

Teoria VSEPR

Jak przewidywać strukturę cząsteczki?

Model VSEPR

- **wiązanie** – pary elektronowe dzielone między atomy tworzące wiązanie. Rozkład elektronów walencyjnych w cząsteczce (struktura Lewisa)
- **stuktura** – minimalizujemy odpychanie między wolnymi parami elektronowymi w cząsteczce

Model VSEPR

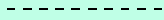

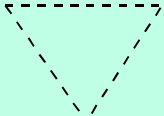
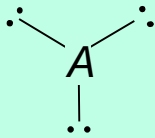
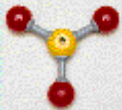
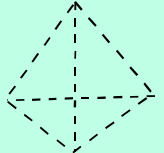
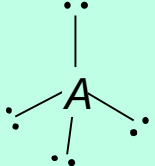

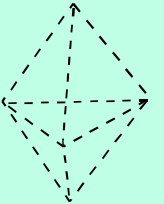
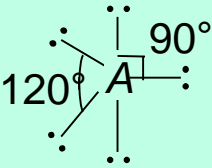

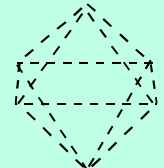
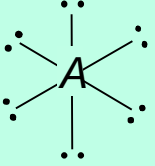

Algorytm

Określ

1. liczbę elektronów walencyjnych LEW w atomie centralnym A
2. wartościowość i liczbę elektronów tworzących pary z elektronami liganda X
3. strukturę Lewisa cząsteczki włączając pary wiążące i niewiążące
4. liczbę koordynacyjną LK atomu centralnego A= liczba wszystkich par elektronowych (niewiążących i w wiązaniach s) i odpowiada liczbie naroży figury geometrycznej będącej podstawą geometrii cząsteczki na podstawie położenia atomów
5. ułóż wolne pary najdalej od siebie w przestrzeni wokół atomu centralnego
6. ułóż atomy liganda X w miejscach wiążących par elektronowych wokół atomu centralnego A
7. ustal geometrię cząsteczki.

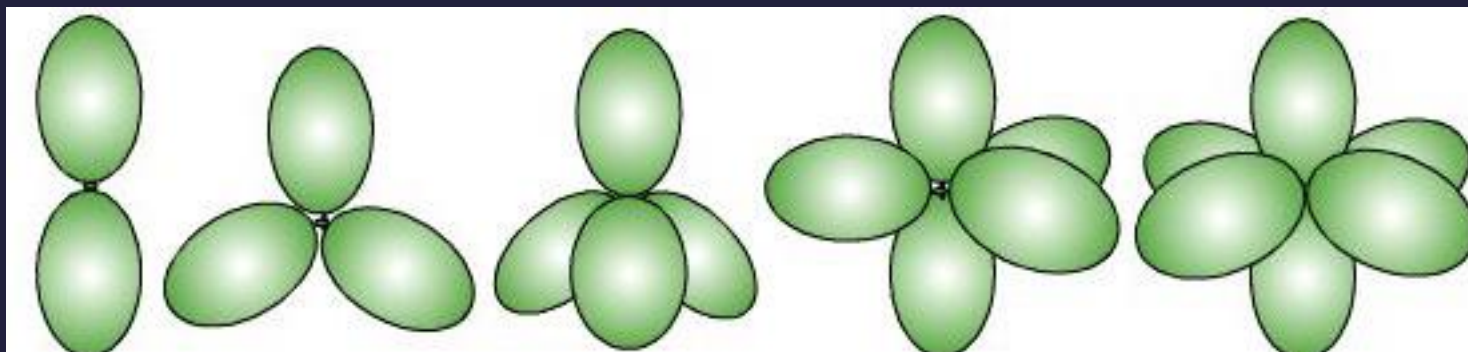
Model VSEPR

Table 8.6 Minimalne odpychanie par i geometria

LK=liczba par elektronowych	geometria	ułożenie par		budowa cząsteczki
2	liniowa		$:\text{—A—}:$	
3	trójkątna			
4	tetraedryczna			
5	bipiramida trygonalna			
6	oktaedryczna			

Model VSEPR

4. Liczba koordynacyjna a figura geometryczna



Model VSEPR

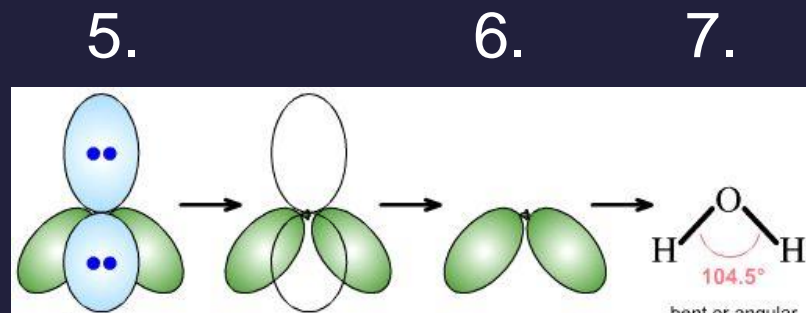
Przykład 1 H₂O

1. O LEW=6

2. O = 2 wartościowy, 2 pary z ligandem H



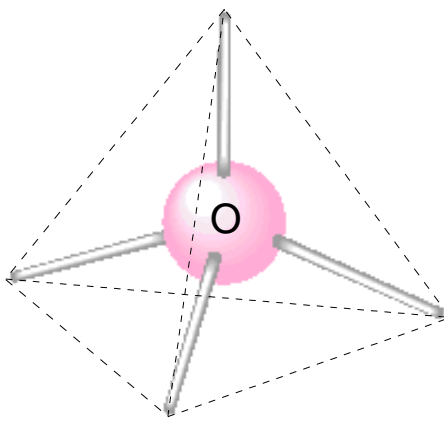
4. LK = 4 = tetraedr



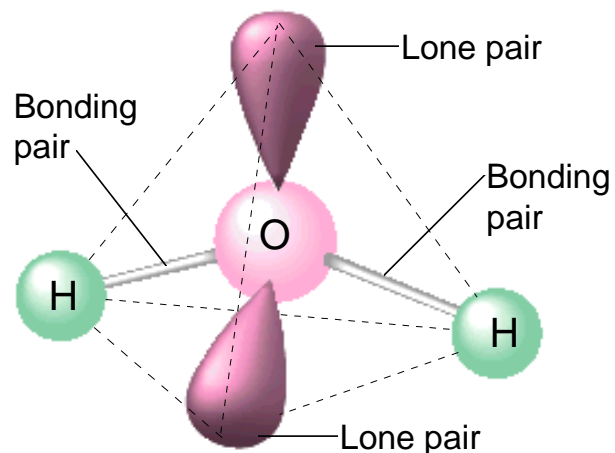
kątowa

Model VSEPR

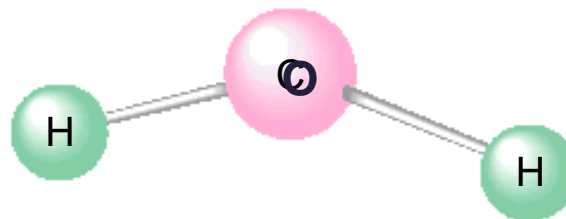
Przykład 1 H₂O



(a)



