

«Химическая связь»

Лекция № 6-7

Дисциплина «Химия 1»

для студентов очного отделения

Лектор: к.т.н., доцент, Мачехина Ксения Игоревна

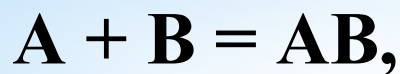
* План лекции

1. Общие сведения о химической связи.
2. Ковалентная связь.
3. Ионная связь.
4. Металлическая связь.
5. Водородная связь.
6. Межмолекулярные связи.

1. Общие сведения о химической связи

Химическая связь – это любое взаимодействие между частицами, при котором выделяется больше 20 кДж энергии.

Основное условие образование химической связи – **понижение полной энергии** многоатомной системы по сравнению с энергией изолированных атомов.



$$E_{AB} < E_A + E_B$$

1. Общие сведения о химической связи

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



1. Общие сведения о химической связи

Виды химической связи

- Ковалентная
- Ионная
- Металлическая
- Водородная
- Межмолекулярные силы
(силы Ван-дер-Ваальса)

1. Общие сведения о химической связи

Характеристики

1) **Длина ($l_{\text{св}}$)** – межъядерное расстояние между двумя химическими связанными атомами

➤ Длина связи зависит от радиусов атомов:

	HF	HCl	HBr	HI
$l_{\text{св.}}$, нм	0,092	0,128	0,142	0,162

➤ Длина связи зависит от кратности связи:

Связь	C–C	–C=C–	–C≡C–
$l_{\text{св.}}$, нм	0,154	0,134	0,120

1. Общие сведения о химической связи

2) Энергия – энергия, затрачиваемая на разрыв химической связи, [кДж/моль]

Чем больше длина связи, тем меньше её энергия.

	HF	HCl	HBr	HI
$l_{\text{св.}}$, нм	0,092	0,128	0,142	0,162
$E_{\text{св.}}$, кДж/моль	536	432	360	299

1. Общие сведения о химической связи

3) Валентный угол – угол между связями, которые образуют атом в молекуле



$\angle 180^\circ$



$\angle 104,5^\circ$

4) Полярность связи – смещение электронной плотности к более электроотрицательному атому

2. Ковалентная связь (КС)

- это химическая связь, образованная атомами двух не металлов или Me и неMe, при условии $\Delta\chi < 1,8$.

$$E_{\text{св}} = 100-800 \text{ кДж/моль}$$

Два метода образования КС:

- метод валентных связей (ВС)
- метод молекулярных орбиталей (МО).

2. Ковалентная связь

Метод валентных связей (Метод ВС)

Обобществление электронов происходит таким образом, что в пространстве между атомами возникает повышенная электронная плотность, обеспечивающая их связь.

2. Ковалентная связь (КС)

Основные положения метода ВС

1. Взаимодействующие атомы могут обмениваться между собой \bar{e} -ми, образующими связывающие пары.
2. Два обменивающихся \bar{e} -а должны (принцип Паули) иметь противоположные (антипараллельные) спины.
3. $E_{св}$ обусловлена обменом \bar{e} -ми между атомами.
4. КС тем прочнее, чем больше область перекрывания АО.
5. Перекрывающиеся АО должны быть близки по энергии и симметрии.
6. Характеристики хим. связи ($E_{св}$, $l_{св}$, полярность) определяется типом перекрывания АО.
7. КС направлена в сторону макс-ого перекрывания АО реагирующих атомов.

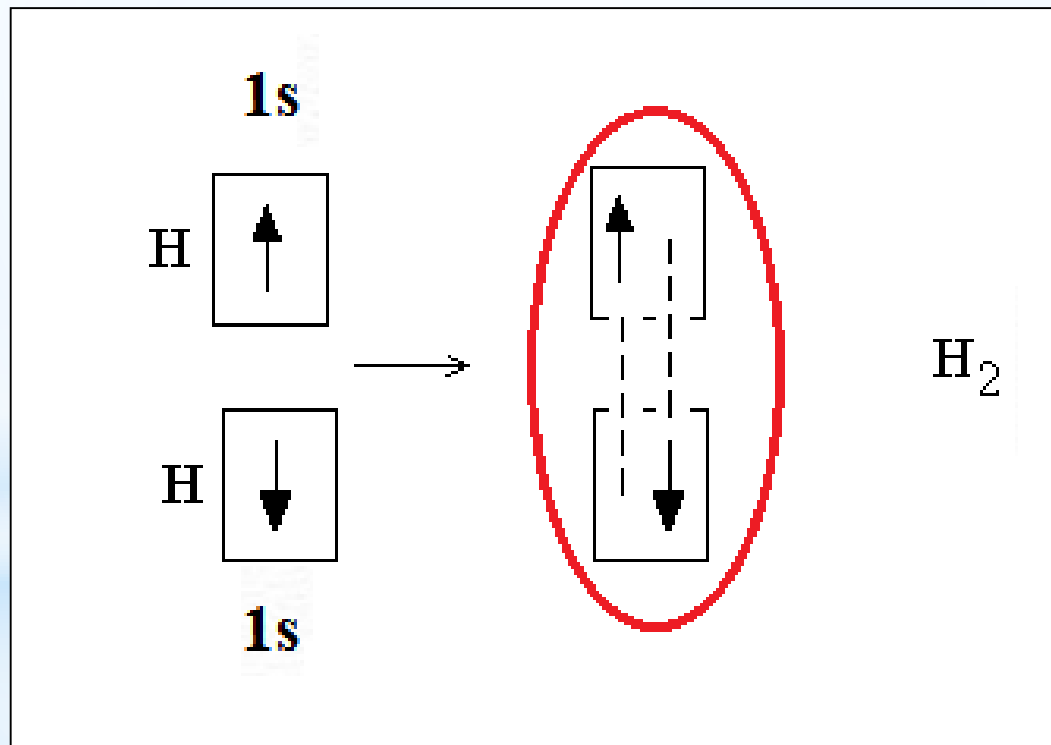
2. Ковалентная связь (КС)

Основные положения метода ВС

1. Связь обусловлена образованием общей электронной пары путем обобществления 2-ух электронов с антипараллельными спинами.
2. Связь 2-ух электронная, 2-ух ядерная, локализованная.

