

# Γενική Χημεία

Ενότητα 5<sup>η</sup>: Ομοιοπολικοί δεσμοί & μοριακή δομή



Πανεπιστήμιο  
Θεσσαλίας

Τμήμα Επιστήμης Τροφίμων & Διατροφής

Οκτώβριος 2018

Δρ. Δημήτρης Π. Μακρής – Αναπληρωτής Καθηγητής

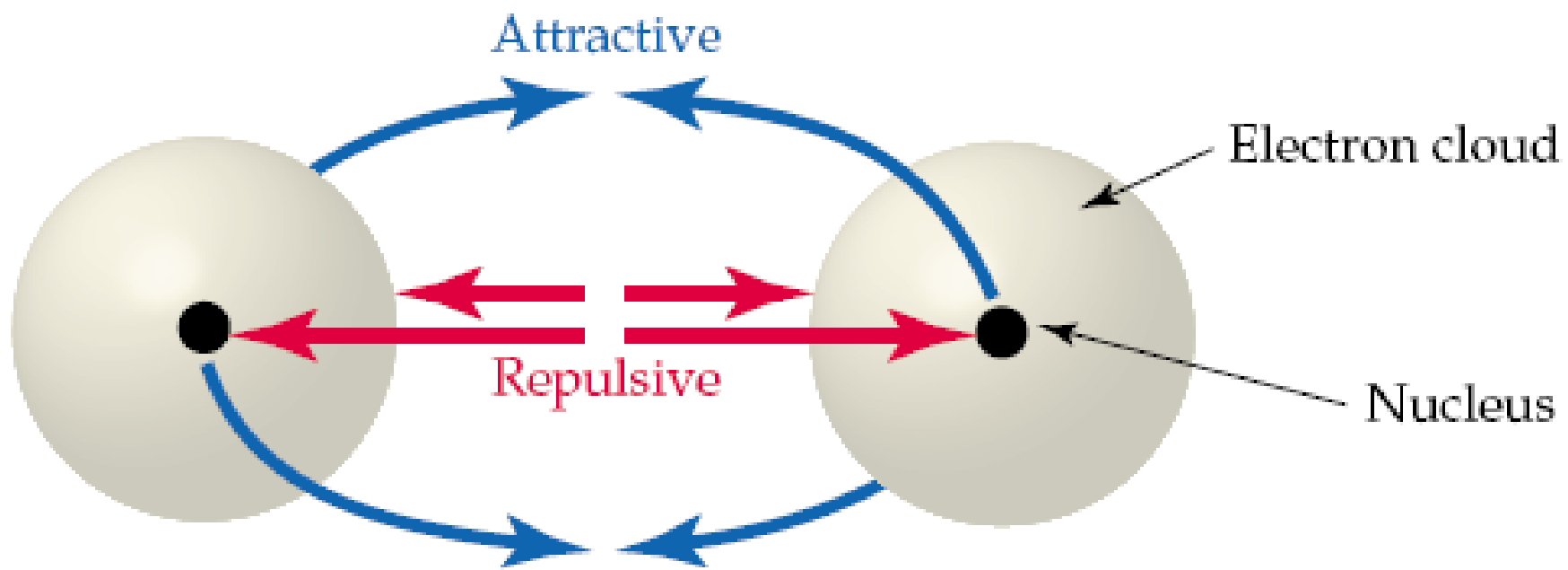
# Ο Ομοιοπολικός Δεσμός

*Ο δεσμός H – H στο μόριο H<sub>2</sub>, ως παράδειγμα*

Καθώς τα δύο άτομα H βρίσκονται σε εγγύτητα, υπάρχει ανάπτυξη ηλεκτροστατικών δυνάμεων μεταξύ τους. Οι θετικώς φορτισμένοι πυρήνες απωθούνται και το ίδιο συμβαίνει και με τα αρνητικών φορτισμένα ηλεκτρόνια. Όμως, ο κάθε πυρήνας έλκει και τα δύο ηλεκτρόνια.

Εάν οι ελκτικές δυνάμεις είναι ισχυρότερες από τις απωστικές σχηματίζεται ένας ομοιοπολικός δεσμός, με τη σύνδεση των δύο ατόμων και το μοίρασμα των ηλεκτρονίων, τα οποία καταλαμβάνουν το διάστημα μεταξύ των δύο πυρήνων.

Αυτό που συμβαίνει είναι ότι και οι δύο πυρήνες έλκονται ταυτόχρονα και από τα δύο ηλεκτρόνια και συγκρατούνται μαζί.



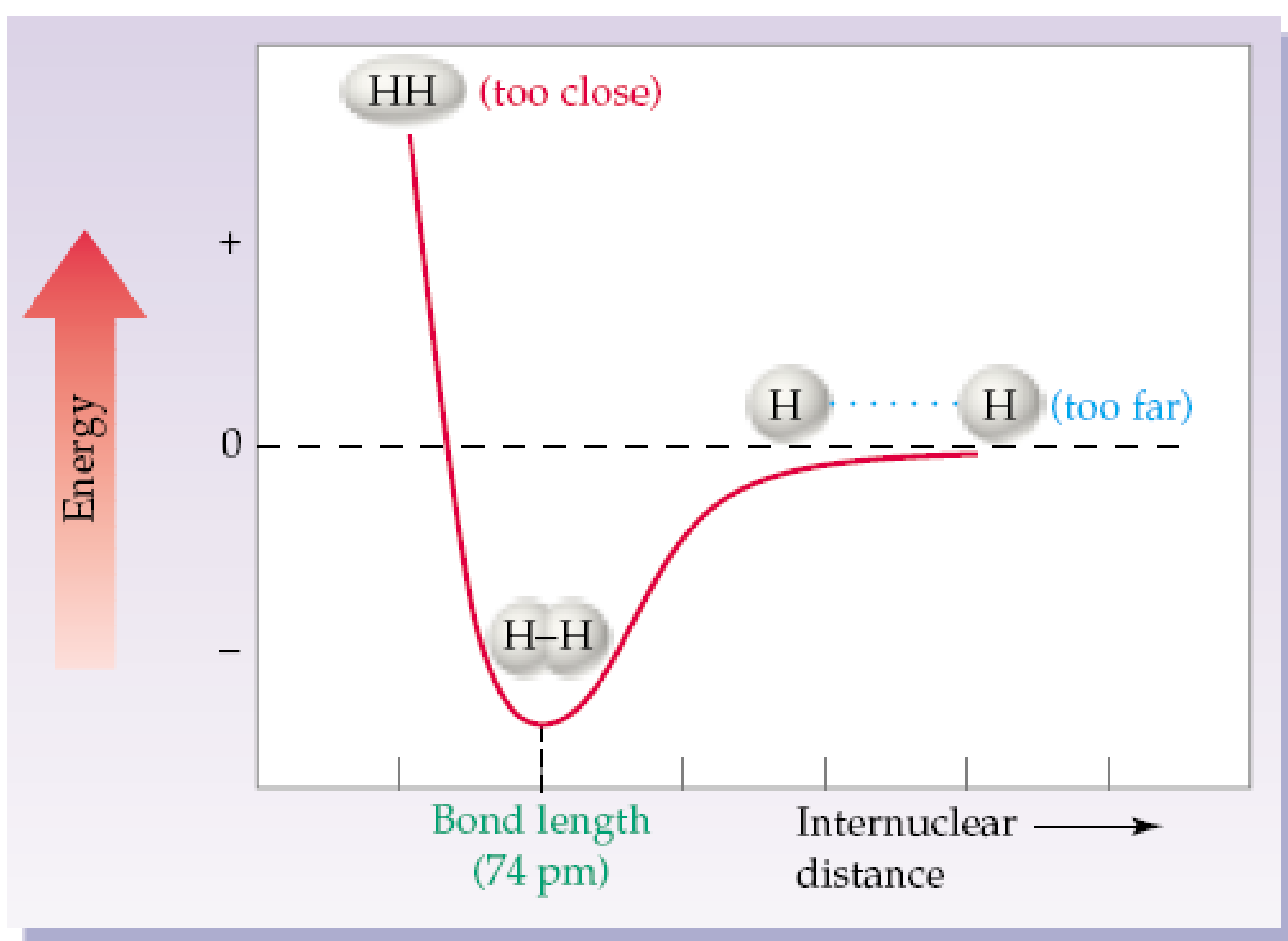
# Ο Ομοιοπολικός Δεσμός

Τα μεγέθη των διαφόρων ελκτικών και απωστικών δυνάμεων μεταξύ των πυρήνων και των ηλεκτρονίων σ' έναν ομοιοπολικό δεσμό εξαρτώνται από την εγγύτητα των ατόμων.

