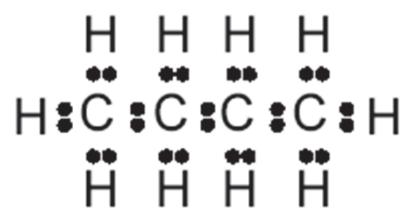
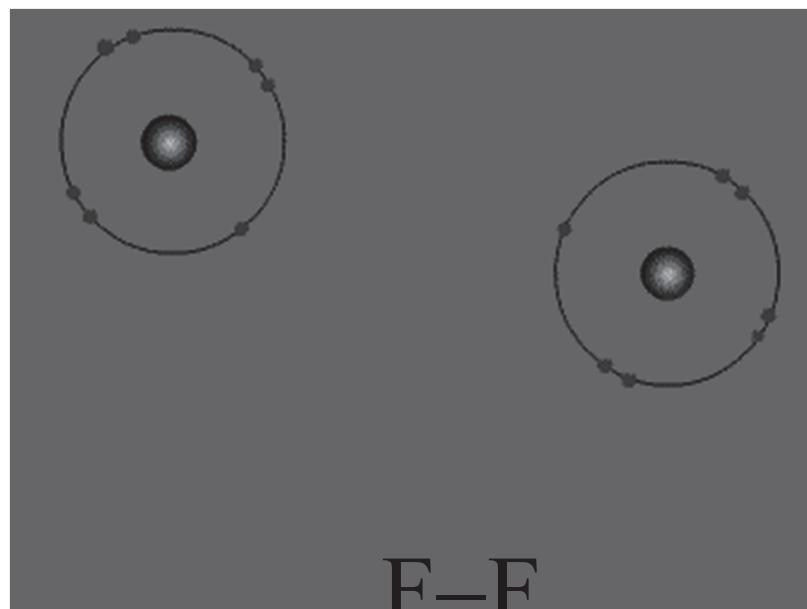


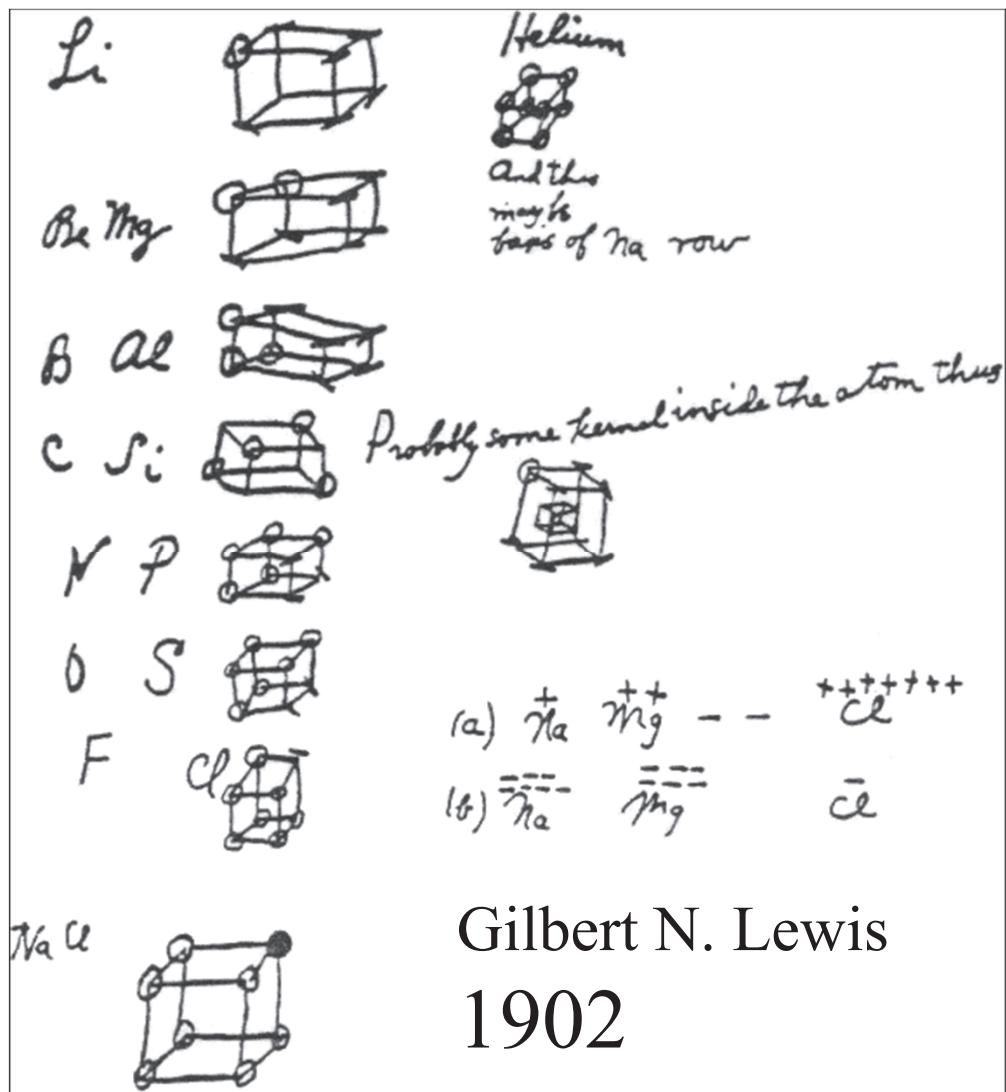
Gilbert N. Lewis
(1875-1946)

Kovalentní vazba

Atomy se sdílením elektronových párů snaží doplnit svou valenční sféru na elektronový oktet



