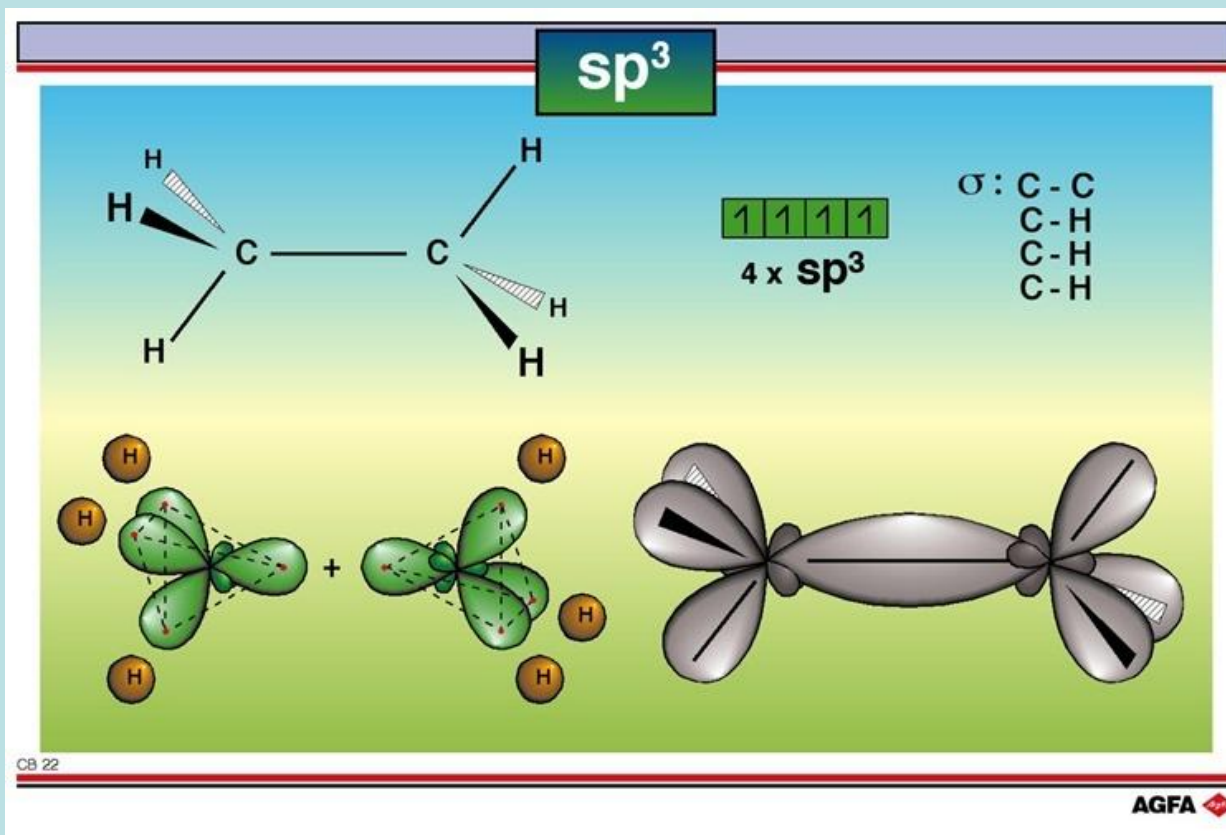
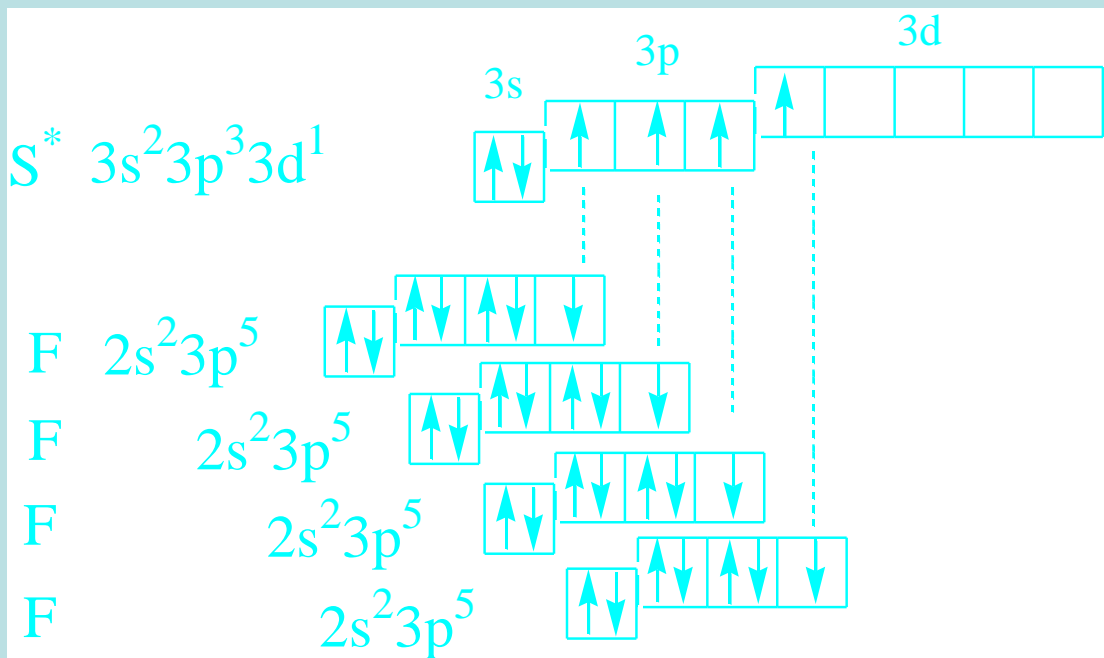


# ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ/ часть 3



# Строение молекулы SF<sub>4</sub>

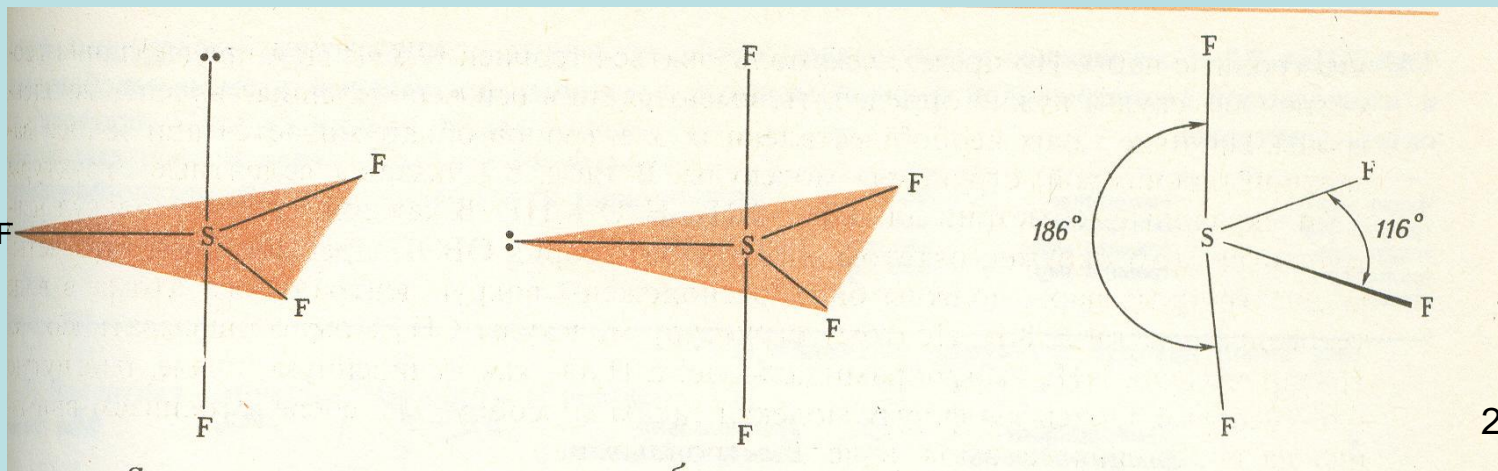


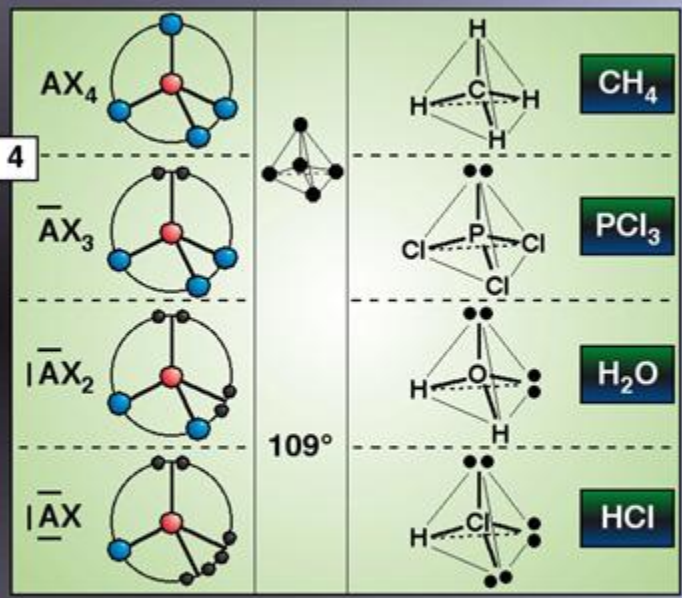
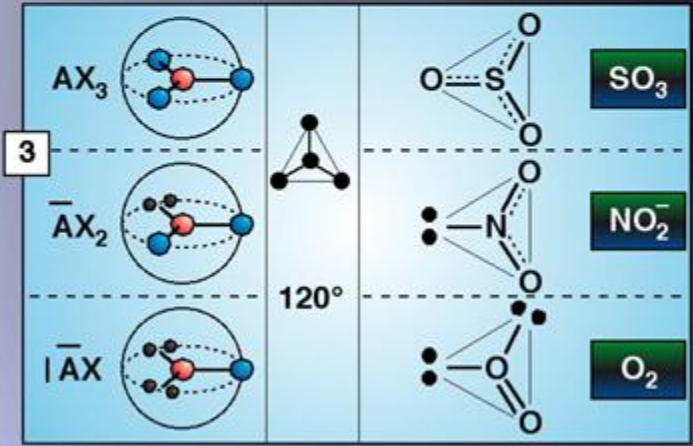
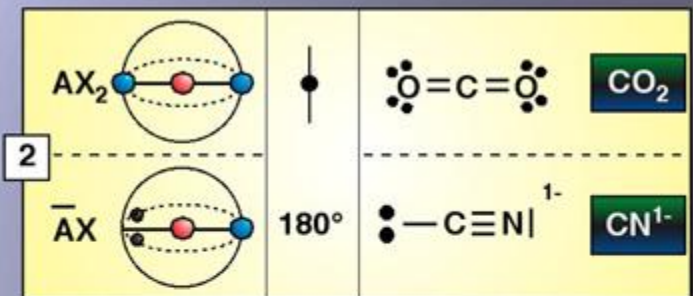
1) Тип гибридизации АО (S):  $sp^3d$ .

2) Расположение АО в пространстве - тригональная бипирамида.

3) Одна несвязывающая  $\bar{e}$  пара

3) Строение молекулы – «качели».





## Недостатки метода ВС

Метод ВС не объясняет:

- существование молекулярных ионов  $\text{H}_2^+$ ,  $\text{O}_2^- \dots$
- магнитные свойства молекул
- изменение прочности связи при отрыве  $\bar{e}$  от молекулы
- существование электронодефицитных молекул, например  $\text{B}_2\text{H}_6$

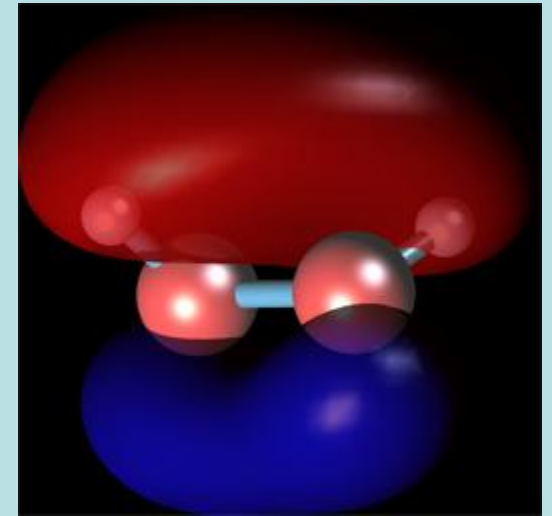
# Метод молекулярных орбиталей (МО)

## Основные положения метода МО

- При образовании молекулы атомы теряют свою индивидуальность, поэтому молекула представляет собой совокупность ядер и  $\bar{e}$ .
- Каждый  $\bar{e}$  принадлежит молекуле в целом и движется в поле её ядер.
- Химическая связь нелокализованная, многоцентровая.

# Метод МО ЛКАО

МО ЛКАО – молекулярная орбиталь есть линейная комбинация атомных орбиталей



МО пероксида водорода

Поведение  $\psi$  в молекуле описывается молекулярной волновой функцией ( $\psi_{\text{МО}}$ ), которую можно представить как **линейную комбинацию** атомных волновых функций ( $\psi_{\text{АО}}$ ).

## Метод МО ЛКАО

$\Psi(+)$ <sub>МО</sub> – связывающая МО

$\Psi(-)$ <sub>МО</sub> – разрыхляющая МО

$$\Psi_{\text{МО}} = \Psi_{\text{АО}(1)} \pm \Psi_{\text{АО}(2)}$$

$\Psi(+)$ <sub>МО</sub> – повышается  $\bar{e}$  плотность между ядрами,  $E$  системы ↓.

$\Psi(-)$ <sub>МО</sub> – понижается  $\bar{e}$  плотность между ядрами,  $E$  системы ↑.

