

# ТЕОРИЯ РЕЗОНАНСА

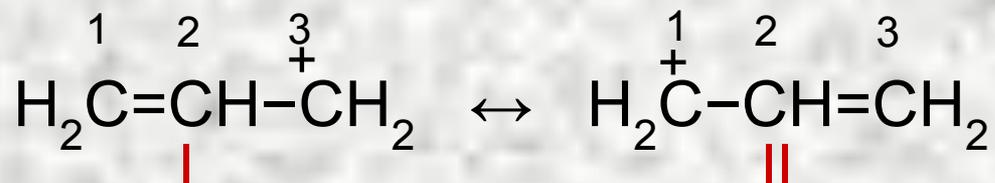
Под термином "РЕЗОНАНС" следует понимать способ изображения молекулы, который применяется в том случае, когда для адекватного (точного) описания данного соединения не может быть использовано единственное электронное распределение.

В теории резонанса реальную молекулу представляют как гибрид структур, которые могут быть нарисованы, но сами по себе в действительности не существуют.

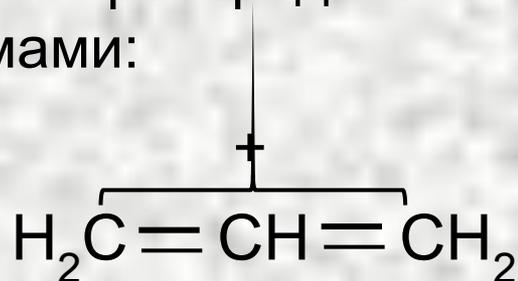
Эти гипотетические структуры называют РЕЗОНАНСНЫМИ (КАНОНИЧЕСКИМИ, ГРАНИЧНЫМИ) структурами.

# ТЕОРИЯ РЕЗОНАНСА

Например: аллил-катион можно представить двумя резонансными структурами I и II:



Видно, что положительный заряд в аллил-катионе не является точно локализованным на одном каком то атоме углерода, а рассредоточен (делокализован) между двумя атомами:



# ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ ТЕОРИИ РЕЗОНАНСА

1) Если молекула может быть представлена двумя или более структурами, отличающимся только распределением электронов, т.е. структурами, в которых расположение атомных ядер одинаково, то становится возможным **резонанс**. **Реальная молекула представляет собой гибрид этих граничных (канонических) структур и не может быть удовлетворительно представлена ни одной из них.**

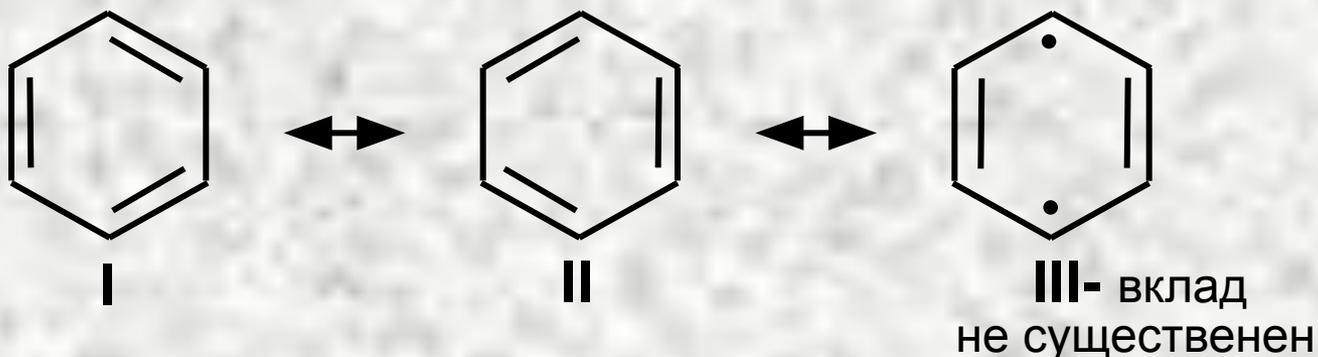
2) Хотя каждая из структур вносит свой вклад в гибрид, наибольший вклад (наилучшее приближение к гибриду) дают структуры с наименьшей энергией (более устойчивые): чем устойчивее структура, тем больше её вклад в гибрид. Отсюда следует:

3) Резонансный гибрид стабильнее чем любая из участвующих в резонансе структур. Такое увеличение устойчивости называют **энергией резонанса**

# ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ ТЕОРИИ РЕЗОНАНСА

## ВКЛАДЫ ГРАНИЧНЫХ СТРУКТУР В ГИБРИД

**2.1.** Все структуры, вклады которых существенны, должны располагать одинаковым (наименьшим) числом неспаренных электронов:



**2.2. Локализация заряда:** из двух структур с разделёнными зарядами более устойчивой будет та структура, у которой минус-заряд будет расположен на более ЭО атоме:



# ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ ТЕОРИИ РЕЗОНАНСА

## ВКЛАДЫ ГРАНИЧНЫХ СТРУКТУР В ГИБРИД

**2.3.** Чем больше степень разделения зарядов в граничной структуре, тем меньше значение этой структуры для описания резонансного гибрида:



**2.4.** Соблюдение правила октета (полнота или неполнота заполнения октета) :

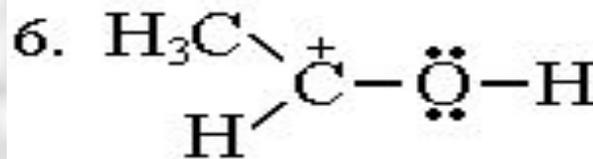
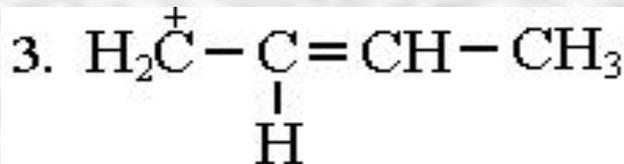
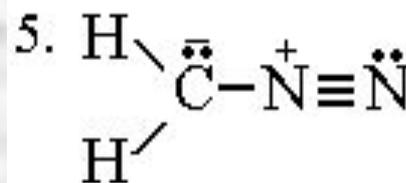
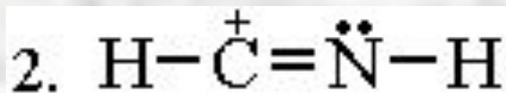
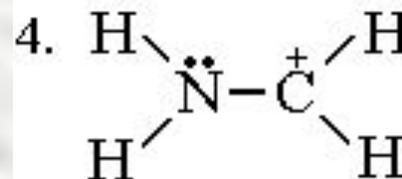
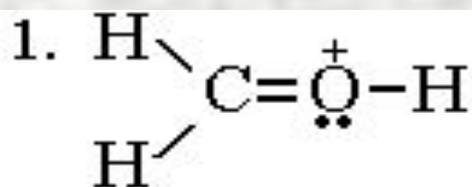


Несмотря на то, что в структуре II «-» заряд расположен на более ЭО атоме, вклад этой структуры будет более существенным, так как соблюдается правило октета: в валентной оболочке атома Cl находится четыре пары электронов ( две неподелённые и две связывающие).

# ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ ТЕОРИИ РЕЗОНАНСА

## ДОМАШНЕЕ ЗАДАНИЕ

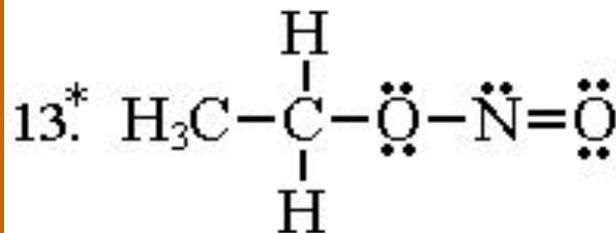
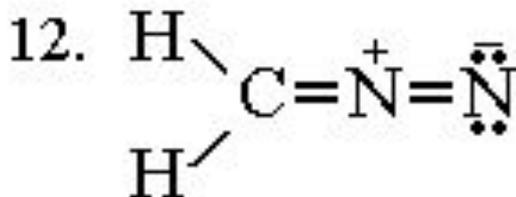
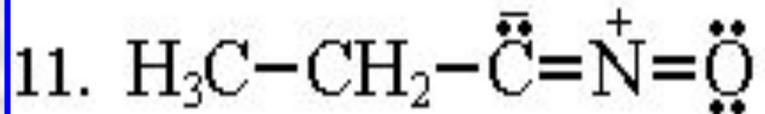
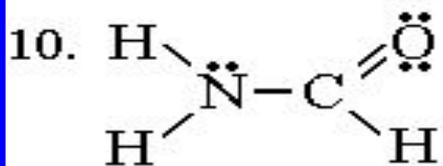
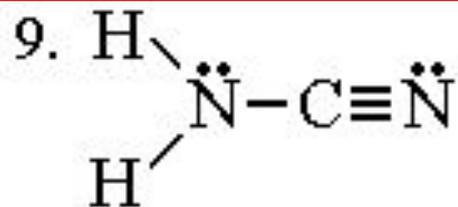
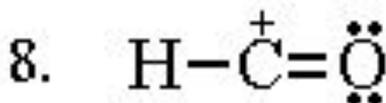
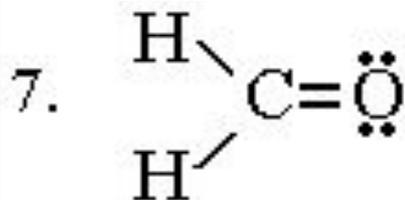
Нарисовать граничные (канонические) структуры, находящиеся в резонансе со структурами изображёнными ниже:



# ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ ТЕОРИИ РЕЗОНАНСА

## ДОМАШНЕЕ ЗАДАНИЕ

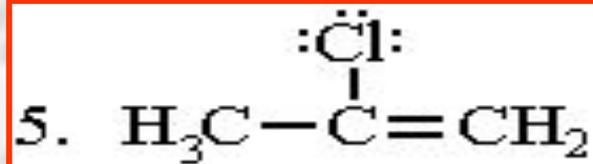
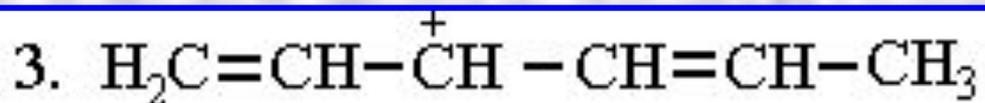
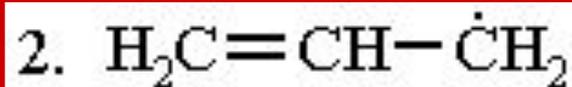
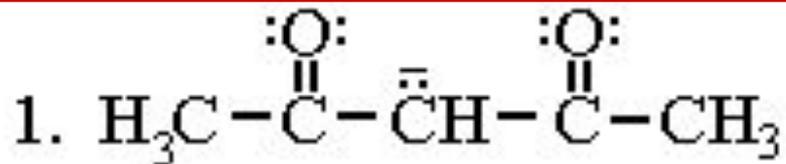
Нарисовать граничные (канонические) структуры, находящиеся в резонансе со структурами изображёнными ниже:



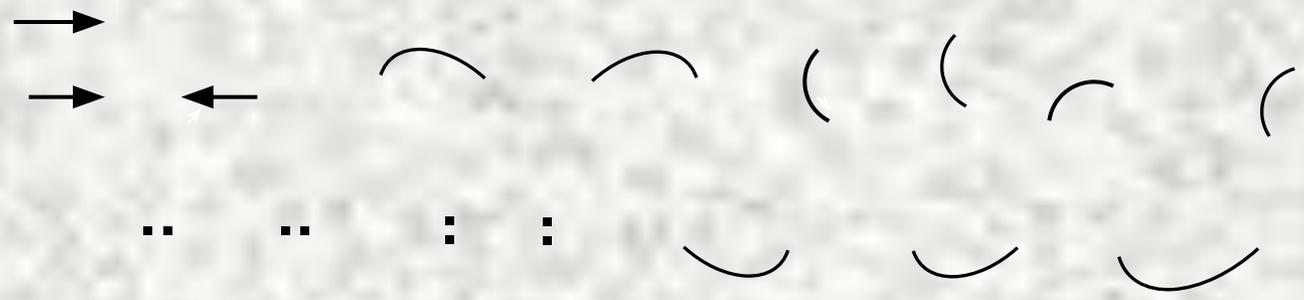
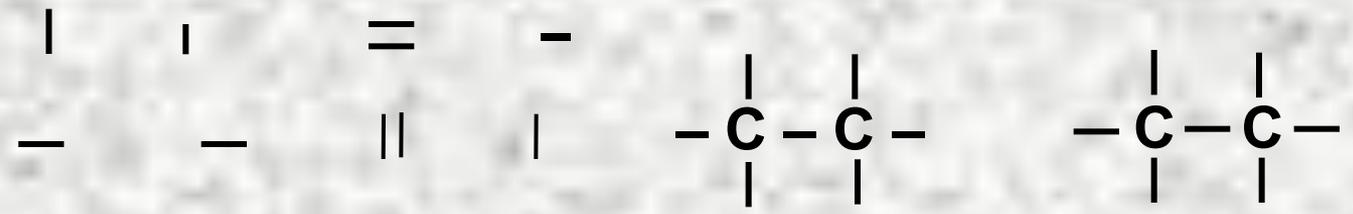
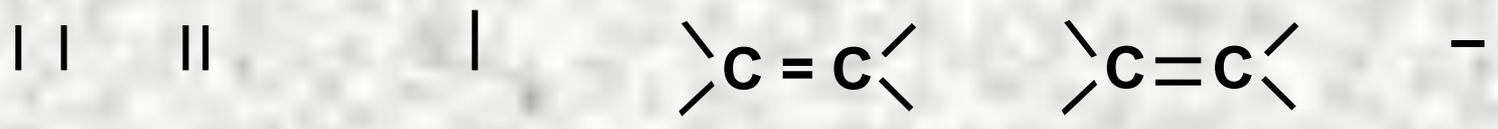
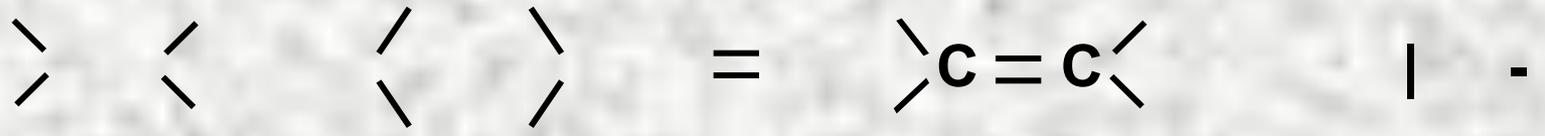
# ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ ТЕОРИИ РЕЗОНАНСА

## ДОМАШНЕЕ ЗАДАНИЕ

Нарисовать граничные (канонические) структуры, находящиеся в резонансе со структурами изображёнными ниже:



End  
следует...



2) Если участвующие в резонансе структуры близки по устойчивости (т.е. содержат примерно одинаковое количество энергии), то в этом случае **резонанс будет весьма существенным**. Вклад каждой структуры в гибрид зависит от относительной устойчивости структур: чем устойчивее структура, тем больше её вклад.

Отсюда следует: