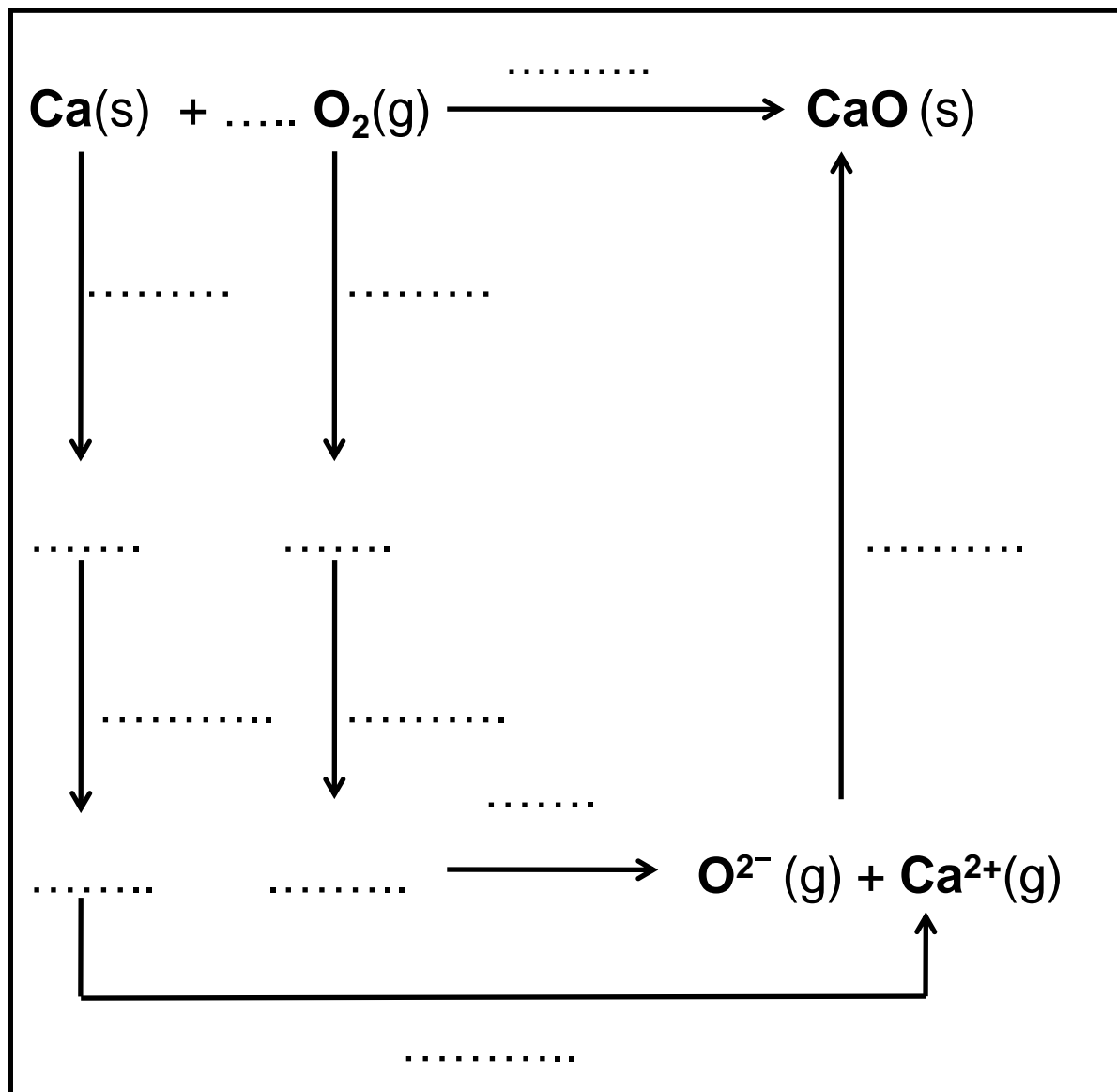


Άσκηση



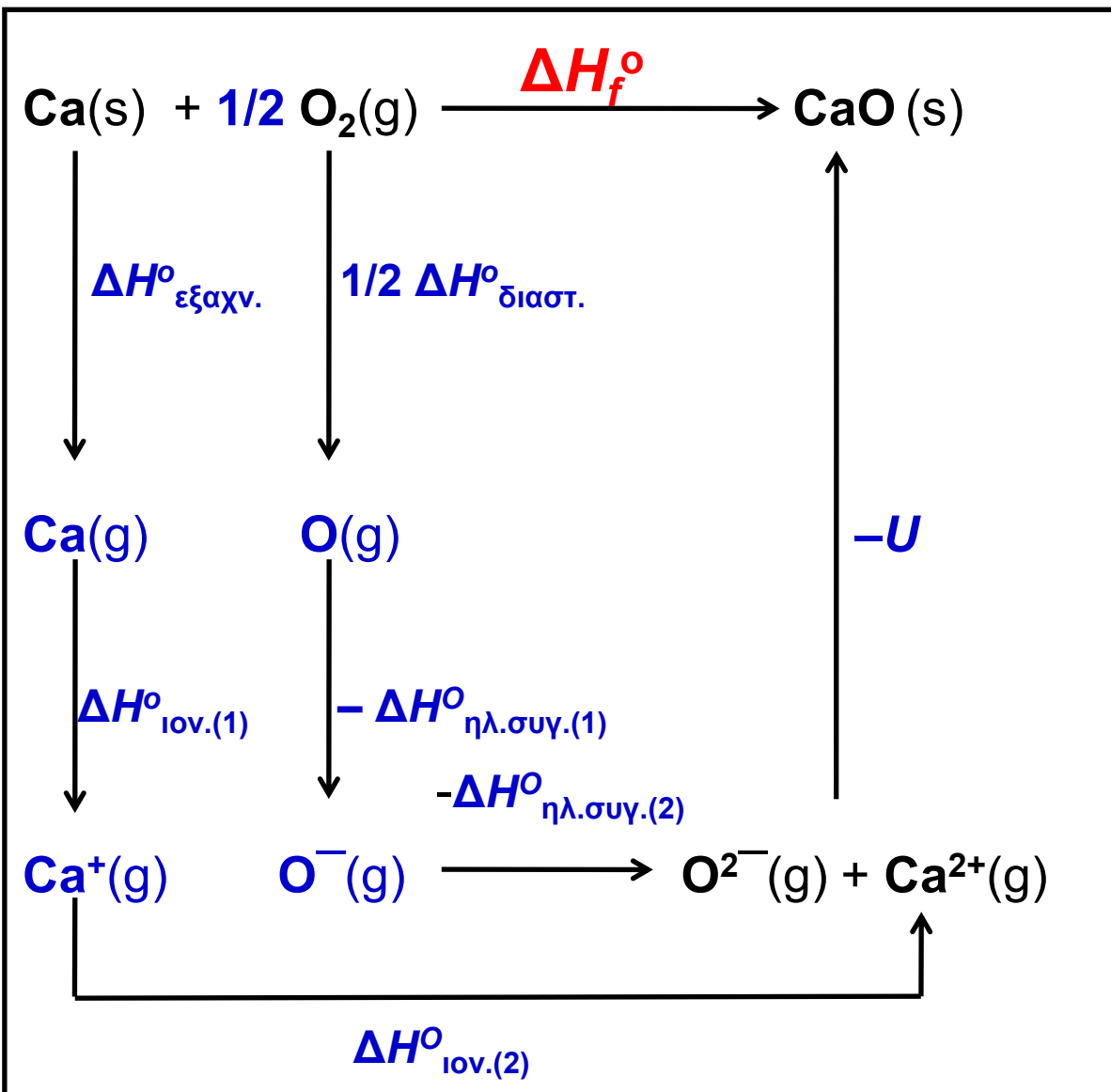
(α) Να συμπληρώσετε τον παρατιθέμενο κύκλο των Born-Haber για το CaO,

(β) Να υπολογίσετε την Ενθαλπία Σχηματισμού του, αν γνωρίζετε ότι:

U του CaO = 3514 kJ mol^{-1} ,
 $\Delta H^\circ_{\text{εξαχν. Ca}} = +193 \text{ kJ mol}^{-1}$,
 $\Delta H^\circ_{\text{ιον.(1) Ca}} = +590 \text{ kJ mol}^{-1}$,
 $\Delta H^\circ_{\text{ιον.(2) Ca}} = +1145 \text{ kJ mol}^{-1}$
 και
 $\Delta H^\circ_{\text{ηλ.συγ.(2) O}} = -844 \text{ kJ mol}^{-1}$

ΛΥΣΗ

(α)



(β)

U του $\text{CaO} = 3514 \text{ kJ mol}^{-1}$,
 $\Delta H^\circ_{\text{εξαχν. Ca}} = +193 \text{ kJ mol}^{-1}$,
 $\Delta H^\circ_{\text{ιον.}(1) \text{ Ca}} = +590 \text{ kJ mol}^{-1}$,
 $\Delta H^\circ_{\text{ιον.}(2) \text{ Ca}} = +1145 \text{ kJ mol}^{-1}$
 και
 $\Delta H^\circ_{\text{ηλ.συγ.}(2) \text{ O}} = -844 \text{ kJ mol}^{-1}$
 $\Delta H^\circ_{\text{ηλ.συγ.}(1) \text{ O}} = +141$
 $\Delta H^\circ_{\text{διάστασης O}} = +496$

