

Тема 4. Хімічний зв'язок і будова речовин. Типи і головні параметри хімічного зв'язку. Ковалентний зв'язок. Механізми утворення та властивості ковалентного зв'язку. Гібридизація валентних орбіталей. Йонний, водневий та металевий зв'язки.

План

1. Поняття про «хімічний зв'язок».
2. Енергія іонізації та спорідненість до електрона
3. Електронегативність.
4. Ковалентний зв'язок. Його види. Основні характеристики
5. Йонний зв'язок.
6. Металевий зв'язок.
7. Водневий зв'язок.

1. **Хімічний зв'язок** – це сила, яка діє між атомами і зв'язує окремі атоми, іони, радикали тощо в молекули, складні йони та радикали, кристали. Головною умовою утворення хімічного зв'язку є зменшення повної енергії багатоатомної системи порівняно з енергією ізольованих атомів, тобто

$$E_{AB} < E_A + E_B \text{ для реакції типу } A + B = AB.$$

Зменшення енергії зумовлене тим, що електрони одночасно притягуються до двох ядер. Унаслідок перекривання електронних хмар у разі зближення атомів у просторі між ядрами цих атомів виникає ділянка підвищеної густини негативного електричного заряду. Позитивно заряджені ядра притягуються в напрямі цієї ділянки перекривання електронних хмар, що й забезпечує стійкість молекули.

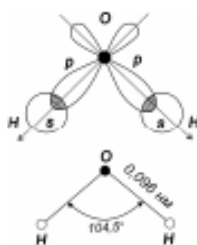
Отже, хімічний зв'язок – це наслідок взаємодії електронів і ядер атомів, що приводить до зменшення енергії системи. Залежно від характеру розподілу електронної густини між атомами, що взаємодіють, розрізняють три головні типи зв'язку: ковалентний, йонний, металевий. Описати хімічний зв'язок у речовині означає визначити, як саме розподілена електронна густина в багатоелектронній системі, знайти його міцність, довжину, валентні кути.

В основі всіх типів хімічного зв'язку лежать електричні сили тяжіння, вони розрізняються між собою тільки за силою. А ця сила у свою чергу визначається типом наявних частинок (атомів, молекул, іонів).

Головні параметри хімічного зв'язку – це енергія, кратність, довжина зв'язку, кут між зв'язками (валентний кут) і полярність.

Мірою міцності зв'язку є енергія зв'язку $E_{зв}$ – кількість енергії, яка витрачається для розриву зв'язку або виділяється під час утворення сполуки з окремих атомів. Енергія хімічних зв'язків може змінюватися у широких межах – від 10 (у частинках Li_2) до ~ 103 кДж/моль (у молекулах N_2 , CO). Наприклад, для молекули H_2 $E_{зв} = -435$ кДж/моль. Енергія зв'язку має знак “–”, тобто енергія виділяється під

час утворення сполуки з окремих атомів. Кратність зв'язку визначена кількістю електронних пар, які зв'язують два атоми. Якщо зв'язок забезпечує одна електронна пара, то його називають простим, або одинарним, а якщо більше ніж одна – кратним (подвійним, потрійним). З підвищенням кратності зв'язку його енергія зростає, а довжина зменшується. Наприклад, для вуглеводнів енергія зв'язків С–С, С=С і С≡С становить, відповідно, 343, 615 і 812 кДж/моль. Довжина зв'язку – відстань між центрами хімічно зв'язаних атомів. Вона залежить від типу зв'язку, його кратності та найближчого оточення атомів і перебуває в межах від сотих до двох–трьох десятих нанометра. Наприклад, довжина зв'язків С–С, С=С і С≡С у вуглеводнях, відповідно, дорівнює 0,154, 0,133 і 0,120 нм. Валентний кут – це кут між уявними лініями, які проходять через ядра взаємозв'язаних атомів. Зокрема, у молекулі води довжина зв'язку О–Н становить 0,096 нм, а валентний кут Н–О–Н – $104,5^\circ$



Полярність зв'язку зумовлена зміщенням електронної густини до атома з більшою електронегативністю, що приводить до поділу центрів тяжіння негативного заряду електронів і позитивного заряду ядра.

Розрізняють п'ять типів хімічного зв'язку. Який з них діє в конкретному випадку, залежить від типу зв'язаних одна з одною частинок.

Існують, перш за все, три «сильні» типи хімічного зв'язку:

- ◆ ковалентний зв'язок між атомами неметалів;
- ◆ металічний зв'язок між атомами металів;
- ◆ іонний зв'язок між іонами, тобто електрично зарядженими частинками.

Окрім цього, існують два типи зв'язку, які значно слабші:

◆ водневий зв'язок між молекулами, в яких атоми Гідрогену пов'язані з найбільш електронегативними атомами, наприклад, атомами Оксигену, Нітрогену, Флуору;

◆ сили Ван-дер-Ваальса, що діють між молекулами значно слабше, ніж інші типи міжмолекулярної взаємодії.

Формування хімічного зв'язку визначається тим, наскільки атоми, що беруть участь у ньому, здатні віддавати або приймати електрони.

2. Енергія іонізації та спорідненість до електрона

Енергія іонізації атома — це енергія, необхідна для повного відриву електрона від

атома. Енергія іонізації є критерієм міцності зв'язку електрона з атомом.

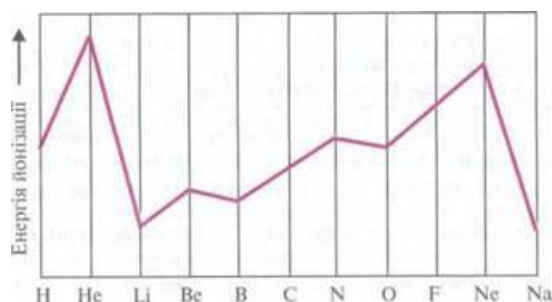
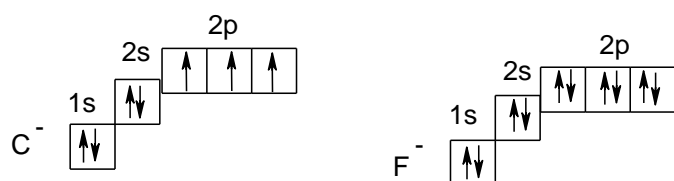


Рис. 1.

Наведена залежність енергії іонізації показує, що атоми з повністю зайнятими орбіталями дуже стійкі й тому мають незначну схильність до утворення зв'язків. Також можна помітити, що й атоми з наполовину зайнятими орбіталями.

