

# ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ И СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛ

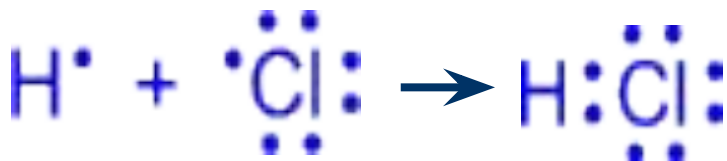
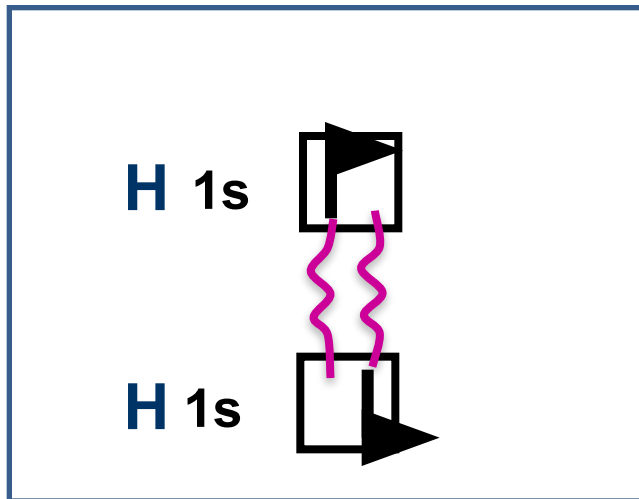
## Лекция 3: Ковалентная связь

008 

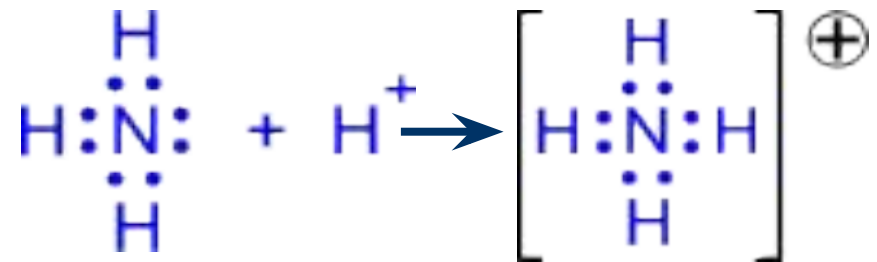
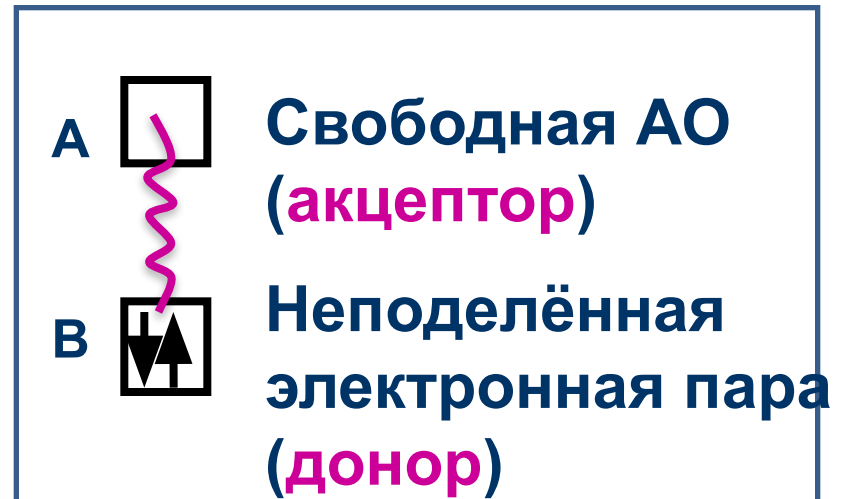
MI6.CO.UK

