

VSEPR - Metoda pro určení tvaru kovalentních molekul nepřechodných prvků (Valence Shell Electron Pair Repulsion)

Tvar molekuly je dán polohou všech atomů molekulu tvořících

Pravidla pro aplikaci VSEPR:

- tvar molekuly ovlivňují všechny elektronové páry (vazebné i nevazebné) vycházející ze středového atomu (jsou tzv. *stereoaktivní*)
- jednotlivé páry (vazebné i nevazebné) z valenční vrstvy středového atomu se soustředí do prostoru tak, aby byly co nejdále od sebe a co nejméně se odpuzovaly
- nevazebný elektronový pár odpuzuje ostatní elektronové páry více než pár vazebný, tj. odpuzování elektronových párů ve valenční vrstvě středového atomu klesá v pořadí:
nevazebný – nevazebný > nevazebný - vazebný > vazebný – vazebný
- dvojná a trojná vazby mají větší odpuzivý účinek než vazby jednoduché
- na odpuzování elektronových párů má vliv elektronegativita vázajících se partnerů

Postup při určování struktury pomocí VSEPR

1. Napsat sumární nebo funkční vzorec sloučeniny (není nezbytně nutné), je-li zadání sloučeniny slovně
2. Nakreslit správně strukturně-elektronový vzorec sloučeniny
3. Spočítat elektronové páry v okolí centrálního atomu (tj. vazebné i nevazebné) – násobnost vazby se v tomto momentě neuvažuje
4. Je dobré si napsat obecný vzorec sloučeniny - AB_xE_y
(x = počet vazebných párů, y = počet nevazebných párů)
5. Na základě počtu párů učít základní „VSEPR“ polyedr a ten nakreslit

Počet párů	2	3	4	5	6	7
VSEPR tvar	přímka	trojúhelník	tetraedr	trigonální bipyramida	tetragonální bipyramida, (oktaedr)	pentagonální bipyramida

6. V polyedru nejprve **zdůraznit centrální a strukturu určující atom**, a podle pravidel VSEPR umístit do polyedru vazby vedoucí k jednotlivým sousedním atomům.
- ✓ V nákresu struktury VSEPR se tlustě nebo barevně zvýrazní **skutečné vazby** vedoucí od centrálního atomu ke skutečným atomům.
 - ✓ Volné (nevazebné) elektronové páry se do této struktury rovněž v příslušném směru naznačí, nejlépe formou protáhlého obláčku. **Nevazebné páry se na konečné struktuře sloučeniny projevují pouze deformací základní struktury.**
 - ✓ Pokud má molekula VSEPR tvar v podobě trigonální bipyramidy, pak se **všechny volné elektronové páry umísťují do ekvatoriální roviny.**
 - ✓ Na výsledný tvar struktury molekuly má také vliv násobnost vazby a elektronegativita atomů vázajících se na centrální atom.
7. Z této struktury při pohledu z odstupů vynikne skutečný tvar molekuly, který pojmenujeme.

Příklady: SnCl_2 , H_2O , NH_3 , BrF_3 , BrF_5 , I_3^- , IF_7 , SF_4