

Лекция 7

Зависимость свойств веществ от их строения. Химическая связь. Основные виды химической связи.

Рассматриваемые вопросы:

1. Уровни организации вещества. Иерархия структуры.
2. Вещества молекулярного и немолекулярного строения.
3. Разнообразии химических структур.
4. Причины возникновения химической связи.
5. Ковалентная связь: механизмы образования, способы перекрывания атомных орбиталей, полярность, дипольный момент молекулы.
6. Ионная связь.
7. Сравнение ковалентной полярной и ионной связи.
8. Сравнение свойств веществ с ковалентными полярными и ионными связями.
9. Металлическая связь.
10. Межмолекулярные взаимодействия.

Вещество (более 70 млн.)

Что надо знать о каждом

- веществе
1. **Формула** (из чего состоит)
 2. **Структура** (как устроено)
 3. **Физические** свойства
 4. **Химические** свойства
 5. **Способы получения**
(лаб. и промышл.)
 6. **Практическое применение**

Иерархия структуры вещества

Все вещества
состоят из
атомов, но не
все – из
молекул.

Атом

У всех веществ

Молекула

Только у веществ
молекулярного
строения

Наноуровень

У всех веществ

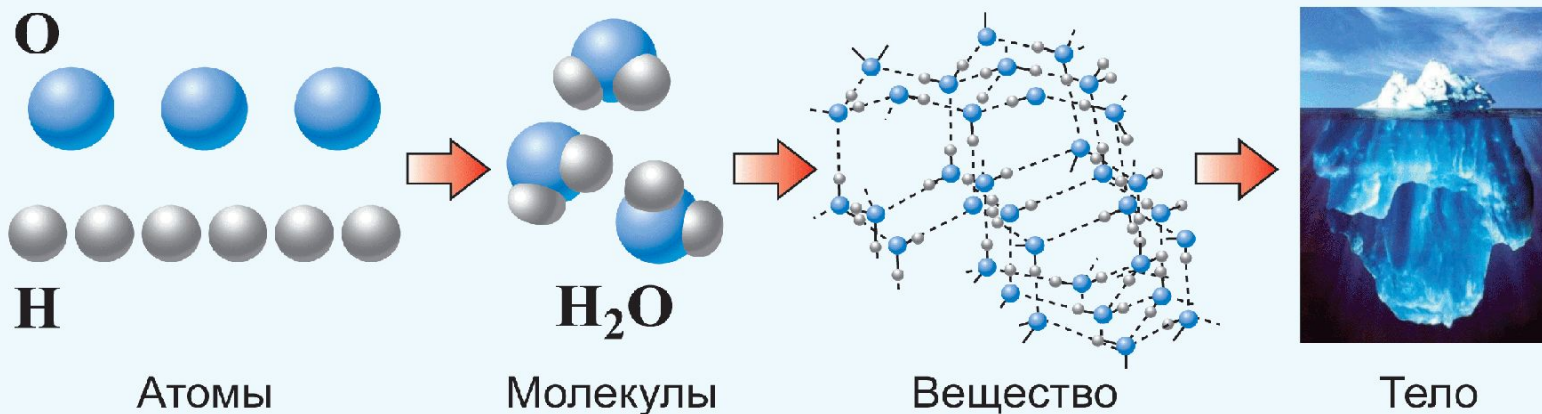
Объемный (макро)
уровень

У всех веществ

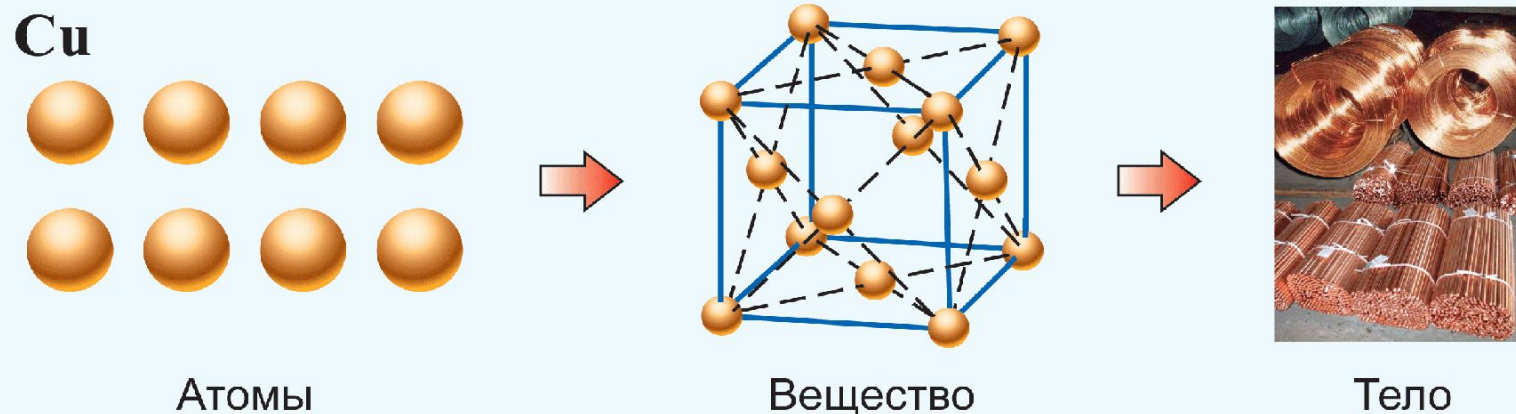
Все 4 уровня – объект изучения химии

Вещества молекулярного и немолекулярного строения

МОЛЕКУЛЯРНОЕ СТРОЕНИЕ



НЕМОЛЕКУЛЯРНОЕ СТРОЕНИЕ



Вещества

Молекулярного
строения

Состоят из молекул

H_2O , CO_2 , HNO_3 , C_{60} ,
почти все орг. вещества

Формула отражает
состав молекулы

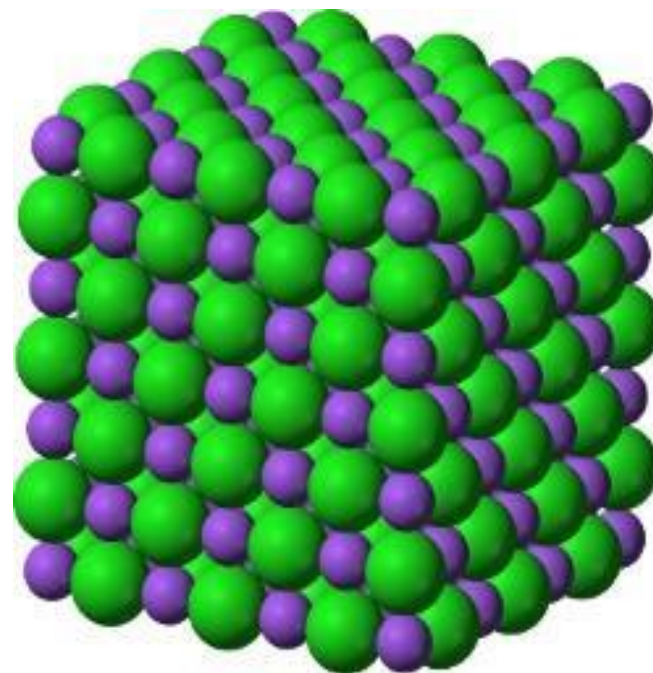
Немолекулярного
строения

Состоят из атомов
или ионов

Алмаз, графит, SiO_2 ,
металлы, соли

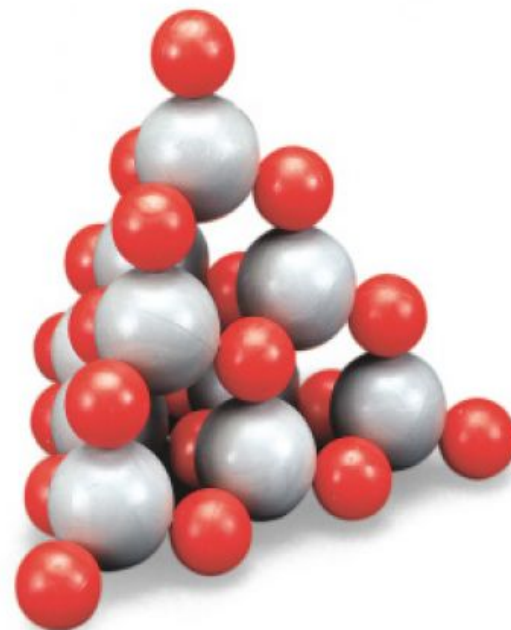
Формула отражает состав
формульной единицы

Вещества



Хлорид натрия
Формульная единица NaCl

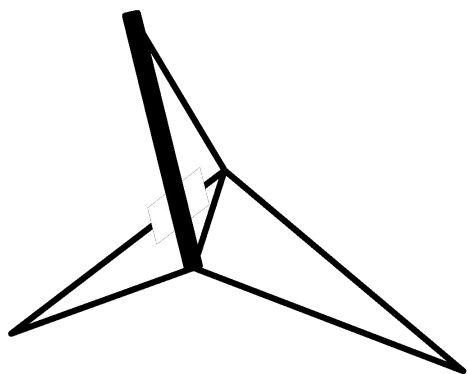
Вещества



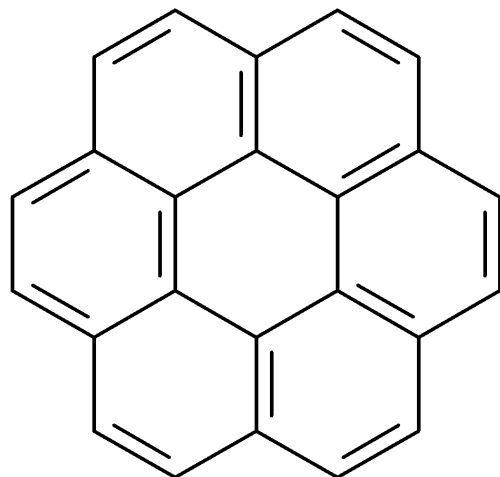
Диоксид кремния
Формульная единица SiO₂

Минералогический музей имени Ферсмана находится возле входа в Нескучный сад.
Адрес: Москва, Ленинский проспект, дом 18, корпус 2.

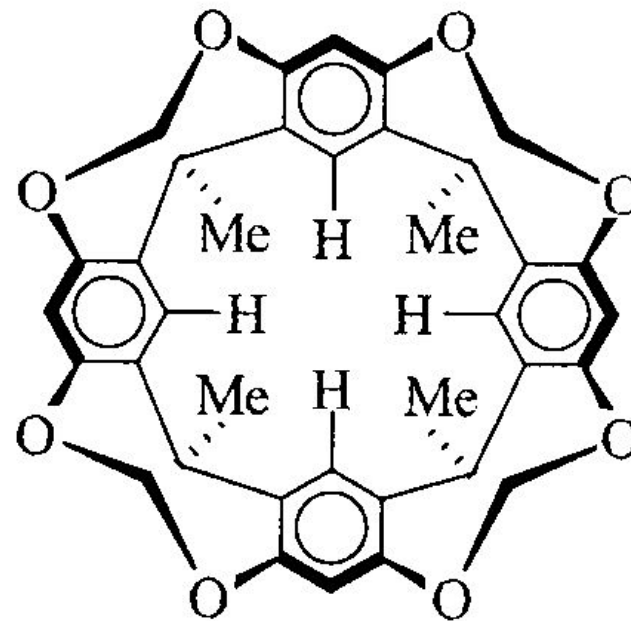
Разнообразие химических структур.



пропеллан
 C_5H_6

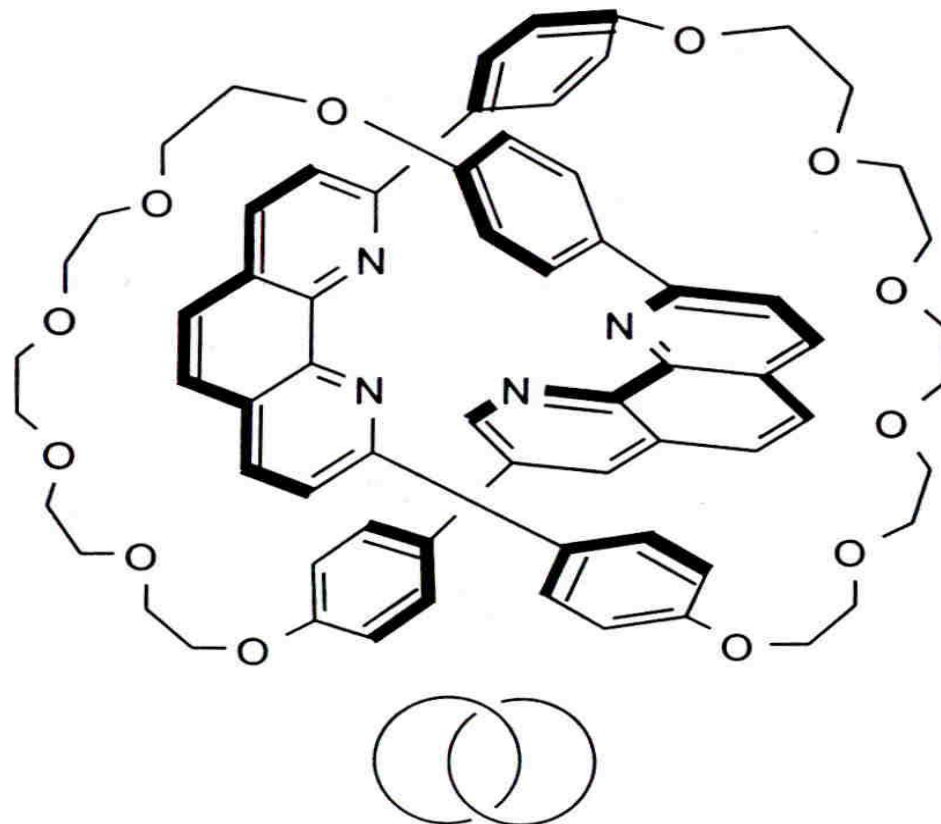


коронен
(супербензол)
 $C_{24}H_{12}$



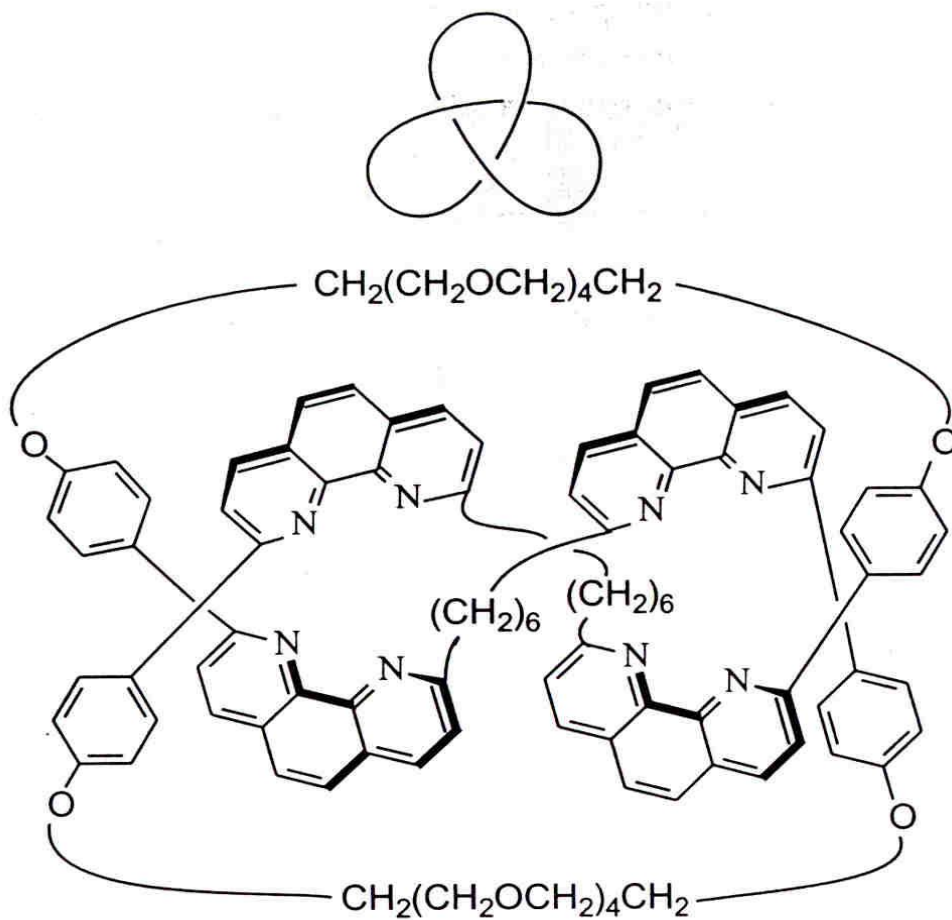
кавитанд
 $C_{36}H_{32}O_8$

Разнообразие химических структур.



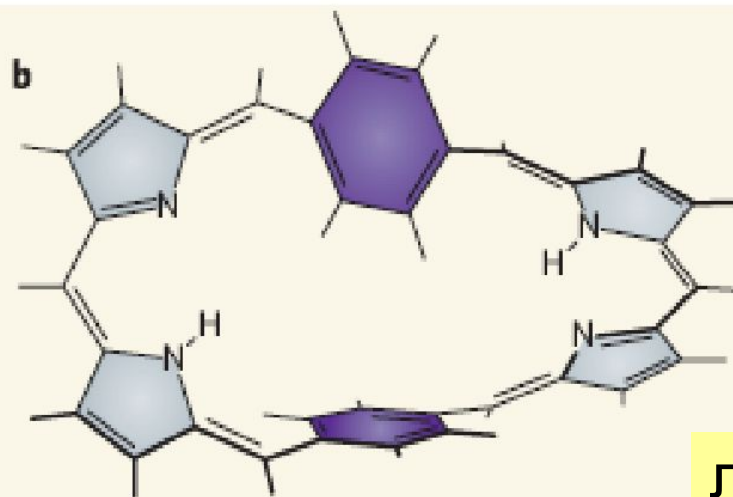
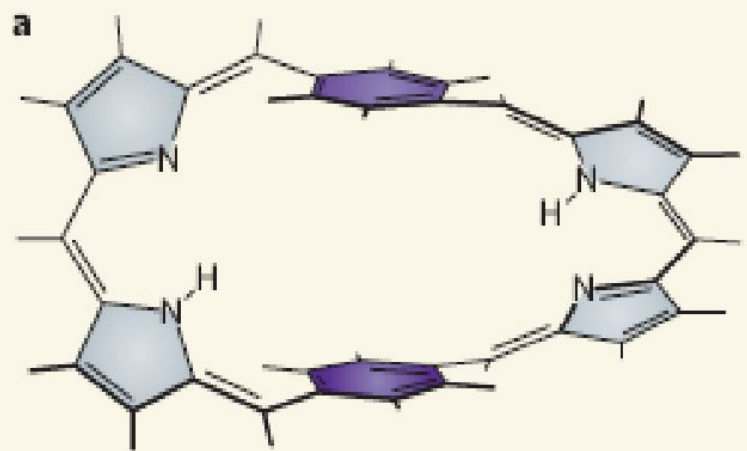
катенан

Разнообразие химических структур.

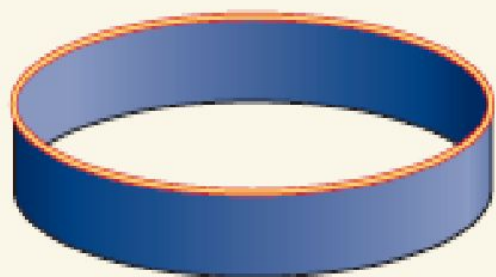


катенан

Разнообразие химических структур.

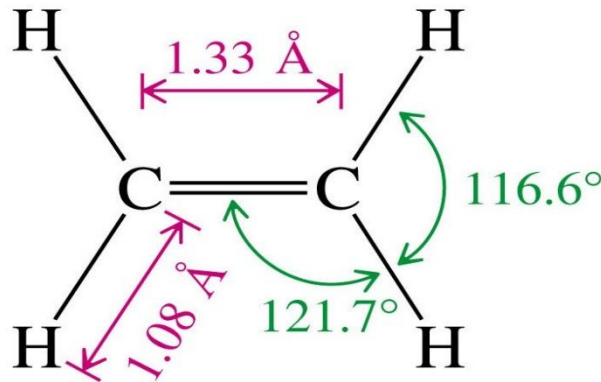


лист Мебиуса



Молекула

- **Молекула** – устойчивая система, состоящая из нескольких атомных ядер и электронов.
- Атомы объединяются в молекулы путем образования **химических связей**.
- **Главная движущая сила образования молекулы из атомов – уменьшение общей энергии.**
- Молекулы имеют **геометрическую форму**, характеризующуюся расстояниями между ядрами и углами между связями.



**Главная движущая сила
образования химической связи
между частицами вещества –
уменьшение общей энергии
системы.**

Основные типы химической связи:

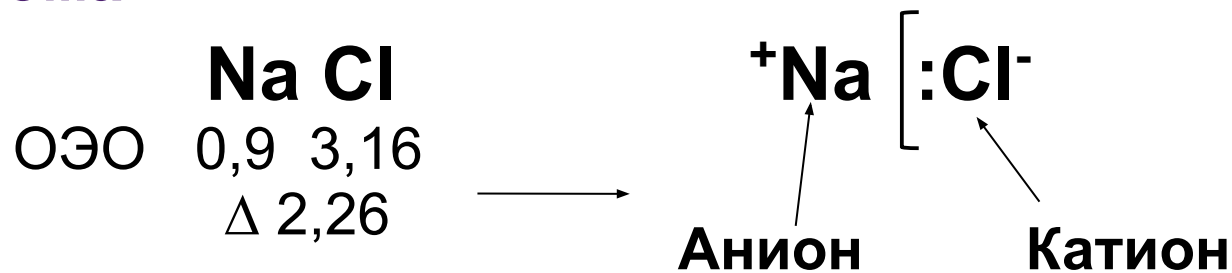
- 1.Ионная**
- 2.Ковалентная**
- 3.Металлическая**

Основные межмолекулярные взаимодействия:

- 1.Водородные связи**
- 2.Ван-дер-Ваальсовы связи**

Ионная связь

Если связь образуют атомы с резко различающимися значениями электроотрицательности ($\Delta\text{ОЭО} \geq 1,7$), общая электронная пара практически полностью смещается в сторону более электроотрицательного атома.



Химическая связь между ионами, возникающая за счет их электростатического притяжения, называется ионной.

Ионная связь

Кулоновский потенциал сферически симметричен, направлен во все стороны, поэтому ионная связь ненаправлена.

Кулоновский потенциал не имеет ограничений на количество присоединяемых противоположно заряженных ионов — следовательно, ионная связь ненасыщаема.

Ионная связь

Соединения с ионным типом связи твердые, хорошо растворимые в полярных растворителях, имеют высокие температуры плавления и кипения.

Ионная связь

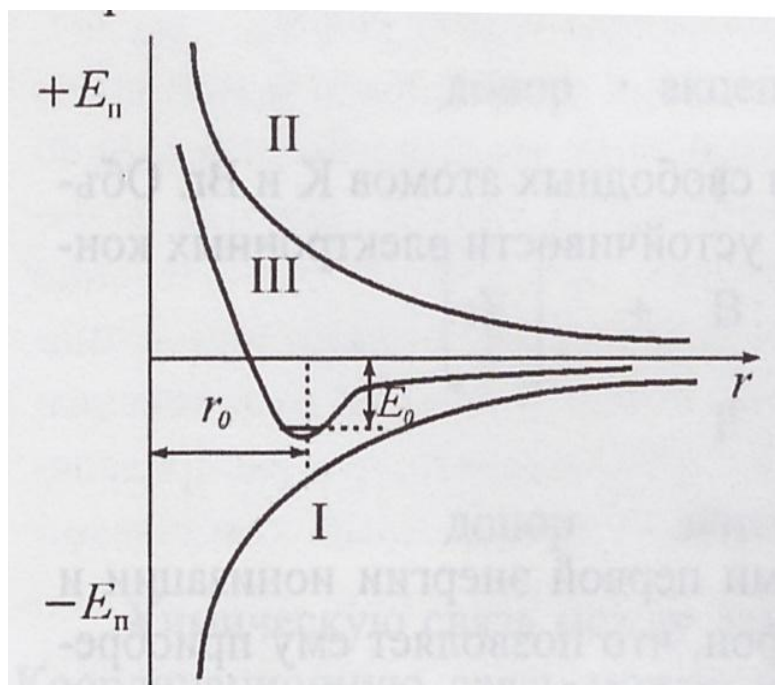


Рис. 5.1. Кривые потенциальной энергии образования ионной пары K^+A^-

Кривая I: притяжение ионов, если бы они представляли собой точечные заряды.

Кривая II: отталкивание ядер в случае сильного сближения ионов.

Кривая III: минимум энергии E_0 на кривой соответствует равновесному состоянию ионной пары, при котором силы притяжения электронов к ядрам скомпенсированы силами отталкивания ядер между собой на расстоянии r_0 ,

Химическая связь в молекулах

Химическую связь в молекулах можно описать с позиций двух методов:

- метода валентных связей, МВС**
- метода молекулярных орбиталей, ММО**

Метод валентных связей Теория Гейтлера-Лондона

Основные положения метода ВС:

- 1. Связь образуют два электрона с противоположными спинами, при этом происходит перекрывание волновых функций и увеличивается электронная плотность между ядрами.**
- 2. Связь локализована в направлении максимального перекрывания Ψ -функций электронов. Чем сильнее перекрывание, тем прочнее связь.**

Образование молекулы водорода:

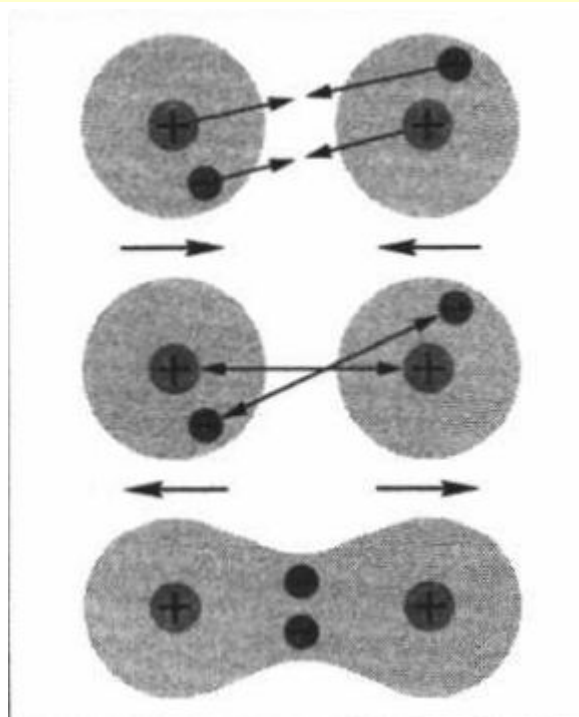
Изменение энергии в молекуле водорода



Изменение средней потенциальной энергии взаимодействия двух сближающихся атомов водорода

$d_{св}$ — длина
связи;
 $E_{св}$ — энергия
связи.

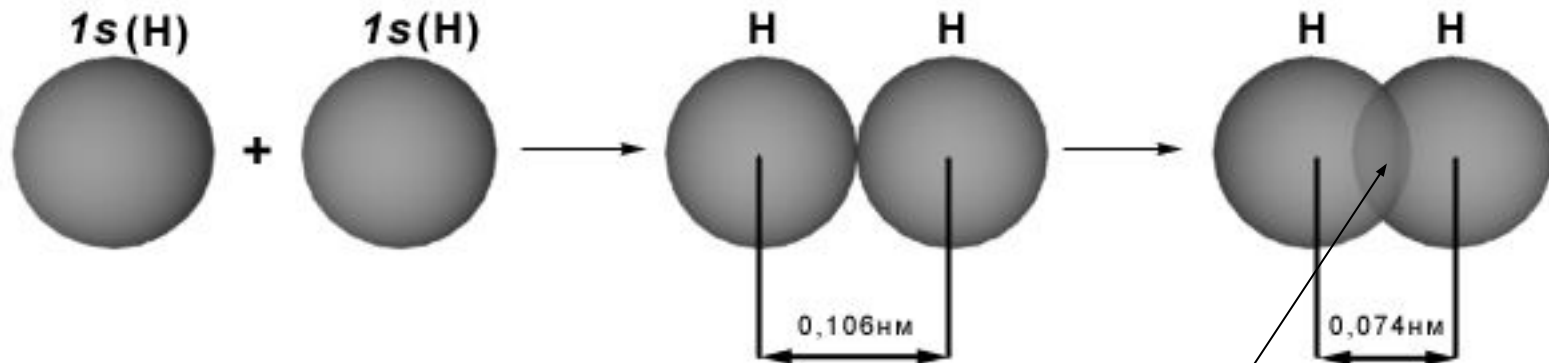
Образование молекулы водорода:



При сближении двух атомов возникают силы притяжения и отталкивания:

- 1) притяжения: «электрон-ядро» соседних атомов;
- 2) отталкивания: «ядро-ядро», «электрон-электрон» соседних атомов.

Образование молекулы водорода:



**Молекулярное
двухэлектронное облако,
обладающее максимальной
электронной плотностью.**

Химическая связь, осуществляемая общими электронными парами, называется ковалентной.

Общая электронная пара может образоваться двумя способами:

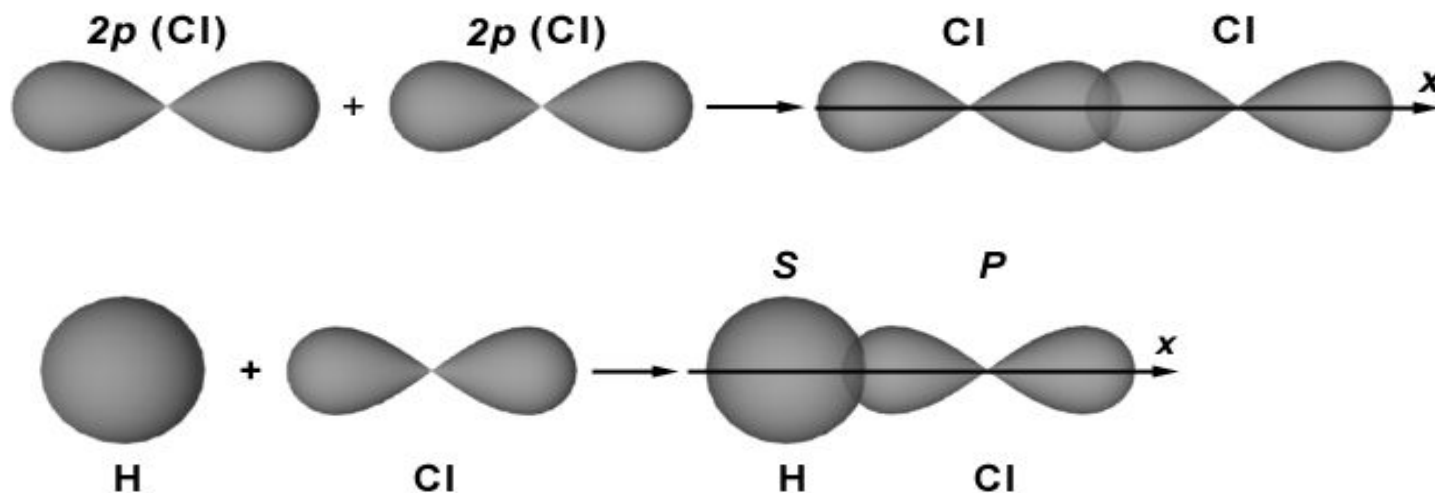
1) в результате объединения двух непарных электронов:

2) в результате обобществления неподеленной электронной пары одного атома (донора) и пустой орбитали другого (акцептора).

Два механизма образования ковалентной связи: обменный и донорно-акцепторный.

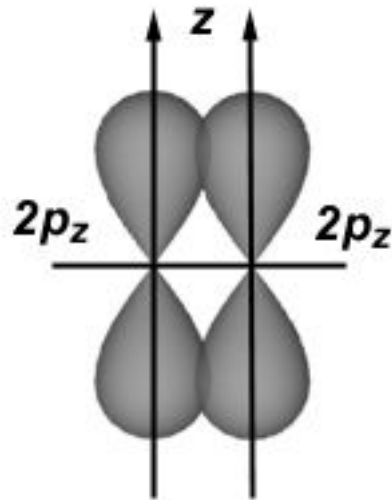
Способы перекрывания атомных орбиталей при образовании ковалентной связи

Если образование максимальной электронной плотности связи происходит по линии, соединяющей центры атомов (ядра), то такое перекрывание называется σ -связью:



Способы перекрывания атомных орбиталей при образовании ковалентной связи

Если образование максимальной электронной плотности связи происходит по обе стороны линии, соединяющей центры атомов (ядра), то такое перекрывание называется π -связью:



Полярная и неполярная ковалентная связь

1) Если связь образуют одинаковые атомы, двухэлектронное облако связи распределяется в пространстве симметрично между их ядрами — такая связь называется неполярной: H_2 , Cl_2 , N_2 .

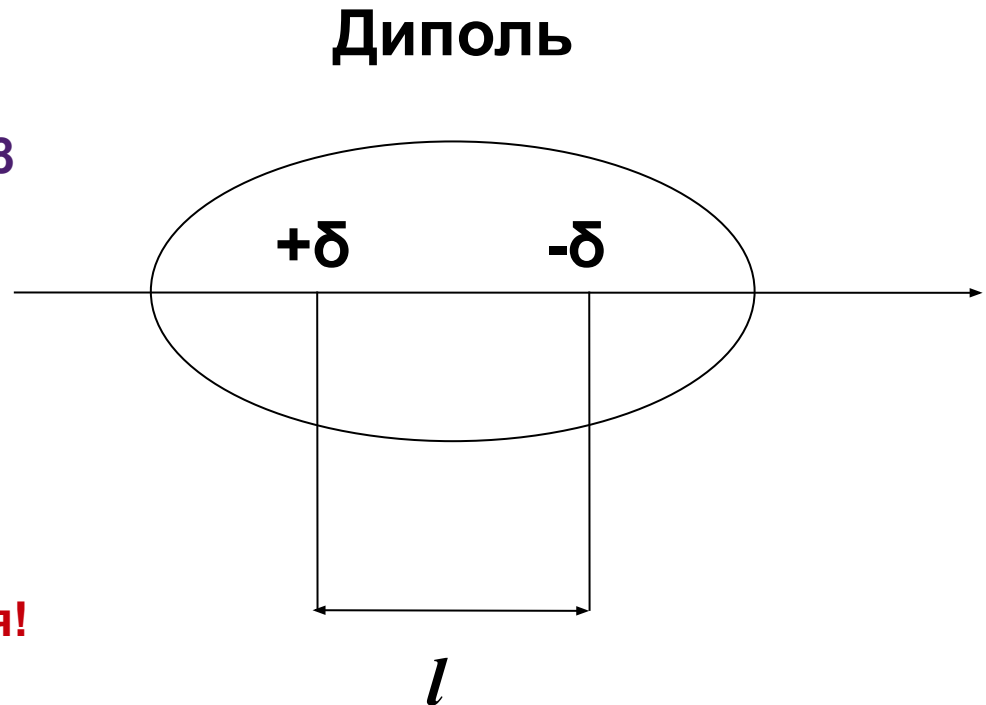
2) если связь образуют разные атомы, облако связи смещено в сторону более электроотрицательного атома — такая связь называется полярной: HCl , NH_3 , CO_2 .

Полярная ковалентная связь Дипольный момент связи



Где $\pm\delta$ — эффективный заряд атома, доля абсолютного заряда электрона.

Не путать со степенью окисления!



Произведение эффективного заряда на длину диполя называется электрическим моментом диполя: $\mu = \delta l$

Это векторная величина: направлен от положительного заряда к отрицательному.

Полярная ковалентная связь Дипольный момент молекулы

Дипольный момент молекулы равен сумме векторов дипольных моментов связей с учетом неподеленных электронных пар.

Единицей измерения дипольного момента является Дебай: $1D = 3,3 \cdot 10^{-30}$ Кл·м.

Полярная ковалентная связь Дипольный момент молекулы

В произведении $\mu = \delta l$ обе величины разнонаправлены.
Поэтому надо внимательно отслеживать причину
изменения μ .

Например,

CsF	CsCl	CsI
24	31	37

δ «проиграл» *l*

HF	HCl	HBr	HI
5,73	3,24	2,97	1,14

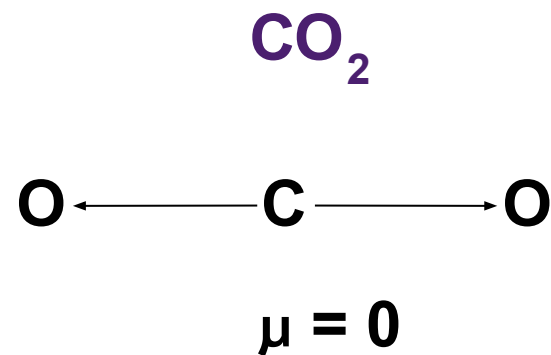
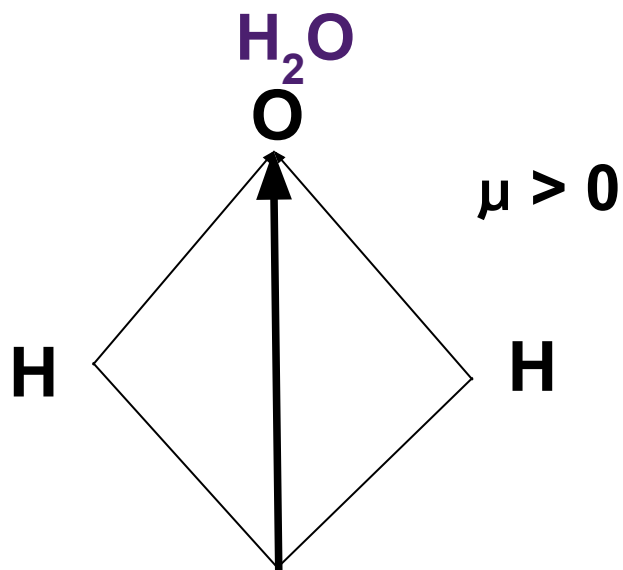
наоборот

Полярная ковалентная связь Дипольный момент молекулы

Может ли молекула быть неполярной, если все связи в ней полярные?

Молекулы типа АВ всегда полярны.

Молекулы типа АВ₂ могут быть и полярными, и неполярными...



Полярная ковалентная связь

Молекулы, состоящие из трех атомов и более
(AB_2 , AB_3 , AB_4 , AB_5 , AB_6),
могут быть неполярными, если они симметричны.

На что влияет наличие дипольного момента молекулы?

Имеются межмолекулярные взаимодействия, а, следовательно, увеличиваются плотность вещества, t° плавления и t° кипения.

Сравнение ионной и ковалентной полярной связей

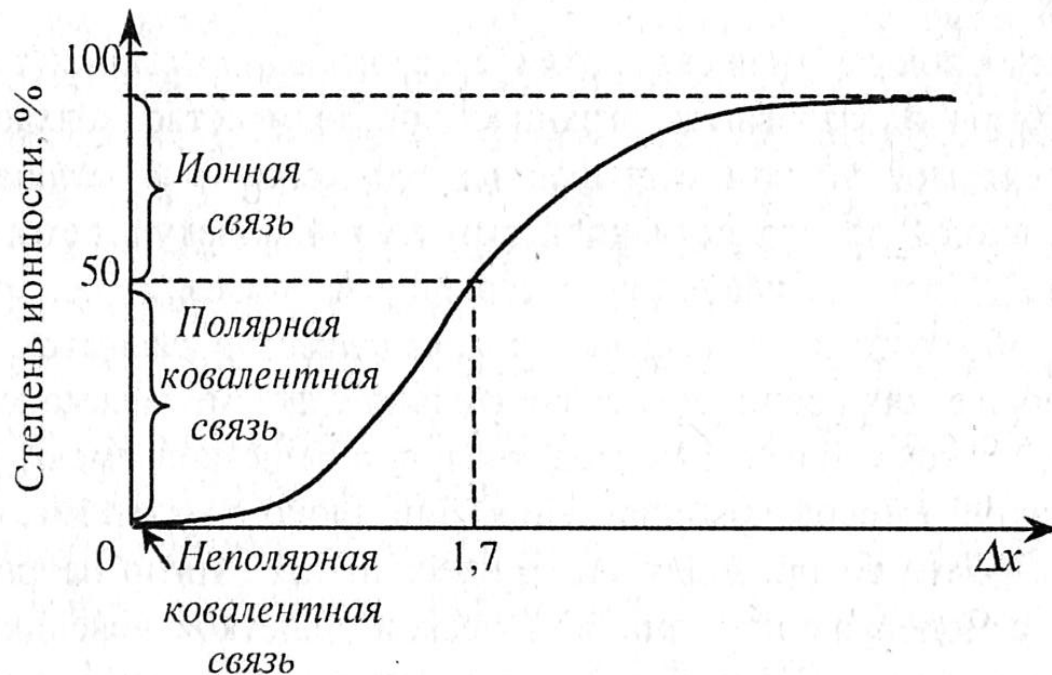


Рис. 5.15. Зависимость степени ионности связи

от разности электроотрицательностей взаимодействующих атомов.

Общее: образование общей электронной пары.

Отличие: степень смещения общей электронной пары (поляризация связи).

Ионную связь следует рассматривать как крайний случай ковалентной полярной связи.

Сравнение характеристик ионной и ковалентной полярной связей

Ковалентная связь: насыщена и направлена

Насыщаемость (максимальная валентность) — определяется способностью атома образовывать ограниченное количество связей (с учетом обоих механизмов образования).

Направление связи задает валентный угол, зависящий от типа гибридизации орбиталей центрального атома.

Ионная связь: ненасыщена и ненаправлена.

Сравнение характеристик ионной и ковалентной полярной связей

Направленность связи задают валентные углы. Валентные углы определяют экспериментально или предсказывают на основе теории гибридизации атомных орбиталей Л. Поллинга либо теории Гиллеспи.

Подробно об этом на семинарах.

Сравнение свойств веществ с ионными и ковалентными связями

Ковалентные связи

Атомные кристаллы

Между атомами
в самом кристалле

Высокая твердость
высокие $t^{\circ}_{\text{плав}}$, $t^{\circ}_{\text{кип}}$
плохие тепло- и
электропроводность

Молекулярные кристаллы

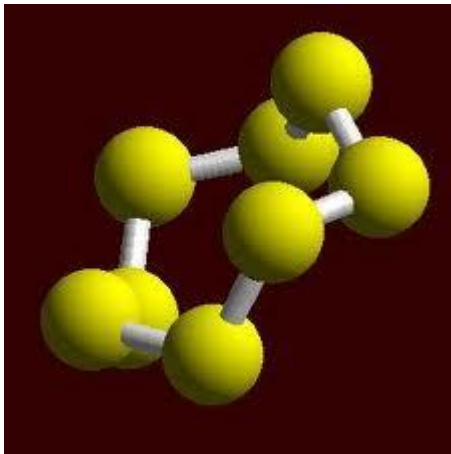
Между атомами
в молекуле

Умеренная мягкость
достаточно низкие
 $t^{\circ}_{\text{плав}}$, $t^{\circ}_{\text{кип}}$
плохие тепло- и
Электропроводность

Нерастворимы в воде

Сравнение свойств веществ с ионными и ковалентными связями

Молекулярный кристалл



Температура плавления $112,85\text{ }^{\circ}\text{C}$

Сравнение свойств веществ с ионными и ковалентными связями

Атомный ковалентный кристалл



Температура плавления $\approx 3700\text{ }^{\circ}\text{C}$

Сравнение свойств веществ с ионными и ковалентными связями

Ионные связи



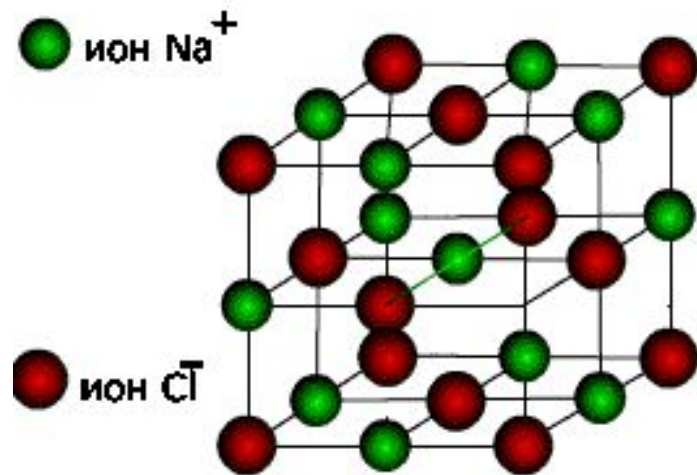
**между ионами
в кристалле**

**твердость и хрупкость
высокая температура плавления
плохие тепло- и электропроводность**

Растворимы в воде

Сравнение свойств веществ с ионными и ковалентными связями

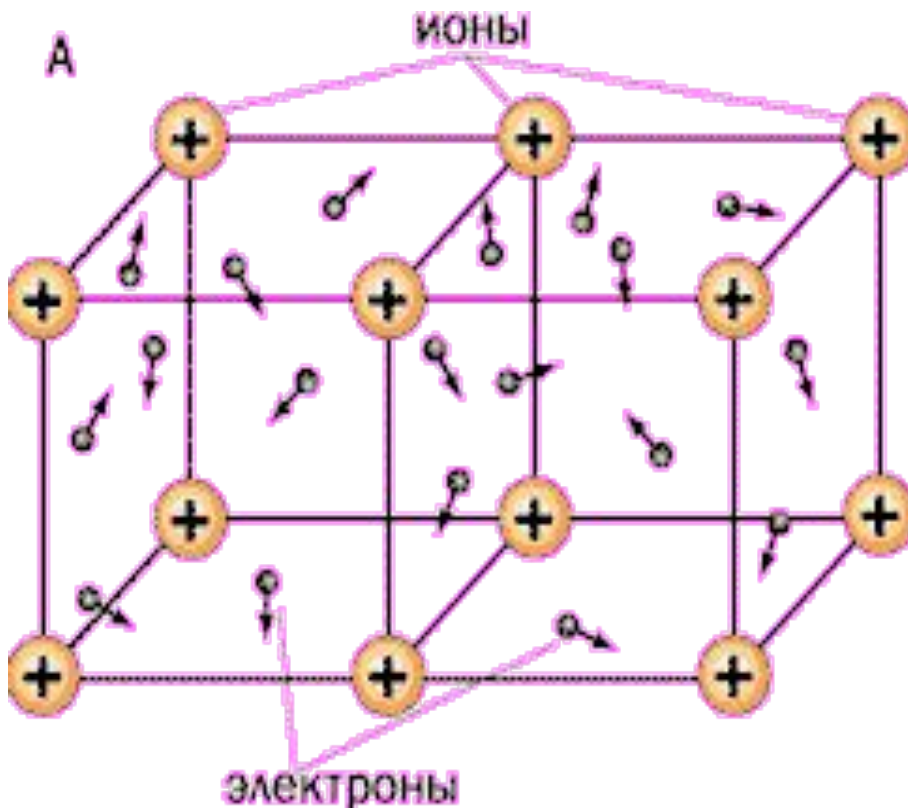
Ионный кристалл



Температура плавления $\approx 800\text{ }^\circ\text{C}$

Металлическая связь

Металлическая связь осуществляется электронами, принадлежащими всем атомам одновременно.



Электронная плотность делокализована - «электронный газ».

Характерный металлический блеск

Пластичность

Ковкость

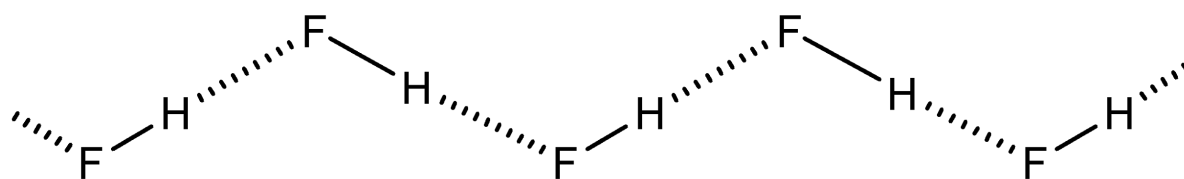
Высокие тепло- и электропроводность

Температуры плавления очень разные.

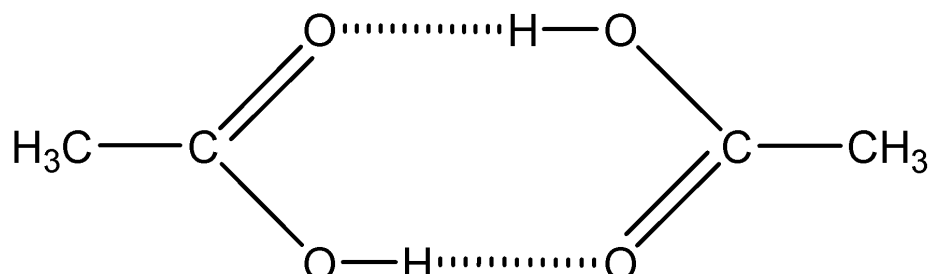
Межмолекулярные связи.

1. Водородная связь

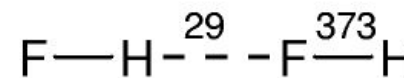
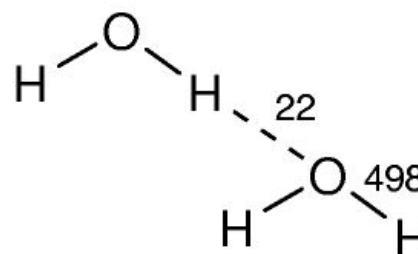
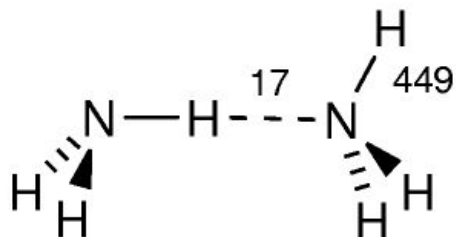
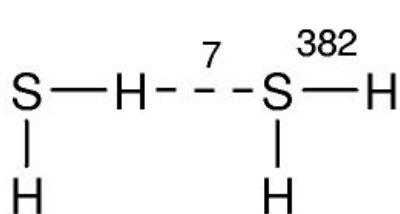
Притяжение между атомом водорода (+) одной молекулы и атомом F, O, N (–) другой молекулы



Полимер
(HF)_n



Димер
уксусной кислоты

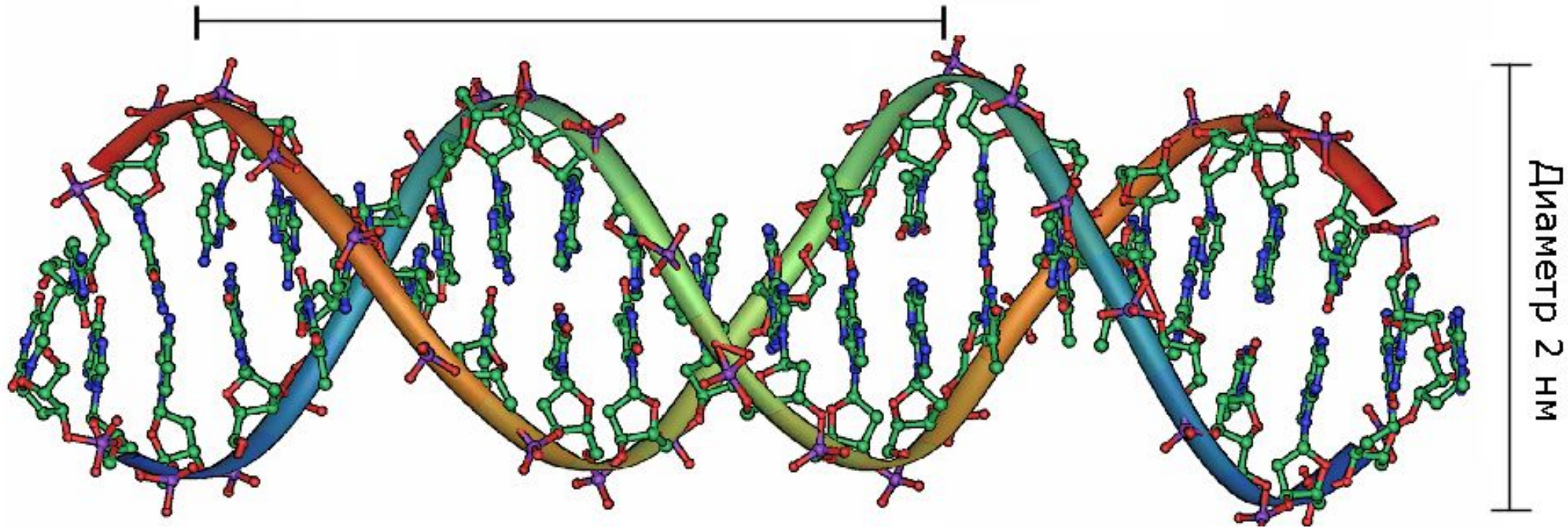


Водородные связи **слабы индивидуально,**
но **сильны коллективно**

Межмолекулярные связи.

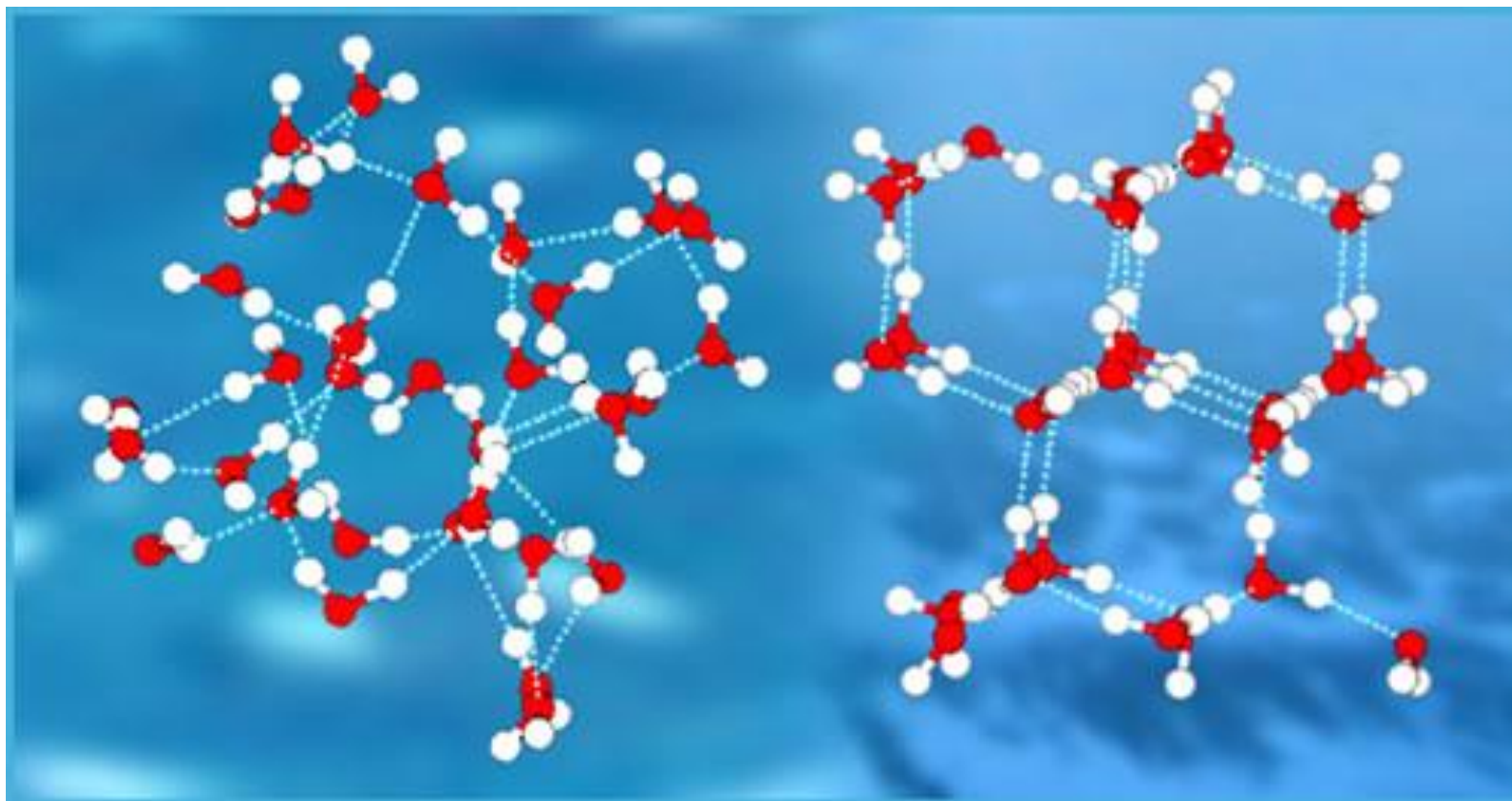
2. Водородная связь в ДНК

1 виток спирали - 10 пар оснований - 3,4 нм



Межмолекулярные связи.

3. Водородные связи в воде

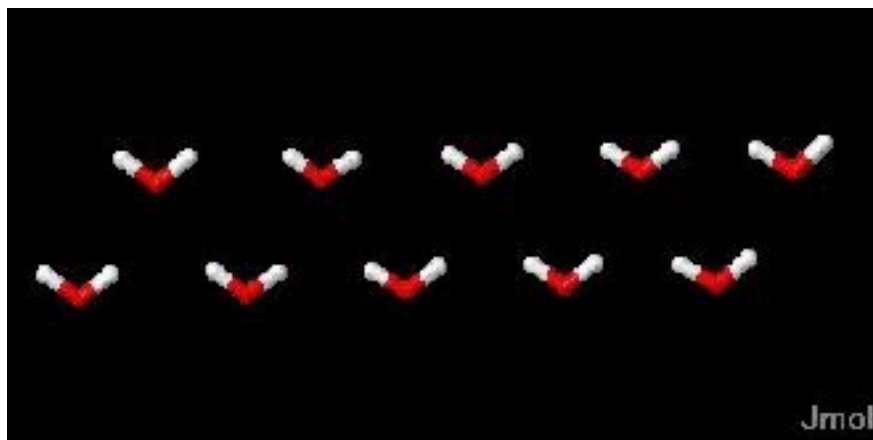


жидкая вода

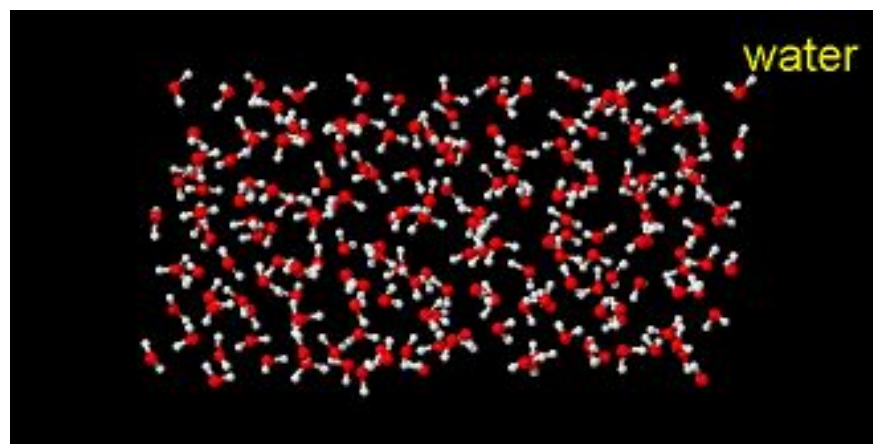
лед

Межмолекулярные связи.

4. Образование водородных связей в воде



жидкая вода



превращение
воды в лед

Межмолекулярные связи.

5. Ван-дер-ваальсовы связи

Даже если между молекулами нет водородных связей, молекулы **всегда притягиваются** друг к другу.

Притяжение между молекулярными диполями называют **ван-дер-ваальсовой связью**.

В-д-в притяжение тем сильнее, чем больше:

1) полярность; 2) размер молекул.

Пример: метан (CH_4) – газ, бензол (C_6H_6) – жидкость

Одна из самых слабых в-д-в связей – между молекулами H_2 (т. пл. -259°C , т. кип. -253°C).

Взаимодействие между молекулами во много раз слабее связи между атомами:

$$E_{\text{ков}}(\text{Cl}-\text{Cl}) = 244 \text{ кДж/моль}, E_{\text{вдв}}(\text{Cl}_2-\text{Cl}_2) = 25 \text{ кДж/моль}$$

но именно оно обеспечивает существование жидкого и твердого состояния вещества

**В лекции использованы материалы профессора
химического факультета МГУ им. Ломоносова
Еремина Вадима Владимировича**

**Спасибо
за внимание!**