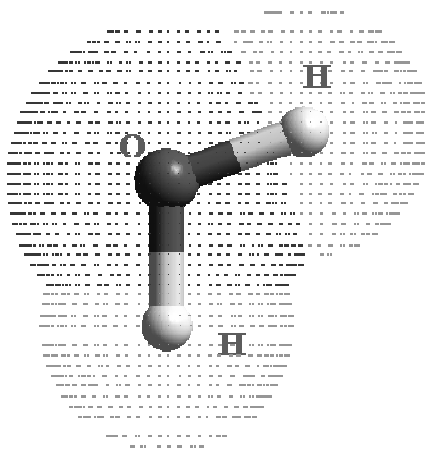


МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ, МОЛОДІ ТА СПОРТУ УКРАЇНИ
ХАРКІВСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ХАРЧУВАННЯ ТА ТОРГІВЛІ

ХІМІЧНІ ОСНОВИ ХАРЧОВИХ ТЕХНОЛОГІЙ
ЗАГАЛЬНА ТА НЕОРГАНІЧНА ХІМІЯ

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ

Для самостійної підготовки та проведення лабораторних занять за темою
«Хімічний зв'язок»
з використанням системного пакету *HyperChem*



для студентів напрямку підготовки 6.051701
"Харчові технології та інженерія"

Харків 2011

Обговорено і схвалено
на засіданні кафедри загальної
та харчової хімії
протокол №_____ від _____

Обговорено і схвалено
науково-методичною комісією
НН ІХТБ ХДУХТ
протокол №_____ від _____

Рецензент к.х.н., доцент Колесник Я.В.

ЗМІСТ

ПЕРЕДМОВА	4
1. ХІМІЧНИЙ ЗВ'ЯЗОК ТА МІЖМОЛЕКУЛЯРНА ВЗАЄМОДІЯ	5
1.1. Природа хімічного зв'язку	5
1.2. Ковалентний зв'язок	6
1.3. Іонний зв'язок	15
1.4. Металевий зв'язок	16
2. ВИКОРИСТАННЯ ПАКЕТУ ПРОГРАМ HYPERCHEM ПІД ЧАС ВИВЧЕННЯ ТЕМИ «ХІМІЧНИЙ ЗВ'ЯЗОК»	17
2.1. Призначення пакету HyperChem	17
2.2. Використання пакету HyperChem	17
2.2.1. Запуск програми	17
2.2.2. Короткий опис зовнішнього вигляду пакету HyperChem	17
2.2.3. Побудова заданої молекули	18
2.2.4. Геометричні характеристики зв'язку побудованої молекули	20
2.2.5. Електричні характеристики зв'язку побудованої молекули	21
2.2.6. Способи відображення молекулярної системи	21
2.2.7. Додаткові можливості пакету HyperChem	23
3. ЗАВДАННЯ ДЛЯ САМОСТІЙНОГО ВИКОНАННЯ	24
4. ТАБЛИЦЯ ВАРІАНТІВ	25
5. РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА	26

ПЕРЕДМОВА

В умовах формування інноваційного суспільства великого значення набуває якість освіти, яка законом України «Про вищу освіту» визначається як «сукупність якостей особи з вищою освітою, що відображає її професійну компетентність, ціннісну орієнтацію, соціальну спрямованість і обумовлює здатність задовольняти як особисті духовні та матеріальні потреби, так і потреби суспільства». Необхідність підвищення якості освіти, її орієнтації на результат зумовлена вимогами бізнесу і підприємництва. Ця необхідність стала головним імпульсом та мотивом виникнення нового підходу до організації навчально-виховного процесу й подання результату освіти – компетентнісного.

Компетентнісний підхід полягає у зміщенні акценту з накопичування нормативно визначених знань, умінь і навичок до формування й розвитку здатності практично діяти, застосовувати індивідуальні техніки і досвід успішних дій у ситуаціях професійної діяльності та соціальної практики.

Велику роль під час формування п'яти ключових компетенцій – соціально - особистісних, загально - наукових, інструментальних, загально - професійних та спеціалізовано - професійних, відіграє комп'ютерна культура. На сьогоднішній день існує величезна кількість інтерактивних електронних засобів, що допомагають отримати хімічні знання та сформувати спеціально-предметні компетенції з хімії. А це у подальшому стане підґрунтям для формування у студентів п'яти ключових компетенцій без яких важко уявити собі сучасного фахівця.

Теми "Будова атому" та "Хімічний зв'язок" є досить складними для засвоєння не тільки тому що вони вимагають від студентів певного багажу знань, але й тому що розуміння цих тем вимагає яскравої уяви. Людині важко уявити собі процеси, що відбуваються на наномолекулярному рівні, що вже казати про атомні глибини та утворення хімічного зв'язку. Але ці теми є ключовими для подальшого вивчення хімічних дисциплін. Саме на ці теми постійно посилаються під час вивчення всіх розділів органічної, аналітичної, фізичної, колоїдної та харчової хімії. Для вивчення цих тем досить важко підбирається ілюстративний матеріал, тому що плоска картинка не може передати весь об'єм інформації, для цього потрібні тривимірні малюнки. Вирішити ці проблеми допомагає використання сучасних комп'ютерних програм, серед яких HyperChem вважається однією з самих популярних через свою легкість у користуванні, зрозуміле меню та інформативність.

HyperChem – це комплексний програмний продукт, який створено для виконання задач з молекулярного моделювання. Він включає в себе програми, що реалізують методи молекулярної механіки, квантової хімії та молекулярної динаміки. HyperChem володіє розвинутим інструментом візуалізації, який може використовуватися не тільки під час розгляду структури молекули, її поведінки у розчині, але й під час аналізу отриманого результату (наприклад, розрахунку характеристик ІЧ- та УФ- спектрів).

1 ХІМІЧНИЙ ЗВ'ЯЗОК ТА МІЖМОЛЕКУЛЯРНА ВЗАЄМОДІЯ

1.1. Природа хімічного зв'язку

Хімічний зв'язок - це взаємодія, яка пов'язує окремі атоми в молекули, іони, радикали, кристали.

Основною умовою утворення хімічного зв'язку є зниження повної енергії Δ багатоатомної системи в порівнянні з енергією ізольованих атомів, тобто у випадку утворення речовини AB з атомів A і B $E_{AB} < E_A + E_B$.

Природа хімічного зв'язку, відповідно до сучасних уявлень, пояснюється взаємодією електричних полів, утворених електронами і ядрами атомів, які беруть участь в утворенні хімічної сполуки. Тому більш точно **хімічний зв'язок можна визначити як взаємодію атомів, зумовлену перекриванням їх електронних хмар і супроводження зменшенням повної енергії системи.**

Залежно від характеру розподілу електронної щільності між взаємодіючими атомами розрізняють три основних типи хімічного зв'язку: *ковалентний, іонний і металевий.*

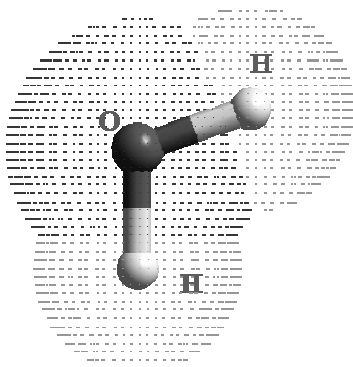
Основними параметрами хімічного зв'язку є його довжина, міцність та валентні кути, що характеризують будову речовин, які утворені з окремих атомів.

Довжина зв'язку - це між'ядерна відстань між хімічно пов'язаними атомами.

Кут між уявними прямими, що проходять через ядра хімічно пов'язаних атомів, називається *кутом зв'язку* або *ковалентним кутом*.

Найважливішою характеристикою хімічного зв'язку, що визначає її міцність, є *енергія зв'язку*. Кількісно вона зазвичай оцінюється за допомогою енергії, що витрачається на розриві такого зв'язку.

