

Тема: ***ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ***

- 1. Основные виды и характеристики химической связи.**
- 2. Ковалентная связь. Методы описания ковалентной связи: 1) метод валентных схем (ВС) и 2) метод молекулярных орбиталей (ММО).**
- 3. Ионная связь. Понятие степени ионности связи.**
- 4. Металлическая связь. Понятие о зонной теории.**
- 5. Химическая связь в комплексных соединениях (КС). Элементы теории кристаллического поля (ТКП).**
- 6. Межмолекулярные взаимодействия (силы Ван-дер-Ваальса): дисперсионные, индукционные и ориентационные.**
- 7. Водородная связь.**
- 8. Агрегатные состояния вещества. Типы кристаллических решеток.**

Химическая связь

- совокупность сил, удерживающих атомы в молекуле, радикале, ионе;**
- совокупность взаимодействий между электронами и ядрами атомов, приводящих к соединению этих атомов;**
- любое взаимодействие частиц, которое сопровождается выделением энергии ~ 21 кДж/моль.**

Основные типы химической связи:

- ковалентная** (H_2 , O_2 , Cl_2 , H_2O , NH_3 , SF_6 , др.)
- ионная** ($NaCl$, KOH , Na_2SO_4 , NH_4NO_3 , др.)
- металлическая** (Na , Mg , Al , Zn , Au , Ag , сплавы)
- водородная** (между молекулами H_2O , HF , спиртов, др.)

