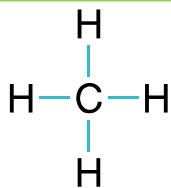


Θεωρία VSEPR: Πρόβλεψη Γεωμετρίας μικρού μορίου

Στερικός αριθμός: Ο συνολικός αριθμός σ δεσμών και μονήρων ζευγών ηλεκτρονίων.

Υποδηλώνει τον αριθμό των ζευγών ηλεκτρονίων που απωθούνται μεταξύ τους.

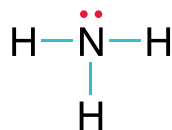
Η γεωμετρία του κεντρικού ατόμου καθορίζεται από τον στερικό αριθμό.



Αριθμός σ δεσμών = 4

Αριθμός μονήρων ζευγών = 0

Στερικός αριθμός = 4



Αριθμός σ δεσμών = 3

Αριθμός μονήρων ζευγών = 1

Στερικός αριθμός = 4



Αριθμός σ δεσμών = 2

Αριθμός μονήρων ζευγών = 2

Στερικός αριθμός = 4

• Άπωση ζευγών ηλεκτρονίων στιβάδας σθένους (Θεωρία VSEPR, **Valence Shell Electron Pair Repulsion**)

• Τα ηλεκτρόνια σθένους (δεσμευμένα και μονήρη ζεύγη) απωθούνται μεταξύ τους.

• Προσδιορισμός της μοριακής γεωμετρίας με πρόβλεψη του υβριδισμού του κεντρικού ατόμου του μορίου.

• Εάν ο Στερικός αριθμός είναι 4, τότε ο υβριδισμός είναι sp^3 .

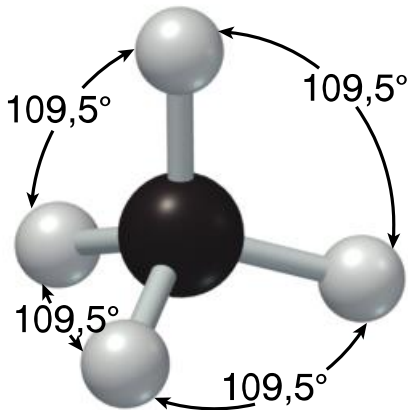
• Εάν ο Στερικός αριθμός είναι 3, τότε ο υβριδισμός είναι sp^2 .

• Εάν ο Στερικός αριθμός είναι 2, τότε ο υβριδισμός είναι sp .

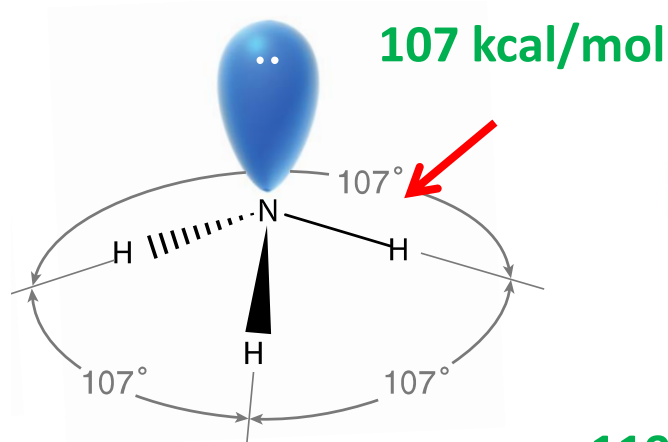
sp^3 Γεωμετρία

- Για κάθε sp^3 υβριδισμένο άτομο, τα 4 ζεύγη ηλεκτρονίων σθένους θα σχηματίσουν μία τετραεδρική γεωμετρία της διευθέτησης ζευγών ηλεκτρονίων

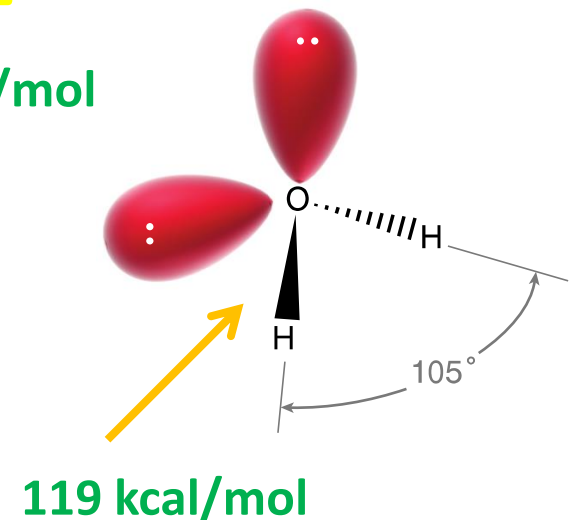
- Το μεθάνιο έχει 4 ίσους δεσμούς, επομένως οι γωνίες των δεσμών είναι ίσες.



- Το μονήρες ζεύγος της αμμωνίας απωθεί τους άλλους δεσμούς και μειώνει τις γωνίες.



- Οι γωνίες δεσμών στο οξυγόνο είναι ακόμη μικρότερες.



Η μοριακή γεωμετρία διαφέρει από τη γεωμετρία των ζευγών ηλεκτρονίων .

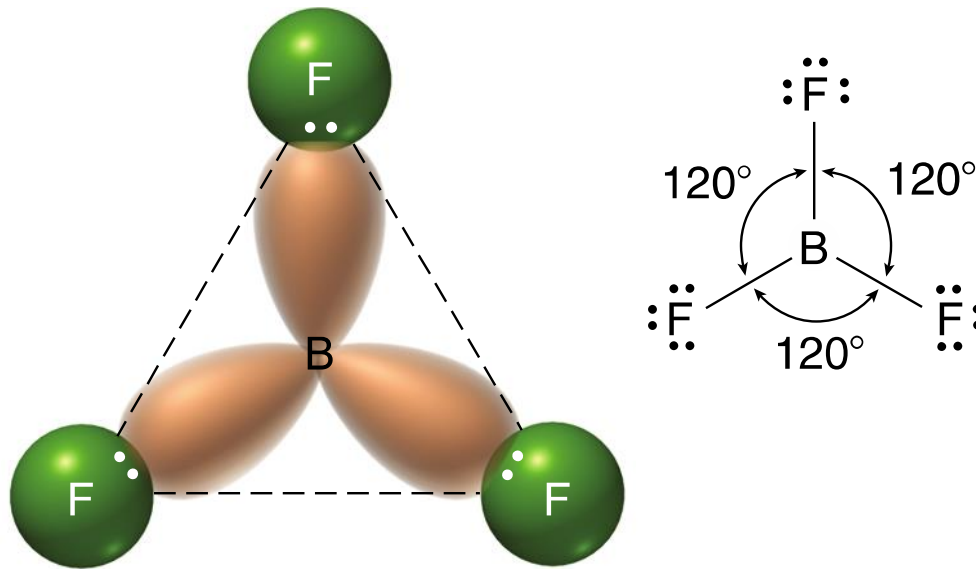
ΠΙΝΑΚΑΣ 1.3 ΓΕΩΜΕΤΡΙΕΣ ΠΟΥ ΠΡΟΚΥΠΤΟΥΝ ΑΠΟ ΥΒΡΙΔΙΣΜΟ sp^3