У випадку молекули води

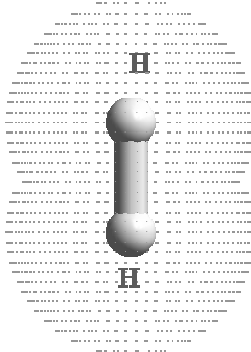


довжина зв'язку $H-O$ дорівнює $0,096$ нм, кут зв'язку $HOH - 104,5^\circ$, а енергія зв'язку $E_{OH} = 464$ кДж / моль.

1.2. Ковалентний зв'язок

Ковалентний зв'язок - тип хімічного зв'язку між двома атомами, що виникає при усупільненні електронів, які належать цим атомам.

Утворення молекули водню H_2 з окремих атомів - один з найбільш простих прикладів виникнення ковалентного зв'язку. Ізольовані атоми, що мають електрони з протилежно спрямованими спінами, при зближенні притягуються одне до одного, в результаті чого їх електронні хмари перекриваються з утворенням загальної молекулярної хмари, максимальна густина якої розташована в між'ядерному просторі:



Ядра атомів стягуються до цієї області підвищеної електронної густини доки не настане рівновага між силами тяжіння і між'ядерного відштовхування. При цьому знижується потенційна енергія системи (рис. 1.1).

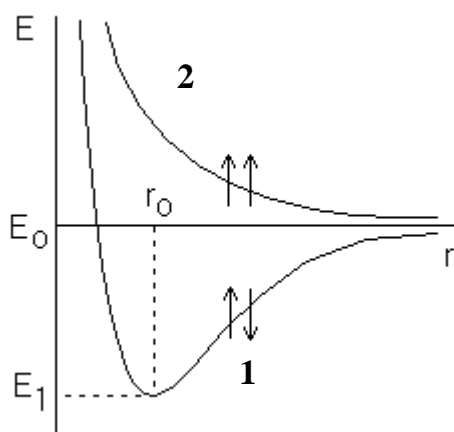


Рис. 1.1 Залежність потенціальної енергії системи з двох атомів гідрогену від між'ядерної відстані: **1** - з утворенням хімічного зв'язку; **2** - без утворення зв'язку.

Мінімум на кривій **1** відповідає енергії зв'язку в молекулі H_2 (максимальна енергія, що виділяється при її утворенні) і мінімально можливої відстані між ядрами, коли сили відштовхування врівноважені силами тяжіння (довжина зв'язку). Якщо спіни електронів паралельні (крива **2**), то потенційна енергія системи з двох атомів безперервно зростає при їх зближенні і, значить, хімічний зв'язок не утворюється.

Схематично утворення молекули водню може бути зображено таким чином: $\text{H} \bullet + \bullet \text{H} \rightarrow \text{H} : \text{H}$. Точками на схемах при хімічному знакові елемента позначаються зовнішні електрони. Усуспільнена пара електронів зазвичай замінюється рискою — наприклад: $\text{H} - \text{H}$.

Для опису багатоелектронних систем, якими є молекули більш складні, ніж H_2 , використовують наближені методи квантово-механічного розрахунку. Найбільш широко відомі два методи - *метод валентних зв'язків* (МВС) та *метод молекулярних орбіталей* (ММО)

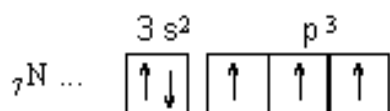
Розглянемо більш детально метод ВС. Основу цього методу (його ще називають метод локалізованих електронних пар) складають наступні положення:

1) ковалентний зв'язок утворюється двома атомами за рахунок двох електронів з антипаралельними спінами, тобто хімічний зв'язок локалізований між двома атомами;

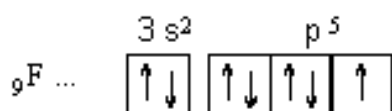
2) зв'язок розташовується в тому напрямку, в якому можливість перекривання електронних хмар найбільша;

3) ковалентний зв'язок є тим більш міцним, чим більш повно перекриваються електронні хмари.

Способи утворення ковалентного зв'язку. Валентність. Так як знаходження двох електронів в полі дії двох ядер енергетично вигідніше, ніж перебування кожного електрона в полі свого ядра, то в утворенні ковалентного зв'язку приймають участь всі одноелектронні орбіталі зовнішнього енергетичного рівня. Наприклад, атом азоту має три неспарених електрони на зовнішньому рівні:



а атом флуору – один:



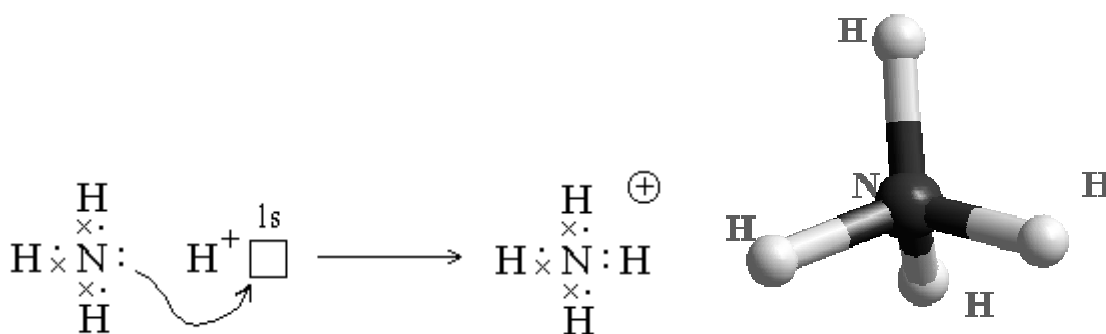
Тому дані атоми можуть утворювати за рахунок таких електронів відповідно три і один ковалентні зв'язки.

Число неспарених електронів може збільшуватися під час переходу атома в збуджений стан за рахунок «розпаровування»:



У цьому випадку атом здатний утворювати більше число зв'язків. «Розпарування» електронів вимагає витрати енергії, яка компенсується енергією, що виділяється при утворенні зв'язків, але, як правило, відбувається лише в межах даного енергетичного рівня. Перехід електронів на вільні орбіталі іншого рівня енергетично не вигідний.

Утворення ковалентного зв'язку можливо і при взаємодії атомів, один з яких має пару електронів, яку називають *неподіленою*, а інший - вільну орбіталь. Неподілена електронна пара стає загальною для обох атомів. Атом, що надає електронну пару для утворення зв'язку, називаються *донором*, а той що бере участь в усупільненні пари за рахунок вільної орбіталі - *акцептором*. Подібний механізм утворення ковалентного зв'язку називається *донорно-акцепторним*. Класичний приклад його – утворення іону амонію NH_4^+ :



Зв'язок, що утворився за таким механізмом, не відрізняється за своїми характеристиками від решти ковалентних зв'язків нітрогену з гідрогеном, утворених за звичайним механізмом.

Таким чином, атоми здатні утворювати ковалентний зв'язок різним чином. При використанні МВС ця здатність оцінюється за допомогою валентності. *Кількісною мірою валентності є число ковалентних зв'язків, утворених даними атомом, або число орбіталей, використовуваних атомом для утворення зв'язків.*

Властивості ковалентного зв'язку. Основними властивостями ковалентного зв'язку є її насичуваність, спрямованість і поляризація.

Ковалентний зв'язок між двома атомами розташовується таким чином, щоб забезпечити максимальне перекриття електронних хмар, тобто можна говорити про спрямованість, як властивість цього хімічного зв'язку.

Загальна кількість ковалентних зв'язків, що здатний утворювати той чи інший атом, обмежена. Вона визначається числом орбіталей атома, використання яких для утворення хімічних зв'язків енергетично вигідно. Так, елементи другого періоду, у атомів яких зовнішній енергетичний рівень складається тільки з чотирьох орбіталей (одна *s* - і три *p* - типу), можуть утворювати не більше чотирьох ковалентних зв'язків. У атомів наступних періодів в утворенні ковалентних зв'язків можуть приймати участь і *d* -орбіталі як зовнішнього, так і передзовнішнього енергетичного рівня.

