

Химична връзка.

Метод на валентните връзки и метод на молекулните орбитали

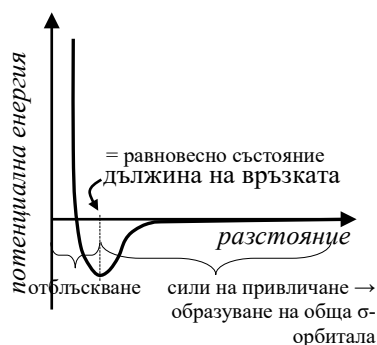
1. Свързано състояние на два атома:

Между два атома най-общо могат да се проявят два типа взаимодействия:

- сили на отблъскване между техните електронни облаци и между техните ядра, които имат еднакви по знак заряди ;
- сили на привличане – между електроните на единия и ядрото на другия, които имат противоположни по знак заряди.

Ако два отдалечени атома, между които е възможно осъществяване на химична връзка, се доближат, най-напред силите на привличане между тях ще са по-силни от тези на отблъскване. Те ще се привличат все по-силно с намаляване на разстоянието между тях. Когато разстоянието между ядрата им обаче намалее твърде много (от порядъка на атомния диаметър), силите на отблъскване рязко нарастват. Измежду разстоянията, при които атомите се привличат и тези, при които се отблъскват, съществува разстояние, при което двата вида сили се компенсират и взаимно нулират. Това е равновесно състояние, което двата атома се стремят да заемат и в което да останат.

Потенциалната енергия на система от два атома зависи от разстоянието между тях. Тя е минимална за разстоянието на равновесие. Като всяка механична система, и тази образувана от двата атома има склонност да заема състоянието, в което нейната енергия е минимална.



Тъй като двата атома на равновесно разстояние не могат да се разделят спонтанно, се казва, че те са **свързани** или че между тях съществува **връзка**. Една молекула съществува само защото нейната енергия е по-малка от тази на отделните атоми, които я изграждат.

Енергия на връзката - енергетичната разлика между състоянието "отделни атоми" и състоянието "свързани атоми" представлява освободената енергия при образуване на връзката и която е необходима за нейното разкъсване. Тя е от порядъка на няколко стотин kJ/mol.

Дължина на връзката – равновесното разстояние между два атома съответстващо на енергията на връзката (с най-малката енергия).

Енергията и дължината на връзката зависят от природата на изграждащите я атоми - тяхната електроотрицателност (електронен афинитет). Колкото по-голяма е разликата в електроотрицателността на елементите изграждащи една химична връзка, толкова по-силна и по-къса е тя. За два свързани елемента, дължината на връзката е по-малка, ако тя е сложна – двойна или тройна.

2. Модел на Gilbert Lewis (1916г.) за ковалентността:

Според модела на Люис, ковалентна връзка се осъществява от **два електрона общи** за два атома. Този дублет може да има два произхода:

- а) **чиста ковалентна връзка** – при нея всеки атом дава по един несдвоен електрон от своя валентен слой, като образувания дублет е общ за двата атома:



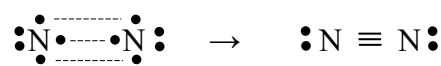
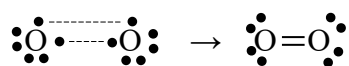
Пример: Образуване на молекула хлор Cl_2 :



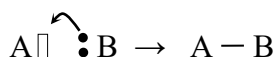
Сложна връзка – с участието на повече от една обща електронна двойка:

Образуване на: молекула кислород

молекула азот

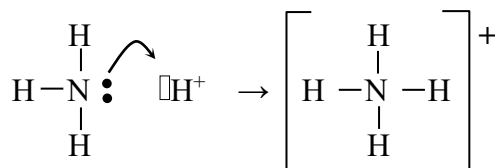


- б) **координационна (донорно-акцепторна) връзка** – един от двата атома (донорът) доставя вече съществуващ във валентния му слой дублет електрони. Другият атом (акцепторът) приема дублета в празна квантова клетка във валентния си слой. Донорно-акцепторната връзка е типична за комплексните съединения. Те са най-типични за d-елементите и за някои органични вещества (хемоглобин, хлорофил и др.).



Пример:

- образуване на амониев йон NH_4^+ от амониак NH_3 в кисела среда



3. Поляризация на връзките. Йонен модел

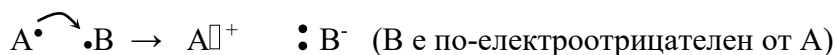
- а) **неполярна връзка** - между два атома на един и същ химичен елемент с неметален характер (напр.: H_2 , O_2 . . .). В този случай общата електронна двойка, изграждаща ковалентната връзка, е точно поделена между тях. Може да се каже, че тя се намира точно на половината от разстоянието между двете ядра. Електронният облак е симетричен, а химична връзка – неполярна.