Νόμος του Hess \Rightarrow

$$\Delta H_f^\circ = \Delta H^\circ_{\text{εξαχν.}} + \Delta H^\circ_{\text{ιον.}(1)} + \Delta H^\circ_{\text{ιον.}(2)} + \frac{1}{2} \Delta H^\circ_{\text{διαστ.}} + \Delta H^\circ_{\text{ηλ.συγ.}(1)} + \Delta H^\circ_{\text{ηλ.συγ.}(2)} + (-U)$$

$$\Delta H_f^\circ = (193 + 590 + 1145 + 496/2 - 141 + 844 - 3514) \text{ kJ/mol} = -635 \text{ kJ/mol}$$

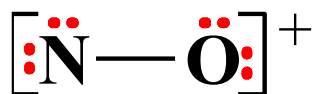
$$\Rightarrow \Delta H_f^\circ = -635 \text{ kJ/mol}$$

Άσκηση 9.4β

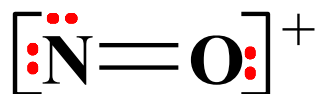
Εφαρμογή του κανόνα της οκτάδας

Ποια από τις παρακάτω δομές Lewis του ιόντος νιτροσυλίου, NO^+ , είναι η σωστή;

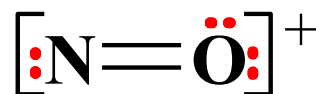
Αιτιολογείστε την απάντησή σας.



(α)



(β)



(γ)



(δ)

Άσκηση 9.5α

Κατατάξτε τους παρακάτω δεσμούς κατά σειρά αυξανόμενης πολικότητας: H–Se, P–Cl, N–Cl, N–F και δείξτε την κατεύθυνση της πόλωσης χρησιμοποιώντας τα σύμβολα δ^+ και δ^- (μερικά φορτία).

ΑΠΑΝΤΗΣΗ

Ένας δεσμός είναι τόσο περισσότερο πολωμένος, όσο μεγαλύτερη είναι η διαφορά ηλεκτραρνητικότητας, ΔX , μεταξύ των συνδεδεμένων ατόμων π.χ.:

$$X_{\text{Se}} - X_{\text{H}} = 2,4 - 2,1 = 0,3$$

$$X_{\text{F}} - X_{\text{N}} = 4,0 - 3,0 = 1,0$$

$$X_{\text{Cl}} - X_{\text{P}} = 3,0 - 2,1 = 0,9$$

$$X_{\text{N}} - X_{\text{Cl}} = 3,0 - 3,0 = 0,0$$

Και η ζητούμενη κατάταξη είναι: N–Cl < H–Se < P–Cl < N–F

Η κατεύθυνση της πόλωσης παριστάνεται ως:



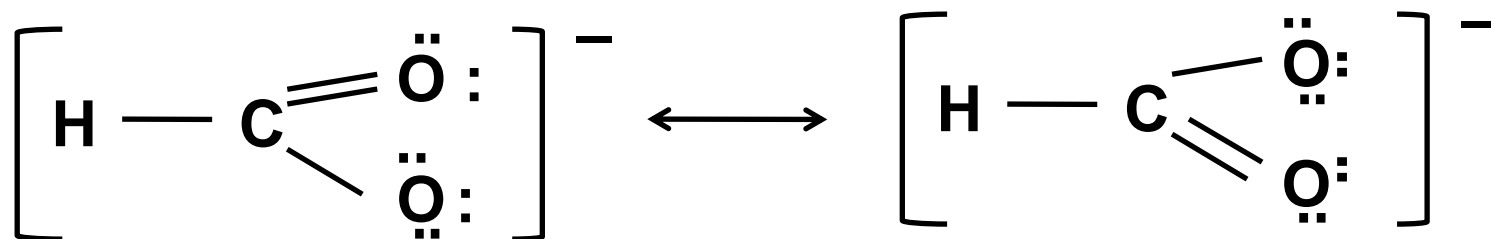
κ.λπ.

Άσκηση 9.7α

Περιγράψτε το δεσμό στο μυρμηκικό ιόν, HCO_2^- , χρησιμοποιώντας δομές συντονισμού.

ΑΠΑΝΤΗΣΗ

★ Η ηλεκτρονική δομή του μορίου που έχει απεντοπισμένους δεσμούς αποδίδεται με αναγραφή όλων των δυνατών τύπων Lewis



1. Ο συνολικός αριθμός ηλεκτρονίων στο HCO_2^- είναι
 $1 + (1 \times 4) + (2 \times 6) + 1 = 18$

2. $X_{\text{C}} < X_{\text{O}} \Rightarrow \text{C} = \text{το κεντρικό άτομο.}$

3. Κατανέμουμε τα ηλεκτρόνια έτσι, ώστε τα περιφερειακά άτομα να ικανοποιούν τον κανόνα της οκτάδας.

Άσκηση 9.9^α

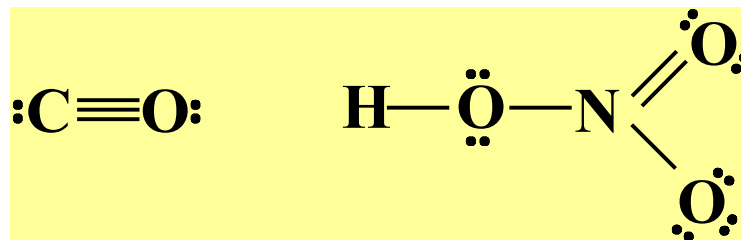
Γράψτε μια δομή Lewis για καθένα από τα παρακάτω μόρια και βρείτε τα τυπικά φορτία των ατόμων: (α) CO (β) HNO₃

ΑΠΑΝΤΗΣΗ 1. Ο συνολικός αριθμός ηλεκτρονίων είναι:



2. $X_N < X_O \Rightarrow C =$ το κεντρικό άτομο. Το όξινο H πρέπει να συνδέεται με O.

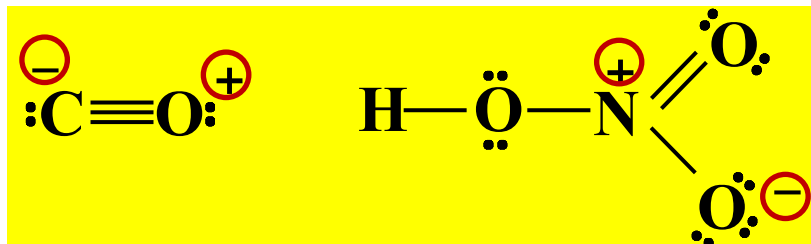
Άρα οι δομές Lewis των παραπάνω μορίων είναι:



Για να βρούμε τα τ.φ., εφαρμόζουμε την Εξίσωση (1).

(α) τ.φ. C = $4 - 2 - \frac{1}{2}(6) = -1$
τ.φ. O = $6 - 2 - \frac{1}{2}(6) = +1$

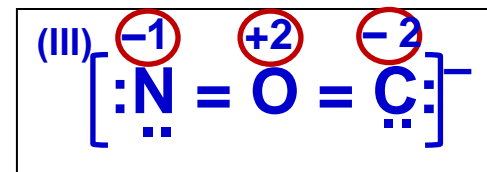
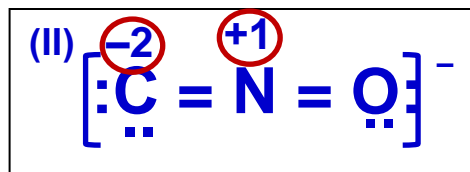
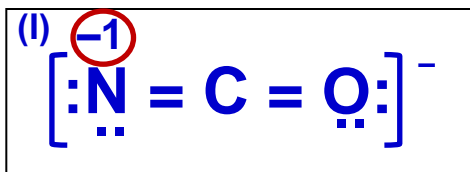
(β) τ.φ. H = $1 - \frac{1}{2}(2) = 0$,
τ.φ. N = $5 - 0 - \frac{1}{2}(8) = +1$
τ.φ. O(ακραίου) = $6 - 6 - \frac{1}{2}(2) = -1$
τ.φ. O(ενδιάμεσου) = $6 - 4 - \frac{1}{2}(4) = 0$
τ.φ. O(δ.δ.) = $6 - 4 - \frac{1}{2}(4) = 0$



Άσκηση

Για το ιόν του NCO^- :

(α) Να σχεδιάσετε τρεις δομές Lewis σημειώνοντας το τυπικό φορτίο κάθε ατόμου (Υπόδειξη: Θεωρείστε κάθε φορά μόνο τις δομές με διαφορετική σειρά των ατόμων και δύο διπλούς δεσμούς)



(β) Να πείτε ποια από τις τρεις αυτές δομές παριστάνει ακριβέστερα το συντακτικό τύπο του ιόντος και γιατί;

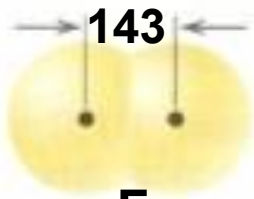
ΑΠΑΝΤΗΣΗ

Η δομή (I) είναι η επικρατέστερη.

