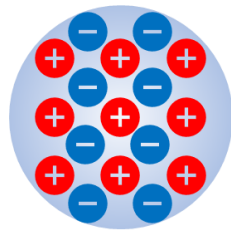


Κεφάλαιο 7^ο Το Κβαντομηχανικό μοντέλο του ατόμου



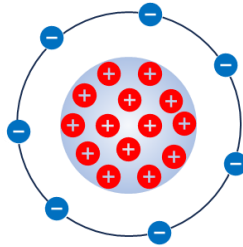
1803

JOHN DALTON



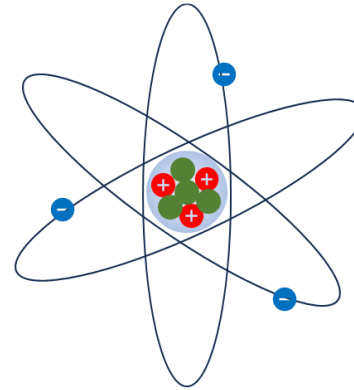
1904

JJ THOMSON



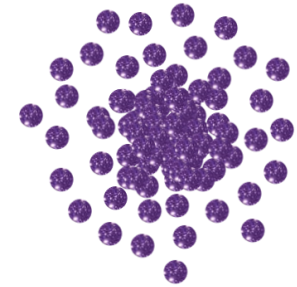
1911

ERNST RUTHERFORD



1913

NEILS BOHR



1926

ERWIN SCHRODINGER

Εξέλιξη της Ατομικής Θεωρίας

Κβαντομηχανικό μοντέλο του ατόμου: εξηγεί τη διάταξη των ηλεκτρονίων (e) στα άτομα και πως αυτά τα ηλεκτρόνια καθορίζουν τις φυσικές και χημικές ιδιότητες των στοιχείων

Διττή φύση φωτός: Κυματική και Σωματική φύση φωτός:

Κυματική φύση: μήκος κύματος (λ), συχνότητα (ν), $\nu=c/\lambda$, συμβολή, περίθλαση

Σωματιδιακή φύση: $E=mc^2$ -> E είναι η ενέργεια ενός σωματιδίου φωτός (ενός

φωτονίου) και ν είναι η συχνότητα του κύματος που αντιστοιχεί σε αυτή την ενέργεια. Για να περιγραφεί λοιπόν πλήρως το φως απαιτείται να λάβουμε υπόψη τόσο την σωματιδιακή όσο και την κυματική του φύση.

Ηλεκτρομαγνητικό φάσμα: περιγραφή

Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο: ($E=h\nu \rightarrow E=hc/\lambda$, $h\nu=\phi \rightarrow KE=h\nu-\phi$)

Εκπομπή e από την επιφάνεια ενός μετάλλου όταν πάνω σε αυτό προσπίπτουν φωτόνια (φως) συγκεκριμένης συχνότητας

Κυματική φύση της ύλης: Το μήκος κύματος de Broglie [$\lambda=h/(m\nu)$]

Κβαντομηχανική και το Άτομο: Ηλεκτρονική δομή ατόμου περιγράφεται από κυματοσυνάρτηση ψ , (ψ^2), $H\psi=E\psi$, κβαντικοί αριθμοί: n , l , m_l ▪ **Ατομικά τροχιακά:** Τα e καταλαμβάνουν τροχιακά γύρω από τον πυρήνα – Διαφορετικά τροχιακά έχουν διαφορετική ενέργεια και σχήμα – s : σφαιρικά, p : σχήμα αλτήρα ▪ Συναρτήσεις ακτινικής κατανομής.

Κεφάλαιο 8° Περιοδικές Ιδιότητες των Στοιχείων

Ηλεκτρονικές δομές: Ηλεκτρονικό Spin, απαγορευτική αρχή Pauli, προάσπιση και διεύθυνση ▪ Ηλεκτρονικές δομές για Πόλυηλεκτρονικά Άτομα (Παραδείγματα) ▪ Ηλεκτρόνια σθένους και ηλεκτρόνια πυρήνα

Ιόντα: Ιοντικές ακτίνες-Ενέργεια Ιοντισμού

Κεφάλαιο 9^ο Χημικός Δεσμός I

Τύποι χημικών δεσμών ▪ Αναπαράσταση των ηλεκτρονίων σθένους με κουκκίδες
▪ Ιοντικός δεσμός ▪ Ομοιοπολικός δεσμός ▪ Ηλεκτραρνητικότητα και Πολικότητα δεσμών ▪ Συντονισμός και Τυπικό Φορτίο ▪ Εξαιρέσεις στον κανόνα της 8άδας

