

Dodatne vsebine Splošna kemija
Samostojno delo

5. In 6.del

P6: Kemijska vez

P5: Atomi in elementi. Elektronska zgradba in periodičnost

Periodičnost v zgradbi atomov → *princip izgradnje*

	1s	2s	2p _x	2p _y	2p _z
H: 1s ¹	<u>↑</u>	<u> </u>	<u> </u>	<u> </u>	<u> </u>
He: 1s ²	<u>↑↓</u>	<u> </u>	<u> </u>	<u> </u>	<u> </u>
Li: 1s ² 2s ¹	<u>↑↓</u>	<u>↑</u>	<u> </u>	<u> </u>	<u> </u>
Be: 1s ² 2s ²	<u>↑↓</u>	<u>↑↓</u>	<u> </u>	<u> </u>	<u> </u>
B: 1s ² 2s ² 2p _x ¹	<u>↑↓</u>	<u>↑↓</u>	<u>↑</u>	<u> </u>	<u> </u>
C: 1s ² 2s ² 2p _x ¹ 2p _y ¹	<u>↑↓</u>	<u>↑↓</u>	<u>↑</u>	<u>↑</u>	<u> </u>
N: 1s ² 2s ² 2p _x ¹ 2p _y ¹ 2p _z ¹	<u>↑↓</u>	<u>↑↓</u>	<u>↑</u>	<u>↑</u>	<u>↑</u>
O: 1s ² 2s ² 2p _x ² 2p _y ¹ 2p _z ¹	<u>↑↓</u>	<u>↑↓</u>	<u>↑↓</u>	<u>↑</u>	<u>↑</u>
F: 1s ² 2s ² 2p _x ² 2p _y ² 2p _z ¹	<u>↑↓</u>	<u>↑↓</u>	<u>↑↓</u>	<u>↑↓</u>	<u>↑</u>
Ne: 1s ² 2s ² 2p _x ² 2p _y ² 2p _z ²	<u>↑↓</u>	<u>↑↓</u>	<u>↑↓</u>	<u>↑↓</u>	<u>↑↓</u>

The atomic numbers of He, Ne, Ar and Kr are 2, 10, 18 and 36 respectively. Write down the ground state

Apply the *aufbau* principle using the atomic orbital energy sequence:

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p$$

The ground state electronic configurations are:

He	$Z = 2$	$1s^2$
Ne	$Z = 10$	$1s^2 2s^2 2p^6$
Ar	$Z = 18$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$
Kr	$Z = 36$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6$

Each element Ne, Ar and Kr has a ground state electronic configuration $\dots ns^2 np^6$. Helium is the odd one out, but still possesses a filled quantum level; this is a characteristic property of a noble gas.

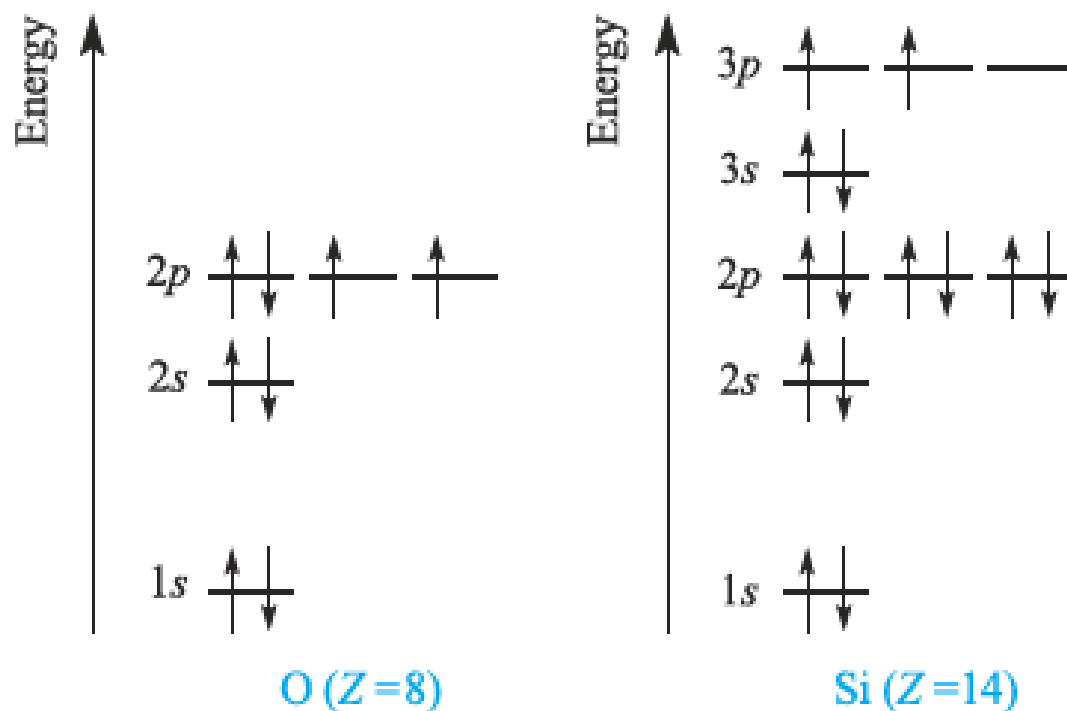


Fig. 1.14 Diagrammatic representations of the ground state electronic configurations of O and Si. The complete configurations are shown here, but it is common to simply indicate the valence electrons. For O, this consists of the $2s$ and $2p$ levels, and for Si, the $3s$ and $3p$ levels.

11. Zapišite *elektronsko konfiguracijo* Mg in Cl (uporabite oba načina – 'škatlast zapis' in spektroskopski način (to je: $1s^2 2s^2 2p^2 \dots$) in dalje:

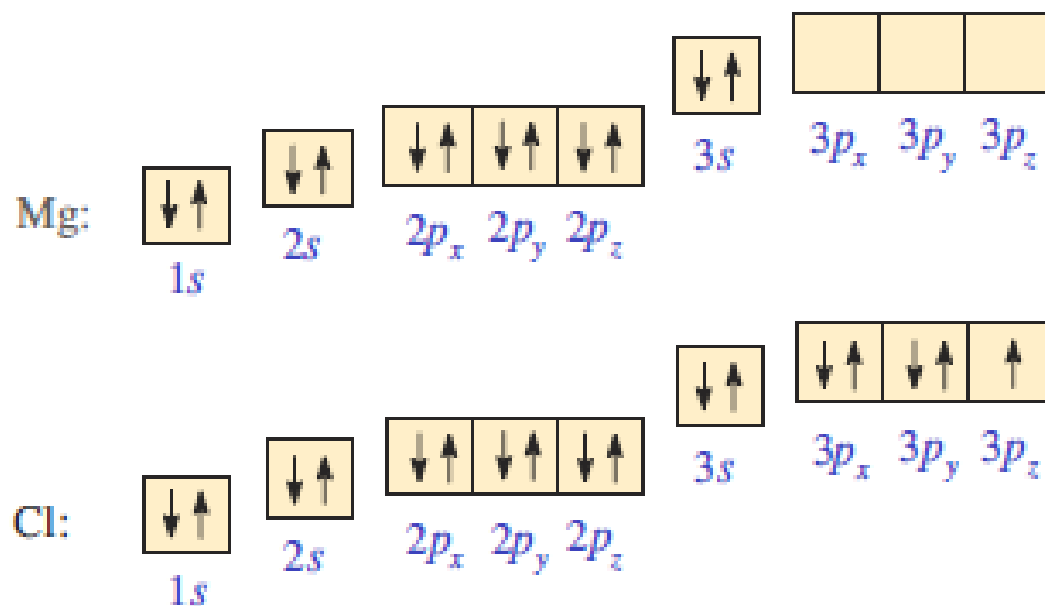
Sr, Zr, Rh, Sn, W, Pt, Eu, Yb, Am, Pu, Es, ^{109}X ,

Na^+ , Al^{3+} , Cl^-

Mg^{2+} , Si^{4+} , O^{2-}

Ti, Ti^{2+} , Ti^{4+} (je kateri od teh paramagneten?)!

ODGOVOR:



Sr: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 \equiv [\text{Kr}]5s^2$

Rh: $[\text{Kr}]5s^2 4d^7$

Pt: $[\text{Xe}]6s^2 4f^{14} 5d^8$

O^{2-} : $[\text{Ne}]$

Ti: $[\text{Ar}]3d^2 4s^2$, Ti^{2+} : $[\text{Ar}]3d^2$, Ti^{4+} : $[\text{Ar}]$;

paramagneten je Ti in spojine Ti^{2+} (v obeh primerih sta po 2 nesparjena elektrona v dveh $3d$ orbitalah).

Dipolni moment in polarne molekule

Polarna molekula ima dipolni moment μ , ki je produkt velikosti naboja (δ^+ , δ^-) in razdalje med središči pozitivnih in negativnih nabojev. Primer za izoliran Na^+Cl^- z nabojem $+e$ in $-e$ in razdalji 251 pm velja :

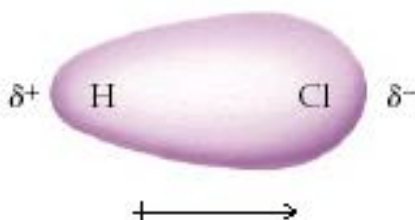
$$\mu = e \cdot q \cdot d$$

$$\mu = 1,602 \times 10^{-19} \text{C} \times 251 \times 10^{-12} \text{m} = 4,02 \times 10^{-29} \text{C m} = 12,1 \text{D}$$

$$1 \text{D (Debye)} = 3,336 \times 10^{-30} \text{C m}$$

Večina molekul pa ima dipolni moment **okoli 1D**.

Primer je HCl , kjer je naboj na posameznem atomu le delni: (δ^+ , δ^-)



Dipolni moment (μ) je vektor ($\vec{\mu}$), ki je v vezi ali molekuli usmerjen od centra pozitivnih proti centru negativnih nabojev. V večatomnih molekulah je rezultirajoči dipolni moment vektorska vsota dipolnih momentov v posameznih vezeh.

Zgled: v molekuli H_2O je dipolni moment vektorska vsota dipolnih momentov v obeh $\text{O}—\text{H}$ vezeh. Leži na premici, ki razpolavlja trikotnik $\text{H}—\text{O}—\text{H}$ (104°) in je usmerjen od atomov H proti atomu O (glejte sliko v nalogi št. 51). Molekula CF_4 ima tetraedrično zgradbo. Dipolni momenti so v vseh štirih vezeh usmerjeni od atoma C, ki je v središču tetraedra, proti bolj elektronegativnim atomom F, ki so v ogliščih tetraedra. Zaradi “simetrične zgradbe” molekule je vektorska vsota vseh štirih dipolnih momentov enaka 0.

DIPOLNI MOMENT MOLEKUL

V molekulah z različno elektronegativnimi atomi, se premakne središče negativnega naboja proti atomu, ki je bolj elektronegativen.

 električni dipol

$$\mu = d \times q \quad \text{razdalja} \times \text{naboj}$$



2.1 / 4.0

1.9



2.1 / 3.0

0.8



2.1 / 2.8

0.7



2.1 / 2.5

0.4

Δ_{EN} (elektronegativnost)

Molecule (AB)	Moment, μ (D)	Geometry
HF	1.78	linear
HCl	1.07	linear
HBr	0.79	linear
HI	0.38	linear
H ₂	0	linear
ClF	0.88	linear
BrF	1.29	linear

Molecule (AB ₂)	Moment, μ (D)	Geometry
H ₂ O	1.85	bent
H ₂ S	0.95	bent
SO ₂	1.62	bent
CO ₂	0	linear

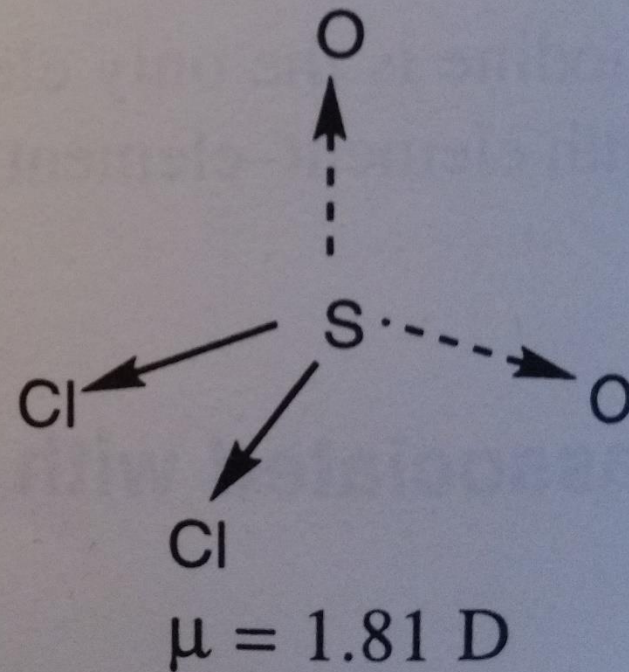
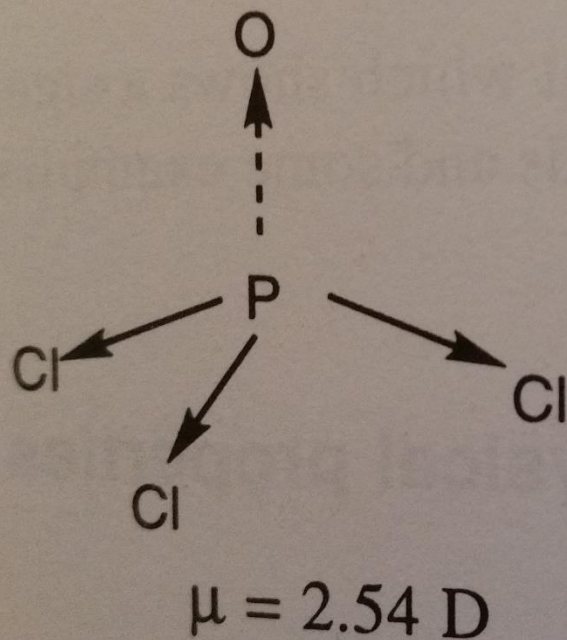
Dipolni moment dvoatomskih molekul enakih elementov je enak 0, ker je delni naboj na atomih enak 0.

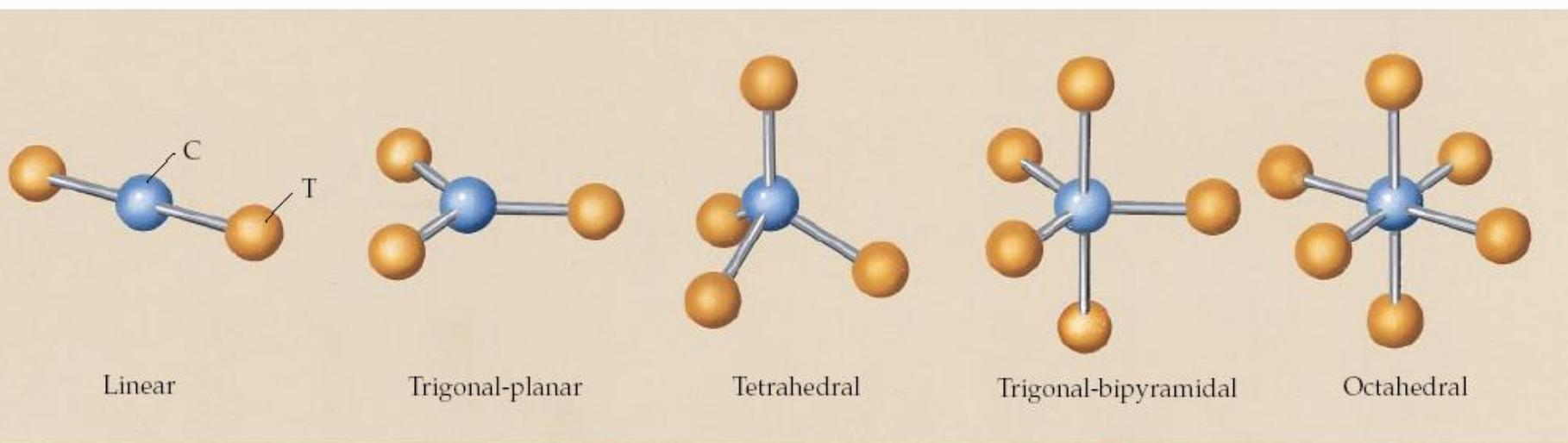
Molecule (AB ₃)	Moment, μ (D)	Geometry
NH ₃	1.47	trigonal-pyramidal
NF ₃	0.23	trigonal-pyramidal
BF ₃	0	trigonal-planar
Molecule (AB ₄)	Molecule, μ (D)	Geometry
CH ₄	0	tetrahedral
CH ₃ Cl	1.92	tetrahedral
CH ₂ Cl ₂	1.60	tetrahedral
CHCl ₃	1.04	tetrahedral
CCl ₄	0	tetrahedral

Delna naboja na atomih v **dvoatomskih molekulah različnih elementov** sta sorazmerna z razliko v EN atomov elementov

Table 2.55 Dipole moments of some Group 15 hydrides, chlorides, and fluorides

	μ/D		μ/D		μ/D
NH_3	1.47	NCl_3	0.39	NF_3	0.24
PH_3	0.57	PCl_3	0.56	PF_3	1.03
AsH_3	0.20	AsCl_3	1.59	AsF_3	2.59
SbH_3	0.12				





Molekule tipa CT_n , kjer je C centralni atom in T terminalni atom. Kadar so vsi terminalni atomi T isti, molekule z zgornjimi geometrijami niso polarne.

The dipole moment of a gas phase HBr molecule is 0.827 D. Determine the charge distribution in this diatomic if the bond distance is 141.5 pm. ($1 \text{ D} = 3.336 \times 10^{-30} \text{ C m}$)

To find the charge distribution we need to find q using the expression:

$$\mu = qed$$

Units must be consistent:

$$d = 141.5 \times 10^{-12} \text{ m}$$

$$\mu = 2.779 \times 10^{-30} \text{ C m}$$

$$q = \frac{\mu}{ed}$$

$$= \frac{2.779 \times 10^{-30}}{1.602 \times 10^{-19} \times 141.5 \times 10^{-12}}$$

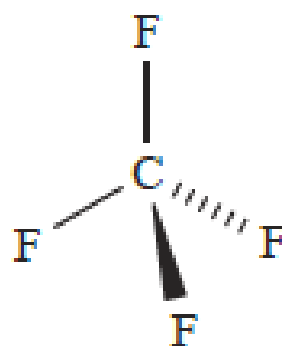
$$= 0.123 \text{ (no units)}$$

The charge distribution can be written as $\overset{+0.123}{\text{H}} \text{ --- } \overset{-0.123}{\text{Br}}$
since we know that Br is more electronegative than H.

Table 1.7 Pauling electronegativity (χ^P) values for the *s*- and *p*-block elements.

Group 1	Group 2		Group 13	Group 14	Group 15	Group 16	Group 17
H 2.2							
Li 1.0	Be 1.6		B 2.0	C 2.6	N 3.0	O 3.4	F 4.0
Na 0.9	Mg 1.3		Al(III) 1.6	Si 1.9	P 2.2	S 2.6	Cl 3.2
K 0.8	Ca 1.0		Ga(III) 1.8	Ge(IV) 2.0	As(III) 2.2	Se 2.6	Br 3.0
Rb 0.8	Sr 0.9	(d-block elements)	In(III) 1.8	Sn(II) 1.8 Sn(IV) 2.0	Sb 2.1	Te 2.1	I 2.7
Cs 0.8	Ba 0.9		Tl(I) 1.6 Tl(III) 2.0	Pb(II) 1.9 Pb(IV) 2.3	Bi 2.0	Po 2.0	At 2.2

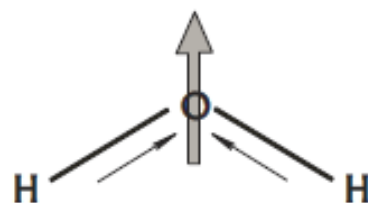
Example 1: CF_4



(1.15)

The values of $\chi^{\text{P}}(\text{C})$ and $\chi^{\text{P}}(\text{F})$ are 2.6 and 4.0, respectively, indicating that each C–F bond is polar in the sense $\text{C}^{\delta+}-\text{F}^{\delta-}$. The CF_4 molecule (1.15) is tetrahedral and the four bond moments (each a vector of equivalent magnitude) oppose and cancel one another. The effects of the F lone pairs also cancel out, and the net result is that CF_4 is non-polar.

Example 2: H₂O

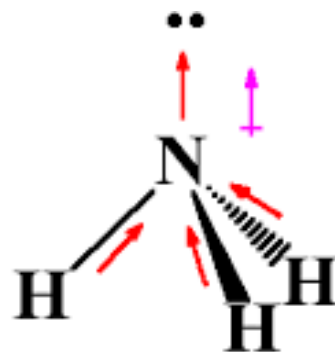
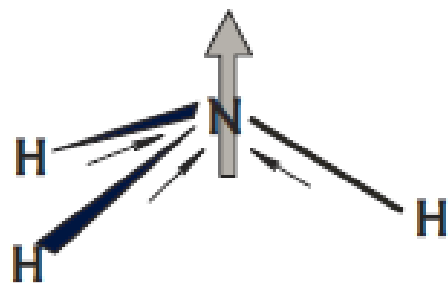


For O and H, $\chi^P = 3.4$ and 2.2, respectively, showing that each O–H bond is polar in the sense $\text{O}^{\delta-} - \text{H}^{\delta+}$. Since the H₂O molecule is non-linear, resolution of the two bond vectors gives a resultant dipole moment which acts in the direction shown in structure 1.16. In addition, the O atom has two lone pairs of electrons which will reinforce the overall moment. The experimental value of μ for H₂O in the gas phase is 1.85 D.

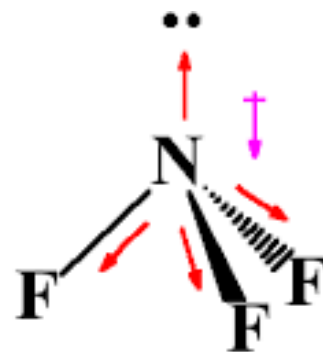
Amoniak, NH_3 , ima podobno strukturo kot dušikov trifluorid, NF_3 . Zakaj sta strukturi podobni? Ugotovite, ali imata molekuli dipolni moment! Če ga imata, navedite, kakšna je njegova smer!

ODGOVOR: obe molekuli imata piramidalno strukturo. Dipolni momenti vezi $\text{N}—\text{H}$ v molekuli NH_3 so usmerjeni proti bolj elektronegativnemu atomu N. Vektorska vsota dipolnih elementov v vseh treh vezeh (stranicah piramide) je usmerjena od središča osnovne ploskve piramide, ki jo tvorijo trije vodikovi atomi, vzdolž telesne višine proti dušikovemu atomu na vrhu piramide. Pri NF_3 je lega rezultirajočega dipolnega momenta* ista, le da je zaradi večje elektronegativnosti F glede na N obrnjen v nasprotno smer.

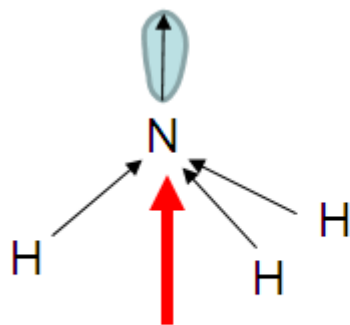
*zaradi vpliva prostega elektronskega para na atomu N je dipolni moment molekule bistveno zmanjšan



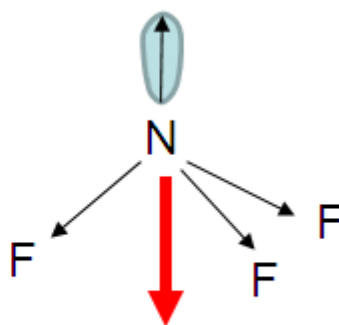
$$\mu = 1.46 \text{ D}$$



$$\mu = 0.24 \text{ D}$$

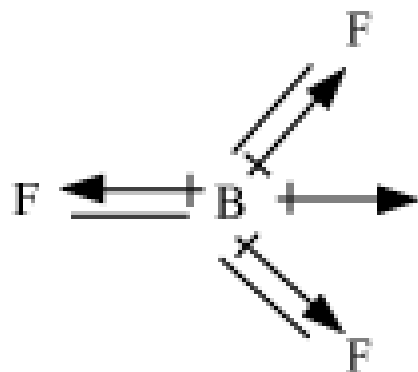


$$\Delta EN = 0.9$$



$$\Delta EN = 1$$

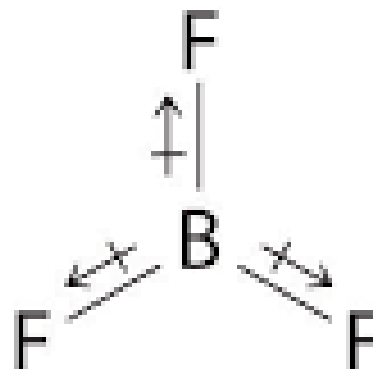
Zakaj BF_3 nima dipolnega momenta?



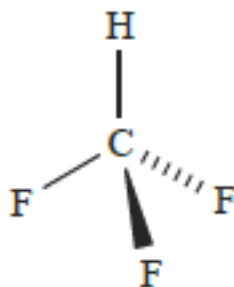
Bond dipoles



Total dipole moment

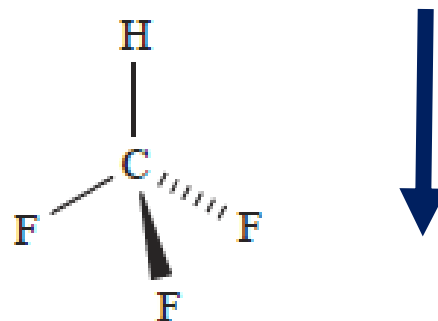


Use electronegativity values in Table 1.7 to work out whether or not the following molecule is polar and, if so, in what direction the dipole acts.



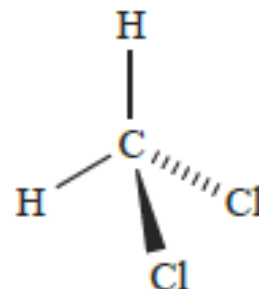
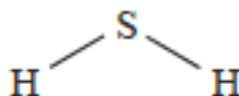
First, look up values of χ^P from Table 1.7: $\chi^P(\text{H}) = 2.2$, $\chi^P(\text{C}) = 2.6$, $\chi^P(\text{F}) = 4.0$. The molecule is therefore polar

with F atoms δ^- , and the molecular dipole moment acts as shown below:

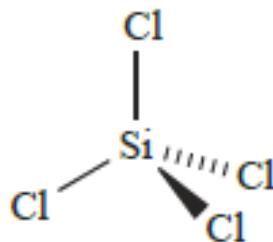
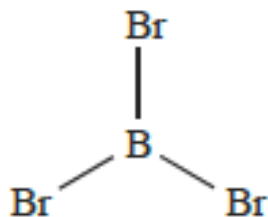


Self-study exercises

1. Use electronegativity values in Table 1.7 to confirm that each of the following molecules is polar. Draw diagrams to show the directions of the molecular dipole moments.



2. Explain why each of the following molecules is non-polar.



51. Imamo skupini molekul:

a) H_2O NH_3 CO_2 ClF

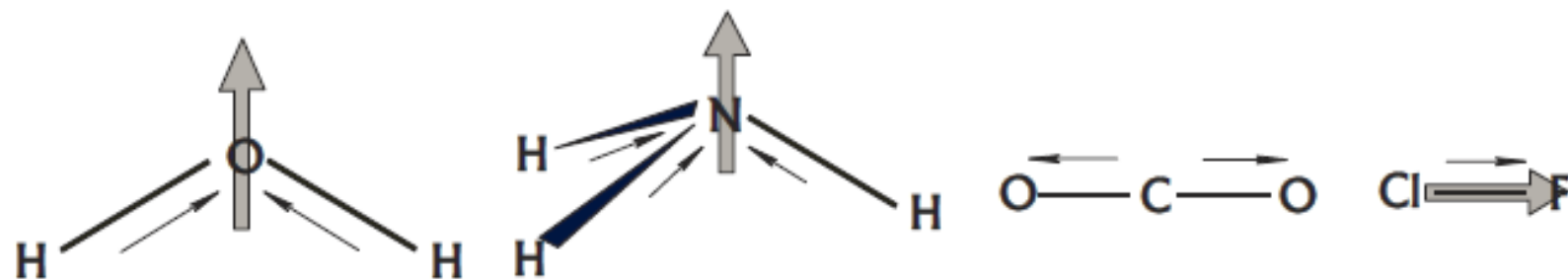
b) CH_4 NCl_3 BF_3 in CS_2 .

- katera molekula v skupinah ima najbolj polarne vezi
- katere od molekul niso polarne
- kako so v molekulah usmerjeni dipolni momenti?

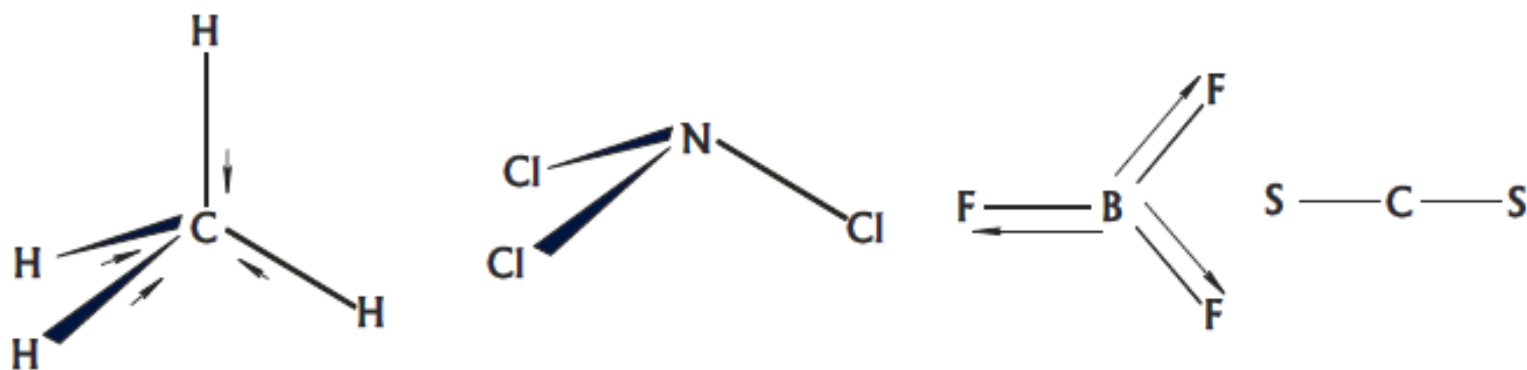
ODGOVOR: v tabeli so podane razlike elektronegativnosti elementov (po Paulingu) v spojinah:

Molekule pod a)	H ₂ O	NH ₃	CO ₂	ClF
$\Delta\chi$	1,4	0,9	1,0	1,0
Molekule pod b)	CH ₄	NCl ₃	BF ₃	CS ₂
$\Delta\chi$	0,4	0	2,0	0

Polarnost vezi je odvisna od razlike elektronegativnosti atomov, ki vez tvorita (na slikah je puščica vedno usmerjena proti bolj elektronegativnemu atomu v vezi). Dolžina puščic približno ponazarja relativno velikost dipolnih momentov v posameznih vezeh in hkrati tudi polarnost vezi. Polarnost spojin je odvisna od vektorske vsote dipolnih momentov v vseh vezeh, vektorska vsota pa od geometrije molekule. V skupini a) je največja razlika v elektronegativnosti med atomoma H in O v molekuli vode, zato upravičeno pričakujemo, da bo imela voda največji dipolni moment. Molekula CO₂ zaradi simetrične zgradbe (je linearna) nima dipolnega momenta.



V skupini b) so najbolj polarne vezi v molekuli BF_3 , ki pa zaradi simetrične zgradbe – tako kot CH_4 in CS_2 – nima dipolnega momenta. Zanimarljiva razlika v elektronegativnosti pa je med N in Cl v molekuli NCl_3 , zato je dipolni moment pri tej molekuli neznaten.



V tabeli obkrožite pravo obliko molekul, prikazanih s formulami na levi strani tabele!

$\text{:}\ddot{\text{S}}\text{--}\ddot{\text{S}}\text{:}$	tetraedrična	linearna	nelinearna	trikotna planarna	piramidalna	oktaedrična
$\text{H--}\ddot{\text{S}}\text{--H}$	tetraedrična	linearna	nelinearna	trikotna planarna	piramidalna	oktaedrična
$\begin{array}{c} \text{F} \\ \\ \text{F--Si--F} \\ \\ \text{F} \end{array}$	tetraedrična	linearna	nelinearna	trikotna planarna	piramidalna	oktaedrična
$\text{:}\ddot{\text{O}}\text{=}\ddot{\text{S}}\text{--}\ddot{\text{O}}\text{:}$	tetraedrična	linearna	nelinearna	trikotna planarna	piramidalna	oktaedrična
$\begin{array}{c} \text{:F:} \\ \\ \text{:F--S--F:} \\ \\ \text{:F:} \end{array}$	tetraedrična	linearna	nelinearna	trikotna planarna	piramidalna	oktaedrična
$\begin{array}{c} \text{:F--B--F:} \\ \\ \text{:F:} \end{array}$	tetraedrična	linearna	nelinearna	trikotna planarna	piramidalna	oktaedrična
$\begin{array}{c} \text{H--}\ddot{\text{P}}\text{--H} \\ \\ \text{H} \end{array}$	tetraedrična	linearna	nelinearna	trikotna planarna	piramidalna	oktaedrična

OVOR: F_2 ; ker je molekula sestavljena le iz dveh atomov, je lahko le *linearna*.

H_2S ; na centralni atom S sta vezana 2 atoma H in 2 NEP (nevezna elektronska para), vsota strukturnih parov (SEP) je 4, kar narekuje idealne kote 109° , struktura je torej *nelinearna*, kot pa je zaradi medsebojnega učinkovanja med veznimi in neveznimi pari manjši od 109° .

SiH_4 ; na atomu Si ni nobenega prostega para, 4 enake vezi Si—H pa narekujejo idealno *tetraedrično* zgradbo te molekule.

SO_2 ; na žveplovem atomu je 1 NEP, atom S pa je povezan z 2 atomoma O. Število strukturnih parov je 3, molekula *ne more biti linearna*, zaradi prostega para pa je kot različen od 120° .

SF_4 ; 4 atomi F in 1 NEP na žveplu narekujejo trikotno bipiramidalno strukturo. Prosti par je v osnovni ploskvi bipiramide, ostala mesta zasedejo atomi F. Zaradi odboja med ekvatorialnim prostim elektronskim parom in veznima paroma med atomom S in aksialnima atomoma F je kot manjši od 180° (glejte sliko na strani 99, naloga 33).

BF_3 ; na atomu B ni nobenega NEP, 3 sigma vezi pa povezujejo atom B s atomi F. Molekula ima zato idealno *trikotno planarno* zgradbo.

PH_3 ; 3 vezi med P in H ter 1 NEP določajo tetraedrično razporeditev SEP. Ker so zasedena le tri mesta, je struktura PH_3 *piramidalna*.

Molekula ion	σ vezi	NEP	Σ	Tip hibridizac.	Geometrija zvrsti	Koti
H ₂ S	2	2	4	sp^3	tetraeder	109°
OF ₂	2	2	4	sp^3	tetraeder	109°
NO ₂ ⁻	2	1	3	sp^2	trikotna planarna	120°
CS ₂	2	0	2	sp	linearna	180°
NO ₂ ⁺	2	0	2	sp	linearna	180°
BCl ₃	3	0	3	sp^2	trikotna planarna	120°
H ₂ CO	3	0	3	sp^2	trikotna planarna	120°
NO ₃ ⁻	3	0	3	sp^2	trikotna planarna	120°
CH ₂ Cl ₂	4	0	4	sp^3	tetraeder	109°
BF ₄ ⁻	4	0	4	sp^3	tetraeder	109°
CHCl ₃	4	0	4	sp^3	tetraeder	109°
BH ₄ ⁻	4	0	4	sp^3	tetraeder	109°

V tabeli je za vsako zvrst (molekulo, ion) podana formula, število σ vezi in število neveznih elektronskih parov (NEP) na centralnem atomu. Vsota σ vezi in NEP je enako številu strukturnih elektronskih parov (SEP), ki določajo tip hibridizacije na osrednjem atomu pripadajoče zvrsti. V zadnjih dveh kolumnah je naveden geometrijski lik ali telo, ki ga hibridne orbitale opišejo in (približni) koti med hibridnimi orbitalami in vezmi.

Oktetno pravilo

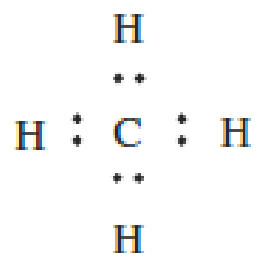
Oktetno pravilo; v mnogih stabilnih zvrsteh (atomih, molekulah in ionih) so atomi obdani z 8 elektroni. Vezne elektrone si delita oba atoma v vezi (medsebojno izposojeni elektronski pari). Oktetno pravilo strogo velja za elemente 2. kratke periode (elementi od Li do Ne). Za ostale atome velja tudi razširjeno oktetno pravilo.

Razširjeno oktetno pravilo; za atome elementov 3. in višjih period velja, da se v stabilnih zvrsteh (atomih, molekulah in ionih) lahko obdajo tudi z več kot 8 elektroni, običajno 10 ali 12 elektroni (glejte oktetno pravilo).

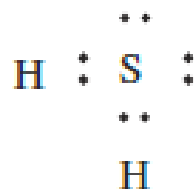
Zgled: v molekuli SF_6 je okrog atoma S 6 strukturnih valenčnih parov, skupno 12 elektronov. V tem primeru velja za žveplo razširjeno oktetno pravilo.

In which of the following covalent compounds is the central atom obeying the octet rule: (a) CH_4 ; (b) H_2S ; (c) ClF_3 ?

(a) CH_4 : A C atom has four valence electrons and forms four covalent bonds by sharing electrons with four H atoms to give an octet. This can be represented by the Lewis structure:

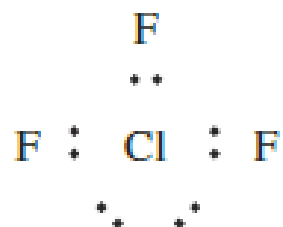


(b) H_2S : An S atom has six valence electrons and forms two covalent bonds by sharing electrons with two H atoms to give an octet. The appropriate Lewis structure which shows that S obeys the octet rule in H_2S is:



Razširjeno oktetno pravilo

(c) ClF_3 : A Cl atom has seven valence electrons and should form only one single covalent bond to obtain an octet (e.g. as in Cl_2). In ClF_3 , the octet appears to be expanded:



Teorija MO

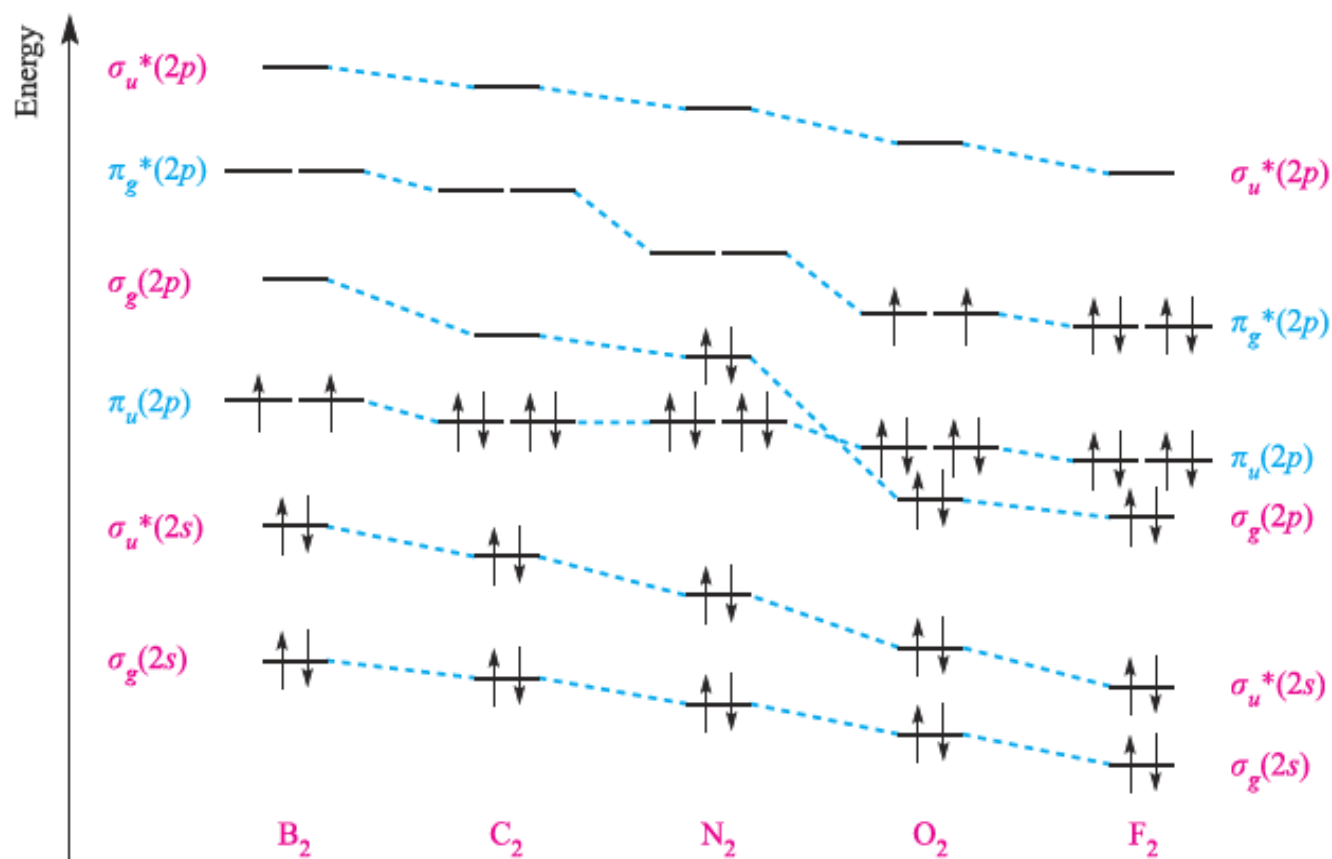
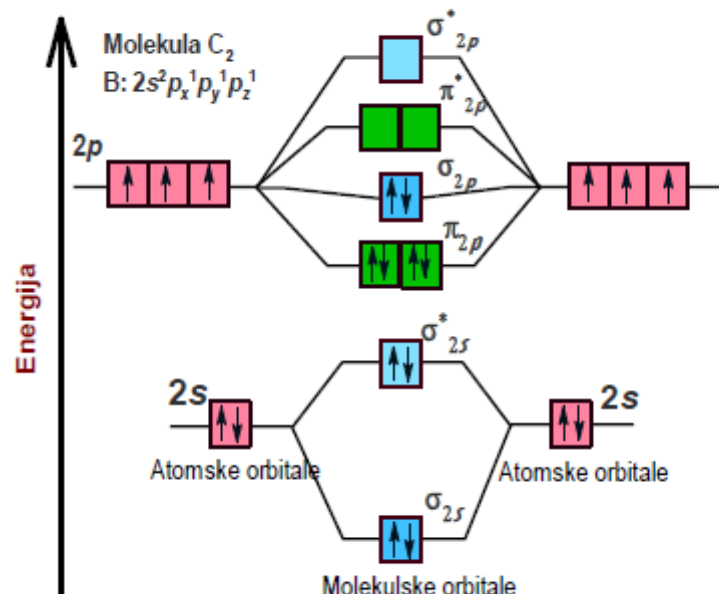
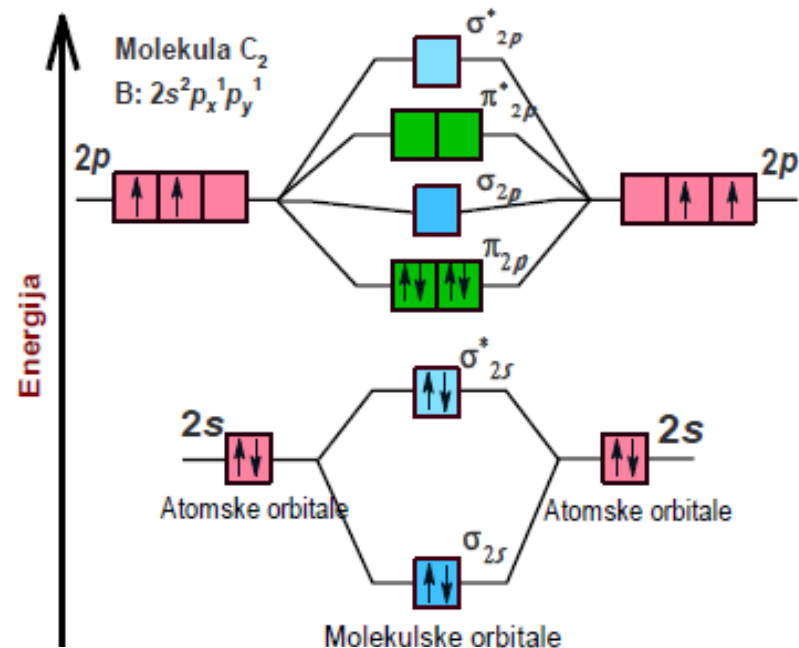
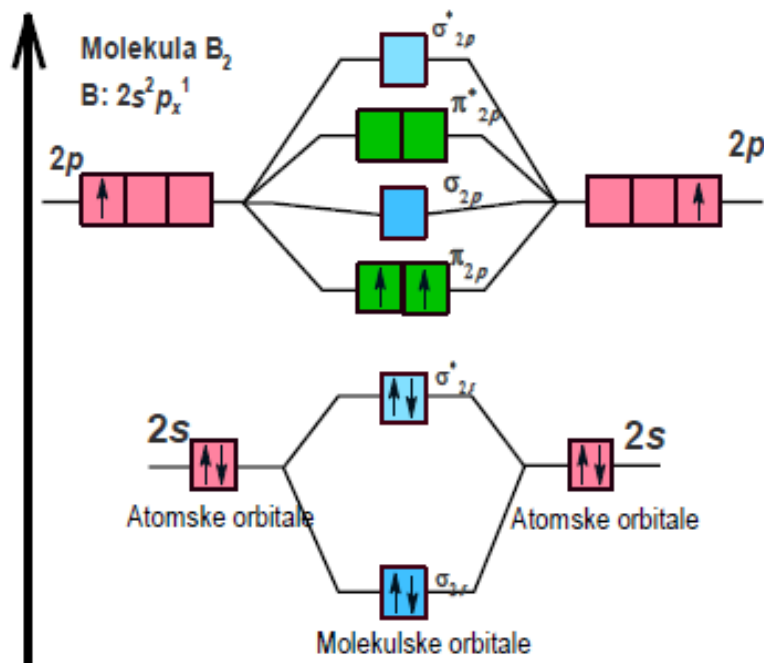
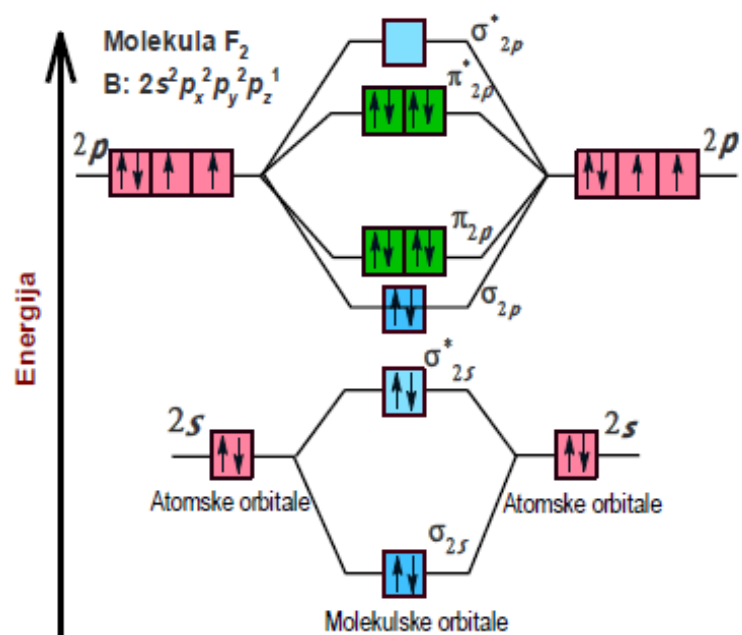
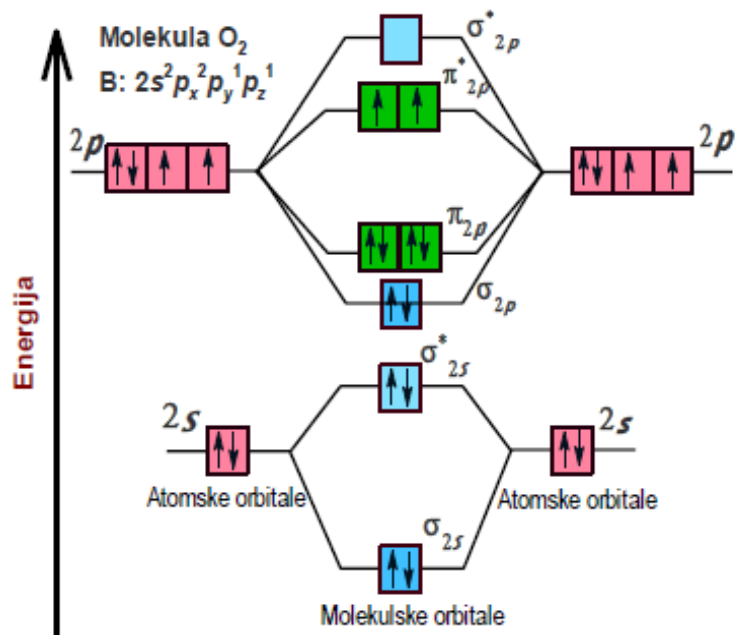


Fig. 1.23 Changes in the energy levels of the MOs and the ground state electronic configurations of homonuclear diatomic molecules involving first-row p -block elements.

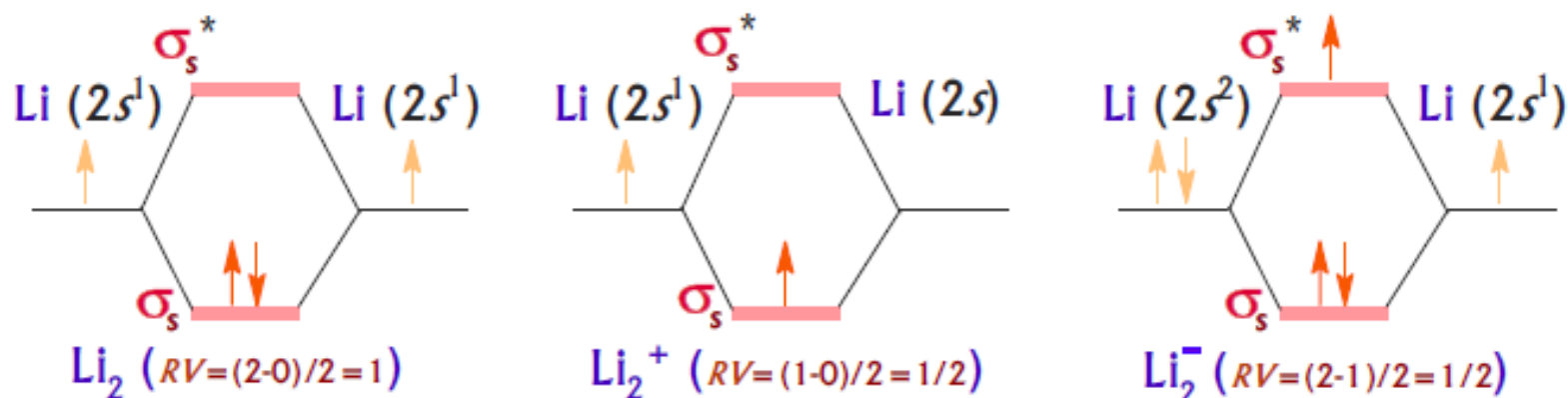
MO diagram za dvoatomne elementne molekule B_2 , C_2 , N_2 , O_2 in F_2 (p. 10.2)



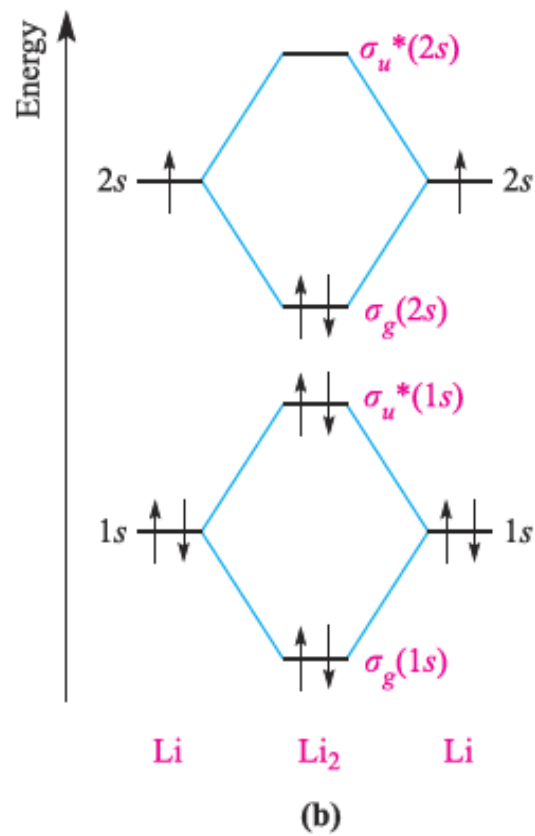
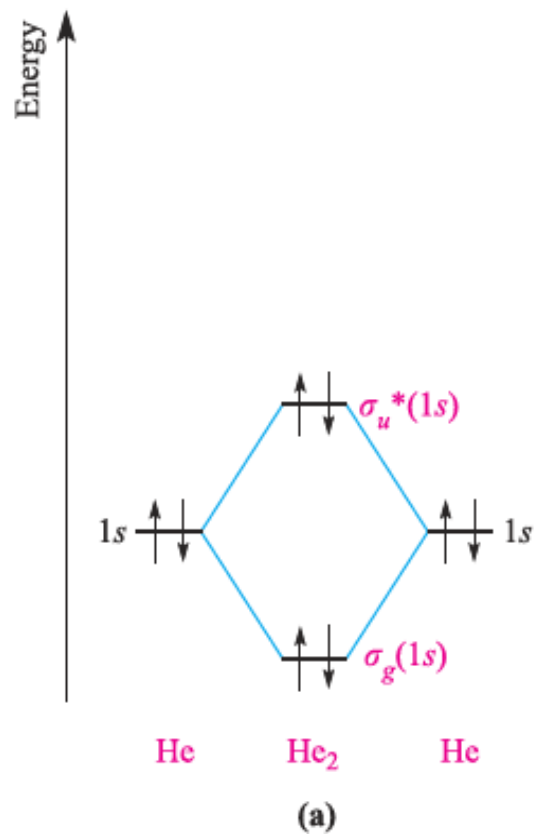


. Skicirajte molekularno orbitalni diagram za molekulo Li_2 in iona Li_2^+ in Li_2^- !

ODGOVOR:



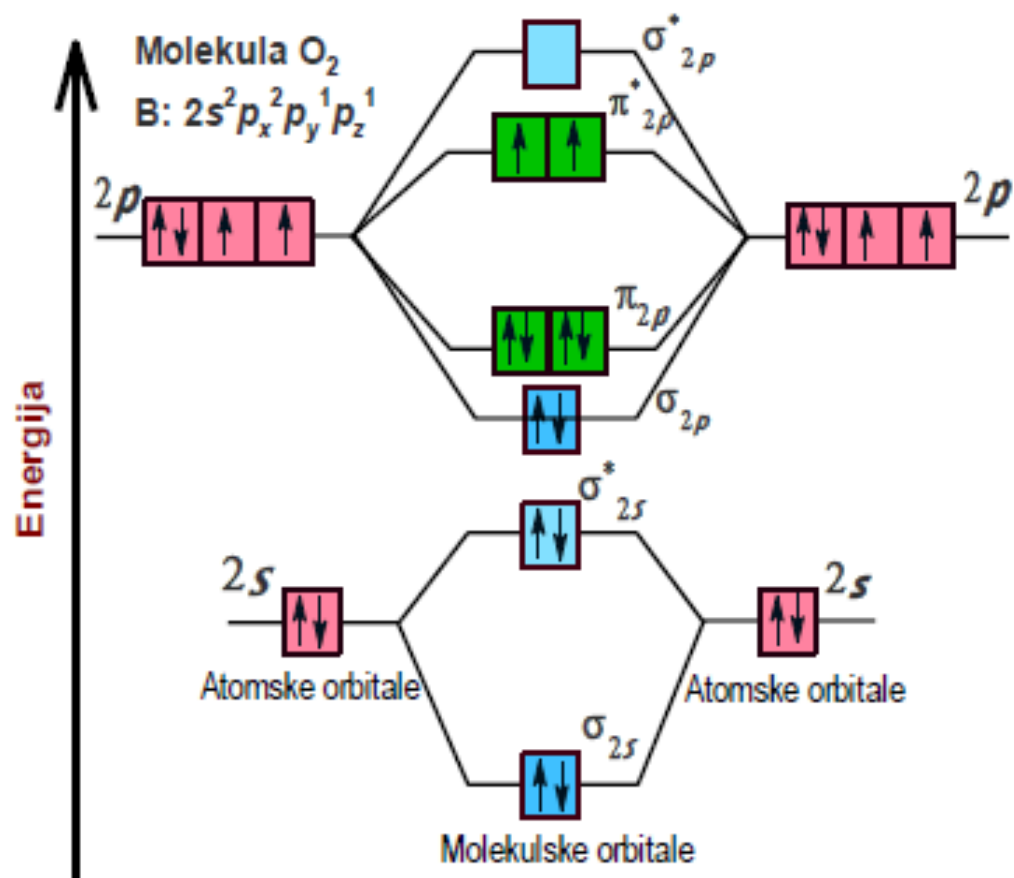
dva atoma Li imata skupno 2 valenčna elektrona, ki v molekuli Li_2 (obstoja je le pri visokih temperaturah) zasedeta σ_s vezno MO orbitalo, dvoatomna iona Li_2^+ in Li_2^- imata po en oziroma 3 elektrone. Red vezi (RV) je pri obeh ionih $1/2$, saj je razlika med številom veznih in razveznih elektronov ($1 - 0 = 3 - 2$) ena.



16. Molekula O_2 lahko odda en elektron ali sprejme enega ali celo dva elektrona. Tako pride do nastanka oksigenilnega kationa, O_2^+ , superoksidnega aniona, O_2^- in peroksidnega aniona, O_2^{2-} . Skicirajte MO diagram za vse štiri zvrsti in za vsako od teh navedite:
- red vezi
 - paramagnetnost/diamagnetnost

DGOVOR: MO diagrame za vse zgornje zvrsti lahko dobimo iz MO diagrama za molekulo O_2 tako, da odvezamemo en elektron (nastane ion O_2^+), dodamo enega (nastane ion O_2^-) ali pa dodamo dva (dobimo ion O_2^{2-}). Ker je peroksidni anion ($2 \times 6 + 2 = 14$ elektronov) izoelektronski z molekulo F_2 ($2 \times 7 = 14$ elektronov), je red vezi med O atomoma – tako kot med F atomoma – enak 1. Za vsak naslednji oddan elektron se red vezi poveča za $1/2$.

- $RV = 1(O_2^{2-}), 1,5(O_2^-), 2(O_2)$ in $2,5(O_2^+)$
- paramagnetne so tiste zvrsti, ki imajo liho število elektronov, torej O_2^- in O_2^+ (13 in 11 elektronov), toda tudi molekula O_2 (12 elektronov), ki ima dva nesparjena elektrona v dveh degeneriranih razveznih (π^*) molekulskih



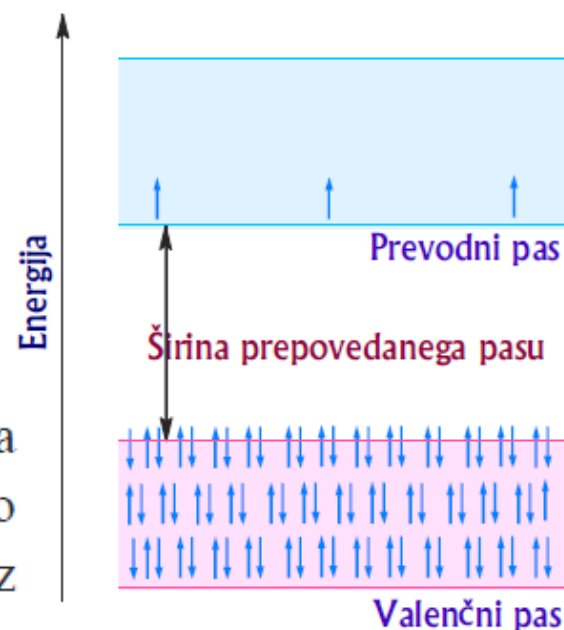
orbitalah.

- c) z večanjem reda vezi se večja tudi energija vezi, torej je največja vezna energija v ionu O_2^+ in najmanjša v ionu O_2^{2-}
- d) z zmanjševanjem reda vezi med istima atomoma se dolžine vezi večajo:
 $d(O_2^+) < d(O_2) < d(O_2^-) < d(O_2^{2-})$.

Kovinska vez

Prevodni pas (*slika 10.4*) je energijsko omejen pas, “sestavljeno” iz ogromnega števila delokaliziranih molekulskih orbital. Pri polprevodnikih je pri nižjih temperaturah skoraj prazen, pri višjih temperaturah pa je delno zaseden z elektroni iz valenčnega pasu.

Zgled: v Si in Ge leži prevodni pas nekoliko nad polnozasedenim valenčnim pasom. Pri višji temperaturi preide vse več elektronov iz valenčnega v prevodni pas in prevodnost zato s temperaturo narašča.



Prepovedan pas (*slika 10.4*) je energijska bariera (pregrada) med valenčnim pasom in energijsko višjim prevodnim pasom. Za prehod elektrona iz valenčnega v prevodni pas je potrebna energija, ki je enaka širini prepovedanega pasu.

Slika 10.4

Polprevodnik (*slika 10.4*) je snov, za katero je značilno, da ima polno zaseden valenčni pas, ki je z razmeroma majhno energijsko bariero (pregrado) ločen od pretežno praznega prevodnega pasu.

Zgled: tipični polprevodniki so elementi v skupini 4A, v prvi vrsti sta to Si in Ge. Polprevodnik je lahko tudi zlitina elementov iz skupin 3A in 5A, tako da je tudi v tem primeru število valenčnih elektronov enako 4, $(3 + 5)/2 = 4$. Najbolj znan tak primer je GaAs (galijev arzenid).

Teorija pasov (*slika 10.4*) razlaga nastanek vezi v trdnih snoveh s tvorbo delokaliziranih MO, ki so razširjene preko vsega kristala in tvorijo valenčne in prevodne energijske pasove. V posameznem pasu so med delokaliziranimi molekulskimi orbitalami neznatne energijske razlike.

Zgled: električna prevodnost kovin je posledica delno ali polnozasedenih valenčnih pasov, ki se prekrivajo s praznimi prevodnimi pasovi. Zato je že ob zelo majhni prejeti energiji možen prehod elektronov med nivoji valenčnega pasu (na primer pri litiju) ali pa med nivoji polno zasedenega valenčnega in praznega prevodnega pasu, ki se z valenčnim prekriva (na primer pri beriliju).