Διότι:

- (1) Προτιμώμενα είναι τα μικρά τ.φ. (+1, -1 και καλύτερα το 0)
- (2) Τα αρνητικά τ.φ. στα πιο ηλεκτραρνητικά άτομα (C:2,5 / N:3 / O:3,5)

Μήκος δεσμού και τάξη δεσμού



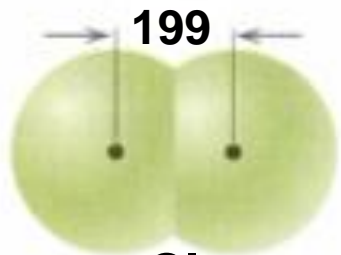
72 pm

F_2

Μήκη δεσμών και ομοιοπολικές ακτίνες αλογόνων

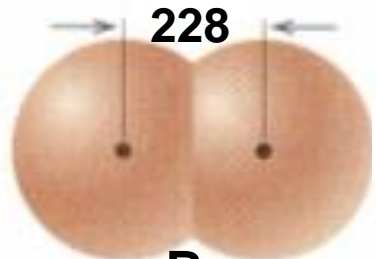
Μήκος δεσμού: μέση απόσταση μεταξύ των πυρήνων των ατόμων που συμμετέχουν στο δεσμό (προσδιορίζεται με περίθλαση ακτίνων-X ή φασματοσκοπικές μεθόδους)

☆ Συχνά τα μήκη απλών ομοιοπολικών δεσμών προβλέπονται από τις ομοιοπολικές ακτίνες (το μισό της απόστασης μεταξύ δύο όμοιων ατόμων που είναι ενωμένα ομοιοπολικά με απλό δεσμό)



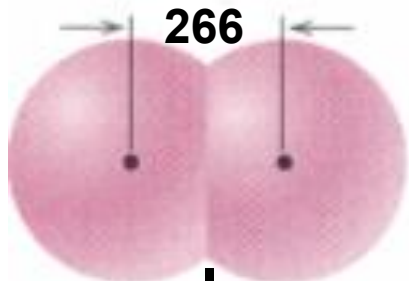
100 pm

Cl_2



114 pm

Br_2



133 pm

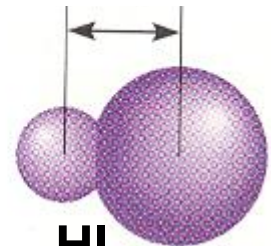
I_2

Μήκος δεσμού σε H_2 και HI

74 pm



161 pm



☆ Το μήκος δεσμού εξαρτάται από το μέγεθος των ατόμων αλλά και της πολικότητας και της τάξης του δεσμού.



Μήκος δεσμού και τάξη δεσμού

Τάξη δεσμού: αριθμός ηλεκτρονικών ζευγών ενός δεσμού.

Δηλαδή:

C–C απλός δεσμός, τάξη δεσμού = 1

C=C διπλός δεσμός, τάξη δεσμού = 2

C≡C τριπλός δεσμός, τάξη δεσμού = 3

Κάθε παύλα
ανάμεσα στα άτομα
αντιπροσωπεύει
ένα HZ

Όταν η τάξη δεσμού μεγαλώνει,
το μήκος δεσμού ελαττώνεται!

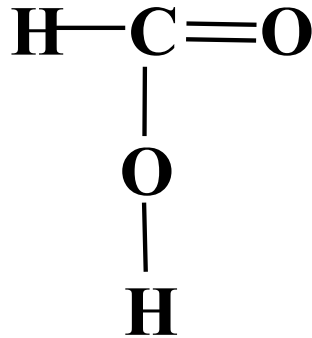
Μέσες τιμές μήκους δεσμών
μερικών συνηθισμένων
απλών, διπλών και τριπλών
δεσμών (σε pm)

C–H	107	C–N	143
C–O	143	C=N	138
C=O	121	C≡N	116
C–C	154	N–O	136
C=C	134	N=O	122
C≡C	120	O–H	96

Άσκηση 9.17

Συσχέτιση τάξης δεσμού και μήκους δεσμού

Το μυρμηκικό οξύ απομονώθηκε για πρώτη φορά το 1670.
Είναι το υγρό που προκαλεί ερεθισμό κατά το τσίμπημα των
μυρμηγκιών. Η δομή του μυρμηκικού οξέος είναι

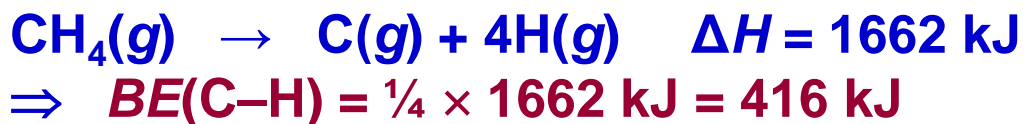
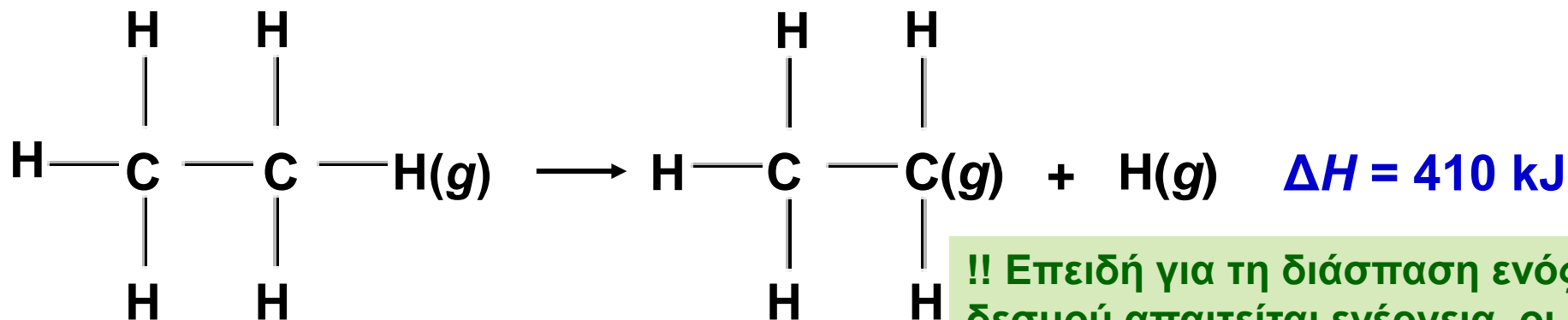
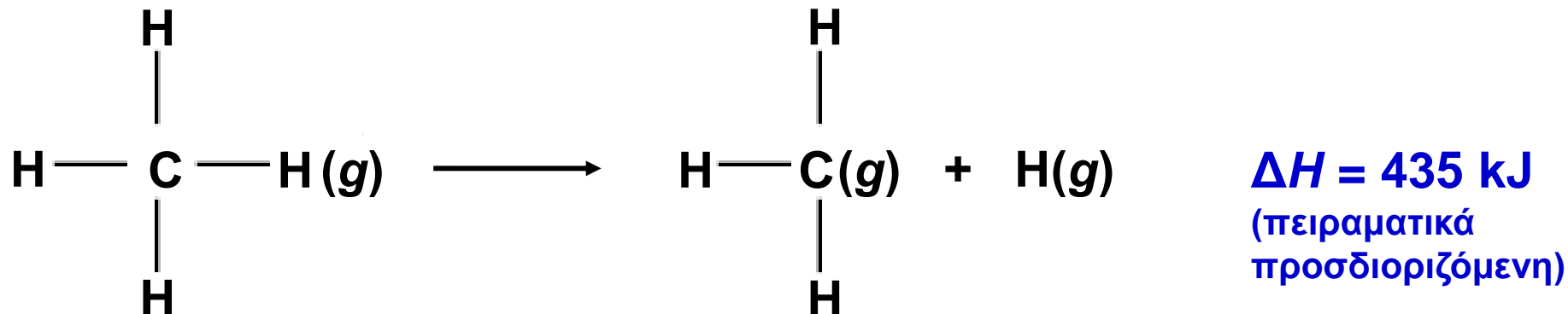


Ο ένας από τους δεσμούς άνθρακα–οξυγόνου έχει μήκος 136 pm και ο άλλος 123 pm.

Ποιο είναι το μήκος του δεσμού C=O στο μυρμηκικό οξύ;

Ενέργεια ή ενθαλπία δεσμού (BE ή D)

Ενέργεια του δεσμού A–B: μέση μεταβολή ενθαλπίας για τη διάσπαση ενός δεσμού A–B που υπάρχει σε μόριο ευρισκόμενο στην αέρια φάση.



