (Σχηματισμός BeF_2)ΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΣ BeF_2 ($\text{F}-\text{Be}-\text{F}$)

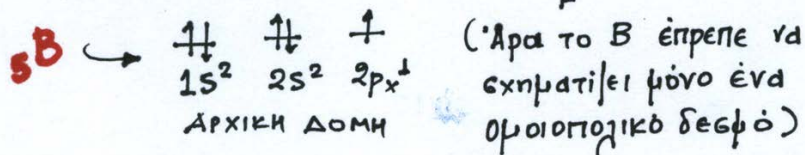
Στο μόριο του αιθινίου τα δύο από τα 4 τροχιακά κάθε C είναι υβριδικά sp και δίνουν τους σ δεσμούς



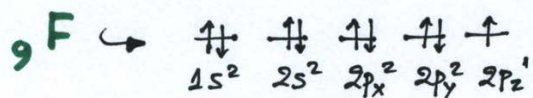
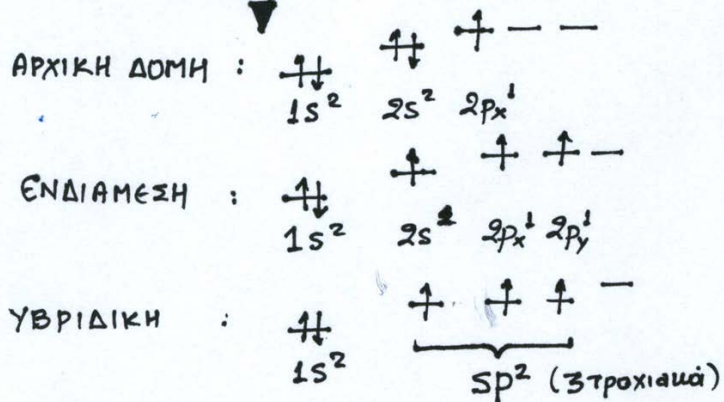


ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ sp^2 (Σχηματισμός BF_3 , διπλού δεσμού $C=C$)

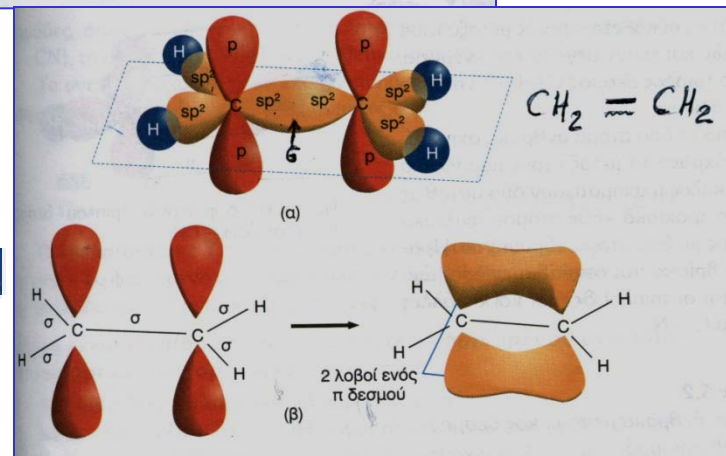
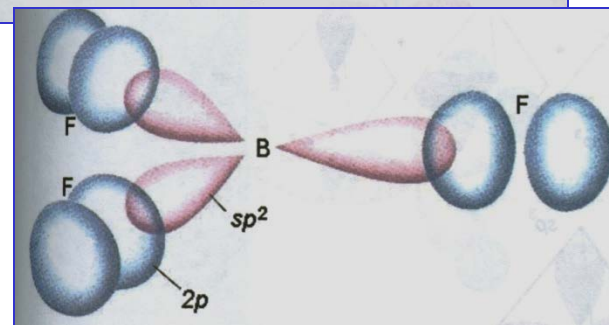
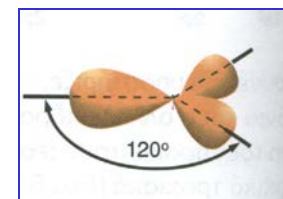
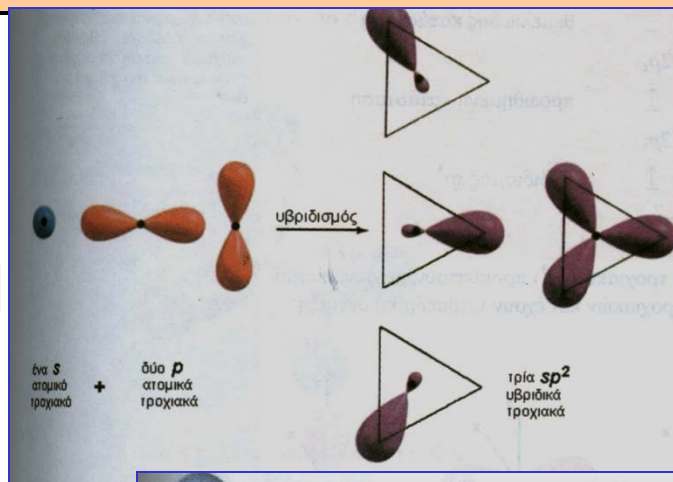
ΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΣ BF_3 ($\begin{array}{c} F \quad B \quad F \\ \quad | \\ \quad F \end{array}$)

