

ΘΕΩΡΙΑ ΔΕΣΜΟΥ ΣΘΕΝΟΥΣ

A. Προ-κβαντική αντίληψη για τη περιγραφή χημικών δεσμών

ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΑΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΤΟΥ ΣΘΕΝΟΥΣ: Τα άτομα ενώνονται μεταξύ τους σε μια προσπάθεια να αποκτήσουν σταθερή δομή. Έτσι αποδίδουν ή λαμβάνουν ή συνεισφέρουν ηλεκτρόνια, με σκοπό να φτιάξουν εξωτερική στιβάδα στην οποία να υπάρχουν οκτώ (8) ηλεκτρόνια (Εξαίρεση για τη K, που ικανοποιείται αν διαθέτει δύο (2) ηλεκτρόνια). Τα ηλεκτρόνια είναι σωματίδια.

Η ΘΕΩΡΙΑ Lewis στηρίζεται στη παραπάνω θεωρία. Στους ηλεκτρονιακούς τύπους των στοιχείων τα ηλεκτρόνια της εξωτερικής στιβάδας παρουσιάζονται ως κουκκίδες. Η θεωρία εξηγεί ικανοποιητικά τις ενώσεις μεταξύ των στοιχείων των τριών πρώτων περιόδων του Περιοδικού Πίνακα.

B. Κβαντικές θεωρίες για την εξήγηση του ομοιοπολικού δεσμού

- Θεωρία δεσμού σθένους
- Θεωρία μοριακών τροχιακών

Κοινό γνώρισμα των δυο θεωριών είναι ότι το ηλεκτρόνιο δεν είναι σωματίδιο που μπορεί να εντοπιστεί σε μια θέση, αλλά απλώνεται σε μια περιοχή του χώρου που ονομάζεται **τροχιακό**.

ΘΕΩΡΙΑ ΜΟΡΙΑΚΩΝ ΤΡΟΧΙΑΚΩΝ

Τα βασικά σημεία της θεωρίας είναι:

1. Τα μοριακά τροχιακά προκύπτουν με συνδυασμό ατομικών τροχιακών. Σχηματίζονται δε τόσα μοριακά τροχιακά όσα είναι τα ατομικά τροχιακά που συνδυάζονται.
2. Τα μοριακά τροχιακά είναι για τα μόρια ότι τα ατομικά τροχιακά για τα άτομα. Τα μοριακά τροχιακά, δηλαδή, περιγράφουν τις περιοχές του χώρου σ' ένα μόριο, όπου έχει μεγάλη πιθανότητα να βρεθούν τα ηλεκτρόνια. Τα μοριακά τροχιακά, με άλλα λόγια, περιβάλλουν δύο ή περισσότερους πυρήνες, σε αντίθεση με τα ατομικά τροχιακά που περιβάλλουν ένα μόνο πυρήνα.
3. Τα μοριακά τροχιακά έχουν ορισμένο σχήμα, μέγεθος και ενεργειακό επίπεδο.
4. Υπάρχουν δύο είδη μοριακών τροχιακών τα δεσμικά (με χαμηλή ενέργεια) και τα αντιδεσμικά (που έχουν μεγάλη ενέργεια).

Εδώ βλέπετε τα βασικά στοιχεία της 'Θεωρίας Μοριακών Τροχιακών':

- Τα μοριακά τροχιακά προκύπτουν από τα ατομικά...
- Τα μ.τ. περιβάλλουν δυο τουλάχιστον πυρήνες...
- Υπάρχει ποικιλία ενεργειακή, σχήματος και μεγέθους...
- Διακρίνονται σε δεσμικά και μη δεσμικά...

Δείτε τώρα τα βασικά σημεία της 'θεωρίας του δεσμού σθένους

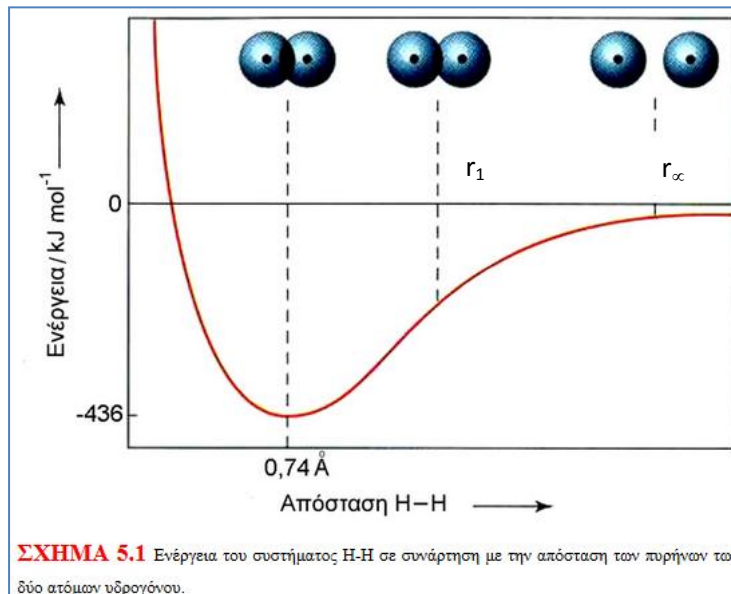
1. Κατά την ανάπτυξη ομοιοπολικού δεσμού ανάμεσα σε δύο άτομα, τροχιακά της στιβάδας σθένους του ενός ατόμου επικαλύπτουν τροχιακά της στιβάδας σθένους του άλλου.
2. Αν στο κάθε τροχιακό που συμμετέχει στο μηχανισμό αυτό της επικάλυψης περιέχεται ένα μονήρες ηλεκτρόνιο, τότε ηλεκτρόνια με αντιπαράλληλα spin δημιουργούν ζεύγη ηλεκτρονίων που ανήκουν και στα δύο άτομα. Η έλξη του ζεύγους ηλεκτρονίων από τους πυρήνες των δύο ατόμων οδηγεί στην ανάπτυξη του δεσμού ανάμεσα τους.
3. Η ισχύς του δεσμού είναι τόσο μεγαλύτερη, όσο ο βαθμός επικάλυψης των τροχιακών αυτών (με ένα μονήρες ηλεκτρόνιο) είναι μεγαλύτερος.

Κρατήστε:

- Ομοιοπολικός δεσμός = **επικάλυψη** ατομικών τροχιακών!
- Ο δεσμός υφίσταται λόγω **έλξης** του κοινού ζεύγους e⁻ από τους πυρήνες
- Η ισχύς του δεσμού είναι ζήτημα του **βαθμού** επικάλυψης (Διαφοροποίηση ισχύος στους σ και π, ισοτιμία δεσμών μεθανίου,...)

Συνέχεια...

Γ. Μελέτη ομοιοπολικού δεσμού στο μόριο του υδρογόνου ως ...αφορμή για να εδραιωθεί η θεωρία του δεσμού σθένους



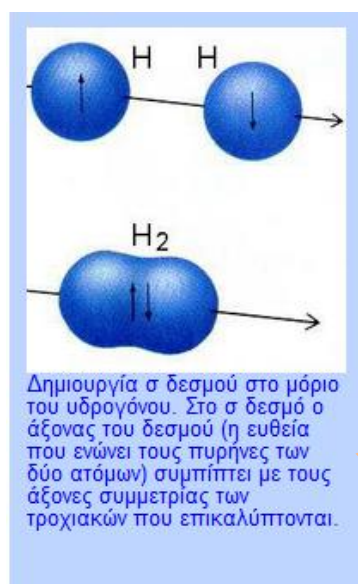
▶ Αρχικά τα άτομα είναι μακριά r_∞ και η ενέργεια του συστήματος είναι μηδέν, αφού δεν αλληλεπιδρούν!

▶ Σε απόσταση r_1 η έλξη δικαιολογεί την αρνητική τιμή της ενέργειας στο σύστημα των δυο ατόμων.

▶ Σε απόσταση $0,74 \text{ \AA}$, το σύστημα εμφανίζει μηδενική ενέργεια και επομένως σταθερότητα.

