

# Лекція 8 БУДОВА ОРГАНІЧНИХ СПОЛУК. ХАРАКТЕР ХІМІЧНИХ ЗВ'ЯЗКІВ

1. Теорія будови органічних сполук
2. Сучасні уявлення про будову атома
  - 2.1 Квантово-механічна модель атома
  - 2.2 Принципи заповнення електронної оболонки атома
3. Стан атома карбону в органічних сполуках
4. Гібридизація атомних орбіталей
5. Природа хімічного зв'язку
6. Ковалентний зв'язок
  - 6.1 Метод валентних зв'язків
  - 6.2 Механізми утворення ковалентного зв'язку
7. Властивості ковалентного зв'язку
8. Висновки
9. Питання для самоперевірки

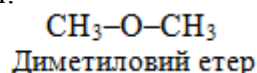
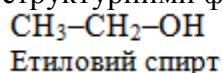
## 8.1 ТЕОРІЯ БУДОВИ ОРГАНІЧНИХ СПОЛУК

До середини XIX ст. в органічній хімії був накопичений величезний фактичний матеріал, подальше вивчення якого гальмувалося відсутністю систематизуючої основи, спроможної пояснити і обґрунтувати особливості будови і властивостей органічних сполук. Тому почали з'являтися численні теорії, які зробили певний внесок у познання структури органічних сполук, однак не могли узагальнити всі відомості про їх властивості та реакційну здатність. Це вдалося здійснити О.М.Бутлерову (1861 р.).

*Сутність теорії будови органічних сполук* Бутлерова можна стисло сформулювати за допомогою декількох основних положень.

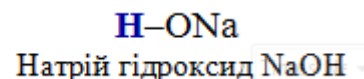
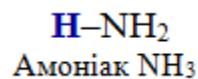
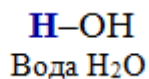
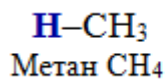
1. *Атоми в молекулах сполучені один із одним хімічними зв'язками відповідно до їх валентностей.* Карбон практично в усіх органічних сполуках виявляє валентність IV, водень – I, кисень – II.
2. *Атоми розташовуються в молекулах не хаотично, а сполучені між собою в певній послідовності.*  
*Порядок розміщення атомів у молекулі та характер хімічних зв'язків між ними називається **хімічна будова**.*
3. *Властивості органічних сполук залежать не тільки від якісного і кількісного складу, але і від хімічної будови їх молекул.*

Це положення найбільш наочно ілюструється при співставленні будови і властивостей ізомерів. Наприклад, відомі дві різні речовини складу  $C_2H_6O$  з однаковою молекулярною масою (46 а.о.м.), які відрізняються послідовністю сполучення атомів, фізичними і хімічними властивостями: етиловий спирт (рідина,  $T_{\text{кип}} = 78^\circ\text{C}$ ) і диметиловий етер (газ,  $T_{\text{кип}} = -24^\circ\text{C}$ ), різна будова яких відображається структурними формулами:



4. *В молекулах існує взаємний вплив атомів – як тих, що сполучені хімічними зв'язками безпосередньо один із одним, так і тих, що розділені проміжними атомами чи атомними групами.*

Для прикладу розглянемо властивості атома водню в сполуках: метані  $CH_4$ , воді  $H_2O$ , амоніаку  $NH_3$ , натрій гідроксиді  $NaOH$ . Умовно виділимо один атом водню в кожній сполуці:



Якщо порівняти відношення виділених атомів гідрогену до металів, кислот, лугів та представників інших класів, зрозуміло, що вони поведуть себе в хімічних реакціях протилежним чином завдяки впливу сполучених з ними різних атомних груп.

5. Хімічна будова речовини встановлюється при вивченні її хімічних перетворень і, навпаки, на основі хімічної будови сполуки можна визначити її властивості.

Теорія будови органічних сполук Бутлерова стала логічно завершеною науковою основою органічної хімії. Вона не тільки пояснила вже відомі на той час факти, але і дозволила прогнозувати існування нових органічних речовин.

## 8.2 СУЧАСНІ УЯВЛЕННЯ ПРО БУДОВУ АТОМА

Викладені в § 8.1 основні положення теорії Бутлерова підкреслюють, що хімічна будова зумовлює властивості органічних сполук, тобто їх здатність вступати в ті чи інші реакції. Отже, для керування перебігом реакцій з метою одержання бажаних продуктів необхідно досконало знати хімічну будову речовин, яка цілком і повністю визначається будовою окремих атомів, що входять до складу сполуки. Тому для розуміння основ органічної хімії необхідно ознайомитися з сучасними концепціями щодо будови атома.

До виникнення сучасної квантово-механічної теорії про будову атома серед науковців панували уявлення, які базувалися на законах класичної фізики. Узагальнювала такі уявлення запропонована Резерфордом (1911 р.) **планетарна модель атома**, що зводилась до декількох основних стверджень:

- атом – електронейтральна система, що складається з ядра і електронної оболонки (рис. 8.1 а);
- у центрі атома міститься позитивно заряджене ядро, радіус якого становить мізерну частину радіуса атома (рис. 8.1 б); увесь позитивний заряд і майже вся маса атома зосереджені в його ядрі;
- навколо ядра обертаються негативно заряджені електрони, кількість яких дорівнює позитивному заряду ядра.

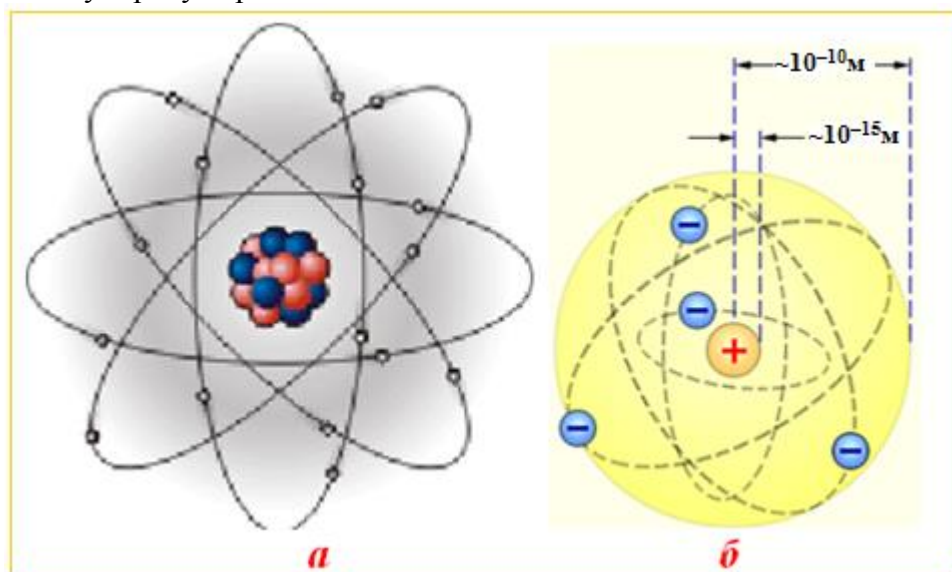


Рисунок 8.1 – Будова атома за Резерфордом: а) планетарна модель; б) розміри атома і атомного ядра

Теорія Резерфорда стала поштовхом до відкриття фундаментальної залежності, нині відомої як **закон Мозлі**:  
*Заряд ядра атома чисельно дорівнює порядковому номеру елемента в періодичній системі Д.И.Менделєєва.*

### 8.2.1 КВАНТОВО-МЕХАНІЧНА МОДЕЛЬ АТОМА

Планетарна модель Резерфорда та інші перші спроби пояснити будову атома довели безпідставність автоматичного поширення законів класичної фізики, справедливих для великих об'єктів макросвіту, на мізерно малі частинки – об'єкти мікросвіту. Тому для опису властивостей і поведінки мікрочастинок поступово сформувалася якісно нова фізична теорія – *квантова механіка* (або *хвильова механіка*), що ґрунтується на видатних гіпотезах і законах, справедливість яких блискуче підтвердилася подальшими науковими відкриттями. Перелічимо найважливіші гіпотези, які прийнято називати принципами.

1) **Принцип квантування енергії**, відкритий Планком, який для пояснення властивостей фотона ввів деякі припущення. По-перше, мікрочастинка є неподільною і існує у вигляді дискретного утворення. По-друге, променева енергія випромінюється і поглинається не безперервно, а дискретно – невеликими порціями (квантами), енергія  $E$  яких залежить від частоти  $\nu$  згідно з рівнянням Планка:

$$E = h \cdot \nu,$$

де  $h$  – стала Планка ( $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$  Дж·с), що визначає квант енергії.

2) **Принцип корпускулярно-хвильового дуалізму**, відповідно до якого електрон в атомі виявляє подвійні властивості, зумовлені наявністю одночасно як ознак корпускули (від латинського *corpusculum* – частинка), що має деяку масу  $m$  і швидкість  $v$ , так і ознак хвилі з певною довжиною хвилі  $\lambda$  та частотою коливань  $\nu$ . Вперше гіпотезу щодо корпускулярно-хвильового дуалізму електрона в атомі висловив Де Бройль (1924 р.), стверджуючи, що електрон має властивості стоячої електромагнітної хвилі, подібної до закріпленої з обох боків скрипкової струни, яка здатна коливатися тільки з певними частотами (рис. 8.2). Коливання, при яких амплітуда на обох зафіксованих кінцях струни не дорівнює нулю, просто неможливі.

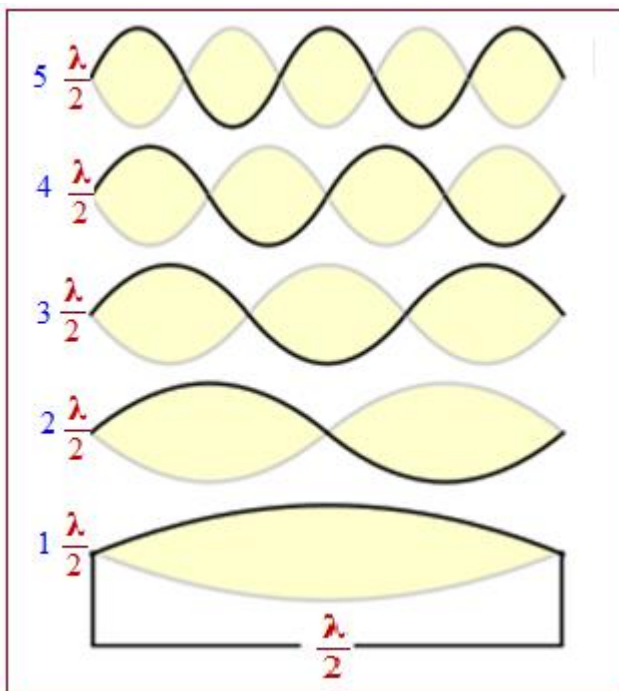


Рисунок 8.2 – Стоячі хвилі, кінці яких закріплені на відстані цілого числа на півхвиль  $\lambda/2$  один від одного

Однак на відміну від коливання скрипкової струни хвилі Де Бройля уявляють собою *хвилі імовірності*. Де Бройль вважав, що електрон в атомі рухається так само, як світловий квант, якому відповідає хвиля світла. Такий погляд пояснював квантові умови: з геометричних міркувань хвиля, що рухається навколо ядра, може бути тільки стаціонарною хвилею, а довжина хвилі повинна бути кратною цілому числу на півхвиль – так званих *хвиль Де Бройля*  $\lambda_B$  – і укладатися на орбіті ціле число напівразів (рис. 8.3).

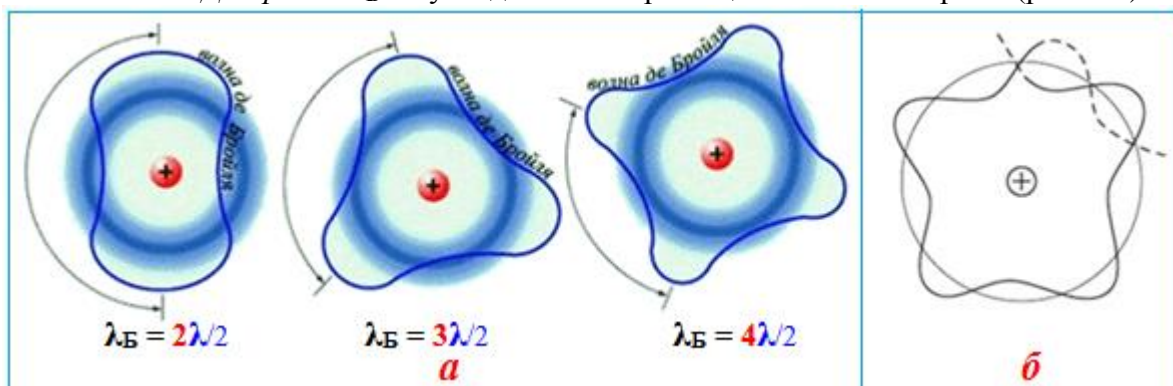


Рисунок 8.3 – Хвилі Де Бройля: а) для електрона з номерами орбіт  $n = 2, 3$  і  $4$  за умови кількості напівхвиль відповідно  $2\lambda/2, 3\lambda/2$  і  $4\lambda/2$ ; б) якщо довжина орбіти не дорівнює цілому числу напівхвиль, тоді електрон покидає межі атома

Двоїсту корпускулярно-хвильову природу електрона в атомі описує *рівняння Де Бройля*, що пов'язує довжину хвилі  $\lambda$  електрона з його масою  $m$  і швидкістю  $v$ :

$$\lambda = h / m \cdot v,$$

Добуток маси  $m$  на швидкість  $v$  називається *кількістю руху, або імпульсом*  $p$  ( $p = m \cdot v$ ), тому рівняння Де Бройля може мати і такого вигляду:

$$\lambda = h / p.$$

Розрахункові порівняння хвильових ( $\lambda$ ) і корпускулярних ( $m$ ) властивостей електрона ( $\lambda : m = 0,332 \cdot 10^{-9} \cdot 9,1095 \cdot 10^{-31} \sim 3,7 \cdot 10^{20}$ ) свідчать про значну ( $\sim 20$  порядків) перевагу хвильових властивостей електрона над корпускулярними.

3) *Принцип невизначеності* Гейзенберга (1927 р.), який спрощено формулюється так:

*неможливо однозначно і точно встановити швидкість електрона і його координати.*

Математичний вираз принципу невизначеності має вигляд

$$\Delta x \Delta p \geq h/2\pi, \quad \text{або} \quad \Delta x \Delta v \geq h/2\pi m,$$

де  $\Delta x, \Delta p, \Delta v$  – відповідно невизначеності (інакше кажучи – похибки у визначенні) в координаті  $x$ , імпульсі  $p$  та швидкості  $v$  електрона.

