

Химическая связь

- Атомы объединяются в молекулы при возникновении между ними химических связей.
- Образование химического соединения (молекулы, сложного иона и др.) происходит потому, что оно более энергетически устойчиво, чем состояние отдельных атомов.
- Природа химической связи объясняется взаимодействием электрических полей, электронов и ядер атомов, участвующих в образовании химического соединения.

- В зависимости от характера распределения электронной плотности между взаимодействующими атомами различают три основных типа химической связи:

**ковалентную,
ионную,
металлическую**

Ковалентная связь

- **Ковалентная связь** – связь, образованная **общими электронными парами атомов**.
- Для описания химических связей в любых молекулах в настоящее время наибольшее распространение получили полуэмпирические методы:
- **метод валентных связей (ВС)**
- **метод молекулярных орбиталей (МО)**.
- В основе этих методов лежат представления квантовой механики.

Метод валентных связей (ВС)

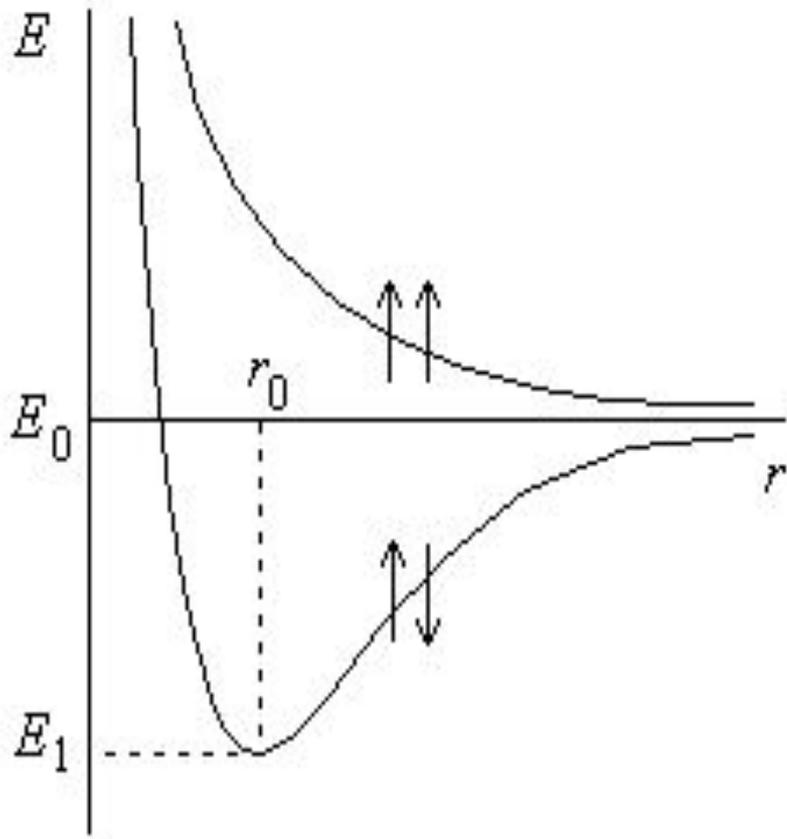
- В 1916 г. американский ученый Льюис высказал предположение о том, что химическая связь образуется за счет обобществления двух электронов. При этом электронная оболочка атома стремится приобрести электронную конфигурацию благородного газа.
- Эти предположения послужили основой для развития метода валентных связей. В 1927 г. Гайтлером и Лондоном был выполнен теоретический расчет энергии двух атомов водорода в зависимости от расстояния между ними.

Результаты расчета зависят от того, одинаковы или противоположны по знаку спины взаимодействующих электронов.

При совпадающем направлении спинов сближение атомов приводит к непрерывному возрастанию энергии системы.

При противоположно направленных спинах на энергетической кривой имеется минимум, т. е. образуется устойчивая система – молекула водорода H_2 .

Зависимость энергии от расстояния между атомами водорода при одинаково и противоположно направленных спинах:



r_0 соответствует минимуму межъядерного расстояния и называется длиной связи, а энергия связи равна глубине потенциальной ямы $E_0 - E_1$, где E_0 – энергия двух невзаимодействующих атомов, находящихся на бесконечном расстоянии друг от друга.

- Образование химической связи между атомами водорода является результатом взаимопроникновения (перекрывания) электронных облаков. Вследствие этого перекрывания плотность отрицательного заряда в межъядерном пространстве возрастает, и положительно заряженные ядра притягиваются к этой области. Такая химическая связь называется **ковалентной**.

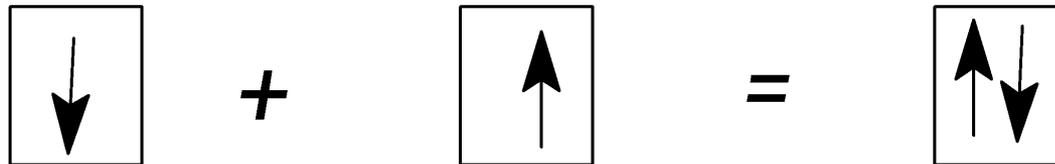
Основные положения метода ВС

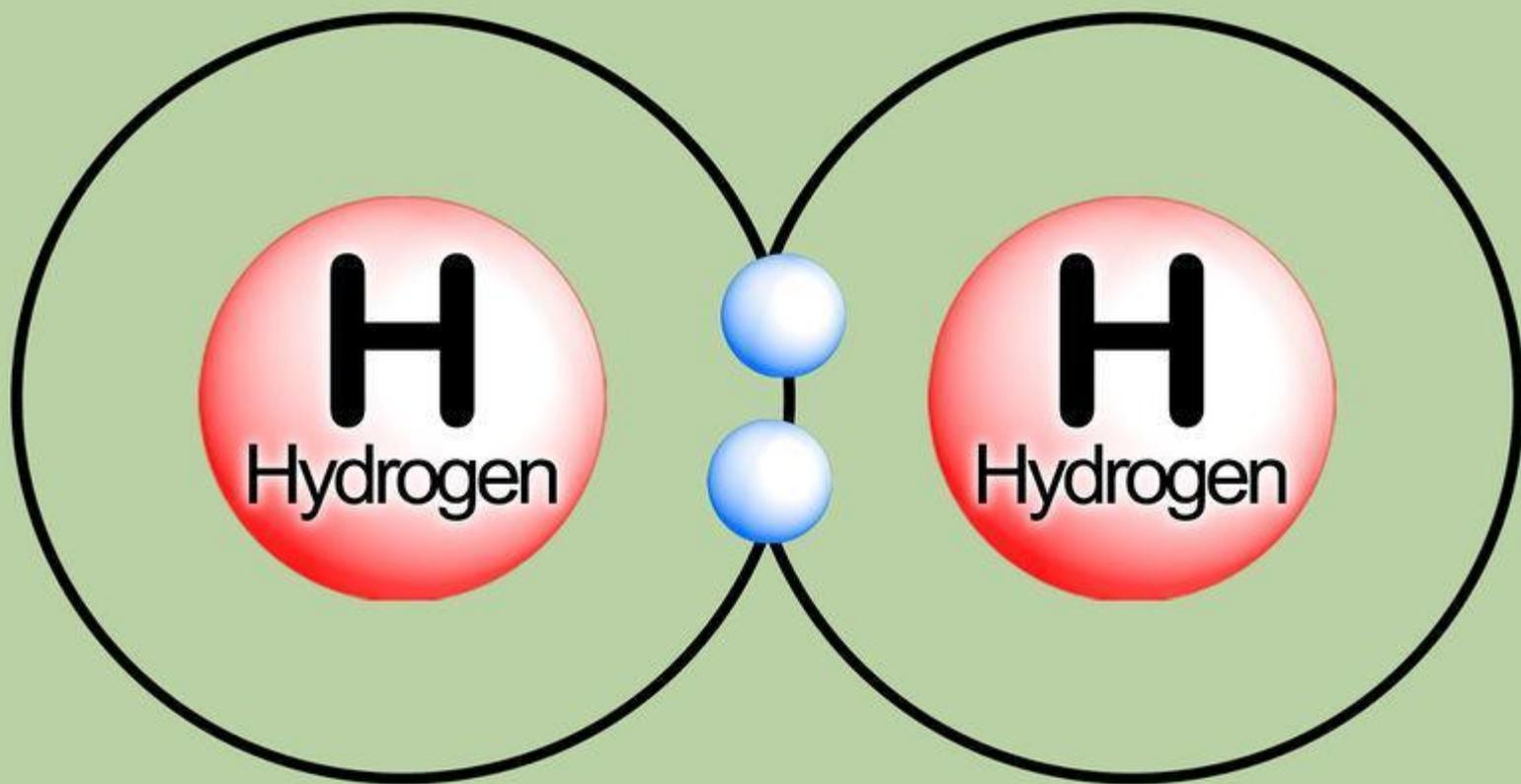
- 1. Ковалентная связь образуется между двумя атомами за счет взаимодействия электронных орбиталей с **антипараллельными** спинами электронов.
- 2. **Связь располагается** в направлении, обеспечивающем наибольшую степень **перекрывания** электронных орбиталей.
- 3. Ковалентная связь тем **прочнее**, чем более полно перекрываются электронные орбитали.

- Различают следующие механизмы образования ковалентной связи:
- **обменный (спин-валентный);**
- **донорно-акцепторный;**
- **дативный.**

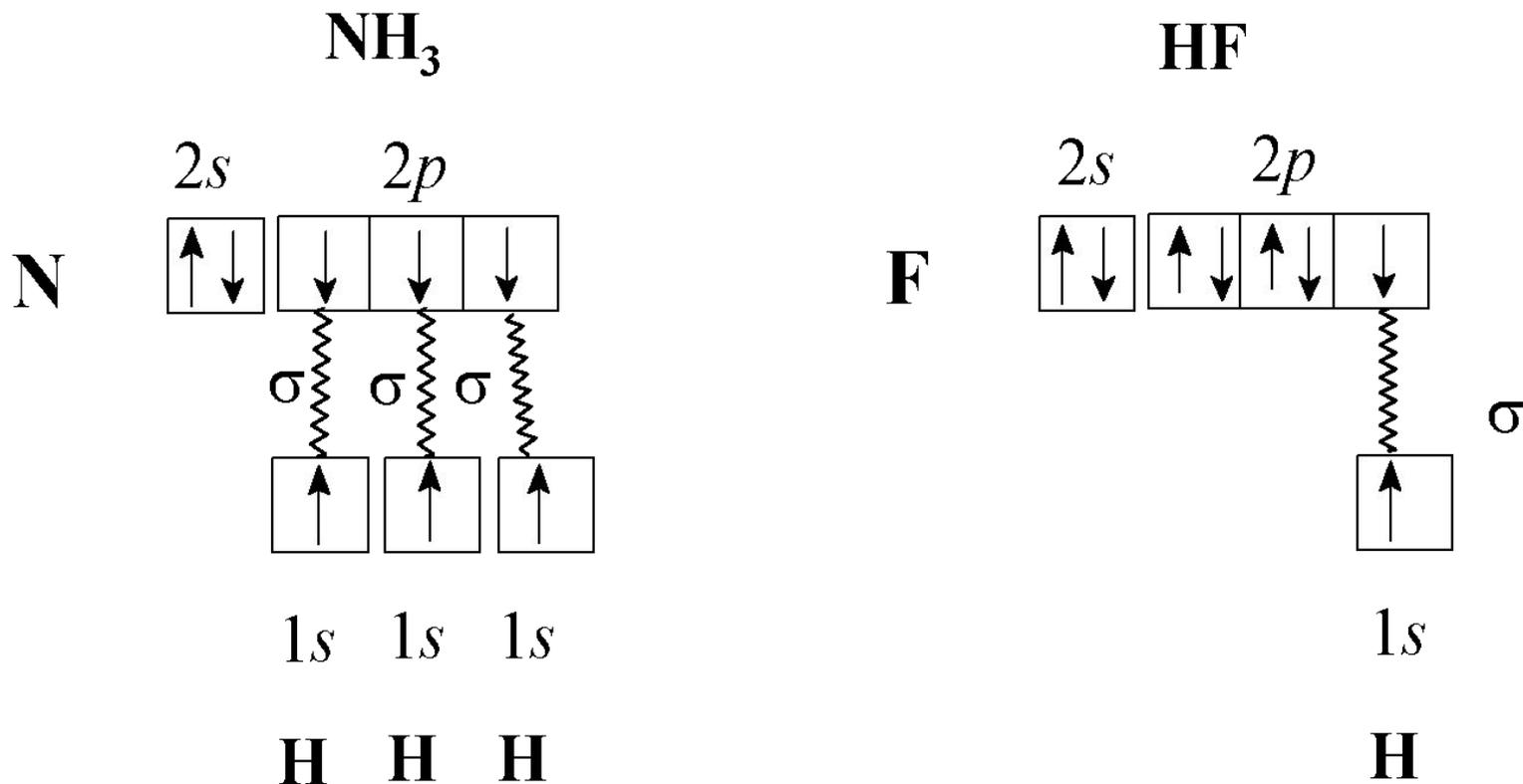
Обменный (спин-валентный) механизм

- механизм, по которому каждый из связываемых атомов предоставляет для ее образования **по одному неспаренному электрону**. Его можно выразить следующей схемой:





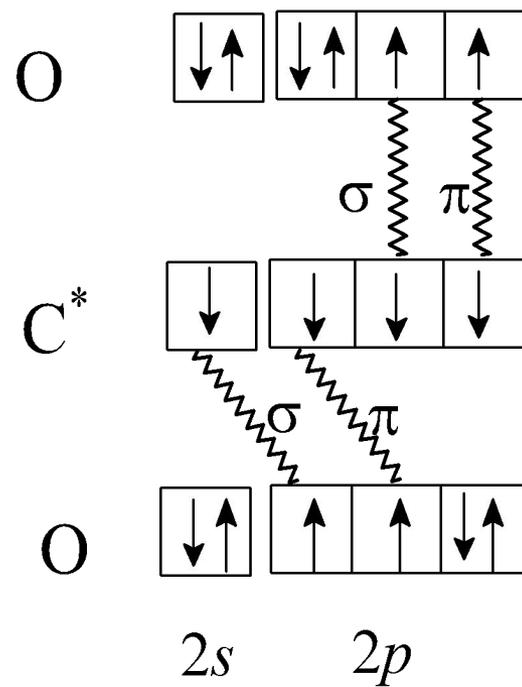
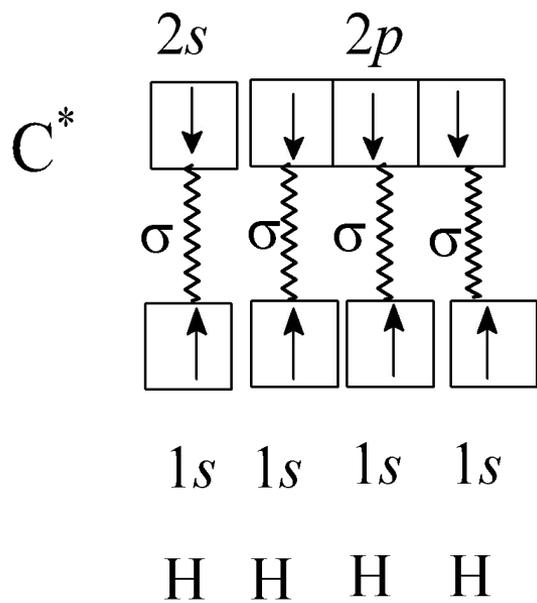
Примеры образования связей по обменному механизму



- у атома углерода только два неспаренных электрона, и он может образовать только две ковалентные связи по обменному механизму. Если атом углерода возбудить, т. е. сообщить ему некоторую дополнительную энергию, то один из $2s$ -электронов может перейти на свободную $2p$ -орбиталь:



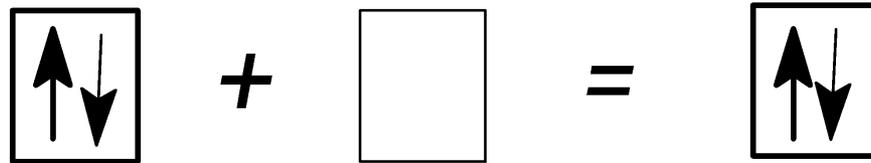
- В этом состоянии углерод может образовать четыре ковалентные связи, например, с атомами водорода или кислорода.



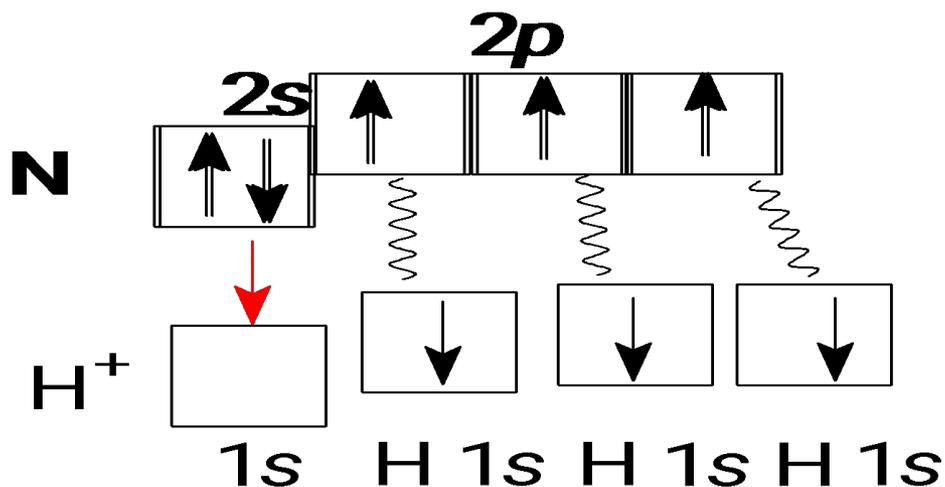
Донорно-акцепторный механизм

- Химическая связь образуется за счет предоставления одним атомом в общее пользование пары электронов, а **другим – свободной орбитали**.
- Атом, предоставляющий электронную пару, называется **донором**, а атом, имеющий свободную орбиталь, – **акцептором**.

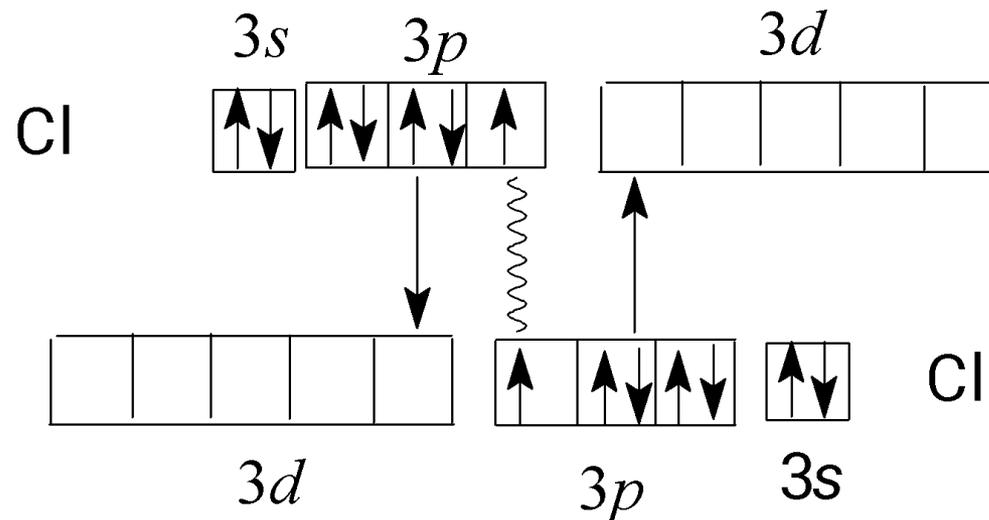
- Схема образования связи в этом случае выглядит так:



- Например, молекула аммиака за счет электронной пары азота может образовать четвертую связь с элементом, имеющим вакантную орбиталь: $\text{NH}_3 + \text{H}^+ = \text{NH}_4^+$



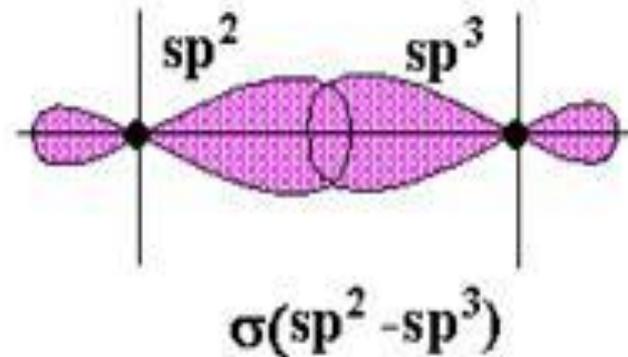
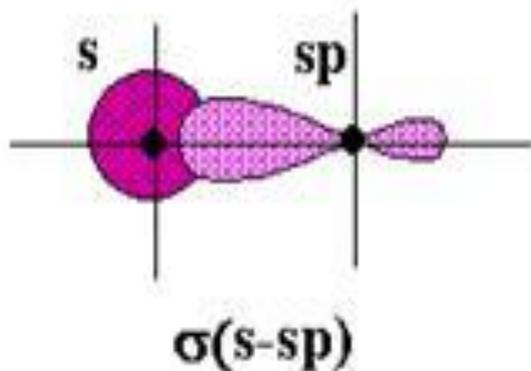
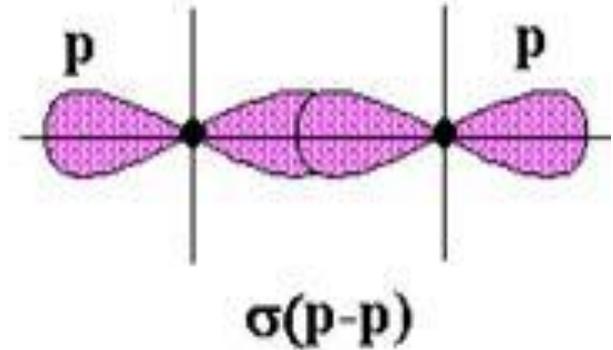
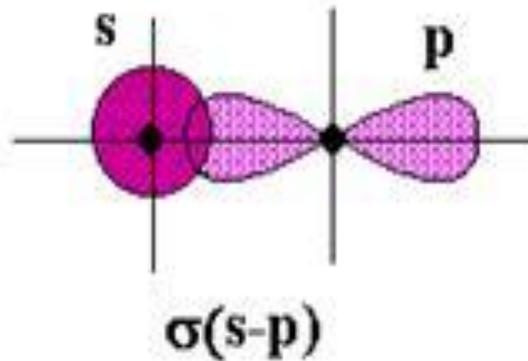
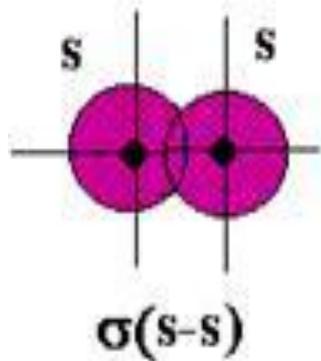
- В случае **дативной связи** оба атома либо обе частицы одновременно выступают в роли и донора, и акцептора электронов.



- Электронные облака атомов имеют различную форму, их **взаимное перекрывание** может осуществляться разными способами.
- В зависимости от **способа перекрывания** и **симметрии** образующегося облака различают **σ - (сигма) и π - (пи) связи.**

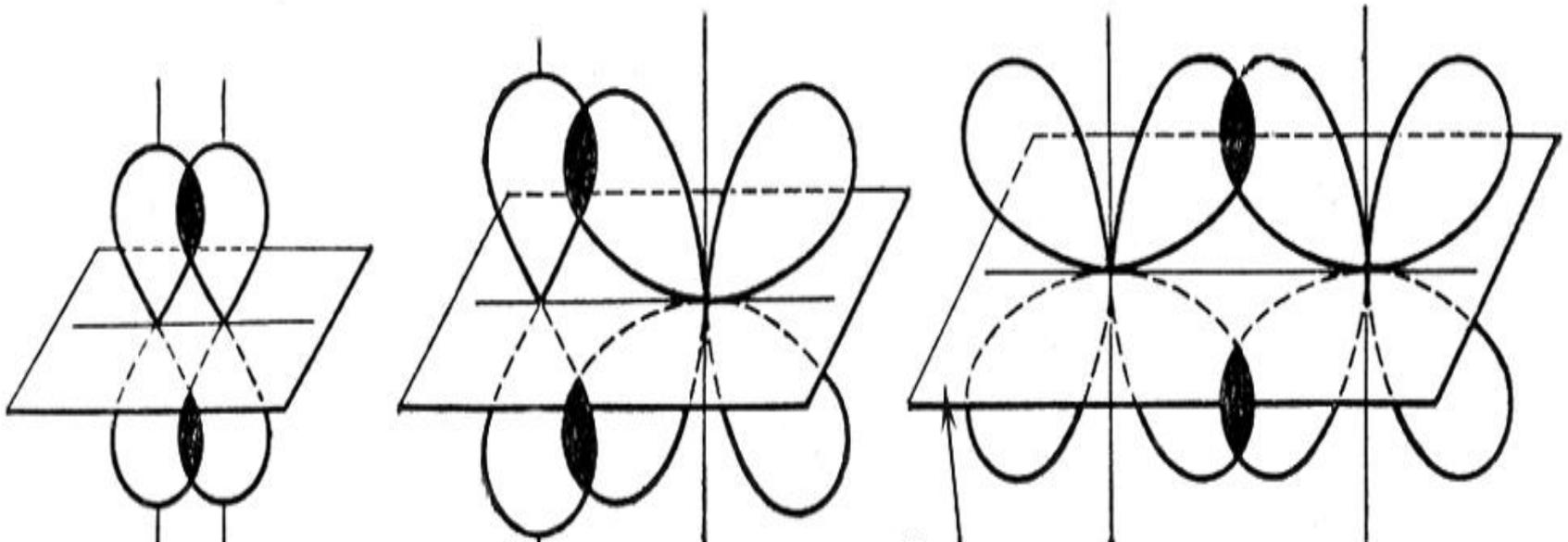
σ- СВЯЗИ

образуются при перекрывании облаков по линии, соединяющей ядра атомов:



π- СВЯЗИ

образуются при перекрывании электронных облаков по обе стороны от линии, соединяющей ядра атомов:



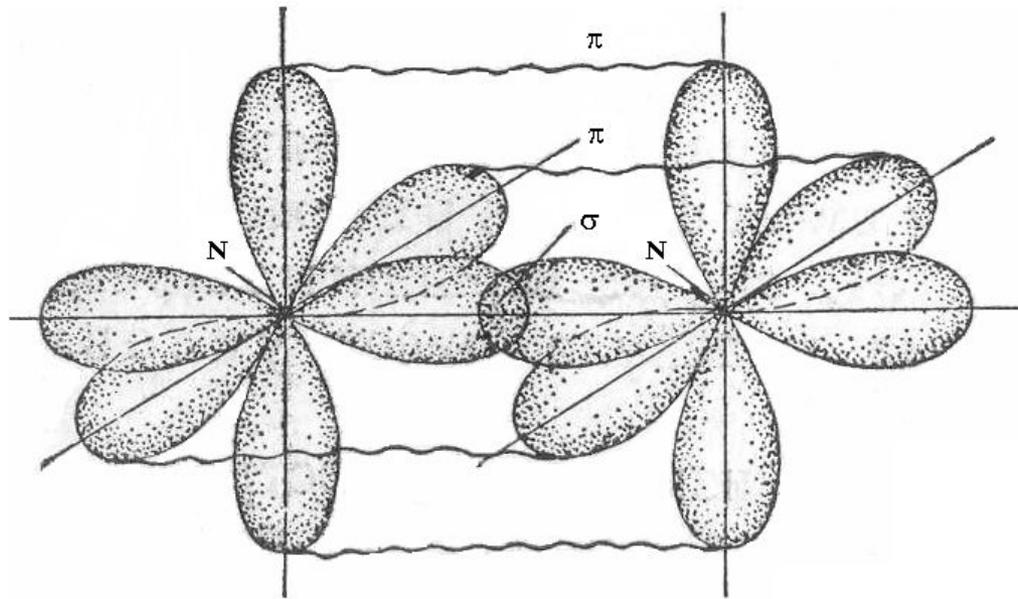
Основные характеристики σ - и π -связей

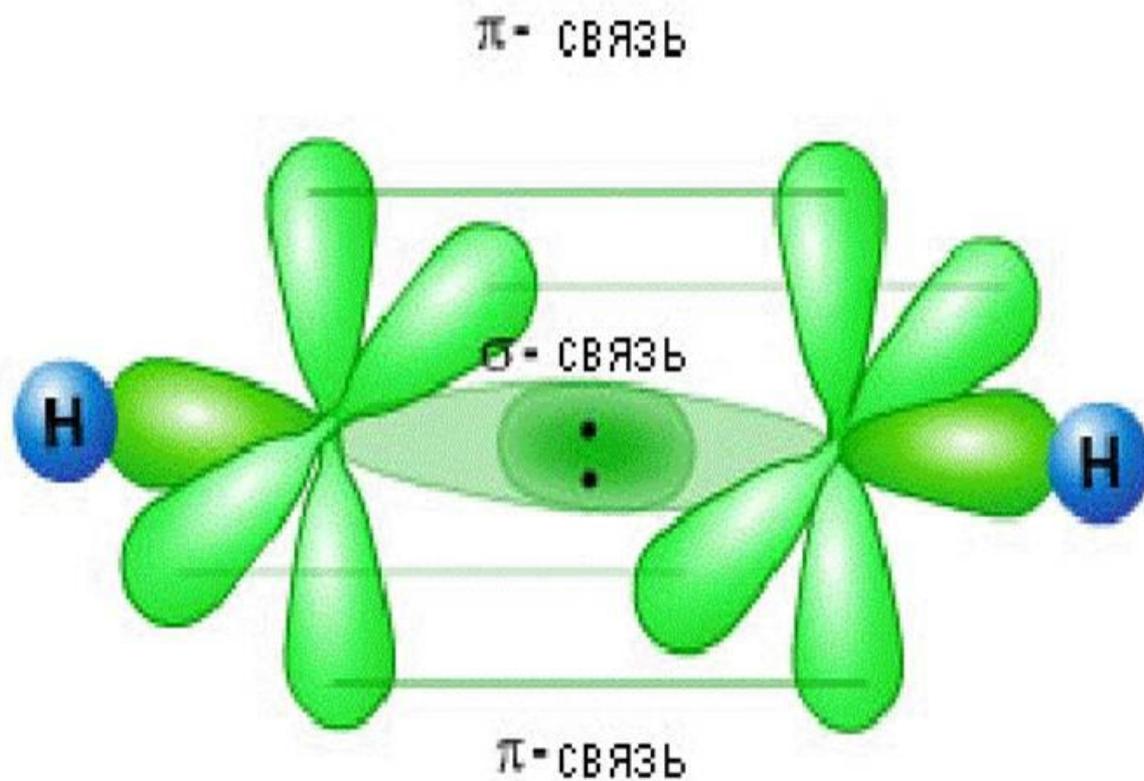
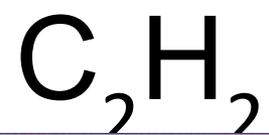
σ -СВЯЗЬ	π -СВЯЗЬ
Одна область перекрывания	Две области перекрывания
Электронные облака перекрываются частями с наибольшей электронной плотностью	Электронные облака перекрываются своими периферийными частями
Связь более прочная	Связь менее прочная
(есть исключения)	

- Химическая связь характеризуется следующими параметрами:
 - 1) **длиной связи** – межъядерным расстоянием между двумя химически связанными атомами;
 - 2) **валентным углом** – углом между воображаемыми линиями, проходящими через центры химически связанных атомов;
 - 3) **энергией связи** – количеством энергии, затрачиваемой на ее разрыв в газообразном состоянии;
 - 4) **кратностью связи** – числом электронных пар, посредством которых осуществляется химическая связь между атомами.

- П-связь возможна только в случае образования кратных связей (двойных и тройных).
- ***Кратные связи короче и прочнее*** одинарных.

Схема связей в молекуле N_2





Свойства ковалентной связи

- Ковалентная связь обладает:
- насыщаемостью,
- направленностью,
- поляризуемостью.

Поляризуемость

- Если электронная пара, связывающая в молекуле два одинаковых атома, в равной мере принадлежит обоим атомам, в молекуле нет разделения центров тяжести положительного и отрицательного зарядов. Такая связь называется **ковалентной неполярной**.

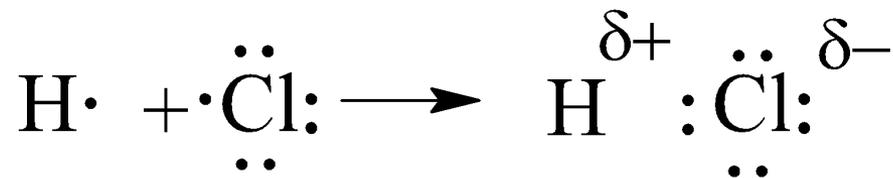
- Для наглядного изображения ковалентной связи в химических формулах используются **точки** (точка соответствует электрону, две точки между элементами – электронной паре), а также **черточки** (чертой обозначают общую электронную пару).
- Например, молекула хлора :



Ковалентная неполярная связь существует в молекулах одноэлементных газов: H_2 , O_2 , N_2 , Cl_2 ...

- Если электронная пара связывает два атома с различной электроотрицательностью, то она смещается в сторону более электроотрицательного атома.
- Элементы с большей электроотрицательностью будут оттягивать общие электроны от элементов с меньшей электроотрицательностью. Центры тяжести положительного и отрицательного зарядов разделяются, связь становится полярной и называется **ковалентной полярной связью (к.п.с.)**.

- К.п.с. существует в молекулах HCl, H₂O, NF₃, CO₂ и др.
- За счет смещения электронов от водорода к хлору в молекуле HCl атом хлора заряжается частично отрицательно (δ^-), водорода – частично положительно (δ^+):



- Мерой полярности связи является **электрический момент диполя (ЭМД)** μ , представляющий собой произведение длины диполя l на абсолютный эффективный заряд δ :

$$\mu = \delta \cdot l$$

ЭМД обычно выражают в Кл · м. Это векторная величина, направленная от положительного полюса диполя к отрицательному. В многоатомных молекулах суммарный ЭМД равен векторной сумме ЭМД отдельных связей и зависит от строения молекулы.

Электрический момент диполя в Кл · м имеет значения порядка 10^{-29} , поскольку длина диполя имеет значение порядка диаметра атома ($\sim 10^{-10}$ м), а заряд электрона $1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл.

В качестве единицы измерения используют также внесистемную единицу измерения дебай (D), **$1 \text{ D} = 3,3 \cdot 10^{-30} \text{ Кл} \cdot \text{м}$** . В справочной литературе дипольные моменты молекул приводят в дебаях. Большинство полярных молекул имеют дипольный момент порядка 1 дебая.

ЭМД химической связи в молекулах

Связь	Разность ЭО	μ , D
H-F	1,78	1,83
H-Cl	0,96	1,11
H-Br	0,76	0,83
H-I	0,46	0,45

- Химическая связь в большинстве соединений сочетает свойства ковалентной и ионной связи. Степень ионности характеризуется эффективным зарядом атомов, определяемым экспериментально.
- В молекуле **HCl** эффективный заряд на атоме **водорода** составляет **+0,18**, а на атоме **хлора** **-0,18** абсолютного заряда электрона. Связь в молекуле HCl имеет на 18% ионный характер и на 82% – ковалентный.

Насыщаемость

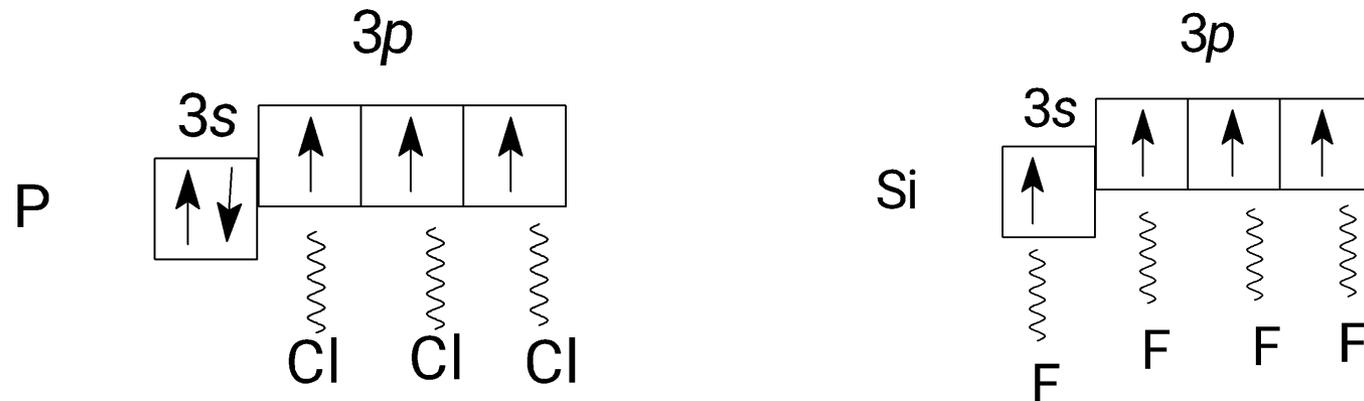
- **Насыщаемость** ковалентной связи обусловлена ограниченными валентными возможностями атомов, т. е. их способностью к образованию строго определенного числа связей. **Общее число валентных орбиталей** в атоме определяет **максимально возможную валентность** элемента.
- Число **использованных** для этого орбиталей определяет **валентность** элемента в **данном соединении**.

1-й период - макс. валентность = 1

2-й период - макс. валентность = 4, т.к.
валентные 4 АО (2s- и три 2p)

3-й период - валентные 9 АО (3s, три 3p и пять
3d), но макс. валентность практически не
реализуется

- Например, в соединении PCl_3 фосфор трехвалентен, в соединении SiF_4 кремний имеет валентность четыре:

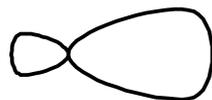


- В HNO_3 валентность азота = 4

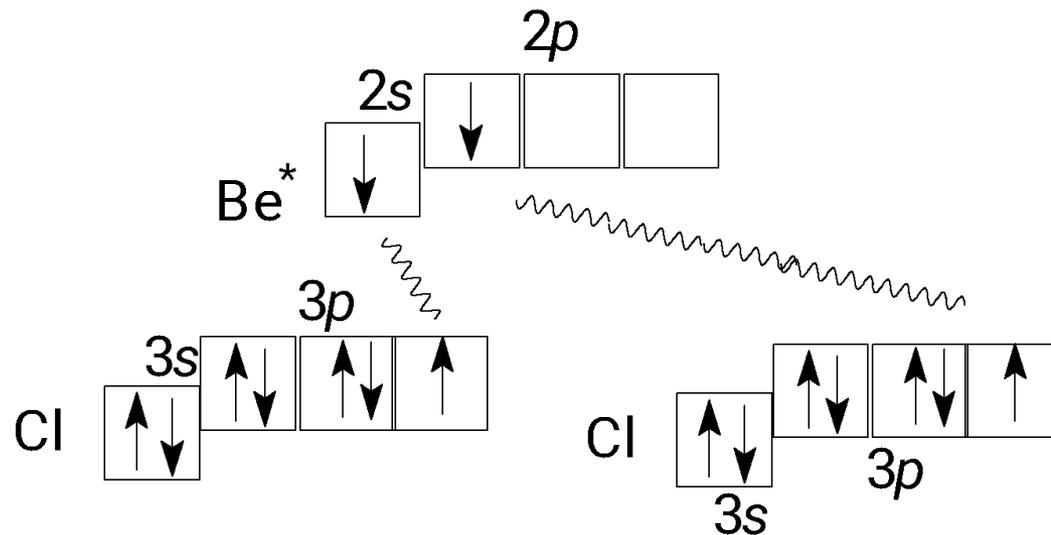
Направленность

- **Направленность** ковалентной связи обуславливается тем, что электронные облака атомов имеют определенное конфигурацию – расположение в пространстве. Часто в образовании связи участвуют *орбитали разных конфигураций*. Для объяснения того, как неравноценные по исходному состоянию орбитали образуют равноценные химические связи используются представления о *гибридизации валентных орбиталей*.

- Гибридизация сопровождается изменением формы и энергии электронных облаков, которое происходит при поглощении энергии и сопровождается образованием одинаковых по форме и энергии гибридных облаков (орбиталей). Незначительные затраты энергии при таких изменениях окупаются при образовании равноценных связей.
- Гибридные орбитали изображают в виде неправильной сильно смещенной в одну сторону гантели

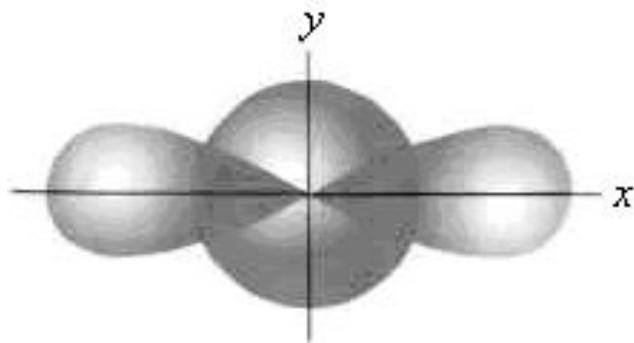


- Образование BeCl_2 с учетом электронного строения атомов бериллия и хлора выражается следующей схемой:

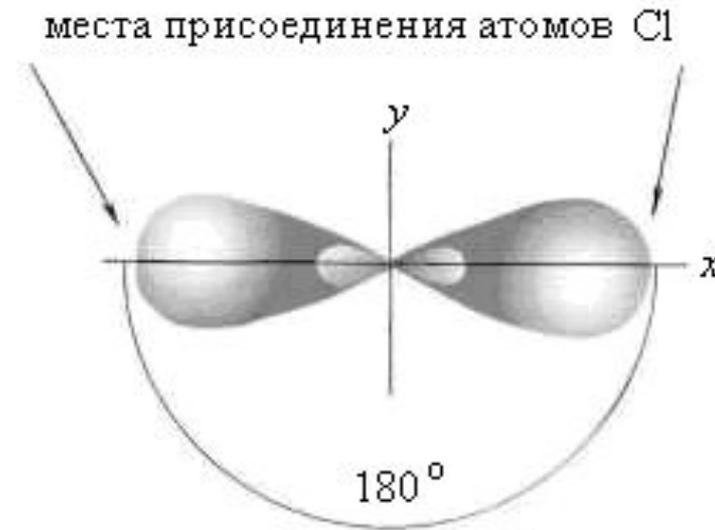


- Для объяснения равноценности связей Be–Cl, используют концепцию о *sp-гибридизации* валентных атомных орбиталей бериллия. При гибридации одна *s*-орбиталь и одна *p*-орбиталь атома бериллия как бы смешиваются и выравниваются по форме и энергии, давая две одинаковые *sp*-гибридные орбитали.

sp-гибридизация



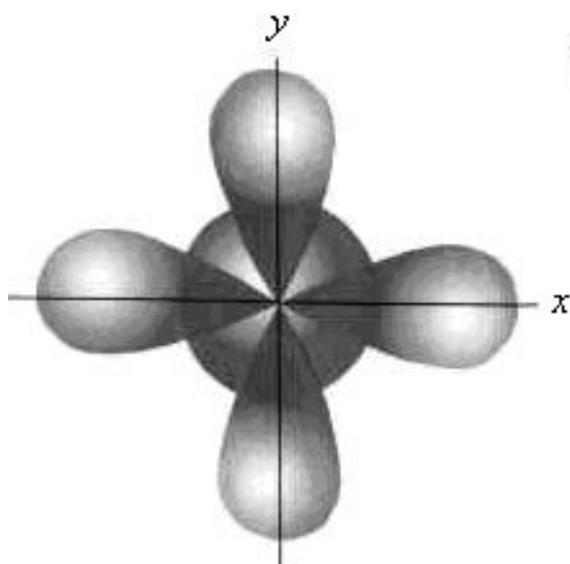
$(s + p_x)$ -орбитали



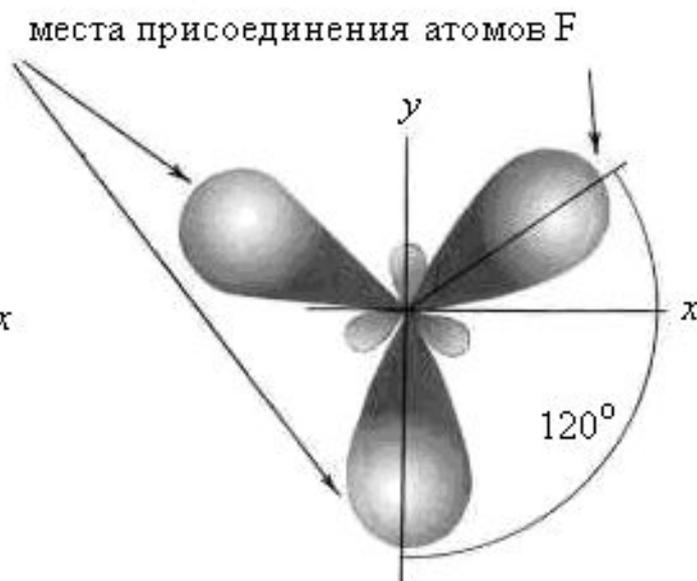
две sp -гибридные орбитали

Линейную форму имеют и все другие молекулы с sp -гибридизацией атомных орбиталей

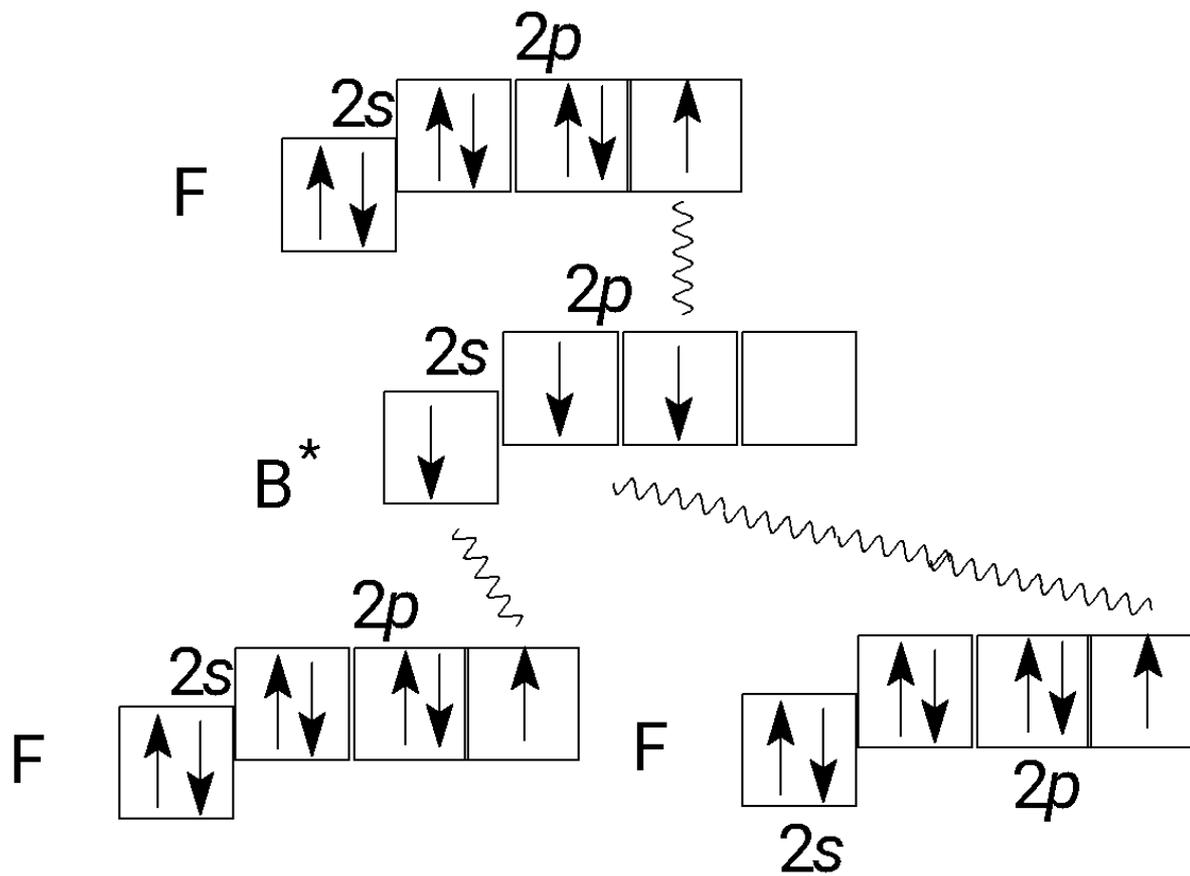
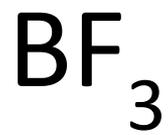
- sp^2 -гибридизация дают плоскостную геометрию молекулы: BF_3



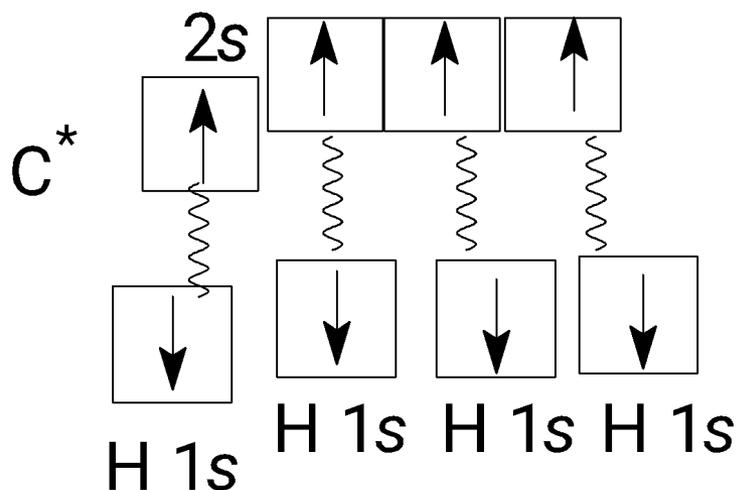
$(s + p_x + p_y)$ -орбитали атома бора в возбужденном состоянии

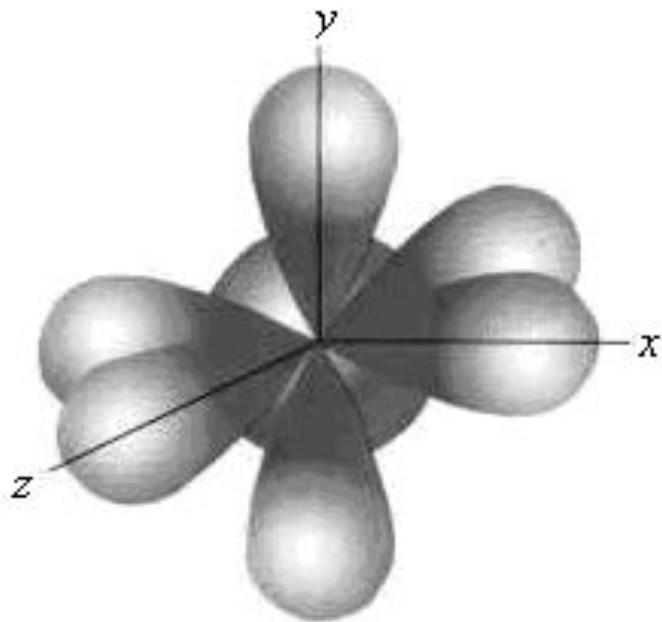


три sp^2 -гибридные орбитали молекулы BF_3

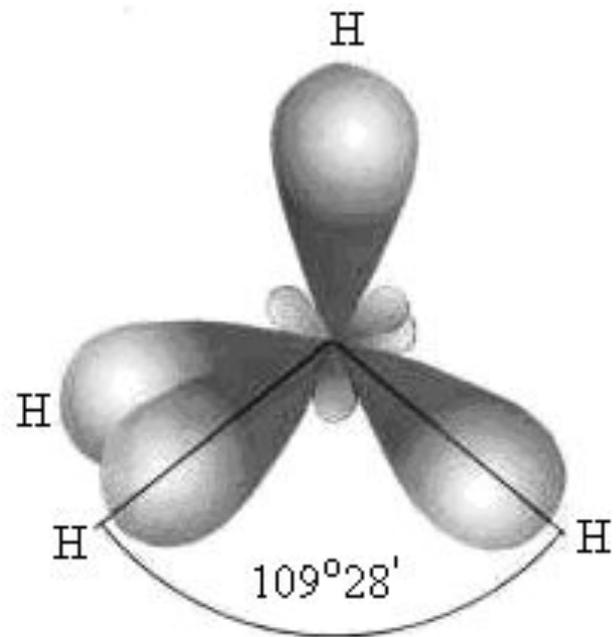


- Когда смешиваются одна s - и три p -орбитали, возникают sp^3 -гибридизованные орбитали, имеющие геометрию тетраэдра (CH_4):



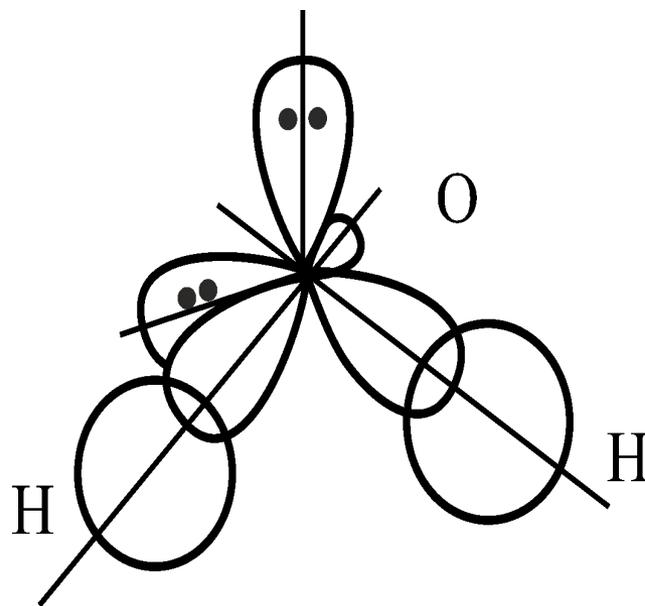
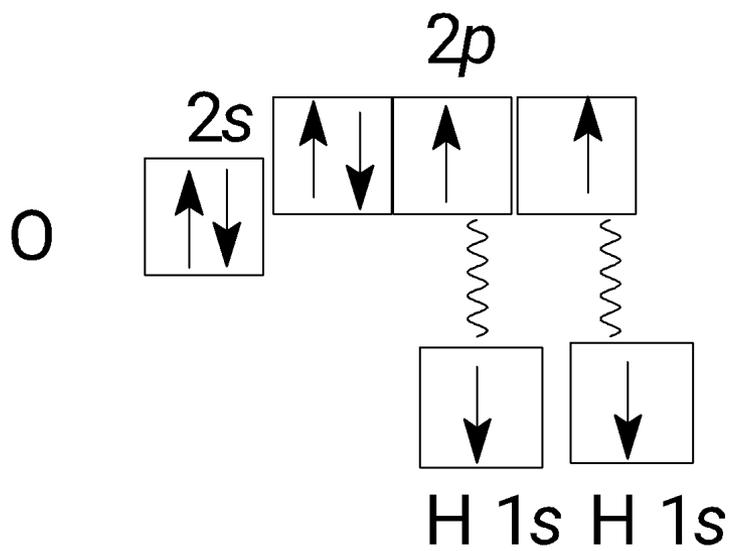
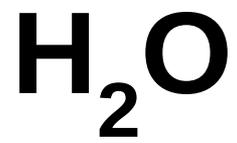


$(s + p_x + p_y + p_z)$ -орбитали
атома углерода в возбужденном
состоянии



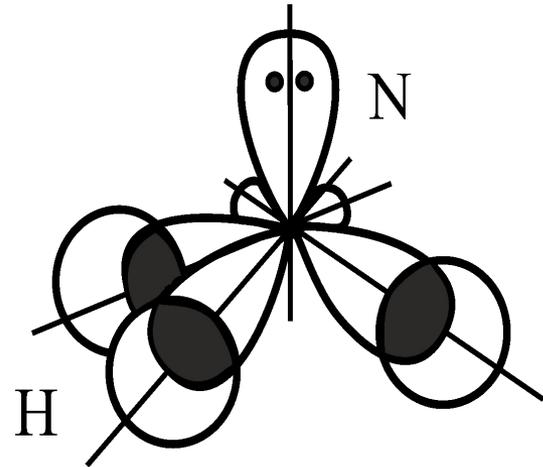
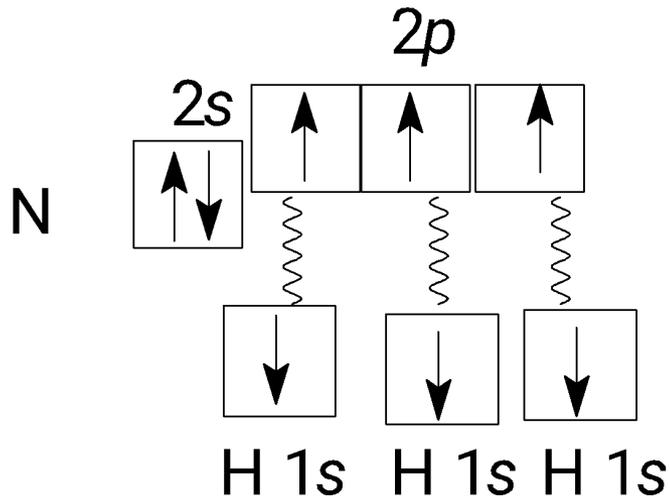
четыре sp^3 -гибридные
орбитали молекулы CH₄

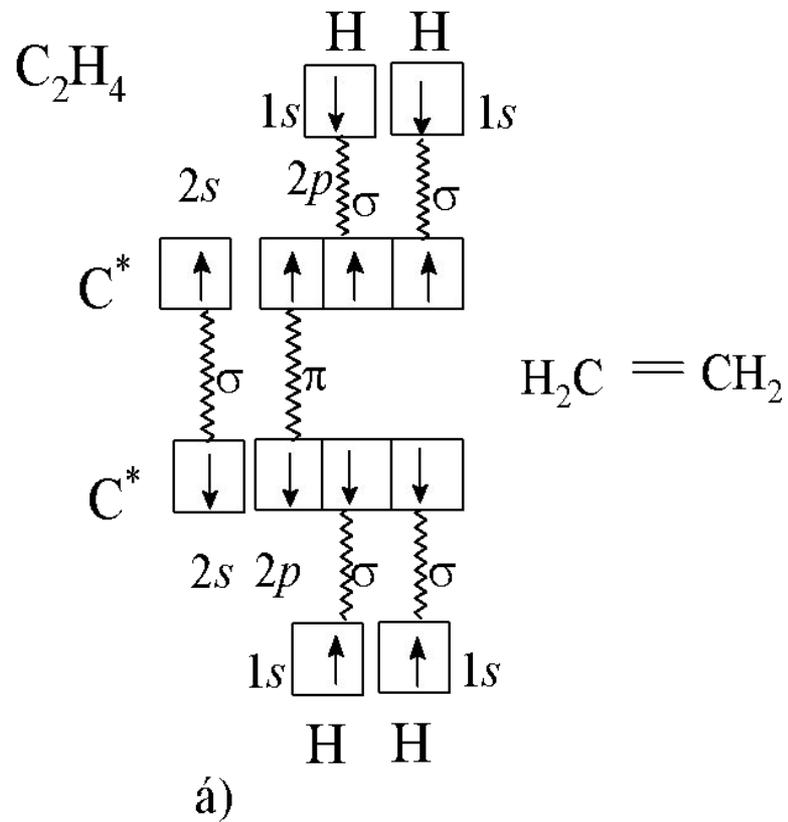
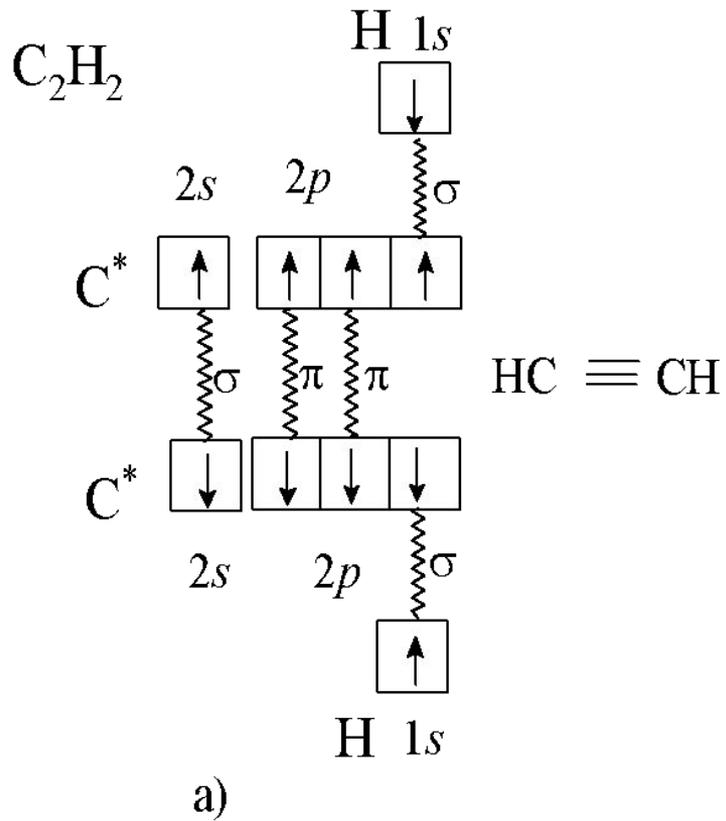
- Гибридизации могут подвергаться как орбитали с неспаренными электронами, так и орбитали, на которых находятся неподеленные электронные пары.
- Например, в молекуле воды H_2O кислород находится в состоянии sp^3 -гибридизации:





- В молекуле аммиака (NH₃) атом азота также находится в sp^3 -гибридном состоянии



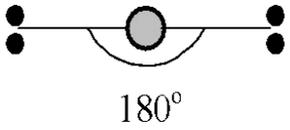


Обобщением метода ВС для предсказания геометрии молекул является **метод Гиллеспи**.

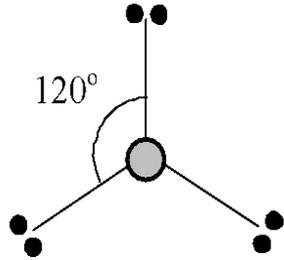
Основные положения метода Гиллеспи:

- 1. Все электроны, образующие химические связи атомов, считаются равноценными независимо от их типа (s, p, d, f).
- 2. Атомный остов, содержащий ядро и внутренние электронные оболочки, не оказывает влияние на расположение валентных электронов.
- 3. Электронные пары располагаются в пространстве таким образом, чтобы отталкивание между ними было минимальным: две электронные пары располагаются линейно, три образуют правильный треугольник, четыре располагаются тетраэдрически, пять направлены к вершинам тригональной бипирамиды, шесть – к вершинам октаэдра

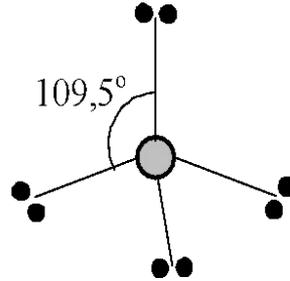
$sp-$



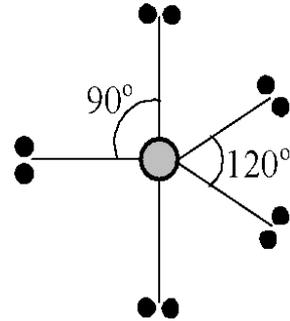
sp^2-



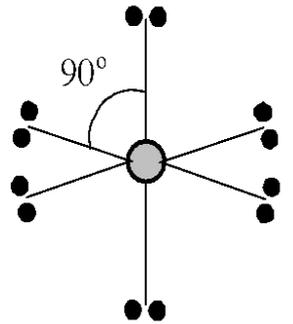
sp^3-



$sp^3 d-$



$sp^3 d^2-$



- 4. Строение молекулы определяется расположением в пространстве связывающих электронных пар.
- 5. Орбиталь кратной связи считается единичной, независимо от того, содержит она одну или две π - связи. В то же время электронные пары двойной и тройной связи занимают в пространстве несколько больше места, чем электронная пара одинарной связи.
- 6. Неподеленная электронная пара в пространстве занимает больше места, чем связывающая электронная пара.

При рассмотрении геометрической формы молекулы методом Гиллеспи ее формула записывается в виде $A\overset{\overset{X}{|}}{\underset{\underset{X}{|}}{A}}\overset{\overset{E}{|}}{\underset{\underset{E}{|}}{A}}$,

A – центральный атом;

X – атом, с которым центральный атом образует химическую связь, то есть дает связывающие электронные пары, **n** – число атомов X ;

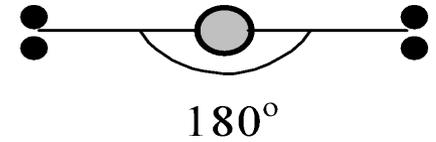
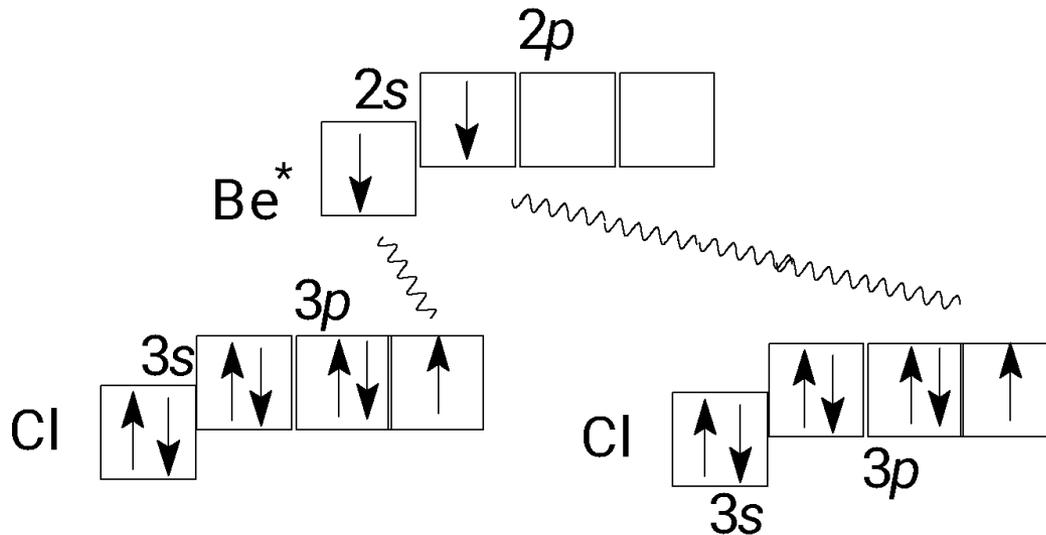
E – неподеленная электронная пара; **m** – число неподеленных электронных пар.

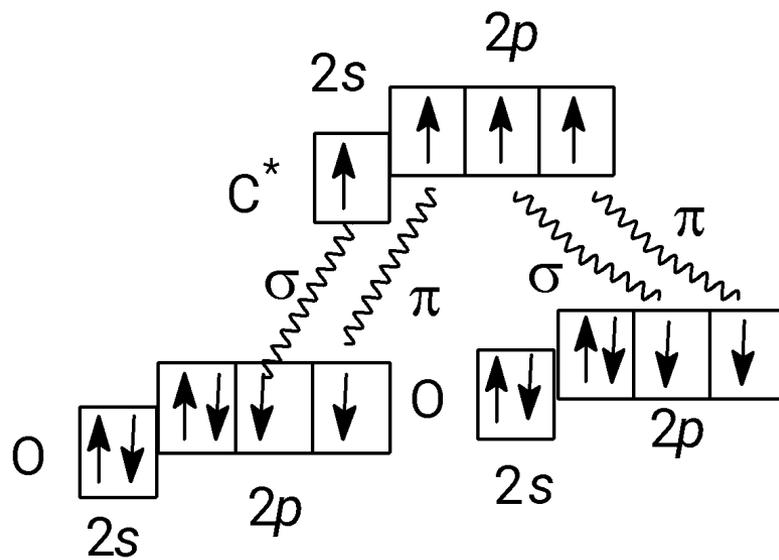
- Число неподеленных электронных пар m определяют следующим образом: число валентных электронов центрального атома минус число электронов, участвующих в образовании связей. Полученную разность делят на 2.
- Далее определяется пространственное расположение всех электронных пар (связывающих и неподеленных), затем устанавливается геометрия молекулы.

AX_2E_0

- $Be\Gamma_2, CO_2, N_2O, [Ag(NH_3)_2]^+$

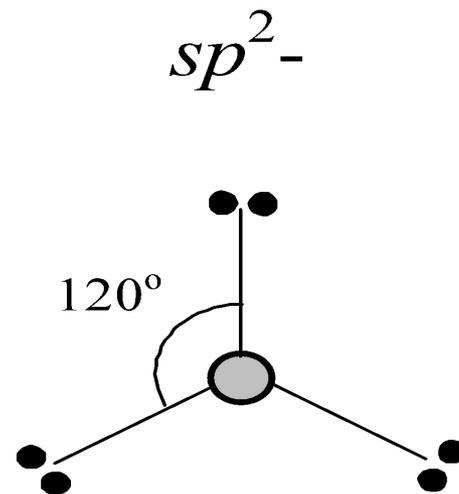
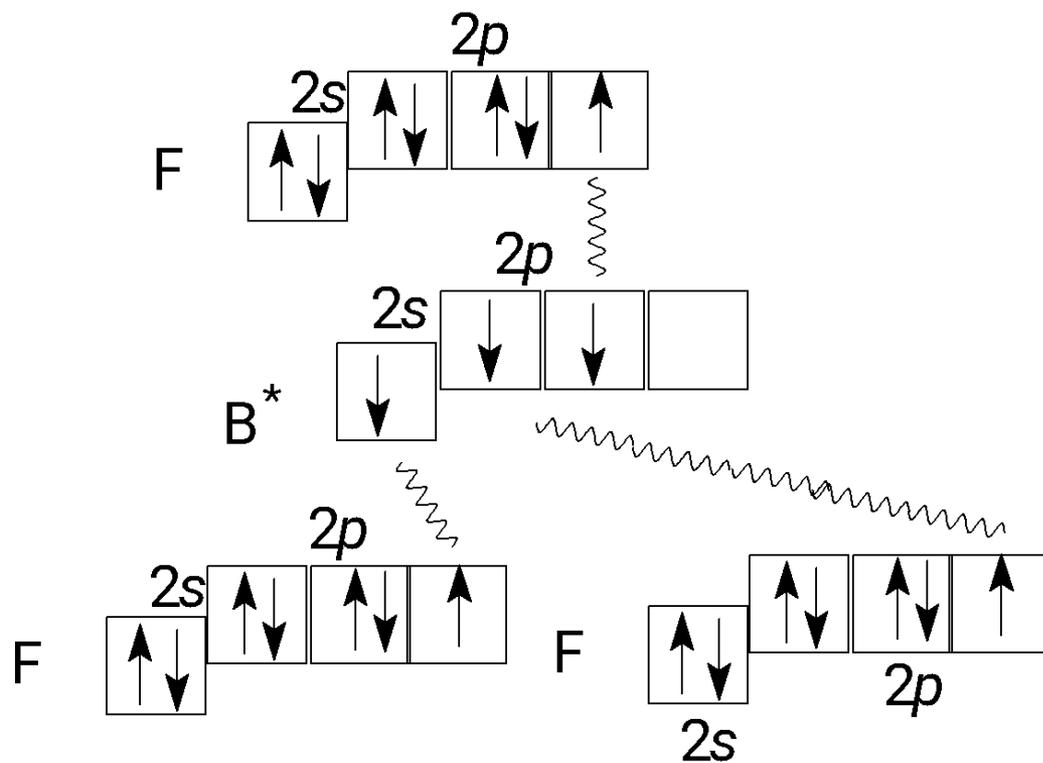
$sp-$





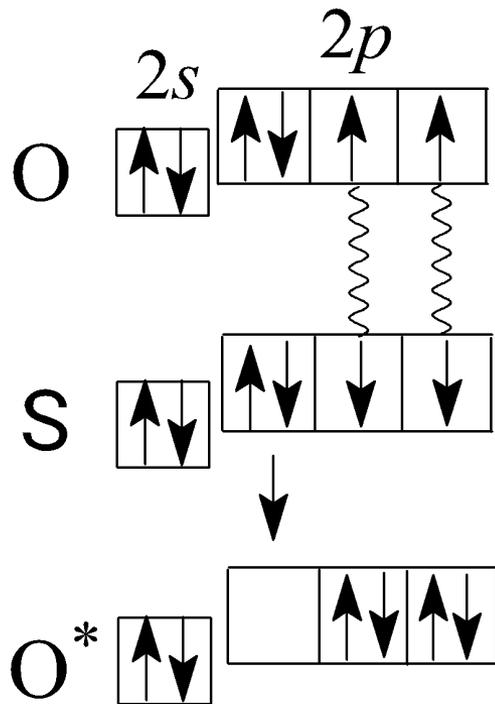


- BF_3 , SO_3 , C_2H_4 , NO_3^- , CO_3^{2-}





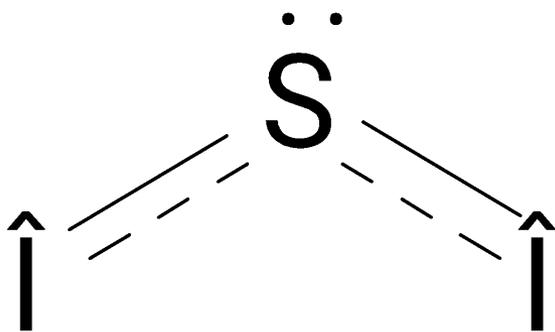
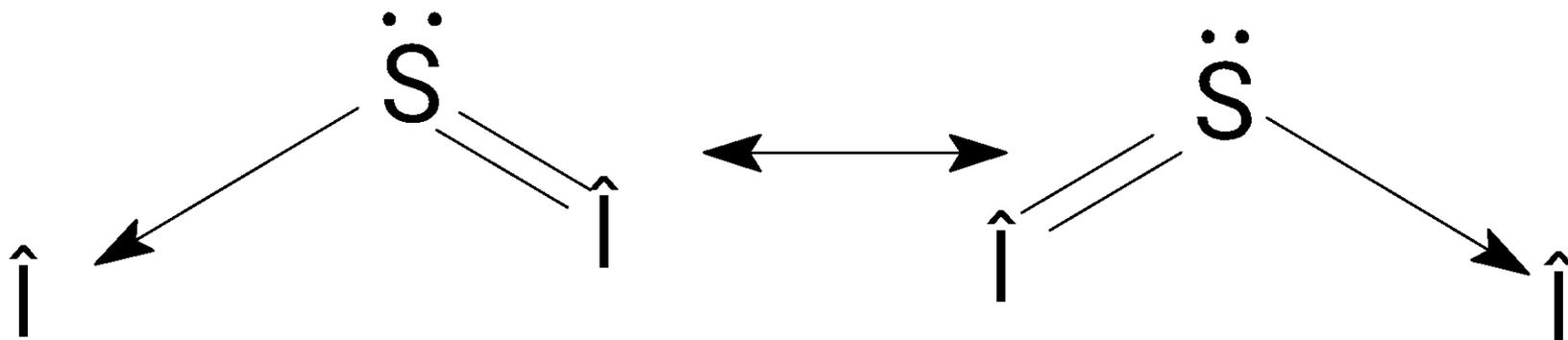
- $SnCl_2$, SO_2 , O_3



sp^2 - hybridization

bent geometry, bond angle $\approx 120^\circ$

- Строение многих молекул нельзя изобразить только одной схемой с локализованной π -связью. В таких случаях строение молекулы может отражаться несколькими структурами с помощью метода ВС, которые по отношению друг к другу являются резонансными.
- Например, молекула SO_2 может быть изображена в виде двух резонансных структур:

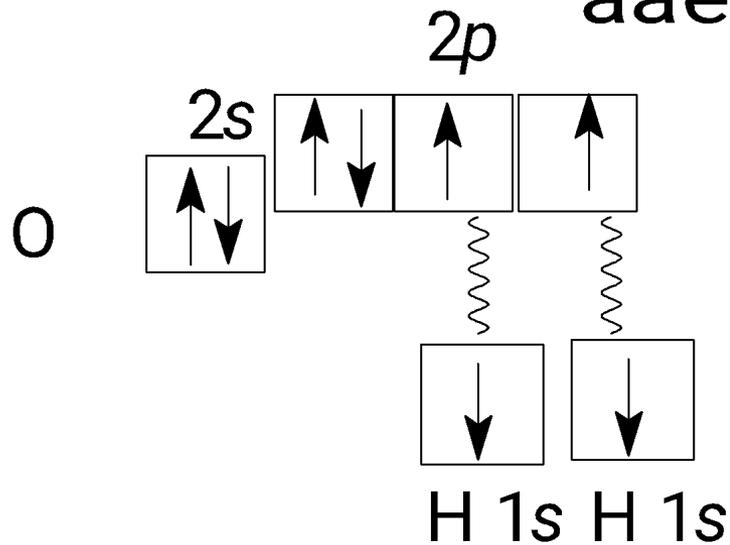




- H_2O

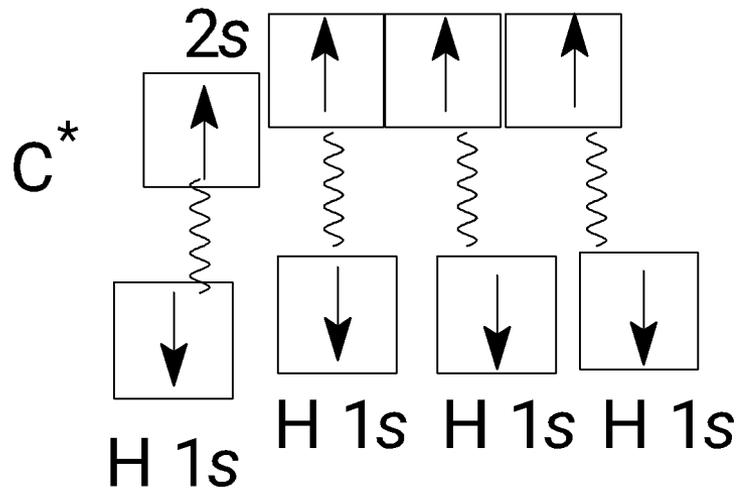
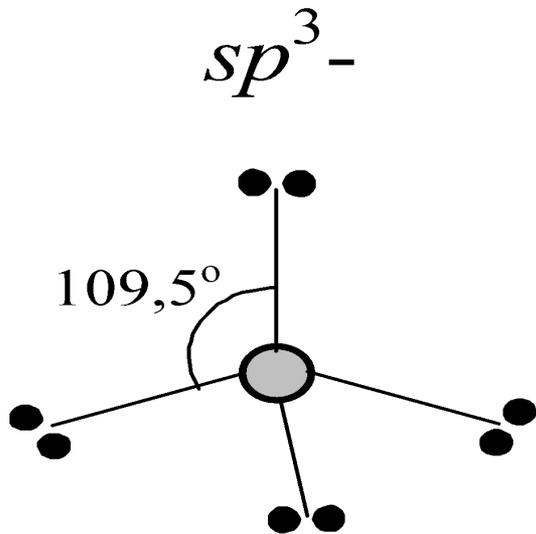
sp^3 - hybridization

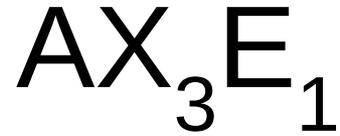
bond angle is $104,5^\circ$



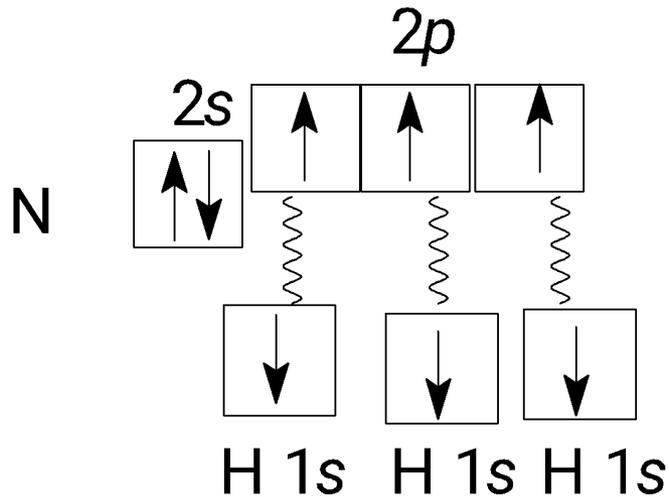


- CH_4 , CF_4 , SiO_4^{4-} , NOF_3 , SO_4^{2-} , ClO_4^- , $Ni(CO)_4$,
 NH_4^+ , $[Zn(CN)_4]^{2-}$





- NH_3 , H_3O^+ , $SOCl_2$, SO_3^{2-} , IO_3^- , BrO_3^-



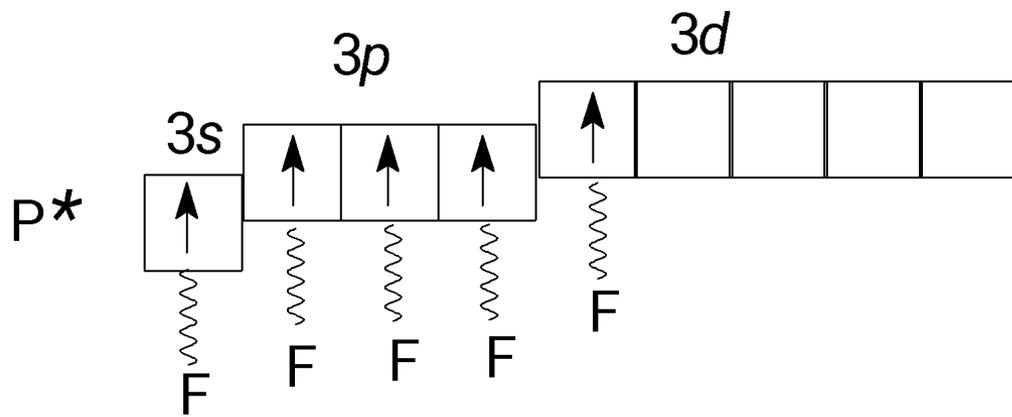
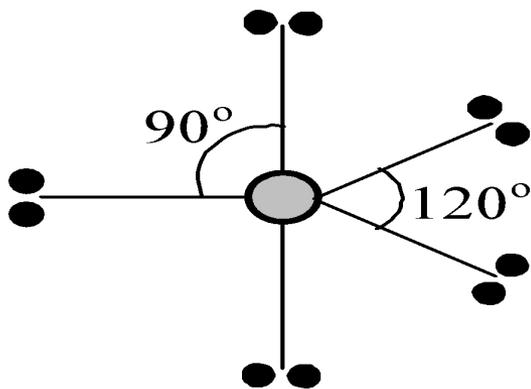
sp^3 - $\approx 107^\circ$

$\approx 107^\circ$



• PF_5 , $Fe(CO)_5$

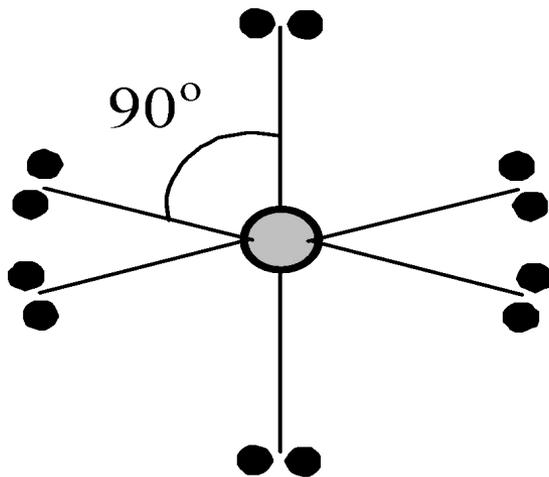
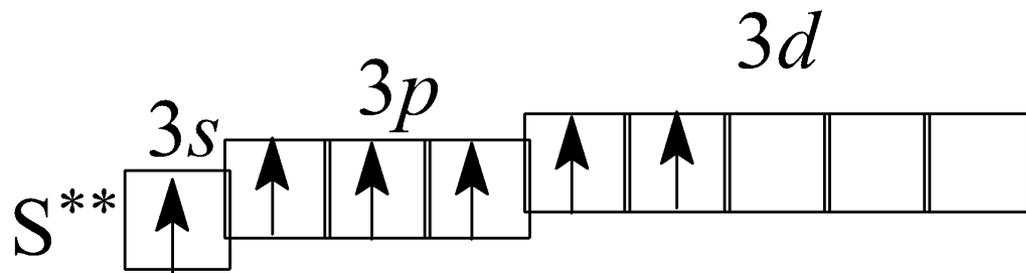
sp^3d-

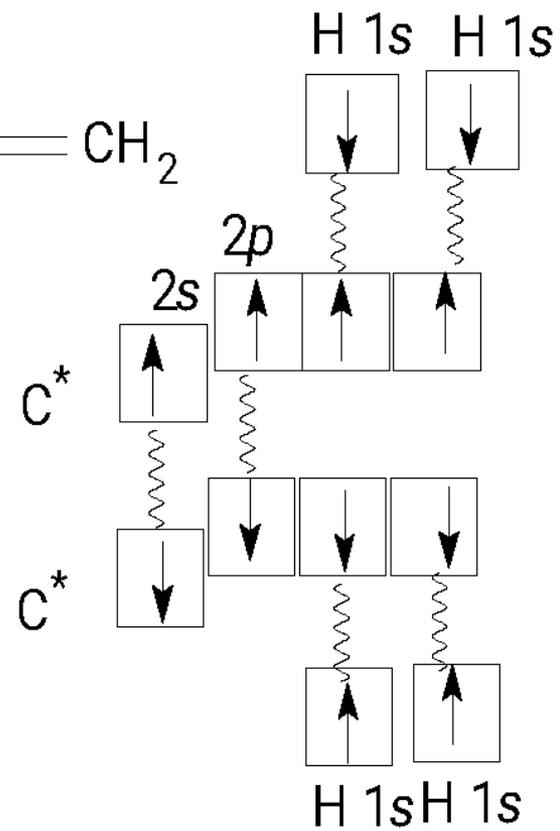
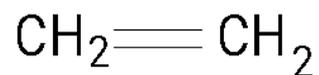
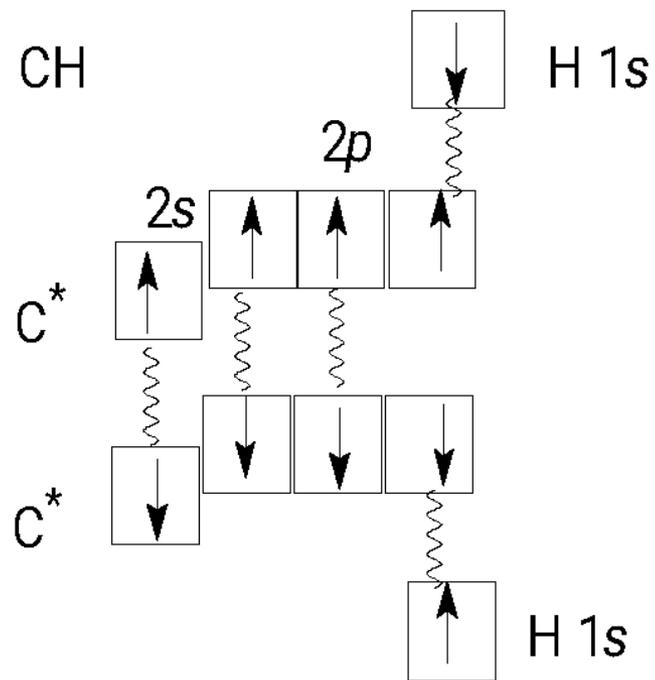
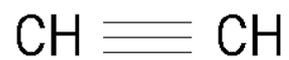




- SF_6 , PF_6^- , $[AlF_6]^{3-}$, $[SiF_6]^{2-}$, $[CoF_6]^{3-}$

sp^3d^2-

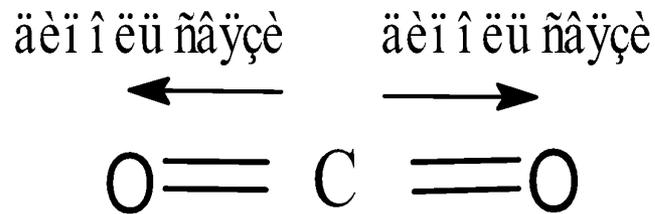




- Следует различать **полярность связей** и **полярность молекул**. Связи в молекуле могут быть полярными, а сами молекулы неполярными в случае ее высокой симметрии. Например, электрический момент диполя симметрично связанных молекул CO_2 , SO_3 , CH_4 равен нулю, хотя связи полярны.
- Дипольный момент молекулы характеризует ее способность ориентироваться в электрическом поле между положительными и отрицательными электродами.

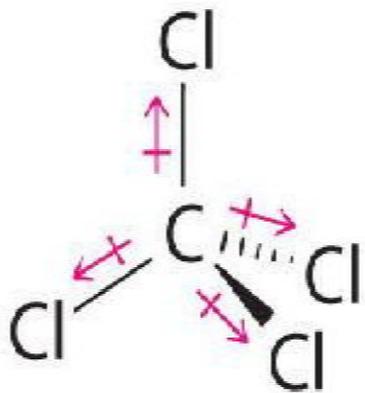
Компенсация диполей в молекуле CO₂

- Электрический момент диполя молекулы CO₂ (*sp*-гибридизация) равен нулю хотя связи C = O полярны :

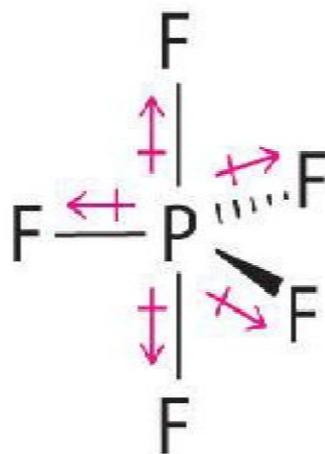


$$\mu_{\text{O}=\text{C}} + \mu_{=\text{O}} = 0$$

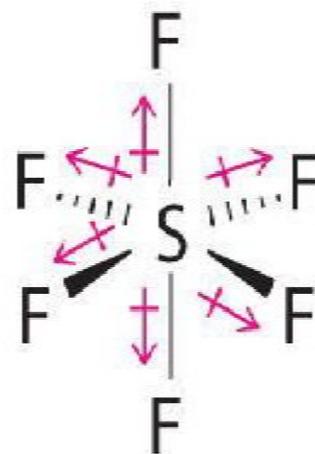
Неполярными являются также CCl_4 (sp^3 -гибридизация), PF_5 (sp^3d -гибридизация), SF_6 (sp^3d^2 -гибридизация), хотя связи C–Cl, P–F и S–F полярны:



CCl_4

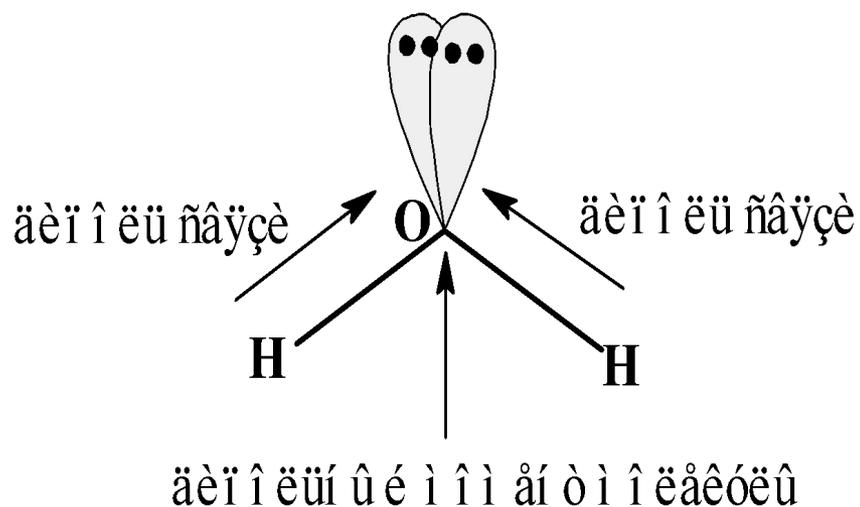


PF_5

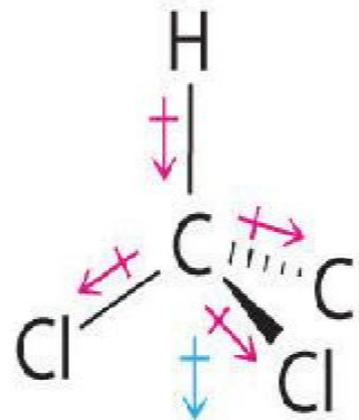
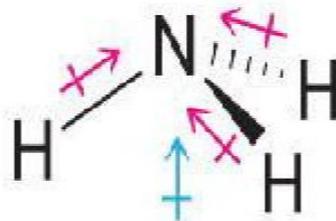
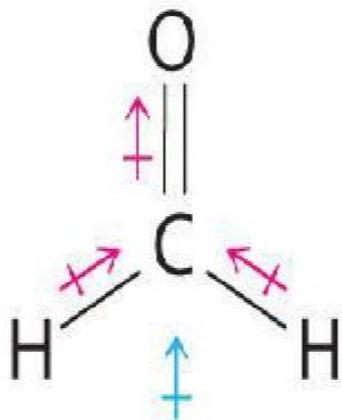


SF_6

- Молекула воды имеет угловое строение (sp^3 -гибридизация), является полярной :



Полярными являются также CH_2O (sp^2 -гибридизация), NH_3 (sp^3 -гибридизация), CHCl_3 (sp^3 -гибридизация):



- Вследствие углового строения $\mu(\text{SO}_2) = 1,79 \text{ D}$.
- Дипольные моменты NF_3 и NH_3 при одинаковой гибридизации атома азота (sp^3), примерно одинаковой полярности связей N–F и N–H и сходной геометрии молекул существенно различаются, поскольку дипольный момент неподеленной пары электронов азота при векторном сложении ЭМД в случае NH_3 увеличивает μ молекулы, а в случае NF_3 уменьшает его.

МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНЫХ ОРБИТАЛЕЙ

- Идея метода молекулярных - все электроны находятся на молекулярных орбиталях, единых для всей системы ядер и электронов данной молекулы.
- Для определения волновых функций молекулярных орбиталей используют приближение, называемое линейной комбинацией атомных орбиталей (ЛКАО): молекулярная волновая функция (МО) получается простым сложением или вычитанием атомных волновых функций (АО).

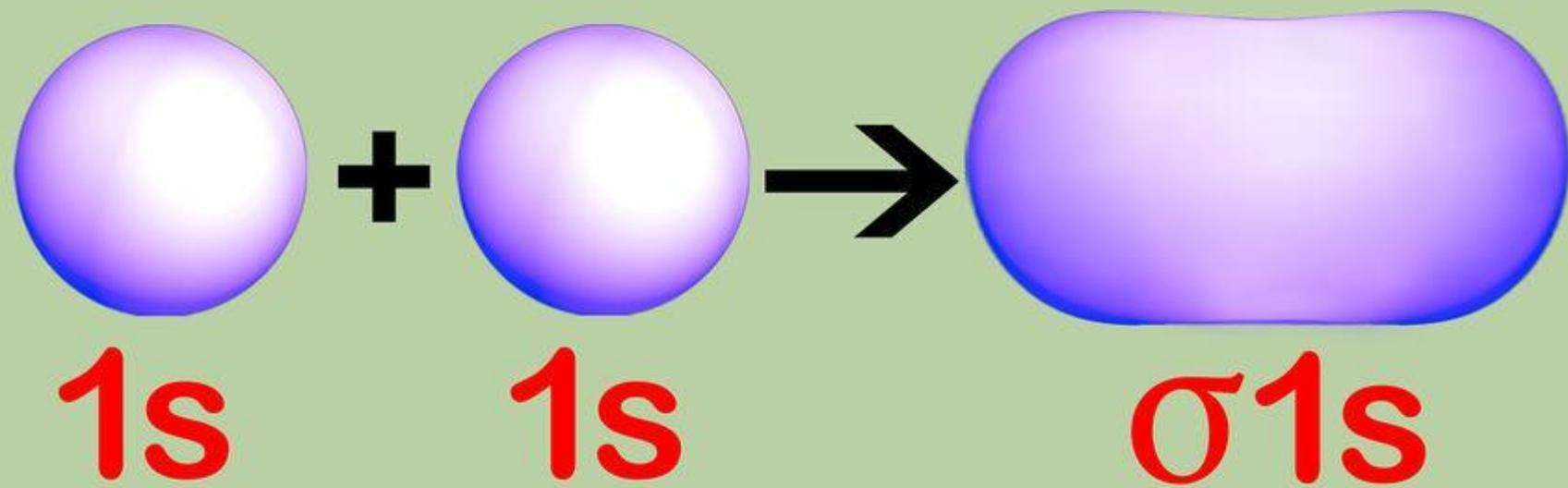
Основные положения метода МО

- в образовании МО могут участвовать АО, имеющие сходную симметрию и близкую энергию;
- количество МО в молекуле равно сумме АО атомов, входящих в ее состав;
- АО должны в достаточной степени перекрываться при образовании МО. Поэтому орбитали внутренних электронных слоев атомов практически не участвуют в образовании связи и в методе МО обычно не рассматриваются.

- По аналогии с атомными **s-, p-, d-, f-орбиталями** молекулярные орбитали обозначают греческими буквами **σ -, π -, δ -, ϕ -**.
- Заполнение молекулярных орбиталей происходит так же, как и атомных, с соблюдением принципа Паули, принципа наименьшей энергии и правила Хунда; на каждой МО может находиться не более двух электронов.

