VSEPR 모형

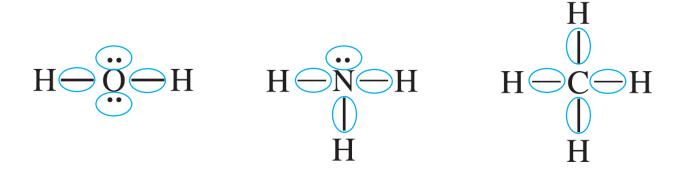
https://www.youtube.com/watch?v=Moj85zwdULg&t=15s

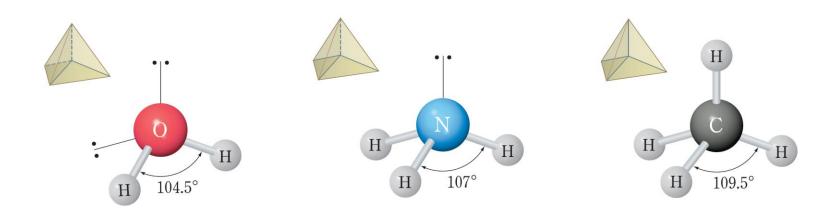
: 원자가 전자쌍

(전하 구름)

VSEPR 모형(valence shell electron pair repulsion model)

- '원자가 껍질 전자쌍 반발' 모형
- 분자 구조상 중심 원자의 원자가에 있는 음극을 띠는 전자쌍들끼리 서로 반발한다는 원리
- 분자의 입체적인 모양(기하 구조) 예측 가능



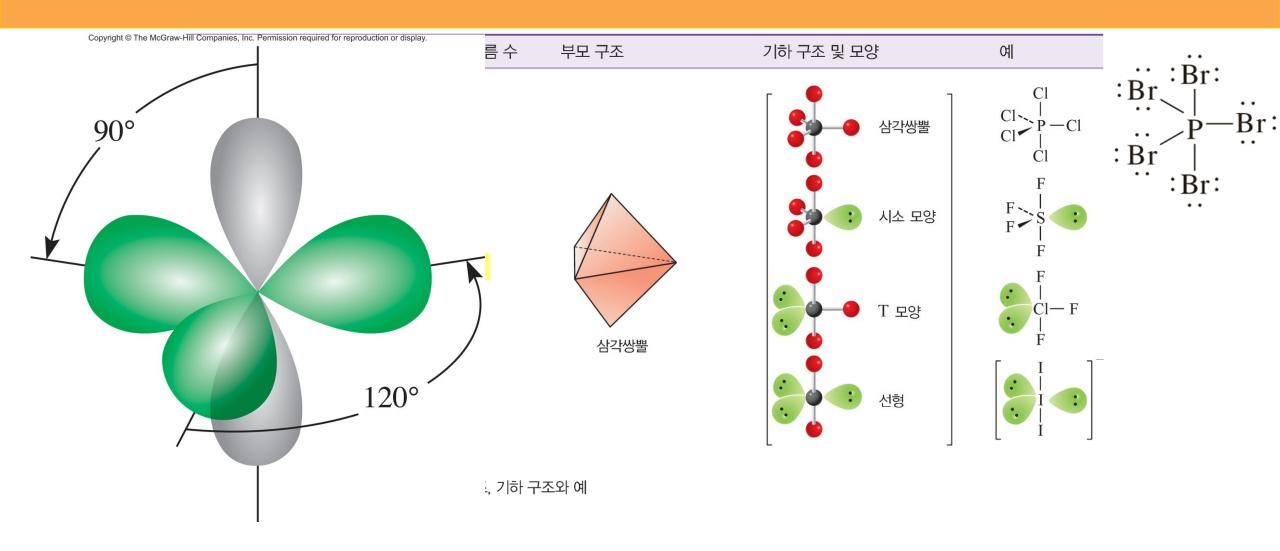


물 분자는 104.5°의 결합각을 가진 <mark>굽은</mark> 형 암모니아 분자는 107°의 결합각을 가진 <mark>삼각뿔</mark> 구조

