

10. ΜΟΡΙΑΚΗ ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ ΚΑΙ ΚΑΤΕΥΘΥΝΤΙΚΟΣ ΔΕΣΜΟΣ

Μοριακή γεωμετρία

ΣΚΟΠΟΣ

Σκοπός αυτής της ενότητας είναι να μάθουμε να προβλέπουμε τη γεωμετρία μορίων μέσω μιας απλής μεθόδου, του λεγόμενου μοντέλου VSEPR.

Προσδοκώμενα αποτελέσματα

Όταν θα έχετε μελετήσει αυτή την ενότητα, θα μπορείτε να:

- ❖ Ορίζετε τι είναι μοριακή γεωμετρία.
- ❖ Προβλέπετε τη μοριακή γεωμετρία εφαρμόζοντας το μοντέλο VSEPR.
- ❖ Ορίζετε τη διπολική ροπή και να εξηγείτε τη σχέση μεταξύ διπολικής ροπής και μοριακής γεωμετρίας.
- ❖ Αντιλαμβάνεστε πώς η πολικότητα ενός μορίου μπορεί να επηρεάζει ορισμένες ιδιότητες, όπως το σημείο ζέσεως.

Έννοιες κλειδιά

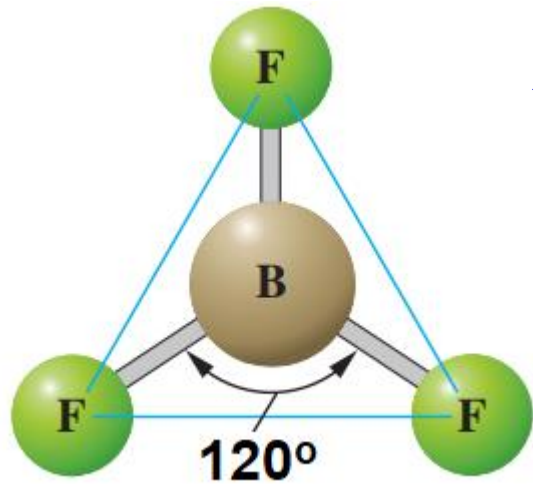
- ❖ Διπολική ροπή
- ❖ Μοντέλο VSEPR (άπωσης ηλεκτρονικών ζευγών του φλοιού σθένους)
- ❖ Μοριακή γεωμετρία

Ebbing – Gammon (Ενότητες)

10.1 Το μοντέλο VSEPR (άπωσης ηλεκτρονικών ζευγών του φλοιού σθένους)

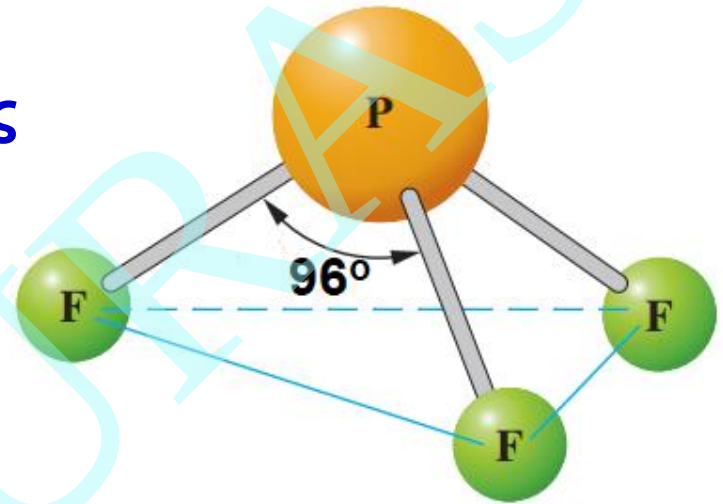
10.2 Διπολική ροπή και μοριακή γεωμετρία

Γιατί πρέπει να γνωρίζω τη γεωμετρία των μορίων;

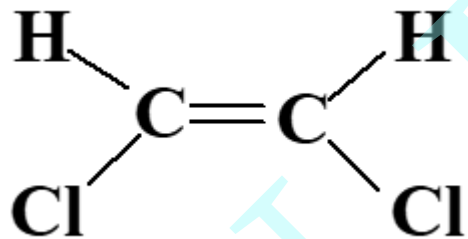


Ίδιος γενικός τύπος
 AX_3

BF_3 επίπεδο τριγωνικό
γωνίες δεσμών 120°

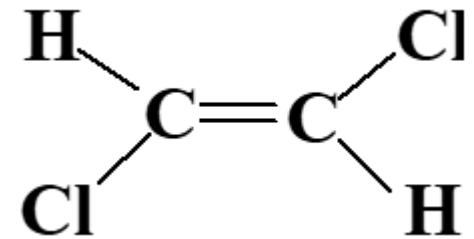


PF_3 τριγωνικό πυραμιδικό
γωνίες δεσμών 96°



cis-1,2-διχλωροαιθένιο
σ.ζ. 60°C

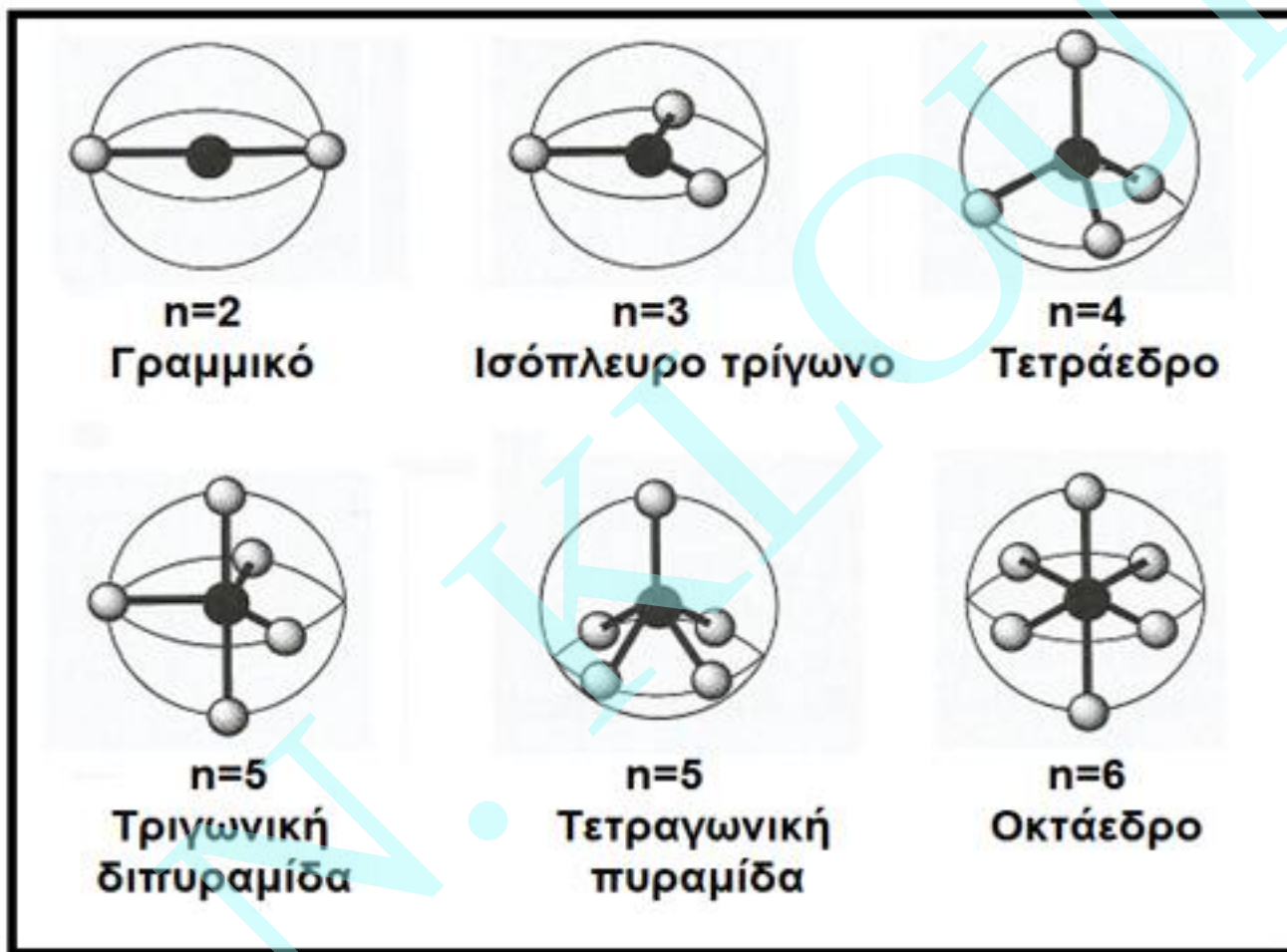
Ισομερή του
διχλωροαιθενίου
 $C_2H_2Cl_2$



trans-1,2-διχλωροαιθέγιο
σ.ζ. 48°C

10.1 Τι είναι το μοντέλο VSEPR

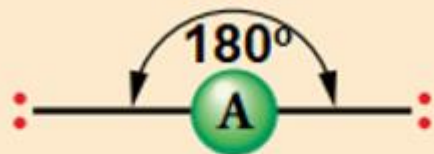
Ένα μοντέλο που προβλέπει τα σχήματα μορίων και ιόντων θεωρώντας ότι τα ηλεκτρονικά ζεύγη (HZ) των φλοιών σθένους διευθετούνται γύρω από κάθε άτομο, έτσι ώστε τα HZ να παραμένουν όσο γίνεται μακρύτερα το ένα από το άλλο, προκειμένου να ελαχιστοποιούνται οι ηλεκτρονικές απώσεις.