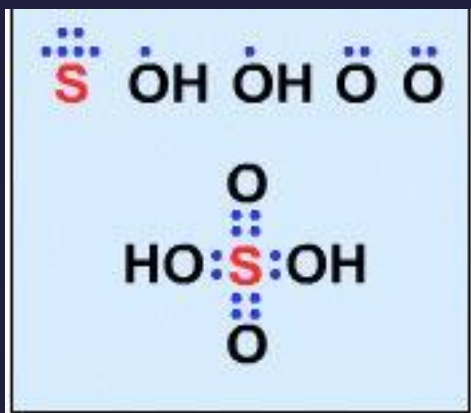
(b)



(c)

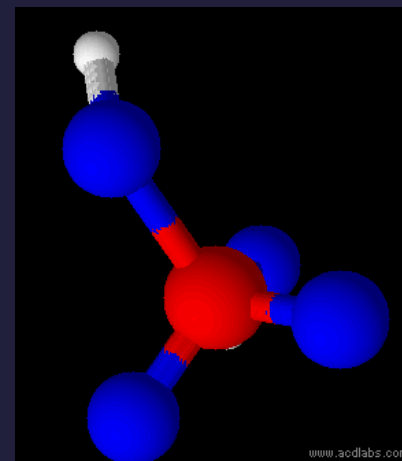
Model VSEPR

Przykład 2 H_2SO_4



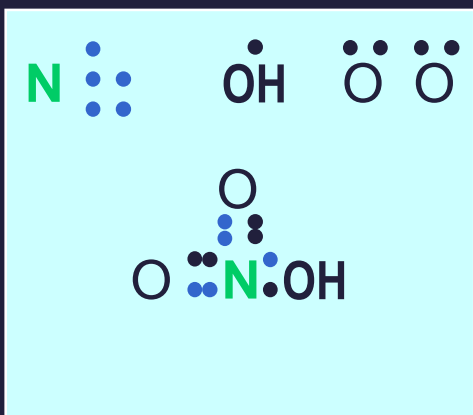
brak wolnych par elektronowych
4 pary wiążące – wiązania σ

LK=4=tetraedr

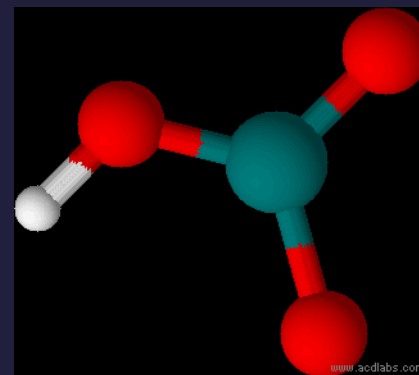


Model VSEPR

Przykład 3 HNO_3



brak wolnych par elektronowych
3 pary elektronowe w wiązaniach σ
LK=3=trójkąt

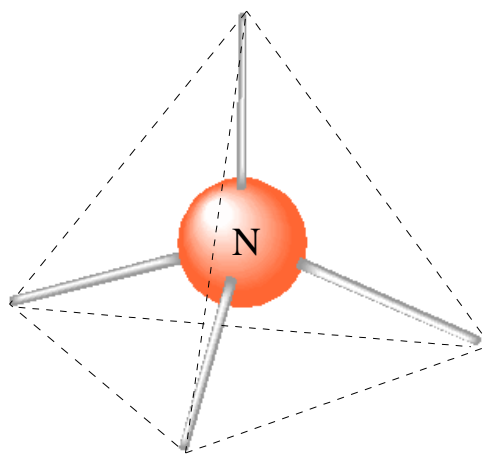


Przykłady do samodzielnego studiowania

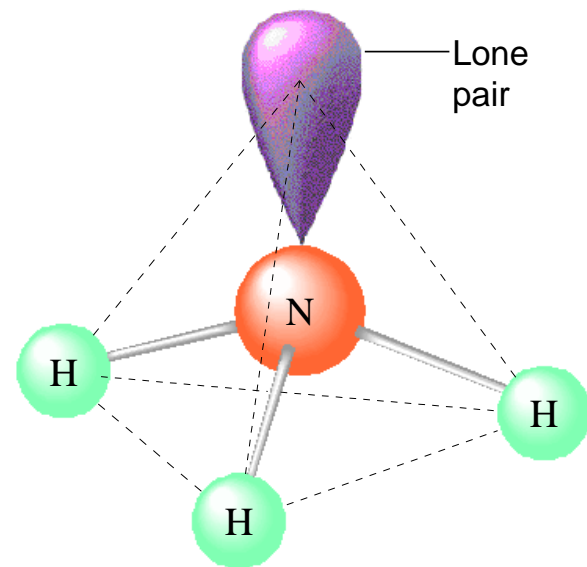
W oparciu o model VSEPR proszę określić budowę cząsteczek: NH_3 , XeF_4 , PCl_5 , PCl_6^- , H_3PO_4

