# Prostorna građa molekula

**Nikolić, Anđelo**

**Undergraduate thesis / Završni rad**

**2016**

*Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj:* **University of Zagreb, Faculty of Science / Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet**

*Permanent link / Trajna poveznica:* https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:217:818416

*Rights / Prava:* In copyright / Zaštićeno autorskim pravom.

*Download date / Datum preuzimanja:* **2024-03-29**




*Repository / Repozitorij:*

Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb









**Anđelo Nikolić**

Student 3. godine Preddiplomskog sveučilišnog studija KEMIJA

Kemijski odsjek
Prirodoslovno-matematički fakultet
Sveučilište u Zagrebu

# Prostorna građa molekula

## Završni rad

Rad je izrađen u Zavodu za opću i anorgansku kemiju

Mentor rada: doc. dr. sc. Ivica Đilović

Zagreb, 2016.

| | |
|---|---|
| Datum predaje prve verzije Završnog rada: | 25. srpnja 2016. |
| Datum predaje korigirane verzije Završnog rada: | 15. rujna 2016. |
| Datum ocjenjivanja Završnog rada i polaganja Završnog ispita: | 23. rujna 2016. |

| | |
|---|---|
| Mentor rada: doc. dr. sc. Ivica Đilović | Potpis: |

# Sadržaj

**§ Sažetak ..... iv**

**§ 1. Uvod ..... 1**

**1.1. Prostorna građa i njezina važnost u biološkim sustavima ..... 1**

**1.2. Određivanje prostorne građe molekula ..... 3**

**§ 2. Modeli za predviđanje prostorne građe ..... 4**

**2.1. Kratki povijesni pregled ..... 4**

**2.2. Lewisovi strukturni dijagrami ..... 5**

**2.3. VSEPR-model ..... 10**

*2.3.1. Osnovna zamisao VSEPR-modela ..... 10*

*2.3.2. Razmještaj domena i molekulski oblici ..... 11*

**§ 3. Literaturna vrela ..... 15**

# § Sažetak

Svaka kemijska vrsta ima svoj oblik te zauzima prostor na sebi svojstven način. U jednostavnijim slučajevima, to jest kod manjih kemijskih vrsta, možemo reći da je prostorna građa definirana položajem atomskih srži (jezgra i unutarnji elektroni). U nekim složenijim kemijskim vrstama prostorna se građa može promijeniti jer između krajnjih stanja postoji mala energijska barijera. S druge strane, promjena građe može biti posljedica međudjelovanja s drugim kemijskim vrstama ili posljedica promjene agregacijskog stanja.

Zašto je važno poznavati prostornu građu kemijskih vrsta? Zato što iz nje proizlazi čitav niz svojstava koja definiraju „ponašanje“ kemijske vrste, drugim riječima, građa nas može dovesti do informacija o funkciji neke molekule ili svojstva nekog materijala. Iako veza između prostorne građe i funkcije/svojstva nije direktna, informacije o građi mogu nas dovesti do brojnih otkrića. Primjerice, do novih lijekova ili materijala poboljšanih svojstava. Mnogi biološki procesi su ovisni o prostornoj građi molekula – od osjetila mirisa do metaboličkih procesa. Također, poznavajući građu možemo predvidjeti ishode nekih kemijskih reakcija itd. U ovom će radu biti opisana strategija primjene VSEPR-modela u predviđanju prostorne građe molekula. Na nekoliko primjera objasnit će se hodogram: molekulska formula → Lewisov strukturni dijagram → tip molekule $AX_mE_n$ → prostorni razmještaj atoma → detalji građe.

# § 1. Uvod

## 1.1. Prostorna građa i njezina važnost u biološkim sustavima

*Form follows function – that has been misunderstood. Form and function should be one, joined in a spiritual union.*[1]

Frank Lloyd Wright

Određivanje prostorne građe i njezinih promjena omogućuju nam dublje razumijevanje kemijskih procesa. Primjerice, mnogi su proizvodi biosintetskih puteva posljedica specifičnog molekulskog prepoznavanja enzima i supstrata.

