

**Химия**

**Химическая связь**

# Химическая связь

Химическая связь – это сложные протонно-электронные взаимодействия атомов, которые приводят к образованию молекул простых или сложных веществ или кристаллов.

Химические реакции сводятся к разрушению старых связей в исходных веществах и образованию новых связей в продуктах реакции.

# Природа химической связи

Химическая связь образуется в результате сложного взаимодействия между электронами взаимодействующих атомов по квантово-механическим законам а так – же протонами в их ядрах.

Возникновение химической связи (или их перестроение в результате реакции) приводит к уменьшению суммарной энергии в системе.

# Основные характеристики химической связи

Основные характеристики химической  
связи:

1. Энергия связи
2. Длина связи
3. Валентный угол

# Энергия связи

Энергия связи ( $E_{св}$ ) – это мера прочности химической связи. Энергия связи определяется энергией, которую необходимо затратить для разрушения связи. Такое - же количество энергии выделится при образовании молекулы из атомов. Измеряется в Дж/моль, либо в Эв/моль.

Чем выше значение энергии связи тем прочнее связь.

# Длина связи

Длина связи,  $\ell$ , - расстояние между центрами двух атомов, образующих молекулу. Измеряется в м (нм) или в ангстремах ( $10^{-10}$  м).

Значения энергии связи и длин связи для некоторых веществ:

Связь	$E_{\text{св}}$ , кДж/моль	$\ell$ , Å
H – H	435,1	0,74
Cl – Cl	238,9	1,99
Br – Br	190,3	2,28
I – I	152,7	2,67
H – Cl	431,0	1,28
H – Br	366,0	1,41
H - I	299,5	1,60

# Валентный угол

Валентный угол – это угол между прямыми, соединяющими центры ядер атомов в молекуле. Значение валентного угла определяется природой атомов, входящих в состав молекулы. Для молекулы, состоящей из двух атомов валентный угол равен  $180^{\circ}$ . Для молекулы, состоящей из трех атомов возможны две конфигурации: линейная и угловая.

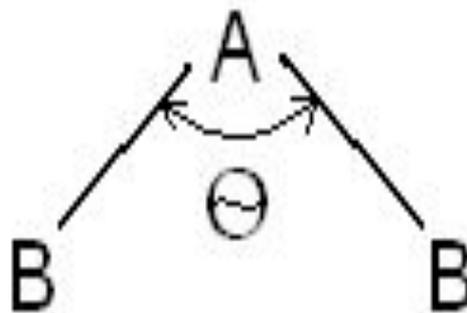
# Примеры конфигураций

Возможные конфигурации трехатомных молекул:

B-

A-

B



# Типы химических связей

По характеру распределения электронной плотности в веществе различают три основных типа химической связи:

- ковалентную
- ионную
- металлическую

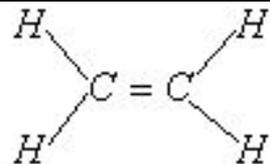
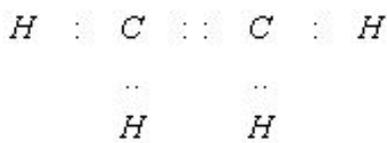
В дополнение к этим типам связей в реальных веществах возникают водородные связи и вандерваальсовы взаимодействия.

# Правило октета

В результате образования химической связи атомы могут приобретать такую же конфигурацию, как у благородных газов, которые (за исключением гелия) имеют на внешней оболочке восемь электронов. Это справедливо как для ионной, так и ковалентной связей.

# Обозначение химической СВЯЗИ.

Электроны внешней оболочки, участвующие в образовании химической связи, могут изображаться точками (формула Льюиса), а связи – черточками.

