



Химическая связь

к.х.н., доц. Губанов Александр
Иридиевич

Что читать?

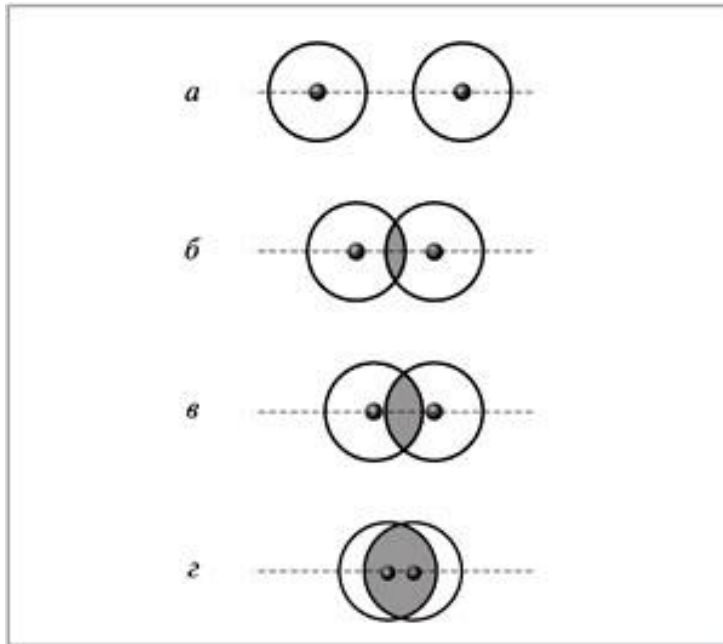
Чупахин А. П. Общая химия. Химическая связь и строение вещества.

Карапетьянц М. Х., Дракин С. И. Общая и неорганическая химия.

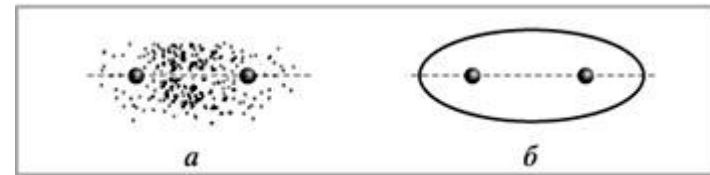
Ахметов Н. С. Общая и неорганическая химия.

Глинка Н.Л. Общая химия.

Сближение атомов



**Перекрывание $1s$ -АО
при сближении атомов водорода**



**Образование молекулярной
орбитали
в результате перекрывания двух $1s$ -
АО:**
**а — распределение электронной
плотности;**
б — МО

Кулоновские силы

При сближении двух атомов водорода электрон атома А притягивается к ядру атома В, а электрон атома В к ядру атома А. Это взаимодействие электростатическое, то есть сила притяжения F описывается уравнением Кулона

$$F = \frac{ee_1}{\epsilon r^2}$$

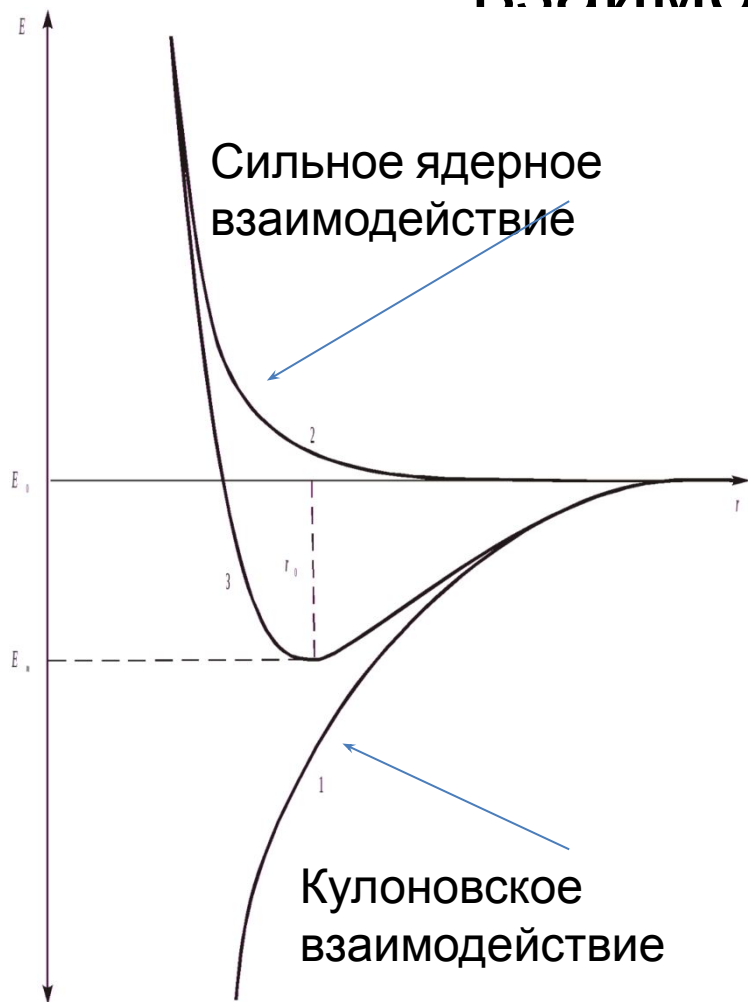
Потенциальная энергия E этого процесса

$$E = \frac{ee_1}{\epsilon r}$$

Силы в природе

- Гравитационное взаимодействие
 - Слабое ядерное взаимодействие
 - Электромагнитное взаимодействие
 - Сильное ядерное взаимодействие
-
- При сближении ядер «включается» сильное ядерное взаимодействие $E \sim 1/r^9$

Сложение потенциалов электромагнитного и сильного ядерного взаимодействий



Уравнение Шредингера

$$\hat{H} \Psi = E \Psi$$

энергия связи молекулы водорода для состояний с параллельными и антипараллельными спинами; б - распределение электронной плотности в молекуле водорода для состояний с антипараллельными и параллельными спинами.

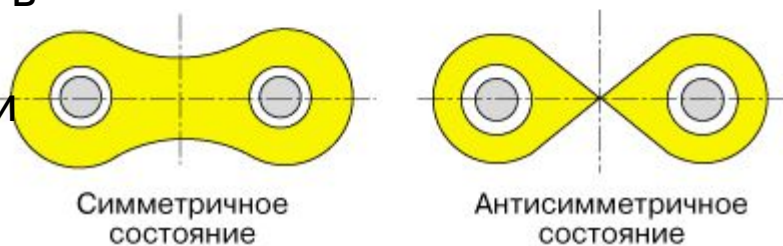
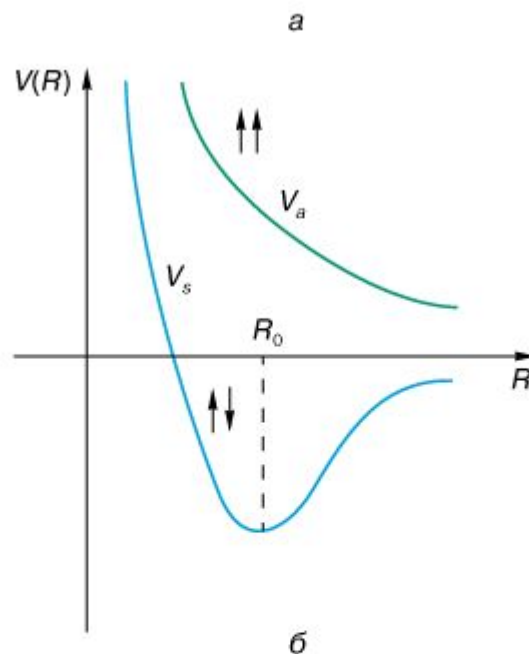
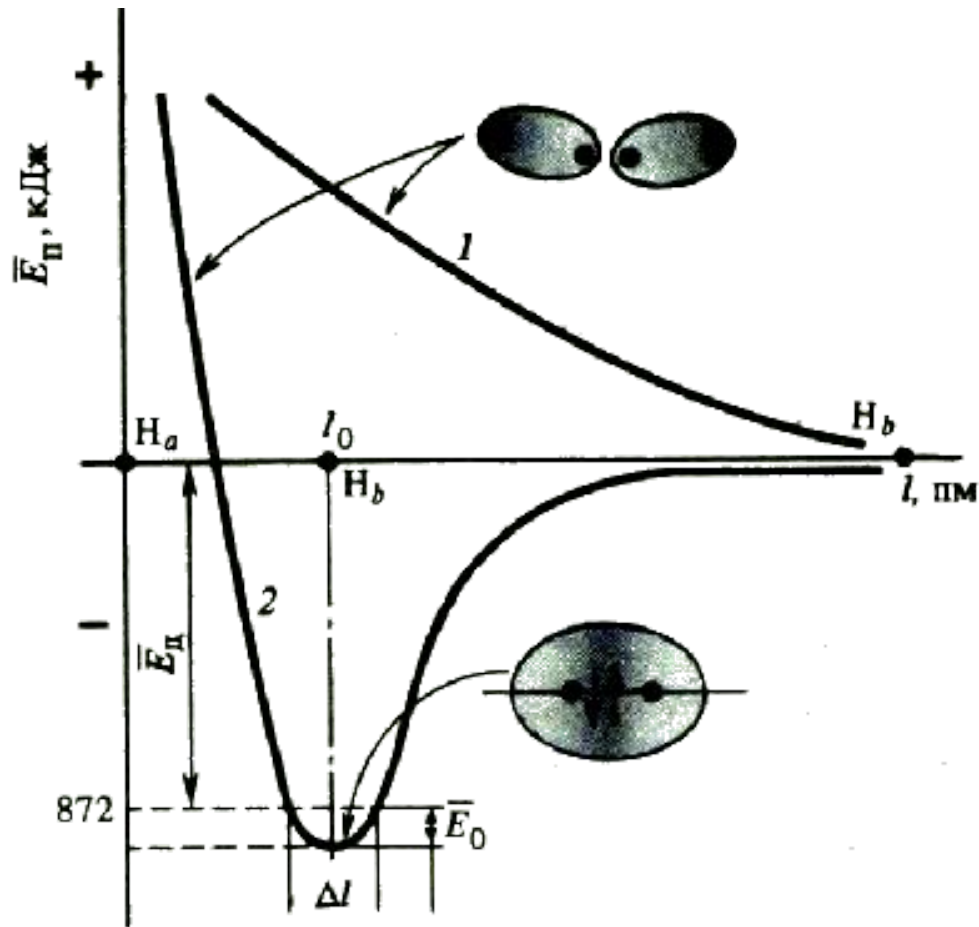


Диаграмма сближения атомов водорода



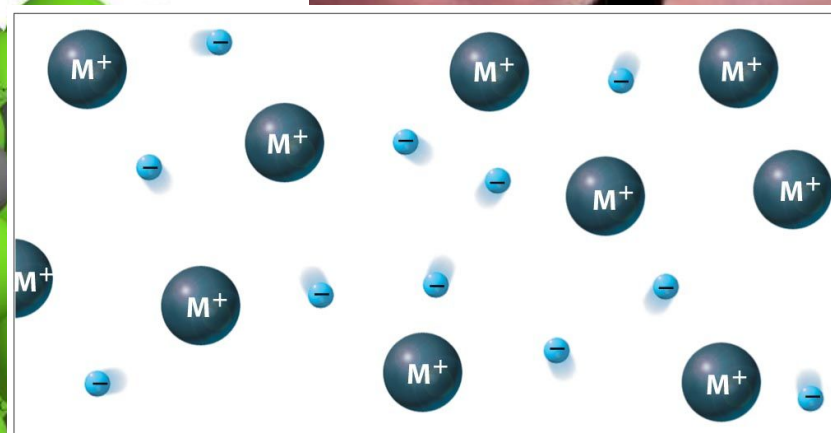
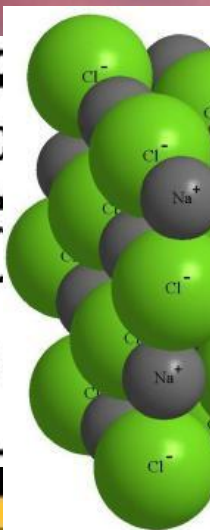
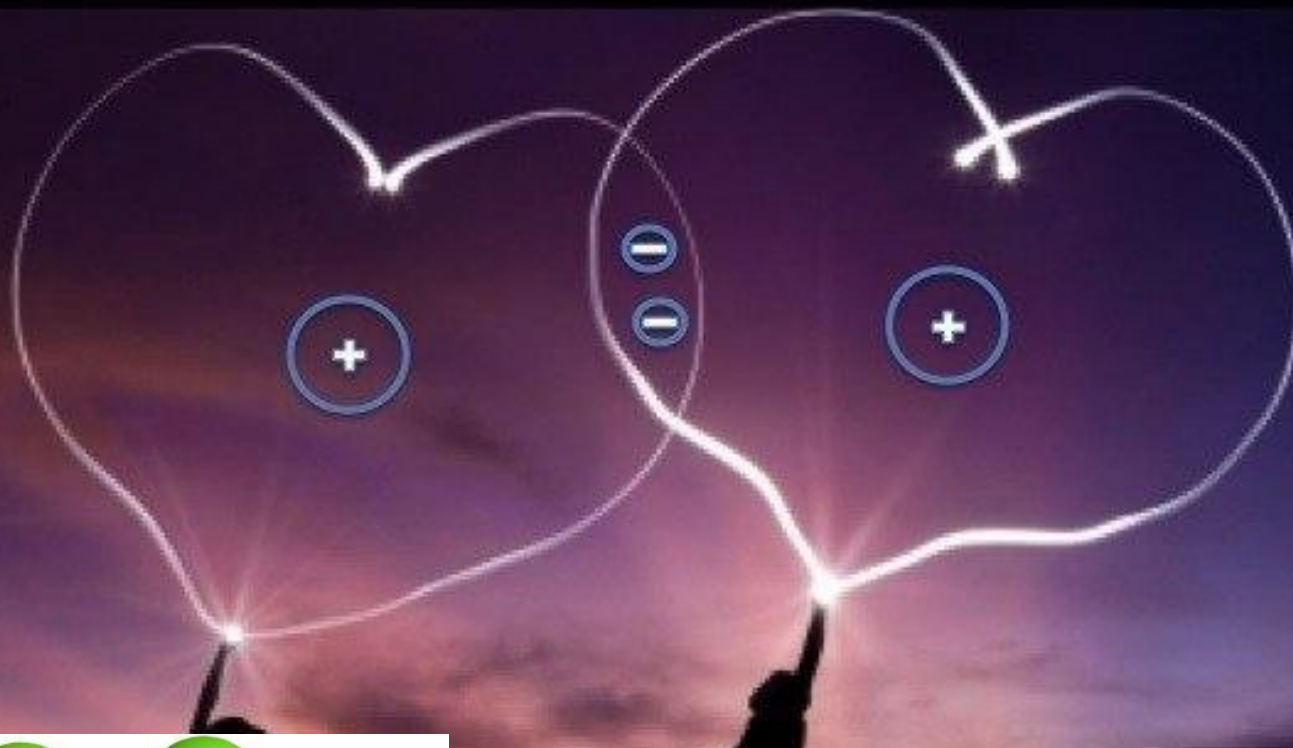
Химическая связь

