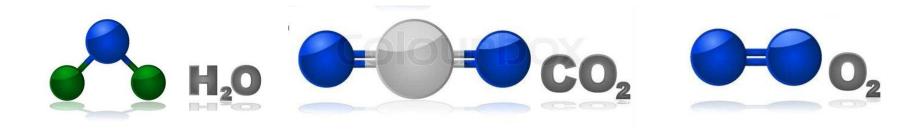
ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ

Викулова Мария Александровна

• Атомы не могут существовать изолированно друг от друга!



•*Химическая связь* - это взаимодействие, которое связывает отдельные атомы в более сложные системы (молекулы, радикалы, кристаллы и др.).



•Основная причина образования химической связи - это достижение более устойчивого состояния с минимально возможным запасом энергии.

• Основное условие образования химической связи - понижение полной энергии системы по сравнению с суммарной энергией изолированных атомов.

+
$$E_{A} + E_{B} > E_{AB}$$

 $E_{\rm A},\,E_{\rm B}$ - полная энергия изолированных атомов $E_{\rm AB}\,$ - полная энергия молекулы

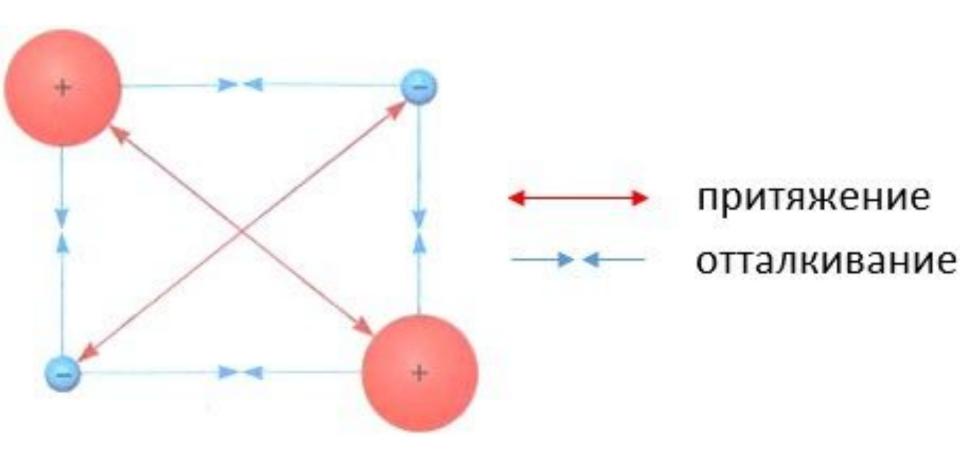
Отличительные признаки химической связи:

•Понижение энергии системы по сравнению с суммой энергий несвязанных атомов;

•Перераспределение электронной плотности в области образования химической связи.

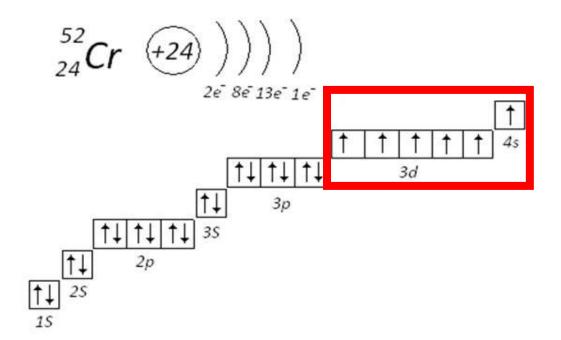
Природа сил химической связи

- электростатическая



•В образовании химической связи принимают участие *валентные электроны*.

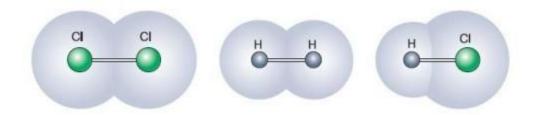
•При образовании химической связи каждый атом хочет *завершить* свой *внешний* энергетический уровень.



химическая связь ковалентная ионная NaCl неполярная полярная Cl Na+ H→C1 CI-CI металлическая водородная Ag фторид водорода e вода CH;

•Межмолекулярные взаимодействия

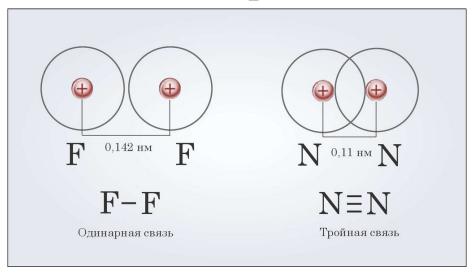
•Длина химической связи (l_{cs}) — расстояние между ядрами соседних атомов в молекуле или кристалле [нм].



• Химическая связь *консервативна* — каждый атом вносит всегда определенный вклад в длину химической связи, не зависимо от того, в состав какой молекулы он входит.