Ковалентний зв'язок характеризується *насичуваністю*. Ця властивість полягає в тому, що утворення зв'язуючої пари електронної пари виключає її участь в інших хімічних взаємодіях. Завдяки цьому ковалентні сполуки мають строго певний склад.

Електронні хмари мають різну форму і орієнтацію, тому їх взаємне перекривання реалізується різними способами.

При перекриванні електронних хмар на лінії, що з'єднує атоми (її часто називають лінією або віссю зв'язку), формується σ - зв'язок (рис. 1.2).

π - Зв'язок утворюється при перекриванні електронних хмар у двох областях простору, по обидві сторони від лінії зв'язку (рис. 1.3).

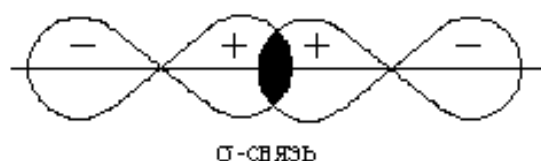


Рис. 1.2. Перекриття в атомах А і В атомних орбіталей при утворенні σ - зв'язків.

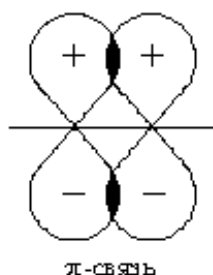
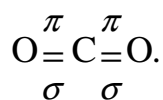
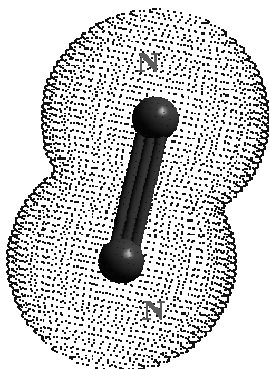


Рис. 1.3. Перекриття атомних орбіталей атомів А і В при утворенні π - зв'язків

Виникнення π - зв'язку відбувається між двома атомами тільки тоді, коли вони вже зв'язані σ - зв'язком. У таких випадках говорять про кратність зв'язку, розуміючи під цим терміном кількість електронних пар, що беруть участь в утворенні ковалентного зв'язку. Наприклад, в молекулі CO_2 кожен атом кисню пов'язаний з атомом вуглецю двома ковалентними зв'язками – одним σ - і одним π - зв'язком:



Молекула азоту утворена з двох атомів, пов'язаних трьома ковалентними зв'язками - одним σ -і двома π - зв'язками:



Збільшення кратності зв'язку призводить до зменшення меж'ядерної відстані та зміцненню зв'язків між атомами.

З таблиці 1 видно, що енергія подвійного зв'язку $\tilde{N}=\tilde{N}$ (або потрійного $\tilde{N}\equiv\tilde{N}$) менше подвоєної (або потрійної) енергії одинарного зв'язку $\tilde{N}-\tilde{N}$, отже, σ - і π зв'язки енергетично неоднакові.

Таблиця 1.1. Характеристика простих і кратних зв'язків

Молекула	Зв'язок	Довжина зв'язку, нм	Енергія зв'язку, кДж/моль
\tilde{N}_2H_6	$\tilde{N}-\tilde{N}$	0,154	348
C_2H_4	$\tilde{N}=\tilde{N}$	0,135	635
C_2H_2	$\tilde{N}\equiv\tilde{N}$	0,120	830

У молекулі, утвореної з атомів одного і того ж елемента, загальна електронна хмара розташована симетрично в просторі між ядрами. Такий ковалентний зв'язок називається *неполярним*.

При виникненні ковалентних зв'язків між атомами різних елементів загальна електронна хмара зміщена в бік атома більш електронегативного елемента. Виникає асиметрія у розподіленні позитивних і негативних зарядів між взаємодіючими атомами, тому вся двохатомна молекула представляє собою *електричний диполь*, а такий ковалентний зв'язок називається *полярним*. Так, у молекулі $HC1$ спільна електронна пара зміщена у бік більш електронегативного хлору, що призводить до виникнення у нього *ефективного негативного* (-0,18 заряду електрона), а в атомі гідрогену *ефективного позитивного заряду* (+0,18 заряду електрона).

Відстань між центрами тяжіння ефективних зарядів ($q+$ і $q-$) називається *довжиною диполя*.

Центри тяжіння ефективних зарядів не збігаються з центрами ядер взаємодіючих атомів, тому довжина диполя для окремого зв'язку завжди менше довжини зв'язку.

Мірою полярності зв'язку є *електричний момент диполя* (ЕМД) μ , що є добутком довжини диполя l на абсолютний ефективний заряд q : $\mu = q \cdot l$. Електричний момент диполя зазвичай висловлюють дебаях (D):
 $1D = 3,33 \cdot 10^{-30} \hat{E} \hat{e} \cdot \hat{i}$.

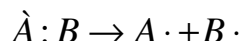
ЕМД зв'язку - векторна величина, направлена від позитивного полюса диполя до негативного. У багатоатомних молекулах сумарний ЕМД молекули дорівнює векторній сумі ЕМД окремих зв'язків. Тому полярність або неполярність молекул, що визначається її ЕМД, залежить від симетричності розподілу зарядів, яка, в свою чергу, обумовлена геометричною структурою молекули. Так, молекула $\hat{N} \hat{I}_2$ є неполярною внаслідок лінійної будови, незважаючи на полярність окремих зв'язків $\hat{N} - \hat{I}$ ($\mu = 8,9 \times 10^{-29} \hat{E} \hat{e} \cdot \hat{i}$). У той же час молекула H_2O з-за своєї кутової будови є полярною.

Велика кількість властивостей речовин, такі як розчинність, здатність до дисоціації та інші, також великою мірою залежать від полярності зв'язків в речовині.

Полярність зв'язків і всієї молекули в цілому може змінюватися під дією зовнішнього електричного поля або під дією іншої молекули або іона. Здатність до такої зміни зазвичай характеризується поляризованістю. В результаті поляризованості неполярні молекули можуть стати полярними, а полярні перетворитися на ще більш полярні аж до повного розриву окремих зв'язків з утворенням позитивних і негативних іонів:

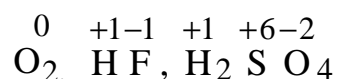


Такого типу розрив зв'язків називається гетеролітичним. На відміну від нього гомолітичний розрив має місце при розпаді молекул на атоми чи радикали:



Ступінь окиснення. Для якісної характеристики зсуву електронних пар, що утворюють хімічні зв'язки, від одного атома до іншого в хімічній сполуці широко використовується умовна величина, яка називається ступенем окиснення.

Ступінь окиснення - це заряд, який придбав би атом у з'єднанні, якщо б всі електронні пари його хімічних зв'язків повністю змістилися в бік більш електронегативних атомів, або інакше - це умовний заряд атома в з'єднанні, що обчислюється виходячи з припущення, що речовина складається тільки з іонів. Чисельне значення цієї характеристики виражається в одиницях заряду і може мати позитивне, негативне і нульове значення, яке вказується звичайно над символом елемента:



Кількісно ступінь окислення визначається, як правило, числом валентних електронів, частково або повністю зміщених від даного елемента в хімічній сполуці (позитивна ступінь окислення) або до нього (негативна ступінь окислення).

В основу такого розрахунку покладено принцип, згідно з яким алгебраїчна сума ступенів окиснення атомів у з'єднанні дорівнює нулю, а в складному іоні - заряду іона. При цьому використовується ряд простих положень, відповідно до яких ступінь окислення:

- 1) атомів у простих речовинах дорівнює нулю;
- 2) простих іонів типу Cl^- , S^{2-} , K^+ , Mg^{2+} дорівнює заряду іона;
- 3) флуору у всіх його сполуках дорівнює -1;
- 4) кисню у всіх сполуках дорівнює -2 (виключення O^{+2}F_2 та пероксиди $\text{O}^{-1} - \text{O}^{-1}$);
- 5) водню в більшості сполук +1, крім сполук з металами (гідридів) -1;
- б) лужних металів у всіх з'єднаннях дорівнює +1, лужноземельних металів, Be, Mg, Zn, Cd +2, алюмінію +3.