Model VSEPR

Przykład 4 NH_3



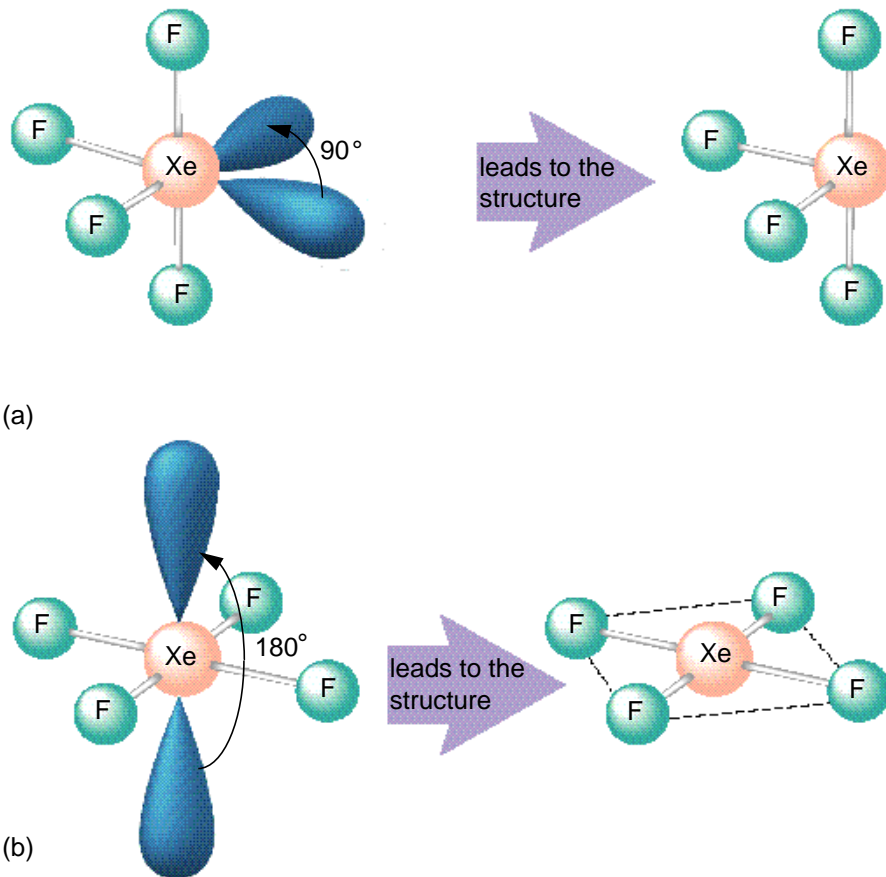
(a)



(b)

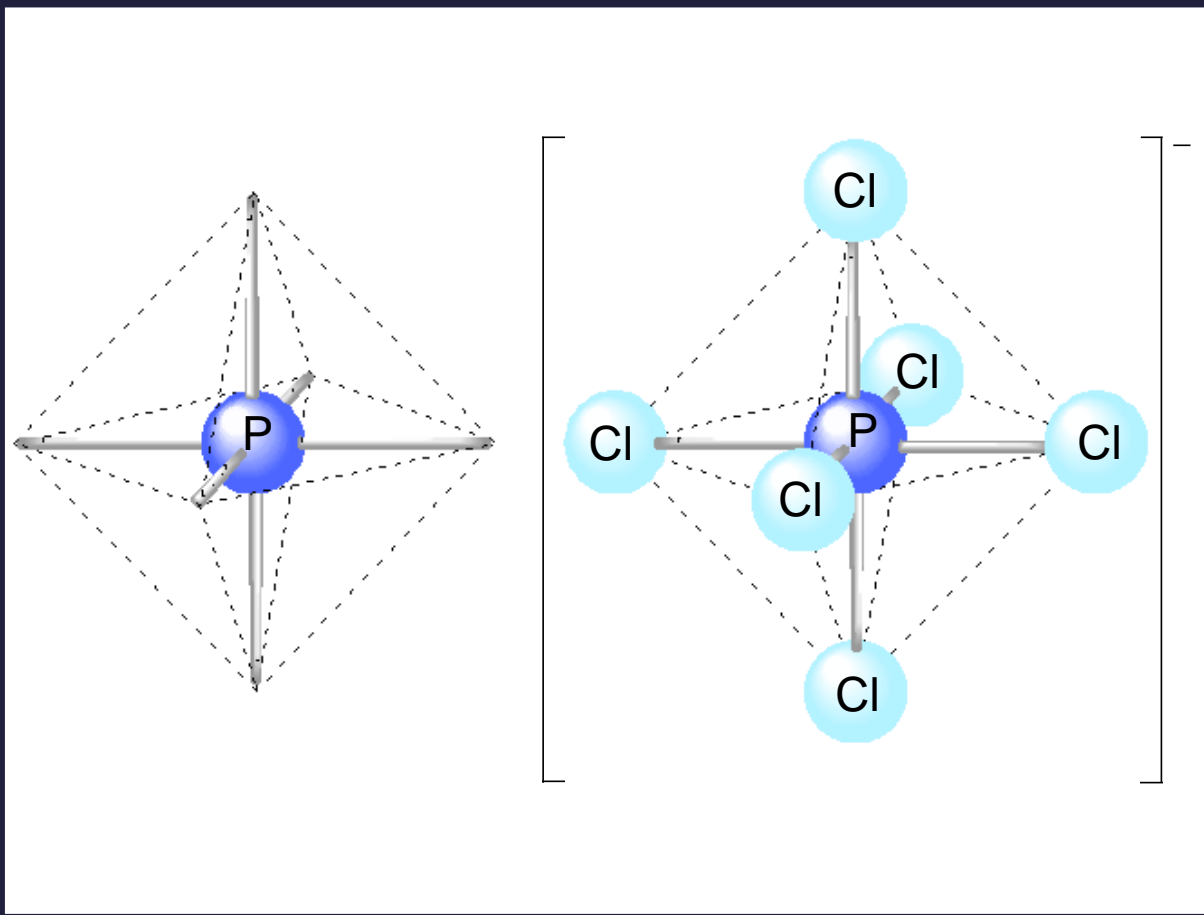
Model VSEPR

Przykład 5 XeF₄



Model VSEPR

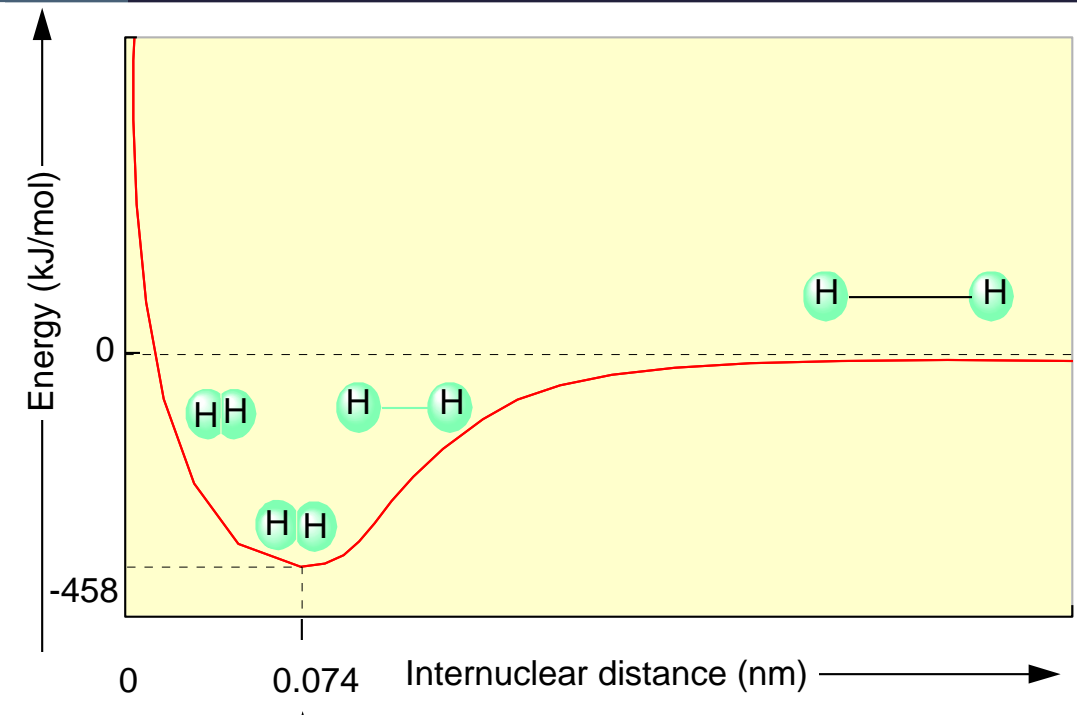
Przykład 6 PCl_6^{--}



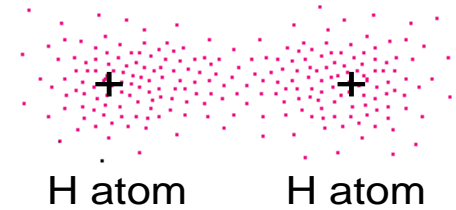
Wiązania

- w świetle teorii kwantów
- fenomenologicznie

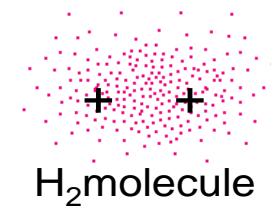
Wiązania



Sufficiently far apart
to have no interaction



The atoms begin to interact
as they move closer together.



Optimum distance to achieve
lowest overall energy of system

Własności wiązań

- Długość
- Energia
- Polarność

Długość wiązania

- odległość dla której energia jest minimalna

Energia wiązania

- energia potrzebna do zerwania wiązania

Typy wiązań – kryterium podziału

Elektroujemność

Definicja Mullikena:

$$E = \frac{P - I}{2} \quad \text{lub} \quad E = \frac{|P| + |I|}{2}$$

P – powinowactwo elektronowe
 I – energia jonizacji

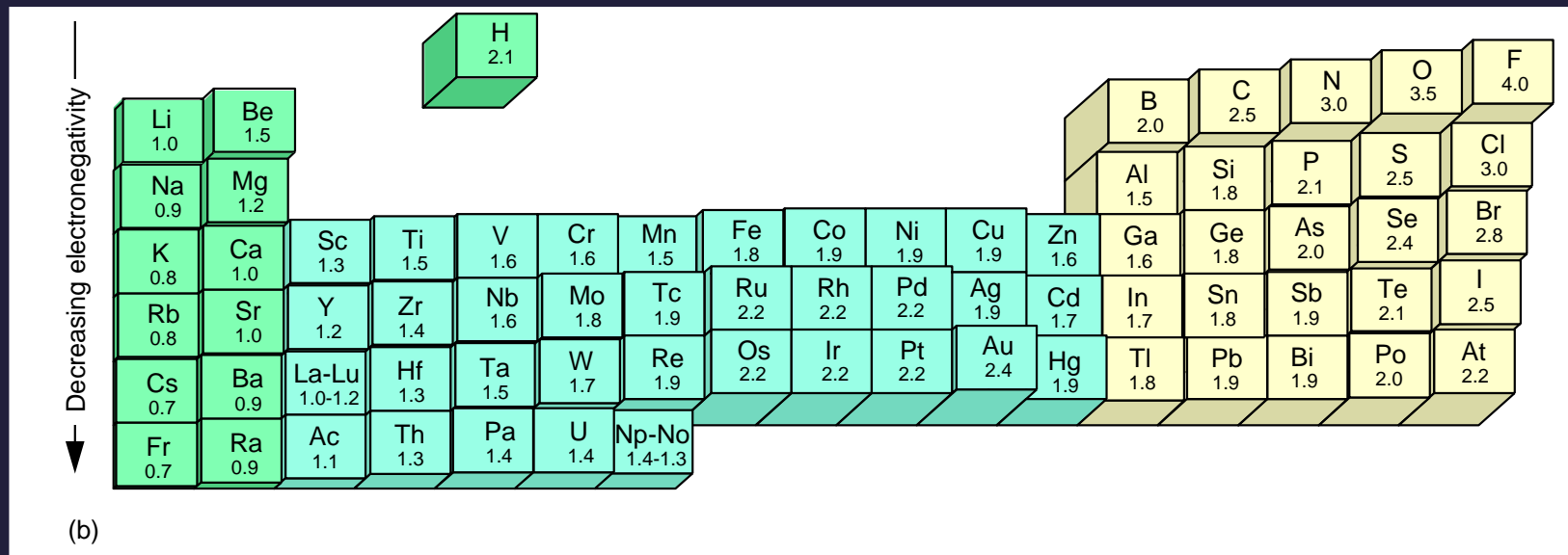
Definicja Paulinga:

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} I_{AB} = \sqrt{I_{AA} \cdot I_{BB}}$$

$$\Delta E = E_A - E_B = 0.1018 \cdot \sqrt{I_{AB} - \sqrt{I_{AA} \cdot I_{BB}}} \quad \mu\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$$

