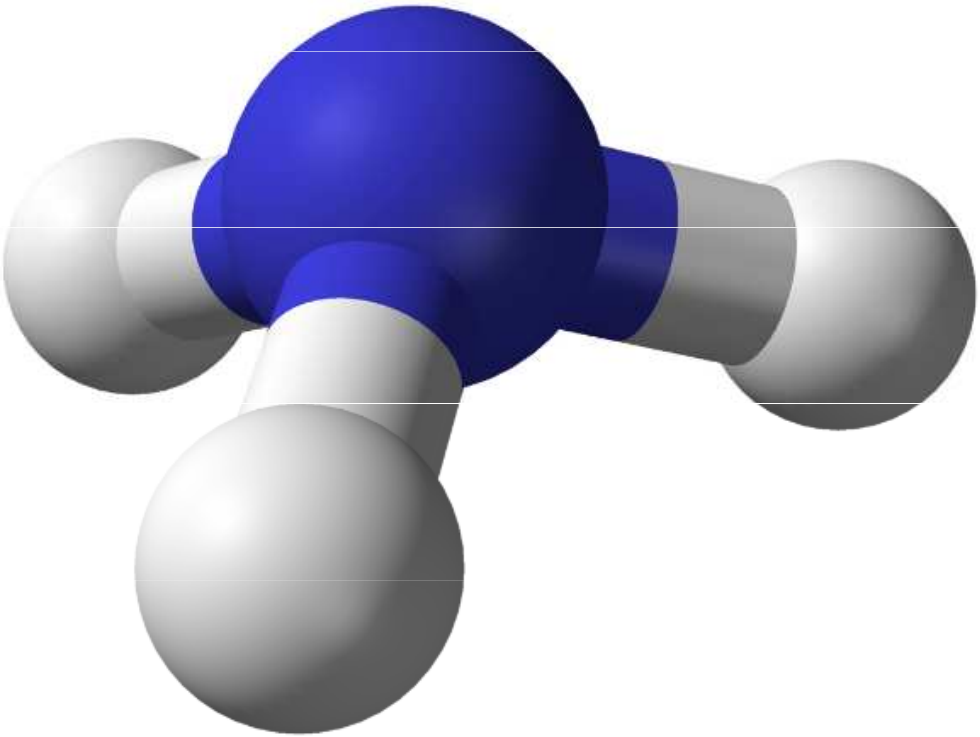
Prečo je čpavok pyramidálna molekula

RomanPetráš

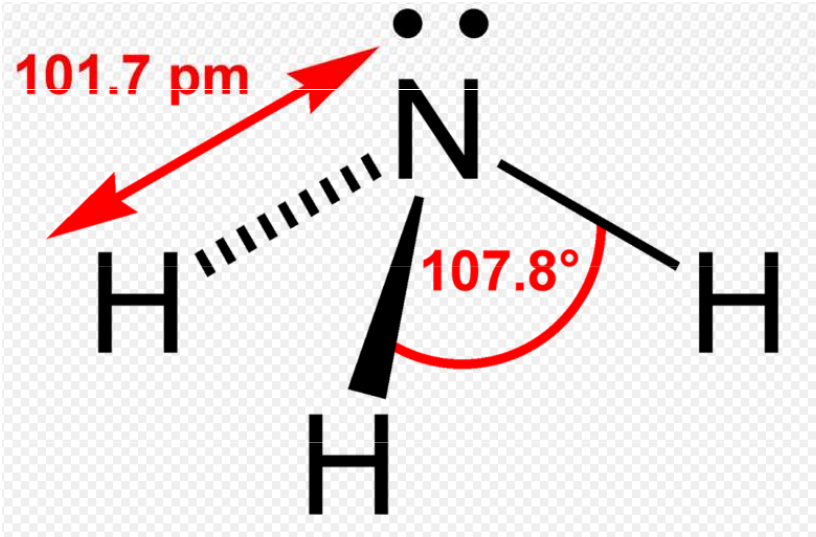
Osnova

- Základný popis
- Pojmy
- Jednoduchý model čpavk
- Teória hybridizácie
- Teória vsepr



Základný popis

- Amoniak alebo azan (triviálny názov čpavok) je bezfarebný veľmi štipľavý plyn
- Binárna zlúčenina dusíka a vodíka so vzorcom NH3.
- trojuholníková pyramída