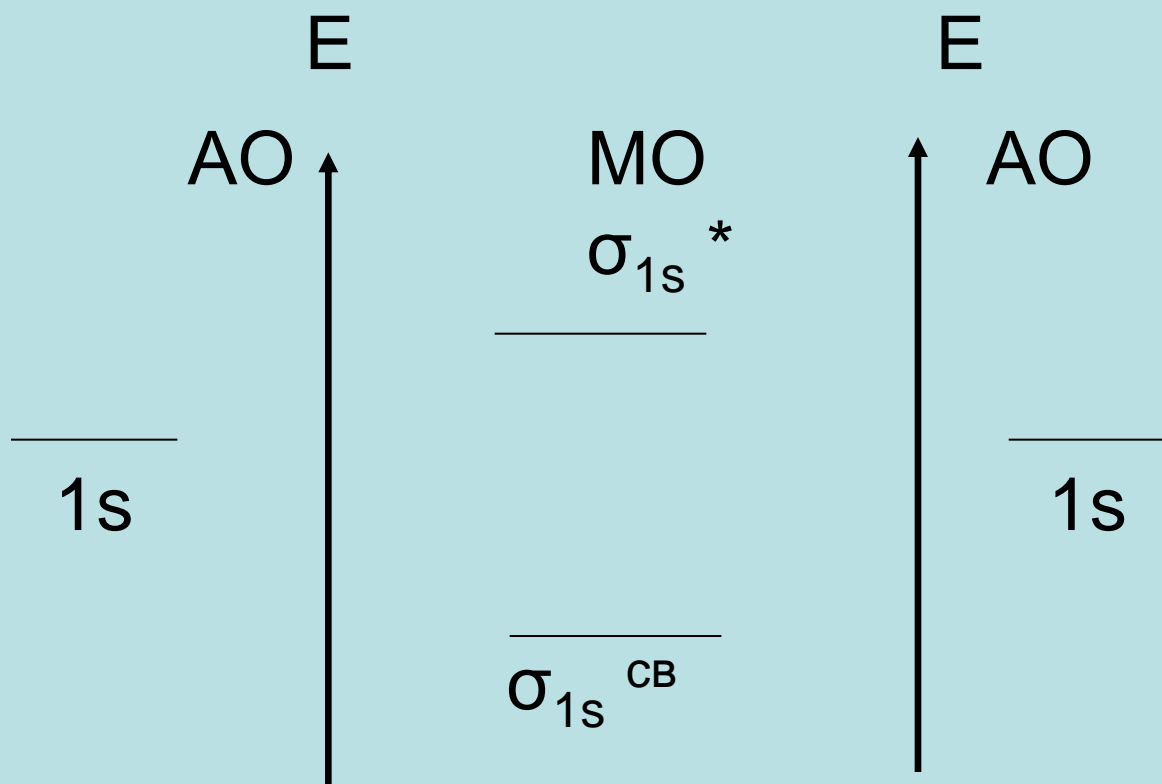
## Энергетические диаграммы МО

Конструирование МО в методе ЛКАО подчиняется **следующим правилам:**

- число МО равно общему числу исходных АО
- число связывающих МО равно числу разрыхляющих МО
- связывающие МО более выгодны по энергии, чем исходные АО, а разрыхляющие МО – менее выгодны.

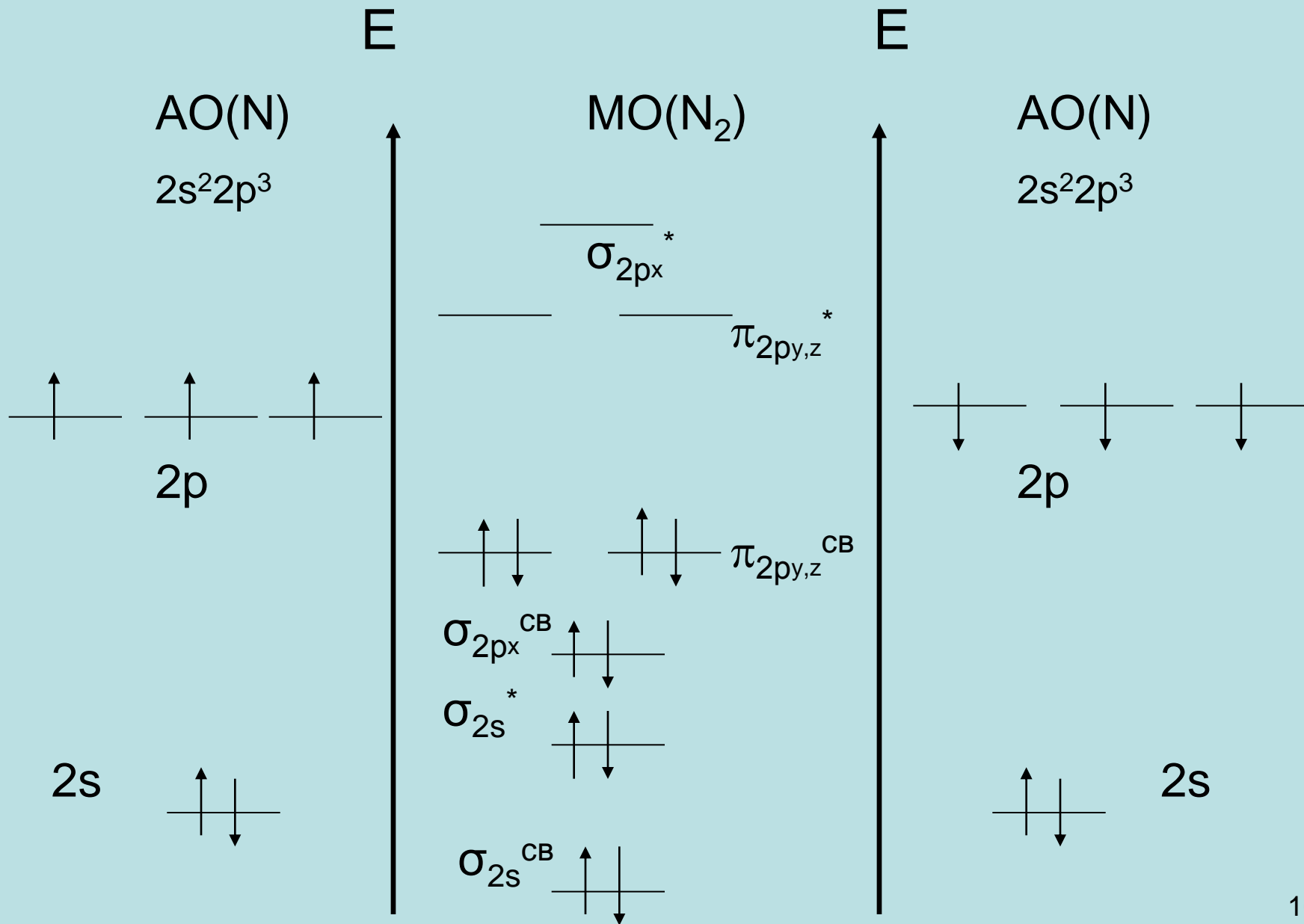


# Энергетические диаграммы МО



- Заполнение  $\bar{e}$  МО происходит в соответствии с 3 основными принципами (наименьшей энергии, Паули и правилом Гунда).

# Диаграмма МО молекулы азота



## Выводы из диаграммы МО

- Кратность связи:

$$КС = \frac{n_e(\text{св.МО}) - n_e(\text{р.МО})}{2}$$

- Магнитные свойства:

парамагнитны молекулы, имеющие  
неспаренные  $\bar{e}$  на МО;

в диамагнитных молекулах неспаренные  $\bar{e}$   
отсутствуют.

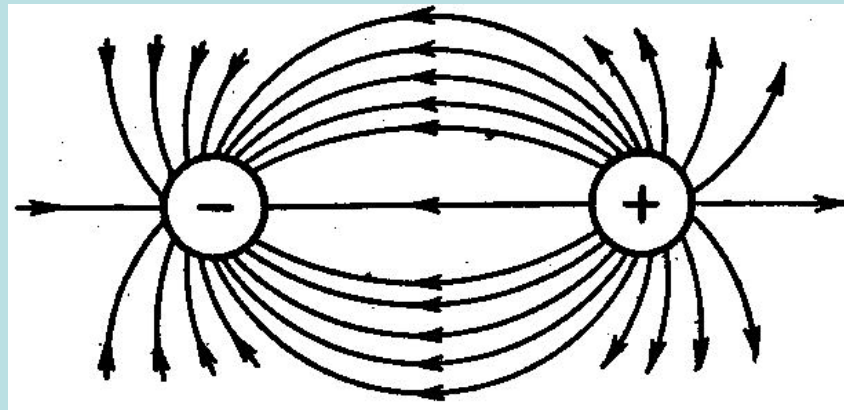
- Энергия ионизации атомов и молекулы.

