

# Tvar molekul podle Ring Theory

Pavel Werner

pwerner@volny.cz

Klíčová slova: tvar molekul, jádro atomu, struktura atomového jádra,

## 1 Úvod

U víceatomových molekul neodpovídají tvary molekul odhadnuté pomocí teorie molekulových orbitalů experimentálně zjištěným údajům. Tvar molekul, vazební úhly a vazebné délky se stanovují experimentálně.

V současné době se v chemii používají dva jednoduché modely přibližného odhadu tvaru molekul. První metoda vysvětluje směrovou orientaci vazeb a vazebních úhlů na základě hybridních orbitalů a používá se od roku 1939 [1], kdy vyšlo první vydání knihy Linuse Paulinga nazvané „The Nature of the Chemical Bond“. Druhou metodu nazvanou VSEPR (Valence Shell Electron Pair Repulsion) [2] rozpracovali Gillespie a Nyholm v roce 1957. Teorie VSEPR je založena na předpokladu, že vazebné i nevazebné elektrony obklopující atom, se navzájem odpuzují, a proto se snaží zaujmout takové uspořádání, aby byly co nejdále od sebe, a tím určují geometrii molekuly [2]. Tvary molekul je také možné předpovídat pomocí analýz založených na řešení Schrödingerovy rovnice [3] v kvantově mechanickém pojetí.

Dnešní věrohodné metody pro predikci určení tvaru molekul v ustáleném dlouhodobém stavu (vázané k pozorování například mikroskopickými nástroji) zahrnují různé formy kvantově – mechanicky orientovaných výkladů a berou také v úvahu nejrůznější interakce, ke kterým v molekulách dochází.

Prstencová teorie využívá k modelování tvaru molekul modely struktur atomových jader a elektromagnetické síly prstencové struktury modelu elektronu a protonu.

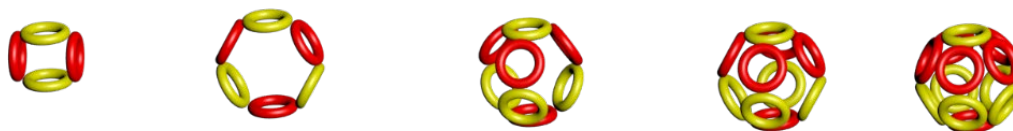
## 2 Struktura a tvar molekul s jedním centrálním atomem podle RT

### 2.1 Model struktury jader atomů a jejich elektronový obal podle RT

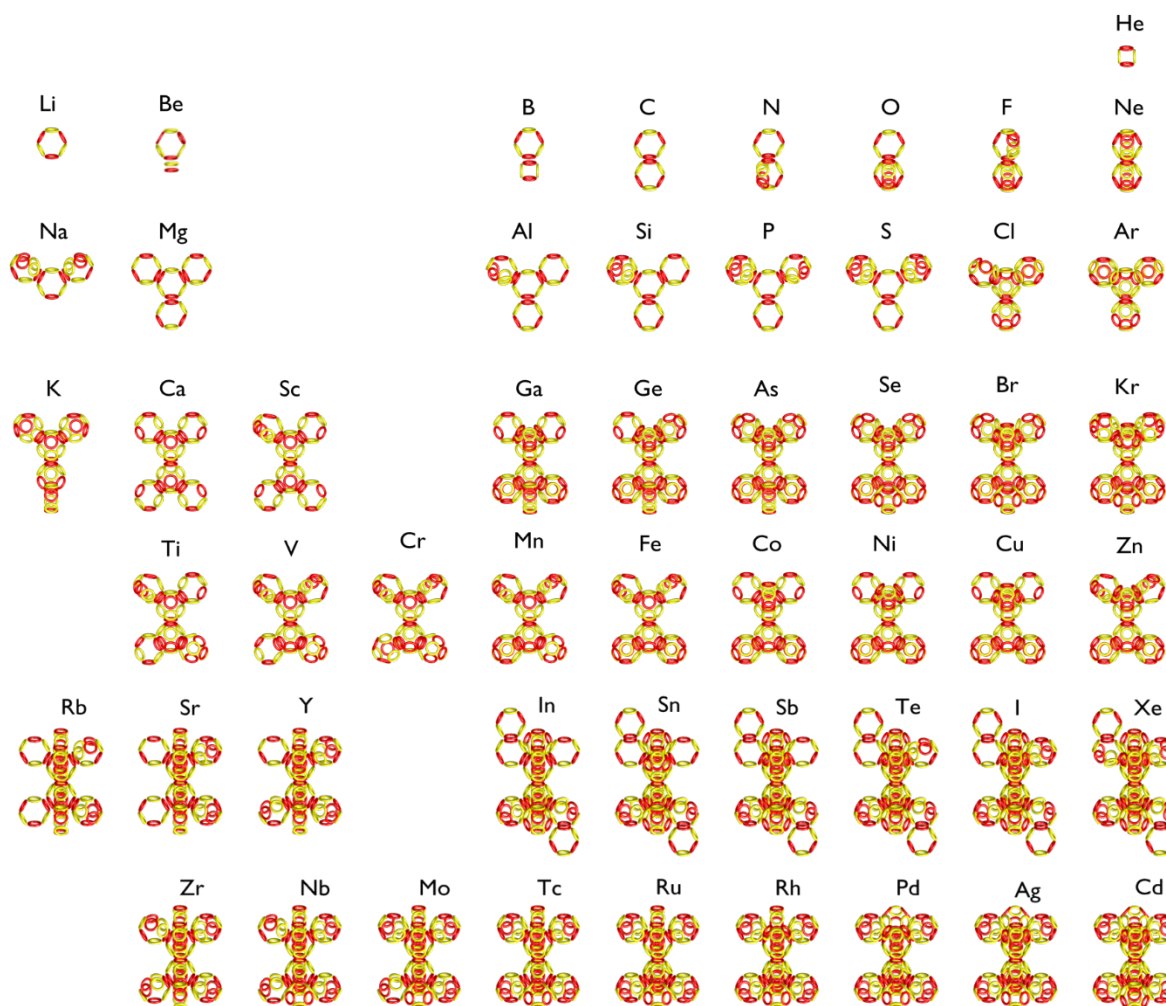
Podle Prstencové teorie je pro stavbu, složení a strukturu elektronového obalu určující modelovaná skladba jádra atomu. Můžeme vyjádřit předpoklad, že atomové jádro není jen nějaké nakupení kladných nábojů, ale jeho struktura přímo určuje vazbu mezi protonem a jemu příslušným elektronem. Na tuto strukturu jádra atomu je navázána struktura elektronového obalu [4]. Teprve na základě takto deterministicky a explicitně popsaného modelu elektronového obalu můžeme vytvářet vazby s jinými atomy a určovat tak tvar a strukturu vytvářených molekul v ustáleném dynamicky rovnovážném stavu.

