

ЛЕКЦИЯ
“ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ
И СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛ”

План:

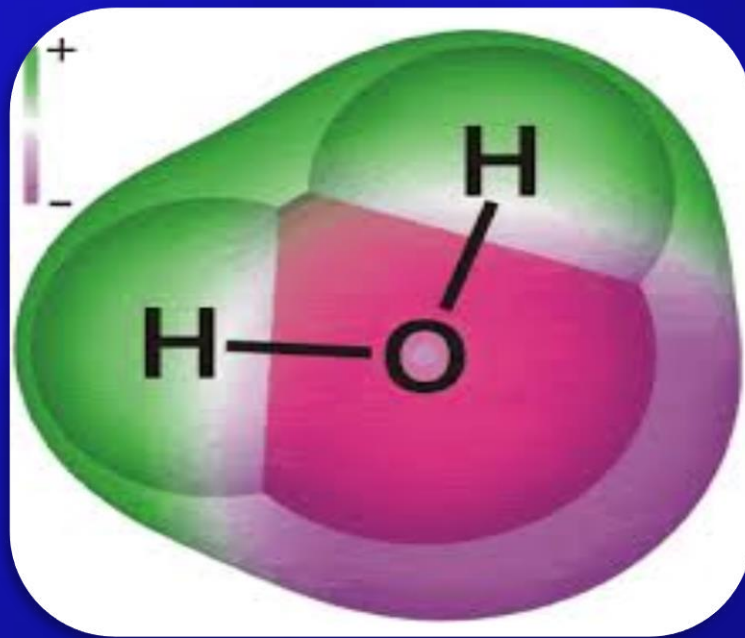
1. Сущность химической связи.
2. Перекрывание атомных орбиталей
3. Механизмы образования ковалентных связей
4. Гибридизация атомных орбиталей

1. Сущность химической связи.

- ▣ Современная теория строения химических связей основана на притяжении между атомами, которое можно представить как электростатическое взаимодействие электронных облаков и положительно заряженных ядер.

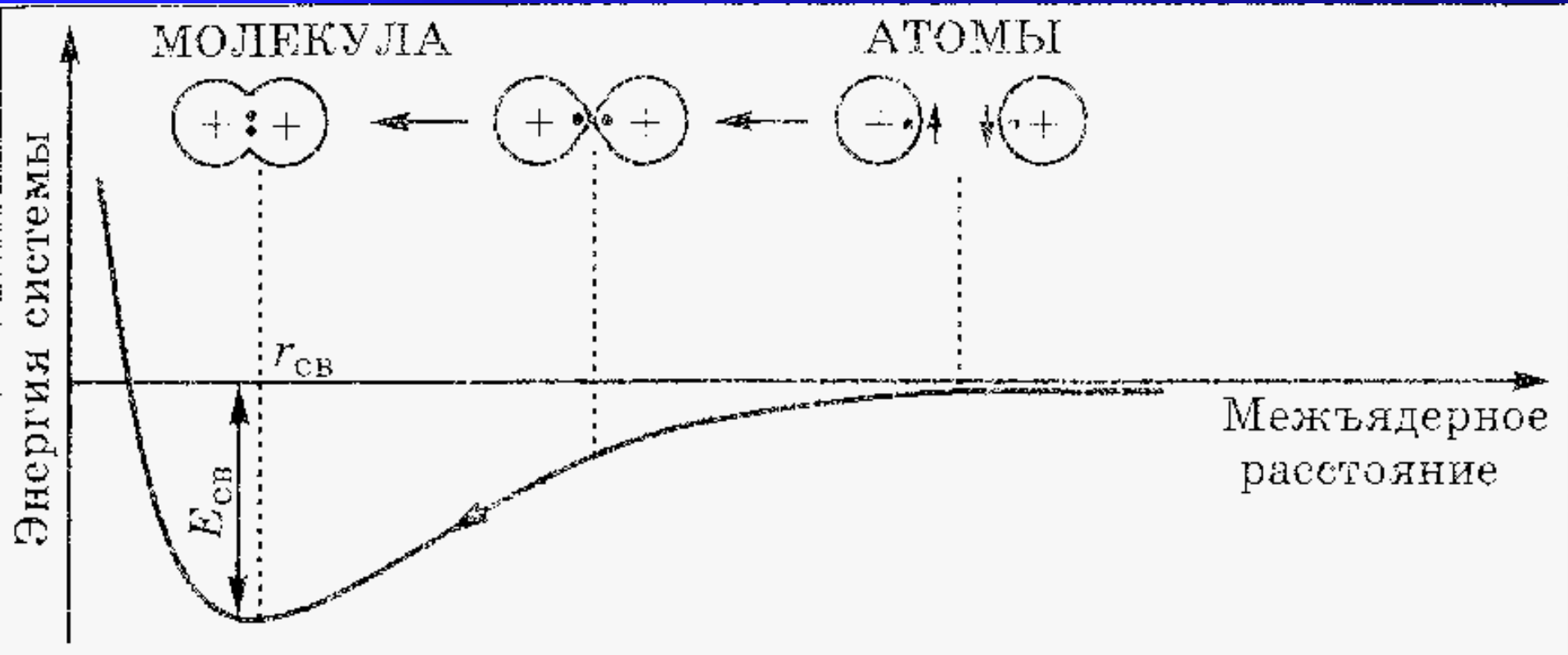
Химическая связь

- это объединение атомов в молекулы, ионы, кристаллы за счет взаимодействия их электронных облаков, в результате чего образуются системы с меньшим запасом энергии.



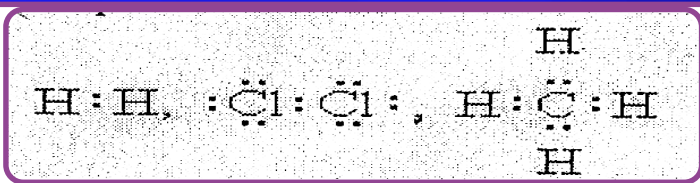
Химическая связь – результат взаимодействия двух или более атомов, приводящий к образованию **устойчивой многоатомной системы.**

Образование молекулы

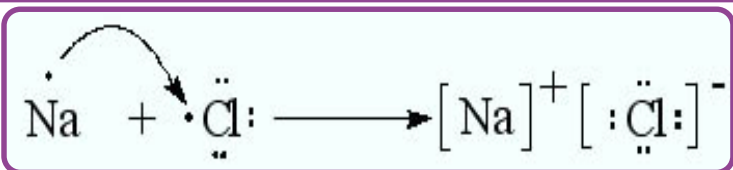


Химическая связь – это понижение энергии атомов при образовании молекулы или СЕ.

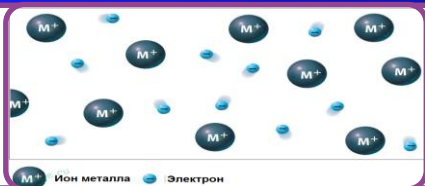
В зависимости от характера взаимодействия электронных облаков атомов различают следующие типы химических связей:



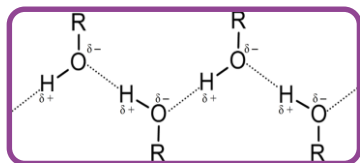
Ковалентная



Ионная



Металлическая



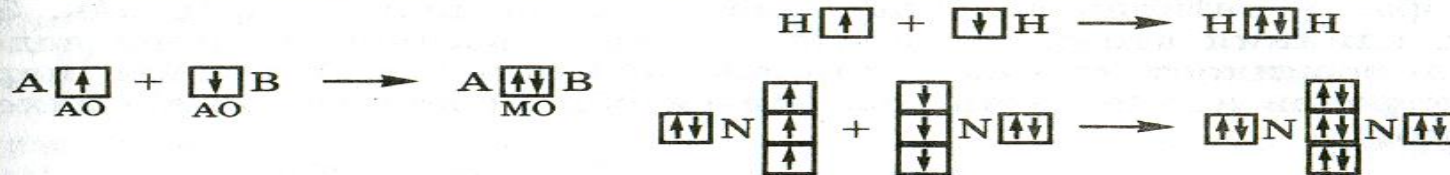
Водородная

Межмолекулярные взаимодействия

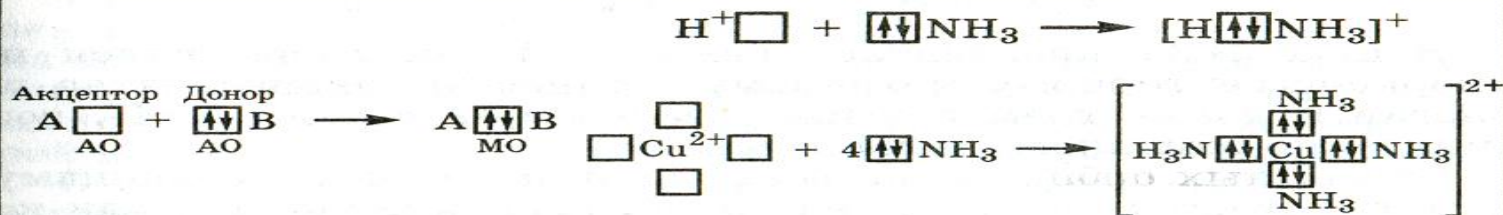
КОВАЛЕНТНАЯ СВЯЗЬ

Механизм образования

ОБМЕННЫЙ



ДОНОРНО-АКЦЕПТОРНЫЙ





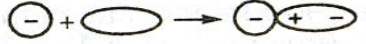



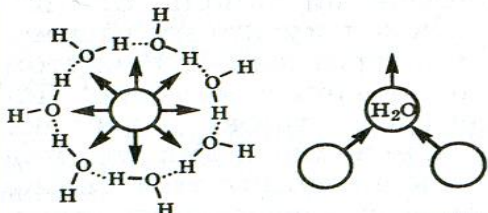
Состояние общих электронных пар в молекуле описывается для ординарных связей σ -молекулярными орбиталями для кратных связей σ - и π -молекулярными орбиталями

Ковалентная связь характеризуется

- Сильным взаимодействием общих электронных пар с ядрами обоих соединяемых атомов
- Энергией связи $E_{\text{св}} = 100\text{--}1000$ кДж/моль
- Насыщенностью
- Кратностью
- Направленностью
- Сопряжением связей
- Степенью полярности
- Поляризуемостью

МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

| Тип взаимодействия | Зависимость энергии взаимодействия от расстояния | Энергия взаимодействия, кДж/моль | Примеры |
|--|--|----------------------------------|--|
| Ион-ионное  | $1/r$ | 160–460 | $R-\overset{+}{N}H_3 \rightarrow \leftarrow \overset{-}{O}OC-R$ $(RO)_2POO^- \rightarrow \leftarrow Mg^{2+}$ |
| Ион-дипольное  | $1/r^2$ | 40–140 | $R-\overset{+}{N}H_3 \rightarrow \leftarrow nH_2O$ $R-COO^- \rightarrow \leftarrow nH_2O$ $Ca^{2+} + 6H_2O \rightarrow [Ca(H_2O)_6]^{2+}$ |
| Ориентационное   | $1/r^6$ | 2–4 | $\overset{\delta+}{H_2O} \rightarrow \leftarrow \overset{\delta-}{H_2O}$ $\overset{\delta+}{HCl} \rightarrow \leftarrow \overset{\delta-}{HCl}$ |
| Индукционное   | $1/r^4$ $1/r^6$ | 1–3 | $I^- + I_2 \rightarrow [I \cdot I_2]^- \rightarrow I_3^-$ $H_2O \cdot I_2$ крахмал $\cdot I_2$ |
| Дисперсионное  | $1/r^6$ | < 2 | $H_2 \rightarrow \leftarrow H_2$ $He \rightarrow \leftarrow He$ $C_6H_6 \rightarrow \leftarrow C_6H_6$ |
| Водородная связь $X-H^{\delta+} \cdots Y^{\delta-}$ | | 10–100 | $\begin{matrix} \text{:}\ddot{O}\text{H}\cdots\text{:}\ddot{O}\text{H} \\ \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \end{matrix}$ $-\text{OH}\cdots\ddot{O}=\text{C}<; >\text{NH}\cdots\ddot{O}=\text{C}<$ $-\text{OH}\cdots\text{N}\leq; >\text{NH}\cdots\text{N}\leq$ |
| Гидрофобное (отталкивание воды) | | 4–8 | Формирование в воде – мицелл ПАВ, – биологических мембран, – белковых глобул и структуры их гидратных оболочек |



Энергия связи (E, кДж/моль)

– это энергия, которая выделяется в результате образования одной связи в 1 моль вещества, находящемся в газообразном состоянии.

