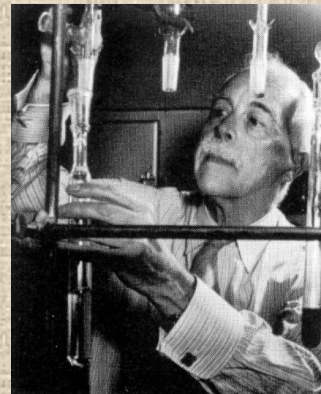
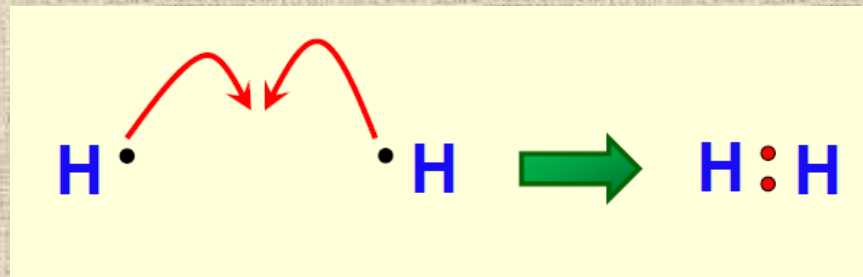
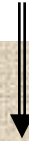


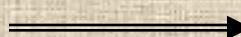
Σωματιδιακή θεώρηση ομοιοπολικού δεσμού

Θεωρία Lewis (1917)

- Ο ΟΔ σχηματίζεται μεταξύ ατόμων ίδιας ή παραπλήσιας ηλεκτραρνητικότητας
- Αμοιβαία συνεισφορά e^- – Σχηματισμός κοινών ζευγών
- Στα κοινά ζεύγη συμμετέχουν μονήρη e^- αντιθέτου spin
- Ο ΟΔ είναι ηλεκτρομαγνητικής φύσης
- Ο εξωτερικός φλοιός των ατόμων αποκτά την σταθερή ηλεκτρονιακή δομή ευγενούς αερίου (κανόνας της οκτάδας)
- Τα άτομα διατάσσονται στο χώρο έτσι ώστε να ελαχιστοποιούνται οι απωστικές δυνάμεις



κοινό ζεύγος ηλεκτρονίων



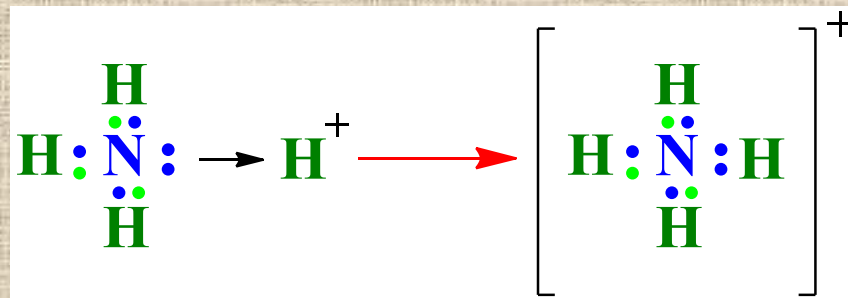
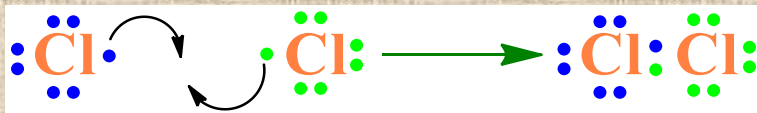
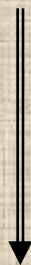
δεσμικό ζεύγος ηλεκτρονίων

σχηματίζεται

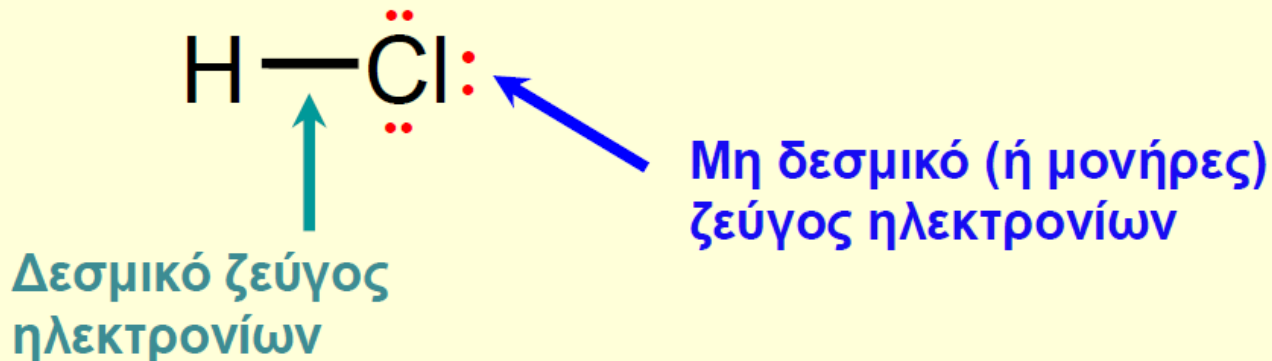


κοινή συνεισφορά ενός e
από κάθε άτομο

προσφορά και των 2 e
από ένα άτομο



Ηλεκτρονιακοί τύποι κατά Lewis



Ο ηλεκτρονιακός τύπος κατά Lewis μοιάζει με το συντακτικό τύπο μιας ένωσης αλλά, εκτός από τους δεσμούς μεταξύ των ατόμων, απεικονίζει και τα μη δεσμικά ζεύγη ηλεκτρονίων στα άτομα

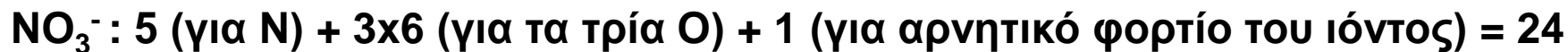
συντακτικός τύπος: **H — Cl**

Πέντε βήματα για την αναγραφή των τύπων Lewis

Βήμα 1:

Πρόσθεση των ηλεκτρονίων σθένους όλων των ατόμων της ένωσης. Για τα πολυατομικά ανιόντα ή κατιόντα προσθέτουμε ή αφαιρούμε, αντίστοιχα, το φορτίο του ιόντος.

π.χ.



- Ομάδα 1,2: ηλεκτρόνια σθένους = αριθμός ομάδας
- Ομάδα 13 – 18: ηλεκτρόνια σθένους = αριθμός ομάδας - 10

IA 1																	VIIIA 18
•H	IIA 2											IIIA 13	IVA 14	VA 15	VIA 16	VIIA 17	He:
•Li	•Be•											•B•	•C•	•N•	•O•	•F•	•Ne:
•Na	•Mg•	IIIB 3	IVB 4	VB 5	VIB 6	VIIIB 7	VIIIB 8,9,10		IB 11	IIB 12	•Al•	•Si•	•P•	•S•	•Cl•	•Ar:	
•K	•Ca•										•Ga•	•Ge•	•As•	•Se•	•Br•	•Kr:	
•Rb	•Sr•										•In•	•Sn•	•Sb•	•Te•	•I•	•Xe:	
•Cs	•Ba•										•Tl•	•Pb•	•Bi•	•Po•	•At•	•Rn:	
•Fr	•Ra•																



Βήμα 2:

Βρίσκουμε το κεντρικό άτομο της ένωσης.

Κεντρικό άτομο είναι αυτό που έχει δείκτη 1 (εκτός του H).

Σε περίπτωση που υπάρχουν περισσότερα τους ενός ατόμου με δείκτη 1, τότε κεντρικό άτομο είναι το λιγότερο ηλεκτραρνητικό.

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	Ba 1,0	In 1,7	Sn 1,8	Sb 1,9	Te 2,1	I 2,5
Cs 0,7						

π.χ.

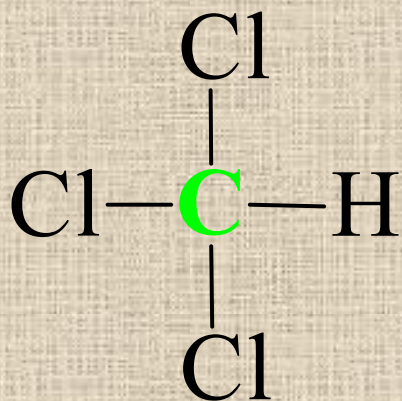
CHCl_3 : κεντρικό άτομο ο C, (δείκτης 1).