Oсобенности l_{ce}

• Длина связи зависит от *степени перекрывания* электронных облаков и *кратности связи*:

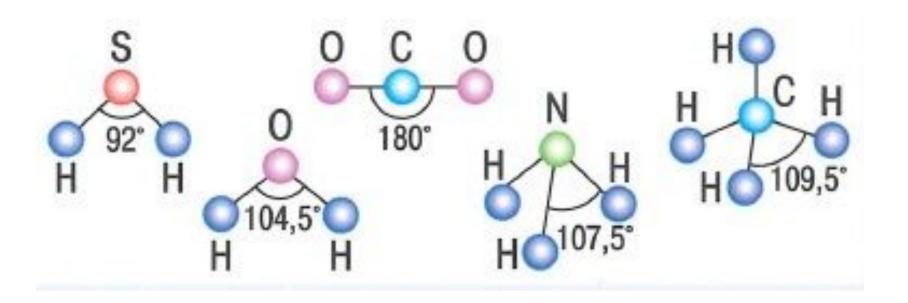


• Длина связи зависит от *радиусов атомов*, образующих связь

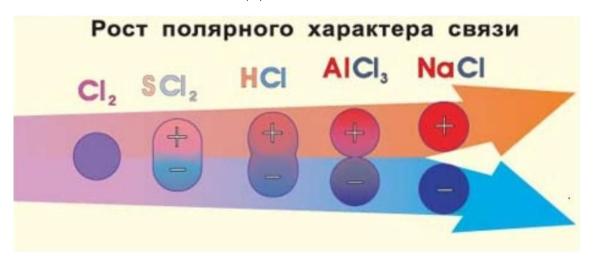
- Энергия химической связи (E_{cs}) энергия, которую необходимо затратить для разрыва химической связи [кДж/моль].
- ✓ Чем больше длина связи, тем меньше её энергия:

| Связь в молекуле | Длина связи, пм | Энергия связи, кДж/моль | Примечание |
|---------------------|--------------------|----------------------------|-------------------------------------|
| N ₂ | 109 | 941 | Одна из наиболее прочных связей |
| CO | 113 | 949 | Одна из наиболее прочных связей |
| HF | 91 | 559 | |
| H ₂ | 74 | 443 | Самая короткая химическая связь |
| NaCl | 236 | 408 | Двухатомная молекула в газовой фазе |
| CO_2 | 131 | 347 | |
| Br ₂ | 228 | 190 | |
| K ₂ | 392 | 50 | Одна из наименее прочных связей |

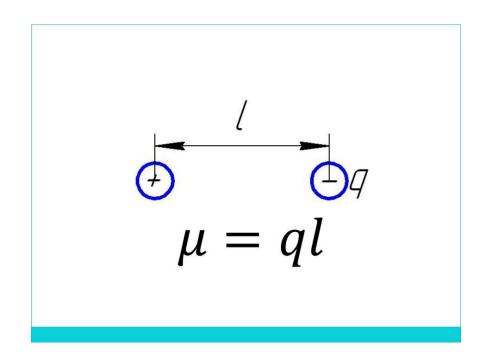
• *Валентный угол* — это угол между связями, которые образует атом в молекуле.



- *Полярность связи* это смещение электронной плотности к более электроотрицательному атому.
- Полярность связи характеризуется дипольным моментом (μ), эффективным зарядом (δ) и степенью ионности (i).



Дипольный момент [$K \pi \cdot M$] = [D]



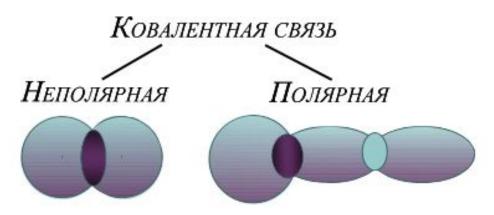
- • ℓ длина диполя;
- •q абсолютная величина заряда в кулонах

• Эффективный заряд — безразмерная величина, определяемая отношением экспериментально найденного µ к теоретически рассчитанному.

•Степень ионности — реальный заряд иона в кристаллической структуре. Может быть, оценена по разности электроотрицательностей атомов.

Ковалентная связь

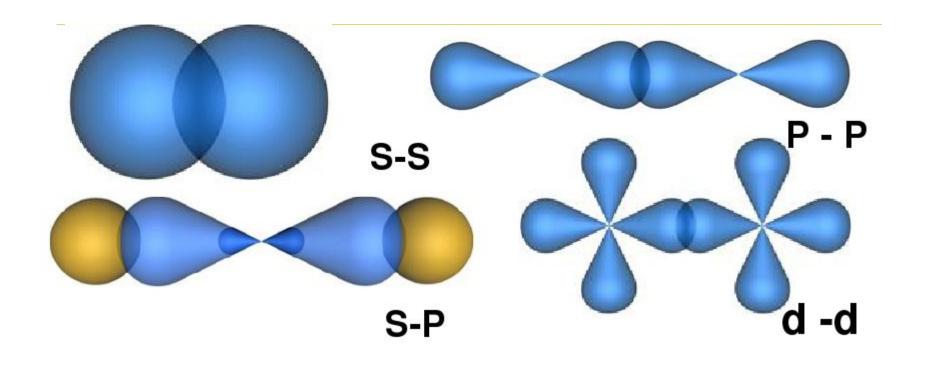
• Возникает между двумя атомами неметаллов с одинаковыми или разными значениями электроотрицательности как результат перекрывания атомных орбиталей (АО) (обобществление электронов).



