

Vārds Uzvārds : _____

Grupa N° _____

VSEPR (Valent Shell Electron Pair Repulsion) kovalentās saites pēc apmaiņas mehānisma

A. Studenta praktiskie soļi molekulārām studijām reālajās molekulu koordinātēs:

<http://aris.gusc.lv/06Daugavpils/Research/VSEPRlat.pdf>

ChemScape MDL  RasWin  MAGE  ISIS  FireFox3.5.5  pārlūkprogramma

B. izpētiet dotās molekulas HTML aplikāciju izvēlnē palaižot mājas lapu **VSEPR**:

http://aris.gusc.lv/ChemFiles/ComplexCompounds/PensilvaniaLebanonUniv/PensilvaniaLebanonUniv/VSEPR_table_C0.html;

un identificējiet vienkāršo sigma σ saiti bet divkāršās un trīskāršās pi π saites kā papildus ķīmiskās saites.

Vizualizācijas - Display iespējas: **Nūjiņu**

(izvēlnē vai ar labo peles pogu)	Bumbiņu un Nūjiņu	Stick	Ball & Stick
Atoms	Simbols	Krāsa	Atoma kovalento vērtību skaits
Ogleklis	C gaiši Pelēks	Pelēks vai Melns	4
Ūdeņradis	H Balts	Balts	1
Skābeklis	O Sarkans	Sarkans 2 (donoru akceptoru ligands līdz 4)	2 & 6
Slāpeklis	N gaiši Zils	Zils 3 + 1 (donoru akceptoru ligands līdz 4)	5 & 3
Sērs	S gaiši Dzeltenš	Dzeltenš	2 & 6
Fosfors	P intensīvi Dzeltenš	Dzeltenš	5 & 3
Nātrija jons	Na⁺	intensīvi Zils	+1 (donoru akceptoru līdz 6)
Kalcija jons	Ca²⁺	tumši Pelēks	+2 (donoru akceptoru līdz 6)
Alumīnija jons	Al³⁺	tumši Pelēks	+3 (donoru akceptoru līdz 6)
Magnija jons	Mg²⁺	Zaļš	+2 (donoru akceptoru līdz 6)
Dzelzs jons	Fe²⁺	pelēki Dzeltenš	+2 (donoru akceptoru līdz 6)
Dzelzs jons	Fe³⁺	pelēki Dzeltenš	+3 (donoru akceptoru līdz 6)

zinātnieki
Corey, Pauling, Koltun
atomu modeļu attēlošanai
publicē **CPK** atomu krāsu
shēmu

Nature 1965 ASV patents.

C Ogleklis

H Ūdeņradis

O Skābeklis

N Slāpeklis

P Fosfors

Fe Dzelzs

3. Veiciet 10 molekulu eksperimentālo pētījumu:

oglekļa(IV)oksīdam **CO₂**, karbonāta anjonam **CO₃²⁻**, skudrskābei **HCOOH**,

metānam **CH₄**, amonjakam **NH₃**, ūdenim **H₂O**, fosfora penta hlorīdam **PCl₅**,

hekso hidroksa alumīnāta(III) anjonam **[Al(OH)₆]³⁻**, etēnam **H₂C=CH₂** un etīnam **H₃C≡CH**

Ierakstīt un iezīmēt tabulā,

1. Pirmajā stabiņā: molekulas formulu, molmasu, elementu sastāva formulu un nosaukumu

ISISDraw izvēlnē: Chemistry: generate Name pierakstiet jums zināmo nosaukumu;

2. Otrajā stabiņā nosauciet molekulu ģeometriskās figūras un elektronu pāru σ , π saišu skaits

simetrizācijas (hibridizācijas) tipu savienojumā, piemēram - **spd**;

3. trešajā stabiņā zīmējiet perspektīvās molekulu skices (lietojiet arī ISIS Draw ) un

select: Mouse Click Action: Angle, iezīmējot atomus nomēra valences leņķus.

un nomērītos leņķus pierakstiet molekulas skicē.