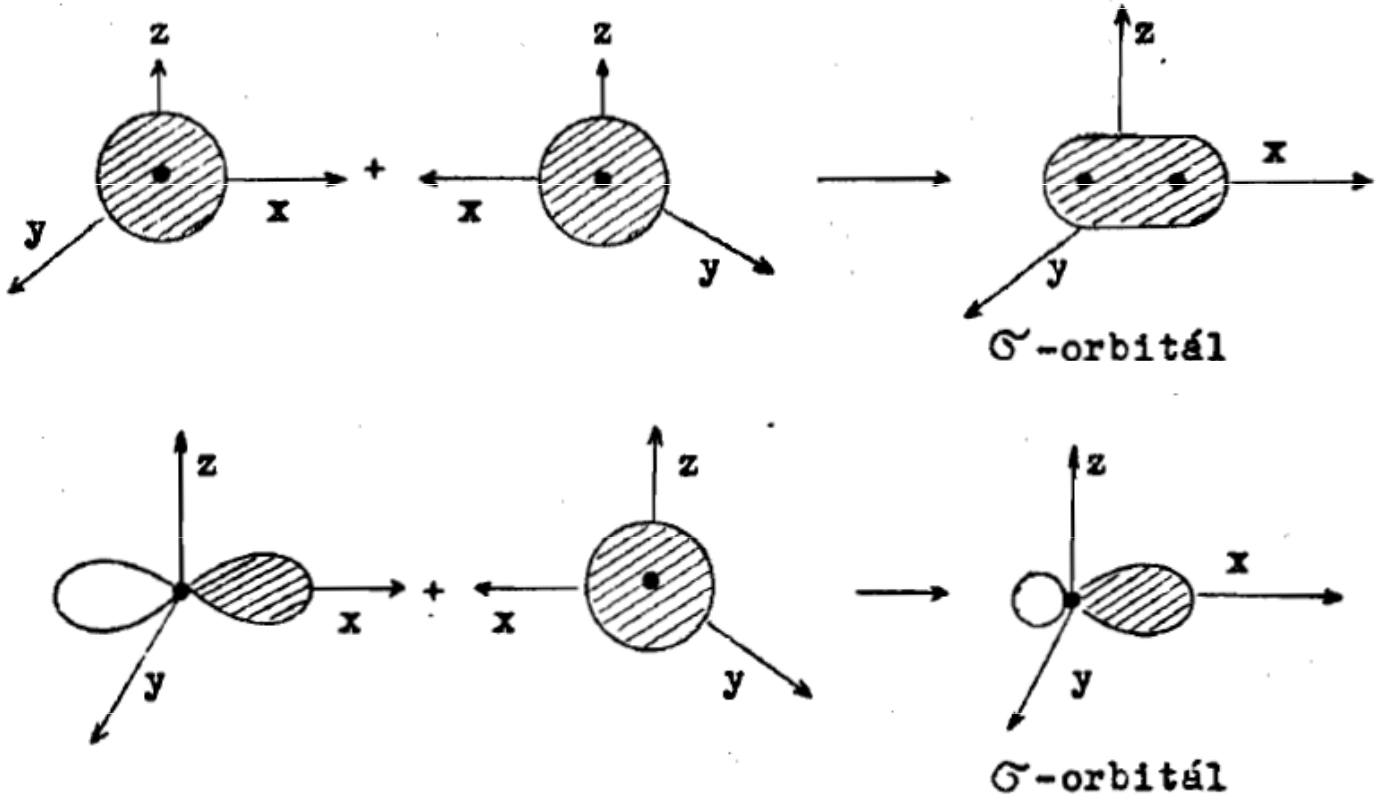


Pojmy

- Kovalentná väzba - typ chemickej väzby, ktorá vzniká medzi dvoma atómami, ktoré majú jeden alebo viac nespárených elektrónov a malý rozdiel elektronegativít
- Z hľadiska rozloženia elektronovej hustoty rozlišujeme dvojicu väzieb: sigma, pi.
- Ak sú atómy v molekule viazané jednoduchou väzbou jedná sa o väzbu sigma. Ak sú atómy viazané násobnou väzbou napríklad dvojitou, jedna z väzieb je sigma a druhá pí väzba.

