

Δύο στοιχεία ενώνονται ιοντικά όταν η ενέργεια ιοντισμού του 61
 ενός είναι αρκετά μικρή και η ηλεκτρονική συγγένεια του άλλου αρκετά μεγάλη.

Ενέργεια ιοντισμού: Η ελάχιστη ενέργεια που απαιτείται για την απομάκρυνση
 ενός εξωτερικού ηλεκτρονίου από το ουδέτερο άτομο στη θεμελιώδη
 κατάσταση σε αέρια φάση

$$\text{Na} (3s^1) \rightarrow \text{Na}^+ + e^- \quad (1s^2 2s^2 2p^6)$$

Τα δραστήια μέταλλα (ομάδα IA) όπως π.χ. Li, Na, K έχουν χαμηλές
 ενέργειες ιοντισμού. → λέμε ότι είναι "ηλεκτροθετικά"

Ηλεκτρονική συγγένεια: Η ενέργεια που απαιτείται για την απομάκρυνση
 ενός ηλεκτρονίου από το αρνητικό ιόν του ατόμου στη θεμελιώδη
 κατάσταση

$$\text{Cl}^- ([\text{Ne}] 3s^2 3p^6) \rightarrow \text{Cl} ([\text{Ne}] 3s^2 3p^5) + e^-$$

Τα δραστήια αμέταλλα (π.χ. τα αλογόνα την ομάδας VIIA) έχουν
 f, Cl, Br, I
 μεγάλες τιμές ηλεκτρονικής συγγένειας → λέμε ότι είναι
 "ηλεκτροαρνητικά"

Έτσι προκύπτει ότι γίνεται, ο δεσμός μεταξύ ενός μετάλλου
 και ενός αμέταλλου είναι ιοντικός.

Ιδιότητες ιοντικών ενώσεων

→ Τυπικά, οι ιοντικές ενώσεις είναι στερεά με πολύ υψηλά σημεία τήξης

π.χ. $\text{NaCl}(s) : 801^\circ\text{C}$
 $\text{MgO}(s) : 2800^\circ\text{C}$

Λόγω των ισχυρών εξέσεων
 μεταξύ των αντίθετο φορτισμένων
 ιόντων μέσα στα κρύσταλλα

→ Νόμος Coulomb μπορεί να εξηγήσει διαφορές μεταξύ στερεών τήσεων
 Διάκριση Coulomb ανάλογη γινόμενων ιοντικών φορτίων

$$\text{Na}^+ - \text{Cl}^- \quad \text{έναντι} \quad \text{Mg}^{2+} - \text{O}^{2-}$$

→ Το υγρό που προκύπτει από την τήξη συνίσταται από ιόντα →
 έχει ηλεκτρικό ρεύμα

Επίσης, η διάλυση ιοντικού στερεού σε μοριακό υγρό (π.χ. H_2O) →
 → Διάλυμα έχει ηλεκτρικό ρεύμα γιατί συνίσταται από ιόντα διασκορπισμένα
 μεταξύ των μορίων του υγρού (π.χ. H_2O).

9.2 Ηλεκτρονική δομή ιόντων

Ιόντα στοιχείων κύριων ομάδων

Ομάδα	IA	IIA	III A ns^2np^1
Περίοδος 2	Li^+	Be^{2+}	B^{3+} Ποτέ
3	Na^+	Mg^{2+}	Al^{3+}
4	K^+	Ca^{2+}	Ga^{3+}
5	Rb^+	Sr^{2+}	In^{3+}
6	Cs^+	Ba^{2+}	Tl^{3+} αλλά και Tl^{+}

Φορτίο ιόντος = Αριθμός ομάδας

Αριθμός ομάδας

Αριθμός ομάδας

Αριθμός ομάδας αλλά και αριθμός ομάδας - 2

Δομή ηχητός ή ψευδοεχέτης αερίου

IV A ns^2np^2	V A ns^2np^3
$C \rightarrow$ Ομοια	N^{3-}
$Si \rightarrow$ Ομοια	P^{3-}
$Ge \rightarrow$ Ομοια	As
Sn^{2+}	Sb
Pb^{2+}	Bi^{3+}

Αριθμός ομάδας - 2 (Υπάρχει και Pb^{4+})

