

Lewisův vzorec je jednoduché grafické znázornění vazebných poměrů v molekule. Využívá počet valenčních elektronů v celé molekule, upravený případně podle náboje, pokud se jedná o ion. Elektronový pár budeme značit rovnou úsečkou (–), která reprezentuje dvojici elektronů – ať už vazebných nebo nevazebných (tzv. volných elektronových párů). Někdy se v literatuře můžeme setkat i se zobrazením elektronového páru jako dvojtečky. Vazby v molekulách H_2 (H–H) a O_2 (O=O) pak budou znázorněny jako H:H a O::O.

Důležitým pojmem je **oktetové pravidlo**. Toto pravidlo lze formulovat dvěma způsoby:

a) Pokud je to možné, mají prvky 2. periody tendenci **obklopit se 8 elektrony**. Jestliže k tomu nestačí jednoduché vazby, budou tvořit vazby násobné. Atomy C, N, O a F musí mít oktet (až na několik výjimek). Tendence ke tvoření násobných vazeb u prvků 3. a vyšších period výrazně klesá.

b) Počet elektronů okolo atomů 2. periody **nesmí být vyšší než 8**. Odpovídá to kapacitním možnostem těchto prvků (do valenčních orbitalů 2s 2p se vejde nanejvýš 8 elektronů, orbital 3s už je pro ně energeticky nedostupný).

Čtyřvaznost uhlíku, jak ji známe z organické chemie, je vlastně konkrétní důsledek oktetového pravidla.

Počet valenčních elektronů

TABLE 7-1 *Lewis Dot Formulas for Representative Elements*

| Group | IA | IIA | IIIA | IVA | VA | VIA | VIIA | VIIIA |
|---|------|------|------|------|------|------|------|------------------|
| <i>Number of electrons in valence shell</i> | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 (except He) |
| Period 1 | H · | | | | | | | He : |
| Period 2 | Li · | Be : | ·B· | ·C· | ·N· | ·O· | ·F· | :Ne: |
| Period 3 | Na · | Mg : | ·Al· | ·Si· | ·P· | ·S· | ·Cl· | :Ar: |
| Period 4 | K · | Ca : | ·Ga· | ·Ge· | ·As· | ·Se· | ·Br· | :Kr: |
| Period 5 | Rb · | Sr : | ·In· | ·Sn· | ·Sb· | ·Te· | ·I· | :Xe: |
| Period 6 | Cs · | Ba : | ·Tl· | ·Pb· | ·Bi· | ·Po· | ·At· | :Rn: |
| Period 7 | Fr · | Ra : | | | | | | |

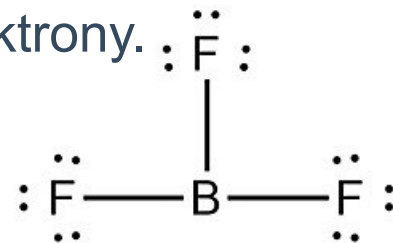
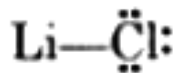


Oktetové pravidlo

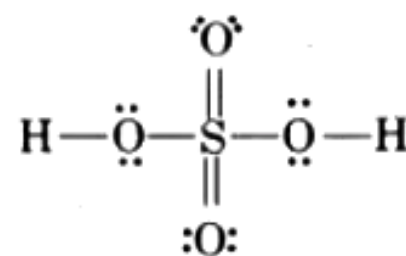
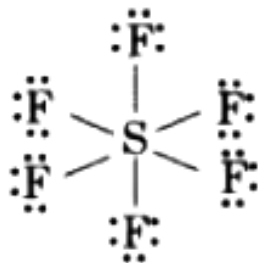
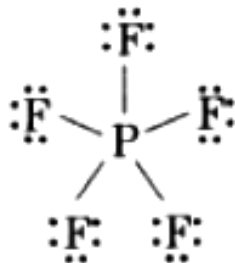
Atomy se stávají stabilními doplněním oktetu buď přenosem valenčních elektronů z jednoho atomu na druhý (přijetím nebo ztrátou) nebo jejich sdílením mezi atomy.

Omezení oktetového pravidla

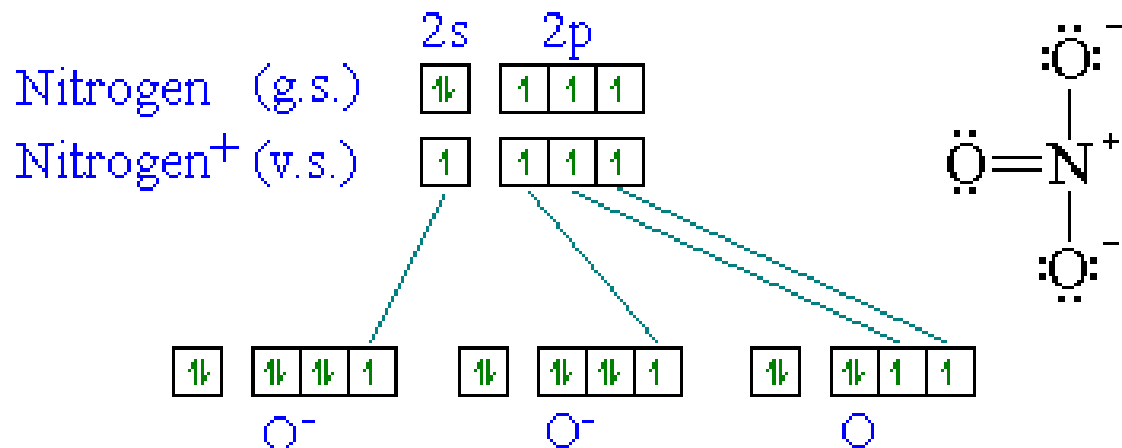
1. U některých sloučenin, je počet elektronů obklopujících centrální atom menší než 8, zejména prvky s méně než 4 valenčními elektrony, např. LiCl, BeH₂ a BCl₃. Prvky Li, Be a B mají 1, 2 resp. 3 valenční elektrony.



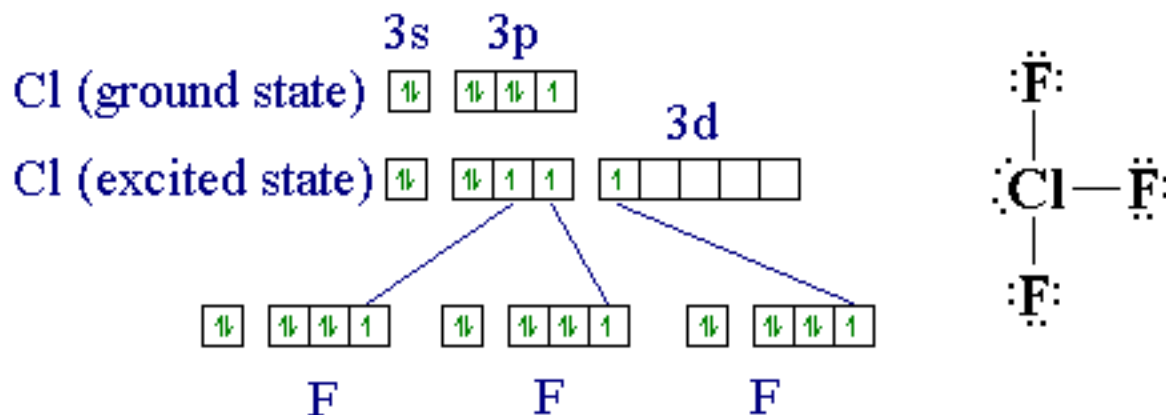
2. Centrální atomy z prvků 3. a vyšších period, které mají d orbitaly, mohou mít více než 8 valenčních elektronů. Např: PF₆, SF₆, H₂SO₄ a řada koordinačních sloučenin.



