

第2章 微粒间相互作用与物质性质

第1节 共价键模型



知识点一

共价键的形成与特征

知识点二

共价键的类型

知识点三

键参数





共价键是原子间通过共用电子对所形成的化学键。

请用电电子式表示 H_2 、 HCl 、 Cl_2 分子的形成过程？



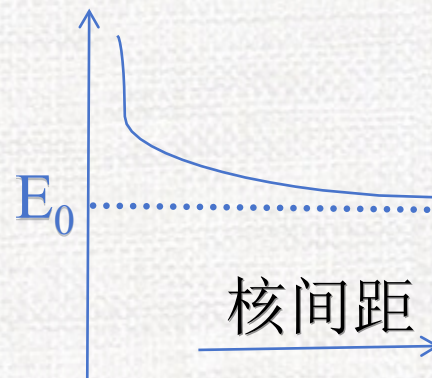
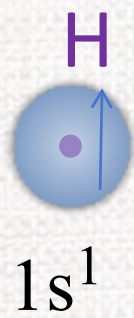
思考：

如何用原子轨道的概念理解共价键的形成？这些分子中共用电子对是怎样运动的？为什么H与Cl、O结合时原子个数比不相同？为什么 N_2 很稳定？

一、共价键的形成与特征

1. 共价键的形成

以氢分子的形成为例(用电子云表示形成过程)



当两个核外电子自旋状态相同的氢原子靠近时

E_0 为两个远离的氢原子的能量之和

当两个核外电子自旋状态不同的氢原子靠近时

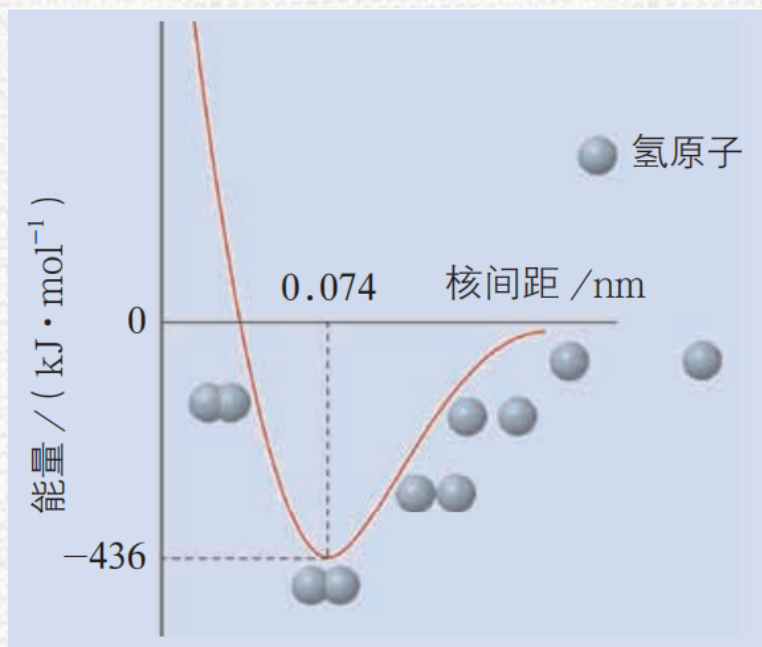


图1 氢分子形成过程中体系能量的变化

两个s轨道相互重叠



电子在核间出现概率增大



电子同时受到两个原子核的吸引，体系的能量逐渐下降



形成氢分子的共价键(H—H)

注意：形成共价键的氢原子不能无限靠近，因为靠得过近时，原子核以及电子之间的排斥作用会导致体系能量上升，导致分子不稳定。

微粒之间吸引作用越强，排斥作用越弱，体系能量越低，原子之间的作用越牢固；反之体系能量越高，原子之间作用越不牢固；微粒之间作用力与微粒之间距离有关。实验和理论均表明，当两个氢原子的核间距为0.074 nm时体系能量最低。

归纳小结：1.共价键的形成

(1) **共价键的定义**：原子间通过**共用电子**形成的化学键称为共价键。

(2) **共价键的形成**：

形成共价键时，原子轨道在两个原子核间重叠，**自旋状态相反**的未成对电子形成共用电子对。电子出现在两个原子核之间的**概率增大**，共用电子对同时受到两个原子核的吸引，导致整个体系的**能量降低**，**稳定性增强**。

