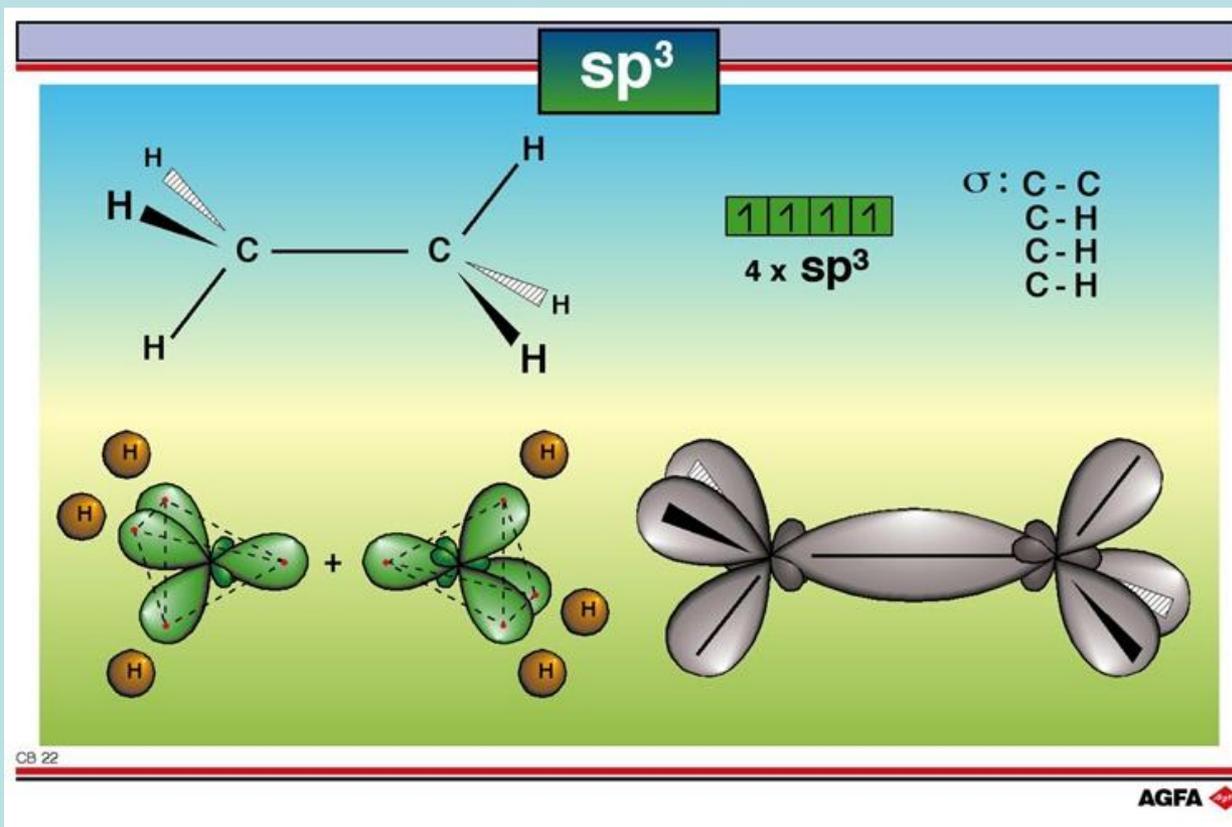


ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ



Понятие химической связи

Химическая связь – это различные виды взаимодействий, обуславливающих существование многоатомных соединений (молекул, ионов, радикалов, кристаллов).