Εάν τα άτομα υδρογόνου απέχουν πολύ μεταξύ τους, οι ελκτικές δυνάμεις είναι ασθενείς και δεν δημιουργείται δεσμός.

Εάν είναι πολύ κοντά, η απωστική αλληλεπίδραση των πυρήνων γίνεται τόσο ισχυρή, που ωθεί τα άτομα μακριά.

Υπάρχει δηλαδή μια βέλτιστη απόσταση μεταξύ των πυρήνων που ονομάζεται **μήκος δεσμού**. Σ' αυτήν την απόσταση οι ελκτικές δυνάμεις μεγιστοποιούνται και το μόριο έχει τη βέλτιστη σταθερότητα.



## Η Ισχύς των Ομοιοπολικών Δεσμών

Όταν ζεύγη ατόμων υδρογόνου συνενώνονται σχηματίζουν μόρια  $H_2$  χαμηλότερης ενέργειας και απελευθερώνεται ενέργεια ίση με  $436 \text{ kJ/mol}$ . Αντιθέτως, μια ισόποση ενέργεια θα πρέπει να διοχετευθεί στο μόριο  $H_2$  για να το διασπάσει σε δύο άτομα  $H$ .

Το ποσό της ενέργειας που πρέπει να διοχετευθεί για να διασπαστεί ένας χημικός δεσμός ενός μορίου που βρίσκεται στην αέρια φάση του (η ενέργεια που απελευθερώνεται όταν σχηματίζεται ο δεσμός) ονομάζεται **ενέργεια διάστασης δεσμού** (bond dissociation energy –  $D$ ).

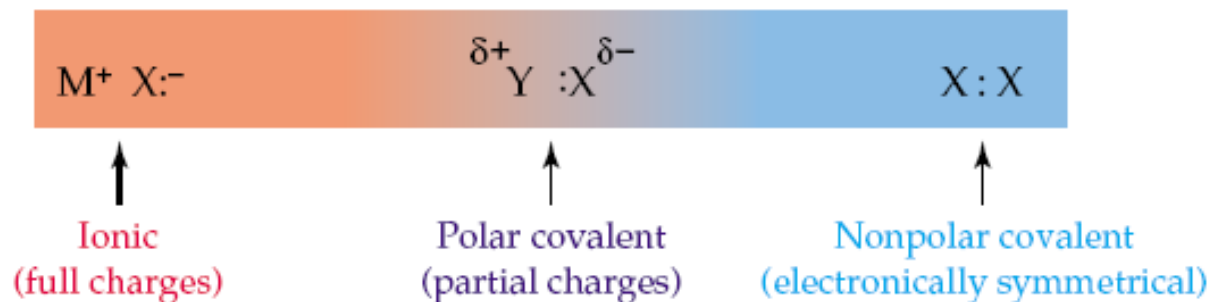
Οι ενέργειες διάστασης δεσμού είναι πάντα θετικές, γιατί πρέπει πάντα να διοχετευθεί ενέργεια για να διασπαστεί ένας δεσμός. Αντιθέτως, η ποσότητα ενέργειας που εκλύεται κατά τον σχηματισμό ενός δεσμού έχει πάντα αρνητική τιμή.

# Πολικοί Ομοιοπολικοί Δεσμοί - Ηλεκτραρνητικότητα

7

Ανάμεσα στον ιοντικό δεσμό (μεταφορά ηλεκτρονίων) και τον ομοιοπολικό (νομή ηλεκτρονίων) υπάρχει ένα ευρύ φάσμα δεσμών ενδιάμεσης φύσης, όπου τα ηλεκτρόνια νέμονται άνισα, αλλά δεν υπάρχει πλήρης μεταφορά. Όταν συμβαίνει αυτό, ο δεσμός χαρακτηρίζεται ως **πολικός ομοιοπολικός δεσμός** (polar covalent bond).

Το μικρό γράμμα  $\delta$  χρησιμοποιείται για να συμβολίζει το μερικό φορτίο στα άτομα, είτε αυτό είναι μερικώς θετικό ( $+\delta$ ), για το άτομο που έχει μικρότερο καταμερισμό των ηλεκτρονίων του δεσμού, είτε αρνητικό ( $-\delta$ ) για το άτομο με το μεγαλύτερο καταμερισμό.



# Πολικοί Ομοιοπολικοί Δεσμοί - Ηλεκτραρνητικότητα

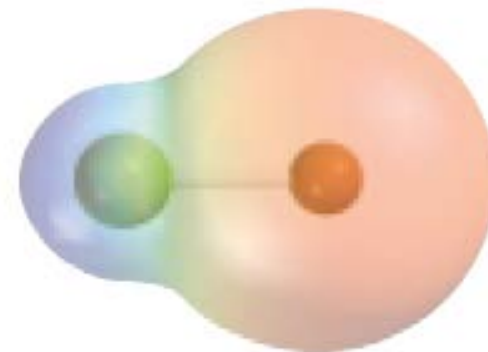
8

Ως παράδειγμα, μπορεί να γίνει η σύγκριση τριών ουσιών· του NaCl, του HCl και του Cl<sub>2</sub>.

**NaCl:** Ο δεσμός θεωρητικά είναι ιοντικός μεταξύ των Na<sup>+</sup> και Cl<sup>-</sup>, αλλά μελέτες έχουν δείξει ότι η φύση του είναι μόνο κατά 80% ιοντική.

Αυτό συμβαίνει γιατί το ηλεκτρόνιο που προσφέρθηκε από το Na στο Cl εξακολουθεί να βρίσκεται για περιορισμένο χρονικό διάστημα κοντά στο Na. Ο χάρτης ηλεκτροστατικού δυναμικού δείχνει με παραστατικό τρόπο την κατανομή των ηλεκτρονίων στο μόριο.

Na<sup>+</sup> Cl<sup>-</sup> An ionic bond





# Πολικοί Ομοιοπολικοί Δεσμοί - Ηλεκτραρνητικότητα

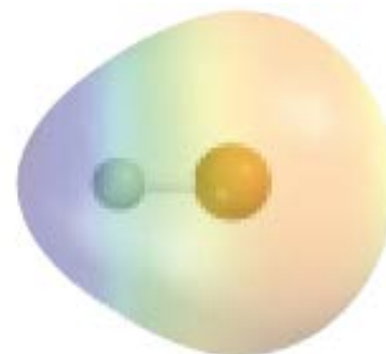
**HCl:** Ο δεσμός είναι ένας πολικός ομοιοπολικός. Το άτομο του Cl έλκει το ζεύγος των ηλεκτρονίων του δεσμού πιο ισχυρά απ' ότι το υδρογόνο και αυτό έχει ως αποτέλεσμα την ασύμμετρη κατανομή ηλεκτρονίων.

