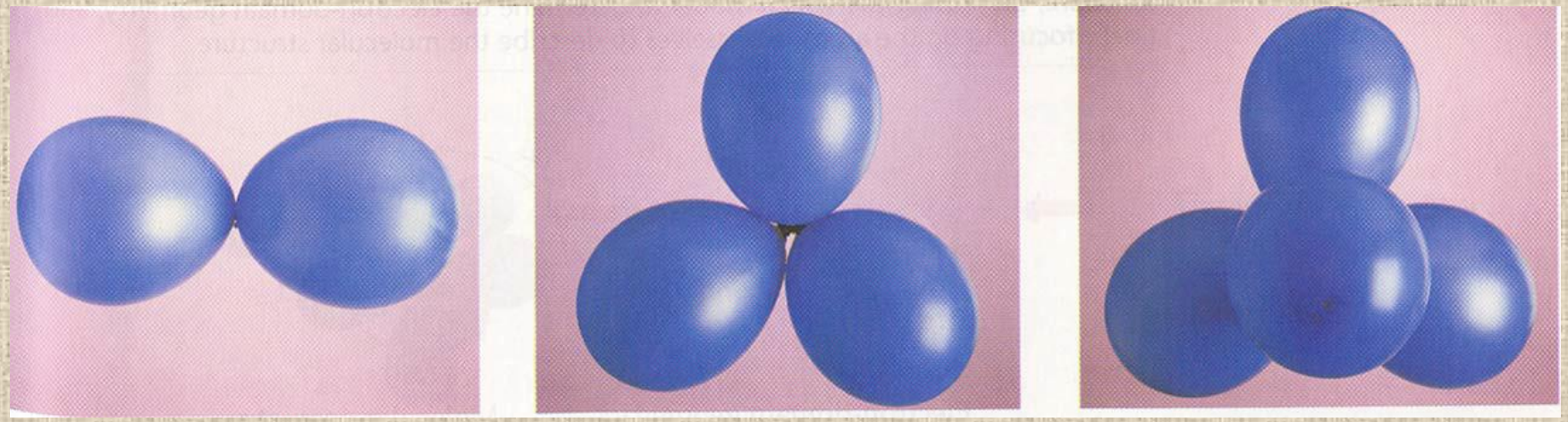
Γεωμετρία Μορίων – Θεωρία VSEPR

VSERP: **V**alence **S**hell **E**lectron **P**air **R**epulsion



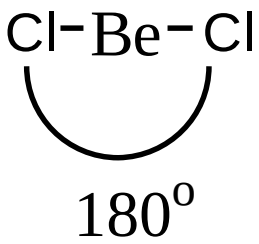
Τα ηλεκτρονιακά ζεύγη της στιβάδας σθένους του κεντρικού ατόμου τοποθετούνται έτσι ώστε να υπάρχουν οι ελάχιστες δυνατές απώσεις.

⇓

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^-

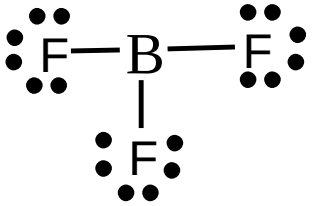
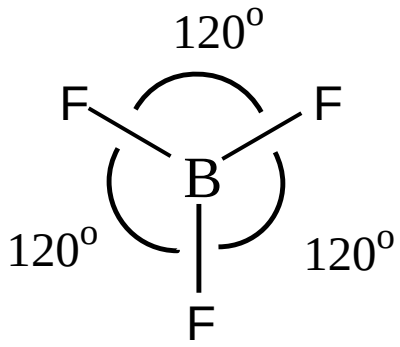
μοριακό τύπος	τύπος κατά Lewis	γεωμετρικό σχήμα
$BeCl_2$		

AB_2

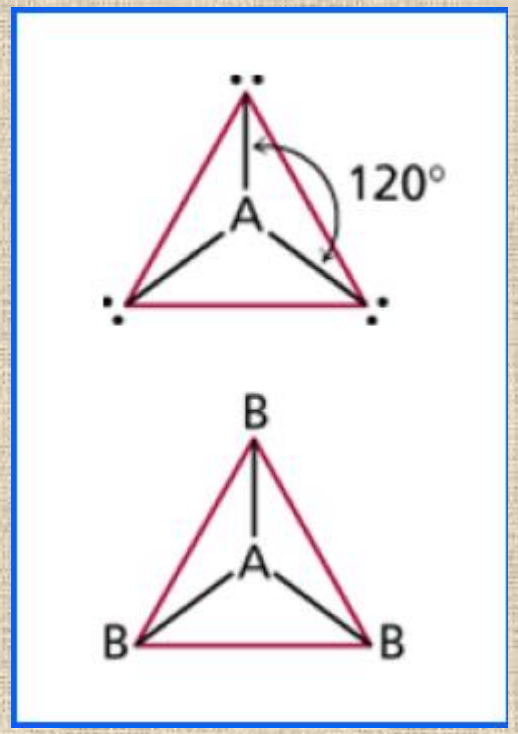
Διευθέτηση ζευγών: γραμμική

Μοριακή γεωμετρία: γραμμική

Περίπτωση 2: το κεντρικό άτομο έχει 3 δεσμικά ζεύγη e^-

μοριακός τύπος	τύπος κατά Lewis	γεωμετρικό σχήμα
BF_3		

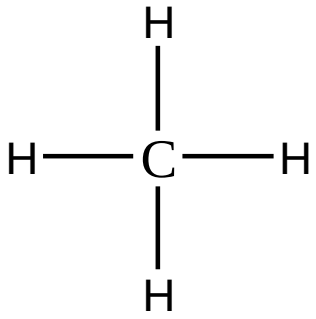
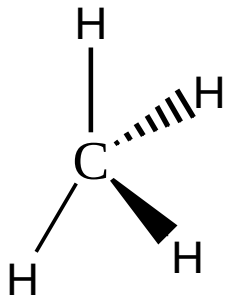
AB_3



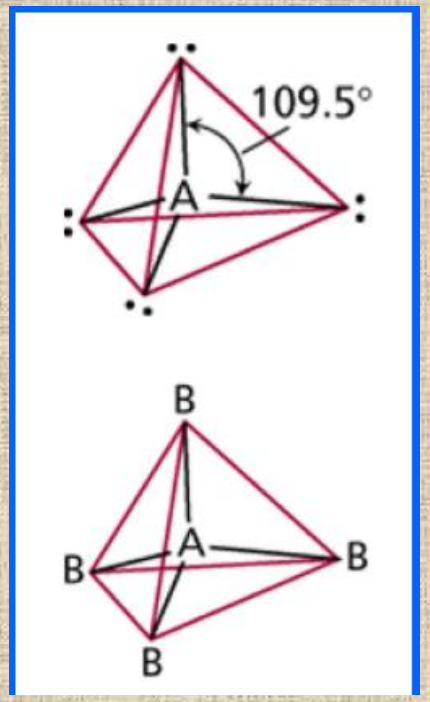
Διευθέτηση ζευγών: τριγωνική

Μοριακή γεωμετρία: τριγωνική

Περίπτωση 3: το κεντρικό άτομο έχει 4 δεσμικά ζεύγη e^-

μοριακός τύπος	τύπος κατά Lewis	γεωμετρικό σχήμα
CH_4		

AB_4

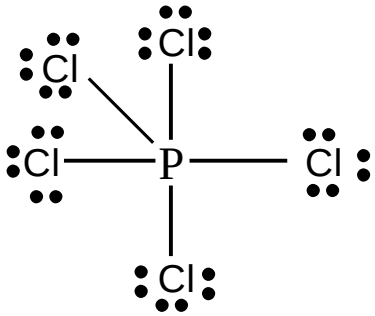
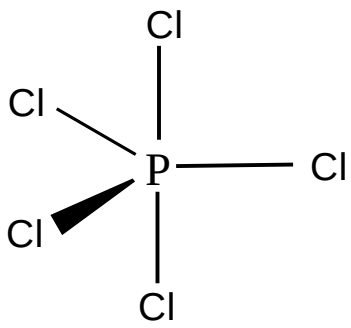


