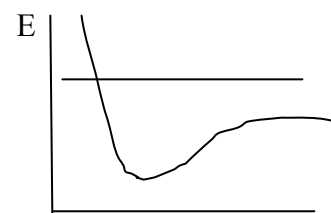


ЛЕКЦИЯ № 5

Химическая связь

Теории химической связи должны описывать свойства молекул в зависимости от особенностей химических связей. Основными характеристиками ХС являются её энергия и длина. Молекулы и структурные единицы, кроме того, имеют определенную форму, обусловленную углами между химическими связями. Химические связи между одними и теми же атомами бывают кратными (1.2.3). Химические связи определяют электрические (дипольный момент, диэлектрическая постоянная) и магнитные свойства веществ. Все эти свойства описываются несколькими теориями химических связей. Квантово-механические теории (теория валентных связей и метод молекулярных орбиталей) основаны на представлениях о волновой функции Ψ , описывающей состояние электронов в молекуле. Молекулы образуются путем перекрывания атомных орбиталей (АО) соседних атомов. При этом образуются состояния, подобные АО, которые заполняются электронами по общим квантово-механическим правилам: принципу наименьшей энергии, принципу Паули, правилам Гунда. Если перекрывающиеся части АО имеют одинаковые знаки Ψ – функции, то образующееся состояние является связывающим. В этом случае между ядрами атомов образуется область с повышенной электронной плотностью или с повышенной вероятностью пребывания в ней электронов. К этой области притягиваются положительно заряженные ядра. Этим объясняется образование химической связи и понижение энергии молекулы.

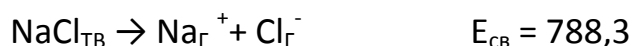


Колебательная теория строения атомов. Родимов Б.Н.

5.1. Основные характеристики молекул и химических связей

1. Энергия химических связей – это энергия, которую необходимо затратить для удаления атомов друг от друга на ∞ расстояние. При разрыве химических связей образуются атомы, радикалы, ионы или возб.молекулы. При разрыве любой химической связи энергия затрачивается.

Например:



Энергия связи зависит от вида продуктов, которые получаются в результате ее разрыва. При последовательном разрыве связей энергия изменяется. Например,



Одни и те же атомы в различных молекулах могут иметь различную энергию связи.

Связь N – N: 160 кДж/моль в N_2H_4 – гидразин

400 кДж/моль в $\text{N}_2(\text{C}_6\text{H}_5)_2$ – азобензол

≥ 900 (940) в N_2

Отсюда вводится понятие об одиночных, двойных и тройных связях (кратные связи).

2. **Длина связи** – расстояние между ядрами соседних атомов в молекуле.

$r_{a-b} \approx r_a + r_b$, при взаимодействии атомов r_{a-b} .

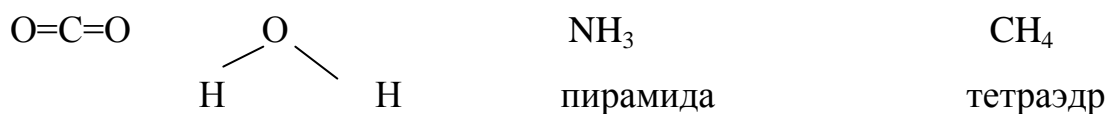
Как и радиусы атомов длины связей в одноподобных соединениях закономерно изменяются в рядах, подгруппах Периодической системы:

H-Г	HF	HCl	HBr	HI
	1.0	1.27	1.41	1.62 Å

C-C = 1,54 ÷ 1,58 Å, C-C = 1,54, C-C = 1.34, C-C = 1.20 Å
C-C C=C C≡C

Чем больше энергия связи, тем меньше ее длина.

3. **Валентные углы (ВУ)** – углы между связями, образуемыми одним атомом в молекуле. ВУ зависят от электронного строения атомов, характера химической связи (ковалентные, ионные, кратные, в металлах, одиночные).



Полярность связей и молекул (электроотрицательность)

HCl(0.35), NaCl(0.85), H₂, Cl₂ – ковалентные связи, HCl – полярная ковалентная связь

Полярность связей характеризуется дипольным моментом:

$$\mu = q \ell$$

Где q – абс. значение заряда, ℓ - расстояние между центрами зарядов.

μ - вектор от $+$ к $-$. 1 Дебай(Д) = $3,33 \cdot 10^{-30}$ Кл.м

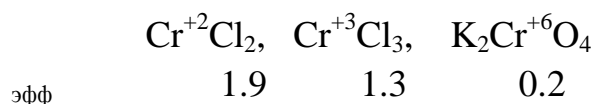
Для HCl $\mu = 3,24 \cdot 10^{-30}$ Кл.м

NaCl $\mu = 30 \cdot 10^{-30}$ Кл.м

Дипольные моменты молекул – сложение векторов.

4. Эффективные заряды на атомах и степень ионности химических связей

Заряды на атомах – эффективные (реальные) заряды ($i_{\text{эфф}}$) и отличаются от степени окисления – формального заряда.



i – степень ионности связи

K – степень ковалентности связи

$$i + K = 1 \quad i = \frac{i_{\text{эфф}}}{i_{\text{форм}}} = \frac{\mu_{\text{экс}}}{l_{AB} \cdot w}, \quad w - \text{степень окисления}$$

Зависимость степени ионности от разности электроотрицательностей

$\Delta\text{ЭО}$	$i, \%$	$\Delta\text{ЭО}$	$i, \%$	$\Delta\text{ЭО}$	$i, \%$	$\Delta\text{ЭО}$	$i, \%$
0,1	0,5	0,9	19	1,7	51	2,4	76
0,2	1	1,0	22	1,8	55	2,5	79
0,3	2	1,1	26	1,9	59	2,6	82
0,4	4	1,2	30	2,0	63	2,7	84
0,5	6	1,4	39	2,1	67	2,9	88
0,6	9	1,5	43	2,2	70	3,1	91
0,8	15	1,6	47	2,3	74	3,2	92