Молекула	$HI$	$C_2H_4$	$N_2$
Связь	$H - I$		$N \equiv N$
Формула Льюиса	$H : I$		$: N :: N :$
Название связи	Простая ковалентная	Двойная ковалентная	Тройная ковалентная

# Способы описания химической связи

В настоящее время используется два метода для описания ковалентных связей:

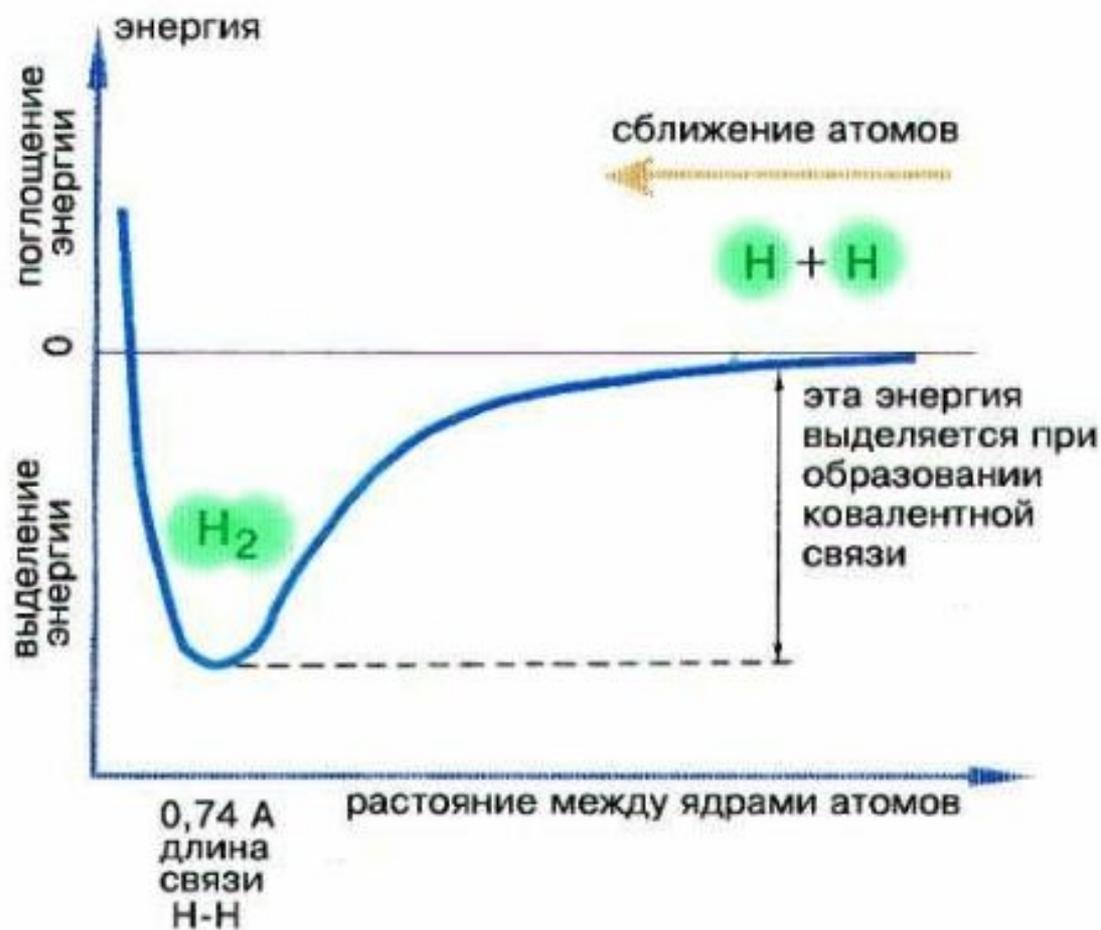
- Метод валентных связей (МВС).
- Метод молекулярных орбиталей (ММО/МО ЛКАО).

ММО рассматривает образующуюся связь как собственность не двух атомов, а всей молекулы в целом.

