



Πανεπιστήμιο Δυτικής Μακεδονίας
Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών

Χημεία

Ενότητα 7: Μοριακή γεωμετρία

Τόλης Ευάγγελος

e-mail: etolis@uowm.gr

Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών



Πανεπιστήμιο Δυτικής Μακεδονίας



Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Άδειες Χρήσης

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό υπόκειται σε άδειες χρήσης Creative Commons.
- Για εκπαιδευτικό υλικό, όπως εικόνες, που υπόκειται σε άλλου τύπου άδειας χρήσης, η άδεια χρήσης αναφέρεται ρητώς.



Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στα πλαίσια του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ψηφιακά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Δυτικής Μακεδονίας**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο τη αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

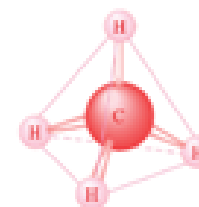


ΕΣΠΑ
2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ



Κεφάλαιο 7^ο

7 Μοριακή γεωμετρία



Μοριακή γεωμετρία (1/22)

Μοριακή Γεωμετρία (στερεοχημεία): Διάταξη των ατόμων του μορίου στο χώρο.



Εξαρτάται από το **είδος** των ατόμων και τον **τρόπο** που αυτά **ενώνονται**.



Ερμηνεία της μοριακής γεωμετρίας, γίνεται με την θεωρία απώσεως των ηλεκτρονιακών ζευγών της στιβάδας σθένους (VSEPR, **V**alence **S**hell **E**lectron **P**air **R**epulsion).








Μοριακή γεωμετρία (2/22)

- Θεωρία VSEPR προβλέπει το σχήμα των μορίων στο χώρο.
- **Αρχή της θεωρία:** Τα ηλεκτρονιακά ζεύγη της στιβάδας σθένους του **κεντρικού ατόμου** τοποθετούνται έτσι ώστε να έχουμε τις **ελάχιστες απώσεις** ή τα ηλεκτρονιακά ζεύγη να βρίσκονται όσο το δυνατό **μακριά** το **ένα από** το **άλλο**.



Μοριακή γεωμετρία (3/22)

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑΤΑ αριθμού ηλεκτρονιακών ζευγών και διάταξη.

| Αριθμός ηλεκτρονιακών ζευγών | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
|------------------------------|---|---|---|---|---|
| Διευθέτηση ζευγών | Γραμμική | Τριγωνική | Τετραεδρική | Τριγωνική διπυραμιδική | Οκταεδρική |
| Μοριακή γεωμετρία |  |  |  |  |  |
| Γωνία δεσμών | 180° | 120° | $109,5^\circ$ | 120° & 90° | 180° |
| Παράδειγμα | BeF_2 | BF_3 | CH_4 | PCl_5 | SF_6 |







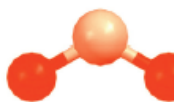
Μοριακή γεωμετρία (4/22)




- Τα ηλεκτρονιακά ζεύγη του κεντρικού ατόμου:
 - Είτε ΔΕΣΜΙΚΑ (ανήκουν σε δεσμό).
 - Είτε ΜΟΝΗΡΗ (το ζεύγος ανήκει εξολοκλήρου στο άτομο).
- Αν **όλα** τα ηλεκτρονιακά ζεύγη **είναι δεσμικά** η γεωμετρία του μορίου **συμπίπτει** με την διάταξη των ηλεκτρονιακών ζευγών.
- Αν υπάρχουν και μονήρη ζεύγη e^- τότε η γεωμετρία του μορίου καθορίζεται μόνο από την διευθέτηση των δεσμικών ζευγών με κάποιες παραμορφώσεις λόγω της ύπαρξης των μονήρων ζευγών e^- .



