

Poznanie struktury cząsteczek jest niezwykle ważnym przedsięwzięciem w chemii, ponieważ pozwala nam zrozumieć zachowanie się materii, ale także daje podstawy do praktycznego wykorzystania zdobytej wiedzy do produkcji wielu materiałów potrzebnych w życiu człowieka. Budowę cząsteczek możemy poznawać z wykorzystaniem aparatury badawczej ale w wielu przypadkach znając mechanizmy tworzenia wiązań chemicznych możemy sami przewidzieć strukturę cząsteczek. Doskonale nadaje się do tego teoria orbitali zhybrydowanych. Koncepcja orbitali zhybrydowanych z którą zapoznaliśmy się w poprzednim rozdziale umożliwia, dzięki swej prostocie, łatwą interpretację struktur cząsteczkowych a to dlatego, że istnieje naturalna korelacja między hybrydacją orbitali danego atomu a obszarami przestrzeni zajmowanymi przez elektrony (wiązące i wolne pary elektronowe) wokół atomu. Pary elektronowe, zarówno tworzące wiązania z innymi atomami, jak i wolne pary elektronowe danego atomu, wykazują tendencję do możliwie największego oddalania się od siebie dla zminimalizowania odpychania się różnych par. Liczba grup (związanych atomów lub wolnych par), które muszą pomieścić się wokół atomu, określa geometrię tego atomu. Metoda, która wykorzystuje zjawisko odpychania się par elektronowych do oceny geometrii cząsteczek nosi nazwę **VSEPR** (Valence Shell Elektron Pair Repulsion - odpychanie się par elektronowych powłoki walencyjnej)

## Co to jest VSEPR?

Istotą tej metody jest ocena wzajemnego oddziaływania na siebie par elektronowych wiązań pomiędzy *atomem centralnym A a ligandami L* oraz *wolnych par elektronowych E* rozmieszczonych wokół *atomu centralnego A*.

**Ligand – to cząsteczka albo jon, który związany jest z jonem albo atomem centralnym.**

W wyniku tego oddziaływania chmury elektronowe pochodzące od par elektronowych wiązań i wolnych par elektronowych atomu centralnego **A** zajmują w przestrzeni położenia jak *najbardziej oddalone od siebie*.

Wzór ogólny takiej cząsteczki możemy zapisać wzorem



gdzie: n - ilość par elektronowych wiązań, m - ilość wolnych par elektronowych atomu centralnego

Znając łączną liczbę par elektronowych można określić ich spodziewane położenie, a więc kąty między wiązaniami w cząsteczce.

W zależności od ilości par elektronowych wiązań (n) i wolnych par elektronowych (m) cząsteczka może przyjąć następujące struktury

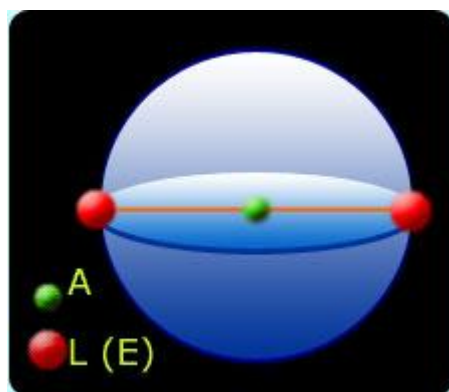
### Geometria VSEPR

Ilość par elektronowych (n +m)	Geometria
2	liniowa
3	trygonalno płaska
4	tetraedryczna

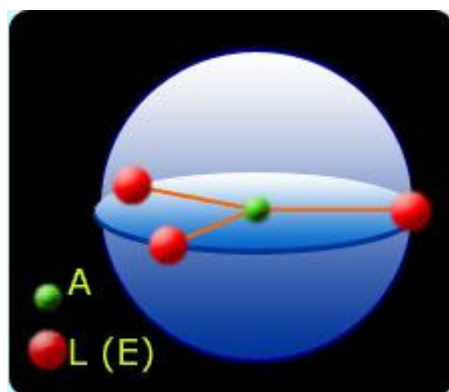
5	piramida trygonalna podwójna
6	oktaedr

Ponieważ na kierunkach wiązań występują atomy lub małe grupy atomów (ligandy) z dużym przybliżeniem możemy przedstawić (narysować) budowę cząsteczki.

