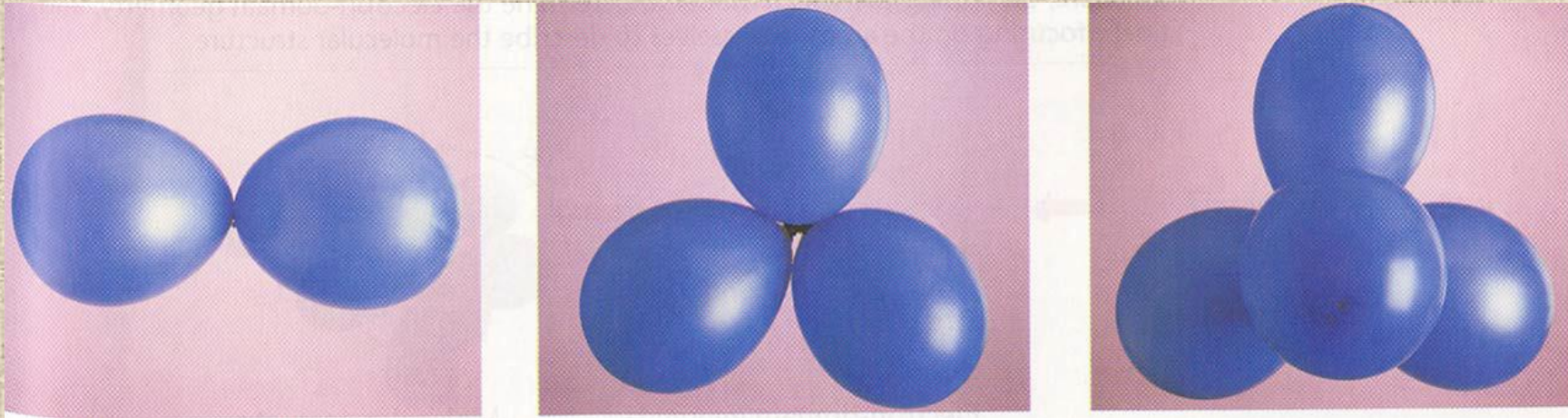


Γεωμετρία Μορίων – Θεωρία VSEPR

VSEPR: Valence Shell Electron Pair Repulsion



Τα ηλεκτρονιακά ζεύγη της στιβάδας σθένους του κεντρικού ατόμου τοποθετούνται έτσι ώστε να υπάρχουν οι ελάχιστες δυνατές απώσεις.



Τα ηλεκτρονιακά ζεύγη βρίσκονται όσο το δυνατό πιο μακριά το ένα από το άλλο.

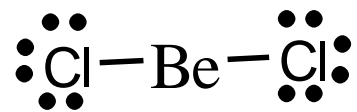
Ιδανική γεωμετρία: το κεντρικό άτομο δεν διαθέτει μη δεσμικά ζεύγη e⁻

Περίπτωση 1: το κεντρικό άτομο έχει 2 δεσμικά ζεύγη e⁻

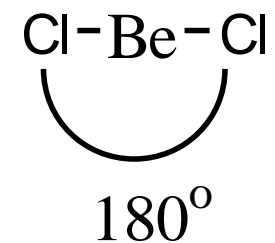
μοριακό τύπος



τύπος κατά Lewis



γεωμετρικό σχήμα



AB₂



Διευθέτηση ζευγών: γραμμική

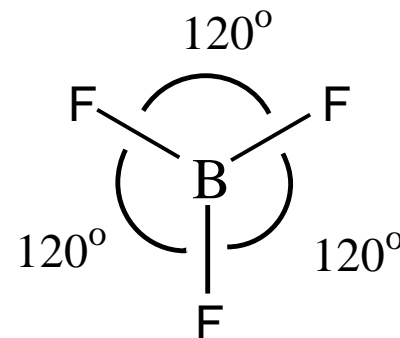
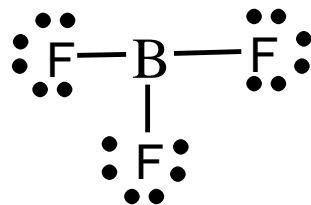
Μοριακή γεωμετρία: γραμμική

Περίπτωση 2: το κεντρικό άτομο έχει 3 δεσμικά ζεύγη e⁻

μοριακός τύπος

τύπος κατά Lewis

γεωμετρικό σχήμα

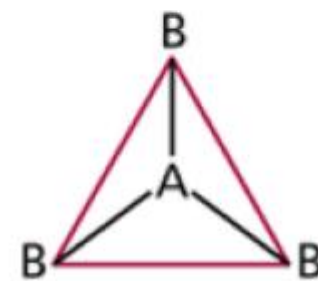
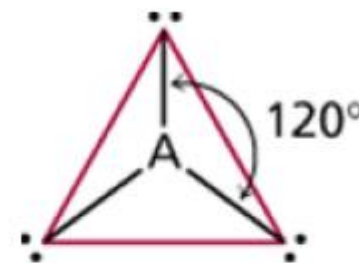


AB₃



Διευθέτηση ζευγών: **τριγωνική**

Μοριακή γεωμετρία: **τριγωνική**

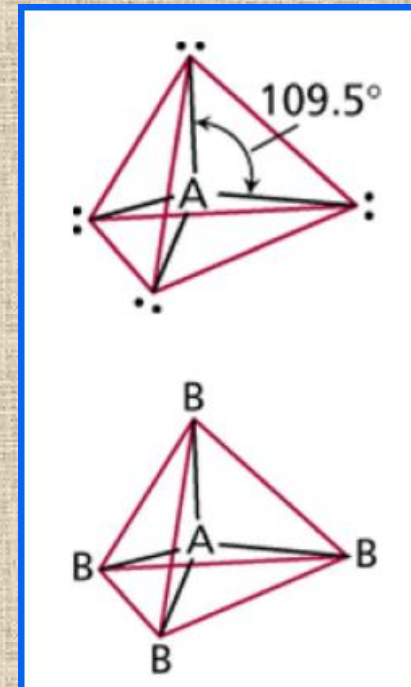
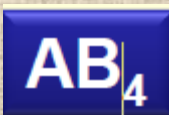
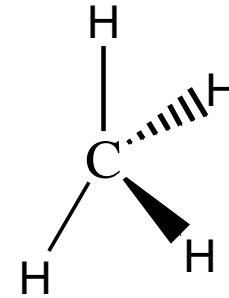
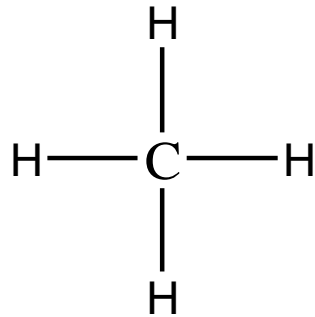


