

***Лекция 5: Строение молекул.
Метод валентных связей***

Основные положения этого

метода:

- в образовании связи участвуют только электроны внешней электронной оболочки атома (валентные электроны);
- химическая связь образуется двумя валентными электронами различных атомов с антипараллельными спинами. При этом происходит перекрывание электронных орбиталей и между атомами появляется область с повышенной электронной плотностью, обуславливающая связь между ядрами атомов. Таким образом, в основе метода ВС лежит образование двухэлектронной, двухцентровой связи;

- химическая связь осуществляется в том направлении, в котором обеспечивается наибольшее перекрывание атомных орбиталей;
- из нескольких связей данного атома наиболее прочной будет связь, которая получилась в результате наибольшего перекрывания атомных орбиталей;
- при образовании молекул электронная структура (кроме внешней электронной оболочки) и химическая индивидуальность каждого атома в основном сохраняются.
- Ковалентная связь обладает рядом важных свойств. К их числу относятся насыщенность и направленность.

Насыщаемость –

- характерное свойство ковалентной связи. Она проявляется в способности атомов образовывать ограниченное число ковалентных связей. Это связано с тем, что одна орбиталь атома может принимать участие в образовании только одной ковалентной химической связи. Данное свойство определяет состав молекулярных химических соединений.

Направленность –

- свойство ковалентной связи, определяющее геометрическую структуру молекулы. Причина направленности связи заключается в том, что перекрывание электронных орбиталей возможно только при их определенной взаимной ориентации, обеспечивающей наибольшую электронную плотность в области их перекрывания, когда образуется прочная химическая связь. С направленностью связей тесно связан вопрос о гибридизации орбиталей.

Теория гибридизации

- Гибридные орбитали, возникающие в результате взаимодействия различных атомных орбиталей, имеют уже одинаковую форму. Они вытянуты в сторону соседних атомов, и поэтому достигается более полное перекрывание с электронными орбиталями этих атомов.
- Процесс гибридизации связан с затратой определенной энергии. Эту затрату компенсирует избыток энергии, который выделяется при образовании более прочной химической связи при перекрывании гибридных орбиталей. Таким образом, гибридизация приводит к уменьшению энергии образующейся молекулы, к ее большей устойчивости

Основные принципы гибридизации:

- Участвующие в гибридации атомные орбитали должны иметь близкие значения энергии.
- Число гибридных орбиталей должно быть равно числу исходных атомных орбиталей.
- Гибридные атомные орбитали представляют собой линейные комбинации исходных орбиталей.
- Гибридные орбитали располагаются в пространстве так, чтобы обеспечить между ними минимальное отталкивание.