- б) **полярна връзка** - ако двата атома с неметален характер не принадлежат на един и същи елемент (напр.: HCl , CO . . .), единият винаги е по-електроотрицателен от другия и той притегля образуваната обща електронна двойка по-силно. Следователно тя вече не е по средата и електронният облак не е симетричен – той е отместен към по-електроотрицателния елемент. В този случай се казва, че връзката е **полярна**.

(Най-общо може да се приеме, че полярната връзка се формира между атомите на два различни неметала.)

- в) **йонна връзка** – взаимно привличане на противоположно заредени аниони и катиони.

Притегляйки в по-малка или по-голяма степен електронната двойка, по-електроотрицателният елемент има в излишък отрицателен заряд, докато другият има недостиг на отрицателен заряд или по друг начин казано – има в излишък положителен заряд. Молекулата в този случай има положителен и отрицателен полюс. В граничния случай по-електроотрицателния атом изтегля напълно електронната двойка към своята електронна обвивка, докато другият – напълно губи един електрон. Това съответства на електронен трансфер на един електрон от по-слабо електроотрицателния елемент към по-електроотрицателния. Този случай се среща винаги, когато съществува голяма разлика в електроотрицателността на двата атома, а резултатът е образуване на два йона:



В този случай говорим за йонна връзка. (Най-общо може да се приеме, че йонната връзка се формира между атомите на метал и неметал.)

Йонните съединения са електронеутрална съвкупност от аниони и катиони. Връзката в тези съединения се осигурява от електростатичното привличане на противоположно заредените йони.

4. Метод на валентните връзки (МВВ)

Този метод изучава ковалентната химична връзка като разглежда атомите в молекулата като отделни квантово-механични системи, но отчита взаимното им влияние, чрез понятието хибридизация. Чрез решаване на уравнението на Шрьодингер може да се определят дължината и енергията на връзката.

Химичната връзка се получава чрез припокриване на електронни облаци от два атома, на всеки от които има по $1e^-$.

σ – връзката лежи на оста между двете ядра;

π – връзката се разполага от двете страни на оста свързваща двете ядра. Изгражда се от атомни орбитали с орбитално квантово число $l \geq 1$.

5. Метод на молекулните орбитали (ММО)

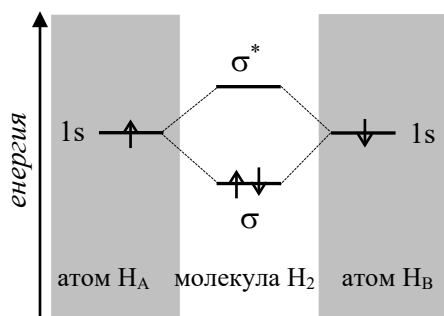
ММО – теория, описваща химичната връзка от гледна точка на молекулните орбитали. Молекулната орбитала (МО) описва областта от молекулата, където вероятността да се намери електронът е голяма. Или по друг начин казано, както атомната орбитала описва електронния облак в атом, така и МО описва електронния облак на електрон, делокализиран между всички атоми в молекулата.

При ММО цялата молекула се разглежда като една квантовомеханична система, за която се решава едно общо уравнение на Шрьодингер. Вместо атомна орбитала се използва понятието молекулна орбитала, като на всяка молекулна орбитала може да се намират най-много два електрона с противоположни спинови квантови числа.

При доближаване на атомите, двете орбитали (на които са валентните електрони, които ще участват в бъдещата връзка) започват да си взаимодействат и дават начало на две нови орбитали – МО, а двата електрона се делокализират между двата атома. Според ММО припокриването на двете $1s$ -орбитали дава начало на две МО наречени σ -орбитала и σ^* -орбитала.

σ -орбитала (свързваща) – увеличена електронна плътност на електронния облак между ядрата. При заемането и от електрони, молекулата се стабилизира, т.е. енергията ѝ се понижава.

σ^* -орбитала (антисвързваща) – вероятността за намиране на електрон на тази орбитала между ядрата на атомите е равна на нула. Всеки електрон на антисвързващата орбитала дестабилизира молекулата, т.е. увеличава нейната енергия.



Взаимодействието на N на брой атомни орбитали води до образуването на N на брой МО. Запълването на МО^{-ли} от електрони става от тази с най-ниска енергия към останалите в ред на нарастване на енергията, при спазване на правилото на Паули – по два електрона на МО.

При решаването на уравнението на Шрьодингер при линейното комбиниране на две атомни орбитали се получават две молекулни орбитали – свързваща и антисвързваща. Енергията на свързващата МО е по-малка от изходните АО, докато тази на антисвързващата е по-голяма.

Молекулната орбитала изразява вероятността, с която може да се открие общата електронна двойка около ядрата на двата атома.

Понятието електронна двойка е тясно свързано с принципа на Паули (и следователно с квантовата механика): всички орбитали могат да бъдат заети от най-много два електрона, чиито спинове обаче са противоположни. Химичната връзка следователно е такава електронна двойка, локализирана между два атома.