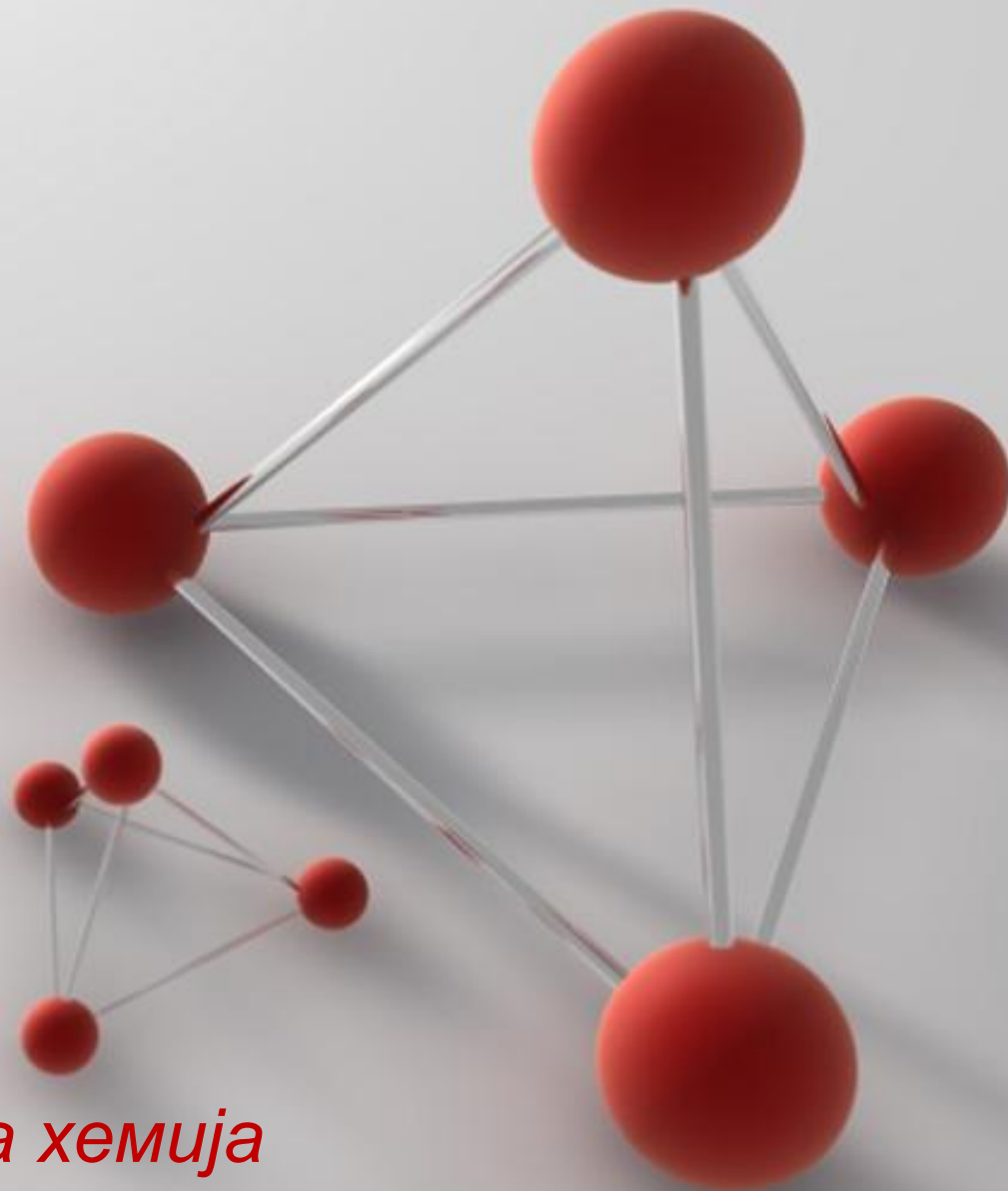


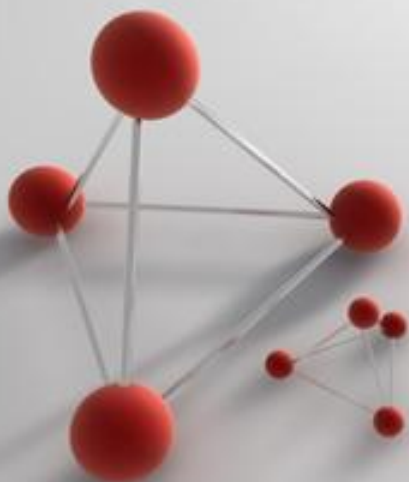


Теоретска неорганска хемија

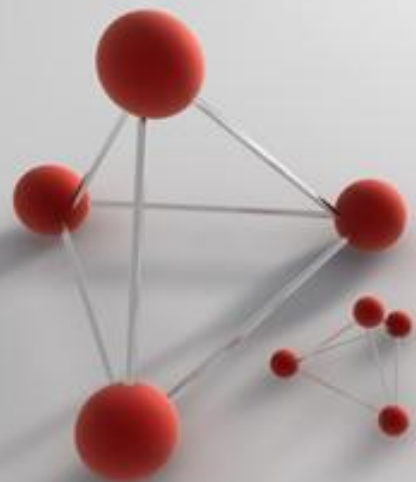
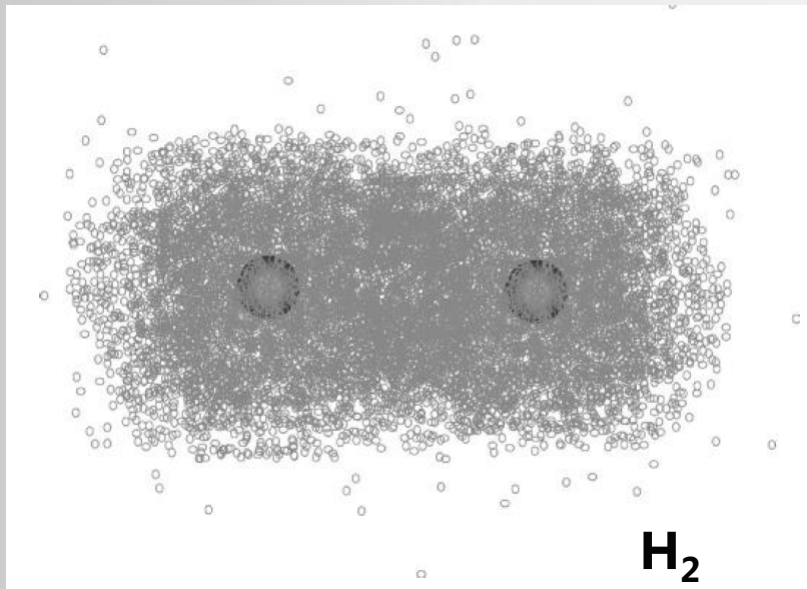
Глава 3: Молекулски форми
кај неорганските соединенија

W. Heitler, F. London, J. Slater, L. Pauling (1920)

ТЕОРИЈА НА ВАЛЕНТНИ ВРСКИ

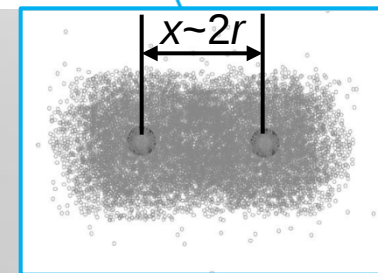
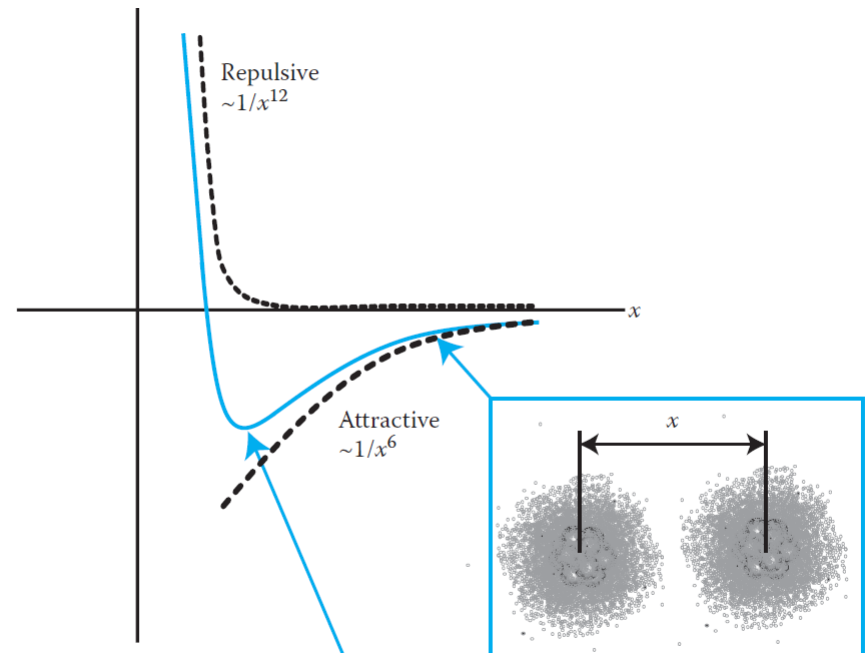


Ковалентно сврзување

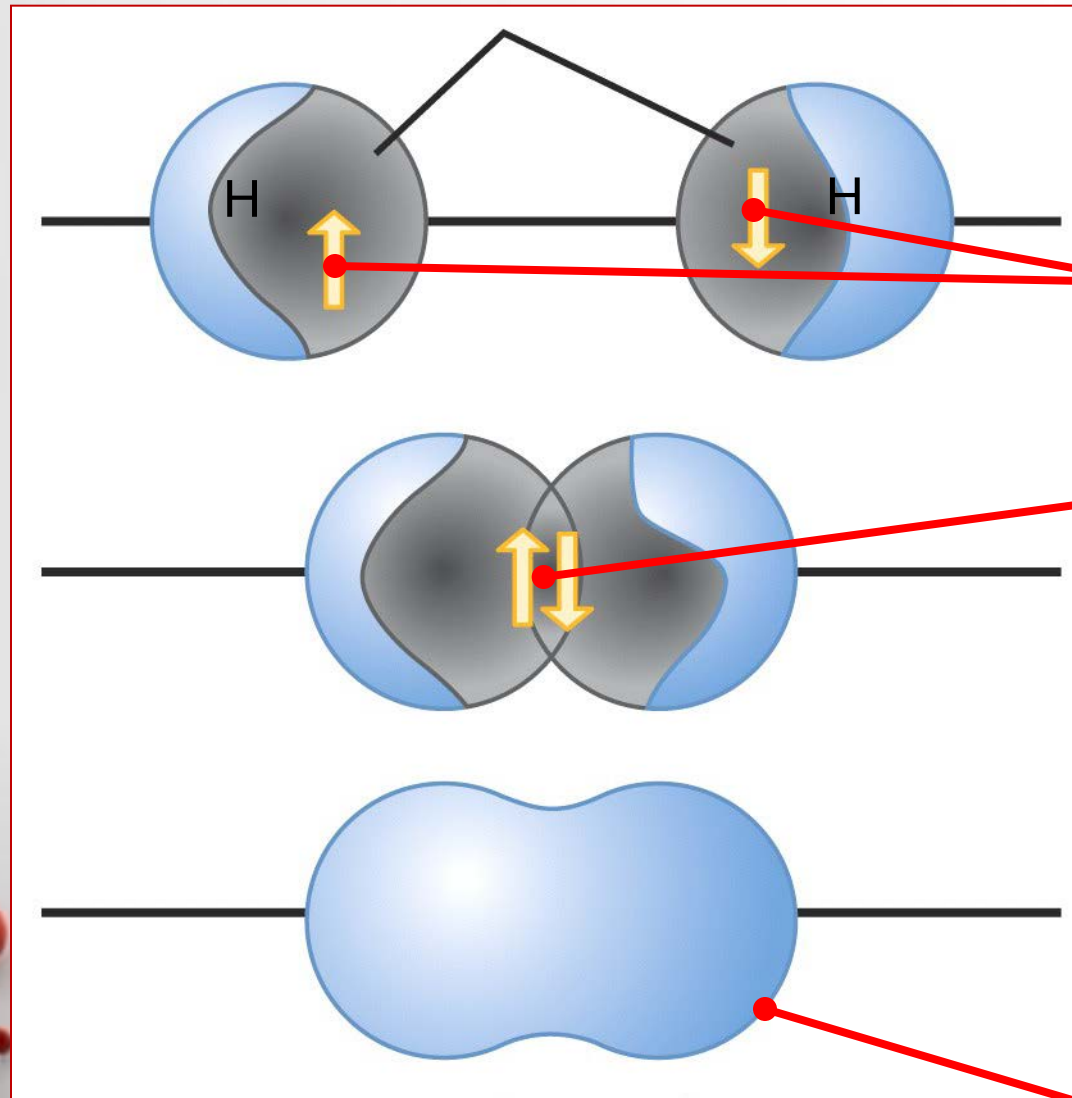


Привлечните сили доминираат при поголеми меѓусебни растојанија, додека, пак, одбивните сили, при помали меѓусебни растојанија.

Потенцијална енергија на интеракција



Атомски орбитали



Електроните
имаат спротивни
спинови.

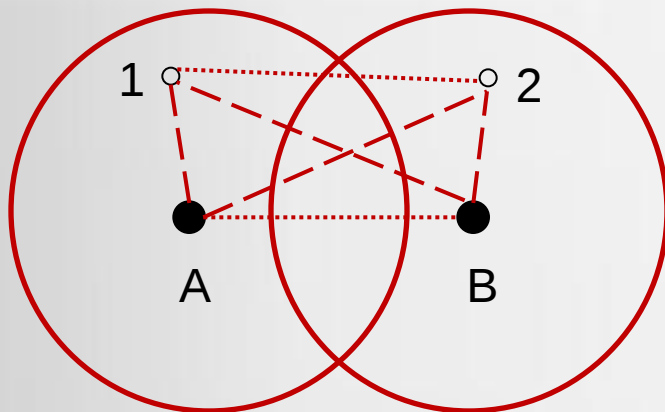
Препокривање
меѓу две
1s-орбитали

Електронски
облак над двата
атоми

Молекулска
орбитала

σ - врска

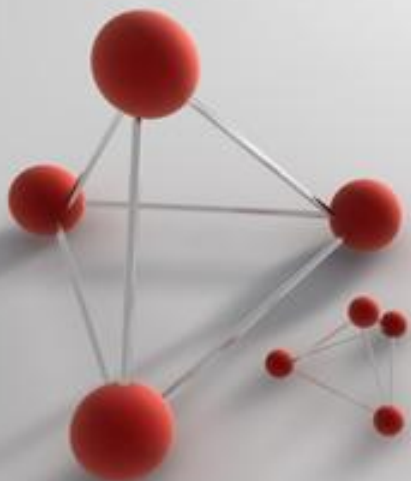
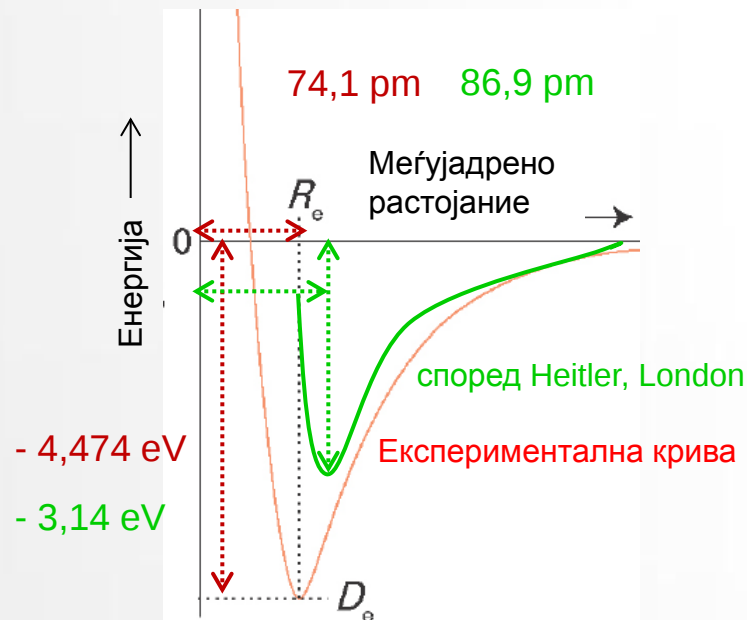




Електростатски интеракции

--- привлечен карактер

----- одбивен карактер

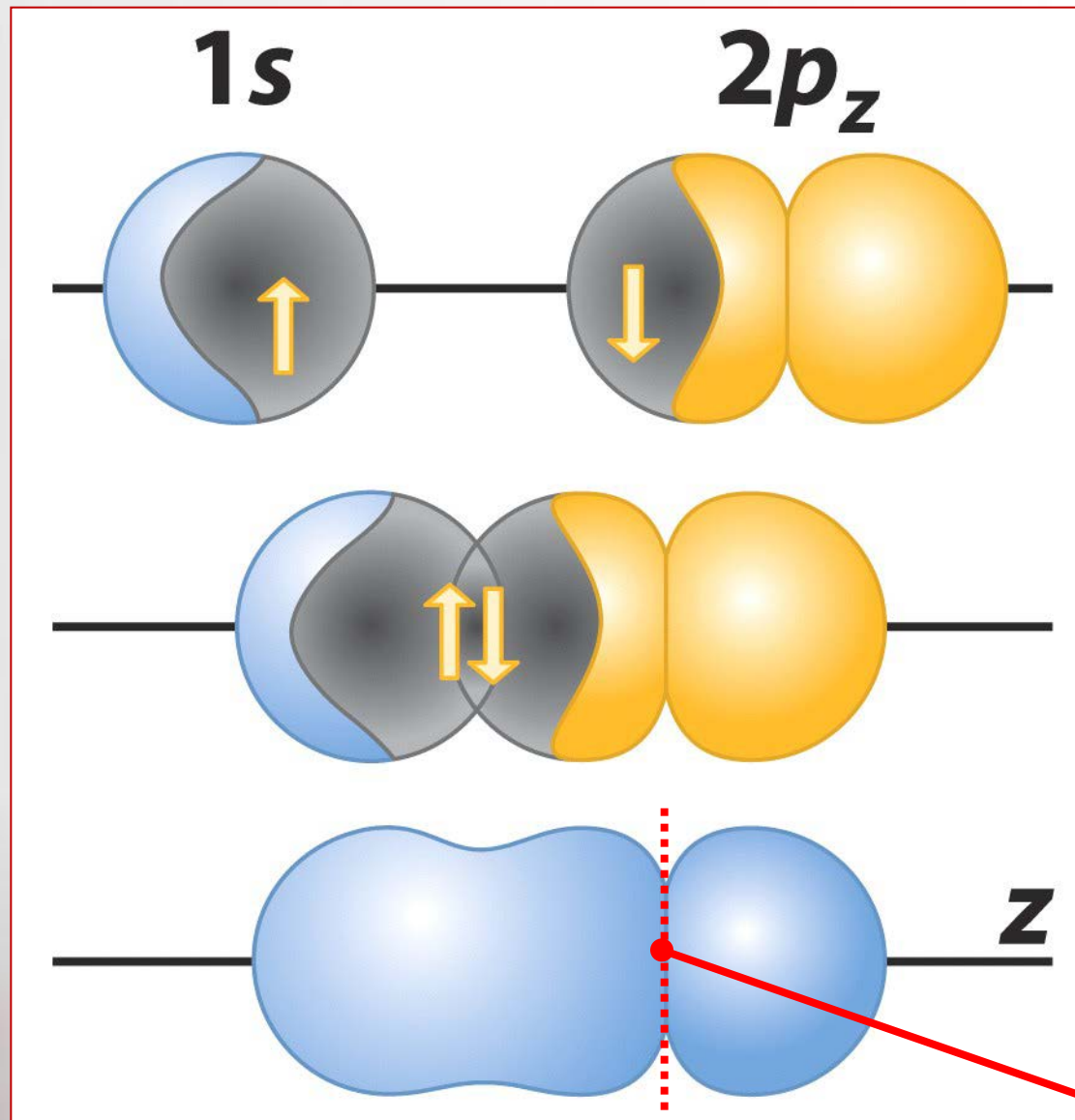


$$\psi = \psi_{A(1)} \cdot \psi_{B(2)} \quad r_{AB} \rightarrow \infty$$

$$\psi = \psi_{A(1)}\psi_{B(2)} + \psi_{A(2)}\psi_{B(1)} \quad (\text{Heitler, London})$$

$$\psi = \psi_{A(1)}\psi_{B(2)} + \psi_{A(2)}\psi_{B(1)} + \lambda\psi_{A(1)}\psi_{A(2)} + \lambda\psi_{B(1)}\psi_{B(2)}$$

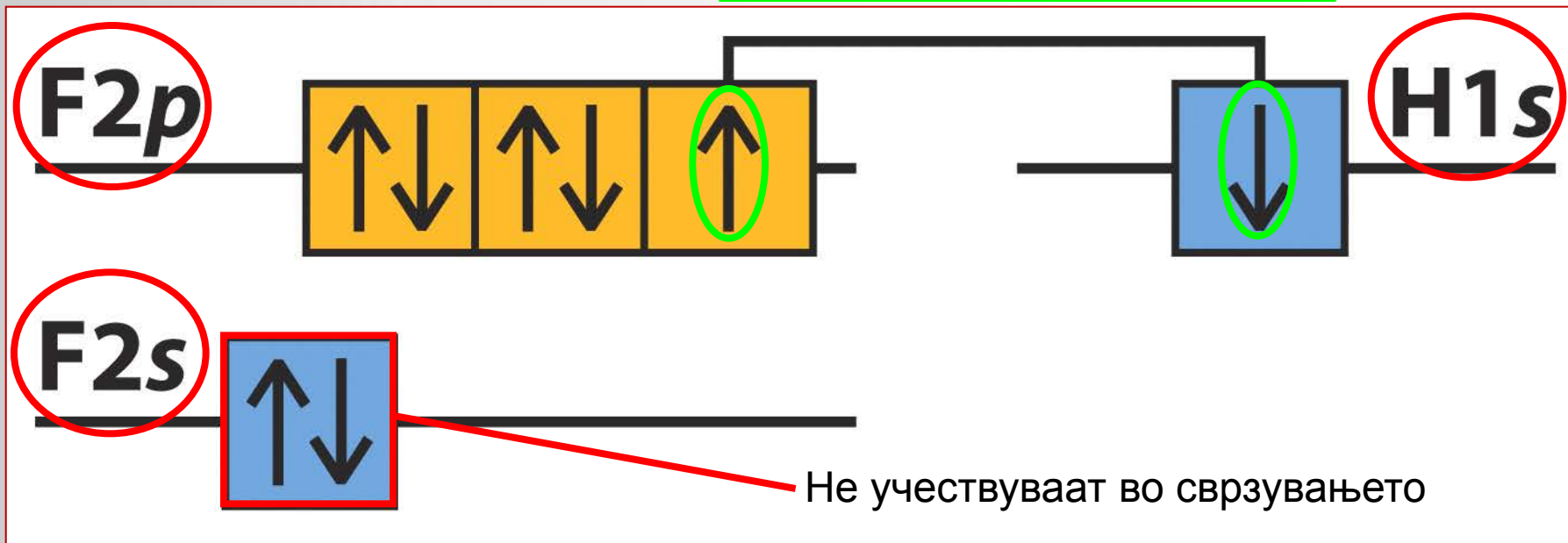
$$\lambda < 0$$



σ - врска

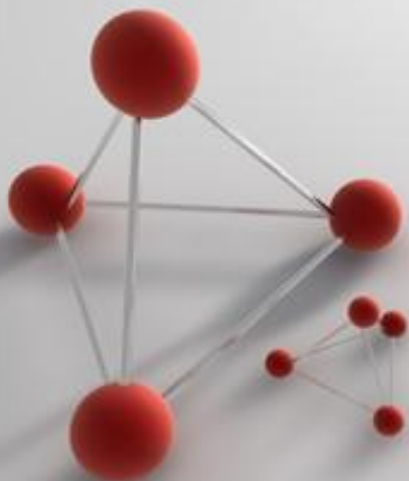
Јазолната рамнина останува.

Во σ -врската кај HF
учествуваат овие електрони.



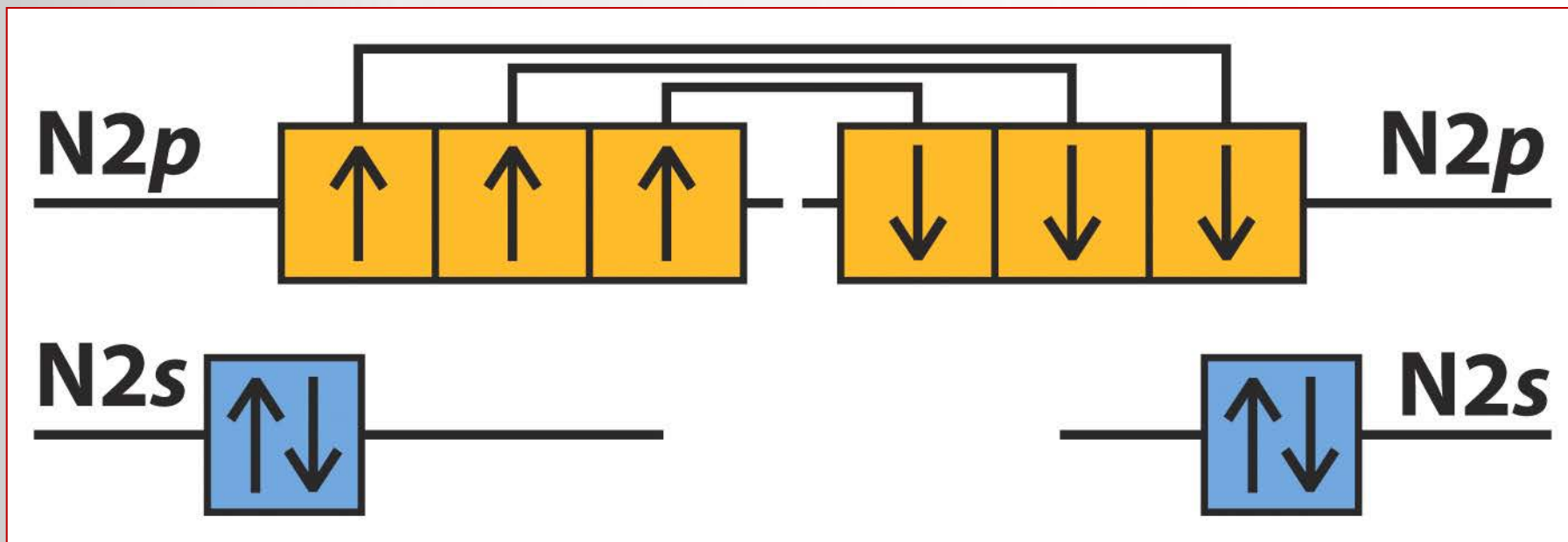
Флуороводород, HF

Атомски орбитали

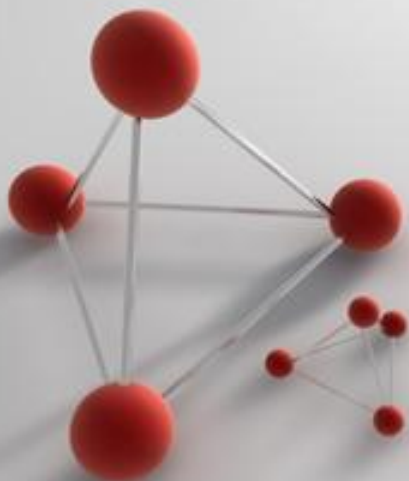


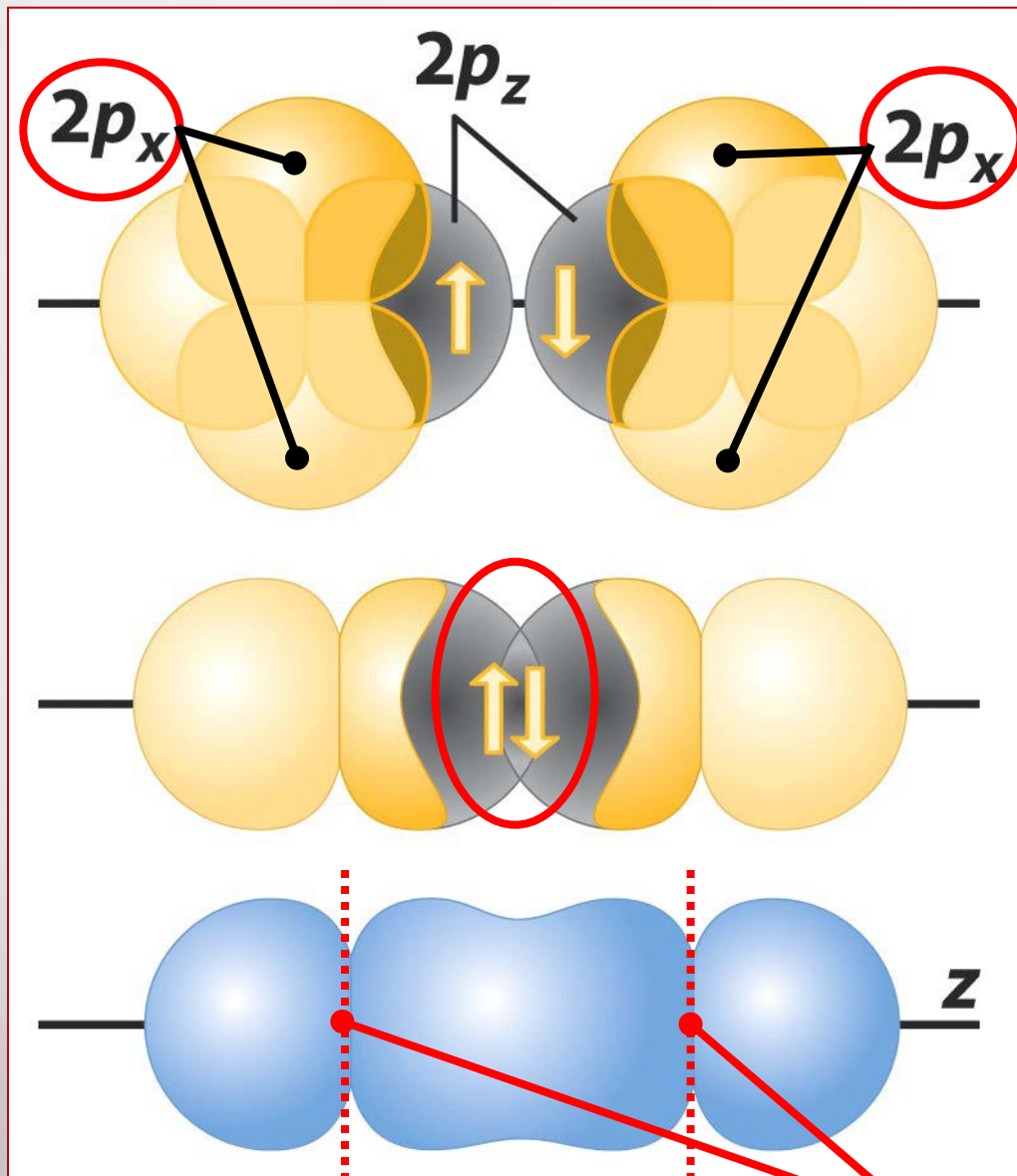
Ќе се образуваат три врски: една σ и две π .

