

# CHEMISTRY

The Central Science  
9th Edition


## Kaflí 9

### Lögun sameinda og efnatengi

David P. White

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kaflí 9  
Glera 1




## Lögun sameinda

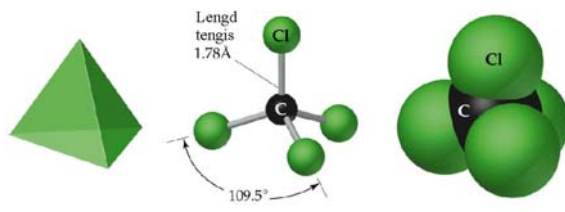
- Lewisbygging sameindar sýnir efnatengi á milli atóma, byggingin sýnir hvaða atóm eru tengd hvert við annað.
- Hornin milli efnatengja gefa upplýsingar um lögun sameindar.
- Athugaðu  $\text{CCl}_4$ : Með mælingum finnst að hornið á milli allra Cl-C-Cl tengja er  $109,5^\circ$ .
  - Þar með geta atómin í sameindinni ekki verið öll í sama fleti.
  - Öll klóratómin eru í hornum ferflötungs með kolefnisatómið í miðjunni.

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kaflí 9  
Glera 2



## Lögun sameinda




Lengd tengis 1,78Å

109,5°

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kaflí 9  
Glera 3

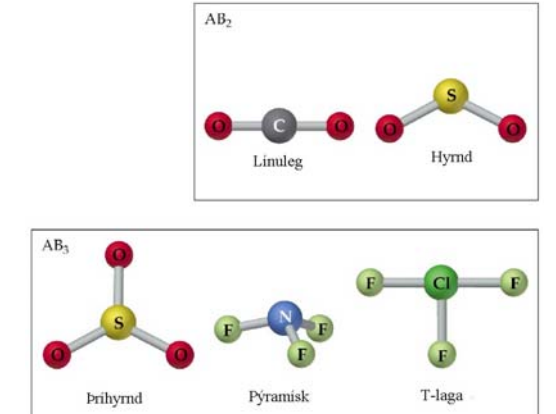


## Lögun sameinda

- Til að segja fyrir um lögun sameinda er gert ráð fyrir að þör gildisrafeinda hrindi hvert öðru frá sér. Rafeindapörin leita í þá stöðu sem gefur lágmarks fráhrindikraft á milli þeirra.
- Þetta er nefnt rafeindaparfráhrindikenning. „Valence Shell Electron Pair Repulsion (VSEPR).“
- Þá er einfaldasta lögun  $\text{AB}_2$  og  $\text{AB}_3$  sameinda.

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kaflí 9  
Glera 4



$\text{AB}_2$

Linuleg

Hyrnd

$\text{AB}_3$


Þrihyrmd

Pýramísk

T-laga

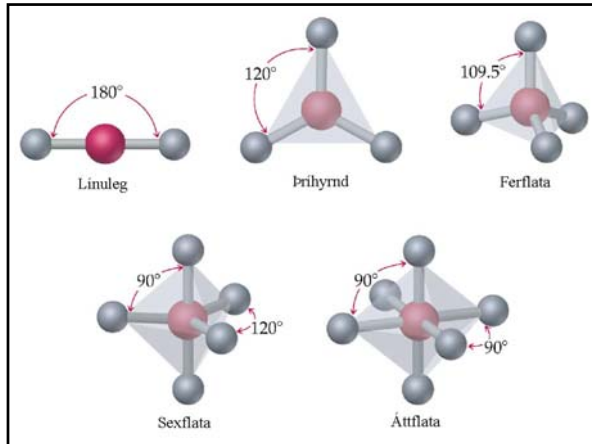
## Lögun sameinda

- Það eru fimm meginform í lögun sameinda:



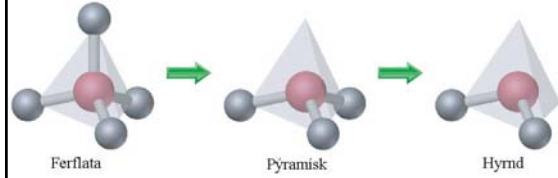
Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kaflí 9  
Glera 6



## Lögun sameinda

- Þegar lögun sameindar er ákvörðuð þarf að taka tillit til allra rafeinda bæði tengirafeinda og ótengdra para.
- Þegar lögun sameindar er gefið nafn er aðeins horft til stöðu atóma.



