



Πανεπιστήμιο Δυτικής Μακεδονίας
Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών

Χημεία

Ενότητα 10: Θεωρία μοριακών τροχιακών

Τόλης Ευάγγελος
e-mail: etolis@uowm.gr

Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών



Πανεπιστήμιο Δυτικής Μακεδονίας



Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Άδειες Χρήσης

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό υπόκειται σε άδειες χρήσης Creative Commons.
- Για εκπαιδευτικό υλικό, όπως εικόνες, που υπόκειται σε άλλου τύπου άδειας χρήσης, η άδεια χρήσης αναφέρεται ρητώς.



Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στα πλαίσια του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ψηφιακά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Δυτικής Μακεδονίας**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο τη αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

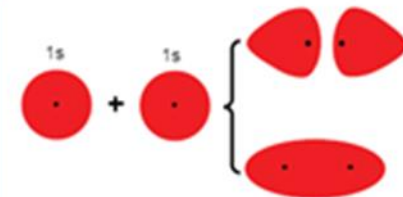


ΕΣΠΑ
2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ



Κεφάλαιο 10^ο

10 Θεωρία
μοριακών τροχιακών



Θεωρία μοριακών τροχιακών (1/7)

- **Θεωρία Lewis**
- **Θεωρία VSEPR**

ΔΕΝ έλαβαν υπόψη την κβαντομηχανική υπόσταση του ατόμου.

- **Θεωρία σθένους δεσμού:** χρησιμοποίησε τα ατομικά τροχιακά για να εξηγήσει τον χημικό δεσμό (επικάλυψη τροχιακών).



Αδυνατούσε όμως να προβλέψει ορισμένες ιδιότητες των μορίων όπως πχ. ο παραμαγνητισμός του O_2 .



Θεωρία μοριακών τροχιακών (2/7)

Απάντηση έδωσε η **Θεωρία των μοριακών τροχιακών** (molecular orbital theory) από τους Hund και Mulliken.

Βασικά σημεία της Θεωρίας των μοριακών τροχιακών:

1. Από συγχώνευση και αλληλοεπικάλυψη ΑΟ προκύπτουν νέα τροχιακά τα οποία ονομάζονται μοριακά τροχιακά (*molecular orbital*).
2. Ο αριθμός των ΜΟ είναι ίσος με τον αριθμό των ατομικών τροχιακών που αλληλεπικαλύπτονται.
3. ΜΟ προκύπτουν από την αλληλοεπικάλυψη ΑΟ παραπλήσιας ενέργειας.



Robert Sanderson Mulliken (1896 - 1986)

Αμερικανός επιστήμονας, πρωτεργάτης της ανάπτυξης της θεωρίας των μοριακών τροχιακών. Για την προσφορά του αυτή τιμήθηκε με το βραβείο Νόμπελ Χημείας το 1966.



Θεωρία μοριακών τροχιακών (3/7)

Βασικά σημεία της Θεωρίας των μοριακών τροχιακών (συνέχεια):

4. Όλα τα e^- ανήκουν πλέον και στα δύο άτομα που έχουν αλληλεπικαλυφθεί και κατανέμονται στον κοινό χώρο των ΜΟ.
5. Τα ΜΟ αποτελούν για το μόριο ότι τα ΑΟ για το άτομο περιγράφουν δηλαδή των χώρο μέσα στον οποίο υπάρχει μεγάλη πιθανότητα να βρεθούν τα e^- 2 ή περισσότερων ατόμων που συμμετέχουν στο δεσμό.
6. Τα e^- κατατάσσονται στα ΜΟ σύμφωνα με τους κανόνες τις ηλεκτρονιακής δόμησης (κανόνας Hund κλπ.).
7. e^- σε χαμηλής ενέργειας ΜΟ οδηγεί σε σταθερότητα του μορίου ενώ σε υψηλής ενέργειας ΜΟ συμβάλλει στην αποσταθεροποίηση του μορίου.

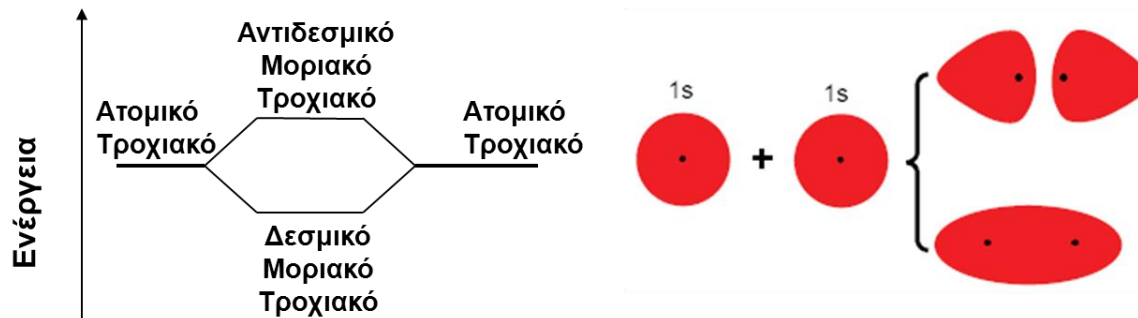
Τα μοριακά τροχιακά είναι και αυτά κυματοσυναρτήσεις οι οποίες έχουν προκύψει από γραμμικό συνδυασμό των κυματοσυναρτήσεων των ατομικών τροχιακών.