Само една σ -врска може да се образува меѓу два атоми.



Азот, N_2





Не учествуваат
во образувањето
на σ -врска

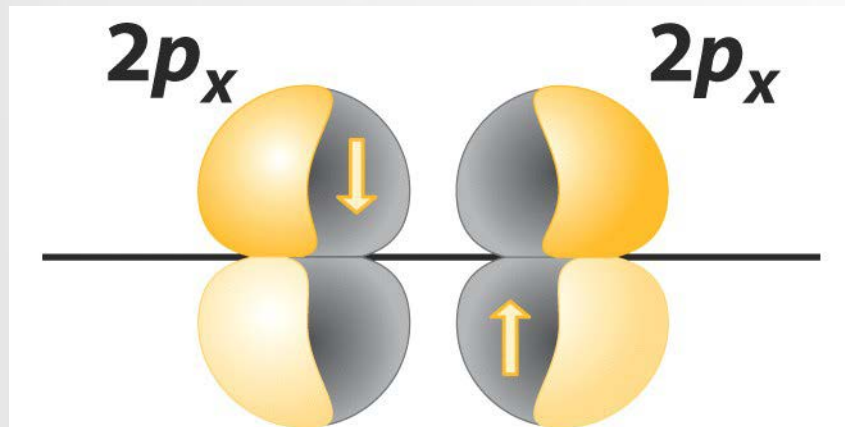
Атомски
орбитали

Област на
препокривање

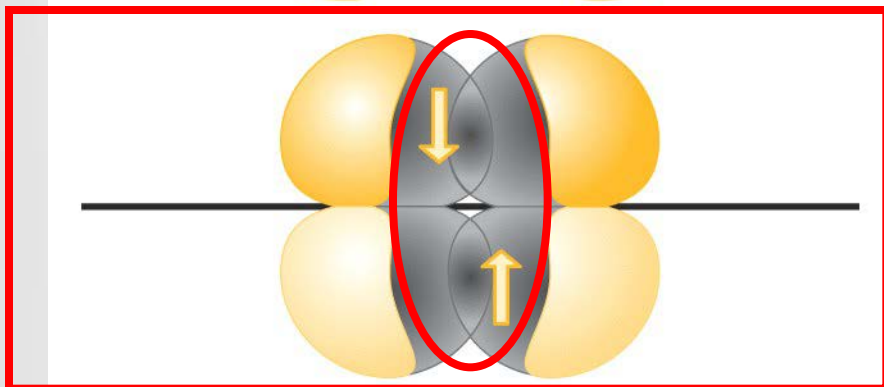
Молекулска
орбитала

Јазолни рамнини

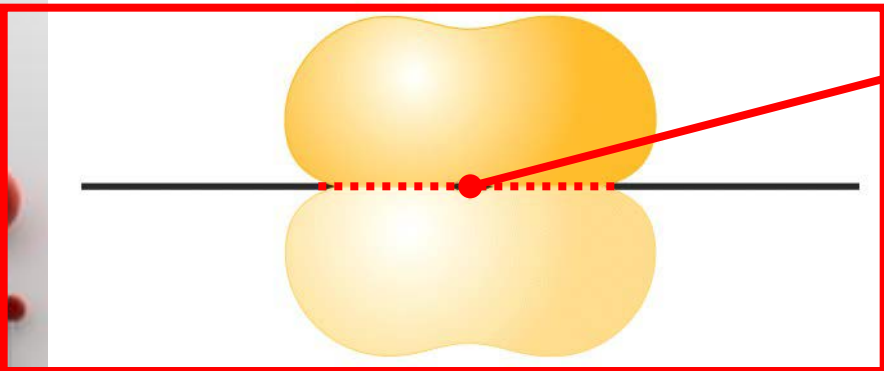
σ - врска



Атомски орбитали



Област на
препокривање



Јазолна рамнина

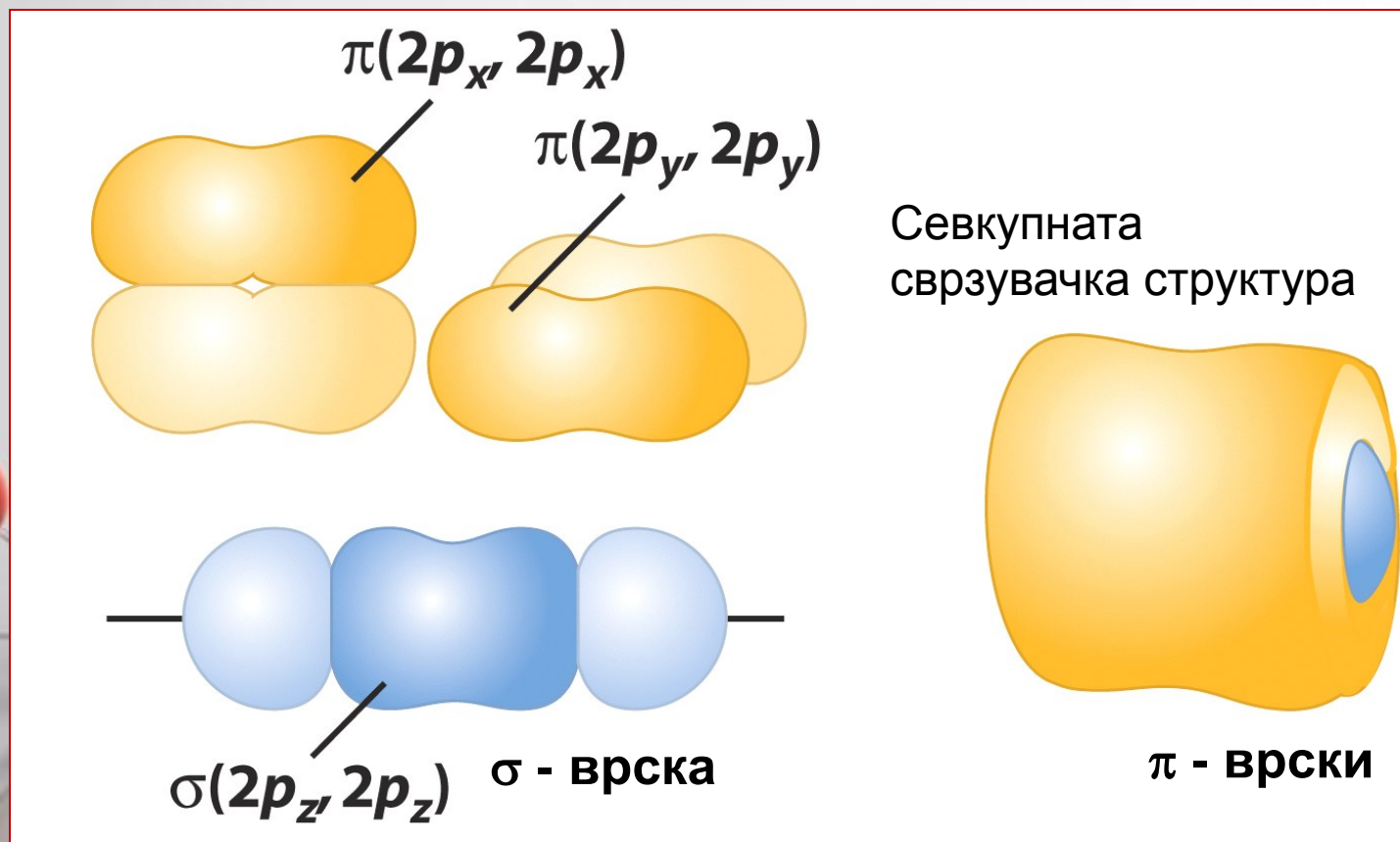
Молекулска орбитала

π - врска

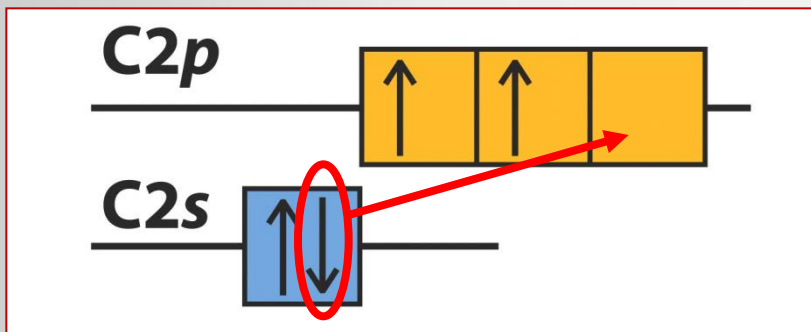
Сврзување кај N_2

една σ -врска

две π -врски



Атомски орбитали

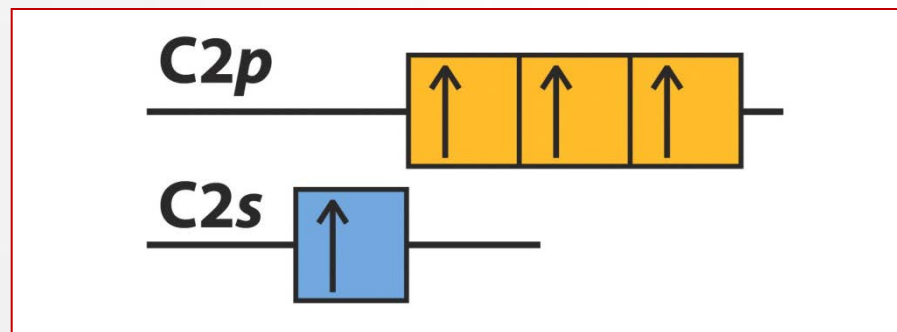


Јаглерод, $[\text{He}] 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$

Според овој приказ,
два неспарени електрони
се наоѓаат на располагање
за образување на врски со
други атоми.



Претпоставка:
 CH_4 не постои.

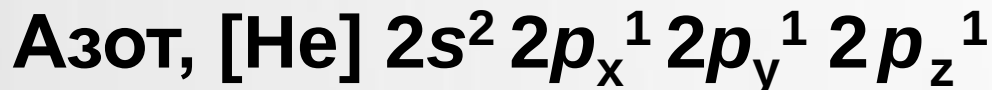
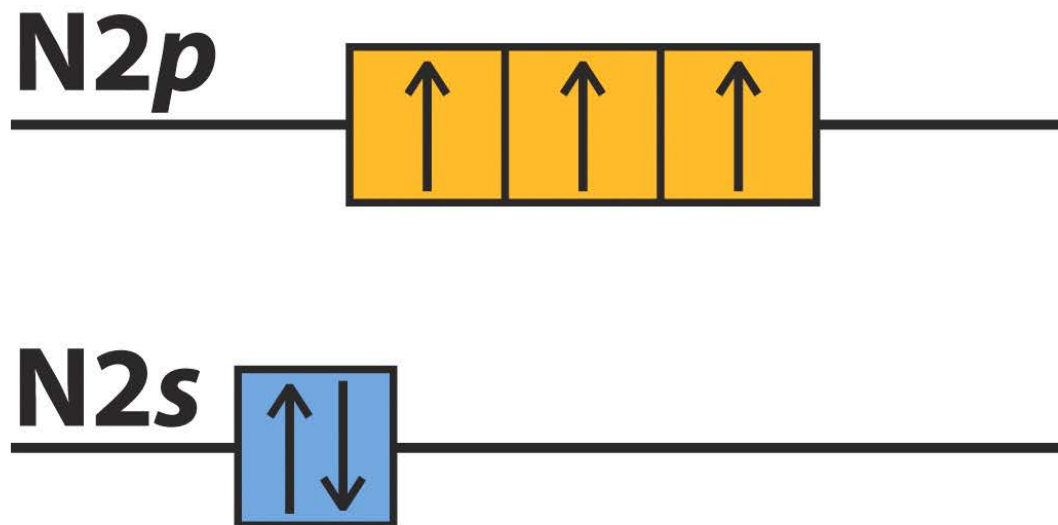


Јаглерод, $[\text{He}] 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$

Според овој приказ,
четири неспарени електрони
се наоѓаат на располагање
за образување на врски со
други атоми.

Претпоставка:
 CH_4 постои.

Се наоѓа во природата



Според овој приказ, три неспарени електрони се на располагање за образување на врски со други атоми.

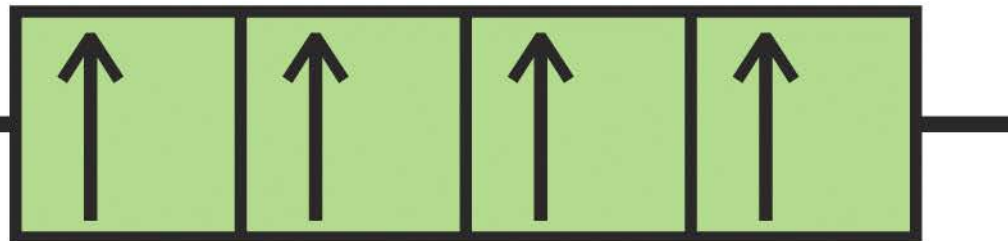
Претпоставка: NH_3 постои.

Постои во природата

За да се објасни сврзувањето кај NH_3 не е потребно да се разгледуваат електронски премини.



$C2sp^3$



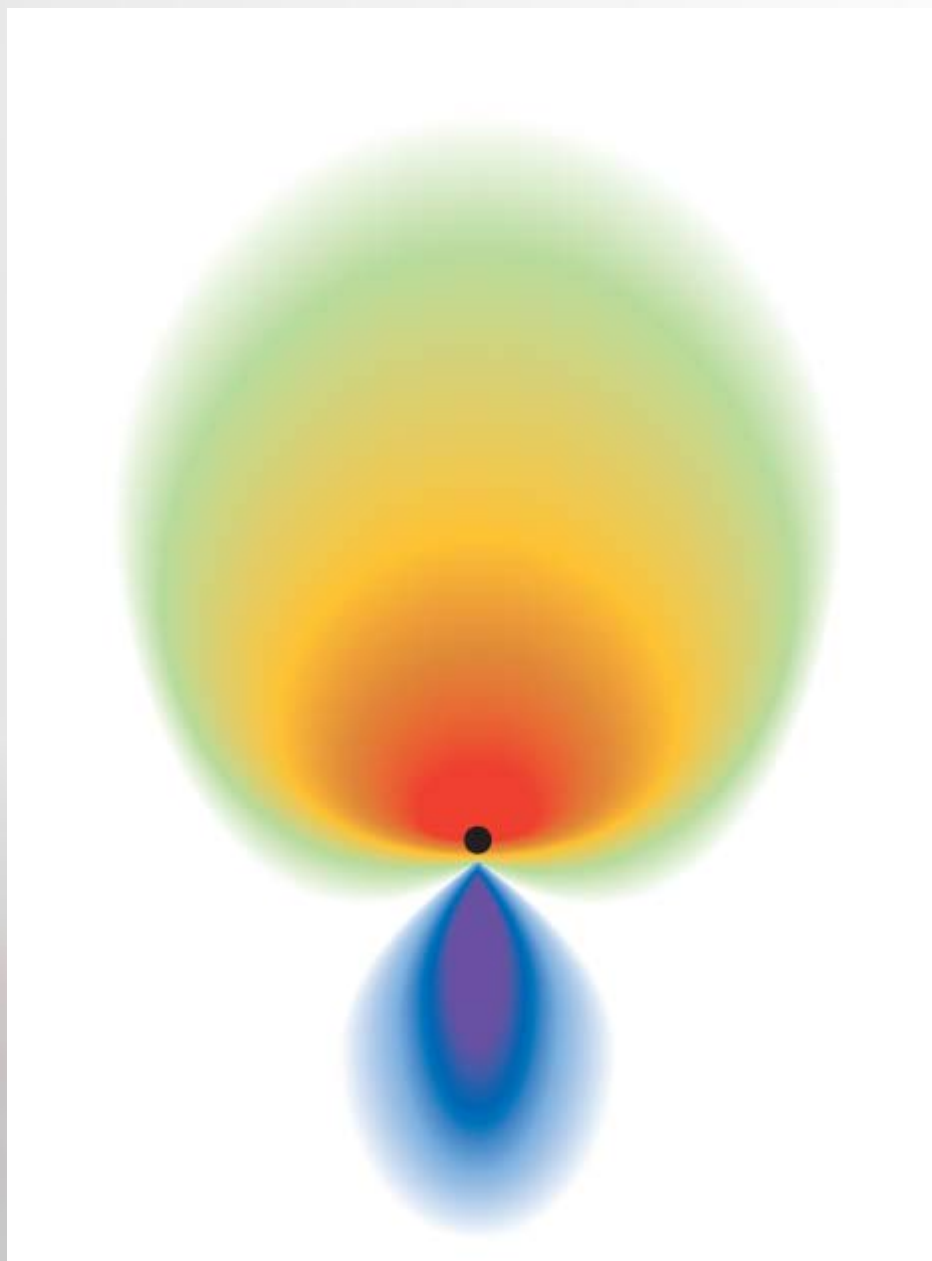
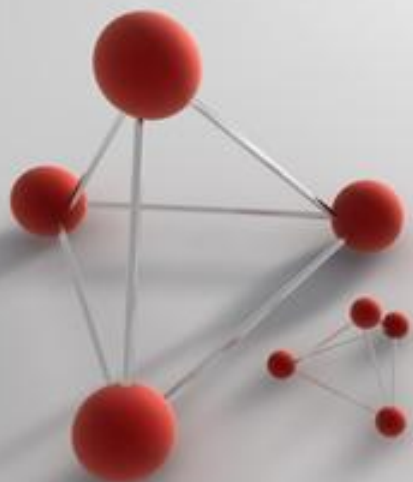
sp^3 хибридизиран јаглороден атом

една s -орбитала се
меша со три p -орбитали

Сите четири електрони
имаат иста енергија.

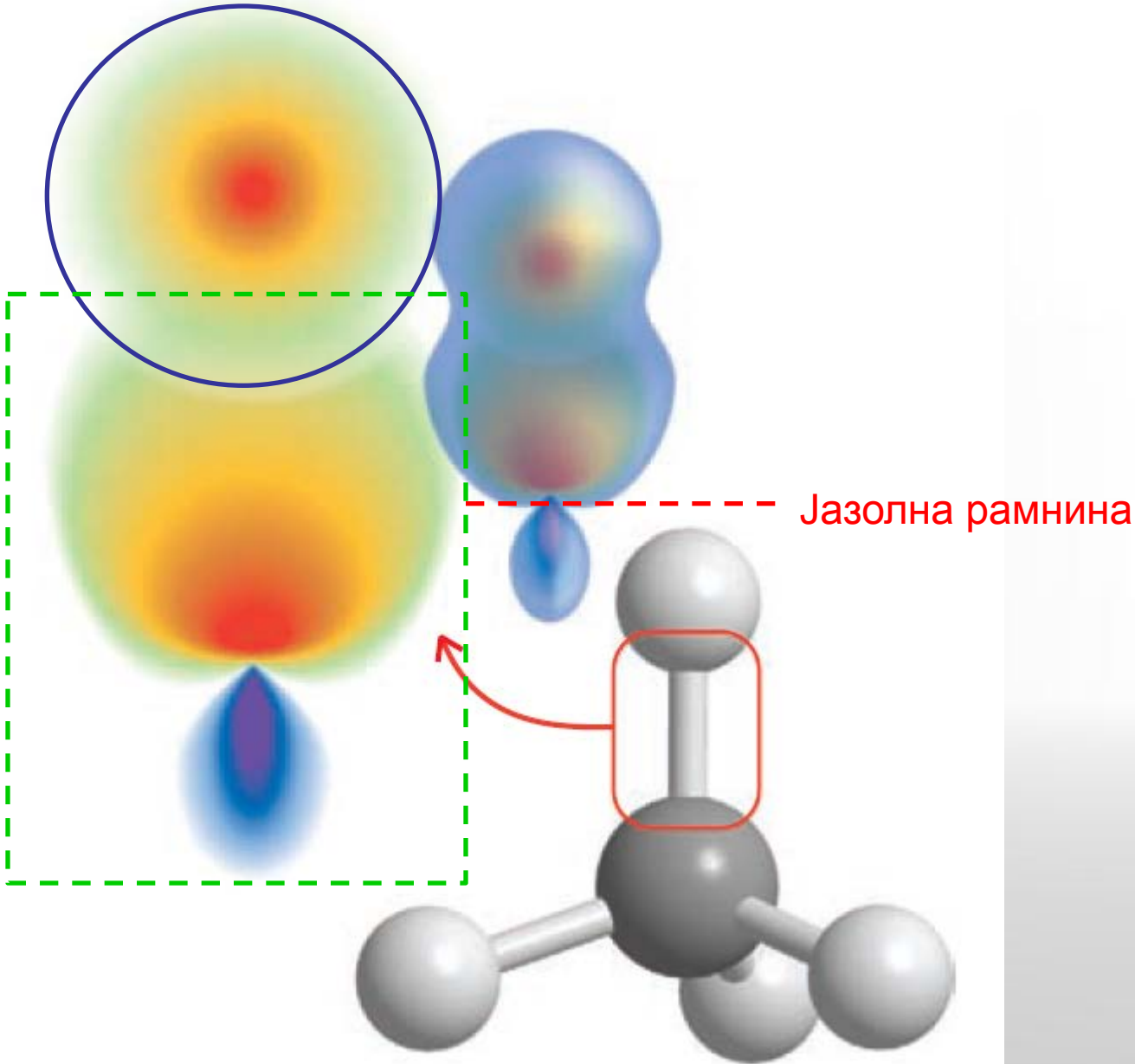


sp^3 хибридна орбитала

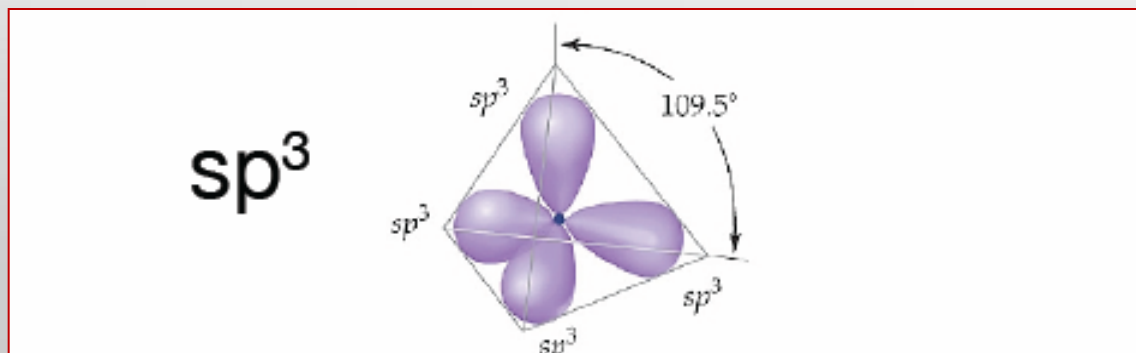
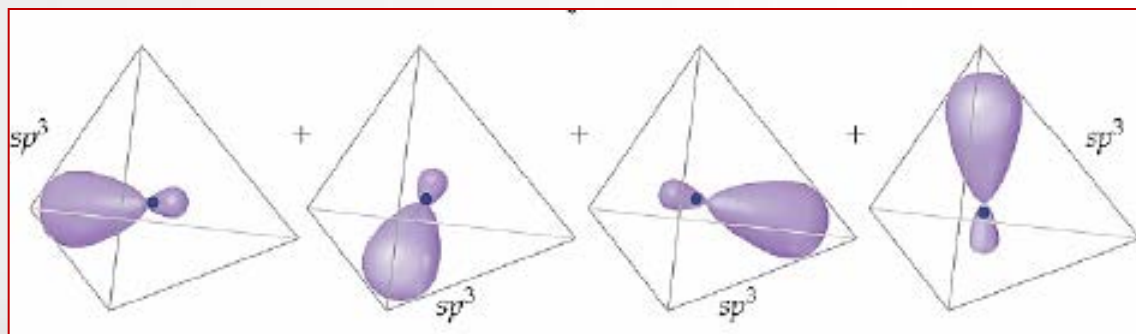
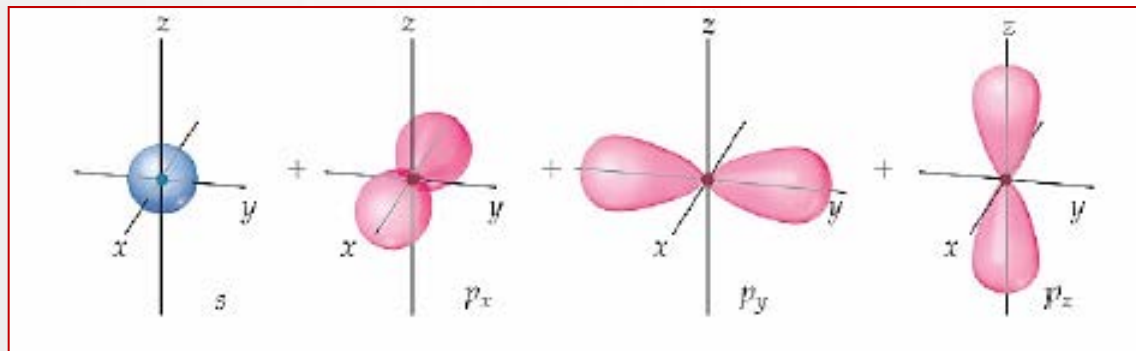
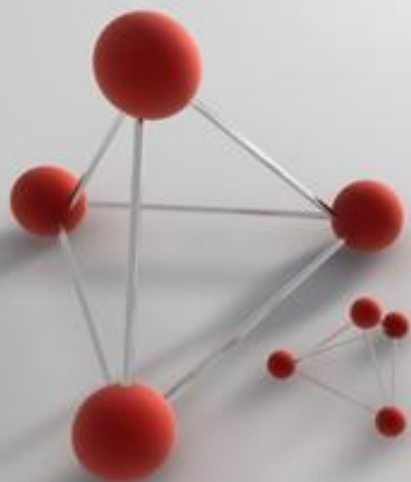
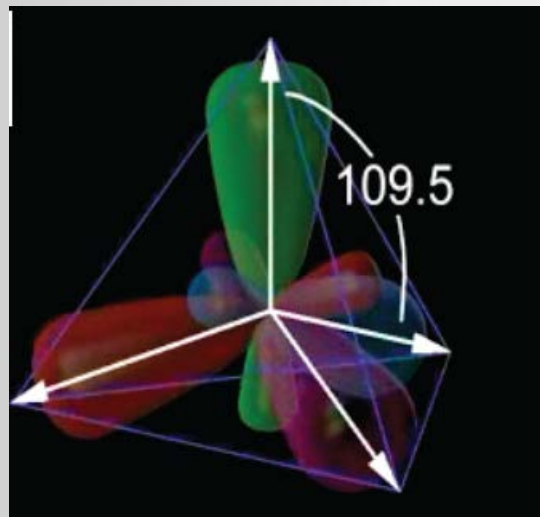


H 1s орбитала

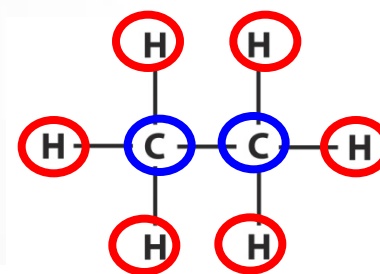
C $2sp^3$ орбитала



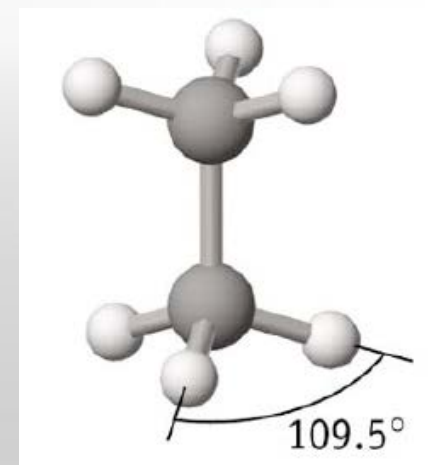
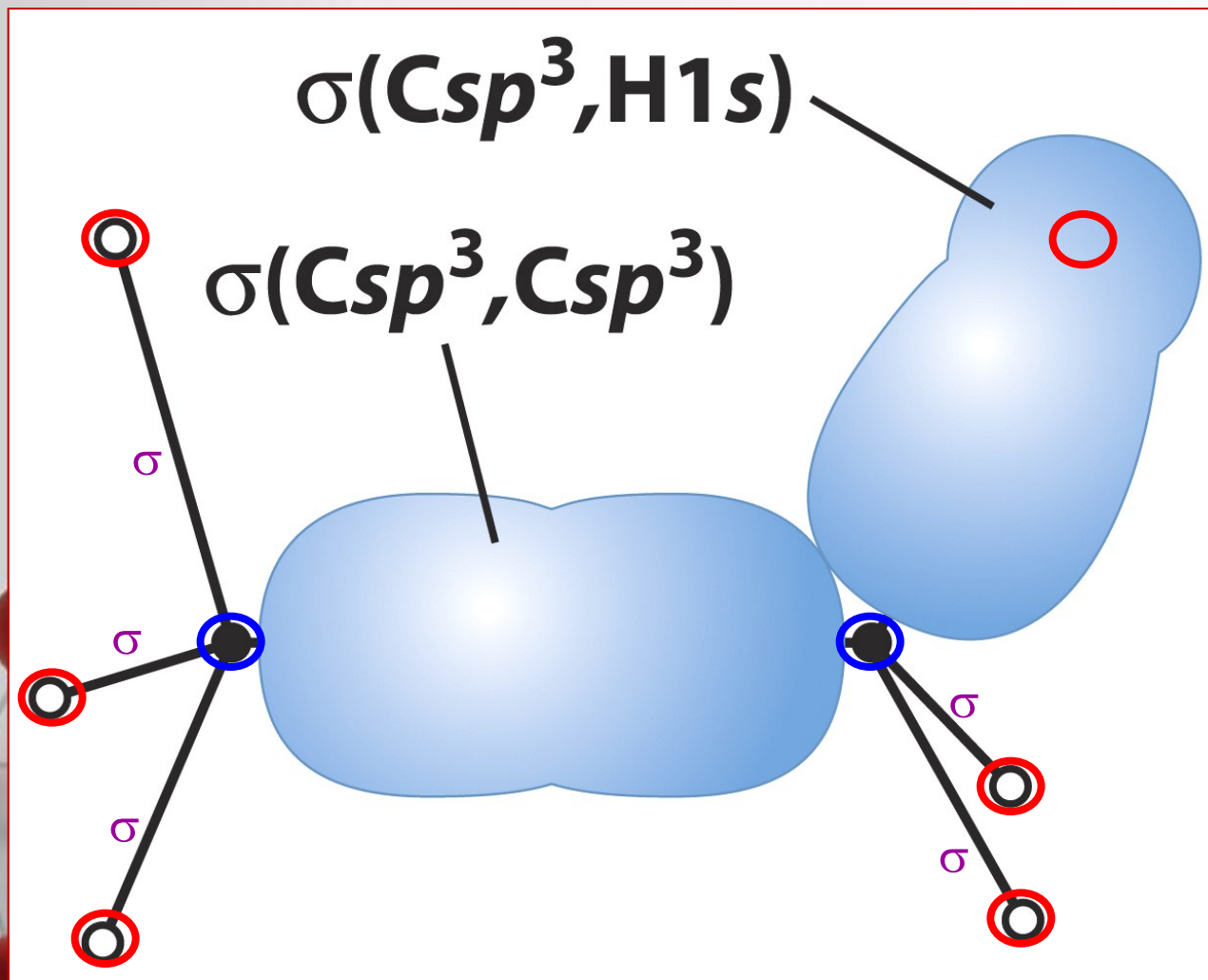
sp^3 хибридизација



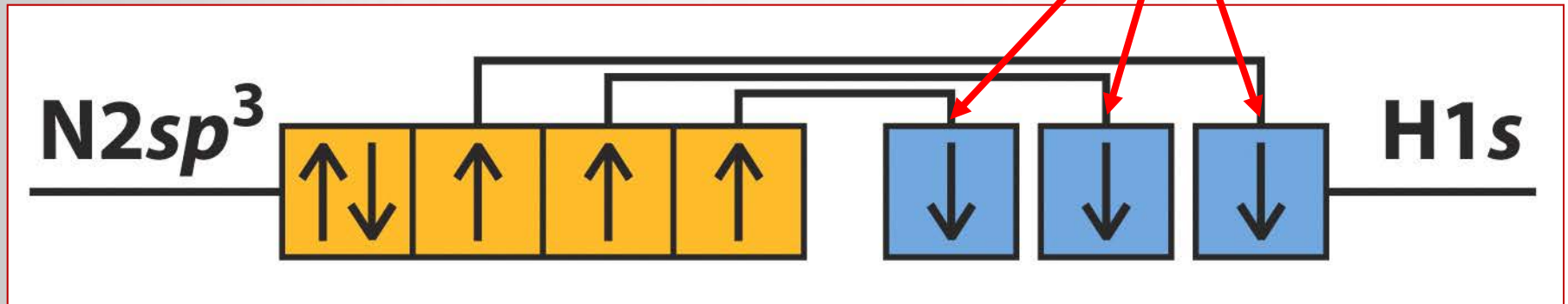
Сврзување кај C_2H_6



Етан, CH_3CH_3



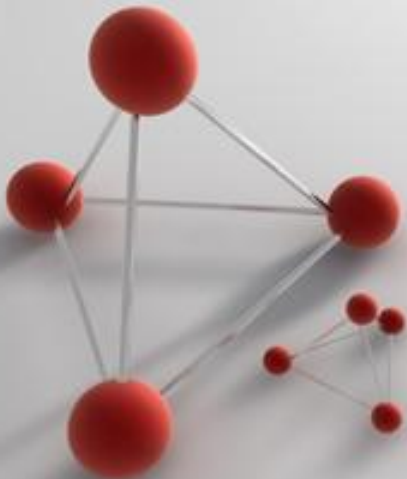
Три различни водородни атоми



Амонијак, NH_3

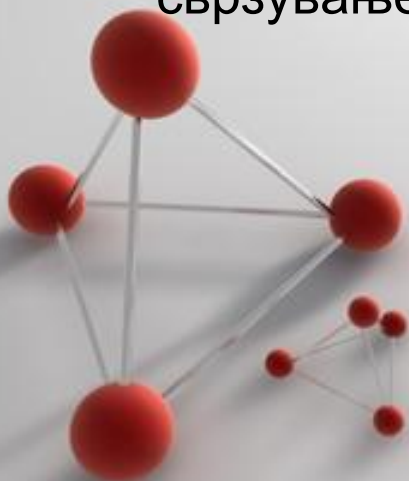
Се образуваат четири sp^3 хибридни орбитали

Само три орбитали учествуваат во сврзувањето, една орбитала веќе содржи два електрони.



Хемиско сврзување кај H_2O според теоријата на валентни врски

- ✓ За каков вид на хибридизација на кислородниот атом се работи?
- ✓ Скицирај го енергетскиот дијаграм на АО од валентниот слој на кислородниот атом пред и по хибридизацијата !
- ✓ Скицирај ги орбиталите кои учествуваат во хемиското сврзување? Кои врски се образуваат и како?



Концепт за хибридизација на орбиталите (предложен од Л. Полинг)

Концепт за хибридизација на орбиталите (предложен од Л. Полинг)

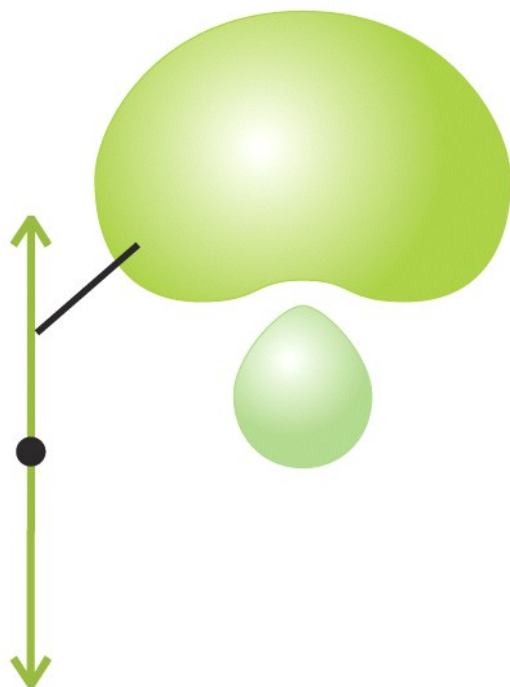
- ✓ Атомските орбитали се бранови функции (опишани со соодветни математички функции)
- ✓ Хибридна орбитала – математичка комбинација на две или повеќе атомски орбитали која учествува во хемиското сврзување
- ✓ Ориентацијата на хибридната орбитала околу централниот атом соодветствува на делот со зголемена електронска густина според VSEPR
- ✓ Формата на хибридната орбитала е таква што овозможува што е можно поголемо препокривање со други атомски орбитали. Поголемо препокривање, посилна врска
- ✓ Со препокривање на хибридните орбитали се образува σ -врска.



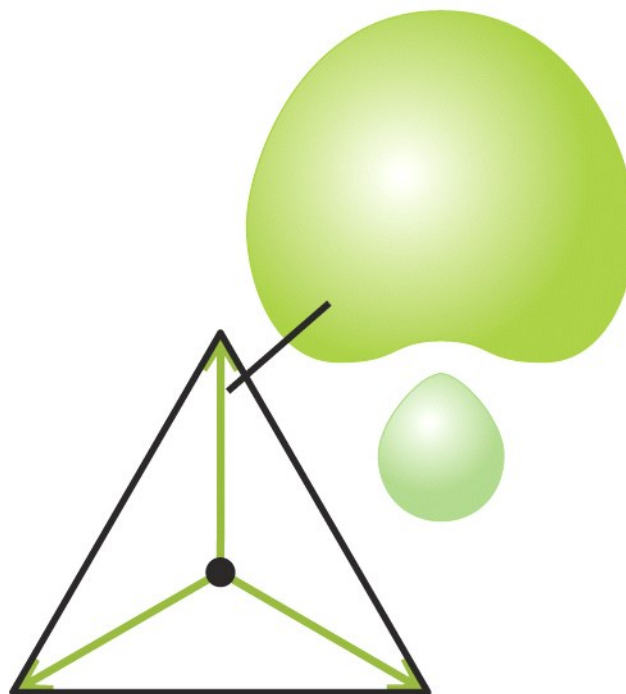
линеарна

триаголно планарна

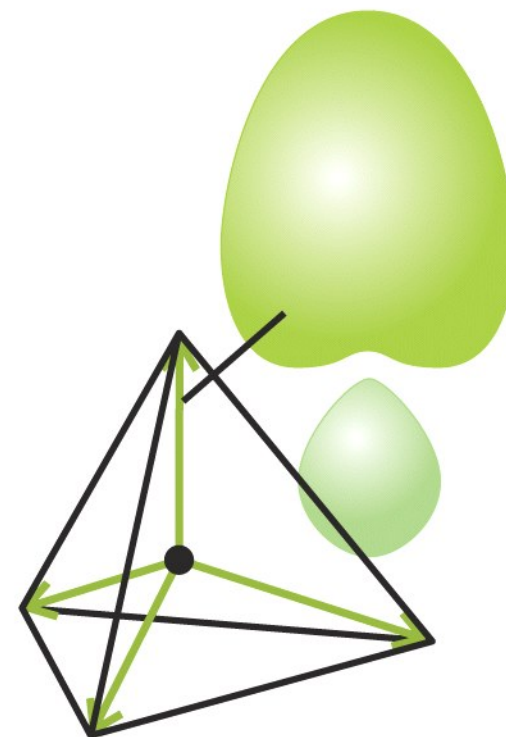
тетраедарска



sp



sp^2



sp^3

Две хибридни орбитали

- учествуваат една s и една p орбитала
- две p нехибридизирани

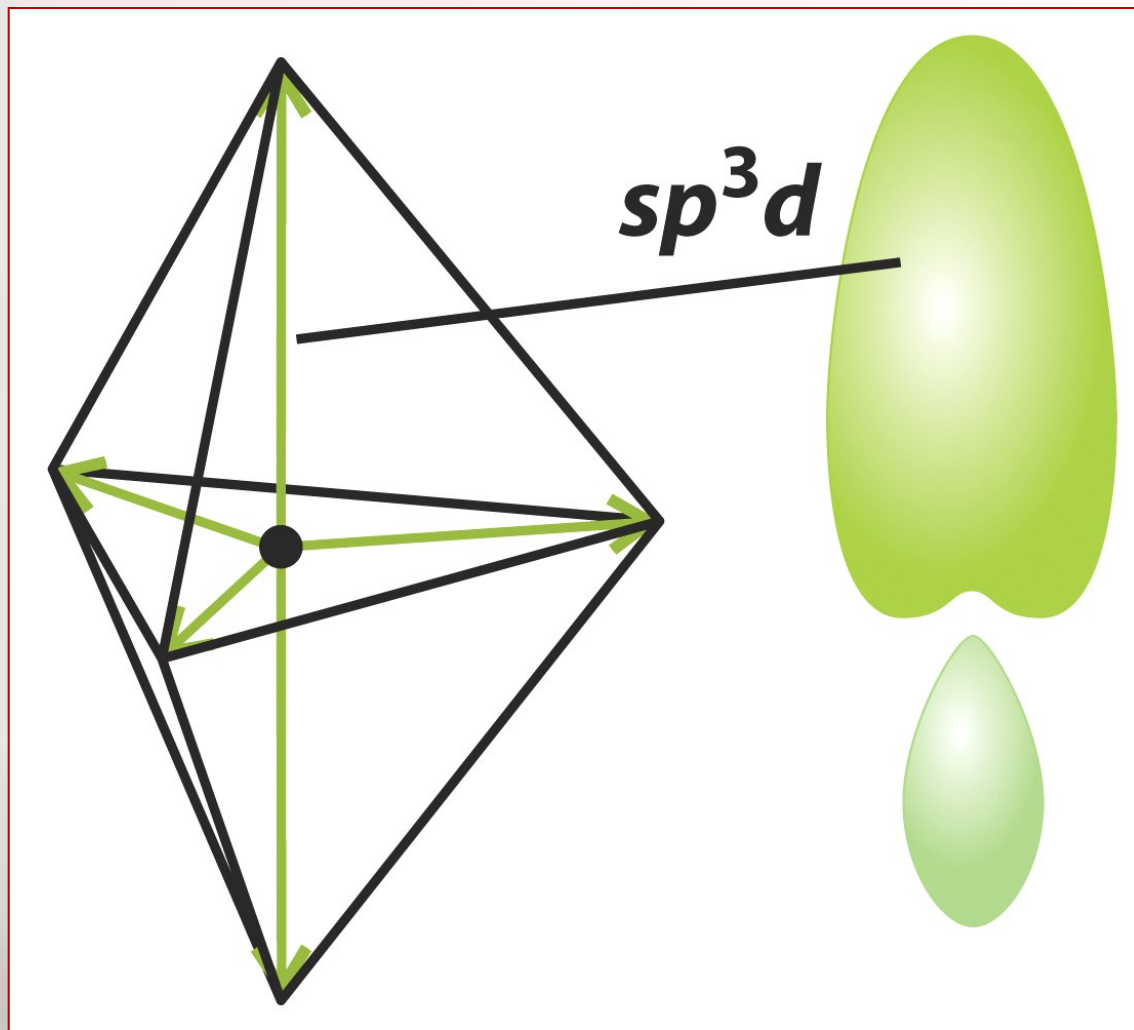
Три хибридни орбитали

- учествуваат една s и две p орбитали
- една p нехибридизирана

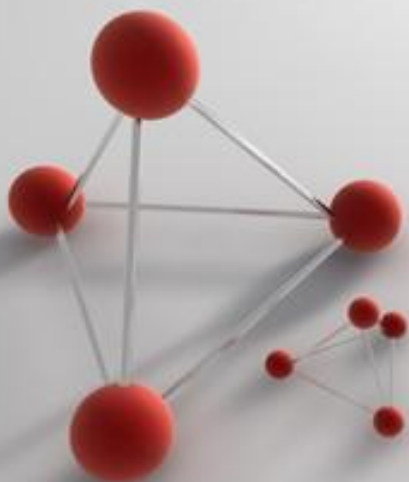
Четири хибридни орбитали

- учествуваат една s и три p орбитали
- нема p нехибридизирани

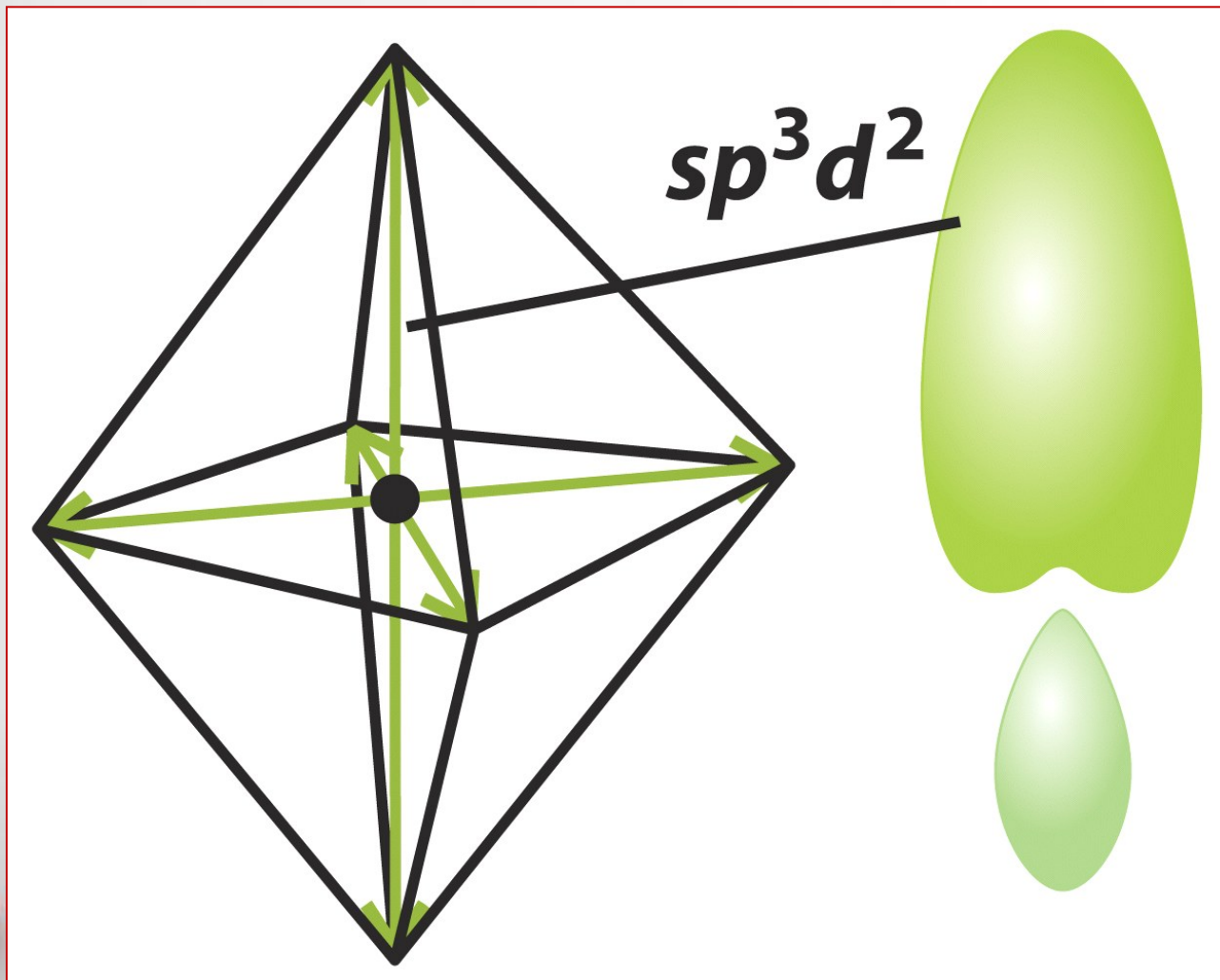
Триаголно-бипирамидална



Пет хибридни орбитали
- участвуват една s , три p и една d орбитала



октаедарски



Се образуваат шест хибридни орбитали
- учествуваат една s , три p и две d

Електронски
распоред

Број на
атомски орбитали

Хибридизација на
централниот атом

Број на
хибридни орбитали

линеарен

2

sp

2

триаголно-планарен

3

sp^2

3

тетраедарски

4

sp^3

4

триаголно-бипирамидален

5

sp^3d

5

октаедарски

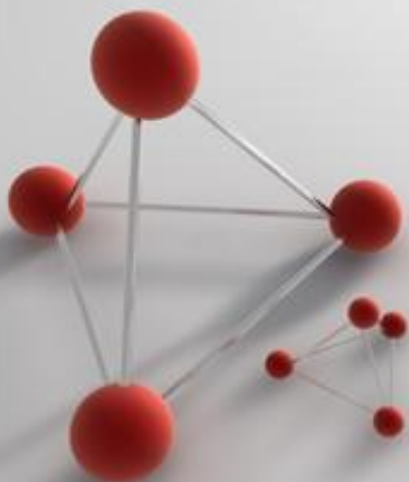
6

sp^3d^2

6

Бројот на орбитали се запазува при хибридизацијата.

Број на орбитали кои учествуваат во хибридизацијата = број на образувани хибридни орбитали



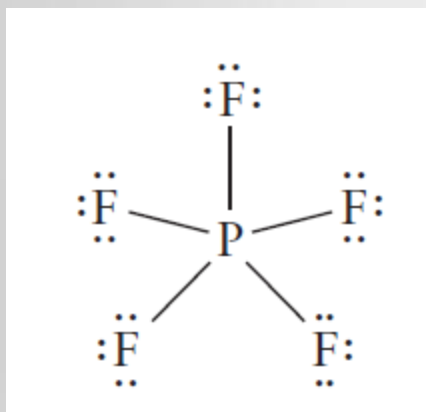
ЗАДАЧА: Да се објасни:

а) електронската распределба околу централниот атом,

б) формата на молекулата и

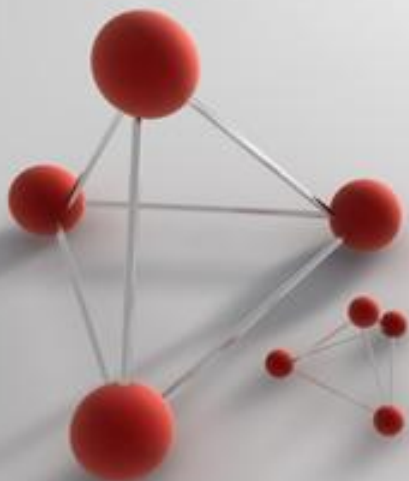
в) хибридизацијата на централниот атом во PCl_5

Луисова структура:



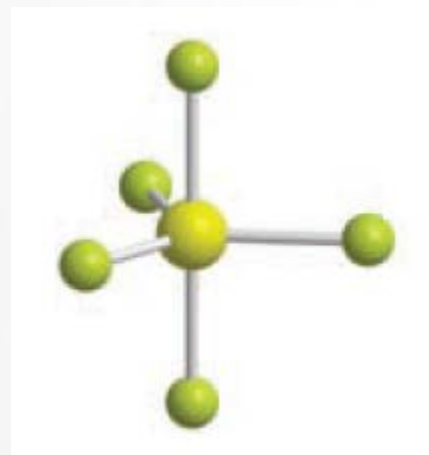
Распределба на електронската густина околу централниот атом:

Триаголно-бипирамидална



Форма на молекулата:

Триаголна бипирамида

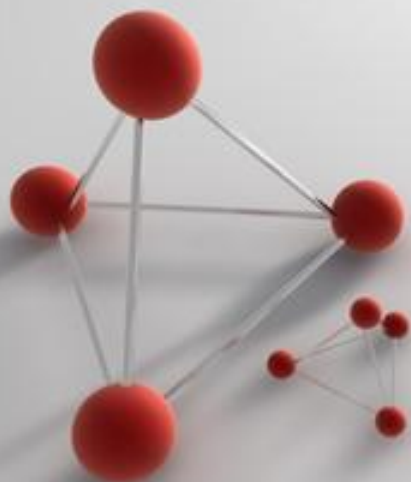
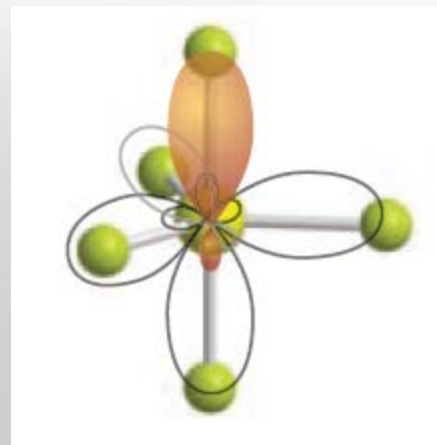


Број на хибридни орбитали

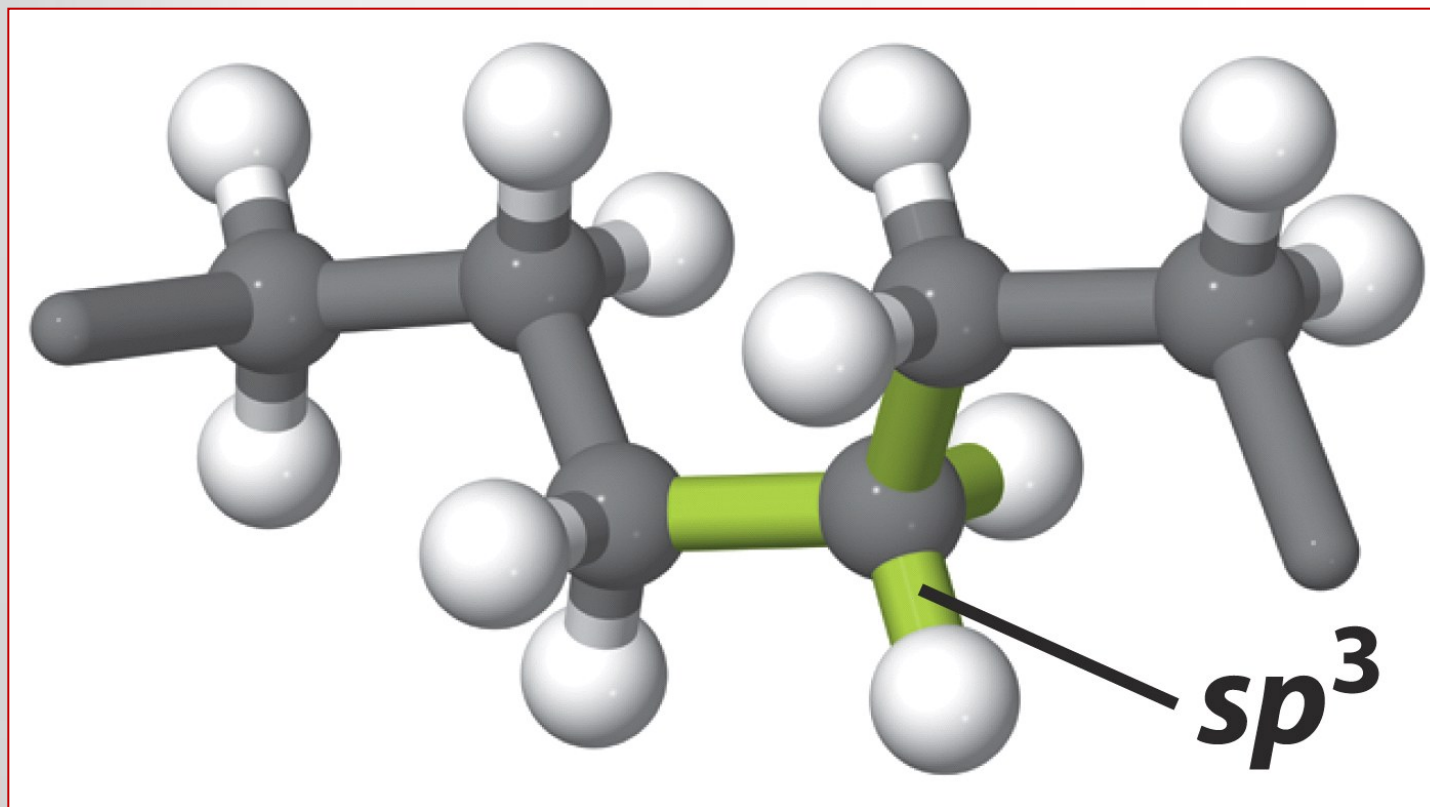
5

Вид на хибридизација:

sp^3d хибридизација



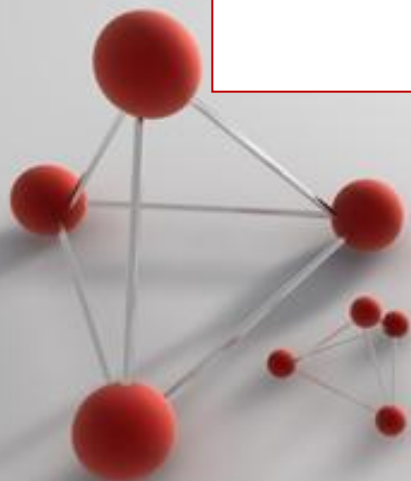
Структура на полиетилен



Секој јаглероден атом е sp^3 хибридизиран.