• Образуется неспаренными электронами с антипараллельными спинами.

Типы перекрывания АО

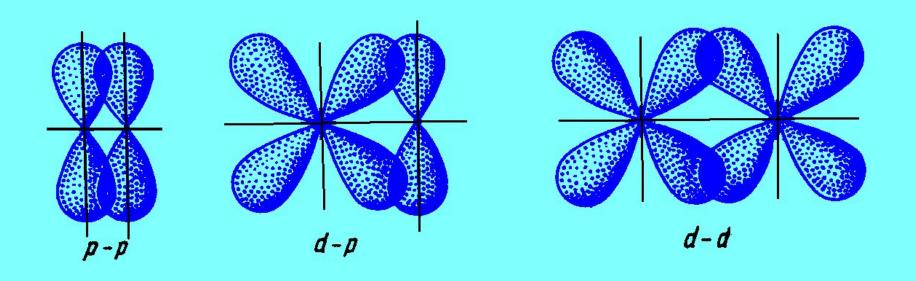
• *σ-связь* — перекрывание AO вдоль линии связи. *Пример*: s-s, s-p, p-p, d-d перекрывание



Типы перекрывания АО

•*п***-связь** – перекрывание АО с двух сторон от линии связи.

Пример: p-p, d-p, d-d перекрывание



Кратность связи

• Это число общих электронных пар (количество связей) между взаимодействующими атомами

О-связь более прочная, чем π-связь!!!!!

Сначала образуется **О**-связь и только потом **Т**-связи (максимум две)!!!!!!

$$0 \frac{\pi}{\sigma} C \frac{\pi}{\sigma} O$$

$$H - \frac{\pi,\pi}{\sigma} C = N$$

Механизмы образования ковалентной связи

•Обменный

•Донорно-акцепторный

•Дативный

Обменный механизм

• Каждый атом отдает на образование общей электронной пары по одному неспаренному электрону.

Электронная формула Графическая (структурная) формула Электронно-графическая схема

$$H_2$$
 — водород: $H \cdot + \cdot H \longrightarrow H H \longrightarrow H H - H$

$$\bigcirc_{s} + \bigcirc_{s} = \bigcirc_{s-s}$$

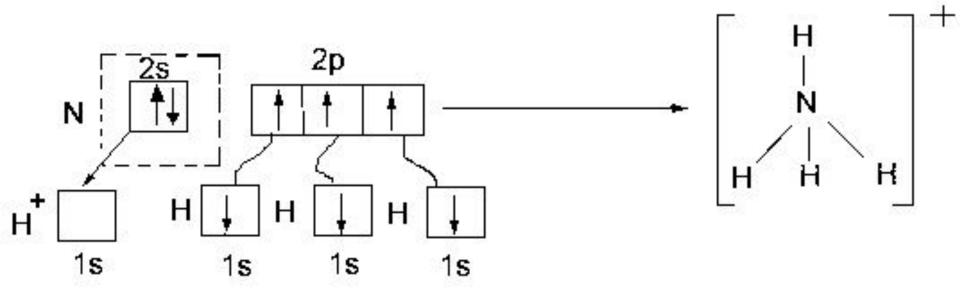
Порядок ковалентной пары

Одинарная Двойная Тройная CBЯ3Ь C

Донорно-акцепторный механизм

• Один атом отдает пару электронов (*донор*), а второй предоставляет свободную орбиталь (*акцептор электронной пары*).

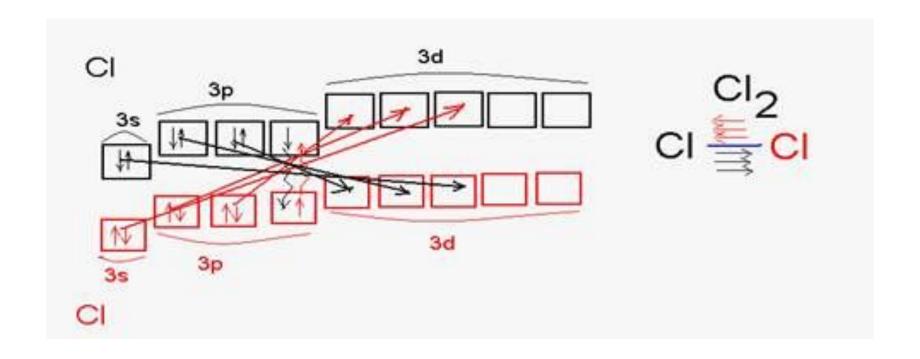




• Все четыре связи равноценны!

