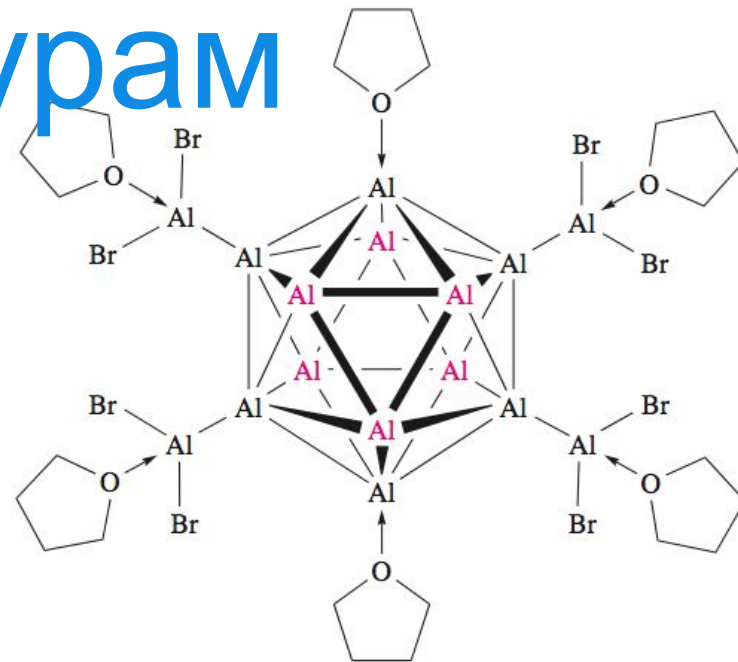
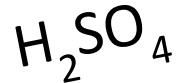


От простых правил к сложным структурам

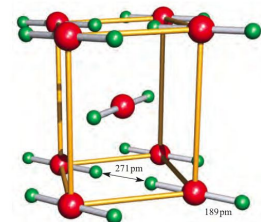
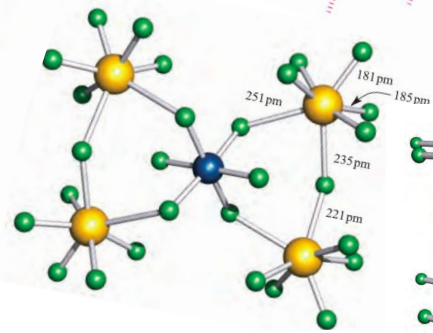
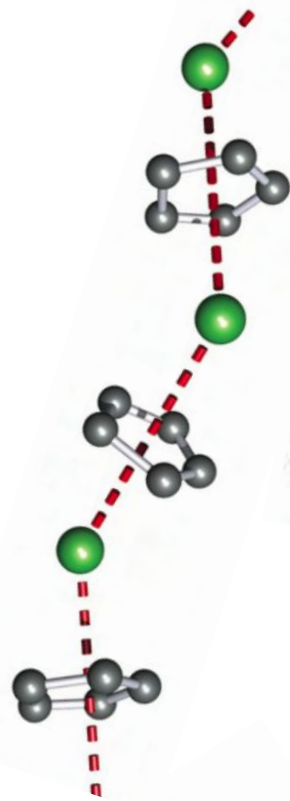
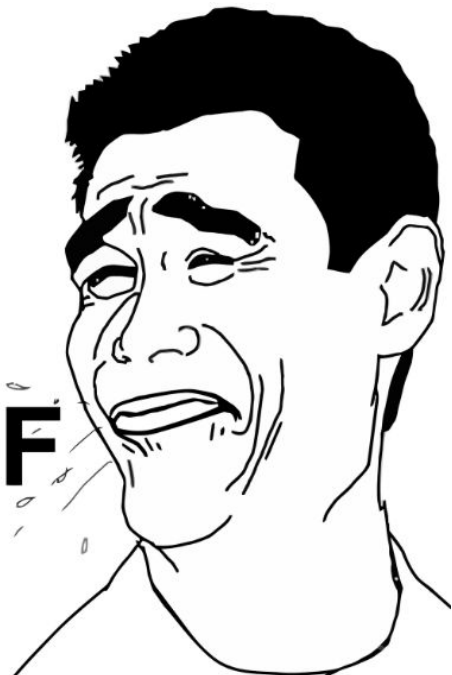


Лекцию подготовил: [Шлапаков Никита](#),
студент 6 курса Химического факультета
МГУ.

Где начинается химия?



PFF



НИЧОСИ



Что нам потребуется?

**Структура
молекул**

**Умение
считать не
более, чем до
18**

**Таблица
Менделеев**

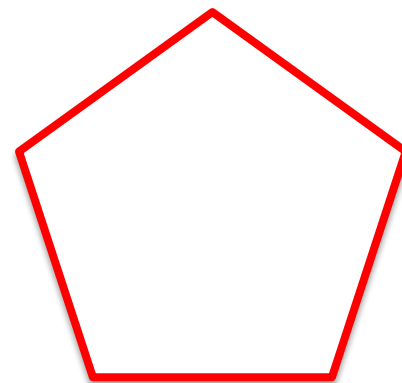
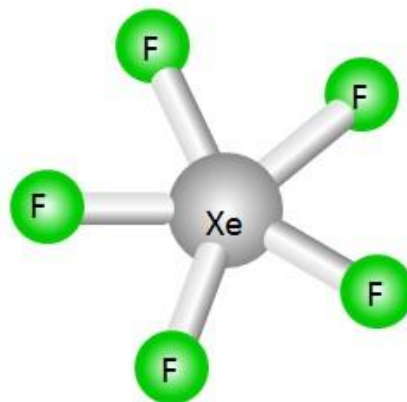
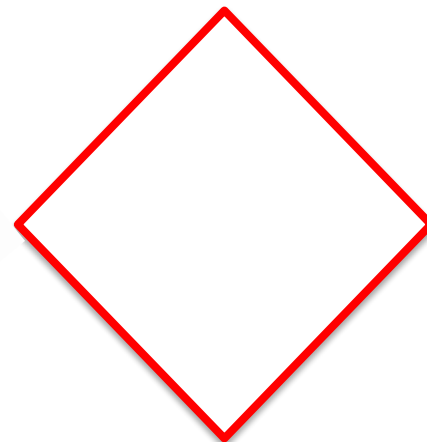
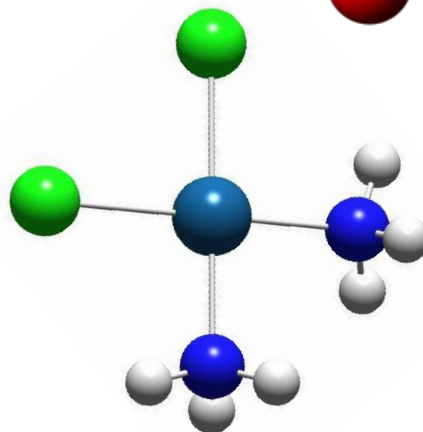
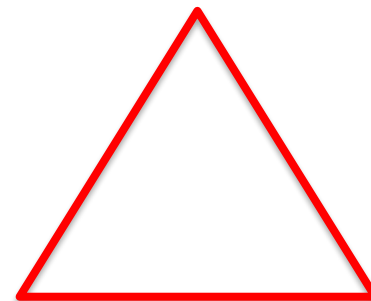
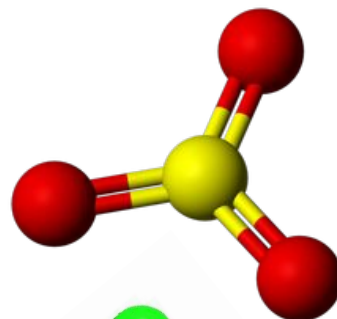
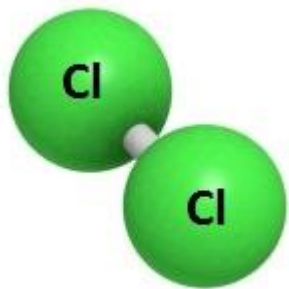
а

**Основы
геометри**

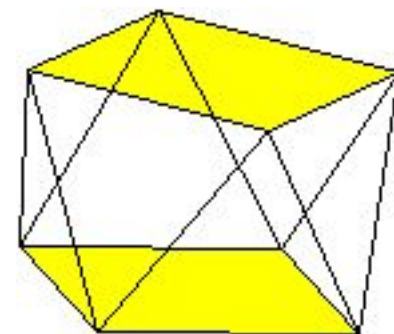
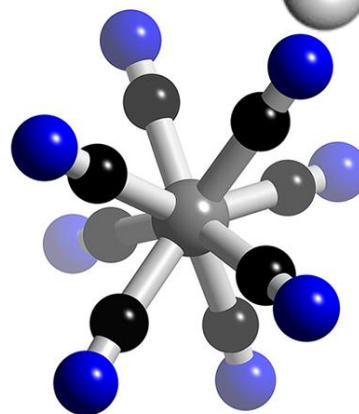
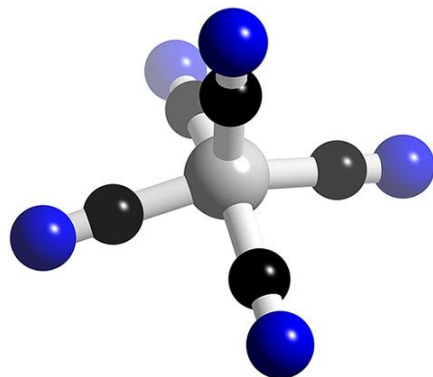
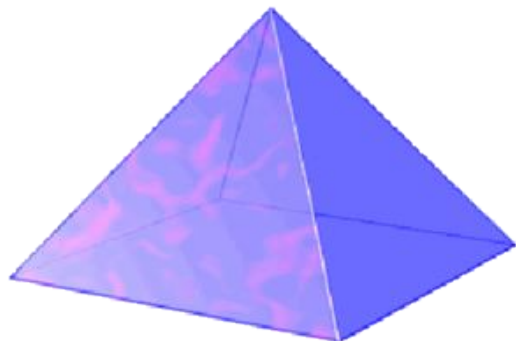
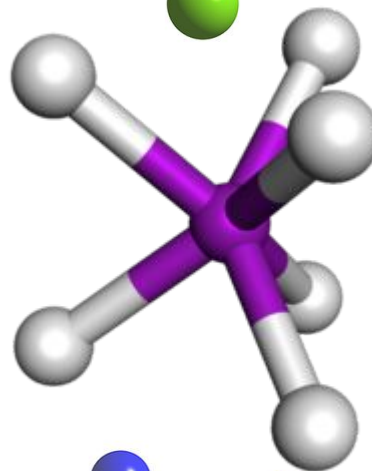
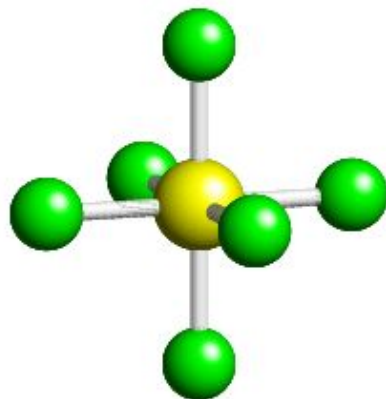
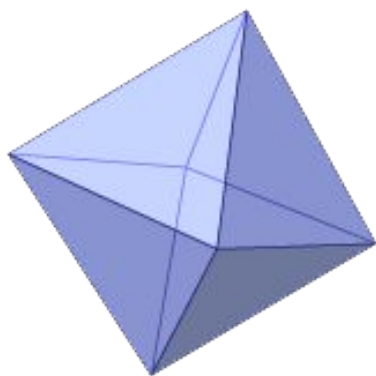
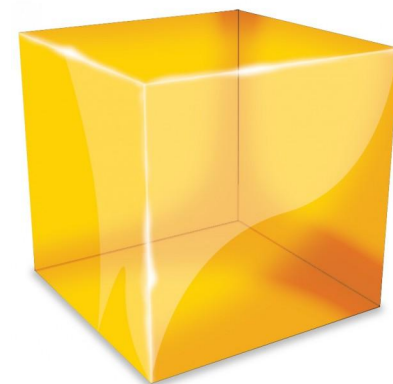
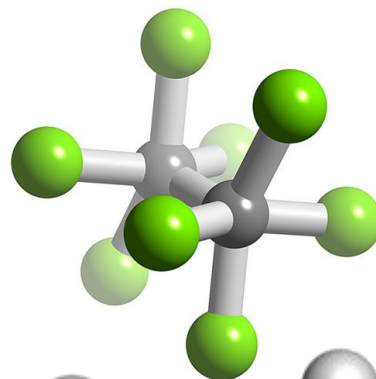
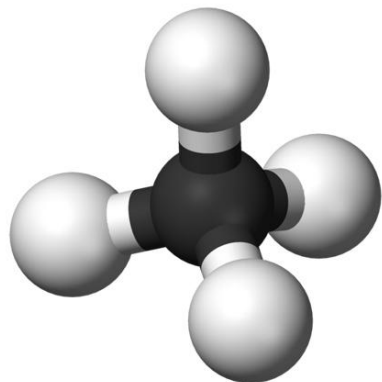
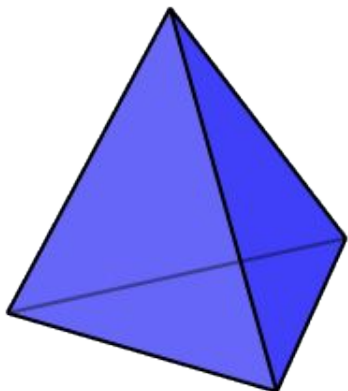
и



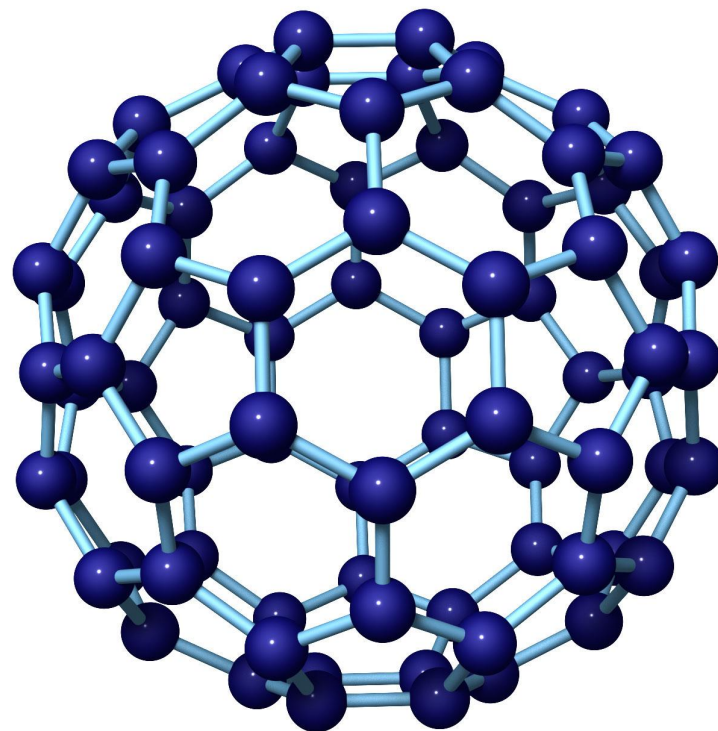
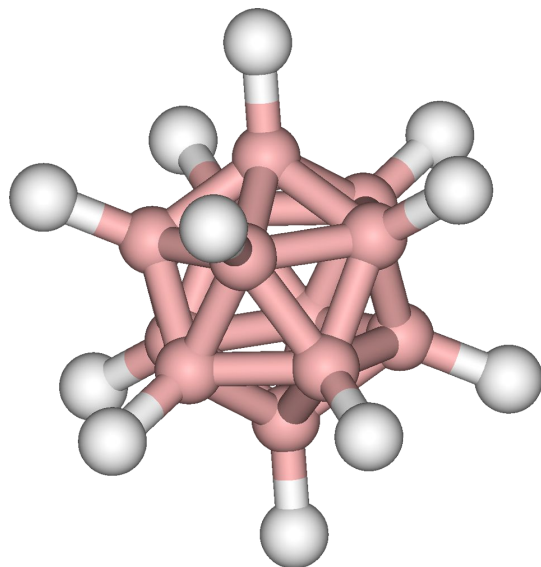
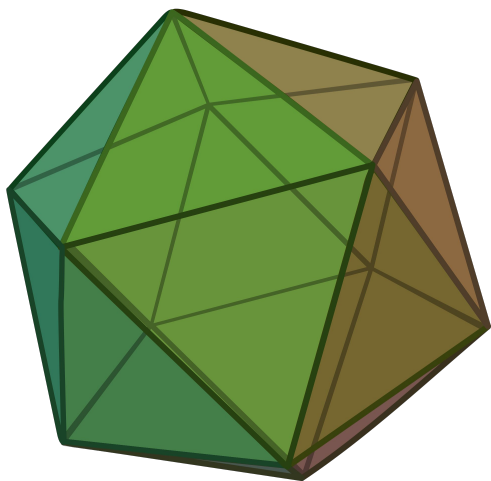
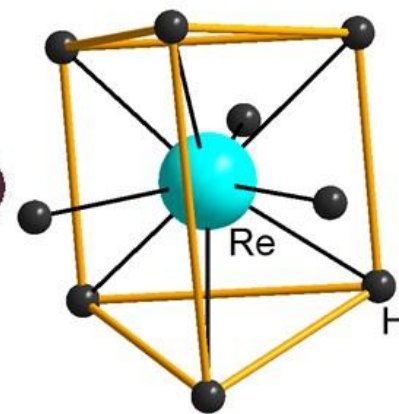
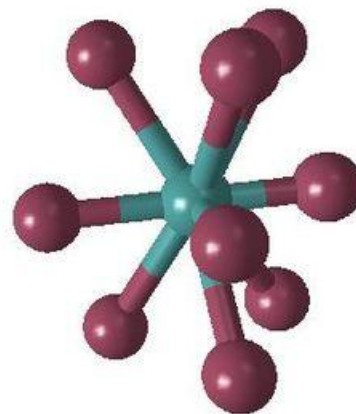
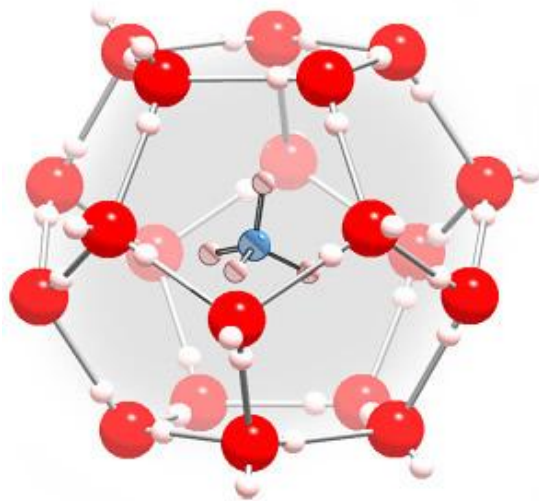
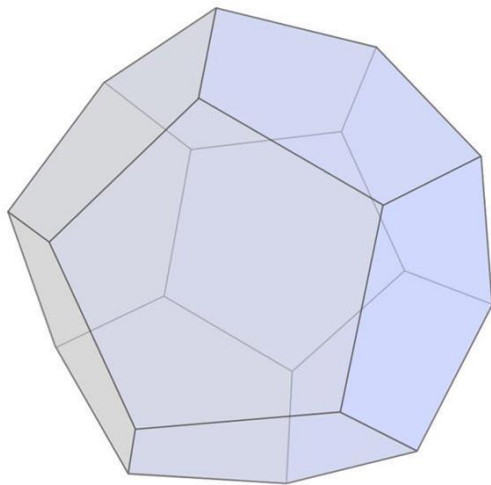
Геометрия в химии



Геометрия в химии



Геометрия в химии

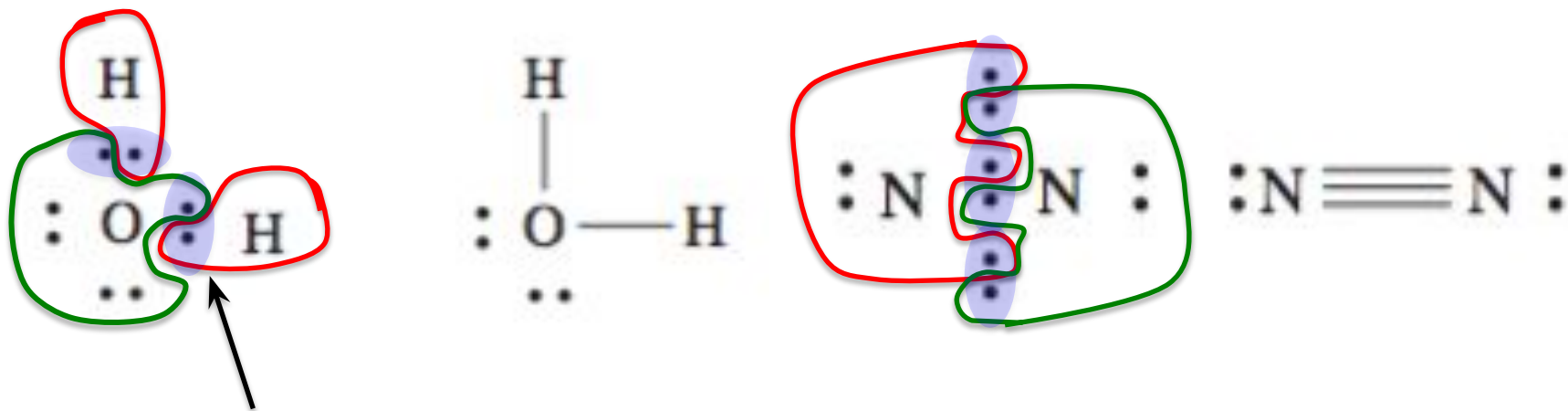


Метод валентных связей

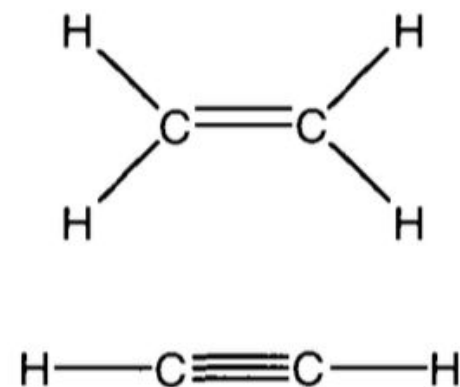
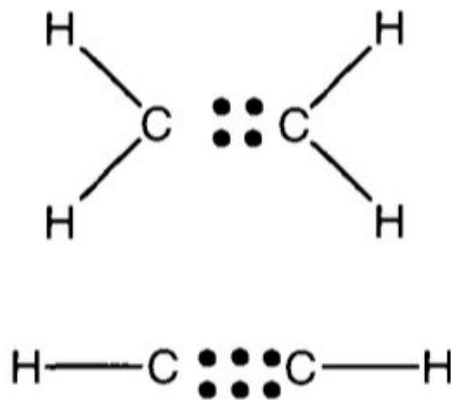
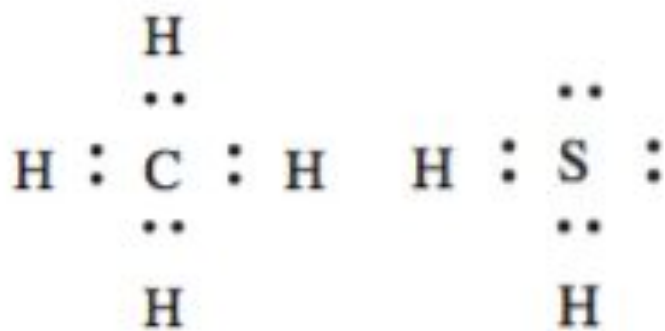
1e 2e 3e 4e 5e 6e 7e 8e