Oktetové pravidlo



He $1s^2$

Ne $[\text{He}] 2s^2 2p^6$

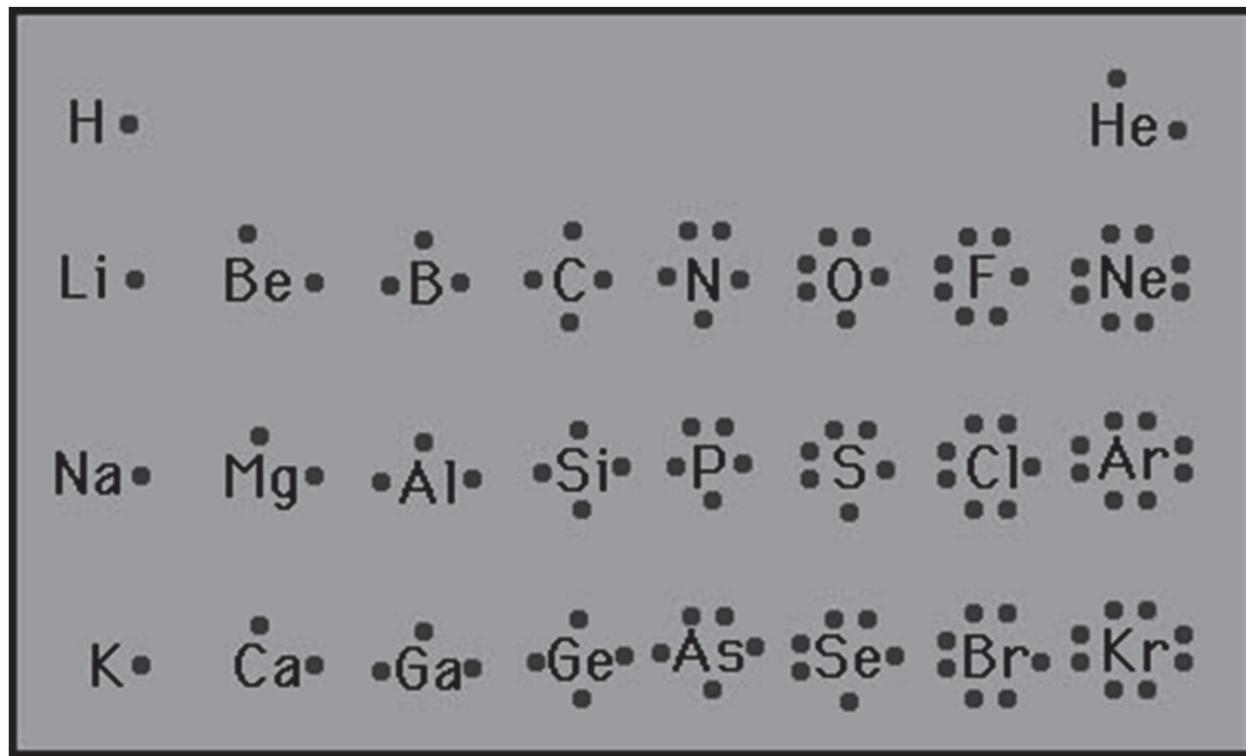
Ar $[\text{Ne}] 3s^2 3p^6$

Kr $[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^2 4p^6$

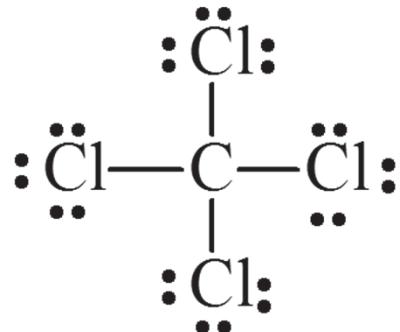
Xe $[\text{Kr}] 4d^{10} 5s^2 5p^6$

Rn $[\text{Xe}] 4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^6$

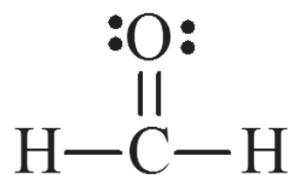
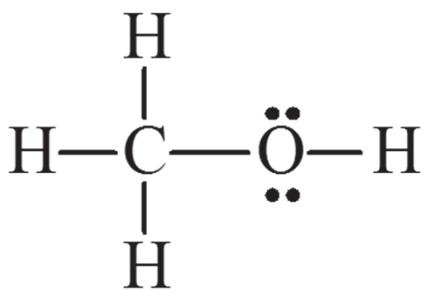
Lewisovy struktury



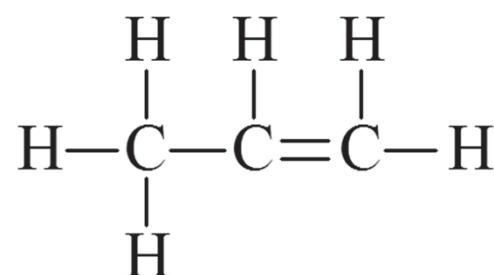
Lewisovy struktury



$n = 5$, $E = 32$ (počet elektronů)
 $8n-E = 40-32 = 8$ sdíleno
 $S = 8$ (4 jednoduché vazby)
 $P = 8n-E-S = 0$ (násobné vazby)
 $E-S-P = 24$ (volné el. páry = 12)



$n = 4$, $E = 12$ (počet elektronů)
 $2.2+2.8-E = 20-12 = 8$ sdíleno
 $S = 6$ (3 jednoduché vazby)
 $P = 8n-E-S = 2$ (1 násobná vazba)
 $E-S-P = 4$ (volné el. páry = 2)



$n = 4$, $E = 10$ (počet elektronů)
 $2.2+8.2-E = 20-10 = 10$ sdíleno
 $S = 6$ (3 jednoduché vazby)
 $P = 8n-E-S = 4$ (2 násobné vazby)
 $E-S-P = 0$ (volné el. páry = 0)



$n = 3$, $E = 10$ (počet elektronů)
 $2.1+8.2-E = 18-10 = 8$ sdíleno
 $S = 4$ (2 jednoduché vazby)
 $P = 8n-E-S = 4$ (2 násobné vazby)
 $E-S-P = 2$ (volné el. páry = 1)

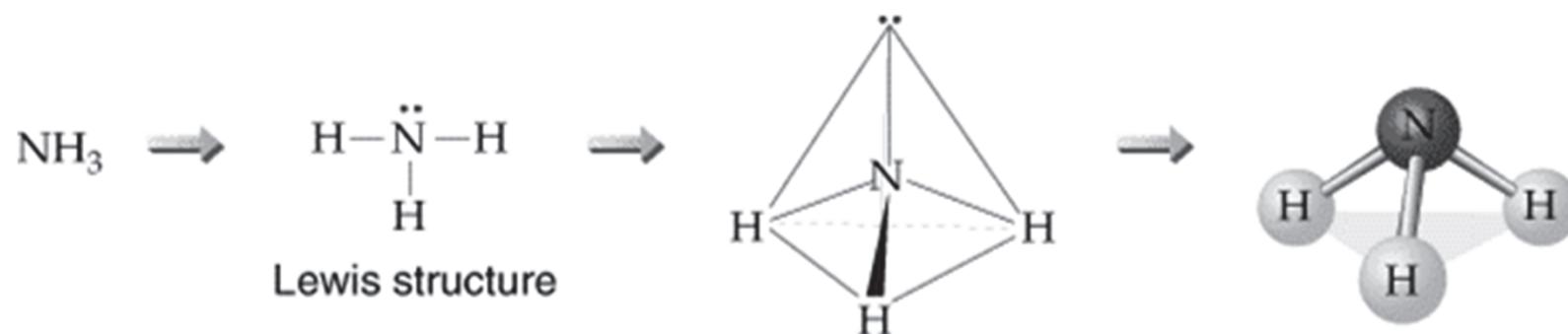


VSEPR

VSEPR = valence shell electron repulsion

Odpuzování elektronových párů ve valenční vrstvě

Empirický soubor pravidel, podle kterého lze snadno určit tvar koordinační sféry atomů a tedy tvar molekul, iontů a molekulových fragmentů prvků hlavních skupin nebo přechodných kovů s elektronovou konfigurací d^0 nebo d^{10} .



VSEPR

Molekula = centrální atom + ligandy + volné elektronové páry

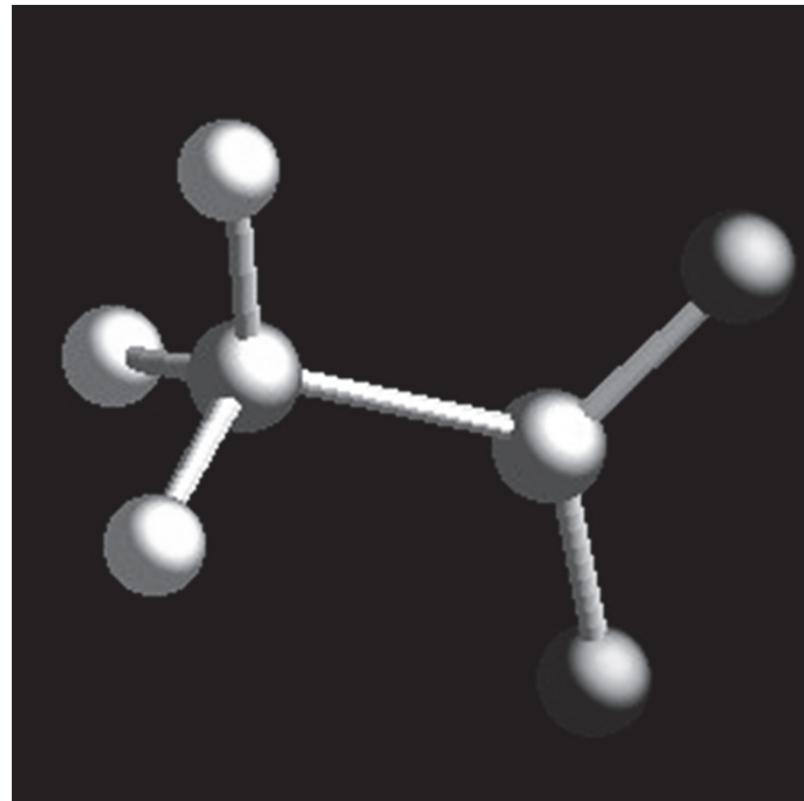
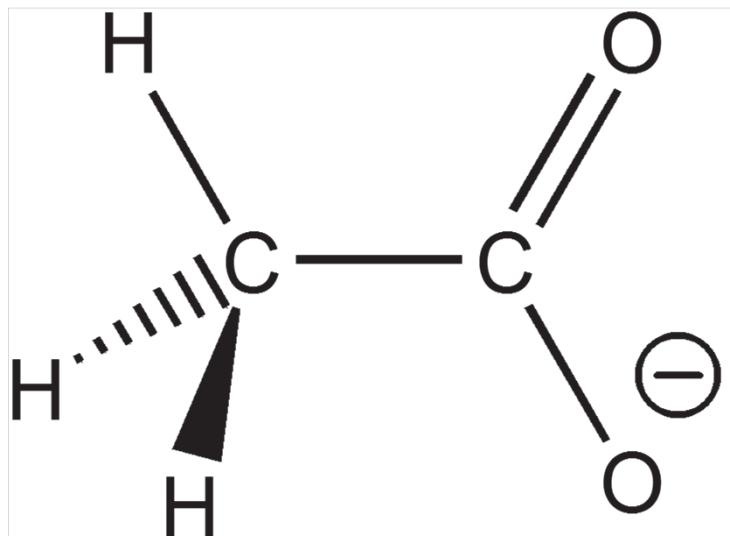
ligandy = jiné atomy nebo skupiny