Більшість інших елементів мають змінну ступінь окислення і, як правило, вища позитивна ступінь окислення чисельно дорівнює номеру групи в періодичній системі. У елементів груп IVA-VIIA нижча негативна ступінь окислення чисельно дорівнює різниці: № групи -8.

Геометрія структур з ковалентним типом зв'язків. Розділ хімії, що вивчає просторову будову молекул, називається *стереохімія*.

У загальному випадку геометрія структури визначається кутами зв'язку. Оскільки π - і δ - зв'язки розташовуються в тих же областях між'ядерного простору, що і σ - зв'язки, і впливають тільки на довжину і міцність зв'язку між двома атомами, геометрична конфігурація молекул визначається в основному просторовою спрямованістю σ -зв'язків.

Стійкому стану молекули відповідає геометрична структура з мінімально можливим значенням потенційної енергії.

У молекулі H_2O атом кисню утворює дві σ - зв'язки з атомами гідрогену за рахунок p - хмар зовнішнього енергетичного рівня, орієнтованих в атомі взаємно перпендикулярно. Отже, кут зв'язку $\text{H} - \text{O} - \text{H}$ повинен бути близьким до 90° . Аналогічно в молекулі NH_3 кути між зв'язками, утвореними трьома p - орбіталями атома нітрогену, також повинні бути близькі до 90° , а вся молекула в цілому повинна мати форму трикутної піраміди з атомом нітрогену у вершині. Проте експериментально встановлені валентні кути ($104,5^\circ$ в молекулі H_2O і $107,3^\circ$ в молекулі NH_3) відрізняються від очікуваних.

За участю в утворенні σ - зв'язків орбіталей різних типів, наприклад, у молекулах BeCl_2 , BF_3 , CH_4 , варто було б очікувати формування зв'язків, що

відрізняються один від одного по довжині та міцності. Проте всі зв'язки $\text{Be}-\text{Cl}$, $\text{B}-\text{F}$, $\text{C}-\text{I}$ рівноцінні і розташовуються симетрично один к одному.

У рамках МВС ці факти пояснюються на основі *концепції гібридизації атомних валентних орбіталей*. Відповідно до даної концепції, в утворенні ковалентних зв'язків беруть участь не «чисті», а так звані *гібридні*, усереднені за формою і розмірами (а отже, і по енергії) орбіталі. Число таких орбіталей дорівнює числу вихідних орбіталей. Гібридні орбіталі більш витягнуті в просторі, що забезпечує їх більш повне перекриття з орбіталями сусідніх атомів (рис. 1.4). Гібридні орбіталі внаслідок особливої симетрії в утворенні π -зв'язків участі не приймають.

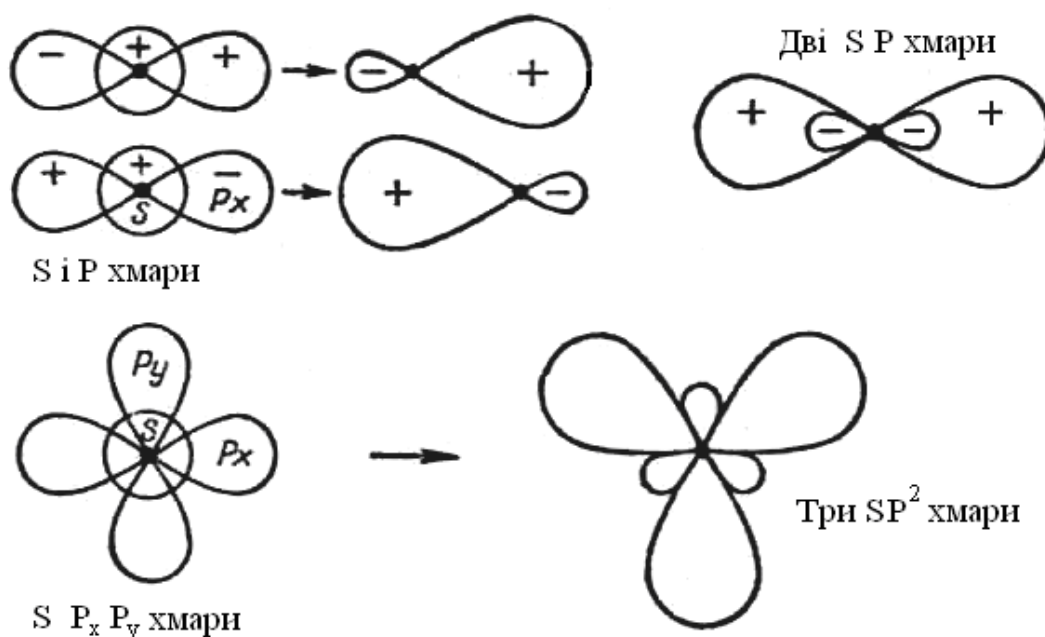
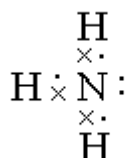


Рис. 1.4 Деякі типи гібридизації валентних орбіталей

Напрямок гібридних орбіталей визначає геометричну структуру молекули. Однак часто реальні кути зв'язку відрізняються від кутів, відповідають типу гібридизації. Основними причинами цих відхилень є наступні:

1. Не всі гібридні орбіталі беруть участь у створенні зв'язку, частина з них - *незв'язуючі*. Електронні пари, що знаходяться на цих орбіталях також є незв'язуючі (або неподілені). Наприклад, у атома нітрогену в молекулі NH_3 одна пара електронів незв'язуюча:



Зв'язуюча електронна пара локалізована між двома атомами і тому займає менше простору, ніж електронна хмара незв'язуючої пари. Внаслідок цього відштовхуюча дія незв'язуючої пари (НП) проявляється в більшій мірі,

ніж зв'язуючої (ЗП). За ступенем взаємного відштовхування електронні пари розташовуються згідно з рядом: $\ddot{I}\ddot{I} - \ddot{I}\ddot{I} > \ddot{I}\ddot{I} - \ddot{N}\ddot{I} > \ddot{N}\ddot{I} - \ddot{N}\ddot{I}$.

Зменшення кута зв'язку ($109^\circ \rightarrow 107^\circ \rightarrow 105^\circ$) в ряду молекул $\text{CH}_4, \text{NH}_3, \text{H}_2\text{O}$ пояснюється збільшенням числа незв'язуючих орбіталей у центрального атома при одному і тому ж типі гібридизації.

2. Чим більше електронегативний ліганд (атом - партнер центрального атома), тим менше простору навколо центрального атома потрібно для електронної пари (через більш сильного зсуву до ліганда) і, таким чином, тим меншою мірою проявляється ефект відштовхування між зв'язуючими парами. Так, в однотипних молекулах NF_3 і NH_3 кут зв'язку FNF (102°) менше, ніж кут зв'язку HNN (107°)

3. Електронна хмара кратного (подвійного або потрійного) зв'язку займає більший простір, ніж одинарної, і тому має більшу відштовхуючу дію. Наприклад, в молекулі COF_2 , що має плоску будову, кути зв'язку FCO більше кута зв'язку FCF .

У табл.2 наведено види геометричних конфігурацій, що відповідають деяким типам гібридизації центрального атома А з урахуванням впливу незв'язуючих електронних пар.

Таблиця 1.2. Геометричні конфігурації молекул, відповідають різним типам гібридизації центрального атома

Тип гібридизації	Кількість електронних пар атома А		Склад молекули	Геометрична конфігурація молекули	Приклад
	ЗП	НП			
sp	2	0	$\text{A}\hat{\text{A}}_2$	Лінійна	$\text{A}\hat{\text{a}}\tilde{\text{N}}\text{l}_2$
sp^2	3	0	$\text{A}\hat{\text{A}}_3$	Трикутна	$\hat{\text{A}}\tilde{\text{N}}\text{l}_2$
	2	1	$\text{A}\hat{\text{A}}_2$	Кутова	SnCl_2
sp^3	4	0	$\text{A}\hat{\text{A}}_4$	Тетраедрична	$\tilde{\text{N}}\text{H}_4, \tilde{\text{N}}\tilde{\text{N}}\text{l}_4$
	3	1	$\text{A}\hat{\text{A}}_3$	Пірамідальна (трикутна піраміда)	NH_3, NF_3
	2	2	$\text{A}\hat{\text{A}}_2$	Кутова	H_2O
sp^3d^2	6	0	$\text{A}\hat{\text{A}}_6$	Октаедрична	SF_6
	5	1	$\text{A}\hat{\text{A}}_5$	Пірамідальна (тетрагональна піраміда)	IF_5
	4	2	$\text{A}\hat{\text{A}}_4$	Квадратна	XeF_4

Число атомів \hat{A} (в загальному випадку і число груп атомів), безпосередньо пов'язаних з центральним атомом \hat{A} , називається його *координаційним числом*. У з'єднаннях з ковалентним типом зв'язків координаційне число атома дорівнює числу σ - зв'язків, яке пов'язує його другими атомами.

1.3. Іонний зв'язок

Іонна зв'язок – це тип хімічного зв'язку, енергія якої в основному визначається електростатичними силами тяжіння протилежно заряджених іонів. Такий зв'язок можна розглядати як граничний випадок ковалентного полярного зв'язку, утвореного атомами що сильно розрізняються за електронегативністю:

співвідношення електронегативностей атомів	тип зв'язку
$\chi_A = \chi_B$	ковалентний неполярний
$\chi_A > \chi_B$	ковалентний полярний
$\chi_A \gg \chi_B$	іонний

Іонний зв'язок, як правило, виникає між атомами елементів груп ІА і ІІА, з одного боку, і елементів групи VIIA - з іншого. Але навіть у з'єднаннях, утворених цими елементами, не відбувається повного розподілення зарядів (тобто повного переходу електрона від одного атома до іншого) та електронна густина між іонами не дорівнює нулю. Тому більш правильно говорити про степені іонності зв'язку. Умовно прийнято вважати, що при $\Delta\chi > 1,9$ (ефективні заряди стають більше ± 0.5 заряду електрона) ступінь іонності більше 50%, і тому атоми розглядаються як іони з цілочисельними зарядами.

У іонному з'єднанні іони представляються у вигляді електричних зарядів зі сферичною симетрією силового поля. Такі заряди можуть притягувати до себе незалежно від напрямку необмежене число зарядів (іонів) протилежного знаку. У відсутності *направленості* і *насичуваності* і проявляться насамперед відмінність іонного зв'язку від ковалентного.

Проте практично навколо кожного іона розташовано (*координовано*) обмежене число протиіонів. Координаційне число іона не залежить від його заряду, а визначається в основному співвідношенням розмірів іонів різного знаку (тобто їх радіусів). У цілому ж іонне з'єднання являє собою гігантську асоціацію іонів протилежних знаків. Тому хімічні формули іонних сполук відображають лише найпростіше співвідношення між числом атомів елементів, що входять до складу такої асоціації.

1.4. Металевий зв'язок

При звичайних умовах метали (за винятком ртуті) існують у вигляді кристалів. Характерна особливість цих кристалів - високі значення координаційних чисел.

Взаємодія, що утримує атоми металів в єдиному кристалі, називається *металевим зв'язком*.

Природа металевого зв'язку подібна ковалентному зв'язку: обидва типи зв'язку засновані на усупільненні валентних електронів. Проте в атомах металів кількість таких електронів значно менше кількості вакантних орбіталей, тому вони можуть переходити з однієї орбіталі в іншу. Невисокі енергії іонізації металів обумовлюють легкість відриву валентних електронів від атомів і переміщення по всьому об'єму кристала. Завдяки вільному переміщенню електронів, метали мають високу електричну провідність і теплопровідність.

Таким чином, відносно невелика кількість електронів забезпечує зв'язування всіх атомів у кристалі металу. Зв'язок такого типу, на відміну від ковалентної, є *нелокалізованою* і *ненаправленою*. Саме цим пояснюється пластичність металів - здатність необоротно міняти свою форму під дією механічних сил.

Спрощено метал можна розглядати як гігантську молекулу, побудовану з катіонів, пов'язаних між собою відносно вільними валентними електронами (*електронним газом*).

2 ВИКОРИСТАННЯ ПАКЕТУ ПРОГРАМ HyperChem ПІД ЧАС ВІВЧЕННЯ ТЕМИ «Хімічний зв'язок»

2.1 Призначення пакету HyperChem

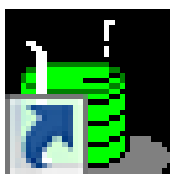
Пакет програм HyperChem володіє широкими можливостями для використання в демонстраційних, навчальних і наукових цілях. Пакет дозволяє будувати молекули з будь-якого набору атомів, включаючи складні біологічні молекули. Побудовані молекули можуть бути представлені в об'ємному або структурному вигляді в різних проекціях. Пакет дозволяє проводити розрахунки молекул полуемпіричними і квантово-механічними методами, в результаті чого визначаються заряди на атомах, електронна густина і структура молекул (в тому числі довжина зв'язку й валентні кути).

Всі дії пакету HyperChem наочно демонструються на екрані монітора, причому програма дозволяє розглядати систему в будь-якому ракурсі.

2.2 Використання пакету HyperChem

2.2.1. Запуск програми.

Для запуску пакету програм HyperChem студенту потрібно на робочому столі знайти ярлик (рис.2.1), навести на нього курсор та два рази швидко натиснути на ліву кнопку миші.



HyperChem Pro 6.Ink

Рис. 2.1 Ярлик для запуску пакету програм HyperChem

2.2.2. Короткий опис зовнішнього вигляду пакету HyperChem.

Після запуску пакета HyperChem на екрані монітора висвічується вікно з рядком меню і панель інструментів (рис.2.2).



Рис.2.2. Основне вікно HyperChem.

панель інструментів

Рядок назви показує ім'я файлу, з яким зараз працюють. Якщо робота ведеться в новоствореному файлі, ім'я з'являється як (untitled).

Рядок меню містить імена інших HyperChem меню:

- **File** - Файл, має службове значення - робота з файлами: відкрити, зберегти, друк і т.д.;
- **Edit** - Редагування, має допоміжне значення при редагуванні отриманих результатів;
- **Build** - Побудова об'єктів, містить параметри, які використовуються для побудови заданих молекул;
- **Select** – Виділення;
- **Display** - Відображення, містить опції дозволяють виробляти візуальний аналіз об'єктів;
- **Databases** - Бази даних, містить велику кількість вже побудованих органічних молекул;
- **Setup** - Установки, тут проводиться вибір методу розрахунку молекулярних систем;
- **Compute** - Розрахунок, тут відбувається вибір характеристик, що потребують розрахунку;
- **Cancel** - Скасувати
- **Script** - Сценарій,
- **Help** - Підказка.

На панелі інструментів перші вісім кнопок використовують, щоб побудувати, вибрати, відобразити, і перемістити атом або молекулу.

Знизу робочого вікна розташовано рядок стану, який показує поточну інформацію, наприклад, кількість атомів в молекулі, що відображається, стан обчислення, енергію або величину градієнта. Коли Ви обираєте пункт меню, короткий опис пункту з'являється в рядку стану.

2.2.3. Побудова заданої молекули.

Розглянемо будування заданої молекули на прикладі молекули H_2O .

Натискаємо функцію **Build**. Із запропонованого меню вибираємо опцію **Default Element**, після натискання на яку з'являється періодична таблиця елементів (рис. 2.3). Вибираємо необхідні атоми, які за допомогою кнопки **Draw** на панелі інструментів (перша кнопка) переносяться в робоче вікно.

Таким чином, для побудови молекули H_2O потрібно натиснути в таблиці спочатку на значок «О», потім навести курсор на чорне поле вікна і натиснути один раз на ліву кнопку миші, на полі з'явиться атом кисню. Потім натискаємо на значок «Н» в таблиці і малюємо в робочому полі два атоми водню. Наносити атоми на робоче поле можна в будь-якому місці. Тепер таблицю елементів можна закрити. З'єднуємо атоми водню з атомом кисню зв'язками (рис.2.4).

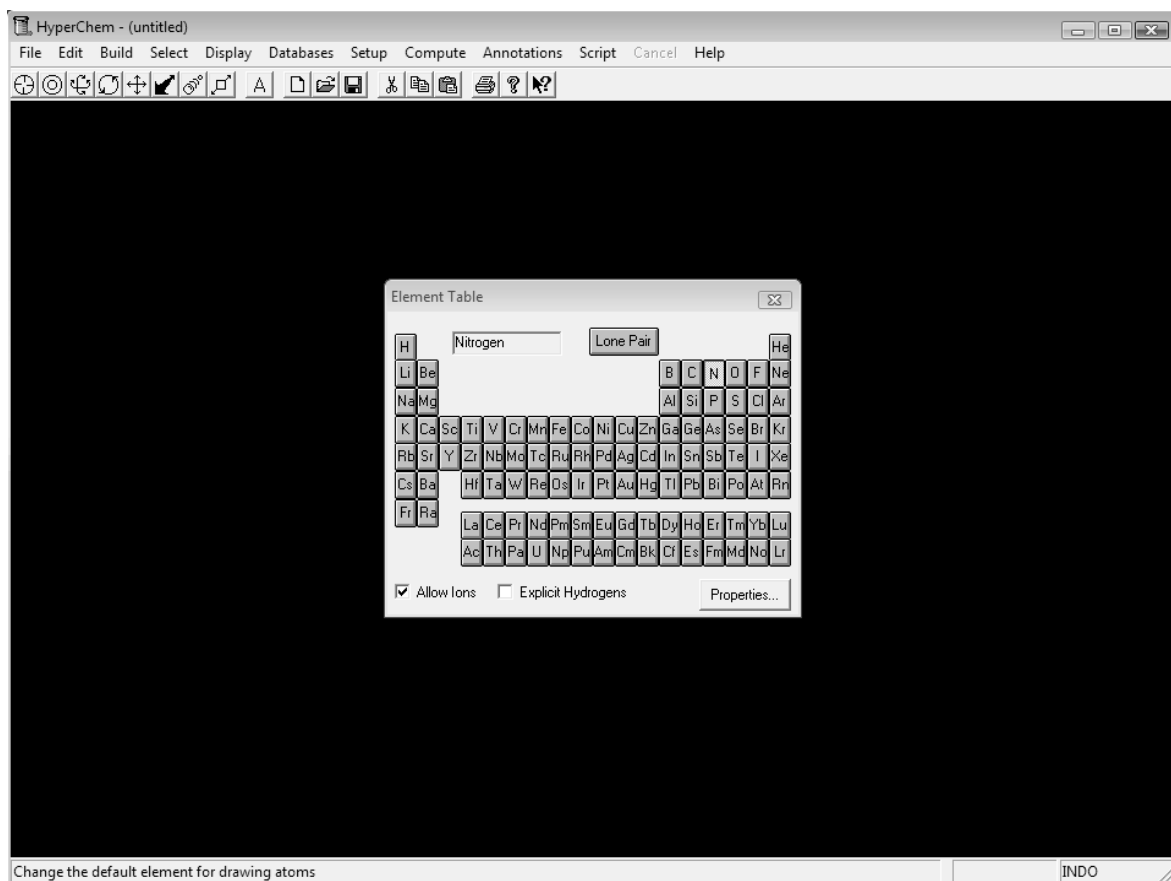


Рис. 2.3 Таблиця вибору атомів для побудування заданої молекули.

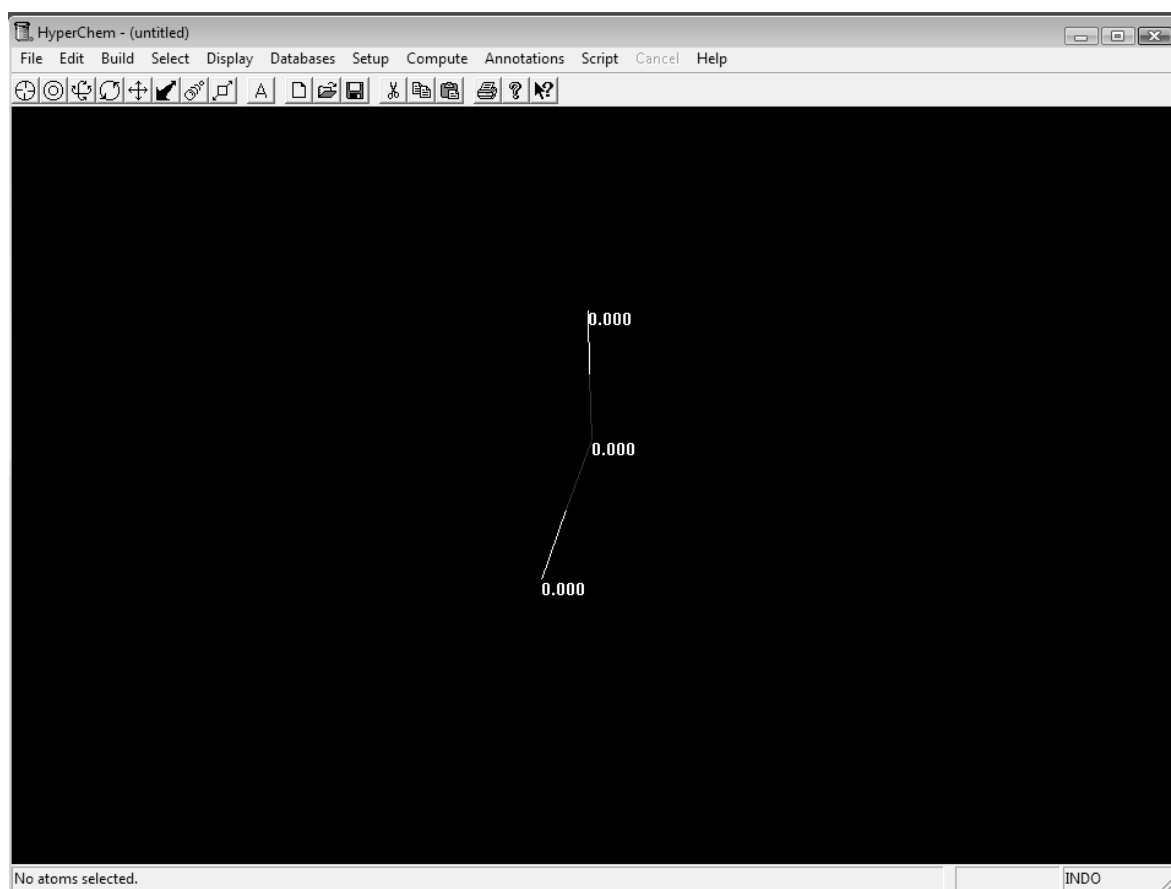


Рис. 2.4 Перший етап побудування молекули H_2O

Так як розміщення атомів здійснювалося довільно, відстань і кути між атомами навряд чи відповідають реальним значень. Необхідно провести геометричну оптимізацію молекули води. Для цього у функції **Setup** вибираємо опцію **Semi-empirical** і в ній систему потенційних функцій **INDO**. Після цього у функції **Compute** вибираємо опцію **Geometry Optimization** з відповідним алгоритмом. Результат оптимізації представлений на рис. 2.5. Цим методом можна побудувати практично будь-яку молекулу.

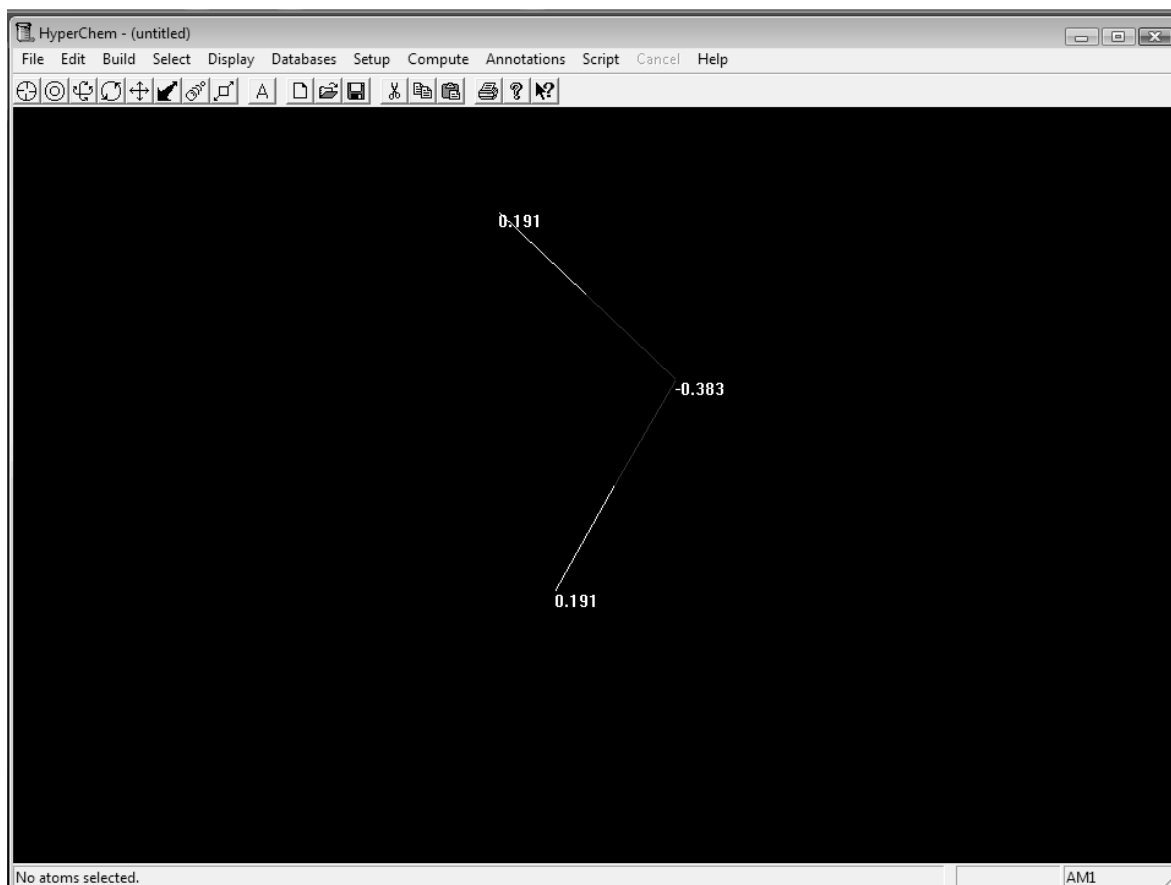


Рис. 2.5 Результат геометричної оптимізації молекули H_2O

2.2.4. Геометричні характеристики зв'язку побудованої молекули.

Після проведення геометричної оптимізації досліджуваної молекули необхідно зняти кількісні характеристики структури молекули.

Натискаємо другу кнопку на панелі інструментів (кнопка **Select**). В опції **Select** в рядку меню вибираємо функції **Atom** та **Multiple Selections**. Наводимо курсор на один з атомів молекули та натискаємо ліву кнопку миші, атом виділено, при цьому він змінює колір.

Якщо виділити одночасно два атоми в рядку стану (знизу робочого вікна) відображається довжина зв'язку (bond length) в ангстремах ($1\text{Å}=1\cdot 10^{-10}\text{ м}$). Ту ж саму інформацію, а також порядок зв'язку (bond order) можна подивитися, якщо, при наявності двох вибраних атомів, послідовно вибрати опції **Compute** і **Propeties**.

Якщо виділити одночасно три атоми в рядку стану відображається кут зв'язку (angle of atoms).

Щоб зняти виділення необхідно навести курсор на атом і натиснути праву кнопку миші.

2.2.5. Електричні характеристики зв'язку побудованої молекули.

Щоб подивитися дипольний момент (dipole moment) побудованої молекули необхідно (при відсутності виділених атомів) в опції **Compute** вибрати функцію **Propeties**.

При послідовнім виборі опцій **Display** → **Labels** → **Atom Charge**, на робочому полі біля відповідних атомів відображається атомний заряд. Величина атомного заряду може дати інформацію про тип зв'язку в молекулі. Якщо заряд всіх атомів близько 0 – зв'язок ковалентний неполярний, якщо заряд близько ± 1 – зв'язок іонний, інші випадки – ковалентний полярний.

2.2.6. Способи відображення молекулярної системи.

Натискаємо функцію **Display**, вибираємо опцію **Rendering**. Опція містить меню, яке дозволяє змінити зовнішній вигляд побудованої молекули.

Sticks – Стрижені, молекула у вигляді системи зв'язків;

Bolls – Кулі, атоми в молекулі у вигляді сфер з діаметрами близькими до Ван-дер-Ваальсовим;

Bolls and Cylinders – Кулі і циліндри, атоми в молекулі у вигляді невеликих сфер, які з'єднані в напрямку хімічних зв'язків циліндрами;

Overlapping Spheres – Сфери, що перекриваються, молекула показана у вигляді об'ємної фігури, сфери відповідають електронним оболонкам атомів;

Dots – Точки, атоми представлені у вигляді набору точок;

Sticks and Dots – Стрижені та точки, атоми представлені у вигляді набору точок зі зв'язками.

Якщо молекула зображена за допомогою першого або останнього способу є можливість позначити деякі характеристики атомів або молекули. При послідовному виборі опцій **Display** → **Labels** з'являється меню яке містить наступні позиції

Atom Symbol – хімічний символ атому;

Atom Charge – електронний заряд атому;

Atom Mass – атомна маса;

Bond length – довжина зв'язку;

Bond order – порядок зв'язку.

При виборі якоїсь позиції відповідна характеристика з'являється на зображенні молекули.

Різні зображення молекули води представлені на рис. 2.6.

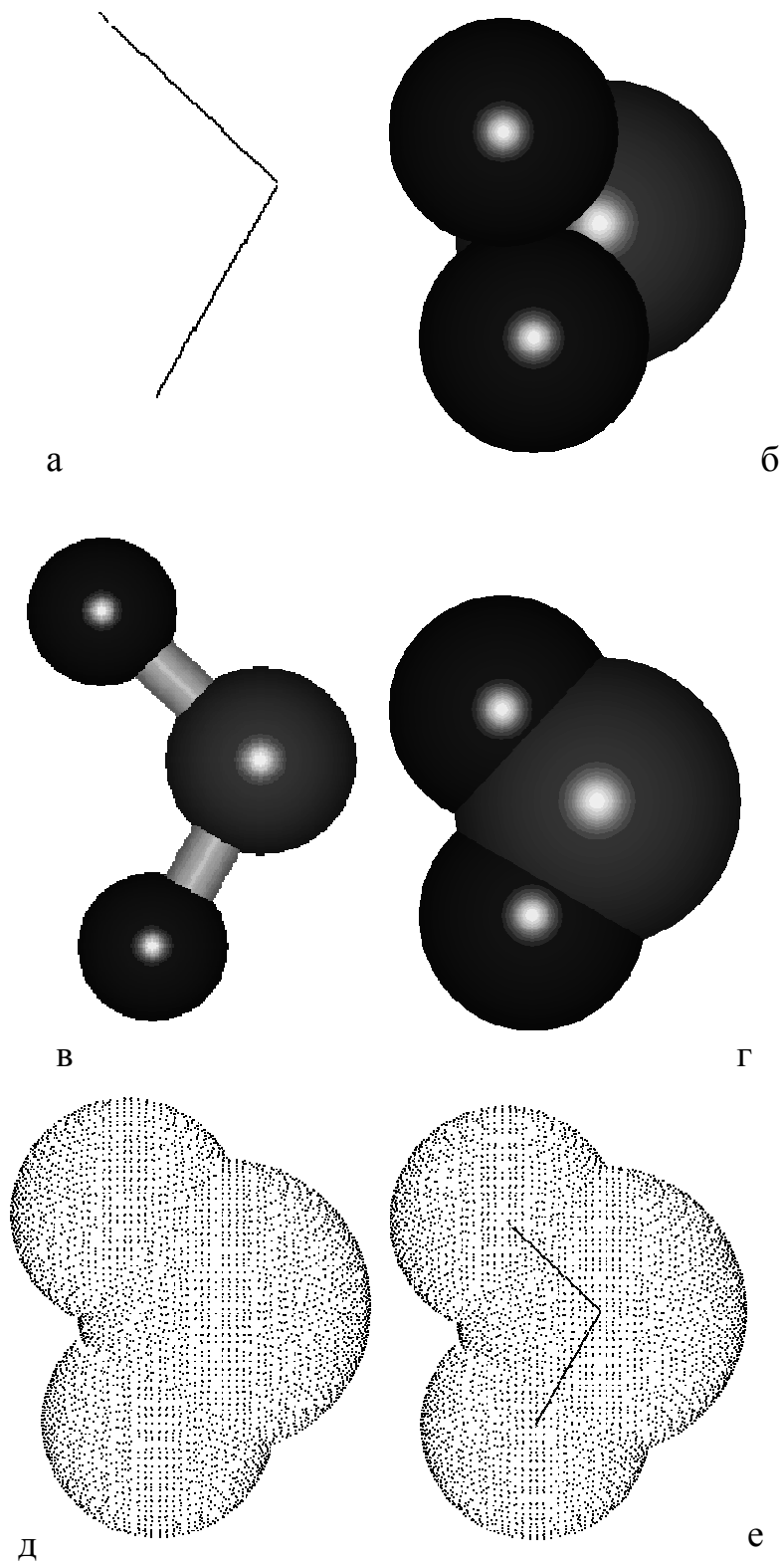


Рис.2.6 Зображення молекули води різними засобами
а) Sticks; б) Bolls; в) Bolls and Cylinders; г) Overlapping; д) Dots; е) Sticks and Dots.

Використовуючи панель інструментів (кнопки 2-6) і клавіатуру можна досліджувати молекулу (систему) переміщати, обертати, збільшувати і зменшувати, тобто всебічно візуально аналізувати створений об'єкт.

2.2.7. Додаткові можливості.

Таблиця елементів, яка використовується при будівництві молекул містить також наступну інформацію про атоми:

Atomic weight – атомна маса;

Electron Configuration – електронна конфігурація;

Atomic Radius – атомний радіус;

Melting Point – температура плавлення;

Boiling Point – температура кипіння;

Heat of Fusion – теплота плавлення;

Heat of Vaporization – теплота випаровування;

Electronegativity – електронегативність;

1-st Ionization Potential – перший потенціал іонізації;

2-nd Ionization Potential – другий потенціал іонізації;

3-rd Ionization Potential – третій потенціал іонізації;

Density – густина;

Specific Heat – питома теплоємність.

Для одержання цієї інформації необхідно вибрати опції **Build** → **Default Element** → **Properties**.

3 ЗАВДАННЯ ДЛЯ САМОСТІЙНОГО ВИКОНАННЯ

Використовуючи періодичну таблицю елементів, закладених у програму HyperChem, побудувати задану молекулу (див. таблицю варіантів), провести її геометричну оптимізацію і представити у вигляді:

- 1) атомних ядер сполучених жорсткими зв'язками;
- 2) електронних оболонок з розстановкою символів атомів;
- 3) сфер, що перекриваються.

В лабораторний журнал виписати для побудованих молекул наступні характеристики:

- 1) довжину зв'язку;
- 2) валентні кути;
- 3) парціальні заряди на атомах;
- 4) дипольний момент молекули.

Зробити висновок щодо типу зв'язку в молекулі.

4 ТАБЛИЦЯ ВАРІАНТІВ

№ варіанту	молекула 1	молекула 2	молекула 3
1	LiF	CO ₂	N ₂ .
2	LiCl	N ₂ O	Br ₂
3	LiBr	SO ₂	Cl ₂
4	Li ₂ S	CO	I ₂
5	NaF	SiO ₂	N ₂
6	NaCl	N ₂ O	O ₂
7	NaBr	CO ₂	Cl ₂
8	Na ₂ S	NO	I ₂
9	BeF ₂	MgO	N ₂
10	BeCl ₂	CO	Cl ₂
11	BeS	SO ₂	Br ₂
12	BeBr ₂	NO	O ₂
13	MgF ₂	BeO	Cl ₂
14	HCl	SiO ₂	Br ₂
15	HBr	N ₂ O	O ₂ .

5 РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Романова, Н.В. Загальна та неорганічна хімія [Текст] : навчальний посібник / Н.В. Романова. – К. : Ірпінь: ВТФ Перун, 1998. – 480 с.
2. HyperChem. Computation Chemistry – Canada: HyperCube Inc., 1996.
3. Князев, Д.А. Неорганическая химия [Текст] : учебник для ВУЗов / Д.А. Князев, С.Н. Смарыгин. – М. : Высшая школа, 1993. – 430 с.
4. Хомченко, І.Г. Загальна хімія [Текст] : навчальний посібник / І.Г. Хомченко. – К. : Вища школа, 2004. – 420 с.
5. Глинка, Н.Л. Общая химия [Текст] : учебник для ВУЗов / Н.Л. Глинка. – Л. : Химия, 2007. – 702 с.
6. Телегус, В.С. Основи загальної хімії [Текст] : навчальний посібник / В.С. Телегус.– Л. : Світ, 2000. – 422 с.
7. Кириченко, В.І. Загальна хімія [Текст]: навчальний посібник / В.І. Кириченко. – К : Вища школа, 2005. – 639 с.
8. Рейтер, Л.Г. Теоретичні розділи загальної хімії [Текст]: навчальний посібник / Л.Г. Рейтер, Степаненко О.М., Басов В.П. – К. : Каравела, 2003 – 344 с.

Навчальне видання

Укладачі:

ОТРОШКО Наталя Олександрівна

АКСЬОНОВА Олена Федорівна

АНТОНОВ Олексій Валентинович

ТОРЯНИК Дмитро Олександрович

ХІМІЧНІ ОСНОВИ ХАРЧОВИХ ТЕХНОЛОГІЙ ЗАГАЛЬНА ТА НЕОРГАНІЧНА ХІМІЯ

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ

Для самостійної підготовки та проведення лабораторних занять за темою
«Хімічний зв'язок»

з використанням системного пакету *HyperChem*

**для студентів напрямку підготовки 6.051701
"Харчові технології та інженерія"**

Підп. до друку _____ Формат 60×84 1/16 Папір газет. Друк. офс.

Обл.-вид.арк Умов.друк.арк. Тираж прим. Зам.№ _____

Видавець та виготовлювач

Харківський державний університет харчування та торгівлі

вул. Клочківська, 333, Харків, 61051

Свідоцтво суб'єкта видавничої справи

ДК № 2319 від 19.10.2005р.