2. Ковалентная связь

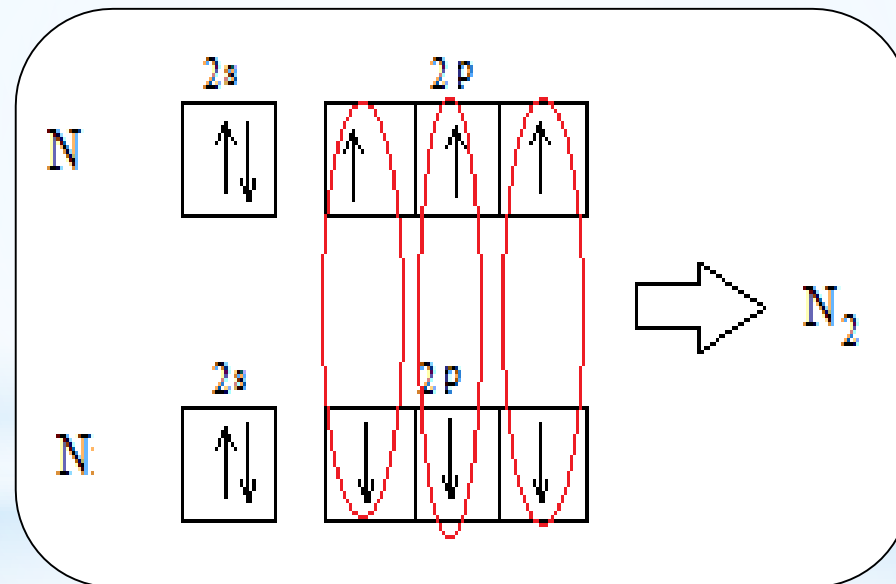
Образование КС в молекуле водорода



2. Ковалентная связь

Механизм образования химической связи

- обменный

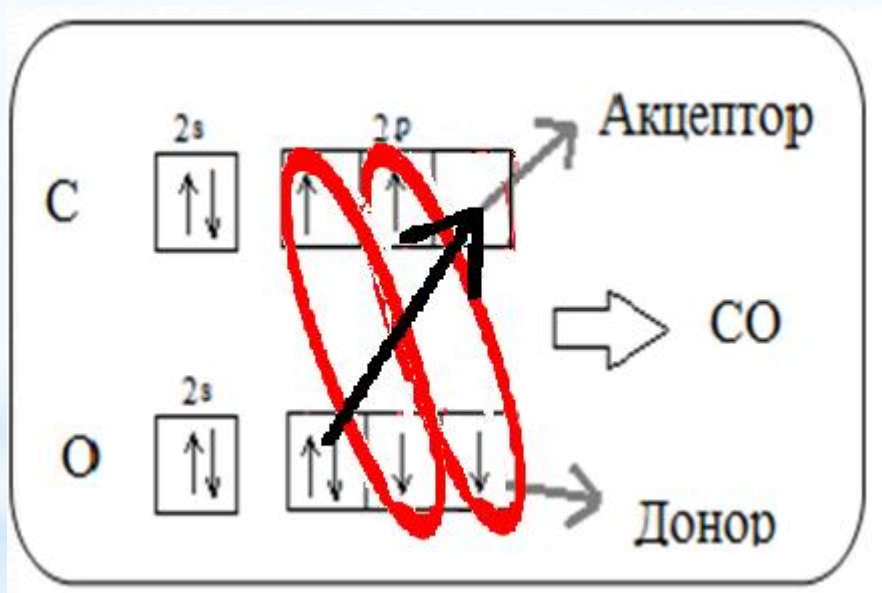


Кратность связи = 3

2. Ковалентная связь

Механизм образования химической связи

- донорно-акцепторный

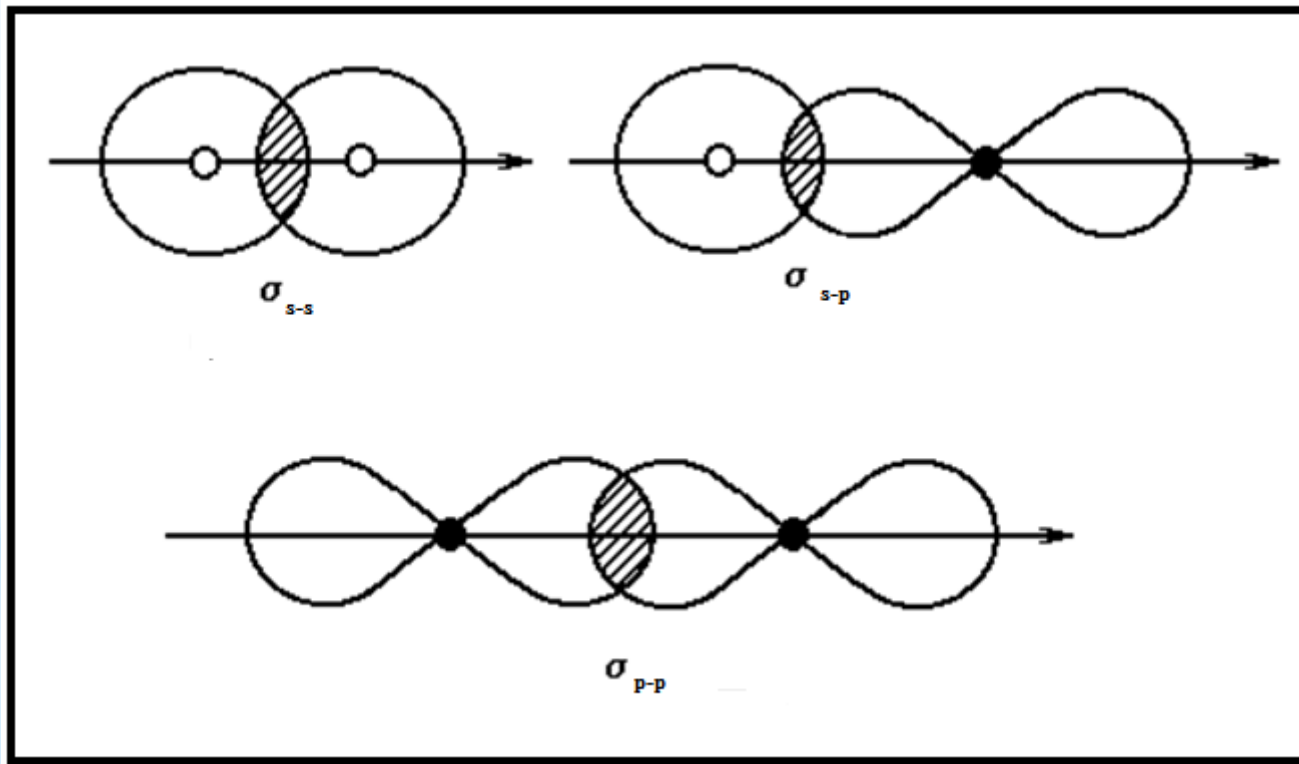


Кратность связи = 3

2. Ковалентная связь

Перекрывание электронных облаков

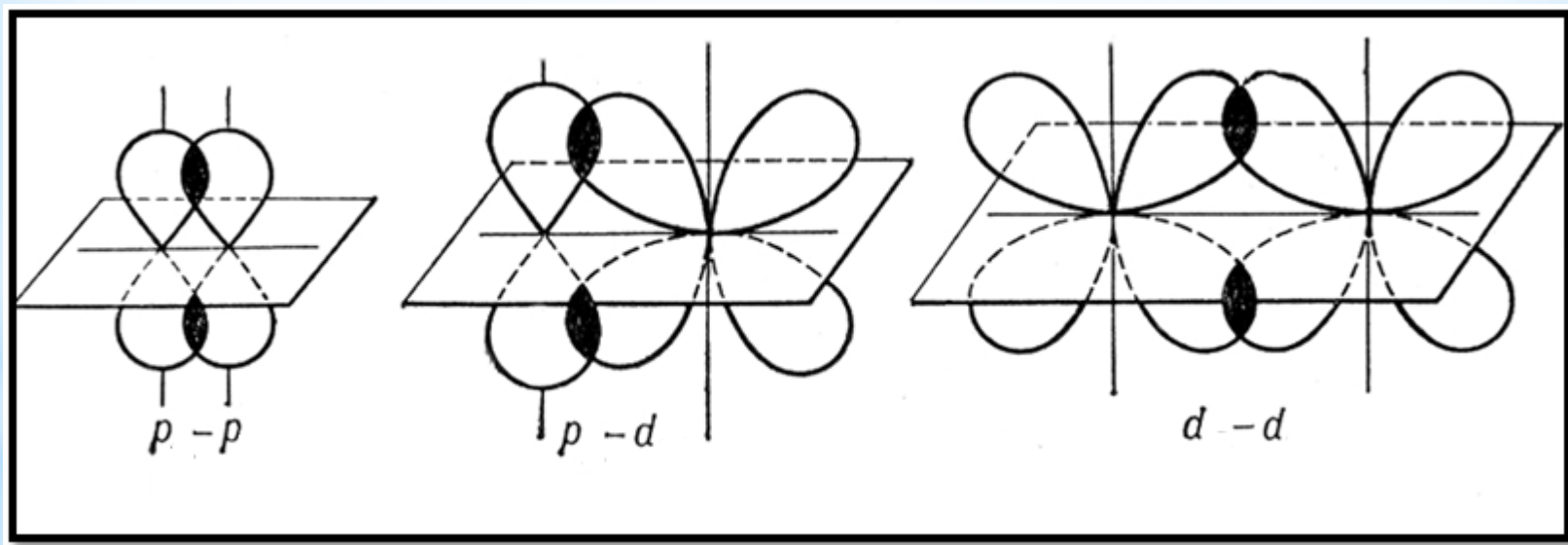
* σ – Связь (Сигма-связь): область общей e^- плотности лежит на линии связи ядер атомов