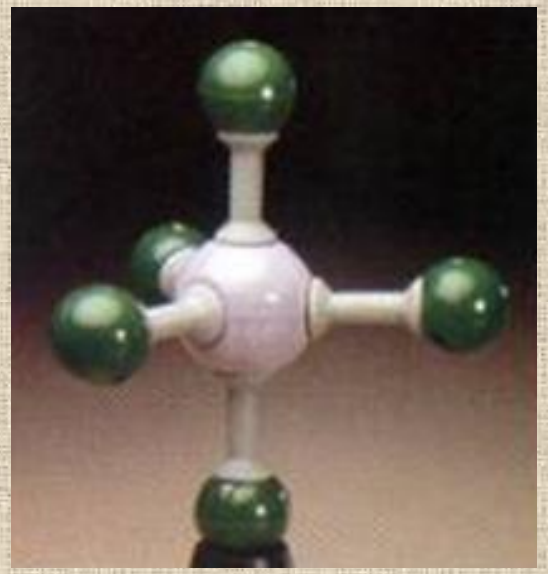
Διευθέτηση ζευγών: τετραεδρική

Μοριακή γεωμετρία: τετραεδρική

Περίπτωση 4: το κεντρικό άτομο έχει 5 δεσμικά ζεύγη e^-

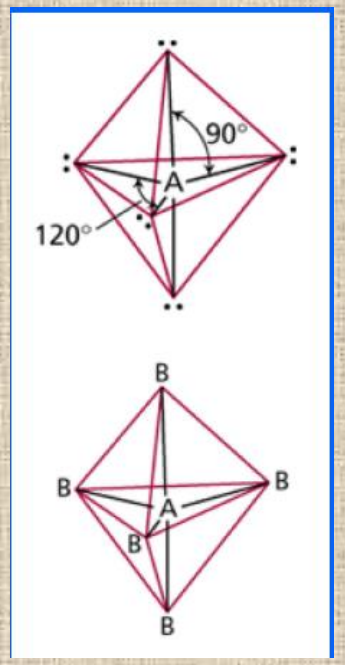
AB_5

μοριακός τύπος	τύπος κατά Lewis	γεωμετρικό σχήμα
PCl_5		



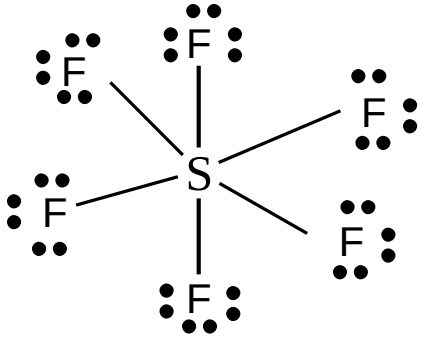
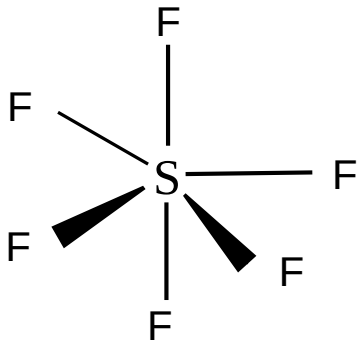
Διευθέτηση ζευγών: τριγωνική διπυραμιδική

Μοριακή γεωμετρία: τριγωνική διπυραμιδική



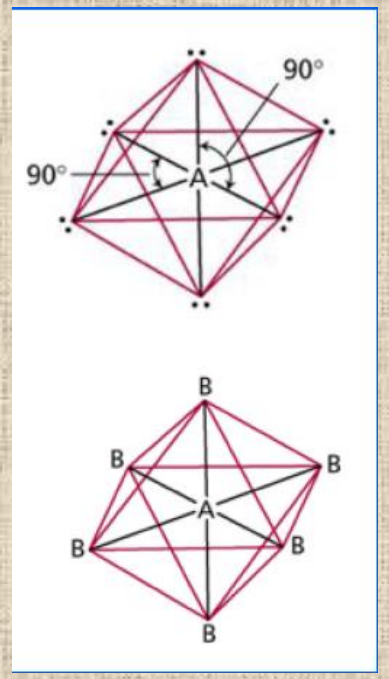
Περίπτωση 5: το κεντρικό άτομο έχει 6 δεσμικά ζεύγη e^-

AB_6

μοριακός τύπος	τύπος κατά Lewis	γεωμετρικό σχήμα
SF_6		

Διευθέτηση ζευγών: οκταεδρική

Μοριακή γεωμετρία: οκταεδρική

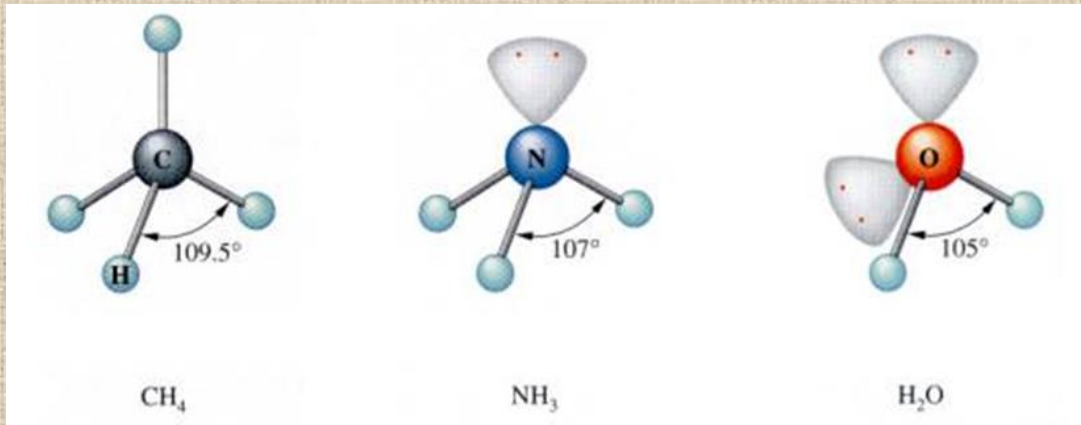


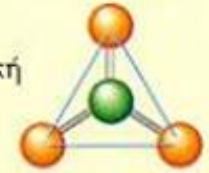
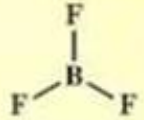
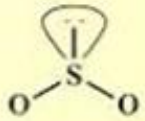
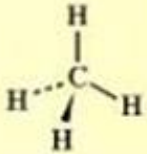
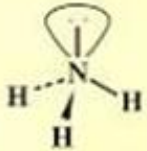
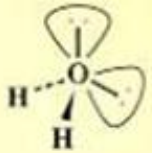
Αποκλίσεις από την ιδανική γεωμετρία:
το κεντρικό άτομο διαθέτει μη δεσμικά ζεύγη e^-

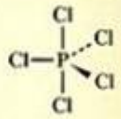
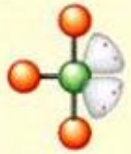
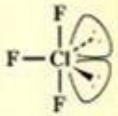
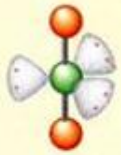
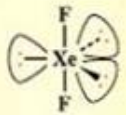
Άπωση δεσμικών ζευγών e- με δεσμικά ζεύγη	<	Άπωση μη δεσμικών ζευγών e- με δεσμικά ζεύγη	<	Άπωση μη δεσμικών ζευγών e- με μη δεσμικά ζεύγη

