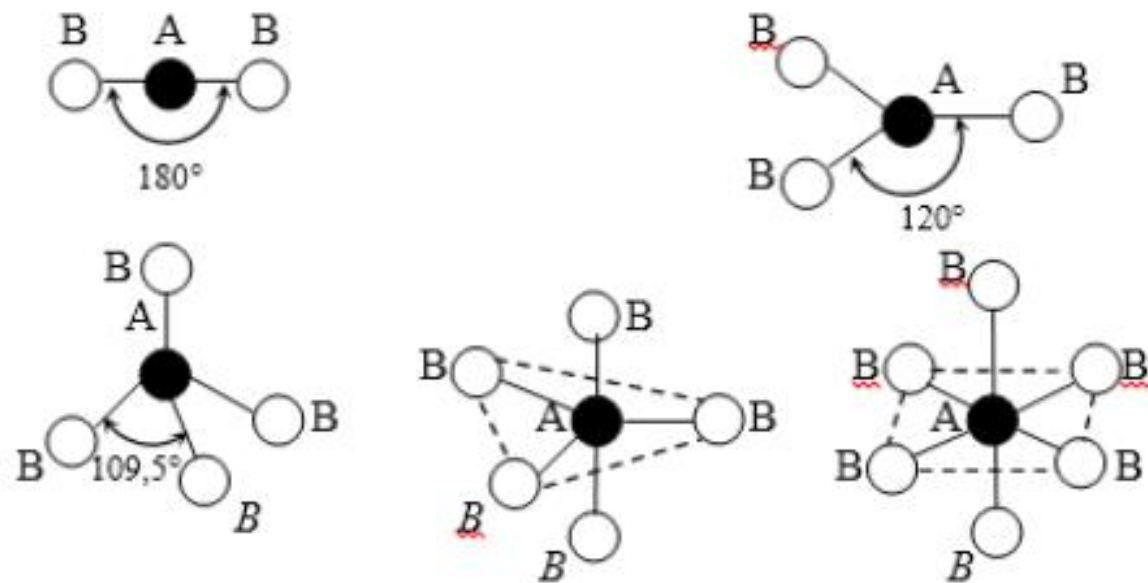


Молекулалардың кеңістіктік конфигурациясы

5 дәріс

Молекулалардың кеңістіктік конфигурациясы

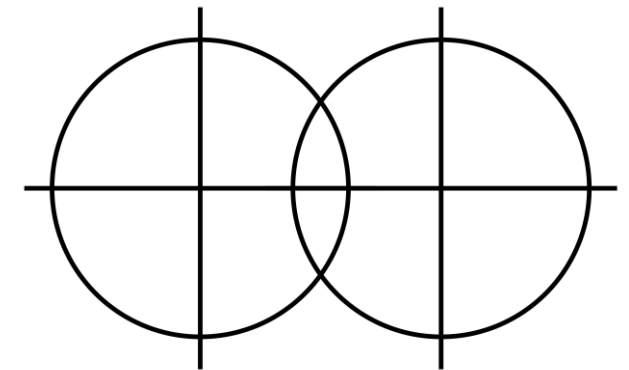
Молекулалардың кеңістіктік конфигурациясы — бұл молекуланың атомдарының өзара орналасуы және олардың кеңістікте қалай орналасқанын сипаттайтын құрылым. Бұл конфигурация молекуланың физикалық және химиялық қасиеттерін, соның ішінде оның реакциялық қабілеттілігін, тұрақтылығын және басқа қасиеттерін анықтайды. Кеңістіктік конфигурацияның ерекшеліктері молекулалардағы байланыс түрлеріне, атомдардың электрондық жағдайына және молекуланың симметриясына байланысты болады.



Валенттік байланыс теориясы

Валенттік байланыстар теориясы (валенттік байланыстар әдісі, валенттік схемалар әдісі, локализацияланған электрондық жұптар әдісі) — әр атом жұбы молекуладағы бір немесе бірнеше ортақ электрондық жұптар арқылы бір-біріне ұсталып тұратын ұғымға негізделген жуық кванттық химиялық есептеу әдісі. Валенттілік байланыс теориясы бойынша, атомдар өздерінің валентті электрондарын басқа атомдармен бөліседі, бұл молекуланың кеңістіктегі құрылымын анықтайды. Әрбір атом өзінің орбитальдарын басқа атомдармен байланыс түзетін орбитальдарға бағыттайды.