Typy wiązań – kryterium podziału

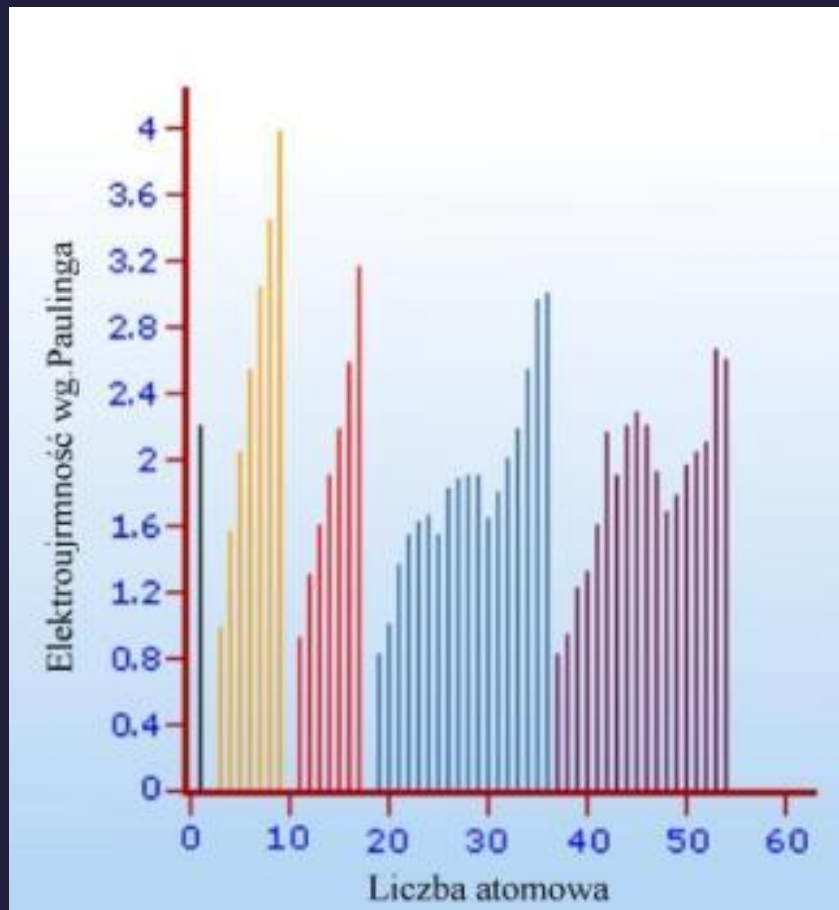
Elektroujemność



skala Paulinga

Typy wiązań – kryterium podziału

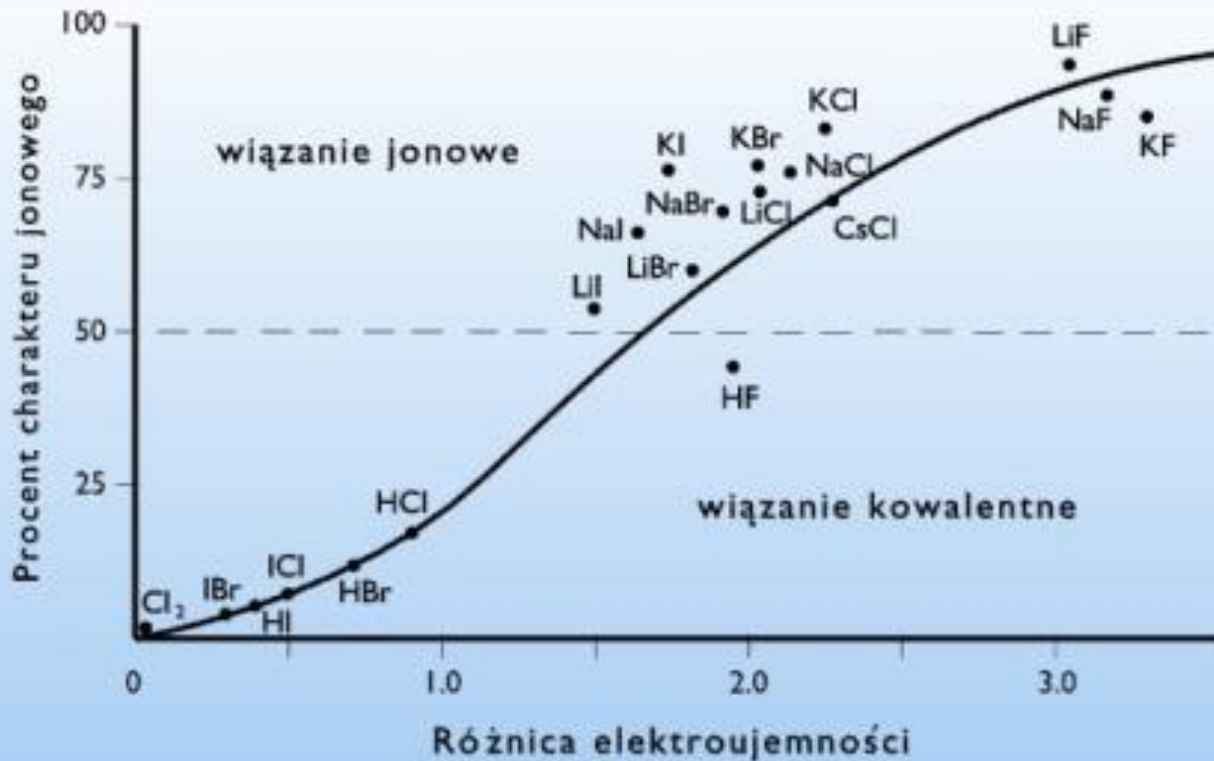
Elektroujemność



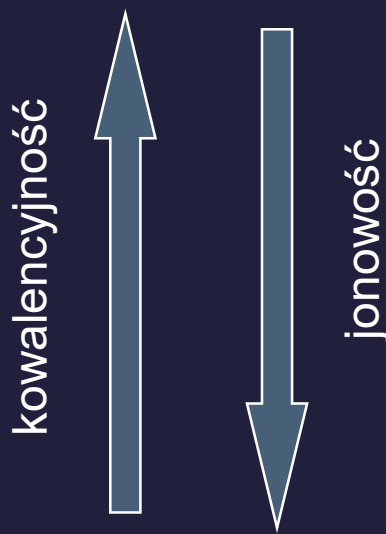
skala Paulinga

Typy wiązań – kryterium podziału

Elektroujemność

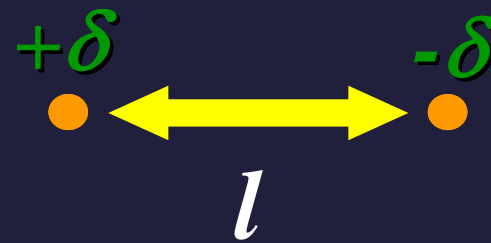
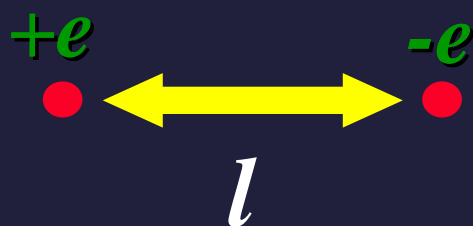


Typy wiązań

Różnica elektroujemności pomiędzy atomami	Typ wiązania	Trendy
0	kowalencyjne	
	kowalencyjne spolaryzowane	
>1.5	jonowe	