Έτσι, το Cl έχει ένα μερικώς αρνητικό φορτίο και το H ένα μερικώς θετικό. Πειραματικώς έχει βρεθεί ότι ο δεσμός στο HCl είναι 83% ομοιοπολικός και 17% ιοντικός.



A polar covalent bond.

The bonding electrons are attracted more strongly by Cl than by H.



## Πολικοί Ομοιοπολικοί Δεσμοί - Ηλεκτραρνητικότητα

10

$\text{Cl}_2$ : Ο δεσμός σ' ένα μόριο χλωρίου είναι μη-πολικός ομοιοπολικός και τα ηλεκτρόνια του δεσμού έλκονται το ίδιο από τα δύο πανομοιότυπα άτομα χλωρίου.

Παρόμοιες περιπτώσεις υπάρχουν για όλα τα διατομικά μόρια που έχουν ομοιοπολικό δεσμό μεταξύ δύο πανομοιότυπων ατόμων.



A nonpolar covalent bond

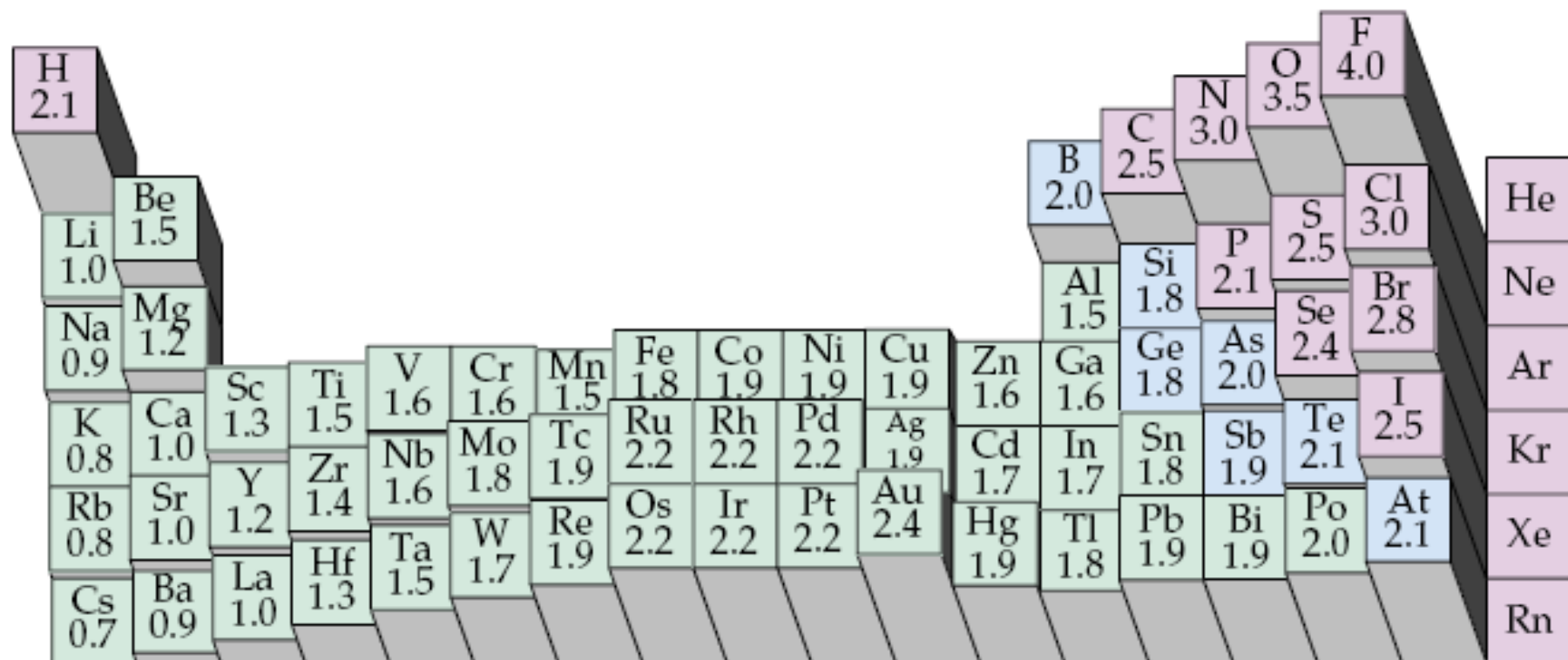


# Πολικοί Ομοιοπολικοί Δεσμοί - Ηλεκτραρνητικότητα

Η πολικότητα ενός δεσμού οφείλεται στην **ηλεκτραρνητικότητα**, που είναι η ικανότητα ενός ατόμου σ' ένα μόριο να έλκει τα κοινά ηλεκτρόνια σ' ένα ομοιοπολικό δεσμό.

Τα μεταλλικά στοιχεία σ' αριστερά του περιοδικού πίνακα έλκουν ηλεκτρόνια ασθενώς, ενώ αντιθέτως τα αλογόνα και άλλα δραστικά μη-μέταλλα πάνω δεξιά στον πίνακα έλκουν ηλεκτρόνια ισχυρώς.

Τα αλκαλιμέταλλα είναι τα λιγότερο ηλεκτραρνητικά, ενώ το F, το O, το N και το Cl είναι τα πιο ηλεκτραρνητικά.

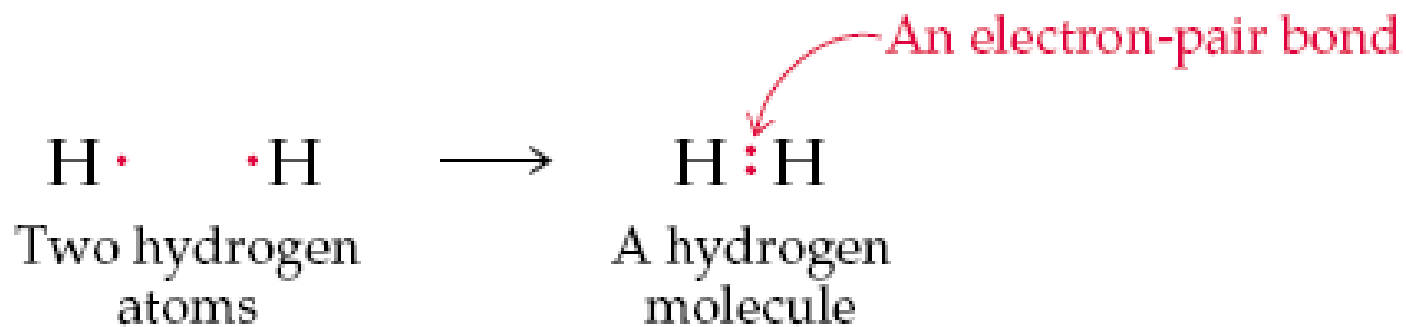


# Αναπαράσταση Δομών με Ηλεκτρόνια - Κουκκίδες

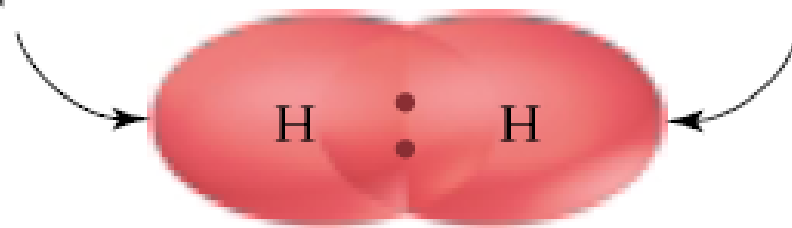
Μια αναπαράσταση δομής με **ηλεκτρόνια – κουκκίδες**, ή αλλιώς όπως ονομάζεται **δομή κατά Lewis**, δείχνει τα ηλεκτρόνια σθένους ενός ατόμου με κουκκίδες και υποδεικνύει, μέσω της τοποθέτησης των κουκκίδων, πως αυτά τα ηλεκτρόνια κατανέμονται στο μόριο.

