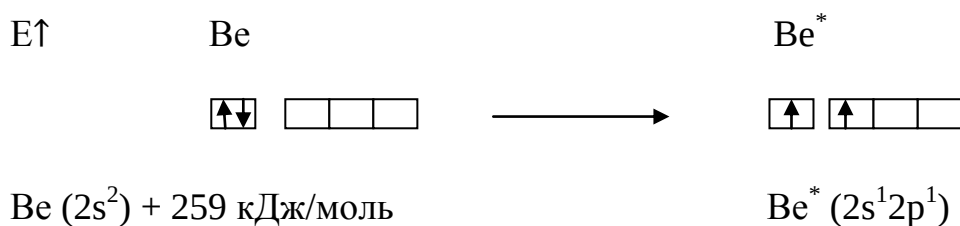


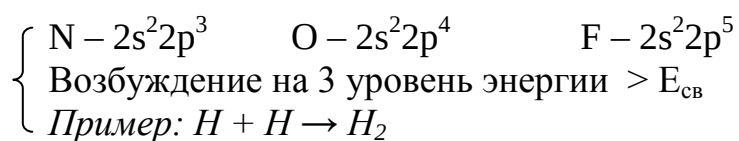
ЛЕКЦИЯ № 6

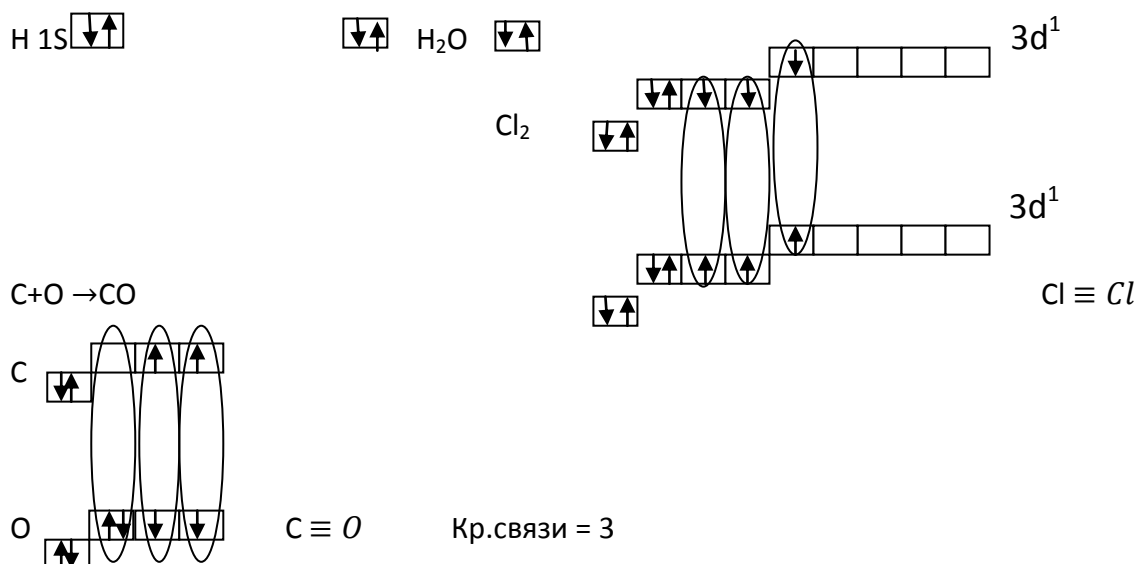
6.1 Теория валентных связей

Образование связей между атомами рассматривается как формирование общих электронных пар для двух соседних атомов, сосредоточенных в небольшом объеме между ядрами атомов, т.е. локализованных в пространстве. Связь может образовываться за счет неспаренных электронов двух атомов (обменный механизм) и за счет электронной пары одного атома (донор) и не занятой атомной орбитали другого (акцептор). В последнем случае реализуется донорно-акцепторный или дативный механизм. Максимально возможная валентность атома определяется суммой числа неспаренных электронов, числа электронных пар, числом не занятых атомных орбиталей, которые участвуют в образовании химических связей. Валентность атома в молекуле равна числу общих с соседними атомами электронных пар.



При образовании одной химической связи происходит выделение энергии от 160 до 900 кДж/моль.





6.2. Гибридизация атомных орбиталей

Обычно в атомах связи формируются за счет электронов разных энергетических состояний. $\text{C}^* 2s^1 2p^3 \rightarrow \text{CH}_4$ (все связи равноценны). Теория резонанса, ОНПВО

Форма молекул, направление химических связей в пространстве объясняется взаимным расположением и углами между МО, которые формируются в результате наложения (перекрывания), сложения и вычитания АО атомов. Обычно атомы формируют связи за счет различных по энергии орбиталей.

Например: $\text{C}^*(2s^1 2p^3)$ в образовании 4-х связей в CH_4 одновременно принимают участие s и p – электроны. Не смотря на различие формы их электронных орбиталей связи, образованные с их участием, оказываются равноценными и расположенными симметрично.

В методе ВС используется представление о гибридизации АО центрального атома. Согласно этому представлению исходные неравноценные АО как бы «перемешиваются», образуя энергетически равноценные или гибридные орбитали. Это приводит к выигрышу энергии, поскольку гибридные орбитали обеспечивают лучшее перекрывание между орбиталями. Число гибридных орбиталей равно числу участвующих в гибридизации исходных АО.

Гибридизация АО приводит к образованию наиболее симметричной фигуры.

sp – линейная ($\angle = 180^\circ$)

sp^2 –треугольная ($\angle = 120^\circ$)

sp^3 – тетраэдр ($\angle = 109^\circ 28'$)

Типы симметрий химических связей

σ -связь – АО по оси связи перекрываются.