Περίπτωση 3: το κεντρικό άτομο έχει 4 δεσμικά ζεύγη e⁻

μοριακός τύπος

τύπος κατά Lewis

γεωμετρικό σχήμα



Διευθέτηση ζευγών: **τετραεδρική**

Μοριακή γεωμετρία: **τετραεδρική**

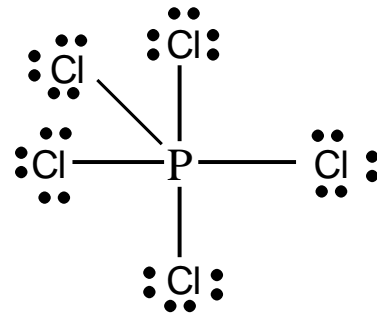
Περίπτωση 4: το κεντρικό άτομο έχει 5 δεσμικά ζεύγη e⁻

AB₅

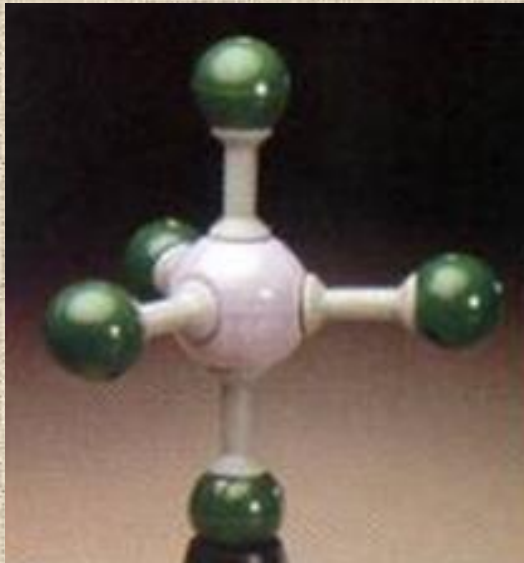
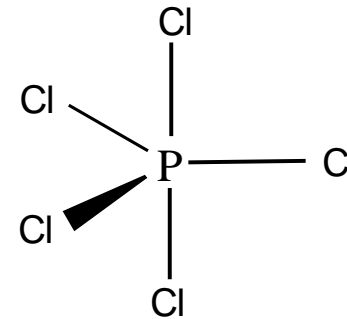
μοριακός τύπος

PCl₅

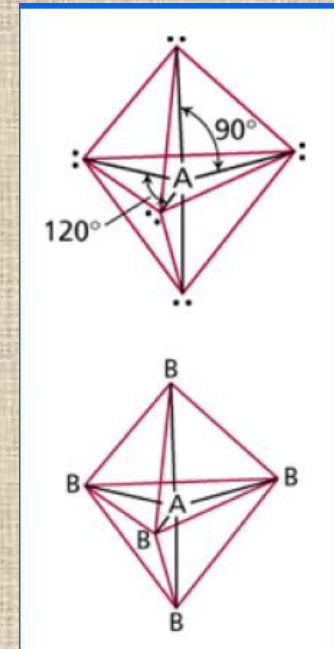
τύπος κατά Lewis



γεωμετρικό σχήμα



Διευθέτηση ζευγών: **τριγωνική διπυραμιδική**
Μοριακή γεωμετρία: **τριγωνική διπυραμιδική**



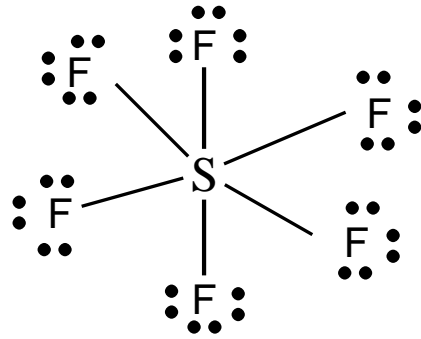
Περίπτωση 5: το κεντρικό άτομο έχει 6 δεσμικά ζεύγη e⁻

AB₆

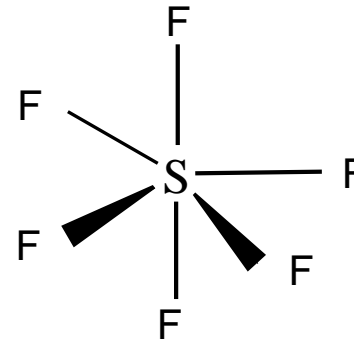
μοριακός τύπος

SF₆

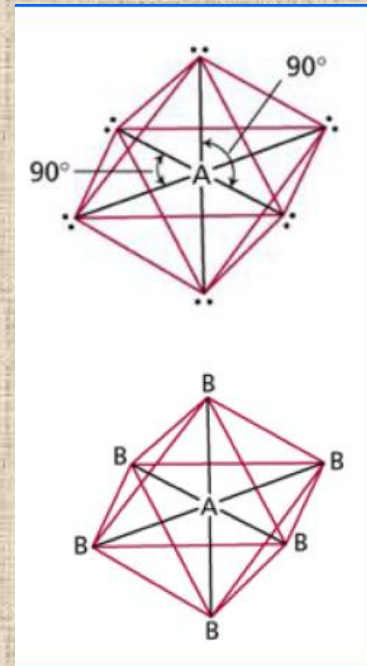
τύπος κατά Lewis



γεωμετρικό σχήμα



Διευθέτηση ζευγών: **οκταεδρική**
Μοριακή γεωμετρία: **οκταεδρική**

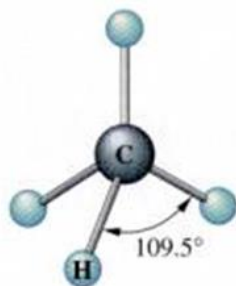


**Αποκλίσεις από την ιδανική γεωμετρία:
το κεντρικό άτομο διαθέτει μη δεσμικά ζεύγη e⁻**

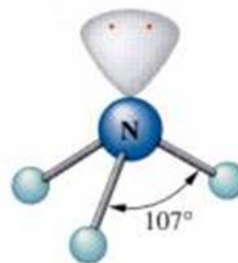
Απωση δεσμικών ζευγών e⁻ < μη δεσμικών ζευγών e⁻ < Απωση μη δεσμικών ζευγών e⁻ με δεσμικά ζεύγη με δεσμικά ζεύγη με μη δεσμικά ζεύγη

AX_nE_m

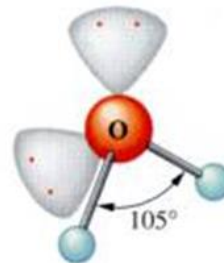
**παραμόρφωση της
στεreoχημικής διάταξης**




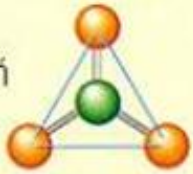

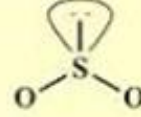

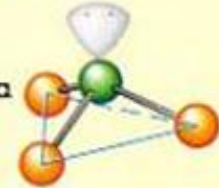
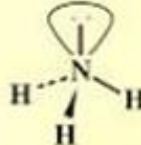


CH₄


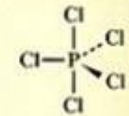

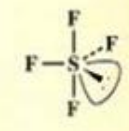
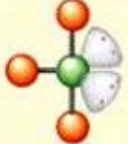
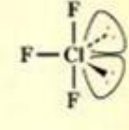
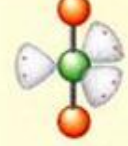
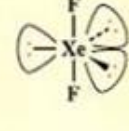
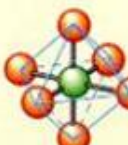


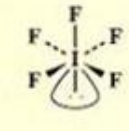




NH₃



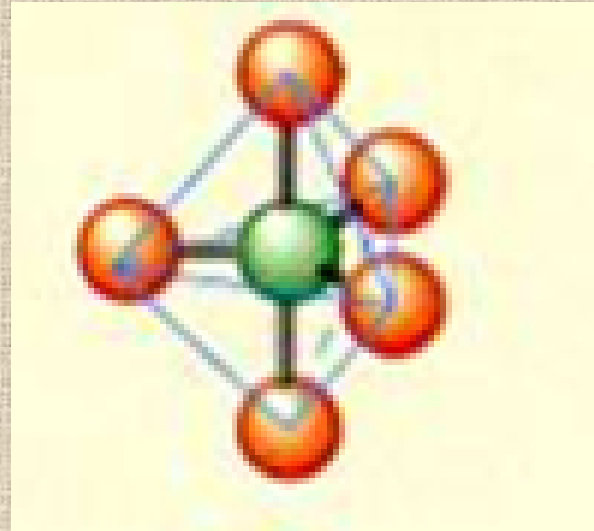
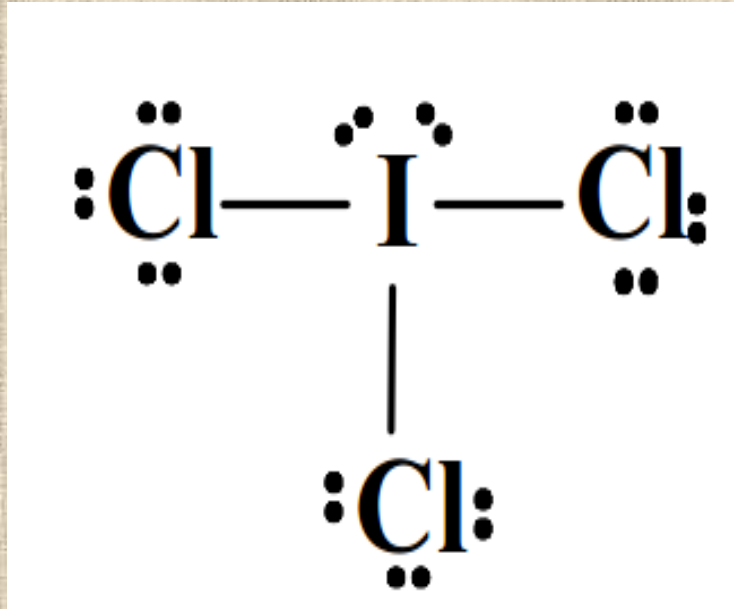
H₂O

ΖΕΥΓΗ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΩΝ συνολικά δεσμικά μη δεσμικά			ΔΙΑΤΑΞΗ ΖΕΥΓΩΝ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΩΝ	ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ ΜΟΡΙΩΝ	ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑΤΑ
2	2	0	γραμμική	γραμμική AX_2	 BeF_2 $F-Be-F$
3	$\left\{ \begin{array}{l} 3 \\ 0 \end{array} \right\}$	$\left\{ \begin{array}{l} 0 \\ 1 \end{array} \right\}$	επίπεδη τριγωνική	επίπεδη τριγωνική AX_3	 BF_3 $\begin{array}{c} F \\ \\ F-B-F \end{array}$
				γωνιακή AX_2E	 SO_2 
4	$\left\{ \begin{array}{l} 4 \\ 3 \\ 2 \end{array} \right\}$	$\left\{ \begin{array}{l} 0 \\ 1 \\ 2 \end{array} \right\}$	τετραεδρική	τετραεδρική AX_4	 CH_4 $\begin{array}{c} H \\ \\ H-C-H \\ \\ H \end{array}$
				τριγωνική πυραμίδα AX_3E	 NH_3 
				γωνιακή AX_2E_2	 H_2O 

ΖΕΥΓΗ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΩΝ συνολικά δεσμικά μηδεσμικά	ΔΙΑΤΑΞΗ ΖΕΥΓΩΝ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΩΝ	ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ ΜΟΡΙΩΝ	ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑΤΑ	
5	$\left. \begin{array}{l} 5 & 0 \\ 4 & 1 \\ 3 & 2 \\ 2 & 3 \end{array} \right\}$	τριγωνική διπυραμίδα	AX_6 	PCl_5 
			AX_4E 	SF_4 
			AX_3E_2 	ClF_3 
			AX_2E_3 	XeF_2 
6	$\left. \begin{array}{l} 6 & 0 \\ 5 & 1 \\ 4 & 2 \end{array} \right\}$	οκτάεδρο	AX_6 	SF_6 
			AX_5E 	IF_5 
			AX_4E_2 	XeF_4 

Μεθοδολογία για την πρόβλεψη της μοριακής γεωμετρίας

1. Γράφουμε τον ηλεκτρονιακό τύπο κατά Lewis.
2. Μετρούμε το συνολικό αριθμό δεσμικών και μη δεσμικών ζευγών ηλεκτρονίων του κεντρικού ατόμου. Προσμετρούμε τους πολλαπλούς δεσμούς ως απλούς δεσμούς.
3. Με βάση τις περιπτώσεις 1-5 της θεωρίας VSEPR, βρίσκουμε την ιδανική γεωμετρική διάταξη των ζευγών ηλεκτρονίων γύρω από το κεντρικό άτομο, θεωρώντας τα μη δεσμικά ζεύγη ηλεκτρονίων σαν «υποκαταστάτες».
4. 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.