Sva osjetila našeg tijela su kemijska, budući da cjelokupna neuronska aktivnost u našem mozgu ovisi o prijenosu molekula i iona s jednog mjesta na drugo i o reakcijama u kojima sudjeluju. Međutim, neke poruke iz vanjskoga svijeta uključuju izravna opažanja molekula koje se ponašaju kao nositelji poruka. To izravno opažanje okoliša uključuje okus, čija su osjetila na jeziku, miris, čija su osjetila smještena u nosu i neke vrste boli, čiji primatelji nastanjuju kožu i organe unutar tijela. Okus je beskonačno složen fenomen jer se molekule, odgovorne za njega, oslobađaju u vremenskim intervalima. Štoviše, njuh igra središnju ulogu kad mirišimo hranu koju prinosimo ustima ili, pak kad hrana unutar naših usta oslobađa hlapljive sastojke koji ulaze u nos sa stražnje strane. Oslobađanje tih mirisa se može također odvijati u vremenskim intervalima. Zato, kad jedemo jagodu, analiza daha pokazuje hlapljive estere koji se oslobađaju u prvom izdahu; drugi izdah je bogat esterima, dok treći sadrži aldehide. Primjerice, okus slatkoće se otkriva na prednjem dijelu jezika. Mačke nemaju puno „slatkih prijamnika" i ubrajamo ih u skupinu životinja koje ne mare za slatko. Preferiranje slatkoće i odbojnost prema gorkom vjerojatno je evolucijska prilagodba jer je izrazito zrelo voće slatko (kiselost opada sa zrelošću te se slatkoća šećera lakše primijeti), a mnogi biljni otrovi su gorki. Za okus je važna topljivost jer se tvar prvo mora otopiti u vodi da bi mogla prodrijeti u okusne bradavice. Molekule sa skupinama atoma u karakterističnom rasporedu nazvanom okusna jedinica, pobuđuju posebne okuse. Okusna jedinica prijemljiva za slatkoću naziva se *glikofor.* Struktura glikofora najvjerojatnije je usklađena sa strukturom proteina u prijamniku okusnog pupoljka,

u blizini prednjeg dijela jezika. Prilikom vezanja molekule s proteinom (vjerojatno vodikovom vezom) signal se šalje u mozak. Nekoliko je modela predloženo za glikofore. Problem je identificirati skupinu atoma u posebnom geometrijskom razmještaju; ako je skupina prisutna u molekuli i nije previše zasjenjena ostatkom molekule, može se vezati na molekulu proteina i prouzrokovati osjet slatkoga. Glikofor je tako vrsta molekulskog ključa, a prijamni protein molekulske brave.[2]

Neke male molekule, uključujući glikole kao što su etilen-glikol ili glicerol, su slatke; $\alpha$-aminokiseline, poput glicina su također slatke, no aminokiseline kod kojih je amino skupina udaljenija od karboksilne skupine nisu slatke. Stereoizomeri nemaju isti okus, sve D-aminokiseline (one koje ne nalazimo u prirodi) su slatke, dok odgovarajuće L-aminokiseline mogu biti slatke, gorke ili bez okusa. To ističe koliko je važan oblik molekule s obzirom na mogućnost vezanja na prijamnu molekulu proteina: zrcalna slika molekulskog ključa ne mora pristajati molekulskoj bravi. Neke vodene otopine metalnih iona su slatke itd.

Sličan proces se zbiva tijekom osjeta mirisa. Da bi se do toga došlo, molekule koje dolaze iz okoline moraju imati mirisno svojstvo. Te molekule moraju biti topljive u sluznici koja ulazi u nosnu šupljinu. Najvažnije od svega, mirisna molekula ili barem jedan njezin dio, mora biti topljiva u tankom sloju vodene otopine koja ulazi u nosnu šupljinu. Drugim riječima, mora imati točno određeni oblik (građu) koja će na točno određen/jedinstven način „sjesti" na jedan od mirisnih receptora. Kada se to dogodi, nastaje živčani impuls koji se u mozgu interpretira kao specifičnu aromu, tj. miris. Pri tome je važno da je konačni osjet u mozgu rezultat kooperativnosti djelovanja dvaju osjetila: okusa i mirisa. Navedena tvrdnja se najbolje manifestira kada ne osjećamo okus zbog začepljenja nosa – mirisna komponenta okusa nedostaje.[2]

## 1.2. Određivanje prostorne građe molekula

Raznim je eksperimentalnim tehnikama moguće proniknuti u prostornu građu kemijskih vrsta. Međutim, valja napomenuti da svaka od njih ima svoje prednosti i nedostatke te je najbolje koristiti podatke komplementarne tehnike kako bi se dobila potpunija slika. Difrakcijske metode su najpreciznije, ali su primijenjive na čvrsto agregacijsko stanje. Metode višedimenzijske nuklearne magnetske rezonancije nisu ograničene na čvrsto agregacijsko stanje, ali su i manje precizne (iako pružaju više informacija o dinamici molekule). Različite spektroskopije, poput infracrvene ili Ramanove u većini slučajeva daju informacije o simetriji molekula, potvrđuju prisutnost nekih karakterističnih skupina i slično.

