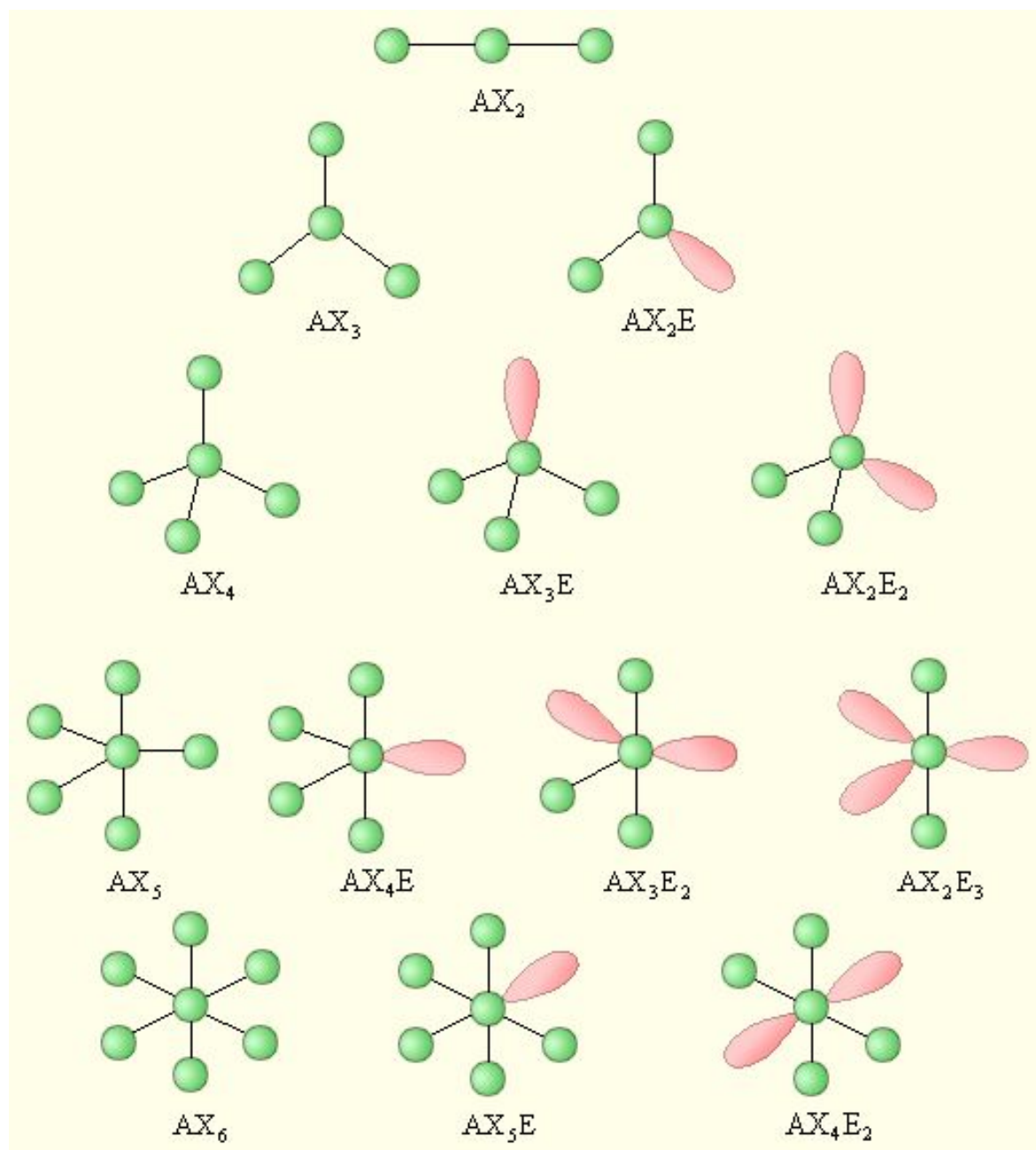


# Метод Гиллеспи– Найхолма

17.07.2021

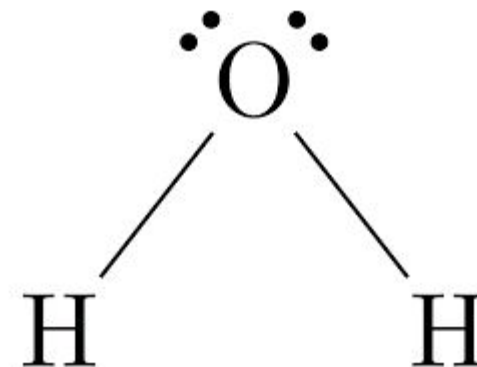
# Суть

- Реальная геометрия молекулы определяется числом двухэлектронных двухцентровых связей (связывающих электронных пар) и наличием неподеленных электронных пар ( $E$ ). При этом каждая молекула представляет собой геометрическую фигуру, вписанную в сферу. Молекула будет иметь минимум энергии, если все связывающие электронные пары будут равноудалены друг от друга на поверхности сферы. Неподеленная электронная пара занимает на сфере большую площадь, что приводит к уменьшению валентного угла тем больше, чем больше в молекуле неподеленных электронных пар  $E$