Із наведених рівнянь випливає: *чим точніше визначена координата електрона (тобто чим менша похибка у визначенні координати  $\Delta x$ ), тим менш визначеною стає величина імпульсу (тобто похибка у визначенні імпульсу прямує до нескінченності  $\Delta p \rightarrow \infty$ ). І навпаки: чим точніше визначений імпульс (швидкість), тим більш невизначене місцезнаходження електрона.* Так, якщо при радіусі атома приблизно  $10^{-10}$  м положення електрона визначено з точністю усього до  $10^{-12}$  м, то невизначеність в швидкості складатиме  $58000000$  м/с (при швидкості електрона  $2,187 \cdot 10^6$  м/с!).

4) Принцип хвильового характеру руху електрона в атомі, виражений через *хвильове рівняння Шредінгера* – ще одне важливе положення, на якому базується квантово-механічна модель будови атома. Квантова механіка відмовилася від уточнення місцезнаходження електрона і від уявлення про його рух по чітко окресленій орбіті, замінивши класичне поняття точних координат поняттям статистичної імовірності його знаходження в даному елементі об'єму  $dV$  навколо ядра. Це й зрозуміло: за умови невизначеності положення електрона в атомі можна говорити лише про імовірність його перебування в тій чи іншій точці атомного простору.



Хвильове рівняння Шредінгера (1925 р.) пов'язує потенціальну  $U$  і повну  $E$  енергії електрона з хвильовою функцією «пси»  $\psi$ , яка не має строгого фізичного змісту, а лише сподобляється тримірній амплітуді коливання, не будучи ідентичною їй. Однак фізичний зміст має добуток  $\psi^2 dV$ , який характеризує імовірність локалізації електрона в елементарному об'ємі навколяядерного простору  $dV = dx dy dz$ .

Подібно до амплітуди будь-якого іншого процесу хвильова функція  $\psi$  може набувати як додатних, так і від'ємних значень, але величина  $\psi^2$  завжди додатна. При цьому вона має надзвичайну властивість: чим більше значення  $\psi^2$  в якійсь точці простору, тим вища імовірність того, що електрон виявить там свою дію, тобто його існування може бути відкритим у фізичному процесі.

Допустимими розв'язками рівняння Шредінгера є функції  $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots, \psi_n$ , кожній з яких відповідає своє значення енергії  $E_1, E_2, E_3, \dots, E_n$ . Тим самим хвильове рівняння підтверджує квантову природу енергії електрона в атомі і одночасно виводить поняття про квантові рівні, або **енергетичні рівні**, фізичним втіленням яких є **електронні шари** в атомі, де розосереджуються електрони.

Найменшу енергію електрон має на найближчому до ядра енергетичному рівні ( $n = 1$ ); у міру віддалення від ядра (із зростанням номера рівня  $n$ ), енергія електрона збільшується. При  $n = \infty$  припускають, що електрону надано енергію, достатню для його повного відділення від ядра (іонізація атома).

З математичних позицій хвильова функція  $\psi$ , що є розв'язком рівняння Шредінгера, називається **орбіталь**.

Проте поряд з математичним часто користуються й спрощеним тлумаченням:

**Орбіталь** – це простір навколо ядра, в якому найімовірніше перебування електрона.

Однак крім поняття «орбіталь» в квантовій механіці застосовують уявлення про електронну хмару.

**Електронна хмара** – фізична модель стану електрона в атомі, густина відповідних ділянок якої пропорційна імовірності перебування там електрона.

Форма електронної хмари може бути різною. Це пояснюється тим, що електрон в атомі одночасно зазнає впливу багатьох сил, наприклад, доцентрової сили, зумовленої притяганням до позитивно зарядженого ядра, відцентрової сили, зумовленою інерцією руху електрона навколо ядра, сили відштовхування від інших електронів в атомі тощо. Сукупна дія всіх сил впливає на енергію зв'язку електрона з ядром і, як наслідок, визначає форму орбіталі, яку позначають латинськими буквами  $s, p, d, f$  (рис. 8.4 і 8.5).

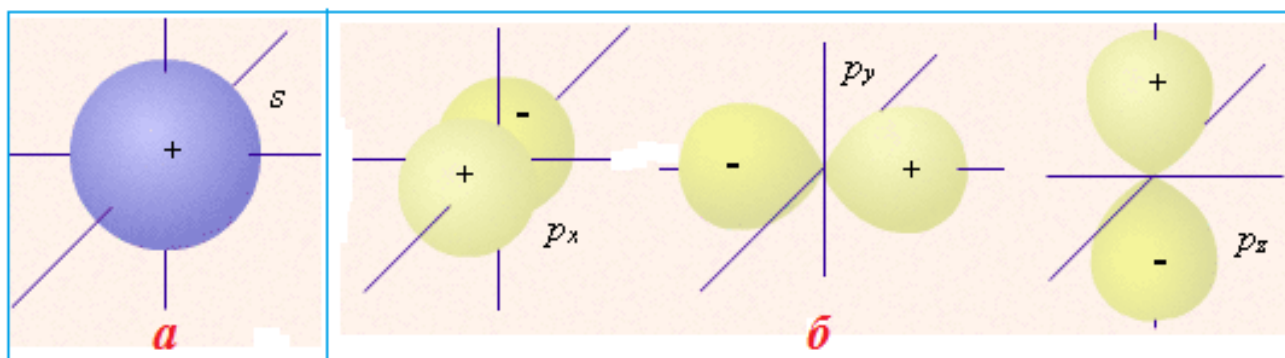


Рисунок 8.4 – Моделі електронних хмар: а) сферична форма  $s$ -орбіталі, яка характеризується найменшою енергією на енергетичному рівні та розташовується найближче від ядра порівняно з іншими орбітальми даного енергетичного рівня; б) три  $p$ -орбіталі: чим вища енергія електрона, тим швидше він обертається навколо ядра, тим сильніше витягується область його існування, набуваючи гантелеподібної форми. При цьому електронні хмари займають в навколяядерному просторі три положення вздовж осей координат  $x, y$  і  $z$ , що пояснюється взаємним відштовхуванням негативно заряджених електронних хмар, які намагаються зайняти положення якомога далі одна від одної. Усі

разом  $p_x$ -,  $p_y$ - і  $p_z$ -електронні хмари утворюють симетричну геометричну фігуру, у центрі якої розміщується атомне ядро

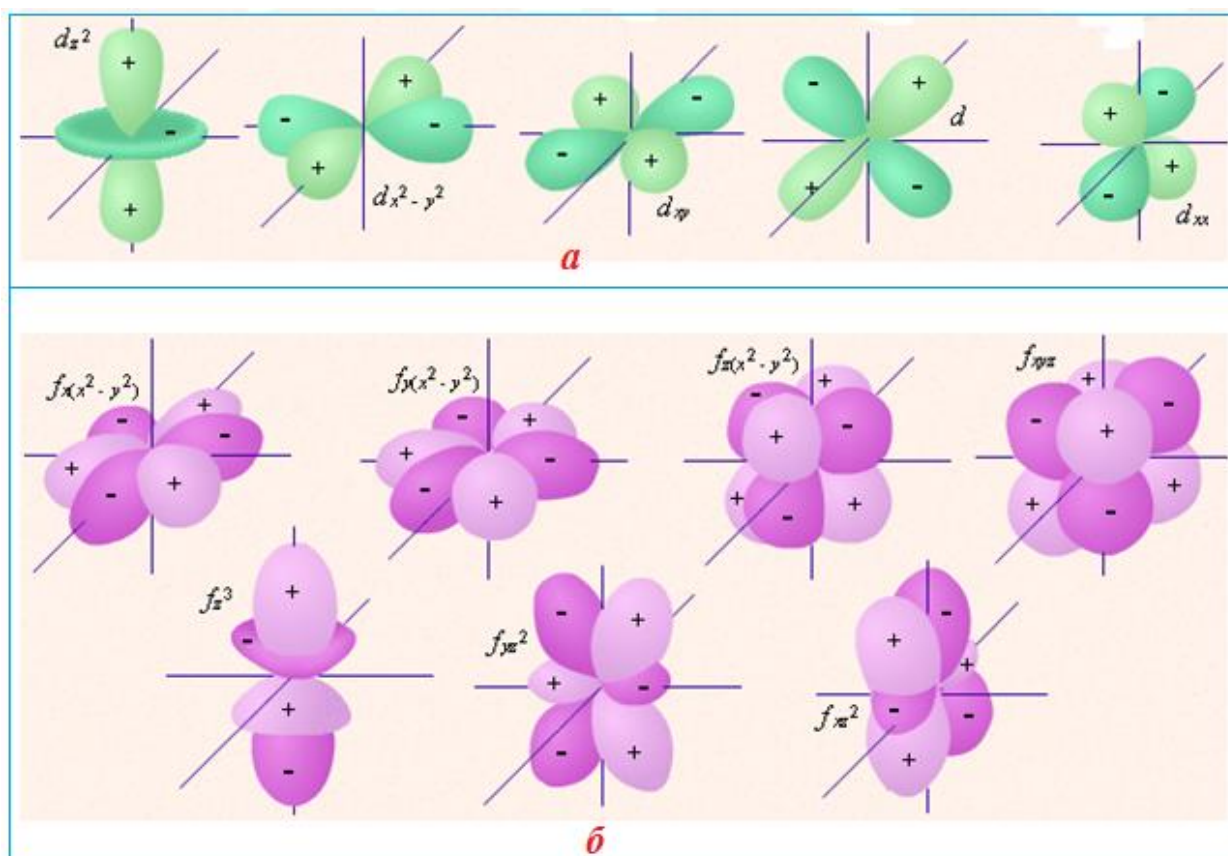


Рисунок 8.5 – Моделі електронних хмар: а) п'ять d-орбіталей; б) сім f-орбіталей

Орбіталі, що мають однакову форму і знаходяться на одному енергетичному рівні, складають **енергетичний підрівень**. Кількість підрівнів на будь-якому енергетичному рівні дорівнює номеру цього рівня. Наприклад, на четвертому енергетичному рівні ( $n = 4$ ) міститься чотири підрівні, кожен з яких має своє позначення:  $4s$ ,  $4p$ ,  $4d$ ,  $4f$ .

### 8.2.2 ПРИНЦИПИ ЗАПОВНЕННЯ ЕЛЕКТРОННОЇ ОБОЛОНКИ АТОМА

Для вичерпного пояснення будови електронних оболонок необхідно знати три фундаментальних положення.

**Принцип Паулі**, який іноді називають *заборонаю Паулі*, формулюється так:  
*В атомі не може бути двох або більше електронів з однаковими властивостями.*

З принципу Паулі випливає декілька *наслідків*, які визначають максимальну ємність енергетичних рівнів, підрівнів і орбіталей.

- 1) *Перший наслідок*: одну орбіталь можуть займати не більше, ніж два електрони з антипаралельними спінами.

Якщо на одній орбіталі знаходиться єдиний електрон, його називають *неспареним*, а якщо два – то це *спарені електрони*. Спарені електрони відрізняються один від одного так званим «спіном» – власним моментом імпульсу, не пов'язаним з рухом електрона в просторі. На теперішній час думки щодо фізичного змісту спіну електрона діаметрально протилежні. Одні доводять, що спін – це суто квантово-механічна ознака електрона, яка не має класичних аналогів, а тільки відображає наявність у електрона власного моменту кількості руху. Інші впевнені, що спін характеризує обертання електрона навколо власної вісі за годинниковою стрілкою чи проти неї (рис. 8.6).

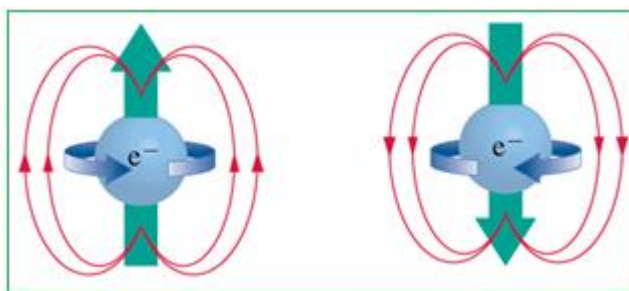


Рисунок 8.6 – Гіпотетична модель спіну електрона, яка достовірно не доведена, але і доказово не спростована

Для ілюстрації розміщення електронів в атомі використовують **електронно-графічні схеми**, в яких одна орбіталь позначається за допомогою квантової комірки (невеликої клітинки), а електрон – стрілкою (рис. 8.7).

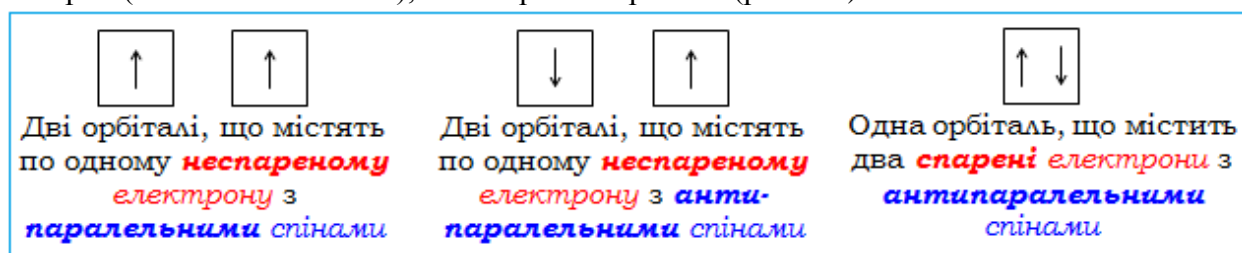


Рисунок 8.7 – Електронно-графічні схеми (пояснення в тексті)

- 2) Другий наслідок принципу Паулі визначає максимальну кількість електронів на енергетичному підрівні, яка залежить від кількості орбіталей (табл. 8.1). З урахуванням Першого наслідку на s-підрівні, що складається з однієї орбіталі, може максимально перебувати  $1 \cdot 2 = 2$  електрони, на трьох орбіталах p-підрівня –  $3 \cdot 2 = 6$ , на п'яти орбіталах d-підрівня –  $5 \cdot 2 = 10$ , на сімох орбіталах f-підрівня –  $7 \cdot 2 = 14$  електронів.