Ligandy mají obvykle vyšší elektronegativitu než centrální atom (ne H nebo kovy)

Valenční elektrony uspořádány do dvojic:

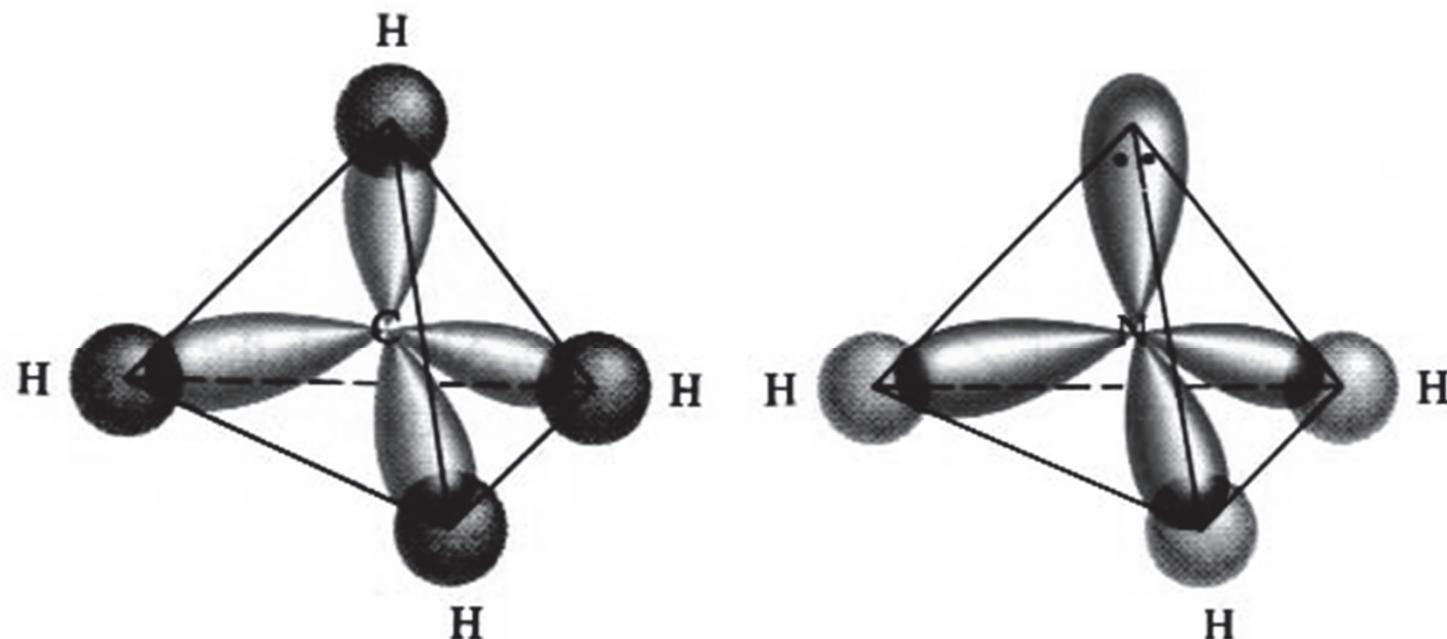
- Vazebné elektronové páry
- Volné (nevazebné) elektronové páry

Centrální atom - ligand



VSEPR

Pro určení základního tvaru koordinační sféry atomu je důležitý počet obsazených **směrů** = počet volných elektronových párů a počet vazeb (bez ohledu na násobnost !!)



VSEPR

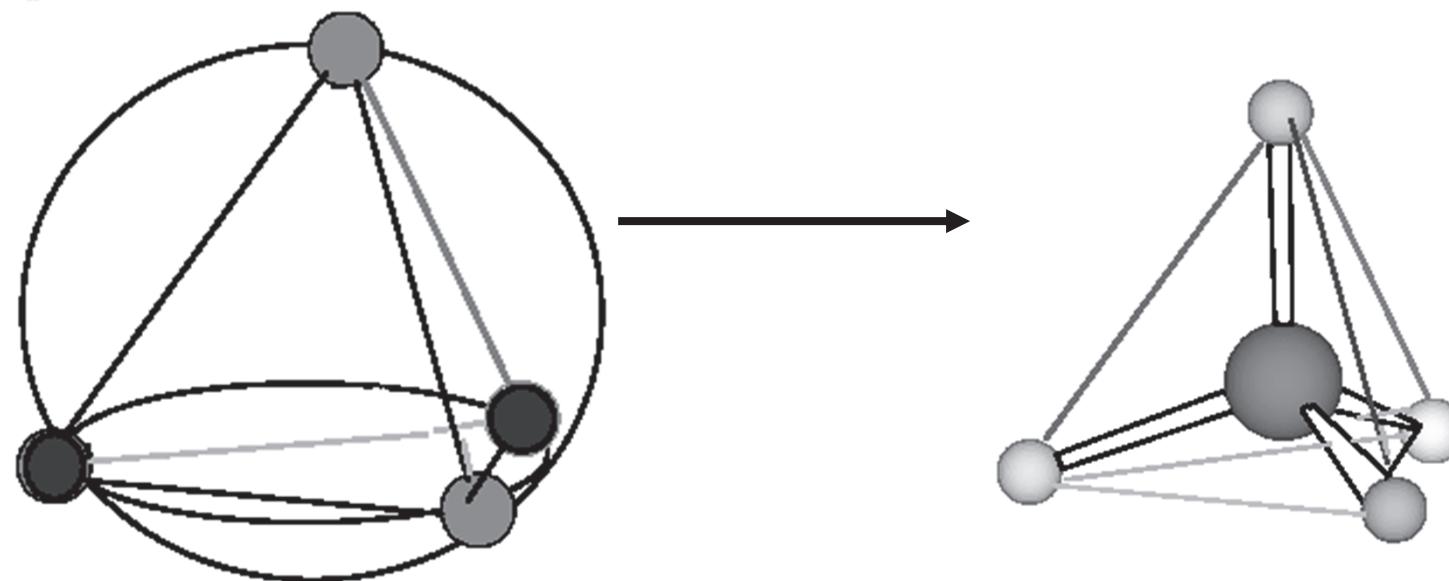
Každý elektronový pár zaujímá určitý prostor kolem centrálního atomu a „zabraňuje“ přístupu ostatním elektronům (odpuzuje je) = Pauliho princip výlučnosti.

Elektronové páry se uspořádají v prostoru kolem centrálního atomu **co nejdále od sebe**, aby se co nejméně odpuzovaly.

Volné elektronové páry „zaujímají“ **větší** část prostoru kolem centrálního atomu a jsou mu blíže než **vazebné** elektronové páry.