Δομή ns^2 ή ψευδοεχέτης (Pb^{4+})

Αριθμός ομάδας - 2 (για μέταλλα) δομή ns^2 ή Αριθμός ομάδας μείον 8 Δομή ns^2np^6 εχέτης αέριο για τα αμέταλλα

Ομάδα	VIA
Περίοδος 2	O^{2-} ns^2np^4
3	S^{2-}
4	Se^{2-}
5	Te^{2-}

Αριθμός ομάδας - 8 εχέτης αέριο ns^2np^6

VII A ns^2np^5
F^-
Cl^-
Br^-
I^-

Αριθμός ομάδας - 8 εχέτης αέριο ns^2np^6

Στοιχεία ομάδων VA - VII A

Πολύ μεγάλες ενέργειες ιοντισμού \rightarrow Δεν σχηματίζουν κατιόντα (εξτός εξαιρέσεων π.χ Bi^{3+})

Έχουν όμως μεγάλες ηλεκτρονική συγγένεια \rightarrow τείνουν να σχηματίζουν ανιόντα οδηγούμενα σε σταθερή δομή (εχέτης αέριο)

Το H έχει δομή $1s^1$

H^+ κανένα ηλεκτρόνιο
(π.χ. H^+)

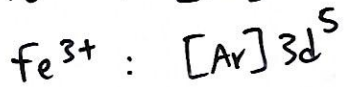
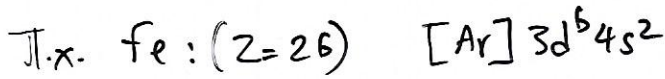
H^- : $1s^2$ δηλ. δομή ίδια με εχέτης αέριο He

↓
Ιόν υδριδίου (NaH)
π.χ.

Ιόντα μεταβατικών μετάλλων

Ομάδες IB - VIII B όπου γίνεται οξείδωση του υποφλοιού d

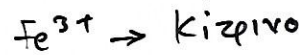
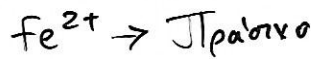
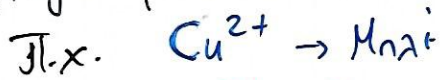
Σχηματίζουν πάνω από ένα ιατιόντα με διαφορετικά φορτία (Συνήθως +2 ή +3)



Συναντώνται και τα δύο ιατιόντα
Το Fe³⁺ πιο σταθερό λόγω
ημιουμπληρωμένου d-τροχιακού

Κανένα από τα ιατιόντα Fe²⁺, Fe³⁺ δεν έχει δομή ευγενούς αερίου
Θα απαιτούνται να φύγουν 8 e⁻ → Τεράστια ενέργεια ιοντισμού

→ Πολλές ενώσεις ιόντων μεταβατικών μετάλλων είναι έγχρωμες
λόγω μεταπτώσεων στις οποίες εμπλέκονται τα d ηλεκτρόνια



Ομοιοπολικοί δεσμοί

Εξήγηση των συνδέσεων μεταξύ των ατόμων σε μοριακές ενώσεις

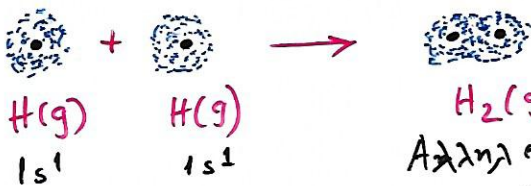
Άλλο παράδειγμα: Δεσμός μεταξύ όμοιων ατόμων π.χ. H₂, N₂

Το ιοντικό μοντέλο δεν μπορεί να δουλέψει

1916: (Lewis) Ομοιοπολικός δεσμός: Χημικός δεσμός που σχηματίζεται με μοίρασμα ενός (τουλάχιστον) ζεύγους ηλεκτρονίων μεταξύ ατόμων.