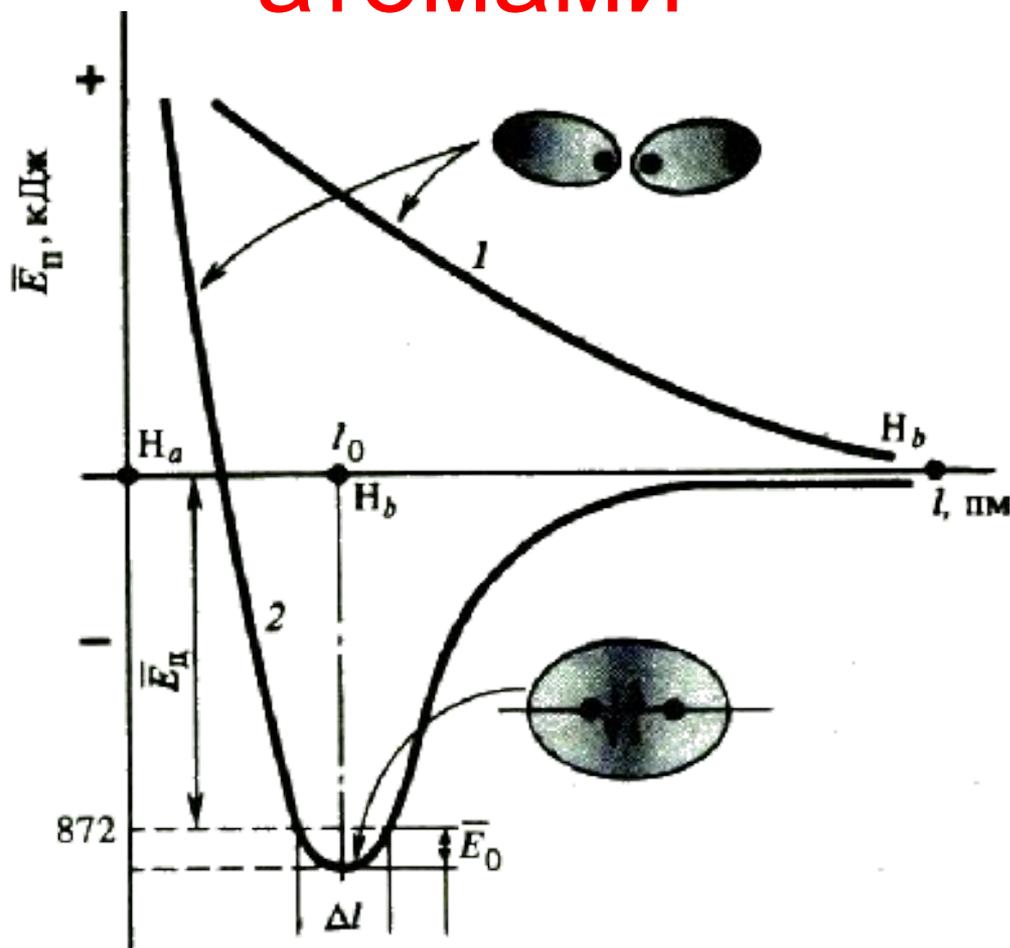
# Основы метода валентных связей

1. Химическая связь образуется двумя валентными электронами различных атомов с антипараллельными спинами. При этом происходит перекрывание электронных облаков и между атомами возникает зона с повышенной электронной плотностью. Это приводит к уменьшению потенциальной энергии системы.

# Зависимость энергии химической связи от расстояния между атомами



# Зависимость энергии химической связи от расстояния между атомами



# Основы метода валентных связей

2. В пространстве связь располагается по направлению, в котором возможность перекрывания электронных облаков наибольшая. Из нескольких связей, образуемых данным атомом, наиболее прочной будет та связь, у которой перекрывание атомных орбиталей наибольшее.
3. Количество электронов, отдаваемых атомом на образование связи, определяет его валентность.

# Ковалентная связь

Химическая связь между атомами, осуществляемая обобществленными электронами, называется ковалентной. Ковалентная связь (означает – «совместно действующая») возникает за счет образования общих электронных пар между атомами в молекуле.

Выделяют два механизма образования ковалентной связи – обменный и донорно-акцепторный.

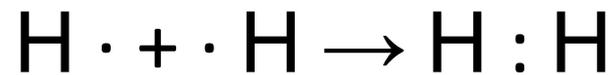
# Обменный механизм образования ковалентной связи

Обменный механизм образования ковалентной связи заключается в том, что каждый из соединяющихся атомов предоставляет на образование общей электронной пары (связи) по одному неспаренному электрону. Электроны взаимодействующих атомов должны при этом иметь противоположные спины ( $\downarrow\uparrow$ ).

# Пример образования ковалентной связи между атомами водорода

${}^1_1\text{H}$  имеет 1 неспаренный электрон –  $1s^1$

При записи в уравнениях неспаренные электроны обозначаются точкой, образующаяся связь парой точек между атомами, либо черточкой:



Выделяющаяся при этом энергия равна энергии связи.

# Донорно-акцепторный механизм образования ковалентной связи

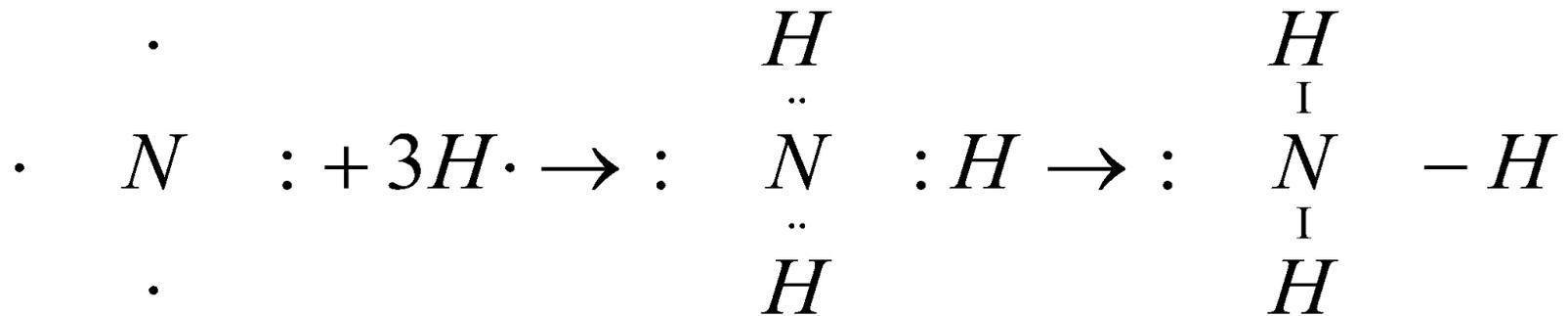
- Донорно-акцепторный механизм образования ковалентной связи заключается в том, что одна частица – донор – представляет на образование связи электронную пару, а вторая – акцептор – свободную орбиталь (лауну):



# Пример образования ковалентной связи в ионе аммония (1)

${}_{7}\text{N}$  имеет 1 пару электронов на  $2s$  подуровне и 3 неспаренных электрона на  $2p$  подуровне  $2s^2 2p^3$

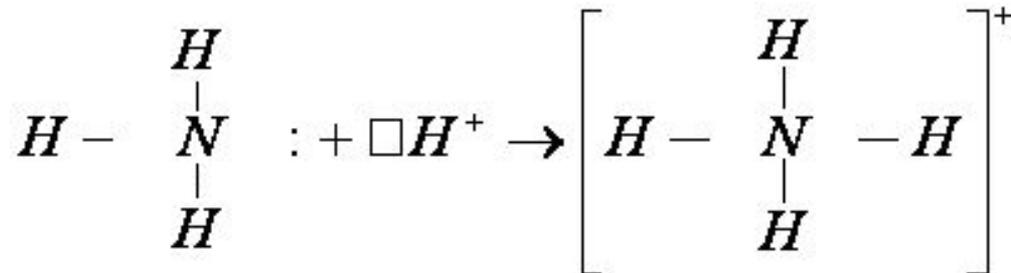
${}_{1}\text{H}$  имеет 1 неспаренный электрон –  $1s^1$



# Пример образования ковалентной связи в ионе аммония (2)

В молекуле аммиака есть 1 пара электронов.

В ионе атома водорода ( $H^+$ ) нет электронов, зато есть вакантная орбиталь (лакуна)  $1s$ :



В соединениях, образованных по донорно-акцепторному типу связи электрический заряд равномерно распределен по всей частице, все связи равноценны.

# Свойства ковалентной связи

Ковалентная связь обладает следующими свойствами:

- насыщаемость;
- направленность;
- полярность и поляризуемость

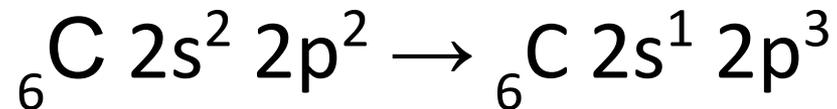
# Насыщаемость ковалентной связи

Насыщаемость ковалентной связи (валентные возможности атома, максимальная валентность) характеризует способность атомов участвовать в образовании определенного ограниченного числа ковалентных связей.