AX_nE_m

παραμόρφωση της στερεοχημικής διάταξης



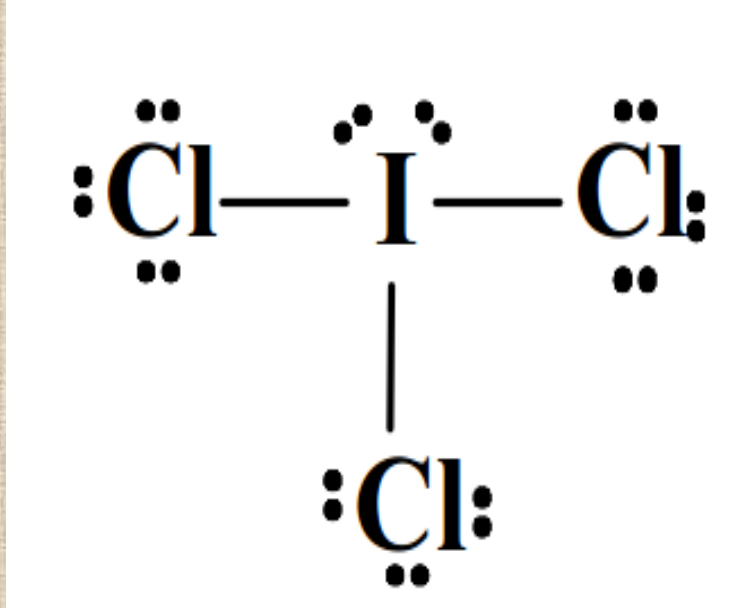
ΖΕΥΓΗ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΩΝ συνολικά	δεσμικά	μη δεσμικά	ΔΙΑΤΑΞΗ ΖΕΥΓΩΝ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΩΝ	ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ ΜΟΡΙΩΝ		ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑΤΑ	
2	2	0	γραμμική	γραμμική AX_2		BeF_2	F—Be—F
3	3	0	επίπεδη τριγωνική	επίπεδη τριγωνική AX_3		BF_3	
	2	1		γωνιακή AX_2E		SO_2	
4	4	0	τετραεδρική	τετραεδρική AX_4		CH_4	
	3	1		τριγωνική πυραμίδα AX_3E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

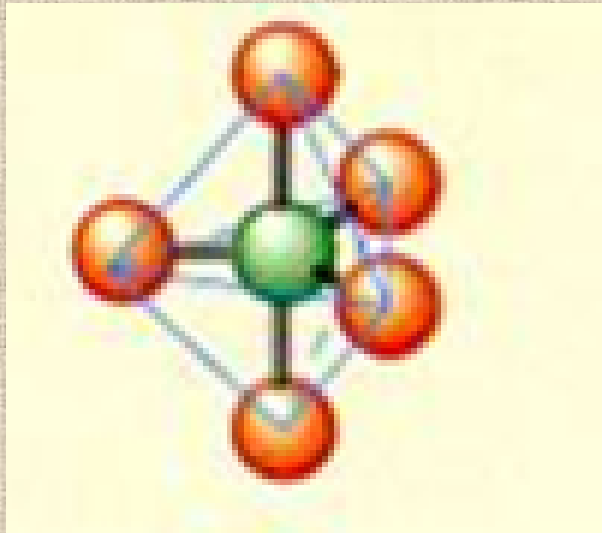
ΖΕΥΓΗ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΩΝ			ΔΙΑΤΑΞΗ ΖΕΥΓΩΝ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΩΝ	ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ ΜΟΡΙΩΝ		ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑΤΑ	
	συνολικά	δεσμικά	μη δεσμικά				
5	5	0	τριγωνική διπυραμίδα	τριγωνική διπυραμίδα AX_5		PCl_5	
	4	1		παραμορφωμένο τετράεδρο AX_4E		SF_4	
	3	2		Τ-μορφή AX_3E_2		ClF_3	
	2	3		γραμμικό AX_2E_3		XeF_2	
6	6	0	οκτάεδρο	οκτάεδρο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

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 VSERP, 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.

ICl_3





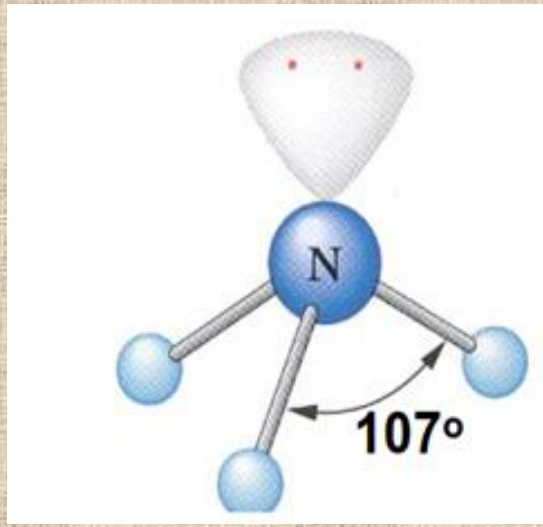
- Γεωμετρία ηλεκτρονικών ζευγών: AX_5 Τριγωνική διπυραμιδική
- Μοριακή γεωμετρία: AX_3E_2 Σχήμα Τ

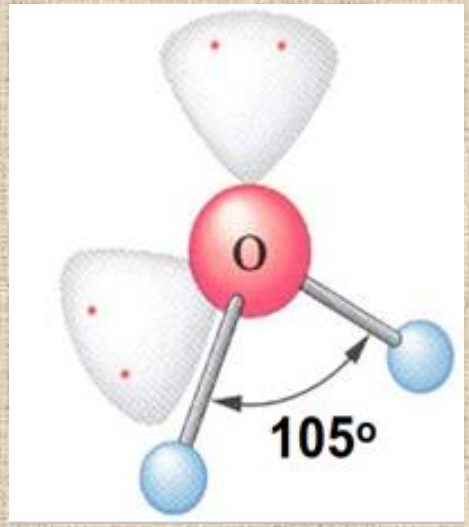
Αποκλίσεις από την ιδανική γεωμετρία – Μη δεσμικά e