Сите агли на врските се блиску до 109.5° .

Само σ -врски се присутни.



Повеќекратни врски ?

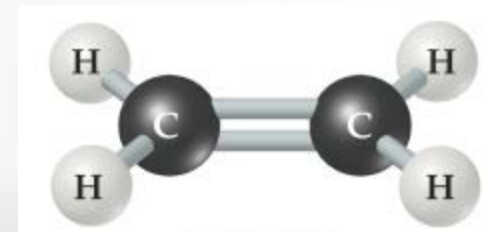
Како теоријата на валентни врски ги опишува повеќекратните врски?

- ✓ Повеќекратните ковалентни врски (двојна и тројна) се образуваат кога доаѓа до препокривање на повеќе од една орбитала од секој атом.
- ✓ Во дополнителното препокривање учествуваат НЕХИБРИДИЗИРАНИ атомски орбитали. Тоа препокривање е познато како π -врска.

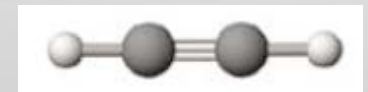
Единечна врска = σ врска

Двојна врска = σ врска + π врска

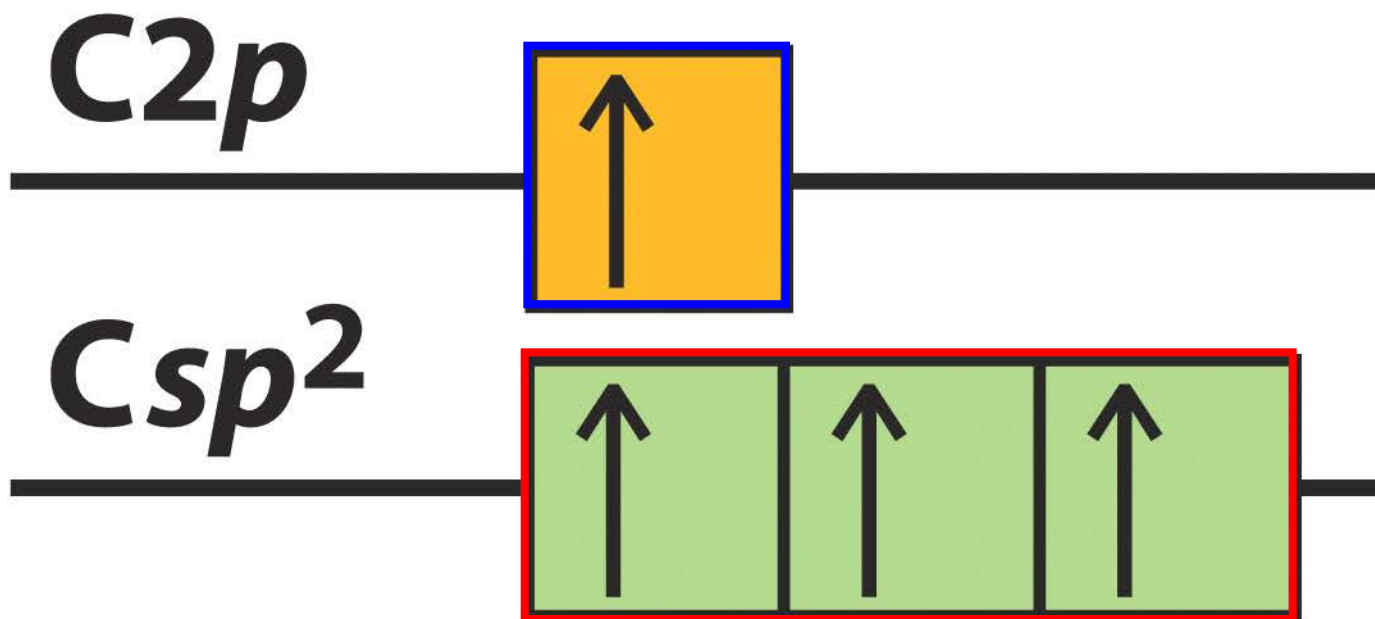
Тројна врска = σ врска + π врска + π врска



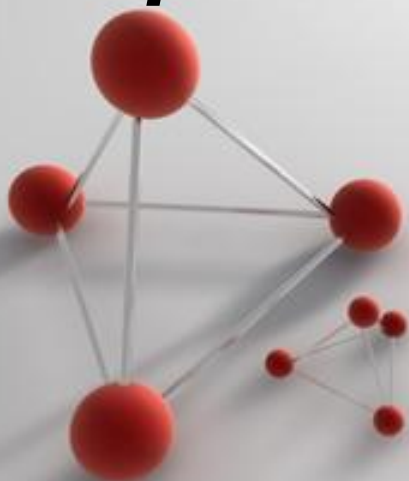
етен



етин



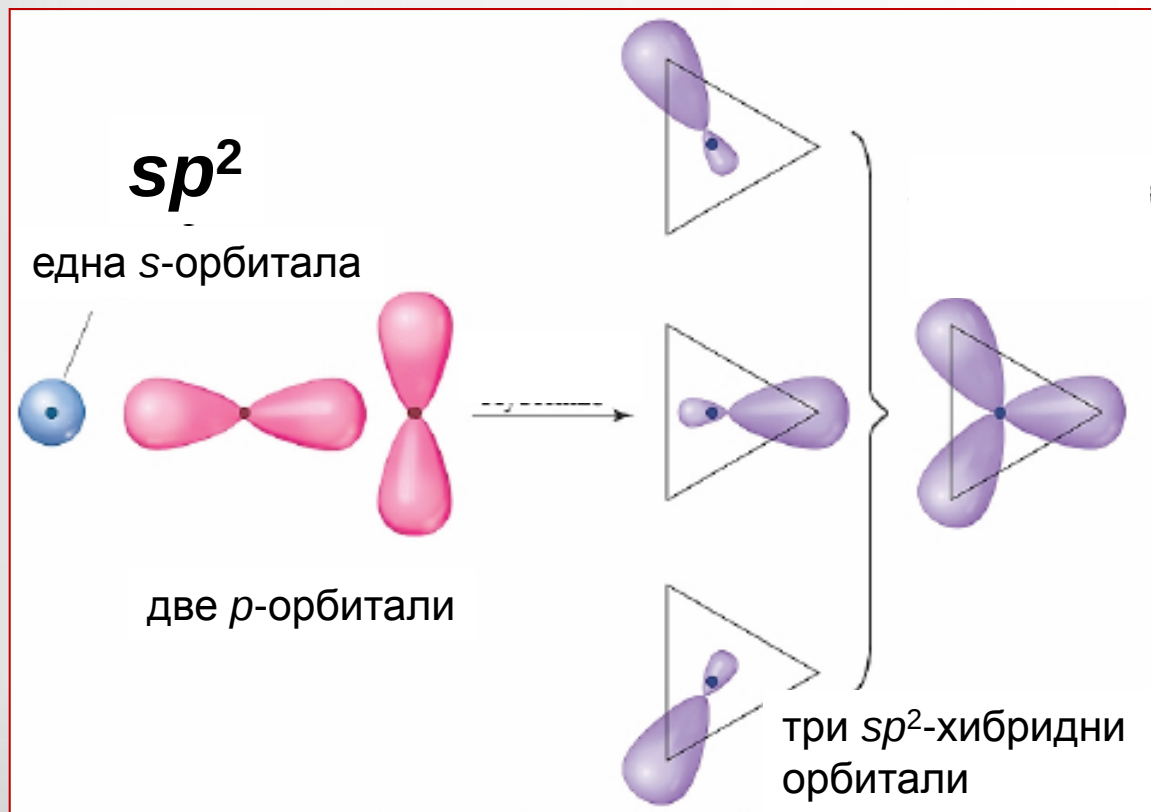
sp^2 хибридизиран јаглороден атом



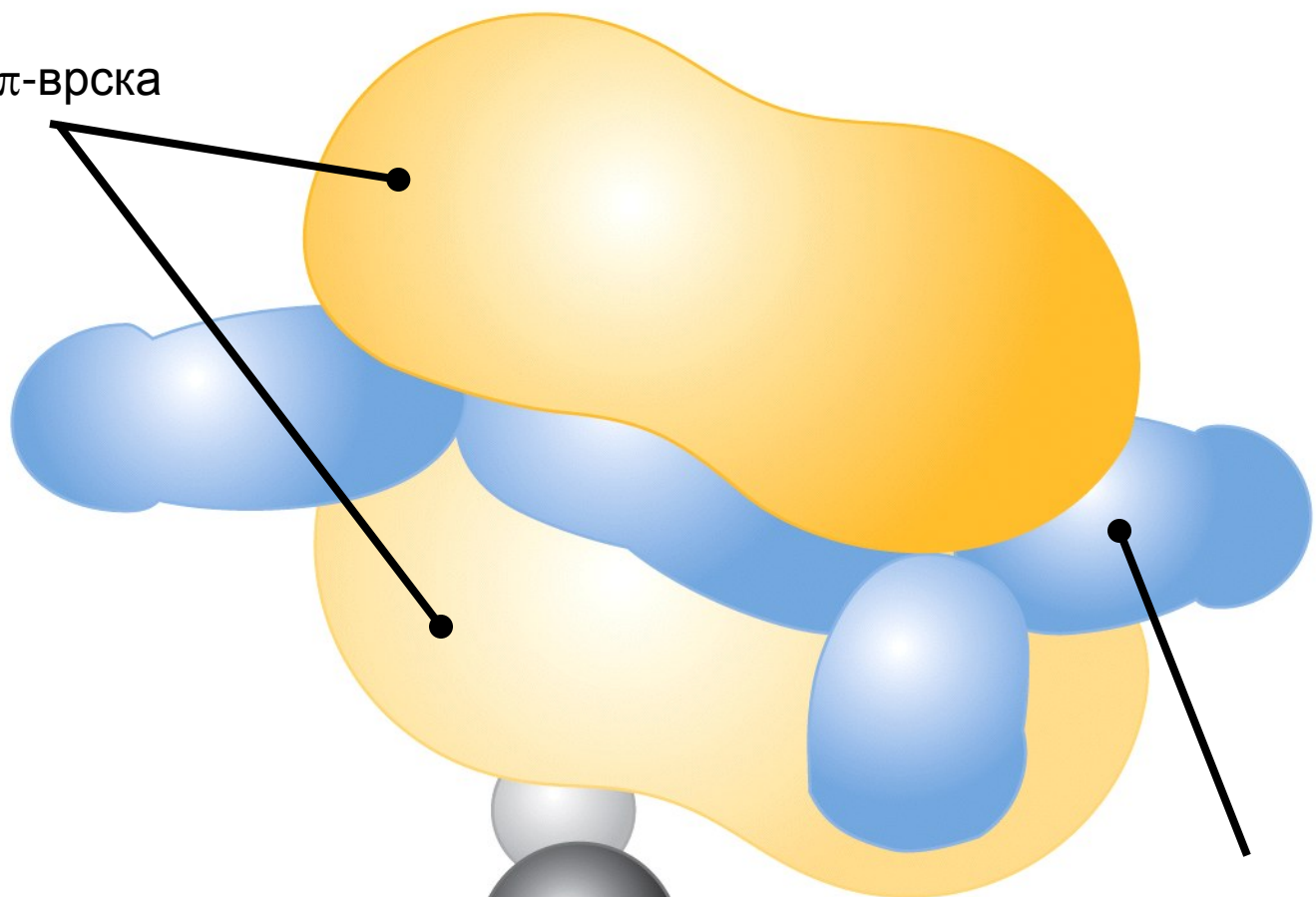
Три хибридни орбитали се на располагање за образување на σ -врски.

Една нехибридирана p -орбитала на располагање за образување на една π -врска.

sp^2 хибридизација

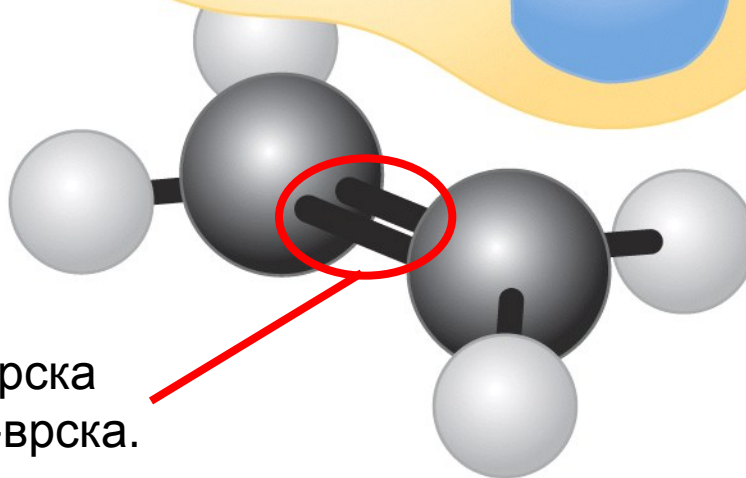


π -врска

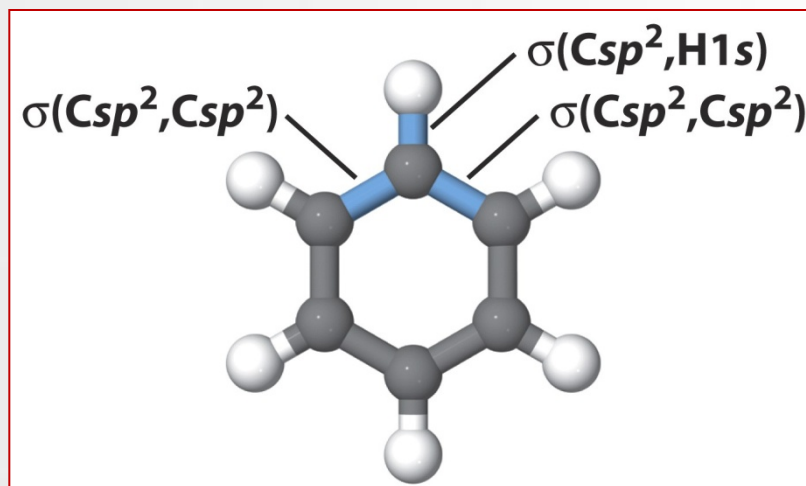


σ -врски

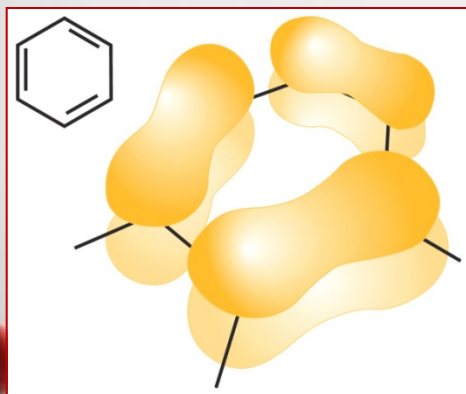
Една σ -врска
и една π -врска.



Сврзување кај бензен, C_6H_6

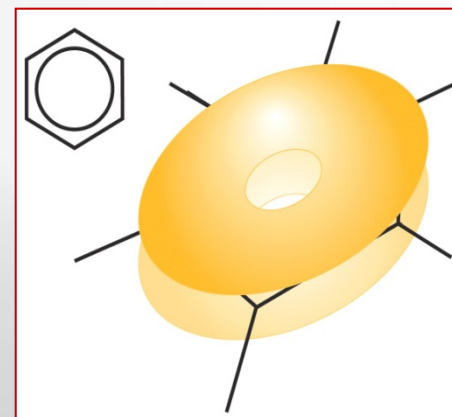


σ -врски



π -врски

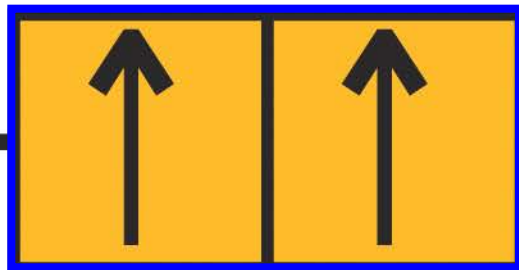
(кај една од структурите на Кекуле)



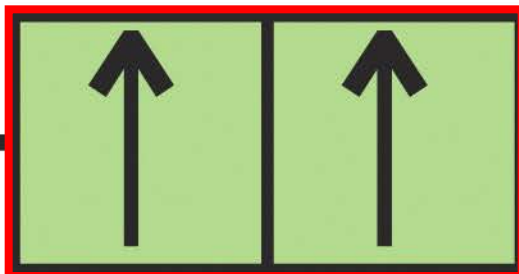
π -врски

(резонантен хибрид)

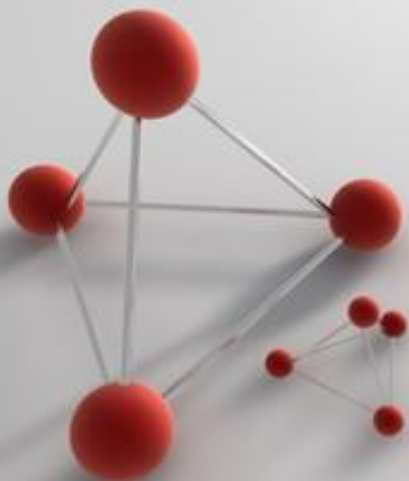
$C2p$



$C2sp$



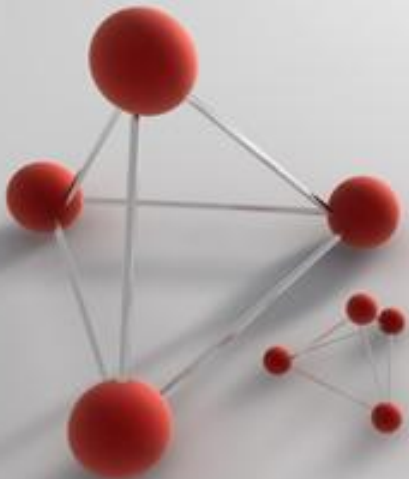
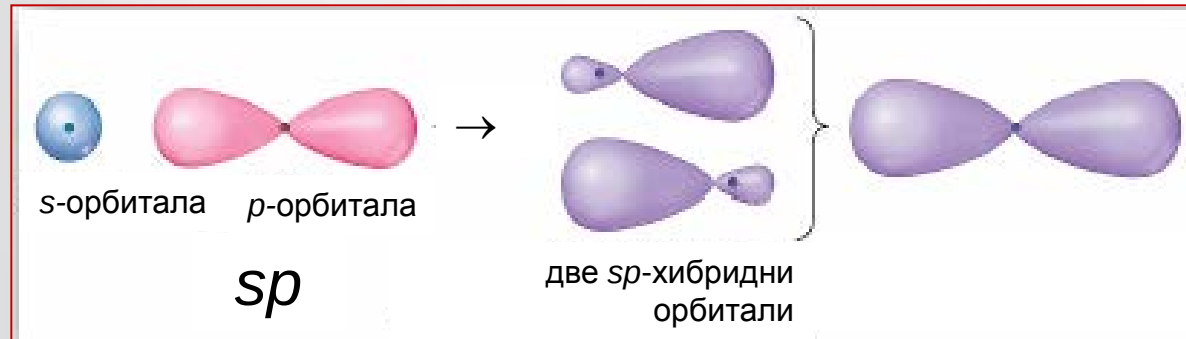
sp хибридизиран јаглероден атом



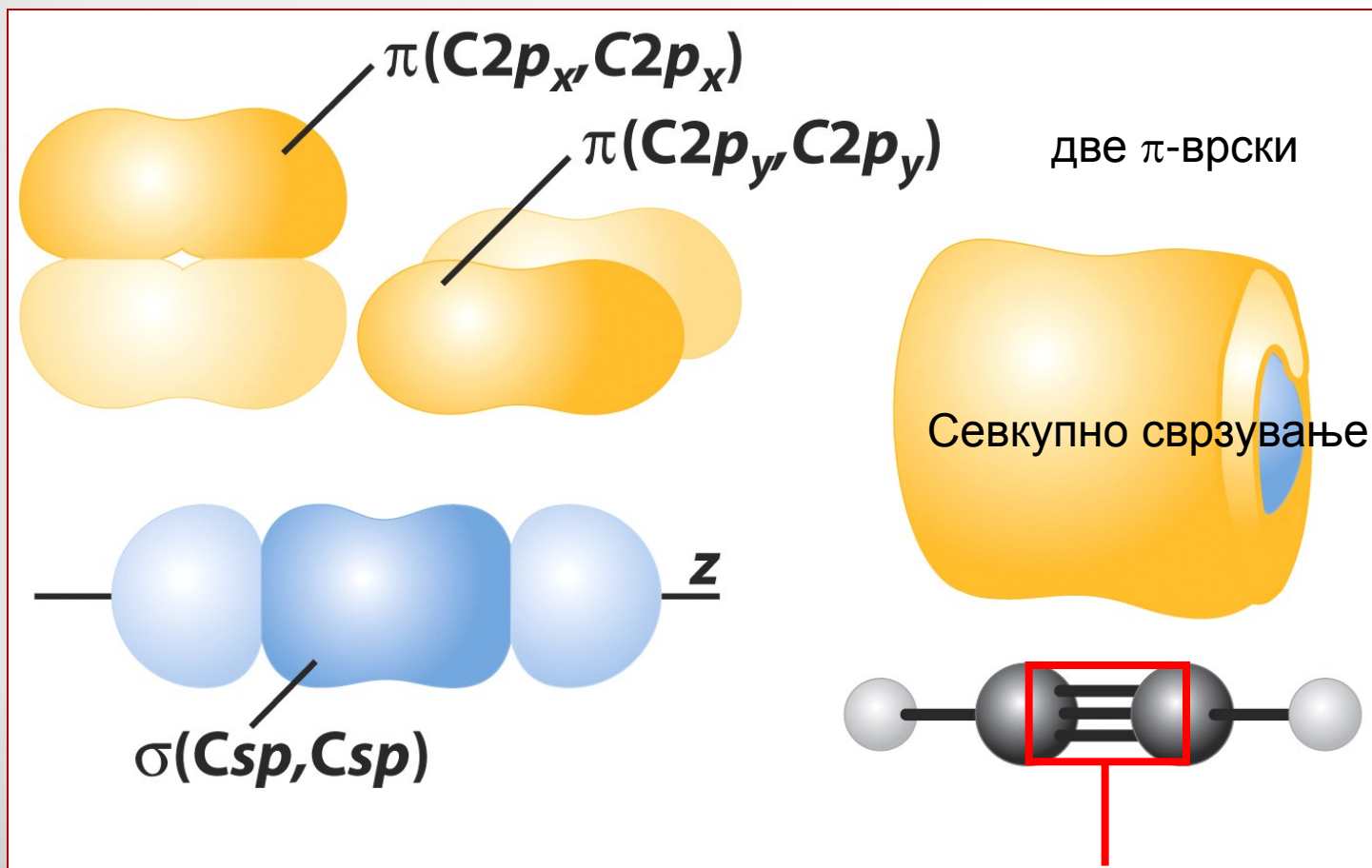
Две хибридни орбитали на располагање
за образување на σ -врски.

Две нехибридизирани p -орбитали на располагање
за образување на две π -врски.

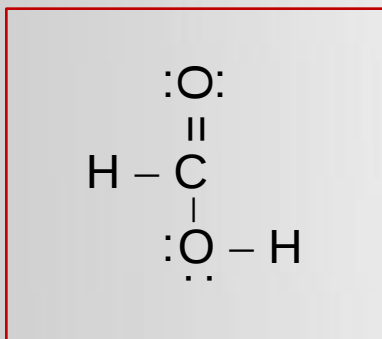
sp хибридизација



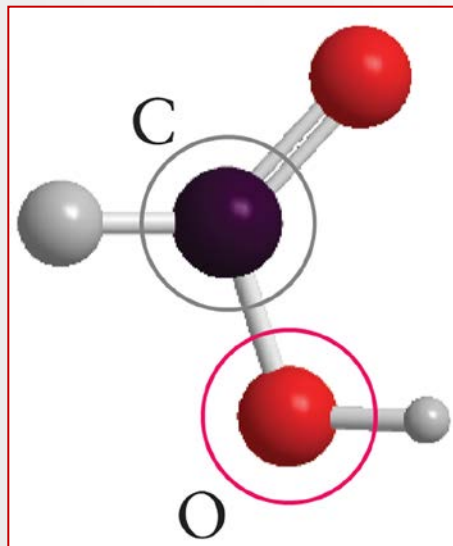
Сврзување кај етин, C_2H_2



Сврзување кај мравска киселина ?

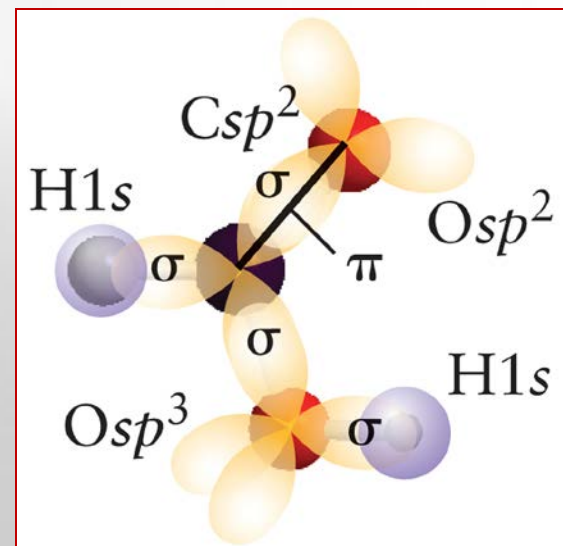
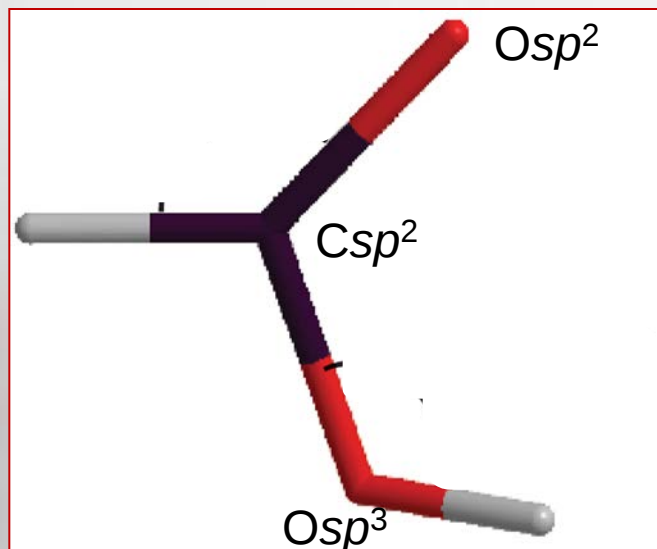
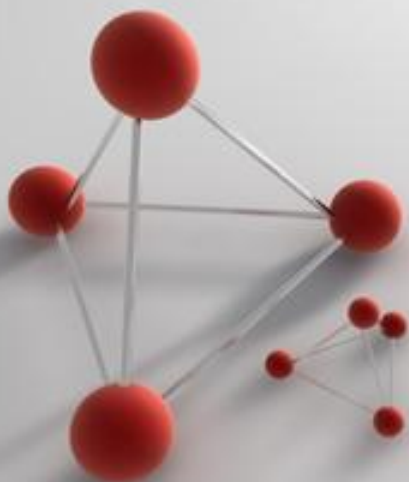


Луисова структура?



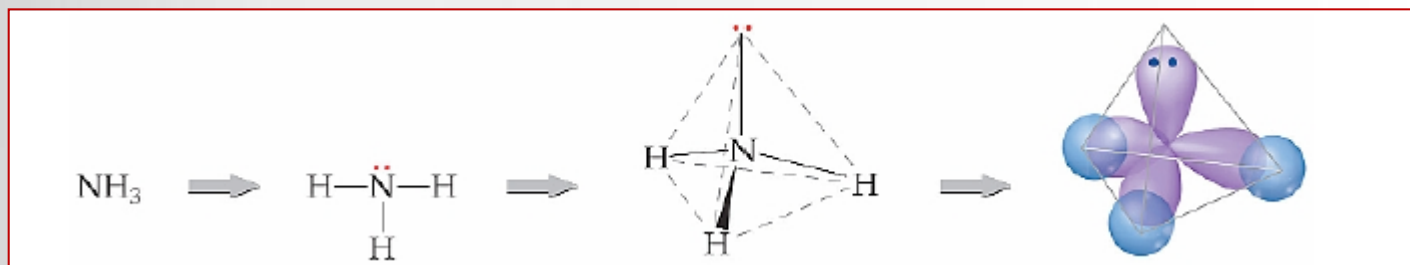
Тригонално-планарна
распределба на валентните
електрони

Тетраедарска распределба
на валентните електрони

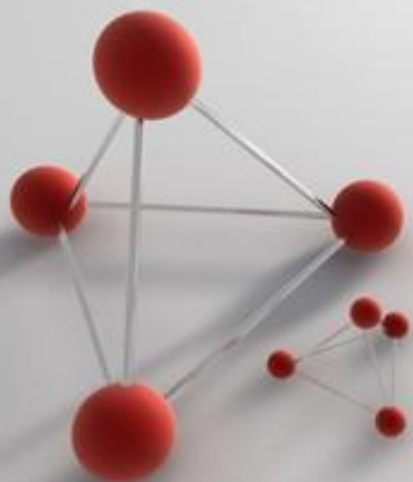


Корелација меѓу VSEPR методот и концептот на хибридизација

формула → Луисова структура →
→ електронски распоред според VSEPR → хибридизација

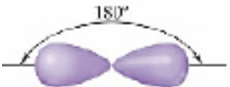
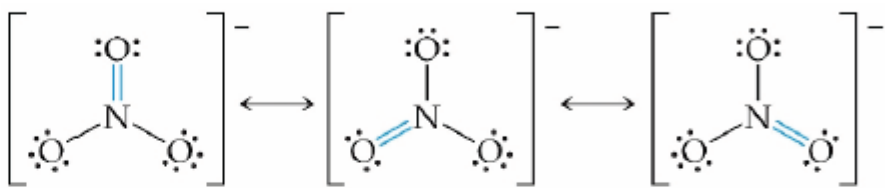
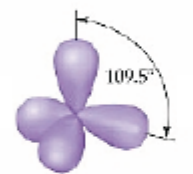
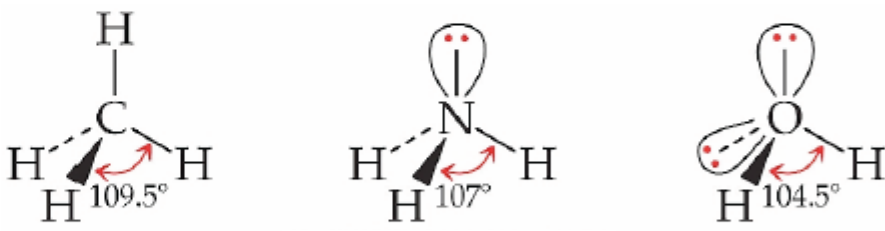
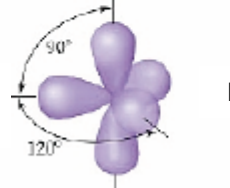
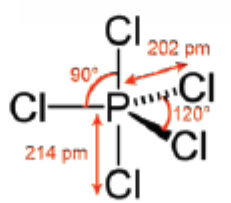
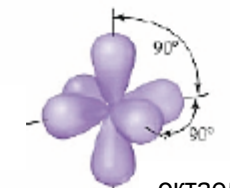
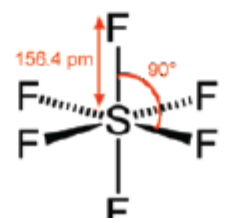


sp^3 - хибридизација



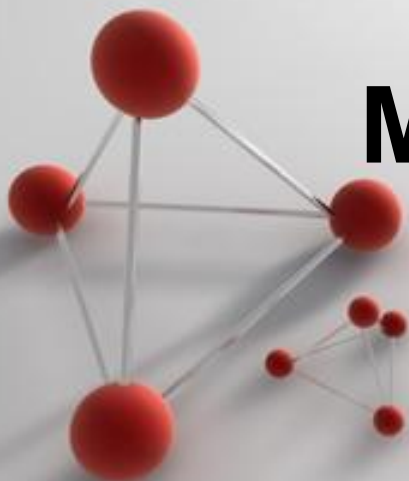
Електронска распределба според VSEPR	хибридизација	пример
линеарна	sp	BeF ₂
тригонално планарна	sp^2	NO ₃ ⁻
тетраедарска	sp^3	CH ₄
тригонално бипирамидална	sp^3d	PCl ₅
октаедарска	sp^3d^2	SF ₆

Корелација меѓу VSEPR методот и концептот на хибридизација

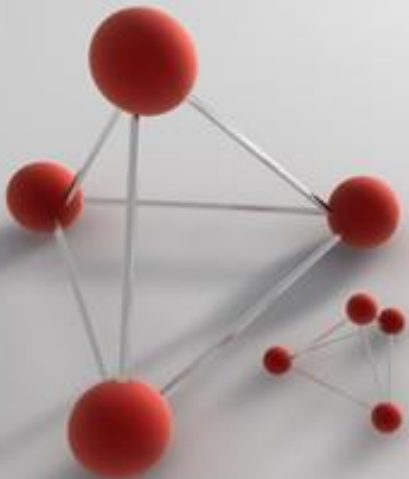
Атомски Орбитали	Хибридни Орбитали	Геометрија	Примери
s, p	две sp	 180° линеарна	BeF_2  F 2p орбитала област на прекривање F 2p орбитала $\text{:}\ddot{\text{F}}\text{—Be—}\ddot{\text{F}}\text{:}$
s, p, p	три sp^2	 120° тригонално планарна	$\text{BF}_3; \text{SO}_3$ 
s, p, p, p	четири sp^3	 109.5° тетраедарска	$\text{CH}_4; \text{NH}_3; \text{H}_2\text{O}; \text{NH}_4^+$ 
s, p, p, p, d	пет sp^3d	 90° 120° тригонално бипирамидална	$\text{PCl}_5; \text{SF}_5$ 
s, p, p, p, d, d	шест sp^3d^2	 90° 90° октаедарска	$\text{SF}_6; \text{ClF}_5$ 

R. Mulliken, F. Hund, J. Slater, J. Lennard-Jones (1920)

ТЕОРИЈА НА МОЛЕКУЛСКИ ОРБИТАЛИ

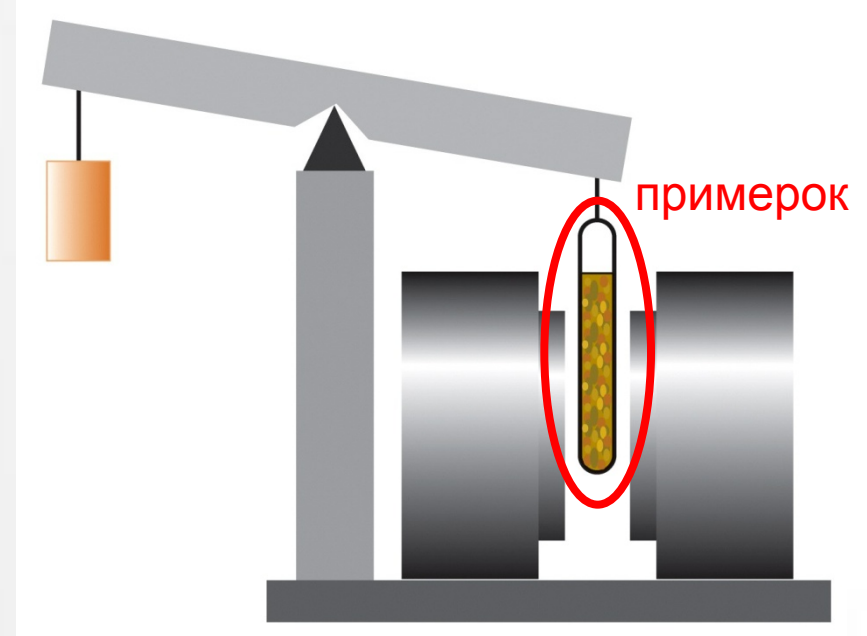


течен O_2



O_2 се задржува меѓу половите бидејќи е парамагнетичен (има неспарени електрони).

Гуева вага



Примерокот се движи нагоре (надвор од магнетното поле):

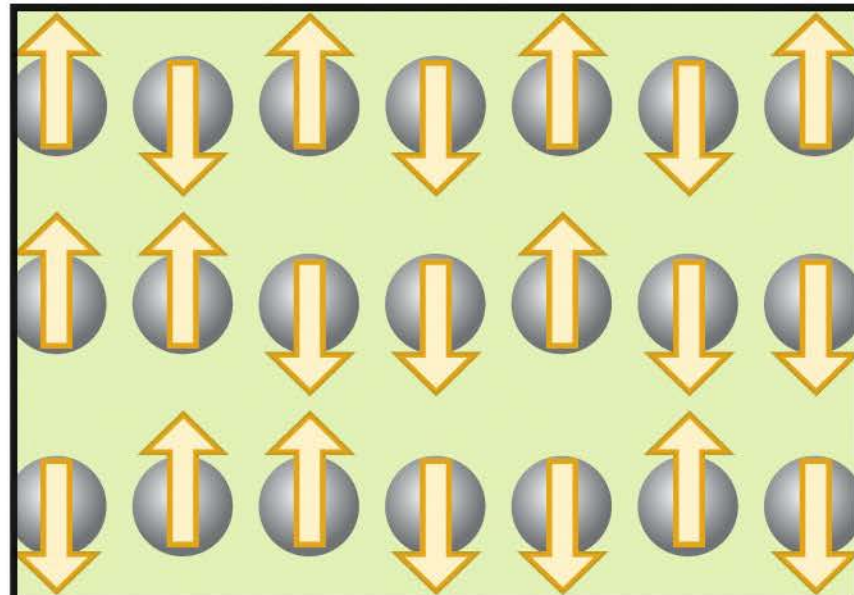
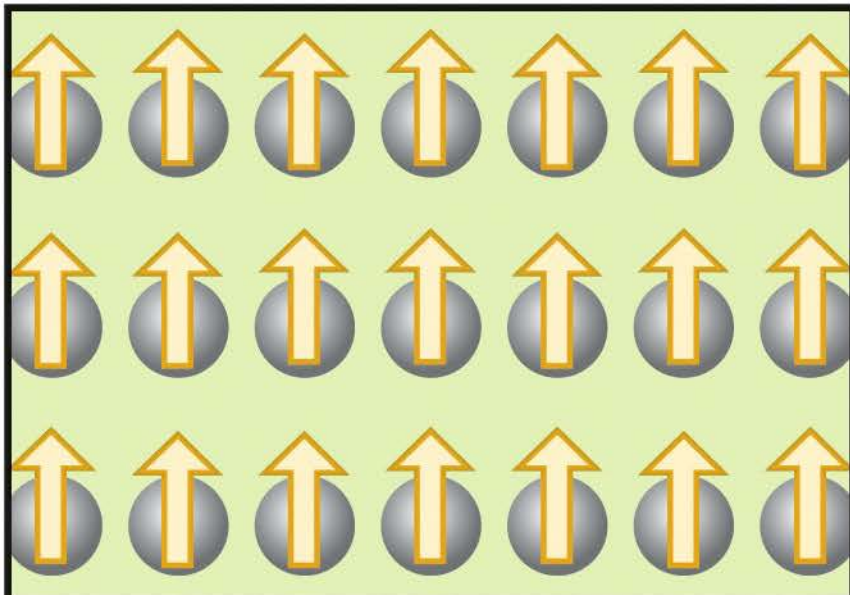
- диамагнетичен

Примерокот се движи надолу (во магнетното поле):

- парамагнетичен

Примерок во магнетно поле

Примерок отстранет од магнетното поле



Парамагнетичен: насочени спинови

Феромагнетичен: насочени спинови

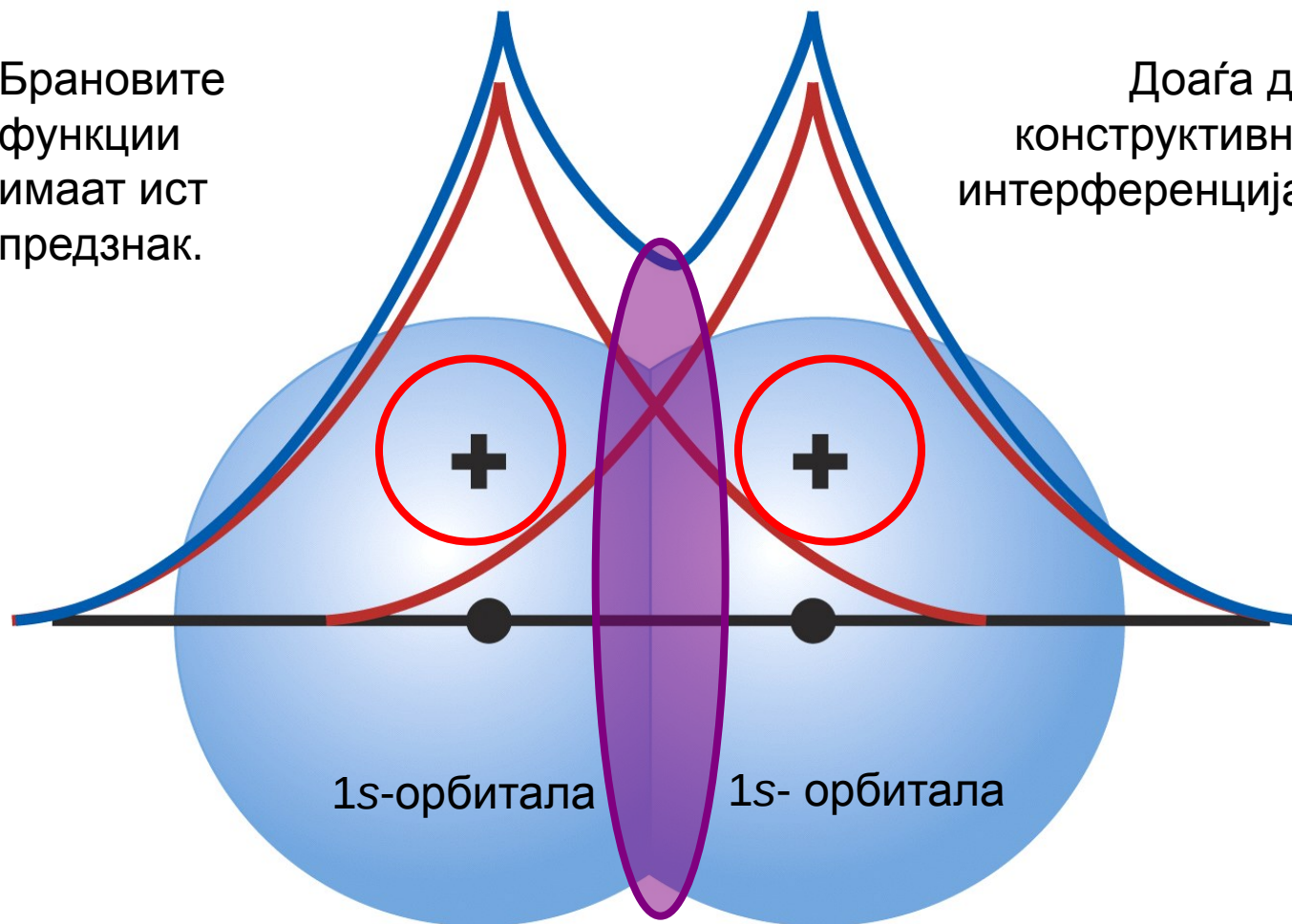
Парамагнетичен:
спиновите се реорентираат по случаен пат

Феромагнетичен:
спиновите остануваат насочени



Брановите
функции
имаат ист
предзнак.

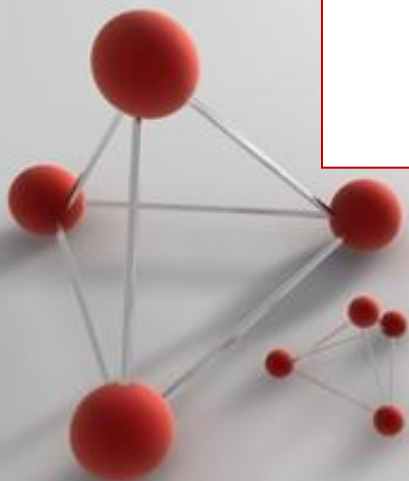
Доаѓа до
конструктивна
интерференција.



Се зголемува електронската густина
меѓу двете јадра.

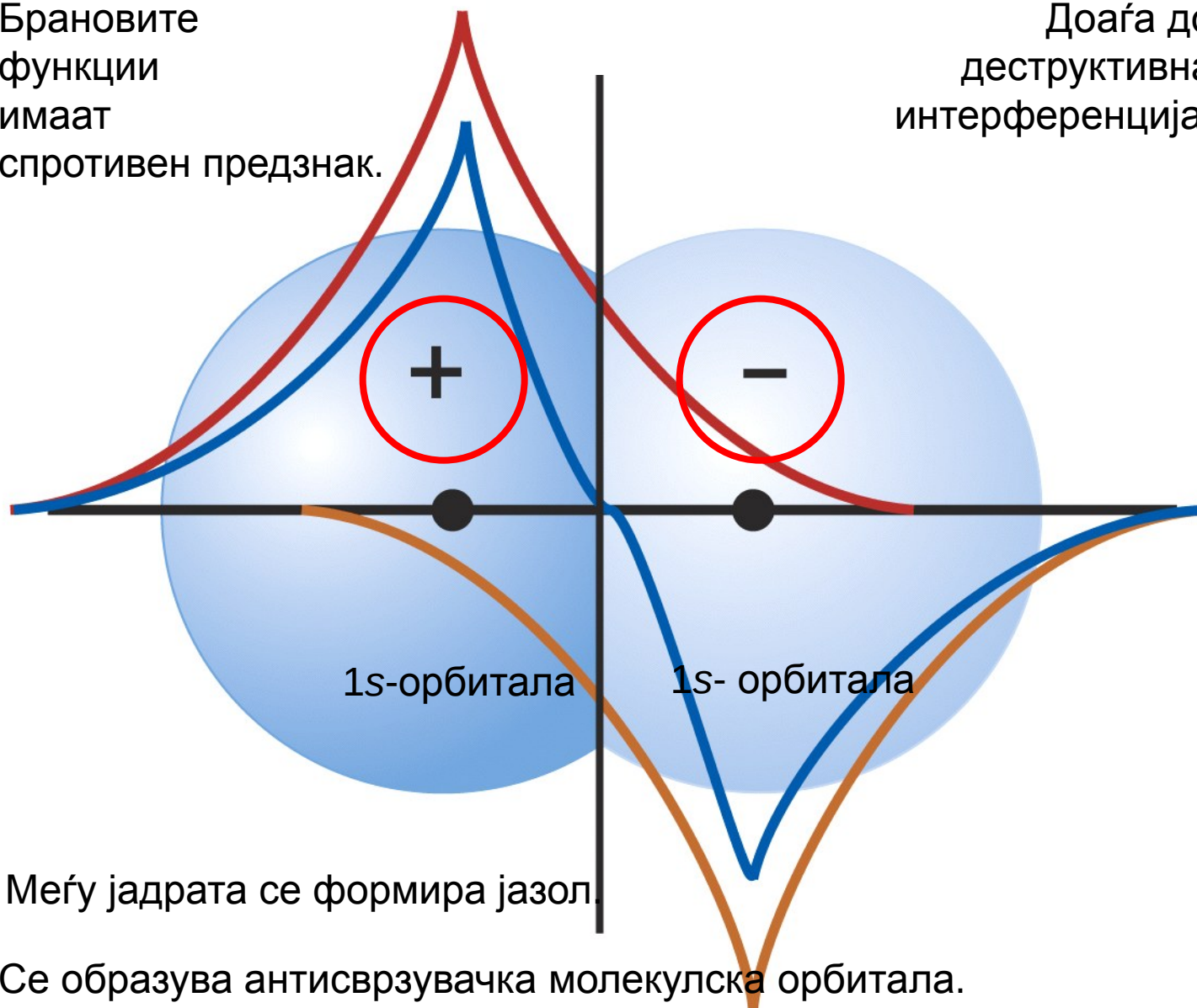
$$\psi = \psi_{A1s} + \psi_{B1s}$$

Се образува сврзувачка молекулска орбитала.



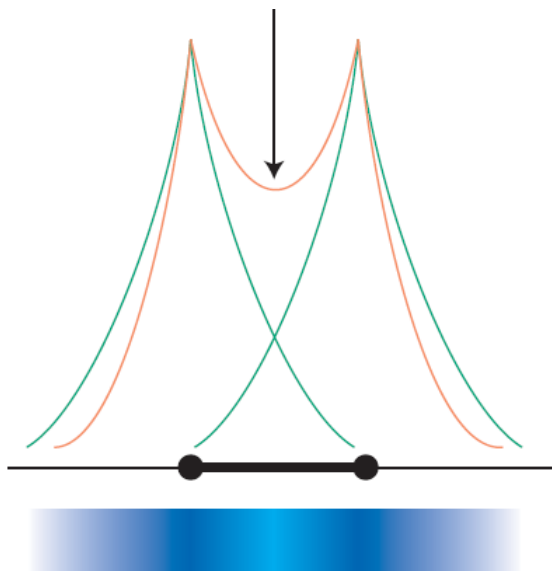
Брановите
функции
имаат
спротивен предзнак.

Доаѓа до
деструктивна
интерференција.

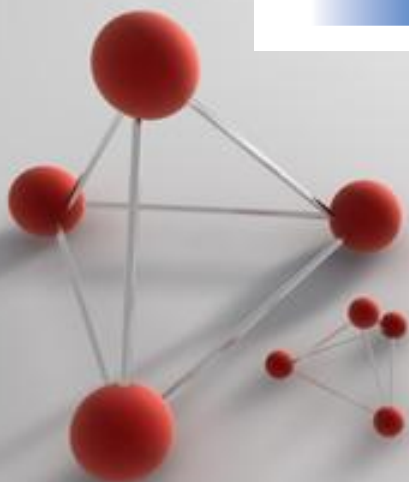
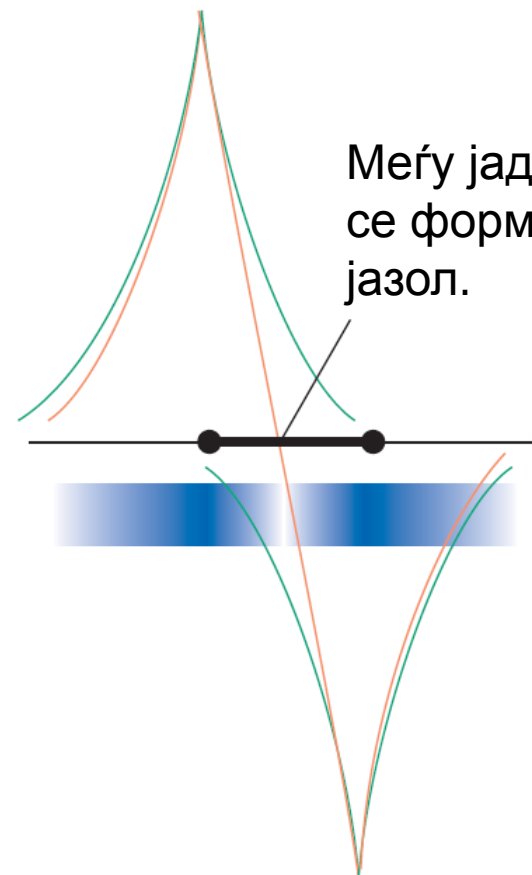


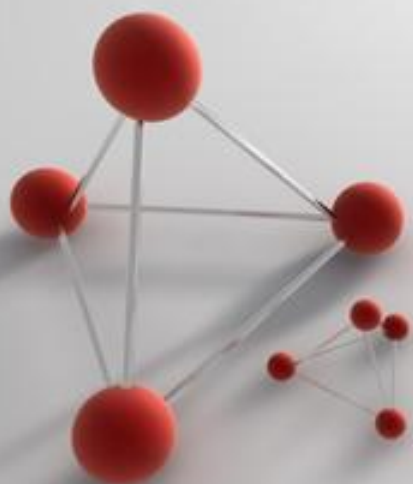
$$\psi = \psi_{A1s} - \psi_{B1s}$$

Се зголемува
електронската
густина меѓу двете јадра.

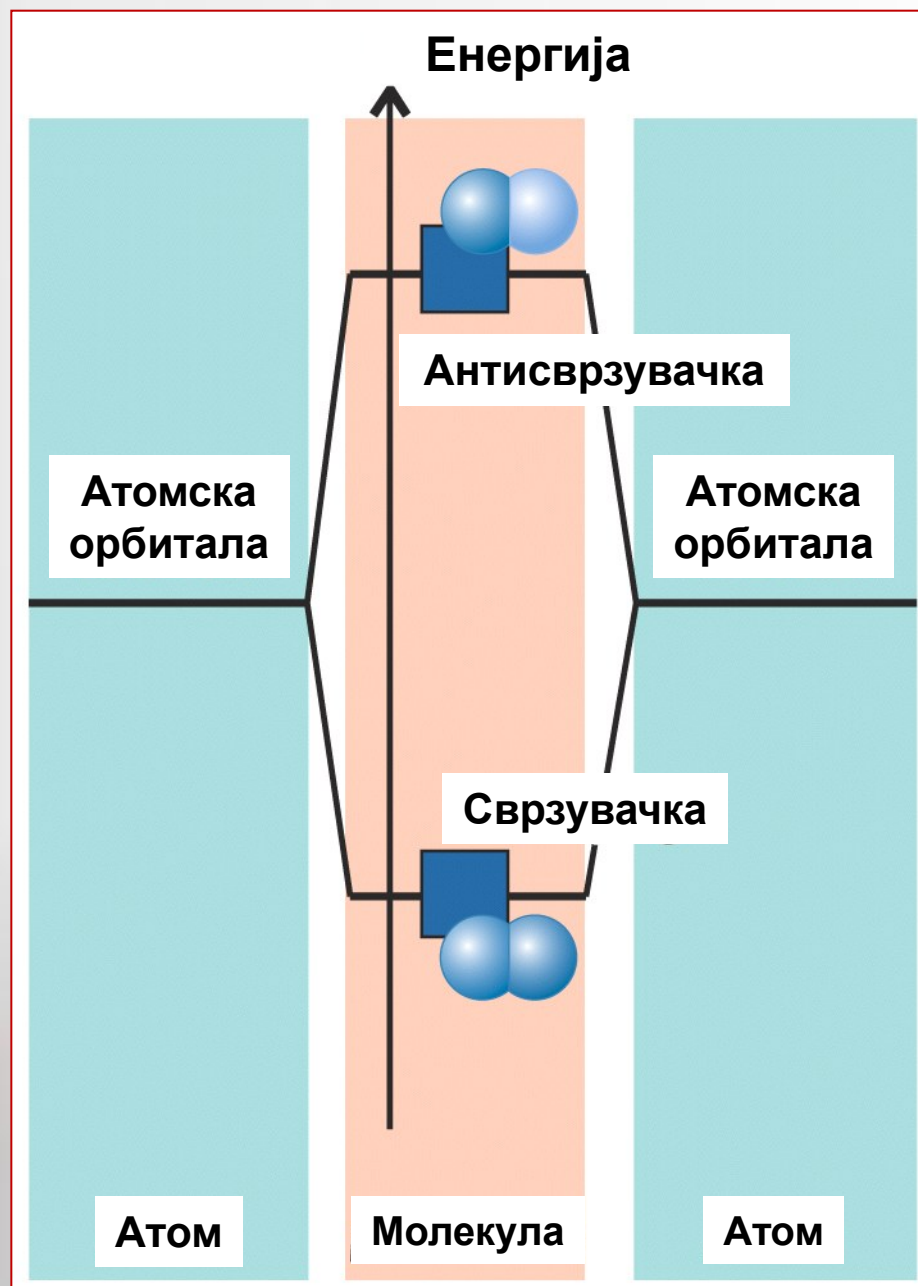


Меѓу јадрата
се формира
јазол.