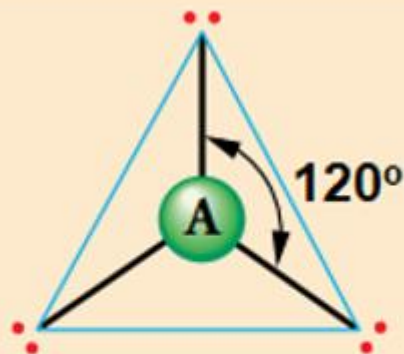
Μαθηματικό πρόβλημα:
διευθέτηση (arrangement) n σημείων στην επιφάνεια μιας σφαίρας κατά τρόπο που αυτά να απέχουν όσο γίνεται περισσότερο μεταξύ τους.

Τα n σημεία αντιστοιχούν σε n HZ

Οι συνηθέστερες μοριακές γεωμετρίες με γωνίες δεσμών



2 HZ
γραμμική

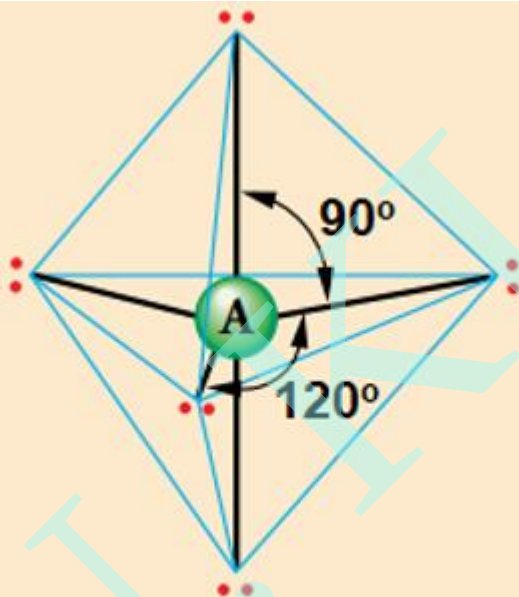


3 HZ
επίπεδη τριγωνική

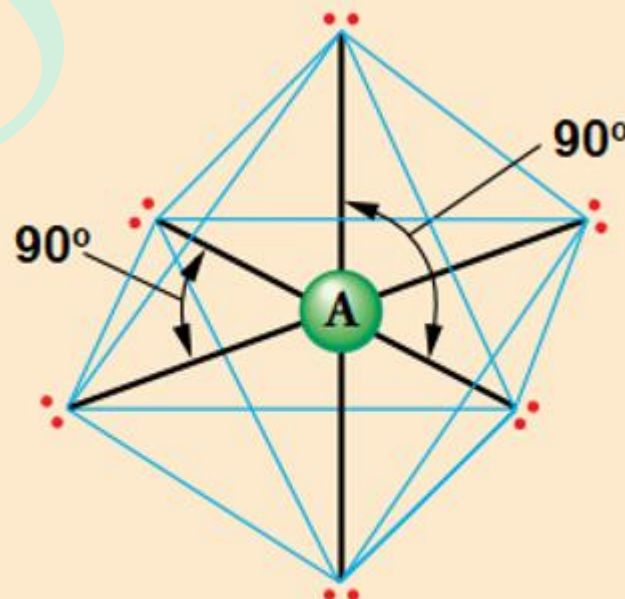


4 HZ
τετραεδρική

109°28′



5 HZ
τριγωνική διπυραμιδική



6 HZ
οκταεδρική

(α) Τα 4 βήματα για την πρόβλεψη της μοριακής γεωμετρίας

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

1. Σχεδιάζουμε τον τύπο Lewis του μορίου.
2. Βρίσκουμε τα HZ (δεσμικά Δ και μονήρη Ε) στον φλοιό σθένους του κεντρικού ατόμου Α.
Αν στο μόριο υπάρχει διπλός ή τριπλός δεσμός, τον θεωρούμε ως απλό. Αν υπάρχει συντονισμός, χρησιμοποιούμε έναν οποιονδήποτε τύπο συντονισμού.
3. Προσδιορίζουμε τη διάταξη όλων των HZ γύρω από το κεντρικό άτομο.
4. Οδηγούμεθα στη μοριακή γεωμετρία από τις κατευθύνσεις των δεσμικών HZ.

(β) Μοριακές γεωμετρίες

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

Ηλεκτρονικά ζεύγη (HZ)		
Συνολικά	Δεσμικά (Δ)	Μονήρη (Ε)
2	2	0

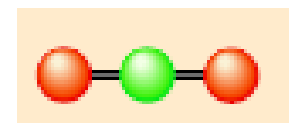
Διευθέτηση όλων των HZ

Μοριακή γεωμετρία

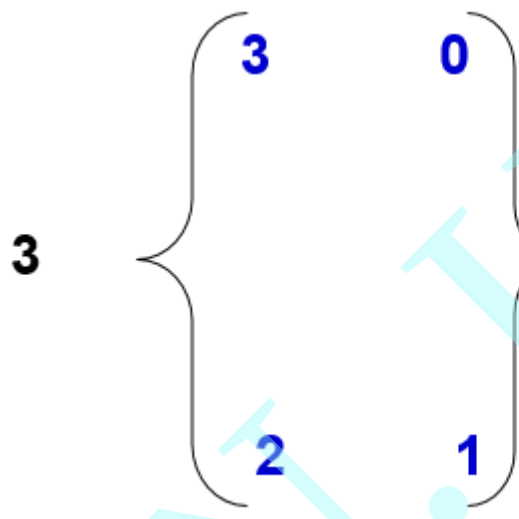
Παράδειγμα

Γραμμική

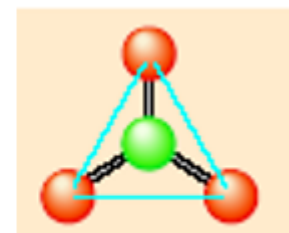
Γραμμική AB_2



BeF_2



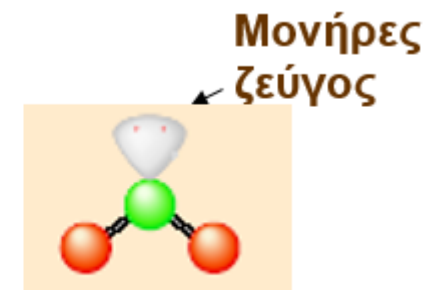
Επίπεδη τριγωνική AB_3



BF_3

Επίπεδη τριγωνική

Κεκαμμένη ή γωνιακή AB_2E



SO_2

Μονήρες ζεύγος

Μοριακές γεωμετρίες

2. Κεντρικό άτομο με τέσσερα ηλεκτρονικά ζεύγη στον φλοιό σθένους

Ηλεκτρονικά ζεύγη (HZ)

Συνολικά Δεσμικά Μονήρη

(Δ) (Ε)

4

0

4

3

1

2

2

Διευθέτηση
HZ

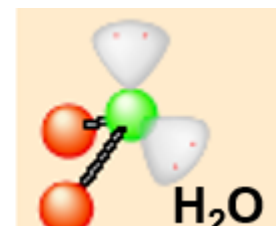
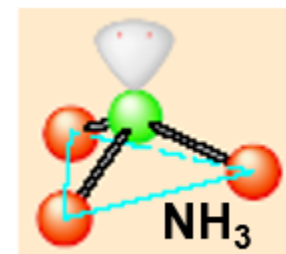
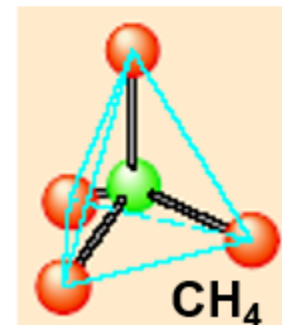
Μοριακή
γεωμετρία

