

# СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА

презентации к лекциям для студентов 1-го курса  
химического факультета ННГУ им. Н.И.  
Лобачевского

**Лектор:** Сулейманов Евгений Владимирович  
доктор химических наук, профессор кафедры  
химии твердого тела ХФ ННГУ

**Лекция 7. Межмолекулярное  
взаимодействие**

<https://vk.com/solstchem>

---

## Рекомендуемая литература

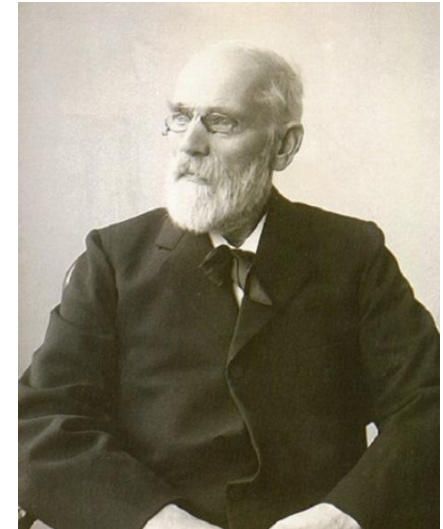
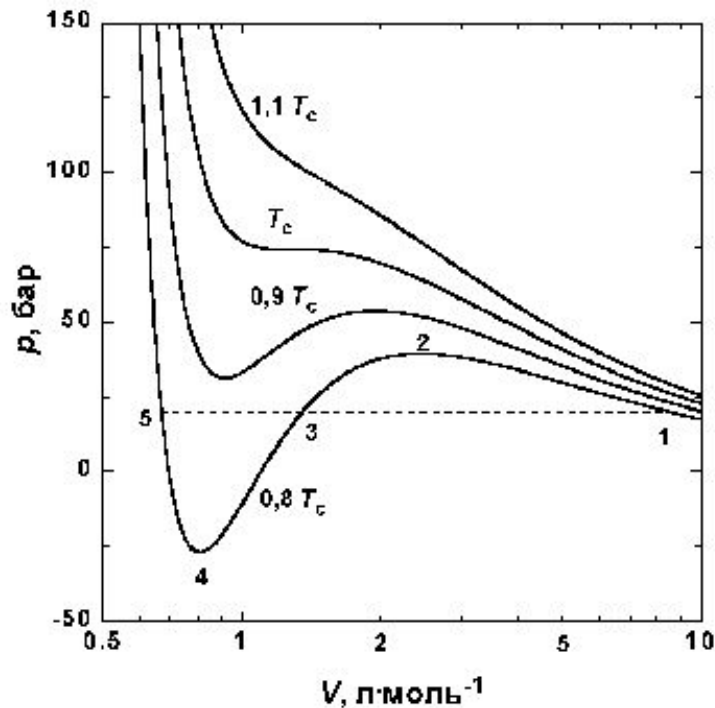
- Карапетьянц М.Х., Дракин С.И. Строение вещества. Изд. 3-е, М.: Высшая школа, 2014. 312 с.
- Краснов К.С. Молекулы и химическая связь. Изд. 2-е, М.: Высшая школа, 1984. 295с.

# Силы Ван-дер-ваальса (~1869 г.)

Уравнение состояния реального  
газа

$$\left(p + \frac{a\nu^2}{V^2}\right) (V - b\nu) = \nu RT$$

Газ	a, л <sup>2</sup> *бар* моль <sup>-2</sup>	b, см <sup>3</sup> * моль <sup>-1</sup>
He	0,03457	23,70
Ne	0,2135	17,09
Ar	1,363	32,19
Kr	2,349	39,78
Xe	4,250	51,05
CO <sub>2</sub>	3,640	42,67
H <sub>2</sub> O	5,536	30,49
H <sub>2</sub> S	4,490	42,87



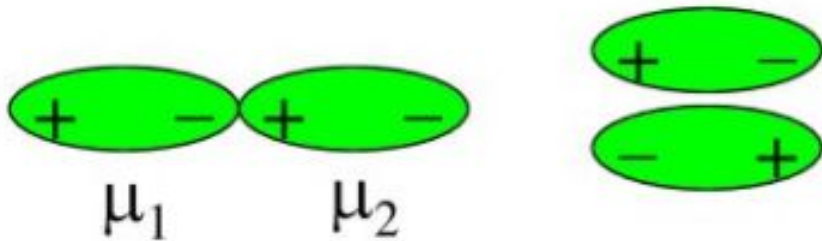
**Йоханнес Дидерик  
Ван дер Ваальс  
(1837 – 1923)**

Нобелевская  
премия по физике -  
1910 г.