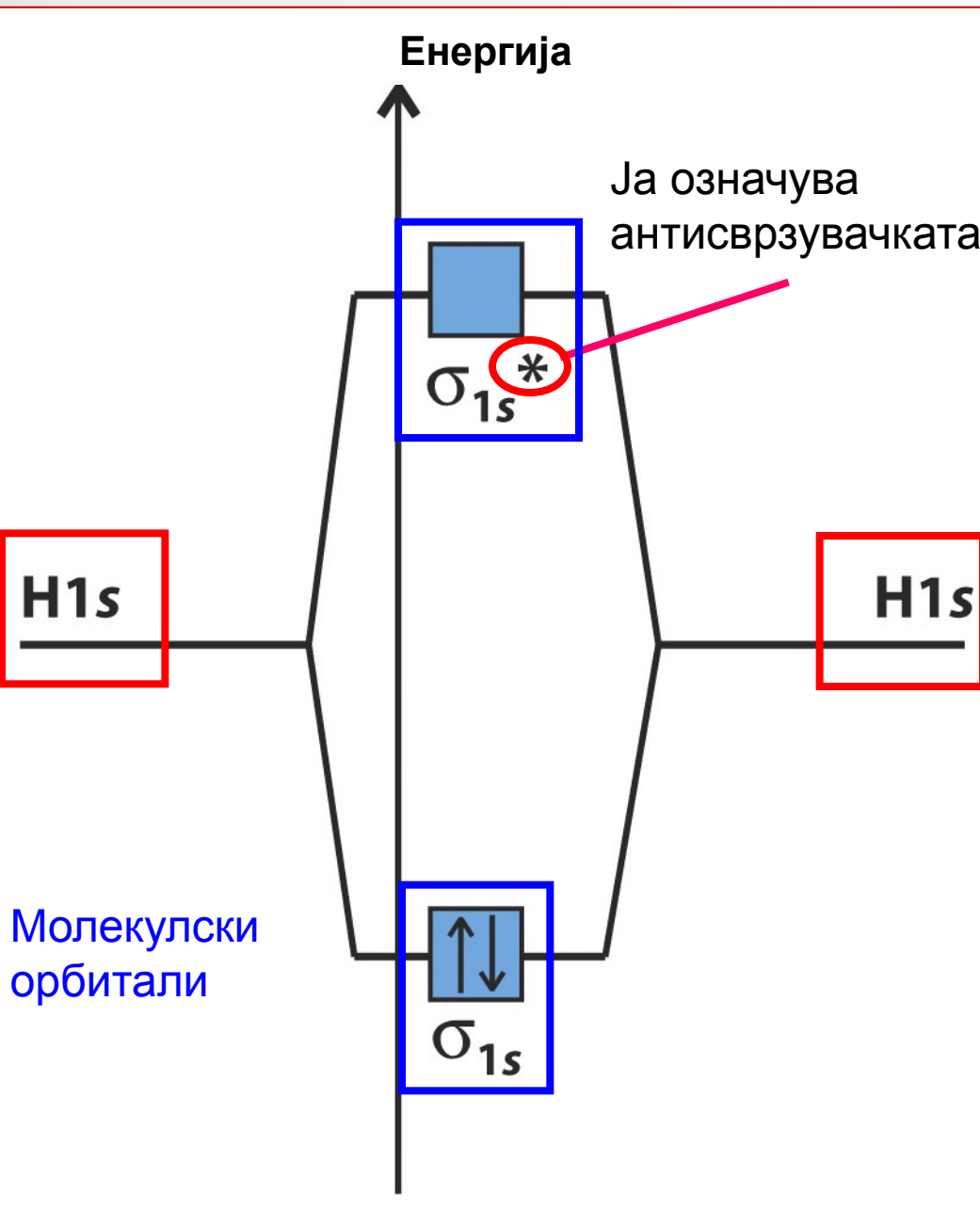
Молекулски
орбитали



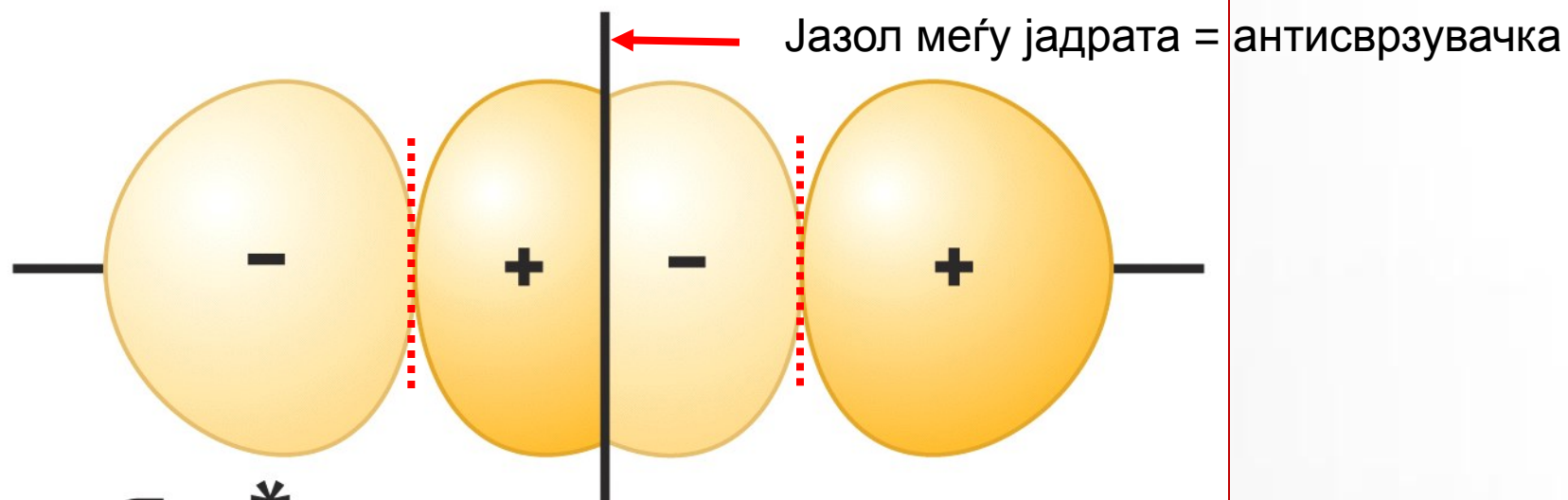
Спротивен
предзнак на
брановата
функција

Ист предзнак
на брановата
функција

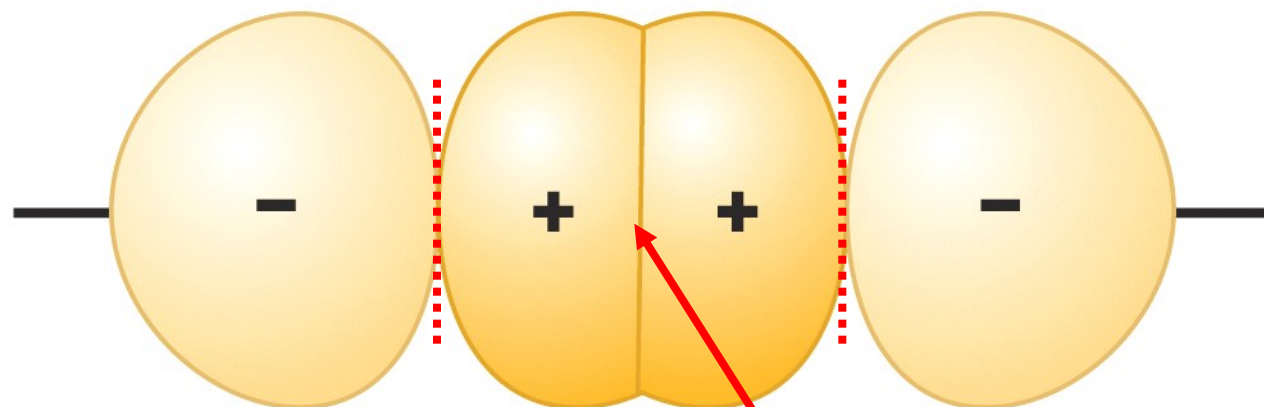
Атомски
орбитали



Молекулски орбитали



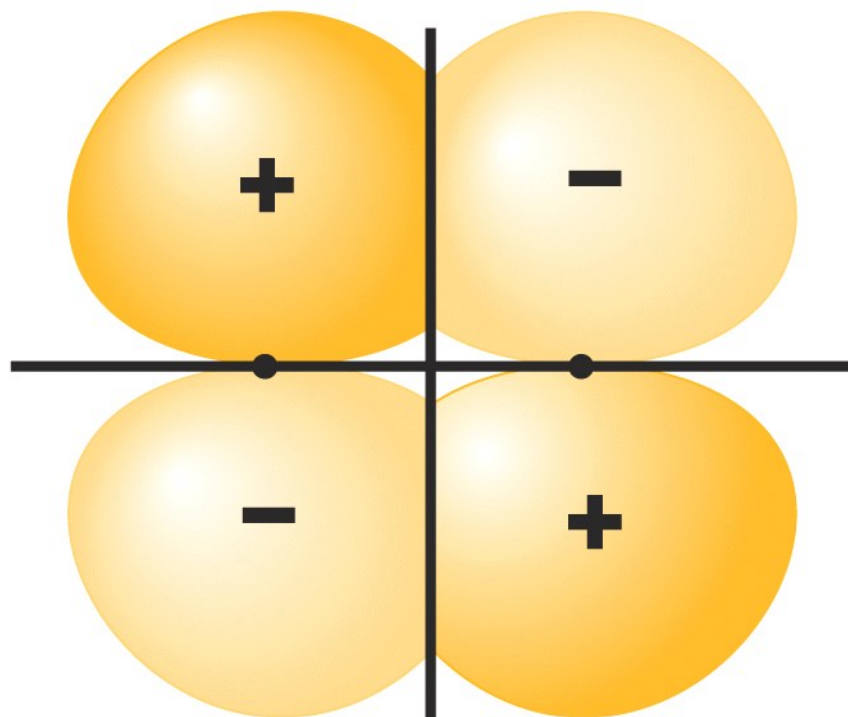
σ_{2p}^*



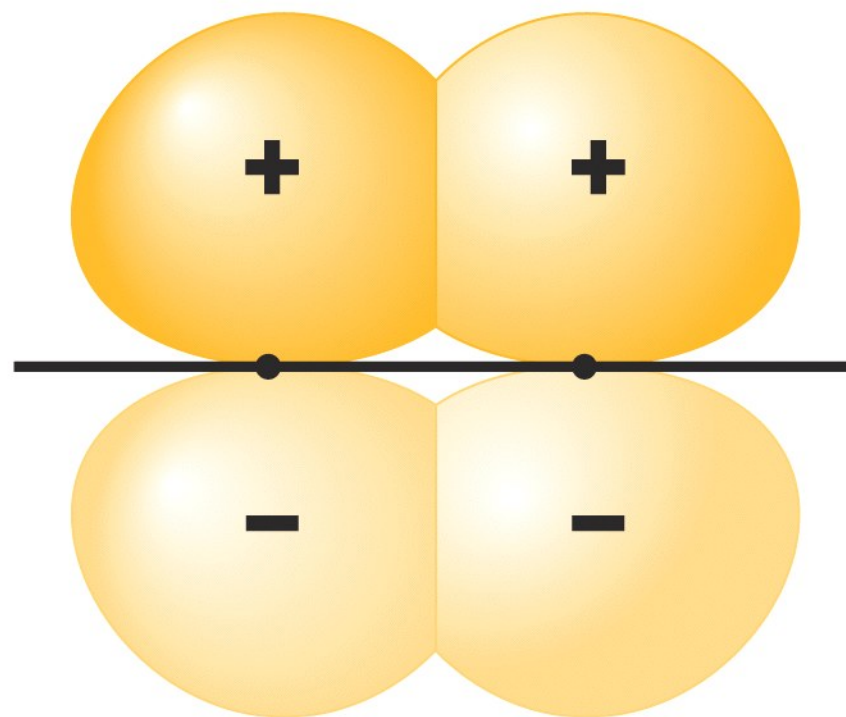
σ_{2p}

Нема јазол међу јадрата = сврзувачка

Молекулски орбитали



π_{2p}^*

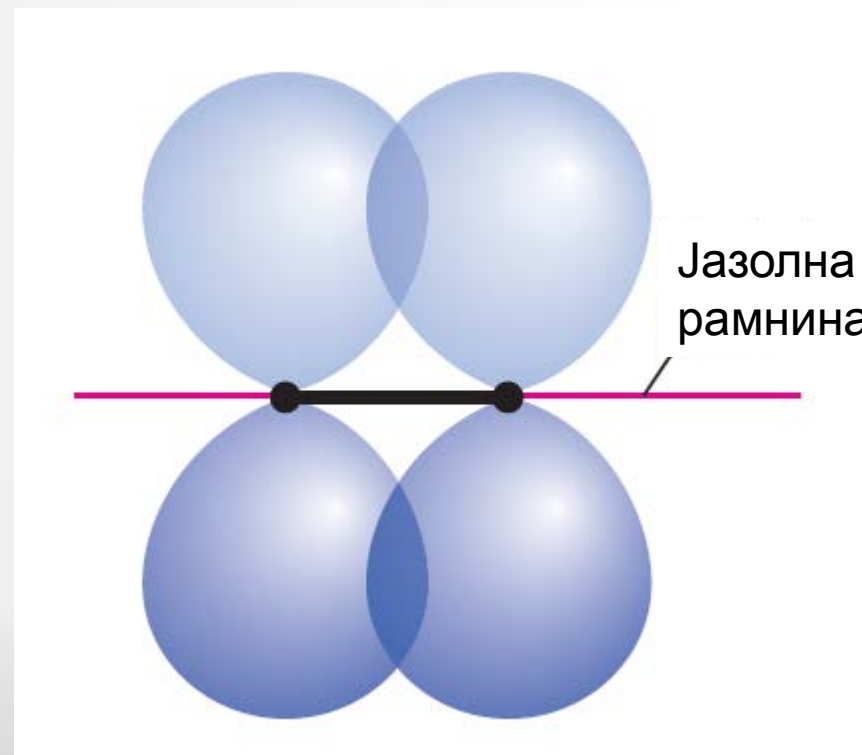
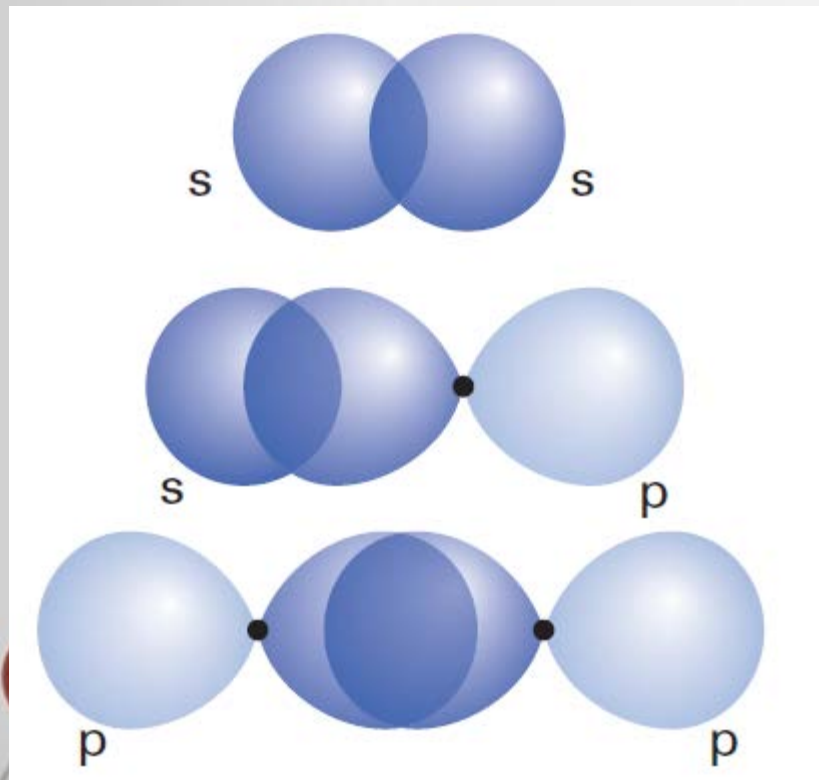


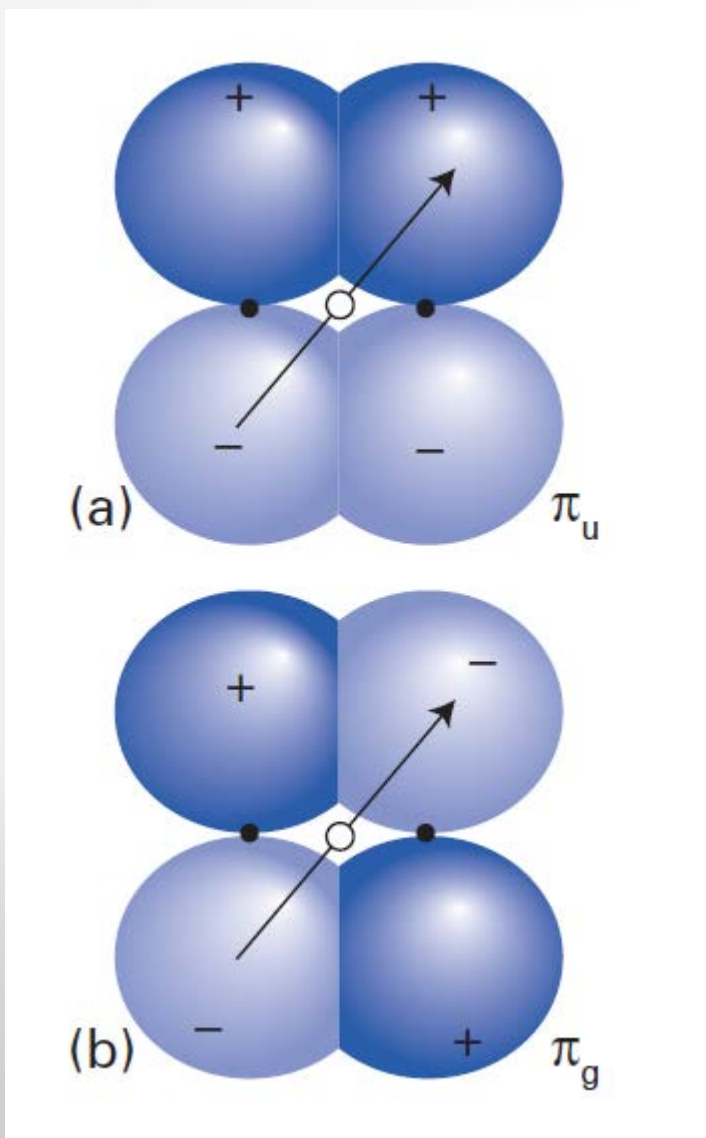
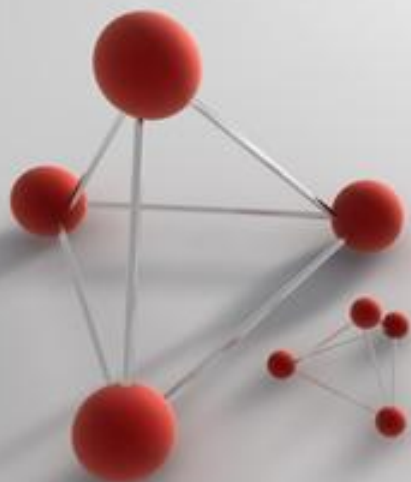
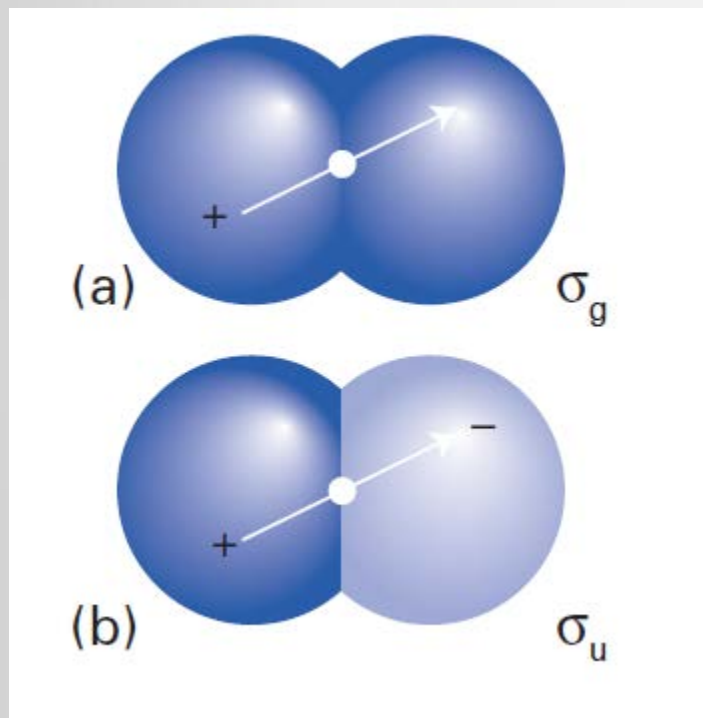
π_{2p}

Јазолна рамнина
међу јадрата = антисврзувачка

Нема јазолна рамнина
међу јадрата = сврзувачка

Молекулски орбитали



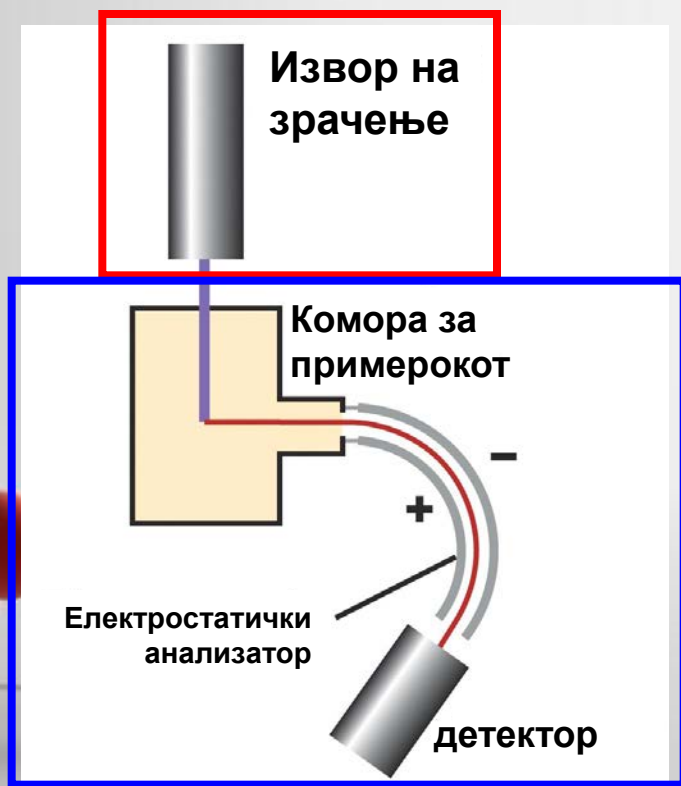


Фотоелектронска спектроскопија: Определување на енергиите на орбиталите

Енергиите на фотоните се познати.

$$h\nu - E_{\text{орбитала}} = E_{\text{к}}$$

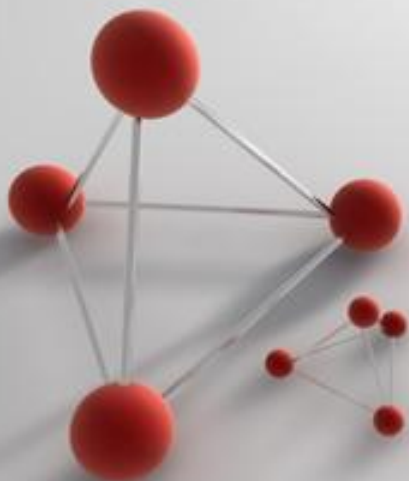
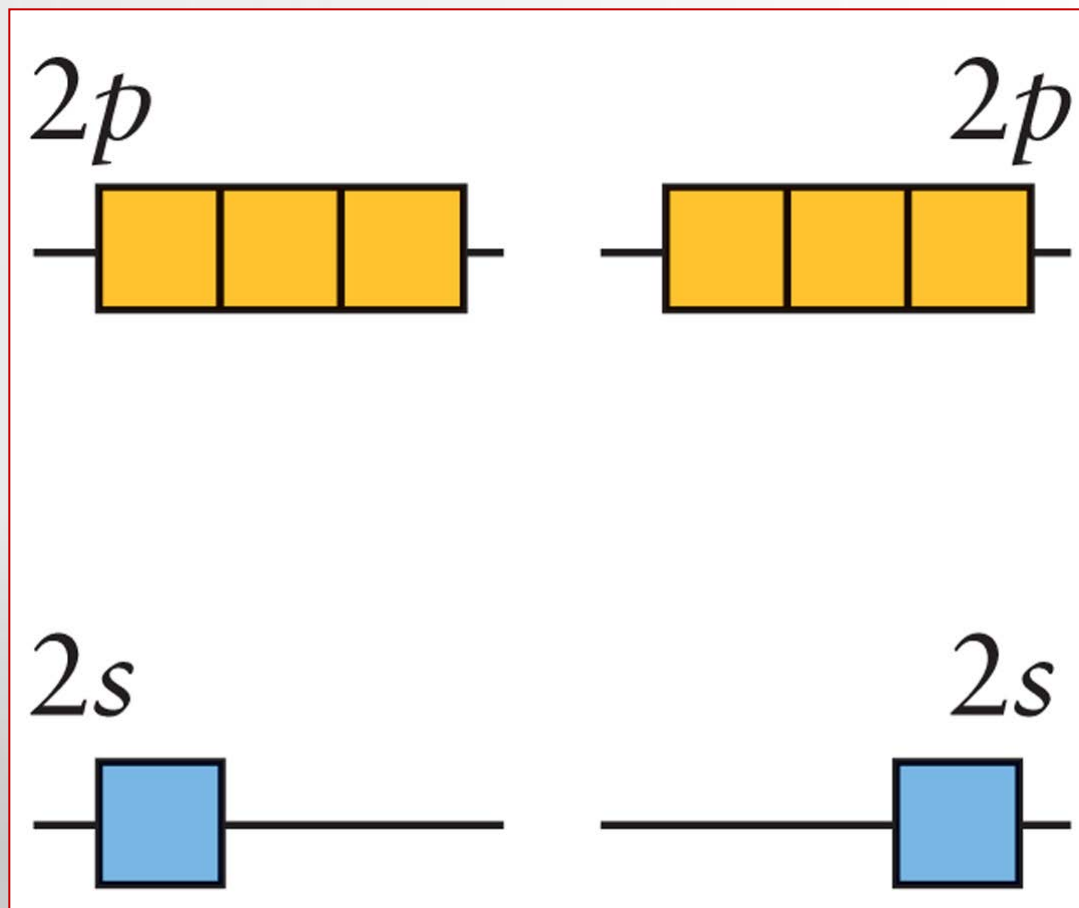
Врз основа на брзината на електронот може да се пресмета $E_{\text{к}}$.



Овозможува да се пресмета енергијата на електронот.