# Ионная связь

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

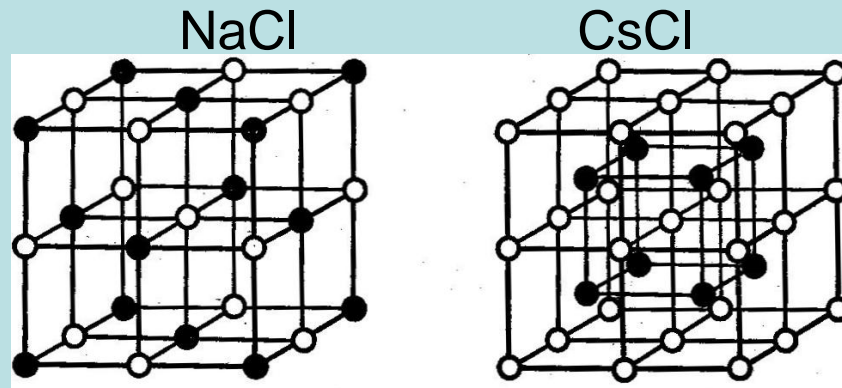
В отличие от ковалентной связи ионная связь

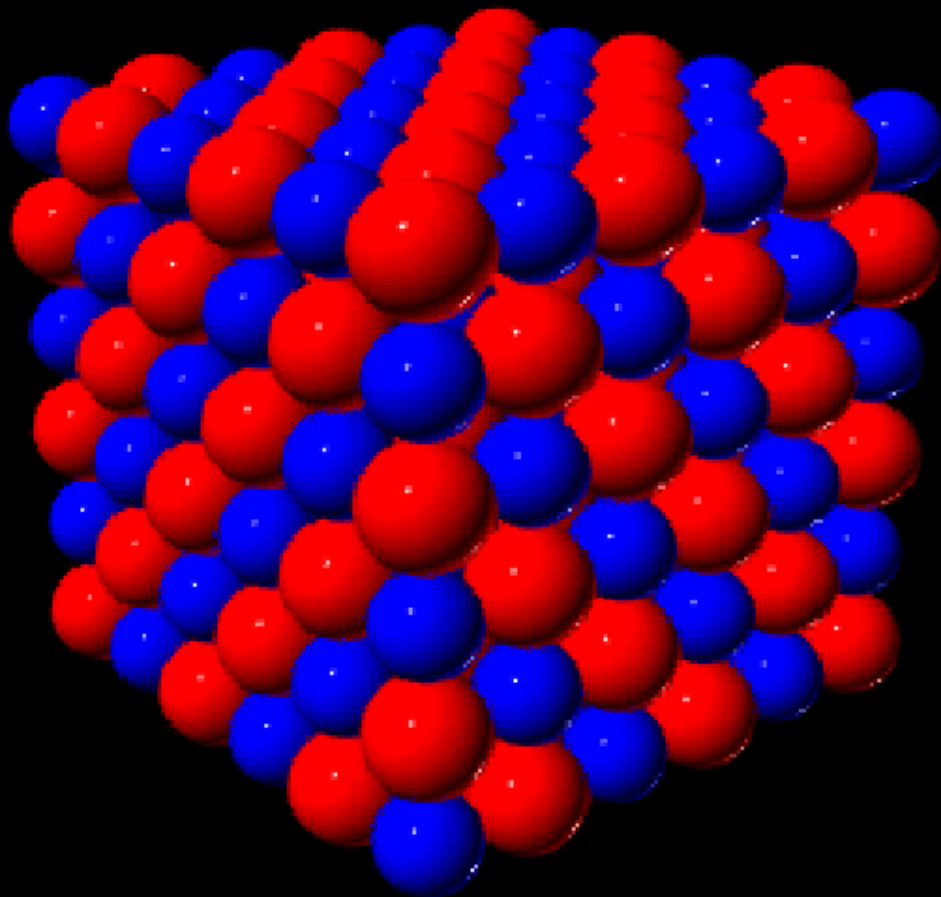
**ненаправлена и ненасыщаема.**



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

Соединения с ионной связью имеют **трёхмерные кристаллические решетки**, в узлах которых находятся ионы.

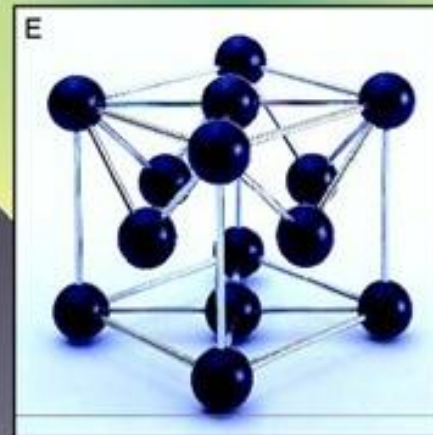
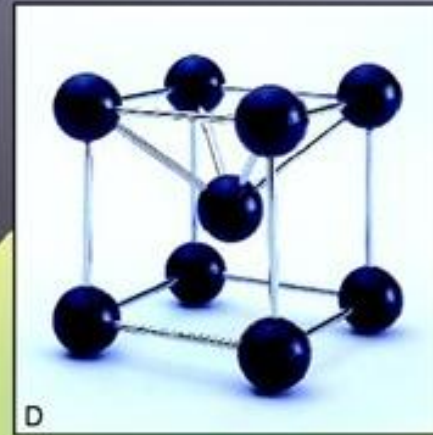
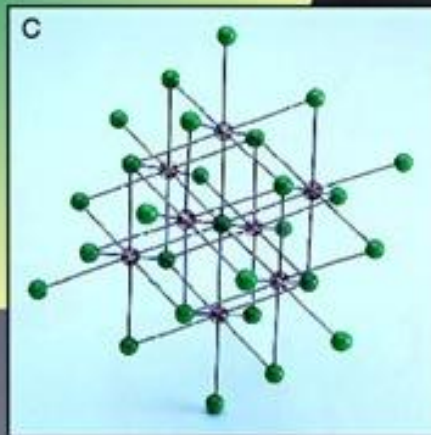
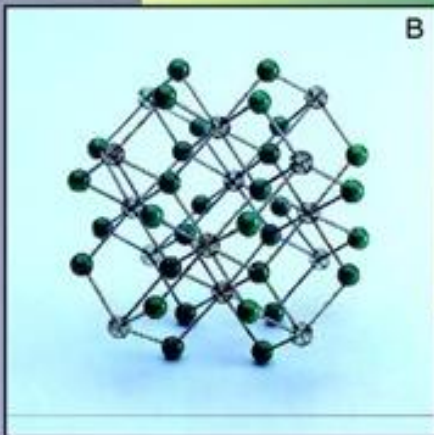
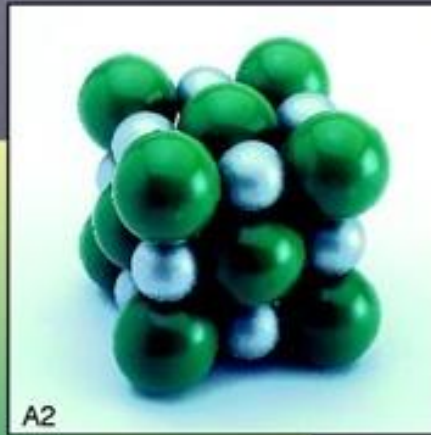
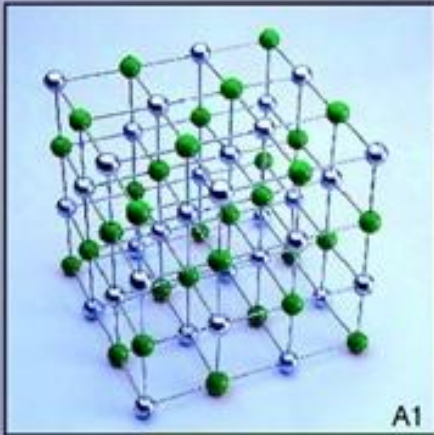




Ионы

# Свойства соединений с ионной связью

- существуют в твёрдом состоянии.
- изоляторы.
- высокие температуры плавления и кипения.
- плавятся с увеличением объёма, расплавы электропроводны
- хорошо растворимы в воде, их растворы электропроводны (**электролиты**).