Navržené modely jader atomů jsou sestaveny z prostorových globulí, obr.1, které vzniknou spojením dvou až šesti prvků v podobě prstencových protonů (prostor výskytu explicitně

určeného elektrického náboje  $q$ ) se stejným počtem neutronů, obr. 1. Důvod uspořádání prvků protonů a neutronů do globule vyplývá z orientace okamžitých elektrických nábojů elementů a magnetických vazeb, blíže popsanych v práci [4]. Tyto globule se mohou navzájem spojovat do složitějších celků pomocí „protonových můstků“, jak bylo zmíněno v předchozím textu. Protonový můstek má také funkci volného vazebního prvku snižujícího pouze jeden stupeň volnosti v navrženém modelu, podobně jako z mechaniky známe „rotační ložisko“ [4].



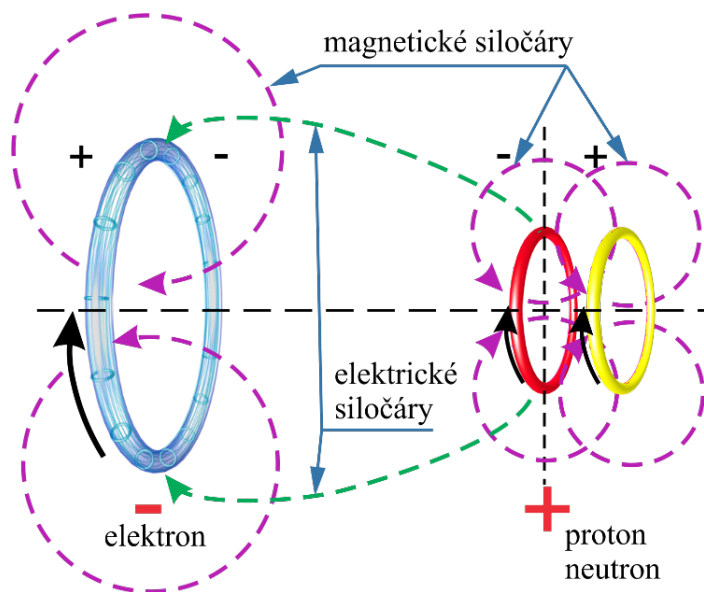
Obr. 1. Symbolicky zobrazený model elementárních prvků „globulí“ podle RT, červeně jsou znázorněny protony a žlutě jsou znázorněny neutrony.



Obr. 2. Navržená struktura jader atomů He – Xe podle RT.

Ke každému prstencovému modelovanému protonu v jádře atomu je na jeho ose vázán elektromagnetickým polem a udržován v dynamické rovnováze jeden modelovaný elektron, jak

je naznačeno v obr. 3. Vzhledem ke stochastickým modelům to znamená, že rozmístění elektronů v elektronovém obalu je determinováno strukturou jádra atomu [4].



Obr. 3. Symbolicky zobrazený prstencový model elektromagnetické vazby mezi elementem představující proton v jádře atomu a elektronem v elektronovém obalu navrženého modelu.

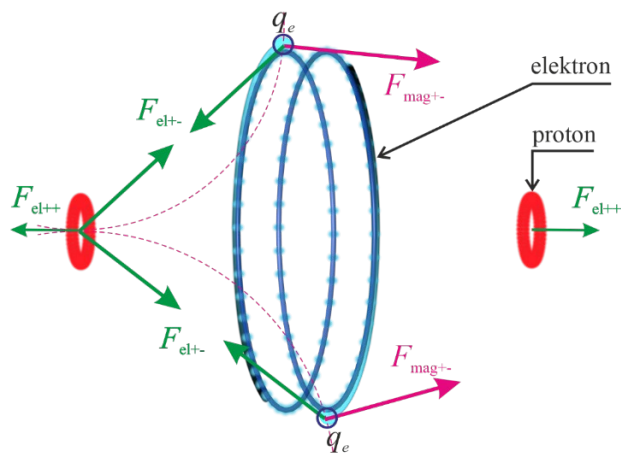
## 2.2 Kovalentní vazba

Chemická vazba je silová interakce tvořená elektrickým a magnetickým polem elementárních částic. Tato silová interakce poutá navzájem sloučené atomy, energeticky je stabilizuje a vede ke vzniku molekuly. Vzniklá molekula má potom nižší energii, než měly původní atomy před sloučením.

Kovalentní vazba je vnitro-molekulární forma chemické vazby, kterou lze charakterizovat sdílením jednoho nebo více párů elektronů mezi dvěma prvky. Tento druh vazby je typický pro atomy organických molekul a pro anorganické látky s krystalovou mřížkou složenou ze stejných atomů [5].

Podle RT je model kovalentní vazby tvořen dvěma prstencovými valenčními elektrony na společné ose (obr. 4). V dynamické rovnováze jsou drženy vlivem existujícího elektromagnetického pole a vzniklých silových účinků mezi jádry obou atomů a jejich valenčními elektrony. Elektrostatické pole dvou opačných elektrických nábojů  $q$  vytváří přitažlivou sílu elektrického původu. Odpudivá síla je vytvářena složkou proudu  $i_e$  elektronu v magnetickém poli protonu při souhlasném směru pohybujících se elektrických nábojů  $q$  se shodně orientovanými vektory magnetických momentů  $\mu_m$ . Podle navrženého modelu prstencové struktury hmoty vektory magnetických momentů mezi protony  $\mu_{mp}$  a elektrony  $\mu_{me}$  v kovalentní vazbě musí mít vždy opačný směr. Přitažlivá magnetická síla dvou protonů je vzhledem k ostatním elementům a jejich vzájemnému silovému působení řádově nižší [4].

Podle výše popsaných přístupů a vyjádření dynamické rovnováhy v kovalentní vazbě lze uvažovat a kvantifikovat vztahy v kovalentní vazbě modelů podle RT.



Obr. 4. Model kovalentní vazby molekuly H<sub>2</sub> se schematickým znázorněním elektrických a magnetických sil.

### 2.3 Základní tvary molekul podle metody VSEPR

Podle metody VSEPR můžeme rozdělit tvary molekul s jedním centrálním atomem do šesti základních tvarů [5] (obr, 5).

1.		Lineární	2.		Rovnostranný trojúhelník
3.		Pravidelný tetraedr	4.		Trigonální bipyramida
5.		Oktaedr (tetragonální bipyramida)	6.		Pentagonální bipyramida

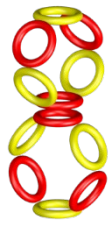
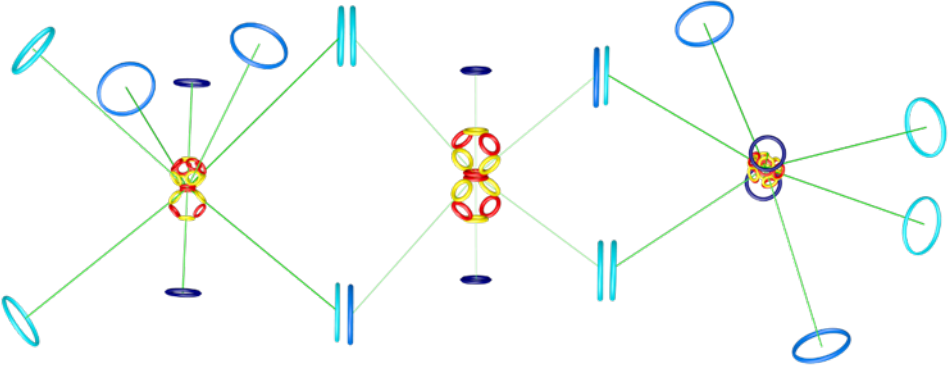
Obr. 5. Základní tvary molekul podle VSEPR [5].

### 3 Tvary molekul podle navržené toroidální struktury - RT

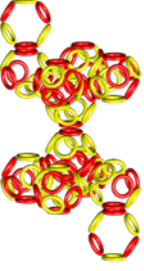
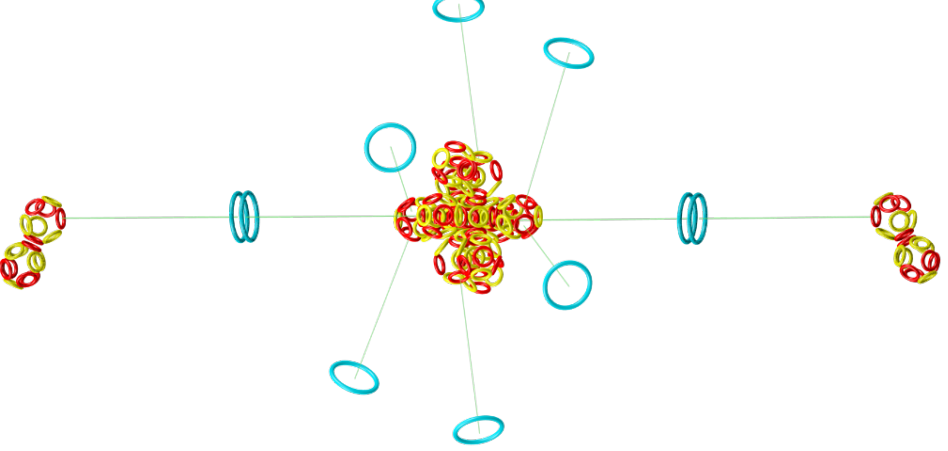
Prstencová teorie přináší v explicitním přístupu některé parametry, které v dosud používaných koncepcích stavby elementární hmoty nejsou běžné, obvyklé nebo se nevyskytují. Pomocí přístupu koncepce navržené toroidální struktury elementárních prvků hmoty se ukazuje její důležitost v objasnění jevů a vlastností modelovaných jaderných struktur. Prstencová teorie se svým explicitním elektrodynamickým přístupem, vzhledem k dosud používaným stochasticky orientovaným hypotézám stavby hmoty, ukazuje, že jádro atomu nemusí být jen náhodný shluk protonů a neutronů pro udržení stochasticky modelovaného elektronového obalu a vyhoví podmínkám dynamické stability. Elektronový obal pro prstencovou teorii stavby hmoty neplní pouze kvantitativní úlohu pouhého nositele elektrického náboje, ale podílí se na kvalitativních ukazatelích při fyzikálních a chemických reakcích elementárních prvků stavby hmoty. Jak bylo výše na příkladech modelů RT elementárních prvků hmoty ukázáno, propojenost každého modelu protonu v jádře se „svým“ elektronem v elektronovém obalu určuje strukturu a charakter elektronového obalu, rozmístění elektronů v jednotlivých slupkách, jejich vzdálenosti od jádra atomu, postavení vazebních elektronů v dynamickém ustáleném stavu a tím i základní prostorový tvar vzniklých molekul. Model založený na prstencové teorii umožňuje řešit elektrodynamické děje jako přechodné děje s explicitním přístupem možných analýz.

Uvažované a modelované elektrony v obalu modelu jádra atomu však nejsou v dynamické rovnováze vázány pouze ke „svým“ protonům v jádře, ale jsou ovlivňovány ostatními elektrony a dalšími elementy v jejich okolí elektromagnetickou vazbou. Proto pro určení a nalezení jejich přesnější polohy, v dynamicky ustáleném stavu systému modelované struktury, můžeme použít/porovnat všechna pravidla, která používá metoda VSEPR [5], protože jsou vytvořena na základě empirických pozorování [1].