(3) **共价键的本质**：

共用电子对在两核间出现**频率增大**，对两个原子核之间的吸引作用增强，形成强烈的相互作用。

注：共价键包括原子核与共用电子对间的**静电吸引**和**电子与电子、两原子核间的静电排斥**，是多种电性作用的平衡状态。



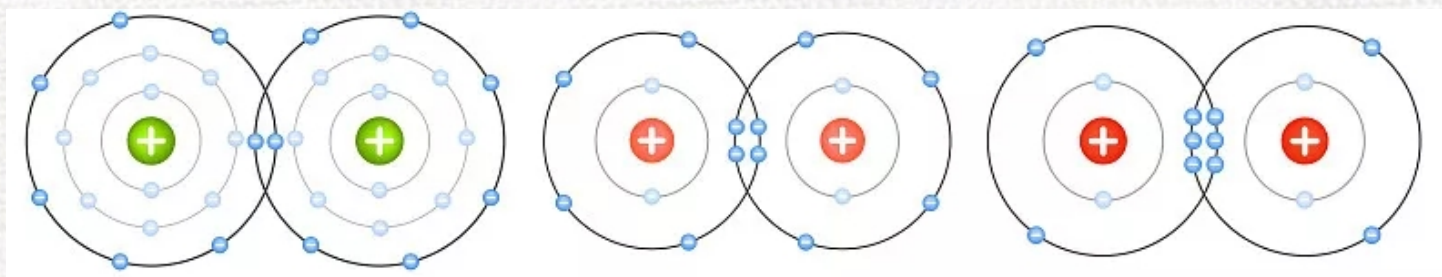
(4)共价键的本质形成条件

通常电负性相同或差值小的非金属元素原子之间形成共价键

[思考]非金属元素只能形成共价键吗?只有非金属原子之间才能形成共价键吗?

不是。有些含离子键的化合物是由非金属元素形成的,如铵盐;少数金属与非金属原子间形成的化学键也可能是共价键,如 AlCl_3 中的化学键是共价键。

(5)共价键的表示方法



$\text{Cl}-\text{Cl}$

$\text{O}=\text{O}$

$\text{N}\equiv\text{N}$

用一条短线表示一对共用电子所形成的共价键;用“=”表示原子间共用两对电子所形成的共价键;用“≡”表示原子间共用三对电子所形成的共价键。

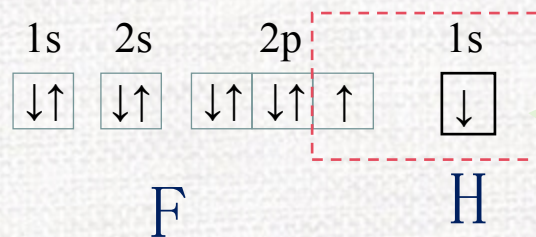
2.共价键的特征

(1)共价键的饱和性

每个原子所能形成共价键的总数或以共价键连接的原子数目是一定的。按照价键理论，一个原子有几个未成对电子，便可和几个自旋状态不同的电子配对成键，这就是共价键的饱和性。

饱和性决定了各种原子形成分子时相互结合的数量关系例如H原子、F原子都只有一个未成对电子，因而只能形成 H_2 、HF、 F_2 分子，不能形成 H_3 、 HF_2 、 F_3 分子。

