
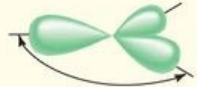
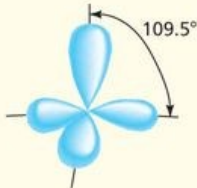
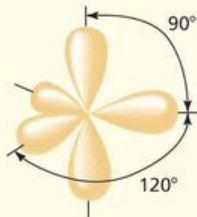
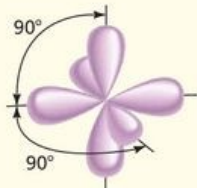


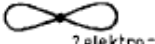
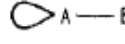




VSEPR

Valence shell electron pair repulsion (VSEPR) model predikuje tvary molekul a iontů u nichž jsou valenční elektronové páry rozmístěny kolem centrálního atomu. Tím že se elektronové páry drží od sebe co možná nejdále, se minimalizuje jejich vzájemné odpuzování.

1. Nakreslete Lewisův vzorec molekuly.
2. Určete sterické číslo centrálního atomu.
3. Určete orientaci elektronových párů na základě sterického čísla.
4. Určete polohu volných párů a odchylky od „pravidelných“ tvarů.
5. Pojmenujte tvar na základě polohy vazebných a volných elektronových párů.

TABLE 10.4 Important Hybrid Orbitals and Their Shapes

Pure Atomic Orbitals of the Central Atom	Hybridization of the Central Atom	Number of Hybrid Orbitals	Shape of Hybrid Orbitals	Examples
			180°  Linear	
<i>s, p</i>	<i>sp</i>	2		BeCl ₂
			120°  Trigonal planar	
<i>s, p, p</i>	<i>sp²</i>	3		BF ₃
			109.5°  Tetrahedral	
<i>s, p, p, p</i>	<i>sp³</i>	4		CH ₄ , NH ₄ ⁺
			90° 120°  Trigonal bipyramidal	
<i>s, p, p, p, d</i>	<i>sp³d</i>	5		PCl ₅
			90° 90°  Octahedral	
<i>s, p, p, p, d, d</i>	<i>sp³d²</i>	6		SF ₆

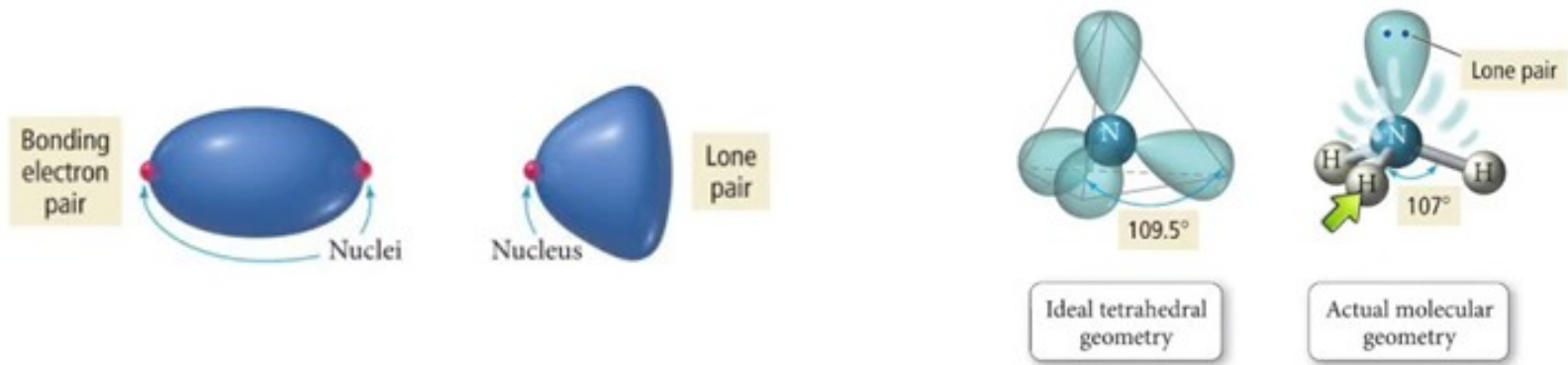
Prostorová orientace elektronových párů	Název tvaru	Znárodnění tvaru molekuly		Počet elektronových párů 6	
	Symbol molekuly	molekuly		Počet elektronových párů n	
lineární  2 elektro- nové páry	lineární  ABE	1	lineární B—A—B	2	
		ABE	1	AB ₂	0
rovnostranný trojúhelník  3 elektro- nové páry	lineární B—A ABE ₂	1	lomený B—A—B	2	
		ABE ₂	2	AB ₂ E	1
			trojúhelník B—A—B	3	AB ₃
tetraedr  4 elektro- nové páry	lineární B—A—B ABE ₃	1	lomený B—A—B	2	
		ABE ₃	3	AB ₂ E ₂	2
	trigonální pyramida B—A—B AB ₃ E	3	tetraedr B—A—B	4	
		AB ₃ E	1	AB ₄	0
trigonální bipyramida  5 elektro- nových párů	lineární B—A—B ABE ₄	1	lineární B—A—B	2	
		ABE ₄	4	AB ₂ E ₃	3
	deformovaný tetraedr B—A—B AB ₄ E	4	trigonální bipyramida B—A—B	5	
		AB ₄ E	1	AB ₅	0
			3	tvar T B—A—B	2
oktaedr  6 elektro- nových párů	lineární B—A—B ABE ₅	1	lineární B—A—B	2	
		ABE ₅	5	AB ₂ E ₄	4
	čtverec B—A—B AB ₄ E ₂	4	tetragonální pyramida B—A—B	5	
		AB ₄ E ₂	2	oktaedr B—A—B	6
			1	AB ₆	0
			3	tvar T B—A—B	3

1: Pokud je centrální atom v molekule obklopen pouze vazebnými elektronovými páry a nemá volné (nevazebné) elektronové páry, bude geometrie molekuly pravidelná:

Electron Groups	2	3	4	5	6
Geometry	Linear	Trigonal planar	Tetrahedral	Trigonal bipyramidal	Octahedral
Predicted Bond Angles	180°	120°	109.5°	90°, 120°	90°

2: Pokud je centrální atom v molekule obklopen vazebnými i nevazebnými elektronovými páry, molekula nemá pravidelný tvar. V důsledku přítomnosti volných elektronových párů na centrálním atomu dochází k deformaci vazebných úhlů a tím i celkového tvaru molekuly.

Volný (nevazebný) elektronový pár obvykle zabírá více prostoru než vazebný pár, protože volný elektronový pár je pouze pod vlivem jádra centrálního atomu a proto zabírá více prostoru s větší elektronovou hustotou než vazebný elektronový pár pod vlivem jader 2 atomů.



