

УНИВЕРЗИТЕТ У КРАГУЈЕВЦУ
ФАКУЛТЕТ МЕДИЦИНСКИХ НАУКА



THE UNIVERSITY OF KRAGUJEVAC
FACULTY OF MEDICAL SCIENCES

Теорије хемијских веза. Међумолекулске интеракције.

Хибридизација атомских орбитала

Једноставном Lewis-овом теоријом валентне везе није могуће објаснити нека структурна својства неких врло једноставних молекула као што су: BeCl_2 , BF_3 , CH_4 , NH_3 , и H_2O . Због тога је било потребно теорију проширити увођењем поступка којег зовемо хибридизација атомских орбитала.

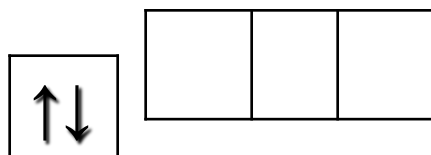
Хибридизација је мешање атомских орбитала истих или сличних енергија при чему настају нове, хибридне орбитале, са новим особинама, а њихов број је једнак броју атомских орбитала чијом комбинацијом настају.

sp – хибридизација

- **комбиновањем s- и p-орбитале**
- **настају две нове орбитале које се називају sp-хибридне орбитале**
- **истог су облика**
- **угао између sp-хибридних орбитала је 180°**
- **линеарна хибридизација**



Be

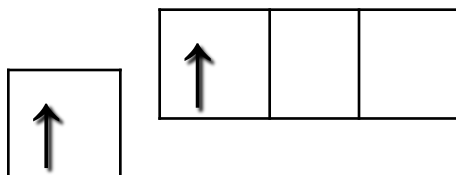


2s

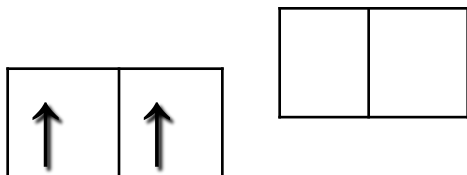
2p

енергија

основно стање



распаривање електрона



sp

sp

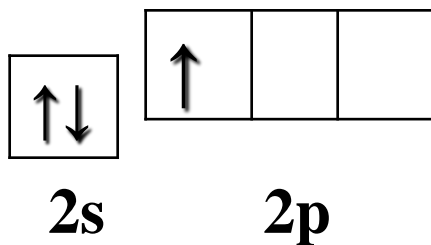
нехибридизоване 2p-орбитале

sp² – хибридизација

- **комбиновањем једне s- и две p-орбитале**
- **настају три нове орбитале које се називају sp²-хибридне орбитале**
- **истог су облика**
- **угао између sp²-хибридних орбитала је 120°**
- **леже у истој равни (планарна)**

