



Πανεπιστήμιο Δυτικής Μακεδονίας  
Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών

---

# Χημεία

## Ενότητα 8: Η θεωρία δεσμού σθένους

Τόλης Ευάγγελος

e-mail: [etolis@uowm.gr](mailto: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

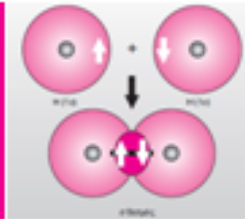


# Κεφάλαιο 8<sup>ο</sup>

---

8

Η θεωρία  
δεσμού σθένους



# Η θεωρία δεσμού σθένους (1/10)

---

- **ΘΕΩΡΙΑ VSERP**: καθορίζει αρκετά ικανοποιητικά τη μοριακή γεωμετρία, έλλειψη όμως πληροφορίας σχετικά με τον τρόπο δημιουργίας των δεσμών!
- **ΘΕΩΡΙΑ Lewis**: αδυνατεί να εξηγήσει την δημιουργία δεσμών σε πολλές περιπτώσεις!



# Η θεωρία δεσμού σθένους (2/10)

---

Για την δημιουργία του χημικού δεσμού (κυρίως του ομοιοπολικού) διατυπώνονται δυο νέες θεωρίες (λαμβάνοντας υπόψη την κβαντομηχανική υπόσταση του ατόμου):

- **Η θεωρία δεσμού σθένους** (Valence Bond Theory).
- **Η θεωρία των μοριακών τροχιακών** (Molecular Orbital Theory).

**Δεν είναι ανταγωνιστικές μεταξύ τους αλλά συμπληρωματικές.**



# Η θεωρία δεσμού σθένους (3/10)

---

Τα βασικότερα σημεία της θεωρίας δεσμού σθένους (VBT) συνοψίζονται στα κάτωθι:

1. Όπως και στην περίπτωση της ηλεκτρονικής θεωρίας του σθένους (κανόνας οκτάδας) **η δημιουργία δεσμών οφείλεται σε κοινά ζεύγη  $e^-$**  τα οποία όμως πλέον υπεισέρχονται με την έννοια των τροχιακών.
2. Τα **άτομα** σε ένα μόριο δεν θεωρούνται μέρος του μορίου αλλά **διατηρούν τον αρχικό τους χαρακτήρα**. Μόνο τα ηλεκτρόνια που συμμετέχουν στην δημιουργία δεσμών (δεσμικά) κινούνται στον ενδιάμεσο χώρο και ανήκουν από κοινού στο μόριο.



# Η θεωρία δεσμού σθένους (4/10)

---

3. Κατά την δημιουργία δεσμού τα **τροχιακά** της **στιβάδας σθένους** του ενός ατόμου **επικαλύπτουν (overlap)** τα **τροχιακά** τις στιβάδας σθένους **του άλλου ατόμου**. Η επικάλυψη αυτή μπορεί να γίνει σε ένα ή περισσότερα ζεύγη τροχιακών των δυο ατόμων. *Η ισχύς του δεσμού που προκύπτει εξαρτάται από την έκταση της επικάλυψης.*
4. Αν στο κάθε τροχιακό που συμμετέχει στο μηχανισμό της επικάλυψης περιέχεται ένα μονήρες  $e^-$ , τότε τα  $e^-$  που έχουν αντιπαράλληλο spin δημιουργούν ζεύγη ηλεκτρονίων που ανήκουν και στα δυο άτομα και έλκονται από τους πυρήνες και των δυο ατόμων (δημιουργία χημικού δεσμού). **Ο συνολικός αριθμός  $e^-$  στα δυο τροχιακά που επικαλύπτονται δεν μπορεί να υπερβαίνει τα δυο.**