HCN : κεντρικό άτομο ο C, (δείκτης 1 και λιγότερο ηλεκτραρνητικός από N)

Βήμα 3:

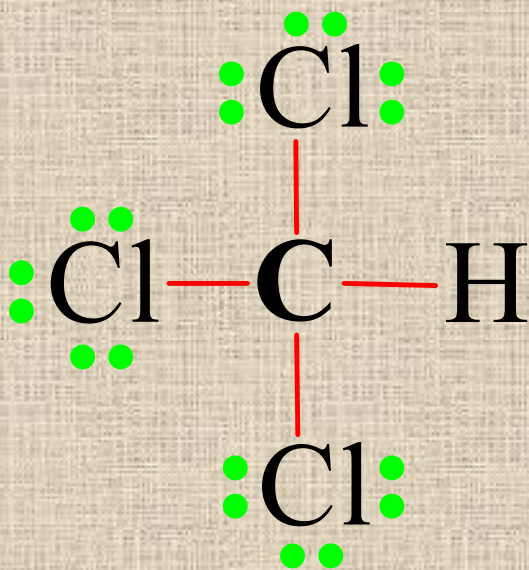
Συνδέουμε το κεντρικό με τα περιφερειακά άτομα με απλούς δεσμούς.

Κάθε δεσμός αντιστοιχεί σε ένα ζεύγος ηλεκτρονίων ($2e^-$)



Βήμα 4:

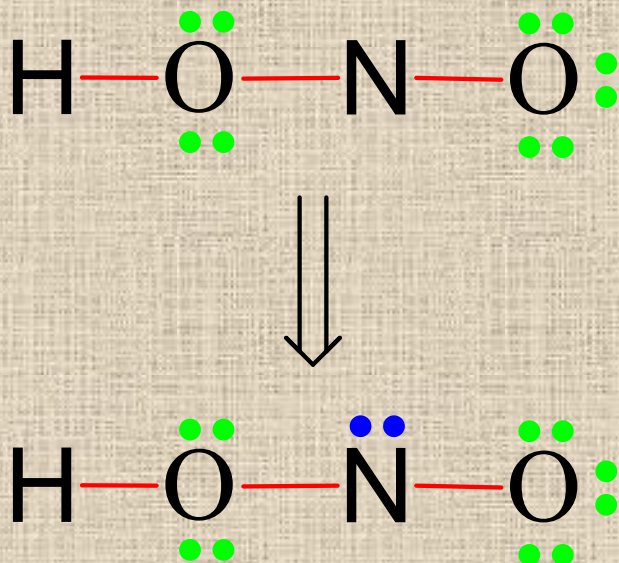
Αφαιρούμε από το συνολικό αριθμό e^- σθένους τα δεσμικά e^- . Αυτά που περισσεύουν τα τοποθετούμε ανά ζεύγη στα περιφερειακά άτομα για να αποκτήσουν $8e^-$ σθένους ($2e^-$ αν πρόκειται για το H).



$$\begin{array}{r} \text{συνολικός αριθμός } e^- \text{ σθένους} = 26e^- \\ \text{δεσμικά } e^- \text{ } 4 \times 2 = 8e^- \\ \hline 18e^- \end{array} \left. \vphantom{\begin{array}{r} 26e^- \\ 8e^- \\ 18e^- \end{array}} \right\} \ominus$$

Βήμα 5:

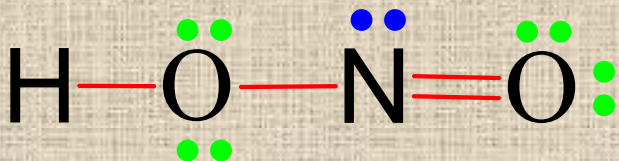
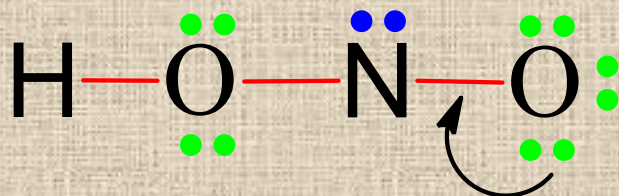
Αν μετά την τοποθέτηση των e^- στα περιφερειακά άτομα περισσέψουν e^- , τότε αυτά τοποθετούνται στο κεντρικό άτομο για να αποκτήσει οκτώ e^- .



$$\begin{array}{r} \text{συνολικός αριθμός } e^- \text{ σθένους} = 18e^- \\ \text{δεσμικά } e^- \text{ } 3 \times 2 = 6e^- \\ \hline 12e^- \\ \text{μη δεσμικά } e^- \text{ } 5 \times 2 = 10e^- \\ \hline 2e^- \end{array} \left. \vphantom{\begin{array}{r} 18e^- \\ 6e^- \\ 12e^- \\ 10e^- \\ 2e^- \end{array}} \right\} \ominus$$

Βήμα 6:

Αν μετά την τοποθέτηση των e^- στο κεντρικό άτομο, το κεντρικό άτομο δεν έχει $8e^-$, τότε μη δεσμικά ζεύγη e^- των περιφερειακών ατόμων μετατρέπονται σε δεσμικά, σχηματίζοντας διπλό ή τριπλό δεσμό με το κεντρικό άτομο, έτσι ώστε να αποκτήσει οκτώ e^- .

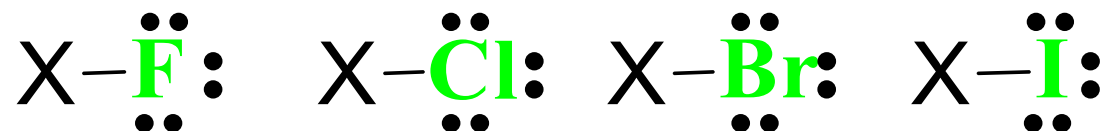


Κανόνες για δομές Lewis

Αν σε μία ένωση περιέχονται Η και Ο, με το Ο σε περιφερειακή θέση, τότε συνήθως το Η συνδέεται με το Ο.



Τα περιφερειακά αλογόνα σχηματίζουν με το κεντρικό άτομο απλό δεσμό και έχουν τρία μη δεσμικά ζεύγη e⁻.

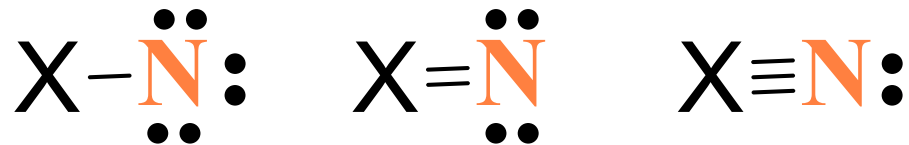


Τα περιφερειακά άτομα Ο και S σχηματίζουν με το κεντρικό άτομο είτε έναν απλό είτε ένα διπλό δεσμό



Κανόνες για δομές Lewis

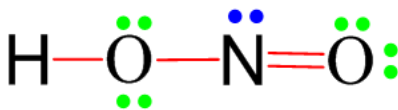
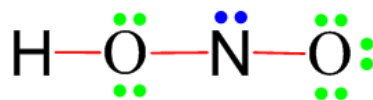
Τα περιφερειακά άτομα N σχηματίζουν με το κεντρικό άτομο είτε έναν απλό είτε ένα διπλό είτε έναν τριπλό δεσμό.





συνολικός αριθμός e- σθένους = $18e^-$

N (δείκτης 1)



Γράψτε τον τύπο Lewis για το τριβρωμίδιο του φωσφόρου, PBr_3

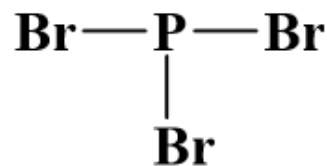
1. Υπολογισμός συνολικού αριθμού ηλεκτρονίων σθένους.

P: Ομάδα 5A \Rightarrow 5 ηλεκτρόνια σθένους

Br: Ομάδα 7A \Rightarrow 7 ηλεκτρόνια σθένους

Ο συνολικός αριθμός ηλεκτρονίων σθένους: $5 + (3 \times 7) = 26$

2. Η σκελετική δομή θα έχει ως κεντρικό άτομο το P, επειδή είναι το λιγότερο ηλεκτραρνητικό, και τα άτομα Br ως περιφερειακά:

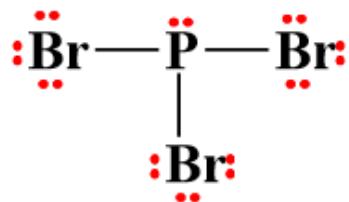


Δαπανήσαμε 6 από τα 26 ηλεκτρόνια

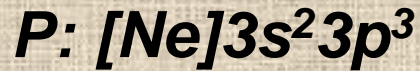
3. Κατανέμουμε ηλεκτρονικά ζεύγη στα περιφερειακά άτομα έτσι, ώστε να ικανοποιείται ο κανόνας της οκτάδας.

(Απαιτούνται $3 \times 6 = 18$ ηλεκτρόνια.)

4. Κατανέμουμε τα υπόλοιπα ηλεκτρόνια ($26 - 24 = 2$) στο άτομο P:

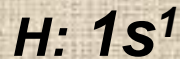


Παράδειγμα εύρεσης δομής Lewis στο όξινο φωσφορικό (HPO_4^{-2}) ιόν.(1/4)



Υπολογίζουμε
τον συνολικό
αριθμό e σθένους.

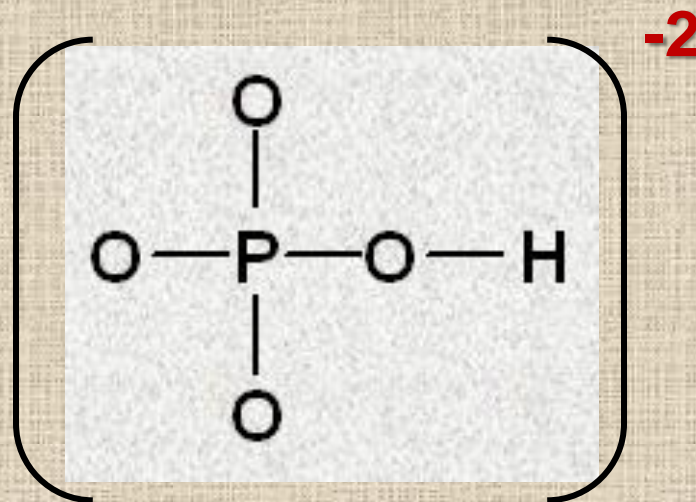
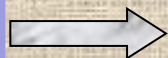
$1e + 5e + 4 \cdot 6e + 2e = 32e$



ηλεκτρικό
φορτίο
ιόντος

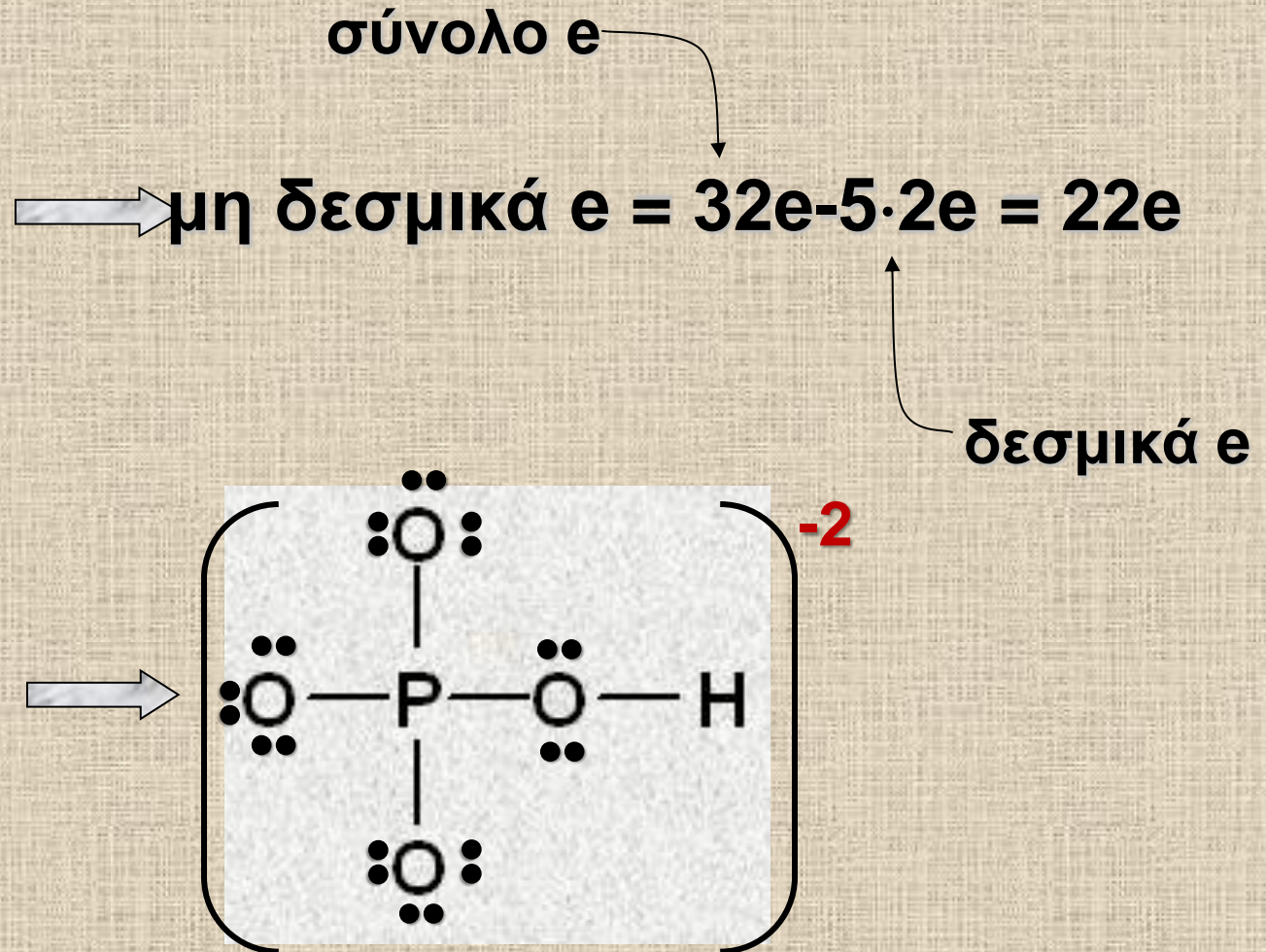
Παράδειγμα εύρεσης δομής Lewis στο όξινο φωσφορικό (HPO_4^{-2}) ιόν. (2/4)

Σχεδιάζουμε
με απλούς
δεσμούς
τον σκελετό
του ιόντος.



Παράδειγμα εύρεσης δομής Lewis στο όξινο φωσφορικό (HPO_4^{-2}) ιόν. (3/4)

Συμπληρώνουμε
με τα μη δεσμικά
ηλεκτρόνια τις
στιβάδες σθένους
ξεκινώντας
από τα
περιφερειακά
άτομα.

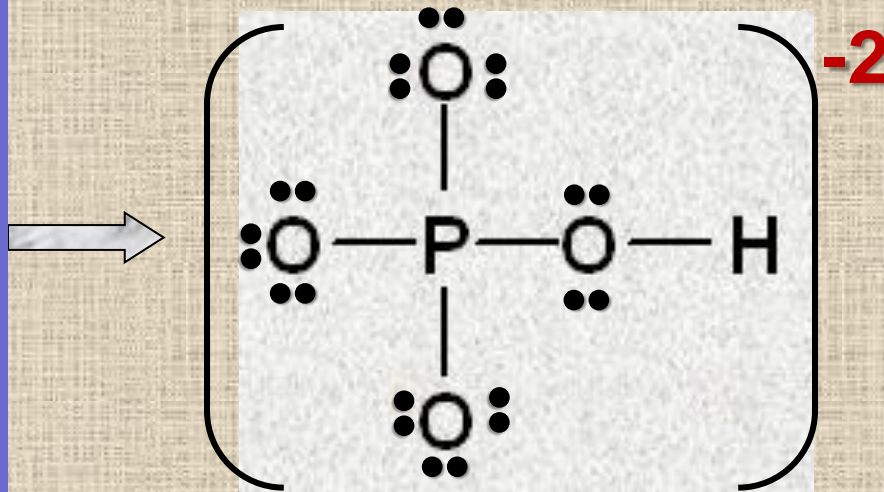


Παράδειγμα εύρεσης δομής Lewis στο όξινο φωσφορικό (HPO_4^{-2}) ιόν. (4/4)

Ελέγχουμε
αν αποκτήθηκαν
οι δομές των
ευγενών αερίων.

Προσθέτουμε
πολλαπλούς
δεσμούς
αν είναι
απαραίτητο.

Ελέγχουμε
αν είναι
αποδεκτή
η τελική
μορφή.