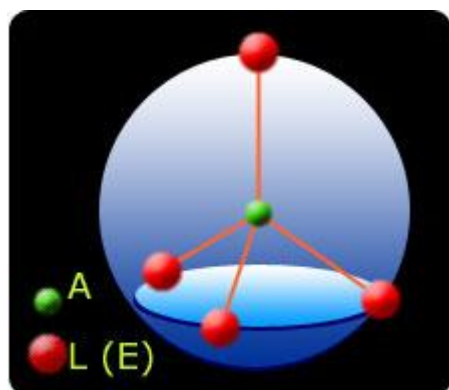
Jeżeli w cząsteczce mamy tylko dwie pary elektronów ( $n + m = 2$ ) wykorzystane do utworzenia wiązań to największą odległość między chmurami elektronowymi zapewnia *struktura liniowa* (patrz rysunek)



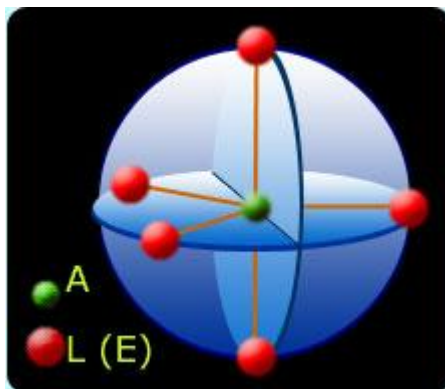
Dla trzech par elektronów ( $n + m = 3$ ) najbardziej korzystnym jest rozmieszczenie chmur elektronowych na jednej płaszczyźnie i kątach między wiązaniami  $120^\circ$  (patrz rysunek)- struktura *trygonalno-płaska*.



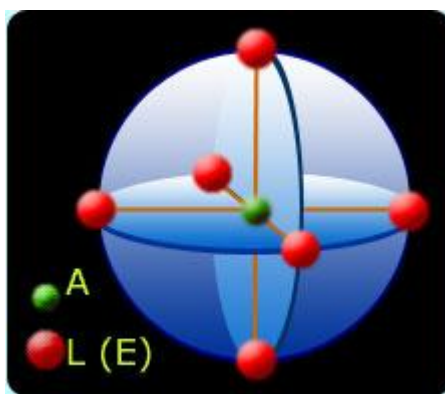
Odpowiednio przy czterech parach ( $n + m = 4$ ) elektronowych korzystnym dla cząsteczki jest przyjęcie *struktury tetraedycznej* w której kąty między dwoma wiązaniami są jednakowe i odpowiadają kątom czworościanu foremnego -  $109,5^\circ$  (patrz rysunek).



Przy pięciu parach elektronów ( $n + m = 5$ ) cząsteczka ma budowę *podwójnej piramidy trójkątnej* (patrz rysunek)



oraz odpowiednio dla sześciu par elektronowych ( $n + m = 6$ ) *oktaedru* (patrz rysunek)



Idealne struktury, takie jakie zostały przedstawione na powyższych rysunkach osiągniemy jeżeli na atomie centralnym nie występują wolne pary elektronowe a na kierunkach wiązań będziemy mieli do czynienia z takimi samymi ligandami.

W przypadku kiedy na atomie centralnym pojawiają się pary elektronowe i ligandy będą różne, siły odpychania chmur elektronowych zmieniają się co prowadzi do zmiany kątów między wiązaniami. Cząsteczka dalej zachowuje swoją strukturę (tabela wyżej), ale wzajemne położenie ligandów zmienia się, wskutek zmiany kątów między wiązaniami.

### Określenie prawdopodobnej struktury cząsteczek

Dla określenia prawdopodobnej struktury cząsteczek przyjmujemy następujące reguły:

- atomy w cząsteczkach łączą się z wykorzystaniem par elektronowych (wiązania  $\sigma$  i  $\pi$ )
- niektóre atomy w cząsteczkach posiadają wolne pary elektronowe nie tworzące wiązań chemicznych
- pary elektronowe wiązań i wolne pary elektronowe zajmują w przestrzeni położenia jak *najbardziej oddalone od siebie*
- najsilniej odpychają się dwie wolne pary elektronowe, słabiej wolna para elektronowa i chmura elektronowa wiązania, najslabiej chmury elektronowe dwóch wiązań
- siły odpychania chmur elektronowych wiązań zmniejszają się w miarę wzrostu elektroujemności ligandu
- siły odpychania wolnych par elektronowych zmniejszają się w miarę wzrostu promienia atomu centralnego

