

ΥΛΙΚΑ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗΣ ΚΑΙ ΔΙΑΤΑΞΕΙΣ

Μάθημα II

Πρασά Βία

Κβαντικοί αριθμοί και ατομικά τροχιακά

Οι τρεις από τους κβαντικούς αριθμούς προκύπτουν από τη μαθηματική επίλυση της εξίσωσης του Schrödinger.

Ένας τέταρτος κβαντικός αριθμός (ο m_s) αναφέρεται σε μια μαγνητική ιδιότητα των ηλεκτρονίων που λέγεται spin.

Πώς χαρακτηρίζονται οι τρεις πρώτοι κβαντικοί αριθμοί;

Κύριος κβαντικός αριθμός (n)

Δευτερεύων (ή αζιμουθιακός) κβαντικός αριθμός (l)

Μαγνητικός κβαντικός αριθμός m_l

1. Κύριος κβαντικός αριθμός (n)

Επιτρεπτές τιμές: $1, 2, 3, \dots - \infty$

Καθορίζει την **ενέργεια** του e και το **μέγεθος** του τροχιακού.

Φλοιός ή στιβάδα: τροχιακά με τον ίδιο n .

2. Δευτερεύων (ή αζιμουθιακός) κβαντικός αριθμός (ℓ)

Επιτρεπτές τιμές: $0, 1, 2, \dots - (n - 1)$

Καθορίζει το **σχήμα** του τροχιακού.

Υποφλοιός (ή υποστιβάδα): τροχιακά με τον ίδιο ℓ .

Χαρακτηρισμός υποφλοιών:

τιμή του ℓ	0, 1, 2, 3, 4, 5, ...
-----------------	-----------------------

χαρακτηρισμός υποφλοιού	s, p, d, f, g, h, \dots
-------------------------	---------------------------

3. Μαγνητικός κβαντικός αριθμός m_ℓ

Επιτρεπτές τιμές: από $-\ell$ έως $+\ell$

Καθορίζει τον **προσανατολισμό** του τροχιακού στο χώρο.

Επιτρεπτές τιμές κβαντικών αριθμών και ατομικά τροχιακά

n	ℓ	Υποφλοιός	m_ℓ	Αριθμός τροχιακών σε έναν υποφλοιό	Συνολικός αριθμός τροχιακών σε έναν φλοιό
1	0	1s	0	1	1
2	0	2s	0	1	
2	1	2p	-1, 0, +1	3	4
3	0	3s	0	1	
3	1	3p	-1, 0, +1	3	
3	2	3d	-2, -1, 0, +1, +2	5	9
4	0	4s	0	1	
4	1	4p	-1, 0, +1	3	
4	2	4d	-2, -1, 0, +1, +2	5	
4	3	4f	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	7	16

Ο τέταρτος κβαντικός αριθμός

Υπάρχει όμως και ένας τέταρτος κβαντικός αριθμός, ο m_s , ο κβαντικός αριθμός του spin του ηλεκτρονίου.

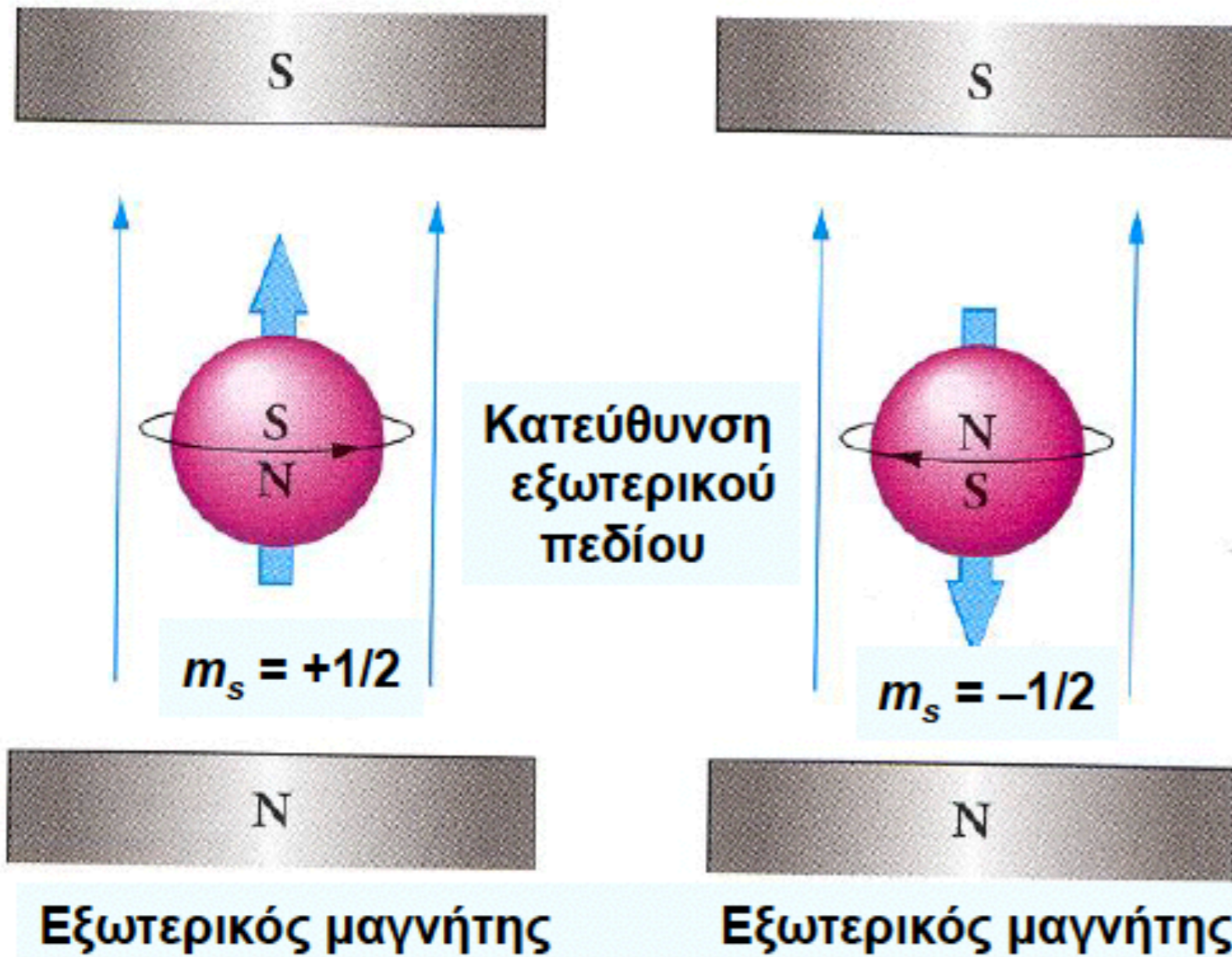
Πειράματα με τα φάσματα εκπομπής ατόμων υδρογόνου και νατρίου έδειξαν ότι οι γραμμές αυτών των φασμάτων μπορούσαν να υποστούν σχάση, δηλαδή μία γραμμή να χωριστεί σε δύο, με εφαρμογή εξωτερικού μαγνητικού πεδίου

Εξήγηση: Το ηλεκτρόνιο, ως σωματίδιο, συμπεριφέρεται όπως μία φορτισμένη σφαίρα, η οποία περιστρέφεται γύρω από έναν άξονα που διέρχεται από το κέντρο της.

Λόγω αυτής της αυτοστροφής, η οποία ονομάζεται spin του ηλεκτρονίου, παράγεται ένα μαγνητικό πεδίο.

Έτσι το ηλεκτρόνιο συμπεριφέρεται ως ένας μικροσκοπικός μαγνήτης.