9.4. Περιγραφή ομοιοπολικών δεσμών

Μόριο H₂



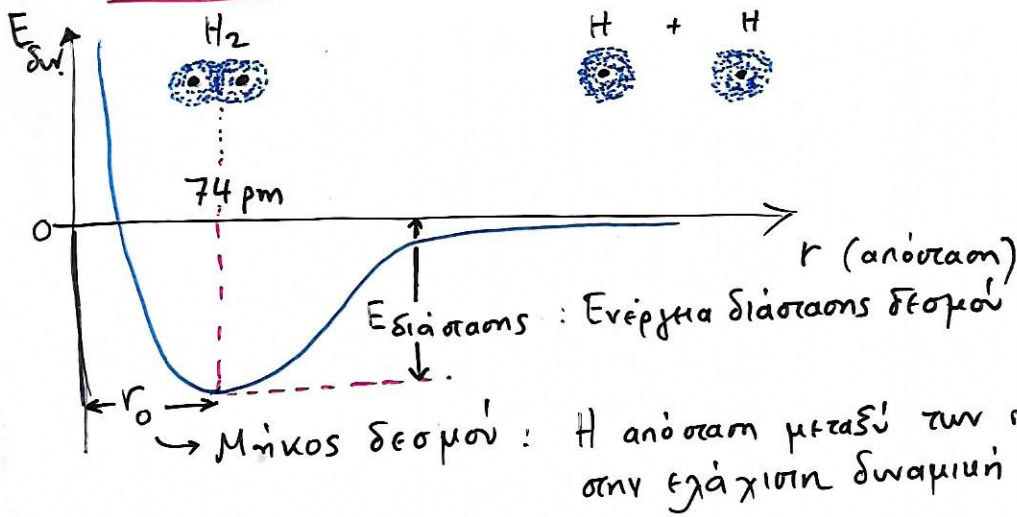
Αλληλεπίδραση ηλεκτρονικών νέφους

Τα 2 e μοιράζονται να ανήκουν και στα δύο άτομα, ελιόμενα.

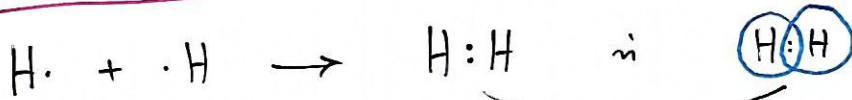
ταυτόχρονα από τα θετικά φορτία και των δύο πυρήνων.

↪ Αρα και στον ομοιοπολικό δεσμό η έλξη συνεχίζει να είναι η ηλεκτροστατική φύσης (πρωτόνια - ηλεκτρόνια) και όχι μεταξύ ιόντων

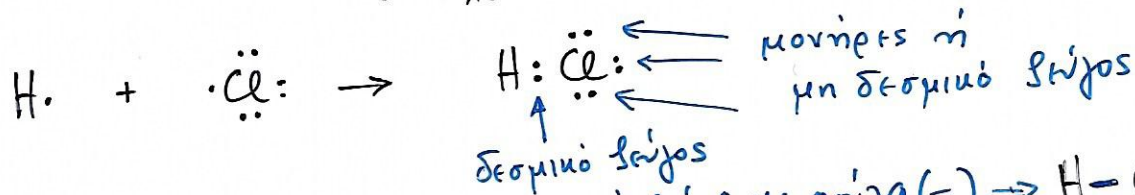
Διάγραμμα δυναμικής ενέργειας του μορίου του H₂



Τύποι Lewis (τα ηλεκτρόνια με κουκκίδες)



Τα δύο ηλεκτρόνια του δεσμού ανήκουν ταυτόχρονα και στα δύο άτομα → κοινό ζεύγος ηλεκτρονίων



Συνήθως δεσμικό ζεύγος με παύλα (-) ⇒ H-Cl:



Έχη ζεύγος ασθένια ε στο σύμβολο Lewis

→ Δημιουργία της ομοιοπολικού δεσμού

Ομοιοπολικοί δεσμοί σύνταξης

Όταν και τα δύο ηλεκτρόνια του δεσμού προσφέρονται από ένα άτομο.

$$A + :B \rightarrow A:B \quad \text{π.χ.} \quad H^+ + \cdot NH_3 \rightarrow \left[\begin{array}{c} H \\ | \\ H:\ddot{N}:H \\ | \\ H \end{array} \right]^+$$

