

План лекции

- 1. Характеристики химической связи.*
- 2. Основные положения метода валентных схем, гибридизация атомных орбиталей (АО).*

1. Определение химической связи

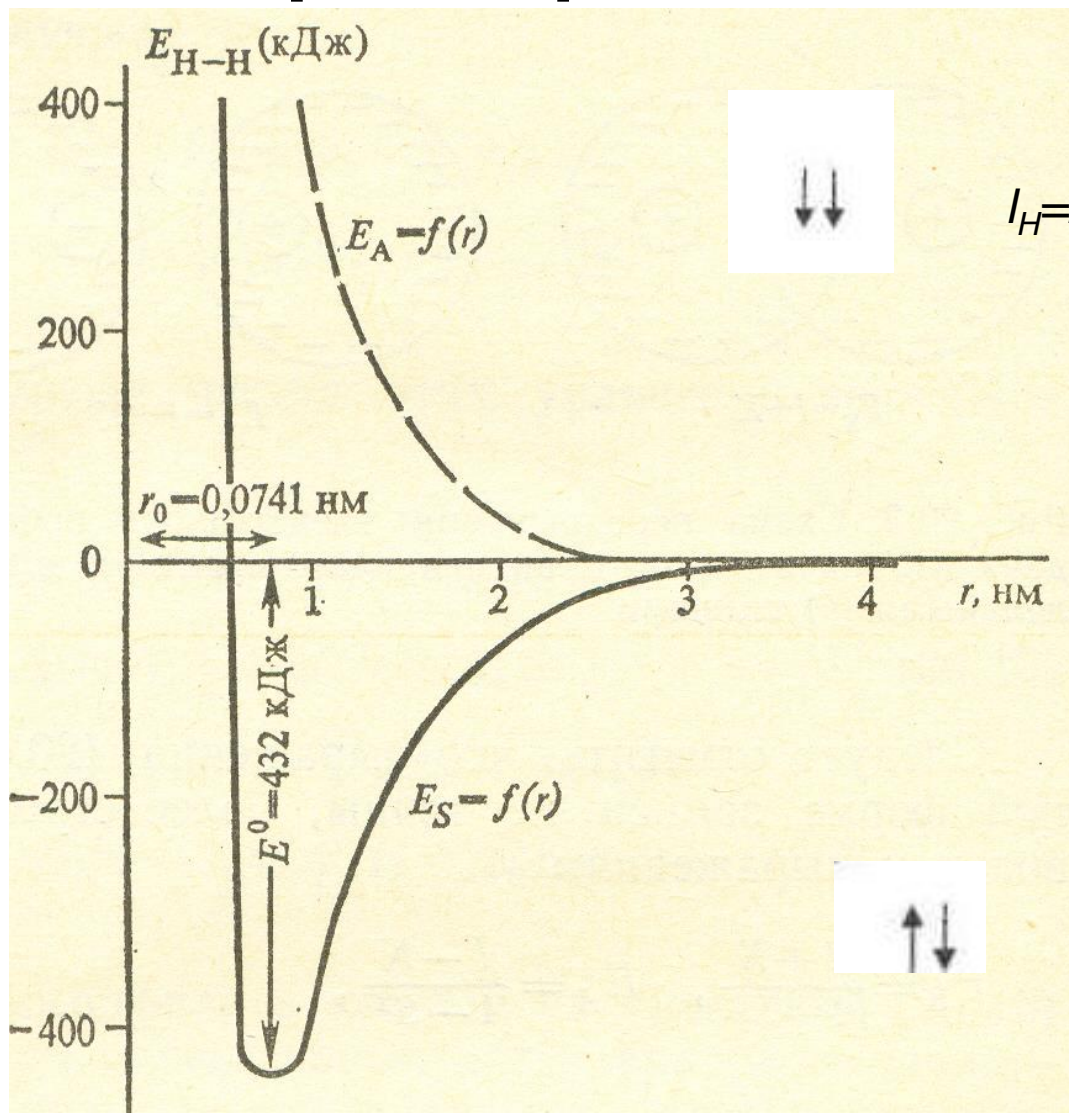
Химическая связь – это взаимодействие атомов, приводящее к образованию молекул, ионов, радикалов за счет перекрывания электронных облаков и понижения полной энергии системы.

Условия образования химической связи

понижение энергии системы

В 1927 г Гейтлер и Ландон провели квантово-механический расчет для простейшей молекулы водорода.

Кривые потенциальной энергии системы из двух атомов водорода от межъядерного расстояния



$$r_{am}^H = 0.053 \text{ нм}$$

$$l_H = 2r = 0,106 \text{ нм}$$

$$l_{H-H} = 0.0741 \text{ нм}$$

Характеристики химической связи

- **1. Длина связи ($l_{\text{св}}$)** - расстояние между ядрами соседних атомов в молекуле.
- $[l] = \text{нм}$.

Длина связи зависит от **радиусов атомов**, образующих связь:

	HF	HCl	HBr	HI
$l_{\text{св}}, \text{ \AA}$	0,92	1,28	1,42	1,62

- **2. Энергия химической связи ($E_{\text{св}}$)** - энергия, которую необходимо затратить для разрыва химических связей.
- характеризует прочность химической связи.
- $[E_{\text{св}}] = \text{кДж/моль}$.

Чем больше длина связи, тем меньше её энергия.

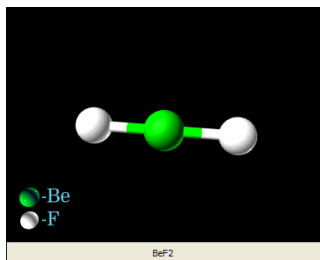
	HF	HCl	HBr	HI
$E_{\text{св}}, \text{ кДж/моль}$	536	432	360	299

Характеристики химической связи

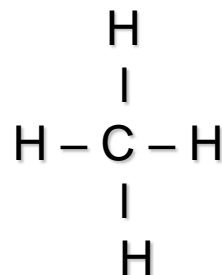
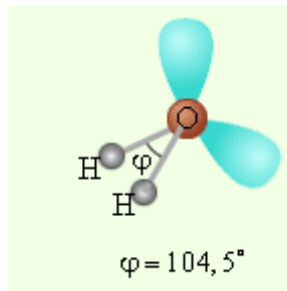
3. Валентные углы – углы между связями, образуемыми одним атомом в молекуле.



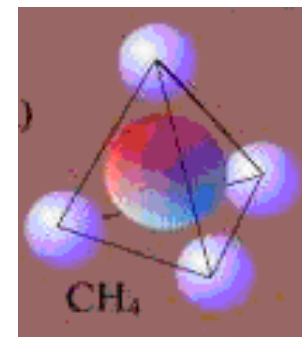
$\angle 180^\circ$



$\angle 104,5^\circ$



$\angle 109^\circ 28'$



Теории химической связи

```
graph TD; A[Теории химической связи] --> B[Метод валентных связей (ВС)]; A --> C[Метод молекулярных орбиталей (МО)];
```

Метод валентных связей (ВС)

Представления о двухцентровых локализованных связях (Ф. Лондон, В. Гайтлер, Л. Полинг).
1927 г.

Метод молекулярных орбиталей (МО)

Представления о многоцентровых делокализованных связях.
(Р. Малликен, Ф. Гунд, Э. Хюккель и др.).
40-е годы XX века

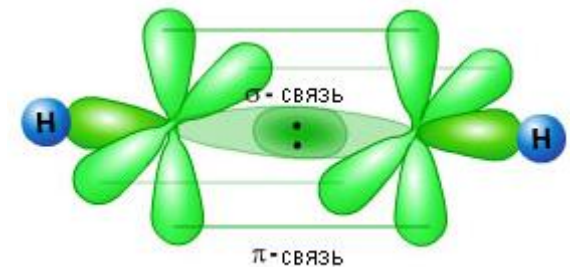
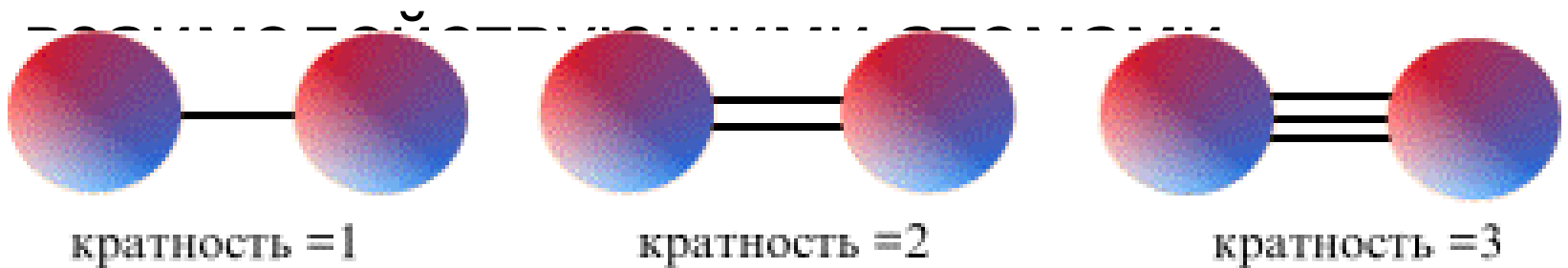
Обе теории не исключают друг друга, а дополняют.

Основные положения МВС:

- химическая связь образуется между двумя атомами как результат перекрывания их АО (обобществление электронов).
- химическая связь образуется неспаренными электронами с антипараллельными спинами в соответствии с принципом Паули.
- характеристики хим. связи (энергия, длина) определяются типом перекрывания их АО.

Кратные связи

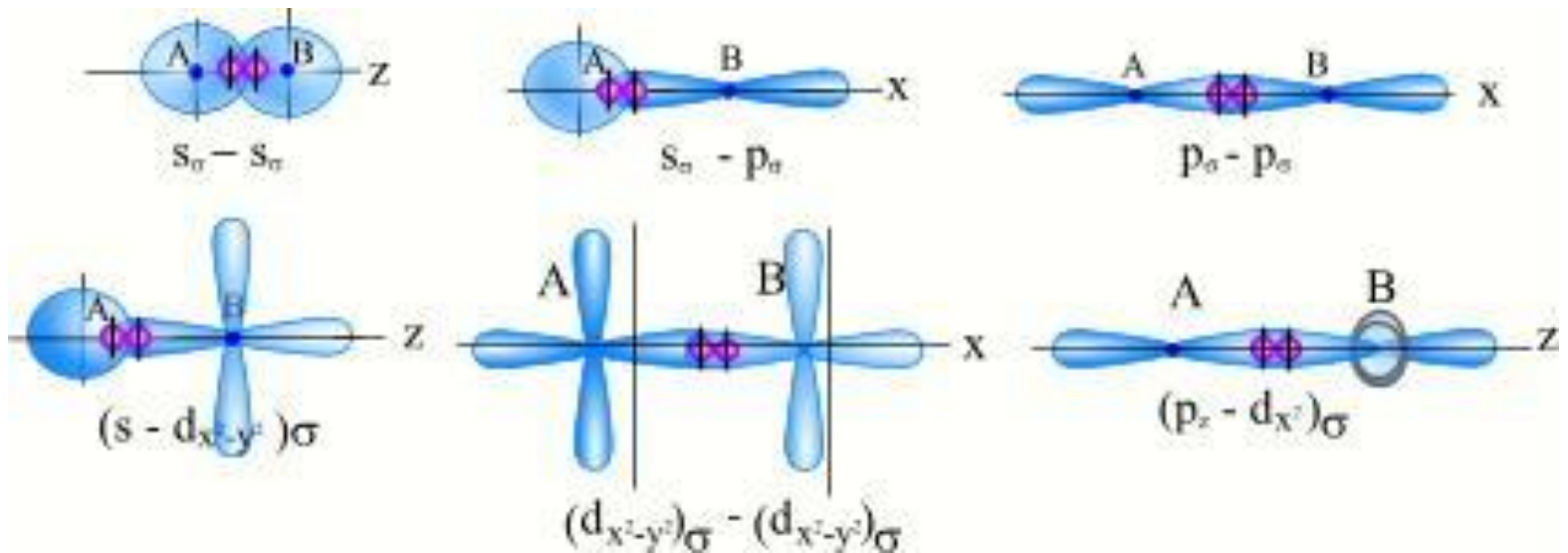
- **Кратная связь** - число общих электронных пар между



Типы перекрывания АО

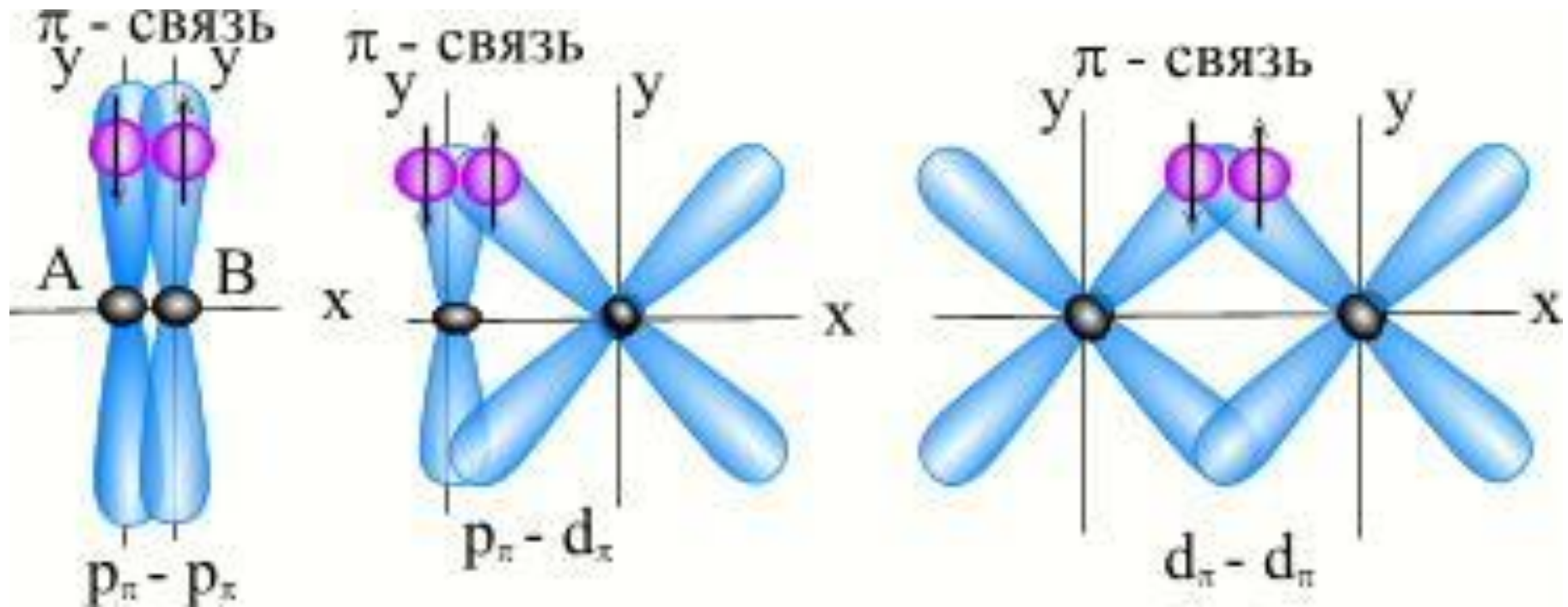
- **σ – связи** – перекрывание АО по оси связи (цилиндрическая симметрия).

σ



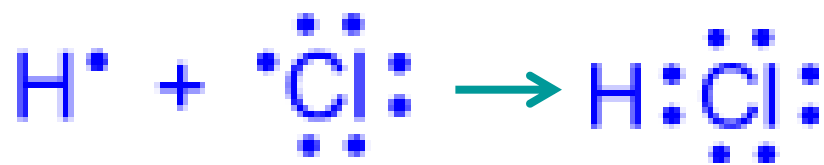
Типы перекрывания АО

- π -связи – перекрывание происходит с двух сторон от линии связи (могут перекрываться АО $p + p$ или $p + d$).



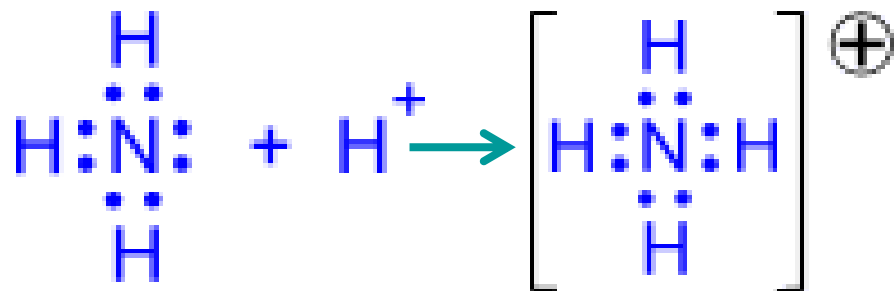
Механизмы образования ковалентной связи

Обменный



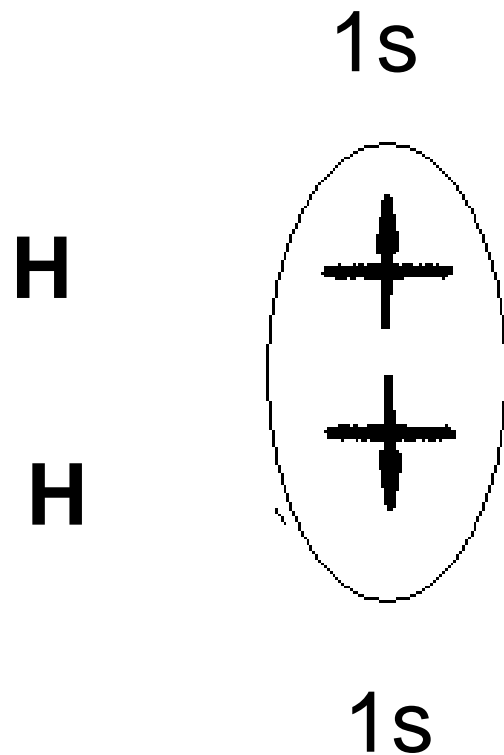
Каждый атом дает по одному неспаренному электрону в общую электронную пару