Μοριακή γεωμετρία (5/22)

Μοριακή Γεωμετρία ανάλογα με τον αριθμό των δεσμικών και των μονήρων ζευγών e⁻ γύρω από το κεντρικό άτομο.

| Αριθμός ηλεκτρονιακών ζευγών | | | Διάταξη ζευγών ηλεκτρονίων | Γεωμετρία μορίου | Παράδειγμα |
|------------------------------|---------|--------|----------------------------|--|------------------|
| Συνολικά | Δεσμικά | Μονήρη | | | |
| 3 | 3 | 0 | Επίπεδη τριγωνική | Επίπεδη τριγωνική  | BF ₃ |
| | 2 | 1 | | Κεκαμμένη ή γωνιακή  | SO ₂ |
| 4 | 4 | 0 | Τετραεδρική | Τετραεδρική  | CH ₄ |
| | 3 | 1 | | Τριγωνική πυραμίδα  | NH ₃ |
| | 2 | 2 | | Κεκαμμένη ή γωνιακή  | H ₂ O |

| Αριθμός ηλεκτρονιακών ζευγών | | Διάταξη ζευγών ηλεκτρονίων | Γεωμετρία μορίου | Παράδειγμα |
|------------------------------|--------|----------------------------|--|------------------|
| Δεσμικά | Μονήρη | | | |
| 6 | 0 | Οκταεδρική | Οκταεδρική  | SF ₆ |
| 5 | 1 | Οκταεδρική | Τετραγωνική πυραμίδα  | BrF ₅ |
| 4 | 2 | Οκταεδρική | Επίπεδη τετραγωνική  | XeF ₄ |



Μοριακή γεωμετρία (6/22)

ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ ΓΙΑ ΤΗΝ ΠΡΟΒΛΕΨΗ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΓΕΩΜΕΤΡΙΑΣ:

1. Σχεδιάζουμε τον τύπο Lewis για το μόριο, προσδιορίζοντας τον αριθμό όλων των ηλεκτρονικών ζευγών γύρω από το κεντρικό άτομο.

Ο τύπος Lewis προσδιορίζεται με βάση τα ηλεκτρόνια σθένους όλων των ατόμων που υπάρχουν στο μόριο.



Μοριακή γεωμετρία (7/22)

2. Από τον τύπου Lewis βρίσκουμε τον αριθμό ηλεκτρονικών ζευγών που υπάρχουν γύρω από το κεντρικό άτομο (δεσμικά και μονήρη), μετρώντας κάθε πολλαπλό δεσμό ως απλό δεσμό.
3. Αν υπάρχουν μόνο δεσμικά ζεύγη ηλεκτρονίων τότε η γεωμετρία του μορίου έχει ως εξής:
 - Δύο ζεύξη → γραμμική γεωμετρία.
 - Τρία → επίπεδη τριγωνική.
 - Τέσσερα → Τετραεδρικό.
 - Πέντε → Τριγωνική δι-πυραμιδική.
 - Έξι → Οκταεδρική.



Μοριακή γεωμετρία (8/22)

4. Αν υπάρχουν και δεσμικά και μονήρη ζεύγη ηλεκτρονίων τότε οδηγούμεθα στην μοριακή γεωμετρία λαμβάνοντας υπόψη ότι τα μη δεσμικά ζεύγη απωθούν περισσότερο τα άλλα ζεύγη ηλεκτρονίων, καταλαμβάνουν δηλαδή πιο πολύ χώρο, απ' ότι τα δεσμικά ζεύγη ηλεκτρονίων. Έτσι, έχουμε αποκλίσεις από τα κανονικά σχήματα τα οποία προκύπτουν στην περίπτωση που όλα τα ζεύγη ηλεκτρονίων είναι δεσμικά.



