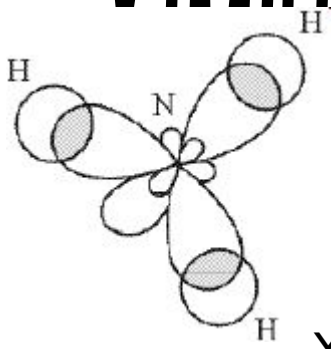
Полтавська державна аграрна академія
Кафедра біотехнології та хімії

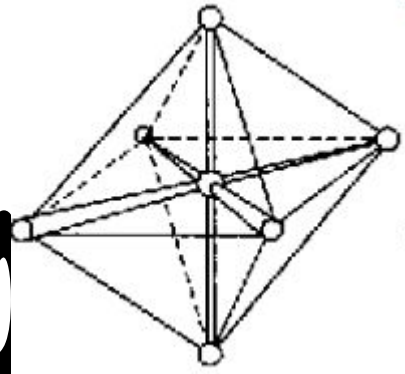
«НЕОРГАНІЧНА ТА ОРГАНІЧНА ХІМІЯ» Лектор: професор кафедри Сахно Тамара Вікторівна

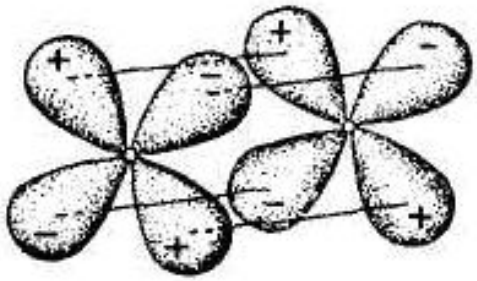
- Освітньо-професійна програма Агрономія
- спеціальність 201 Агрономія
- галузь знань 20 Аграрні науки і продовольство
- освітній ступінь Бакалавр
- факультет агротехнологій та екології

Лекцій - 14 Лабораторних робіт – 32
Самостійна робота студента – 120
Всього 180 годин Залік

Хімічний зв'язок і будова молекули







Хімічний зв'язок: типи хімічного зв'язку, способи утворення. Теорії хімічного зв'язку: Метод валентних зв'язків та метод молекулярних орбіталей.

Навчальна мета заняття: Сформувати уявлення про природу хімічного зв’язку; засвоїти поняття “ковалентний зв’язок”, “іонний зв’язок”, “металічний зв’язок”, “водневий зв’язок”, “міжмолекулярні взаємодії”; набути навичок визначення типів зв’язку в молекулах, встановлення структури простих молекул та молекулярних фрагментів відповідно до характеру хімічних зв’язків.

Виховна мета заняття: формування відповідальності за виконання та дотримання в процесі професійної діяльності теоретичних основ неорганічної хімії; усвідомлення відповідальності при здійсненні професійної діяльності набутих знань в процесі прийняття рішень в галузі аграрного виробництва; здійснення аналізу літературних джерел та використання власного досвіду у проведенні хімічних досліджень під час виконання професійних заходів.

ПЛАН

1. Хімічний зв’язок: типи хімічного зв’язку, способи утворення.
2. Теорії хімічного зв’язку:
3. Метод валентних зв’язків та метод молекулярних орбіталей.

- При взаємодії атомів, іонів чи їх груп між ними може виникати хімічний звя'зок, який приводить до утворення стійкої багатоатомної системи – молекули, молекулярного іону, кристалу, сольвату, комплексної сполуки. Умовою утворення хімічного зв'язку є зменшення потенціальної енергії системи взаємодіючих атомів. Система – сукупність взаємодіючих часточок – атомів, атомних ядер, електронів.
- Основні типи хімічного зв'язку:
- іонний,
- ковалентний,
- водневий.
- Мірою міцності зв'язку є енергія розриву, яка завжди позитивна, в іншому випадку хімічний зв'язок розривався б самостійно з виділенням енергії.
- ***Ковалентний зв'язок*** - двоелектронний, двохцентровий. На основі уявлень про механізм утворення хімічного зв'язку Гайтлером і Лондоном було розроблено теорію хімічного зв'язку .