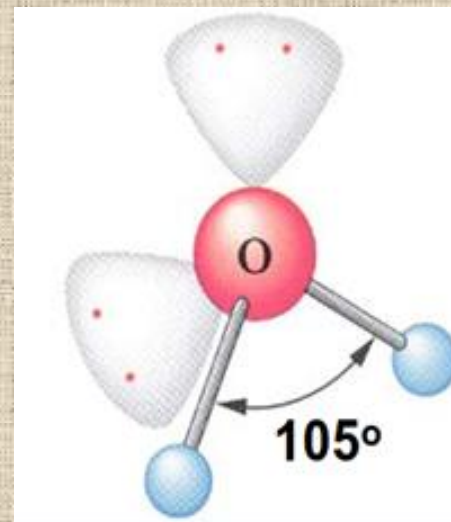
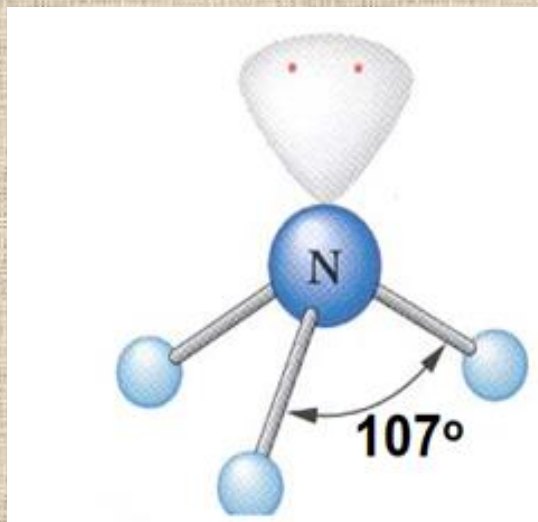
- Γεωμετρία ηλεκτρονικών ζευγών: AX_5 Τριγωνική διπυραμιδική
- Μοριακή γεωμετρία: AX_3E_2 Σχήμα T

Αποκλίσεις από την ιδανική γεωμετρία – Μη δεσμικά e

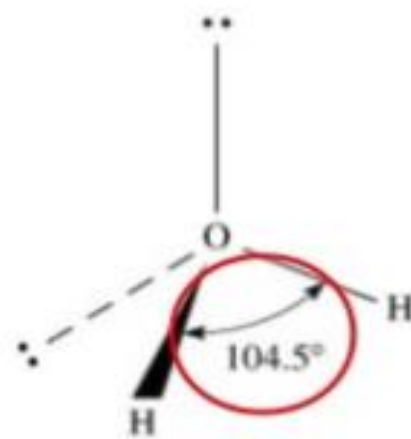
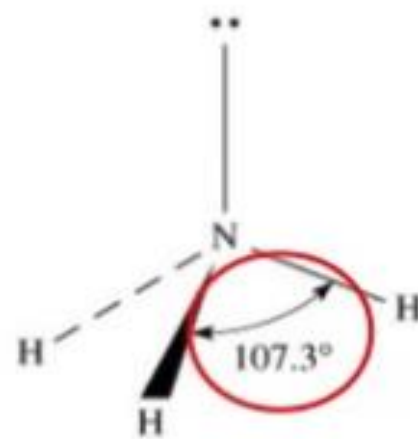
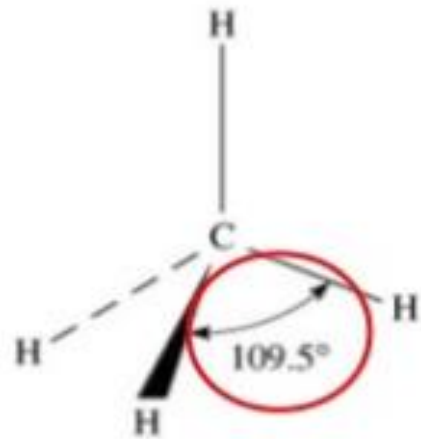
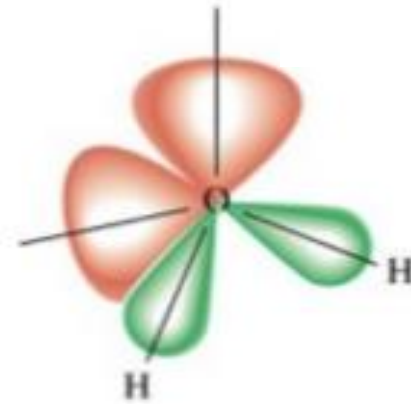
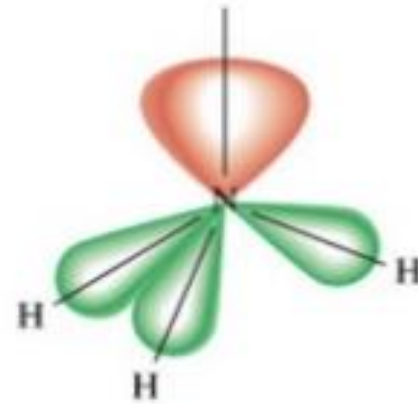
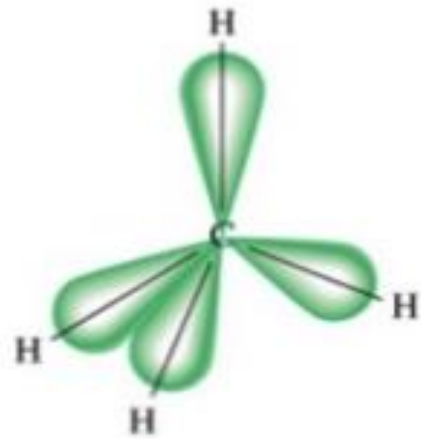
Τα μη δεσμικά ηλεκτρόνια είναι πιο διάχυτα στο χώρο από τα δεσμικά που συγκρατούνται πιο κοντά στους πυρήνες



Ένα μη δεσμικό ζεύγος ηλεκτρονίων καταλαμβάνει περισσότερο χώρο από ένα δεσμικό ζεύγος

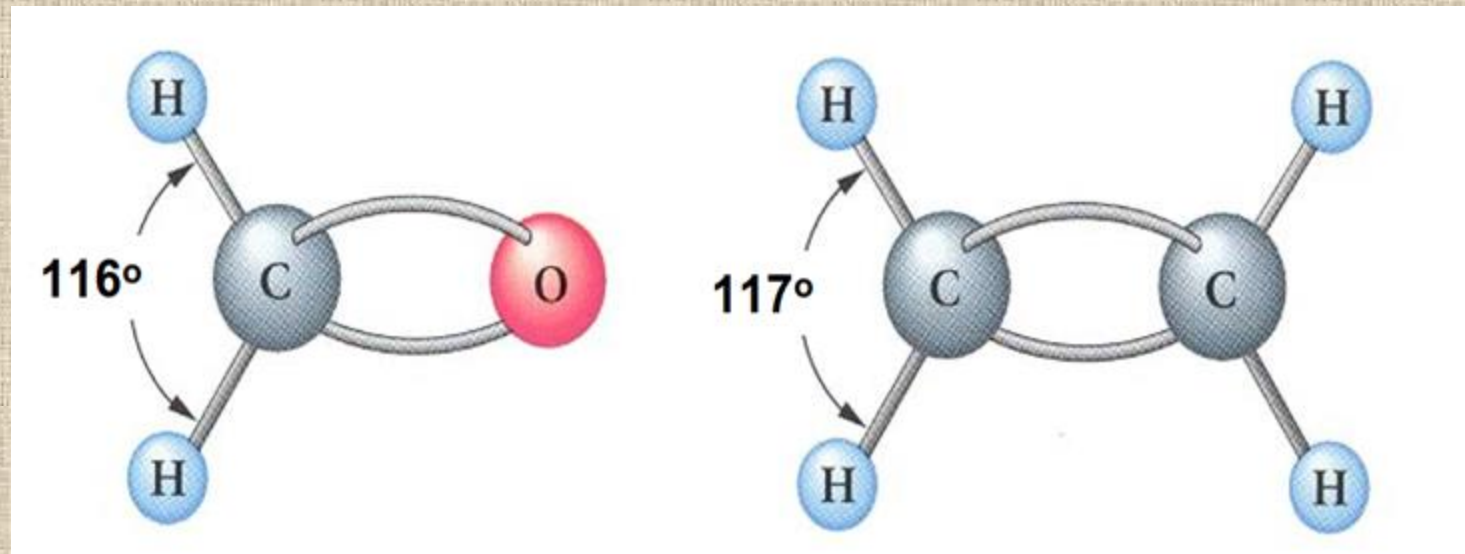


Άπωση δεσμικών ζευγών e- με δεσμικά ζεύγη < μη δεσμικών ζευγών e- με δεσμικά ζεύγη < Άπωση μη δεσμικών ζευγών e- με μη δεσμικά ζεύγη



Αποκλίσεις από την ιδανική γεωμετρία – Πολλαπλοί δεσμοί

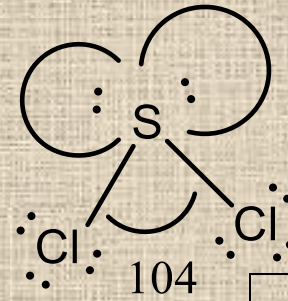
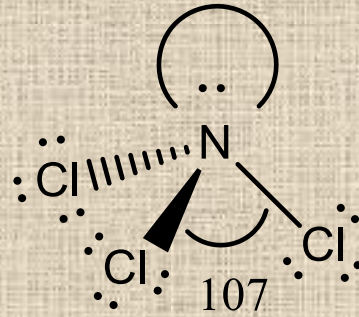
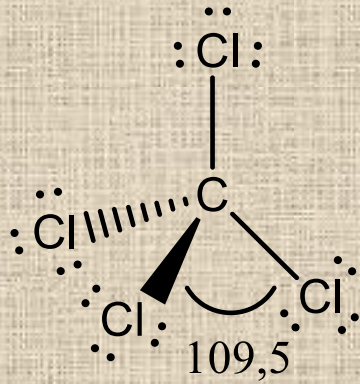
- ❖ Οι πολλαπλοί δεσμοί καταλαμβάνουν περισσότερο χώρο από τους απλούς δεσμούς
- ❖ Ο χώρος που καταλαμβάνουν είναι ανάλογος της τάξης του δεσμού



Να καταταγούν κατά σειρά αυξανόμενης γωνίας δεσμών τα παρακάτω:

α) CCl_4 β) NCl_3 γ) Cl_2S

Γεωμετρία Ηλεκτρονικών Ζευγών : Τετραεδρική, $109,5^\circ$

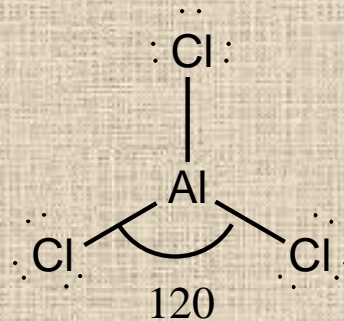
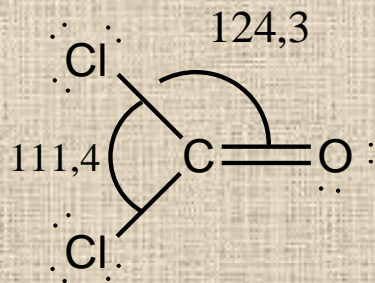


$\text{Cl}_2\text{S} < \text{NCl}_3 < \text{CCl}_4$

αριθμός μη δεσμικών ζευγών ↑
γωνία δεσμού ↓

Να εξηγηθεί η διαφορά των γωνιών δεσμών στις ενώσεις COCl_2 και AlCl_3

Γεωμετρία Ηλεκτρονικών Ζευγών : Επίπεδη τριγωνική, 120°

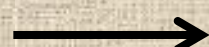
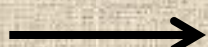