Периоды	Ряды	Г Р У П П Ы Э Л Е М Е Н Т О В																											
		I		II		III		IV		V		VI		VII		VIII													
		а	б	а	б	а	б	а	б	а	б	а	б	а	б	б						а							
1	1	1 Н ВОДОРОД 1,008																2 He ГЕЛИЙ 4,003											
2	2	3 Li ЛИТИЙ 6,941		4 Be БЕРИЛЛИЙ 9,0122		5 B БОР 10,811		6 C УГЛЕРОД 12,011		7 N АЗОТ 14,007		8 O КИСЛОРОД 15,999		9 F ФТОР 18,998								10 Ne НЕОН 20,179							
3	3	11 Na НАТРИЙ 22,99		12 Mg МАГНИЙ 24,312		13 Al АЛЮМИНИЙ 26,982		14 Si КРЕМНИЙ 28,086		15 P ФОСФОР 30,974		16 S СЕРА 32,064		17 Cl ХЛОР 35,453								18 Ar АРГОН 39,948							
4	4	19 K КАЛИЙ 39,102		20 Ca КАЛЬЦИЙ 40,08		21 Sc СКАНДИЙ 44,956		22 Ti ТИТАН 47,867		23 V ВАНАДИЙ 50,941		24 Cr ХРОМ 51,996		25 Mn МАРГАНЕЦ 54,938		26 Fe ЖЕЛЕЗО 55,845		27 Co КОБАЛЬТ 58,933		28 Ni НИКЕЛЬ 58,7									
	5	29 Cu МЕДЬ 63,546		30 Zn ЦИНК 65,37		31 Ga ГАЛЛИЙ 69,72		32 Ge ГЕРМАНИЙ 72,59		33 As МыШЬЯК 74,922		34 Se СЕЛЕН 78,96		35 Br БРОМ 79,904								36 Kr КРИПТОН 83,6							
5	6	37 Rb РУБИДИЙ 85,468		38 Sr СТРОНЦИЙ 87,62		39 Y ИТРИЙ 88,906		40 Zr ЦИРКОНИЙ 91,22		41 Nb НИОБИЙ 92,906		42 Mo МОЛИБДЕН 95,94		43 Tc ТЕХНЕЦИЙ (98)		44 Ru РУТЕНИЙ 101,07		45 Rh РОДИЙ 102,905		46 Pd ПАЛЛАДИЙ 106,4									
	7	47 Ag СЕРЕБРО 107,868		48 Cd КАДМИЙ 112,41		49 In ИНДИЙ 114,82		50 Sn ОЛОВО 118,69		51 Sb СУРЬМА 121,76		52 Te ТЕЛЛУР 127,6		53 I ИОД 126,905								54 Xe КСЕНОН 131,3							
6	8	55 Cs ЦЕЗИЙ 132,905		56 Ba БАРИЙ 137,34		57-71 ЛАНТАНОИДЫ		72 Hf ГАФНИЙ 178,49		73 Ta ТАНТАЛ 180,948		74 W ВОЛЬФРАМ 183,85		75 Re РЕНИЙ 186,207		76 Os ОСМИЙ 190,2		77 Ir ИРИДИЙ 192,22		78 Pt ПЛАТИНА 195,09									
	9	79 Au ЗОЛОТО 196,967		80 Hg РУТУТЬ 200,59		81 Tl ТАЛЛИЙ 204,37		82 Pb СВИНЕЦ 207,19		83 Bi ВИСМУТ 208,98		84 Po ПОЛОНИЙ (209)		85 At АСТАТ (209)								86 Rn РАДОН (222)							
7	10	87 Fr ФРАНЦИЙ (223)		88 Ra РАДИЙ (226)		89-103 АКТИНОИДЫ		104 Rf РЕЗЕРФОРДИЙ (261)		105 Db ДУБИНИЙ (262)		106 Sg СНБОРГИЙ (263)		107 Bh БОРИЙ (262)		108 Hn ХАННИЙ (285)		109 Mt МЕЙТНЕРИЙ		110									
Л А Н Т А Н О И Д Ы																													
57	La	58	Ce	59	Pr	60	Nd	61	Pm	62	Sm	63	Eu	64	Gd	65	Tb	66	Dy	67	Ho	68	Er	69	Tm	70	Yb	71	Lu
	ЛАНТАН 138,905		ЦЕРИЙ 140,12		ПРАЗЕОДИЙ 140,908		НЕОДИМ 144,24		ПРОМЕТИЙ (145)		САМАРИЙ 150,4		ЕВРОПИЙ 151,96		ГАДОЛИНИЙ 157,25		ТЕРБИЙ 158,928		ДИСПРОЗИЙ 162,5		ГОЛЬМИЙ 164,03		ЭРБИЙ 167,26		ТУЛЬИЙ 168,934		ИТТЕРБИЙ 173,04		ЛЮТЕЦИЙ 174,97
А К Т И Н О И Д Ы																													
89	Ac	90	Th	91	Pa	92	U	93	Np	94	Pu	95	Am	96	Cm	97	Bk	98	Cf	99	Es	100	Fm	101	Md	102	No	103	Lr
	АКТИНИЙ (227)		УРАНИЙ 232,038		ПРОТАКТИНИЙ (231)		УРАН 238,29		НЕПУТУНИЙ (237)		ПЛУТОНИЙ (244)		АМЕРИЦИЙ (243)		КЮРИЙ (247)		БЕРКЛИЙ (247)		КАЛИФОРНИЙ (251)		ЭЙНШТЕЙН (254)		ФЕРМИЙ (257)		МЕНДЕЛЕВИЙ (258)		НОБЕЛИЙ (259)		ЛОРЕНСЦИЙ (260)

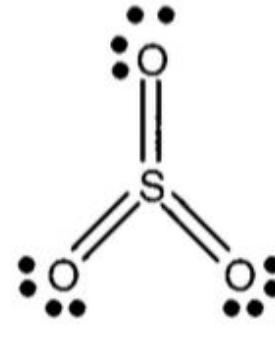
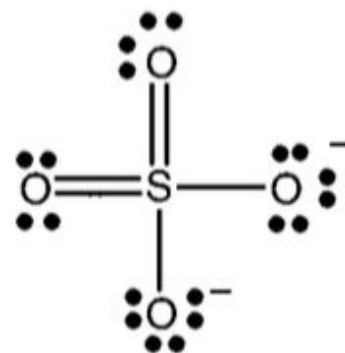
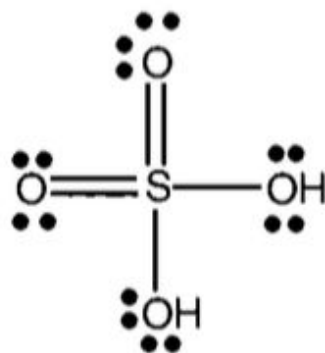
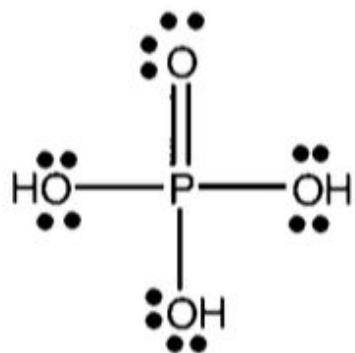
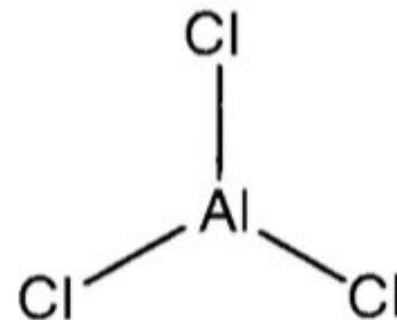
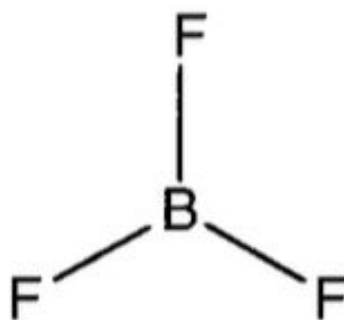
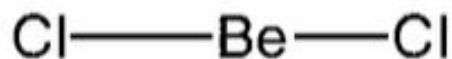
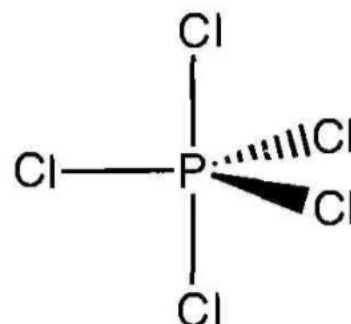
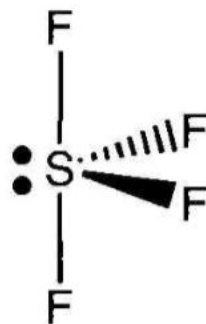
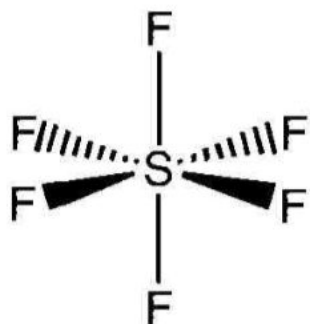
Правило октета. Структуры Льюиса.