메테인 분자는 109.5°의 결합각을 가진 사면체 구조

| 결합수 | 고립 전자쌍 수 | 전하 구름 수 | 부모 구조 | 기하 구조 및 모양 | 예 |
|-----|----------|---------|----------|------------|-------|
| 2 | 0 | 2 | | ● ● 선형 | O=C=O |
| 3 | 0 | 3 | | 삼각 평면 | H>C=O |
| 2 | 1 | | 삼각 평면 | 굽은형 | o>s : |
| _ | - | | <u> </u> | | H |
| 4 | 0 | | | 사면체 | H C H |
| 3 | 1 | 4 | | 삼각뿔 | H-N-H |
| 2 | 2 | | 사면체 | 708 | • |
| | | | | 굽은형 | H-O |

그림 4.9 중심 원자의 전하 구름의 수, 부모 구조, 기하 구조와 예



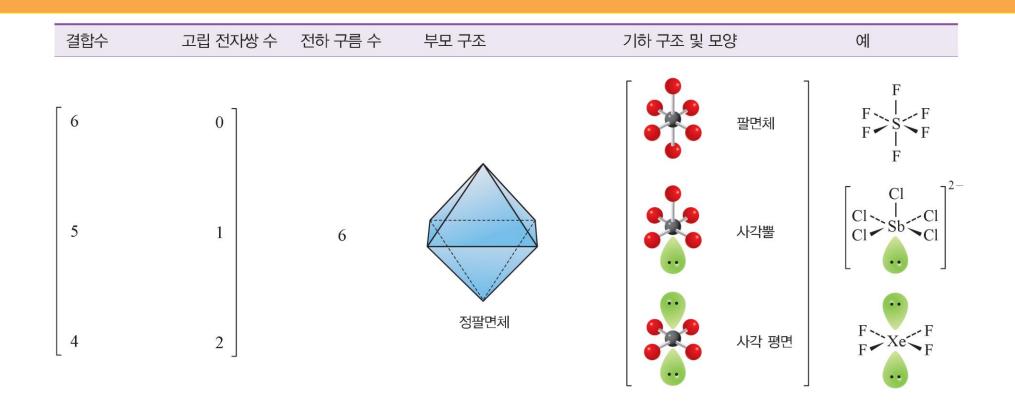
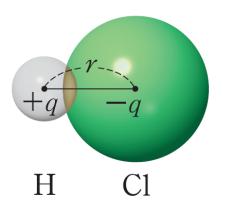


그림 4.9 중심 원자의 전하 구름의 수, 부모 구조, 기하 구조와 예

분자의 극성

편극(polarization): 극성 공유 결합의 양 끝에 약한 두 극성이 조성되어 있는 상태

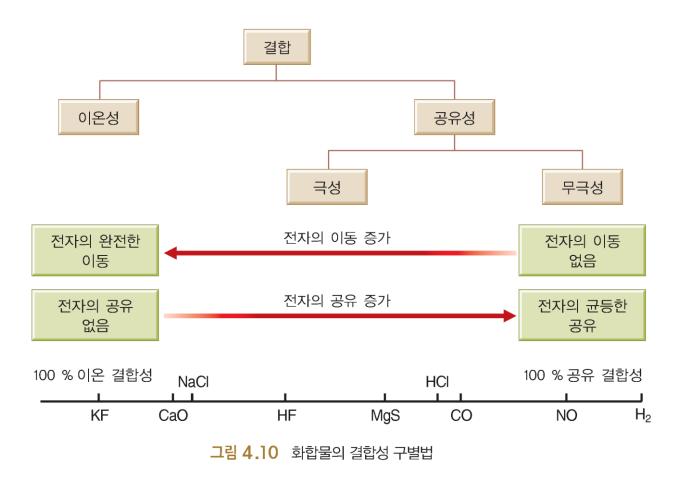


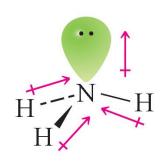
+→→: 쌍극자 (결합 쌍극자)

결합의 극성

두 개의 원자 사이에 형성되는 화학 결합이 이온 결합인지 공유 결합인지 판단하려면 두 원소의 전기 음성도의 차이 확인한다.

