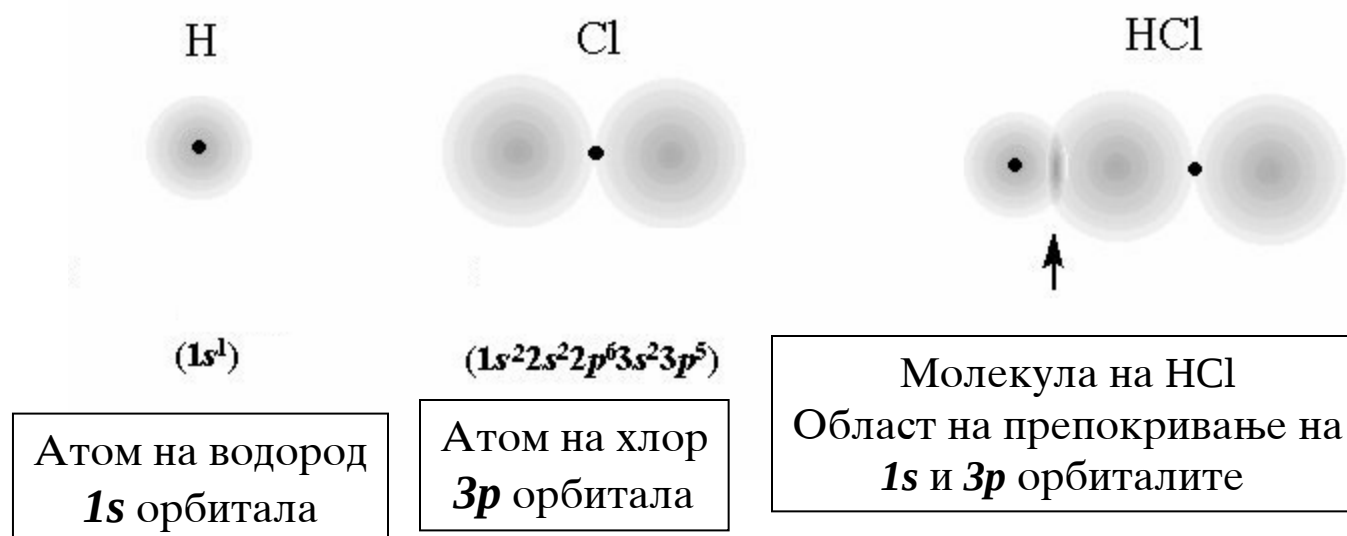


IX. Ковалентна врска и препокривање на орбиталите

Ковалентна врска и препокривање на орбитали

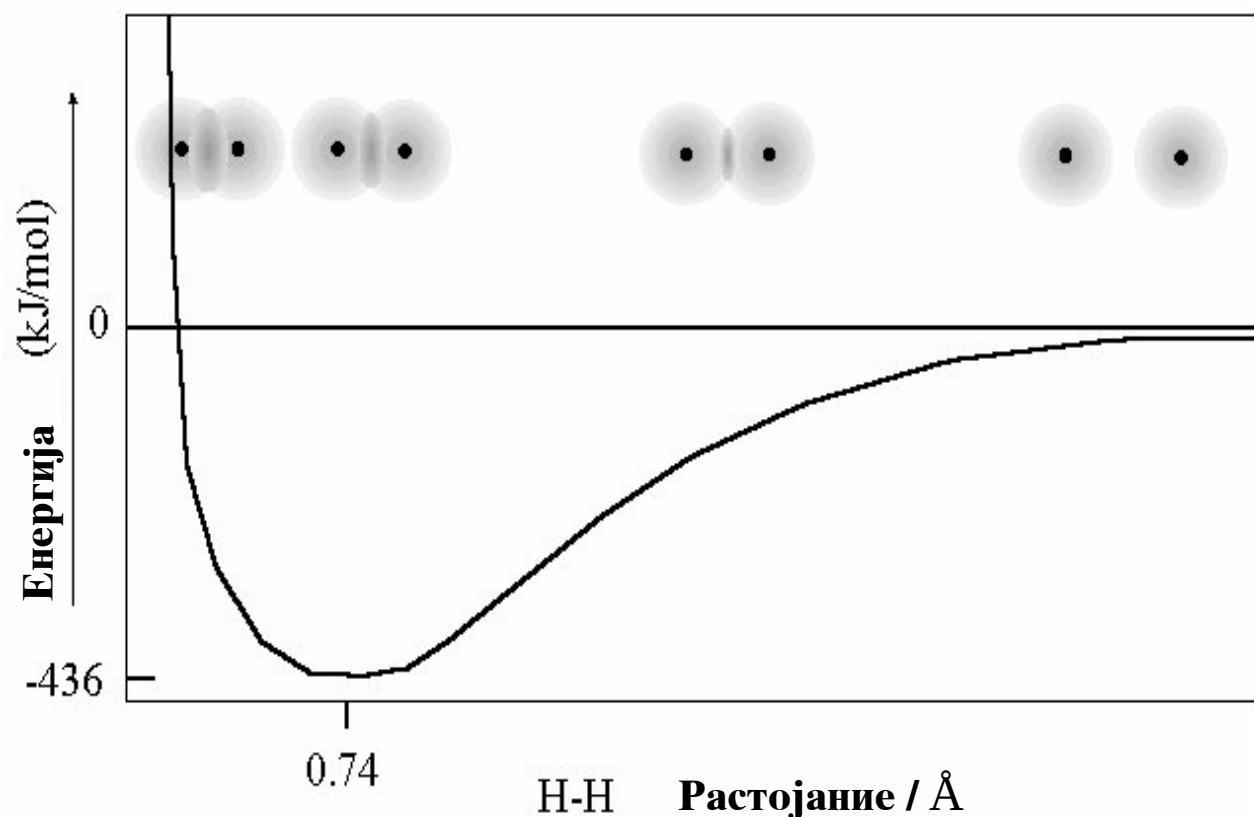
- Ковалентна врска и квантна механика: два основни концепта, (теории):
 - теорија за валентни врски
 - теорија за молекулски орбитали