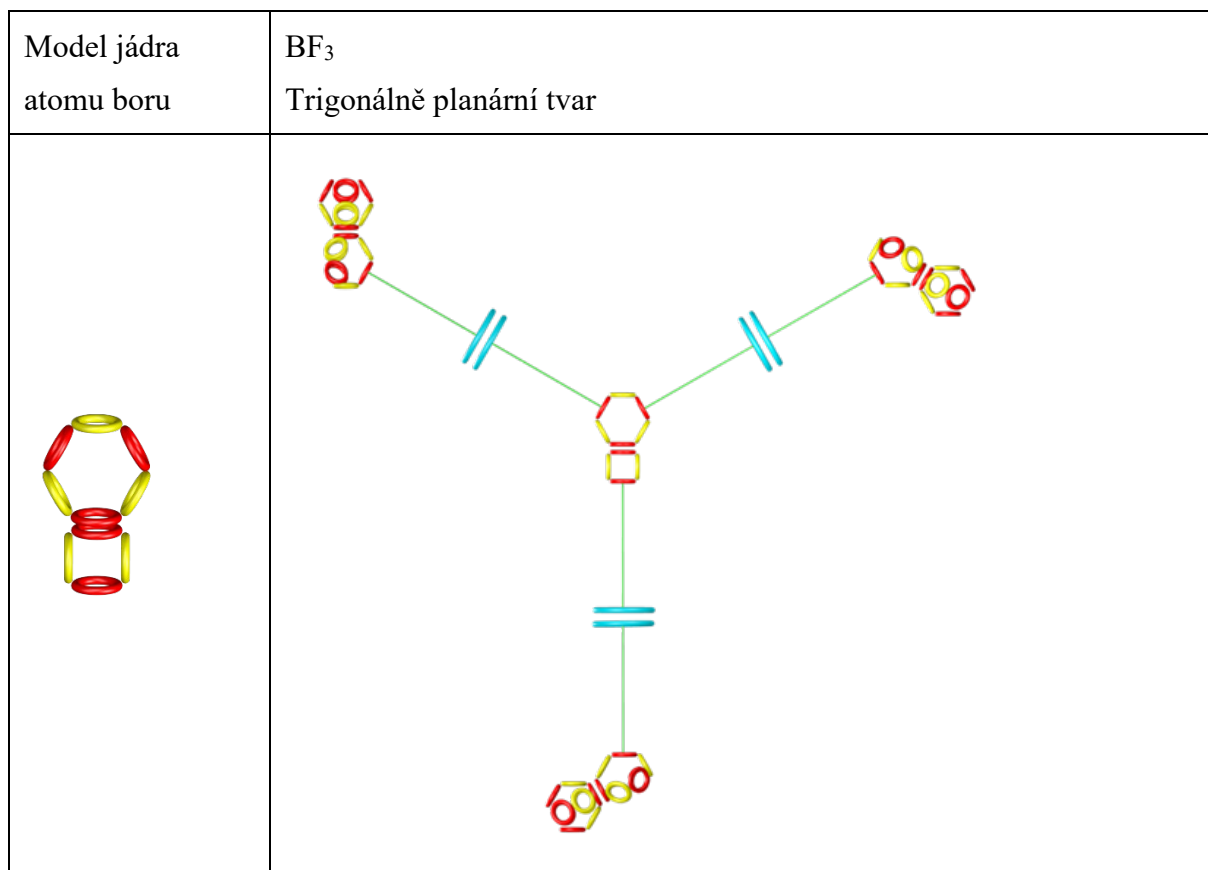
V následujících obrázcích (obr. 6 – obr. 20) jsou ukázány některé příklady symbolicky charakterizovaných základních tvarů molekul, které jsou modelovány a odvozeny z modelů struktur jader jejich centrálních atomů podle RT.

Model jádra atomu uhlíku	CO <sub>2</sub> Lineární tvar
	

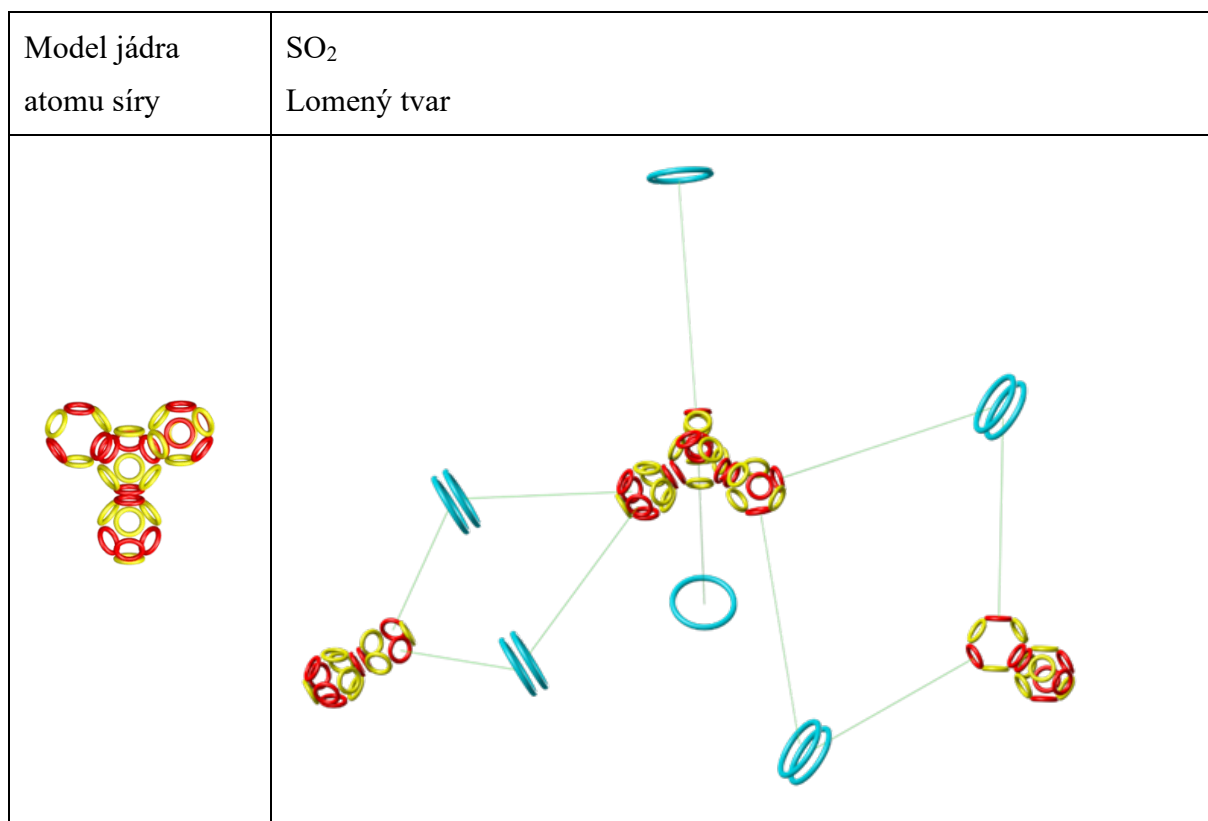
Obr. 6. Model jádra atomu uhlíku a model molekuly CO<sub>2</sub>, lineární tvar podle RT.