обобществлённые электроны – электроны «общего пользования», принадлежат обоим атомам

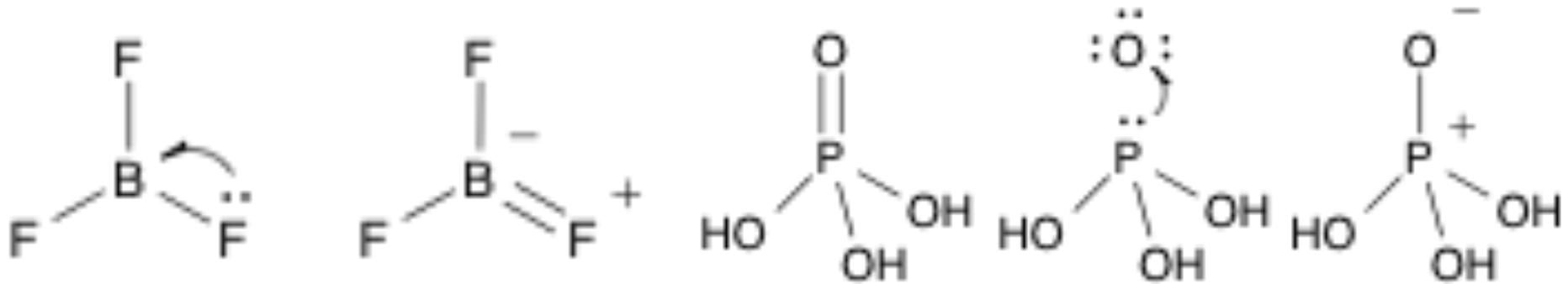


Неудачи «правила» октета

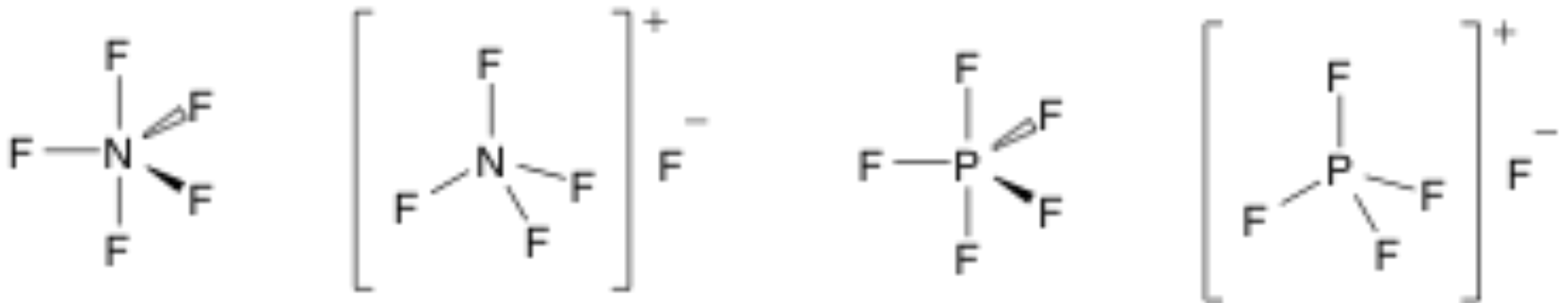


Необходимые меры

1) Донорно-акцепторные связи



2) Подключение свободных d-орбиталей в качестве «хранилища» электронов



Плохо! 10 e!
Нет 3d-вакансий!

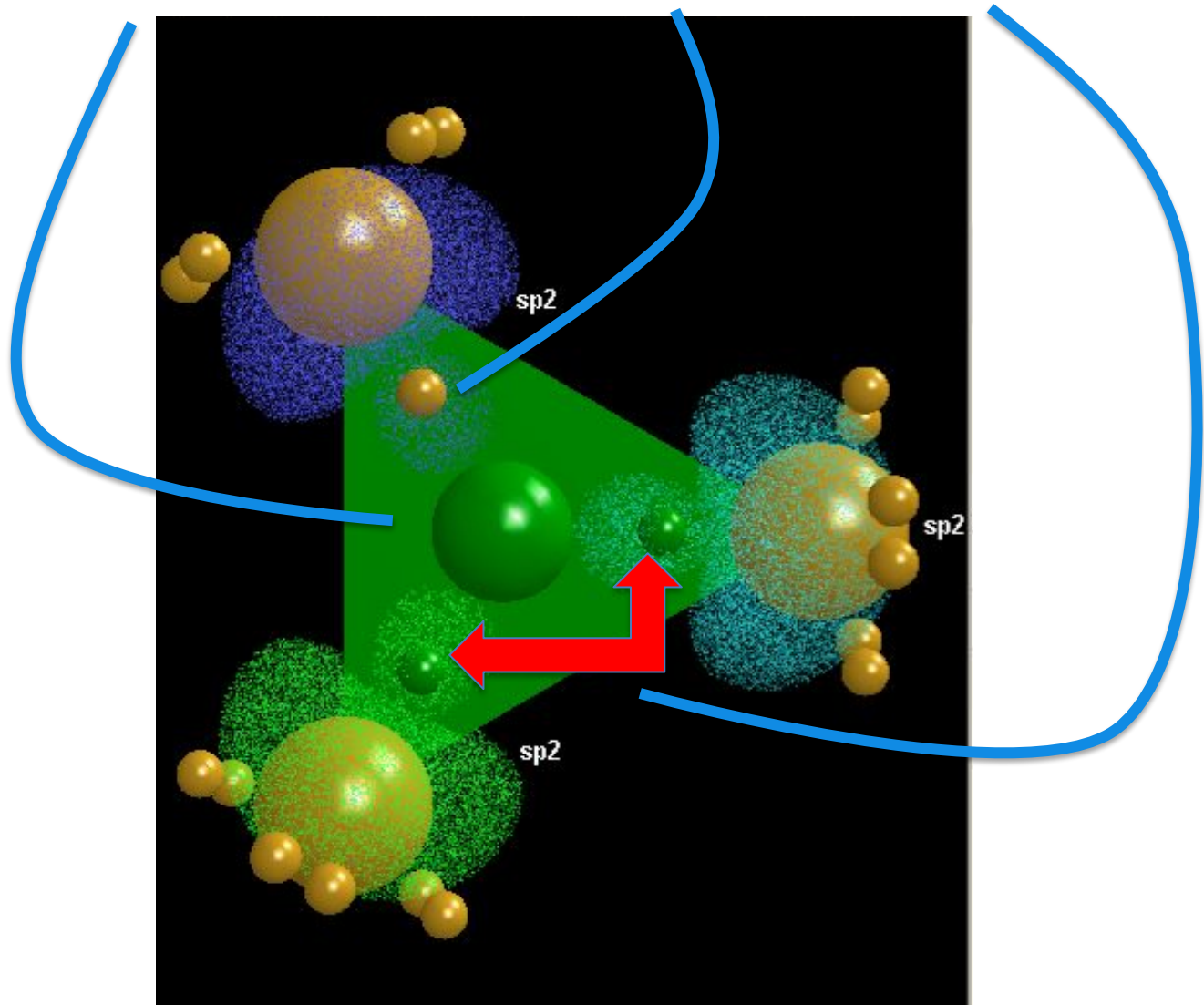
Хорошо! 8 e!
3d не нужны!

Хорошо! 10 e!
Есть 3d-вакансии!

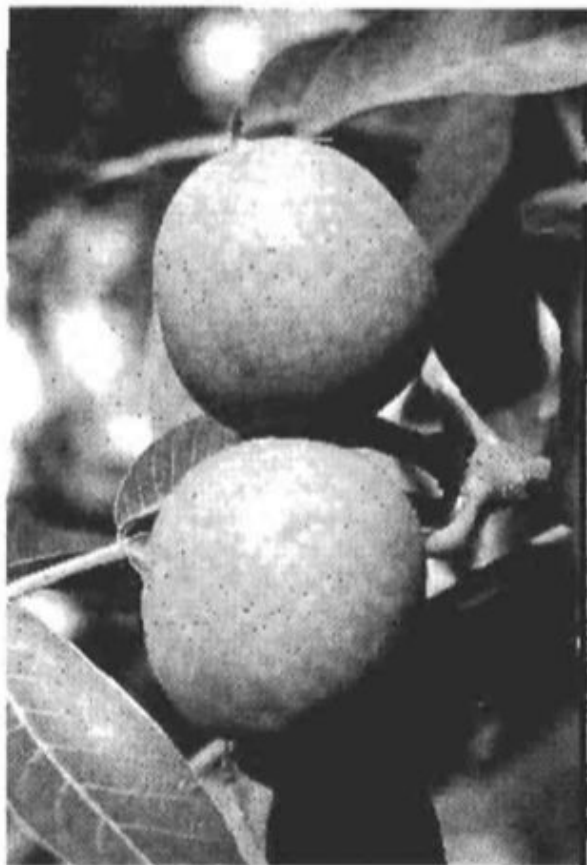
Плохо! Не согласуется
с экспериментом!