# § 2. Modeli za predviđanje prostorne građe

## 2.1. Kratki povijesni pregled

Moderne tehnike strukturne analize, poput rentgenske ili nuklearne magnetske rezonancije, omogućile su uvid u strukturu molekula i kompleksih iona s velikom točnošću. U nepunih 100 godina prošli smo put od strukture natrijevog klorida do strukture ribosoma.

Radi jednostavnosti i jasnoće, u ovome radu neće biti opisano na koje se načine atomi povezuju u složenije sustave. Dakle, neće biti riječi o kemijskoj vezi, njezinoj prirodi i svojstvima.

Gledano s povijesne strane, važne su sljedeće godine:

1. 1916. kada je G. N. Lewis svojom teorijom omogućio predviđanje topologije molekula;[3]
2. 1940. kada se N. V. Sidgwick i H. M. Powell dokučili da je prostornu građu molekula moguće je protumačiti elektronskom strukturom molekula (vezni i nevezni elektronski parovi)[4] i;
3. 1957. kada su R. S. Nyholm i R. J. Gillespie predstavili VSEPR-model[5] (akronim od engl. *Valence Shell Electron Pair Repulsion*).

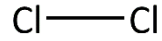
Potonji model je postulirao da je najvažniji čimbenik u predviđanju prostorne građe molekula odbijanje veznih i neveznih elektronskih parova oko središnje atomske srži. Nadalje, taj se model najčešće koristi u srednjoškolskim i sveučilišnim udžbenicima kemije.[6-9] U radu će se opisati kako se crtaju Lewisovi strukturni dijagrami iz kojih se uz pomoć hodograma iz Sažetka ovog rada može predvidjeti prostorna građa jednostavnijih molekula.

## 2.2. Lewisovi strukturni dijagrami

U svom epohalnom radu „*The Atom and the Molecule*" iz 1916. Gilbert Newton Lewis je postavio temelje teorije koja omogućuje predviđanje topologije molekula.[3] Iako je izvorni skup pravila izmijenjen, model je i koristan i gotovo nezaobilazan. Osim predviđanja topologije može poslužiti i upoznavanju znanstvene metode.

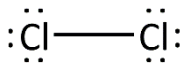
Za sam početak potrebno je pojasniti Lewisovu simboliku. Što predstavljaju crtice, točkice, slova i uglate zagrade? Lewisov simbol za atom vodika je H·. Slovo H predstavlja atomsku srž – *kernel*, u ovom slučaju jezgru atoma vodika (općenito je to jezgra s unutarnjim elektronima), a · predstavlja valentni elektron. U Lewisovom prikazu molekule vodika, H−H, crtica predstavlja vezni elektronski par. Uglate zagrade se koriste u slučaju kad kemijska vrsta ima više ili manje valentnih elektrona od zbroja valentnih elektrona slobodnih atoma koje čine tu kemijsku vrstu. Primjerice, u Lewisovom strukturnom dijagramu $[\cdot C{\equiv}O:]^+$, + znači da ta vrsta ima jedan valentni elektron manje (9) od zbroja valentnih elektrona slobodnih atoma ugljika i kisika (10). U tom slučaju potrebno je koristiti i uglatu zagradu.

Kako nacrtati Lewisov strukturni dijagram molekule klora? Prema prvom i drugom pravilu svi valentni elektroni pripadaju cijeloj molekuli i moraju biti u prikazu. Koliko se atoma klora nalazi u molekuli? Dva. Koliko svaki od atoma klora ima valentnih elektrona? Sedam. Dakle, molekula klora ima 14 valentnih elektrona. Prvi korak je crticom povezati atomske srži klora (shema 1).



Shema 1. Prvi korak u crtanju Lewisovog strukturnog dijagrama molekule klora.