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ	ΣΤΕΡΙΚΟΣ ΑΡΙΘΜΟΣ	ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ	ΔΙΕΥΘΕΤΗΣΗ ΖΕΥΓΩΝ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΩΝ	ΔΙΕΥΘΕΤΗΣΗ ΑΤΟΜΩΝ (ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ)
CH_4	4	sp^3	Τετραεδρική	Τετραεδρική
NH_3	4	sp^3	Τετραεδρική	Τριγωνική Πυραμιδική
H_2O	4	sp^3	Τετραεδρική	Κεκαμμένη

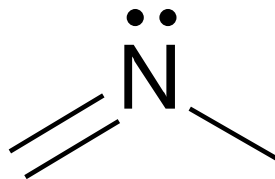
sp^2 Γεωμετρία

Υπολογισμός του Στερικού αριθμού του BF_3 .

Τα ζεύγη ηλεκτρονίων που υπάρχουν στα sp^2 υβριδικά τροχιακά θα σχηματίσουν μία τριγωνική επίπεδη γεωμετρία.



Ανάλυση του στερικού αριθμού, του υβριδισμού, της γεωμετρίας της διευθέτησης των ζευγών ηλεκτρονίων και της μοριακής γεωμετρίας της ιμίνης:



Αριθμός σ δεσμών = 2

Αριθμός μονήρων ζευγών ηλεκτρονίων = 1

Στερικός αριθμός = 3

Άρα το N θα έχει sp^2 υβριδισμό.

sp Γεωμετρία

BeH₂ 2 σ δεσμοί. Επομένως sp υβριδισμός.

CO₂ 2 σ δεσμοί (Οι π δεν λαμβάνονται υπόψη).
Επομένως sp υβριδισμός.

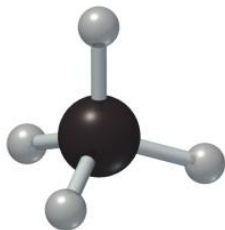
Εάν ο στερικός αριθμός = 4

sp^3

Τετραεδρική
διευθέτηση των ζευγών ηλεκτρονίων

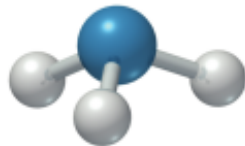
Κανένα μονήρες ζεύγος

Τετραεδρική



Ένα μονήρες ζεύγος

Τριγωνική πυραμιδική



Δύο μονήρη ζεύγη

Κεκαμμένη



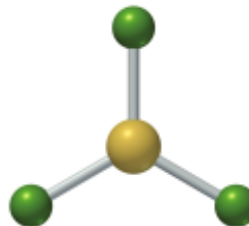
Εάν ο στερικός αριθμός = 3

sp^2

Επίπεδη τριγωνική
διευθέτηση των ζευγών ηλεκτρονίων

Ένα μονήρες ζεύγος

Επίπεδη τριγωνική



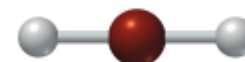
Κανένα μονήρες ζεύγος

Εάν ο στερικός αριθμός = 2

sp

Γραμμική
διευθέτηση των ζευγών ηλεκτρονίων

Γραμμική

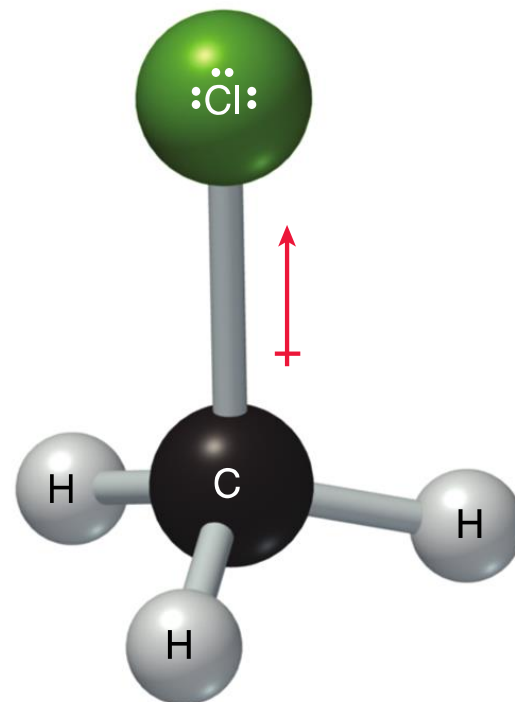
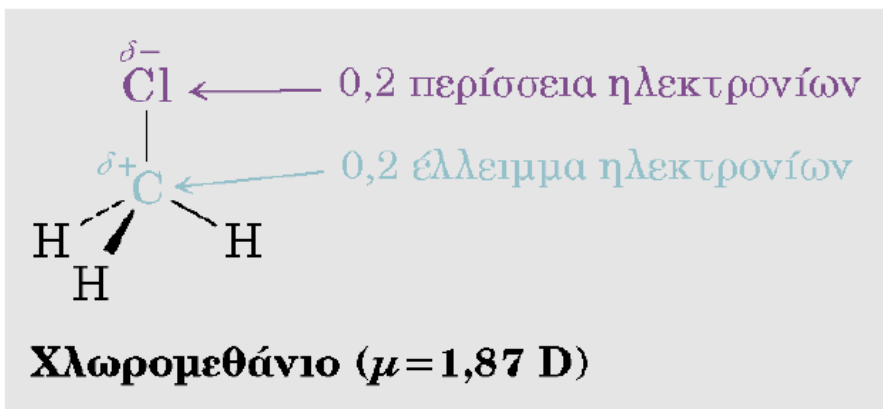


