

Ковалентная связь

В слове "ковалентная" приставка "ко-" означает "совместное участие". А "валента" в переводе на русский – сила, способность. В данном случае имеется в виду способность атомов связываться с другими атомами.

При образовании ковалентной связи атомы объединяют свои электроны как бы в общую "копилку" – *молекулярную орбиталь*, которая формируется из атомных оболочек отдельных атомов. Эта новая оболочка содержит по возможности *завершенное* число электронов и заменяет атомам их собственные незавершенные атомные оболочки.

Рассмотрим возникновение ковалентной связи на примере образования молекулы водорода из двух атомов водорода (рис. 3-1). Этот процесс уже является типичной *химической реакцией*, потому что из одного вещества (атомарного водорода) образуется другое – молекулярный водород. Внешним признаком энергетической выгоды этого процесса является выделение большого количества теплоты.

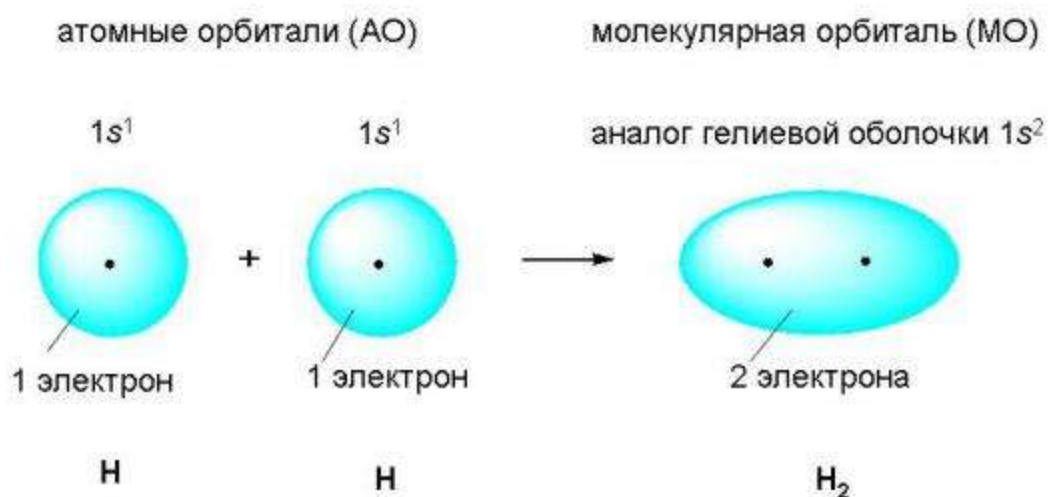


Рис 3-1. Возникновение ковалентной связи при образовании молекулы водорода из двух атомов водорода. Электронные оболочки атомов водорода (с одним s-электроном у каждого атома) сливаются в общее электронное облако (молекулярную орбиталь), где оба электрона "обслуживают" ядра независимо от того, "свое" это ядро или "чужое".

Когда электронные оболочки двух атомов водорода сближаются и образуют новую, теперь уже *молекулярную* электронную оболочку (рис. 3-1), эта новая оболочка подобна *завершенной* электронной оболочке атома благородного газа гелия (1s²).

Завершенные оболочки, как мы помним, устойчивее незавершенных. Таким образом, суммарная энергия новой системы – молекулы водорода – оказывается гораздо ниже суммарной энергии двух несвязанных атомов водорода. Избыток энергии при этом выделяется в виде теплоты.

В образовавшейся системе из двух водородных атомов каждое ядро обслуживается двумя электронами. В новой (молекулярной) оболочке уже невозможно различить, какой из электронов ранее принадлежал тому или другому атому. Принято говорить, что электроны *обобществлены*. Поскольку оба ядра претендуют на пару электронов в равной

степени, электронная плотность сосредоточена как вокруг ядер, так и в пространстве между атомами (это показано на рис. 3-3).

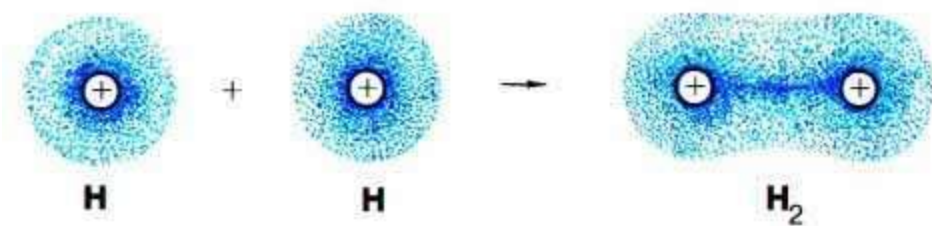
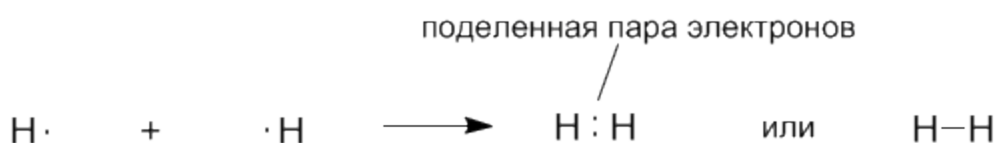


