

Химическая связь

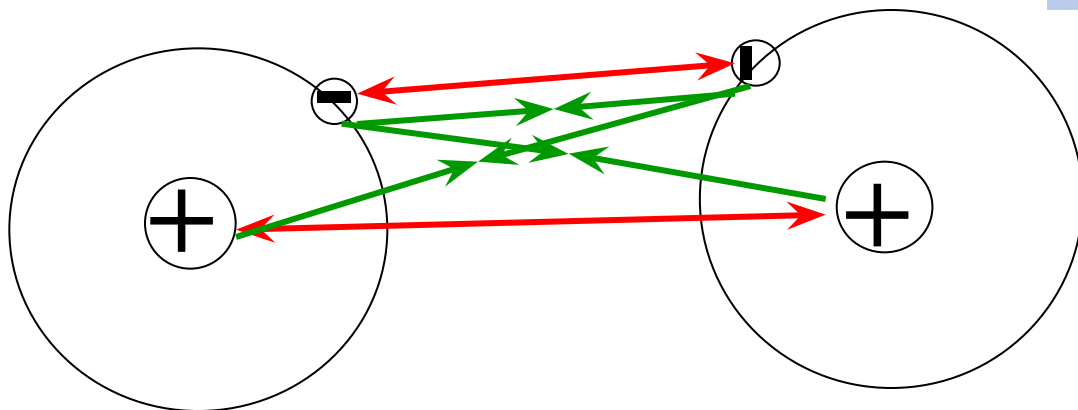
A decorative graphic element consisting of a solid blue horizontal bar that transitions into a series of white and light blue horizontal lines of varying lengths and thicknesses on the right side.

Химическая связь – совокупность сил притяжения и отталкивания, создающая динамически устойчивую систему из двух и более атомов.

Основной причиной образования химических связей между атомами является понижение полной энергии системы при переходе от свободных атомов к молекуле.

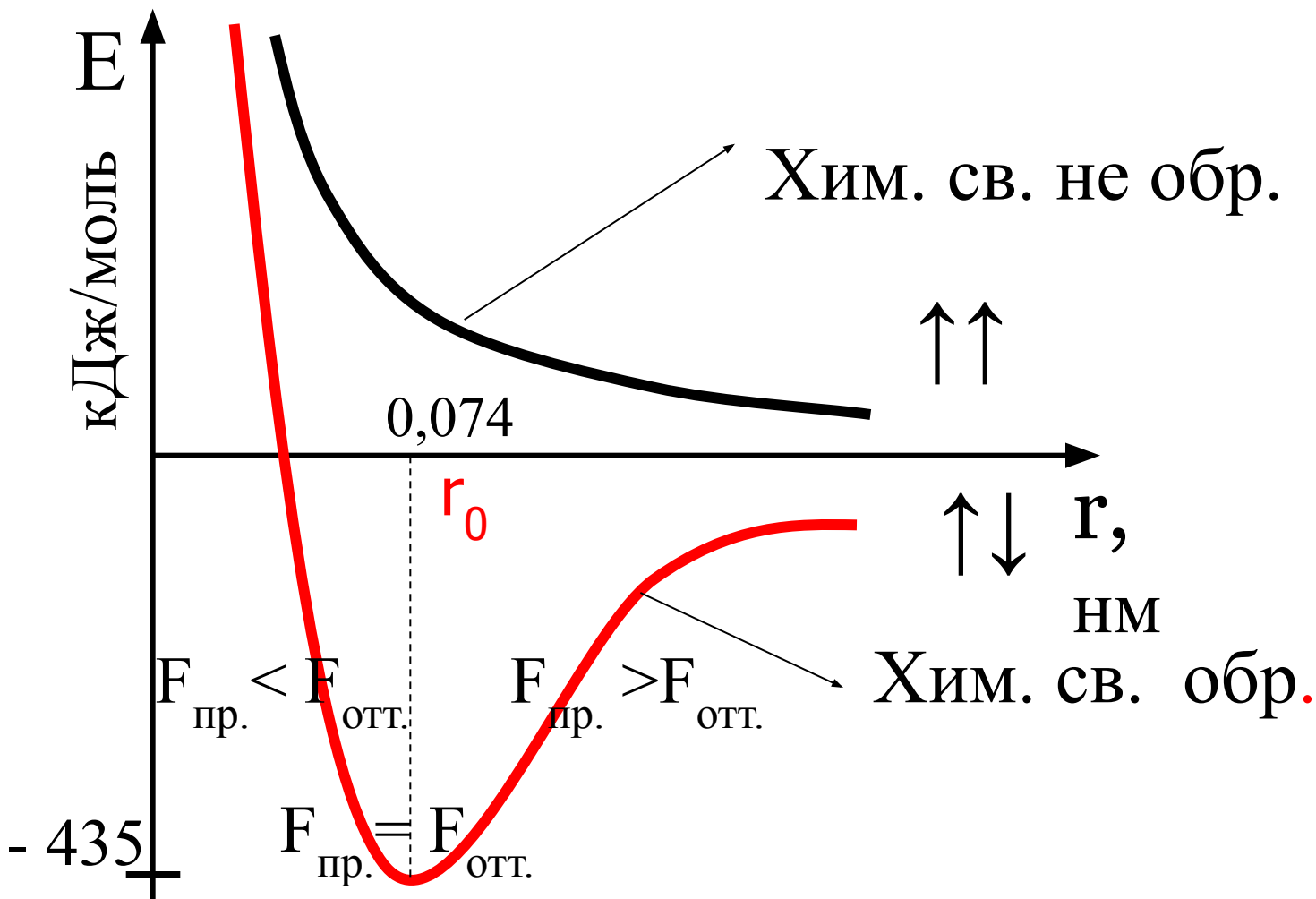
ОСНОВНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ:

1. Энергия связи (Прочность связи)
2. Длина связи
3. Полярность связи
4. Валентный угол
5. Поляризуемость связи



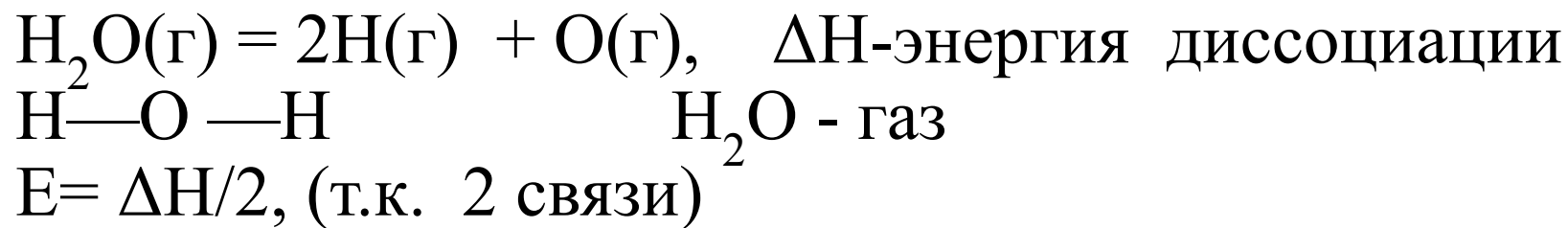
1. Ядерно-электронные взаимодействия способствуют образованию химической связи. (\rightleftarrows)
2. Межэлектронные взаимодействия двух типов:
 - а) притяжение электронов с антипараллельными спинами (положительный фактор в образовании связи);
 - б) отталкивание электронов с параллельными спинами (отрицательный фактор).