Volný > Vazebný

Tetraedrická molekula methanu CH_4



Umístit 4 body na povrchu koule tak, aby měly mezi sebou maximální vzdálenost → tetraedr

VSEPR

Volné elektronové páry a jednotlivé vazby zaujmou v prostoru kolem centrálního atomu uspořádání s nejnižší energií, tj. s nejmenším odpuzováním mezi elektronovými páry:

centrální atom + 2 ligandy

lineární

centrální atom + 3 ligandy

rovnostranný trojúhelník

centrální atom + 4 ligandy

tetraedr

centrální atom + 5 ligandů

trigonální bipyramida nebo
čtvercová pyramida

centrální atom + 6 ligandů

oktaedr

centrální atom + 7 ligandů

pentagonální bipyramida

VSEPR

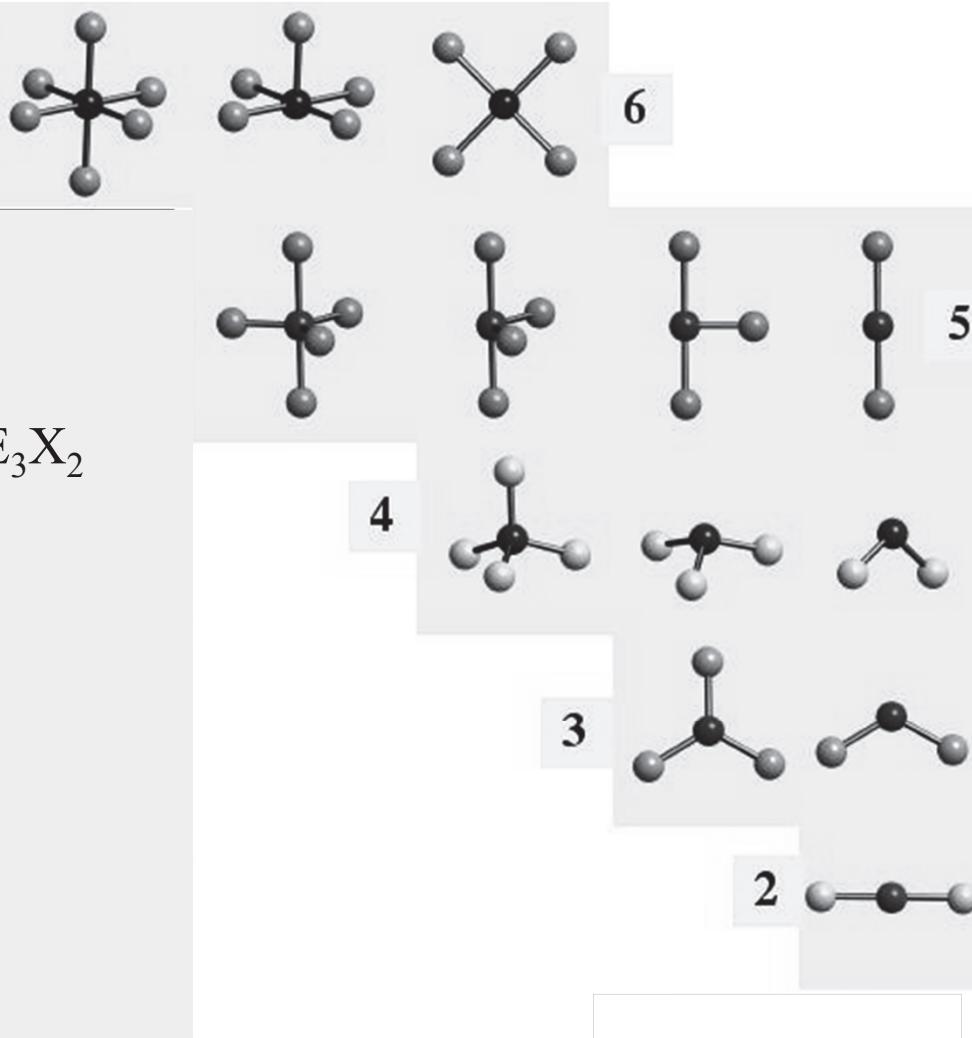
$\text{AX}_6 \quad \text{AEX}_5 \quad \text{AE}_2\text{X}_4$

$\text{AX}_5 \quad \text{AEX}_4 \quad \text{AE}_2\text{X}_3 \quad \text{AE}_3\text{X}_2$

$\text{AX}_4 \quad \text{AEX}_3 \quad \text{AE}_2\text{X}_2$

$\text{AX}_3 \quad \text{AEX}_2$

AX_2



VSEPR

Pro pojmenování výsledného tvaru molekuly uvažujeme
jen polohy jader, NE volné elektronové páry

Objem obsazený vazebnými el.páry klesá v řadě :

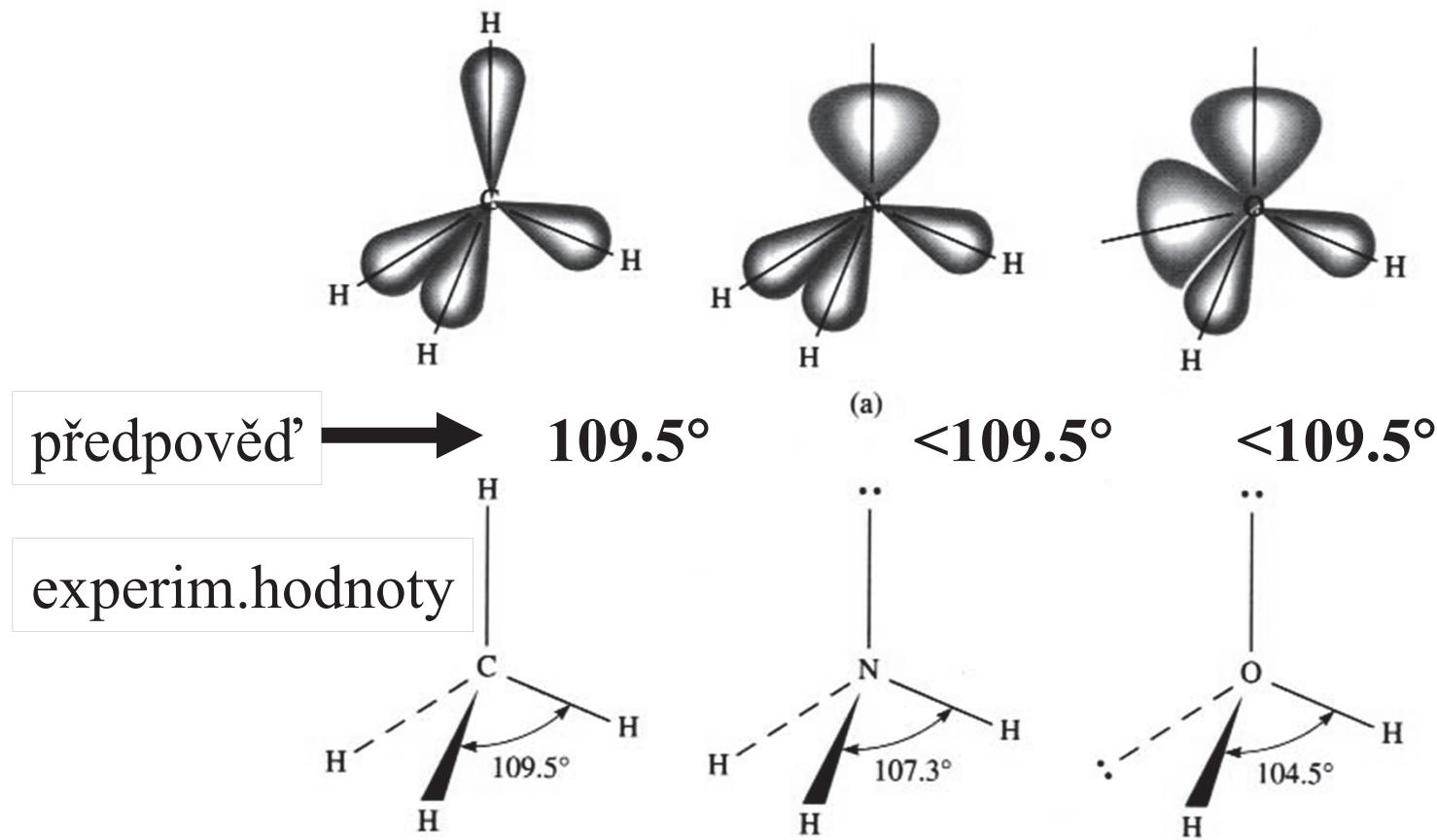
trojná vazba > dvojná vazba > jednoduchá vazba.