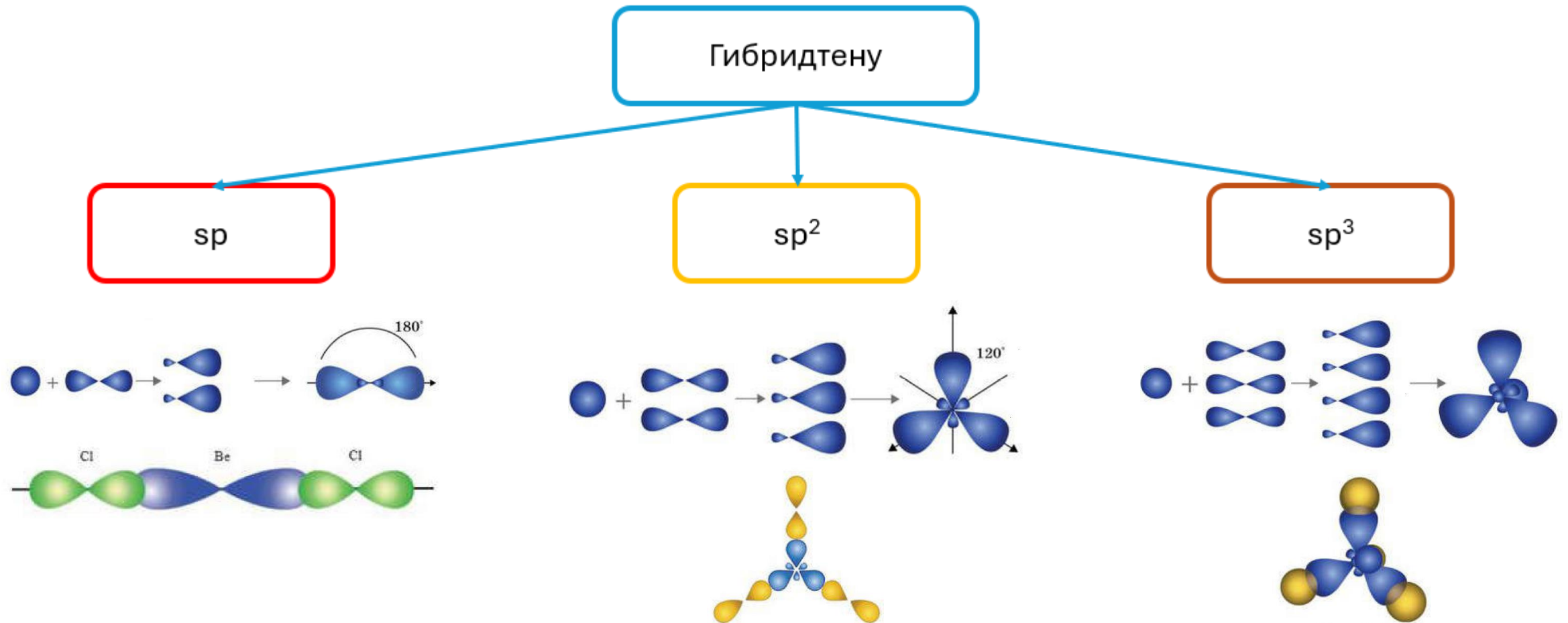
Электрондық жұп молекуланың барлық кеңістігінде әртүрлі тығыздықпен жайылған болады, сонымен қатар байланыс сызығы бойында басқа кеңістік аймақтарына қарағанда электрондық тығыздықтың шоғырлануы байқалады. Бұл атом ядролары арасындағы байланыс сызығы бойындағы электрондық тығыздықтың шоғырлануы ядроларға тартылу күшін тудырады және соның нәтижесінде химиялық байланыс түзіледі (сурет 1). Байланыс энергиясы негізінен айырбас интегралы арқылы анықталады, оның мәні атомдық орбитальдардың қиылысу дәрежесіне айтарлықтай байланысты.