Таблиця 8.1 – Графічне зображення орбіталей у вигляді квантових комірок

<i>Кількість орбіталей на енергетичному підрівні</i>	<i>Графічне позначення орбіталей</i>
<i>Одна орбіталь s-підрівня</i>	□
<i>Три орбіталі p-підрівня</i>	□ □ □
<i>П'ять орбіталей d-підрівня</i>	□ □ □ □ □
<i>Сім орбіталей f-підрівня</i>	□ □ □ □ □ □ □

- 3) Третій наслідок принципу Паулі: максимальна кількість електронів на будь-якому енергетичному рівні дорівнює  $2n^2$ , де  $n$  – номер рівня. Виходячи з цього, легко розрахувати можливу кількість електронів на будь-якому енергетичному рівні: на першому ( $n = 1$ ) може знаходитися  $2 \cdot 1^2 = 2$  електрони, на другому ( $n = 2$ ) –  $2 \cdot 2^2 = 8$ , на третьому ( $n = 3$ ) –  $2 \cdot 3^2 = 18$ , на четвертому ( $n = 4$ ) –  $2 \cdot 4^2 = 32$  електрони.

**Принцип мінімуму енергії:** В атомі електрони заповнюють вільні орбіталі з мінімальними енергіями, що відповідає їх найміцнішому зв'язку з ядром.

За зростанням енергії орбіталей енергетичні підрівні розміщуються в послідовності, яка називається **шкала енергії** (рис. 8.8):

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s \approx 4f \approx 5d < 6p < 7s \approx 5f \approx 6d < 7p$$

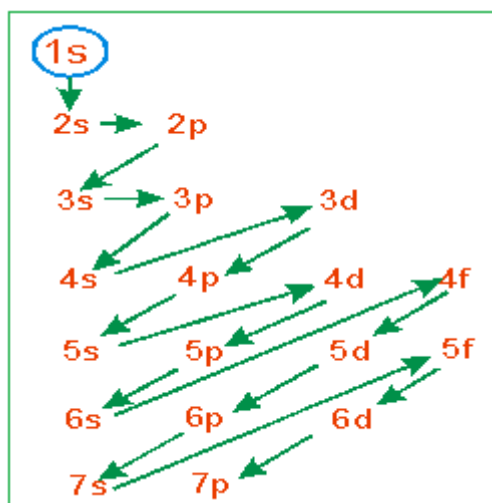


Рисунок 8.8 – Послідовність заповнення електронами енергетичних підрівнів

На кожному наступному рівні енергія електронів більша, ніж на попередньому, а зв'язок із ядром відповідно менший. У межах певного енергетичного рівня енергія електронів збільшується при переході з s-підрівня на p- і з p- на d-підрівень (рис. 8.9).

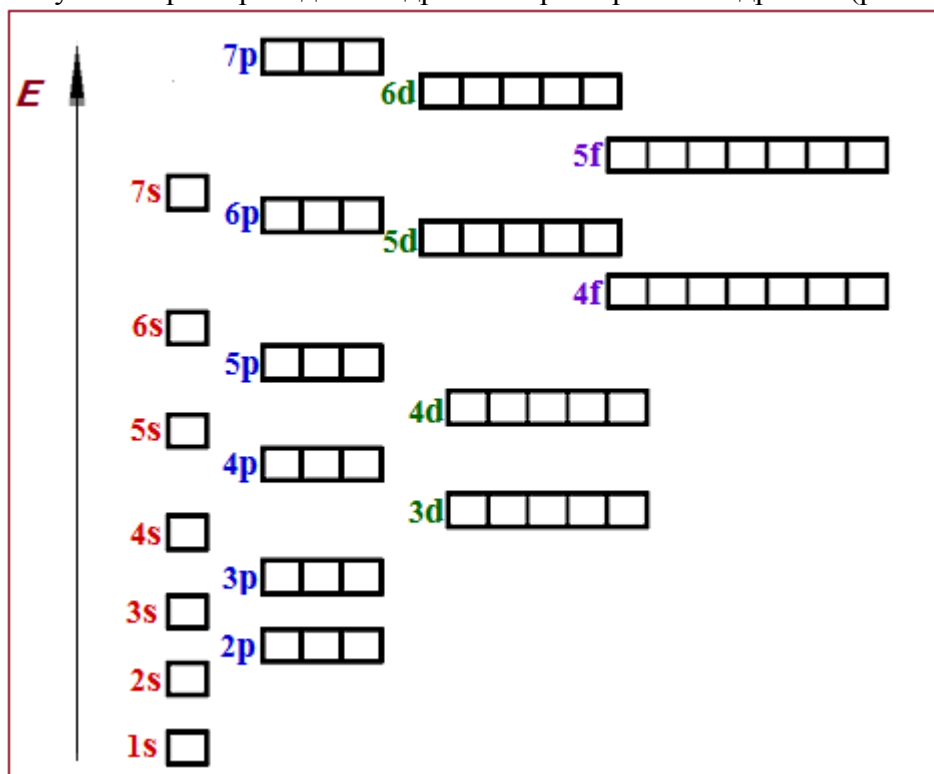
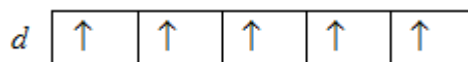


Рисунок 8.9 – Зростання енергії енергетичних рівнів і підрівнів

**Правило Гунда:** *Стійкому стану атома відповідає такий розподіл електронів на енергетичному підрівні, при якому електрони певного підрівня займають максимально можливу кількість орбіталей.*

З цього випливає, що на суміжних орбіталях одного підрівня спочатку розміщуються електрони з паралельними спінами, а після цього ті самі орбіталі заповнюються електронами з антипаралельними спінами. Наприклад, на d-підрівні п'ять електронів розміщуються за схемою

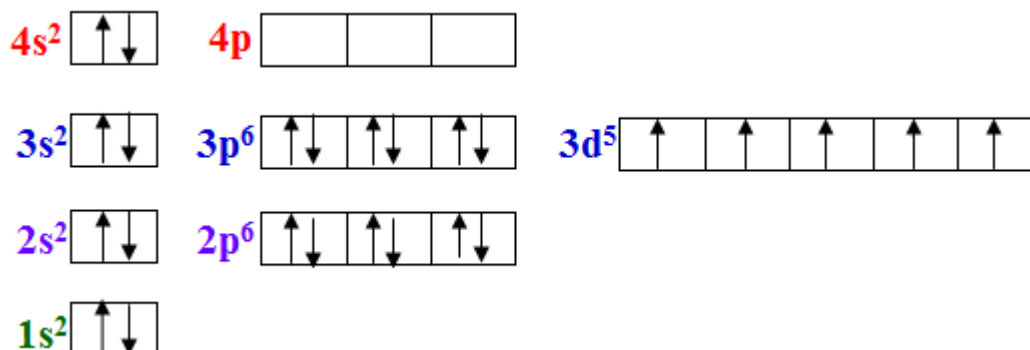




Правило Гунда не забороняє іншого розподілу електронів у межах підрівня. Воно лише стверджує, що атом має найменшу можливу енергію при максимальній кількості неспарених електронів. При будь-якому іншому розподілі електронів енергія атома буде більшою, отже, атом буде перебувати в нестійкому (збудженому) стані.

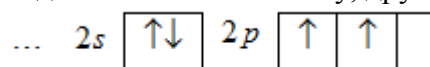
Розподіл електронів в атомі виражають не тільки *електронно-графічними схемами* (квантовими комірками, в яких клітинка символізує орбіталь, а стрілка – електрон), але і за допомогою умовного запису, який називається *електронні формули*. В електронних формулах цифрами вказують номер енергетичного рівня, латинськими буквами – енергетичні підрівні, а цифрами вгорі справа – кількість електронів на підрівні. Так, запис  $5d^4$  означає, що на d-підрівні п'ятого енергетичного рівня розміщуються чотири електрони.

Складемо для прикладу електронну формулу елемента мангану. Порядковий номер мангану, який дорівнює 25, вказує на загальну кількість електронів в атомі, розподілених по чотирьох електронних шарах (оскільки Mn знаходиться в четвертому періоді періодичної системи елементів). Спочатку проходить заповнення електронами першого енергетичного рівня ( $n = 1$ ), який складається з одного s-підрівня, що має одну s-орбіталь, тому на першому рівні максимально може перебувати два електрони:  $1s^2$ . На другому рівні ( $n = 2$ ) відповідно до *Третього наслідку* принципу Паулі розміщуються ще вісім електронів ( $2 \cdot 2^2 = 8$ ), які розподіляються по двох підрівнях:  $2s^2 2p^6$ . На третьому рівні ( $n = 3$ ) може перебувати вісімнадцять електронів ( $2 \cdot 3^2 = 18$ ), але зі шкали енергії (рис. 8.8) випливає, що спочатку заповнюється електронами 4s-підрівень і тільки потім – 3d. З урахуванням цього маємо кінцевий вигляд електронної формули і електронно-графічної схеми атома елемента мангану:



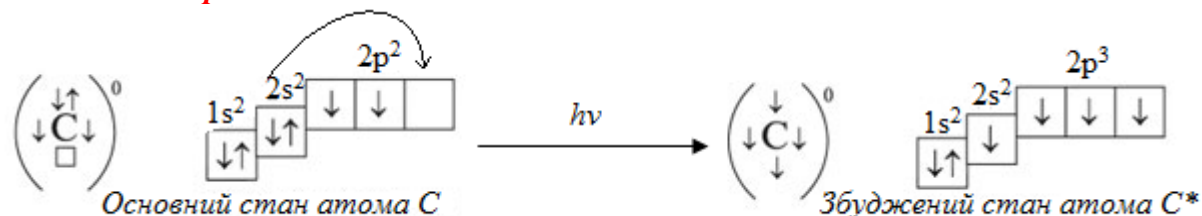
### 8.3 СУЧАСНІ УЯВЛЕННЯ ПРО СТАН АТОМА КАРБОНУ В ОРГАНІЧНИХ СПОЛУКАХ

Елемент карбон (порядковий номер 6) розміщується в другому періоді, головній підгрупі IV групи періодичної системи Д.І. Менделєєва. З електронної конфігурації карбону ( $1s^2 2s^2 2p^2$ ) випливає, що на двох енергетичних рівнях атома С перебуває шість електронів, з яких чотири знаходяться на зовнішньому, другому рівні:



Зовнішні електрони атома зумовлюють спінвалентність, або ковалентність карбону. **Ковалентність** – це кількість ковалентних зв'язків, що утворює атом; ковалентність визначається кількістю неспарених електронів в основному стані атома або кількістю неспарених електронів, що з'являються в атомі при його збудженні.

Оскільки атом карбону в основному стані має два неспарених електрони, його ковалентність дорівнює двом, тобто він може утворювати два зв'язки. Однак практично в усіх органічних сполуках атом С утворює чотири зв'язки завдяки збудженню внаслідок поглинання певної кількості енергії (405,7 кДж/моль) – при цьому відбувається розпаровування спарених електронів. У збудженому стані, який позначають за допомогою зірочки С\*, атом карбону має вже чотири неспарених електрони, які називаються **валентні електрони**:



Збудження атома С при переході із стану  $2s^2 2p^2$  в стан  $2s^1 2p^3$  потребує витрати енергії ( $h\nu$ ), яка не тільки повністю компенсується, але й дає енергетичний вигравш при утворенні хімічних зв'язків. Наприклад, енергія, що виділяється при утворенні кожного зв'язку С–Н у вуглеводнях, становить 415,5 кДж/моль. А при утворенні двох додаткових зв'язків (порівняно з основним станом) виділяється енергії на  $415,5 \cdot 2 - 405,7 = 425,3$  кДж/моль більше, ніж її потрібно для збудження атома.

Кожна орбіталь збудженого атома С\* характеризується певною формою та енергією (рис. 8.10).

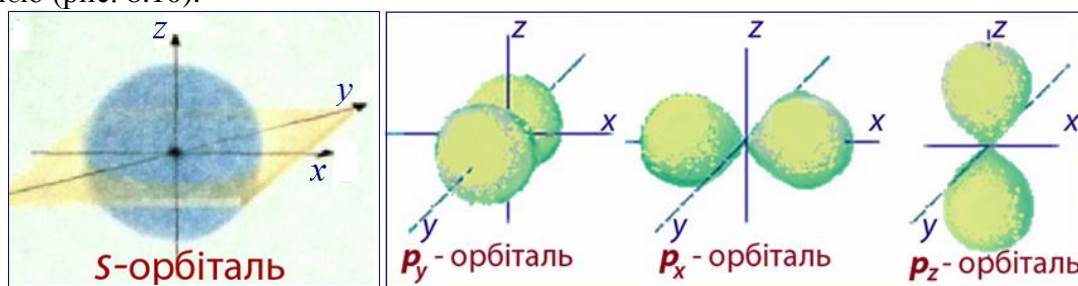


Рисунок 8.10 – Орбіталі атома карбону в основному стані

## 8.4 ГІБРИДИЗАЦІЯ АТОМНИХ ОРБІТАЛЕЙ

Різниця у формі та енергії атомних орбіталей повинна спричиняти утворення хімічних зв'язків С–Н, відмінних за своєю енергією. Однак дослідження доводять, що насправді зв'язки рівноцінні завдяки явищу гібридизації.

**Гібридизація** – це процес змішування та вирівнювання орбіталей за формою і енергією, при якому відбувається перерозподіл електронних густин близьких за енергією орбіталей, внаслідок чого вони стають рівноцінними.

Для валентних орбіталей збудженого атома карбону можливі три типи гібридизації.

**I. sp-Гібридизація.** При комбінації однієї s- і однієї p-орбіталей виникають дві sp-гібридизовані орбіталі у формі неправильної вісімки, що розміщуються симетрично під валентним кутом  $180^\circ$  (рис. 8.11).

**Валентний кут** – це кут між осями зв'язку – уявними лініями, які проходять через ядра хімічно сполучених атомів.

Зв'язки, які утворюються за участю електронів валентних орбіталей, також розміщуються під кутом  $180^\circ$ , що зумовлює *лінійну форму* молекули. Такий тип гібридизації спостерігається в молекулах вуглеводнів з потрійними зв'язками (наприклад, в ацетилені  $\text{HC}\equiv\text{CH}$  та його гомологах).