Ένα μόριο  $H_2$ , για παράδειγμα, γράφεται δείχνοντας ένα ζεύγος κουκκίδων ανάμεσα στα άτομα H, υποδεικνύοντας ότι τα H μοιράζονται το ζεύγος των ηλεκτρονίων σ' ένα ομοιοπολικό δεσμό.

Με τη νομή δύο ηλεκτρονίων σ' έναν ομοιοπολικό δεσμό κάθε άτομο H έχει συμπληρωμένη τη στοιβάδα σθένους και τη σταθερή δόμηση ατόμου He.



This hydrogen shares  
an electron pair

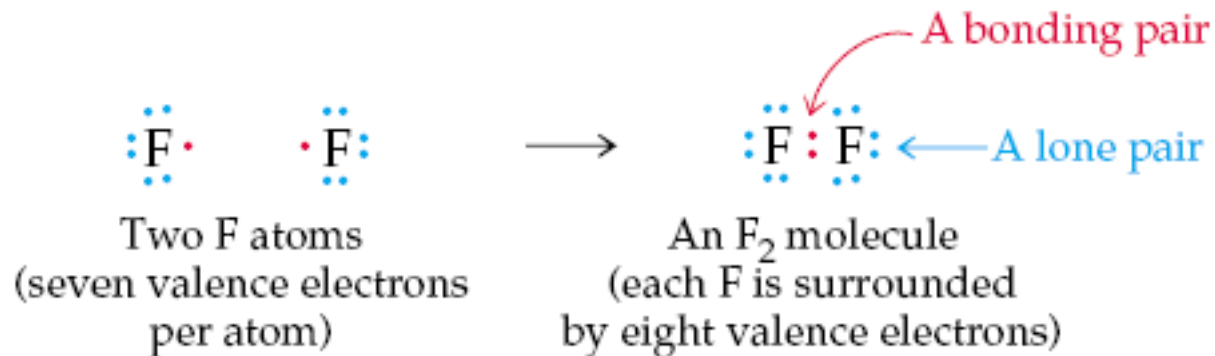


...and this hydrogen  
shares an electron pair.

# Αναπαράσταση Δομών με Ηλεκτρόνια - Κουκκίδες

15

Το στοιχείο του φθορίου (ομάδα 7A) έχει επτά ηλεκτρόνια σθένους και η δομή κατά Lewis του μορίου  $F_2$  πως μπορεί να σχηματισθεί ο ομοιοπολικός δεσμός:



Έξι από τα επτά ηλεκτρόνια σθένους στο άτομο F είναι ήδη σε ζεύγη σε τρία συμπληρωμένα ατομικά τροχιακά και δεν μπορούν να μοιραστούν σ' ένα δεσμό.

Το έβδομο ηλεκτρόνιο σθένους, όμως, είναι ασύζευκτο και μπορεί να σχηματίσει ομοιοπολικό δεσμό μ' ένα άλλο άτομο F.

# Αναπαράσταση Δομών με Ηλεκτρόνια - Κουκκίδες

Κάθε άτομο σ' ένα μόριο  $F_2$  έχει τη στοιβάδα σθένους συμπληρωμένη σε δόμηση octet. Τα τρία ζεύγη μη-δεσμικών ηλεκτρονίων ονομάζονται **μονήρη ζεύγη** ή **μη-δεσμικά ζεύγη** και τα μοιρασμένα ηλεκτρόνια ονομάζονται **δεσμικό ζεύγος**.

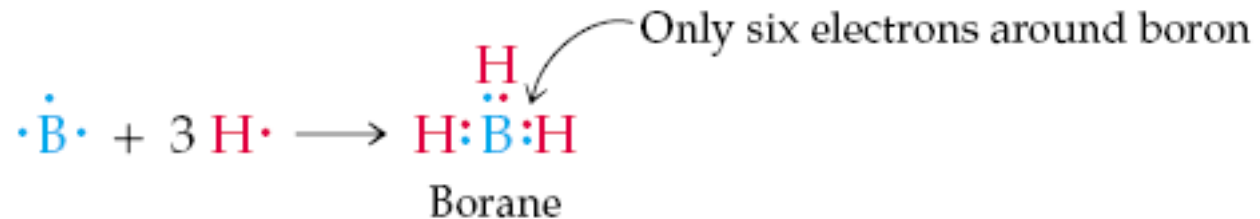
Ως γενικός κανόνας, ένα άτομο μοιράζεται όσο το δυνατό περισσότερα από τα ηλεκτρόνια σθένους του, μέχρις ότου δεν έχει άλλα ηλεκτρόνια να μοιραστεί ή έχει αποκτήσει δόμηση octet.



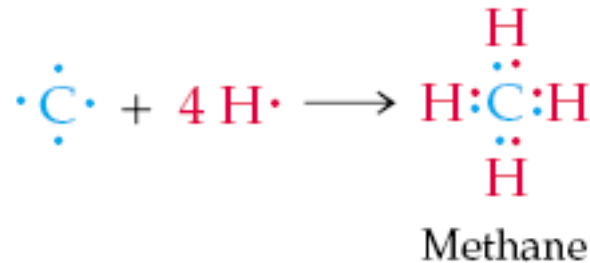
# Αναπαράσταση Δομών με Ηλεκτρόνια - Κουκκίδες

17

Στοιχεία ομάδας 3A: Έχουν τρία ηλεκτρόνια σθένους και επομένως μπορούν να σχηματίσουν τρεις δεσμούς ηλεκτρονιακών ζευγών.



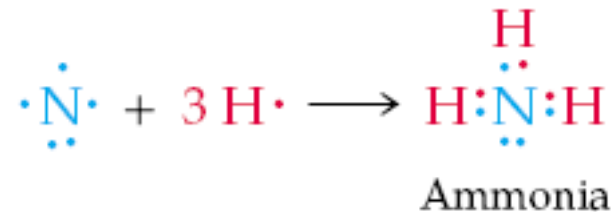
Στοιχεία ομάδας 4A: Έχουν τέσσερα ηλεκτρόνια σθένους και μπορούν να σχηματίσουν τέσσερις δεσμούς.



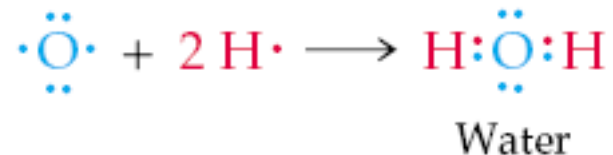
# Αναπαράσταση Δομών με Ηλεκτρόνια - Κουκκίδες

18

Στοιχεία ομάδας 5A: Έχουν πέντε ηλεκτρόνια σθένους και μπορούν να σχηματίσουν τρεις δεσμούς.



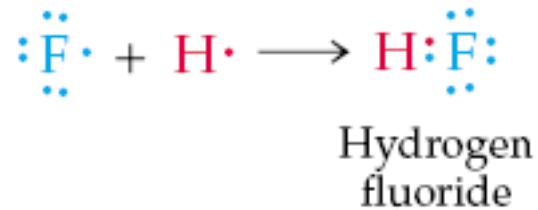
Στοιχεία ομάδας 6A: Έχουν έξι ηλεκτρόνια σθένους και σχηματίζουν δύο δεσμούς.