ПРИРОДА ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

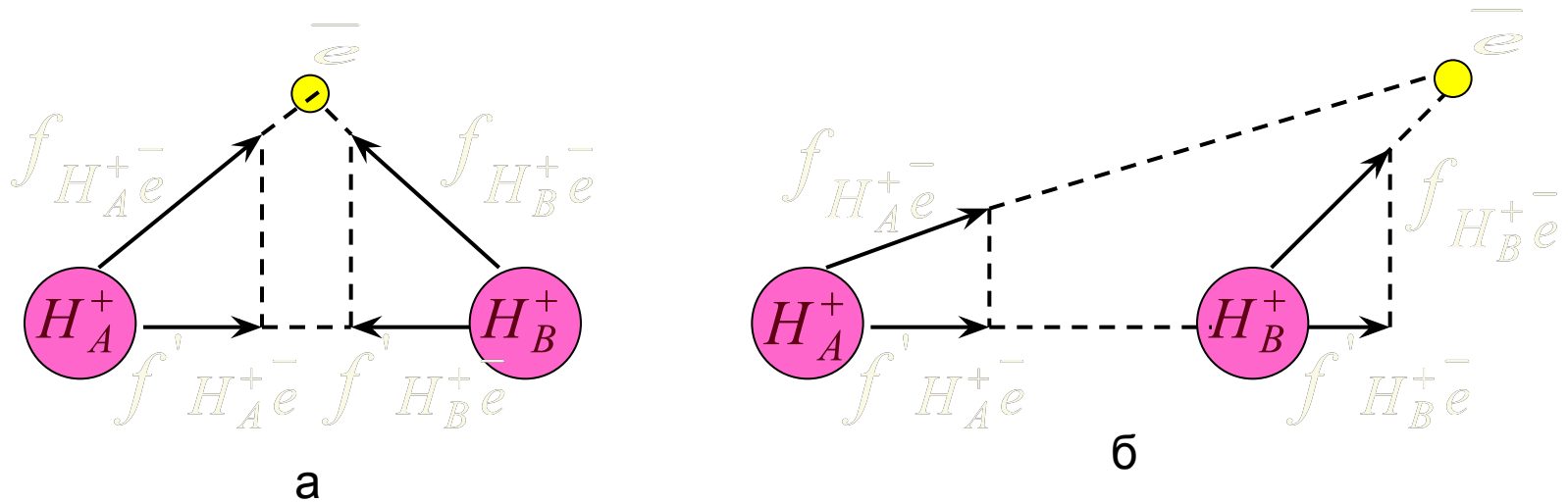
Образование молекулярного иона H_2^+

$l = 0,106 \text{ нм}; E_{\text{св}} = 255,7 \text{ кДж/моль}$

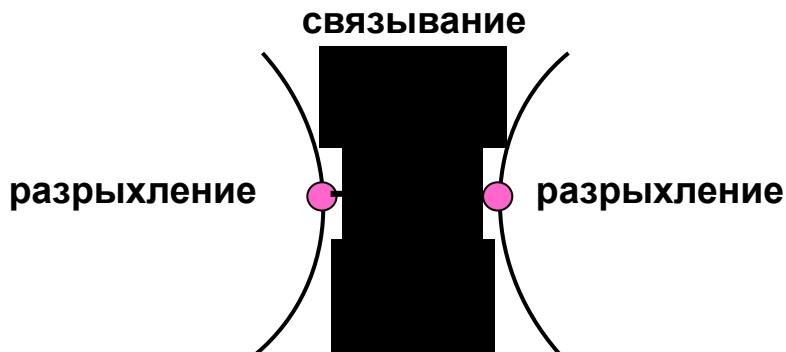
силы отталкивания



силы притяжения

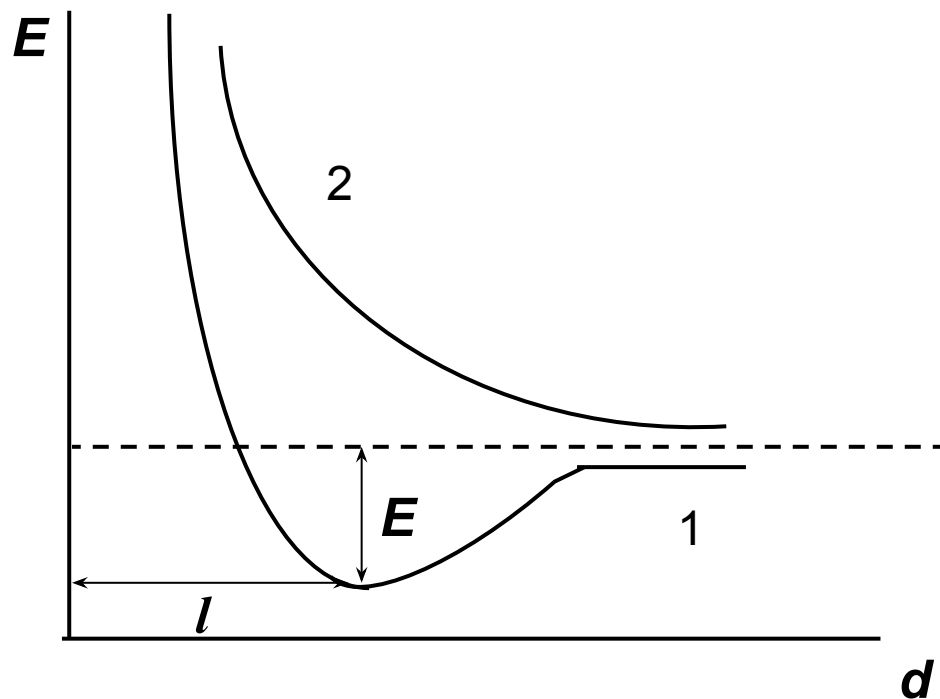


Природа химической связи



**Теория В. Гейтлера и Ф. Лондона
– метод ВС (1927 г.):**

- ✓ Условие образования химической связи – **уменьшение потенциальной энергии системы взаимодействующих атомов.**
- ✓ Чем больше выделяется энергии при образовании химической связи, тем связь прочнее.



1. КОВАЛЕНТНАЯ ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ

Ковалентная химическая связь – это связь, которая возникает между атомами за счет образования общих (одной или нескольких) электронных пар

Ковалентная связь а) локализована между двумя связанными атомами, **б) осуществляется** между атомами элементов, не сильно отличающихся по электроотрицательности, как правило, – между атомами элементов-неметаллов.

Теории химической связи:

□ **Метод валентных схем (ВС),**

В. Гейтлер и Ф. Лондон (1927 г.)

□ **Метод молекулярных орбиталей (МО, ЛКАО),**

Т. Гунд, Дж. Леннард-Джонс и Р. Малликен (1928-1932 гг.)