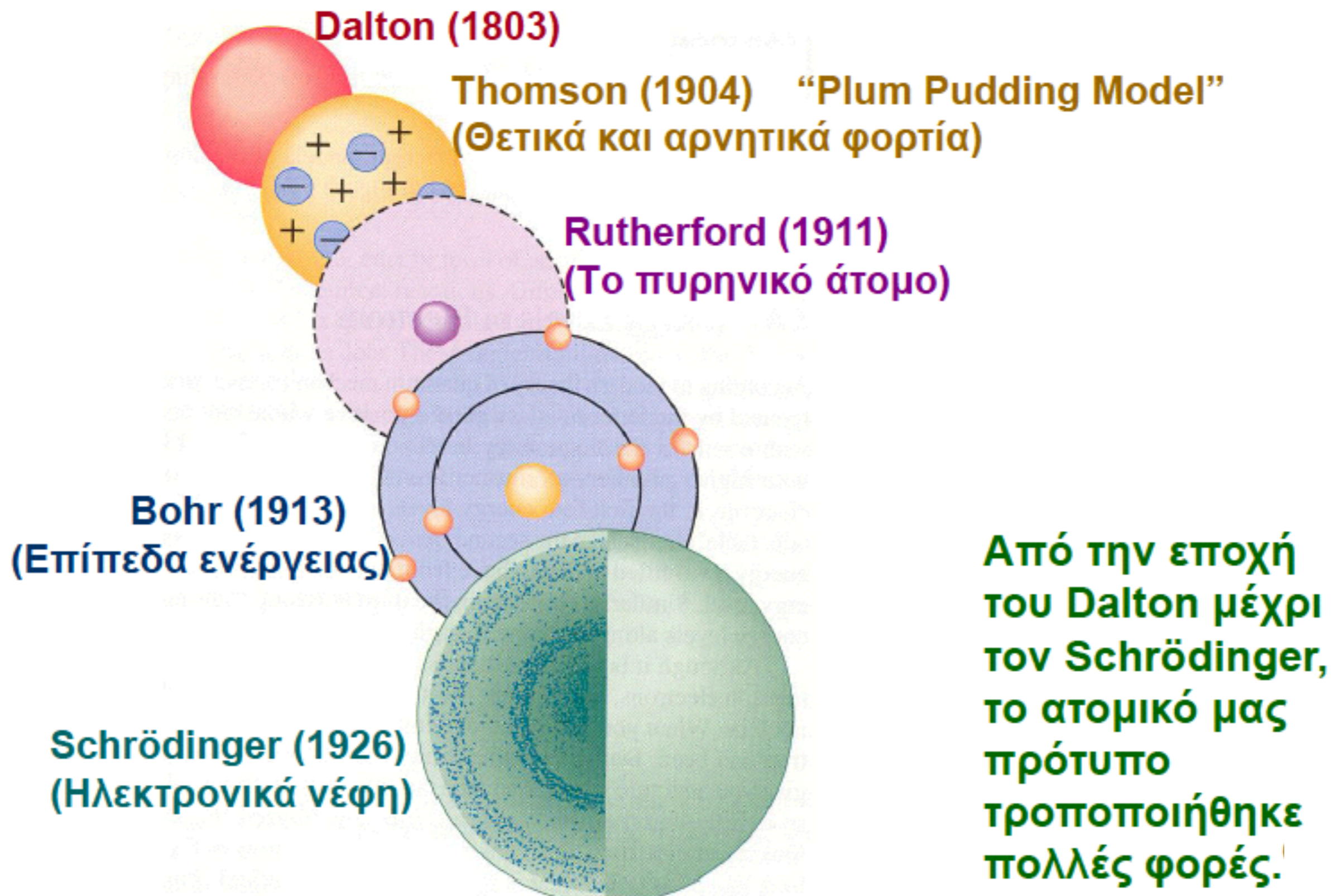
Πώς ερμηνεύεται το spin του ηλεκτρονίου



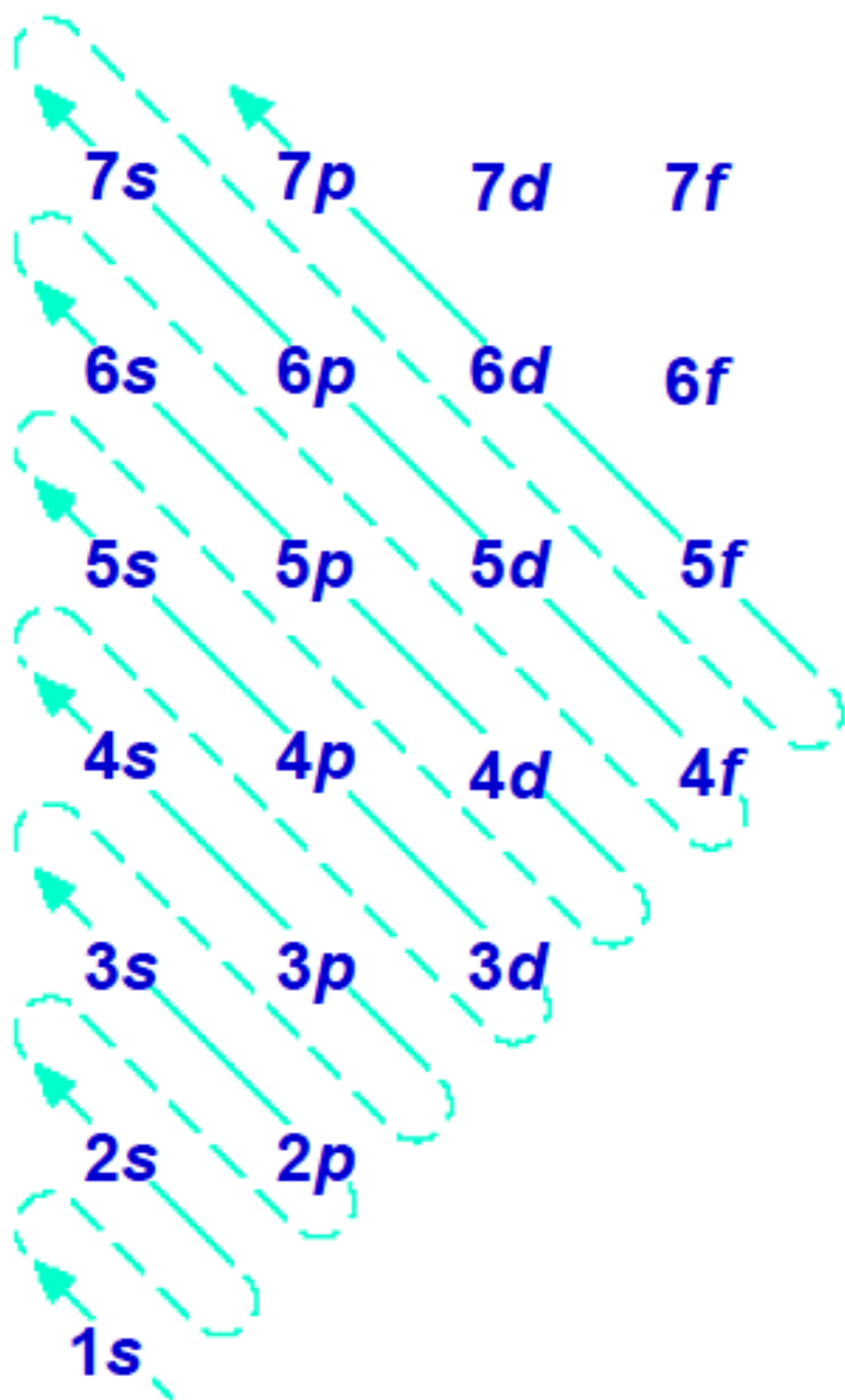
Λόγω αυτοστροφής (spin) του e παράγεται ένα μαγνητικό πεδίο, η κατεύθυνση του οποίου εξαρτάται από τη φορά του spin (δεξιόστροφο ή αριστερόστροφο).

Συμβατικά, το δεξιόστροφο spin χαρακτηρίζεται από τον **μαγνητικό κβαντικό αριθμό του spin $+1/2$** , ενώ το αριστερόστροφο spin από τον **μαγνητικό κβαντικό αριθμό του spin $-1/2$** .

...Η πορεία του ατομικού προτύπου



Μνημονικό διάγραμμα για τη σειρά δόμησης



(α) Γράφουμε τους υποφλοιούς σε οριζόντιες σειρές, με κάθε σειρά να έχει υποφλοιούς του ίδιου n .

(β) Μέσα σε κάθε σειρά τοποθετούμε τους υποφλοιούς κατά αυξανόμενο l .

(γ) Ξεκινώντας με τον υποφλοιό $1s$, κατασκευάζουμε μια σειρά διαγωνίων, όπως δείχνει το σχήμα.

(δ) Η σειρά δόμησης είναι η σειρά κατά την οποία αυτές οι διαγώνιες συναντούν τους υποφλοιούς.

Η απαγορευτική αρχή του Pauli

1. Ποια αρχή διατύπωσε ο Pauli, προκειμένου να εξηγήσει τα φάσματα εκπομπής πολυηλεκτρονικών ατόμων εντός μαγνητικού πεδίου;

Δύο ηλεκτρόνια σε ένα άτομο δεν μπορούν να έχουν και τους τέσσερις κβαντικούς αριθμούς ίδιους. (Απαγορευτική αρχή του Pauli)

2. Ποια είναι η σημαντικότερη συνέπεια της παραπάνω αρχής;

Επειδή οι δυνατές τιμές του m_s είναι δύο ($+1/2$ και $-1/2$), ένα τροχιακό μπορεί να χωρέσει το πολύ δύο ηλεκτρόνια, τα οποία όμως θα πρέπει να έχουν αντίθετα spin

Η απαγορευτική αρχή του Pauli

3. Ποιο συμπέρασμα συνάγεται, ως προς τη χωρητικότητα των υποφλοιών με ηλεκτρόνια, από μια τέτοια διατύπωση;

Ο μέγιστος αριθμός των e που μπορεί να χωρέσει ένας υποφλοιός είναι διπλάσιος από τον αριθμό των τροχιακών που διαθέτει \Rightarrow

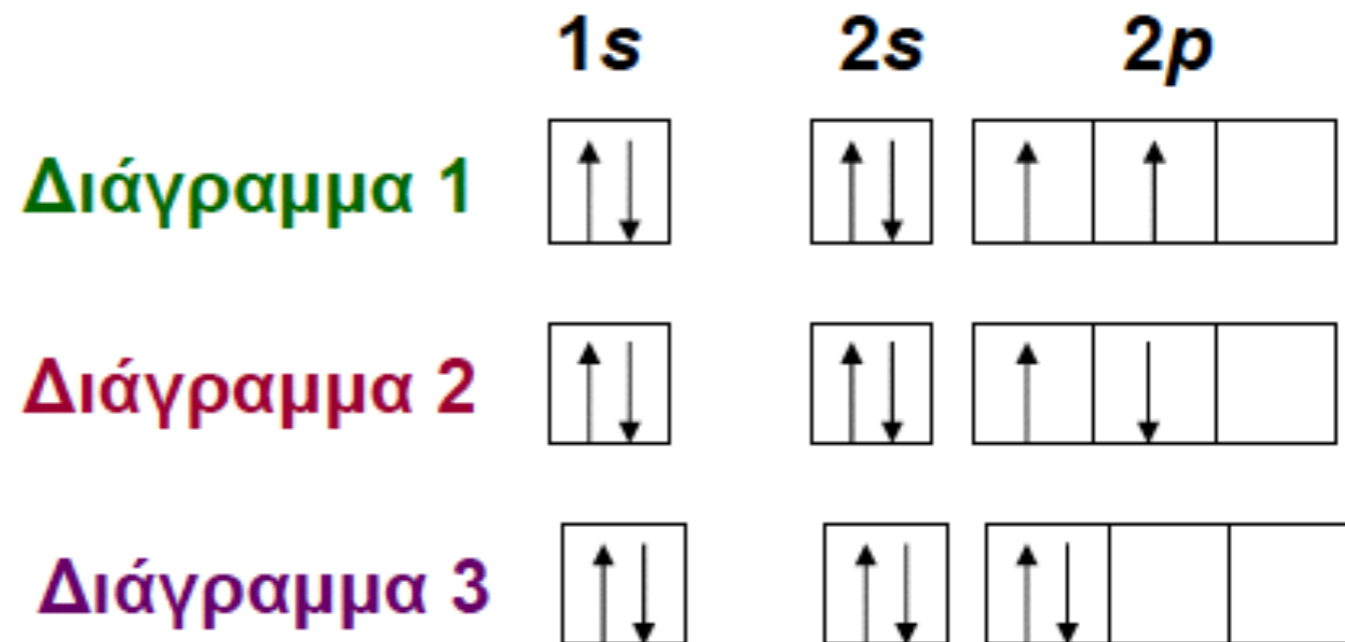
Υποφλοιός	Αριθμός τροχιακών	Μέγιστος αριθμός e
s ($l = 0$)	1	2
p ($l = 1$)	3	6
d ($l = 2$)	5	10
f ($l = 3$)	7	14

Ο κανόνας του Hund (ή της μέγιστης πολλαπλότητας του spin)

Ποιον εμπειρικό κανόνα διατύπωσε ο Hund (1927), βάσει του οποίου λαμβάνουμε την ενεργειακά χαμηλότερη διάταξη των ηλεκτρονίων ενός υποφλοιού;

Όταν ηλεκτρόνια καταλαμβάνουν τροχιακά της ίδιας ενέργειας, σταθερότερη είναι εκείνη η ηλεκτρονική διάταξη που δίνει το μέγιστο συνολικό spin.

Για το άτομο C ($Z = 6$), με δομή θεμελιώδους κατάστασης $1s^2 2s^2 2p^2$, ποιο διάγραμμα εκφράζει τη σταθερότερη κατάσταση του ατόμου C;



Στοιχεία κύριων ομάδων συμπληρώνεται ο υποφλοιός s

Στοιχεία κύριων ομάδων συμπληρώνεται ο υποφλοιός p

Περίοδος

1
H
 $1s^1$
Ατομικός αριθμός
Σύμβολο
Δομή φλοιού σθένους

Μεταβατικά μέταλλα
συμπληρώνεται ο υποφλοιός d

Εσωτερικά μεταβατικά μέταλλα
συμπληρώνεται ο υποφλοιός f

1	IA 1 H $1s^1$														VIIIA 2 He $1s^2$			
2	3 Li $2s^1$	IIA 4 Be $2s^2$	Μεταβατικά μέταλλα συμπληρώνεται ο υποφλοιός d										5 B $2s^2 2p^1$	6 C $2s^2 2p^2$	7 N $2s^2 2p^3$	8 O $2s^2 2p^4$	9 F $2s^2 2p^5$	10 Ne $2s^2 2p^6$
3	11 Na $3s^1$	12 Mg $3s^2$											13 Al $3s^2 3p^1$	14 Si $3s^2 3p^2$	15 P $3s^2 3p^3$	16 S $3s^2 3p^4$	17 Cl $3s^2 3p^5$	18 Ar $3s^2 3p^6$
4	19 K $4s^1$	20 Ca $4s^2$	21 Sc $3d^1 4s^2$	22 Ti $3d^2 4s^2$	23 V $3d^3 4s^2$	24 Cr $3d^5 4s^1$	25 Mn $3d^5 4s^2$	26 Fe $3d^6 4s^2$	27 Co $3d^7 4s^2$	28 Ni $3d^8 4s^2$	29 Cu $3d^{10} 4s^1$	30 Zn $3d^{10} 4s^2$	31 Ga $4s^2 4p^1$	32 Ge $4s^2 4p^2$	33 As $4s^2 4p^3$	34 Se $4s^2 4p^4$	35 Br $4s^2 4p^5$	36 Kr $4s^2 4p^6$
5	37 Rb $5s^1$	38 Sr $5s^2$	39 Y $4d^1 5s^2$	40 Zr $4d^2 5s^2$	41 Nb $4d^4 5s^1$	42 Mo $4d^5 5s^1$	43 Tc $4d^5 5s^2$	44 Ru $4d^7 5s^1$	45 Rh $4d^8 5s^1$	46 Pd $4d^{10}$	47 Ag $4d^{10} 5s^1$	48 Cd $4d^{10} 5s^2$	49 In $5s^2 5p^1$	50 Sn $5s^2 5p^2$	51 Sb $5s^2 5p^3$	52 Te $5s^2 5p^4$	53 I $5s^2 5p^5$	54 Xe $5s^2 5p^6$
6	55 Cs $6s^1$	56 Ba $6s^2$	57 La⁺ $5d^1 6s^2$	72 Hf $5d^2 6s^2$	73 Ta $5d^3 6s^2$	74 W $5d^4 6s^2$	75 Re $5d^5 6s^2$	76 Os $5d^6 6s^2$	77 Ir $5d^7 6s^2$	78 Pt $5d^9 6s^1$	79 Au $5d^{10} 6s^1$	80 Hg $5d^{10} 6s^2$	81 Tl $6s^2 6p^1$	82 Pb $6s^2 6p^2$	83 Bi $6s^2 6p^3$	84 Po $6s^2 6p^4$	85 At $6s^2 6p^5$	86 Rn $6s^2 6p^6$
7	87 Fr $7s^1$	88 Ra $7s^2$	89 Ac⁺ $6d^1 7s^2$	104 Rf $6d^2 7s^2$	105 Db $6d^3 7s^2$	106 Sg $6d^4 7s^2$	107 Bh $6d^5 7s^2$	108 Hs $6d^6 7s^2$	109 Mt $6d^7 7s^2$	110 Lr $6d^8 7s^2$	111 Ct $6d^9 7s^2$	112 Cn $6d^{10} 7s^2$						

*Λανθανίδια

**Ακτινίδια

58 Ce $4f^1 5d^1 6s^2$	59 Pr $4f^3 6s^2$	60 Nd $4f^4 6s^2$	61 Pm $4f^5 6s^2$	62 Sm $4f^6 6s^2$	63 Eu $4f^7 6s^2$	64 Gd $4f^7 5d^1 6s^2$	65 Tb $4f^9 6s^2$	66 Dy $4f^{10} 6s^2$	67 Ho $4f^{11} 6s^2$	68 Er $4f^{12} 6s^2$	69 Tm $4f^{13} 6s^2$	70 Yb $4f^{14} 6s^2$	71 Lu $4f^{14} 5d^1 6s^2$
90 Th $6d^2 7s^2$	91 Pa $5f^2 6d^1 7s^2$	92 U $5f^3 6d^1 7s^2$	93 Np $5f^4 6d^1 7s^2$	94 Pu $5f^6 7s^2$	95 Am $5f^7 7s^2$	96 Cm $5f^7 6d^1 7s^2$	97 Bk $5f^9 7s^2$	98 Cf $5f^{10} 7s^2$	99 Es $5f^{11} 7s^2$	100 Fm $5f^{12} 7s^2$	101 Md $5f^{13} 7s^2$	102 No $5f^{14} 7s^2$	103 Lr $5f^{14} 6d^1 7s^2$

Μοριακή δομή

- **Μεμονωμένα άτομα:** Μόνο τα ευγενή αέρια
- **Μόρια:** Τα υπόλοιπα άτομα σχηματίζουν μόρια
 - Γιατί; Διότι η ολική ενέργεια ενός ευσταθούς μορίου είναι μικρότερη από την ολική ενέργεια των μεμονωμένων ατόμων που αποτελούν το μόριο.
- **Μοριακή συμπεριφορά:** Πολυπλοκότερη των ατόμων. Πέραν των ηλεκτρονικών ενεργειακών καταστάσεων τα μόρια εμπεριέχουν δονητικούς και περιστροφικούς βαθμούς ελευθερίας με αντίστοιχες ενεργειακές καταστάσεις. Ως αποτέλεσμα τα μοριακά φάσματα πολυπλοκότερα αυτών των ατόμων.
- **Μοριακός Δεσμός:** Η ελκτική δύναμη μεταξύ ατόμων σε ένα μόριο είναι πρωτίστως ηλεκτροστατική. Ωστόσο οι μηχανισμοί διαφέρουν κατά περίπτωση.

Ιοντικός Δεσμός

Φύση του δεσμού: Η ηλεκτροστατική έλξη μεταξύ αντίθετα φορτισμένων ιόντων

- Ο ιοντικός δεσμός από τη φύση του φτιάχνει ηλεκτρικά δίπολα. Επομένως τα μόρια των ιοντικών δεσμών εμφανίζουν μόνιμη διπολική ροπή. Είναι πολικά μόρια.

Παράδειγμα: Το μόριο του NaCl

Ηλεκτρονική διάταξη Na: $1s^2 2s^2 2p^6 3s$

Η αποβολή του 3s ηλεκτρονίου οδηγεί στην σταθερότερη ηλεκτρονική διάταξη $1s^2 2s^2 2p^6$ με συμπληρωμένο το φλοιό $n=2$. Η ενέργεια που απαιτείται (ιονισμός) είναι ίση με $E(\text{Na}^+) = 5,1 \text{ eV}$.

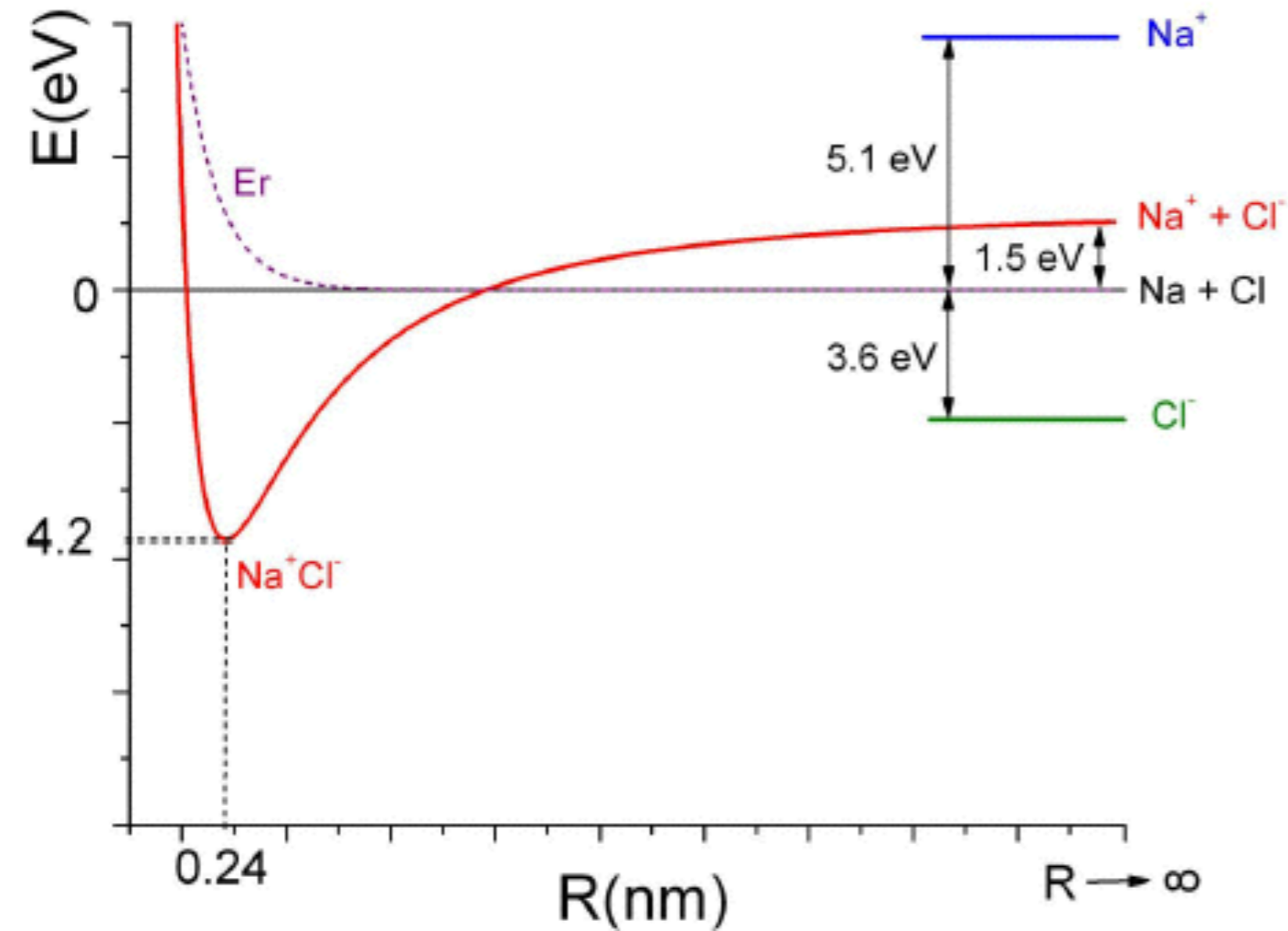
Ηλεκτρονική διάταξη Cl: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$

Η σύλληψη ενός ηλεκτρονίου στην 3p κατάσταση οδηγεί στην σταθερότερη ηλεκτρονική διάταξη $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ με συμπληρωμένο το φλοιό $n=3$. Η ενέργεια που ελευθερώνεται (ηλεκτρονική συγγένεια) είναι ίση με $E(\text{Cl}^-) = 3,6 \text{ eV}$.

Η συνολικά απαιτούμενη ενέργεια για τον σχηματισμό ενός ιόντος Na^+ κι ενός ιόντος Cl^- είναι $5,1 - 3,6 = 1,5 \text{ eV}$. Το μόριο του NaCl θα σχηματιστεί από την ηλεκτροστατική έλξη των Na^+ και Cl^- και θα ισορροπήσει σε απόσταση $R_0 = 2,4 \text{ nm}$.

Ιοντικός Δεσμός

Υπολογισμός Ενέργειας Σύνδεσης
στη θέση ισορροπίας



$$E_o = E_c + E_r + E(\text{Na}^+) + E(\text{Cl}^-)$$

$$E_c = -k \frac{e^2}{R_o} = -5.99 \text{ eV}$$

$$E(\text{Na}^+) = 5.1 \text{ eV}$$

$$E(\text{Cl}^-) = -3.6 \text{ eV}$$

$$E_r = ?$$

$$E_o = (-4.49 + E_r) \text{ eV}$$

$$E_o (\text{πειραμ. τιμή}) = -4.2 \text{ eV}$$

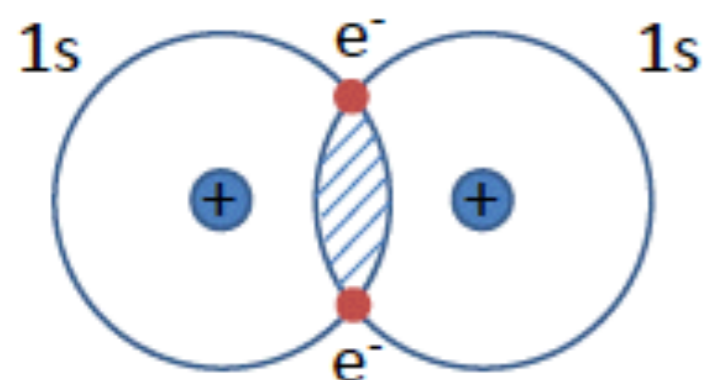
$$E_r = 0.29 \text{ eV}$$

Οφείλεται στην άπωση των εσωτερικών ηλεκτρονίων όταν πλησιάσουν οι πυρήνες

Ομοιοπολικός Δεσμός

Φύση του δεσμού: Το από κοινού μοίρασμα των ηλεκτρονίων των ατόμων που σχηματίζουν το μόριο

Παράδειγμα: Το μόριο του H_2



➤ Η πιθανότητα να βρεθούν τα δυο ηλεκτρόνια στην μεταξύ των δυο πυρήνων περιοχή είναι αρκετά μεγάλη. Αυτή η ηλεκτρονική πυκνότητα είναι η αιτία των εκατέρωθεν έλξεων των δυο πυρήνων και συνεπώς της αμοιβαίας έλξης των δυο ατόμων.

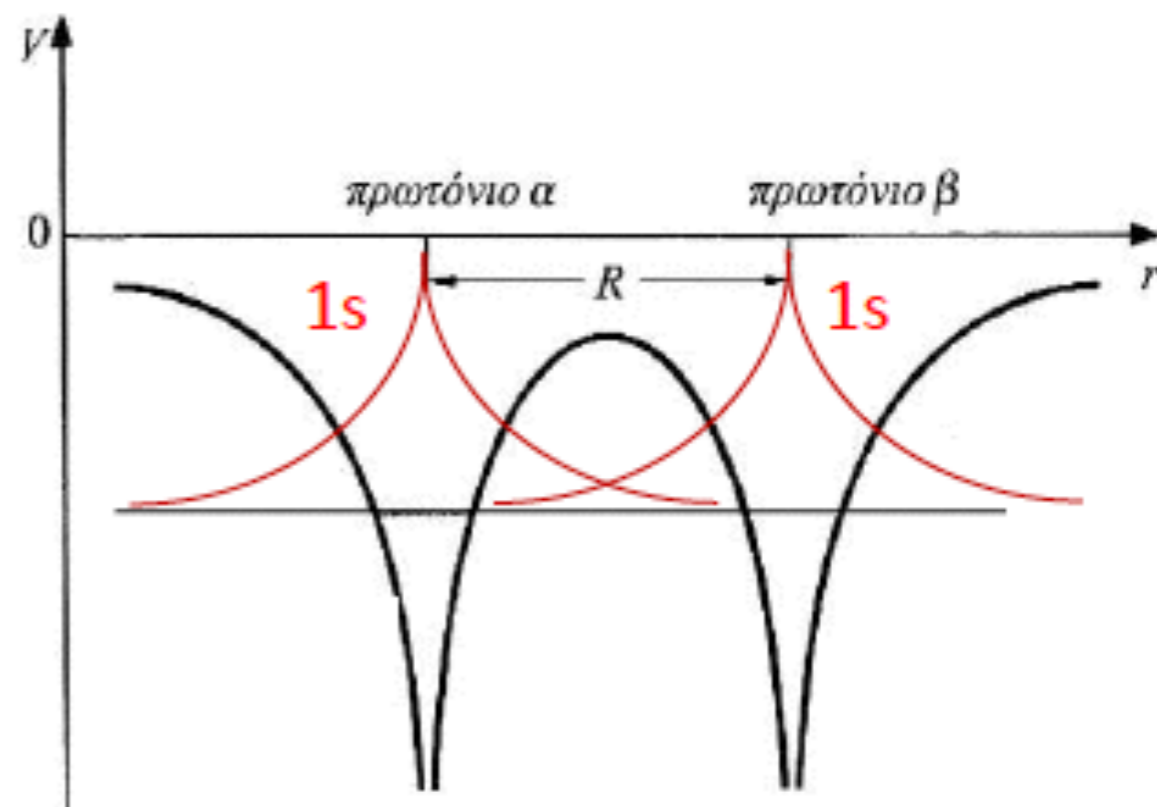
➤ Από την σκοπιά της κβαντομηχανικής τα δυο ηλεκτρόνια βλέπουν και τα δυο πυρηνικά φορτία σε κοντινές αποστάσεις από αυτά και προσαρμόζουν κατάλληλα τις κυματοσυναρτήσεις τους (αλληλεπικάλυψη ατομικών κυματοσυναρτήσεων). Με αυτόν τον τρόπο προκύπτουν τα λεγόμενα μοριακά τροχιακά.

Ομοιοπολικός Δεσμός

Ο μηχανισμός του δεσμού: Το φαινόμενο σήραγγας

Παράδειγμα: Το ιόν του μοριακού υδρογόνου H_2^+

- Τα δύο πρωτόνια μοιράζονται το ίδιο ηλεκτρόνιο χαμηλώνοντας έτσι την ολική ενέργειά τους συγκριτικά με το σύστημα $H + H^+$.
- Το μοίρασμα του ηλεκτρονίου επιτυγχάνεται μέσω του φαινομένου της σήραγγας μεταξύ των δυο πηγαδιών δυναμικού των δυο πρωτονίων.
- Η πιθανότητα και κατ' επέκταση ο χρόνος του φαινομένου της σήραγγας εξαρτάται από την απόσταση των πυρήνων. Για παράδειγμα
 $R = 0.1 \text{ nm}$, $t = 10^{-15} \text{ sec}$
 $R = 1.0 \text{ nm}$, $t = 1 \text{ sec}$! → Μη δέσμια κατάσταση



- Δεδομένου ότι το μέγεθος της 1s κυματοσυνάρτησης είναι $\sim 0.5 \text{ nm}$ (ακτίνα Bohr) συμπεραίνουμε πως η δέσμια κατάσταση του μορίου απαιτεί ικανοποιητική αλληλεπικάλυψη των ατομικών κυματοσυναρτήσεων