# Η θεωρία δεσμού σθένους (5/10)

---

**Η κυριότερη διαφορά της θεωρίας του δεσμού σθένους με την θεωρία των Μοριακών Τροχιακών:**

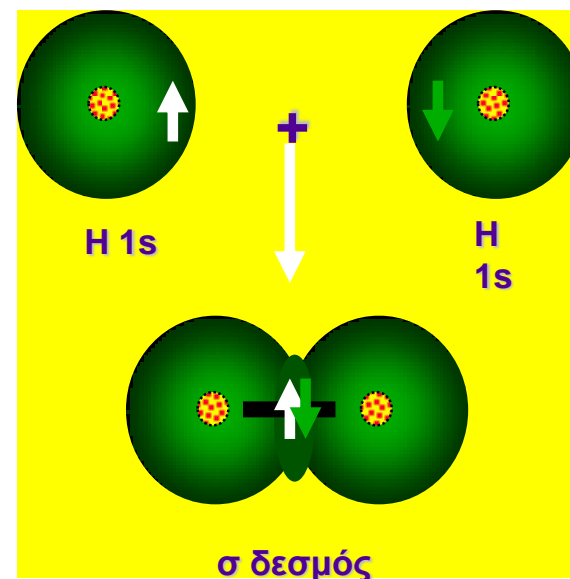
*Η θεωρία των MO θεωρεί ολόκληρο το μόριο σαν μια μονάδα στην οποία ανήκουν όλα τα ηλεκτρόνια των ατομικών τροχιακών που συγχωνεύτηκαν και τα οποία κινούνται πλέον σε ένα ενιαίο χώρο υπό την επίδραση όλων των πυρήνων.*



# Η θεωρία δεσμού σθένους (6/10)

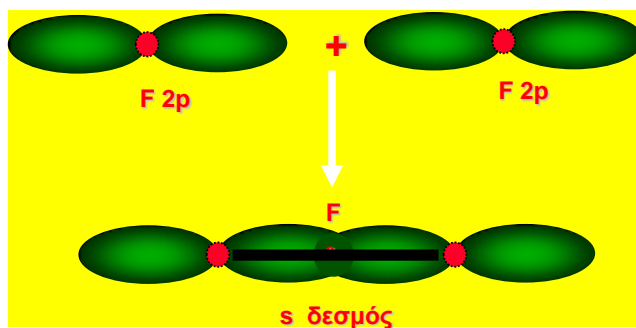
- Πχ, πως σχηματίζεται το μόριο του  $H_2$  από δυο άτομα  $H$  με βάση όσα αναφέρθηκαν παραπάνω.

Κάθε άτομο  $H$  έχει ηλεκτρονιακή διαμόρφωση  $1s^1$ . Προκειμένου να **σχηματιστεί δεσμός** θα πρέπει τα ατομικά **τροχιακά** των δυο ατόμων  $H$  να **επικαλυφθούν** έτσι ώστε να προκύψει ένα ζεύγος ηλεκτρονίων το οποίο θα έλκεται από τους δυο πυρήνες  $H$  και το οποίο ουσιαστικά θα αποτελεί τον ομοιοπολικό δεσμό.

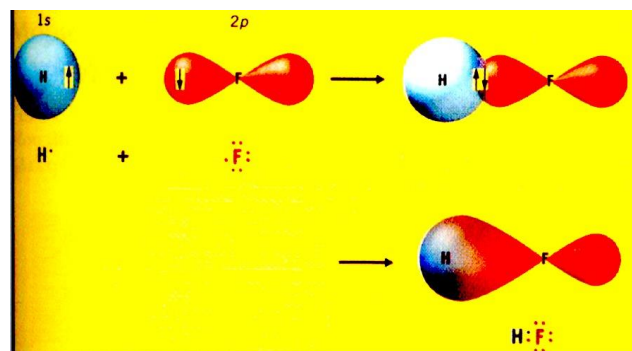


# Η θεωρία δεσμού σθένους (7/10)

- Ο ομοιοπολικός δεσμός που προκύπτει από την επικάλυψη των  $s$  τροχιακών, κατά μήκος του άξονα που συνδέει τους πυρήνες των δύο ατόμων, ονομάζεται  $\sigma$  (σίγμα) δεσμός. Το ίδιο είδος δεσμού μπορεί να προκύψει και από **επικαλύψεις  $s-p$  και  $p-p$  τροχιακών κατά τον άξονά τους**, όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα.