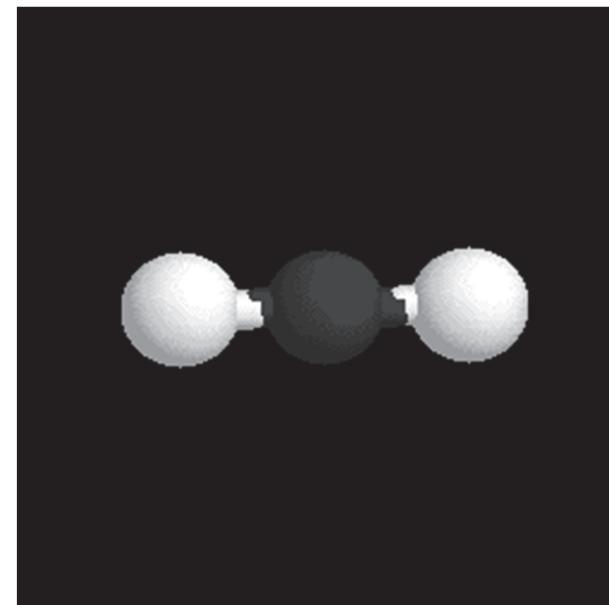
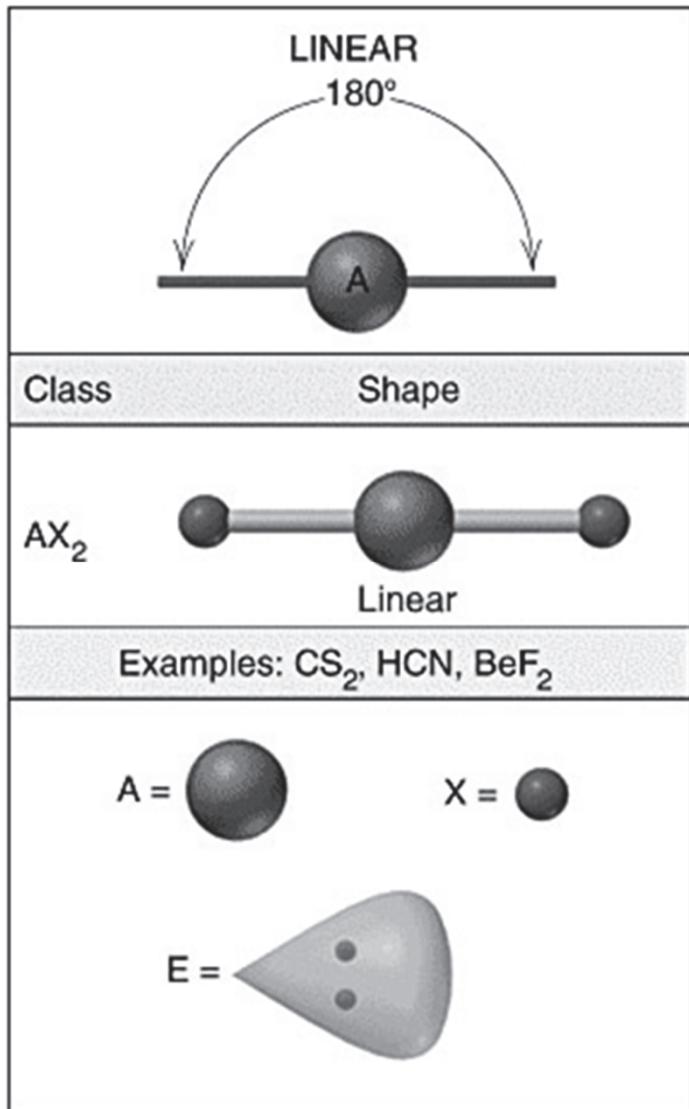
Odpuzování mezi el.páry klesá v řadě:

volný-volný > volný-vazebný > vazebný-vazebný

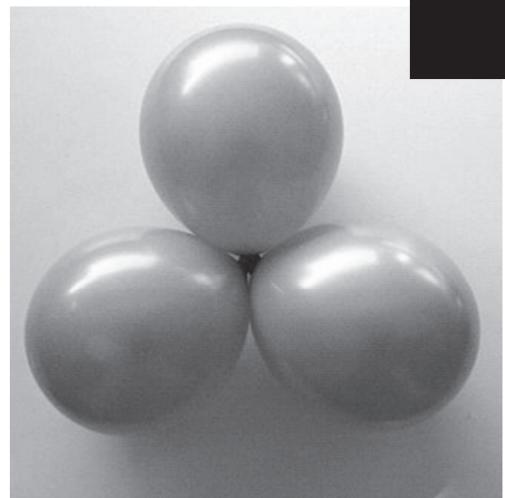
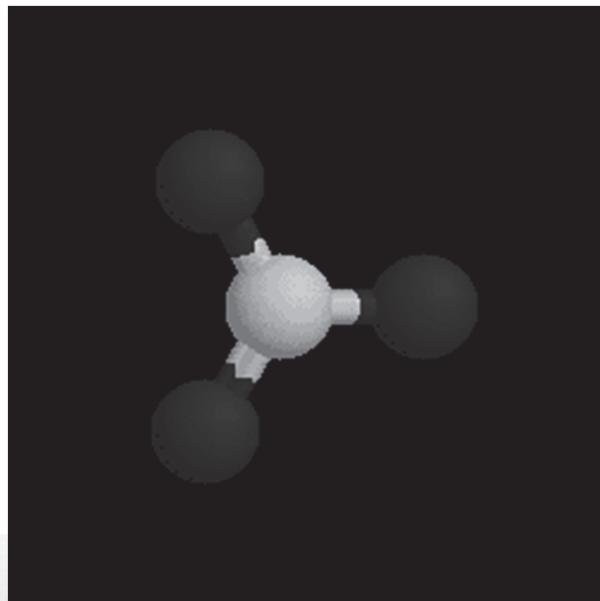
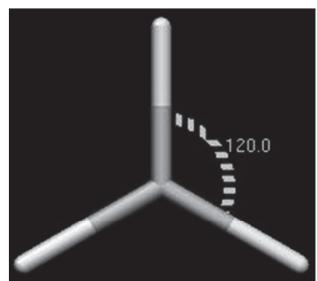
Změny vazebných úhlů

VSEPR předpovídá změnu vazebního úhlu od ideální hodnoty
Ne však numerickou hodnotu vazebního úhlu





AX_2
Vazebný úhel = 180°

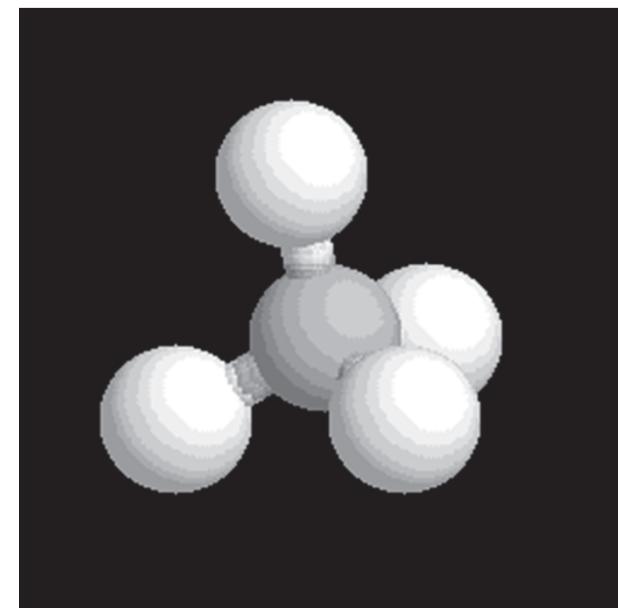
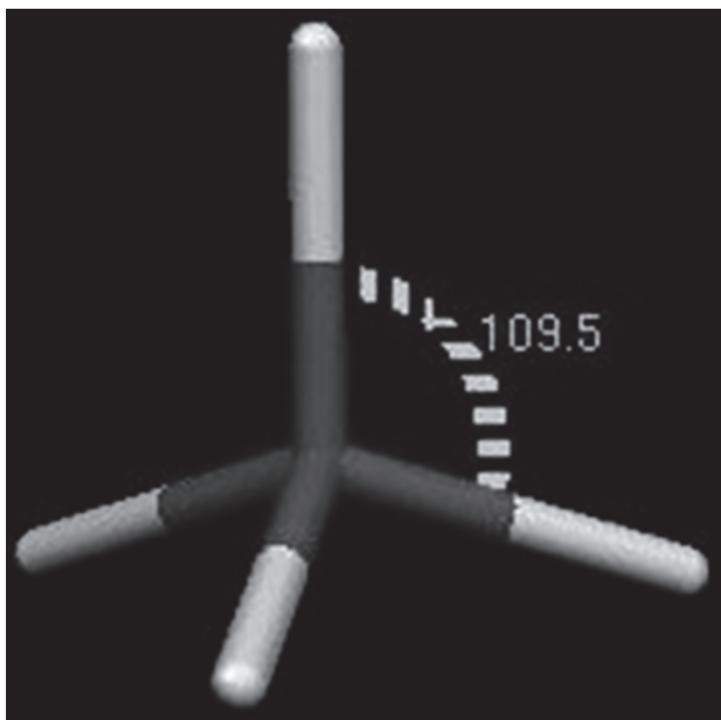