Model jádra atomu xenonu	XeF <sub>2</sub> Lineární tvar
	

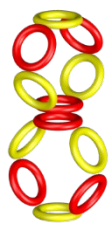
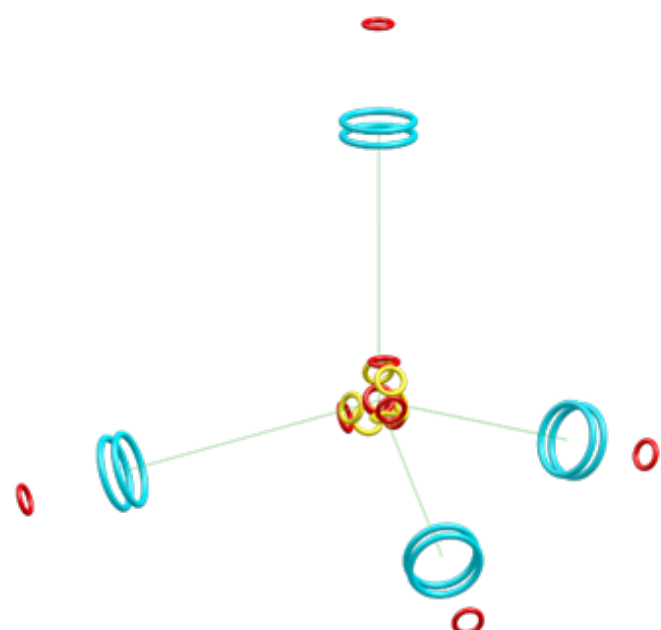
Obr. 7. Model jádra atomu xenonu a model molekuly XeF<sub>2</sub>, lineární tvar podle RT.




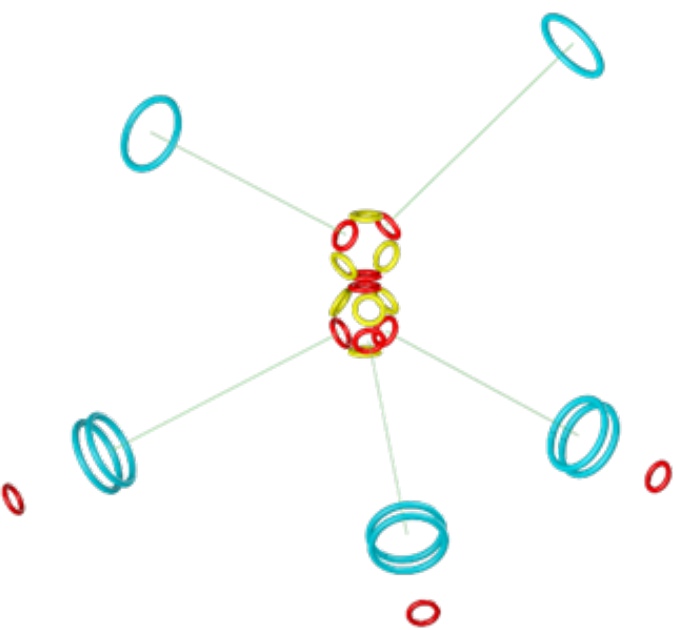
Obr. 8. Model jádra atomu boru a model molekuly  $\text{BF}_3$ , trigonálně planární tvar podle RT.



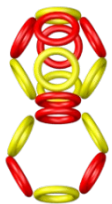
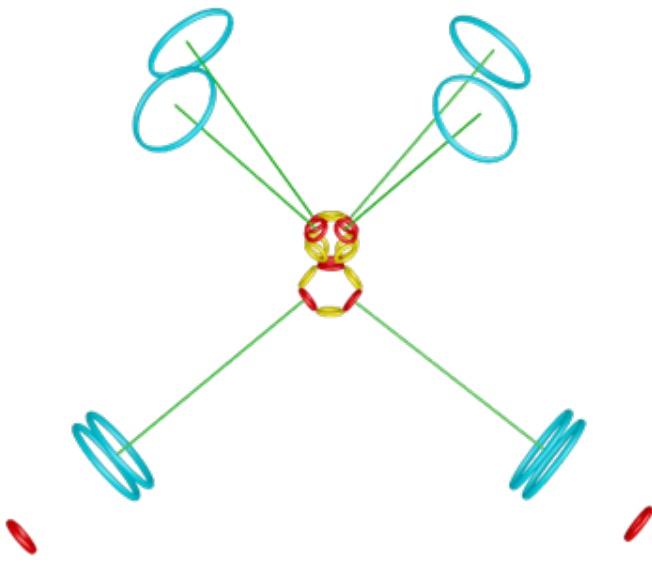
Obr. 9. Model jádra atomu síry a model molekuly  $\text{SO}_2$ , lomený tvar podle RT.

Model jádra atomu uhlíku	$\text{CH}_4$ Tetraedr
	

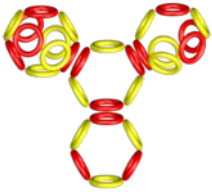
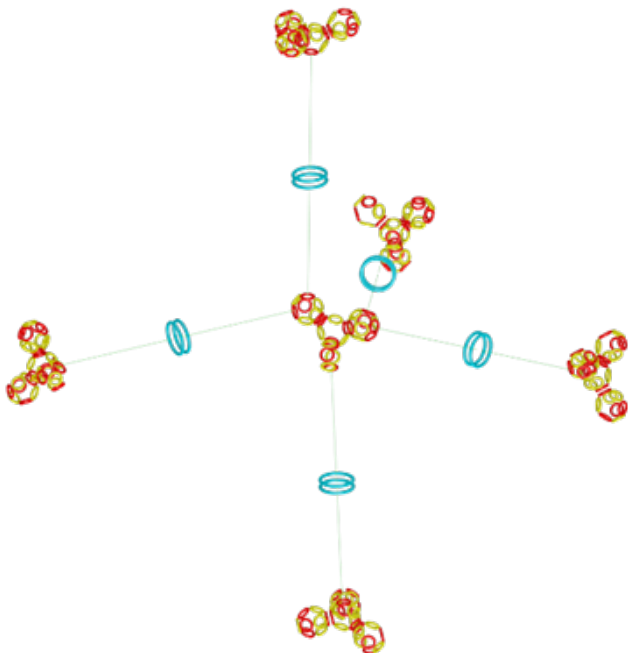
Obr. 10. Model jádra atomu uhlíku a model molekuly  $\text{CH}_4$ , tetraedr tvar podle RT.

