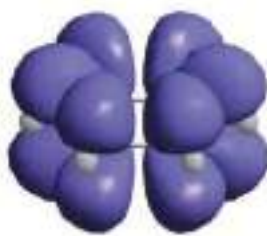
Schematyczne przedstawienie orbitali p benzenuKształty obliczonych orbitali p w benzenieObliczony cząsteczkowy orbital benzenu wynikający z korzystnego nakładania się p orbitali nad i pod płaszczyzną pierścienia benzenowego

Na marginesie str. 59
Model kryształu fluorku litu

W wyjaśnieniu orbitali molekularnych, co zostanie omówione znacznie bardziej szczegółowo w rozdziale 14 zaczynamy od stwierdzenia, że atomy węgla pierścienia benzenowego są zhybrydyzowane sp^2 i mają kąty wiązania 120° . Dlatego każdy atom węgla ma orbital p , który ma jeden płat powyżej płaszczyzny pierścienia i jeden płat poniżej, jak pokazano w schematycznym i obliczonym przedstawieniu orbitali p .

Płaty każdego orbitalu p nad i pod pierścieniem pokrywają się z płatami orbitali p przy atomach po obu stronach. Ten rodzaj nakładania się orbitali p prowadzi do zestawu wiązań orbitala molekularnego, który obejmuje wszystkie atomy węgla pierścienia benzenu, co przedstawiono jako obliczony orbital molekularny. Tak więc sześć elektronów związanych z tymi orbitalami p (jeden elektron z każdego orbitalu) są **zdelokalizowane** wokół wszystkich sześciu atomów węgla pierścienia. Ta delokalizacja elektronów wyjaśnia, w jaki sposób wszystkie wiązania węgiel–węgiel są równocenne i mają taką samą długość. W rozdziale 14.7B, kiedy zostanie omówiona spektroskopia magnetycznego rezonansu jądrowego, przedstawione zostaną przekonujące dowody fizyczne na tę delokalizację elektronów.

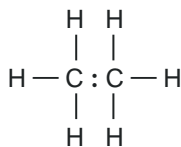
2.2 POLARNE WIĄZANIA KOWALENCYJNE

W omówieniu dotyczącym wiązań chemicznych w rozdziale 1.3 analizowaliśmy związki, takie jak fluorek litu, w którym wiązanie znajduje się między dwoma atomami o bardzo dużej różnicy elektroujemności. W takich przypadkach zachodzi całkowity transfer elektronów między atomami, co w konsekwencji prowadzi do powstania **wiązania jonowego**:



Fluorek litu ma wiązanie jonowe

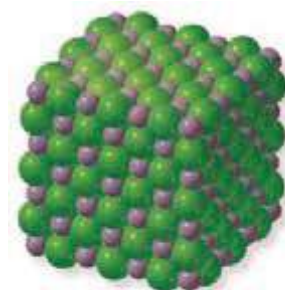
Opisaliśmy również cząsteczki, w których różnice elektroujemności nie są duże lub takie, w których atomy nie różnią się elektroujemnością, jak na przykład w wiązaniu węgiel–węgiel etanu. Tutaj elektrony są równo dzielone między atomy.



Wiązanie kowalencyjne w etanie.
Elektrony są uwspólnione przez atomy węgla

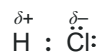
Do tej pory nie rozważaliśmy możliwości, że elektrony wiązania kowalencyjnego mogą być dzielone nierówno.

- Jeśli istnieje różnica elektroujemności między dwoma związanymi atomami i nie jest ona duża, elektrony nie są równo dzielone pomiędzy atomami, w wyniku czego powstaje **polarne wiązanie kowalencyjne**.
- Pamiętaj: jedną z definicji **elektroujemności** jest zdolność atomu do przyciągania elektronów, które zlokalizowane są w wiązaniu kowalencyjnym.