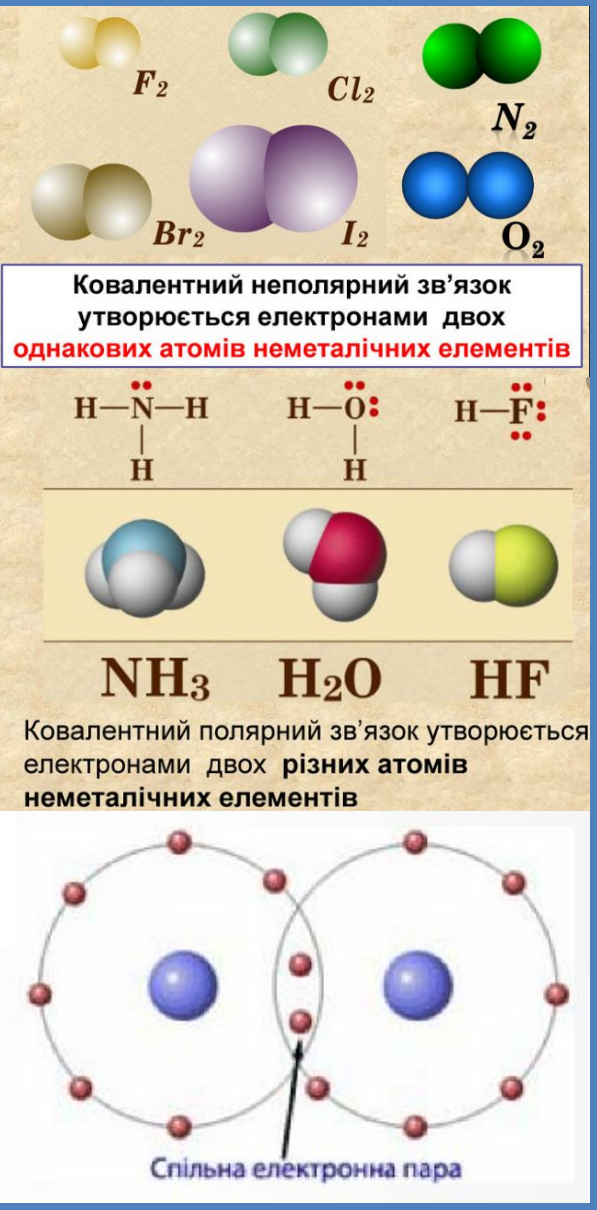
Основні параметри хімічного зв'язку

- *довжина зв'язку l* - відстань між центрами атомів у молекулі;
- *валентні кути* – кути, утворені лініями, що з'єднують центри взаємодіючих атомів;
- *енергія зв'язку* - кількості теплоти, яка виділяється внаслідок утворення із атомів одного моля речовини за стандартних умов;
- *міцність хімічного зв'язку* – характеристика, що залежить від ступеня перекривання електронних хмар (чим більша область перекривання, тим міцніший зв'язок)

Молекула	**Між'ядерна відстань *l*, нм**	**Е, кДж/моль**
HF	0,100	536
HC1	0,127	432
HBr	0,141	360
HI	0,162	299

Зв'язок	Між'ядерна відстань, нм	Е, кДж/моль
C-C	0,154	356
C = C	0,134	598
C ≡ C	0,121	813

Ковалентний зв'язок



Хімічний зв'язок, який утворюється внаслідок узагальнення електронів взаємодіючих атомів (утворення спільної електронної пари), називають ***ковалентним***.

- Це двоелектронний і двоцентровий зв'язок (утримує два ядра).
- Участь кожного атома в утворенні загальної електронної пари рівнозначна.

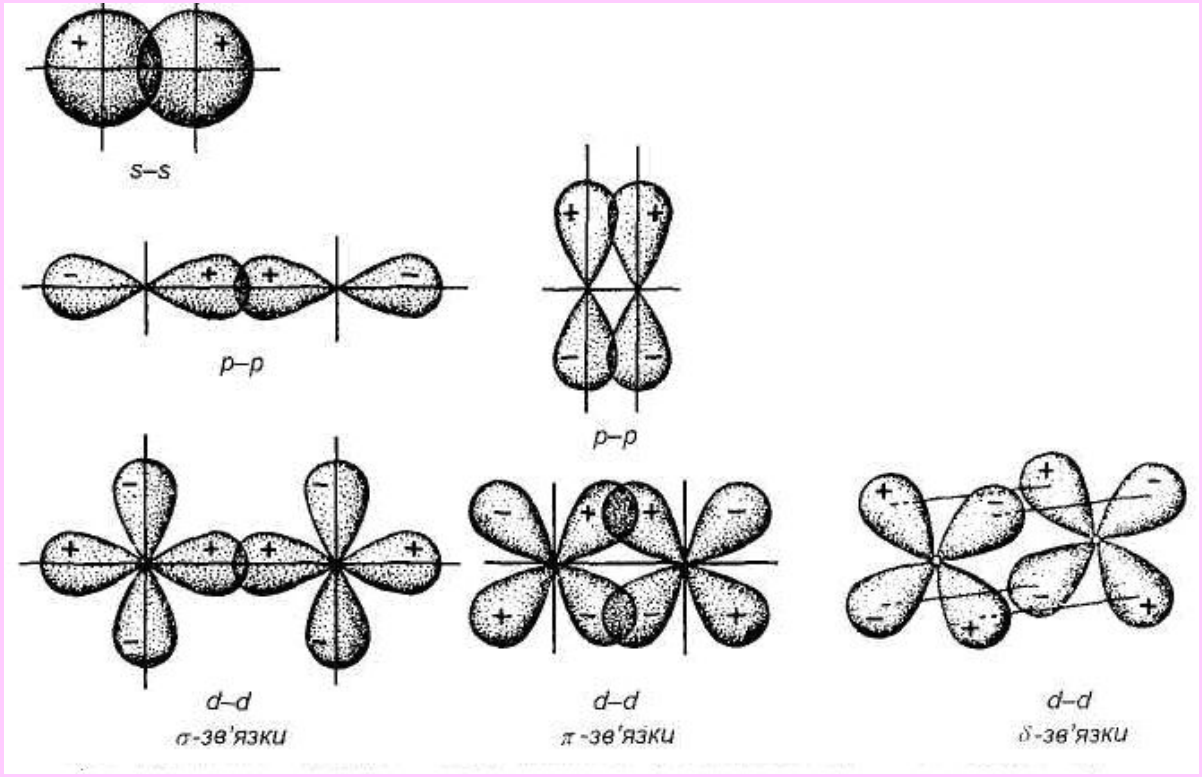
Властивості ковалентного зв'язку

1. ***Насичуваність*** — це здатність атомів утворювати обмежену кількість ковалентних зв'язків.

Внаслідок насичуваності зв'язку молекули мають певний хімічний склад та існують у вигляді дискретних частинок з певною структурою (H_2, H_2O, CH_4).

2. ***Напрямленість*** ковалентного зв'язку зумовлює просторову структуру молекул - геометрію молекул.

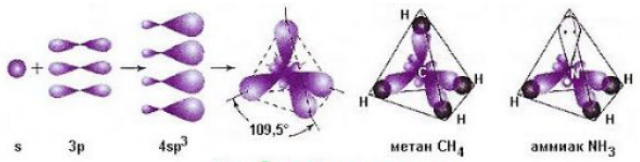
Кількісною характеристикою напрямленості ковалентного зв'язку є валентні кути.



Гібридиза́ція· орбіта́лей· —· явище· змішування· атомних· орбіталей· визначеного·атома·із·утворенням·такого·ж·числа·нових·гібридних·орбіталей,· яким· притаманна· однакова· форма· та· виражена· просторова· спрямованість.· Гібридизація· атомних· орбіталей· відбувається,· зокрема,· при· виникненні· ковалентних·зв'язків·між·атомами.¶

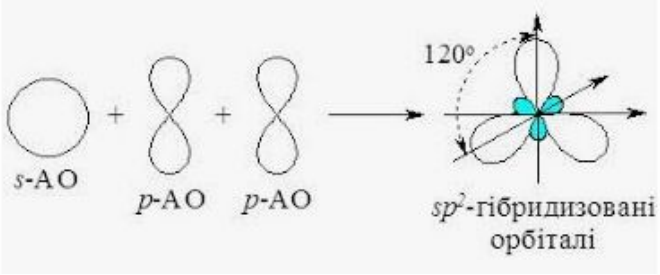
Гібридна·орбіталь·—·атомна·орбіталь,·отримана·змішуванням·двох·чи· більше· атомних· орбіталей· атома· з· різними· значеннями· орбітального· квантового·числа,·має·виражене·просторове·спрямування.·Таке·змішування·є· наслідком· зниження· симетрії· атома· при· його· входженні· у· взаємодію.· Гібридні· орбіталі· атома· з· певним· координаційним· числом· є· подібними· для· переважної· більшості· органічних· та· неорганічних· молекул.· Проте· для· передбачення· просторової· структури· молекул· слід· спиратися· на· фізично· змістовні· теорії,· в· першу· чергу· на· теорію· відштовхування· електронних· пар· валентних·оболонок.¶

Опис окремих типів гібридизації орбіталей.

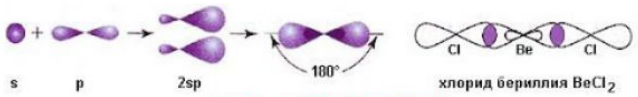


а) sp^3 - гибридизация

sp3-гібридизація. Відбувається при змішуванні однієї s- і трьох p-орбіталей. Виникає чотири однакові орбіталі, розташовані одна щодо іншої під тетраедричним кутом 109°28'. Прикладом sp^3-гібридизації є молекула метану, або кристалічна ґратка типу алмазу (кремній, германій, арсенід галію).



sp2-гібридизація. Відбувається при змішуванні однієї s- і двох p-орбіталей. Утворюється три гібридні орбіталі з осями, розташованими в одній площині і направленими до вершин правильного трикутника під кутом 120°. Негібридизована атомна p-орбіталь перпендикулярна площині і, як правило, бере участь в утворенні π-зв'язків. Прикладом sp^2-гібридизації є молекула бензолу, ненасичені полімери, графіт.



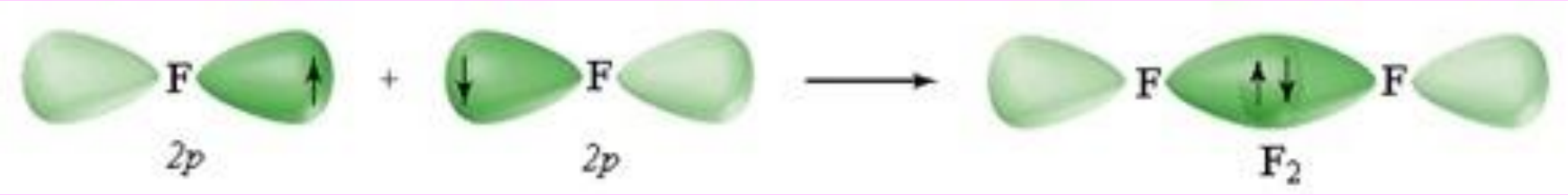
в) sp - гибридизация

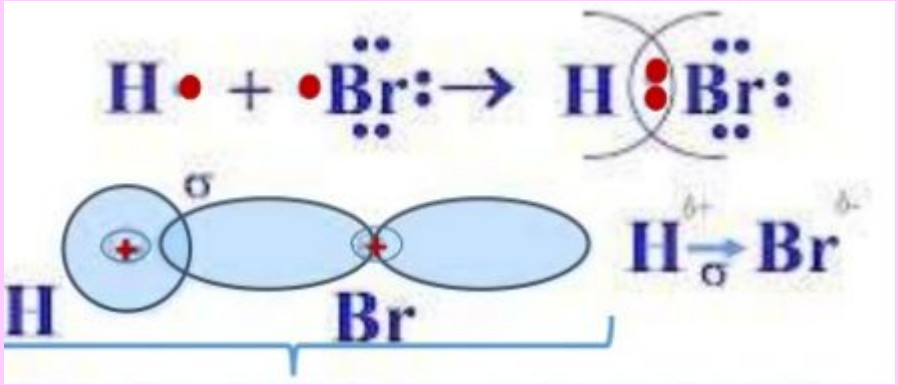
sp-гібридизація. Відбувається при змішуванні однієї s- і однієї p-орбіталей. Утворюється дві рівноцінні sp-гібридні орбіталі, розташовані лінійно (під кутом 180°) і направлені в різні боки від ядра атома. Дві інші негібридні p-орбіталі розташовуються у взаємно перпендикулярних площинах. Приклад sp-гібридизації дають молекули ацетилену, алену та ланцюжок карбіну.

sp3d2-гібридизація Відбувається при змішуванні однієї s, трьох p та двох d атомних орбіталей, утворюється октаедральна структура.