Διπολική Ροπή και Μοριακή Πολικότητα

- Η Διαφορά Ηλεκτραρνητικότητας προκαλεί επαγωγή
- Η επαγωγή (μετατόπιση των ηλεκτρονίων ΕΝΤΟΣ των τροχιακών τους) έχει ως αποτέλεσμα μία διπολική ροπή.
- Διπολική ροπή = (ποσότητα του μερικού φορτίου) x (απόσταση μεταξύ των $\delta+$ και $\delta-$) $\mu = \delta \times d$
- Οι διπολικές ροπές αναφέρονται σε μονάδες debye (D)
- $1 \text{ debye} = 10^{-18} \text{ esu} \cdot \text{cm}$
 - Το esu είναι μονάδα φορτίου. 1 e έχει φορτίο $4.80 \times 10^{-10} \text{ esu}$
 - Τα cm περιλαμβάνονται στη μονάδα, επειδή η απόσταση μεταξύ των κέντρων των + και – φορτίων επηρεάζει το δίπολο

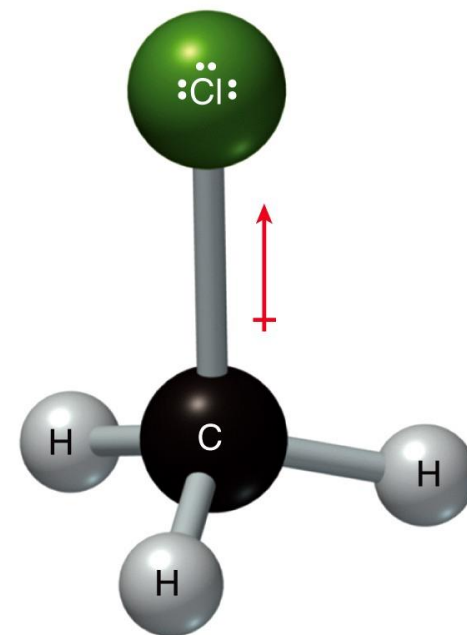
P. Debye, Nobel 1936.

- Θεωρούμε το δίπολο του **CH₃Cl**
- Διπολική ροπή (μ) = φορτίο (e) x απόσταση (d)
- $\mu = (1.056 \times 10^{-10} \text{ esu}) \times (1.772 \times 10^{-8} \text{ cm})$
 - Σημειώστε ότι η ποσότητα του διαχωρισμού φορτίου είναι μικρότερη από εκείνη που θα ήταν εάν υπήρχε πλήρης διαχωρισμός φορτίου ($4.80 \times 10^{-10} \text{ esu}$)
- $\mu = 1.87 \times 10^{-18} \text{ esu} \cdot \text{cm}$
 - Μετατρέπουμε σε debye
- $\mu = 1.87 \text{ D}$



Υπολογισμός % ποσοστού ιοντικού χαρακτήρα των δεσμών

- Ποια θα ήταν η διπολική ροπή εάν το CH_3Cl ήταν 100% ιοντικό;
- $\mu = \text{φορτίο } (e) \times \text{απόσταση } (d)$
- $\mu = (4.80 \times 10^{-10} \text{ esu}) \times (1.772 \times 10^{-8} \text{ cm})$
 - Εάν ο δεσμός είναι 100% ιοντικός
- $\mu = 8.51 \times 10^{-18} \text{ esu} \cdot \text{cm} = 8.51 \text{ D}$
- Ο δεσμός C-Cl είναι ιοντικός σε % ποσοστό
- $1,87/8,51 = 22$
- Ο δεσμός C-Cl είναι κυρίως ομοιοπολικός.



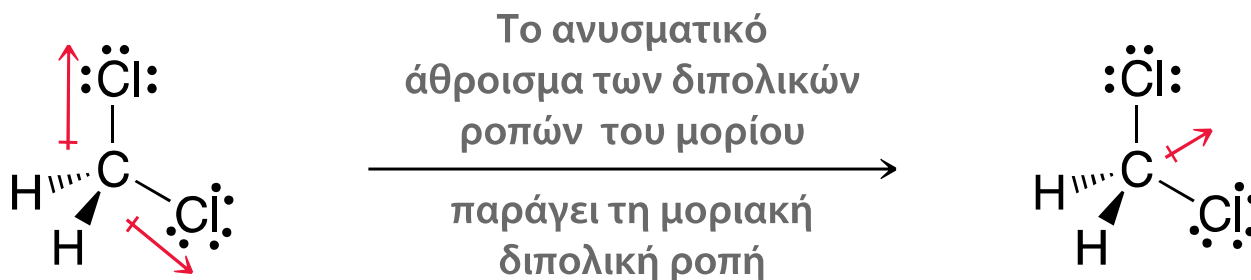
Πολικότητα ορισμένων συνήθων δεσμών.

Ο διπλός δεσμός C=O είναι πολικότερος του απλού δεσμού C-O.

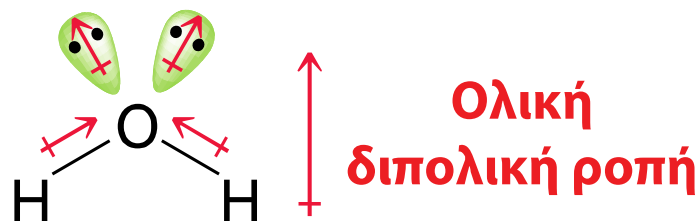
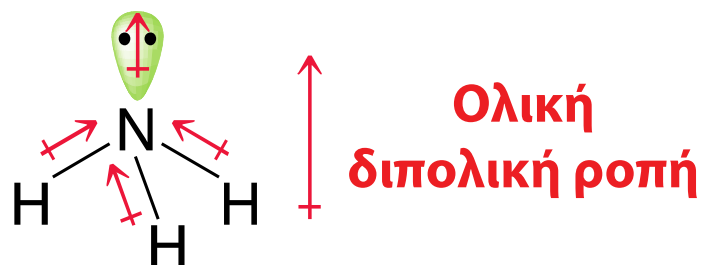
ΠΙΝΑΚΑΣ 1.4 ΕΚΑΤΟΣΤΙΑΙΟΣ ΙΟΝΤΙΚΟΣ ΧΑΡΑΚΤΗΡΑΣ ΣΕ ΔΙΑΦΟΡΟΥΣ ΔΕΣΜΟΥΣ