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

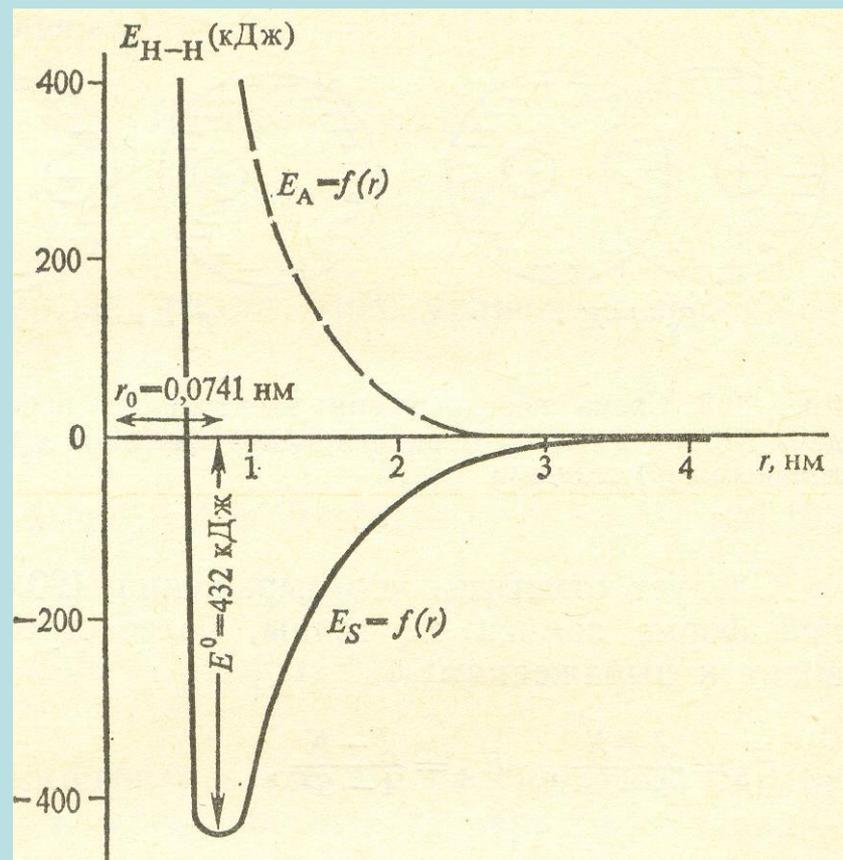
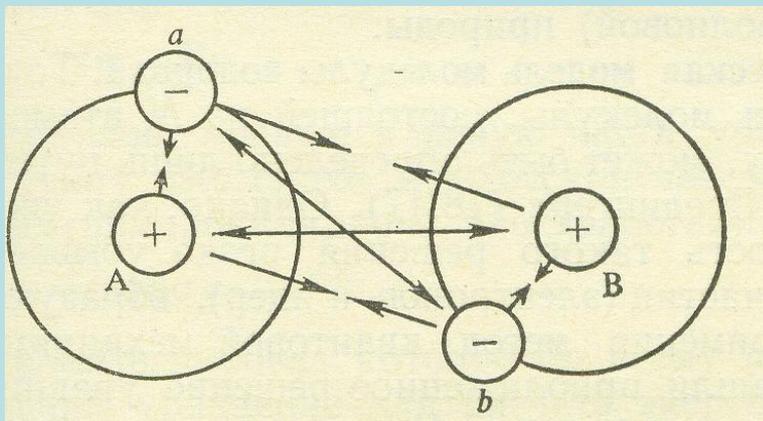
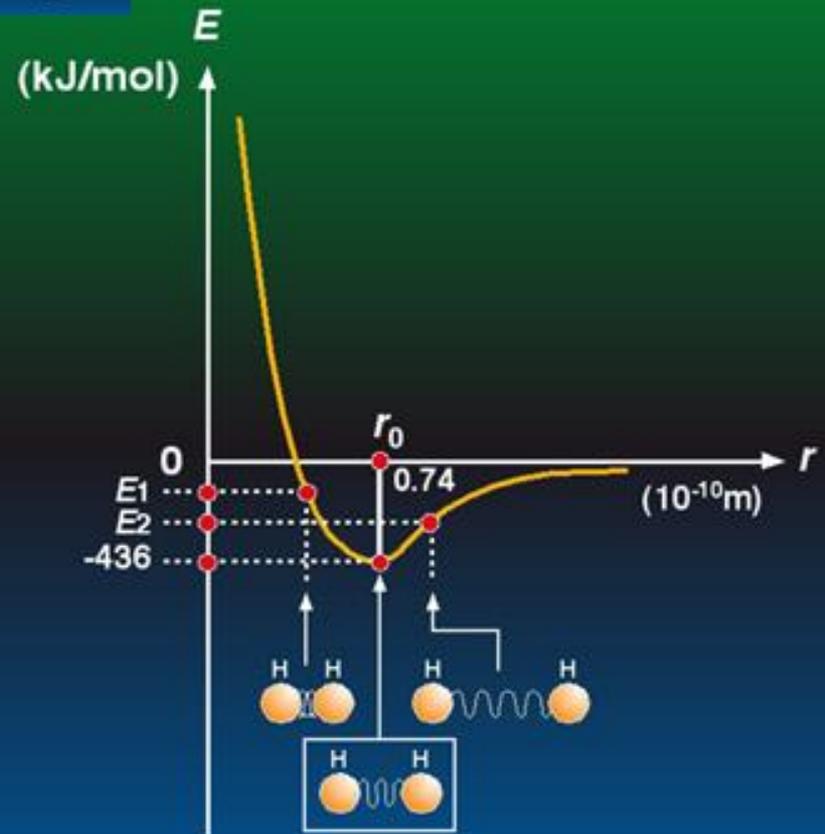
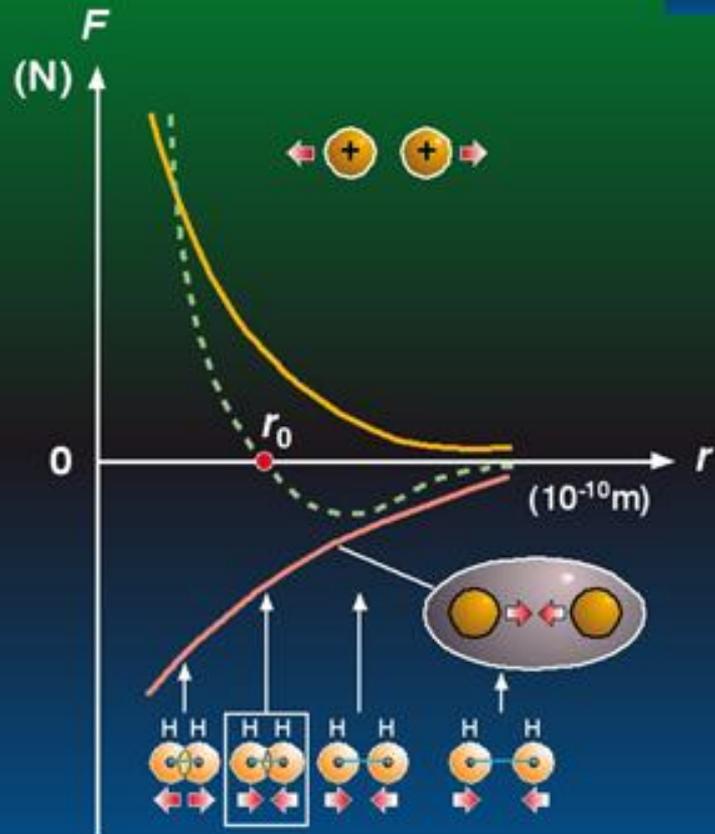


Схема Гейтлера и Лондона для расчета связи в атоме Н

H₂



Виды химической связи

- Ковалентная
- Ионная
- Металлическая
- Водородная (внутри- и межмолекулярная)

- Межмолекулярные силы
(силы Ван-дер-Ваальса)

Характеристики химической связи

- Длина химической связи ($\ell_{\text{св.}}$) – это межъядерное расстояние в молекулах или кристаллах

	HF	HCl	HBr	HI
$\ell_{\text{св.}}, \text{Å}$	0,92	1,28	1,42	1,62

- Энергия связи ($E_{\text{св}}$) – это энергия, которая выделяется при образовании химической связи или затрачивается на её разрыв.

Чем больше длина связи, тем меньше её энергия!

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

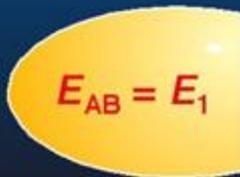
AB

+

ΔE



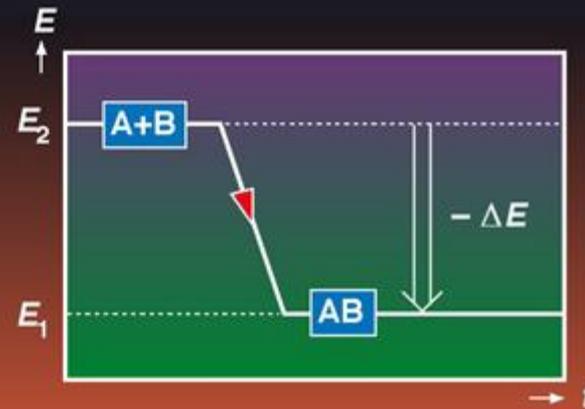
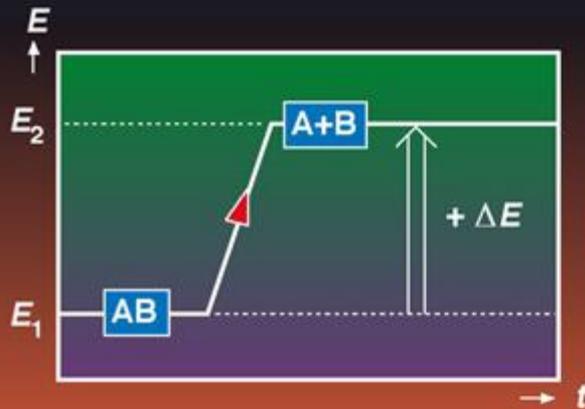
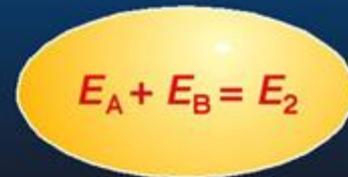
A + B



+

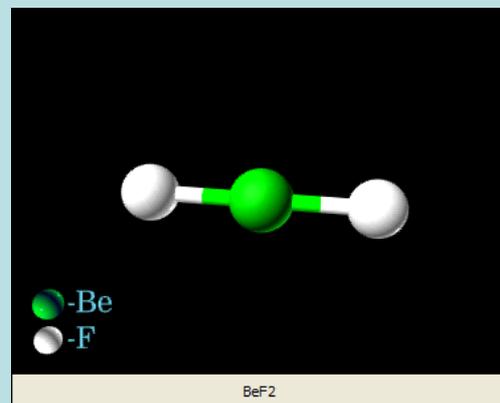
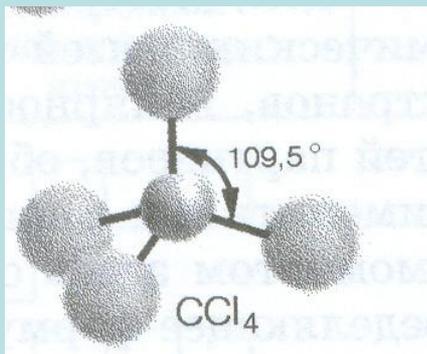
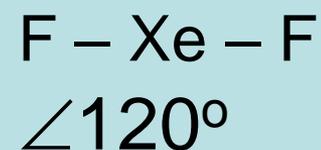
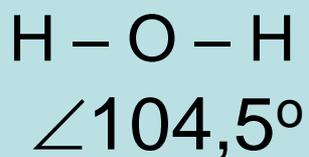


=



CB 01b

- Валентный угол – это угол между связями, которые образуют атомы в молекуле.



