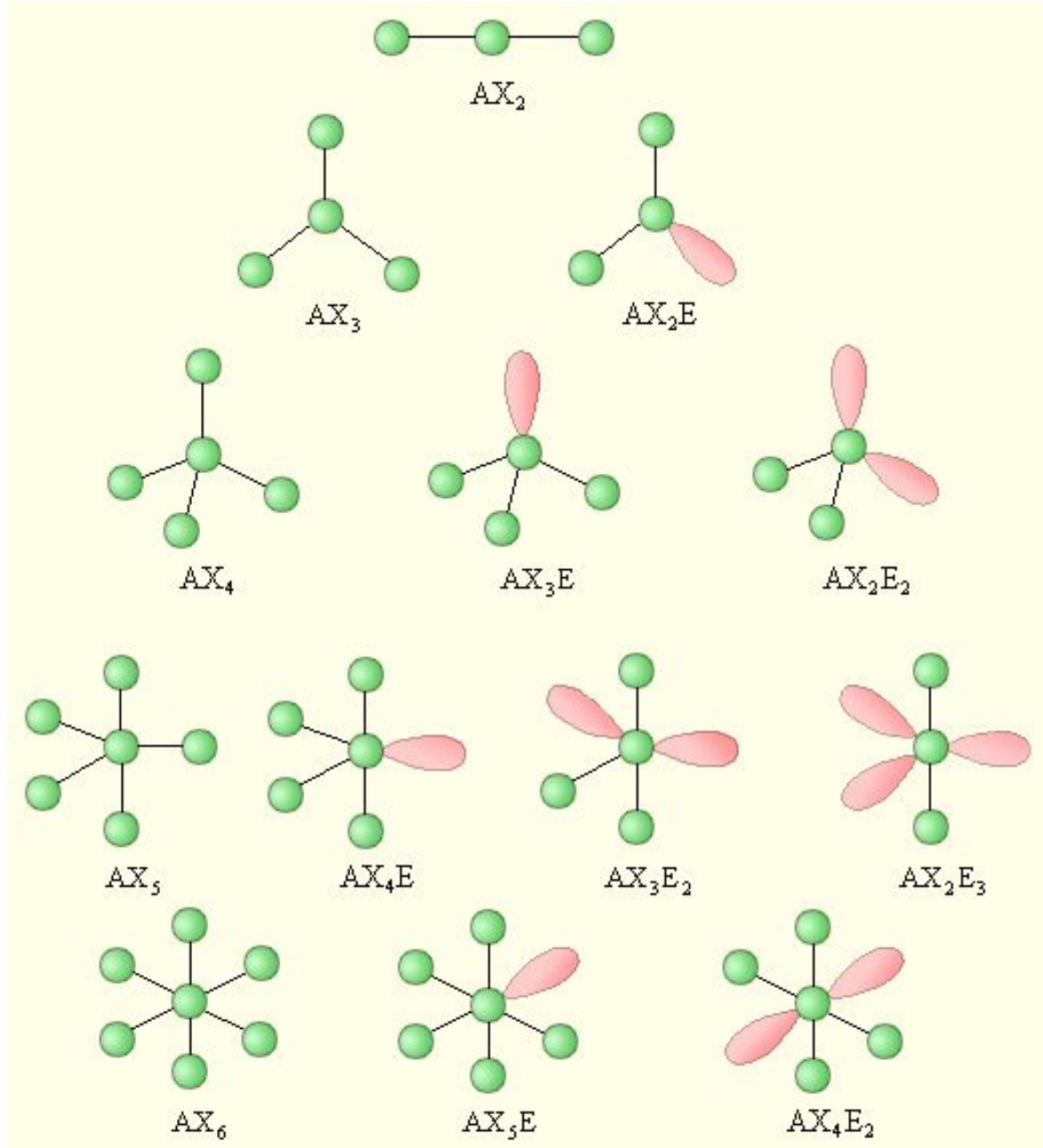
Метод Гиллеспи–Найхолма

17.07.2021

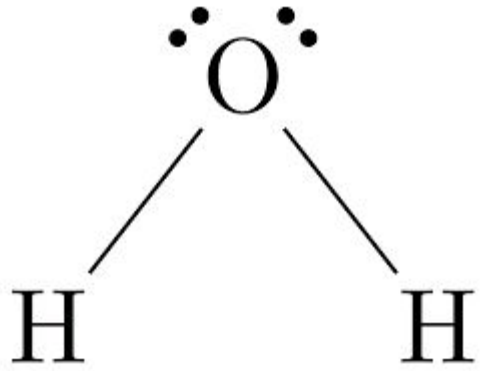
Суть

- 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


AX_2
AX_3
AX_2E
AX_4
AX_3E
AX_2E_2
AX_5
AX_4E
AX_3E_2
AX_2E_3
AX_6
AX_5E
AX_4E_2

Пример: определить форму молекулы H_2O

- 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_2O угловая , атомы водорода на концах угла.



Пример: определить форму молекулы SF4

- 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 треугольнаки и на противостоящих вершинах “состыкованных” пирамид. Форма молекулы SF4 – “качели”, “ручной пулемет на ножках” или дисфеноид .

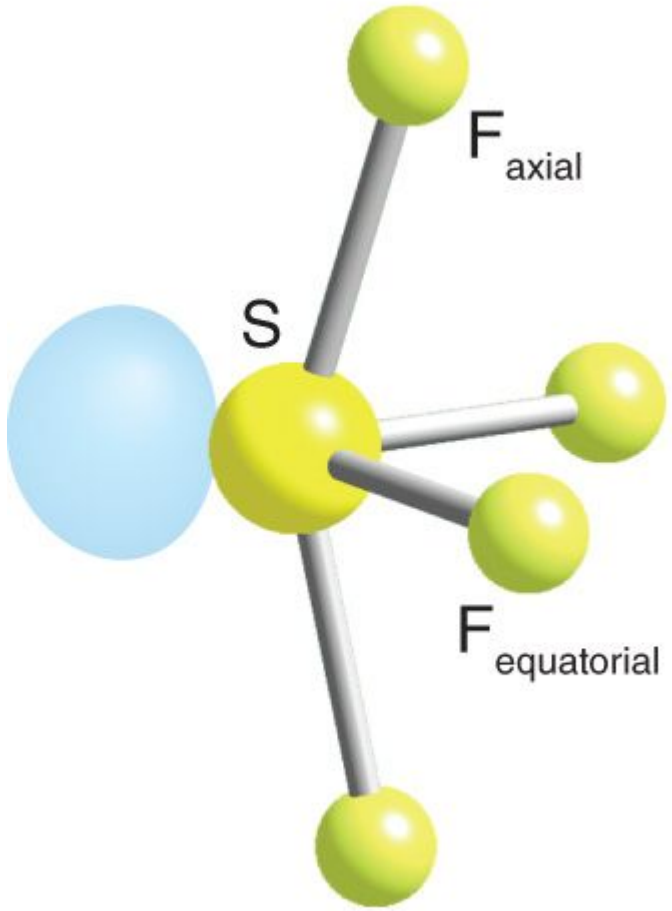


Таблица 9

Геометрия частиц по Гиллеспи

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