第五节 分子间作用力

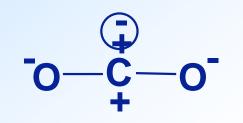
一. 分子的极性

子 { 非极性分子 分子正负电荷重心重合 分子 { 极性分子 分子正负电荷重心不重合

双原子分子 非极性共价键——非极性分子 双原子分子 (H₂, N₂, Cl₂) 极性共价键——极性分子 (HCl, HBr)

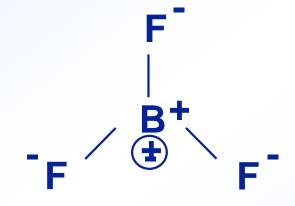
 $\{ egin{align*} & \end{align*} \begin{align*} & \end{align*} \begin{align*} & \end{align*} & \end{align*} \begin{align*} & \end{align*} & \end{align*} \begin{align*} & \end{align*} & \end{align*} & \end{align*} \begin{align*} & \end{align*} & \end{align*} \begin{align*} & \end{align*} &$ (H_2O, NH_3)

CO₂



非极 性

BF₃



非极 性

H₂O



极性

分子偶极距:

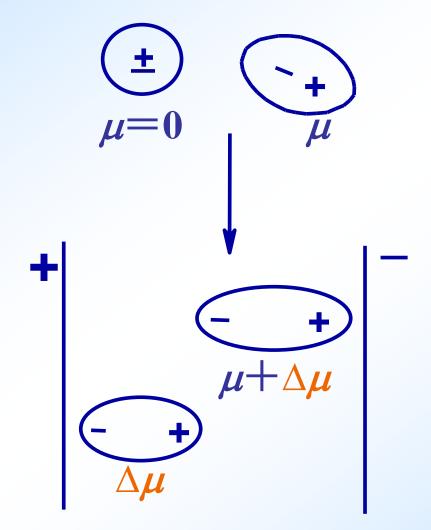
分子中正、负电荷重心间距离 (d) 与正或负电荷重心所带电荷量 (q) 的乘积,符号 μ ,矢量,方向由正电荷重心指向负电荷重心

$$\mu = q \cdot d$$

偶极距的应用:

- ① 判断分子有无极性,若 μ =0,为非极性,若 $\mu \neq 0$,则为极性;
- ② 判断分子极性大小, µ大, 分子极性也大;
- ③ 推断分子的空间构型
- ④ 计算化学键的离子性百分率

二. 范德华力



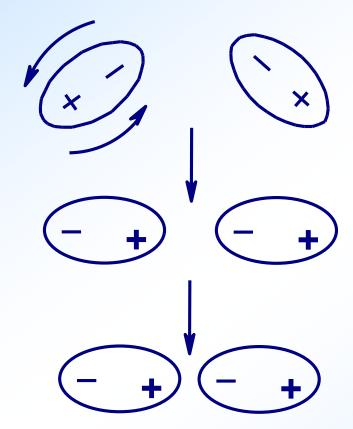
分子在电场中的极化

分子的极化(polarizing)