Polarność

wiązań



miara - moment dipolowy

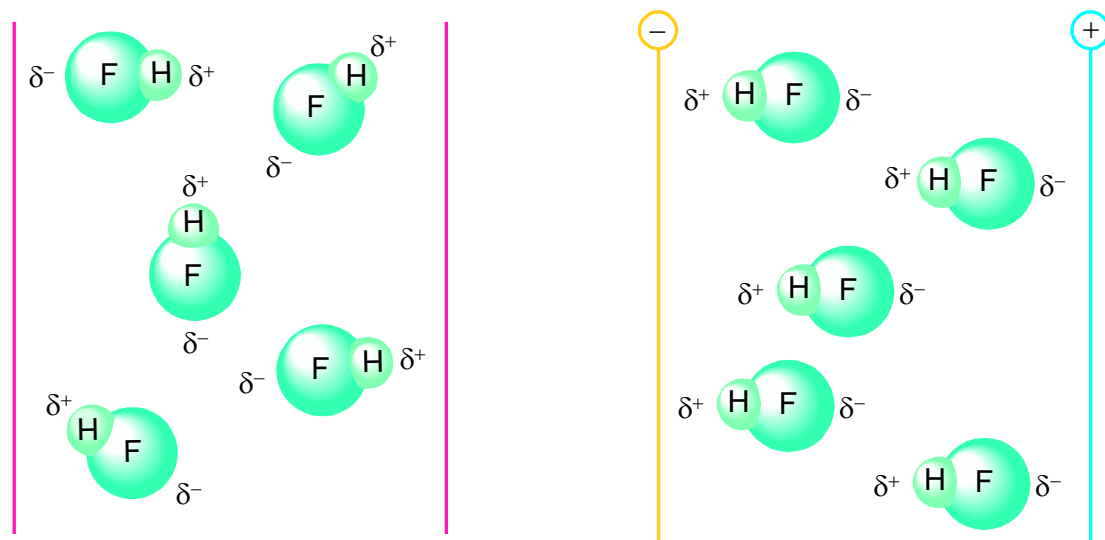
$$e \cdot l$$

$$\mu = \delta \cdot l$$

δ - ładunek efektywny
 l - długość wiązania

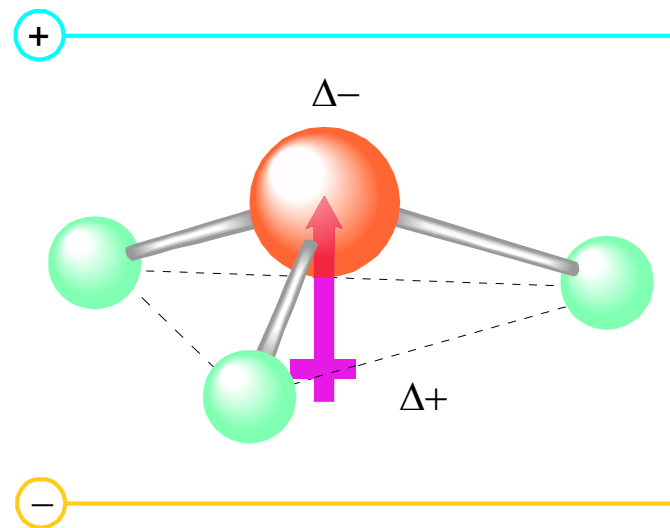
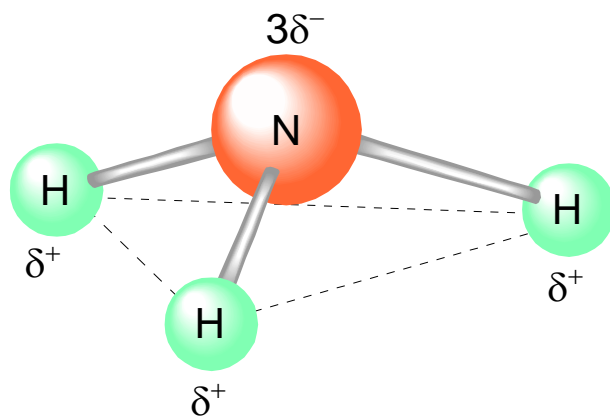
Polarność