!! Επειδή για τη διάσπαση ενός δεσμού απαιτείται ενέργεια, οι BE είναι πάντοτε θετικοί αριθμοί

!! Η εκλυόμενη κατά τη δημιουργία δεσμού ενέργεια, είναι ίση και αντίθετη με την BE

Ενέργειες δεσμών (σε kJ/mol)

Η ενέργεια δεσμού είναι μέτρο της ισχύος του δεσμού: όσο μεγαλύτερη η ενέργεια δεσμού, τόσο ισχυρότερος ο χημικός δεσμός

Μέσες ενέργειες δεσμών (σε kJ/mol)

Απλοί Δεσμοί

C–H	411	N–F	283	S–Cl	255
C–C	346	N–Cl	313	S–Br	217
C–N	305	N–Br	243	S–S	226
C–O	358				
C–F	485	H–H	432	F–F	155

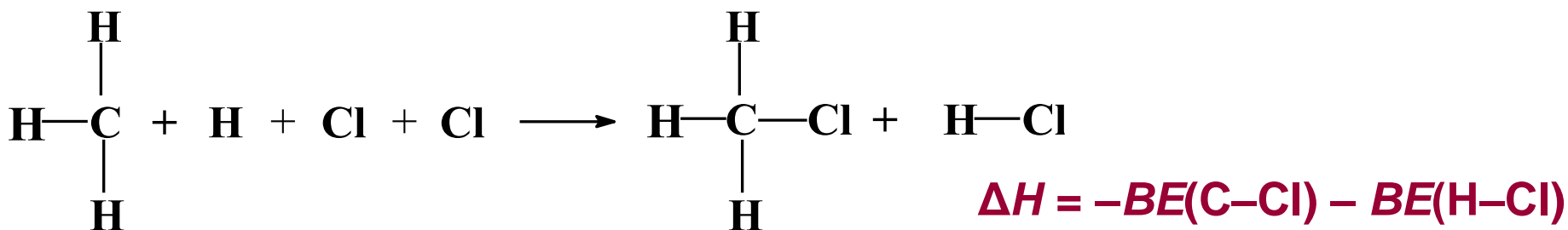
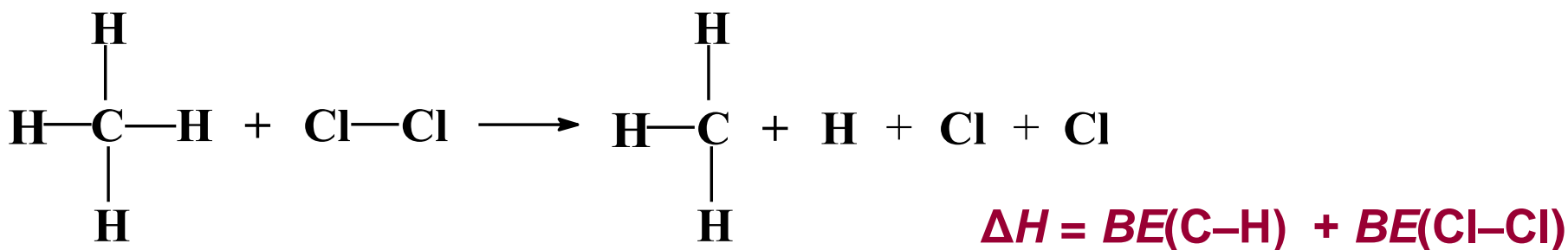
Πολλαπλοί δεσμοί

C=C	602	N=N	418	O=O	494
C≡C	835	N≡N	942		
C=N	615			S=O	532
C≡N	887			S=S	418
C=O	799				

!!! Πώς σχετίζεται η ενέργεια δεσμού με την τάξη δεσμού;

Υπολογισμός της μεταβολή ενθαλπίας (ΔH) από ενέργειες δεσμών μιας αντίδρασης σε αέρια φάση

Π.χ., $\text{CH}_4(g) + \text{Cl}_2(g) \rightarrow \text{CH}_3\text{Cl}(g) + \text{HCl}(g) \Rightarrow$ Υποθετική πορεία:



Γενικά:

$$\Delta H = \sum BE(\text{δεσμών που διασπώνται}) - \sum BE(\text{δεσμών που σχηματίζονται})$$

$$\Delta H \cong BE(\text{C}-\text{H}) + BE(\text{Cl}-\text{Cl}) - BE(\text{C}-\text{Cl}) - BE(\text{H}-\text{Cl}) =$$

$$(411 + 240 - 327 - 428) \text{ kJ} = -104 \text{ kJ}$$

Σε ποιο νόμο στηρίζεται ο παραπάνω γενικός τύπος της ΔH ;

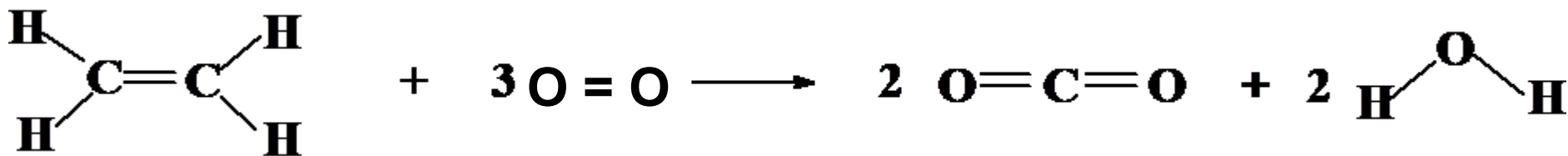
Τι σημαίνει το αρνητικό πρόσημο; Γιατί η τιμή αυτή είναι προσεγγιστική;

Άσκηση 9.18

Χρησιμοποιήστε ενέργειες δεσμών προκειμένου να εκτιμήσετε τη μεταβολή ενθαλπίας για την καύση αιθυλενίου, C_2H_4 , σύμφωνα με την εξίσωση: $C_2H_4(g) + 3O_2(g) \rightarrow 2CO_2(g) + 2H_2O(g)$

ΑΠΑΝΤΗΣΗ

Γράφουμε την αντίδραση με συντακτικούς τύπους για να ξεχωρίσουμε εύκολα τους δεσμούς που διασπώνται και τους δεσμούς που σχηματίζονται.



Διασπώνται: ένας δεσμός C=C, τέσσερις δεσμοί C–H και τρεις δεσμοί O=O, ενώ σχηματίζονται: τέσσερις δεσμοί C=O και τέσσερις δεσμοί O–H.

Παίρνουμε τις τιμές ενεργειών δεσμών που χρειαζόμαστε από τον κατάλληλο Πίνακα και εφαρμόζουμε την εξίσωση:

$$\Delta H_{\text{αντίδρ.}} \cong \Delta H(\text{δεσμών που διασπώνται}) - \Delta H(\text{δεσμών που σχηματίζονται})$$

$$\Rightarrow \Delta H_{\text{αντίδρ.}} \cong (614 + 4 \times 413 + 3 \times 498 - 4 \times 804 - 4 \times 463) \text{ kJ} = -1308 \text{ kJ}$$

Ενέργειες δεσμών στην ερμηνεία της θερμότητας μιας αντίδρασης ή της σταθερότητας προϊόντων



Έκρηξη του συμπλόκου τριιωδιδίου του αζώτου–αμμωνίας

Το καστανέρυθρο σύμπλοκο τριιωδιδίου του αζώτου και αμμωνίας είναι τόσο ευαίσθητο σε έκρηξη, ώστε μπορεί να εκραγεί με το άγγιγμα ενός φτερού. Απλοί δεσμοί αζώτου–ιωδίου αντικαθίστανται από πολύ ισχυρούς τριπλούς δεσμούς αζώτου–αζώτου (N_2) και απλούς δεσμούς ιωδίου–ιωδίου (I_2).

! Διατυπώστε τη χημική εξίσωση για την παραπάνω αντίδραση

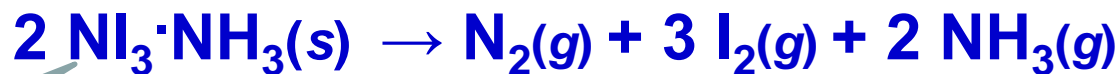
Ενέργειες δεσμών στην ερμηνεία της θερμότητας μιας αντίδρασης ή της σταθερότητας προϊόντων



Έκρηξη του συμπλόκου τριωιδίου του αζώτου–αμμωνίας

Το καστανέρυθρο σύμπλοκο τριωιδίου του αζώτου και αμμωνίας είναι τόσο ευαίσθητο σε έκρηξη, ώστε μπορεί να εκραγεί με το άγγιγμα ενός φτερού. Απλοί δεσμοί αζώτου–ιωδίου αντικαθίστανται από πολύ ισχυρούς τριπλούς δεσμούς αζώτου–αζώτου (N_2) και απλούς δεσμούς ιωδίου–ιωδίου (I_2).

! Διατυπώστε τη χημική εξίσωση για την παραπάνω αντίδραση



Μικτή πολυμερής
ένωση

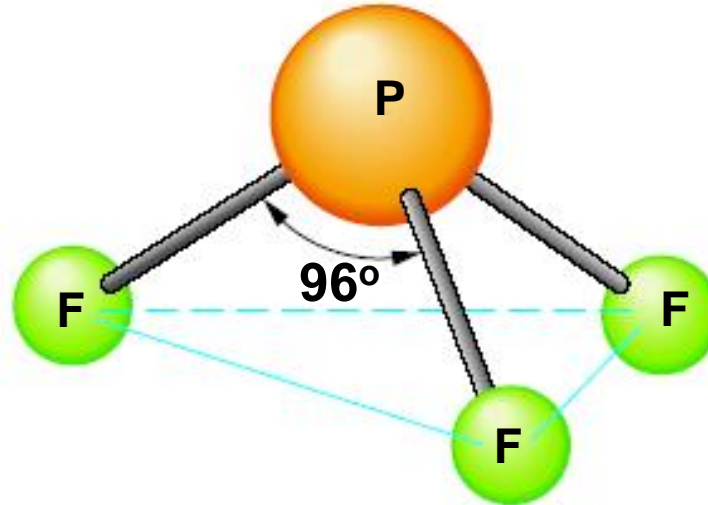
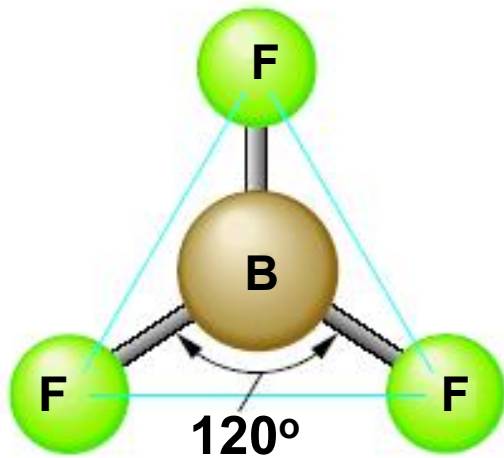
7. Μοριακή Γεωμετρία και Θεωρία του Χημικού Δεσμού

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

- Το μοντέλο VSEPR
- Διπολική ροπή και μοριακή γεωμετρία
- Θεωρία του δεσμού σθένους
- Περιγραφή πολλαπλών δεσμών
- Αρχές της θεωρίας των μοριακών τροχιακών
- Ηλεκτρονικές δομές διατομικών μορίων των στοιχείων της 2ης περιόδου
- Μοριακά τροχιακά και απεντοπισμένοι δεσμοί

Μόρια με τον ίδιο γενικό τύπο έχουν και την ίδια μοριακή γεωμετρία;

Μοριακή Γεωμετρία: γενικό σχήμα μορίου καθοριζόμενο από τις σχετικές θέσεις των ατομικών πυρήνων

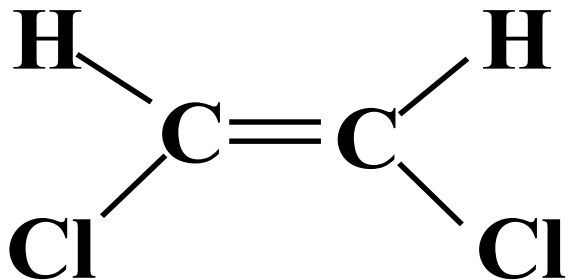


Μοριακά μοντέλα των BF_3 και PF_3

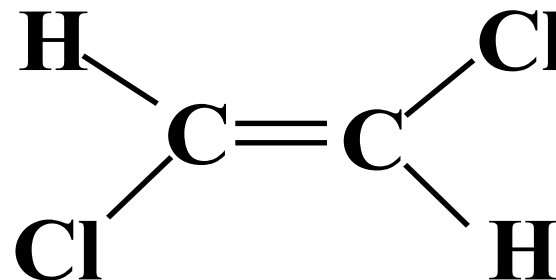
Παρόλο που και τα δύο μόρια έχουν τον ίδιο γενικό τύπο AX_3 , το τριφθορίδιο του βορίου είναι επίπεδο, ενώ το τριφθορίδιο του φωσφόρου πυραμιδικό.



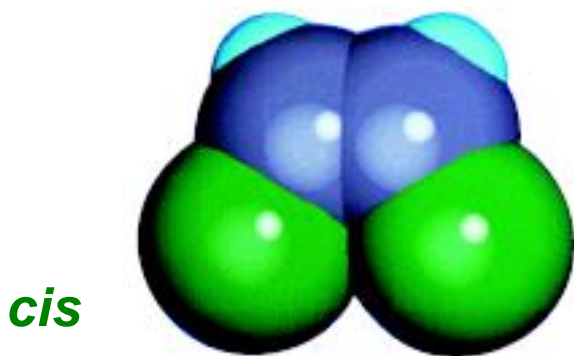
Διαφορές στη δομή των μορίων είναι σημαντικές;



cis-1,2-διχλωροαιθένιο
σ.ζ. 48°C

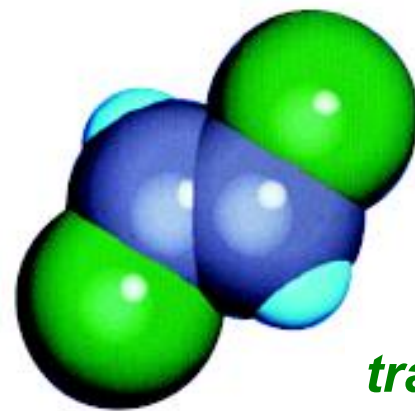


trans-1,2-διχλωροαιθένιο
σ.ζ. 60°C



cis

Ισομερή του
διχλωροαιθενίου

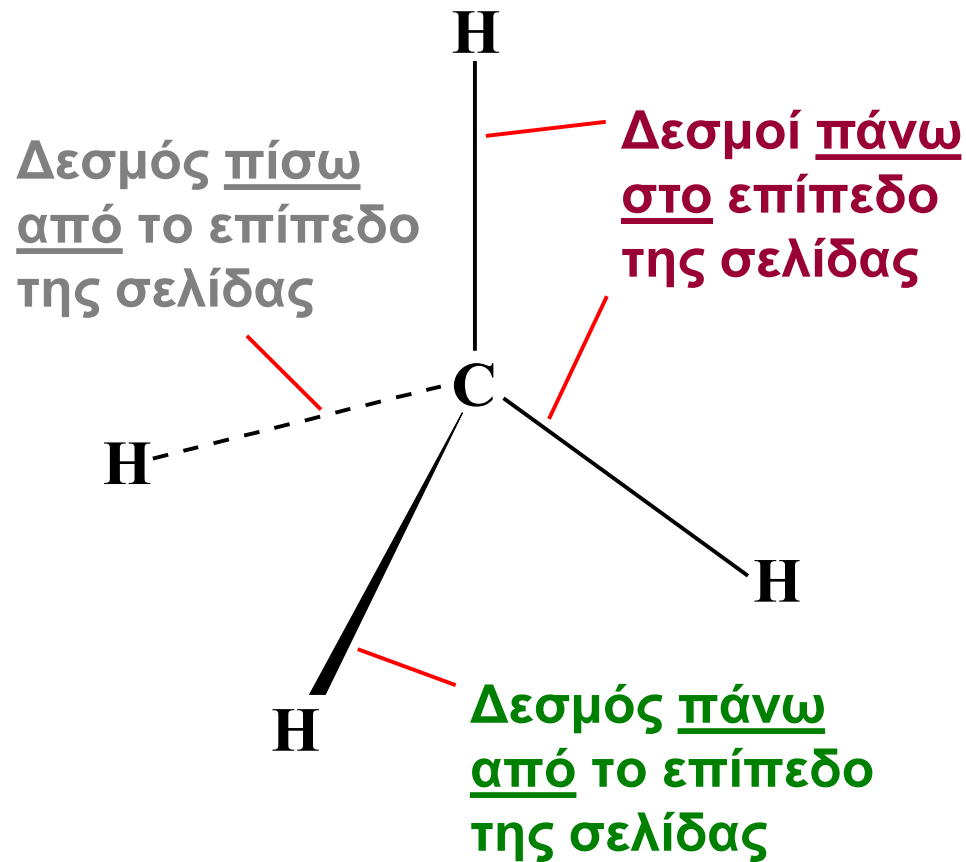


trans

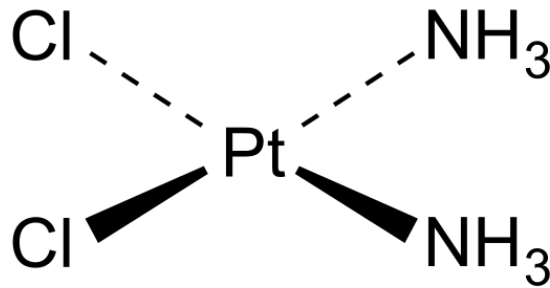
Πώς εξηγείται η ύπαρξη ενώσεων *cis* και *trans*;

Μοριακή γεωμετρία και προβλέψεις βάσει του μοντέλου VSEPR

Πώς σχεδιάζω έναν στερεοχημικό τύπο;

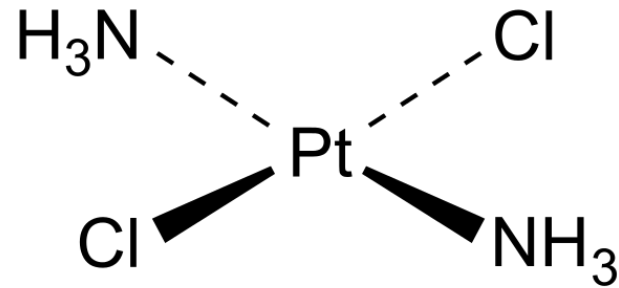


Διαφορές στη δομή των μορίων είναι σημαντικές;