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

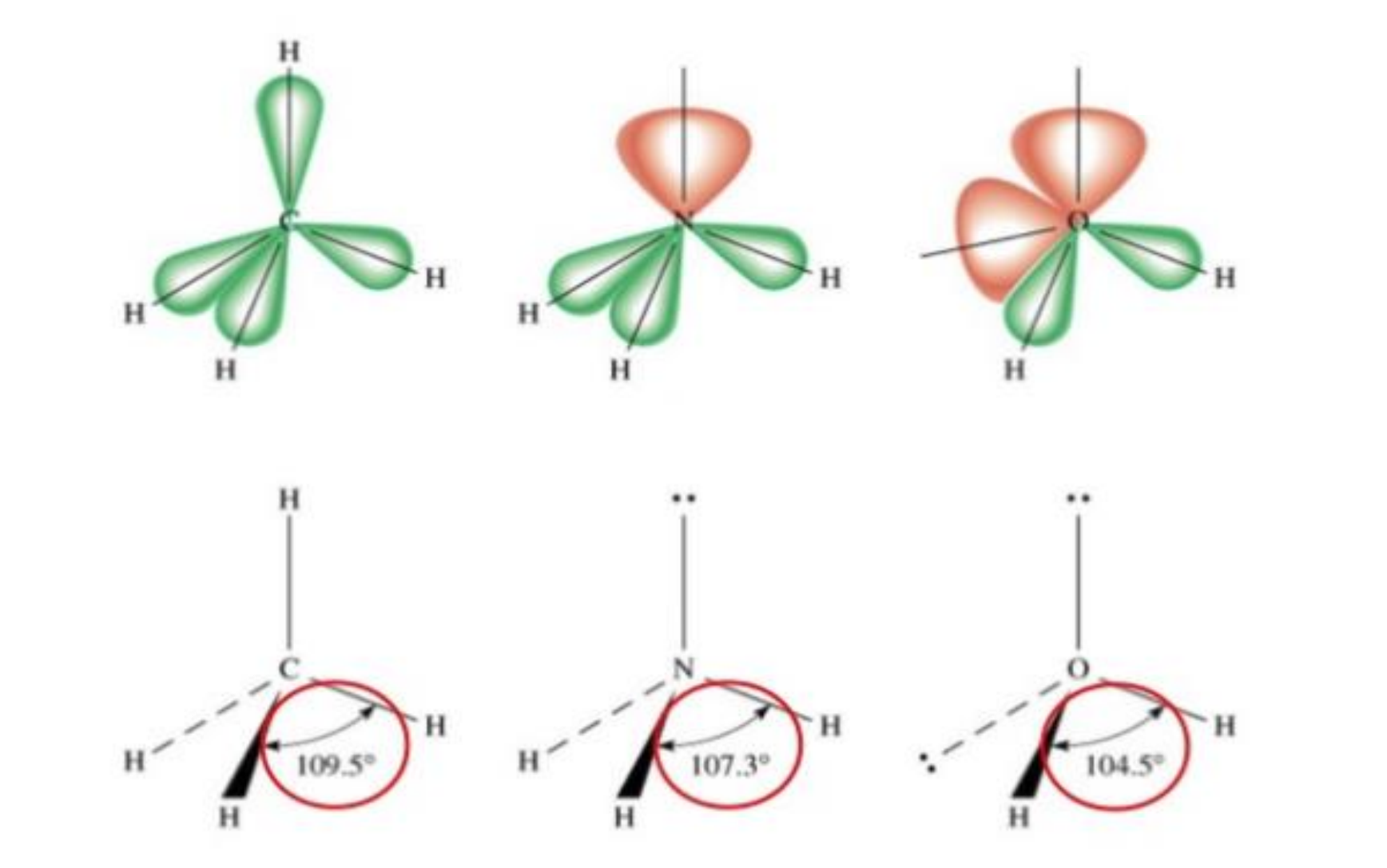
↓

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



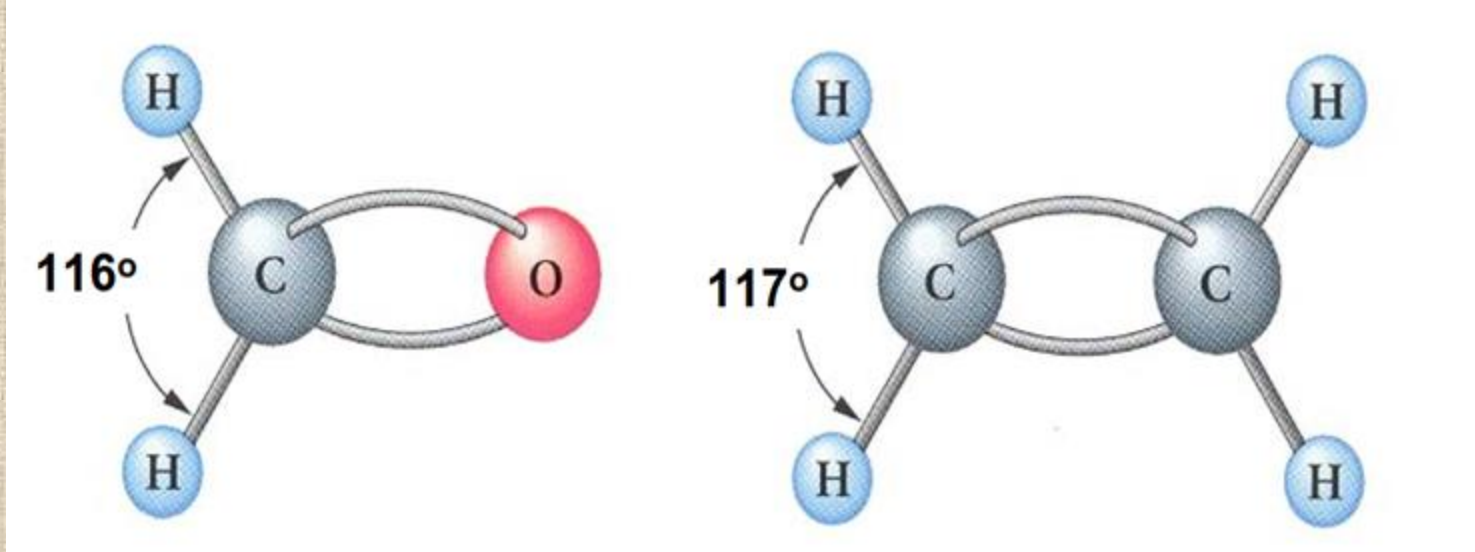


Άπωση δεσμικών ζευγών e- με δεσμικά ζεύγη	<	Άπωση μη δεσμικών ζευγών e- με δεσμικά ζεύγη	<	Άπωση μη δεσμικών ζευγών e- με μη δεσμικά ζεύγη



Αποκλίσεις από την ιδανική γεωμετρία – Πολλαπλοί δεσμοί

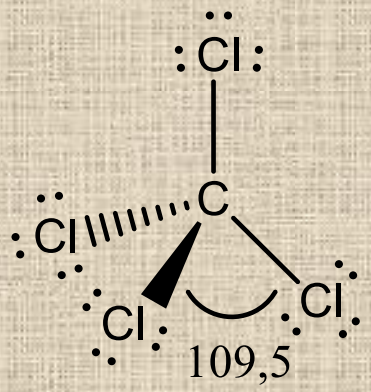
- Οι πολλαπλοί δεσμοί καταλαμβάνουν περισσότερο χώρο από τους απλούς δεσμούς
- Ο χώρος που καταλαμβάνουν είναι ανάλογος της τάξης του δεσμού

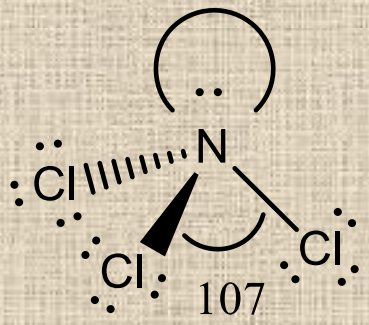


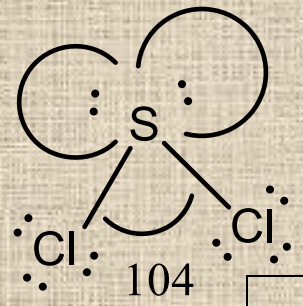
Να καταταγούν κατά σειρά αυξανόμενης γωνίας δεσμών τα παρακάτω:

α) CCl_4 β) NCl_3 γ) Cl_2S

Γεωμετρία Ηλεκτρονικών Ζευγών : Τετραεδρική, 109,5^o





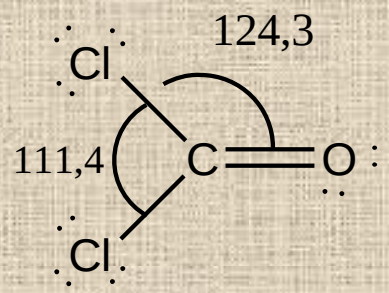


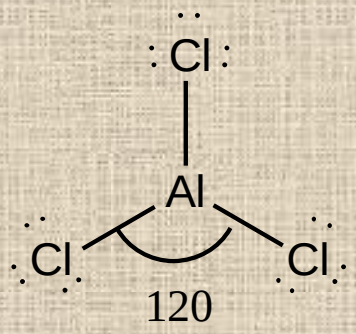
Cl_2S < NCl_3 < CCl_4

αριθμός μη δεσμικών ζευγών ↑
γωνία δεσμού ↓

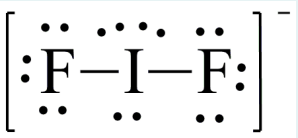
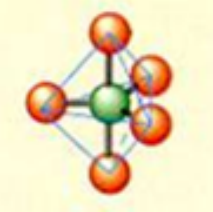
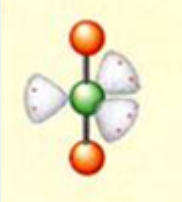
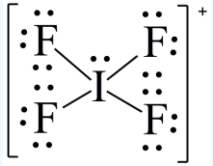
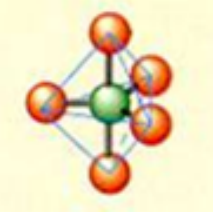
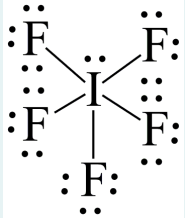
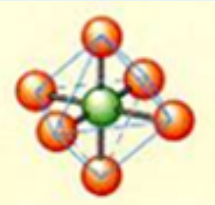
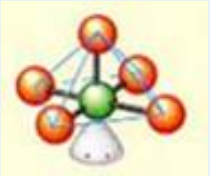
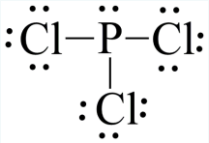
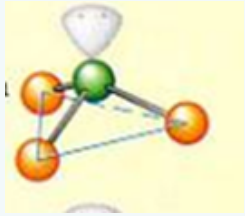
Να εξηγηθεί η διαφορά των γωνιών δεσμών στις ενώσεις $COCl_2$ και $AlCl_3$