Принцип VSEPR

(VSEPR) valence-shell *e*lectron-*p*air **r**epulsion

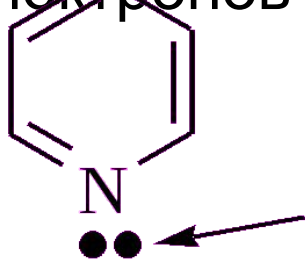


Принцип VSEPR



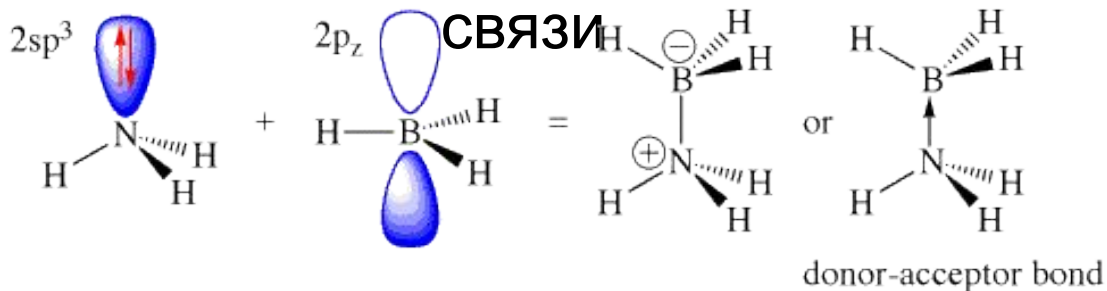
Виды электронных пар

Свободные
(несвязанные) пары
электронов

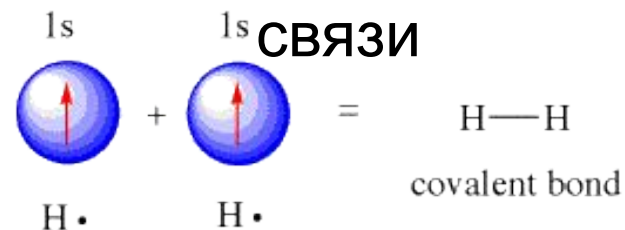


Связанные пары
электронов

Донорно-акцепторные



Обменные

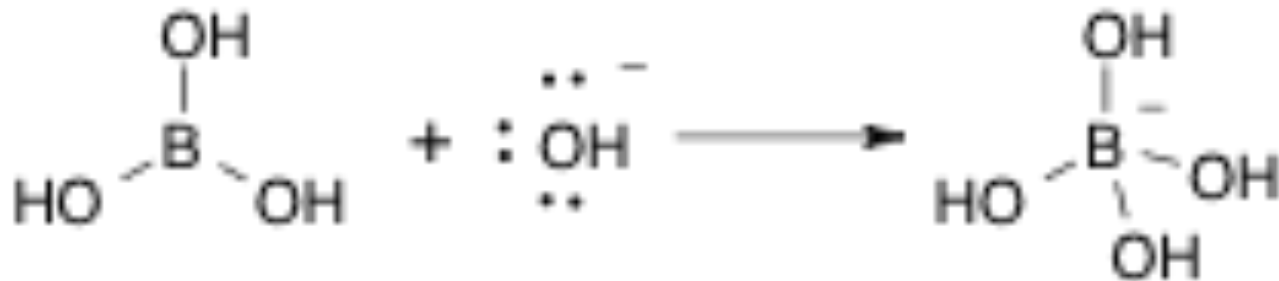


Виды электронных дыр

1) s-дыры



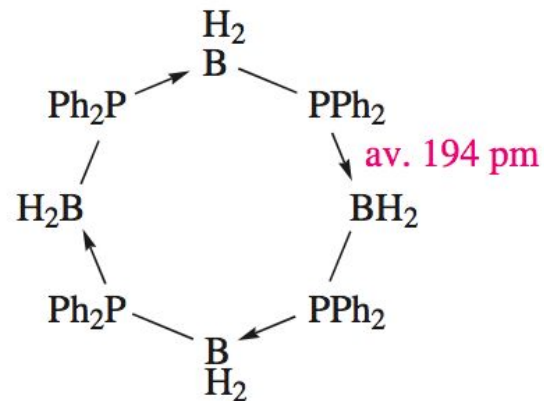
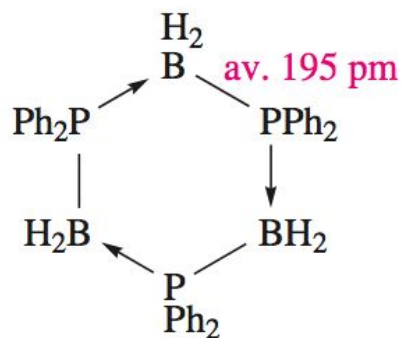
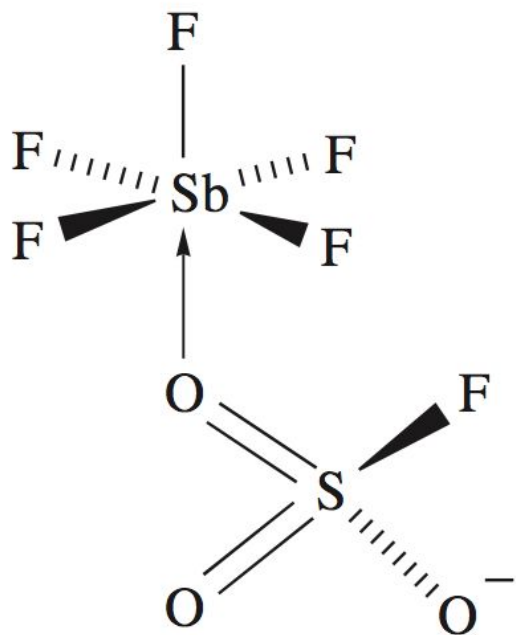
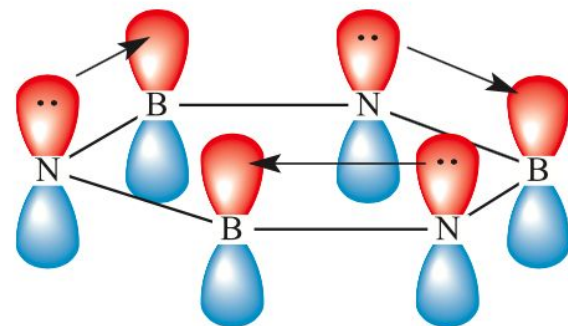
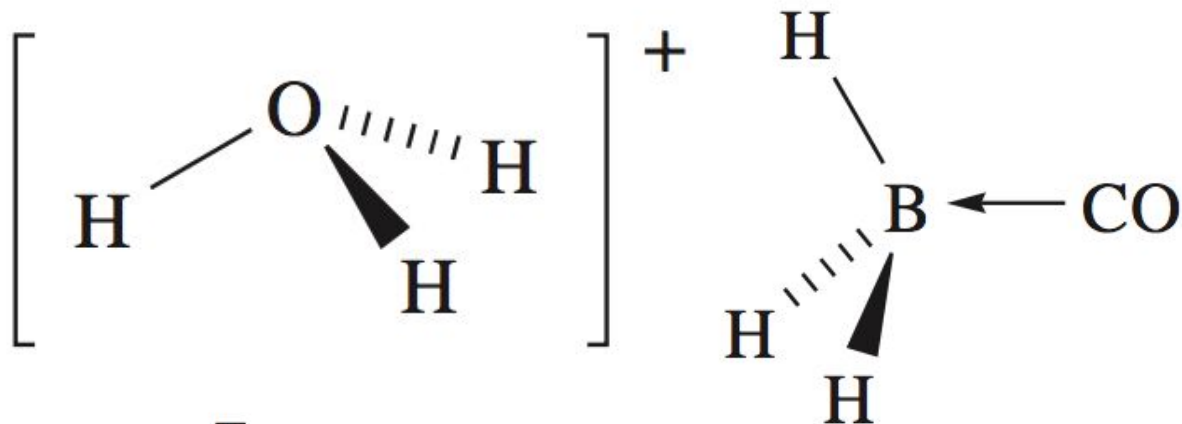
2) p-дыры



3) d-дыры



Донорно-акцепторная связь

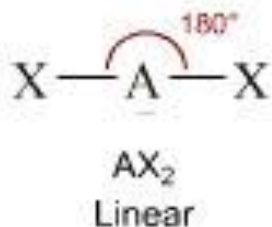


Принцип VSEPR (правила Гиллеспи)

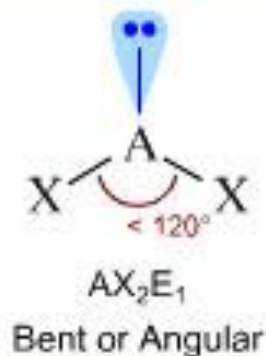
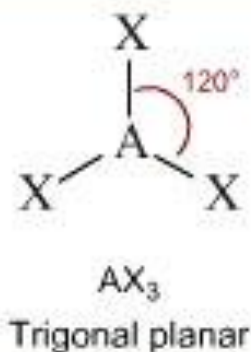
1. Пары электронов внешней оболочки центрального атома **испытывают взаимное отталкивание**;
2. Электронное отталкивание между парами ослабевает, если **электронная плотность связи уменьшается**. Следствия:
 - Отталкивание ослабевает при оттягивании электронной плотности от центрального атома за счёт электроотрицательности лигандов;
 - Отталкивание ослабевает при уменьшении порядка связи с лигандом;
3. Молекула стремится к такому расположению окружающих центральный атом лигандов, **при котором отталкивание минимально**.

Принцип VSEPR (до 8 электронов)

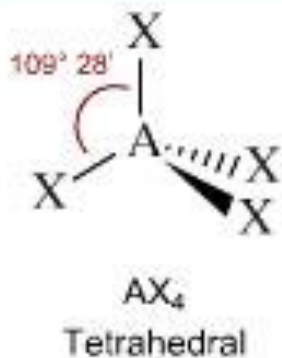
4 e



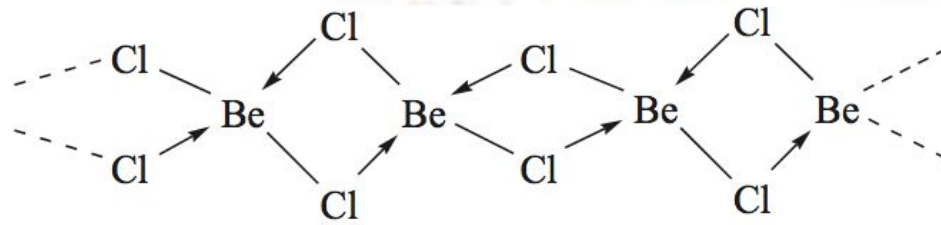
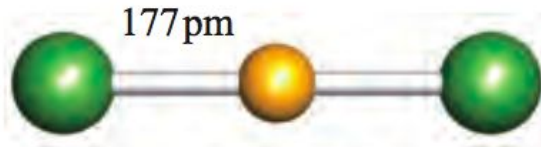
6 e



8 e

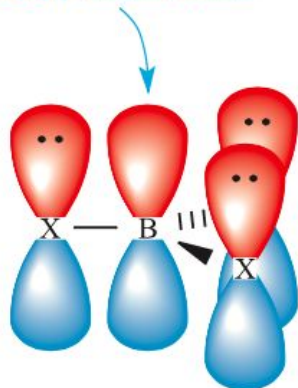


Примеры

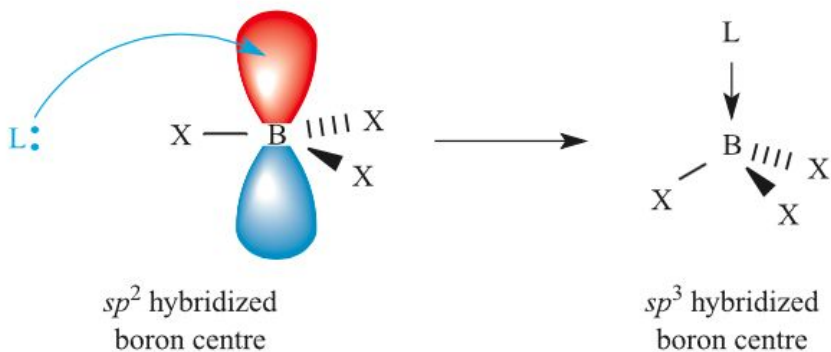


Примеры

Empty p atomic orbital



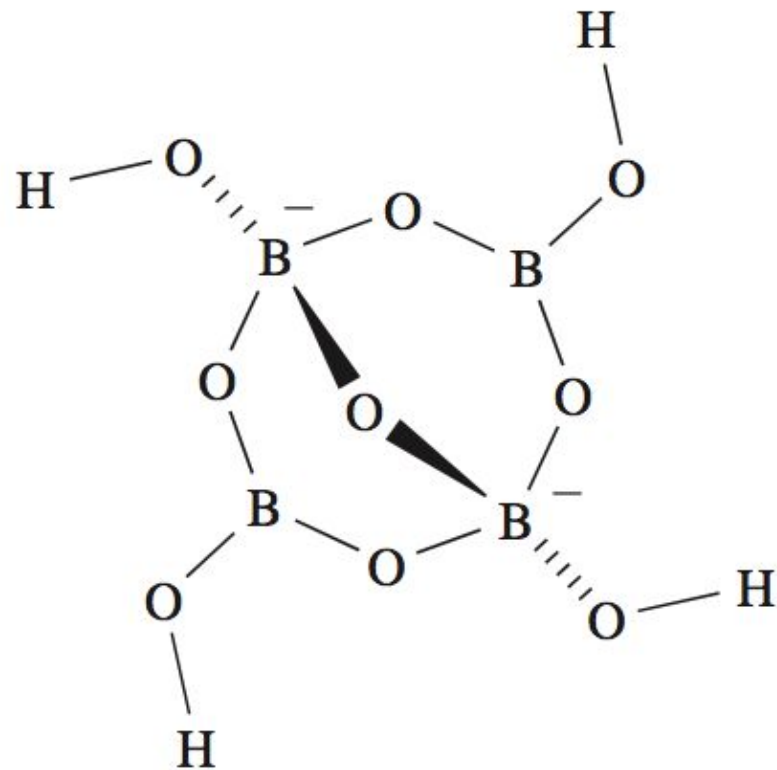
(a)



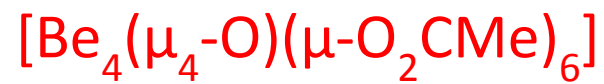
sp^2 hybridized
boron centre

sp^3 hybridized
boron centre

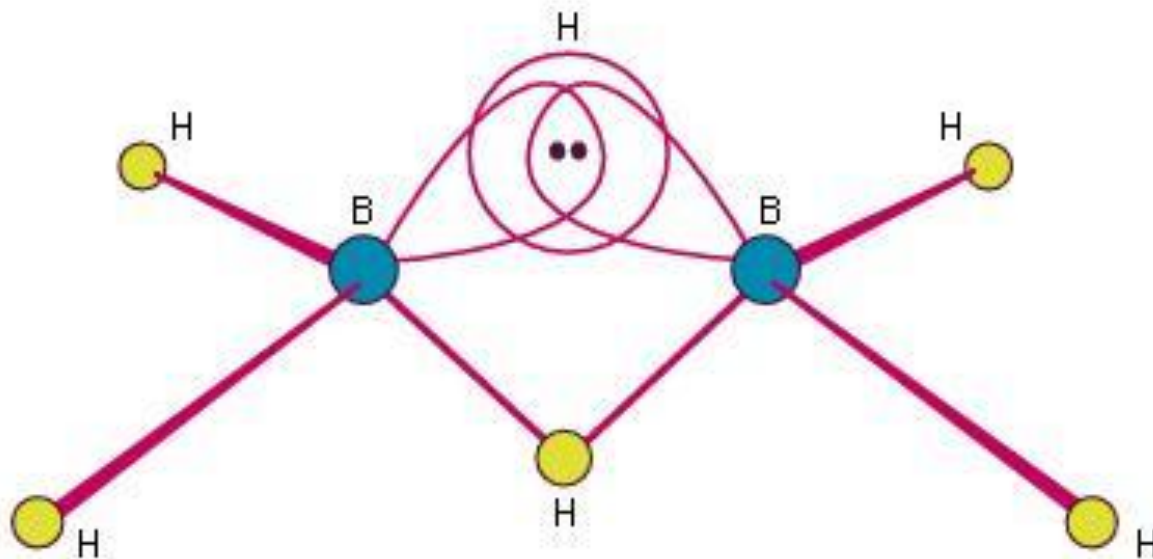
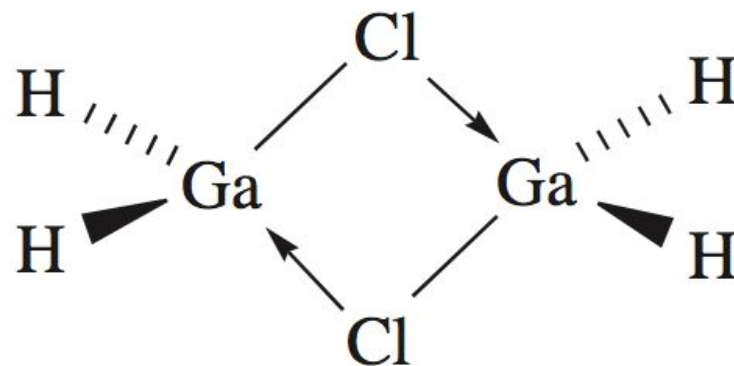
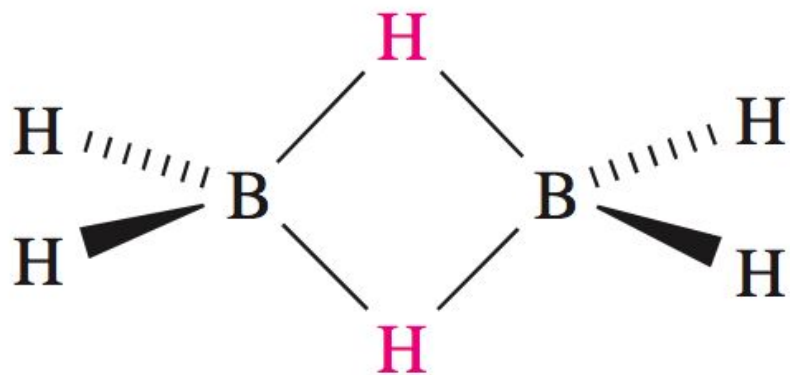
(b)



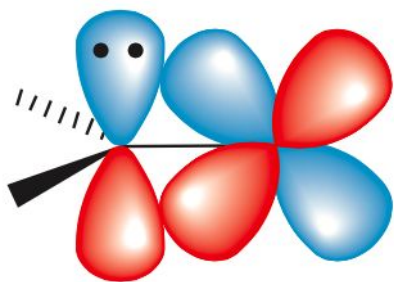
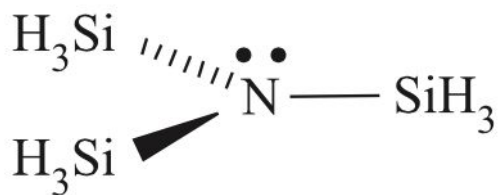
Примеры



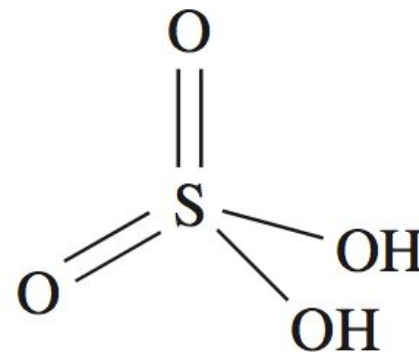
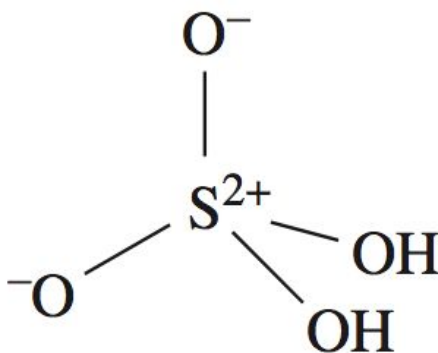
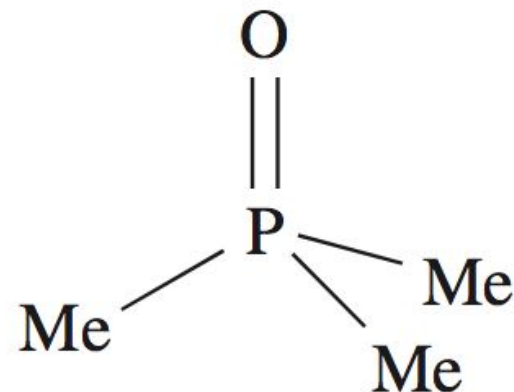
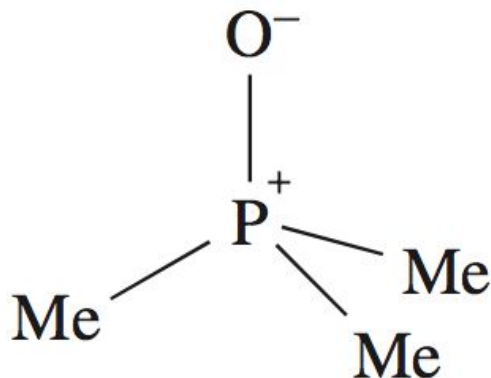
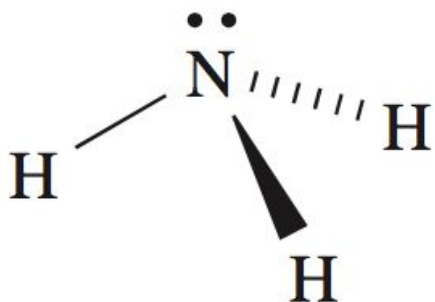
Примеры (хитрые)



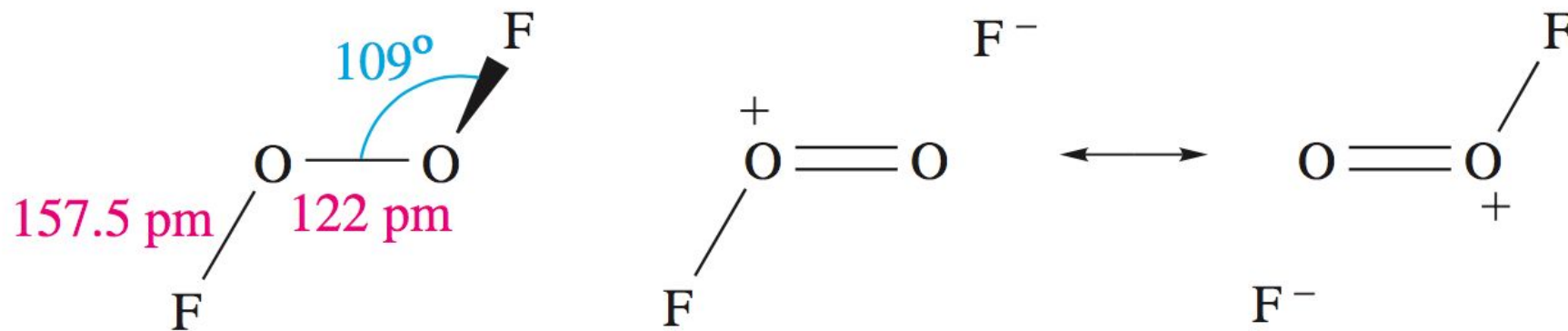
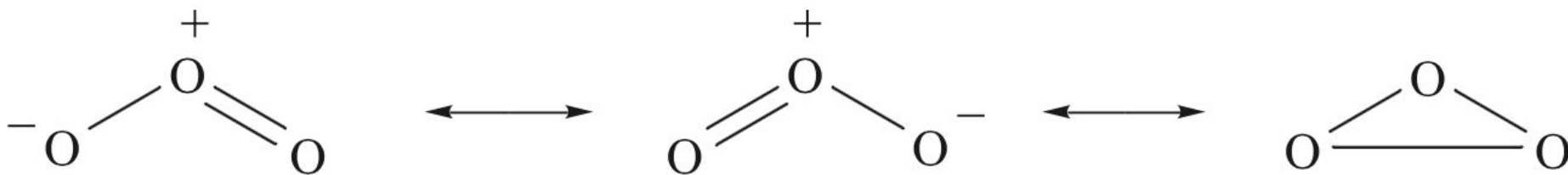
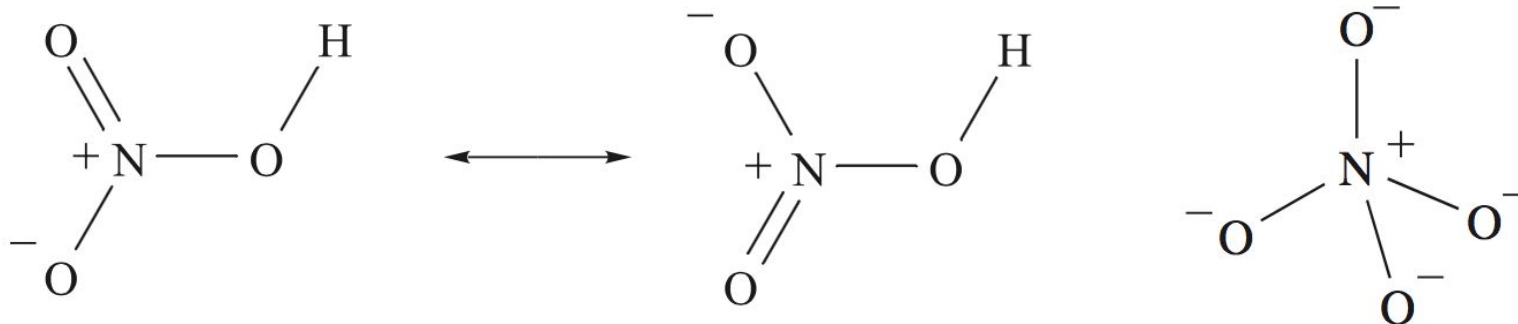
Примеры (хитрые)



