

3,5. Метод валентных связей



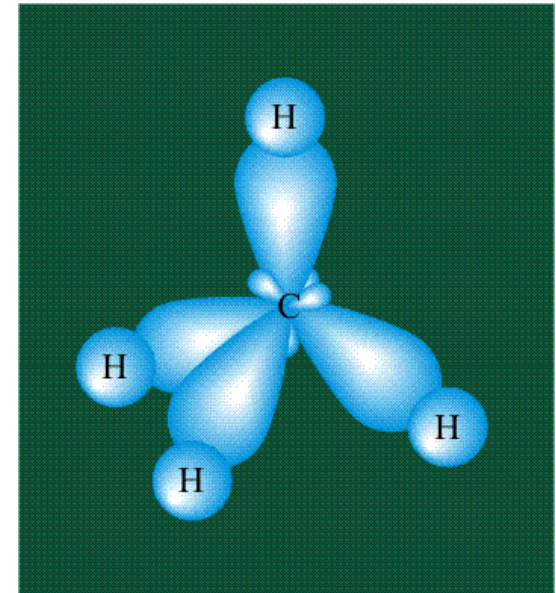
Метод валентных связей

(Гайтлер, Лондон, Слетер, Полинг):
2 атома связываются одной или несколькими общими электронными парами

- 1) связь *двухцентровая*,
- 2) связь *двухэлектронная*

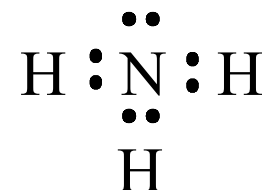
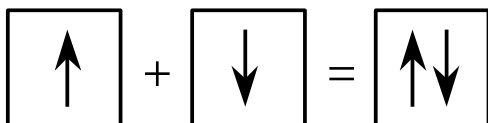
Преимущества:

- 1. Простота и наглядность, в том числе для описания многоатомных молекул.
- 2. Возможность предсказания *количественного состава* молекул.
- 3. «Дополнения» к классическому методу дают возможность предсказания *геометрии* молекул.

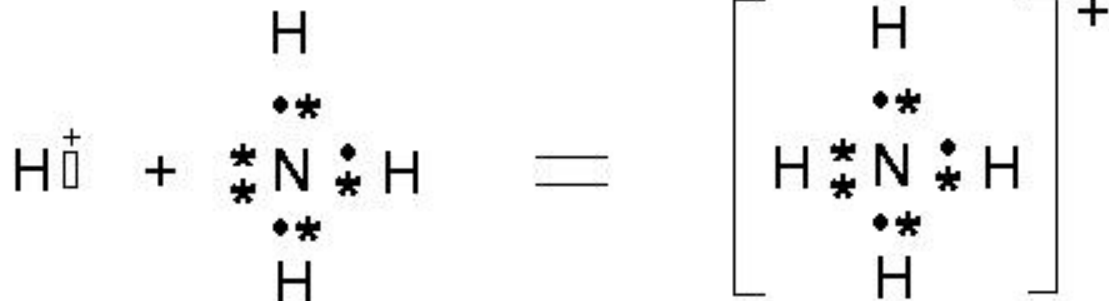
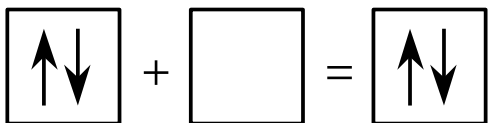


Механизмы образования ковалентной связи

- Обменный

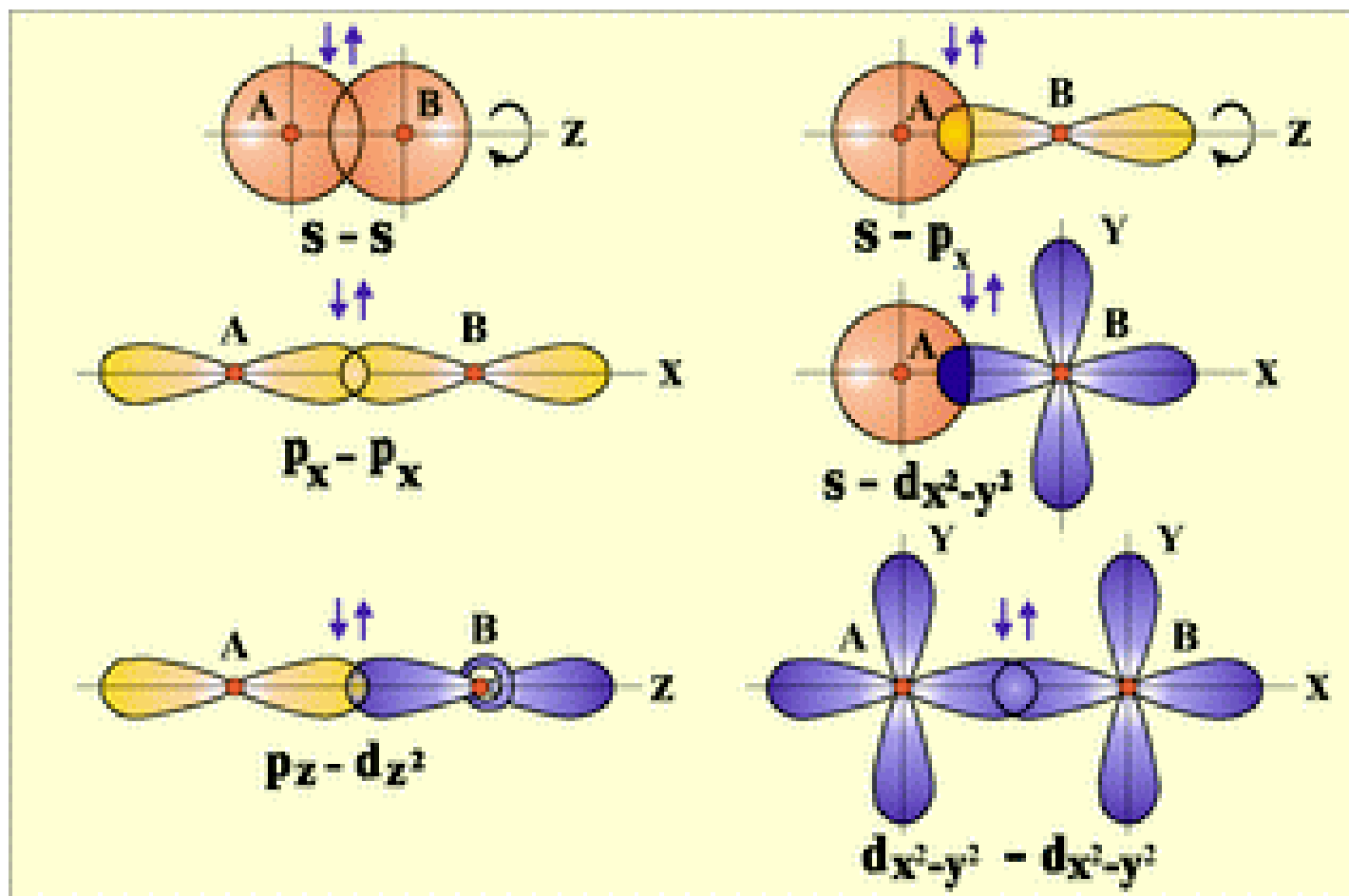


- Донорно-акцепторный



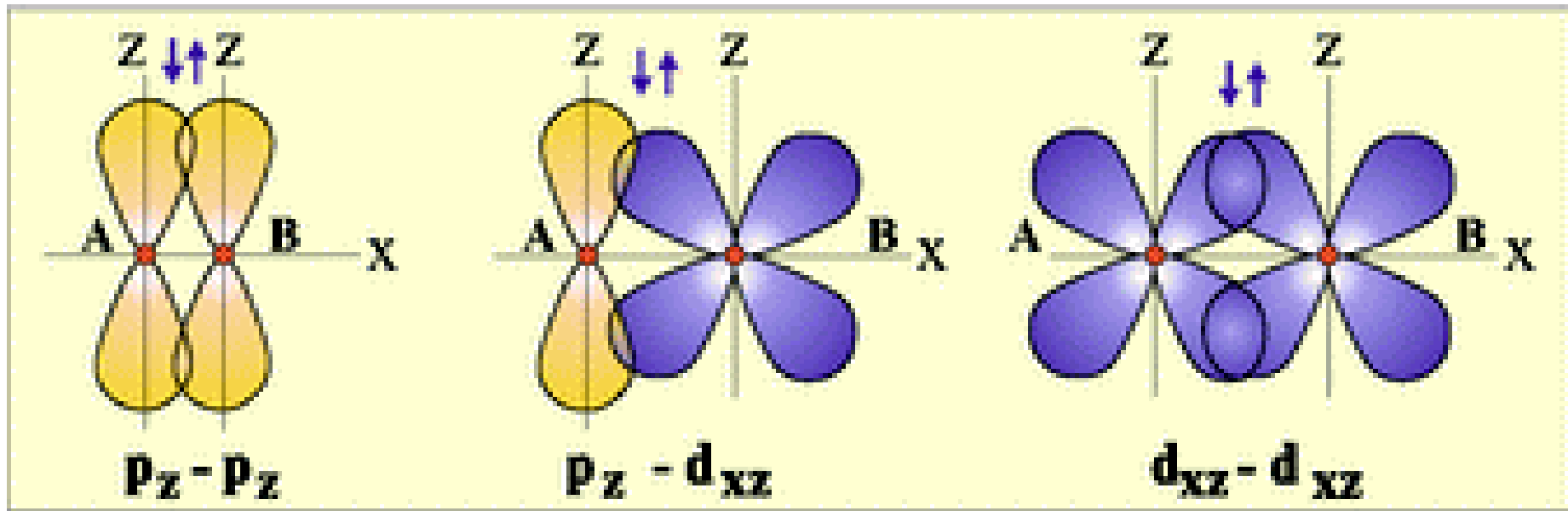
Типы перекрывания электронных облаков

- σ -связь – перекрывание вдоль линии, соединяющей центры атомов



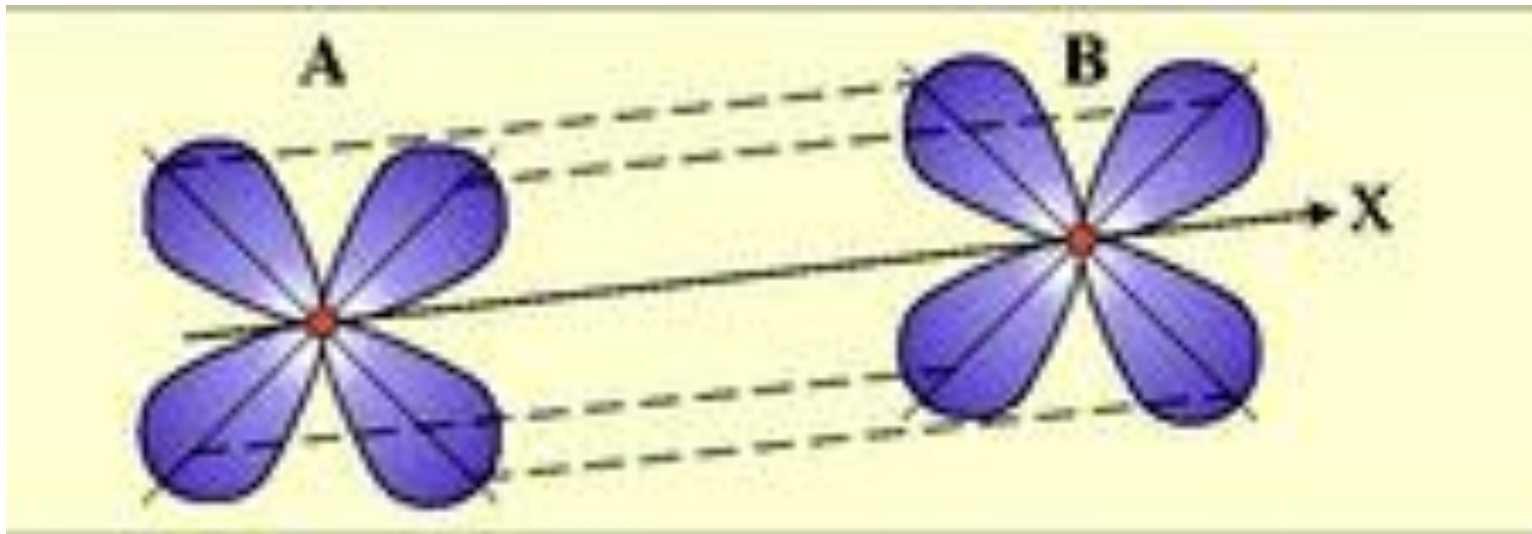
Типы перекрывания электронных облаков

- π -связь – перекрывание над и под линией, соединяющей атомы

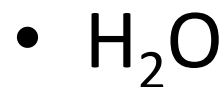
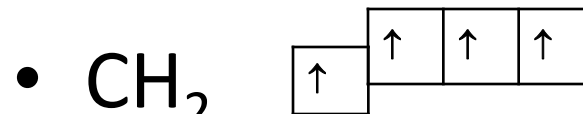
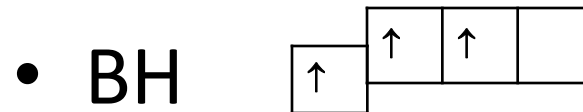
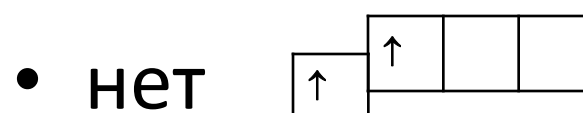
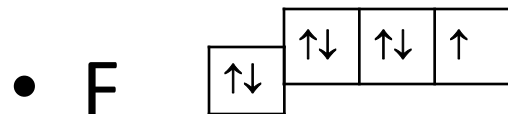
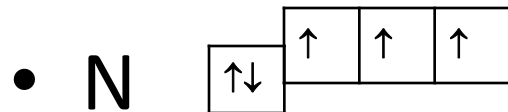
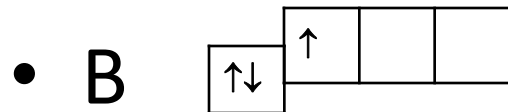
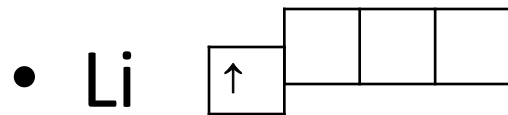


Типы перекрывания электронных облаков

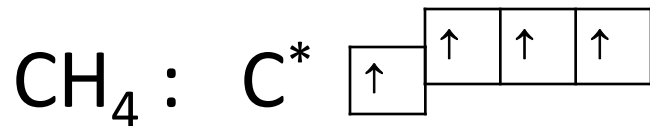
- δ -связь – перекрывание 4 лепестков электронных облаков



Водородные соединения элементов 2 периода



Гибридизация



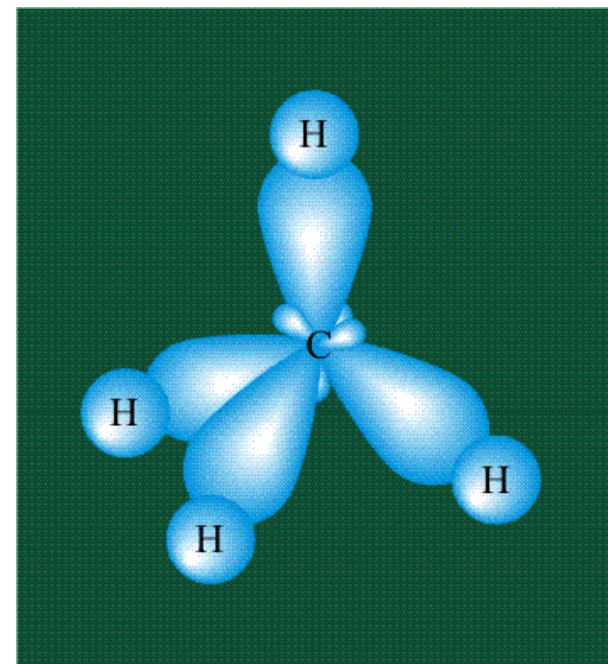
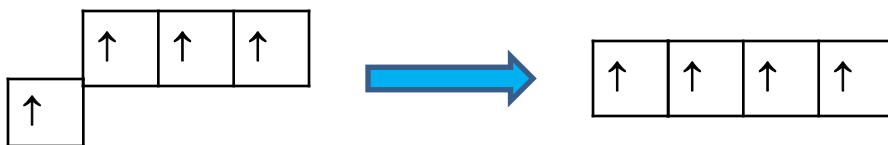
- Энергии s и p разные! $\Rightarrow$ энергии связей разные
 $\Rightarrow$ длины связей разные
- Направление p – под 90° ! Направление s – ?

А в реальности:

$\angle 109^\circ 28'$, $l = 0,109 \text{ нм}$



- Усреднение энергий орбиталей
(и форм эл. облаков)

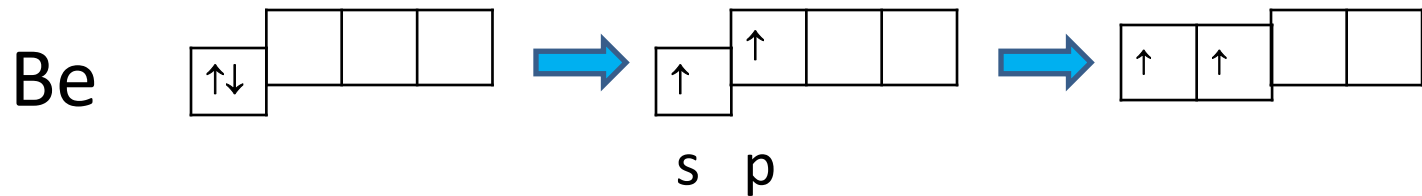


Теория гибридизации

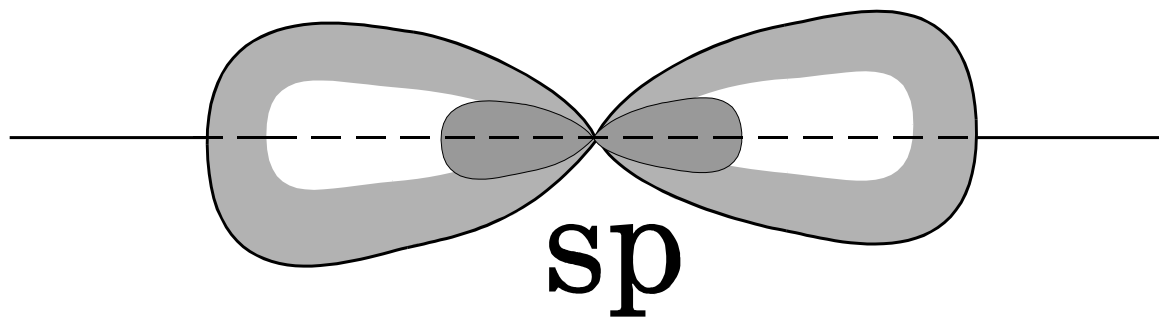
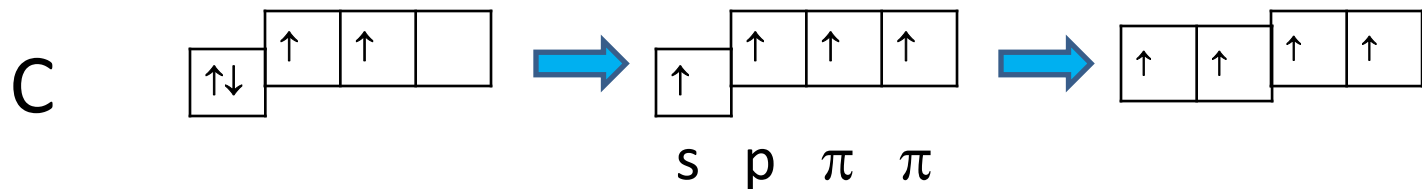
- попытка проследить за взаимодействием и изменением орбиталей при образовании молекулы
- *Энергии заполненных орбиталей валентного уровня, образующих σ -связи, усредняются.*
- *Из них образуется столько же одинаковых гибридных орбиталей.*
- *Энергия орбиталей меняется из-за изменения формы электронных облаков.*
- *Оно обусловлено стремлением к большей прочности связей.*

sp-гибридизация

- BeH_2

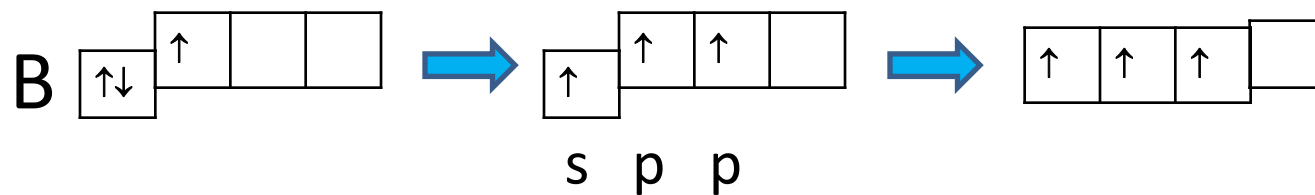


- C_2H_2

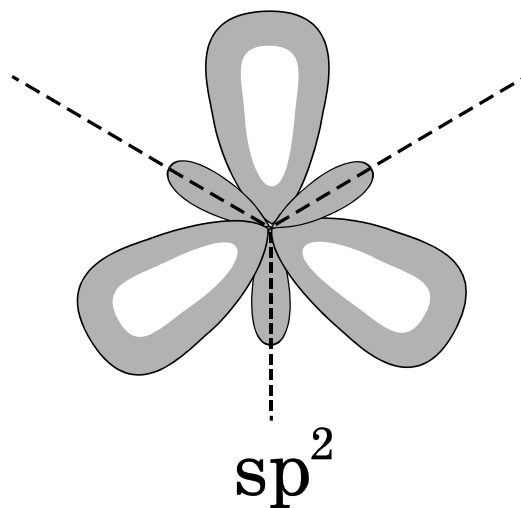
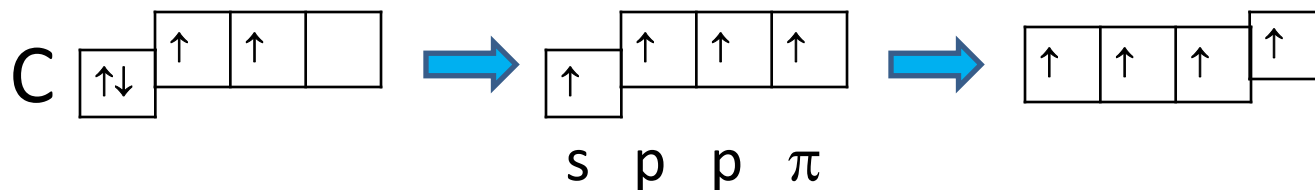


sp²-гибридизация

- BF₃



- C₂H₄



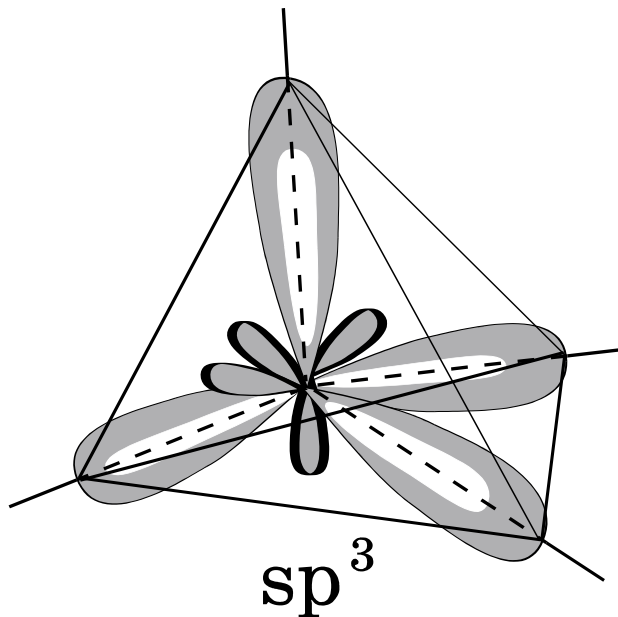
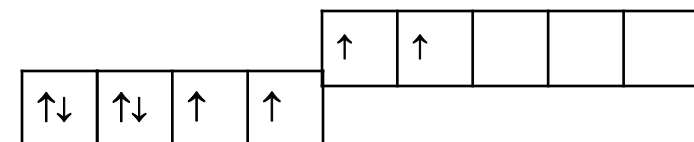
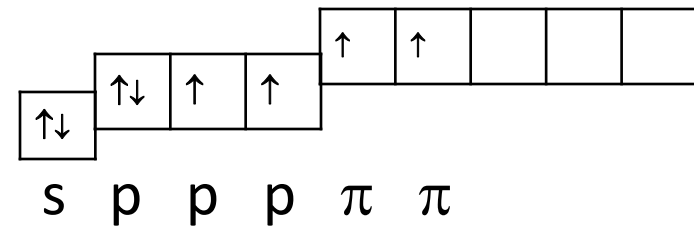
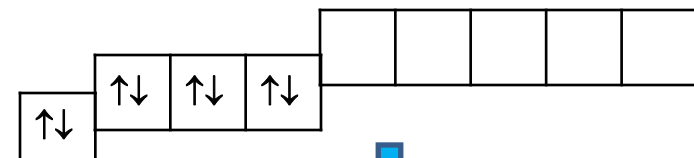
sp^3 -гибридизация

- NH_3



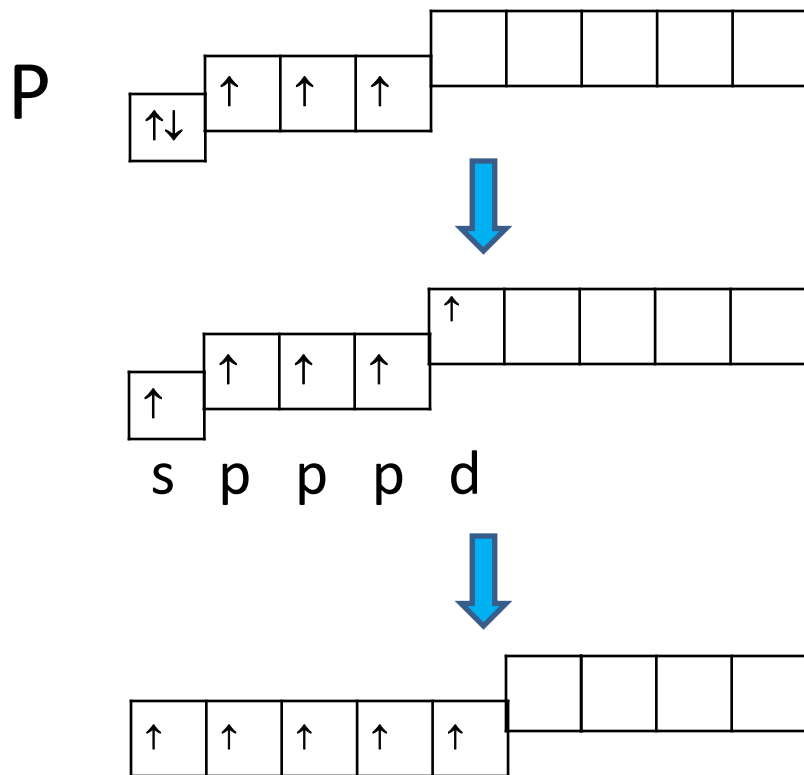
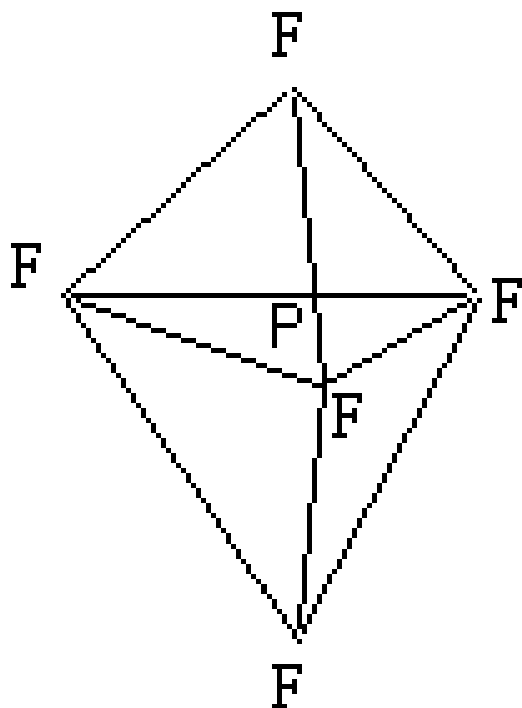
- SO_4^{2-}

S^{2-}



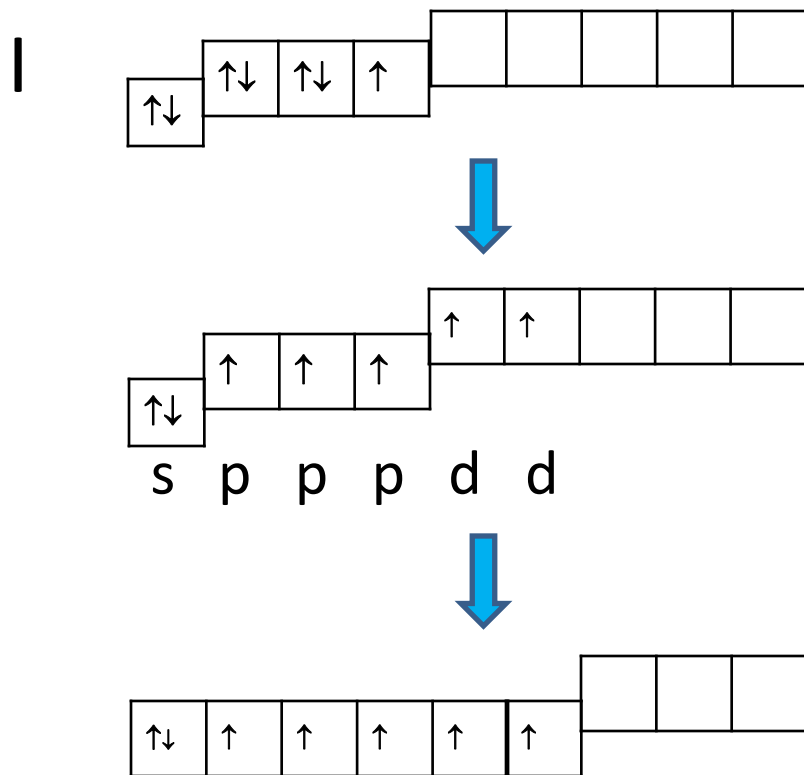
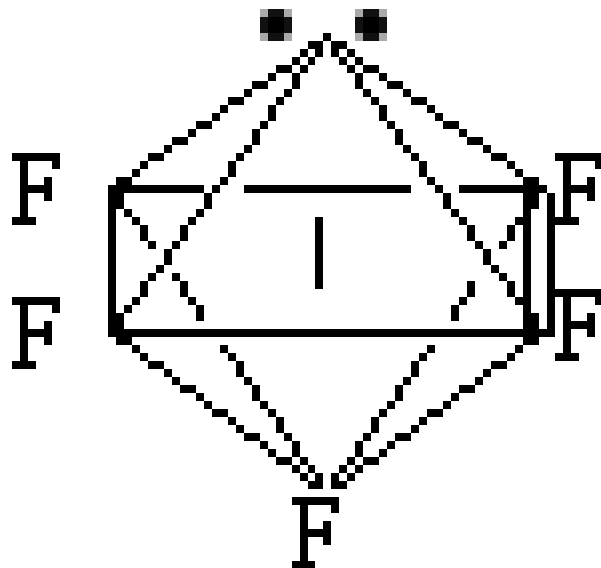
sp^3d -гибридизация

- PF_5



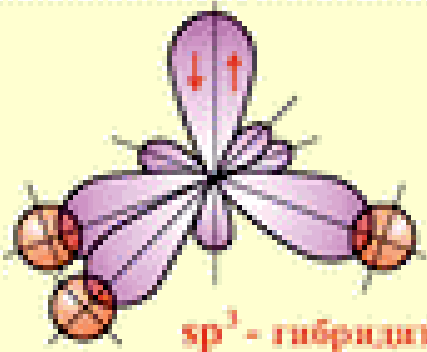
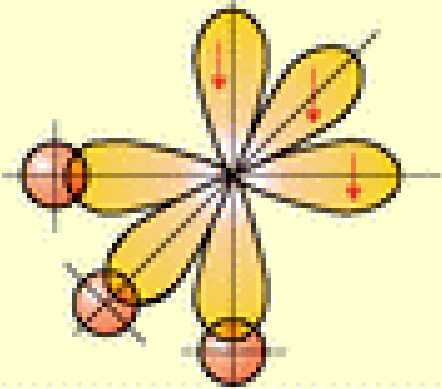
sp^3d^2 -гибридизация

- IF_5



Условия гибридизации

- энергетическая близость орбиталей
- высокая степень их перекрывания

Соединение	Валентный угол	Строение молекулы
NH_3	$106^\circ 47'$	 sp^3 - гибридизация
PH_3	$93^\circ 30'$	
AsH_3	$92^\circ 0'$	
SbH_3	$91^\circ 30'$	

Теория Гиллеспи (ОВЭП)

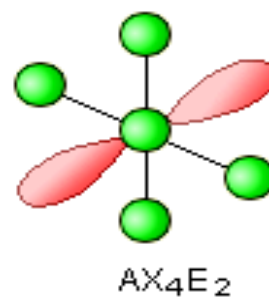
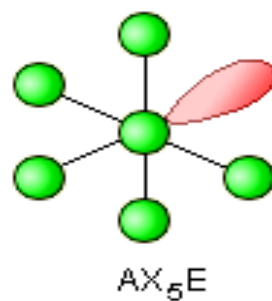
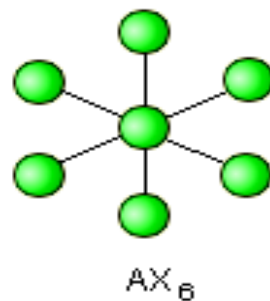
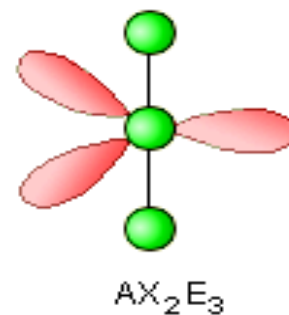
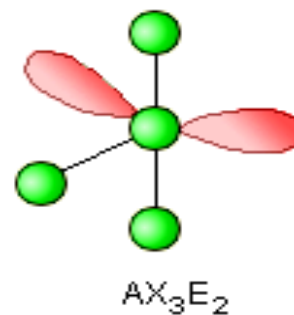
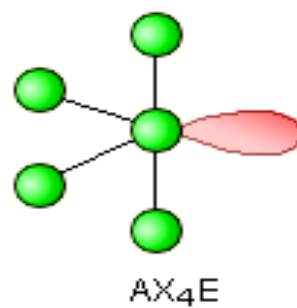
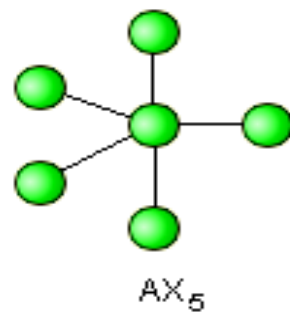
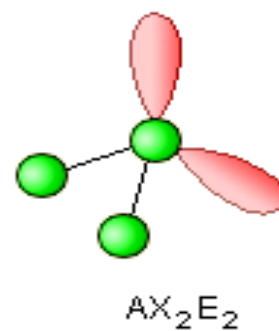
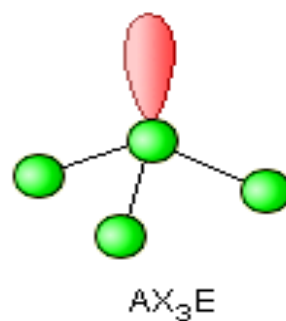
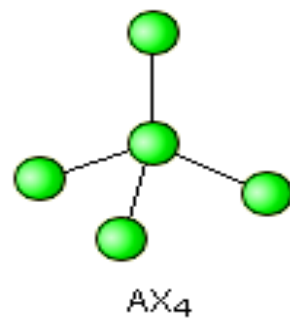
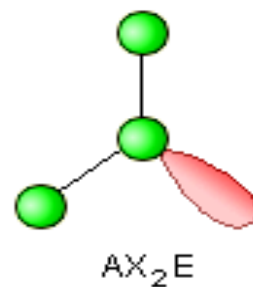
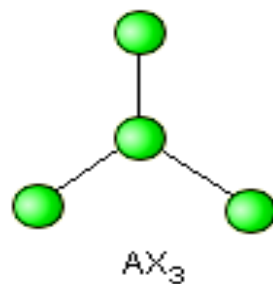
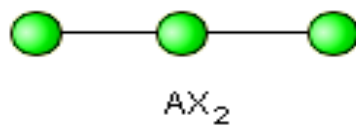
- Теория гибридизации не предсказывает геометрию ☹️
- Теория Гиллеспи предсказывает! 😊

1. **Геометрия** молекулы или иона **определяется числом электронных пар** на валентной оболочке центрального атома.
2. **Электронные пары** ведут себя так, как если бы они взаимно отталкивались.

Формула молекулы (иона)



- **A** – многовалентный атом;
- **X** – атомы, связанные с атомом A;
- **n** – число атомов X;
- **E** – неподеленная пара электронов;
- **m** – количество неподеленных электронных пар



Теория Гиллеспи

3. Область пространства, которую занимает **неподеленная пара** электронов, **больше**, чем область, которая занята связывающей электронной парой.

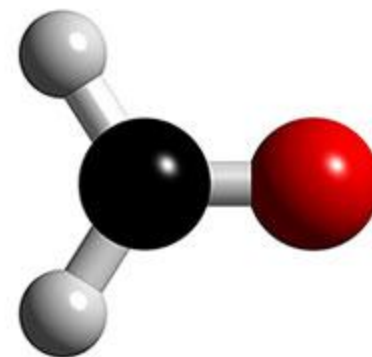
Угол H-N-H в молекуле аммиака больше или меньше тетраэдрического ($109^{\circ}28'$)?

(107°)

Теория Гиллеспи

4. Две электронные пары **двойной связи** занимают **больше пространства**, чем одна электронная пара простой связи.

Какой угол в молекуле формальдегида больше – $H-C-H$ или $H-C-O$?



Теория Гиллеспи

5. Размер пространства, занятого связывающей парой электронов, уменьшается с увеличением электроотрицательности лиганда и с уменьшением электроотрицательности центрального атома.

Какой угол в молекуле CFClBrCH_3 наибольший, а какой наименьший?

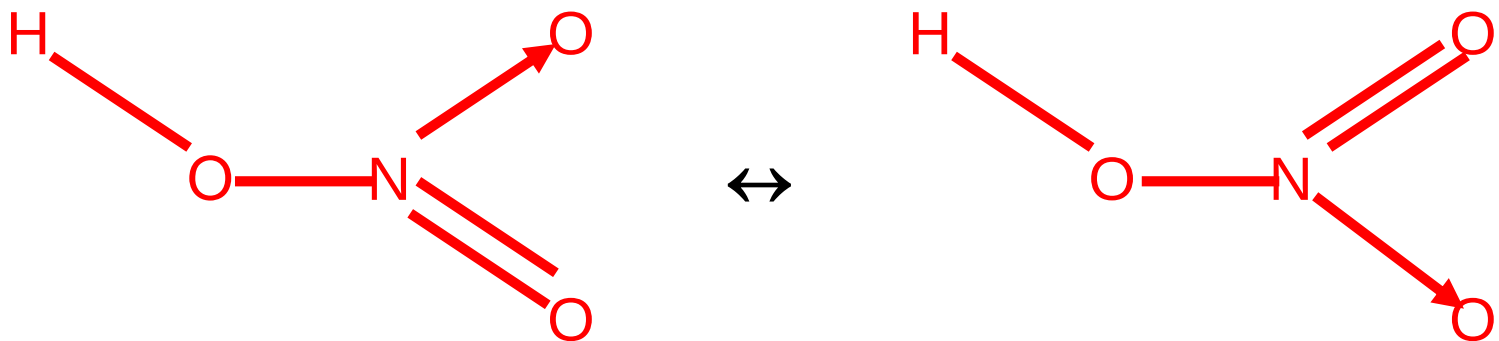
В какой молекуле валентный угол больше – SF_4 или SeF_4 ?

Ограничения метода ВС

- азотная кислота, бензол, озон???



**наложение валентных схем или
резонансные структуры**





Модель Стоунхенджа