Γεωμετρία Μορίων – Θεωρία VSEPR

- **Μοριακή γεωμετρία:** είναι η διάταξη των ατόμων του μορίου στο χώρο.
  - Εξαρτάται από το είδος των ατόμων που απαρτίζουν την ένωση και τον τρόπο με τον οποίο ενώνονται.

- Η ερμηνεία της μοριακής γεωμετρίας βασίζεται στη θεωρία της απώσεως των ηλεκτρονιακών ζευγών της στιβάδας σθένους (**VSEPR**, **V**alence **S**hell **E**lectron **P**air **R**epulsion).

  - Τα ηλεκτρονιακά ζεύγη της στιβάδας σθένους του κεντρικού ατόμου τοποθετούνται έτσι ώστε να υπάρχουν οι ελάχιστες δυνατές απώσεις, δηλαδή τα ηλεκτρονιακά ζεύγη βρίσκονται όσο το δυνατό πιο μακριά το ένα από το άλλο.

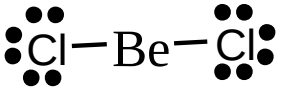
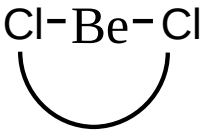
- Με τη θεωρία VSEPR μπορεί να γίνει πρόβλεψη της γεωμετρίας των ενώσεων.

Γεωμετρία Μορίων – Θεωρία VSEPR

❖ **Κανόνες που εφαρμόζονται στη θεωρία VSEPR**

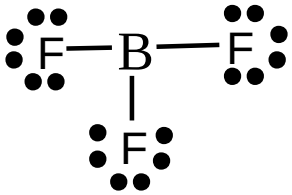
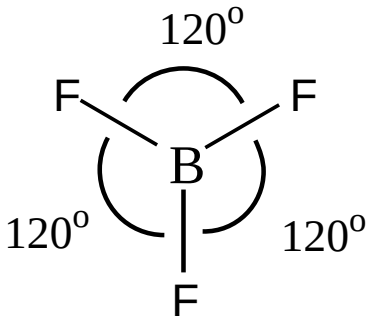
➢ Μόρια ή ιόντα που δε διαθέτουν μη δεσμικά ζεύγη ηλεκτρονίων – Ιδανική γεωμετρία

❖ 1η περίπτωση: Όταν το κεντρικό άτομο ενός μορίου (ή ιόντος) έχει δύο δεσμικά ζεύγη ηλεκτρονίων και κανένα μη δεσμικό ζεύγος, τότε **το μόριο είναι γραμμικό.** Τα δύο ζεύγη ηλεκτρονίων διατάσσονται ευθύγραμμα έχοντας στη μέση το κεντρικό άτομο.

μοριακό τύπος	τύπος κατά Lewis	γεωμετρικό σχήμα
$BeCl_2$		 180°

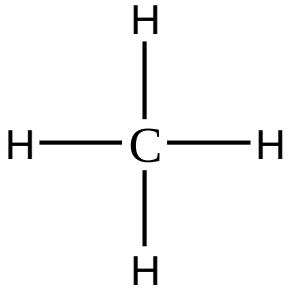
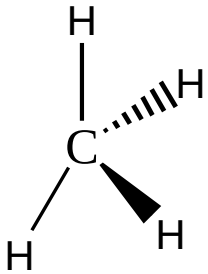
Γεωμετρία Μορίων – Θεωρία VSEPR

- 2η περίπτωση: Όταν το κεντρικό άτομο ενός μορίου (ή ιόντος) έχει τρία δεσμικά ζεύγη ηλεκτρονίων και κανένα μη δεσμικό ζεύγος, τότε **το μόριο είναι επίπεδο τριγωνικό,** καθώς τα τρία ζεύγη ηλεκτρονίων διατάσσονται τριγωνικά γύρω από το κεντρικό άτομο.

μοριακός τύπος	τύπος κατά Lewis	γεωμετρικό σχήμα
BF_3		

Γεωμετρία Μορίων – Θεωρία VSEPR

- 3η περίπτωση: Όταν το κεντρικό άτομο ενός μορίου (ή ιόντος) έχει τέσσερα δεσμικά ζεύγη ηλεκτρονίων και κανένα μη δεσμικό ζεύγος, τότε **το μόριο είναι τετραεδρικό,** καθώς τα τέσσερα δεσμικά ζεύγη ηλεκτρονίων διατάσσονται τετραεδρικά γύρω από το κεντρικό άτομο.