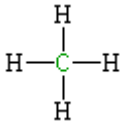
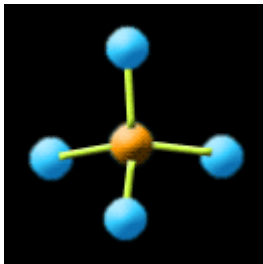
- wiązania wielokrotne i wolne elektrony liczymy jak pojedyncze wiązanie

Dla określenia prawdopodobnej struktury cząsteczek postępujemy w następującej kolejności:

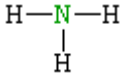
- określamy atom centralny i ligandy oraz rysujemy wzory Lewisa dla tej cząsteczki
- określamy ilość elektronów walencyjnych atomu centralnego
- określamy ilość elektronów ligandów wykorzystanych do utworzenia wiązań
- określamy ilość elektronów pochodzącą od donora par elektronowych (np.  $\text{NH}_3$ )
- określamy ilość elektronów atomu centralnego wykorzystaną do utworzenia wiązań typu  $\pi$  (podwójne i potrójne)
- obliczamy sumę elektronów
- obliczamy łączną ilość par elektronowych dzieląc obliczoną sumę elektronów przez 2
- określenie typu struktury przez porównanie z tabelą (patrz wyżej) lub z rysunkami wzorcowymi
- korekta kątów między wiązaniami na podstawie reguł opisanych wyżej

## Przykłady

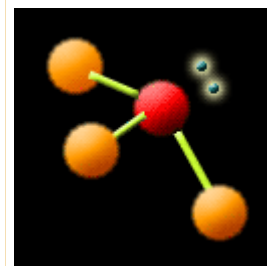
### Metan

Struktura Lewisa:	
Atom centralny:	węgiel
Ilość elektronów walencyjnych atomu centralnego:	4
Ilość elektronów ligandów - 4 atomy H:	4
Razem:	8
Obliczamy ilość par elektronowych dzieląc przez 2	4
4 pary elektronów - <i>struktura tetraedryczna</i>	

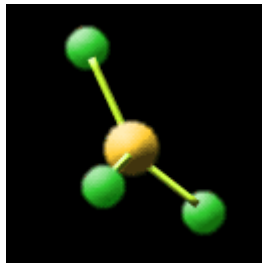
### Amoniak

Struktura Lewisa:	
Atom centralny:	amoniak
Ilość elektronów walencyjnych atomu centralnego:	5
Ilość elektronów ligandów - 3 atomy H:	3
Razem:	8
Obliczamy ilość par elektronowych dzieląc przez 2	4

4 pary elektronów - *struktura tetraedryczna*



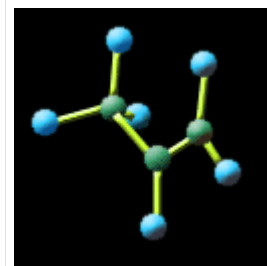
BF<sub>3</sub>

Struktura Lewisa:	$\begin{array}{c} \text{F} - \text{B} - \text{F} \\   \\ \text{F} \end{array}$
Atom centralny:	bor
Ilość elektronów walencyjnych atomu centralnego:	3
Ilość elektronów ligandów - 3 atomy F:	3
Razem:	6
Obliczamy ilość par elektronowych dzieląc przez 2	3
3 pary elektronów - <i>struktura trygonalna</i>	

Propen

Struktura Lewisa:	$\begin{array}{c} \text{CH}_2 \\    \\ \text{H}_3\text{C} - \text{C} - \text{H} \end{array}$
Atom centralny:	węgiel (MeCH=CH <sub>2</sub> )
Ilość elektronów walencyjnych atomu centralnego:	4
Ilość elektronów ligandu Me(CH <sub>3</sub> ) - 1 grupa:	1
Ilość elektronów ligandu H - 1 H:	1
Ilość elektronów ligandu =CH <sub>2</sub> - 1 elektron $\sigma$	1
ilość elektronów atomu centralnego wykorzystaną do utworzenia wiązań typu $\pi$	-1
Razem:	6
Obliczamy ilość par elektronowych dzieląc przez 2	3

3 pary elektronów - *struktura trygonalna*



$\text{PF}_6^-$  - anion

Struktura Lewisa:	
Atom centralny:	fosfor
Ilość elektronów walencyjnych atomu centralnego:	5
Ilość elektronów ligandów - 6 atomów F:	6
Ilość elektronów ładunku anionu:	1
Razem:	12
Obliczamy ilość par elektronowych dzieląc przez 2	6
6 par elektronów - <i>struktura oktaedryczna</i>	

