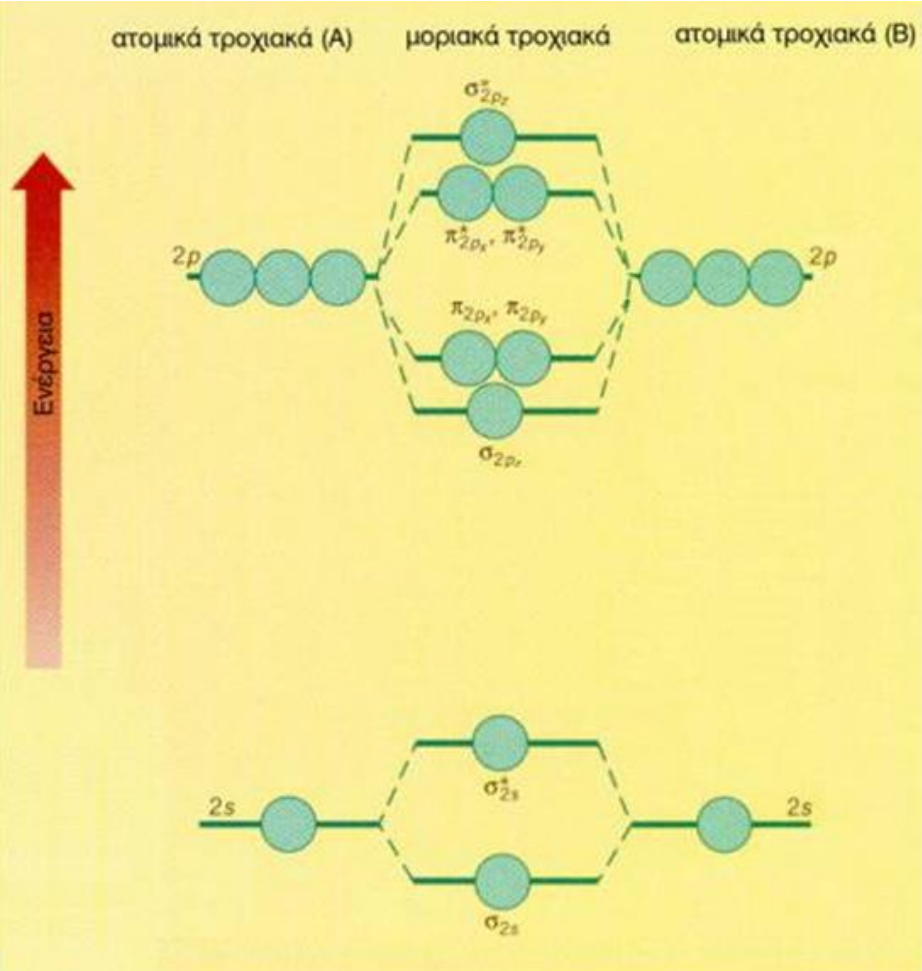
Θεωρία Μοριακών Τροχιακών (MO)

❖ **Μοριακά τροχιακά για ομοιοπυρηνικά διατομικά μόρια της 2ης περιόδου του Π.Π. με μεγάλη ΔΕ μεταξύ των 2s & 2p ΑΟ.**