因外电场作用,使分子变形产生偶极矩 或增大偶极矩的现象

由此产生或增大的偶极矩称为诱导偶极矩 (induced dipole moment), $\Delta\mu$

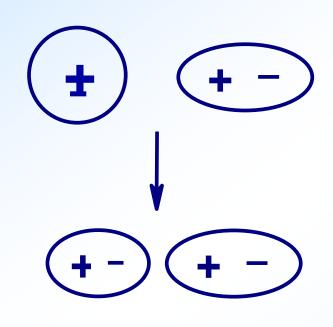
(一)取向力: 极性分子间产生



取向力的产生过程

因极性分子永久偶极的取向而产生的分子偶极间的静电引力

(二)诱导力 极性分子间、极性与非极性分子间

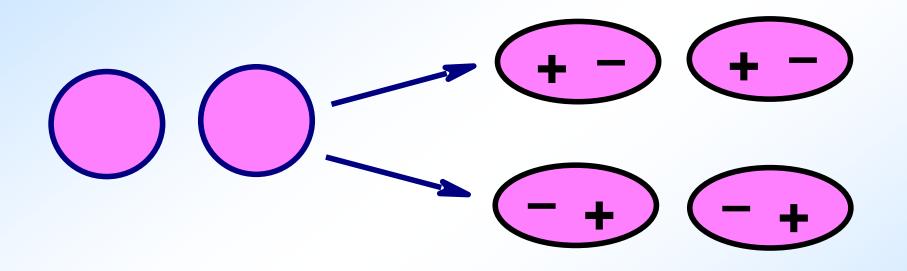


诱导偶极的产生

诱导偶极与极性分子永久偶极之间产生的 静电引力

(三)色散力

非极性分子间、极性分子间、极性一非极性分子间



色散力的产生

由于瞬间偶极产生

色散力随分子变形性增大而增大

分子间作用力类型

分子类型	分子间作用力		
非极性分子间	色散力		
极性 - 非极性分子间	色散力、诱导力		
极性分子间	色散力,取向力,诱导力		

范德华力的特点:

- (1) 存在于分子间的一种弱的静电引力;
- (2) 作用范围小,为短程作用力,只有几百pm;
- (3) 能量比化学键的键能小1~2个数量级;
- (4) 没有饱和性、方向性
- (5) 对大多数分子色散力是主要的, 只有当分子的极性较大时, 才以取向力为主。 极性大, 取向力显著; 变形性大, 色散力显著

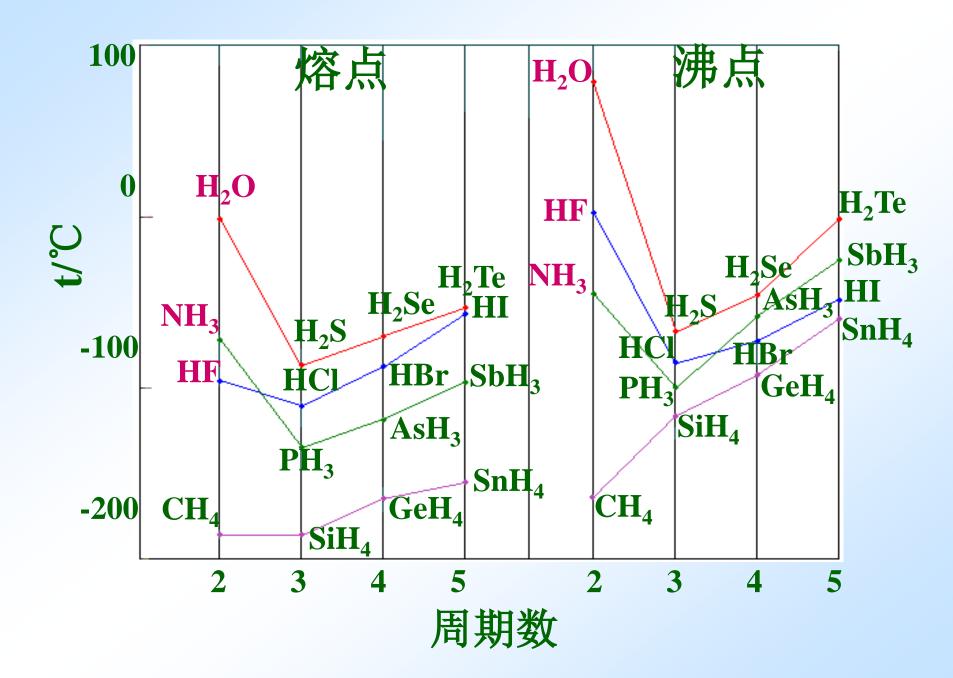
影响分子间作用力的因素:

- ① 分子间距离越大,作用力迅速减弱。主要因素
- ② 取向力:分子偶极矩越大,取向力越强;温度越高,取向力越弱
- ③ 诱导力:极性分子偶极矩越大,诱导力越强; 非极性分子变形性越大,诱导力越强。
- ④ 色散力:分子变形性越大,色散力越强

分子间作用力对物质性质的影响:

1. 影响熔沸点 范德华力越大,熔点、沸点越高

2. 影响溶解度相似相溶



三、氢键

(一) 氢键的形成

氢键:

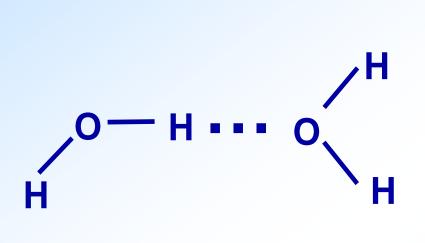
当氢原子和电负性大、半径小的原子以共价 键形成强极性键时,这个氢原子还可与另一个键 上电负性大、半径小的原子中的孤对电子产生定 向吸引力

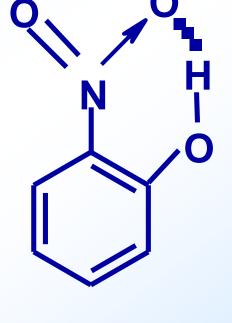
表示方法: X—H···Y

X, Y: F、O、N等

- (二) 氢键的特点
 - 1. 氢键本质上属于静电吸引作用。
 - 2. 氢键键能比一般共价键的键能小得多,但 比范德华力稍强。可用氢键的键能和键长 来描述氢键。
 - 3. 氢键具有饱和性和方向性

(三)分子间氢键和分子内氢键





分子间氢键

分子内氢键

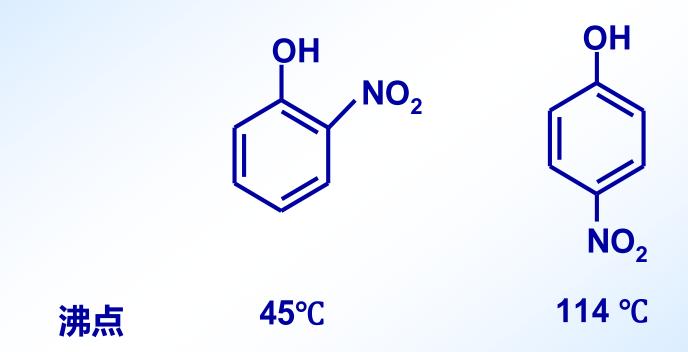
(四) 氢键对物质性质的影响

1. 对熔点沸点的影响

分子间氢键使物质熔点、沸点升高

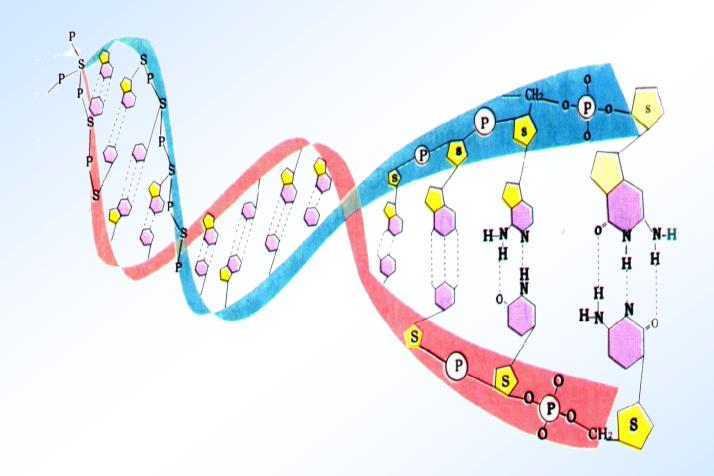
		HF	HCl	HBr	HI
沸点	(°C)	19.9	-85.0	-66.7	-35.4
		H_2O	H_2S	H ₂ Se	H ₂ Te
沸点	(C)	100	-60	-42	-2
熔点	(°C)	0	-85.6	-65.7	-46

分子内氢键则会使物质的熔点、沸点较低



2. 对溶解度的影响

在极性溶剂中,若溶质与溶剂间能形成氢键,则溶解度增加;如果溶质能形成分子内氢键,则在极性溶剂中,其溶解度减小,在非极性溶剂中则溶解度相对较大。



DNA的双螺旋结构

腺嘌呤(A)

胸腺嘧啶(T)

核苷酸碱基间的氢键