Model kryształu fluorku litu

Przykładem takiego polarnego wiązania kowalencyjnego jest to w chlorowodorze. Atom chloru, ze swoją większą elektroujemnością, przyciąga do siebie elektrony wiążące. To sprawia, że atom wodoru ma pewien niedobór elektronów, co powoduje powstanie częściowego ładunku dodatniego (δ^+). Atom chloru staje się nieco bardziej bogaty w elektrony i niesie częściowy ładunek ujemny (δ^-):



Tak więc cząsteczka chlorowodoru ma jeden koniec częściowo dodatni, a drugi częściowo ujemny, jest dipolem i charakteryzuje się **momentem dipolowym**.

Kierunek polaryzacji wiązania spolaryzowanego można symbolicznie przedstawić jako wektor. Przekreślony koniec strzałki wektora jest końcem dodatnim, a grot wskazuje koniec ujemny:

(koniec dodatni) \rightarrow (koniec ujemny)

Na przykład w HCl wskazujemy kierunek momentu dipolowego w sposób następujący:



Moment dipolowy jest właściwością fizyczną, którą można zmierzyć doświadczalnie. Jest on zdefiniowany jako iloczyn wielkości ładunku w jednostkach elektrostatycznych (ang. *electrostatic units*, esu) i odległości dzielącej je w centymetrach (cm):

Moment dipolowy = ładunek (w esu) \times odległość (w cm)

$$\mu = e \times d$$

Wielkości ładunku są zazwyczaj rzędu 10^{-10} esu, a odległości są rzędu 10^{-8} cm; stąd momenty dipolowe są zatem zazwyczaj rzędu 10^{-18} esu \cdot cm. Dla wygody, tę jednostkę, 1×10^{-18} esu \cdot cm, definiujemy jako jeden **debaj**, symbol D. (Jednostka nosi imię Petera J. W. Debye'a, chemika urodzonego w Holandii i który wykładał na Cornell University w latach 1936–1966. Debye zdobył Nagrodę Nobla w chemii w 1936 roku). W jednostkach SI 1 D = $3,336 \times 10^{-30}$ kulombometr (C \cdot m).

W razie potrzeby długość strzałki może służyć do wskazania wielkości momentu dipolowego. Momenty dipolowe, jak zobaczymy w rozdziale 2.3, są bardzo użytecznymi wielkościami w różnicowaniu właściwości fizycznych związków.

• ĆWICZENIE 2.2

Wskaż ładunki δ^+ i δ^- na odpowiednich atomach i narysuj wektor momentu dipolowego dla poniżej przedstawionych cząsteczek, które są polarne:

(a) HF (b) IBr (c) Br₂ (d) F₂

Polarne wiązania kowalencyjne silnie wpływają na właściwości fizyczne i reaktywność cząsteczki. W wielu przypadkach te polarne wiązania kowalencyjne są częścią grup funkcyjnych, z którymi się wkrótce zapoznamy (rozd. 2.5–2.13). **Grupy funkcyjne** to zdefiniowane grupy atomów w cząsteczce, które determinują właściwości chemiczne (reaktywność lub właściwości fizyczne) cząsteczki. Grupy funkcyjne często zawierają atomy o różnej elektroujemności i niewiążące pary elektronów. (Atomy, takie jak tlen, azot i siarka tworzą wiązania kowalencyjne i mają niewiążące pary elektronów nazywane są **heteroatomami**).

2.2A Mapy potencjału elektrostatycznego

Jednym ze sposobów wizualizacji rozkładu ładunku w cząsteczce jest **mapa potencjału elektrostatycznego (MEP)**. Obszary powierzchni gęstości elektronowej, które są bardziej ujemne niż inne – mają kolor czerwony. Regiony te przyciągają dodatnio naładowane indywidua molekularne (lub odpychają te obarczone ładunkiem ujemnym). Regiony, które są mniej ujemne (lub są dodatnie) zaznaczono kolorem niebieskim. Niebieskie regiony