Model jádra atomu dusíku	$\text{NH}_3$ Trigonální pyramida
	

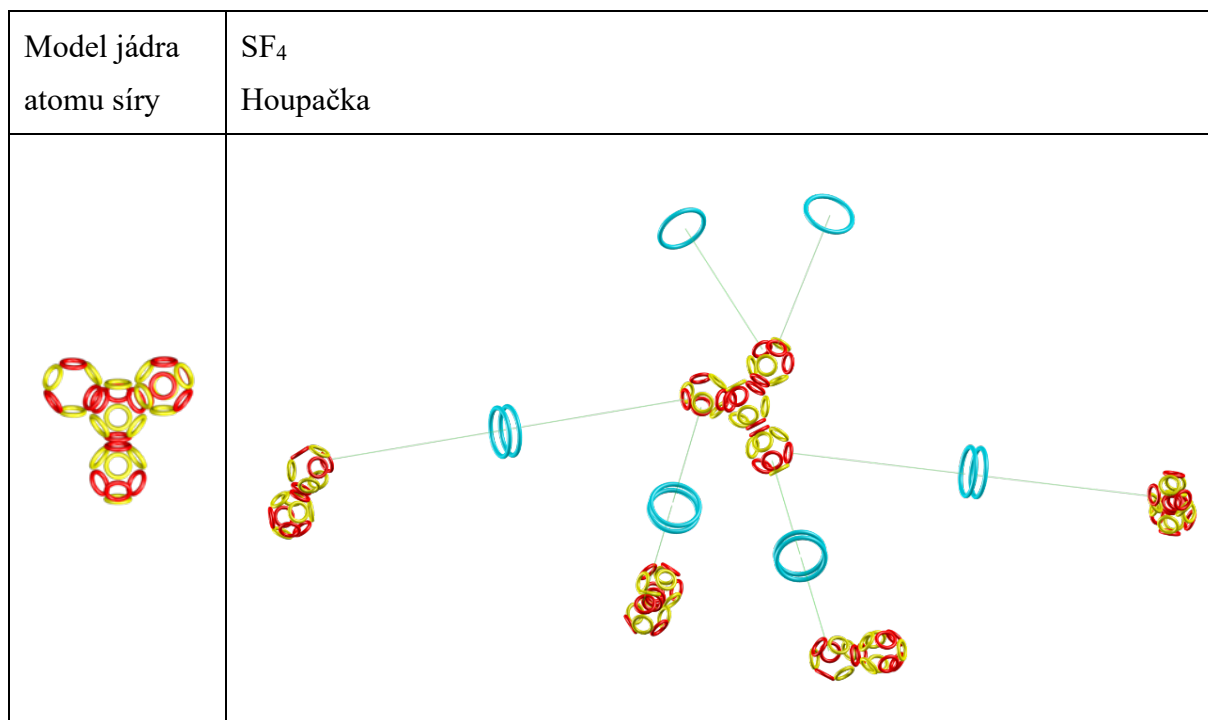
Obr. 11. Model jádra atomu dusíku a model molekuly  $\text{NH}_3$ , trigonální pyramida podle RT.

Model jádra atomu kyslíku	$\text{H}_2\text{O}$ Lomený tvar
	

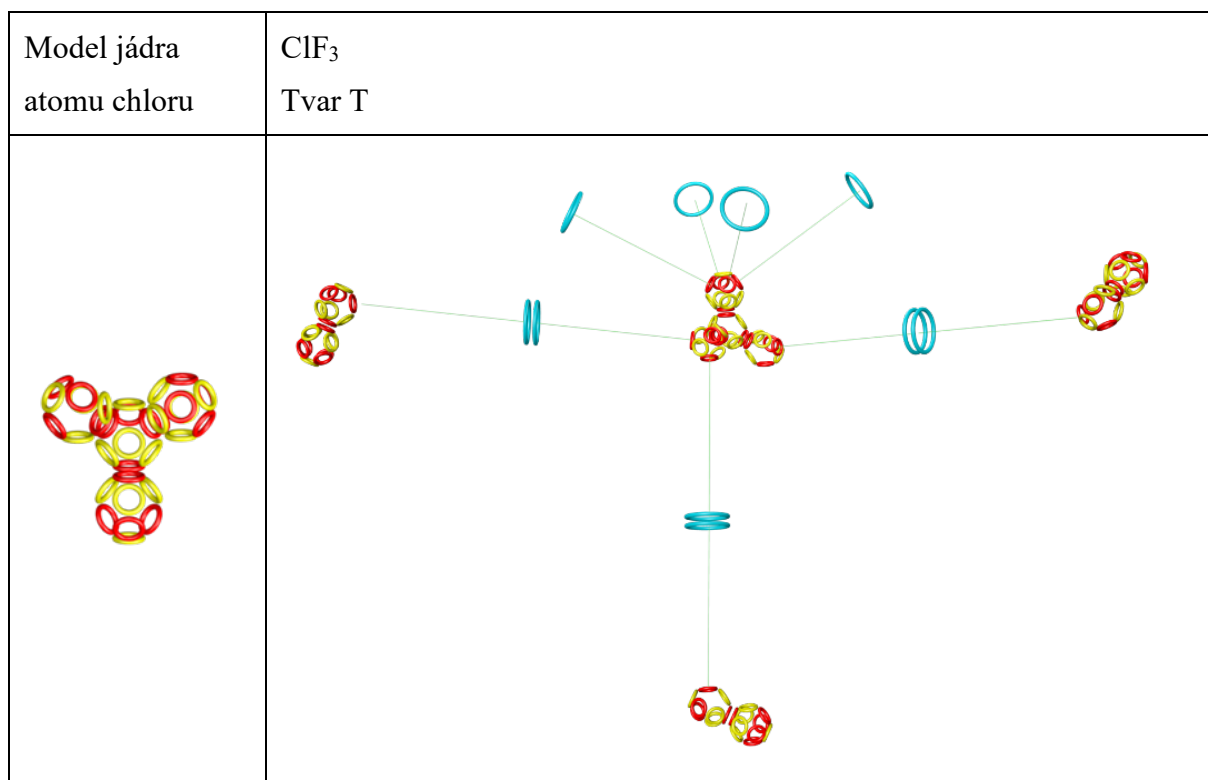
Obr. 12. Model jádra atomu kyslíku a model molekuly  $\text{H}_2\text{O}$ , lomený tvar podle RT.

Model jádra atomu fosforu	$\text{PCl}_5$ Trigonální bipyramida
	

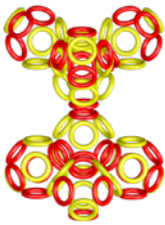
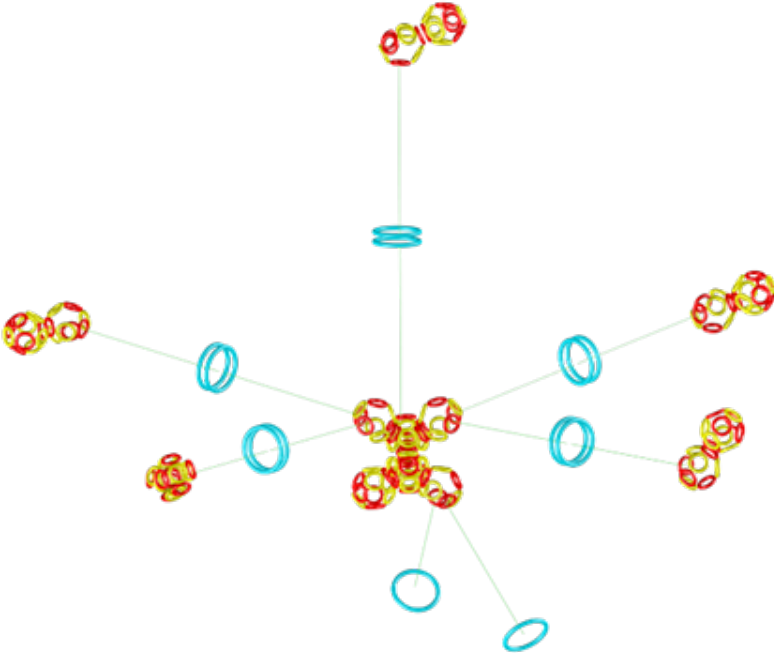
Obr. 13. Model jádra atomu fosforu a model molekuly  $\text{PCl}_5$ , trigonální bipyramida podle RT.