Рис. 3-3. Другой способ изображения атомных и молекулярной орбиталей: густота точек отражает "электронную плотность", то есть вероятность нахождения электрона в какой-либо точке пространства около ядер атомов водорода. Видно, что значительная электронная плотность сосредоточена в пространстве между двумя ядрами в молекуле водорода.

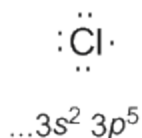
На рисунках 3-1 и 3-3 вы видите очень детальное изображение ковалентной связи. На практике используют более простые способы. Например, американский химик Дж. Льюис в 1916 году предложил обозначать электроны *точками* рядом с символами элементов. Одна точка обозначает один электрон. В этом случае образование молекулы водорода из атомов записывается так:



Оказалось, что формулы Льюиса имеют глубокий химический смысл. Мы видим, что связь между атомами водорода обозначается парой электронов. Как предположил Льюис, именно *пара электронов* позволяет образовать ковалентную связь. Впоследствии это предположение подтвердилось квантовой теорией.

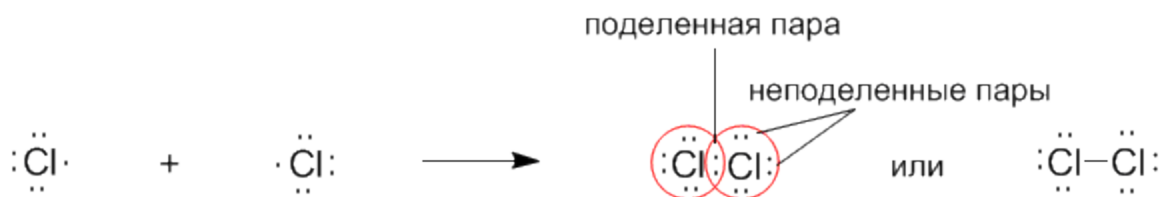
Ковалентной связью называется связывание атомов с помощью общих (поделенных между ними) электронных пар.

Рассмотрим связывание двух атомов хлора ${}_{17}\text{Cl}$ (заряд ядра $Z = 17$) в двухатомную молекулу с позиций строения электронных оболочек хлора. Для этого запишем формулу Льюиса для атома хлора и конфигурацию его внешней электронной оболочки:



На внешнем электронном уровне хлора содержится $s^2 + p^5 = 7$ электронов. Поскольку электроны нижних уровней не принимают участия в химическом взаимодействии, точками мы обозначили только электроны *внешнего*, третьего уровня. Эти внешние электроны (7 штук) можно расположить в виде трех электронных пар и одного неспаренного электрона.

После объединения атомов в молекулу из двух неспаренных электронов атомов получается новая электронная пара:



При этом каждый из атомов хлора оказывается в окружении **ОКТЕТА** электронов. В этом легко убедиться, если обвести кружком любой из атомов хлора.

Ковалентную связь образует только пара электронов, находящаяся между атомами. Она называется *поделенной парой*. Остальные пары электронов называют *неподеленными парами*. Они заполняют оболочки и не принимают участие в связывании.

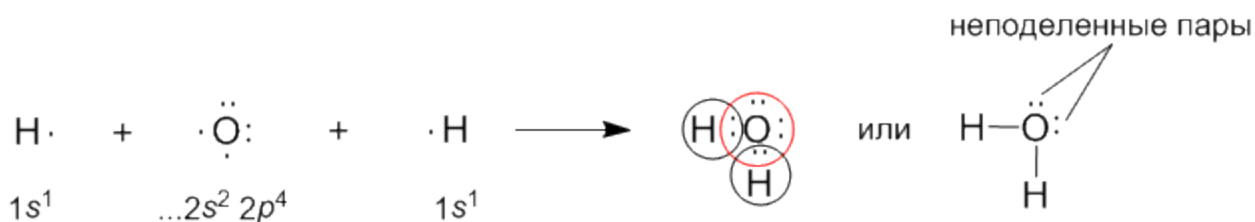
Льюис не только предложил теорию ковалентной связи, но и первым сформулировал правило октета-дублета, которым мы уже пользовались в прошлой главе для объяснения устойчивости атомов. Это правило применительно к химическим связям можно сформулировать так:

атомы образуют химические связи в результате обобществления такого количества электронов, чтобы приобрести электронную конфигурацию, подобную завершенной электронной конфигурации атомов благородных элементов.