Приклад 1. Атом Нітрогену має більшу енергію іонізації, ніж сусідній з ним у періодичній системі атом Оксигену. Спорідненість до електрона (ДНЕА) — це енергія, яка вивільняється або необхідна для приєднання електрона до атома з утворенням негативно зарядженого іона. І в цьому випадку слід зазначити, що приєднання електронів відбувається легше, якщо при цьому виникають наполовину або повністю заповнені електронами орбіталі.

Приклад 2. Карбон має порівняно велику спорідненість до електрона: при приєднанні одного електрона той займає вільну третю р-орбіталь. Флуор має дуже високу спорідненість до електрона, оскільки при приєднанні одного електрона виникає виключно стійка електронна конфігурація інертного газу.



Залежно від своєї енергії іонізації та спорідненості до електрона атоми проявляють різну здатність сполучатися і утворювати різні типи хімічних зв'язків:

Енергія іонізації	Спорідненість до електрона	Утворення частинок	Наприклад
низька	низька	катіони	лужні метали
середня	середня	електронні пари	Карбон
висока	висока	аніони	галогени

Якщо один атом сполучається з іншим атомом, то залежно від виду атомів

утворюються іони або молекули.

◆ При утворенні іонного зв'язку валентні електрони приймаються або віддаються повністю.

◆ При утворенні молекул валентні електрони йдуть на утворення спільних електронних пар.

Число хімічних зв'язків за рахунок отриманих або відданих електронів, чи тих, що йдуть на утворення зв'язків, називають валентністю відповідного атома. Інертні гази особливо стійкі. Розташування електронів у зовнішніх шарах їхніх атомів — 2 валентних електронів в Гелію і по 8 валентних електронів у інших інертних газів (електронний октет) — визначає енергетично стійкий стан. Атоми, які не мають електронної конфігурації інертного газу, прагнуть її досягти (правило октету). Валентність атома залежить від того, скільки електронів потрібно прийняти, віддати, або надати на утворення хімічного зв'язку. Гідроген завжди одновалентний, Оксиген майже завжди двовалентний, незалежно від того, утворюють вони іони чи молекули.

3. Електронегативність

Енергія іонізації показує, наскільки легко атом втрачає електрон. Спорідненість до електрона визначає здатність нейтрального атома приймати електрон. **Електронегативність (ЕН)** – це здатність атома хімічного елемента притягувати до себе спільні електронні пари. Вона визначає розподіл електронів в існуючому хімічному зв'язку і є мірою здатності атома залучати валентні електрони до спільного зв'язку. Електронегативність елемента визначається сумою його енергій іонізації та спорідненості до електрона. Чим більша електронегативність атома, тим сильніше він притягує спільну електронну пару. Під час утворення ковалентного зв'язку спільні електронні пари зміщуються в бік більш електронегативного атома – хлору в молекулі HCl, Оксигену в молекулі H₂O. внаслідок цього зв'язку поляризуються: на атомі з вищою електронегативністю (F, O, N) виникає від'ємний заряд (-q), а на атомі з нижчою – позитивний (+q). Такі заряди атомів у молекулі називають ефективними. Експериментально встановлено, що в молекулі HCl $q(\text{Cl}) = -0,18$; $q(\text{H}) = +0,18$.

Електрони, які здійснюють зв'язок між атомами, притягуються сильніше до атома, що має більшу електронегативність. Різниця в електронегативності ($\Delta\text{ЕН}$) атомів, які беруть участь у зв'язку, дозволяє ідентифікувати тип зв'язку, що присутній в даній речовині.

При $\Delta\text{ЕН} > 1,9$ виникає іонний зв'язок. При $\Delta\text{ЕН} < 1,9$ утворюється ковалентний зв'язок. Між типами хімічного зв'язку немає чіткої межі. Немає сполук з «чистим» іонним зв'язком і — окрім випадку $\Delta\text{ЕН} = 0$ — з чистим ковалентним зв'язком.

Приклад 3.

Пара елементів	ΔEN	Тип зв'язку
H — C	0,4	полярний ковалентний зв'язок
H — F	1,9	полярний ковалентний зв'язок
Li — F	3,0	іонний зв'язок

Елетронегаивність елемента та періодичний закон. Елетронегаивність підлягає періодичному закону. У періоді елетронегаивність елементів елементів зростає зі збільшенням порядкового номера елемента, тобто зліва направо. На початку періоду містяться елементи, елетронегаивність яких низька (метали), а в кінці – найбільш елетронегаивні (неметали). В групі елетронегаивність елементів зменшується із зростанням порядкового номера, тобто згори донизу. Найбільш елетронегаивним у періодичній системі є флуор. Інертні елементи елетронегаивності не мають.

Для оцінки ступеня елетронегаивності була створена відносна шкала елетронегаивності від 1,0 - Літій - 4,0 -Флуор.

Елемент	ЕН	Елемент	ЕН	Елемент	ЕН
Цезій	0,74	Алюміній	1,60	Сульфур	2,60
Калій	0,91	Силіцій	1,90	Бром	2,80
Натрій	0,93	Гідроген	2,10	Хлор	3,00
Літій	0,98	Фосфор	2,20	Нітроген	3,07
Кальцій	1,04	Селен	2,50	Оксиген	3,50
Магній	1,20	Карбон	2,50	Флуор	4,00

За зростанням елетронегаивності хімічні елементи можна розташувати згідно такої послідовності:

Rb, K, Na, Li, Sr, Ca, Mg, Be, In, Al, Sn, Ga, Sb, Si, B, As, H, Te, P, S, Se, I, Br, Cl, N, O, F.

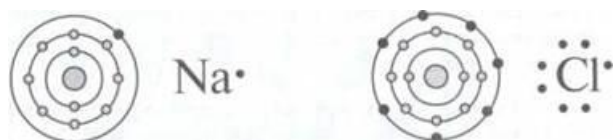
Елетронегаивність застосовують як якісну характеристику для визначення напряму зміщення спільних елетронних пар під час утворення молекул, тобто для оцінки полярності хімічного зв'язку в різних сполуках і пояснення їх хімічної поведінки. Чим більшою є різниця елетронегаивностей атомів, що з'єднані, тим полярні ший зв'язок між ними.

Наприклад: NaOH різниця між елетронегаивностями Na та O становить $3,5 - 0,93 = 2,57$, O та H $3,5 - 2,1 = 1,4$. Зв'язок Na—O значно полярні ший за O—H ($2,57 > 1,4$). NaOH - йонна сполука, що містить йони Na^+ та OH^- Оскільки більш полярний

зв'язок розривається легше, тому можна зрозуміти, чому NaOH проявляє основні властивості.

При утворенні хімічного зв'язку атоми, що беруть участь у ньому, намагаються набути конфігурації інертного газу. Оскільки при цьому в утворенні хімічного зв'язку беруть участь лише валентні електрони, тобто електрони зовнішнього енергетичного рівня. Для зображення «енергетичного стану атома» використовують так звану формулу Льюїса, в якій зображені лише валентні електрони.

Приклад 4. Зображення електронної будови атома Na і атома Cl та їх запис у вигляді формули Льюїса, в яких показані лише ті орбіталі, електрони яких беруть участь в утворенні хімічного зв'язку.



4. Ковалентний зв'язок. Його види.

Ковалентний зв'язок – це тип зв'язку між двома атомами, при якому утворюються спільні пари електронів у полі ядер обох атомів. Ковалентний зв'язок може утворюватися за участю більшої, ніж два, кількості спільних електронів. Цей зв'язок утворюють типові неметали. Для утворення спільних пар електронів кожен атом дає однакову кількість електронів. У цьому випадку кожен атом хоче оточити себе дублетом або октетом електронів, характерним для зовнішнього енергетичного рівня атомів шляхетних газів.

Формування ковалентного зв'язку відбувається також за правилом октету. Атоми сполучаються в молекули і при цьому намагаються шляхом утворення спільних електронних пар сформувати стійку конфігурацію інертного газу.

У 1916 р. американський фізикохімік Дж. Льюїс висловив припущення, що хімічний зв'язок може утворюватися, якщо виникає спільна пара електронів, які одночасно належать двом атомам. Ця ідея стала провідною для розроблення сучасної теорії ковалентного зв'язку.

Ковалентний зв'язок поділяють на ковалентний неполярний і ковалентний полярний.

Ковалентний неполярний зв'язок

Найпростіший приклад утворення ковалентного неполярного зв'язку – молекула H_2

Утворення хімічного зв'язку між двома атомами Гідрогену розглядають як результат перекривання їхніх атомних орбіталей у разі наближення атомів, що взаємодіють, внаслідок чого збільшується густина негативного електричного заряду в просторі між двома атомними ядрами (рис. 2).

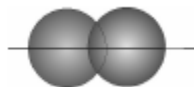
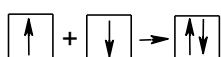


Рис. 2. Схема перекривання атомних електронних хмар у молекулі водню

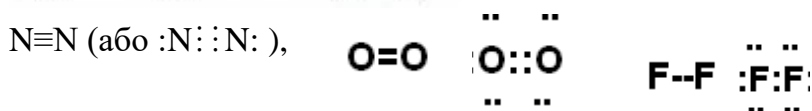
Позитивно заряджені ядра притягуються до області перекривання атомних орбіталей, внаслідок чого утворюється молекула H_2 . Якщо валентні електрони позначити крапками, то ковалентний зв'язок між атомами Гідрогену можна зобразити схемою

$H\cdot + \cdot H = H : H$ (або $H\uparrow + \downarrow H = H\downarrow\uparrow H$), $E_{зв} = -435$ кДж/моль.

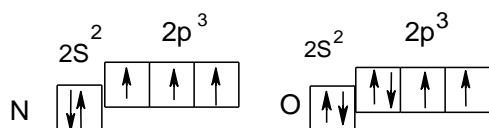


Спільна пара електронів належить обом атомам, кожен з яких одержує двохелектронну оболонку. Найбільшою електронна густина спільної електронної хмари є між ядрами атомів. Молекула водню утворюється за рахунок взаємодії спільної електронної пари з ядрами обох атомів.

У молекулах фтору, хлору, кисню, азоту зв'язок між атомами ковалентний неполярний. Він утворюється в молекулах фтору та хлору за допомогою однієї спільної пари електронів



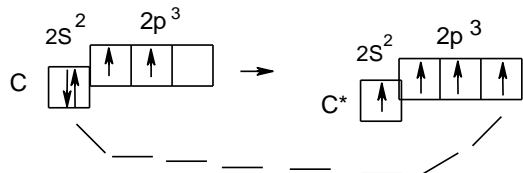
Перебування пари електронів у полі двох ядер є більш вигідним, ніж кожного електрона в полі свого ядра, тому в утворенні ковалентного зв'язку беруть участь усі одноелектронні орбіталі зовнішнього рівня. Наприклад, в атома Нітрогену є три неспарені р-електрони на зовнішньому рівні: в атома Оксигену – два неспарені р-електрони:



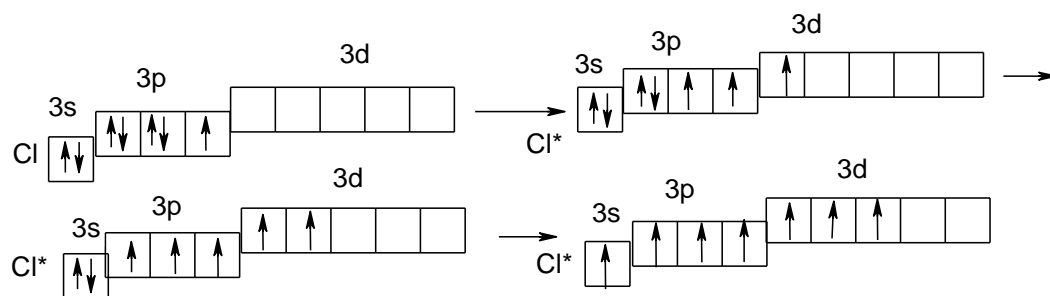
Внаслідок утворення ковалентних зв'язків між цими атомами навколо кожного

атома утворюється стійка конфігурація з восьми (октет) електронів, як у випадку шляхетного газу; для H_2 – дублет (два електрони), як у He. Відповідно до кількості утворених спільних електронних пар, у молекулі азоту зв'язок потрійний, у молекулі кисню – подвійний, а в молекулі фтору – одинарний. Такий спосіб утворення ковалентного зв'язку називають обмінним, оскільки в цьому разі відбувається перекривання атомних орбіталей атомів, що взаємодіють.

