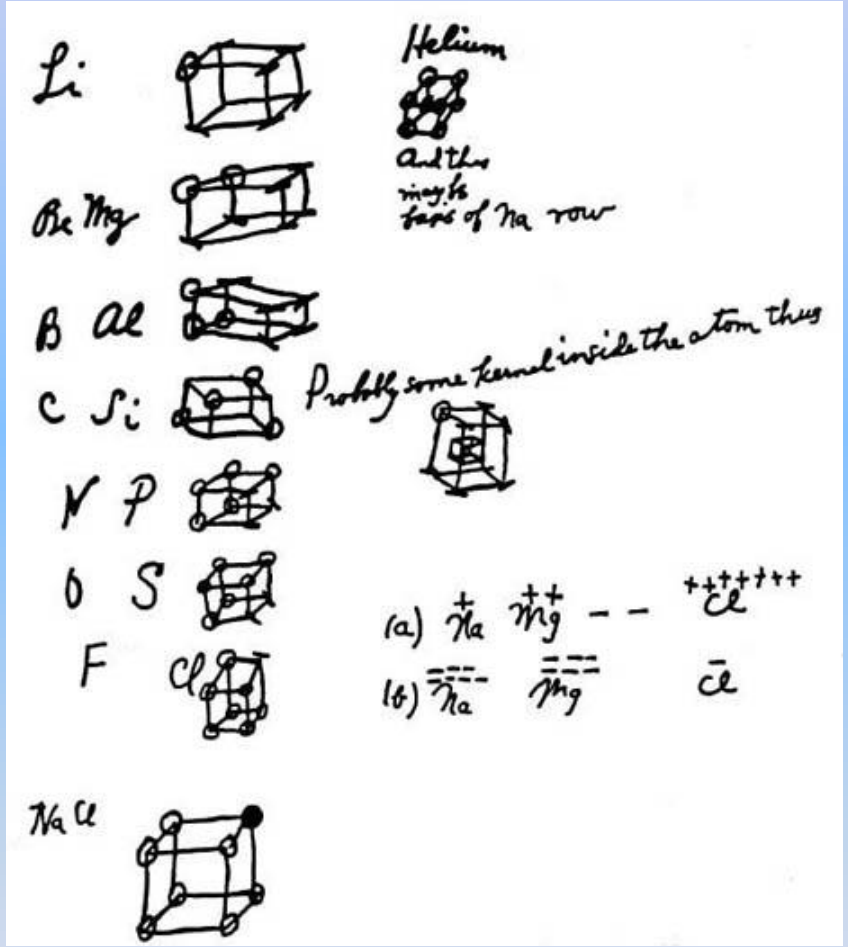
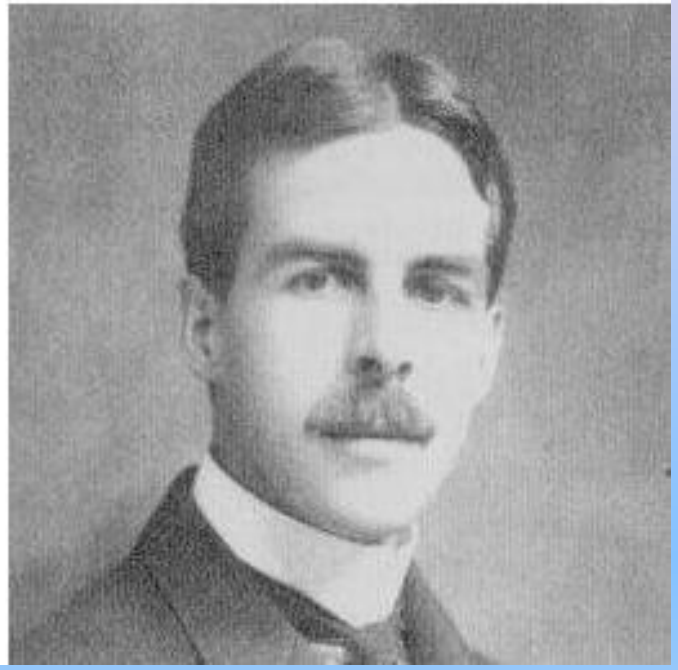
Лекція № Дата

ХІМІЧНИЙ ЗВ’ЯЗОК ТА БУДОВА МОЛЕКУЛ



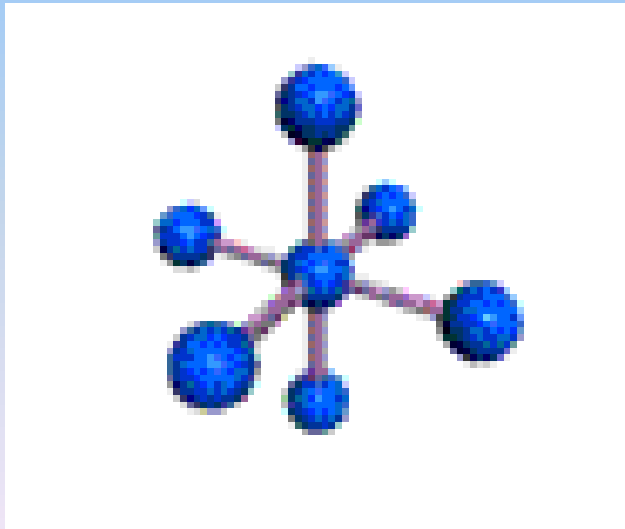


Одна з первших дійсно успішних теорій хімічного зв’язку бУла сформульорована **G.N.Lewis**,

(стаття *The Atom and the Molecule*, 1916).

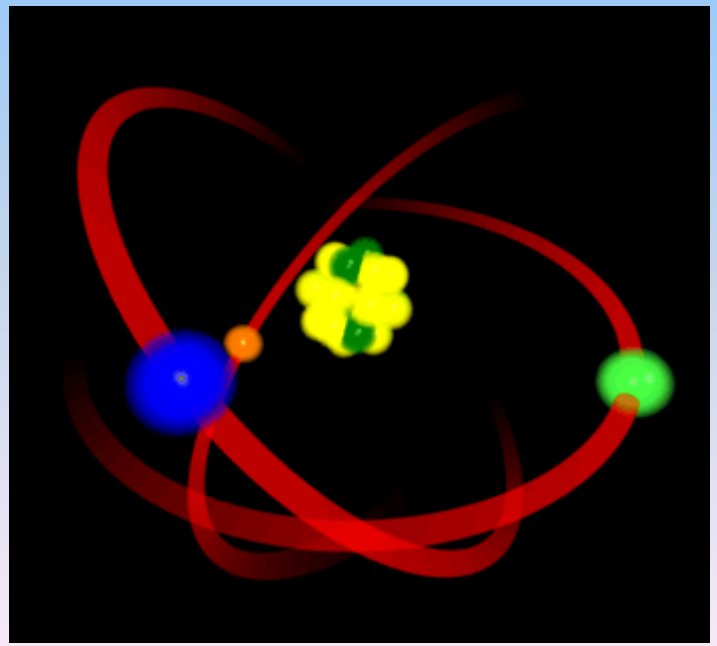
Хімічний зв'язок *це всі види взаємодії між атомами, які забезпечують стійке існування молекул, іонів, радикалів, кристалів*

В основі хімічного зв'язку завжди ***електростатична взаємодія*** *заряджених частинок.*



Види хімічного зв’язку:

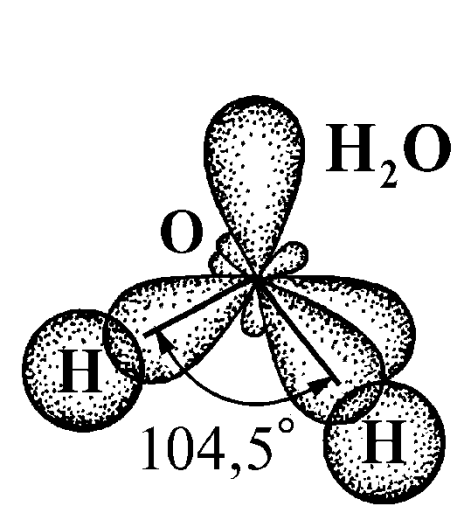
– ковалентний (полярний і неполярний);
– іонний;
– металічний;
– водневий;
– міжмолекулярна взаємодія
(ван-дер-ваальсова взаємодія).



Основні параметри

хімічного зв'язку :

– ***доджина зв'язку l***
відстань між центрами атомів в молекулі

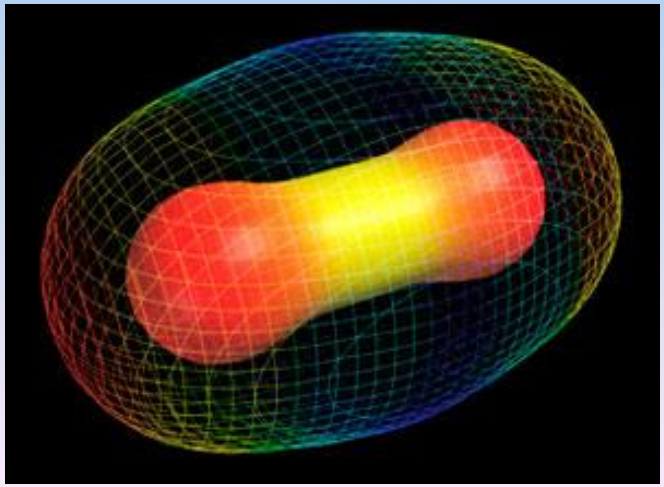


– ***валентні кути***, *утворені умовними лініями, що з'єднують центри взаємодіючих атомів*

– ***енергія зв'язку*** – *енергія, яка виділяється при утворенні зв'язку* ***(E, кДж/моль)***.

Чисельно ***енергія зв'язку*** *дорівнює кількості теплоти, яка виділяється в результаті утворення з атомів одного моль речовини за стандартних умов*.

Величину зворотню величині енергії зв'язку називають ***енергією дисоціації зв'язку*** – це енергія, яку необхідно затратити на розрив зв'язку (Е, кДж/моль).
Її позначають *D*, вимірюють в кДж/моль.



Для характеристики хімічного зв’язку в молекулах використовують два методи:

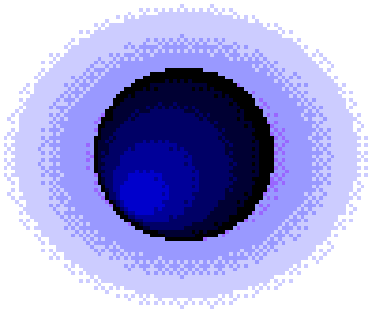
метод валентних зв’язків (ВЗ) і

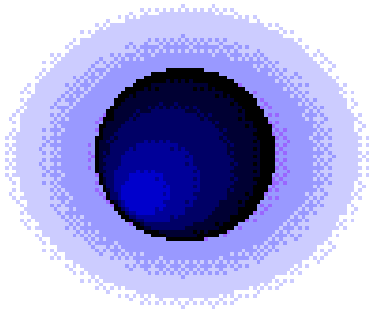
метод молекулярних орбіталей (МО)

Ковалентний зв’язок

Ковалентний зв’язок – це *хімічний зв’язок за рахунок утворення* ***загальної електронної пари.***

Це двоелектронний і двоцентровий зв’язок (утримує два ядра).



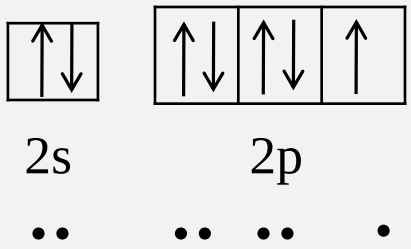


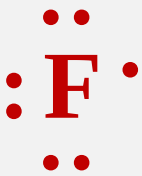
Механізм утворення ковалентного зв'язку на прикладі утворення молекули водню:

$H\cdot + H\cdot = H_2$, $\Delta H = -436$ кДж/моль.

молекула F_2

F $1s^2\underline{2s^2 2p^5}$





(одинарний зв'язок)

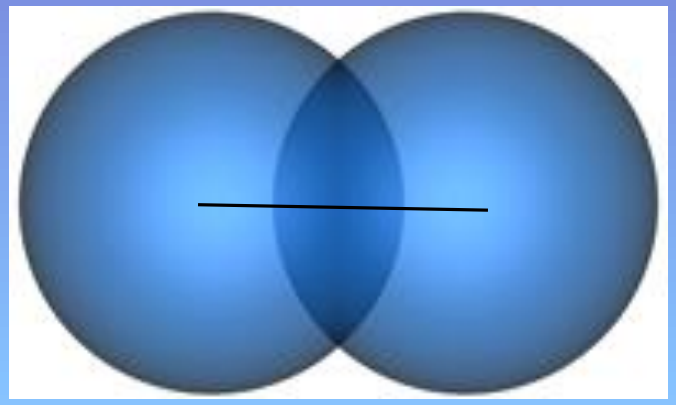


Рис. Зміна потенциальної енергії системи з двох атомів Гідрогена

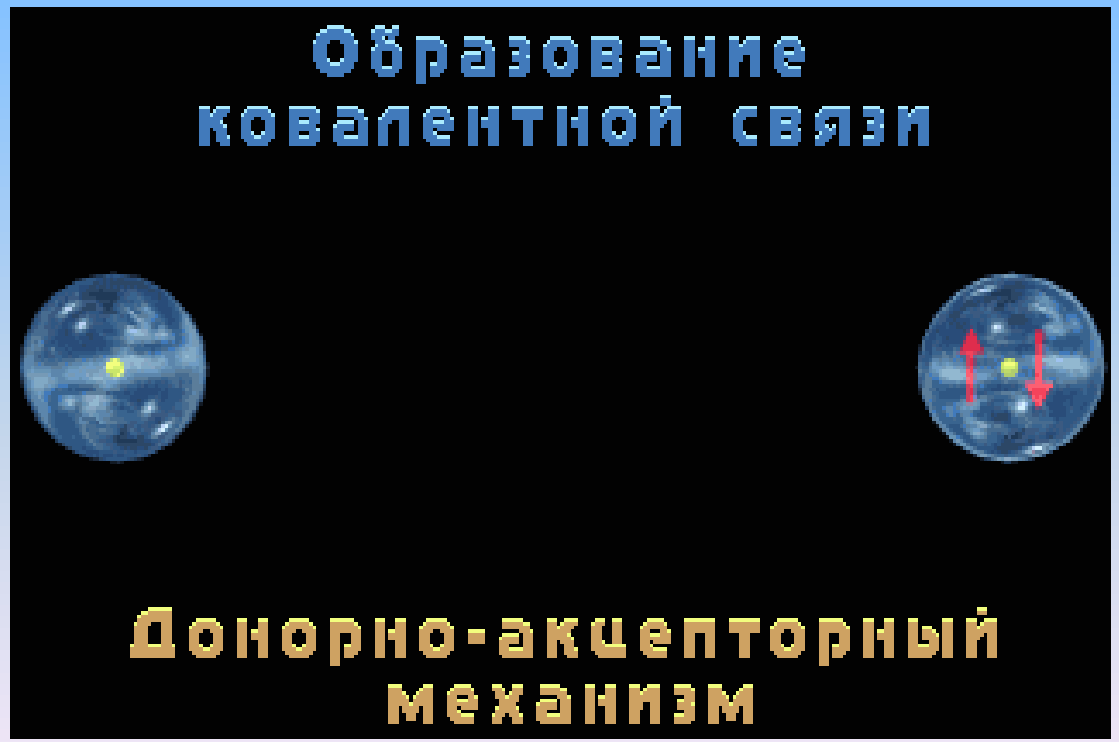
Ковалентний зв’язок може утворюватися задопомогою *обмінного і донорно-акцепторного механизму*.

Механізм утворення хімічного зв’язку за рахунок усуспільнення електронів і утворення спільних електронних пар назвабють***обмінним***.

Механізм утворення ковалентного зв’язку за рахунок двоелектронної хмари однієї частинки і вільної орбіталі іншої, називають ***донорно-акцепторним***.

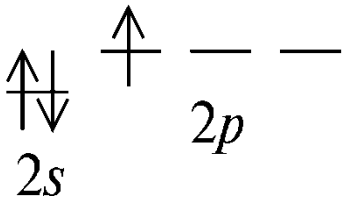
➢Частинку, яка для утворення ковалентного зв’язку надає пару електронів, називають ***донором.***

➢Частинку із вільною орбіталлю, яка приймає цю електронну пару, називають ***акцептором.***

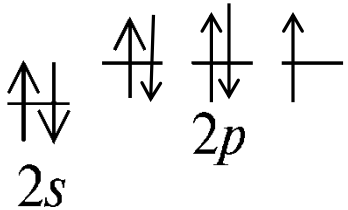


Утворення BF_3 і BF_4^- згідно методу ВЗ

B $2s^2 2p^1$

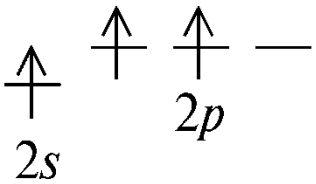


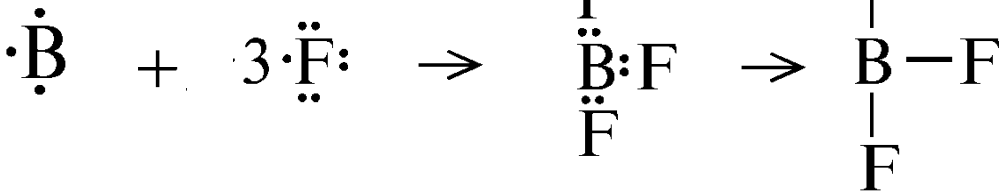
F $1s^2 \underline{2s^2 2p^5}$



Збуджений стан

B^* $2s^1 2p^2$





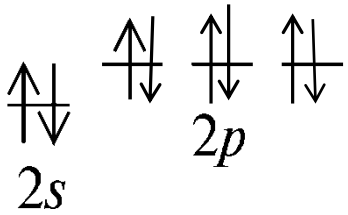
Валентність бора дорівнює III

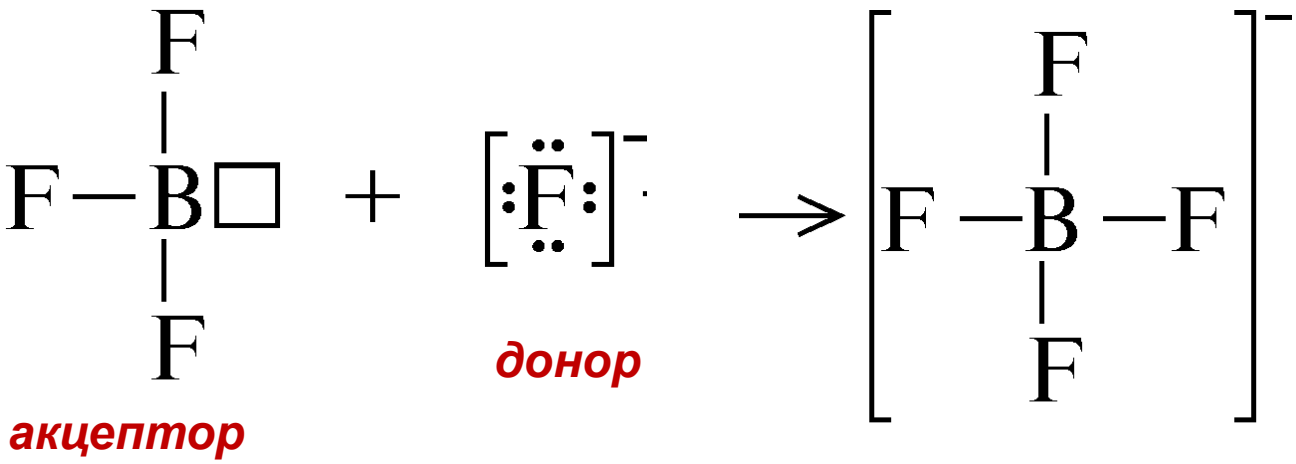
Валентність –

число ковалентних зв'язків,
які утворює атом даного елемента
в основному чи збудженому стані
як за обмінним, так і за донорно-акцепторним механізмами
кількість орбіталей валентного рівня, які приймають участь
в утворенні хімічного зв'язку.

BF_4^-

F^- $1s^2\underline{2s^2 2p^6}$





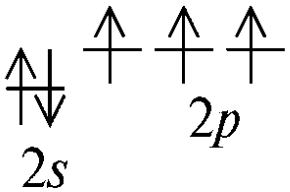
Валентність бора дорівнює IV

Завдання 1. Напишить електронно-графічну формулу атома Нітрогена. Чому дорівнює валентність і ступінь окиснення Нітрогена в HNO_3?

Відповідь:

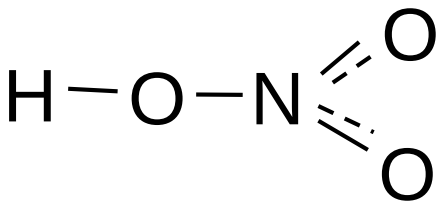
$$\overset{+1}{H}\overset{+5}{N}\overset{-2}{O_3}$$

N $2s^2 2p^3$



H $\underline{1s^1}$

O $1s^2\underline{2s^2 2p^4}$



Валентність Нітрогена дорівнює IV
Ступінь окиснення Нітрогена +5

Згідно методу ВЗ

основні властивості

ковалентного зв'язку це

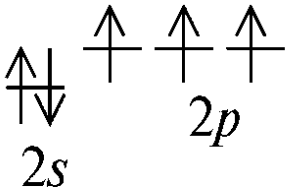
- **насиченість,**
- **спрямованість,**
- **полярність і поляризованість**

Насиченість *– це здатність атомів утворювати обмежену кількість хімічних зв'язків.*

H $\underline{1s^1}$

атом Гідрогена може утворювати ***один*** *зв'язок*

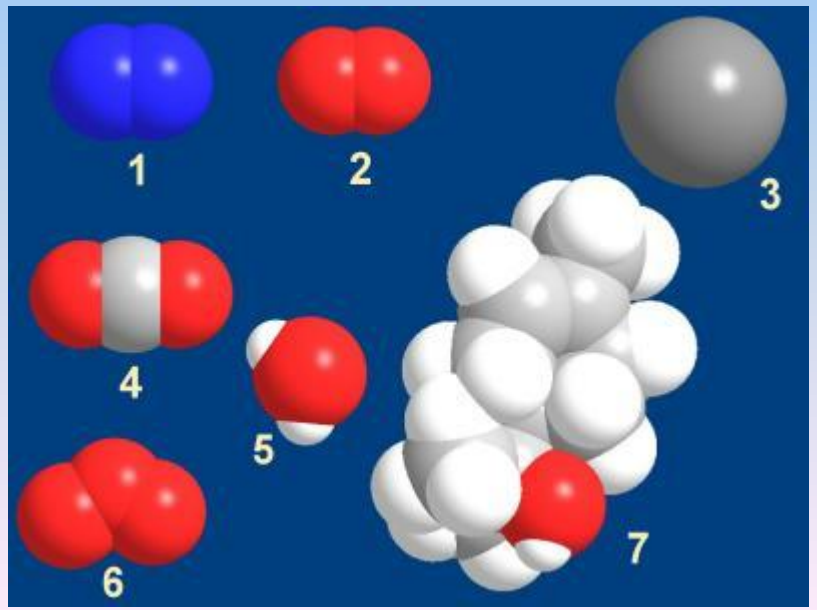
N $2s^2 2p^3$



атом Нітрогена може утворювати ***чотири*** *зв'язки*

Завдяки насиченості ковалентного зв'язку молекули мають певний хімічний склад і існують у вигляді дискретних частинок з певною структурою (H_2, H_2O, CH_4).

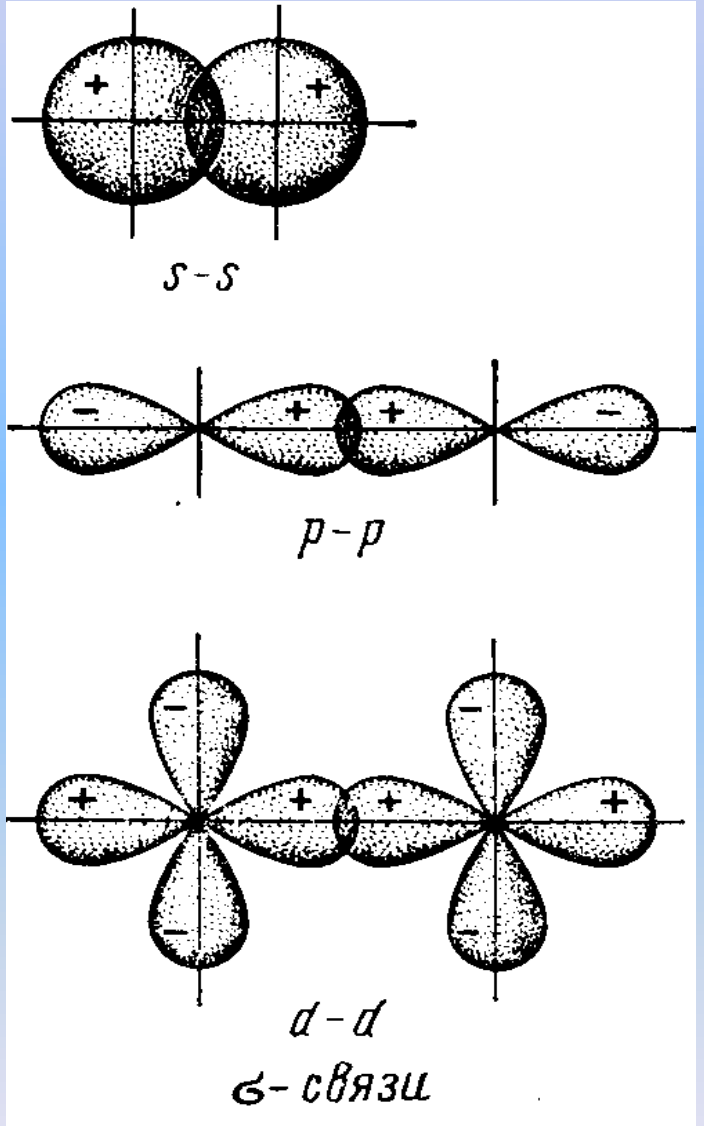
Насиченість визначає *формулу* хімічної сполуки.



Моделі молекул (лісове повітря):
1 - азот,
2 - кисень,
3 - аргон,
4 - вуглекислий газ,
5 - вода,
6 - озон,
7 - терпінеол

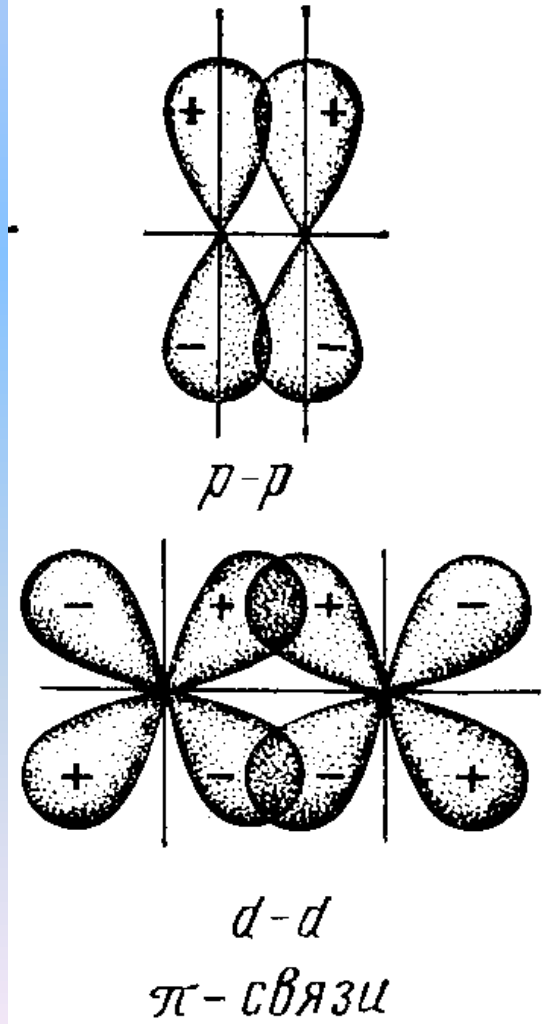
Спрямованість *ковалентного зв'язку обумовлює просторову структуру молекул – геометрію молекул. Кількісна характеристика спрямованості ковалентного зв'язку це валентні кути.*

Утворення ковалентного зв'язку це результат перекривання електронних хмар взаємодіючих атомів.
В залежності від способа перекривання і симетрії утвореної електронної хмари, розрізняють ***σ-, π- і δ- зв'язки****.*



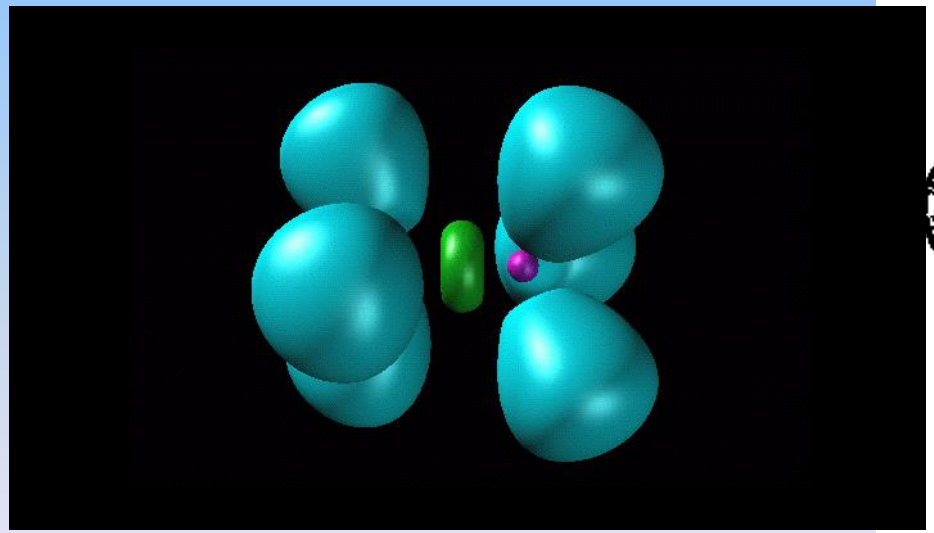
σ-Зв'язки *утворюються при перекриванні атомних орбіталей вздовж лінії,яка з'єднує центри атомів.*

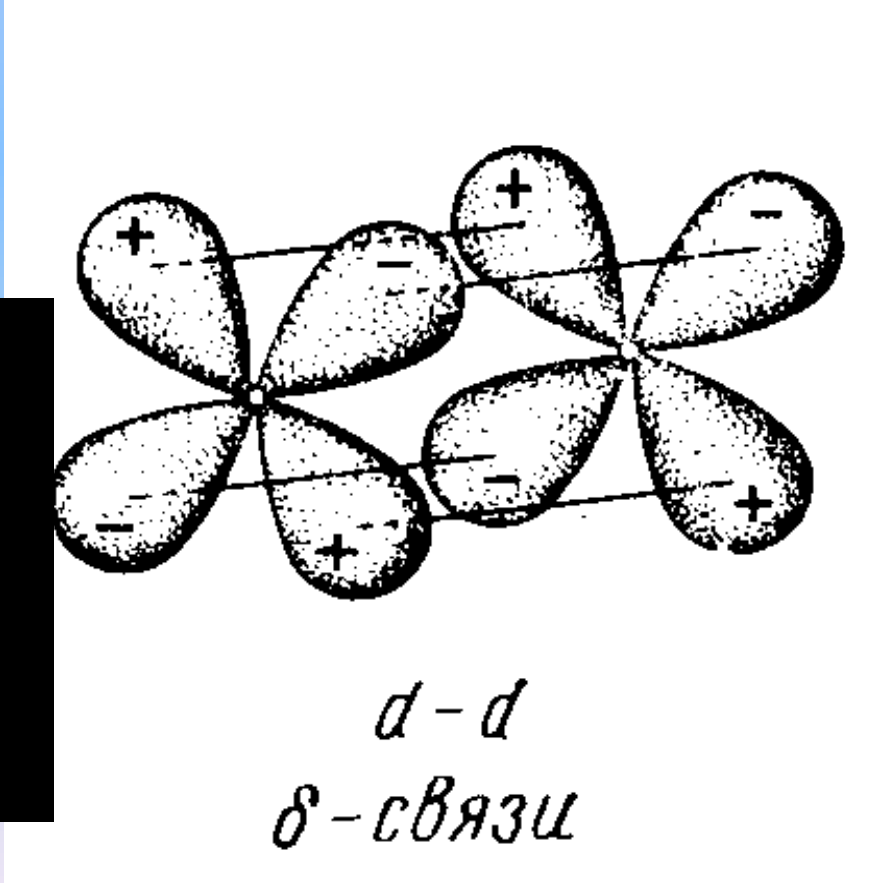
Молекули з такими зв'язками мають лінійну форму с валентним кутом 180°



π-Зв'язки виникають при перекриванні електронних хмар, орієнтованих перпендикулярно до осі зв'язку, при цьому утворюються дві області перекривання, розташовані з обох боків від лінії, яка з'єднує центри атомів

δ-Зв'язки утворюються перекрыванням чотирьох лопастей *d*-електронних хмар, розташованих в паралельних площинах





Теорія гібридизації

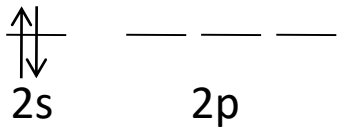
*Хімічні зв'язки здійснюються внаслідок перекривання змішаних - **гібридних орбіталей**.*

*При гібридизації **початкова форма** і **енергія** орбіталей змінюються, утворюються орбіталі однакової форми і енергії.*

sp-Гібридизація

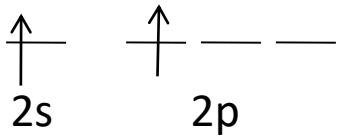
$BeCl_2$

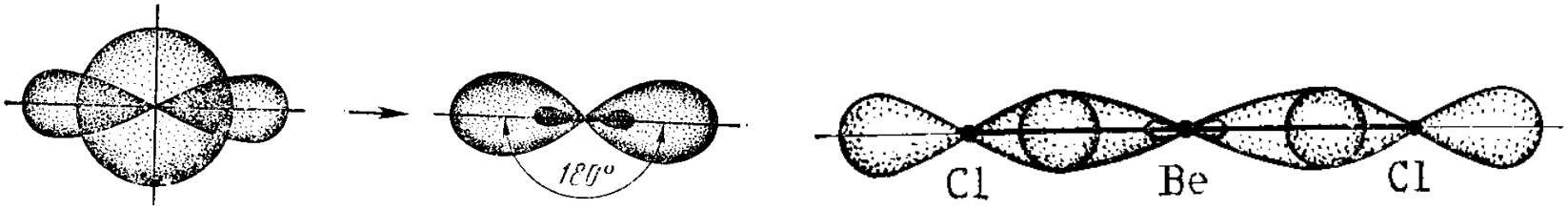
Be $1s^2\underline{2s^2 2p^0}$



в збудженому стані

Be* $1s^2\underline{2s^1 2p^1}$

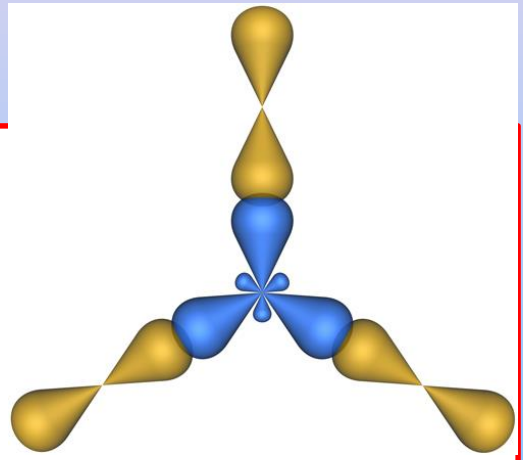




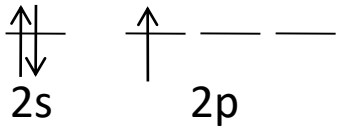
s + *p*-орбіталі | *sp*-гібридизовані орбіталі | лінійна молекула $BeCl_2$

sp^2-Гібридизація

BCl_3

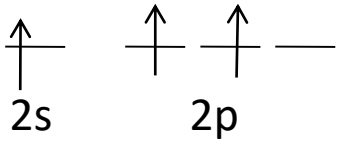


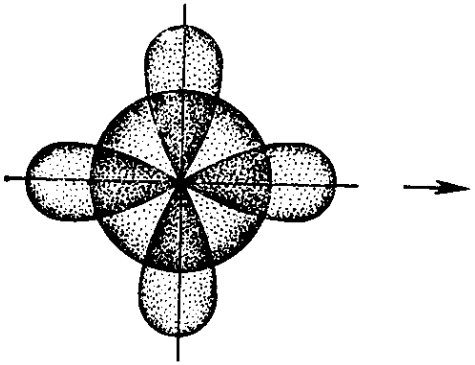
B $1s^2\underline{2s^2 2p^1}$



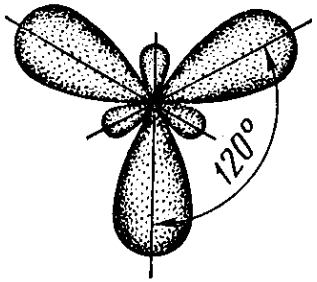
в збудженому стані

B* $1s^2\underline{2s^1 2p^2}$

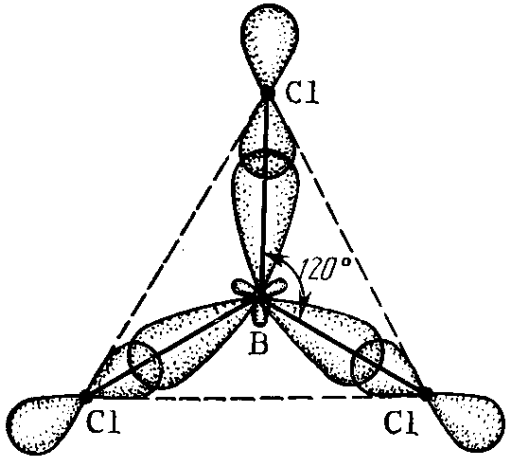




s + 2*p*-орбіталі

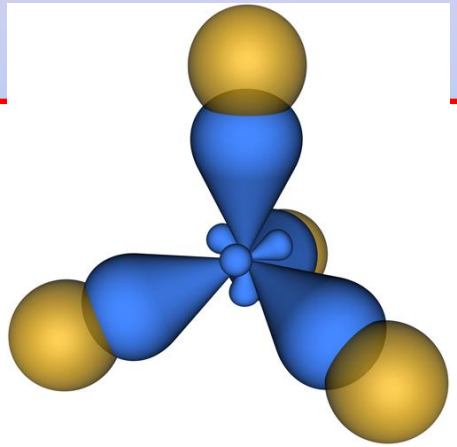


^{sp2}-гібридизовані орбіталі



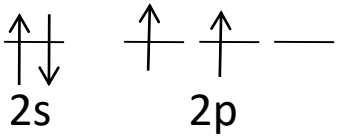
sp^2-гібридизація валентних орбіталей атома бора

sp^3-Гібридизація



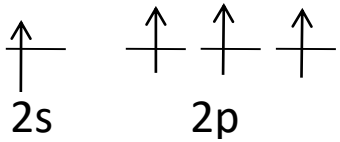
CH_4

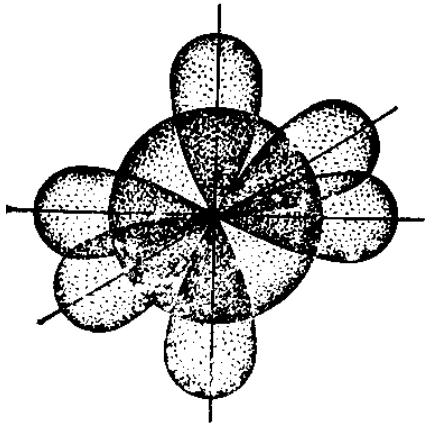
C $1s^2\underline{2s^2 2p^2}$



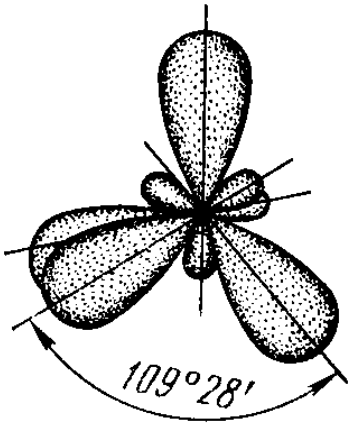
в збудженому стані

C* $1s^2\underline{2s^1 2p^3}$





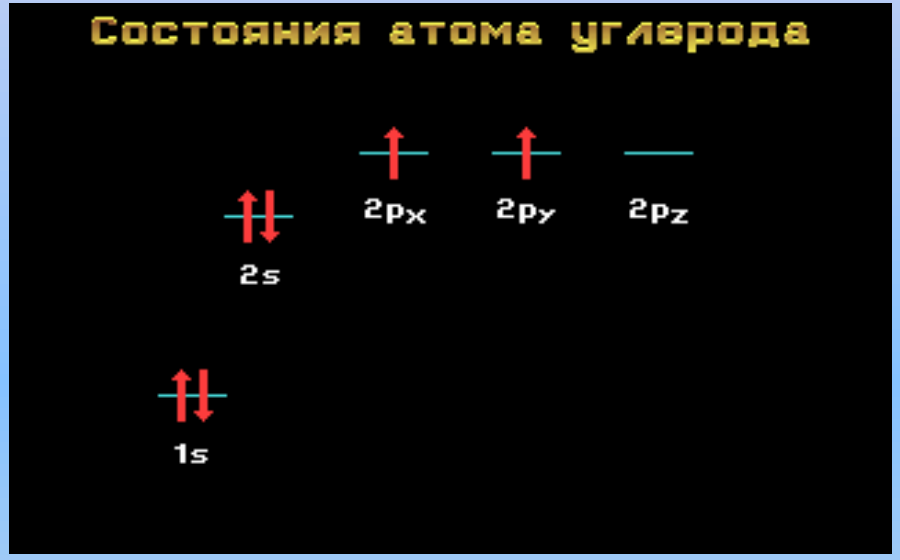
(s+p+p+p)-орбіталі

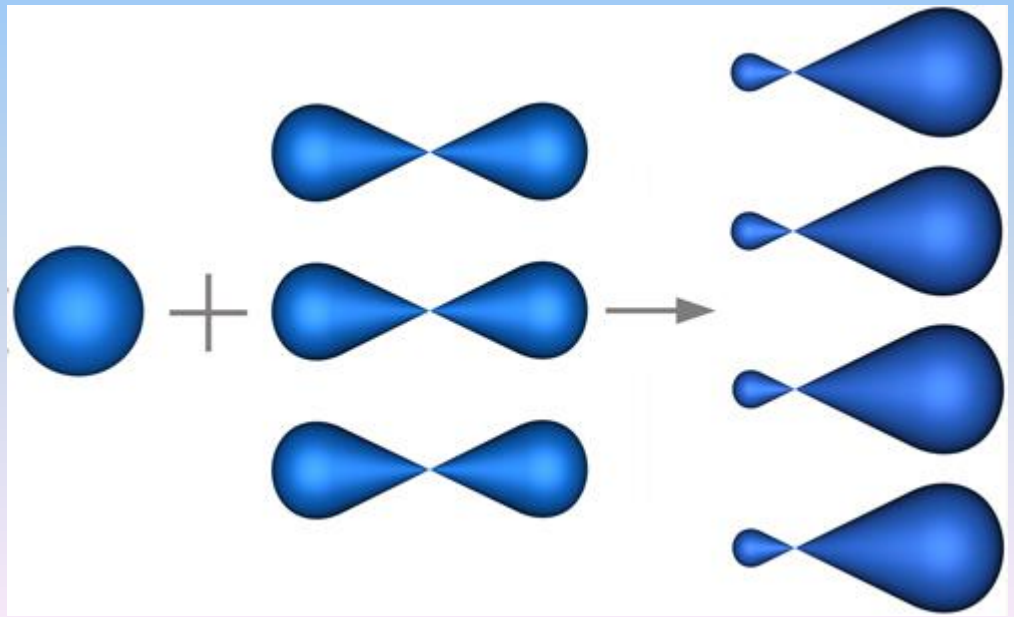


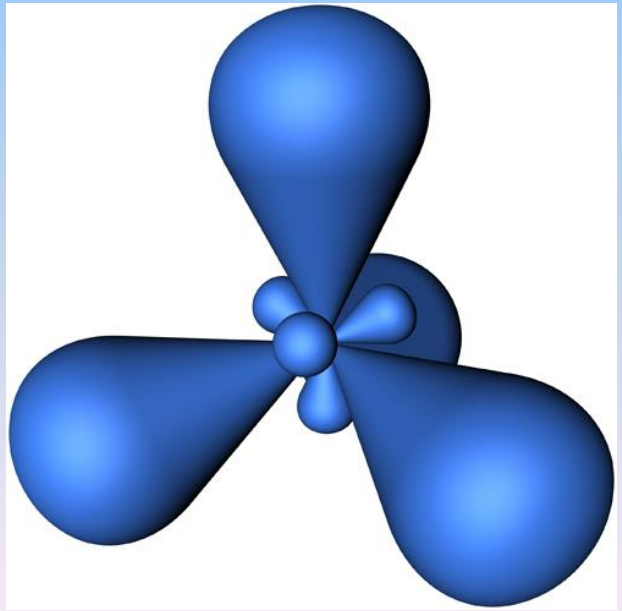
чотири sp^3-гібридні орбіталі

sp^3-Гібридизація атомних орбіталей

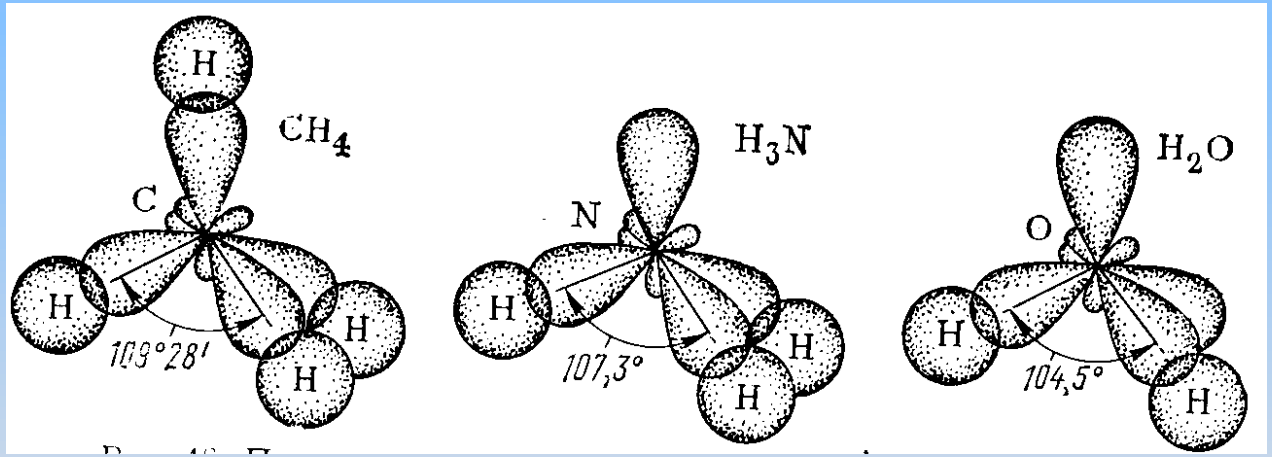
C* $2s^1 2p^3$







sp^3-гібридизацією атомних орбіталей пояснюється рівноцінність чотирьох зв'язків атома Карбона в сполуках CH_4, CF_4, CCl_4, $C(CH_3)_4$ їх спрямованість під однаковими (тетраедричними) кутами.



Перекривання орбіталей в молекулах CH_4, NH_3, H_2O

Тип гібридизації центрального атома	***Просторова конфігурація молекули***	***Тип молекули***
sp	*лінійна*	AB_2
sp^2	*трикутна*	AB_3
sp^3	*тетраедрична* *тригонально-пірамідальна* *кутова*	AB_4 AB_3 AB_2
dsp^3 sp^3d	*тригональна-бипірамідальна*	AB_5
d^2sp^3 sp^3d^2	*октаедрична*	AB_6

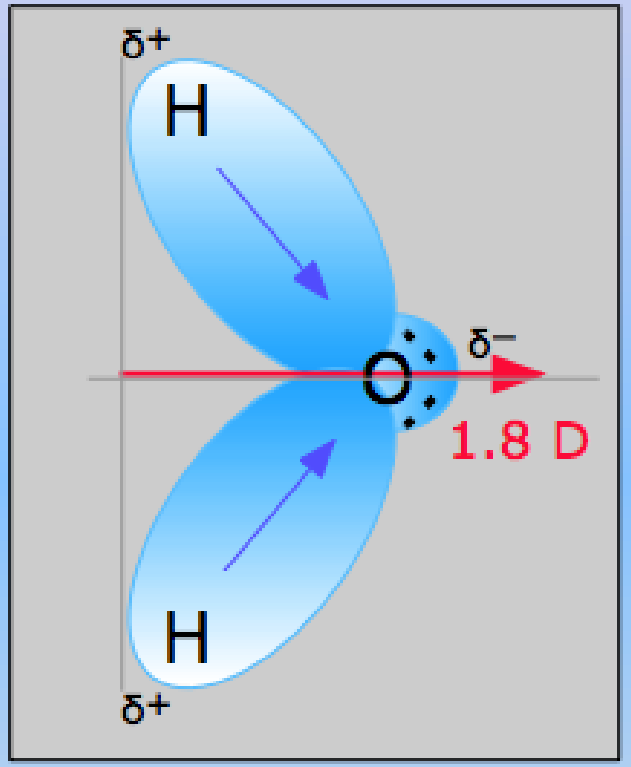
Полярність *ковалентного зв'язку – зміщення електронної пари до більш електронегативного атому*.

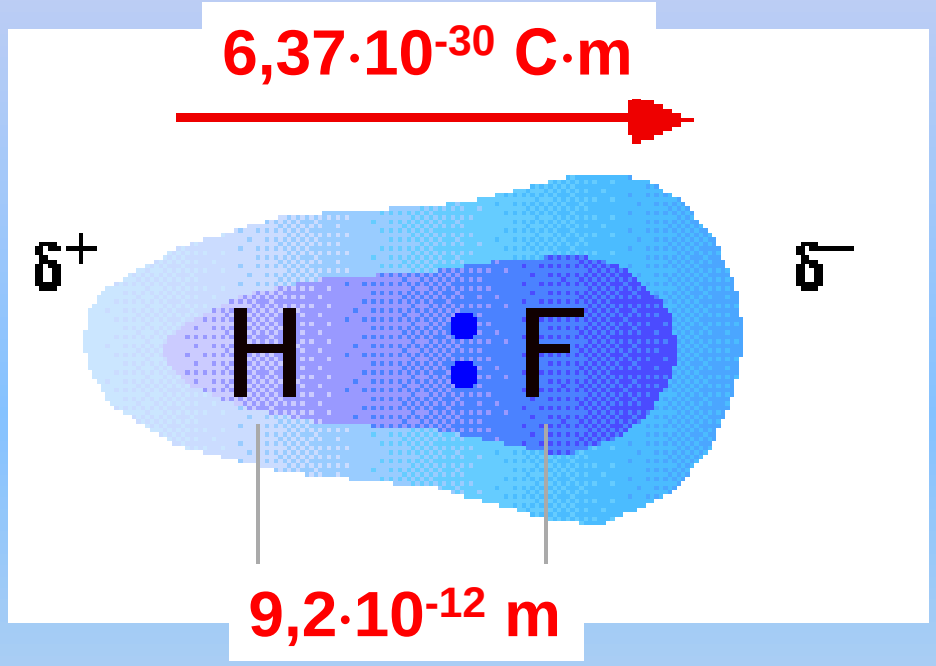
Полярні молекули це ***диполі***
- *системи двох рівних по величині і протилежних за знаком зарядів* ***(+q і –q),***
які знаходяться на відстані ***l*** *один від одного.*

Величину зміщення електронів характеризує величина

дипольного електричного момента μ :

$$\mu = q \times l$$





D – Дебай – величина *дипольного момента*
Peter Debye (1884-1966) Датско-Американский фізик,
Nobel Prize for Chemistry in 1936

Відносна електронегативність елементів

	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII		
I	H 2.1									
II	Li 1.0	Be 1.5	B 2.0	C 2.5	N 3.0	O 3.5	F 4.0			
III	Na 0.9	Mg 1.2	Al 1.5	Si 1.8	P 2.1	S 2.5	Cl 3.0			
IV	K 0.8	Ca 1.0	Sc 1.3	Ti 1.5	V 1.6	Cr 1.6	Mn 1.5	Fe 1.8	Co 1.8	Ni 1.8
	Cu 1.9	Zn 1.6	Ga 1.6	Ge 1.8	As 2.0	Se 2.4	Br 2.8			
V	Rb 0.8	Sr 1.0	Y 1.2	Zr 1.4	Nb 1.6	Mo 1.8	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.2	Pd 2.2
	Ag 1.9	Cd 1.7	In 1.7	Sn 1.8	Sb 1.9	Te 2.1	I 2.5			
VI	Cs 0.7	Ba 0.9	La 1.1	Hf 1.3	Ta 1.5	W 1.7	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.2	Pt 2.2
	Au 2.4	Hg 1.9	Ti 1.8	Pb 1.8	Bi 1.9	Po 2.0	At 2.2			
VII	Fr 0.7	Ra 0.9	Ac 1.1							

За величиною різниці відносної електронегативності елементів ($\Delta\chi$) можливо визначити характер зв'язку між ними.

$0 < \Delta\chi < 0.4$	ковалентний ***неполярний***;
$0.5 < \Delta\chi < 1.9$	ковалентний ***полярний***;
$\Delta\chi > 2.0$	зв'язок іонний

Завдання 2. Визначте тип хімічного зв'язку в молекулах: O_2, HCl, CH_4, NaCl.

Відповідь:

O_2 $\Delta\chi(O - O) = \chi(O) - \chi(O) = 3.5 - 3.5 = 0$

ковалентний неполярний

HCl $\Delta\chi(H - Cl) = \chi(Cl) - \chi(H) = 3.0 - 2.1 = 0.9$

ковалентний полярний

CH_4 $\Delta\chi(H - C) = \chi(C) - \chi(H) = 2.5 - 2.1 = 0.4$

ковалентний неполярний

NaCl $\Delta\chi(Na - Cl) = \chi(Cl) - \chi(Na) = 3.0 - 0.9 = 2.1$

іонний

Поляризованість

- *здатність молекул (і окремих зв'язків) поляризуватися під дією зовнішнього електричного поля.*

- *користуючисьсь значеннями відносної електронегативності елементів, можна кількісно оцінити стан атома в сполуці у вигляді так званого* ***ступеня окиснення****.*

Ступінь окиснення

– електричний заряд атома в сполуці, якщо вважаємо, що молекула нейтральна, складається з іонів

– умовний заряд атома при повному переході електронних пар до більш електронегативного атома.

$\overset{0}{O_2}$ $\overset{+1}{H_2}\overset{-2}{O}$ $\overset{+2}{O}\overset{-1}{F_2}$

$\chi(F) = 4{,}0$ $\chi(O) = 3{,}5$

$\chi(H) = 2{,}1$

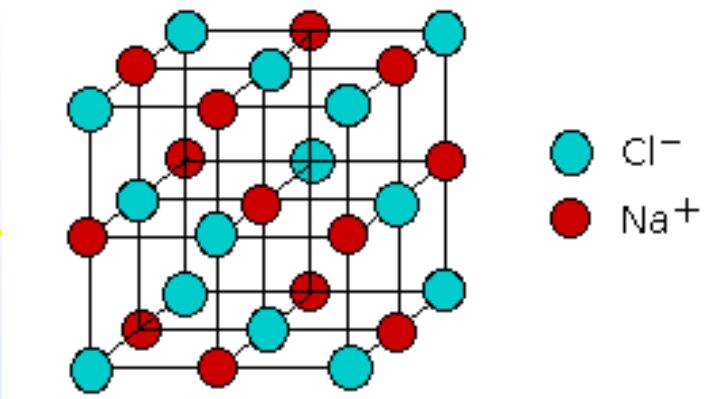
$\overset{+1}{H_2}\overset{+6}{S}\overset{-2}{O_4}$

$2\cdot(+0)+x+4\cdot(-2) = 0$

$+2+x-8 = 0$

$x = +6$

Іонний зв'язок



- *це хімічний зв'язок за рахунок*

електростатичного притяжіння

протилежно заряджених ***іонів***

NaCl

$Na - e^- = Na^+$

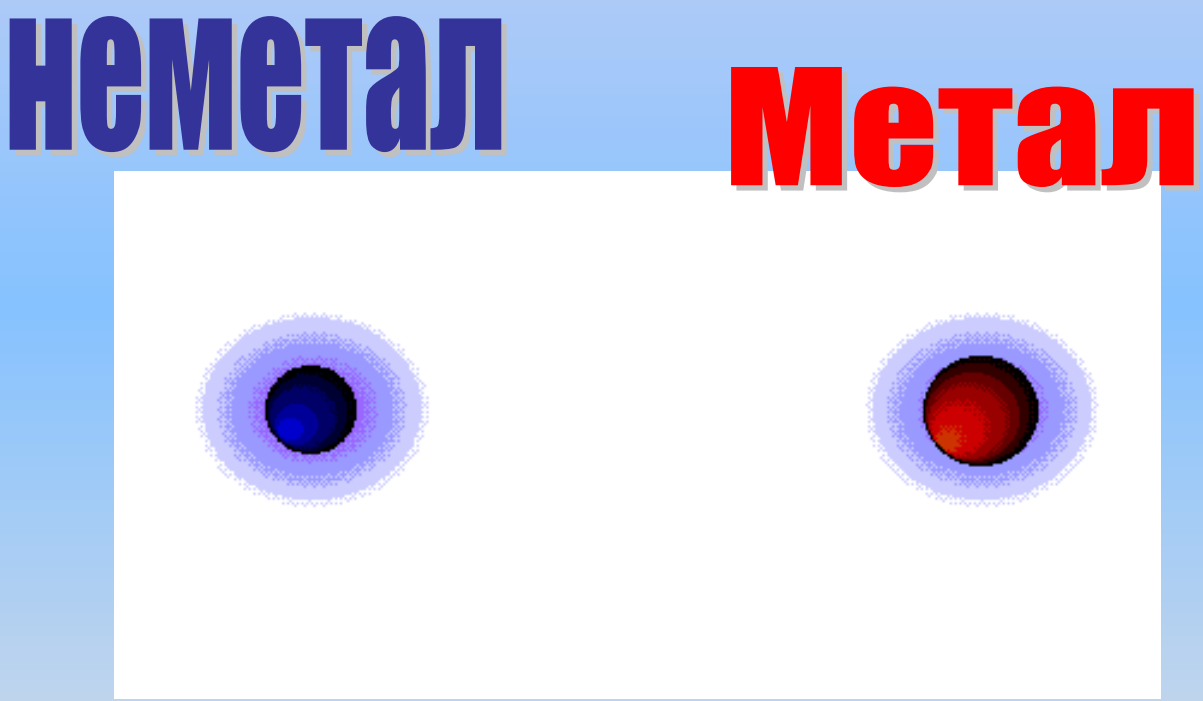
катіон

$Cl + e^- = Cl^-$

аніон

Іонний зв'язок ненасичений і неспрямований.

Утворення іонного зв’язку



Нейтральні атоми притягуються.
Електрон(и) переходять від Метала до НеМетала.
Електростатичні сили притяжіння тримають їх разом.

Завдання 3.

Напишіть електронні формули іонів Br^{-}, Li^{+}.

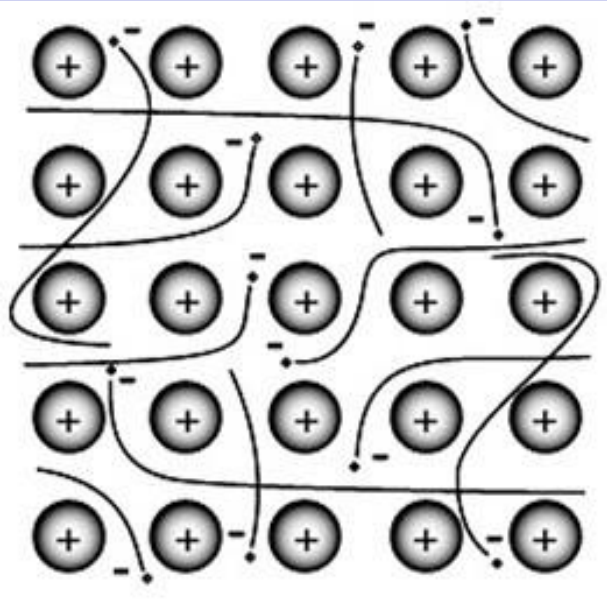
Br^{0} $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} \underline{4s^2 4p^5}$

Br^{-1} $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} \underline{4s^2 4p^6}$ Br^{-1} [Xe]

Li^{0} $1s^2 \underline{2s^1}$

Li^{+1} $1s^2 \underline{2s^0}$ Li^{+1} [He]

Металічний зв’язок



- *це зв’язок між катіонами металів, які знаходяться в вузлах кристалічної решітки і «електронним газом»*

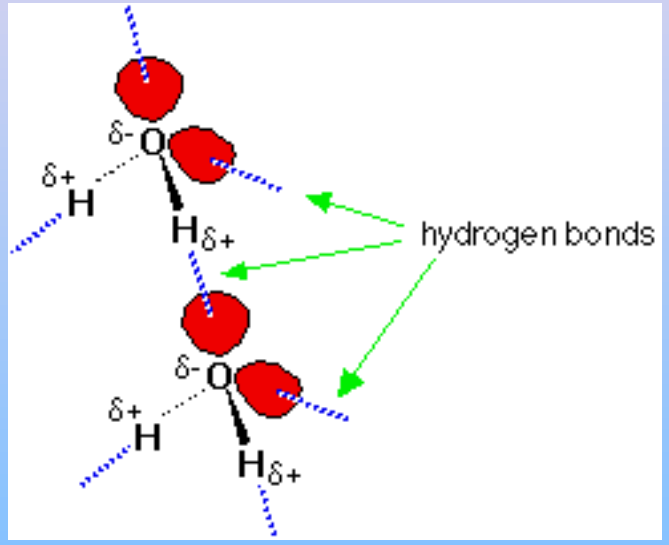
Приклад – метали

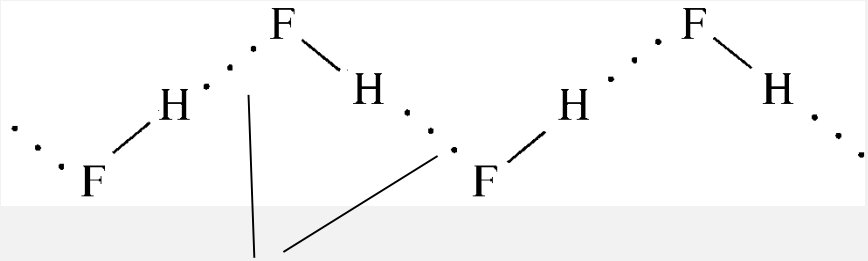
золото Au,

залізо Fe

Водневий зв’язок

- *це зв’язок* ***атома Гідрогена****, що звязанний в сполуці з іншим електронегативним атомом або групою атомів*

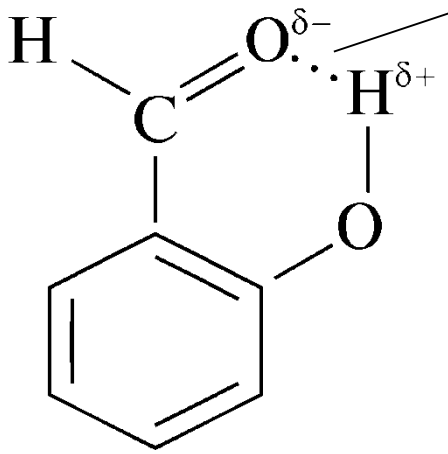




водневий зв’язок в речовині HF

міжмолекулярний

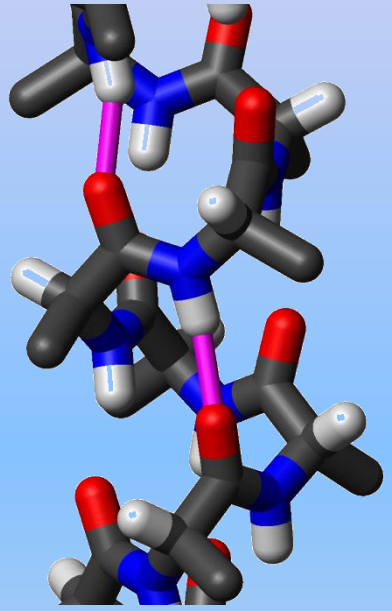
Водневий зв’язок може бути ***міжмолекулярний*** *і* ***внутрішньомолекулярний***

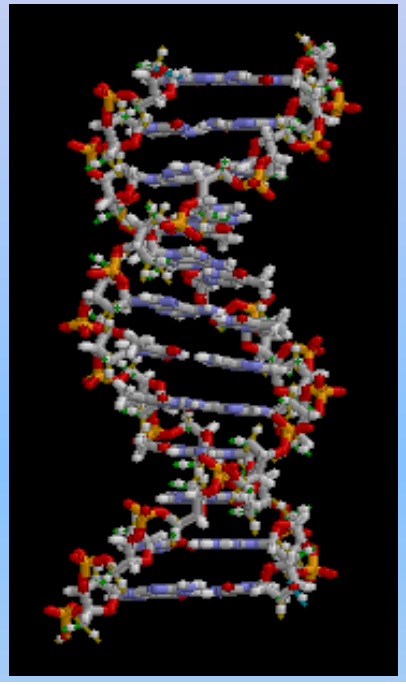


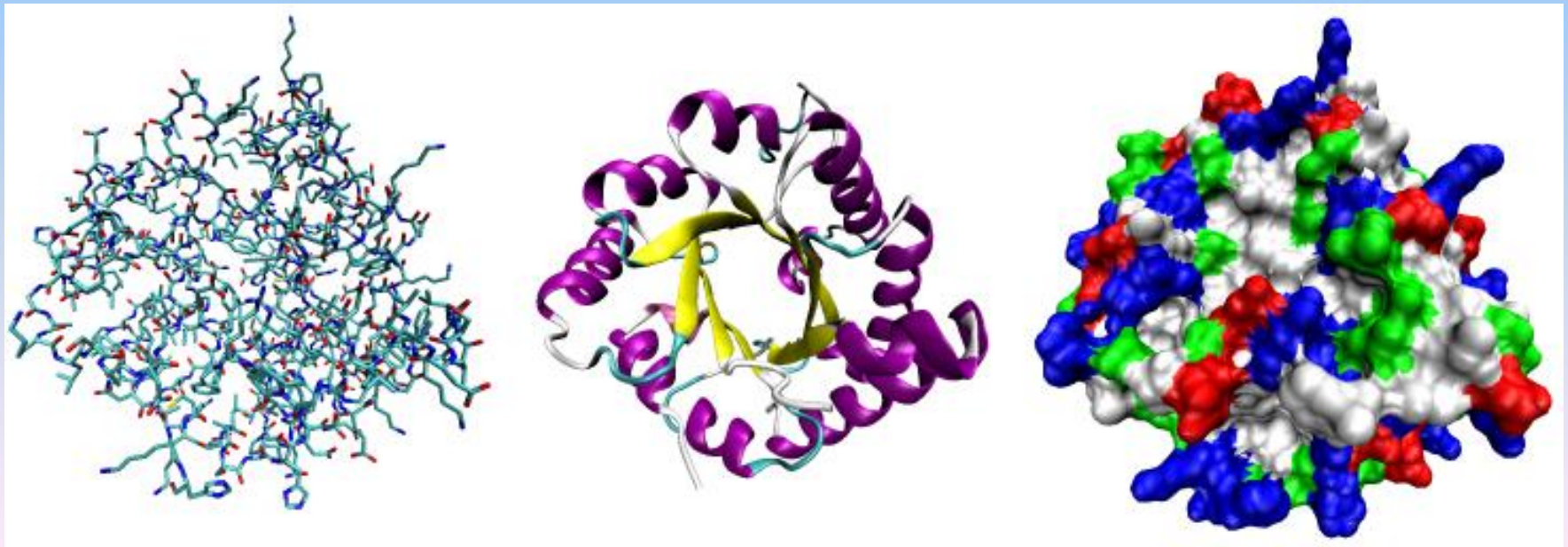
водневий зв’язок в молекулі

внутрішньомолекулярний

Водневий зв'язок



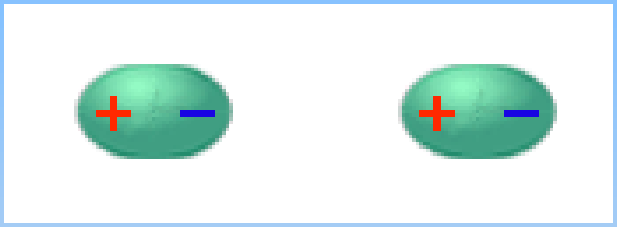




Міжмолекулярна взаємодія

- між молекулами – сили притяжіння і відштовхування – *сили ван-дер-ваальса*

орієнтаційна

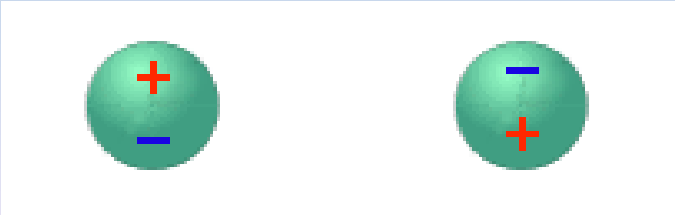


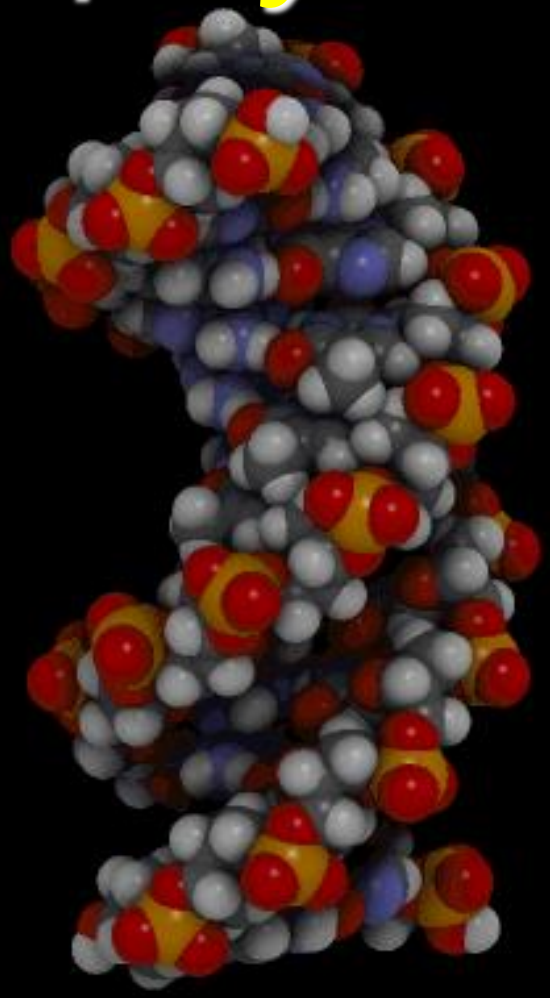
між полярними молекулами HCl

індукційна

між полярною HCl и неполярною Cl_2

дисперсійна



між неполярними молекулами Cl_2

Дякую!