Θεωρία μοριακών τροχιακών (4/7)

Δημιουργία Μοριακών Τροχιακών:

- Για το σχηματισμό δύο MO πρέπει να συνδυαστούν δυο AO ίσης ή παραπλήσιας ενέργειας έτσι ώστε οι κυματοσυναρτήσεις τους να ενισχυθούν ή να εξουδετερωθούν.
- Στην πρώτη περίπτωση έχουμε τον σχηματισμό δεσμικών τροχιακών (Bonding Molecular Orbitals) τα οποία έχουν μικρότερη ενέργεια από την ενέργεια καθενός από τα AO που συγχωνεύτηκαν.
- Στην δεύτερη περίπτωση έχουμε τον σχηματισμό αντιδεσμικών τροχιακών (Antibonding Molecular Orbitals) τα οποία έχουν μεγαλύτερη ενέργεια από την ενέργεια καθενός από τα AO που συγχωνεύτηκαν.



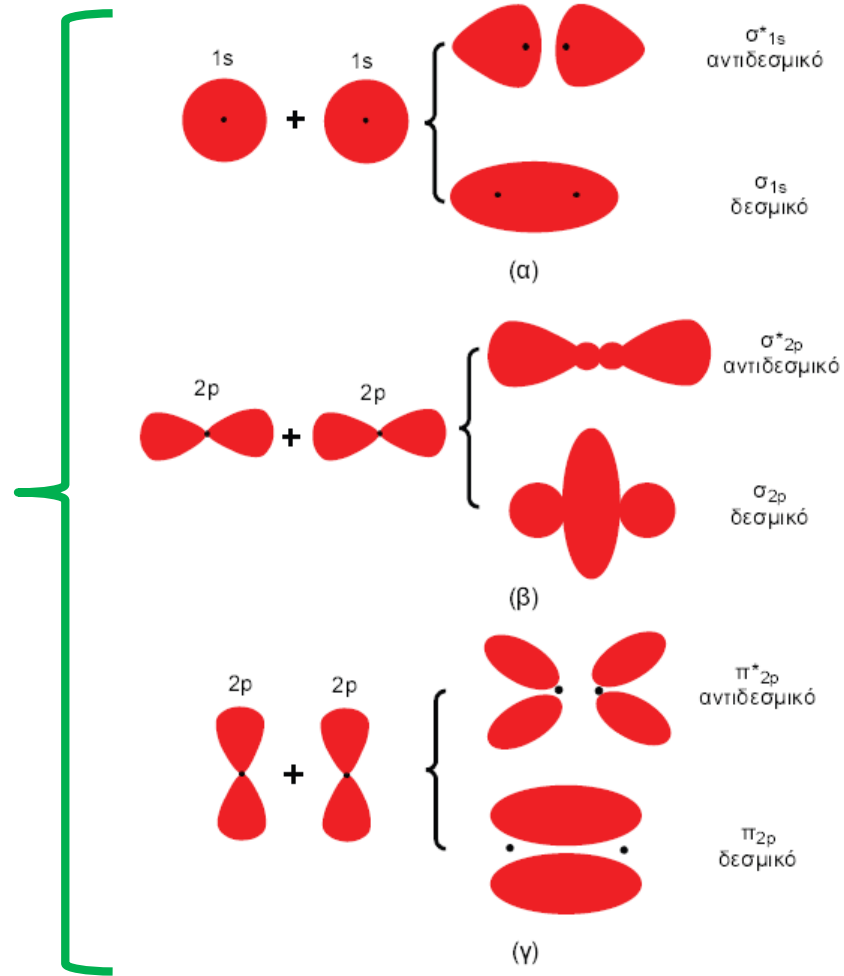
Θεωρία μοριακών τροχιακών (5/7)

- **Είδη MO:**
 - ✓ σ MO τα οποία προκύπτουν από αλληλοεπικάλυψη AO κατά τον άξονα συμμετρίας των AO πχ. Αλληλοεπικαλύψεις $s+s$, $s+p$, $s+d$, $p+p$, $p+d$ κλπ.
 - ✓ π MO τα οποία προκύπτουν από πλευρική αλληλοεπικάλυψη AO πχ. $p+p$, $p+d$, $d+d$, κλπ.