Odpudivé (repulzní) síly výrazně klesají s rostoucím úhlem mezi elektronovými páry. Nejsilnější je při 90° , slabší při 120° a velmi slabé při 180° . Pokles repulze probíhá v řadě:


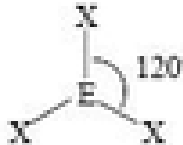
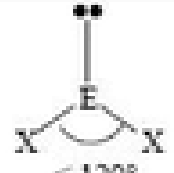
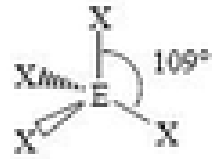
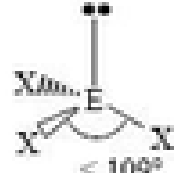

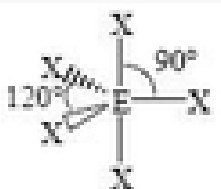
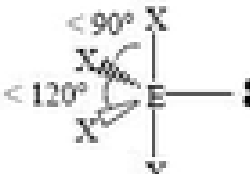
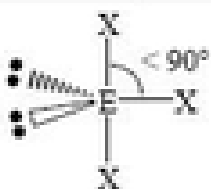
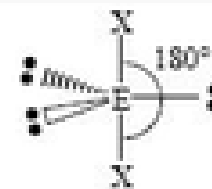


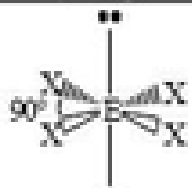
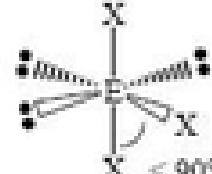
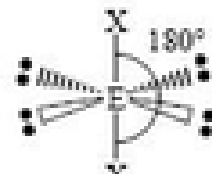
volný pár - volný pár > volný pár - vazebný pár > vazebný pár - vazebný pár

Volný elektronový pár odpuzuje vazebný elektronový pár, což vede k deformacím tvaru molekuly.

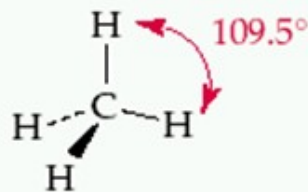
3: Vazebný úhel B-A-B se zmenšuje s rostoucí elektronegativitou atomu B v molekule AB (A je centrální atom). S rostoucí elektronegativitou atomu B se poloha vazebného elektronového páru posouvá z centrálního atomu A a proto odpuzování vazebného elektronového páru na sousední elektronový pár na atomu A klesá.

Např.: **$\text{PI}_3 > \text{PBr}_3 > \text{PCl}_3$**

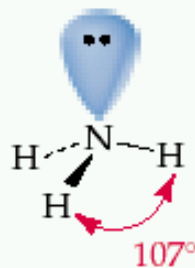
VSEPR Geometries

Steric No.	Basic Geometry 0 lone pair	1 lone pair	2 lone pairs	3 lone pairs	4 lone pairs
2	 <p style="text-align: center;">Linear</p>				
3	 <p style="text-align: center;">Trigonal Planar</p>	 <p style="text-align: center;">Bent or Angular</p>			
4	 <p style="text-align: center;">Tetrahedral</p>	 <p style="text-align: center;">Trigonal Pyramid</p>	 <p style="text-align: center;">Bent or Angular</p>		
5	 <p style="text-align: center;">Trigonal Bipyramid</p>	 <p style="text-align: center;">Sawhorse or Seesaw</p>	 <p style="text-align: center;">T-shape</p>	 <p style="text-align: center;">Linear</p>	
6	 <p style="text-align: center;">Octahedral</p>	 <p style="text-align: center;">Square Pyramid</p>	 <p style="text-align: center;">Square Planar</p>	 <p style="text-align: center;">T-shape</p>	 <p style="text-align: center;">Linear</p>

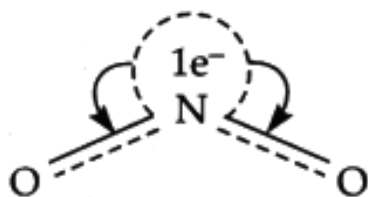
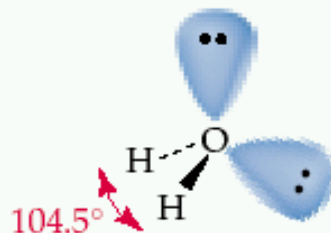
A methane molecule is tetrahedral, with bond angles of 109.5° .



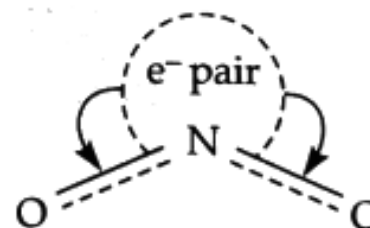
An ammonia molecule is trigonal pyramidal, with bond angles of 107° .



A water molecule is bent, with a bond angle of 104.5° .



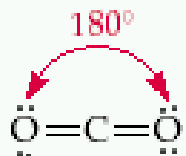
NO₂ has one unshared electron
(Bond angle = 132°)



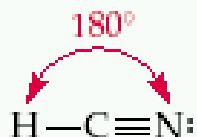
NO₂⁻ has one unshared pair of electron.
(Bond angle = 115°)

4: Násobná vazba se chová ve VSEPR jako jeden vazebný elektronový pár. Dva elektronové páry dvojně vazby však zaujímají větší prostor než jeden elektronový pár jednoduché vazby. Vazebné úhly zahrnující násobné vazby jsou tak obecně větší než ty zahrnující pouze jednoduché vazby. Na druhou stranu, násobné vazby nemají vliv na geometrii molekul.

A CO_2 molecule is linear, with a bond angle of 180° .



An HCN molecule is linear, with a bond angle of 180° .



5: Odpuzování mezi elektronovými páry v zaplněné valenční sféře je větší než odpuzování mezi elektronovými páry v neúplně zaplněné valenční sféře (prázdné d-orbitaly).

Např. vazebný úhel H-O-H v H_2O >> vazebný úhel H-S-H v H_2S .

H_2O



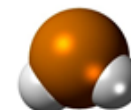
$n = 2$
 104.5°

H_2S



$n = 3$
 92.1°

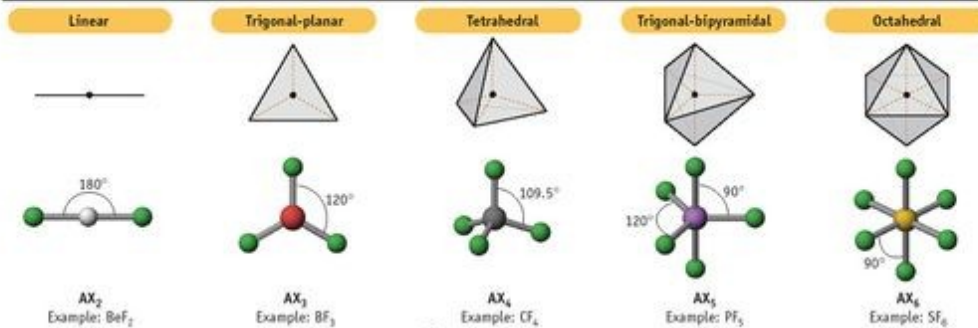
H_2Te



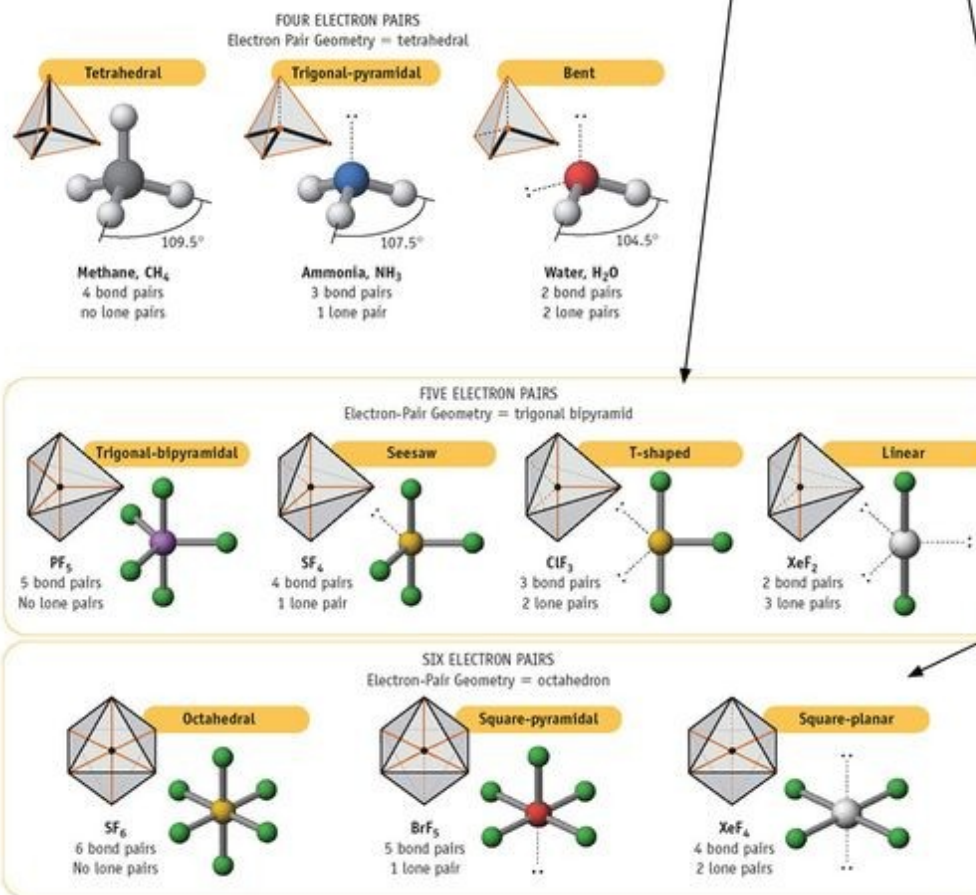
$n = 5$
 90.0°

Electron Pair Geometries

2 Structural Pairs 3 Structural Pairs 4 Structural Pairs 5 Structural Pairs 6 Structural Pairs



Molecular Geometries



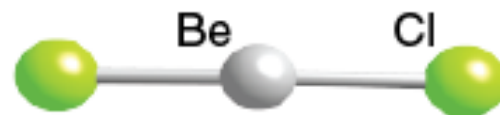
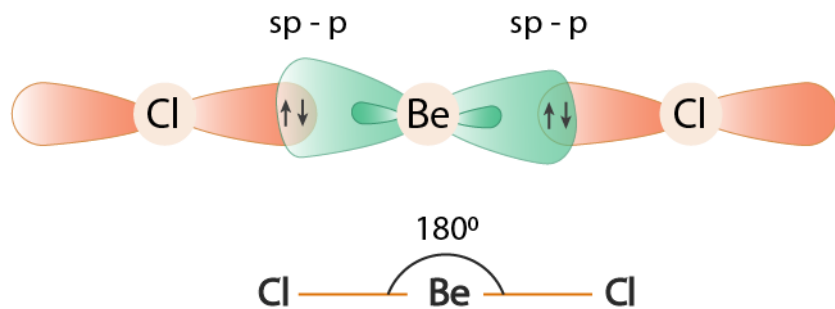
Jaký je tvar molekuly BeCl_2 ?

Lewisův vzorec BeCl_2 $:\ddot{\text{Cl}}-\text{Be}-\ddot{\text{Cl}}:$

Centrální atom Be má 2 vazebné páry Be-Cl (SN = 2).

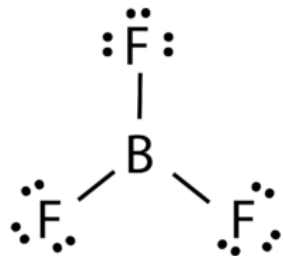
Odpuzování mezi těmito 2 páry vede k tomu, že atomy jsou od sebe co možná nejdále.

Tvar molekuly je **lineární**, vazebný úhel Cl-Be-Cl je 180° .



Jaký je tvar molekuly BF_3 ?

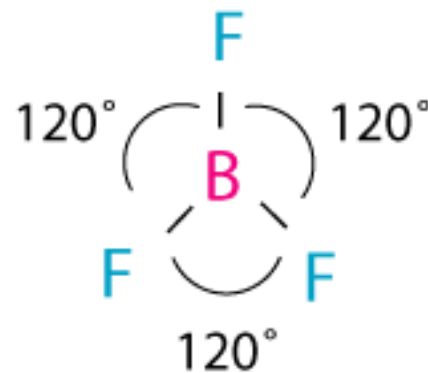
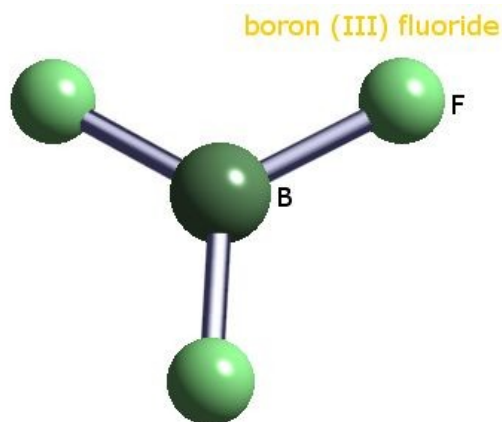
Lewisův vzorec BF_3



Atom B má 3 vazebné páry B-F ($\text{SN} = 3$).