Γεωμετρία Ηλεκτρονικών Ζευγών : Επίπεδη τριγωνική, 120°

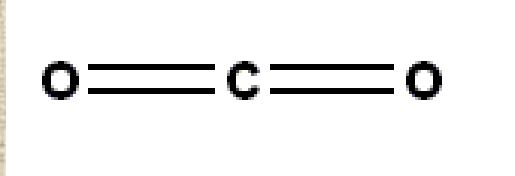




τάξη δεσμού ↑
απώσεις ↓

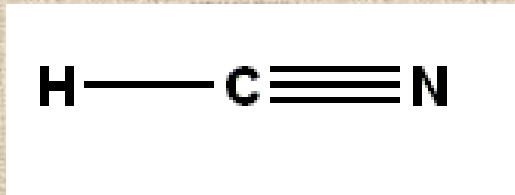
Μόριο/ιόν	Τύπος Lewis	Γεωμετρία HZ	Μοριακή Γεωμετρία
IF_2^-		τριγωνική διπυραμιδική 	γραμμική 
IF_4^+		τριγωνική διπυραμιδική 	παραμορφωμένη τετραεδρική
IF_5		οκταεδρική 	τετραγωνική πυραμιδική 
PCl_3		τετραεδρική	τριγωνική πυραμιδική 

CO_2 →



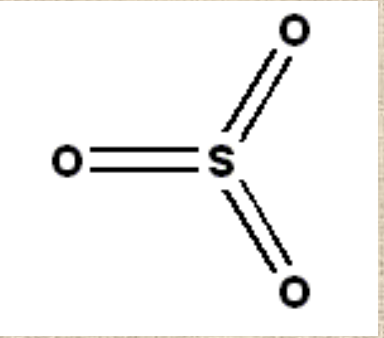
→ *Ζεύγη: γραμμική*
Μόριο: γραμμικη

HCN →



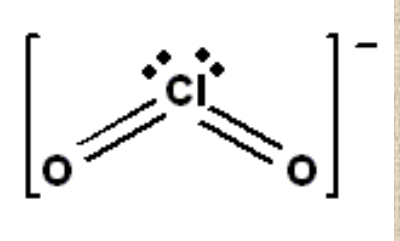
→ *Ζεύγη: γραμμική*
Μόριο: γραμμικη

SO_3 →



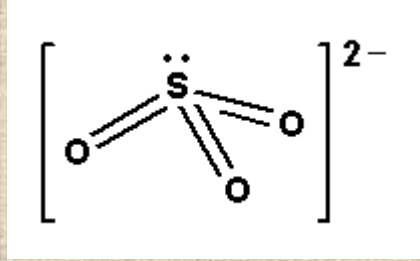
→ *Ζεύγη: επίπεδη τριγωνική*
Μόριο: επίπεδη τριγωνική

ClO_2^- →



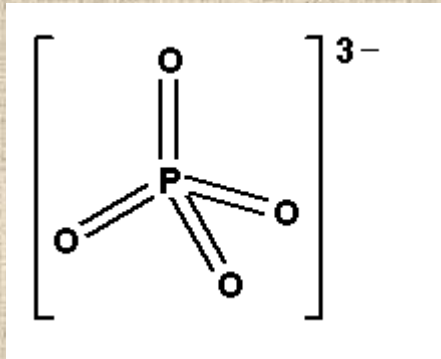
→ *Ζεύγη: τετραεδρική*
Μόριο: γωνιακή

SO_3^{-2} →



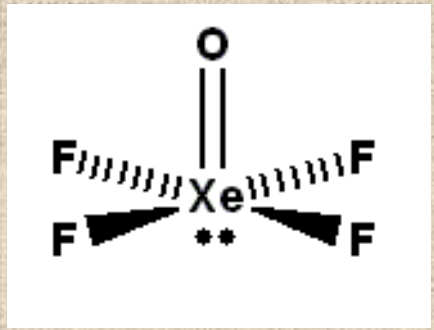
→ *Ζεύγη: τετραεδρική*
Μόριο: τριγωνική πυραμιδική

PO_4^{-3} →



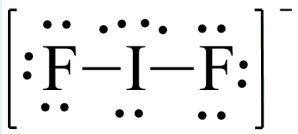
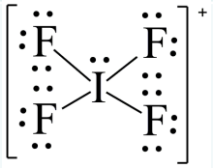
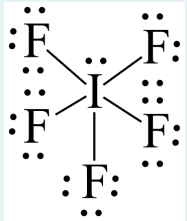
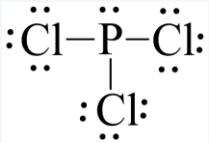
→ *Ζεύγη: τετραεδρική*
Μόριο: τετραεδρική

$XeOF_4$ →



→ *Ζεύγη: οκταεδρική*
Μόριο: τετραγωνική πυραμίδα

Πρόβλεψη της γεωμετρίας μορίων/ιόντων με βάση τη θεωρία VSEPR

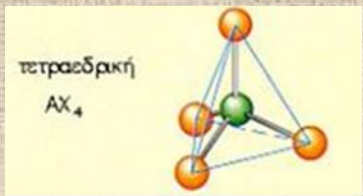
Μόριο/ιόν	Τύπος Lewis	Γεωμετρία
IF_2^-		γραμμική
IF_4^+		παραμορφωμένη τετραεδρική
IF_5		τετραγωνική πυραμιδική
PCl_3		τριγωνική πυραμιδική

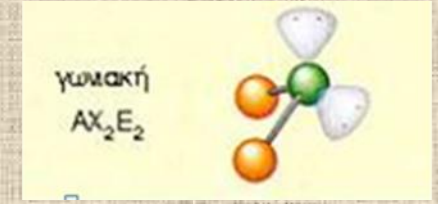
Τι σχήμα έχει το μόριο του H_2O σύμφωνα με τη θεωρία Lewis;

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





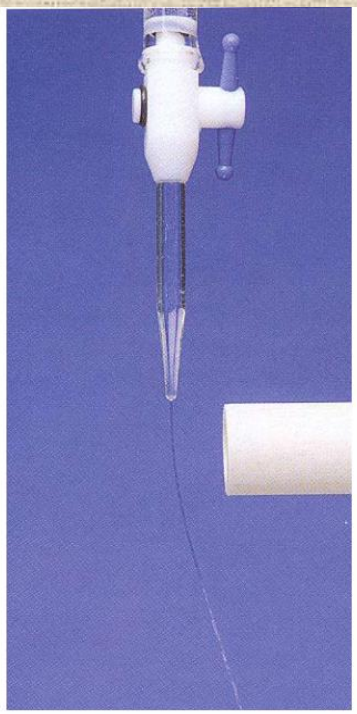
Να προβλέψετε τα γεωμετρικά σχήματα των παρακάτω μορίων ή ιόντων με βάση τη θεωρία VSEPR: α) HCN, β) NH_4^+, γ) NO_3^-, δ) NSF

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)$ClNO_2$.