Дативный механизм

• Каждый атом хлора одновременно является и донором, и акцептором электронной пары.

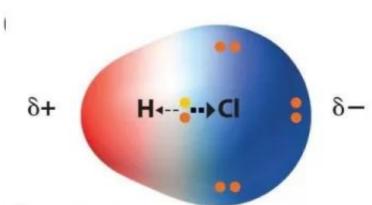


Свойства ковалентной связи

- **Полярность** смещение электронной плотности к более электроотрицательному атому.
- Ковалентная неполярная связь образована атомами с одинаковыми значениями ЭО: H-H, $O=O(\Delta \Theta)$.
- *Ковалентная полярная связь* образуется между атомами с разными значениями ЭО: H₂O, NH₃.

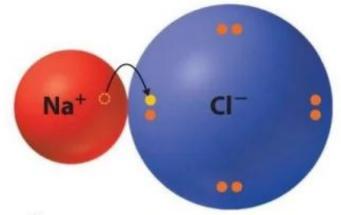


Неполярная ковалентная связь Связывающие электроны в равной степени принадлежат обоим атомам. На атомах отсутствует заряд.



Полярная ковалентная связь

Электронная плотность смешена к более электроотрицательному атому, на котором возникает частичный отрицательный заряд. На менее электроотрицательном атоме возникает частичный положительный заряд.



Ионная связь

Перенос одного или нескольких валентных электронов от атома металла к атому неметалла. Образуются целочисленно заряженные ионы.

Свойства ковалентной связи

- *Насыщаемость* определенное число химических связей атома, вызванное ограниченным числом валентных связей и AO.
- Отсюда следует, что максимальная валентность (ковалентность):
- ✓ элементов первого периода равна 1,
- ✓ второго 4 (одна 2s-AO + три 2p-AO),
- ✓ третьего 9 (одна 3s-AO + три 3p-AO и + 5d-AO).

Свойства ковалентной связи

•*Направленность* — молекулы и ионы с ковалентными связями имеют определённое геометрическое строение.

•Геометрическое строение молекул и ионов объясняется гибридизацией атомных орбиталей.

Теория гибридизации

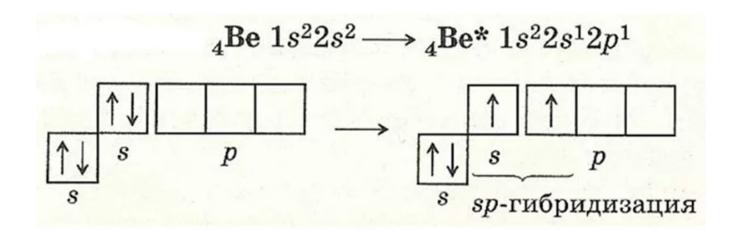
- *Гибридизация* это выравнивание атомных орбиталей по форме и энергии.
- Основные положения теории гибридизации:
- ✓ гибридизуются АО центрального атома
- ✓ гибридные АО имеют определённую форму, которая обеспечивает максимальное перекрывание
- ✓ гибридизуются АО с неспаренными электронами, а также занятые парой электронов
- ✓ гибридизуются АО, участвующие в сигма-связывании
- ✓ гибридные АО располагаются в пространстве таким образом, чтобы испытывать минимальное межэлектронное отталкивание
- ✓ Число АО = числу ГАО!

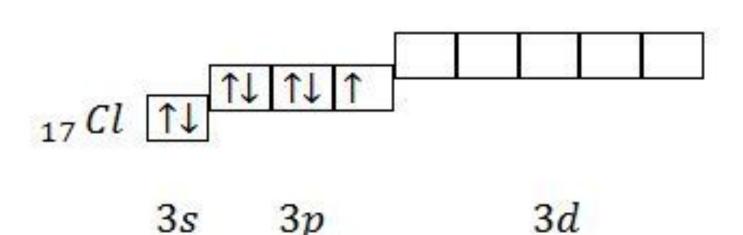
Алгоритм определения типа гибридизации в молекулах

- •Записать электронно-графическую формулу для валентных электронов (участвуют в образовании химической связи).
- •Записать электронно-графическую формулу центрального атома в возбужденном состоянии (если необходимо).
- •По числу АО построить ГАО.
- •Определить тип гибридизации по числу атомных орбиталей, участвующих в гибридизации.