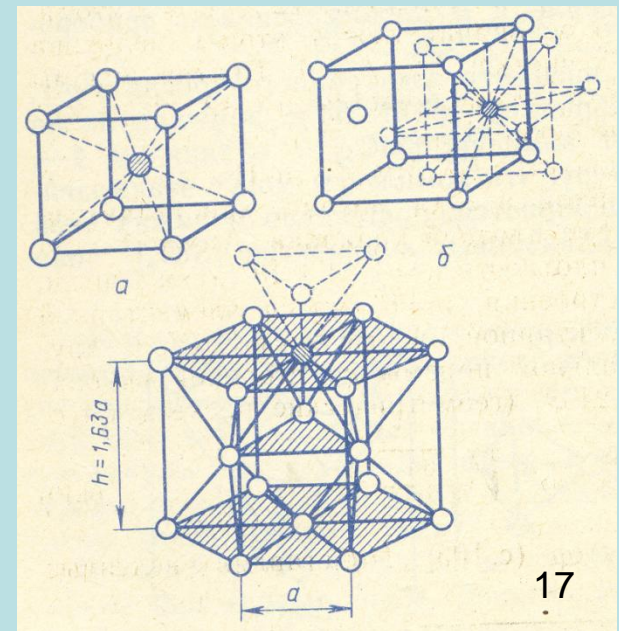
D – тип кристаллической решетки ОЦК  
 E – тип кристаллической решетки ГЦК



# Металлическая связь

## Характерные свойства металлов:

- электро- и теплопроводность
- пластичность
- металлический блеск
- КОВКОСТЬ
- образование кристаллических структур с высокими координационными числами (8-12)



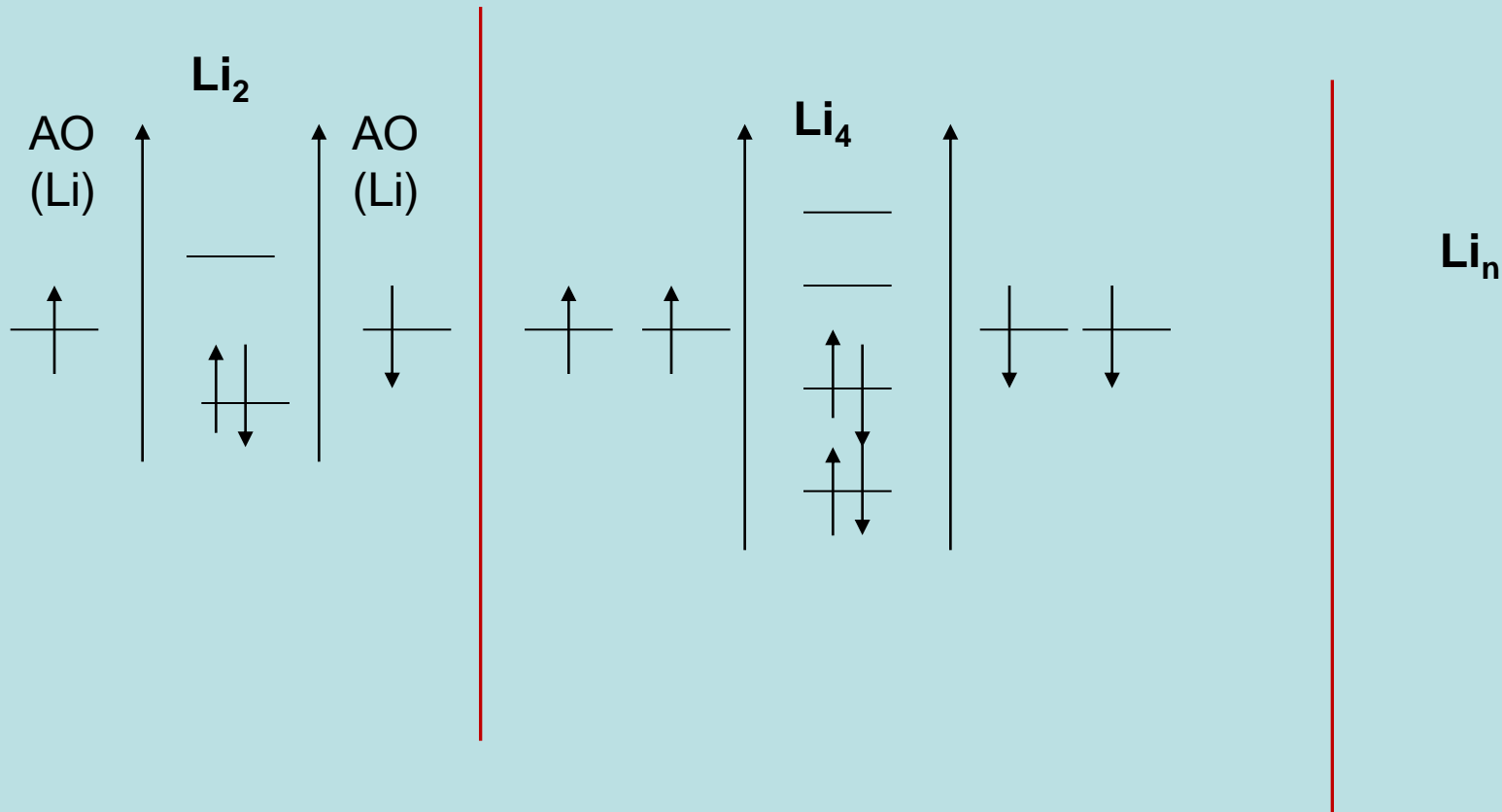
# Химическая связь в металлах

Объясняют разные теории:

1. Теория электронного газа
2. Зонная теория
- 3....

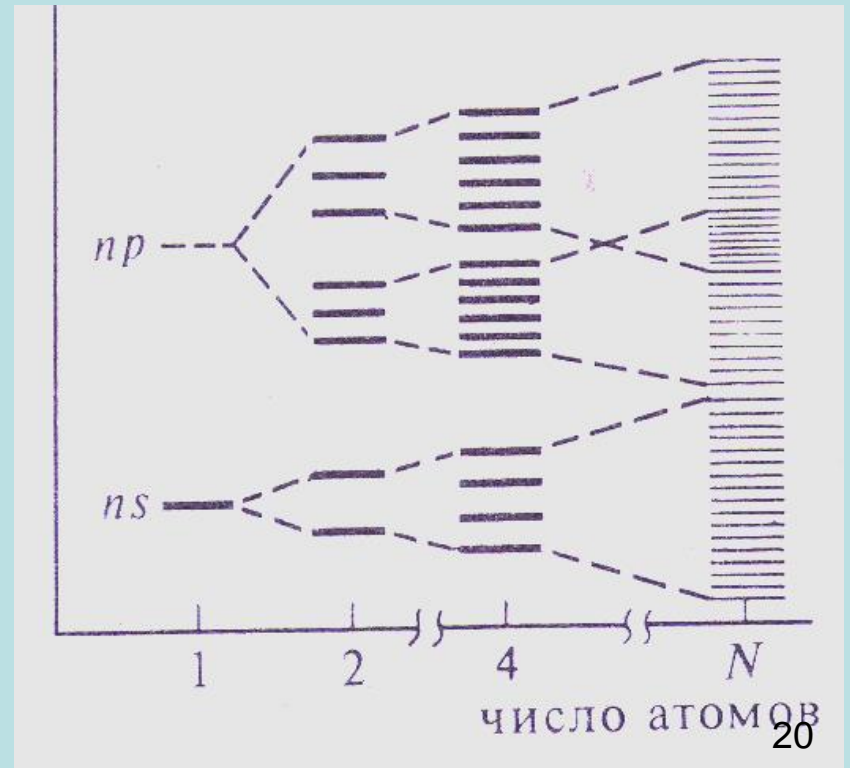
# Химическая связь в металлах. Зонная теория.

