

9.kafli

Lögun sameinda og efnatengi

Kafli 9.1: Lögun sameinda

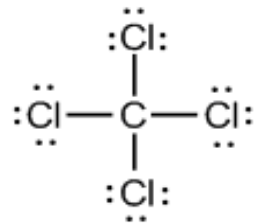
Kafli 9.2: VSEPR líkanið

Kafli 9.3: Lögun sameinda og skautun þeirra

9.1 Lögun sameinda

- Lewisbyggingar sameinda sýna hvaða atóm eru tengd hvert við annað og fjölda efnatengja.

- t.d. CCl_4

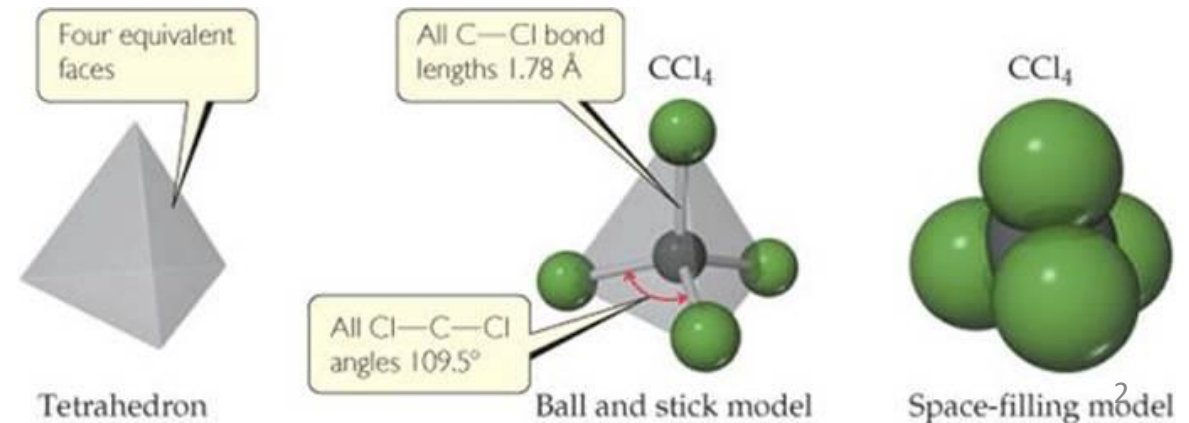


Lewisbygging CCl_4 sýnir eingöngu að fjögur Cl atóm er tengd með eintengjum við miðatómið C.

- Lewisbyggingar sýna **ekki** lögun sameinda.

- Lögun sameinda og stærð ákvarðast af tengihornum á milli efnatengja og fjarlægð á milli kjarna atóma.

- t.d. CCl_4 – Lögun þess er ferflötungur:



9.2 VSEPR líkanið

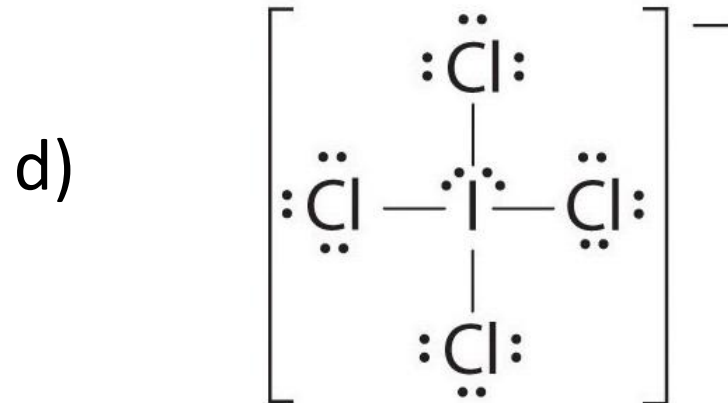
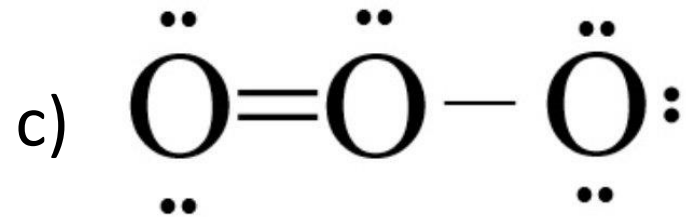
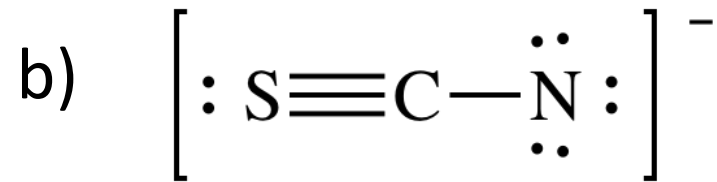
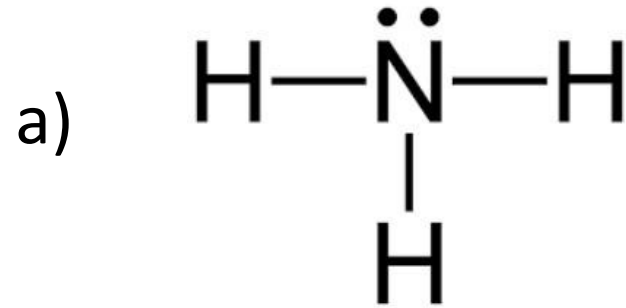
- Við notum VSEPR líkanið til að spá fyrir um lögun AB_n sameinda / sameindajóna.
 - A er miðjuatómið og svo eru n B atóm í kringum það.
- Þegar lögun AB_n sameinda / sameindajóna er ákvörðuð þarf að taka tillit til allra rafeinda í kringum miðjuatómið (A).
 - Það er, bæði til tengirafeinda (efnatengja) og ótengdra rafeindapara (frjálsra rafeindapara).

9.2 frh.

- Til þess að segja fyrir um lögun sameinda er gert ráð fyrir því að rafeindasvæði hrindi hvert öðru frá sér.
 - Rafeindasvæðin leita þá í stöðu sem gefur lágmarks fráhrindikraft á milli þeirra.
 - Þ.e. Rafeindasvæðin leita eins langt frá hvort öðru og hægt er.
 - Þetta kallast **VSEPR líkanið**.
- Rafeindasvæði:
 - Hvert eintengi telst sem eitt rafeindasvæði.
 - Hvert tvítengi telst sem eitt rafeindasvæði.
 - Hvert þrítengi telst sem eitt rafeindasvæði.
 - Hvert frjálst rafeindapar telst sem eitt rafeindasvæði.

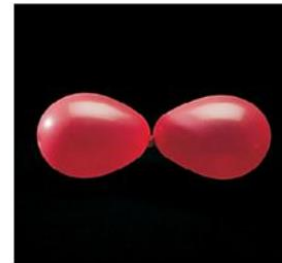
9.2 frh.

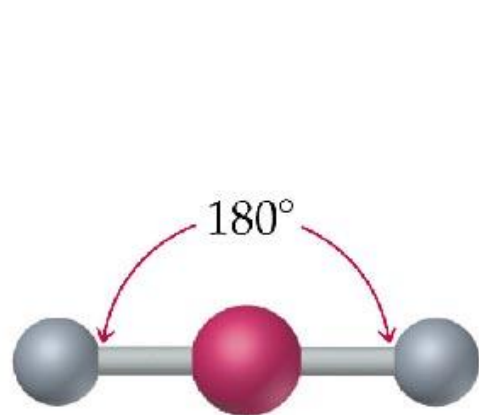
- Dæmi: Hvað hafa þessar sameindir / sameindajónir mörg rafeindasvæði?



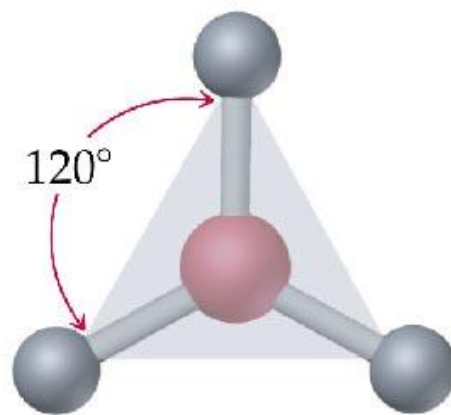
9.2 frh.

- Rafeindasvæðin raðast umhverfis miðatómið eins langt frá hvort öðru og hægt er til að lágmarka fráhrindikraft á milli þeirra.
- Það eru fimm grunnform í lögun AB_n sameinda / sameindajóna:
 - Línuleg
 - Þríhyrnd
 - Ferflötungur
 - Sexflötungur
 - Áttflötungur

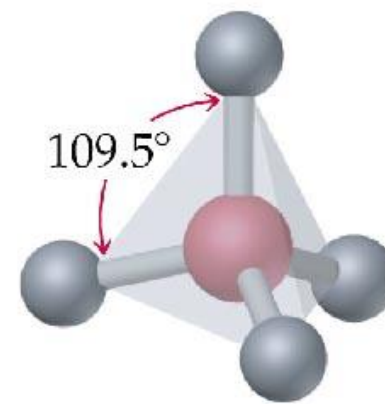




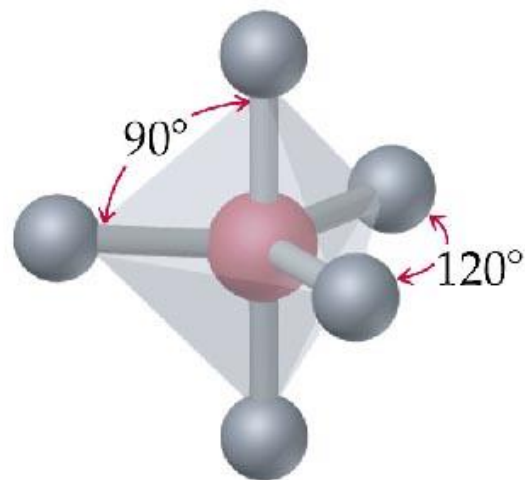
Línuleg



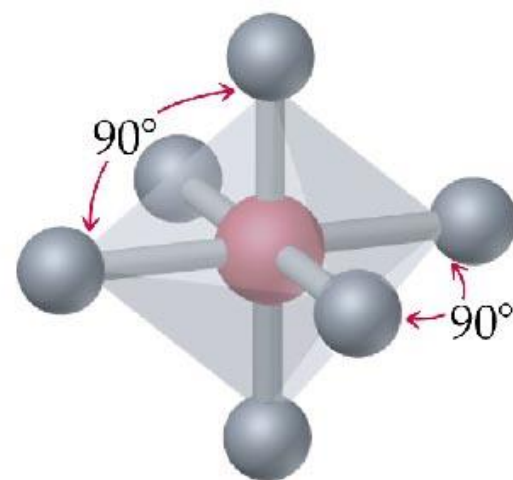
Þríhyrnd



Ferflata



Sexflata



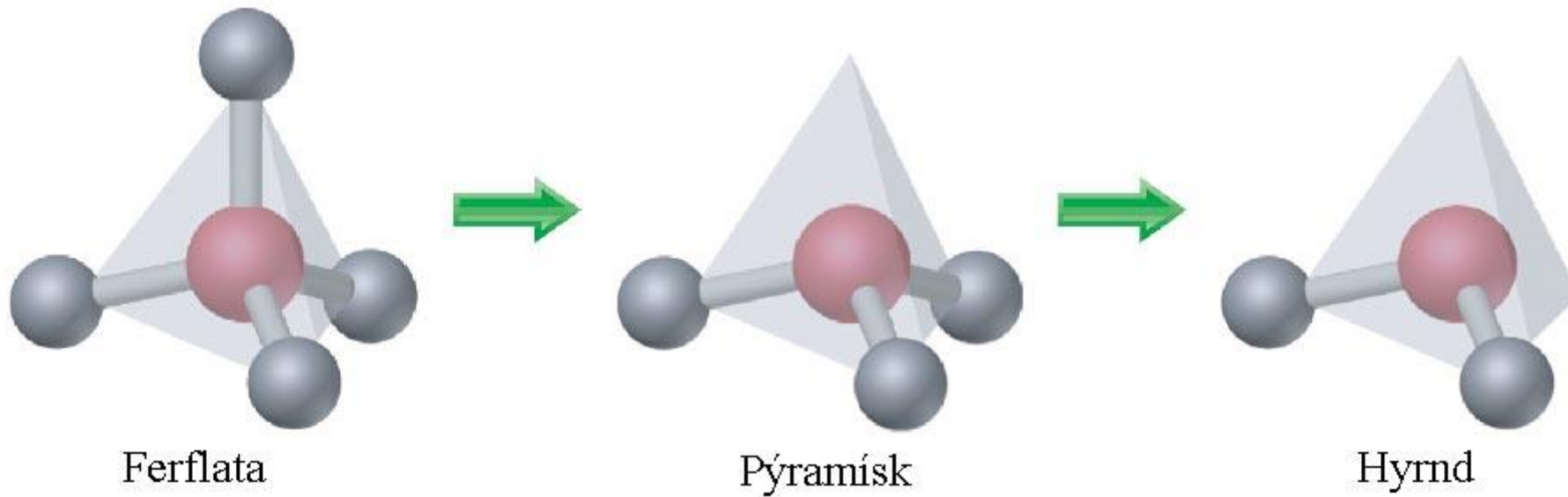
Áttflata

9.2 frh.

- Teiknum grunnformin fimm:

9.2 frh.

- Lögun allra AB_n sameinda / sameindajóna má leiða út frá einu af grunnformunum fimm.
 - t.d.



9.2 frh.

- Til að ákvarða lögun sameinda / sameindajóna þarf að fylgja nokkrum skrefum:
 1. Teiknaðu Lewisbyggingu sameindarinnar / -jónarinnar.
 2. Teldu heildarfjölda rafeindasvæða umhverfis miðatómið.
 3. Ákvarðaðu afstöðu rafeindasvæða.
 - Það er, raðaðu rafeindasvæðunum í kringum miðatómið samkvæmt viðeigandi grunnformi þannig að rafeindasvæðin séu eins langt frá hvort öðru og hægt er.
 4. Ákvarðaðu lögun sameindarinnar.
 - Það er, slepptu „tengjunum“ á frjálsu rafeindapörunum og settu þau við miðatómið. Efnatengin við atómin halda sér óbreytt.

TABLE 9.2 Electron-Domain Geometries and Molecular Shapes for Molecules with Two, Three, and Four Electron Domains Around the Central Atom

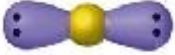
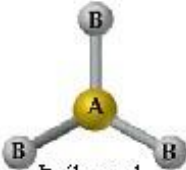
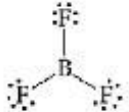
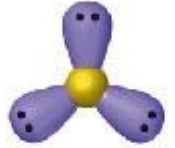
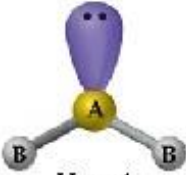
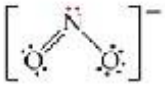
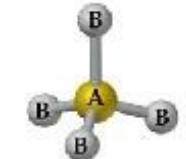
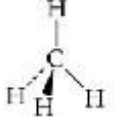
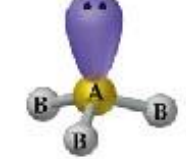
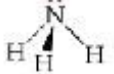
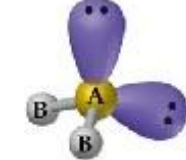
Number of Electron Domains	Electron-Domain Geometry	Bonding Domains	Nonbonding Domains	Molecular Geometry	Example
2	 Línuleg	2	0	 Línuleg	$\ddot{\text{O}}=\text{C}=\ddot{\text{O}}$
		3	0	 Þríhyrnd	
3	 Þríhyrnd	2	1	 Hyrnd	
		4	0	 Ferflata	
4	 Ferflata	3	1	 Pýramísk	
		2	2	 Hyrnd	

TABLE 9.3 Electron-Domain Geometries and Molecular Shapes for Molecules with Five and Six Electron Domains Around the Central Atom

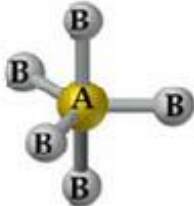
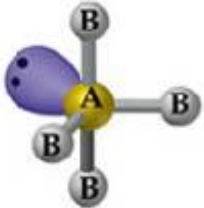
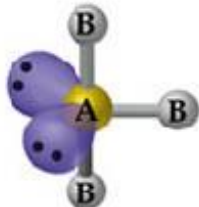
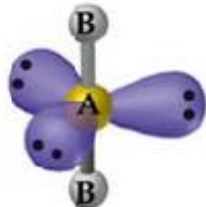
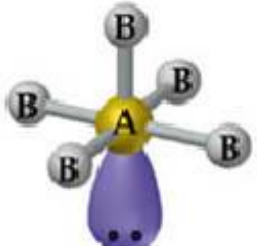
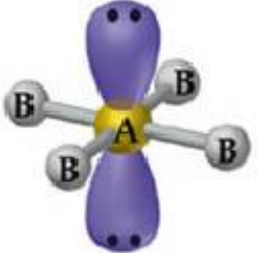
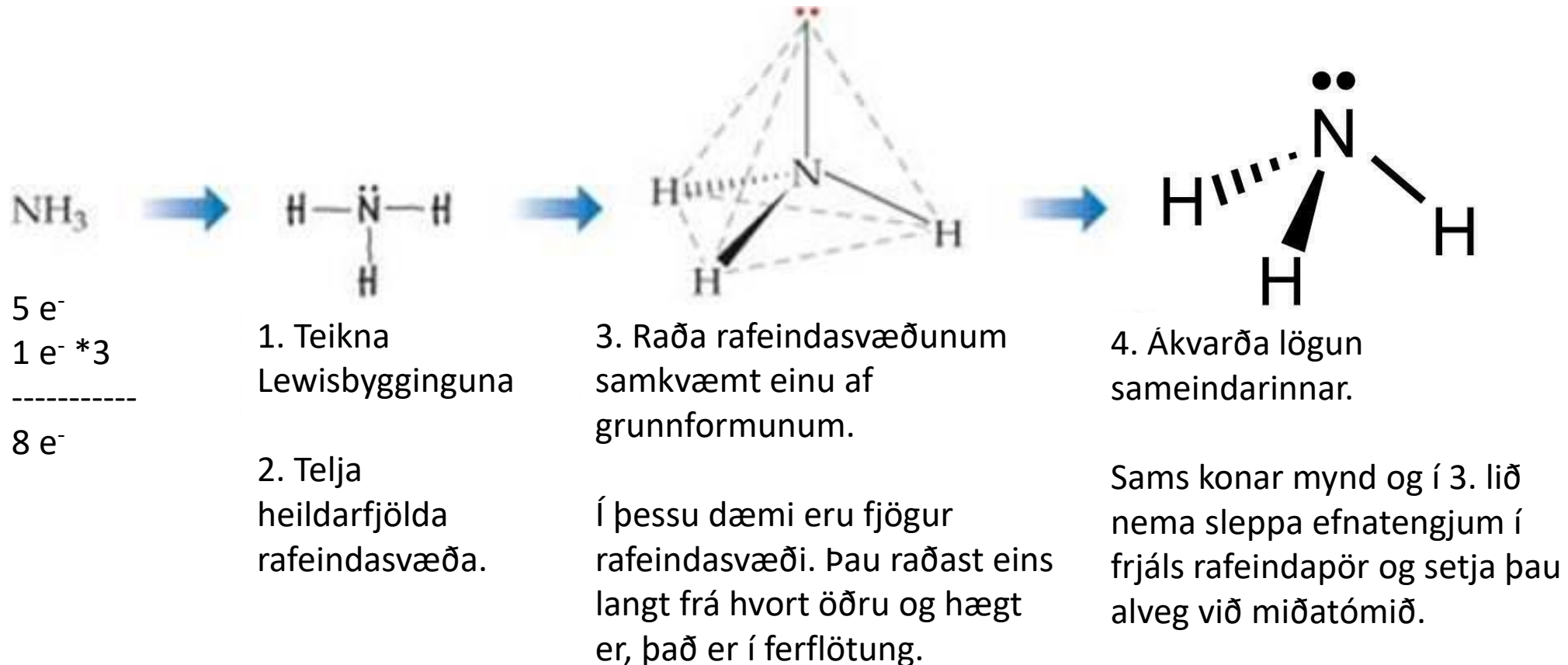
Rafeinda- pör	Afstaða rafeindapara	Tengi- pör	Ótengd pör	Lögun sameindar	Dæmi
5	 Sexflata	5	0	 Sexflata	PCl_5
		4	1	 Vegasaltlögun	SF_4
		3	2	 T-lögun	ClF_3
		2	3	 Línulegt	XeF_2

TABLE 9.3 Electron-Domain Geometries and Molecular Shapes for Molecules with Five and Six Electron Domains Around the Central Atom

Rafeindapör	Afstaða rafeindapara	Tengd rafeindapör	Ótengd rafeindapör	Lögun sameindar	Dæmi
6	 Áttflata	6	0	 Áttflata	SF_6
		5	1	 Pýramísk	BrF_5
		4	2	 Ferningslaga	XeF_4

9.2 frh.

- Dæmi: Skoðum hvernig VSEPR líkanið er notað til að ákvarða lögun NH_3



9.2 frh.

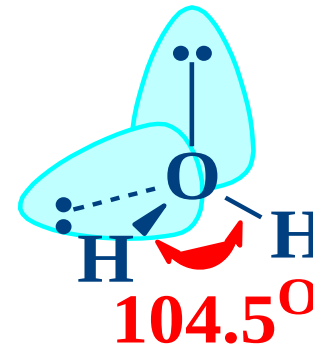
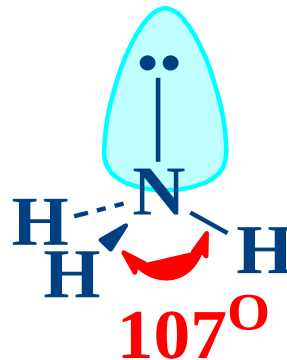
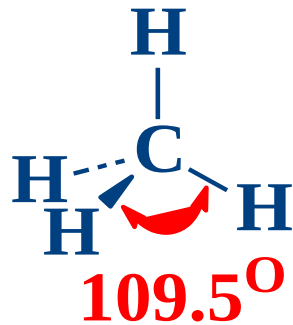
- Dæmi: Notaðu VSEPR líkanið til að ákvarða lögun eftirtalinna sameinda / sameindajóna:



9.2 frh.