Καμία ουσιαστική διαφορά με τους "κανονικούς" ομοιοπολικούς δεσμούς

Κανόνας της οκτάδας

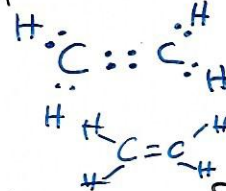
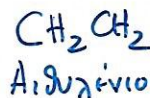
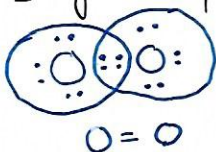
Η τάση των ατόμων στα μόρια να έχουν οκτώ ηλεκτρόνια στον φλοιό σθένος τους (δύο για τα άτομα υδρογόνου)

Υπάρχουν όμως και εξαιρέσεις

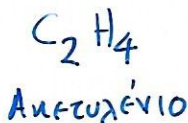
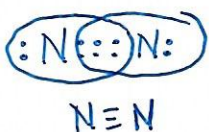
Πολλαπλοί δεσμοί

Απλός δεσμός: Ένα μόνο ζεύγος e μοιράζεται ανάμεσα σε δύο άτομα.

Διπλός δεσμός: Δύο ζεύγη e μοιράζονται ανάμεσα σε δύο άτομα



Τριπλός δεσμός: Τρία ζεύγη e μοιράζονται ανάμεσα σε δύο άτομα



Διπλοί δεσμοί: C, N, O, S

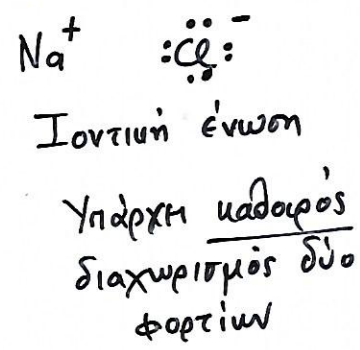
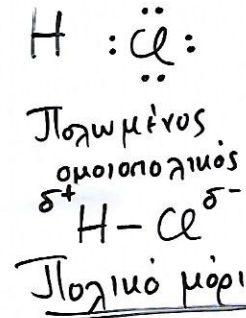
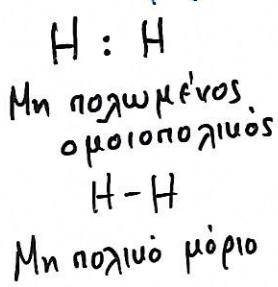
Τριπλοί δεσμοί: C, N

9.5 Ποικίλοι ομοιοπολικοί δεσμοί - Ηλεκτραρνητικότητα

Ποικίλος ομοιοπολικός δεσμός: Ένας ομοιοπολικός δεσμός στον οποίο τα δεσμικά ηλεκτρόνια βρίσκονται πλησιέστερα στο ένα άτομο από ό,τι στο άλλο.

Αυτό συμβαίνει όταν ανάμεσα στα δύο άτομα υπάρχει διαφορά ως προς την ηλεκτραρνητικότητα

Μέτρο της ικανότητας ενός ατόμου που βρίσκεται σε μόριο να έλκει προς το μέρος του δεσμικά ηλεκτρόνια.



Υπάρχουν μερικά φορτία δ^+, δ^- επάνω στα άτομα

1934: Mulliken Ηλεκτραρνητικότητα $X = \frac{I + EA}{2}$

I: Ενέργεια ionτισμού
EA: Ηλεκτραρνητική ενέργεια

Έτσι τα μέταλλα (π.χ. Li, Na) που έχουν μικρή I και μικρό EA →
→ χαμηλή ηλεκτραρνητικότητα (ηλεκτροθετικά)
Τα αμέταλλα (π.χ. F) που έχουν μεγάλα I και EA → υψηλή ηλεκτραρνητικότητα (ηλεκτραρνητικά)

Αύξηση Ηλεκτραρνητικότητας



Κρίμακα Pauling: $\leq 1,0$ - $4,0$ (Με βάση τις ενέργειες δεσμών)

IA	IIA	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA
Li 1,0	Be 1,5	B 2,0	C 2,5	N 3,0	O 3,5	F 4,0
Na 0,9	Mg 1,2	Al 1,5	Si 1,8	P 2,1	S 2,5	Cl 3,0
K 0,8	Ca 1,0	Ga 1,6	Ge 1,8	As 2,0	Se 2,4	Br 2,8
Rb 0,8	Sr 1,0	In 1,7	Sn 1,8	Sb 1,9	Te 2,1	I 2,5
Cs 0,7	Ba 0,9	Tl 1,8	Pb 1,9	Bi 1,9	Po 2,0	At 2,2