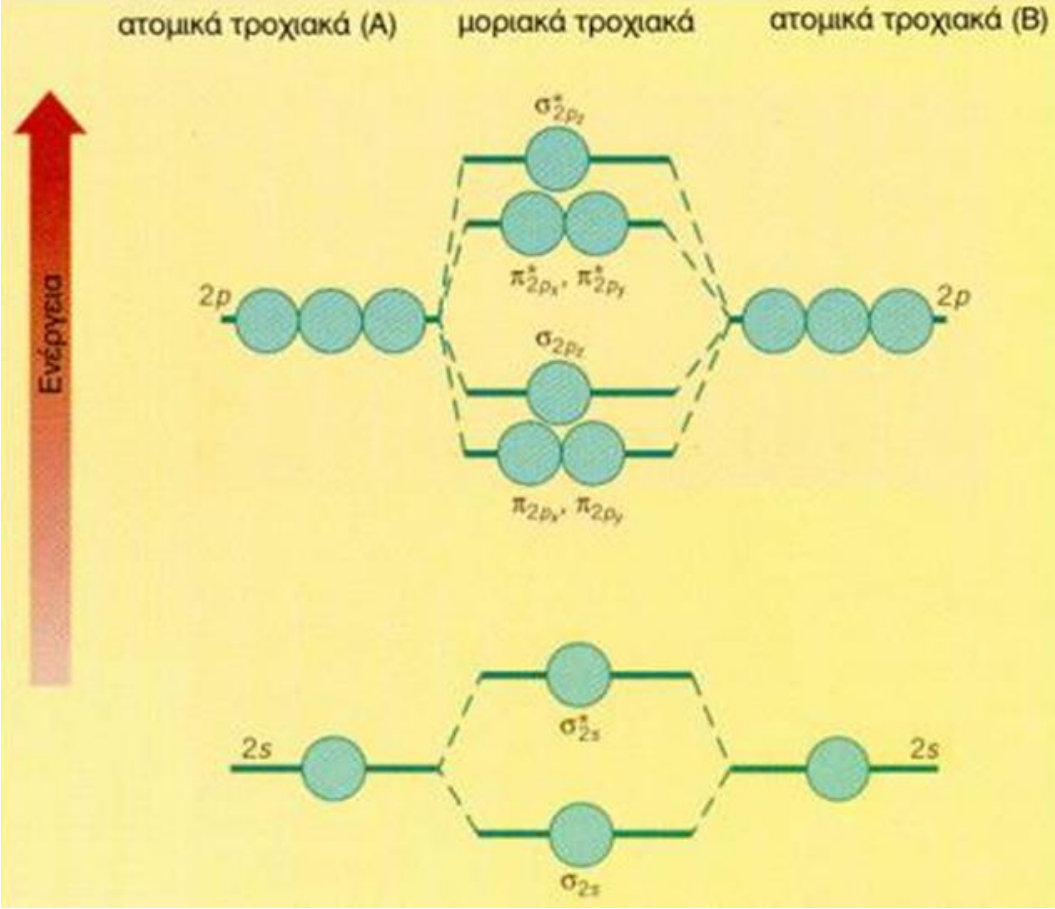


O_2, F_2, Ne_2

$$\sigma_{1s} < \sigma^*_{1s} < \sigma_{2s} < \sigma^*_{2s} < \sigma_{2pz} < \pi_{2px} = \pi_{2py} < \pi^*_{2px} = \pi^*_{2py} < \sigma^*_{2pz}$$

Θεωρία Μοριακών Τροχιακών (MO)

- Μοριακά τροχιακά για ομοιοπυρηνικά διατομικά μόρια της 2ης περιόδου του Π.Π. με μικρή ΔΕ μεταξύ των 2s & 2p ΑΟ (B_2, C_2, N_2), της 3ης και μεγαλύτερης περιόδου του Π.Π.



B_2, C_2, N_2

$$\sigma_{1s} < \sigma^*_{1s} < \sigma_{2s} < \sigma^*_{2s} < \pi_{2px} = \pi_{2py} < \sigma_{2pz} < \pi^*_{2px} = \pi^*_{2py} < \sigma^*_{2pz}$$

Θεωρία Μοριακών Τροχιακών (ΜΟ)

Τάξη – Μήκος – Ενέργεια δεσμού

- **Τάξη δεσμού = ½ (n_b – n_a)**

- **Όπου** **n_b = ο αριθμός των δεσμικών e-**

  n_a = αριθμός αντιδεσμικών e-

- ✓ **Μεγάλη τάξη δεσμού → μικρό μήκος δεσμού → μεγάλη ενέργεια δεσμού (ισχύς δεσμού)**

Θεωρία Μοριακών Τροχιακών (ΜΟ)

- Ιδιότητες δεσμών ομοιοπυρηνικών διατομικών μορίων της 2ης περιόδου του Π.Π.
- Μεγάλη τάξη δεσμού → μικρό μήκος δεσμού → μεγάλη ενέργεια δεσμού (ισχύς δεσμού)

Μόριο	Τάξη δεσμού	Μήκος δεσμού (pm)	Ενέργεια δεσμού (kJ/mol)	Μαγνητικός χαρακτήρας
Li_2	1	267	110	διαμαγνητικό
Be_2	0	το μόριο αυτό δεν μπορεί να υπάρξει		
B_2	1	159	290	παραμαγνητικό
C_2	2	131	620	διαμαγνητικό
N_2	3	110	941	διαμαγνητικό
O_2	2	121	495	παραμαγνητικό
F_2	1	143	155	διαμαγνητικό
Ne_2	0	το μόριο αυτό δεν μπορεί να υπάρξει		

Μοριακά Τροχιακά

❖ Ασκήσεις

- Με βάση τη θεωρία των μοριακών τροχιακών να σχολιάσετε τις ιδιότητες δεσμού (μήκος και ισχύς) του Cl_2 και του Cl_2^+.

- Με βάση τη θεωρία των μοριακών τροχιακών να σχολιάσετε τις ιδιότητες δεσμού (μήκος και ισχύ) των O_2, O_2^+, O_2^-, O_2^{2-}. Που εμφανίζεται παραμαγνητισμός;

- Ποια από τα ακόλουθα μοριακά ιόντα είναι παραμαγνητικά; O_2^+, N_2^-, Li_2^+ O_2^{2-}. Για τα ιόντα που είναι παραμαγνητικά να προσδιορίσετε τον αριθμό των ασύζευκτων e. Επίσης, να βρείτε την τάξη δεσμού σε κάθε μοριακό ιόν. Δίνονται $_7N$, $_8O$, $_3Li$.

- Το μόριο του N_2 έχει εξαιρετικά μεγάλη σταθερότητα επειδή η ενέργεια δεσμού N-N είναι πολύ μεγάλη. Περιμένετε να ισχύει το ίδιο και για τα μοριακά ιόντα N_2^- και N_2^{2-}; Η εξήγηση να δοθεί με βάση τη θεωρία των ΜΟ. Ποια είναι η τάξη δεσμού σε κάθε ένα από τα παραπάνω μόρια ή μοριακά ιόντα; Να τα κατατάξετε κατά αυξανόμενο μήκος δεσμού. Σε ποια από τα παραπάνω μόρια ή μοριακά ιόντα εμφανίζεται παραμαγνητισμός;