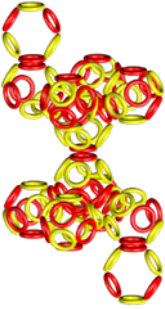
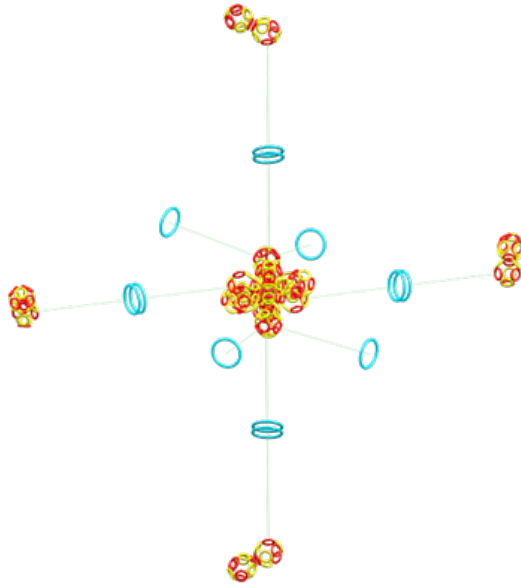
Obr. 14. Model jádra atomu síry a model molekuly SF<sub>4</sub>, tvar „houpačka“ podle RT.



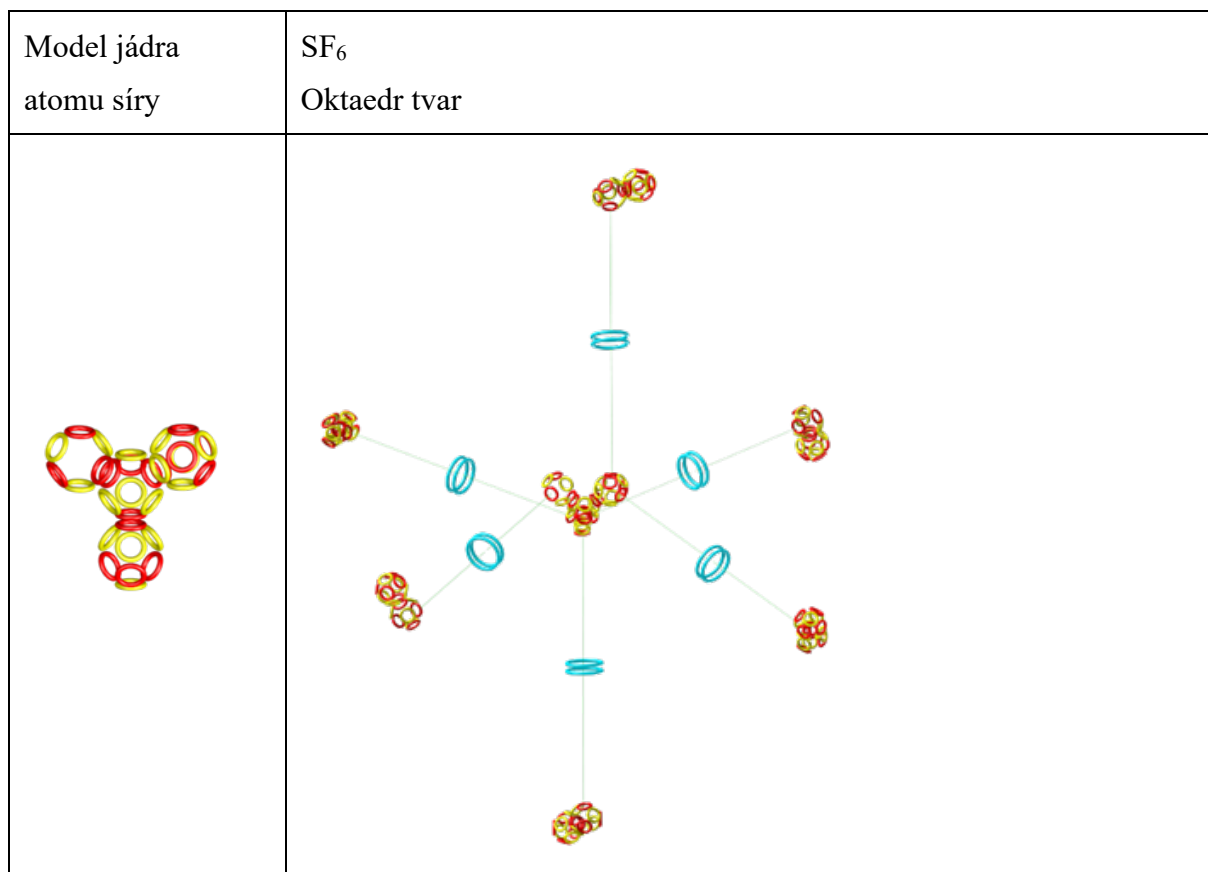
Obr. 15. Model jádra atomu chloru a model molekuly ClF<sub>3</sub>, tvar T podle RT.