2. Ковалентная связь

Перекрывание электронных облаков

π - Связь (Пи-связь): область общей \bar{e} плотности перпендикулярна линии связи ядер атомов.



2. Ковалентная связь

СВОЙСТВА КС

1. полярность

обусловлена неравномерным
распределением электронной плотности
вследствие различий в
электроотрицательностях атомов

Ковалентная связь

полярная

HCl, CO, H₂O

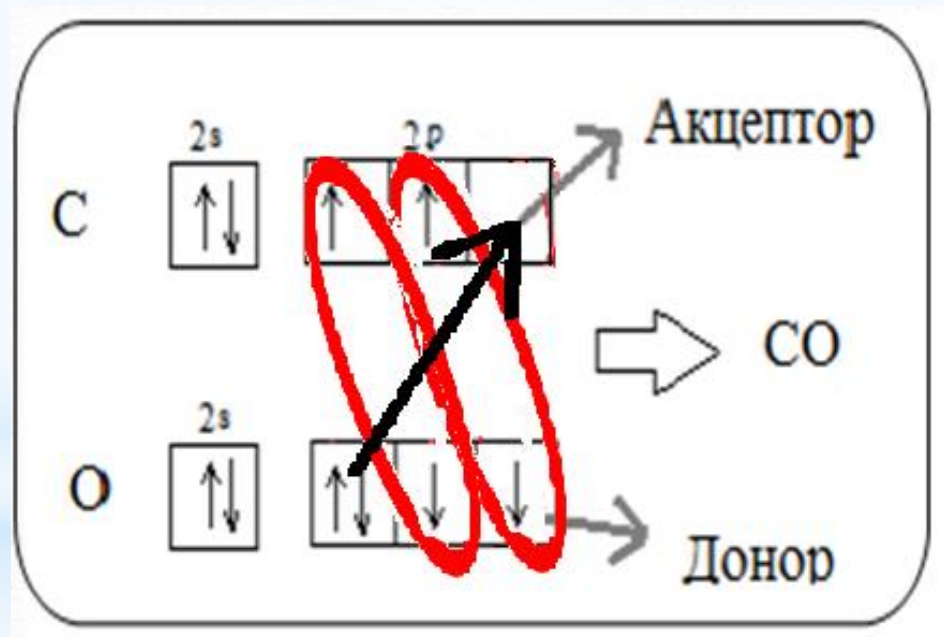
неполярная

H₂, O₂, N₂

2. Ковалентная связь

2. насыщаемость

стремление атомов полностью реализовать свои валентные возможности

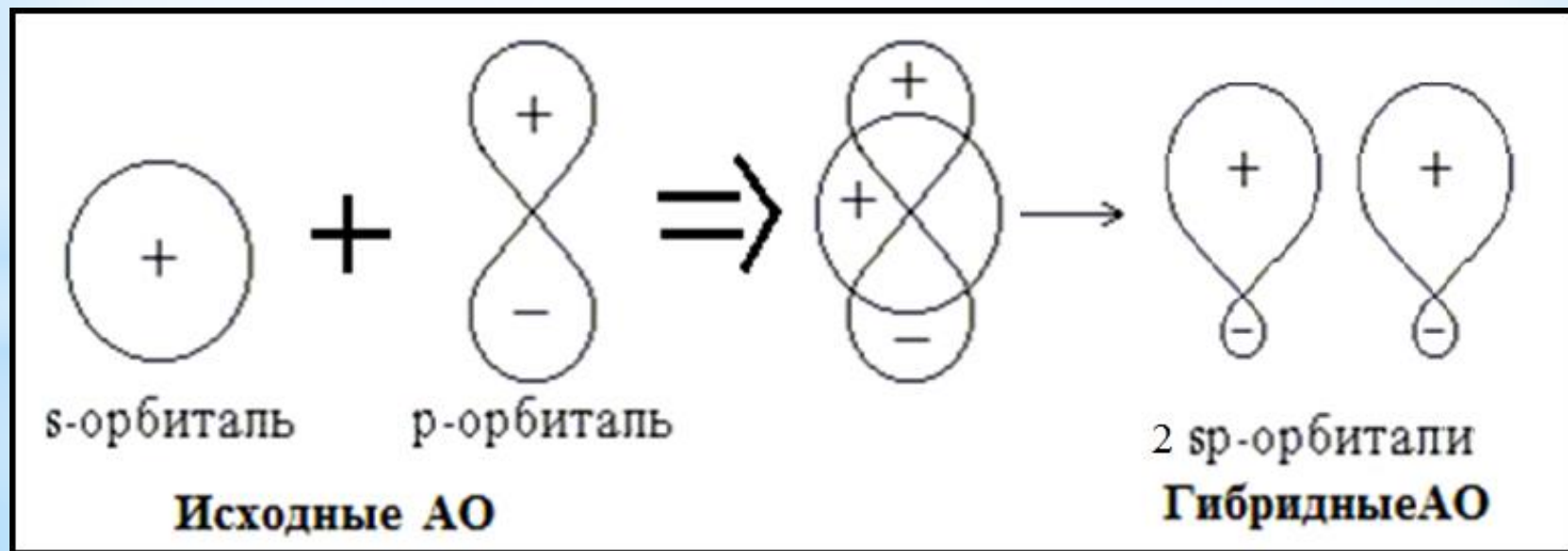


2. Ковалентная связь

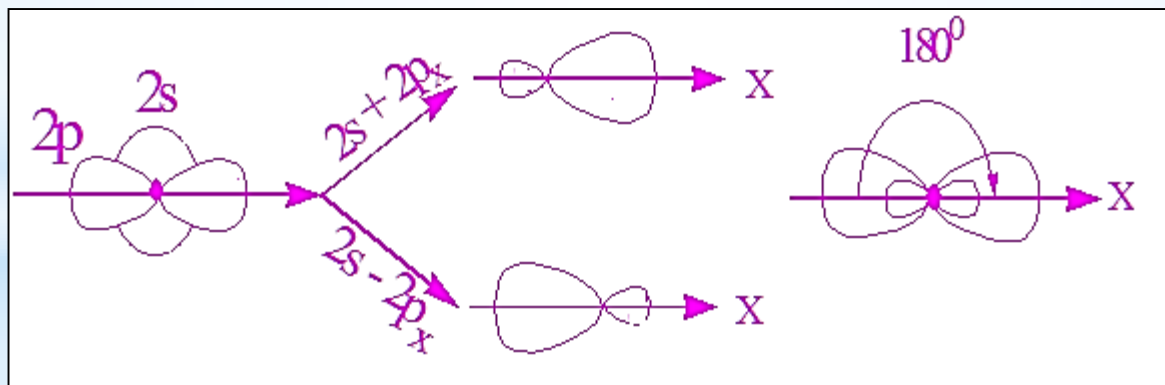
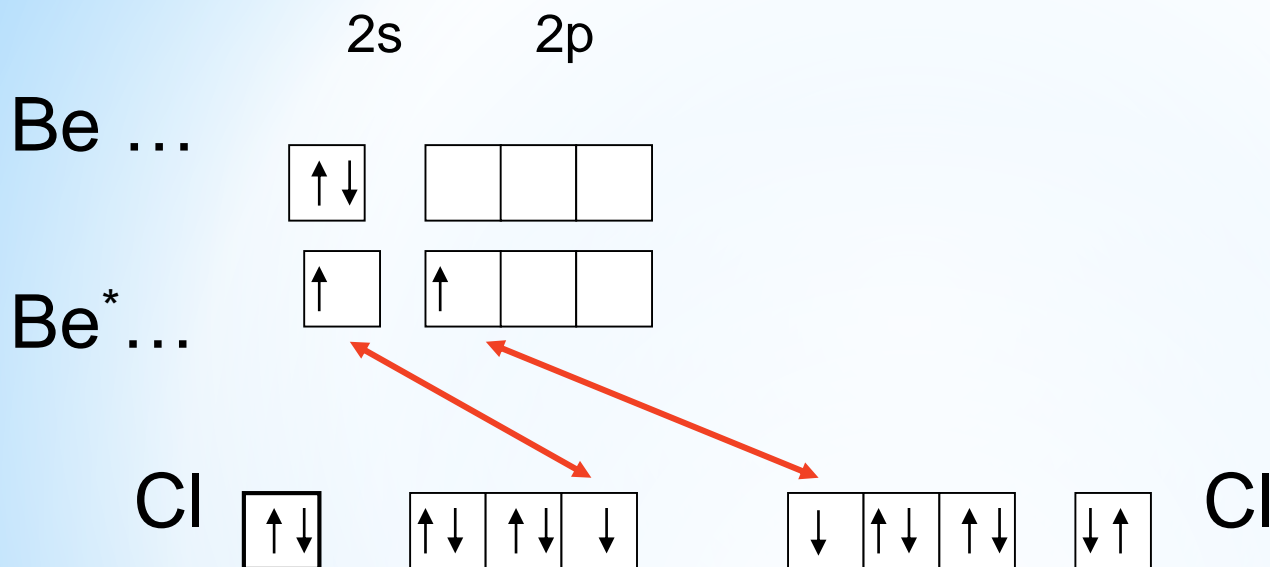
3. направленность

обуславливает геометрическую форму молекул

Гибридизация АО – выравнивание по форме и энергии АО для достижения более эффективного их перекрывания.