Проте кількість ковалентних зв'язків може бути більшою, ніж кількість наявних у незбудженому атомі неспарених електронів. Наприклад, атом Карбону у незбудженому стані на зовнішньому рівні має два неспарені електрони, тобто здатний утворювати два ковалентні зв'язки. Але валентність атома карбону в органічних сполуках -4. Це пояснити можна тим, що атом C переходить у збуджений стан, тобто відбувається розпаровування 2s-енергетичного рівня і один електрон перейде на вакантну 2p-орбіталь. Збуджений стан позначається C^*



Таке “розпарування” електронів потребує затрати енергії, яка компенсується завдяки енергії утворення зв'язку, проте, як звичайно, відбувається тільки в межах цього енергетичного рівня. Перехід електрона на вільні орбіталі іншого рівня енергетично невигідний. Тому, наприклад, атоми Оксигену та Флуору, які не мають вільних орбіталей на зовнішньому електронному рівні, не можуть утворювати більшої кількості валентних зв'язків, ніж, відповідно, два і один, і тому їхня валентність постійна. Атоми елементів третього і наступних періодів на зовнішньому енергетичному рівні мають d-підрівень, на який у разі збудження можуть переходити s- і p-електрони зовнішнього рівня. Тому в них з'являються додаткові можливості збільшення кількості неспарених електронів. Наприклад, атом Хлору, який у незбудженому стані має один неспарений електрон і може переходити, залежно від умов, у збуджені стани (Cl^*), за яких наявні три, п'ять або сім неспарених електронів:



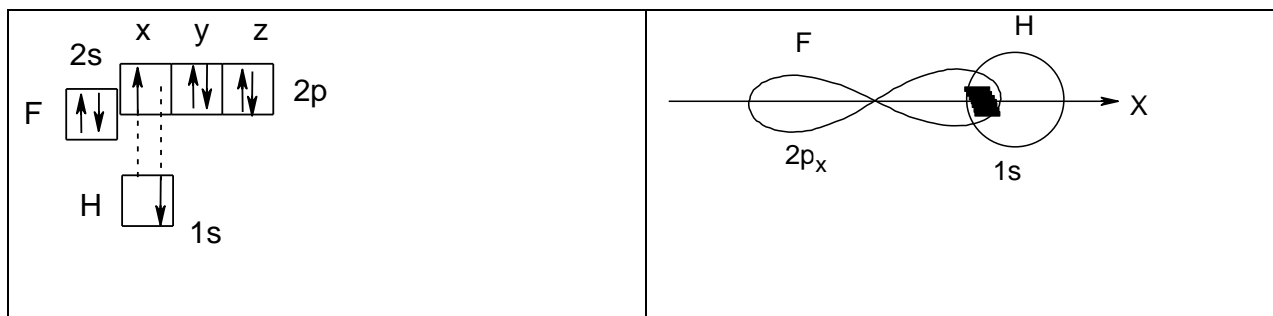
Тому, на відміну від атома Флуору, атом Хлору може брати участь в

утворенні не лише одного, а й трьох, п'яти і семи ковалентних зв'язків. Зокрема, у хлоритній кислоті HClO_2 валентність Хлору дорівнює трьом, у хлоратній HClO_3 – п'яти, а у перхлоратній - HClO_4

Механізм утворення ковалентного полярного зв'язку.

Якщо загальна електронна пара симетрична щодо атомів, то ковалентний зв'язок називається неполярний. неполярний ковалентний зв'язок утворюється при взаємодії атомів з однаковою електронегативністю

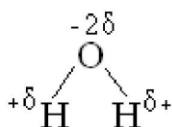
Якщо взаємодіють між собою атоми, які відрізняються за електронегативністю то утворюється ковалентний полярний зв'язок (HCl H_2O NH_3 CH_4). При цьому спільна електронна пара зміщена до атома з більшою електронегативністю. У цьому випадку виникає полярна ковалентний зв'язок. При утворенні молекули HF відбувається перекривання s -орбітами атома фтору. Загальна електронна пара розташована несиметрично щодо центрів взаємодіючих атомів.



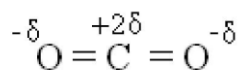
В результаті зсуву електронної пари в молекулі HF виникає диполь. **Диполь** - це система з двох зарядів, рівних за абсолютною величиною, але протилежних за знаком. Приймають, що атом, до якого зміщена загальна електронна пара, набуває певний негативний заряд, а інший атом - позитивний заряд: Багато молекули, в яких виникають диполі, є полярними. Утворення молекули хлороводня HCl представляють схемою: $\text{H} + \text{Cl} = \text{H}^{\delta+} \text{Cl}^{\delta-}$.

Електронна пара зміщується до атома Cl , оскільки електронегативність атома Cl вища, ніж атома H . Тому в молекулі HCl електронна густина біля ядра Хлору буде вища, ніж в ядра H . Полярна молекула - це електричний диполь із зарядом δ^- у атома Cl , а δ^+ - у атома H . Такі зв'язки і молекули називають полярними. Молекули також можуть бути полярними і неполярними залежно від будови молекули.

Наприклад,



кутова будова:

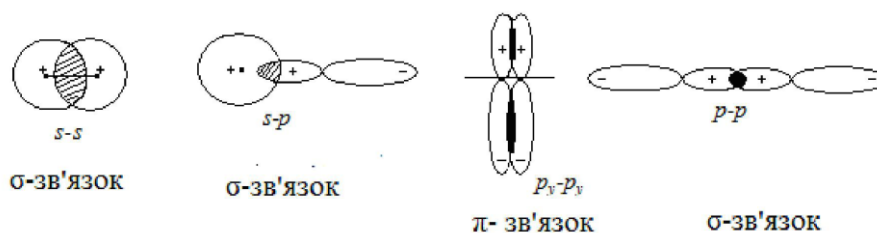


лінійна будова:

не компенсуються електричні моменти диполя, внаслідок кутової будови молекули;

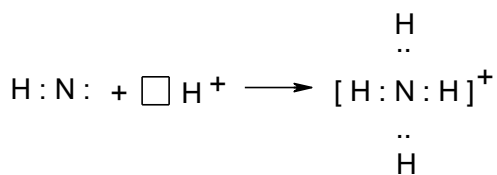
компенсуються електричні моменти диполя, хоча зв'язки C=O сильно полярні.

Ковалентний зв'язок може бути σ - або π -зв'язком. σ -зв'язок утворюється по осі, що з'єднує ядра взаємодіючих атомів. π - зв'язок утворюється по обидві сторони від осі, що сполучає ядра атомів:



Інший механізм утворення ковалентного зв'язку – донорно-акцепторний, коли один атом (донор) надає для зв'язку неподілену пару електронів, а інший (акцептор) – вільну орбіталь. Прикладом може бути утворення йона амонію за реакцією $\text{NH}_3 + \text{H}^+ = \text{NH}_4^+$

У молекулі NH_3 атом N має неподілену електронну пару. Така пара електронів може брати участь в утворенні ковалентного зв'язку з іншим атомом, якщо на зовнішньому електронному рівні цього атома є вільна орбіталь. Незаповнена 1s-орбіталь є, наприклад, в іона H^+ , який взагалі не має електронів, тому під час взаємодії молекули NH_3 з іоном N між ними виникає ковалентний зв'язок. Неподілена пара електронів від атома N, який є донором, у молекулі аміаку стає спільною для двох атомів, унаслідок чого утворюється йон амонію NH_4^+

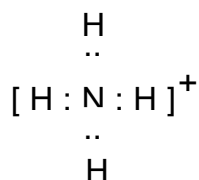


Всі чотири зв'язки в іоні амонію рівноцінні, хоча утворені за двома різними механізмами, і заряд іона (+1) належить не якомусь окремому атомові, а йонові взагалі. Зв'язок, утворений за донорно-акцепторним механізмом, за характеристиками не відрізняється від зв'язку, утвореного шляхом перекривання атомних орбіталей (тобто за обмінним механізмом). Донорно-акцепторний механізм утворення ковалентного зв'язку має важливе значення в разі утворення координаційних (комплексних) сполук, тому його ще називають координаційним зв'язком.

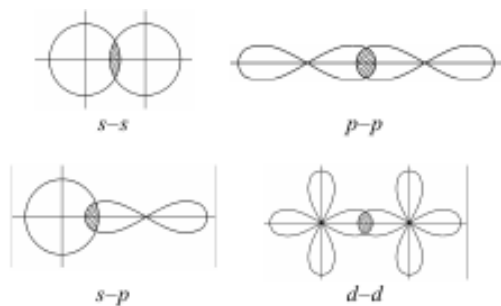
Властивості ковалентного зв'язку

Ковалентний зв'язок належить до найміцніших хімічних зв'язків; його характеризують насичуваність, напрямленість і полярність (поляризованість).

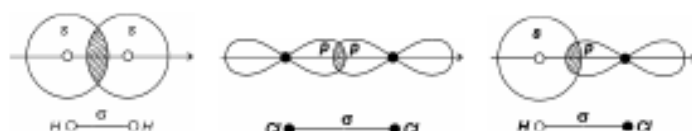
Насичуваність зв'язку – це здатність атома утворювати певну кількість ковалентних зв'язків. Наприклад, у молекулі аміаку ковалентний зв'язок ненасичений – залишається неподіленою пара електронів (:NH₃); а в іоні амонію зв'язок насичений щодо атома Нітрогену, який має чотири спільні електронні пари з атомами Гідрогену:



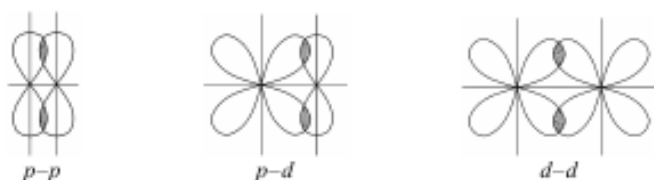
Тут валентність, або точніше – ковалентність, атома Нітрогену дорівнює чотирьом. Кількість ковалентних зв'язків, утворених заданим атомом, називають ковалентністю елемента. Згідно з положеннями квантової механіки, найміцнішими будуть зв'язки, що виникають у напрямках максимального перекривання хмар валентних електронів, тому говорять про напрямленість ковалентного зв'язку. Залежно від способу перекривання атомних орбіталей атомів, що взаємодіють, розрізняють σ -, π - та δ -зв'язки. Сигма(σ)-зв'язок утворюється в разі перекривання електронних хмар уздовж лінії, що з'єднує ядра атомів, які взаємодіють. Такий зв'язок може формуватися за участю усіх видів орбіталей:



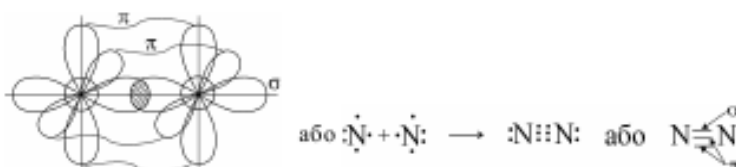
Наприклад, у молекулах H₂, Cl₂ і HCl перекривання електронних хмар з утворенням σ -зв'язку можна описати такими схемами:



Пі(π)-зв'язок виникає у випадку перекривання електронних хмар у площині, перпендикулярній до лінії зв'язку, унаслідок чого формуються дві області перекривання, розташовані по обидва боки від лінії зв'язку (p-p, p-d, d-d електрони). Схематично це можна зобразити так:



π -зв'язки, наприклад, виявляються в молекулі азоту. Якщо за лінію зв'язку прийняти вісь X, то спосіб перекривання p_x -орбіталей буде відрізнятися від перекривання p_y - і p_z -орбіталей. Унаслідок перекривання p_x -орбіталей уздовж осі X утворюється один σ -зв'язок, а внаслідок перекривання p_y - і p_z -орбіталей – два π -зв'язки:



Хімічний зв'язок, утворений більш ніж однією електронною парою, називають кратним. З підвищенням кратності зв'язку збільшується його енергія (і, відповідно, міцність) та зменшується довжина зв'язку. Атоми сполучаються між собою одинарними, подвійними або потрійними зв'язками. Одинарний зв'язок між атомами завжди є σ -зв'язком. Якщо молекула містить кратні зв'язки, то один з них завжди є σ -зв'язком. Просторову напрямленість мають також зв'язки, утворені d- або f-орбіталами, оскільки вони теж напрямлені у просторі. Типовий ковалентний зв'язок формується між атомами одного елемента, наприклад, у молекулах водню, кисню, азоту, хлору тощо. В молекулі, утвореній з атомів одного й того ж елемента, спільна електронна хмара розміщена симетрично між ядрами. Такий ковалентний зв'язок називають неполярним, або гомеополарним. Коли в утворенні зв'язку беруть участь атоми різних елементів, які відрізняються за електронегативністю, то спільна пара електронів буде зміщена до елемента з більшою електронегативністю. Виникає асиметрія в розміщенні позитивних і негативних зарядів між атомами, що взаємодіють, і молекула є електричним диполем. Наприклад, у молекулі HCl в атома Хлору виникає надлишковий негативний ($-0,18$ заряду електрона), а у Гідрогену – надлишковий позитивний ($+0,18$ заряду електрона) заряди. Ці заряди називають ефективними (реальними) зарядами атомів у молекулі. Полярний, або гетерополярний, зв'язок – це такий ковалентний зв'язок, якому притаманне зміщення спільної пари електронів у бік одного з атомів, що взаємодіють. Більшість ковалентних зв'язків є полярною. Зокрема, у молекулі карбон (IV) оксиду з лінійною будовою заряди розподілені симетрично і вона є неполярною. У молекулі сульфур (IV) оксиду, що має

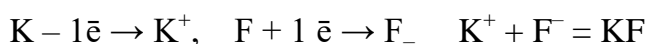
кутову будову, заряди розподілені асиметрично, і така молекула буде полярною. Полярність молекули головно визначає властивості речовини. Полярні молекули повертаються одна до одної протилежно зарядженими полюсами і між ними виникає взаємне електростатичне притягання (кулонівська взаємодія). Тому речовини, утворені полярними молекулами, мають вищі температури плавлення, проводять електричний струм у розчиненому і розплавленому вигляді, добре розчинні у полярних розчинниках (зокрема, у воді), порівняно з речовинами, які утворені неполярними молекулами. Речовини, утворені неполярними молекулами, ліпше розчиняються в неполярних розчинниках (бензен, чотирихлористий вуглець).