Полярность связи – это смещение электронной плотности к более электроотрицательному атому.

Полярность связи характеризуется дипольным моментом (μ), эффективным зарядом (δ) и степенью ионности.

$$\mu = \ell \cdot q$$

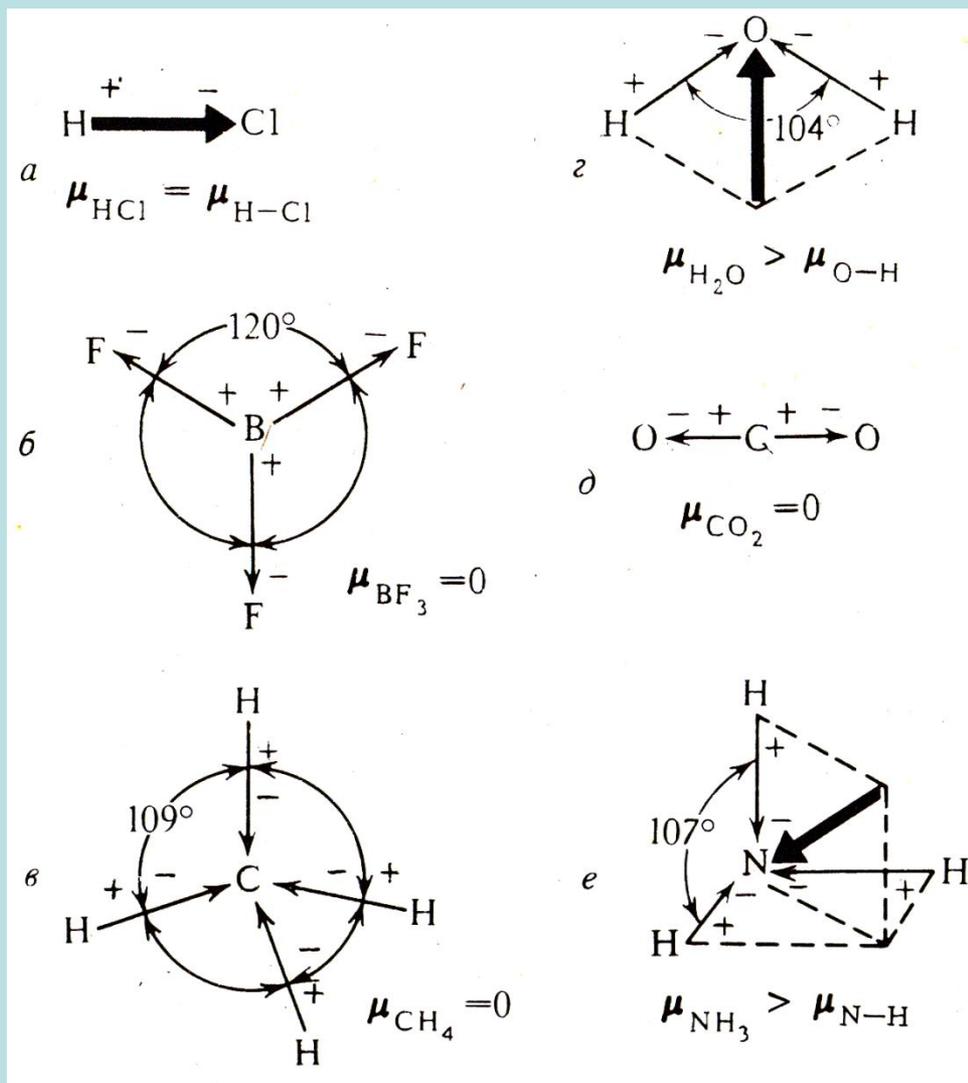
ℓ - длина диполя

q – абсолютная величина заряда в кулонах.

$$[\mu] = \text{Кл} \cdot \text{м} \text{ или } \text{D} \text{ (Дебай)}$$

$$1 \text{ D} = 3,33 \cdot 10^{-30} \text{ Кл} \cdot \text{м}$$

Различают дипольный момент связи и дипольный момент молекулы



Эффективный заряд – безразмерная
величина



Степень ионности составляет 41%.