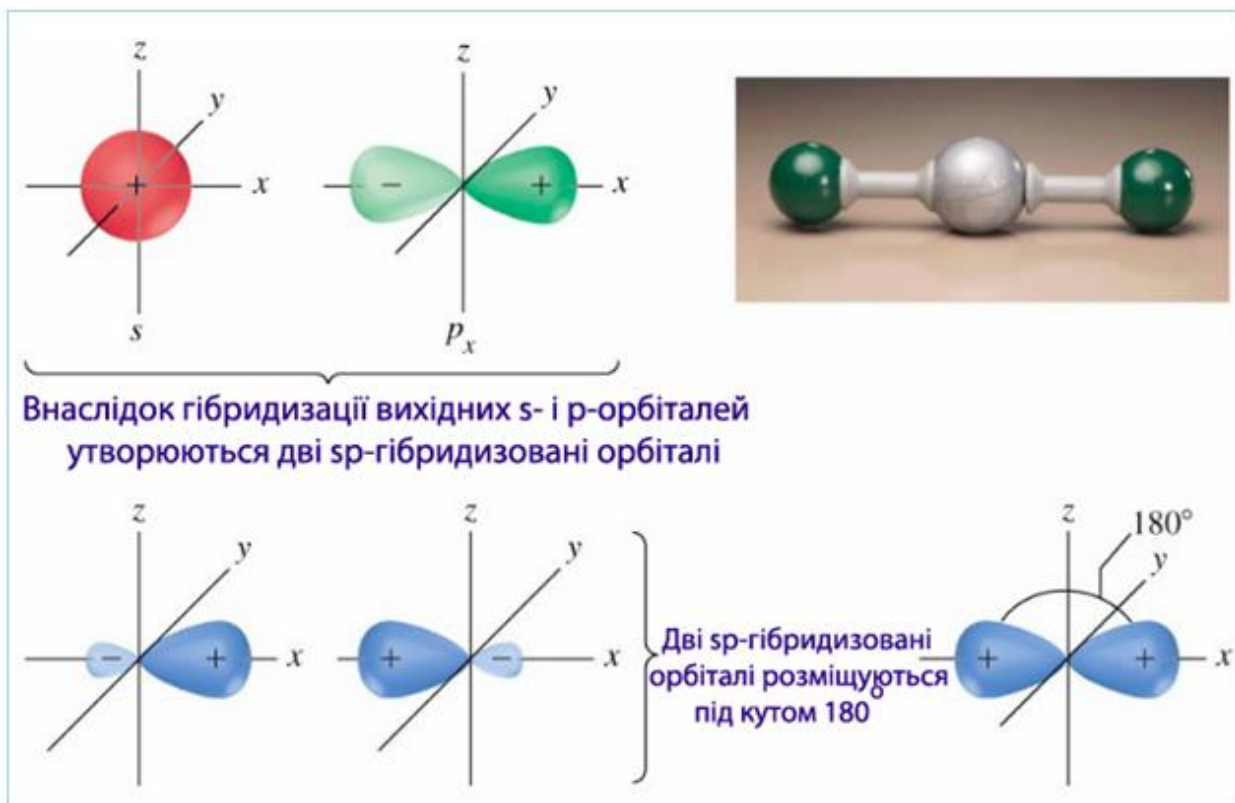


Рисунок 8.11 – Загальна схема  $sp$ -гібридизації

**II.  $sp^2$ -Гібридизація.** Комбінація однієї  $s$ - і двох  $p$ -орбіталей приводить до утворення  $sp^2$ -гібридизованих зв'язків, розміщених під кутом  $120^\circ$  (рис. 8.12). Тому фрагмент молекули, в якому зв'язки утворені за рахунок  $sp^2$ -гібридизованих орбіталей, набуває форми правильного трикутника. Наприклад, збуджений атом карбону  $C^*$  ( $2s^1 2p^3$ ) перебуває в стані  $sp^2$ -гібридизації в молекулі етилену ( $H_2C=CH_2$ ). Три гібридизовані орбіталі кожного атому карбону утворюють три зв'язки: два з атомами водню ( $C-H$ ) і один з сусіднім атомом карбону ( $C-C$ ), а негібридизовані  $p$ -орбіталі утворюють ще один додатковий зв'язок між атомами карбону.

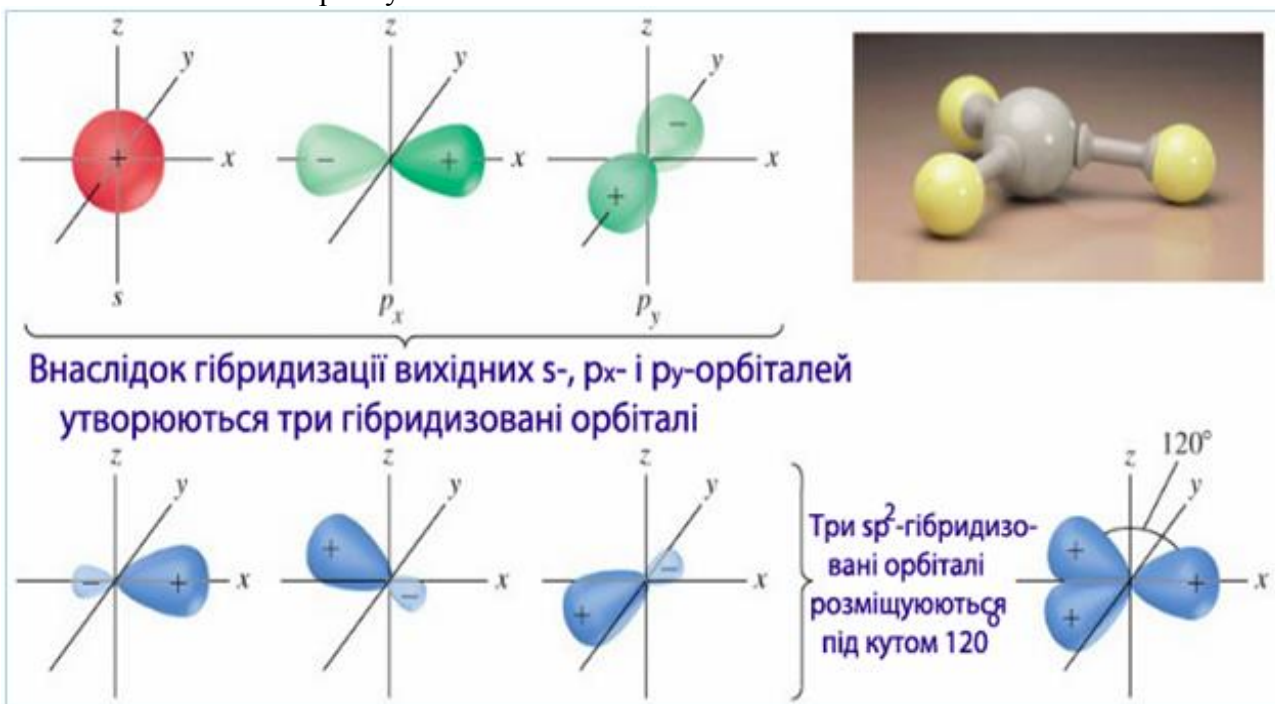


Рисунок 8.12 – Схема  $sp^2$ -гібридизації атомних орбіталей і плоска трикутна форма молекули, зумовлена  $sp^2$ -гібридизацією атомних орбіталей

**III.  $sp^3$ -Гібридизація.** Комбінація чотирьох орбіталей (однієї s- і трьох p-) приводить до  $sp^3$ -гібридизації, при якій чотири гібридизовані орбіталі симетрично орієнтовані у просторі до чотирьох вершин уявного тетраедра, тобто під кутом  $109^{\circ}28'$  (рис. 8.13). Таке розміщення зв'язків зумовлює *тетраедричну форму* молекул, що характерно для насичених сполук чотиривалентного карбону ( $CH_4$ ,  $CCl_4$ ,  $C_2H_6$ ).

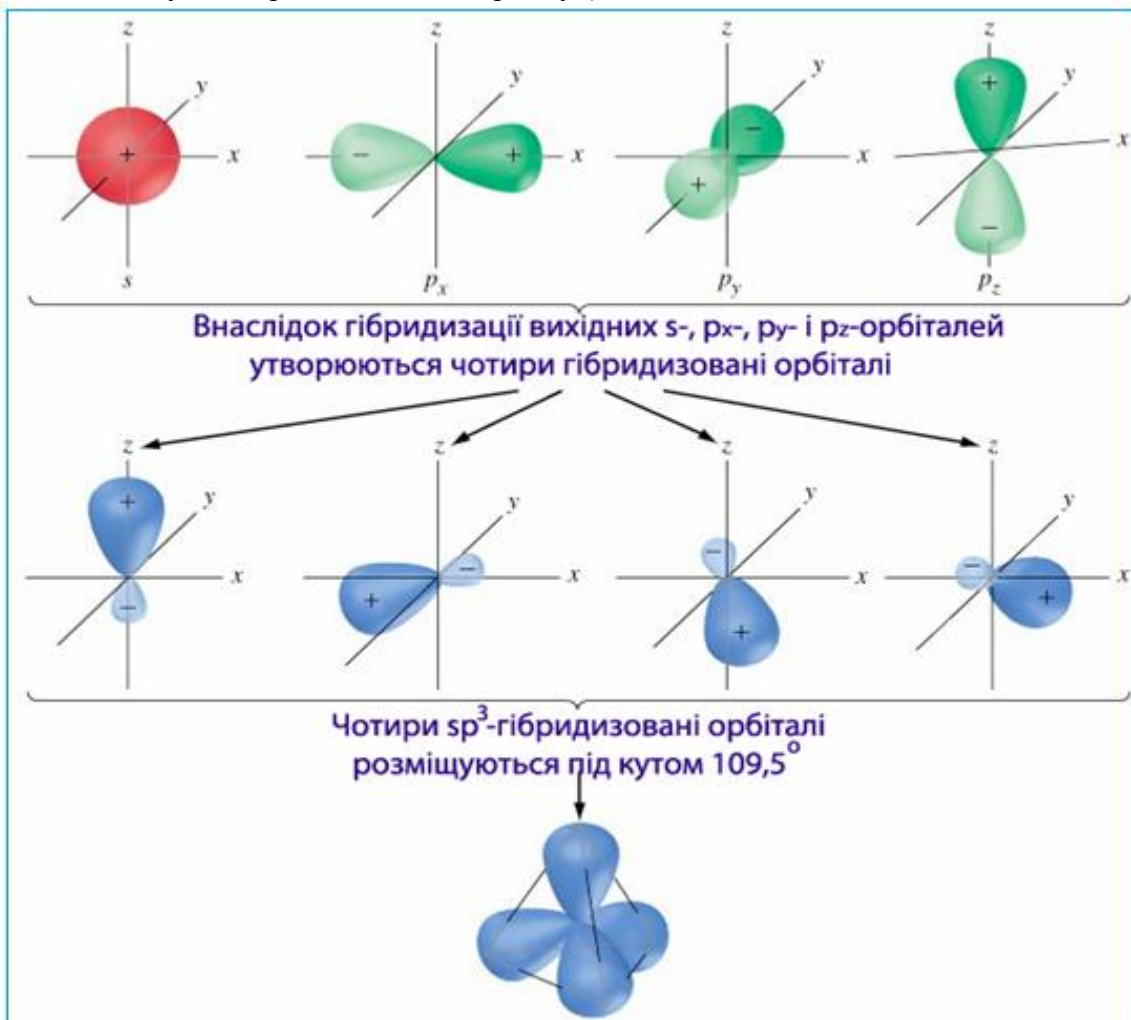


Рисунок 8.13 – Схема  $sp^3$ -гібридизації атомних орбіталей і тетраедрична форма молекули, що зумовлена  $sp^3$ -гібридизацією

Так, в молекулі метану  $CH_4$  атом карбону, який в основному стані мав електронну структуру  $2s^2 2p^2$ , а після збудження –  $2s^1 2p^3$ , піддається  $sp^3$ -гібридизації, причому кожна з чотирьох гібридизованих орбіталей містить по одному неспареному електрону (рис. 8.14) і утворює чотири рівноцінні зв'язки при перекриванні з сферичними  $1s$ -орбіталями чотирьох атомів Н. Це сприяє симетричному перекриванню електронних орбіталей у вершинах уявного тетраедру з атомом  $C^*$  у центрі (рис. 8.15).





Рисунок 8.14 – Схема послідовного переходу атома карбону в збуджений і гібридизований стан

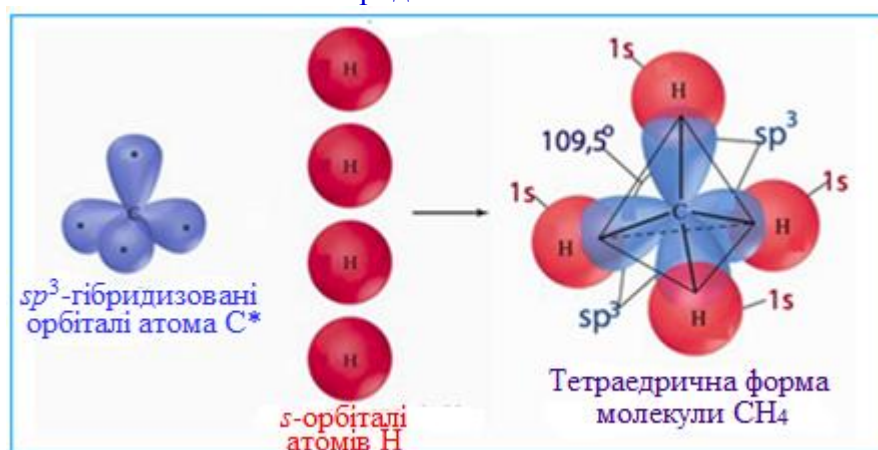


Рисунок 8.15 – Тетраедрична форма молекули  $\text{CH}_4$ , що зумовлюється  $sp^3$ -гібридизацією орбіталей атома  $\text{C}^*$

Завдяки  $sp^3$ -гібридизації, яка зумовлює розмір валентного кута ( $109^{\circ}28'$ ), молекули насичених алканів з довгим ланцюгом мають зигзагоподібну форму (рис. 8.16).

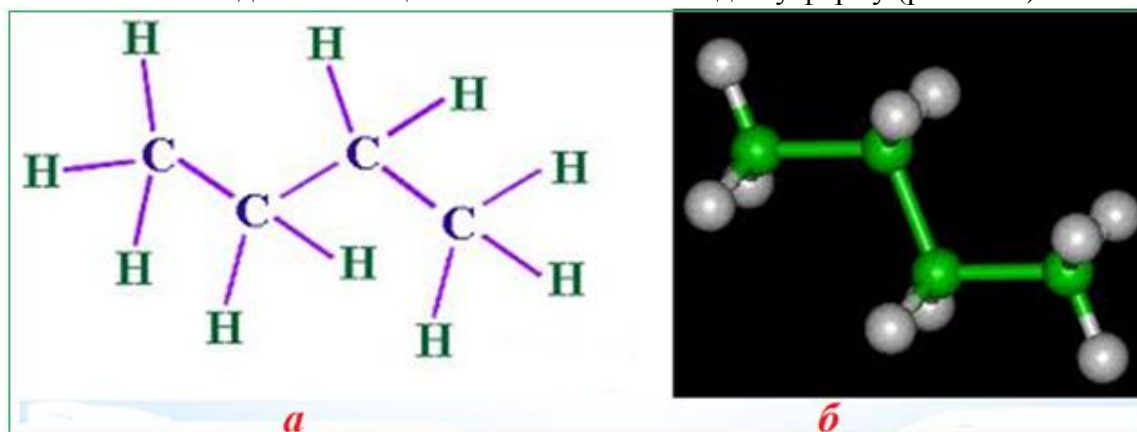


Рисунок 8.16 – Просторова форма молекули бутану  $\text{C}_4\text{H}_{10}$ : а) структурна формула; б) модель молекули

Тип гібридизації визначається типом і кількістю вихідних орбіталей і змінює розмір валентного кута (рис. 8.17, табл. 8.2), а також просторову конфігурацію молекул.