Παράδειγμα εύρεσης δομής Lewis στο νιτρικό (NO_3^{-1}) ιόν. (1/4)



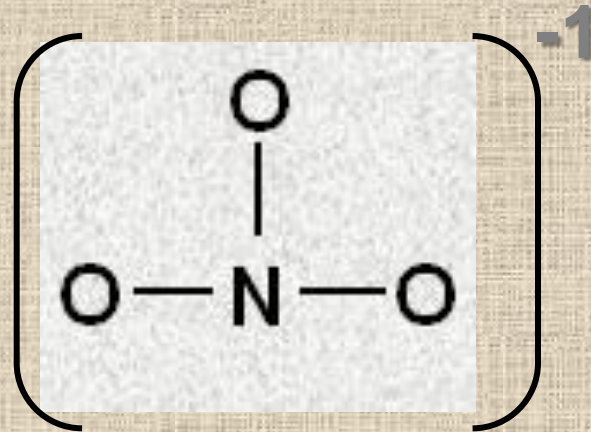
Υπολογίζουμε
τον συνολικό
αριθμό e σθένους.

$$5e + 3 \cdot 6e + 1e = 24e$$

ηλεκτρικό
φορτίο
ιόντος

Παράδειγμα εύρεσης δομής Lewis στο νιτρικό (NO_3^{-1}) ιόν. (2/4)

Σχεδιάζουμε
με απλούς
δεσμούς
τον σκελετό
του ιόντος



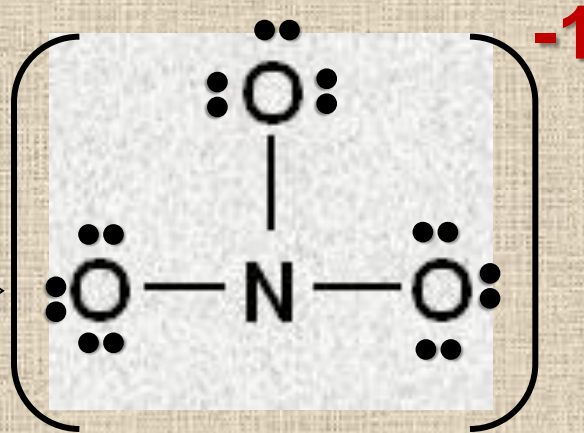
Παράδειγμα εύρεσης δομής Lewis στο νιτρικό (NO_3^{-1}) ιόν. (3/4)

σύνολο e

$$\text{μη δεσμικά } e = 24e - 3 \cdot 2e = 18e$$

δεσμικά e

Συμπληρώνουμε
με τα μη δεσμικά
ηλεκτρόνια τις
στιβάδες σθένους
ξεκινώντας
από τα
περιφερειακά
άτομα.

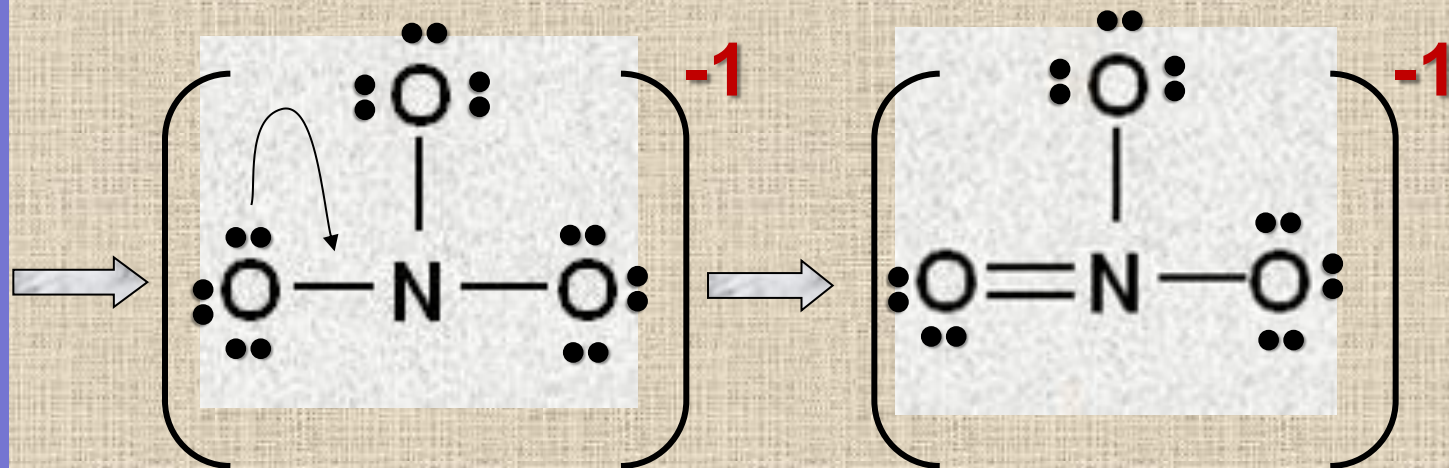


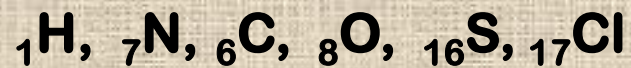
Παράδειγμα εύρεσης δομής Lewis στο νιτρικό (NO_3^{-1}) ιόν. (4/4)

Ελέγχουμε
αν αποκτήθηκαν
οι δομές των
ευγενών αερίων.

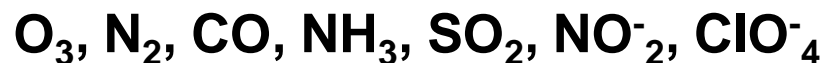
Προσθέτουμε
πολλαπλούς
δεσμούς
αν είναι
απαραίτητο.

Ελέγχουμε
αν είναι
αποδεκτή
η τελική
μορφή.

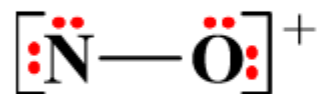




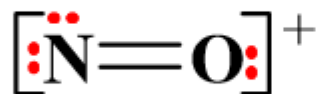
Να γραφούν οι τύποι Lewis για:



Ποια από τις παρακάτω δομές Lewis του ιόντος νιτροσυλίου, NO^+ , είναι η σωστή;



(α)



(β)



(γ)

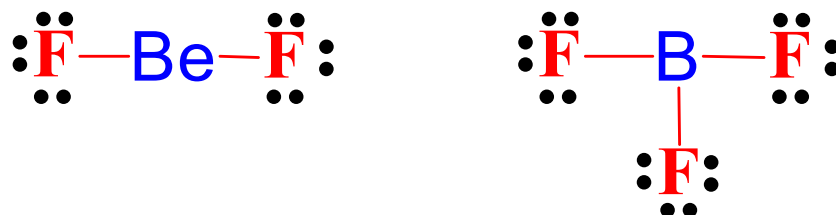


(δ)

Αποκλίσεις από τον κανόνα της οκτάδας

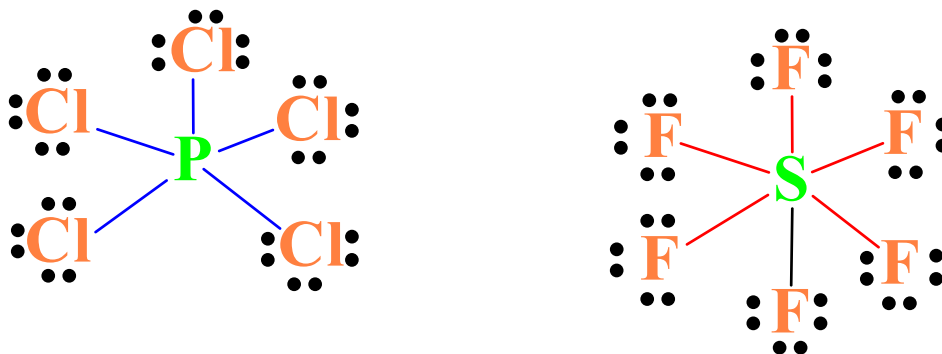
Μόρια ελλιπή ηλεκτρονίων:

τα στοιχεία των ομάδων 2 και 13 (Be, B) μπορεί ως κεντρικά άτομα, να έχουν ασυμπλήρωτες οκτάδες (λιγότερο από $8e^-$)

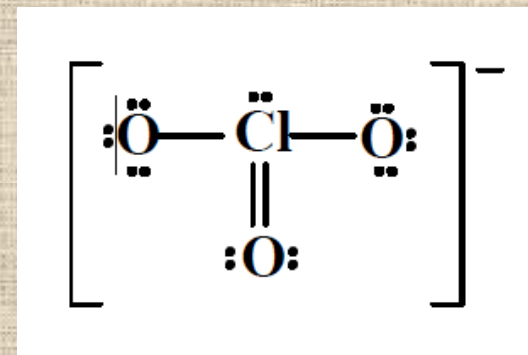
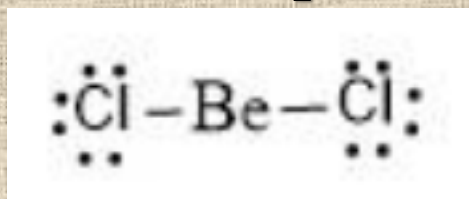
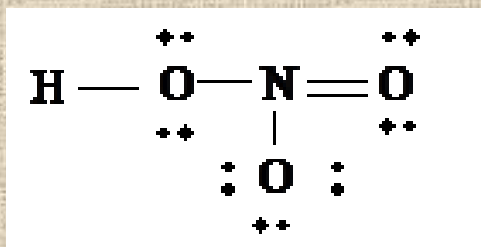
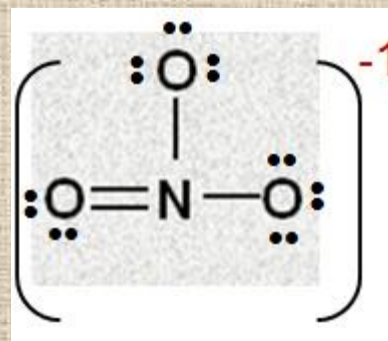
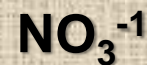
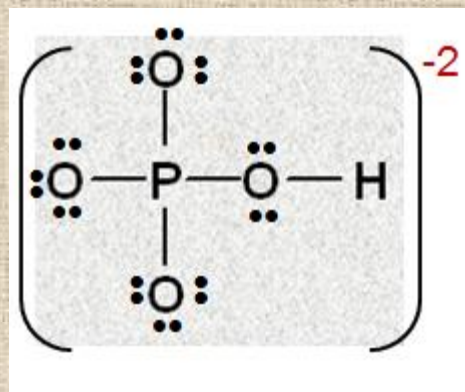
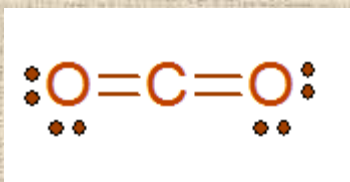