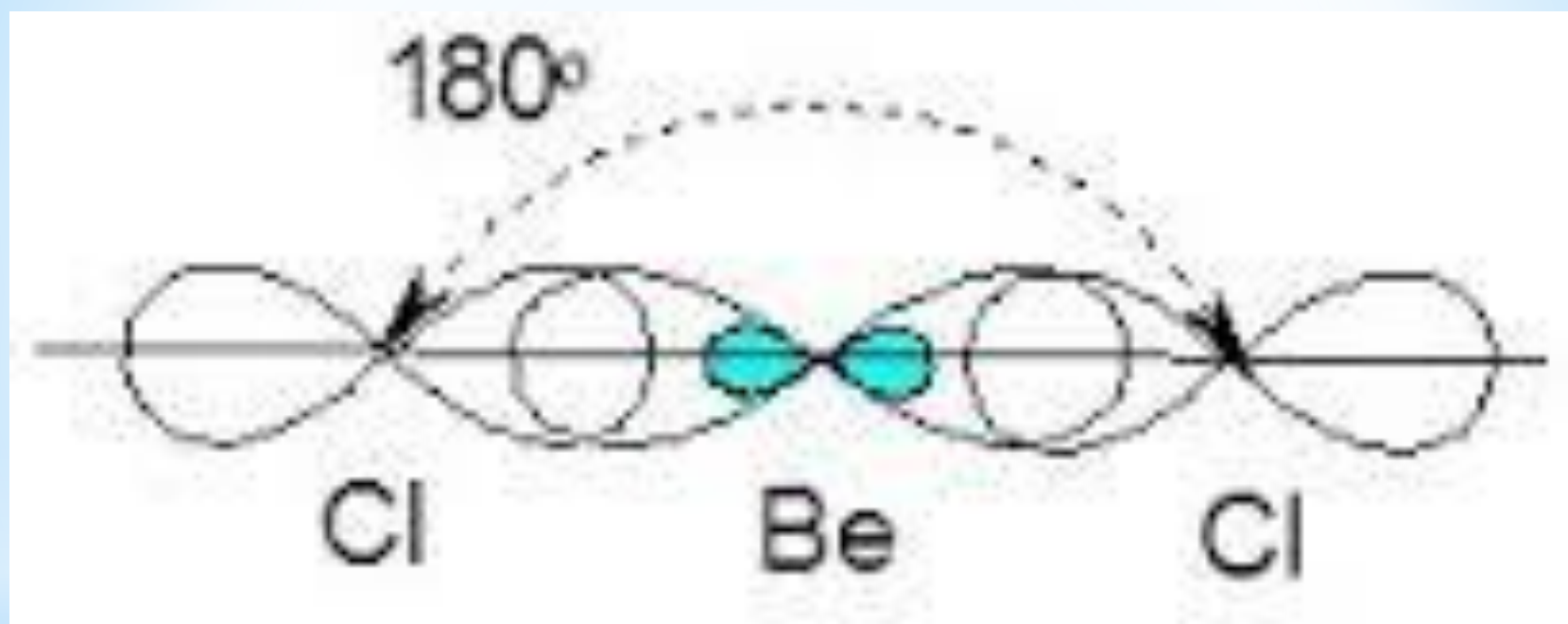


Строение молекулы BeCl_2



Тип гибридизации АО(Be): sp .

Строение молекулы: линейное, угол – 180°



2. Ковалентная связь

Тип гибридизации	Геометрическое строение молекулы	Валентный угол
sp	Линейное	180
sp^2	Треугольное	120
sp^3	тетраэдрическое	109,28
sp^3d	Тригональная бипирамида	120 и 90
sp^3d^2	октаэдрическое	90

Теория Гиллеспи (Метод ОЭПВО)

ОЭПВО – отталкивание электронных пар валентных оболочек.

Теория описывает строение молекул (ионов), атомы которых имеют неподделённые (несвязывающие) электронные пары.

Связывающей называется такая пара электронов, которая образует связь между двумя атомами.

Несвязывающая пара электронов принадлежит только одному центральному атому и не принимает участия в образовании химической связи.