# Типы межмолекулярного взаимодействия

<b>Специфические взаимодействия</b>	<b>Неспецифические взаимодействия</b>
<ul style="list-style-type: none"><li>- имеют пространственную направленность</li><li>- обусловлены наличием определённых атомов и их групп</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>- равнонаправлены во все стороны</li><li>- существуют независимо от состава структуры химической частицы</li></ul>
<ul style="list-style-type: none"><li>• водородные связи</li><li>• ориентационное взаимодействие</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>• индукционное взаимодействие</li></ul>
<ul style="list-style-type: none"><li>• галогенные (<math>\sigma</math>-дырочные) связи</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>• дисперсионное взаимодействие</li></ul>
<ul style="list-style-type: none"><li>• стэкинг-взаимодействие</li><li>• (<math>\pi/\rho</math>-<math>\pi</math>-взаимодействие, ароматическое взаимодействие)</li></ul>	
<ul style="list-style-type: none"><li>• донорно-акцепторное взаимодействие</li><li>• комплексообразование</li></ul>	

# Ориентационное взаимодействие (эффект Кeesома)



$$u_{op} = -\frac{2\mu_1^2\mu_2^2}{3r^6} \cdot \frac{1}{kT}$$

5-10  
кДж/моль

$\mu_1$  и  $\mu_2$  - дипольные моменты обеих молекул,

$r$  - расстояние между центрами диполей,

$kT$  - энергия микроброуновского движения (постоянная Больцмана и абсолютная температура).

# Ориентационное взаимодействие (водородная СВЯЗЬ)

## Классические

### Доноры протона

- OH, NH<sub>2</sub>, SH, COOH, NH, H<sub>2</sub>O

### Акцепторы протона

- C=O, COOH, OH, C=N, C=S, H<sub>2</sub>O, F, Cl, P=O, P-OR

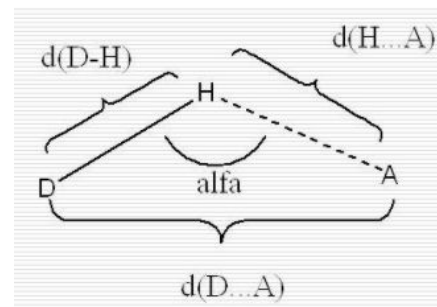
## Неклассические

### Доноры протона

- C-H, B-H

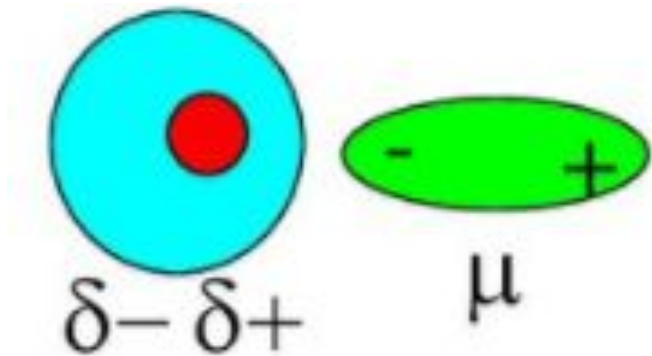
### Акцепторы протона

- NH<sub>2</sub>, π-система, H<sup>-</sup> (гидрид ион)



Тип водородной связи	Интервалы изменения параметров	
	$d(\text{H}\dots\text{A}), \text{\AA}$	$\alpha(\text{D-H}\dots\text{A}), \text{град.}$
Сильные	$d < 1.7 \text{\AA}$	$\alpha > 160^\circ$
Средние	$d = 1.7 - 2.2 \text{\AA}$	$\alpha > 120^\circ$
Слабые	$d > 2.2 \text{\AA}$	$\alpha > 110^\circ$