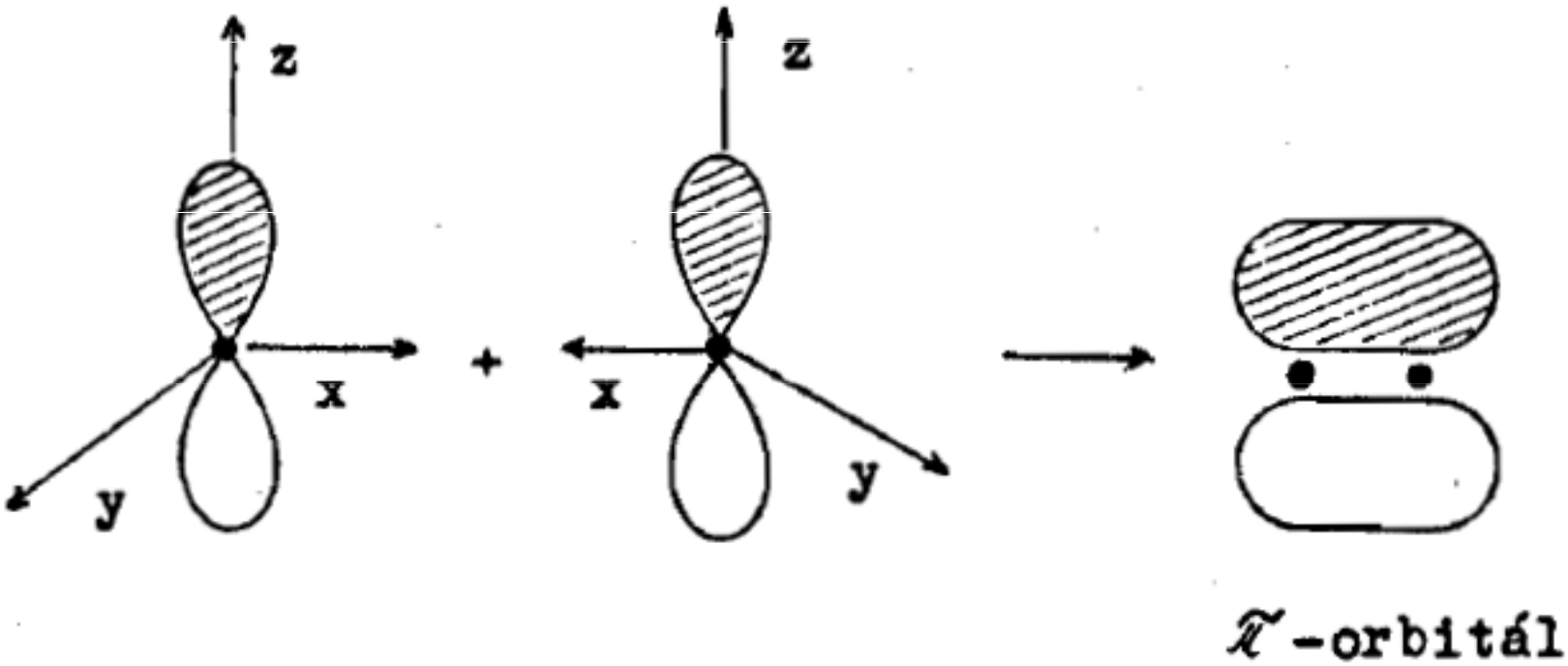
Pojmy

- σ väzba - elektrónová hustota je koncentrovaná medzi atómami a je rozložená rovnomerne okolo spojnice jadier.



Pojmy

- π väzba - elektronová hustota sa koncentruje do dvoch oblakov nad a pod spojnicou jader



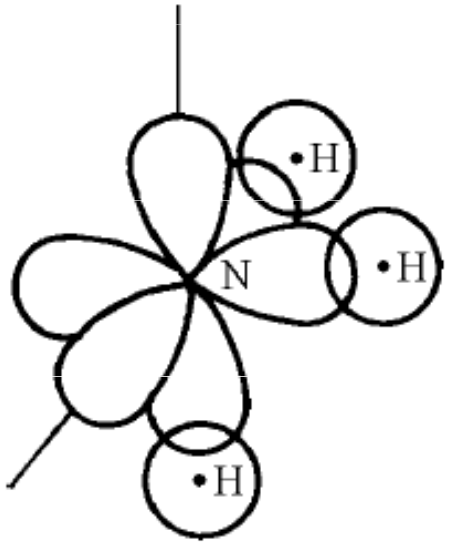
Jednoduchý model čpavku

- Vlnová funkcia elektrónu v atóme H je sféricky symetrická a neovplyvňuje smerové vlastnosti väzby v molekule.
- Elektrónová konfigurácia atómu dusíka je daná podľa nasledujúcej tabuľky

atóm N (7 elektrónov)	$1s$	$2s$	$2p_x$	$2p_y$	$2p_z$
	↑↓	↑↓	↑	↑	↑

- Atómy vodíka sa priviažu na tri *2p orbitaly dusíka. Tieto tri 2px, 2py, 2pz orbitaly majú smer osí x, y, z*

Jednoduchý model čpavku



Uhly medzi smermi jednotlivých väzieb sú takto 90°. V skutočnosti sú uhly väčšie, sú rovné 107,5°. Odchýlku možno kvalitatívne vysvetliť elektrostatickým odpudzovaním sa jadier atómov vodíka.