Теорија за валентни врски: Ковалентната врска се формира со препокривање на орбиталите на валентните електрони на два атоми. Препокривањето овозможува два **различни електрони со сировни сџинови** да споделуваат заеднички простор помеѓу атомските јадра и со тоа да ја формираат ковалентната врска.



- Постои оптимална вредност на растојанието помеѓу јадрата на двата атоми поврзани со ковалентна врска што е во врска со потенцијалната енергија на системот:

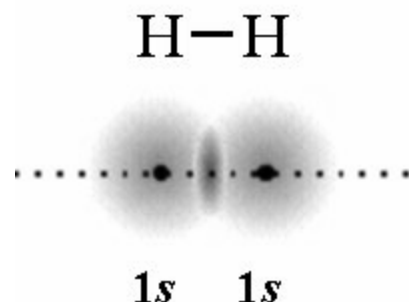
Промена на потенцијалната енергија на системот при формирањето на H_2 молекулата.



Со приближувањето на H атомите опаѓа потенцијалната енергија заради пораст на привлечните сили помеѓу јадрата и зголемената електронска густина помеѓу нив. Но, понатамошното приближување доведува до позначителен удел на одбивните сили помеѓу јадрата, па енергијата повторно расте. *Меѓујадрено̄о рас̄тојание ш̄то одговара на минимумо̄т на по̄тенцијална̄та енергија на сис̄темо̄т одговара на должина̄та на ковалентна̄та врска.*

Препокривање кај повеќекрајниите ковалентни врски

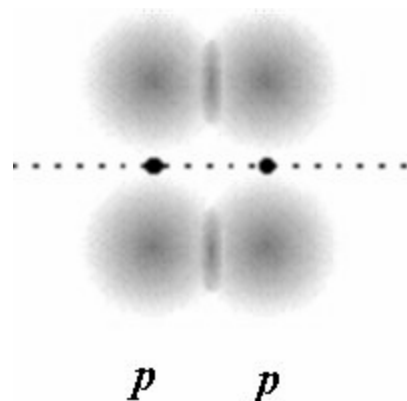
Под поимот *интернуклеарна оска* се подразбира замислена оска што ги поврзува двете атомски јадра поврзани со ковалентна врска.



Во горниот пример, електронската густина е симетрична во однос на интернуклеарната оска. Вакво својство имаат ковалентните врски добиени со преклопување на s-s орбитали, s-p орбитали и челно препокривање на две p орбитали.

Ковалентната врска кај која електронската густина е симетрична во однос на интернуклеарната оска се нарекува сигма (σ) врска.

Со странично препокривање на две p орбитали, кои стојат нормално (перпендикуларно) на интернуклеарната оска се формира π (π) врска.

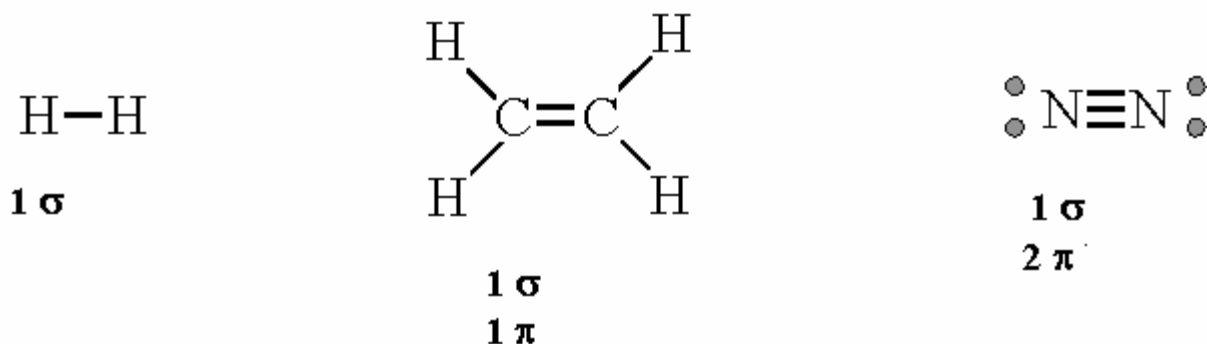


Забелешка: Пи врска̄а е единечна врска иако p орбиталӣе се̄ препокриваа̄и во два различни делови од̄ просторот̄ помеѓу атомскӣе јадра!