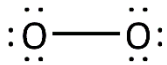
Zatim, svakoj srži dodati onoliko elektrona koliko joj nedostaje do okteta (shema 2).



Shema 2. Lewisov strukturni dijagrama molekule klora.

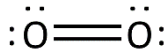
Drugi korak je prebrojati sve elektrone i usporediti njihov broj s brojem elektrona koja te kemijska vrsta mora imati. Kako je u ovom slučaju broj elektrona u prikazu jednak broju valentnih elektrona koje ta vrsta ima gotovi smo s crtanjem.

Kako izgleda Lewisov strukturni dijagram molekule kisika? Molekula kisika ima 12 valentnih elektrona. Povežemo li atomske srži kisika crticom (shema 3) i dopišemo li onoliko točkica da svakoj atomskoj srži osiguramo oktet dobit ćemo:



Shema 3. Prvi korak u crtanju Lewisovog strukturnog dijagrama molekule kisika.

Takva vrsta ima 14 valentnih elektrona, a treba ih imati 12. Što treba napraviti? Iz prethodnog prikaza uklone se po dvije točkice (dva valentna elektrona) sa svake srži, a između simbola atomskih srži dopiše se još jednu veznu crtica (shema 4). Sad prikaz izgleda ovako:



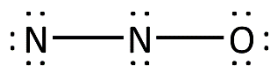
Shema 4. Lewisov strukturni dijagram molekule kisika.

Molekule dušika i ugljikovog(II) oksida su dvoatomne i izoelektronske. Slijedeći gore navedena pravila dolazi se do dijagramâ (shema 5) koji izgledaju ovako:



Shema 5. Lewisovi strukturni dijagrami molekule dušika (lijevo) i ugljikovog(II) oksida (desno).

Kod višeatomnih molekula situacija je složenija. Uglavnom se postavlja pitanje: „Koji atom ide u sredinu?“ Za veliku većinu slučajeva vrijedi da u sredinu ide najelektropozitivniji atom. Primjerice, u molekuli dušikovog(I) oksida takva je atomska srž dušika (shema 6). Postavi se u sredinu, poveže se ostalim atomskim sržima i dopune li se srži do okteta prikaz će izgledati ovako:



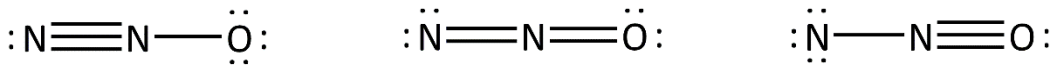
Shema 6. Prvi korak u crtanju Lewisovog strukturnog dijagrama molekule dušikovog(I) oksida.

Kako broj valentnih elektrona (20) u prikazu ne odgovara broju valentnih elektrona molekule (16) moraju se napraviti izmjene (shema 7).



Shema 7. Drugi korak u crtanju Lewisovog strukturnog dijagrama molekule dušikovog(I) oksida.

Za prikaz s ispravnim brojem valentnih elektrona potrebno je izvršiti dodatne izmjene.

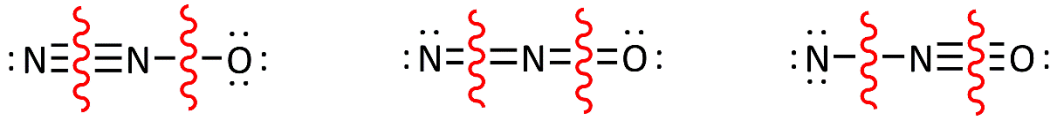


Shema 8. Treći korak u crtanju Lewisovog strukturnog dijagrama molekule dušikovog(I) oksida.

Svaki od ova tri prikaza ima 14 valentnih elektrona – onoliko koliko bi trebao imati. Dakle, moguće je nacrtati nekoliko Lewisovih strukturnih dijagrama poštujući dosadašnja pravila (shema 8). Ali, koji prikaz je ispravan? Da bi se razriješio taj „misterij" mora se uvesti pojam formalnog naboja koji „vodi" k ispravnom rješenju.[10]

Formalni naboj je umjetno pripisan naboj pojedinoj atomskoj srži u nekoj kemijskoj vrsti.* Formalni naboj određujemo na temelju Lewisovog strukturnog prikaza, a postupak je sljedeći:

A) Zamislimo da su sve veze između atomskih srži u Lewisovom strukturnom prikazu jedinke homolitički pokidane (shema 9); dakle tako da svakoj atomskoj srži pripadne polovina zajedničkih veznih elektrona.