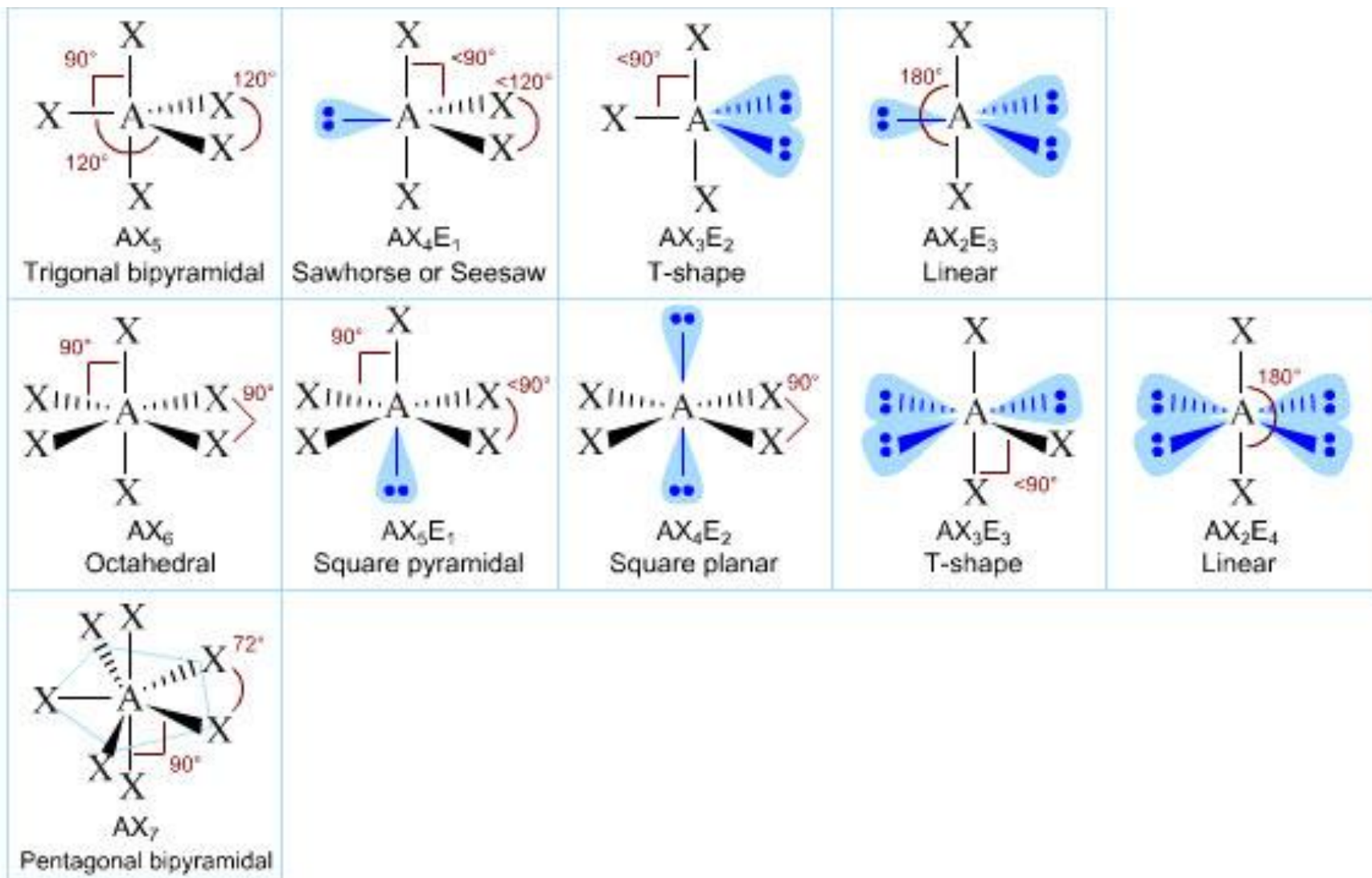
$(p-d) \pi$ overlap



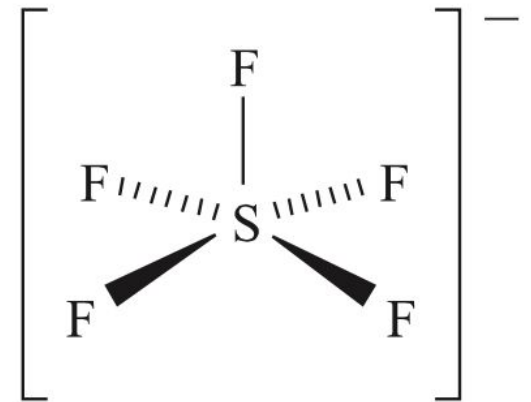
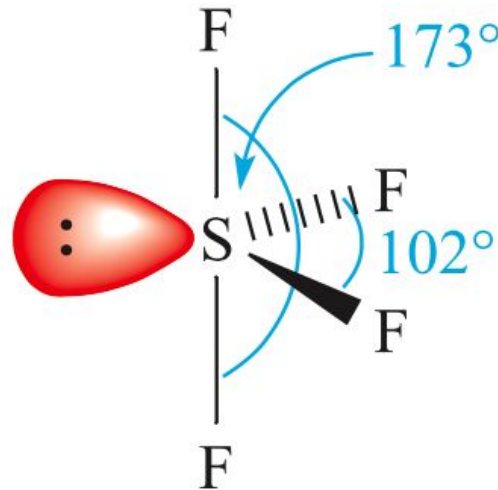
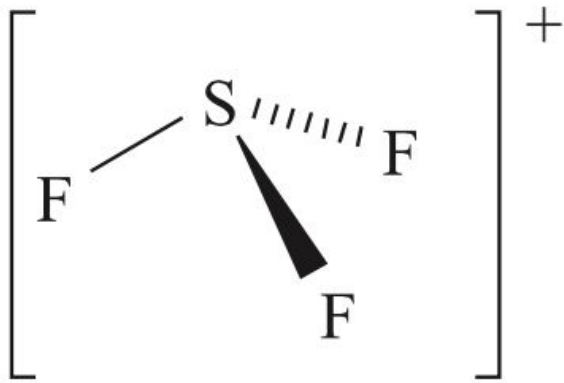
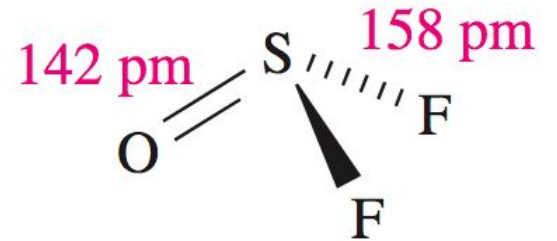
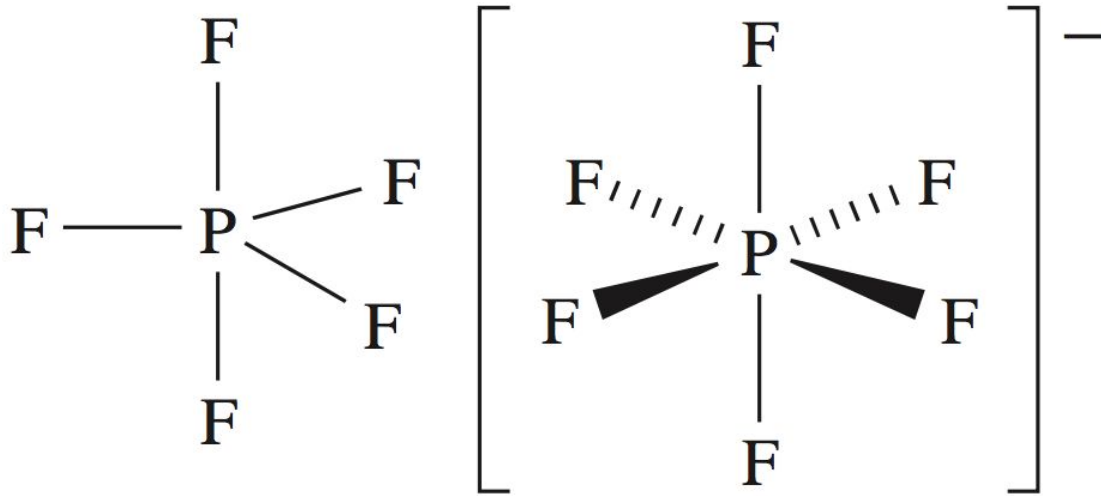
Примеры (хитрые)



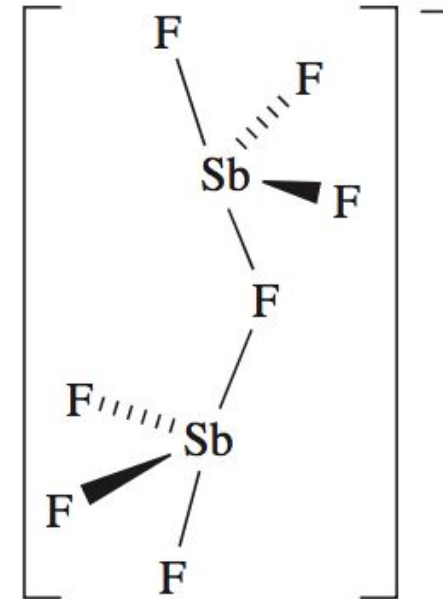
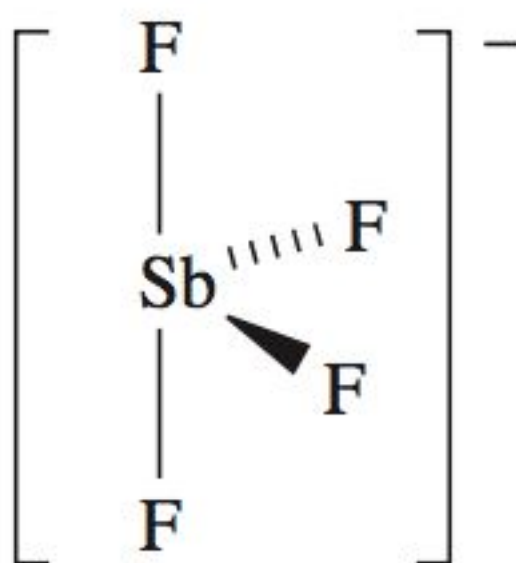
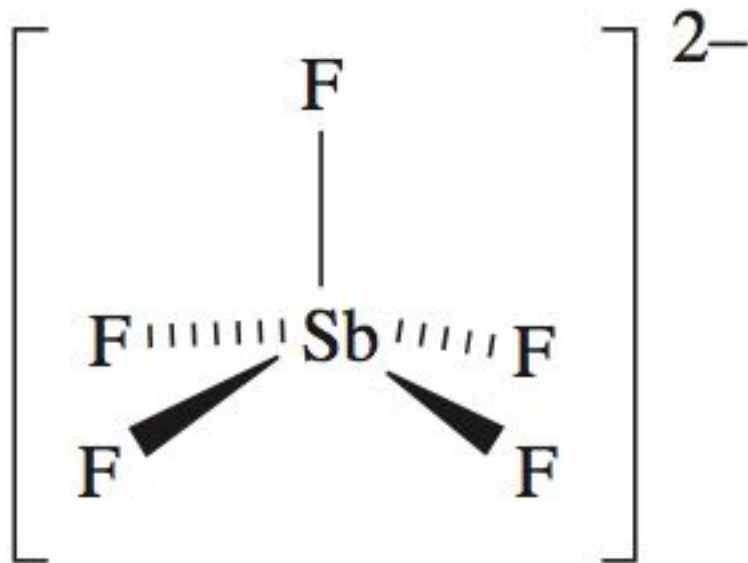
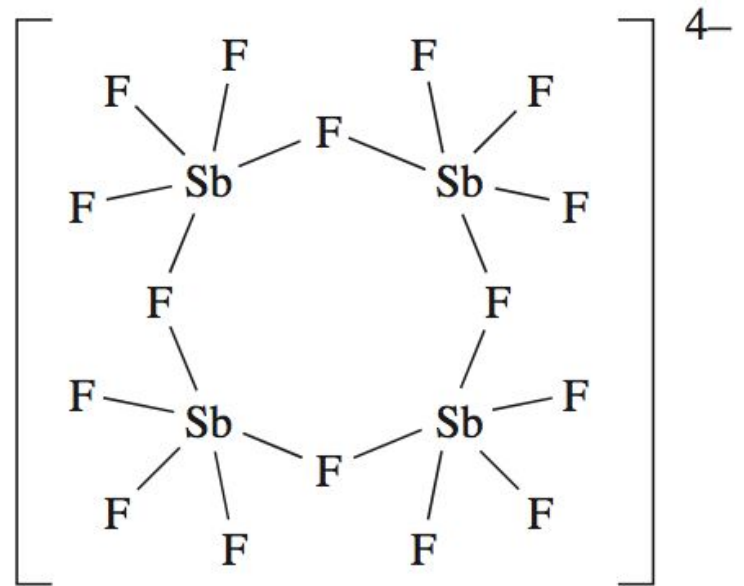
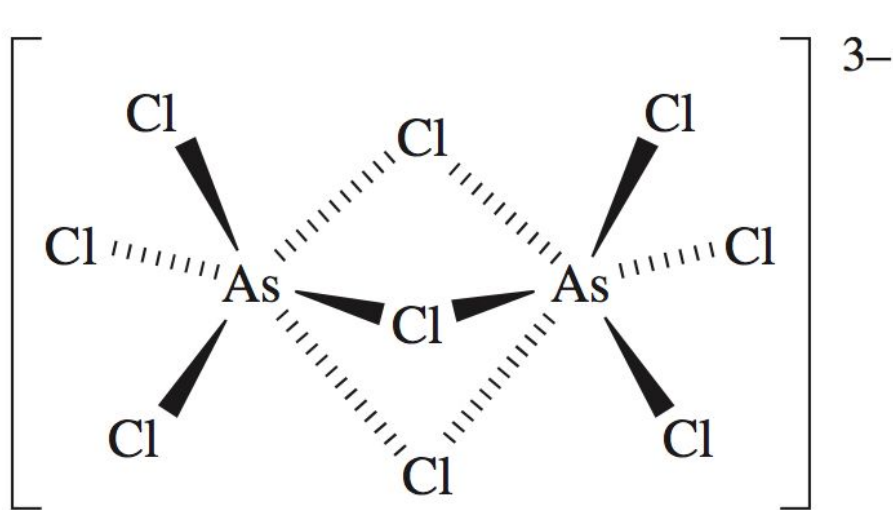
Принцип VSEPR (расширенный)



