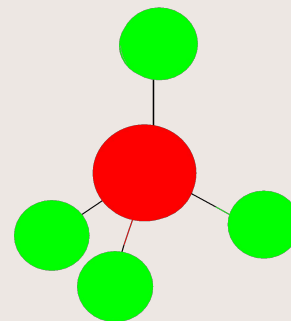


Моделирование. Геометрия молекул.

Содержание.

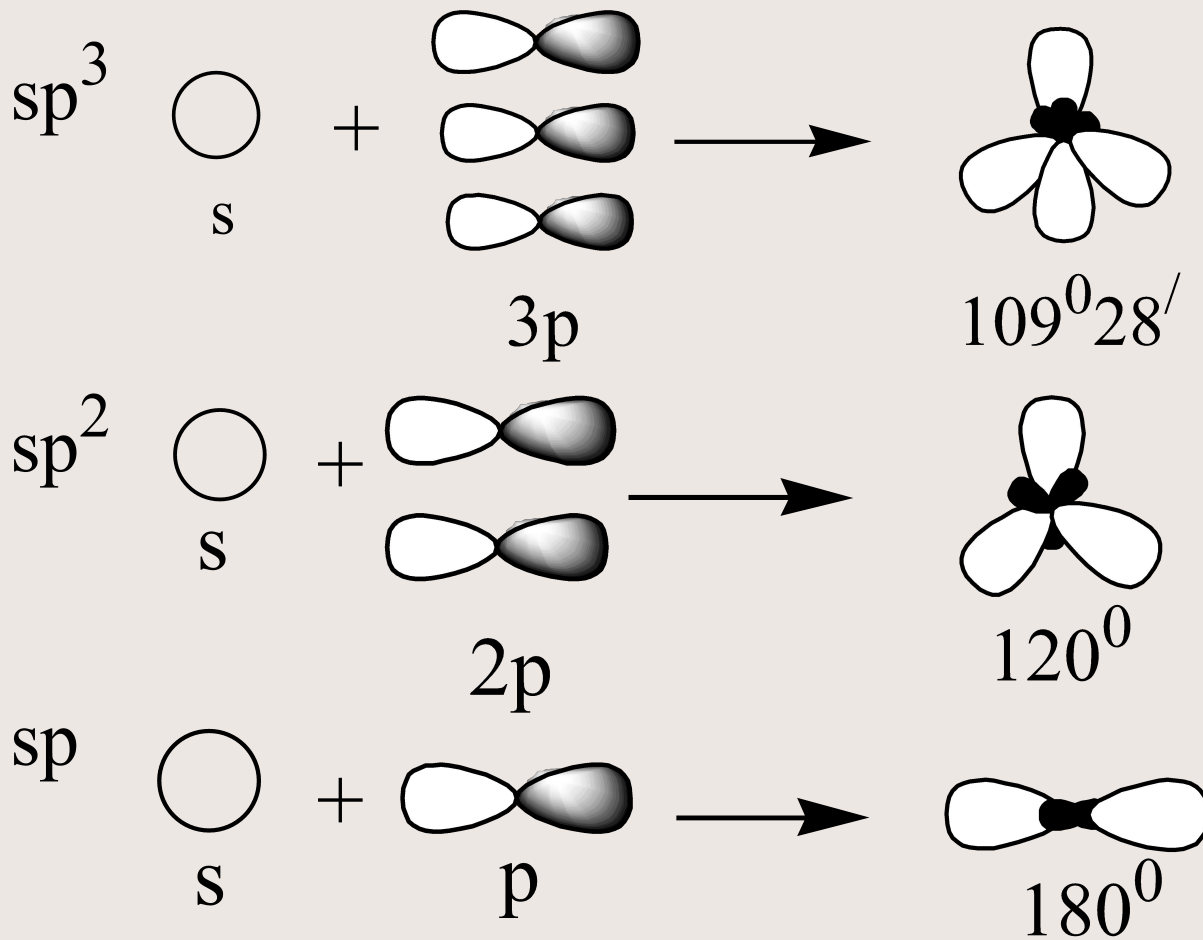
1. Элементы теории гибридизации.
2. Определение типа гибридизации.
3. Составление характеристики пространственно-электронного строения молекулы.
4. Изготовление шаростержневой модели.