Теория Гиллеспи (Метод ОЭПВО)

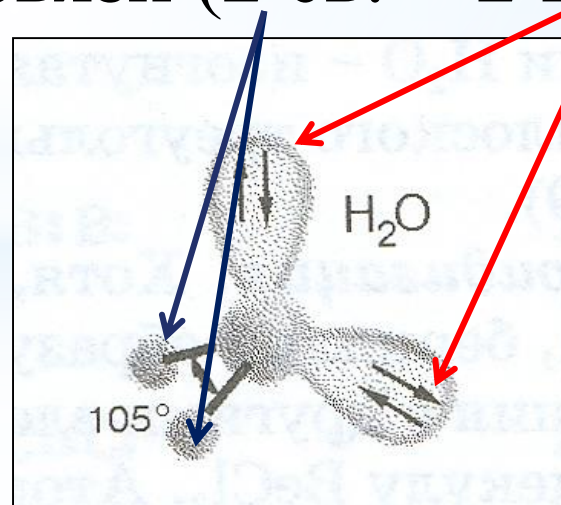
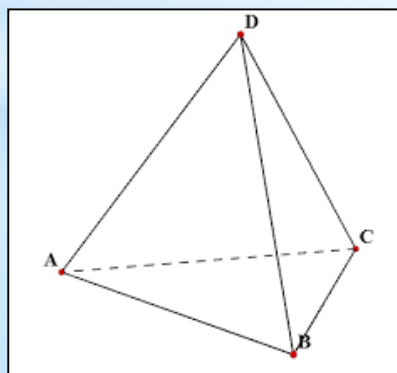
Основные положения:

1. Электронные пары, окружающие центральный атом, должны занимать такое пространственное положение, чтобы сводить к минимуму их взаимное отталкивание.
2. Наиболее сильное межэлектронное отталкивание происходит между несвязывающими электронными парами.
3. АО несвязывающей электронной пары занимает больше места в пространстве, чем связывающей электронной пары.

Теория Гиллеспи (Метод ОЭПВО)



$2\bar{e} + 6\bar{e} = 8\bar{e}/2\bar{e} = 4$ СВЯЗИ (2 св. + 2 несв.)



Теория Гиллеспи (Метод ОЭПВО)

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

Молекула:

CH_4 NH_3 H_2O

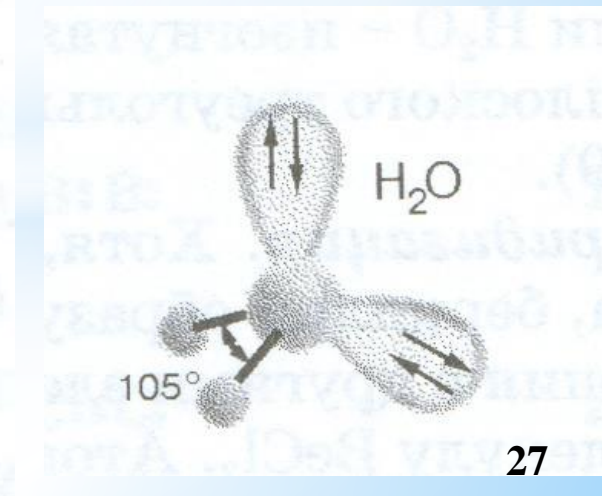
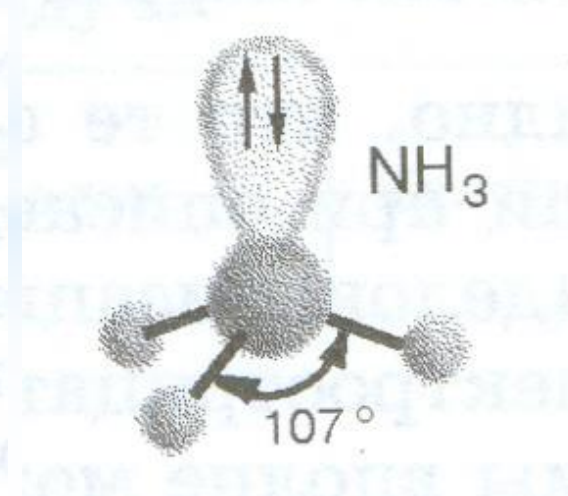
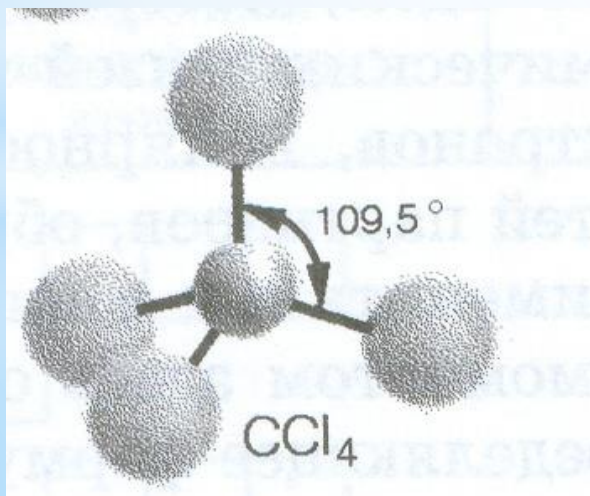
Число несвязывающих электронных пар:

0 1 2

Валентный угол:

109,28° 107° 104,5°

Строение молекулы:



Теория Гиллеспи (Метод ОЭПВО)

5. Влияние **несвязывающей** электронной пары тем сильнее, чем дальше от ядра она находится:

Молекула	H_2O	H_2S	H_2Se
Валентный угол	$104,5^\circ$	92°	91°

6. Влияние **несвязывающей** электронной пары тем сильнее, чем больше электроотрицательность атома – партнёра:

Молекула	OH_2	OF_2
Валентный угол	$104,5^\circ$	$103,2^\circ$

2. Ковалентная связь

Метод МО

Поведение электрона в молекуле описывается волновой функцией (ψ_{MO}), которую можно представить как линейную комбинацию атомных волновых функций (ψ_{AO}).

$$\psi_{MO} = a\psi_{AO(1)} \pm b\psi_{AO(2)}$$

Сложение атомных волновых функций соответствует повышению электронной плотности между ядрами, понижению энергии системы в целом и образованию **связывающей** волновой функции Ψ^{cb}_{MO} .

