

TVAR MOLEKUL

1 Teorie VSEPR

- Valence Shell Electron-Pair 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
 $z = a + b$

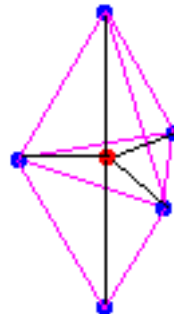
- tvary molekul v závislosti na z :

- $z = 1$... 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.

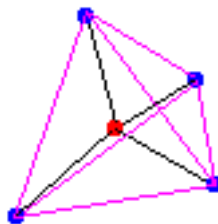
- příklady:

- $BeCl_2$: $a=2$, $b=0$, $z=2$ → lineární molekula

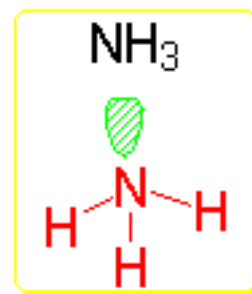


- PCl_5 : $a=5$, $b=0$, $z=5$ → trojboká bipyramida

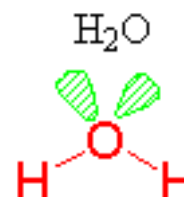
– SiH_4 : $a=4$, $b=0$, $z=4$ → tetraedr



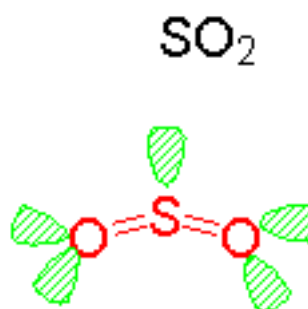
– NH_3 : $a=3$, $b=1$, $z=4$ → trojboká pyramida (zákl. tvar tetraedr)



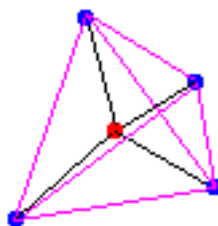
– H_2O : $a=2$, $b=0$, $z=2$ → lomená molekula (zákl. tvar tetraedr)



– SO_2 : $a=2$, $b=0$, $z=2$ → lineární molekula

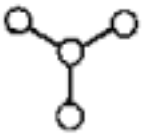







– NH_4^+ : $a=4$, $b=0$, $z=4$ → tetraedr



2 Teorie hybridizace

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

B+E	E	tvary molekuly	hybridizace	příklad
3	0		sp^2	BF_3
3	1		sp^2	SO_2
4	0		sp^3	CH_4
4	1		sp^3	NH_3
4	2		sp^3	H_2O
6	0		sp^3d^2	SF_6

- příklady:
 - CH_4 : $sp^3 \rightarrow$ tetraedr

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

6. března 2010