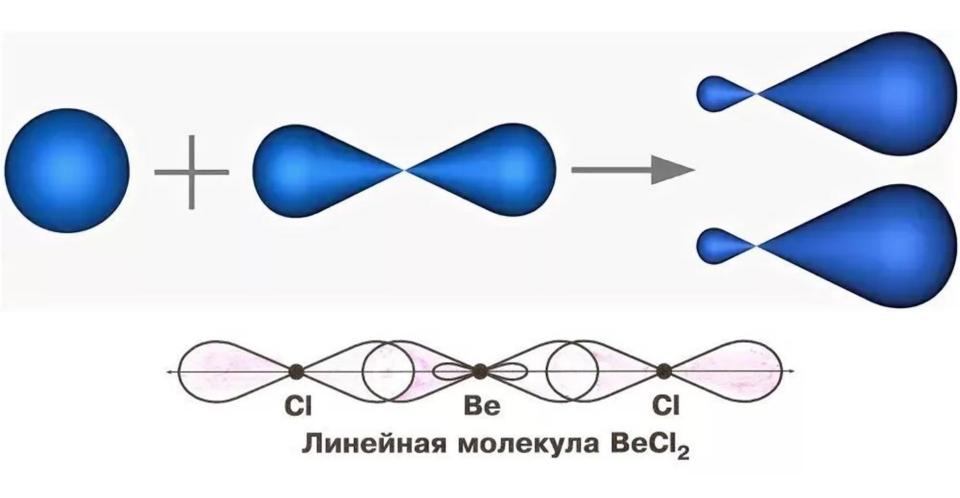
sp-гибридизация

(на примере BeCl₂)





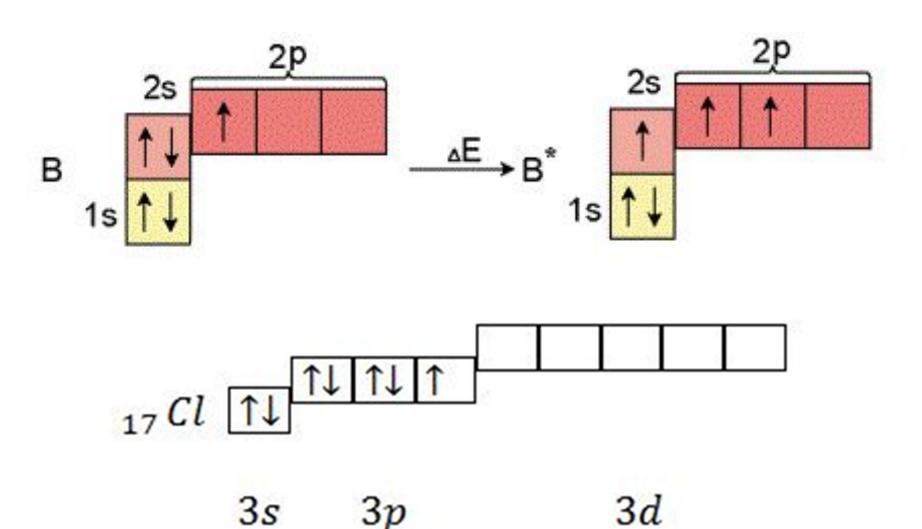
sp-гибридизация



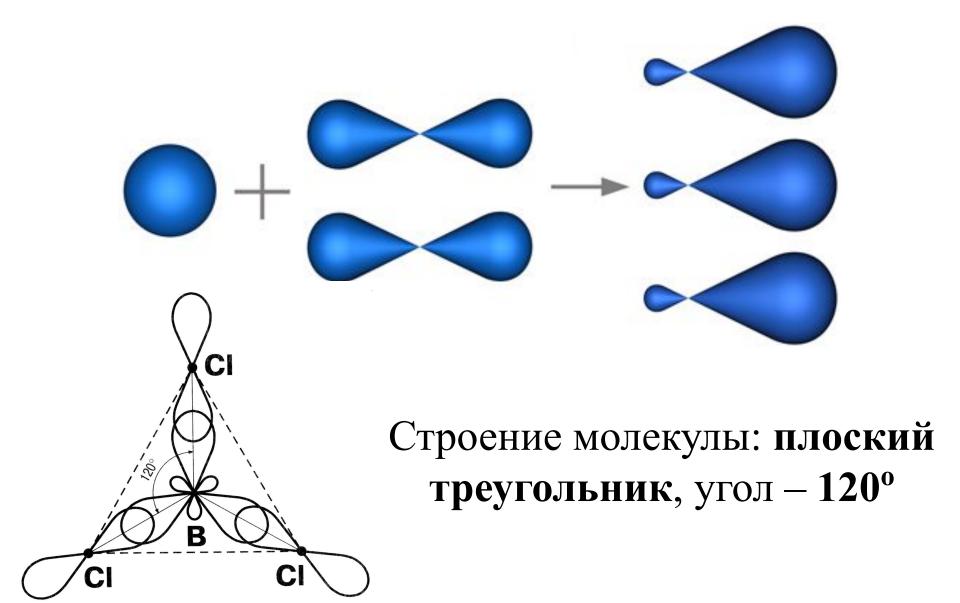
Строение молекулы: **линейное**, угол — **180°**

sp^2 -гибридизация

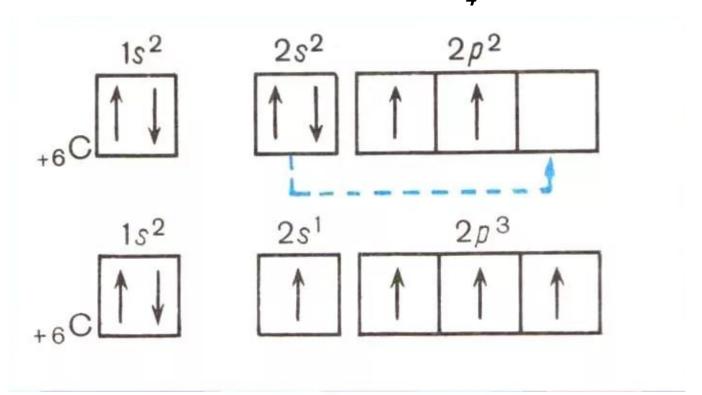
(на примере BCl₃)

