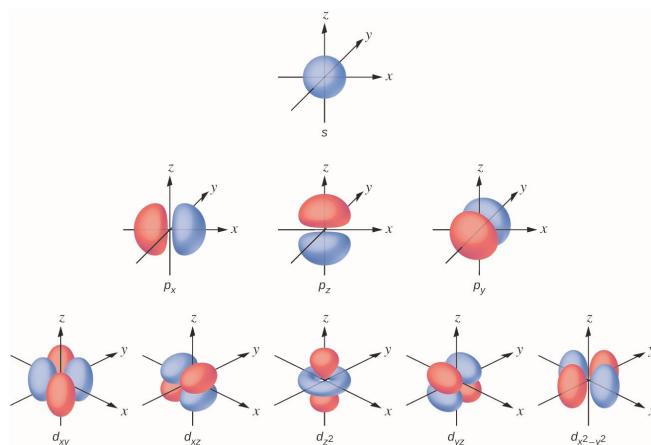


Orbitāles un kīmiskās saites

1. Atomu orbitāles

Elementa kārtas skaitlis apzīmē tā protonu un elektronu skaitu, piemēram, oglekļa atomu veido 6 protoni un 6 elektroni. Atoma kodols aizņem tikai 10^{-12} daļu no atoma telpas, pārējo daļu aizņem kustībā esoši elektroni. Tie ir izklidēti pa visu atoma telpu, taču atkarībā no to enerģijas, elektronu atrašanās sadalījums mainās. **Orbitāle** ir tā atoma telpas daļa, kurā noteikti atrodas elektrons. Orbitāles tiek attēlotas kā virsmas, kas ietver elektronu ar varbūtību 0.9 (1. attēls).



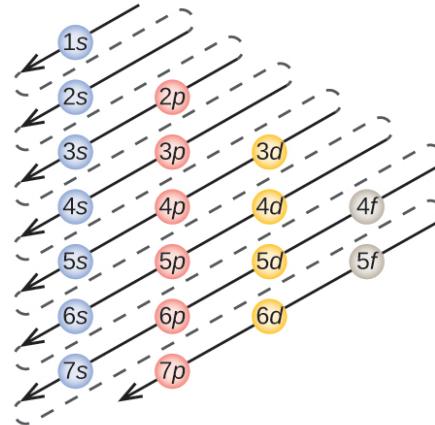
1. attēls. Orbitāļu attēlojums.

Elektronu enerģijas vērtības apzīmē ar **līmeniem** (1, 2, 3, ...) un **apakšlīmeniem** (s, p, d, f). Elektronu un tā orbitāli attiecīgi apakšlīmenim dēvē par s, p, d, f elektronu vai orbitāli.

- Katrā enerģijas līmenī ir viena s orbitāle.
- Sākot ar otro enerģijas līmeni pievienojas trīs p orbitāles.
- Sākot ar trešo enerģijas līmeni pievienojas piecas d orbitāles.

Orbitālē var atrasties elektronu pāris vai viens nepārots elektrons. Sapāroties var elektroni ar pretējiem spiniem, ko apzīmē ar $\uparrow\downarrow$. Orbitāļu shēmu zīmēšana parādīta 2.a attēlā. Elektroni vispirms novietojas brīvā orbitālē ar zemāko enerģiju, ja nav brīva cita tās pašas enerģijas orbitāle, tad tas sapārojas ar citu elektronu šajā orbitālē. Orbitāļu aizpildīšanās secība parādīta 2.b attēlā.

H	$1s^1$	
He	$1s^2$	
Li	$1s^2 2s^1$	
Be	$1s^2 2s^2$	
B	$1s^2 2s^2 2p^1$	
C	$1s^2 2s^2 2p^2$	
N	$1s^2 2s^2 2p^3$	
O	$1s^2 2s^2 2p^4$	
F	$1s^2 2s^2 2p^5$	
Ne	$1s^2 2s^2 2p^6$	
Na	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$	
Mg	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$	



(a) Elektronformulas un orbitāļu diagrammas attomiem līdz $3s$ orbitālei.

(b) Elektronu pildīšanās secība apakšlīmeņos.

2. attēls. Elektronu konfigurācijas un aizpildīšanas secība.

1. uzdevums. Uzzīmē hlora atoma orbitāļu diagrammu kā attēlā 2.a un nosaki elektronformulu!

Ķīmisku saiti veido elektronu pāris, kurš atrodas orbitālē, kuru dēvē par molekulāru orbitāli (MO). Šie elektroni var atrasties gan viena, gan otra atoma telpā, un ķīmiskās saites iedala pēc šī sadalījuma.

Saites veids	Apraksts	Piemēri
Nepolāra kovalenta saite	Elektronu pāris pieder tikpat daudz vienam cik otram atomam.	H_2 , O_2 , N_2
Polāra kovalenta saite	Ap viena atoma elektronu atrašanās varbūtība ir lielāka. Šim atomam ir daļēji negatīvs lādiņš, bet otram tikpat daļēji pozitīvs.	HCl , H_2S , NH_3
Jonu saite	Elektronu pāris atrodas gandrīz tikai viena atoma telpā. Atomi pārvēršas par joniem un turas kopā elektrostatiski.	$NaCl$, KBr , Na_2S

2. Luisa struktūras

Luisa simbolu veido elementa simbols un punkti, kuri apzīmē šī elementa ārējā līmeņa jeb valences elektronus. Valences elektronu skaitu A grupas elementiem var noteikt pēc to grupas numura (skat. 3. attēlu).

1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A	Noble Gases
H•							He:
Li•	:Be	B•	C•	N•	O•	F•	:Ne:
Na•	:Mg	Al•	Si•	P•	S•	Cl•	:Ar:
K•	:Ca						

3. attēls. Luisa simboli A grupu elementiem.

Ar Luisa simboliem var parādīt kovalento saišu veidošanos. **Luisa struktūras** ir molekulu attēlojumi, piemēram, Cl₂ molekulai (skat. 4.a attēlu), kuri izceļ to, ka ķīmisko saiti veido elektronu pāris. Ierastāk elektronu pāri apzīmē ar svītru (skat. 4.b attēlu).



(a) Cl₂ molekulas Luisa struktūra.

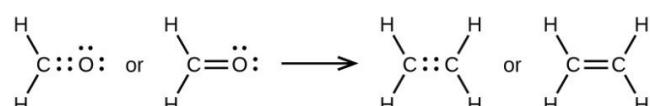


(b) Luisa saites attēlojums.

4. attēls. Luisa struktūru attēlojumi.

Elementu atomiem atšķiras valences elektronu skaits, bet to, kā tie veido saites vieno **okteta likums** — atomi dalās ar elektroniem tā, lai to ārējā energijas līmenī būtu astoņi elektroni. Izņēmumi ir H, He, Li un Be. Tiem kopumā ir maz elektronu, tāpēc astoņi valences elektroni tos nepadarītu stabilākus, tā vietā tie vēlas divus. Cik elektronu pietrūkst atomam lai izpildītu okteta likumu, tik kovalentās saites tas parasti veido.

Veidojoties dubultajām vai trīskāršajām saitēm, atomi savā starpā dala attiecīgi divus vai trīs elektronu pārus (5. attēls).



5. attēls. Luisa struktūras ar dubultsaiti.

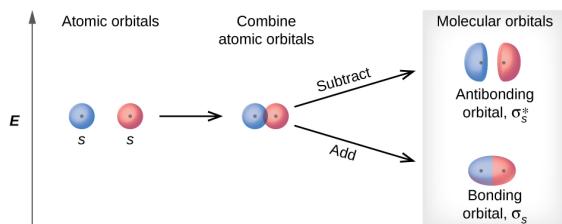
2. uzdevums. Cik kovalentās saites veido O, N un C atoms?

3. Molekulāro orbitālu teorija

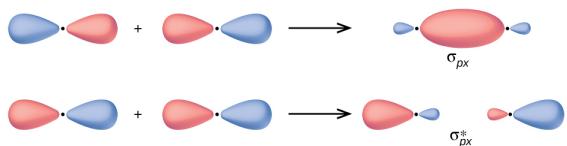
Līdz šim mēs ķīmisko saiti definējām kā elektronu pāri. Tagad aplūkosim, kā dažādos veidos elektronu orbitāles savā starpā mijiedarbojoties veido molekulārās orbitāles (MO), kas ir pamatā ķīmiskajai saitei.