ΔΕΣΜΟΣ	ΜΗΚΟΣ ΔΕΣΜΟΥ ($\times 10^{-8}$ cm)	ΠΑΡΑΤΗΡΟΥΜΕΝΗ μ (D)	ΕΚΑΤΟΣΤΙΑΙΟΣ ΙΟΝΤΙΚΟΣ ΧΑΡΑΚΤΗΡΑΣ
C—O	1,41	0,7 D	$\frac{(0,7 \times 10^{-18} \text{ esu} \times \text{cm})}{(4,80 \times 10^{-10} \text{ esu})(1,41 \times 10^{-8} \text{ cm})} \times 100\% = 10\%$
O—H	0,96	1,5 D	$\frac{(1,5 \times 10^{-18} \text{ esu} \times \text{cm})}{(4,80 \times 10^{-10} \text{ esu})(0,96 \times 10^{-8} \text{ cm})} \times 100\% = 33\%$
C=O	1,227	2,4 D	$\frac{(2,4 \times 10^{-18} \text{ esu} \times \text{cm})}{(4,80 \times 10^{-10} \text{ esu})(1,23 \times 10^{-8} \text{ cm})} \times 100\% = 41\%$

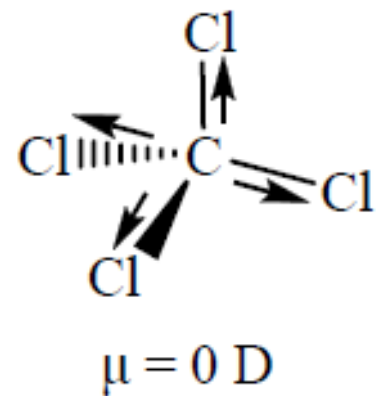
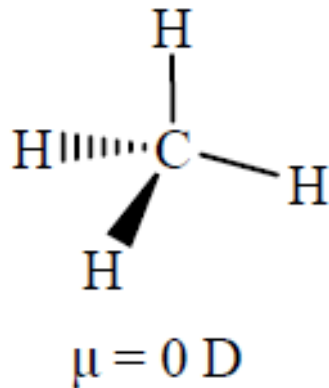
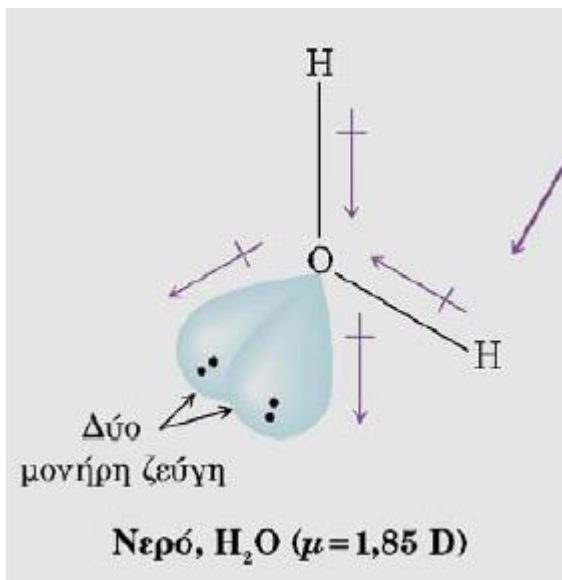
- Για μόρια με πολλαπλούς πολικούς δεσμούς, η μοριακή διπολική ροπή είναι το διανυσματικό άθροισμα όλων των μεμονωμένων διπόλων των δεσμών.



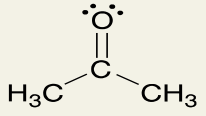
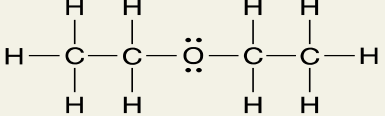
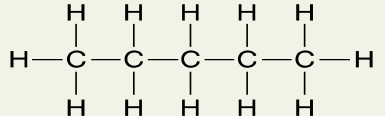
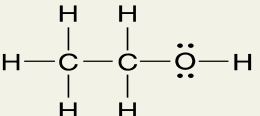
Μοριακή διπολική ροπή

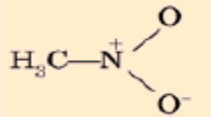
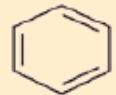


- ΠΡΩΤΑ προσδιορίζεται η γεωμετρία ενός μορίου προτού αναλυθεί η πολικότητά του.
- Εάν δεν σχεδιαστεί το μόριο με τη σωστή γεωμετρία, αυτό μπορεί να οδηγήσει σε λανθασμένη εκτίμηση της πολικότητας.
- Το δίπολο του νερού θα ήταν διαφορετικό εάν το νερό ήταν γραμμικό αντί για γωνιακό.



ΠΙΝΑΚΑΣ 1.5 ΔΙΠΟΛΙΚΕΣ ΡΟΠΕΣ ΟΡΙΣΜΕΝΩΝ ΚΟΙΝΩΝ ΔΙΑΛΥΤΩΝ (20 °C)

ΕΝΩΣΗ	ΔΟΜΗ	ΔΙΠΟΛΙΚΗ ΡΟΠΗ	ΕΝΩΣΗ	ΔΟΜΗ	ΔΙΠΟΛΙΚΗ ΡΟΠΗ
Ακετόνη		2,69 D	Αμμωνία	:NH ₃	1,47 D
Χλωρομεθάνιο	CH ₃ Cl	1,87 D	Διαιθυλαιθέρας		1,15 D
Νερό	H ₂ O	1,85 D	Μεθυλενοχλωρίδιο	CH ₂ Cl ₂	1,14 D
Μεθανόλη	CH ₃ OH	1,69 D	Πεντάνιο		0 D
Αιθανόλη		1,66 D	Τετραχλωράνθρακας	CCl ₄	0 D