Донорно-акцепторный

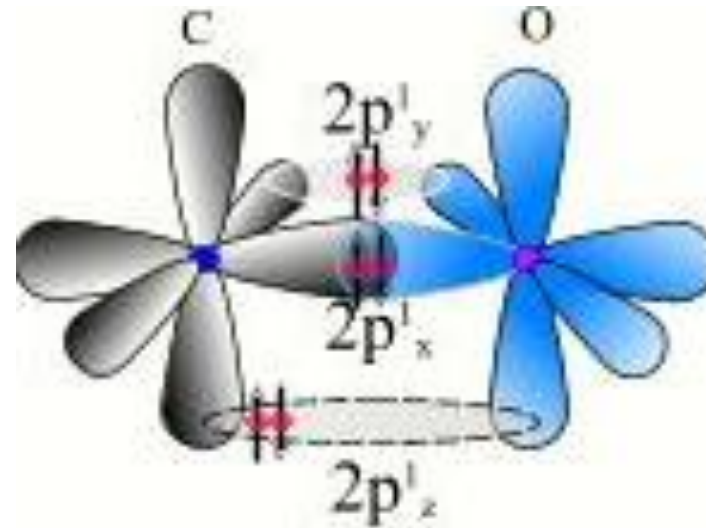
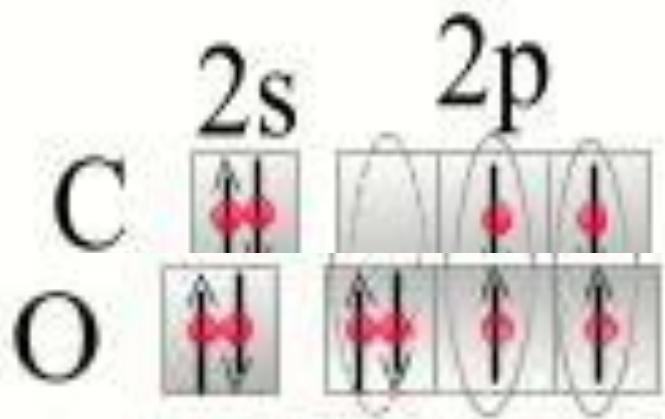


Один атом (донор) предоставляет электронную пару, а другой атом (акцептор) предоставляет для этой пары свободную орбиталь

1. Обменный механизм образования связи .



Донорно-акцепторный механизм образования связи



C – акцептор электронной пары

O – донор электронной пары

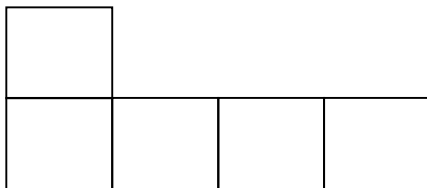
КС=3

Основные свойства ковалентной связи

1) **Насыщаемость** – определенное число химических связей атома, вызванное ограниченным числом валентных электронов и АО. Пример: молекула водорода.



II период – макс. валентность не более IV



Основные свойства ковалентной связи

2) Валентность (ковалентность) элементов – число связей, которые атом может образовать за счет неспаренных электронов.

I период Валентность водорода = 1.

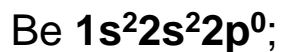
II период Валентность кислорода = 2.

Основные свойства ковалентной связи

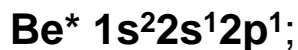
- **2) Направленность** химической связи определяется направленностью в пространстве всех АО с $l > 0$.
- **Гибридизация** - перемешивание АО с различными орбитальными квантовыми числами с получением гибридных (смешанных) АО одинаковой формы и энергии.
- Гибридизуются АО центрального атома.
- Гибридные АО, участвуют **в σ -связывании**.
- Число АО равно числу ГАО.

Алгоритм для определения типа гибридизации в молекулах

1. Запишите электронную формулу центрального атома в основном состоянии



2. Запишите электронную формулу центрального атома в возбужденном состоянии

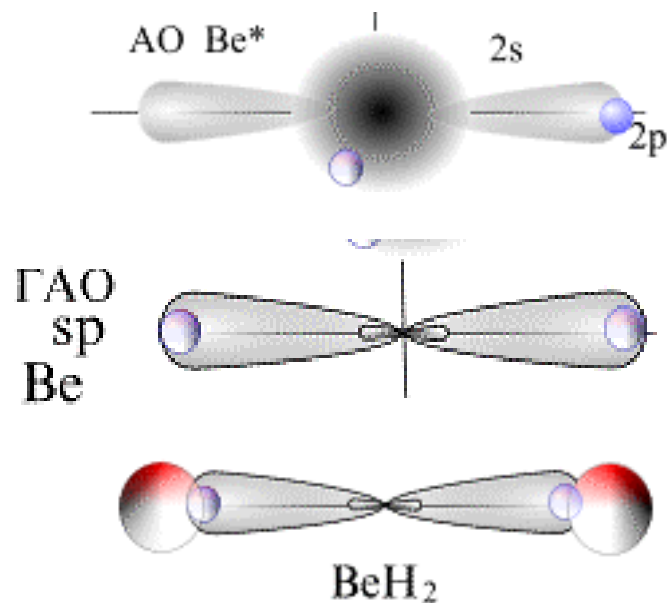


3. Определите число неспаренных электронов –

один на s –орбитале и один на p-орбитале;

4. По числу АО (2) постройте ГАО (2);

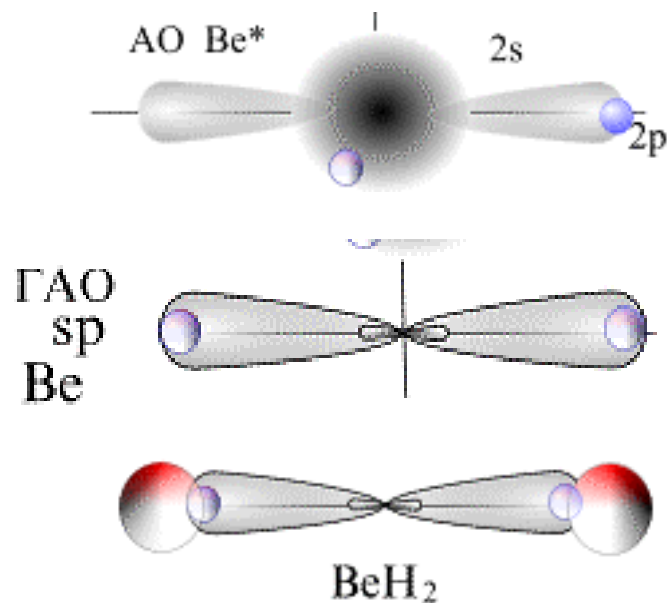
5. На концах ГАО происходит спаривание электронов с неспаренными электронами атома водорода;