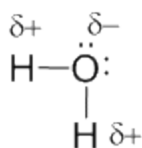
Два атома водорода, объединившись в молекулу, приобрели “завершенную” *молекулярную* оболочку, подобную завершенной электронной оболочке *атома* благородного газа гелия. Атомы хлора в молекуле приобрели *молекулярную* оболочку, похожую на завершенную оболочку *атома* аргона.

Полярная ковалентная связь занимает промежуточное положение между чисто ковалентной связью и ионной связью. Так же, как и ионная, она может возникнуть между двумя атомами разных видов. В полярной ковалентной связи электроны смещаются от атома к атому не так сильно, как в ионной. Это происходит тогда, когда атомам энергетически невыгодно далеко “отпускать” свои собственные электроны, отданные в общую “копилку” – молекулярную орбиталь. Если электроны слишком далеко сдвинутся к одному из атомов, молекулярная орбиталь перестанет быть похожей на “октетную”.

В качестве примера рассмотрим образование воды в реакции между атомами водорода ($Z = 1$) и кислорода ($Z = 8$). Для этого удобно сначала записать электронные формулы для внешних оболочек водорода ($1e^-$) и кислорода ($1e^-; 6e^-$). Так образуются “завершенные” электронные оболочки рядом с атомами водорода и кислорода в молекуле воды:



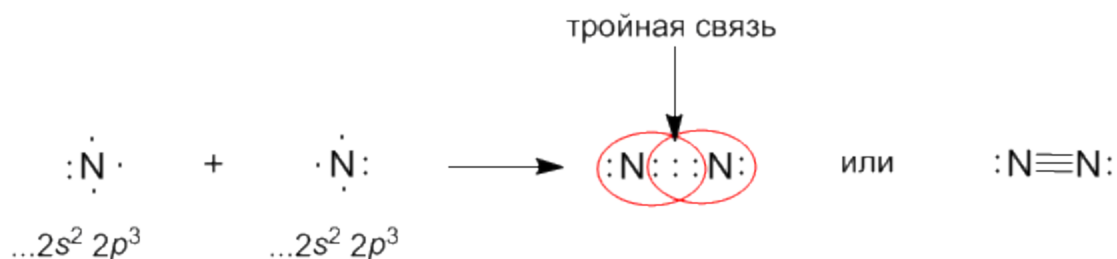
Оказывается, для этого необходимо взять именно два атома водорода на один атом кислорода. Однако природа такова, что общие электроны нужнее атому кислорода. Поэтому связывающие электронные пары для воды слегка смещены к ядру атома кислорода. Связь в молекуле воды – полярная ковалентная, а на атомах появляются частичные положительные и отрицательные заряды.



По правилу октета, связь между атомами может осуществляться не обязательно одной, но и *двумя* и даже *тремя* поделенными парами, если этого требует правило октета. Такие связи называются *двойными* и *тройными*. Например, только что рассмотренный нами кислород может образовывать двухатомную молекулу с октетом электронов у каждого атома только тогда, когда между атомами помещаются две поделенные пары:



Атомы азота также связываются в двухатомную молекулу, но для организации октета электронов им требуется расположить между собой уже три поделенные пары:



В настоящее время принято изображать электронные пары (то есть химические связи) между атомами *черточками*. Каждая черточка – это поделенная пара электронов. В этом случае уже знакомые нам молекулы выглядят так:



Формулы с черточками между атомами называются *структурными формулами*. Чаще в структурных формулах не изображают неподеленные пары электронов, но в ряде случаев (мы столкнемся с ними при обсуждении донорно-акцепторных связей) неподеленные пары играют важную роль.

Структурные формулы очень хороши для изображения молекул: они четко показывают – как атомы связаны между собой, в каком порядке, какими связями.

Связывающая пара электронов в электронных формулах – то же самое, что одна черточка в структурных формулах.

Двойные и тройные связи имеют общее название – *кратные* связи. О молекуле азота говорят, что она имеет *порядок связи*, равный трем. В молекуле кислорода порядок связи равен двум. Порядок связи в молекулах водорода и хлора – один. У водорода и хлора уже не кратная, а простая связь.

Порядок связи – это число обобществленных поделенных пар между двумя связанными атомами. Порядок связи выше трех не встречается.

Чем выше порядок связи, тем прочнее связаны между собой атомы и тем короче сама связь