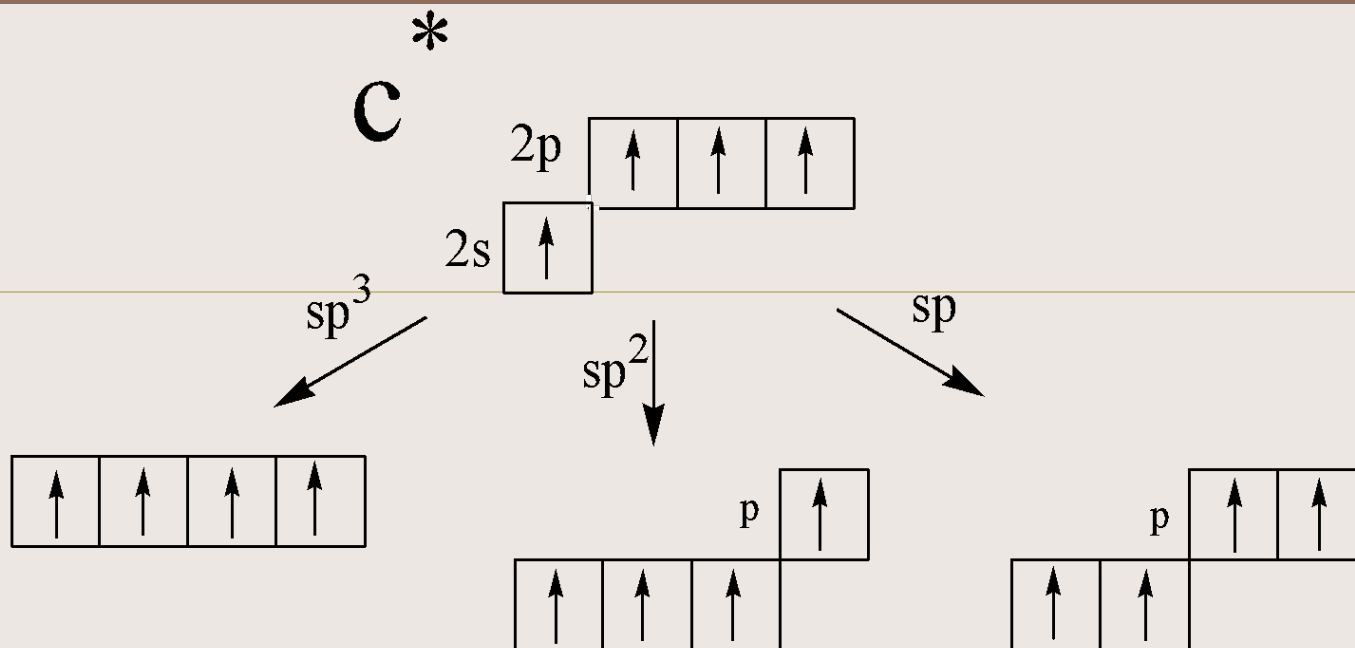


ГИБРИДИЗАЦИЯ – «СМЕШЕНИЕ»

(Лайнус Полинг 1931 год)

Выравнивание электронных облаков по форме и энергии.

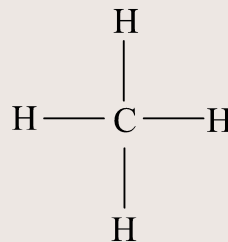




В гибридизации участвуют близкие по энергии атомные орбитали, не занятые электронами (вакантные) или орбитали с неспаренными электронами и неподделёнными электронными парами.



Определение типа гибридизации на примере молекулы метана.



1. Написать полную структурную формулу вещества.

2. Подсчитать число электронов, предоставляемые центральным атомом.

3. Подсчитать число электронов, предоставляемые соседними атомами.

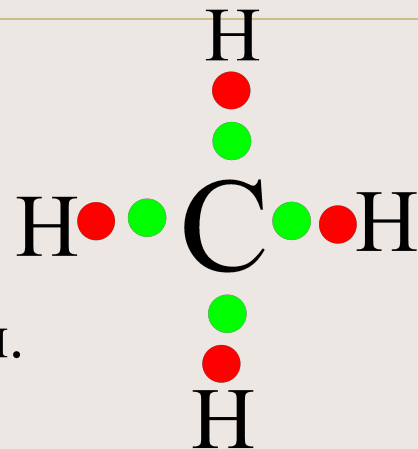
4. Подсчитать число электронов, приходящихся на π -связь.

5. Полученный результат разделить на два.