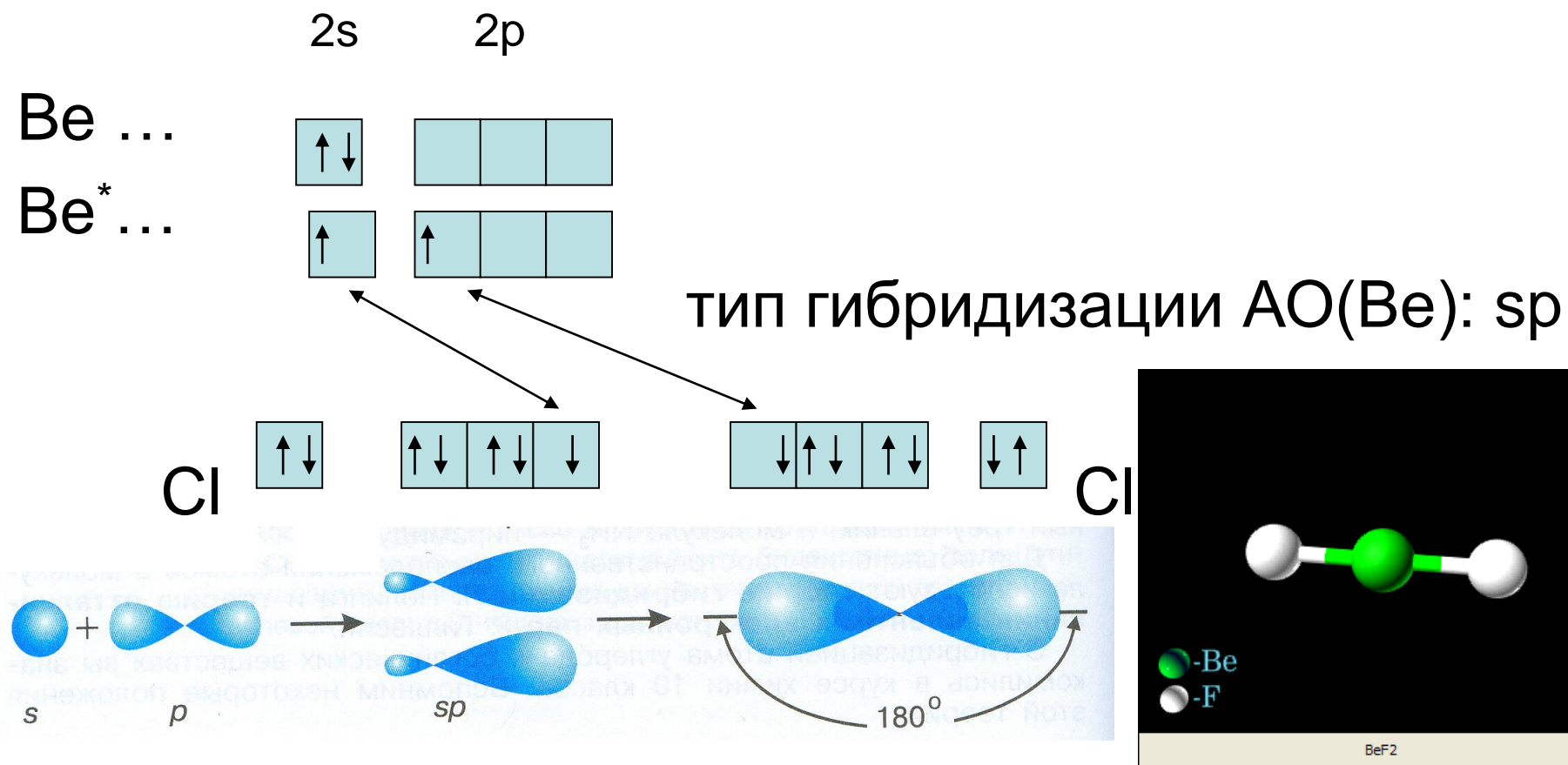
•6. Вывод: **тип гибридизации – sp; угол между связями – 180°**

Алгоритм для определения типа гибридизации в молекулах

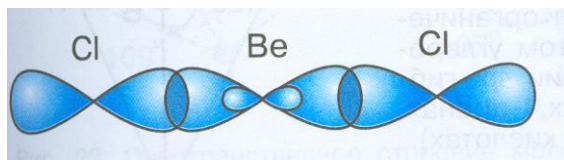
1. Запишите электронную формулу центрального атома в основном состоянии $1s^2 2s^2 2p^0$;
2. Запишите электронную формулу центрального атома в возбужденном состоянии $1s^2 2s^1 2p^1$;
3. Определите число неспаренных электронов – **один на s –орбитале и один на p –орбитале;**
4. По числу АО (2) постройте ГАО (2);
5. На концах ГАО происходит спаривание электронов с неспаренными электронами атома водорода;
 - 6. Определите тип гибридизации
 - **тип гибридизации – sp; строение – линейное;**
 - **угол между связями – 180°**



Строение молекулы BeCl_2



Строение молекулы: линейное, угол – 180°



Построение ГАО для молекулы BCl_3

- 1. Запишите электронную формулу атома в основном состоянии
- **B** $1s^2 2s^2 2p^1$
- 2. Запишите электронную формулу атома в возбужденном состоянии
- **B*** $1s^2 2s^1 2p^2$;

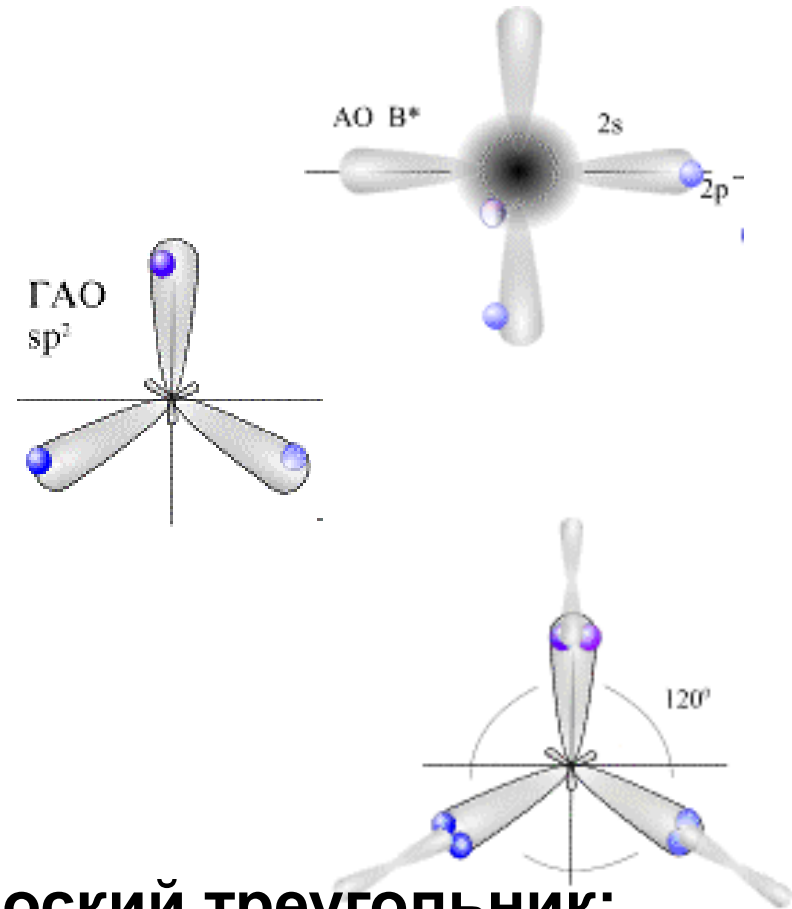
3. Определите число неспаренных электронов