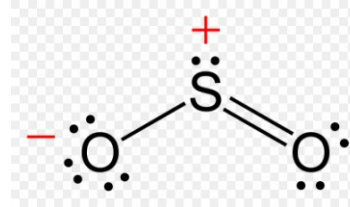
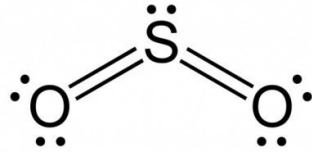
Minimalizace vzájemného odpuzování vede k tomu, že atomy F tvoří rovnostranný trojúhelník.

Tvar molekuly je **trojúhelník**, všechny atomy jsou v téže rovině, vazebné úhly F-B-F jsou 120° .



Jaký je tvar molekuly SO₂?

Lewisův vzorec SO₂

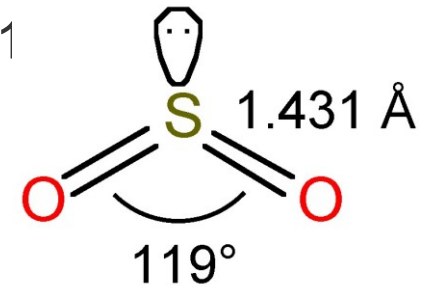
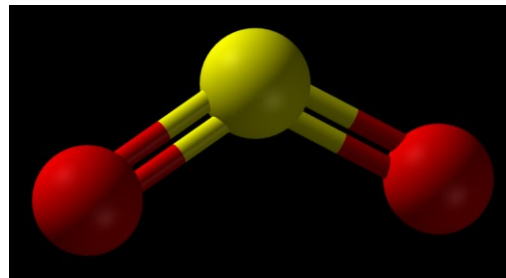
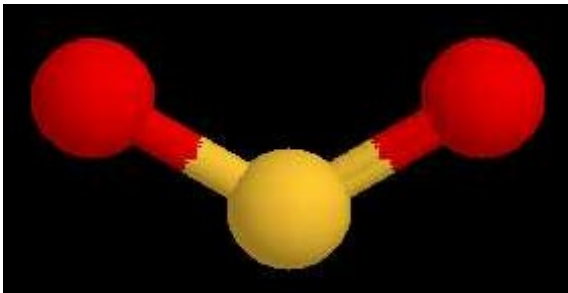


Centrální atom S má 2 σ vazebné páry S-O a 1 volný pár.

Geometrie elektronových párů v SO₂ je trojúhelníkovitá.

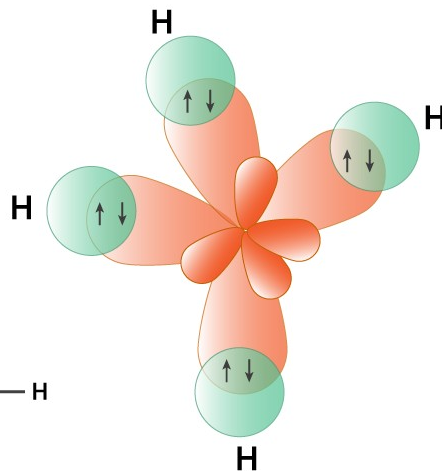
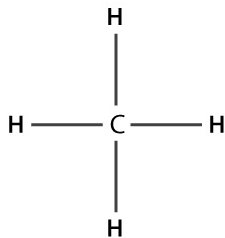
Protože se volné páry do tvaru molekuly nezahrnují, výsledný tvar molekuly SO₂ je **lomený**.

Objemný volný pár stlačuje vazebný úhel O-S-O na cca 11



Jaký je tvar molekuly CH_4 ?

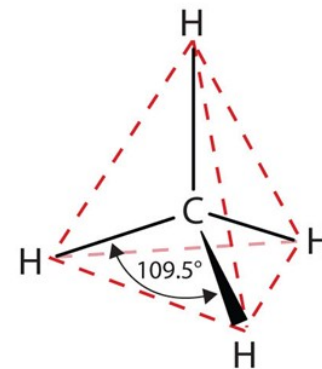
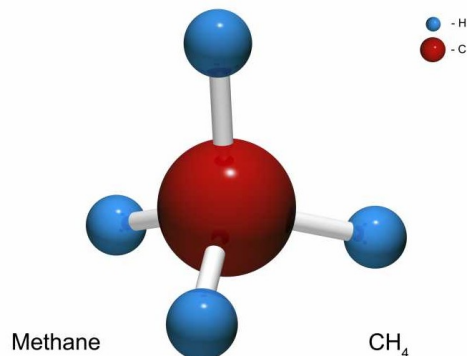
Lewisův vzorec CH_4



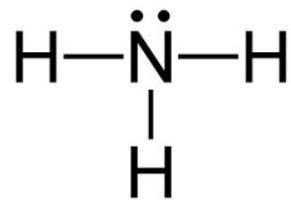
4 vazebné páry vycházející z centrálního atomu C jsou uspořádány do tetraedru. Tento tvar minimalizuje repulzi mezi vazebnými páry.

Všechny H-C-H vazebné úhly mají stejnou velikost $109,5^\circ$.

Tvar molekuly CH_4 je **tetraedr**.

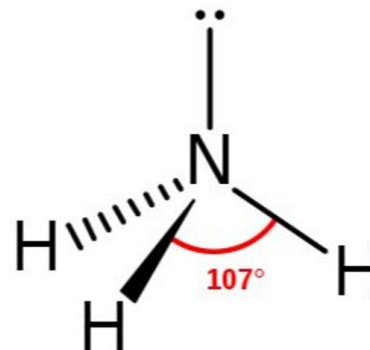
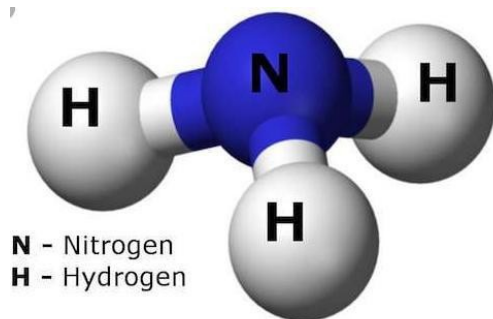


Jaký je tvar molekuly NH_3 ?