*** Оба метода правильно отражают природу взаимодействий между валентными электронами и ядрами связывающихся атомов

МЕТОД ВАЛЕНТНЫХ СХЕМ (метод ВС)

Основные положения:

1. Химическая связь – это результат перекрывания внешних атомных орбиталей (АО) путем обобщения двух электронов, находящихся на этих орбиталях. Химическая связь, осуществляемая за счёт общих электронных пар, называется ковалентной.
2. Ковалентная связь (К. с.) осуществляется двумя электронами с противоположно направленными спинами. Комбинация таких пар называется двухцентровой связью.
3. В образовании связей участвуют электроны только валентных орбиталей. При этом электронная структура каждого атома (кроме валентных орбиталей) сохраняется.
4. Ковалентная связь тем прочнее, чем в большей степени перекрываются электронные облака взаимодействующих атомов. Перекрывающиеся электронные облака должны обладать подходящей симметрией.

Основные положения метода ВС:

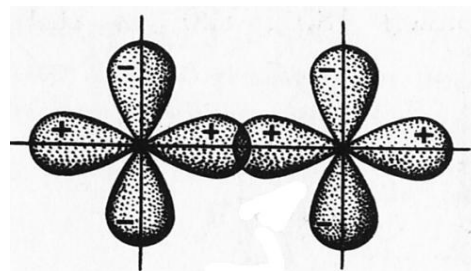
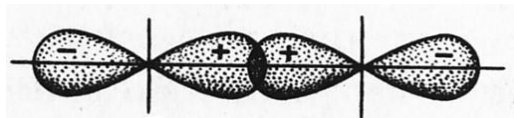
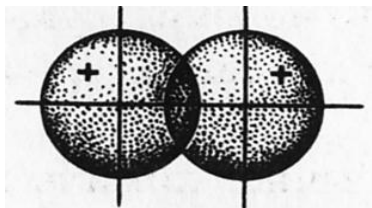
5. Образование общей электронной пары связи может происходить за счет:

- а)** обмена неспаренными электронами атомов (обменный механизм);
- б)** электронной пары одного атома (донора) и вакантной орбитали другого атома (акцептора) (донорно-акцепторный механизм).

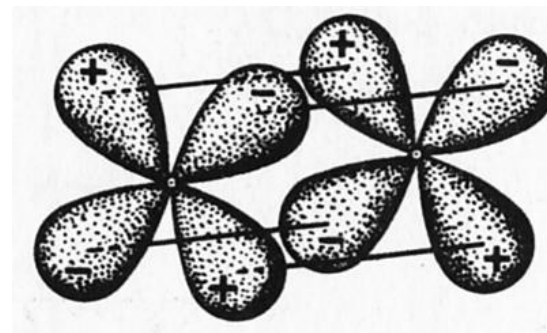
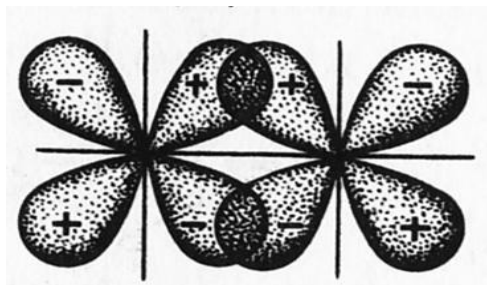
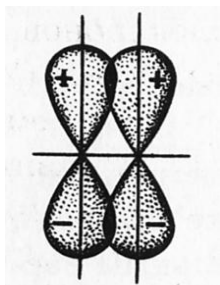
6. Ковалентная связь обладает свойствами насыщаемости и направленности.

Насыщаемость – способность атомов участвовать в образовании ограниченного числа ковалентных связей (примеры: атом H – одна связь; атомы B, C, N – четыре связи).

Направленность – перекрывание атомных орбиталей (АО) происходит в наиболее выгодном направлении (например: а) вдоль линии, проходящей через ядра атомов – σ -связь; б) по обе стороны от этой линии – π -связь). ***Взаимное направление нескольких ковалентных связей в многоатомной молекуле определяет её геометрию (пространственную конфигурацию, форму).