6. Если 4 – sp^3 расположение тетраэдр

Если 3 – sp^2 расположение плоское тригональное

Если 2 – sp расположение линейное



0

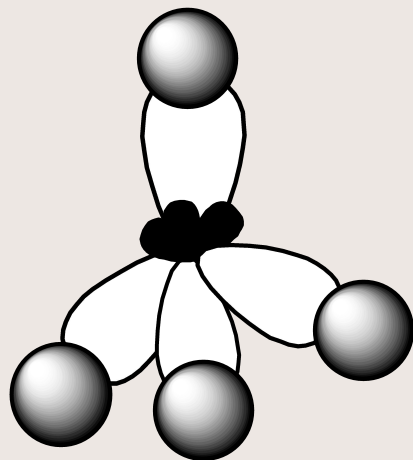
$$\begin{array}{r} 4 + 4 - 0 \\ \hline \end{array}$$

2

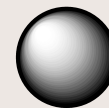


Гибридизация не является реальным процессом.
Введено для описания геометрии молекулы.

Молекула метана: расположение тетраэдрическое,
угол между осями электронных
облаков – $109^{\circ}28'$



Атомы водорода -

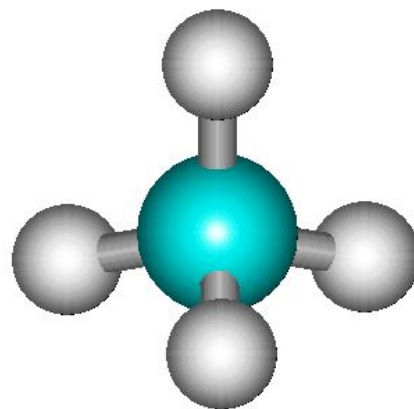


Гибридизованные
электронные облака
атома углерода -



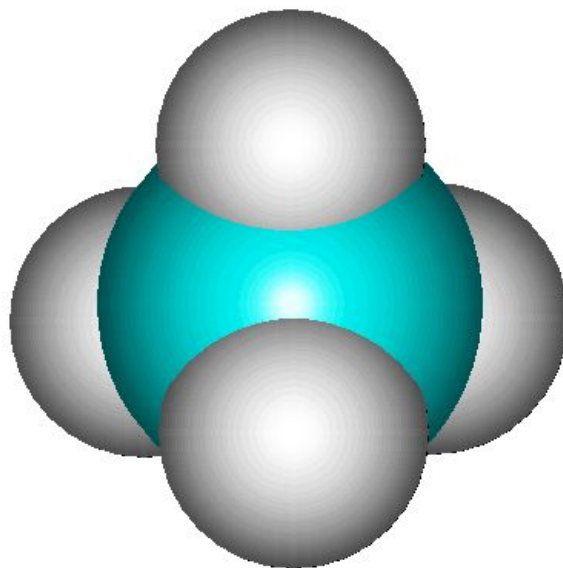
Для изучения строения вещества используют структурные модели:

1. Шаростержневые модели (отражают ориентацию валентных связей в пространстве)



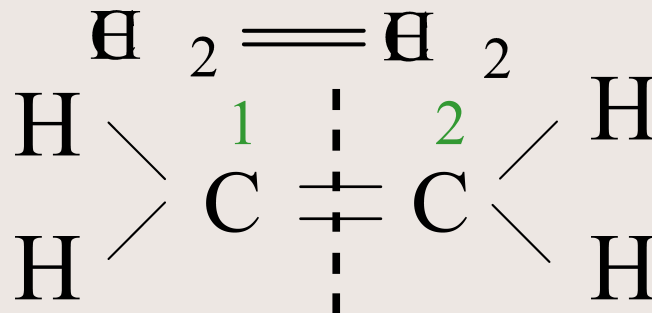
Для изучения строения вещества используют структурные модели:

2. Масштабные модели
Стюарта-Бриглеба (объёмная)



Исследование пространственного расположения молекулы этилена (этена).

Тип гибридизации:

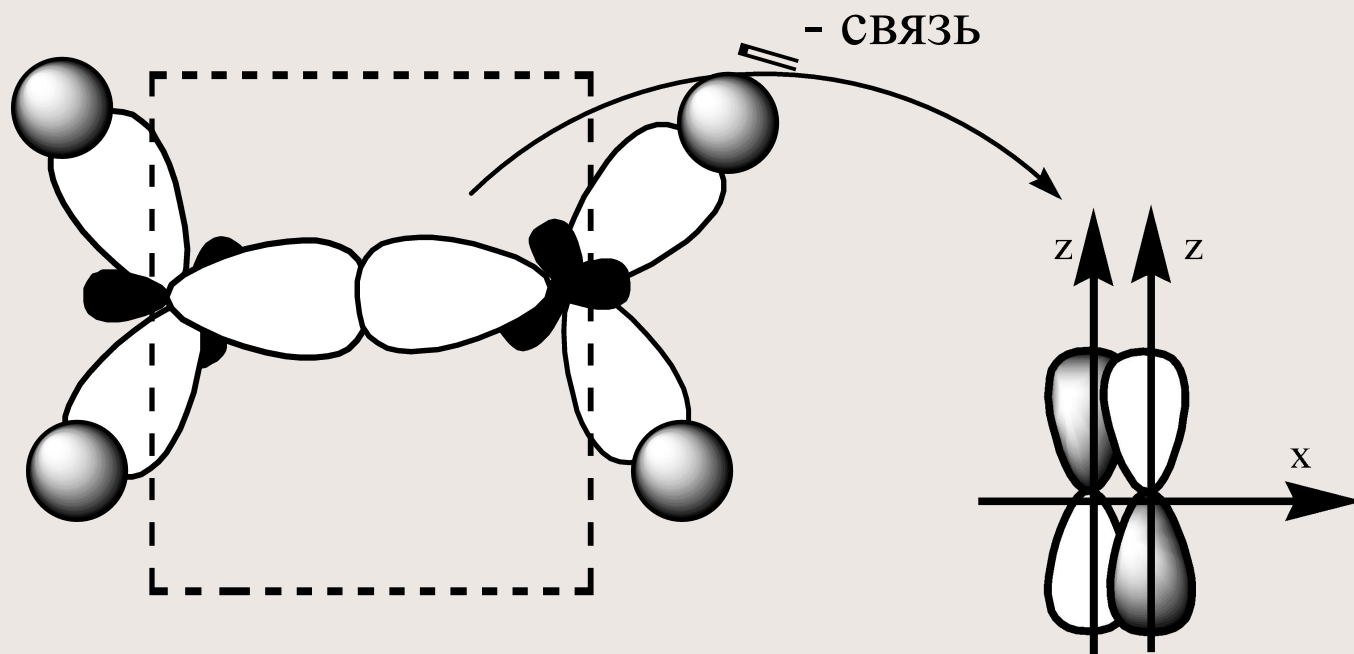


$$1 \text{ атом углерода: } 4 + 4 - 2 = 6 \qquad 6 : 2 = 3$$

Гибридизация sp^2 расположение треугольное,
угол между осями 120°

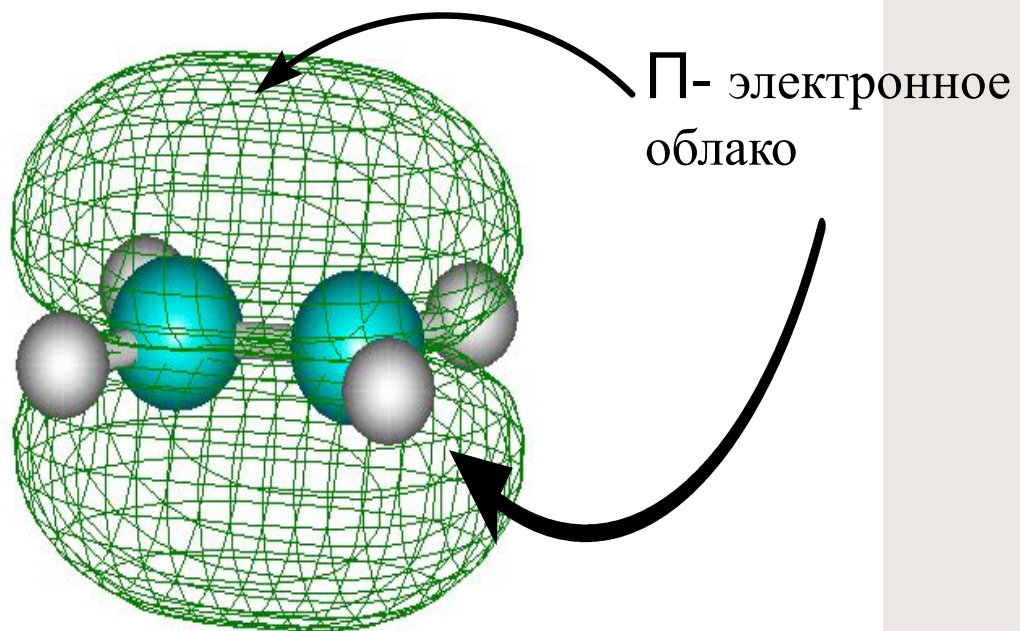
2 атом углерода аналогично, так как молекула симметрична.