Τετραεδρική AB_4

Τετραεδρική

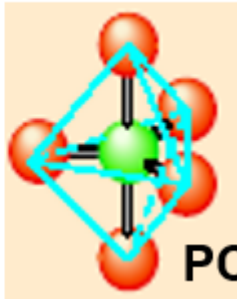
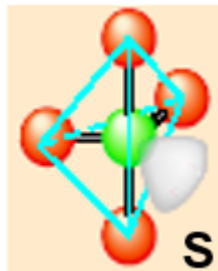
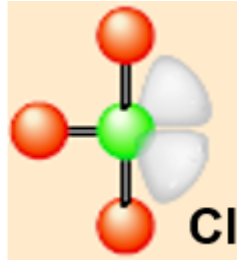
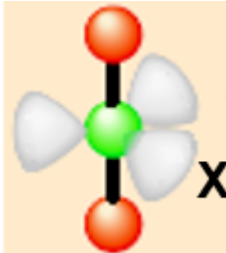
Τριγωνική
πυραμιδική AB_3E

Κεκαμμένη
ή γωνιακή AB_2E_2



(β) Μοριακές γεωμετρίες (συνέχεια)

3. Κεντρικό άτομο με πέντε ηλεκτρονικά ζεύγη στον φλοιό σθένους

<u>Ηλεκτρονικά ζεύγη (HZ)</u>			Διευθέτηση HZ	Μοριακή γεωμετρία	
Συνολικά	Δεσμικά	Μονήρη			
	(Δ)	(Ε)			
5	5	0		Τριγωνική διπυραμιδική AB_5	 PCl_5
	4	1		Παραμορφωμένο τετράεδρο (ή τραμπάλα) AB_4E	 SF_4
	3	2	Τριγωνική διπυραμιδική	Σχήματος T AB_3E_2	 ClF_3
	2	3		Γραμμική AB_2E_3	 XeF_2

(β) Μοριακές γεωμετρίες (συνέχεια)

4. Κεντρικό άτομο με έξι ηλεκτρονικά ζεύγη στο φλοιό σθένους

Ηλεκτρονικά ζεύγη (HZ)

Διευθέτηση
HZ

Μοριακή
γεωμετρία

Συνολικά Δεσμικά Μονήρη

(Δ)

(Ε)

6

0

5

1

4

2

6

Οκταεδρική

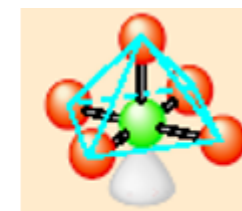
Οκταεδρική AB_6

Τετραγωνική
πυραμιδική AB_5E

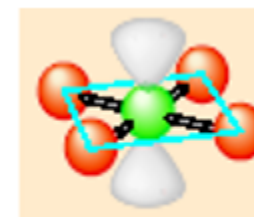
Επίπεδη
τετραγωνική AB_4E_2



SF_6

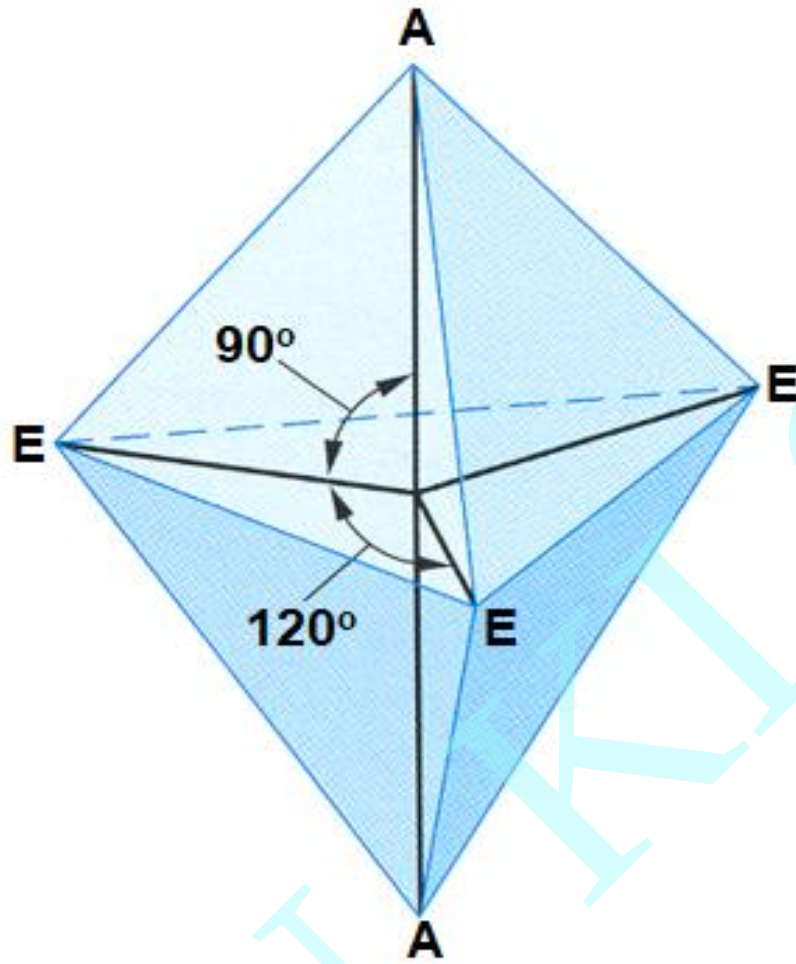


IF_5



XeF_4

Αξονικές και ισημερινές κατευθύνσεις (θέσεις) στην τριγωνική διπυραμιδική διευσθέτηση



Τα ηλεκτρονικά ζεύγη κατευθύνονται κατά μήκος των μαύρων γραμμών προς τις κορυφές μιας τριγωνικής διπυραμίδας.

Οι αξονικές θέσεις συμβολίζονται με A (Axial) και οι ισημερινές με E (Equatorial).

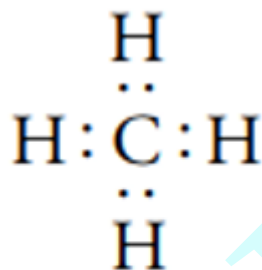
Από την τριγωνική διπυραμίδα, μπορούμε, με κατάλληλες μετατροπές, να λάβουμε τις παράγωγες μοριακές γεωμετρίες **παραμορφωμένο τετράεδρο, σχήμα T και γραμμική γεωμετρία.**

(β) Μοριακές γεωμετρίες (συνέχεια)

!!! Η διεύθυνση των HZ γύρω από το κεντρικό άτομο δεν συμπίπτει πάντοτε με τη μοριακή γεωμετρία.

Π.χ., τέσσερα HZ γύρω από το κεντρικό άτομο σημαίνει τετραεδρική διεύθυνση.

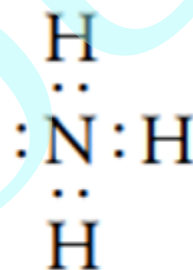
Το μόριο όμως δεν έχει πάντοτε τετραεδρική γεωμετρία!



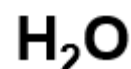
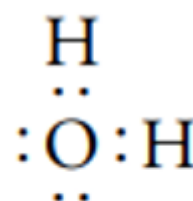
Μοριακή
γεωμετρία:

τετραεδρική

Γενικός τύπος:



τριγωνική
πυραμιδική



κεκαμμένη



Παράδειγμα 10.1

Πρόβλεψη μοριακής γεωμετρίας από το μοντέλο VSEPR

Σύμφωνα με το μοντέλο VSEPR, ποια μοριακή γεωμετρία θα προβλέπατε για το τριφθορίδιο του ιωδίου, IF_3 ;

Απάντηση

Σχεδιάζουμε τύπο Lewis και βρίσκουμε τον αριθμό ηλεκτρονικών ζευγών (HZ), δεσμικών (Δ) και μονήρων (E), που υπάρχουν γύρω από το κεντρικό άτομο.