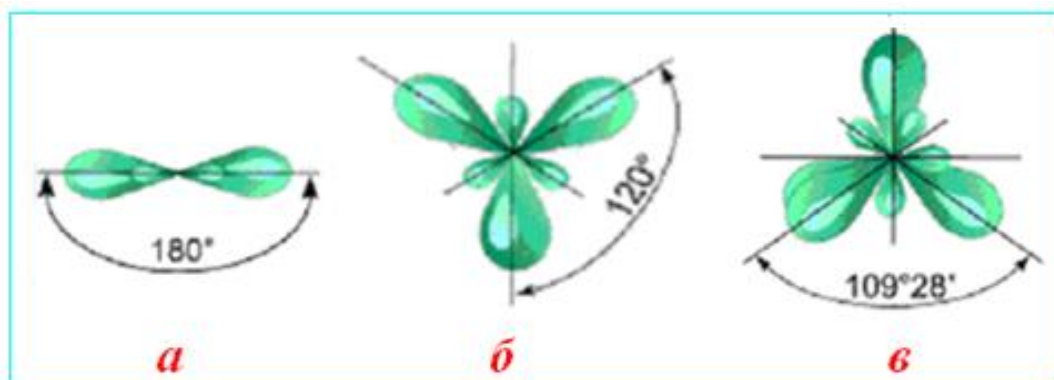


Рисунок 8.17 – Форма гібридизованих орбіталей і розмір валентних кутів залежно від типу гібридизації: а)  $sp$ -гібридизація; б)  $sp^2$ -гібридизація; в)  $sp^3$ -гібридизація

Таблиця 8.2 – Геометрична конфігурація молекул залежно від типу гібридизації центрального атома

Тип гібридизації	Валентний кут	Геометрична конфігурація частинки	Приклади сполук
$sp$	$180^\circ$	 Лінійна	 $O=C=O$ , $HC\equiv CH$
$sp^2$	$120^\circ$	 Трикутна	 Атоми С в етилені $C_2H_4$ та інших алкенах, бензені $C_6H_6$
$sp^3$	$109^\circ 28'$	 Тетраедрична	 Атоми С в $CH_4$ , $CCl_4$ і в насичених вуглеводнях $C_nH_{2n+2}$

## 8.5 ПРИРОДА ХІМІЧНОГО ЗВ'ЯЗКУ

Однозначно встановлено, що будь-який хімічний зв'язок має електричну природу. Це означає, що при його утворенні найбільш суттєву роль відіграють сили взаємодії між електричними зарядами, носіями яких є негативно заряджені електрони й позитивно заряджені ядра атомів. Суть взаємодії полягає у відштовхуванні однойменно заряджених частинок (ядро-ядро, електрон-електрон) і притяганні різнойменно заряджених (ядро-електрон). Зрозуміло, що система буде стійкою, якщо сили притягання переважають над силами відштовхування (рис. 8.18).



Рисунок 8.18 – Сили міжатомної взаємодії: відштовхування між електронними оболонками двох атомів та між їх ядрами; притягання між ядром одного атома і електронною оболонкою іншого і навпаки

Зростання сил притягання при утворенні молекули з ізолюваних атомів супроводжується виділенням енергії, внаслідок чого енергія системи зменшується порівняно з загальною енергією окремих атомів. Отже, *рушійною силою утворення хімічного зв'язку є прагнення ізолюваних атомів до виграшу в енергії, який досягається при їх об'єднанні в систему; стійкість системи забезпечується виникненням області підвищеної густини негативного електричного заряду в між'ядерному просторі, яка притягує до себе позитивно заряджені ядра атомів.*

При утворенні хімічного зв'язку найважливішими є електрони зовнішнього шару, тобто *валентні електрони*, які утримуються ядром найменш міцно. Саме тому будова електронної конфігурації атомів є визначальним чинником при розгляданні умов утворення хімічного зв'язку.

Відповідно до запропонованого Льюїсом **правило октету** *Найбільш стабільними й енергетично вигідними є зовнішні оболонки з електронними конфігураціями благородних газів, тобто такі, що містять два (у випадку найближчого до ядра енергетичного рівня) або вісім електронів.*

Правило октету є фундаментальним законом, який за своїм значенням не поступається відкриттю періодичного закону чи теорії будови сполук. Згідно з ним при утворенні молекул атоми задовольняють свою потребу в досягненні енергетично вигідного стану шляхом набуття на зовнішньому рівні двохелектронної структури – *електронний дублет* (для елементів, розташованих на початку періодичної системи) чи восьмиелектронної структури – *електронний октет* для елементів, що мають більш віддалені від ядра електронні шари. Тому при сполученні атомів із незавершеними зовнішніми електронними шарами їх оболонки зазнають перегрупування (рис. 8.19).

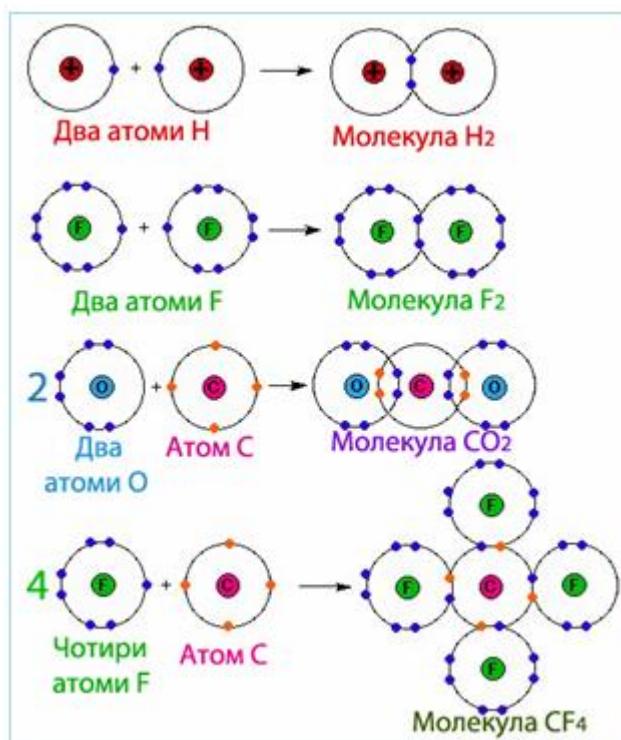


Рисунок 8.19 – Утворення електронного дублету і електронного октету за схемою Льюїса

Будь-який хімічний зв'язок утворюється, якщо це енергетично вигідно – лише тоді, коли зближення ізольованих атомів приводить до зменшення повної енергії системи, яка складається з кінетичної і потенціальної енергій ядер атомів і електронів.

Для характеристики енергії системи, що містить два ізольованих атоми, які наближуються один до одного, застосовують так звані **потенціальні криві** (рис. 8.20).

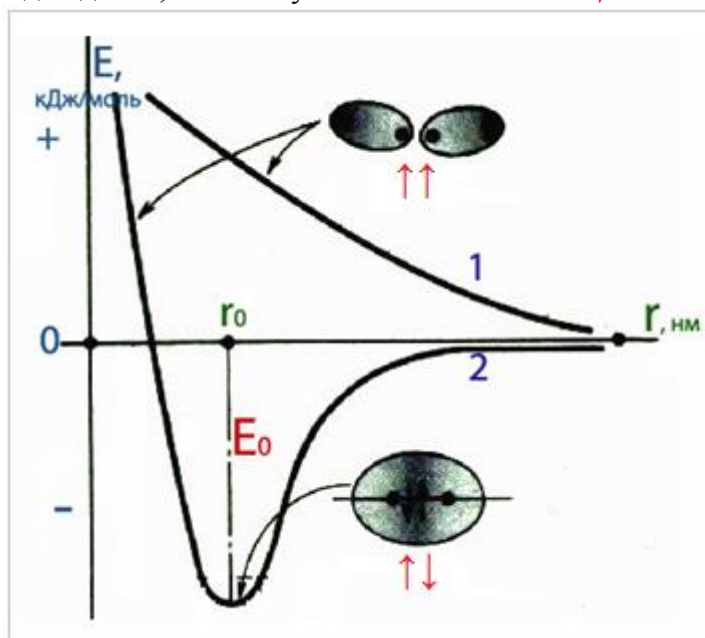


Рисунок 8.20 – Загальний вигляд потенціальних кривих для характеристики зміння енергії системи з двох атомів залежно від відстані між ядрами

Верхня потенціальна крива **1** відображає збільшення загальної енергії системи у міру зменшення відстані  $r$  між двома атомами, оскільки *при зближенні атомів з паралельними спінами ( $\downarrow$  і  $\downarrow$ ) переважають сили відштовхування між їх електронними оболонками*. При цьому зв'язок не утворюється. Нижня потенціальна крива **2** показує

зменшення енергії системи у випадку зближення атомів, що мають антипаралельні спіни ( $\downarrow$  і  $\uparrow$ ), на певну відстань – довжину зв'язку  $r_0$ , на якій відбувається утворення хімічного зв'язку. Мінімум на потенціальній кривій 2 визначає енергію зв'язку  $E_0$ . При подальшому зближенні атомів починають переважати сили відштовхування між їх ядрами, тому загальна енергія системи зростає.

**Енергія зв'язку** – це міра міцності зв'язку, що визначається кількістю енергії, яка виділяється внаслідок утворення зв'язку.

**Довжина зв'язку** – це відстань між ядрами хімічно сполучених атомів.

Одиниці вимірювання енергії зв'язку: [кДж/моль] або – рідше – [eV]. Енергія зв'язку характеризує його міцність: чим більше енергія зв'язку, тим він міцніший.

Довжину зв'язку вимірюють частіше у нанометрах [нм], пікометрах [пм], але інколи – в ангстремах [Å] ( $1 \text{ нм} = 10^{-9} \text{ м}$ ,  $1 \text{ пм} = 10^{-12} \text{ м}$ ,  $1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ м}$ ). Зі збільшенням радіусів атомів, між якими виникає зв'язок, зростає його довжина. Наприклад, довжини зв'язків у ряду гідрогенгалогенідів складають (нм): HF – 0,092; HCl – 0,128; HBr – 0,141; HI – 0,162.

Довжина зв'язку завжди менше суми радіусів двох сполучених атомів, оскільки утворення молекули супроводжується, крім зміни енергії, й зміною густини електронних хмар. Наприклад, якщо при утворенні зв'язку між двома атомами гідрогену, радіуси яких дорівнюють 0,053 нм, електронні хмари взаємно не проникали б одна в одну, то довжина зв'язку повинна була дорівнювати подвоєному радіусу:  $0,053 \cdot 2 = 0,106 \text{ нм}$ . Насправді ж довжина зв'язку в молекулі  $\text{H}_2$  становить 0,074 нм (рис. 8.21).

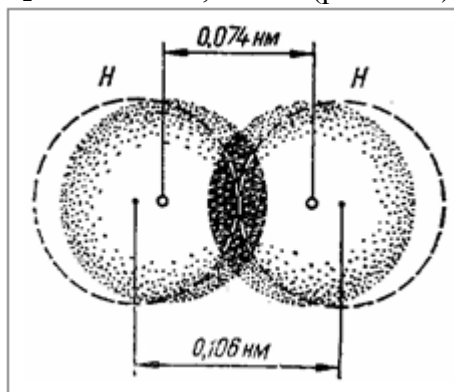


Рисунок 8.21 – Довжина зв'язку в молекулі  $\text{H}_2$

Це свідчить про *перекривання електронних хмар* ізольованих атомів, що відбувається при утворенні зв'язку, тобто в молекулі змінюється густина і форма електронних хмар порівняно з ізольованими атомами (рис. 8.22).

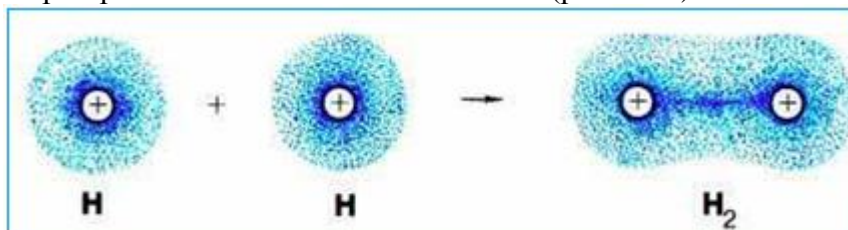


Рисунок 8.22 – Перерозподіл електронної густини електронних хмар атомів Н при утворенні зв'язку Н–Н в молекулі  $\text{H}_2$

## 8.6 КОВАЛЕНТНИЙ ЗВ'ЯЗОК

В органічних сполуках найчастіше зустрічається ковалентний тип хімічного зв'язку.

Зв'язок атомів за допомогою спільних електронних пар називається **ковалентний зв'язок**.

Для скорочення спільні пари електронів позначаються рискою між символами атомів відповідних елементів: C–H, C–C, C–Cl.

Після відкриття електрона проводилося багато спроб розробити електронну теорію хімічного зв'язку. Найбільш вдалим стали роботи Льюїса (1916 р.), який запропонував розглядати ковалентний зв'язок як наслідок виникнення спільної для двох атомів електронної пари (рис. 8.23 а). Для цього кожний атом надає однакову кількість електронів і намагається оточити себе октетом або дублетом електронів, характерним для зовнішньої електронної конфігурації інертних газів. Графічно за методом Льюїса утворення ковалентних зв'язків за рахунок неспарених електронів подають за допомогою точок, які позначають зовнішні електрони атома. Наприклад, утворення ковалентних зв'язків у молекулах Cl<sub>2</sub> і HCl з урахуванням електронної структури атомів елементів гідрогену (H: 1s<sup>1</sup>) і хлору (Cl: 1s<sup>2</sup>2s<sup>2</sup>2p<sup>6</sup>3s<sup>2</sup>3p<sup>5</sup>) виглядає як показано на рис. 8.23 б.