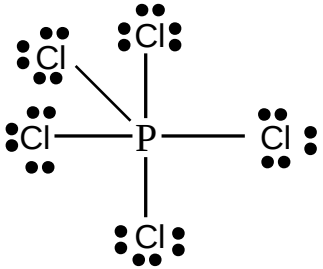
μοριακός τύπος	τύπος κατά Lewis	γεωμετρικό σχήμα
CH_4		

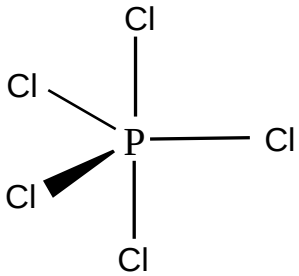
Γεωμετρία Μορίων – Θεωρία VSEPR

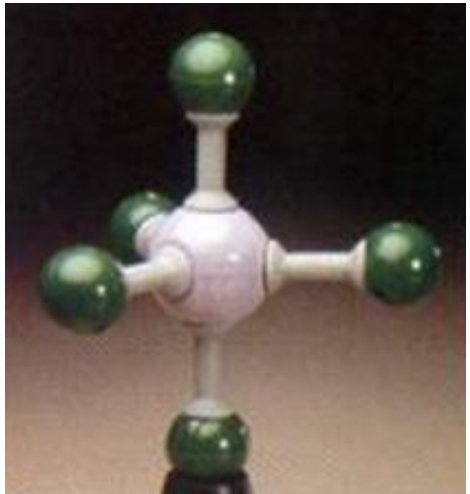
- 4η περίπτωση: Όταν το κεντρικό άτομο ενός μορίου (ή ιόντος) έχει πέντε δεσμικά ζεύγη ηλεκτρονίων και κανένα μη δεσμικό ζεύγος, τότε **το μόριο είναι τριγωνικό διπυραμιδικό**.

μοριακός τύπος | τύπος κατά Lewis | γεωμετρικό σχήμα

PCl_5

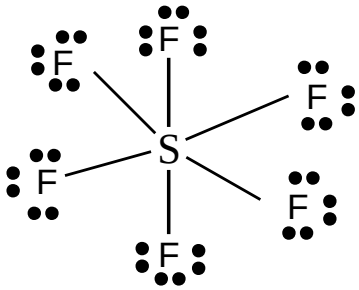
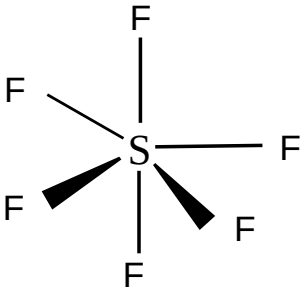


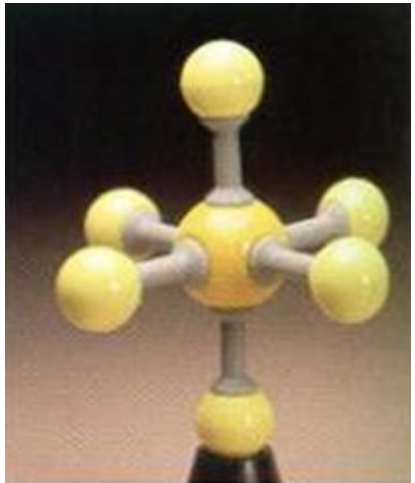




Γεωμετρία Μορίων – Θεωρία VSEPR

- 5η περίπτωση: Όταν το κεντρικό άτομο ενός μορίου (ή ιόντος) έχει έξι δεσμικά ζεύγη ηλεκτρονίων και κανένα μη δεσμικό ζεύγος, τότε **το μόριο είναι οκταεδρικό**.