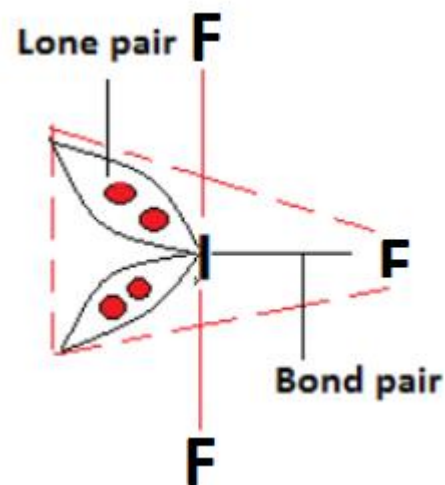
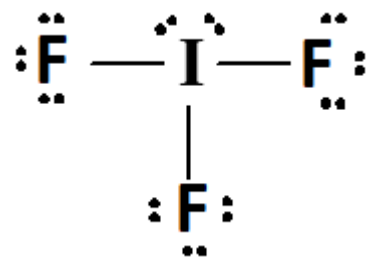
Μετράμε έναν πολλαπλό δεσμό ως απλό.
Αν υπάρχει συντονισμός, χρησιμοποιούμε έναν τύπο συντονισμού

Γενικός τύπος: AB_3E_2

Διευθέτηση HZ ($\Delta + \text{E}$): τριγωνική διπυραμιδική

Μοριακή γεωμετρία: Σχήμα T

Ποιες θέσεις καταλαμβάνουν τα μονήρη HZ; Γιατί;



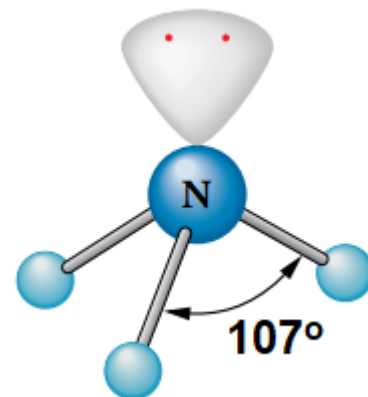
(β) Μοριακές γεωμετρίες (συνέχεια)

Γιατί έχουμε αποκλίσεις των γωνιών δεσμών από τις ιδανικές τιμές, όταν υπάρχουν μονήρη ηλεκτρονικά ζεύγη;

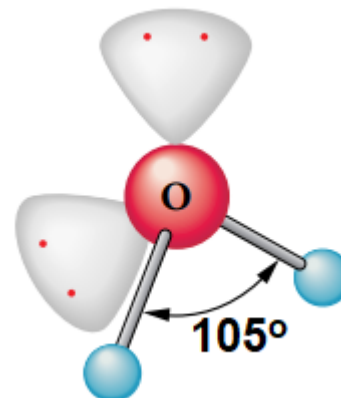
Ένα μονήρες ζεύγος ηλεκτρονίων απαιτεί περισσότερο χώρο από ένα δεσμικό ζεύγος.

Το μονήρες ζεύγος είναι στον χώρο πιο διάχυτο, ενώ το δεσμικό ζεύγος συγκρατείται πιο κοντά στους πυρήνες.

NH_3 : Το μονήρες ζεύγος στο άτομο του αζώτου διεκδικεί περισσότερο χώρο από ό,τι τα δεσμικά ζεύγη.



Ανάλογη είναι και η περίπτωση του H_2O , όπου όμως τα μονήρη ΗΖ είναι δύο.

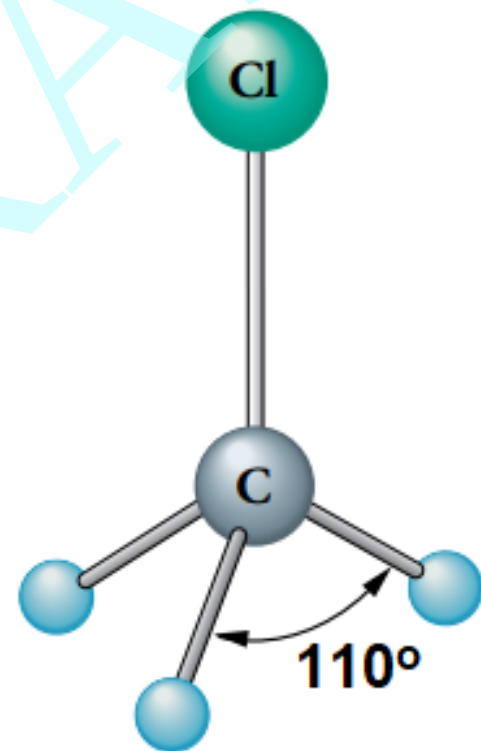


(β) Μοριακές γεωμετρίες (συνέχεια)

Πού οφείλονται οι αποκλίσεις των γωνιών δεσμών από τις ιδανικές τιμές όταν έχουμε περιφερειακά άτομα γύρω από το κεντρικό άτομο, τα οποία διαφέρουν σε ηλεκτραρνητικότητα;

Υπό την επίδραση ενός ισχυρά ηλεκτραρνητικού ατόμου, όπως είναι το Cl, το ηλεκτρονικό ζεύγος του δεσμού C–Cl έλκεται ισχυρότερα από το Cl και διεκδικεί λιγότερο χώρο γύρω από το κεντρικό άτομο C, με αποτέλεσμα τα υπόλοιπα δεσμικά HZ να μπορούν να απλωθούν περισσότερο.

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



CH3Cl
χλωρομεθάνιο

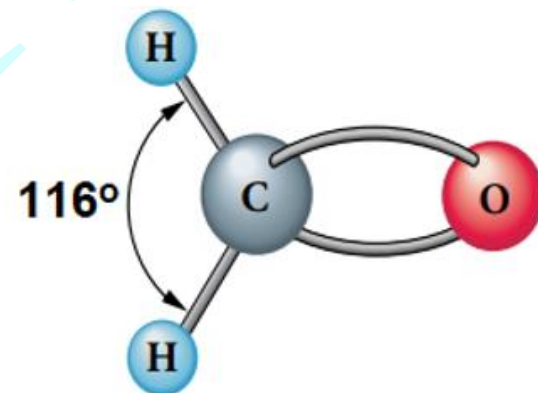
(β) Μοριακές γεωμετρίες (συνέχεια)

Πώς επηρεάζουν οι πολλαπλοί δεσμοί τη γεωμετρία ενός μορίου;

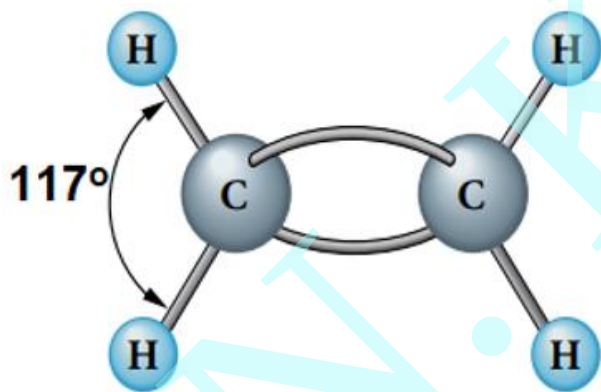
Οι πολλαπλοί δεσμοί διεκδικούν περισσότερο χώρο από ό,τι οι απλοί δεσμοί λόγω του μεγαλύτερου αριθμού ηλεκτρονίων.

Π.χ., 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° .



$\text{H}_2\text{C}=\text{O}$ (φορμαλδεΐδη)

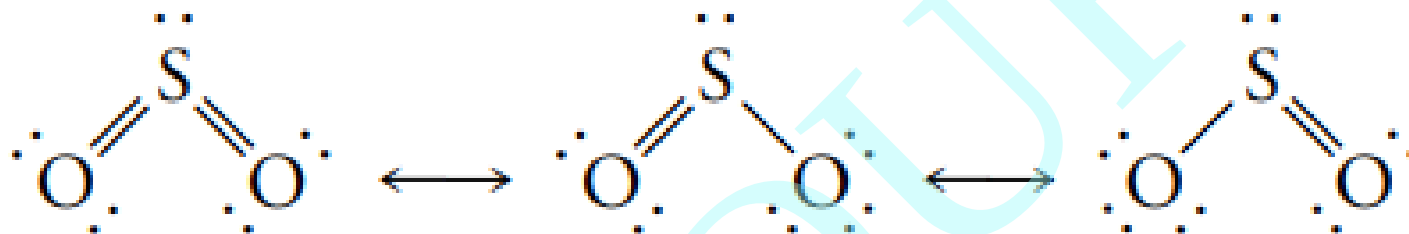


$\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$ (αιθυλένιο)

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

(β) Μοριακές γεωμετρίες (συνέχεια)

Πώς εφαρμόζεται το μοντέλο VSEPR σε περιπτώσεις τύπων συντονισμού, π.χ. για το μόριο SO_2 ;



Όποιον τύπο συντονισμού και αν θεωρήσουμε, το άτομο S περιβάλλεται από 3 ηλεκτρονικά ζεύγη (γενικός τύπος AB_2E , ο διπλός δεσμός μετρά ως απλός)

⇒ μόριο SO_2 κεκαμμένο (ή γωνιακό)

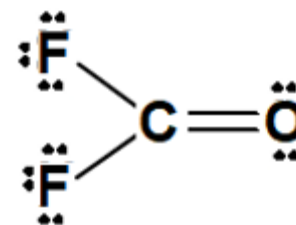
Παράδειγμα 10.2

Πρόβλεψη μοριακής γεωμετρίας από το μοντέλο VSEPR

Χρησιμοποιήστε το μοντέλο VSEPR για να προβλέψετε τη γεωμετρία του μορίου COF_2 και του ιόντος N_3^- .

Απάντηση

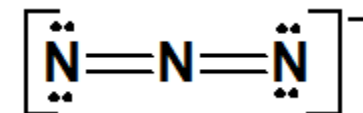
Σχεδιάζουμε τον τύπο Lewis κάθε μορίου και βρίσκουμε τον αριθμό ηλεκτρονικών ζευγών (HZ), δεσμικών (Δ) και μονήρων (E), που υπάρχουν γύρω από το κεντρικό άτομο.