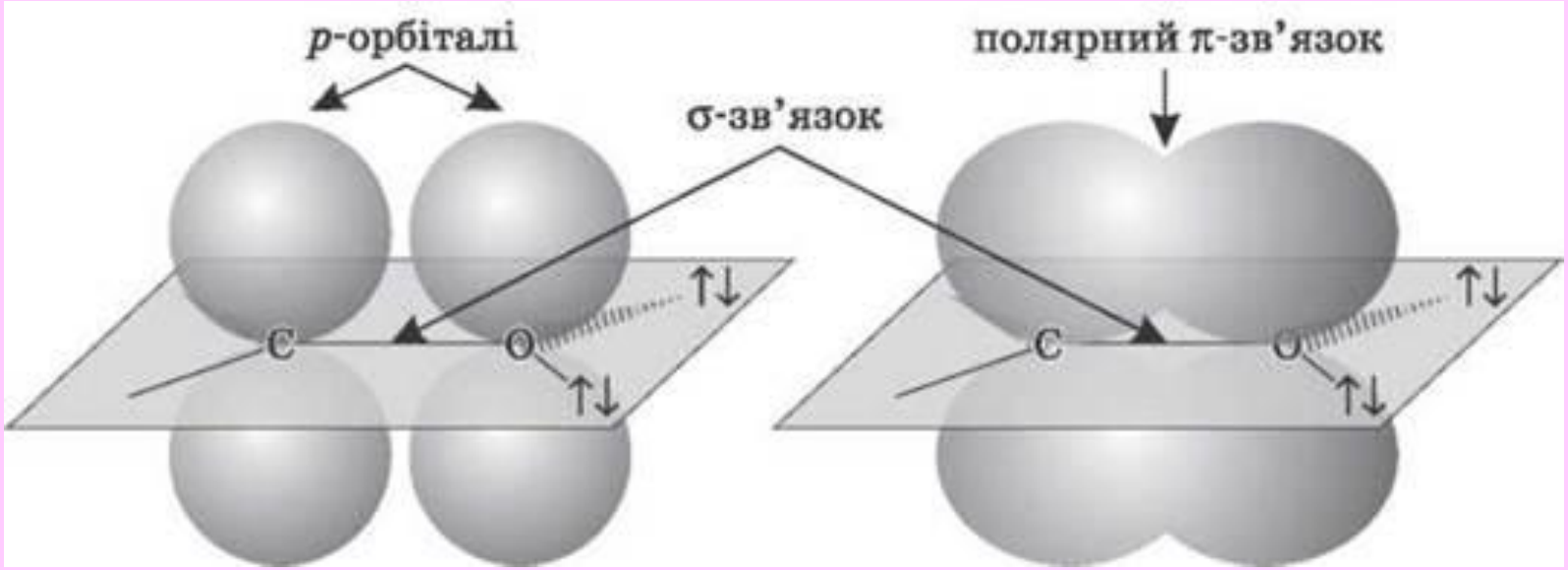
sp2d-гібридизація. Відбувається при змішуванні однієї s, двох p та однієї d атомних орбіталей, утворюється плоска квадратна структура.

σ-зв'язки утворюються при перекриванні атомних орбіталей вздовж лінії, яка з'єднує атоми.