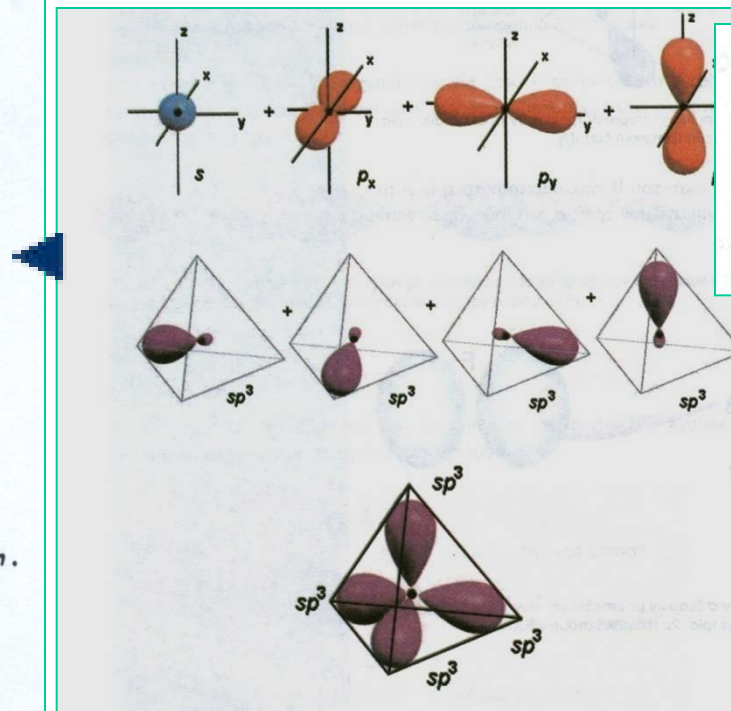
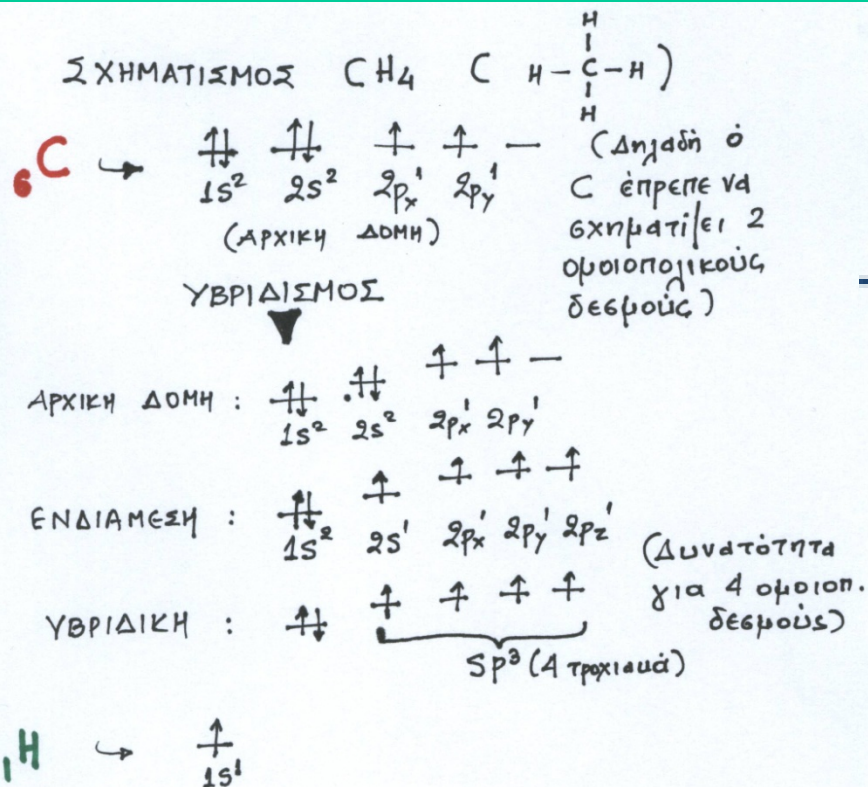


ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ



Στο μόριο του αιθενίου τα τρία από τα 4 τροχιακά κάθε C είναι υβριδικά sp^2 και δίνουν τους σ δεσμούς



ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ sp^3 (Σχηματισμός CH_4)

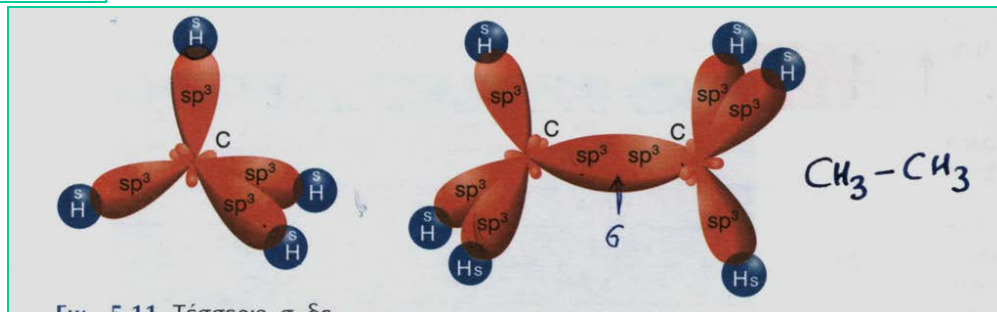
Στο μόριο αιθανίου και τα 4 τροχιακά κάθε C είναι υβριδικά sp^3 και δίνουν τους σ δεσμούς

Συνοψίζοντας: Υβριδικά τροχιακά προκύπτουν από τις εξής επικαλύψεις ατομικών τροχιακών

Ένα s και ένα p $\Rightarrow$ 2 Υβριδικά sp

Ένα s και δύο p $\Rightarrow$ 3 Υβριδικά sp^2

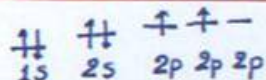
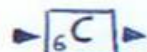
Ένα s και τρία p $\Rightarrow$ 4 Υβριδικά sp^3