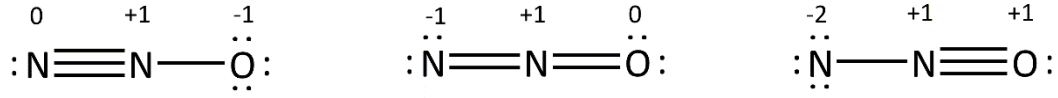


Shema 9. Četvrti korak u crtanju Lewisovog strukturnog dijagrama molekule dušikovog(I) oksida.

B) Na ovaj način dobivene Lewisove prikaze pojedinih atoma (atomske srži zajedno s valentnim elektronima koji su im pripali ili preostali) treba usporediti s Lewisovim simbolima

* Formalni naboj i oksidacijski broj su zamišljeni naboji pripisani pojedinoj atomskoj srži uporabom određenog skupa pravila, a na temelju poznavanja Lewisovog prikaza pojedine kemijske vrste (koji i sam nastaje primjenom niza pravila). Formalni naboj atomske vrste mora biti jednak i predznakom i vrijednošću njenom nabojnom broju.

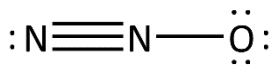
odgovarajućih neutralnih atoma. Ukoliko je broj valentnih elektrona oko pojedine atomske srži veći od broja valentnih elektrona u Lewisovom prikazu odgovarajućeg neutralnog atoma, toj atomskoj srži pripisat ćemo odgovarajući negativni formalni naboj (shema 10).




Shema 10. Mogući Lewisovi strukturni dijagrami molekule dušikovog(I) oksida s pripadnim nabojima atomskih srži.

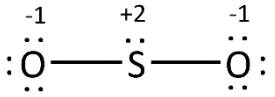
Primjerice, krajnje lijevoj atomskoj srži homolitičkim cijepanjem „pripadnu“ 4 valentna elektrona, a u slobodnom atomu ih je 5. U slučaju manjka valentnih elektrona formalni naboj će imati odgovarajuću vrijednost i pozitivan predznak. Prema tome, formalni naboj spomenute atomske srži je +1 (shema 10).

Kad se sve uzme u obzir, neispravan prikaz će biti onaj koji ima manje atomskih srži s formalnim nabojem 0 (to diskvalificira krajnje desni prikaz u shemi 10). Ukoliko ima prikaza s istom distribucijom formalnih naboja, ispravan prikaz će biti onaj na kojemu su negativniji formalni naboji na elektronegativnijim sržima (shema 11). Dakle, Lewisov strukturni dijagram molekule dušikovog(I) oksida je



Shema 11. Lewisov strukturni dijagram molekule dušikovog(I) oksida.

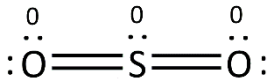
Postoje molekule koje su sastavljene od većih atoma. Takvim se atomima smatraju oni s atomskim brojem većim od 11. U tim slučajevima moguće je kršiti pravilo okteta „na više“. Primjer takve molekule je ona sumporovog(IV) oksida. Jednostavno je nacrtati prikaz s ispravnim brojem valentnih elektrona (shema 12).




Shema 12. Mogući Lewisov strukturni dijagram molekule sumporovog(IV) oksida s pripadnim nabojima atomskih srži.

Međutim, iz gore spomenutih razloga, moguće je to napraviti i na način prikazan na shemi 13. Svi valentni elektroni su u prikazu, najmanje elektronegativna srž je u središtu i svi formalni

naboji su jednaki nuli (treba težiti prikazu u kojem brojem dominiraju srži s formalnim nabojem 0).




Shema 13. Lewisov strukturni dijagram molekule sumporovog(IV) oksida.

## 2.3. VSEPR-model

### *2.3.1. Osnovna zamisao VSEPR-modela*

Kao što je već ranije spomenuto, znanstvenici Nyholm i Gillespie su predstavili svoj VSEPR-model (akronim od engl. *Valence Shell Electron-Pair Repulsion*).[5] Odtad je njihov model jedan od najvažnijih čimbenika u predviđanju prostorne građe kemijskih vrsta.