AX_3 : Vazebný úhel = 120°

AEX_2 : Vazebný úhel < 120°

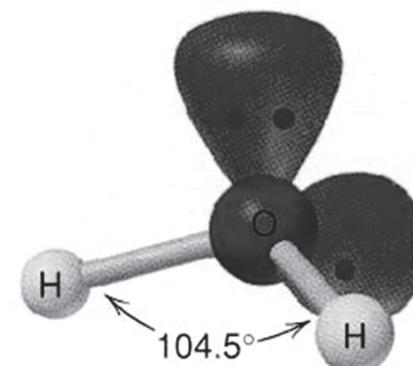
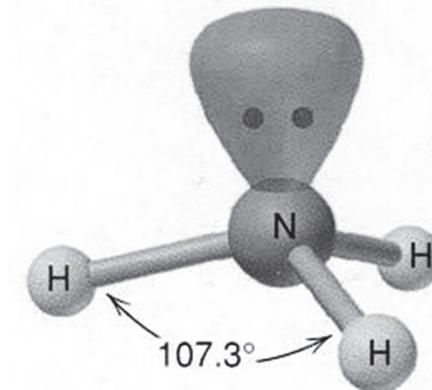
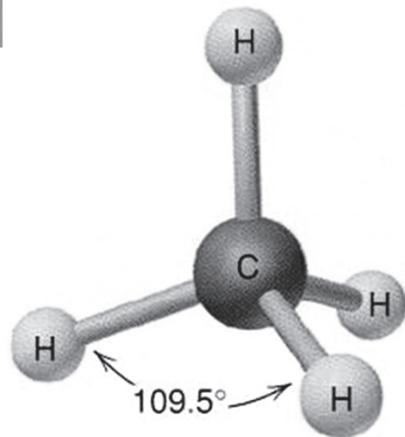
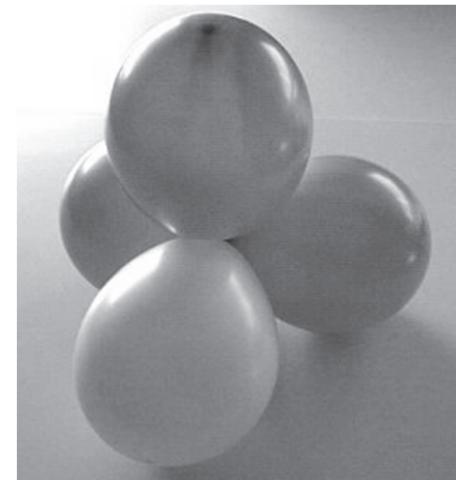
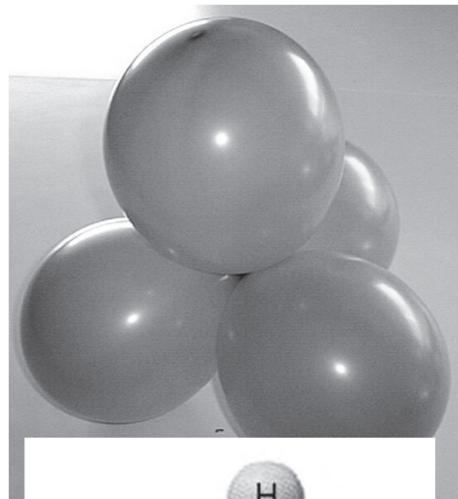
Class	Shape
AX_3	Trigonal planar
Examples: SO_3 , BF_3 , NO_3^- , CO_3^{2-}	
AX_2E	Bent (V shaped)
Examples: SO_2 , O_3 , PbCl_2 , SnBr_2	

Tetraedrický vazebný úhel



Tetraedrický vazebný úhel = 109.5°

Deformace vazebných úhlů



Tetraedr

Trojboká pyramida

Lomená

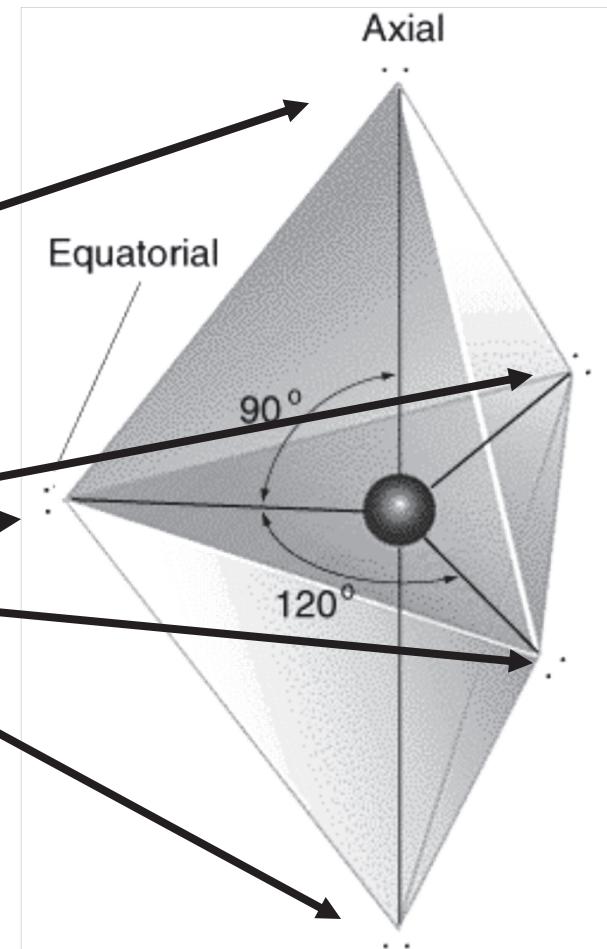
Trigonální bipyramida

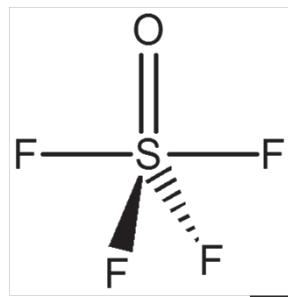
TBP má dva různé typy vrcholů =
dva chemicky odlišné typy
substituentů, pozic