Валентность элемента (V) - его способность к образованию химических связей. В представлении МВС численное значение валентности соответствует числу ковалентных связей, которые образует атом.

# Насыщаемость ковалентной связи

В ряде случаев атом, имеющий пару электронов может перейти в возбужденное состояние (промотирование электрона):



Происходит это в тех случаях, когда выделение энергии от образования химической связи больше, чем поглощение энергии, затрачиваемой на промотирование.

# Пример промотирования электрона для кислорода и серы.

И  ${}_{8}\text{O}$  и  ${}_{16}\text{S}$  имеют одинаковую электронную конфигурацию последнего уровня –  $2s^2 2p^4$  и  $3s^2 3p^4$  соответственно, но кислород, в отличие от серы не может промотировать свои электроны.

Следующий подуровень для кислорода –  $3s$  принадлежит к другому энергетическому уровню, в то время как для серы это  $3d$  подуровень, который находится недалеко от  $3p$  подуровня. Поэтому валентность кислорода равна двум, а для серы может достигать шести.

# Гибридизация

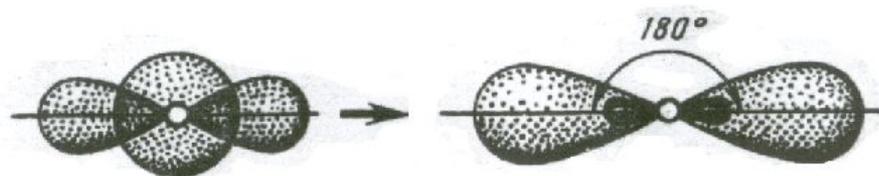
Гибридизация – выравнивание по форме и энергии электронных облаков с образованием новых, одинаковых по форме и энергии. Новые облака называются гибридными, их число равно сумме электронных облаков, участвующих в гибридизации.

# Основные положения теории гибридизации

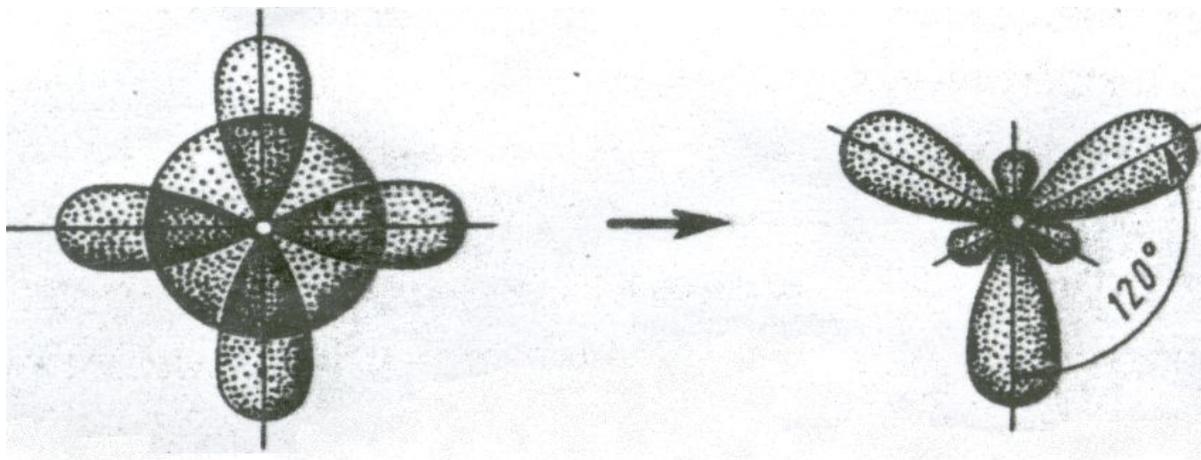
1. Если у атома, вступающего в химическую связь, имеются разные АО ( $s$ -,  $p$ -,  $d$ - или  $f$ -АО), то в процессе образования химической связи происходит гибридизация (смешение) АО, т.е. из разных АО образуются одинаковые (эквивалентные) АО.
2. Форма гибридной АО отличается от формы исходных АО. В гибридной АО электронная плотность смещается в одну сторону от ядра, поэтому при взаимодействии ее с АО другого атома происходит максимальное перекрывание, которое приводит к повышению энергии связи.