Áhrif frjálsra rafeindapara og fjöltengja á tengihorn

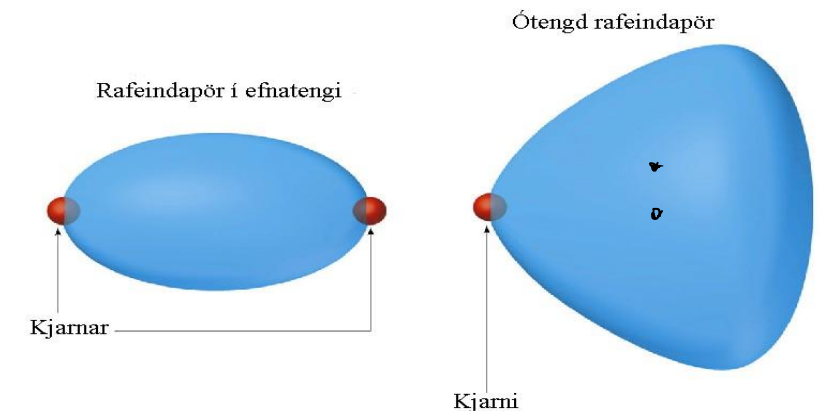
- Tengihorn minnka þegar fjöldi frjálsra rafeindapara eykst.
 - t.d.



9.2 frh.

Áhrif frjálsra rafeindapara og fjöltengja á tengihorn

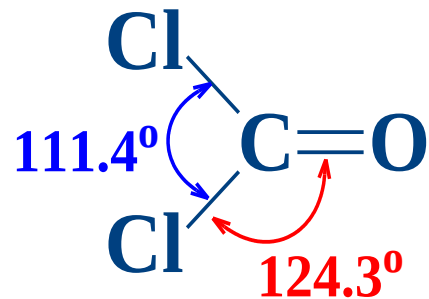
- Ástæðan fyrir því að tengihorn minnka með auknum fjölda frjálsra rafeindapara:
 - Rafeindapar í tengi dregst að tveimur kjörnum en frjálst rafeindapar dregst aðeins að einum kjarna.
 - Frjáls rafeindapör dreifast því yfir stærra svæði sem leiðir til aukins fráhrindikrafts og því verða tengihornin minni.



9.2 frh.

Áhrif frjálsra rafeindapara og fjöltengja á tengihorn

- Fjöltengi hafa meiri rafeindapéttleika en eintengi og því eru rafeindasvæði þeirra stærri en rafeindasvæði eintengja.
 - Rafeindasvæði fjöltengja hafa þannig meiri fráhrindikraft en rafeindasvæði eintengja.
 - t.d.

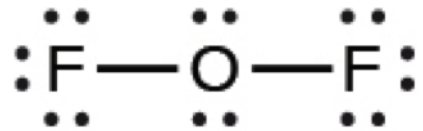


Þrjú rafeindasvæði, þríhyrnd lögun. Vanalega eru tengihornin 120° en tvítengið hefur meiri fráhrindikraft (tekur meira pláss) og tengihornin breytast þar af leiðandi.

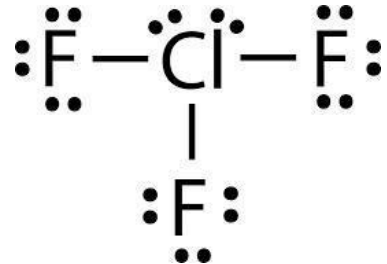
9.2 frh.

Dæmi: Hver er lögun sameindanna /-sameindajónanna og spáðu fyrir um tengihornin:

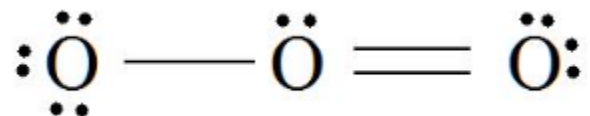
a)



b)



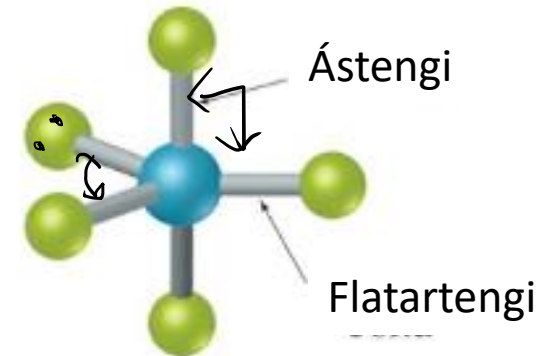
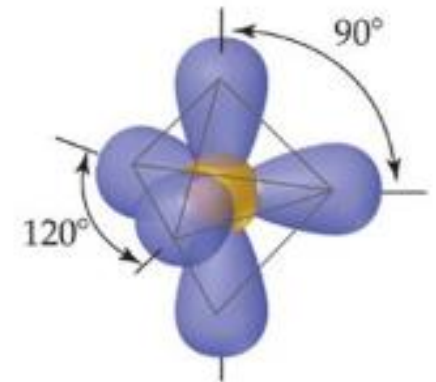
c)



9.2 frh.

Sameindir með fleiri en fjögur rafeindasvæði: AB_5 og AB_6

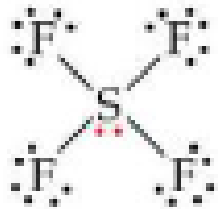
- AB_5 sameindir: Grunnformið er sexflötungur.
 - Þrjú rafeindasvæði í plani (á flatartengi), en tvö rafeindasvæði fyrir ofan og neðan planið (á ástengi).
- Til að fráhrindikraftar á milli rafeindapara séu í lágmarki, þá eru frjáls rafeindapör ætíð á flatartengi.