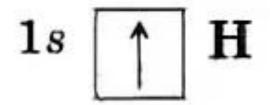


sp^2 -гибридизация

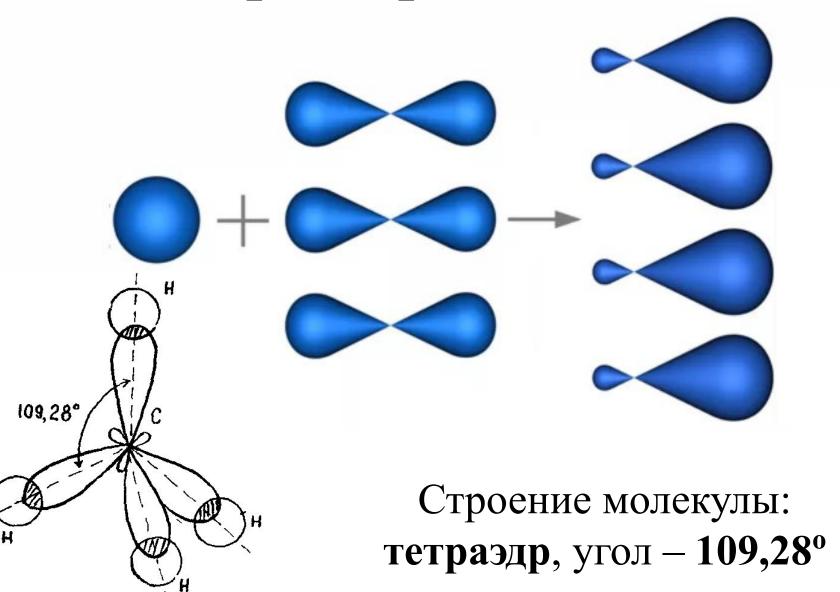


sp³-гибридизация (на примере CH₄)

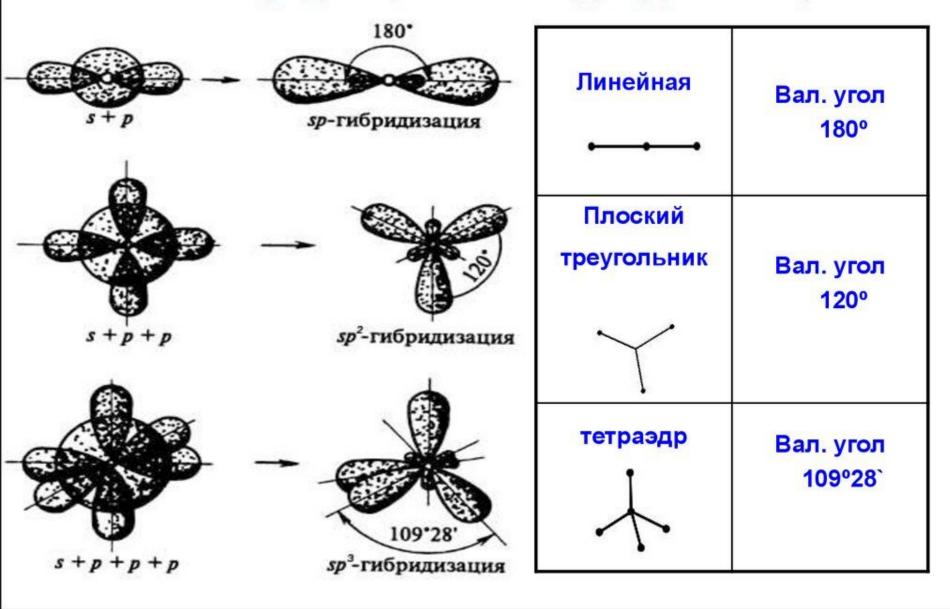




sp³-гибридизация



типы гибридизации АО и структура молекул



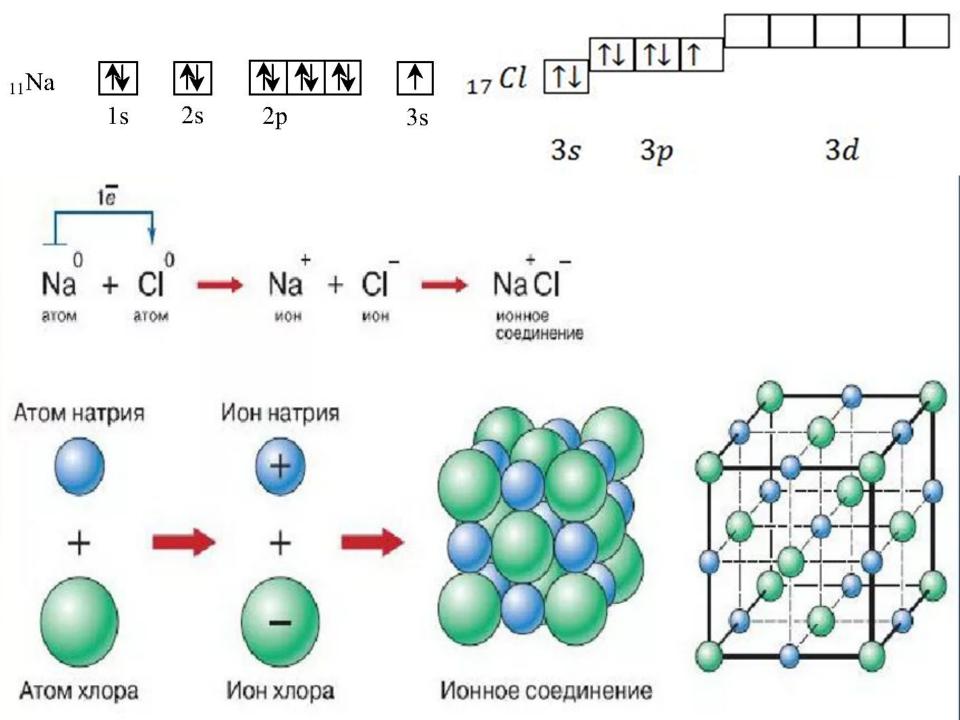
Ионная связь

• Осуществляется за счет электростатического взаимодействия противоположно заряженных ионов в химическом соединении.

• Возникает между катионами s-металлов I и II группы п.с. и анионами неметаллов VI и VII группы.

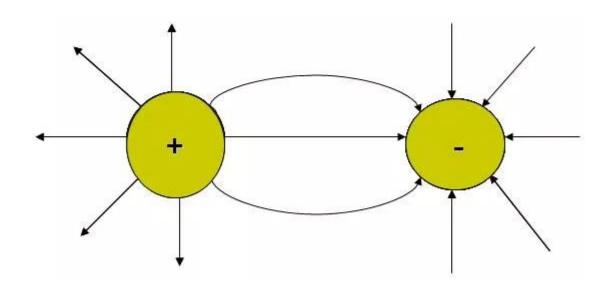
•*430* > *1*,*9*

•Пример: NaCl, LiF, K₂O, MgO



Свойства ионной связи

• ненаправлена, т.к. электростатическое поле иона обладает сферической симметрией и способно притягивать ионы противоположного знака в любом направлении.



Свойства ионной связи

- *ненасыщаема* ионы данного знака способны притягивать к себе переменное количество ионов противоположного знака.
- Эти свойства приводят к тому, что соединения с ионной связью имеют *трёхмерные* кристаллические решетки, в узлах которых находятся ионы.
- Весь кристалл можно рассматривать как гигантскую молекулу, состоящую из огромного числа ионов:

NaCI

CsCI

CaF,

Ионная связь — образуется между металлом и неметаллом NaCl Na \circ + \circ Cl \circ Na \circ Cl \circ Cl \circ Na \circ Cl \circ Cl \circ Na \circ N

Ковалентная неполярная связь — образуется между одинаковыми неметаллами.

$$Br_2$$
 $Br + Br \longrightarrow Br Br$

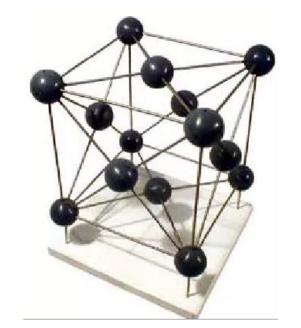
Ковалентная полярная связь – образуется между разными неметаллами.

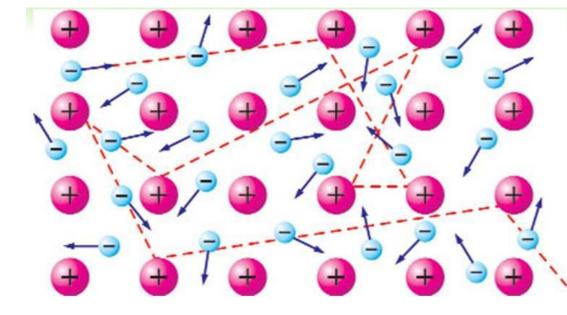
Металлическая связь

• Возникает за счет обобществления валентных электронов, только в металле обобществленные электроны обслуживают весь кристалл (электронный газ).

Me ⁰ - ne

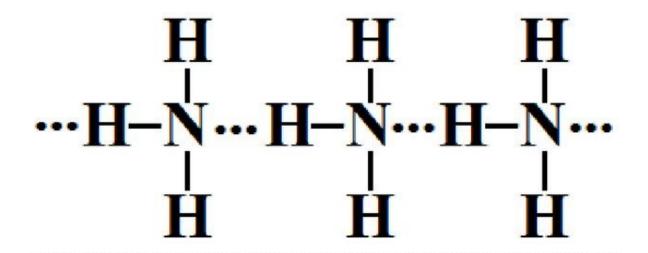
Meⁿ⁺





Водородная связь

- Возникает в молекулах или между молекулами, в состав которых входит *атом водорода* и наиболее *электроотрицательный атом* (F, O, N).
- •*Пример:* NH₃, H₂O, HF



• Межмолекулярная водородная связь — это химическая связь между положительно поляризованным атомом водорода одной молекулы и наиболее электроотрицательным атомом другой молекулы.

$$\begin{array}{c} H \\ O \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ O \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ O \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ O \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ O \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ O \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ O \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ O \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ O \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ O \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ O \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ O \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ O \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ O \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ O \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ O \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ O \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ O \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ O \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ O \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} H \\ \end{array} \\ \begin{array}{c} C \\$$

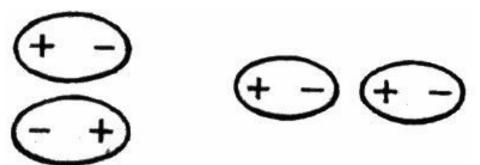
Межмолекулярная водородная связь в парагидроксибензальдегиде • Внутримолекулярная водородная связь возникает между функциональными группами внутри одной молекулы.

Внутримолекулярная Н-связь в салициловом альдегиде

Силы Ван-дер-Ваальса

- Связи между молекулами, обусловленные электростатическим взаимодействием.
- Различают 3 типа сил:
- *Ориентационное (диполь-дипольное)* взаимодействие возникает между полярными молекулами (HCl-HCl).
- *Индукционное взаимодействие* возникает между полярными и неполярными молекулами $(H_2\text{-HCl})$.
- Дисперсионное взаимодействие возникает между неполярными молекулами (H_2-H_2) .

1. Диполь-дипольное (ориентационное)



2. Индукционное

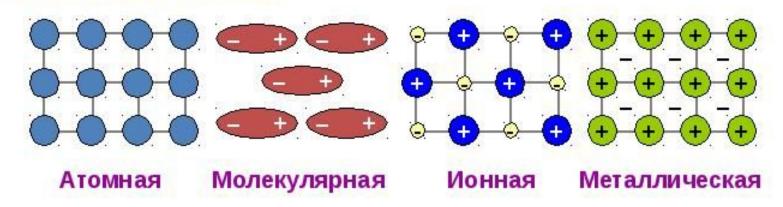


3. Дисперсионное



Типы кристаллических решеток

Тип химической связи











Свойства кристаллов определяются особенностями строящих кристаллическую решетку атомов и молекул, силами связей и взаимным расположением в пространстве – структурой кристалла

| Особенность | Тип кристаллической решетки | | | | | | |
|-----------------------------------|--|---|--|---|--|--|--|
| кристаллической решетки | Молекулярная | Ионная | Атомная | Металличе ская Катионы и атомы металлов Металличе ская связь | | | |
| Частицы в узлах решетки | | Катионы и анионы | Атомы | | | | |
| Характер связи между частицами | Силы межмолекулярног о взаимодействия (в том числе водородные связи) | | Ковалентные связи | | | | |
| Прочность связи | Слабая | Прочная | Очень прочная | Разной прочности | | | |
| ♣ 3 | возгоняющиеся, небольшой твердости, многие растворимы в воде | твердые, многие растворимы в воде. Растворы и расплавы | Очень тугоплавкие, очень твердые, практически нерастворимы в воде | Высокая электро- и теплопроводность , металлический блеск | | | |
| Примеры веществ | лед | 1 0 0 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 1 | Алмаз, кремний, бор, германий | Медь, калий, цинк, железо | | | |

| Период | | Группа | | | | | | | | | |
|--|-----|---------------|----|----|---------|------------------|-------------------|-----------------|------|--|--|
| | | Ι | II | Ш | IV | V | VI | VII | VIII | | |
| | I | | | | | | | H_2 | He | | |
| | II | Li | Be | В | | N_2 | O_2 | $\mathbf{F_2}$ | Ne | | |
| | III | Na | Mg | Al | Si | \mathbf{P}_{4} | S_8 | Cl_2 | Ar | | |
| | IV | K | Ca | Ga | Ge | | Se | Br ₂ | Kr | | |
| | V | Rb | Sr | In | Sn | Sb | Te | I_2 | Xe | | |
| Тип крис- талличес- кой решётки | | МЕТАЛЛИЧЕСКАЯ | | | АТОМНАЯ | | МОЛЕКУ- ЛЯРНАЯ | | | | |