**Химическая связь. Строение молекул. Теория гибридизации.**

 В молекулах между атомами связь ковалентная. Она может быть полярной или неполярной, но всегда её образование связано с обобществлением электронной пары. Ковалентная связь, в отличии от ионной или металлической, является направленной (орбитали только в определённом положении в пространстве могут перекрываться) и насыщаемой (максимальное число связей атома ограничено числом его внешних орбаталей). Классический вопрос: какова валентность азота в азотной кислоте? Азот – элемент второго периода, а значит имеет только 4 орбитали внешнего (второго) уровня-одну s и три р. Значит максимальная валентность его не может быть больше четырёх! Другое дело – степень окисления: внешних электронов 5 и все они могут быть смещены к более электроотрицательному атому и степень окисления +5 для него возможна. **Механизмы образования ковалентной связи: *обменный*** (в обобществлении участвует по одному электрону от каждого атома) и ***донорно-акцепторный*** (один атом, донор, предоставляет орбиталь с парой электронов, а второй только свободную орбиталь).

 Важнейшими характеристиками любой связи являются: энергия (всегда ***выделяется*** при образовании связи), длина (чем короче связь, тем прочнее), а для ковалентной связи также

кратность (число обобществлённых электронных пар) и угол связи.

 В молекулах азота и угарного газа прочность связи обусловлена кратностью (≡), но в полярной молекуле СО имеет место ещё и электростатическое взаимодействие, кстати, это самая прочная связь известная для двухатомных молекул.



 Угол связи в молекуле (угол между двумя линиями связи одного атома) определяется направлением связывающих орбиталей в пространстве. Когда в образовании связей участвуют

р-орбитали, то этот угол близок к 900  (обычно чуть больше –действуют силы отталкивания). Метод рентгеноструктурного анализа позволяет определить и углы, и межъядерные расстояния (см. табл.).

 Величина углов связи многих молекул может быть объяснена с позиций **теории гибридизации**, предложенной Полингом. Гибридизация – смешение орбиталей: выравнивание их по энергии и симметрии. В обозначении типов гибридизации заключена информация об исходных орбиталях, участвующих в процессе: **sp, sp2 , sp3, sp3d , sp3d2 , dsp2** .

Из различных (но близких!) по энергии и симметрии исходных атомных орбиталей образуются одинаковые гибридные и их ровно столько, сколько исходных участвовало. Положение гибридных орбиталей в пространстве легко предсказуемо: минимум энергии при минимальных силах отталкивания, т.е. области перекрывания орбиталей, участвующих в связях, располагаются как можно дальше друг от друга.

 2 гибридные орбитали (**sp-гибридизация**) ориентированы под углом 1800 – образуются линейные молекулы – СО2, С2Н2, CS2.

3 гибридные орбитали (**sp2-гибридизация**) расположены под углом к 1200 – образуются плоские молекулы и ионы– SО3, С2Н4, BCl3, CO32-, NO3-.

 4 гибридные орбитали (**sp3-гибридизация**) направлены к углам тетраэдра, в центре которого находится тот самый атом с sp3-гибридными орбиталями. Угол в этом случае–109028l  и образуются тетраэдрические молекулы и ионы: СН4, NH4+,SO42-, PO43-.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Линейные молекулы  | http://onx.distant.ru/tests/test85/Molek_1.gif | http://onx.distant.ru/tests/test85/Molek_4.gif |

В случае sp3d (PCl5) , sp3d2(SF6)–гибридизаций молекулы имеют тригонально-бипирамидальное и октаэдрическое строение, соответственно.

**Строение молекул и ионов**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Формула | Углы между связями | Формула | Углы между связями |
| H2OH3O+H2SH2SeH2TeCO2CS2N2ONO2O3OF2HCN | H-O-HH-O-HH-S-HH-Se-HH-Te-HO-C-OS-C-SO-N-NO-N-OO-O-OF-O-FH-C-N | 104,5107929190,5180180180134117103180 | SO2BF3BCl3BBr3CO32–P4NH4+NO3–NH3PH3AsH3 | O-S-OF-B-FCl-B-ClBr-B-BrO-C-OP-P-PH-N-HO-N-OH-N-HH-P-HH-As-H | 119120120120120601091201079392 |

 Тип гибридизации легко определяется из величины угла связи. Отметим, что гибридные орбитали образуют **только σ-связи** и в **π**-связывании не участвуют. Однако, в ряде случаев, наблюдается образование большего числа гибридных орбиталей, чем это необходимо для образования σ-связей. Например, в молекуле аммиака у азота 3 σ-связи – по одной с каждым атомом водорода, а тип гибридизации азота - sp3. Очевидно, что одна гибридная орбиталь с двумя электронами не участвует в связи и называется **гибридной несвязывающей**. Аналогично, у атома кислорода (sp3) в молекуле воды две несвязывающие гибридные орбитали, поскольку только две из четырёх гибридных задействованы на связь с атомами водорода.

Гибридные несвязывающие орбитали не локализованы ядром атома-соседа и занимают больший объём, поэтому они отталкивают связывающие орбитали уменьшая угол связи, по сравнению с углом, характерным для данного типа гибридизации. Так, наличие одной несвязывающей орбитали в молекуле аммиака уменьшает угол от классического 109028l до 1070, а двух несвязывающих орбиталей в молекуле воды, уже до 104,50.



Очевидно, что присоединение иона водорода к таким молекулам по донорно-акцепторному механизму приводит к уменьшению такого отталкивания и углы связи увеличиваются (образуются, соответственно, ионы аммония NH4+ и гидроксония Н3О+) . Обратите внимание, что в случае молекулы NH3 и иона Н3О+ геометрия частиц не тетраэдрическая, а пирамидальная.