ГОУ ВПО «Донбасская Национальная академия строительства и архитектуры»,
кафедра «Прикладная химия»
Курс лекций по дисциплине «Химия»
для студентов 1 курса
Направление подготовки – 08.03.01 Строительство

Лекция №3
«Химическая связь»

Составил:
Ташкинов Ю.А.

Макеевка, 2019

План занятия

1. Характеристики химических связей
2. Типы химических связей
3. Методы описания химической связи
4. Гибридизация атомных орбиталей. Пространственная форма молекулы

Учение о химической связи - основа теоретической химии.

Фундаментальной основой химической связи явилась теория химического строения А.М. Бутлерова (1861 г.): свойства соединений зависят от природы и числа составляющих их частиц и химического строения.

Под **химической связью** понимаются различные виды взаимодействий, обуславливающие устойчивое существование двух- и многоатомных соединений: молекул, ионов, кристаллических и иных веществ.

Изображение ХС

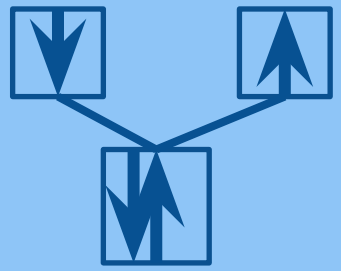
с помощью **электронов в виде точек**, поставленных у знака химического элемента

H° + **°H** ⟶ **H : H**

в виде **черточки**, которая символизирует пару электронов **H** ---- **H**

с помощью квантовых **ячеек**

или



Валентность – способность атомов одного элемента соединяться с определенным количеством атомов другого элемента (для количественного определения за единицу приняли валентность водорода).

Степень окисления – это условный электрический заряд, который имел бы атом, если бы все валентные электроны в молекуле перешли бы к более электроотрицательному атому, а электронные пары, принадлежащие одинаковым атомам, были бы поделены между ними.

К основным чертам химической связи можно отнести:

а) снижение общей энергии двух- или многоатомной системы по сравнению с суммарной энергией изолированных частиц, из которых эта система образована;

б) перераспределение электронной плотности в области химической связи по сравнению с простым наложением электронных плотностей несвязанных атомов, сближенных на расстояние связи.

По своей природе химическая связь представляет собой взаимодействие между положительно заряженными ядрами и отрицательно заряженными электронами, а так же электронов друг с другом.

Свойства ковалентной связи.

Длина связи – это межъядерное расстояние (нм).

Энергия связи – количество энергии, которое необходимо для разрыва связи; (кДж/моль).

Насыщенность – способность атомов образовывать ограниченное число ковалентных связей.

Направленность связи обусловливает пространственную структуру молекул, т.е. их геометрию.

Характеристики ХС

- **Длина химической связи** (*l* св) - **расстояние между ядрами атомов в соед-ях**
- **В однотипных соед-ях длина связи закономерно изменяется:**

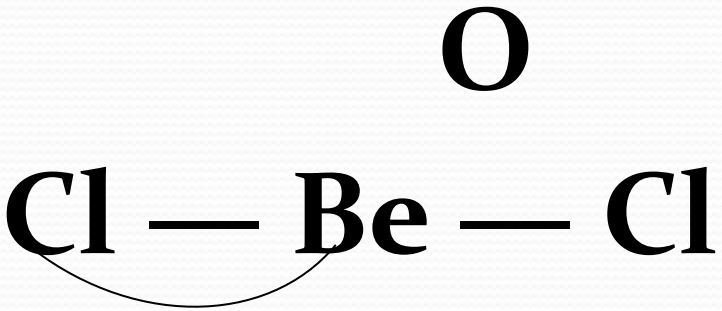
HF – HCl – HBr – HI

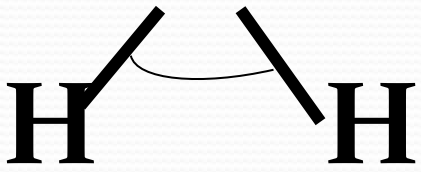
длина связи возрастает

- **Энергия связи ($E_{св}$)** – это энергия, выделяющаяся при образовании хим. связи или расходуемая на её разрыв
- **Взаимосвязь $E_{св}$ и $l_{св}$:**

Молекула	HF	HCl	HBr	HI
$l_{св}$, нм	0,092	0,128	0,142	0,162
$E_{св}$ кДж/моль	566	432	366	298

- **Валентный угол** образован воображаемыми линиями, соединяющими центры взаимодействующих атомов





$\alpha = 180^{O}$ $\alpha = 104{,}5^{O}$

- **Дипольный момент** – колич-ная характеристика полярности связи (измеряется в дебаях) [Кл · м]

$$\mu = q \cdot l_{дип}$$

q– заряд полюса [Кл]

$l_{дип}$ – длина диполя [м]

Дебай (D):1D = $3{,}33 \cdot 10^{-3}$ Кл · м

- **Правило октета**. В результате образования химической связи атомы могут приобретать такую же электронную конфигурацию, как у благородных газов, которые (за исключением гелия) имеют на внешней оболочке восемь (октет) электронов. Стремление к созданию такой устойчивой электронной конфигурации получило название правило октета. Это справедливо как для ионной, так и ковалентной связей.

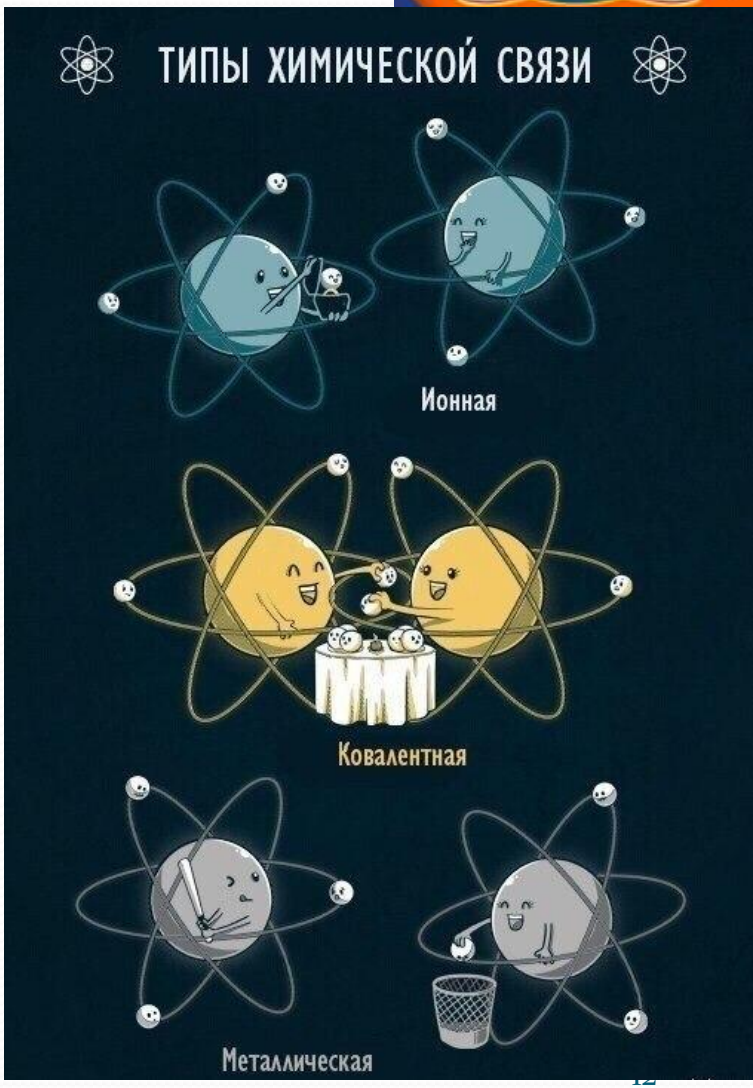


Таблица Полинга (ЭО)

