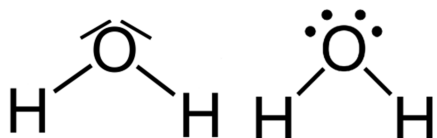


VYTVOŘENÍ LEWISOVA ELEKTRONOVÉHO STRUKTURNÍHO VZORCE

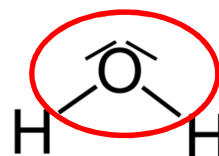
Lewisovy elektronové strukturní vzorce zobrazují uspořádání všech valenčních elektronů v kovalentních molekulách. Poznáme z nich: i) které atomy molekuly tvoří jednotlivé vazby, ii) je-li konkrétní vazba vyššího řádu než 1, iii) jsou-li v molekule přítomny volné elektronové páry nebo nepárové elektrony. Elektronové vzorce jsou také využitelné pro určení geometrie molekuly metodou VSEPR.

Na následujícím obrázku je znázorněn elektronový vzorec molekuly vody. Symbol prvku reprezentuje jádro a vnitřní elektrony daného prvku, úsečky představují elektronový pár (vazebný nebo nevazebný) a tečka představuje jeden elektron. V literatuře se můžeme setkat s dvojným zobrazením volného (nevazebného) elektronového páru – buď



úsečkou, nebo dvojicí teček (viz obrázky). Můžeme najít i podobu vzorců, kde i vazebný pár je zobrazen dvojtečkou.

Pro sestavování elektronových vzorců je důležité znát pojem elektronového oktetu atomu: atom se obklopí čtyřmi páry elektronů a dosáhne tak stabilního stavu - na obrázku znázorněn oktet atomu kyslíku (dva vazebné a dva nevazebné páry). Výrazným rysem chování prvků druhé periody je to, že nemohou tento počet elektronů ve svém okolí překročit (protože mají k dispozici pouze čtyři valenční atomové orbitály), a na druhou stranu ty elektronegativnější (F, O, N, C) tento oktet obvykle mají naplněn. Prvky třetí a vyšších period mohou být obklopeny více než 8 elektrony.



Sestavení Lewisova elektronového vzorce ukážeme na molekulách CO_2 a SO_4^{2-} .

	CO_2	SO_4^{2-}
1. Sečteme počet valenčních elektronů zúčastněných atomů a přičteme nebo odečteme náboj aniontu, respektive kationtu.	$4e^- (\text{C}) + 2 \times 6e^- (\text{O}) = 16e^-$	$6e^- (\text{S}) + 4 \times 6e^- (\text{O}) + 2 e^- = 32e^-$
2. Nakreslíme skelet molekuly . Jako centrální atom určíme zpravidla ten nejméně elektronegativní; elektronegativní atomy obsazují tzv. periferní pozice; vodík je až na výjimky vždy koncovým atomem; u některých molekul si musíme skelet molekuly pamatovat (můstkové kyseliny, asymetrické molekuly apod.).	$\text{O}-\text{C}-\text{O}$	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{O}-\text{S}-\text{O} \\ \\ \text{O} \end{array}$
3. Umístíme zbývající valenční elektrony (celkový počet valenčních e^- bez elektronů umístěných v σ -vazbách ve skeletu). Elektrony nejdříve spotřebujeme na volné elektronové páry periferních atomů k dosažení jejich oktetu, teprve zbývající elektrony umísťujeme jako volné elektronové páry na středovém atomu.	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \text{O} \end{array} \text{O}-\text{C}-\text{O} \begin{array}{c} \text{O} \\ \text{O} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \text{O} \end{array} \text{O}-\text{S}-\text{O} \begin{array}{c} \text{O} \\ \text{O} \end{array}$

