



高中化学共价键键角大小比较的方法研究

■ 杨灵娜

摘要: 高中化学选修三《物质结构与性质》第二章分子的结构与性质在探究分子结构键参数中指出键角的概念并在价键理论中指出斥力大小,但并没有明确指出键角比较的方法,因此结合实例将键角比较从孤对效应、重键效应、电负性效应三个效应进行分析阐述,希望能让初学者的学习更加条理化、清晰化。

关键词: 共价键; 键角; 电子云密度; 高中化学

高中化学《物质结构与性质》中第二章“分子结构与性质”中,在2018年考纲中明确指出能用价层电子对互斥理论及键参数中键长、键角、键能说明“分子的某些性质”,因此分子键角的判断就显得尤为重要。具体体现为在刚刚过去的东北地区三省三校的一模考试,哈三中的一模考试,三省四市的一模考试,三大权威组织命题中均有键角问题的出现,因此将共价键键角问题作为专项问题研究和归纳对于中学生的学习是极其有帮助的,也在一定程度上迎合权威机构命题方向,要求学生対问题理解的要深入透彻。

随着课程改革的深入,近几年高考试卷对学生知识能力的考查越来越重视学生对化学模型的建立过程的理解,体现的问题更加灵活和具有实践性。根据笔者多年对课程的研究,现针对(人教版高中化学选修三)共价键键角大小确定和比较这一问题的方法进行研究整理。

一、确定共价键键角的理论依据

键角是指分子中一个原子与其他两个原子形成两

个共价键之间的夹角,它是反映的分子空间构型重要因素之一。在高中阶段解决问题主要依托的是VSEPR理论模型,也就是价层电子对互斥理论。所谓的价层电子对指的是中心原子形成的 σ 键和孤电子对的和。互斥理论指出:价层电子对之间彼此存在斥力,其中孤电子对之间的斥力大于孤电子对与成键电子对的斥力;而孤电子对与成键电子对的斥力又大于成键电子对之间的斥力。

二、影响共价键键角大小的三种效应

1. 孤对效应

孤对效应是指孤电子对越多,共价键的斥力越大,共价键的键角就越小。

CH_4 中 σ 键与孤电子对的加和是 $4+0$,因此当中心原子碳向空间以正四面体方向伸展的4个成键轨道彼此斥力相同,呈现最大的伸展方向,故键角为 109.28° 。分子构型呈现正四面体结构, NH_3 分子中 σ 键和中心原子的孤电子对数为 $3+1$,孤电子对对成键电子对的斥力大于成键电子之间的斥力,因而中心原子氮向空间伸展的4条轨道中的3条成键轨道受到挤压,因而键角被压缩为 107.5° 。 H_2O 分子中 σ 键和中心原子的孤电子对数为 $2+2$,中心原子氧向空间伸展的4条轨道中的2条成键轨道受到两对孤电子对挤压,因而键角更小被压缩为 104.5° 。因此,孤电子对越多,共价键的斥力越大,共价键的键角就越小。

2. 重键效应

作者简介: 杨灵娜(1977-),女,黑龙江人,本科,中学一级教师,主要从事高中化学教学研究



共价键在形成时种类很多,有单键、双键、三键,更有像苯分子结构中出现的介于单双键之间的特殊共价键,这些共价键都称为重键,重键效应是指重键中 π 键越多,中心原子周围电子云密度就会越大,成键电子形成的共价键之间的斥力就会越大,故而会使键角变大。例如甲醛分子中,碳氧双键与碳氢键之间的键角大于碳氢键与碳氢键之间的键角。光气中碳氧双键与碳氯单键之间的斥力大,键角也比碳氯单键之间的键角大。

3. 电负性效应

中心原子与成键原子的电负性大小也会影响到键角的大小,中心原子电负性大于成键原子的电负性,则中心原子周围电子云密度就会越大,故而共价键之间的斥力就会越大,键角就会变大,反之,中心原子的电负性小于成键原子的电负性,则中心原子周围电子云密度较小,共价键彼此之间斥力就小,因此键角就小,这就是电负性效应。例如: NH_3 与 NF_3 的键角比较, NH_3 中氮电子云密度大,故 NH_3 的键角稍大, NF_3 中,电子云密度靠近F,远离氮,故N—F键的键角较小。再如:水分子和硫化氢分子的共价键键角如何比较呢:电

负性O大于S,故氧氢键和硫氢键比较,氧周围电子云密度更大,共价键之间的斥力大,因此水分子的键角大。

另外,有时配合物形成时,结构上的变化也会对键角产生干扰,如: NH_3 与 $\text{Cu}(\text{NH}_3)_4^{2+}$,虽然都有 NH_3 ,但在四氨合铜配离子中,由于铜离子与氨分子形成配位键,因此氨分子中已经没有了孤电子对,共价键之间斥力变小,键角变大。

综上所述,物质世界是复杂多变的,结构之间的相互影响也是时刻存在的,在高中范围内将价键理论的理解和应用进行小范围的研究、归纳,希望能给更多的初学者以帮助。

参考文献:

[1] 人民教育出版社,课程教材研究所,化学课程教材研究开发中心. 物质结构与性质: 第三版. 北京: 北京: 人民教育出版社 2009.

[2] 周公度. 结构化学基础[M]. 武汉: 武汉科学出版社 1987.

[哈尔滨市第24中学(150066)]