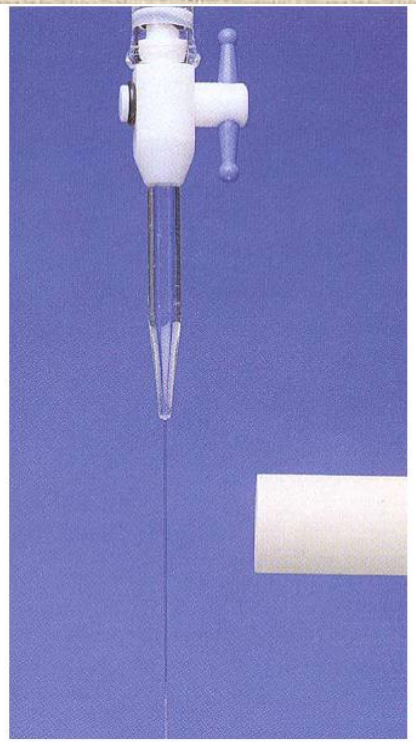
Με βάση τη θεωρία VSEPR προβλέψτε τη γεωμετρία των παρακάτω ενώσεων ή πολυατομικών ιόντων: TeF_6, H_2Se, IF_4^-, BBr_3, $AsCl_5$, GeI_4, BrF_3, SeF_4. Δίνονται: $_{52}Te$, $_{34}Se$, $_{53}I$, $_{35}Br$, $_{33}As$, $_{32}Ge$.

Πολικές και μη πολικές ενώσεις



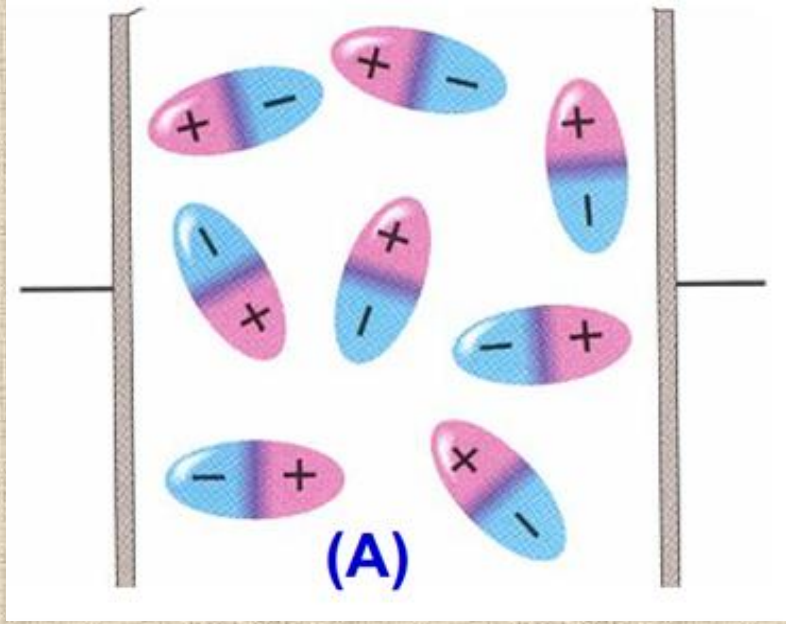
Ηλεκτρικά φορτισμένη ράβδος

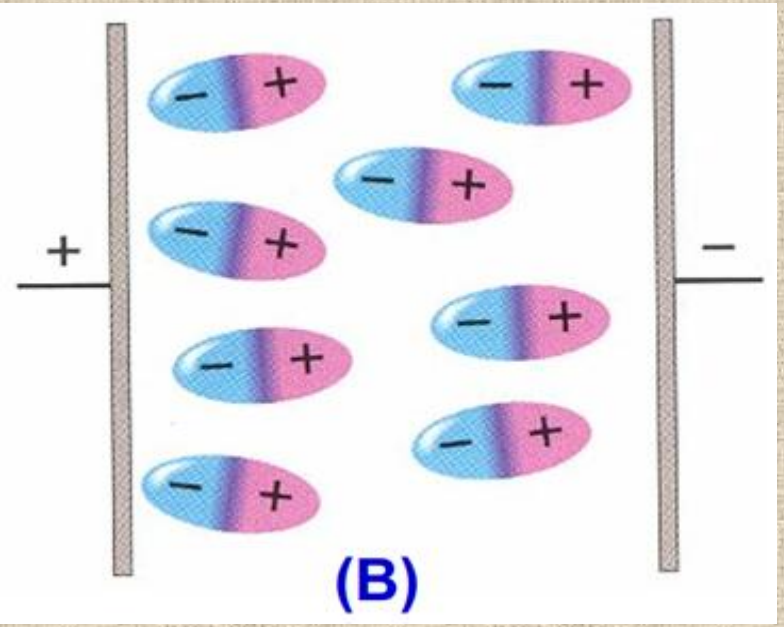
Το νερό είναι ένα πολικό υγρό και γι' αυτό έλκεται προς την ηλεκτρικά φορτισμένη ράβδο.



Το τετραχλωρίδιο του άνθρακα, CCl_4, είναι ένα μη πολικό υγρό και δεν έλκεται προς τη γυάλινη ράβδο.

Μέτρηση της διπολικής ροπής





Προσανατολισμός πολικών μορίων

(A) χωρίς ηλεκτρικό πεδίο **(B) εντός ηλεκτρικού πεδίου**

Πολικότητα Μορίων

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

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

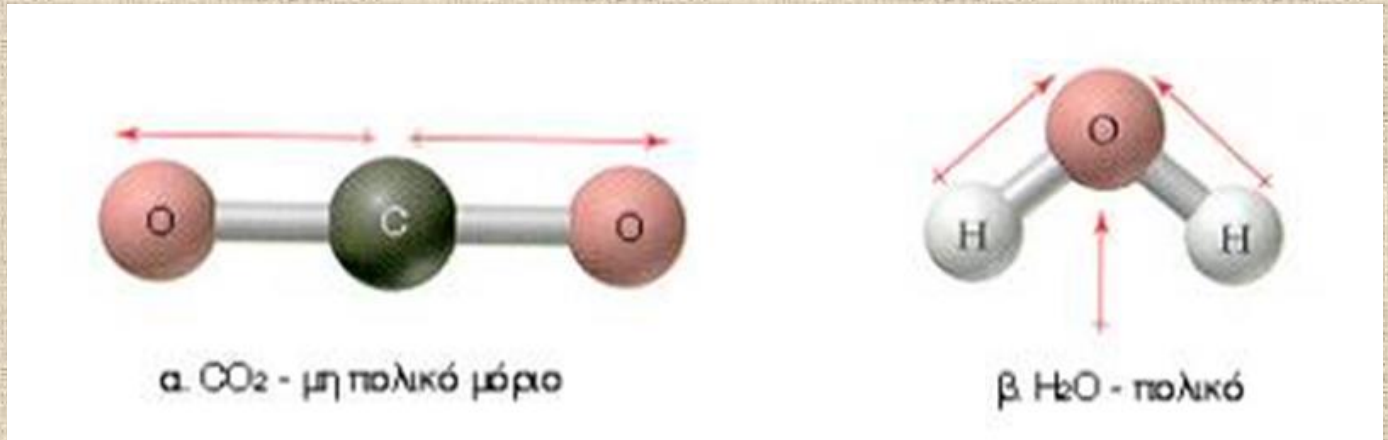
μ: διπολική ροπή

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

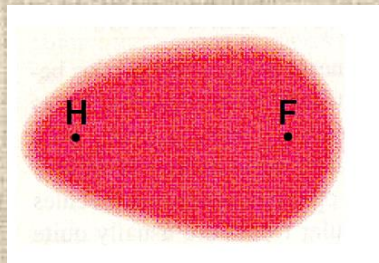
r: η απόσταση των πόλων

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**



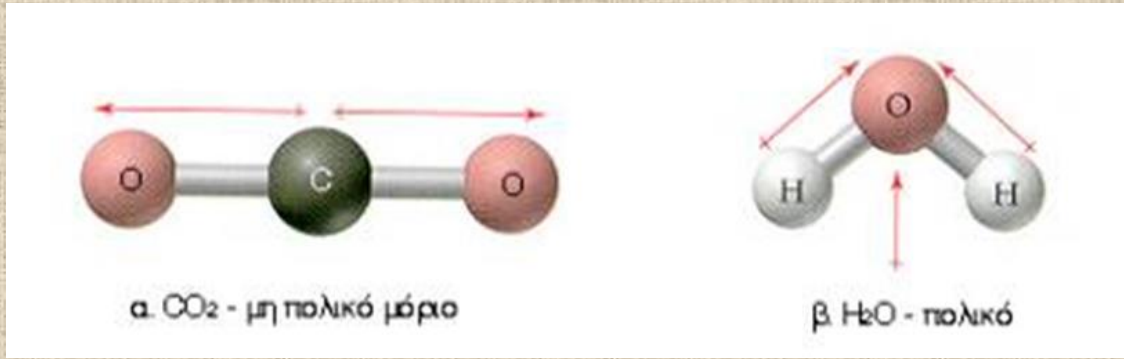
Li 1,0	Be 1,5	B 2,0	C 2,5	N 3,0	O 3,5	F 4,0
Na 0,9	Mg 1,2	Al 1,5	Si 1,8	P 2,1	S 2,5	Cl 3,0
K 0,8	Ca 1,0	Ga 1,6	Ge 1,8	As 2,0	Se 2,4	Br 2,8
Rb 0,8	Ba 1,0	In 1,7	Sn 1,8	Sb 1,9	Te 2,1	I 2,5
Cs 0,7						