## VSEPR líkanið

- Við ákvörðun á lögun sameinda er gerður greinarmunur á ótengdum rafeindapörum og rafeindapörum í efnatengjum.
- Lögun sameindar fæst með því að ákveða stöðu allra svæða sem rafeindapör eru í.
- Rafeindasvæðin radast umhverfis miðatómið þannig að fráhrindikraftar á milli þeirra séu í lágmarki.

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kaflí 9  
Glera 9

TABLE 9.1 Electron-Domain Geometries as a Function of the Number of Electron Domains

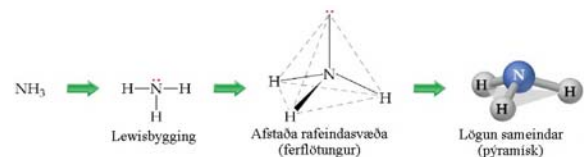
Fjöldi rafeindasvæða	Staða rafeindasvæða	Lögun sameindar	Horn á milli rafeindasvæða
2		Linuleg	$180^\circ$
3		Þrihyrmd	$120^\circ$
4		Ferflata	$109.5^\circ$

TABLE 9.1 Electron-Domain Geometries as a Function of the Number of Electron Domains

Fjöldi rafeindasvæða	Staða rafeindasvæða	Lögun sameindar	Horn á milli rafeindasvæða
5		Sexflata	$120^\circ$ $90^\circ$
6		Áttflata	$90^\circ$

## VSEPR líkanið

- Að ákvarða stöðu rafeindapara:
  - Teiknaðu Lewisbyggingu.
  - Teldu heildarfjölda rafeindapara umhverfis miðatómið.
  - Skipaðu rafeindasvæðunum þannig að lágmarks fráhrindikraftar séu á milli þeirra, tví- og þrítengi eru eitt rafeindasvæði.



**TABLE 9.2 Electron Domains, 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	Linear	2	0	Linear	$[\text{C}=\text{C}]$
3	Trigonal planar	3	0	Trigonal planar	$\text{BF}_3$
3	Trigonal planar	2	1	Bent	$[\text{O}=\text{C}=\text{O}]$
4	Tetrahedral	4	0	Tetrahedral	$\text{CH}_4$
4	Tetrahedral	3	1	Trigonal pyramidal	$\text{NH}_3$
4	Tetrahedral	2	2	Bent	$\text{H}_2\text{O}$

**VSEPR líkanið**

**VSEPR líkanið**

**Áhrif ótengdra rafeindapara og fjöltengja á horn milli tengja**

- Staða rafeindasvæða ræðst af fjölda þeirra.
- Staða atóma í sameind er lögun hennar.
- Ótengd rafeindapör eru ekki hluti af lögum sameindar.
- Sé áttureglu fullnægt hjá atómi þá er staða rafeindapara hjá því ferflötungur.

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kaflí 9  
Glera 14

**VSEPR líkanið**

**Áhrif ótengdra rafeindapara og fjöltengja á horn milli tengja**

- Samkvæmt mælingum fer hornið milli tengja í vetni minnkandi hjá efnunum:  $\text{CH}_4$ ,  $\text{NH}_3$  og  $\text{H}_2\text{O}$ .

- Þar sem rafeindapar í tengi dregst að tveimur kjörnum þá er fráhrindikraftur þess minni en frá ótengdu rafeindapari.
- Hornið minnkar með vaxandi fjölda ótengdra para.

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kaflí 9  
Glera 15

**VSEPR líkanið**

**Áhrif ótengdra rafeindapara og fjöltengja á horn milli tengja**

Ótengd rafeindapör

Rafeindapör í efnatengi

Kjarnar

Kjarni

**VSEPR líkanið**

**Áhrif ótengdra rafeindapara og fjöltengja á horn milli tengja**

- Rafeindir í tví- og þrítengi hafa sterkari fráhrindikraft en rafeindir í eintengi.

111.4°

124.3°

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kaflí 9  
Glera 17

**VSEPR líkanið**

**Sameindir með fleiri en fjögur rafeindapör**

- Atóm geta haft fleiri en fjögur rafeindasvæði. Algengust eru fimm,  $\text{AB}_5$ , sem mynda sexflötung og sex  $\text{AB}_6$ , sem mynda áttflötung.
- Hjá sexflötungi eru þrjú rafeindapör í plani en fjórða og fimmta eru ofan og neðan við planið.
- Hjá áttflötungi eru fjögur rafeindapör í plani en fimmta og sjötta eru ofan og neðan við planið.