Splňuje oktetové pravidlo



Nesplňuje oktetové pravidlo



Elektrony se pouze přerozdělí mezi s, p a d orbitály. Maximální počet vazebných párů vycházejících z centrálního atomu je roven počtu jeho valenčních elektronů (tj. číslu A skupiny v periodické tabulce)

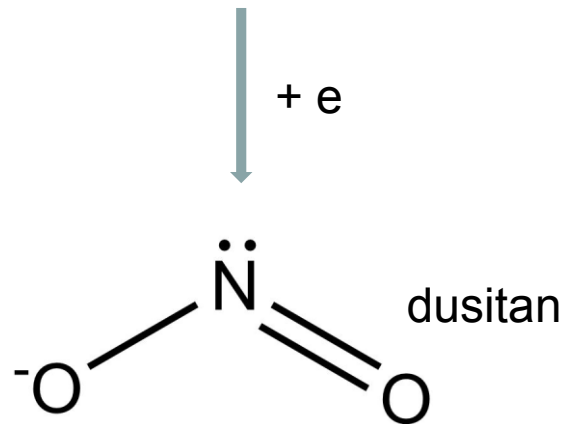
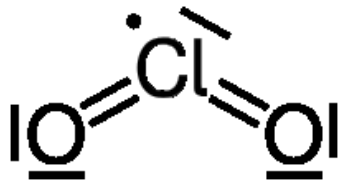
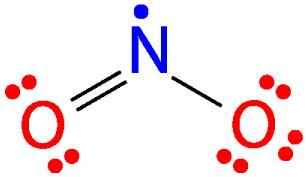
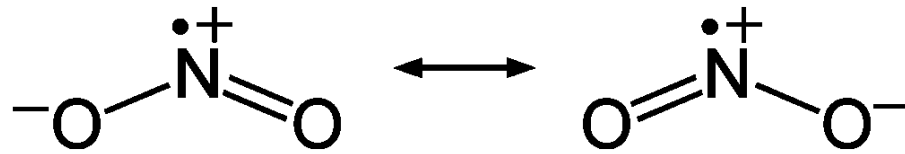
Počet valenčních elektronů

TABLE 7-1 *Lewis Dot Formulas for Representative Elements*

| Group | IA | IIA | IIIA | IVA | VA | VIA | VIIA | VIIIA |
|---|------|------|------|------|------|------|------|-------------------------|
| <i>Number of electrons in valence shell</i> | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 <i>(except He)</i> |
| Period 1 | H · | | | | | | | He : |
| Period 2 | Li · | Be : | ·B· | ·C· | ·N· | ·O· | ·F· | :Ne: |
| Period 3 | Na · | Mg : | ·Al· | ·Si· | ·P· | ·S· | ·Cl· | :Ar: |
| Period 4 | K · | Ca : | ·Ga· | ·Ge· | ·As· | ·Se· | ·Br· | :Kr: |
| Period 5 | Rb · | Sr : | ·In· | ·Sn· | ·Sb· | ·Te· | ·I· | :Xe: |
| Period 6 | Cs · | Ba : | ·Tl· | ·Pb· | ·Bi· | ·Po· | ·At· | :Rn: |
| Period 7 | Fr · | Ra : | | | | | | |

Oktetové pravidlo

3. U molekul s lichým počtem elektronů of elektronů není oktetové pravidlo splněno pro všechny atomy. Např. NO, NO₂, ClO₂, .



V případě lichého počtu valenčních elektronů se nespárovaný elektron se označuje tečkou u atomu, ke kterému patří. Molekula je volným radikálem a má paramagnetické vlastnosti.

Identifikujte u které z uvedených sloučenin není splněno oktetové pravidlo: SO_2 , SF_2 , SF_4 , SF_6 , OF_2 , BCl_3 , PCl_3

Identifikujte u které z uvedených sloučenin není splněno oktetové pravidlo: PCl_3 , SO_2 , SO_3 , NO_2 , SF_4 , NO , BF_3 , H_2S , SF_6

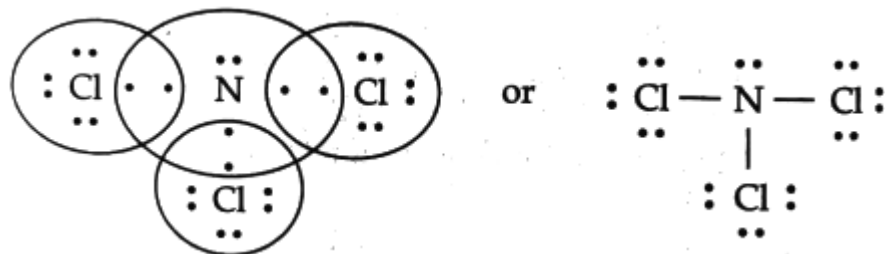
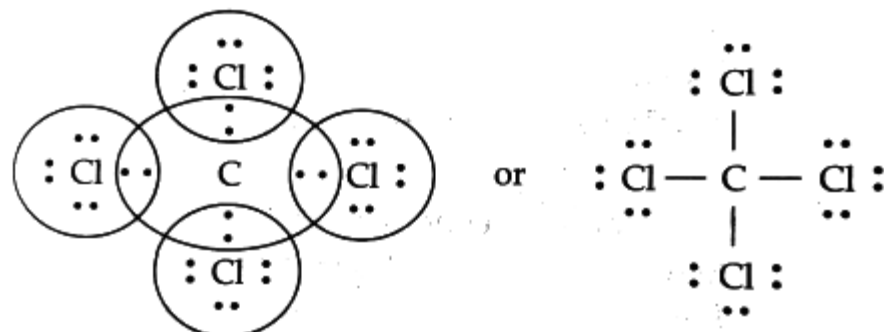
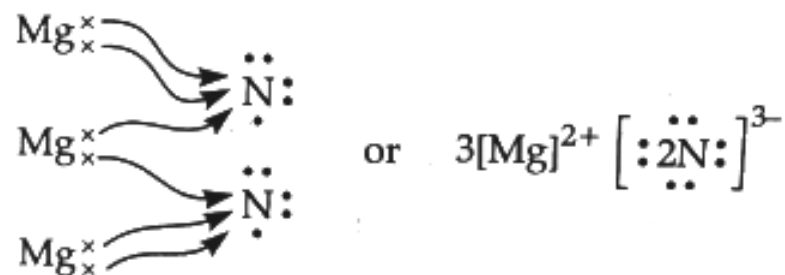
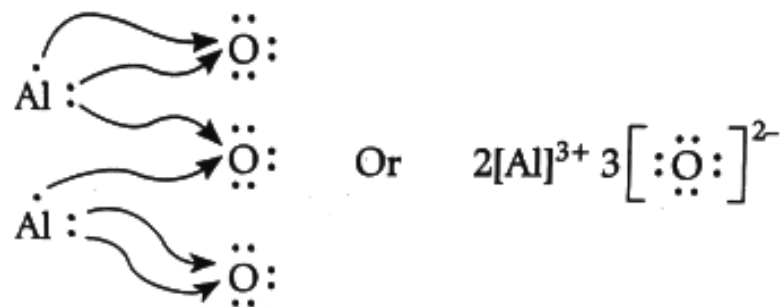
Identifikujte u které z uvedených sloučenin síry není splněno oktetové pravidlo: SO_2 , SF_2 , SF_4 , SF_6 .

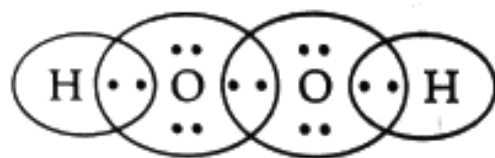
Který z uvedených atomů bude vždy splňovat oktet pravidlo: S, C, P, Br?