Παραδείγματα δεσμών

	Διαφορά ηλεκτραρνητικότητας
H - H 2,1 2,1	$2,1 - 2,1 = 0$
H - Cl 2,1 3,0	$3,0 - 2,1 = 0,9$
H - O 2,1 3,5	$3,5 - 2,1 = 1,4$
Na - Cl 0,9 3,0	$3,0 - 0,9 = 2,1$
P - H 2,1 2,1	$2,1 - 2,1 = 0$
C - S 2,5 2,5	$2,5 - 2,5 = 0$

Πόσων δεσμών

- Μη πολωμένος
- Πολωμένος ομοίως
- Πολωμένος ομοίως
- Ιοντικός (πολύ μεγάλη διαφορά στις ηλεκτρ/τικτές)
- Μη πολωμένος
- Μη πολωμένος

9.6. Σχεδίαση τύπων Lewis με ηλεκτρόνια-κουκκίδες

Τα δεσμικά ηλεκτρόνια παριστάνονται με δύο κουκκίδες ή μια γραμμή. Επικεφάλα δίδονται και τα μονήρη ζεύγη ηλεκτρονίων. Πρέπει να γνωρίζουμε τη στοιχειώδη δομή του μορίου δηλ. ποιά άτομα συνδέονται με ποια μέσα στο μόριο. Κανονικά η στοιχειώδη δομή προκύπτει από πηγάρι. Αλλά για μικρά μόρια μπορούμε να κάνουμε προβλέψεις.

9.7 Απεντατισμένοι δεσμοί - Συντονισμός

Τύπος δεσμού όπου ένα δεσμικό ζεύγος ηλεκτρονίων δεν εκονίζεται ανάμεσα σε δύο άτομα, αλλά απλώνεται σε περισσότερα άτομα.

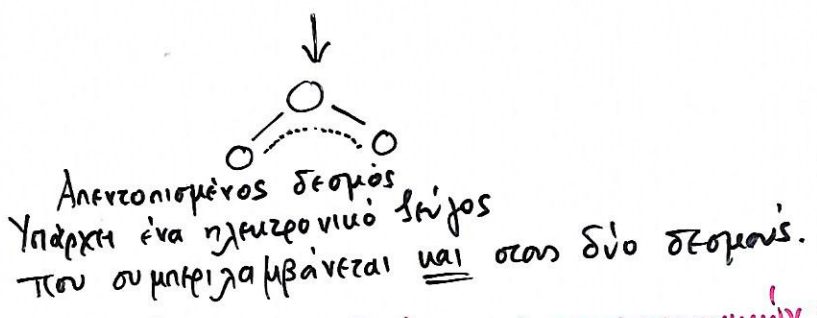
Π.χ. Το μόριο του όζοντος (O_3) (αέριος ρύπος)

Δύο πιθανοί τύποι Lewis



Το πέρασμα δείχνει ότι οι δύο δεσμοί $O \cdots O$ είναι ισοδύναμοι
Άρα ούτε ο τύπος A ούτε ο τύπος B είναι ορθός

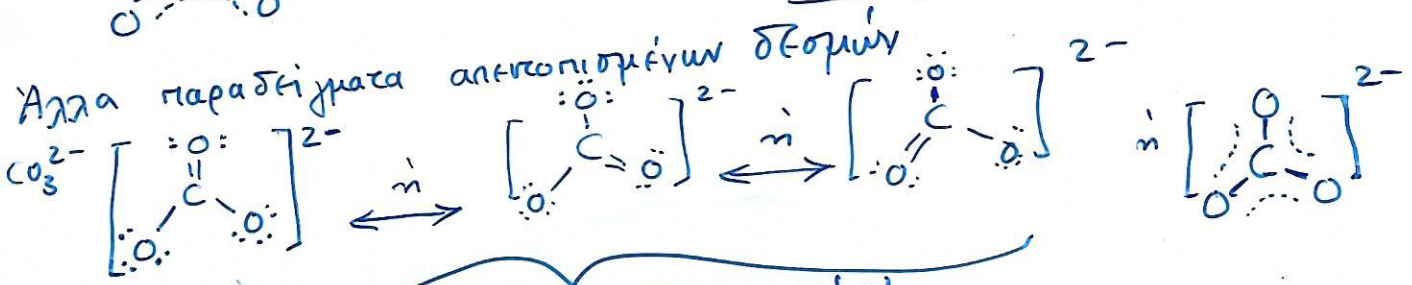
Π.χ. έχουν ίδιο μήκος ενώ κανονικά ο διπλός δεσμός είναι πιο κοντός από τον απλό