# Механизмы образования ковалентной СВЯЗИ

## Обменный



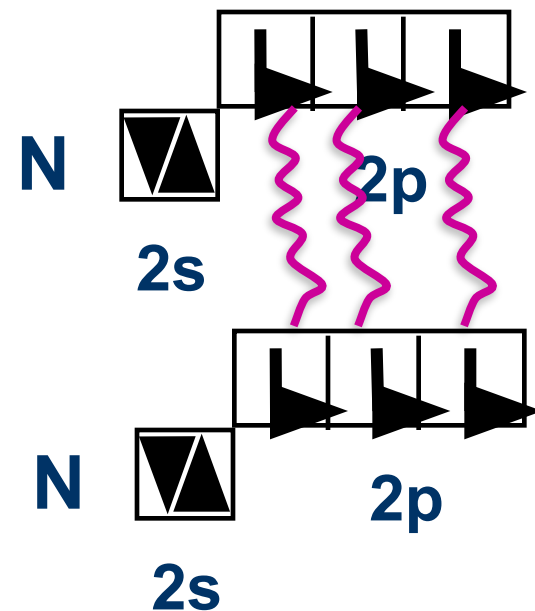
## Донорно-акцепторный



# Пример I: образование ковалентной связи в молекуле N<sub>2</sub>

## Состав сухого воздуха на уровне моря

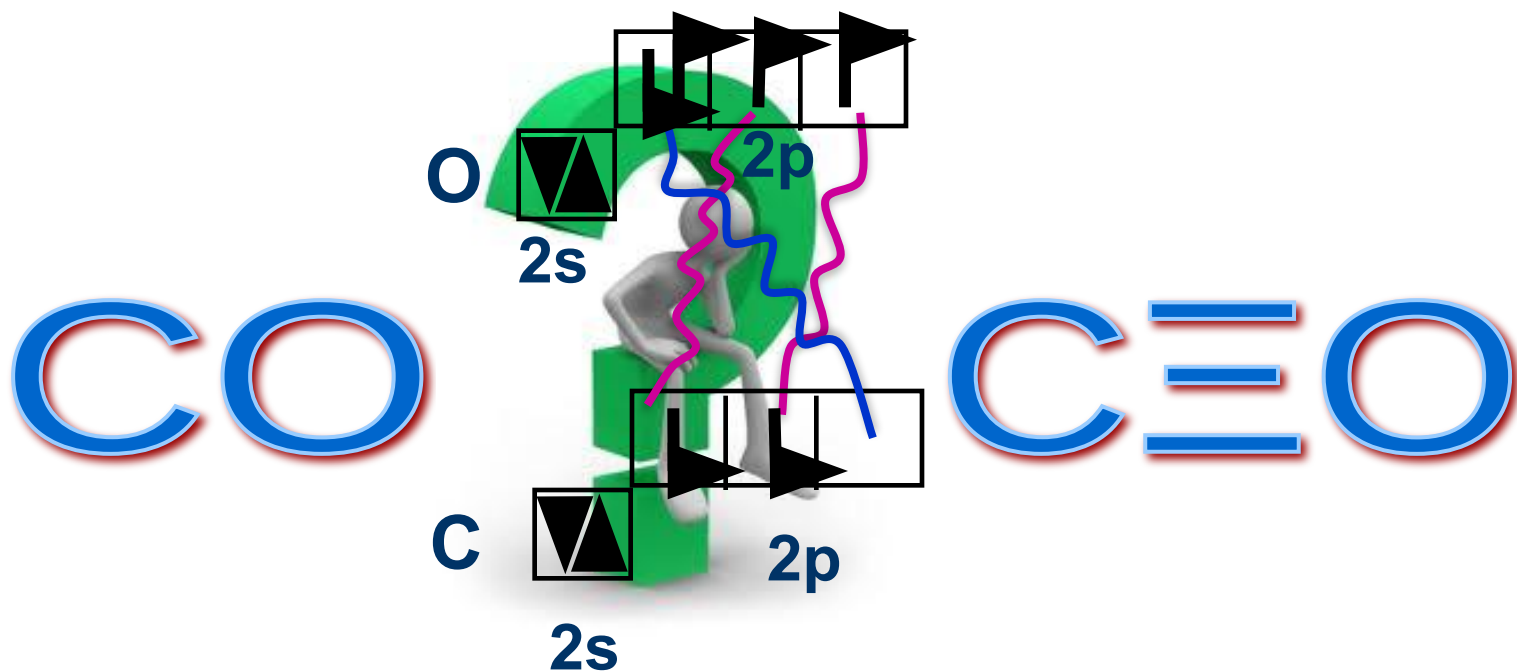
Газ	Содержание, % об.	Газ	Содержание, % об.
Nitrogen	78.084	Krypton	0.0001
Oxygen	20.948	Carbon monoxide <sup>†</sup>	0.00001
Argon	0.934	Xenon	0.000008
Carbon dioxide*	0.033	Ozone <sup>†</sup>	0.000002
Neon	0.00182	Ammonia	0.000001
Hydrogen	0.0010	Nitrogen dioxide <sup>†</sup>	0.0000001
Helium	0.00052	Sulfur dioxide <sup>†</sup>	0.00000002
Methane*	0.0002		



$$E_{\text{связи N}\equiv\text{N}} = 941,4 \text{ кДж/моль}$$

$$E_{\text{связи N}-\text{N}} = 193 \text{ кДж/моль}$$

# Пример II: образование ковалентной связи в молекуле CO

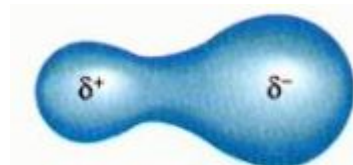


# Свойства ковалентной связи

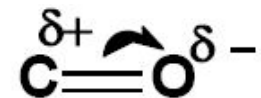
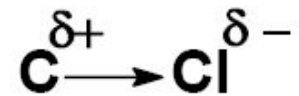
- 1) Направленность:** связь атомов осуществляется в том направлении, в котором обеспечивается максимальное перекрывание орбиталей  $\longrightarrow$  **Геометрия молекул**
- 2) Насыщаемость:** способность атомов образовывать ограниченное число ковалентных связей
- 3) Полярность:** результат неравномерного распределения электронной плотности