Μετράμε έναν πολλαπλό δεσμό ως απλό.

COF_2 : Γενικός τύπος: $\text{AB}_3 \Rightarrow$ επίπεδη τριγωνική γεωμετρία

Από τους τρεις τύπους συντονισμού του ιόντος N_3^- , επιλέγουμε έναν.



N_3^- : Γενικός τύπος: $\text{AB}_2 \Rightarrow$ γραμμική γεωμετρία

Ποιοι είναι οι άλλοι τύποι συντονισμού του ιόντος N_3^- ;

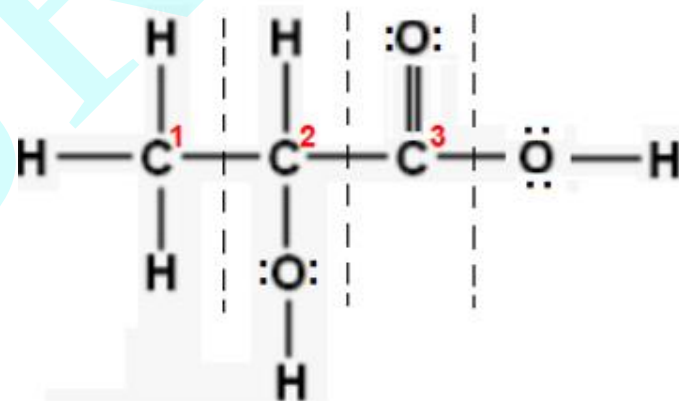
Παράδειγμα 10.3

Εφαρμογή του μοντέλου VSEPR σε μεγάλα μόρια

Χρησιμοποιήστε το μοντέλο VSEPR για να προσδιορίσετε τη γεωμετρία του μορίου του γαλακτικού οξέος, $\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{COOH}$

Απάντηση

Σχεδιάζουμε τον τύπο Lewis του μορίου και τον «κόβουμε» σε τμήματα τέτοια, ώστε στο καθένα ξεχωριστά να μπορούμε να εφαρμόσουμε το μοντέλο VSEPR:

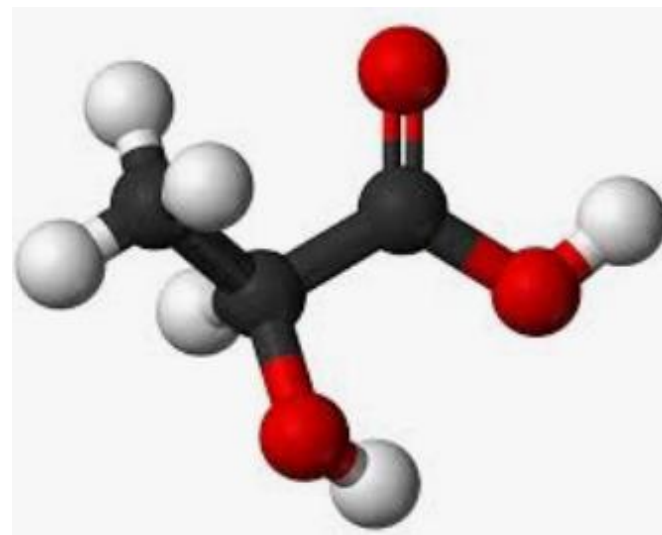


1° Τμήμα CH_3 : Γεωμετρία γύρω από C^1 τετραεδρική

2° Τμήμα CHOH : Γεωμετρία γύρω από C^2 τετραεδρική

3° Τμήμα COOH : Γεωμετρία γύρω από C^3 επίπεδη τριγωνική

Ομάδες OH : 4 HZ γύρω από κάθε O
 $\Rightarrow$ γεωμετρία $\text{C}-\text{O}-\text{H}$ κεκαμμένη

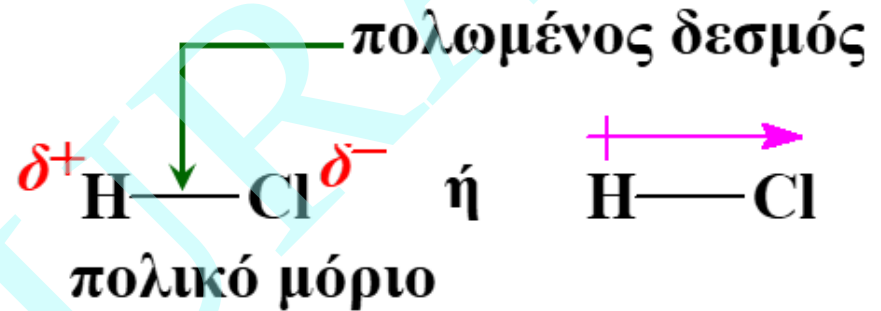


10.2 Διπολική ροπή και μοριακή γεωμετρία

Ηλεκτραρνητικότητα: μέτρο της ικανότητας ενός ατόμου, που βρίσκεται ενωμένο σε μόριο, να έλκει προς το μέρος του δεσμικά e.

Παράδειγμα H–Cl

$$X_{\text{Cl}} = 3,0 \quad X_{\text{H}} = 2,1 \Rightarrow \Delta X = 0,9$$



Κάθε μόριο AB, για το οποίο $\Delta X \neq 0$, είναι πολικό (μόνιμο ηλεκτρικό δίπολο)

(Ηλεκτρική) διπολική ροπή (μ): ένα διανυσματικό μέγεθος που μετρά ποσοτικά τον διαχωρισμό φορτίων σε ένα μόριο

$$\mu = \delta \times d$$

d = η απόσταση ανάμεσα στα μερικά φορτία δ^+ και δ^-

Μονάδα μέτρησης διπολικής ροπής

$$1 \text{ debye (D)} = 3,34 \times 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m} \quad (\text{coulomb} \times \text{meter}) \quad \mu_{(\text{HCl})} = 1,08 \text{ D}$$

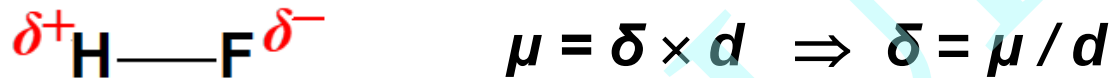
Για μη πολικά (ή απολικά) μόρια (H_2 , Cl_2 , CO_2 , CH_4) $\Rightarrow \mu = 0$

Παράδειγμα 10.4

Υπολογισμός μερικών φορτίων δ^+ και δ^-

Το μήκος του δεσμού στο μόριο HF είναι 0,920 Å. Το HF έχει διπολική ροπή ίση με 1,82 D. Υπολογίστε (σε μονάδες e) τα μερικά φορτία των ατόμων H και F (φορτίο ηλεκτρονίου $e = 1,60 \times 10^{-19}$ C)

Απάντηση



Μετατροπή των debye σε coulomb × meter (C·m)

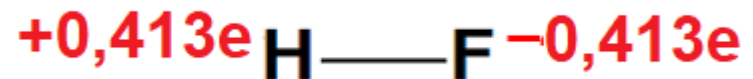
$$1 \text{ D} = 3,34 \times 10^{-30} \text{ C}\cdot\text{m}$$

$$\Rightarrow 1,82 \text{ D} = 1,82 \times 3,34 \times 10^{-30} \text{ Cm} = 6,08 \times 10^{-30} \text{ C}\cdot\text{m}$$

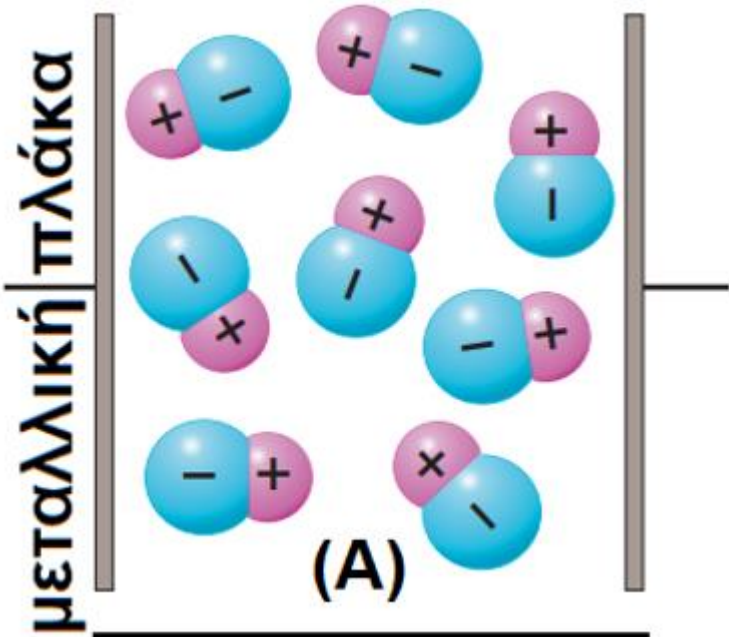
$$\text{Επίσης, } 0,920 \text{ Å} = 0,920 \times 10^{-10} \text{ m} \Rightarrow$$

$$\delta = \frac{\mu}{d} = \frac{6,08 \times 10^{-30} \text{ C}\cdot\text{m}}{0,920 \times 10^{-10} \text{ m}} = 6,61 \times 10^{-20} \text{ C}$$

$$\delta_e = \frac{6,61 \times 10^{-20} \text{ C}}{1,60 \times 10^{-19} \text{ C}} = 0,413$$



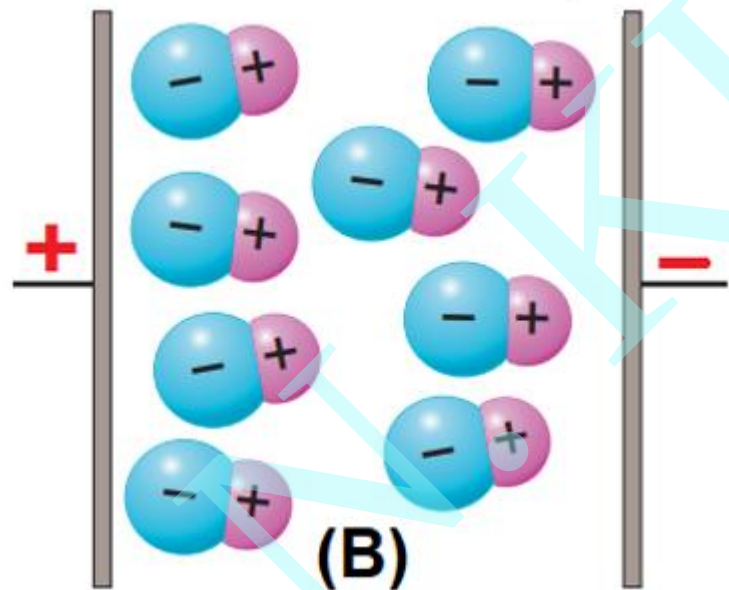
(α) Μέτρηση της διπολικής ροπής



Προσανατολισμός πολικών μορίων
(A) χωρίς ηλεκτρικό πεδίο
(B) εντός ηλεκτρικού πεδίου

Πώς μπορούν και προσανατολίζονται τα πολικά μόρια μέσα σε ένα ηλεκτρικό πεδίο;

Τα αρνητικά τους άκρα στρέφονται προς τη θετική πλάκα, ενώ τα θετικά άκρα προς την αρνητική πλάκα του πυκνωτή.



Αυτός ο προσανατολισμός των μορίων επηρεάζει την χωρητικότητα (ποσότητα φορτίου) των φορτισμένων πλακών.

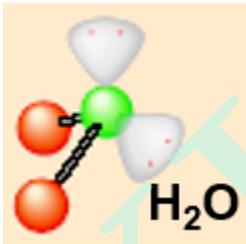
Μετρήσεις της χωρητικότητας πλακών με διάφορες ουσίες ανάμεσά τους, μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την εύρεση των διπολικών ροπών αυτών των ουσιών.

Τα μη πολικά μόρια δεν επηρεάζονται από ηλεκτρικά πεδία.

(β) Διάκριση ενός πολικού υγρού από ένα μη πολικό

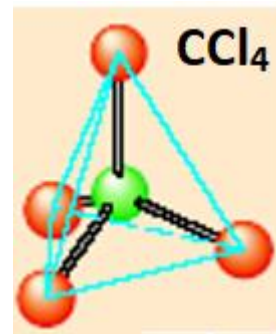
H₂O

Ηλεκτρικά
φορτισμένη
ράβδος



Το νερό είναι ένα πολικό υγρό ($\mu \neq 0$) και γι' αυτό έλκεται προς την ηλεκτρικά φορτισμένη ράβδο.

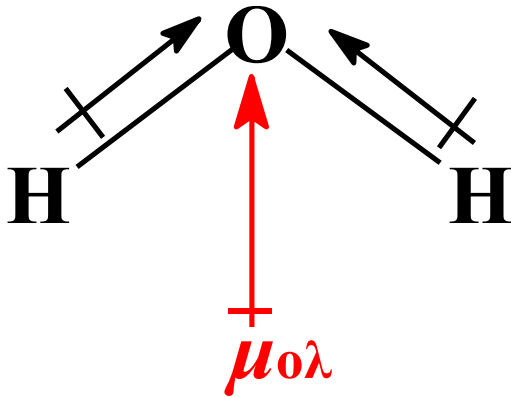
CCl₄



Το τετραχλωρίδιο του άνθρακα, CCl₄, είναι ένα μη πολικό υγρό ($\mu = 0$) και δεν έλκεται προς τη φορτισμένη ράβδο.

Για σχέση μοριακής γεωμετρίας και διπολικής ροπής, 24
βλ. επόμενη διαφάνεια

(γ) Σχέση μεταξύ μοριακής γεωμετρίας και διπολικής ροπής

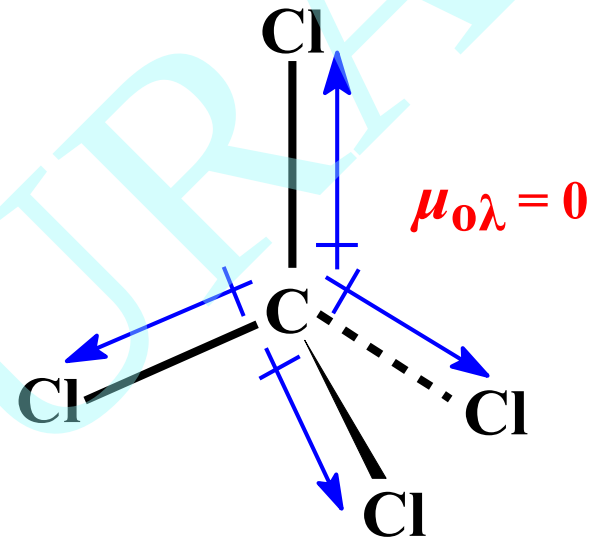


Το μόριο H_2O είναι
κεκαμμένο

Οι επιμέρους διπολικές
ροπές των δεσμών $\text{O}-\text{H}$
δίνουν συνισταμένη
διπολική ροπή $\mu_{\text{ολ}} \neq 0$

$\Rightarrow$ μόριο πολικό

Πειραματικά: $\mu(\text{H}_2\text{O}) = 1,94 \text{ D}$



Το μόριο CCl_4 είναι
τετραεδρικό

Οι επιμέρους διπολικές
ροπές των δεσμών $\text{C}-\text{Cl}$
δίνουν συνισταμένη
διπολική ροπή $\mu_{\text{ολ}} = 0$

$\Rightarrow$ μόριο μη πολικό

(β) Σχέση μεταξύ μοριακής γεωμετρίας και διπολικής ροπής (συνέχεια)

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.

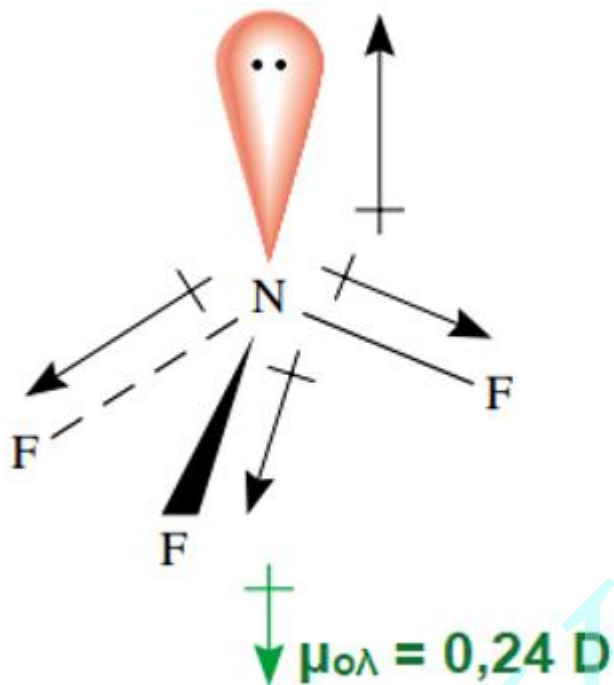
Εξαίρεση αποτελούν:

1. τα μόρια του γενικού τύπου AB_2E_3 που είναι γραμμικά, όπως π.χ. το XeF_2
2. τα μόρια του γενικού τύπου AB_4E_2 , που είναι επίπεδα τετραγωνικά, όπως π.χ. το XeF_4 .