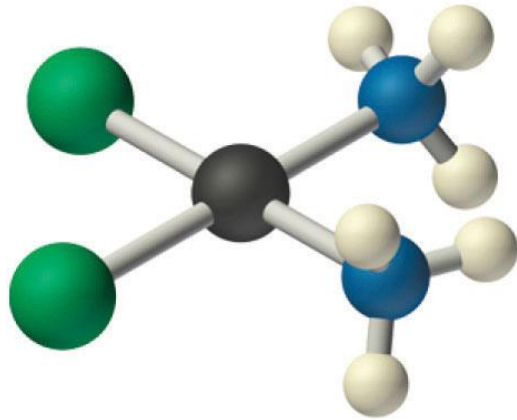
cis-διαμμινοδιχλωρολευκόχρυσος(II)

Cisplatin

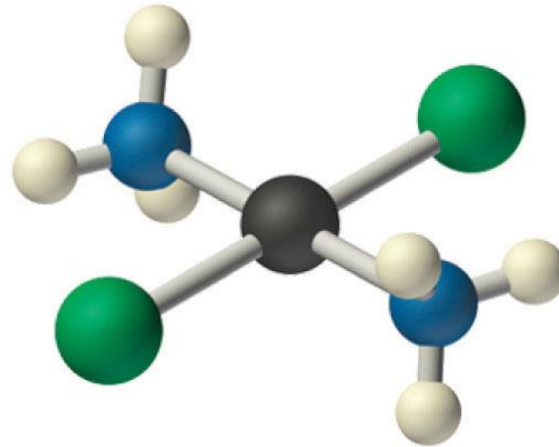


trans-διαμμινοδιχλωρολευκόχρυσος(II)

Transplatin



cis-Pt(NH₃)₂Cl₂



trans-Pt(NH₃)₂Cl₂

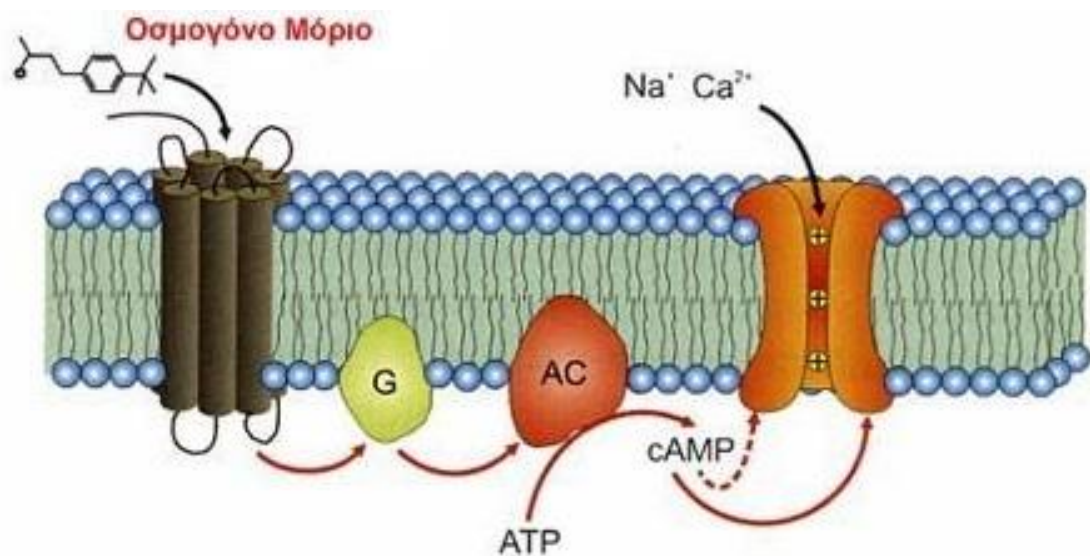
Μόνο η *cis*-μορφή παρουσιάζει κυτταροτοξική δράση για κακοήθη κύτταρα, διότι το DNA αυτών σχηματίζει διάφορες ενώσεις προσθήκης (adducts) με τη σισπλατίνη

Γιατί πρέπει να γνωρίζω τη γεωμετρία των μορίων;

Στερεοχημική ερμηνεία της όσφρησης

Δεκαετία '50: Στη **μύτη** υπάρχουν απολήξεις νεύρων όσφρησης με **υποδοχές** καθορισμένου **γεωμετρικού σχήματος** και **διαστάσεων**.

Όσα **οσμηρά** μόρια έχουν **κατάλληλο σχήμα** και **μέγεθος** εισέρχονται στις υποδοχές των απολήξεων και ερεθίζουν το κατάλληλο νεύρο



Βασικές οσμές:

- 1) Καμφοράς
- 2) Μόσχου
- 3) Ανθέων
- 4) Μέντας
- 5) Αιθερική (αιθέρας)
- 6) Όξινη (καυτερή)
- 7) Λευκωμάτων υπό αποσύνθεση (σαπίλα)

Μεταφορά οσμηρής ουσίας σε κατάλληλη υποδοχή

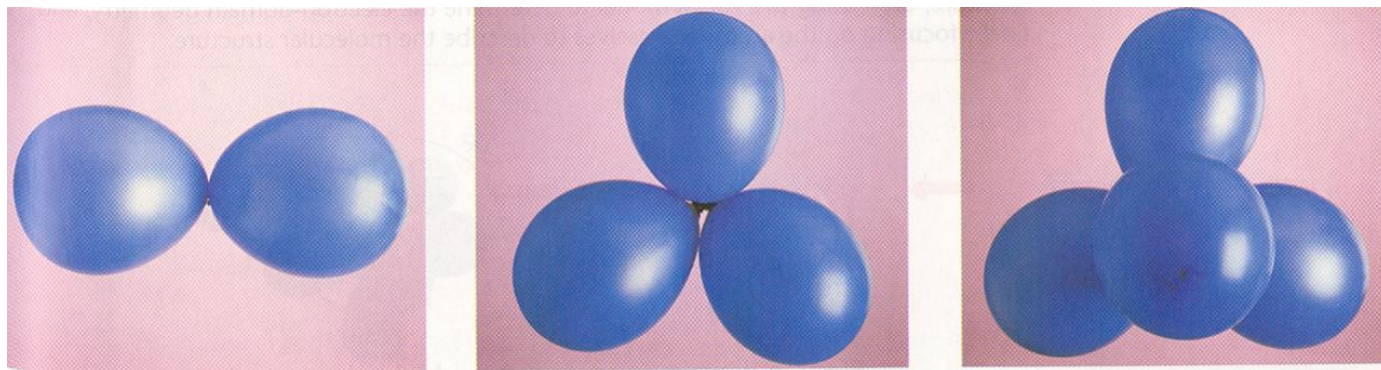
Δεκαετία '90: Αποδείχθηκε η παρουσία **1000 υποδοχέων** και ο άνθρωπος μπορεί να διακρίνει πάνω από **10.000 οσμές!**

Μοριακή γεωμετρία και προβλέψεις βάσει του μοντέλου VSEPR (άπωσης ηλεκτρονικών ζευγών του φλοιού σθένους)

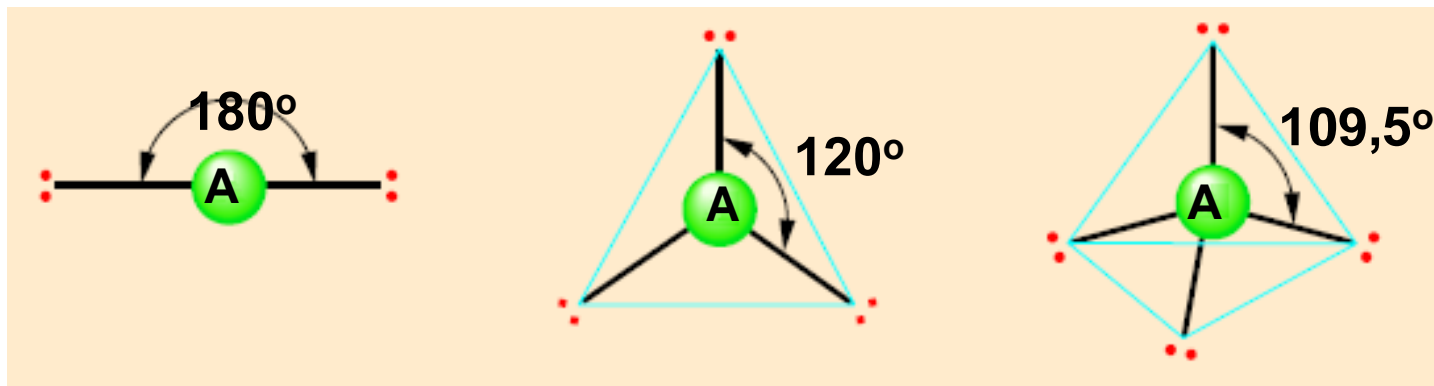
✓ Το μοντέλο VSEPR (Valence Shell Electron Pair Repulsion) προβλέπει τα **σχήματα μορίων** και **ιόντων** θεωρώντας ότι τα ηλεκτρονικά ζεύγη των φλοιών σθένους **διευθετούνται γύρω από κάθε άτομο έτσι ώστε τα ηλεκτρονικά ζεύγη να παραμένουν όσο γίνεται μακρύτερα το ένα από το άλλο, προκειμένου να ελαχιστοποιούνται οι ηλεκτρονικές απώσεις!**

Πώς διευθετούνται 2, 3 ή 4 ηλεκτρονικά ζεύγη γύρω από ένα άτομο;

Μπαλόνια δεμένα μαζί στα άκρα τους υιοθετούν από μόνα τους τη διευσθέτηση με τη χαμηλότερη ενέργεια



Μοριακή γεωμετρία και προβλέψεις βάσει του μοντέλου VSEPR



Αριθμός ζευγών

2

3

4

Διευθέτηση ζευγών

γραμμική

επίπεδη τριγωνική

τετραεδρική

☞ Προσδιορισμός γεωμετρίας μορίου σημαίνει εντοπισμός θέσεων των **ατόμων** και όχι ηλεκτρονικών ζευγών!