– **один на s –орбитали и два на p-орбитали;**

4. По числу АО (3) постройте ГАО (3);

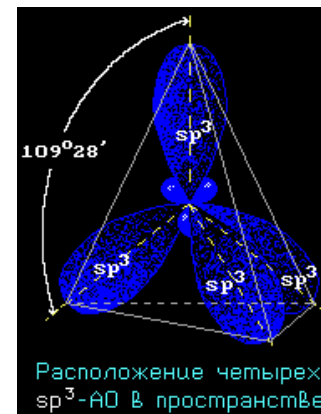
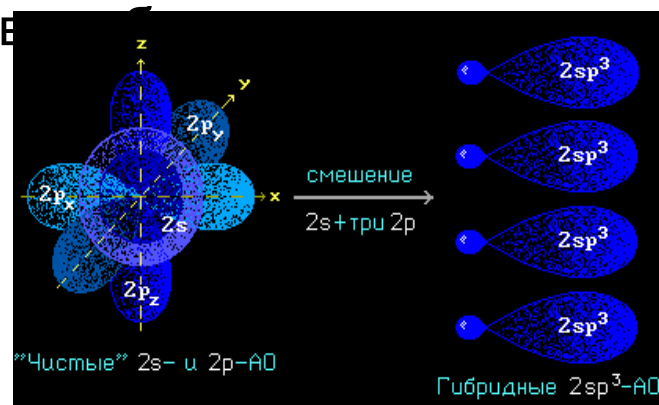
5. На концах ГАО происходит спаривание электронов с неспаренными электронами атома хлора;

6. Определите тип гибридизации - **sp^2 ; плоский треугольник; угол 120°**



Построение ГАО для молекулы CH_4

- 1. Запишите электронную формулу атома в основном состоянии
- **C** $1s^2 2s^2 2p^2$
- 2. Запишите электронную формулу атома в возбужденном состоянии
- **C*** $1s^2 2s^1 2p^3$;
- 3. Определите число неспаренных электронов –
- один на s –орбитали и
- два на p-орбитали;
- 4. По числу АО (4) постройте ГАО (4);
- 5. На концах ГАО происходит спаривание электронов с неспаренными электронами атома водорода;

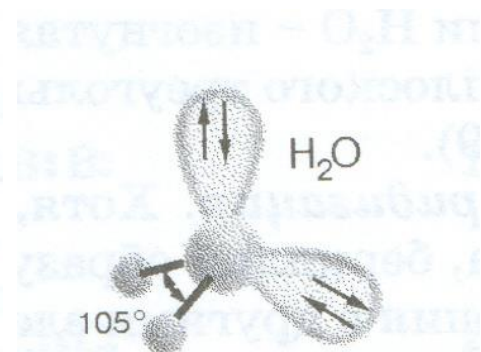
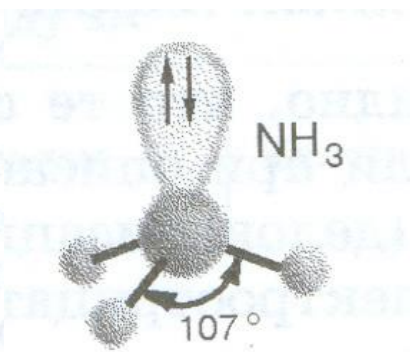
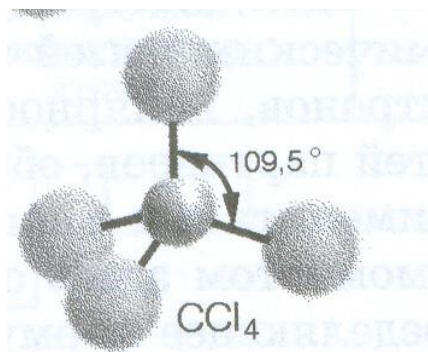


sp^3 гибридизация. Форма – тетраэдр, угол $109^\circ 28'$

Метод отталкивания электронных пар (ООЭВП)

Чем больше число несвязывающих электронных пар, тем меньше валентный угол:

Молекула:	CH_4	NH_3	H_2O
Число несвязывающих электронных пар:	0	1	2
Валентный угол:	$109,28^\circ$	107°	$104,5^\circ$
Строение молекулы:			



Полярность связи

·
С
Л
О
Ж
Е
Н
И
Е
П
О
Л
Ь
Н
Ы
Х
Э
Л
Е
М
Е
Н
Т
О
В

В

М
О
Л
Е
К

- **Полярность связи** – смещение электронной плотности от атома одного элемента к атому более электроотрицательного элемента.
Чем $\uparrow \Delta \text{ОЭО}$, тем \uparrow полярность х.с
Если $\Delta \text{ОЭО} = 0$, то связь ковалентно-неполярная (H_2 , Cl_2 , $\text{N}_2 \dots$).
Если $1 < \Delta \text{ОЭО} < 2$, то связь полярная.
Если $\Delta \text{ОЭО} \approx 2,5-3,2$ связь условно считают ионной и рассматривают как предельный случай ковалентной полярной связи.