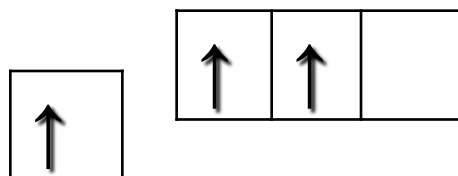


B

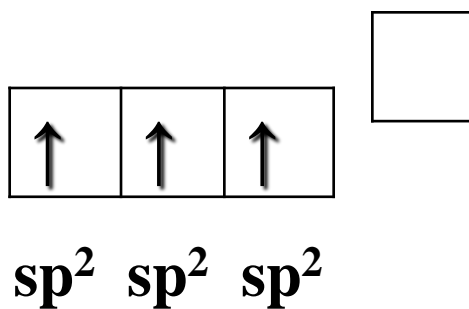


енергија

основно стање



распаривање електрона



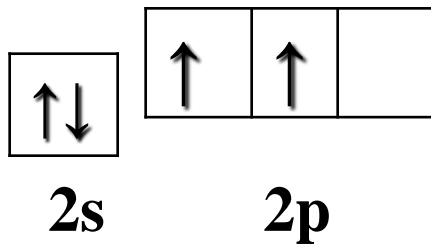
нехибридизована 2p-орбитала

sp³ – хибридизација

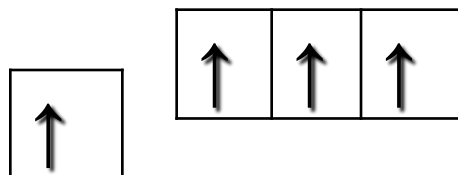
- **комбиновањем једне s- и три p-орбитале**
- **настају четири нове орбитале које се називају sp³-хибридне орбитале**
- **истог су облика**
- **угао између sp³-хибридних орбитала је 109,5°**
- **налазе се у простору (тетраедарска)**



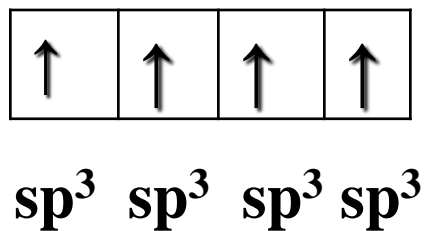
C



енергија
 _____→
основно стање



распаривање електрона



Молекулско-орбитална теорија

Линеарном комбинацијом две атомске орбитале добијају се две молекулске орбитале, односно ЛКАО N атомских орбитала добија се исто толико, N , молекулских орбитала, половина везивних, половина антивезивних.

Попуњавање МО електронима – важе иста правила као и код попуњавања АО

Молекулско-орбитална теорија

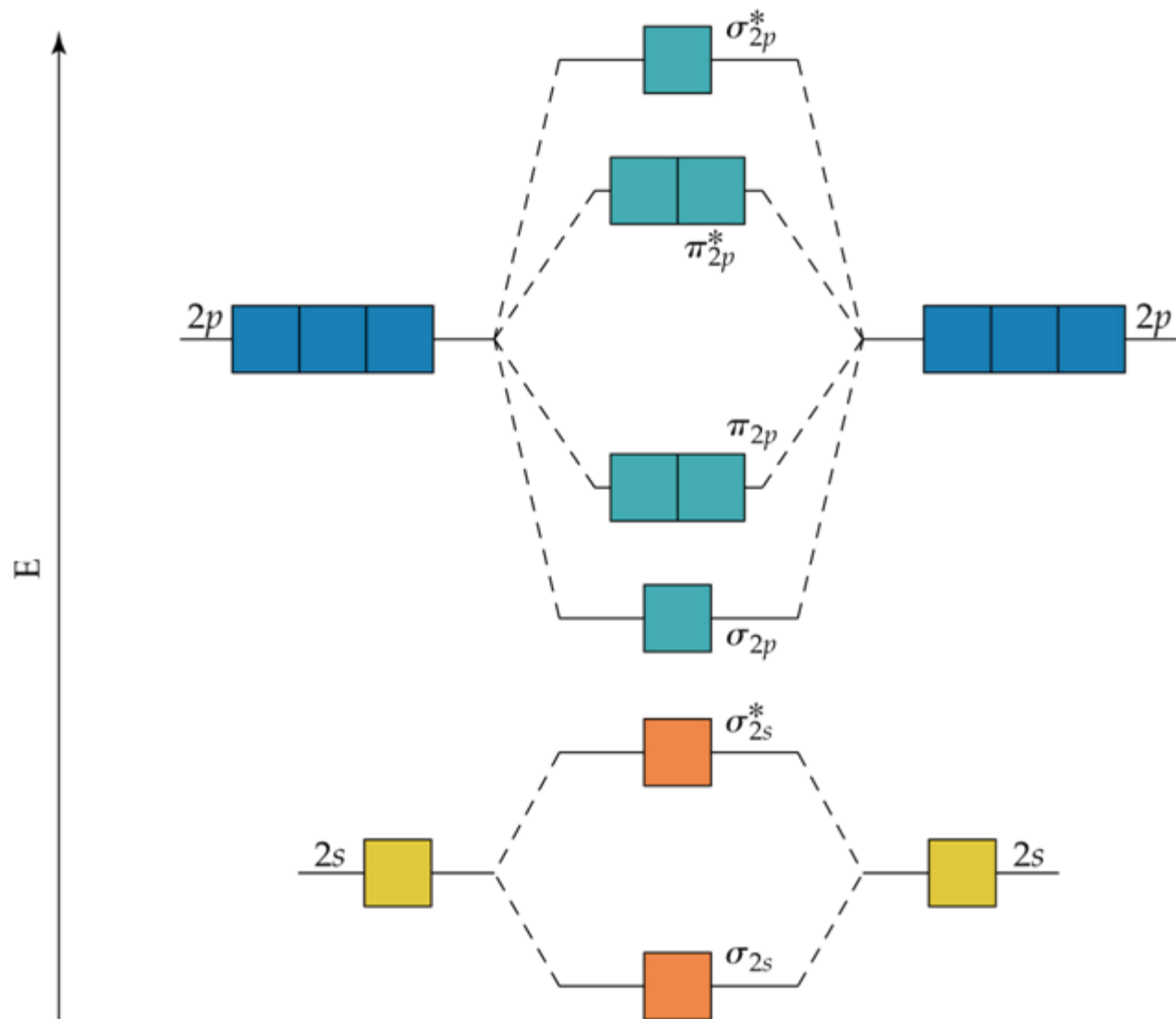
Општа правила стварања молекулних орбитала су:

- N атомских орбитала ($N \Psi_{AO}$) ствара N молекулних орбитала ($N \Psi_{MO}$)
- једна молекулска орбитала је **енергијом нижа** а друга **виша** од атомских орбитала чијом комбинацијом су настале
- молекулска орбитала енергијом нижа од атомских орбитала које учествују у њеном стварању зове се **везивна молекулска орбитала**
- молекулска орбитала енергијом виша од атомских орбитала које учествују у њеном стварању зове се **противезна молекулска орбитала**

Ред везе

Да би објаснила појам вишеструких веза у Лиусовим структурама, молекулско орбитална теорија уводи појам *ред везе*. Ред везе, по овој теорији, представља број електронских парова који су заједнички за оба међусобно повезана атома. Дефинише се:

$$R.V. = \frac{1}{2} (\text{broj elektrona u vezivnim} - \text{broj elektrona u antivezivnim mol. orbitalama})$$



Парамагнетизам и дијамагнетизам

- Велико повећање тежине указује на парамагнетизам
- Мало смањење тежине указује на дијамагнетизам

Guoу-ва вага

Међумолекулске силе

Крајем XIX века Van der Vals је дошао до закључка да између молекула свих супстанци постоје привлачне силе, било да су супстанце јонске природе било да су ковалентне природе, са трајним диполом (HF, H₂O, NH₃, итд.) или без дипола због симетричног распореда електронске густине у молекулима (CO₂, CH₄, итд.), односно због сферно симетричног распореда електронске густине код атома племенитих гасова.

1. ЈОН – ДИПОЛ ИНТЕРАКЦИЈЕ (ВЕЗЕ)

Остварују се измену јона и перманентних дипола

- јаче су од осталих међумолекулских интеракција

Зависе од:

- **растојања измену јона и дипола**

- мање растојање, јаче привлачне силе

- **наелектрисања јона**

- веће наелектрисање јона, јаче привлачне силе

- **величине диполног момента дипола**

- већи диполни моменат, јаче привлачне силе

2. ДИПОЛ – ДИПОЛ ИНТЕРАКЦИЈЕ (ВЕЗЕ)

