

Typy chemických vzorců

Podle potřeby použití lze chemické vzorce zapisovat různými způsoby, které se liší mírou informací o struktuře uvažované látky.

Stechiometrický vzorec (empirický) vyjadřuje stechiometrické složení dané sloučeniny, tj. určuje, které atomy a v jakém poměru jsou ve sloučenině obsaženy. Počet sloučených atomů se vyznačuje číselným indexem vpravo dole za značkou prvku. Číslice 1 se zpravidla neuvádí. Vzorec se obvykle uzavírá do složených závorek.

Příklady:

{CH₂} Zápis znamená, že v molekule dané sloučeniny je vázán uhlík s vodíkem v poměru počtu atomů 1:2, tedy např. C₂H₄ nebo C₃H₆ nebo C₂₀H₄₀ atd.
{P₂O₅} Zápis znamená, že v molekule dané sloučeniny je vázán fosfor s kyslíkem v poměru počtu atomů 2:5, tedy např. P₂O₅ nebo P₄O₁₀.

Molekulový vzorec (souhrnný) vyjadřuje nejen stechiometrické složení sloučeniny, ale i přesné počty vázaných atomů. V mnoha případech je shodný se vzorcem stechiometrickým.

Příklady:

molekulový vzorec	chemický název	stechiometrický (empirický) vzorec
NO ₂	(monomerní) oxid dusičitý	{NO ₂ }
N ₂ O ₄	dimerní oxid dusičitý	{NO ₂ }
P ₂ O ₅	monomerní oxid fosforečný	{P ₂ O ₅ }
P ₄ O ₁₀	dimerní oxid fosforečný	{P ₂ O ₅ }
H ₂ O	voda	{H ₂ O}
NaCl	chlorid sodný	{NaCl}

Racionální (funkční) vzorec umožňuje zdůraznit přítomnost charakteristických atomových skupin, tzv. funkčních skupin v dané sloučenině. Představuje zjednodušenou formu strukturního vzorce. Při jejich používání je třeba dodržovat určitá pravidla:

– Funkční skupiny je možno pro větší přehlednost:

- a) uzavírat do kulatých závorek, např.: Ca(OH)₂, CH₃(CH₂)₃OH, (NH₂)₂
b) oddělovat vazebnou čárkou, např.: HO–Ca–OH, CH₃–CH₂–CH₂–CH₂–OH, H₂N–NH₂

– Je-li funkční skupina, molekula nebo ion koordinační, uvádí se v hranatých závorkách, např.:
K₂[PtCl₆], K₃[Fe(CN)₆]

– Vzorec molekuly vody v hydrátu se od vzorce základní sloučeniny odděluje tečkou, která se čte „plus“ nebo „krystaluje s“. Počet molekul se vyjádří arabskou číslicí před vzorcem (obvykle se od něj neodděluje mezerou).
Např.: CuSO₄ · 5H₂O

Strukturní (konstituční) vzorec zobrazuje, které atomy jsou navzájem spojeny, zpravidla však neudává prostorové uspořádání molekuly a nemusí uvádět ani násobnost vazeb.

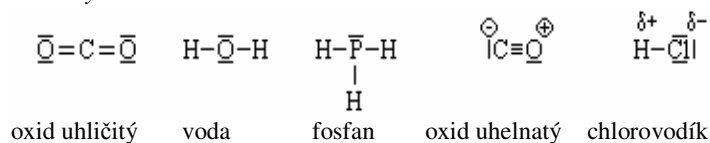
Příklady:

Typ vzorce: Název:	stechio- metrický	molekulový	funkční	strukturní
peroxid vodíku	{HO}	H ₂ O ₂	HO–OH	H–O–O–H
kyselina sírová	{H ₂ SO ₄ }	H ₂ SO ₄	H ₂ SO ₄	$\begin{array}{c} \text{H-O} & \text{O} \\ & \backslash / \\ & \text{S} \\ & / \backslash \\ \text{H-O} & \text{O} \end{array}$

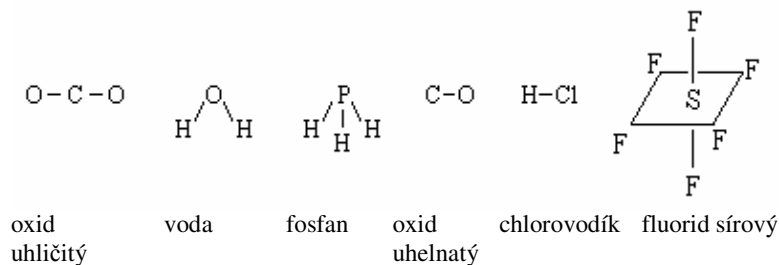
Jeho často užívanou formou je **elektronový strukturní vzorec**, který graficky vyjadřuje uspořádání valenčních elektronů (vazebných i nevazebných) v atomu, iontu nebo molekule. Parciální náboje na atomech

spojených kovalentní vazbou se vyznačují znaménky $\oplus, \ominus, \delta+, \delta-$. Kovalentní vazbu symbolizují čárky – (jednoduchá vazba), = (dvojná vazba), \equiv (trojná vazba) mezi sloučenými atomy.

Příklady:



Geometrický (konfigurační) vzorec znázorňuje prostorové uspořádání atomů, iontů nebo molekul.



Krystalochemický (koordináční) vzorec vyjadřuje koordináční čísla, tj. počet atomů, iontů nebo molekul, které bezprostředně obklopují určitý atom v krystalové struktuře. Koordináční čísla se zapisují ve tvaru zlomku (jejich podělením dostáváme odpovídající koeficient ve stechiometrickém vzorci). Číselník udává koordináční číslo prvního atomu (nebo iontu či molekuly), jmenovatel udává koordináční číslo druhého atomu (nebo iontu či molekuly). Význam koeficientů si vysvětlíme na příkladech:

