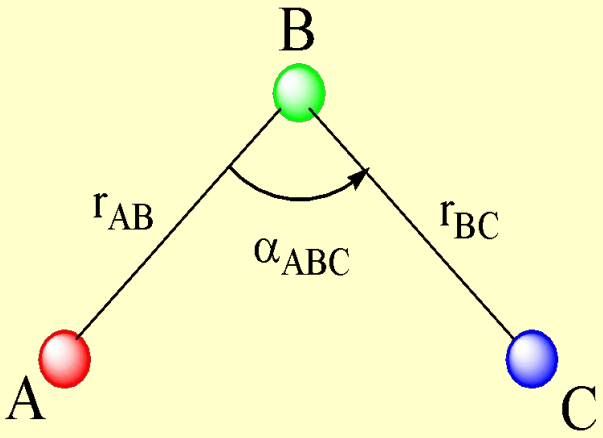
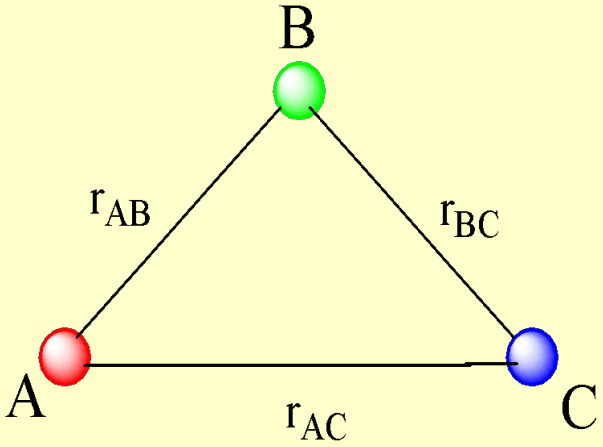
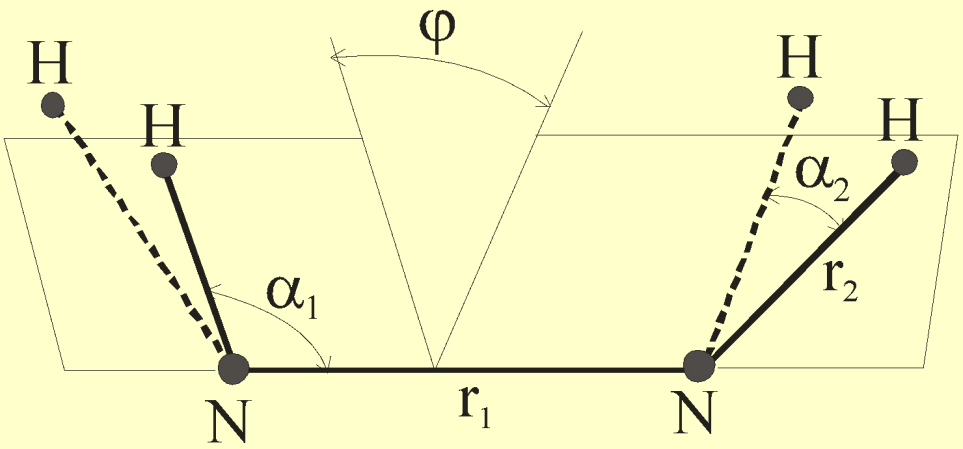
Различный набор параметров, описывающих конфигурацию трехатомной молекулы



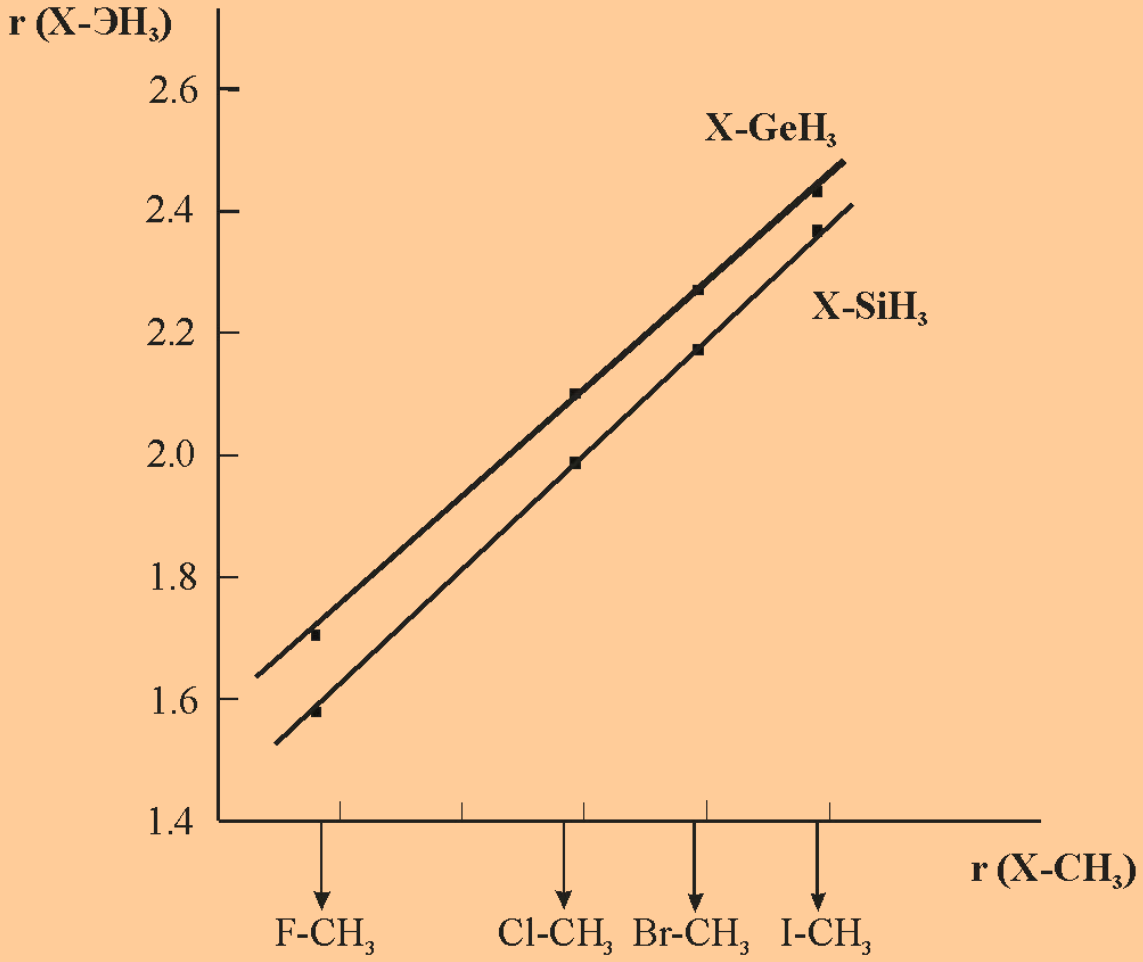


Набор параметров, описывающих конфигурацию гидразина

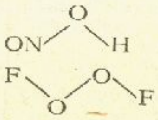
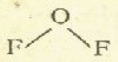
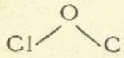
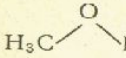
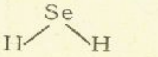
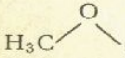
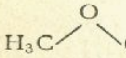
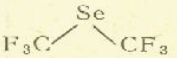
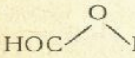


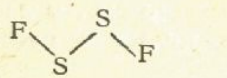
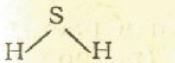
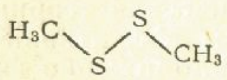
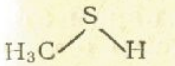
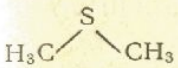
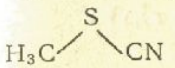
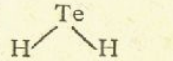
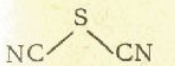
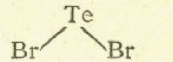
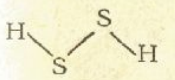
(Угол поворота в положении равновесия одной группы NH_2 относительно другой группы вокруг оси обозначен ϕ)

Закономерности в межъядерных расстояниях для связей одинаковых типов



Закономерности в валентных углах у атомов в подгруппе кислорода

Молекула	Угол α	Молекула	Угол α
			102°±0,5°
	104,52°±0,05°		109,5°±0,5°
	103,1°±3′	$\alpha_{ср} = 108° \pm 5°$	
	110,86°±0,04°		
	108,9°±2°		90,9°±0,1°
	112,8°±2,1°		96,2°±0,2°
	111,7°		104°±5°
	106,3°±1°	$\alpha_{ср} = 97° + 7°$	

Молекула	Угол α	Молекула	Угол α
			108,3°±0,5°
	92,1°		102,8°
	96,5°±1°	$\alpha_{ср} = \sim 100° \pm 8°$	
	98,9°		
	99,6°		90,2°
	98,3°		98°±2°
	91,3°±0,5°	$\alpha_{ср} = 94° \pm 4°$	

Основные положения теории МОЭПВО

Идея Льюиса – атомы удерживают друг друга совместно используя одну или более электронных пар. Координация ковалентных связей вокруг атома зависит от полного числа электронных пар в валентной оболочке, включая неподеленные пары.

Если к центральному атому *A* присоединены *n* атомов *X*, а также имеются *m* неподеленных пар, то в целом в валентной оболочке атома *A* находится *n+m* электронных пар. Форма молекулы AX_nE_m, где E обозначает электронную пару, зависит от координации *n+m* электронных пар в валентной оболочке атома *A*.

Допущения

1. Координация данного числа электронных пар в валентной оболочке определяется максимальным взаимным удалением этих пар друг от друга.

2. Электронные пары можно моделировать точечным зарядом, находящимся на поверхности сферы. Координация определяется максимальным удалением таких точек друг от друга.

3. Пространство, занимаемое электронной парой, представляется как электронное облако фиксированного объема и шаровидной формы. При этом присутствие в этом объеме других электронов не допускается.

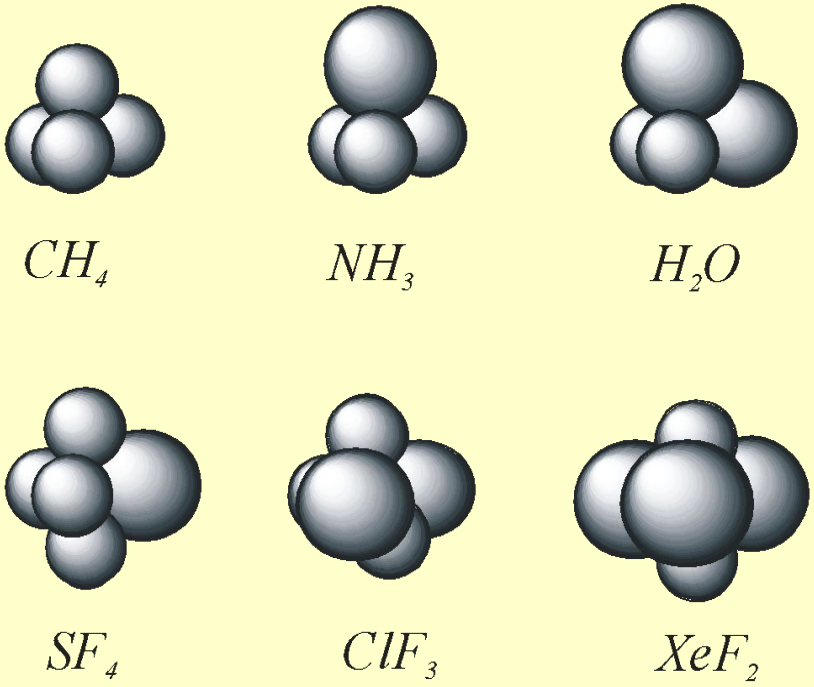
4. Домены (пространства, занимаемые электронным облаком пары электронов с противоположными спинами) неподеленных пар больше, чем связывающих. Домены связывающих пар растут с ростом электроотрицательности центрального атома и уменьшаются с ростом электроотрицательности лиганда.

5. Домены двойных и тройных связей больше, чем домены простых связей.

6. Величина взаимного отталкивания электронных пар уменьшается в ряду:

$$н.п. - н.п > н.п. - св.п. > св.п. - св.п.$$

Домены электронных пар для некоторых молекул



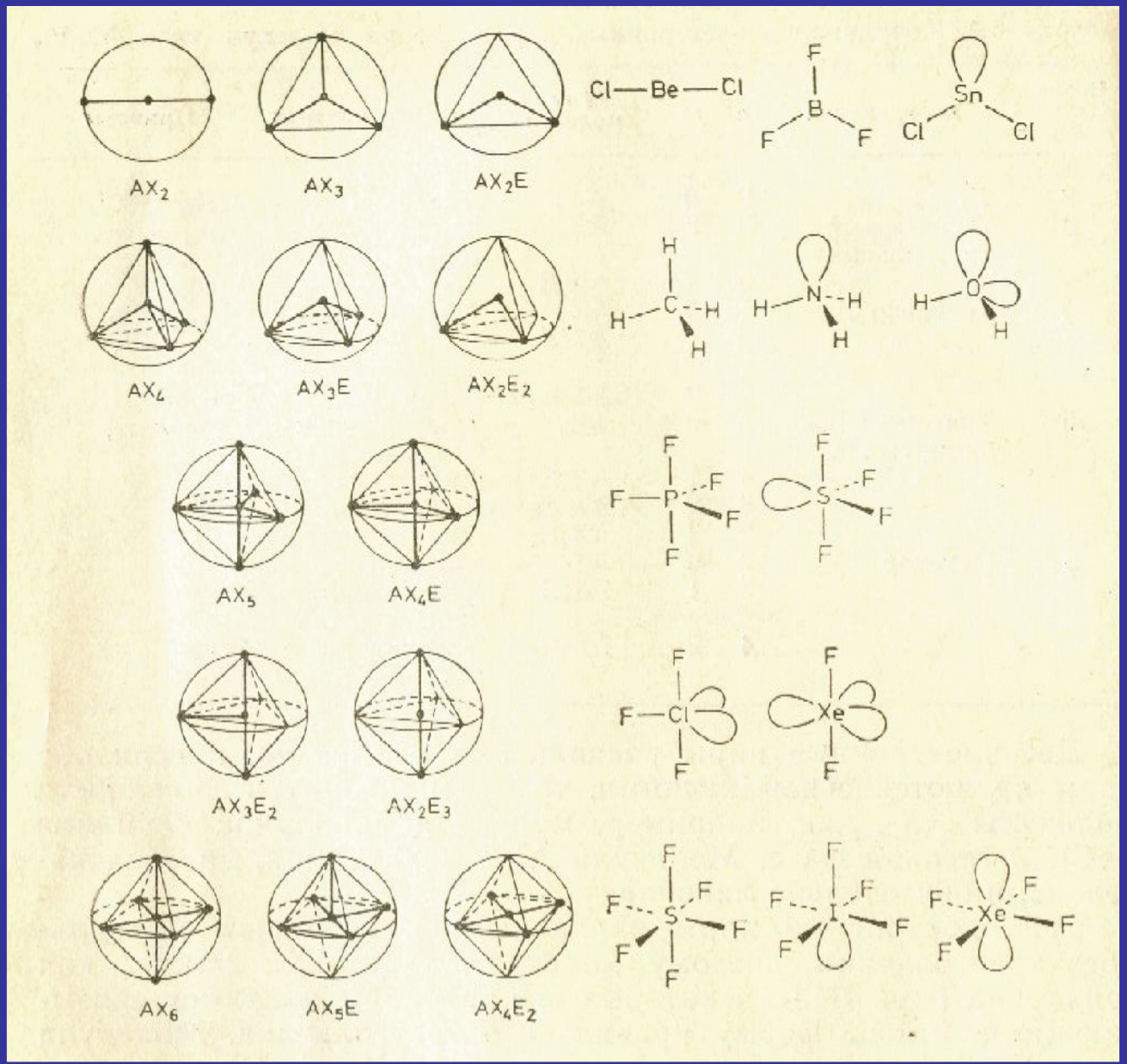
Ограничения

1. Неприменима к ионным связям.
2. В общем случае плохо описывает **трехцентровые** связи.
3. Лиганды должны быть не очень большими (стерические взаимодействия между ними могут превышать взаимодействия между химическими связями).
4. Неоднозначность предсказания для оболочек из 7-8 электронных пар
5. Для **несферического** центрального атомного остова модель не всегда пригодна.
6. Применима только если в веществе можно выделить молекулы.

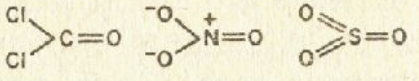
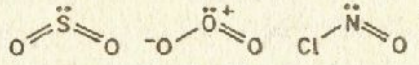
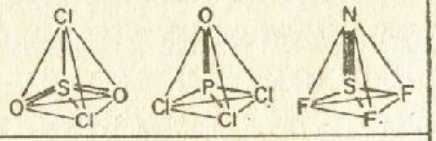
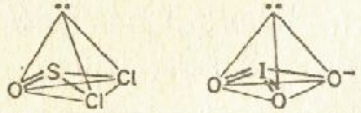
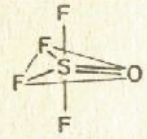
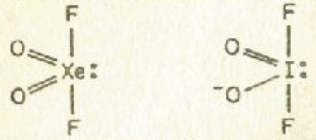
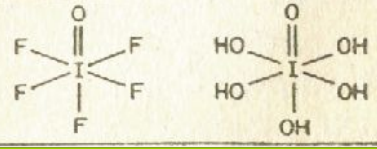
Формы молекул с координацией от двух до шести электронных пар