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

Να καταταγούν οι παρακάτω δεσμοί κατά σειρά αυξανόμενης πολικότητας:

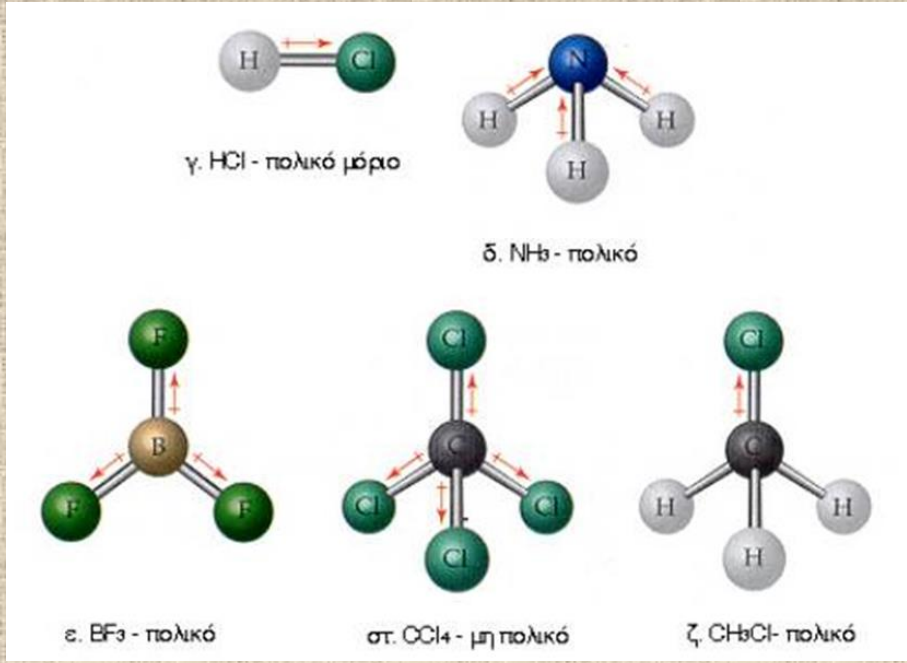
H–Se, P–Cl, N–Cl, N–F ***(ηλεκτραρνητικότητα H = 2.1)***

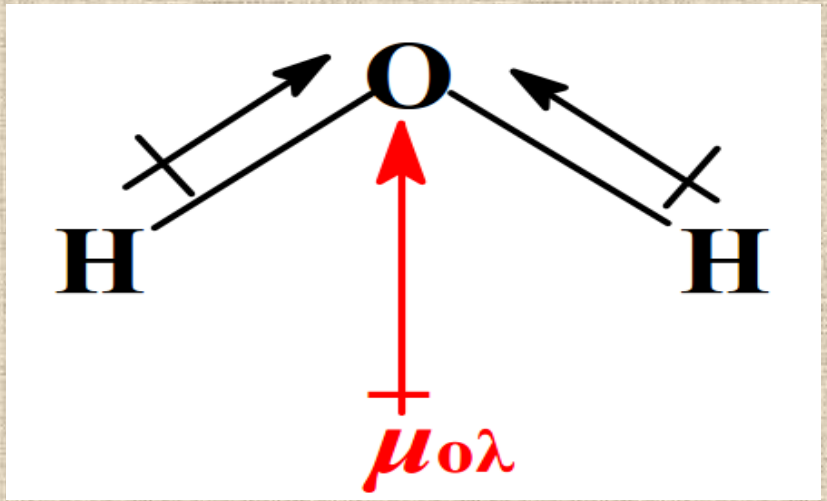
❖ **Η πολικότητα ενός μορίου καθορίζεται από την γεωμετρία του μορίου**