Μοριακή γεωμετρία (9/22)

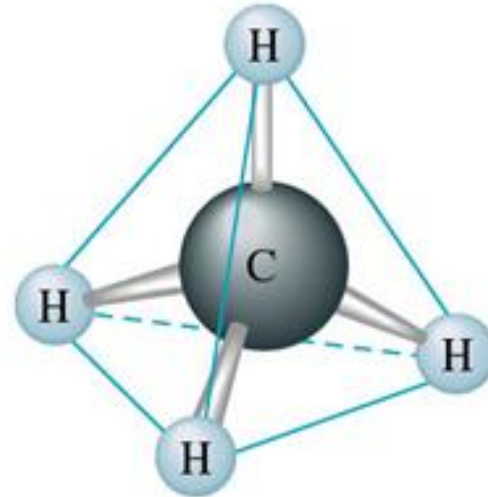
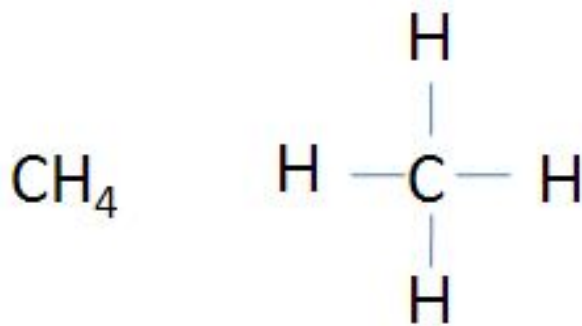
ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΜΟΝΗΡΩΝ ΖΕΥΓΩΝ e^- ΣΤΗ ΜΟΡΙΑΚΗ ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ:

- Σύγκριση των μορίων μεθανίου (CH_4), νερού (H_2O) και αμμωνίας (NH_3) ως προς την μοριακή γεωμετρία.

Και στα τρία μόρια γύρω από το κεντρικό άτομο (C, O και N, αντίστοιχα) υπάρχουν τέσσερα ζεύγη ηλεκτρονίων. Παρόλα αυτά η μοριακή γεωμετρία τα των μορίων αυτών είναι διαφορετική. Γιατί ;



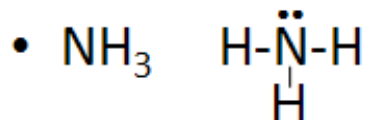
Μοριακή γεωμετρία (10/22)



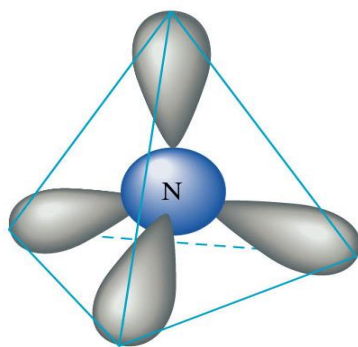
Υπάρχουν τέσσερα ζεύγη ηλεκτρονίων γύρω από το κεντρικό άτομο (C) άρα η διευσθέτηση των ζευγών ηλεκτρονίων θα είναι τετραεδρική. **Τετραεδρική** είναι και η μοριακή γεωμετρία του μεθανίου αφού δεν υπάρχει κανένα μονήρες ζεύγος ηλεκτρονίων.



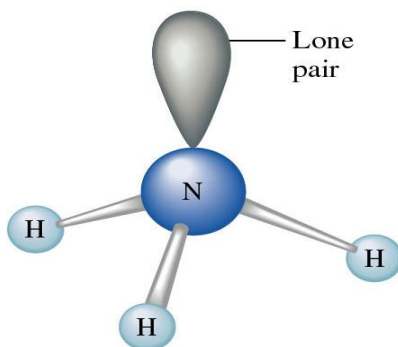
Μοριακή γεωμετρία (11/22)



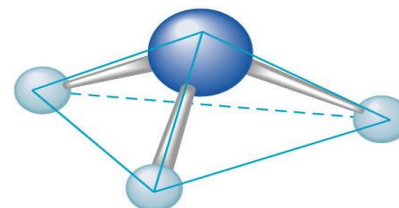
4 ζεύγη ηλεκτρονίων γύρω από το κεντρικό άτομο (N) άρα η διευσθέτηση των ζευγών ηλεκτρονίων θα είναι τετραεδρική. Τετραεδρική θα ήταν και η γεωμετρία του μορίου αν όλα τα ζεύγη ηλεκτρονίων ήταν δεσμικά. Όμως επειδή υπάρχει 1 μονήρες ζεύγος ηλεκτρονίων θα έχουμε αποκλίσεις από την τετραεδρική δομή. Το μονήρες ζεύγος καταλαμβάνει περισσότερο χώρο με αποτέλεσμα η πραγματική γεωμετρία του μορίου να είναι **τριγωνική πυραμίδα**.



