## ЧЕРНИГОВСКИЙ АВТОРСКИЙ КОЛЛЕГИУМ

Реферат по учебной дисциплине химия на тему:

## “Химическая связь ”

Выполнил: ученик 11-Д класса

### Пономарёв Алексей

# Чернигов 2002

ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ, общее определение сил и различ­ных типов взаимодействий, обусловливающих существова­ние двух- и многоатомных соединений — молекул, ионов, радикалов, кристаллов. Главные отличитительные черты X. с.: 1) понижение полной энергии многоатомной системы по срав­нению с энергией изолированных атомов или атомных фраг­ментов, из которых она образована; 2) существенное перерас­пределение электронной плотности в области X. с. по срав­нению с простым наложением электронных плотностей не­связанных атомов или атомных фрагментов, сближенных на расстояние связи. Последняя особенность наиболее, точно отделяет X. с. от межмолекулярных взаимодействий, тогда как энергетический критерий является менее опреде­ленным.

Природа X. с. полностью определяется электрическим кулоновскими взаимодействием ядер и электронов, однако правильное описание распределения электронного заряда возможно лишь с учетом законов квантовой механики. Точные расчеты зависимостей полной энергии и ее компонент от межъядер­ного расстояния для простейшей структуры с X. с.— моле­кулярного иона Н с одноэлектронной связью — показы­вают, что минимум полной энергии, который достигается при равновесном межъядерном расстоянии, равном 1,06 А, связан с резким понижением потенциальной энергии элек­трона вследствие концентрации и сжатия облака электрон­ной плотности в межъядерной области. При этом кинетическая энергия электрона возрастает и наполовину компенсирует понижение потенциальной. Результирующий эффект (по­нижение энергии) превышает энергию расталкивания по­ложительно заряженных ядер и обусловливает образование X. с. с энергией 255 кДж/моль. Такая интерпретация при­роды X. с., дополненная учетом эффектов межэлектронного отталкивания и электронной корреляции, в целом распро­страняется на описание связей в двух- и многоэлектронных молекулах.

Полагая движение электронов независимым от намного более медленных ядерных движений (адиабатическое при­ближение), можно вполне строго описать образование X. с. как результат действия кулоновских сил притяжения по­ложительно заряженных атомных ядер к электронному облаку, сконцентрированному в межъядерном пространстве. Заряд этого облака стремится приблизить ядра друг к другу (свя­зывающая область), тогда как электронный заряд вне межъ­ядерного пространства (несвязывающая область) стремится ядра раздвинуть. В этом же направлении действуют и силы ядерного отталкивания. При сближении атомов на равновес­ное расстояние часть электронной плотности из несвязываю­щей области переходит в связывающую (см. рис.). Электронный заряд распределяется в обеих областях так, чтобы силы, стремящиеся сблизить и оттолкнуть ядра, были одинаковыми. Это достигается при некотором равновесном расстоянии, соответствующем длине связи.

Варианты классификации X. с. определяются различными ее характеристиками или способами описания (в духе классической теории валентности или в рамках квантовохимических представлений; следует подчеркнуть, что между этими подходами не всегда могло 6ыть установлено однозначное соответствие). В теории валентности каждой связи между атомами соответствует одна электронная пара. В зависимости от способа ее образования из электронов связываемых атомов можно выделить ковалентную связь и координационную связь. Если электронная пара X. с. полностью принадлежит од­ному из атомов, то образуется ионная связь. По степени смещения центра тяжести электронного облака связывающих; электронов X. с. делят на неполярные (равноудаленность от обоих атомных центров) и полярные (промежуточные между неполярными и ионными). Ковалентные и координационные связи подразделяются по числу образующих их элек­тронных пар на простые и кратные — двойные, тройные и четвертные.

При рассмотрении X. с., основанном на квантовомеханических рас­четах волновых функций многоатомных молекул, ионов, кристаллов, понятие двухцентровой связи, используемое в классической теории валентности, не получает прямого экви­валента, вследствие делокализации электронных орбиталей по нескольким (нередко всем) атомным центрам. Переход к локализованным орбиталям часто сохраняет возможность анализировать X. с. в многоатомных молекулах в рамках традиционных представлений о связях, поделенных и неподеленных электронных парах. Типичные примеры соеди­нений с локализованными двухцентровыми связями — насыщенные углеводороды (связи С—С, С—Н). В том случае, когда процедура локализации не позволяет однозначно вы­делить в молекуле локализованные двухцентровые орбитали, реализующиеся в ней X. с. относят к мпогоцентровым связям, характерным для ненасыщенных соединений с сопря­женными связями. Предельный случай делокализации — металлическая связь, обусловленная перемещением валентных электронов металла во всем прост­ранстве кристаллической решетки, образуемой его положительными ионами.

Основные характеристики X. с.— прочность, длина, поляр­ность. Прочность X. с. определяется энергией связи. В двухатомной молекуле она равна теплоте диссоциации моле­кулы на отдельные атомы. Энергии X. с. в многоатомной молекуле соответствует энергия атомизации — разность между пол­ной энергией молекулы и суммой энергий изолированных атомов и энергии нулевых колебаний молекулы. В расчете на одну связь энергии X. с. составляют от 10—20 кДж/модъ (связи в молекулах и ионах Сd2, Н, связь С—С1 в ради­кале СОСl, слабые водородные связи) до > 1000 кДж/моль (тройные связи в молекулах N2, СО). Для многоатом­ных молекул с хорошо локализованными двухцентровыми связями полная энергия X. с. достаточно точно оценивается как сумма энергий отдельных связей.

Длина X. с. меньше суммы ван-дер-ваальсовых радиусов атомов, образующих связь. В зависимости от кратности связей, а также от характера ближайшего окружения она может изменяться в довольно широких пределах, например для углерод-углеродных связей — от 1,21 А (тройные свя­зи в алкинах) до 1,7—1,8А (простые связи в напряженных углеводородах).

Полярность связи характеризуется ее дипольным момен­том, который для большинства ковалентных связей состав­ляет 0—3D, для координационных связей — обычно 2—7D. Дипольные моменты соединений с ионной связью сущест­венно выше, например для молекулы КВг — 10, 4D (1D = 3,33564\*10 Кл\*м).

