

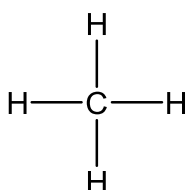
ГИБРИДИЗАЦИЯ АТОМНЫХ ОРБИТАЛЕЙ УГЛЕРОДА И ПРОСТРАНСТВЕННОЕ СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛ УГЛЕВОДОРОДОВ

Т. А. Колевич, Вадим Э. Матулис, Виталий Э. Матулис

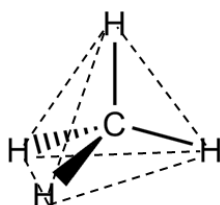
Строение молекул принято изображать **структурными формулами**. Структурные формулы отражают не только состав, но и последовательность соединения атомов в молекуле.

Формулы, отражающие только состав соединения, называются **молекулярными**.

Для метана, молекулярная формула которого CH_4 , структурная формула выглядит следующим образом:

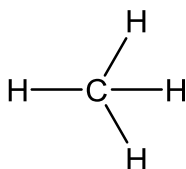


Структурные формулы могут не показывать пространственного строения молекулы. Например, молекула метана имеет форму правильного тетраэдра, в центре которого находится атом углерода, а в вершинах – атомы водорода:



Угол между связями в молекуле метана равен $109^{\circ}28'$.

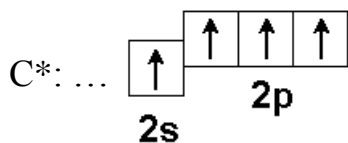
В структурной формуле метана связи часто изображают под углом 90° . Возможны и другие варианты, например:



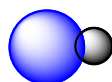
Все эти варианты структурных формул являются правильными, так как правильно отображают последовательность соединения атомов в молекуле.

Рассмотрим строение молекулы метана более подробно. Образование связей в молекулах происходит в результате перекрывания

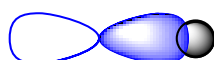
атомных орбиталей. Строение электронной оболочки атома углерода в возбужденном состоянии показано на схеме:



В возбужденном состоянии у атома углерода имеется один электрон на s -орбитали и три электрона на p -орбиталях. При образовании ковалентных связей с атомами водорода возможны следующие виды перекрывания электронных облаков:

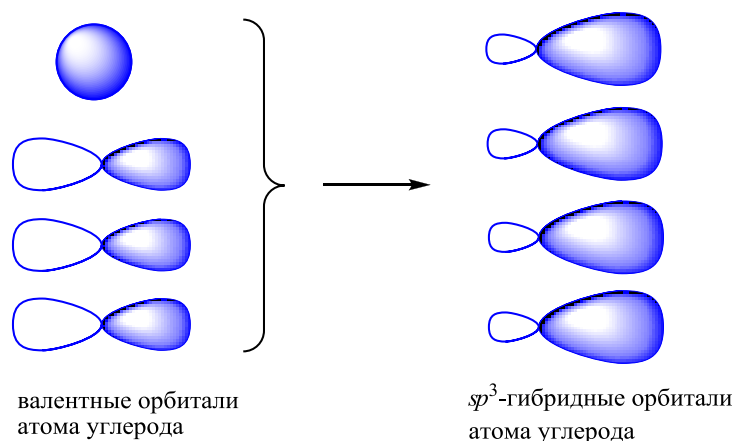


Перекрывание $2s$ -орбитали атома углерода и $1s$ -орбитали атома водорода



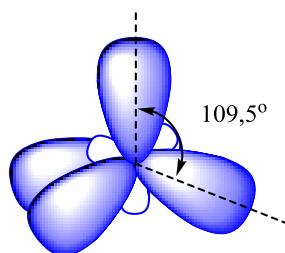
Перекрывание $2p$ -орбитали атома углерода и $1s$ -орбитали атома водорода

Очевидно, что в молекуле метана связь, образованная в результате перекрывания $2s$ -орбитали атома углерода и $1s$ -орбитали атома водорода, должна отличаться от трех других связей, которые образуются в результате перекрывания $2p$ -орбиталей атома углерода и $1s$ -орбитали атома водорода. В действительности все четыре связи в молекуле CH_4 совершенно одинаковы. Для объяснения этого факта используется концепция *гибридизации*. Согласно этой концепции при образовании ковалентных связей в молекуле метана четыре валентные орбитали атома углерода смешиваются и образуют четыре орбитали одинаковой формы (гибридные орбитали):



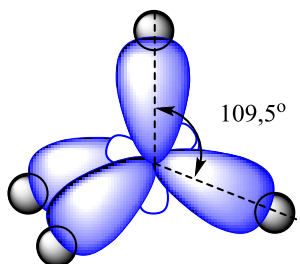
sp^3 -Гибридизация орбиталей атома углерода

