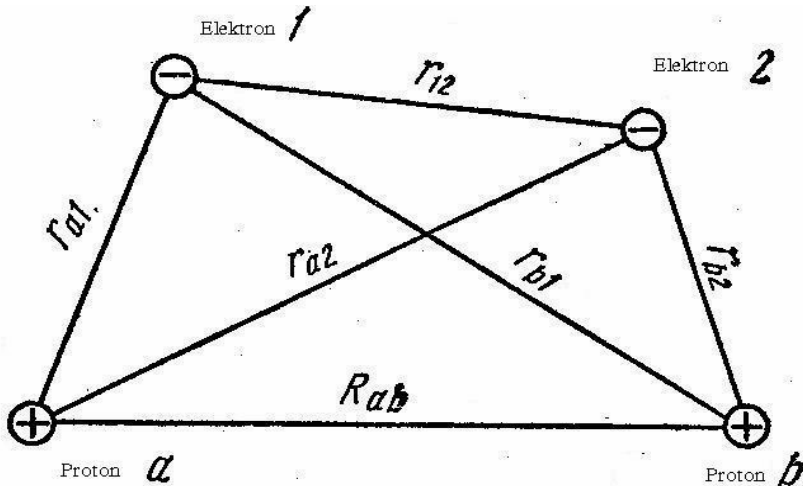


Mühazirə 5. KOVALENT RABİTƏNİN KVANT NƏZƏRİYYƏSİ.

H_2 MOLEKULU

Məlumdur ki, kimyəvi rabitələr ikimərkəzli, ikielektronlu olurlar, yəni, rabitənin yaranmasında iştirak edən iki atomdan hər biri bu rabitəyə bir elektron təqdim edir. Əgər rabitə elektroməfilikləri kəskin fərqlənən atomlar arasında yaranarsa (məs: metallar və qeyri metallar), onda rabitənin elektron buludu elektroməfiliyi çox olan atoma doğru sürüşür. Həmin atom «-» iona çevrilir, digəri isə «+» iona çevrilir. Əks işarəli bu 2 ion arasında Kulon cazibə qüvvəsi rabitənin yaranmasını təmin edir. Belə rabitəyə **ion rabitəsi** deyilir. Bəzən kimyəvi rabitə elektroməfilikləri bir-birinə çox yaxın olan və ya eyni olan atomlar arasında yaranır. Bu zaman rabitənin elektron buludu atomlardan hər hansı birinə tərəf sürüşür. Elektron buludu rabitənin ortalarında lokallaşmış olur. Belə rabitəyə **kovalent rabitə** deyilir. Kovalent rabitənin yaranmasında Kulon qüvvələri əsas rol oynaya bilməz. Kovalent rabitənin yaranma səbəbləri yalnız kvant mexanikası yarandıqdan sonra izah oluna bilib. 1927-ci ildə Qaytler və London H_2 molekulu üçün Şredinger tənliyini həll etmişlər və göstərmişlər ki, H atomları arasında rabitənin yaranmasında əsas rolu elektronların dalğa təbiətli olması oynayır. H_2 molekulu iki nüvədən və iki elektrondan ibarət dayanıqlı sistemdir. Hesablamalar adiabatik yaxınlaşma çərçivəsində aparılmışdır. Yəni, nüvələr sükunətdə götürülmüş və elektronların sükunətdə olan nüvələr ətrafında hərəkəti öyrənilmişdir.



Şəkil H_2 molekulunda hissəciklər arasındakı məsafələr

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{r_{a1}} - \frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} - \frac{e^2}{r_{b2}} + \frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{R_{ab}} \quad (1)$$

Molekul üçün Şredinger tənliyi aşağıdakı kimi olur:

$$\hat{H}\psi(1,2) = E\psi(1,2) \quad (2)$$

Burada bir və iki ilə uyğun olaraq I və II elektronun koordinatları çoxluğu işarə edilmişdir. Hesablamalar zamanı Qaytler və London qəbul etmişlər ki, H atomları arasında qarşılıqlı təsir çox zəifdir. Ona görə də molekulun dalğa funksiyasını H atomlarının atom orbitallarının hasili kimi axtarmaq olar.

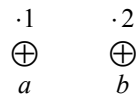
Hesablamalar zamanı H atomlarının $1s$ atom orbitallarından istifadə edilir:

$$\chi_a = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-ra}; \quad \chi_b = \frac{1}{\sqrt{\pi}} r^{-rb}$$

(3)

Elektronların nüvələr ətrafında yerləşməsinin aşağıdakı 4 limit halı ola bilər.

1. I elektron a nüvəsinin, II isə b nüvəsinin ətrafındadır:



Onda, $\psi_1 = \chi_a(1) \cdot \chi_b(2)$

2. $\begin{array}{cc} \cdot 2 & \cdot 1 \\ \oplus & \oplus \\ a & b \end{array} \quad \psi_2 = \chi_a(2) \cdot \chi_b(1)$

3. $\begin{array}{cc} 1 \cdot 2 \\ \oplus & \oplus \\ a & b \end{array} \quad \psi_3 = \chi_a(1) \cdot \chi_a(2)$

4. $\begin{array}{cc} & 1 \cdot 2 \\ \oplus & \oplus \\ a & b \end{array} \quad \psi_4 = \chi_b(1) \cdot \chi_b(2)$

Molekulun tam dalğa funksiyası ayrı-ayrı limit quruluşlarının dalğa funksiyasının xətti kombinasiyası kimi axtarılır. Yəni,

$$\psi(1,2) = \sum_{i=1}^4 c_i \psi_i = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 + c_3 \psi_3 + c_4 \psi_4 \quad (4)$$

$\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4$ məlum funksiyalardır. c_i -lər naməlum əmsallardır və onlar molekulun dalğa funksiyasında ayrı-ayrı limit quruluşlarının paylarını müəyyən edirlər.

Aydındır ki, hər iki elektronun eyni zamanda bir nüvə ətrafında olma ehtimalı çox kiçikdir. Ona görə də (4)-də c_3 və $c_4 \approx 0$ olur. Bu səbəbdən molekulun dalğa funksiyası iki limit quruluşunun xətti kombinasiyası kimi axtarıla bilər:

$$\psi(1,2) = \sum_{i=1}^2 c_i \psi_i = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 \quad (5)$$

(5)-dən istifadə edib (2) Şredinger tənliyini c_1 və c_2 əmsalları köməyi ilə ifadə etsək və enerjinin minimumlaşdırsaq, c_1 və c_2 əmsalları üçün xətti bircins tənliklər sistemi alınır. Bu tənliklər həll olunsaysa c_1 və c_2 əmsallarının qiymətləri, eləcə də H_2 molekulunun orbital enerjiləri tapılmış olur. c_1 və c_2 -nin hesablanmış qiymətləri əsasında H_2 molekulunun molekulyar orbitalları üçün aşağıdakı ifadələr alınır:

$$\psi_I = \psi_S = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot (1 + s^2)}} [\chi_a(1)\chi_b(2) + \chi_a(2)\chi_b(1)], \quad (6)$$

$$E_1 = 2E_H + \frac{K + A}{1 + s^2}$$

$$\psi_{II} = \psi_{AS} = \frac{1}{\sqrt{2(1 - s^2)}} [\chi_a(1)\chi_b(2) - \chi_a(2)\chi_b(1)], \quad (7)$$

$$E_2 = 2E_H + \frac{K - A}{1 - s^2}$$

$$S = \int \chi_a \chi_b dV \quad (8)$$

Burada E_H - izolə edilmiş H atomunun enerjisidir.

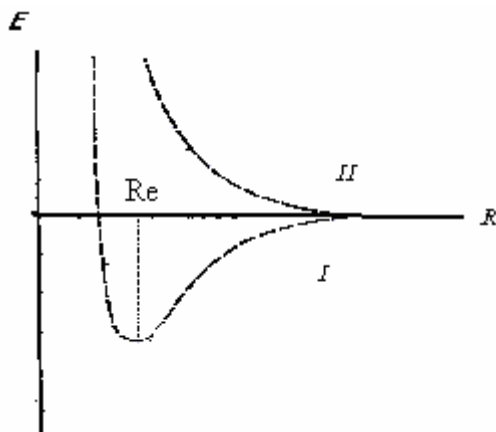
S - χ_a və χ_b atom orbitalları arasında örtmə inteqralıdır.

K - nin ifadəsinə molekulda mümkün olan bütün növ Kulon qarşılıqlı təsir enerjiləri daxildir (buraya elektronlarla nüvələr arasında Kulon cazibə, elektronlarla elektronlar və nüvələrlə-nüvələr arasında Kulon itələmə enerjiləri daxildir).

A - ilə mübadilə qarşılıqlı təsir enerjiləri işarə edilmişdir (buraya mübadilə yük sıxlıqlarının bir-biri ilə və mübadilə yük sıxlığının nüvələrlə qarşılıqlı təsirləri daxildir).

Göründüyü kimi ψ_1 dalğa funksiyasında elektronların yerini dəyişsək o

işarəsini dəyişməyəcək. Ona görə də ψ_1 -ə **simmetrik dalğa funksiyası** deyilir. ψ_2 - isə elektronların yeri dəyişərkən işarəsini dəyişir, yəni ψ_2 **antisimmetrik dalğa funksiyasıdır**. Molekulun E_1 və E_2 enerjilərinin ifadələrinə daxil olan K, A və S elementləri nüvələrarası məsafədən asılı olaraq dəyişirlər. Ona görə də E_1 və E_2 -nin nüvələrarası məsafədən asılılıq qrafikalərini qurmaq olar. Bu qrafiklər aşağıdakı kimidir:



R_e - nüvələrarası tarazlıq məsafəsidir.

Göründüyü kimi, E_1 enerjili hal, müəyyən minimuma malikdir. E_2 -də isə belə minimum yoxdur. Deməli, molekulun ψ_1 dalğa funksiyası ilə təsvir olunan E_1 enerjili halı onun dayanıqlı halıdır. ψ_2 dalğa funksiyası ilə təsvir olunan E_2 enerjili halı isə dayanıqsız halıdır. Molekulun hansı halda dayanıqlı olduğunu müəyyən etmək üçün həm də elektron buludu sıxlığının paylanması şəklindən istifadə etmək olar.

Nüvələrarası məsafənin ortasından ona perpendikulyar çəkilmiş müstəvi üzərində $r_a = r_b$ olur. Ona görə bu müstəvi üzərində $\chi_a = \chi_b$ olur. Qeyd olunan müstəvi üzərində elektron buludu sıxlığını həm ψ_1 , həm də ψ_2 dalğa funksiyası ilə hesablayaq. Bu nöqtədə

$$\rho_1 = |\psi_I|^2 \neq 0$$

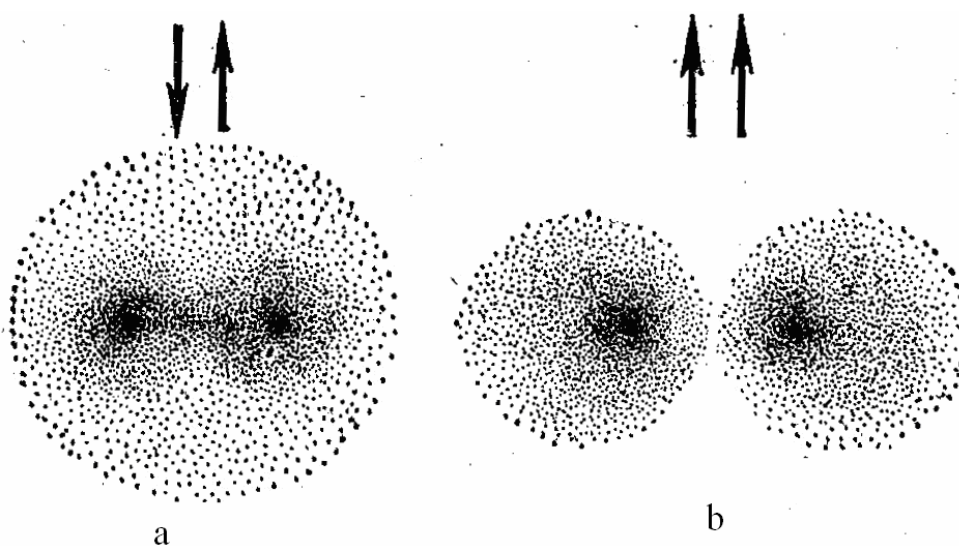
$$\rho_2 = |\psi_{II}|^2 = 0$$

olur.

Beləliklə, məlum olur ki, ψ_1 dalğa funksiyası ilə hesablanan elektron buludu sıxlığı nüvələrarası oblastda 0-dan fərqli olur. Bu buludun sıxlığının maksimumları nüvələrarası oblasta düşür. Nəticədə «-» yüklü elektron buludu protonları özünə doğru cəzb edərək dayanıqlı kovalent rabitə yaradır.

ψ_2 dalğa funksiyası ilə hesablanan elektron buludu sıxlığı isə nüvələrarası oblastda 0-a qədər azalır. Buludun sıxlığının maksimumları nüvələrarası oblastdan kənara düşür. Nəticədə protonlar əks tərəflərə dartılır, molekul dissosasiya edir (dayanıqsız hal).

Bu deyilənləri qrafiki olaraq təsvir etmək olar:



ψ_1 dalğa funksiyası ilə təsvir olunan halda molekulda kiçik rəqslər də baş verir. Nüvələrarası oblastdakı elektron buludu protonları özünə doğru cəzb edir. Protonlar bir-birinə yaxınlaşdıqca onlar arasındakı Kulon itələmə qüvvəsi artır, elə bir an yaranır ki, Kulon itələmə qüvvəsi cazibə qüvvələrinə üstün gəlir. Onda protonlar əks tərəflərə hərəkət edir, məsafə artır, itələmə qüvvələri azalır, müəyyən an cazibə qüvvələri itələmə qüvvələrinə üstün gəlir və proses təkrarlanır. Nəticədə nüvələrin müəyyən tarazlıq nöqtəsi ətrafında kiçik rəqsləri baş verir.

İndi də rabitənin yaranmasında spinlərin rolunu aydınlaşdıraq. Spinlərin yerləşməsinə əsasən aşağıdakı iki hal mümkündür:

1. Rabitəni yaradan elektronların spinləri antiparaleldir. Bu halın tam spini 0-a bərabərdir. Onda spinin üstün istiqamət üzrə proyeksiyası da 0-a bərabər olacaq.

$M_s = 0$, $2s + 1$ kəmiyyətinə halın multipletliyi deyilir. Aydındır ki, bu halda $2s + 1 = 1$ olur. Belə hala **sinqlet hal** deyilir.

Kvant mexanikasında müəyyən edilmişdir ki, sinqlet halın spin dalğa funksiyası elektronların spin koordinatlarının yerdəyişməsinə nəzərən antisimmetrikdir. Bu şərti ödəyən spin dalğa funksiyası aşağıdakı kimi axtarılır:

$$\Phi_{\text{sinq}}(\sigma_1, \sigma_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[U_{\frac{1}{2}}(\sigma_1)U_{-\frac{1}{2}}(\sigma_2) - U_{-\frac{1}{2}}(\sigma_1)U_{\frac{1}{2}}(\sigma_2) \right] \quad (9)$$

2. Elektronların spinləri paraleldir: $S = 1$, $M_s = -1, 0, 1$ $2s + 1 = 3$. Belə hala **triplet hal** deyilir. Müəyyən edilmişdir ki, triplet halın spin dalğa funksiyası elektronların spin koordinatlarına nəzərən simmetrikdir və aşağıdakı kimi ifadə olunur:

$$\Phi_{\text{trip}} = \begin{cases} U_{\frac{1}{2}}(\sigma_1)U_{\frac{1}{2}}(\sigma_2) & M_s = 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left[U_{\frac{1}{2}}(\sigma_1)U_{-\frac{1}{2}}(\sigma_2) + U_{-\frac{1}{2}}(\sigma_1)U_{\frac{1}{2}}(\sigma_2) \right] & M_s = 0 \\ U_{-\frac{1}{2}}(\sigma_1)U_{-\frac{1}{2}}(\sigma_2) & M_s = -1 \end{cases} \quad (10)$$

Məlumdur ki, elektronlar sisteminin tam dalğa funksiyası antisimmetriklilik şərtini ödəməlidir. Elektronların həm fəza, həm də spin koordinatlardan asılı olan və antisimmetriklilik şərtini ödəyən dalğa funksiyası aşağıdakı kimi təşkil edilir. Fəza koordinatlarından asılı simmetrik dalğa funksiyası, spin koordinatlarından asılı antisimmetrik dalğa funksiyasına vurulmaqla sistemin tam dalğa funksiyası əldə edilir.

Beləliklə, H_2 molekulunun həm fəza, həm də spin koordinatlarından asılı dalğa funksiyalarını aşağıdakı kimi axtarılır:

$$\psi_1 = \psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \cdot \Phi_{\text{sinq}}(\sigma_1, \sigma_2) \quad (11)$$

$$\psi_2 = \psi_{AS}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \cdot \Phi_{\text{trip}}(\sigma_1, \sigma_2)$$

(12)

Qeyd etdiyimiz kimi molekulun dayanıqlı halının dalğa funksiyası ψ_1 -dir. Bu halda kovalent rabitəni yaradan elektronların spinləri antiparalel olur. Nüvələrarası oblastda bu elektronlara məxsus elektron buludları bir-birini örtür, örtmə oblastında yaranan mübadilə qüvvələri elektronların spinləri antiparalel olduqda cazibə xarakterli olur. Bu da molekulun dayanıqlılığını təmin edir. Yuxarıda deyilənlərdən aydın olur ki, kovalent rabitənin yaranmasında əsas rolu mübadilə qüvvələri oynayır.

İKİ ATOMLU MOLEKULLARDA KOVALENT RABİTƏ

Kimyəvi rabitələrin müxtəlif növləri vardır. Kovalent rabitələr bir-birindən rabitənin elektron buludunun paylanma mənzərəsinə görə fərqlənirlər. Kovalent rabitə elektromənfilikləri eyni olan və ya çox yaxın olan atomlar arasında yaranır. Rabitənin yaranmasında iştirak edən elektronların spinləri antiparalel olur. Nüvələrarası oblastda elektron buludu sıxlığı 0-dan fərqli olur. «-» yüklü bu bulud protonları özünə doğru çəkir, sistemin enerjisi azalır və dayanıqlı rabitə yaranır. Kovalent rabitənin xassələri onun 2 eyni atom və ya 2 fərqli atom arasında yaranmasından asılı olur. Eyni atomlar arasında yaranan kovalent rabitəyə **homopolyar kovalent rabitə** deyilir. Əgər kovalent rabitə fərqli atomlar arasında yaranarsa, **heteropolyar kovalent rabitə** adlanır. Rabitənin dalğa funksiyası aşağıdakı kimi yazıla bilər:

$$\psi_{A-B} = a\psi_A + b\psi_B \quad (1)$$

Burada, ψ_A və ψ_B rabitəni yaradan atomların dalğa funksiyaları, a və b naməlum sabitlərdir. Onlar rabitənin dalğa funksiyasında ψ_A və ψ_B -nin paylarını müəyyən edən əmsallardır. Əgər $a = b$ olarsa, rabitə homopolyar, $a \neq b$ olduqda isə heteropolyar olur.

Müəyyən edilmişdir ki, homopolyar kovalent rabitə **qeyri polyardır** və belə rabitənin dipol momenti 0-a bərabər olur.

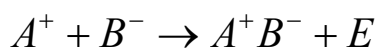
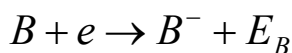
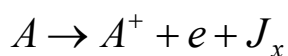
Heteropolyar kovalent rabitədə isə rabitənin elektron buludu az da olsa atomlardan birinə doğru sürüşür və rabitə **polyarlaşır**. Müəyyən edilmişdir ki,

heteropolyar rabitənin dipol momenti 3-4 Db tərtibindədir.

Qeyd edək ki, homopolyar kovalent rabitə də ani polyarlığa malik ola bilər. Elektron dalğa xassəli olduğundan hər 2 elektronun eyni bir nüvə ətrafında olma ehtimalı 0-dan fərqli olur. Məs: H_2 molekulunda rabitəni yaradan elektronlar müəyyən anda I nüvənin ətrafında ola bilər, eyni ehtimalla hər 2 elektronun II nüvə ətrafında olması da mümkündür. Bu hallarda rabitə ani polyarlığa malik olur. Lakin belə rabitənin uzun müddət üçün dipol momentinin orta qiyməti 0-a bərabər olacaqdır.

İON RABİTƏSİ

Əgər rabitənin dalğa funksiyasında $a \ll b$ olarsa, rabitə ion xarakterli olacaqdır. İon rabitəsi elektromənilikləri bir-birindən kəskin fərqlənən atomlar arasında yaranır. Məs: metallar və qeyri metallar. Belə rabitə yaranarkən elektron buludunun elektromənilikləri çox olan atomlara doğru kəskin sürüşməsi baş verir. Nəticədə həmin atom «-» yüklü iona, digəri isə «+» iona çevrilir. Əks işarəli bu iki ion arasında Kulon cazibə qüvvəsi dayanıqlı kimyəvi rabitə yaradır. Aydın olur ki, rabitənin yaranmasında əsas rolu elektrostatik təbiətli Kulon qüvvələri oynayır. İon rabitəsinin yaranmasında mübadilə qüvvələri demək olar ki, heç bir rol oynamır. Yuxarıda deyilənləri sxematik olaraq aşağıdakı kimi təsvir etmək olar:



J_x - ionlaşma potensialı,

E_B - elektrona hərislik (B atomunun),

E - rabitə yaranarkən ayrılan və ya udulan enerjidir.

İon rabitəsinin təbiəti kvant mexanikası yaranmamışdan əvvəl də məlum idi. İon rabitəsi yaranarkən atomlar öz elektron təbəqələrini uyğun təsirsiz qaz atomlarının elektron təbəqələrinə tamamlamağa çalışırlar. Məs: $NaCl$ molekulu

yanarkən *Cl* atomunun elektron təbəqəsi *Ar*-un, *Na* atomunun elektron təbəqəsi isə *Ne*-un elektron təbəqəsinə çevrilir.

Elektron dalğa təbiətli olduğundan təbiətdə 100%-li ion rabitəsi mümkün deyildir. Məs: tipik *NaCl* molekulu yanarkən *Na*-dan elektron buludunun heç də hamısı *Cl*-a sürüşür. Müəyyən edilmişdir ki, rabitə yanarkən *Na*-dan elektron buludunun 0,8 hissəsi *Cl*-a doğru sürüşür və molekulu $Na^{+0,8}Cl^{-0,8}$ kimi yazılmalıdır.

İon rabitəni kovalent rabitədən fərqləndirən bir sıra xüsusiyyətlər vardır:

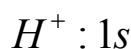
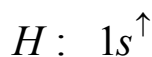
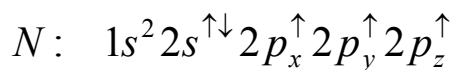
1. İon rabitəsi heteropolyar kovalent rabitəyə nisbətən daha çox polyardır. Müəyyən edilmişdir ki, ion rabitəsinin dipol momenti 9-12 Db tərtibindədir.
2. İon rabitəsi kovalent rabitədən fərqli olaraq doyma və istiqamətlənmə xassəsinə malik deyildir. Məlumdur ki, hər bir ion öz ölçülərinin imkan verdiyi qədər istənilən sayda əks işarəli ionla qarşılıqlı təsirdə olur. Məs: *NaCl* molekulunda hər bir *Na* ionu öz ətrafında olan *Cl* ionları ilə qarşılıqlı təsirdə olur. Bu ədədə koordinasiya ədədi deyilir. Hər bir ion əks işarəli ionla istənilən istiqamətdə qarşılıqlı təsirdə ola bilər.
3. Bərk halda ion rabitələri ion kristallarını, kovalent rabitələr isə molekulyar kristalları yaradır. Bunlar da xassələrinə görə bir-birindən fərqlənilir. Məs: ion kristallarının suda məhlulları elektrik cərəyanını yaxşı keçirir, molekulyar kristalların suda məhlulları isə elektrik cərəyanı keçirir.
4. Kovalent rabitənin enerjisi $E_{AB} = \frac{1}{2}[E_{A-B} + E_{B-B}]$ düsturu ilə hesablanır.

İon rabitəsi üçün bu düstur doğru olmur.

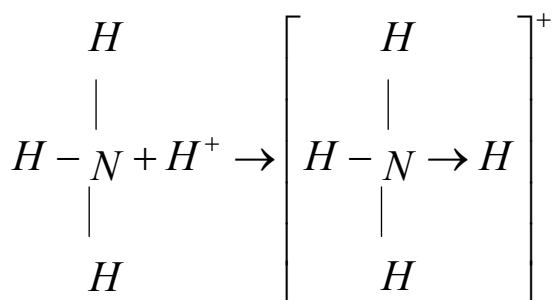
DONOR-AKSEPTOR RABİTƏSİ

Məlumdur ki, kovalent rabitə 2 atom arasında yaranır. Rabitəni yaradan atomlardan hər biri 1 elektron təqdim edir. Bu elektronların spinləri antiparalel olduqda dayanıqlı kimyəvi rabitə yaranır. Bəzən bu qayda pozulur. Belə ki, rabitəni yaradan atomlardan biri 2 elektron, digəri isə boş atom orbitalını təqdim edir. Belə rabitəyə **donor-akseptor rabitəsi** deyilir. Bu zaman elektronlarını təqdim edən atom

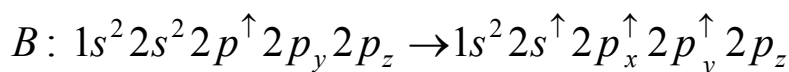
donor, boş atom orbitalını təqdim edən atom isə **akseptor** adlanır. Donor-akseptor rabitəsinə misal olaraq NH_3 molekulu ilə proton arasında yaranan rabitəni göstərmək olar:



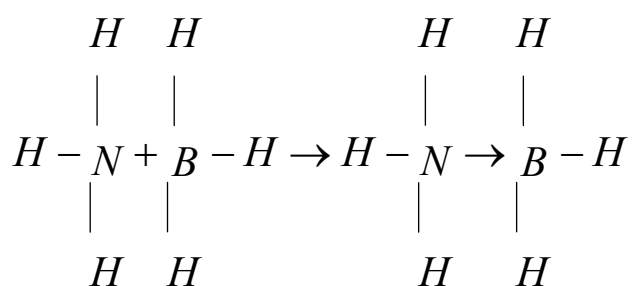
N -un elektron konfigurasiyası yuxarıdakı şəkildədir. Bu konfigurasiyaya uyğun olaraq N atomu 3 dənə H -lə 3 kovalent rabitə yaradır. Bu zaman N -un $2s$ -dəki elektronları rabitənin yaranmasında iştirak etmir və bölünməz elektron cütü təşkil edir. H^+ isə boş orbitala malikdir. Protonla NH_3 yaxınlaşarkən N -un bölünməz elektron cütü protonun boş orbitalına keçir və donor-akseptor rabitəsi yaranır. Rabitənin yaranmasını sxematik olaraq aşağıdakı kimi yazmaq olar:



Donor-akseptor rabitəsi 2 molekul arasında da yarana bilər. Məs: NH_3 və BF_3 molekulları yaxınlaşarkən N və B atomları arasında donor-akseptor rabitəsi yaranır:



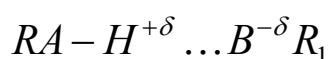
Borun 3 cütləşməmiş elektronu 3 F atomu ilə kovalent rabitə yaradır. $2p_z$ orbitalı isə boş olur. NH_3 və BF_3 bir-birinə yaxınlaşarkən N -un $2s$ -dəki bölünməz cütü Borun boş $2p_z$ orbitalına keçir və donor-akseptor rabitəsi yaranır:



Yuxarıdakı misallarda rabitə yaranarkən qeyri metal atomları öz bölünməz elektron cütlərini metal atomları isə boş orbitalını təqdim edirdi. Bəzən bu qayda pozulur. Belə ki, rabitə yaranarkən metallar donor, qeyri metallar isə akseptor rolunda çıxış edir. Belə rabitəyə tərs donor-akseptor və ya dativ rabitə deyilir.

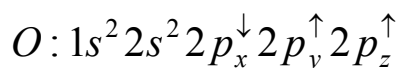
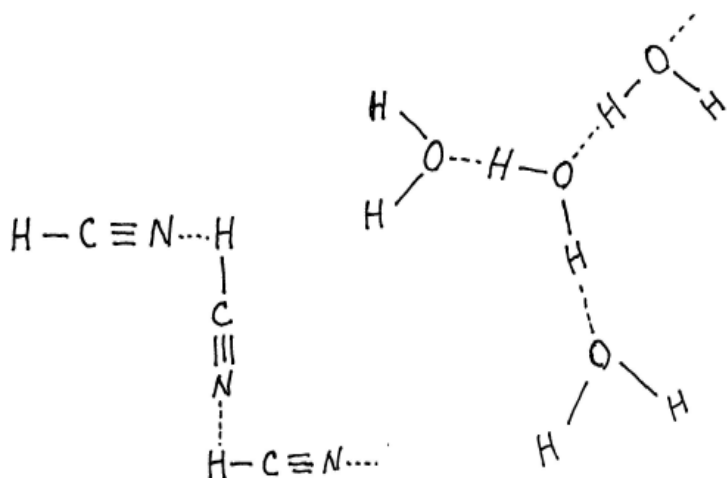
HİDROGEN RABİTƏSİ

Təcrübi faktlar göstərir ki, H atomu elektromənfilikləri böyük və heç olmazsa bir bölünməz elektron cütünə malik iki atom arasında rabitə yarada bilir. Belə rabitəyə **hidrogen rabitəsi** deyilir. Hidrogen rabitəsi bir molekulun iki atomu arasında və ya iki molekulun atomları arasında yarana bilər. Ona görə də hidrogen rabitəsinin iki növündən danışılır. Molekul daxili və molekullararası hidrogen rabitələri, hidrogen rabitəsini qırıq-qırıq xətlərlə göstərilər. Rabitənin mexanizmi ümumi şəkildə aşağıdakı kimidir:



H atomu A ilə kovalent rabitədir. A -nın elektromənfililiyi çox olduğundan rabitənin elektron buludu A -ya doğru sürüşür, nəticədə H protonlaşır. O, «+» effektiv yükə, həm də boş orbitala malik olur. B ilə R_1 arasında rabitə polyardır. Rabitənin elektron buludu B -yə doğru sürüşür. Nəticədə B «-» effektiv yükə malik olur. B -nin eyni zamanda bölünməz elektron cütü də vardır. Bu iki molekul bir-birinə yaxınlaşarkən H -lə B arasında rabitə yaranır. Deyilənlərdən aydın olur ki, hidrogen rabitəsinin yaranmasında həm elektrostatik qarşılıqlı təsir, həm də donor-akseptor qarşılıqlı təsiri rol oynayır. Rabitənin yaranmasının bir səbəbi də protonlaşmış H -nin çox kiçik ölçüyə malik olması və onun B -nin elektron təbəqəsinə daxil ola bilməsidir.

Molekullararası hidrogen rabitəsinə misal olaraq, sinil və su molekulları arasında yaranan rabitəni göstərmək olar:



Göründüyü kimi əsas halda O atomunun iki cütləşməmiş spinli elektronu vardır. Bu elektronlar vasitəsilə oksigen 2 H atomu ilə iki kovalent rabitə yaradır. Bu rabitələr polyardır. Belə ki, O -nin elektromənfiyyəti H -dən çox olduğundan rabitənin elektron buludu O -nə doğru sürüşür və H^+ protonlaşır. Hər bir O atomu həm də iki bölünməz elektron cütünə malikdir. Protonlaşmış H -lə bölünməz elektron cütləri arasında qarşılıqlı təsir hesabına su molekulları arasında hidrogen rabitələri yaranır. Hər bir oksigen iki bölünməz elektron cütünə malik olduğundan o, iki dənə hidrogen rabitəsi yarada bilər. Beləliklə, su molekulunun qarşılıqlı təsiri zamanı hər bir O atomu dörd rabitənin, 2 dənə hidrogen, iki kovalent rabitənin yaranmasında iştirak edir. Buzun kristallik quruluşu da bununla izah olunur. Qeyd edək ki, O və H atomları arasında yaranan kovalent rabitənin uzunluğu bu atomlar arasında yaranan hidrogen rabitəsinin uzunluğundan kiçik olur. Müəyyən edilmişdir ki,

$$d_{O-H} = 0,76 \overset{\circ}{A}$$

$$d_{O\dots H} = 1,76 \overset{\circ}{A}$$

Ona görə də $O-H$ kovalent rabitəsinin möhkəmliyi və enerjisi $O\dots H$ hidrogen rabitəsinin möhkəmliyi və enerjisindən çox olur.

Müəyyən edilmişdir ki, buz əriyərkən hidrogen rabitələrinin 15%-i, suyu 40°C -yə qədər qızdırdıqda 50%-i, su buxarlandıqda isə 100% qırılır.