HCl

HBr

HI

ΔE_0 :

0,9

0,7

0,5



Полярность связи уменьшается

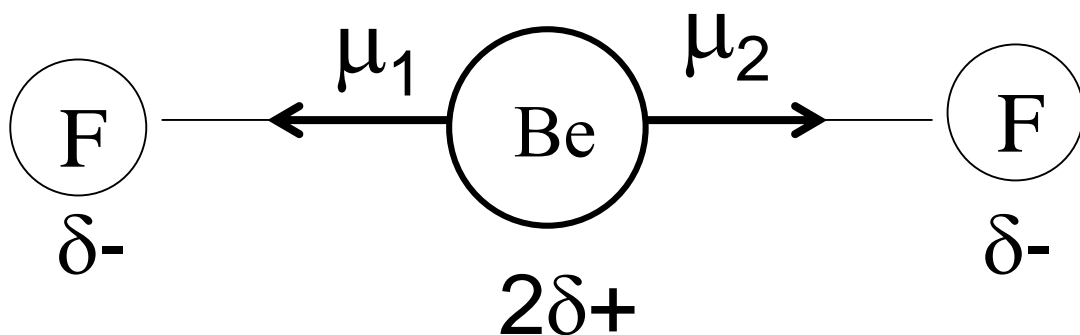
**Полярность молекулы определяется
величиной дипольного момента**

Дипольный момент молекулы зависит:

- 1) От геометрии молекулы**
- 2) От наличия неподеленных пар**

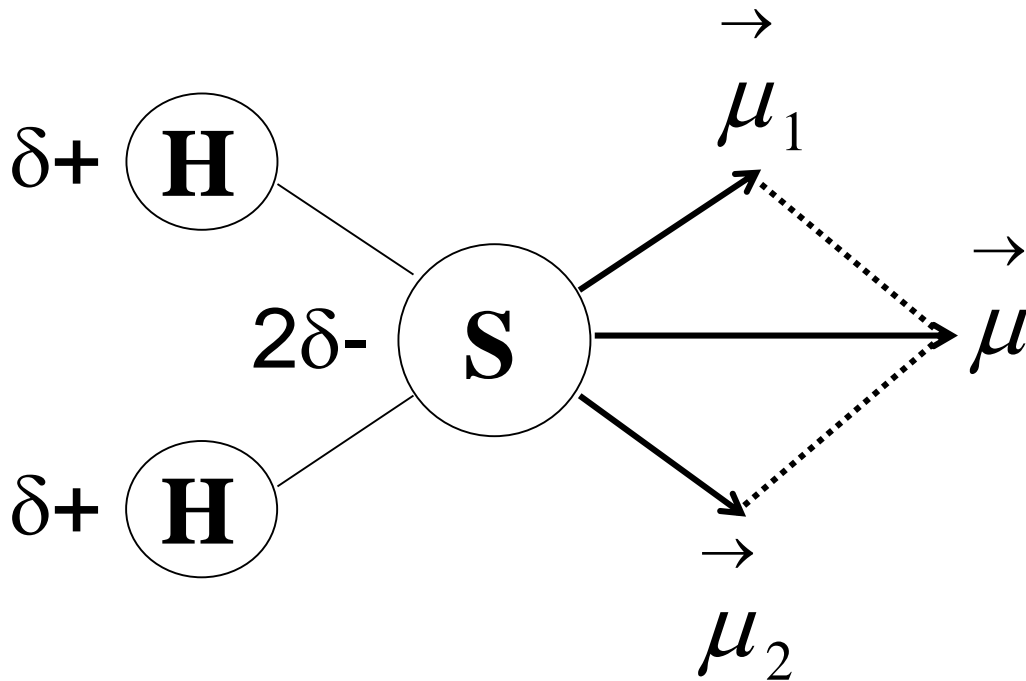
Неполярные молекулы

Молекула неполярна, если суммарный μ всех связей = 0.



$$\begin{array}{ccc} \rightarrow & \rightarrow & \rightarrow \\ \mu & = & \mu_1 + \mu_2 = 0 \end{array}$$

Полярные молекулы



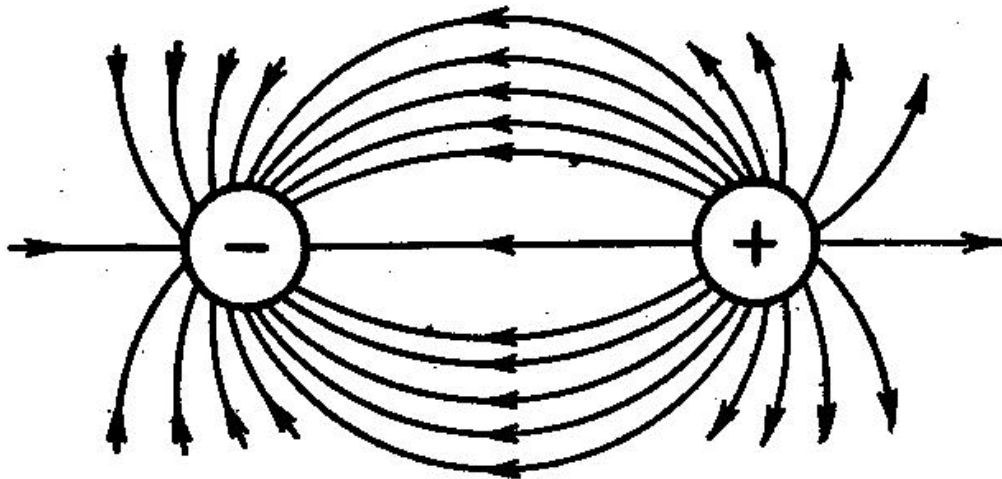
$$\begin{array}{ccc} \rightarrow & \rightarrow & \rightarrow \\ \mu_1 + \mu_2 = \mu & \neq & 0 \end{array}$$

Ионная связь

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

Например: NaCl

В отличие от ковалентной связи ионная связь **ненаправлена** и **ненасыщаема**.