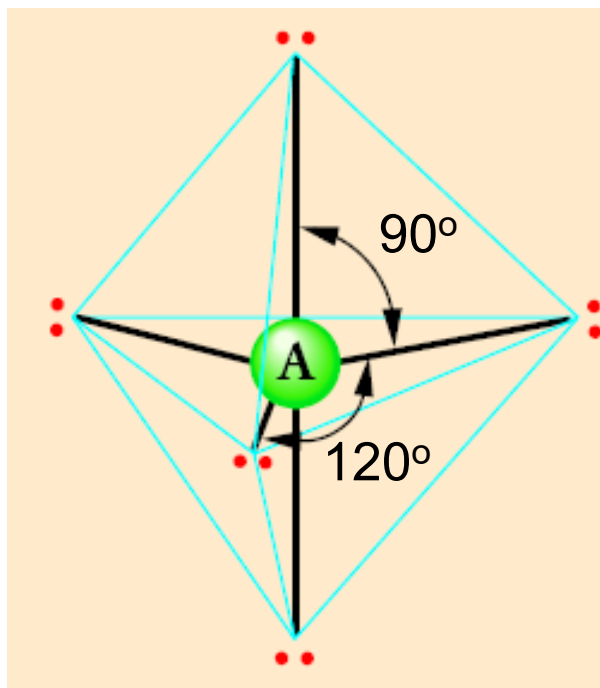
➡ Πρώτα πρέπει να προβλεφθεί (βάσει VSEPR) η διευθέτηση των ηλεκτρονικών ζευγών (μονήρων και **δεσμικών**) του φλοιού σθένους γύρω από το **κεντρικό άτομο**.

☆ Ο προσανατολισμός των δεσμικών ηλεκτρονίων στο χώρο μας δίνει τη μοριακή γεωμετρία!



Μοριακή γεωμετρία και προβλέψεις βάσει του μοντέλου VSEPR

Πώς διευθετούνται 5 ή 6 ηλεκτρονικά ζεύγη γύρω από ένα άτομο;

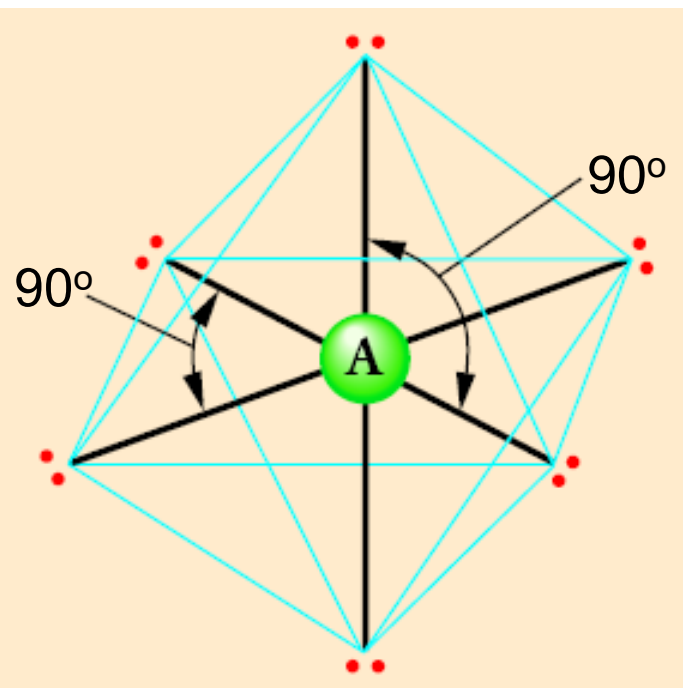


Αριθμός ζευγών

5

Διευθέτηση ζευγών

τριγωνική
διπυραμιδική



6

οκταεδρική

Μοριακή γεωμετρία και προβλέψεις βάσει του μοντέλου VSEPR

☞ Για να προβλέψουμε τη γεωμετρία ενός μορίου του γενικού τύπου AB_n , με τη θεωρία VSEPR, ακολουθούμε τα εξής βήματα:

1. Σχεδιάζουμε τη δομή Lewis του μορίου

2. Βρίσκουμε τα ηλεκτρονικά ζεύγη (δεσμικά Δ και μονήρη Ε) στο φλοιό σθένους του κεντρικού ατόμου Α. [Αν στο μόριο υπάρχει διπλός ή τριπλός δεσμός, τον θεωρούμε ως απλό]

3. Χαρακτηρίζουμε τη συνολική διεύθυνση των ηλεκτρονικών ζευγών (θεωρώντας και τα Ε ως ψευδοϋποκαταστάτες)

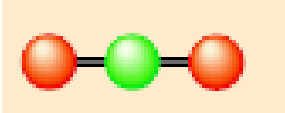
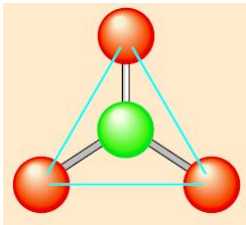
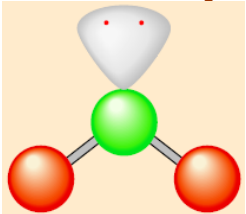

4. Αγνοούμε τις κορυφές πολυέδρων που οφείλονται στα Ε

5. Χαρακτηρίζουμε γεωμετρικά το σχήμα που απομένει (δηλ. τη μοριακή γεωμετρία σύμφωνα και με τους πίνακες που εμφανίζονται στις επόμενες διαφάνειες)



Μοριακή γεωμετρία και προβλέψεις βάσει του μοντέλου VSEPR

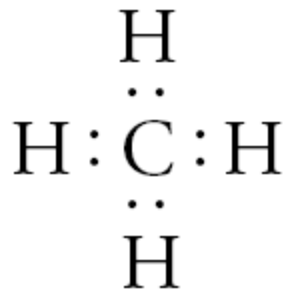
1. Κεντρικό άτομο με δύο ή τρία ηλεκτρονικά ζεύγη στο φλοιό σθένους

Ηλεκτρονικά ζεύγη (HZ)			Γεωμετρία ηλ. ζευγών	Μοριακή γεωμετρία	
Συνολικά	Δεσμικά (Δ)	Μονήρη (Ε)			
2	2	0	Γραμμική	<u>Γραμμική</u> AX ₂	 BeF ₂
3	3	0	Επίπεδη τριγωνική	<u>Επίπεδη τριγωνική</u> AX ₃	 BF ₃
	2	1		<u>Κεκαμμένη ή γωνιακή</u> AX ₂ E	 SO ₂
4			τετραεδρική		

Μονήρες ζεύγος

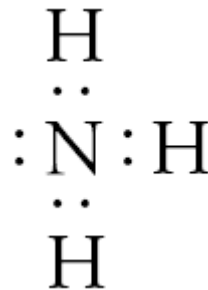
Μοριακή γεωμετρία και προβλέψεις βάσει του μοντέλου VSEPR

ΠΡΟΣΟΧΗ!: Τέσσερα ηλεκτρονικά ζεύγη γύρω από το κεντρικό άτομο σημαίνει **τετραεδρική διευθέτηση**. Το μόριο όμως δεν έχει πάντοτε τετραεδρική γεωμετρία.