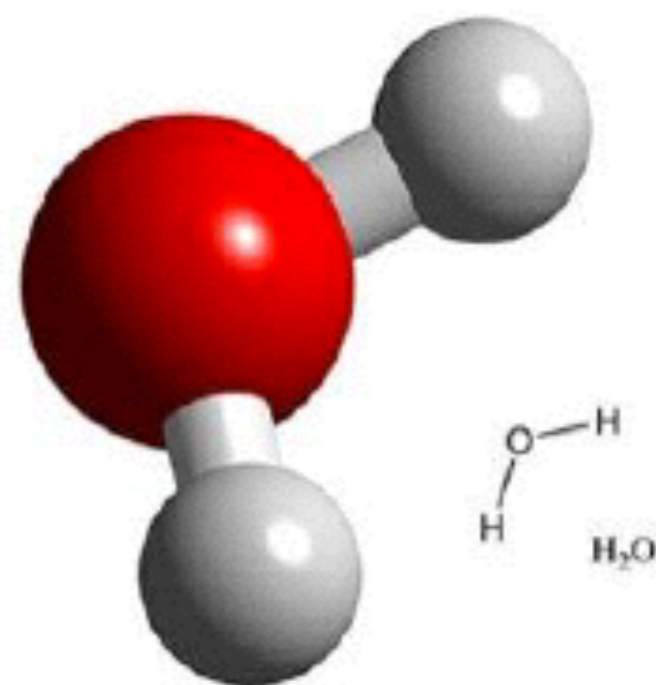
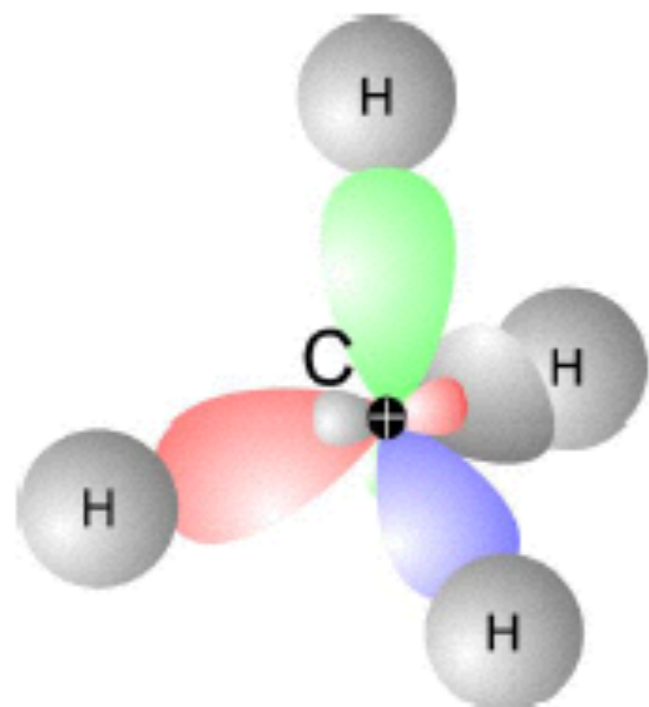
➤ Γιατί το μόριο H_3 δεν είναι σταθερό?

Με βάση τα όσα αναφέραμε τα δυο ηλεκτρόνια της θεμελιώδους κατάστασης του H_2 έχουν αντιπαράλληλα σπιν. Ένα τρίτο ηλεκτρόνιο είναι αδύνατο να προστεθεί στην βασική $1s$ κατάσταση λόγω της απαγορευτικής αρχής. Επομένως θα πρέπει να καταλάβει την πρώτη διεγερμένη κατάσταση με αποτέλεσμα η ενέργεια σύνδεσης του μορίου πλέον να μην είναι αρνητική και το σύστημα μη-ευσταθές.

➤ Γιατί το μόριο του νερού H_2O είναι σταθερό?

Το άτομο του οξυγόνου χρειάζεται δυο $2p$ ηλεκτρόνια για να συμπληρώσει την εξωτερική στιβάδα του. Επομένως μπορεί να μοιραστεί, μέσω ομοιοπολικού δεσμού, δυο από τα p ηλεκτρόνιά του με ένα από τα s ηλεκτρόνια του υδρογόνου χωρίς να παραβιάζεται η απαγορευτική αρχή σε καμία περίπτωση. Η ενέργεια σύνδεσης είναι μεγαλύτερη αυτής των μεμονομένων ατόμων και κατά συνέπεια το μοριακό σύστημα προτιμητέο.

➤ Το μόριο του μεθανίου CH_4

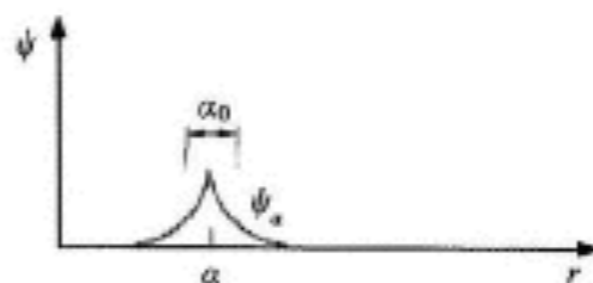


Ομοιοπολικός Δεσμός

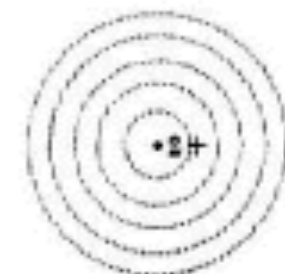
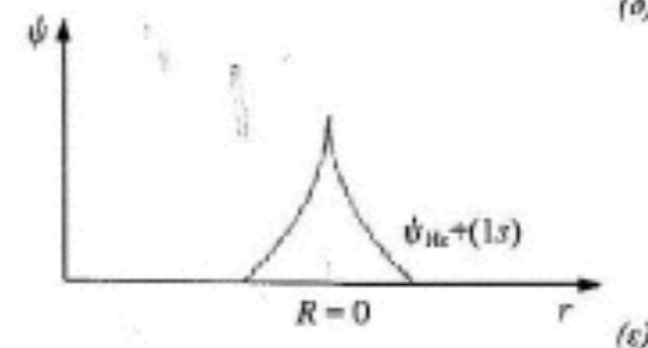
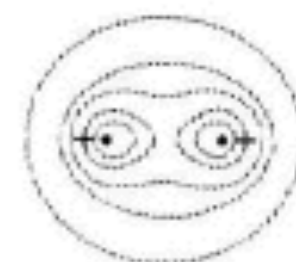
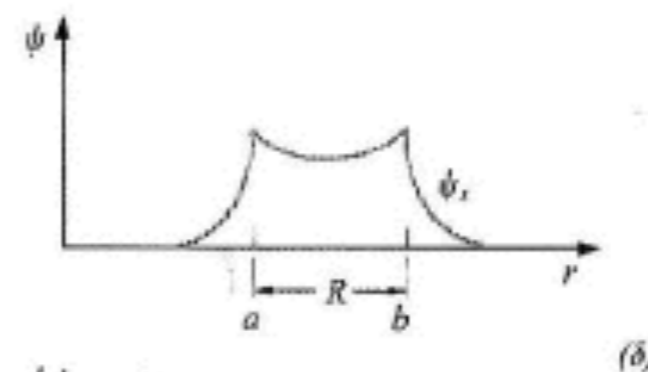
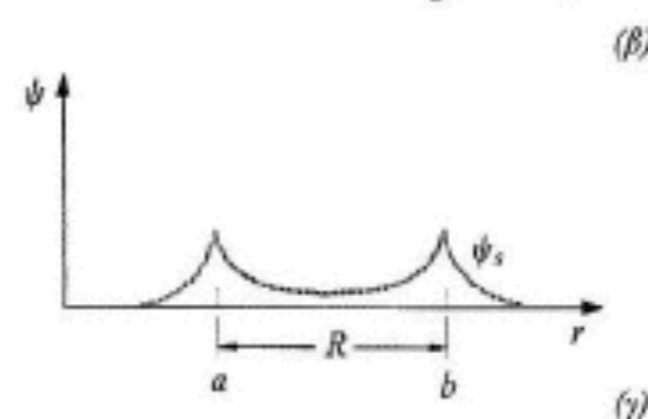
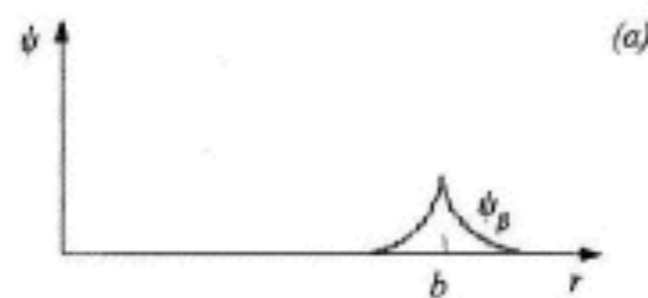
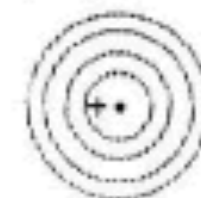
Η χωρικά συμμετρική κυματοσυνάρτηση του H_2^+

$$\Psi_S = \Psi_{100}(\bar{r}) + \Psi_{100}(\bar{r} - \bar{R})$$

- $R \gg \alpha_0$: Η κυματοσυνάρτηση κοντά στους δυο πυρήνες θα μοιάζει με την 1s κυματοσυνάρτηση του υδρογόνου. Επομένως το συμμετρικό τους άθροισμα θα είναι $\Psi = \Psi_\alpha(1s) + \Psi_\beta(1s)$. {σχήματα (α) και (β)}
- $R \rightarrow 0$: Η κυματοσυνάρτηση μοιάζει με την 1s κυματοσυνάρτηση του ιόντος του ηλίου, δηλ. $\Psi = \Psi_{He^+}(1s)$. {σχήμα (ε)}
- $R \sim \alpha_0$: Η κυματοσυνάρτηση μοιάζει με αυτήν του σχήματος (δ). Υπάρχει αυξημένη πιθανότητα να βρούμε το ηλεκτρόνιο στο χώρο μεταξύ των πυρήνων. Αυτό το πλεόνασμα αρνητικού φορτίου μεταξύ των πυρήνων δημιουργεί την έλξη μεταξύ τους. Η έλξη αυτή υπερβαίνει τις απωστικές δυνάμεις των πυρηνικών φορτίων, με αποτέλεσμα τη δημιουργία δέσμιας κατάστασης.