Υπερσθενή μόρια:

τα στοιχεία P, I, S, Xe, ως κεντρικά άτομα στις ενώσεις PCl₅, ICl₅, SF₆, XeF₂ κ.λ.π. εμφανίζουν κεντρικά άτομα με περισσότερα από $8e^-$.



Δομές Lewis – Παραδείγματα



Γράψτε τον τύπο Lewis για το χλωριούχο νιτροσύλιο (NOCl)

Βήμα 1: υπολογισμός e⁻ σθένους $5+6+7 = 18e^-$

Βήμα 2: εύρεση του κεντρικού ατόμου N ή Cl

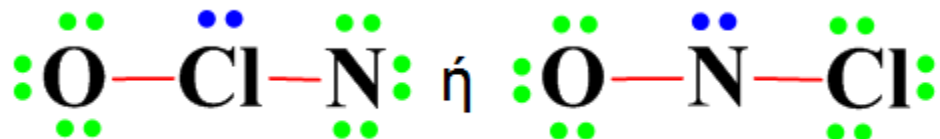
Βήμα 3: σύνδεση του κεντρικού ατόμου με τα περιφερειακά άτομα



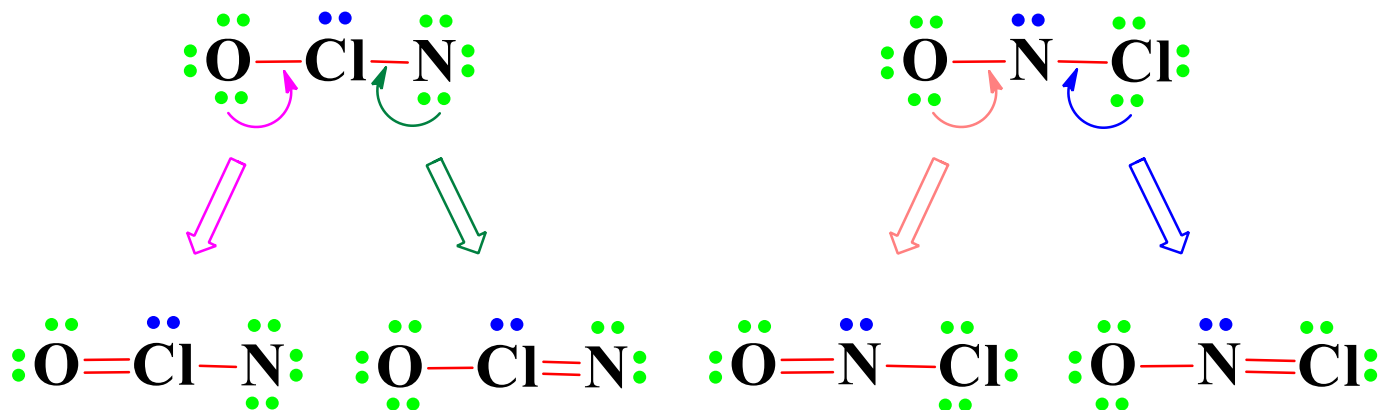
Βήμα 4: συνολικός αριθμός e⁻ σθένους = $18e^- - 4e^- (\text{δεσμικά}) = 14e^-$



Βήμα 5: περίσσειμα e⁻ σθένους και τοποθέτηση στο κεντρικό άτομο



Βήμα 6: το κεντρικό άτομο δεν έχει 8e- σθένους, οπότε ένα μη δεσμικό ζεύγος e- από τα περιφερειακά άτομα μετατρέπεται σε δεσμικό σχηματίζοντας διπλό δεσμό με το κεντρικό άτομο



Η σταθερότερη δομή καθορίζεται με βάση το τυπικό φορτίο

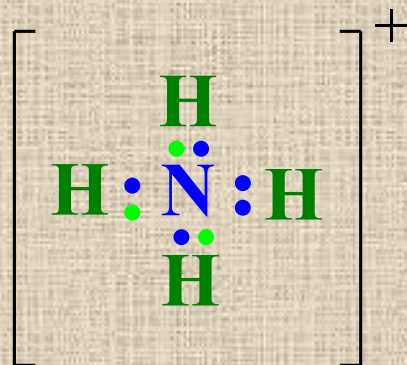
Τυπικό φορτίο (FC, formal charge) ατόμου σε μια δομή κατά Lewis, είναι το φαινομενικό φορτίο που αποκτά το άτομο αν οι δεσμοί στο μόριο θεωρηθούν τέλεια ομοιοπολικοί και τα κοινά ζεύγη ηλεκτρονίων διαμεριστούν εξίσου μεταξύ των συνδεδεμένων ατόμων.

$$FC = V - L - \frac{1}{2} \times P$$

V: ηλεκτρόνια σθένους (Valence e⁻)

L: μη δεσμικά ηλεκτρόνια (Lone paired e⁻)

P: δεσμικά ηλεκτρόνια (Paired e⁻)



$$FC_N = 5 - 0 - (\frac{1}{2} \times 8) = +1$$

Τυπικό φορτίο και σταθερότητα δομής Lewis

- Η πιθανότερη δομή κατά Lewis είναι αυτή που εξασφαλίζει στα άτομα μηδενικά τυπικά φορτία.
- Σε περίπτωση που τα τυπικά φορτία είναι διάφορα του μηδενός, τότε θα πρέπει να έχουν τη μικρότερη δυνατή τιμή.
- Αρνητικά τυπικά φορτία συνήθως έχουν τα ηλεκτραρνητικότερα άτομα και θετικά τα λιγότερο ηλεκτραρνητικά άτομα.
- Το άθροισμα των τυπικών φορτίων των ατόμων σε μια δομή κατά Lewis θα πρέπει να είναι ίσο με μηδέν για τα ουδέτερα σωματίδια (μόρια ή ρίζες) ή ίσο με το φορτίο του ιόντος στα πολυατομικά ιόντα.