## Przykłady różnych struktur

### Struktury liniowe $\text{AL}_2$

Przykłady z wiązaniem pojedynczym :



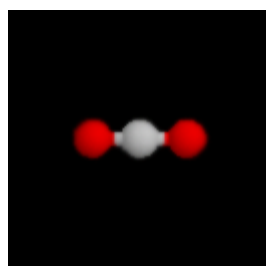
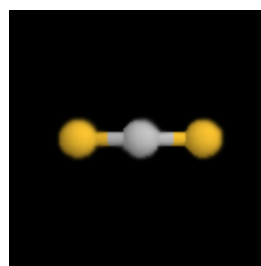
Przykładem jest cząsteczka  $\text{BeCl}_2$



Przykłady z wiązaniem podwójnym

Przykładem jest cząsteczka  $\text{CO}_2$  i  $\text{CS}_2$

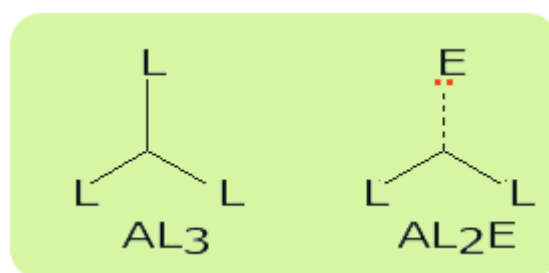


AL<sub>2</sub>AL<sub>2</sub>

### Struktura trygonalna

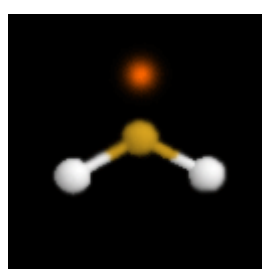
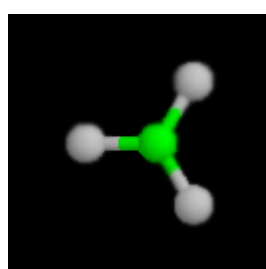
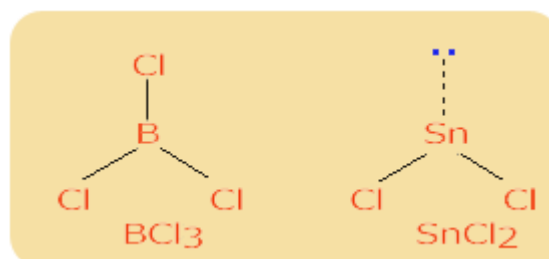
Zawiera dwie rodziny :

AL <sub>3</sub>	AL <sub>2</sub> E
Trygonalna płaska	Kątowa



Przykłady z wiązaniem pojedynczym BCl<sub>3</sub> i SnCl<sub>2</sub>:

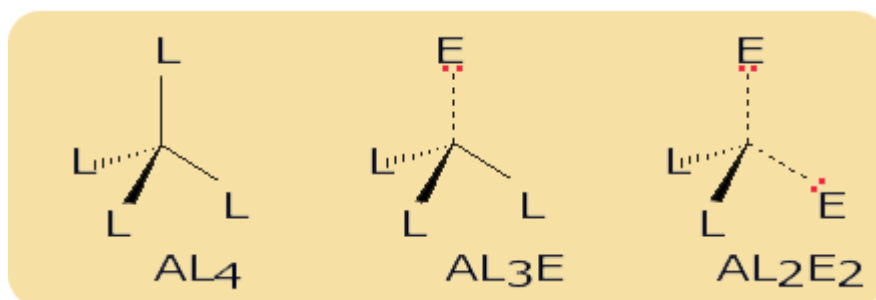
B	Sn
[He] 2s <sup>2</sup> 2p <sup>1</sup>	[Kr] 4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>2</sup>