Motivácia

- Vysvetlenie tvaru molekuly CH4
- Identita všetkých štyroch C-H väzieb v molekule

	$1s$	$2s$	$2p_x$	$2p_y$	$2p_z$
exitovaný atóm C	↑↓	↑	↑	↑	↑

- Odpoveď sformuloval Linus Pauling v roku 1931 pomocou hybridizácie atómových orbitálov.

Teória hybridizácie

- Základom hybridizácie je predstava, že vo valenčnej vrstve atómu vznikajú lineárnou kombináciou energeticky rozdielnych atómových orbitálov energeticky rovnocenné hybridné orbitály. Pri tvorbe hybridných orbitálov platia určité pravidlá:
- Počet vytvorených hybridných orbitálov sa rovná počtu pôvodných atómových orbitálov, z ktorých vznikli.
- Hybridné orbitály môžu vzniknúť lineárnou kombináciou len energeticky blízkych atómových orbitálov (2s – 2p)
- Hybridné orbitály majú iné tvary ako orbitály, z ktorých pôvodne vznikli. Hybridné atómové orbitály sú nesymetricky rozložené vzhľadom na jadro atómu.

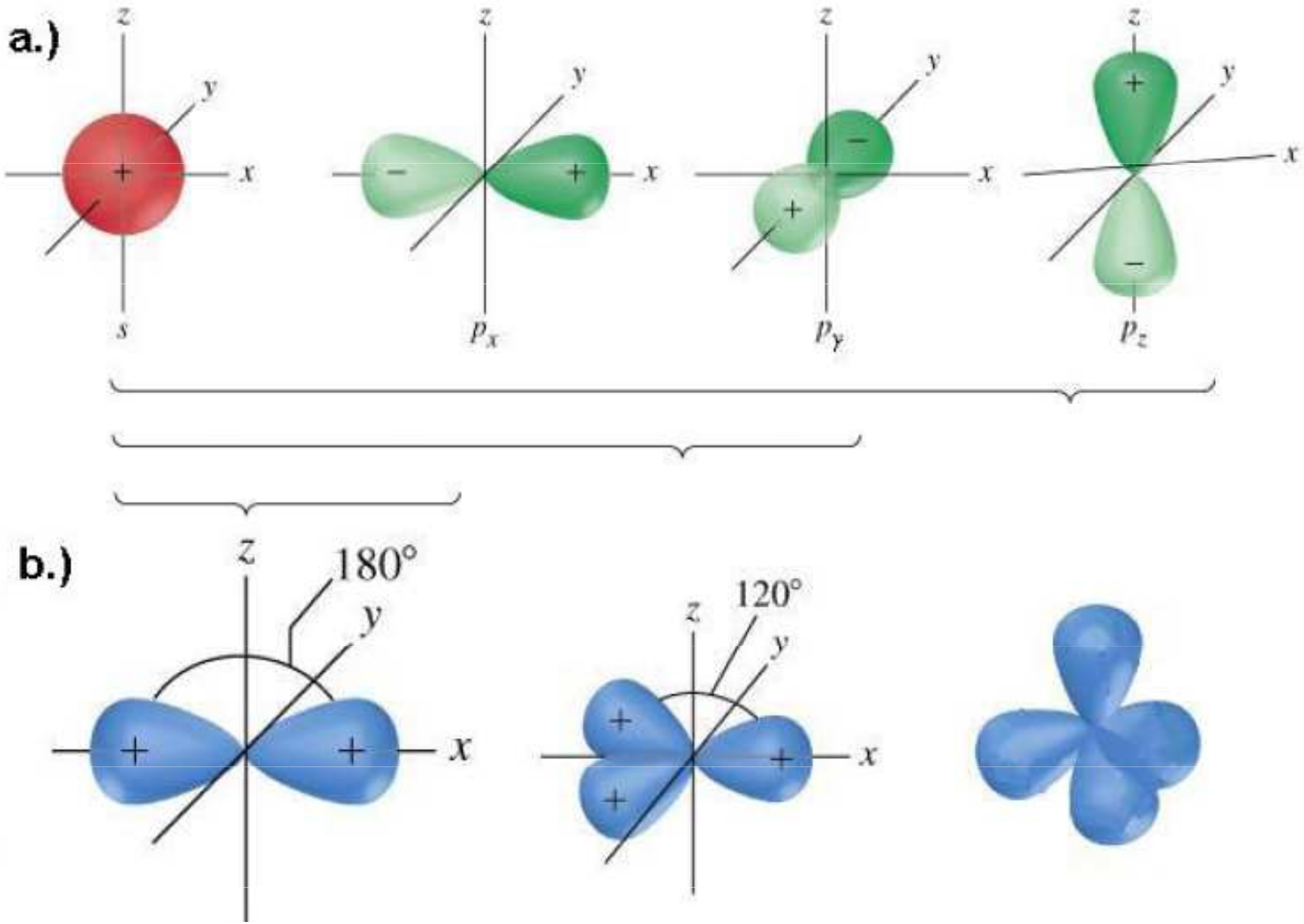
Teória hybridizácie

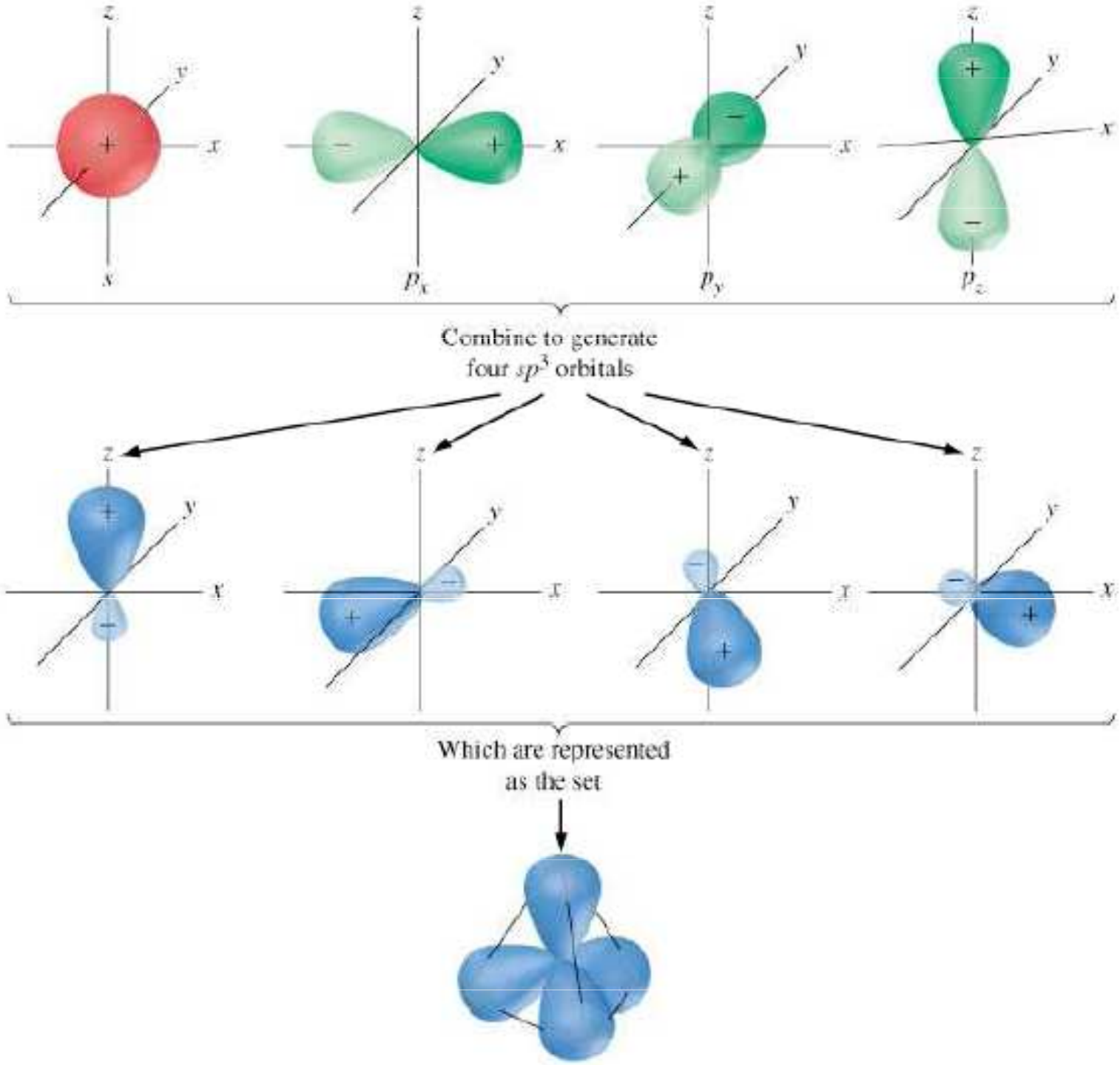
- V závislosti od toho, ktoré orbitály boli použité pri lineárnej kombinácii, hovoríme sp^1, sp^2 a sp^3 hybridizácii.