Изменение потенциальной энергии в системе из двух атомов водорода в зависимости от расстояния между ядрами атомов

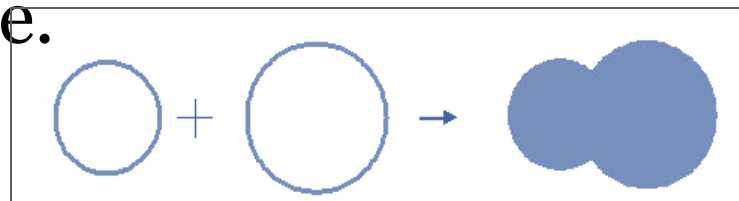


Энергия химической связи

- **Е_{связи}** - доля энергии расщепления молекулы газообразного вещества на газообразные атомы, приходящаяся на одну связь



Длина связи ($l_{\text{св}}$) – среднее равновесное расстояние между ядрами химически связанных атомов в молекуле.



Длины и энергии химических связей

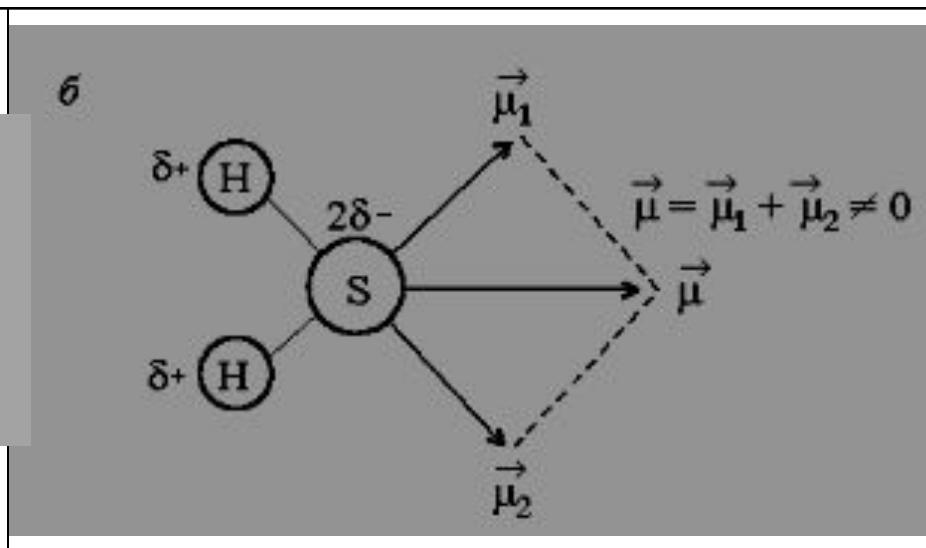
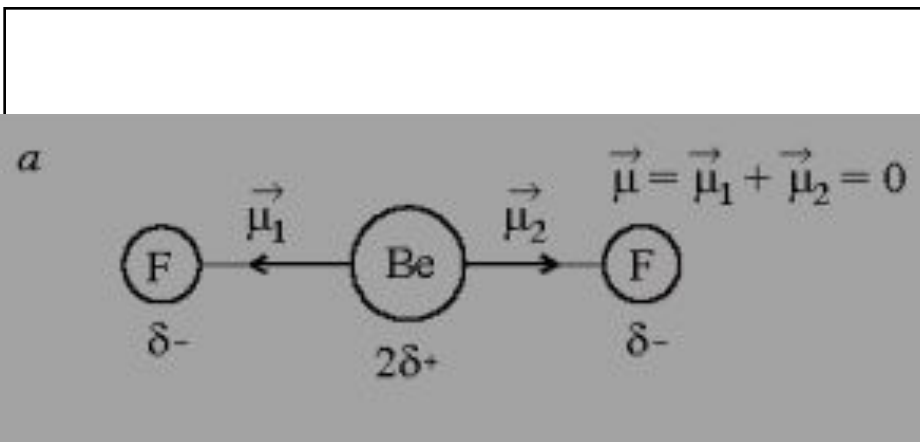
Химическая связь	E, В	L, нм
Ковалентная Н—Н	435	
=C=C= O=O	600-700	0.1 - 0.3
—C≡C— N≡N	>1000	0.1 – 0.3
Ионная	10-500	0.3
Межмолекулярная	0.1-10	0.3-0.5

При длине связи больше 0.5 нм связь между атомами не образуется

3. Полярность связи – возникновение эффективных электрических зарядов на химически связанных атомах в молекуле за счет смещения электронной плотности из-за разной электроотрицательности.

$$\mu = |q| \cdot l$$

l – длина химической связи;
 q – эффективный заряд;
 μ – дипольный момент



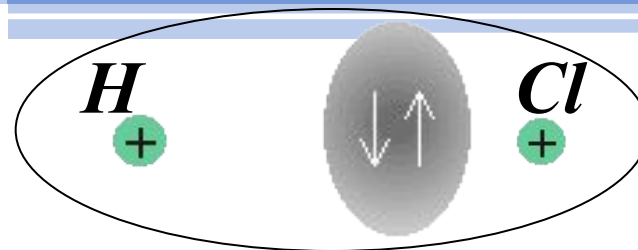
Смещение электронной
плотности к более ЭО
атому



Возникновение
эффективных зарядов (δ)



Степень ионности



Связь в молекуле HCl полярная, имеет
на 17 % ионный характер.