Dvě axiální

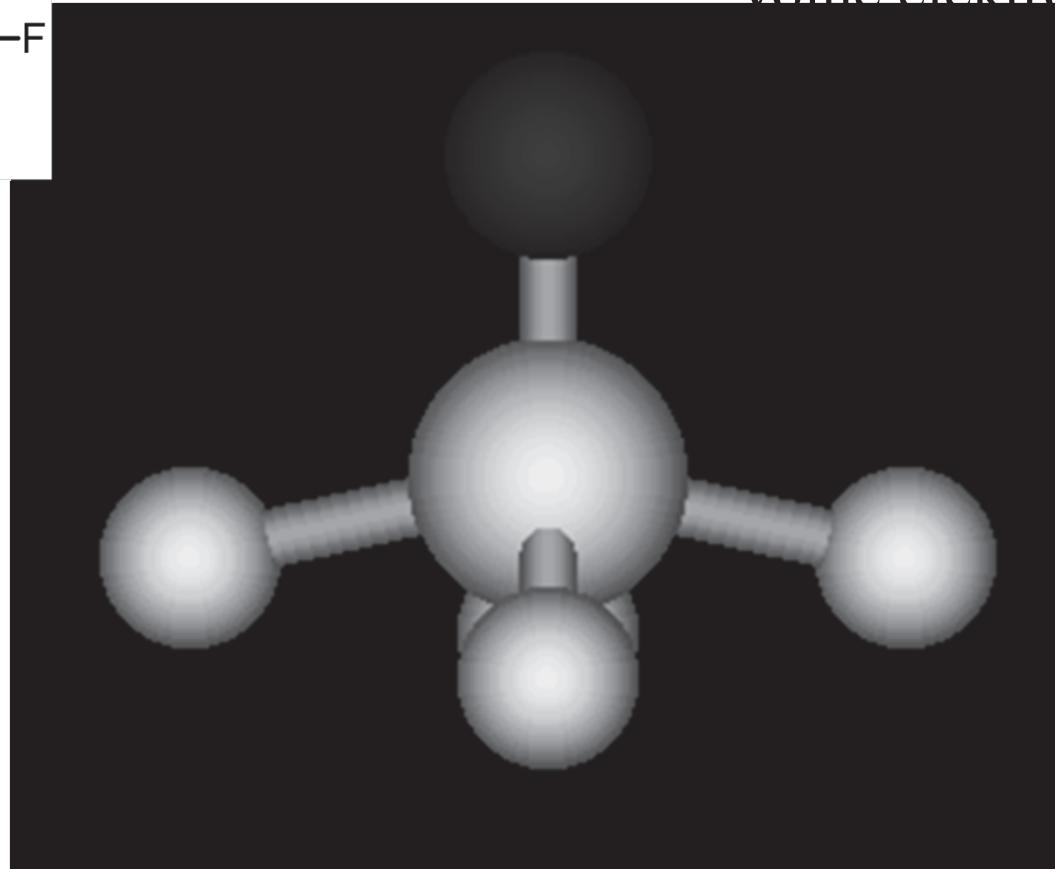
Tři ekvatoriální

Volné elektronové páry a násobné
vazby obsazují vždy ekvatoriální
polohy

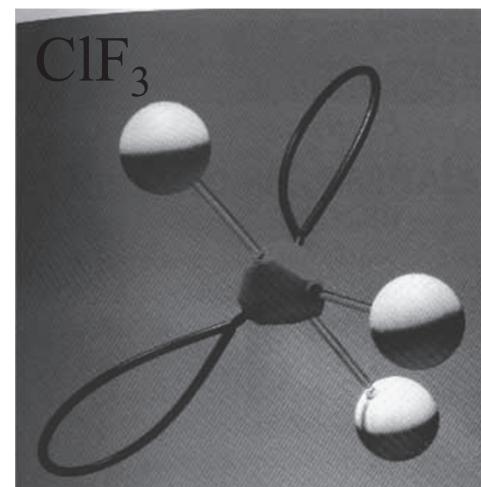
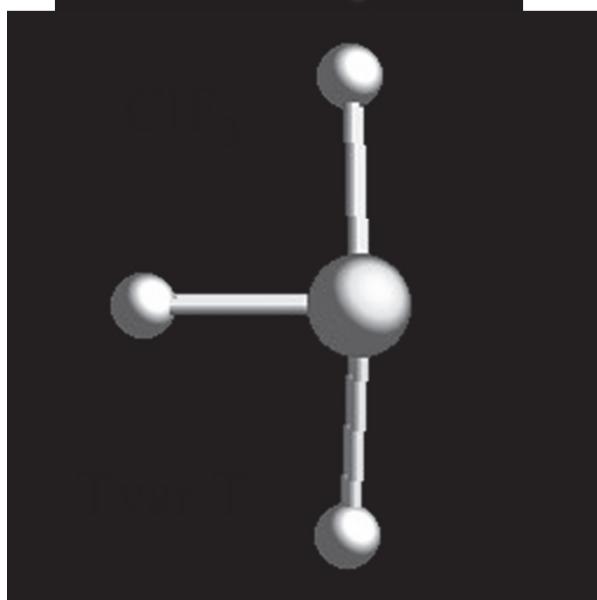
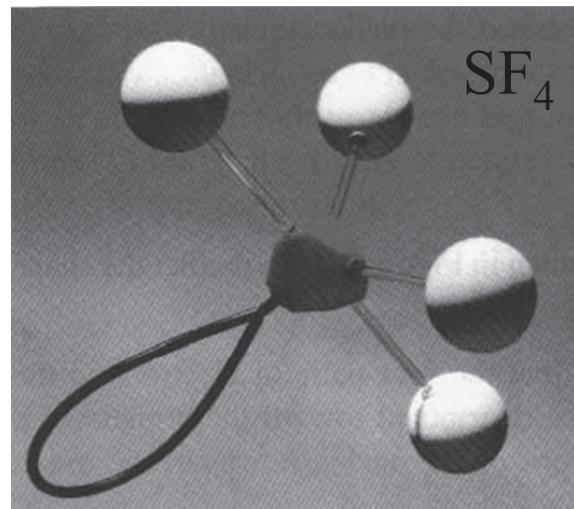
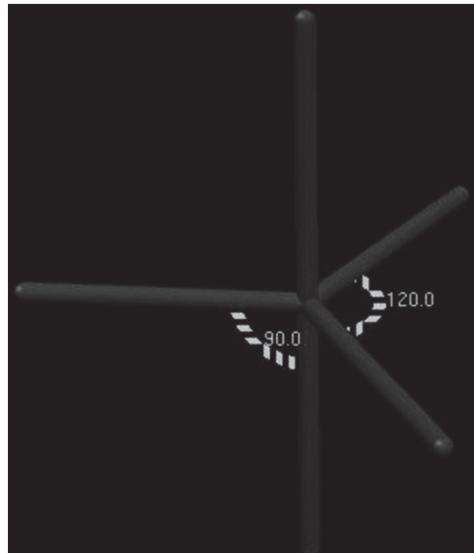