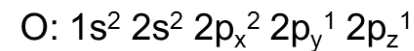
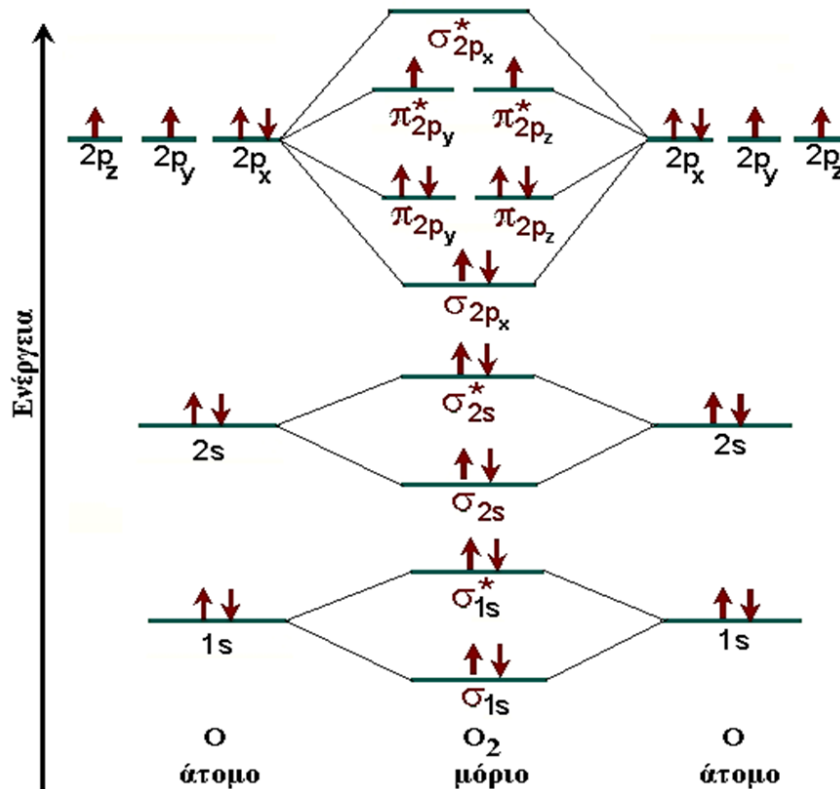
Θεωρία μοριακών τροχιακών (6/7)

Είδη
Μοριακών
Τροχιακών



Θεωρία μοριακών τροχιακών (7/7)

- Ηλεκτρονιακή διαμόρφωση του O₂.



Τάξη Δεσμού = $\frac{1}{2} [(δεδσμικά e) - (αντιδεδσμικά e)]$

Τάξη δεσμού = $[10-6]/2=2$ (διπλός δεσμός, O=O)

Ηλεκτρονική δομή O₂ : $(\sigma_{1s})^2 (\sigma^*_{1s})^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma^*_{2s})^2 (\sigma_{2p_x})^2 (\pi_{2p_y})^2 (\pi_{2p_z})^2 (\pi^*_{2p_y})^1 (\pi^*_{2p_z})^1$



Τέλος Ενότητας



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ & ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ, ΠΟΛΙΤΙΣΜΟΥ & ΑΘΛΗΤΙΣΜΟΥ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ & ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ, ΠΟΛΙΤΙΣΜΟΥ & ΑΘΛΗΤΙΣΜΟΥ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Σημείωμα Αναφοράς

- Copyright Πανεπιστήμιο Δυτικής Μακεδονίας, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Μαρνέλλος Γεώργιος. «Χημεία». Έκδοση: 1.0. Κοζάνη 2015. Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση: [https:// eclass.uowm.gr/courses/MECH100/](https://eclass.uowm.gr/courses/MECH100/)



Σημείωμα Αδειοδότησης

Το παρόν υλικό διατίθεται με τους όρους της άδειας χρήσης Creative Commons Αναφορά, Όχι Παράγωγα Έργα Μη Εμπορική Χρήση 4.0 [1] ή μεταγενέστερη, Διεθνής Έκδοση. Εξαιρούνται τα αυτοτελή έργα τρίτων π.χ. φωτογραφίες, διαγράμματα κ.λ.π., τα οποία εμπεριέχονται σε αυτό και τα οποία αναφέρονται μαζί με τους όρους χρήσης τους στο «Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων».



[1] <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>

Ως Μη Εμπορική ορίζεται η χρήση:

- που δεν περιλαμβάνει άμεσο ή έμμεσο οικονομικό όφελος από την χρήση του έργου για το διανομέα του έργου και αδειοδόχο
- που δεν περιλαμβάνει οικονομική συναλλαγή ως προϋπόθεση για τη χρήση ή πρόσβαση στο έργο
- που δεν προσπορίζει στο διανομέα του έργου και αδειοδόχο έμμεσο οικονομικό



Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων

Το Έργο αυτό κάνει χρήση των ακόλουθων έργων:

Εικόνες/Σχήματα/Διαγράμματα/Φωτογραφίες

- Γενική Χημεία. Θεωρία & Εφαρμογές, Μ.Ι. Κονσολάκης, Εκδόσεις ΑΕΝΑΟΣ, 2008



Διατήρηση Σημειωμάτων

Οποιαδήποτε αναπαραγωγή ή διασκευή του υλικού θα πρέπει να συμπεριλαμβάνει:

- το Σημείωμα Αναφοράς
- το Σημείωμα Αδειοδότησης
- τη δήλωση Διατήρησης Σημειωμάτων
- το Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων (εφόσον υπάρχει)

μαζί με τους συνοδευόμενους υπερσυνδέσμους.