Чем больше энергия связи, тем прочнее химическая связь.

| Тип связи | Примеры | Энергия связи, кДж/моль |
|----------------------|--------------------------------------|--|
| Ковалентная | H - H H - Cl | 200 - 800 |
| Ионная | Na⁺ Cl⁻ | 40 - 400 |
| Металлическая | Fe Fe Al Al | 400 - 1200 |

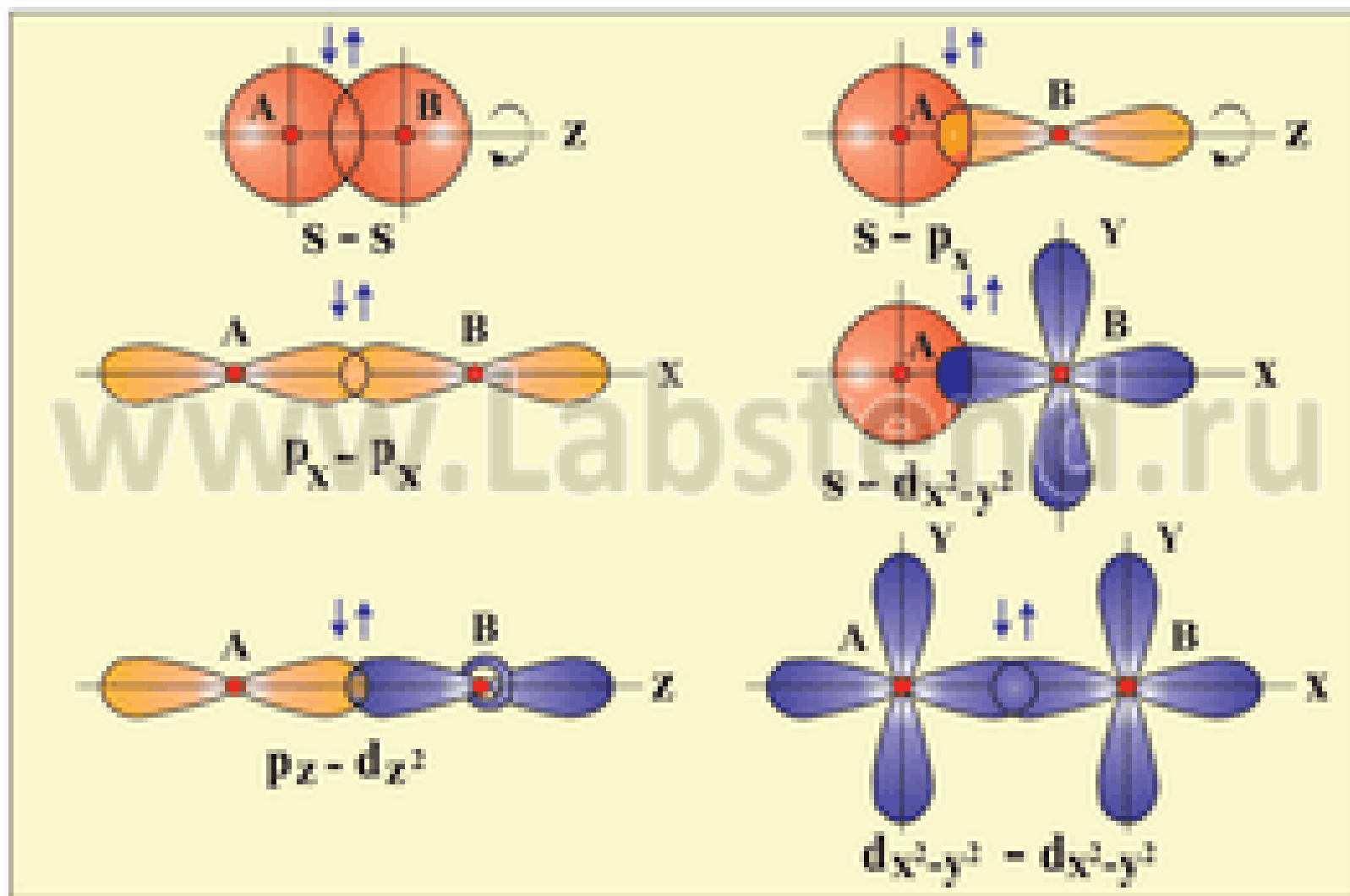
2. Перекрывание атомных орбиталей

Образованию общей электронной пары соответствует перекрывание АО взаимодействующих атомов.

При этом, в межъядерном пространстве возникает *область повышенной электронной плотности.*

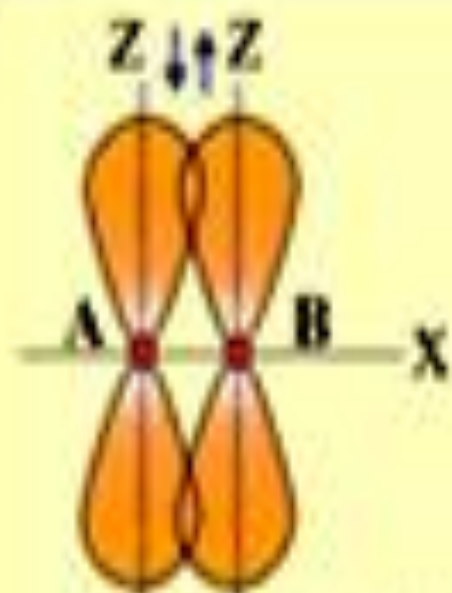
Образование σ -связей

РАЗЛИЧНЫЕ ВИДЫ σ -СВЯЗИ МЕЖДУ АТОМАМИ А И В

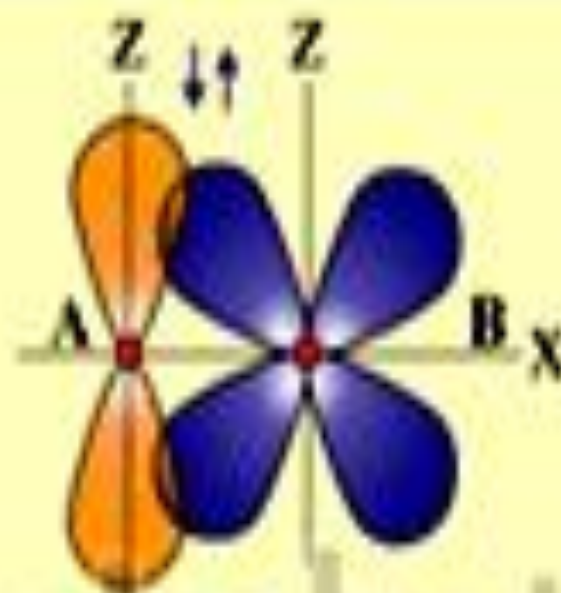


Образование π - связей

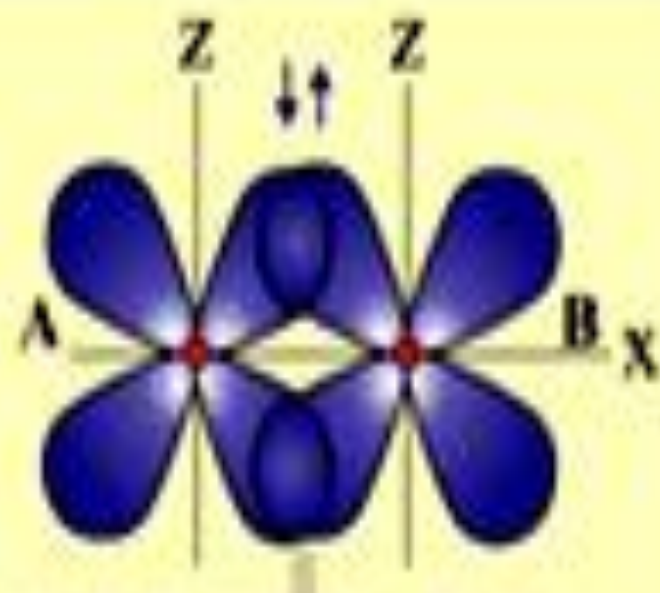
РАЗЛИЧНЫЕ ВИДЫ π - СВЯЗИ МЕЖДУ АТОМАМИ А И В



