LaTeX

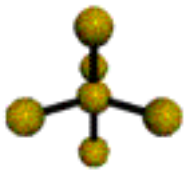
TVAR MOLEKUL

1 Teorie VSEPR

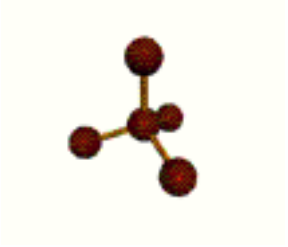
- Valence Shell Electron-Pait Repulsion
- vzájemné odpuzování elektronových párů valenční vrstvy
- vazby jsou zprostředkovány elektrony, protože stejné náboje se odpuzují, proto i vazby se snaží v prostoru zaujmout takovou pozici, aby byly od sebe co nejvíce vzdáleny. Na tvar molekul mají vliv i volné elektronové páry (nejen vazebné).
  Celkový počet el. párů z, který ovlivňuje tvar molekuly:
  a ... počet sigma vazeb
  b ... počet volných el. párů
  $z = a + b$

- tvary molekul v závislosti na z:
  - $z = 1$ ... lineární
  - $z = 2$ ... lineární
  - $z = 3$ ... rovnostranný trojúhelník
  - $z = 4$ ... tetraedr / čtverec (u koordinačních sloučenin)
  - $z = 5$ ... trojboká bipyramida
  - $z = 6$ ... oktaedr
- v případě, že molekula obsahuje volné elektronové páry, dochází k deformaci základního tvaru a vazebných úhlů, které se zmenší – volný elektronový pár silněji odpuzuje zbývající vazebné el. páry.
- příklady:
  - $BeCl_2$: a=2, b=0, z=2 $\longrightarrow$ lineární molekula

  - PCl_5: a=5, b=0, z=5 $\longrightarrow$ trojboká bipyramida



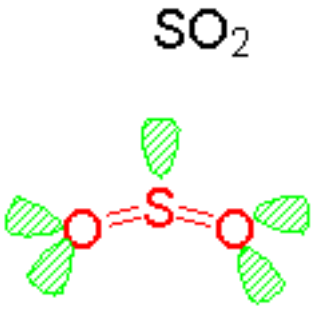
  - SiH_4: a=4, b=0, z=4 $\longrightarrow$ tetraedr



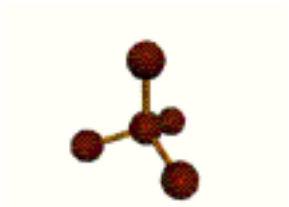
– NH_3: a=3, b=1, z=4 $\longrightarrow$ trojboká pyramida (zákl. tvar tetraedr)

– H_2O: a=2, b=2, z=4 $\longrightarrow$ lomená molekula (zákl. tvar tetraedr)

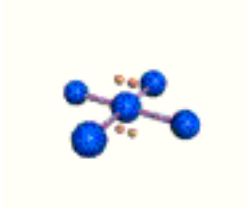
– SO_2: a=2, b=1, z=3 $\longrightarrow$lomená



– NH_4^+: a=4, b=0, z=4 $\longrightarrow$ tetraedr



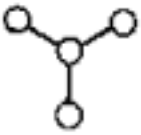
– SF_6: a=6, b=0, z=6 $\longrightarrow$ oktaaedr



– $XeF4$: a=4, b=2, z=6 $\longrightarrow$ čtverec (zákl. tvar oktaaedr)

2 Teorie hybridizace

- Energetické sjednocení atomových orbitalů s blízkou hodnoutou energie. Do hybridizace vstupují pouze ty valenční orbitaly, které obsahují elektrony podílející se na vytvoření σ vazby, nebo obsahují volný el. pár. Vzniklé hybridí orbitaly mají stejný tvar i stejnou energii, proto se rozmístí tak, aby byly co nejdále od sebe.

B+E	E	tvar molekuly	hybridizace	příklad
3	0		trigonální plošná	sp^2	BF_3
3	1		lomená	sp^2	SO_2
4	0		tetraedr	sp^3	CH_4
4	1		trigonální pyramida	sp^3	NH_3
4	2		lomená	sp^3	H_2O
6	0		oktaedr	sp^3d^2	SF_6

- příklady:
  - CH_4 : sp^3 $\longrightarrow$ tetraedr
  - $BeCl_2$: sp $\longrightarrow$ lineární molekula
  - H_2O : sp^3 $\longrightarrow$ základní tvar tetraedr $\longrightarrow$ lomená molekula
  - SF_6 : sp^3d^2 $\longrightarrow$ oktaedr
  - CO_2 : sp $\longrightarrow$ lineární molekula
  - PCl_5 : sp^3d $\longrightarrow$ trojboká bipyramida
  - H_3O^+ : sp^3 $\longrightarrow$základní tvar tetraedr $\longrightarrow$ trojboká pyramida
  - NH_4^+ : sp^3 $\longrightarrow$ tetraedr
  - PO_4^{3-} : sp^3 $\longrightarrow$ tetraedr
  - H_2Te : sp^3 $\longrightarrow$ základní tvar tetraedr $\longrightarrow$ lomená molekula
  - PCl_3 : sp^3 $\longrightarrow$ základní tvar tetraedr $\longrightarrow$ trojboká pyramida
  - C_2H_2:
  - PCl_5:
  - CO_3^{2-}:
  - CCl_4:
  - SO_2:
  - BCl_3:
  - SO_4^{2-}:
  - $SbCl_5$:
  - SiH_4:

11. března 2010