Пространственная конфигурация молекулы этилена (этена).



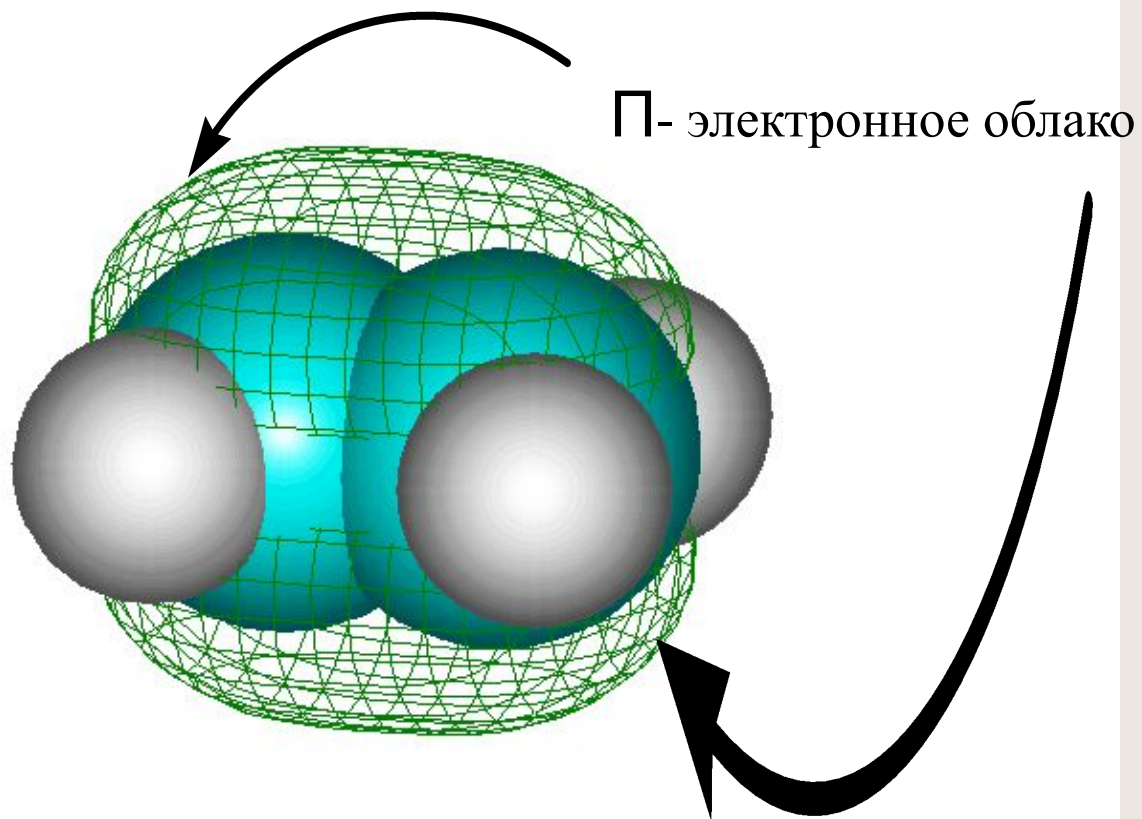
Модели молекулы этилена (этена).

1. Шаростержневая модель.

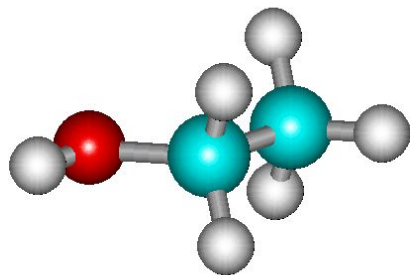


Модели молекулы этилена (этена).

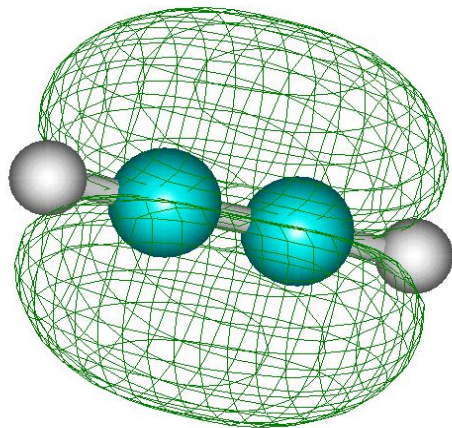
2. Масштабная модель Стюарта-Бриглеба.



Пространственное расположение на примере других молекул.



молекула этилового спирта
 C_2H_5O



молекула ацетилена (этина)
 C_2H_2