Число электронных пар	Координация	n	m	Тип молекул	Форма молекул	Примеры
2	Линейная	2	0	AX_2	Линейная	BeH_2, $BeCl_2$
3	Правильный треугольник	3	3	AX_3	Правильный треугольник	BCl_3, $AlCl_3$
		2	1	AX_2E	Угловая	$SnCl_2$
4	Тетраэдр	4	0	AX_4	Тетраэдр	CH_4, $SiCl_4$
		3	1	AX_3E	Тригональная пирамида	NH_3, PCl_3
		2	2	AX_2E_2	Угловая	H_2O, SCl_2
5	Тригональная бипирамида	5	0	AX_5	Тригональная бипирамида	PCl_5, AsF_5
		4	1	AX_4E	Дисфеноид	SF_4
		3	2	AX_3E_2	Т-образная	ClF_3
		2	3	AX_2E_3	Линейная	XeF_2
6	Октаэдр	6	0	AX_6	Октаэдр	SF_6
		5	1	AX_5E	Квадратная пирамида	BrF_5
		4	2	AX_4E_2	Плоский квадрат	XeF_4

Структуры молекул с координацией от двух до шести электронных пар



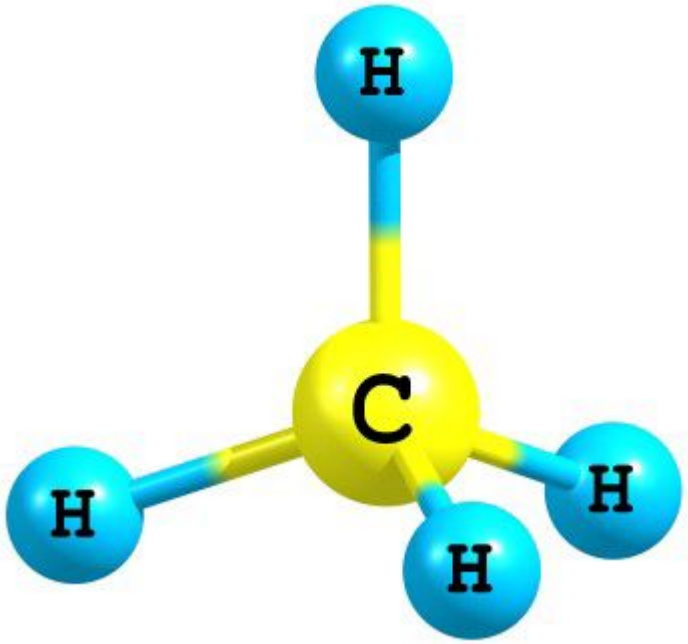
Формы молекул, содержащих двойные и тройные связи

Общее число связей и неподеленных пар	Координация	Число связей	Число неподеленных пар	Форма молекулы	Примеры
2	линейная	2	0	линейная	O=C=O H−C≡N
3	тригональная	3	0	треугольник	
		2	1	V-образная	
4	тетраэдрическая	4	0	тетраэдр	
		3	1	тригональная пирамида	
		2	2	V-образная	
5	тригонально-бипирамидальная	5	0	тригональная бипирамида	
		4	1	неправильный тетраэдр	
6	октаэдрическая	6	0	октаэдр	

Гибридные орбитали в молекуле метана

$$\psi_{sp^3}(1) = \frac{1}{2}(\psi_{2s} + \psi_{2p_x} + \psi_{2p_y} + \psi_{2p_z})$$

$$\psi_{sp^3}(2) = \frac{1}{2}(\psi_{2s} + \psi_{2p_x} - \psi_{2p_y} - \psi_{2p_z})$$

$$\psi_{sp^3}(3) = \frac{1}{2}(\psi_{2s} - \psi_{2p_x} + \psi_{2p_y} - \psi_{2p_z})$$

$$\psi_{sp^3}(4) = \frac{1}{2}(\psi_{2s} - \psi_{2p_x} - \psi_{2p_y} + \psi_{2p_z})$$