- *Химическая связь* это энергетически выгодное взаимодействие атомов, приводящие к образованию устойчивых групп атомов (молекул).
- Взаимодействия, скрепляющие в единое целое молекулы, полимеры (а часто – кристаллы и жидкости,), принято называть *химической связью*.

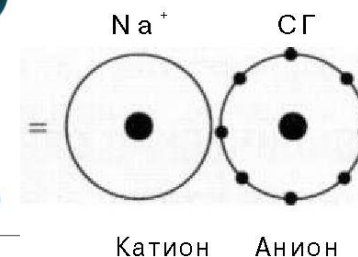
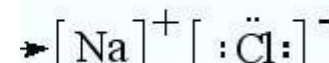
Молекула

- *Моле́кула* (новолат. *molecula*, уменьшительное от лат. *moles* — масса) — электрически нейтральная частица, образованная из двух или более связанных ковалентными связями атомов частица, образованная из двух или более связанных ковалентными связями атомов

Ничто так не сближает ...

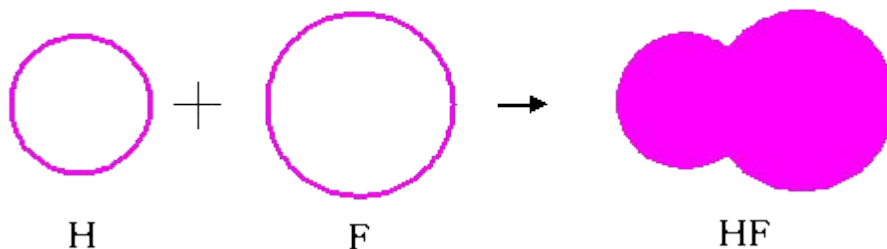


M^+ Ион металла e^- Электрон



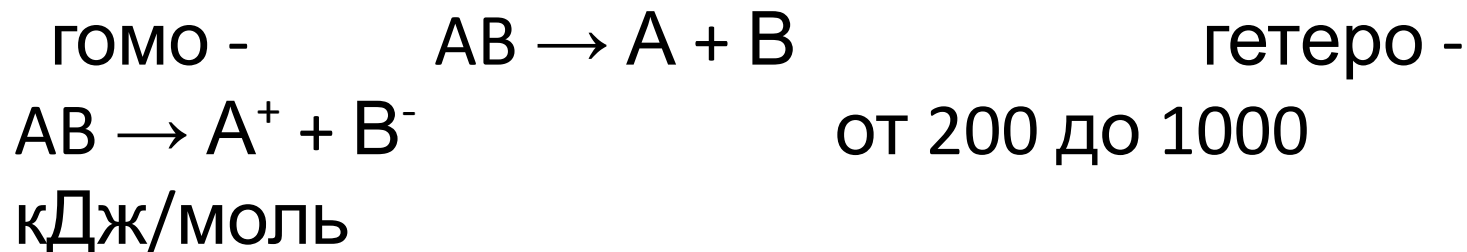
Свойства химической связи

- Длина
 - Около 1 Å (10^{-10} м или 0,1 нм)
 - Если расстояние ядро-ядро < суммы атомных радиусов, то связь есть.
- $r(A-B) < r(A) + r(B)$
- Радиус атома водорода составляет 53 пм, атома фтора – 71 пм, а расстояние между ядрами атомов в молекуле HF равно 92 пм:



- Прочность

- энергия гомолитического разрыва.



- Полярность.

- Смещение электронной плотности в сторону одного из атомов

Ковалентные связи

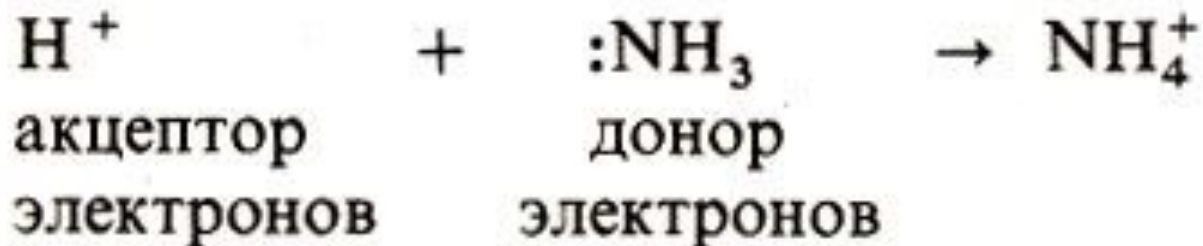
- *Ковалентные химические связи* обычно образуются при обобществлении принадлежащих первоначально разным атомам **неспаренных** электронов с различными спинами:



- Вступающие в связь атомы как бы обмениваются электронами – такой механизм образования ковалентной связи называется *обменным*.

