

**Министерство Здравоохранения Республики Узбекистан
ТАШКЕНТСКИЙ ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
КАФЕДРА НЕОРГАНИЧЕСКОЙ, ФИЗИЧЕСКОЙ И КОЛЛОИДНОЙ ХИМИИ**

3-лекция:

Химическая связь и строение молекулы. Метод (МО).

Автор презентации:

Д.фарм.наук, проф. Тухтаев Х.Р.

Старший преподаватель: Жумабаев Ф.Р.

ТАШКЕНТ-2023

План:

Вопросы рассматриваемое в ходе лекции:

- ▶ 1. Правила Октетта;
- ▶ 2. Гипервалентность;
- ▶ 3. Метод молекулярных орбиталей;
- ▶ 4. Межмолекулярные взаимодействия.

Вопросы для самоподготовки:

1. Ковалентная связь и ее характеристики;
2. Ионные, металлические связи;
3. Дипольный момент;
4. Гибридизация.



1. Оганесян, Э. Т., Общая и неорганическая химия : учебник для вузов / Э. Т. Оганесян, В. А. Попков, Л. И.Щербакова, А. К. Брель ; под ред. Э. Т. Оганесяна. — М. : Юрайт,2016. — 447 с. — Серия : Специалист.

2. Общая и неорганическая химия для фармацевтов: учебник и и практикум для СПО/ под общ.ред. В.В.Негребецкого, И.Ю.Белавина, В.П.Сергеевой.-Издательство Юрайт, 2019.-357 с.-Серия: профессиональное образование.

3. Shriver and Atkins, Inorganic Chemisrty, Fifth Edition, 2010/ P.W.Atkins, T.L.Owerton, J.P. Rourke, M.T. Weller and F.A. Armstrong, W.H. Freeman and Company, New York. 2010. P. 825.

4. Tuxtayev X.R., Sharipov A.T., Aminov S.N. Noorganik kimyo. Darslik. — Toshkent.: “Fan va texnologiya”,2018,560 bet.

6. Шрайвер Д., Эткинс П. Неорганическая химия. В 2-х т. Т 1/ Перевод с англ. М.Г.Розовой, С.Я. Истомина, М.Е.Тамм-Мир, 2004.-679 с.

7. Шрайвер Д., Эткинс П.. Неорганическая химия. В 2-х т. Т 2/ Перевод с англ. А.И.Жирова, Д.О.Чаркина, С.Я. Истомина, М.Е.Тамм-Мир, 2004.-486 с.



Химическая связь

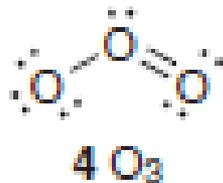
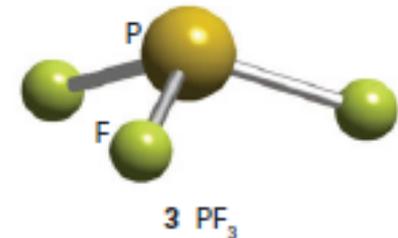
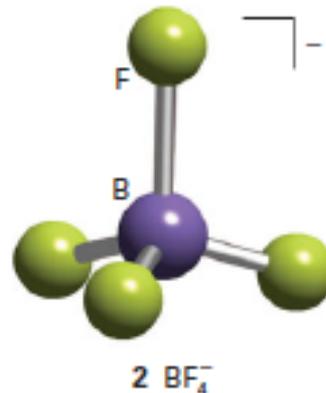
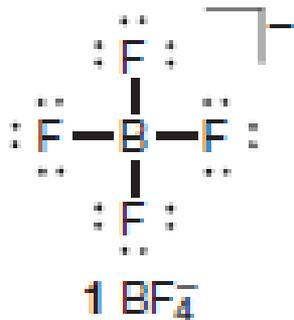
«Связь - это своего рода межатомное, межмолекулярное или ионное притяжение, которое удерживает вместе два или более компонентов (атомы, молекулы или ионы)».



1. Правила октета

Поделенные пары описаны Г. Н. Льюисом в 1916 г.

правила октета: каждый атом делит с соседним атомом для достижения полной валентной оболочки с восемью электронами.



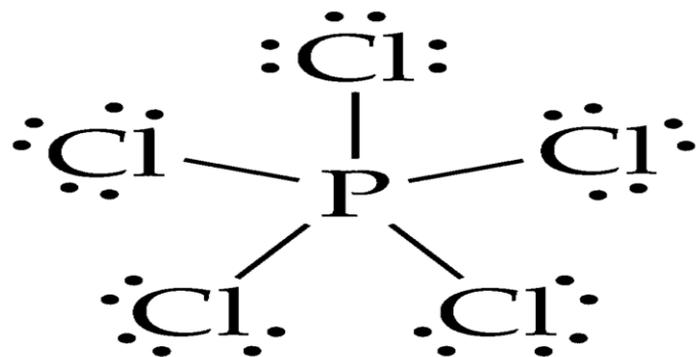
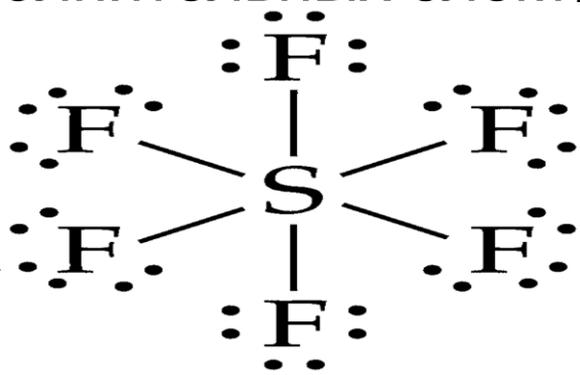
2. Гипервалентность

Наличие электронов, превышающих число валентных электронов октета, называется **ГИПЕРВАЛЕНТНОСТЬЮ**.

Атомы с более чем 8 электронами, участвующими в образовании связи с центральным атомом называются гипервалентными атомами.

Это явление называется *расширенным октетом* и встречается в основном в тех элементах, находящихся после 2 периода.

Например, в молекуле **SF₆** участвуют 12 электронов в образовании связей с центральным атомом. При этом учитывается наличие пустых d-орбиталей для размещения дополнительных электронов.



Доля ионной связи в различных связях

Связь	C-I	C-H	C-Cl	C-F
Доля ионной связи, %	0	4	6	40
Связь	H-Cl	H-F	Be-F	Li-F
Доля ионной связи, %	18	45	80	89

С переходом связи C-I к связи C-F увеличивается уровень ионизации связи.



3. Метод молекулярных орбиталей

Недостатки метода ВС:

- ▶ - Образование связей в некоторых веществах без участия электронной пары. Еще в XIX веке англ. физик Tomson открыл H_2^+
- ▶ - вещества имеющие неспаренных электронов притягиваются к магниту. (жидкий или тв. O_2)
- ▶ - наличие спаренных электронов у радикалов.
- ▶ - структуру бензола метод ВС не смог объяснить.
- ▶ - теорию роли неспаренных электронов выдвигали в 1932 г. англ. ученые Хунд и Маликкен, и называется теория молекулярных орбиталей (МО) .

В молекуле описывается состояние электрона при воздействии двух ядер и одного электрона, то движение электрона выражается волновой функцией:

Связывающая симметрическая функция:

$$\omega_1 = C_1 \varphi_1 + C_2 \varphi_2$$

Разрыхляющая антисимметрическая функция :

$$\omega_2 = C_1 \varphi_1 - C_2 \varphi_2$$

C_1, C_2 - коэффициенты;

φ_1, φ_2 - волновая функция состояния электрона в 1 и 2 ядре;

ω_1 - симметрическая функция;

ω_2 - антисимметрическая функция.

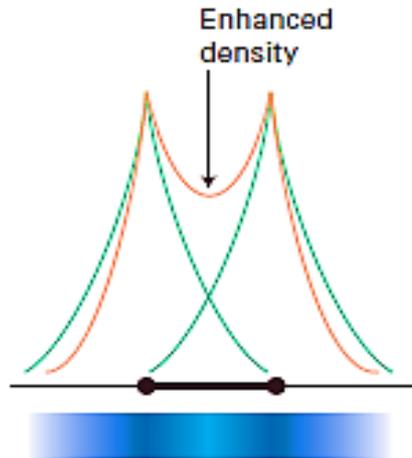


Molecular orbital theory

$$\psi = c_A \chi_A + c_B \chi_B$$

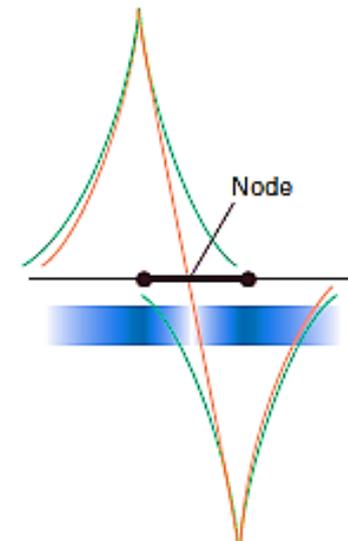
$$\psi_{\pm} = \chi_A \pm \chi_B$$

Связывающие орбитали



the atomic orbitals on neighbouring atoms.

Разрыхляющие орбитали



nodal surface in an antibonding molecular orbital.



В МО не учитывается взаимодействие электронов между собой в составе молекуле.

АО имеется s, p, d, f орбитали.

МО тоже $\sigma, \pi, \lambda, \varphi$ мол. орбитали.

в АО энергия электрона зависит от главного и орбитального квантового числа, но не зависит от магнитного квантового числа.

В МО энергия электронов зависит от главного, орбитального и магнитного квантового числа.



$$\text{ПС} = \frac{n_{\text{связыв.е}} - n_{\text{разрых.е}}}{2}$$

Если $\lambda = \pm 1$, π - состояние

$n_{\text{связыв.е}}$ – число электронов в связывающих орбиталях;
 $n_{\text{разрых.е}}$ – число электронов в разрыхляющих орбиталях;

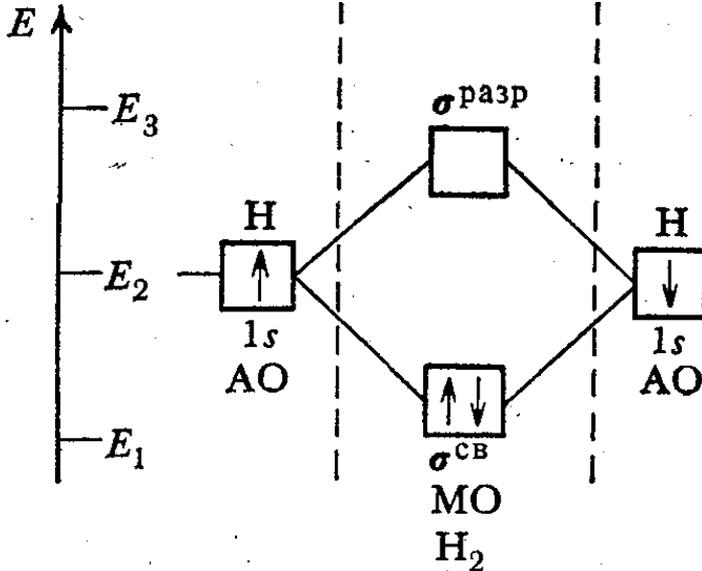


Порядок связи равно 1:

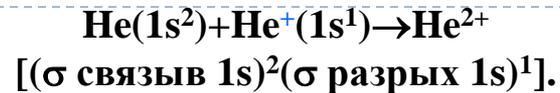
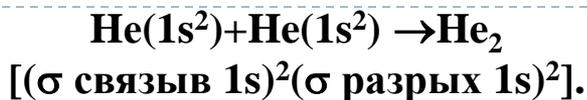
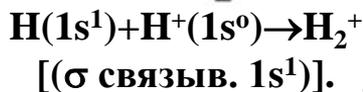
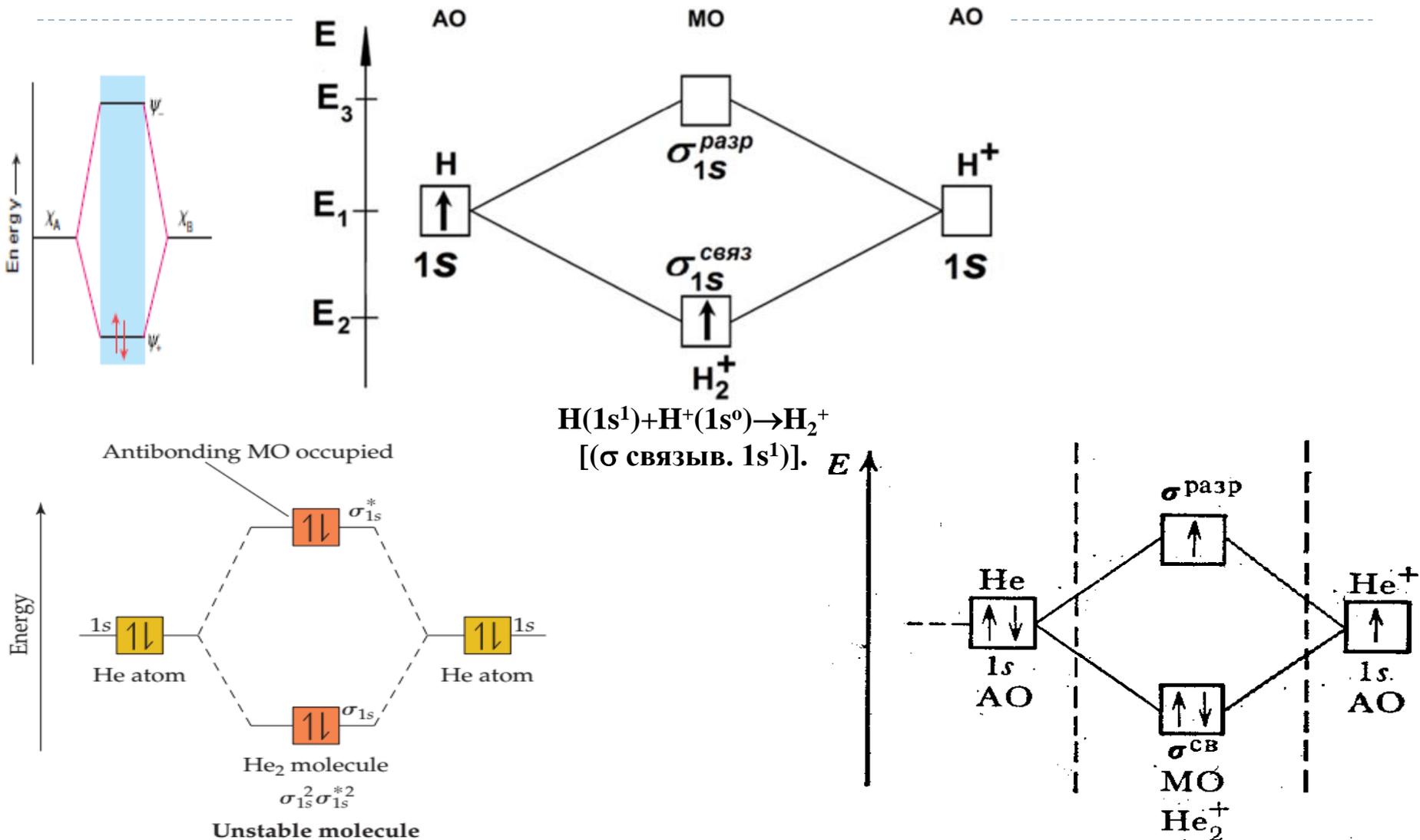
$$\text{ПС} = \frac{2 - 0}{2} = 1$$

При образовании молекулы H_2 выделяется 435 кДж/моль энергии. $2\text{H}(1s^1) \rightarrow \text{H}_2[\sigma_{\text{связыв}} 1s]^2$

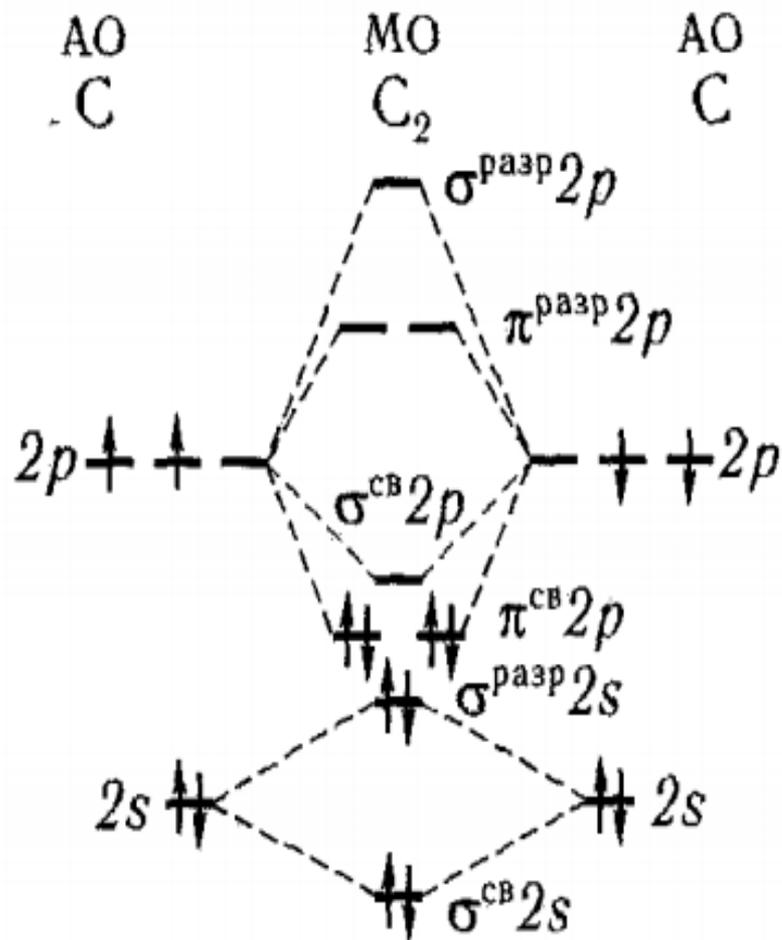
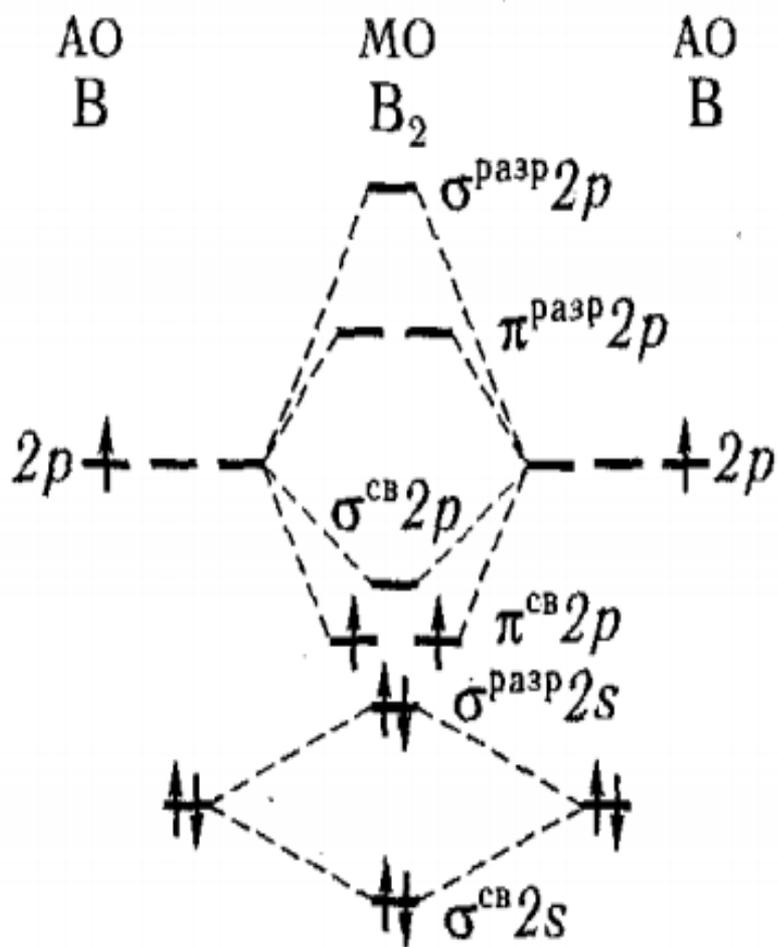
$$n = \frac{N_{\text{св}} - N_{\text{р}}}{2}$$



Строения молекулярного ион водорода H_2^+ , молекула гелия и ион гелия He_2^+ по методу МО



Энергетическая схема образования молекул B₂ и C₂

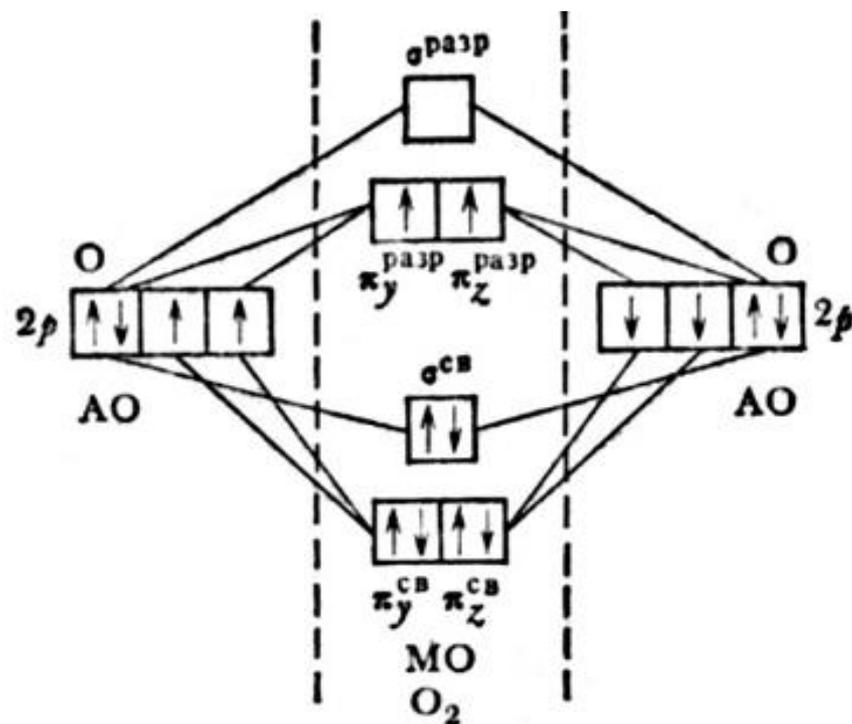
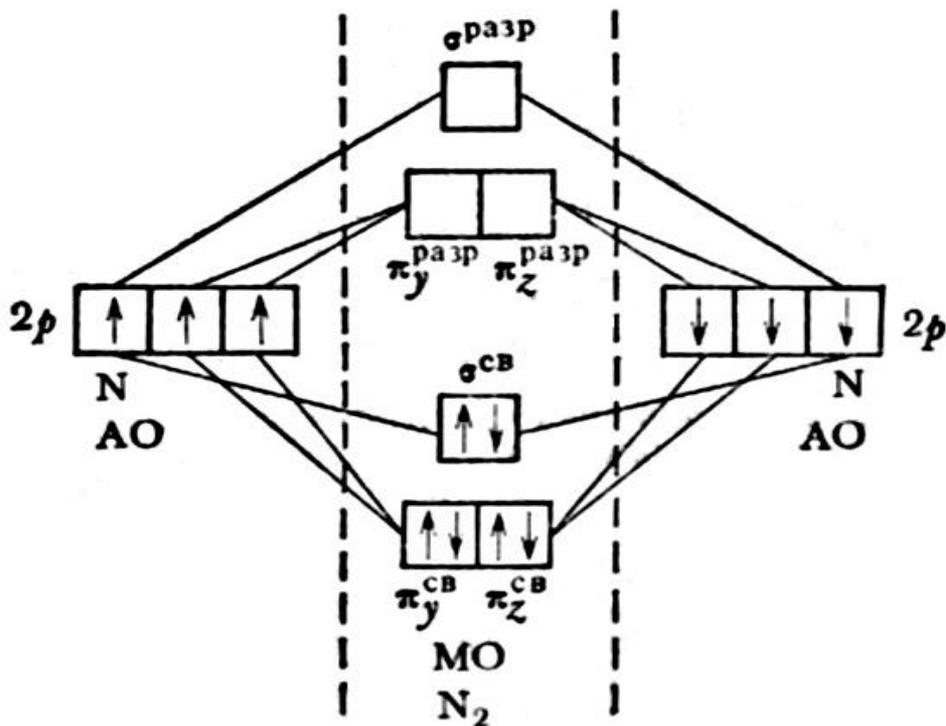


Структура молекул азота и кислорода по методу МО



$$\text{ПС} = 6 - 0/2 = 3$$

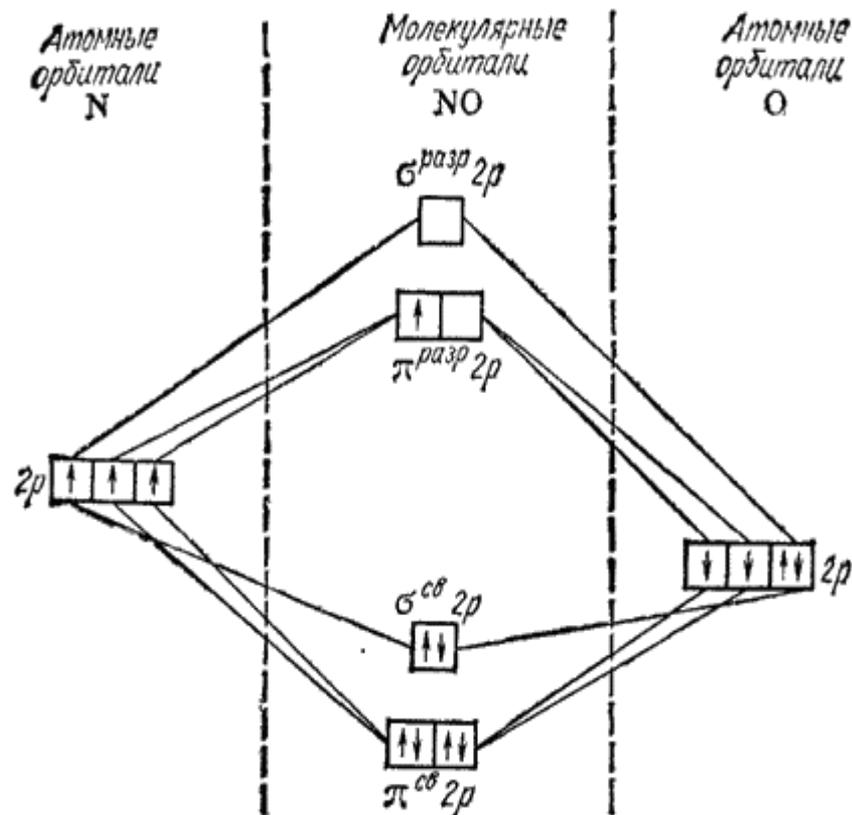
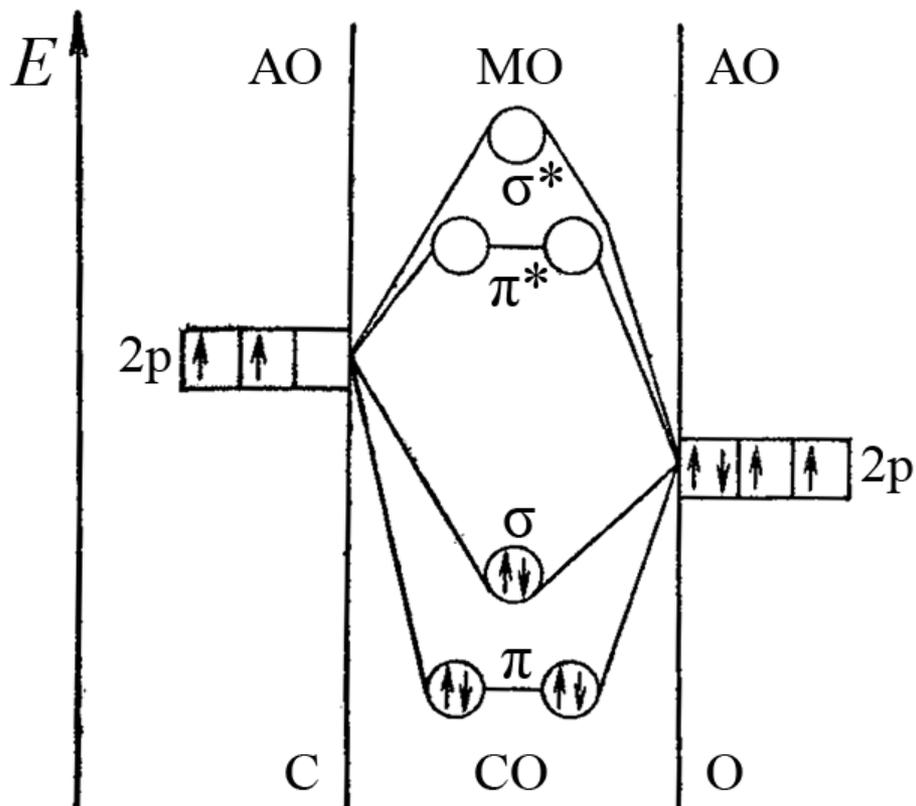
$$\text{ПС} = 6 - 2/2 = 2$$



Структура молекул CO и NO по методу МО

$$\text{ПС} = 6 - 0/2 = 3$$

$$\text{ПС} = 6 - 1/2 = 2,5$$



Преимущества метода МО

- ▶ - **МО** объясняет устойчивость любой ядерной системы и электронов;
- ▶ - **магнитные и оптические свойства молекул и комплексных соединений;**
- ▶ - **состояние каждого электрона в молекуле.**

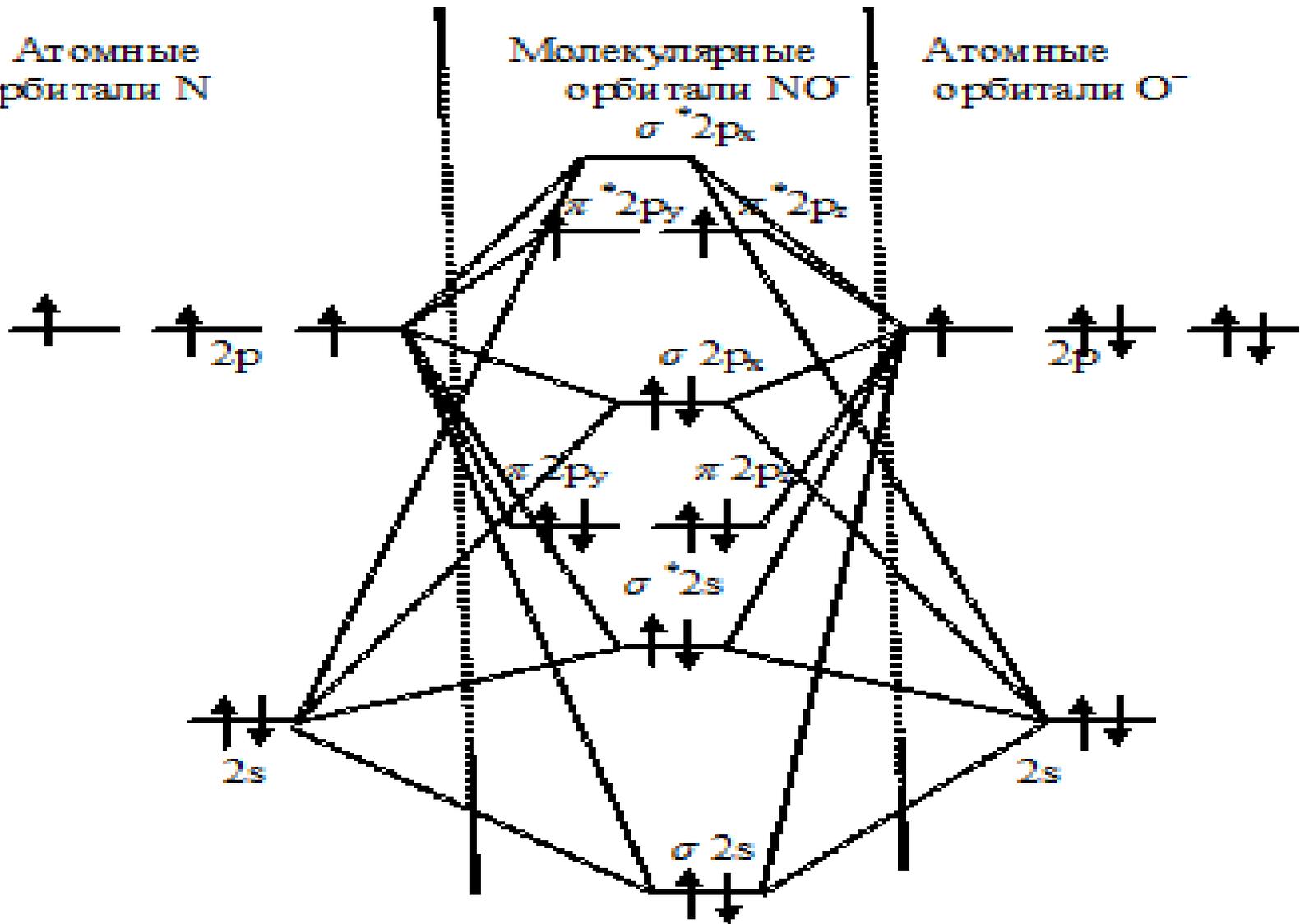


Энергетическая схема образования молекул NO-

в) Атомные орбитали N

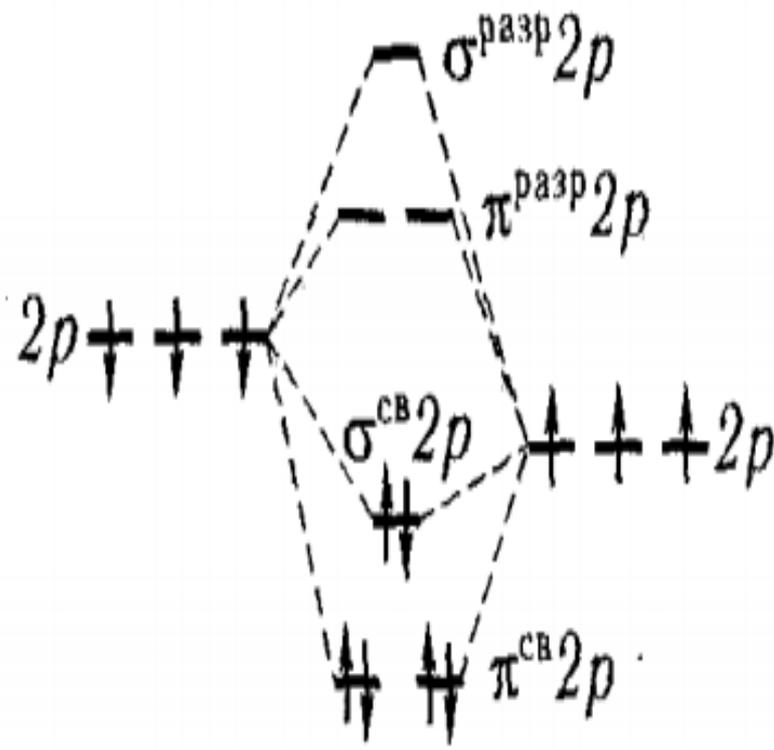
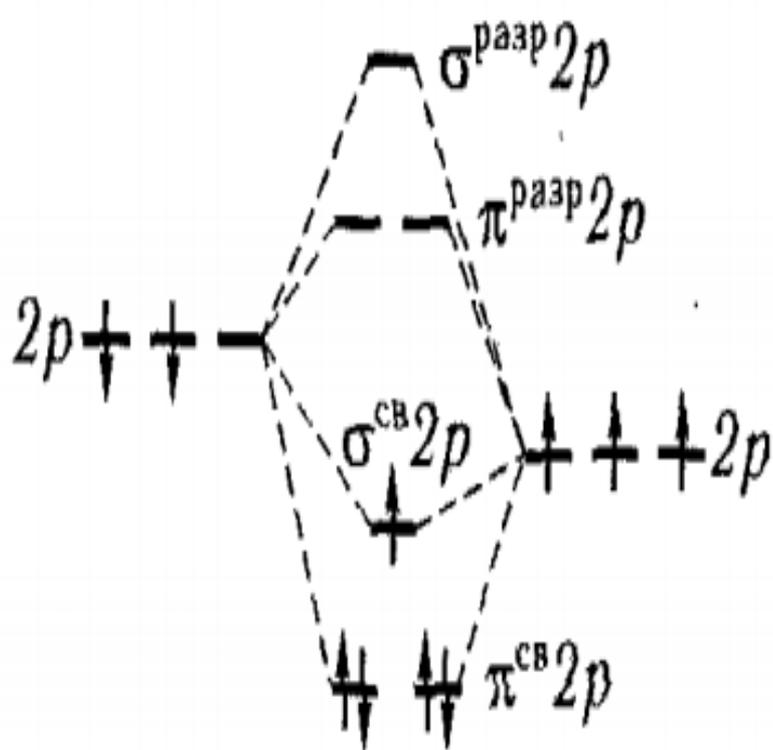
Молекулярные орбитали NO⁻

Атомные орбитали O⁻

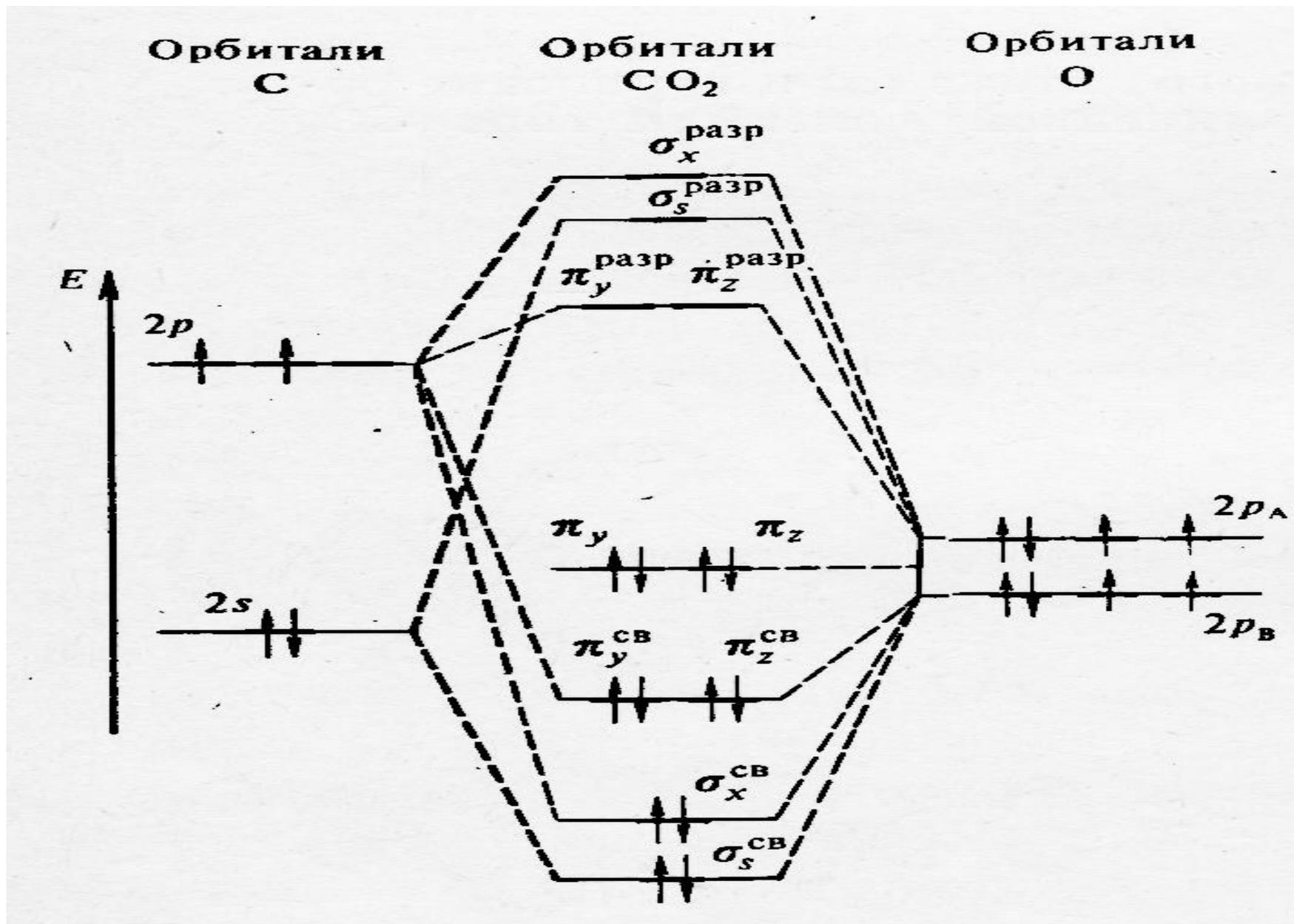


Энергетические схемы образования молекулы CN и молекулярного иона CN⁻.

АО	МО	АО	АО	МО	АО
C	CN	N	C ⁻	CN ⁻	N



Энергетическая схема образования молекул CO₂



4. Межмолекулярные взаимодействия

Между молекулами имеются ориентационные, дисперсионные и индукционные взаимодействия.

Дисперсионное - обусловлено взаимодействием молекул друг с другом за счет их мгновенных микродиполей.

Ориентационное - взаимодействие проявляется между полярными молекулами. Чем более полярны молекулы, тем сильнее они притягиваются и тем самым больше ОВ.

Индукционное - взаимодействие осуществляется за счет их индуцированных диполей. ИД тем больше, чем больше электрический момент диполя и поляризуемость молекулы.



Силы межмолекулярного взаимодействия, возникающие без передачи атомами электронов называется ван-дер-ваальсовыи силы или взаимодействия.

Ван-дер-ваальс силы обуславливают притяжение молекул и агрегацию вещества, превращение газообразного вещества в жидкое и далее в твердое состояние.

При охлаждении газообразного хлора между кристаллами возникают дисперсионные силы. При разложении хлора на атомы выделяется 243 кДж/моль.

при переходе кристаллов хлора на газы энергия сублимации составляет 25 кДж/моль.



Спасибо за внимание!