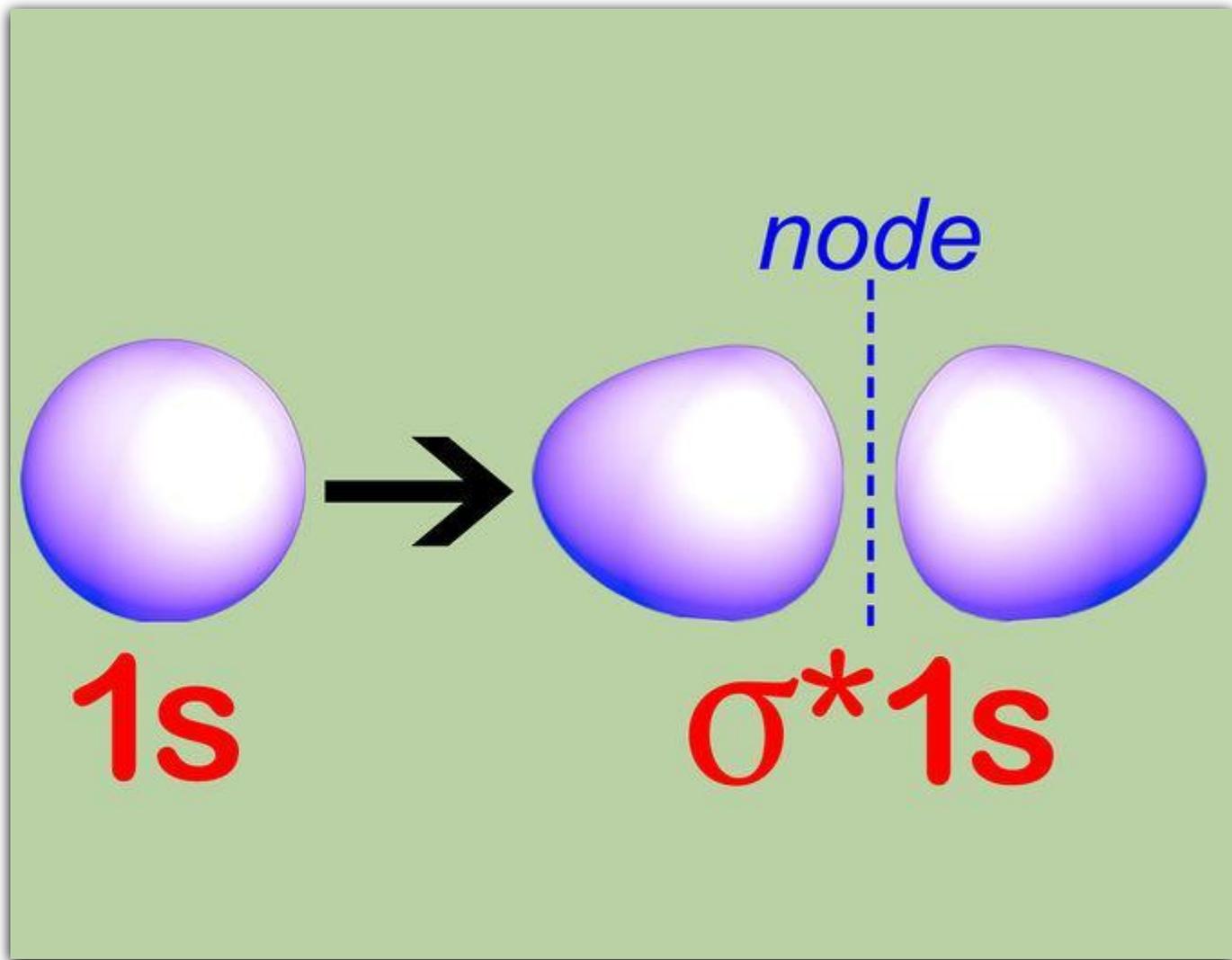
- В методе МО образование молекулярных орбиталей рассматривается как результат сложения и вычитания комбинируемых АО. Молекулярная орбиталь, возникающая в результате сложения АО, отвечает более низкому значению энергии, чем сумма энергий исходных АО. Такая МО имеет повышенную электронную плотность в пространстве между ядрами и способствует образованию химической связи, она называется **связывающей**.

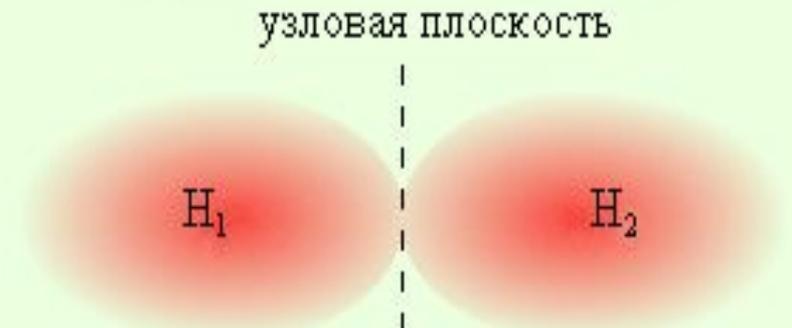
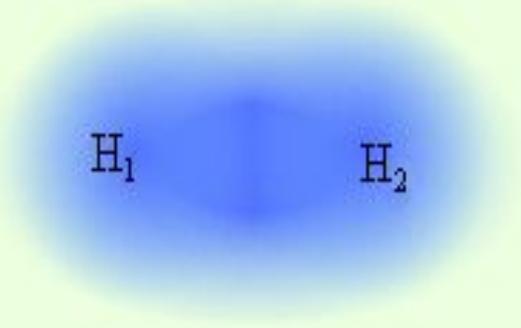
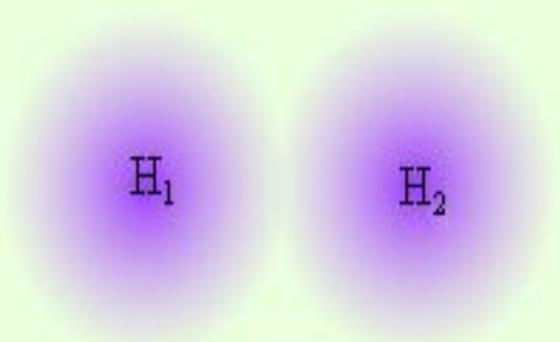
- Молекулярная орбиталь, возникающая в результате вычитания АО, отвечает более высокому значению энергии, чем сумма энергий исходных АО. Электронная плотность в этом случае сконцентрирована за ядрами атомов, а между ними равна нулю.
- Подобные МО энергетически менее устойчивы, они приводят к ослаблению химической связи и называются **разрыхляющими** (их часто обозначают звездочками на схемах)





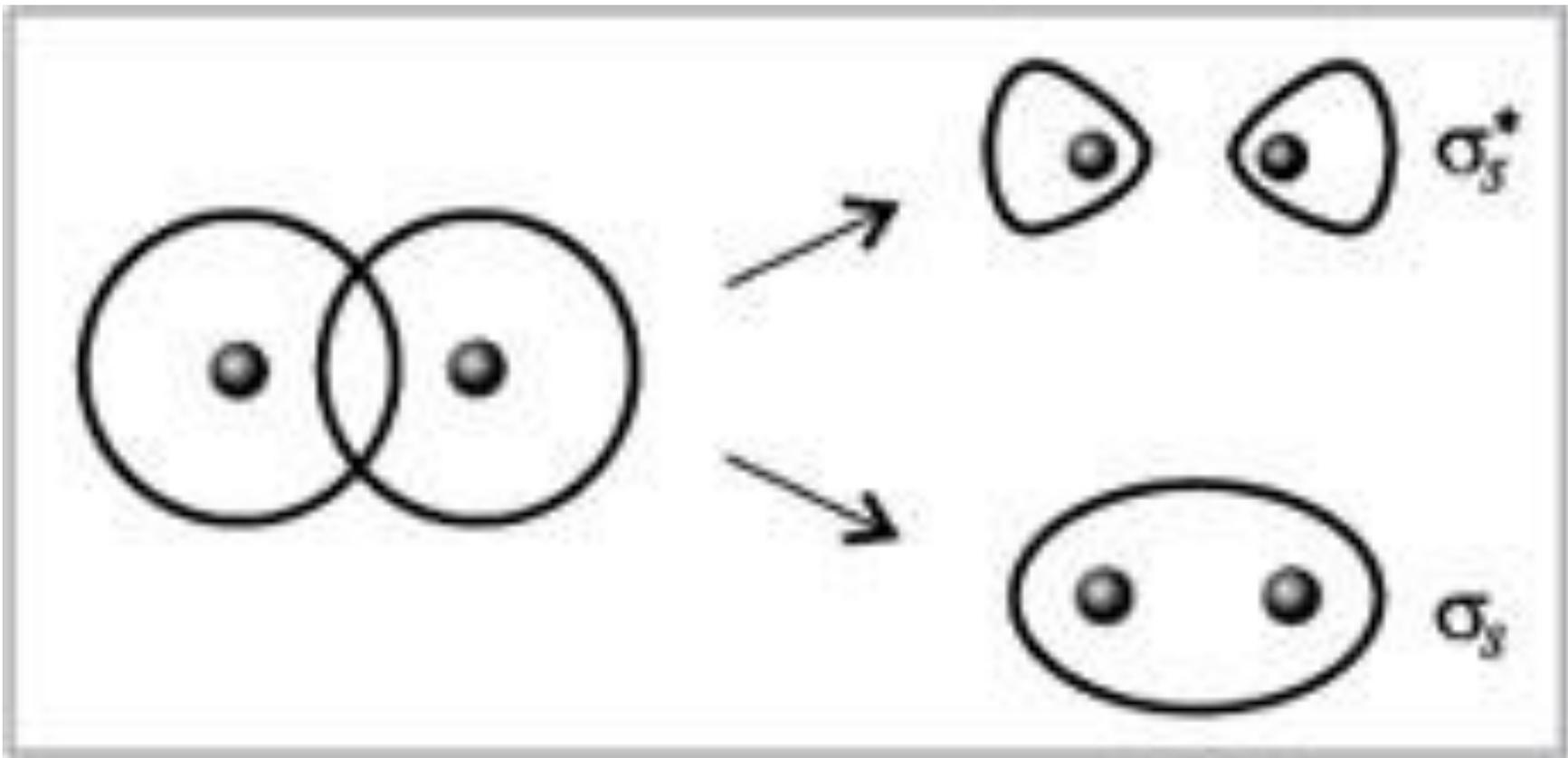
-



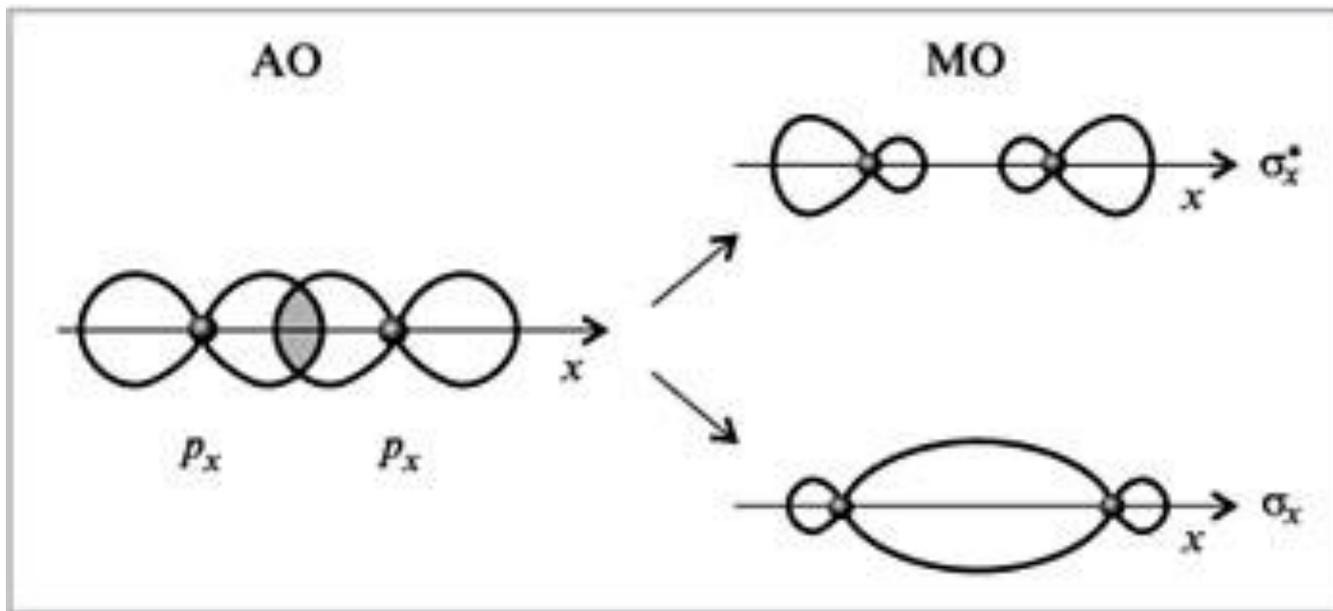


$$MO_+ = 1s_1 + 1s_2 = \sigma^{cb}$$

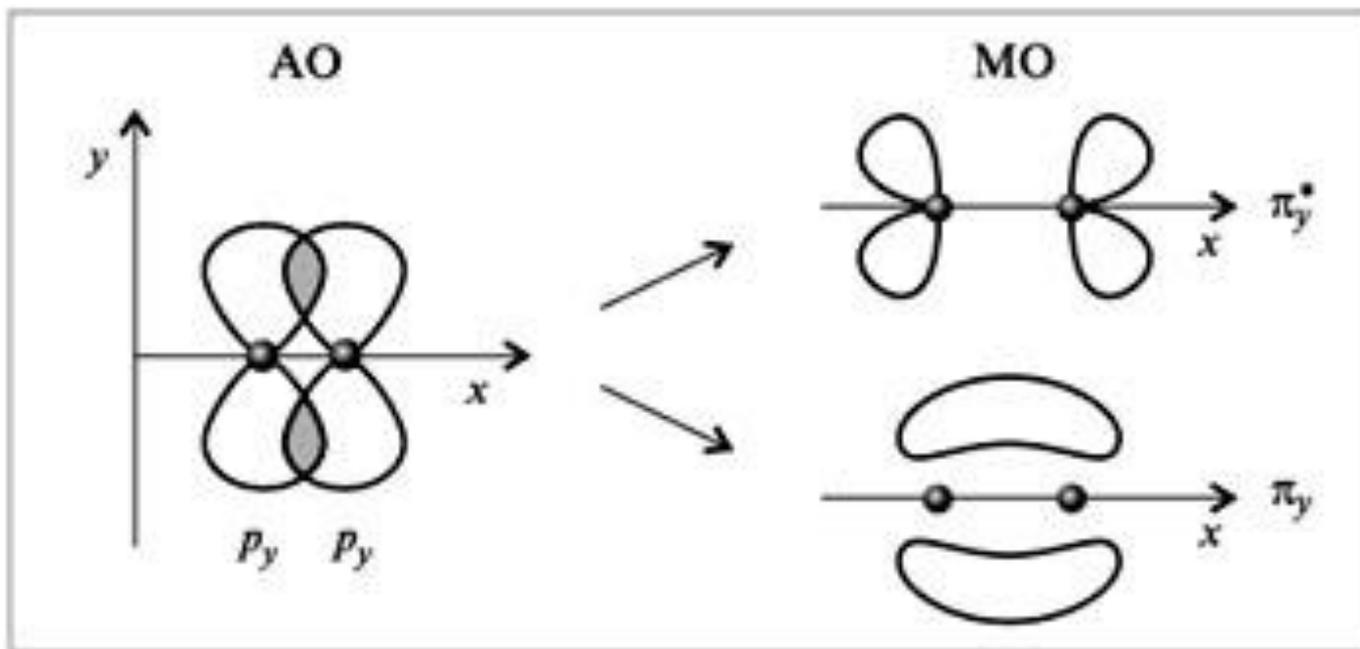
$$MO_- = 1s_1 - 1s_2 = \sigma^*$$



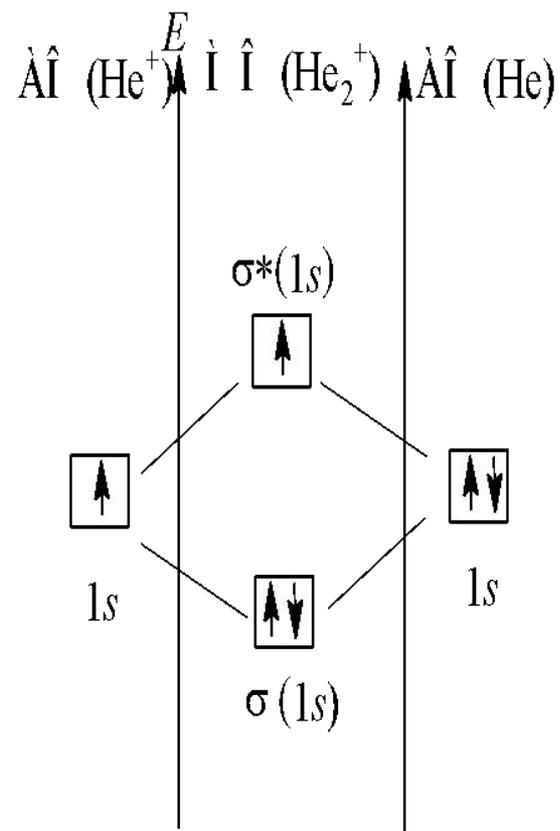
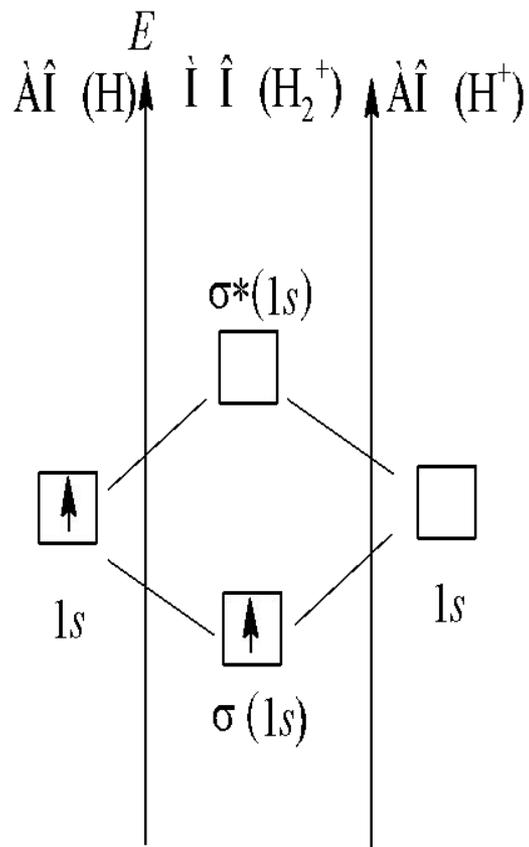
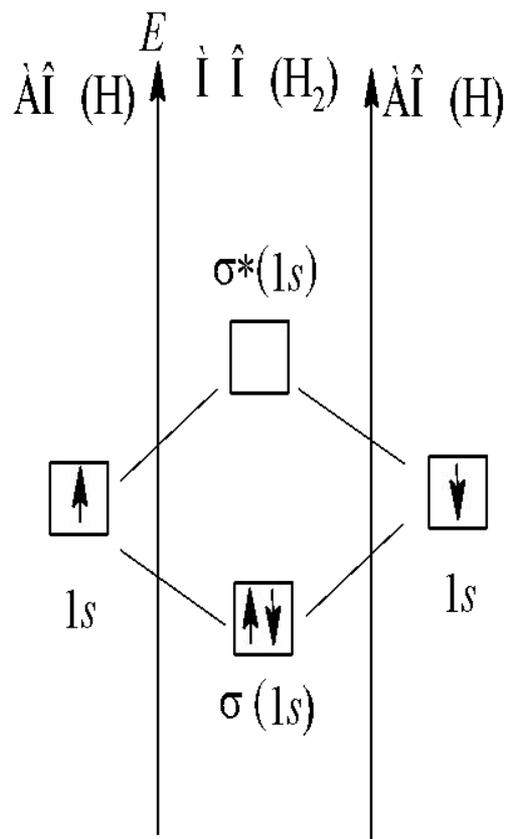
- перекрывание p_x -АО, (p -орбиталей, вытянутых вдоль оси x , соединяющей ядра атомов).
Образуется связывающая МО и разрыхляющая МО