# Индукционное взаимодействие (эффект Дебая)

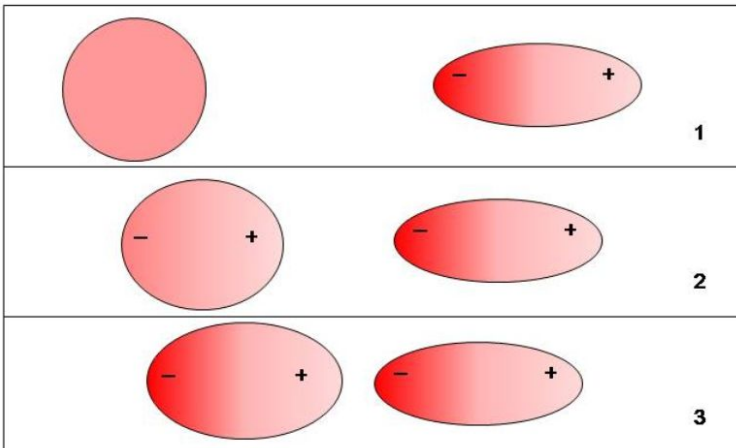


$$U_{\text{ин}} = -\frac{2a_1\mu_1^2 + a_2\mu_2^2}{r^6}$$

$\mu_1$  и  $\mu_2$  - дипольные моменты молекул,

$a_1$  и  $a_2$  - поляризуемость молекул,

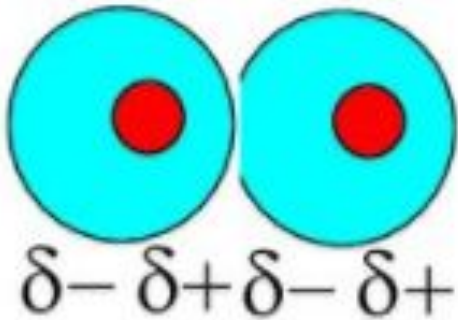
$r$  - расстояние между диполями.



№1 – исходный диполь

№2 - наведённый диполь

# Дисперсионное взаимодействие (эффект Лондона)



«МГНОВЕННЫЕ ДИПОЛИ»

$$u_{\text{дис}} = -\frac{3}{4} \cdot \frac{\alpha^2 \hbar \nu_0}{r^6}$$

$\alpha$  - поляризуемость атома,

$\hbar$  - постоянная Планка,

$\nu_0$  - частота дисперсионного спектра колебаний атома,

$r$  - расстояние между атомами.

Формула Лондона 
$$u_{\text{дис}} = -\frac{3\alpha_A\alpha_B I_A I_B}{2(I_A + I_B)} r^6$$

Формула Дж.Слетера и Дж.Кирквуда 
$$u_{\text{дис}} = -\frac{3}{4} \frac{\hbar e}{r^6} \sqrt{\frac{N\alpha^3}{m}}$$



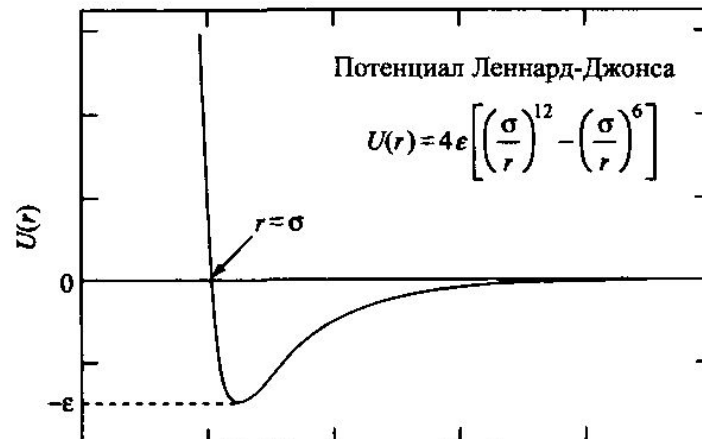
# Силы Ван-дер-Ваальса

- Учёт сил отталкивания
- Описание с помощью «потенциалов»

Вещество	$\mu$ , Д	$E_{ор}$ , %	$E_{инд}$ , %	$E_{дис}$ , %	$T_{кип}$ , К	$E_{VDW}$ , кДж/моль
Ar	0	0	0	100	87,29	5,77
NH <sub>3</sub>	1,46	44,9	5,3	49,8	239,5	15,5
H <sub>2</sub> O	1,86	76,9	4,1	19,0	373,15	38,01