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kaflí 9  
Glera 18

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










Rafeindapör	Afstaða rafeindapara	Tengi-pör	Ótengd pör	Lögun sameindar	Dæmi
5	 Sexflata	5	0	 Sexflata	$\text{PCl}_5$
		4	1	 Vegasaltlögun	$\text{SF}_4$
		3	2	 T-lögun	$\text{ClF}_3$
		2	3	 Línulegt	$\text{XeF}_2$

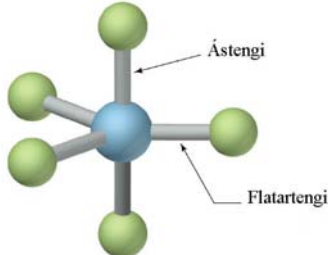
TABLE 9.3 Electron-Domain Geometries and Molecular Shapes for Molecules with Five and Six Electron Domains Around the Central Atom

Rafeindapör	Afstaða rafeindapara	Tengd rafeindapör	Ótengd rafeindapör	Lögun sameindar	Dæmi
6	 Áttflata	6	0	 Áttflata	$\text{SF}_6$
		5	1	 Pýramísk	$\text{BrF}_5$
		4	2	 Ferningslaga	$\text{XeF}_4$

### VSEPR líkanið

Sameindir með fleiri en fjögur rafeindapör

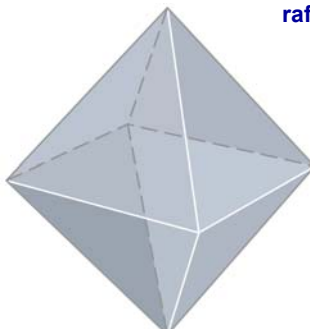
- Til að fráhrindikraftar milli rafeindapara séu í lágmarki þá eru ótengd rafeindapör ætíð í plani þríhyrningsins.



Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

### VSEPR líkanið

Sameindir með fleiri en fjögur rafeindapör

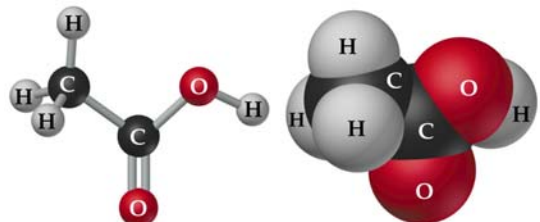


Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

### VSEPR líkanið

Lögun stærri sameinda

- Í ediksýru,  $\text{CH}_3\text{COOH}$ , eru þrjú miðatóm.
- Hvert atóm ræður í megindráttum afstöðu sinna tengja.



Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

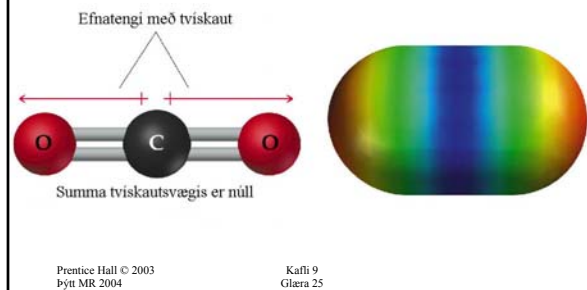
### Lögun sameinda og skautun þeirra

- Þegar atóm með mismunandi rafdrægni eru tengd þá er tengið skautað.
- Sameindir geta verið óskautaðar þó að í þeim séu skautuð efnatengi.
- Skautun í efnatengjum  $\text{CO}_2$  veða hvor aðra upp vegna þess að sameindin er línuleg.

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kaflí 9  
Glaera 24

## Lögun sameinda og skautun þeirra



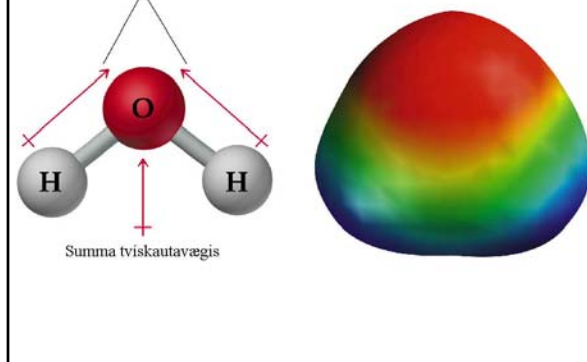
## Lögun sameinda og skautun þeirra

- Í vatnssameind er summa skautunar ekki núll vegna þess að sameindin er ekki línuleg.
- Vatnssameind er skautuð.