<p>Model jádra atomu bromu</p>	<p><math>\text{BrF}_5</math> Čtvercová pyramida</p>
	

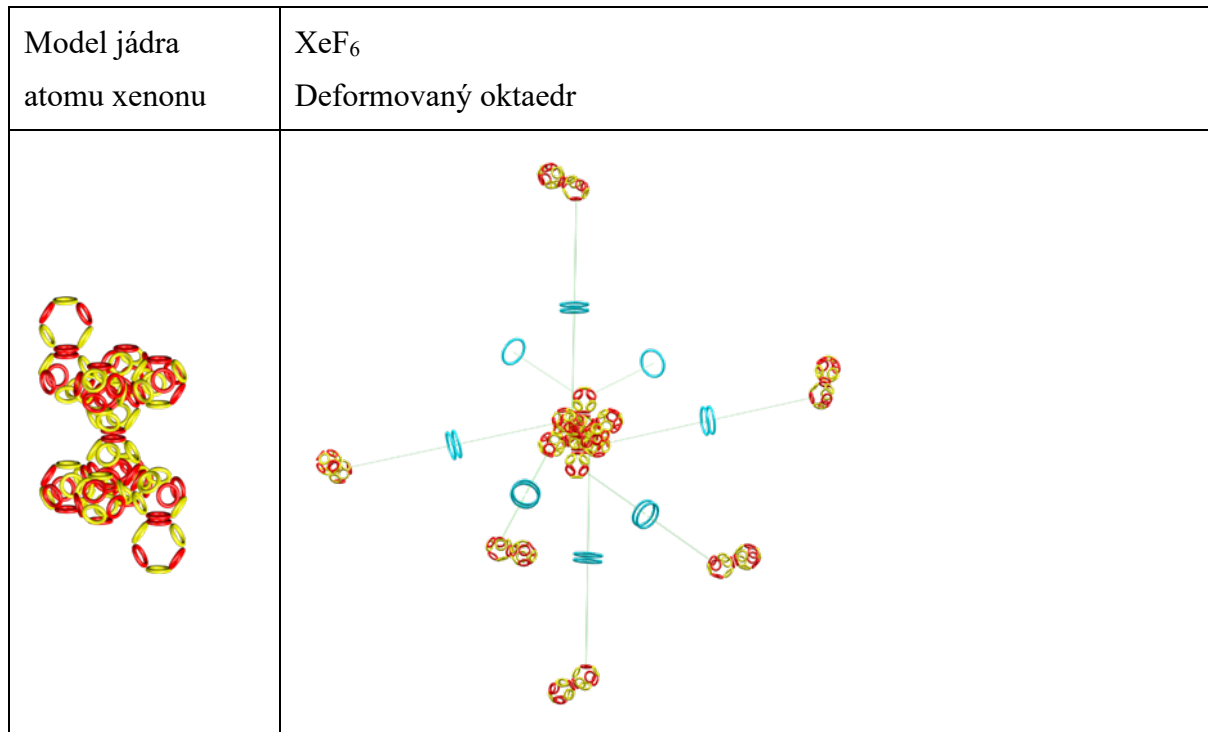
Obr. 16. Model jádra atomu bromu a model molekuly  $\text{BrF}_5$ , tvar čtvercová pyramida podle RT.

<p>Model jádra atomu xenonu</p>	<p><math>\text{XeF}_4</math> Čtverec/kvádr</p>
	

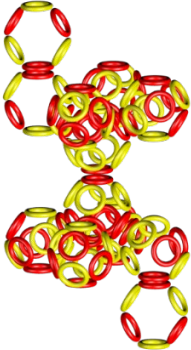
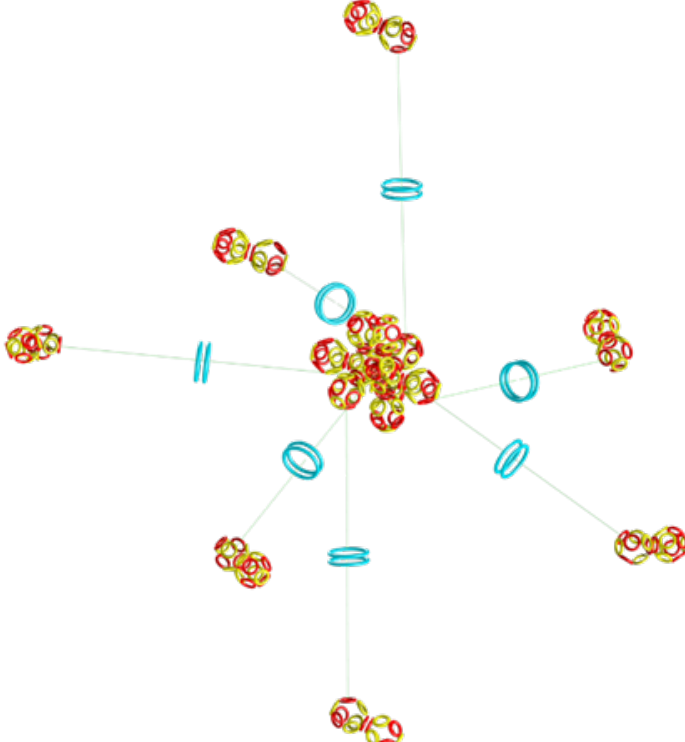
Obr. 17. Model jádra atomu xenonu a model molekuly  $\text{XeF}_4$ , tvar čtverec/kvádr podle RT.



Obr. 18. Model jádra atomu síry a model molekuly SF<sub>6</sub>, oktaedr tvar podle RT.



Obr. 19. Model jádra atomu xenonu a model molekuly XeF<sub>6</sub>, deformovaný oktaedr podle RT.

Model jádra atomu jodu	IF <sub>7</sub> Pentagonální bipyramida
	

Obr. 20. Model jádra atomu jodu a model molekuly IF<sub>7</sub>, pentagonální bi-pyramida podle RT.

## 4 Závěr

Prstencová teorie a její explicitně definované modely využívající platné elektromagnetické pole v dynamickém vázaném systému se snaží poukázat na důležitost struktury jader atomů při vytváření vazeb, a tedy i elektronových obalů. S navrženými modely jader atomů se pak dokáže jiným pohledem racionálně a ověřitelným způsobem vysvětlit a zdůvodnit rozložení elektronů v elektronovém obalu atomů, dokáže vyjádřit jejich parametry, zejména vzdálenosti od jádra v dynamickém ustáleném stavu a popsat/vysvětlit i vazby mezi atomy a tvary vzniklých molekul a další navazující jevy a efekty.

## 5 Literatura

- [1] Pauling, L. (1939) The nature of the chemical bond and the structure of molecules and crystals. Ithaca: The Cornell University Press, 1939.
- [2] Gillespie, R.J. (1970), *The electron-pair repulsion model for molecular geometry*. *Journal of Chemical Education*. 1970-01-01, roč. 47, čís. 1, s. 18.

[3] Zamastil, J., Benda, J. (2016), *Kvantová mechanika a elektrodynamika*, Univerzita Karlova v Praze, 2016.

[4] Werner, P. (2017), *Základy modelování prstencové struktury elementárních částic*. VUT ISBN 978-80-214-5620-4. <https://www.ringtheory.eu>

[5] Ebbing D, Gammon S. D., (2016), *General Chemistry*, ISBN-13: 978-1305580343