Lewisovy vzorce

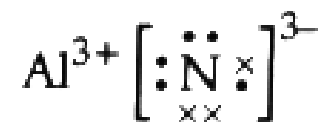
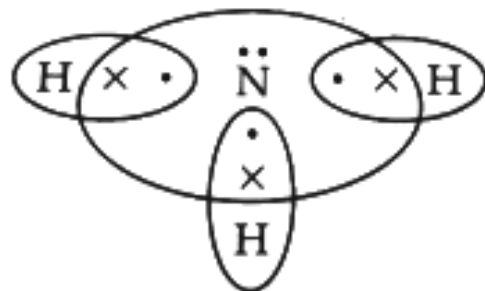
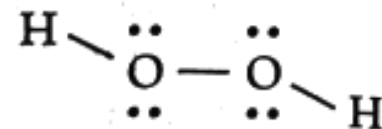
1. Určete, zda je sloučenina kovalentní nebo iontová. Pokud je kovalentní, určuje se vzorec celé molekuly. Pokud je iontová, určuje se vzorec každého iontu zvlášť. Sloučeniny kovů s nízkou a nekovů s vysokou hodnotou elektronegativity ($\Delta EN > 1.6$) jsou iontové, stejně jako sloučeniny kovů s polyatomickými anionty. U monoatomických iontů jejich elektronová konfigurace iontu reprezentuje správnou Lewisovu strukturu. U sloučenin obsahujících komplexní ionty musíte nejprve odlišit vzorce kationtu a aniontu.

| Metal | | Nonmetal | | Ionic Compound |
|-------|---|-------------------|---|---|
| Na • | + | •• :Cl: •• | → | Na ⁺ [:Cl:] ⁻ sodium chloride (sodium ion and chloride ion) |
| •Mg• | + | •• :O: •• | → | Mg ²⁺ [:O:] ²⁻ magnesium oxide (magnesium ion and oxide ion) |
| •Ca• | + | 2 •• :F: •• | → | Ca ²⁺ [:F:] ₂ ⁻ calcium fluoride (calcium ion and two fluoride ions) |



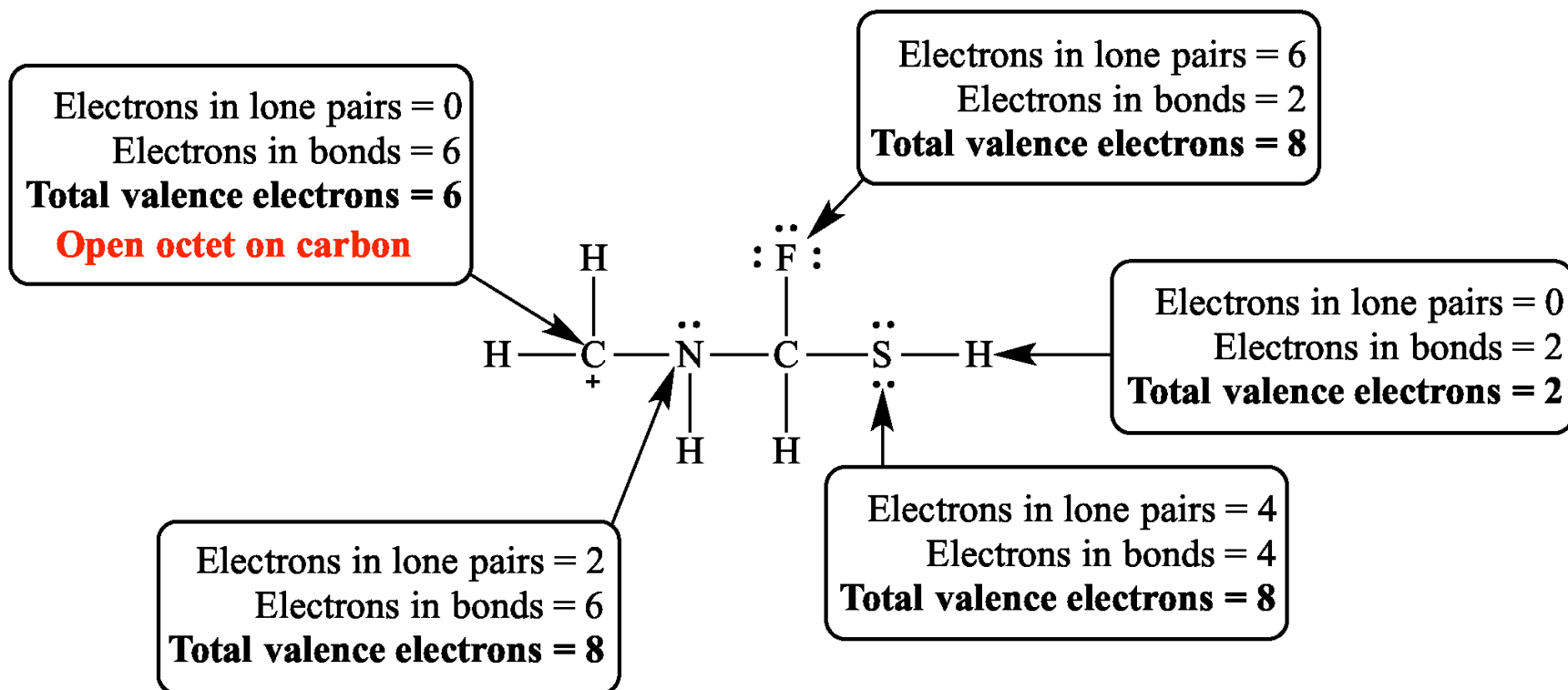


or



2. Určete celkový počet valenčních elektronů molekuly nebo iontu:

- (a) stanovte počet valenčních elektronů pro všechny atomy v molekule
- (b) přidejte 1 elektron pro každý celkový negativní náboj u aniontu nebo odečtěte 1 elektron pro každý celkový pozitivní náboj u kationtu. Potom vydělením celkového množství dostupných elektronů 2 získáme počet dostupných elektronových párů (E.P.).

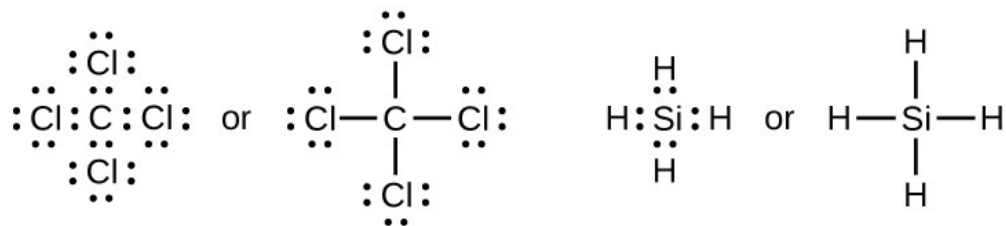


3. Nakreslete základ struktury molekuly/iontu, rozmístěním atomů okolo centrálního atomu. Uspořádejte atomy tak, aby byl centrální atom (zpravidla atom nejméně elektronegativní) obklopen vnějšími atomy (ligandy). Vodík nikdy nebývá centrálním atomem (má jediný valenční elektron, do elektronových vzorců se zapisuje jedinou vazebnou čárkou). Pokud se jedná o oxokyselinu, pak musíme zachovat skupinu OH, vodík tedy v tomto případě bude na centrální atom připojen přes kyslík

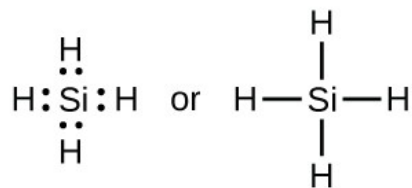
4. Určete předběžné rozdělení elektronů uspořádáním elektronových párů (E.P.). Atomy spojte vždy jednou vazbou s centrálním atomem (tj. jedním elektronovým párem):

a) přidáme jeden elektronový pár (čárku) mezi centrální atom a každý vnější atom.

b) přidáme tři další volné páry (čárky) ke každému vnějšímu atomu (kromě H, ke kterému se žádné další páry nepřidávají) tak, aby u každého atomu (kromě H) byly celkem 4 elektronové páry (čárky) tvořící oktet).