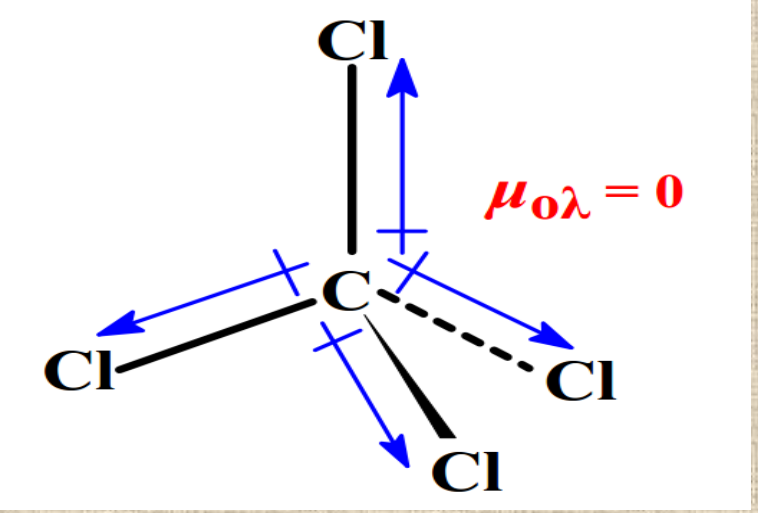


Η διπολική ροπή είναι διανυσματικό μέγεθος

$\longleftrightarrow$



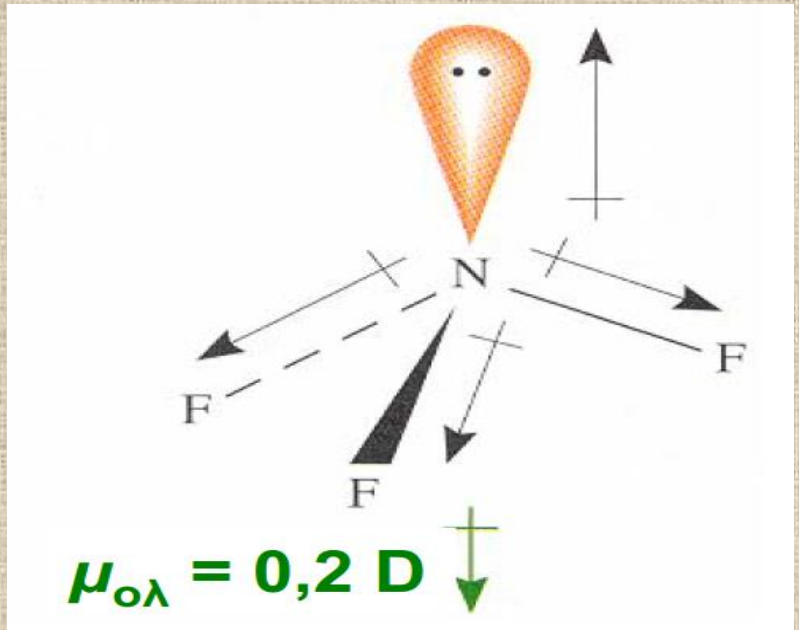


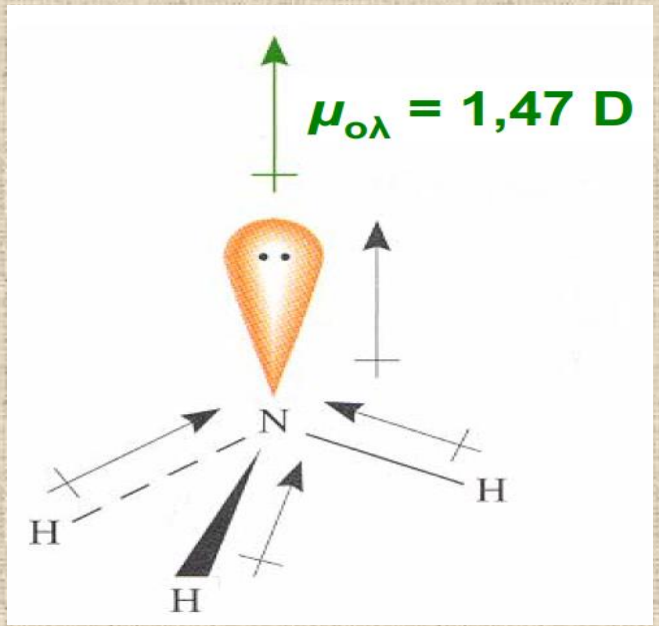


Το μόριο H_2O είναι κεκαμμένο. Οι επιμέρους διπολικές ροπές των δεσμών O–H δίνουν συνισταμένη διπολική ροπή $\mu_{ολ} \neq 0$
⇒ μόριο πολικό
Πειραματικά: $\mu(H_2O) = 1{,}94$ D

Το μόριο CCl_4 είναι τετραεδρικό. Οι επιμέρους διπολικές ροπές των δεσμών C–Cl δίνουν συνισταμένη διπολική ροπή $\mu_{ολ} = 0$
⇒ μόριο μη πολικό

Επίδραση των μονήρων ΗΖ πάνω στη διπολική ροπή





Η διπολική ροπή που οφείλεται στο μονήρες ΗΖ αντισταθμίζει τις διπολικές ροπές των δεσμών N–F και το μόριο NF_3 εμφανίζεται με πολύ μικρή διπολική ροπή

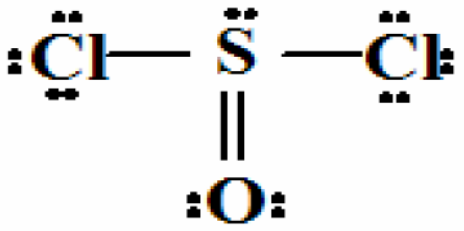
Στο μόριο NH_3, η διπολική ροπή του μονήρους ΗΖ ενισχύει τις διπολικές ροπές των δεσμών N–H

Ποιο από τα παρακάτω μόρια θα περιμένατε, για λόγους συμμετρίας, να έχει διπολική ροπή ίση με μηδέν; Εξηγήστε.

(α) $SOCl_2$ (β) SiF_4 (γ) OF_2

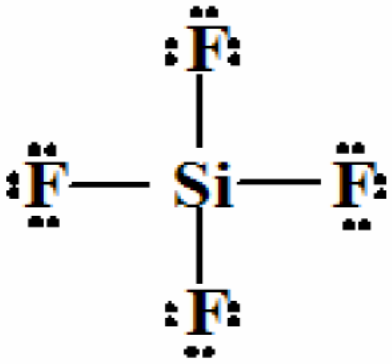
$SOCl_2$: 6+ 6 +2x7=26

-6



AB_3E
τριγωνικό πυραμιδικό
$\mu_{ολ} \neq 0$

SiF_4: 4+ 4x7=32



AB_4
τετραεδρικό
$\mu_{ολ} = 0$

OF_2: 6+ 2x7=20

-4

AB_2E_2
κεκαμμένο
$\mu_{ολ} \neq 0$

Μοριακή γεωμετρία και πολικότητα μορίων

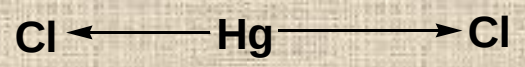
- **Γενικά, όλα τα μόρια του τύπου *ABn (n= 2–6)* είναι, λόγω συμμετρίας, *μη πολικά*, παρά την ύπαρξη επιμέρους διπολικών ροπών των δεσμών A–B.**

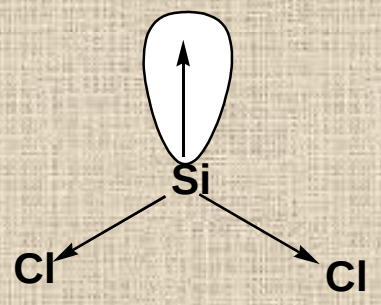
- **Πολυατομικά μόρια των τύπων AB_nE_m (όπου E τα μονήρη ζεύγη ηλεκτρονίων κεντρικού ατόμου A) είναι *πολικά*.**

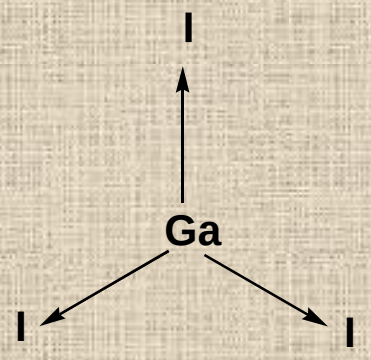
- **Εξαίρεση:**
  - **τα μόρια του γενικού τύπου AB_2E_3 που είναι γραμμικά, όπως π.χ. το XeF_2.**
  - **τα μόρια του γενικού τύπου AB_4E_2, που είναι επίπεδα τετραγωνικά, όπως π.χ. το XeF_4.**

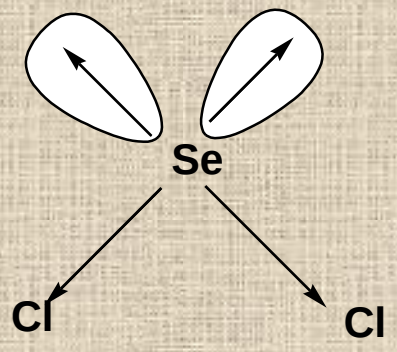
Ποια από τα παρακάτω μόρια είναι μόνιμα δίπολα;

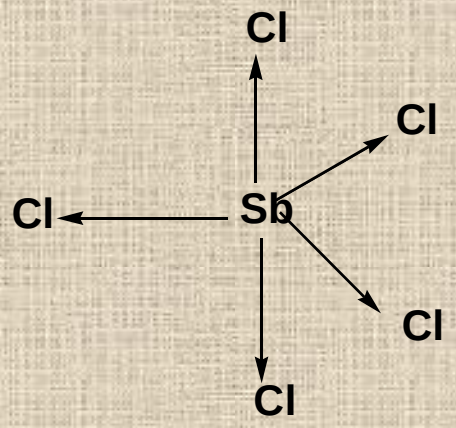
α)$HgCl_2$ β) $SiCl_2$ γ)GaI_3 δ)$SeCl_2$ ε)$SbCl_5$ στ)$Te(OH)_6$

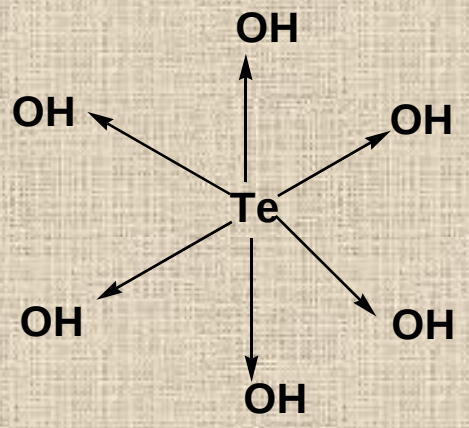












Να γίνει κατάταξη των μορίων της καθεμιάς από τις παρακάτω ομάδες κατά αυξανόμενη διπολική ροπή:

α) HCl, HF, HI, HBr **b) PH_3, NH_3, ASH_3** **c) H_2O, H_2S, H_2Te, H_2Se**

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 $6,38x10^{-30}$ Cm.

Το μήκος του δεσμού H-I είναι 161 pm η δε διπολική του ροπή είναι 1,27x10-30 Cm. Να υπολογιστεί το ιοντικό ποσοστό του δεσμού H-I.