Τυπικό φορτίο και σταθερότερη δομή Lewis



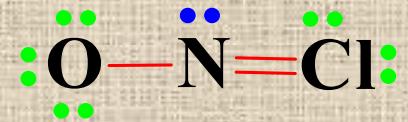
Δομή 1



Δομή 2



Δομή 3



Δομή 4

Δομή 1

$$FC_O = 6 - 4 - (\frac{1}{2} \times 4) = 0$$

$$FC_{Cl} = 7 - 2 - (\frac{1}{2} \times 6) = +2$$

$$FC_N = 5 - 6 - (\frac{1}{2} \times 2) = -2$$

Δομή 2

$$FC_O = 6 - 6 - (\frac{1}{2} \times 2) = -1$$

$$FC_{Cl} = 7 - 2 - (\frac{1}{2} \times 6) = +2$$

$$FC_N = 5 - 4 - (\frac{1}{2} \times 4) = -1$$

Δομή 3

$$FC_O = 6 - 4 - (\frac{1}{2} \times 4) = 0$$

$$FC_N = 5 - 2 - (\frac{1}{2} \times 6) = 0$$

$$FC_{Cl} = 7 - 6 - (\frac{1}{2} \times 2) = 0$$

Δομή 4

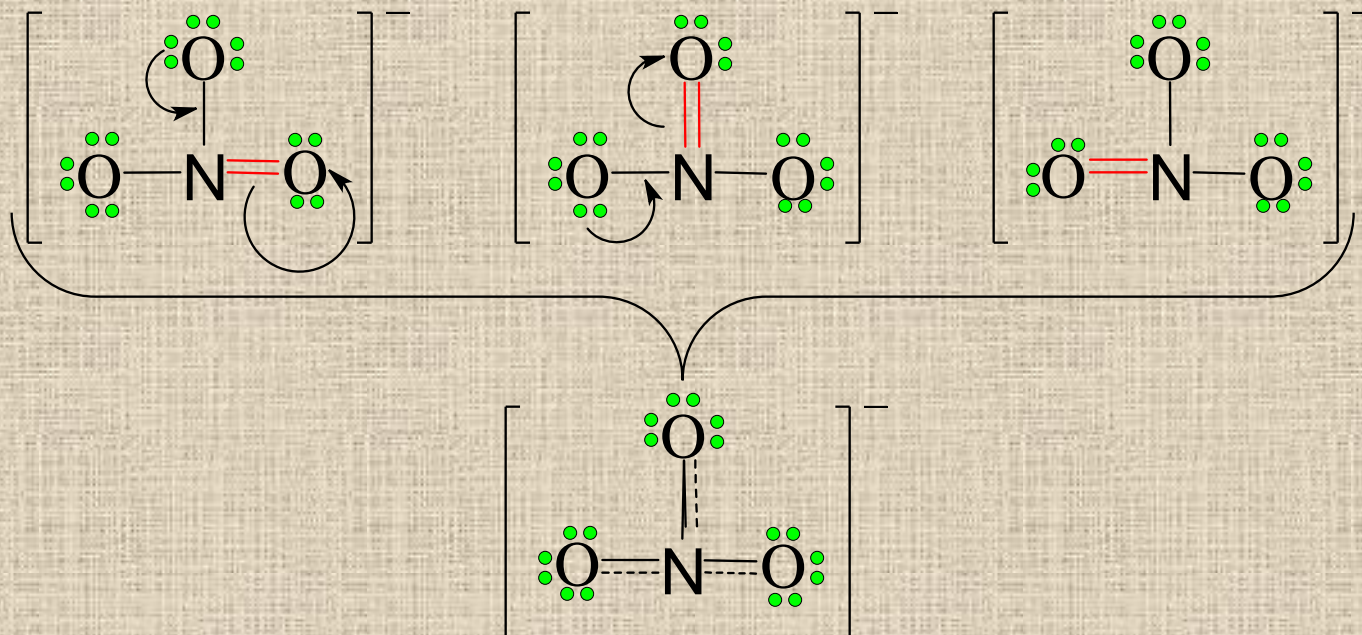
$$FC_O = 6 - 6 - (\frac{1}{2} \times 2) = -1$$

$$FC_N = 5 - 2 - (\frac{1}{2} \times 6) = 0$$

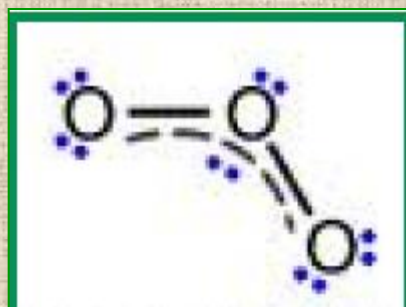
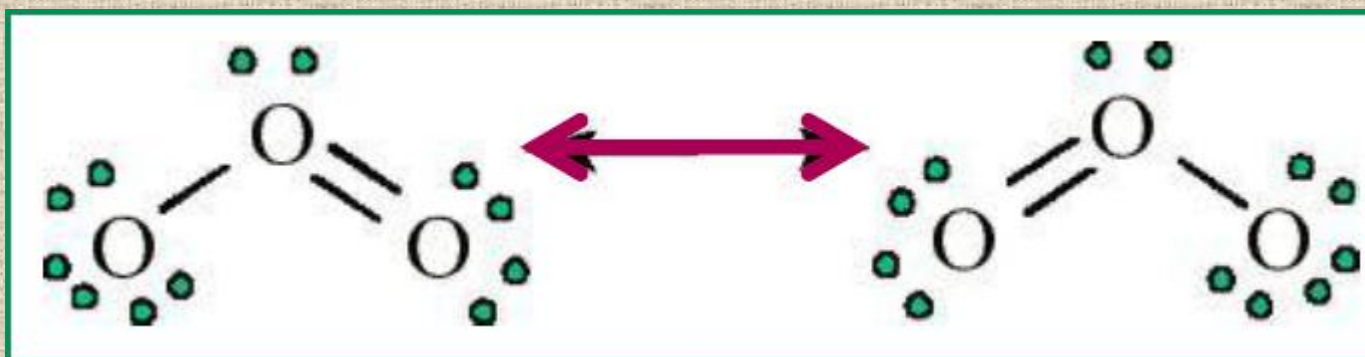
$$FC_{Cl} = 7 - 4 - (\frac{1}{2} \times 4) = +1$$

Συντονισμός - Μεσομέρεια

Συντονισμός ή μεσομέρεια παρουσιάζεται σε μόρια (ή ιόντα) που μπορούν να παρασταθούν με δύο ή περισσότερες ηλεκτρονιακές δομές κατά Lewis, οι οποίες είναι ενεργειακά ισοδύναμες. Η δε πραγματική δομή του μορίου (ή ιόντος) είναι υβρίδιο των οριακών αυτών δομών. Ο συντονισμός συμβολίζεται με διπλό βέλος που τίθεται ανάμεσα στις οριακές δομές Lewis.

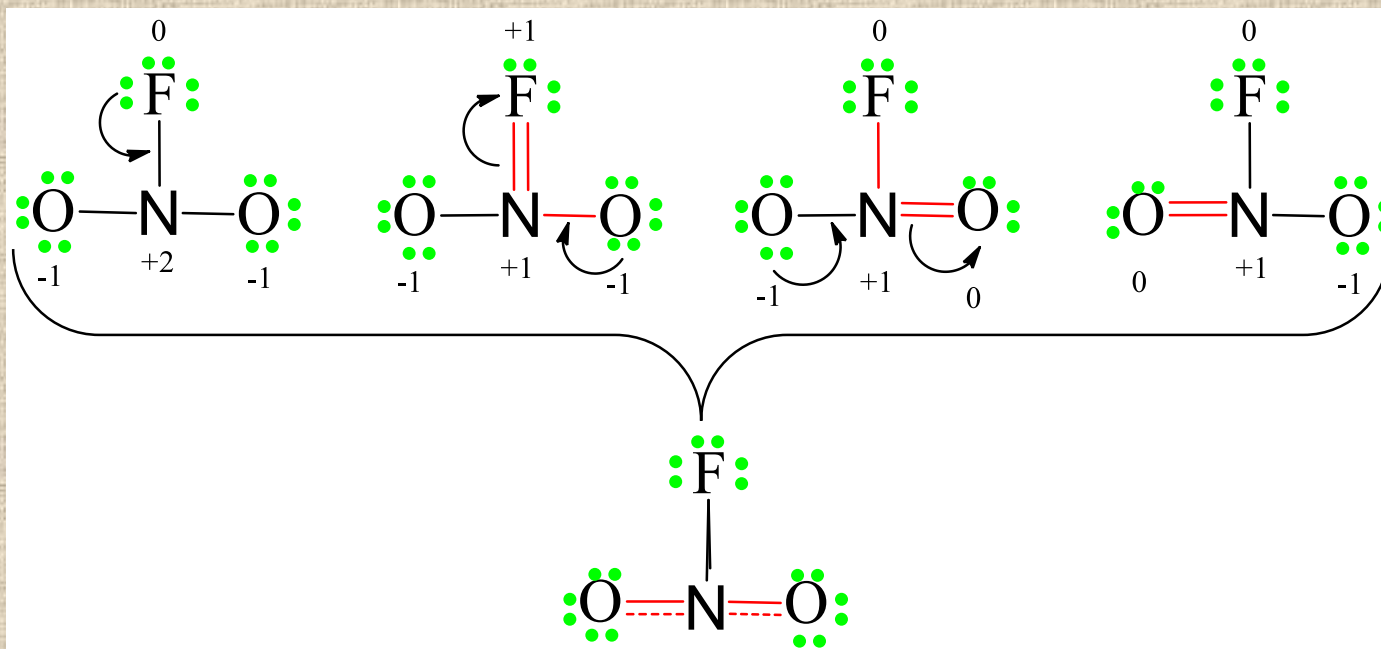


Συντονισμός – Μεσομέρεια στο μόριο O_3



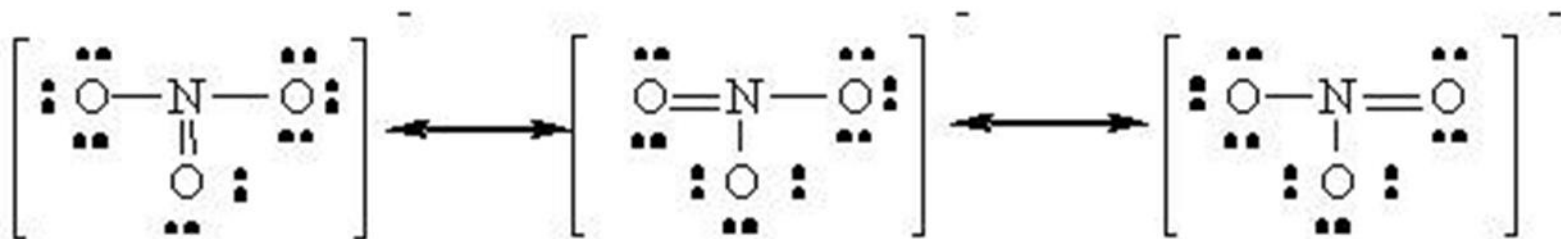
Να γράψετε τις μεσομερείς δομές του NFO_2 .