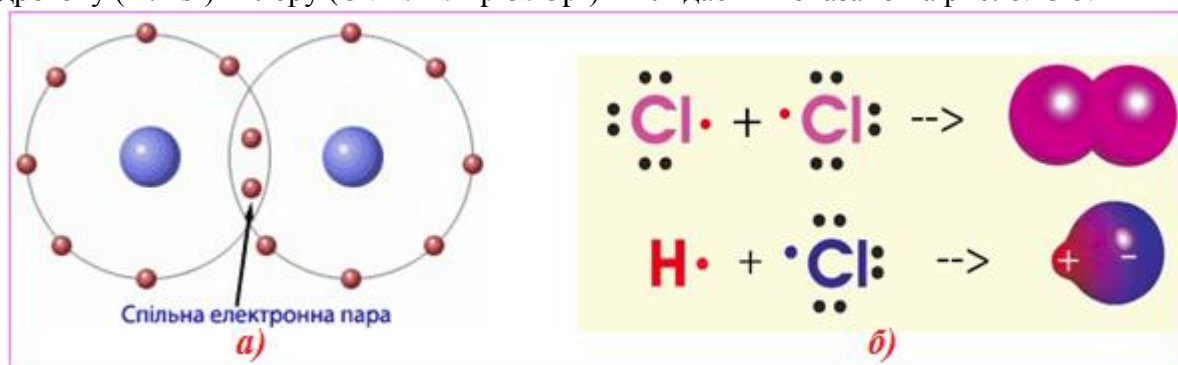


Рисунок 8.23 – Виникнення спільної електронної пари відповідно до теорії Льюїса: а) узагальнена спрощена модель; б) утворення ковалентного зв'язку в молекулах Cl<sub>2</sub> і HCl

Теорія Льюїса показувала механізм утворення ковалентного зв'язку, проте не могла пояснити його природи, оскільки уявлення про хвильові властивості електронів виникли значно пізніше, з розвитком квантової механіки.

Перша *квантово-механічна теорія ковалентного зв'язку* була створена Гейтлером і Лондоном (1927 р.) для опису молекули водню, а потім застосована Полінгом до багатоатомних молекул. Ця теорія одержала назву *метод валентних зв'язків* (ВЗ). Паралельно Маллікеном і Гундом розвивався інший підхід для пояснення ковалентного зв'язку – *метод молекулярних орбіталей* (МО).

Основне положення, на якому ґрунтуються обидва методи, полягає в тому, що багатоелектронна хвильова функція для молекули утворюється як лінійна комбінація одноелектронних функцій, кожна з яких описує відповідний електрон. У цих методах використовуються різні підходи до побудови вихідної хвильової функції та різні уявлення про електронну будову молекул. В методі МО молекула розглядається як єдине ціле, де кожний електрон рухається в полі інших електронів і ядер, а її стан описується сукупністю електронних молекулярних орбіталей. Метод ВЗ дає більш наочне уявлення про будову молекули і характерні особливості ковалентного зв'язку, тому він частіше застосовується для якісного вирішування питань хімічного зв'язку.

### 8.6.1 МЕТОД ВАЛЕНТНИХ ЗВ'ЯЗКІВ

Сутність ковалентного зв'язку пояснюється досить складними теоріями, серед яких найбільш доступною є **модель валентних зв'язків** (так званий **метод ВЗ**). Основні положення методу ВЗ стисло можна викласти так:



1. Кожна пара атомів у молекулі утримується разом за допомогою однієї або декількох спільних електронних пар; при цьому електронні орбіталі сполучених атомів перекриваються (рис. 8.24);

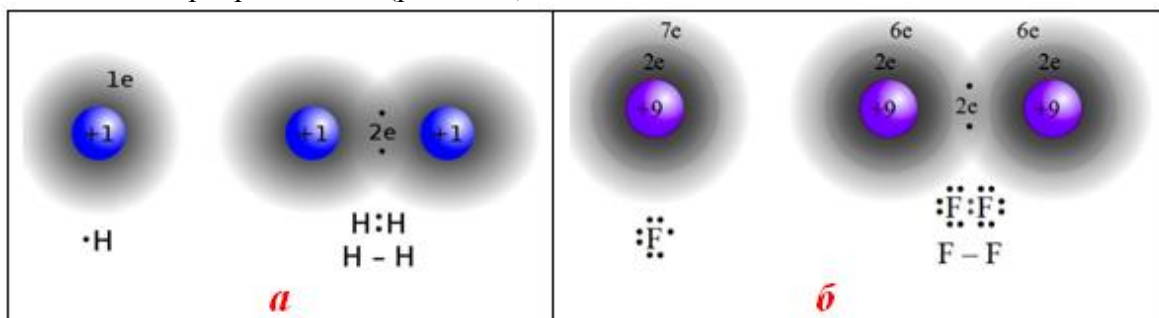


Рисунок 8.24 – Перекривання орбіталей при утворенні ковалентного зв'язку за рахунок виникнення спільної електронної пари в молекулах  $H_2$  і  $F_2$

2. Міцність зв'язку залежить від ступеня перекривання електронних орбіталей: чим більша область перекривання, тим стійкіший зв'язок;
3. Умовою утворення ковалентного зв'язку є анти-направленість спінів електронів ( $\uparrow\downarrow$ ); завдяки цьому виникає узагальнена електронна орбіталь з найбільшою електронною густиною в між'ядерному просторі (рис. 8.25), яка забезпечує притягання позитивно заряджених ядер і зменшує загальну енергію системи.

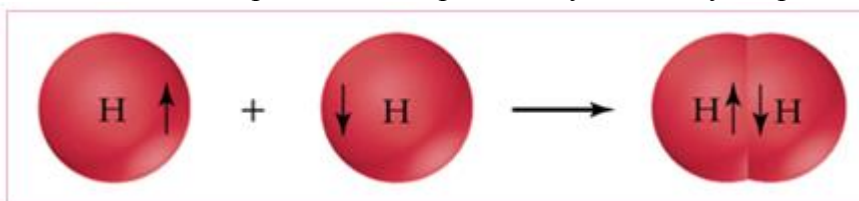
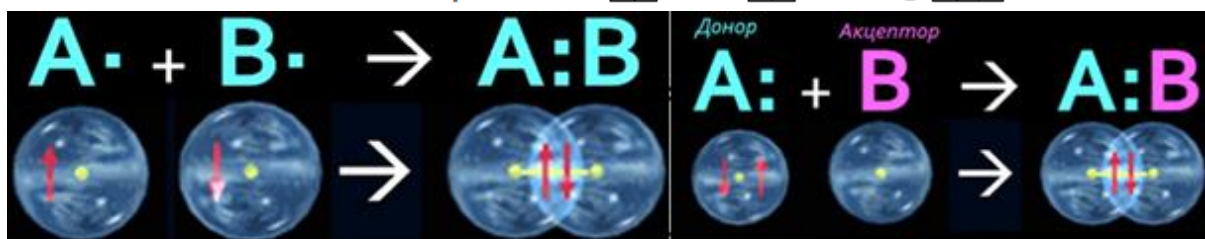
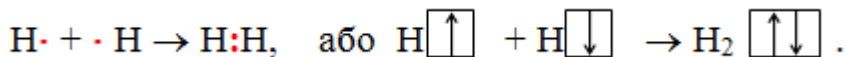


Рисунок 8.25 – Анти-направленість спінів електронів при перекриванні орбіталей – умова виникнення ковалентного зв'язку

### 8.6.2 МЕХАНІЗМ УТВОРЕННЯ КОВАЛЕНТНОГО ЗВ'ЯЗКУ

Основною ознакою ковалентного зв'язку є наявність спільної електронної пари, яка належить обом хімічно сполученим атомам, оскільки перебування двох електронів у полі дії двох ядер енергетично вигідніше, ніж знаходження кожного електрона у полі свого ядра. Однак виникнення спільної електронної пари зв'язку може проходити за різними механізмами: частіше – за обмінним, а інколи – за донорно-акцепторним.

**Обмінний механізм утворення ковалентного зв'язку** полягає в тому, що кожний із взаємодіючих атомів постачає на утворення спільних двохелектронних хмар однакову кількість електронів з антипаралельними спінами (рис. 8.26 a). Наприклад, утворення спільної електронної пари (або спільної двохелектронної хмари) при сполученні двох атомів H:



a

b

Рисунок 8.26 – Загальна схема утворення ковалентного зв'язку: а) за обмінним механізмом; б) за донорно-акцепторним механізмом

**Донорно-акцепторний механізм утворення ковалентного зв'язку** реалізується при взаємодії різних частинок, одна з них – **донор** ( $A:$ ) – має **незв'язувальну, неподілену** пару електронів (тобто таку, що належить тільки одному атому), а інша **акцептор** ( $B\Box$ ) – має **вакантну орбіталь** (рис. 8.26 б).

Частинка, яка надає для зв'язку **двоелектронну хмару** (неподілену пару електронів), називається **донор**, а частинка з **вільною орбітальною**, яка приймає цю електронну пару, – **акцептор**. Механізм утворення ковалентного зв'язку за рахунок **двоелектронної хмари** одного атома та **вакантної орбіталі** іншого називається **донорно-акцепторним**.

В органічній хімії донорно-акцепторний зв'язок частіше називається **семіполярний зв'язок** (тобто **напівполярним**), оскільки на атомі-донорі виникає частковий ефективний позитивний заряд  $\delta^+$  (за рахунок відхилення від нього його неподіленої пари електронів), а на атомі-акцепторі – частковий ефективний негативний заряд  $\delta^-$  (завдяки зміщенню в його бік неподіленої електронної пари донора).

Найпростіший акцептор електронної пари – катіон гідрогену  $H\Box^+$ , утворений при втраті атомом гідрогену електрона ( $H^0 - 1e \rightarrow H^+$ ). Він може бути акцептором і надавати свою вакантну орбіталь для неподіленої пари донора, який має неподілену електронну пару. Наприклад, при взаємодії іона  $H\Box^+$  з молекулою амоніаку  $NH_3$ , центральний атом якої має неподілену електронну пару ( $:N$ ), утворюється комплексний іон амонію  $NH_4^+$  з позитивним зарядом (рис. 8.27 а).

Як приклад найпростішого донора електронної пари можна навести гідрид-іон  $H^-$ , утворений внаслідок приєднання електрона до атома гідрогену ( $H^0 + 1e \rightarrow H^-$ ). За рахунок неподіленої електронної пари іон  $H^-$  може відігравати роль донора при взаємодії з частинкою-акцептором, на центральному атомі якої є вільна орбіталь. Наприклад в молекулі  $BH_3$  атом бору має вакантну орбіталь ( $B\Box$ ), на яку поступає неподілена електронна пара гідрид-іона  $H^-$  (рис. 8.27 б). При цьому утворюється складний комплексний іон  $BH_4^-$  з негативним зарядом ( $H^- + \Box BH_3 \rightarrow [BH_4]^-$ ).

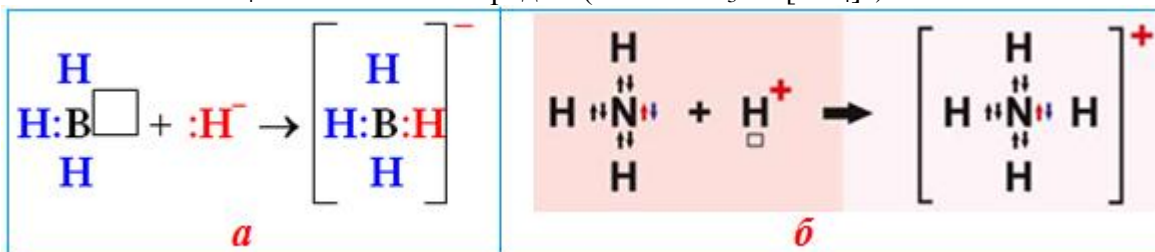


Рисунок 8.27 – Утворення ковалентного зв'язку за донорно-акцепторним механізмом: а) в іоні  $NH_4^+$ ; б) в іоні  $[BH_4]^-$

## 8.7 ВЛАСТИВОСТІ КОВАЛЕНТНОГО ЗВ'ЯЗКУ

*Властивості ковалентного зв'язку – це такі характеристики: валентний кут, довжина і енергія зв'язку, напрямленість, насиченість, кратність, поляризація та поляризованість* тощо. Енергія і довжина зв'язку вже були розглянуті, тепер зупинимося на інших характеристики.

**1) Напрямленість.** Відповідно до методу ВЗ хімічний зв'язок між атомами зумовлюється перекриванням орбіталей, які, за винятком сферичних  $s$ -орбіталей, мають певну орієнтацію у просторі.

**Напрямленість ковалентного зв'язку** – це таке розміщення електронної густини між атомами, яке забезпечує максимальне перекривання електронних орбіталей.

Оскільки електронні орбіталі мають різні форму і орієнтацію у просторі, то область їх взаємного перекривання може локалізуватися різним чином відносно *уявної лінії, що з'єднує два ядра, яка називається вісь зв'язку*. Залежно від цього розрізняють окремі типи зв'язків, які позначають грецькими буквами  $\sigma$ ,  $\pi$ ,  $\tau$ ,  $\delta$ . В органічних сполуках найчастіше зустрічаються  $\sigma$ - і  $\pi$ -зв'язки, значно рідше –  $\tau$ -зв'язки і тільки у виключних випадках –  $\delta$ -зв'язки.

**Сигма-зв'язок ( $\sigma$ -зв'язок)** – це таке перекривання електронних орбіталей, при якому максимальна електронна густина концентрується у між'ядерному просторі вздовж осі зв'язку.

Сигма-зв'язок може утворюватися за рахунок двох s-електронів, одного s- і одного p-електрона, двох p-електронів або за участю гібридних орбіталей. *Ознакою сигма-зв'язку є наявність однієї області перекривання, зосередженої між ядрами атомів* (рис. 8.28).