Καμπύλες σταθερών ηλεκτρονιακών πιθανοτήτων



Ομοιοπολικός Δεσμός

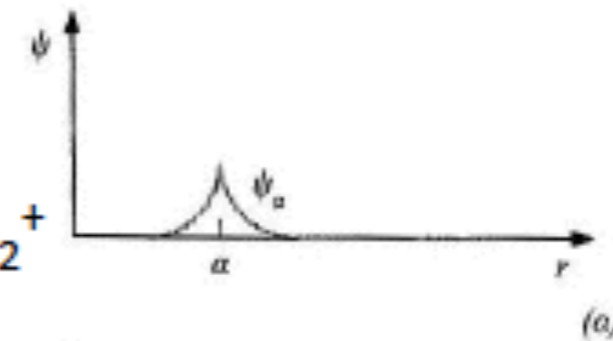
Η χωρικά αντισυμμετρική κυματοσυνάρτηση του H_2^+

$$\Psi_A = \Psi_{100}(\bar{r}) - \Psi_{100}(\bar{r} - \bar{R})$$

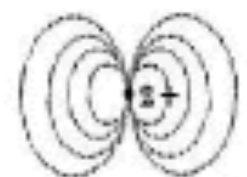
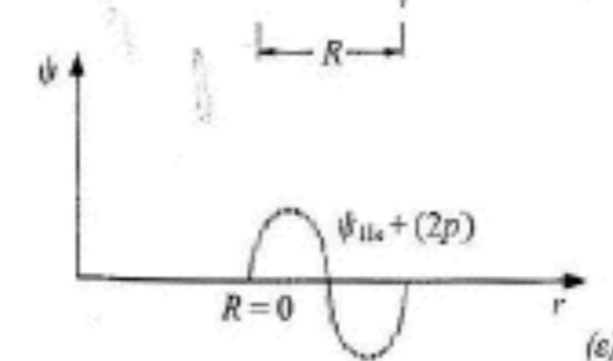
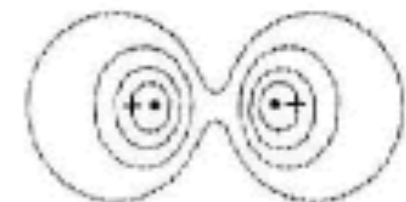
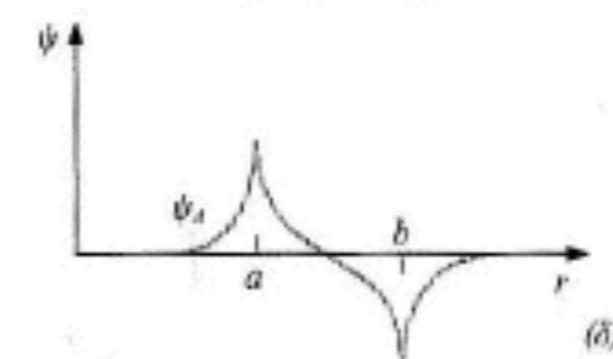
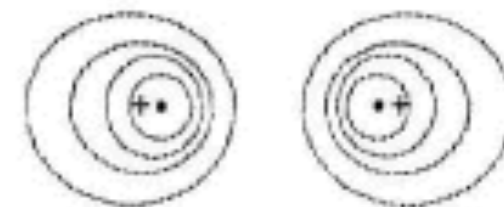
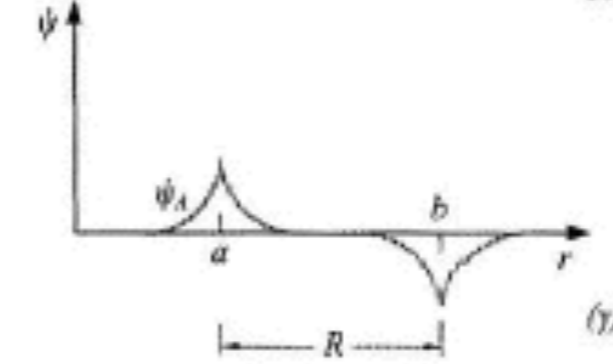
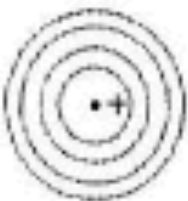
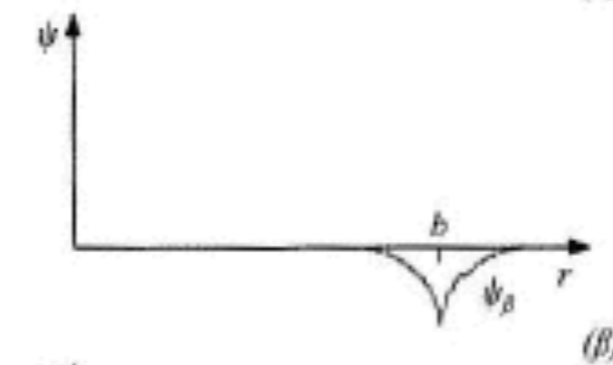
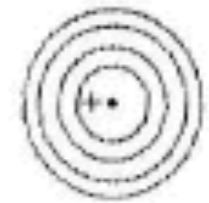
➤ $R \gg \alpha_0$: Η κυματοσυνάρτηση κοντά στους δυο πυρήνες θα μοιάζει με την 1s κυματοσυνάρτηση του υδρογόνου. Επομένως το αντισυμμετρικό τους άθροισμα θα είναι $\Psi = \Psi_\alpha(1s) - \Psi_\beta(1s)$. {σχήματα (α) και (β)}

$R \rightarrow 0$: Η κυματοσυνάρτηση μοιάζει με την 2p κυματοσυνάρτηση του ιόντος του ηλίου, δηλ. $\Psi = \Psi_{He^+}(2p)$ {Παρατηρείστε ότι η ενέργεια της κατάστασης είναι $E = -13.6 (2^2/2^2) = -13.6$ eV, δηλ. όση και η ενέργεια του συστήματος $H + H^+$. Άρα δεν μπορεί να είναι δέσμια.}

➤ $R \sim \alpha_0$: Η κυματοσυνάρτηση μοιάζει με αυτήν του σχήματος (δ). Η πιθανότητα να βρούμε το ηλεκτρόνιο στο χώρο μεταξύ των πυρήνων είναι ελάχιστη. Αυτή η έλλειψη αρνητικού φορτίου μεταξύ των πυρήνων δεν εμποδίζει την άπωση μεταξύ των, με αποτέλεσμα να μην μπορεί να δημιουργηθεί δεσμός.