wiązań i cząsteczek



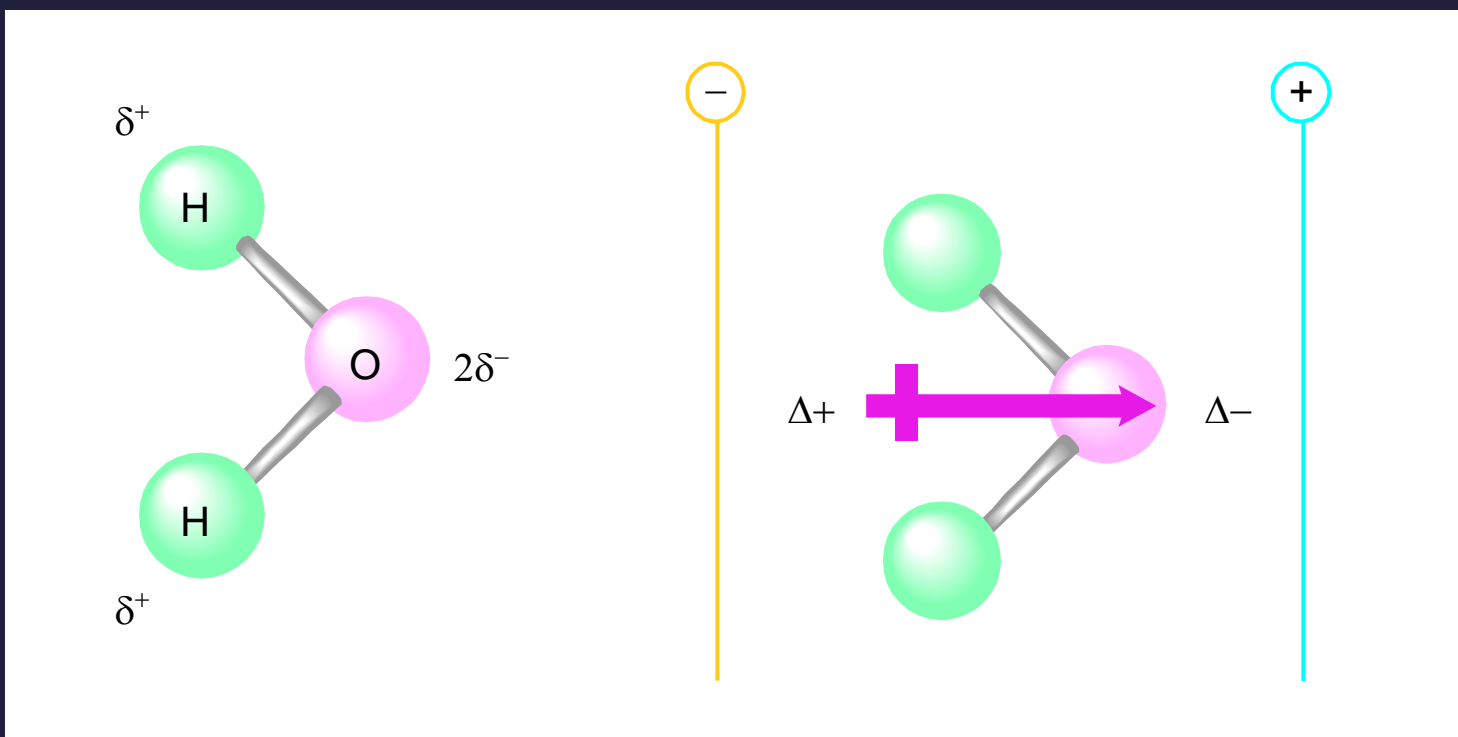
Polarność

wiązań i cząsteczek



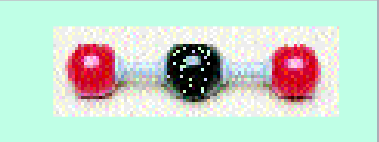
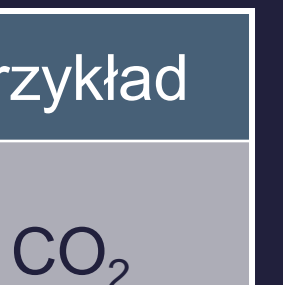