τάξη δεσμού ↑
απώσεις ↓

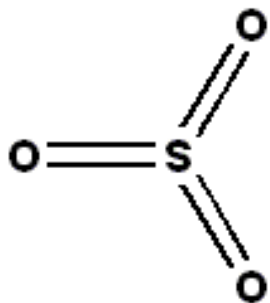
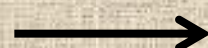
Μόριο/ίόν	Τύπος Lewis	Γεωμετρία ΗΖ	Μοριακή Γεωμετρία
IF_2^-		τριγωνική διπυραμδική 	γραμμική
IF_4^+		τριγωνική διπυραμδική 	παραμορφωμένη τετραεδρική
IF_5		οκταεδρική 	τετραγωνική πυραμδική
PCl_3		τετραεδρική 	τριγωνική πυραμδική



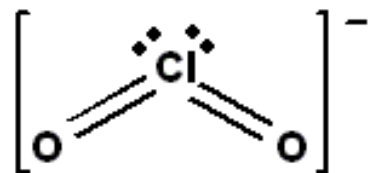
Ζεύγη: γραμμική
Μόριο: γραμμική



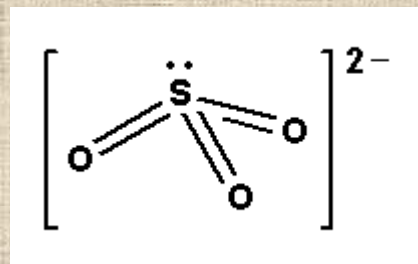
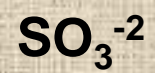
Ζεύγη: γραμμική
Μόριο: γραμμική



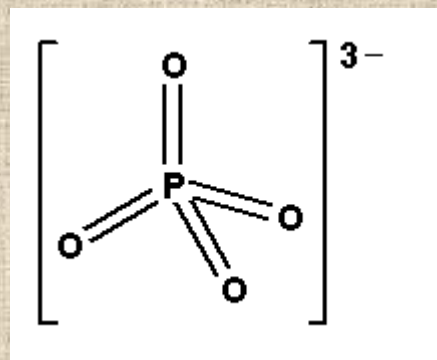
Ζεύγη: επίπεδη τριγωνική
Μόριο: επίπεδη τριγωνική



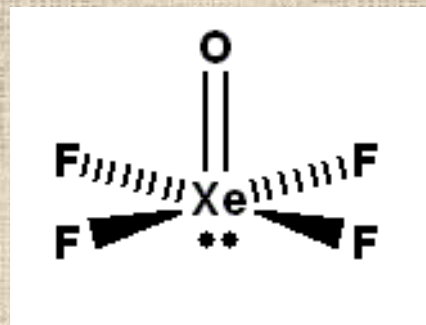
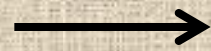
Ζεύγη: τετραεδρική
Μόριο: γωνιακή



Ζεύγη: τετραεδρική
Μόριο: τριγωνική πυραμιδική



Ζεύγη: τετραεδρική
Μόριο: τετραεδρική



Ζεύγη: οκταεδρική
Μόριο: τετραγωνική πυραμίδα

Πρόβλεψη της γεωμετρίας μορίων/ιόντων με βάση τη θεωρία VSEPR

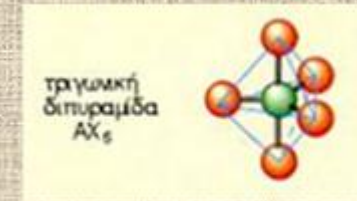
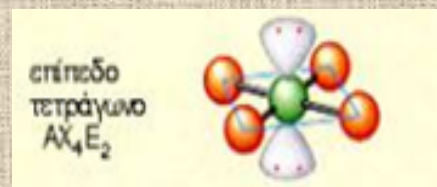
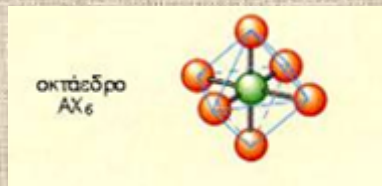
Μόριο/ιόν	Τύπος Lewis	Γεωμετρία
IF_2^-	$\left[\begin{array}{c} \cdot\cdot \\ \cdot\cdot \\ \text{:F} - \text{I} - \text{F:} \\ \cdot\cdot \\ \cdot\cdot \end{array} \right]^-$	γραμμική
IF_4^+	$\left[\begin{array}{c} \cdot\cdot \\ \cdot\cdot \\ \text{:F} & \text{I} & \text{F:} \\ \cdot\cdot & \cdot\cdot & \cdot\cdot \\ \cdot\cdot & \cdot\cdot & \cdot\cdot \\ \text{:F} & & \text{F:} \\ \cdot\cdot & & \cdot\cdot \end{array} \right]^+$	παραμορφωμένη τετραεδρική
IF_5	$\begin{array}{c} \cdot\cdot \\ \cdot\cdot \\ \text{:F} & \text{I} & \text{F:} \\ \cdot\cdot & \cdot\cdot & \cdot\cdot \\ \cdot\cdot & \cdot\cdot & \cdot\cdot \\ \text{:F} & & \text{F:} \\ \cdot\cdot & & \cdot\cdot \\ & & \cdot\cdot \\ & & \text{:F:} \\ & & \cdot\cdot \end{array}$	τετραγωνική πυραμιδική
PCl_3	$\begin{array}{c} \cdot\cdot \\ \cdot\cdot \\ \text{:Cl} - \text{P} - \text{Cl:} \\ \cdot\cdot \\ \cdot\cdot \\ & & \cdot\cdot \\ & & \text{:Cl:} \\ & & \cdot\cdot \end{array}$	τριγωνική πυραμιδική

Τι σχήμα έχει το μόριο του H_2O σύμφωνα με τη θεωρία Lewis;

Έχει βρεθεί ότι το μήκος των δεσμών N-O στο νιτρώδες οξύ είναι 120 και 146 pm. Ποιος είναι ο τύπος Lewis;

Ποιοι είναι οι τύποι Lewis και ποια προβλέπεται να είναι η γεωμετρία των ιόντων: (α) ClF_2^- , (β) ClF_4^- , (γ) ClF_4^+ , (δ) ClF_6^+

Να εξηγηθεί γιατί στα ιόντα NO_2^+ και NO_2^- η γωνία O-N-O είναι 180° και 115° αντίστοιχα



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: $_{52}\text{Te}$, $_{34}\text{Se}$, $_{53}\text{I}$, $_{35}\text{Br}$, $_{33}\text{As}$, $_{32}\text{Ge}$.