$p_z - p_z$



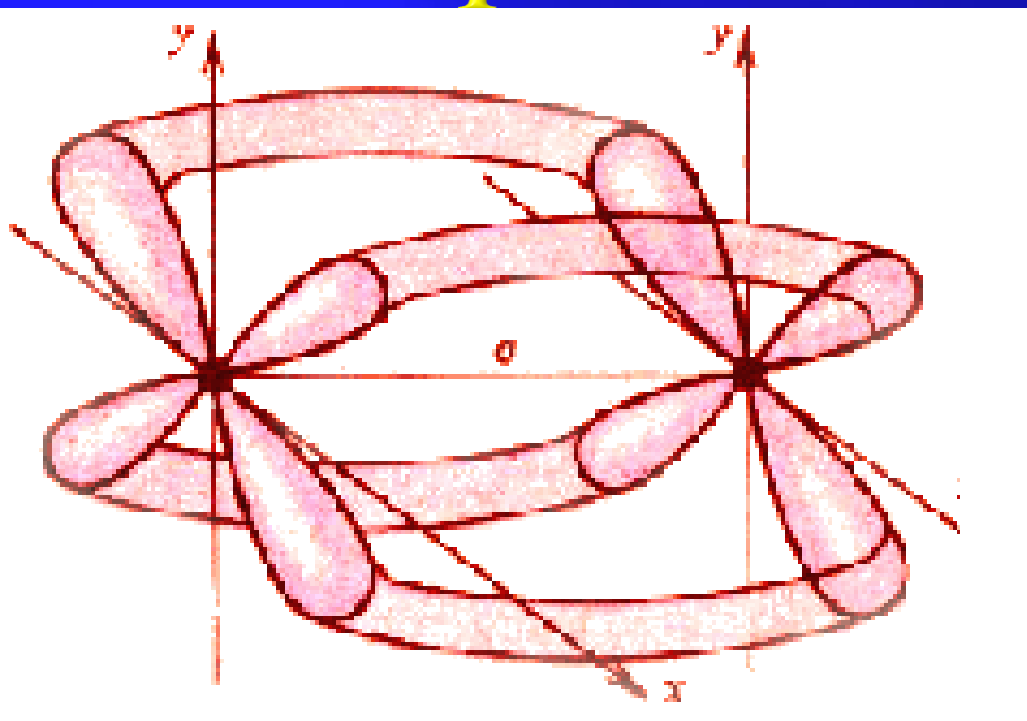
$p_z - d_{xz}$



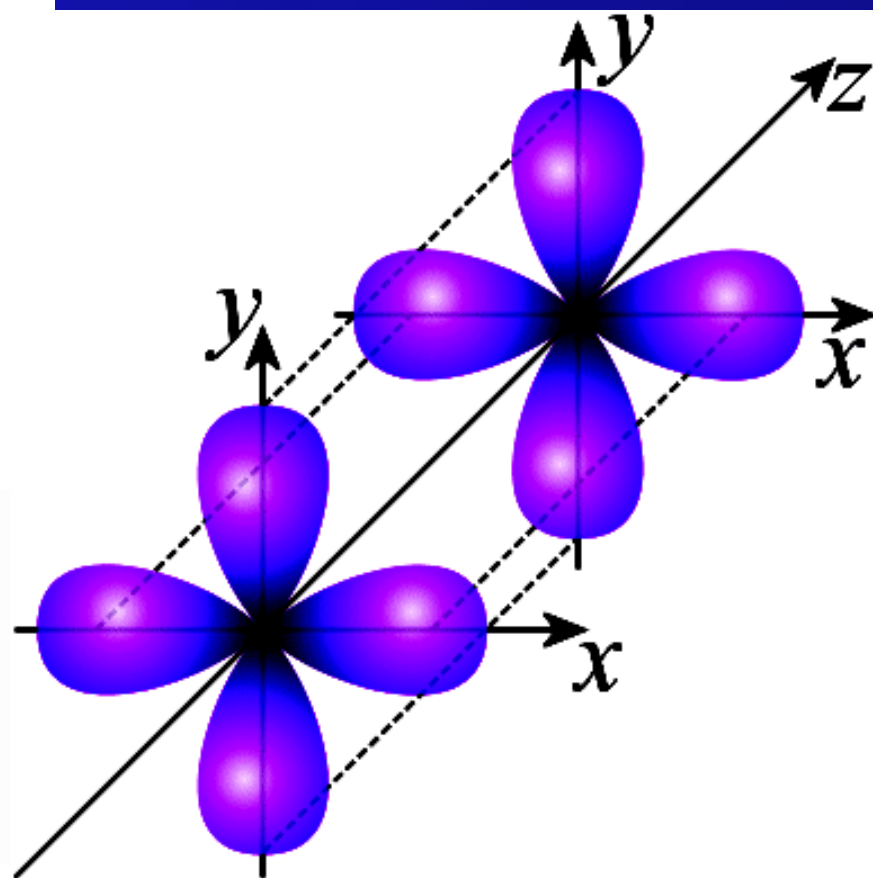
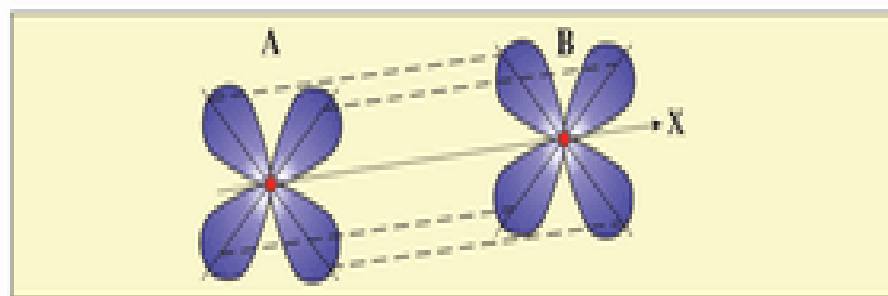
$d_{xz} - d_{xz}$

www.abstend.ru

Образование δ - связи



ОБРАЗОВАНИЕ δ - СВЯЗИ МЕЖДУ АТОМАМИ А И В



3. Механизмы образования ковалентных связей (КС)

Существует два подхода к описанию
КС:

метод валентных связей (ВС)

метод молекулярных орбиталей (МО)

Ковалентная связь

Ковалентная связь – это химическая связь, образованная при помощи общих электронных пар, принадлежащих двум или более атомам.

Обменный

Механизмы
образования
ковалентных
связей

Донорно-
акцепторный

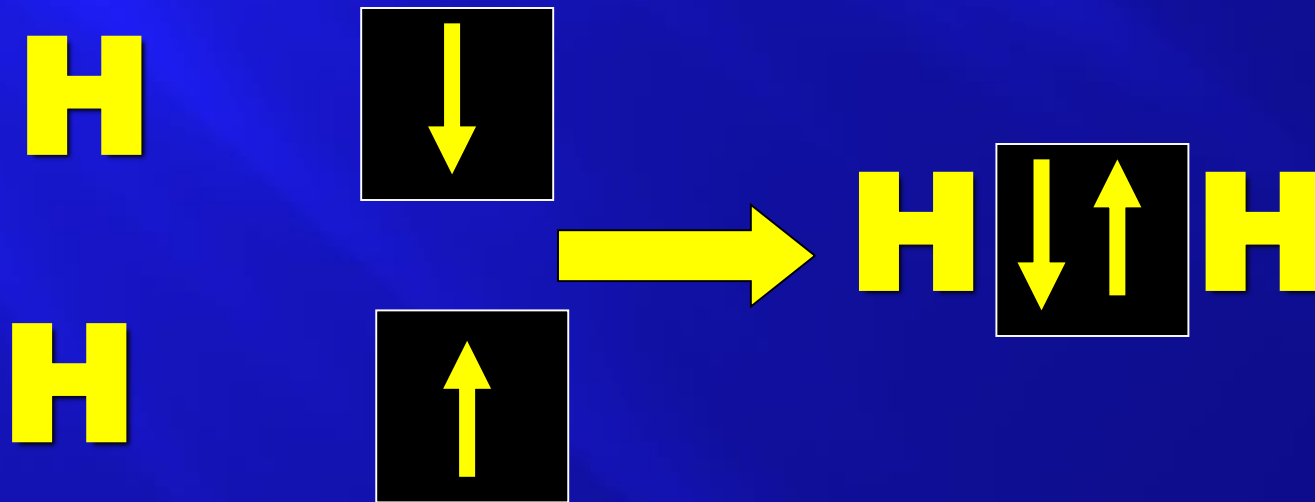
Дативный

Обменный механизм —

обобществление

неспаренных электронов

взаимодействующих атомов



**Кратность связи (n)
равна числу общих
электронных пар:**



$$n = 1$$



$$n = 2$$



$$n = 3$$

Увеличение
прочности
связи

Ковалентная связь



Неполярная Полярная

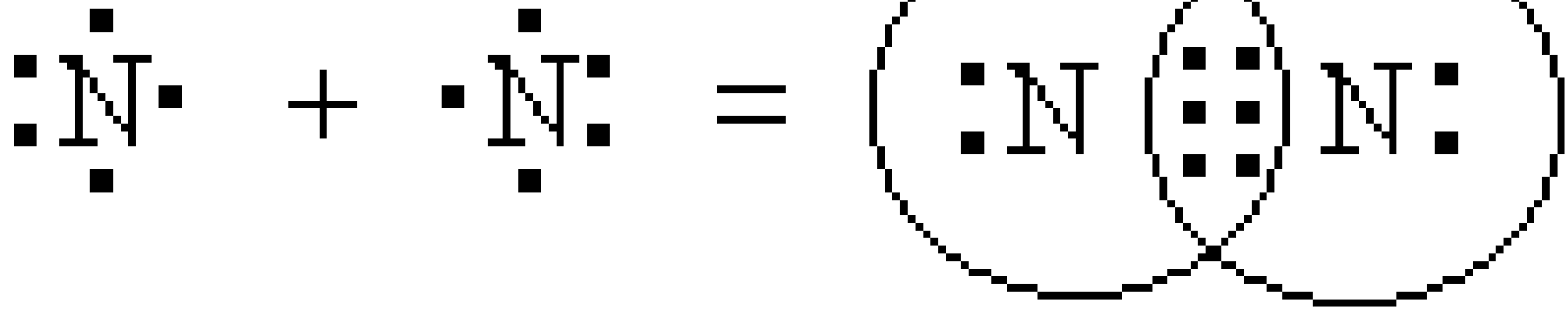
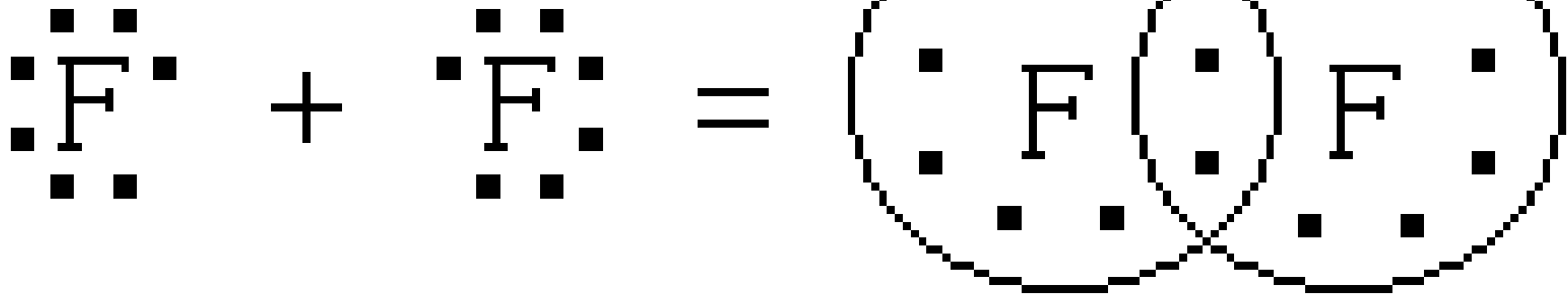
Неполярные КС

связывают атомы

одного химического

элемента:

$\text{H}-\text{H}$, $\text{O}=\text{O}$, $\text{N} \equiv \text{N}$.



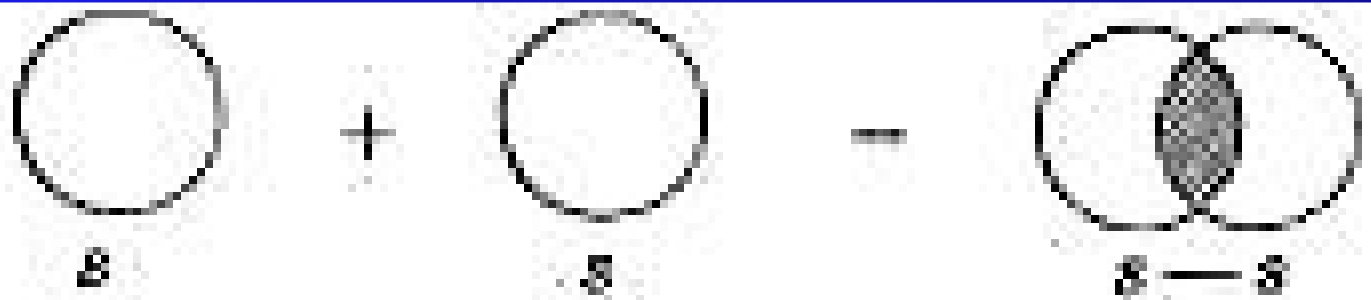
Полярные КС

связывают атомы

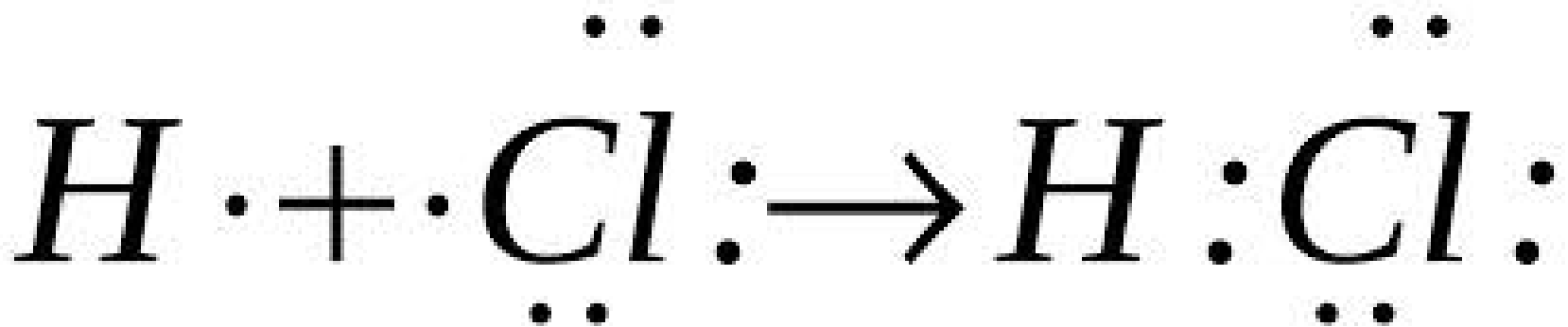
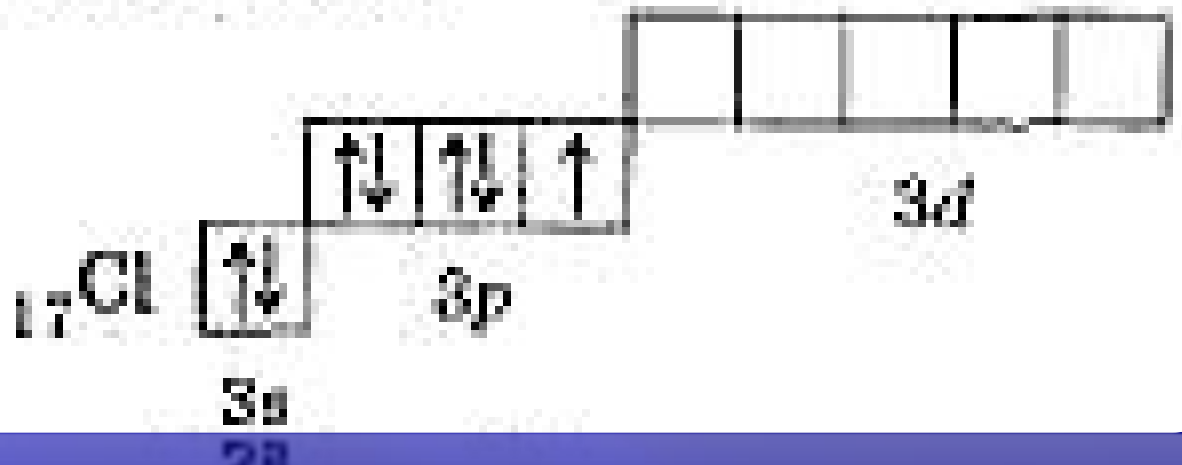
химических элементов

с различной ЭО:

H-Cl , H-O-H , $\text{C}\equiv\text{O}$.



2) HCl — хлороводород:



**Полярность связи обусловлена
смещением общей электронной
пары в сторону более
электроотрицательного атома.**

**Полярная молекула – это
диполь, характеризующийся
величиной**

дипольного момента(μ).

$$\mu = \ell q,$$

ℓ — расстояние между центрами тяжести положительного и отрицательного зарядов в молекуле,
 q — эффективный заряд.

δ_+

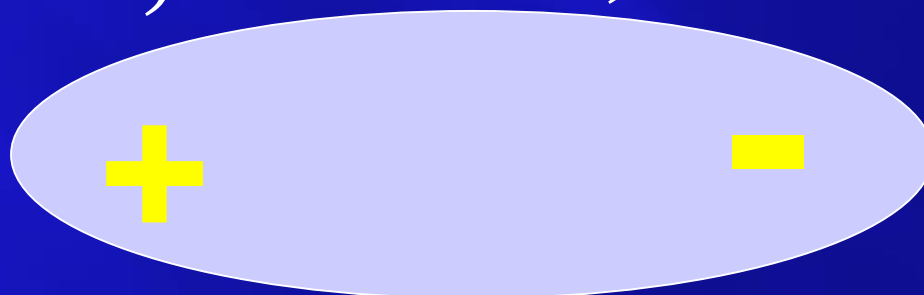
δ_-

H - F

030

2,10

4,10



ℓ

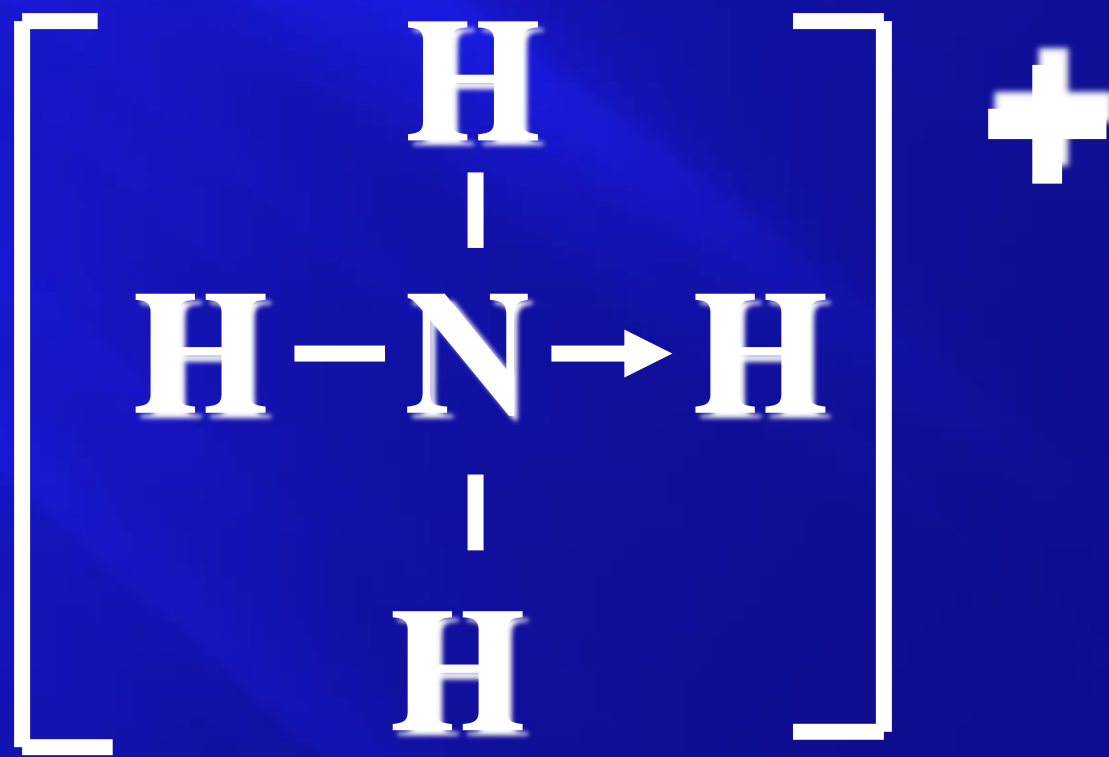
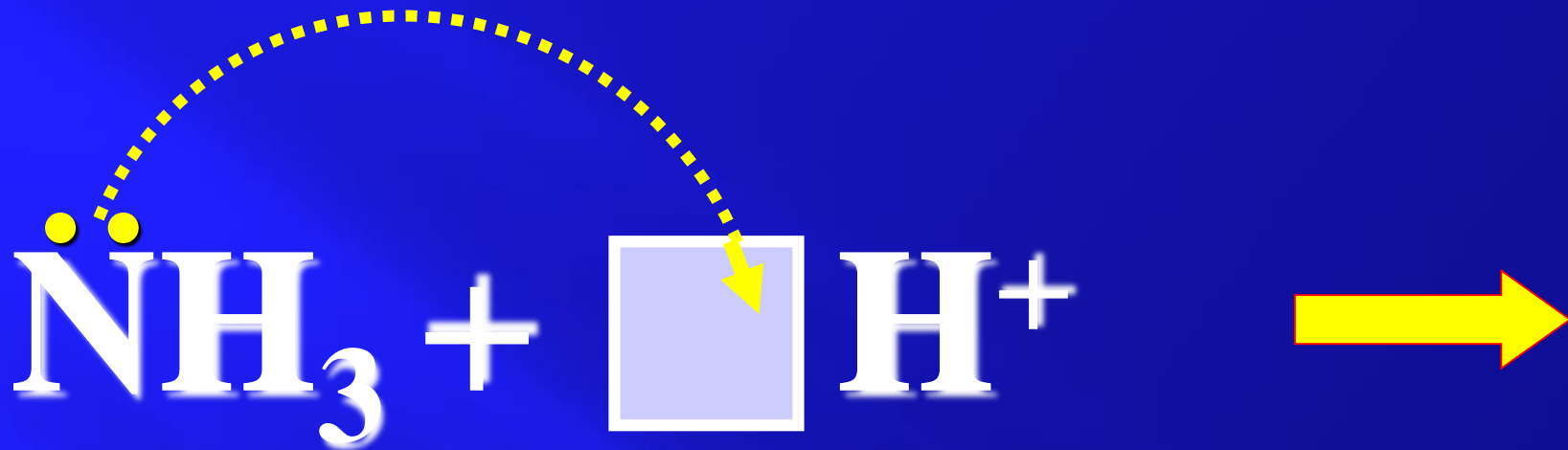
| Молекула | μ, Д | Эффективный заряд |
|-----------------|----------------------------|--------------------------|
| HF | 5,82 | 0,77 |
| CO | 0,11 | 0,02 |
| HCl | 1,08 | 0,18 |

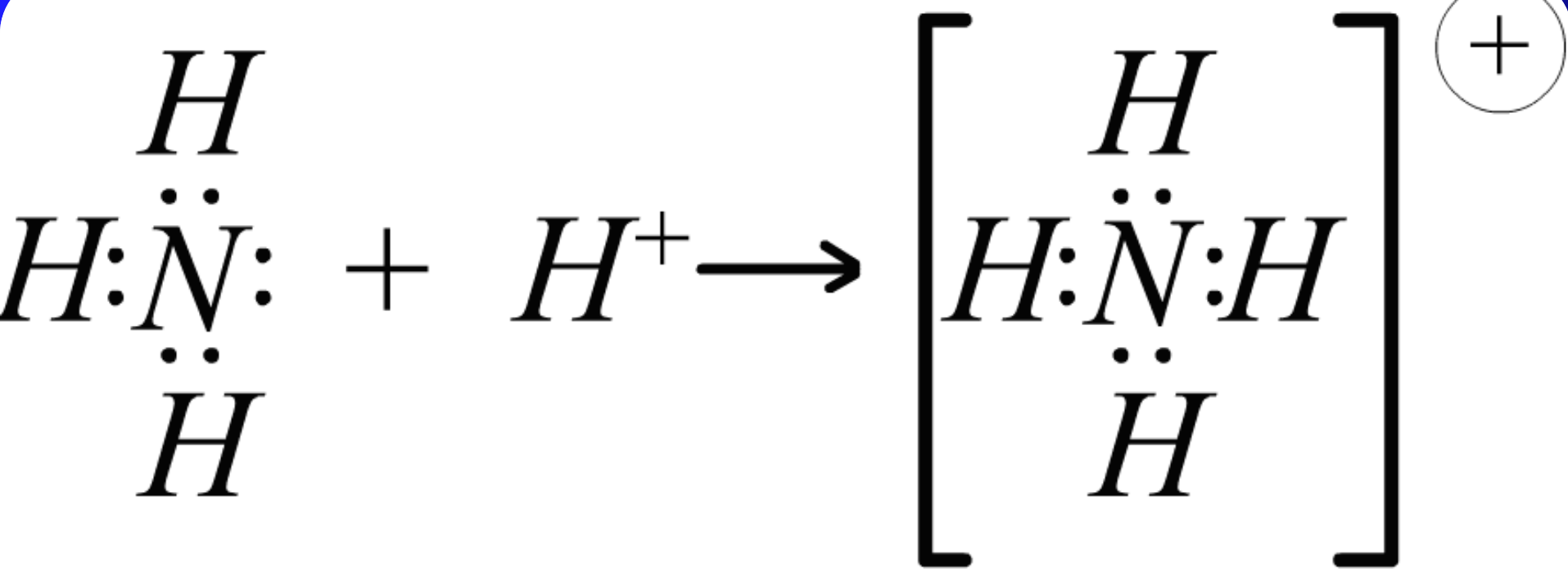
ДИПОЛЬНЫЕ МОМЕНТЫ НЕКОТОРЫХ МОЛЕКУЛ

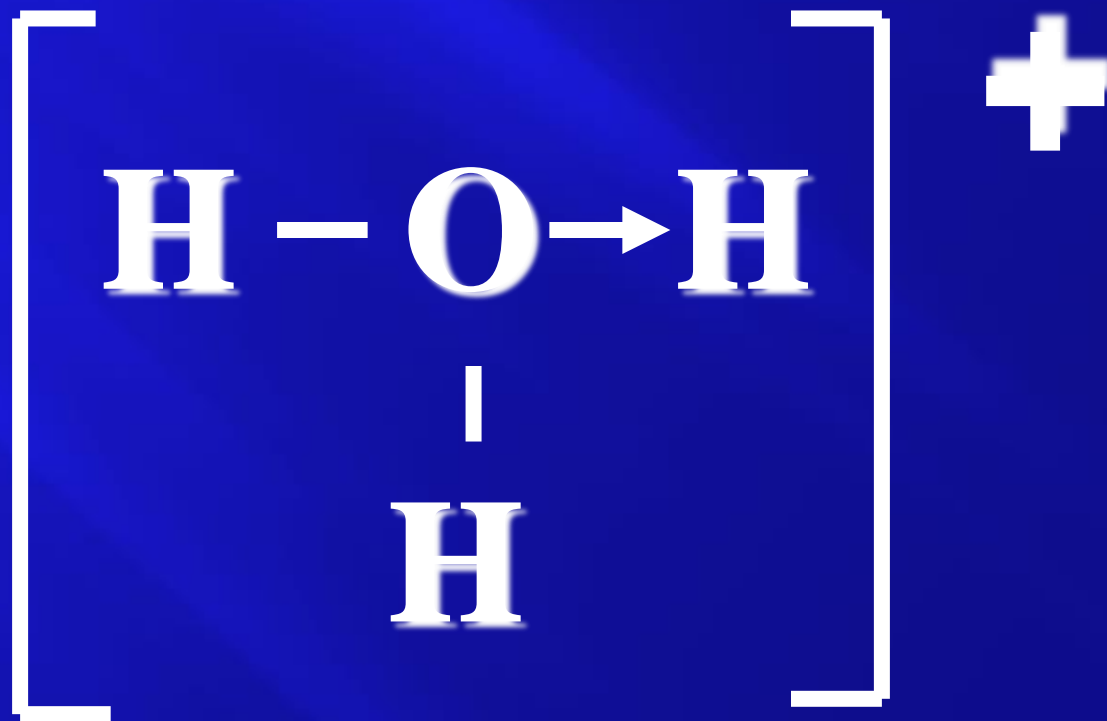
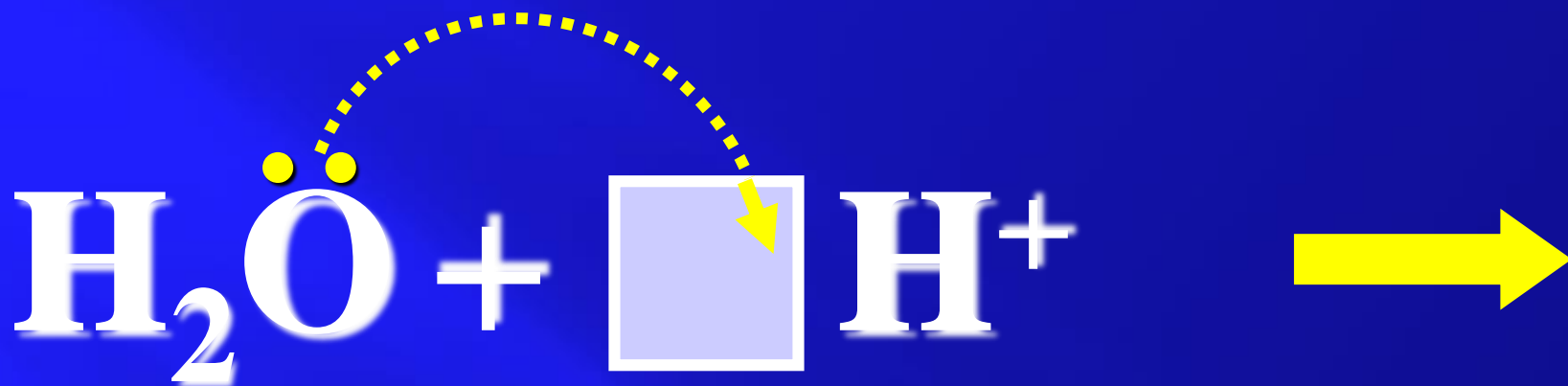
| Молекула | $\mu \cdot 10^{30}$, Кл·м | Молекула | $\mu \cdot 10^{30}$, Кл·м | Молекула | $\mu \cdot 10^{30}$, Кл·м |
|-----------------------|-------------------------------|-----------------------|-------------------------------|-----------------------|-------------------------------|
| H₂ | 0 | HF | 6,40 | NH₃ | 4,94 |
| N₂ | 0 | HCl | 3,47 | PH₃ | 1,83 |
| CO | 0,33 | HBr | 2,63 | CH₄ | 0 |
| NO | 0,23 | HI | 1,27 | SO₂ | 5,30 |
| CO₂ | 0 | H₂O | 6,10 | SO₃ | 0 |
| NO₂ | 0,97 | H₂S | 3,40 | BF₃ | 0 |

Донорно-акцепторный механизм –

- ▣ **атом-донор отдает неподеленную электронную пару на вакантную орбиталь атома-акцептора**







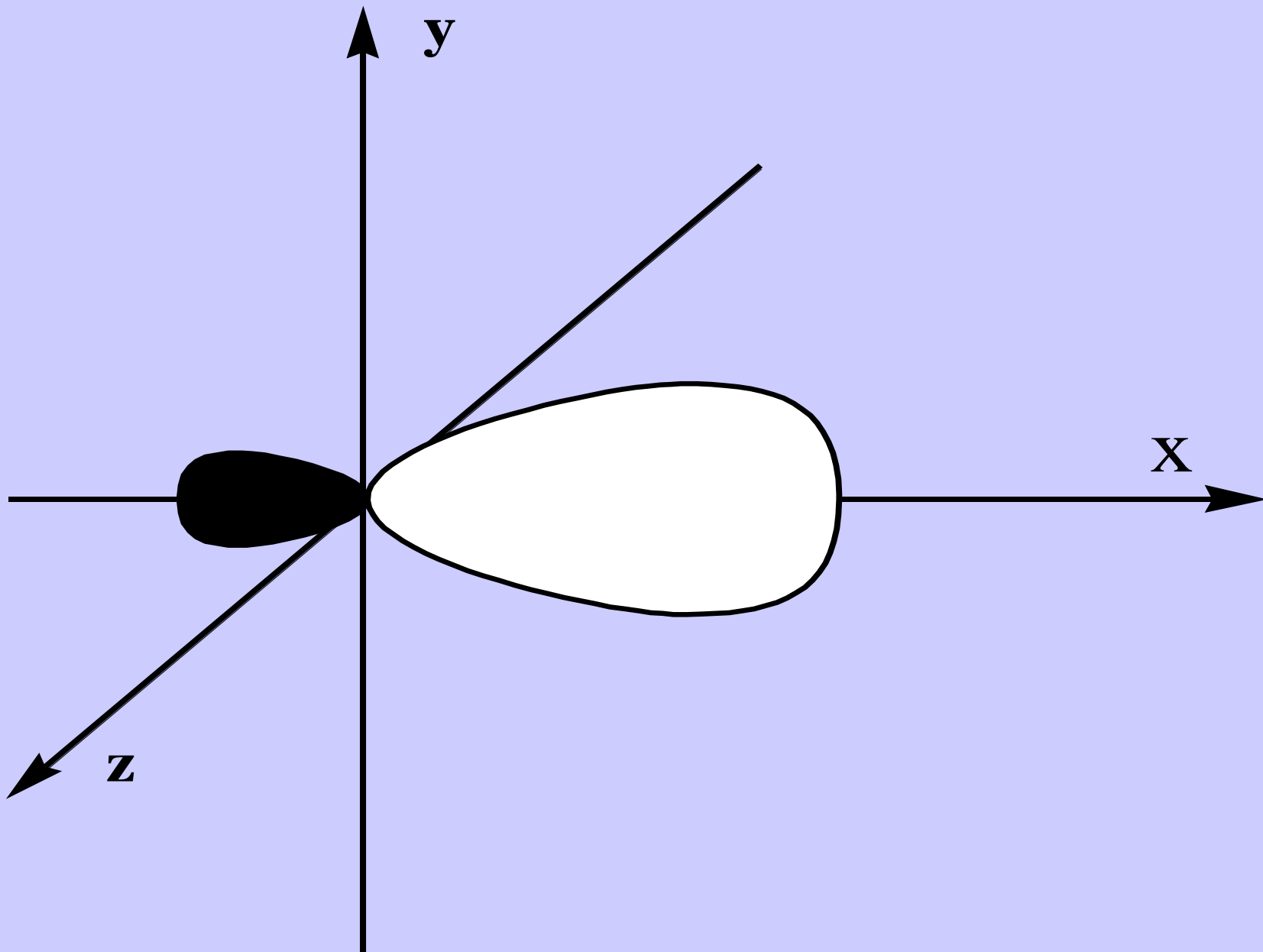
Дативный механизм

4. Гибридизация атомных орбиталей

Гибридизация – это смешивание и выравнивание атомных орбиталей по их форме и энергии.

Сущность гибридизации атомных орбиталей состоит в том, что электрон вблизи ядра связанного атома характеризуется *не отдельной атомной орбиталью, а комбинацией атомных орбиталей с одинаковым главным квантовым числом.* Такая комбинация называется гибридной орбиталью.

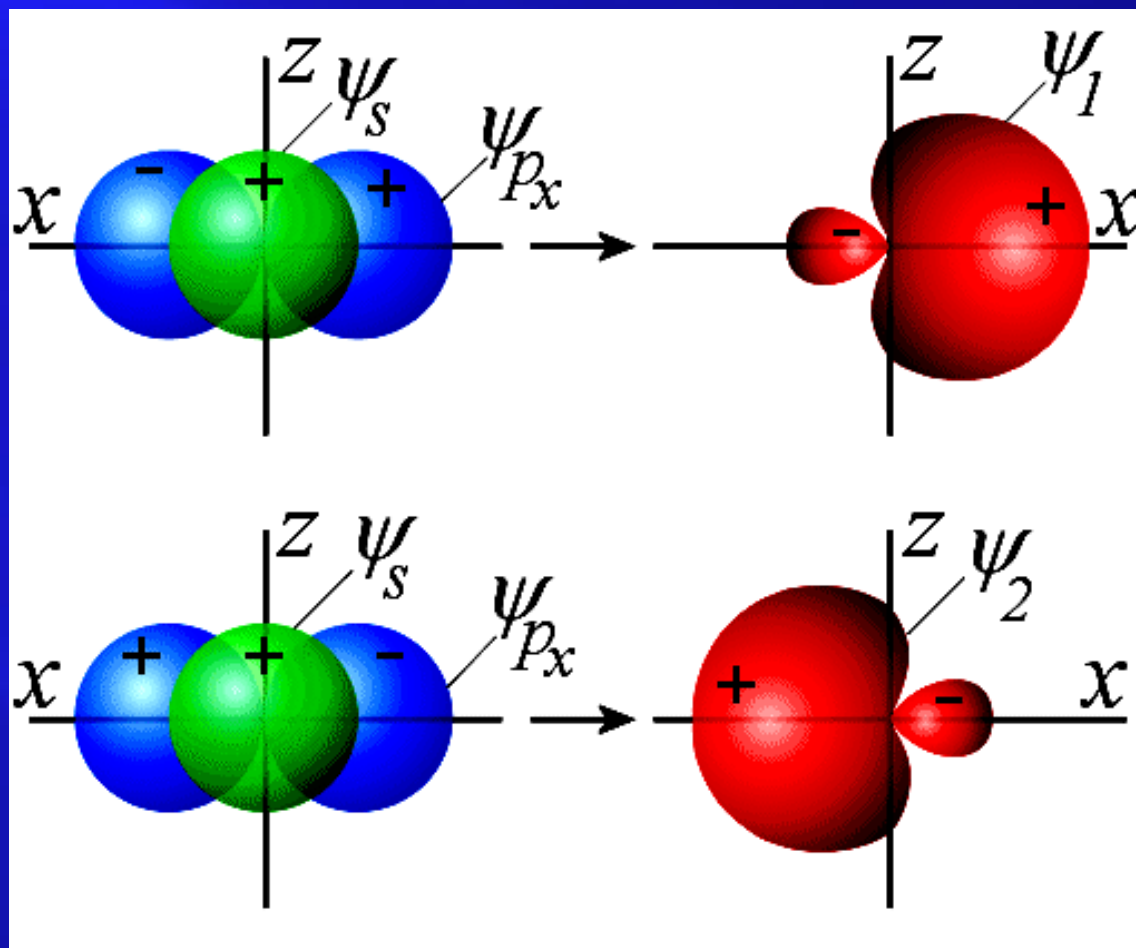
Гибридная АО



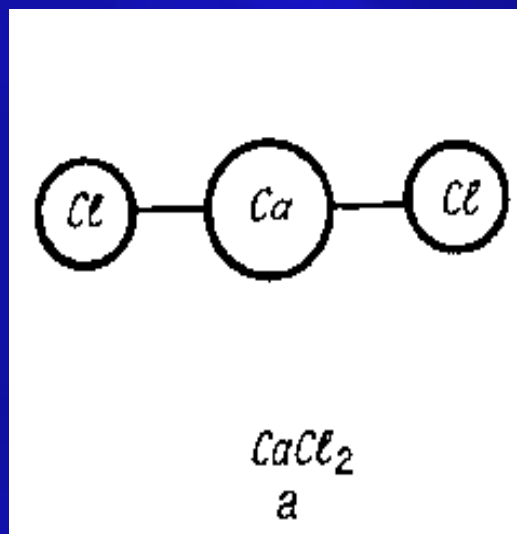
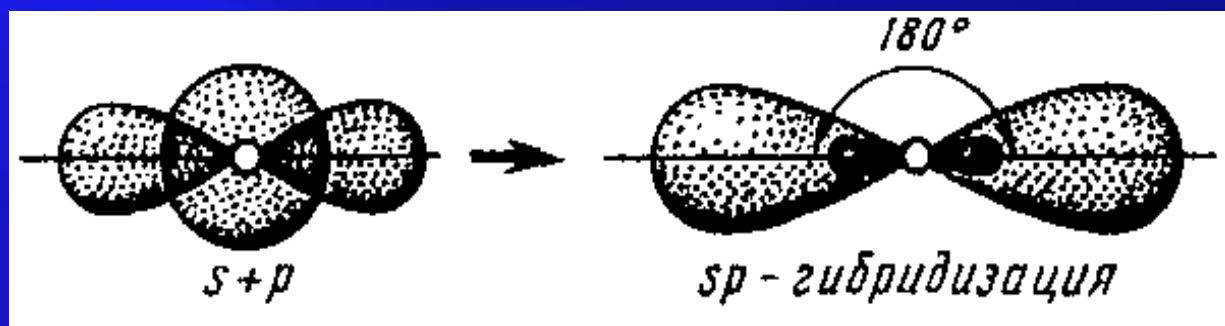
Основные положения:

1. В гибридизации могут участвовать атомные орбитали с одним электроном, атомные орбитали со спаренными электронами и очень редко свободные атомные орбитали.
2. В процессе гибридизации энергия гибридных облаков уменьшается, гибридные облака перекрываются **ТОЛЬКО по типу σ -связи**.
3. **Тип гибридизации** определяет конфигурацию молекулы.

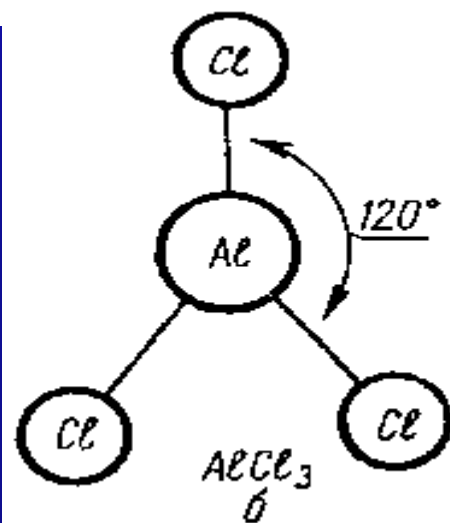
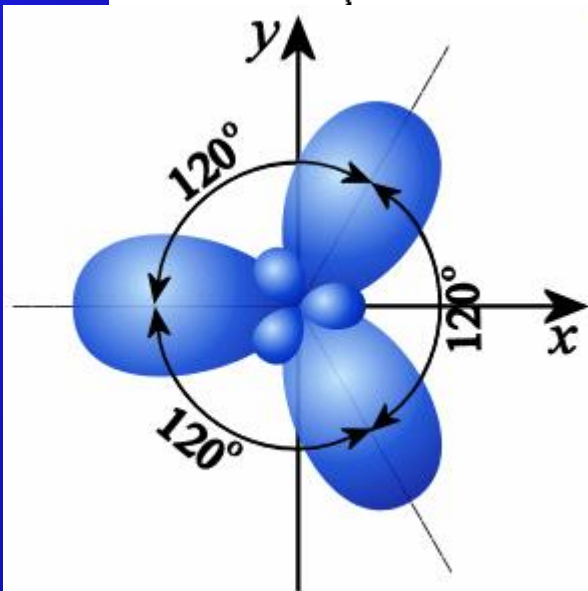
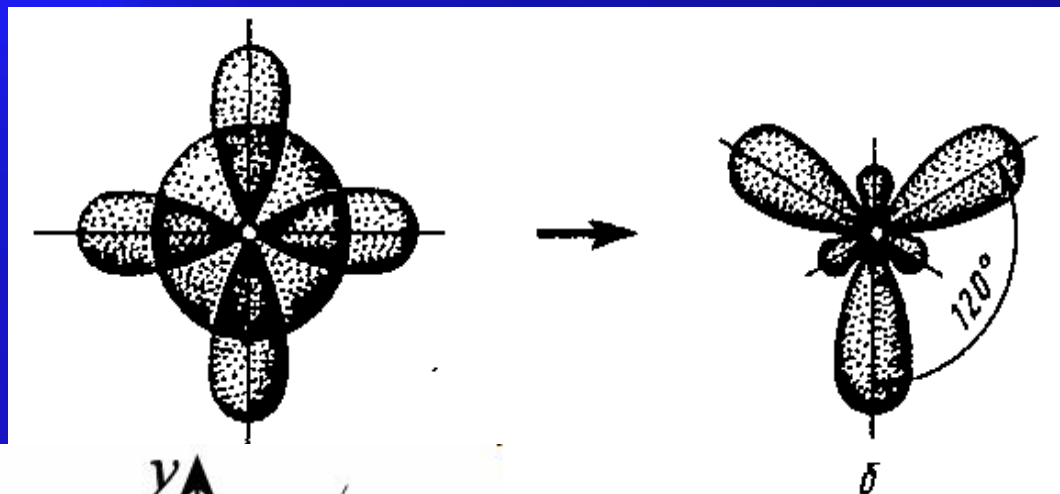
ПОСТРОЕНИЕ SP-ГИБРИДНЫХ ОРБИТАЛЕЙ ИЗ S-и P-ОРБИТАЛЕЙ



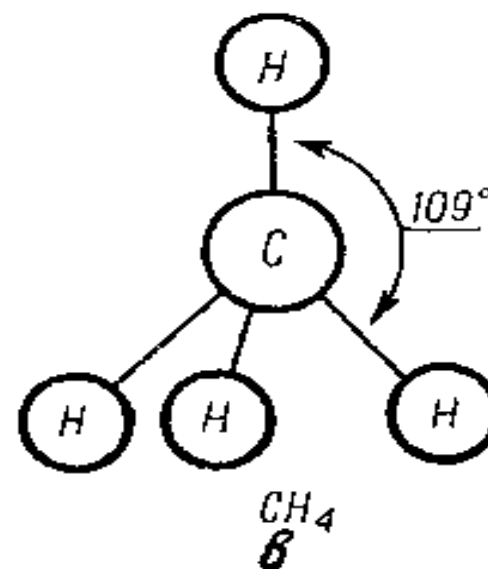
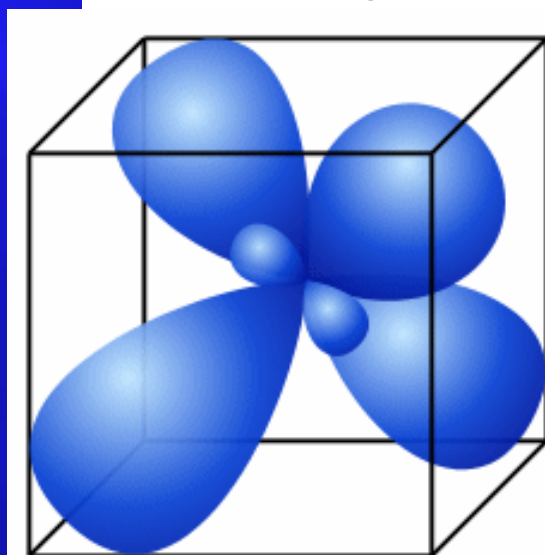
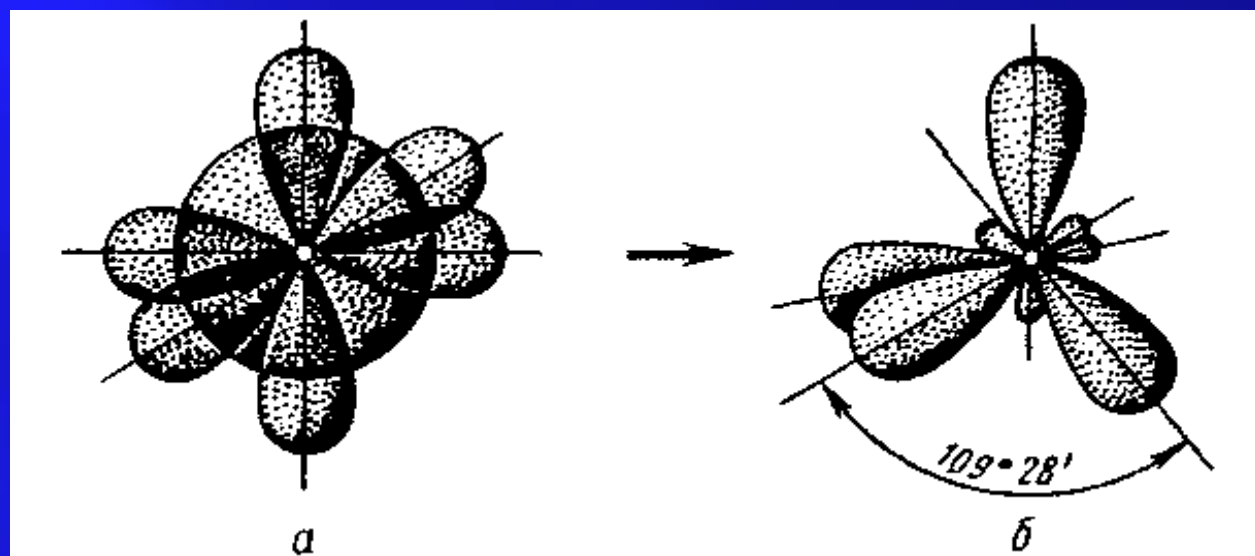
SP-гибридизация



SP^2 -гибридизация



SP^3 -гибридизация



ГИБРИДИЗАЦИЯ ВАЛЕНТНЫХ ОРБИТАЛЕЙ



$(s+p)$ - орбитали



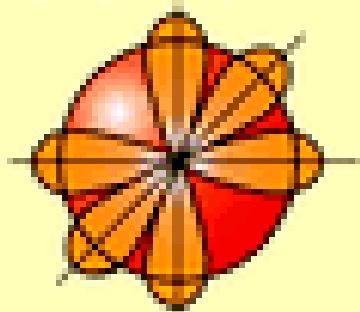
Две sp - гибридные орбитали



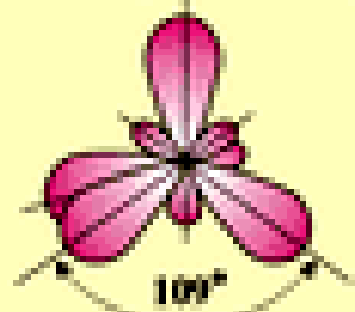
$(s+p+p)$ - орбитали



Три sp^2 - гибридные орбитали

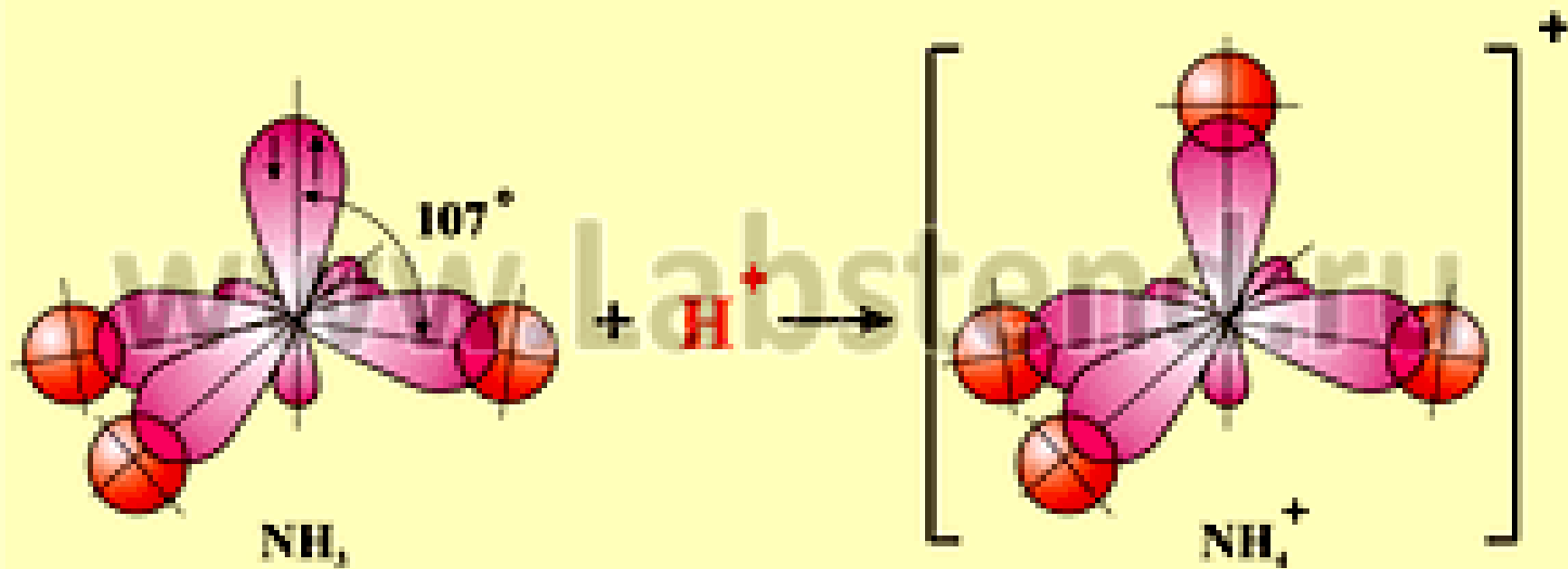


$(s+p+p+p)$ - орбитали



Четыре sp^3 - гибридные орбитали

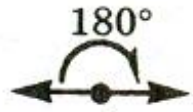



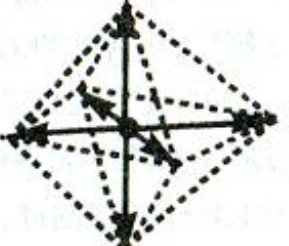
ОБРАЗОВАНИЕ ИОНА АММОНИЯ



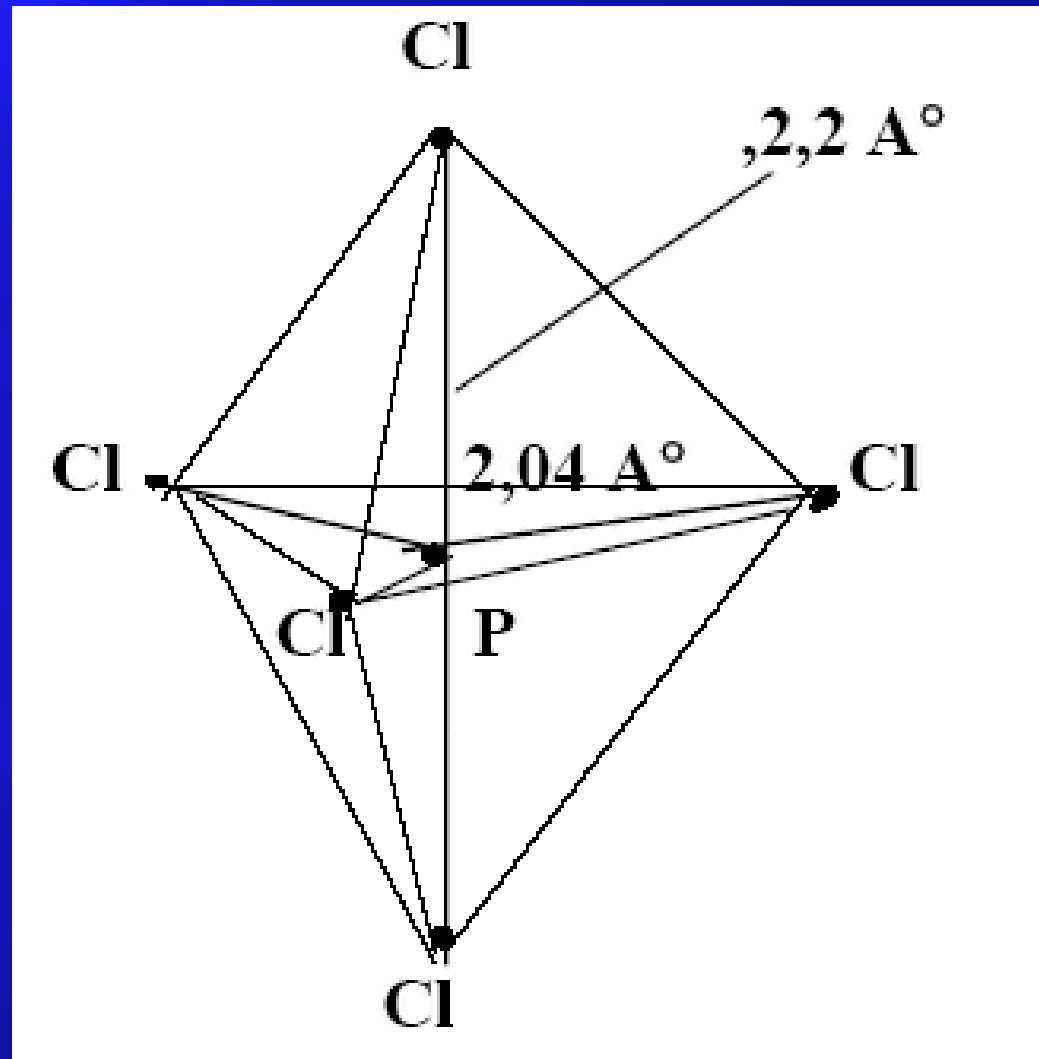
ТИПЫ ГИБРИДИЗАЦИИ

| Тип гибридизации | 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 | $90^\circ; 120^\circ$ | PCl_5 |
| sp^3d^2 | октаэдрическая | 90° | SF_6 |

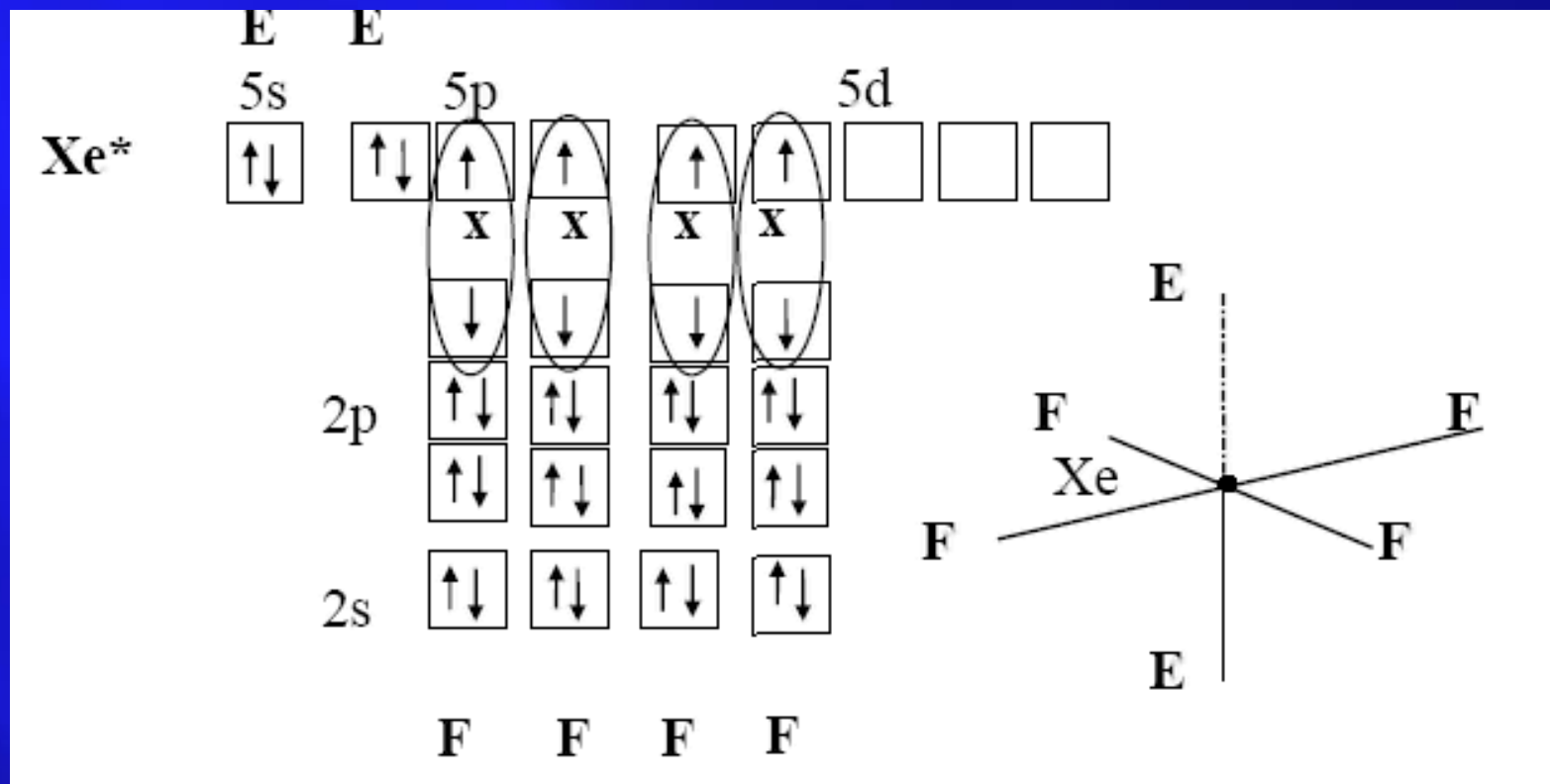
Гибридизация атомных орбиталей и расположение их осей в пространстве