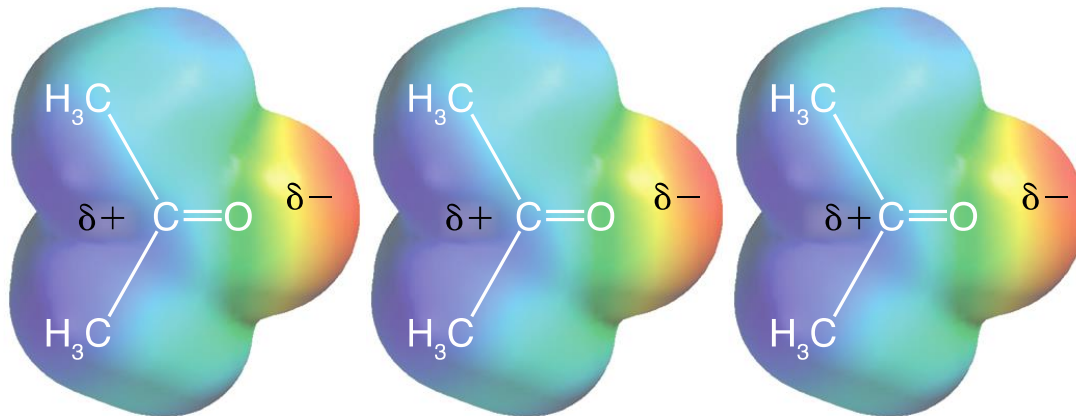
Ένωση	Διπολική ροπή (D)	Ένωση	Διπολική ροπή (D)
NaCl	9,0	NH ₃	1,47
	3,46	CH ₄	0
Νιτρομεθάνιο		CCl ₄	0
CH ₃ Cl	1,87	CH ₃ CH ₃	0
H ₂ O	1,85		0
CH ₃ OH	1,70	Βενζόλιο	
H ₂ C=N ⁺ =N ⁻	1,50	BF ₃	0
Διαζομεθάνιο			

Διαμοριακές Δυνάμεις και Φυσικές ιδιότητες

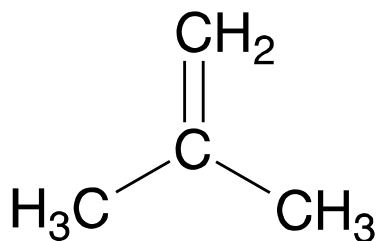
- Πολλές ιδιότητες όπως η διαλυτότητα, το σημείο ζέσεως, η πυκνότητα, η κατάσταση της ύλης, το σημείο τήξεως, κ.λπ. επηρεάζονται από τις ελκτικές δυνάμεις ΜΕΤΑΞΥ των μορίων
- Τα ουδέτερα μόρια (πολικά και μη πολικά) έλκονται το ένα προς άλλο μέσω...
 - Αλληλεπιδράσεων διπόλου-διπόλου
 - Δεσμών υδρογόνου
 - Δυνάμεων διασποράς (γνωστών και ως δυνάμεων διασποράς London ή παροδικών δυνάμεων διπόλου-διπόλου)

Αλληλεπιδράσεις Διπόλου-Διπόλου

- Οι δυνάμεις διπόλου-διπόλου αναπτύσσονται όταν τα πολικά μόρια προσανατολίζονται κατά τρόπο ώστε να αντιπαρατάσσονται τα αντίθετα φορτία τους.
- Το μόνιμο δίπολο της ακετόνης είναι αποτέλεσμα της διαφοράς ηλεκτραρνητικότητας μεταξύ C και O
- Οι ελκτικές δυνάμεις διπόλου-διπόλου ΜΕΤΑΞΥ των μορίων της ακετόνης επηρεάζουν τα σημεία ζέσεως και τήξεως της ακετόνης.



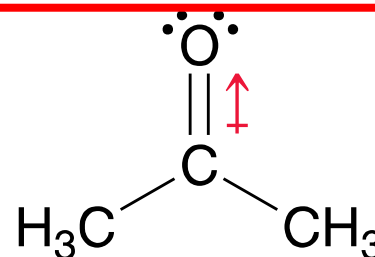
Το ισοβουτυλένιο και η ακετόνη έχουν τόσο διαφορετικά σημεία ζέσεως και τήξεως λόγω των αλληλεπιδράσεων διπόλου-διπόλου.



Ισοβουτυλένιο

Σημείο τήξεως = $-140,3\text{ }^{\circ}\text{C}$

Σημείο ζέσεως = $-6,9\text{ }^{\circ}\text{C}$



Ακετόνη

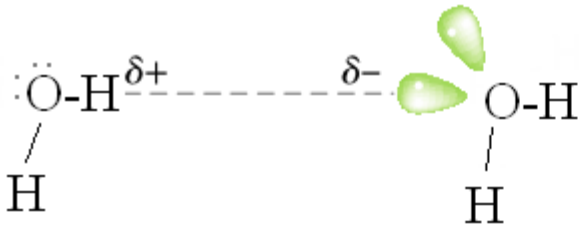
Σημείο τήξεως = $-94,9\text{ }^{\circ}\text{C}$

Σημείο ζέσεως = $56,3\text{ }^{\circ}\text{C}$

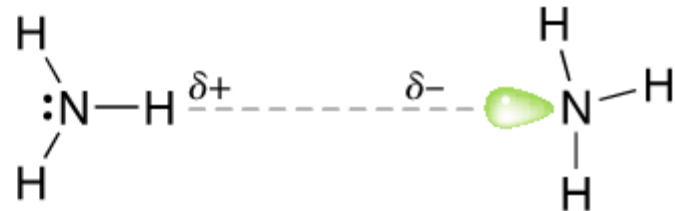
Δεσμός Υδρογόνου

- Οι δεσμοί υδρογόνου είναι ένας ιδιαίτερα ισχυρός τύπος ελκτικής αλληλεπίδρασης διπόλου-διπόλου.
- Οι δεσμοί υδρογόνου είναι ισχυροί διότι τα μερικά φορτία προσεγγίζουν πολύ μεταξύ τους λόγω μικρού μεγέθους του H.

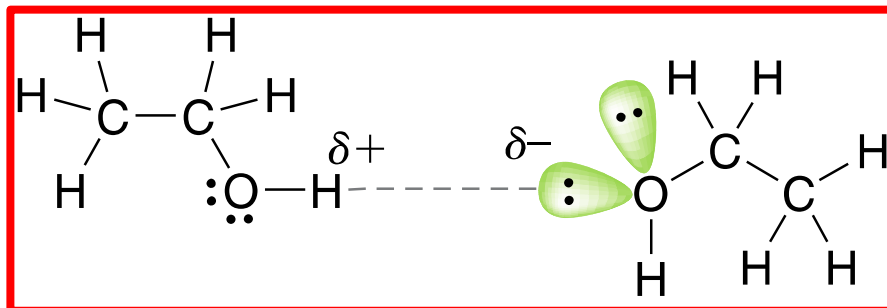
Δεσμός υδρογόνου
μεταξύ μορίων νερού



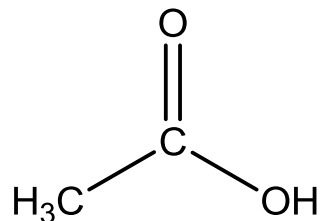
Δεσμός υδρογόνου
μεταξύ μορίων αμμωνίας



- Μόνο όταν ένα άτομο υδρογόνου μοιράζεται ηλεκτρόνια με ένα εξόχως **ηλεκτραρνητικό άτομο (O, N, F)** θα φέρει μερικό θετικό φορτίο
- Το μεγάλο $\delta+$ στο άτομο H μπορεί να έλκει $\delta-$ φορτία άλλων μορίων
- Ακόμη και με μεγάλα μερικά φορτία, οι δεσμοί υδρογόνου εξακολουθούν να είναι περίπου 20 φορές ασθενέστεροι από τους ομοιοπολικούς δεσμούς
- Ενώσεις με άτομα H οι οποίες είναι ικανές να σχηματίζουν δεσμούς υδρογόνου ονομάζονται **πρωτικές**

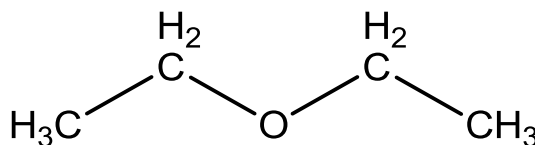


Οξικό οξύ



Πρωτικός διαλύτης

Διαιθυλαιθέρας

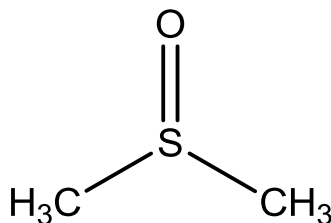


Απρωτικός διαλύτης

Μεθυλενο διχλωρίδιο (CH₂Cl₂)

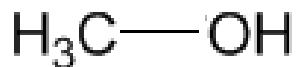
Απρωτικός διαλύτης

Διμεθυλοσουλφοξείδιο



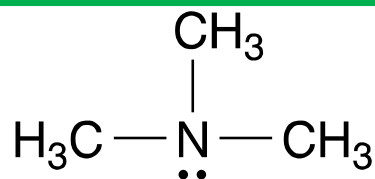
Απρωτικός διαλύτης

Μεθανόλη



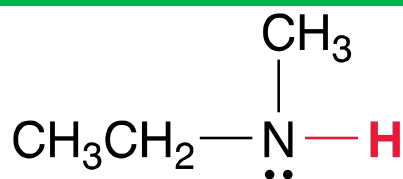
Πρωτικός διαλύτης

Τα παρακάτω ισομερή έχουν διαφορετικά Σημεία Ζέσεως λόγω δημιουργίας δεσμών Υδρογόνου.