Дипольный момент связи (μ)

$$\vec{\mu} = q \cdot l \longrightarrow \text{Длина связи}$$

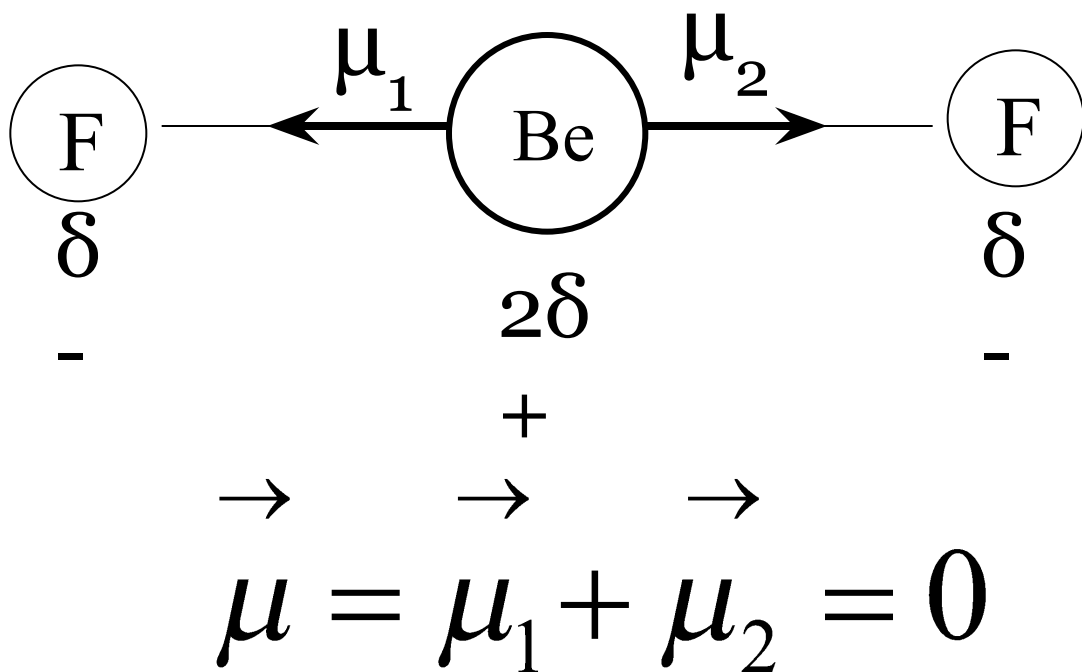
Эффективный заряд

$$\vec{\mu} \text{ [Д]} (\text{Дебай}) \quad \text{или} \quad [\text{Кл} \cdot \text{м}]$$

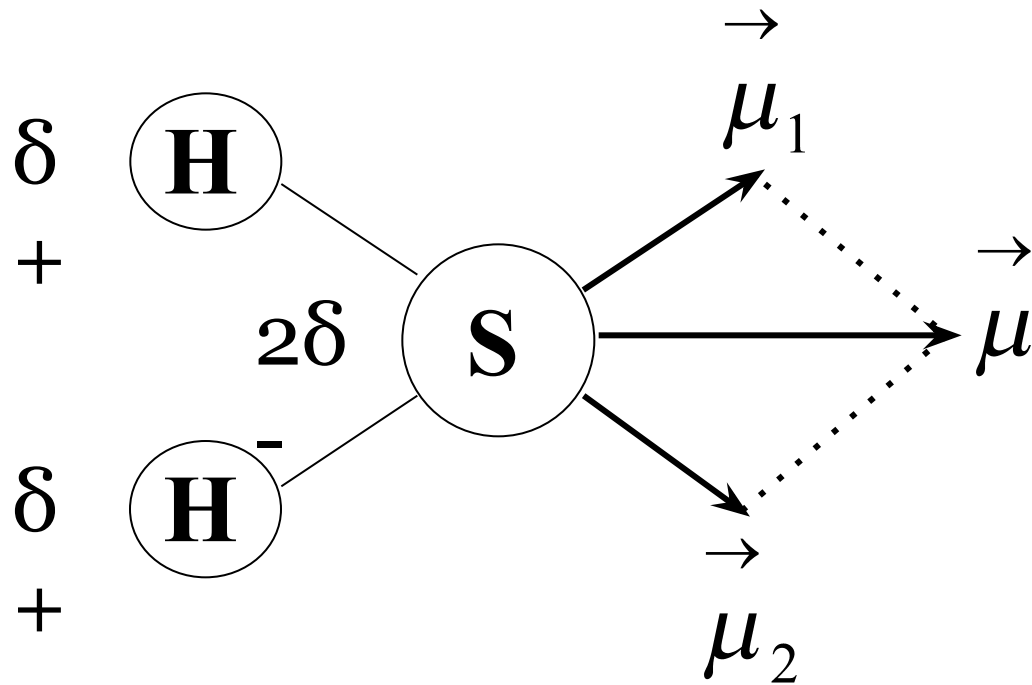
$$1 \text{ Д} = 0,33 \cdot 10^{-29} \text{ Кл} \cdot \text{м}$$

Неполярные молекулы

Молекула неполярна, если суммарный μ всех связей $= 0$.



Полярные молекулы



$$\begin{array}{ccc} \rightarrow & \rightarrow & \rightarrow \\ \mu_1 + \mu_2 = \mu & \neq & 0 \end{array}$$

- **Поляризуемость химической связи** – это способность химической связи приобретать дипольный момент (μ) под действием внешнего электрического поля, обладающего напряженностью (Н).

$$\mu_{\text{инд}} = \alpha * H$$

α – поляризуемость;
Н – напряженность электрического поля;

$\mu_{\text{инд}}$ – приобретенный дипольный момент.



Схема индукционного взаимодействия

Теории химической связи

```
graph TD; A[Теории химической связи] --> B[Метод валентных связей (МВС)]; A --> C[Метод молекулярных орбиталей (ММО)];
```

Метод валентных связей (МВС)

Представления о двухцентровых локализованных связях (Ф.Лондон, В. Гайтлер, Л.Полинг).
1927 г.

Метод молекулярных орбиталей (ММО)

Представления о многоцентровых делокализованных связях.
(Р.Малликен, Ф.Гунд, Э. Хюккель и др.).
40-е годы XX века

Обе теории не исключают друг друга, а дополняют.

СВЯЗИ

1. Метод валентных связей (МВС)

- в образовании химической связи участвуют только неспаренные электроны атомов, либо свободные атомные орбитали одного атома и электронная пара другого;
- при сближении атомов и образовании химической связи атомные орбитали сохраняются (то есть электроны движутся на своих атомных орбиталях), но могут видоизменяться вследствие стремления к наиболее полному перекрыванию;
- при образовании молекулы атомные орбитали перекрываются, при этом вследствие неразличимости электронов они могут переходить от одного ядра к другому, то есть обмениваться. Но в каждый момент времени электроны находятся под влиянием лишь одного ядра;
- связь располагается в том направлении, в котором возможность перекрывания волновых функций электронов, образующих связь, является наибольшей;
- из двух орбиталей атома более прочную связь образует та, которая сильнее перекрывается орбиталью другого атома;
- метод валентных связей объяснил механизм образования ковалентной связи и дал ее определение;

Основные положения метода ВС

1. Х. с. между атомами образуется в результате обобществления валентных электронов, т.е. образования общих электронных пар.
2. Общие электронные пары образуют лишь неспаренные электроны с антипараллельными спинами.
3. При обр. х. с. происходит частичное перекрывание АО, что приводит к увеличению электронной плотности в межъядерном пространстве.
4. Химическая связь тем прочнее, чем в большей степени перекрываются взаимодействующие АО.