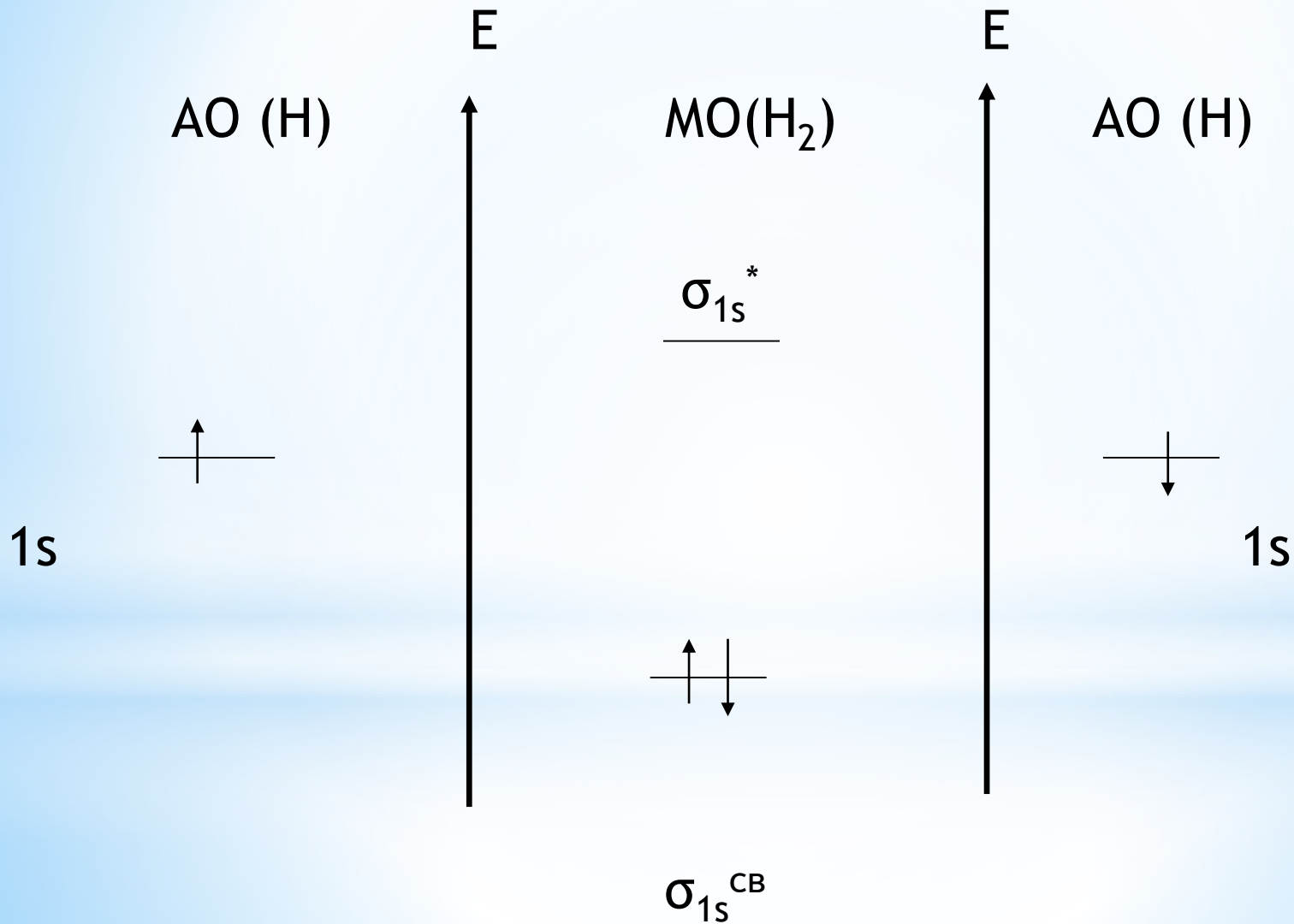
Вычитание атомных волновых функций соответствует понижению электронной плотности между ядрами атомов, повышению энергии системы в целом, образованию **разрыхляющей** волновой функции Ψ^*_{MO} .

2. Ковалентная связь

Правила при использовании ЛКАО в методе МО:

- * число МО равно общему числу исходных АО;
- * число связывающих МО (MO_{cb}) равно числу разрыхляющих МО (MO^*);
- * связывающие МО более выгодны по энергии, чем исходные АО, а разрыхляющие МО – менее выгодны, чем исходные АО;

2. Ковалентная связь



2. Ковалентная связь

Выводы из диаграммы МО:

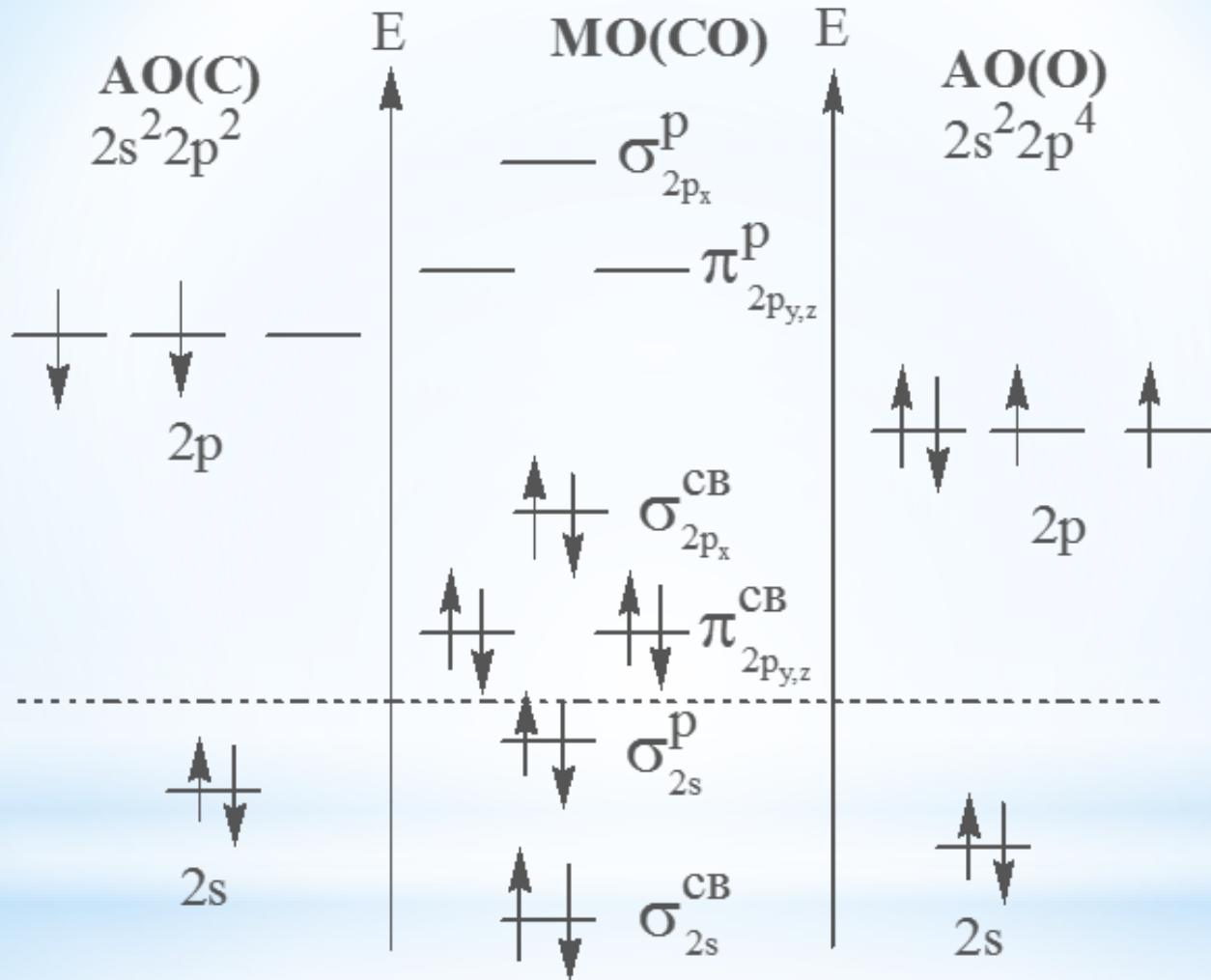
1. Порядок связи:

$$ПС = \frac{n_e(\text{на связ.МО}) - n_e(\text{на разр.МО})}{2}$$

2. Магнитные свойства:

- **парамагнитны** молекулы (есть неспаренные электроны на МО)
- **диамагнитны** молекулы (нет неспаренных электронов)

2. Ковалентная связь

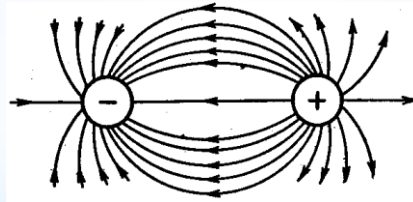


В диаграмме МО гетероядерной молекулы АО более электроотрицательного атома расположены ниже.

3. Ионная связь (ИС)

- образуется за счет электростатического взаимодействия между ионами противоположного знака.

Ненаправленность ИС связана с тем, что электростатическое поле иона обладает сферической симметрией и способно притягивать ионы противоположного знака в любом направлении.



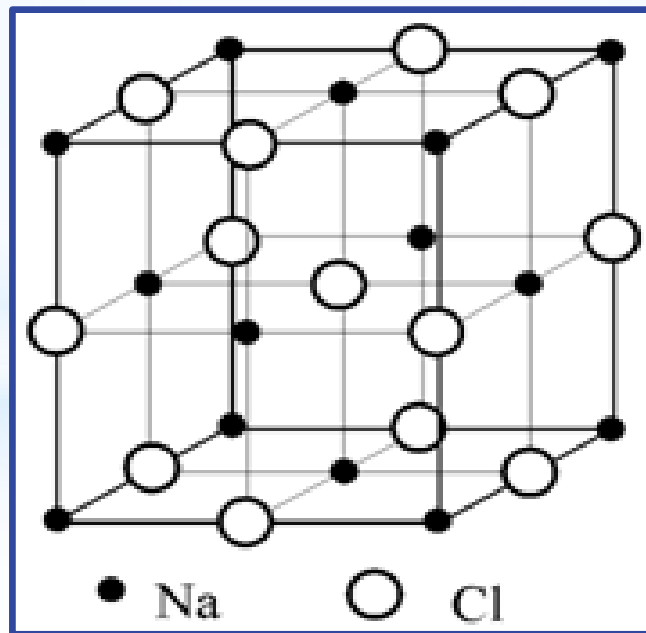
Ненасыщаемость – это способность иона данного знака притягивать к себе переменное количество ионов противоположного знака.

3. Ионная связь

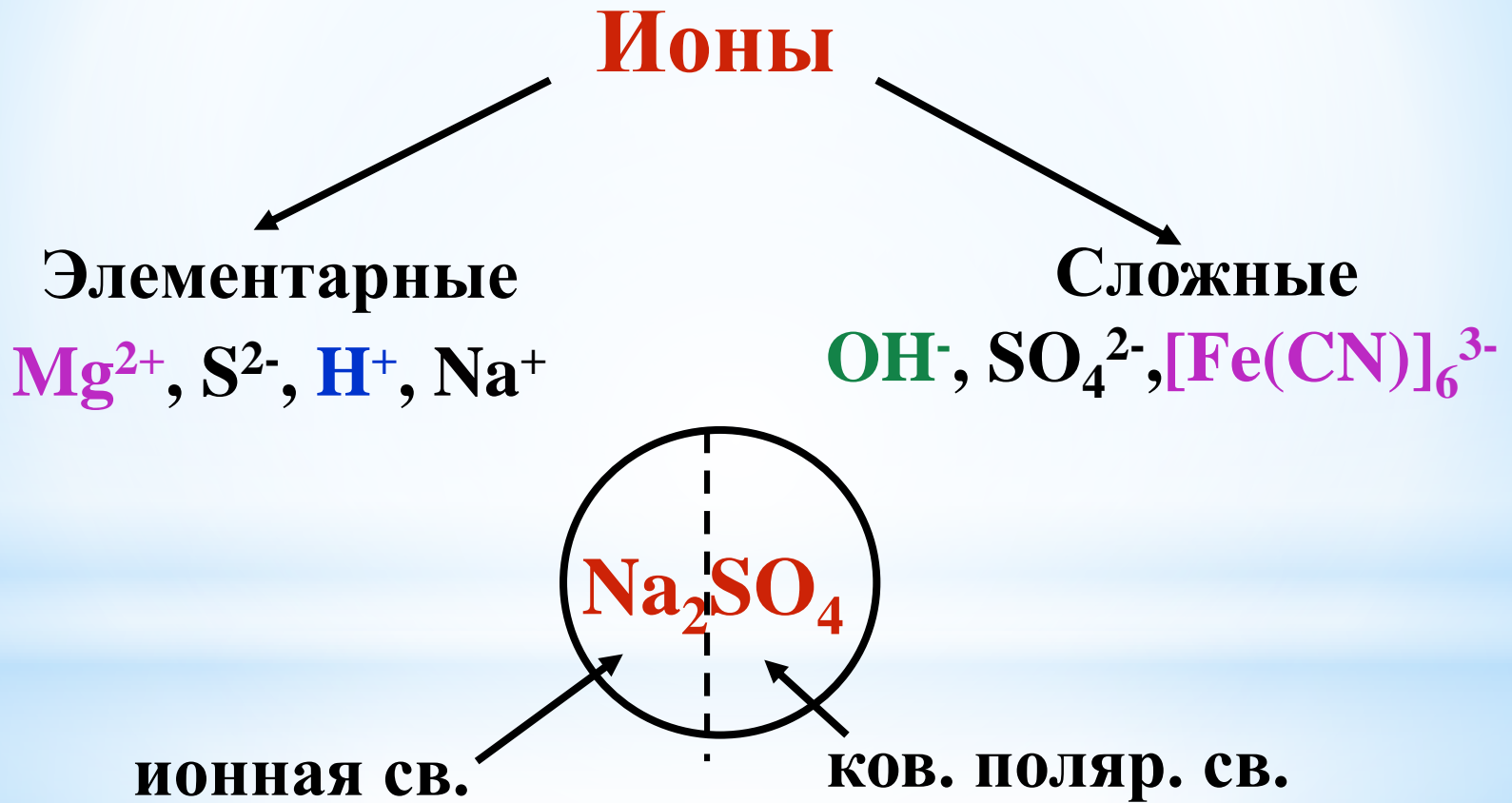
При разности электроотрицательностей атомов $\Delta\chi > 1,8$ (по шкале Полинга) - это ионная связь, $\Delta\chi < 1,8$ – ковалентная связь.



$$\Delta\chi = 3,0 (\text{Cl}) - 0,9 (\text{Na}) = 2,1$$



3. Ионная связь



3. Ионная связь

- * При обычной температуре соединения с ИС существуют в твёрдом состоянии.
- * Ионные кристаллы – изоляторы.
- * Ионные кристаллы имеют высокие температуры плавления и кипения.
- * Ионные кристаллы плавятся с увеличением объёма.
- * Соединения с ИС хорошо растворимы в воде, их растворы электропроводны.

3. Ионная связь

Поляризация - – смещение электронной плотности в результате электростатического воздействия на частицу.

Процесс является двусторонним. Ионы и молекулы обладают поляризующей способностью и поляризуемостью.

Поляризуемость тем больше, чем больше радиус частицы и меньше ее заряд.

Поляризующая способность тем больше, чем меньше радиус частицы и больше ее заряд.

