



Химическая связь

Преподаватель:
Усольцева Анастасия Сергеевна

Оглавление:

1. Типы химических связей.

- 1.1. Ионная связь
- 1.2. Ковалентная связь.
- 1.3. Донорно-акцепторная связь.
- 1.4. Водородная связь.

2. Квантово-механические основы теории химической связи.

2.1. Гибридизация атомных орбиталей.

- 2.1.1. sp^3 -гибридизация
- 2.1.2. sp^2 -гибридизация
- 2.1.3. sp -гибридизация

2.2. Ковалентные σ - и π - связи

2.3. Основные характеристики ковалентной связи.

- 2.3.1. Длина связи
- 2.3.2. Энергия связи.
- 2.3.3. Полярность связи.
- 2.3.4. Поляризуемость связи.
- 2.3.5. Направленность связей.

1. Типы химических связей.

В 1916 году немецкий ученый Вальтер Коссель и американский ученый Гильберт Льюис Ньютон предложили электронную теорию химической связи, которая явилась важным этапом в развитии теории строения. *Согласно электронной теории, химическая связь рассматривается как результат взаимодействия внешних электронных оболочек (валентных электронов) атомов.* Учитывая химическую инертность благородных газов, их внешние электронные оболочки (для гелия — двухэлектронная, для неона, аргона и т. п. — восьмиэлектронная) считают наиболее устойчивыми к взаимодействию. Стремление атомов других элементов связываться друг с другом обусловлено неустойчивостью их валентных оболочек. Поэтому каждый атом, образуя химическую связь, принимает, отдает или обобществляет валентные электроны таким образом, чтобы его внешняя электронная оболочка соответствовала конфигурации инертных газов. Такой принцип заполнения валентных оболочек получил название «октетное правило», или «правило октета». В зависимости от способа образования различают два основных типа химической связи — ионную и ковалентную.

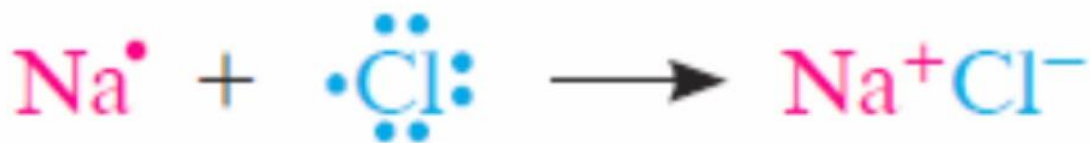
Оглавление:

1. Типы химических связей.
 - 1.1. Ионная связь
 - 1.2. Ковалентная связь.
 - 1.3. Донорно-акцепторная связь.
 - 1.4. Водородная связь.
2. Квантово-механические основы теории химической связи.
 - 2.1. Гибридизация атомных орбиталей.
 - 2.1.1. sp^3 -гибридизация
 - 2.1.2. sp^2 -гибридизация
 - 2.1.3. sp -гибридизация
 - 2.2. Ковалентные σ - и π - связи
 - 2.3. Основные характеристики ковалентной связи.
 - 2.3.1. Длина связи
 - 2.3.2. Энергия связи.
 - 2.3.3. Полярность связи.
 - 2.3.4. Поляризуемость связи.
 - 2.3.5. Направленность связей.

1.1. Ионная связь

Ионная связь образуется между атомами, которые значительно отличаются по электроотрицательности. Электронная конфигурация инертного газа достигается в данном случае путем переноса электрона к более электроотрицательному атому.

В результате образуются противоположно заряженные ионы, которые электростатически притягиваются друг к другу. Поэтому ионную связь называют еще *электровалентной*:



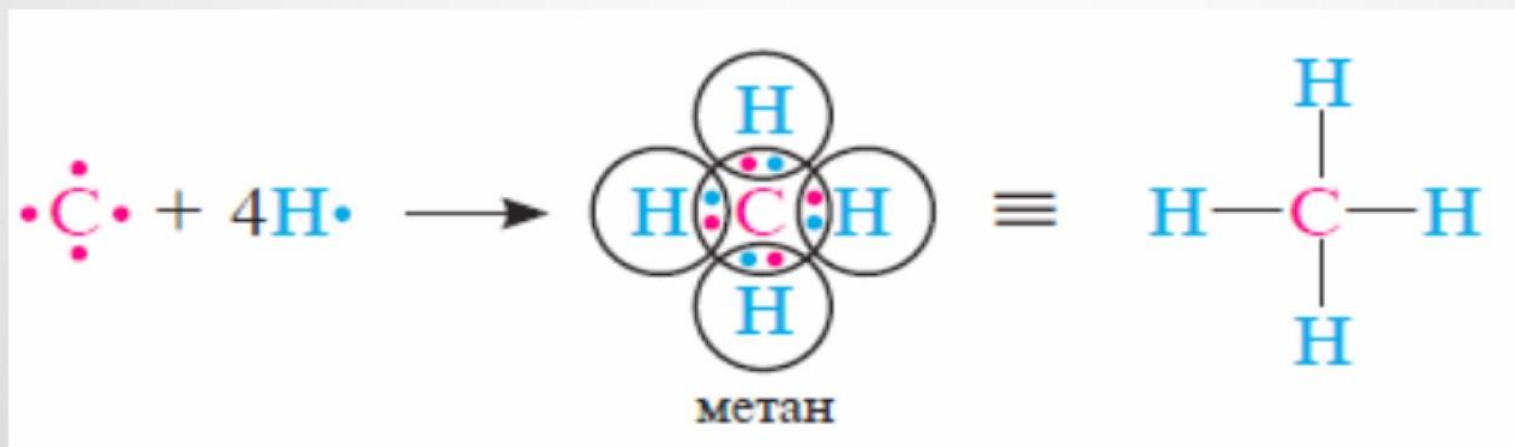
В приведенном примере ион натрия обладает электронной конфигурацией неона, а ион хлора — конфигурацией аргона.

Оглавление:

1. Типы химических связей.
 - 1.1. Ионная связь
 - 1.2. Ковалентная связь.
 - 1.3. Донорно-акцепторная связь.
 - 1.4. Водородная связь.
2. Квантово-механические основы теории химической связи.
 - 2.1. Гибридизация атомных орбиталей.
 - 2.1.1. sp^3 -гибридизация
 - 2.1.2. sp^2 -гибридизация
 - 2.1.3. sp -гибридизация
 - 2.2. Ковалентные σ - и π - связи
 - 2.3. Основные характеристики ковалентной связи.
 - 2.3.1. Длина связи
 - 2.3.2. Энергия связи.
 - 2.3.3. Полярность связи.
 - 2.3.4. Поляризуемость связи.
 - 2.3.5. Направленность связей.

1.2. Ковалентная связь.

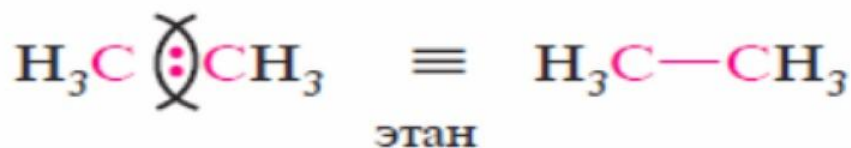
Ковалентная связь является основным типом химической связи в органических соединениях. Она *образуется между атомами, равными или близкими по электроотрицательности*. Электронная конфигурация инертного газа в данном случае достигается за счет обобществления валентных электронов и формирования одной или нескольких общих электронных пар:



В результате обобществления валентных электронов углерода и водорода образуются четыре электронные пары, которые являются общими для данных атомов. Углеродный атом при этом приобретает конфигурацию неона, а атомы водорода — конфигурацию гелия. Каждая из обобществленных пар электронов составляет ковалентную связь, которая обозначается в виде валентного штриха (—).

1.2. Ковалентная связь.

При образовании ковалентной связи между атомами с одинаковой электроотрицательностью общая электронная пара располагается симметрично по отношению к центрам обоих атомов. Такая связь называется *ковалентной неполярной*:



ковалентная неполярная связь

Если в образовании ковалентной связи участвуют атомы с различной электроотрицательностью, общая пара электронов смещается к атому с большей электроотрицательностью. В этом случае связь называют *ковалентной полярной*:



ковалентная полярная связь

Полярную ковалентную связь изображают в виде стрелки (\rightarrow), направленной к более электроотрицательному атому. Буквой δ (греч. «дельта») условно обозначают дробные (частичные) заряды на атомах. Символ δ^+ отражает пониженную, а δ^- — повышенную электронную плотность.

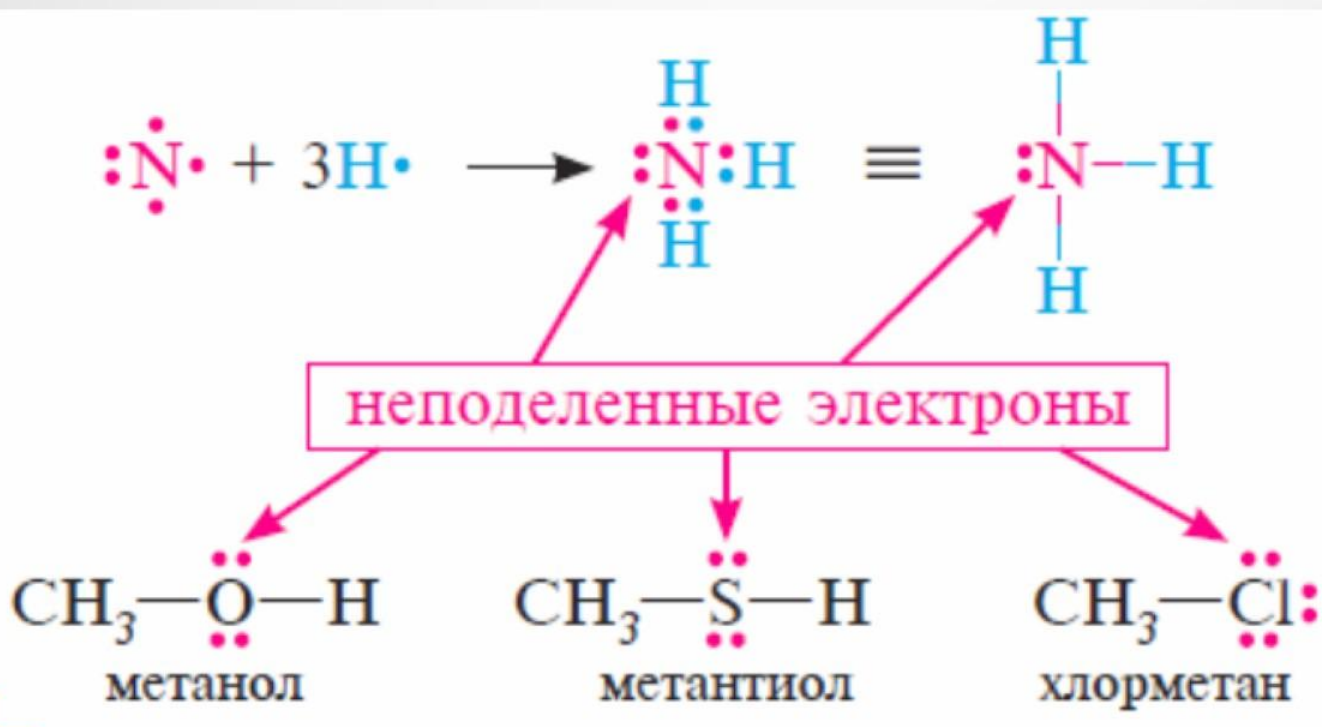
1.2. Ковалентная связь.

