

# 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

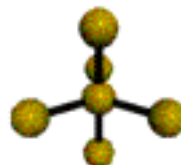
$z = a + b$

- 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:

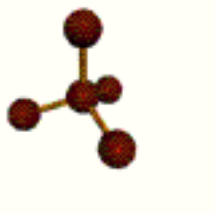
–  $BeCl_2$ :  $a=2$ ,  $b=0$ ,  $z=2$  → lineární molekula



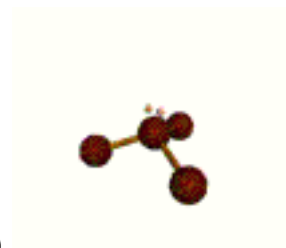
–  $PCl_5$ :  $a=5$ ,  $b=0$ ,  $z=5$  → trojboká bipyramida



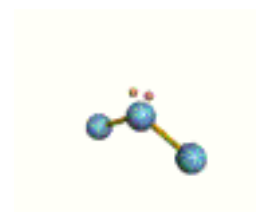
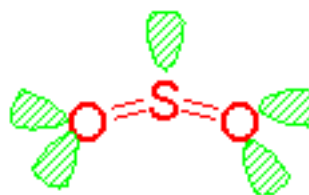
–  $SiH_4$ :  $a=4$ ,  $b=0$ ,  $z=4$  → tetraedr



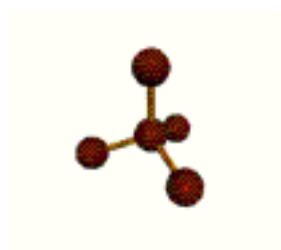
–  $NH_3$ :  $a=3$ ,  $b=1$ ,  $z=4$  → trojboká pyramida (zákl. tvar tetraedr)



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



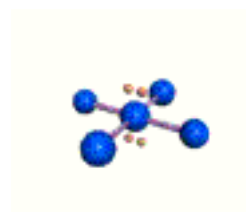
–  $SO_2$ :  $a=2$ ,  $b=1$ ,  $z=3$  → lomená



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



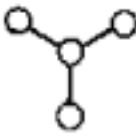





–  $SF_6$ :  $a=6$ ,  $b=0$ ,  $z=6$  → oktaedr



–  $XeF_4$ :  $a=4$ ,  $b=2$ ,  $z=6$  → čtverec (zákl. tvar oktaedr)

## 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  $\sigma$  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	tvar molekuly	hybridizace	příklad
3	0		$sp^2$	$\text{BF}_3$
3	1		$sp^2$	$\text{SO}_2$
4	0		$sp^3$	$\text{CH}_4$
4	1		$sp^3$	$\text{NH}_3$
4	2		$sp^3$	$\text{H}_2\text{O}$
6	0		$sp^3d^2$	$\text{SF}_6$

• příklady:

- $CH_4$ :  $sp^3$  → tetraedr
- $BeCl_2$ :  $sp$  → lineární molekula
- $H_2O$ :  $sp^3$  → základní tvar tetraedr → lomená molekula
- $SF_6$ :  $sp^3d^2$  → oktaedr
- $CO_2$ :  $sp$  → lineární molekula
- $PCl_5$ :  $sp^3d$  → trojboká pyramida
- $H_3O^+$ :  $sp^3$  → základní tvar tetraedr → trojboká pyramida
- $NH_4^+$ :  $sp^3$  → tetraedr
- $PO_4^{3-}$ :  $sp^3$  → tetraedr
- $H_2Te$ :  $sp^3$  → základní tvar tetraedr → lomená molekula
- $PCl_3$ :  $sp^3$  → základní tvar tetraedr → 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