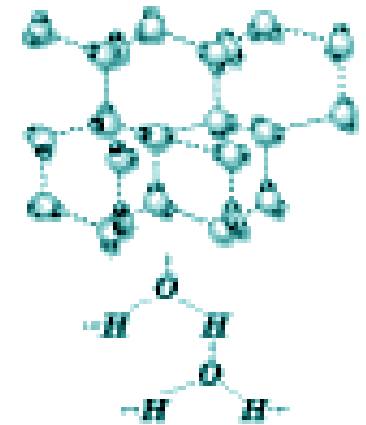
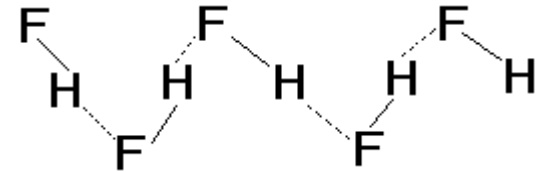
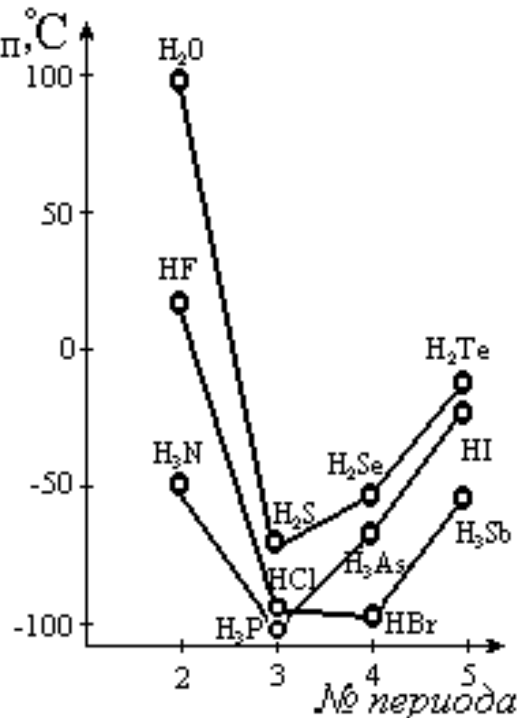
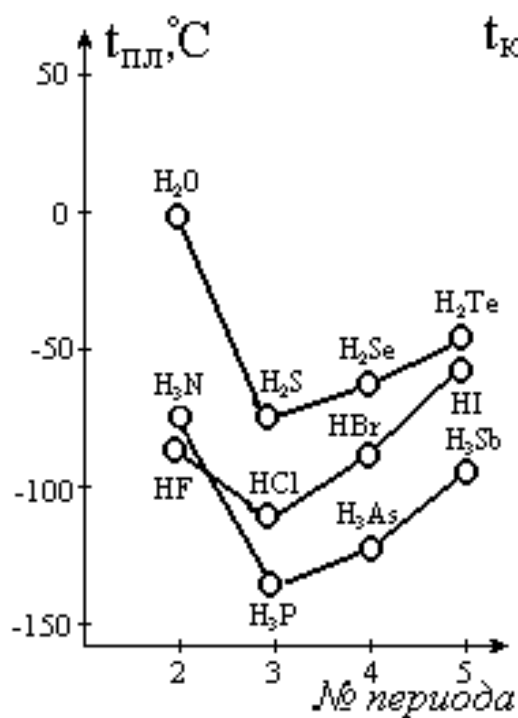


Недостатки метода ВС

не объясняет:

- существование молекулярных ионов H_2^+ , O_2^-
- магнитные свойства молекул

Водородная связь



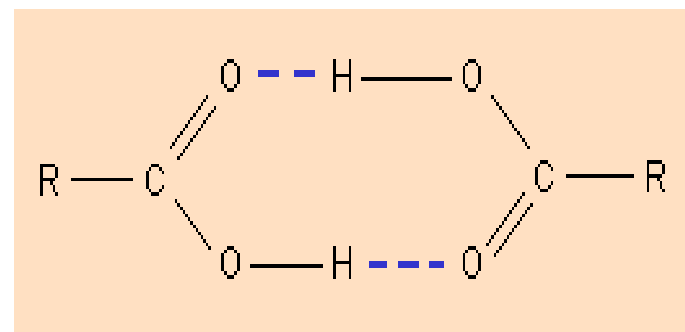
водородные связи между молекулами воды

Вещества обладают аномально высокими температурами плавления и кипения

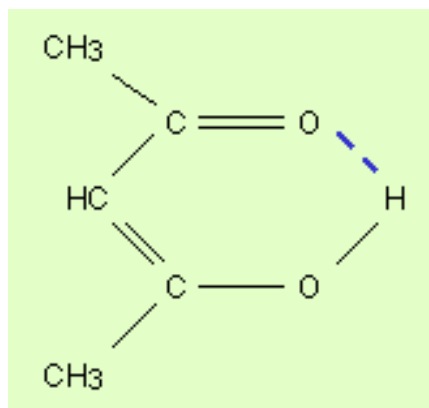
Водородная связь

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

Межмолекулярная водородная СВЯЗЬ



Внутримолекулярная водородная СВЯЗЬ

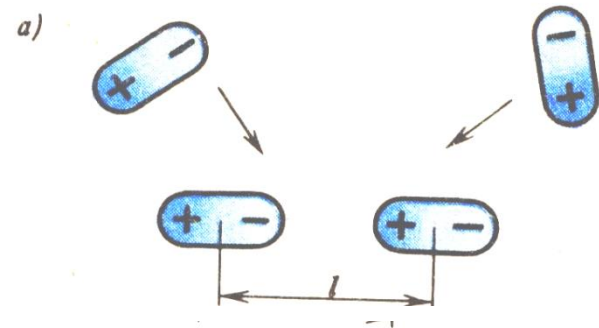


Силы Ван-дер-Ваальса (1873)

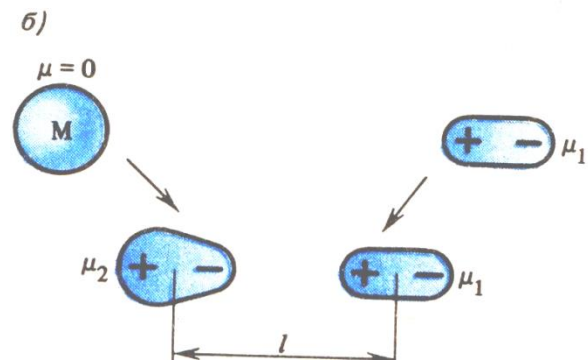
Связи между молекулами, обусловленные электростатическим взаимодействием, называются силами **Ван-дер-Ваальса**

Различают 3 типа сил:

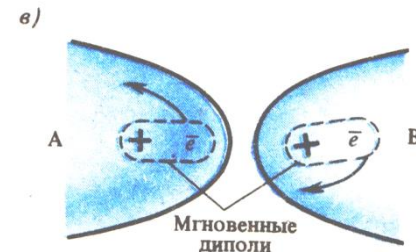
- **Ориентационное** взаимодействие возникает между полярными молекулами (а).



- **Индукционное** взаимодействие возникает между полярными и неполярными молекулами.



- **Дисперсионное** взаимодействие возникает между неполярными молекулами.



Вопрос для самостоятельного изучения:

- **Металлическая связь**
- **Кристаллические решетки**
- **Отчет на практическом занятии**