| 결합 중인 두 원자간 전기 음성도의 차이 | 결합의 성격 | |
|------------------------|----------|--|
| 1.9 이상 | 이온 결합 | |
| 0.4 초과 1.9 미만 | 극성 공유결합 | |
| 0.4 이하 | 무극성 공유결합 | |





암모니아($\mu = 1.47 \, D$)

그림 4.12 암모니아와 물의 쌍극자 모멘트

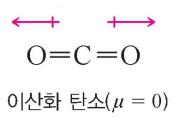


그림 4.13 이산화 탄소와 사염화 탄소의 쌍극자 모멘트

쌍극자 모멘트는 계산도 가능하다.

: 쌍극자의 양쪽 끝단의 전하량 Q와 끝단 사이의 거리 r의 곱으로 정의한다.

$$\mu = Q \times r$$

Ex) 전하량이 1.60 X 10⁻¹⁹ C인 전자가 양성자 하나와 100 pm만큼 떨어져 있을 때,

쌍극자 모멘트는? 1 D=3.336×10⁻³⁰ C·m

$$\mu = (1.60 \times 10^{-19} \text{ C})(100 \times 10^{-12} \text{ m}) \left(\frac{1 \text{ D}}{3.336 \times 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}} \right) = 4.80 \text{ D}$$

쌍극자 모멘트(dipole moment, μ , 단위 : D (Debye)) : 쌍극자들의 벡터합

- 분자내에 극성 공유 결합이 다수 존재할 경우, 쌍극자(결합 쌍극자)도 여러 개 나타난다.
- 쌍극자는 백터의 성질이 있기 때문에 다수 쌍극자들의 벡터합 표기 가능

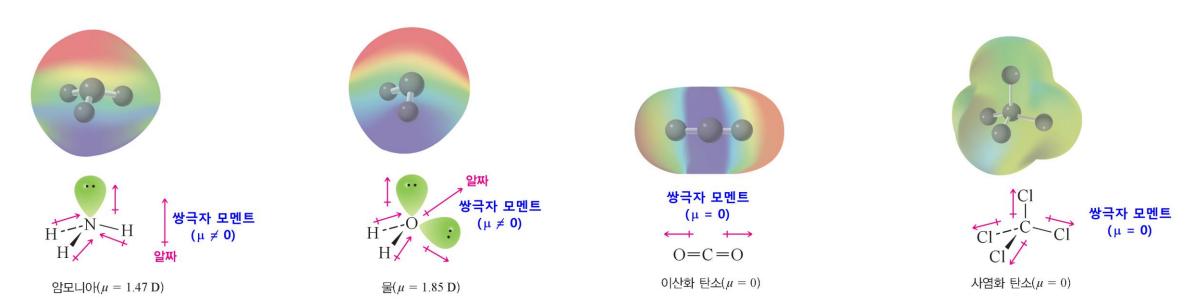


그림 4.12 암모니아와 물의 쌍극자 모멘트

그림 4.13 이산화 탄소와 사염화 탄소의 쌍극자 모멘트

실제 실험실에서 측정된 몇몇 분자의 쌍극자 모멘트(μ)

| - " , | |
|--------------------|---------------|
| 이름 | 쌍극자 모멘트(D) |
| NaCl ^a | 9.0 |
| CH ₃ Cl | 1.90 |
| H ₂ O | 1.85 |
| NH ₃ | 1.47 |
| HC1 | 1.11 |
| CO ₂ | 0 |
| CCl ₄ | 0 |
| · | |

^a기체상에서 측정

물과 암모니아는 분자 전체적으로 전자의 쏠림 현상이 있어 부분적인 극성을 띠고 있는 극성 분자(polar molecule)이며, 이산화 탄소와 사염화 탄소는 분자 전체적으로 전자의 쏠림 현상이 없는 무극성 혹은 비극성 분자(nonpolar molecule)이다.

- 극성 분자: 쌍극자 모멘트(μ) 값이 있는 분자($\mu \neq 0$)
- 무극성(비극성) 분자: 쌍극자 모멘트(μ) 값이 없는 분자($\mu = 0$)