



УДК 546

С.Ю. Елисеев

Учреждение образования «Белорусский государственный педагогический университет имени Максима Танка», г. Минск, Республика Беларусь

ОСОБЕННОСТИ РАССМОТРЕНИЯ ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ И СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ В КУРСЕ ОБЩЕЙ ХИМИИ

Объяснение электронного строения атомов является одной из сложнейших задач курса общей химии. Но не менее сложная задача использование этого материала для объяснения химической связи и строения молекул. Для их объяснения привлекаются различные модели.

Эти теории базируются на теории электронного строения атомов, констатирующей, что каждый электрон описывается определенным набором квантовых чисел, которые определяют форму электронного облака, в котором максимально вероятно его обнаружить. Тип орбиталей определяет их форму и пространственную ориентацию. На этих представлениях базируются теории химической связи – теория (Метод) Валентных Связей и Метод Молекулярных Орбиталей. Используя общие представления эти теории с разной степенью точности и наглядности объясняют образование химической связи. В настоящий момент вряд ли удастся одинаково наглядно их объяснить, но теории строения молекул с точки зрения МВС в большей степени наглядности позволяют использовать общие положения.

Говоря о строении молекул чаще всего привлекают наиболее простые и наглядные представления Метода Валентных Связей (МВС). В рамках МВС широко применяется концепция гибридизации атомных валентных орбиталей [1, с. 70-77; 2, с. 84-100; 3, с. 60-65]. Согласно данной концепции, в образовании ковалентных связей участвуют не «чистые» орбитали (имеющие не слишком большую разницу в энергиях), а так называемые «гибридные», усредненные по форме и размерам (а соответственно, по энергиям) орбитали. Их число равно числу исходных орбиталей, они более вытянуты в пространстве и обеспечивают более полное перекрывание с орбиталями соседних атомов. И что самое важное, гибридные орбитали должны быть так ориентированы в пространстве, чтобы обеспечить максимальное взаимное удаление друг от друга. В этом случае энергия их отталкивания – минимальна (что сообщает минимальную энергию всей системе). Надо отметить, что могут подвергаться гибридизации не все электронные орбитали, некоторые могут сохранять свою исходную форму. Все определяется принципом минимальной энергии системы.

Но и гибридные орбитали могут не все участвовать в образовании связи, тогда они остаются несвязывающими (неподеленными). Каждая пара электронов может быть представлена в виде точечного отрицательного заряда, а вокруг орбиталей можно мысленно провести сферу. И эти точечные отрицательные заряды равномерно размещаются по сфере, обеспечивая минимальное отталкивание зарядов.

В рамках МВС концепция гибридизации атомных валентных орбиталей достаточно хорошо объясняет образование связей в большом числе соединений. Соединения могут содержать как одинарные, так и кратные (двойные и тройные связи). Наиболее точно эта модель описывает поведение элементов начальных периодов, так как в гибридизации участвуют орбитали с достаточно высокой электронной плотностью.

Практически параллельно с концепцией гибридизации атомных валентных орбиталей в описании строения геометрии молекул и молекулярных ионов рассматривается модель отталкивания электронных пар валентной оболочки (ОЭПВО) (теория Гиллеспи) [4, с. 214-225; 5, с. 130-132]. И в этой модели исходят из того, что только электроны валентной оболочки определяют геометрию молекулы или иона. По теории Гиллеспи, для достижения стабильно-



сти строения молекулы пары валентных электронов должны находиться на максимальном расстоянии друг от друга, что соответствует минимуму межэлектронного отталкивания. Здесь так же пары валентных электронов рассматриваются как точечные заряды, расположенные максимально удаленно друг от друга на противоположных сторонах сферы. Точно также в межэлектронном отталкивании учитывается влияние «качества» валентной пары (связывающая, несвязывающая, ее кратность).

Связывающие (СП) и несвязывающие (НП) пары электронов отталкиваются друг от друга с разной силой. Связывающая электронная пара локализована между двумя атомами и соответственно занимает меньшее пространство, чем электронное облако несвязывающей пары. По степени взаимного отталкивания электронные пары можно расположить в ряд: НП – НП > НП – СП > СП – СП. Учитывая природу лигандов, а также кратность связи, можно достаточно точно учесть степень отталкивания электронных пар.