μοριακός τύπος	τύπος κατά Lewis	γεωμετρικό σχήμα
SF_6		

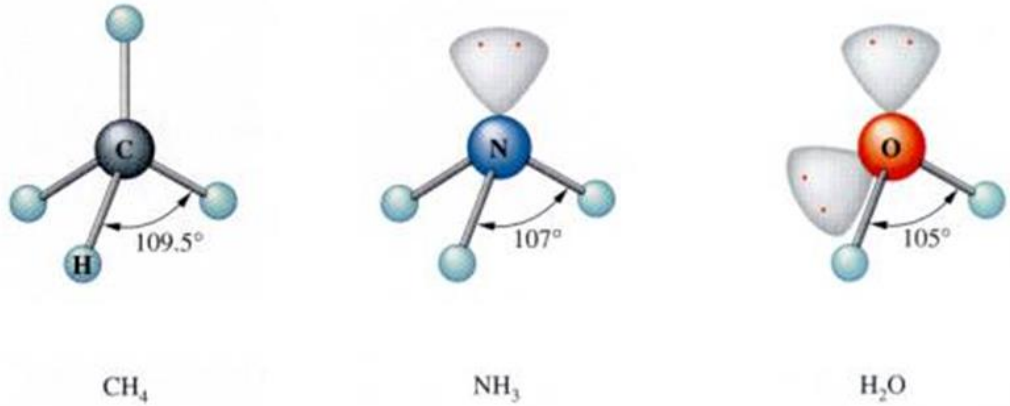


Γεωμετρία Μορίων – Θεωρία VSEPR

❖ Μόρια ή ιόντα που διαθέτουν μη δεσμικά ζεύγη ηλεκτρονίων – Αποκλίσεις από την ιδανική γεωμετρία

➢ Η παρουσία μη δεσμικών ζευγών ηλεκτρονίων στο κεντρικό άτομο προκαλεί **παραμόρφωση της στερεοχημικής διάταξης**, όπως αυτή προκύπτει (με βάση τους προηγούμενους κανόνες) αν προσμετρήσουμε τα μη δεσμικά ως δεσμικά ζεύγη ηλεκτρονίων.

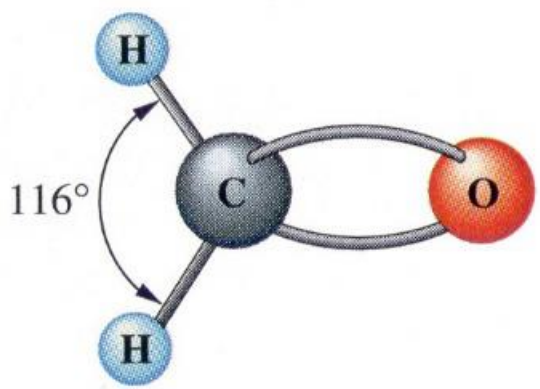
✓ Αυτό συμβαίνει επειδή τα μη δεσμικά ζεύγη απωθούν περισσότερο τα άλλα ζεύγη ηλεκτρονίων, καταλαμβάνοντας πιο πολύ χώρο απ' ότι τα δεσμικά ζεύγη ηλεκτρονίων



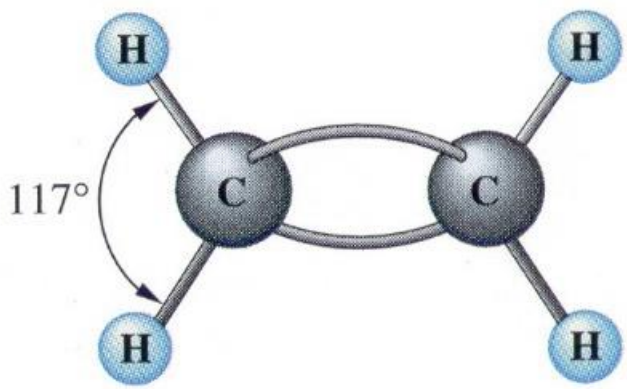
Γεωμετρία Μορίων – Θεωρία VSEPR

❖ Αποκλίσεις από την ιδανική γεωμετρία

➢ Οι πολλαπλοί δεσμοί αντιμετωπίζονται όπως οι απλοί δεσμοί. Όμως, οι πολλαπλοί δεσμοί λόγω του μεγαλύτερου ηλεκτρονιακού φορτίου τους, απωθούν περισσότερο (σε σχέση με τους απλούς δεσμούς) τα γειτονικά ζεύγη ηλεκτρονίων, συνεπώς, καταλαμβάνουν πιο πολύ χώρο από ότι οι απλοί δεσμοί.

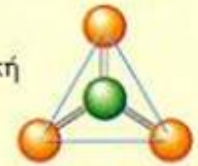
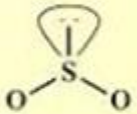
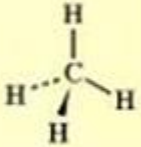
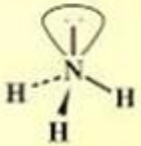


CH_2O

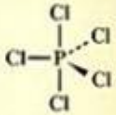
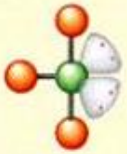
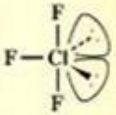
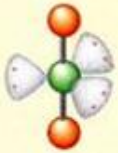
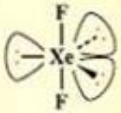