(a)



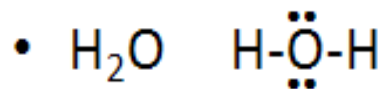
(b)



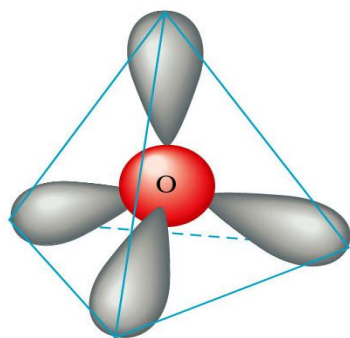
(c)



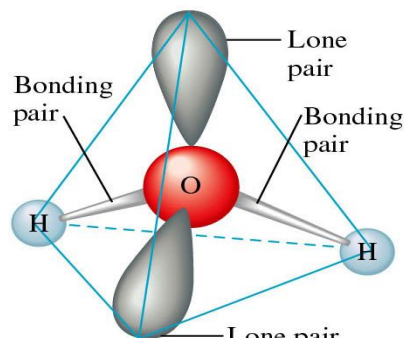
Μοριακή γεωμετρία (12/22)



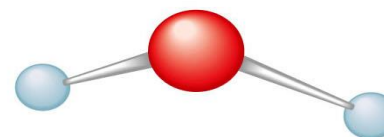
4 ζεύγη ηλεκτρονίων γύρω από το κεντρικό άτομο (O) άρα η διευσθέτηση των ζευγών ηλεκτρονίων θα είναι τετραεδρική. Όμως επειδή υπάρχουν δυο μονήρη ζεύγη ηλεκτρονίων θα έχουμε αποκλίσεις από την τετραεδρική δομή. Τα δυο μονήρη ζεύγη καταλαμβάνουν ακόμα περισσότερο χώρο σε σύγκριση με την NH_3 που έχει ένα μονήρες ζεύγος με αποτέλεσμα η πραγματική γεωμετρία του μορίου να είναι **γωνιακή** (σχήματος V).



(a)



(b)



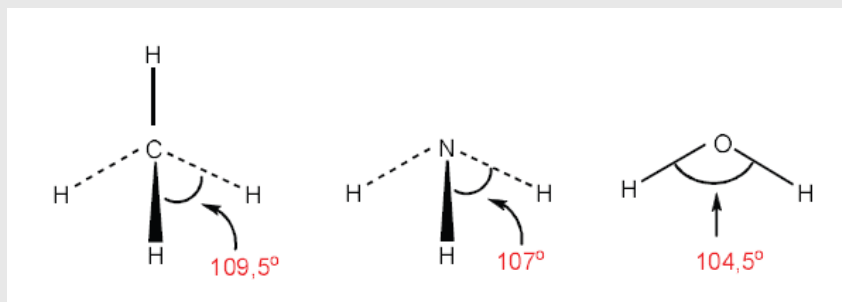
(c)



Μοριακή γεωμετρία (13/22)

Επίδραση των μονήρων ζευγών στις γωνίες δεσμών:

Τα **μονήρη** ζεύγη e^- καταλαμβάνουν **περισσότερο χώρο** από τα δεσμικά με αποτέλεσμα να **απωθούν** τα **άλλα ζεύγη e^-** και ως εκ τούτου να **επηρεάζουν** τις γωνίες δεσμών.



Η ύπαρξη μονήρων ζευγών e^- στα μόρια της NH_3 (1 μονήρες ζεύγος) και H_2O (2 μονήρη ζεύγη) οδηγεί σε αποκλίσεις από την γωνία $109,5^\circ$ του ιδανικού τετραέδρου.