Сурет 1. Сигма байланысын құру кезінде атомдық орбитальдардың қиылысу моделі

Гибридтелу

Электрондық орбитальдардың пішіні мен энергиясы бойынша теңесу процесін **гибридтену** деп аталады.

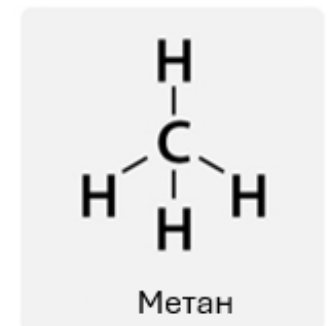
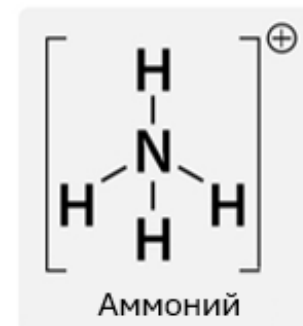
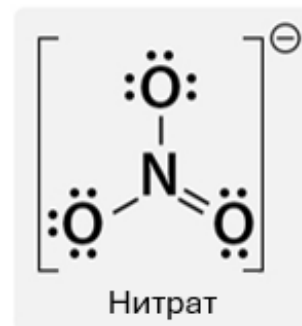
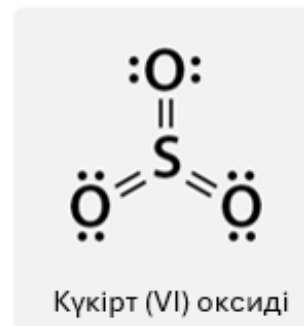
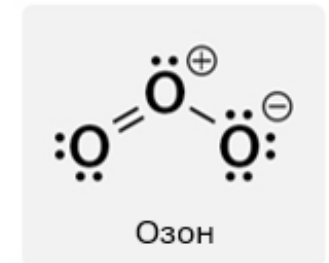
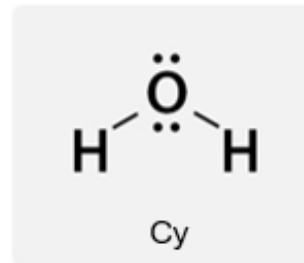
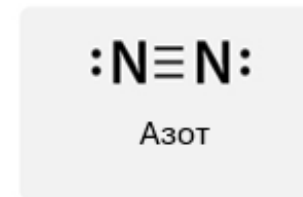
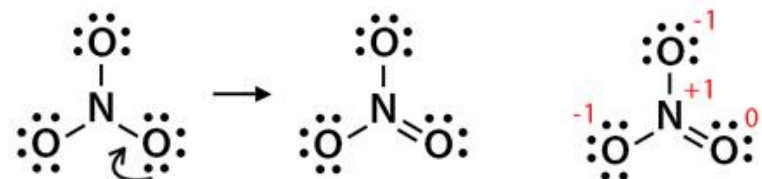


Льюис құрылымдары

Льюис құрылымы — бұл атомдардың байланыс орбитальдарындағы электрондарын көрсету үшін қолданылатын модель. Льюис құрылымы молекуланың құрылымдық формуласын көрсетеді.



ChemistryLearner.com



ChemistryLearner.com

Льюис құрылымдары

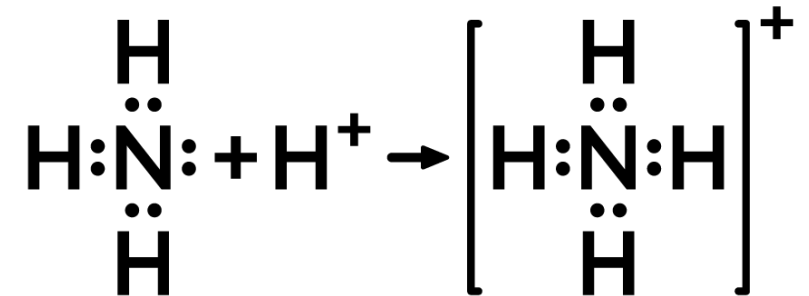
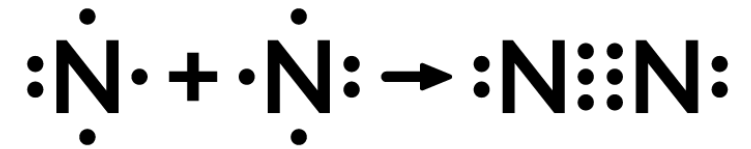
Льюис құрылымдарын салу әдістемесі:

1. Валенттік электрондардың жалпы санын анықтаңыз. Катиондар үшін әрбір оң заряд үшін бір электронды алып тастаңыз. Аниондар үшін әрбір теріс заряд үшін бір электронды қосыңыз.
2. Молекуланың немесе ионның скелеттік құрылымын салыңыз, онда атомдарды орталық атомның айналасында орналастырыңыз. (Әдетте, ең аз электронды элемент орталықта орналасады.)
3. Әрбір атомды орталық атоммен бір байланыспен (бір электронды жұппен) байланыстырыңыз.
4. Қалған электрондарды терминалды атомдарда (сутек атомынан басқа) бір жұп электрон ретінде таратыңыз, әр атомның айналасында октет жасай отырып. Барлық қалған электрондарды орталық атомға қойыңыз.
5. Терминалды атомдардағы электрондарды қайта реттеңіз, орталық атоммен бірнеше байланыс жасау үшін, мүмкін болса, октеттерді аяқтау үшін.

Байланыс механизмі

Жалпы электрондық жұптың түзілуі кезінде әрбір екі атом бір-біріне бір электроннан береді. Мұндай байланыс түзілу механизмі **алмасу механизмі** деп аталады.

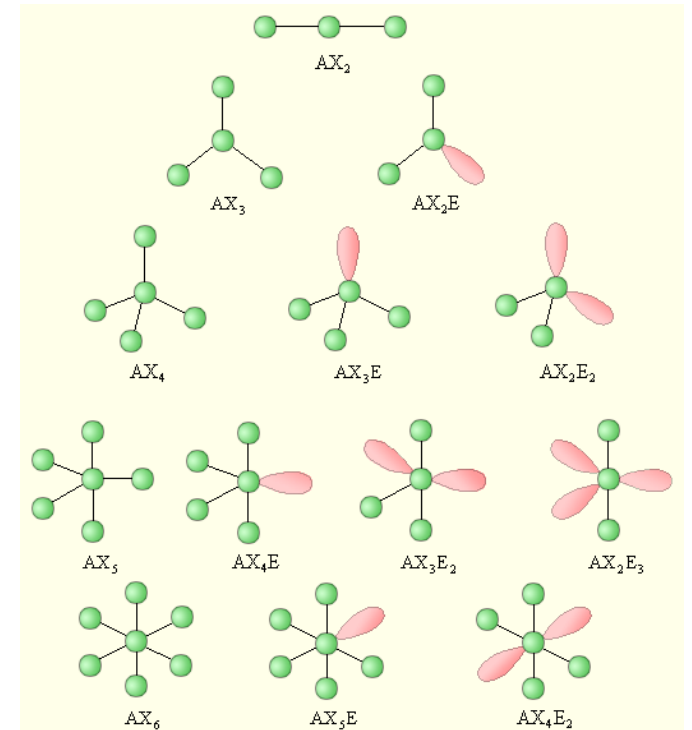
Сонымен қатар, басқа механизм бойынша коваленттік байланыс түзілуі мүмкін, бұл жағдайда бір атом екі электронды жалпы пайдалануға ұсынады, ал екінші атом осы электрондарды өзінің бос орбиталына қабылдайды. Электрон жұбын ұсынатын атом **донор** деп аталады, ал бос орбитальға электрондарды қабылдайтын атом **акцептор** деп аталады. Мұндай коваленттік байланыс түзілу механизмі **донор-акцепторлық** деп аталады.



Гиллеспи әдісі

Гиллеспи әдісі (VSEPR теориясы, валенттік электрондардың тебілу теориясы) — бұл теория молекулалардың кеңістіктегі құрылымын, яғни атомдардың өзара әсерлесуін және электронды бұлттардың кеңістікте қалай орналасатынын түсіндіреді. Бұл теория молекуланың геометриясын (тетраэдрлік, сызықты, тригональді және т.б.) болжауға мүмкіндік береді.