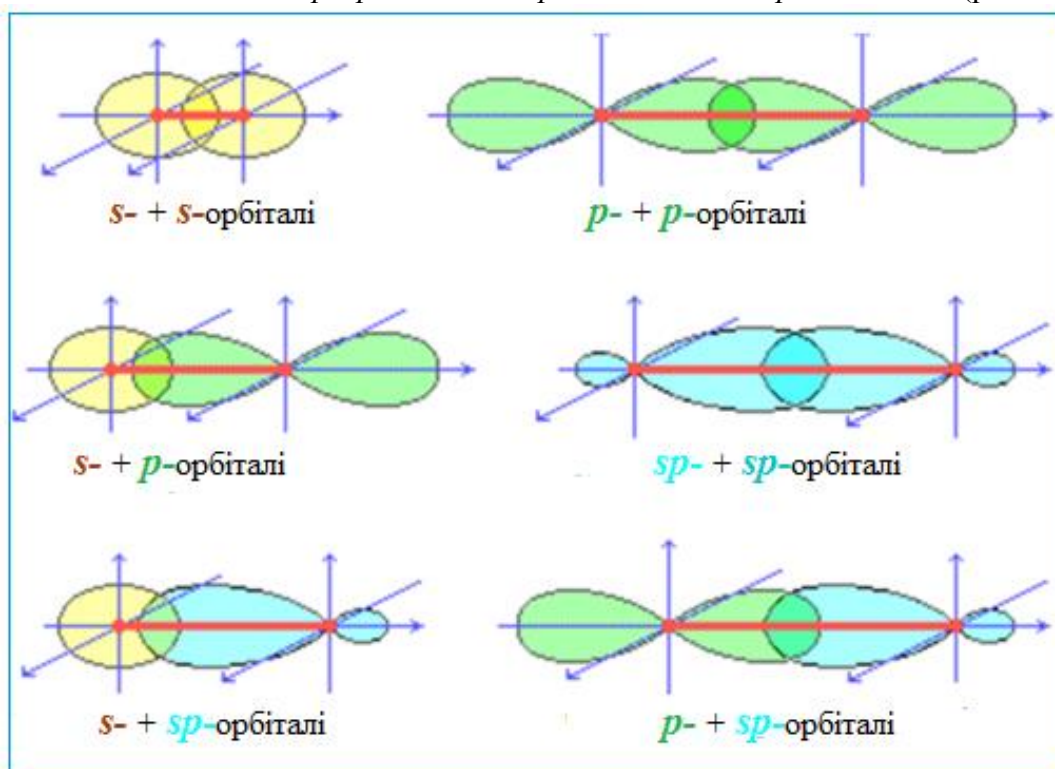


Рисунок 8.28 – Схема перекривання електронних орбіталей при утворенні  $\sigma$ -зв'язку

На відміну від  $\sigma$ -зв'язку, при якому найбільша електронна густина локалізується на осі зв'язку,  $\pi$ -зв'язок характеризується боковим перекриванням валентних орбіталей (рис. 8.29 і 8.30).

**Пі-зв'язок ( $\pi$ -зв'язок)** – це перекривання електронних орбіталей, при якому максимальна електронна густина концентрується з обох боків від осі, що з'єднує ядра атомів.

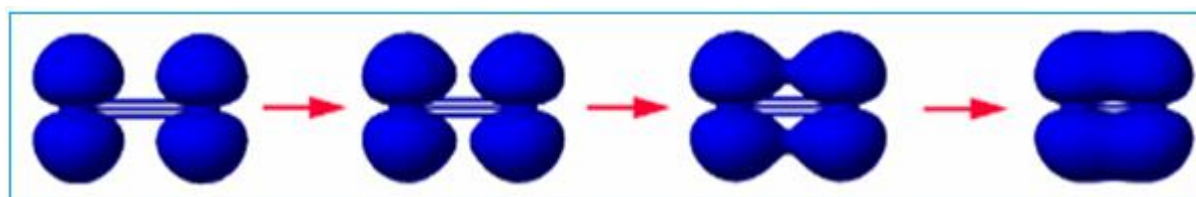


Рисунок 8.29 – Модель поетапного формування  $\pi$ -зв'язку при зближенні та перекриванні двох  $p_z$ -орбіталей

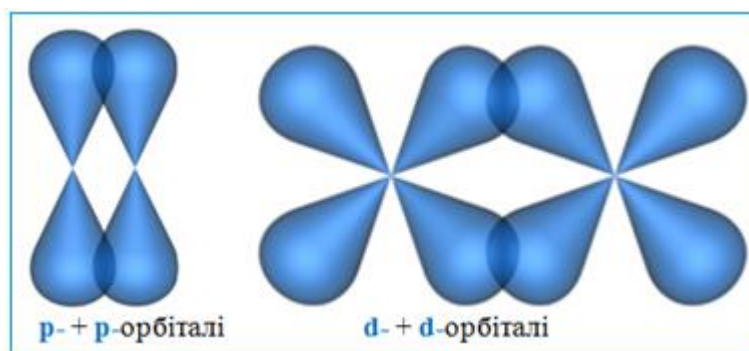


Рисунок 8.30 – Схема перекривання електронних орбіталей при утворенні  $\pi$ -зв'язку

Різне розміщення електронної густини при утворенні  $\sigma$ - і  $\pi$ -зв'язків визначає їх характерні особливості:

- $\pi$ -Зв'язок менш міцний порівняно з  $\sigma$ -зв'язком, оскільки осьове перекривання орбіталей і розташування електронної густини  $\sigma$ -зв'язку в між'ядерному просторі є більш ефективним і енергетично вигідним;
- $\sigma$ -Зв'язок сприяє можливості внутрішньомолекулярного обертання атомів без розриву зв'язку, а  $\pi$ -зв'язок такого обертання не допускає (без розриву зв'язку);
- Електрони при  $\pi$ -перекриванні, які знаходяться збоку від меж'ядерного простору, мають більшу рухливість, ніж  $\sigma$ -електрони, тому  $\pi$ -зв'язок здатний сильно деформуватися під впливом зовнішнього силового поля, тобто виявляє значну схильність до *поляризації* (див. нижче), ніж  $\sigma$ -зв'язок.

В органічних сполуках, молекули яких містять фрагменти на основі циклопропану, інколи зустрічається ще один тип зв'язків – так звані «бананові» зв'язки, які утворюються при боковому перекриванні виключно  $sp^3$ -гібридизованих орбіталей і позначаються грецькою буквою  $\tau$  (рис. 8.31).

**Тау-зв'язок** ( **$\tau$ -зв'язок**) – це таке перекривання  $sp^3$ -гібридизованих орбіталей, при якому максимальна електронна густина зосереджується не на вісі зв'язку, а з одного боку іззовні неї.

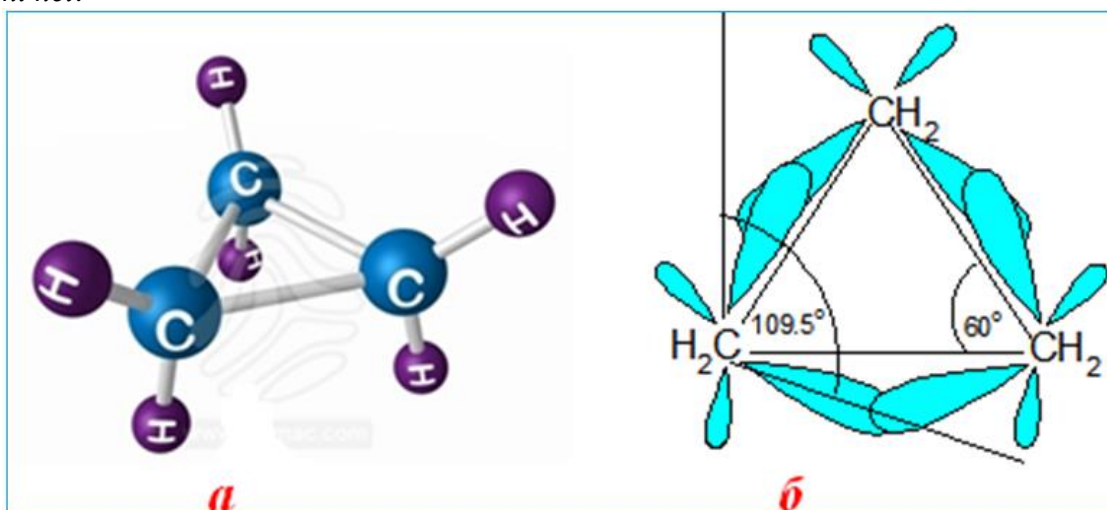


Рисунок 8.31 – Циклопропан  $C_3H_6$ : а) модель молекули; б) утворення  $\tau$ -зв'язків

2) **Кратність** – ще одна властивість ковалентного зв'язку.

**Кратність ковалентного зв'язку** – це характеристика, яка визначається числом спільних електронних пар, що сполучають атоми.

Ковалентний зв'язок за кратністю може бути одинарним (простим), подвійним і потрійним (рис. 8.32).



Зв'язок між двома атомами за допомогою однієї спільної електронної пари називається **одинарний зв'язок** (простий), двох електронних пар – **подвійний зв'язок**, трьох електронних пар – **потрійний зв'язок**.

Так, у молекулі етану  $C_2H_6$  атоми карбону сполучені одинарним зв'язком (C–C), в етилені  $C_2H_4$  – подвійним (C=C), в ацетилені  $C_2H_2$  – потрійним (C≡C).

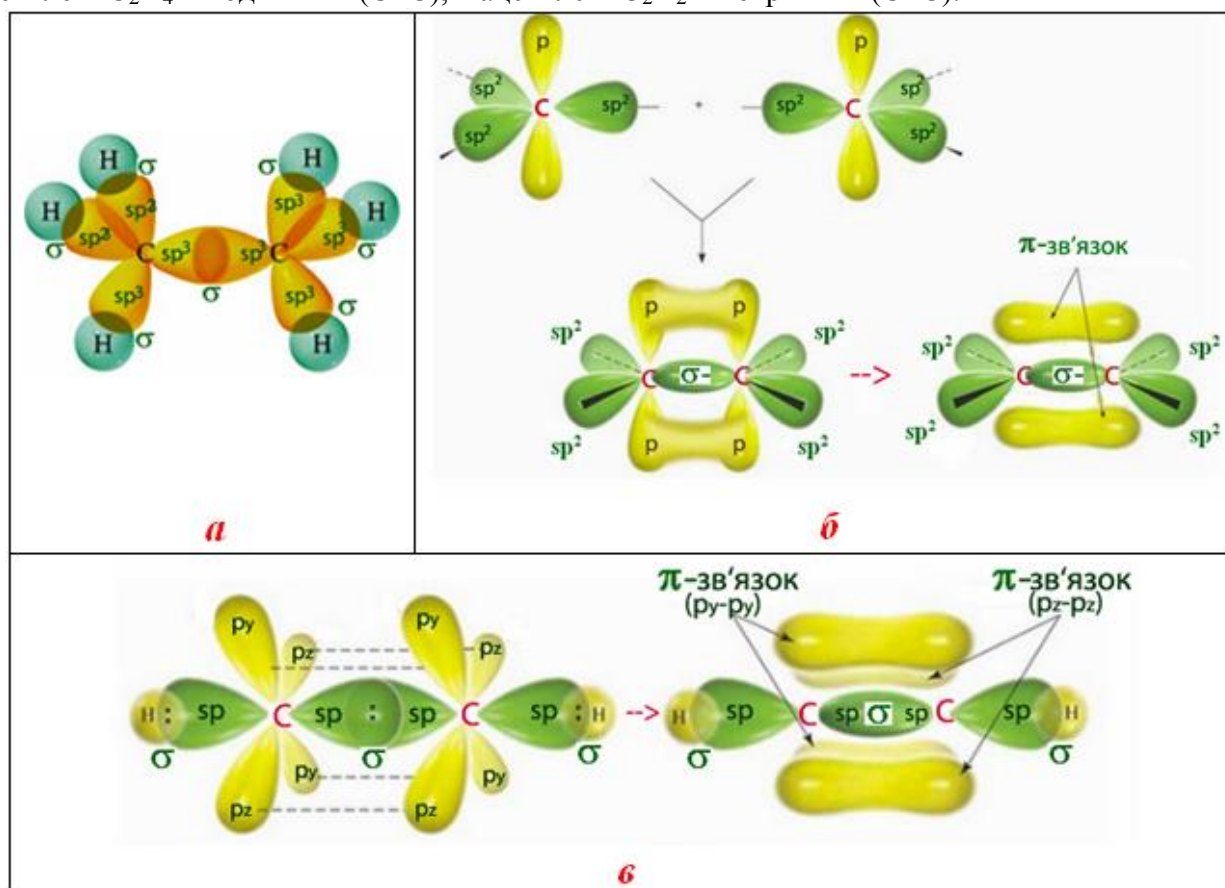


Рисунок 8.32 – Кратність зв'язку між атомами карбону:

а) одинарний  $\sigma$ -зв'язок C–C в етані  $H_3C-CH_3$ ; б) подвійний  $\sigma+\pi$ -зв'язок C=C в етилені  $H_2C=CH_2$ ; в) потрійний  $\sigma+\pi+\pi$ -зв'язок C≡C в ацетилені  $HC\equiv CH$

Кратність зв'язку не завжди виражається цілими числами, як це було в наведених прикладах (рис. 8.32). Досить часто кратність набуває дробових значень, особливо часто це зустрічається в молекулах ароматичних і гетероциклічних сполук. Наприклад, в бензені кратність зв'язку дорівнює 1,67 (рис. 8.33).

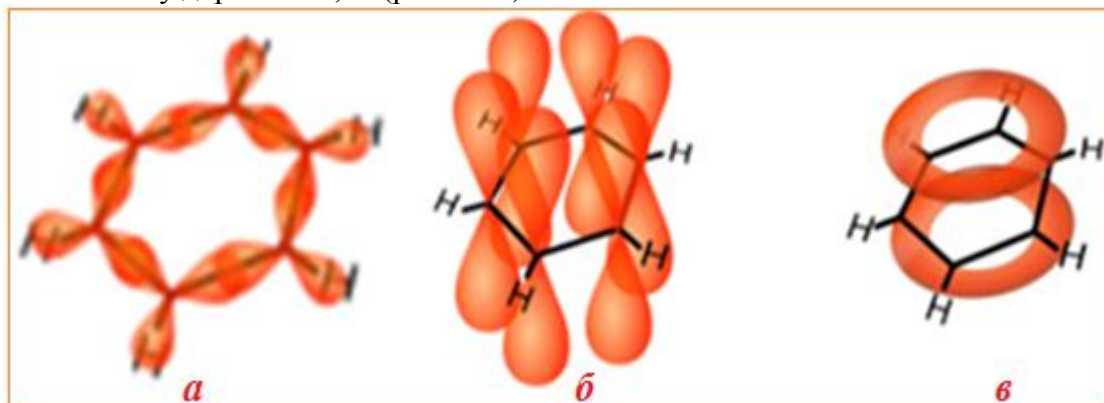


Рисунок 8.33 – Будова молекули бензену: а)  $\sigma$ -скелет молекули, утворений  $\sigma$ -зв'язками C–C і C–H, вісі симетрії яких знаходяться на одній площині; б) розташування негібридизованих  $p_z$ -орбіталей перпендикулярно до площини  $\sigma$ -зв'язків; в) утворення суцільного шестиелектронного  $\pi$ -зв'язку (так званого колового спряження)



Кратність зв'язку впливає на його енергію: з підвищенням кратності зростає міцність зв'язку. Підвищення кратності приводить до зменшення між'ядерної відстані (довжини зв'язку) і збільшення енергії зв'язку.