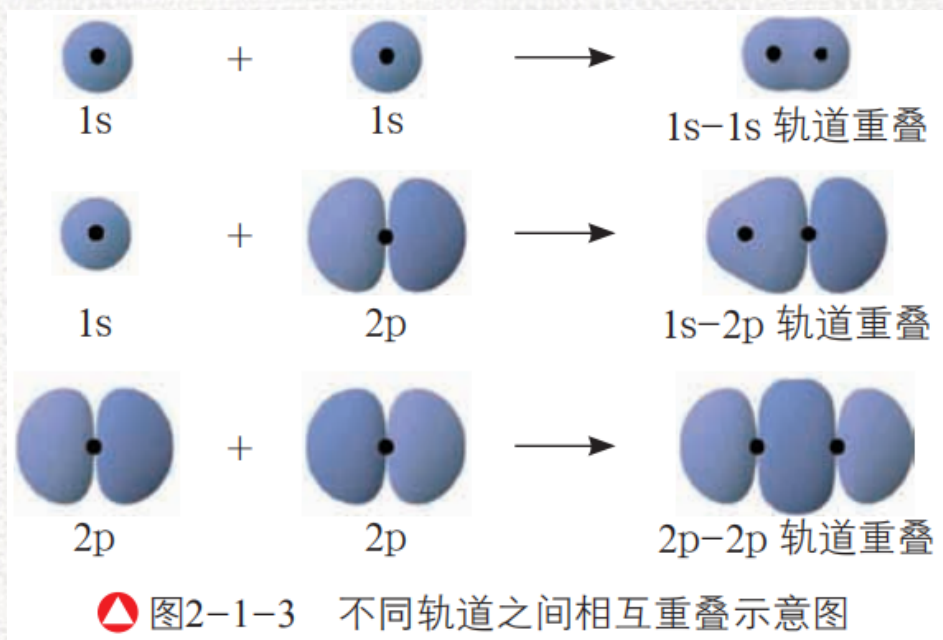
用电子排布图表示HF分子中共用电子对的形成：



原子轨道(电子云)重叠

思考：为什么不可能有 H_3 、 Cl_3 分子的形成？为什么H与Cl、O结合时原子个数比不相同？为什么 NH_3 分子中N原子只有1个，H原子有3个？

(2) 共价键的方向性

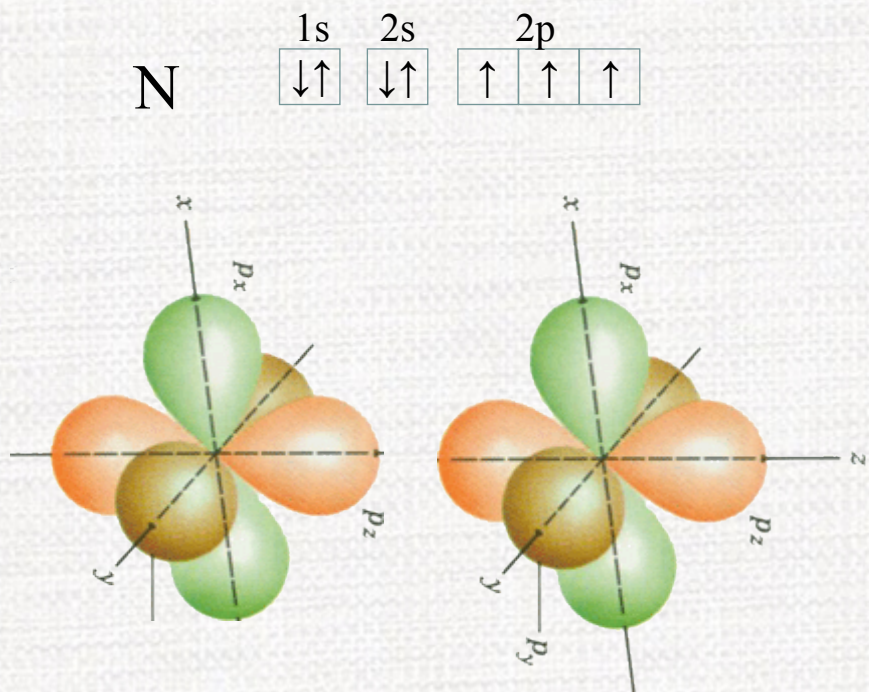


在形成共价键时,原子轨道重叠得越多,电子在核间出现的概率越大,所形成的共价键就越**牢固**。因此,共价键将尽可能沿着电子出现概率最大的方向形成,这就是共价键的方向性。

分子的空间结构与共价键的方向性密切相关。

交流·研讨

通过“人工固氮”将空气中的氮气转化为含氮化合物用于生产化肥或其他化工产品是人类突破的重要课题。解决这个课题的难点在于氮分子中的共价三键使构成氮分子的两个氮原子紧紧地结合在一起，由此氮气的性质非常稳定。请从轨道重叠的角度解释氮分子中的共价三键是如何形成的。