5. В пространстве х. с. располагается в том направлении, в котором возможность перекрывания АО наибольшая.

6. Связь, образованная перекрыванием АО по линии, соединяющей центры атомов, называется – σ -связью, а по обе стороны от линии - π -связью.

$$E_{\sigma} > E_{\pi}$$

7. Если молекула образуется путём перекрывания двух АО, связь называется одинарной, если более двух АО – кратной. Одинарная связь представлена всегда σ -связью, а кратные связи включают σ - и π -связи.

8. Общая электронная пара соответствует единице химической связи.

Основные виды химической связи

- Ионная
- Ковалентная
- Донорно-акцепторная
- Водородная

- Межмолекулярная
- Металлическая

Ковалентная связь

Химическая связь, образованная двумя атомами путем обобществления пары электронов, называется **ковалентной связью**

Ковалентная связь возникает между атомами с относительно малыми различиями в электроотрицательностях (χ) ($\Delta\chi < 2$).

Ковалентная полярная связь - связь между атомами с различной электроотрицательностью (0.5 - 2.0) и несимметричным расположением общей электронной пары.

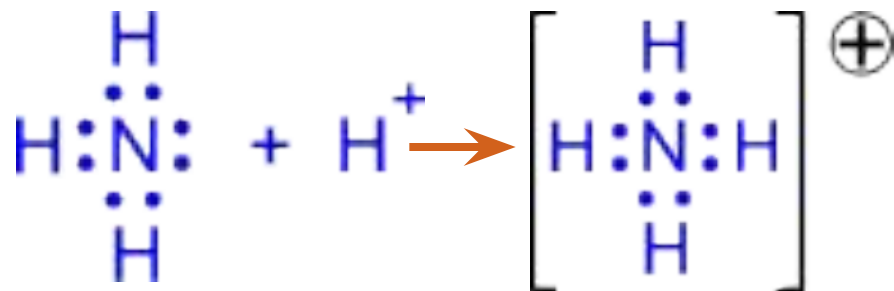
Механизмы образования ковалентной связи

Обменный



Каждый атом дает по одному неспаренному электрону в общую электронную пару

Донорно-акцепторный



Один атом (донор) предоставляет электронную пару, а другой атом (акцептор) предоставляет для этой пары свободную орбиталь

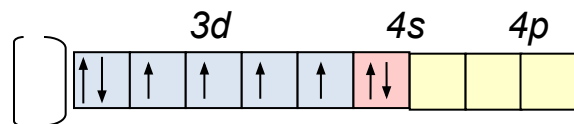
Структурные формулы молекул по методу ВС

Степень окисления – условный заряд атома в веществе, рассчитанный из предположения, что в полярных связях электронные пары полностью смещены, а неполярные – поделены между связываемыми атомами.

Валентностью – называется способность атома присоединять или замещать определенное число других атомов с образованием химической связи.

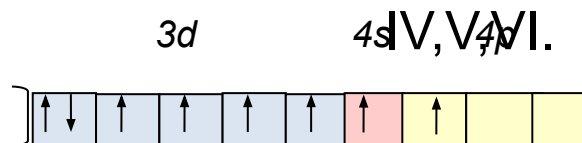
Количественной мерой валентности в обменном механизме ВС считают число неспаренных электронов у атома в основном или возбужденном состоянии атома

атом железа :



Fe*

$V^* = II, III,$

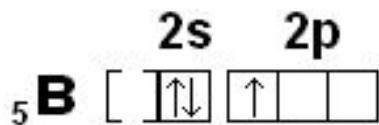


Характеристики ковалентной связи

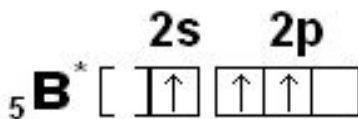
1. Валентные возможности

атомов.

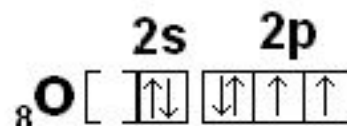
Валентность — способность атомов элементов образовывать химические связи с атомами других элементов; численно равна количеству неспаренных электронов атома.



Валентность: I



Валентность: III

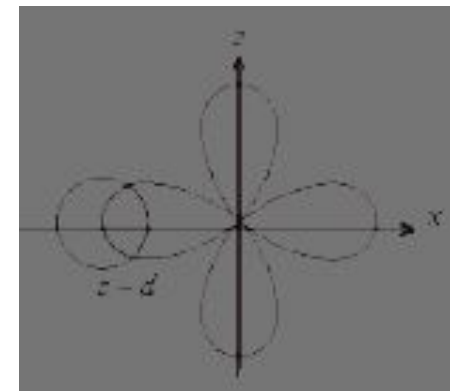
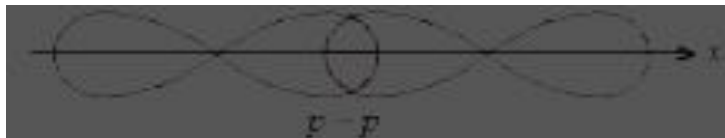
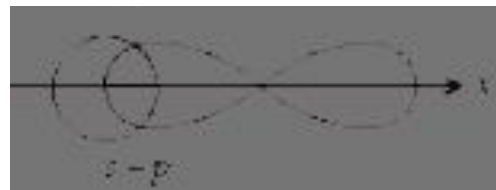
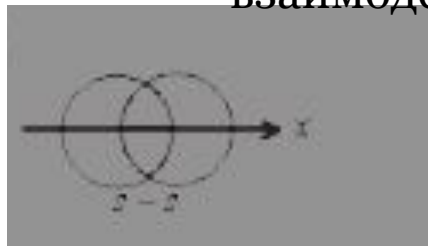