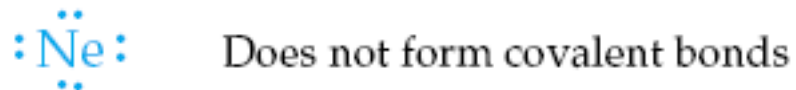
# Αναπαράσταση Δομών με Ηλεκτρόνια - Κουκκίδες

19

Στοιχεία ομάδας 7A: Έχουν επτά ηλεκτρόνια σθένους και μπορούν να σχηματίσουν ένα δεσμό.



Στοιχεία ομάδας 8A (ευγενή αέρια): Η στοιβάδα σθένους έχει δόμηση octet. Σπάνια σχηματίζουν ομοιοπολικούς δεσμούς.

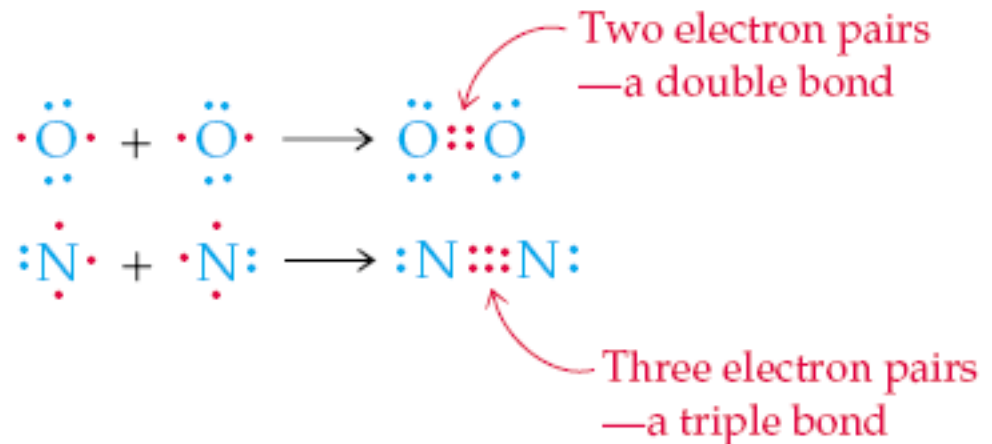


# Αναπαράσταση Δομών με Ηλεκτρόνια - Κουκκίδες

20

Δεν περιέχουν όλοι οι δεσμοί μόνο ένα μοιρασμένο ηλεκτρονικό ζεύγος (απλός δεσμός). Σε μόρια όπως το  $O_2$ ,  $N_2$  και πολλά άλλα, τα άτομα μοιράζονται περισσότερα από ένα ζεύγη ηλεκτρονίων, σχηματίζοντας πολλαπλούς ομοιοπολικούς δεσμούς.

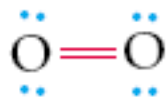
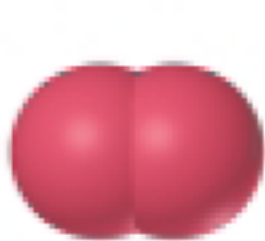
Για παράδειγμα, τα άτομα  $O$  στο μόριο  $O_2$  επιτυγχάνουν δόμηση octet της στοιβάδας σθένους με τη νομή τεσσάρων ηλεκτρονίων (δύο ζεύγη), δημιουργώντας ένα **διπλό δεσμό**. Ομοίως στο  $N_2$  τα άτομα μοιράζονται έξι ηλεκτρόνια (τρία ζεύγη) σχηματίζοντας ένα **τριπλό δεσμό**.



# Αναπαράσταση Δομών με Ηλεκτρόνια - Κουκκίδες

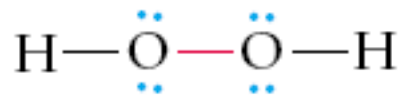
21

Οι πολλαπλοί δεσμοί είναι βραχύτεροι και ισχυρότεροι από τους αντίστοιχους απλούς, γιατί περισσότερα μοιρασμένα ηλεκτρόνια συγκρατούν τα άτομα.



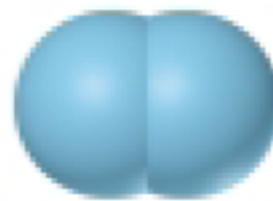
Bond length: 121 pm

Bond strength: 498 kJ/mol



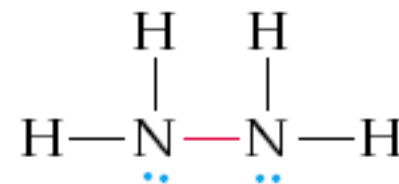
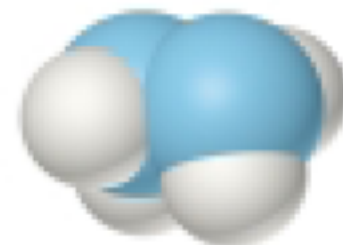
148 pm

213 kJ/mol



110 pm

945 kJ/mol



145 pm

275 kJ/mol

## Αναπαράσταση Δομών με Ηλεκτρόνια - Κουκκίδες

22

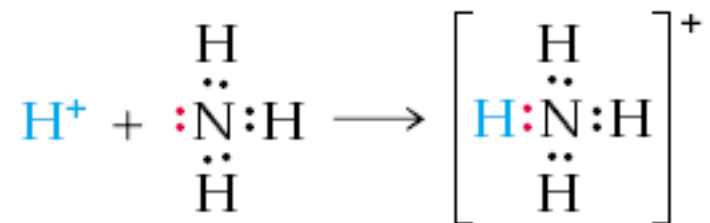
Αν και οι περισσότεροι ομοιοπολικοί δεσμοί σχηματίζονται όταν δύο άτομα συνεισφέρουν ένα ηλεκτρόνιο, μπορούν να σχηματισθούν δεσμοί όταν ένα άτομο προσφέρει και τα δύο ηλεκτρόνια (μονήρες ζεύγος) σ' ένα άλλο άτομο που έχει κενό το τροχιακό σθένους.

Αυτοί οι δεσμοί ονομάζονται **ομοιοπολικοί δεσμοί σύνταξης** (coordinate covalent bonds).

An ordinary covalent bond—each atom donates one electron



A coordinate covalent bond—the nitrogen atom donates both electrons

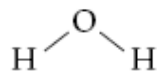
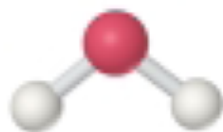


# Μοριακά Σχήματα: Το Μοντέλο VSEPR

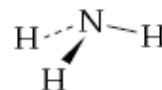
23

Το σχήμα ενός μορίου, όπως και πολλές άλλες μοριακές ιδιότητες, καθορίζεται από την ηλεκτρονιακή δομή των ενωμένων ατόμων. Το προσεγγιστικό σχήμα ενός μορίου μπορεί να προβλεφθεί χρησιμοποιώντας το **μοντέλο άπωσης ηλεκτρονιακών ζευγών της στοιβάδας σθένους** (valence-shell electron-pair repulsion, VSEPR).

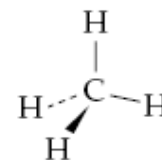
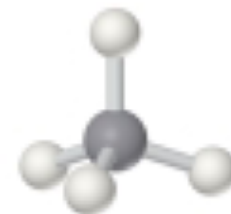
Τα ηλεκτρόνια στους δεσμούς και τα μονήρη ζεύγη μπορούν να θεωρηθούν ως «νέφη φορτίου» που απωθούνται μεταξύ τους και παραμένουν το δυνατόν μακρύτερα, κάτι που ωθεί τα μόρια να λαμβάνουν συγκεκριμένα σχήματα.



Water,  $\text{H}_2\text{O}$



Ammonia,  $\text{NH}_3$



Methane,  $\text{CH}_4$

# Μοριακά Σχήματα: Το Μοντέλο VSEPR

Υπάρχουν δύο βήματα για την εφαρμογή του μοντέλου VSEPR:

1. Καταγράφεται η δομή του μορίου κατά Lewis και γίνεται καταμέτρηση του αριθμού των νεφών φορτίου που περιβάλλουν το υπό μελέτη άτομο. Το νέφος φορτίου είναι μια ομάδα ηλεκτρονίων, είτε δεσμικά είτε μονήρη.