3. ДИПОЛ – ИНДУКОВАНИ ДИПОЛ ИНТЕРАКЦИЈЕ

ПРИМЕР дипол - индуковани дипол интеракције: Растварање O_2 у води

4. ИНДУКОВАНИ ДИПОЛ – ИНДУКОВАНИ ДИПОЛ ИНТЕРАКЦИЈЕ

ПРИМЕР инд. дипол – инд. дипол интеракције:

Различито агрегатно стање халогених елемената (на собној температури)

Водонична веза

Посебна врста дипол - дипол интеракција (веза)

Успоставља се измену поларних молекула који садрже водоник ковалентно везан за мали атом велике електронегативности (F, O, N)

Интермолекулска и интрамолекулска водонична веза

Водонична веза има за последицу абнормално понашање једињења:

- различито агрегатно стање аналогних једињења
- веће вредности тачке топљења
- веће вредности тачке кључања
- већи вискозитет
- **већу растворљивост у води !!!**

Стање материје и агрегатна стања.

Агрегатна стања материје

Агрегатно стање материје зависи од односа привлачних и одбојних сила које делују између атома унутар тог материјала.

Материја се јавља у четири агрегатна стања:

➤ чврсто (с)

➤ течно (л)

➤ гасовито (г)

➤ плазма



Агрегатна стања материје

Идеално чврсто стање (идеални кристали) - делују само привлачне силе.

Идеално гасно стање - делују само одбојне силе.

**Реални гасови, течности и чврсти материјали - прелазна стања између
два идеална стања.**

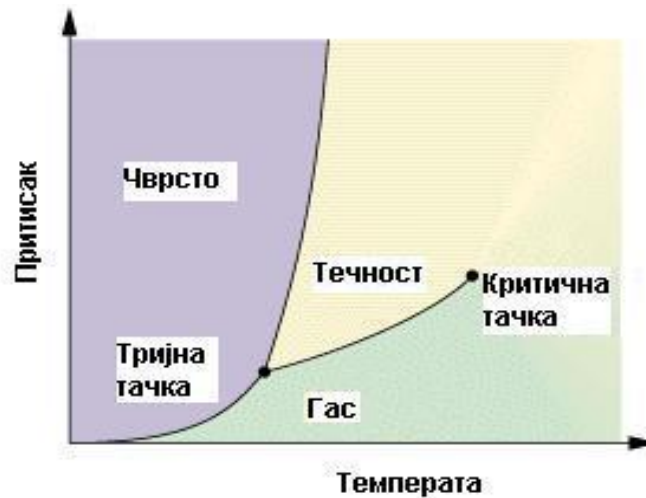
Чврста тела имају одређени облик и запремину.

**Течности имају одређену запремину али не и облик већ
заузимају облик суда у коме се налазе.**

Гасови немају одређен облик ни запремину.

Агрегатна стања материје

За свако агрегатно стање, честице (атоми, молекули, јони...) имају карактеристичан просторни распоред и карактеристичне облике кретања. Тип агрегатног стања зависи од односа термалне енергије честица и енергије међучестичних интеракција. Промене агрегатних стања се називају *фазни прелази*.



Дијаграм промене агрегатних стања

Чврсто агрегатно стање

Кристално

- Честице правилно и периодично распоређене
- Јачине веза једнаке у целој запремини
- Прелаз у течно стање је оштар- растоп

Аморфно

- Честице нису правилно и периодично распоређене
- Јачине веза нису једнаке у целој запремини
- Интервал прелаза у течно стање, прво омекшавају- растоп

Хемијске везе у чврстом стању

Јонски кристали се састоје од позитивних и негативних јона који се држе заједно *Кулоновом* привлачном силом између супротно наелектрисаних јона (NaCl , MgO , CaCl_2 , KNO_3).

Ковалентни кристали се састоје од “бесконачне” мреже атома који се држе заједно ковалентним (*поларним или неполарним*) везама или молекула који се заједно држе привлачним *Van der Waals-овим*, *дипол-дипол* или *дисперзионим* силама (угљеник у форми дијаманта или графита, Si , SiO_2 , SiC).

Метални кристали су састављени од везаних атома метала. Неки од валентних електрона су делокализовани кроз цео метал (Na , Cu , Fe и различите легуре).

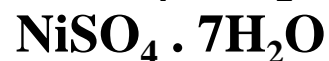
Кристално стање

Спољашњи облик кристала – ХАБИТУС

- Зависи од услова (хемијски састав раствора, рН...)
- кристал “расте” у различитим правцима

ИЗОМОРФИЗАМ

Различита једињења са сличном структуром кристалишу у истом кристалном систему.



Услов:

- да имају формулу истог типа
- сличне односе пречника честица
- сличне поларизационе особине

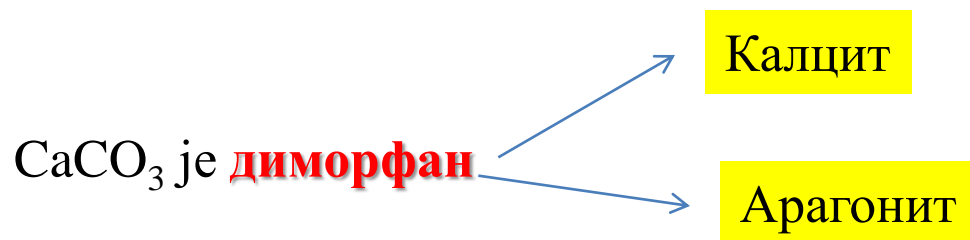
Не морају бити хемијски слични

NaNO_3 није изоморфан са KNO_3 , а хемијски су слични, јер је **Na** мањи од **K**

NaNO_3 је изоморфан са CaCO_3

ПОЛИМОРФИЗАМ

Једна супстанца кристалише у више кристалних облика – **модификација**

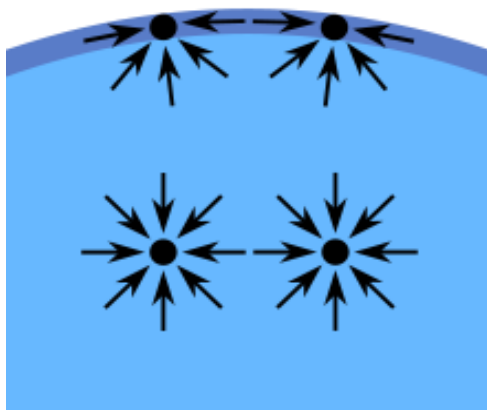


Уколико је кристал од елемената: **алотропија**

ТЕЧНО АГРЕГАТНО СТАЊЕ

Јаке међумолекулске привлачне силе (*кохезионе силе*) у течностима омогућавају одржавање њихове слободне површине, односно сталне запремине при одређеним условима.

У унутрашњости течности постоји равнотежа између привлачних и одбојних сила, и то доводи до појаве *унутрашњег притиска*.



Напон паре и **површински напон** течности су мерила јачине међумолекулских сила у течности.

Површински напон је отпор честица на површини течности ка ширењу течности.

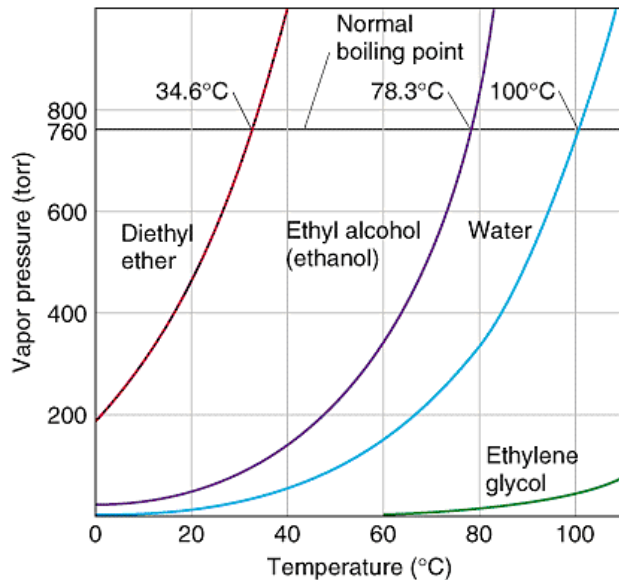
Сурфактанти (површински активне материје, тензиди) су супстанце које снижавају површински напон течности у односу на ваздух или у односу на граничну површину са другим супстанцама.

Особине течности

1. ПРИТИСАК ПАРЕ

КЉУЧАЊЕ

Када се напон паре изједначи са спољашњим притиском, течност почиње да кључа.



НОРМАЛНА ТЕМПЕРАТУРА КЉУЧАЊА-
тем. на којој течност кључа када је
спољашњи притисак једнак стандардном,
 $P^{\circ}=101325 \text{ Pa}$

Особине течности

2. ВИСКОЗНОСТ

Особина флуида (гасова и течности) да пружају отпор протицању - потиче од међумолекулских сила привлачења

Силе јаче → вискозност флуида већа

На вискозност утиче:

Природа супстанце:

- Облик, величина молекула, **јачина међумолекуларних сила, наелектрисање...**

Температура:

- Вискозност течности **опада са повећањем температуре (гасова расте)**

Особине течности

3. ПОВРШИНСКИ НАПОН

Тежња течности да смањи своју површинску енергију-
да смањи слободну површину.

Међуповршински напон

сила која тежи да смањи додирну површину две
течности

Гасовито агрегатно стање

Стање гаса се може описати са четири параметра:

притиском, температуром, запремином и количином гаса.

Међусобна зависност ових параметара описују гасни закони (*Boyle-Mariottov, Charles-Gay-Lussacov* и *Avogadrov zakon*).

Притисак гаса је резултат ударања молекула гаса у зидове суда. Према томе, притисак гаса зависи од броја и брзине молекула гаса.

Законитости понашања гасова

Бојл-Мариотов закон

R. Bojl

E. Mariotte 1682.

$$T = \textit{const.}$$

$$P \cdot V = \textit{const.}$$

На константној температури промена притиска је обрнуто пропорционална промени запремине гаса.

$$P_1 \cdot V_1 = P_2 \cdot V_2 = \dots = P_n \cdot V_n$$

Шарл-Геј-Лисаков закон

Jacques Alexandre Charles 1787.

Gay Lussak 1802.

На сталном притиску, за исту количину гаса, при повећању температуре за 1° C запремина гаса се повећа за 1/273,15 део првобитне запремине.

$$V = V_0 + \frac{V_0}{273,15} \cdot t = \frac{V_0}{273,15} (273,15 + t)$$

$$V = \textit{const.} \cdot T \quad \longrightarrow \quad \frac{V}{T} = \textit{const}$$

Геј-Лисаков закон

Gay Lussak

За исту запремину исте количине гаса, при повећању температуре за 1°C притисак гаса се повећа за 1/273,15 део првобитног притиска.

$$P = P_0 + \frac{P_0}{273,15} \cdot t = \frac{P_0}{273,15} (273,15 + t)$$

$$P = \textit{const.} \cdot T \longrightarrow \frac{P}{T} = \textit{const}$$

Једначина стања идеалног гаса

Авогадров закон

$$V = \text{const.} \cdot n$$

Бојл-Мариотов и Шарл-Геј-Лисаков

$$V = \frac{\text{const.} \cdot n \cdot T}{P}$$

Једначина стања идеалног гаса

$$P \cdot V = \text{const} \cdot n \cdot T$$

$$P \cdot V = n \cdot R \cdot T$$

$$R = 8,314 \text{ Jmol}^{-1}\text{K}^{-1}$$

$$P \cdot V = \frac{m}{M} \cdot R \cdot T$$