σ - СВЯЗЬ



π - СВЯЗЬ

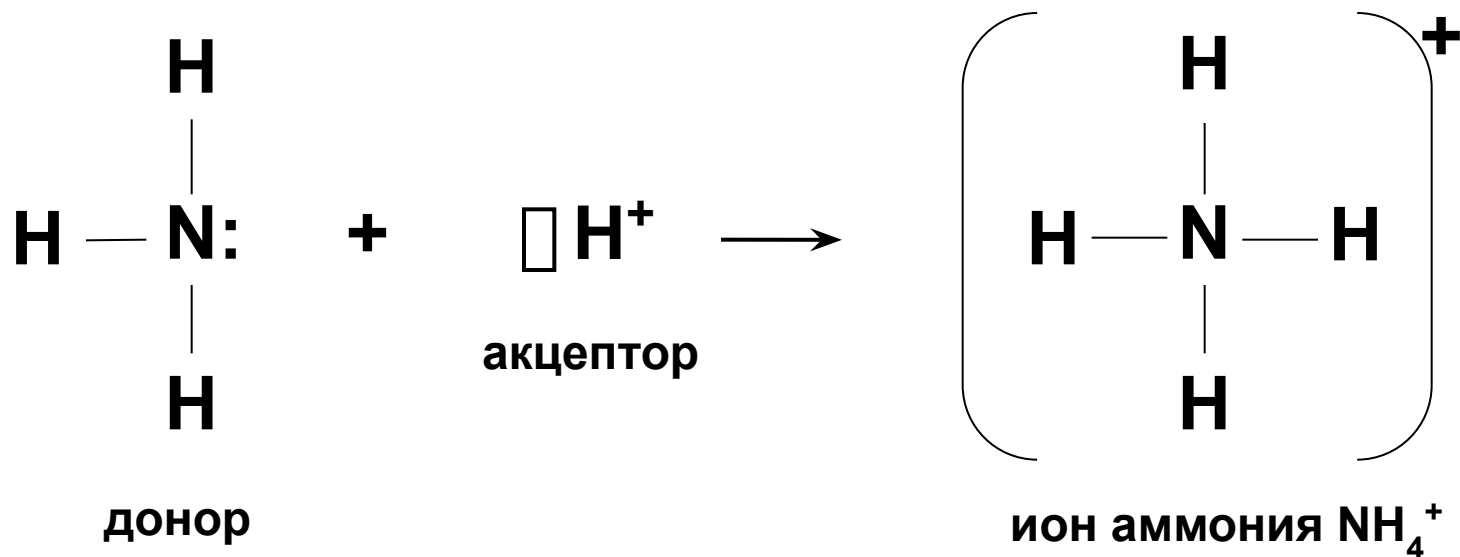
δ - СВЯЗЬ

МЕХАНИЗМЫ ОБРАЗОВАНИЯ КОВАЛЕНТНОЙ СВЯЗИ

Обменный механизм:



Донорно-акцепторный механизм:



ХАРАКТЕРИСТИКИ ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

*** Длина, энергия, кратность, полярность связи зависят от свойств химически связанных атомов и типа перекрывающихся АО

1. **Длина химической связи** (l , м, нм, Å) – межъядерное расстояние между химически связанными атомами

$$l_{A-B} = \frac{1}{2} (l_{A-A} + l_{B-B})$$

l_{A-B} зависит от величины атомных радиусов (r_A, r_B) и от кратности связи

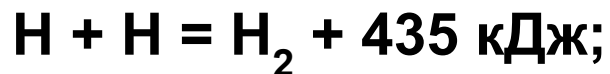
атом	$r_{\text{ат}}, \text{Å}$	связь	длина связи $l_{\text{H-Г}}, \text{Å}$
F	0,64	H-F	0,92
Cl	0,99	H-Cl	1,27
Br	1,14	H-Br	1,41
I	1,33	H-I	1,61
H	0,53	H-H	0,74

Å (Ангстрем) – единица атомной длины; $10 \text{ Å} = 1 \text{ нм}$

$$l_{\text{H-Г}} < r_{\text{H}} + r_{\text{Г}}$$

ХАРАКТЕРИСТИКИ ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

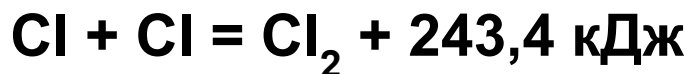
2. Энергия химической связи (E_{A-B} , кДж, ккал) – энергия, которая выделяется при образовании молекул из одиночных атомов