3) **Полярність** – це властивість ковалентного зв'язку, яка характеризує відносну відстань області найщільнішої електронної густини від ядер обох сполучених атомів. Залежно від неї розрізняють *полярний* і *неполярний* ковалентні зв'язки (рис. 8.34).

**Неполярний зв'язок** (або **гомеополярний зв'язок**) – це зв'язок, при якому область перекривання електронних орбіталей розміщується симетрично відносно ядер сполучених атомів і однаковою мірою належить обом атомам.

**Полярний зв'язок** (або **гетерополярний зв'язок**) – це зв'язок, при якому область перекривання електронних орбіталей несиметрична і зміщена до одного з атомів.

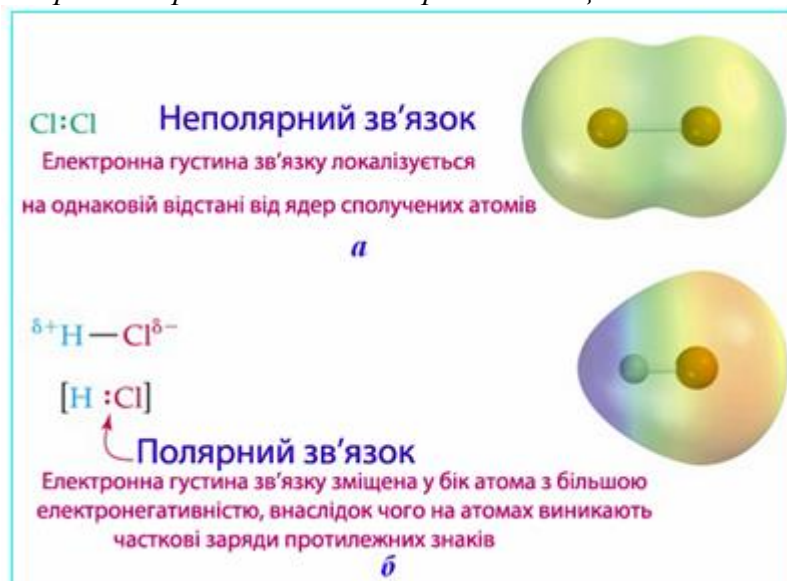


Рисунок 8.34 – Полярність ковалентного зв'язку:  
а) неполярний в гомоядерній молекулі  $\text{Cl}_2$ ;  
б) полярний в гетероядерній молекулі  $\text{HCl}$

Щоб визначити, в який бік буде зміщуватися електронна густина полярного ковалентного зв'язку, необхідно порівняти електронегативність обох атомів (рис. 8.35). За зростанням електронегативності (позначається грецькою буквою  $\chi$ ) найбільш поширені хімічні елементи розміщуються у такій послідовності:

**Rb, K, Na, Li, Ca, Mg, Be, In, Al, Sr, Ga, Sb, Si, B,  
As, H, Te, P, C, Se, I, S, Br, Cl, N, O, F.**

→  
**Підвищення електронегативності**

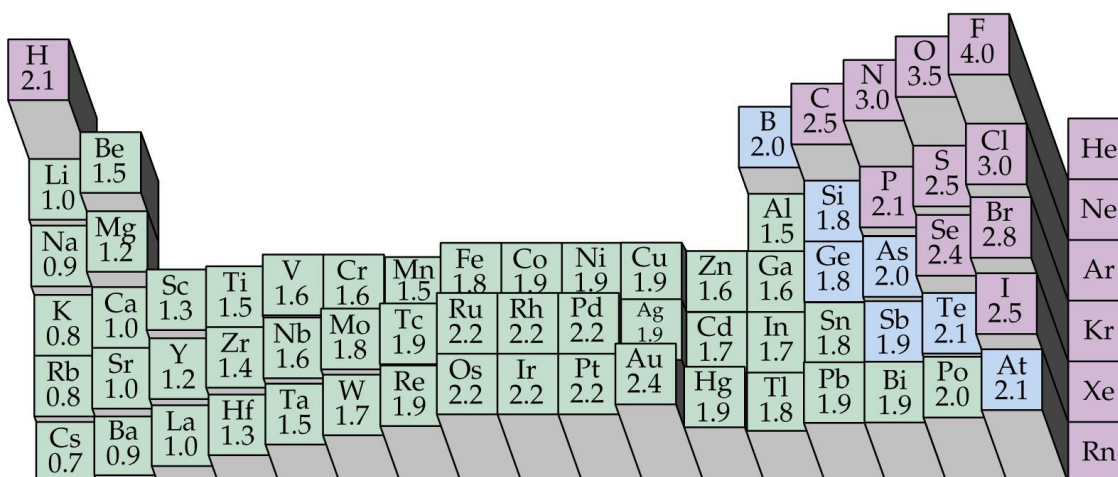


Рисунок 8.35 – Величини електронегативностей хімічних елементів за Полінгом

Користуючись наведеною шкалою електронегативності, можна порівняти ступінь полярності зв'язку. Але слід знати, що у тому випадку, коли електронегативності елементів різко відрізняються між собою ( $\Delta\chi > 1,7$  за шкалою Полінга), то утворений ними зв'язок вже вважається іонним.

**4) Поляризованість.** Електронна густина зв'язку здатна зміщуватися під дією зовнішнього електричного поля, в тому числі й поля іншої молекули або іона. *Зміна полярності зв'язку молекули внаслідок зміщення електронної густини під дією зовнішнього електричного поля іншої молекули (або атома чи атомної групи) називається **поляризованість**.*

Поляризованість молекули залежить від напрямленості зовнішнього поля і від здатності електронних хмар деформуватися. Під дією зовнішнього поля неполярні молекули стають полярними, а полярні – ще більш полярними, тобто в молекулах індукується диполь, який називається **наведений диполь**, або **індукований диполь**, (рис. 8.36). На відміну від постійних індуковані диполі виникають лише при дії зовнішнього електричного поля.

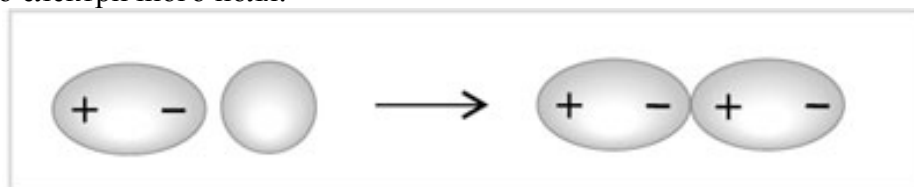


Рисунок 8.36 – Схема утворення індукованого (наведеного) диполя з неполярної молекули під дією силового поля полярної частинки – диполя

Поляризація може спричиняти не тільки поляризованість зв'язку, але й його розрив, при якому відбувається перехід зв'язувальної електронної пари до одного з атомів і утворюються негативно і позитивно заряджені іони.

## 8.8 ВИСНОВКИ

Згідно з сучасною теорією будови органічних сполук атоми в молекулах сполучені один із одним хімічними зв'язками відповідно до їх валентностей і розташовуються не хаотично, а в певній послідовності; властивості органічних сполук залежать не тільки від якісного і кількісного складу, але і від хімічної будови їх молекул; в молекулах існує

взаємний вплив атомів – як тих, що сполучені хімічними зв'язками безпосередньо один із одним, так і тих, що розділені проміжними атомами чи атомними групами; хімічна будова речовини встановлюється при вивченні її хімічних перетворень і, навпаки, на основі хімічної будови сполуки можна визначити її властивості. Теорія будови органічних сполук Бутлерова не тільки пояснила вже відомі факти, але і дозволила прогнозувати існування нових органічних речовин.

Атом – це складна електронейтральна система, що складається з позитивно зарядженого ядра і негативно зарядженої електронної оболонки. Кількість електронів в електронній оболонці чисельно дорівнює кількості протонів у ядрі, яка зумовлює його заряд і одночасно відповідає порядковому номеру елемента.

Електрон в атомі характеризується двоїстою корпускулярно-хвильовою природою: він являє собою матеріальну частинку з власною масою спокою і в той же час виявляє хвильові властивості. Заповнення електронами енергетичних рівнів, підрівнів і орбіталей відбувається згідно з певними законами: принципом Паулі, принципом мінімуму енергії, правилом Гунда.

Чотиривалентний атом карбону може піддаватися гібридизації різних типів, які зумовлюють валентний кут і просторову конфігурацію молекул.

Під хімічним зв'язком розуміють різні види взаємодії частинок, яка забезпечує стійке існування двох- чи багатоатомних систем: молекул, йонів, кристалічних речовин.

Будь-який хімічний зв'язок має електричну природу, оскільки утворюється внаслідок взаємодії між позитивно зарядженими ядрами і негативно зарядженими електронами, а також електронів один із одним.

У результаті утворення хімічного зв'язку відбувається зменшення загальної енергії системи порівняно з сумою енергій ізольованих атомів, з яких ця система утворилася. При цьому електронна густина в області хімічного зв'язку розподіляється таким чином, що досягається максимальний енергетичний вигравш. Перерозподіл електронної густини є відмінним від того, яким він міг би бути при простому накладенні густин хімічно несполучених атомів, зближених на відстань довжини зв'язку.

Між атомами карбону в молекулах органічних речовин здійснюється ковалентний зв'язок, якому притаманні певні характеристики: довжина і енергія зв'язку, напрямленість, кратність, полярність і поляризованість.

Згідно з сучасною теорією будови органічних сполук атоми в молекулах сполучені один із одним хімічними зв'язками відповідно до їх валентностей і розташовуються не хаотично, а в певній послідовності; властивості органічних сполук залежать не тільки від якісного і кількісного складу, але і від хімічної будови їх молекул; в молекулах існує взаємний вплив атомів – як тих, що сполучені хімічними зв'язками безпосередньо один із одним, так і тих, що розділені проміжними атомами чи атомними групами; хімічна будова речовини встановлюється при вивченні її хімічних перетворень і, навпаки, на основі хімічної будови сполуки можна визначити її властивості. Теорія будови органічних сполук Бутлерова не тільки пояснила вже відомі факти, але і дозволила прогнозувати існування нових органічних речовин.

## 8.9 ПИТАННЯ ДЛЯ САМОПЕРЕВІРКИ

1. Що називається хімічною будовою? Викладіть основні положення теорії будови органічних сполук.
2. Охарактеризуйте модель будови атома, запропоновану Резерфордом.
3. Сформулюйте закон Мозлі. Яке значення він мав у історії розвитку хімічної науки?
4. На яких принципах ґрунтується квантова механіка?
5. Охарактеризуйте основні положення теорії Планка.

6. Які висновки випливають з рівняння де Бройля?
7. У чому суть принципу невизначеності Гейзенберга?
8. Що таке хвильова функція? У чому фізичний зміст квадрату хвильової функції?
9. Поясніть з огляду на квантовомеханічні уявлення такі поняття «енергетичний рівень», «енергетичний підрівень».
10. Охарактеризуйте поняття «орбіталь», «електронна хмара».
11. Які форми мають s-, p-, d- і f-орбіталі? Як графічно позначаються енергетичні підрівні?
12. Який стан атома називається основним, а який – збудженим?
13. Які електрони називаються електронами з паралельними спінами, а які – з антипаралельними?
14. Який принцип дозволяє визначити максимальну кількість електронів на одній орбіталі і як він формулюється?
15. Як визначити максимально можливу кількість електронів на енергетичному рівні, підрівні?
16. Що таке шкала енергії? Як її можна вивести за допомогою правил Клечковського?
17. За яким правилом розподіляються електрони у межах одного підрівня?
18. Охарактеризуйте поняття «ковалентність».
19. Поясніть, чому атом карбону, який в основному стані має тільки два неспарених електрони, утворює в органічних сполуках чотири зв'язки і виявляє валентність IV.
20. Яку форму і орієнтацію у просторі мають валентні орбіталі атома карбону в збудженому стані?
21. Що називається валентним кутом?
22. Що називається гібридизацією? Яка кількість гібридизованих орбіталей утворюється, якими є валентні кути і геометричні конфігурації молекул залежно від типу гібридизації?
23. Перелічіть типи гібридизації, яким може піддаватися атом карбону в органічних сполуках.
24. Наведіть приклади сполук, в яких атоми карбону піддаються: а) sp-, б) sp<sup>2</sup>-, в) sp<sup>3</sup>-гібридизації.
25. Охарактеризуйте природу хімічного зв'язку. Що є рушійною силою утворення хімічних зв'язків?
26. Сформулюйте правило октету. На підставі правила октету складіть схеми Льюїса для молекул F<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, CH<sub>4</sub>.
27. Як за допомогою потенціальних кривих показати утворення хімічного зв'язку при зближенні двох атомів? Якого вигляду набувають потенціальні криві при зближенні атомів з валентними електронами, що мають паралельні та антипаралельні спіни?
28. Що таке енергія зв'язку, довжина зв'язку? В яких одиницях вони вимірюються?
29. Як впливає довжина зв'язку на енергію зв'язку і міцність молекули?
30. Чим пояснити, що довжина зв'язку завжди менше суми радіусів двох атомів, що утворюють цей зв'язок?
31. Викладіть основні положення методу ВЗ (валентних зв'язків).
32. Розгляньте обмінний механізм утворення ковалентного зв'язку на прикладі молекули NH<sub>3</sub>.
33. Який зв'язок називається донорно-акцепторним? Яка частинка відіграє роль донора, а яка – акцептора при утворенні ковалентного зв'язку за донорно-акцепторним механізмом?
34. Розгляньте донорно-акцепторний механізм утворення ковалентного зв'язку на прикладі іона NH<sub>3</sub><sup>+</sup>.
35. Що називається напрямленістю хімічного зв'язку, вісью зв'язку? На які види поділяється зв'язок залежно від напрямленості?



36. При перекриванні яких орбіталей можуть утворюватися  $\sigma$ - і  $\pi$ - зв'язки? У чому полягають характерні особливості кожного з них?
37. Охарактеризуйте «банонові»  $\tau$ -зв'язки на прикладі молекули циклопропану.
38. Що називається кратністю хімічного зв'язку? На які типи він поділяється залежно від кратності? Відповідь проілюструйте на прикладі утворення зв'язків у молекулах етану  $C_2H_6$ , етилену  $C_2H_4$ , ацетилену  $C_2H_2$ , бензену  $C_6H_6$ .
39. Що називається полярністю хімічного зв'язку? На які типи він поділяється залежно від полярності? Наведіть приклади гомеополярних і гетерополярних зв'язків.
40. Виходячи з розміщення елемента на шкалі електронегативності визначте, в який бік зміщується електронна густина таких зв'язків: C–H, C–C, C–O, C–N, C–Br.
41. Що називається поляризованістю зв'язку, індукованим (наведеним) диполем?