	CO ₂	SO ₄ ²⁻
<p>4. Určíme formální náboje (f.n.) atomů: f.n.=počet valenčních elektronů mínus počet elektronů ve volných elektronových párech mínus počet σ vazeb (počet sdílených e⁻ atomu v σ vazbách) pozn. ačkoli tato podoba vzorce nemusí být konečná, můžeme již zde určit hybridizaci středového atomu, sterické koordinační číslo a geometrii částice pomocí metody VSEPR</p>	$\begin{array}{c} \text{---}\overline{\text{O}}\text{---} \\ \text{---}\overline{\text{O}}\text{---}\text{C}^{2+}\text{---}\overline{\text{O}}\text{---} \\ \text{---}\overline{\text{O}}\text{---} \end{array}$ <p>f.n.(C) = 4 - 0 - 2 = 2 f.n.(O) = 6 - 6 - 1 = -1</p>	$\begin{array}{c} \text{---}\overline{\text{O}}\text{---} \\ \text{---}\overline{\text{O}}\text{---}\text{S}^{2+}\text{---}\overline{\text{O}}\text{---} \\ \text{---}\overline{\text{O}}\text{---} \\ \text{---}\overline{\text{O}}\text{---} \end{array}$ <p>f.n.(O) = 6 - 6 - 1 = -1 f.n.(S) = 6 - 0 - 4 = 2</p>
<p>5. U nejelektronegativnějších atomů (C, N, O, F) naplníme oktet v jejich okolí - přesunem volných elektronových párů do vazebné nebo nevazebné pozice v okolí nenasatovaného atomu. Přepočteme formální náboje atomů.</p>	$\overline{\text{O}}=\text{C}=\overline{\text{O}}$	<p>předchozí forma Lewisova vzorce síranového aniontu může být považována za konečnou; ačkoli opačné formální náboje na síře a kyslíku predikují zvýšenou elektronovou hustotu mezi těmito atomy (π vazba) není potřeba tyto vazby do základní podoby vzorce zakreslovat</p>
<p>6. Pokud má molekula rezonanční struktury, zakreslíme i ostatní formy molekuly. Souhrn všech rezonančních vzorců dává obraz o reálném rozložení elektronové hustoty. Pro tvorbu rezonančních struktur platí výše popsany postup.</p>	$\begin{array}{c} \overline{\text{O}}=\text{C}=\overline{\text{O}} \\ \text{---}\overline{\text{O}}\equiv\text{C}\text{---}\overline{\text{O}}\text{---} \\ \text{---}\overline{\text{O}}\text{---}\text{C}\equiv\overline{\text{O}}\text{---} \end{array}$	<p>pokud je to požadováno lze zakreslit rezonanční vzorce i pro síranový anion:</p> $\begin{array}{c} \text{---}\overline{\text{O}}\text{---} \\ \text{---}\overline{\text{O}}\text{---}\text{S}\text{---}\overline{\text{O}}\text{---} \\ \text{---}\overline{\text{O}}\text{---} \end{array} \quad \begin{array}{c} \text{---}\overline{\text{O}}\text{---} \\ \text{---}\overline{\text{O}}\text{---}\text{S}\text{---}\overline{\text{O}}\text{---} \\ \text{---}\overline{\text{O}}\text{---} \end{array} \quad \text{atd.}$
<p>7. Nesprávné podoby elektronových vzorců</p>	$\text{---}\overline{\text{O}}\text{---}\text{C}\equiv\overline{\text{O}}\text{---}$ <p>uhlík jako prvek druhé periody nemá dostatek valenčních atomových orbitalů, aby mohl překročit oktet; v tomto chybném vzorci je v okolí uhlíku 12 e⁻</p>	$\begin{array}{c} \text{---}\overline{\text{O}}\text{---} \\ \text{---}\overline{\text{O}}\text{---}\text{S}^{2-}\text{---}\overline{\text{O}}\text{---} \\ \text{---}\overline{\text{O}}\text{---} \\ \text{---}\overline{\text{O}}\text{---} \end{array}$ <p>síra má menší elektronegativitu než kyslík, proto nedojde k tak masivnímu přesunu elektronové hustoty od kyslíku a vzniku 4 π vazeb</p>