

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


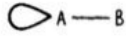
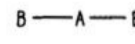
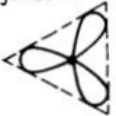

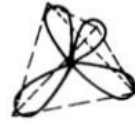




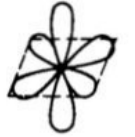
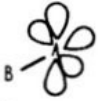
1. Napsat sumární nebo funkční vzorec sloučeniny (není nezbytně nutné), je-li zadání sloučeniny slovně
2. Nakreslit správně strukturně-elektronový vzorec sloučeniny
3. Spočítat elektronové páry v okolí centrálního atomu (tj. vazebné i nevazebné) – násobnost vazby se v tomto momentě neuvažuje
4. Je dobré 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 odstupu vynikne skutečný tvar molekuly, který pojmenujeme.

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

Tvary molekul odvozené z modelu VSEPR

Prostorová orientace elektronových párů	Název tvaru	Znázornění tvaru molekuly		Počet elektronových párů 6
	Počet elektronových párů 6 + n	Symbol molekuly		Počet elektronových párů n
lineární  2 elektro- nové páry	lineární 1		lineární 2	
	ABE 1	AB ₂ 0		
ravnostřanný trojúhelník  3 elektro- nové páry	lineární 1		lomený 2	trojúhelník 3
	ABE ₂ 2	AB ₂ E 1	AB ₃ 0	
tetraedr  4 elektro- nové páry	lineární 1		lomený 2	
	ABE ₃ 3	AB ₂ E ₂ 2		
	trigonální pyramida 3	tetraedr 4		
	AB ₃ E 1	AB ₄ 0		
trigonální bipyramida  5 elektro- nových párů	lineární 1		lineární 2	tvář T 3
	ABE ₄ 4	AB ₂ E ₃ 3	AB ₃ E ₂ 2	
	deformovaný tetraedr 4	trigonální bipyramida 5		
	AB ₄ E 1	AB ₅ 0		
oktaedr  6 elektro- nových párů	lineární 1		lineární 2	tvář T 3
	ABE ₅ 5	AB ₂ E ₄ 4	AB ₃ E ₃ 3	
	čtverec 4	tetragonální pyramida 5	oktaedr 6	
	AB ₄ E ₂ 2	AB ₅ E 1	AB ₆ 0	