

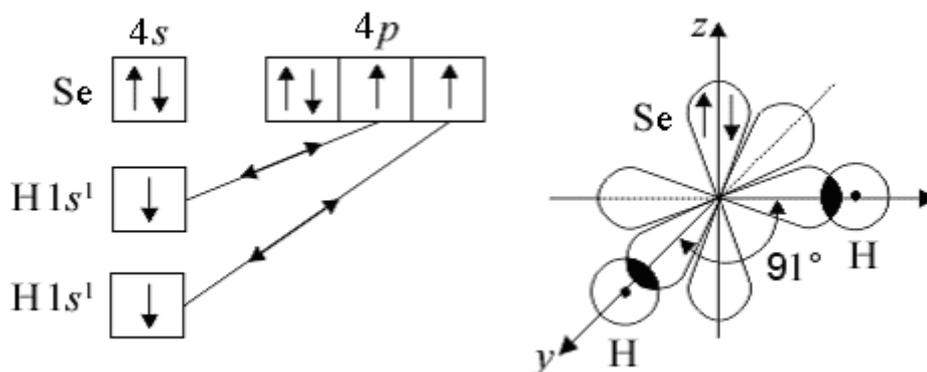
Лекция 5

Структура и полярность многоатомных молекул

План лекции

1. Примеры различных структур молекул и их характеристики.
2. Гибридизация атомных орбиталей.
3. Влияние неподеленных пар на структуру и полярность.

ПРИМЕРЫ:



Образование молекулы H_2Se

\Rightarrow угловая структура ($\angle 91^\circ$)

$\text{ЭО}(\text{H}) = 2,1$ и $\text{ЭО}(\text{Se}) = 2,4 \Rightarrow$ связь полярная.

! Полярность молекулы:

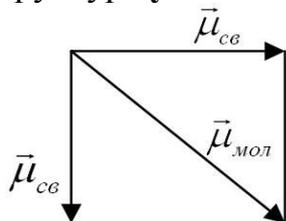
Электрический момент диполя молекулы (μ_m) равен векторной сумме электрических моментов диполей всех связей в молекуле.

Если $\mu_m = \sum \mu_{\text{св}} = 0 \Rightarrow$ молекула неполярная

Если $\mu_m = \sum \mu_{\text{св}} \neq 0 \Rightarrow$ молекула полярная

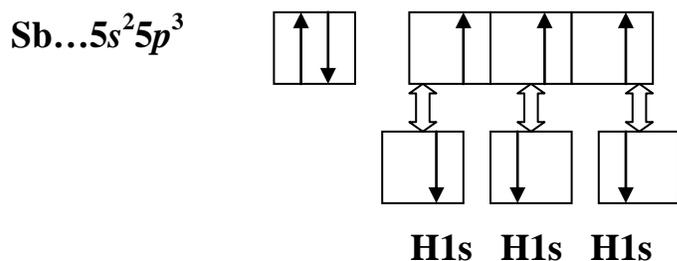
Полярность молекулы зависит от ее геометрической структуры.

В случае H_2Se – структура угловая, векторная сумма имеет вид:



$\mu_m = \sum \mu_{\text{св}} \neq 0 \Rightarrow$ молекула в целом полярная.

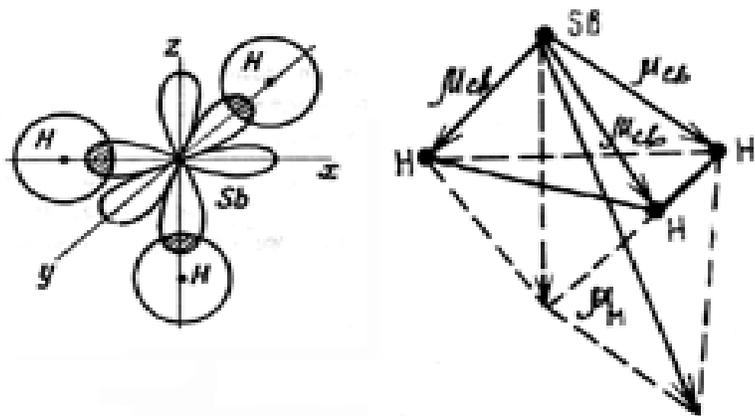
Образование молекулы SbH_3



Структура молекулы – **пирамидальная**;

связь полярная, т.к. $\Delta\text{ЭО} \neq 0$;

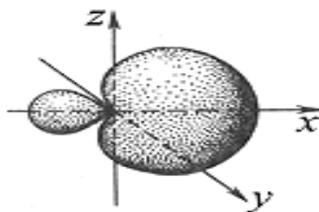
$\mu_{\text{м}} = \Sigma \mu_{\text{св}} \neq 0 \Rightarrow$ молекула в целом **полярная**.



Гибридизация атомных орбиталей

Если у одного атома в образовании химических связей участвуют разные по типу АО (s -, p -, d - или f -АО), то химические связи образуются с участием не «чистых», а «смешанных», или гибридных орбиталей.

Таким образом, **гибридизация** – это смешение АО **разного типа у одного атома** с разными (но близкими) энергетическими состояниями, вследствие которого возникает такое же число **одинаковых** по **форме** и **энергии** орбиталей, симметрично расположенных в пространстве.



Гибридная sp -орбиталь, возникающая при взаимодействии s и p - орбиталей у одного атома

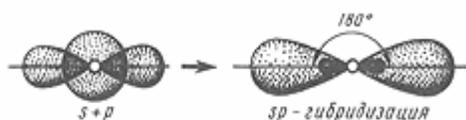


Схема sp -гибридизации

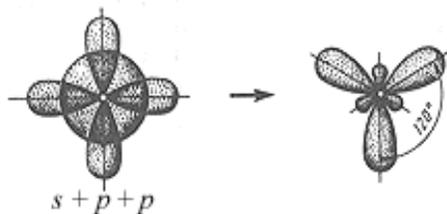


Схема sp^2 -гибридизации

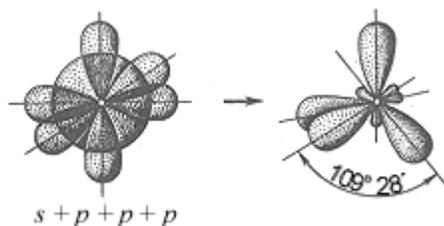
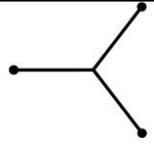
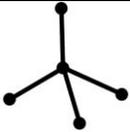
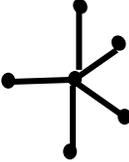
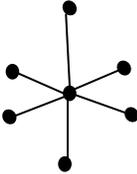
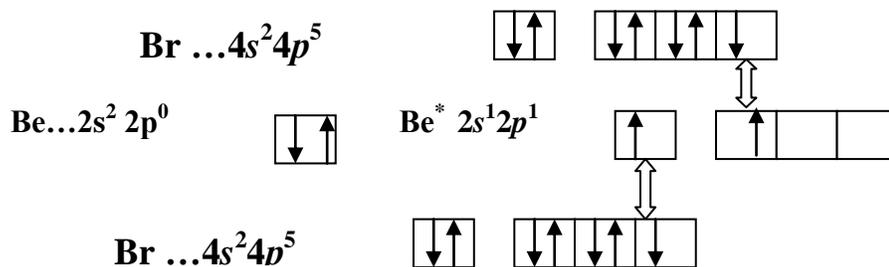


Схема sp^3 -гибридизации

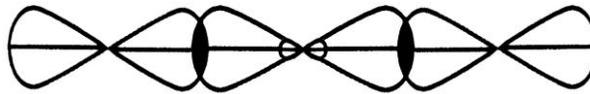
Орбитали, участвующие в гибридизации	Тип гибридизации	Структура молекулы	Валентный угол
$s+p$	sp	 линейная	180°
$s+p+p$	sp^2	 плоский треугольник	120°

$s+p+p+p$	sp^3	 тетраэдр	$109,3^\circ$
$s+p+p+p + d$	sp^3d	Тригональная бипирамида 	$90^\circ; 120^\circ$
$s+p+p+p + d + d$	sp^3d^2	Октаэдр 	90°

Молекула BeBr_2



- sp -гибридизация АО Be, $\angle 180^\circ$
- пространственная структура \Rightarrow линейная.

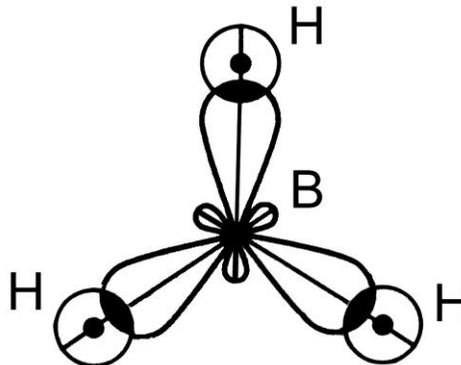
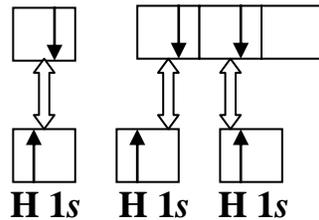


Br Be Br

- две полярные связи $\mu_{\text{св}} \neq 0$, т.к. ЭО Be и Br равны 1,5 и 2,8
 $\Rightarrow \text{Br} \leftarrow \text{Be} \rightarrow \text{Br}$
- $\mu_{\text{мол}} = \Sigma \mu_{\text{св}} = 0 \Rightarrow$ молекула в целом неполярная.

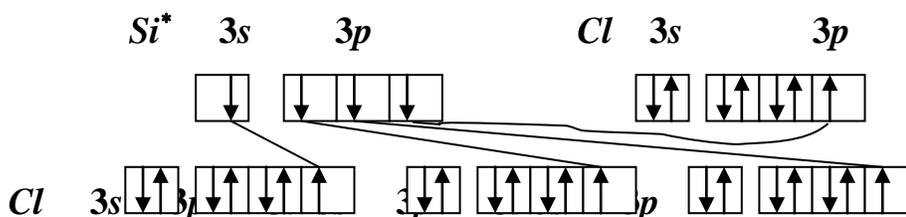
Молекула BH_3

$\text{B}^* \quad 2s^1 \quad 2p^2$

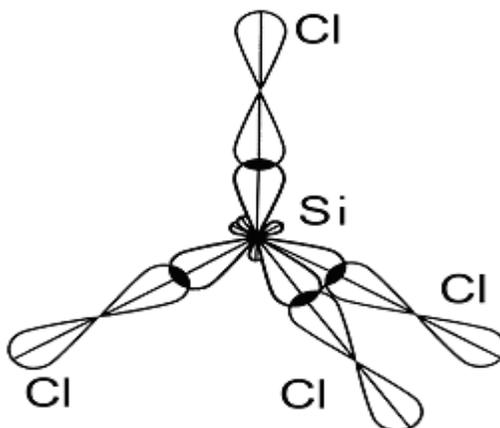


- sp^2 -гибридизация АО бора B
- 3 σ -связи, $\angle 120^\circ$
- три полярные связи $\Delta \text{ЭО} = (2.1 - 2.0) \neq 0$
- структура молекулы – плоская, треугольная
- $\mu_{\text{мол}} = \Sigma \mu_{\text{св}} = 0 \Rightarrow$ молекула BH_3 - неполярная.

Молекула SiCl_4



- одна s -АО и три p -АО кремния $\Rightarrow sp^3$ -гибридизация АО
- структура молекулы \Rightarrow тетраэдр, $\angle 109,3^\circ$
- связи полярные, но $\Sigma\mu_{\text{мол}} = 0$ - молекула в целом неполярная.

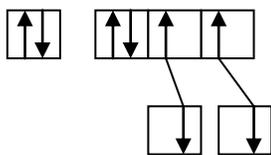


! ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ :

- если гибридные АО центрального атома взаимодействуют с АО других **одинаковых атомов**, то молекула симметричная и \Rightarrow **неполярная** (CH_4 , BF_3).
- если гибридные АО взаимодействуют с АО **разных атомов** (CH_2Br_2 , BF_2Cl), то молекулы \Rightarrow **полярные**, т. к. величины векторов электрических моментов диполей отдельных связей **не одинаковы** $\rightarrow \Sigma\mu_{\text{св}} \neq 0$.

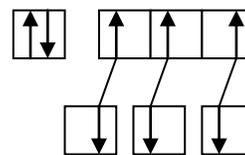
Особенности молекул NH_3 и H_2O – влияние неподеленных пар электронов

O... $2s^2 2p^4$

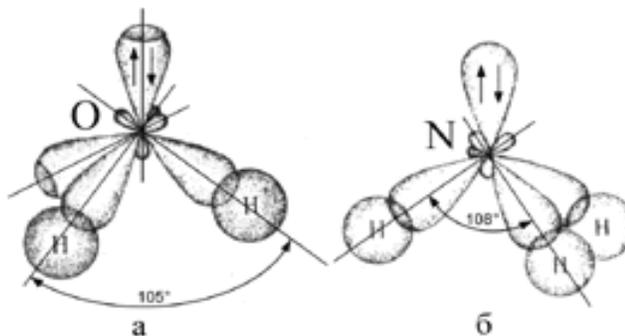


H $1s^1$ H $1s^1$

N... $2s^2 2p^3$



H $1s^1$ H $1s^1$ H $1s^1$



Пространственная структура молекул
а – H_2O и б – NH_3 .

Структура молекулы H_2O – **угловая с валентным углом $104,5^\circ$** молекулы NH_3 – **пирамидальная с углом при вершине 107°**

Структуры установлены методом рентгеноструктурного анализа.

Метод ВС объясняет величину углов, отличную от 90° , предполагая sp^3 – гибрилизацию АО азота «N» и кислорода «O».

● В гибрилизации могут участвовать вакантные АО, АО с неподеленными парами электронов и АО с неспаренными электронами.

● Неподеленные электронные пары (НП) влияют на величину валентных углов \Rightarrow силы отталкивания между ними больше, чем между относительно локализованными электронными парами образующими связь.

В молекуле NH_3 одна НП уменьшает тетраэдрический угол ($109,3^\circ$) до 107° , а в молекуле H_2O две НП уменьшают его до $104,5^\circ$.

ИОННАЯ СВЯЗЬ

Это связь, образованная в результате электростатического взаимодействия ионов, ее можно считать предельным случаем полярной ковалентной связи:

анион A^- , катион K^+ .

Особенности ионной связи:

не обладает

- насыщенностью
- направленностью
- повышенной электронной плотностью в области связывания

▼ Каждый ион окружен **сферическим** электрическим полем, действующим на любой другой ион.

▼ Сила взаимодействия ионов определяются величиной их заряда и расстоянием между ними по закону Кулона.

▼ Ион **окружает** себя наибольшим числом ионов противоположного заряда в определенном порядке, позволяющем занять минимально возможный объем с минимальной потенциальной энергией.

Ионные кристаллы - это гигантские полимерные молекулы.

Формулы (NaCl , CaF_2 , $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$) - отражают лишь состав.

- Понятие валентности к ионной связи **неприменимо**. Чисто ионная связь не существует: **доля ионности** связи максимальна составляет около 95%, например в $\text{Na}^{+0.9}\text{Cl}^{-0.9}$)
- Ионные связи - **прочные**.
- Твердые кристаллические вещества ионного типа - **тугоплавкие, высокопрочные, но хрупкие, растворяются в полярных растворителях** (например, в H_2O).

МЕТАЛЛИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ

Представляет собой специфический вид связи **в твердых металлах**.

Металлические кристаллы:

- в узлах расположены положительные ионы атомов металлов, имеющих низкие величины электроотрицательности и энергии ионизации.

Металлическая связь осуществляется взаимодействием большого числа обобществленных свободных (делокализованных) электронов внешних электронных оболочек атомов и положительных ионов, образующих кристаллическую решетку.

К металлическим кристаллам (металлам) принадлежат большинство элементов периодической системы.

- **Энергия** металлической связи меньше, чем ковалентной.

- Металлическая связь **не обладает насыщенностью и направленностью**.

- Металлы обладают **характерным блеском** и **высокой отражательной способностью** поверхности,

высокой тепло- и электропроводностью (вследствие наличия свободных электронов),

пластичностью (ковкостью) при механических деформациях, обусловленной относительной подвижностью ионов металлов в узлах решетки.