Μοριακή γεωμετρία (14/22)

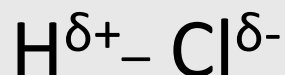
Γεωμετρία και Διπολική Ροπή (Dipole Moment):

- Πολικά είναι τα μόρια στα οποία υπάρχει διαχωρισμός ηλεκτρικού φορτίου, υπάρχουν δηλαδή δυο κέντρα φορτίου (δ^+ και δ^-). Αυτό οφείλεται στο ότι οι έλξεις των πυρήνων των ατόμων που συμμετέχουν στους δεσμούς επί του ηλεκτρονικού νέφους είναι διαφορετικές ανάλογα με την ηλεκτραρνητικότητα των στοιχείων.
- Στην περίπτωση, ομοπυρηνικών μορίων A-A τα ηλεκτρόνια έλκονται εξίσου και από τους δυο πυρήνες των ατόμων A, με αποτέλεσμα το μόρια αυτά να είναι μη πολικά.
- Στην περίπτωση όμως των ετεροπυρηνικών μορίων A-B, το ηλεκτρονικό νέφος έλκεται περισσότερο από το πιο ηλεκτραρνητικό άτομο, με αποτέλεσμα αυτό να φορτίζεται αρνητικά (δ^-) ενώ το άλλο άτομο να «απογυμνώνεται» ηλεκτρονικά με αποτέλεσμα να φορτίζεται θετικά (δ^+).



Μοριακή γεωμετρία (15/22)

- Έτσι για παράδειγμα στο μόριο του HCl, το Cl όντας ηλεκτραρνητικότερο του H **έλκει** προς το μέρος του το **ηλεκτρονικό νέφος** με αποτέλεσμα να **φορτίζεται αρνητικά** ενώ το H να φορτίζεται θετικά. Στην περίπτωση αυτή μπορούμε να συμβολίσουμε το μόριο ως :



- Το φαινόμενο αυτό είναι γνωστό ως πόλωση και **ο δεσμός που προκύπτει ονομάζεται πολωμένος**. Όσο μεγαλύτερη η διαφορά ηλεκτραρνητικότητας των ατόμων που συμμετέχουν στον δεσμό, τόσο περισσότερο πολωμένος είναι ο δεσμός.



Μοριακή γεωμετρία (16/22)

- Μέτρο για την ποσοτική έκφραση της πόλωσης ενός δεσμού αποτελεί η **Διπολική Ροπή** (Dipole moment). Είναι μέγεθος διανυσματικό και συμβολίζεται με ένα βέλος η αιχμή του οποίου δείχνει το κέντρο του αρνητικού φορτίου. Ουσιαστικά εκφράζει ποσοτικά τον διαχωρισμό των φορτίων σε ένα δεσμό και μπορεί να υπολογιστεί μέσω της σχέσης:

$$\mu = \delta \cdot d$$

όπου δ : το στοιχειώδες φορτίο και,

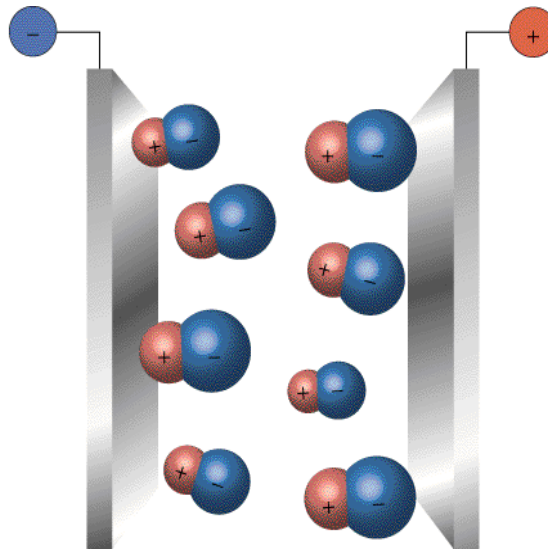
d : η απόσταση των μερικών φορτίων δ^+ και δ^- .

- Η διπολική ροπή μετράται συνήθως σε μονάδες debye (D). Στο διεθνές σύστημα μονάδων (SI) η μονάδα διπολικής ροπής είναι το coulomb-meter (C·m) και ισχύει : **1D=3,34x10⁻³⁰ C·m**.



Μοριακή γεωμετρία (17/22)

- Πειραματικά η διπολική ροπή προσδιορίζεται από τον προσανατολισμό των πολικών μορίων μέσα σε ένα ηλεκτρικό πεδίο, όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα (χωρητικότητα των πλακών).

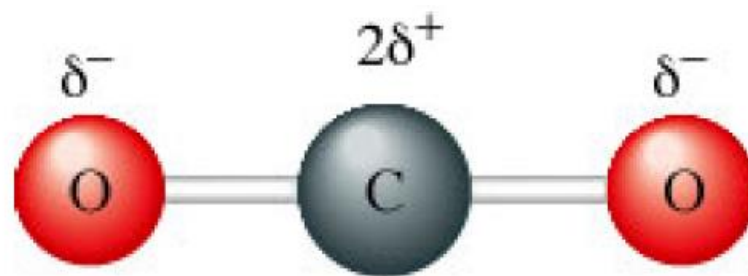


Προσανατολισμός πολικών μορίων εξαιτίας του ηλεκτρικού πεδίου.



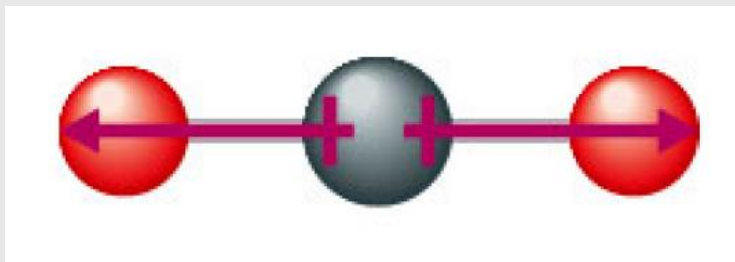
Μοριακή γεωμετρία (18/22)

- Επειδή η διπολική ροπή είναι ανυσματικό μέγεθος (έχει και μέτρο και κατεύθυνση), είναι φανερό ότι θα εξαρτάται από την γεωμετρία των μορίων. Έτσι για παράδειγμα στο μόριο του διοξειδίου του άνθρακα **κάθε δεσμός C-O είναι πολωμένος** με αποτέλεσμα τα άτομα του οξυγόνου ως πιο ηλεκτροαρνητικά να εμφανίζουν μια αρνητική διαφορά φορτίου δ^- .



Μοριακή γεωμετρία (19/22)

- Σε κάθε πολωμένο δεσμό αντιστοιχεί μια διπολική ροπή, μ , η οποία έχει κατεύθυνση προς το αρνητικό φορτίο, δηλαδή ως προς το οξυγόνο όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα στο μόριο του CO_2 να εμφανίζονται **δύο** ανυσματικά μεγέθη ροπής με το **ίδιο μέτρο** αλλά με **αντίθετη φορά**. Το τελικό αποτέλεσμα είναι να αλληλοακυρώνονται και ως εκ τούτου το μόριο του CO_2 να εμφανίζει **μηδενική διπολική ροπή**.

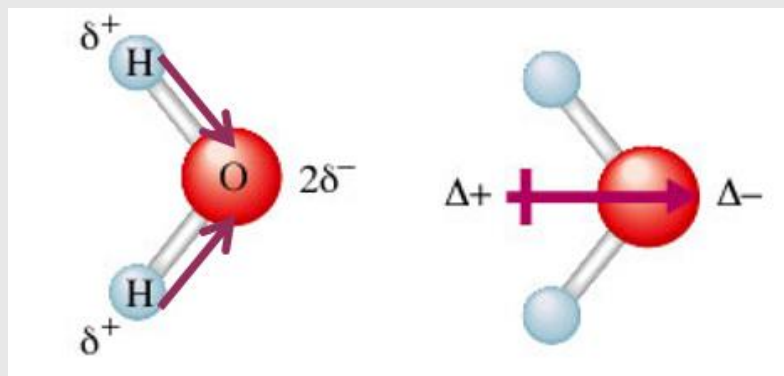


Αλληλοακύρωση ανυσματικών μεγεθών ροπής. Μηδενική διπολική ροπή στο μόριο του CO_2 .