H 2.20																	He n.a.
Li 0.98	Be 1.57											B 2.04	C 2.55	N 3.04	O 3.44	F 3.98	Ne n.a.
Na 0.93	Mg 1.31											Al 1.61	Si 1.90	P 2.19	S 2.58	Cl 3.16	Ar n.a.
K 0.82	Ca 1.00	Sc 1.36	Ti 1.54	V 1.63	Cr 1.66	Mn 1.55	Fe 1.83	Co 1.88	Ni 1.91	Cu 1.90	Zn 1.65	Ga 1.81	Ge 2.01	As 2.18	Se 2.55	Br 2.96	Kr 3.00
Rb 0.82	Sr 0.95	Y 1.22	Zr 1.33	Nb 1.60	Mo 2.16	Tc 1.90	Ru 2.20	Rh 2.28	Pd 2.20	Ag 1.93	Cd 1.69	In 1.78	Sn 1.96	Sb 2.05	Te 2.10	I 2.66	Xe 2.60
Cs 0.79	Ba 0.89	La 1.10	Hf 1.30	Ta 1.50	W 2.36	Re 1.90	Os 2.20	Ir 2.20	Pt 2.28	Au 2.54	Hg 2.00	Tl 1.62	Pb 2.33	Bi 2.02	Po 2.00	At 2.20	Rn n.a.
Fr 0.70	Ra 0.89	Ac 1.10	Rf n.a.	Db n.a.	Sg n.a.	Bh n.a.	Hs n.a.	Mt n.a.	Ds n.a.	Rg n.a.	Uub n.a.	—	Uuq n.a.	—	—	—	—

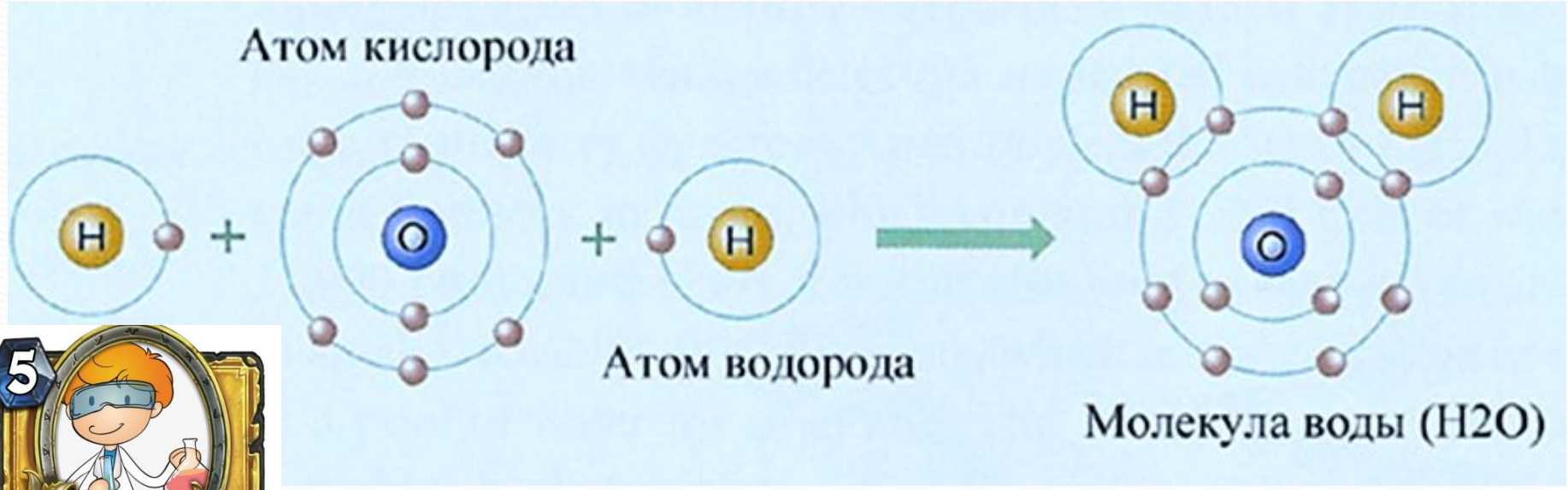
Типы ХС

- $\Delta\chi=0$ эВ – неполярная связь КНПС
- $\Delta\chi<0{,}5$ эВ – малополярная КС (МКПС)
- $\Delta\chi\approx0{,}5\div1{,}0$ эВ – среднеполярная срПКС
- $\Delta\chi\approx1{,}0\div2{,}0$ эВ – сильнополярная СКПС
- $\Delta\chi>2{,}0$ эВ – ионная связь

Ковалентная связь.

Химическая связь – это связь, возникающая между атомами за счет образования общих электронных пар.

Смысл связи – приобретение атомами химических элементов энергетически устойчивой электронной конфигурации из восьми электронов (для атома водорода из двух).



Механизмы ковалентной связи.

Ковалентная связь

Донорно-акцепторный

Обменный

Полярная связь

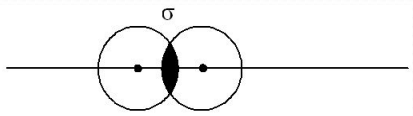
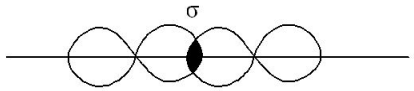
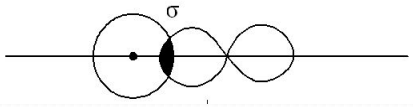
Неполярная связь

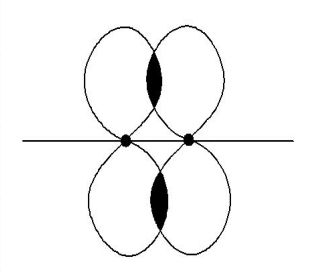
Обменный механизм: за счет перекрывания электронных облаков.

Донорно-акцепторный механизм: за счет двухэлектронного облака донора и свободной орбитали акцептора.

Способы перекрывания электронных облаков.

σ– связь – перекрывание электронных облаков вдоль оси, соединяющей центры атомов.

H-H	*s-s*	
Cl-Cl	*p-p*	
H-Cl	*s-p*	



π – связь, возникающая между атомами, когда перекрывание электронных облаков происходит по обе стороны от линии, соединяющей ядра обоих атомов.