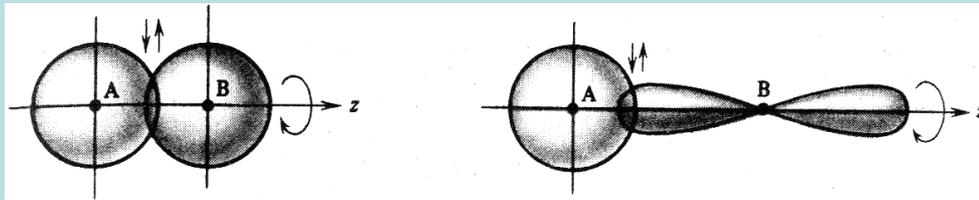
Ковалентная связь.

Метод валентных связей (Метод ВС).

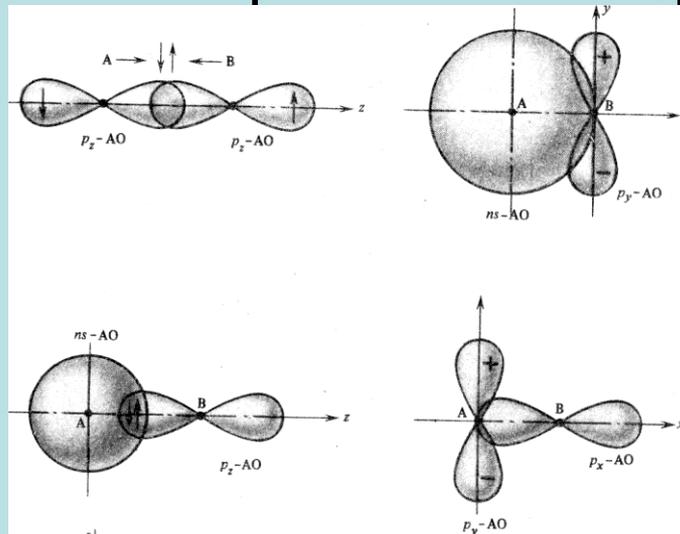
Основные положения.

- Химическая связь образована за счёт обобществления электронов с антипараллельными спинами.
- Химическая связь – двухцентровая, двухэлектронная, локализованная между двумя атомами.

Ковалентная связь тем прочнее, чем больше область перекрытия электронных облаков:



Перекрывающиеся атомные орбитали должны быть близки по энергии и симметрии:



Механизмы образования ковалентной связи

Различают два механизма образования ковалентной связи (КС):

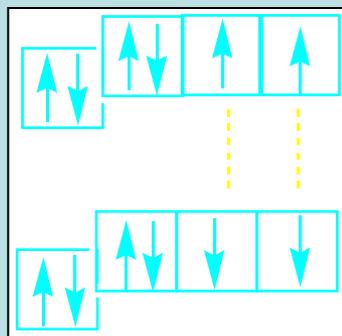
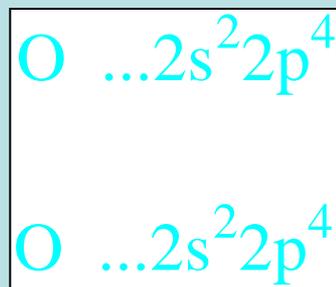
- Обменный
- Донорно-акцепторный

Обменный механизм образования КС

- атомы имеют неспаренные электроны для образования химической связи.