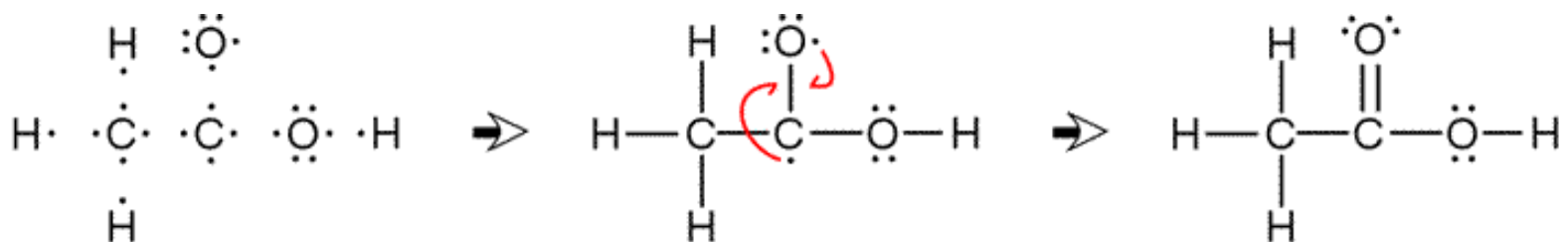


carbon tetrachloride



silane

c) uspořádejte elektrony na vnějších atomech do násobných vazeb s centrálním atomem tak, aby byly vytvořeny oktety tam, kde je to možné. Pokud jeden nebo více atomů nemá 8 elektronů, musí být mezi nimi přítomna dvojná nebo trojná vazba (každá jednoduchá vazba zahrnuje 2 elektrony). U dvojně vazby se kreslí 2 čárky (4 elektrony), u trojně vazby 3 čárky (6 elektronů).

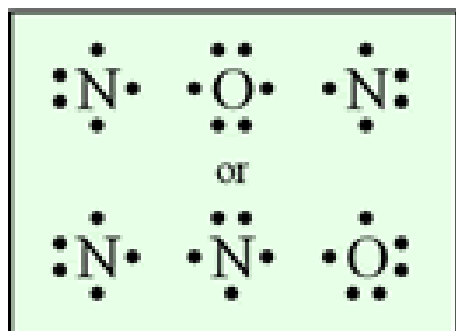


Tento krok lze vynechat a dvojně vazby doplnit až na základě analýzy formálních nábojů v bodu 7.

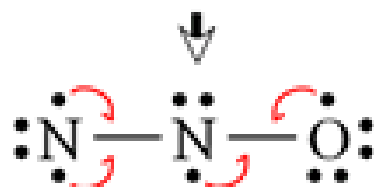
Dvojnou nebo násobnou vazbu jsou schopny tvořit jen C, N a O a v kombinaci s nimi částečně i S. Toto pravidlo se někdy nedodržíje.

d) rozmístěte všechny zbývající elektrony na centrální atom. Pokud zjistíte přebytečné valenční elektrony, přidejte je na centrální atom (mohou porušovat oktetové pravidlo).

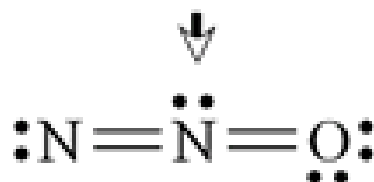
choose skeletal structure



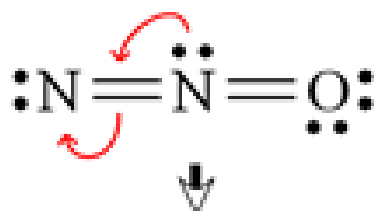
correct skeletal structure;
form bonds by pairing electrons



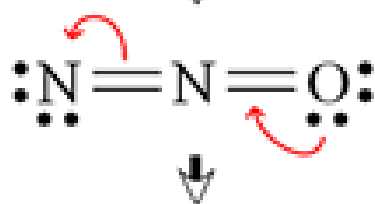
form additional bonds by pairing electrons;
attempt to satisfy octet rule for all three atoms



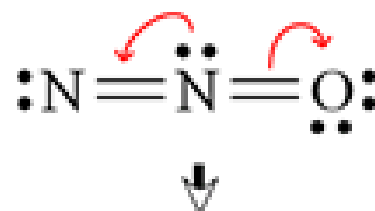
terminal N is octet deficient
central N exceeds an octet **not valid!**



valid!



valid!



move electrons,
usually in pairs, to
generate valid structure(s)



valid!

5. Spočítejte **formální náboj** (F) na centrálním atomu.

a) Spočítejte elektrony sdílené ve vazbách (b).

b) Spočítejte elektrony ve volných elektronových párech (n).

$$F = V - (n + b/2)$$

kde V = počet valenčních elektronů atomu.

$$F = (\text{č. skupiny}) - [(\text{počet vazeb}) + (\text{počet nevazeb. el.})]$$

6. Pokud je formální náboj centrálního atomu 0 nebo je roven náboji iontu, rozdělení elektronů je správné. Vypočítejte formální náboj na periferních atomech pro dokončení výsledného Lewisova vzorce.



$$\text{For Cl, FC} = 7 - (2 + 4) = +1$$

$$\text{For N, FC} = 5 - (3 + 2) = 0$$

$$\text{For O, FC} = 6 - (1 + 6) = -1$$



$$\text{For Cl, FC} = 7 - (1 + 6) = 0$$

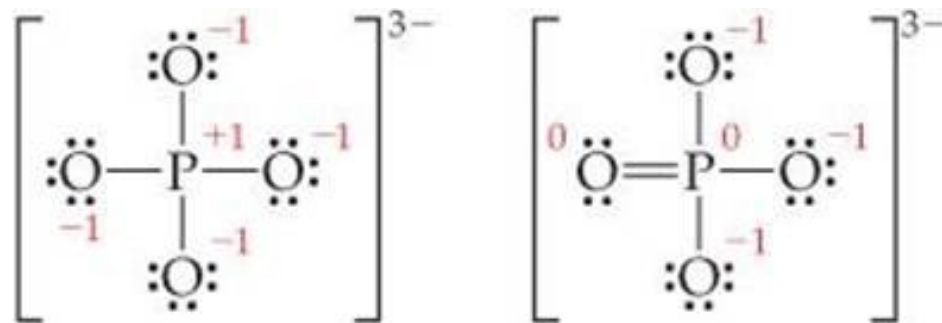
$$\text{For N, FC} = 5 - (3 + 2) = 0$$

$$\text{For O, FC} = 6 - (2 + 4) = 0$$

7. Pokud struktura není správná, spočítejte formální náboj na každém z periferních atomů. Pro získání správné struktury je třeba tvořit násobné vazby sdílením elektronového páru z periferního atomu tak, že má maximálně negativní formální náboj.

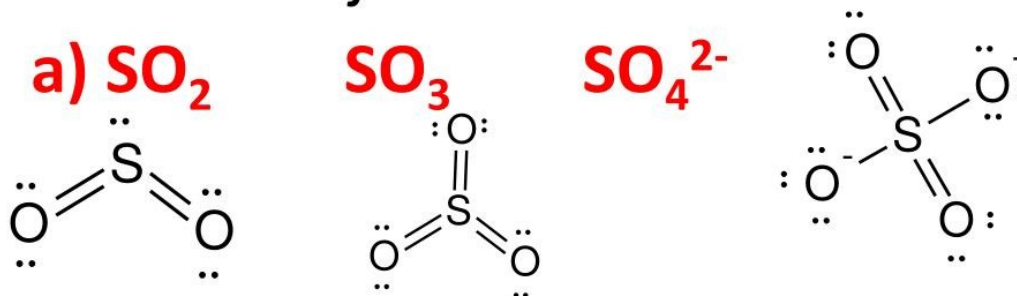
a) Pro centrální atomy z druhé ($n = 2$) periody periodické tabulky pokračuje tento proces postupně dokud centrální atom má 4 E.P. (oktet).

b) Pro všechny ostatní prvky pokračuje tento proces postupně dokud formální náboj na centrálním atomu je nulový nebo se vytvoří dvojně vazby.



V případě struktury vpravo, atom P nesplňuje oktetové pravidlo (5 elektronových párů), ale ve struktuře je méně formálních nábojů na atomech a také jsou možné 3 rezonanční struktury. Studie založená na kvantové mechanice naznačují, že dominantní je struktura vlevo. Studium vazebných délek v iontu preferuje spíše strukturu vpravo. Tento nesoulad souvisí s tím, že více Lewisových struktur (viz rezonance) může odrážet skutečné rozdělení elektronů v atomu resp. molekule.