Химическую связь и свойства металлов хорошо объясняет метод МО.



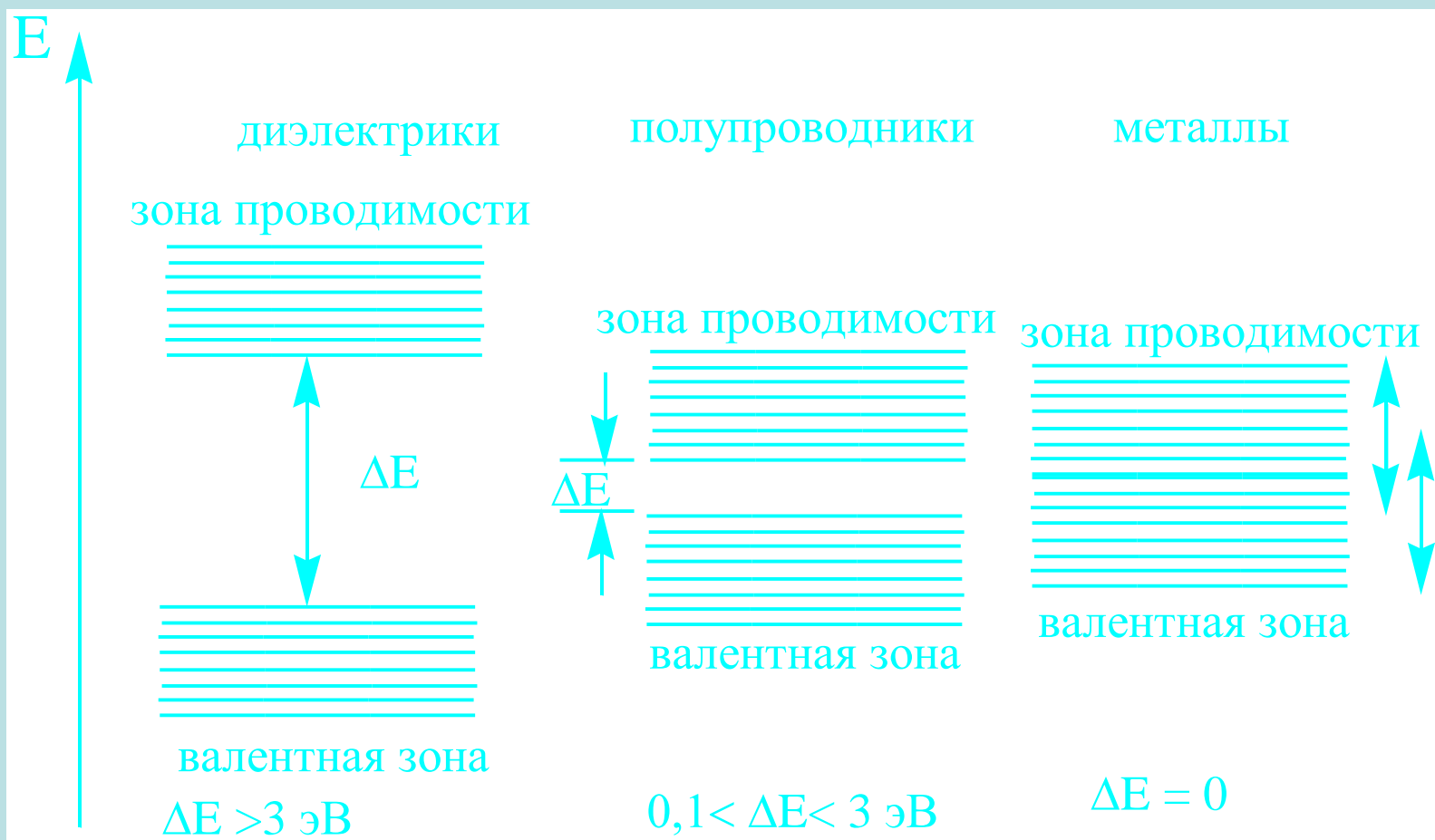
## Зонная теория

- При образовании х. с. образуются МО, охватывающие всю структуру металла.
- Число МО равно общему числу АО.
- Разность в энергии МО очень мала из-за большого числа МО.



# Зонная теория

Зона заполненная  $\bar{e}$  называется валентной. Зона свободная от  $\bar{e}$  называется зоной проводимости.



# Объяснение свойств металлов по зонной теории

## 1. Электро- и теплопроводность

У металлов валентная зона и зона проводимости перекрываются. Энергии МО близки, поэтому при небольшом возбуждении  $e$  легко переходят с одной МО на другую.

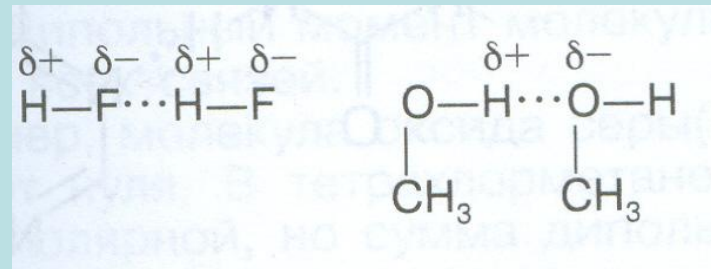
## 2. Уменьшение электропроводности при повышении $t$ .

С ростом  $t$  увеличивается амплитуда колебаний атомов в узлах кр. решетки. Увеличивается частота столкновений  $\bar{\nu}$  проводимости с атомами, длина свободного пробега  $\bar{l}$  падает и, соответственно, уменьшается их подвижность.

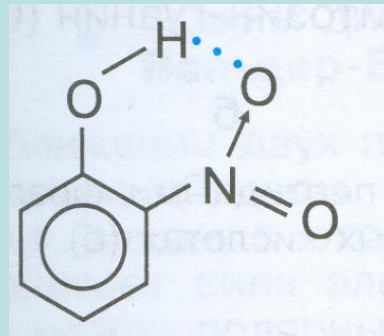
# Водородная связь (Н-связь)