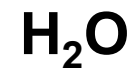
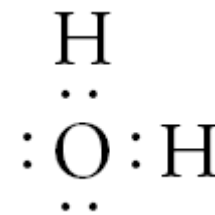
Μοριακή γεωμετρία: τετραεδρική

Γενικός τύπος: AX_4



τριγωνική πυραμιδική

AX_3E



κεκαμμένη

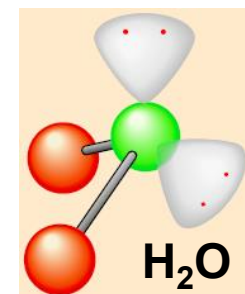
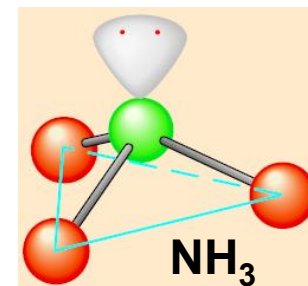
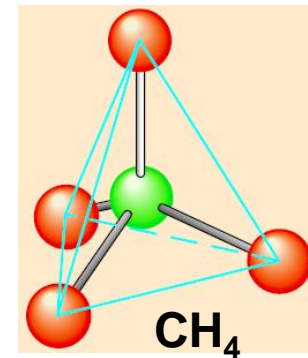
AX_2E_2



Μοριακή γεωμετρία και προβλέψεις βάσει του μοντέλου VSEPR

2. Κεντρικό άτομο με τέσσερα ηλεκτρονικά ζεύγη στο φλοιό σθένους

Ηλεκτρονικά ζεύγη (HZ)		Διευθέτηση ζευγών	Μοριακή γεωμετρία
Συνολικά	Δεσμικά Μονήρη		
	(Δ)	(E)	
4	4	0	<u>Τετραεδρική</u> AX_4
	3	1	Τετραεδρική <u>Τριγωνική πυραμιδική</u> AX_3E
	2	2	Κεκαμμένη ή γωνιακή AX_2E_2



Μοριακή γεωμετρία και προβλέψεις βάσει του μοντέλου VSEPR

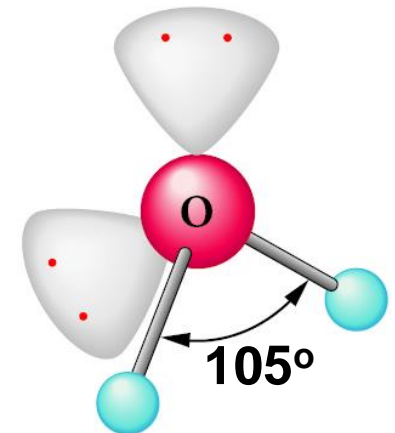
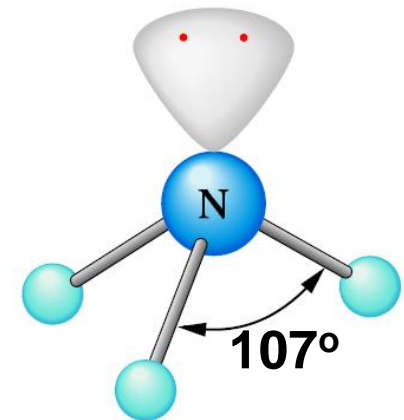
★ Όταν υπάρχουν μονήρη ηλεκτρονικά ζεύγη έχουμε αποκλίσεις των γωνιών δεσμών από τις ιδανικές τιμές διότι:

1. Ένα μονήρες ζεύγος ηλεκτρονίων απαιτεί **περισσότερο χώρο** από ένα δεσμικό ζεύγος.
2. Το μονήρες ζεύγος είναι στο χώρο **πιο διάχυτο**, ενώ το δεσμικό ζεύγος συγκρατείται **πιο κοντά στους πυρήνες**.

NH₃: Το μονήρες ζεύγος στο άτομο του αζώτου διεκδικεί περισσότερο χώρο από ό,τι τα δεσμικά ζεύγη.

Για το λόγο αυτό οι δεσμοί N–H "συμπιέζονται" από το μονήρες ζεύγος με αποτέλεσμα οι γωνίες δεσμών H–N–H να γίνονται μικρότερες από την τετραεδρική τιμή 109,5°.

Ανάλογη είναι και η περίπτωση του **H₂O**, όπου όμως τα μονήρη ΗΖ είναι δύο.



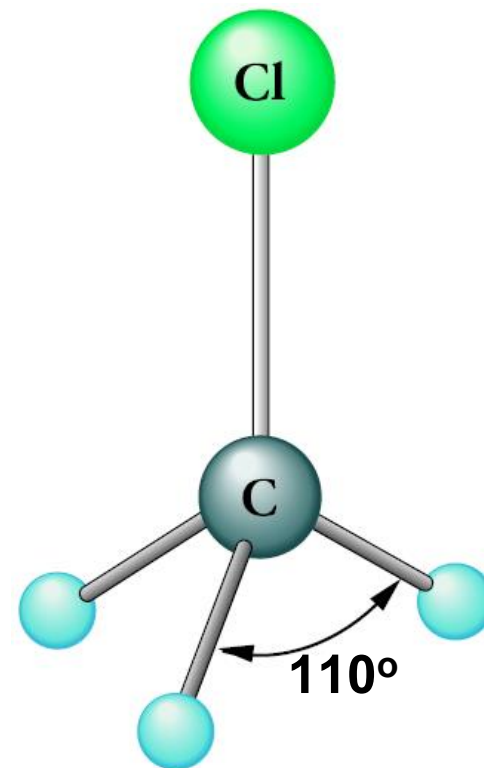
Μοριακή γεωμετρία και προβλέψεις βάσει του μοντέλου VSEPR

Αποκλίσεις των γωνιών δεσμών από τις ιδανικές τιμές έχουμε και όταν τα **περιφερειακά άτομα** γύρω από το κεντρικό άτομο διαφέρουν σε **ηλεκτραρνητικότητα**.

Χλωρομεθάνιο, CH_3Cl

Υπό την επίδραση ενός ισχυρά ηλεκτραρνητικού ατόμου, όπως είναι το Cl, το δεσμικό H-Z C-Cl **συστέλλεται** και διεκδικεί **λιγότερο χώρο**, με αποτέλεσμα τα υπόλοιπα δεσμικά H-Z να μπορούν να απλωθούν περισσότερο.

Έτσι, οι γωνίες H-C-H μεγαλώνουν, ενώ οι γωνίες Cl-C-H μικραίνουν.

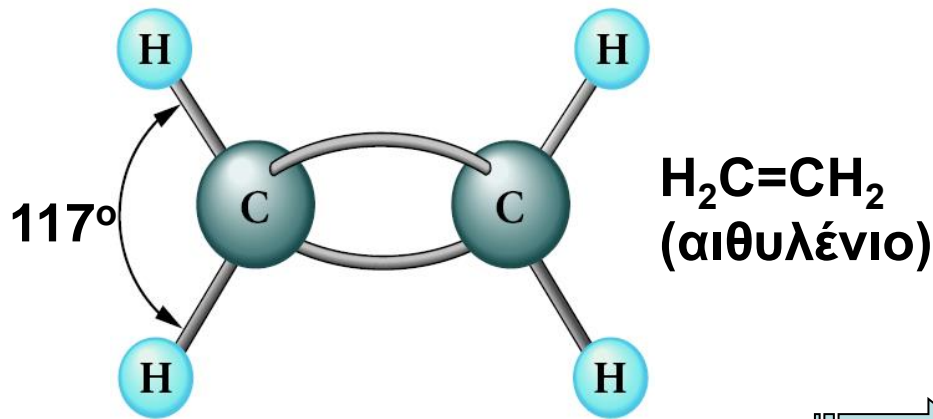
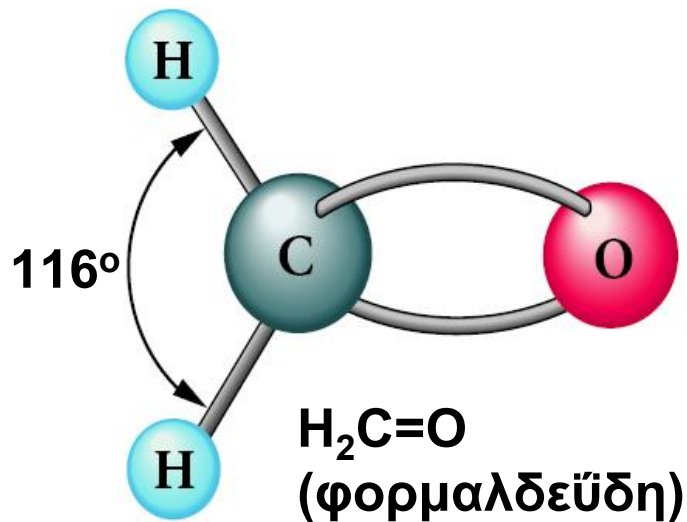


Μοριακή γεωμετρία και προβλέψεις βάσει του μοντέλου VSEPR

⇒ Οι **πολλαπλοί δεσμοί** διεκδικούν **περισσότερο χώρο** από ό,τι οι απλοί δεσμοί λόγω του μεγαλύτερου αριθμού ηλεκτρονίων και επηρεάζουν ισχυρά τη γεωμετρία ενός μορίου.

⇒ ο διπλός δεσμός C=O του μορίου της φορμαλδεΐδης, CH_2O , περιμένουμε να διεκδικεί περισσότερο χώρο από τους δεσμούς C–H. Προβλέπουμε λοιπόν ότι η γωνία δεσμών H–C–H θα είναι μικρότερη από την ιδανική τιμή των 120° .

Ομοίως για τους δεσμούς H–C–H στο μόριο $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$



Άσκηση 10.1

Πρόβλεψη μοριακής γεωμετρίας (δύο, τρία ή τέσσερα ηλεκτρονικά ζεύγη)

(α) Χρησιμοποιήστε το μοντέλο VSEPR για να προβλέψετε τη γεωμετρία των ακόλουθων οντοτήτων:

(i) ClO_3^- , (ii) OF_2 , (iii) SiF_4

(β) Ποια αναμένεται να είναι (κατά προσέγγιση) η τιμή των γωνιών των δεσμών O–Cl–O στο (i), των F–O–F στο (ii) και των F–Si–F στο (iii);