9.2 frh.

Sameindir með fleiri en fjögur rafeindasvæði: AB_5 og AB_6

- Skoðum SF_4 sem dæmi um sameind með fimm rafeindasvæði:



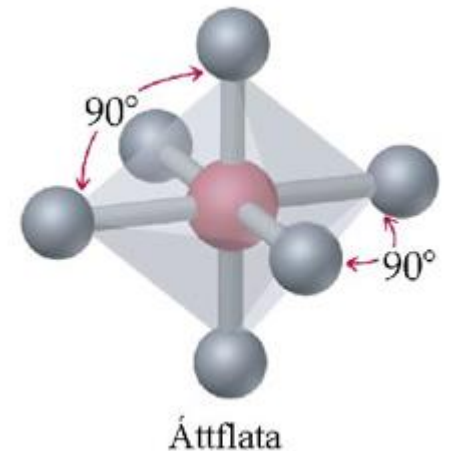
- Lögun SF_4 er vegasaltslögun:



9.2 frh.

Sameindir með fleiri en fjögur rafeindasvæði: AB_5 og AB_6

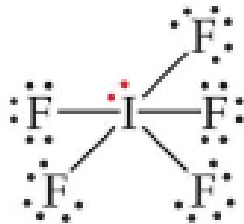
- AB_6 sameindir: Grunnformið er áttflötungur.
 - Fjögur rafeindasvæði í plani (á flatartengi), en tvö rafeindasvæði fyrir ofan og neðan planið (á ástengi).
- Til að fráhrindikraftar á milli rafeindapara séu í lágmarki:
 - Ef eitt fráls rafeindapar er til staðar, þá skiptir staðsetningin ekki máli þar sem öll tengihorn eru 90° .
 - Ef tvö frjáls rafeindapör eru til staðar, þá eru þau beint á móti hvort öðru (vísa í 180°).



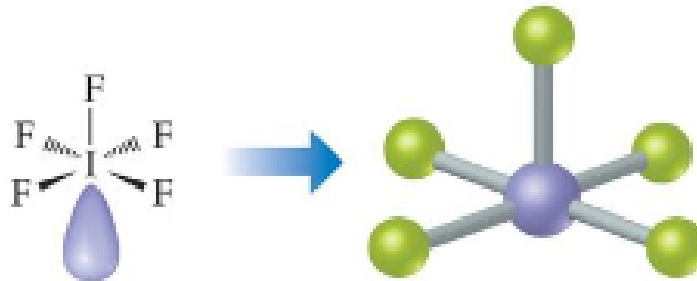
9.2 frh.

Sameindir með fleiri en fjögur rafeindasvæði: AB_5 og AB_6

- Skoðum IF_5 sem dæmi um sameind með sex rafeindasvæði:



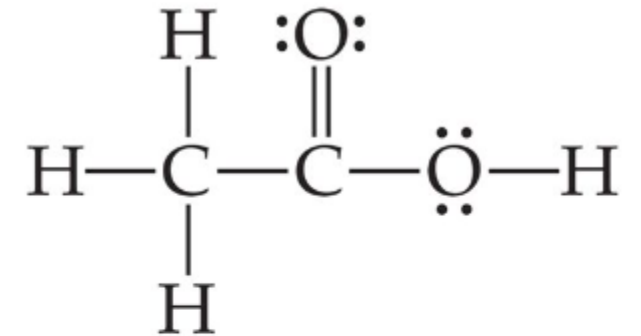
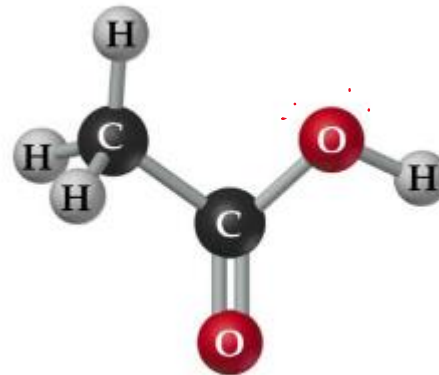
- Lögun IF_5 er pýramísk:



9.2 frh.

Lögun stærri sameinda

- Fyrir stærri sameindir ræður hvert atóm (miðatóm) í megindráttum afstöðu sinna tengja.
 - T.d. Ediksýra, CH_3COOH



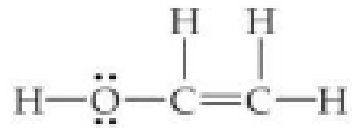
Fjöldi rafeindasvæða	4	3	4
Afstæða rafeindasvæða	Ferflötungur	Þríhyrnd lögun	Ferflötungur
Áætluð tengihorn	109.5°	120°	109.5°

9.2 frh.

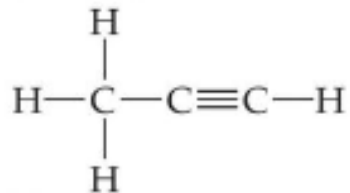
Lögun stærri sameinda

Dæmi: Reyndu að meta lögun eftirfarandi sameinda:

a)



b)



9.3 Lögun sameinda og skautun þeirra

- Þegar atóm með mismunandi rafdrægni eru tengd saman, þá er efnatengið skautað.
 - Munum: Ef mismunur í rafdrægni á milli tveggja atóma í efnatengi er ≤ 2 er efnatengið skautað.
- Ef sameind hefur fleiri en tvö atóm er tvískautsvægi sameindarinnar (heildarskautun sameindarinnar) háð bæði:
 - Skautun einstakra efnatengja.
 - Lögun sameindarinnar.