В зависимости от числа общих электронных пар, возникающих между атомами при образовании связи, различают простые и кратные ковалентные связи. Простые представлены одной, кратные — двумя или тремя парами электронов:



1.2. Ковалентная связь.

Атомы азота, кислорода, серы, галогенов и некоторых других элементов при образовании ковалентных связей формируют октетную оболочку обобществлением не всех внешних электронов. Часть электронов не участвует в образовании химических связей. Эти электроны называют *необобществленными*, *неподеленными* или *n-электронами*:

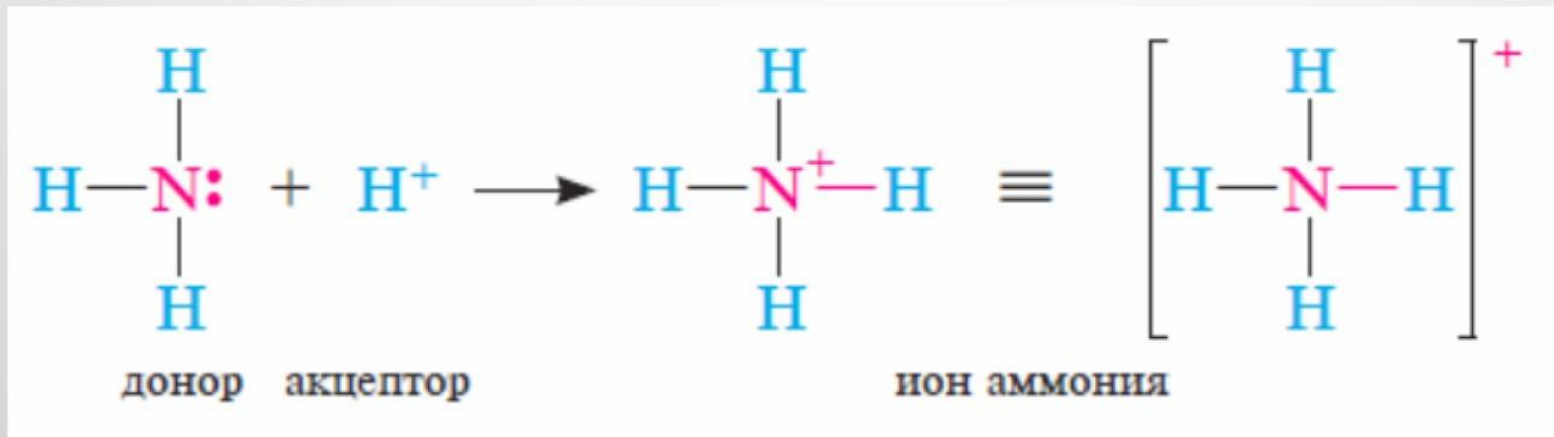


Оглавление:

1. Типы химических связей.
 - 1.1. Ионная связь
 - 1.2. Ковалентная связь.
 - 1.3. Донорно-акцепторная связь.
 - 1.4. Водородная связь.
2. Квантово-механические основы теории химической связи.
 - 2.1. Гибридизация атомных орбиталей.
 - 2.1.1. sp^3 -гибридизация
 - 2.1.2. sp^2 -гибридизация
 - 2.1.3. sp -гибридизация
 - 2.2. Ковалентные σ - и π - связи
 - 2.3. Основные характеристики ковалентной связи.
 - 2.3.1. Длина связи
 - 2.3.2. Энергия связи.
 - 2.3.3. Полярность связи.
 - 2.3.4. Поляризуемость связи.
 - 2.3.5. Направленность связей.

1.3. Донорно-акцепторная связь.

Донорно-акцепторная связь представляет собой разновидность ковалентной связи. Если ковалентная связь образуется путем обобществления пары электронов по одному от каждого атома, то донорно-акцепторная — за счет двух электронов, предоставляемых одним из атомов. При этом *атом, поставляющий пару электронов в общее пользование, называют донором, а атом, принимающий электроны,— акцептором.* Донор должен иметь пару неподеленных электронов. Акцептором может быть протон или другой атом, у которого не хватает до образования октета двух электронов. По донорно-акцепторному механизму, например, протекает образование иона аммония, гидроксония и др.:



Поскольку пара электронов атома азота ушла на образование связи с протоном и стала общей для двух атомов, азот приобретает положительный заряд. Образовавшаяся в ионе аммония по донорно-акцепторному механизму ковалентная связь ничем не отличается от трех остальных связей.

Оглавление:

1. Типы химических связей.
 - 1.1. Ионная связь
 - 1.2. Ковалентная связь.
 - 1.3. Донорно-акцепторная связь.
 - 1.4. Водородная связь.
2. Квантово-механические основы теории химической связи.
 - 2.1. Гибридизация атомных орбиталей.
 - 2.1.1. sp^3 -гибридизация
 - 2.1.2. sp^2 -гибридизация
 - 2.1.3. sp -гибридизация
 - 2.2. Ковалентные σ - и π - связи
 - 2.3. Основные характеристики ковалентной связи.
 - 2.3.1. Длина связи
 - 2.3.2. Энергия связи.
 - 2.3.3. Полярность связи.
 - 2.3.4. Поляризуемость связи.
 - 2.3.5. Направленность связей.

1.4. Водородная связь.

Водородная связь образуется в результате электростатического взаимодействия между активными атомами водорода в молекуле и атомами с неподеленной электронной парой в этой же или в другой молекуле.



Активными называют атомы водорода, связанные в молекуле сильно полярной ковалентной связью, например:



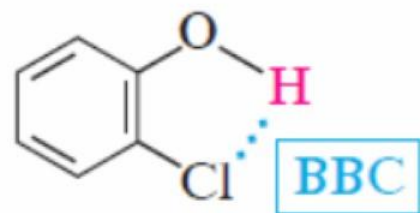
Графически водородную связь обозначают тремя точками:



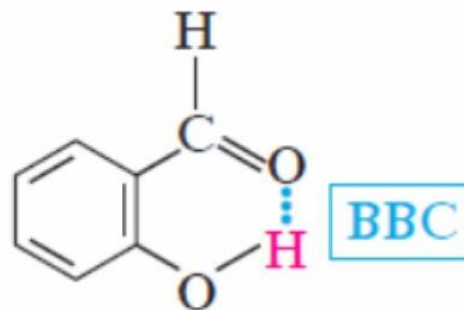
Энергия водородной связи (10—40 кДж/моль) по сравнению с энергией ковалентной связи (340—360 кДж/моль) невелика.

1.4. Водородная связь.

Различают *внутримолекулярные* и *межмолекулярные водородные связи*. Внутримолекулярные водородные связи (ВВС) возникают в пределах одной молекулы с образованием пяти-, шести- или семичленных хелатообразных структур (от лат. chela — клешня):

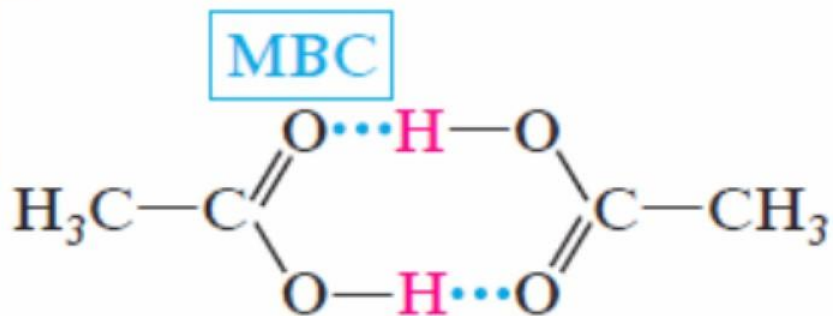


o-хлорфенол

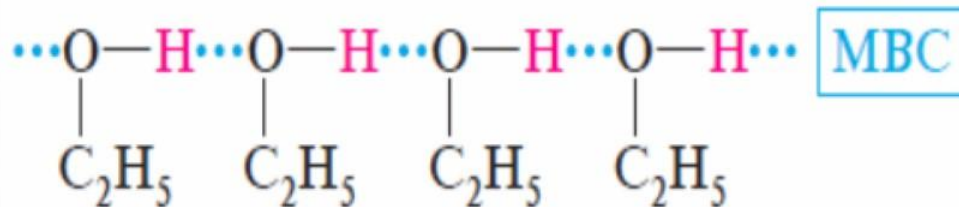


салициловый альдегид

Межмолекулярные водородные связи (МВС) возникают между двумя или несколькими молекулами с образованием димеров или ассоциатов:



димер уксусной кислоты



ассоциат этилового спирта

Оглавление:

1. Типы химических связей.
 - 1.1. Ионная связь
 - 1.2. Ковалентная связь.
 - 1.3. Донорно-акцепторная связь.
 - 1.4. Водородная связь.
2. Квантово-механические основы теории химической связи.
 - 2.1. Гибридизация атомных орбиталей.
 - 2.1.1. sp^3 -гибридизация
 - 2.1.2. sp^2 -гибридизация
 - 2.1.3. sp -гибридизация
 - 2.2. Ковалентные σ - и π - связи
 - 2.3. Основные характеристики ковалентной связи.
 - 2.3.1. Длина связи
 - 2.3.2. Энергия связи.
 - 2.3.3. Полярность связи.
 - 2.3.4. Поляризуемость связи.
 - 2.3.5. Направленность связей.

Атомной орбиталью (АО) называют область пространства, внутри которой вероятность нахождения электрона максимальна.

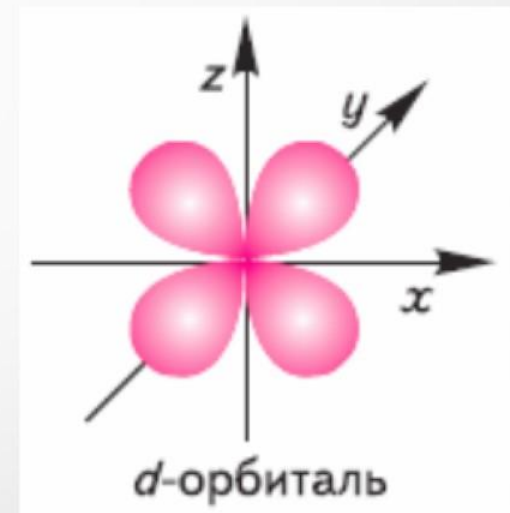
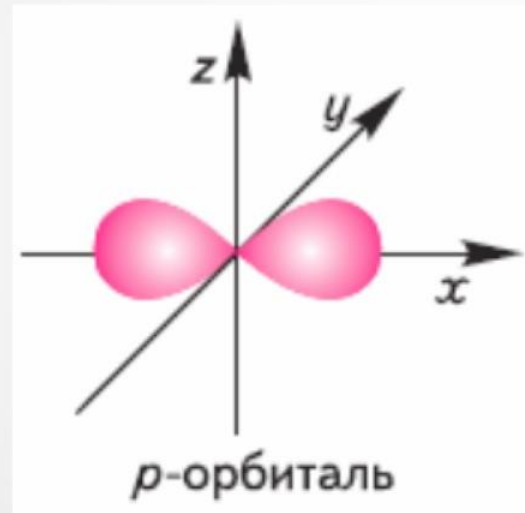
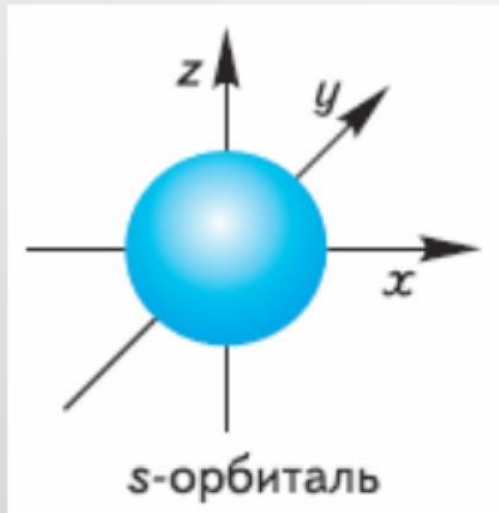
Согласно квантовой теории состояние любого электрона в атоме описывается четырьмя квантовыми числами: n , l , m_l , m_s .

Первые три числа характеризуют атомную орбиталь:

- *главное квантовое число n* определяет энергетический уровень орбитали,
- *побочное квантовое число l* — геометрическую форму орбитали,
- *магнитное квантовое число m_l* — ориентацию различных атомных орбиталей в пространстве.

Спиновое квантовое число m_s описывает вращение электрона вокруг собственной оси.

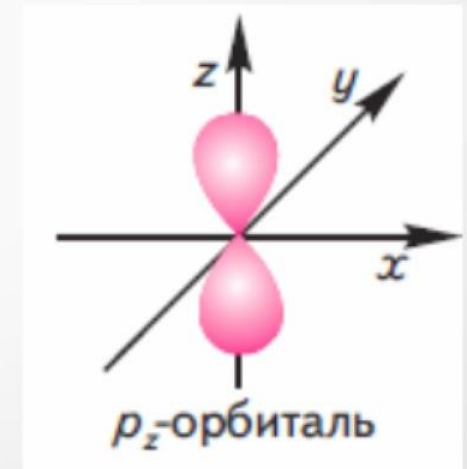
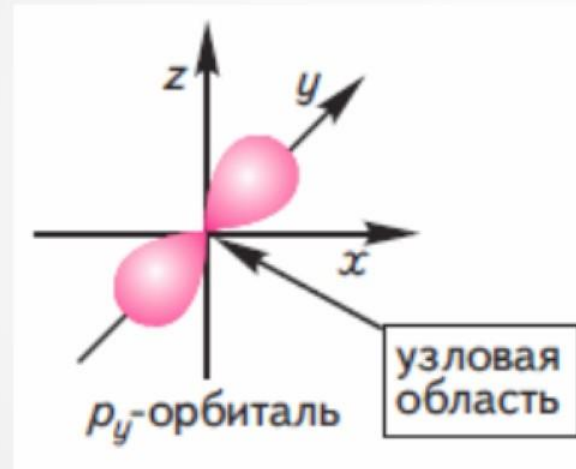
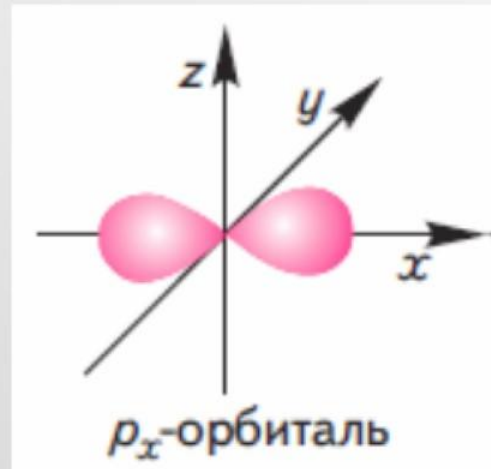
Из курса неорганической химии известны геометрические формы s -, p -, d - атомных орбиталей



Атомные орбитали s -типа имеют сферическую симметрию.

2. Квантово-механические основы теории химической связи.

Существуют три одинаковые по энергии p -АО гантелеобразной формы, отличающиеся друг от друга ориентацией в пространстве: p_x p_y p_z .



Каждая p -орбиталь имеет узловую область, в которой вероятность нахождения электрона равна нулю. Существует пять атомных орбиталей d -типа с более сложной геометрической формой.

Оглавление:

1. Типы химических связей.
 - 1.1. Ионная связь
 - 1.2. Ковалентная связь.
 - 1.3. Донорно-акцепторная связь.
 - 1.4. Водородная связь.
2. Квантово-механические основы теории химической связи.
 - 2.1. Гибридизация атомных орбиталей.
 - 2.1.1. sp^3 -гибридизация
 - 2.1.2. sp^2 -гибридизация
 - 2.1.3. sp -гибридизация
 - 2.2. Ковалентные σ - и π - связи
 - 2.3. Основные характеристики ковалентной связи.
 - 2.3.1. Длина связи
 - 2.3.2. Энергия связи.
 - 2.3.3. Полярность связи.
 - 2.3.4. Поляризуемость связи.
 - 2.3.5. Направленность связей.

Согласно квантово-механической теории химической связи число образуемых атомом ковалентных связей определяется количеством одноэлектронных атомных орбиталей, то есть количеством неспаренных электронов. Однако в действительности атомы некоторых элементов образуют большее число ковалентных связей по сравнению с количеством неспаренных электронов в основном состоянии.

2.1. Гибридизация атомных орбиталей.

Так, атом углерода в основном состоянии имеет два неспаренных электрона.



В органических соединениях он образует четыре ковалентные связи. Это можно объяснить, если представить, что один из $2s$ -электронов переходит на вакантную $2p_z$ -орбиталь:



2.1. Гибридизация атомных орбиталей.

В таком состоянии, называемом возбужденным, атом углерода имеет четыре одноэлектронные орбитали. Поскольку валентные орбитали углерода неравноценны (одна — s , а три — p), то и ковалентные связи, образованные с их участием, не должны быть эквивалентными. В действительности же, например, в молекуле метана CH_4 все четыре ковалентные связи C—H равноценны. Для объяснения этого факта в квантово-механической теории химической связи введено математически обоснованное понятие о гибридизации атомных орбиталей.

Сущность гибридизации заключается в том, что из нескольких различных по форме и близких по энергии атомных орбиталей образуется такое же число одинаковых по форме и энергии гибридных орбиталей.

Оглавление:

1. Типы химических связей.
 - 1.1. Ионная связь
 - 1.2. Ковалентная связь.
 - 1.3. Донорно-акцепторная связь.
 - 1.4. Водородная связь.
2. Квантово-механические основы теории химической связи.
 - 2.1. Гибридизация атомных орбиталей.
 - 2.1.1. sp^3 -гибридизация
 - 2.1.2. sp^2 -гибридизация
 - 2.1.3. sp -гибридизация
 - 2.2. Ковалентные σ - и π - связи
 - 2.3. Основные характеристики ковалентной связи.
 - 2.3.1. Длина связи
 - 2.3.2. Энергия связи.
 - 2.3.3. Полярность связи.
 - 2.3.4. Поляризуемость связи.
 - 2.3.5. Направленность связей.

sp^3 -Гибридизация атома углерода (первое валентное состояние).

При sp^3 -гибридизации из одной s - и трех p -орбиталей образуются четыре качественно новые, равноценные sp^3 -гибридные орбитали, направленные в пространстве под углом $109^\circ 28'$ (от центра правильного тетраэдра к его вершинам). Поэтому *sp^3 -гибридизацию* называют еще *тетраэдрической*.

Доля s -облака в гибридных sp^3 -орбиталях равна $1/4$.

В первом валентном состоянии атом углерода образует только простые ковалентные связи.

2.1.1. sp^3 -гибридизация

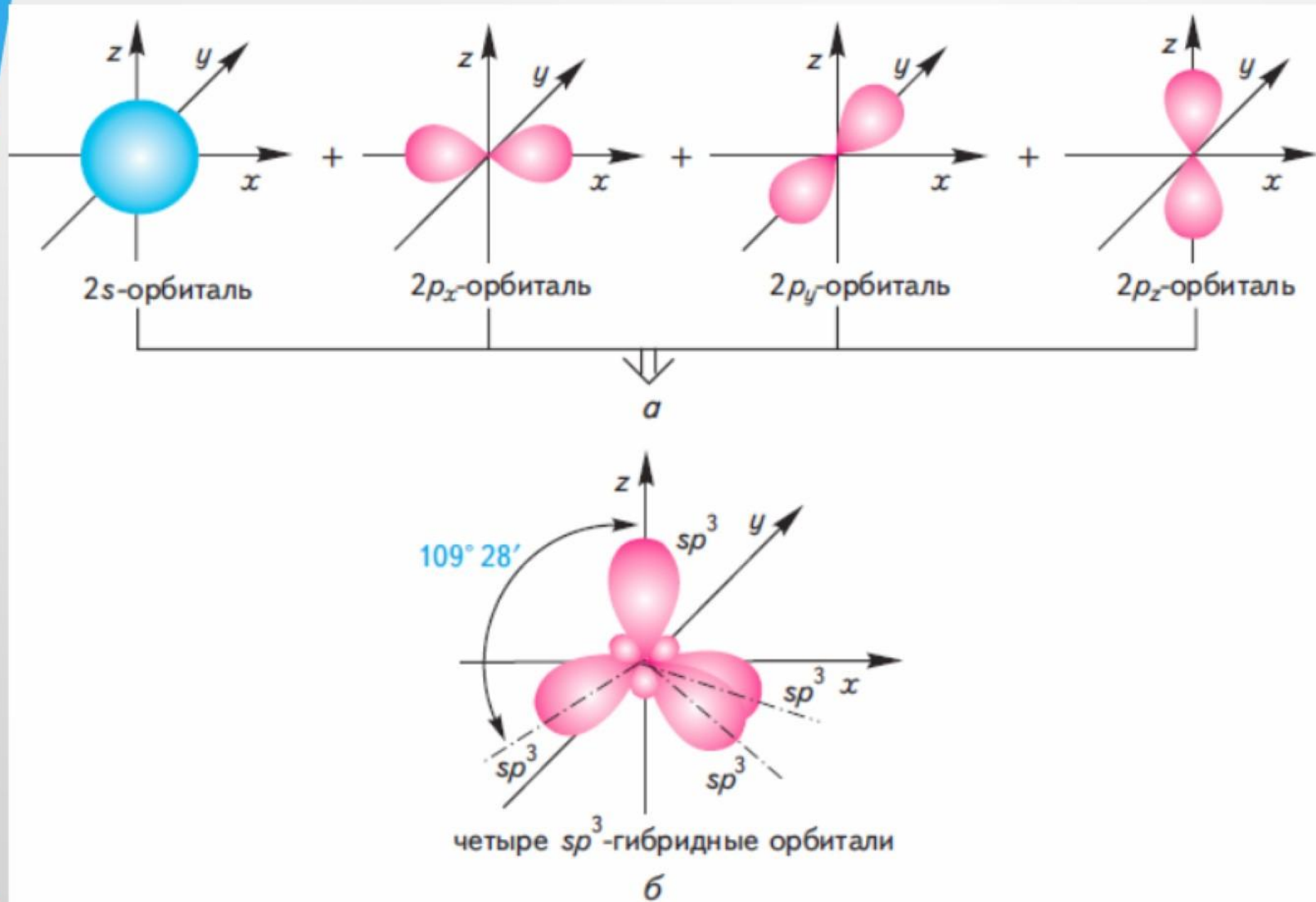


Рис. Строение атома углерода в sp^3 -гибридизации:
а) схема образования гибридных sp^3 -орбиталей;
б) взаимное расположение орбиталей при sp^3 -гибридизации.

Оглавление:

1. Типы химических связей.
 - 1.1. Ионная связь
 - 1.2. Ковалентная связь.
 - 1.3. Донорно-акцепторная связь.
 - 1.4. Водородная связь.
2. Квантово-механические основы теории химической связи.
 - 2.1. Гибридизация атомных орбиталей.
 - 2.1.1. sp^3 -гибридизация
 - 2.1.2. sp^2 -гибридизация
 - 2.1.3. sp -гибридизация
 - 2.2. Ковалентные σ - и π - связи
 - 2.3. Основные характеристики ковалентной связи.
 - 2.3.1. Длина связи
 - 2.3.2. Энергия связи.
 - 2.3.3. Полярность связи.
 - 2.3.4. Поляризуемость связи.
 - 2.3.5. Направленность связей.

sp^2 -Гибридизация атома углерода (второе валентное состояние).

sp^2 -Гибридизация осуществляется в результате взаимодействия одной s - и двух p -орбиталей (p_x, p_y). В результате образуются три эквивалентные sp^2 -гибридные орбитали, которые лежат в одной плоскости под углом 120° . Поэтому sp^2 -гибридизацию называют еще *тригональной*.

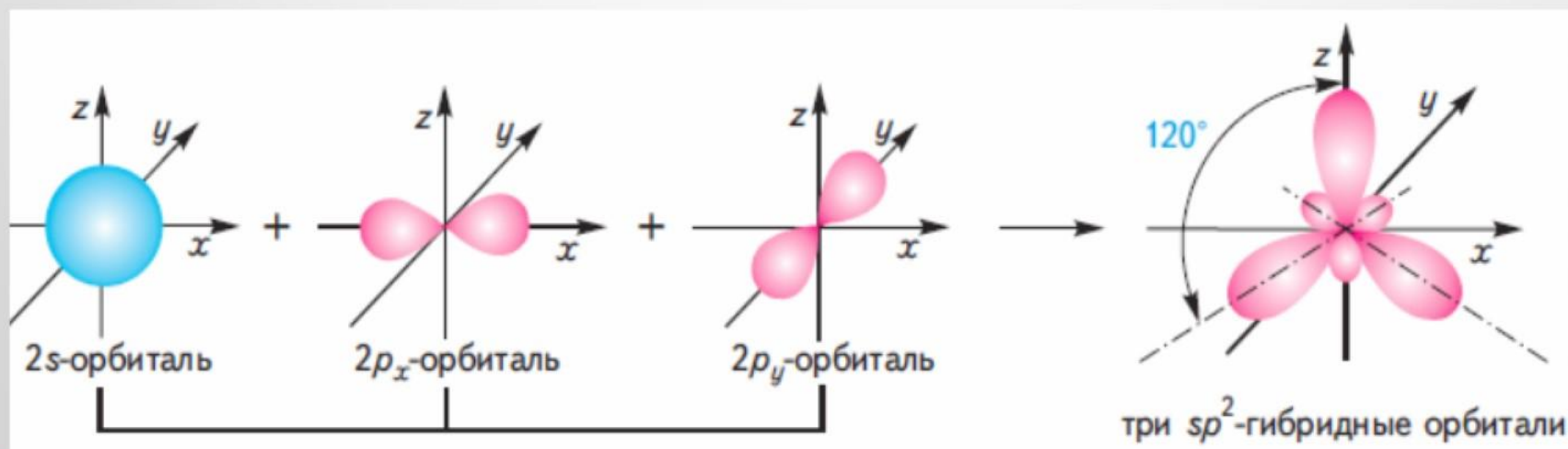


Рис. Строение атома углерода в sp^2 -гибридизации:
а) схема образования гибридных sp^2 -орбиталей;

2.1.2. sp^2 -гибридизация

Оставшаяся негибридизованной p_z -орбиталь расположена в плоскости, перпендикулярной к плоскости гибридных орбиталей.

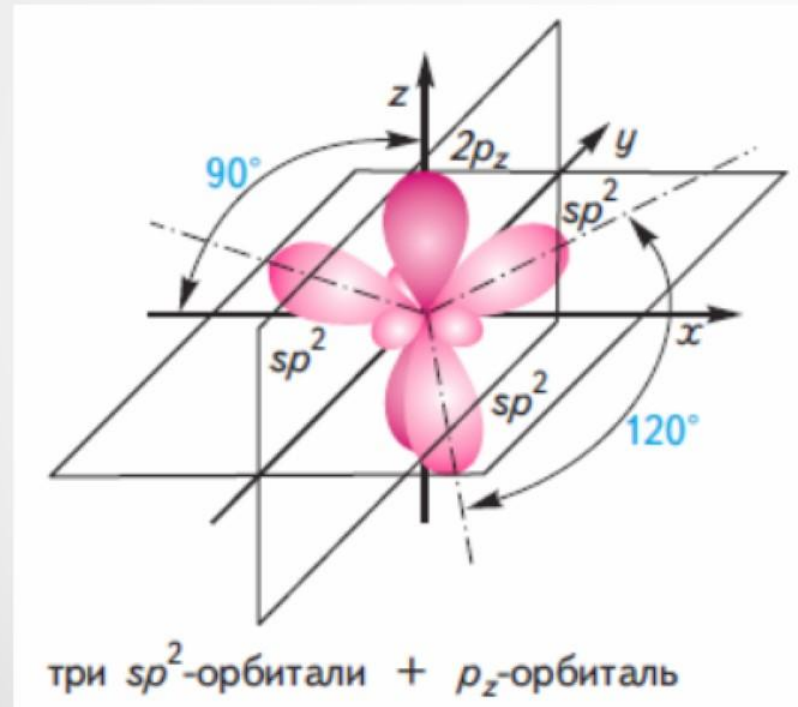


Рис. Строение атома углерода в sp^2 -гибридизации:
б) взаимное расположение орбиталей при sp^2 -гибридизации.

Условно доля s -облака в sp^2 -гибридных орбиталях равна $1/3$. Атом углерода в sp^2 -гибридизации образует двойную СВЯЗЬ.

Оглавление:

1. Типы химических связей.
 - 1.1. Ионная связь
 - 1.2. Ковалентная связь.
 - 1.3. Донорно-акцепторная связь.
 - 1.4. Водородная связь.
2. Квантово-механические основы теории химической связи.
 - 2.1. Гибридизация атомных орбиталей.
 - 2.1.1. sp^3 -гибридизация
 - 2.1.2. sp^2 -гибридизация
 - 2.1.3. sp -гибридизация
 - 2.2. Ковалентные σ - и π - связи
 - 2.3. Основные характеристики ковалентной связи.
 - 2.3.1. Длина связи
 - 2.3.2. Энергия связи.
 - 2.3.3. Полярность связи.
 - 2.3.4. Поляризуемость связи.
 - 2.3.5. Направленность связей.

***sp*-Гибридизация атома углерода** (третье валентное состояние).

sp-Гибридизация возникает в результате слияния одной *s*- и одной *p*-орбиталей (p_x). При этом образуются две *sp*-гибридные орбитали, расположенные друг к другу под углом 180° . Отсюда *sp*-гибридизацию называют линейной.

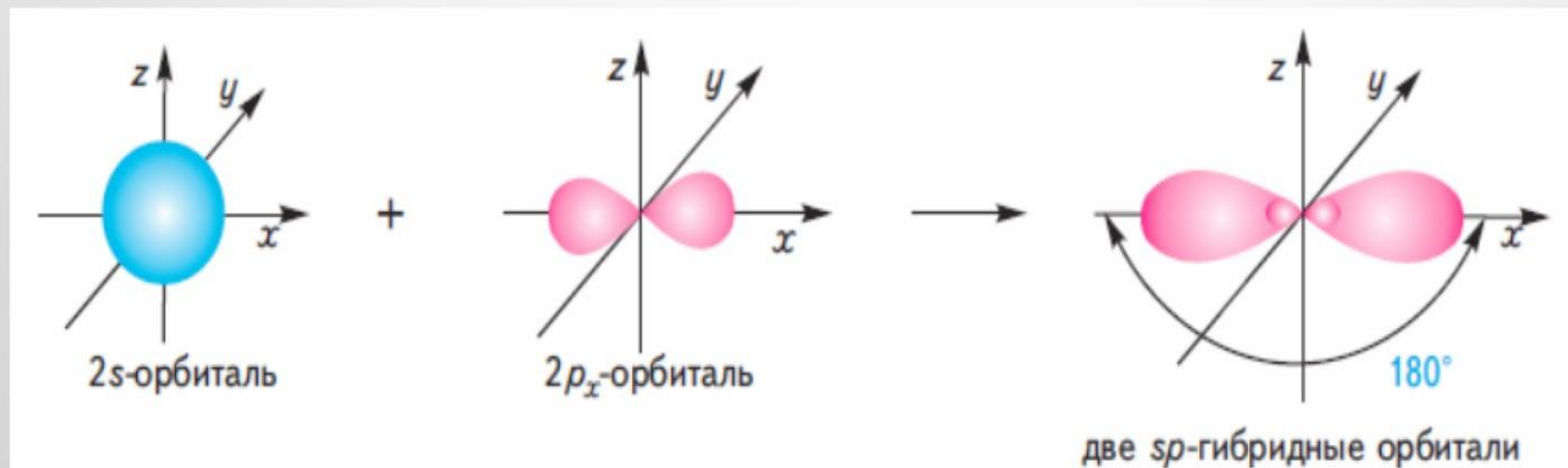


Рис. Строение атома углерода в *sp*-гибридизации:
а) схема образования гибридных *sp*-орбиталей;

2.1.3. *sp*-гибридизация

Негибридизованные p_y - и p_z -орбитали расположены во взаимно перпендикулярных плоскостях и под прямыми углами к *sp*-гибридным орбиталям

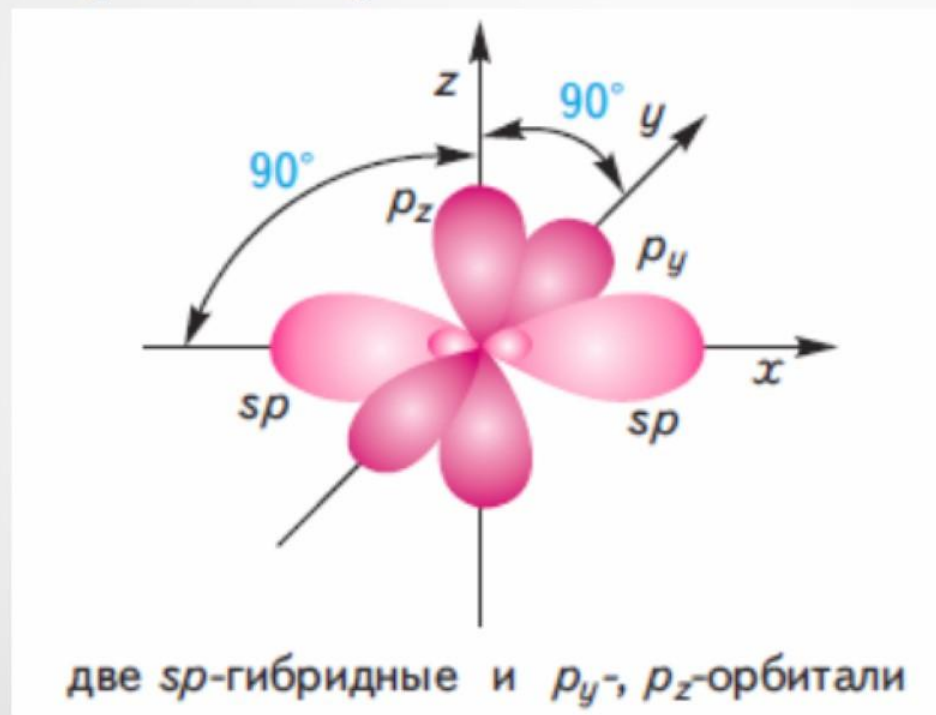


Рис. Строение атома углерода в *sp*-гибридизации:
б) взаимное расположение орбиталей при *sp*-гибридизации.

Доля *s*-облака в гибридных *sp*-орбиталях равна $1/2$. Атом углерода в состоянии *sp*-гибридизации образует тройную СВЯЗЬ.

Оглавление:

1. Типы химических связей.
 - 1.1. Ионная связь
 - 1.2. Ковалентная связь.
 - 1.3. Донорно-акцепторная связь.
 - 1.4. Водородная связь.
2. Квантово-механические основы теории химической связи.
 - 2.1. Гибридизация атомных орбиталей.
 - 2.1.1. sp^3 -гибридизация
 - 2.1.2. sp^2 -гибридизация
 - 2.1.3. sp -гибридизация
 - 2.2. Ковалентные σ - и π - связи
 - 2.3. Основные характеристики ковалентной связи.
 - 2.3.1. Длина связи
 - 2.3.2. Энергия связи.
 - 2.3.3. Полярность связи.
 - 2.3.4. Поляризуемость связи.
 - 2.3.5. Направленность связей.

Локализованная связь – это химическая связь, электроны которой поделены между ядрами двух атомов.

Ковалентная связь – это химическая связь, образованная за счет обобществления электронов связываемых атомов.

Ковалентная связь образуется в результате перекрывания двух АО с образованием молекулярной орбитали, занимаемой двумя электронами. Представление о том, что химические связи могут быть результатом совместного владения парой электронов двумя атомами, было выдвинуто Г.Льюисом (1916) и развито В.Гайтлером и Ф.Лондоном (1927). В дальнейшем Л.Полинг ввел чрезвычайно полезные для понимания ковалентной связи понятия направленной валентности и гибридизации орбиталей.

Согласно понятию направленной валентности, связь атомов осуществляется в том направлении, при котором обеспечивается максимальное перекрывание орбиталей. Чем лучше перекрывание, тем прочнее должна быть связь, и только при максимальном перекрывании достигается минимум энергии системы.

В зависимости от способа перекрывания атомных орбиталей различают ковалентные связи двух типов: σ - (греч «сигма») связи и π - (греч «пи») связи.

σ -Связью называют одинарную ковалентную связь, образованную в результате перекрывания атомных орбиталей вдоль линии, соединяющей ядра двух связываемых атомов (σ -перекрывание)

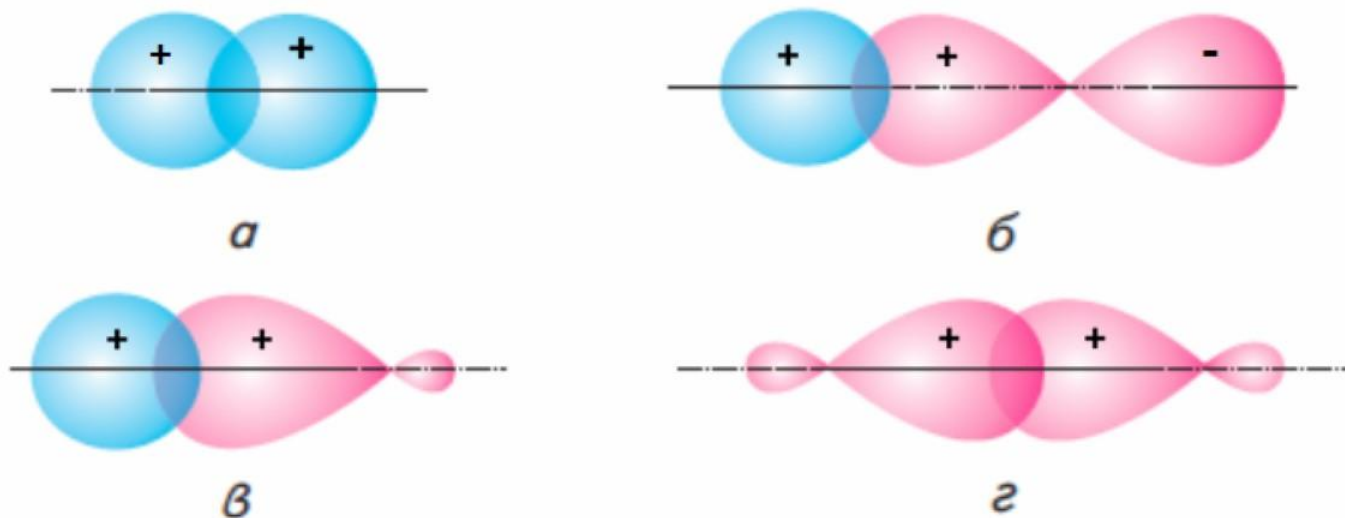


Схема перекрывания атомных орбиталей при образовании σ -связи:
 a — тип $s-s$; $б$ — тип $s-p$; $в$ — тип $s-sp^3$; $г$ — тип sp^3-sp^3

При образовании ковалентных связей посредством перекрывания p -орбиталей доли p -орбиталей помечают знаками «+» и «-», но эти математические знаки не нужно соотносить с положительными или отрицательными зарядами. Обе доли p -электронного облака несут отрицательный заряд, но волновая функция ψ всегда имеет противоположные знаки по обе стороны узла орбитали. Перекрываются орбитальные доли одинакового знака.

2.2. Ковалентные σ - и π -связи

В молекуле этана σ -связи C—H образуются в результате осевого s — sp^3 -перекрывания, а σ -связь C—C — за счет sp^3 — sp^3 -перекрывания орбиталей. Поскольку максимальная электронная плотность при σ -перекрывании сосредоточена в пространстве между ядрами атомов, σ -связь обладает большой прочностью.

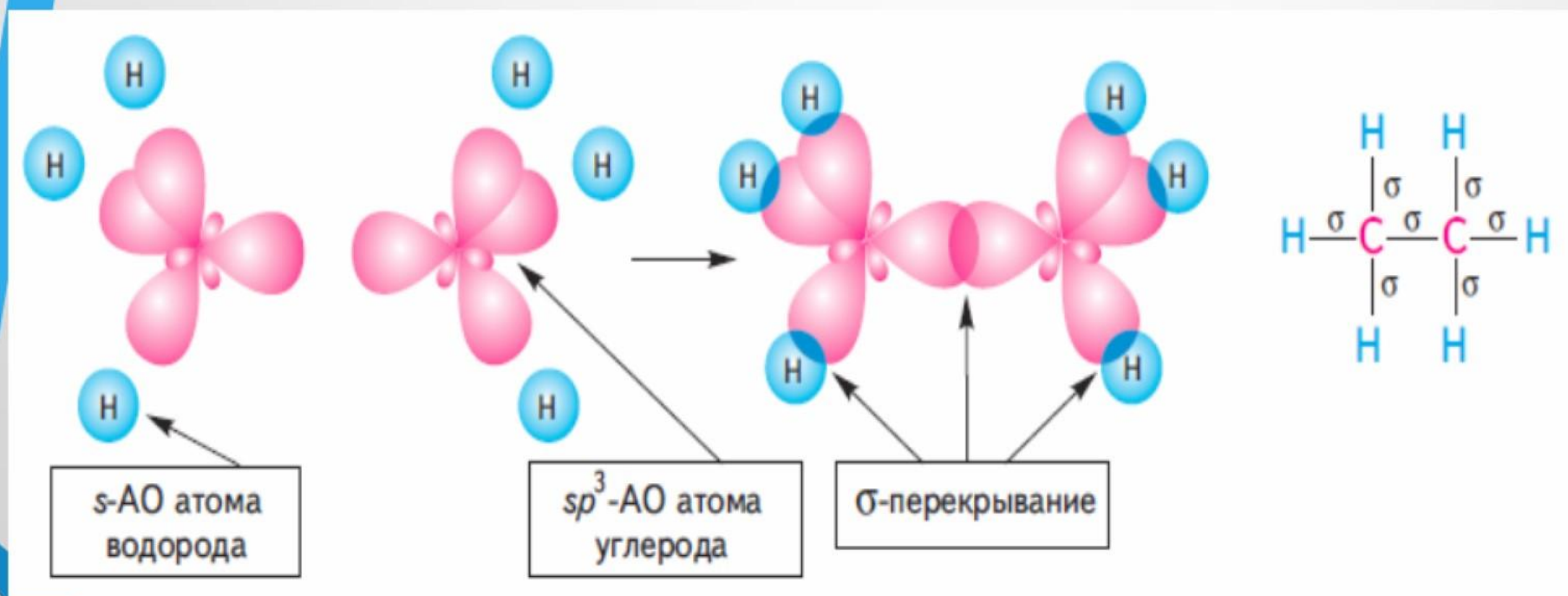
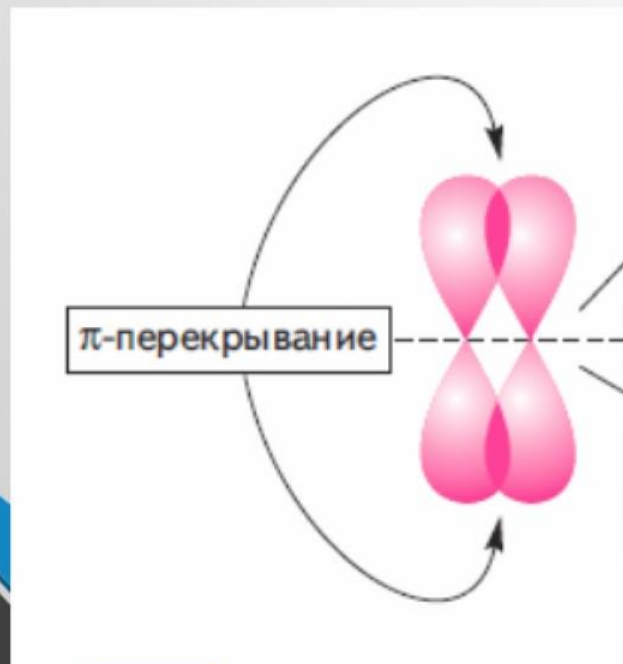


Рис. Образование σ -связей в молекуле этана $\text{CH}_3\text{—CH}_3$

Наряду с перекрыванием атомных орбиталей вдоль оси, соединяющей ядра атомов, существует так называемое боковое перекрывание атомных орбиталей.

В нем принимают участие только параллельно расположенные p -атомные орбитали.

Боковое перекрывание p -орбиталей называют π -перекрыванием, а образующуюся связь — π -связью



Максимальная электронная плотность π -связи сконцентрирована в двух областях — выше и ниже оси, соединяющей ядра атомов. Поэтому π -связь является менее прочной, чем σ -связь. Образуется π -связь только между атомами, которые находятся в sp^2 - и sp -гибридном состоянии

2.2. Ковалентные σ - и π -связи

В молекуле этилена атомы углерода находятся в sp^2 -гибридизации. σ -Перекрывание трех гибридованных орбиталей каждого из атомов углерода приводит к уже рассмотренным σ -связям (две C—H и одну C—C). π -Перекрывание двух негибридизованных p -орбиталей дает углерод-углеродную π -связь. В итоге между атомами углерода образуется двойная связь, которая представляет собой сочетание σ - и π -связей. При этом π -связь расположена в плоскости, перпендикулярной плоскости σ -связи.

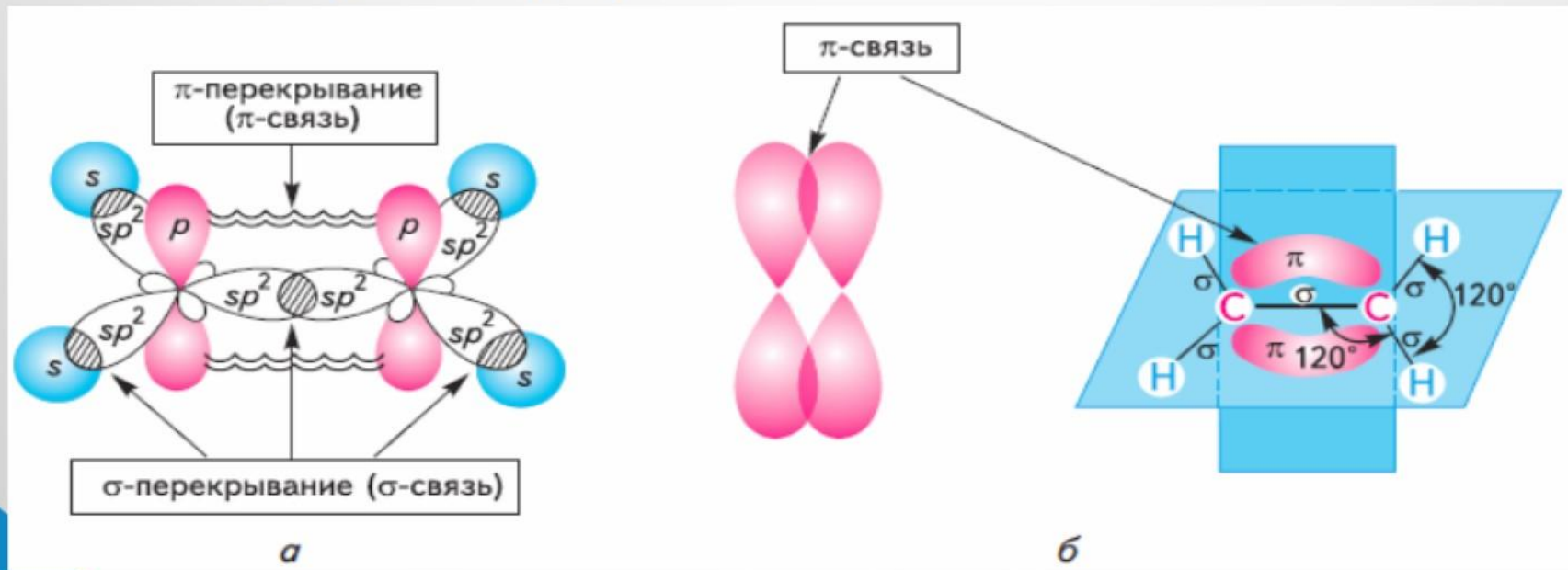


Рис. Образование π -связи в молекуле этилена $H_2C=CH_2$:
а — атомно-орбитальная модель этилена; *б* — π -связь

2.2. Ковалентные σ - и π -связи

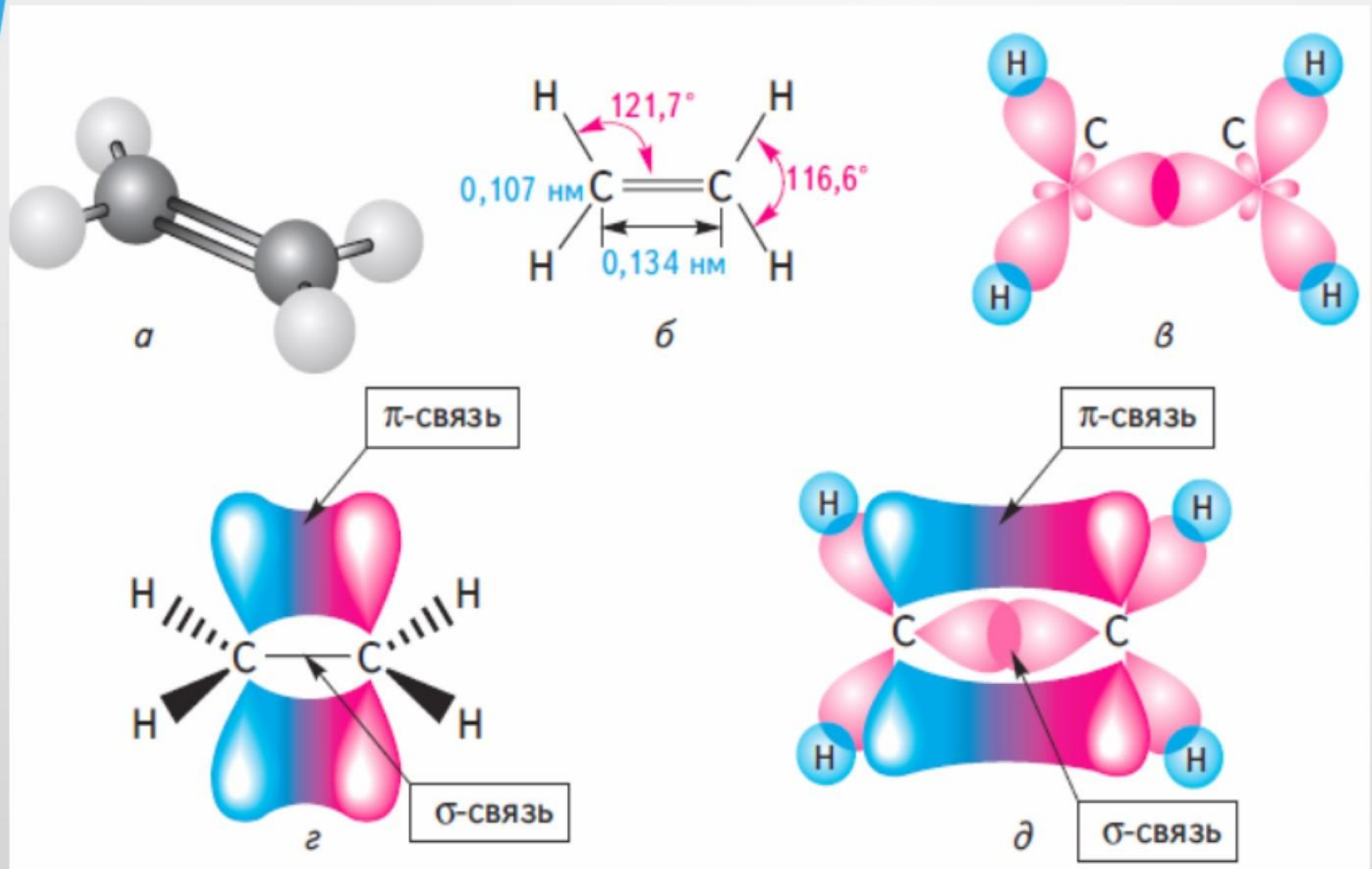


Рис. Строение молекулы этилена:
а — шаростержневая модель; б — геометрия молекулы; в — σ -связи;
г — π -связь; д — атомно-орбитальная модель

2.2. Ковалентные σ - и π -связи

В молекуле ацетилена углеродные атомы находятся в sp -гибридизации и образуют между собой тройную связь, которая состоит из одной σ - и двух π -связей. σ -Связь возникает за счет перекрывания sp -гибридизованных орбиталей, а четыре p -орбитали образуют две π -связи, расположенные во взаимно перпендикулярных плоскостях.

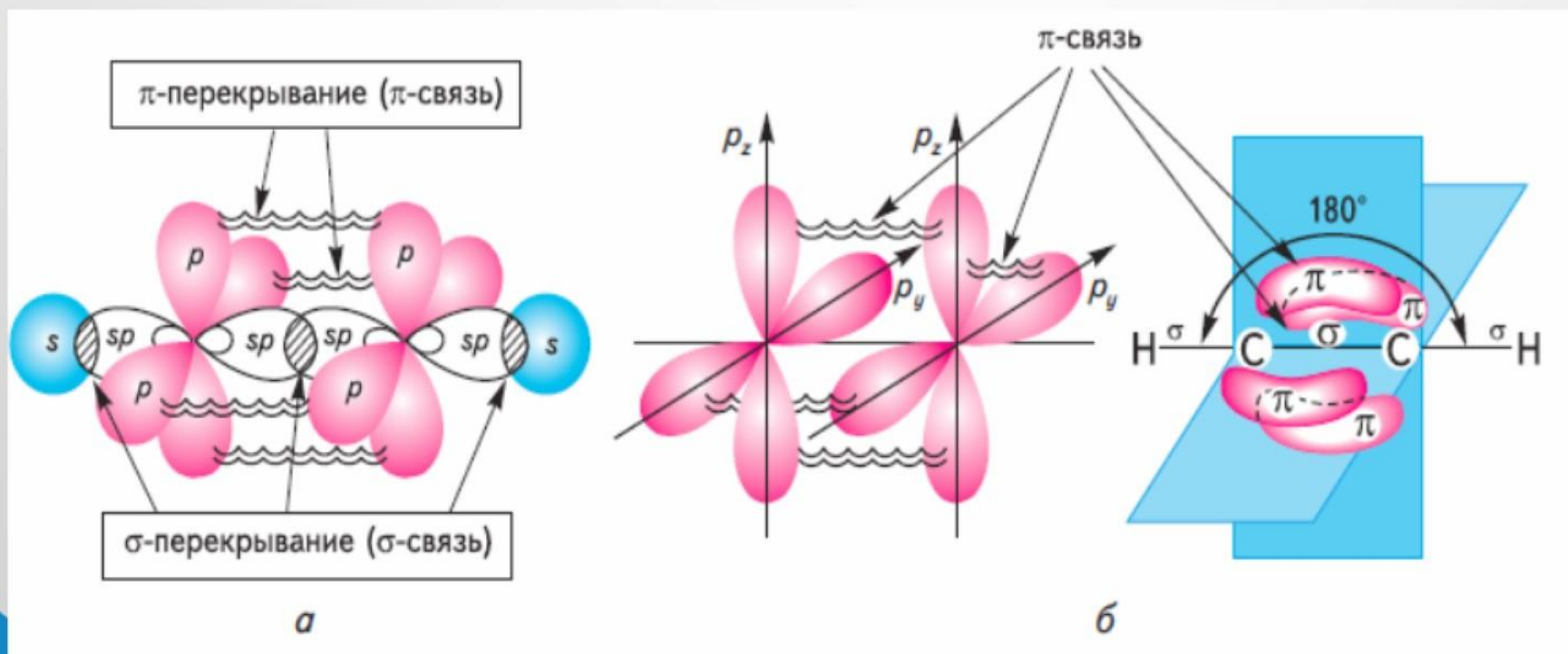


Рис. Образование π -связей в молекуле ацетилена:
а — атомно-орбитальная модель ацетилена; б — π -связи

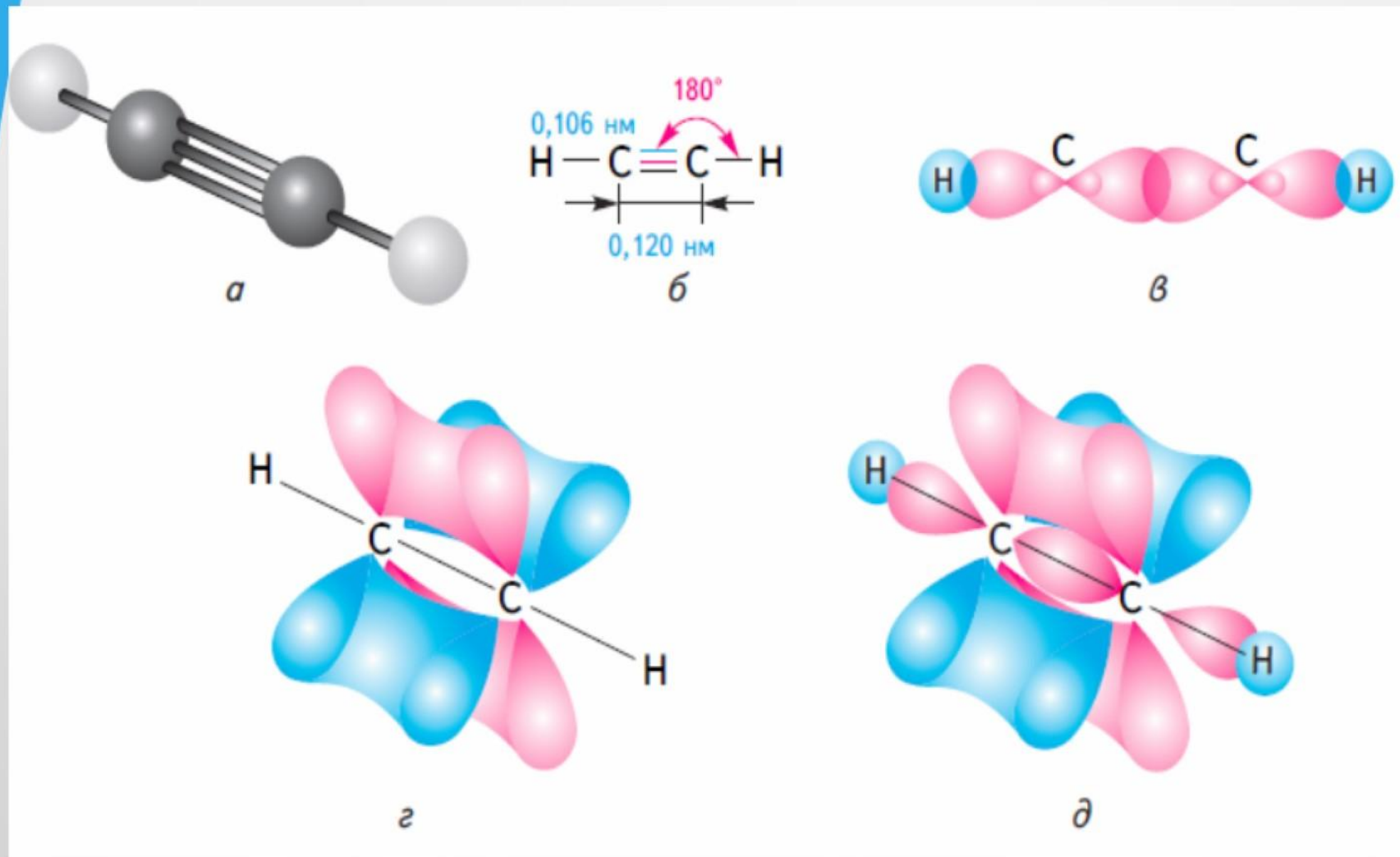


Рис. Строение молекулы ацетилен:
a — шаростержневая модель; *б* — геометрия молекулы; *в* — σ -связи;
г — π -связи; *д* — атомно-орбитальная модель

Задание для самостоятельной работы.

Изобразите атомно-орбитальные модели следующих органических соединений:

- Триметиламин C_3H_9N
- Формальдегид CH_2O
 - Пиридин C_5H_5N
- Диметиловый эфир C_2H_6O
 - Фенол C_6H_5OH
- Уксусная кислота CH_3COOH
 - Формамид CH_3NO
 - Ацетальдегид C_2H_4O
 - Ацетон C_3H_6O
 - Пропадиен

Оглавление:

1. Типы химических связей.
 - 1.1. Ионная связь
 - 1.2. Ковалентная связь.
 - 1.3. Донорно-акцепторная связь.
 - 1.4. Водородная связь.
2. Квантово-механические основы теории химической связи.
 - 2.1. Гибридизация атомных орбиталей.
 - 2.1.1. sp^3 -гибридизация
 - 2.1.2. sp^2 -гибридизация
 - 2.1.3. sp -гибридизация
 - 2.2. Ковалентные σ - и π - связи
 - 2.3. Основные характеристики ковалентной связи.
 - 2.3.1. Длина связи
 - 2.3.2. Энергия связи.
 - 2.3.3. Полярность связи.
 - 2.3.4. Поляризуемость связи.
 - 2.3.5. Направленность связей.

Длина связи.

Длиной связи называют расстояние между центрами связанных в молекуле атомов.

В химической литературе длины связей чаще приводятся в ангстремах (Å°) или нанометрах (нм). В международной системе единиц (СИ) в качестве единицы длины связи применяют пикометры ($1 \text{ нм} = 10 \text{ Å}^\circ = 1000 \text{ пм}$).

Длина связи зависит от природы и типа гибридизации атомов, образующих связь. Чем больше *s*-характер атомов углерода, тем прочнее связь между ними. Чаще всего это объясняют увеличением *s*-характера гибридной орбитали и увеличением площади перекрывания орбиталей.

2.3. Основные характеристики ковалентной связи.

СВЯЗЬ	Длина		СВЯЗЬ	Длина	
	А°	нм		А°	нм
Csp^3-H	1,11	0,111	$C\equiv N$	1,16	0,116
Csp^2-H	1,07	0,107	$C-F$	1,39	0,139
Csp^3-Csp^3	1,54	0,154	$C-Cl$	1,78	0,178
$Csp^2=Csp^2$	1,34	0,134	$C-Br$	1,93	0,193
$Csp\equiv Csp$	1,20	0,120	$C-I$	2,14	0,214
$C-O$	1,43	0,143	$O-H$	0,96	0,096
$C=O$	1,21	0,121	$N-H$	1,01	0,101
$C-N$	1,47	0,147	$S-H$	1,30	0,130
$C=N$	1,28	0,128	$C-S$	1,81	0,181

Оглавление:

1. Типы химических связей.
 - 1.1. Ионная связь
 - 1.2. Ковалентная связь.
 - 1.3. Донорно-акцепторная связь.
 - 1.4. Водородная связь.
2. Квантово-механические основы теории химической связи.
 - 2.1. Гибридизация атомных орбиталей.
 - 2.1.1. sp^3 -гибридизация
 - 2.1.2. sp^2 -гибридизация
 - 2.1.3. sp -гибридизация
 - 2.2. Ковалентные σ - и π - связи
 - 2.3. Основные характеристики ковалентной связи.
 - 2.3.1. Длина связи
 - 2.3.2. Энергия связи.
 - 2.3.3. Полярность связи.
 - 2.3.4. Поляризуемость связи.
 - 2.3.5. Направленность связей.

Энергия связи.

Энергией связи называют энергию, выделяющуюся при образовании химической связи между двумя свободными атомами, или же энергию, которую необходимо затратить на разъединение двух связанных атомов.

Образование связи всегда сопровождается выделением, а ее разрыв — затратой определенного количества энергии.

Энергия, необходимая для гомолитического расщепления отдельной связи в молекуле, называется *энергией диссоциации связи*.

Гомолитическим называют разрыв ковалентной связи, в результате которого каждый из атомов, участвующих в ее образовании, сохраняет один электрон:



Гетеролитическим называют разрыв, в результате которого один из атомов, участвующих в ее образовании, сохраняет оба электрона.

Поскольку энергия диссоциации зависит от структуры молекулы, для характеристики энергии связи обычно используют средние значения энергии диссоциации. Энергию связи выражают в килоджоулях на моль (кДж/моль) или в килокалориях на моль (ккал/моль). Значение энергии связи служит мерой ее прочности.

2.3. Основные характеристики ковалентной связи.

СВЯЗЬ	Энергия		СВЯЗЬ	Энергия	
	кДж/моль	ккал/моль		кДж/моль	ккал/моль
Csp^3-H	414	99	$C\equiv N$	890	213
Csp^2-H	435	104	$C-F$	427	102
Csp^3-Csp^3	348	83	$C-Cl$	339	81
$Csp^2=Csp^2$	620	146	$C-Br$	284	68
$Csp\equiv Csp$	836	200	$C-I$	213	51
$C-O$	368	88	$O-H$	464	111
$C=O$	724	173	$N-H$	389	93
$C-N$	305	73	$S-H$	339	83
$C=N$	598	143	$C-S$	260	64

2.3. Основные характеристики ковалентной связи.

С увеличением s-характера связи ее длина уменьшается, а прочность возрастает. Двойные связи короче и прочнее соответствующих одинарных, а тройные — двойных. Но вместе с тем энергия двойной связи меньше удвоенной, а тройной — утроенной энергии одинарной связи. Это означает, что σ -связь прочнее π -связи.

Например, в молекуле этилена:

$$620 (146) - 348 (83) = 272 \text{ кДж/моль (63 ккал/моль)}$$



Проанализировав элементы в пределах группы периодической системы (например, связь C—Hal), можно увидеть, что при движении сверху вниз длина связи увеличивается, а прочность — уменьшается.

Оглавление:

1. Типы химических связей.
 - 1.1. Ионная связь
 - 1.2. Ковалентная связь.
 - 1.3. Донорно-акцепторная связь.
 - 1.4. Водородная связь.
2. Квантово-механические основы теории химической связи.
 - 2.1. Гибридизация атомных орбиталей.
 - 2.1.1. sp^3 -гибридизация
 - 2.1.2. sp^2 -гибридизация
 - 2.1.3. sp -гибридизация
 - 2.2. Ковалентные σ - и π - связи
 - 2.3. Основные характеристики ковалентной связи.
 - 2.3.1. Длина связи
 - 2.3.2. Энергия связи.
 - 2.3.3. Полярность связи.
 - 2.3.4. Поляризуемость связи.
 - 2.3.5. Направленность связей.

Полярность связи.

Полярностью связи называют неравномерное распределение электронной плотности связи, обусловленное различной электроотрицательностью атомов.

Электроотрицательность — это способность атома притягивать электроны.

Она зависит от эффективного заряда ядра атома и вида гибридизации атомных орбиталей. Наиболее известна шкала электроотрицательности, составленная американским химиком Лайнусом Карлом Полингом

Атом	H	S	Csp ³	I	Csp ²	Br	Cl	N	Csp	O	F
ЭО	2,1	2,5	2,5	2,6	2,8	2,8	3,0	3,0	3,2	3,5	4,0

Электроотрицательность атома углерода возрастает при переходе от sp^3 - к sp -гибридному состоянию, что объясняется увеличением s -характера орбиталей.

2.3. Основные характеристики ковалентной связи.

Полярная ковалентная связь образуется между атомами с различной электроотрицательностью, а также между атомами с одинаковой электроотрицательностью, но которые в свою очередь связаны с атомами, имеющими другую электроотрицательность:



В молекуле хлорэтана атом хлора поляризует не только связь С—Сl, но и связь С—С.

Количественно полярность связи выражается значением дипольного момента, который обозначают буквой μ (греч. «мю»).

Дипольный момент равен произведению расстояния между «центрами тяжести» положительных и отрицательных зарядов на их значение.

Оглавление:

1. Типы химических связей.
 - 1.1. Ионная связь
 - 1.2. Ковалентная связь.
 - 1.3. Донорно-акцепторная связь.
 - 1.4. Водородная связь.
2. Квантово-механические основы теории химической связи.
 - 2.1. Гибридизация атомных орбиталей.
 - 2.1.1. sp^3 -гибридизация
 - 2.1.2. sp^2 -гибридизация
 - 2.1.3. sp -гибридизация
 - 2.2. Ковалентные σ - и π - связи
 - 2.3. Основные характеристики ковалентной связи.
 - 2.3.1. Длина связи
 - 2.3.2. Энергия связи.
 - 2.3.3. Полярность связи.
 - 2.3.4. Поляризуемость связи.
 - 2.3.5. Направленность связей.

Поляризуемость связи.

Под «поляризуемостью» понимают легкость, с которой смещаются электроны связи под влиянием внешних воздействий (электрическое поле, реагирующая частица и др.). Другими словами, поляризуемость — это способность электронного облака связи к поляризации при действии внешнего электрического поля или электрически заряженных частиц. В результате внешних воздействий происходит деформация электронного облака связи, возрастает ее полярность (увеличивается дипольный момент). Следует отличать понятия «поляризуемость» и «полярность» связи. Если полярность обусловлена различной электроотрицательностью связанных атомов, то поляризуемость определяется степенью подвижности электронов связи. Полярность — это статическое явление, а поляризуемость — динамическое.

Поляризуемость не всегда согласуется с полярностью. Так, полярность связи $C-NaI$ в ряду $C-F > C-Cl > C-Br > C-I$ уменьшается, а ее поляризуемость, напротив, увеличивается.

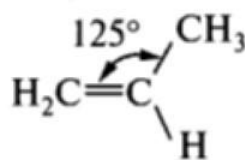
При сравнении поляризуемости σ - и π -связей необходимо отметить, что π -связи поляризуются гораздо легче, чем σ -связи, поскольку π -электронная плотность находится дальше от атомных ядер. Как и полярность, поляризуемость влияет на реакционную способность веществ, но ее вклад значительно больше.

Оглавление:

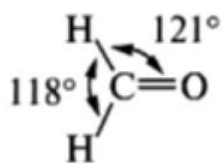
1. Типы химических связей.
 - 1.1. Ионная связь
 - 1.2. Ковалентная связь.
 - 1.3. Донорно-акцепторная связь.
 - 1.4. Водородная связь.
2. Квантово-механические основы теории химической связи.
 - 2.1. Гибридизация атомных орбиталей.
 - 2.1.1. sp^3 -гибридизация
 - 2.1.2. sp^2 -гибридизация
 - 2.1.3. sp -гибридизация
 - 2.2. Ковалентные σ - и π - связи
 - 2.3. Основные характеристики ковалентной связи.
 - 2.3.1. Длина связи
 - 2.3.2. Энергия связи.
 - 2.3.3. Полярность связи.
 - 2.3.4. Поляризуемость связи.
 - 2.3.5. Направленность связей.

Направленность связей.

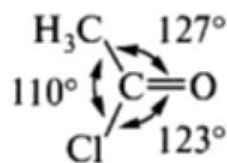
Ковалентные связи имеют определенную направленность в пространстве. Электронные пары, образующие химические связи, стремятся занять такое пространственное положение относительно друг друга, чтобы силы электростатического отталкивания между ними были минимальными. Углы между направлениями связей в молекуле называют валентными углами. Значение валентного угла зависит от состояния гибридизации атомных орбиталей и природы атомов, образующих связи. Так, углы между связями С—Н в метане составляют $109^{\circ} 28'$. Однако это справедливо только в тех случаях, когда атом углерода связан с четырьмя одинаковыми заместителями. В большинстве же случаев наблюдаются небольшие отклонения от угла правильного тетраэдра. Например, в пропане угол С—С—С равен $112^{\circ} 5'$, в молекуле 2-бромпропана валентный угол С—С—Br составляет $114^{\circ} 2'$. Аналогично незначительное отклонение от валентных углов 120° и 180° наблюдается в соединениях с атомом углерода в sp^2 - и sp -гибридизации. Ниже приведены примеры валентных углов ряда соединений, содержащих атом углерода в состоянии sp^2 -гибридизации:



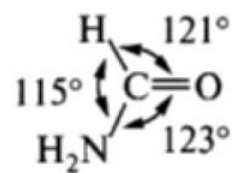
пропен



формальдегид



ацетилхлорид



формамид