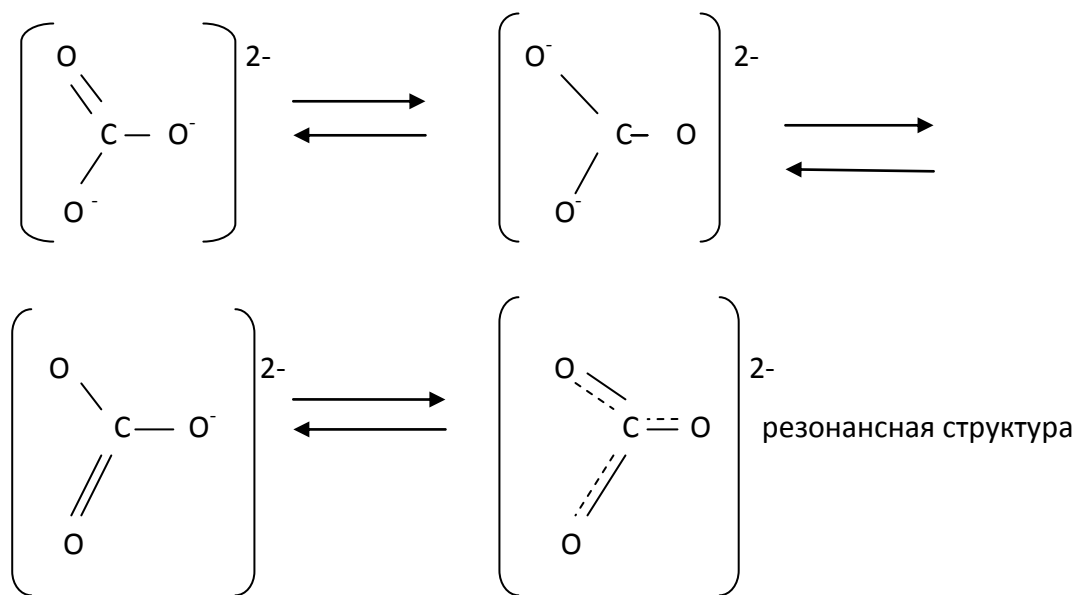
π -связь – АО перекрываются по обеим сторонам от оси, связывающей ядра атомов.

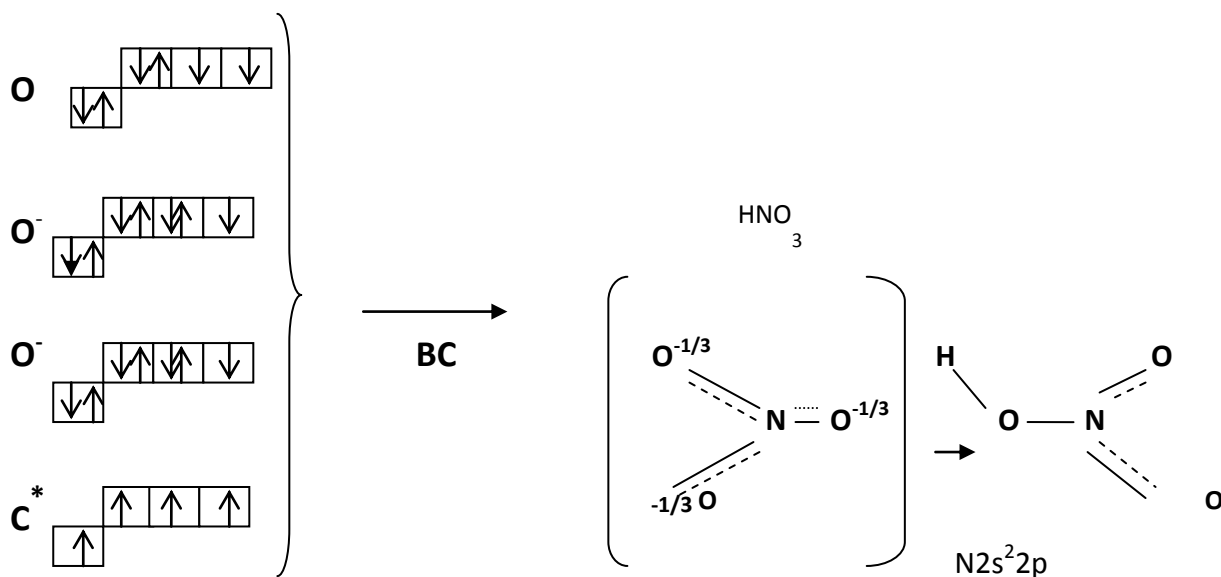


δ -связь – четыре области перекрывания

ϕ -связь

6.3. . Делокализация связей





Недостатки теории ВС: не возможно объяснить

1. парамагнетизм O_2
2. устойчивость He^+_2, Ne^+_2

6.4. Теория МО

В теории МО рассматривается перекрывание, наложение, взаимодействие АО сразу всех электронов молекулы или структурной единицы вещества. В результате получается сразу локализованные МО. Кратность (или порядок) связи определяется количеством электронных пар, приходящихся на каждый меж-атомный промежуток. Электронная пара может принадлежать нескольким промежуткам, кратность связи может быть дробной. Более того, в методе МО связь может образовываться одним электроном, а не парой, как в методе ВС. Кратность такой связи для двухатомной молекулы равна $\frac{1}{2}$ (H_2^+).

Заполнение МО электронами происходит в соответствии с теми правилами, что и заполнение АО: принцип наименьшей энергии, Паули, правила Гунда.