Rafdrægnitafla

– Til að meta skautun einstakra efnatengja –

1 H 2.1																
3 Li 1.0	4 Be 1.5											5 B 2.0	6 C 2.5	7 N 3.0	8 O 3.5	9 F 4.0
11 Na 0.9	12 Mg 1.2											13 Al 1.5	14 Si 1.8	15 P 2.1	16 S 2.5	17 Cl 3.0
19 K 0.8	20 Ca 1.0	21 Sc 1.3	22 Ti 1.5	23 V 1.6	24 Cr 1.6	25 Mn 1.5	26 Fe 1.8	27 Co 1.9	28 Ni 1.9	29 Cu 1.9	30 Zn 1.6	31 Ga 1.6	32 Ge 1.8	33 As 2.0	34 Se 2.4	35 Br 2.8
37 Rb 0.8	38 Sr 1.0	39 Y 1.2	40 Zr 1.4	41 Nb 1.6	42 Mo 1.8	43 Tc 1.9	44 Ru 2.2	45 Rh 2.2	46 Pd 2.2	47 Ag 1.9	48 Cd 1.7	49 In 1.7	50 Sn 1.8	51 Sb 1.9	52 Te 2.1	53 I 2.5
55 Cs 0.7	56 Ba 0.9	57 La 1.1	72 Hf 1.3	73 Ta 1.5	74 W 1.7	75 Re 1.9	76 Os 2.2	77 Ir 2.2	78 Pt 2.2	79 Au 2.4	80 Hg 1.9	81 Tl 1.8	82 Pb 1.9	83 Bi 1.9	84 Po 2.0	85 At 2.2
87 Fr 0.7	88 Ra 0.9	89 Ac 1.1														

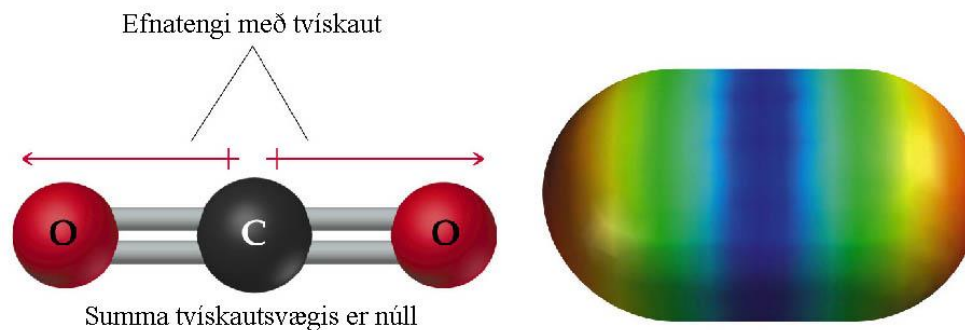
Increasing →

Decreasing ↓

Electronegativities of the Elements

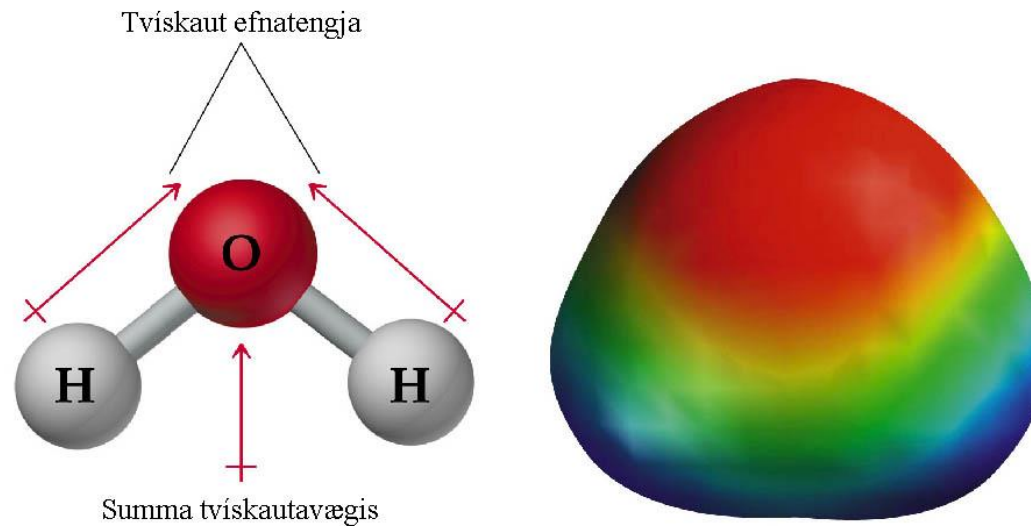
9.3 frh.

- Tvískaut er vigurstærð, þ.e. hefur stærð og átt.
- Heildartvískautsvægi (heildarskautun) sameindar er vigursumma einstrakra tvískauta í sameindinni.
 - T.d. CO_2 . Línuleg sameind. Hvort efnatengið fyrir sig er skautað en summa tvískautsvægis er núll þannig að sameindin í heild sinni er óskautuð.



9.3 frh.

- Skoðum annað dæmi, H_2O . Hyrnd sameind. Hvort efnatengið um sig er skautað og summa tvískautsvægis er ekki núll þannig að sameindin í heild sinni er skautuð.