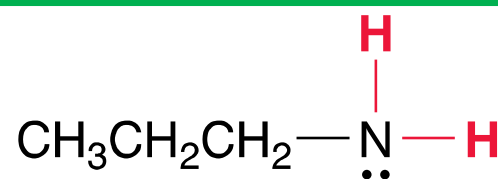
Τριμεθυλαμίνη

Σημείο ζέσεως = 3,5 °C



Αιθυλομεθυλαμίνη

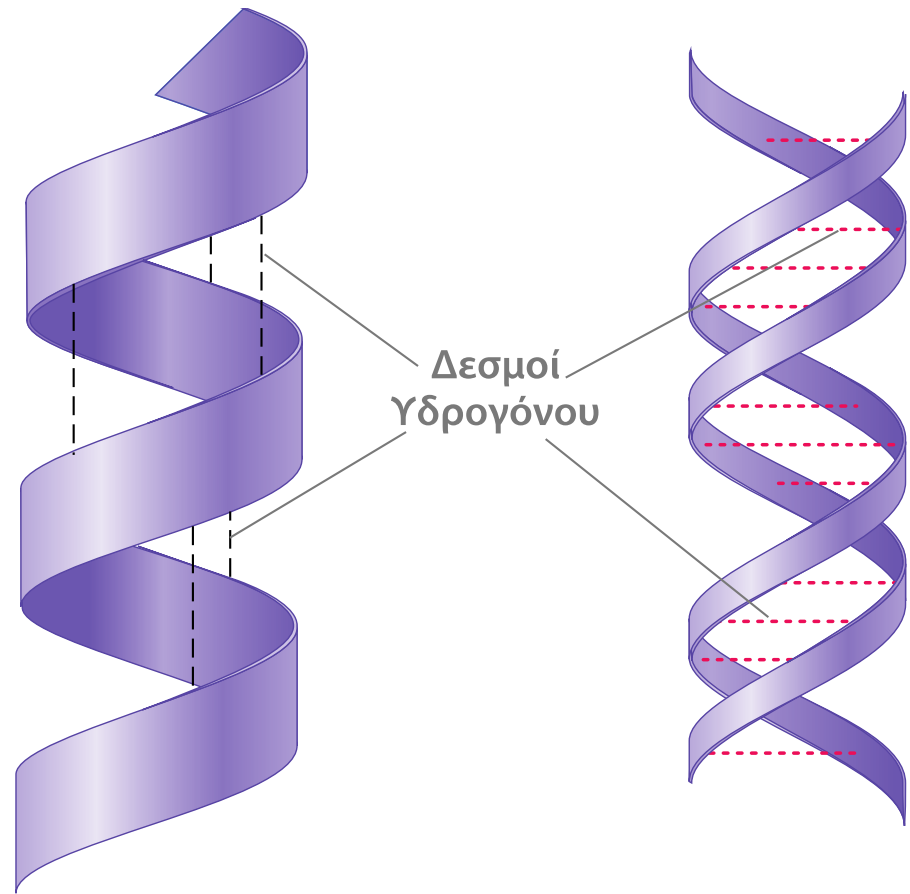
Σημείο ζέσεως = 37 °C



Προπυλαμίνη

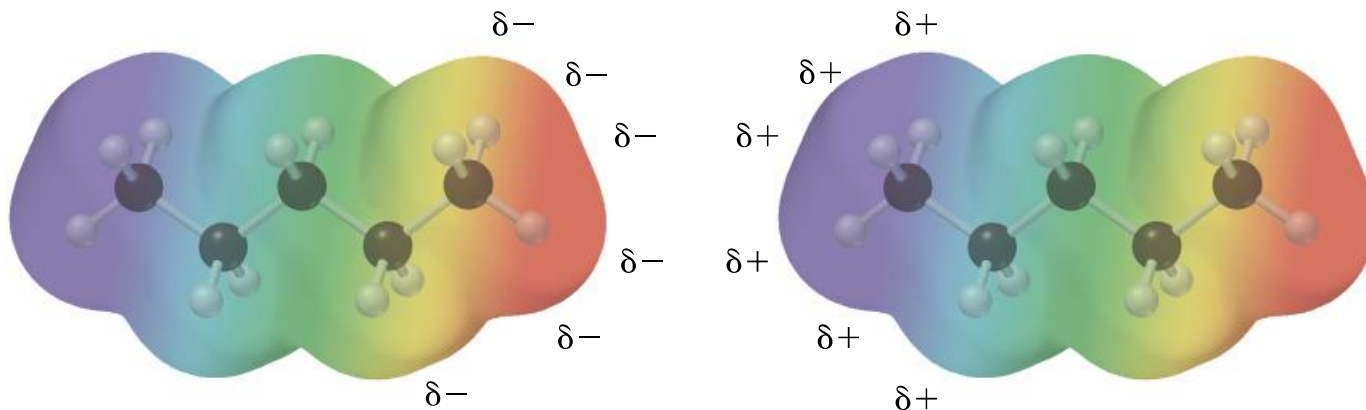
Σημείο ζέσεως = 49 °C

**Οι δεσμοί Υδρογόνου
συγκαταλέγονται
μεταξύ των δυνάμεων που
προκαλούν το σχηματισμό
διπλής έλικας στο μόριο
του DNA και την
αναδίπλωση ορισμένων
πρωτεϊνών σε α-έλικα**

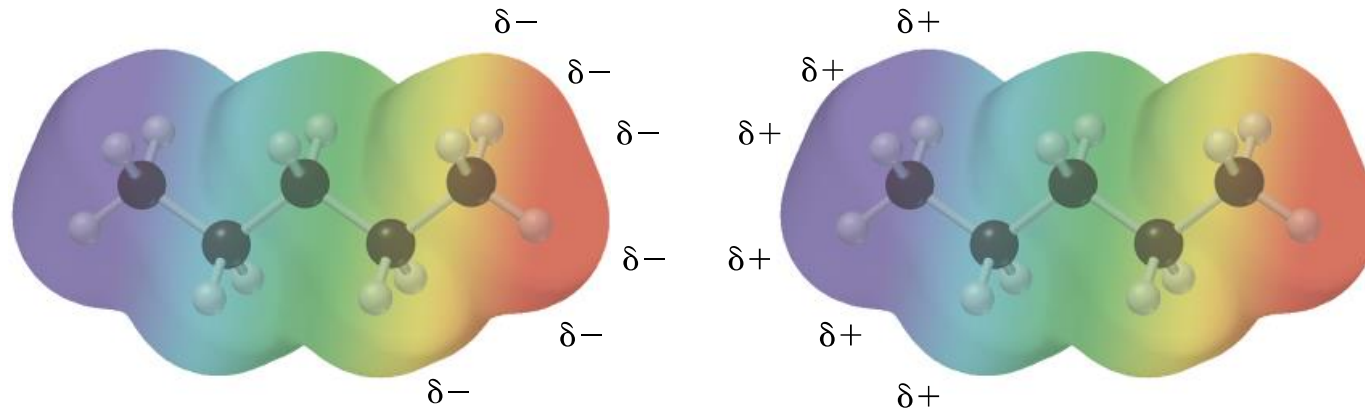


Δυνάμεις Διασποράς London

- Η συνεχής τυχαία κίνηση των ηλεκτρονίων στα άπολα μόρια παράγει μερικές φορές μία κατανομή ηλεκτρονίων η οποία ΔΕΝ είναι ομοιόμορφα ισορροπημένη με το θετικό φορτίο των πυρήνων.
- Μία τέτοια ακανόνιστη κατανομή παράγει ένα προσωρινό δίπολο, το οποίο μπορεί με τη σειρά του να επάγει ένα προσωρινό δίπολο σε ένα γειτονικό μόριο.



Το αποτέλεσμα είναι μία παροδική έλξη μεταξύ των δύο μορίων.

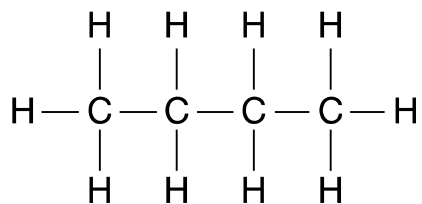


Τέτοιες παροδικές έλξεις είναι γενικά ασθενείς.

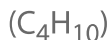
Αλλά όπως κάθε ασθενής έλξη, εάν υπάρχουν σε ικανό αριθμό, μπορούν να αθροιστούν σε μία ισχυρή έλξη.

Όσο μεγαλύτερο είναι το επιφανειακό εμβαδό ενός μορίου, τόσο περισσότερες έλξεις μεταξύ παροδικών διπόλων είναι εφικτές.

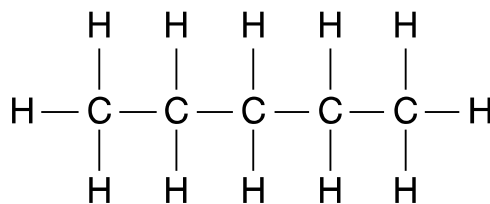
Τα μόρια με μεγαλύτερη μάζα γενικά έχουν υψηλότερα σημεία βρασμού (μεγαλύτερο επιφανειακό εμβαδόν).