We-work-it Examples where formal charge is minimized even if we break the octet rule.



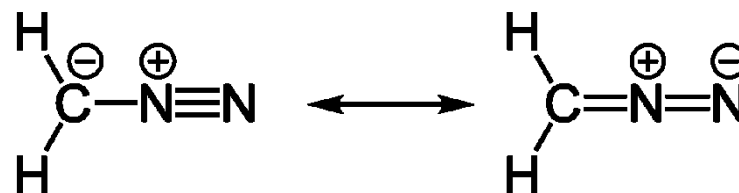
What is the octet rule prediction for SO_2 ?



+ and – formal charges
Lewis rule 3 says not good

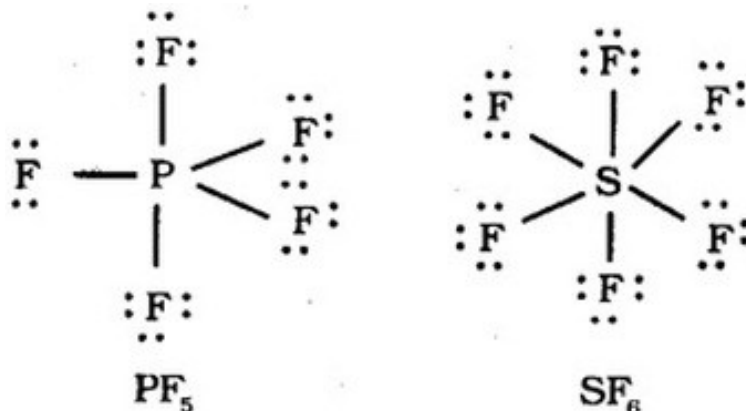
No formal charges anywhere.
Lewis rule 3 says good !

U diazomethanu je struktura stabilizována rezonancí, sloučenina je velmi reaktivní



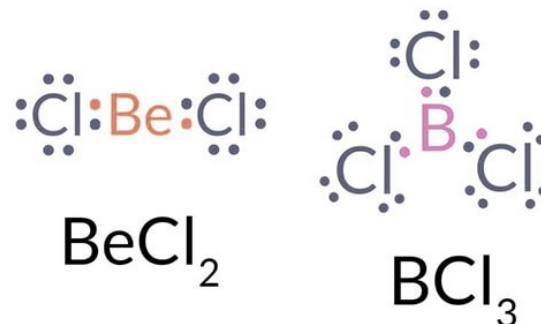
8. Přepočítejte formální náboj každého atomu pro získání výsledné Lewisovy struktury.

9. Oktetová struktura může být v ojedinělých případech rozšířena na 10 (decet), 12 (dodecet) nebo více elektronů, nikdy však u prvků 2. periody (C, O, N, F).

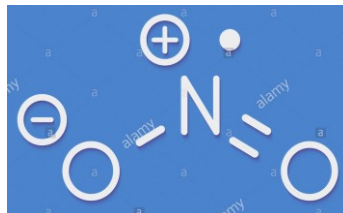
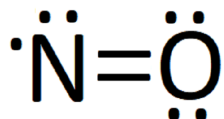


10. Někdy může být mezi kovalentně vázanými atomy sdíleno méně než 8 elektronů (Be a atomy III. A skupiny), např. Be v BeCl₂ nebo B v BCl₃.

Tyto atomy mohou doplnit oktet pomocí koordinačně kovalentní vazby



11. V případě lichého počtu valenčních elektronů se nespárovaný elektron se označuje tečkou u atomu, ke kterému patří. Molekula je volným radikálem a má paramagnetické vlastnosti.



DRAW A LEWIS DOT STRUCTURE

STEP 1



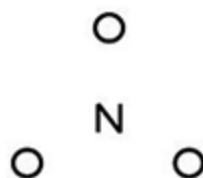
Nitrogen: 5e⁻
Oxygen: 6x3=18e⁻
Ion's charge: 1e⁻

24 electrons

COUNT ALL VALENCE ELECTRONS

STEP 2

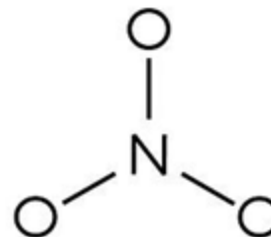
0 electrons



DRAW THE LEAST ELECTRONEGATIVE ATOM IN THE CENTER WITH THE OTHER ATOMS SPACED EVENLY AROUND IT

STEP 3

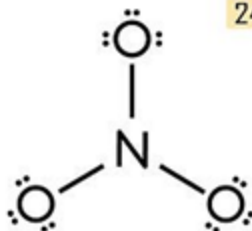
6 electrons



DRAW SINGLE BONDS TO THE CENTRAL ATOM

STEP 4

24 electrons

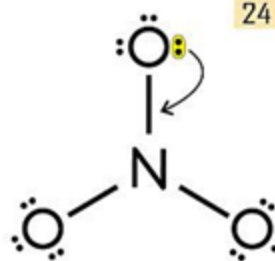


COMPLETE OCTETS WITH REMAINING ELECTRONS FOR THE OUTER ATOMS FIRST AND ADD REMAINING ELECTRONS (IF ANY) TO THE CENTRAL ATOM

NOTE 1: FOR HYDROGEN USE THE DUET RULE

STEP 5

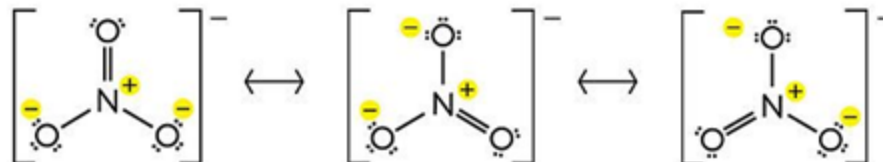
24 electrons



COMPLETE THE CENTER ATOM'S OCTET BY MAKING COVALENT BOND(S) USING LONE PAIR ELECTRONS FROM AN OUTER ATOM OF YOUR CHOICE

STEP 6 - DRAWING RESONANCE STRUCTURES & DETERMINING FORMAL CHARGE

formal charge of an atom = [#valence electrons] - [#dots] - [#lines]



DEPENDING ON WHICH ELECTRONS YOU MOVE IN STEP 5 A VARIETY OF RESONANCE STRUCTURES CAN BE DETERMINED

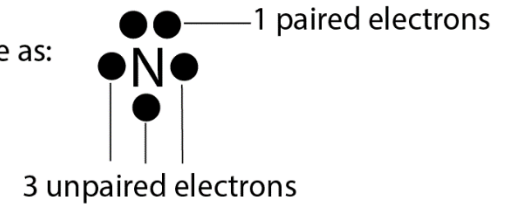
NOTE 2: THE "CORRECT" STRUCTURE CONSIDERS ALL RESONANCES AND CAN ONLY BE DETERMINED EXPERIMENTALLY

PERIOD 1 ELEMENTS FOLLOW THE DUET RULE - PERIOD 2 ELEMENTS FOLLOW THE OCTET RULE - PERIOD 3 ELEMENTS CAN HAVE EXPANDED OCTETS

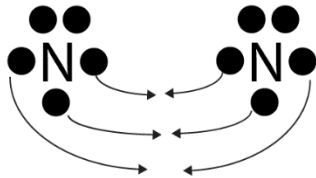
Nitrogen molecule has the chemical symbol: N_2

Příklad

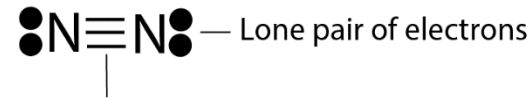
Since nitrogen has 5 valence electrons, we can draw its lewis structure as:



One N atom shares its 3 unpaired electrons with the other so that they can both get 8 electrons each



Each N now has 8 valence electrons. The octet rule is fulfilled



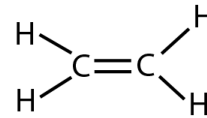
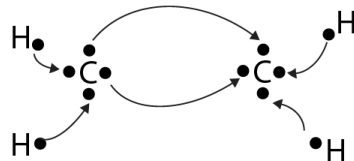
Bonding pair of electrons
(Each covalent bond consists of 2 shared electrons)

Příklad

Molecule name : ethene

Chemical formula: CH_2CH_2

Valence electrons: 4 for C and 1 for H. Notice! because hydrogen has only one electron, it can only share one electron to make one covalent bond.