Volné elektronové páry a
pary obsazují
priální polohy



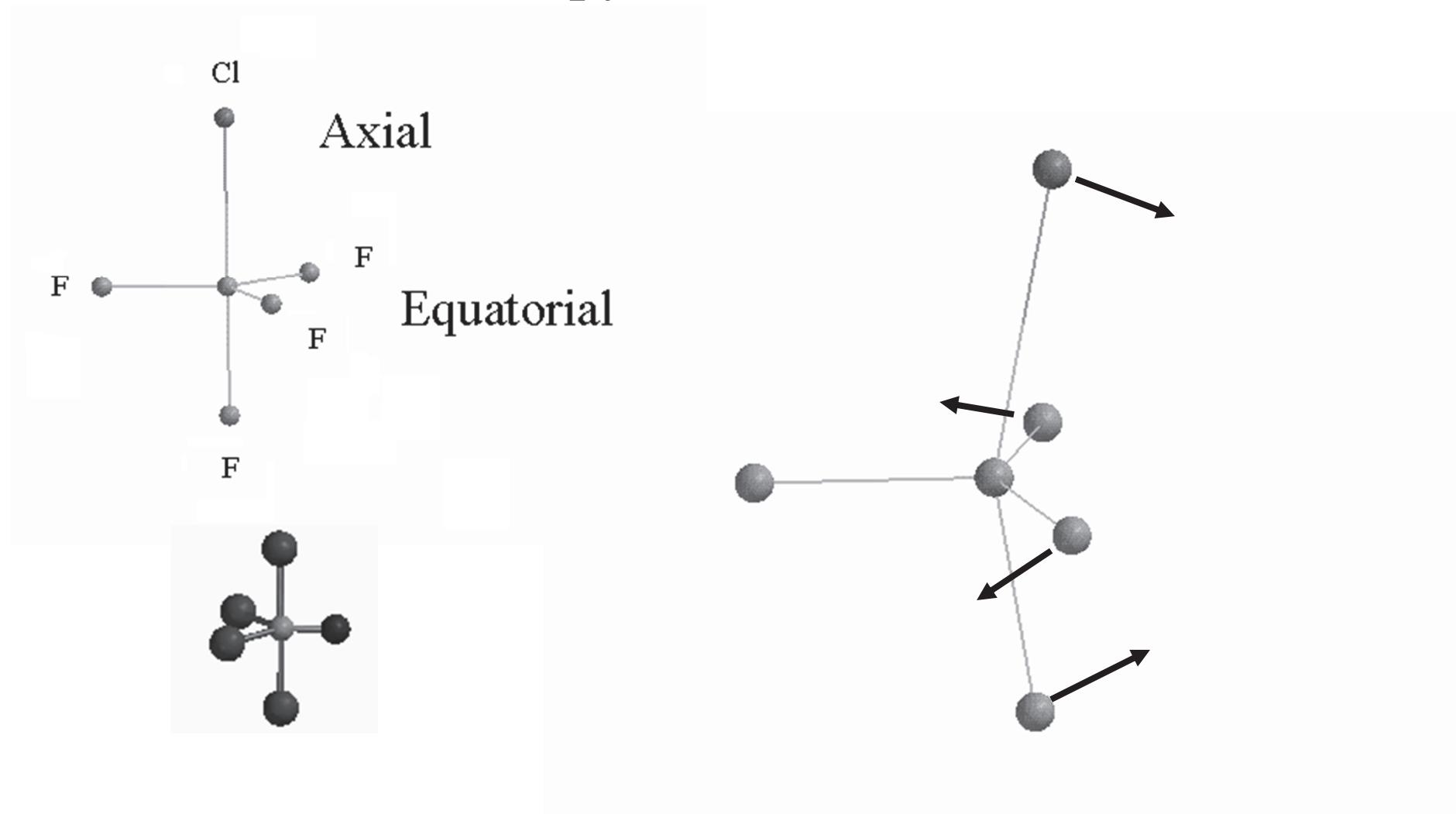
Trigonální bipyramida



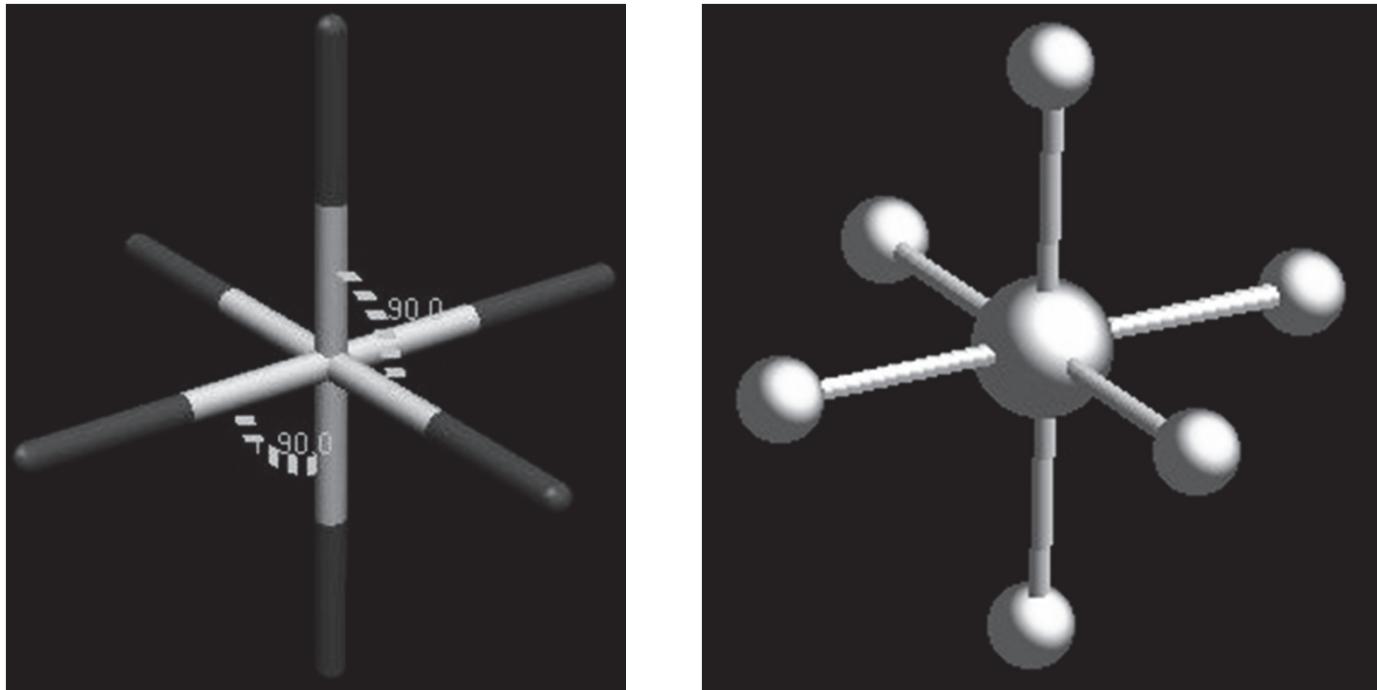
Výsledný název
tvaru molekuly
určuje poloha jader,
neuvažujeme volné
elektronové páry

Lineární

Trigonální bipyramida (TBP) a čtvercová pyramida (SP)

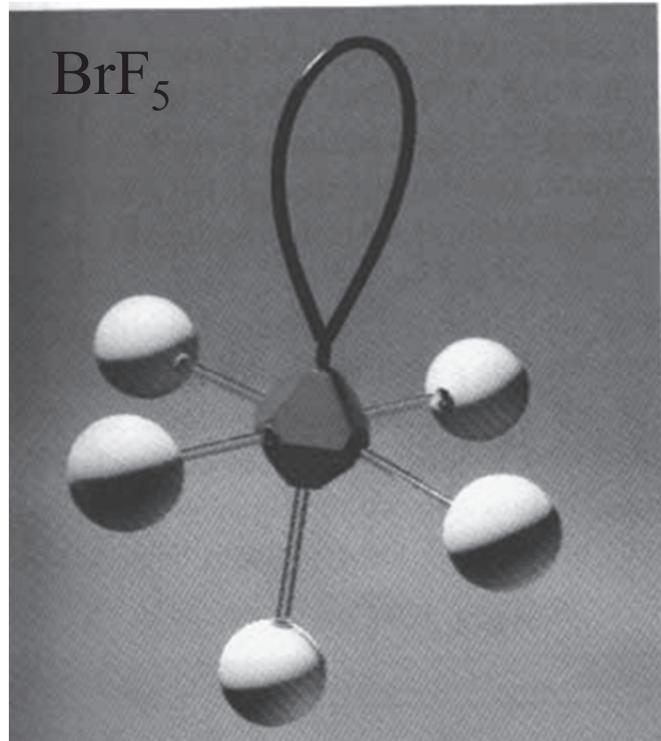


Oktaedr

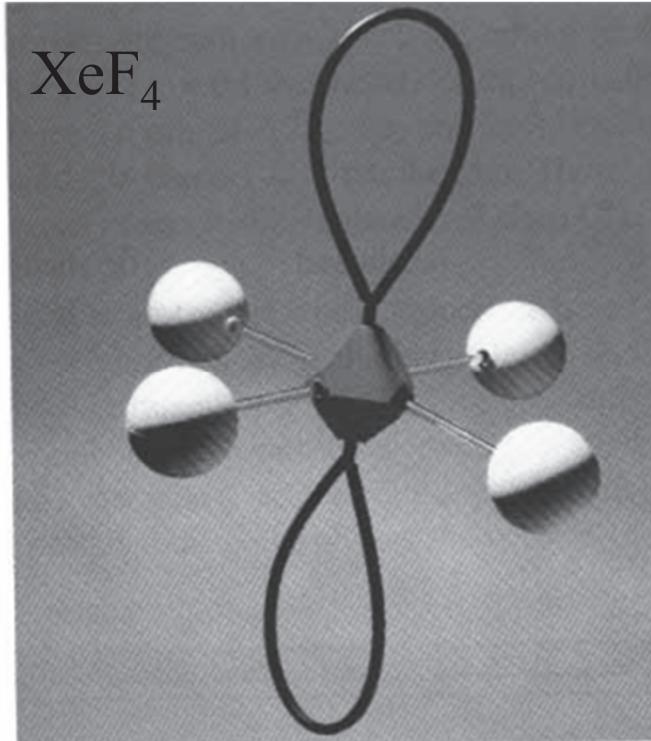


Oktaedrický vazebný úhel = 90°

Oktaedr



Čtvercová pyramida



Čtverec