Polarność

wiązań i cząsteczek



Polarność

wiązań i cząsteczek

cząsteczka	budowa	przykład
AB_2		CO_2
AB_3		SO_3
AB_4		CCl_4

Cząsteczki symetryczne
- wiązania polarne
- moment dipolowy=0

Jony

Konfiguracja elektronowa



Jony

Konfiguracja elektronowa

Przykład przewidywanie rozmiarów jonów

jony izoelektronowe

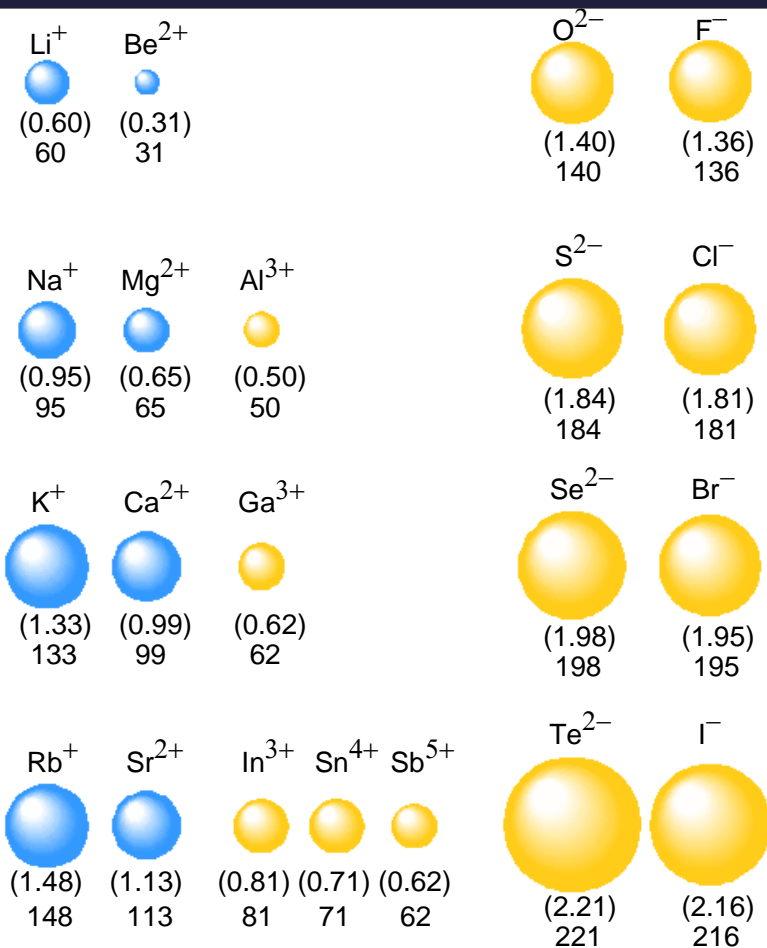


największy

najmniejszy

Jony

promień jonowy



Związki jonowe

Etapy tworzenia związku jonowego

1. Sublimacja metalu



2. Jonizacja metalu (I)



3. Dysocjacja niemetalu



4. Utworzenie anionu niemetalu (P):

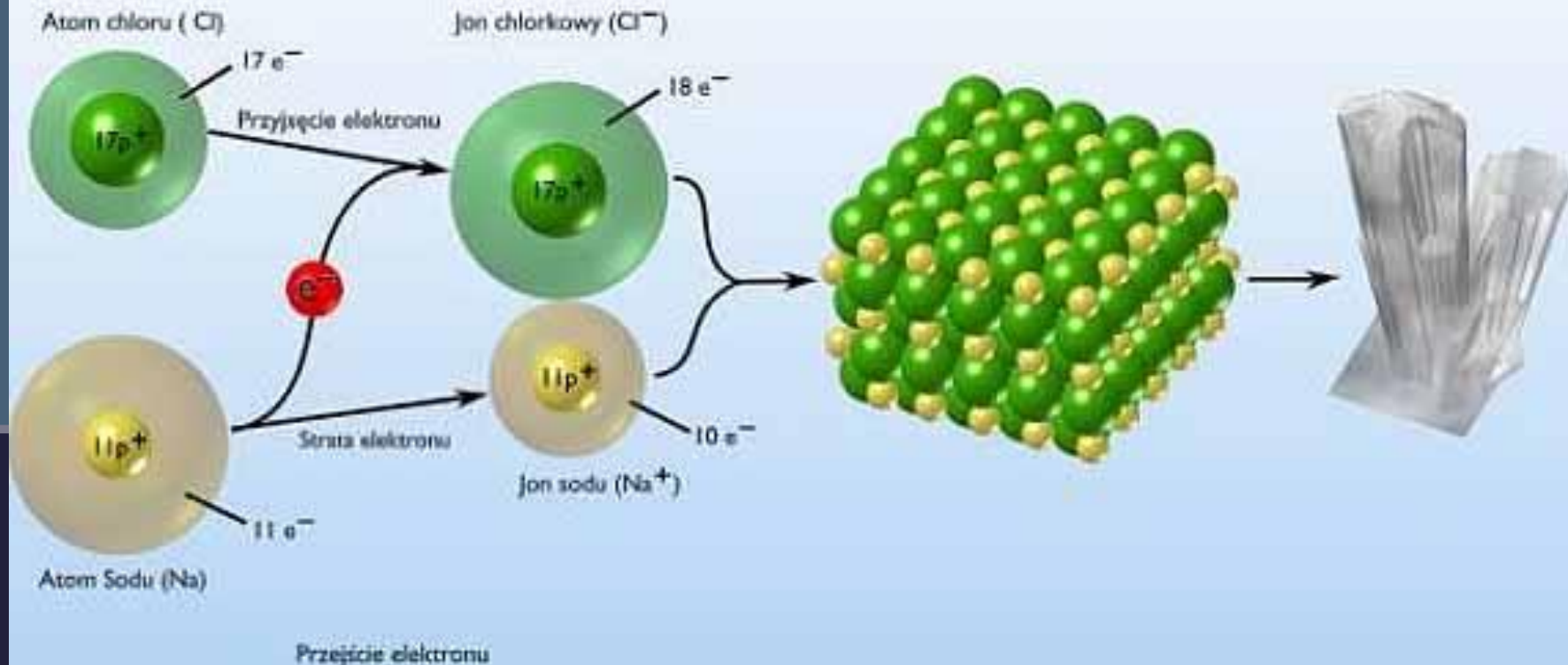


5. Utworzenie związku jonowego



Związki jonowe

Etapy tworzenia związku jonowego



Związki jonowe

Energia sieciowa

Zmiana energii podczas następującej przemiany:



Efekt energetyczny (z punktu widzenia układu) egzotermiczny

Związki jonowe

Energia sieciowa

$$\text{Energia sieciowa} = k \frac{Q_1 Q_2}{r}$$

oddziaływanie Coulombowskie

Q_1, Q_2 = ładunki jonów

r = minimalna odległość pomiędzy kationem i anionem

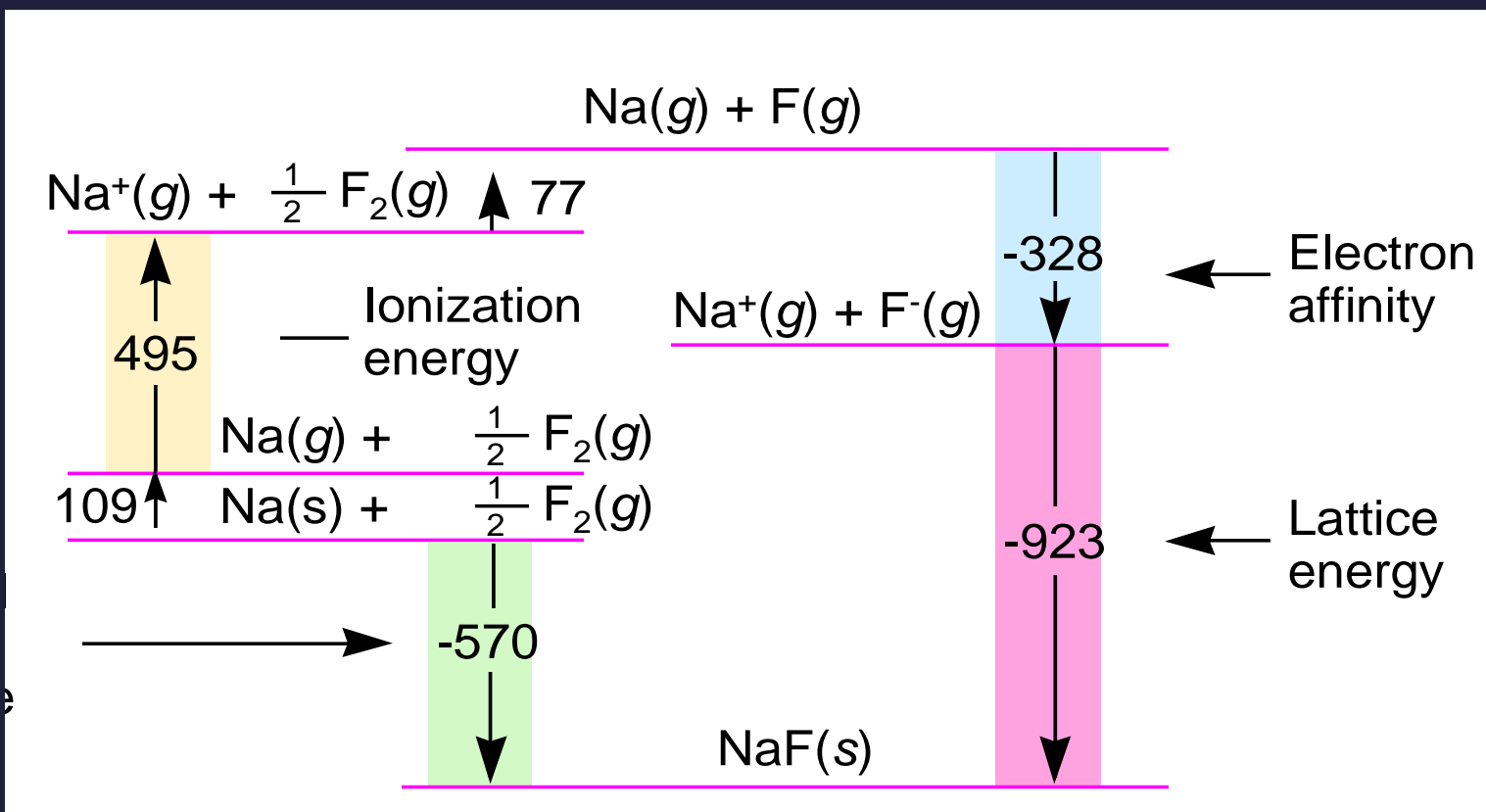
Związki jonowe

Przemiany energii podczas tworzenia NaF

$\text{Na(s)} \rightarrow \text{Na(g)}$	sublimacja	161
$\text{Na(g)} \rightarrow \text{Na}^+(\text{g}) + \text{e}^-$	jonizacja	495
$\frac{1}{2}\text{F}_2(\text{g}) \rightarrow \text{F(g)}$	dysocjacja	77
$\text{F(g)} + \text{e}^- \rightarrow \text{F}^-(\text{g})$	utworzenie anionu	-328
$\text{Na}^+(\text{g}) + \text{F}^-(\text{g}) \rightarrow \text{NaF(s)}$	reakcja	-923
<hr/>		
$\text{Na(s)} + \frac{1}{2}\text{F}_2(\text{g}) \rightarrow \text{NaF(s)}$		-570

Związki jonowe

Przemiany energii podczas tworzenia NaF



Związki jonowe

Przemiany energii podczas tworzenia MgO