If you double count the shared electrons, you will notice that each carbon now has 8 valence electrons. As you recall, H can only share one electron to get a duet.

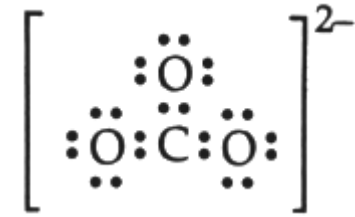
As you may have noticed, there is only one way to put the ethene molecule together. If you put all the four hydrogen atoms on the same carbon, you will violate the octet rule for the other carbon.

Nakreslete Lewisův vzorec iontu CO_3^{2-}

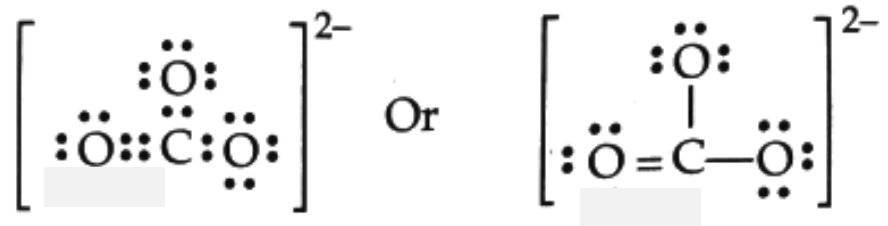
Počet valenčních elektronů $\text{CO}_3 = 4 + 3 \times 6 = 22$

Počet valenčních elektronů $\text{CO}_3^{2-} = 22 + 2 = 24$

Počet elektronových párů = 12



Ve výše uvedené struktuře, není kompletní oktet na C. Proto musí být mezi C a O násobná vazba.

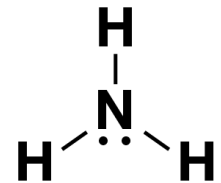
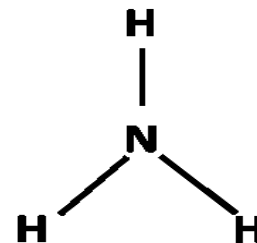


Nakreslete Lewisův vzorec amoniaku NH_3

Počet valenčních elektronů ($\text{N} + 3 \times \text{H}$) = $5 + 3 \times 1 =$

8

Počet elektronových párů = 4



Molecule name: carbonate anion

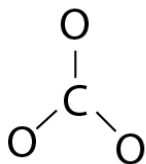
Chemical formula: CO_3^{2-}

Step 1: Let's figure out the total number of valence electrons for the carbonate anion.

C: 4 and O: 6 Since we have 3 atoms of O, total valence electrons for O is: $3 \times 6 = 18$.

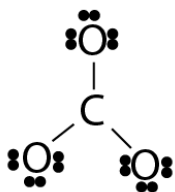
Since the -2 charge means the ion has received 2 electrons, we must add 2 electrons to the total number of electrons for the carbonate anion. So total is $= 4 + 18 + 2 = 24$ electrons.

Step 2: If the carbon atom is at the center position and all the other atoms are attached to it, we can connect them with single bonds like so:

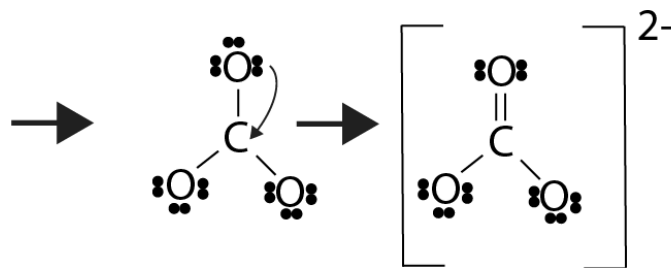


The three bonds have consumed 6 electrons out of the 24. If we subtract 6 from 24, we will get 18. So we now have 18 electrons to distribute.

Step 3: Let's fill in the remaining electrons as lone pairs



Each O has an octet, but C has no octet and we have run out of electrons. What should we do? We must borrow a lone pair from one of the O atoms to share with carbon.



If we use the lone pair from the second and third O atom, we will get a similar second and third structure. Together, these structures are called resonance forms.

Nakreslete Lewisův vzorec oxidu uhelnatého

El. konfigurace C = $1s^2 2s^2 2p^2$

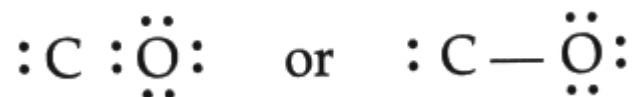
El. konfigurace O = $1s^2 2s^2 2p^4$

Odtud počet valenčních elektronů C = 4 a O = 6

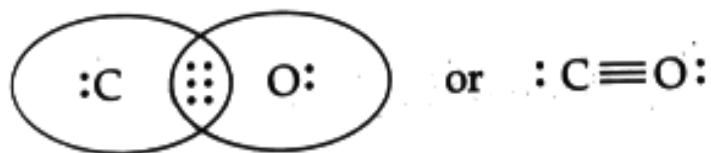
Celkový počet valenčních elektronů = $4 + 6 = 10$

Celkový počet el. párů = $10 / 2 = 5$

Nakreslete jednoduchou vazbu (1 sdílený elektronový pár) mezi C a O, doplňte oktet na O, zbývající elektrony umístěte jako volný pár na C.



Jelikož na C není plný oktet, bude mezi C a O násobná (trojná) vazba.



Určete Lewisův vzorec chlorečnanového aniontu ClO_3^-

Počet valenčních elektronů z Cl: 7

Počet valenčních elektronů z O = $3 \times 6 = 18$

Počet valenčních elektronů z negativního náboje = 1

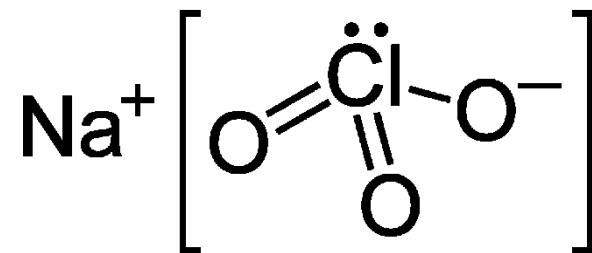
Celkem elektronů = $7 + 18 + 1 = 26$

Celkem el. párů = $26 / 2 = 13$

Formální náboj: Cl: $\text{FC} = 7 - (2 + 10/2) = 0$

O sdílející 2 elektrony: $\text{FC} = 6 - (4 + 4/2) = 0$

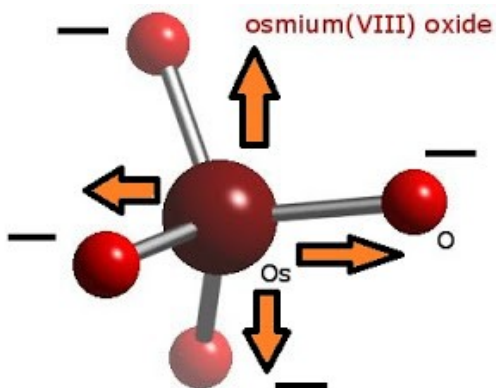
O sdílející 1 elektron: $\text{FC} = 6 - (6 + 2/2) = -1$



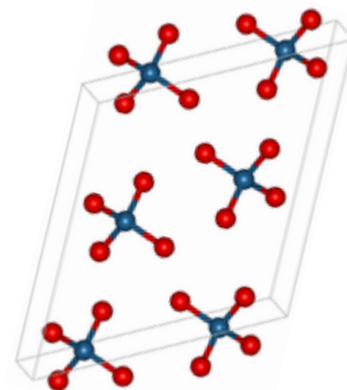
Napište elektronový strukturní vzorec oxidu osmičelého