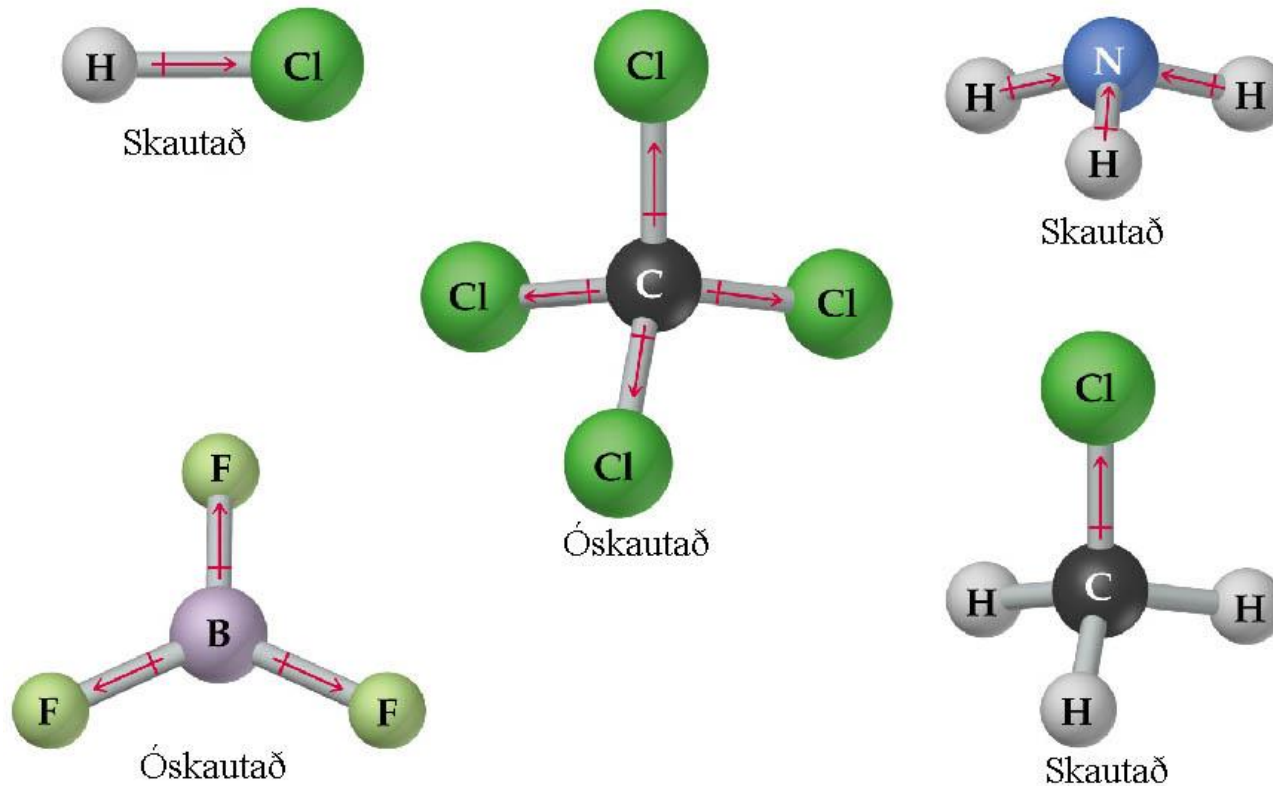


9.3 frh.

- Nokkrar tegundir AB_n sameinda, sem hafa öll B atómin eins, eru alltaf óskautaðar þó að í sameindunum séu skautuð efnatengi.
 - Lögun sameindanna gerir það að verkum að summa tvískautsvægis í sameindunum er núll og sameindirnar í heild sinni því óskautaðar:
 - AB_2 (línulegar sameindir)
 - AB_3 (þríhyrndar sameindir)
 - AB_4 (ferflata og ferningslaga sameindir)
 - AB_5 (sexflata sameindir)
 - AB_6 (áttflata sameindir)

9.3 frh.

- Dæmi um sameindir sem allar hafa skautuð efnatengi en aðeins sumar þeirra eru skautaðar í heild sinni:



9.3 frh.

- Dæmi: Spáðu fyrir um hvert eftirtaldar sameindir séu skautaðar í heild sinni eða ekki:

a) BrCl

b) SO_2

c) SF_6

d) NF_3

e) BCl_3

f) IF_5

g) XeF_4

Rafdrægnitafla

– Til að meta skautun einstakra efnatengja –

1 H 2.1																
3 Li 1.0	4 Be 1.5											5 B 2.0	6 C 2.5	7 N 3.0	8 O 3.5	9 F 4.0
11 Na 0.9	12 Mg 1.2											13 Al 1.5	14 Si 1.8	15 P 2.1	16 S 2.5	17 Cl 3.0
19 K 0.8	20 Ca 1.0	21 Sc 1.3	22 Ti 1.5	23 V 1.6	24 Cr 1.6	25 Mn 1.5	26 Fe 1.8	27 Co 1.9	28 Ni 1.9	29 Cu 1.9	30 Zn 1.6	31 Ga 1.6	32 Ge 1.8	33 As 2.0	34 Se 2.4	35 Br 2.8
37 Rb 0.8	38 Sr 1.0	39 Y 1.2	40 Zr 1.4	41 Nb 1.6	42 Mo 1.8	43 Tc 1.9	44 Ru 2.2	45 Rh 2.2	46 Pd 2.2	47 Ag 1.9	48 Cd 1.7	49 In 1.7	50 Sn 1.8	51 Sb 1.9	52 Te 2.1	53 I 2.5
55 Cs 0.7	56 Ba 0.9	57 La 1.1	72 Hf 1.3	73 Ta 1.5	74 W 1.7	75 Re 1.9	76 Os 2.2	77 Ir 2.2	78 Pt 2.2	79 Au 2.4	80 Hg 1.9	81 Tl 1.8	82 Pb 1.9	83 Bi 1.9	84 Po 2.0	85 At 2.2
87 Fr 0.7	88 Ra 0.9	89 Ac 1.1														

Increasing →

Decreasing ↓

Electronegativities of the Elements