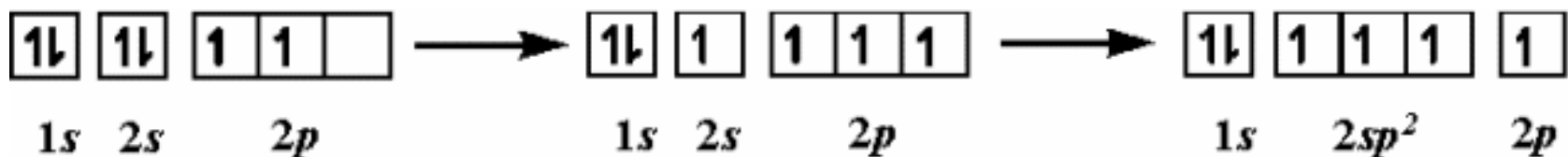
Внимание! Не е возможно да̄ постои само π ковалентна врска! Пи врска̄а може да се формира само доколку веќе̄ постои сигма врска.

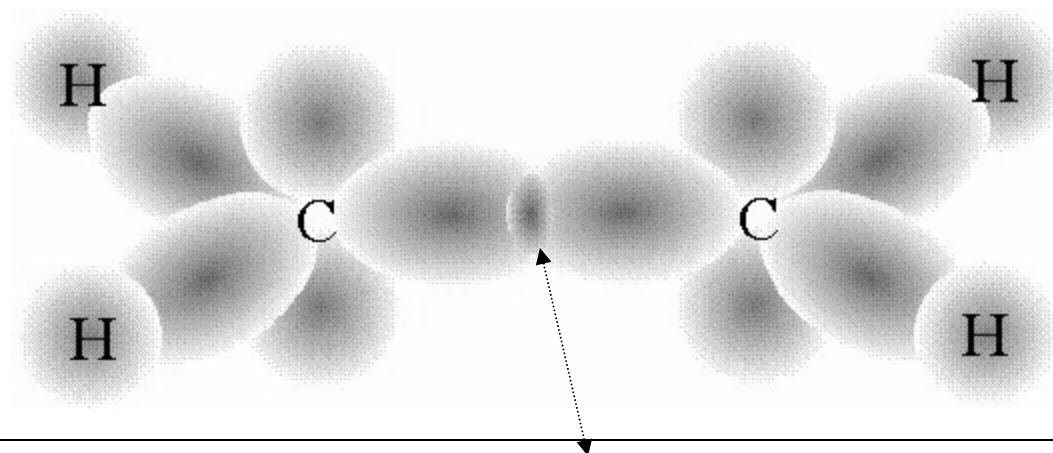
Степенот на препокривање кај π врска̄та е помал отколку кај σ врска̄та. Според тоа π врска̄та е послаба од σ врска̄та. Областите на препокривање на електронските облаци кај π врска̄та лежат над и под интернуклеарната оска (долж нуклеарната оска најмала е веројатноста за наоѓање на електронот).

- *Единечна̄та ковален̄на врска е сочинен̄та од една сӣма врска.*
- *Двојна̄та ковален̄на врска е сочинен̄та од една сӣма и една ѝи ѝрска.*
- *Тројна̄та ковален̄на врска е сочинен̄та од една сӣма и две ѝи врски.*



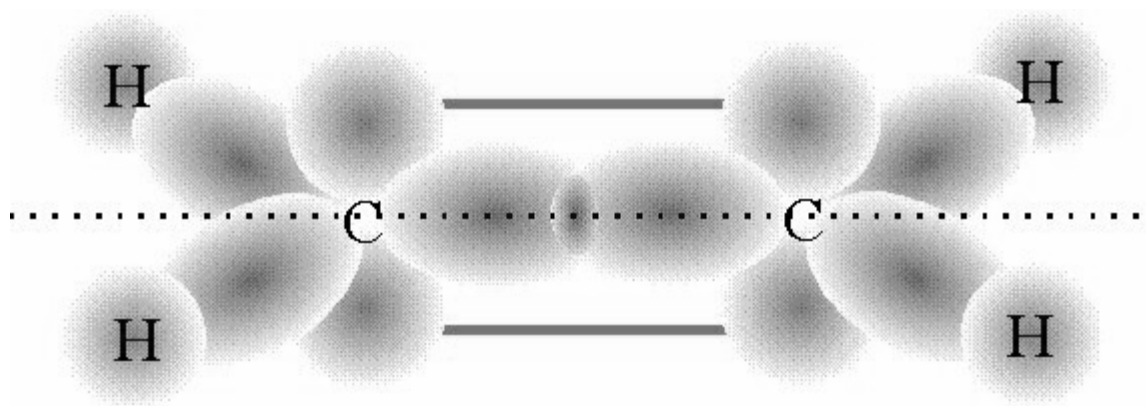
- *Пример: C_2H_4 (етен или етилен)*
- *Елетронска конфигурација на јаглеродот: $1s^2 2s^2 2p^2$*