Следующий вопрос: как располагаются четыре гибридные орбитали атома углерода в пространстве? Напомним, что на орбиталях размещаются отрицательно-заряженные электроны. Следовательно, гибридные орбитали должны располагаться таким образом, чтобы отталкивание одноименно заряженных электронов было наименьшим. Пространственное расположение гибридных орбиталей атома углерода в молекуле метана показано на рисунке:



Орбитали sp^3 -гибридного атома углерода

Эти выводы подтверждаются результатами исследования с помощью физико-химических методов. Действительно, молекула имеет тетраэдрическую форму, угол между связями С–Н (*валентный угол*) составляет $109^{\circ}28'$.



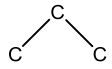
Перекрытие электронных облаков в молекуле метана

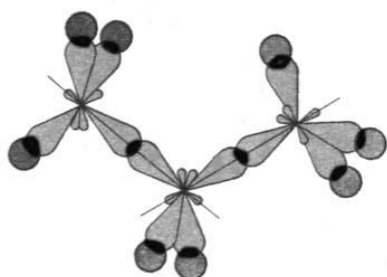
Виды гибридизации атомных орбиталей

В зависимости от числа орбиталей атома углерода, участвующих в гибридизации, возможны три типа гибридизации.

sp³-Гибридизация

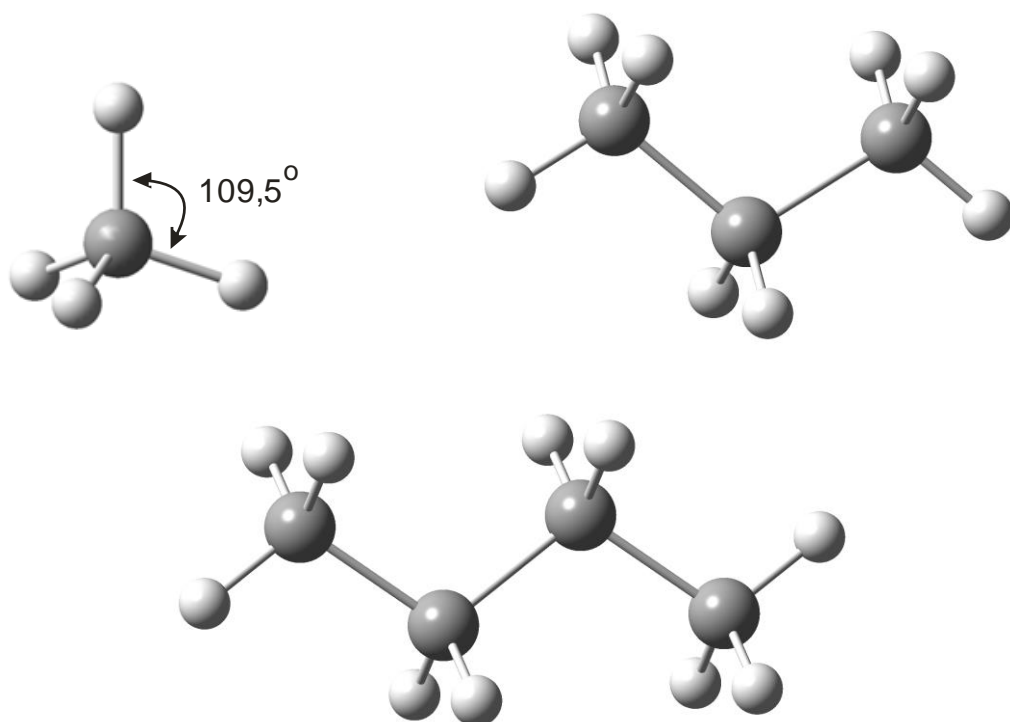
В *sp³-гибридизации* участвуют четыре орбитали атома углерода – одна *s*- и три *p*-орбитали. *sp³-Гибридные* орбитали располагаются в пространстве под углом **109°28'**.

Из *sp³*-гибридных атомов углерода построены молекулы алканов. Углеродная цепь, состоящая из таких атомов, имеет зигзагообразную форму, валентный угол  в алканах близок к 109°:



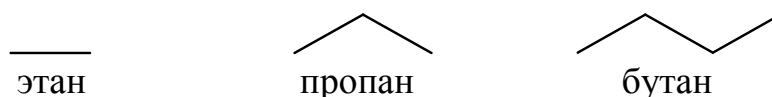
Перекрывание электронных облаков в молекуле пропана

Пространственное строение молекул органических соединений можно моделировать с помощью шаростержневых моделей. Моделями атомов углерода являются шарики серого цвета с четырьмя отверстиями, атомов водорода – шарики белого цвета с одним отверстием. Модели ковалентных химических связей – пластмассовые стержни. На рисунке показаны шаростержневые модели молекул метана пропана и бутана.