Іонний зв'язок

Під час взаємодії двох атомів, які суттєво відрізняються відносною електронегативністю, електронна густина може практично повністю зміститися до більш електронегативного атома. У такому разі маємо граничний випадок полярного ковалентного зв'язку, що наближається до йонного. За ступенем зміщення електронної густини в молекулі зв'язок може бути ковалентним неполярним, ковалентним полярним та йонним.

Іонний зв'язок – це зв'язок, що утворюється завдяки електростатичному притягання протилежно заряджених іонів. Значний внесок у розробку теорії йонного зв'язку, що формується внаслідок зміщення електронної пари від одного атома до іншого, зробив німецький фізик В. Коссель 1916р.

Сполучення різних елементів зумовлене намаганням їхніх атомів утворити енергетично найстійкіші електронні системи. Така енергетично стійка електронна система може виникнути завдяки односторонньому передаванню електронів від одного атома до іншого, що й простежують в іонних сполуках. Притягування електронів одним з атомів приводить до утворення негативно та позитивно заряджених іонів, які сполучаються між собою у складніший агрегат завдяки силам електростатичної взаємодії. Наприклад, розглянемо сполучення атомів Калію і Флуору. Атом Флуору на зовнішньому електронному рівні має сім електронів ($2s^2 2p^5$), атом Калію на зовнішньому електронному рівні має лише один електрон ($4s^1$). Щоб утворилась стійка електронна конфігурація, атому Калію, який має незначний потенціал іонізації, легше віддати свій один електрон, ніж приєднати сім чужих. Так утворюється позитивно заряджений іон (катіон) K^+ Аналогічно атом Флуору, маючи значну спорідненість до електрона, приєднує один електрон, утворюючи негативно заряджений іон (аніон) F^- :

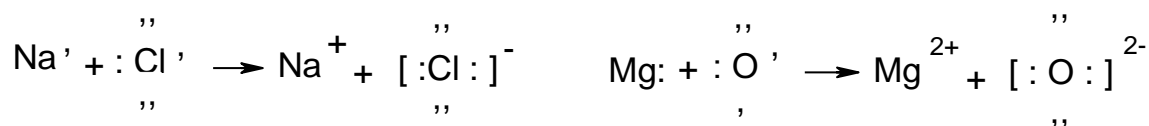


Під час утворення катіона радіус відповідного атома зменшується, а під час утворення аніона – збільшується. Іони бувають прості (K^+ , Cl^- , Na^+ , I^-), складні (SO_4^{2-} , OH^- , NO_3^-), одно- і багатозарядні.

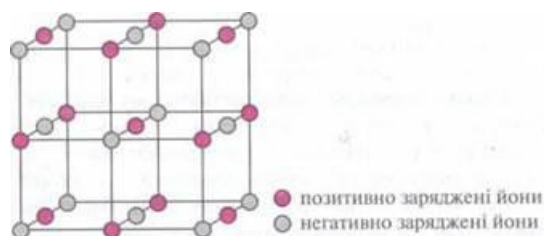
Здатність атомів утворювати прості йони зумовлена їхньою електронною структурою, яку оцінюють за потенціалом іонізації та спорідненістю до електрона. Наприклад, лужні та лужноземельні метали, що мають малі значення потенціалів іонізації, легко утворюють катіони, а р-елементи шостої–сьомої груп унаслідок великої спорідненості до електрона найлегше утворюють прості аніони. Тому до сполук з іонним типом зв'язку належать галогеніди лужних металів, наприклад, $NaCl$, CsF тощо.

багатозарядні складні аніони (SO_4^{2-} , CO_3^{2-} , PO_4^{3-} та ін.) є енергетично стійкими, оскільки надлишкові електрони розподілені між кількома атомами, так що ефективний заряд кожного атома не перевищує заряду електрона. Навіть у типових іонних сполуках ($NaCl$, KF) не відбувається повного розділення позитивного і негативного зарядів, тобто повного переходу електрона від одного атома до іншого електрона. Тому йонний зв'язок можна розглядати як граничний випадок ковалентного полярного зв'язку, у якому відбувається значне зміщення електронної густини до більш електронегативного атома.

Для створення конфігурації інертного газу, оболонка валентних електронів атома може втрачати або приймати електрони. При цьому утворюються позитивно або негативно заряджені іони.



Між іонами, що мають різні заряди, відбувається сильна електростатична взаємодія. Тому іонні сполуки в твердому стані утворюють стійку іонну кристалічну ґратку.



Особливості металевого зв'язку

Метали, на відміну від речовин, у яких є ковалентні чи іонні зв'язки, мають низку характерних особливостей. По-перше, у металів, порівняно з іншими

речовинами, високі електро- і теплопровідність; по-друге, за звичайних умов метали (за винятком ртуті) є кристалічними речовинами з високою щільністю укладки атоміввалентних кристалів, у яких координаційні числа значно менші. Високу електро- і теплопровідність металів можна пояснити тим, що частина електронів може переміщатися по всьому зразку металу. З іншого боку, на підставі кристалічної будови металів можна зробити висновок, що атоми металу не сполучені один з одним локалізованими двохелектронними зв'язками, оскільки валентних електронів атома металу недостатньо для утворення подібних зв'язків з усіма сусідніми атомами. На відміну від ковалентних та йонних сполук, у металах невелика кількість валентних електронів одночасно сполучає велику кількість атомів, а самі електрони можуть вільно переміщатися в об'ємі металу. Невисокі енергії йонізації металів зумовлюють легкість відривання валентних електронів і переміщення їх по всьому об'єму кристала. Такі електрони ще називають електронами провідності. Завдяки цьому метали мають добру тепло- й електропровідність. Отже, метал можна уявити як щільно упаковану структуру з катіонів та колективізованих електронів провідності, які утворюють електронний газ. Електронний газ компенсує сили взаємного електростатичного відштовхування позитивно заряджених катіонів, забезпечуючи їхній зв'язок у твердому тілі, тобто металевий зв'язок. Такий зв'язок характерний для металів, сплавів та інтерметалевих сполук (див. 6.9). У металах електрони провідності є завжди, на відміну від напівпровідників, де вони з'являються лише за певних умов (наприклад, підвищення температури, освітлення). Металевий зв'язок нелокалізований і ненапрявлений. Такі властивості металів, як пластичність або ковкість, зумовлені саме ненасичуваністю і ненапрявленістю металевого зв'язку. Механічні навантаження не спричиняють розриву зв'язку в металах, а тільки приводять до зміщення одного шару щодо іншого.

7. Водневий зв'язок

Атом Гідрогену може сполучатися з атомами сильно електронегативних елементів (наприклад, Флуору, Оксигену, Нітрогену) завдяки утворенню додаткового виду зв'язку – водневого. Водневим називають зв'язок між атомом Гідрогену й атомами більш електронегативних елементів однієї і тієї самої речовини, які мають неподілені пари електронів. Цей тип зв'язку дуже поширений і відіграє важливу роль у хімічних та біологічних процесах. Водневий зв'язок проміжний між електростатичним притяганням і донорно-акцепторною взаємодією, у цьому разі донором є атом більш електронегативного елемента, акцептором – атом Гідрогену. Енергія водневого зв'язку зазвичай невелика (8–40 кДж/моль), та оскільки для нього характерні

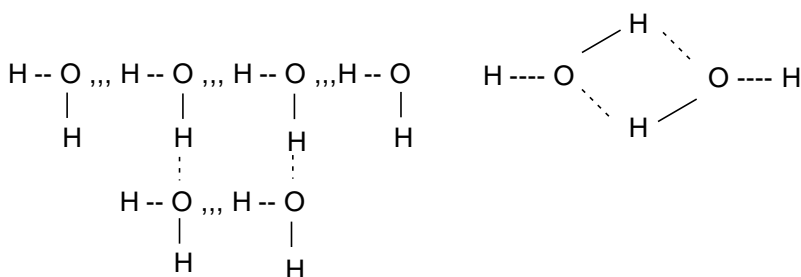
напрявленість і насичуваність, то його можна вважати різновидом ковалентного зв'язку. Умовою утворення водневого зв'язку є висока електронегативність атома елемента, зв'язаного з атомом Гідрогену. Водневий зв'язок тим сильніший, чим більша електронегативність атомапартнера і чим менші його розміри. Тому такий зв'язок характерний для сполук Гідрогену з Флуором, Оксигеном, менше – з Нітрогеном, Хлором, Сульфуром. Не ослаблюючи зв'язку з атомом елемента, з яким він утворює полярний ковалентний зв'язок, атом Гідрогену притягує електрони електронегативного елемента від іншої молекули сполуки. Цю здатність атома Гідрогену пояснюють його малим розміром і здатністю проникати в електронні оболонки інших атомів. Завдяки наявності водневих зв'язків молекули фтороводню сполучаються в складні асоціати, і газоподібний фтороводень легко зазнає зрідження. Навіть у пароподібному стані фтороводень складається з полімерних молекул $(\text{HF})_n$. За температури кипіння HF середнє значення n близьке до 4.

Механізм утворення водневого зв'язку на прикладі HF можна пояснити так. Під час утворення молекули HF спільна електронна пара сильно зміщена в бік атома Флуору (як дуже електронегативного). Внаслідок цього на атомі Флуору виникає значний ефективний негативний заряд, а ядро атома Гідрогену (протон) практично повністю позбавлене електронної хмари. Між протоном атома Гідрогену і негативно зарядженим атомом Флуору сусідньої молекули HF виникає електростатичне притягання, що й приводить до утворення водневого зв'язку. На схемах водневий зв'язок позначають трьома крапками:

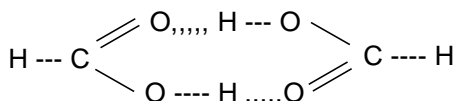


Енергія зв'язку $\text{H}^+-\text{F}^- \dots \text{H}^+-\text{F}^-$ досить велика і становить 113 кДж/моль. Порівняно з хлоридною кислотою фторидна кислота слабка, причиною чого є утворення складних асоціатів завдяки водневому зв'язку. Наявністю водневого зв'язку часто зумовлена асоціація молекул у рідинах. Вода, аміак, спирти, органічні кислоти є асоційованими рідинами. Асоціацією молекул зумовлене підвищення їхніх температур плавлення, кипіння, теплоти пароутворення тощо. Наприклад, температура кипіння води є суттєво вищою від температур кипіння інших сполук елементів шостої групи з Гідрогеном: за звичайних умов H_2S , H_2Se – це газу, а H_2O – рідина. Якби вода не була асоційованою рідиною, то її температура плавлення була б не 0, а -100°C , а температура кипіння не 100, а -80°C . Варіанти утворення водневих зв'язків у воді наведено на схемах

Деякі органічні кислоти (форміатна, ацетатна, монохлорацетатна) утворюють асоціати двох видів: ланцюгові та циклічні димери. Наприклад,



форміатна кислота як у рідкій, так і у газоподібній фазі існує у вигляді димеру:



Розглянуті випадки стосувалися міжмолекулярного водневого зв'язку.

Внутрішньомолекулярний водневий зв'язок виникає між атомами однієї й тієї самої молекули, найчастіше – у великих молекулах органічних сполук, що містять гідроксильні (OH), аміногрупи (NH₂) та нітрогрупи (NO₂). жмолекулярний. Сполуки з внутрішньомолекулярним водневим зв'язком є більш леткими, ліпше розчиняються в органічних розчинниках, це зумовлено тим, що в них нема міжмолекулярної асоціації. Водневий зв'язок виявляється в неорганічних та органічних сполуках, полімерах, білках, тканинах живих організмів. Його універсальність пояснюють поширенням у природі води та сполук зі зв'язками O–H. Водневий зв'язок відіграє важливу роль у процесах розчинення і кристалізації, електролітичній дисоціації, кислотно-основних та окисно-відновних реакціях. Він легко виникає та руйнується за звичайних умов, що є суттєвим для біологічних процесів. Зберігання та передавання спадкової інформації, дію пам'яті пов'язують з молекулярними конфігураціями сполук з водневими зв'язками.

Міжмолекулярна взаємодія

Коли речовина перебуває у газуватому стані, то її частинки – молекули або атоми – хаотично рухаються і зазвичай перебувають на відстанях одна від одної, що значно перевищують власні розміри частинок. Унаслідок цього сил взаємодії між ними практично нема. Зі зниженням температури, коли речовина перебуває у конденсованому (рідкому або твердому) стані, відстані між її частинками невеликі, а сили взаємодії значні. Ці сили утримують частинки рідини або твердого тіла одну біля одної. Тому речовини в конденсованому стані мають, на відміну від газів, сталий за заданої температури об'єм. Дуже слабкі сили притягання між нейтральними атомами або молекулами, що виявляються на відстанях, які перевищують розміри частинок, називають міжмолекулярними, або силами Ван-дер-Ваальса (на честь ученого, який запропонував рівняння стану газу, що

враховує міжмолекулярну взаємодію). Виникнення міжмолекулярної взаємодії не супроводжується передаванням атомами електронів. Міжмолекулярні сили мають електричну природу, їх розглядають як результат дії трьох ефектів – орієнтаційного, індукційного та дисперсійного. Міжмолекулярна Орієнтаційна (диполь-дипольна) взаємодія виявляється в речовинах, молекули яких є полярними (наприклад, зріджені хлороводень HCl або бромоводень HBr). Унаслідок хаотичного теплового руху молекули зі зближенням орієнтуються так, що різнойменно заряджені кінці диполів притягуються (рис. 6.12). Чим полярнішими є молекули, тим сильніше вони притягаються, а отже, сильнішою є орієнтаційна взаємодія. Нагрівання збільшує тепловий рух молекул, унаслідок чого зменшується їхня орієнтація, що послаблює орієнтаційну взаємодію, яка взаємодія відрізняється від хімічної тим, що вона виявляється на значно більших відстанях, не супроводжується насичуваністю, має малу енергію (8–16 кДж/моль), не специфічна.

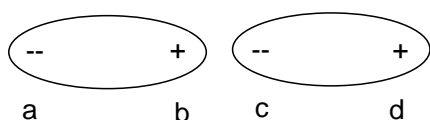


Схема притягання двох диполів ab і cd завдяки електростатичній взаємодії різнойменних зарядів у точках b і c Вандерваальсова взаємодія відіграє важливу роль у конденсації газів і перетворенні їх у рідкий і твердий стан. Наприклад, у разі охолодження газоподібного хлору утворюються кристали, що складаються з молекул Cl₂, між якими діють дисперсійні сили. Міжмолекулярна взаємодія є важливою в процесах адсорбції, каталізу, розчинення і сольватації.

Вандерваальсова взаємодія Водневі зв'язки обумовлені постійною наявністю диполів, вандерваальсові сили виникають при взаємодії короткочасно утворених диполів. Ван-дер-ваальсовий зв'язок — найслабший з усіх типів зв'язку. Короткочасний асиметричний розподіл зарядів є тимчасовим диполем. Цей диполь може поляризувати сусідні молекули і тим самим індукувати (лат. *inducere* — вводити) нові диполі. Здатність до поляризації залежить від загальної кількості електронів у молекулі. Чим більша молекула, тим більша кількість електронів, і тим більше може виникати внутрішньо-молекулярних зміщень зарядів. Унаслідок цього утворюється багато короткочасних часткових зарядів (миттєвих диполів). Чим більша молекула речовини, тим більше ван-дер-ваальсових взаємодій між молекулами, отже, тим вища температура кипіння речовини. Такі сили присутні практично в усіх речовинах. Проте вони відіграють певну роль лише при взаємодіях неполярних молекул, тому що там відсутні сильні взаємодії. Ван-дер-ваальсові сили включають диполь — дипольне притягування між молекулами, що не утворюють водневих зв'язків, а також притягування типу «постійний диполь —

індукований диполь». У даному випадку розглядається взаємодія типу «миттєвий диполь - індукований диполь (дисперсійна взаємодія)». Особливо великий вплив має водневий зв'язок на властивості води. Це є наслідком того, що в кожній молекулі води є два протони, які можуть брати участь в утворенні двох водневих зв'язків. У твердому стані (лід) молекули води утворюють структуру, в якій кожен атом Оксигену зв'язаний містками через атоми Гідрогену з чотирма сусідніми атомами Оксигену, утворюючи тетраедр.

Запитання для самопідготовки

1. Чому утворення хімічного зв'язку супроводжується зменшенням енергії системи?
2. Назвіть головні параметри та властивості хімічного зв'язку.
3. Які типи хімічного зв'язку ви знаєте? Чому ковалентний тип зв'язку можна вважати найуніверсальнішим?
4. У чому полягає суть методу валентних зв'язків? Схарактеризуйте механізми утворення ковалентного зв'язку.
5. Схарактеризуйте головні властивості ковалентного зв'язку.
6. Що таке гібридизація валентних орбіталей?
7. Поясніть суть методу молекулярних орбіталей. У чому його переваги порівняно з методом валентних зв'язків?
8. Схарактеризуйте властивості йонного типу зв'язку.
9. У чому полягають особливості металевого зв'язку? Поясніть головні положення зонної теорії твердого тіла.
10. Які умови необхідні для виникнення водневого зв'язку?
11. Які сили називають міжмолекулярними? За яких умов вони виявляються?

Література

1. О.В. Жак, Я.М. Каличак. Загальна хімія.-Львів ВЦ ЛНУ імені Івана Франка, 2010.- 368с.
2. Григорєва В.В., Самійленко В.М., Сич А.М., Загальна хімія.- К.: Вища школа., 1991.- 461с.
3. Луцевич Д.Д. Довідник з хімії.-Львів НВФ«Українські технології», 2008.- 430с.
4. Неділько С.А, Попель П.П. Загальна й неорганічна хімія .Задачі та вправи.- К.: Либідь, 2001.- 400с.
5. Романова Н.В. Загальна та неорганічна хімія.- К.: Перун, 2007.-4008с.
6. Телегус В.С., Бодак О.І., Заречнюк О.С, Кінжибало В.В. Основи загальної хімії - Львів: Світ, 2000.- 424с.
7. Яворський В.Т. Основи теоретичної хімії.- Львів ВЦ Нац. Ун-ту «Львівська політехніка», 2008.-348с.
8. Полінг Г. Общая химия.- Мир, 1974.-848с.
9. Степаненко О.М, Рейтер Л.Г., Ледовских В.М., Иванов С.В. Загальна та неорганічна хімія.- К.: Пед. Преса, 2002.- У 2ч. -Ч.1.- 520с.
10. Ахметов Н.С. Неорганическая химия. – М.: Химия, 1981.- 434с.
11. Глинка Н.Л. Общая химия. – М.: Химия, 1981.- 568с.
12. Григор'єва В.В. Загальна хімія. – К.: Вища школа, 1989.- 342с.
13. Карапетьянц М.Х. Общая химия. – М.: Химия, 1981. – 453с.

