

# 第三章 分子结构与化学键理论

✿ 3.1 电子对价键理论

✿ 3.2 价层电子对互斥理论

✿ 3.3 分子轨道理论

✿ 3.4 多原子分子的结构

✿ 3.5 键参数

✿ 3.6 分子间作用力

## 3.5 键参数

★ 3.5.1 键的极性

★ 3.5.2 键能

★ 3.5.3 键长

★ 3.5.4 键角

## 3.5.1 键的极性

21世纪高等院校教材

我们把正负电荷中(重)心不重合的化学键称为**极性键**, 而正负电荷中(重)心重合的称为**非极性键**.

键的极性大小用偶极距  $\mu$  表示

$$\mu = q \times l$$

偶极距

正负电荷重心所带电量

正负电荷重心间的距离

它是一个矢量，方向从正极指向负极。

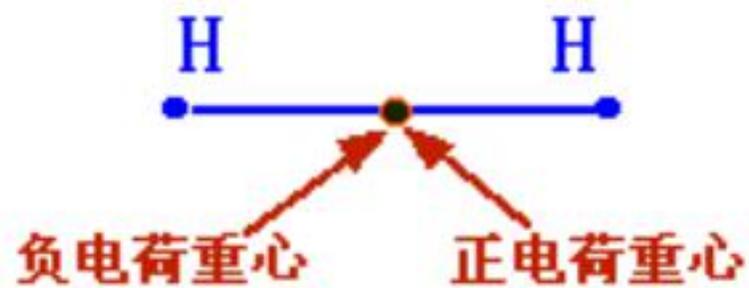
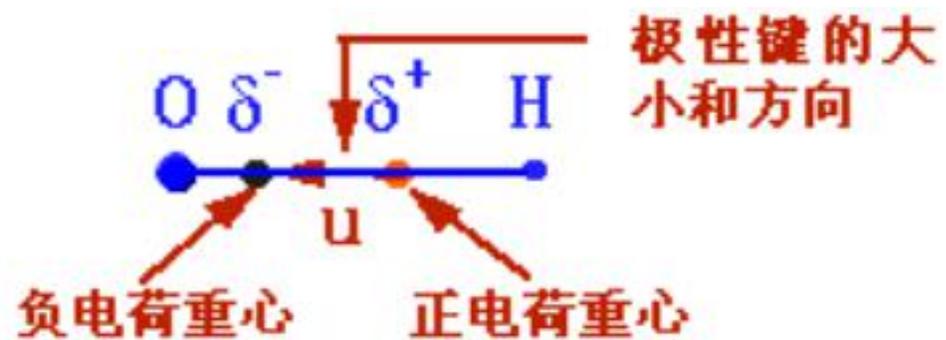
$\mu$  值越大，键的极性越强。而  $\mu$  值的大小与成键元素的电负性差值  $\Delta x$  有关。

一般情况下， $\Delta x=0$ ，键是非极性的， $\Delta x$  值越大，则键的极性就越强。离子键可认为是最强的极性键。

# 无机化学

主 编 章伟光

钟声亮 吴云影



O-H键和H-H键的偶极距示意图

## 3.5.2 键能

在100kPa, 298K下, 将1mol气态AB键断开为气态A, B原子时吸收的能量, 称为**AB键的键能** (严格地应叫标准键离解能)。一般化学键键能在125~630kJ/mol范围之内。

21世纪高等院校教材

# 无机化学

副主编 申俊英 方霞 李志强 钟声亮 吴云影

科学出版社

例如：NH<sub>3</sub>分子中每一个N-H键的离解能都不一样。



$$D_{\text{总}} = D_1 + D_2 + D_3 = 1156 \text{ kJ/mol}$$

N-H键的(平均)键能为

$$1156 \div 3 = 386 \text{ (kJ/mol)}$$

# 无机化学

主 编 章伟光

副主编 申俊英 万霞 李志强 钟声亮 吴云影

一般来说, **键能越大, 键越牢固**, 由该键构成的分子也就越稳定.

表 3.3 常见化学键的键能

共价键	键能/(kJ · mol <sup>-1</sup> )	共价键	键能/(kJ · mol <sup>-1</sup> )
H—H	432	C—S	255
H—N	386	C=S	477
H—O	460	N—N	193
H—S	368	N=N	418
H—P	326	N≡N	941
H—F	568	N—O	176
H—Cl	432	N—P	209
H—Br	366	O—O	142
H—I	298	O=O	499

共价键	键能/(kJ·mol <sup>-1</sup> )	共价键	键能/(kJ·mol <sup>-1</sup> )
C—H	414	O—P	502
C—C	347	O—S	469
C—C	620	P—P	197
C=C	812	P—P	489
C—N	276	S—S	268
C—N	615	S—S	352
C=N	891	F—F	157
C—O	351	Cl—Cl	243
C=O	745	Br—Br	196
C—P	263	I—I	151

学

钟声亮 吴云影

### 3.5.3 键长

分子中成键原子核间的平均距离称为**键长**（也叫核间距）。键长的大小与原子的大小，原子核电荷以及化学键的性质等因素有关。一般**键长越长，该键的键能就越小**。

21世纪高等院校教材

无机化学

主编 章伟光  
副主编 申俊英 万霞 李志强 钟声亮 吴云影

科学出版社

BACK

## 一些共价键的键长 (pm)

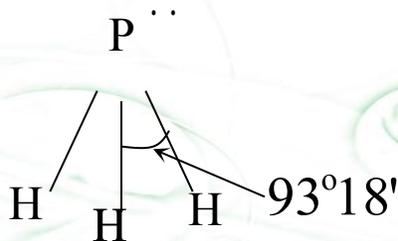
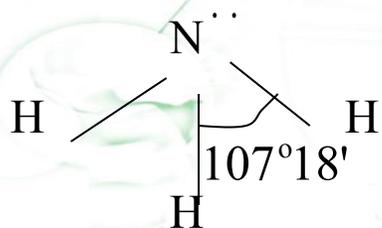
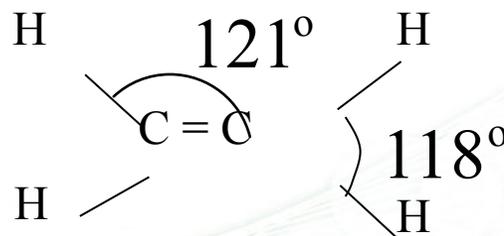
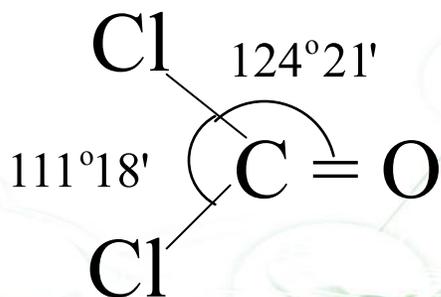
共价键	键长 /pm	共价键	键长 /pm
H—F	92	H—H	74
H—Cl	127	C—C	154
H—Br	141	C=C	134
H—I	161	C≡C	120
F—F	141	N—N	145
Cl—Cl	199	N≡N	110
Br—Br	228	C—H	109
I—I	267	O—H	96

编 李志强 钟声亮 吴云影

## 3.5.4 键角

21世纪高等院校教材

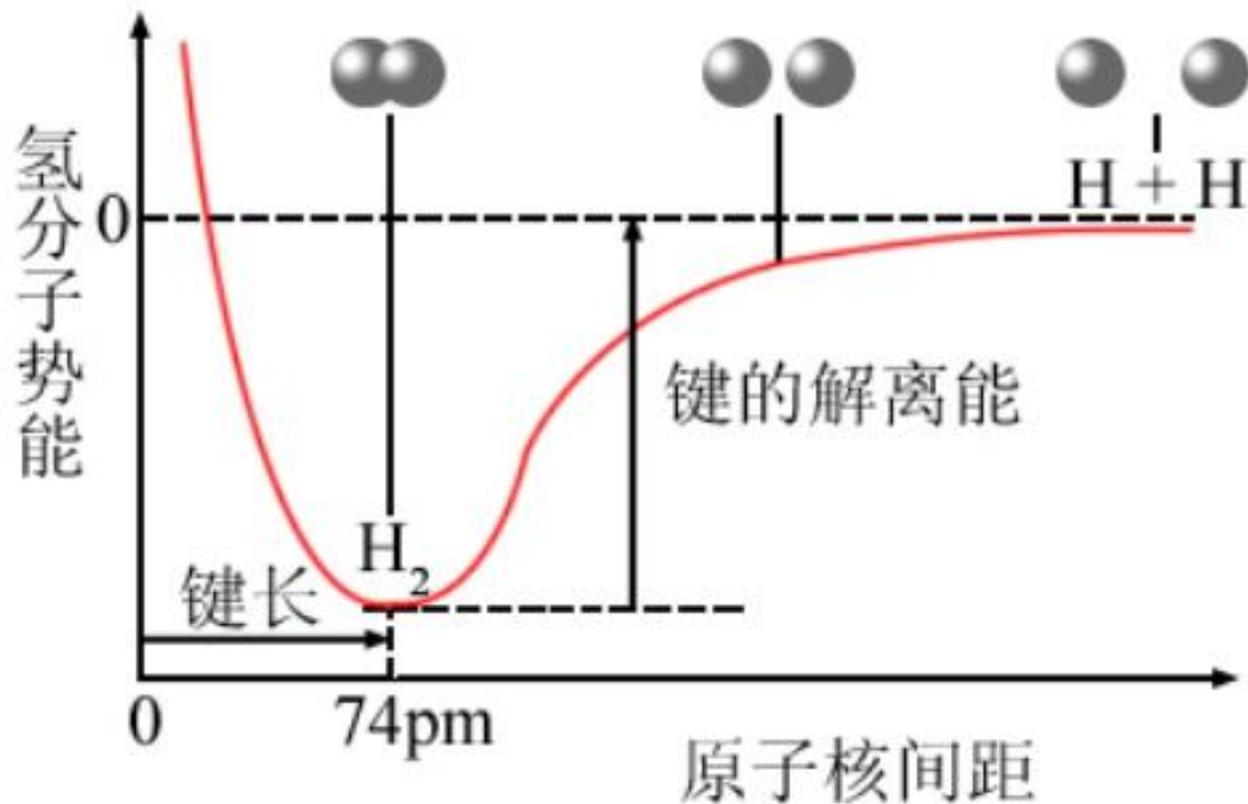
在分子中键和键之间的夹角叫做**键角**。  
键角是反映分子空间结构的重要因素一。



# 键参数小结:

键的强度 { 键级 (B · O)  
键能 (E)

分子的空间构型 { 键角 ( $\theta$ )  
键长 (l) } 键的极性  
— 偶极矩 ( $\mu$ )



## 练习题

21世纪高等院校教材

3.18 两个元素的电负性相等，则形成的键一定无极性，这种说法对吗？为什么？

3.19 指出下列各组化合物中，哪一个化合物的化学键极性最小？哪一个化学键极性最大？