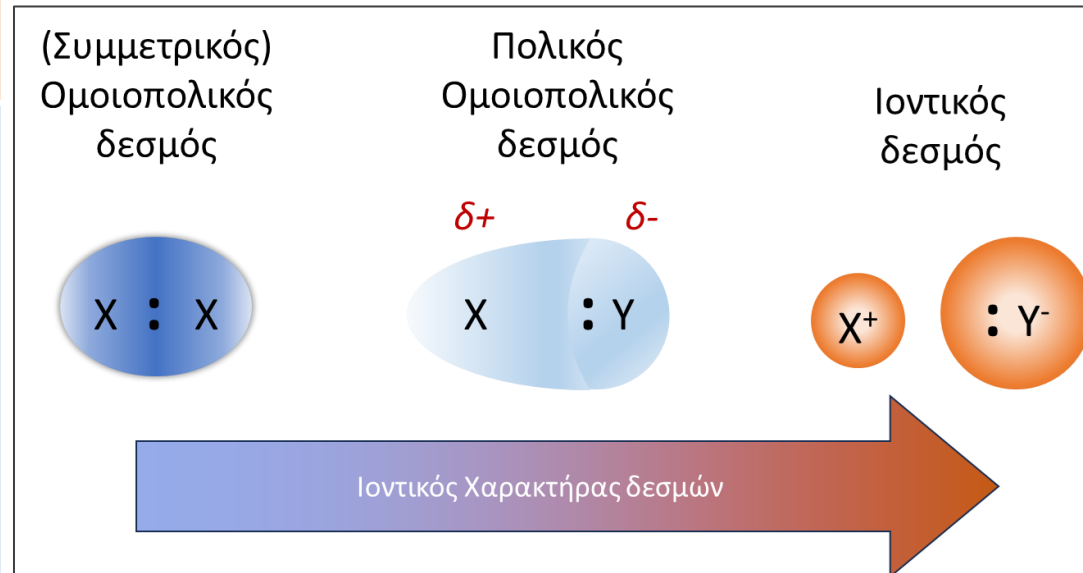
Ιοντικός δεσμός: Ηλεκτροστατικής φύσης, σχηματίζονται με κέρδος ή απώλεια e
Ένα e μεταφέρεται από ένα μέταλλο σε ένα αμέταλλο και τα ιόντα που προκύπτουν έλκονται μεταξύ τους με δυνάμεις coulomb

Ομοιοπολικός δεσμός: ζεύγος e (δεσμικό) διαμοιράζεται μεταξύ ατόμων (κοινή συνεισφορά e) - Συγκεκριμένος προσανατολισμός βάσει του προσανατολισμού των τροχιακών προς επίτευξη μέγιστης ισχύος δεσμού. *Αμέταλλα διαμοιράζονται e που αλληλεπιδρούν με τους πυρήνες και των δύο ατόμων μέσω δυνάμεων coulomb*

Οι ομοιοπολικοί δεσμοί μπορεί να έχουν **ιοντικό χαρακτήρα**

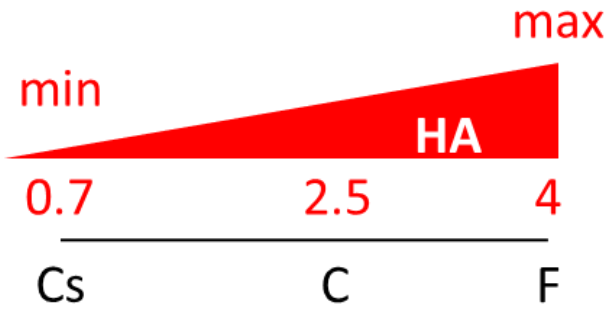
Υπάρχουν πολικοί ομοιοπολικοί δεσμοί:

- Τα e σε ένα δεσμό (δεσμικά) έλκονται περισσότερο από το ένα άτομο
- Ασύμμετρη κατανομή e μεταξύ ατόμων



Ηλεκτραρνητικότητα (HA): εκφράζει την ικανότητα ατόμου να έλκει e σε ομοιοπολικό δεσμό. **Η διαφορά στην HA ατόμων δημιουργεί πολικούς δεσμούς**
 Αυθαίρετη κλίμακα HA των ατόμων στον Π.Π.