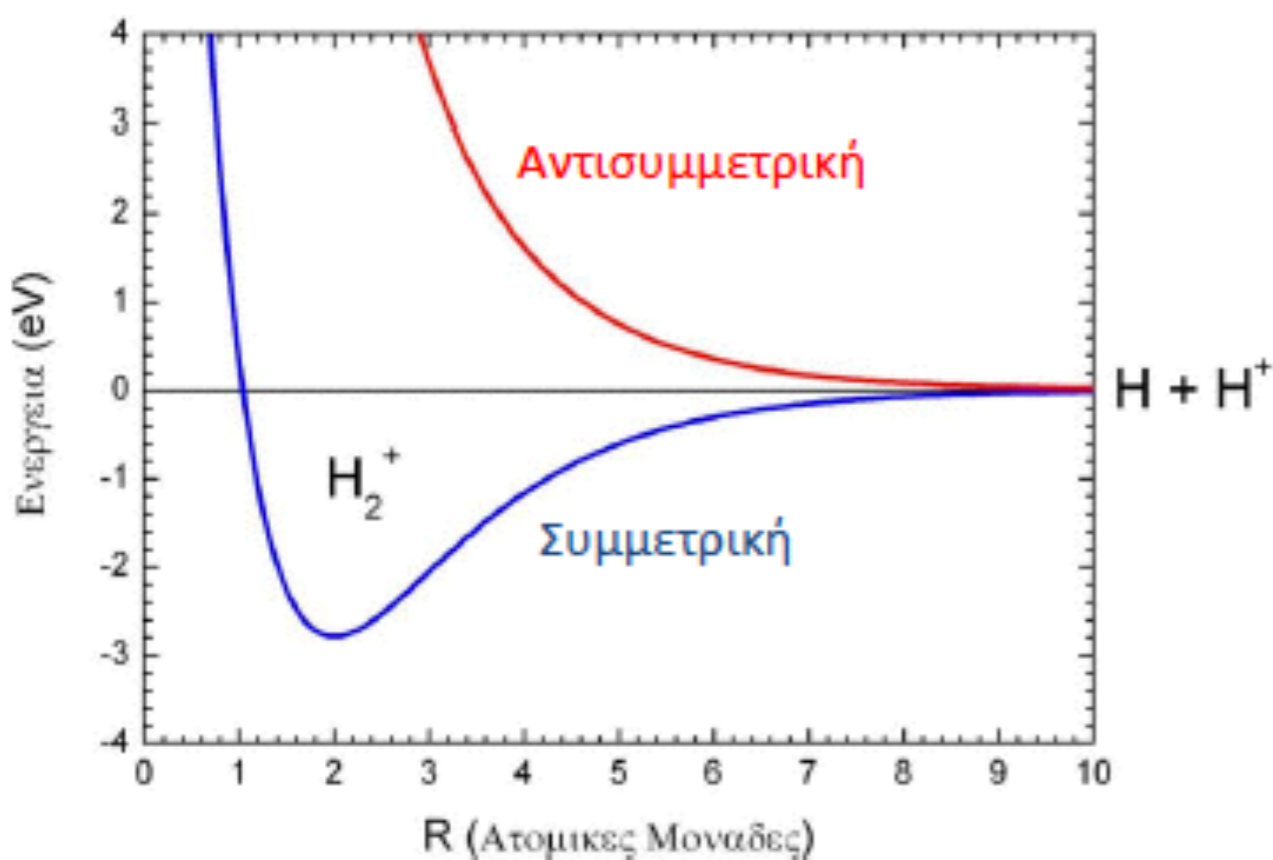


Καμπύλες σταθερής ηλεκτρονιακής πιθανότητας



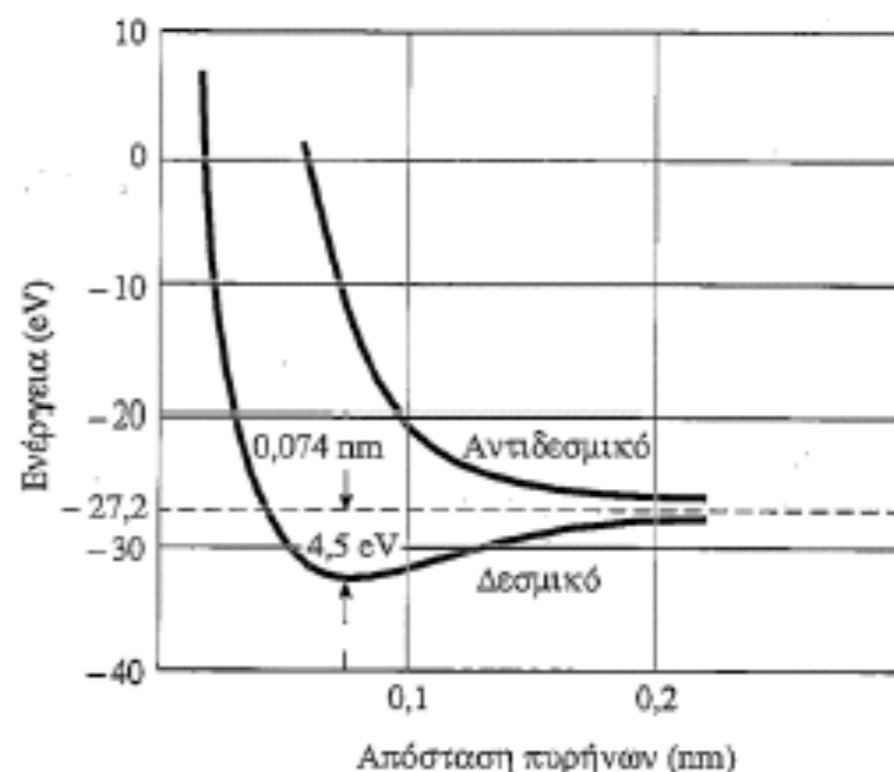
Ομοιοπολικός Δεσμός

Στο παρακάτω σχήμα δίνονται οι ενεργειακές καταστάσεις της συμμετρικής κι αντισυμμετρικής κυματοσυνάρτησης του H_2^+ . Παρατηρείστε ότι η αντισυμμετρική κυματοσυνάρτηση δεν μπορεί να αντιστοιχεί σε δέσμια κατάσταση. {Σκεφτείτε ότι με βάση την αρχή απροσδιοριστίας η αντισυμμετρική κυματοσυνάρτηση αντιστοιχεί σε μεγαλύτερη κινητική ενέργεια από ότι η συμμετρική}



Το μόριο του υδρογόνου H_2

Με όμοια συλλογιστική οι ενεργειακές καταστάσεις για το μόριο του υδρογόνου (δυο ηλεκτρόνια) προκύπτουν όπως στο παρακάτω σχήμα



- Η συμμετρική χωρική κυματοσυνάρτηση πρέπει να έχει αντισυμμετρικό σπιν, δηλ. αντιπαράλληλα σπιν. Το προκύπτον τροχιακό ονομάζεται δεσμικό.
- Η αντισυμμετρική χωρική κυματοσυνάρτηση πρέπει να έχει συμμετρικό σπιν, δηλ. παράλληλα σπιν. Το προκύπτον τροχιακό ονομάζεται αντιδεσμικό.
- Παρατηρείστε ότι η ενέργεια σύνδεσης του H_2 είναι μεγαλύτερη από αυτήν του H_2^+ . {Μπορείτε να το δικαιολογήσετε ποιοτικά;}

Ομοιοπολικός Δεσμός

Γενικές ιδιότητες

- Σε πολλά μόρια τα ηλεκτρόνια μοιράζονται άνισα μεταξύ των δυο ατόμων. Π.χ. στο μόριο του HCl το Cl έλκει κοντύτερα το ζεύγος των ηλεκτρονίων του ομοιοπολικού δεσμού από ότι το H.
- Ακραία μορφή αυτού του φαινόμενου είναι ο ετεροπολικός δεσμός.
- Στα περισσότερα μόρια οι δεσμοί είναι μια ενδιάμεση κατάσταση μεταξύ ενός καθαρού ομοιοπολικού δεσμού κι ενός ιοντικού.
- Περισσότεροι του ενός ομοιοπολικοί δεσμοί μπορούν να σχηματιστούν σε ένα μόριο αρκεί να μην παραβιάζεται η απαγορευτική αρχή. Π.χ.
 - Η κατάσταση ($\uparrow\uparrow\uparrow$) επιτρέπει το σχηματισμό μέχρι τριών ομοιοπολικών δεσμών
 - Η κατάσταση ($\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow$) επιτρέπει το σχηματισμό μέχρι δυο ομοιοπολικών δεσμών
- Ομοπυρηνικά μόρια δεν εμφανίζουν μόνιμη διπολική ροπή
Το ηλεκτρονικό νέφος είναι στο κέντρο της απόστασης των δυο πυρήνων με αποτέλεσμα οι διπολικές ροπές να αλληλοαναιρούνται.
- Ετεροπυρηνικά μόρια εμφανίζουν μόνιμη διπολική ροπή
Το ηλεκτρονικό νέφος δεν είναι στο κέντρο της απόστασης των δυο πυρήνων με αποτέλεσμα οι διπολικές ροπές να μην αλληλοαναιρούνται.

Μεταλλικός Δεσμός

Ο μεταλλικός δεσμός έχει σχέση με τα κοινά ηλεκτρόνια των μετάλλων που **δεν συγκρατούνται ισχυρά και κινούνται ελεύθερα μεταξύ των ατόμων**. Αυτή η **απομάκρυνση** τους από τους πυρήνες, επιτρέπει **στιγμιαία τη δημιουργία θετικών φορτίων στα άτομα που περισφίγγονται από τα νέφη των ελεύθερων ηλεκτρονίων**.

Στα άτομα των μεταλλικών στοιχείων τα **ηλεκτρόνια σθένους** είναι **χαλαρά συνδεδεμένα** με τον πυρήνα. Αποτέλεσμα αυτού είναι ότι τα ηλεκτρόνια σθένους μετακινούνται εύκολα από τον έναν πυρήνα στον άλλο και είναι κατά έναν τρόπο κοινό "κτήμα" όλων των ατόμων.

Κατά την ελεύθερη μετάβαση των ηλεκτρονίων από πυρήνα σε πυρήνα κάθε ένας πυρήνας φορτίζεται προς στιγμήν θετικά. Αυτό δημιουργεί **ηλεκτροστατικές έλξεις** μεταξύ αυτών των πυρήνων και των ελευθέρως κινούμενων ηλεκτρονίων. Οι έλξεις αυτές συγκρατούν τους πυρήνες μεταξύ τους.

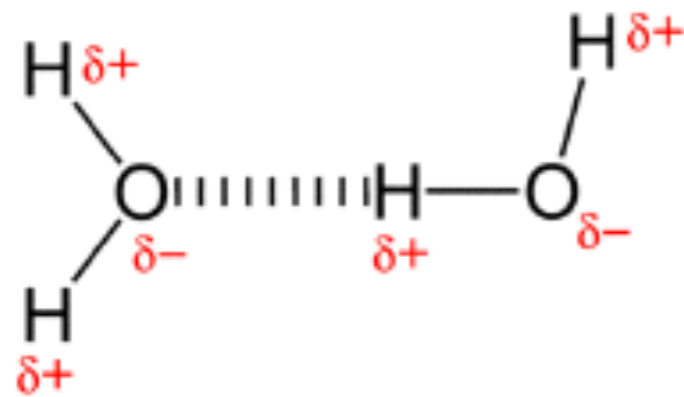
Δεδομένου δε ότι το ηλεκτρικό ρεύμα είναι κίνηση ηλεκτρονίων και ότι στα **μέταλλα τα ηλεκτρόνια μετακινούνται ελεύθερα, τα μέταλλα είναι καλοί αγωγοί του ηλεκτρισμού**.

Δεσμός Υδρογόνου

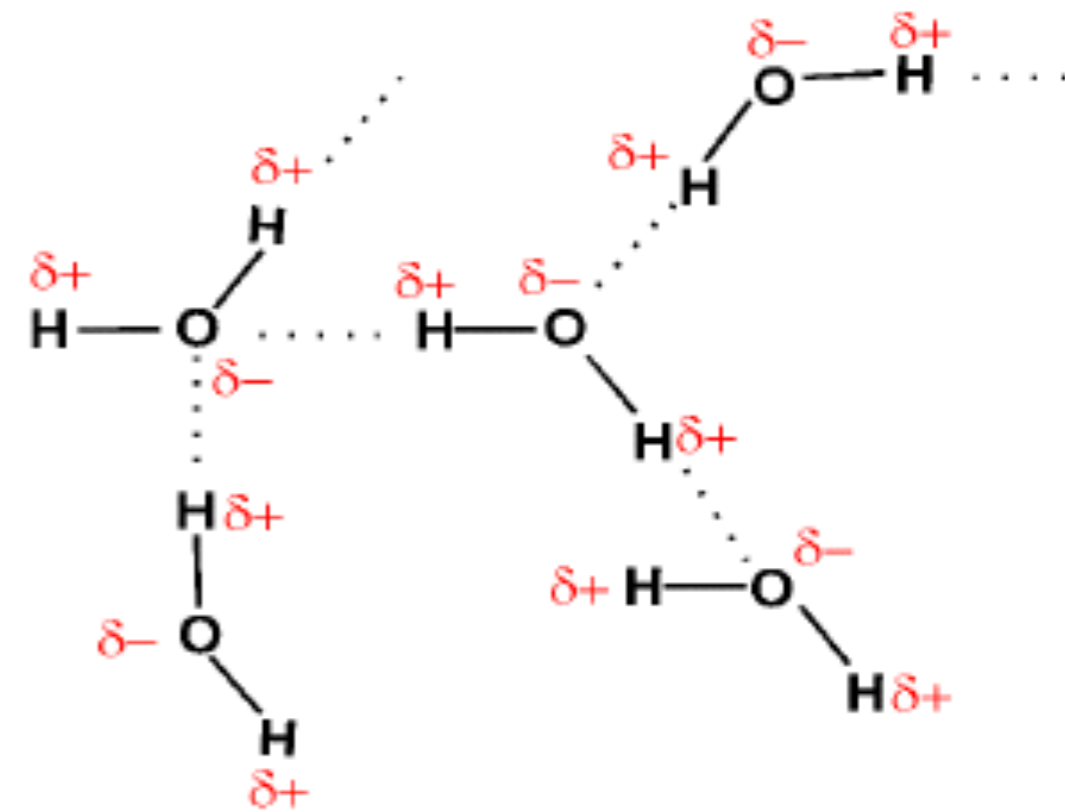
Φύση του δεσμού: Η ηλεκτροστατική έλξη μεταξύ ενός ατόμου υδρογόνου και ενός ηλεκτραρνητικού ατόμου που ανήκει σε κάποιο μόριο.