Сигма врска добиена со препокривање на две sp^2 хибридни орбитали
(за поимот хибридизација и хибридни орбитали, види ја наредната лекција)

Останува по една p орбитала кај двата јаглеродни атоми. Овие p орбитали можат странично да се препокријат и да се формира пи врска.

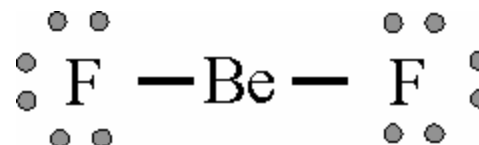


Хибридни орбитали

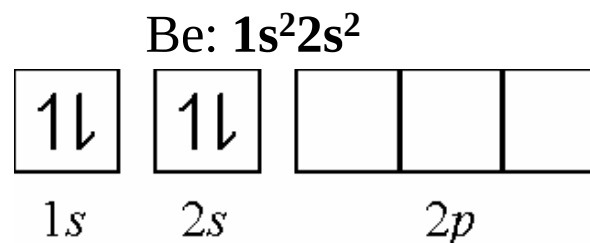
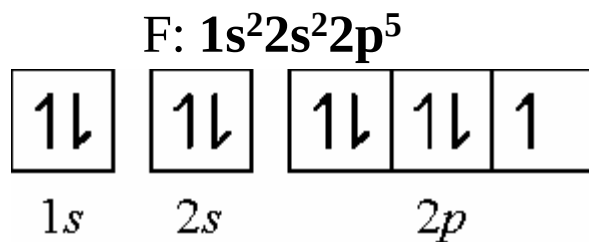
- При образувањето на полиатомските молекули, важно е да се предвиди:
 - бројот на формирани врски
 - геометријата на молекулите

sp хибридни орбитали

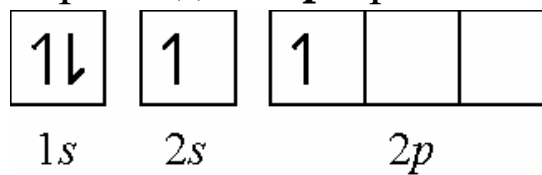
Пример: BeF_2 Луисова формула:



- Електронска конфигурација на:



Во основната состојба, Be нема неспарени електрони. Меѓутоа, при формирањето на врските, возможно е да се предпостави дека доаѓа до преод на еден електрон од *s* во *p* орбиталата.