Lewisův vzorec NH_3

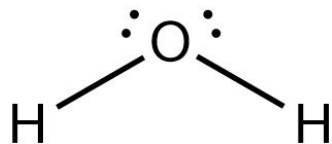
Centrální atom N má 3 vazebné páry N-H a 1 volný pár. Geometrie elektronových párů molekuly NH_3 je tetraedrická, tvar molekuly ale zahrnuje pouze vazebné páry. Výsledným tvarem je **trigonální pyramida**.



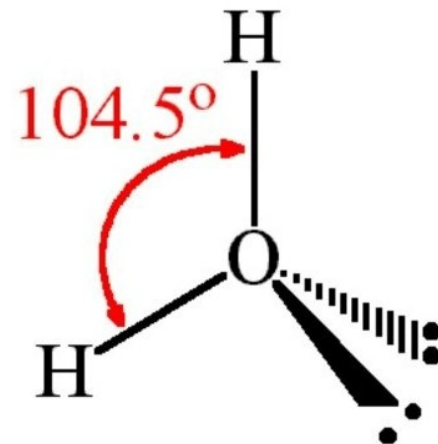
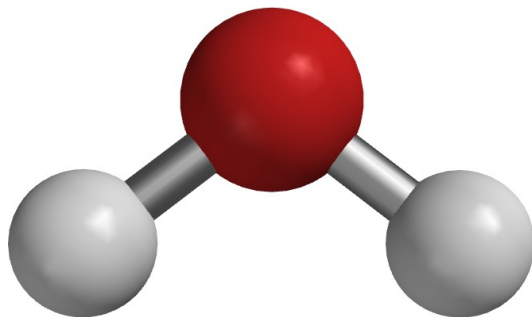
Větší odpuzování volného páru vede ke zmenšení vazebného úhlu: oproti úhlu v CH_4 (109.5°) je v molekule NH_3 vazebný úhel H-N-H 107.3° .

Jaký je tvar molekuly H₂O ?

Lewisův vzorec H₂O



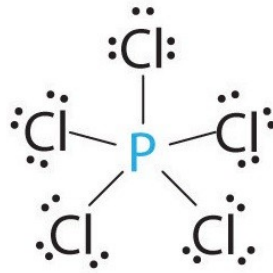
Centrální atom O má 2 vazebné páry O-H a 2 volné páry, geometrie elektronových párů je tetraedrická, tvar molekuly ale zahrnuje pouze vazebné páry. Výsledný tvar molekuly H₂O je **lomený**.



Vazebný úhel H-O-H (104.5°) je menší než v NH₃ (107.3°) i v CH₄ (109.5°) v důsledku větší repulze dvou volných párů.

Jaký je tvar molekuly PCl_5 ?

Lewisův vzorec PCl_5



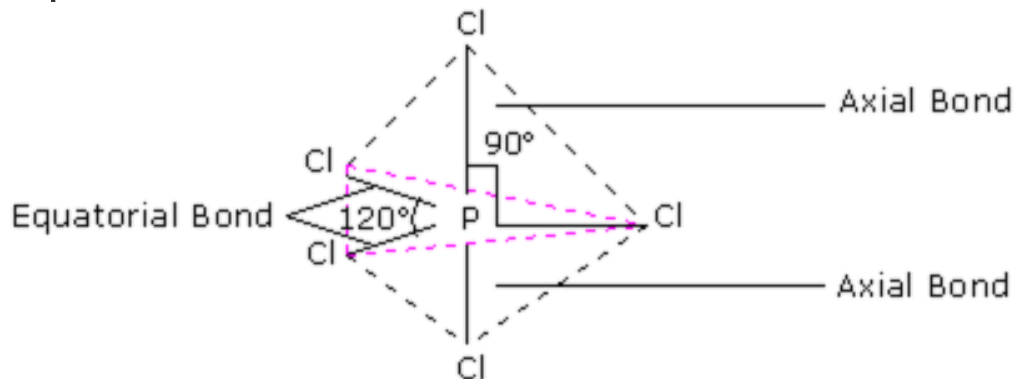
There are two different bond angles in the molecule. The axial Cl atoms are at angles of 90° to the equatorial Cl atoms, while the equatorial Cl atoms are at angles of 120° to each other.

V důsledku odchylky od oktetového pravidla má centrální atom P 5 vazebných párů. Geometrie vazebných párů odpovídá **trigonální bipyramidě**.

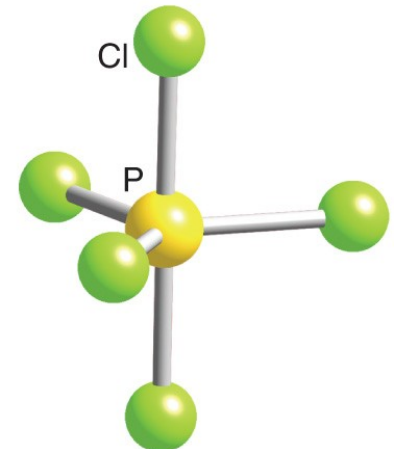
Atomy Cl v této molekule zaujímají 2 typy poloh:

Axiální: 2 atomy Cl leží na přímce procházející centrálním atomem shora dolů.

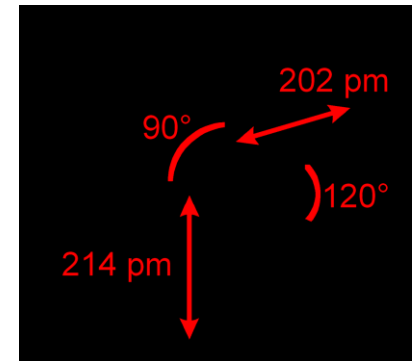
Ekvatoriální: 3 atomy Cl leží v rovině procházející centrálním atomem a kolmou na tut



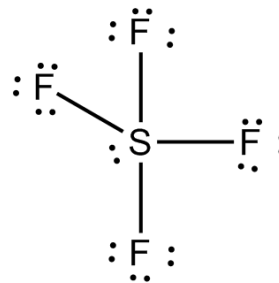
----- Imaginary Line
——— Bond



Vazebný úhel Cl-P-Cl mezi atomem Cl v ekvatoriální a atomy Cl v axiální poloze je 90° , mezi atomy v ekvatoriální poloze je vazebný úhel Cl-P-Cl 120° .



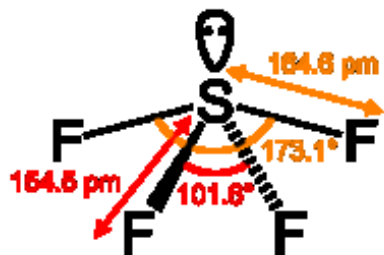
Jaký je tvar molekuly SF_4 ?



