**Хімічний зв’язок і будова молекул**

План

1. Природа хімічного зв’язку
2. Характеристика хімічного зв’язку .
3. Типи зв’язків.
4. Міжмолекулярна взаємодія.
5. Типи кристалічних граток.
6. Просторова будова молекул.

Форми існування хімічних елементів у природі різні – це прості або складні сполуки, атоми яких сполучені хімічними зв’язками. Лише інертні гази перебувають у природі в атомарному стані, тому що вони мають завершений зовнішній енергетичний рівень, який характеризується великою стійкістю (ns2np6). Зовнішні рівні атомів інших елементів незавершені і є нестійкими. В процесі хімічної взаємодії вони перебудовуються і завершуються. Неспарені електрони різних атомів утворюють електронні пари, які є спільними для двох атомів. Таким чином за рахунок хімічного зв’язку відбувається утворення молекул.

У процесі хімічної взаємодії атомів їх ядра залишаються без змін, а відбувається лише переміщення валентних електронів.

**Хімічний зв’язок** - це взаємодія, яка зв’язує окремі атоми, молекули, іони, радикали, кристали.

Основною умовою утворення хімічного зв’язку є зменшення повної енергії багатоатомної системи порівняно з енергією ізольованих атомів, з яких вона утворена. Тобто утворення молекул з атомів супроводжується виграшем енергії, тому молекулярний стан стійкіший за атомний. Виграш енергії - це необхідна умова утворення хімічного зв’язку: А + В = АВ

ЕАВ < ЕА + ЕВ

із двох атомів, в результаті якої утворюється хімічно стійка система.

Графічно хімічний зв’язок можна зобразити у вигляді рисок або крапок.

Хімічний зв’язок між атомами здійснюється валентними електронами:

- у електронів А-підгруп – це електрони зовнішнього енергетичного рівня;

- у електронів В-підгруп – це s-електрони зовнішнього та d-електрони передостаннього енергетичних рівнів ( для d-елементів).

Згідно з сучасними уявленнями хімічний зв’язок виникає як результат взаємодії електростатичних кулонівських сил, носіями яких є електрони і ядра атомів. **Тобто хімічний зв’язок** це – взаємодія атомів, що зумовлюється перерозподілом їх електронної густини і супроводжується зменшенням повної енергії системи.

  В залежності від характеру розподілу електронної густини в речовині розрізняють такі основні **типи хімічного зв’язку:**

 -ковалентний;

-йонний;

-металічний.

Окремо типи хімічного зв. трапляються дуже рідко. Для переважної більшості речовин характерне накладання різних типів зв’язку.

2. Основними характеристиками хімічного зв’язку є **енергія, довжина зв’язку та кут між зв’язками.**

**Довжина зв’язку** – це між ядерна відстань між хімічно зв’язаними атомами(1 нм = 10-9 м)

**Енергія зв’язку –** визначає його міцність, кількісно вона дорівнює енергії, що витрачається на розрив такого зв’язку.

**Кут між зв’язками** – валентний кут – кут між уявними прямими, що проходять крізь ядра хімічно зв’язаних атомів.

У молекулі води: довжина зв’язку l ( Н – О) = 0,096 нм

 Енергія зв’язку – ЕО-Н= 464 кДж/моль

Кут між зв’язками НОН – 104,5

Тип хімічного зв’язку, що реалізується, залежить від хімічної природи елементів, яка зумовлена здатністю атомів віддавати або приєднувати електрони. Кількісно ця властивість визначається величинами енергії іонізації та відносної електронегативності (ВЕН).

Вважається, якщо: різниця ВЕН атомів, що утворюють зв’язок,

 ∙Δ ВЕН = 0 – зв’язок ковалентний неполярний;

∙ Δ ВЕН 0 – (2,0; 1,9) – ковалентний полярний.

Δ ВЕН ≥ 2,1- то зв’язок іонний;

Приклад визначення типу хімічного зв’язку в молекулі NaF: Na-F

ВЕН (Na) = 1,01

ВЕН (F) = 4,10

ΔВЕНNa - F = 4,10– 1,01 = 3,09 – зв’язок йонний.

***Ковалентний зв’язок*** – це тип хімічного зв’язку, що здійснюється за рахунок спільних електронних пар, що одночасно належать обом атомам. Залежно від способу утворення спільних електронних пар розрізняють **два механізми утворення ковалентного зв’язку:**

- обмінний;

- донорно-акцепторний.

***Ковалентний зв’язок за обмінним механізмом*** виникає за рахунок перекривання одноелектронних хмар (орбіталей) неспарених електронів з антипаралельними спінами, які є у взаємодіючих атомів. Наприклад, в молекулах водню Н2, хлору Сl2  хлороводню НСl.

Ковалентний зв’язок за ***донорно-акцепторним механізмом*** виникає за рахунок неподіленої електронної пари, яка є на зовнішньому енергетичному рівні одного атома, і вільної орбіталі іншого атома. Наприклад, утворення іону амонію NH4+.

Атом, що надає для утворення зв’язку неподілену пару електронів, називається

***донором.*** Донорами електронних пар можуть бути нейтральні молекули (NH3, H2O) або негативно заряджені іони (F-, Cl-, Br-, J-, NO2-, CN-).

Атом, який має вільну орбіталь і приймає електронну пару, називається ***акцептором.*** Найчастіше роль акцептора виконують катіони металів побічних підгруп (Cu2+ , Fe2+ , Fe3+ , Ag+, Co2+ , Co3+ , ін.).

Донорно-акцепторне утворення зв’язку реалізується в координаційних сполуках.

***Основні властивості ковалентного зв’язку:***

1. ***Полярність*** - визначається розподілом спільної електронної хмари щодо  ядер обох атомів, що утворюють зв’язок. Розрізняють два види ковалентного зв’язку:

* ***неполярний*** – якщо спільні електронні хмари розміщені симетрично щодо ядер обох атомів; утворюється між атомами з однаковими або близькими значеннями ВЕН і характерний для молекул переважно простих речовин (H2, O2, Cl2, N2), буває складних (PH3).

- ***полярний*** – якщо спільні електронні пари  зміщені до одного з атомів; такий зв’язок поєднує атоми, що відрізняються за значенням ВЕН, і характерний для молекул складних сполук (HCl, H2O, NH3, ін.);

Полярні молекули є диполями, тобто системами в яких, центри тяжіння позитивних зарядів ядер і негативних зарядів е не співпадають. Відстань між центрами тяжіння в молекулі називається **довжиною диполя L.**

**Полярність молекули** або зв’язку характеризується **дипольним моментом**

μ = l∙ q (Кл∙м)

(Дебай) 1D = 3,33∙10-30Кл∙м

q – заряд електрона = 1,6∙10-19Кл

2. ***Кратність*** – це кількість спільних електронних пар, що зв’язують атоми під час утворення хімічного зв’язку.

За кількістю спільних електронних пар, які утворюються між двома атомами, розрізняють простий або одинарний (H – Cl, H2O), подвійний (O=О, C2H4), потрійний (N ≡ N, C2H2) і т.д. зв’язок.

Кратність зв’язку зумовлена способом перекривання різних за формою електронних орбіта лей, що беруть участь в утворенні зв’язку. Залежно від способу перекривання орбіталей розрізняють – σ - , π- зв’язок .

1. ***Насиченість*** –це здатність атомів утворювати обмежену кількість хімічних зв’язків, яка обумовлена числом орбіталей, що беруть участь у виникненні цих хімічних зв’язків.

Атом Нітрогену та Фосфору незважаючи на одинакові електронні конфігурації s2p3 і однакове число п’яти валентних електронів утворюють у сполуках різне максимальне число зв’язків: N – чотири, Р – п’ять. У нітрогену на зовнішньому ен.рівні немає вакантних орбіталей, тому атом може утворювати не більше 4 зв’язків (і один із них дон-акц.). У Фосфору є вільні 3d –орбіталі на одну з яких може переходити 3 s-електрон, і кількість утворюваних зв’язків –п’ять, утворюючи е конфігурацію 3s1 3p3 3d1.

1. ***Напрямленість у просторі*** – зумовлена тим, що орбіталі, які беруть участь в утворенні хімічного зв’язку, мають різну форму і орієнтацію в просторі (крім s- орбіталі). Максимальне перекривання зв’язуючих електронних хмар може здійснюватись лише у відповідних напрямках. У випадку р-електронів максимальне перекривання зв’язуючих електронних хмар відбувається у напрямку осі гантелі, отже кут між двома зв’язками має бути 90о. Подібний стан молекули спостерігається в молекулі Н2S.

Проте атоми деяких елементів у збудженому стані містять неспарені е на різних орбіталях. Наприклад, атом Ве\* у збудженому стані має е конфігурацію 2s1 2p1. Можна було б чекати, що у молекулі ВеCl2 два зв’язки за міцністю нерівноцінні, так як утворені різними s та p електронами. Дослідження вказують на те , що обидва зв’язки рівноцінні. Таке явище назване **гібридизацією валентних орбіталей –** яка полягає у тому, що орбіталі різної форми та які різняться за енергією при перекриванні утворюють нові орбіталі однакової форми та енергії. Число гібридизованих орбіталей = числу орбіталей, що беруть участь у гібридизації. Гібридизовані орбіталі більш витягнуті в напрямку утворення хімічних зв’язків, тому зумовлюють краще перекривання е орбіталей. Отже, гібридизація пов’язана з енергетичним виграшем внаслідок утворення міцніших зв’язків і більш симетричного розподілу е густини в молекулі.Геометричні конфігурації молекул, що відповідають різним типам гібридизації центрального атома у ГФК табл.

***Йонний  зв’язок*** – це зв’язок між іонами, що здійснюється завдяки силам електростатичного притягання (напр., КСl, NаСl). Іонний зв’язок розглядають як граничний випадок ковалентного полярного зв’язку, коли пара електронів практично повністю зміщена до більш електронегативного атома. Утворюється між атомами елементів, що значно відрізняються за значенням ВЕН. Характерні ознаки: не насиченість, ненапрямленість.

***Металічний зв’язок*** – зв’язок, що існує у металах та їх сплавах між позитивно зарядженими іонами та валентними електронами, що є спільними для всіх атомів; він зумовлює всі хімічні та фізичні властивості металів, зокрема тепло- та електропровідність. Характерна властивість – ненапрямленість.

***Водневий зв’язок*** – це зв’язок типу X-H…Y, що виникає через атом водню між двома сильно електронегативними атомами X та Y. Розрізняють:

-***міжмолекулярний*** виникає атомом однієї молекули сильно електронегативним атомом іншої;

-***внутрішньомолекулярний*** – виникає між атомами однієї молекули. Утворюється в молекулах органічних сполук, що містять у своєму складі групи ОН-, NН2-  NО2-, тощо (напр., молекули білків, нуклеїнових кислот).