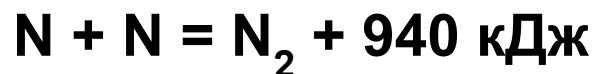
$$E_{\text{H-H}} = 435 \text{ кДж/моль}$$



$$E_{\text{H-Cl}} = 431,6 \text{ кДж/моль}$$



$$E_{\text{Cl-Cl}} = 243,4 \text{ кДж/моль}$$



$$E_{\text{N}\equiv\text{N}} = 940 \text{ кДж/моль}$$

*****Для двухатомных ковалентных молекул энергия связи ($E_{\text{св}}$) численно равна энергии диссоциации ($E_{\text{дис}}$) молекул на атомы, но имеет противоположный знак**

$$E_{\text{св}} (\text{F-F}) = 159 \text{ кДж/моль}$$

$$E_{\text{св}} (\text{N}\equiv\text{N}) = 940 \text{ кДж/моль}$$

$$E_{\text{дис}} (\text{F-F}) = -159 \text{ кДж/моль}$$

$$E_{\text{дис}} (\text{N}\equiv\text{N}) = -940 \text{ кДж/моль}$$

ХАРАКТЕРИСТИКИ ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Для многоатомных молекул типа AB_n средняя энергия связи E_{A-B} равна $1/n$ части полной энергии диссоциации соединения AB_n на атомы



$$E_{A-B} = \frac{E_{\text{дис}}}{n}$$

Пример: Энергия, поглощаемая в процессе:



– на 1 моль воды H_2O ;

в молекуле воды обе связи $O-H$ равноценны, поэтому средняя энергия связи $O-H$ равна:

$$E_{O-H} = \frac{E_{\text{дис}}}{2} = \frac{924}{2} = 462 \text{ кДж/моль}$$

ХАРАКТЕРИСТИКИ ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Энергия химической связи E_{A-B} зависит от длины l_{A-B} и от кратности связи

3. **Кратность химической связи** – число химических связей между двумя атомами; – число общих электронных пар между связанными атомами

связь	длина связи l , нм	энергия связи E , кДж/моль
C–C	0,154	348
C=C	0,135	635
C≡C	0,120	830

ХАРАКТЕРИСТИКИ ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

4. Полярность химической связи – зависит от электроотрицательности связанных атомов

Связь ковалентная неполярная – между атомами с одинаковой электроотрицательностью (H–H, Cl–Cl, O=O, N≡N, C–C, др.)

Связь ковалентная полярная – между атомами с разной электроотрицательностью (H–Cl, H–O, C–Cl, N–O, B–F, др.)

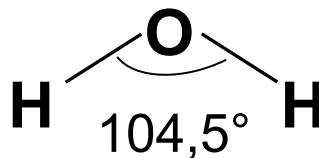
Дипольный момент (μ , D – Дебай) – количественная характеристика полярности связи:

$$\mu = \delta \cdot l = q \cdot d,$$

(δ – абсолютное значение заряда на атоме; l – длина диполя;

q – абсолютное значение заряда электрона; d – межъядерное расстояние)

5. Валентный угол – угол между воображаемыми линиями, проходящими через ядра химически связанных атомов



ГИБРИДИЗАЦИЯ АТОМНЫХ ОРБИТАЛЕЙ и пространственная конфигурация ковалентных молекул

*Подходы к рассмотрению геометрии (пространственной конфигурации)
ковалентных молекул:*