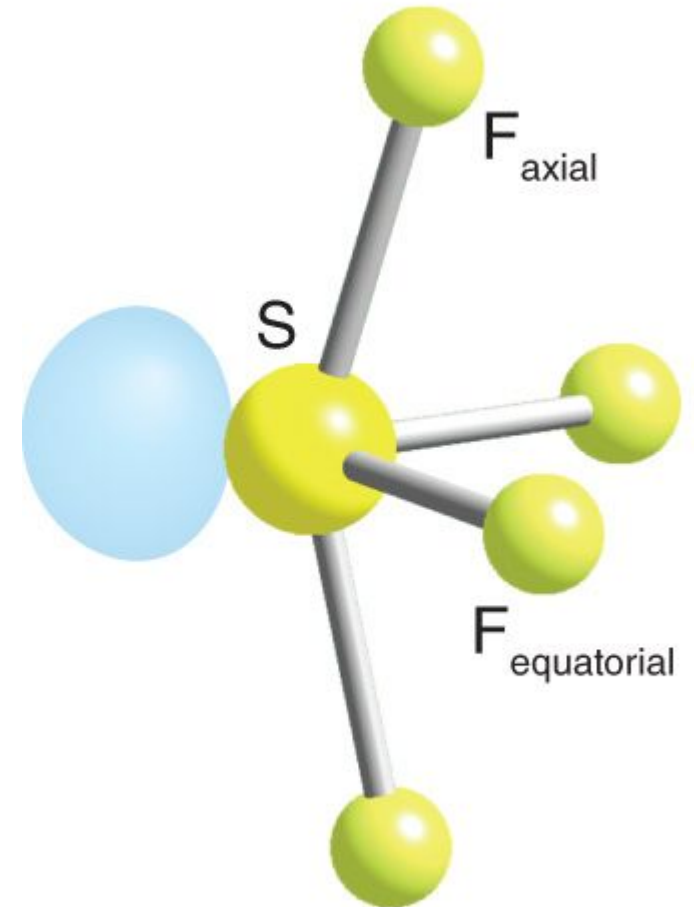
# Пример: определить форму молекулы H<sub>2</sub>O

- Сначала определяем число электронов вокруг центрального атома. У кислорода 6 своих электронов, еще 2 предоставляют ему 2 атома водорода. Всего вокруг кислорода 8 электронов или 4 электронные пары. Эти пары расположены в пространстве максимально симметрично – считаем, что все они одновременно притягиваются к общему центру (кислород) и взаимно отталкиваются. Фигура, которую могут по таким законам образовать 4 шара – тетраэдр. На двух вершинах этого тетраэдра находятся ядра водорода, и между этими двумя вершинами угол может отличаться от тетраэдрического. Вывод: форма молекулы H<sub>2</sub>O угловая, атомы водорода на концах угла.



# Пример: определить форму молекулы SF<sub>4</sub>

- Сначала определяем число электронов вокруг центрального атома. У серы 6 своих электронов, на образование связей с 4 атомами фтора фтор “предоставляет” еще 4 электрона для получения электронных пар. Всего вокруг центрального атома серы 10 электронов или 5 пар. Максимально симметричная фигура – тригональная бипирамида (два тетраэдра с общей гранью). Фторы располагаются у двух вершин центрального треугольника и на противоположных вершинах “состыкованных” пирамид. Форма молекулы SF<sub>4</sub> – “качели”, “ручной пулемет на ножках” или дисфеноид .



### Геометрия частиц по Гиллеспи

СЧ	Тип	Расположение ЭП	Геометрия частицы	Идеальные валентные углы	Примеры
2	$AX_2E_0$	Линейное	Линейная	$180^\circ$	$BeF_2, CO_2$
3	$AX_3E_0$	Треугольное	Треугольная	$120^\circ$	$BF_3, SO_3$
	$AX_2E_1$	угловое	Угловая	$120^\circ$	$SnCl_2, SO_2$
4	$AX_4E_0$	Тетраэдрическое	Тетраэдрическая	$109^\circ$	$CH_4, SO_4^{2-}$
	$AX_3E_1$		Пирамидальная	$109^\circ$	$H_3O^+, SO_3^{2-}$
	$AX_2E_2$		Угловая	$109^\circ$	$H_2O, ClO_2^{2-}$
5	$AX_5E_0$	По ТБП	ТБП	$90^\circ (6)^*, 120^\circ (3), 180^\circ (1)$	$PF_5, SiF_5^-$
	$AX_4E_1$		Искажённая тетраэдрич. («ходули»)	$90^\circ (3), 120^\circ (1), 180^\circ (1)$	$SF_4, IOCl_3$
	$AX_3E_2$		«Т»-образная	$90^\circ(2), 180^\circ(1)$	$ClF_3, XeOF_2$
	$AX_2E_3$		Линейная	$180^\circ$	$ICl_2^-, XeF_2$
6	$AX_6E_0$	Октаэдрическое	Октаэдрическая	$90^\circ$	$SF_6, PCl_6^-$
	$AX_5E_1$		Квадратная пирамида	$90^\circ$	$ClF_5, TeCl_5^-$
	$AX_4E_2$		Квадрат	$90^\circ$	$ICl_4^-, XeF_4$