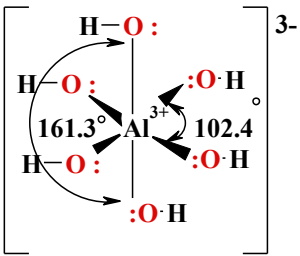

4. ceturtajā stabiņā attēlo modeļu zīmējumus Ball and Stick manierē;




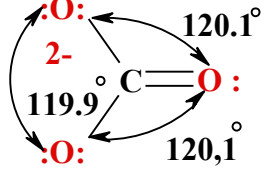
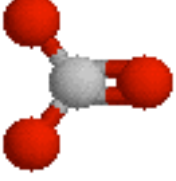
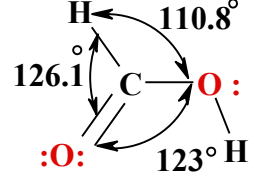
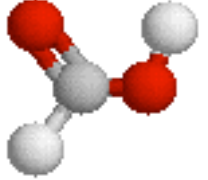
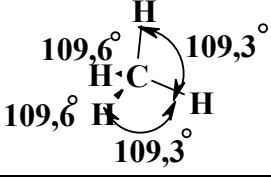


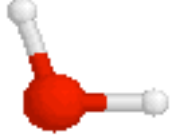
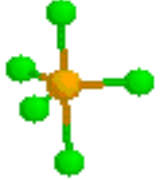
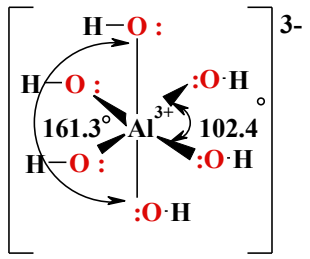

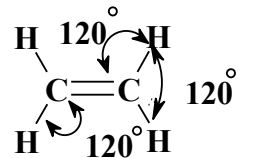


5. piektajā stabiņā ar labo peles pogu izmantojot MDL opcijas

izvēlnē: select: Mouse Click Action: Distance, iezīmējot atomus nomēra starp atomu attālumus.

Pēc nomērīšanas status bārā redzams starp atomu attālumus molekulā Å angstrēmos un

nomērītos valences saišu starp atomu attālumus molekulā Å angstrēmos pierakstiet stabiņā.

Molekulu Sastāv-formula molmasa nosaukums	ģeometriskās figūras un simetrizācija hibridizācija σ , π saišu skaits	Perspektīvā skice ar valences leņķi	Molekulas modeļa zīmējums Ball & Stick atveidojumā	nomērītie valences starp atomu attālumi Å angstrēmos
$[\text{Al}(\text{OH})_6]^{3-}$ $\text{H}_6\text{O}_6\text{Al}$ 129,03 g/mol Heksa hidroksu alumināta (III) anjons	Oktaedrāls Heksagonāls Bipiramidāls sp^3d^2			O-H Å O-Al Å

Molekulu Sastāv-formula molmasa nosaukums	ģeometriskās figūras un hibridizācija σ, π saišu skaits	Perspektīvā skice ar ISIS Draw  valences leņķi	Molekulas modeļa zīmējums  Ball & Stick atveidojumā	nomērītie valences starp atomu attālumi Å angstrēmos
oglekļa(IV) oksīds CO_2 44,01 g/mol	lineāra sp 2σ 2π			1,498 Å
karbonāta anjons CO_3^{2-} 62,03 g/mol	trigonāla planāra sp^2 3σ 1π			1,296 Å 1,294 Å
skudrskābe HCOOH 129,03 g/mol	I trigonāla planāra sp^2 4σ 1π			1,111 Å 1,205 Å 1,344 Å
metāns CH_4 16,04 g/mol	tetragonāla tetraedrāla sp^3 4σ ; 0π			1,111 Å
amonjaks NH_3 17,03 g/mol	trigonāla piramīda sp^3 3σ ; 0π			0,997 Å
ūdens H_2O 18,02 g/mol	leņķisks V-veida sp^3 2σ ; 0π			0,940 Å
fosfora penta hlorīds PCl_5 208,24 g/mol	trigonāla piramīda sp^3d 5σ ; 0π			2,076 Å 1,968 Å
$[\text{Al}(\text{OH})_6]^{3-}$ $\text{H}_6\text{O}_6\text{Al}$ 129,03 g/mol Heksa hidrokso alumināta (III) anjons	Oktaedrāls Heksagonāls Bipiramidāls sp^3d^2			1,665 Å 1,009 Å O-H 1,660 Å O-Al
etēns $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$ 28.05 g/mol	trigonāla planāra sp^2 3σ ; 1π			1,330 Å 1,328 Å
etīns $\text{HC}\equiv\text{CH}$ 26.04 g/mol	lineāra sp 2σ ; 2π			1,212 Å 1,212 Å