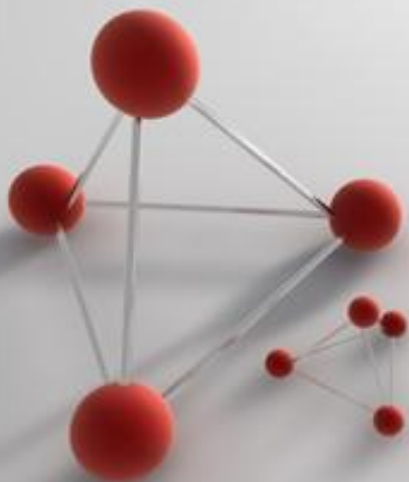
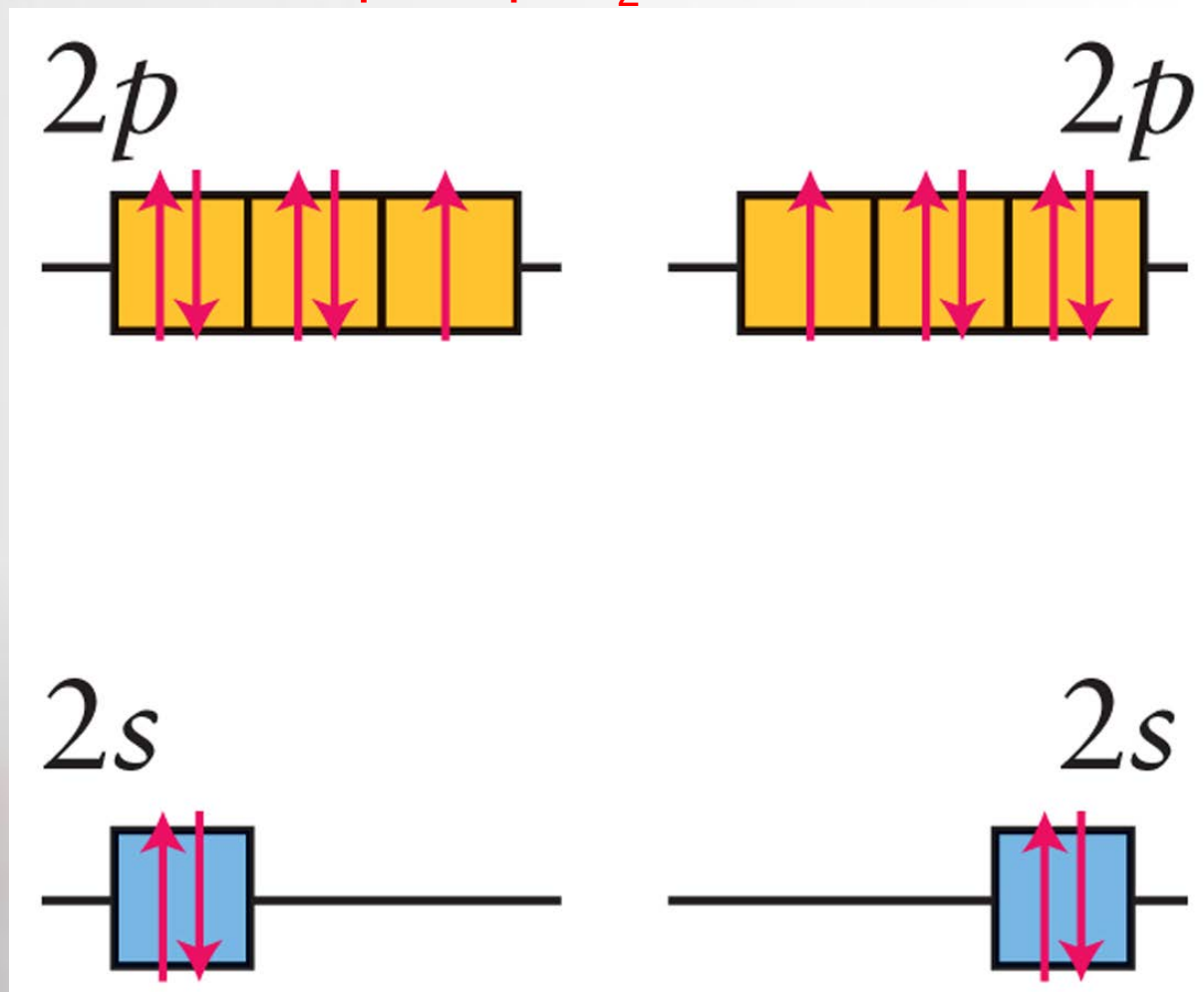
Енергетски дијаграм на молекулските орбитали кај мононуклеарни двоатомски молекули

пример: F_2



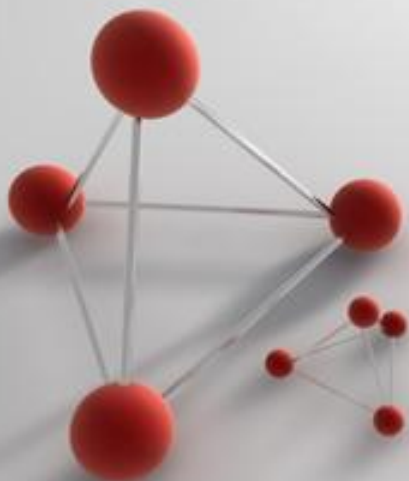
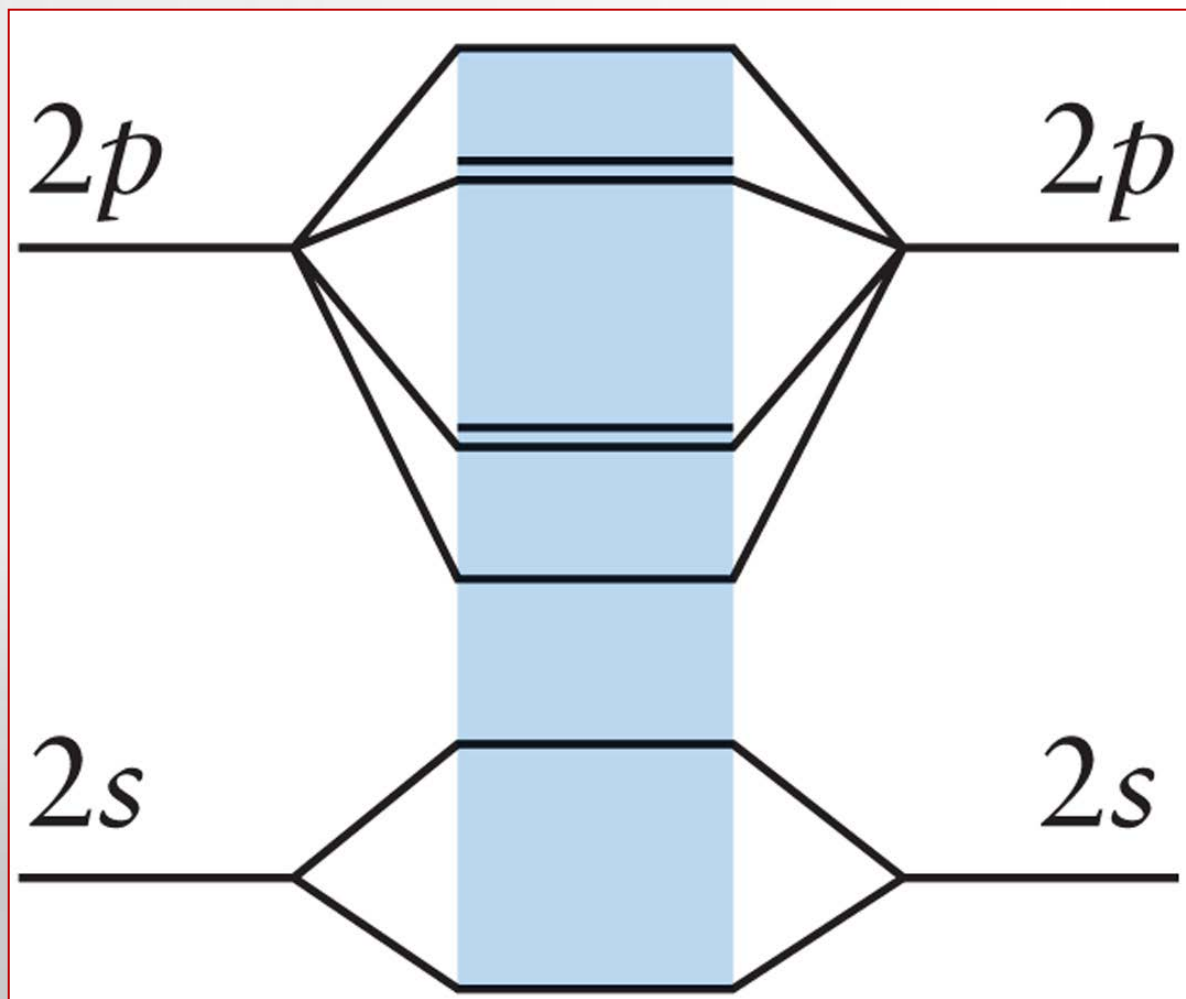
Енергетски дијаграм на молекулските орбитали кај мононуклеарни двоатомски молекули

пример: F_2



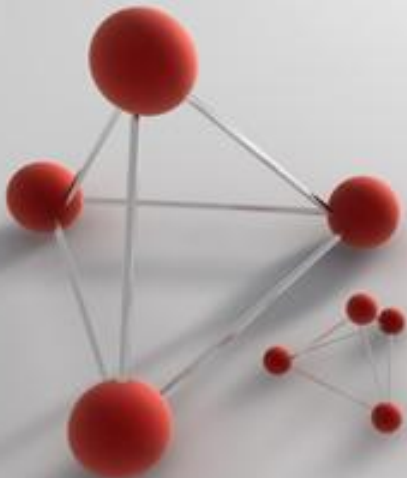
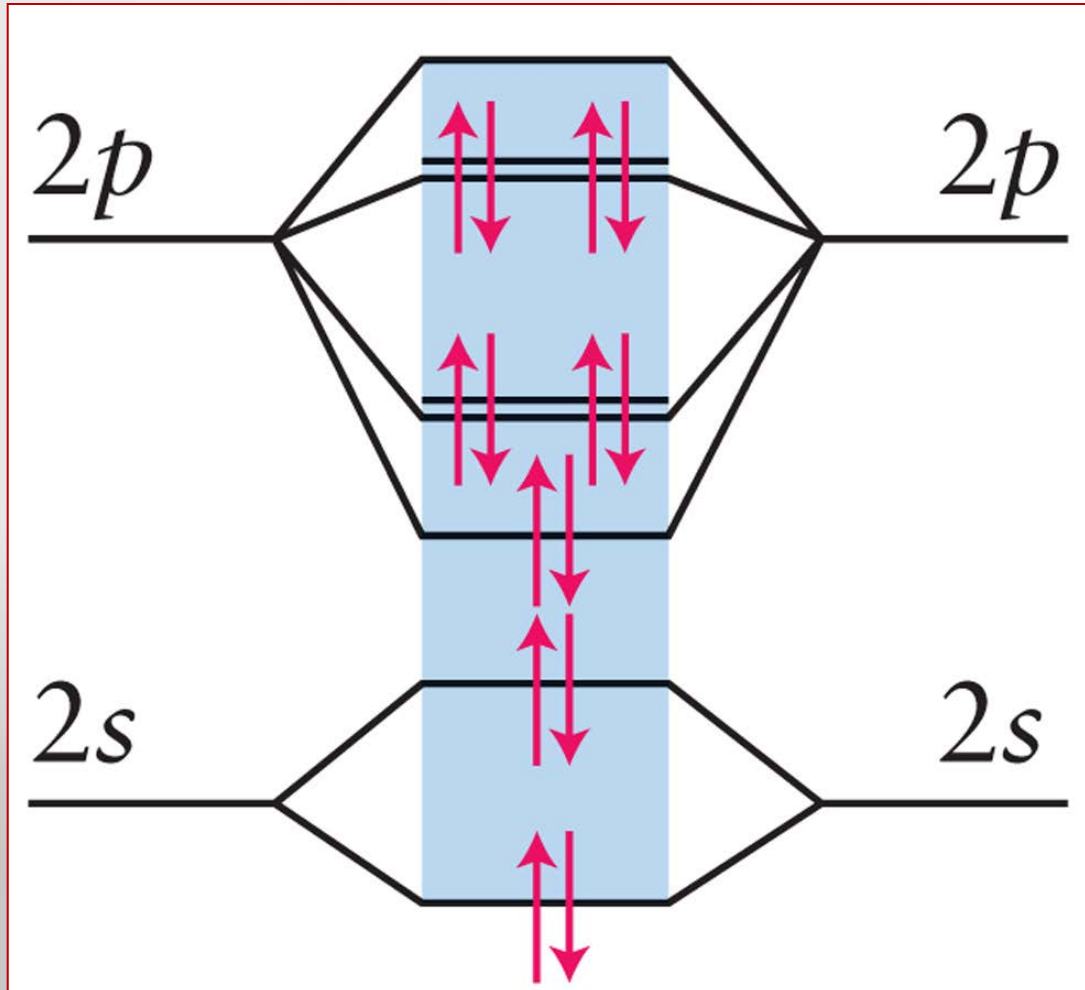
Енергетски дијаграм на молекулските орбитали кај мононуклеарни двоатомски молекули

пример: F_2



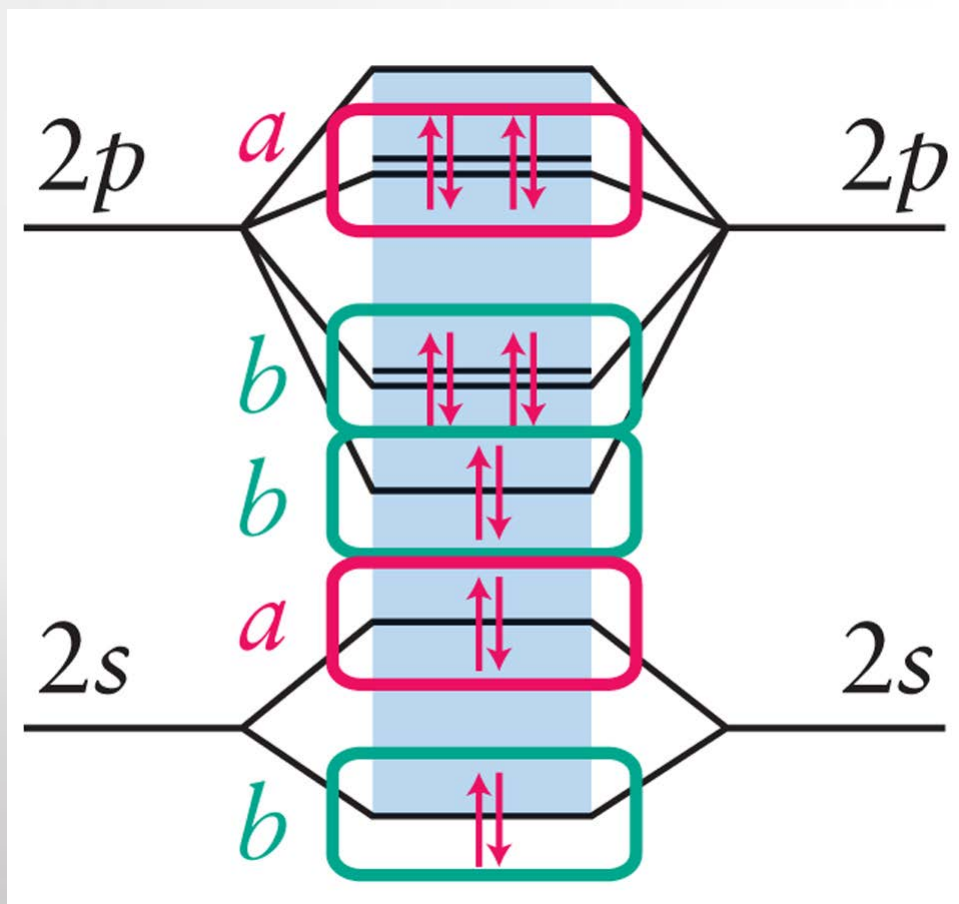
Енергетски дијаграм на молекулските орбитали кај мононуклеарни двоатомски молекули

:пример F_2



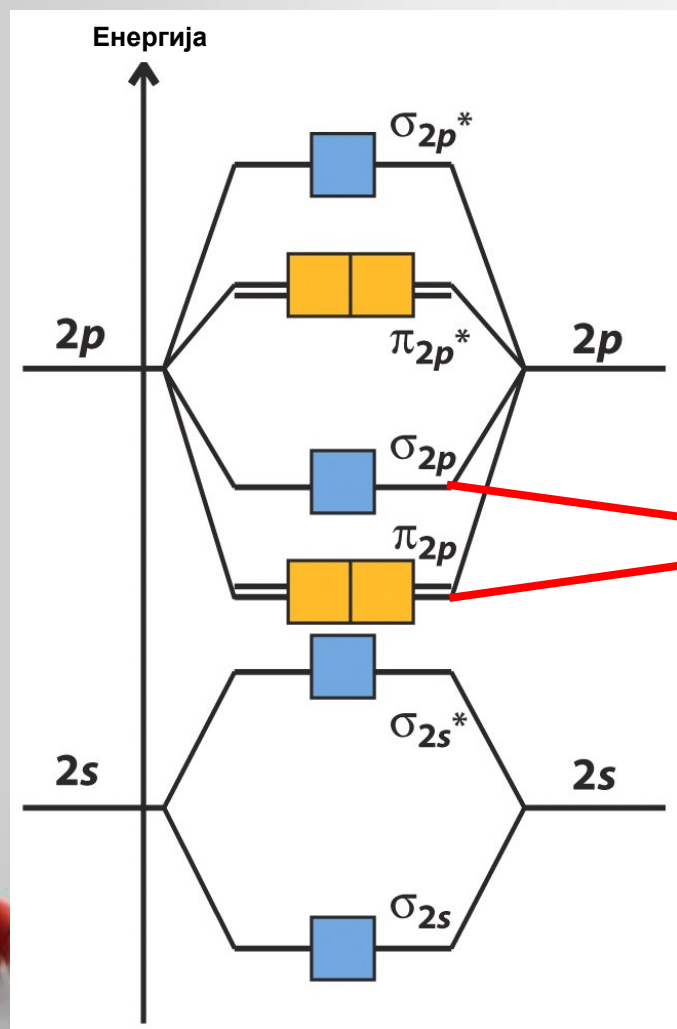
Енергетски дијаграм на молекулските орбитали кај мононуклеарни двоатомски молекули

пример: F_2



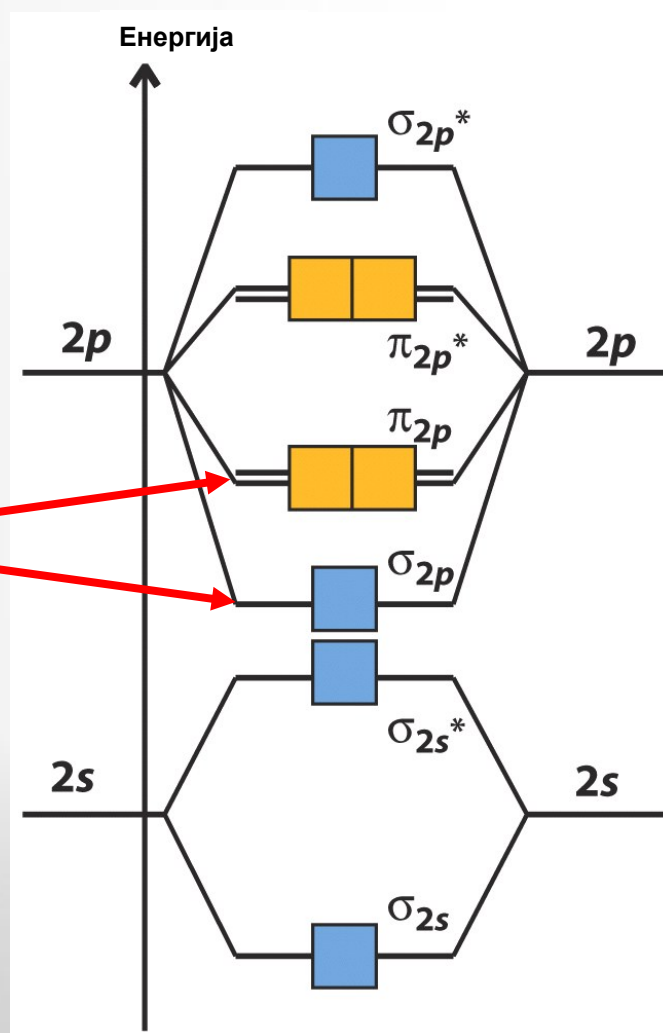
ред на врската =
$$\frac{N(e)_{\text{сврзувачки МО}} - N(e)_{\text{антисврзувачки МО}}}{2}$$

Енергетски дијаграм на молекулските орбитали

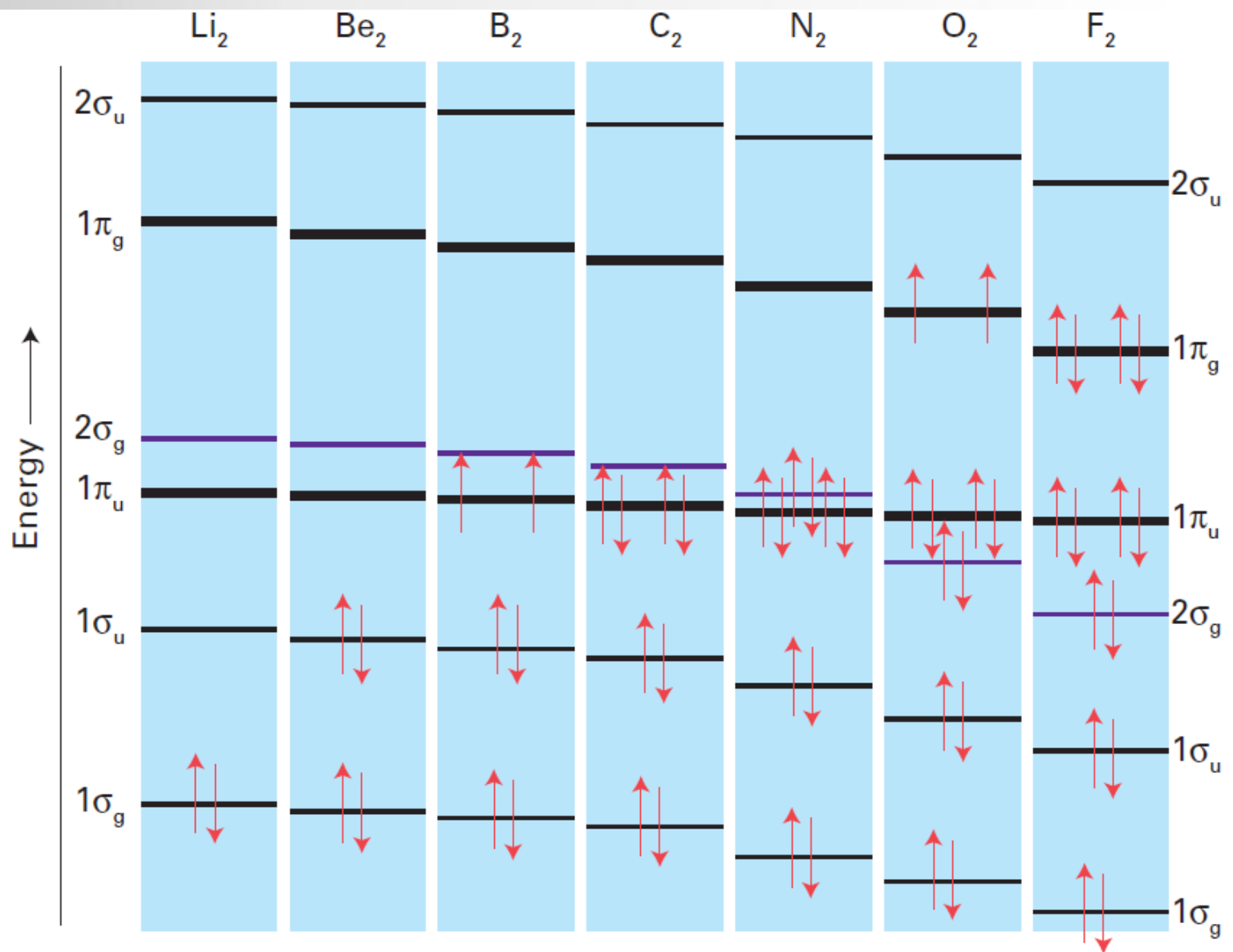


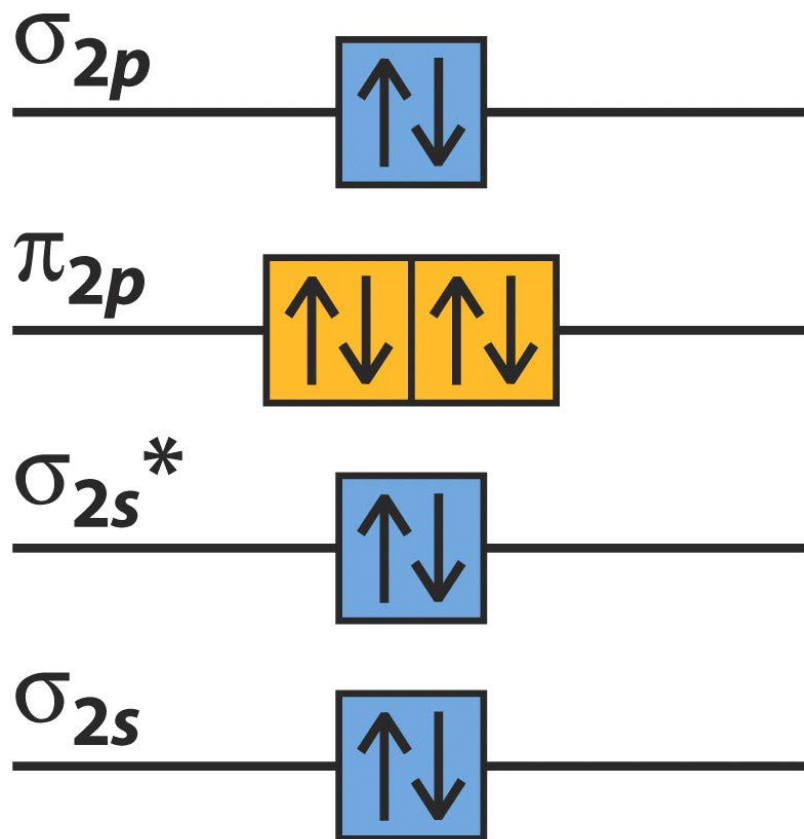
Li₂ до N₂

Редоследот
се менува



O₂ и F₂



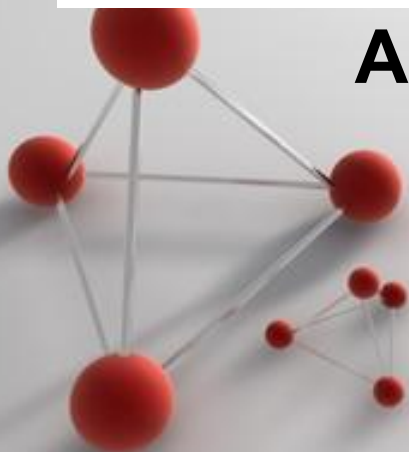


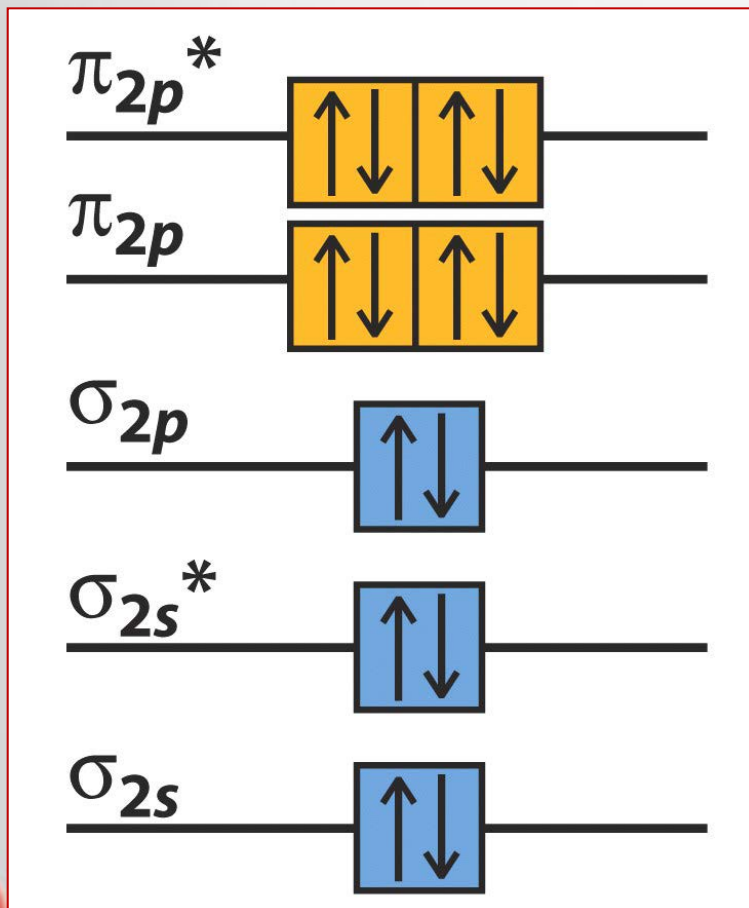
Два N атоми:
 - 10 валентни електрони

N₂ молекула:
 - 8 електрони во сврзувачката МО
 - 2 електрони во антисврзувачката МО