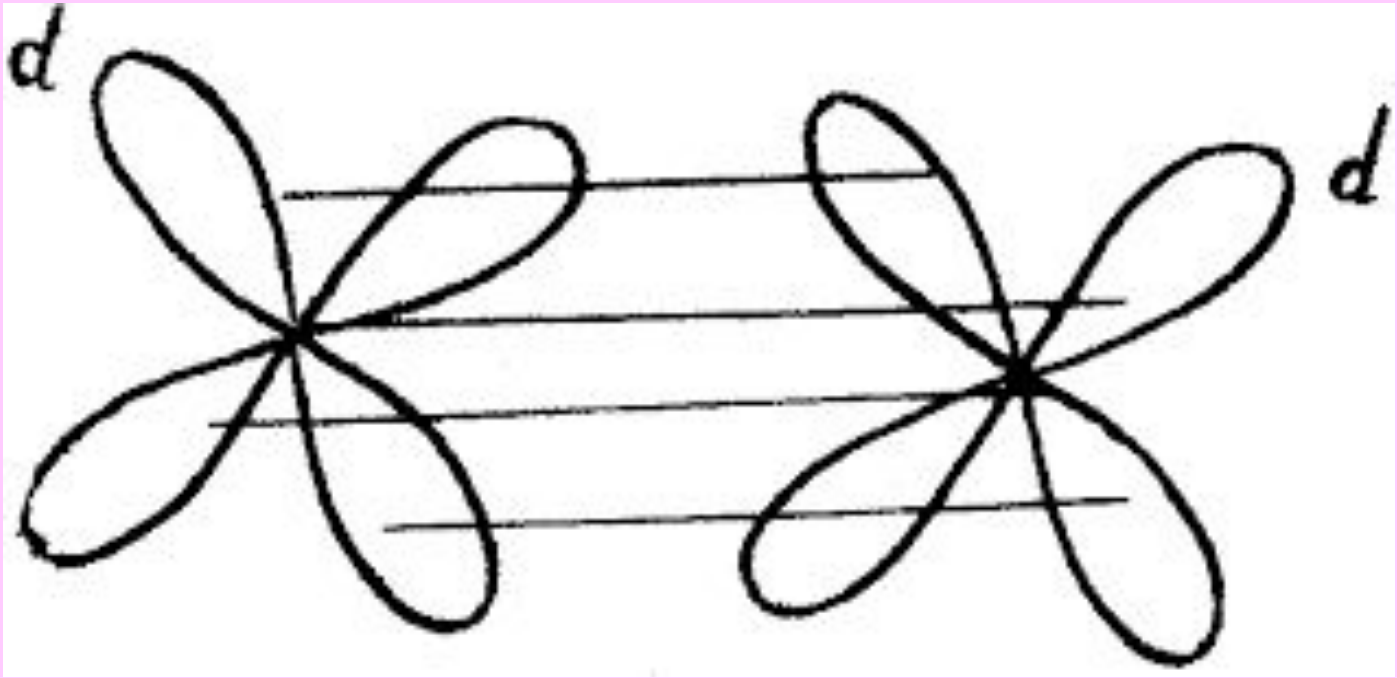




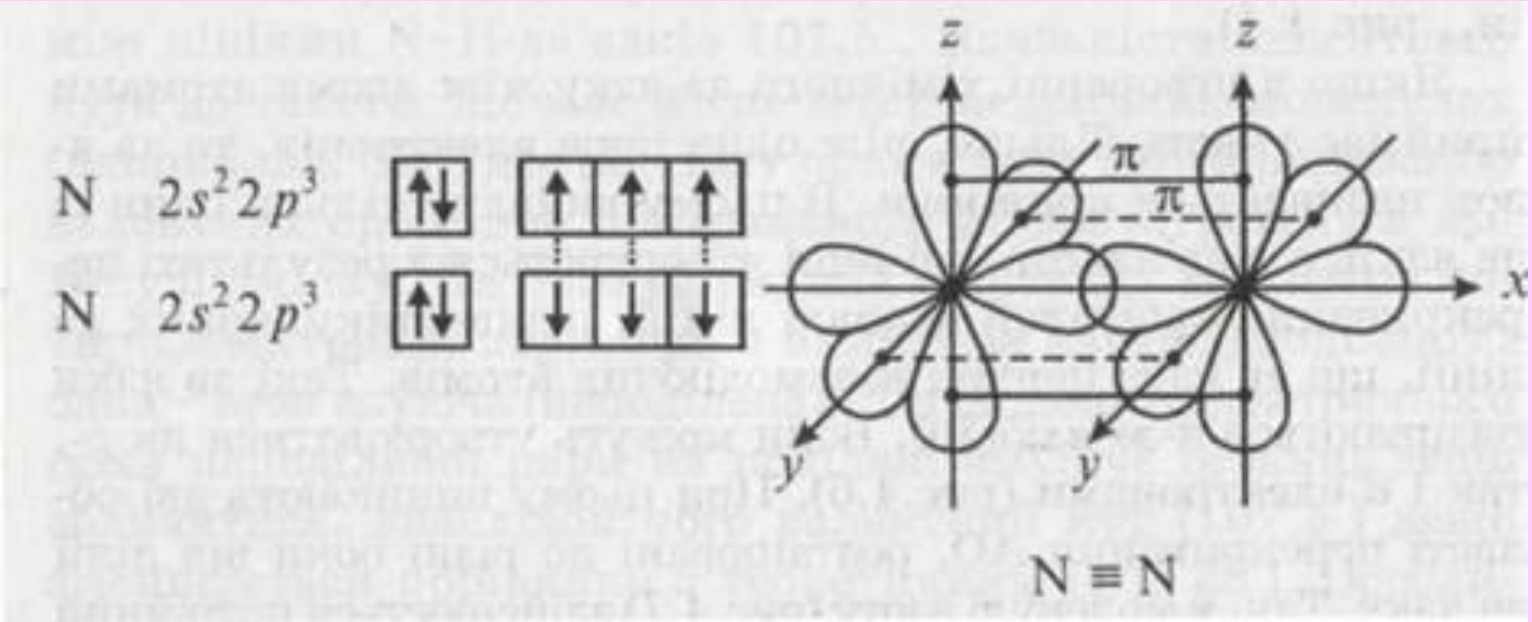
π-зв'язки виникають при перекриванні електронних хмар, орієнтованих перпендикулярно до осі зв'язку, при цьому утворюється дві області перекривання, які розташовані з обох боків від лінії, що зв'язує центри атомів.



δ-Зв'язки утворюються перекриванням чотирьох лопатей d-електронних хмар, розміщених у паралельних площинах.



3. ***Кратність зв'язку*** - кількість зв'язків між атомами називають



Таким чином, два атоми азоту в молекулі N_2 сполучені трьома ковалентними зв'язками: одним σ- та двома π-зв'язками.

4. ***Полярність та поляризованість зв'язку***

Ковалентним неполярним називають зв'язок в молекулах яких електронна хмара розташовується відносно ядер взаємодіючих атомів симетрично.

Приклади: H_2, O_2, Cl_2.

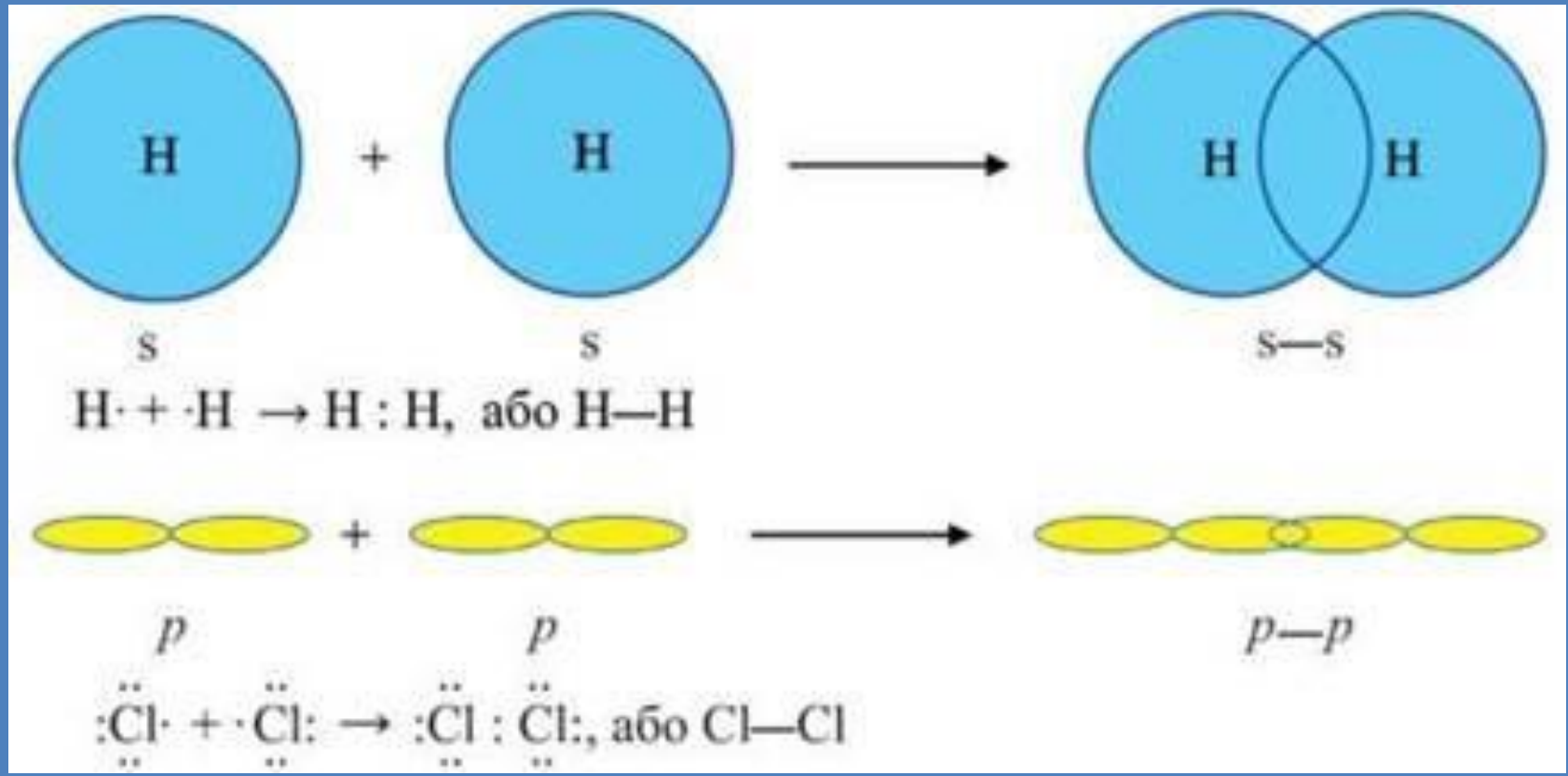
Ковалентним полярним називають зв'язок в молекулах яких електронна хмара зміщується до більш електронегативного атому.

Приклади: HCl, LiH, CO.

Зміщення електронної густини у молекулі називають *поляризацією*.

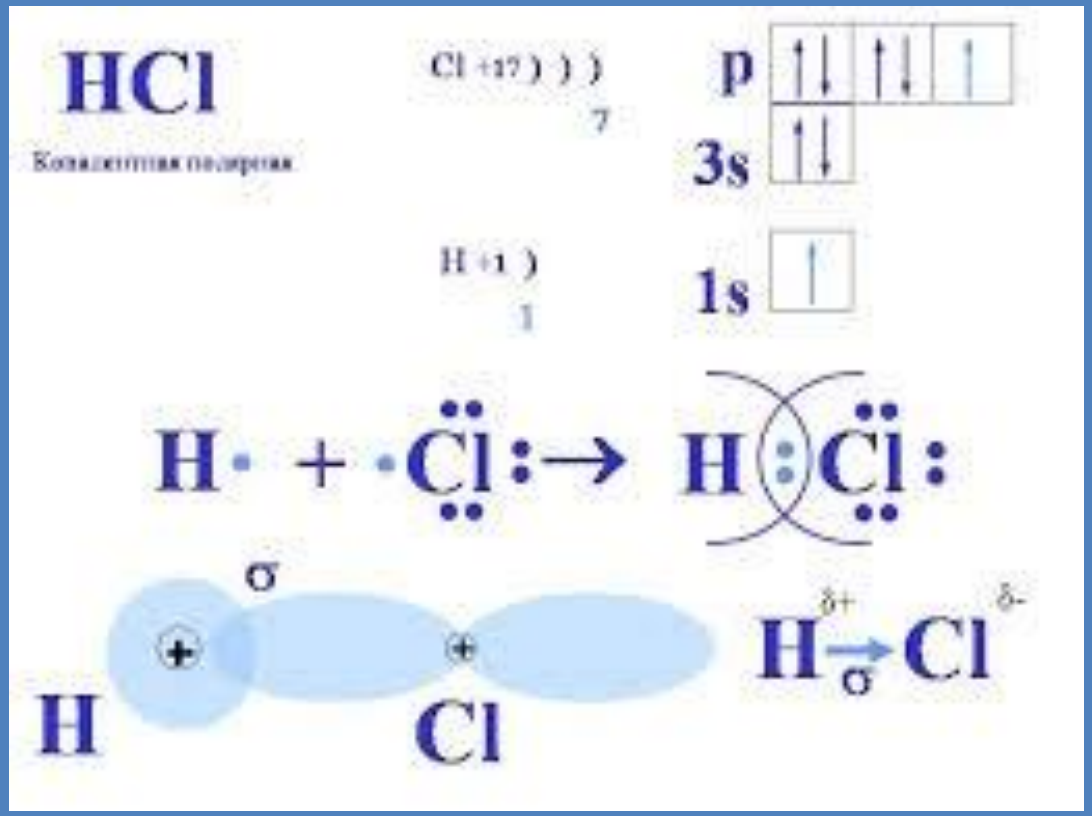
Механізм утворення ковалентного зв'язку

а) Ковалентний неполярний зв’язок



Механізм утворення ковалентного зв'язку

б) Ковалентний полярний зв’язок

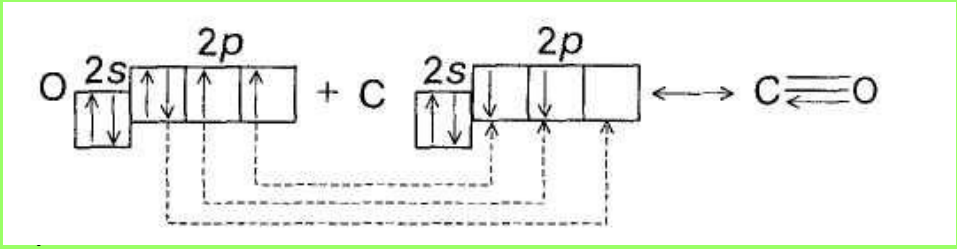


Механізм утворення ковалентного зв'язку

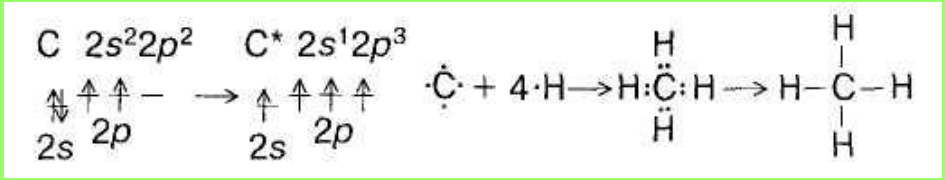
в) Донорно-акцепторний зв’язок

Валентність — це число ковалентних зв'язків, які утворює атом даного елемента в основному або збудженому стані як за обмінним, так і за донорно-акцепторним механізмами або це кількість орбіталей валентного рівня, які приймають участь в утворенні хімічного зв'язку.

Атом вуглецю в основному стані має два неспарені електрони $2s2^2p^2$ та вільну орбіталь. Завдяки цьому він може утворити три ковалентних зв'язки: два за обмінним та один за донорно-акцепторним механізмами.



У збудженому стані у атома вуглецю утворюється чотири неспарених електрони $2s^12p^3$, тому що один 2s-електрон переходить у 2p-стан.



Тому у збудженому стані атом вуглецю може утворити чотири зв'язки, наприклад, з чотирма атомами водню, фтору або хлору.

Ступінь окиснення елементів

Під ступенем окиснення розуміють електричний заряд атома у сполуці, який обчислюють із припущення, що сполука складається з іонів.

- Елементи мають позитивні та негативні ступені окиснення.
- Значення позитивного ступеня окиснення відповідає числу відтягнутих від атома електронів, а значення негативного — числу притягнутих атомом електронів.

Для обчислення ступеня окиснення елементів користуються такими положеннями:

1. Ступінь окиснення елемента в його простій речовині дорівнює нулю: Zn^0, Ca^0, H_2^0, $C1_2^0$.

2. Сталу ступінь окиснення у сполуках мають лужні метали +1, лужноземельні +2, фтор -1, бор та алюміній +3.

3. Для водню у більшості сполук характерний ступінь окиснення +1, але в гідридах металів, наприклад, NaH, CaH_2 вона дорівнює -1.

4. Ступінь окиснення кисню у більшості сполук дорівнює -2, але в пероксидах H_2O_2, Na_2O_2 він дорівнює -1, у фториді кисню OF_2 +2.

5. Максимальний позитивний ступінь окиснення елемента, як правило, дорівнює номеру групи в періодичній системі, в якій знаходиться елемент.

6. Нижчий негативний ступінь окиснення елемента дорівнює різниці між позитивним ступенем окиснення та цифрою вісім.

7. Для елементів із змінним ступенем окиснення його значення обчислюють на основі формули сполуки та враховують, що сума ступенів окиснення всіх атомів у молекулі дорівнює нулю, а в іоні — заряду іона.

Іонний зв'язок

Хімічний зв'язок обумовлений електростатичною взаємодією протилежно заряджених іонів називається ***іонним***.

Атоми натрію і хлору мають незавершені зовнішні рівні.

Na $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

Cl $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$

При взаємодії цих елементів один електрон атома натрію переходить до атома хлору:

$$Na - e^- = Na^+, \quad Cl + e^- = Cl^-.$$

Внаслідок такого переходу електронна оболонка атома натрію перетворюється на стійку оболонку інертного газу неону ($1s^2 2s^2 2p^6$), а оболонка атома хлору — на оболонку аргону ($1s^2 2s^2 2p^2 3s^2 3p^6$).

$$Na^+ + C1^{-} = NaCl.$$

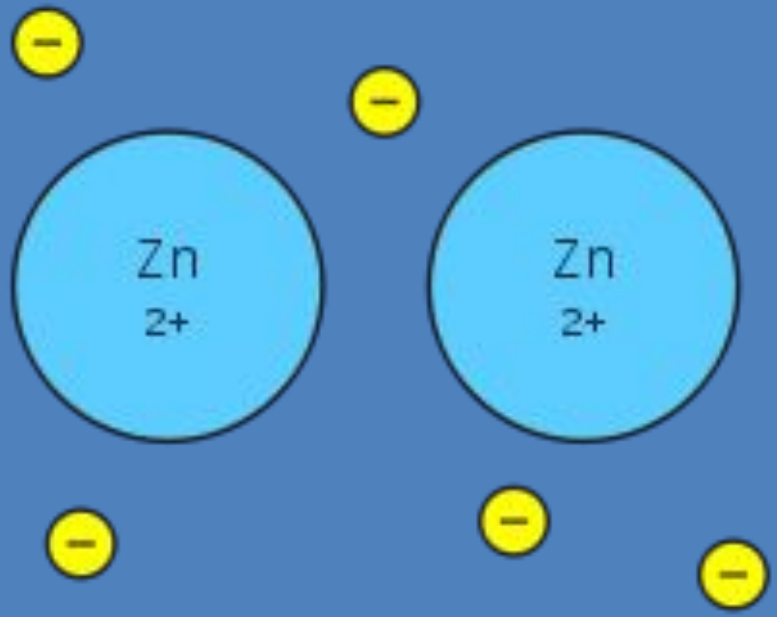
Не можна провести жорстку межу між іонним зв'язком і ковалентним полярним зв'язком.

Можна оцінити лише ступінь іонності зв'язку.

Ступінь іонності пов'язаний з різницею відносних електронегативностей взаємодіючих атомів.

Металічний зв'язок

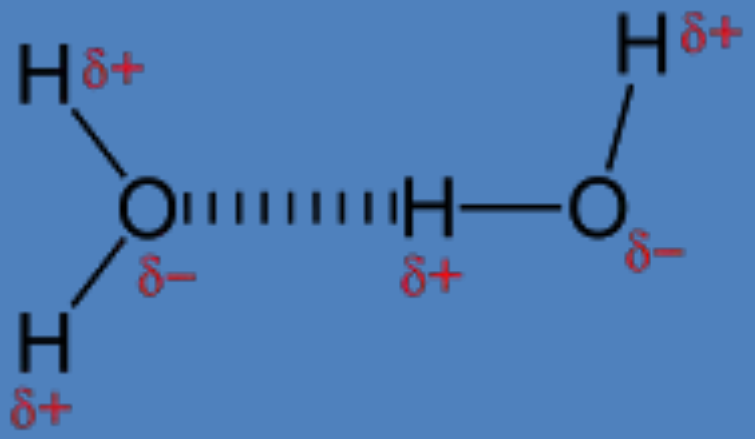
Зв’язок, утворений за рахунок валентних електронів, що належать усьому кристалу металу, називають ***металічним.***



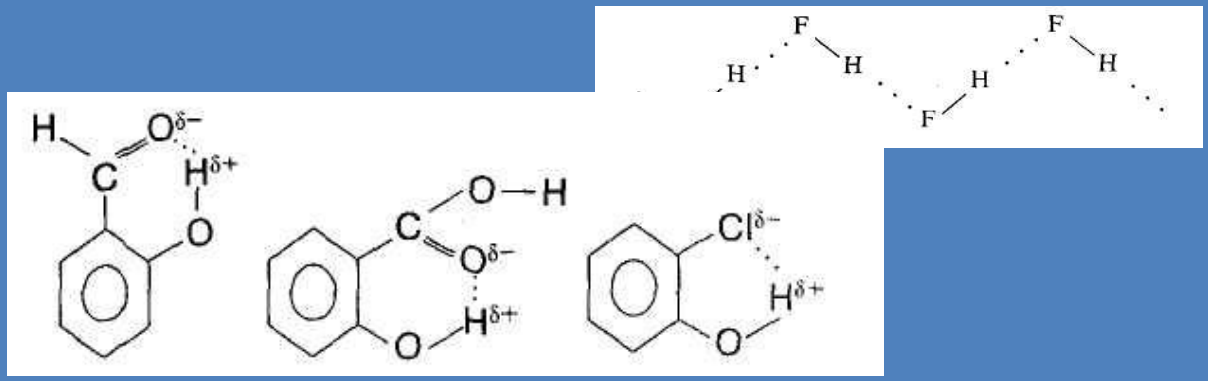
Водневий зв'язок

Трицентровий зв'язок утворений за рахунок атома Гідрогену однієї молекули і більш електронегативного атому іншої молекули ***називають водневим***

X — H ··· У



Водневі зв’язки

внутрішньомолекулярні

міжмолекулярні