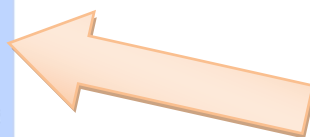
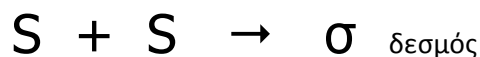
- ▶ Η απόσταση $0,74 \text{ \AA}$, ονομάζεται **μήκος δεσμού**.
- ▶ Αν θελήσουμε τα άτομα να έλθουν πιο κοντά από το μήκος του δεσμού, οι πυρήνες απωθούνται ισχυρά και το σύστημα εμφανίζει ακόμη και θετική τιμή ενέργειας, που σημαίνει αστάθεια και μη δυνατότητα να υπάρξει ως μοριακή οντότητα!
- ▶ Η ενέργεια -436 kJ/mol εκφράζει την ποσότητα της ενέργειας που αποδίδεται από το σύστημα, όταν σχηματίζεται 1 mol μορίων H-H.
- ▶ Πόση ελάχιστη ενέργεια απαιτείται για το «σπάσιμο» ενός δεσμού H-H;

Δ. Ο δεσμός σ στο μόριο του υδρογόνου



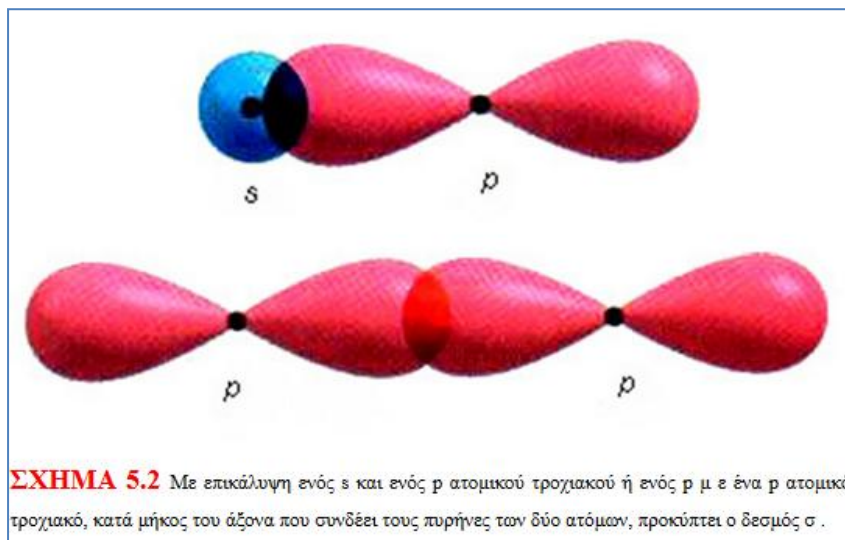
Η παραπάνω μελέτη ανέδειξε την επικάλυψη των τροχιακών και τη δημιουργία δεσμού ως συνέπεια της.

Έτσι :

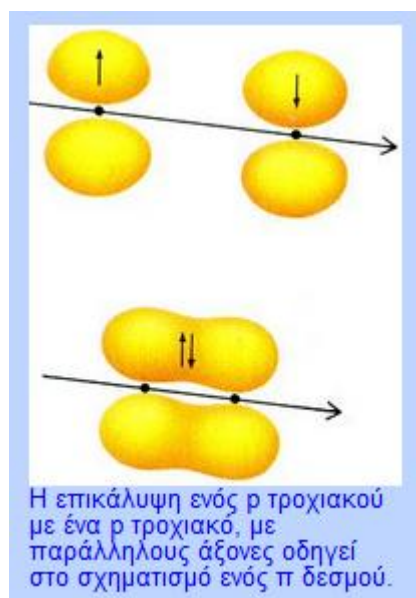


Ε. Άλλες περιπτώσεις δημιουργίας σ δεσμού

Στη παρακάτω εικόνα δείτε ότι:



ΣΤ. Ο δεσμός π



Οι π δεσμοί προκύπτουν με πλευρικές επικαλύψεις P-P ατομικών τροχιακών (των οποίων οι άξονες είναι παράλληλοι) και είναι ασθενέστεροι των σ.

Ακόμη!

- 2 τροχιακά δε συμμετέχουν σε π δεσμούς.
- Ο δεσμός π, προϋποθέτει τη δημιουργία του σ.
- Ο σ δεσμός είναι ισχυρότερος του π.
- Μεταξύ δυο ατόμων μόνο ένας σ υπάρχει.

Μελετήστε τους δεσμούς στα μόρια: HF, HCl, N₂, Cl₂

Δείτε [ΕΔΩ](#) ένα video με τα τροχιακά s, p ...για χαλάρωση.