Если в атоме больше свободных валентных электронов, чем 1, то такие образования – σ-связи, остальные облака перекрываются вне линии связи, но в плоскостях, проходящих через линию связи

Обменный механизм.

за счет перекрывания электронных облаков

неполярная ковалентная связь – электронное облако, образованное общей парой электронов, распределяется в пространстве

H:H

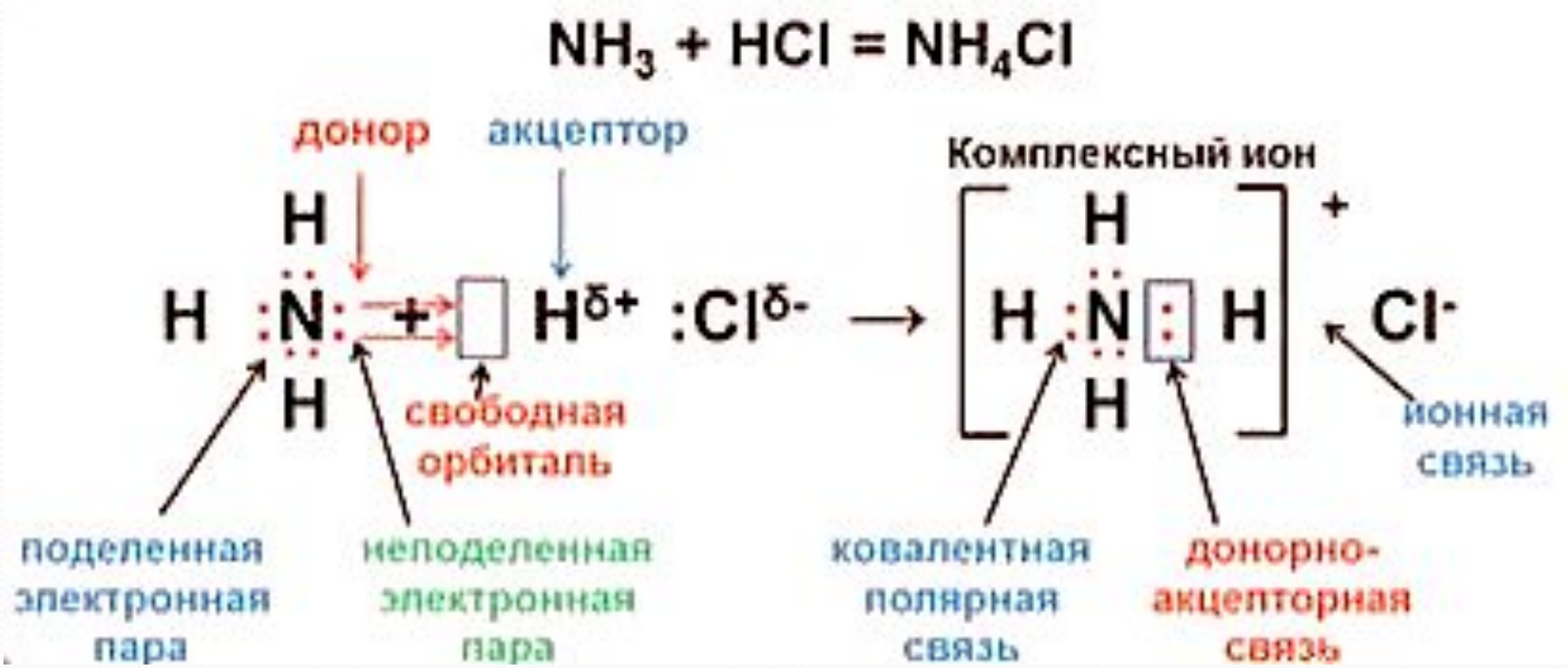
H_2; Cl_2; N_2; O_2

полярная ковалентная связь – электронное облако связи смещено к атому с большей электроотрицательностью

H:Cl

HCl; H_2O; H_2S

Донорно-акцепторная связь



Свойства ковалентной связи

- Насыщаемость –это способность атомов участвовать в образовании ограниченного числа ковалентных связей.
- Направленность –взаимная ориентация электронных облаков.
- Поляризуемость –определяется величиной электроотрицательности атомов

Кратность ковалентной связи.

Одинарная C – C, H – H

(в молекуле H_2)

Двойная C = C, O = O

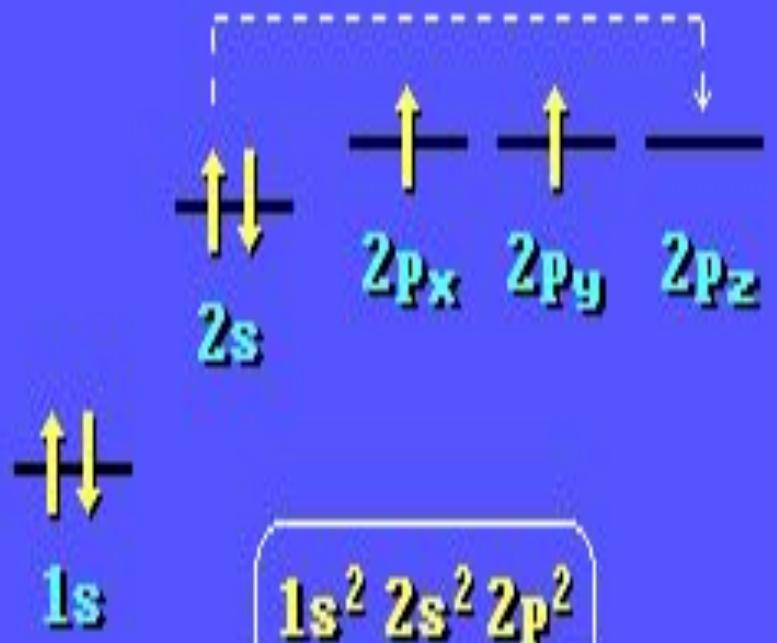
(в молекуле O_2)

Тройная C ≡ C, N ≡ N

(в молекуле N_2)

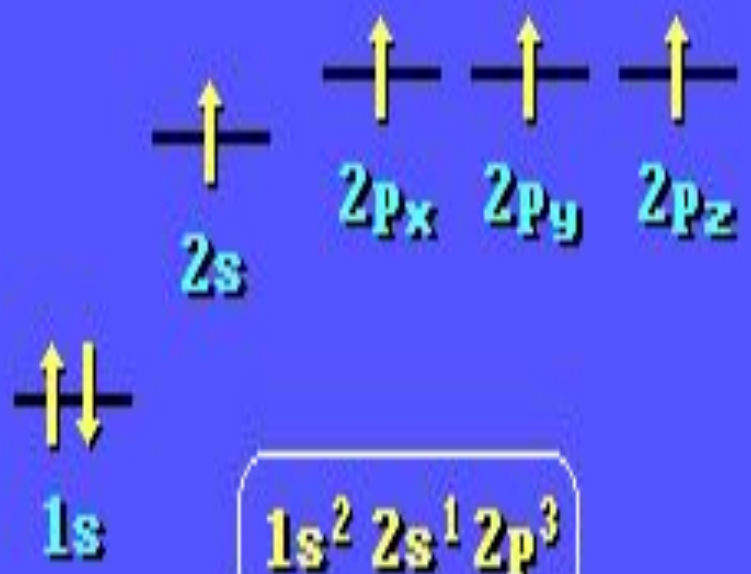
СОСТОЯНИЯ АТОМА УГЛЕРОДА

Невозбужденное (основное) состояние



$1s^2\,2s^2\,2p^2$

Возбужденное состояние

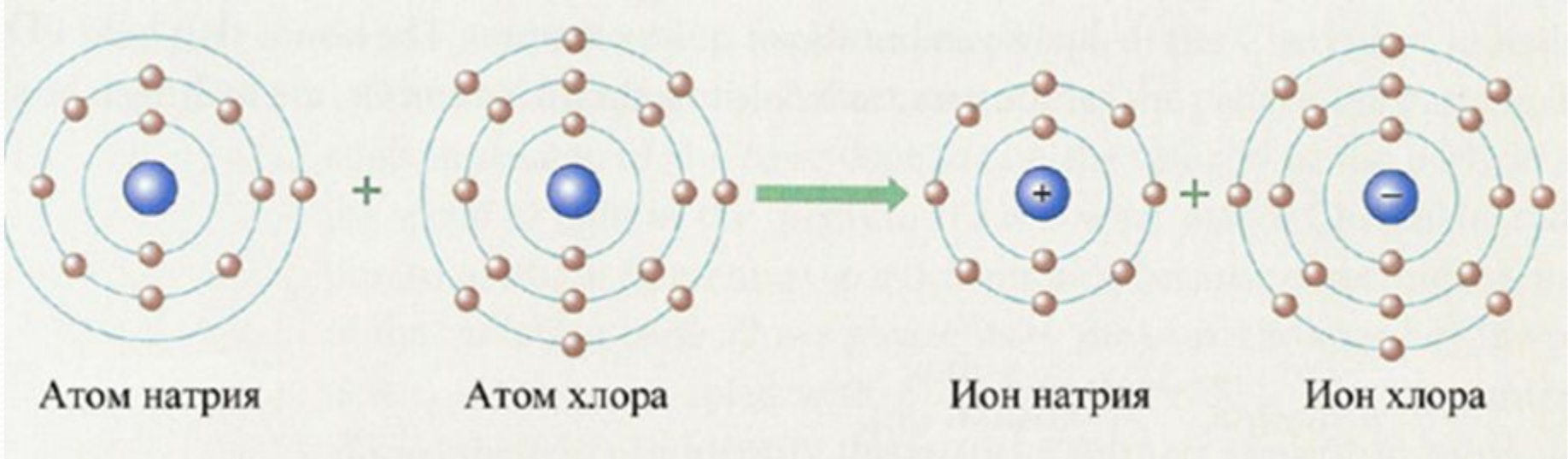


$1s^2\,2s^1\,2p^3$

Ионная химическая связь

Ионная или **электровалентная связь** – химическая связь между ионами, осуществляемая электростатическим притяжением.

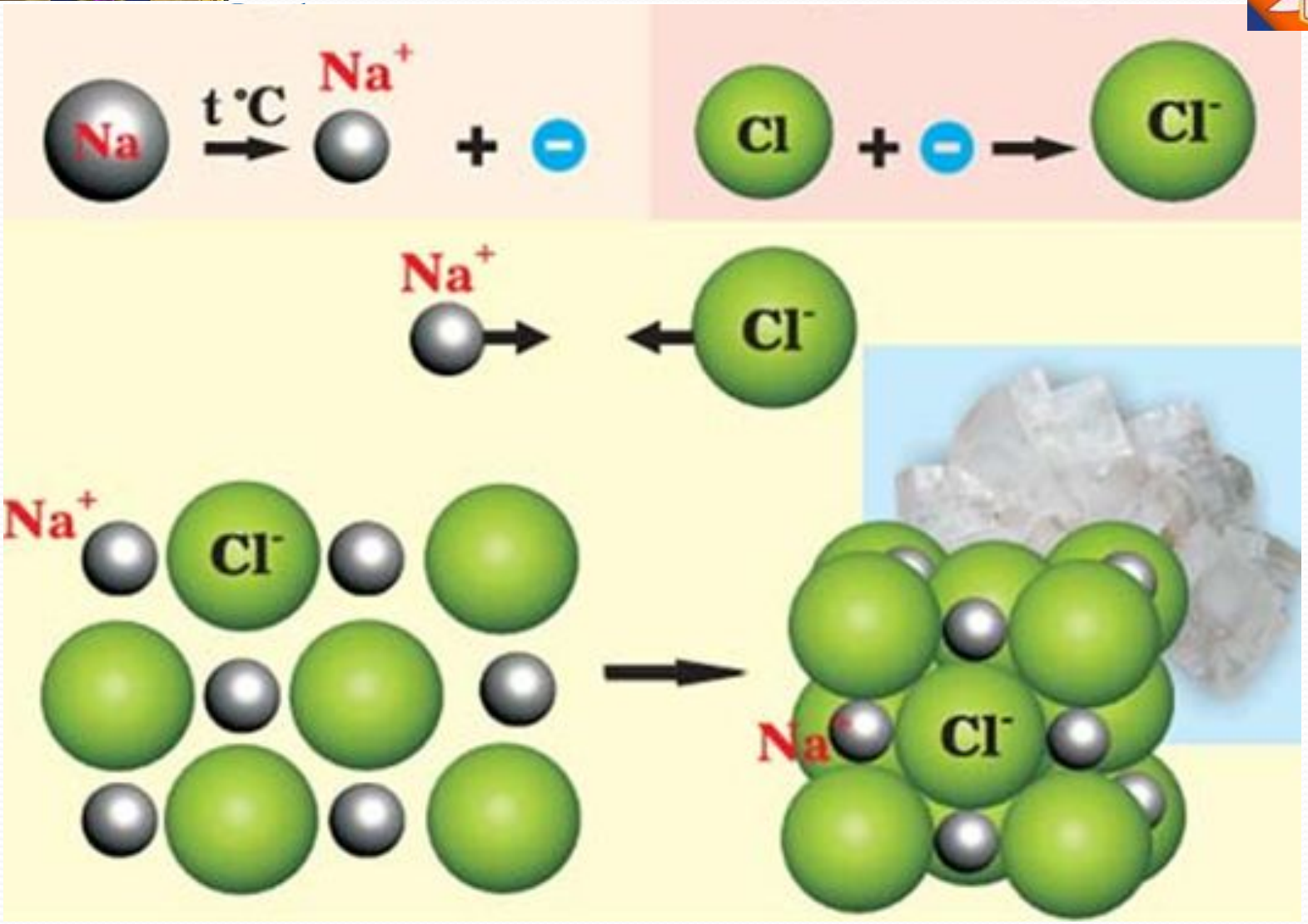
Образуется между атомами, которые сильно различаются по электроотрицательности.