Παράδειγμα: Το νερό (H_2O)

Το μόριο του νερού εμφανίζει ανισοτροπία στην κατανομή του αρνητικού του φορτίου. Το Οξυγόνο εμφανίζεται μερικώς αρνητικά φορτισμένο και το υδρογόνο μερικώς θετικά, ως αποτέλεσμα των ομοιοπολικών δεσμών του μορίου. Επομένως μόρια νερού μπορούν να έλξουν το ένα το άλλο μέσω της ηλεκτροστατικής έλξης του οξυγόνου και του υδρογόνου όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα. Ο δεσμός αυτής της φύσης καλείται δεσμός υδρογόνου.



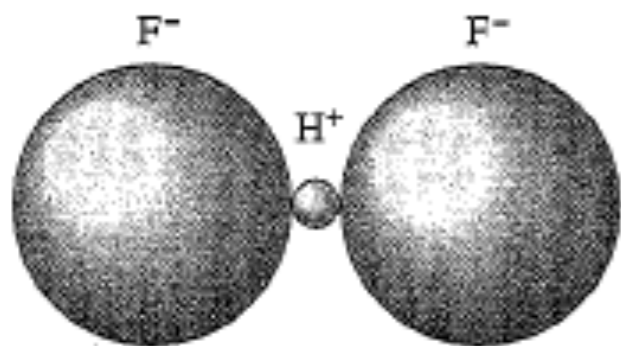
Πολλαπλοί δεσμοί υδρογόνου σχηματίζουν το υγρό νερό.



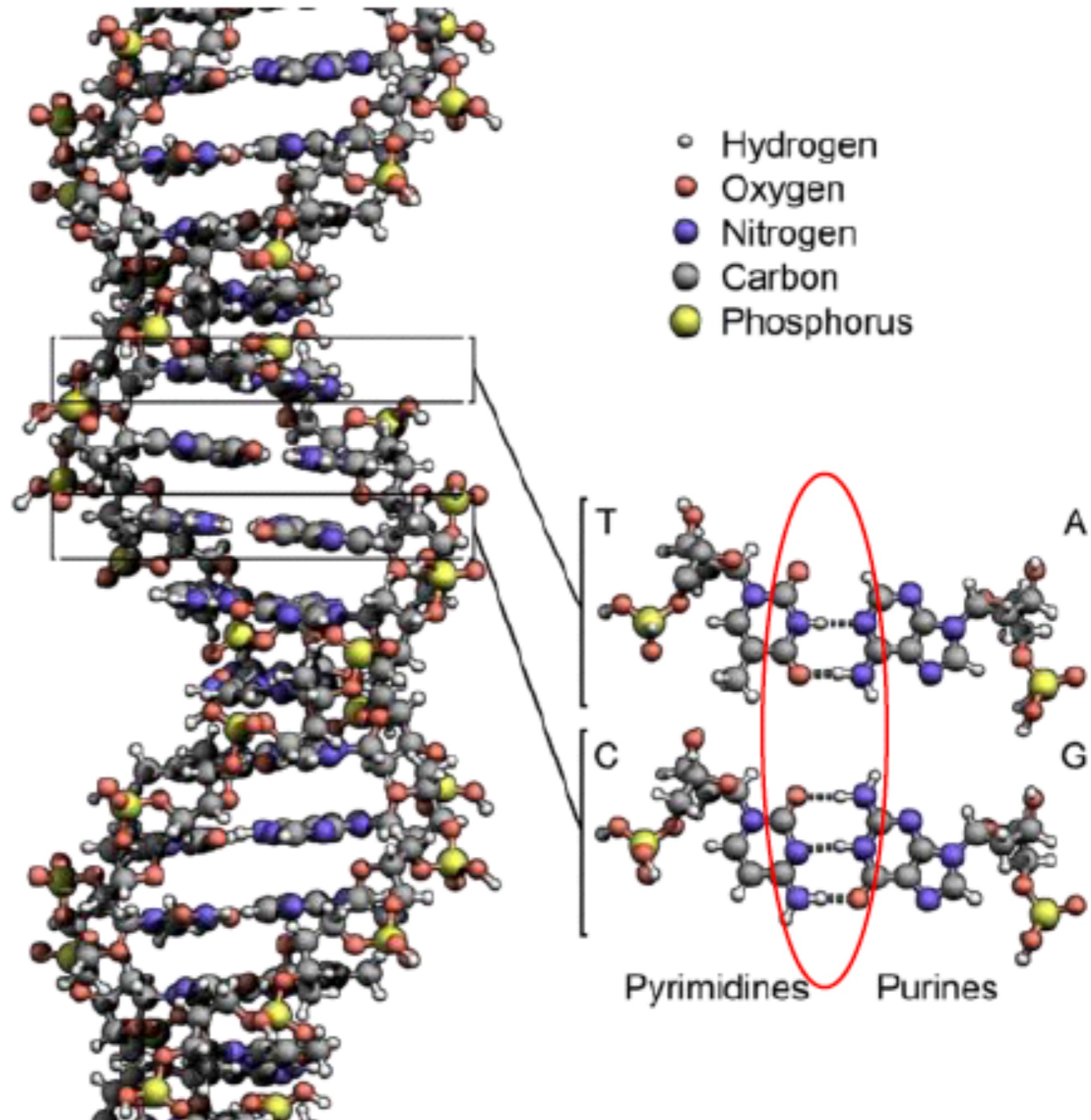
Δεσμός Υδρογόνου

Παράδειγμα: Το ιόν $(\text{HF}_2)^-$

Τα δυο αρνητικά ιόντα φθορίου συνενώνονται με το θετικό πρωτόνιο που βρίσκεται μεταξύ τους



Παράδειγμα: Το μόριο DNA



Δεσμοί Van der Waals

Φύση του δεσμού: Δυνάμεις μεταξύ δίπολων.

➤ Δυνάμεις διπόλου-διπόλου.

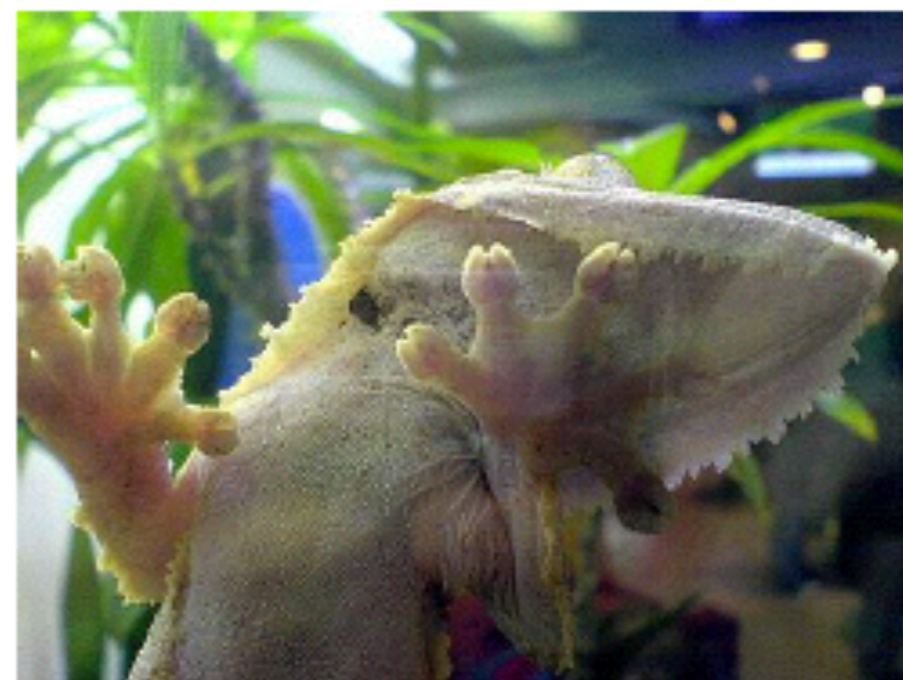
Ασκούνται μεταξύ μορίων με μόνιμη διπολική ροπή, δηλ. μεταξύ πολικών μορίων, π.χ. HCl. Το ένα πολικό μόριο αλληλεπιδρά με το ηλεκτρικό πεδίο που δημιουργεί το άλλο πολικό μόριο. Οι ελκτικές δυνάμεις είναι αρκετά ασθενείς (σαφώς ασθενέστερες από αυτές των ομοιοπολικών δεσμών αλλά και από αυτές των δεσμών υδρογόνου) και είναι ανάλογες του $1/r^7$.

➤ Δυνάμεις διπόλου εξ επαγωγής.

Ασκούνται μεταξύ ενός πολικού κι ενός μη πολικού μορίου. Ένα πολικό μόριο επάγει μια διπολική ροπή σε μη πολικό μόριο με αποτέλεσμα την εμφάνιση ελκτικής δύναμης της μορφής διπόλου-διπόλου. Η ελκτική δύναμη είναι ανάλογη του $1/r^7$.

➤ Δυνάμεις διασποράς.

Ασκούνται μεταξύ μη πολικών μορίων. Στα μόρια αυτά η μέση διπολική ροπή είναι μηδέν όχι όμως και η διακύμανσή της (λόγω διακυμάνσεων του φορτίου). Επομένως δυο μη πολικά μόρια μπορούν να εμφανίσουν διπολικές ελκτικές δυνάμεις εξαιτίας αυτής της μη μηδενικής διακύμανσης της διπολικής τους ροπής. Οι δυνάμεις αυτές είναι εξίσου ασθενείς με τις δυο παραπάνω περιπτώσεις.



Η αναρρίχηση της σαύρας Gecko σε γυάλινη επιφάνεια οφείλεται στις δυνάμεις Van der Waals που αναπτύσσονται μεταξύ των πελμάτων της και της γυάλινης επιφάνειας.