Πολικότητα Μορίων

- ❖ Πολικά είναι τα μόρια τα οποία παρουσιάζουν θετικό και αρνητικό πόλο.
- ❖ Η πολικότητα των μορίων έχει άμεση σχέση με την ισχύ των διαμοριακών δυνάμεων και την συμπεριφορά των ενώσεων ως διαλύτες

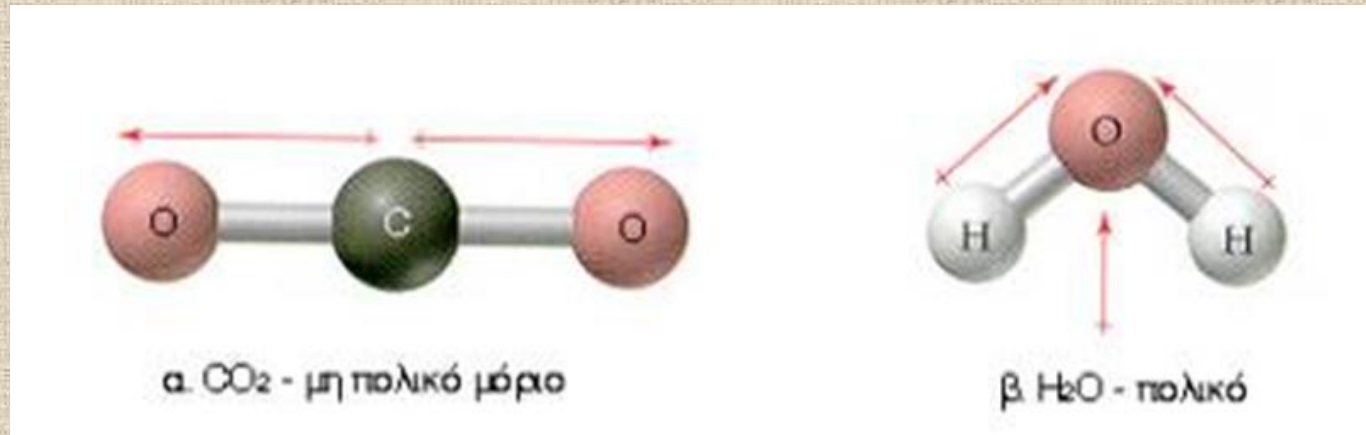
$$\mu = \delta \cdot r$$

μ : διπολική ροπή

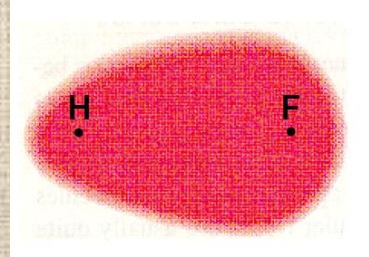
δ : το στοιχειώδες φορτίο ($\delta+$ ή $\delta-$) που εντοπίζεται στον κάθε πόλο ($q=1,61 \times 10^{-19}$ C)

r : η απόσταση των πόλων

Μονάδες διπολικής ροπής : debye (D), C·m (coulomb x meter) $1D=3.34 \times 10^{-30}$ C·m



- ❖ Η πολικότητα ενός μορίου καθορίζεται από την πολικότητα των δεσμών μεταξύ των ατόμων
- ❖ Η πολικότητα των δεσμών καθορίζεται από την διαφορά ηλεκτραρνητικότητας των ατόμων



Li 1,0	Be 1,5	B 2,0	C 2,5	N 3,0	O 3,5	F 4,0
Na 0,9	Mg 1,2	Al 1,5	Si 1,8	P 2,1	S 2,5	Cl 3,0
K 0,8	Ca 1,0	Ga 1,6	Ge 1,8	As 2,0	Se 2,4	Br 2,8
Rb 0,8	Ba 1,0	In 1,7	Sn 1,8	Sb 1,9	Te 2,1	I 2,5
Cs 0,7						

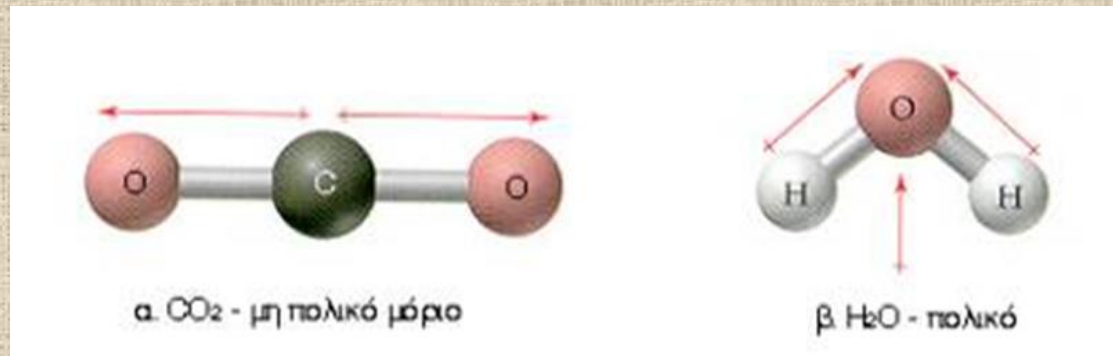


*όσο μεγαλύτερη η διαφορά
ηλεκτραρνητικότητας, τόσο μεγαλύτερη η
πολικότητα του δεσμού*

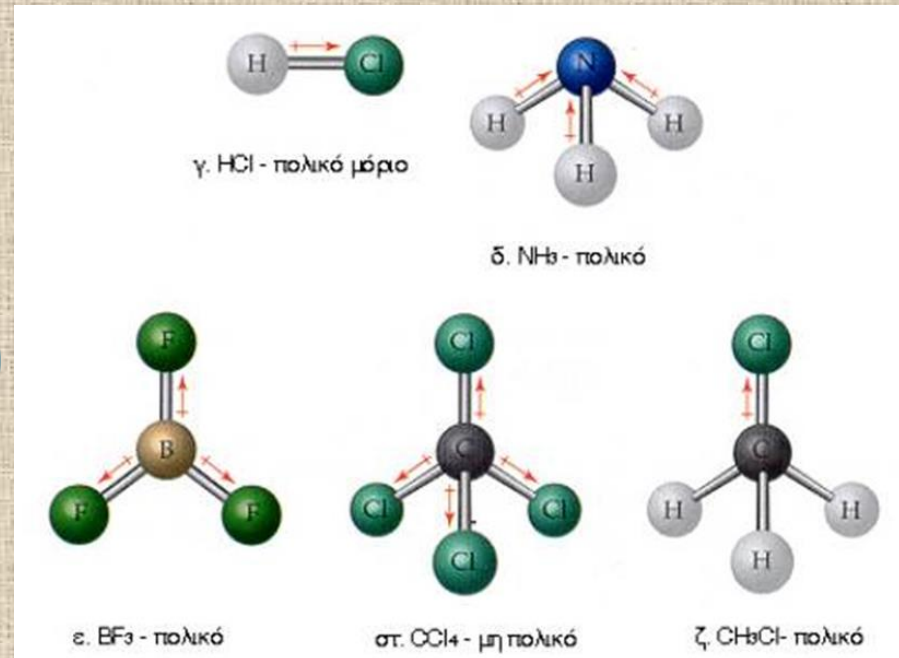
Να καταταγούν οι παρακάτω δεσμοί κατά σειρά αυξανόμενης πολικότητας:

H–Se, P–Cl, N–Cl, N–F (ηλεκτραρνητικότητα H = 2.1)

❖ Η πολικότητα ενός μορίου καθορίζεται από την γεωμετρία του μορίου



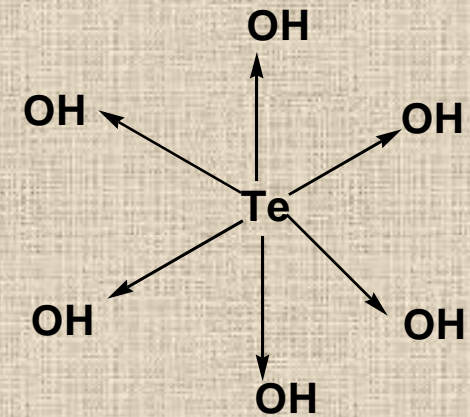
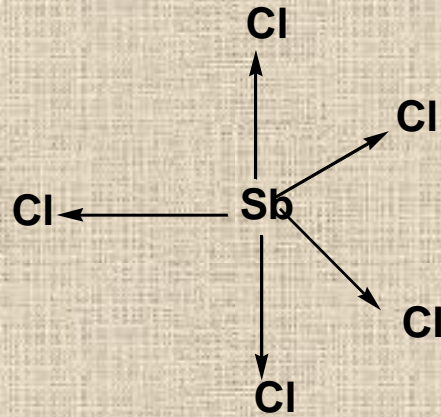
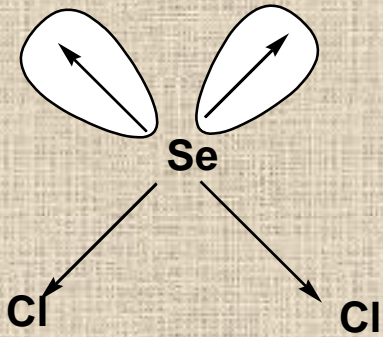
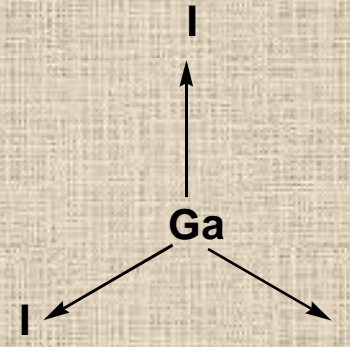
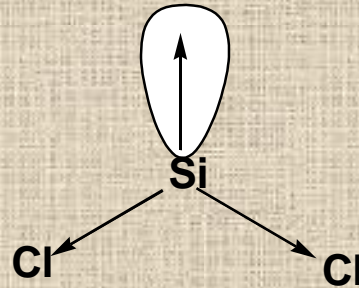
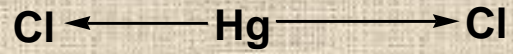
Η διπολική ροπή είναι
διανυσματικό μέγεθος



Μοριακή γεωμετρία και πολικότητα μορίων

- ❖ Γενικά, όλα τα μόρια του τύπου AB_n ($n=2-6$) είναι, λόγω συμμετρίας, μη πολικά, παρά την ύπαρξη επιμέρους διπολικών ροπών των δεσμών A-B.
- ❖ Πολυατομικά μόρια των τύπων AB_nE_m (όπου E τα μονήρη ζεύγη ηλεκτρονίων κεντρικού ατόμου A) είναι πολικά.
- ❖ **Εξαίρεση:**
 - τα μόρια του γενικού τύπου AB_2E_3 που είναι γραμμικά, όπως π.χ. το XeF_2 .
 - τα μόρια του γενικού τύπου AB_4E_2 , που είναι επίπεδα τετραγωνικά, όπως π.χ. το XeF_4 .

Ποια από τα παρακάτω μόρια είναι μόνιμα δίπολα;
α) HgCl_2 β) SiCl_2 γ) GaI_3 δ) SeCl_2 ε) SbCl_5 στ) Te(OH)_6



Να γίνει κατάταξη των μορίων της καθεμιάς από τις παρακάτω ομάδες κατά αυξανόμενη διπολική ροπή:

α) HCl, HF, HI, HBr b) PH₃, NH₃, ASH₃ c) H₂O, H₂S, H₂Te, H₂Se

Να εξηγήσετε γιατί ενώ η διπολική ροπή της NH₃ είναι μεγαλύτερη από αυτή του NF₃, αντίθετα η διπολική ροπή του PH₃ είναι μικρότερη από εκείνη του PF₃. Δίνονται: χN=3,0, χH=2,1, χF=4,0 και χP=2,1.

Ο δεσμός του H-F είναι κατά προσέγγιση 43,3% ιοντικός. Ποιο είναι το μήκος του δεσμού στο μόριο αν η διπολική ροπή του HF ισούται με $6,38 \times 10^{-30}$ Cm.

Το μήκος του δεσμού H-I είναι 161 pm η δε διπολική του ροπή είναι $1,27 \times 10^{-30}$ Cm. Να υπολογιστεί το ιοντικό ποσοστό του δεσμού H-I.

Αν το τριατομικό μόριο XY₂ είναι μη πολικό και το κάθε άτομο Y συνδέεται με το άτομο X με ένα σ και ένα π δεσμό, ποιος είναι ο υβριδισμός του ατόμου X; Ποια είναι η γεωμετρία του μορίου; Να δώσετε ένα παράδειγμα ένωσης με τα παραπάνω χαρακτηριστικά.