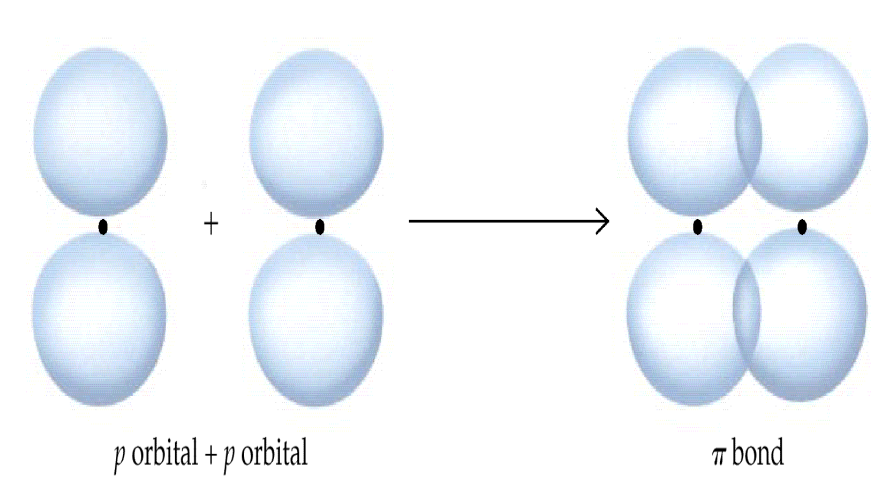
Επικάλυψη  $p-p$  και δημιουργία  $\sigma$  δεσμού στο μόριο του φθορίου ( $F_2$ ).



Επικάλυψη  $s-p$  και δημιουργία  $\sigma$  δεσμού στο μόριο του φθορίου ( $HF$ ).

# Η θεωρία δεσμού σθένους (8/10)

- Αν τα ατομικά τροχιακά **συγχωνευτούν** όχι κατά μήκος του άξονά τους αλλά **πλευρικά**, τότε οδηγούμαστε και πάλι στην δημιουργία δεσμών οι **οποίοι ονομάζονται π (πι) δεσμοί**. Οι π δεσμοί είναι ασθενέστεροι από τους σ δεσμούς αφού στην τελευταία περίπτωση επιτυγχάνεται μεγαλύτερη αλληλοεπικάλυψη.



*Δημιουργία π δεσμού κατά την πλευρική επικάλυψη p ατομικών τροχιακών*

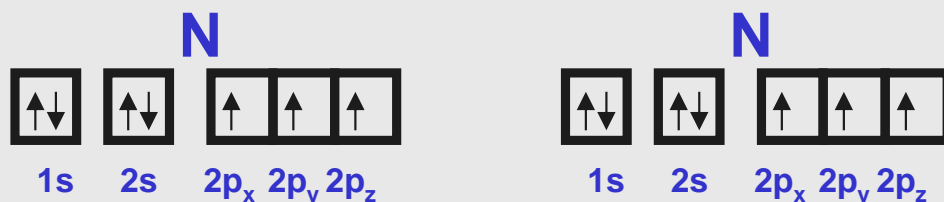
# Η θεωρία δεσμού σθένους (9/10)

## Η μεθοδολογία που ακολουθείται γενικώς περιλαμβάνει δυο στάδια.

– Γράφουμε τις ηλεκτρονιακές διαμορφώσεις των ατόμων που συμμετέχουν στην δημιουργία δεσμών.

– Οδηγούμαστε στο σχηματισμό δεσμών μέσω της επικάλυψης τροχιακών που περιέχουν μονήρη ηλεκτρόνια. Η επικάλυψη οδηγεί στην δημιουργία  $\sigma$  και  $\pi$  δεσμών.

Πχ. Για να ερμηνεύσουμε την δημιουργία δεσμών στο μόριο του αζώτου ( $N_2$ ):



Κάθε ΑΟ αλληλεπικαλύπτεται με το αντίστοιχο του άλλου ατόμου με αποτέλεσμα να προκύψουν τελικά ένας  $\sigma$  δεσμός από την επικάλυψη 2 p τροχιακών κατά τον άξονα τους και 2  $\pi$  δεσμοί από την πλευρική επικάλυψη των άλλων p τροχιακών. Στο  $N_2$  αναπτύσσεται δηλ. ένας τριπλός δεσμός ο οποίος συνίσταται από 1  $\sigma$  και 2  $\pi$  δεσμούς.



# Η θεωρία δεσμού σθένους (10/10)

---

Με βάση την **θεωρία δεσμού σθένους**, ο αριθμός των **δεσμών** που δύναται να σχηματίσει ένα άτομο είναι **ίσος** με τον αριθμό των **μονήρων ηλεκτρονίων** τις **στιβάδας σθένους** του ατόμου αυτού.



---

# Τέλος Ενότητας



Ευρωπαϊκή Ένωση  
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



# 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.