Большой мешок, подарков груз
Несет Ион своим подругам:
Для КАТИ ОН несет свой плюс,
Для АНИ ОН несет свой минус

5
Прикладная химия

DOCENDO DISCIMUS

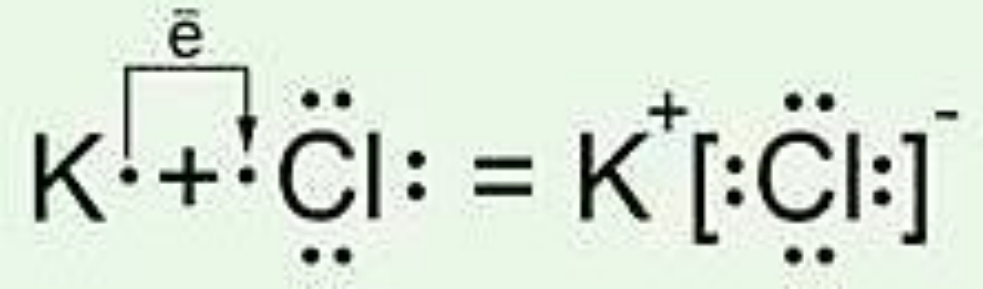

Na
t °C
Na+
+
Cl
+
Cl-
Na+
Cl-
Na+
Cl-
Na+
Cl-

Свойства ионной ХС

Ненаправленность. Каждый ион, представляющий как бы заряженный шар, может притягивать ион противоположного знака по любому направлению.

Ненасыщаемость. Взаимодействие ионов противоположного знака не приводит к компенсации силовых полей способность притягивать по другим по другим направлениям остается.

Изображение ХС



$$Na^0 - 1\,e^- \longrightarrow Na^+$$

атом ион

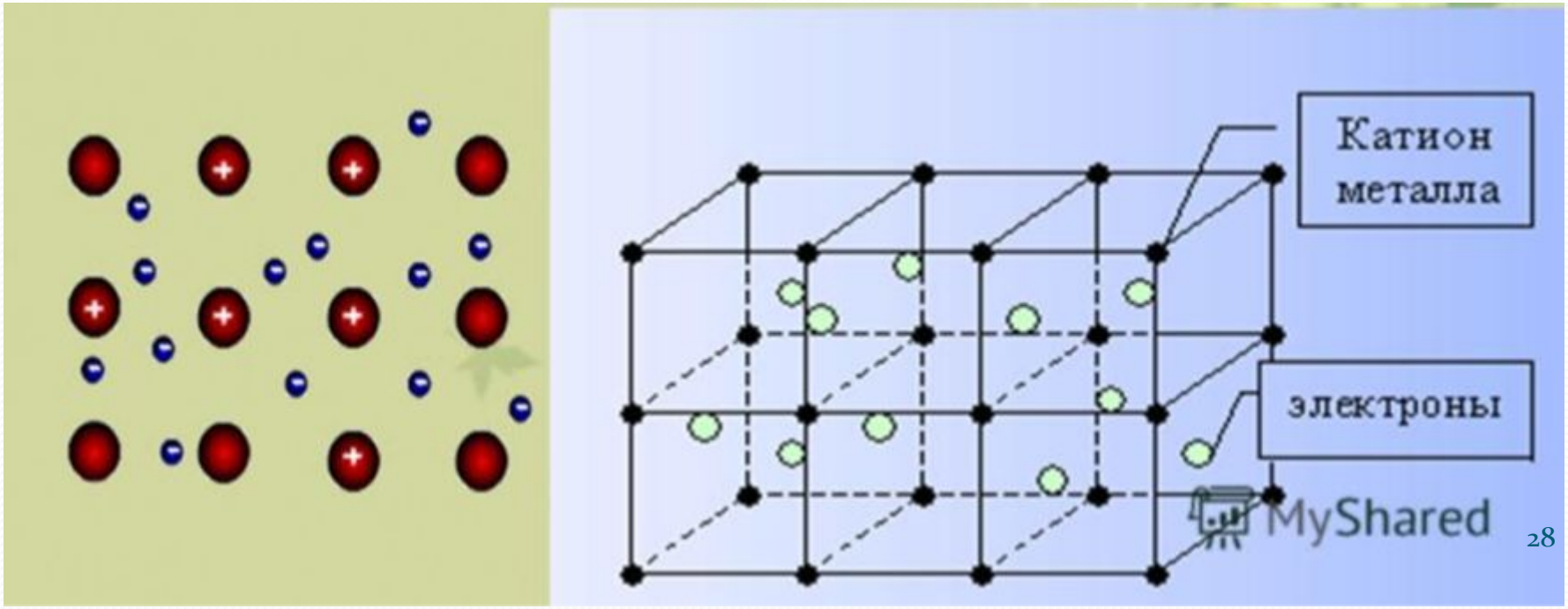
$$O^0 + 2\,e^- \longrightarrow O^{2-}$$

атом ион

$$2Na^0 + O^0 \xrightarrow{2e} Na_2^+O^{2-} \longrightarrow Na_2O$$

Металлическая ХС

Связь, которую осуществляют относительно свободные электроны между ионами или атомами металлов в кристаллической решетке – называется **металлической.**

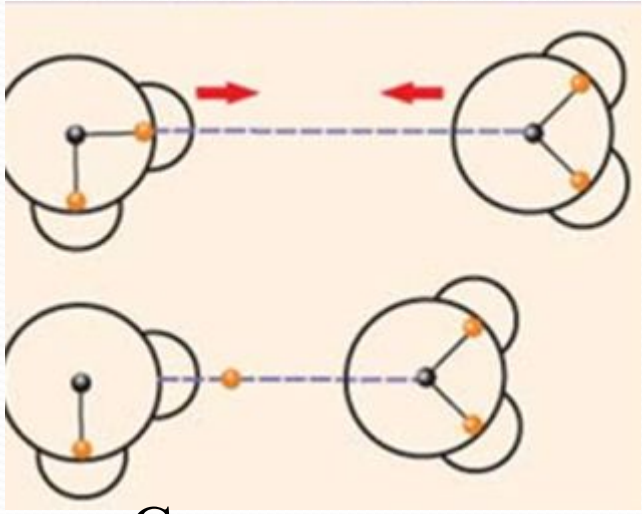


Особенности металлической связи.

Металлическую связь образуют элементы, атомы которых на внешнем уровне имеют мало валентных электронов по сравнению с общим числом внешних энергетически близких орбиталей.

1. Валентные электроны из-за небольшой энергии ионизации слабо удерживаются в атоме.
2. Электроны, осуществляющие связь, обобществлены («электронный газ») и перемещаются по всему куску металла, в целом электронейтрального.
3. Металлическая связь характерна для металлов твердом и жидком состоянии.

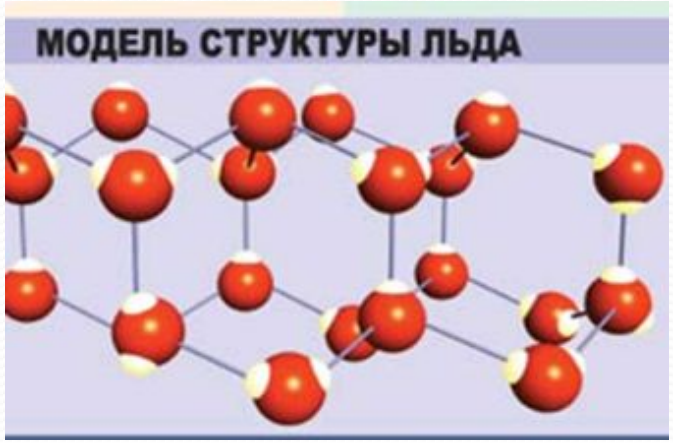
Водородная ХС



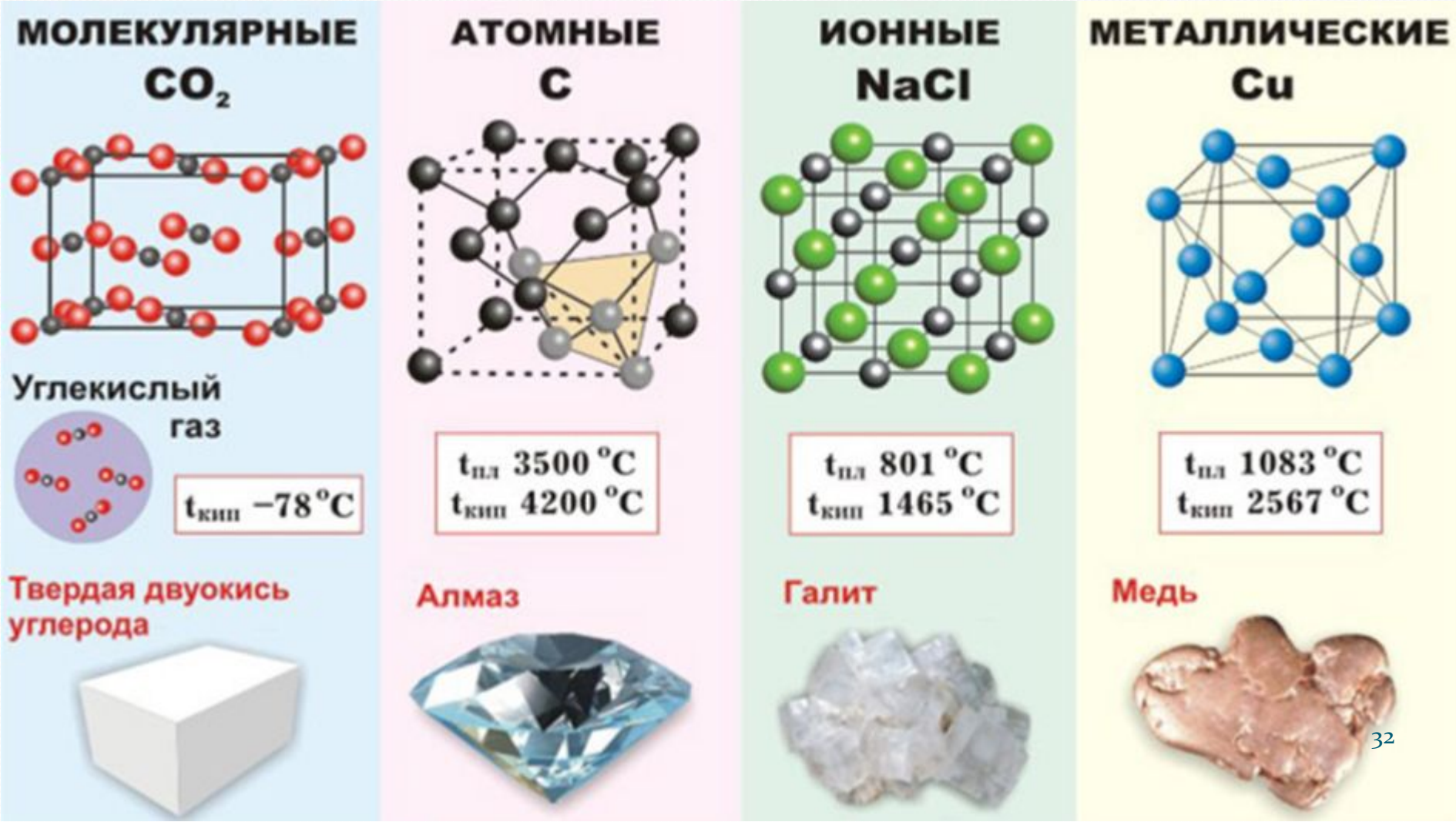
Связь между атомом водорода , соединенным с атомом сильно электроотрицательного элемента, одной молекулы и сильно электроотрицательными элементами другой молекулы – называется **водородной.**

Оосбенности водородной связи

1. Связь относится к межмолекулярной; возможно образование внутримолекулярной водородной связи.
2. Водородная связь вторая по образованию в веществе, поэтому более слабая.
3. Тем не менее она ответственна за ассоциацию молекул.
4. Водородная связь оказывает влияние на свойства вещества, т.к. нужна дополнительная энергия для разрыва водородной связи.



Типы кристаллических решеток



Метод валентных связей (ВС)

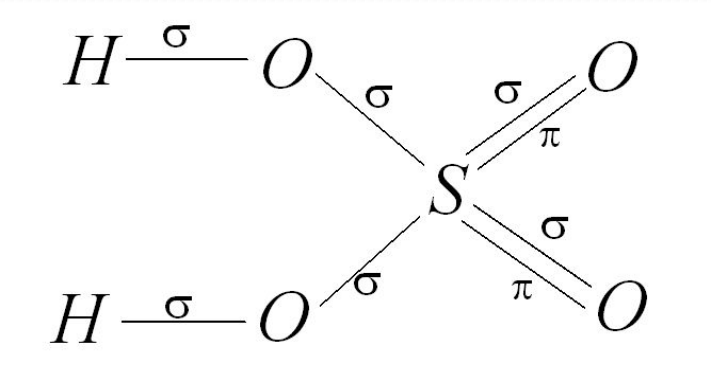
- Связанные между собой атомы в молекуле удерживаются вместе при помощи одной или нескольких общих эл-ных пар
- Химическая связь между двумя атомами локализована в месте перекрывания атомных орбиталей (локализованная двухцентровая связь)

Основные положения метода ВС

- Ков. связь образуют два электрона с противоположными спинами, принадлежащие двум атомам
- При образовании связи происходит перекрывание АО и увеличение электронной плотности между ними, что приводит к уменьшению энергии
- Связь реализуется в направлении наибольшего перекрывания АО

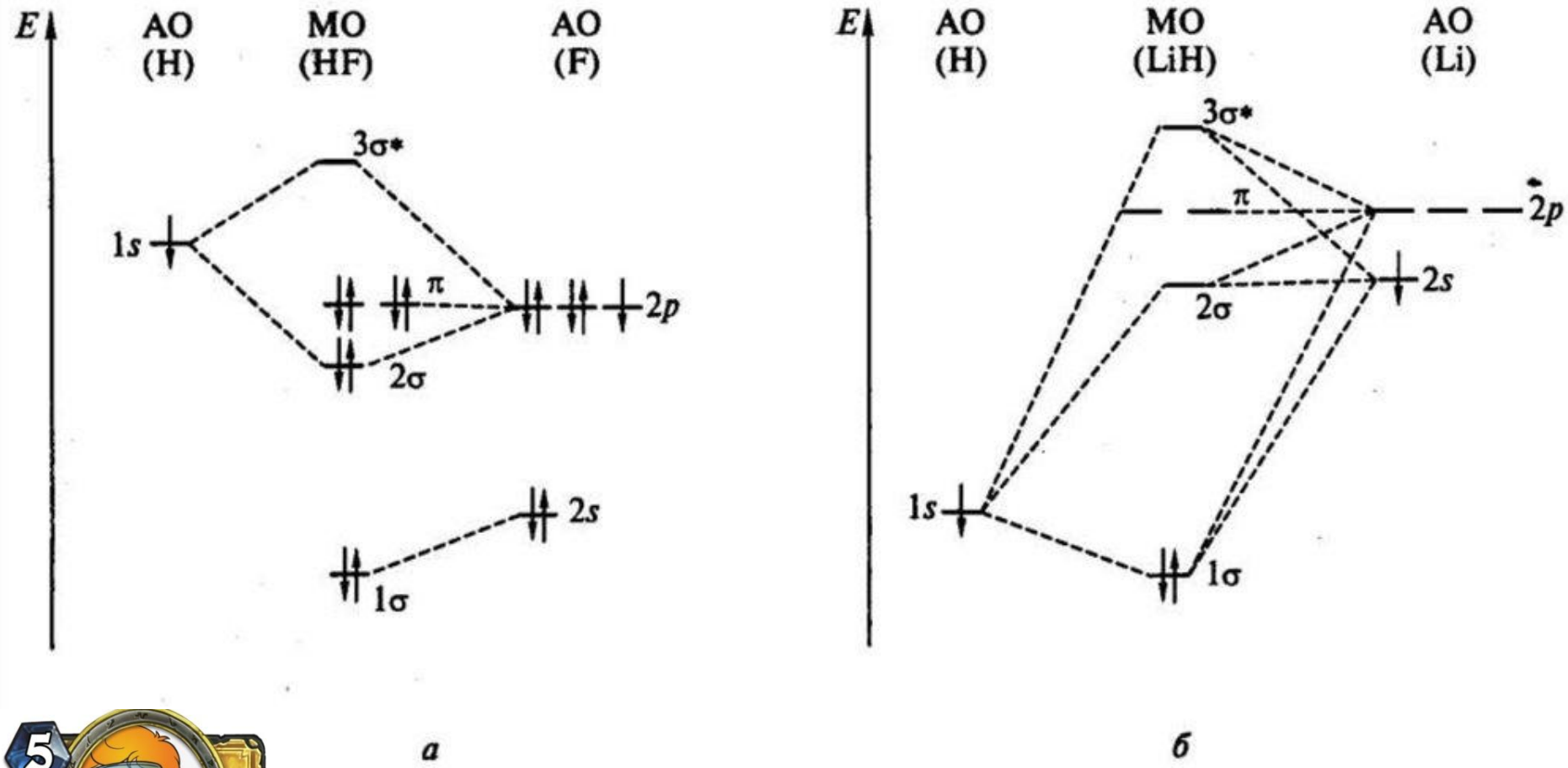
Пример

- если в соединение входит кислород, то два других элемента соединяются только через кислород
- водород образует только одну связь (одна –)
- кислород – только две связи
- где одна – обозначаем σ связь, а остальные – π-связи

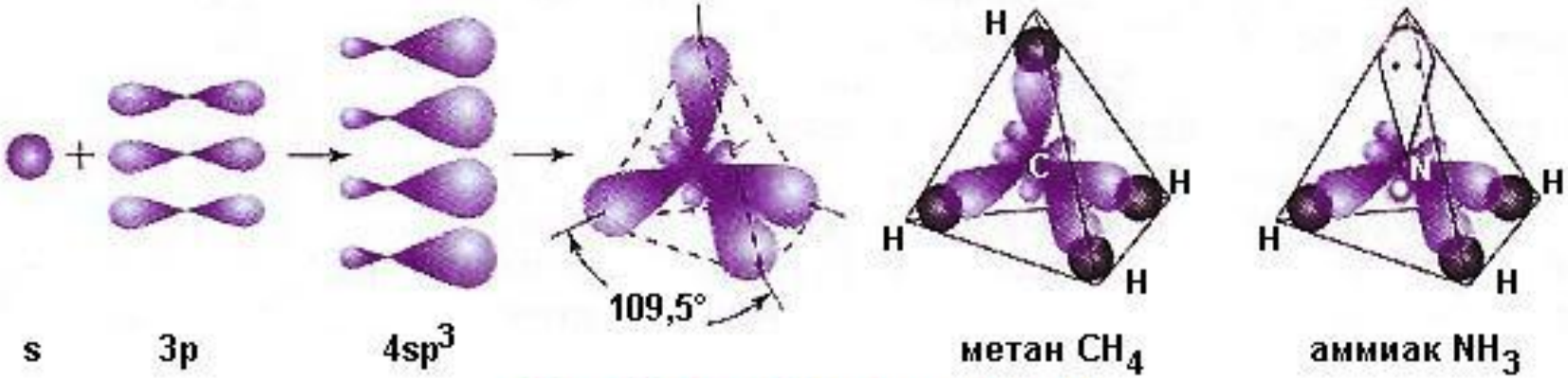


Метод молекулярных орбиталей

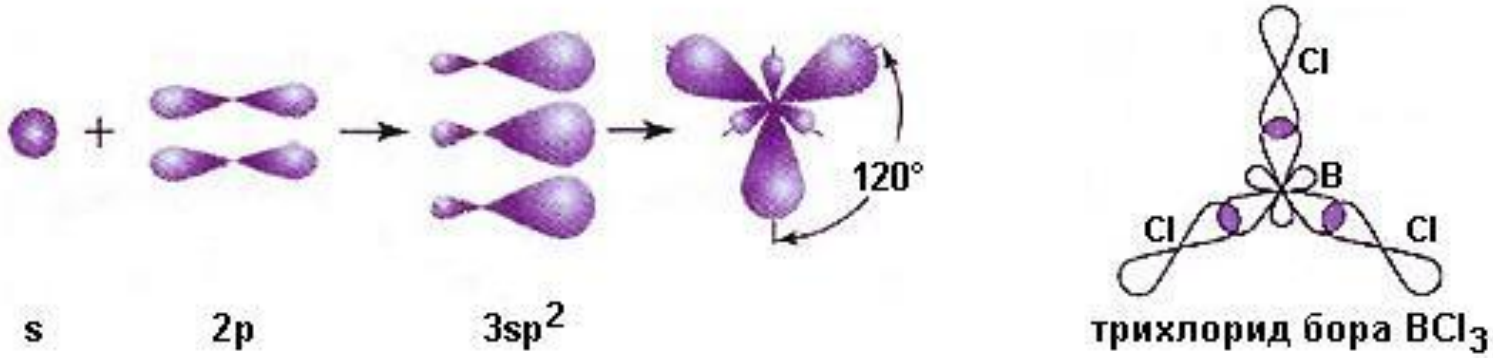
Гетероядерные двухатомные молекулы



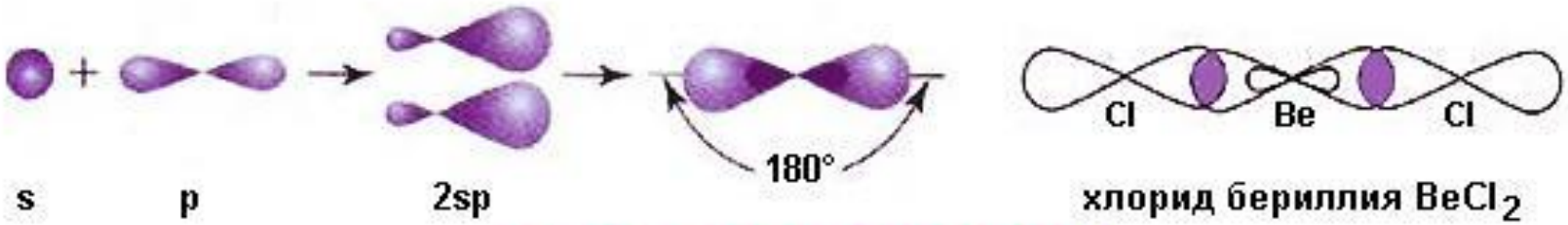
Энергетические диаграммы МО молекул HF (*а*), LiH (*б*)



а) sp^3 - гибридизация

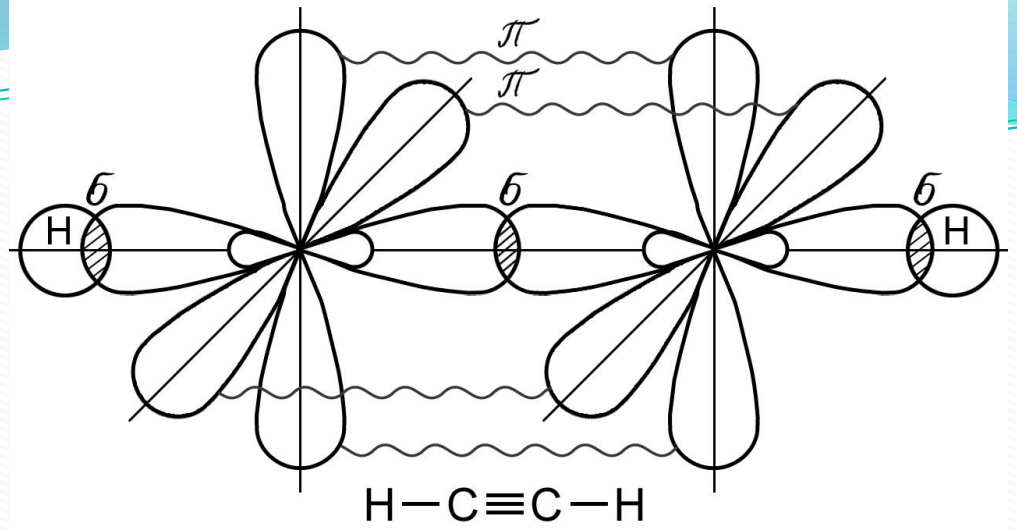


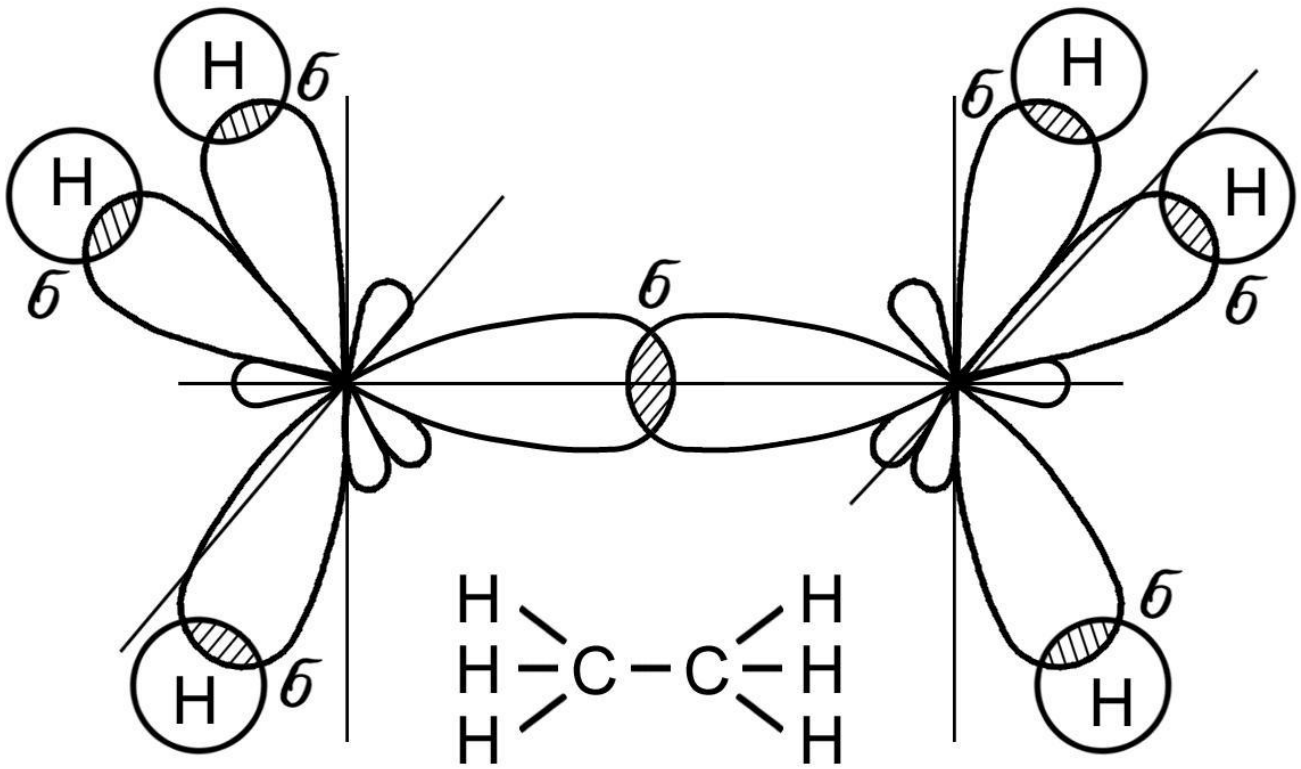
б) sp^2- гибридизация



в) sp - гибридизация

5
Прикладная химия


π
π
б
б
б
H
H
H—C≡C—H


H
б
H
б
б
б
H
б
H
б
H
б
H
б
H
H
H
C
C
H
H
H

Спасибо за внимание