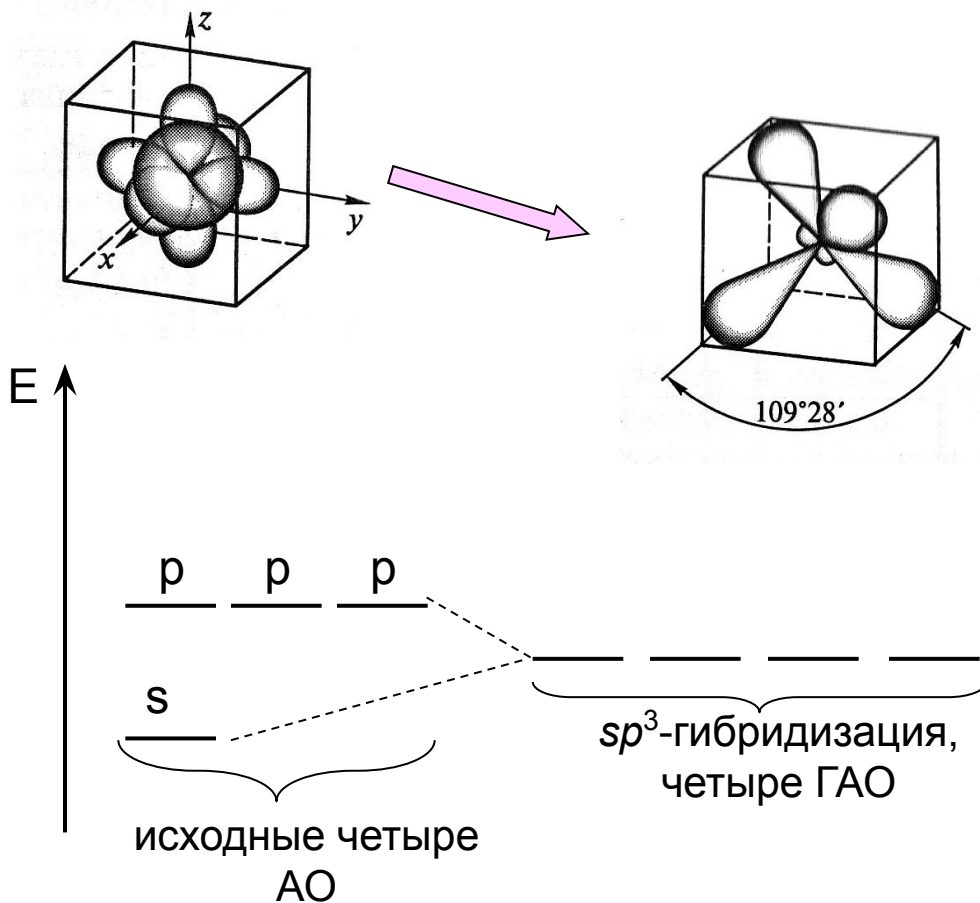
- 1. В образовании молекулы могут участвовать «чистые» (негибридизованные) атомные орбитали (АО) центрального атома (ц. а.)**
- 2. В образовании молекулы могут участвовать «гибридизованные» атомные орбитали (ГАО) центрального атома (ц. а.)**

Автор концепции ГАО – Л. Полинг, американский ученый, физик, математик

Суть концепции ГАО

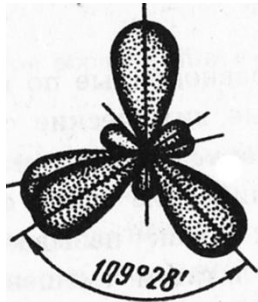
При рассмотрении образования химической связи в многоатомных молекулах несколько различных АО ц. а., не сильно различающихся по симметрии (форме) и энергии, заменить тем же число одинаковых по симметрии и энергии ГАО

ГИБРИДИЗАЦИЯ АТОМНЫХ ОРБИТАЛЕЙ и пространственная конфигурация ковалентных молекул



Геометрия ковалентных молекул определяется пространственным расположением ГАО со связывающими (поделенными, п.п.) и несвязывающими (неподеленными, н.п.) электронными парами

ВИДЫ ГИБРИДИЗАЦИИ АТОМНЫХ ОРБИТАЛЕЙ

Тип гибри- дизации	Число ГАО	Число поделенных электронных пар (п.п.)	Конфигу- рация молекул	Угол между связями	Расположение ГАО в пространстве
sp	2	2	линейная	180°	
sp^2	3	3	плоский треуголь- ник	120°	
sp^3	4	4	тетраэдр	$109^\circ 28'$	

ВИДЫ ГИБРИДИЗАЦИИ АТОМНЫХ ОРБИТАЛЕЙ

Тип гибри- дизации	Число ГАО	Число поделенных электронных пар	Конфигурация молекул	Примеры молекул, ионов
sp^3d	5	5	Тригональная бипирамида	PCl_5 , SbF_5
sp^3d^2	6	6	Тетрагональная бипирамида (октаэдр)	SF_6 , $[SiF_6]^{2-}$