

## **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


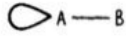
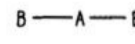
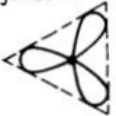

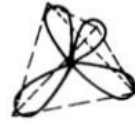


1. Napsat sumární nebo funkční vzorec sloučeniny (není nezbytně nutné), je-li zadání sloučeniny slovně
2. Nakreslit správně strukturně-elektronový vzorec sloučeniny
3. Spočítat elektronové páry v okolí centrálního atomu (tj. vazebné i nevazebné) – násobnost vazby se v tomto momentě neuvažuje
4. Je dobré 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:  $\text{SnCl}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{BrF}_3$ ,  $\text{BrF}_5$ ,  $\text{I}_3^-$ ,  $\text{IF}_7$ ,  $\text{SF}_4$

Tvary molekul odvozené z modelu VSEPR

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