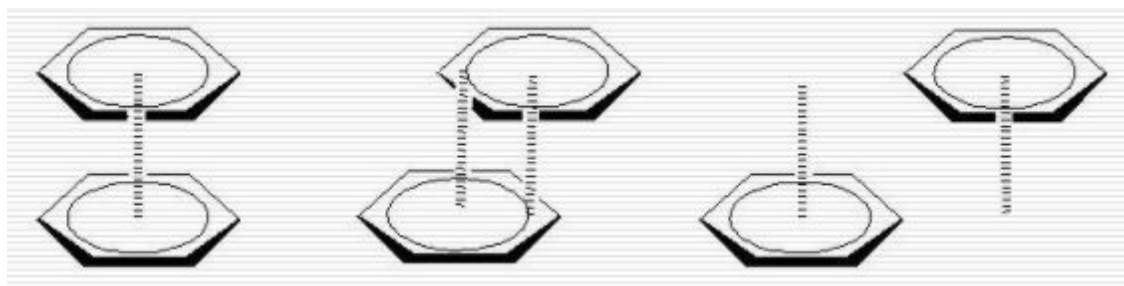
## Виды ММВ:

- диполь-диполь: вода
- диполь – неполярная молекула: неполярное в полярном
- неполярная молекула – неполярная молекула: неполярное в неполярном



# $\pi/\pi$ -взаимодействие

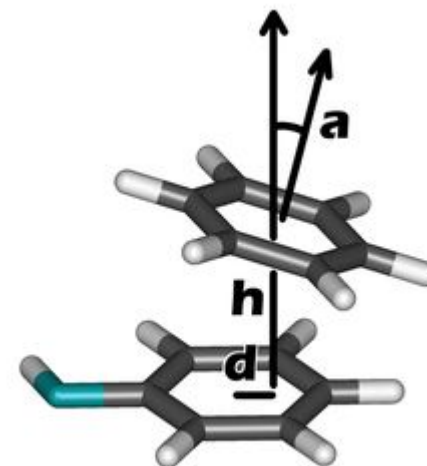
Стэкинг взаимодействия – это взаимодействие двух планарных или квази-планарных сопряженных систем между собой.



есть

есть

нет

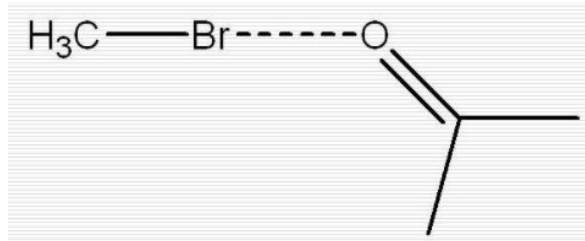


Энергия стэкинг-взаимодействия зависит от:

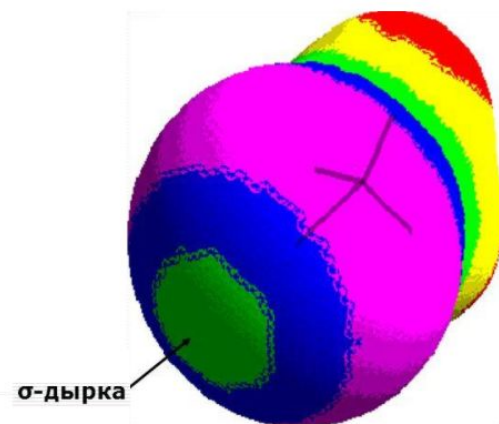
- Расстояния между плоскостями взаимодействующих фрагментов (3.2-3.5 Å);
- Угла между этими плоскостями (0-15°);
- Степени перекрытия взаимодействующих фрагментов (50-100%).

# Галогенные ( $\sigma$ -дырочные) связи

Галогенные ( $\sigma$ -дырочные) связи образуются в результате взаимодействия атомов галогенов с донорами электронов.



- ❑ Расстояние между атомом галогена и донором электронов заметно меньше суммы ван-дер-Ваальсовых радиусов
- ❑ Угол C-Hal...D больше  $140^\circ$ .
- ❑ В качестве донора электронов могут выступать гетероатомы с неподеленной парой и  $\pi$ -системы ароматических циклов и кратных связей



Электростатический потенциал в молекуле  $\text{CH}_3\text{Br}$ . Зеленым цветом показана область положительного электростатического потенциала.