Μοριακή γεωμετρία (20/22)

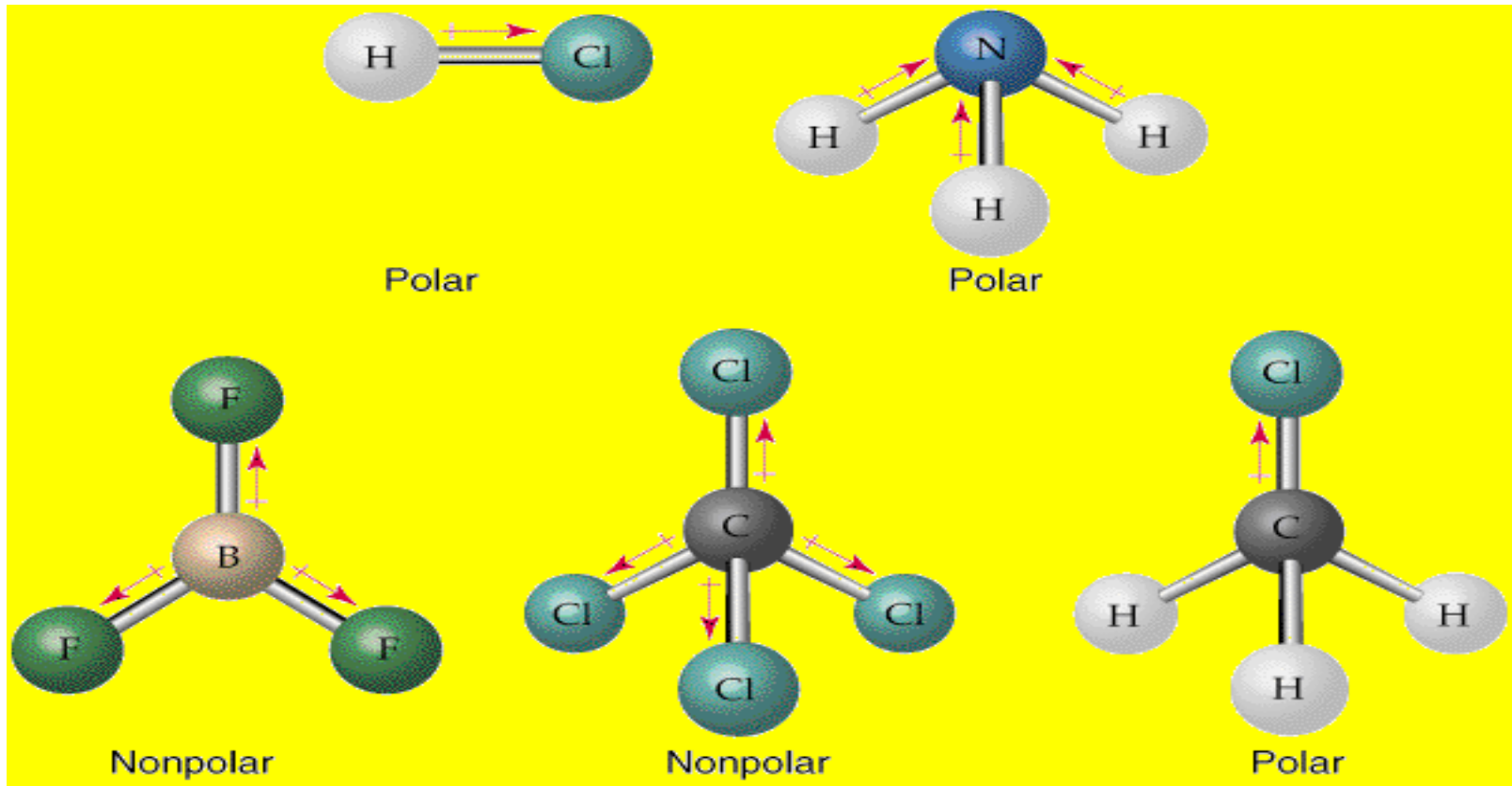
- Αντίθετα, στο μόριο του νερού του οποίου η γεωμετρία είναι γωνιακή, όπως προκύπτει από την θεωρία VSEPR, αναπτύσσονται δυο δίπολα δεσμών με κατεύθυνση προς το πιο ηλεκτραρνητικό άτομο οξυγόνου και με ίσα μέτρα.



Το τελικό αποτέλεσμα στην περίπτωση αυτή, όπως προκύπτει από την πρόσθεση των διανυσμάτων είναι το μόριο του νερού να εμφανίζει διπολική ροπή το μέτρο της οποίας όπως έχει προσδιοριστεί πειραματικά είναι 1,94 D.



Μοριακή γεωμετρία (21/22)



Συσχέτιση της διπολικής ροπής διαφόρων μορίων με την μοριακή γεωμετρία τους.



Μοριακή γεωμετρία (22/22)

Ο προσδιορισμός της διπολικής ροπής ενός μορίου αποτελεί σημαντική ένδειξη για την γεωμετρία του μορίου. Έτσι για παράδειγμα στο μόριο του H_2O η μη μηδενική διπολική ροπή που μετράται πειραματικά αποδεικνύει ότι πράγματι η γεωμετρία του μορίου είναι γωνιακή και όχι γραμμική, οπότε και η διπολική ροπή θα ήταν μηδέν.



Τέλος Ενότητας



Ευρωπαϊκή Ένωση

Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Σημείωμα Αναφοράς

- Copyright Πανεπιστήμιο Δυτικής Μακεδονίας, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Μαρνέλλος Γεώργιος. «Χημεία». Έκδοση: 1.0. Κοζάνη 2015. Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση: [https:// eclass.uowm.gr/courses/MECH100/](https://eclass.uowm.gr/courses/MECH100/)



Σημείωμα Αδειοδότησης

Το παρόν υλικό διατίθεται με τους όρους της άδειας χρήσης Creative Commons Αναφορά, Όχι Παράγωγα Έργα Μη Εμπορική Χρήση 4.0 [1] ή μεταγενέστερη, Διεθνής Έκδοση. Εξαιρούνται τα αυτοτελή έργα τρίτων π.χ. φωτογραφίες, διαγράμματα κ.λ.π., τα οποία εμπεριέχονται σε αυτό και τα οποία αναφέρονται μαζί με τους όρους χρήσης τους στο «Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων».



[1] <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>

Ως Μη Εμπορική ορίζεται η χρήση:

- που δεν περιλαμβάνει άμεσο ή έμμεσο οικονομικό όφελος από την χρήση του έργου για το διανομέα του έργου και αδειοδόχο
- που δεν περιλαμβάνει οικονομική συναλλαγή ως προϋπόθεση για τη χρήση ή πρόσβαση στο έργο
- που δεν προσπορίζει στο διανομέα του έργου και αδειοδόχο έμμεσο οικονομικό



Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων

Το Έργο αυτό κάνει χρήση των ακόλουθων έργων:

Εικόνες/Σχήματα/Διαγράμματα/Φωτογραφίες

- Γενική Χημεία. Θεωρία & Εφαρμογές, Μ.Ι. Κονσολάκης, Εκδόσεις ΑΕΝΑΟΣ, 2008



Διατήρηση Σημειωμάτων

Οποιαδήποτε αναπαραγωγή ή διασκευή του υλικού θα πρέπει να συμπεριλαμβάνει:

- το Σημείωμα Αναφοράς
- το Σημείωμα Αδειοδότησης
- τη δήλωση Διατήρησης Σημειωμάτων
- το Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων (εφόσον υπάρχει)

μαζί με τους συνοδευόμενους υπερσυνδέσμους.