Pārkļājoties divām s orbitālēm, piemēram diviem H atomiem, veidojas σ molekulārā orbitāle. Elektroniem ir gan dalīņu, gan viļņu raksturs, tāpēc, ja abu elektronu viļņi ir vienā fāzē, veidojas zemas energijas σ_s MO, savukārt, ja elektronu viļņi ir pretfāzē, veidojas augstas energijas nesaistošā σ_s^* MO (6.a attēls). Tikai no zemas energijas MO veidojas kīmiskā saite.

Turklāt σ saites var veidoties arī no pretejī novietotām p orbitālēm, kuras pārklājas (6.b attēls).



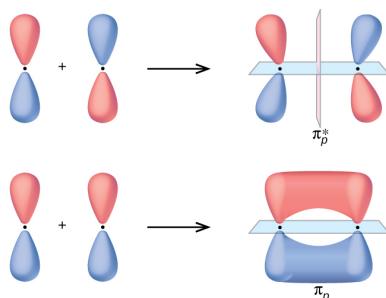
(a) σ molekulāro orbitāļu veidošanās no s orbitālēm.



(b) σ molekulāro orbitāļu veidošanās no p orbitālēm. Ar krāsām apzīmē elektronu viļņu fāzes.

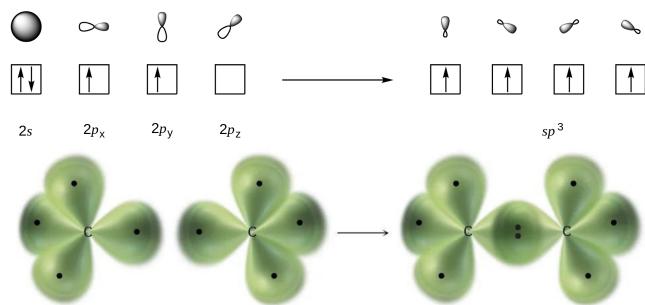
6. attēls. σ molekulāro orbitāļu veidošanās.

Sāniski pārklājoties p orbitāles veido π molekulārās orbitāles (7. attēls).



7. attēls. π molekulāro orbitāļu veidošanās no p orbitālēm.

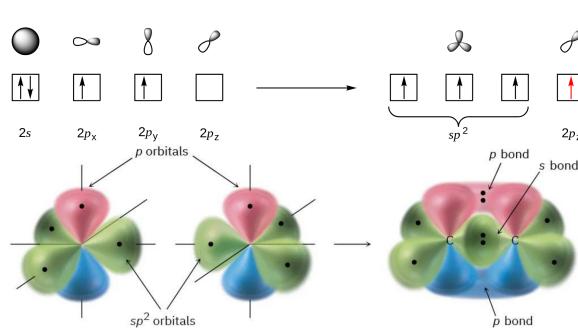
Pēdējais knifs, ko aplūkosim ir saišu hibridizācija. Ja aplūkoji C atoma elektronu konfigurāciju 2. attēlā, varbūt ievēroji, ka, lai aizpildītos pēdējā p orbitāle, C atomam būtu jāiegūst vesels elektronu pāris no cita atoma. Lietas notiek citādi. Vienā no gadījumiem 2s orbitāle hibridizējas ar trīs 2p orbitālēm, veidojot četras sp^3 orbitāles. Šīs orbitāles var veidot σ saites, piemēram ar H vai C atomiem, veidojot alkānus (8. attēls).



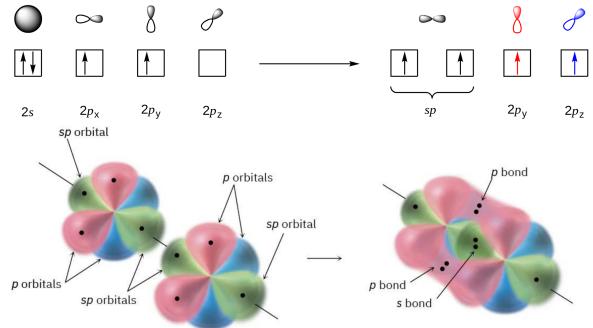
8. attēls. sp^3 hibridizācija un etāna saites.

Tāpat 2s orbitāle var hibridizēties ar divām vai vienu 2p orbitāli, veidojot attiecīgi trīs sp^2

orbitāles vai divas sp orbitāles. Atlikusās orbitāles ir p orbitāles, tāpēc tagad var veidoties σ un π saites reizē, veidojot dubultās (9.a attēls) vai trīskāršās saites (9.b attēls).



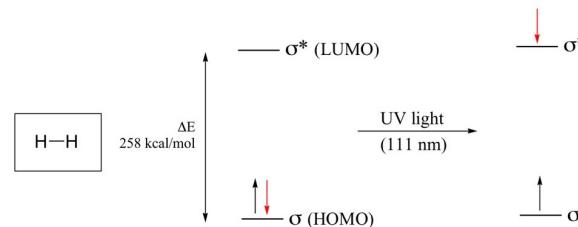
(a) sp^2 hibridizācija un etēna saites.



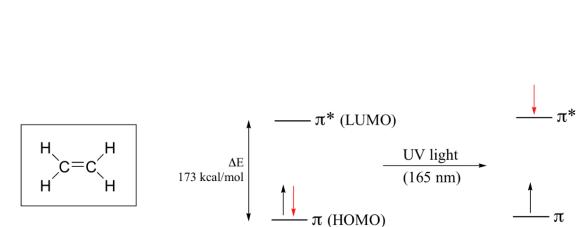
(b) sp hibridizācija un etīna saites.

9. attēls. Hibridizācijas veidi.

Ja ķīmiskajai saitei pievada atbilstošu energiju, piemēram, elektromagnētisko vilņu veidā, viens no tās elektroniem var pāriet augstas energijas MO, tādējādi saraujot saiti. Tā kā π saitēs atomu orbitāles mazāk pārklājas nekā σ saitēs, tās ir vieglāk saraut (10.a attēls un 10.b attēls).



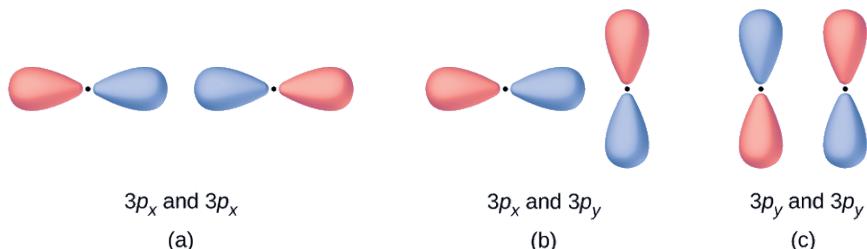
(a) Nepieciešamā energija (gaismas vilnis) σ saites saraušanai H_2 .



(b) Nepieciešamā energija (gaismas vilnis) π saites saraušanai C_2H_4 .

10. attēls. Saišu saraušanas energijas.

3. uzdevums. Padomā, kāda molekulārā orbitāles veidojas (un vai tā veidojas) un izvēlies gadījumu(s), kad veidojas ķīmiskā saite!

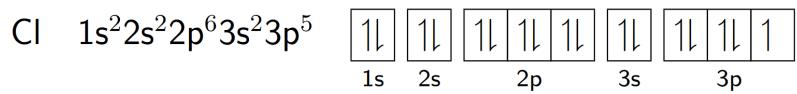


Atsauses

Chemistry (Open Stax), Paul Flowers, Klaus Theopold, Richard Langley & William R. Robinson, darbs ir licencēts saskaņā ar CC BY 4.0. Bezmaksas pieeja Chemistry (OpenStax).

Atbildes

1. uzdevums.



2. uzdevums. O veido 2 saites. N veido 3 saites. C veido 4 saites.

3. uzdevums. (a) gadījumā veidojas σ_p molekulārā orbitāle un saite. (b) gadījumā orbitāles nepārklājas, neveidojas molekulārā orbitāle. (c) gadījumā veidojas π_p^* molekulārā orbitāle, tāpēc kīmiskā saite neveidojas.