Неполярная ковалентная  
связь  
 $\mu = 0$



Полярная ковалентная  
связь  
 $\mu > 0$



- 4) Дипольный момент связи ( $\mu$ ):** векторная величина, характеризующая полярность связи

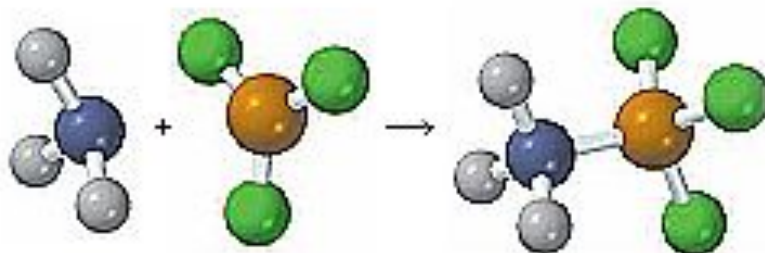
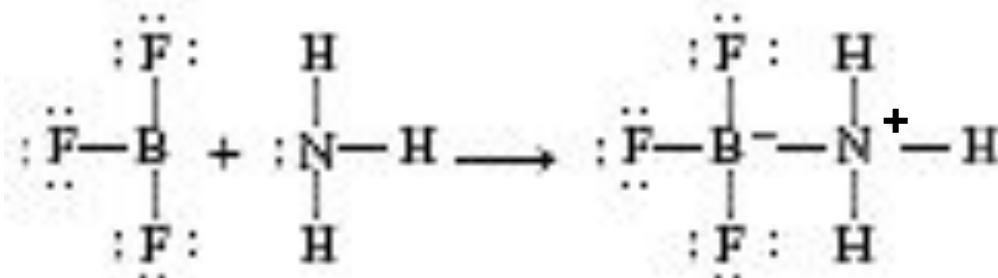
$$\mu \text{ [D, Кл}\cdot\text{м]}$$

$$1\text{D} = 3,4 \cdot 10^{-30} \text{ Кл}\cdot\text{м}$$

# Насыщаемость ковалентной СВЯЗИ

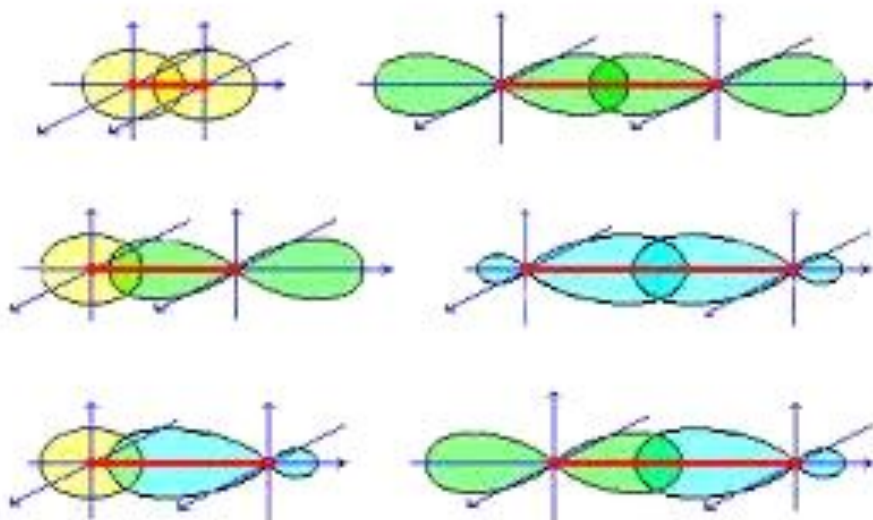
Число химических связей, которые образует атом, определяет его **валентность** в данном соединении

Макс. валентность атома зависит от положения элемента в ПС:  
II период – макс. валентность не более IV



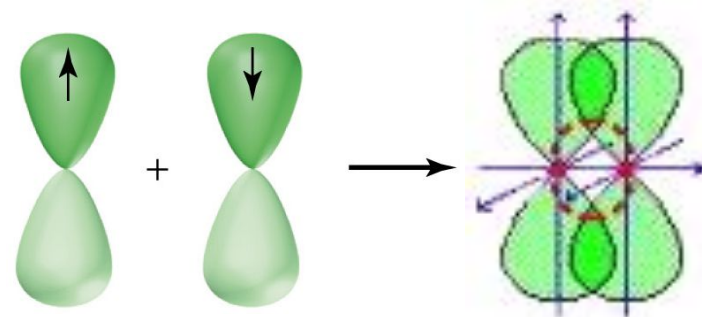
# Направленность ковалентной СВЯЗИ: $\sigma$ - И $\pi$ -СВЯЗИ

## $\sigma$ -СВЯЗЬ



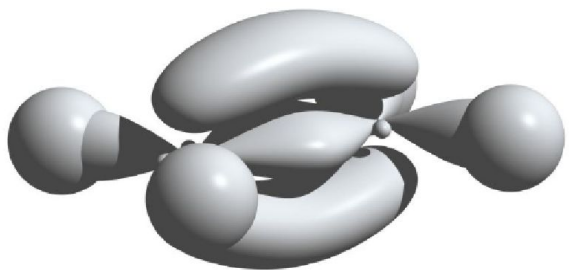
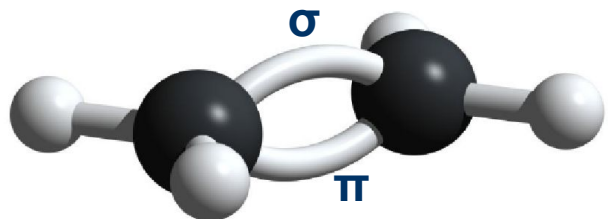
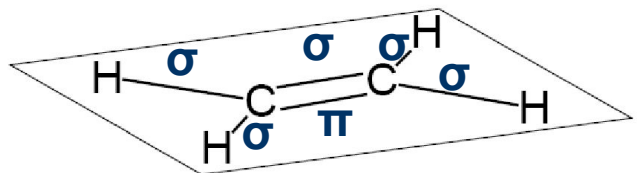
Одинарная ковалентная связь, образованная при перекрывании АО по прямой, соединяющей ядра двух связываемых атомов с максимальным перекрыванием на этой прямой

## $\pi$ -СВЯЗЬ

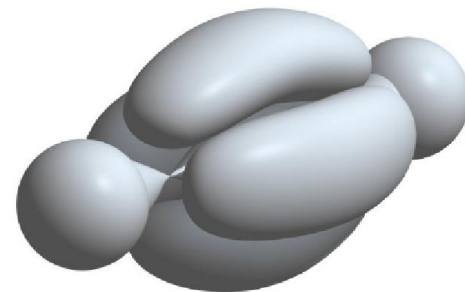
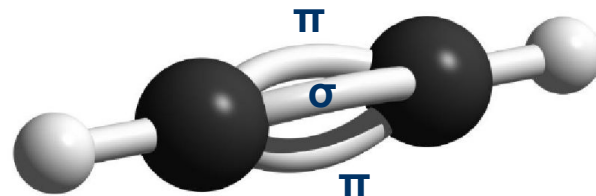
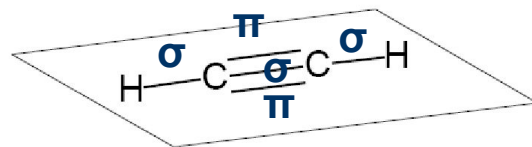


Связь, образованная при боковом перекрывании **негибризованных p-АО** с максимальным перекрытием над и под плоскостью  $\sigma$ -связей

# Примеры молекул, содержащих кратные связи



этилен  $C_2H_4$



ацетилен  $C_2H_2$

Связь	Гибридизация атома С	Энергия, кДж/моль	Длина, нм
C-C	$sp^3$	348	0.154
C=C	$sp^2$	626	0.134
C≡C	$sp$	814	0.120



# Геометрия молекул: Теория отталкивания электронных пар валентных орбиталей (ОЭПВО)

Молекула принимает форму, при которой отталкивание **внешних электронных пар** вокруг центрального атома минимально

- 1) Конфигурация связей многовалентного атома обуславливается исключительно **числом связывающих и несвязывающих пар** в валентной оболочке центрального атома.
- 2) Ориентация облаков электронных пар валентных орбиталей определяется **максимальным взаимным отталкиванием** заполняющих их электронов.

# Некоторые правила для ОЭПВО

- Атомы связываются так, чтобы сформировать октет
- Связывающие электронные пары занимают меньше пространства, чем несвязывающие
- Силы отталкивания уменьшаются в ряду:

Неподеленная  
электронная пара  
vs.  
неподеленная  
электронная пара

>

Неподеленная  
электронная пара  
vs.  
связывающая  
электронная пара

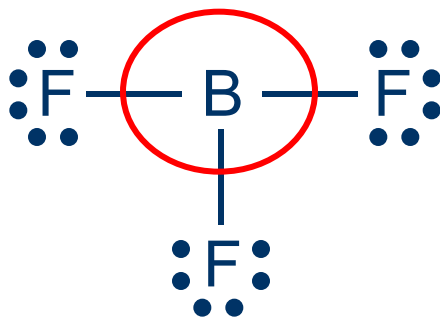
>

Связывающая  
электронная пара  
vs.  
связывающая  
электронная пара

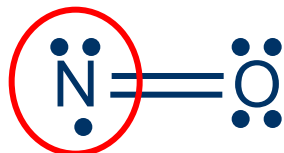
- С двойными и тройными связями обращаются также, как с одинарными

# Исключения из правила октета

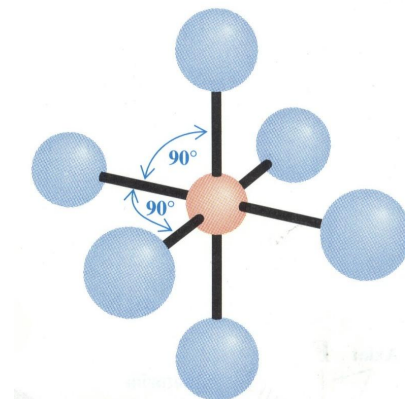
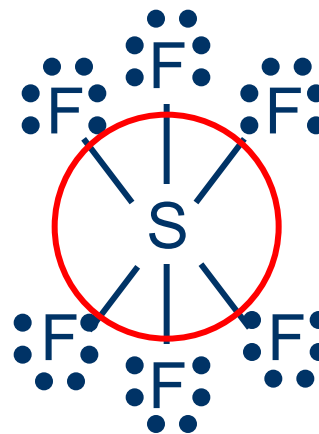
Неполный октет



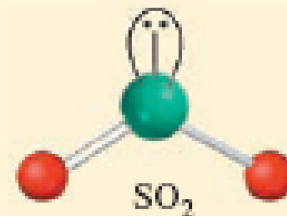
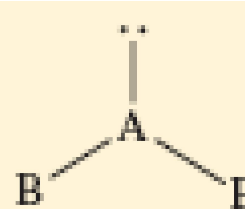
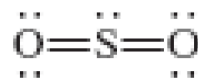
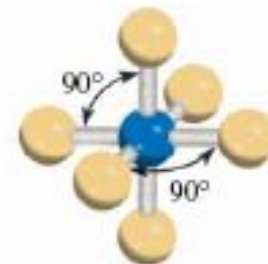
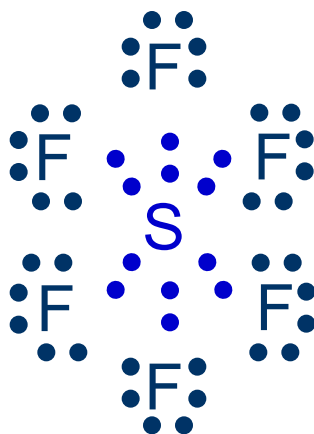
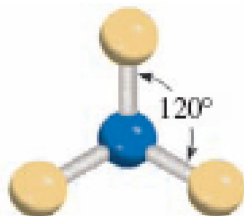
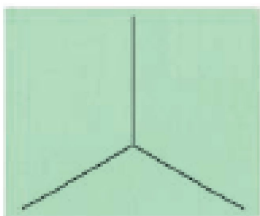
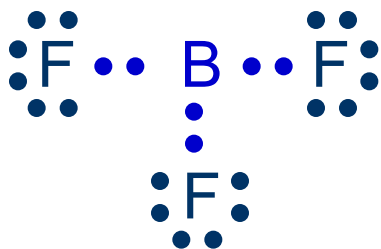
Молекулы, содержащие нечетное число электронов



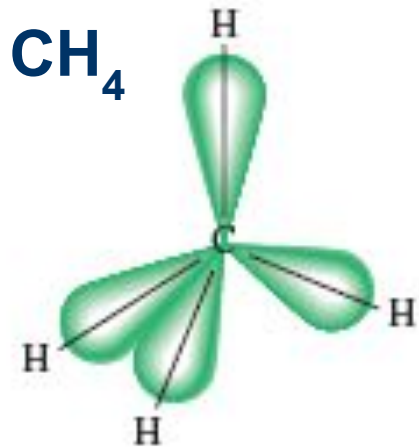
Расширенный октет  
(центральный атом с  
главным квантовым числом  $n > 2$ )



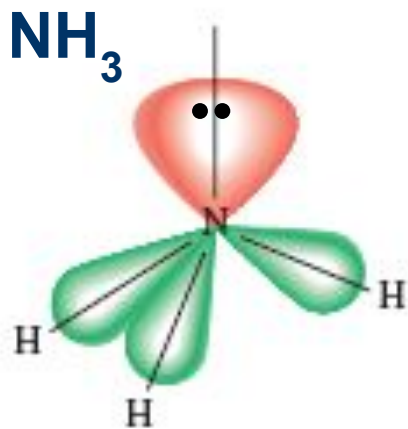
# Примеры для молекул типа $AB_2$ , $AB_3$ , $AB_6$ , $AB_2E$ :



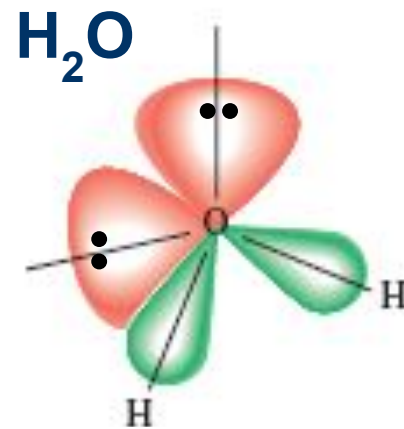
# Влияние неподеленных электронных пар на геометрию молекулы (AB<sub>4</sub>, AB<sub>3</sub>E, AB<sub>2</sub>E<sub>2</sub>)



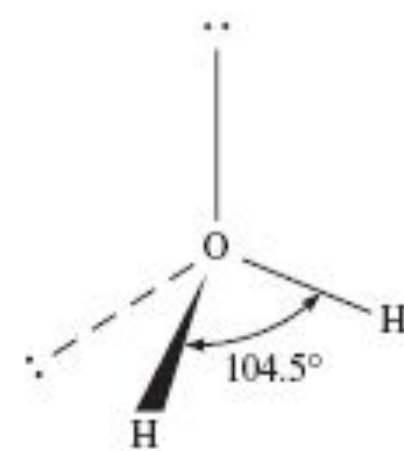
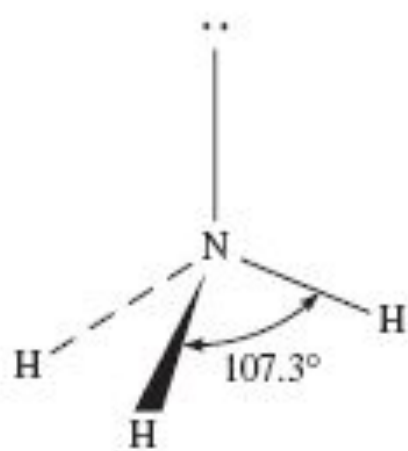
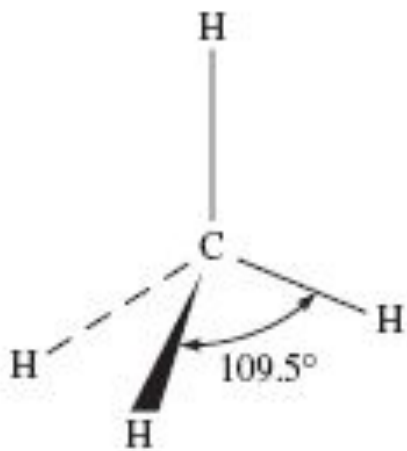
Тетраэдр



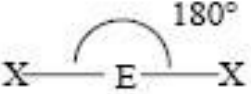
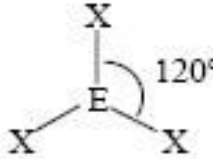
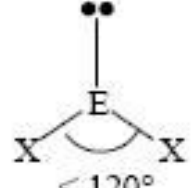
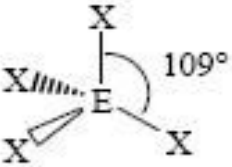
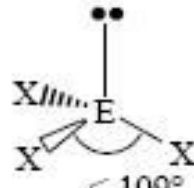
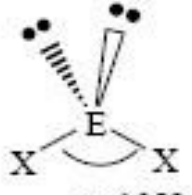
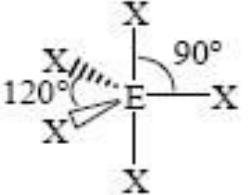
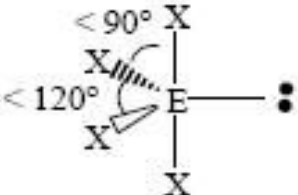
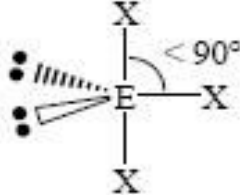
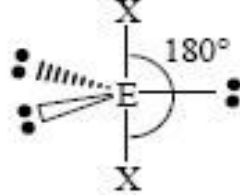
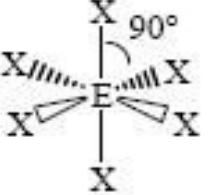
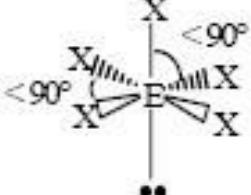
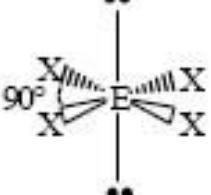
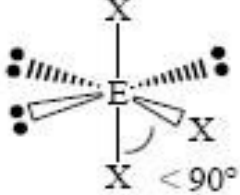
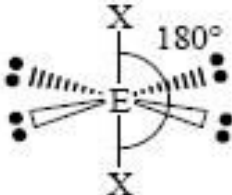
Тригональная пирамида



Угловая молекула



## VSEPR Geometries

Steric No.	Basic Geometry 0 lone pair	1 lone pair	2 lone pairs	3 lone pairs	4 lone pairs
2	 <p style="text-align: center;">Linear</p>				
3	 <p style="text-align: center;">Trigonal Planar</p>	 <p style="text-align: center;">Bent or Angular</p>			
4	 <p style="text-align: center;">Tetrahedral</p>	 <p style="text-align: center;">Trigonal Pyramid</p>	 <p style="text-align: center;">Bent or Angular</p>		
5	 <p style="text-align: center;">Trigonal Bipyramid</p>	 <p style="text-align: center;">Sawhorse or Seesaw</p>	 <p style="text-align: center;">T-shape</p>	 <p style="text-align: center;">Linear</p>	
6	 <p style="text-align: center;">Octahedral</p>	 <p style="text-align: center;">Square Pyramid</p>	 <p style="text-align: center;">Square Planar</p>	 <p style="text-align: center;">T-shape</p>	 <p style="text-align: center;">Linear</p>

# Теории химической связи. Гибридизация атомных орбиталей

## Теории химической связи



**Гибридизация атомных орбиталей** – изменение формы и энергии орбиталей атома при образовании ковалентной связи для достижения более эффективного перекрывания орбиталей

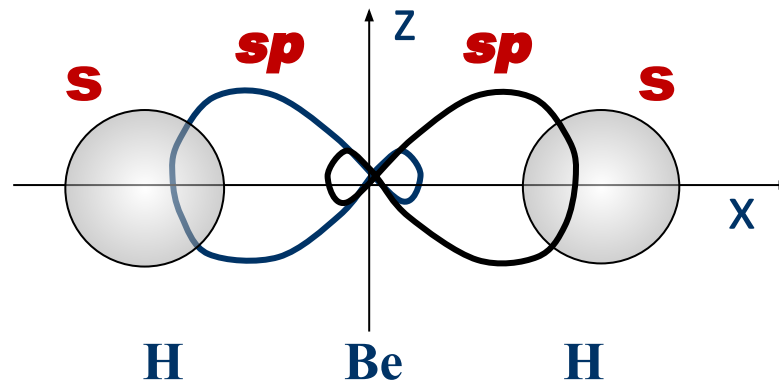
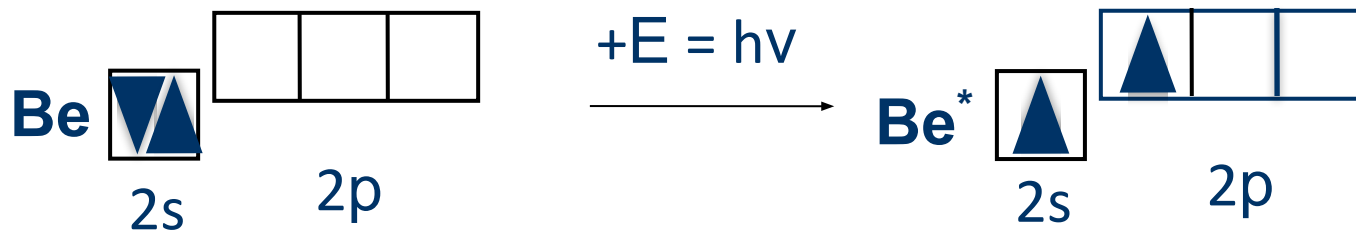
# Основные положения теории гибридизации

- Гибридируются орбитали атома, реализующего связи с другими атомами
- Гибридируются АО с близкой энергией
- Число гибридных орбиталей равно суммарному числу исходных орбиталей
- Гибридизация сопровождается изменением формы электронных облаков, поэтому хим. связи с участием гибр. орбиталей обладают большей прочностью, чем связи с “чистыми” АО

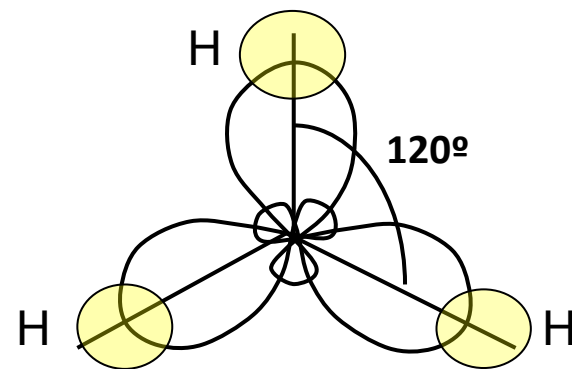
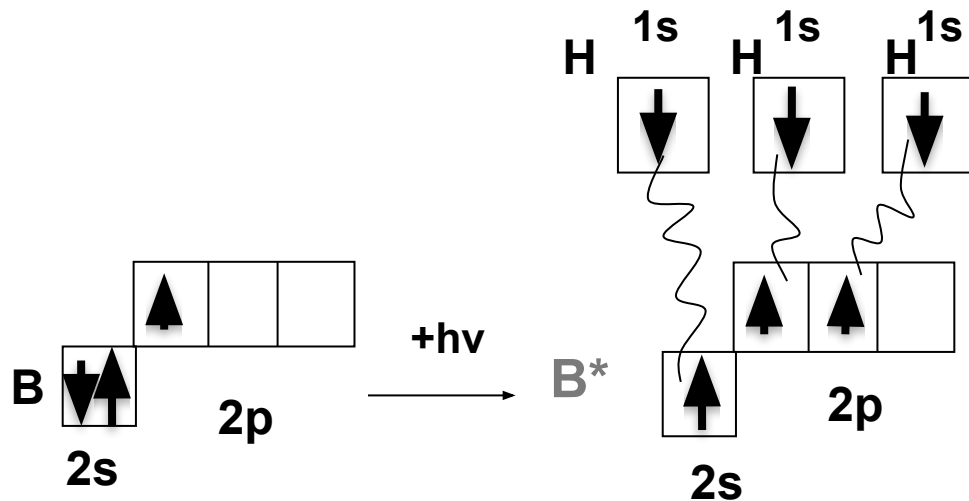
*Гибридизация атомных орбиталей возможна лишь для атомов, образующих химические связи, но не для свободных атомов!*



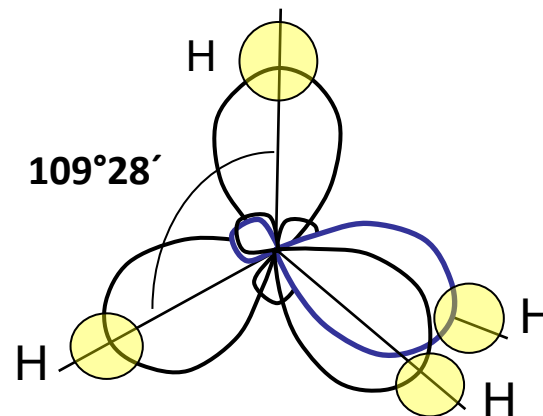
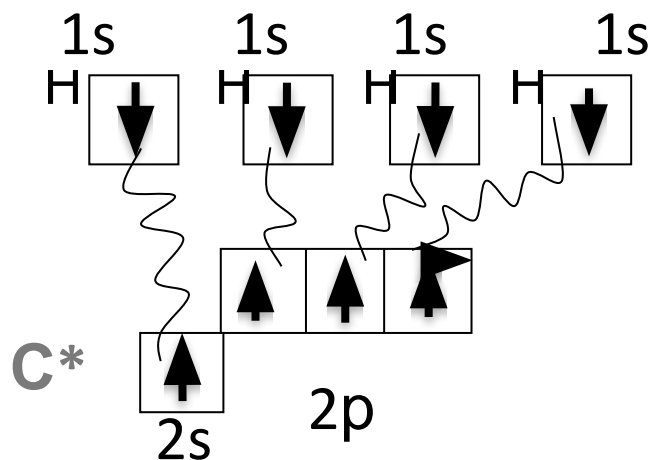
# Образование молекулы $\text{BeH}_2$



# Образование молекул $\text{BH}_3$ и $\text{CH}_4$

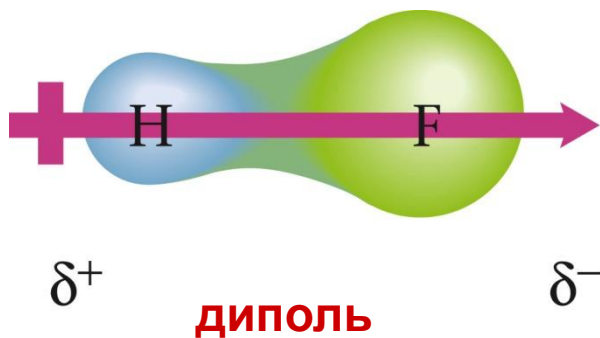


Расположение  $sp^2$ -ГО и схема образования связей в молекуле  $\text{BH}_3$



Взаимное расположение  $sp^3$ -ГО и схема образования связей в молекуле  $\text{CH}_4$

# Дипольный момент связи



$$\mu = Q \times r$$

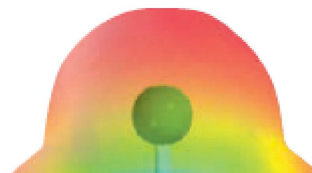
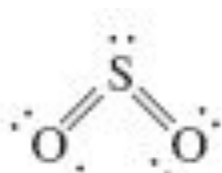
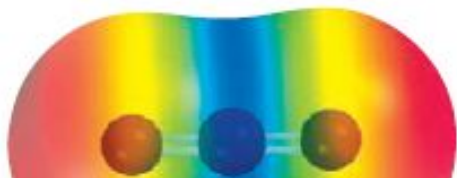
$$1D = 3,4 \cdot 10^{-30} \text{ Кл}\cdot\text{м}$$

Compound	Bond Length (Å)	Electronegativity Difference	Dipole Moment (D)
HF	0.92	1.9	1.82
HCl	1.27	0.9	1.08
HBr	1.41	0.7	0.82
HI	1.61	0.4	0.44

Чем больше разница электроотрицательностей элементов, тем полярнее связь

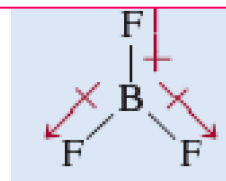
# Полярные и неполярные молекулы

Все ли молекулы, содержащие полярные связи полярны?



**Молекулы с полярными связями  
могут быть неполярными  
Все зависит от геометрии молекулы**

молекула  
 $\mu = 0 \text{ D}$



Плоский  
треугольник  
 $\mu = 0 \text{ D}$

пирамида  
 $\mu = 1,46 \text{ D}$

# Полярность молекул с ковалентными связями: Влияние неподеленных электронных пар

Дипольный момент молекулы зависит:

- от полярности связей
- от геометрии молекулы
- от **наличия неподелённых пар электронов**