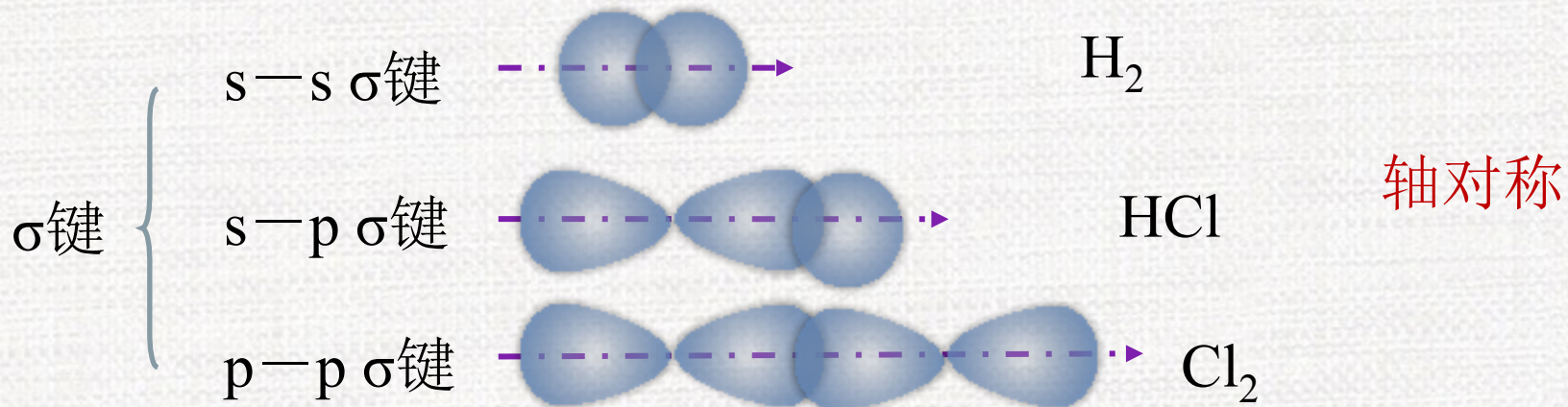


根据**洪特规则**，氮原子中处于 $2p$ 轨道的三个电子实际上分别占据 $2p_x$ 、 $2p_y$ 、 $2p_z$ 三个原子轨道，是**三个未成对电子**。当形成氮分子的两个氮原子相互接近时，一个氮原子 $2p_z$ 轨道与另一个氮原子的 $2p_z$ 轨道重叠形成一个共价键、同时它们的 $2p_x$ 和 $2p_y$ 轨道也会分别两两重叠形成两个共价键。这样形成的共价键称为共价三键；也就是说，氮分子中的氮原子之间是以共价三键结合的。

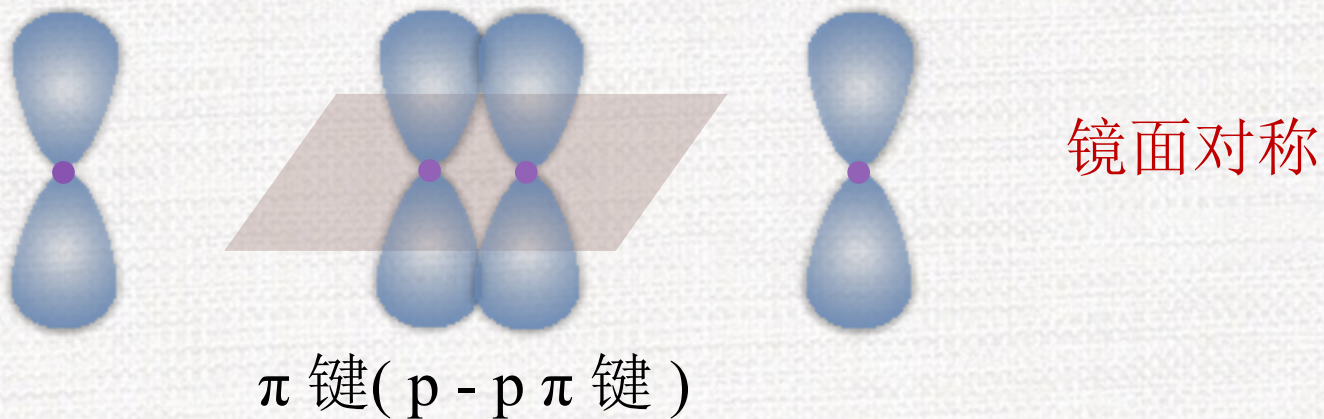
仔细分析氮分子中共价三键的三个共价键，可以发现它们并不是完全等同的。当两个氮原子的 $2p_z$ 轨道以“**头碰头**”的方式相互重叠时，相互平行的 $2p_x$ 或 $2p_y$ 轨道只能分别以“**肩并肩**”的方式重叠。