Ред на врската = 3

Азот, N₂



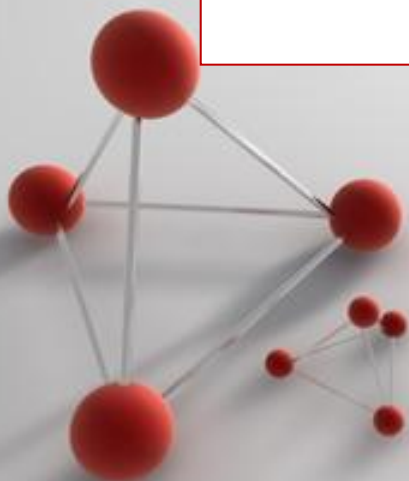


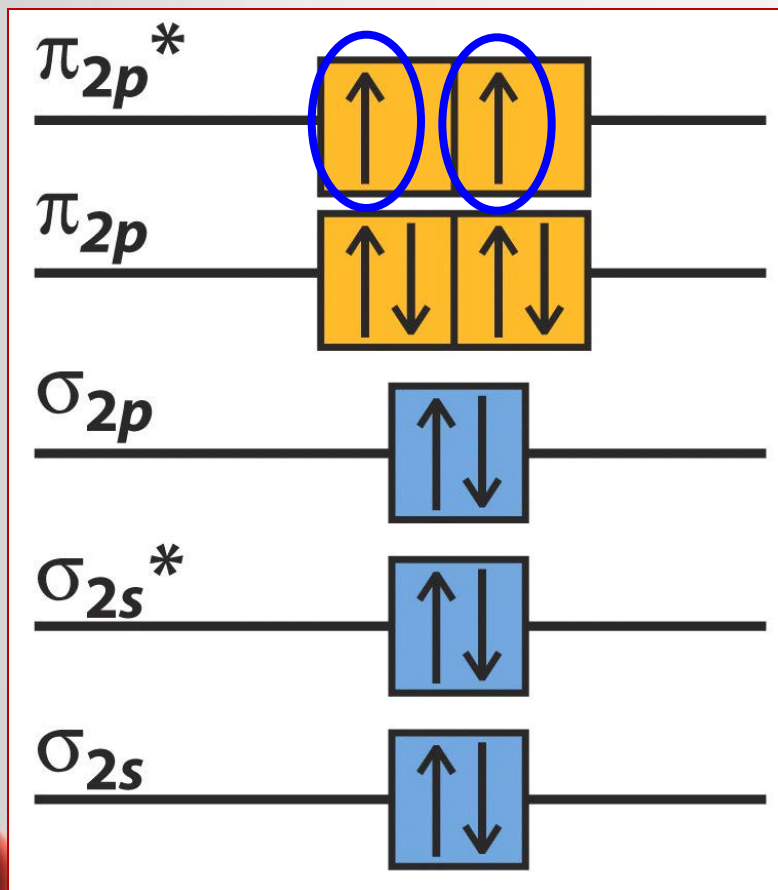
Два F атоми:
 - 14 валентни електрони

F_2 молекула:
 - 8 електрони во сврзувачката МО
 - 6 електрони во антисврзувачката МО

Ред на врската = 1

Флуор, F_2





Два О атоми:

- 12 валентни електрони

O_2 молекула:

- 8 електрони во сврзувачката МО

- 4 електрони во антисврзувачката МО

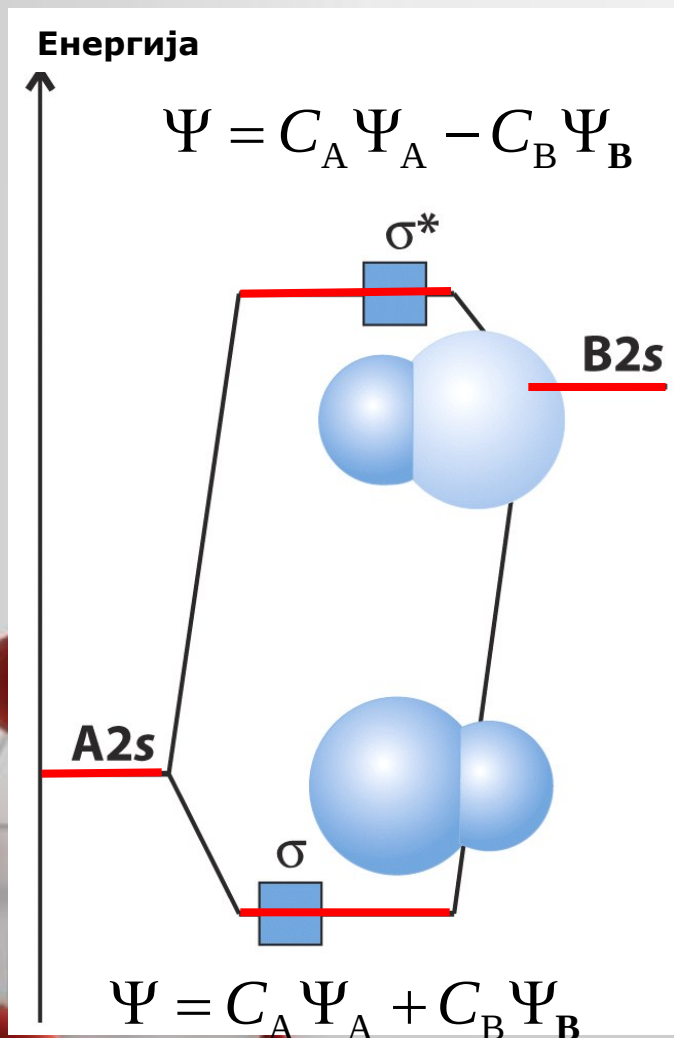
Ред на врската = 2

Укажува дека O_2 има два неспарени електрони (парамагнетичен), што е во согласност со експерименталните податоци.

Кислород, O_2



Хетеронуклеарни двоатомски молекули, АВ



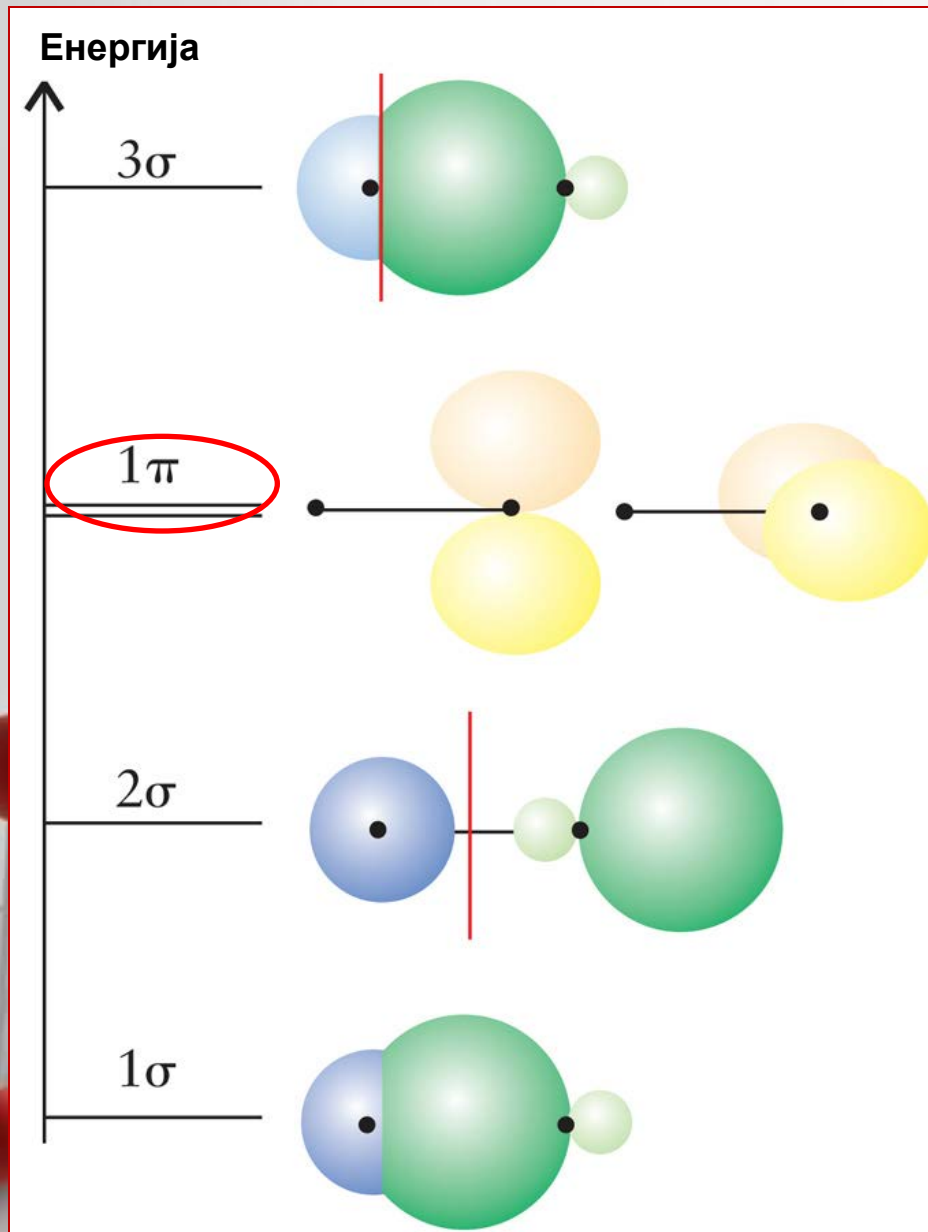
А и В се атоми на различни елементи.

А е поелектронегативен од В.

Енергијата на антисврзувачката МО е слична со енергијата на атомската орбитала на помалку електронегативниот елемент.

Енергијата на сврзувачката МО е слична со енергијата на атомската орбитала на поелектронегативниот елемент.

Дијаграм на МО кај HF



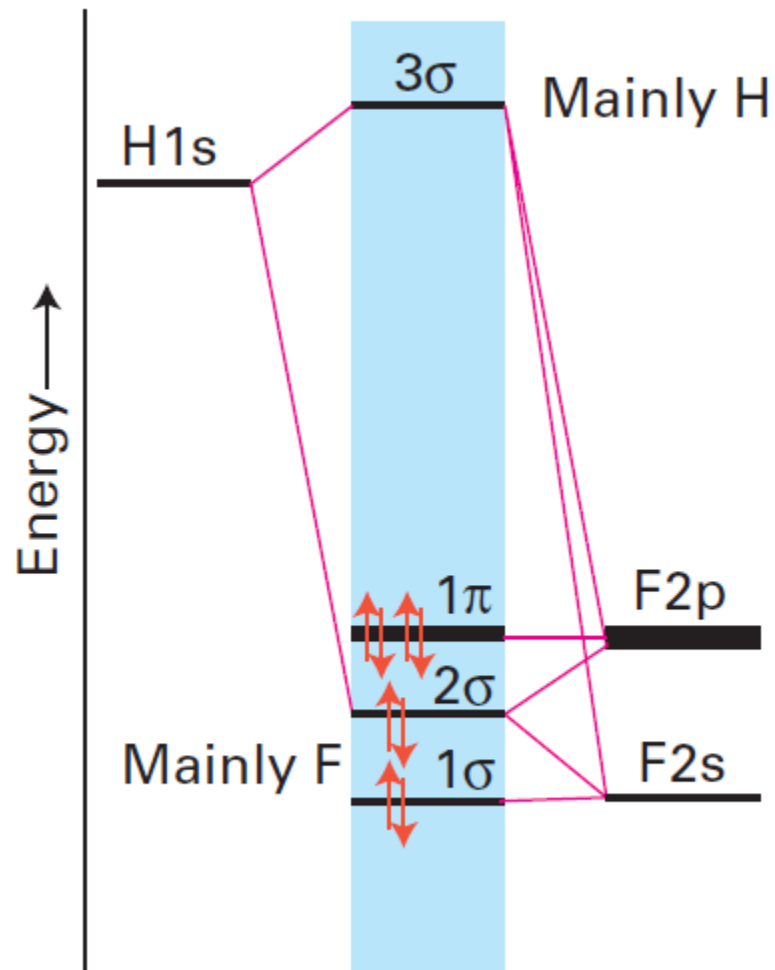
Антисврзувачка H 1s, F 2p_z

Несврзувачка 2 орбитали
F 2p_x, F 2p_y

Сврзувачка H 1s, F 2p_z

Несврзувачка F 2s

Дијаграм на МО кај HF



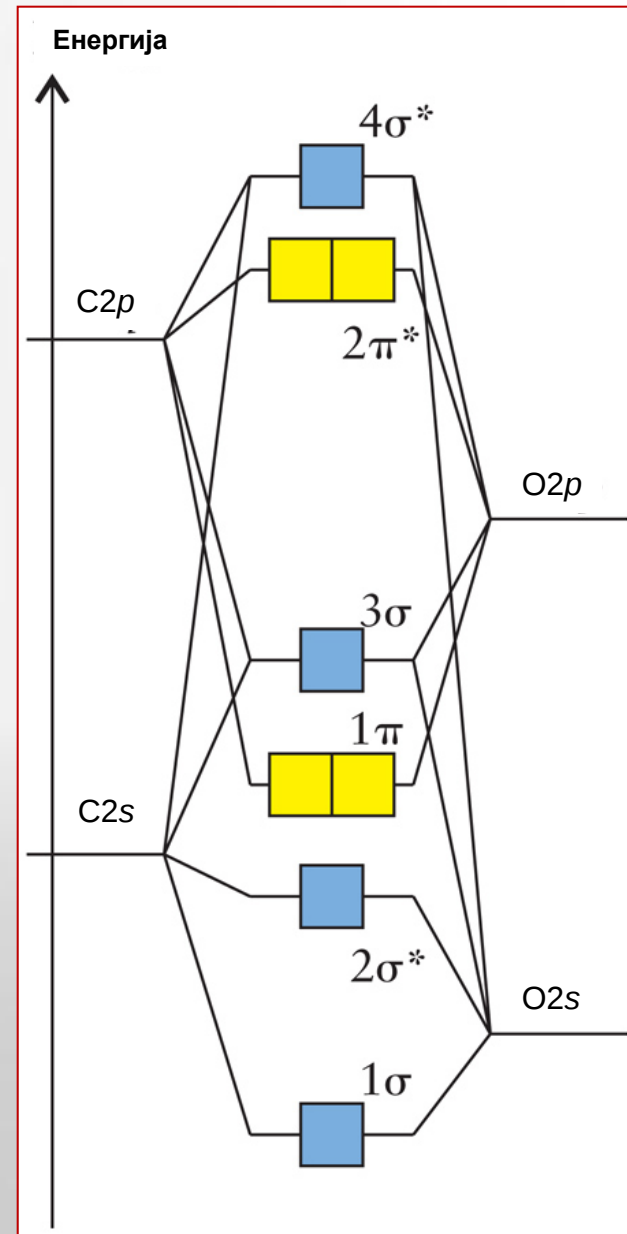
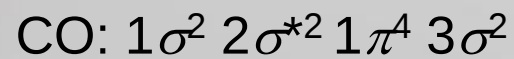
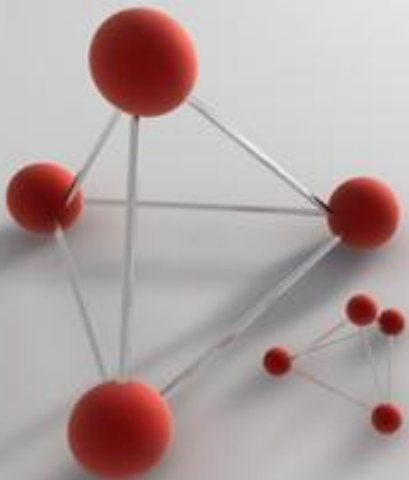
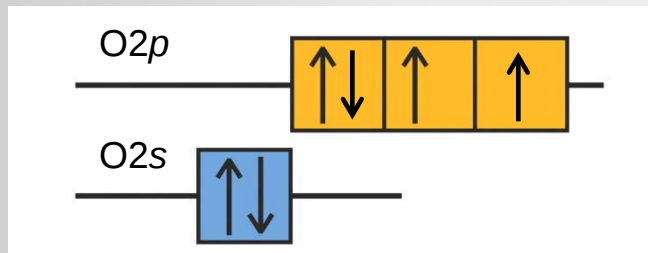
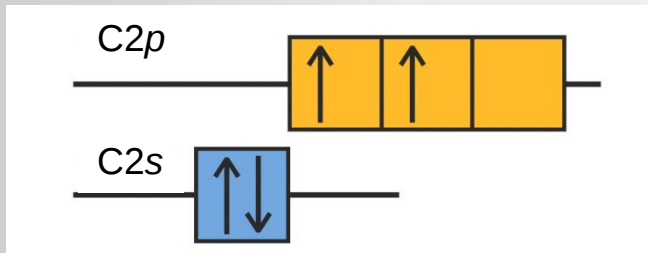
Антисврзувачка H 1s, F 2 p_z

Несврзувачка 2 орбитали
F 2 p_x , F 2 p_y

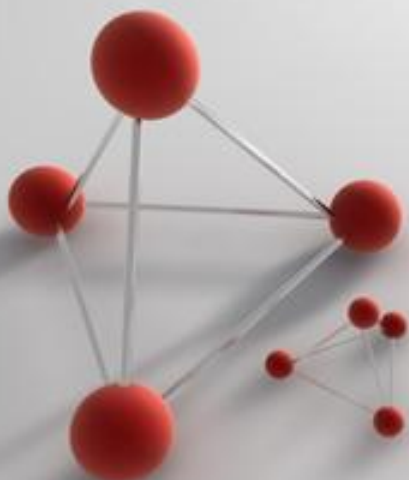
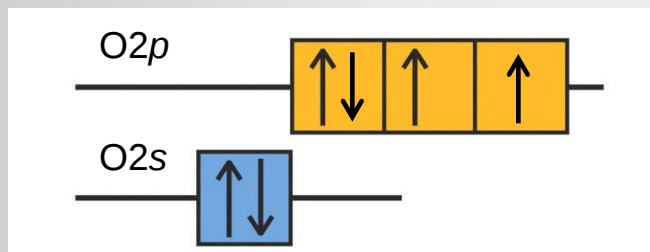
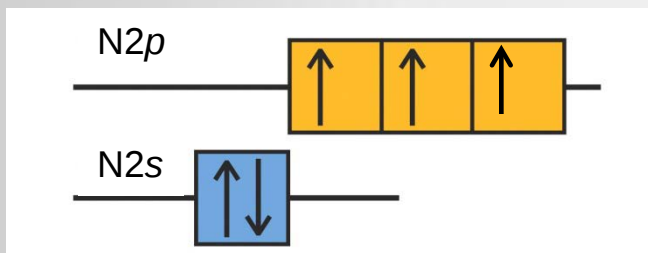
Сврзувачка H 1s, F 2 p_z

Несврзувачка F 2s

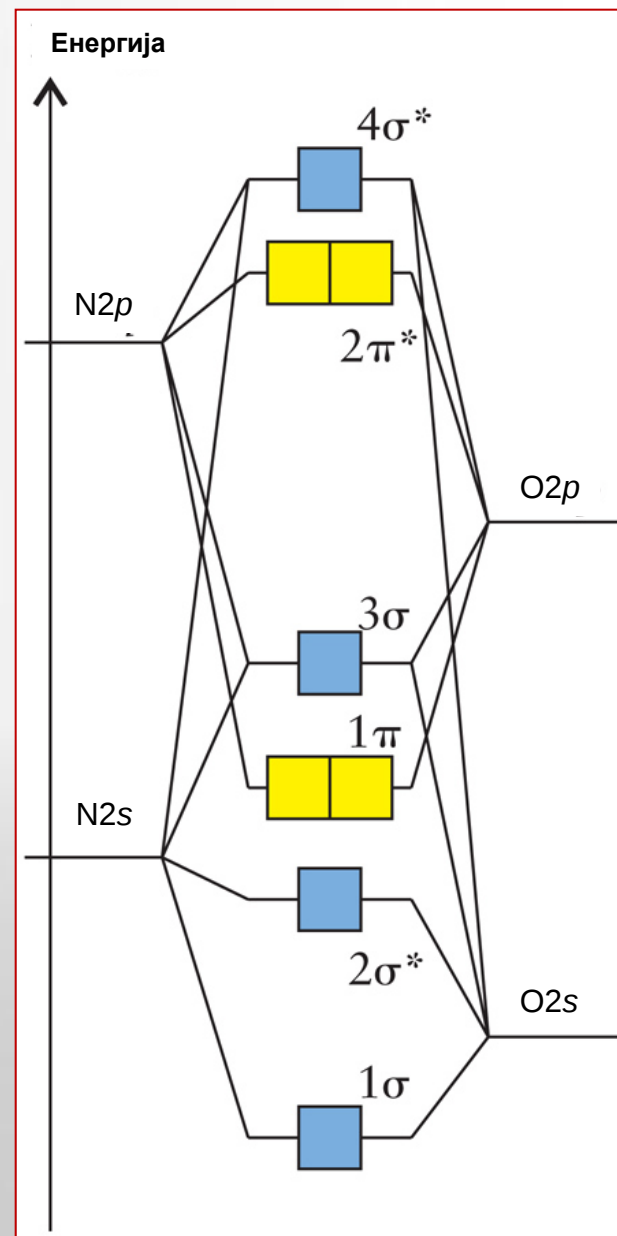
Дијаграм на МО кај СО



Дијаграм на МО кај NO

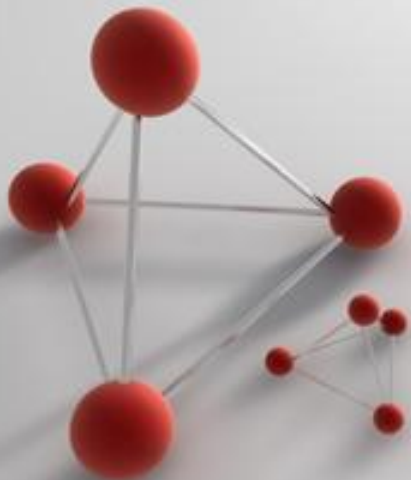


NO: $1\sigma^2 2\sigma^{*2} 1\pi^4 3\sigma^2 2\pi^{*1}$

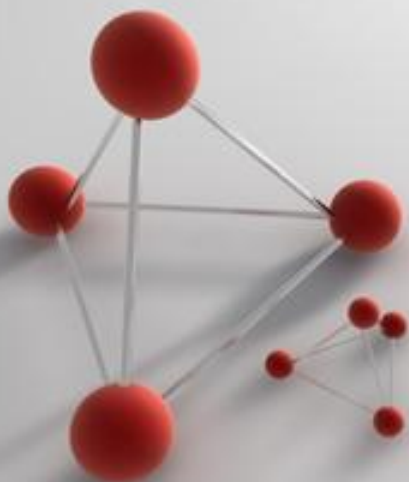


ВЕЖБИ

ТВВ и ТМО



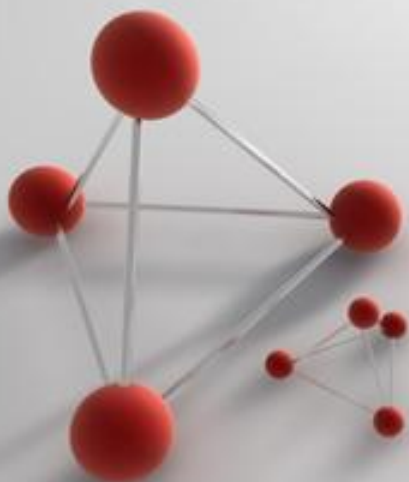
1. За каков тип хибридизација на валентните електрони на централниот атом станува збор во случајот на следните честички:



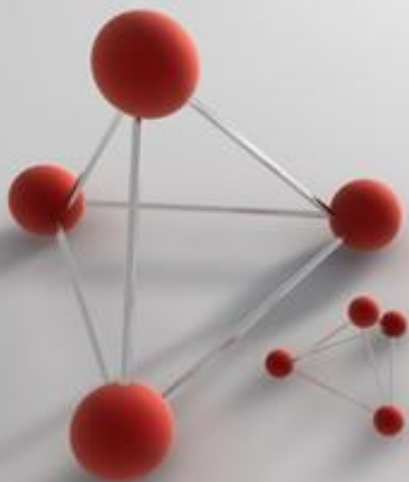
2. Четирите атоми кај белиот фосфор, P_4 , образуваат тетраедар во кој секој атом е поврзан со три други атоми.

а) Да се опише хемиското сврзување според ТВВ

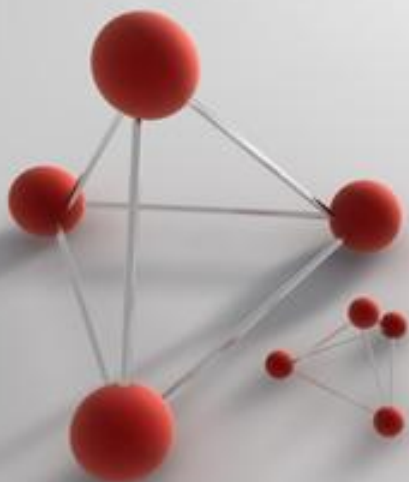
б) Дали молекулата е поларна или неполарна?



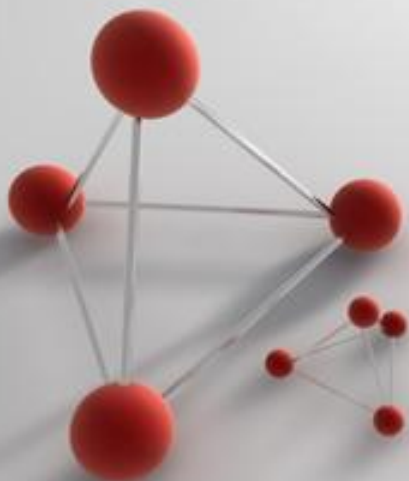
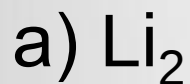
3. NH_2^- и NH_2^+ се нелинеарни честички, но аголот на врска кај NH_2^- е помал во споредба со NH_2^+ . Која е причината за разликата во аглите на врска?



4. Ксеноноот образува XeO_3 , XeO_4 и XeO_6^{4-} кои се однесуваат како силни оксиденси. За каков тип хибридизација на валентните орбитали се работи? Кај која од наведените честички Хе-О врска ќе биде најдолга?



5. Да се скицира енергетскиот дијаграм на молекулските орбитали и да се определи редот на врска за следните диатомски честички:



6. Да се скицира енергетскиот дијаграм на молекулските орбитали за следните диатомски честички:

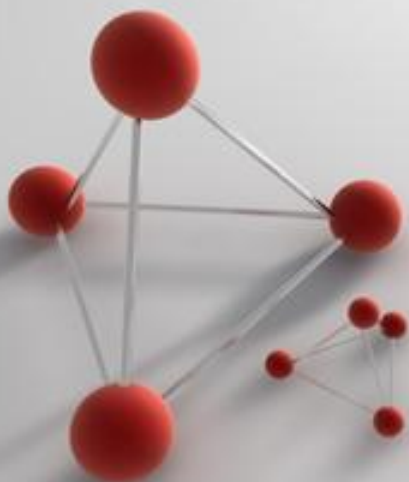


За секоја честичка да се определи редот на врска! Дали некои од честичките се парамагнетични? Дали орбиталата со најголема енергија која содржи електрон/и има σ или π карактер?

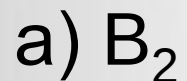


7. Електронската конфигурација на јонот C_2^{n-} во основната состојба е $\sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} \pi_{2p}^4 \sigma_{2p}^2$.

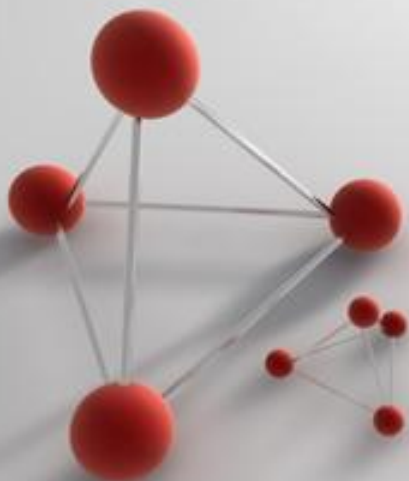
Да се определи редот на врска, како и полнежот на јонот!



8. Кои од следните честички се парамагнетични:



Доколку честичката е парамагнетична, колку неспарени електрони поседува?



9. Врз основа на електронската конфигурација, кои од следните честички ќе имаат најмала енергија на јонизација:

