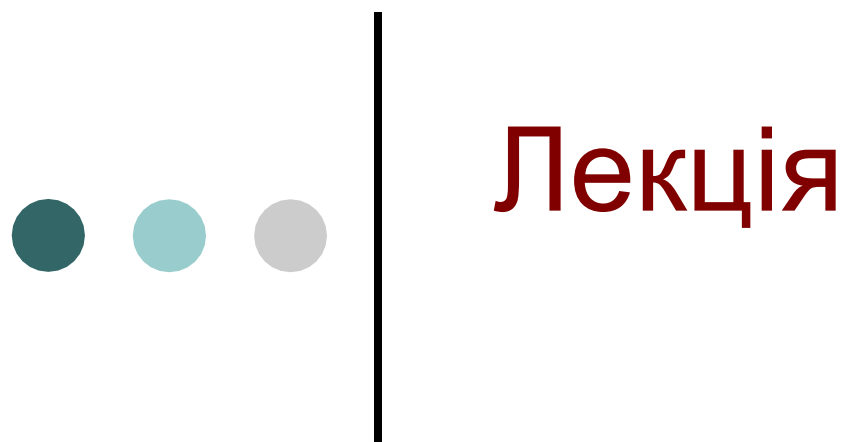




Лекція

Хімічний зв'язок
Будова молекул



Чому вивчають хімічний зв'язок?

- Тип хімічного зв'язку обумовлює:
- будову молекул,
- будову кристалів,
- фізичні властивості речовин:
 - температуру плавлення, кипіння,
 - твердість тощо;
- хімічні властивості речовин:
 - розчинність і дисоціацію,
 - взаємодію з іншими речовинами тощо



Чому між атомами виникає хімічний зв'язок?

- Кожна система прямує до стану, якому відповідає мінімальна енергія.
- З огляду на електронну будову – це завершений електронний рівень:





Від чого залежить тип хімічного зв'язку?

- Природа елемента (метал, неметал, металоїд)
- Електронна будова валентних підрівнів (кількість неспарених електронів і загальне число валентних електронів)
- Електронегативність атома

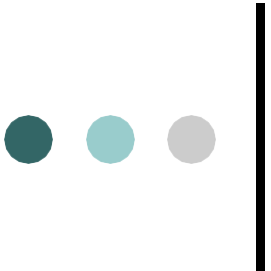
Електронегативність (ЕН) - здатність атома в молекулі або складному йоні притягувати до себе електрони, які беруть участь в утворенні хімічного зв'язку

Шкала Полінга

Група→ Период↓	1	2	3	4	5	6	7
I	H 2.1						
II	Li 1.00	Be 1.5	B 2.0	C 2.5	N 3.07	O 3.5	F 4.0
III	Na 0.93	Mg 1.2	Al 1.5	Si 1.8	P 2.2	S 2.6	Cl 3.0
IV	K 0.91	Ca 1.04	Ga 1.8	Ge 1.8	As 2.1	Se 2.5	Br 2.8
V	Rb 0.89	Sr 0.99	In 1.5	Sn 1.8	Sb 1.8	Te 2.1	I 2.6
VI	Cs 0.7	Ba 0.9	Tl 1.8	Pb 1.6	Bi 1.9	Po 1.8	At 2.3

ЕН неметалів > 2

ЕН металів < 2



Відстань дії хімічного зв'язку

1. Короткодійний хімічний зв'язок

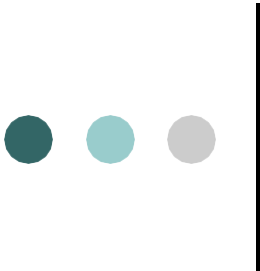
- ковалентний;
- іонний;
- металічний.

Залежно від ступеня усупільнення електронної густини розглядають такі види хімічного зв'язку як:

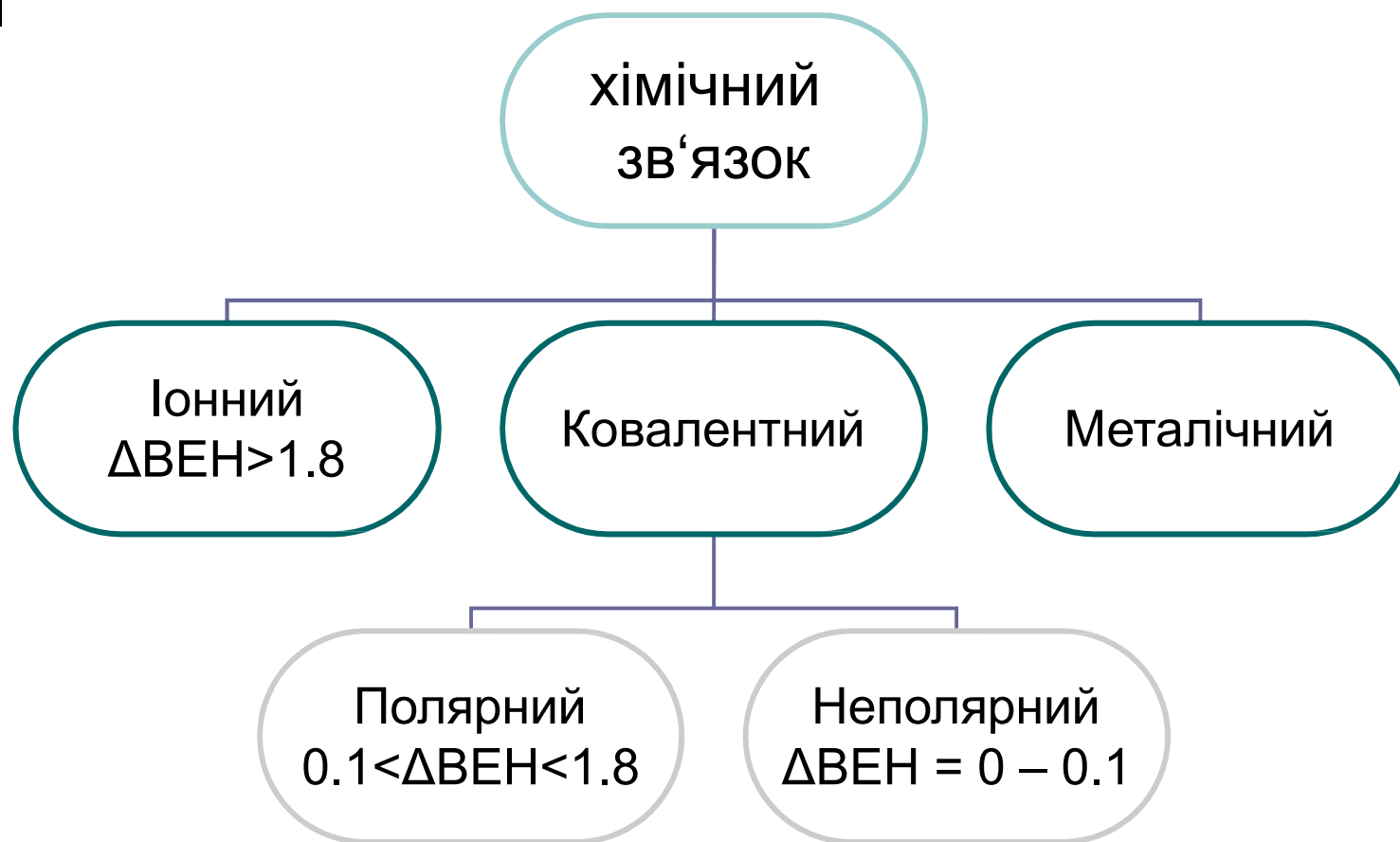
- локалізований хімічний зв'язок,
- делокалізований хімічний зв'язок,

2. Дальнодіючий хімічний зв'язок

- водневий зв'язок;
- міжмолекулярна взаємодія.



Типи короткодiючого хiмiчного зв'язку





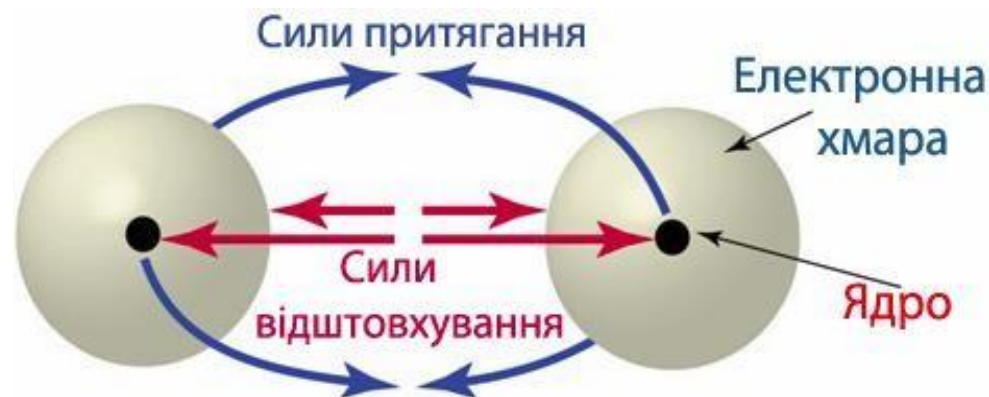
Ковалентний зв'язок

- механізм утворення
- кількісні характеристики
- властивості зв'язку



Механізм утворення

- Причиною утворення хімічного зв'язку є прагнення системи до мінімальної енергії (завершеної електронної оболонки).
- хімічний зв'язок утворюють тільки неспарені електрони.
- зв'язок виникає як баланс сил тяжіння електронної хмари одного атома ядром іншого і взаємного відштовхування електронних хмар.





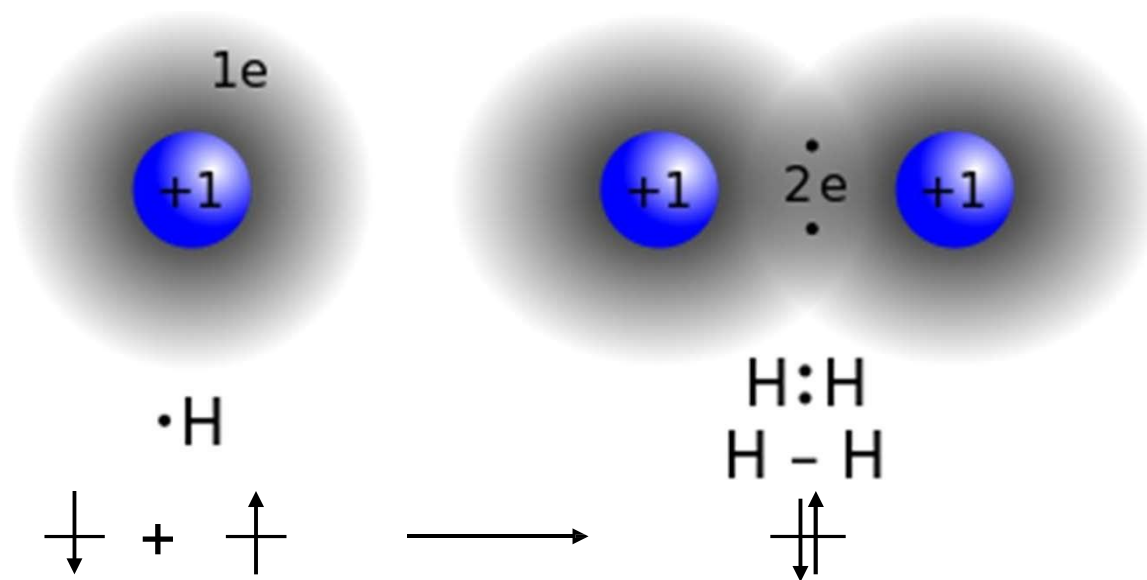
Ковалентний зв'язок

- **Ковалентний зв'язок** (атомний, гомеополлярний) – хімічний зв'язок, який утворюється перекриванням валентних електронних хмар з антипаралельними спинами або утворенням спільної пари електронів.
- Електронні хмари або електрони, які забезпечують зв'язок називають спільною електронною парою.
- Ковалентний зв'язок утворюють атоми **близької хімічної природи** (неметали). Різниця ВЕН атомів:

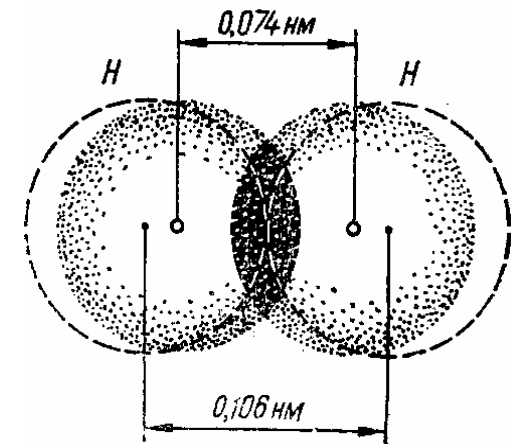
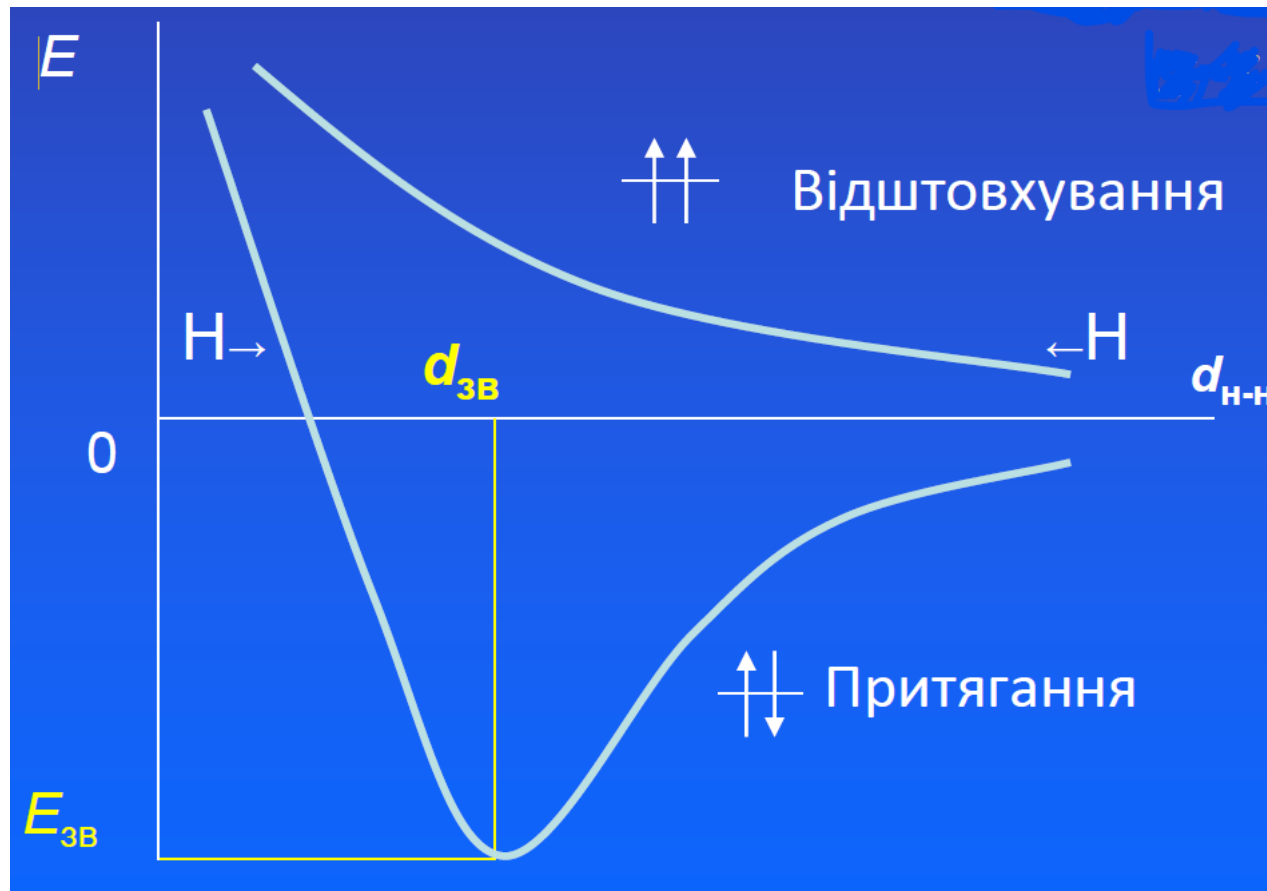
$$\Delta \text{ВЕН} < 1.8$$

Утворення молекули водню

- Хімічний зв'язок утворюється лише неспареними електронами з антипаралельними спінами



Потенціальні криві для системи з двох атомів Н





Характеристика ковалентного зв'язку

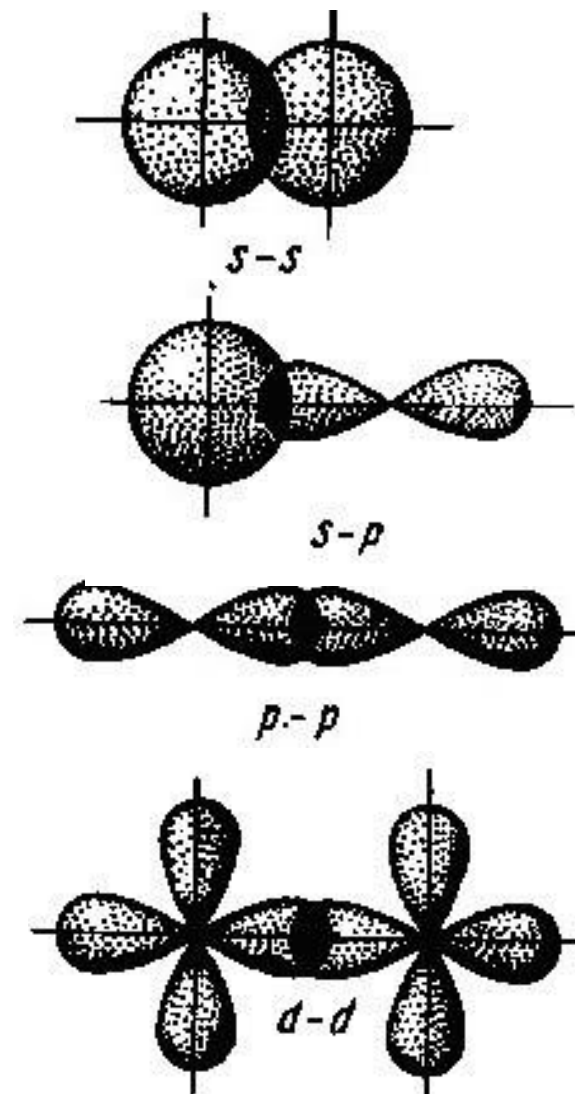
- На відстані кількох атомних радіусів домінують сили тяжіння
- На дуже малій відстані – сили відштовхування
- Тяжіння і відштовхування збалансовані в точці мінімуму енергії.

Довжина зв'язку – відстань між ядрами, яка відповідає мінімуму енергії. Чим менше довжина зв'язку, тим зв'язок міцніше.

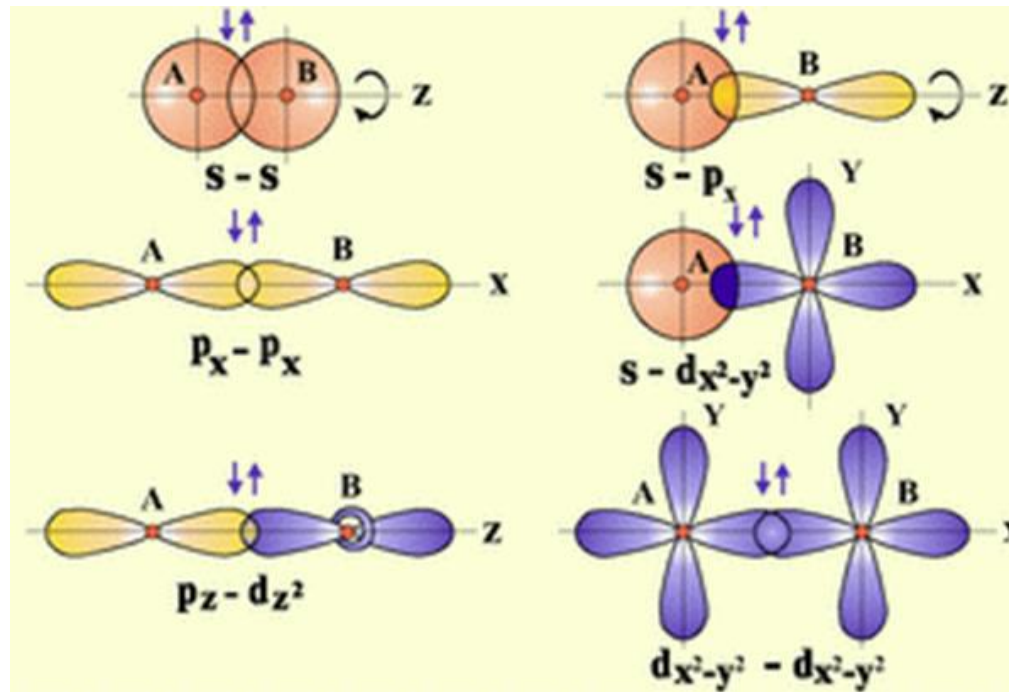
Енергія зв'язку – це кількість енергії, що виділяється при утворенні зв'язку. Або: робота, яка витрачається на розділення атомів.

Властивості ковалентного зв'язку

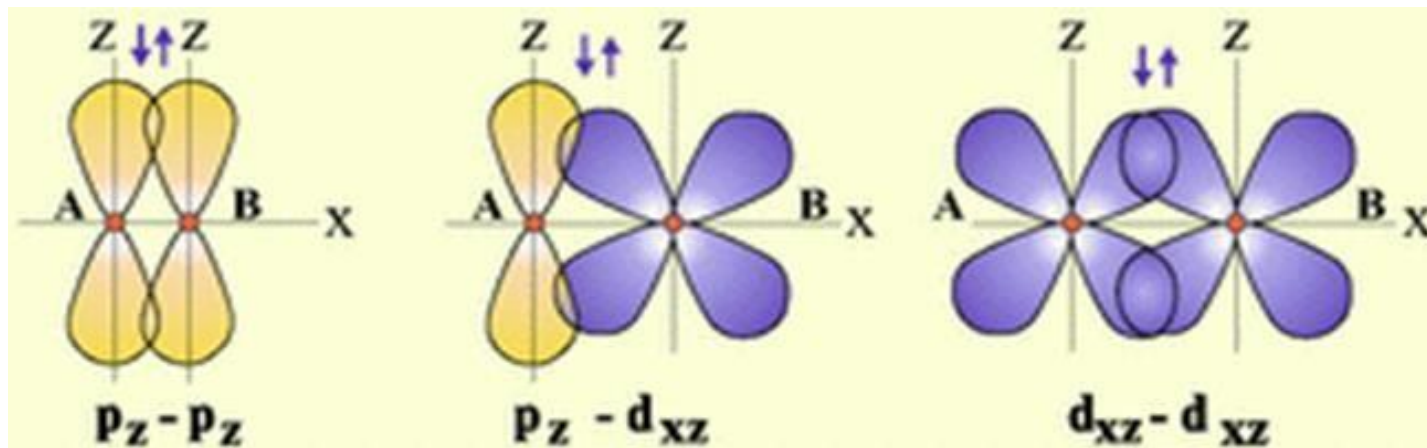
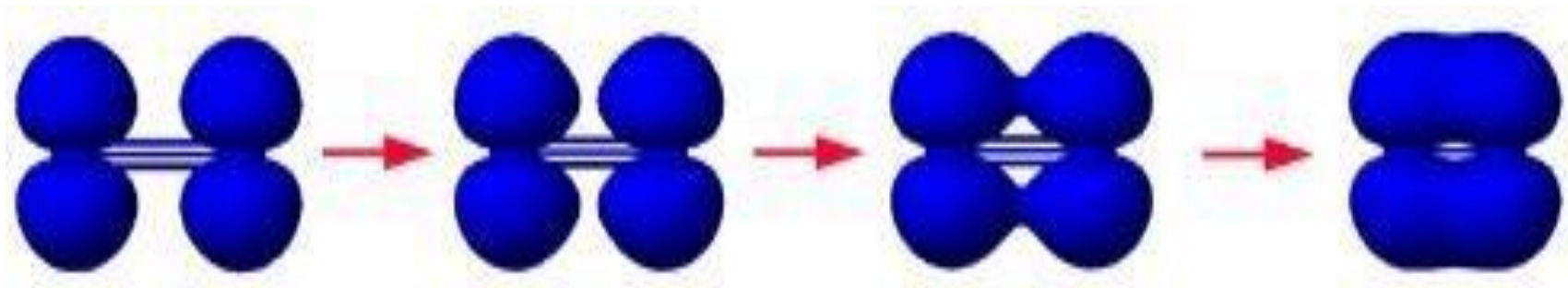
- *Спрямованість* зв'язку – перекривання відбувається в напрямку максимальної електронної густини електронних хмар
- обумовлює молекулярну будову речовини і геометричну форму молекул
- *Кути* між двома зв'язками називають *валентними*.



● ● ● **σ-зв'язок** – це таке перекривання електронних орбіталей, при якому максимальна електронна густина концентрується вздовж уявної лінії, що з'єднує два ядра.



● ● ● **π-зв'язок** – це перекривання електронних орбіталей, при якому максимальна електронна густина концентрується з обох боків від лінії, що з'єднує ядра атомів (тобто від вісі зв'язку)

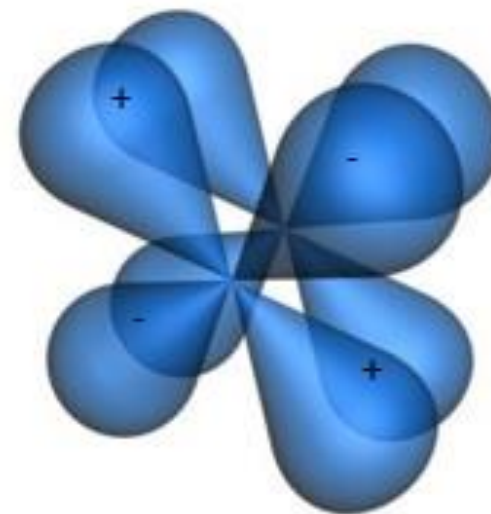




Дельта-зв'язок (δ -зв'язок)

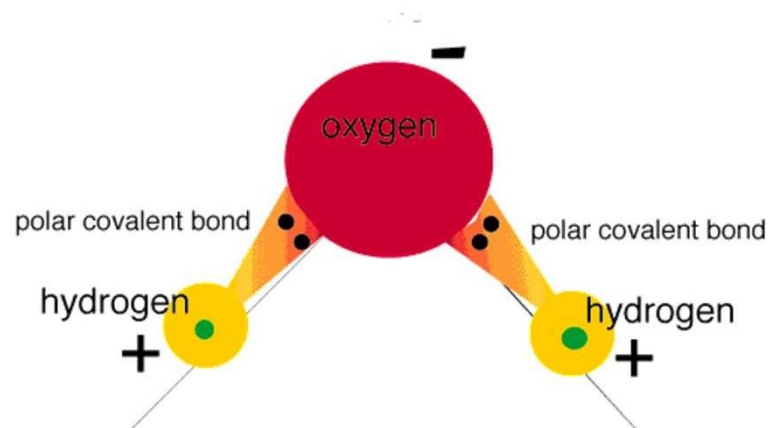
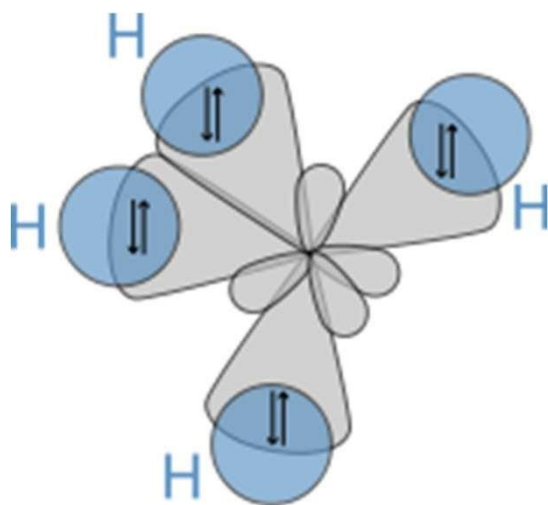
Ковалентний хімічний зв'язок, де чотири частини орбіталі, зайняті одним електроном, перекриваються чотирма частинами іншої орбіталі, зайнятою одним електроном. Між двома зв'язаними атомами існує рівно дві вузлові площини. Це перекривання призводить до утворення зв'язуючої молекулярної орбіталі з двома вузловими площинами, які містять між'ядерну вісь і проходять через обидва атоми

Утворюється під час перекривання d-орбіталей (рідше f-орбіталей), які мають відповідну чотирипелюсткову геометрію



Властивості ковалентного зв'язку

- *Насичуваність* – здатність атомів утворювати обмежене число ковалентних зв'язків, яке дорівнює числу зовнішніх атомних орбіталей або валентних електронів.





Властивості ковалентного зв'язку

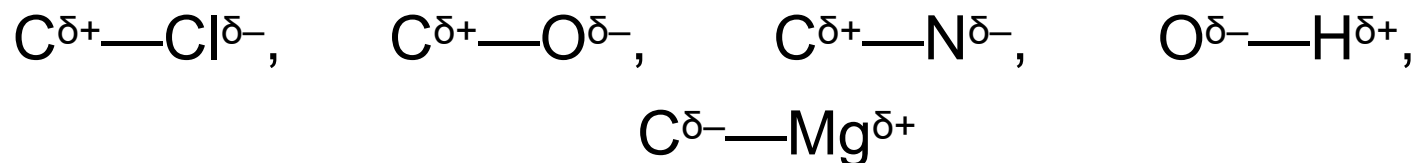
- *Полярність* зв'язку обумовлена нерівномірним розподілом електронної густини спільної електронної пари, яке обумовлене різницею ВЕН атомів.
- За цією ознакою ковалентний зв'язок поділяють на неполярний і полярний.

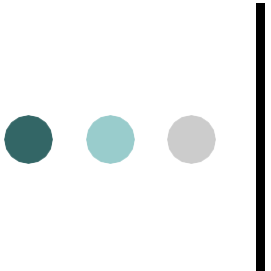
Ковалентний полярний зв'язок

	Н	Cl
ВЕН	2.1	3.1



- Полярний (несиметричний) ковалентний зв'язок утворюється між атомами с різницею $1.8 > \Delta \text{ВЕН} > 0.1$
- Електронна густина зв'язку зміщена в бік більш електронегативного атома, який набуває часткового негативного заряду δ^- . Атом з меншою ВЕН набуває часткового позитивного заряду δ^+ :

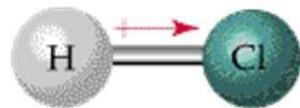




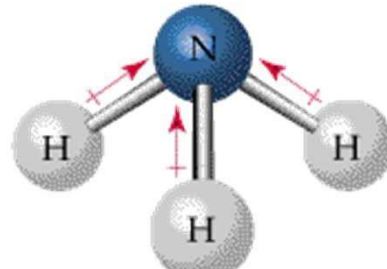
Властивості ковалентного зв'язку

- *Поляризованість* зв'язку виявляється в зміщенні електронів зв'язку під впливом зовнішнього електричного поля, зокрема і іншої частинки.
- Поляризованість визначається рухливістю електронів і зростає з їх віддаленням від ядер.
- Полярність і поляризованість ковалентних зв'язків визначають реакційну здатність молекул по відношенню до полярних реагентів.

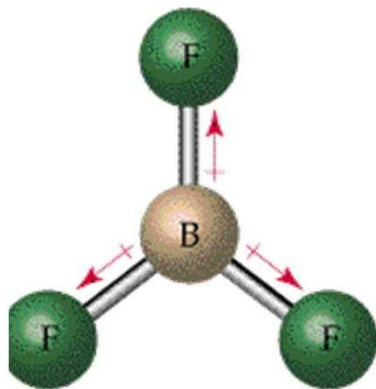
Полярні і неполярні молекули



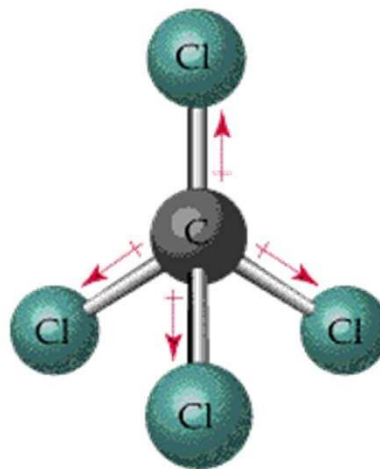
Polar



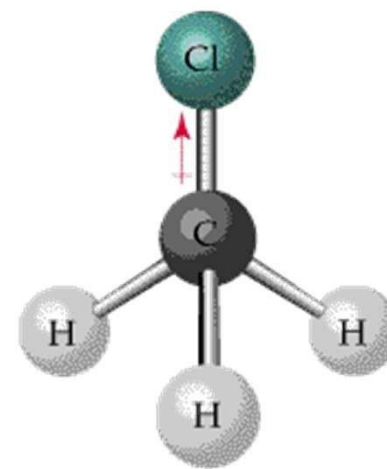
Polar



Nonpolar

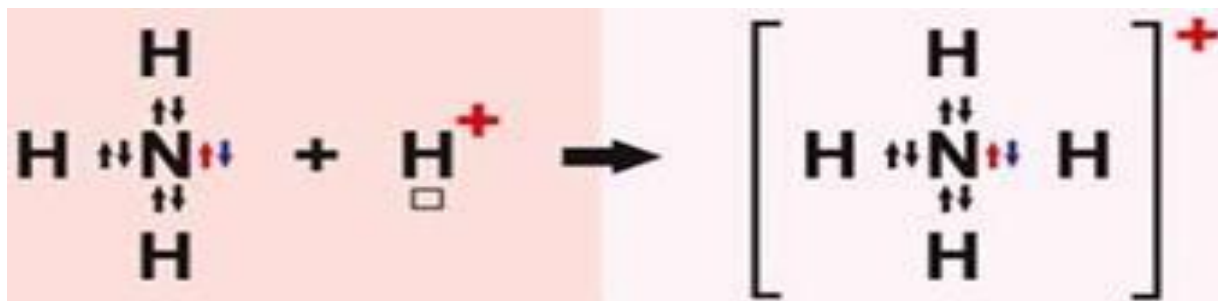
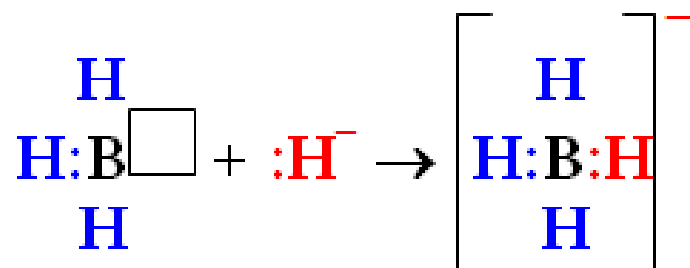
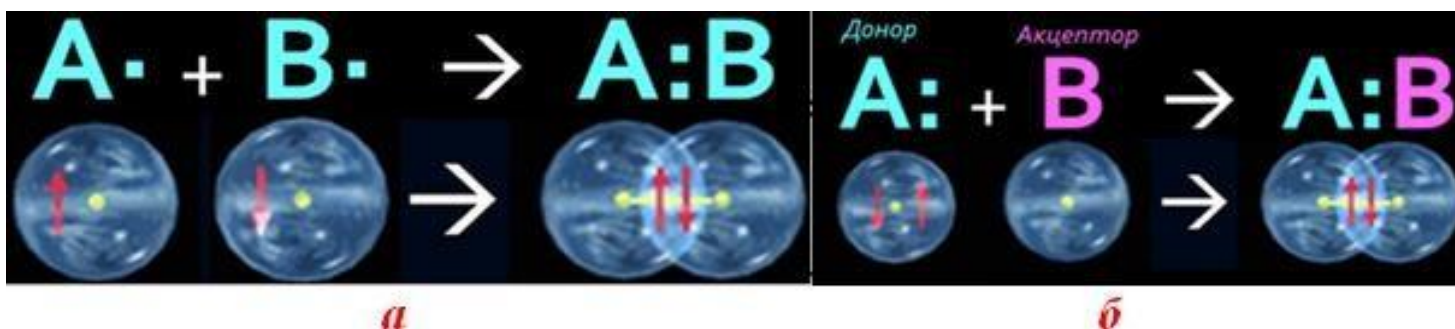
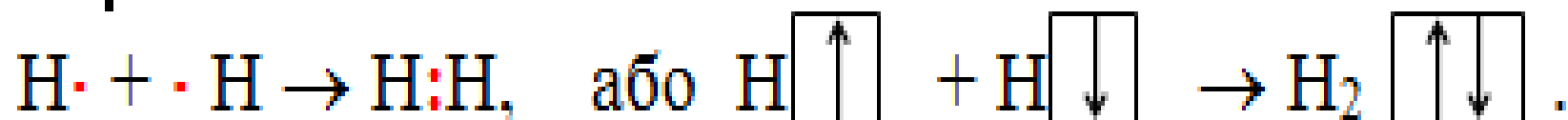


Nonpolar

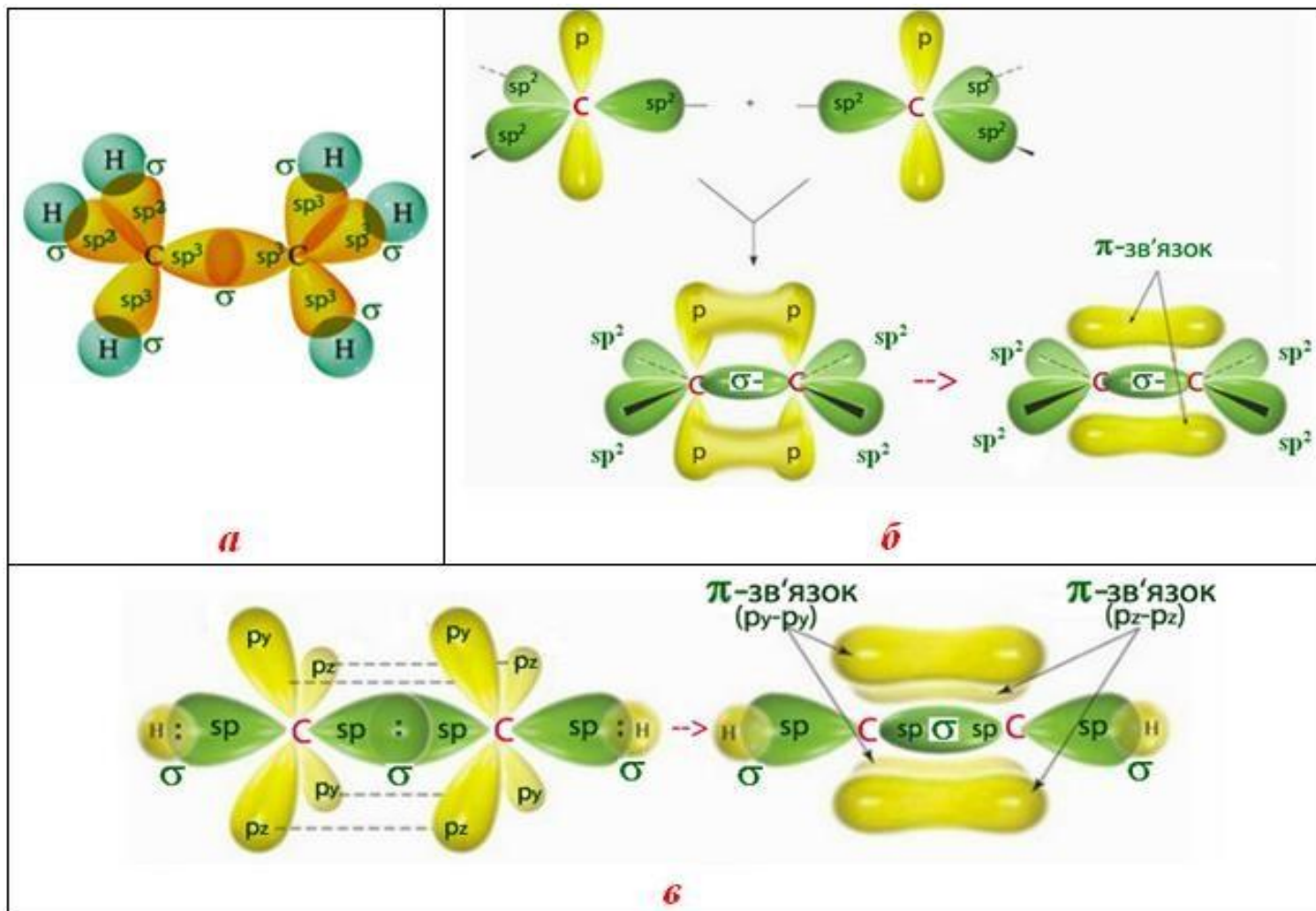


Polar

МЕХАНІЗМ УТВОРЕННЯ КОВАЛЕНТНОГО ЗВ'ЯЗКУ



Кратність. Ця характеристика **визначається** числом **спільних** електронних пар, що зв'язують атоми.



ВЛАСТИВОСТІ СПОЛУК З КОВАЛЕНТНИМИ ЗВ'ЯЗКАМИ

Речовини

Молекулярні

Речовини, що складаються з молекул (гази, тверді речовини)



CO_2



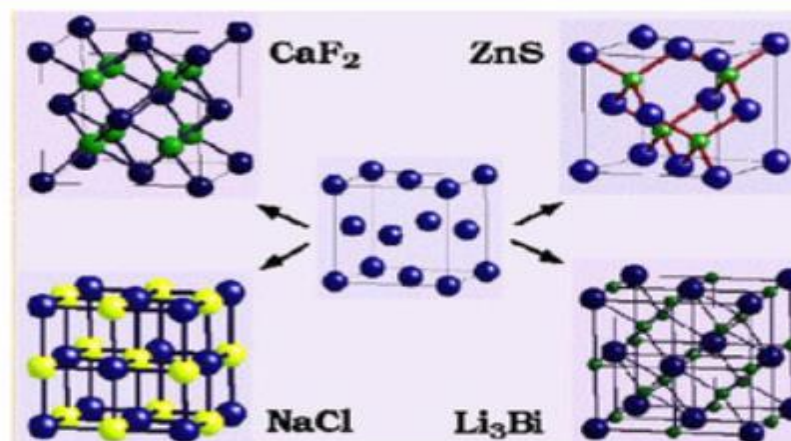
H_2O



H_2O

Немолекулярні

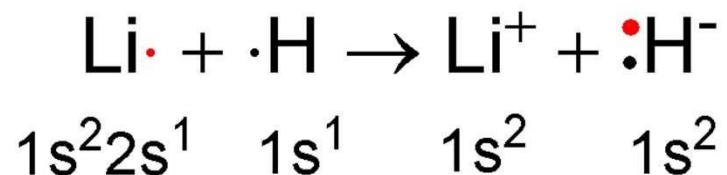
Речовини, що складаються не з молекул (солі, оксиди, основи)





Іонний зв'язок

- Утворюється атомами різної хімічної природи
 $\Delta \text{ВЕН} > 1.8$
- Спільна електронна пара повністю зміщується в бік атома з більшою ВЕН, який стає **аніоном**.
- Атом, який втрачає електрон, стає **катионом**.
- Протилежно заряджені іони утримуються силами кулонівського тяжіння.

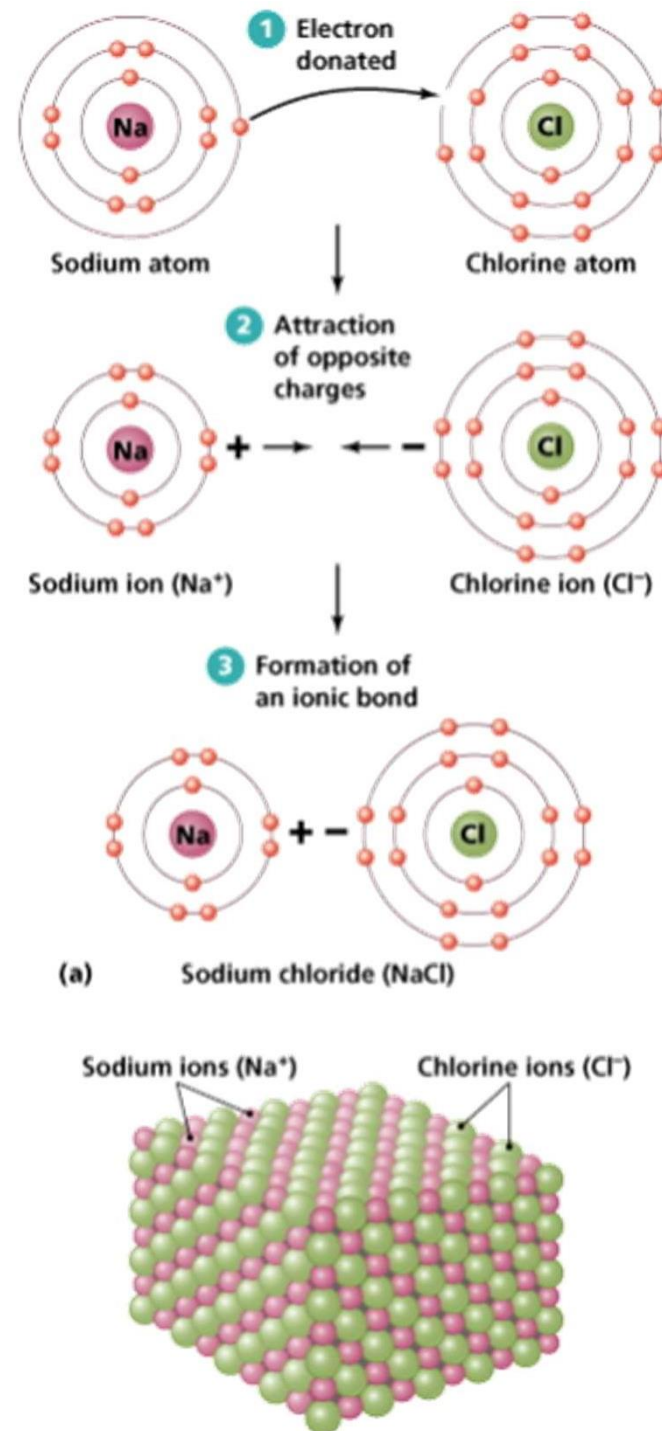


- Іонна кристалічна ґратка

NaCl: кожний іон Na^+ і Cl^- оточений шістьма іонами протилежного заряду.

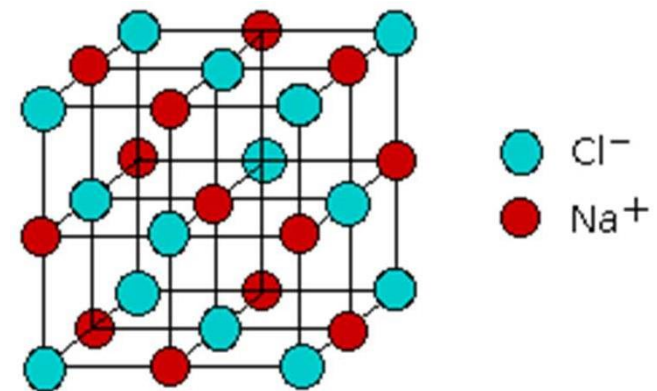
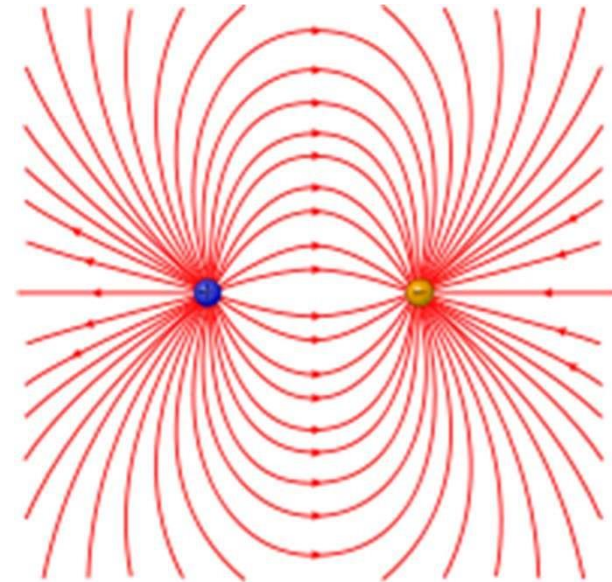
- Фізичні властивості: твердість, блиск, високі температури плавлення і кипіння.

- Більшість розчиняється у воді, а кожний іон виявляє індивідуальні хімічні властивості.



Властивості іонного зв'язку

- **Відсутність спрямованості** обумовлена рівномірним розподілом у просторі електричного поля точкових заряджених частинок
- **Відсутність насиченості** – координаційне число іонів у кристалі більше числа валентних електронів



ВЛАСТИВОСТІ ІОННИХ СПОЛУК

Високі температури плавлення - іонні кристалічні решітки дуже міцні.

Крихкість. Іонні сполуки, як правило, тверді, але крихкі.

Електропровідність у розчині або розплаві – за рахунок наявності заряджених частинок





Геометрична форма молекул

Гібридизація атомних орбіталей



Правила гібридизації

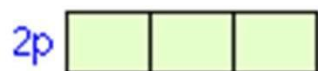
Якщо **число зв'язків у молекулі більше числа неспарених електронів** в атомі, перед утворенням зв'язку відбувається:

- розпаровування електронів на вільну орбіталь у межах одного енергетичного рівня
- **гібридизація** – вирівнювання енергій і форм електронних орбіталей
- Якщо число зв'язків у молекулі дорівнює числу неспарених електронів в атомі гібридизація перед утворенням зв'язку не потрібна.

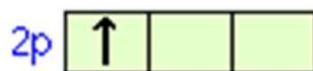


Гідрид берилію BeH_2

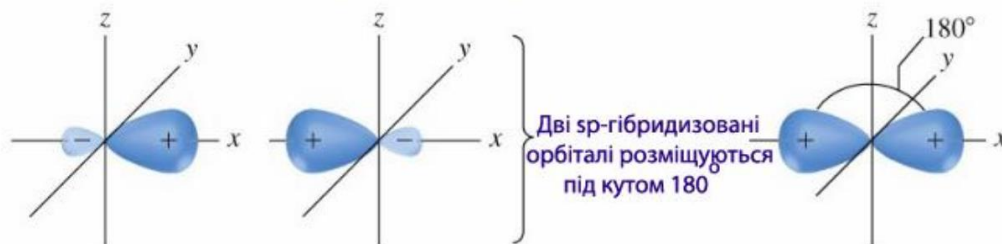
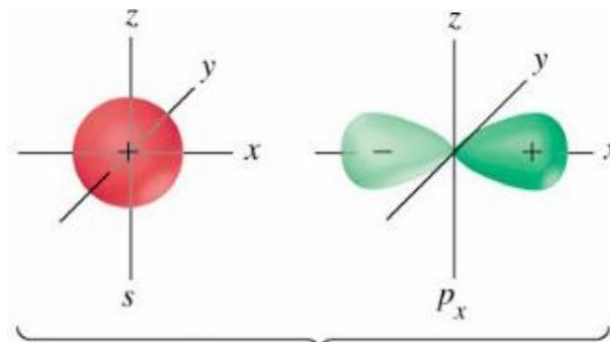
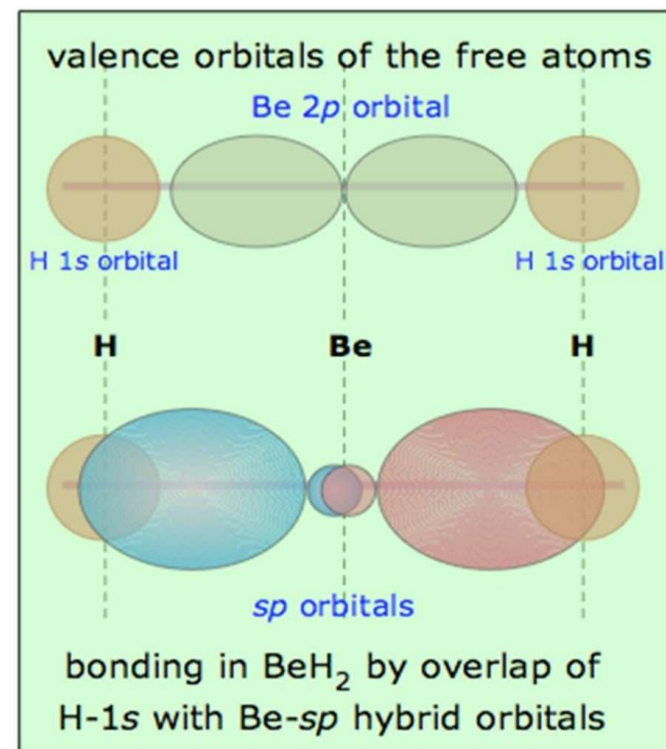
- sp гібридизація дає дві гібридних орбіталі, розташованих під кутом 180°
- молекула лінійна, симетрична і неполярна
- зв'язок – ковалентний полярний



Be atom in ground state



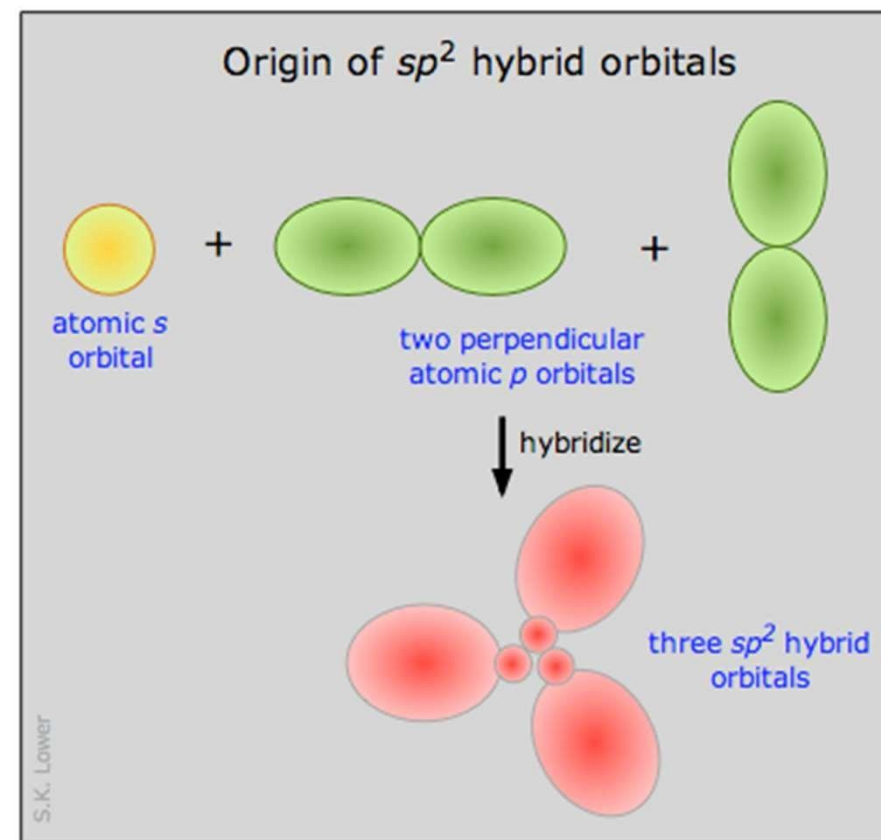
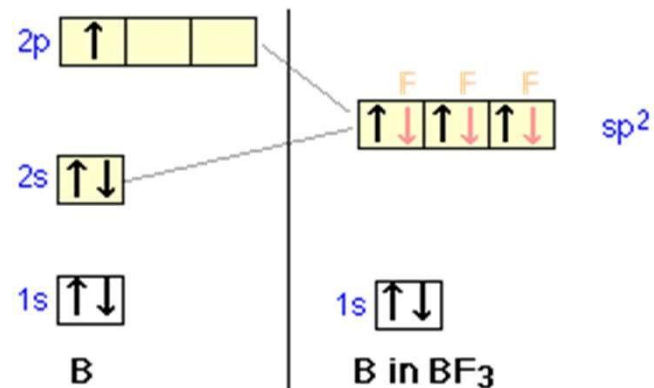
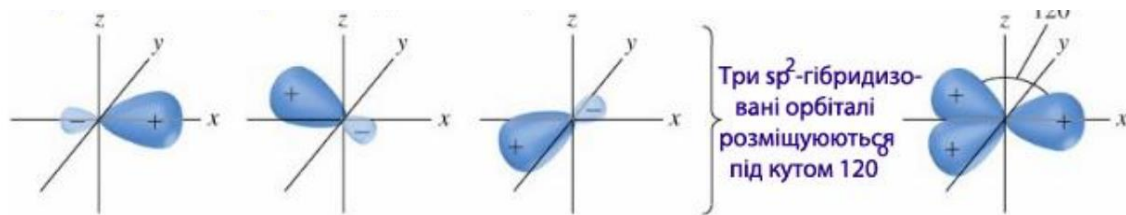
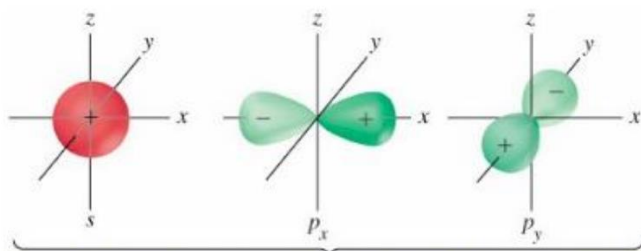
Be atom in excited state





Гідрид бору BH_3

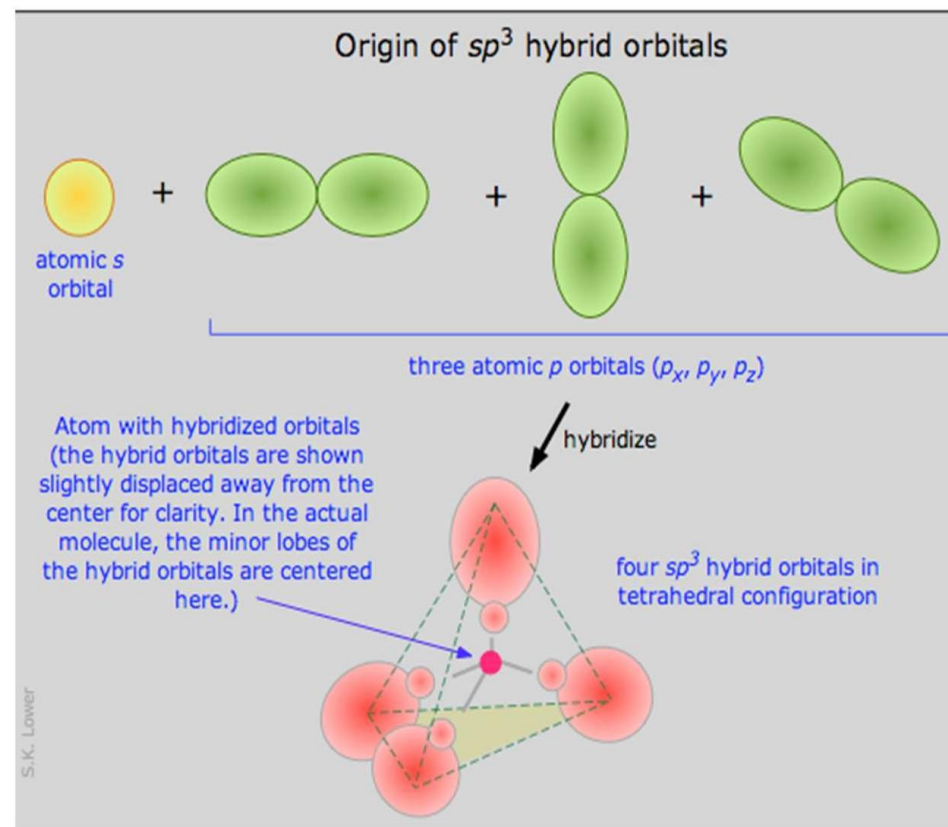
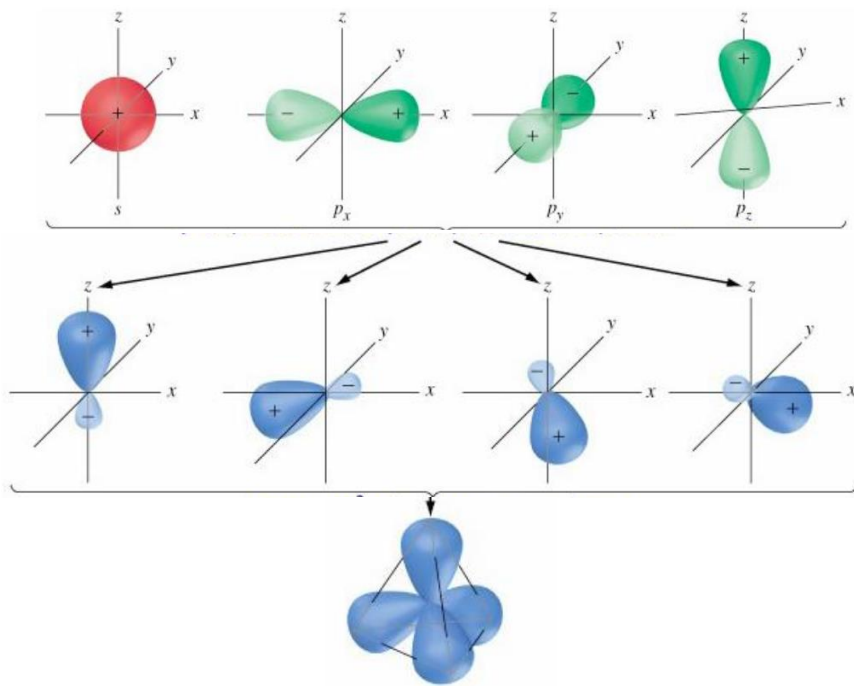
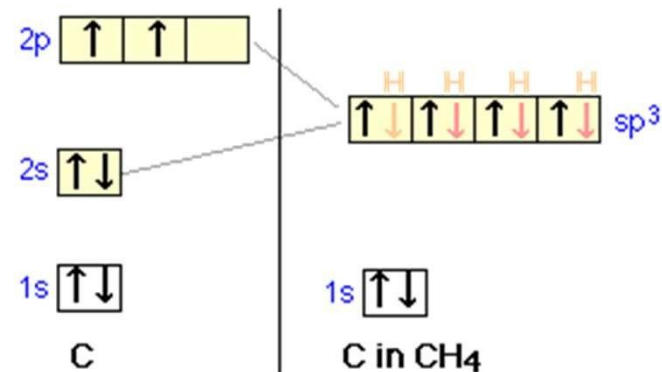
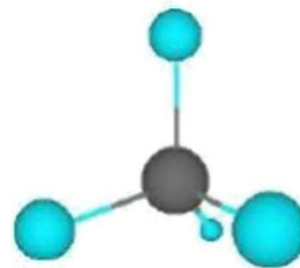
- sp^2 гібридизація дає три орбіталі, розташовані під кутом 120° .
- Молекула – **плаский трикутник**, симетрична і неполярна
- зв'язок – ковалентний полярний.





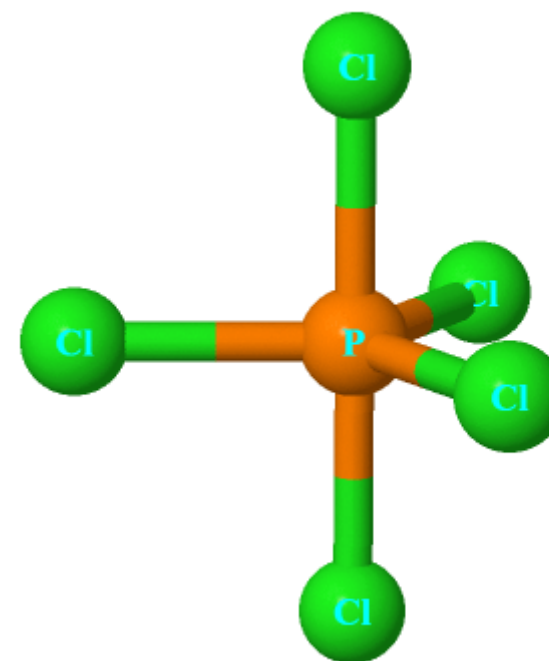
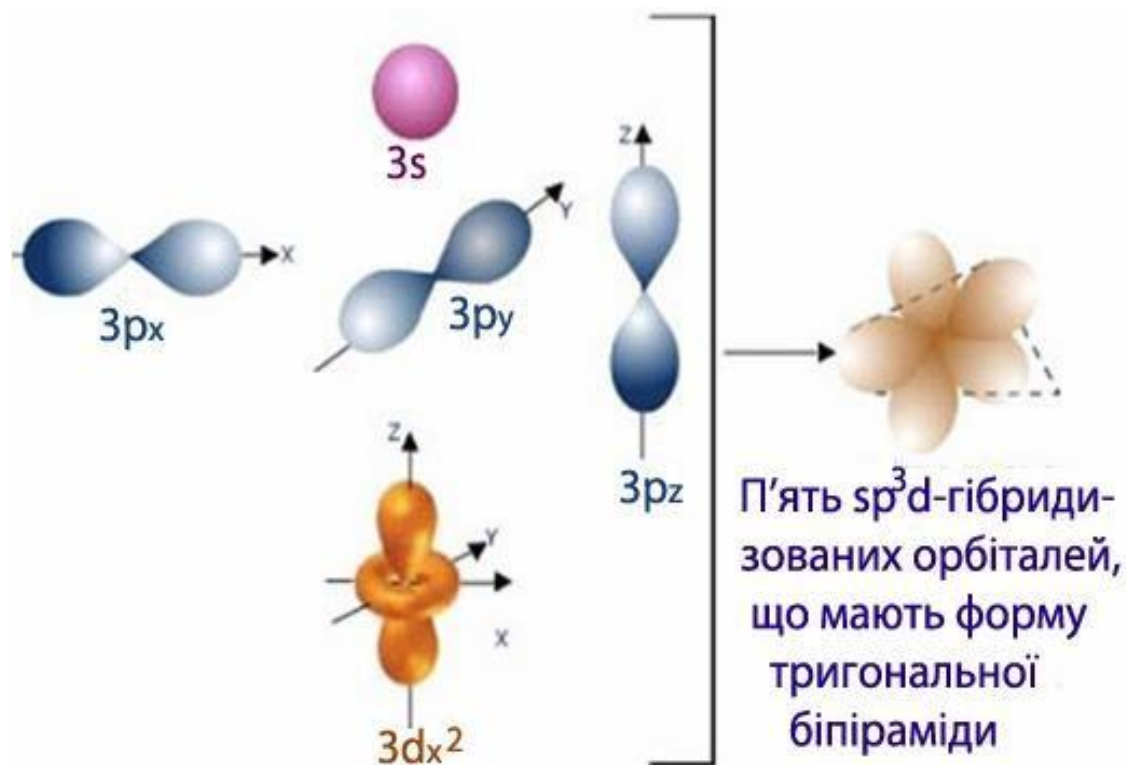
Метан CH₄

- sp^3 гібридизація дає чотири орбіталі, ковалентні кути 109.5°.
- Форма молекули – тетраедр, симетрична і неполярна
- зв'язок – ковалентний слабополярний.



Пентахлорид фосфору PCl_5

- sp^3d гібридизація реалізується комбінацією однієї s-, трьох p- і однієї d-орбіталі
- просторова орієнтація - тригональна біпіраміда



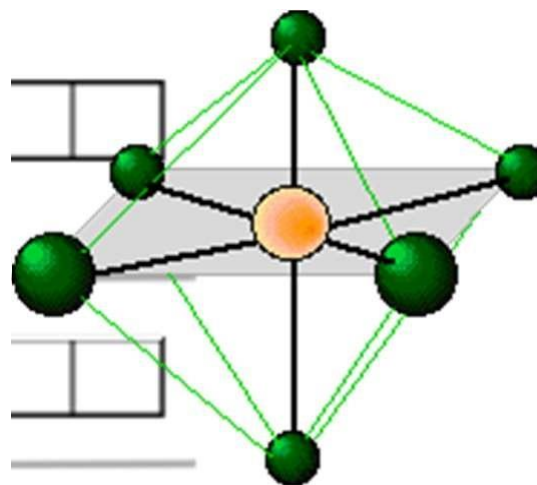
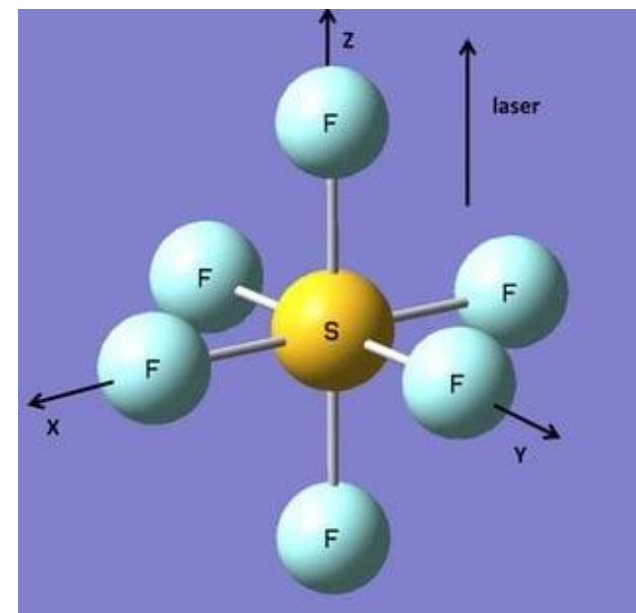


Гексафторид сульфуру SF₆

sp³d²-гібридизація – це процес змішування шести атомних орбіталей центрального атома (однієї s-, трьох p- та двох d-орбіталей) з утворенням шести однакових гібридних орбіталей

Основні характеристики

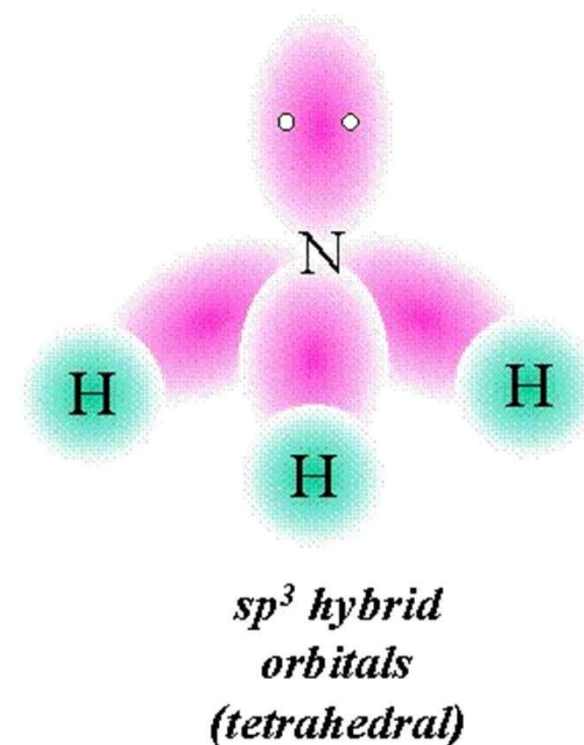
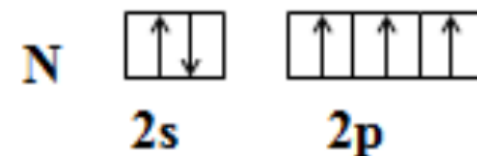
Число гібридних орбіталей: 6.
Просторова форма: Октаедр.
Валентний кут: 90 ° і 180 °





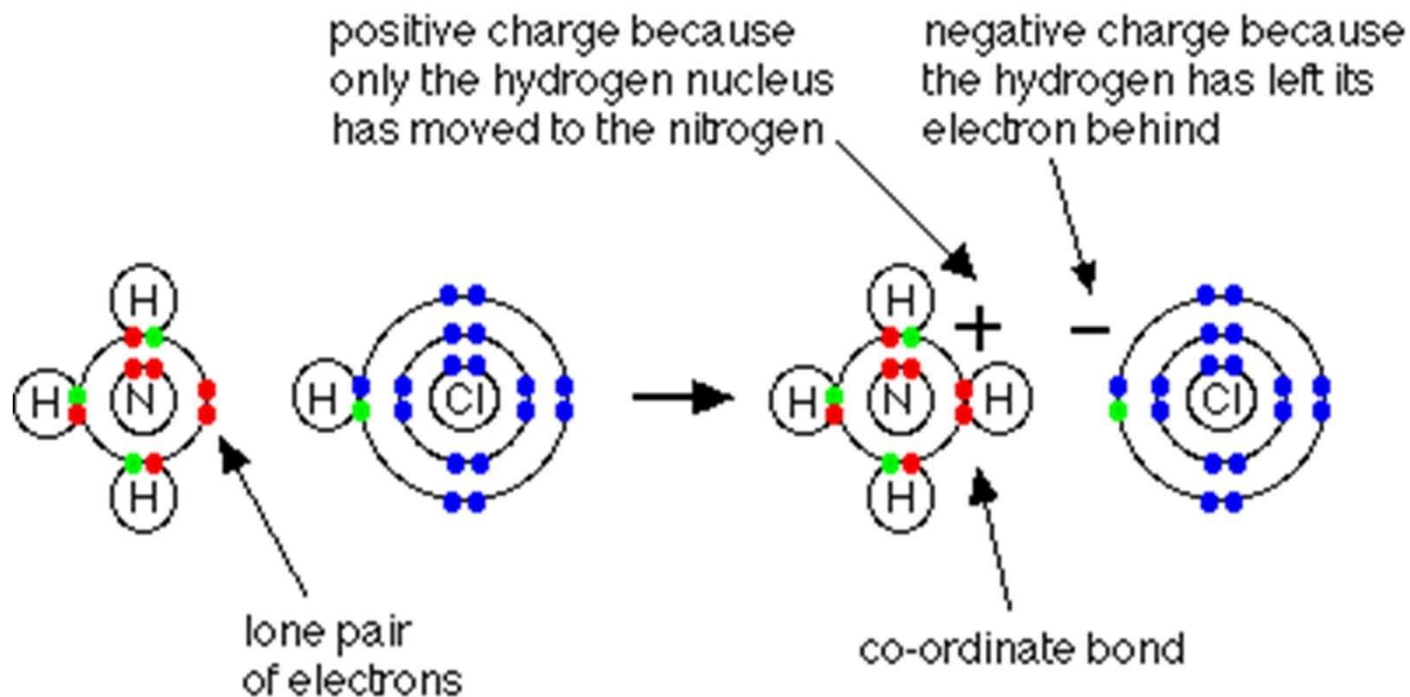
Неподілена електронна пара E і гібридні орбіталі X. Молекули складу (AX₃E)

- 3 неспарені електрони N на 2p підрівні утворюють 3 ковалентні полярні зв'язки з H.
- 2s не бере участі в утворенні зв'язку.
- Молекула несиметрична і полярна.
- Неподілена електронна пара може утворювати донорно-акцепторний ковалентний зв'язок с H⁺
$$\text{NH}_3 + \text{H}^+ \rightarrow \text{NH}_4^+.$$
- Ковалентний зв'язок утворюється між двома атомами за рахунок спільної електронної пари між ядрами обох атомів



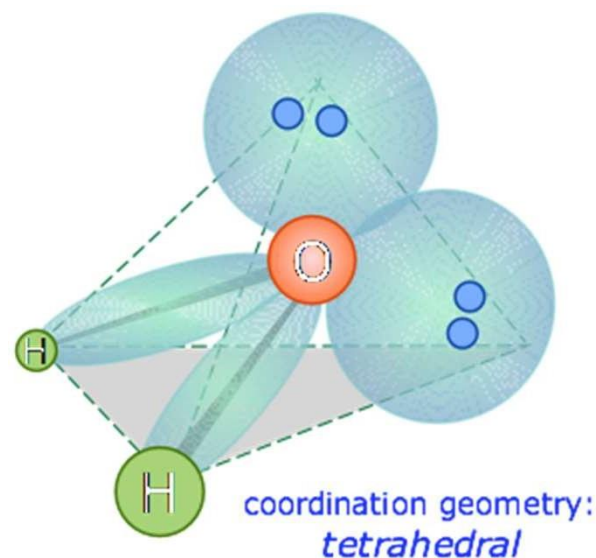
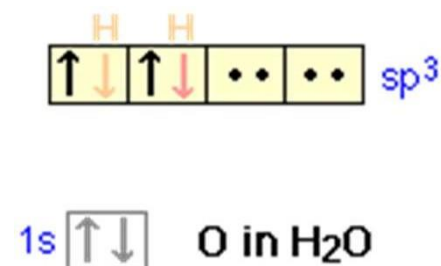


- Три атоми Н утворюють з Нітрогеном 3 ковалентні зв'язки, а четвертий – донорно-акцепторний.

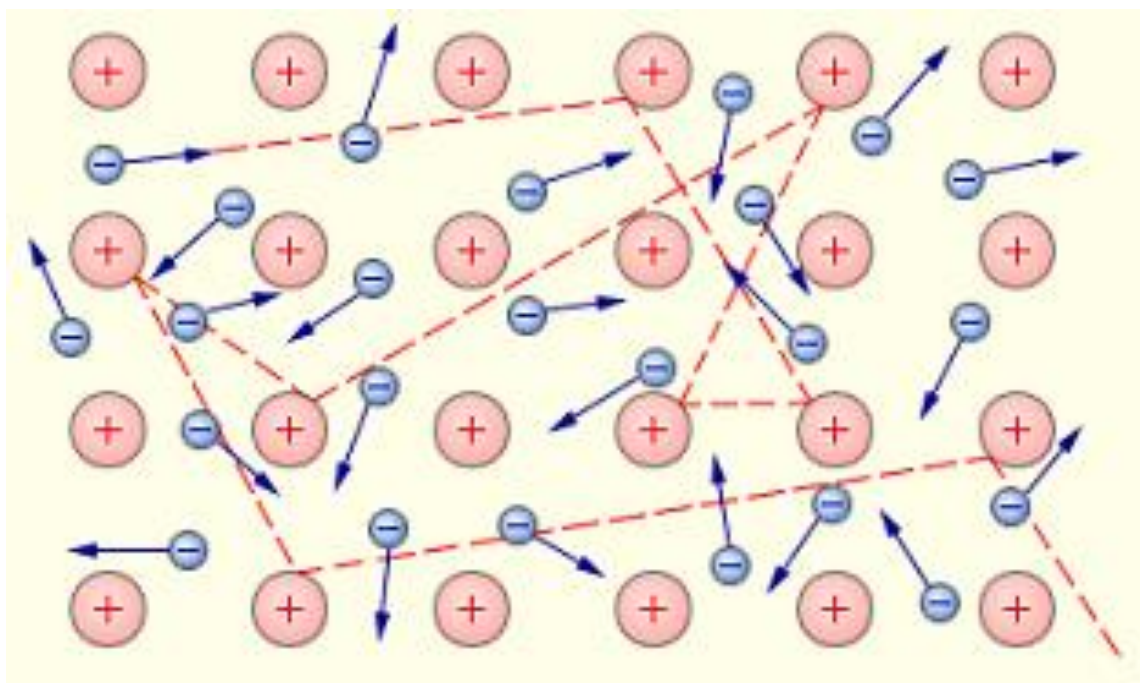


Дві неподілені електронні пари E і гібридні орбіталі X. Молекули складу (AX_2E_2)

- Два неспарених електрони на $2p$ підрівні утворюють полярні ковалентні зв'язки H–O,
- Неподілені електронні пари $2s$ і $2p_x$ підрівнів не беруть участі в утворенні зв'язків
- Кут між зв'язками H–O–H у молекулі води 104.5° .
- Молекула несиметрична і полярна.



МЕТАЛІЧНИЙ ЗВ'ЯЗОК

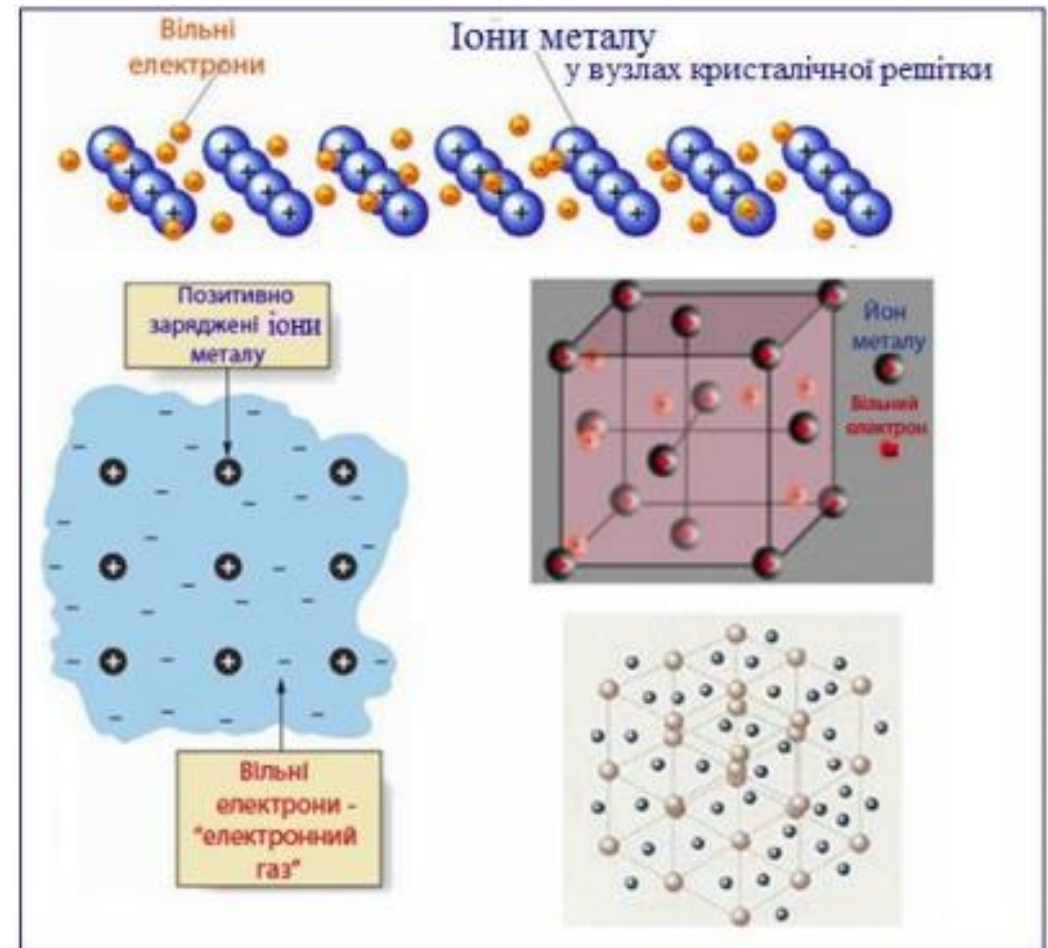


Вільне переміщення електронного газу між вузлами кристалічної решітки в кристалі металу

Металічний зв'язок — це тип хімічного зв'язку в металах та їх сплавах, обумовлений взаємодією електронного газу, утвореного внаслідок усупільнення валентних електронів, з остовом кристалічної решітки металу, у вузлах якої розміщуються позитивно заряджені іони металів.

ПРОСТОРОВА БУДОВА МЕТАЛІВ

Просторова будова металів – це кристал, який можна уявити як клітку з позитивно зарядженими іонами у вузлах, занурену в негативно заряджений електронний газ. Всі атоми віддають свої валентні електрони на утворення електронного газу, що вільно переміщується усередині кристалу, не порушуючи хімічного зв'язку.





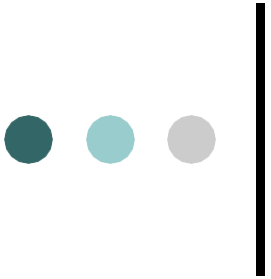
ВЛАСТИВОСТІ МЕТАЛІЧНОГО ЗВ'ЯЗКУ

багатоцентровість — одночасне виникнення хімічного зв'язку між величезною кількістю вузлових частинок у кристалі; саме багатоцентровість забезпечує високу теплопровідність металів;

багатоелектронність — здійснення хімічного зв'язку за рахунок усупільнення всіх валентних електронів, що знаходяться в кристалі металу; багатоелектронність зумовлює електропровідність металів;

ізотропність, або ненапрявленість — рівномірний розподіл електронної густини за всіма напрямками; при цьому валентні електрони жорстко не закріплюються між двома атомами, як при ковалентному зв'язку, а переходять у стан провідності, внаслідок чого повністю делокалізуються і належать не одному конкретному атому, а однаковою мірою всім іонам у вузлах кристалічної решітки;

ненасиченість — можливість утворення хімічних зв'язків між невизначеною кількістю атомів, яка обмежується лише геометричними параметрами (розмірами атомів) і взаємним відштовхуванням однойменно заряджених вузлових частинок; ненасиченістю пояснюються великі координаційні числа (як правило, 8 чи 12), які показують кількість найближчих вузлів кристалічної решітки, що оточують даний вузол.



ДАЛЬНОДІЮЧИЙ ХІМІЧНИЙ ЗВ'ЯЗОК

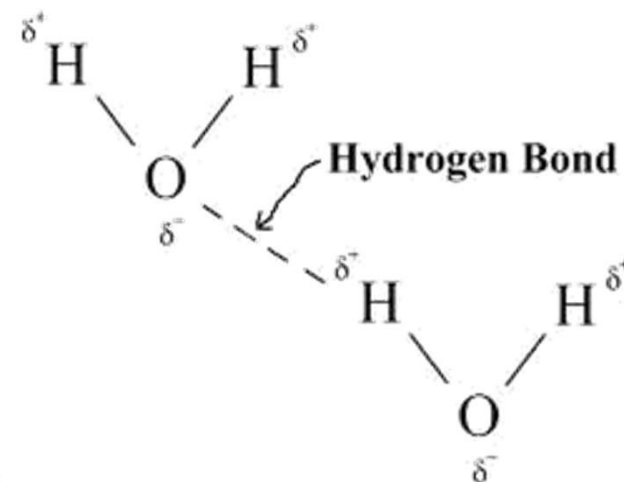
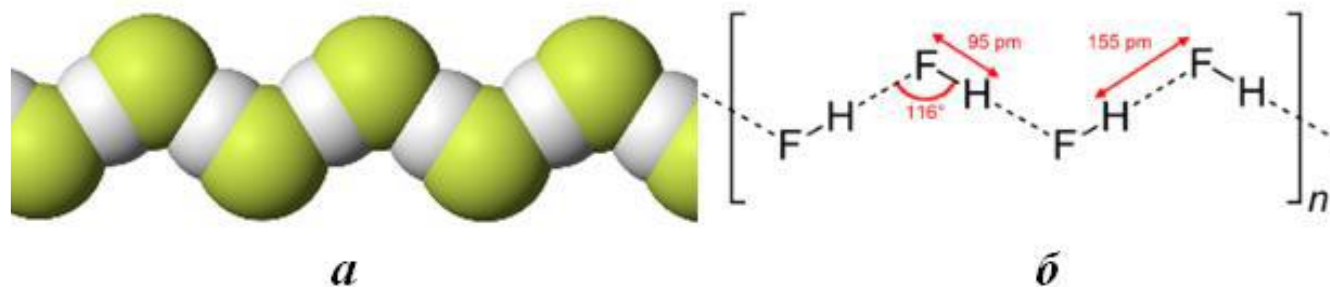
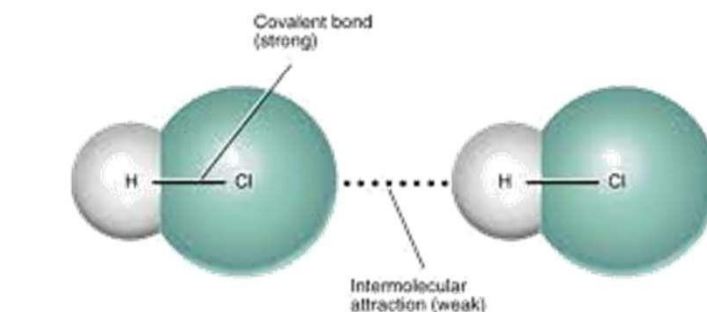
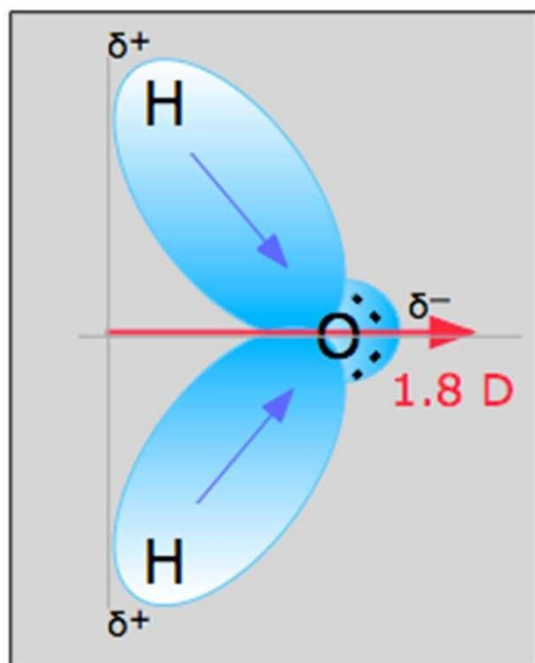
Дальнодіючі хімічні зв'язки умовно поділяються на такі групи:

- *специфічна міжмолекулярна взаємодія, до якої належить водневий зв'язок;*
- *універсальна міжмолекулярна взаємодія.*



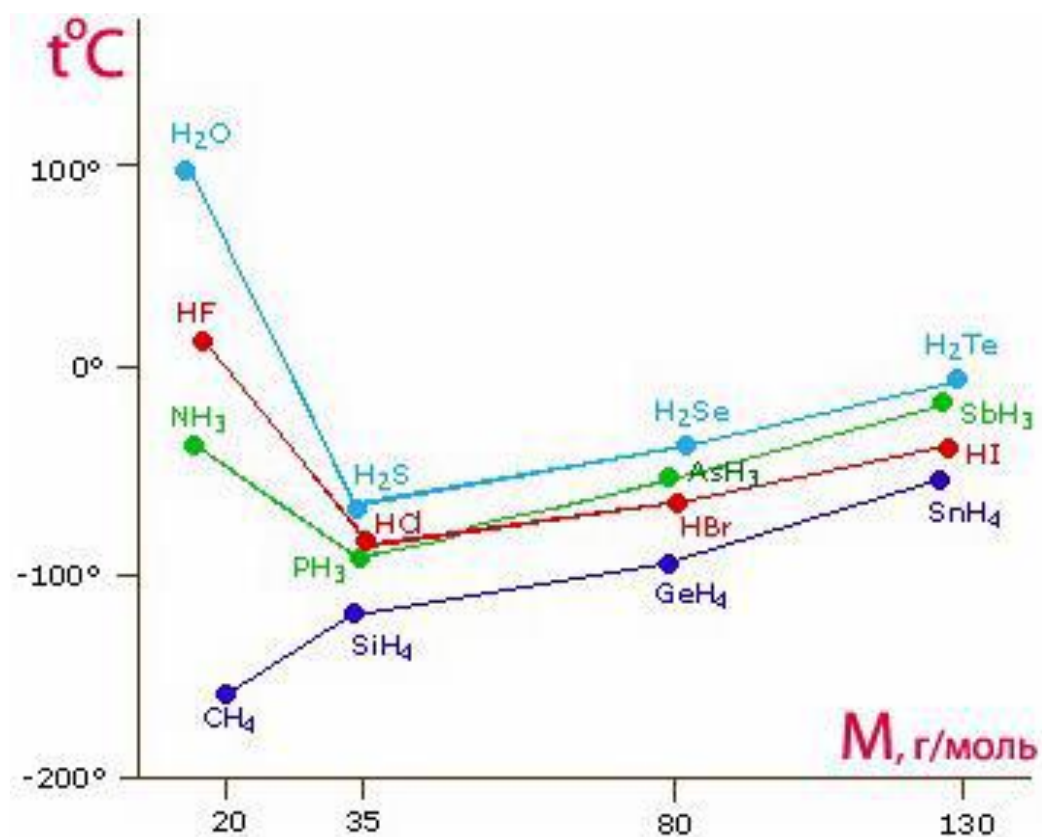
Водневий зв'язок

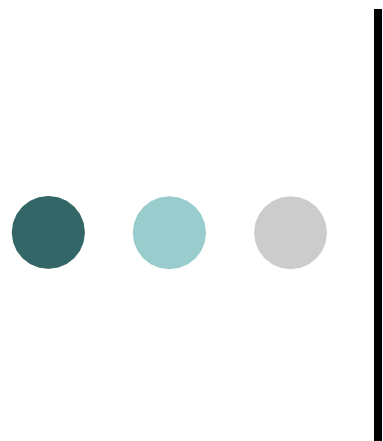
Водневий зв'язок – це електростатична взаємодія між протонізованим атомом Гідрогену однієї молекули і атомом електронегативного елемента, що несе негативний ефективний заряд і входить до складу іншої молекули





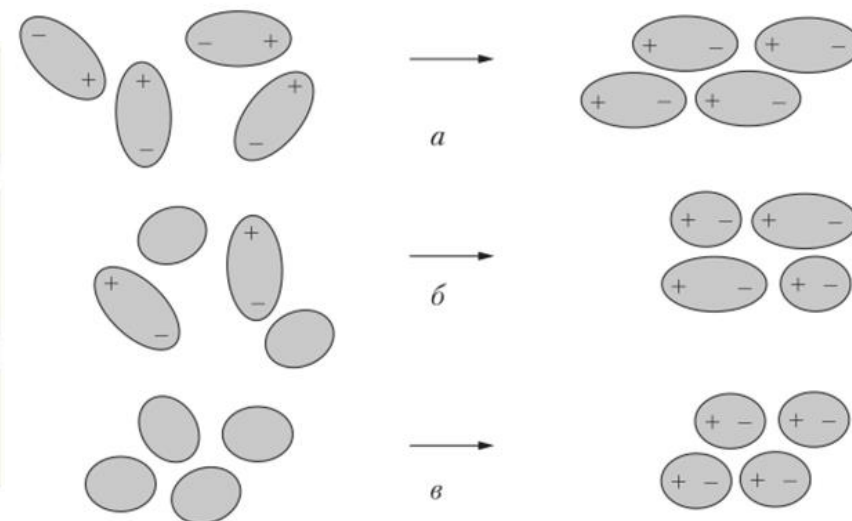
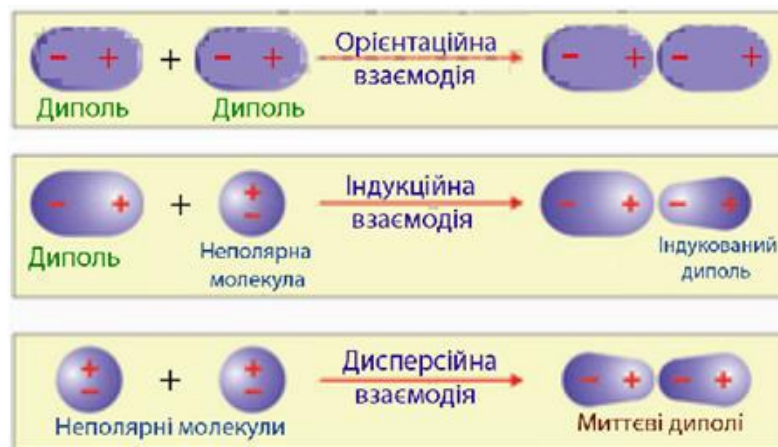
Залежність температури плавлення
сполук елементів IVA-VIIA-підгруп з
гідрогеном від молярної маси





Міжмолекулярна взаємодія

- орієнтаційна (полярні молекули)
- індукційна (полярна – неполярна молекули)
- дисперсійна (неполярні молекули)



Орієнтаційна міжмолекулярна взаємодія (диполь-дипольна) – це взаємодія в конденсованому стані речовин, при якій сусідні молекулярні диполі розміщуються один відносно одного протилежно зарядженими полюсами, що забезпечує їх взаємне притягання.

Індукційна міжмолекулярна взаємодія – це взаємодія, що зумовлена дією індукованих диполів молекул.

Дисперсійна міжмолекулярна взаємодія – це взаємодія між неполярними молекулами, яка виявляється за рахунок їхніх миттєвих мікродиполів, що утворюються внаслідок руху електронів в атомах і коливань ядер.

Сили відштовшування електронних оболонок молекул