Njihova temeljna ideja je da su vezni i nevezni elektronski parovi oko atomskih srži u molekulama međusobno maksimalno udaljeni jer se odbijaju. Zašto se elektronski parovi (elektroni) odbijaju? Jer su istog naboja. Zašto se i kako onda sparuju? Odgovor valja potražiti u Paulijevom principu koji sparivanje elektrona objašnjava činjenicom da su različitog spina – takvi „ne utječu jedni na druge“. Što je elektronski spin? To je prirodno svojstvo elektrona (i drugih elementarnih čestica) i nije ga ispravno zamišljati kao vrtnju elektrona oko svoje osi.

Kako se prostorna građa molekule određuje pomoću tog modela? Svaku kemijsku vrstu ili neki njezin dio možemo prikazati općom formulom $AX_nE_m$ u kojoj je:

A – središnji atom

X – oznaka za vezne domene

E – oznaka za nevezne domene

*n* – broj veznih domena

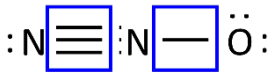
*m* – broj neveznih domena

Spomenute domene će se maksimalno razmaknuti jedne od drugih u prostoru i time odrediti prostornu građu molekule ili onog njezinog dijela koji promatramo. Kad opisujemo prostornu građu molekule onda promatramo samo raspored atomskih srži. Odstupanje od idealnog oblika molekule moguće je objasniti činjenicama da se:

1. Nevezni elektronski parovi jače se odbijaju od veznih.
2. Odbijanje uzrokovano veznim elektronskim parovima smanjuje se kako raste elektronegativnost terminalnih atoma.
3. Višestruke veze (više podijeljenih elektronskih parova između dva atoma) jače se odbijaju od jednostrukih (jednog veznog para).

### 2.3.2. *Razmještaj domena i molekulski oblici*

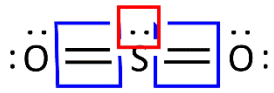
Iz Lewisovih strukturnih dijagrama moguće je odrediti tip molekule $AX_nE_m$, a time i njegovu prostornu građu. Za molekulu



Shema 14. Lewisov strukturni dijagram molekule dušikovog(I) oksida s pripadnim veznim domenama (plavi kvadrati).

lako je utvrditi da oko središnjeg atoma dušika postoje dvije vezne (označene plavim kvadratima) i niti jedna nevezna domena (shema 14). Dakle, to odgovara tipu molekule $AX_2$. Spomenute domene će biti maksimalno udaljene jedna od druge ukoliko su usmjerene duž zamišljenog pravca. U tom su slučaju i sve atomske srži na istom tom pravcu molekula je linearnog ili štapićastog oblika.

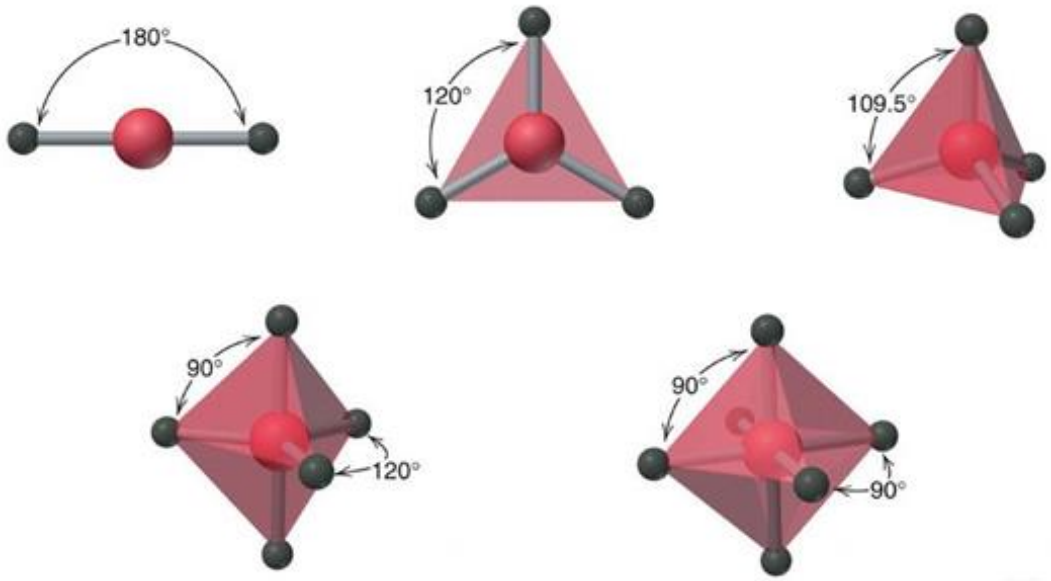
U molekuli sumporovog dioksida, središnji atom je okružen s dvije vezne (označene plavim kvadratima) i jednom neveznom (označenom crvenim kvadratom) domenom (shema 15). Ukupno su to tri domene i to odgovara tipu molekule $AX_2E$.



