

Teorie VSEPR

=Valence Shell Electron Pair Repulsion

Model k předpovídání geometrie molekul na základě počtu a druhu elektronových párů kolem centrálního atomu

- Elektrony kolem atomu se odpuzují, jak elektrostaticky, tak především Pauliho vylučovacím principem → snaží se uspořádat co nejdále od sebe
- Volné elektronové páry se odpuzují více, než vazebné
→ *Vysvětluje geometrické anomálie (např. H₂O s vazebným úhlem 104,5°)*
- Násobné vazby se zjednodušují jako 1 σ -vazba

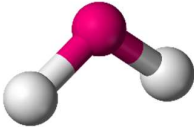
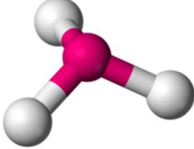
Postup:

- 1) Počet valenčních elektronů centrálního atomu (viz tabulka)
- 2) Lewisův strukturní vzorec
 - a. Vazebné páry vyznačeny jako vazba
 - b. Volné páry jako tečky
- 3) Sterické číslo centrálního atomu:
 σ – vazby + volné elektronové páry
 - a. Násobné vazby se počítají jako 1 σ -vazba
 - b. Počítají se pouze volné elektronové páry centrálního atomu
 - c. Elektrony násobných vazeb se do volných párů nepočítají
- 4) Sterické číslo určuje počet vrcholů geometrického tvaru

s	Nepřechodné	ns^{1-2}
p	Nepřechodné	$ns^2 np^{1-6}$
d	Přechodné	$ns^2 (n-1)d^{1-10}$
f	Vnitřně přechodné	$ns^2 (n-2)f^{1-14}$



Sterické číslo	Z toho nevazebných elektronů	Tvar	Úhel	Model	Příklad
Základní					
2	0	Lineární	180°		CO ₂
3	0	Trigonálně planární	120°		BF ₃
4	0	Tetraedr	109,5°		CH ₄
5	0	Trigonální bipyramida	120° a 90°		PCl ₅
6	0	Oktaedr	90°		SF ₆

Jiné					
Sterické číslo	Z toho nevazebných elektronů	Tvar	Úhel	Model	Příklad
3 / 4	1 / 2	Lomený	≈100°-120°		H ₂ O, SO ₂
4	1	Trigonálně pyramidální	≈107°		NH ₃

- VSEPR je základní model určený pro jednoduché molekuly – u složitějších může být nanejvýš dobrou predikcí
- Pro centrální atom s několika různými ligandy nutno rozšířit o další předpoklady
- Neuvažuje rozdíly mezi π a σ orbitaly
- U interakce volných (E) a vazebných (X) párů lze pouze aproximovat vazebný úhel – dle principu:
 - E-E (nejsilnější odpuzování)
 - E-X
 - X-X (nejslabší odpuzování)