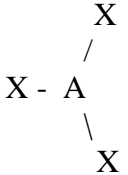
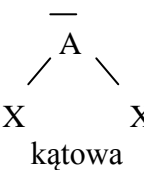


Cz. IX Ustalenie kształtu cząsteczek metodą VSEPR

1. Tabela struktur wzorcowych:

Liczba przestrzenna (L_p)	Liczba wolnych par elektronow. (L_{wpE})	Typ cząsteczki	Geometria cząsteczki	Kąt między wiązaniami	Przykład
2	0	AX_2	X - A - X Liniowa	180°	BCl_2
3	0	AX_3	 Trójkątna płaska	120°	BF_3
	1	AX_2E	 kątowna	Ok. 120°	SO_2
4	0	AX_4	Tetraedryczna	$109,5^\circ$	CH_4
	1	AX_3E	Piramida trygonalna	107°	NH_3
	2	AX_2E_2	Kątowna	105°	H_2O
5	0	AX_5	Bipiramida trygonalna	$90^\circ, 120^\circ$	PCl_5
	1	AX_4	jw		SF_4
	2	AX_3	jw		ClF_3
	3	AX_2H	jw		ICl_2^-
6	0	AX_6	Bipiramida tetragonalna	90°	SF_6
	1	AX_5	Bipiramida tetragonalna		IF_5
	2	AX_4	jw		XeF_4
7	0	AX_7	Bipiramida pentagonalna		IF_7
	1		jw		$SeBr_6^{2-}$

2. Reguły metody VSEPR

- O przestrzennym rozmieszczeniu ligandów wokół atomu centralnego, czyli budowie przestrzennej drobin, decyduje łączna liczba par elektronowych σ (sigma) i wolnych par elektronowych atomu centralnego,
- Orientacja przestrzenna kierunków orbitalnych par elektronowych decydujących o budowie przestrzennej drobin jest maksymalnie symetryczna (w jak największej odległości kątowej od siebie) i zależy tylko od ich liczby,
- Wzajemne odpychanie się par elektronowych odbywa się wg następujących relacji:
 - Najsilniej odpychają się dwie wolne (niewiązane) pary elektronowe,
 - Słabiej odpycha się wolna para z parą σ (wiązącą),

- Najslabiej odpychają się pary wiążące σ .
- d) Atomy stanowiące ligandy (z wyjątkiem atomu wodoru) mają oktet elektronowy.
(***ligand** – to jon lub cząsteczka obojętna połączona z atomem centralnym).

3. Liczba przestrzenna i liczba wolnych par elektronowych ; EA_nH_m

* **E** – atom centralny; * **A** – ligandy; * **H** – wodór; **n** i **m** – indeksy stechiometryczne

- **Liczba przestrzenna:** $L_P = L_{wpE} + \text{liczba par } \sigma$

- **liczba par σ** = **n + m** (równa liczbie ligandów);

- $L_P = L_{wpE} + n + m$

- **liczba wolnych par elektronowych:** $L_{wpE} = 1/2 L_{wal} - 4n - m$

- L_{wal} – łączna liczba elektronów walencyjnych.

4. Ustalenie kształtu drobiny

- obliczenie elektronów walencyjnych,
- obliczenie wolnych par elektronowych,
- obliczenie liczby przestrzennej, która przybiera wartości: 2, 3, 4, 5, 6, 7.

Przykłady;

A. XeF_4 , $n = 4$; $m = 0$.

- $L_{wal} = 8 + 4 \times 7 = 36$,

- $L_{wpE} = 1/2 \times L_{wal} - 4n - m = 1/2 \times 36 - 4 \times 4 - 0 = 2$

- $L_P = L_{wpE} + n + m = 2 + 4 + 0 = 6$

- na podstawie tabeli struktur wzorcowych – **bipiramida tetragonalna**.

B. (Dla cząsteczek kwasów wygodniejsze jest przyjęcie do obliczeń anionu reszty kwasowej) **HNO_2** , **to NO_2^-** , należy uwzględnić do obliczeń dodatkowy elektron na anionie

- $L_{wal} = 5 + 2 \times 6 + 1 = 18$,

- $L_{wpE} = 1/2 \times L_{wal} - 4n - m = 1/2 \times 18 - 4 \times 2 - 0 = 1$

- $L_P = L_{wpE} + n + m = 1 + 2 + 0 = 3$ (kątowna , trygonalna).

C. NO_2^+ (w tym przypadku należy uwzględnić deficyt elektronów na kationach)

- $L_{wal} = 5 + 2 \times 6 - 1 = 16$,

- $L_{wpE} = 1/2 \times L_{wal} - 4n - m = 1/2 \times 16 - 4 \times 2 - 0 = 0$

- $L_P = L_{wpE} + n + m = 0 + 2 + 0 = 2$ (liniowa).

Przykłady do samodzielnego rozwiązania:

- a) H_3PO_4 , b) $HClO_4$, c) H_2SO_3 , d) SO_3 , e) NH_3 , f) NH_4^+ , g) H_2CO_3 , h) H_3O^+ , i) CO_2 ,
j) CH_4