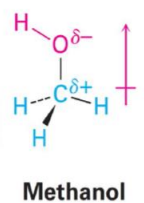
- Τα μέταλλα (αριστερό μέρος του Π.Π.) ασκούν στα e ασθενή έλξη
- Τα αλογόνα (δεξί μέρος του Π.Π.) ασκούν στα e ισχυρή έλξη



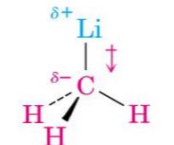
ΔEN* μεταξύ δύο ατόμων	Τύπος δεσμού
$\Delta EN < 0.5$	Ομοιοπολικός
$0.5 < \Delta EN < 2$	Πολικός Ομοιοπολικός
$\Delta EN > 2$	Ιοντικός

*ΔEN: Διαφορά ηλεκτραρνητικότητας

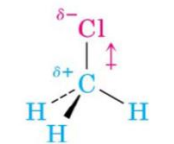
Παραδείγματα



Oxygen: EN = 3.5
 Carbon: EN = 2.5
 Difference = 1.0



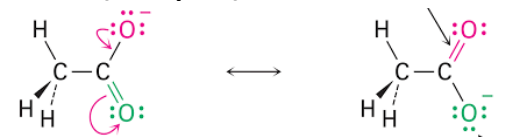
Carbon: EN = 2.5
 Lithium: EN = 1.0
 Difference = 1.5



Chlorine: EN = 3.0
 Carbon: EN = 2.5
 Difference = 0.5

Συντονισμός: Κάποιες ενώσεις στη φύση υπάρχουν ως ενδιάμεσα δύο δομών Lewis. που στην περίπτωση αυτή ονομάζονται δομές υβρίδια συντονισμού (πραγματική δομή) ενώ οι δομές Lewis (δύο ή περισσότερες έγκυρες δομές) ονομάζονται δομές συντονισμού. πχ οξικό οξύ.

- Οι δομές συντονισμού δεν εναλλάσσονται ανάμεσα στις διαφορετικές δομές Lewis.
- Κατά την αναπαράταση τους, συνδέονται με διπλο τόξο
- Οι δομές συντονισμού προσφέρουν ενεργειακή σταθερότητα



Κεφάλαιο 10^ο Χημικός Δεσμός II

1. Θεωρία άπωσης ηλεκτρονικών ζευγών στοιβάδας σθένους, VSEPR (valence shell electron pair repulsion model): Ένα σύνολο εμπειρικών κανόνων για την πρόβλεψη μιας γεωμετρίας χρησιμοποιώντας σαν βάση μια ορθή αναπαράσταση της δομής κατά Lewis

Βασίζεται στην απλή ιδέα ότι ομάδες e (μονήρη ζεύγη, απλοί και πολλαπλοί δεσμοί, μονήρη e) απωθούνται μεταξύ τους μέσω δυνάμεων coulomb. Η άπωση στα εσωτερικά άτομα ενός μορίου καθορίζει και τη μοριακή γεωμετρία του.

Παραδείγματα: BeCl_2 , CO_2 , BF_3 , CH_2O , CH_4 , PCl_5

Ομάδες e	Γεωμετρία
2	γραμμική
3	τριγωνική
4	τετραεδρική
5	τριγωνικής διπυραμίδας

2. Θεωρία Δεσμού Σθένους: Μια πιο εξελιγμένη περιγραφή των τροχιακών στα μόρια. Εστιασμός στα υβριδικά τροχιακά. Καλή εφαρμογή στα οργανικά μόρια.

Κύριες έννοιες της Θεωρίας:

- Τα e σθένους των ατόμων σε ένα μόριο βρίσκονται μέσα στα κβαντομηχανικά ατομικά τροχιακά. Τα τροχιακά μπορεί να είναι τα πρότυπα s , p , d και f ή υβριδικοί συνδυασμοί αυτών
- Ένας χημικός δεσμός προκύπτει από την επικάλυψη δύο ημι-συμπληρωμένων τροχιακών με δύο e με συζευγμένο spin
- Το σχήμα του μορίου καθορίζεται από την γεωμετρία των επικαλυπτόμενων τροχιακών

Θεωρία δεσμού σθένους: αλληλεπικάλυψη ημιπληρωμένων τροχιακών:

Δεσμός (σ) – Σχηματίζονται από μετωπική αλληλεπικάλυψη τροχιακών s

Δεσμός (π) – Σχηματίζονται από πλευρική αλληλεπικάλυψη τροχιακών p

Υβριδισμός Ατομικών Τροχιακών: Σημασία υβριδισμού - Παράδειγμα CH_4