二、共价键的类型 1. σ 键与 π 键(按原子轨道重叠方式分类)

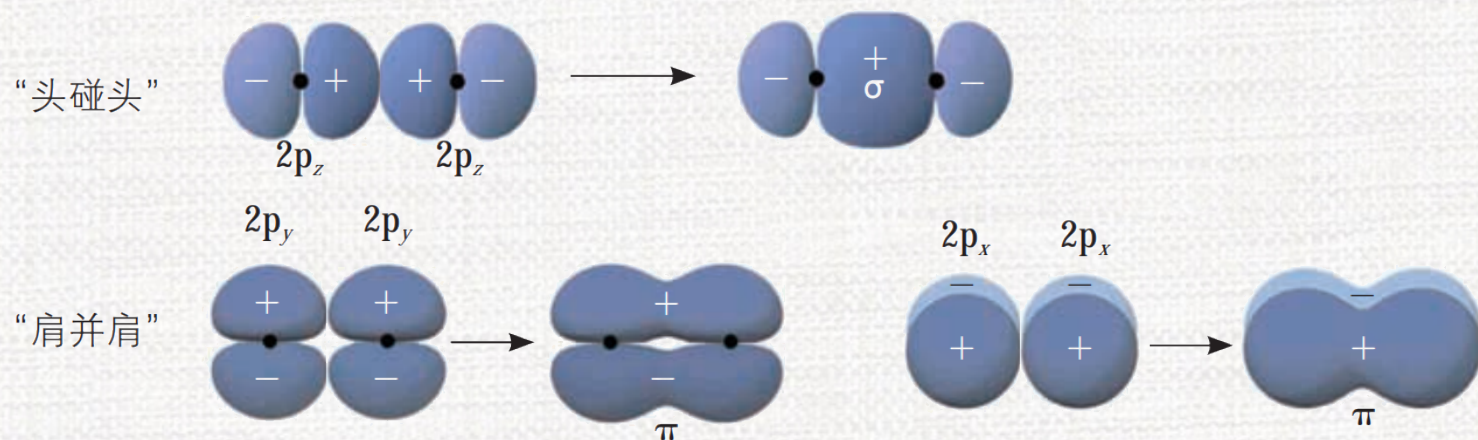
(1) σ 键 成键时，原子轨道以“**头碰头**”方式重叠形成的共价键。



(2) π 键 成键时，原子轨道以“**肩并肩**”方式重叠形成的共价键



氮分子中 σ 键和 π 键形成示意图



思考与交流

I. 哪种成键方式电子云重叠程度大? **头碰头**

II. σ 键和 π 键哪个更牢固? **σ 键**

III. 所有 σ 键都有方向性吗? **S-S σ 键没有方向性**

IV. 如何判断共价键是 σ 键, 还是 π 键?

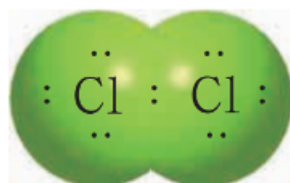
一般规律: 共价单键是 σ 键; 共价双键中有一个 σ 键, 另一个是 π 键;
共价三键由一个 σ 键和两个 π 键组成。

二、共价键的类型

2. 极性键和非极性键(按共用电子对是否偏移分类)

(1) 非极性键

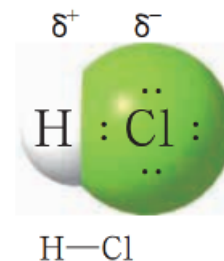
构成分子的是同种元素的两个原子，它们吸引电子的能力相同，所以共用的电子不偏向其中任何一个原子，参与成键的原子都不显电性，这种共价键叫作非极性共价键，简称非极性键。



Cl—Cl

图2-1-7 氯分子中的非极性键

判断H₂O₂分子中各种键的极性？



H—Cl

图2-1-8 氯化氢分子中的极性键

(2) 极性键

构成分子的两个原子是不同元素的原子时，由于两个原子吸引电子的能力不同，共用的电子必然偏向吸引电子能力大的原子一方，这个原子因附近电子出现的概率较大而带部分负电荷，而另一原子则带部分正电荷，这种共价键叫作极性共价键，简称极性键。

原子的电负性差值越大，形成的共价键极性越强，如H-F为强极性键，H-I为弱极性键。

以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：
<https://d.book118.com/988013044041006052>