# Основные типы гибридизации

- $sp$  – гибридизация:

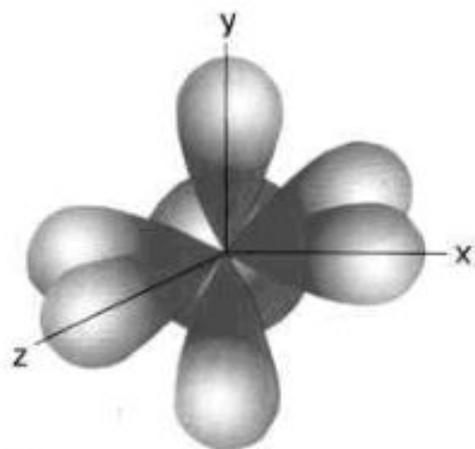


- $sp^2$  – гибридизация:

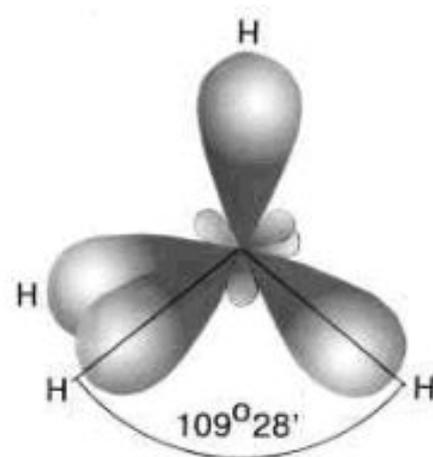


# Основные типы гибридизации

- $sp^3$  – гибридизация:



( $s+p_x+p_y+p_z$ )-орбитали  
атома углерода в возбужденном  
состоянии



четыре  $sp^3$ -гибридные  
орбитали молекулы  $CH_4$

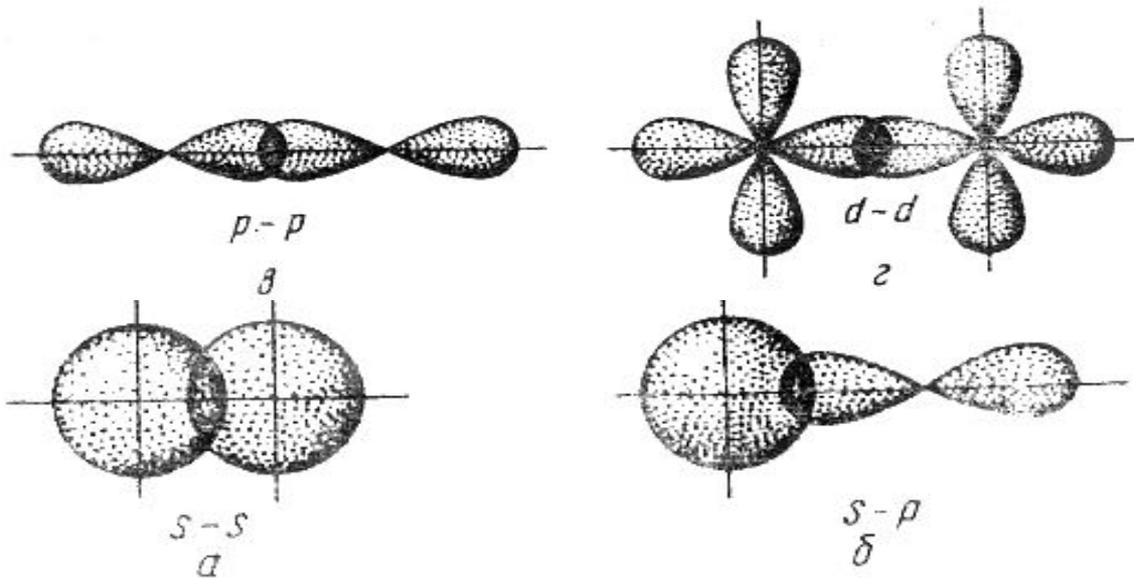
# Направленность связи

Направленность связи заключается в том, что максимальное перекрывание валентных электронных облаков взаимодействующих атомов возможно при определенной их взаимной ориентации. Направленность ковалентной связи определяет пространственную конфигурацию молекул.

Выделяют  $\sigma$  -,  $\pi$  – и  $\delta$  – связи.

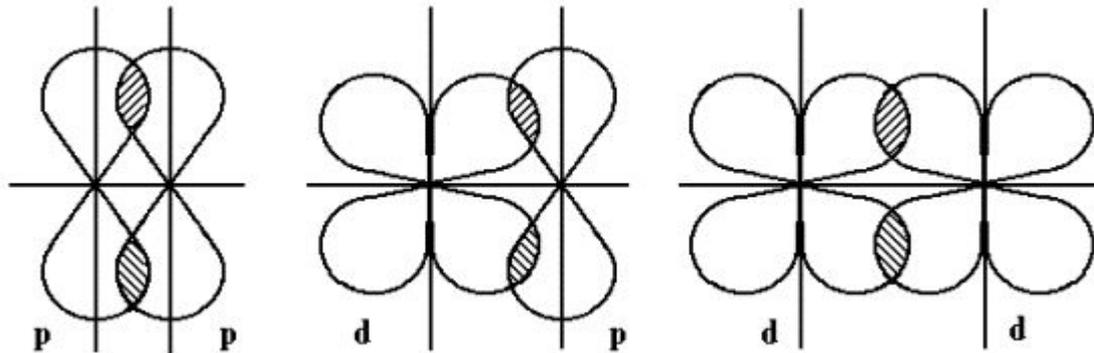
# $\sigma$ - СВЯЗЬ

Связь, образованная перекрыванием АО по линии, соединяющей ядра взаимодействующих атомов, называется  $\sigma$  – связью. Этот вид связи са



# π – СВЯЗЬ

Связь, образованная перекрыванием АО по обе стороны линии, соединяющей ядра атомов (боковые перекрывания), называется π-связью.



# Кратность связи

Связь, которая образована одной электронной парой между двумя атомами, называется одинарной. Одинарная связь всегда  $\sigma$  – связь.

Связь, образованная более чем одной электронной парой, называется кратной (двойной или тройной).

Энергия тройной связи  $>$  двойной  $>$  одинарной.

Кратность – количество связей между двумя атомами.

Двойная связь обозначается двумя черточками, тройная тремя.

# Полярность химической связи

Общая электронная пара может быть смещена к более электроотрицательному атому. Такая связь называется полярной. Возникает в случае, если два атома обладают различной электроотрицательностью.

В неполярной связи общая электронная пара находится посередине между двумя атомами.

# Полярность химической связи

В результате смещения электронной плотности от центра связи на атомах возникает частичный (эффективный) заряд ( $\delta$  – «дельта»).

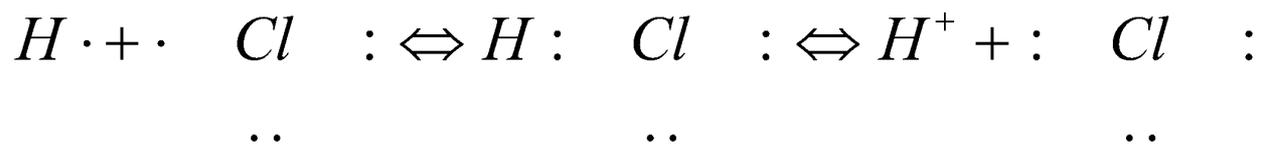
Мерой полярности связи служит электрический момент диполя, равный произведению эффективного заряда  $\delta$  на длину диполя  $l$ :

$$\mu_{св} = \delta \cdot l$$

# Поляризуемость химической связи

Поляризуемость связи характеризует способность становиться полярной (или более полярной) в результате действия на молекулу внешнего электрического поля.

В результате воздействия внешнего поля может произойти разрыв связи: .. –



# Степень окисления

Степень окисления элемента - это условный заряд, который приписывается атому в предположении, что все связи в молекуле или ионе предельно поляризованы.

Степень окисления элемента в составе молекулы вещества или иона определяется как число электронов, смещенных от атома данного элемента (положительная степень окисления) или к атому данного элемента (отрицательная степень окисления).

Максимальная степень окисления (положительная) равна количеству электронов на валентном уровне.

# Задание на дом

- Изучить ионную связь и её основные свойства: ненаправленность и ненасыщенность.
- Изучить металлическую связь и её основные свойства: ненаправленность, проводимость.