

# CLARKOVA METODA PRO KONSTRUKCE ELEKTRONOVÝCH VZORCŮ MOLEKULÁRNÍCH LÁTEK

Pro zápis Lewisových elektronových vzorců složitějších molekul navrhl americký chemik T.Clark metodu, jejímž základem je posouzení, zda všechny atomy molekuly splňují oktetové pravidlo. Je-li tomu tak, potom na centrálním atomu (CA) musí být 8 elektronů a na všech okolních atomech (kromě H), které jsou k CA vázány jednoduchou vazbou, je po šesti elektronech. Při celkovém počtu atomů jiných než H rovném  $y$  musí být v molekule celkem  $8 + 6(y - 1) = 6y + 2$  elektronů. Není-li tedy tato podmínka splněna, potom buď není splněno oktetové pravidlo na všech atomech, nebo jsou některé atomy na CA vázány vazbami vyššího řádu. Celý postup lze shrnout do jednoduchého algoritmu:

1. Spočítáme všechny valenční elektrony  $z$  v molekule nebo molekulovém iontu
2. Vyhodnotíme číslo  $6y+2$ , kde  $y$  je počet atomů v molekule jiných než vodík
3. Porovnáme zjištěné číslo  $6y + 2$  s počtem elektronů  $z$ 
  - (a) Jsou-li obě čísla stejná, potom všechny atomy v molekule splňují oktetové pravidlo a nejsou v ní přítomny žádné násobné vazby
  - (b) Je-li počet elektronů  $z$  větší než  $6y + 2$ , pak má centrální atom rozšířenou valenční sféru
  - (c) Je-li počet elektronů  $z$  menší než  $6y + 2$ , potom buď
    - (i) v molekule existují násobné vazby (rozdíl 2 indikuje jednu dvojnou vazbu, rozdíl 4 znamená dvě dvojnou nebo jednu trojnou vazbu) nebo
    - (ii) atom 1., 2. nebo (nejčastěji) 13. skupiny vykazuje elektronový deficit (rovný zjištěnému rozdílu)
4. Vybereme centrální atom a nakreslíme skelet molekuly, prozatím bez vodíkových atomů
5. Rozdělíme elektrony zjištěné v kroku 1 po párech. Začneme elektrony násobných vazeb předpovězených v kroku 3c(i), které umístíme mezi CA a koncové atomy, dále doplníme oktety na koncových atomech a zbývající elektrony přiřadíme CA. *Poznámka:* dospějeme-li v tomto bodě k více možným variantám, nakreslíme je všechny, abychom je mohli později porovnat a rozhodnout, která je správná.
6. Do struktury přidáme atomy vodíku. *Poznámka:* pokud opět existuje více možností, zaznamenáme je všechny.
7. Pokud existuje více struktur zkonstruovaných na základě výše uvedených bodů, přiřadíme jednotlivým atomům v každém vzorci formální náboje a vybereme tu strukturu, která nese minimální počet nenulových formálních nábojů a jejich velikosti jsou minimální (suma absolutních hodnot dosahuje minima). Vyřadíme také všechny struktury, u nichž nejsou formální náboje konzistentní s elektronegativitami zúčastněných prvků.

Celý algoritmus lze shrnout do následujícího schematu:

