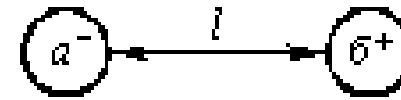


Химиялық байланыстың негізгі түрлері. Валенттік байланыс теориясының (ВБ) негізгі ережелері.

4 дәріс

Кіріспе: химиялық байланыс

Химиялық байланыстың түзілуінің негізгі шарты — жүйенің жалпы энергиясының изолирленген атомдардың суммарлық энергиясымен салыстырғанда төмендеуі. Молекула тек қана атомдардың өзара әрекеттесуі кезінде олардың жалпы энергиясы азайса ғана түзіле алады. Химиялық байланыстың түзілуі әрқашан энергияның бөлінуімен сүйемелденеді, бұл энергия химиялық байланыс энергиясы деп аталады.



Энергия E_1



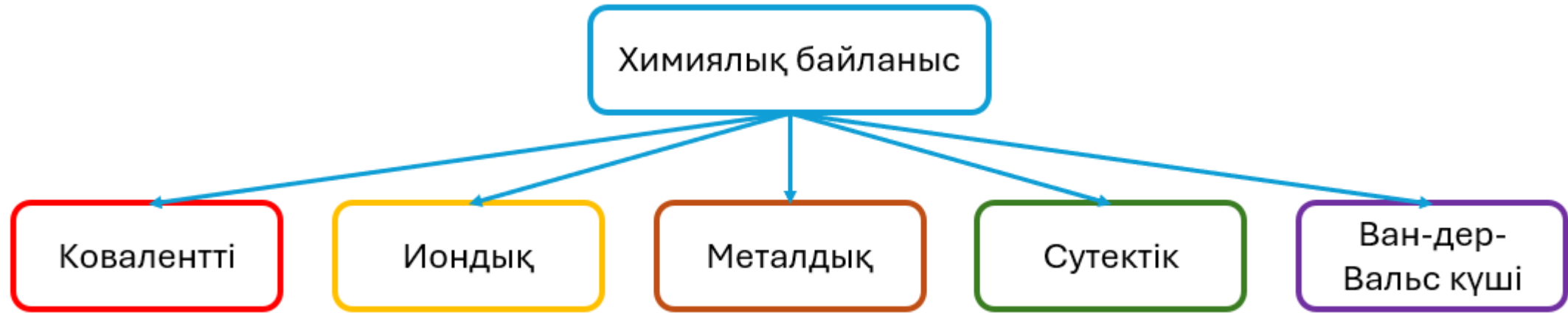
Энергия E_2

$$E_1 > E_2; \quad \Delta E = E_1 - E_2$$

Химиялық байланыс — атомдар арасындағы өзара әрекеттесу, молекуланың немесе кристалдың тұтастай тұрақтылығын қамтамасыз етеді. Химиялық байланыс зарядталған бөлшектердің (ядролар мен электрондардың) өзара әрекеттесуі арқылы анықталады. Қазіргі кезде химиялық байланыстың сипаттамасы кванттық механика негізінде жүргізіледі.

Химиялық байланыстың негізгі сипаттамалары — беріктік, ұзындық, полярлық және тұрақтылық.

Химиялық байланыс түрлері



Химияда төрт түрлі байланыс түрі ажыратылады: коваленттік, иондық, металдық және сутекті. Алайда, олар таза күйінде сирек кездеседі, әдетте бірнеше химиялық байланыстың қосарлануы байқалады. Мысалы, аммоний фосфатының $(\text{NH}_4)_3\text{PO}_4$ молекуласында иондар арасындағы иондық байланыс пен иондар ішіндегі коваленттік байланыс бір уақытта бар. Сонымен қатар, кристалл түзілгенде бөлшектер арасындағы байланыстың түріне байланысты кристалл торының қандай болатыны анықталады. **Кристалл торының** түрі химиялық байланыс арқылы физикалық қасиеттерді де анықтайды: қаттылық, ұшқыштық, балқу температурасы және т.б.

Байланыс сипаттамалары

Беріктік — байланыс қаншалықты күшті екенін және атомдар арасындағы өзара тартылыс күшінің деңгейін сипаттайды. Бұл сипаттама химиялық байланыстың әлсіз немесе күшті болуын анықтайды.

Ұзындық — атомдар арасындағы байланыс ұзындығы, яғни екі атомның ядролары арасындағы қашықтық. Әр түрлі байланыс типтерінде бұл көрсеткіш әртүрлі болады.

Полярлық — байланысқан атомдар арасындағы электрондардың таралуы тең емес болғанда, бұл байланыс полярлы деп аталады. Полярлық химиялық байланыстың электрлік қасиеттерін сипаттайды және молекуланың дипольдік сәтін анықтайды.

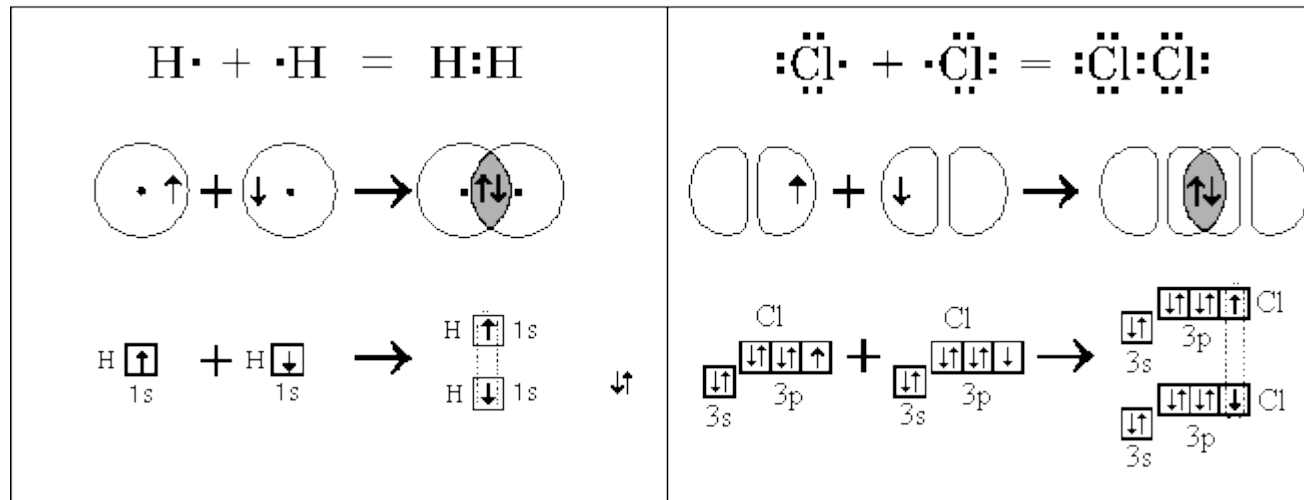
Тұрақтылық — химиялық байланыстың сыртқы әсерлерге, мысалы, температураға немесе қысымға қарсы тұру қабілеті. Тұрақты байланыстар молекуланы немесе кристалды ұзақ уақыт бойы сақтайды.

Ковалентті байланыс

Ковалентті байланыс атомдардың жұптаспаған валенттік электрондарының ортақ жұбы арқылы түзілетін байланыс. (1916 ж. Гилберт Льюис)

Түзілу механизмі: алмасу және донорлы-акцепторлы

Типі: Полюсті және плюссіз



Ковалентті байланыс

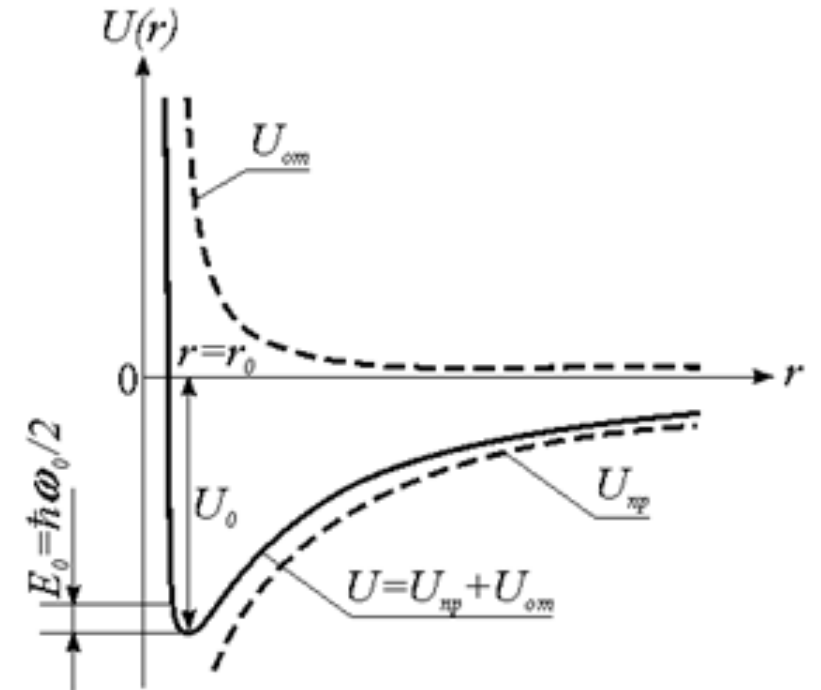
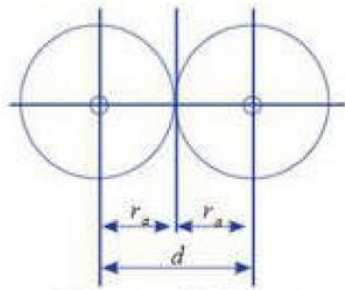
Байланыс энергиясы – байланыс түзілгенде бөлінетін энергия немесе байланысты үзуге қажет энергия

Байланыс ұзындығы – ядролардың арақашықтығы

Байланыс бағытталуы – байланыстың кеңістікте орналасуы

Байланыстың қанығуы деп атомдардың коваленттік байланыстың шекті бір санын түзі қабілеті.

Байланыс еселігі – екі атом арасындағы түзілген байланыстар саны

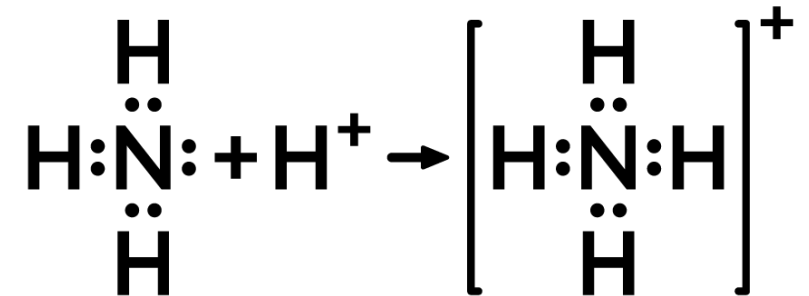
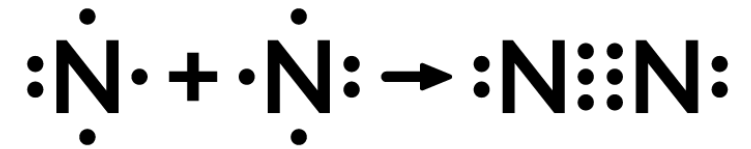


Екі атом арасындағы байланысқан толық потенциалдық энергиясының арақашықтыққа тәуелділігі.

Байланыс механизмі

Жалпы электрондық жұптың түзілуі кезінде әрбір екі атом бір-біріне бір электроннан береді. Мұндай байланыс түзілу механизмі **алмасу механизмі** деп аталады.

Сонымен қатар, басқа механизм бойынша коваленттік байланыс түзілуі мүмкін, бұл жағдайда бір атом екі электронды жалпы пайдалануға ұсынады, ал екінші атом осы электрондарды өзінің бос орбиталына қабылдайды. Электрон жұбын ұсынатын атом **донор** деп аталады, ал бос орбитальға электрондарды қабылдайтын атом **акцептор** деп аталады. Мұндай коваленттік байланыс түзілу механизмі **донор-акцепторлық** деп аталады.

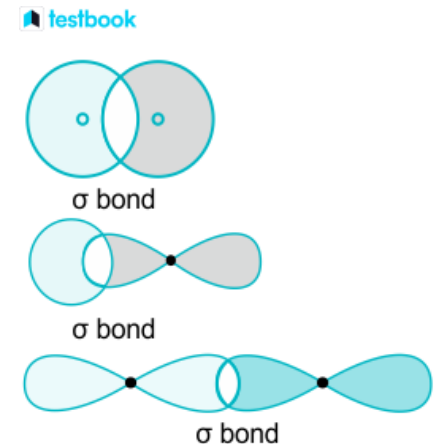
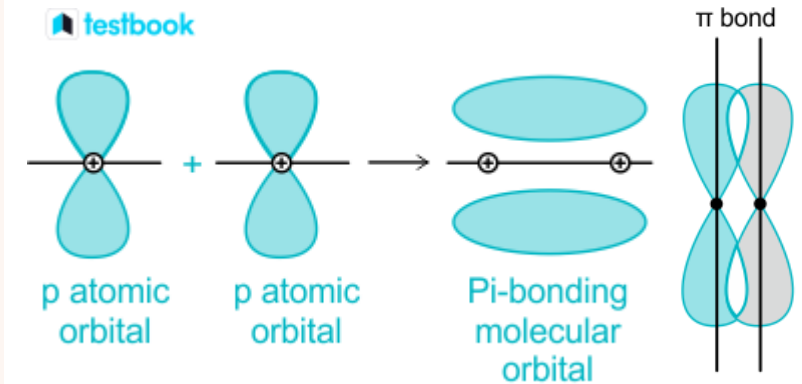


Пи және сигма байланыс

Пи-байланыс (π-байланыс) — бұл атомдық p-орбитальдардың қиылысып байланыс түзуі нәтижесінде пайда болатын коваленттік байланыс. Сигма-байланыстан айырмашылығы, сигма-байланысы атомдардың орбитальдары арасындағы түзу сызық бойымен қиылысып пайда болады, ал пи-байланыстар атомдардың орбитальдарының сызықтан екі жақта қиылысуы нәтижесінде пайда болады. Пи-байланыстар көбінесе бірнеше байланыстарда кездеседі: екілік байланыс бір сигма- және бір пи-байланыстан тұрады, ал үштік байланыс бір сигма- және екі ортогональді пи-байланыстан тұрады.

Сигма-байланыс (σ-байланыс) — бұл атом ядролары арасындағы «осьтік сызық» бойымен электрондық бұлттардың қиылысуы нәтижесінде пайда болатын коваленттік байланыс. Сигма-байланыс осьтік симметриямен сипатталады.

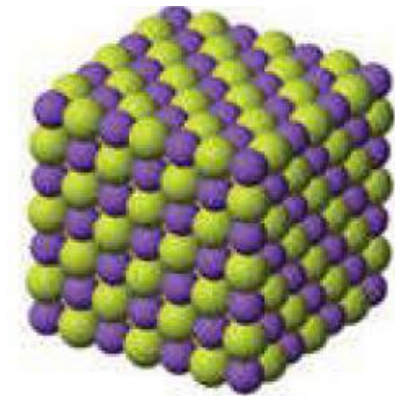
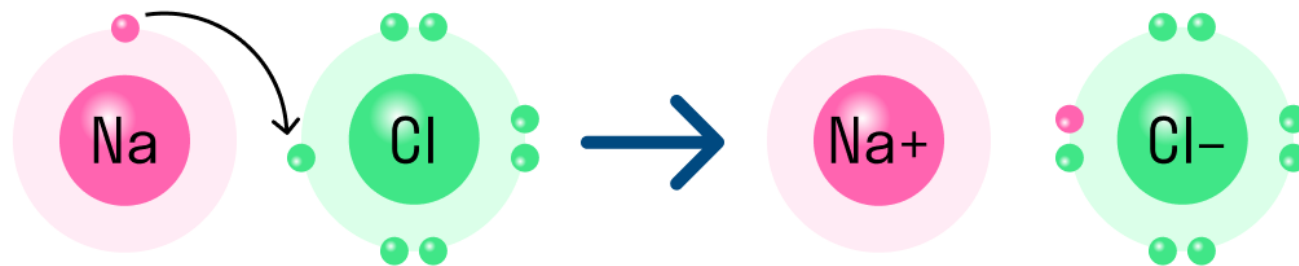
Бұл идея атомдық орбитальдардың гибридизациясын қамтыды, оны қарапайым алгебралық амалдар арқылы есептеп шығаруға болады. Сигма-байланыс ұзындыққа созылған гибридтік орбитальдардың қиылысуы нәтижесінде түзіледі, ал пи-байланыс p-орбитальдардың қиылысуы нәтижесінде түзіледі.



Иондық байланыс

Байланыс түзуге қатысқан екі атомның электртерістілік мәндерінің айырымы үлкен ($\Delta\text{ЭТ} > 1.7$) болса, онда ортақ электрон тығыздығы электртерістілігі жоғары атомға ығысады. Нәтижесінде бөлшектерде зарядтар пайда болады.

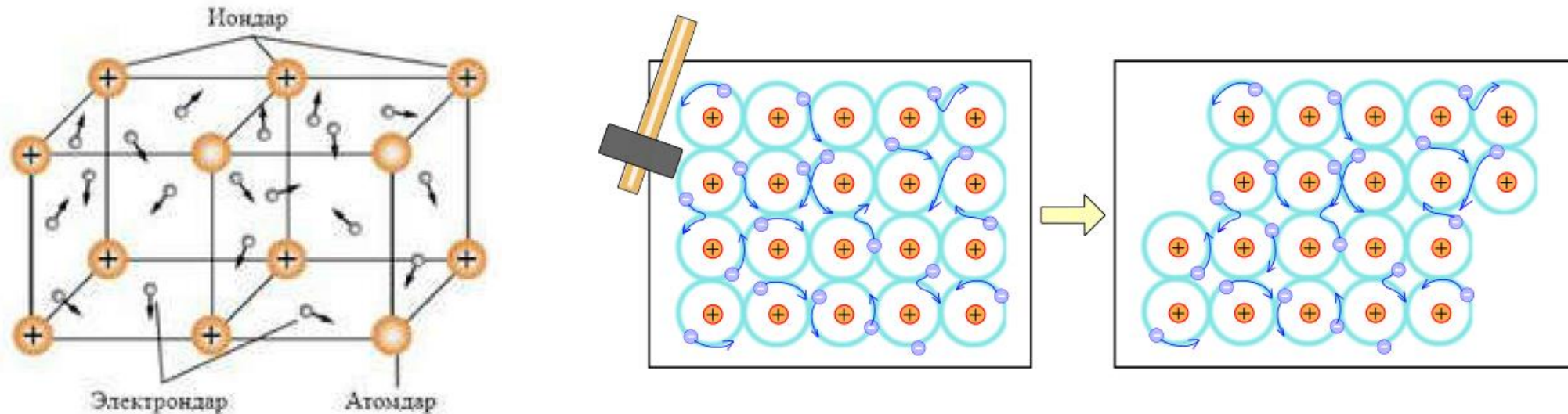
Зарядталған бөлшектерді **иондар** деп атаймыз. Иондар арасында пайда болған байланыс – **иондық байланыс (электростатикалық тартылыс)**.



Металдық байланыс

Металдар деп электр тогы мен жылуөткізгіштігі жоғары, тапталғыш, иілгіш және металдық жылтыры бар заттарды айтамыз.

Кристалдық тор түйіріндегі оң иондар мен кейбір бейтарап атомдар арасында еркін қозғалатын электрондар болатын тор **металдық кристалдық тор** деп аталады.



Сутектік байланыс

Сутектік байланыс – бір молекуладағы оң зарядталған сутек атомы мен екінші молекуладағы теріс зарядталған атом арасында түзілетін байланыс. Жартылай электростатикалық, жартылай донорлы-акцепторлы механизм арқылы түзілген байланыс.