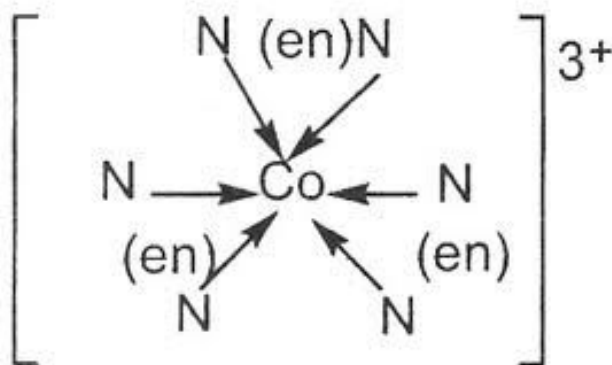
Ковалентные связи

- *Донорно-акцепторный механизм* образования ковалентной связи когда один из пары образующих связь атомов предоставляет пару электронов (донор), а другой принимаете (акцептирует), предоставляя для этого вакантную АО:



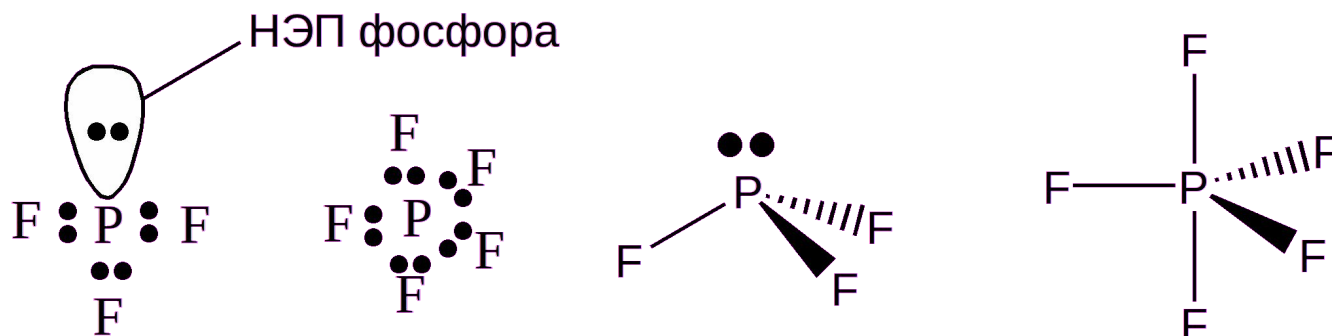
Примеры донорно-акцепторной СВЯЗИ

- $\text{H}_3\text{O}^+ \quad \text{H}_2\text{O} : + \square \text{H}^+ = \text{H}_3\text{O}^+$
- Все комплексные (координационные) соединения основаны на взаимодействии между акцепторами – катионами (часто d-элементов) и такими донорами НП, как H_2O , NH_3 , Cl^- , $\text{C}_2\text{O}_4^{2-}$: $[\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$, $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$, $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}]^{2+}$, $[\text{AlF}_6]^{3-}$ и др.

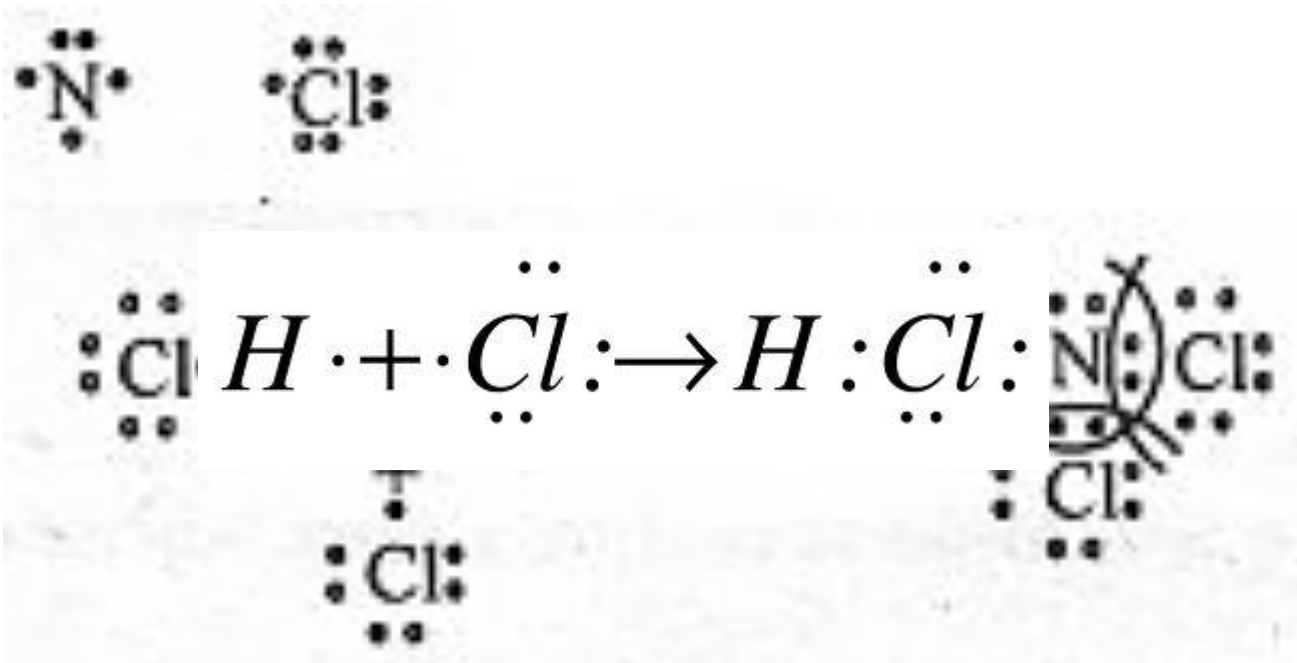


Электронные пары

- Участвующие в образовании связи обобществлённые пары электронов называют *связывающими (СП)*,
- Не участвующие, принадлежащие и в образовавшейся молекуле по-прежнему собственным атомам – *неподелёнными (НЭП)*.



Электронные пары

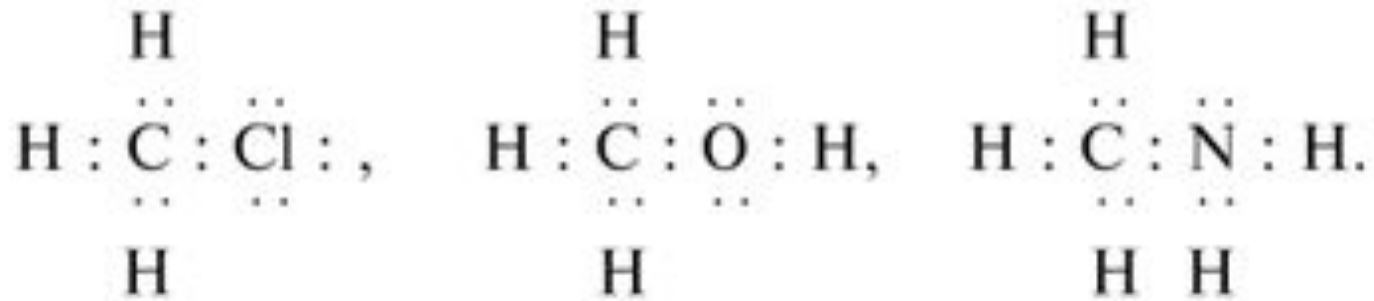


Радикалы

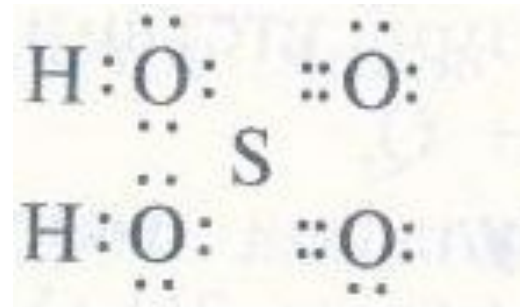
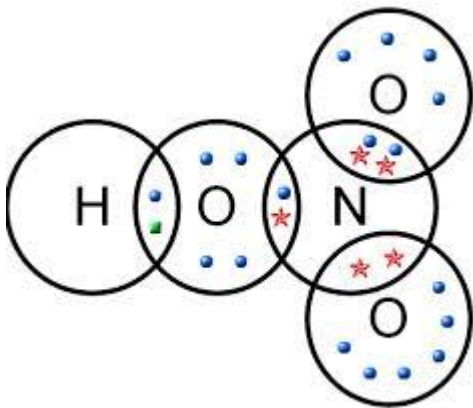
- Частицы с неспаренными электронами называются *радикалами*.
- Примеры радикалов: $\text{H}\cdot$, $\text{Cl}\cdot$, $\cdot\text{OH}$, $\cdot\text{CH}_3$.
- Стабильные радикалы редки, из неорганических отметим $\cdot\text{NO}$ и $\cdot\text{NO}_2$.

Электронные формулы

- Электроны изображаются точками

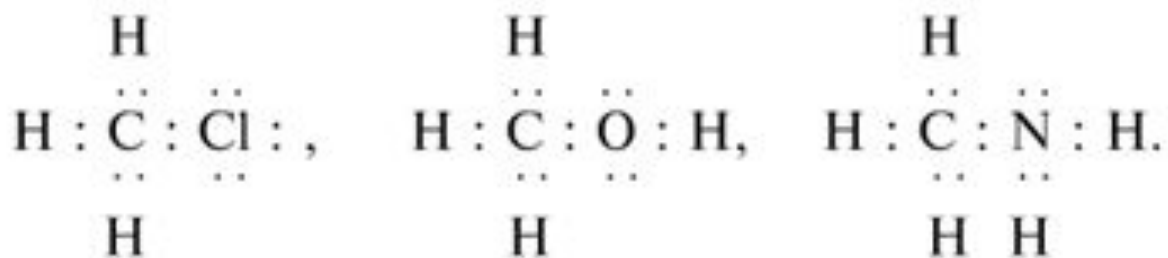


электронные формулы молекул

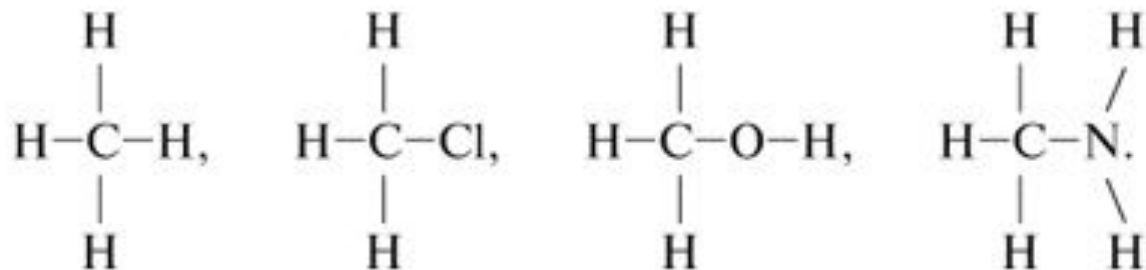


Структурные формулы

- Химические связи (связывающие электронные пары) обозначается черточками.



электронные формулы молекул



структурные формулы

Стехиометрические формулы

- В *стехиометрических формулах*, (HCl , BCl_3 , H_2O , H_2S_2 , SO_3^{2-} ит. п.), указан только состав частицы или *химического соединения*.

Формулы

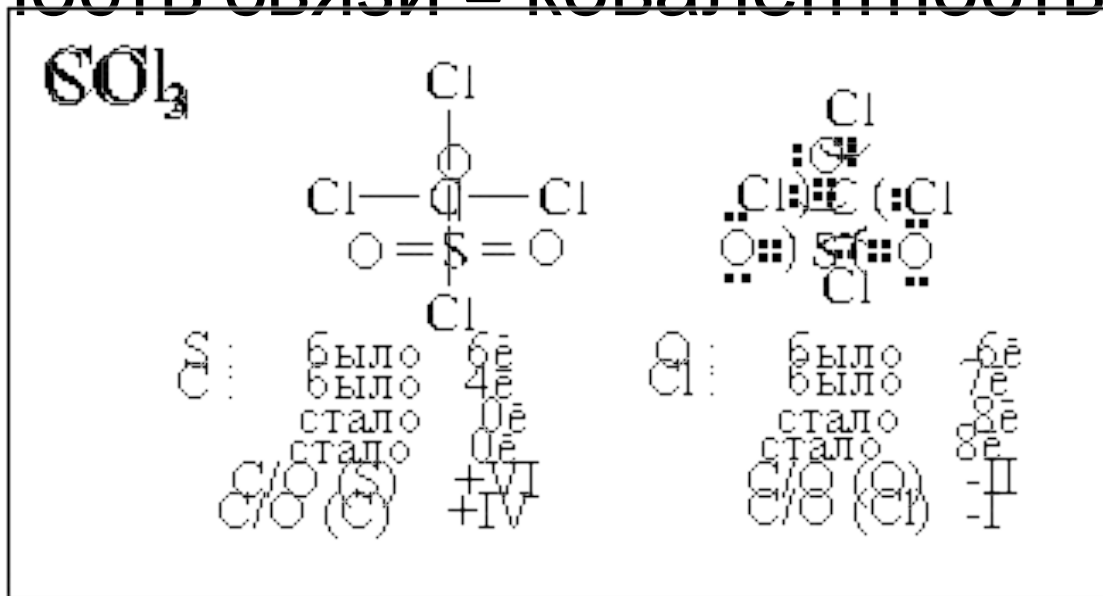
	Электронная	Структурная	Стехиометрическая
Электроны	Электроны указываются точками	СП указываются черточками	-
		НП не указываются	
Формулой устанавливается	строение, химический состав, НП	строение и химический состав	химический состав (заряд частицы)

Химическое соединение

- *Химическое соединение* – вещество, состоящее из разных элементов в определенных соотношениях, т.е. имеющее определенный *химический состав*
- Вещества, состоящие из атомов одного элемента, называют *простыми веществами* (например, двухатомный кислород O_2 , озон O_3 ; алмаз, графит, карбин, фуллерены – различные модификации углерода, C).

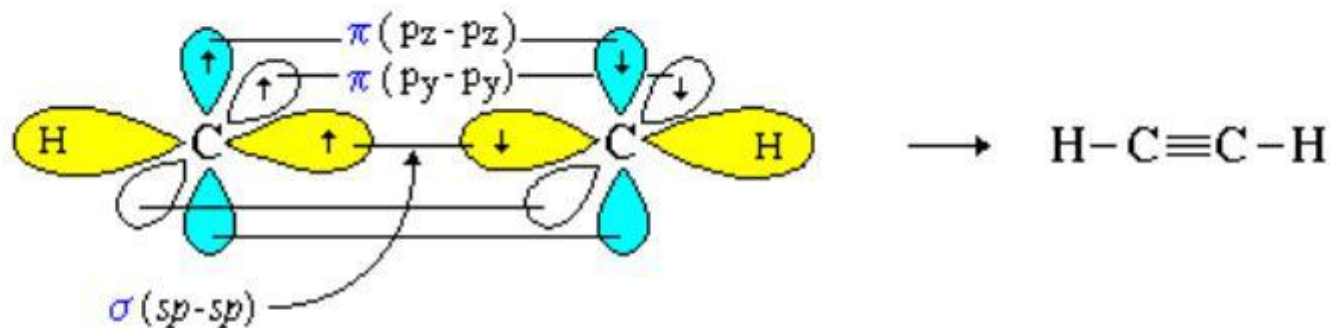
Ковалентность / кратность СВЯЗИ

- *ковалентность*: количество образованных данным атомом ковалентных связей.
- Кратность связи = ковалентность



Кратность связи

Образование тройной связи $C \equiv C$



Характеристики sp -гибридизации:

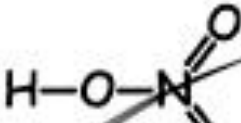

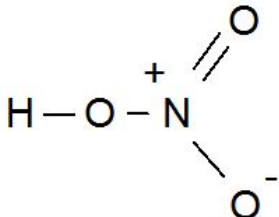
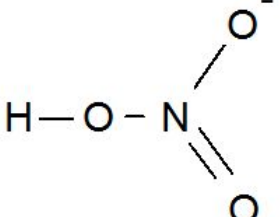
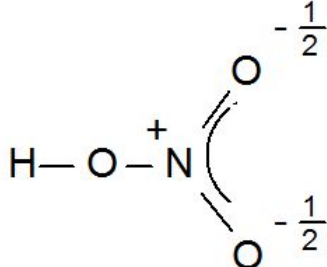
- Угол связи 180°
- **Тройная связь** состоит из одной σ -связи и двух π -связей
- Длина тройной связи $C \equiv C$ 0,120 нм



4?

Ковалентность / кратность СВЯЗИ

- Кратность связи может быть дробной

Связь	Длина	Энергия	Связь	Длина	Энергия
C—C					351
C=C					711
C≡C					1096
C—N					—
					
					592
					640
	Резонансные структуры				

Сопряжение связей

- Сопряжение в частицах CO_2 , N_2O , BO_3^{3-} на основе резонанса

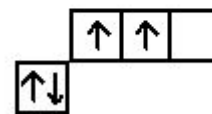
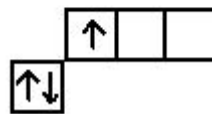
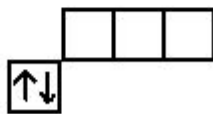
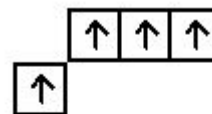
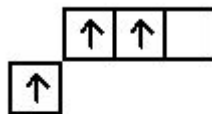
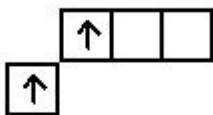
CO_2	$\text{O}=\text{C}=\text{O} \leftrightarrow \text{O}^--\text{C}\equiv\text{O}^+ \leftrightarrow \text{O}^+\equiv\text{C}-\text{O}^-$	$\text{O}\equiv\text{C}\equiv\text{O}$
N_2O	$\text{N}\equiv\text{N}^+-\text{O}^- \leftrightarrow \text{N}^--\text{N}^+=\text{O}$	$\text{N}\equiv\text{N}=\text{O}$
BO_3^{3-}		

Насыщенность связи

- Насыщенность связи - максимально возможная ковалентность/кратность.
Определяется:
 - *количеством орбиталей.*
Взаимодействие орбиталей крайне необходимо для образования хим. связи.
 - *количеством электронов.*

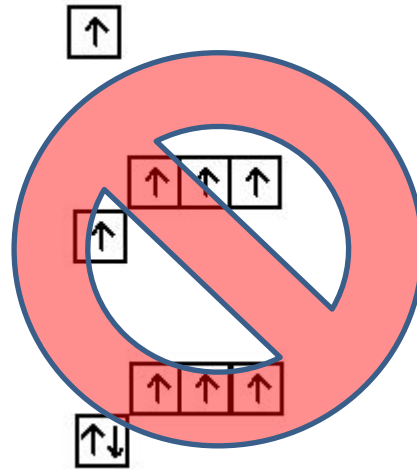
Насыщенность связи и количество электронов

- Переход электронов на более высокие уровни (*промотирование*):
 - $\text{Be}([\text{He}]2s^2) \rightarrow \text{Be}^*([\text{He}]2s^1 2p^1)$;
 - $\text{B}([\text{He}]2s^2 2p^1) \rightarrow \text{B}^*([\text{He}]2s^1 2p^2)$;
 - $\text{C}([\text{He}]2s^2 2p^2) \rightarrow \text{C}^*([\text{He}]2s^1 2p^3)$



Насыщенность связи и количество электронов

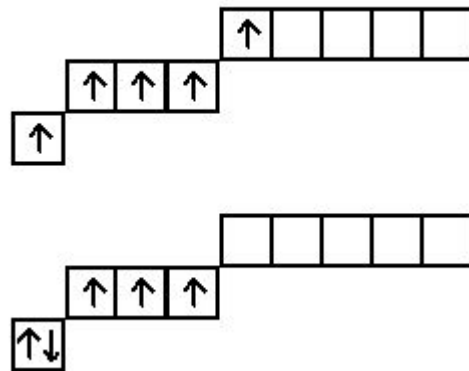
- $N([He]2s^2 2p^3) \rightarrow N^*([He]2s^1 2p^3 3s^1)$



Нужно много
энергии.
Да и валентность 1.