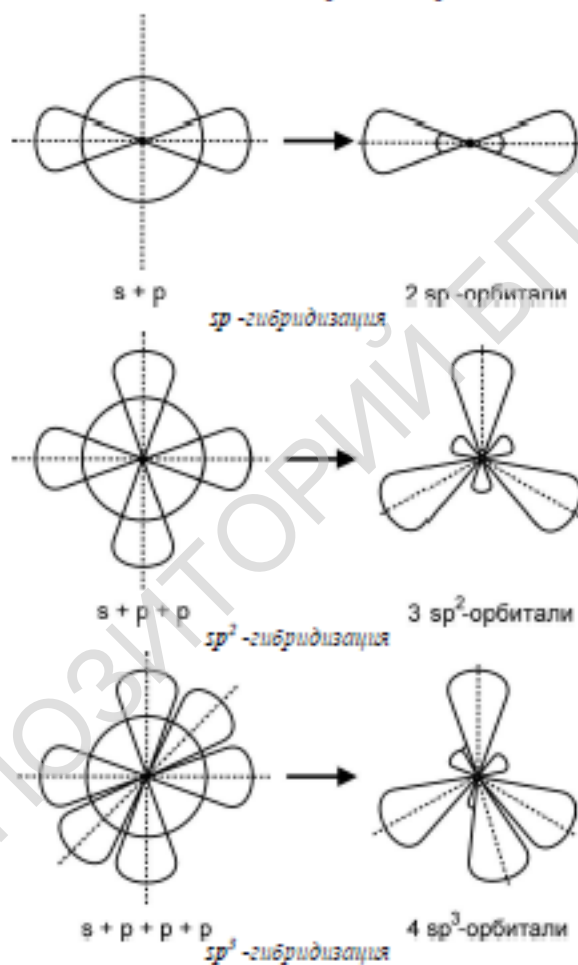


Рисунок 1 – Различные виды гибридизации атомных орбиталей



Электронные пары, образующие одинарные связи и неподеленные электронные пары, равномерно распределенные по сфере с целью минимизации отталкивания, должны иметь практически одинаковую симметрию. Т.е. эти орбитали должны быть гибридными. В обеих моделях рассматриваются практически одни базовые положения и наблюдается четкая связь между двумя моделями. И та и другая модели наилучшим образом работают, рассматривая связи в молекулах, содержащих в качестве центрального атома *p*-элементы.

Но есть и определенные сложности. Теория ОЭПВО в отличие от представлений теории гибридизации АО не учитывает прямо тип орбиталей электронных пар, что и не позволяет учесть отдельные тонкие различия.

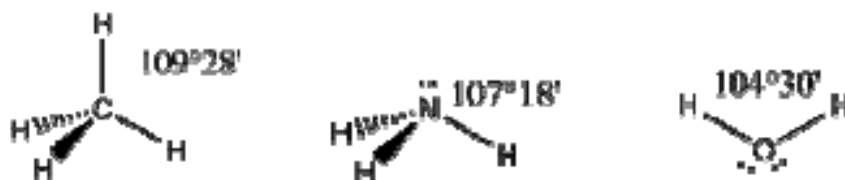


Рисунок 2 – Влияние вида электронной пары (связывающая (СП) и несвязывающая (НП)) на строение молекулы

Так, обе модели не могут предсказать неучастие неподеленной электронной пары («эффект инертной пары») в определении геометрической формы частиц для тяжелых *p*-элементов. (В этом случае приходится принимать во внимание общие положения электронного строения *p*-элемента.)

Модель Гиллеспи получила развитие (модель Кеперта) в применении к *d*-элементам [6]. Правда, при этом модель Кеперта игнорирует наличие неподеленных электронных пар. Предсказываемая по модели Кеперта форма молекулы не зависит от электронной конфигурации основного состояния центрального атома металла. В модели Кеперта основное внимание уделяется отталкиванию между лигандами и игнорируется влияние неподеленных электронных пар. Это создает особые проблемы в предсказании строения атомов в координационном числе 4, предсказывая тетраэдрическую модель строения, вместо плоскоквадратной для большого числа частиц. Тем не менее обе модели широко и продуктивно используются.

Рассматривая концепцию гибридизации атомных валентных орбиталей в рамках МВС необходимо распространять ее и на модель Гиллеспи (и ее модификацию – модель Кеперта), что позволит с меньшими затратами времени объяснить более широкий круг вопросов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ахметов, Н.С. Общая и неорганическая химия: учебник для химико-технологических спец. / Н.С. Ахметов. – 3-е изд., перераб. и доп. – М.: Высшая школа, 1998. – 744 с.
2. Карапетянц, М.Х. Общая и неорганическая химия. учебное пособие для вузов / М.Х. Карапетянц, С.И. Дрозд. – М.: Химия, 1981. – 632 с.
3. Общая химия в формулах, определениях, схемах: учебное пособие / И.Е. Шамшурович [и др.]; под ред. В.Ф. Ткаченко – Минск: Універсітэцкае, 1996. – 528 с.
4. Хаускрофт, К. Современный курс общей химии. В 2 т. / К. Хаускрофт, Э. Констобл, пер. с англ.; под ред. В.П. Злобина. – М.: Мир, 2002. – Т.1. – 528 с.
5. Шрайвер, Д. Неорганическая химия в 2-х томах: пер. с англ. / Д. Шрайвер, П. Эттингс; Ред. В.П. Злобина. – М.: Мир, 2004 – Т.1. – 679 с.
6. Елисева, С.Ю. Геометрия молекул / С.Ю. Елисева // Хімія: праблемы выкладання. – 2012. – № 3. – С.41-45.