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kaflí 9  
Glera 26

Tvískaut efnatengja



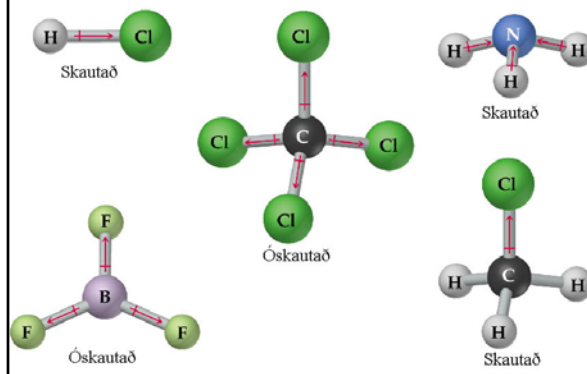
## Lögun sameinda og skautun þeirra

- Skautun sameinda er háð lögun þeirra.

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kaflí 9  
Glera 28

## Lögun sameinda og skautun þeirra



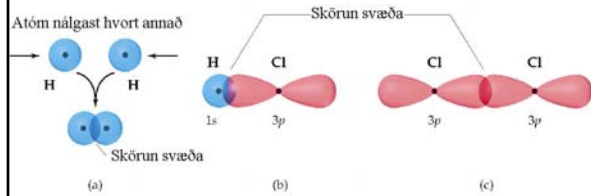
## Samgild efnatengi og skörun svigrúma

- Lewisbygging og VSEPR útskýra ekki hvers vegna efnatengi myndast.
- Skammtafræði er notuð til að sýna fram á tilvist efnatengja.
- Hvað með svigrúmin sem koma við sögu í efnatengi?
- Notuð er kenningin um tengingu gildissvigrúma:
  - Tengir myndast þegar svigrúm skarast.
  - Það eru tvær rafeindir með gagnstæðan spuna í svigrúmum sem skarast.

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kaflí 9  
Glera 30

## Samgild efnatengi og skörun svigrúma



Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kaflí 9  
Glaera 31

## Samgild efnatengi og skörun svigrúma

- Þegar atóm nálgast hvort annað skarast svigrúm þeirra.
- Þegar skörun eykst minnkar orkan í samspili atómanna.
- Við ákveðna fjarlægð atóma nær orkan lágmarki sá fjarlægð er lengd efnatengis.
- Þegar atómin nálgast meir byrja kjarnarnir að hrinda hvor öðrum frá sér og orkan eykst.

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

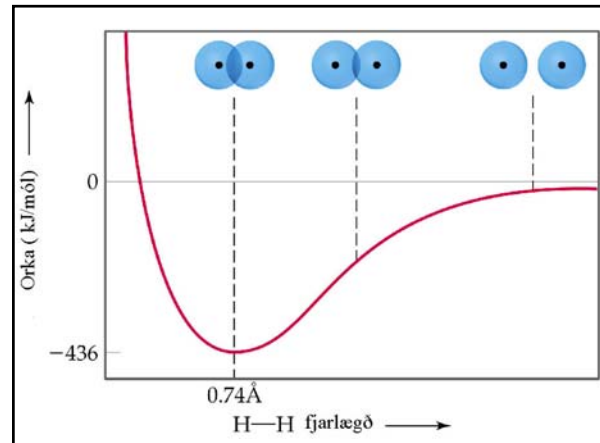
Kaflí 9  
Glaera 32

## Samgild efnatengi og skörun svigrúma

- Þegar fjarlægð milli kjarna er jöfn lengd efnatengis þá eru aðdráttarkraftar milli kjarna og rafeinda jafnstærkir og fráhrindikraftar milli kjarnanna og milli rafeindanna.

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kaflí 9  
Glaera 33



Greinum 9.5 til 9.8 er sleppt  
Dæmi 9.1, 9.3, 9.5, 9.7, 9.9, 9.11, 9.15, 9.17,  
9.19, 9.25, 9.27 og 9.29

## Lok 9. kafla Lögun sameinda og efnatengi

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kaflí 9  
Glaera 35