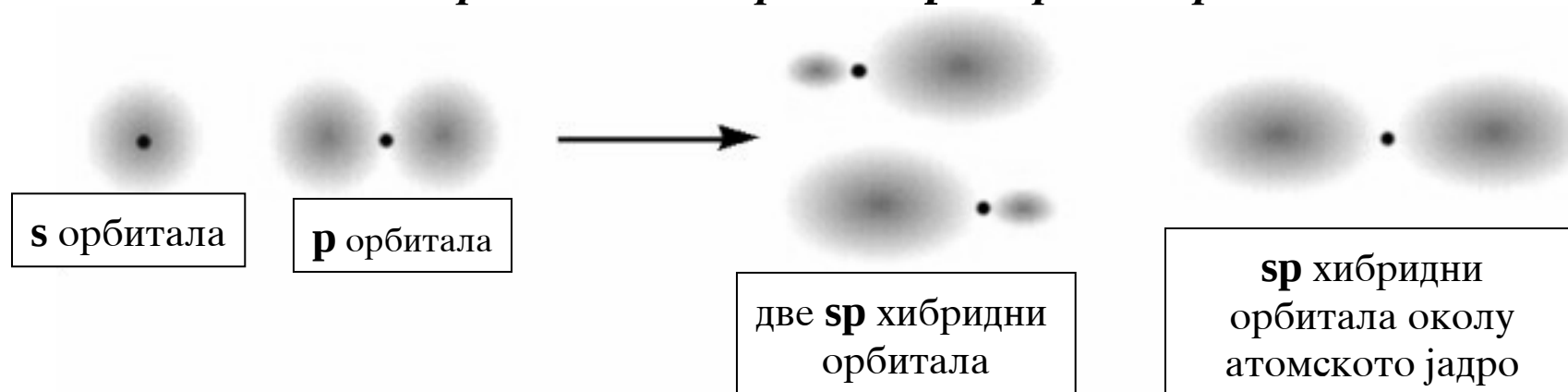


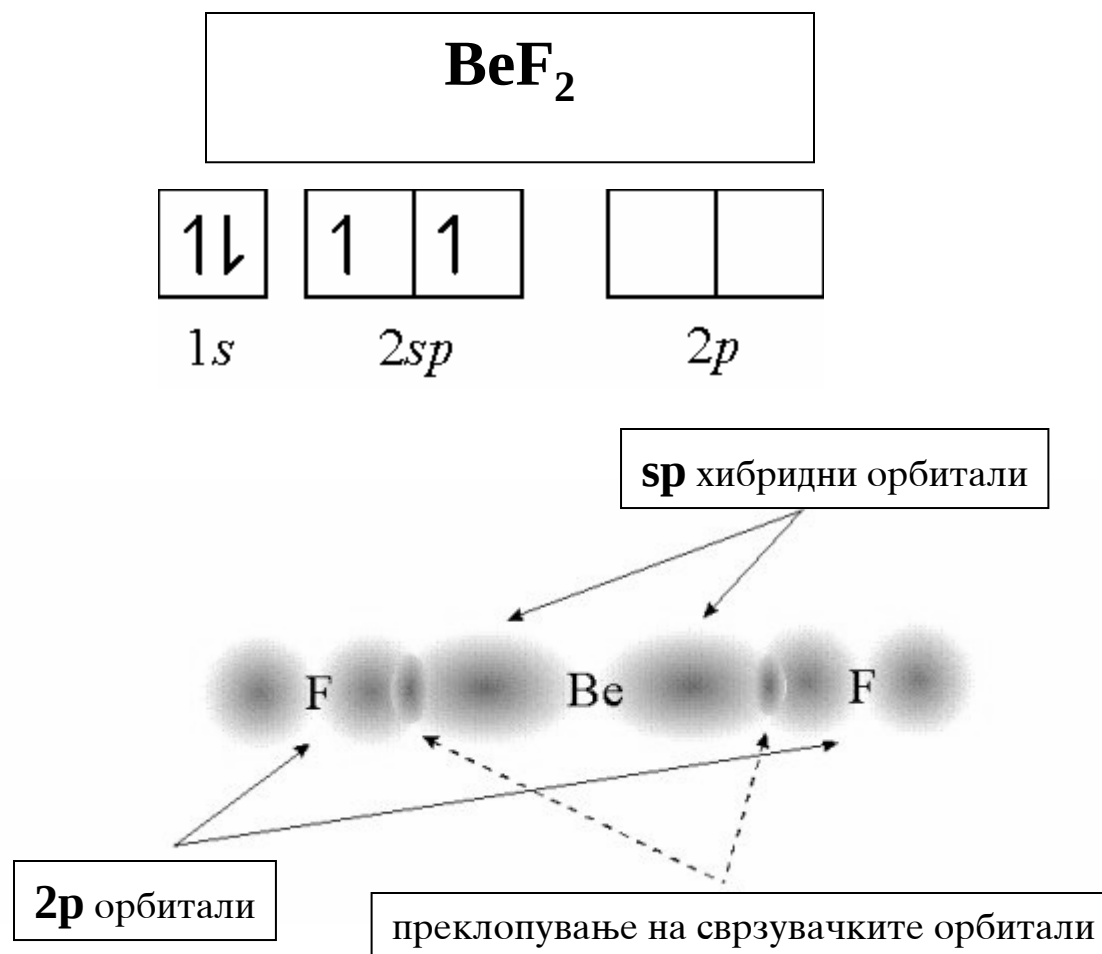
- Се очекува Ве да формира две ковалентни врски со препокривање на **s** и **p** орбиталите со **p** орбиталите од двата атоми на флуорот. Формираните врски не би биле идентични. Тие би зафаќале одреден агол и би се разликувале по својата енергија и должина.

Меѓутоа, структурата на BeF_2 е линеарна и двете врски се идентични.

*Идејно решение: Комбинација на брановите функции што ја опишуваат s и p орбиталата и добивање на нови две **хибридни (измешани) орбитали**.*