| Орбитали, участвующие в гибридизации | Тип гибридизации | Пространственная форма | Примеры |
|--------------------------------------|------------------|---|--|
| s, p | sp |  <p style="text-align: center;">линейная</p> | BeCl_2 C_2H_2 $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$ |
| s, p, p | sp^2 |  <p style="text-align: center;">треугольная</p> | BF_3 C_2H_4 NO_3^- |
| s, p, p, p | sp^3 |  <p style="text-align: center;">тетраэдрическая</p> | CH_4 $[\text{BF}_4]^-$ PO_4^{3-} $[\text{NH}_4]^+$ |
| s, p, p, d | sp^2d |  <p style="text-align: center;">квадратноплоскостная</p> | $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$ $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_2\text{Cl}_2]^0$ |
| s, p, p, p, d, d | sp^3d^2 |  <p style="text-align: center;">октаэдрическая</p> | SF_6 $[\text{SiF}_6]^{2-}$ $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-}$ $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$ |

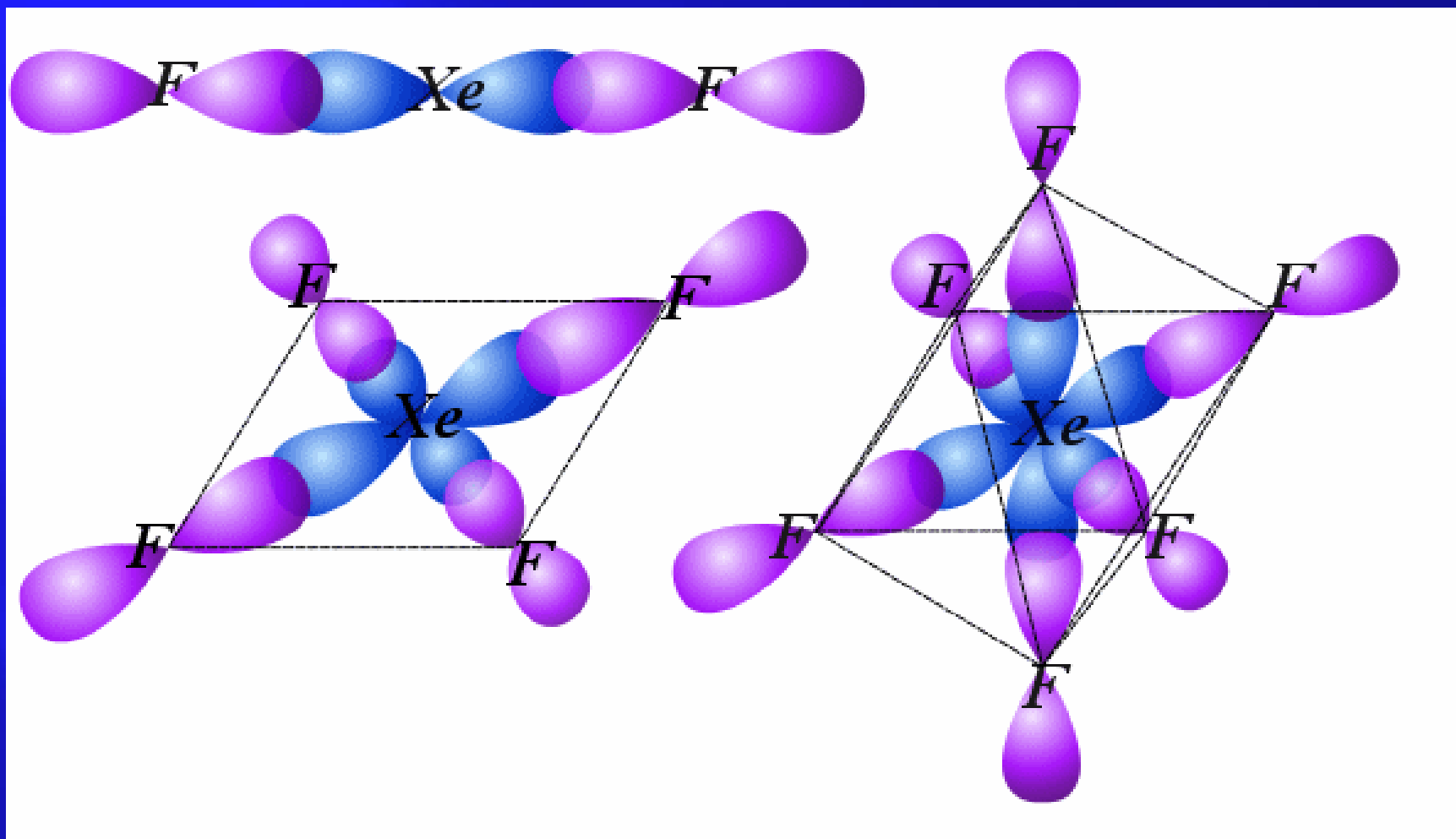
SP³d-гибридизация



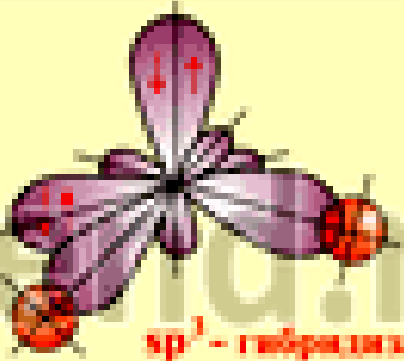
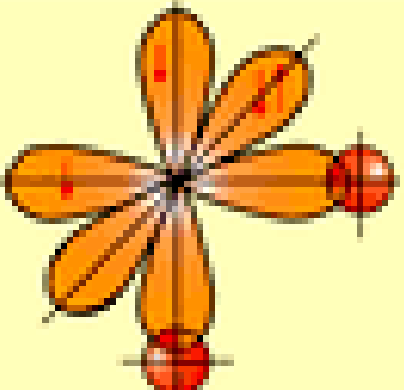
SP^3d^2 -гибридизация



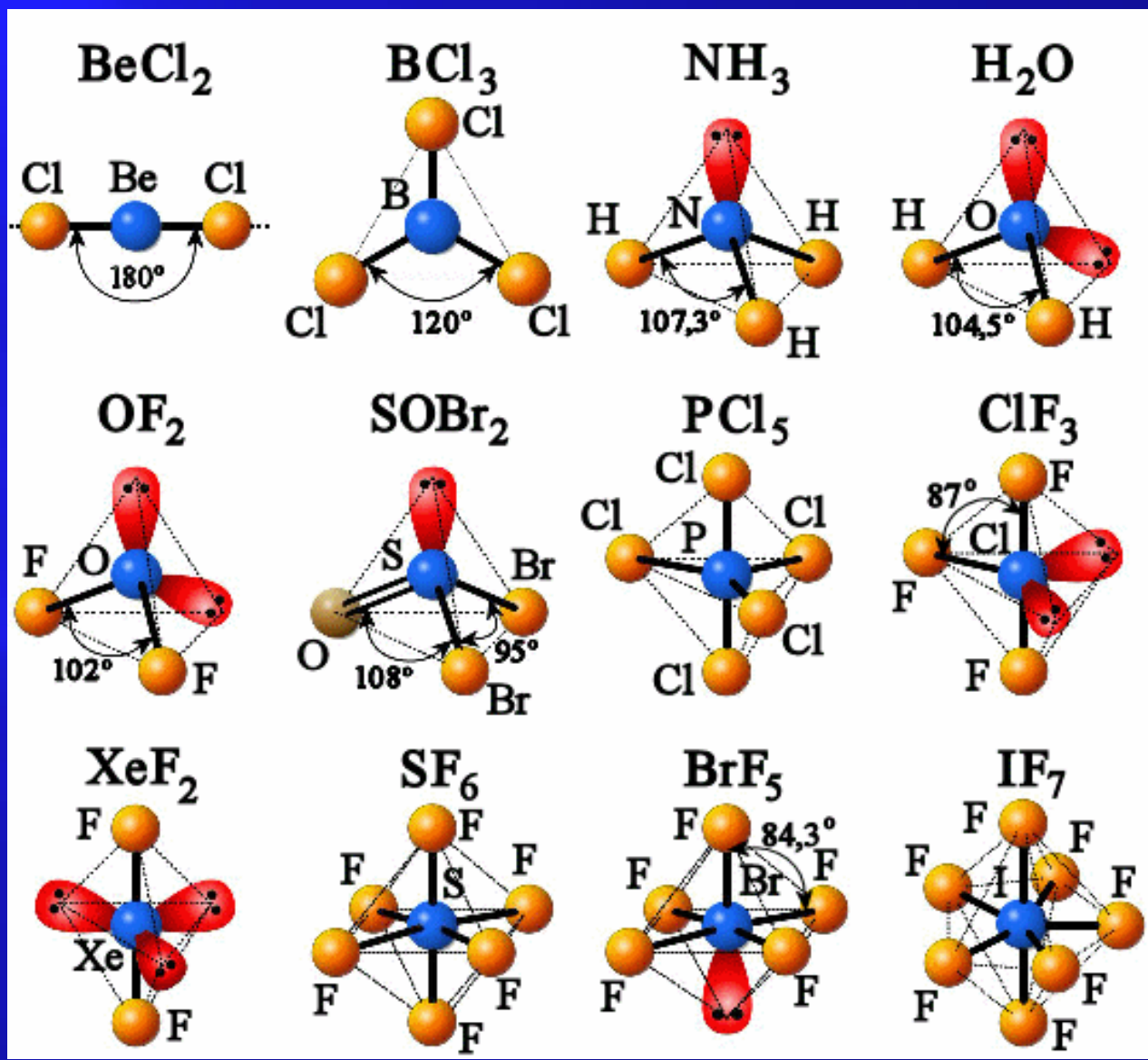
Геометрия молекул фторидов ксенона



ВАЛЕНТНЫЕ УГЛЫ И СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛ ВОДОРОДНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ЭЛЕМЕНТОВ VI A ГРУППЫ

| Соединение | Валентный угол | Строение молекулы |
|-----------------------|-----------------|---|
| H_2O | $104^\circ 27'$ |  <p style="text-align: center;">sp^3 - гибридизация</p> |
| H_2S | $92^\circ 16'$ |  |
| H_2Se | $91^\circ 0'$ | |
| H_2Te | $89^\circ 30'$ | |

Конфигурации различных молекул



Спасибо за внимание!