Бұл әдіс молекуланың нақты геометриясы тек АО (атомдық орбиталь) гибридизациясымен ғана емес, сонымен қатар екі электронды екі орталықты байланыстардың (байланыстыратын электронды жұптардың) саны мен бөлінбеген электронды жұптардың (E) болуы арқылы анықталатынына негізделген. Сонда бірдей гибридизация кезінде метан молекуласы CH_4 формуласын, аммиак молекуласы NH_3E , су молекуласы H_2OE_2 формулаларын алады. Мұндай жағдайда әрбір молекула сфераға кіретін геометриялық фигура болып табылады. Молекула энергияның минимумына ие болады, егер барлық байланыстырушы электронды жұптар бір-бірінен тең қашықтықта орналасса, яғни сфераның бетінде.



Негізгі тұжырымдама

- Барлық химиялық байланыстарды құрайтын электрондар олардың типіне (s, p, d, f) қарамастан теңдесіп есептеледі.
- Атомдық құрылым, ядро мен ішкі электрондық қабықтарды қамтитын, валенттік электрондардың орналасуына әсер етпейді.
- Электронды жұптар кеңістікте олар арасындағы тебілісті минимумға жеткізетін түрде орналасады (екі электронды жұп сызықтық орналасады, үш жұп дұрыс үшбұрыш құрайды, төрт жұп тетраэдриалық орналасады және т.б.).
- Молекуланың құрылымы байланыстырушы электронды жұптардың кеңістіктегі орналасуымен анықталады.
- Кратная байланыс орбиталі бірлікті болып есептеледі, оның ішінде бір немесе екі π -байланыс болса да. Сол уақытта қос және үш байланыстың электронды жұптары кеңістікте бір электронды жұптан көбірек орын алады.
- Бөлінбеген электронды жұп кеңістікте байланысушы электронды жұптан көбірек орын алады.

Гиллеспи әдісі

Молекуланың геометриялық пішінін Гиллеспи әдісімен қарастырғанда оның формуласы:



A — орталық атом;

X — орталық атоммен химиялық байланыс түзетін лигандтар, яғни олар байланысқан электрондық жұптарды береді;

E — орталық атомда қалған бөлінбеген электрондық жұптар;

n — байланысқан электрондық жұптардың саны (байланысқан электрондар);

m — бөлінбеген электрондық жұптардың саны.

Бұл әдіс молекуланың пішінін анықтауға мүмкіндік береді, өйткені ол тек байланысқан электрондық жұптардың санын ғана емес, орталық атомда бөлінбеген электрондық жұптардың болуын да ескереді, бұл атомдардың кеңістіктік орналасуына және байланыс бұрыштарына әсер етеді.

Сутектік байланыс

№	Молекуланың типі	Мысалдар	Байланысқан және бөлінбеген электрондық жұптардың жалпы саны	Электрондық жұптардың кеңістіктегі орналасуы	Байланысқан электрондық жұптар саны	Молекуланың геометриясы
1	AX_2E_0	$BeCl_2$, CO_2	2	сызықтық	2	сызықтық
2	AX_3E_0	BF_3 , SO_3	3	тең бүйірлі үшбұрыш	3	тең бүйірлі үшбұрыш
3	AX_2E_1	$SnCl_2$, SO_2	3	тең бүйірлі үшбұрыш	2	бұрыштық
4	AX_4E_0	CH_4 , CCl_4	4	тетраэдр	4	тетраэдр
5	AX_3E_1	NH_3 , PH_3	4	тетраэдр	3	үшбұрышты пирамида
6	AX_2E_2	H_2O	4	тетраэдр	2	бұрыштық
7	AX_5E_0	PCl_5	5	үштік бипирамида	5	үштік бипирамида
8	AX_4E_1	SF_4	5	үштік бипирамида	4	"тербелмелі"
9	AX_3E_2	ClF_3	5	үштік бипирамида	3	"Т-суретті"
10	AX_2E_3	XeF_2	5	үштік бипирамида	2	сызықтық
11	AX_6E_0	SF_6	6	октаэдр	6	октаэдр
12	AX_5E_1	ICl_5	6	октаэдр	5	квадратты пирамида
13	AX_4E_2	XeF_4	6	октаэдр	4	жазық