Валентность: II

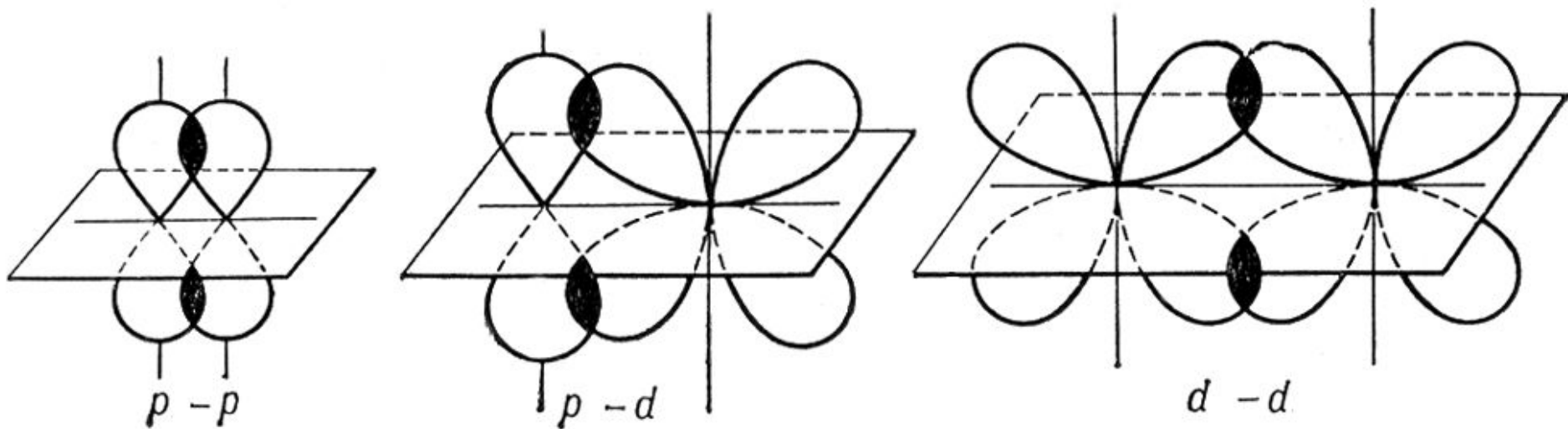
2. Направленность химической

связи

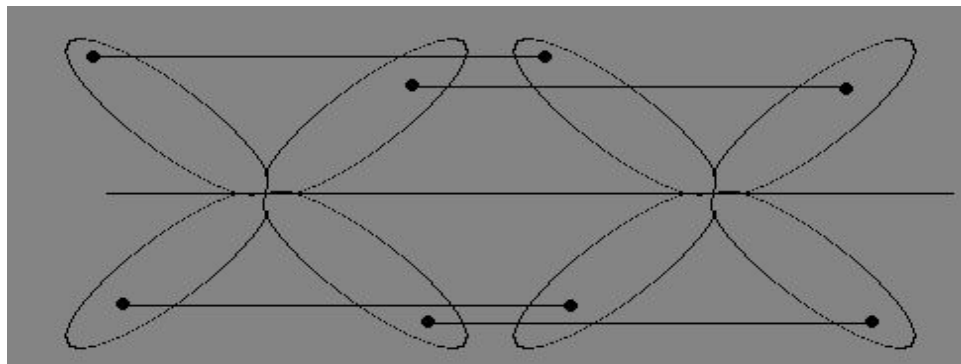
σ **связь** - связь, при образовании которой максимальное перекрывание облаков происходит вдоль прямой, соединяющей центры взаимодействующих атомов.



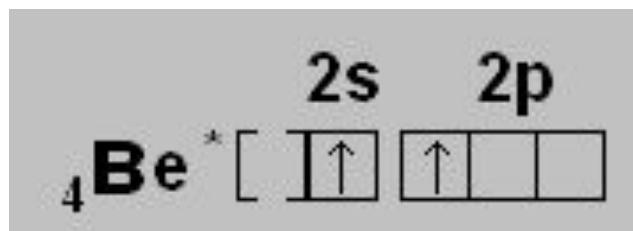
π -связь - связь, при образовании которой перекрывание электронных облаков происходит по обе стороны линии, соединяющей центры атомов.



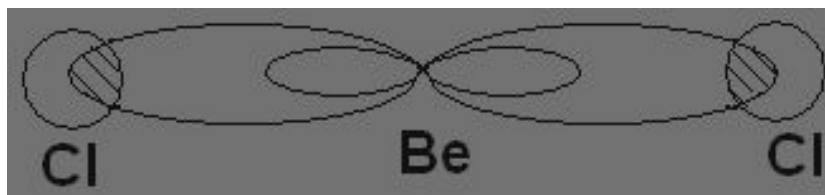
δ -связь - связь, при образовании которой происходит перекрывание всех четырех облаков в плоскости, перпендикулярной плоскости соединения атомов.



В молекуле **BeCl₂** две ковалентные связи Be–Cl образуются за счет двух неспаренных электронов атома хлора и двух неспаренных электронов возбужденного атома бериллия, один из которых находится в *p*-орбитали, а другой в *p*-состоянии.



Вследствие гибридизации обе связи равноценны:



Гибридизация атомных орбиталей

При гибридизации первоначальная форма и энергия орбиталей взаимноизменяются и образуются орбитали с новой, но уже одинаковой формой и энергией.

Число гибридных орбиталей равно числу атомных орбиталей, участвующих в гибридизации, причем энергии АО не должны сильно отличаться.

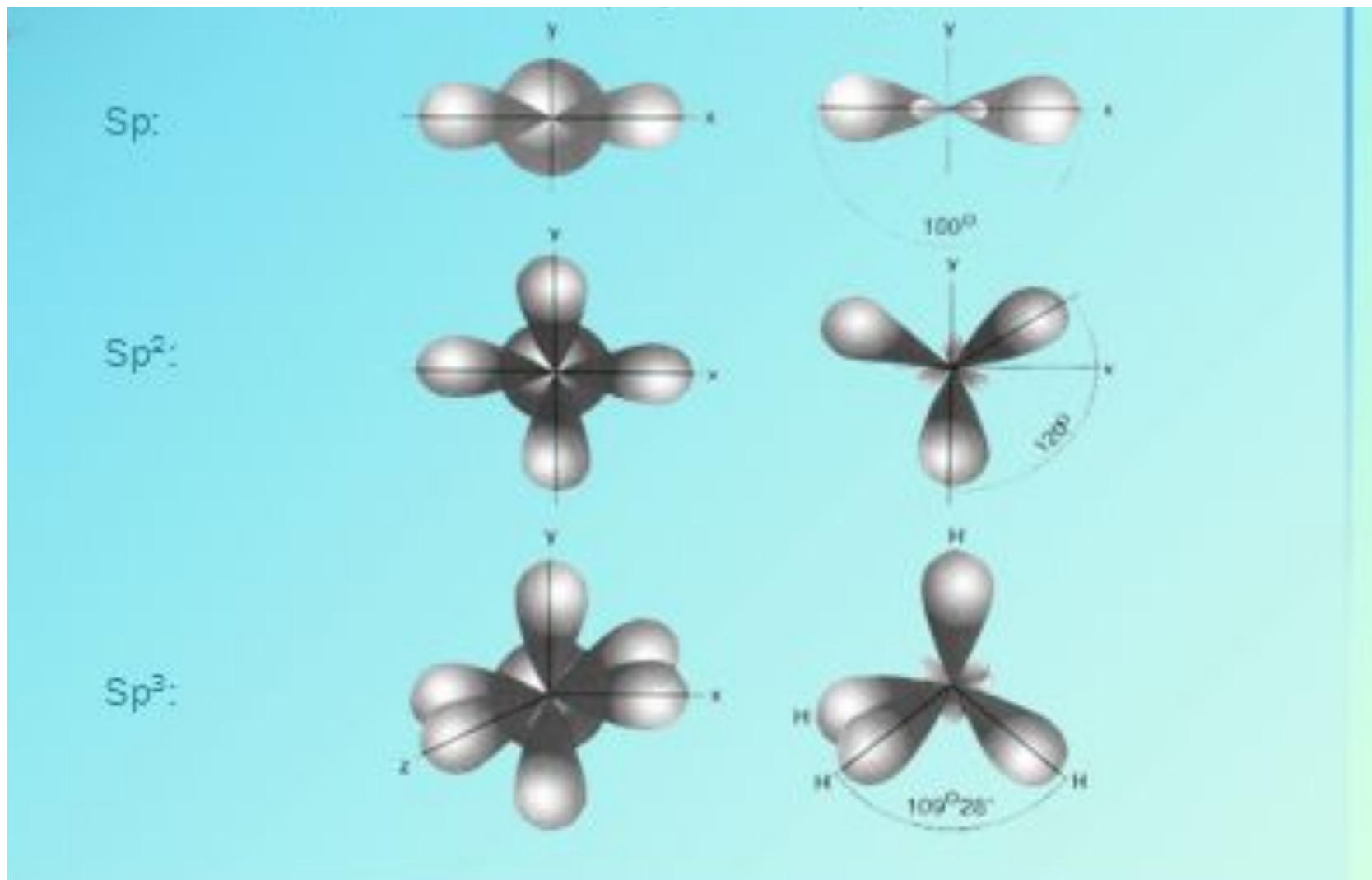
Формы и энергии гибридных орбиталей одинаковы.

химические связи, образованные гибридными орбиталями, прочнее, а полученная молекула более устойчива

Гибридизация

Тип гибридизации	Геометрическая форма	Угол между связями	Примеры
sp	линейная	180°	BeCl_2
sp^2	треугольная	120°	BCl_3
sp^3	тетраэдрическая	$109,5^\circ$	CH_4
sp^3d	тригонально-бипирамидальная	90° ; 120°	PCl_5
sp^3d^2	октаэдрическая	90°	SF_6

Формы гибридных орбиталей



Ионная связь

Чем больше разница электроотрицательностей атомов, тем более полярна связь.

Ионная связь является предельным случаем ковалентной полярной связи

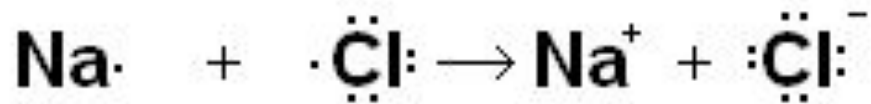
$\Delta\chi = 0 - 0.4$ – ковалентная неполярная

$\Delta\chi = 0.4 - 2.0$ – ковалентная полярная связь;

$\Delta\chi > 2.1$ - ионная

Ионная химическая связь представляет собой электростатическое взаимодействие отрицательно и положительно заряженных ионов в химическом соединении

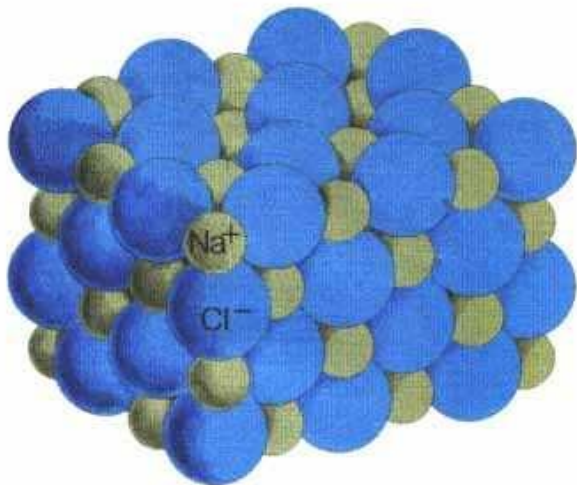
Ионная связь - предельный случай полярной ковалентной связи, при которой более электроотрицательный элемент практически полностью присоединяет к себе электронную пару и становится анионом, а менее электроотрицательный атом отдает электроны и становится катионом.



- необходимым условием образования ионной связи является значительная разница электроотрицательности атомов;
- образование анионов происходит в результате присоединения электрона к атому. Количественной характеристикой этого процесса является *сродство к электрону*
- упорядоченная упаковка ионов называется ионным кристаллом. Они устойчивы к нагреванию и

низких

температурах являются

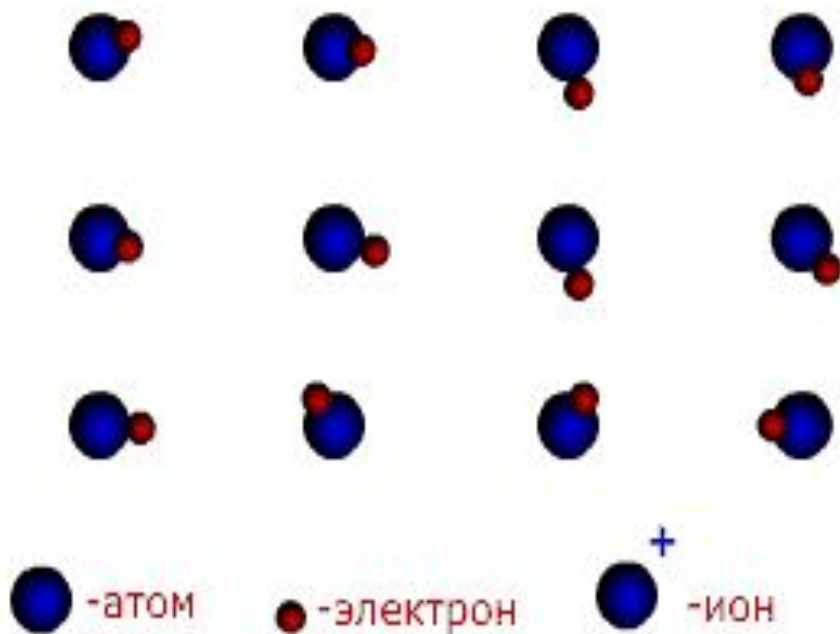


- ионная связь не обладают
цаемостью, ни направленностью.

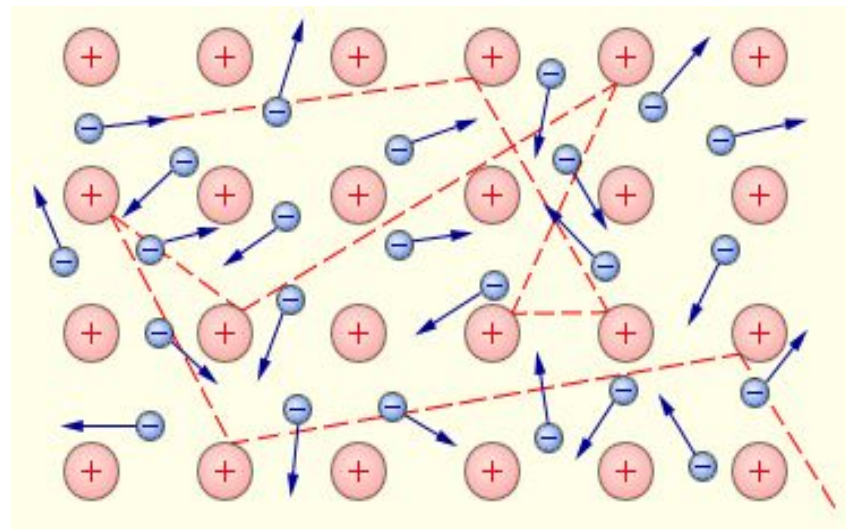
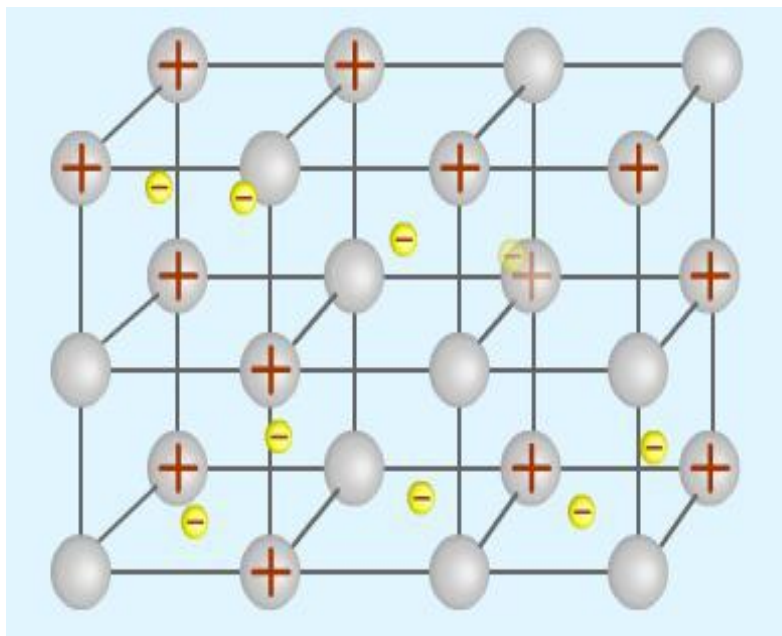
Металлическая связь

Связь в металлах и расплавах за счет электростатического взаимодействия положительно заряженных катионов, которые располагаются в узлах кристаллической решетки и свободных делокализованных электронов.

СХЕМА ОБРАЗОВАНИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ СВЯЗИ.

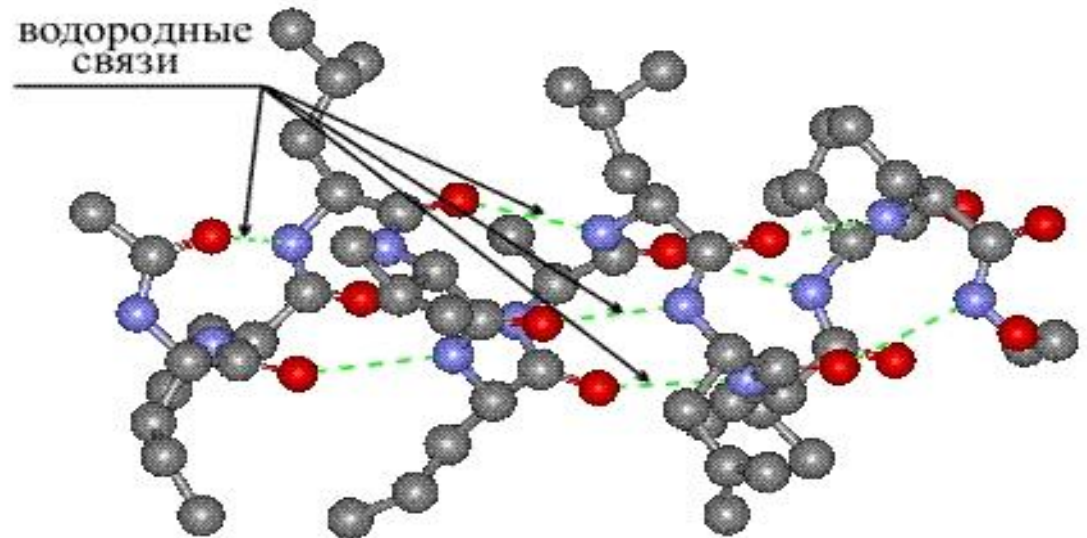
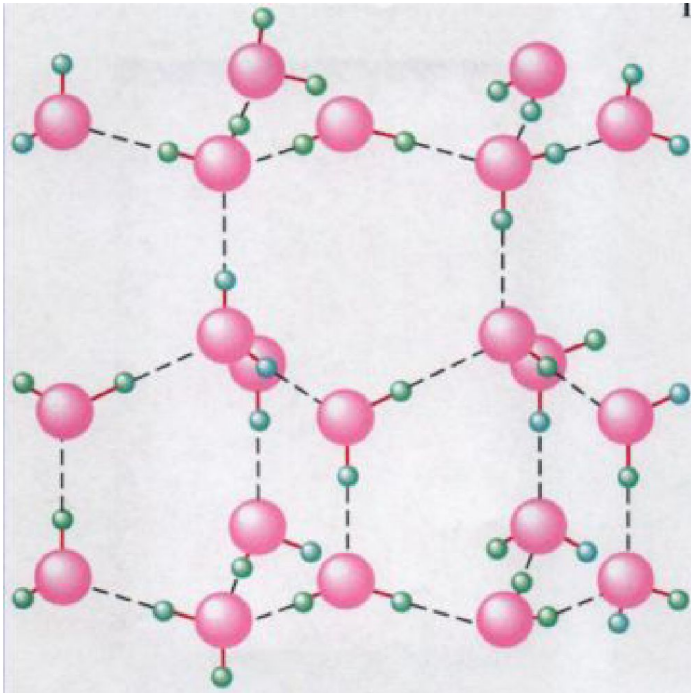
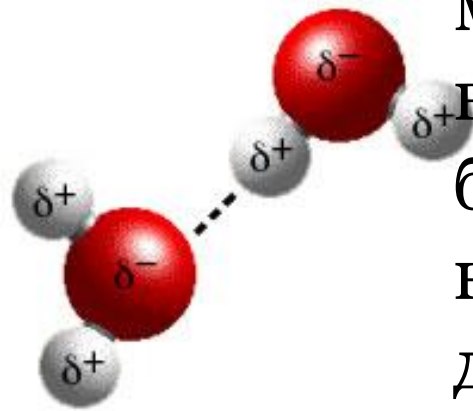


Металлическая связь не проявляет свойств насыщенности, направленности, но ей характерны высокие координационные числа металлических структур.

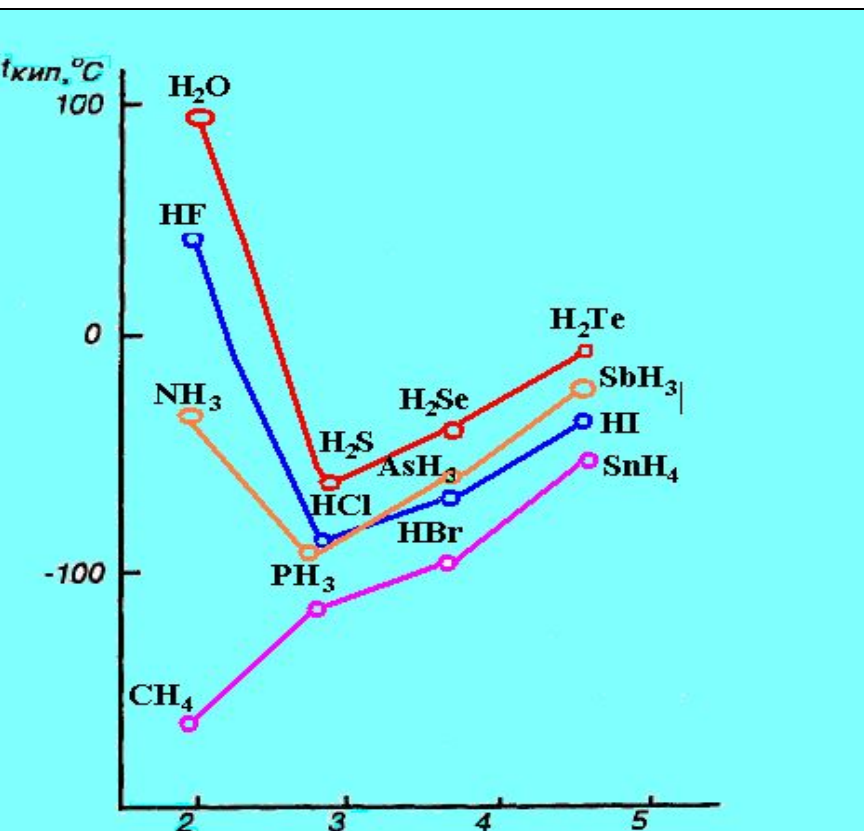


- в образовании металлического кристалла (с металлической связью) участвует большое число атомных орбиталей с одинаковой энергией, которые сближаются, перекрываются, образуя молекулярные орбитали с одинаковой энергией (электронная зона). В пределах этой электронной зоны свободные электроны могут перемещаться по всему кристаллу, не выделяя и не поглощая энергию;
- металлическая связь ненасыщаема и не имеет направленности в пространстве;
- вещества, с металлической связью, обладают высокой плотностью, твердостью, высокой температурой кипения и температурой плавления, высокой электропроводностью, ковкостью и пластичностью.

Водородная связь – это связь между сильнополяризованным атомом водорода одной молекулы и атомом с большой электроотрицательностью и неподеленной электронной парой другой молекулы (или другой части этой же молекулы)



Температуры кипения соединений водорода



Образование межмолекулярных водородных связей приводит к существенному изменению ряда свойств веществ: повышению вязкости, диэлектрической постоянной, температуры кипения и плавления. Так вода, фтороводород и аммиак, благодаря водородным связям, имеют аномально высокие температуры кипения и плавления

Межмолекулярные взаимодействия

– взаимодействие электронейтральных валентнонасыщенных молекул между собой по электростатическому взаимодействию

- эти взаимодействия обусловлены действием сил Ван-дер-Ваальса;

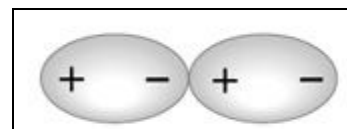
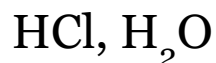
• проявляется на значительно больших расстояниях и характеризуется отсутствием насыщаемости и небольшими энергиями;

Основу ван-дер-ваальсовых сил составляют кулоновские силы взаимодействия между электронами и ядрами одной молекулы и ядрами и электронами другой.

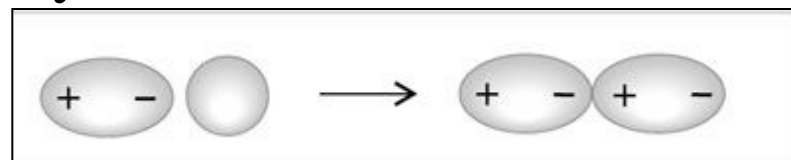
Межмолекулярные взаимодействия

• подразделяется на:

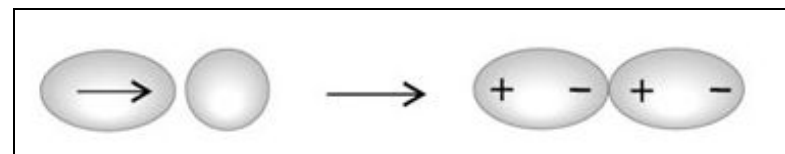
ориентационное – взаимодействие между полярными молекулами (диполь – дипольное);



индукционное - взаимодействие между полярной и неполярной молекулами (постоянный диполь – наведенный диполь);



дисперсионное - взаимодействие между неполярными молекулами (наведенный диполь – наведенный диполь).



Дисперсионные силы действуют между частицами любого вещества.