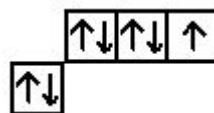
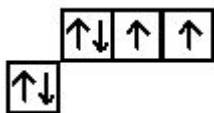
Насыщенность связи и количество электронов

- $P([\text{Ne}]3s^23p^3) \rightarrow P^*([\text{Ne}]3s^13p^33d^1)$

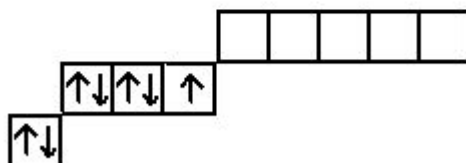
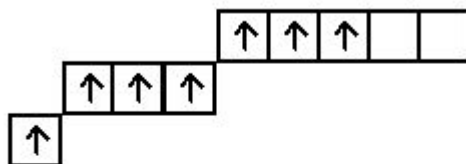


Насыщенность связи и количество электронов

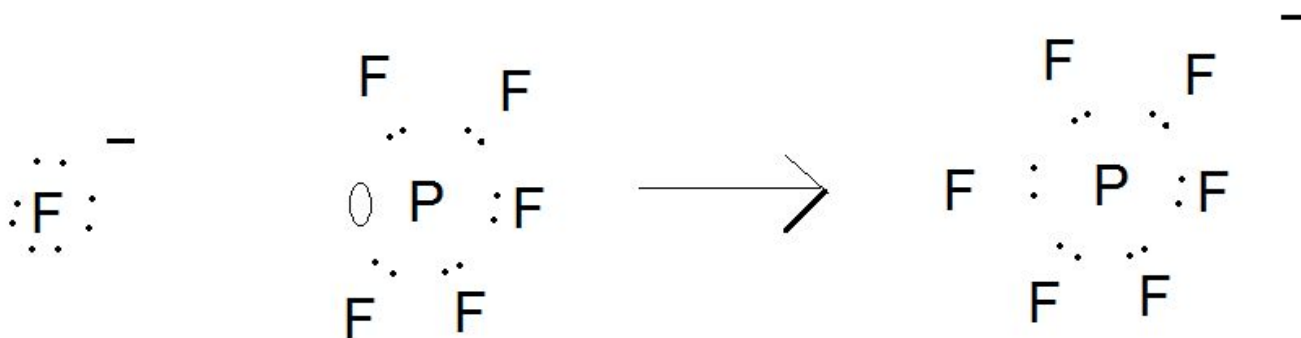
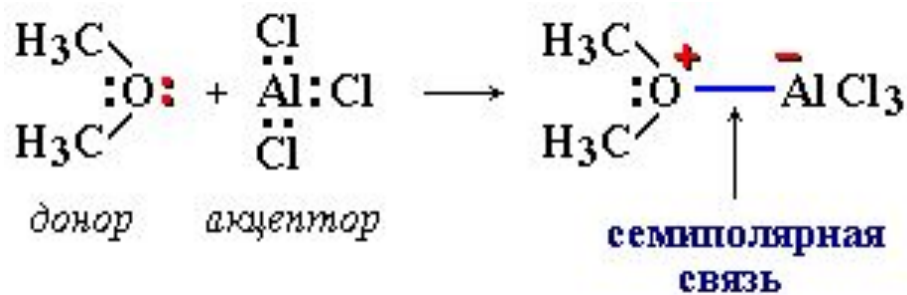
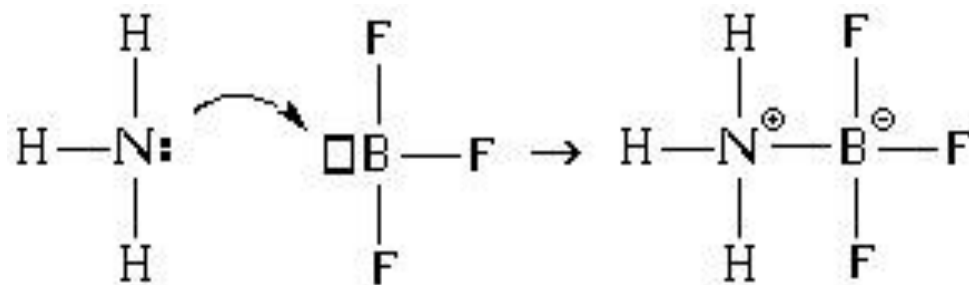
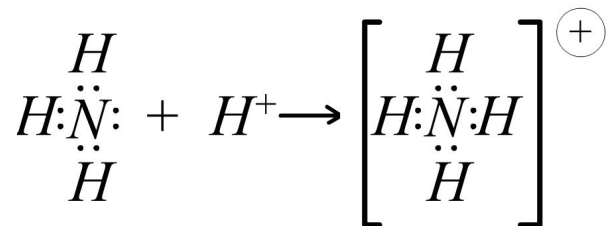
- $O([He]2s^2 2p^6) \rightarrow O^*([He]2s^1 2p^4 3s^1)$;
- $F([He]2s^2 2p^1) \rightarrow F^*([He]2s^1 2p^5 3s^1)$
- Слишком большие энергии.



- $Cl([Ne]3s^2 3p^5) \rightarrow Cl^*([Ne]3s^1 3p^3 3d^3)$



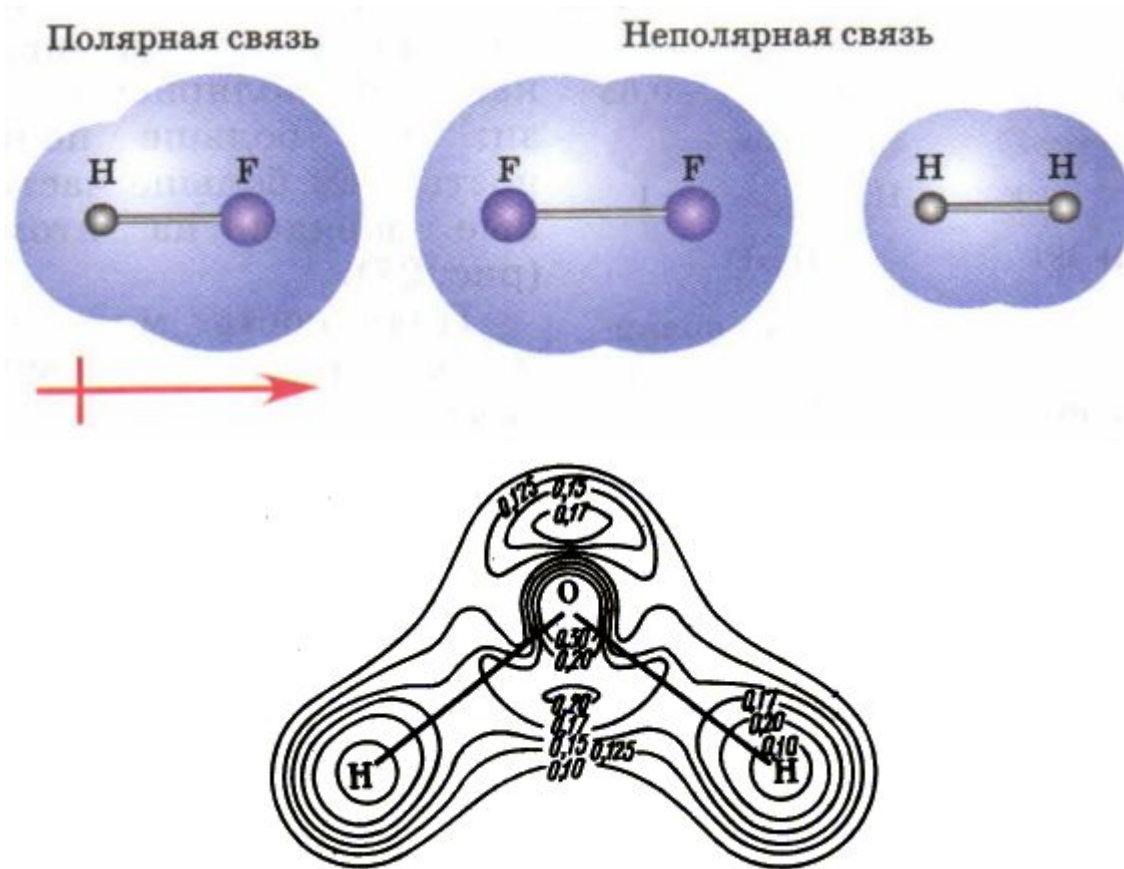
Насыщенность связи и количество орбиталей



КЧ

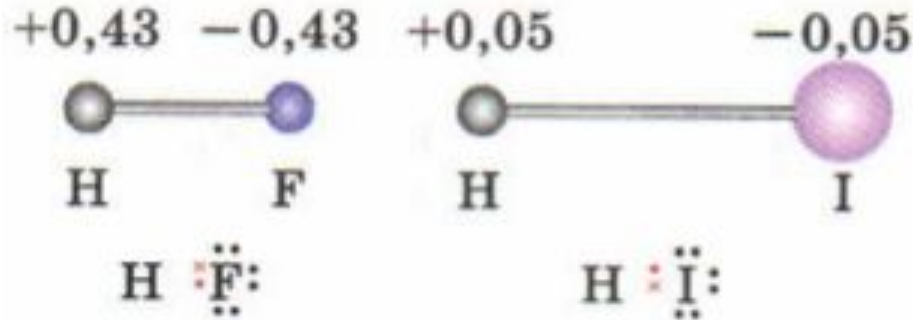
- Количество ближайших к выделенному атому соседних атомов (ближайших соседей) называют *координационным числом (КЧ)*.
- Для частиц с ковалентными связями КЧ равно числу σ -связей.

Полярность связи



- Распределение электронной плотности в молекуле воды

Смещение зарядов при полярной СВЯЗИ



Электроотрицательность

- Кто у кого забирает электроны?
- *Электроотрицательность (ЭО)* это свойство атомов оттягивать на себя электронную плотность при образовании ковалентной связи.
- Существует несколько количественных шкал ЭО.
- По Малликену, $ЭО = (I_A + E_A)/2$, где I_A – энергия ионизации и E_A – сродство к электрону

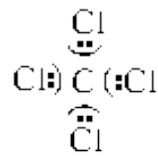
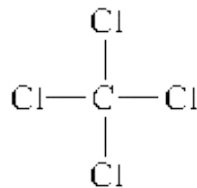
Второй период	Li	Be	B	C	N	O	F
ЭО	1,0	1,5	2,0	2,5	3,0	3,5	4,0
Третий период	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl
ЭО	0,9	1,2	1,5	1,8	2,1	2,5	3,0

Электроотрицательность атомов элементов по Полингу

Степень окисления

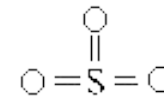
- *Степень окисления (СО)* – условный заряд атома в соединении, если считать все связи полностью ионными.
- *Степень окисления (СО)* – условный заряд, который бы возник на атоме в случае полного перехода электронов при образовании связи.
- С использованием степени окисления записывается последовательность элементов в химических формулах, названия соединений, уравниваются окислительно восстановительные реакции.
- Именно соотношение ЭО атомов определяет СО.

CO



C: было 4e
 стало 0e
C/O (C) +IV

Cl: было 7e
 стало 8e
C/O (Cl) -I



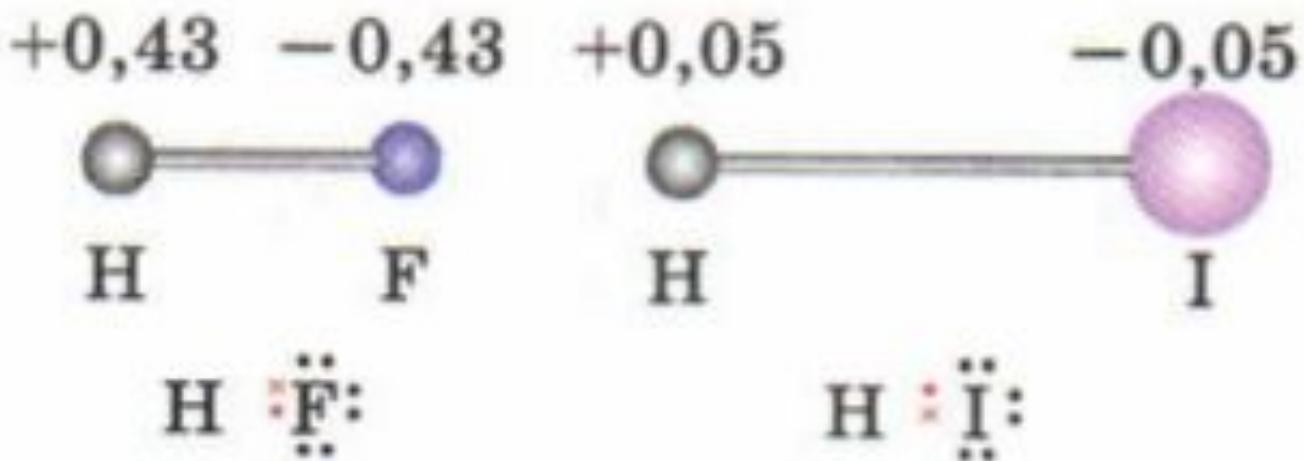
S: было 6e
 стало 0e
C/O (S) +VI

O: было 6e
 стало 8e
C/O (O) -II

ДИПОЛЬНЫЙ МОМЕНТ

- **Электрический дипольный момент** — векторная физическая величина, характеризующая, электрические свойства системы заряженных частиц в смысле создаваемого ею поля и действия на нее внешних полей.
- $\vec{p} = q \times \vec{l}$ — где q — величина положительного заряда, — вектор с началом в отрицательном заряде и концом в положительном.

Дипольный момент



$$\vec{p}(\text{HF}) = 0,43 \times 92 \text{ (ед} \cdot \text{пм)}$$

$$\vec{p}(\text{HI}) = 0,05 \times 161 \text{ (ед} \cdot \text{пм)}$$

Дипольные моменты молекул обычно измеряют в дебаях (D): $1\text{D} = 3,34 \cdot 10^{-30} \text{ Кл} \cdot \text{м}$.

Дипольный момент

формула	<u>молярная масса</u>	длина связи $d(\text{H-X})/\text{pm}$ (газ)	<u>дипольный момент</u> μ/D
HF	20	91,7	1,86
HCl	36,5	127,4	1,11
HBr	81	141,4	0,79
HI	128	160,9	0,38