Образование молекулы кислорода (O_2) методом ВС:

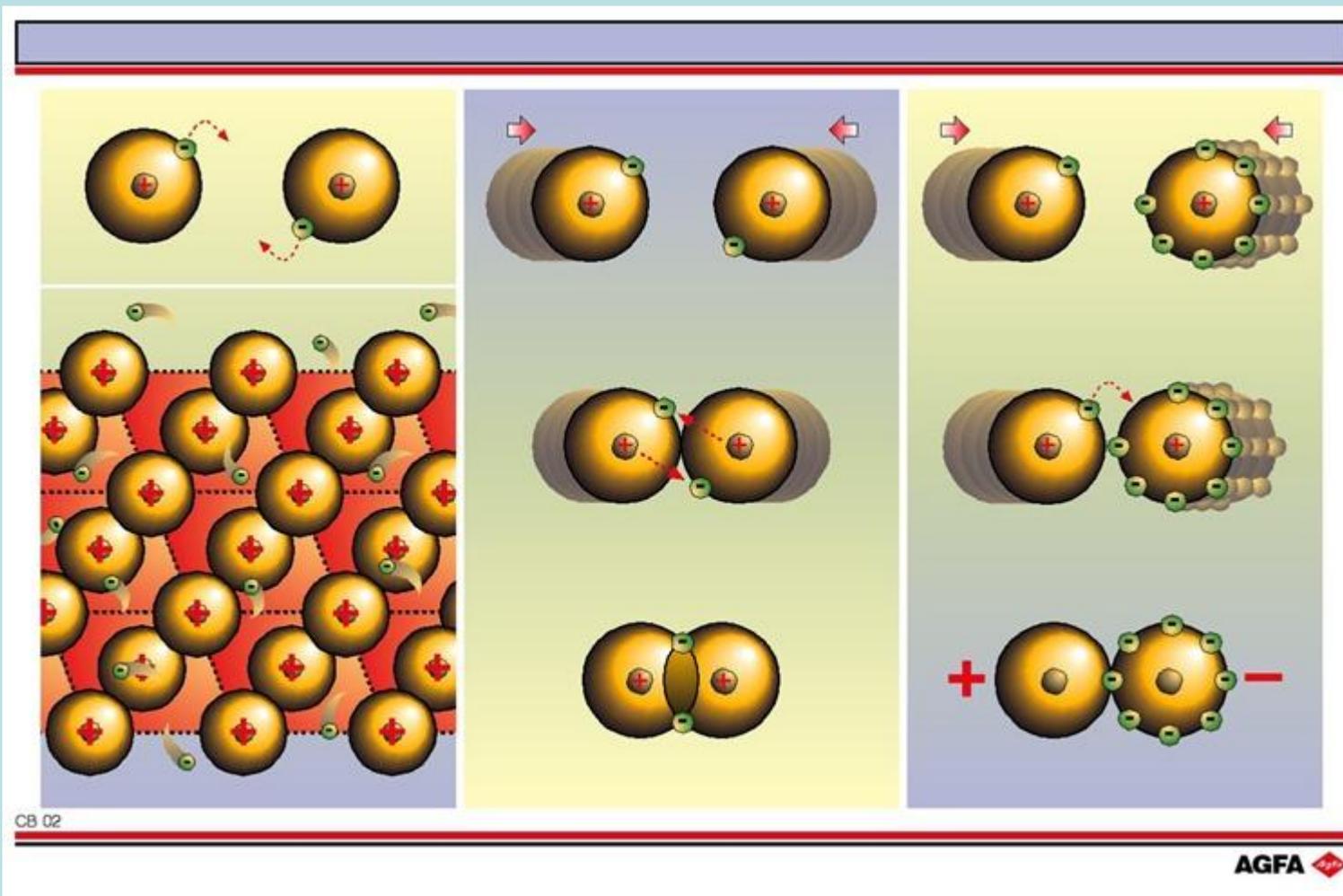
Схема ВС:



$$КС(O_2) = 2$$

Число общих электронных пар называется **кратностью связи** (КС).