**Struktura tetraedryczna**

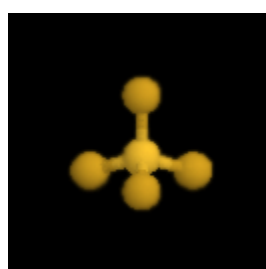
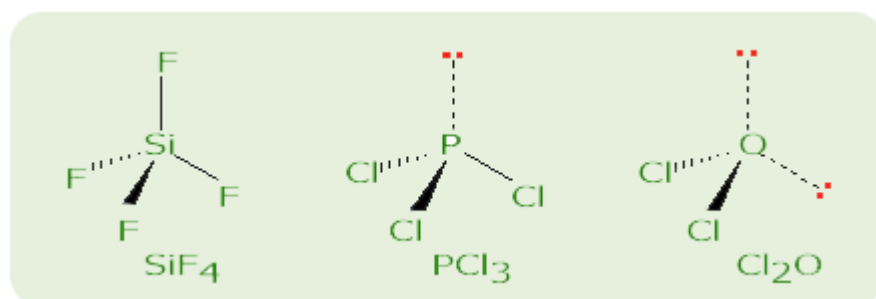
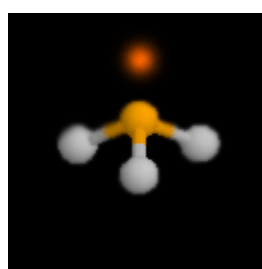
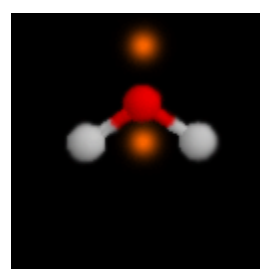
Struktura ta posiada trzy rodziny:

$AL_4$	$AL_3E$	$AL_2E_2$
Tetraedryczna	Trygonalno piramidalna	Kątowa



Przykłady z wiązaniami pojedynczymi -  $SiF_4$ ,  $PCl_3$ ,  $Cl_2O$ :

Si	P	O
$[Ne] 3s^2 3p^2$	$[Ne] 3s^2 3p^3$	$[He] 2s^2 2p^4$

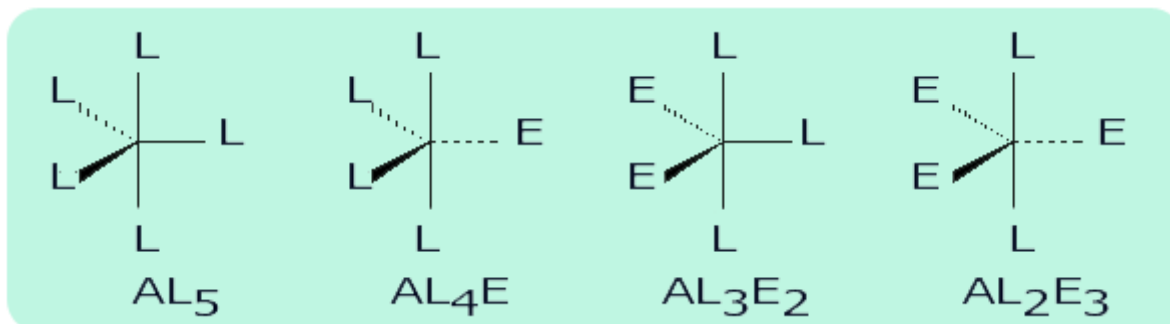
 $AL_4$  $AL_3E$  $AL_2E_2$



## Struktura piramidy trygonalnej podwójnej

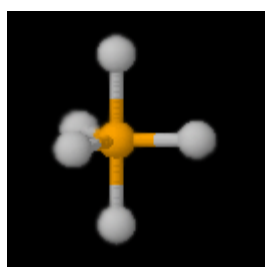
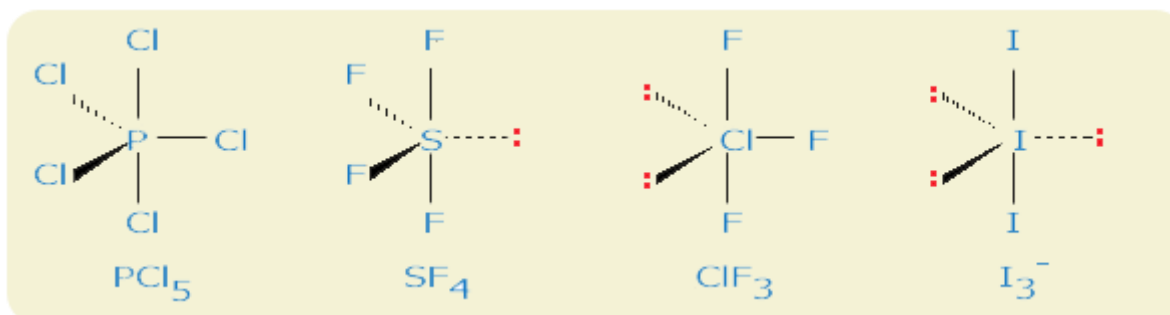
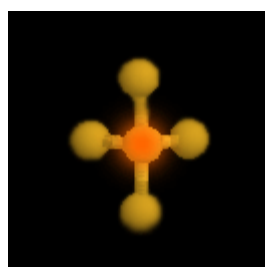
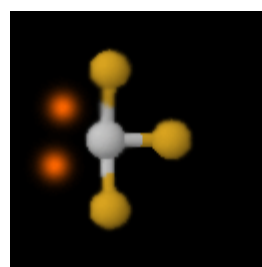
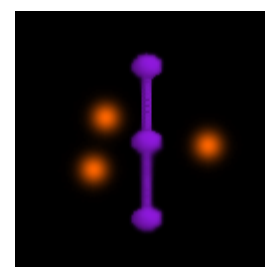
Struktura ta posiada cztery rodziny:

$AL_5$	$AL_4E$	$AL_3E_2$	$AL_2E_3$
Piramida trygonalna podwójna	Piły	T-kształt	Liniowa



Przykłady z wiązaniem pojedynczym :

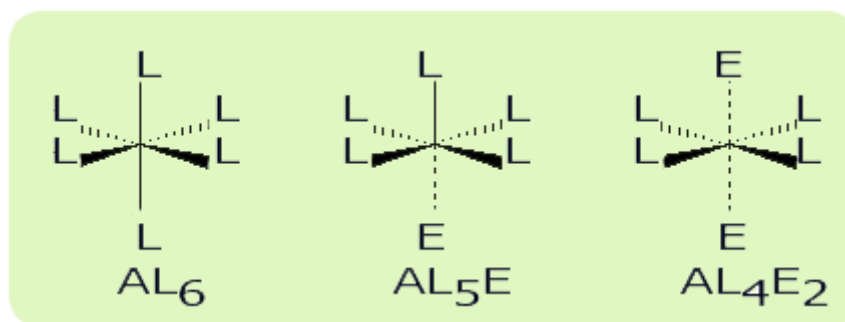
P	S	Cl	I
$[Ne] 3s^2 3p^3$	$[Ne] 3s^2 3p^4$	$[Ne] 3s^2 3p^5$	$[Kr] 4d^{10} 5s^2 5p^5$

 $AL_5$  $AL_4E$  $AL_3E_2$  $AL_2E_3$ 

## Struktura oktaedryczna

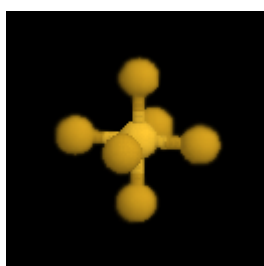
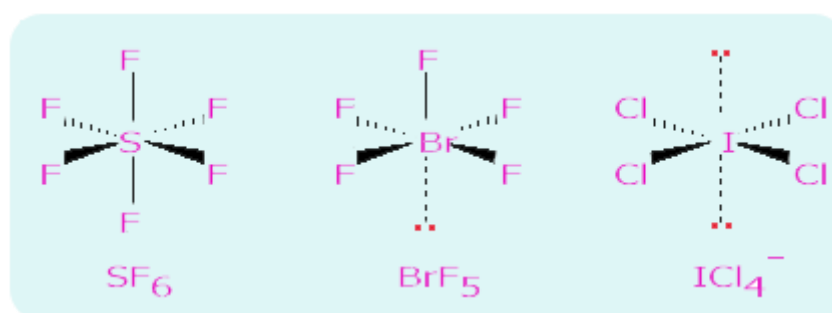
Struktura ta ma trzy rodziny:

$AL_6$	$AL_5E$	$AL_4E_2$
Oktaedryczna	Kwadratowa piramidalna	Kwadratowa płaska

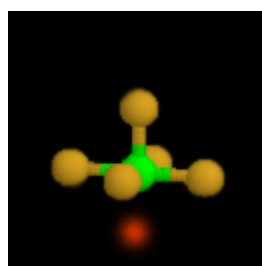


Przykłady z wiązaniem pojedynczym:

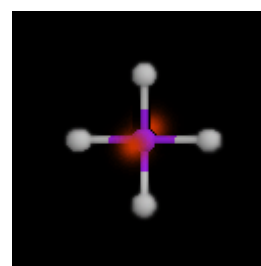
S	Br	I
[Ne] 3s <sup>2</sup> 3p <sup>4</sup>	[Kr] 3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>5</sup>	[Kr] 4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>5</sup>



$AL_6$



$AL_5E$



$AL_4E_2$