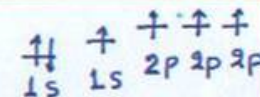
Λ. ΤΖΙΑΝΟΥΔΑΚΗ

ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΙ ΑΤΟΜΟΥ C

ΑΡΧΙΚΗ ΔΟΜΗ



ΕΝΔΙΑΜΕΣΗ ΔΟΜΗ



ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ	ΕΠΙΚΑΛΥΨΗ	ΥΒΡΙΔΙΚΗ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ	ΣΚΑΡΙΦΗΜΑ ΤΡΟΧΙΑΚΩΝ	ΕΠΙΚΑΛΥΨΕΙΣ ΣΤΟΝ ΔΕΣΜΟ C	ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ
sp	$S+P$ ↓ $2sp$	$\begin{array}{c} \uparrow\downarrow \\ 1s \end{array} \quad \begin{array}{c} \uparrow \\ sp \end{array} \quad \begin{array}{c} \uparrow \\ sp \end{array} \quad \begin{array}{c} \uparrow \\ p \end{array} \quad \begin{array}{c} \uparrow \\ p \end{array}$		ΤΡΙΠΛΟΣ ΔΕΣΜΟΣ $-C \equiv C-$ 4 ΔΕΣΜΟΙ C $\rightarrow$ $\begin{array}{l} 6 (sp+sp) \\ 6 (sp+sp) \\ \pi (p+p) \\ \pi (p+p) \end{array}$	
sp^2	$S+2p$ ↓ $3sp^2$	$\begin{array}{c} \uparrow\downarrow \\ 1s \end{array} \quad \begin{array}{c} \uparrow \\ sp^2 \end{array} \quad \begin{array}{c} \uparrow \\ sp^2 \end{array} \quad \begin{array}{c} \uparrow \\ sp^2 \end{array} \quad \begin{array}{c} \uparrow \\ p \end{array}$		ΔΙΠΛΟΣ ΔΕΣΜΟΣ $>C = C<$ 4 ΔΕΣΜΟΙ C $\rightarrow$ $\begin{array}{l} 6 (sp^2+...) \\ 6 (sp^2+...) \\ 6 (sp^2+sp^2) \\ \pi (p+p) \end{array}$	
sp^3	$S+3p$ ↓ $4sp^3$	$\begin{array}{c} \uparrow\downarrow \\ 1s \end{array} \quad \begin{array}{c} \uparrow \\ sp^3 \end{array} \quad \begin{array}{c} \uparrow \\ sp^3 \end{array} \quad \begin{array}{c} \uparrow \\ sp^3 \end{array} \quad \begin{array}{c} \uparrow \\ sp^3 \end{array}$		ΑΠΛΟΣ ΔΕΣΜΟΣ $\begin{array}{c} \diagup \\ C \\ \diagdown \end{array} - \begin{array}{c} \diagup \\ C \\ \diagdown \end{array}$ 4 ΔΕΣΜΟΙ C $\rightarrow$ $\begin{array}{l} 6 (sp^3+...) \\ 6 (sp^3+...) \\ 6 (sp^3+...) \\ 6 (sp^3+sp^3) \end{array}$	



ΕΡΩΤΗΣΕΙΣ ΚΑΤΑΝΟΗΣΗΣ

5. Αντιστοιχίστε τις ενώσεις της πρώτης στήλης με τον αριθμό σ και π δεσμών της δεύτερης:
- | | |
|--|-----------|
| A) Υδροκύνιο ($\text{HC}\equiv\text{N}$) | α) 4σ, 1π |
| B) Μεθανικό οξύ | β) 1σ, 2π |
| Γ) μεθανάλη | γ) 5σ, 0π |
| Δ) Μεθανόλη | δ) 2σ, 2π |
| | ε) 3σ, 1π |
6. Συμπληρώστε δίπλα στις ενώσεις της πρώτης στήλης το είδος και τον αριθμό των υβριδικών τροχιακών που συνεισφέρει το άτομο άνθρακα που περιέχουν για να σχηματίσει δεσμό με άλλο στοιχείο.
- | | |
|--|-----------------|
| A) Υδροκύνιο ($\text{HC}\equiv\text{N}$) | α), |
| B) Μεθανικό οξύ | β), |
| Γ) Μεθανάλη | γ), |
| Δ) Μεθανόλη | δ), |
7. Στις ενώσεις που ακολουθούν να συμπληρώσετε το είδος του δεσμού που υποδεικνύεται (σ ή π) καθώς και το είδος των τροχιακών που επικαλύπτονται σ' αυτόν (π.χ. $\text{sp}^2 + \text{p}$) Δίνονται οι ατομικοί αριθμοί : H:1, O:8, Cl:17.