Βουτάνιο



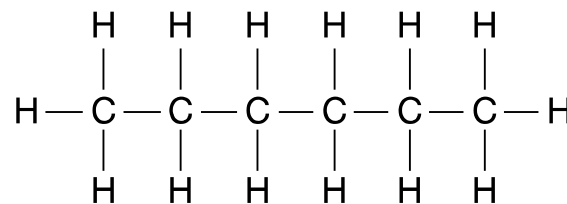
Σημείο ζέσεως = 0 °C



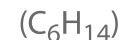
Πεντάνιο



Σημείο ζέσεως = 36 °C

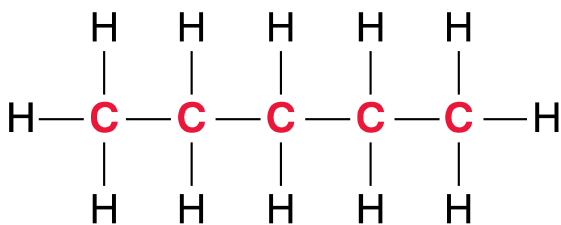


Εξάνιο



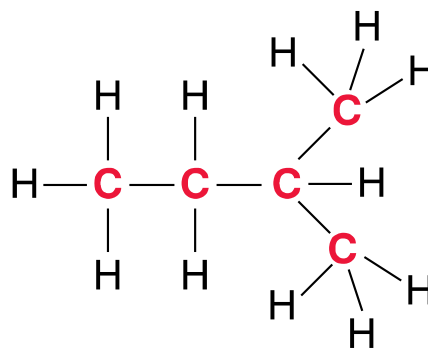
Σημείο ζέσεως = 69 °C

Τα περισσότερο διακλαδισμένα μόρια γενικά έχουν χαμηλότερα σημεία βρασμού (μικρότερο επιφανειακό εμβαδόν).



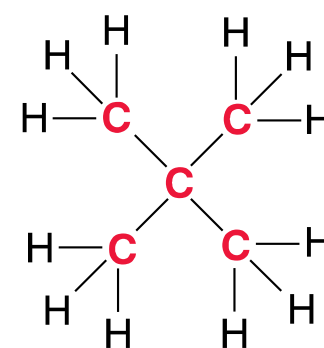
Πεντάνιο

Σημείο ζέσεως = 36 °C



2-Μεθυλοβουτάνιο

Σημείο ζέσεως = 28 °C

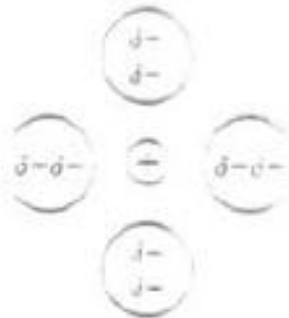




2,2-Διμεθυλοπροπάνιο

Σημείο ζέσεως = 10 °C

TABLE 2.5 Attractive electric forces

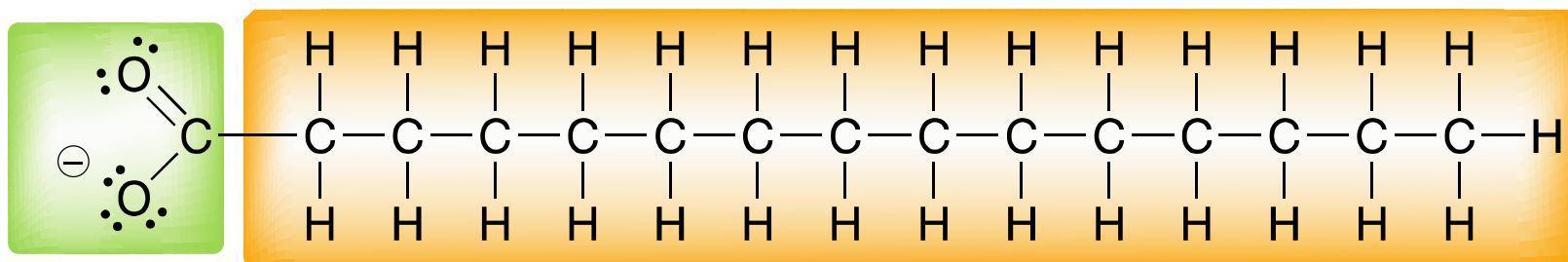
SOLOMONS "ORGANIC CHEMISTRY"

ELECTRIC FORCE	RELATIVE STRENGTH	TYPE	EXAMPLE
Cation-anion (in a crystal)	Very strong	$\ominus \ominus$	Lithium fluoride crystal lattice
Covalent bonds	Strong (36–125 kcal/mole)	Shared electron pairs	H—H (104 kcal/mole) CH ₃ —CH ₃ (88 kcal/mole) I—I (36 kcal/mole)
Ion-dipole	Moderate		Na ⁺ in water (see Fig. 2.18)
Dipole-dipole (including hydrogen bonds)	Moderate-weak (1–9 kcal/mole)	$\overset{\delta-}{\text{Z}} \cdots \overset{\delta+}{\text{H}}$ and 	$\text{R} \overset{\delta-}{\text{O}} \cdots \overset{\delta+}{\text{H}} \text{R}$ $\overset{\delta-}{\text{H}}$ and 
van der Waals	Variable	Fluctuating dipole	Interactions between methane molecules

Διαλυτότητα

- “Τα όμοια διαλύουν τα όμοια”
- Οι πολικές ενώσεις γενικά αναμιγνύονται καλά με άλλες πολικές ενώσεις.
 - Εάν οι αναμιγνυόμενες ενώσεις είναι όλες ικανές να σχηματίζουν δεσμούς H και/ή ισχυρές δυνάμεις διπόλου-διπόλου, θα πρέπει να αναμιγνύονται μεταξύ τους.
- Οι μη πολικές ενώσεις γενικά αναμιγνύονται καλά με άλλες μη πολικές ενώσεις
 - Εάν καμία από τις ενώσεις δεν είναι ικανή να σχηματίσει ισχυρές έλξεις, τότε θα πρέπει να αναμιγνύονται μεταξύ τους.

- Γνωρίζουμε ότι είναι δύσκολο να αναμίξουμε μία πολική ένωση (όπως το νερό) με μία μη πολική ένωση (όπως το έλαιο).
 - Δεν μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε μόνο νερό για να καθαρίσουμε τα ρούχα μας που έχουν λερωθεί με έλαιο.
- Για να απομακρύνουμε μη πολικά έλαια, γράσο, και λιπαρούς λεκέδες, χρειαζόμαστε σαπούνι.



Πολική ομάδα
(υδροφιλικό τμήμα)

Μη πολική ομάδα
(υδροφοβικό τμήμα)

Δεκαπεντανοικό ανιόν

- Τα μόρια του σαπουνιού οργανώνονται σε μικκύλια στο νερό, τα οποία σχηματίζουν ένα μη πολικό εσωτερικό παρασύροντας την ελαιώδη ακαθαρσία.