Τάξη δεσμού: Ο αριθμός των ηλεκτρονικών ζευγών προς δεσμούς

- $C:C$ → Τάξη δεσμού 1 (απλός)
- $C::C$ → Τάξη δεσμού 2 (διπλός)
- $C:::C$ → Τάξη δεσμού 3 (τριπλός)

$O \cdots O$ → Τάξη δεσμού 1,5 δηλ. κάτι μεταξύ απλού και διπλού απεντατισμένος δεσμός



Τύποι συντονισμού του ίδιου μορίου
Αναγράφονται όλοι και συνδέονται με βέλη

Άλλο παράδειγμα: NO_3^-

Κεφάλαιο 10 - Μοριακή Γεωμετρία και Θεωρία του Χημικού Ατόμου

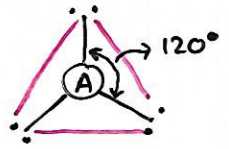
10.1 Το μοντέλο VSEPR (άρωσης ηλεκτρονικών ζευγών του φλοιού σθένους)

Προβλέπει τα σχήματα μορίων και ιόντων θεωρώντας ότι τα ηλεκτρονικά ζεύγη των φλοιών σθένους διευθετούνται γύρω από κάθε άτομο, έτσι ώστε να είναι όσο το δυνατόν μακρύτερα, προκειμένου να ελαχιστοποιούνται οι απώσεις μεταξύ των ηλεκτρονίων

Πιθανές διευθετήσεις (προσανατολισμοί) δεσμών στο χώρο για διάφορους αριθμούς ηλεκτρονικών ζευγών που υπάρχουν γύρω από ένα κεντρικό άτομο μιας ένωσης.

(A)

<p><u>Αριθμός ζευγών e γύρω από κεντρικό άτομο</u></p> <p>2</p>	<p>→</p>	<p><u>Χωριστή διευθέτηση ηλεκτρονικών ζευγών</u></p> <p>Γραμμική</p> <p>$\text{:}\ddot{\text{F}}\text{:Be}\text{:}\ddot{\text{F}}\text{:}$ ή $\text{:}\ddot{\text{O}}\text{:}\text{:}\text{C}\text{:}\text{:}\text{O}\text{:}$</p> <p>F-B-F O=C=O</p> <p>Δεν υπάρχει που είναι διπλοί δεσμοί. Τους μεταχειριζόμαστε στο VSEPR σαν να ήταν απλοί</p>
---	----------	--