Шаростержневые модели молекул метана, пропана и бутана

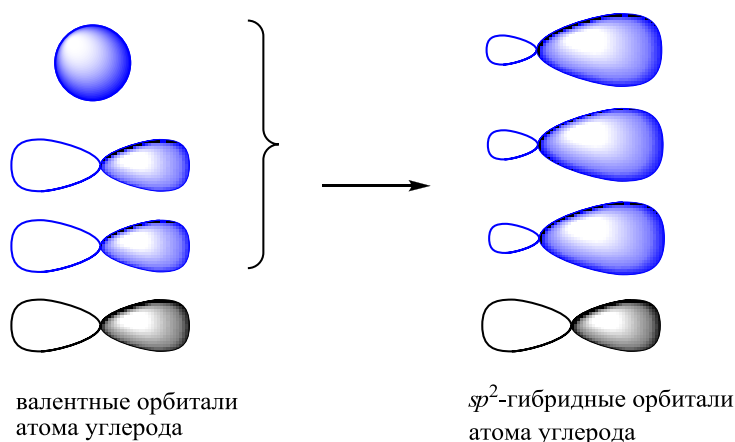
Для изображения структуры алканов и других органических веществ часто используют формулы, в которых вообще не указываются химические символы углерода и водорода. Формулы алканов в этом случае представляют собой ломаные линии, отображающие углеродный скелет молекулы. Такие формулы называются *скелетными формулами*. Очевидно, что скелетные формулы можно записывать для алканов, начиная с этана, при этом формула этана будет иметь вид черточки, а формула пропана будет представлять собой ломаную линию, состоящую из двух прямых и т.д.:



Скелетные формулы органических соединений широко используются, наряду с обычными структурными формулами. Преимущество данных формул – компактность и быстрота написания. Кроме этого, скелетные формулы, в отличие от обычных структурных формул, дают представление о пространственном строении молекул органических соединений.

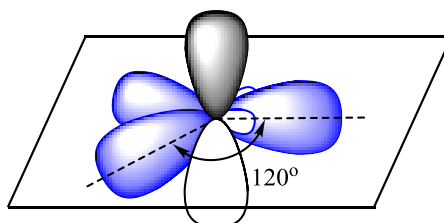
sp²-Гибридизация

В *sp²*-гибридизации принимают участие **одна s**- и **две p**-орбитали:



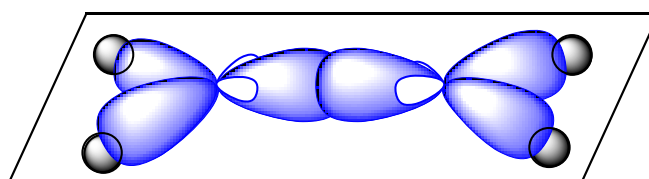
sp²-Гибридизация орбиталей атома углерода

sp²-Гибридные орбитали располагаются в одной плоскости, под углом **120°**. Одна *p*-орбиталь атома углерода остается негибридизованной. Она сохраняет свою первоначальную форму и располагается перпендикулярно плоскости, в которой лежат три *sp²*-гибридные орбитали:



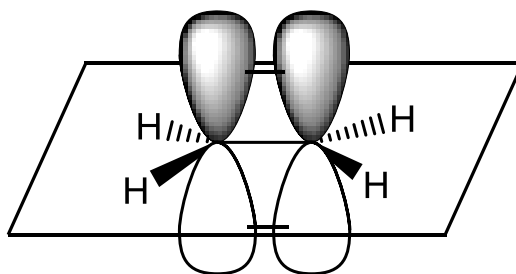
Орбитали *sp²*-гибридного атома углерода

Из *sp²*-гибридных атомов углерода построена молекула **этена** (этилена). За счет перекрывания гибридных орбиталей образуются σ -связи:



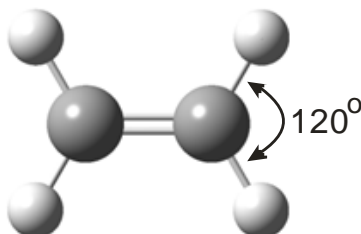
Образование σ -связей в молекуле этилена

Орбитали, не участвующие в гибридизации, формируют π -связь между атомами углерода:



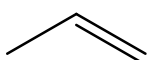
Образование π -связи в молекуле этилена

Таким образом, в молекуле этилена имеется пять σ -связей и одна π -связь. Молекула этилена плоская, валентный угол равен 120° . Связь между атомами углерода двойная:

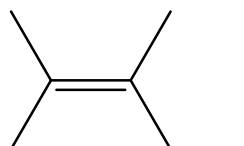


Шаростержневая модель молекулы этилена

Скелетные формулы некоторых алкенов:



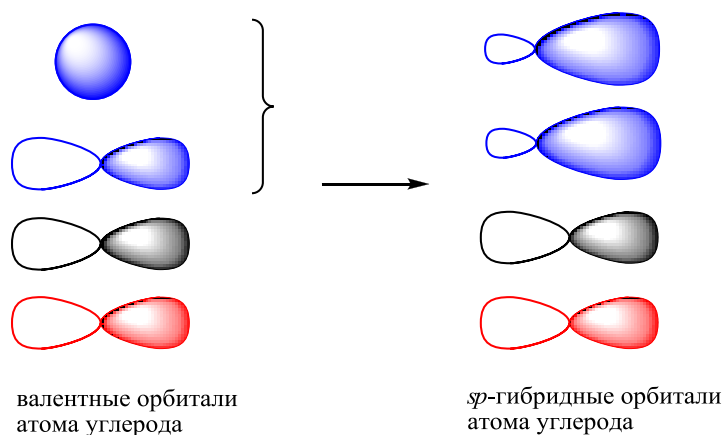
пропен



2,3-диметилпентен-2

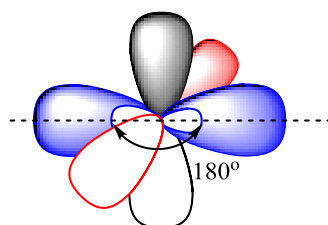
sp-Гибридизация

В *sp*-гибридизации принимают участие **одна s**- и **одна p**-орбиталь:



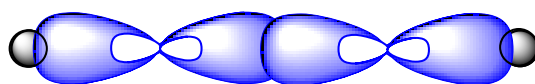
sp-Гибридизация орбиталей атома углерода

sp-Гибридные орбитали располагаются на одной прямой, под углом 180° . Две не участвующие в гибридизации *p*-орбитали атома углерода сохраняют свою первоначальную форму и располагается взаимно перпендикулярно:



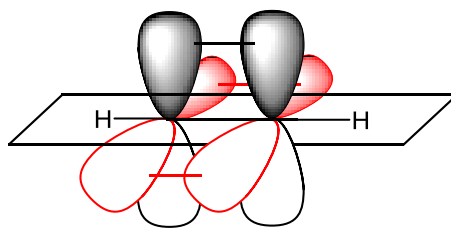
Орбитали *sp*-гибридного атома углерода

sp-Гибридизация атомов углерода реализуется в молекулах алкинов, в частности, *этина* (ацетилена) $\text{CH}\equiv\text{CH}$. За счет перекрывания гибридных орбиталей образуются σ -связи:



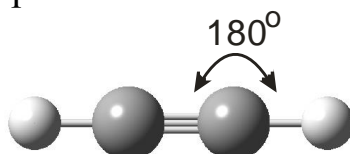
Образование σ -связей в молекуле ацетилена

Орбитали, не участвующие в гибридизации, формируют две π -связи между атомами углерода:



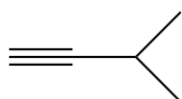
Образование π -связей в молекуле ацетилена

Таким образом, в молекуле ацетилена имеется три σ -связи и две π -связи. Молекула ацетилена линейная, валентный угол равен 180° . Связь между атомами углерода тройная:

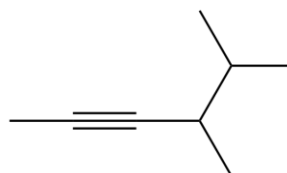


Шаростержневая модель молекулы ацетилена

Скелетные формулы некоторых алкинов:



3-метилбутин-1



4,5-диметилгексин-2

ВОПРОСЫ И ЗАДАНИЯ

1. Почему молекула метана не является плоской? Какую пространственную форму имеет молекула CCl_4 ?
2. Какие типы гибридизации атомных орбиталей вы знаете?
3. Какую пространственную форму имеют молекулы метана, этилена и ацетилена? Укажите валентные углы и типы гибридизации атомных орбиталей углерода в этих молекулах.
4. Какие орбитали атомов углерода перекрываются при образовании двойной $\text{C}=\text{C}$ связи в молекуле этилена. Что такое σ - и π -связи?
5. Укажите число σ - и π -связей в молекуле пропена.
6. Укажите атомы углерода, которые лежат на одной прямой для молекул пропина, бутин-1 и бутин-2.