Ποιές από αυτές έχουν τη μεγαλύτερη συμμετοχή στη διαμόρφωση της δομής του μορίου.

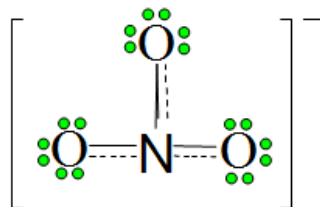


Οι δομές συντονισμού δεν υπάρχουν!

Οι δομές συντονισμού δεν βρίσκονται σε ισορροπία μεταξύ τους.



Μόνο η υβριδική δομή αποδίδει με ακρίβεια τη δομή του μορίου.



Οι δομές συντονισμού δεν είναι ισομερείς.

- Τα ισομερή διαφέρουν ως προς τη διεύθυνση των ατόμων.
- Οι δομές συντονισμού μόνο ως προς τη διεύθυνση των ηλεκτρονίων.



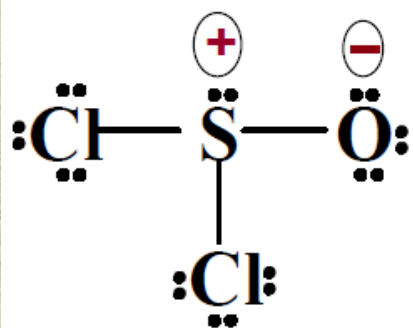
αιθανόλη

διμεθυλαιθέρας

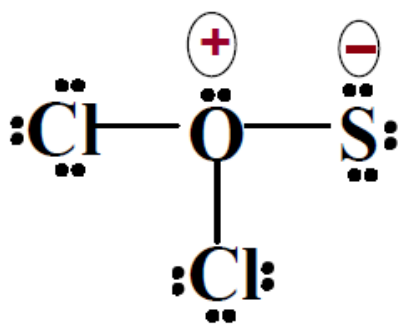
Μοριακός τύπος
 C_2H_6O

Ποιες είναι οι δομές συντονισμού του μυρμηκικού ιόντος HCO_2^-

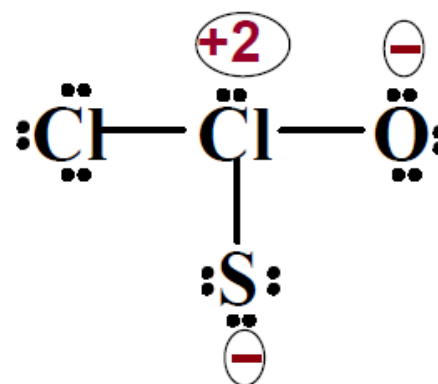
Ποια από τις τρεις σκελετικές δομές του θειονυλοχλωριδίου, SOCl_2 είναι η πιθανότερη και γιατί.



(α)



(β)

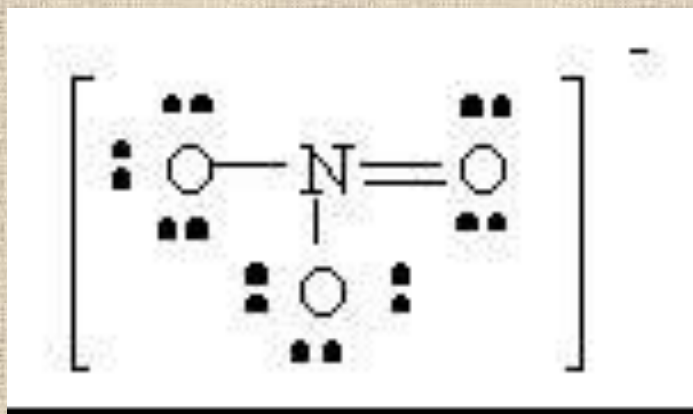


(γ)

Γράψτε μια δομή Lewis για καθένα από τα παρακάτω μόρια και βρείτε τα τυπικά φορτία των ατόμων.

(α) CO (β) HNO_3 (γ) ClO_3^- (δ) POCl_3

Αριθμός οξείδωσης είναι το φαινομενικό φορτίο που αποκτά το άτομο στις ομοιοπολικές ενώσεις (ή πραγματικό φορτίο στις ιοντικές ενώσεις), αν οι δεσμοί που σχηματίζει θεωρηθούν τέλεια ιοντικοί. Είναι δηλαδή το φορτίο που αποκτά το άτομο αν τα κοινά ζεύγη ηλεκτρονίων αποδοθούν στο ηλεκτραρνητικότερο άτομο.

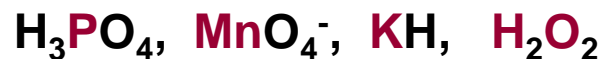


Αριθμός Οξείδωσης N = 5

Αριθμός οξειδωσης

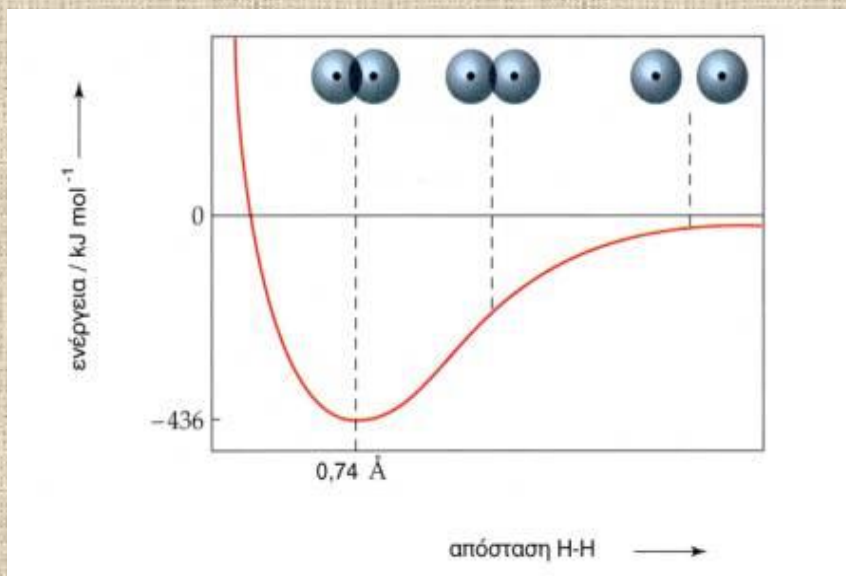
1	Το άθροισμα των αριθμών οξειδωσης των ατόμων σε μια ένωση ισούται με το μηδέν, ενώ το άθροισμα των αριθμών οξειδωσης των ατόμων σε πολυατομικό ιόν ισούται με το φορτίο του ιόντος.	
2	Τα άτομα των στοιχείων σε ελεύθερη κατάσταση:	0
3	α. Τα άτομα της ομάδας 1 του περιοδικού πίνακα στις ενώσεις τους:	+1
	β. τα άτομα της ομάδας 2:	+2
	γ. τα άτομα της 13 ομάδας (εκτός από το B):	συνήθως +3
4	Το υδρογόνο (H) στις ενώσεις του:	+1 (ενώσεις με αμέταλλα) -1 (ενώσεις με μέταλλα)
5	Το οξυγόνο (O) στις ενώσεις του:	-2 +2 (όταν συνδυάζεται με F) -1 (στα υπεροξείδια, O_2^{2-}) -1/2 (στα σουπεροξείδια, O_2^-) -1/3 (στα οζονίδια, O_3^-)
6	Το φθόριο (F) στις ενώσεις του:	-1
7	Αλογόνα (εκτός φθορίου) σε ενώσεις τους:	-1 (εκτός αν η ένωση περιέχει οξυγόνο ή πιο ηλεκτραρνητικό αλογόνο)

Να βρεθούν οι αριθμοί οξειδωσης:



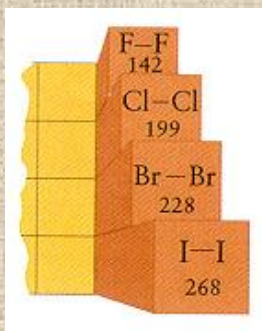
Βασικά χαρακτηριστικά του ομοιοπολικού δεσμού

Μήκος δεσμού AB: η διαπυρηνική απόσταση μεταξύ των ατόμων A και B

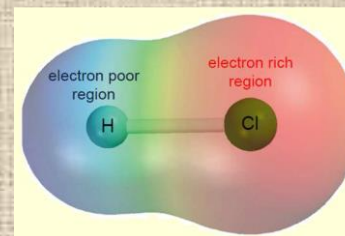


Το μήκος δεσμού εξαρτάται από:

το μέγεθος των ατόμων – την τάξη του δεσμού – την πολικότητα

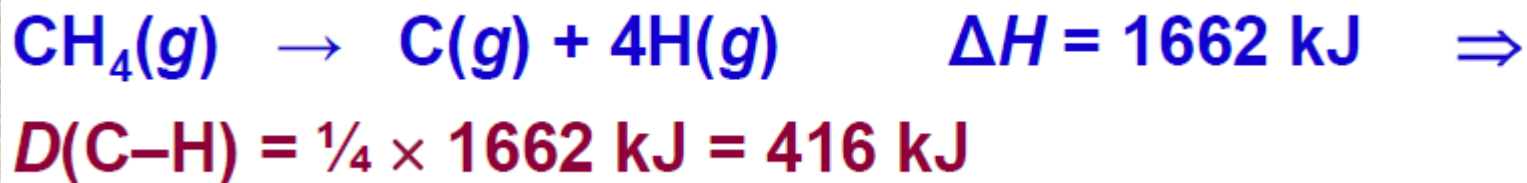


C-C	154
C=C	134
C≡C	120



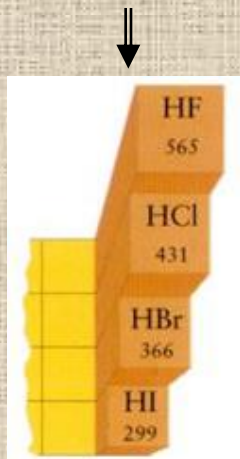
Βασικά χαρακτηριστικά του ομοιοπολικού δεσμού

Ενέργεια ή ενθαλπία δεσμού AB είναι η μέση μεταβολή ενθαλπίας για τη διάσπαση ενός δεσμού A–B που υπάρχει σε μόριο ευρισκόμενο στην αέρια φάση.



Η ενθαλπία δεσμού εξαρτάται από:

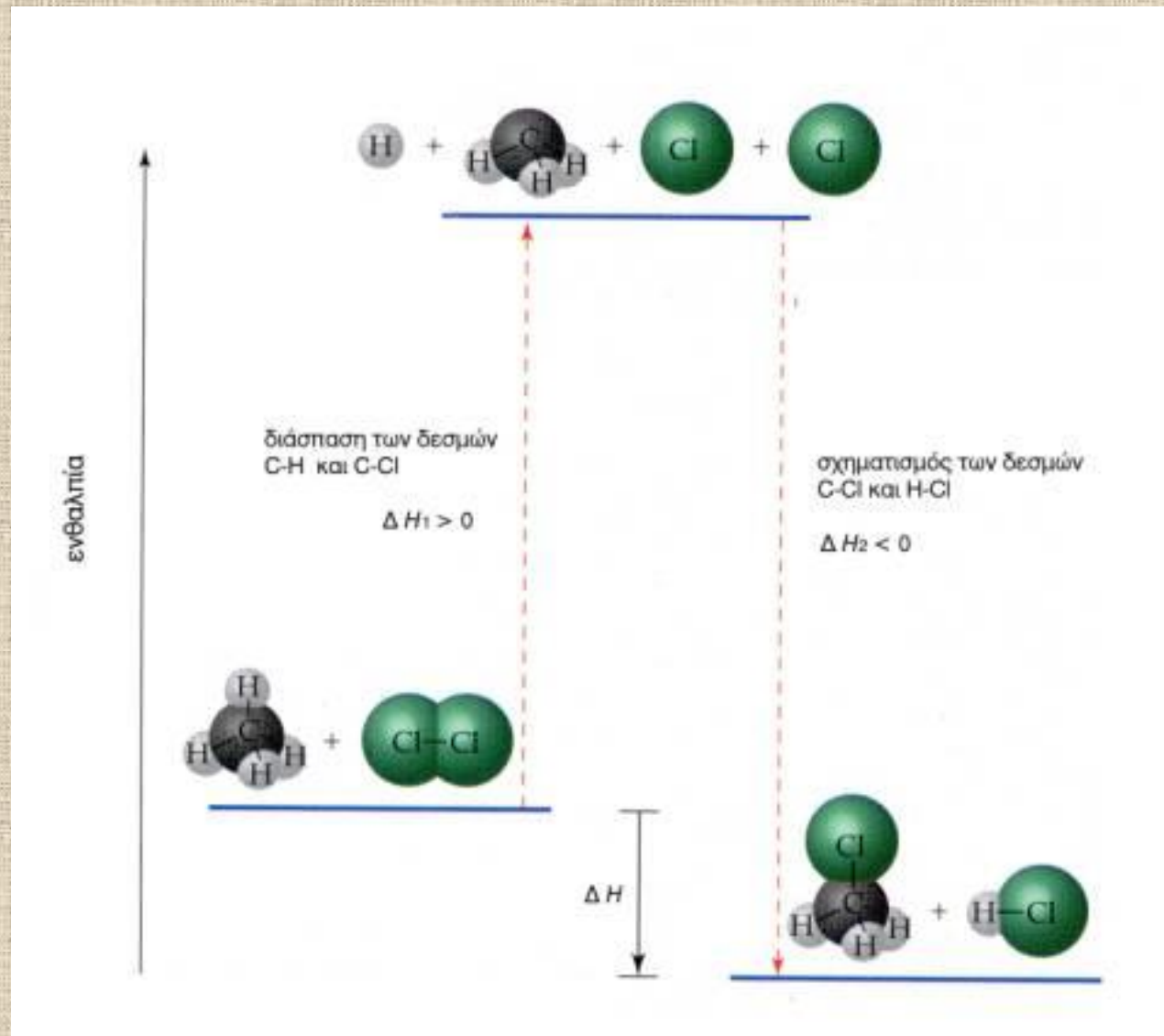
το μήκος του δεσμού – την τάξη του δεσμού – την πολικότητα



N=N 418
N≡N 941

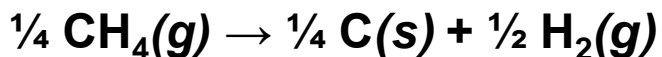
N-F 272
N-Cl 200

Υπολογισμός της μεταβολή ενθαλπίας (ΔH) μιας αντίδρασης από ενέργειες δεσμών



Μπορούμε, με βάση τις ατομικές ακτίνες να καθορίσουμε επακριβώς το μήκος ενός δεσμού;

Η ενέργεια δεσμού C-H εκφράζεται από τη χημική εξίσωση:



Να υπολογιστεί η μέση ενέργεια του δεσμού P-P, αν είναι γνωστό ότι η ενθαλπία διάσπασης της φωσφίνης (PH₃) είναι $\Delta H = + 956 \text{ kJ mol}^{-1}$ και της διφωσφίνης (P₂H₄) = +1485 kJ mol⁻¹.

Να υπολογισθεί η μεταβολή ενθαλπίας κατά την καύση αιθυλενίου C₂H₄

kJ/mol

C-H	413
C-C	348
C-N	293
C-O	358
C-F	485

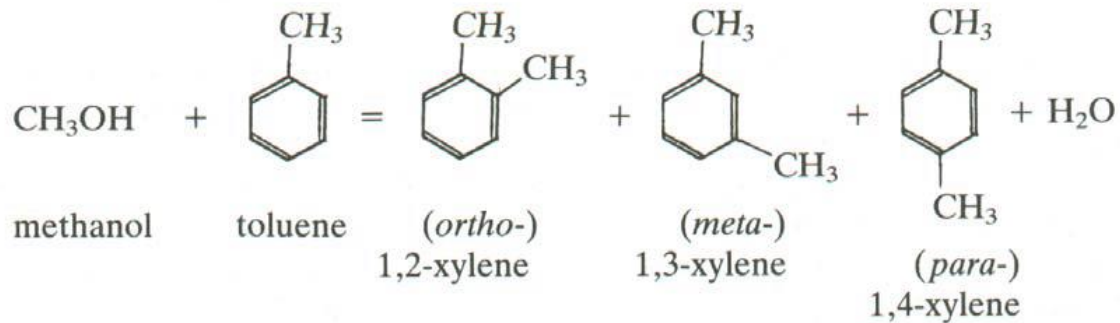
C=C	614
C≡C	839
C=N	615
C≡N	891
C=O	799

O=O 495

O-H
459

Γιατί είναι σημαντική η μοριακή γεωμετρία;

Σύνθεση και απομόνωση παραξυλενίου.



Ζεόλιθοι
Μοριακά κόσκινα