CH_2CH_2

Γεωμετρία Μορίων – Θεωρία VSEPR

ΖΕΥΓΗ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΩΝ συνολικά	δεσμικά	μη δεσμικα	ΔΙΑΤΑΞΗ ΖΕΥΓΩΝ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΩΝ	ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ ΜΟΡΙΩΝ		ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑΤΑ	
2	2	0	γραμμική	γραμμική AX_2		BeF_2	F—Be—F
3	3	0	επίπεδη τριγωνική	επίπεδη τριγωνική AX_3		BF_3	
	2	1		γωνιακή AX_2E		SO_2	
4	4	0	τετραεδρική	τετραεδρική AX_4		CH_4	
	3	1		τριγωνική πυραμίδα AX_3E		NH_3	
	2	2		γωνιακή AX_2E_2		H_2O	

Γεωμετρία Μορίων – Θεωρία VSEPR

ΖΕΥΓΗ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΩΝ			ΔΙΑΤΑΞΗ ΖΕΥΓΩΝ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΩΝ	ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ ΜΟΡΙΩΝ		ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑΤΑ	
συνολικά	δεσμικά	μη δεσμικά					
5	5	0	τριγωνική διπυραμίδα	τριγωνική διπυραμίδα AX_5		PCl_5	
	4	1		παραμορφωμένο τετράεδρο AX_4E		SF_4	
	3	2		Τ-μορφή AX_3E_2		ClF_3	
	2	3		γραμμικό AX_2E_3		XeF_2	
6	6	0	οκτάεδρο	οκτάεδρο AX_6		SF_6	
	5	1		τετραγωνική πυραμίδα AX_5E		IF_5	
	4	2		επίπεδο τετράγωνο AX_4E_2		XeF_4	

Γεωμετρία Μορίων – Θεωρία VSEPR

❖ Μεθοδολογία για την πρόβλεψη της μοριακής γεωμετρία:

- Γράφουμε τον ηλεκτρονιακό τύπο κατά Lewis.
- Μετρούμε το συνολικό αριθμό δεσμικών και μη δεσμικών ζευγών ηλεκτρονίων του κεντρικού ατόμου.
- Προσμετρούμε τους πολλαπλούς δεσμούς ως απλούς δεσμούς.
- Με βάση τις περιπτώσεις 1-5 της θεωρίας VSERP, βρίσκουμε την ιδανική γεωμετρική διάταξη των ζευγών ηλεκτρονίων γύρω από το κεντρικό άτομο, θεωρώντας τα μη δεσμικά ζεύγη ηλεκτρονίων σαν «υποκαταστάτες».
- Προσμετρούμε τα μη δεσμικά ζεύγη ηλεκτρονίων και καθορίζουμε την παραμόρφωση της γεωμετρίας, λαμβάνοντας υπόψη ότι τα μη δεσμικά ζεύγη ηλεκτρονίων, καθώς και οι πολλαπλοί δεσμοί, καταλαμβάνουν περισσότερο χώρο από ότι τα δεσμικά και οι απλοί δεσμοί, αντίστοιχα.

Ομοιοπολικός Δεσμός

❖ Ασκήσεις

Να προβλέψετε τα γεωμετρικά σχήματα των παρακάτω μορίων ή ιόντων με βάση τη θεωρία VSEPR: α) HCN, β) NH_4^+, γ) NO_3^-, δ) NSF

Ένα από τα παρακάτω ιόντα έχει επίπεδη τριγωνική διάταξη. Ποιο είναι αυτό; Να δικαιολογήσετε την απάντησή σας. α) SO_3^{2-}, β) PO_4^{3-}, γ) PF_6^-, δ) CO_3^{2-}.

Καθένα από τα παρακάτω μόρια έχουν ένα ή περισσότερους πολλαπλούς δεσμούς. Να γράψετε τις δομές Lewis των μορίων και να προβλέψετε με βάση τη θεωρία VSEPR τη γεωμετρία των μορίων: α) CO_2, β) Cl_2CO, γ)$ClNO_2$.

Με βάση τη θεωρία VSEPR προβλέψτε τη γεωμετρία των παρακάτω ενώσεων ή πολυατομικών ιόντων: TeF_6, H_2Se, IF_4^-, BBr_3, $AsCl_5$, GeI_4, BrF_3, SeF_4. Δίνονται: $_{52}Te$, $_{34}Se$, $_{53}I$, $_{35}Br$, $_{33}As$, $_{32}Ge$.