- p_y -АО и p_z -АО перекрываются с образованием по паре одинаковых по энергии, но взаимно перпендикулярно ориентированных в пространстве -МО



- Образование молекулярных орбиталей из атомных изображают схематически в виде энергетических диаграмм.
- Рассмотрим построение такой энергетической диаграммы на примере молекулы водорода H_2 , ионов H_2^+ , He_2^+



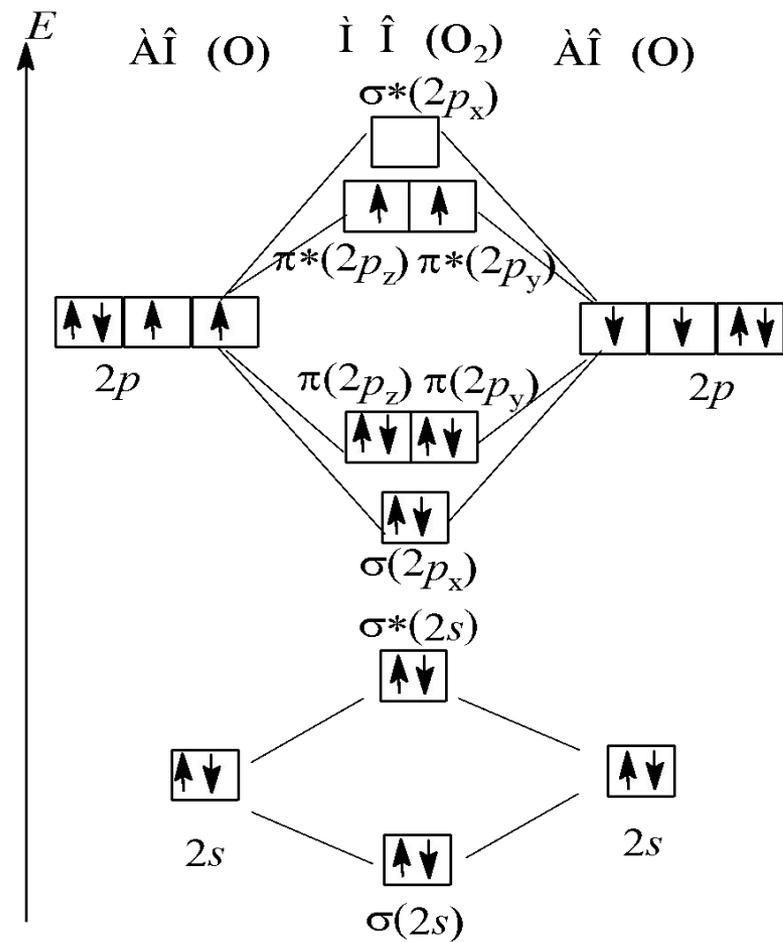
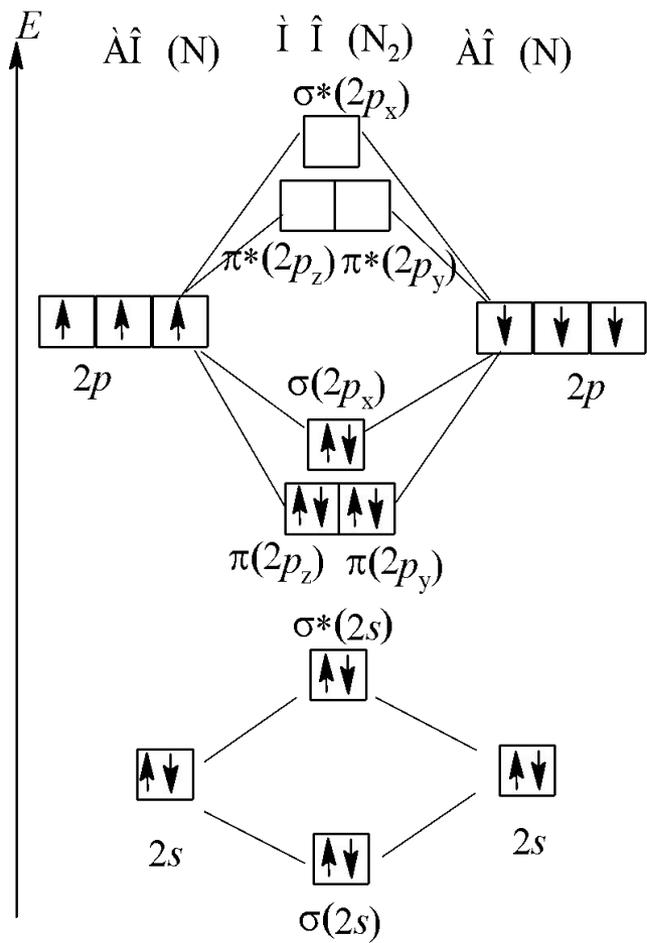
- Устойчивая частица (молекула, ион) образуется в случае, если сумма электронов, расположенных на связывающих МО, превышает сумму электронов на разрыхляющих МО.
- Порядок связи равен половине разности числа электронов на связывающих $N_{\text{св}}$ и разрыхляющих $N_{\text{разр}}$ МО:

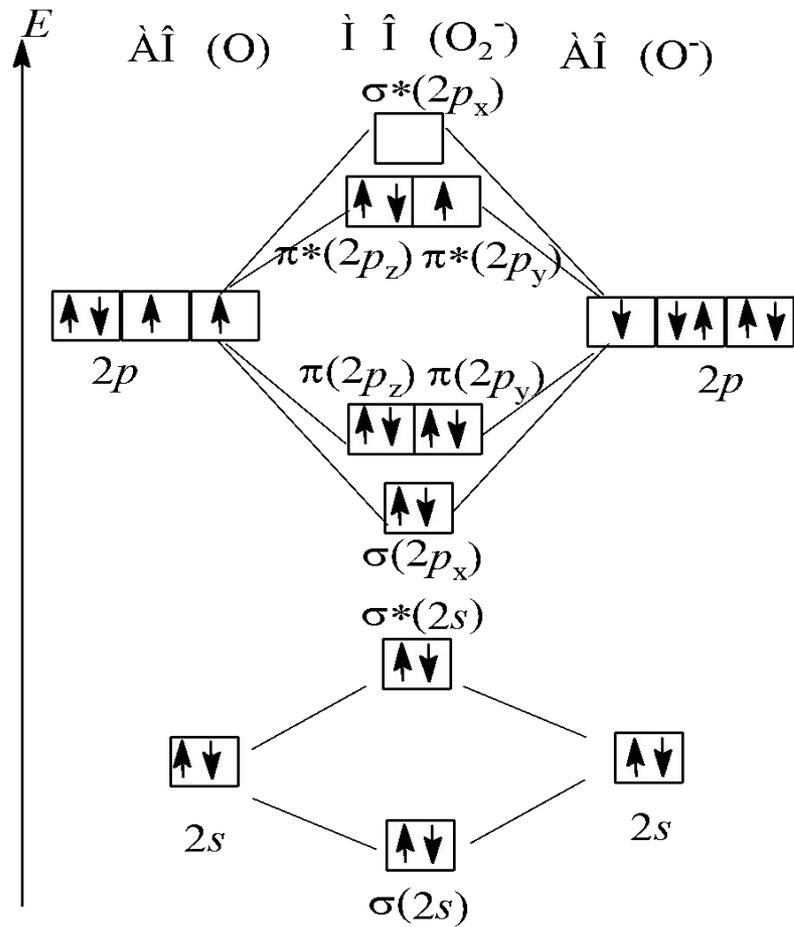
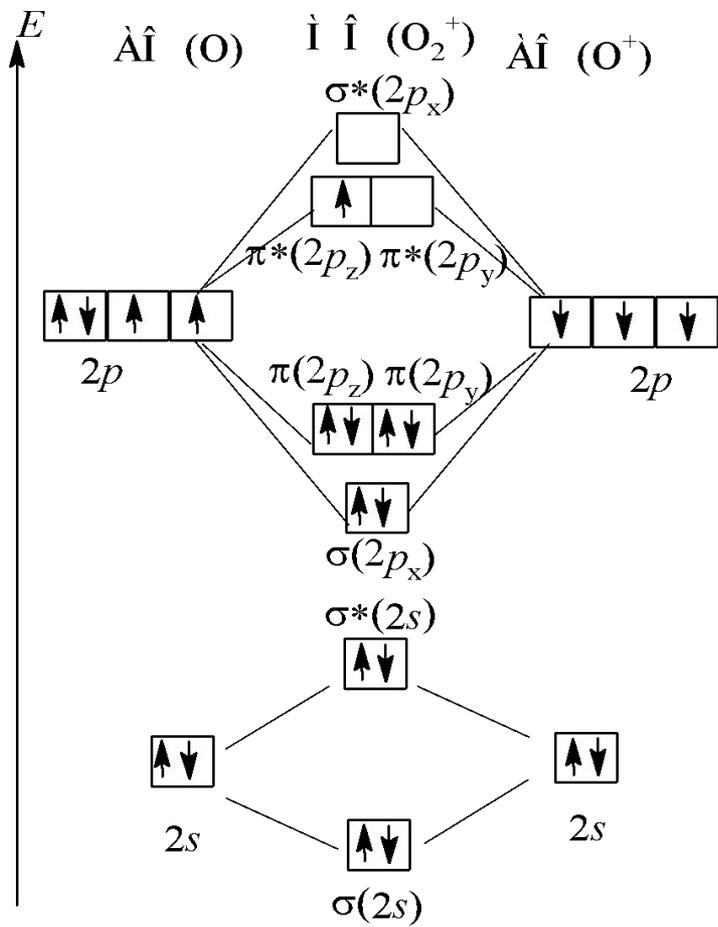
$$\text{Порядок связи (ПС)} = \frac{N_{\text{св}} - N_{\text{разр}}}{2}$$

- Если порядок связи = 0, то молекула не образуется. Порядок связи может принимать как целые, так и дробные положительные значения. Чем выше порядок связи, тем прочнее молекула.

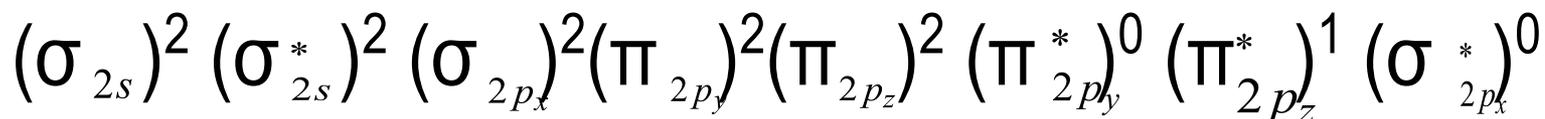
частица	электронная конфигурация молекулы	порядок связи	$E_{\text{связи}}$, кДж/моль
H_2	$(\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^0$	1,0	432
H_2^+	$(\sigma_{1s})^1 (\sigma_{1s}^*)^0$	0,5	256
He_2^+	$(\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^1$	0,5	250

- молекулярные орбитали двухатомных гомоядерных молекул элементов II периода по энергии располагаются следующим образом:
- а) для молекул Li_2 , Be_2 , B_2 , C_2 , N_2 этот порядок σ_{2s}^{CB}
 $\sigma_{2s}^{\text{разр}} < \pi_{2p_y}^{\text{CB}} = \pi_{2p_z}^{\text{CB}} < \sigma_{2p_x}^{\text{CB}} < \pi_{2p_y}^{\text{разр}} = \pi_{2p_z}^{\text{разр}} < \sigma_{2p_x}^{\text{разр}}$





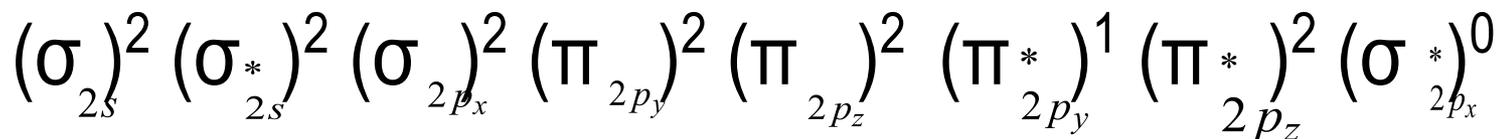
Электронная конфигурация молекулярного иона O_2^+ :



Порядок связи:

$$n = \frac{8-3}{2} = 2,5$$

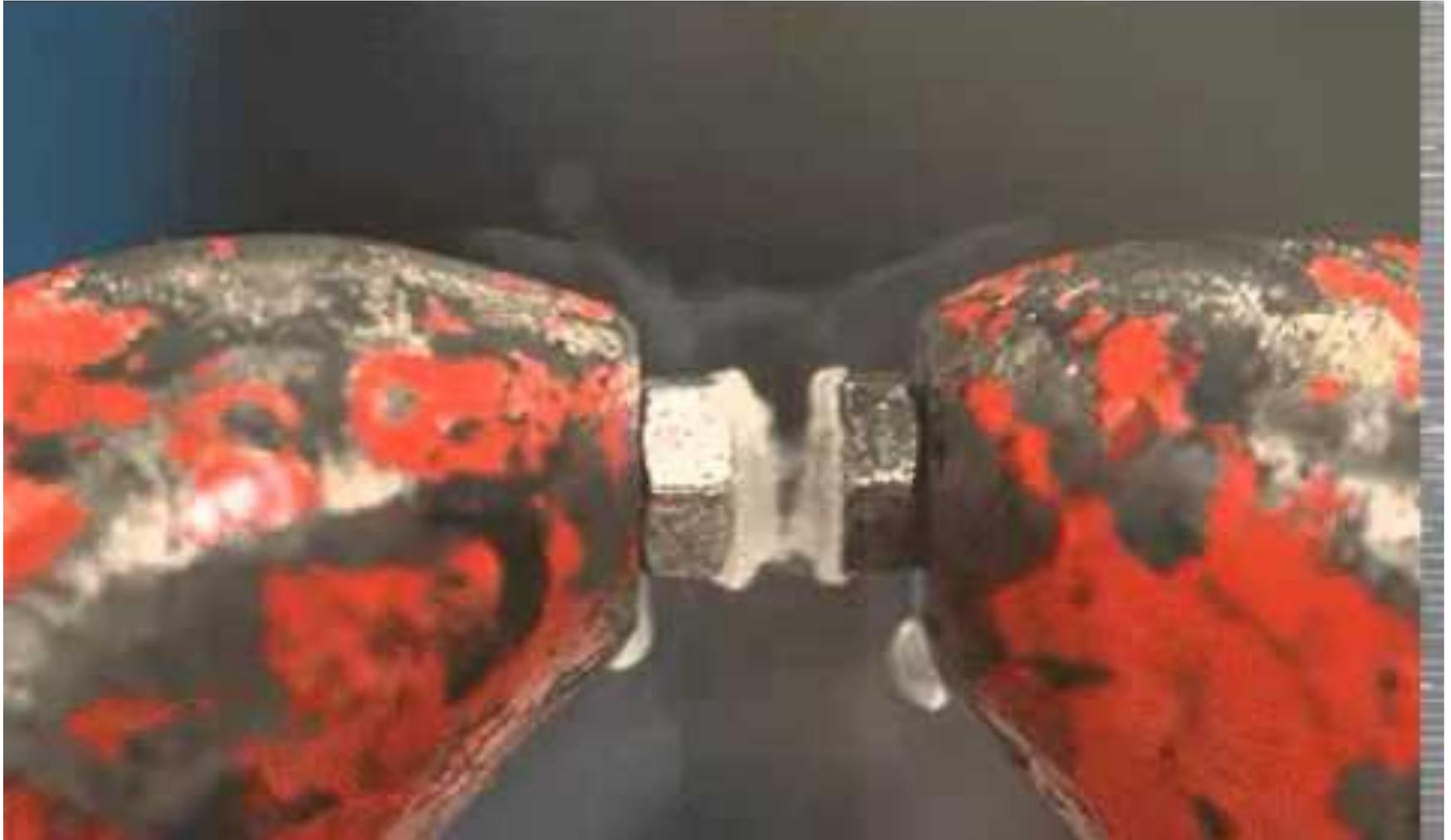
Электронная конфигурация молекулярного иона O_2^- :



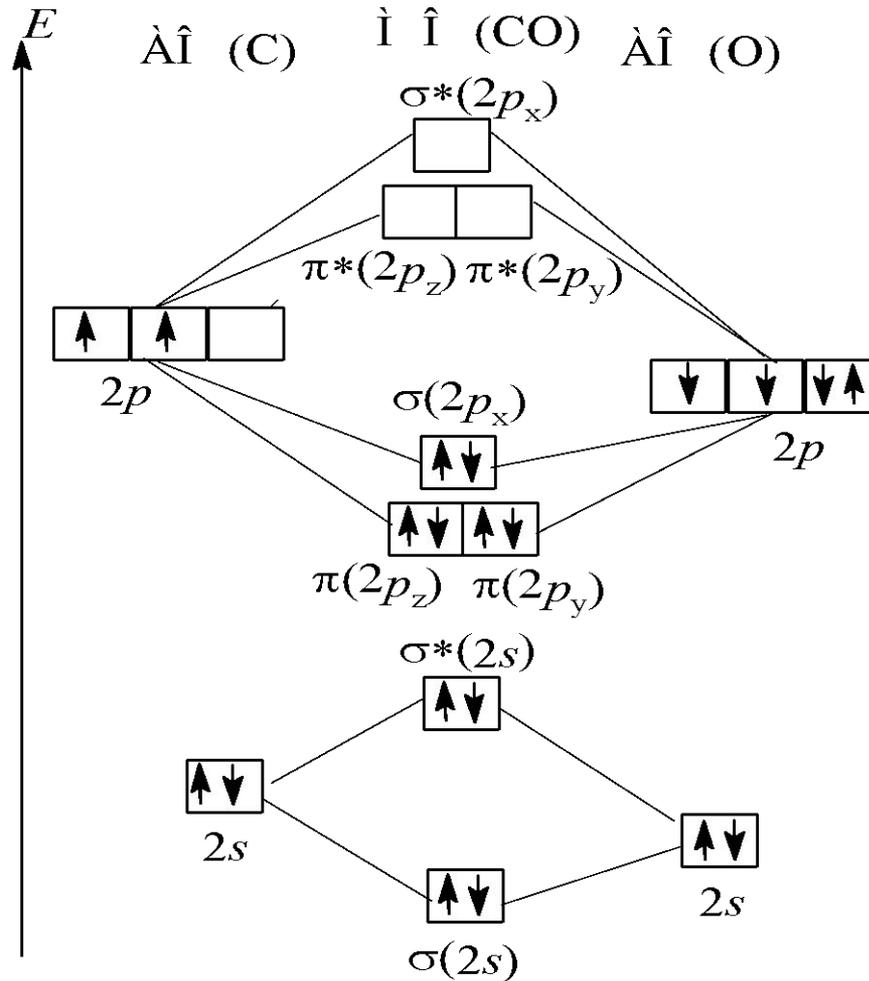
Порядок связи:

$$n = \frac{8-5}{2} = 1,5$$

Парамагнетизм кислорода

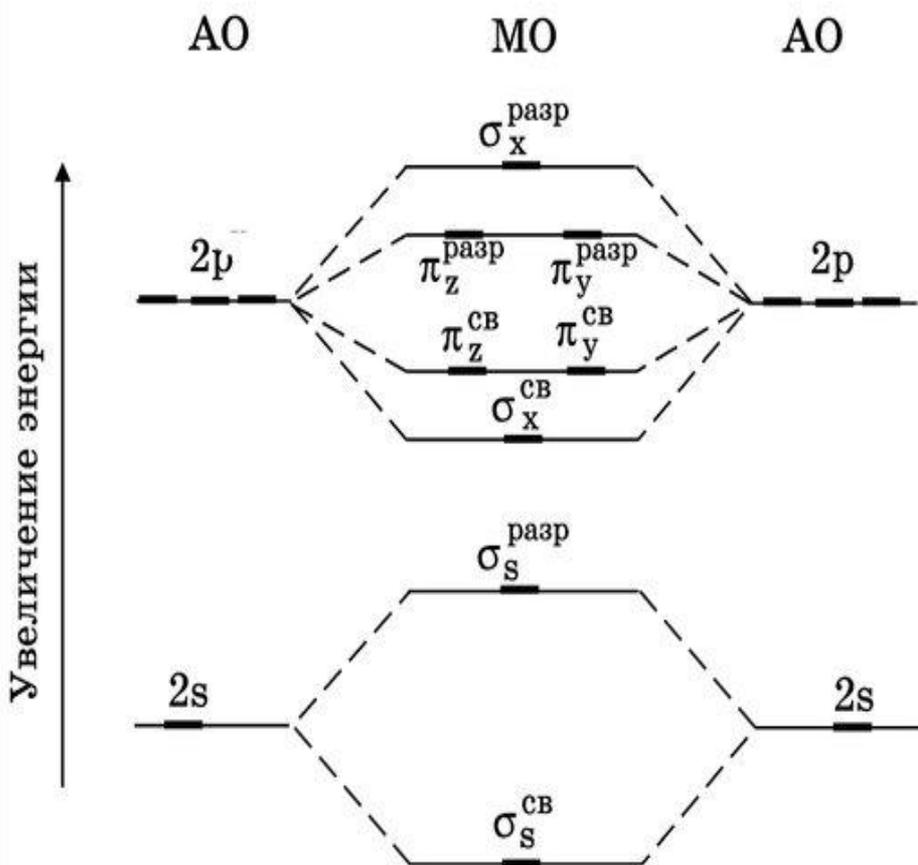


Энергетическая диаграмма молекулы CO

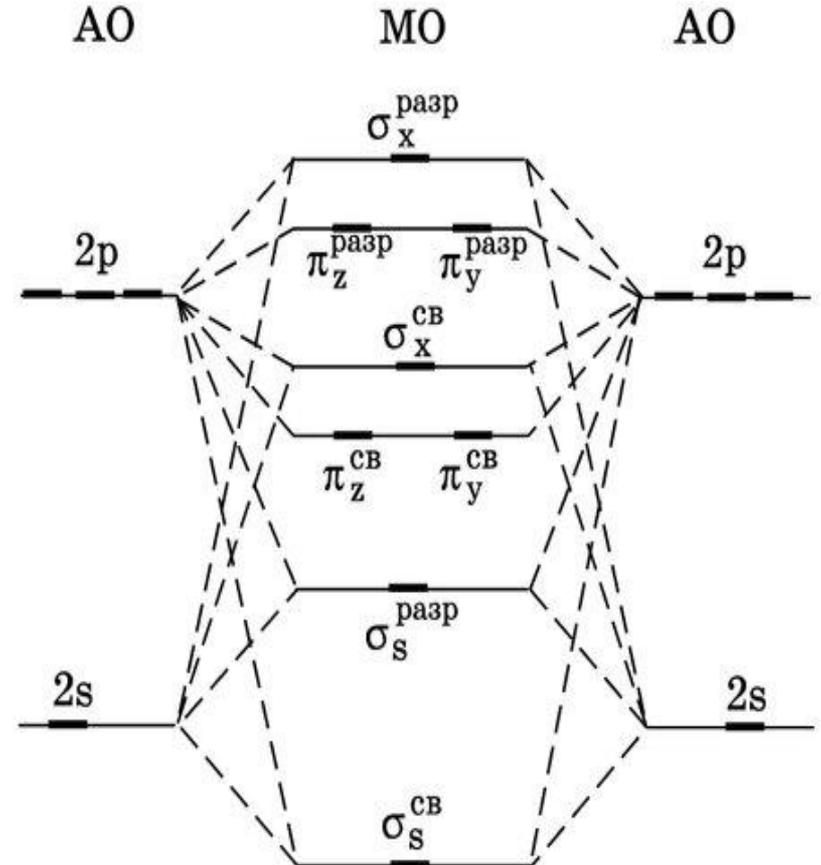


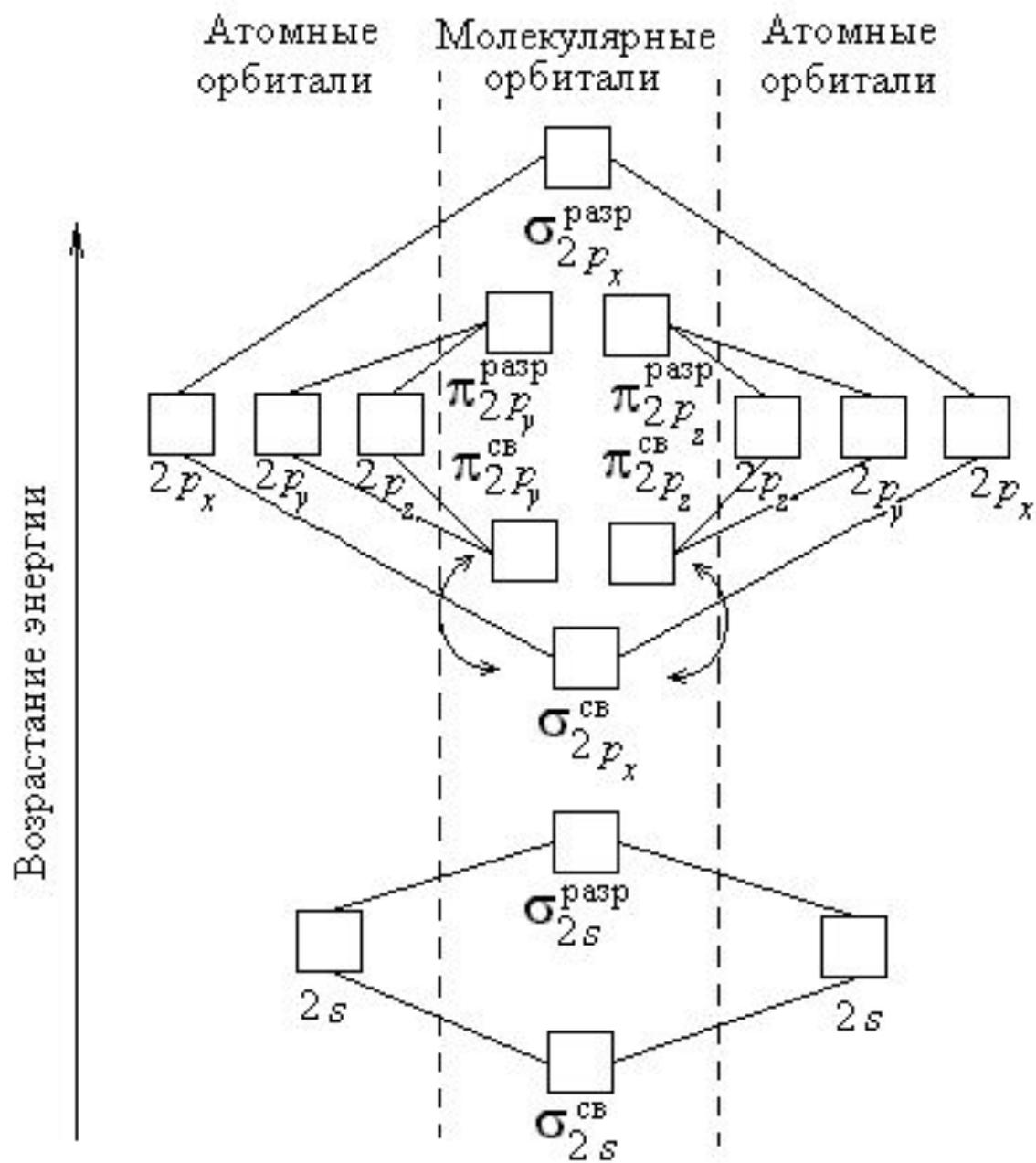
Конец периода ($O_2 - F_2$)

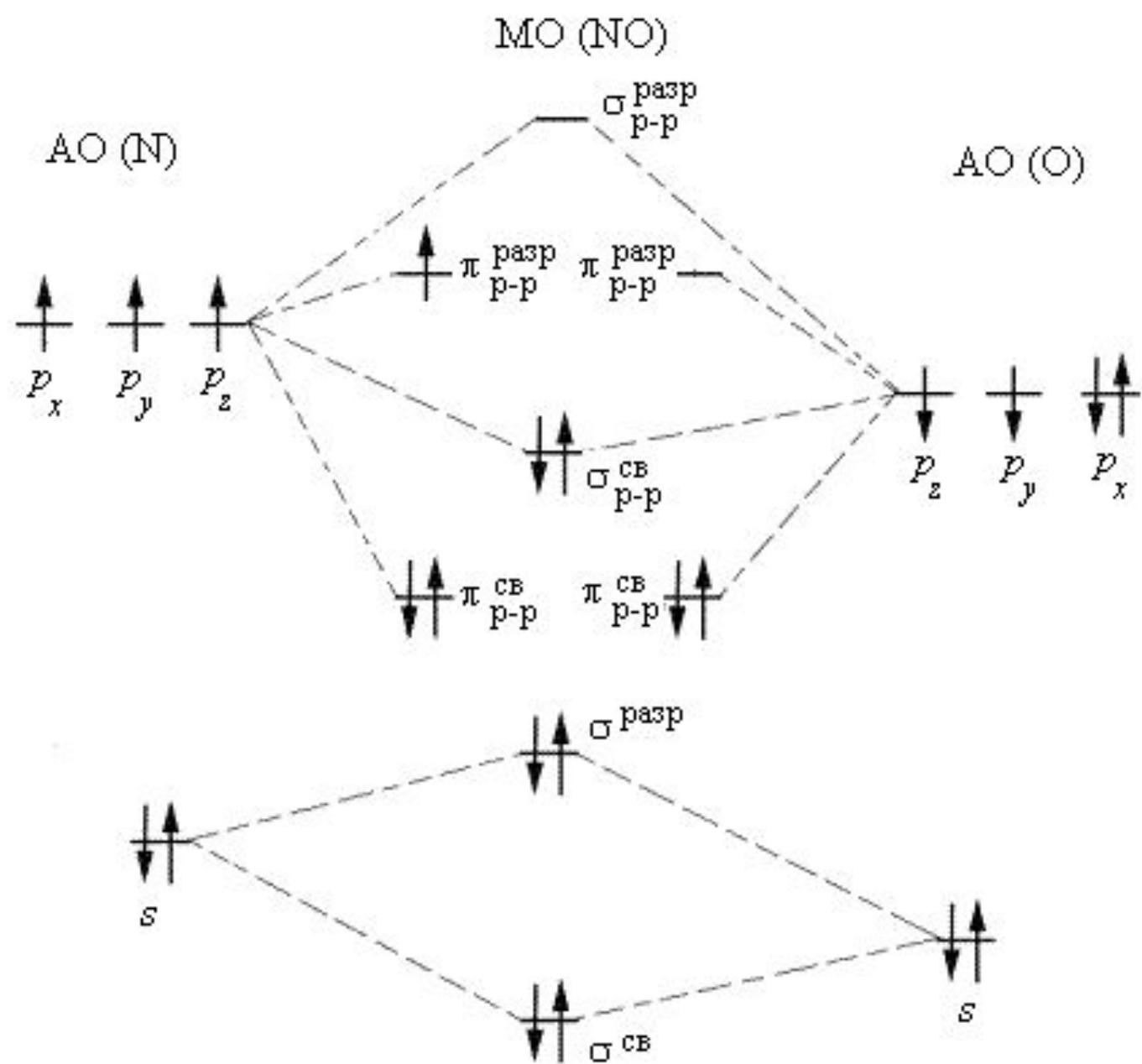
Начало периода ($Li_2 - N_2$)

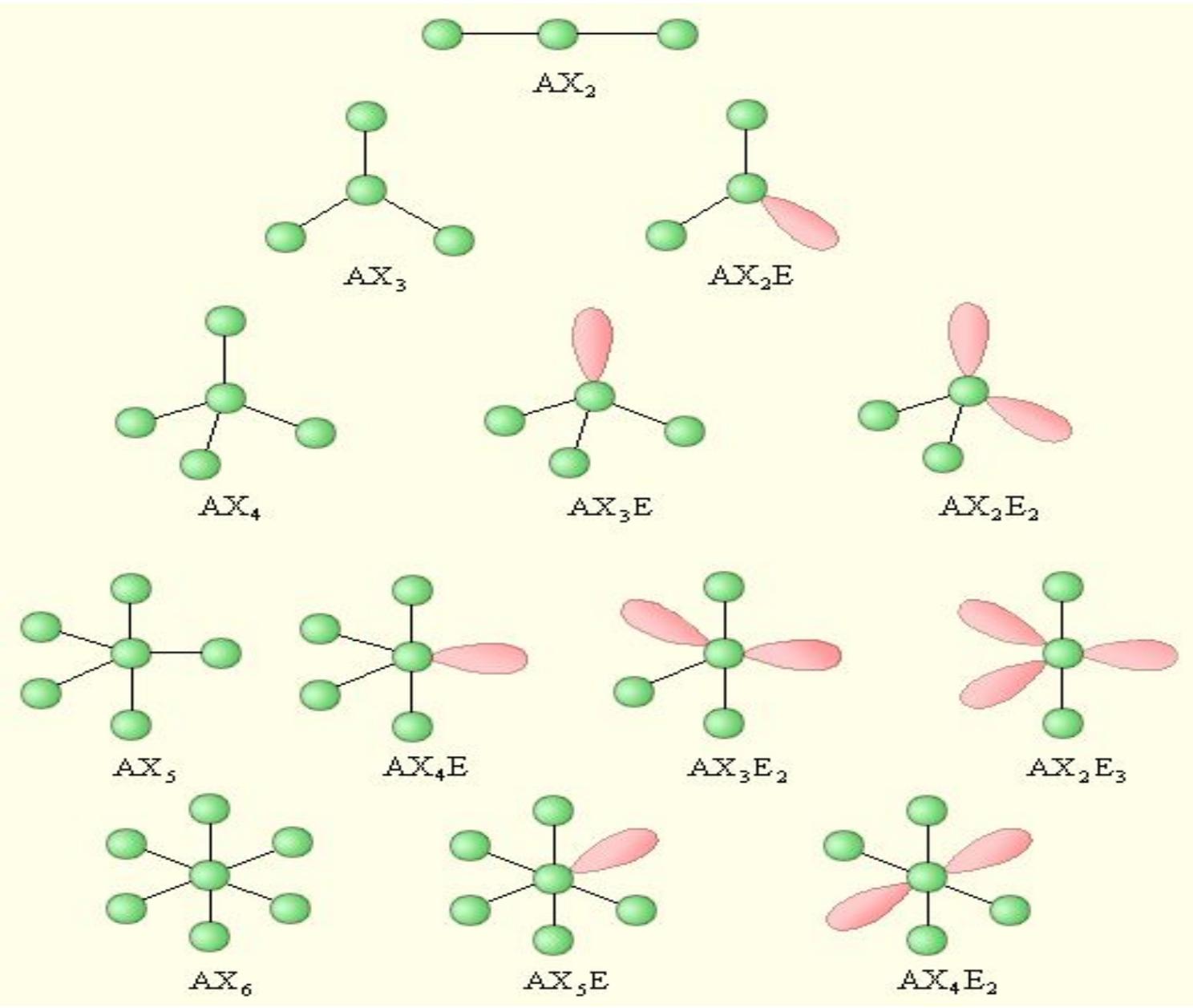


a









Тип молекулы	n	m	Тип гибридизации	Пространственное расположение электронных пар	Геометрия молекулы	Примеры
AX_2E_0	2	0	sp	линейное	линейная	$BeF_2, CO_2, N_2O, [Ag(NH_3)_2]^+$
AX_2E_1	2	1	sp^2	правильный треугольник	угловая	$SnCl_2, SO_2, O_3,$
AX_3E_0	3	0	sp^2	правильный треугольник	плоскостная	$BF_3, SO_3, C_2H_4,$ NO_3^-, CO_3^{2-}
AX_4E_0	4	0	sp^3	тетраэдр	тетраэдр	$CH_4, CF_4, SiO_4^{4-},$ $NOF_3, SO_4^{2-}, ClO_4^-,$ $Ni(CO)_4, NH_4^+,$ $[Zn(CN)_4]^{2-}$
AX_3E_1	3	1	sp^3	тетраэдр	треугольная пирамида	$NH_3, H_3O^+,$ $SOCl_2, SO_3^{2-}, IO_3^-,$ BrO_3^-

AX_2E_2	2	2	sp^3	тетраэдр	угловая	$H_2O,$ $SCl_2,$ $OF_2,$
AX_5E_0	5	0	$sp^3d,$ dsp^3	тригональная бипирамида	тригональная бипирамида	$PCl_5,$ $Fe(CO)_5$
AX_4E_1	4	1	sp^3d	тригональная бипирамида	качели	SF_4
AX_3E_2	3	2	sp^3d	тригональная бипирамида	T-образная	$ClF_3,$ BrF_3
AX_2E_3	2	3	sp^3d	тригональная бипирамида	линейная	XeF_2
AX_6E_0	6	0	sp^3d^2	октаэдр	октаэдр	$SF_6,$ PF_6^- , $[AlF_6]^{3-},$ $[SiF_6]^{2-}$ $[CoF_6]^{3-}$
AX_5E_1	5	1	sp^3d^2	октаэдр	тетрагональна я пирамида	$ICl_5,$ IF_5
AX_4E_2	4	2	sp^3d^2	октаэдр	плоская (квадрат)	XeF_4

- **Пример 1.** Молекула BF_3 . Число валентных электронов 3. Неподелённых электронных пар у атома бора нет ($m = 0$). Формула молекулы AX_3E_0 .

$$n + m = 3.$$

Расположение электронных пар в пространстве – правильный треугольник

• **Пример 2.** Молекула SnCl_2 . Число валентных электронов у атома олова = 4.

Число неподеленных электронных пар:

$$m = \frac{4 - 2 \cdot 1}{2} = 1$$

Формула молекулы AX_2E_1 .² Общее число электронных пар:

$$n + m = 3.$$

Расположение электронных пар в пространстве – плоский треугольник. Молекула имеет угловое строение.

• **Пример 3.** Молекула XeF_4 . Число валентных электронов у атома ксенона = 8. Число неподелённых электронных пар:

$$m = \frac{8 - 4 \cdot 1}{2} = 2.$$

Формула молекулы AX_4E_2 . Общее число электронных пар:

$$n + m = 6.$$

Расположение электронных пар в пространстве – октаэдр. Строение молекулы – квадрат. У атома ксенона остаются две неподелённые пары электронов.

Пример 4. Молекула SO_2 . Число валентных электронов у атома серы = 6. Молекула содержит две π -связи. Число неподелённых электронных пар:

$$m = \frac{6 - 2 \cdot 2}{2} = 1.$$

Формула молекулы AX_2E_1 .

$$n + m = 3.$$

Расположение электронных пар в пространстве – правильный треугольник. Молекула имеет угловое строение, у атома серы остается одна неподелённая пара электронов.

Поскольку **неподеленная** электронная пара образует более размытое электронное облако, чем общая (обобществленная, связывающая), поэтому она занимает **большой объем**. Это приводит к уменьшению валентных углов по сравнению с тетраэдрическими $109^{\circ}28'$.

- Орбитали центрального атома, участвующие в образовании π -связей, не подвергаются гибридизации. Например, в ацетилене C_2H_2 реализуется sp -гибридизация орбиталей атома углерода, в этилене C_2H_4 – sp^2 -гибридизация