*Новите орбитали се наречени **sp хибридни орбитали**:*





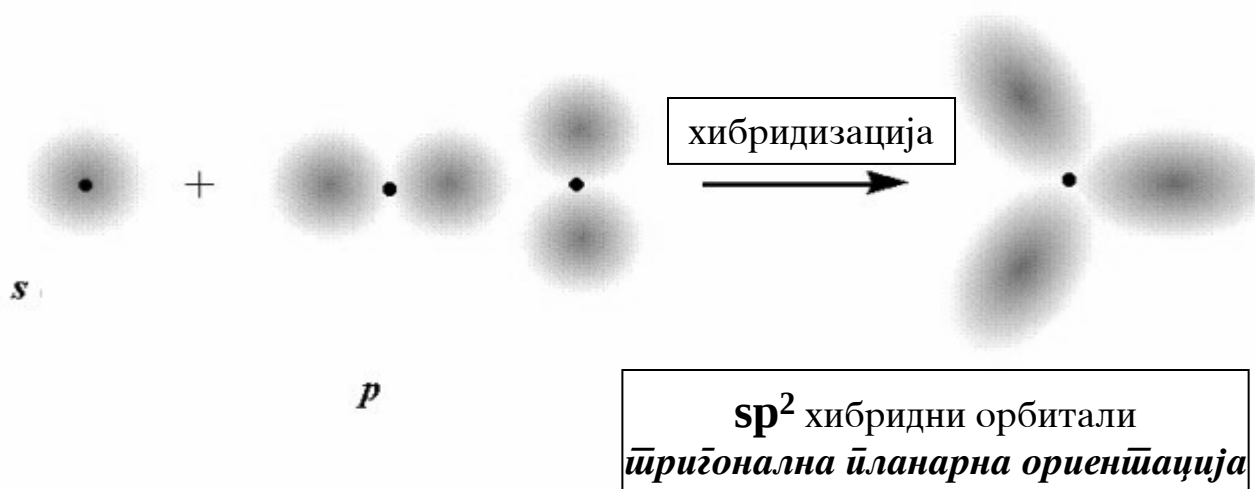
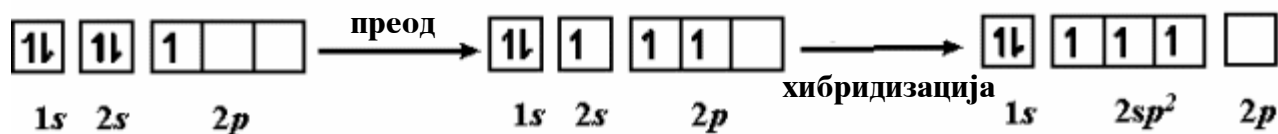
Двете **sp** хибридните орбитали се идентични според обликот и енергијата и зафаќаат меѓусебен агол од 180°. При формирање на ковалентна врска **sp** орбиталата се преклопува со својот поголем дел при што се формира посилна ковалентна врска. Енергијата што при тоа се ослободува е доволна да ја надополни неопходната енергија за преминување на електрон од **s** во **p** орбиталата што е неопходен предуслов за формирање на **sp** хибридни орбитали.

sp^2 и sp^3 хибридни орбитали

- При секое формирање на хибридни орбитали, бројот на хибридните орбитали е еднаков на бројот на орбиталите коишто при тоа се мешаат (хибридизираат) помеѓу себе.
- Сите новоформирани хибридни орбитали се идентични помеѓу себе, а се разликуваат по својата ориентација во просторот.

BF_3 бор флуорид

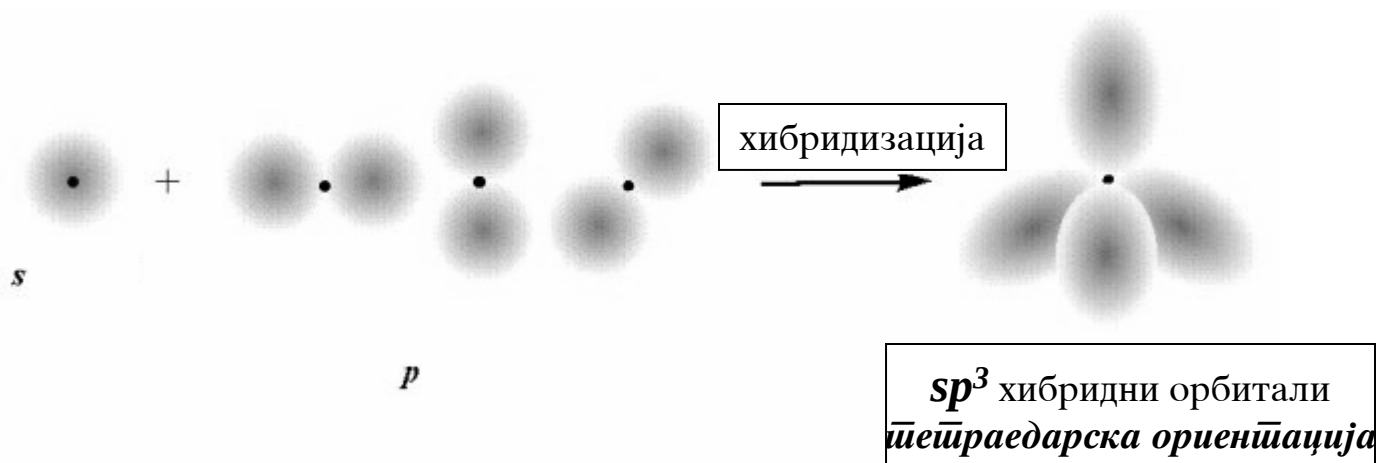
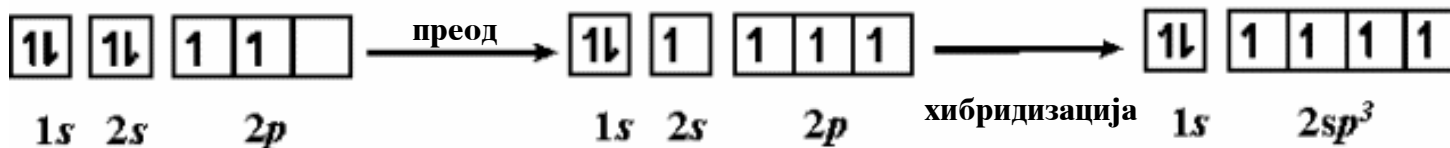
Електронска конфигурација на B:



Внимание! Во ознаката sp^2 , бројот 2 покажува само дека при хибридизацијата се измешале две p орбитали. Тој не означува постоење на два електрони во p орбиталата.

CH_4 метан

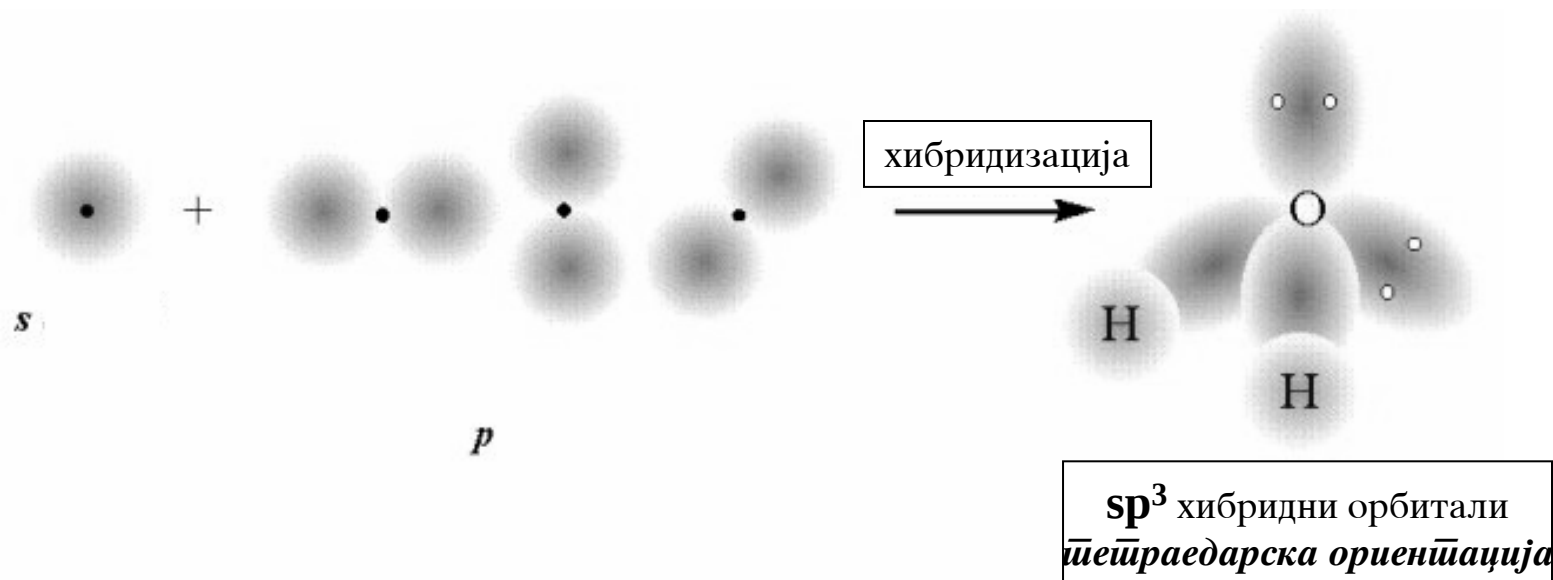
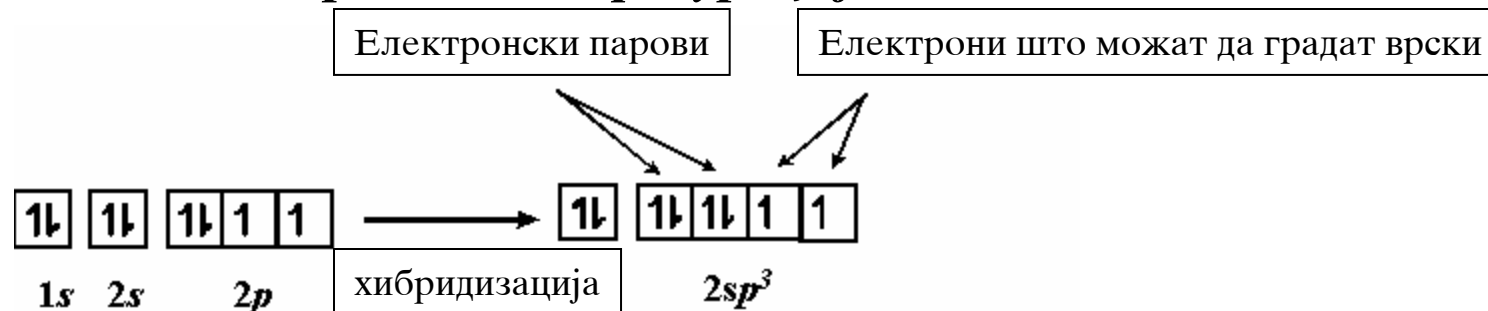
Електронска конфигурација на C:



Внимание! Ознаката sp^3 , покажува дека при хибридизацијата се измешале една s и три p орбитали. Според тоа, постојат четири идентични sp^3 орбитали, што се разликуваат само по својата ориентација.

H_2O вода

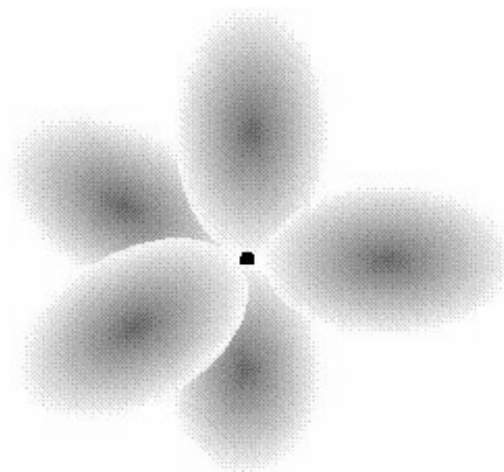
Електронска конфигурација на О:



Хибридизација што вклучува d орбитали

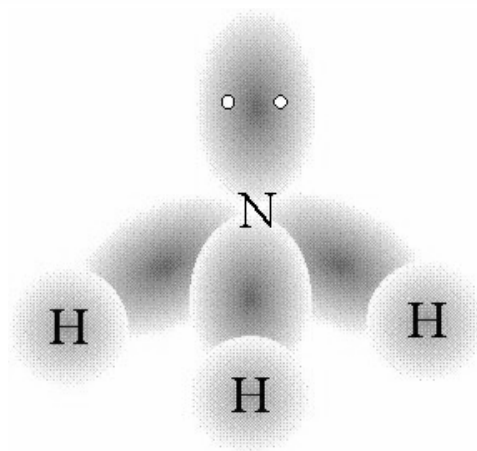
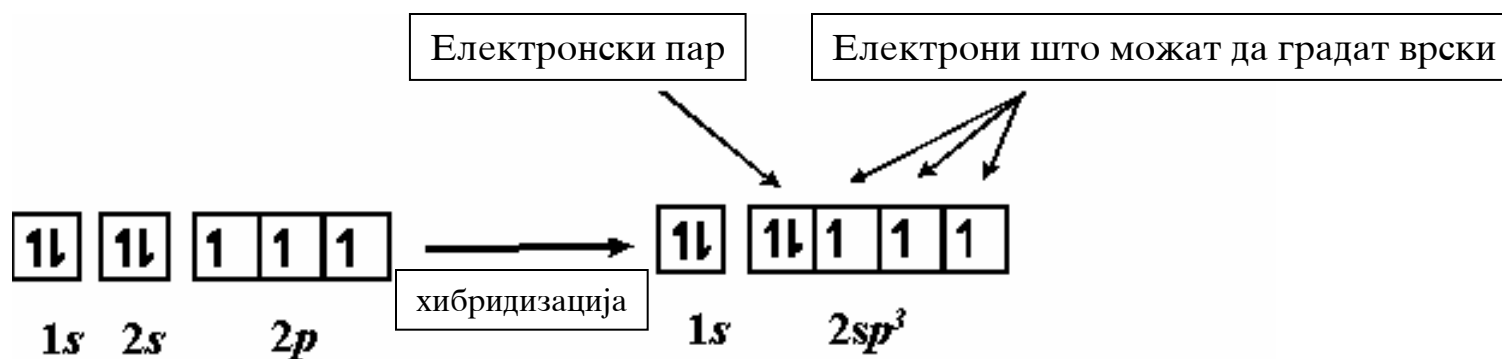
▪ PF_5 фосфор(V) флуорид

Електронска конфигурација на P:



sp^3d хибридни орбитали; геометрија на тригонална бипирамида

NH_3 амонијак Електронска конфигурација на N:



sp^3 хипридни орбитали; *тетраедарска ориентација*

<i>Геометрија на валентниот Хибридни орбитали</i>	<i>број на орбитали</i>	<i>хибридни орбитали</i>
Линеарна	2	sp
Тригонална планарна	3	sp^2
Тетраедарска	4	sp^3
Тригонална бипирамида	5	sp^3d
октаедарска	6	sp^3d^2