Δηλαδή ο αριθμός των νεφών φορτίου είναι ο συνολικός αριθμός των δεσμών και των μονήρων ηλεκτρονίων. Οι πολλαπλοί δεσμοί μετράνε όπως και οι απλοί, γιατί δεν παίζει ρόλο ο αριθμός των ηλεκτρονίων που απαρτίζουν κάθε νέφος.

2. Γίνεται πρόβλεψη της διάταξης των νεφών φορτίου γύρω από κάθε άτομο, υποθέτοντας ότι τα νέφη είναι προσανατολισμένα στο χώρο έτσι ώστε να βρίσκονται όσο το δυνατόν μακρύτερα. Το πώς επιτυγχάνεται αυτός ο προσανατολισμός εξαρτάται από τον αριθμό τους.

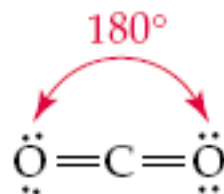


# Μοριακά Σχήματα: Το Μοντέλο VSEPR

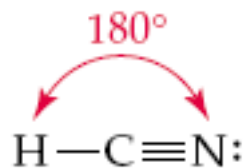
25

Δύο νέφη φορτίου: Σ' αυτήν την περίπτωση τα νέφη βρίσκονται μακρύτερα όταν βρίσκονται σε ακριβώς αντίθετες κατευθύνσεις. Για παράδειγμα, τα μόρια  $\text{CO}_2$  και  $\text{HCN}$  είναι γραμμικά μόρια με γωνίες δεσμών  $180^\circ$ .

A  $\text{CO}_2$  molecule is linear, with a bond angle of  $180^\circ$ .



An  $\text{HCN}$  molecule is linear, with a bond angle of  $180^\circ$ .

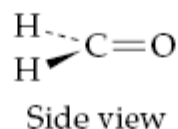
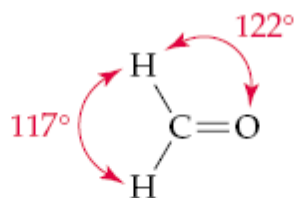


# Μοριακά Σχήματα: Το Μοντέλο VSEPR

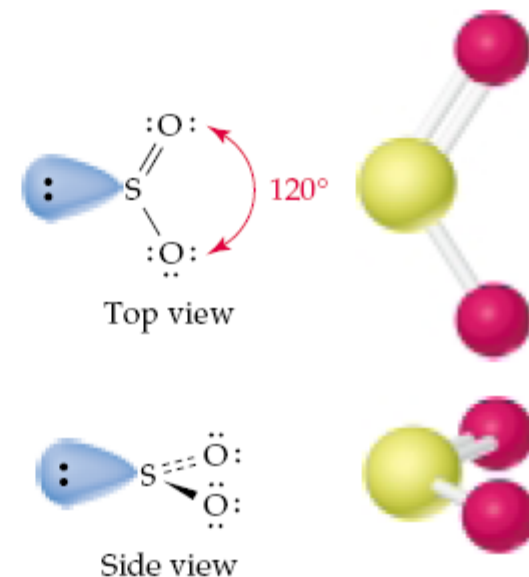
26

Τρία νέφη φορτίου: Σ' αυτήν την περίπτωση τα νέφη βρίσκονται μακρύτερα όταν βρίσκονται στο ίδιο επίπεδο και προσανατολίζονται προς τις γωνίες ενός ισοσκελούς τριγώνου.

A formaldehyde molecule is trigonal planar, with bond angles of roughly  $120^\circ$ .



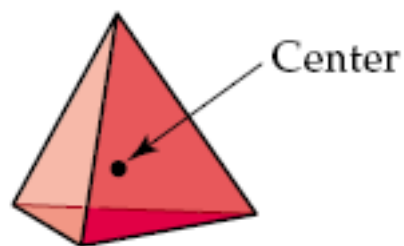
An  $\text{SO}_2$  molecule is bent with a bond angle of approximately  $120^\circ$ .



# Μοριακά Σχήματα: Το Μοντέλο VSEPR

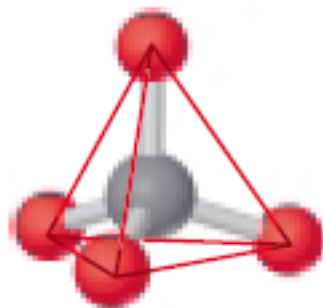
27

*Τέσσερα νέφη φορτίου:* Σ' αυτήν την περίπτωση τα νέφη βρίσκονται μακρύτερα όταν τείνουν προς τις γωνίες ενός κανονικού τετράεδρου, με το κεντρικό άτομο να βρίσκεται στο κέντρο του τετράεδρου ( $\text{CH}_4$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ).

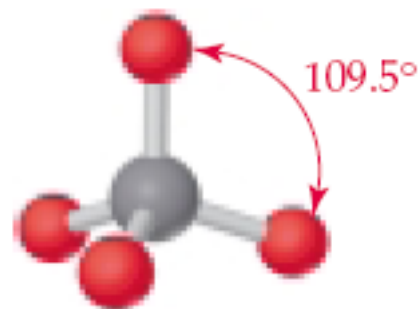


A regular tetrahedron

(a)



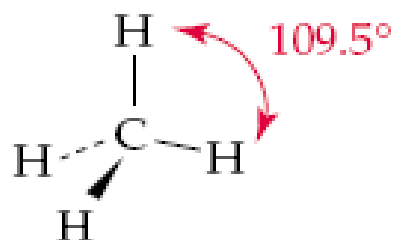
(b)



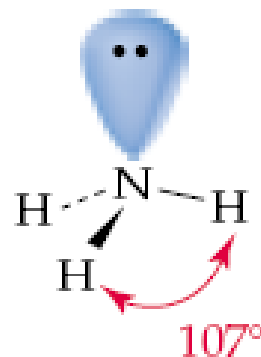
A tetrahedral molecule

(c)

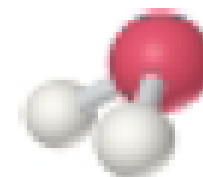
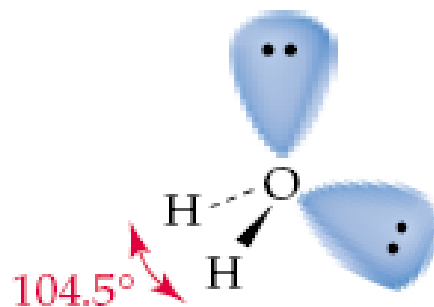
A methane molecule is tetrahedral, with bond angles of  $109.5^\circ$ .



An ammonia molecule is trigonal pyramidal, with bond angles of  $107^\circ$ .



A water molecule is bent, with a bond angle of  $104.5^\circ$ .



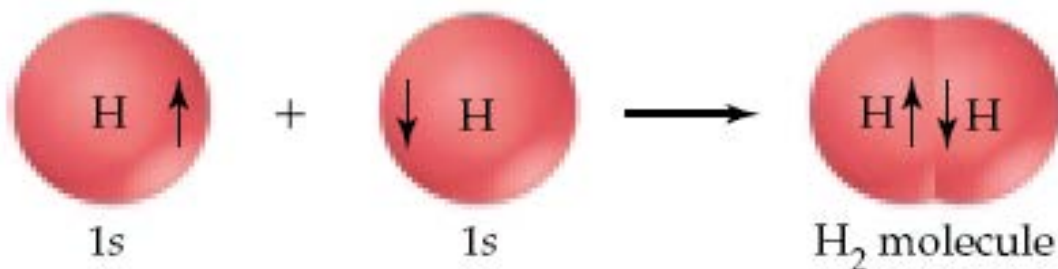
# Θεωρία του Δεσμού Σθένους

29

Η θεωρία δεσμού σθένους παρέχει μια οπτικοποίηση των τροχιακών και της νομής των ηλεκτρονίων σ' ένα ομοιοπολικό δεσμό.

Στην πραγματικότητα, ένας ομοιοπολικός δεσμός προκύπτει όταν δύο άτομα πλησιάσουν αρκετά κοντά έτσι ώστε το τροχιακό του ενός ατόμου, που καταλαμβάνεται από ένα ηλεκτρόνιο, αλληλεπικαλύπτεται με το τροχιακό του άλλου ατόμου, το οποίο επίσης καταλαμβάνεται από ένα ηλεκτρόνιο.

Το ζεύγος των ηλεκτρονίων που προκύπτει στα αλληλεπικαλυπτόμενα τροχιακά έλκονται από τους πυρήνες και των δύο ατόμων κι έτσι «δένουν» τα δύο άτομα μαζί.

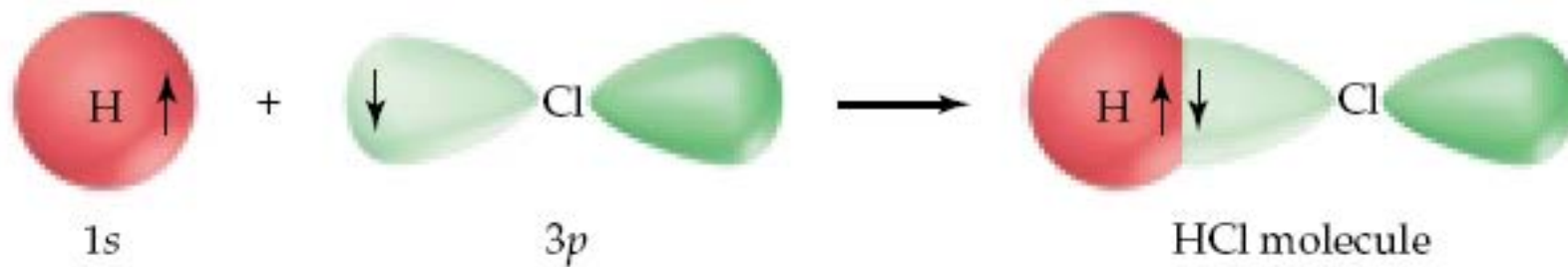
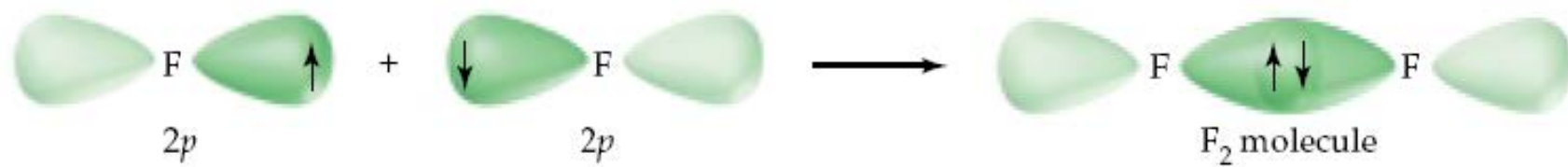


# Θεωρία του Δεσμού Σθένους

Στο μοντέλο δεσμού σθένους, η ισχύς ενός ομοιοπολικού δεσμού εξαρτάται από την έκταση της αλληλοεπικάλυψης τροχιακών. Όσο μεγαλύτερη αλληλοεπικάλυψη, τόσο ισχυρότερος ο δεσμός. Σε περιπτώσεις που υπάρχει αλληλοεπικάλυψη τροχιακών εκτός των  $s$ , τότε υπάρχει συγκεκριμένη κατεύθυνση.

Για παράδειγμα, σ' ένα μόριο  $F_2$ , ο δεσμός  $F - F$  προκύπτει από την αλληλοεπικάλυψη δύο  $2p$  τροχιακών που έχουν από ένα ηλεκτρόνιο. Τα δύο  $p$  τροχιακά θα πρέπει να τείνουν επακριβώς το ένα προς το άλλο για βέλτιστη αλληλοεπικάλυψη, και ο δεσμός σχηματίζεται κατά μήκος του άξονα των τροχιακών.

Οι δεσμοί που προκύπτουν από μετωπική αλληλοεπικάλυψη τροχιακών ονομάζονται «**σ δεσμοί**».



# Θεωρία του Δεσμού Σθένους

Οι βασικές αρχές της θεωρίας δεσμού σθένους συνοψίζονται ως εξής:

1. Οι ομοιοπολικοί δεσμοί σχηματίζονται από αλληλοεπικάλυψη ατομικών τροχιακών, καθένα από τα οποία περιέχει ένα ηλεκτρόνιο με αντιπαράλληλο spin.
2. Καθένα από τα ενωμένα άτομα περιέχει τα δικά του ατομικά τροχιακά, αλλά το ηλεκτρονικό ζεύγος στα αλληλεπικαλυπτόμενα τροχιακά μοιράζεται και στα δύο άτομα.
3. Όσο μεγαλύτερη η έκταση αλληλοεπικάλυψης, τόσο πιο ισχυρός ο δεσμός. Σ' αυτό παίζει ρόλο και η κατεύθυνση, όταν δεν εμπλέκονται μόνο s τροχιακά.



# Θεωρία Μοριακών Τροχιακών

*Το μόριο του  $H_2$*

Το μοριακό τροχιακό είναι για το μόριο ότι είναι το ατομικό τροχιακό για το άτομο. Δηλαδή, μια κυματική συνάρτηση, το τετράγωνο της οποίας είναι η πιθανότητα εύρεσης ενός ηλεκτρονίου μέσα σε μια δεδομένη περιοχή στο χώρο, μέσα στο μόριο.

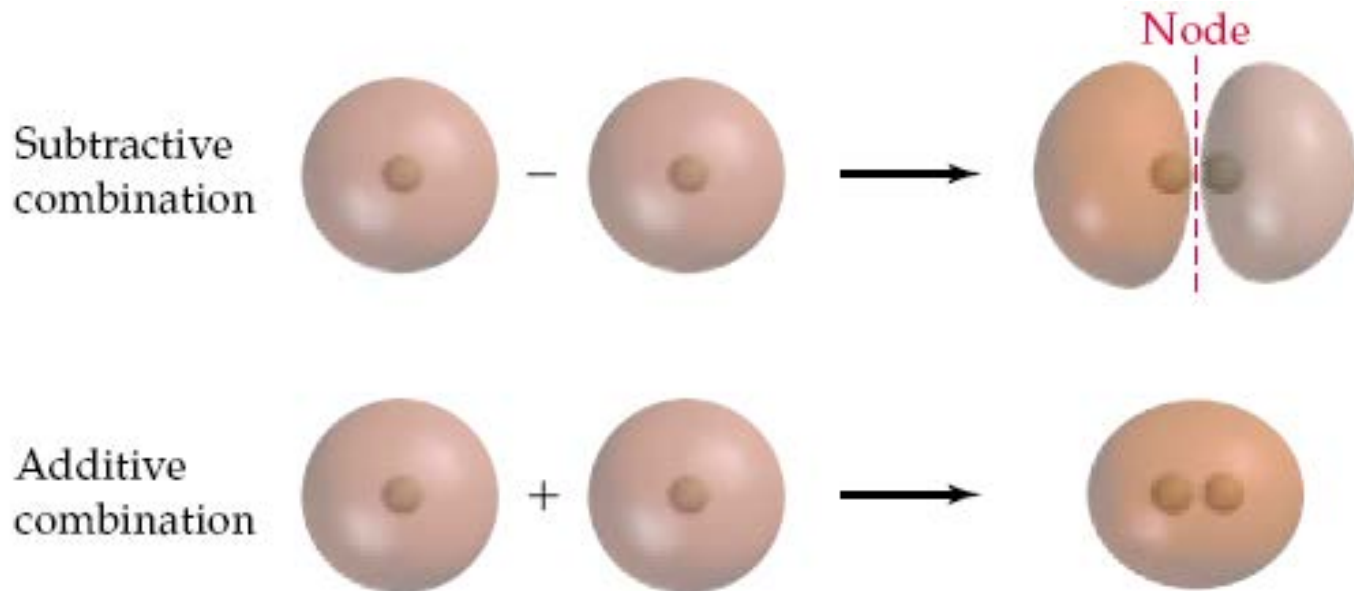
Όπως και τα ατομικά τροχιακά, έτσι και τα μοριακά έχουν συγκεκριμένα επίπεδα ενέργειας και συγκεκριμένα σχήματα, και μπορούν να καταλαμβάνονται το πολύ από δύο ηλεκτρόνια με αντιπαράλληλα spin.