Osmium Os $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 4f^{14} 5d^6 6s^2$

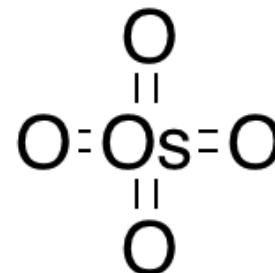
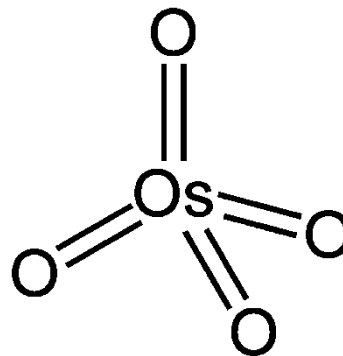
Osmium má 8 valenčních elektronů z 5d a 6s orbitalů. Ze 4 navázaných atomů kyslíku přistupuje 24 dalších valenčních elektronů, celkem je 32 elektronů, které tvoří 16 elektronových párů. Tyto páry se znázorní tak, aby všechny atomy měly oktety. Osmium je takto čtyřvazné, se 4 kladnými náboji a kyslík je jednovazný s příslušným záporným nábojem.



Oxid osmičelý je těkává kapalina s nízkým bodem varu. To může být důsledkem rozložení nábojů (záporné na okraji molekuly, kladný ve středu), kdy se molekuly více odpuzují než přitahují.

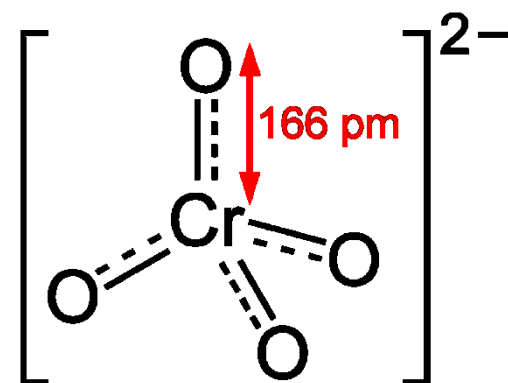
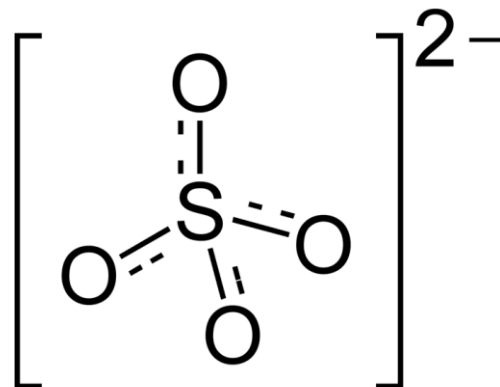
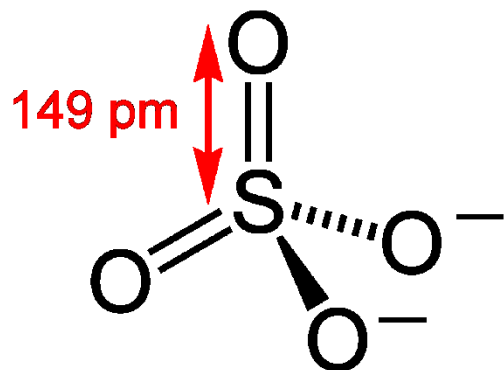
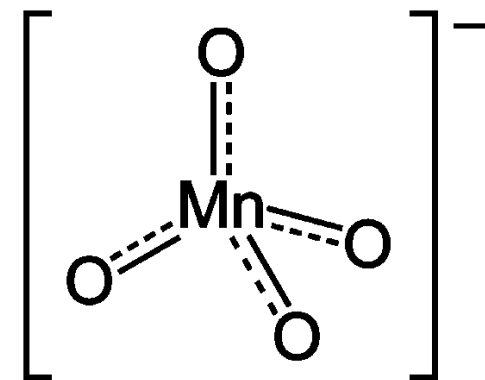
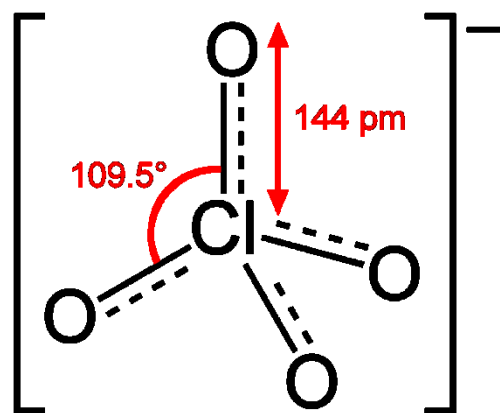
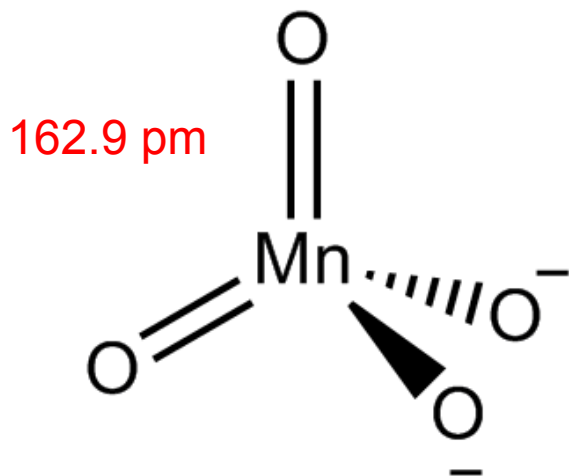
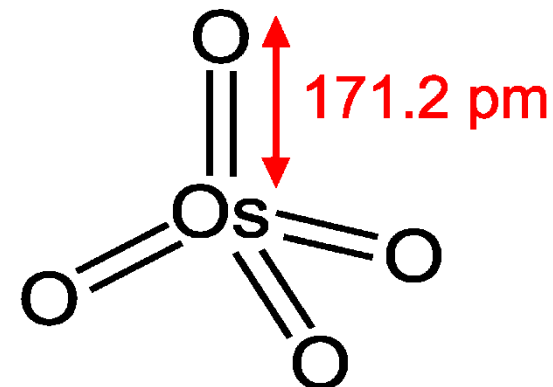


Za předpokladu, že Os nesplňuje oktetové pravidlo, kompenzujeme formální náboje s pomocí dvojných vazeb.



Oxid osmičelý a izoelektronové částice

Skutečnosti by tak možná spíše odpovídala struktura s delokalizací vazebných elektronů, uváděná u částic izoelektronových k OsO_4 .

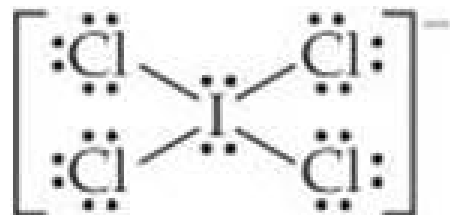


Napište Lewisův vzorec iontu ICl_4^- .

Jod (skupina VII A) má 7 valenčních elektronů, stejně jako každý atom chloru (skupina VII A). Jeden elektron navíc se přidává díky náboji -1 na iontu. Celkový počet valenčních elektronů je tudíž

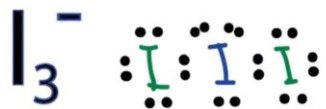
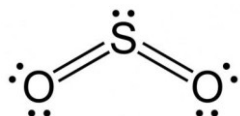
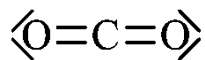
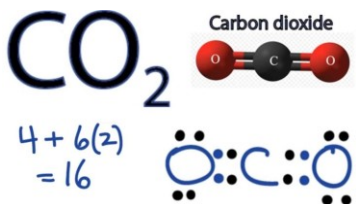
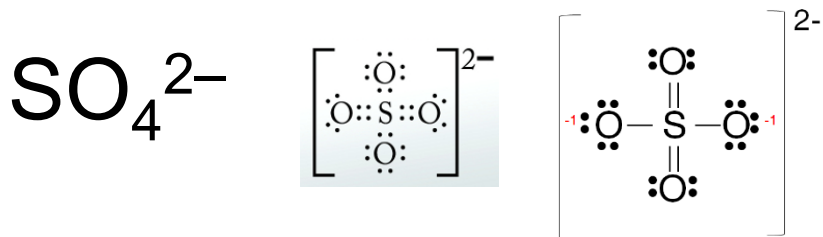
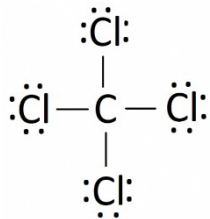
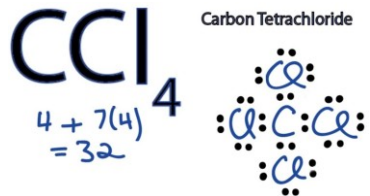
$$7 + (4 \cdot 7) + 1 = 36$$

Atom jodu je centrální atom tohoto iontu (J má nižší hodnotu elektronegativity než Cl). Přidání 8 elektronů okolo každého atomu Cl (včetně vazebných elektronových párů reprezentujících jednoduché vazby mezi I a každým Cl) vyžaduje $8 \cdot 4 = 32$ elektronů. Proto $36 - 32 = 4$ elektrony (2 volné elektronové páry) bude umístěno na centrální atom jodu:



Jod má 12 valenčních elektronů, o 4 více než dává oktet.

Nakreslete Lewisův vzorec pro zadané molekuly CCl_4 , SO_4^{2-} , CO_2 , SO_2 , I_3^-

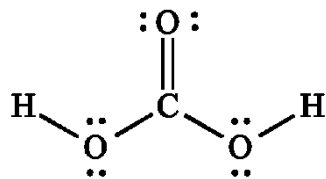
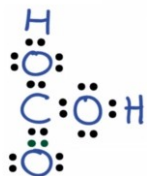


Nakreslete Lewisovy struktury pro H_2CO_3 , SF_6 , PF_5 , IF_7 and CS_2 .



$$1(2) + 4 + 6(3) = 24$$

Carbonic Acid



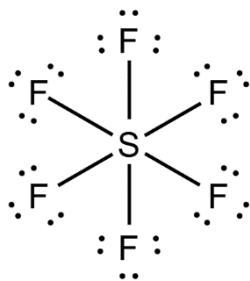
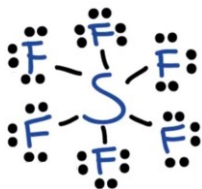
Carbon Disulfide

$$4 + 6(2) = 16$$



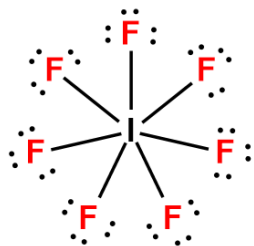
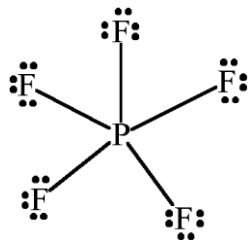
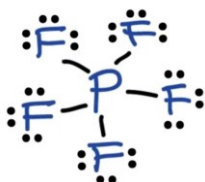
$$6 + 7(6) = 48$$

Sulfur Hexafluoride

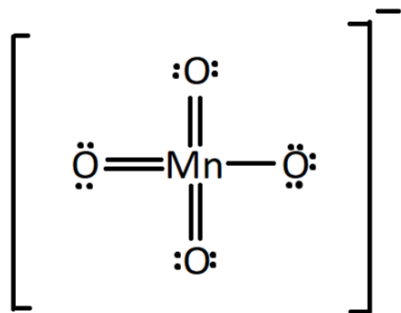
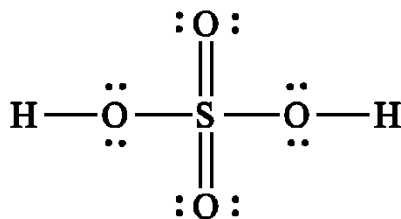
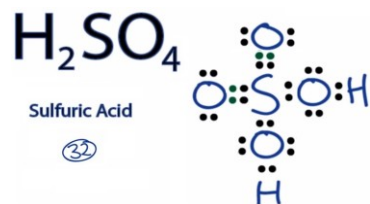
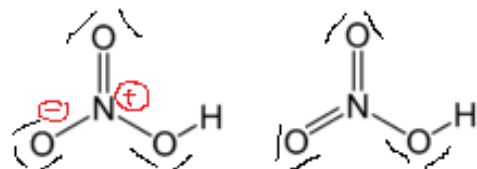
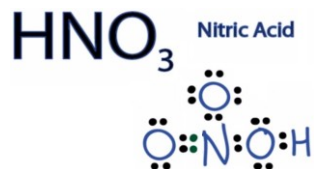


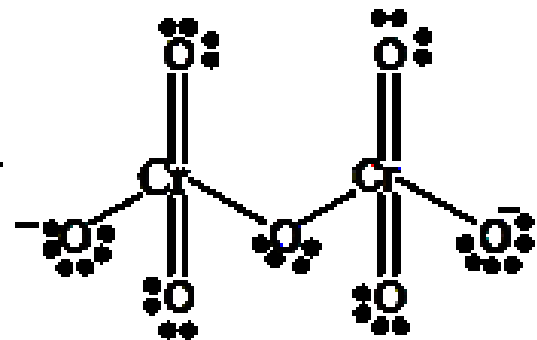
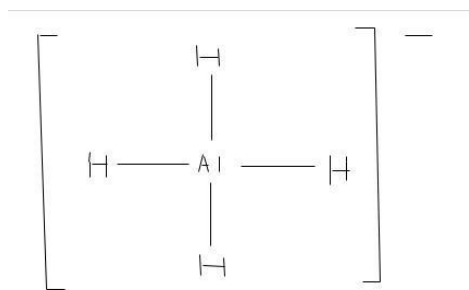
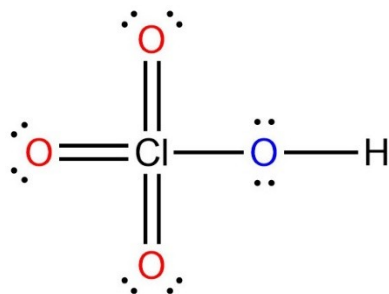
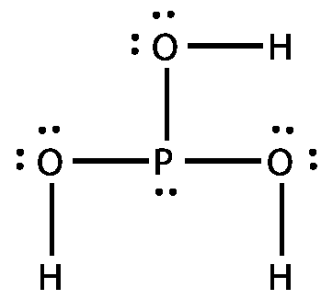
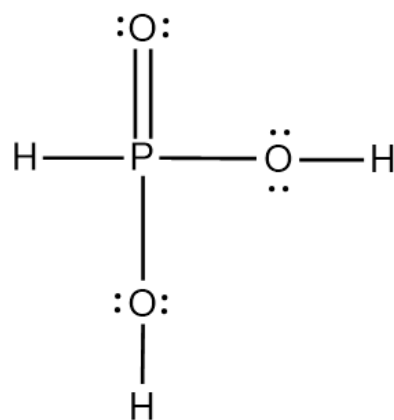
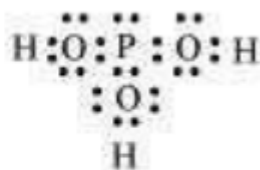
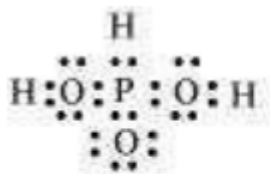
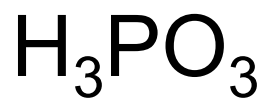
$$5 + 7(5) = 40$$

Phosphorus Pentafluoride



Nakreslete Lewisův vzorec pro zadané molekuly HNO_3 , H_2SO_4 , MnO_4^- , H_3PO_3 , HClO_4 , AlH_4^- , $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$,





Nakreslete Lewisův vzorec XeF₂.



Xenon Difluoride

$$8 + 7(2) = \underline{22}$$