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

Межмолекулярная  
Н-связь



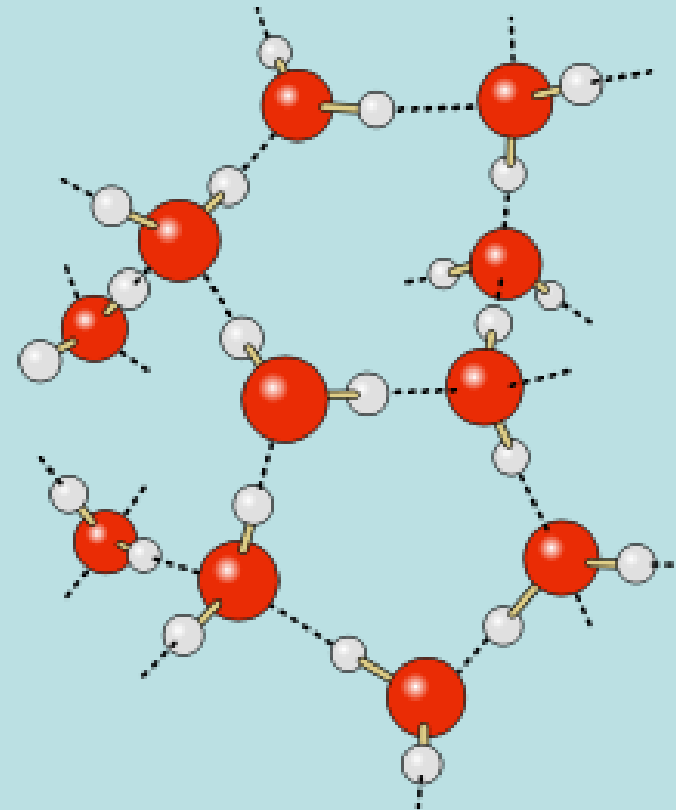
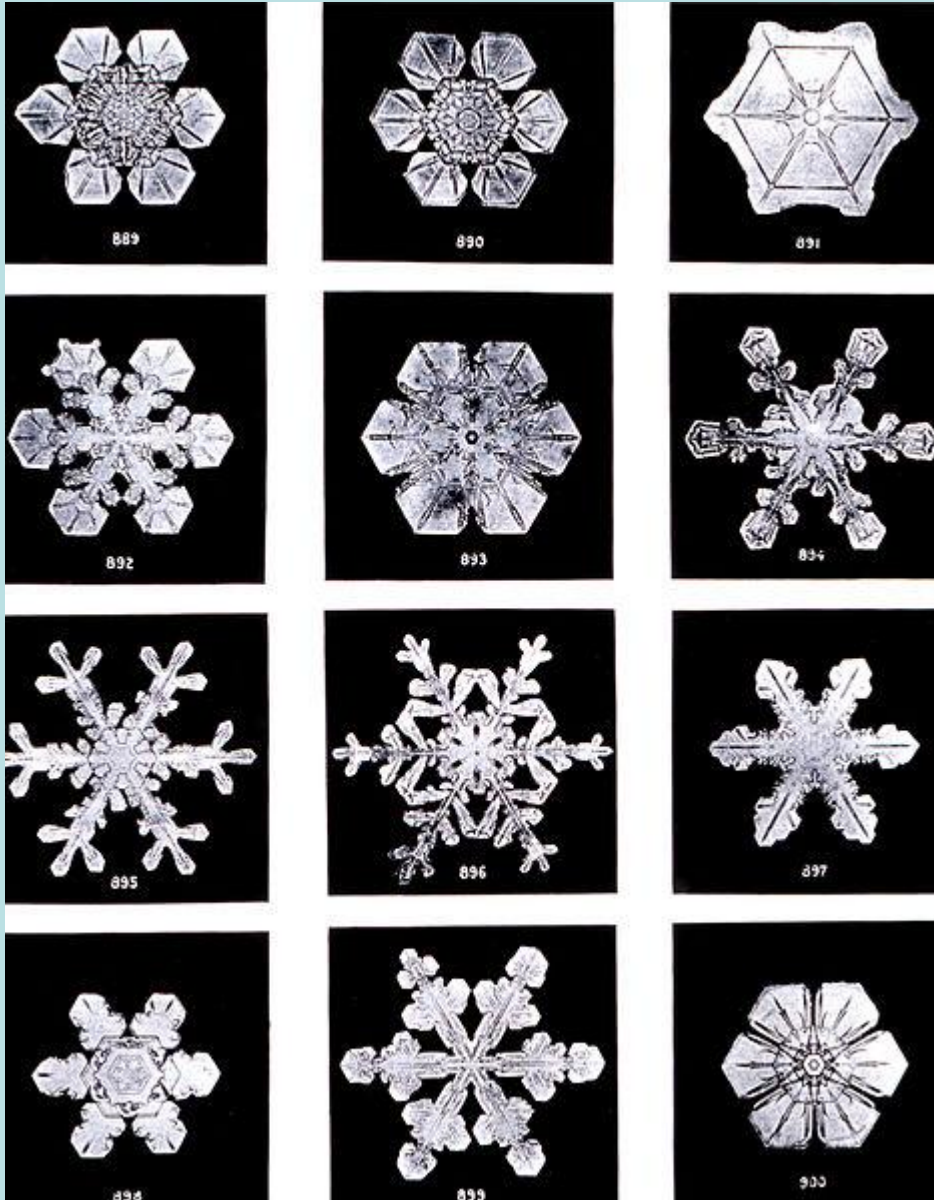
Внутримолекулярная  
Н-связь



Энергия водородной связи в среднем 20 кДж/моль.

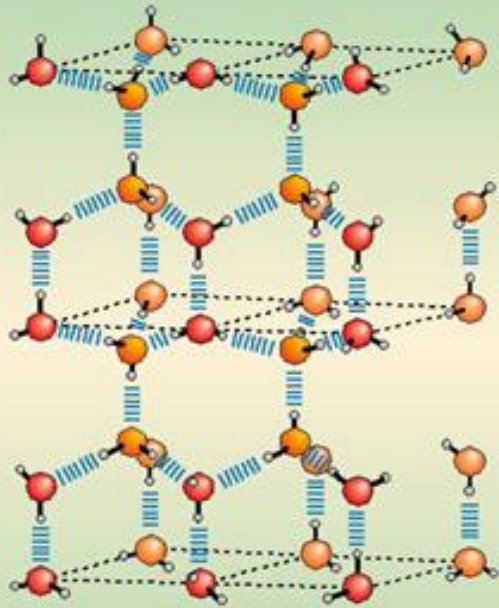


# Водородная связь между молекулами ВОДЫ



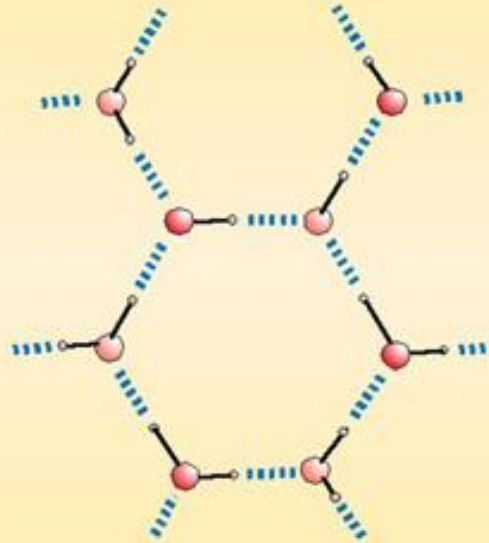
Плотность твердой воды (льда) меньше плотности жидкой воды!

$\text{H}_2\text{O (s)}$



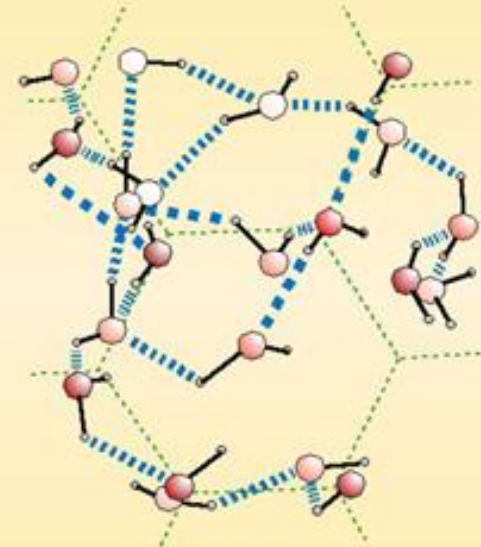
$r(\text{O} - \text{O}) = 0.276 \text{ nm}$