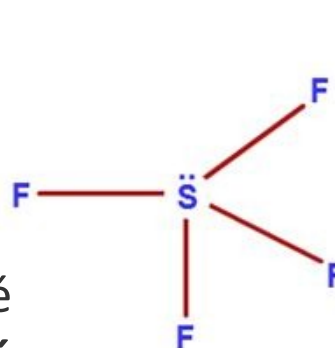
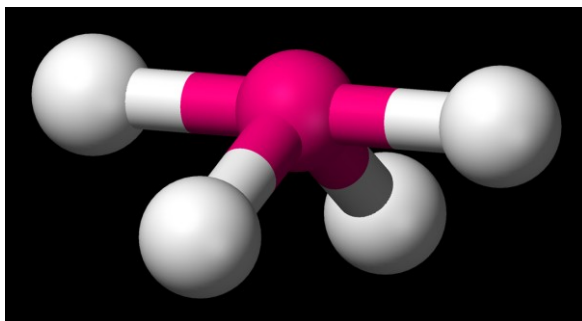
Lewisův vzorec SF_4

Geometrie 5 elektronových párů (4 vazebné S-F páry a 1 volný) odpovídá trigonální bipyramidě.

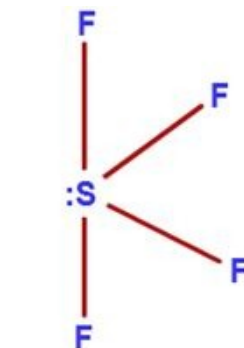
Volný pár se vyskytuje v ekvatoriální pozici – díky tomu je nejvíce vzdálen od vazebných párů.



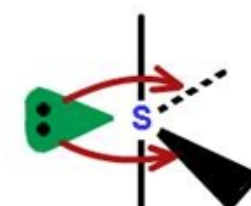
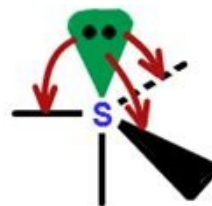
Tvar molekuly ale zahrnuje pouze vazebné páry. Výsledný tvar molekuly je **deformovaný tetraedr** (see-saw).



Lone pair in axial Position



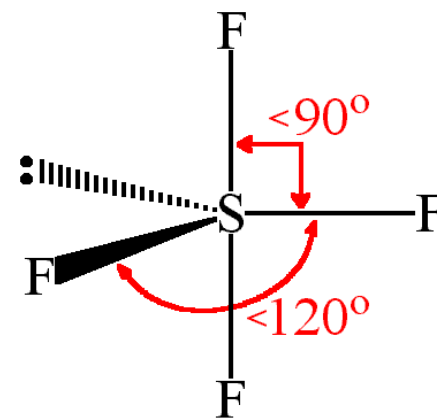
Lone pair in equatorial position



(Preferred arrangement)

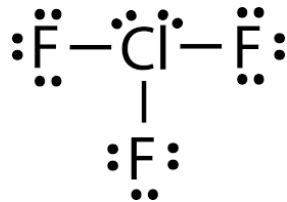
Vazebný úhel F–S–F mezi ekvatoriálními atomy Cl je 173.1° na rozdíl od 180° v PCl₅ = důsledek přítomnosti volného páru v ekvatoriální poloze.

Z téhož důvodu je vazebný úhel F-S-F mezi axiálními a ekvatoriálními Cl zmenšen na 101.6° na rozdíl od 120° v PCl₅.



Jaký je tvar molekuly ClF_3 ?

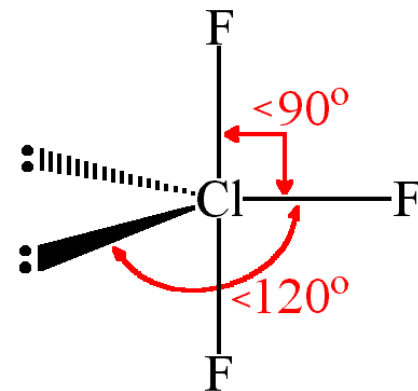
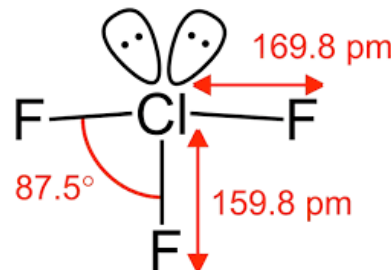
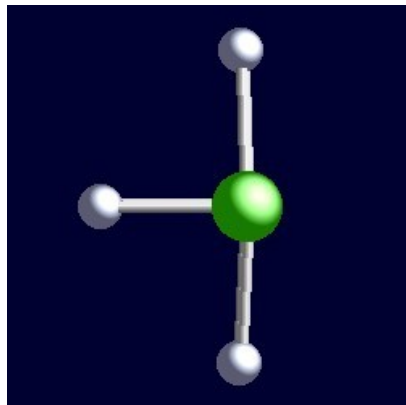
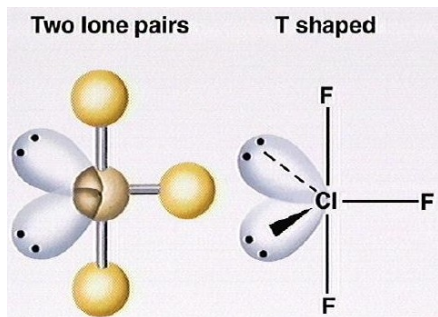
Lewisův vzorec ClF_3



Geometrie 5 elektronových párů (3 vazebné Cl-F páry a 2 páry volné) odpovídá trigonální bipyramidě.

Oba volné páry se vyskytují v ekvatoriální pozici – díky tomu jsou nejvíce vzdáleny navzájem a také od vazebných párů a tím minimalizují repulzi.

Tvar molekuly ale zahrnuje pouze vazebné páry. Výsledný tvar molekuly je deformovaný **tvar T** (“distorted-T”)



Molekula má tvar deformovaného T, protože 2 volné páry zmenšují vazebný úhel F-S-F mezi axiálními a ekvatoriálním atomem F na 86.98° , oproti z 90° u PCl_5 a úhel mezi axiálními atomy F je redukován ze 180° na 173.96° .

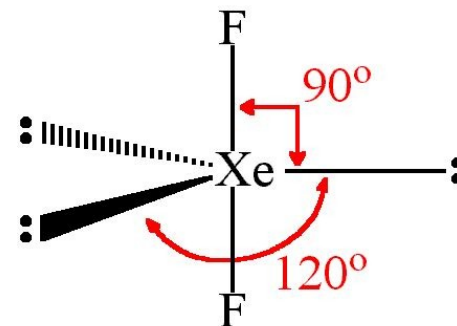
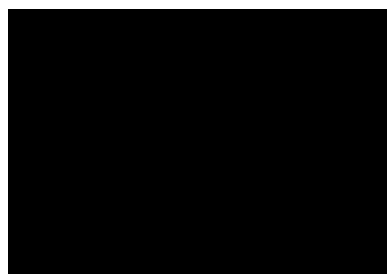
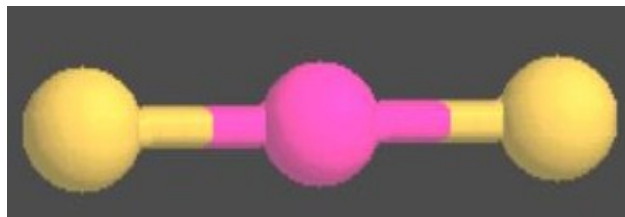
Jaký je tvar molekuly XeF₂?

Lewisův vzorec XeF₂



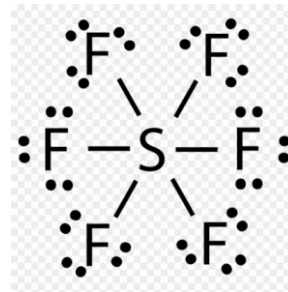
Geometrie 5 elektronových párů (2 vazebné Xe-F páry a 3 páry volné) odpovídá trigonální bipyramidě.

Všechny 3 volné páry se vyskytují v ekvatoriální pozici – díky tomu jsou nejvíce vzdáleny navzájem a také od vazebných párů a tím minimalizují repulzi.



Tvar molekuly zahrnuje pouze vazebné páry. Výsledný tvar je **lineární**, vazebný úhel F-Xe-F je 180°.

Jaký je tvar molekuly SF₆?

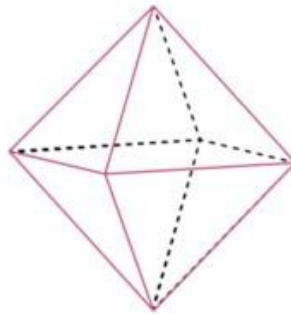


Lewisův vzorec SF₆

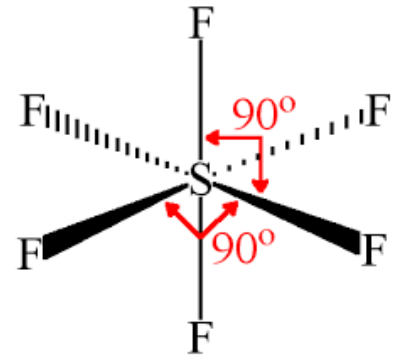
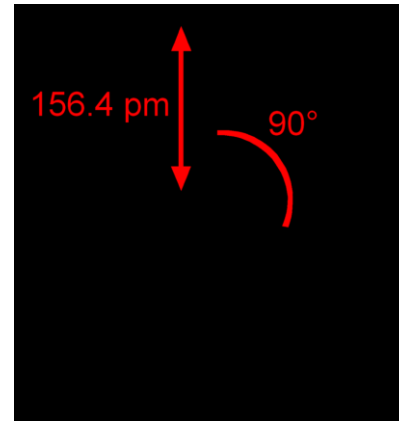
Geometrie 6 vazebných S-F elektronových párů odpovídá **oktaedru**, který má 2 elektronové páry v axiální a 4 v ekvatoriální poloze.



Sulfur Hexafluoride, SF₆

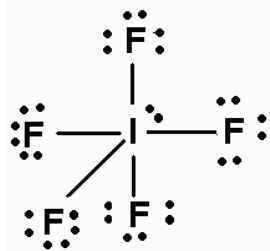


Octahedron



Vazebný úhel Cl-S-Cl mezi atomem Cl v ekvatoriální a atomy Cl v axiální poloze je 90°, mezi atomy v ekvatoriální poloze je vazebný úhel Cl-P-Cl také 90°.

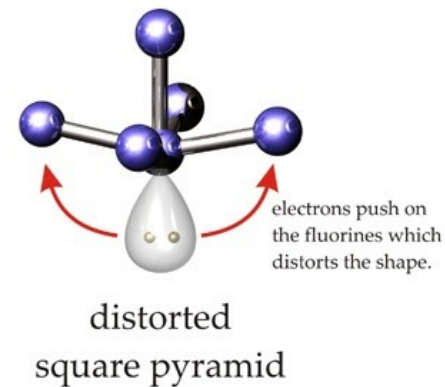
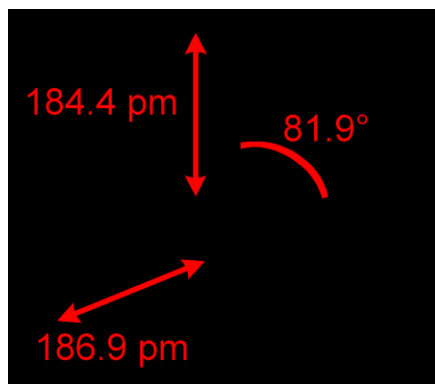
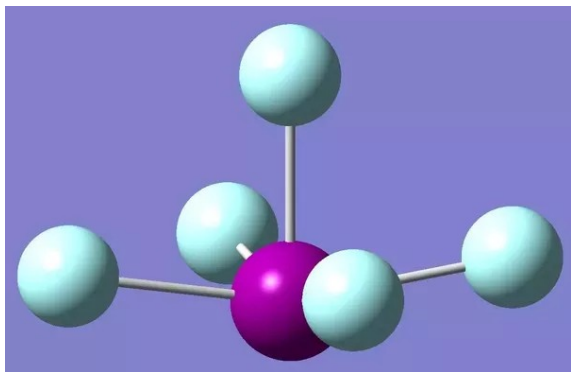
Jaký je tvar molekuly IF_5 ?



Lewisův vzorec IF_5

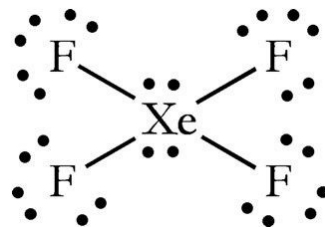
Geometrie 6 vazebných elektronových párů (5 vazebných I-F párů a 1 pár volný) odpovídá oktaedru.

Volný elektronový pár se nachází v axiální poloze. Tvar molekuly zahrnuje pouze vazebné páry. Výsledný tvar molekuly je **tetragonální pyramida**.



Vazebné úhly F-I-F mezi atomy v ekvatoriální poloze jsou 90° , vazebný úhel F-I-F mezi atomem F v axiální a atomy v ekvatoriální poloze je menší než 90° vlivem volného páru.

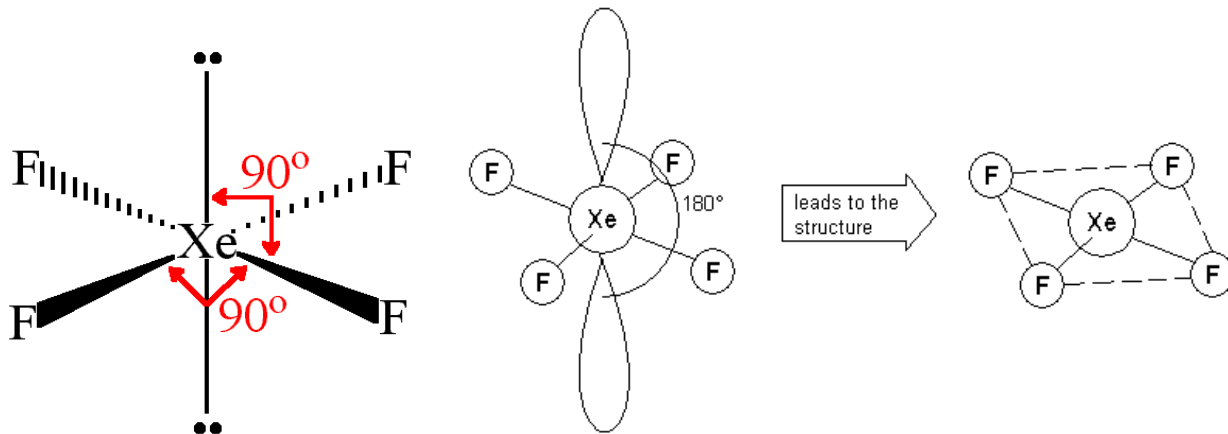
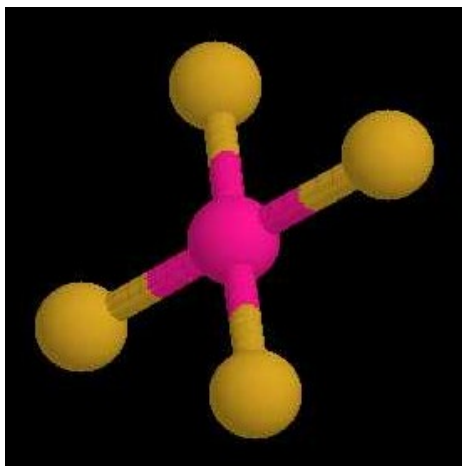
Jaký je tvar molekuly XeF_4 ?



Lewisův vzorec XeF_4

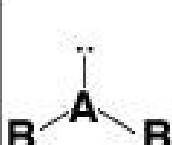
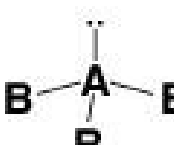
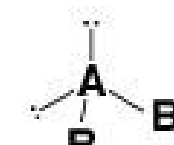
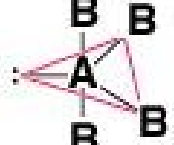
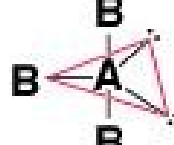
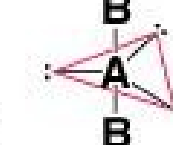
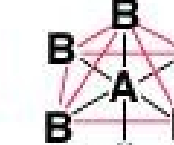
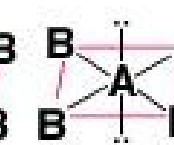
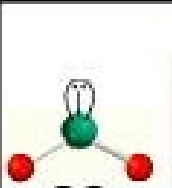
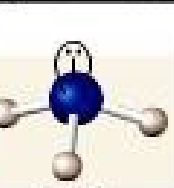
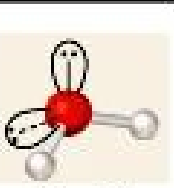
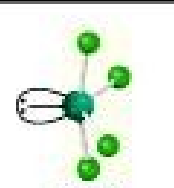
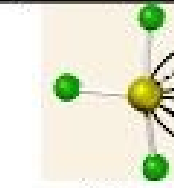
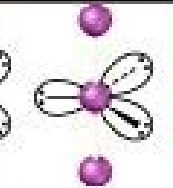
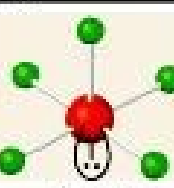
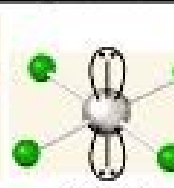
Geometrie 6 vazebných elektronových párů (5 vazebných I-F párů a 1 pár volný) odpovídá oktaedru.

Oba volné elektronové páry se nachází v axiální poloze. Tvar molekuly zahrnuje pouze vazebné páry. Výsledný tvar molekuly je **čtverec**.



Vazebné úhly F-Xe-F mezi sousedními atomy F jsou 90°.

Table 10.2 Geometry of Simple Molecules and Ions in Which the Central Atom Has One or More Lone Pairs

Class of molecule	AB_2E	AB_3E	AB_2E_2	AB_4E	AB_3E_2	AB_2E_3	AB_5E	AB_4E_2
Total number of electron pairs	3	4	4	5	5	5	6	6
Number of bonding pairs	2	3	2	4	3	2	5	4
Number of lone pairs	1	1	2	1	2	3	1	2
Arrangement of electron pairs*	 Trigonal planar	 Tetra-hedral	 Tetra-hedral	 Trigonal bipyra-midal	 Trigonal bipyra-midal	 Trigonal bipyra-midal	 Octa-hedral	 Octa-hedral
Geometry	Bent	Trigonal pyramidal	Bent	Distorted tetrahedron (or seesaw)	T-shaped	Linear	Square pyramidal	Sqaure planar
Examples	 SO_2	 NH_3	 H_2O	 SF_4	 ClF_3	 I_3^-	 BrF_5	 XeF_4

* The colored lines are used to show the overall shape, not bonds.

Jaký je tvar molekuly IF_5 ?

TeCl_4 , SO_2 , H_2Se , BrF , I_3^- , WF_6 , CS_2 , CO_3^{2-} , IF_4^- , IF_4^+ , O_3 , H_3BO_3 , SbCl_5 , BrF_5 , AsCl_3 , HClO ,
 HClO_3 , OF_2 , NO_3^- , ClF_3 , SO_4^{2-} , NO_2^- ,