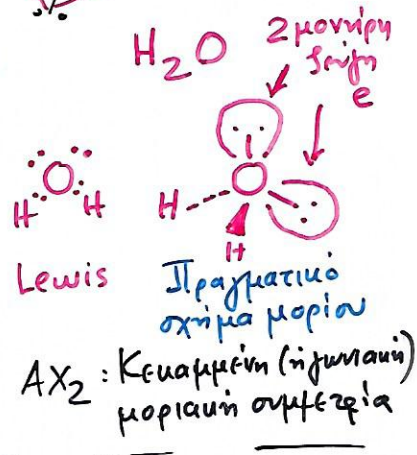
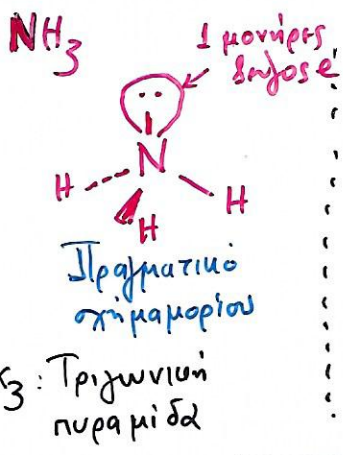
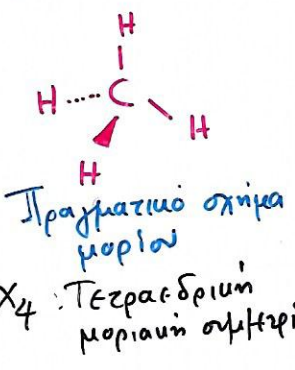
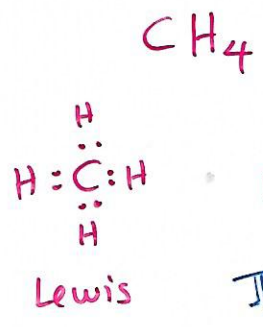
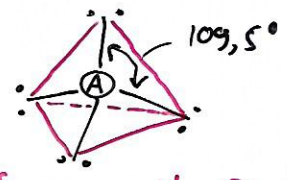
<p>3</p> <p>→</p>	<p>Επίκεντρο τριγωνική</p> 
<p>$\text{F}\ddot{\text{B}}\text{F}$ Lewis</p> <p>BF_3 Πραγματικό σχήμα μορίου</p> <p>AX_3 : Επίκεντρο τριγωνική μοριακή γεωμετρία</p>	<p>$\text{O}=\ddot{\text{S}}=\text{O}$ Lewis</p> <p>SO_2 Μονήρες ζεύγος</p> <p>Πραγματικό σχήμα μορίου</p> <p>AX_2 : Κυρτωμένη (ή γυμναστή) μοριακή συμμετρία</p>

Αριθμός δεσμών e⁻
πρω από κεντρικό άτομο

Χωρίτη διανόμιση
ηλεκτρονικών δεσμών

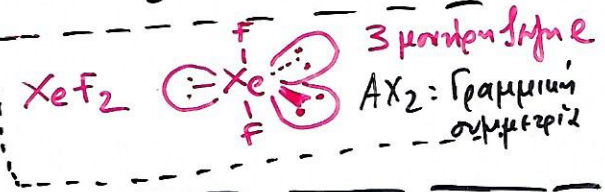
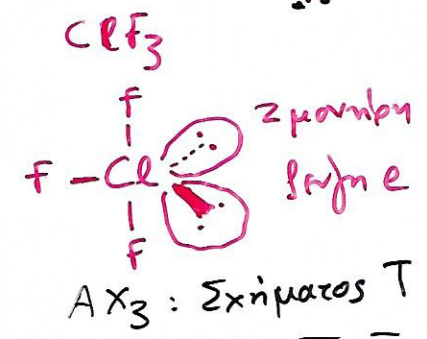
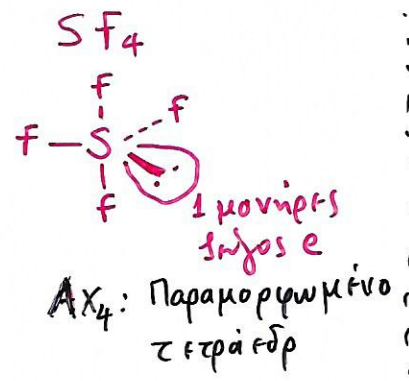
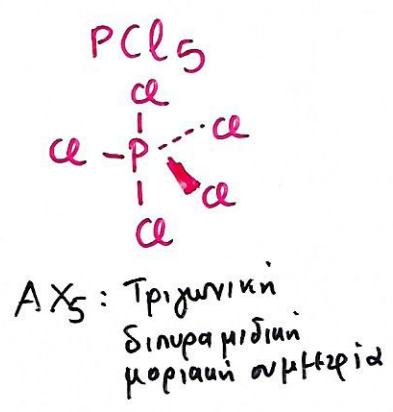
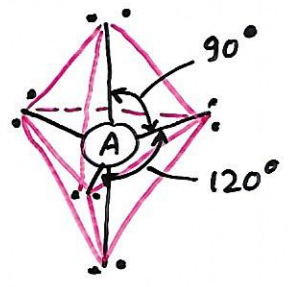
4

Τετραεδρική



5

Τριγωνική διπυραμίδα



6

Οκταεδρική διανόμιση