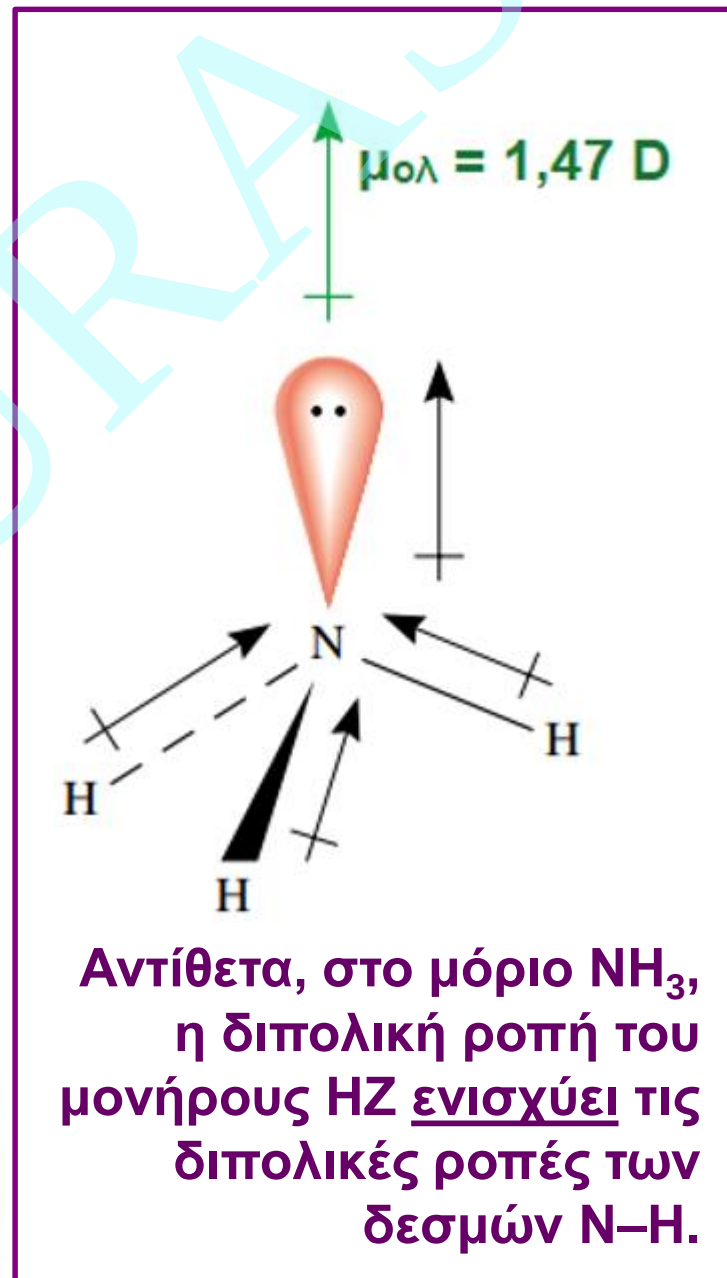
Συμπερασματικά: Για να πούμε αν ένα πολυατομικό μόριο είναι πολικό ή όχι, θα πρέπει, εκτός από την πολικότητα των δεσμών, να λαμβάνουμε υπ' όψιν και τη μοριακή γεωμετρία.

(γ) Επίδραση των μονήρων HZ πάνω στη διπολική ροπή

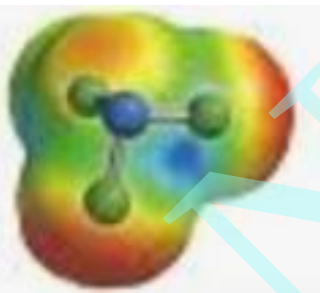
Ερμηνεία της μικρής
διπολικής ροπής του NF_3



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

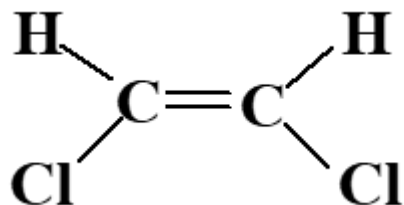


Μοντέλα
ηλεκτροστατικού
δυναμικού των
 NF_3 και NH_3

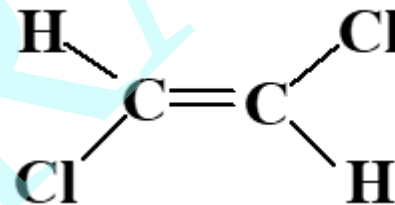


(δ) Επίδραση της πολικότητας στις μοριακές ιδιότητες

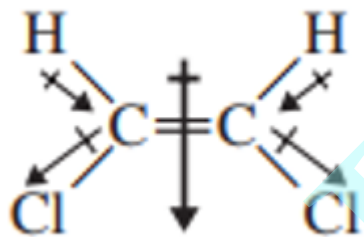
Η ύπαρξη ή όχι διπολικής ροπής μπορεί να επηρεάσει τις ιδιότητες των ενώσεων, όπως σ.ζ., σ.τ., θερμοότητες εξατμίσεως κ.λπ.



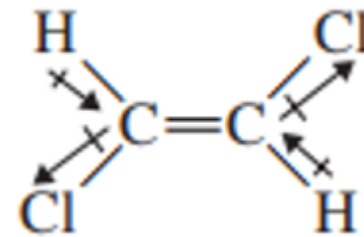
cis-1,2-διχλωροαιθένιο
σ.ζ. **60°C**



trans-1,2-διχλωροαιθένιο
σ.ζ. **48°C**



Μόριο μη συμμετρικό
 $\mu_{ολ} \neq 0$, μόριο πολικό



Μόριο συμμετρικό
 $\mu_{ολ} = 0$, μόριο απολικό

Παράδειγμα 10.5

Σχέση γεωμετρίας και πολικότητας πολυατομικών μορίων

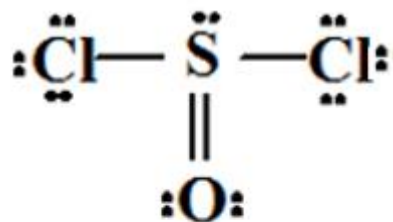
Ποιο από τα παρακάτω μόρια θα περιμένατε, για λόγους συμμετρίας, να έχει διπολική ροπή ίση με μηδέν; Εξηγήστε.

(α) SOCl_2 , (β) SiF_4 , (γ) OF_2

Απάντηση

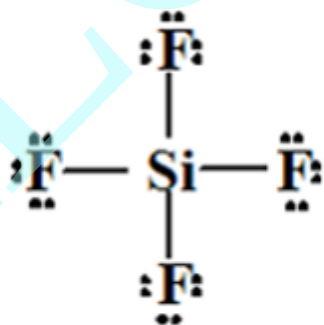
Μόρια του τύπου AB_n ($n = 2 - 6$) είναι απολύτως συμμετρικά και δίνουν $\mu_{\text{ολ}} = 0$.

Μόρια του τύπου AB_nE_m (με εξαίρεση τα AB_2E_3 και AB_4E_2) είναι μη συμμετρικά και έχουν $\mu_{\text{ολ}} \neq 0 \Rightarrow$



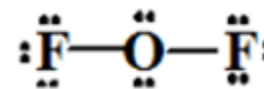
AB_3E
τριγωνικό
πυραμιδικό

$\mu_{\text{ολ}} \neq 0$



AB_4
τετραεδρικό

$\mu_{\text{ολ}} = 0$



AB_2E_2
κεκαμμένο

$\mu_{\text{ολ}} \neq 0$

Keep in mind!

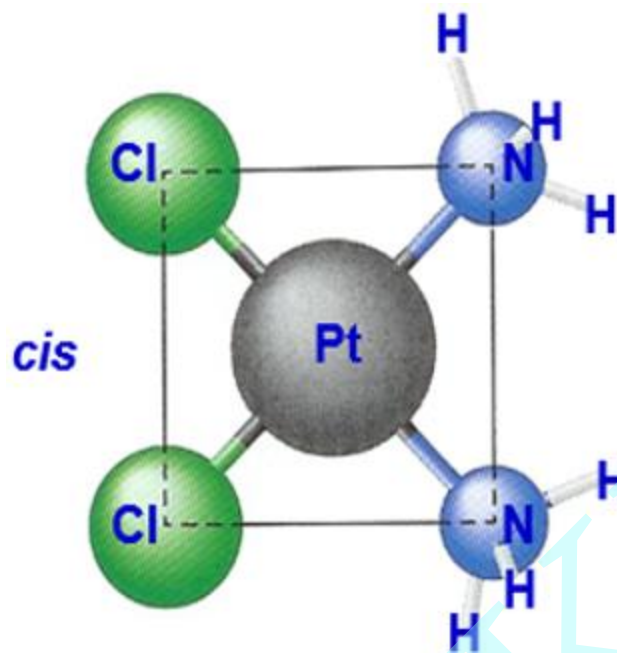
The precise **shape** of a **molecule** is usually very **important** to its function in the living cell.

Molecular shape is crucial in biology because it determines how biological **molecules** recognize and respond to one another with specificity.

