

ODVOZENÍ TVARU MOLEKULY POMOCÍ METODY VSEPR

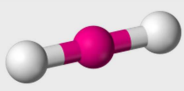
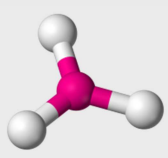
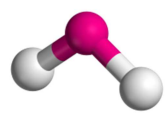
K popisu uspořádání elektronových párů kolem atomů v molekulách a následně k předpovědi či zdůvodnění tvarů molekul používáme teorii VSEPR (Valence Shell Electron Pair Repulsion theory). Tato teorie je vhodná pouze pro sloučeniny s-prvků a p-prvků (1., 2., 13. až 18. skupina), pro sloučeniny d-prvků se použít nedá, v jejich případě může být elektronová struktura odlišná.

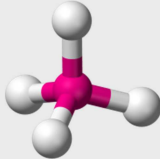
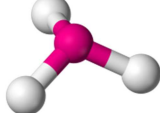
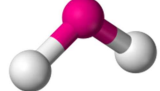
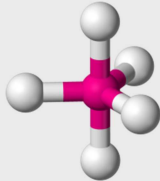
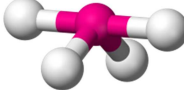
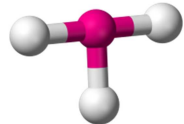
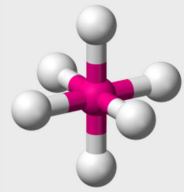
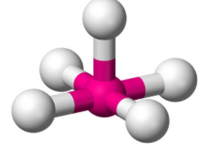
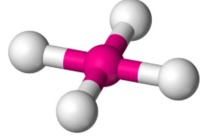
Tato teorie například umožňuje vysvětlit, proč mají některé molekuly - např. SO_2 a CO_2 - stejnou stechiometrii, stejnou topologii (kyslíky vázány k centru, $\text{O}-\text{C}-\text{O}$ a $\text{O}-\text{S}-\text{O}$), ale jiný tvar a jiné vlastnosti. Molekula CO_2 je lineární, molekula SO_2 je lomená; v případě CO_2 získáme zkapalněním nepolární rozpouštědlo, které dobře rozpouští nepolární organické molekuly (využívá se pro extrakci kofeinu z kávy). V případě SO_2 dostaneme polární rozpouštědlo, v němž lze rozpustit iontové soli a měřit vodivost. Vysvětlit tyto rozdíly je možno teprve tehdy, když vezmeme v úvahu nejen atomy a vazby mezi nimi, ale také vliv všech valenčních elektronů, které daná částice obsahuje a které se vzájemně odpuzují.

Elektronové páry (ať už vazebné nebo nevazebné) v okolí každého atomu jsou v prostoru umístěny tak, aby se co nejméně odpuzovaly. Počet elektronových párů v okolí atomu se nazývá sterické koordinační číslo. V následující tabulce je přehled základních tvarů molekul pro sterická koordinační čísla 2-6. Zobrazen je vždy základní tvar s ideálními hodnotami úhlů a dále tvary odvozené, kde vazebné úhly a délky závisí na konkrétních poměrech v molekule.

Postup při odvození tvaru molekuly:

1. Sestrojíme elektronový vzorec zadané částice. Pro účely odvození tvaru stačí dojít do stavu skeletu molekuly s umístěním všech valenčních elektronů (bod 3 v návodu na sestavení el. vzorce v této aplikaci)
2. Určíme sterické koordinační číslo centrálního atomu jako součet σ -vazeb a volných elektronových párů (v.e.p.) na centrálním atomu.
3. Pokud jsou všechny elektronové páry vazebné, tedy je-li sterické koordinační číslo rovno počtu substituentů, a dále pokud jsou všechny substituenty totožné, odpovídá tvar molekuly základnímu tvaru pro dané sterické koordinační číslo. Je-li jeden nebo více elektronových párů na centrálním atomu nevazebných, nebo pokud dojde k substituci atomů, bude tvar molekuly odvozen z tohoto základního tvaru.

sterické koordinační číslo		vazebné úhly	tvar molekuly
2	2 σ -vazby	180°	 lineární molekula
3	3 σ -vazby	120°	 trojúhelník
	2 σ -vazby + 1 volný e ⁻ pár	$\neq 120^\circ$	 lomená molekula

sterické koordinační číslo		vazebné úhly	tvar molekuly
4	4 σ -vazby	109,5°	 tetraedr
	3 σ -vazby + 1 volný e ⁻ pár	≠ 109,5°	 trigonální pyramida
	2 σ -vazby + 2 volné e ⁻ páry		 lomená molekula
5	5 σ -vazeb	90° a 120°	 trigonální bipyramida
	4 σ -vazby + 1 volný e ⁻ pár	≠ 90° ≠ 120°	 houpačka
	3 σ -vazby + 2 volné e ⁻ páry		 T-tvar
6	6 σ -vazeb	90°	 oktaedr
	5 σ -vazeb + 1 volný e ⁻ pár	≠ 90°	 tetragonální pyramida
	4 σ -vazby + 2 volné e ⁻ páry	90°	 čtverec

Obrázky převzaty z <https://commons.wikimedia.org>