Sp1 hybridizácia – jeden 2s a jeden 2p orbitál

Sp2 hybridizácia – dva 2p a jeden 2s orbitál

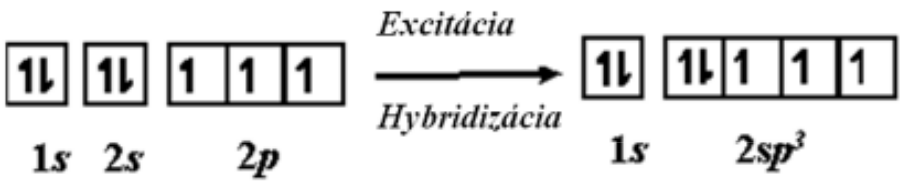
Sp3 hybridizácia – tri 2p a jeden 2s orbitál

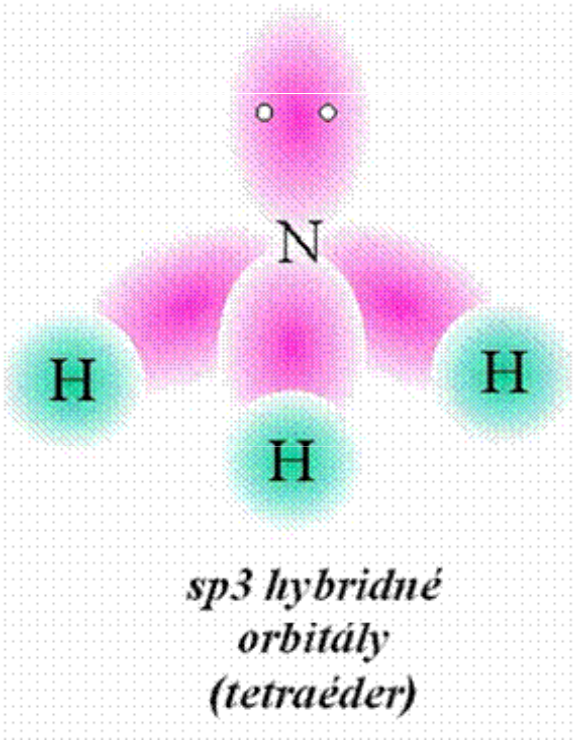

a.)
z
y
x
s
p_x
p_y
p_z
b.)
180°
120°


z
y
x
s
p_x
p_y
p_z
Combine to generate
four sp^3 orbitals
Which are represented
as the set

Prípad amoniaku

- Experimentálne zistené väzbové uhly v molekule NH3 ukazujú, že i väzby v týchto molekulách môžeme vysvetliť pomocí *sp3 hybridizácie atómových orbitálov dusíka, s* tým, že niektoré HAO sú zaplnené dvojicou elektrónov, ktorá sa neúčastní väzby (voľným elektrónovým párom). Taká hybridizácia sa nazyvá **neekvivalentní.** Voľné elektrónové páry sú príčinou nepravidelného priestorového tvaru.





- Orbitály sú modelom reprezentácie správanie elektrónov vo vnútri molekúl. V prípade jednoduchého hybridizácie je založená na priblížení atómových orbitálov, podobné tým, ktoré získal pre atóm vodíka, jediný atóm, pre ktoré je známe presné analytické riešenie Schrödinger rovnice. V ťažších atómov, ako je uhlík, dusík a kyslík, atómové orbitály sú použité 2s a 2p orbitály, podobné excitovaným stavom orbitálov vodíku. Hybridizáciou nie je nutné popisovať molekuly, ale pre molekuly zložené z uhlíka, dusíka a kyslíka (a v menšej miere, síry a fosforu) je popis oveľa jednoduchšií.

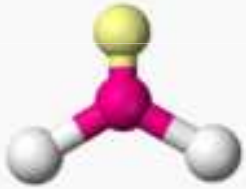
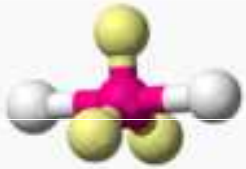
Teorie VSEPR - Valence Shell Electron Pair Repulsion = Teorie odpuzování elektronových párů ve valenční vrstvě

Teória VSEPR vychádza z jednoduchej predstavy o vzájomnom odpudzovaní elektrónových párov vo valenční vrstve viazaných atómov - elektrónové páry v najjednoduchších molekulách musia byť rozmiestnené okolo centrálneho atómu naproste symetricky.

"AXE metóda" počítania elektrónov sa bežne používa pri aplikácii teórie VSEPR. A predstavuje centrálny . X predstavuje počet sigma väzieb medzi centrálnymi atómami a ligandami. E predstavuje počet osamotené páry elektrónov obklopujúcich centrálnu atóm. Súčet X a E je známy ako stérické číslo.

Čo rozhoduje o tvare molekuly

- O základnom tvare molekuly rozhoduje číslo udávajúce súčet počtu väzbových elektrónových párov sigma a počtu neväzbových elektrónových párov, umiestených na centrálnom atómu molekuly.
- Väzbové elektrónové páry sigma a neväzbové elektrónové páry (n) sa rozmiestňujú do priestoru tak, aby mali čo najnižšiu energiu.
- Neväzbový elektrónový pár odpudzuje ostatné elektróny viac než väzbový.
- U násobných väzieb je odpudzovanie opäť väčšie, dôsledkom prítomnosti ďalších elektrónov, než u jednoduchej väzby.
- Odpudzovanie zdieľaných elektrónov závisí na rozdiele elektronegativít partnerov.

Molecule Type	Shape	Electron arrangement†	Geometry‡	Examples
AX_2E_0	Linear			$BeCl_2$, $HgCl_2$, CO_2
AX_2E_1	Bent			NO_2^-, SO_2, O_3, CCl_2
AX_2E_2	Bent			H_2O, OF_2
AX_2E_3	Linear			XeF_2, I_3^-, $XeCl_2$
AX_3E_0	Trigonal planar			BF_3, CO_3^{2-}, NO_3^-, SO_3
AX_3E_1	Trigonal pyramidal			NH_3, PCl_3

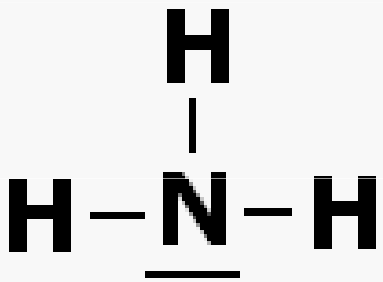
Určenie tvaru

Postup pri určovaní tvaru molekúl

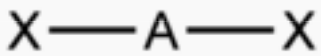
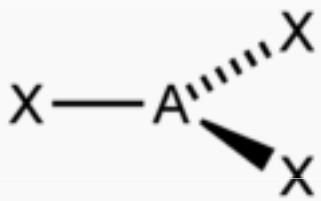
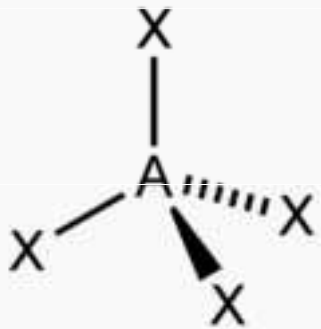
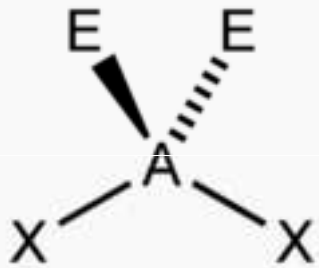
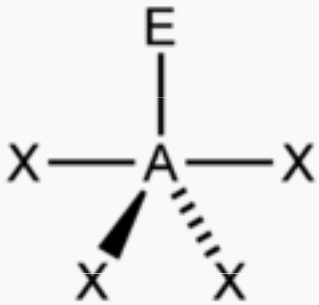
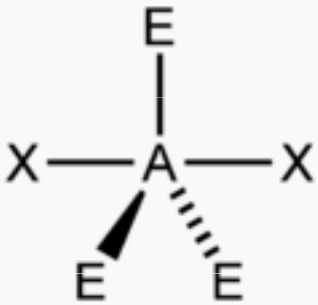
- a) Napíšeme si vzorec molekuly
- b) vypočítame si a = počet sigma väzieb
- c) vypočítame si b = počet voľných el. párov
- d) vypočítame si z = a+b

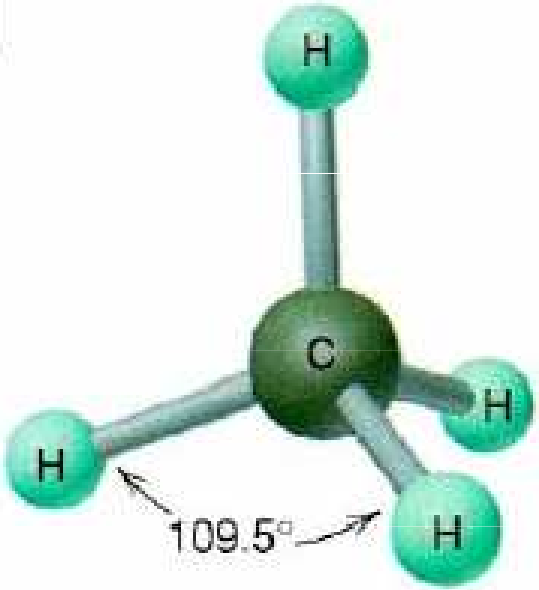
Určenie tvaru

NH_3 . . .

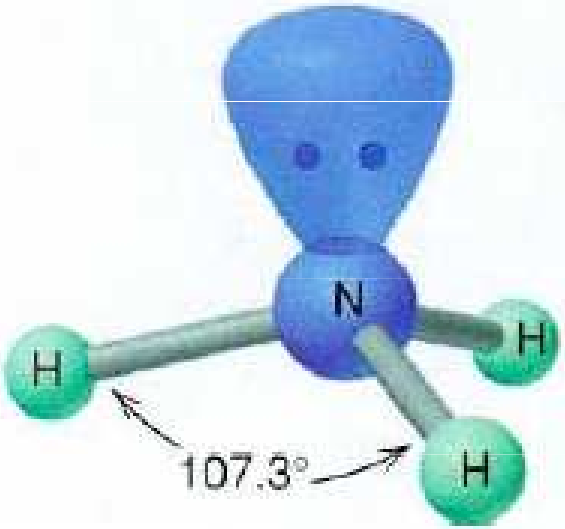


- Určíme si centrálny atóm - N - V.A skupina (5 valenčných elektrónov)
- Podľa rozkresleného vzorca vidíme, že N uplatnil 3 sigma väzby (a=3)
- N má celkom 5 valenčných el., z ktorých 3 sú vo väzbách (b=1 elektrónový pár)
- Spočítajme z=a+b=3+1=4

Steric No.	Basic geometry 0 lone pair	1 lone pair	2 lone pairs	3 lone pairs
2	 Linear (BeF_2)			
3	 Trigonal planar (SO_3)	Bent (CCl_2)		
4	 Tetrahedral (CH_4)	Trigonal pyramid (NH_3)	 Bent (H_2O)	
5	Trigonal bipyramid (PCl_5)	 Seesaw (SF_4)	T-shaped (ClF_3)	 Linear (I_3^-)



Tetraedr



Trojboká pyramida

Obecne

- Dusík v molekule amoniaku a odvodených amínov nesie tri substituenty pútané jednoduchou s väzbou a jeden neväzbový elektrónový pár. Všetky elektrónové páry smerujú do vrcholu tetraedra, pretože sú však pre tvar molekuly určujúce iba atómy, hovoríme, že molekula amoniaku ma tvar trojbokej pyramídy s atómom dusíka na vrchole. Neväzbový elektrónový pár atómu dusíku môže prispieť ku vzniku novej väzby po kombinácii s prázdnym orbitálom. Koordinácia atómu dusíku vo vzniknutom amóniovom katióne bude tetraedrická, pokiaľ budú skupiny viazané na atóm dusíku rôzne, dôjde tiež k menšej nebo väčšej deformácii tvaru tetraedru.

Literatúra

- Prostorové uspořádání molekul organických sloučenin - Jaromír Literák
- http://physics.mff.cuni.cz/kchfo/burda/OCh/Part03.pdf
- http://inorgchem.muni.cz/cho/podzim2003/vsepr.pdf
- http://heylottka.blog.cz/0801/tvary-molekul-aneb-vsepr-1,2-cast
- http://en.wikipedia.org/wiki/VSEPR_theory
- http://www.scribd.com/doc/68624881/Hybridizacia-a-štruktura-molekul-v-priestore
- http://volejnik.tym.cz/03a_principy_metody_vsepr.htm
- Teória hybridizácie - Mgr. Zuzana Szocsová
- O atómoch a kvantovaní - JÁN PIŠÚT, RUDOLF ZAJAC
- http://fst2010sst.gosys.sk/download/chemia/Prvky_kovovych_a_polokovovych_vlastosti.pdf
- http://www.fns.uniba.sk/fileadmin/user_upload/editors/chem/kor/organika/Org-2_Vazby_acidobaz.pdf

Prof. Ing. Jaroslav Kováč, DrSc., Prof. Dr. Ing. Štefan Kováč, DrSc., Organická chémia , 1.diel – 8. VSEPR, hybridizace a ligandové pole. VB-metody. Kvantově chemické výpočty. Funkcionál hustoty. - prof. RNDr. Jiří Pinkas, Ph.D.