










Ķīmiskie mijiedarbības spēki un ķīmiskā saite

Ķīmiskā mijiedarbība starp vis sīkākām vielas daļiņām (atomiem, joniem un molekulām) nav novērojama vienīgi gāzveida stāvoklī. Ja gāzi pietiekami atdzesē tā sašķīdinās un sasilstot sacietē, jo starp atomiem, joniem un molekulām veidojas ķīmiskā mijiedarbības spēki, kuru dēļ daļiņas salīp un veido agregātus.

Ķīmiskā mijiedarbība ir pievilksnās un saistīšanās spēki, kas darbojas starp atomiem, joniem un molekulām, veidojot savienojumus, agregātus un kompleksus. Dabā to var novērot kā atomi, molekulas un joni pievelkas un salīp kopā, piemēram: no iztvaikojošiem ūdens tvaikiem (gāzveida ūdens molekulām H_2O) veidojas lietūs pīles, sniega pārslas, migla un mākoņi, kuri saplūst un nokrišņu veidā nokļūst peļķēs, ezeros, upēs, jūrās, okeānos, ledājos un sniega segās. Ķīmiskās saistīšanās spēki pēc to stipruma iedalās vājās ķīmiskajā saistībās, vidēji stiprās ķīmiskajās saistībās un stiprās ķīmiskās saitēs, kur stiprās ķīmiskās saites sauc par **ķīmiskajām saitēm**. **Ķīmiskā saite** veidojas starp diviem atomiem pēc apmaiņas mehānisma vai pēc donora akceptora mehānisma.

1. Apmaiņas mehānisms savieno divus atomus ar kopīgu saistošu elektronu pāru orbitāli  , ko sauc par **kovalento saiti**. Tā veidojas kopēja diviem atomiem, ja viena atoma ārējā elektronu enerģijas līmeni atrodas viens nesapārots elektrons ar spinu $s + 1/2$  un, ja otram atomam ārējā elektronu enerģijas līmeni atrodas viens nesapārots elektrons ar pretēji vērstu spinu $s - 1/2$ . Tā saista ķīmiskās saites daļiņniekus, atomus cieši kopā ar vienas vērtības ķīmisko **kovalento saiti** starp atomiem. No pamatskolas kursa zināms, ka **kovalentā saite** katram no diviem atomiem dod vienu **valento vērtību** ķīmiskajā savienojumā. Kopējo vērtību skaitu ķīmiskā elementa atomam savienojumā nosaka šī atoma veidoto **kovalento saišu** skaits.

2. Donora akceptora mehānisms savieno divus atomus ar kopīgu saistošu elektronu pāru orbitāli , ko sauc par **donoru-akceptoru saiti** vai **koordinatīvo saiti**. Tā veidojas kopēja diviem atomiem, ja viena **centrālā atoma** ārējā elektronu enerģijas līmenī atrodas brīvas orbitāles , un, ja otram atomam ārējā elektronu enerģijas līmeni atrodas vismaz viens brīvs nedalīts elektronu pāris orbitālē . **Centrālais** metāliskā elementa **atoms** parasti ir **katjons** ar dažām brīvajām orbitālēm , kurās atoms **akceptors koordinē** ap sevi vienu, divus, četrus vai sešus atomus, kuri ir elektronu pāru **donori** , un tos sauc par **ligandiem**. **Koordinatīvajā savienojumā** centrālā atomam ir **koordinācijas skaitlis**, kurš atbilst **donoru-akceptoru saišu** skaitam, donoru atomu skaitam un **ligandu** skaitam, kuri koordinējas ap **centrālo atomu**.

Elektronu valento pāru saišu metode pēc apmaiņas mehānisma.

(VSEPR) Valent Shell Electron Pair Repulsion

Ķīmisko saiti starp diviem atomiem veido kopīgs elektronu pāris, ko sauc par **kovalento saiti**.

Kovalent – *co* no *latīņu* valodas – kopā, ar un – *valēre* no *latīņu* valodas – būt vērtam.



Ķīmiskās mijiedarbības problēma, saistoties ar **kovalento saiti** vai jebkuru citu **ķīmisko saistību** ir centrālā problēma dabaszinātnēs nozarēs, kuras saistītas ar ķīmiju un izmanto ķīmiju.





I, II, III



Kovalento saišu veidi un piemēri

I Kovalentā nepolārā, polārā un jonu saite: nemetāli, oksīdi, skābes, bāzes, sāļi, minerāli un organiskās vielas;

II Donoru-akceptoru saite jeb koordinatīvās saites: kompleksajos vai koordinatīvajos savienojumos; un

III Metāliskā saite metālos ir s orbitāles elektroniem  , kuri saglabā brīvu, sfērisku pamat svārstības stāvokli **metāla** ķermenī, un kā brīvie elektroni piešķir **metāliskas** īpašības: atstaro gaismu kā spogulis,

vadītspēja u.c. Piemēram: Al, Fe, Cu, Ag, Au, Pt u.c.. Atšķirīgi **metālu** orbitālēs p  , d  un f  elektroni ir lokalizēti ap mezglu plaknēm un nevar būt brīvi no piesaistītā pozitīvi lādētā atoma kodola, kurš

atrodas mezglu plaknē, pretēji kā tas ir ar brīviem elektroniem s orbitāles   **metāla** ķermenī, kuriem nav mezglu plaknes, un tāpat kā **metāla** ķermenī ir brīvi elektroni, nesaistīti tāpat arī vienlaicīgi pieder visiem atomiem **metāla** ķermenī.

Apmaiņas mehānisms - σ , π kovalentās saites. Valent Shell Electron Pair Repulsion (VSEPR)

Elektronu valento pāru saišu metodi (VSEPR) pēc apmaiņas mehānisma definē pieci punkti, kas atklāj kovalentā saites īpašības veidot nepolāras, polāras un jonu kovalentās saites, kuras piemīt vielām

nemetāliem, oksīdiem, skābēm, bāzēm, sāļiem, minerāliem un organiskām vielām.

1. Kovalento saiti veido abiem atomiem kopīgs elektronu pāris ar pretēji vēršiem spiniem .

1. atoms 2. atoms



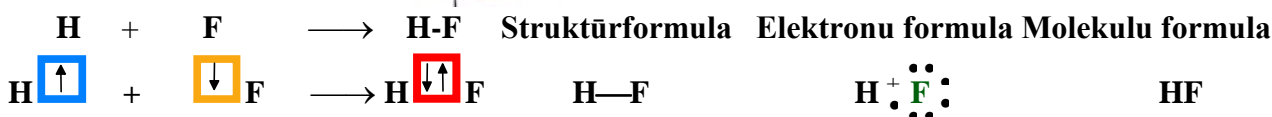
2. Elektronu pāris veidojas abu atomu orbitālēm pārklājoties. Jo lielāka ir pārklāšanās, jo stiprāka ir kovalentā saite starp atomiem.

Ūdeņraža 1s \uparrow orbitāle un fluora 2p \downarrow orbitāle, pārklājoties starp atomiem, veido kopīgu elektronu pāra orbitāli $\uparrow\downarrow$ – **kovalento saiti** (4.1.att.)

fluora atoma ↓ mezglu plakne ↓



Attēlojumi dažādos ķīmisko formulu veidos:



4.1.att. Kovalentās saites veidošanās starp H un F atomiem, pārklājoties elektronu orbitālēm. Kopīgs

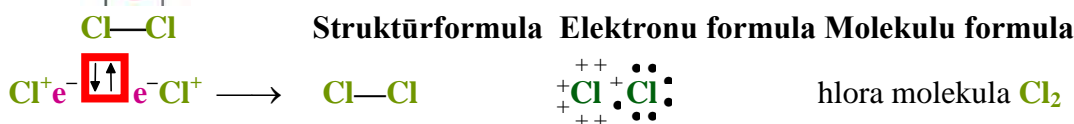
elektronu pāris $\uparrow\downarrow$ no katra atoma pa vienam elektronam apvienojoties $\uparrow + \downarrow$ ar pretēji vēršiem spiniem.

3. Orbitāļu pārklāšanās zonā starp pozitīvi lādētiem (+) atomu kodoliem palielinātais elektronu negatīvais lādiņš (—) **blīvums** pavājina atgrūšanās spēkus starp atomiem un nostiprina **kovalento saiti**.

Hloru atomu mezglu plaknes ↓ ↓



Attēlojumi dažādos ķīmisko formulu veidos:



Elektronu negatīvā lādiņa **sablīvējums** ↑ starp pozitīvi lādētiem (+) atomu kodoliem pavājina atgrūšanās spēkus un nostiprina kovalento saiti.

4. Kovalentā saite ir **piesātināta**, jo abiem atomiem kopīgo orbitāli var aizņemt tikai divi elektroni ar

antiparalēliem spiniem $\uparrow\downarrow$. Katrai ķīmiskā elementa atoma vērtība savienojumā ir vienvērtīga un atbilst vienai

kopīgai orbitālei ar diviem elektroniem $\uparrow\downarrow$. Ūdeņradis savienojumos ir vienvērtīgs **H-H** (**H:H** ūdeņraža molekula H_2), **H—O—H** ūdens molekulā H_2O ūdeņradis ir vienvērtīgs. Skābeklis —O— ir divvērtīgs ar divām

vērtībām – katra no divām **kovalentā saite** ir **piesātināta** $\text{H} \uparrow\downarrow \text{O} \uparrow\downarrow \text{H}$ ar vērtību viens vesels

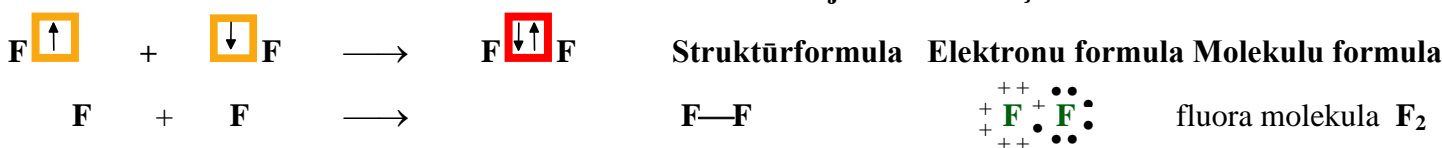
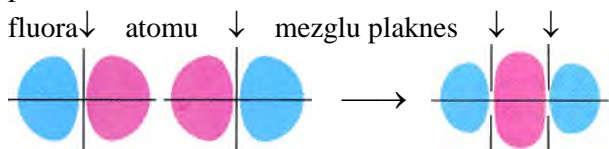
5. Kovalentai saitei piemīt centrālam atomam **simetrizēts ģeometrisks virziens telpā**, kas optimizē maksimālo orbitāļu **pārklāšanos** gar ķīmisko saiti starp atomiem. Atomi savienojoties veido centrālās **simetrijas ģeometriskās figūras**, kuras formējas un veidojas ar valences leņķi un saišu garumu (starp atomu attālumu).

Veidojoties molekulārām orbitālēm (kovalentām saitēm) ir iespējama divu veidu orbitāļu pārklāšanās konfigurācija sigma σ (singulārā) saite, kuras simetrijas ass atrodas uz vienas taisnes, kuras simetrijas ass atrodas uz vienas taisnes.

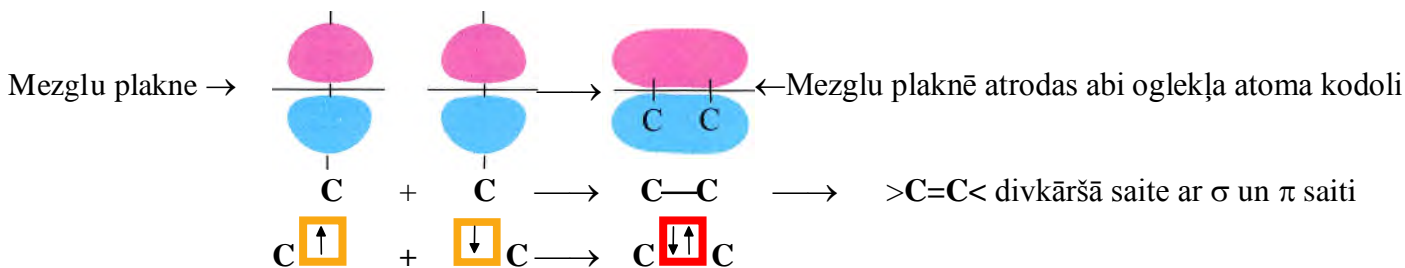
<http://aris.gusc.lv/BioThermodynamics/CrystalloGraphyL.pdf>

un pī π (papildus –pāra) saite.

3.att. F-F σ saite veido p orbitāles, kuru simetrijas ass atrodas uz vienas taisnes. Orbitāles tuvojas ar elektronu antiparalēliem spiniem saplūstot **sarkanām** daļām, **zilās** daļas paliek ārpusē aiz atomu kodoliem. Mezglu plaknes saglabā savu pozīciju uz atomu kodoliem perpendikulāri simetrijas asīm un ir savstarpēji paralēlas.



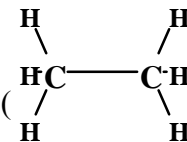
3.att. F un F atomu p orbitāles saplūst σ molekulārajā orbitālē un veido elektronu negatīvā lādiņa (\ominus) **sablīvējumu** starp fluora pozitīvi lādētiem atomu kodoliem, pavājinot kodolu atgrūšanās spēkus un nostiprinot atomu saistību fluora molekulā F_2 . Atomu kodoli atrodas paralēlās orbitāļu mezglu plaknēs perpendikulāras simetrijas ass taisnei, kuras sadala negatīvi lādēto elektronu blīvumus trīs simetriskos reģionos un vislielākais elektronu blīvums atrodas starp atomu kodoliem.



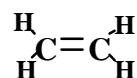
4.att. C un C atomu p orbitāles saplūst π molekulārajā orbitālē un veido divkāršo saiti $>\text{C}=\text{C}<$, kura ir otra papildus pāra saite pēc sigma σ saites $\text{C}-\text{C}$ izveidošanas. Kopīgajā mezglu plaknē atrodas abi oglekļa atoma kodoli, bet elektronu negatīvā lādiņa (\ominus) **sablīvējumu** starp pozitīvi lādētiem oglekļa atomu kodoliem atrodas kopīgās mezglu plaknes abās pusēs, pavājinot kodolu atgrūšanos un nostiprinot atomu saistību kopīgi ar sigma saiti σ izveidotajā dubultsaitē $>\text{C}=\text{C}<$.

π saite veidojas pārklājoties (C un C vai O vai S vai P vai N) atomu elektronu orbitālēm ar paralēlām simetrijas asīm un kopīgu mezglu plakni. Atomu kodoliem satuvojas uz kopīgas mezglu plaknes un saplūst p orbitāļu daļas abās mezglu plaknes pusēs.

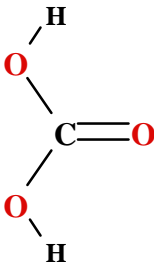
σ molekulārajās orbitālēs elektrona negatīvā lādiņa blīvums palielinās uz taisnes, kas savieno atomu kodolus. π saite veido negatīvā elektrona lādiņa sablīvējumu starp atomiem (C un C vai O vai S vai P vai N) abās mezglu plaknes pusēs. *Latīņu* vārds *SINGULĀRIS* – nozīmē viens, viens pats un *grieķu* burts sigma σ ir šī vārda pirmais burts un apzīmē vienkāršo ķīmisko saiti – sigma saiti. Divkāršā saite ir pāris $>\text{C}=\text{C}<$ un *latīniskais PĀR* –pāris latviski un vārda pirmais burts grieķu alfabētā ir pī π ar ko apzīmē divkāršo vai trīskāršo saiti.



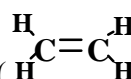
π orbitāles piebiedrojas σ orbitālei jeb tā sauktai vienkāršai kovalentai saitei etānā ($\text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{H}$) kā etēna



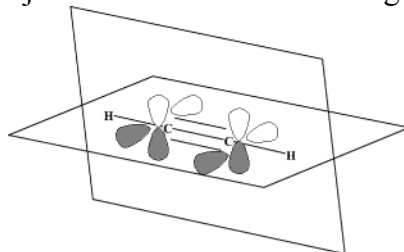
un etīna ($\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$) papildinājums σ saitei (vienkāršai saitei) ir divkāršās un trīskāršās saites. Dabā satopamās π saites pastāv vienīgi kombinācijā ar σ saiti kā papildus kovalentā saite divkāršā un trīskāršā saitē.



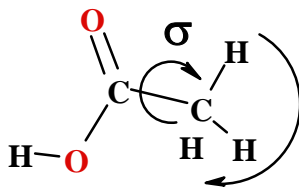
$\text{C}=\text{O}$; $\text{O}=\text{C}=\text{O}$;
Oglekļa(II) oksīds; oglekļa(IV) oksīds; ogļskābe H_2CO_3



Vienkāršās saites vienmēr ir σ molekulārās orbitāles, bet divkāršās ($\text{H}-\text{C}=\text{C}-\text{H}$) un trīskāršās ($\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$) saites ir π molekulāro orbitāļu (vienas vai divu) papildus kombinācija ar vienkāršās saites σ molekulāro orbitāli. Trīskāršās saites gadījumā abām π orbitālēm mezglu plaknes ir savstarpēji perpendikulāras.

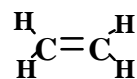


Ar σ saiti savienotajiem atomiem molekulā ir rotācijas brīvības pakāpe ap orbitāles simetrijas asi.



Etiķskābes molekulā $\text{H}-\text{O}-\text{C}-\text{CH}_3$ starp oglekļa atomiem ir vienkāršā sigma saite.

Kamēr divkāršā saite ir cieta, fiksēta un nerotējoša konsistence (*consistere –latīņu vārds– cieti, stingri stāvošs*).




Etēna molekula ir plakana cieta struktūra bez rotācijas iespējām ap $>\text{C}=\text{C}<$ dubulto saiti.



Etīna trīskāršā saite nodrošina četru atomu pilnīgi lineāru struktūru $\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$ taisnas nūjas formā.


Uzdevums. Uzzīmējiet struktūrformulas dotajām molekulām! Saskaitiet sigma σ un π saites tanīs?

Uzskaitiet un uzrādiet π saites starp kuriem atomiem molekulā tās ir izveidojušās? Skābeklis O_2 , slāpeklis N_2 , oglekļa IV oksīds CO_2 , sēra IV oksīds SO_2 , sēra VI oksīds SO_3 , slāpekļa IV oksīds NO_2 , ogļskābe H_2CO_3 , sērskābe H_2SO_4 , fosforskābe H_3PO_4 , etiķskābe CH_3COOH , acetons CH_3COCH_3 , kalcija karbīds CaC_2 , etīns C_2H_2 .

Svarīgākais: par kovalento saiti

1. Kovalento saiti starp diviem atomiem veido kopīgs elektronu pāris molekulārā orbitālē .

2. Pēc apmaiņas mehānisma no katra atoma piedalās pa vienam nesapārotam brīvam elektronam  un ,

veidojot kopēju orbitāli ar elektronu pāri un pretēji vērstiem spiniem .

3. Sigma σ saite ir vienkāršā kovalentā saite, kura var papildināties ar π saiti dubultās saites vai trīskāršās saites formā.