

? Zadanie 2.14

- Zastosuj metodę (i) hybrydyzacji oraz (ii) podejścia orbitali grupowych ligandów w celu przedstawienia diagramów orbitali dla cząsteczki SiH_4 .
- Które z tych podejść daje lepsze oszacowanie energii wiązania orbitali molekularnych w SiH_4 ?

2.11 Kształty związków kowalencyjnych bloku p

Teoria odpychania par elektronowych powłoki walencyjnej (VSEPR)


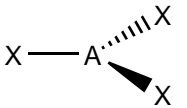
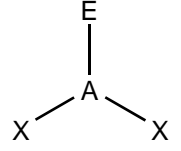
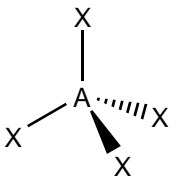
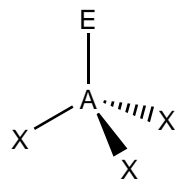
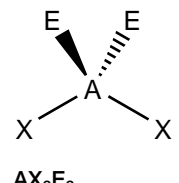
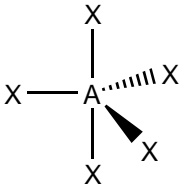
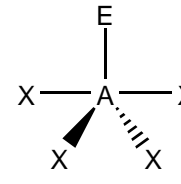
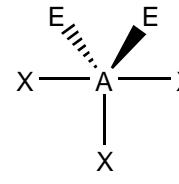
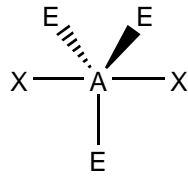
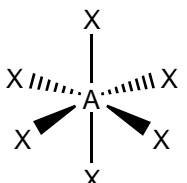
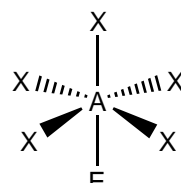
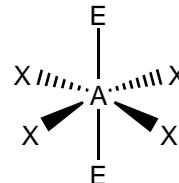
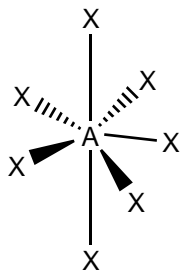
Teoria orbitali molekularnych szybko się komplikuje, gdy wyjdziemy poza proste cząsteczki dwuatomowe. Użyteczna metoda określania kształtów wielu cząsteczek i jonów bloku p jest nazywana teorią odpychania par elektronowych powłoki walencyjnej (VSEPR, ang. *Valence Shell Electron Pair Repulsion*). Zgodnie z prostymi zasadami policzenie liczby par elektronowych wokół centralnego atomu pozwala nam przewidzieć kształt prostych cząsteczek.

Jedną z popularnych metod podejścia do VSEPR jest tak zwana metoda AXE, którą można przedstawić w punktach:

- Oblicz liczbę elektronów walencyjnych atomu centralnego (A).
- Określ liczbę elektronów związanych z każdym ligandem (X) na podstawie jego wartościowości (tj. ile wiązań utworzy). Na przykład atom F związany kowalencyjnie utworzy jedno wiązanie kowalencyjne, do którego wnosi jeden elektron. W tym przypadku dodajemy jeden elektron do całkowitej liczby. Atom tlenu zazwyczaj tworzy podwójne wiązanie, a zatem przyczynia się do dodania dwóch elektronów. W takim przypadku dodajemy dwa elektrony do całkowitej liczby.
- Odejmij elektrony, aby uwzględnić ładunek dodatni (tj. dla ładunku +2, odejmij dwa elektrony) lub dodaj elektrony, aby uwzględnić ładunek ujemny (tj. dodaj dwa elektrony dla ładunku -2).
- Odejmij $2(n - 1)$ elektronów dla każdego wiązania n -tego rzędu (tj. dla potrójnego wiązania odejmij $2 \times (3 - 1) = 4$ elektrony).
- Oblicz całkowitą liczbę par elektronowych wokół centralnego atomu, dzieląc całkowitą liczbę elektronów obliczoną w krokach od i do iv przez dwa. Całkowita liczba par elektronowych nazywana jest liczbą przestrzenną, która pozwala nam uzyskać podstawowy kształt cząsteczki.
- Określ, jak te elektrony są rozmieszczone między parami tworzącymi wiązania (X) i wolnymi parami (E). Liczba wolnych par równa się: całkowita liczba par elektronowych minus liczba związanych atomów.
- Umieść pary elektronowe wokół centralnego atomu zgodnie z podstawowym kształtem, mając na uwadze, że odpychanie elektronowe zmniejsza się zgodnie z: $E - E > E - X > X - X$.
- Ostateczny kształt cząsteczki nie obejmuje wolnych par elektronowych.

W tabeli 2.1 zawarto kilka powszechnie spotykanych kształtów podstawowych, ich liczbę przestrzenną i ich konfigurację „AXE”.

Tabela 2.1. Powszechnie spotykane kształty podstawowe, skojarzona z nimi liczba przestrzenna i konfiguracja „AXE”

Liczba przestrzenna	0 wolnych par elektronowych (Kształt podstawowy)	1 wolna para elektronowa	2 wolne pary elektronowe	3 wolne pary elektronowe
2	 AX_2E_0 Liniowa			
3	 AX_3E_0 Trygonalna płaska	 AX_2E_1 Zgięta (kształt litery V)		
4	 AX_4E_0 Tetraedryczna	 AX_3E_1 Trygonalna piramida	 AX_2E_2 Zgięta (kształt litery V)	
5	 AX_5E_0 Bipiramida trygonalna	 AX_4E_1 Zdeformowany tetraedr	 AX_3E_2 Kształt litery T	 AX_2E_3 Liniowa
6	 AX_6E_0 Oktaedryczna (ośmiościan)	 AX_5E_1 Piramida tetragonalna	 AX_4E_2 Płasko-kwadratowa	
7	 AX_7E_0 Bipiramida pentagonalna			