Shema 15. Lewisov strukturni dijagram molekule sumporovog(IV) oksida s pripadnim veznim (plavi kvadrati) i neveznom (crveni kvadrat) domenama.

Tri su domene maksimalno udaljene kad su usmjerene u vrhove jednakostraničnog trokuta, a molekula ima V-oblik (Lewisov prikaz je napravljen tako da je iz njega vidljiva prostorna građa). Kako je odbijanje neveznih i veznih parova jače od odbijanja veznih parova, valentni kut je manji od 120°.

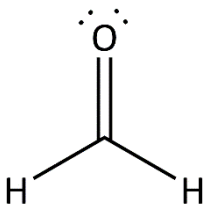
Broj domena diktira njihov međusobni razmještaj, a položaji atomskih srži definiraju prostornu građu molekule. Primjerice, kada se oko središnjeg atoma nalaze dvije, tri, četiri, pet ili šest domena one će se razmjestiti na način koji je prikazan na slici 1. Takav razmještaj, koji je posljedica odbijanja domena, rezultira minimalnom energijom sustava.




Slika 1. Razmještaj domena s obzirom na njihov ukupan broj (navedene su idealne vrijednosti kutova među njima).[11]

U sustavima s dvije domene odbijanje je najmanje kad su one okrenute u suprotnim smjerovima. Takav razmještaj domena u molekuli rezultira linearnom ili štapićastom sturkturom u kojoj je valentni kut jednak 180°. Primjeri su molekule ugljikovog dioksida, molekule cijanovodika ili tiocijanatnog iona.

Tri domene oko centralnog atoma maksimalno se odbijaju kada su usmjerene u kutove trokuta. U molekuli sumporovog(VI) oksida terminalni atomi su istovrsni pa su valentni kutovi jednaki i iznose 120°. U molekula sumporovog(IV) oksida oko središnje atomske srži su također prisutne tri domene od kojih je jedna nevezna. Kako se nevezne i vezne domene međusobno jače odbijaju od dviju veznih domena valentni kut će biti manji od 120°. Kako položaji atomskih srži definiraju prostornu građu molekule, ona je kutnog ili V-oblika. U slučaju molekule formaldehida, čiji je Lewisov strukturni dijagram prikazan na shemi 16, valentni kut O−C−H iznosi 122°, a valentni kut H−C−H iznosi 116°. To je zato što je odbijanje veznih domena manje u slučaju kad su „siromašnije“ elektronima.

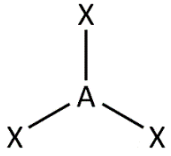
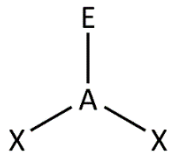
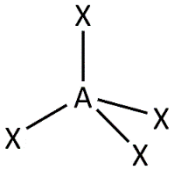
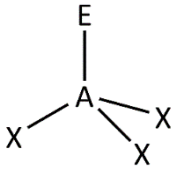
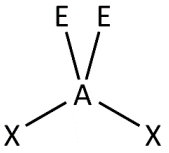
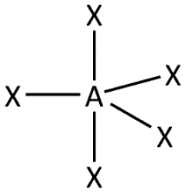
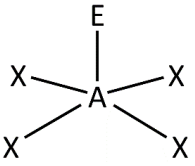
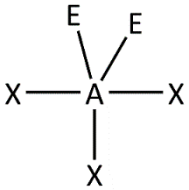
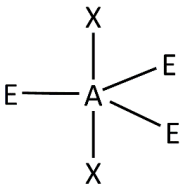
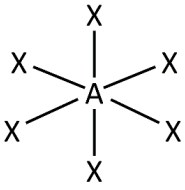
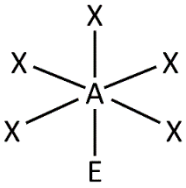
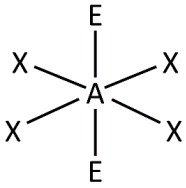



Shema 16. Lewisov strukturni dijagram molekule formaldehida.

Molekula vode i molekula sumporovodika su jednake građe – V-oblik, ali valentni kutovi im se razlikuju. U molekuli vode taj kut je približno jednak 105°, a u molekuli sumporovodika iznosi 92°. To je zato jer je atomska srž sumpora veća od atomske srži kisika.

Primjeri molekulskih oblika s četiri ili više domena prikazani su u tablici 1. Uglavnom, najviše se problema javlja u predviđanju građe molekula u kojima se oko središnje atomske srži nalazi pet domena. One su maksimalno udaljene kada su usmjerene u kutove trigonske bipiramide. S molekulama tipa $AX_5$ i $AX_2E_3$ općenito nema problema. Oni se javljaju u predviđanju građe molekula tipa $AX_4E$ i $AX_3E_2$. Takvim se molekulama redovito predviđa neispravna prostorna građa – kvadratno-planarna, odnosno trokutasta. Međutim, kvalitativnom analizom odbijanja veznih i neveznih domena lako se može utvrditi da će nevezne domene zauzeti ekvatorijalni položaj. Na taj način vrše slabija međuvezna odbijanja unutar molekule. U molekuli sumporovog tetrafluorida ($SF_4$ – tip $AX_4E$) ekvatorijalni valentni kutvi iznose 101,5°, a aksijalno-ekvatorijalni 86,8° (obje vrijednosti su značajno manje od onih u molekulama tipa $AX_5$). U molekuli bromov trifluorid, koja je inače T-oblika, valentni kut iznosi 86,2°.

Tablica 1. Primjeri i opisi prostorne građe molekula različitih tipova $AX_mE_n$.

| | Prostorna građa | | | |
|---|---|---|---|---|
| Ukupan broj domena | bez neveznih domena | s jednom neveznom domenom | s dvije nevezne domene | s tri nevezne domene |
| 2 |  Linearna ili štapićasta ($HCN$, $CO_2$) | | | |
| 3 |  Trigonsko-planarna ili trokutasta ($H_2CO$, $SO_3$) |  Kutna ili V-oblika ($O_3$, $SO_2$) | | |
| 4 |  Tetraedarska ($CH_4$, $SO_4^{2-}$) |  Trigonsko-piramidalna ($NH_3$, $H_3O^+$) |  Kutna ili V-oblika ($H_2O$, $H_2S$) | |
| 5 |  Trigonsko-bipiramidalna ($PCl_5$) |  Klackalica ($SF_4$) |  T-oblik ($BrF_3$, $PCl_3$) |  Linearna ili štapićasta ($I_3^-$, $XeF_2$) |
| 6 |  Oktaedarska ($SF_6$) |  Četverostrana piramida ($XeOF_4$) |  Kvadratno-planarna ($XeF_4$) | |

# § 3. Literaturna vrela


1. https://hr.wikipedia.org/wiki/Frank_Lloyd_Wright (preuzeto 17. srpnja 2016.)
2. P. Atkins, *Atkinsove molekule*, Profil, Zagreb, 2009, str. 121.-124.
3. G. N. Lewis, *J. Am. Chem. Soc.,* **38** 762-785.
4. N. V. Sidgwick, H. M. Powell, *Proc. Roy. Soc. A.* **176** (1940) 153-180.
5. R. J. Gillespie, R. S. Nyholm, *Quart. Rev. Chem. Soc.* **11** (1957) 339-380.
6. M. S. Silberberg, *Chemistry: The molecular Nature of Matter and Change*, McGraw Hill, New York, 2006, str. 365-390.
7. D. F. Shriver, P. W. Atkins, C. H. Langford, *Inorganic Chemistry*, Oxford, Oxford University Press, 1994, str. 109-111.
8. F. A. Cotton, G. Wilkinson, P. L. Gaus, *Basic Inorganic Chemistry*, John Wiley & Sons Inc., Toronto, 1995, str. 73-78.
9. I. Filipović, S. Lipanović, *Opća i anorganska kemija 1.dio*, Školska knjiga, Zagreb, 1995, str. 197-198.
10. http://goldbook.iupac.org (preuzeto 13. rujna 2006.)