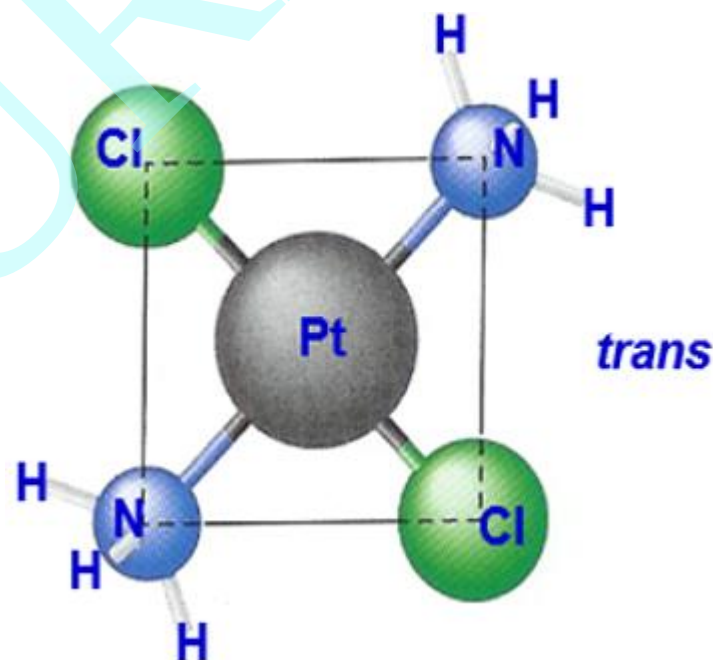
The shape of a molecule helps to determine its **properties**.

Barnett Rosenberg

Εφευρέτης της αντικαρκινικής δράσης του cisplatin



Ίδιος
μοριακός τύπος
 $[Pt(NH_3)_2Cl_2]$



Χρώμα: Πορτοκαλοκίτρινο

Διαλυτότητα: 0,252 g / 100 g H₂O

Διπολική ροπή: $\mu \neq 0$

Αντικαρκινική δράση: ΝΑΙ

Ωχροκίτρινο

0,037 g / 100 g H₂O

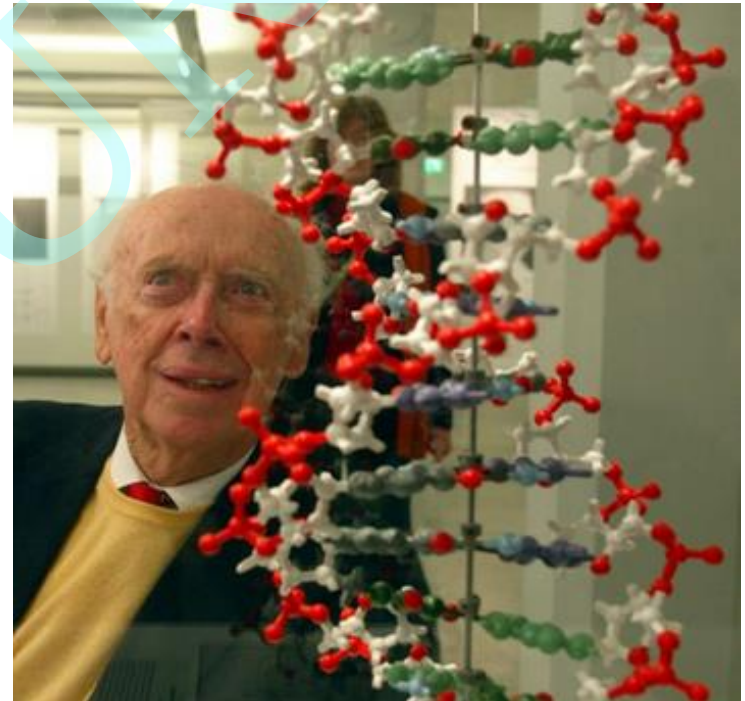
$\mu = 0$

ΟΧΙ

Understanding molecular geometry also helps scientist to understand the shapes of more complex molecules such as proteins and DNA.

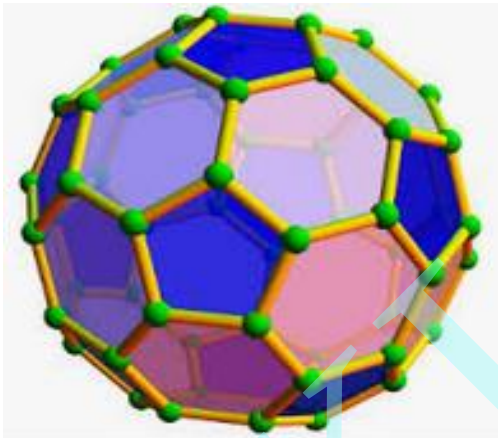
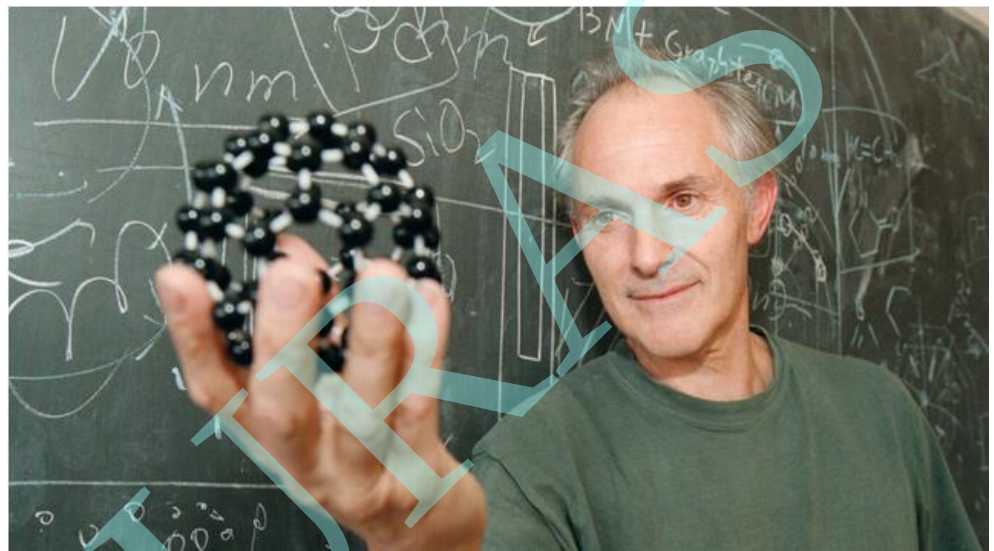
The shapes of these molecules play incredibly important roles in determining the jobs performed by these molecules in our bodies.

**James Watson
co-discoverer
of the structure of DNA
in 1953
Nobel Prize in
Physiology or Medicine
1962**



"for the discoveries concerning the molecular structure of nucleic acids and its significance for information transfer in living material"

Harold Kroto Nobel Prize in Chemistry 1996 for the discovery of fullerenes



C_{60} , buckminsterfullerene,
η τρίτη αλλοτροπική μορφή
του άνθρακα

An important area of research in modern material **nanoscience** concerns carbon-based materials, among which fullerenes take one of the first places. ...

Spherical fullerenes are also referred to as buckyballs.

An important property of C_{60} molecule is its high symmetry.

Ερωτήσεις – Ασκήσεις – Προβλήματα

10.1 Χρησιμοποιήστε το μοντέλο VSEPR για να προβλέψετε τη γεωμετρία των ακόλουθων ιόντων:

(α) SCN^- , (β) H_3O^+ , (γ) BH_4^- , (δ) NO_2^-

10.2 Βάσει του μοντέλου άπωσης ηλεκτρονικών ζευγών του φλοιού σθένους, προβλέψτε τη γεωμετρία των παρακάτω μορίων:

(α) OF_2 , (β) SeF_4 , (γ) SbF_5 , (δ) TeF_6

10.3 Προβλέψτε τη γωνία δεσμών για καθένα από τα ακόλουθα μόρια. Περιμένετε οι πραγματικές γωνίες δεσμών να είναι μεγαλύτερες ή μικρότερες από αυτές που δίνει η απλή εφαρμογή του μοντέλου VSEPR;

(α) NCl_3 , (β) GeF_4 , (γ) COCl_2 , (δ) SCl_2

10.4 (α) Το μόριο AsF_3 έχει διπολική ροπή 2,59 D. Ποιες από τις παρακάτω γεωμετρίες είναι πιθανές: επίπεδη τριγωνική, τριγωνική πυραμιδική ή σχήματος T; (β) Το μόριο H_2S έχει διπολική ροπή 0,97 D. Πρόκειται για γραμμικό ή κεκαμμένο μόριο;

10.5 Ποιο από τα ακόλουθα μόρια θα περιμένετε να έχει μηδενική διπολική ροπή βάσει της γεωμετρίας του;

(α) CS_2 , (β) SeCl_4 , (γ) TeF_2 , (δ) XeF_4