

# ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ

Лекция 4, 5

Князева Е.М.

---

**Химическая связь** – это любое вз-ие между частицами, при котором выделяется больше 20 кДж Е.

1927 г. Гейтлер и Лондон, применив  
квантово-механические расчеты, вычислили  
E и длину связи в молекуле  $H_2$ .

# Виды хим. связи

- Ковалентная
  - Ионная
  - Металлическая
  - Водородная
  - Межмолекулярные силы (силы Ван-дер-Ваальса)
- Основными видами связи являются: Ковалентная, Ионная, Металлическая.
- Дополнительными являются: Водородная, Межмолекулярные силы (силы Ван-дер-Ваальса).

# Характеристики хим. связи

---

- Длина хим. связи ( $\ell_{\text{св.}}$ ) – это межъядерное расстояние в молекулах или кристаллах.

# Характеристики хим. связи

- Энергия связи ( $E_{\text{св}}$ ) – это  $E$ , которая выделяется при образовании хим. св. или затрачивается на её разрыв.
- Валентный угол – это угол между <sup>УМ-ся</sup>связями, которые образует атом в молекуле.

# Характеристики хим. связи

---

Полярность связи – это смещение  $\bar{\rho}$  плотности к более электроотрицательному атому.

# Магнитные свойства

---

По характеру поведения в магнитном поле в-ва разделяются на диамагнитные и парамагнитные.

Парамагнетики

Диамагнетики



# Механизмы образования ковалентной связи

---

Различают три механизма образования  
ковалентной связи.

- Обменный
- Донорно-акцепторный
- Дативный

# Обменный механизм

---

заключается в предоставлении атомами  
неспаренных  $e$  для образования хим. связи.

Образование молекулы  $O_2$ :

- $2s^2 2p^4$
- $2s^2 2p^4$

# Типы перекрывания АО

---

**$\sigma$ -тип перекрывания:** область общей  $\bar{e}$  плотности лежит на линии связи ядер атомов.

**$\pi$ -тип:** область общей  $\bar{e}$  плотности перпендикулярна линии связи ядер атомов.

# Донорно-акцепторный механизм

---

Хим. связь обр-ся за счёт  $\bar{e}$  пары одного атома и вакантной АО другого атома:

Образ. молекулы CO:

C

O

# Свойства ковалентной связи

---

Ков. связь имеет 3 основных св-ва:  
полярность, насыщенность, направленность.

**Полярная** ковалентная связь образуется при взаимодействии атомов различных химических элементов: HF, NO, BN ...

**Неполярная** ковалентная связь образуется при взаимодействии атомов одинаковых химических элементов:

$H_2$ ,  $F_2$ ,  $N_2$ ,  $O_2$  ...

# Насыщаемость ковалентной связи

---

Нас-мость связи заключается в стремлении атомов полностью реализовать свои валентные возможности.

# Направленность ковалентной связи

---

Геом-кое строение молекул и ионов объясняется теорией гибридизации АО.

**Гибридизация** – это выравнивание АО по форме и E.

# Теория Гиллеспи (Метод ОЭПВО)

**ОЭПВО** – отталкивание  $\bar{e}$  пар валентных орбиталей.

Теория описывает строение молекул (ионов), атомы которых имеют неподелённые (несвязывающие)  $\bar{e}$  пары.

**Связывающей** называется такая пара  $\bar{e}$ , кот. образ-ет связь между двумя атомами.

**Несвязывающая** пара  $\bar{e}$  принадлежит только одному ц. а. и не принимает участия в образ-и хим. связи, но влияет на форму молекулы (иона).



# Недостатки метода ВС

---

Метод ВС не объясняет:

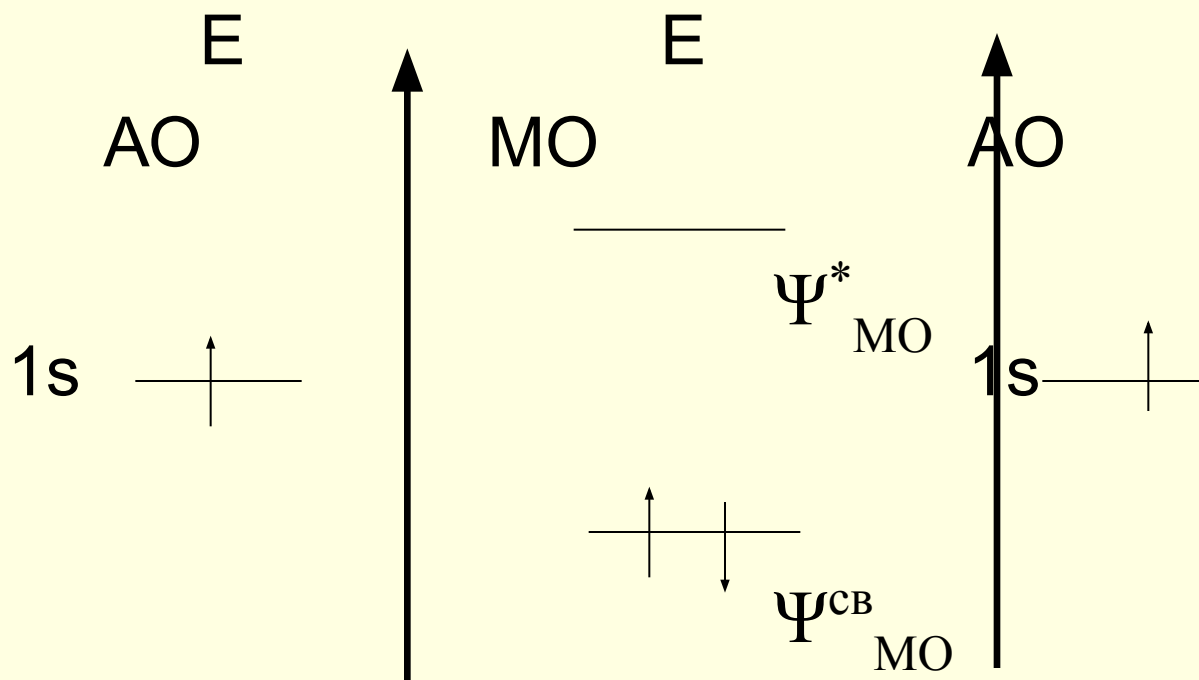
- существование молекулярных ионов  $\text{H}_2^+$ ,  $\text{O}_2^- \dots$
- магнитные свойства молекул
- изменение  $E$  связи при отрыве  $e$  от молекулы
- существование электронодефицитных молекул, например  $\text{B}_2\text{H}_6$

## Метод МО ЛКАО

---

Поведение  $\bar{\epsilon}$  в молекуле описывается молекулярной волновой функцией ( $\psi_{MO}$ ), которую можно представить как линейную комбинацию атомных волновых функций ( $\psi_{AO}$ ).

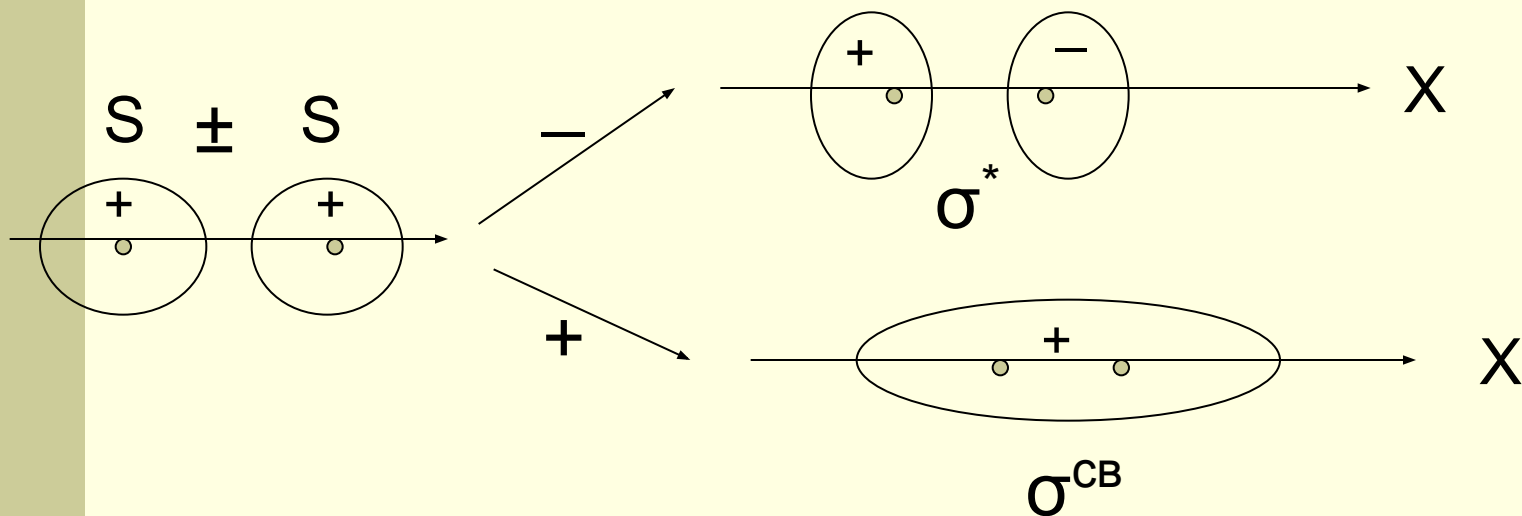
# Энергетические диаграммы МО



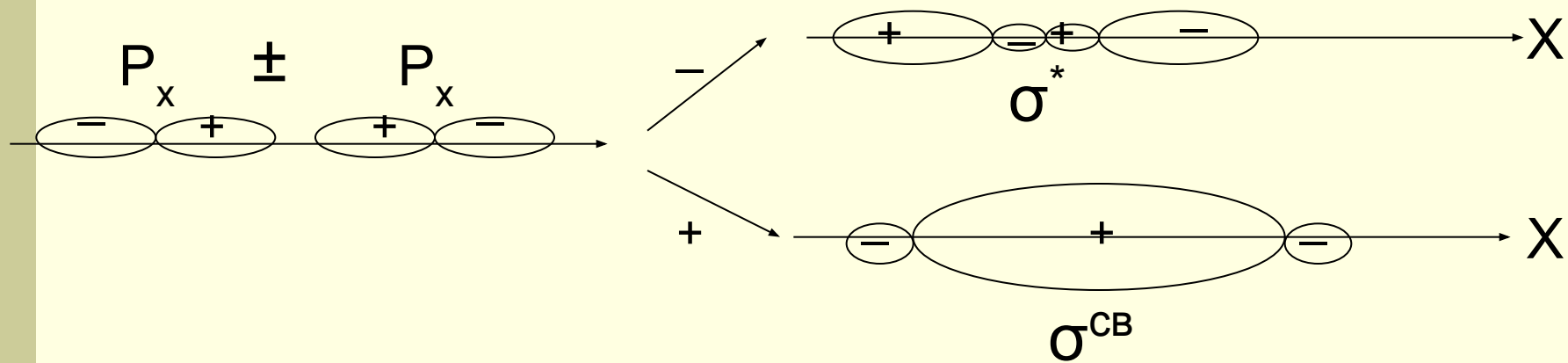
Заполнение  $\bar{e}$  МО происходит в соот-вии с 3 основными принципами (min энергии, Паули и правилом Гунда).

# Симметрия МО зависит от способа перекрывания АО

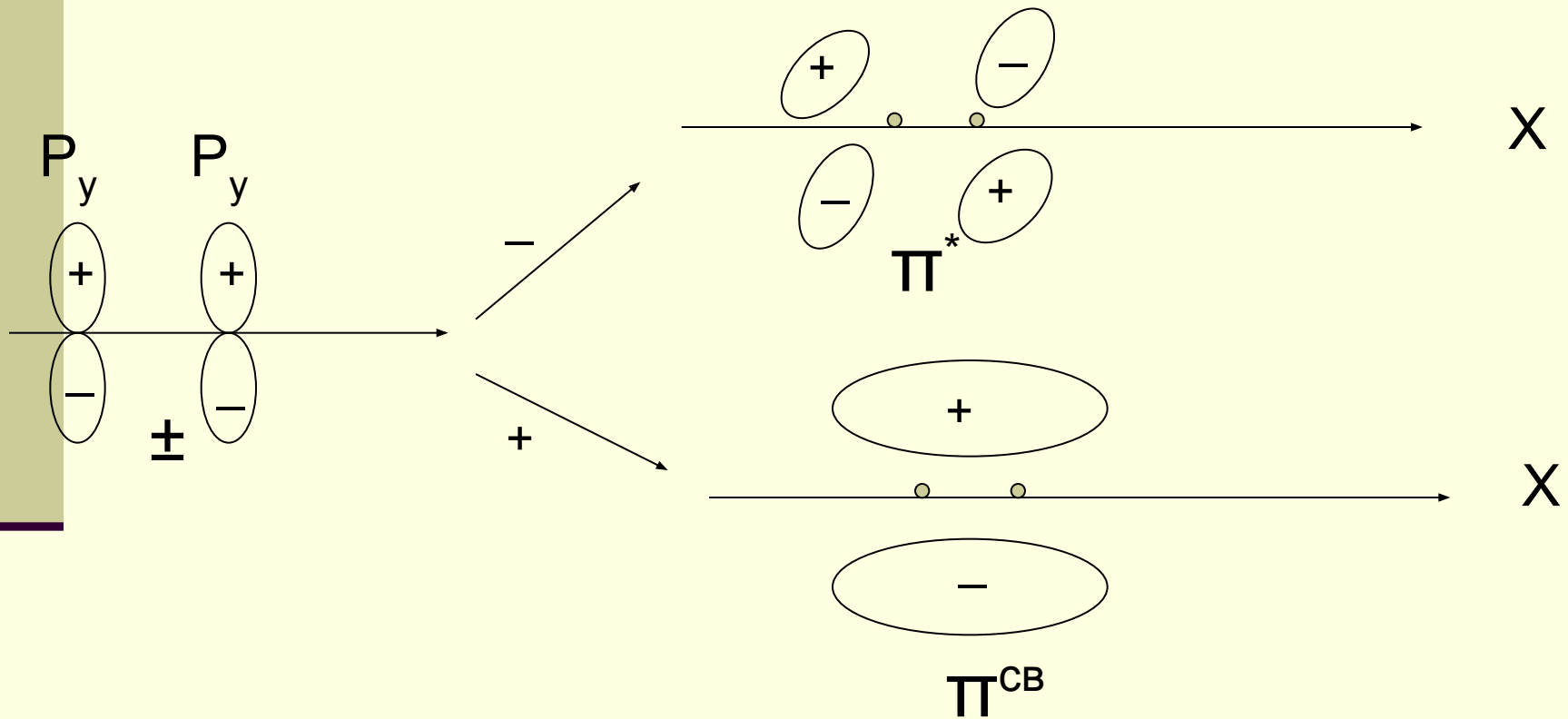
## Сложение атомных $\psi_s$ функций



# Сложение и вычитание атомных $\psi_{p_x}$ функций

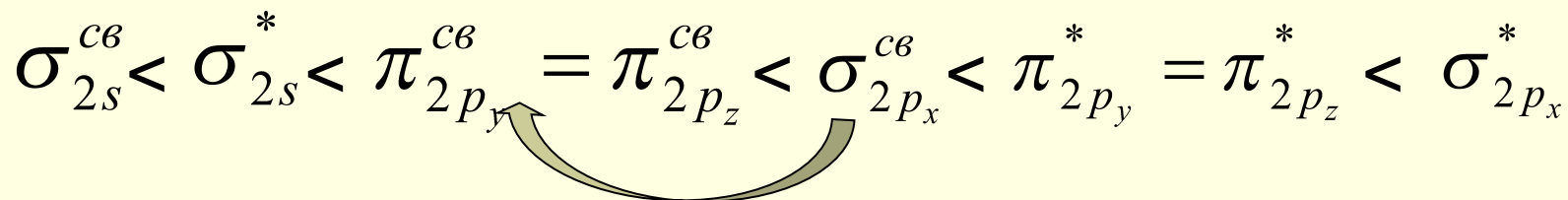


# Сложение и вычитание атомных $\psi_{p_y}$ ( $\psi_{p_z}$ ) функций



# Энергия МО

- Для молекул, образ. атомами начала II периода (до N):



- Для молекул, образ. атомами конца II периода (после N):

# Выводы из диаграммы МО

---

- Кратность связи:
- Магнитные свойства



# Ионная связь

---

Ионная связь образуется за счёт электростат. взаимодействия между ионами противоположного знака.

Ионная связь **ненаправлена** и **ненасыщаема**.

**Ненаправленность** связана с тем, что электростат. поле иона обладает **сферической симметрией**.

# Ионная связь

---

**Ненасыщаемость** – это способность иона данного знака притягивать к себе переменное кол-во ионов противоположного знака.

# Металлическая связь

---

## Характерные св-ва металлов:

- электро- и теплопроводность
- пластичность
- металлический блеск
- КОВКОСТЬ

# Металлическая связь

---

- образование кристаллических структур с высокими координационными числами (8-12)

# Водородная связь

---

H-связь возникает в молекулах или между молекулами, в состав которых входит **атом водорода** и наиболее электроотрицательный атом (F,O,N).

# Водородная связь

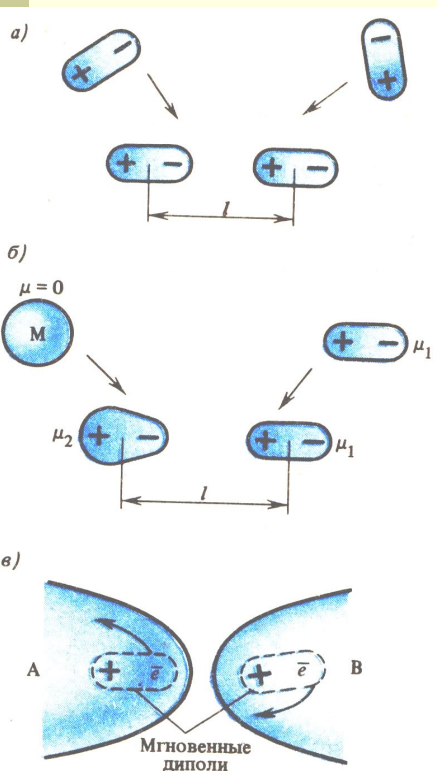
---

## Внутримолекулярная Н-связь

возникает между функциональными группами внутри одной молекулы.

# Силы Ван-дер-Ваальса

Связи между молекулами, обусловленные электростатическим взаимодействием, называются силами Ван-дер-Ваальса.



т 3 типа сил.

**Ориентационное** вз-ие возникает между молекулами (а).

**Индукционное** вз-ие возникает между неполярными молекулами.

**Дисперсионное** вз-ие возникает между молекулами.

## Уравнение состояния реального газа

---

Учитывая силы межмолекулярного взаимодействия, Ван-дер-Ваальс предложил ввести поправочные коэффициенты в уравнение Менделеева-Клапейрона:

$$(p + a/V^2) \cdot (V - b) = RT,$$

где:

$a/V^2$  – поправочный коэффициент, учитывающий силы Ван-дер-Ваальса или внутреннее давление газа;

$b$  – собственный объём молекул газа.