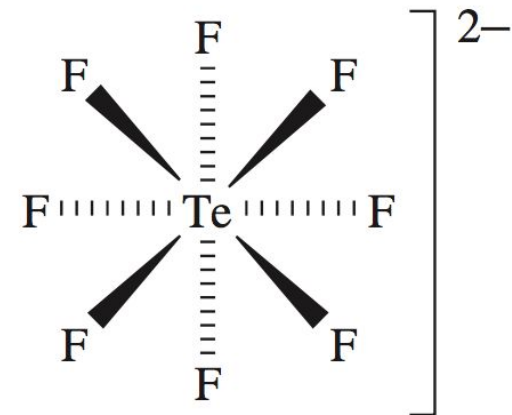
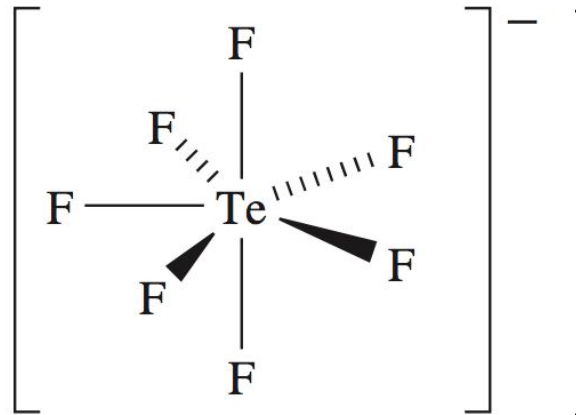
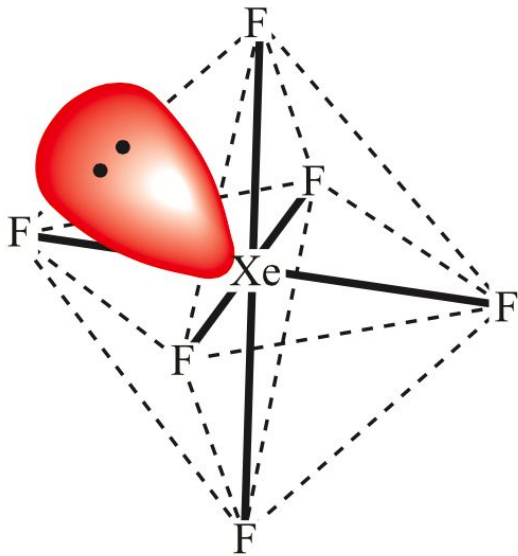
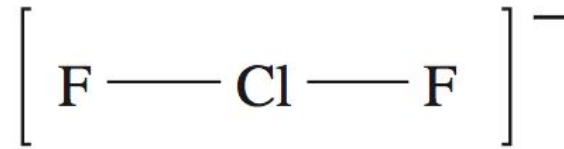
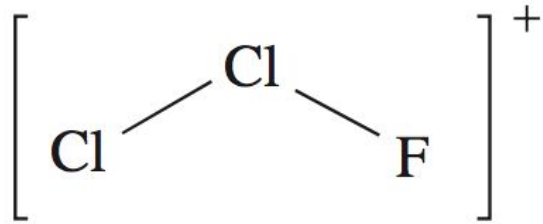
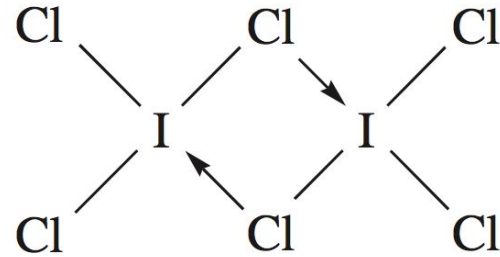
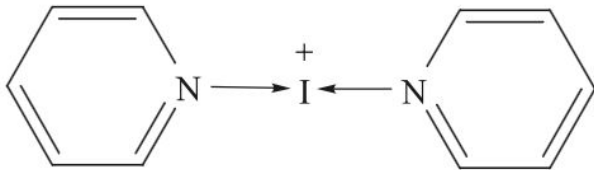
Примеры



Примеры



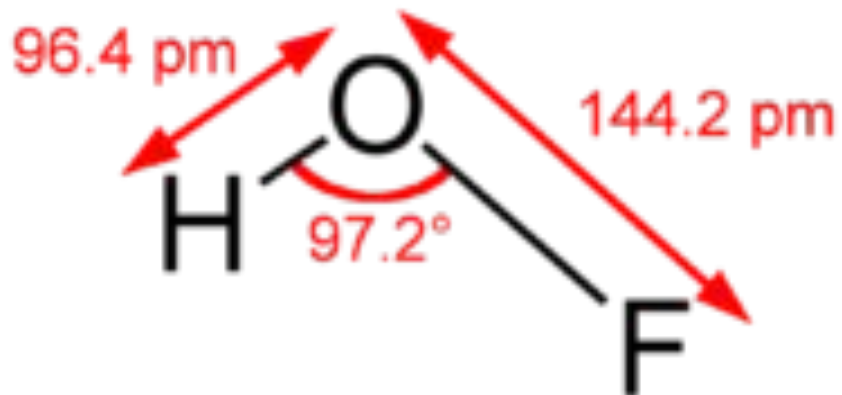
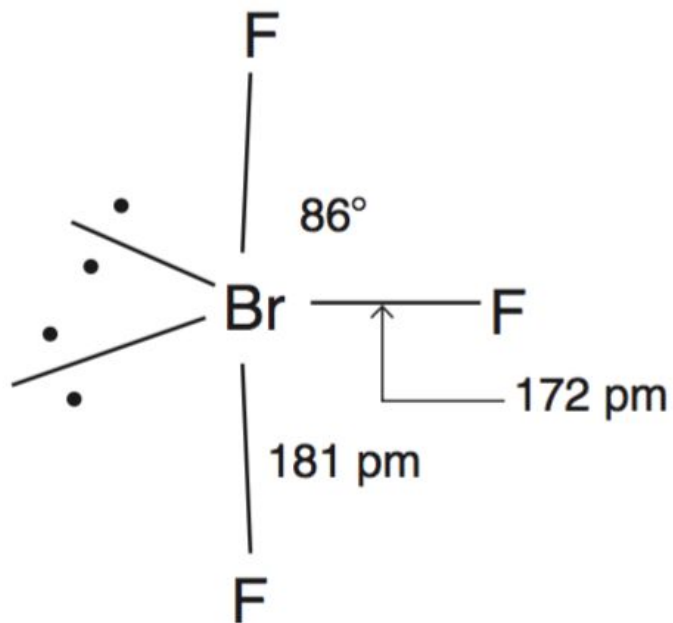
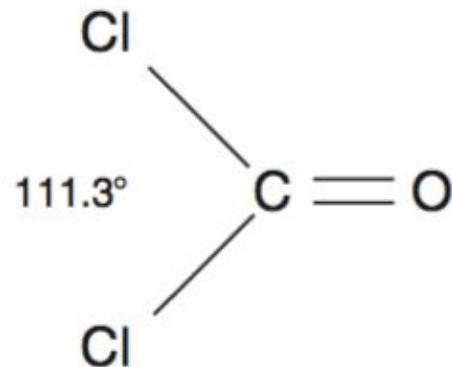
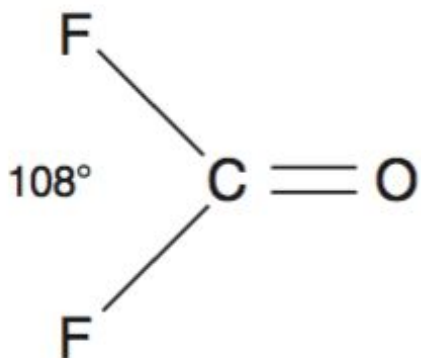
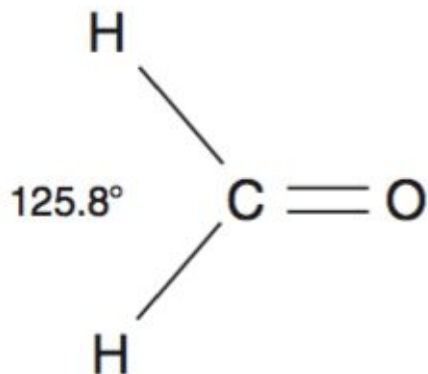
Примеры



Ограничения использования VSEPR

1. Применим только для предсказания строения p-элементов
2. Наблюдаются отклонения от правила из-за наличия стереохимически инертной s-пары у тяжёлых элементов с большим количеством электронов
3. Не учитывает отклонения от планарности ввиду стерических эффектов
4. Не учитывает специфические взаимодействия между лигандами

Искажения валентных углов



КОНЕЦ