$\text{H}_2\text{O (s)}$



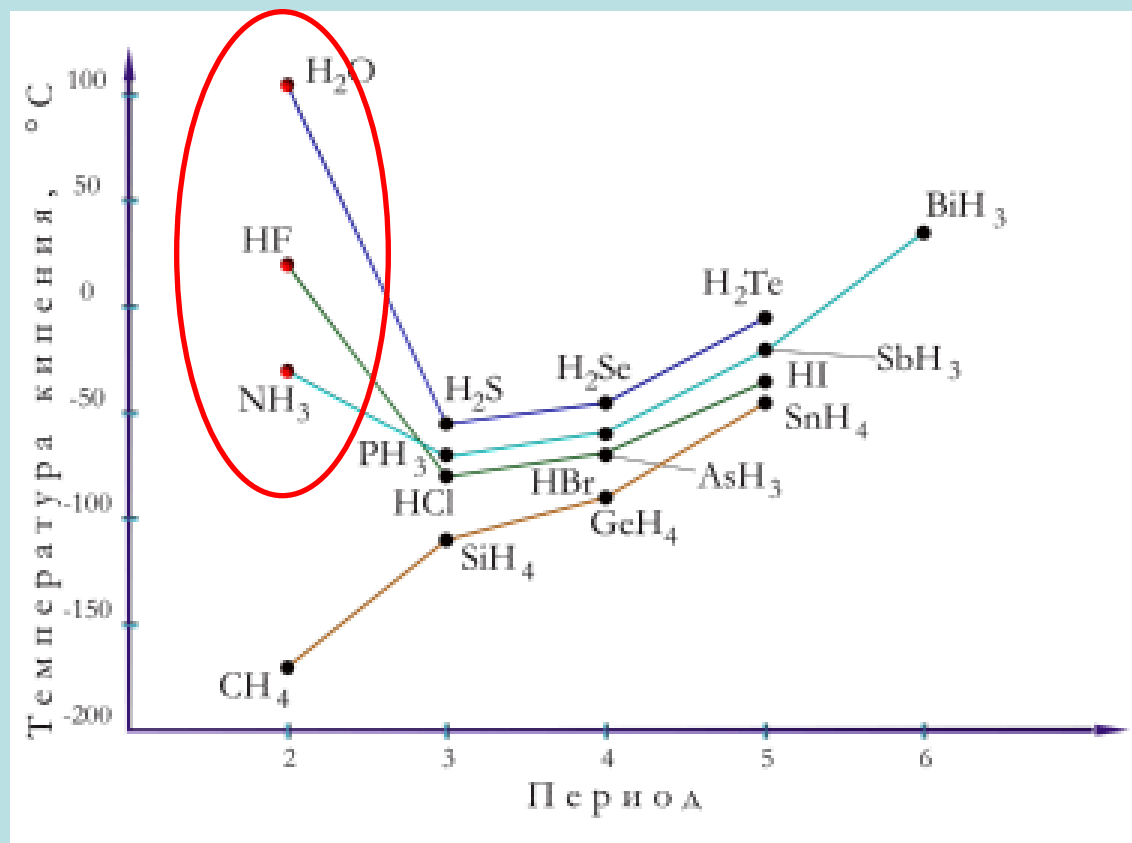
$r(\text{O} - \text{O}) = 0.276 \text{ nm}$

$\text{H}_2\text{O (l)}$



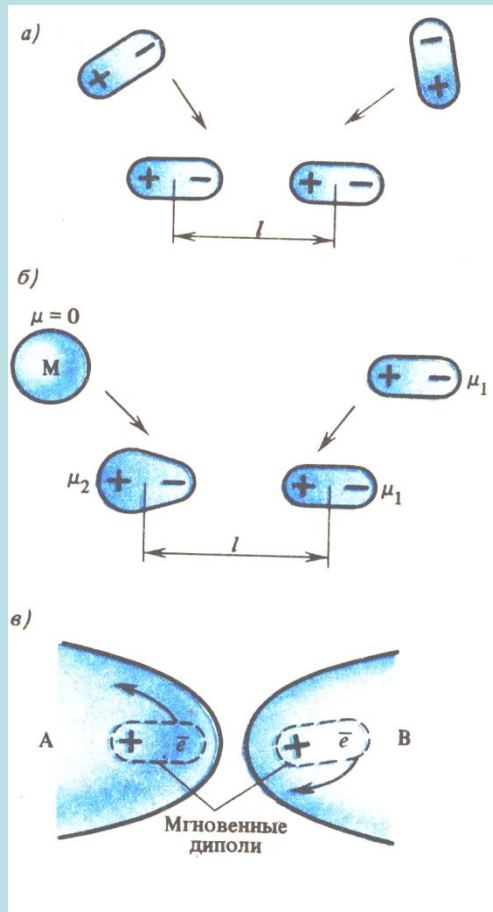
$r(\text{O} - \text{O}) = 0.23 \rightarrow 0.32 \text{ nm}$

Вещества за счет Н-связи обладают более высокими температурами кипения и плавления.



# Межмолекулярные силы взаимодействия (силы Ван-дер-Ваальса)

Связи между молекулами, обусловленные электростатическим взаимодействием, называются силами В-д-Ваальса.



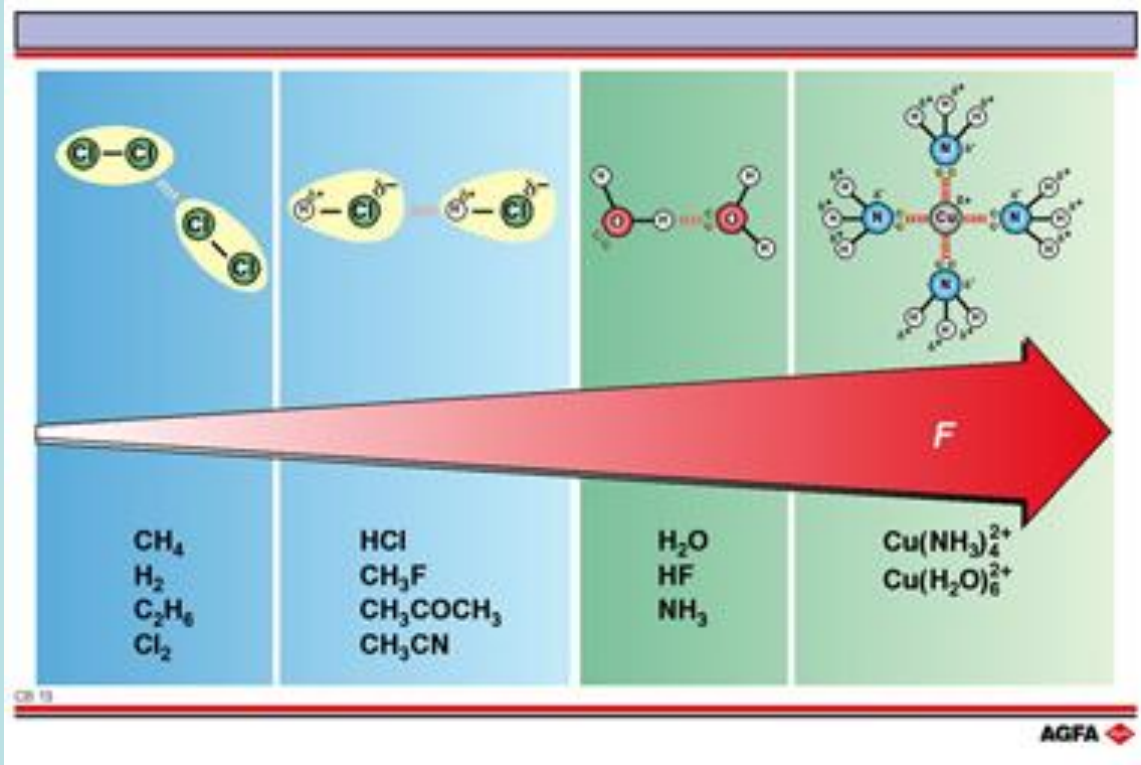
Различают 3 типа сил:

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

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

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

Уменьшение энергии



# Влияние сил Ван-дер-Ваальса на свойства веществ

- Вызывает способность всех газов при соответствующих условиях **конденсироваться**.

- Вызывает закономерное изменение **t кипения** газообразных однотипных веществ:

	He	Ne	Ar	Kr	Xe	Rn
°C, T <sub>кип</sub>	-269	-246	-186	-153	-108	-62

- Вызывает усиление **агрегации** веществ:

F <sub>2</sub>	Cl <sub>2</sub>	Br <sub>2</sub>	I <sub>2</sub>
газ	газ	жид.	тв.



Адгезия

climbing glass