# Θεωρία Μοριακών Τροχιακών

34

Η θεωρία των μοριακών τροχιακών παρέχει δύο τρόπους αλληλεπίδρασης τροχιακών· ένα προσθετικό και έναν αφαιρετικό.

Ο προσθετικό τρόπος οδηγεί στο σχηματισμό μοριακού τροχιακού που έχει περίπου το σχήμα αυγού, ενώ ο αφαιρετικός τρόπος οδηγεί στο σχηματισμό ενός μοριακού τροχιακού, το οποίο περιέχει έναν κόμβο μεταξύ των δύο ατόμων.

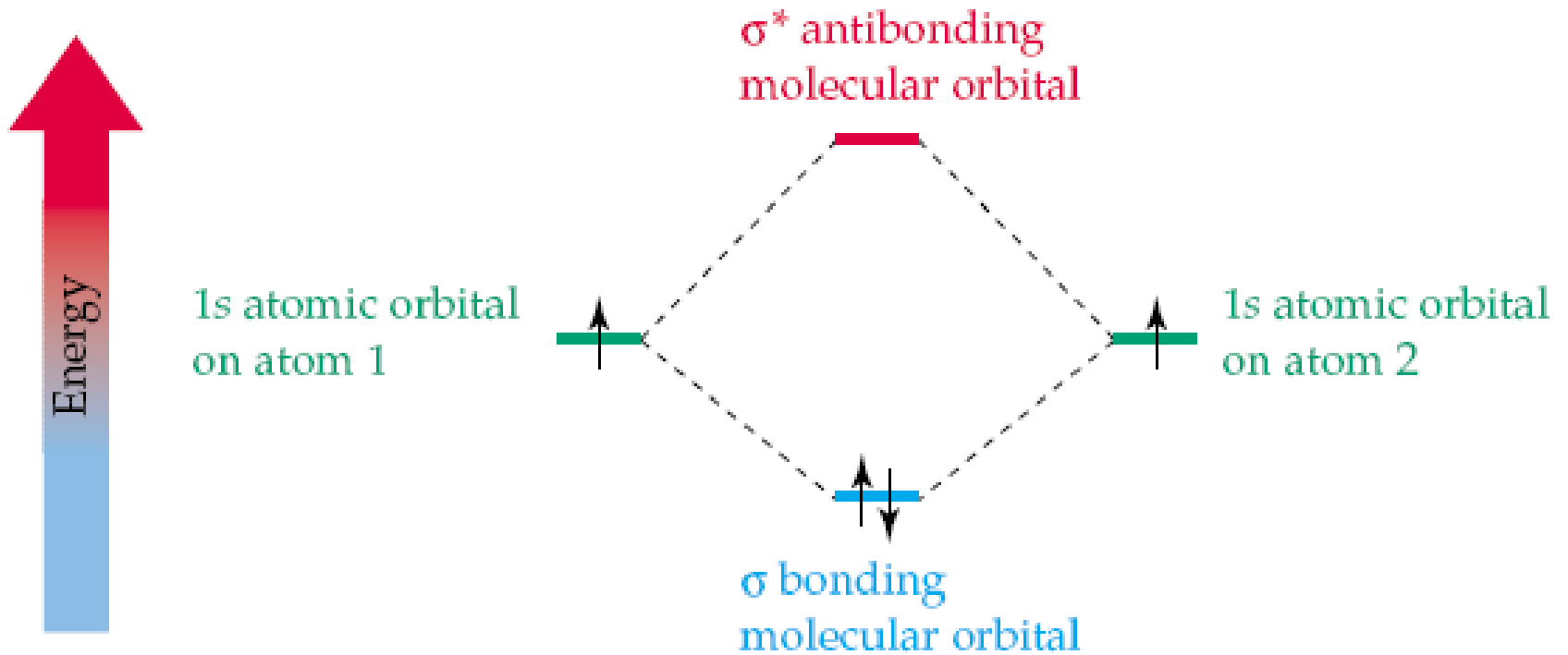


# Θεωρία Μοριακών Τροχιακών

35

Ο προσθετικός συνδυασμός, που συμβολίζεται με  $\sigma$ , έχει χαμηλότερη ενέργεια από τα δύο ξεχωριστά  $1s$  τροχιακά και ονομάζεται **δεσμικό μοριακό τροχιακό**, γιατί οποιοδήποτε ηλεκτρόνιο περιέχει βρίσκεται μεγαλύτερο χρονικό διάστημα μεταξύ των δύο πυρήνων, συγκρατώντας τα δύο άτομα μαζί.

Ο αφαιρετικός συνδυασμός, που συμβολίζεται με  $\sigma^*$ , έχει υψηλότερη ενέργεια από τα δύο ξεχωριστά  $1s$  τροχιακά και ονομάζεται **αντιδεσμικό μοριακό τροχιακό**, γιατί οποιοδήποτε ηλεκτρόνιο περιέχει δεν μπορεί να βρίσκεται μεταξύ των δύο πυρήνων και δεν συνεισφέρει στο δεσμό.



Διάγραμμα μοριακού τροχιακού

# Θεωρία Μοριακών Τροχιακών

Οι σημαντικότερες ιδέες της θεωρίας μοριακών τροχιακών έχουν ως εξής:

1. Το μοριακό τροχιακό είναι για το μόριο ότι είναι το ατομικό τροχιακό για το άτομο. Τα μοριακά έχουν συγκεκριμένα επίπεδα ενέργειας και συγκεκριμένα σχήματα.
2. Τα μοριακά τροχιακά σχηματίζονται από συνδυασμό ατομικών τροχιακών που βρίσκονται σε διαφορετικά άτομα. Ο αριθμός των μοριακών τροχιακών που σχηματίζονται είναι ο ίδιος με τον αριθμό των ατομικών τροχιακών που συνδυάζονται.
3. Τα μοριακά τροχιακά που έχουν χαμηλότερη ενέργεια από τα αρχικά ατομικά τροχιακά είναι δεσμικά. Αυτά με υψηλότερη ενέργεια είναι αντιδεσμικά.
4. Τα ηλεκτρόνια καταλαμβάνουν τα μοριακά τροχιακά αρχίζοντας από αυτά με τη χαμηλότερη ενέργεια. Μόνο δύο ηλεκτρόνια με αντιπαράλληλο spin καταλαμβάνουν ένα μοριακό τροχιακό.