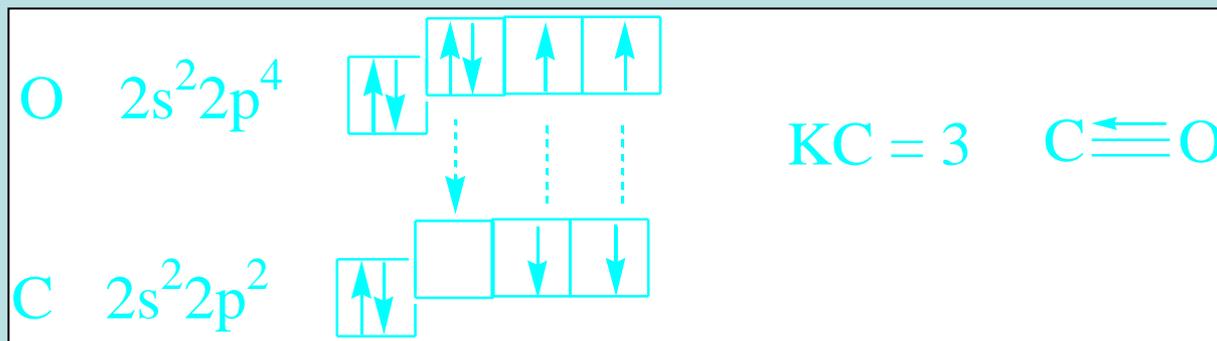
Чем больше КС, тем больше её $E_{св}$, тем более прочной является молекула.



Металлическая связь, ковалентная связь, ионная связь

Донорно-акцепторный механизм образования КС

- образование ХС за счёт электронной пары одного атома и вакантной АО другого атома:
например, образование молекулы СО:

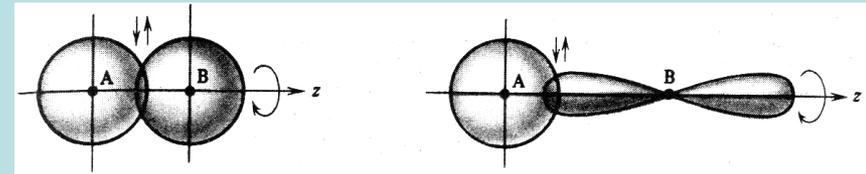


С – акцептор электронной пары

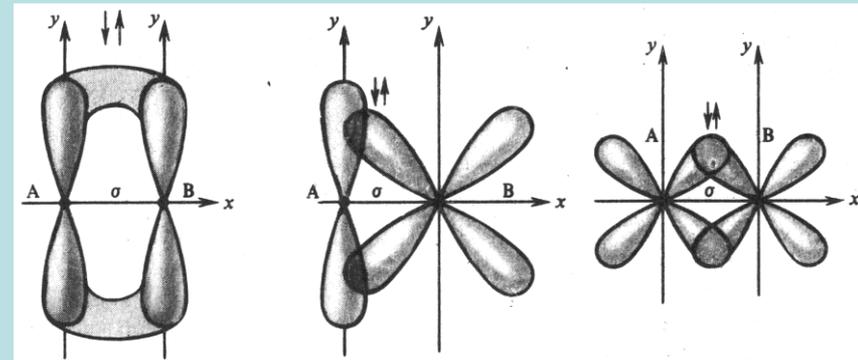
О – донор электронной пары

Типы перекрывания АО

σ -СВЯЗЬ - область общей электронной плотности лежит на линии связи ядер атомов.



π -СВЯЗЬ - область общей электронной плотности перпендикулярна линии связи ядер атомов.



σ

