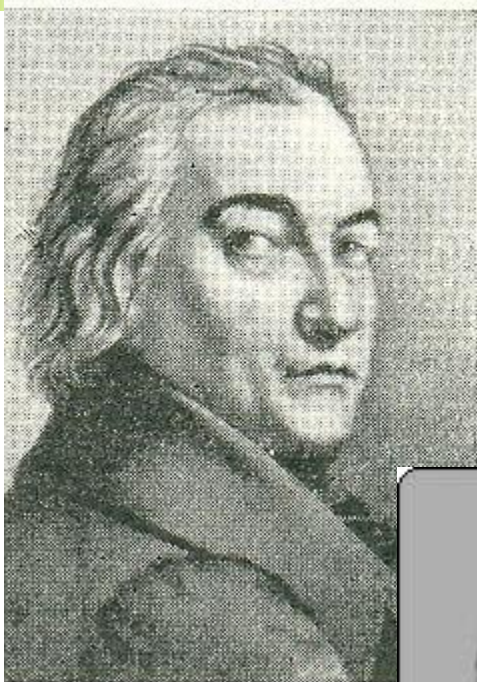


## Тема 4. Химическая связь

### 4.1. Природа химической связи



1748-1822

**Теория химической связи Бертоле:** в основе химической связи лежит чисто гравитационное притяжение атомов



1799-1848

**Теория химической связи Берцелиуса:** между атомами в молекулах и кристаллах действуют силы электростатического притяжения

# Современная теория химической связи

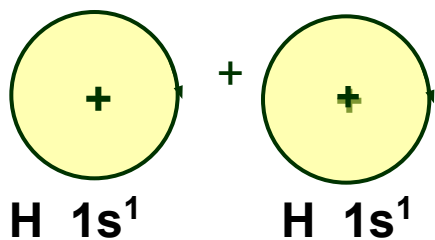
( Г. Льюис, 1916)



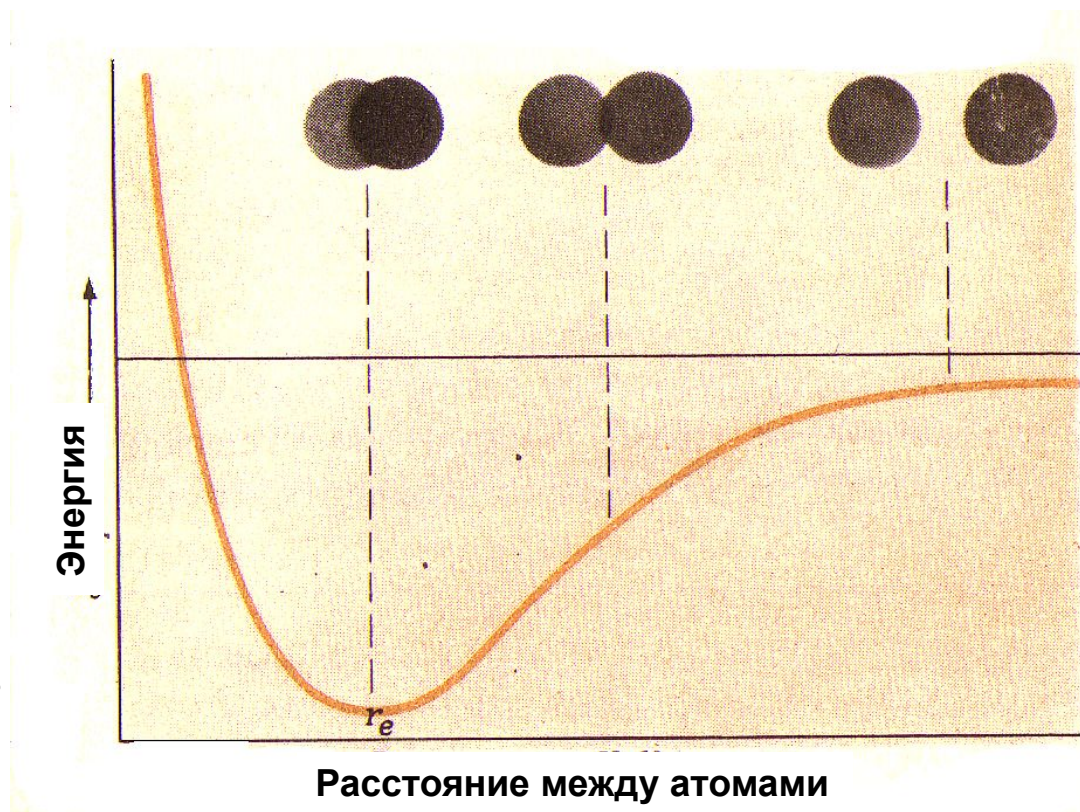
1875-1946

*Возникновение химической связи обусловлено стремлением атомов элементов к «электронному октету» - электронной конфигурации ближайшего инертного газа.*

*При достраивании электронных оболочек происходит перераспределение электронной плотности (электронов) между двумя или несколькими центрами (атомами элементов) и возникновение общей для этих центров области повышенной электронной плотности, которая притягивается к соответствующим центрам и удерживает их друг с другом.*



Радиус атома водорода –  $0,53 \cdot 10^{-10}$  м, а расстояние между центрами атомов в молекуле водорода –  $0,73 \cdot 10^{-10}$  м.



## Современная теория химической связи базируется на трех основных методах:

- **метод валентных связей** описывает химическую связь чисто качественно, трактуя образование ее как возникновение общей пары электронов
- **метод молекулярных орбиталей** описывает химическую связь количественно; базируется на рассмотренных нами принципах построения электронных орбиталей (принцип запрета Паули, принцип минимальной энергии, правило Гунда)
- **метод отталкивания электронных пар** (метод валентных углов) позволяет получить представление о пространственной конфигурации молекул

## 4.2. Типы химических связей

- **Тип химической связи** определяется характером распределения делокализованной электронной плотности между центрами образующих связь атомов
- **Относительная электроотрицательность ( $\chi$ )** – это способность атома элемента оттягивать на себя электроны, осуществляющие химическую связь
  - По Полингу:

$$\chi = \frac{I + E_{cp}}{2}$$

- F.....O.....Ti.....Li.....Cs
- 4,1.....3,5.....1,32.....1.01...0,86

# Химическая связь

Ковалентная

$$0 \leq \Delta\chi \leq 3,5 \text{ (1,8-2)}$$

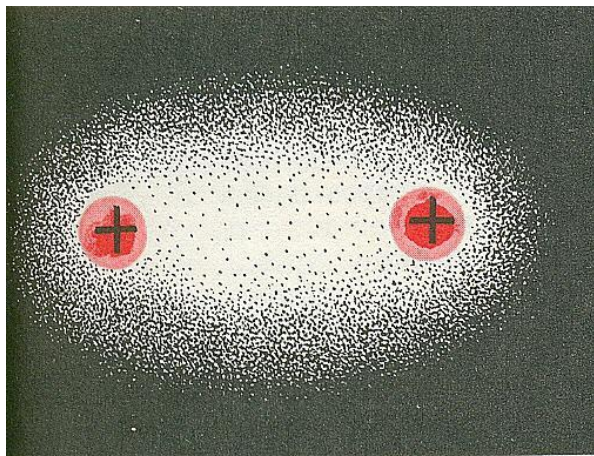
Осуществляется за счет  
общей пары электронов

Неполярная

$$\Delta\chi = 0$$



$$\Delta\chi = 2,1 - 2,1 = 0$$

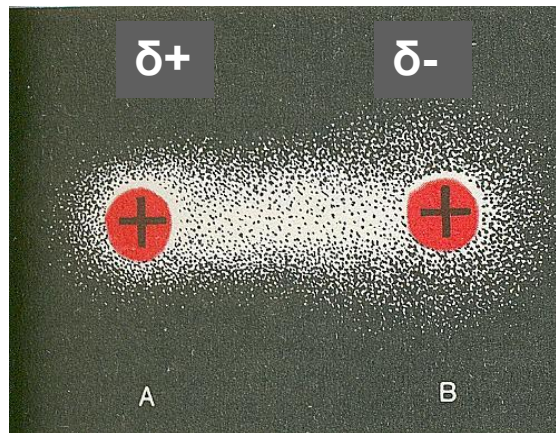


Полярная

$$3,5 \text{ (1,8-2)} > \Delta\chi > 0$$



$$\Delta\chi = 3,0 - 2,1 > 0$$



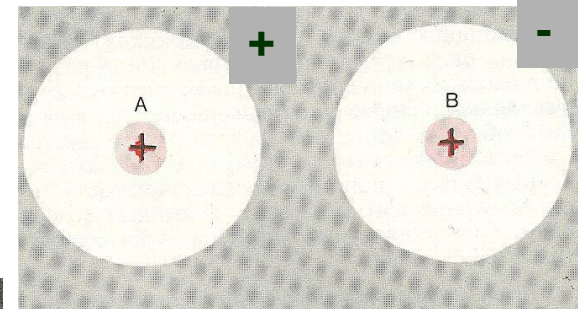
Ионная

$$\Delta\chi > 3,5 \text{ (1,8-2,0- условно ионная)}$$

Осуществляется за счет  
электростатического притяжения  
ионов



$$\Delta\chi = 4,1 - 0,86 = 3,24$$

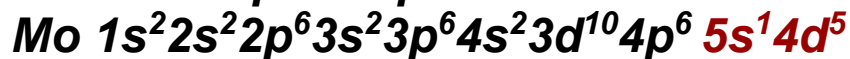
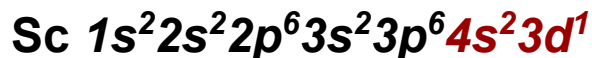
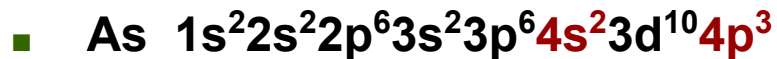
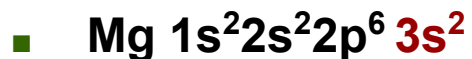
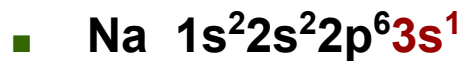


## 4.3 Механизм образования ковалентной связи

Электроны, принимающие участие в образовании связи называются **валентными**.

У **s- и p-элементов** валентными являются электроны внешнего энергетического уровня.

У **d- и f-элементов** – s-электроны внешнего и d-электроны предвнешнего уровня.

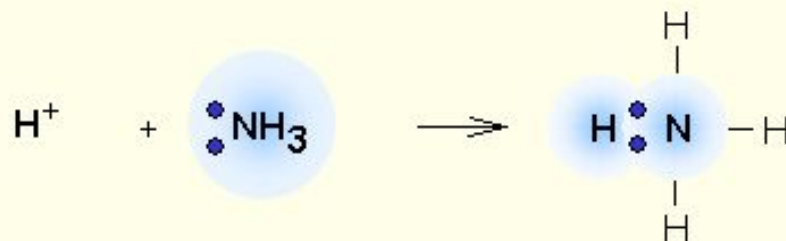
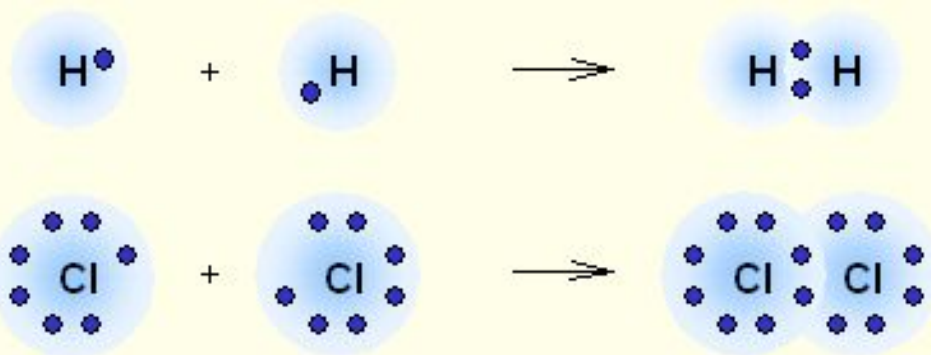




## Механизм образования ковалентной связи

Обычный (обменный)

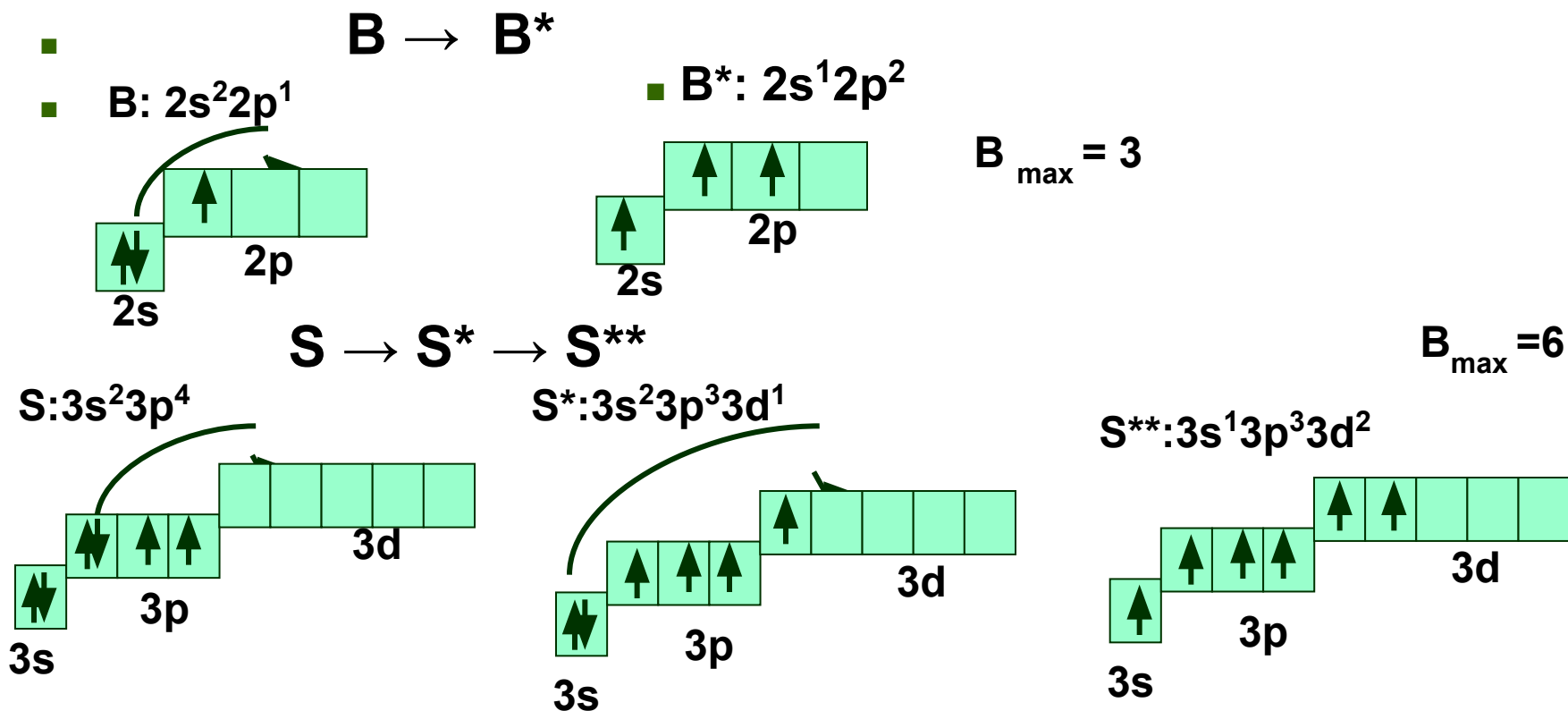
Донорно-акцепторный



По обычному механизму в образовании химической связи принимают участие **неспаренные валентные электроны с противоположными спинами**.

По донорно-акцепторному механизму в образовании химической связи принимают участие **свободная орбиталь одного атома и неподеленная пара электронов другого**

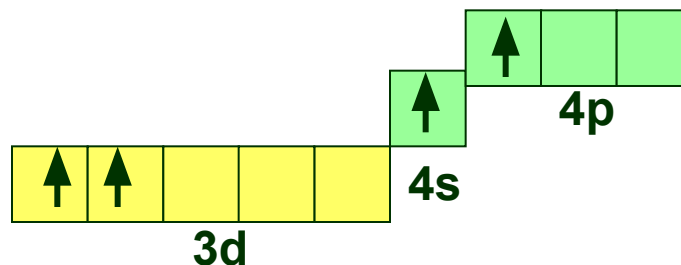
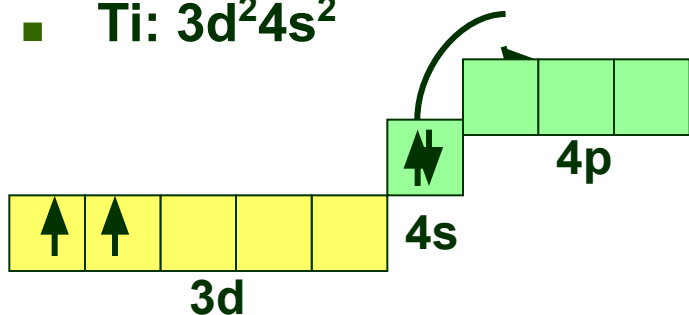
**В ряде случаев с целью увеличения валентных возможностей перед образованием химической связи атом переходит в «возбужденное состояние». При этом происходит «распаривание» электронов на валентном уровне.**



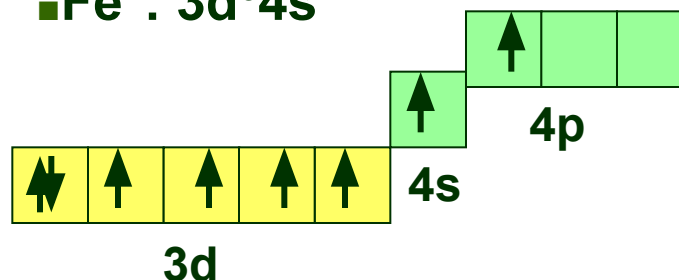
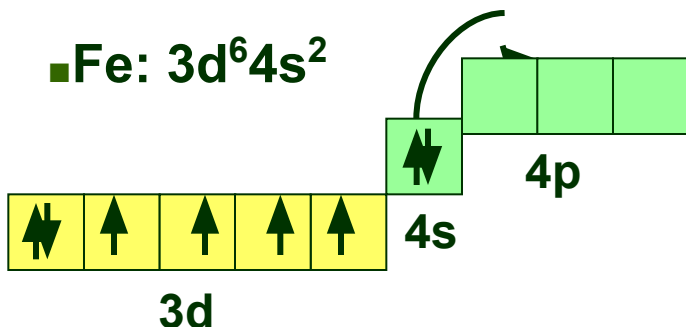
**Энергия, поглощенная при переходе в возбужденное состояние полностью компенсируется энергией, которая выделяется при образовании химической связи**

Переход электронов при «возбуждении» атома возможен только в пределах одного энергетического уровня.

Независимо от порядка заполнения электронами орбиталей «распариваются» электроны только внешнего электронного уровня



$$V_{\max} = 4$$

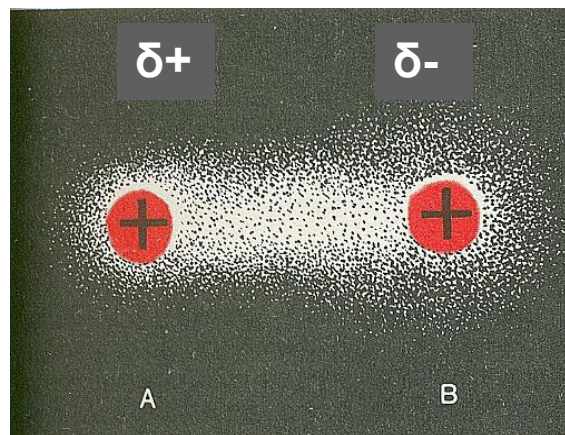


$$V_{\max} = 6$$

Способность атома элемента образовывать химическую связь называется **валентностью**. **Число неспаренных электронов у электрона отвечает его валентности.**

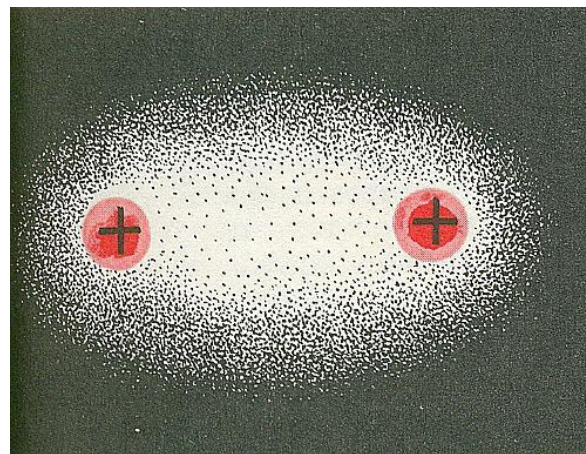
**Степень окисления** – это условный заряд, который приобрел бы атом, если бы валентная пара электронов полностью перешла бы атому более электроотрицательного элемента.

## ■ HCl



- H  $1s^1$ , валентность 1,  $X=2,1$
- Cl ...  $3s^23p^5$ ,  $X=3$ , валентность 1,
- Степень окисления водорода +1
- Степень окисления хлора -1

## ■ N<sub>2</sub>

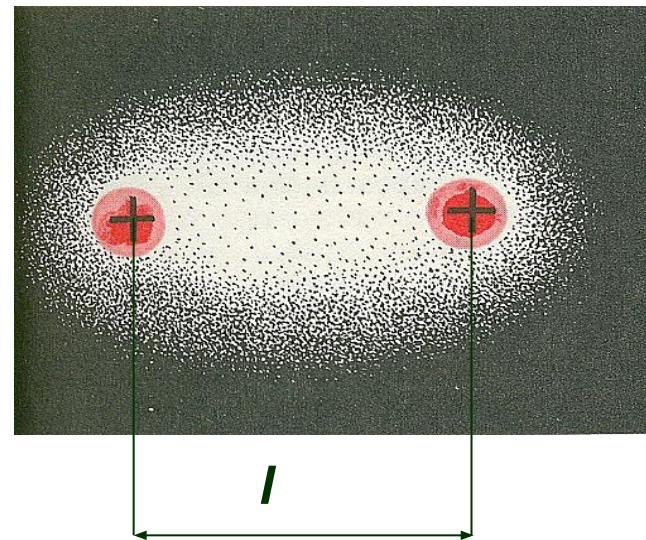


- N<sub>2</sub> ...  $2s^22p^3$
- Валентность 3,
- Степень окисления 0

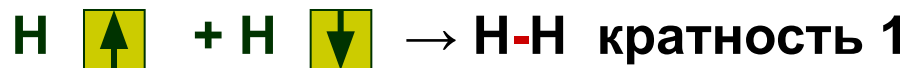
## 4.4. Параметры и свойства ковалентной связи

- Основные параметры ковалентной связи:

- 1. **Длина связи  $l$**  – это расстояние между ядрами атомов, образующих связь.



- **2. Кратность связи** определяется количеством электронных пар, осуществляющих связь

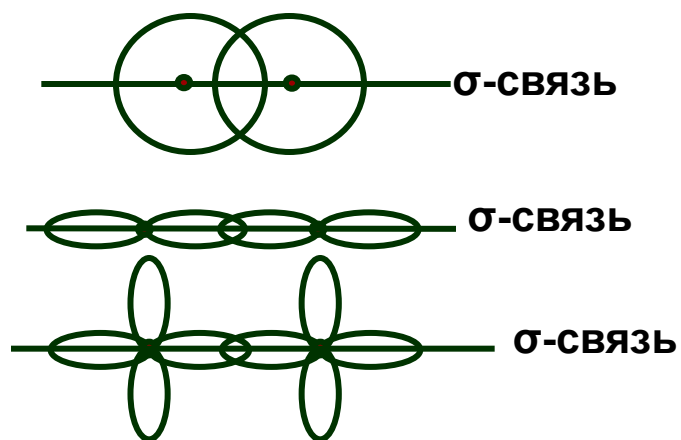


- **3. Энергия связи** – это энергия, которую нужно затратить на разрушение связи

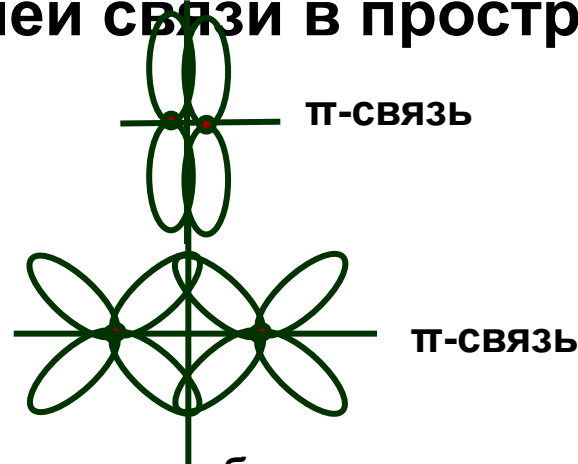
Молекула	Длина связи, нм	Кратность связи	Энергия связи, кДж/моль
H <sub>2</sub>	0,073	1	432
F <sub>2</sub>	0,142	1	155
O <sub>2</sub>	0,121	2	498
N <sub>2</sub>	0,110	3	942

# Основные свойства ковалентной связи

- **1. Насыщаемость:** одна орбиталь атома с неспаренными электронами может принимать участие в образовании только одной связи.
- **2. Направленность** связи обусловлена определенной ориентацией связи в пространстве



**σ-СВЯЗЬ:** область максимальной электронной плотности лежит в плоскости, на которой располагаются ядра атомов

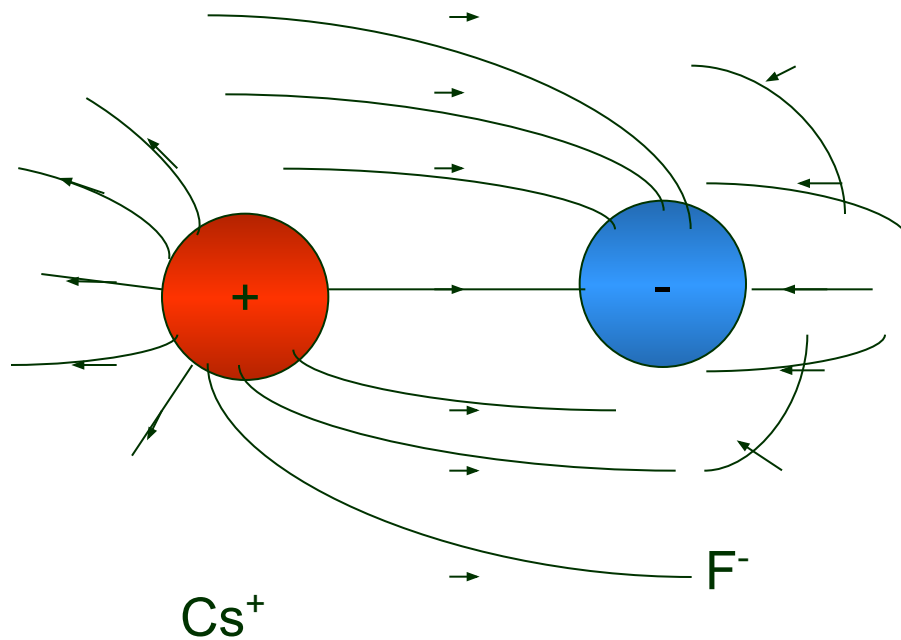


**π-СВЯЗЬ:** область максимальной электронной плотности лежит в плоскости, перпендикулярной той, на которой располагаются ядра атомов

- **3. Поляризуемость связи** – способность молекулы с неполярной связью становиться полярной под действием внешнего поля.

# Основные свойства ионной связи

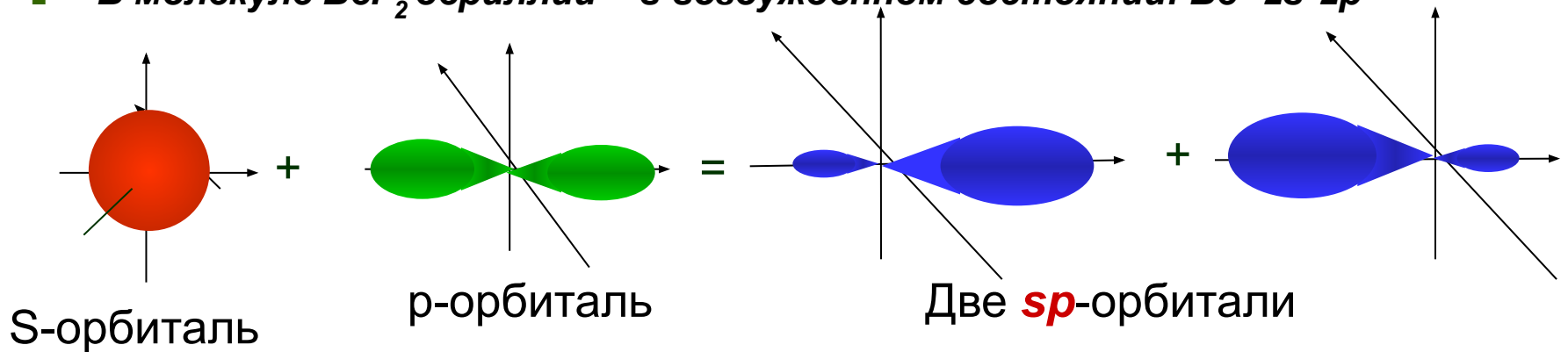
- Ионная связь **ненасыщаемая и ненаправленная**





## 4.5. Гибридизация орбиталей. Геометрическая форма молекул

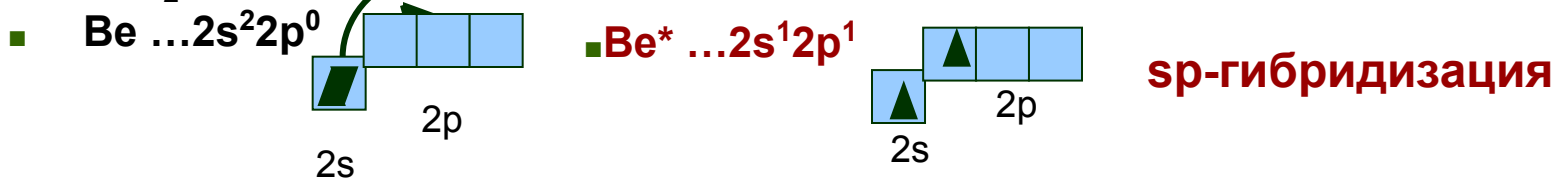
- В молекуле все связи, независимо от того, каким электронами они образованы, энергетически равноценны. Энергетическая равноценность химических связей объясняется тем, что их образованию может предшествовать изменение валентных орбиталей атома: исходные неравноценные атомные орбитали как бы «перемешиваясь», образуют энергетически равноценные орбитали.
- В молекуле  $\text{BeF}_2$  бериллий – в возбужденном состоянии:  $\text{Be}^* 2s^1 2p^1$



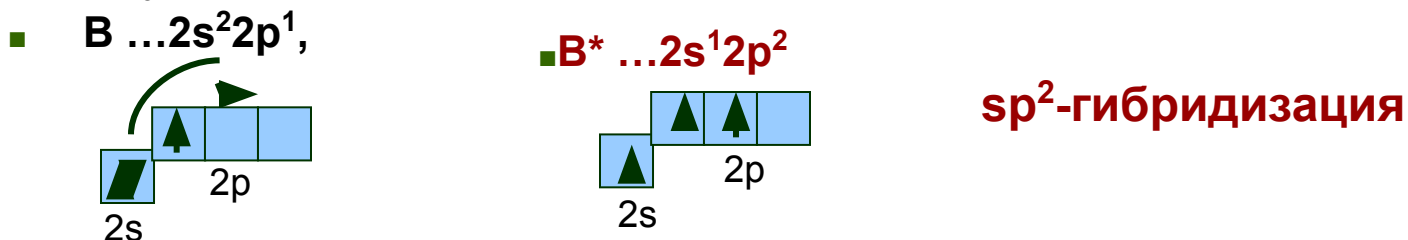
- При гибридизации происходит перераспределение электронной плотности, которое требует затрат энергии.
- В результате гибридизации электронное облако вытягивается по направлению к взаимодействующему атому, благодаря чему увеличивается его перекрывание с электронными облаками последнего. Это приводит к образованию более прочной связи и следовательно к дополнительному выделению энергии, которое компенсирует затраты энергии на гибридизацию.
- В гибридизации принимают участие **неспаренные электроны, образующие  $\sigma$ -связь и неподеленные пары электронов**, находящиеся на внешнем электронном уровне.

# Характер гибридизации

- BeF<sub>2</sub> - бериллий 2-валентный, находится в возбужденном состоянии



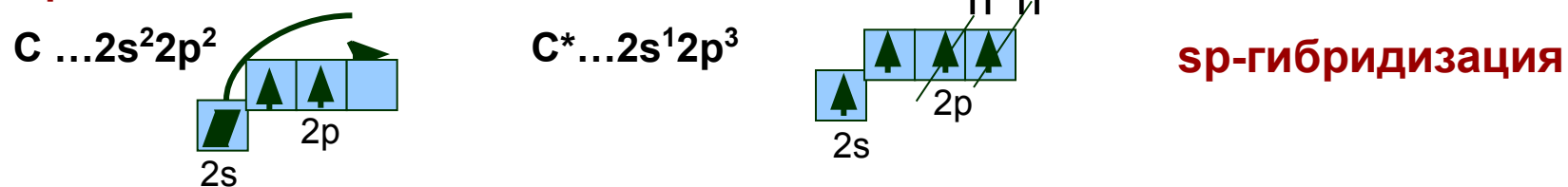
- BF<sub>3</sub> - бор 3-валентный, находится в возбужденном состоянии



- NH<sub>3</sub> – азот 3-валентный, находится в нормальном состоянии


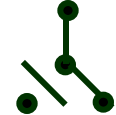

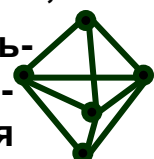
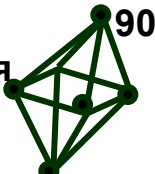


- C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> HC≡CH – углерод 4-хвалентный, находится в возбужденном состоянии.  
В тройной связи одна-σ-связь и две π-связи.

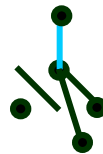
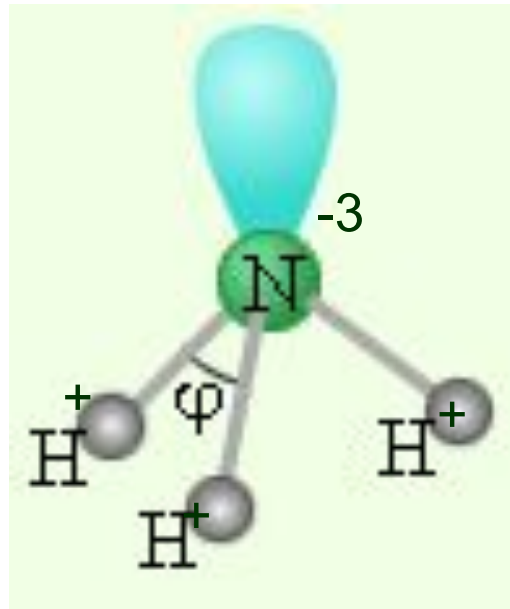


## Геометрическая форма молекул

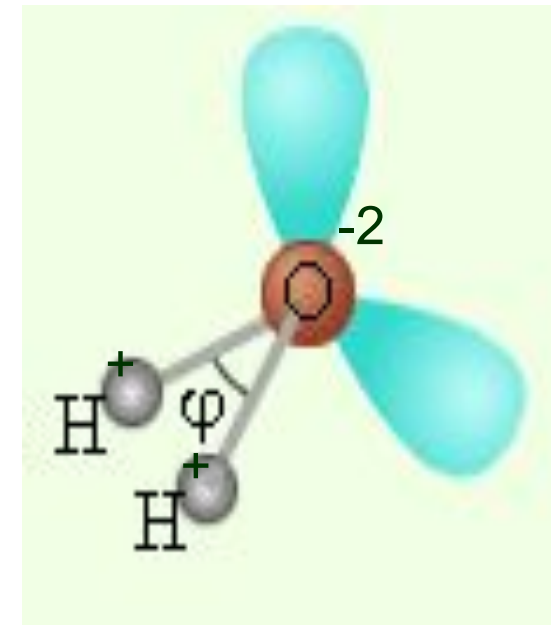
- Гибридные орбитали представляют собой участки повышенной электронной плотности. Они стремятся оттолкнуться друг от друга на максимально возможный угол.
- Если в гибридизации орбиталей не принимают участие неподеленные пары электронов центрального атома, форма молекул соответствует приведенной в таблице и молекула неполярна.

$sp$	 <p>линейная</p>	$F-Be-F$ , $HC\equiv CH$
$sp^2$	 <p>плоская треуголь- ная</p>	$H_2C=CH_2$ , $BF_3$
$sp^3$	 <p>тетраэд- рическая</p>	$CH_4$ , $CCl_4$ , $H_3C-CH_3$
$sp^3d$	 <p>тригональ- но-бипира- мидальная</p>	$PCl_5$
$sp^3d^2$	 <p>октаэд- рическая</p>	$SF_6$

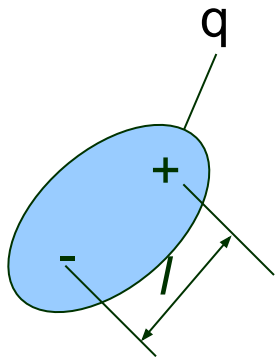
- Если в гибридизации орбиталей принимают участие неподеленные пары электронов центрального атома, форма молекулы меняется и **молекула становится полярной**, превращается в диполь.



форма - пирамидальная



форма – плоская, угловая



**Диполь**- это система из двух равных по величине, но противоположных по знаку зарядов

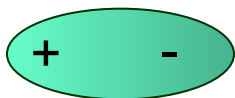
$q$  - заряд диполя;

$l$  – длина диполя

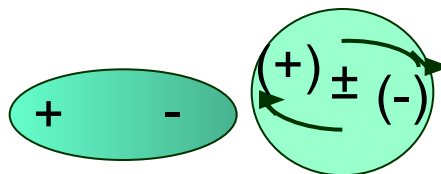
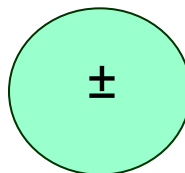
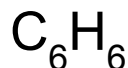
$\mu = q l$ ;  $\mu$  – дипольный момент

## Диполи

Постоянные

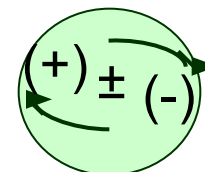
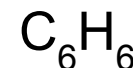


Индукцированные



Полярная молекула воды индуцирует диполь в неполярной молекуле бензола

Мгновенные

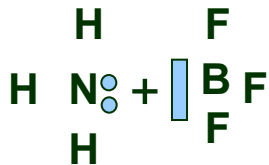


В неполярной молекуле на мгновения образуются диполи за счет мгновенного смещения относительно друг друга центров положительного и отрицательного зарядов

# 4.6. Межмолекулярные взаимодействия

## Межмолекулярные взаимодействия

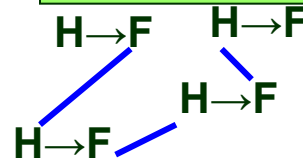
### Донорно-акцепторное



Возникают между молекулами, одна из которых обладает неподеленной парой электронов, а другая – свободной орбиталью

E: 6-12...200 кДж/моль

### Водородная связь



Образуется между молекулами соединений, которые содержат атом водорода и атом элемента с высокой электроотрицательностью (F, O и N).

E: 8-40 кДж/моль

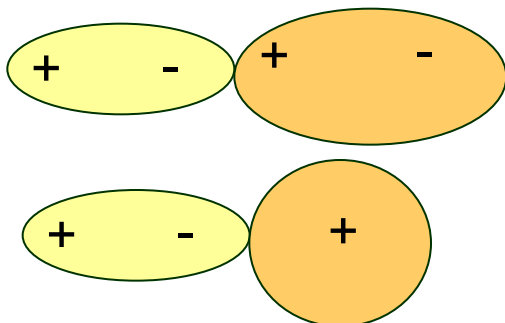
### Силы Ван-дер-Ваальса

Силы электростатического взаимодействия между молекулами и ионами

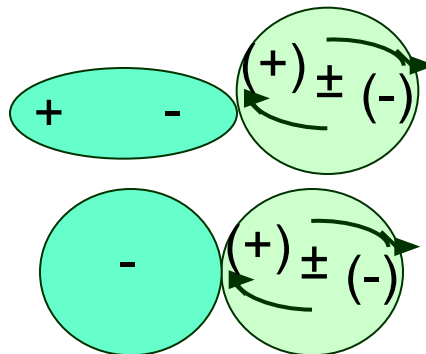
E: 8-16 кДж/моль

# Силы Ван-дер-Ваальса

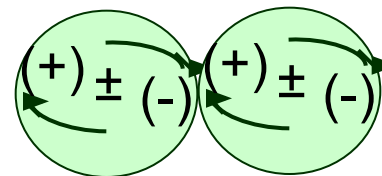
Ориентационное взаимодействие



Индукционное взаимодействие



Дисперсионное взаимодействие



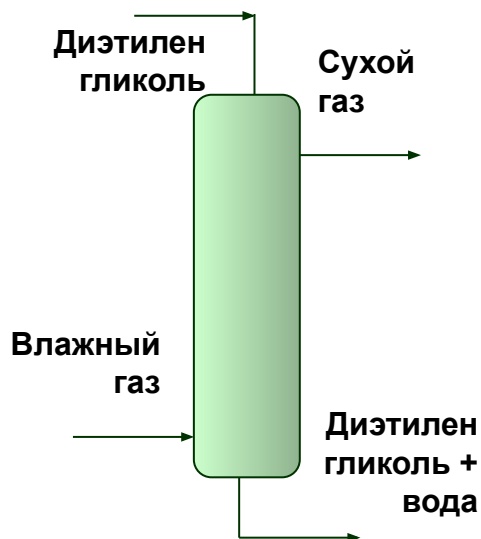
**Энергия взаимодействия убывает**

При растворении веществ друг в друге молекулы одного вещества равномерно распределяются между молекулами другого. Поэтому чем ближе энергии межмолекулярного взаимодействия, характерные для растворителя и растворяемого вещества, тем лучше они растворяются друг в друге. **Подобное растворяется в подобном.**



# Практическое использование вопросов, связанных с межмолекулярными взаимодействиями при добыче нефти и газа.

## ■ 1. Осушка природного газа селективными растворителями



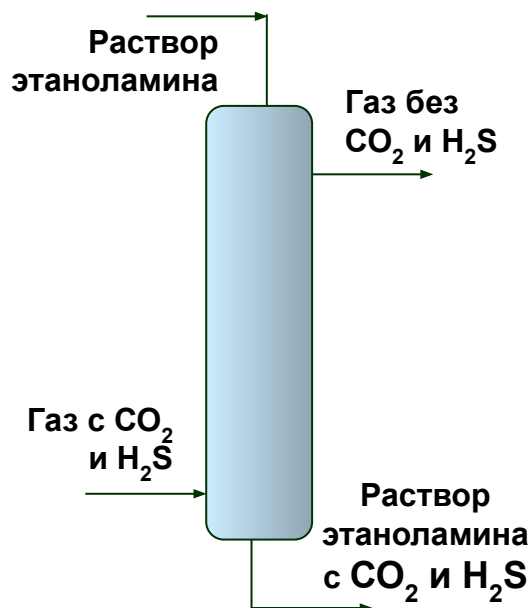
**Природный газ:**  $C_n H_{2n+2}$  (неполярные молекулы).  
**ММВ** – дисперсионное

**Диэтиленгликоль (ДЭГ):**  $(C_2H_5O)_2$  (полярные молекулы, содержат группу  $OH$ ). **ММВ** – ориентационное взаимодействие + водородная связь

**Влага:**  $H_2O$  (полярные молекулы, содержат группу  $OH$ ). **ММВ** – ориентационное взаимодействие + водородная связь

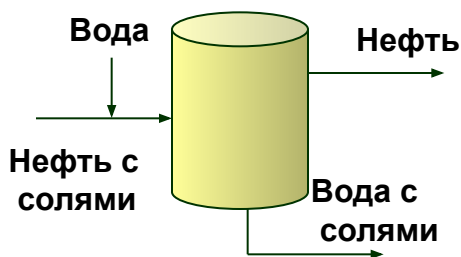
При обработке ДЭГом влажного газа ДЭГ избирательно растворяет воду и освобождает от нее природный газ.

## ■ 2. Очистка природного газа от кислых компонентов



*Этаноламин вступает с кислыми компонентами природного газа,  $\text{CO}_2$  и  $\text{H}_2\text{S}$  в донорно-акцепторное межмолекулярное взаимодействие, образуя комплексное соединение.*

## ■ 3. Отмывка нефти от солей



*Нефть:  $\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$  (неполярные молекулы). ММВ – дисперсионное.*

*Соли ( $\text{NaCl}$ ) ММВ – ориентационное взаимодействие .*

*Влага:  $\text{H}_2\text{O}$  (полярные молекулы, содержат группу  $\text{OH}$ ). ММВ – ориентационное взаимодействие + водородная связь*

*При обработке водой нефти вода избирательно растворяет соли и освобождает от них нефть.*