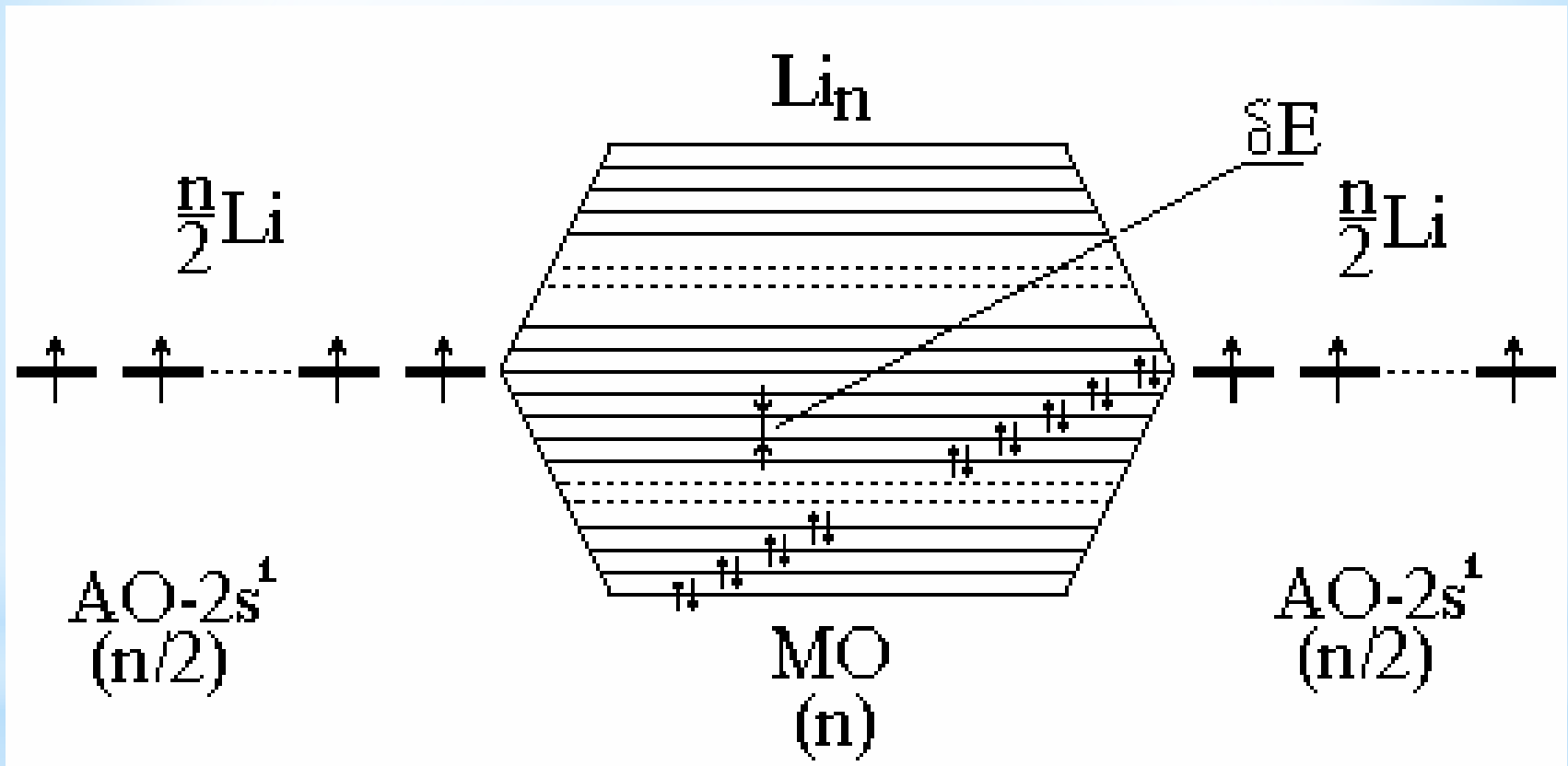
4. Металлическая связь

- образуется при взаимодействии положительных ионов металлов и валентных электронов, а также между атомам

$$E_{\text{св}} = 100-200 \text{ кДж/моль}$$



4. Металлическая связь



4. Металлическая связь

Зонная теория (САМОСТОЯТЕЛЬНО)

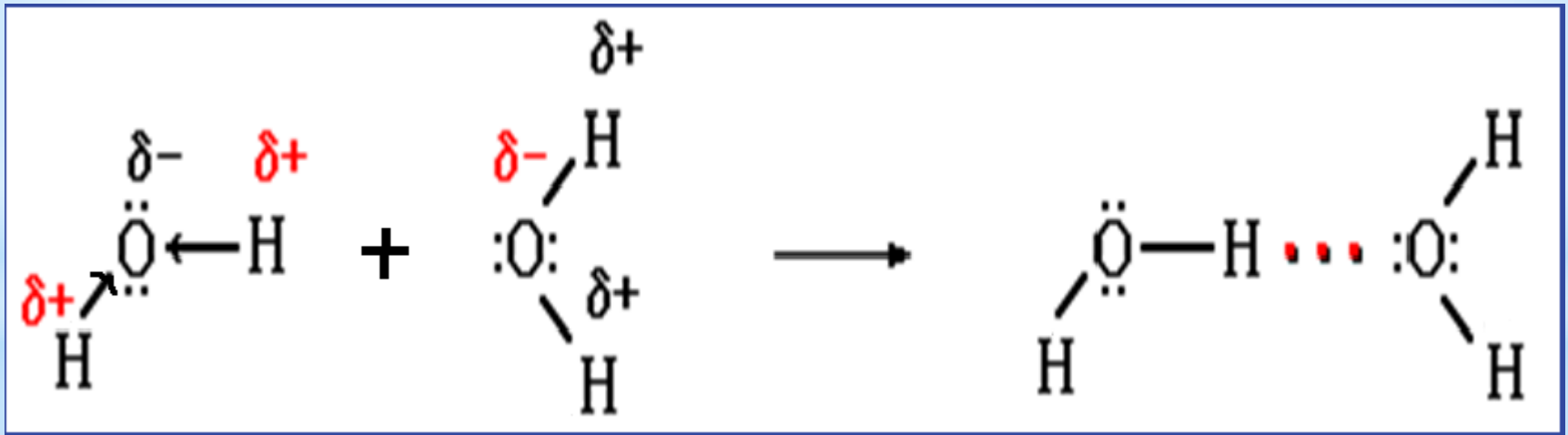
Зона заполненная электронами называется валентной.
Зона свободная от электронов называется зоной проводимости.



5. Водородная связь

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

$$E_{\text{св}} = 20-40 \text{ кДж/моль}$$



5. Водородная связь

Наличие водородных связей влияет на свойства веществ:

1. Вещества состоят из ассоциированных молекул.
2. Увеличивается плотность вещества при переходе из твёрдого состояния в жидкое (вода).
3. Вещества обладают более высокими температурами кипения и плавления.

6. Межмолекулярные химические связи

Тип	Определение	Примеры
Дисперсионные	взаимодействие между двумя неполярными молекулами	H_2 и N_2 , H_2 и H_2
Индукционные	взаимодействие между полярной и неполярной молекулами	HCl и O_2 , NH_3 и N_2
Ориентационные	взаимодействие между двумя полярными молекулами	HCl и HCl HBr и HCl

Влияние сил Ван-дер-Ваальса на свойства веществ

- Способность всех газов при соответствующих условиях конденсироваться.

- Закономерное изменение температуры кипения газообразных однотипных веществ:

He	Ne	Ar	Kr	Xe	Rn
-269	-246	-186	-153	-108	-62

- Усиление агрегации веществ:

F ₂	Cl ₂	Br ₂	I ₂
газ	газ	жид.	тв.

«Химическая связь»

Лектор: к.т.н., Мачехина Ксения Игоревна

<http://portal.tpu.ru/SHARED/m/MACHEKHINAKSU>

Email: mauthksu@yandex.ru

Научный парк ТПУ ауд. 308