Типы гибридизации

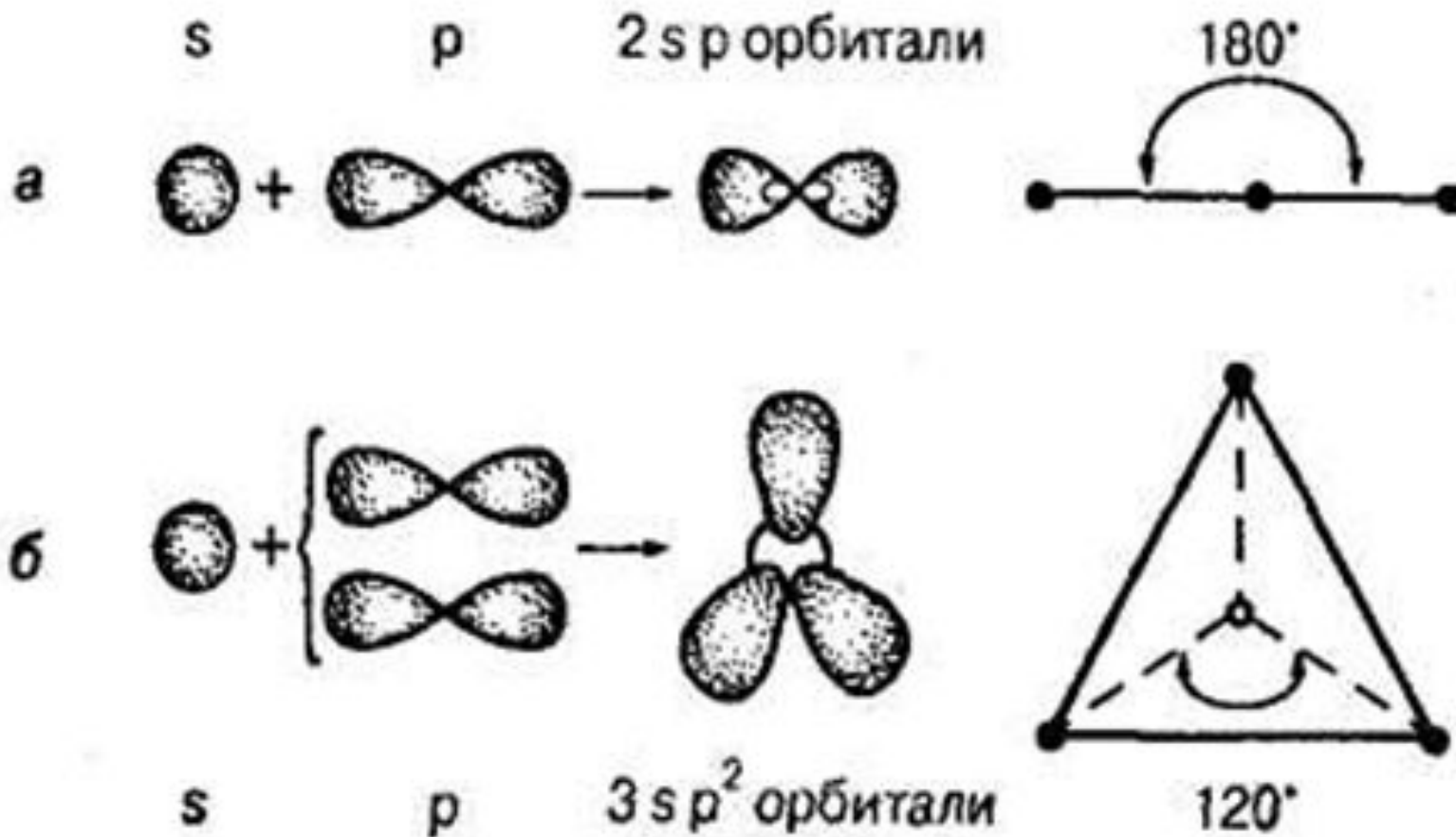


Рис. 1. sp - и sp^2 -гибридизация атомных орбиталей

Типы гибридизации

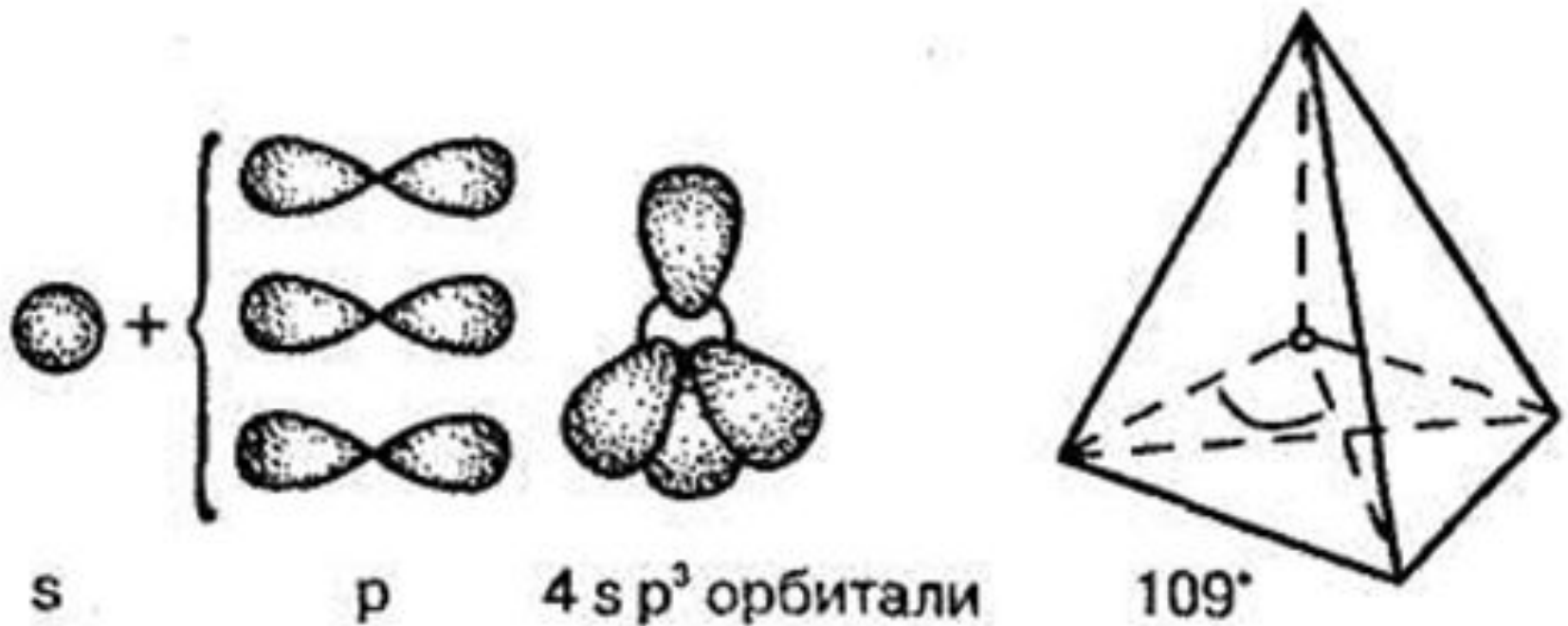


Рис. 2. sp^3 -гибридизация атомных орбиталей

Гибридизация d-орбиталей

- В этом случае наблюдаются более сложные виды гибридизации, связанные с их взаимодействием. Наиболее часто встречаются sp^3d^2 - и sp^3d -гибридизации, причем в первом случае пространственная конфигурация гибридных орбиталей и молекул октаэдрическая (SF_6), во втором – бипирамидальная (PCl_5).