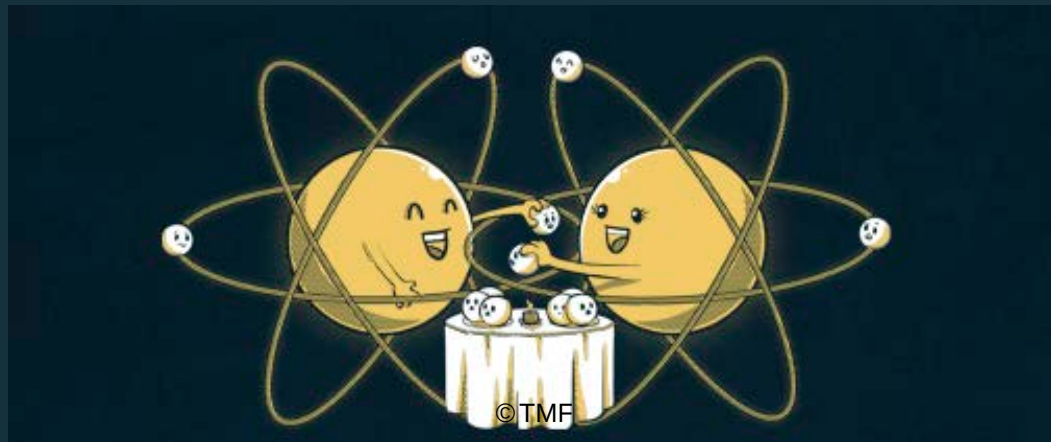


HEMIJSKE VEZE, II deo



HEMIJSKA VEZA, II deo

Govorićemo samo o kovalentnoj vezi i nekim savremenijim teorijama koje objašnjavaju ovu vezu.

Podsećanje: Luisova (elektronska) teorija kovalentne veze zasnivala se na

- stvaranju zajedničkog elektronskog para koji kruži oko oba atoma u vezi i
- pravilu okteta.

Stvaranje zajedničkih elektronskih parova leži u osnovi svih teorija kovalentne veze, ali ...

Otvorena pitanja:

- Zašto dolazi do stvaranja stvaranja zajedničkih elektronskih parova i koliko će takvih parova nastati (σ -veza, π -veza)?
- Kakva će biti geometrija (oblik) molekula?

SLAGANJE EKSPERIMENTA I TEORIJE!!!

Talasna funkcija elektrona, Ψ , ima dva dela:

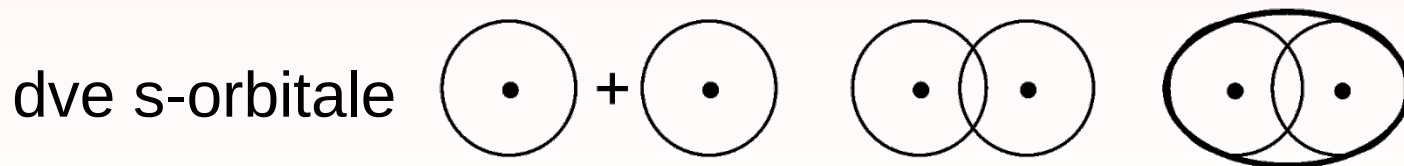
- funkcija radijalne raspodele,
- **funkcija ugaone raspodele** (pokazuje oblik i položaj atomskih orbitala u prostoru).

Pri građenju hemijske veze moramo voditi računa o:

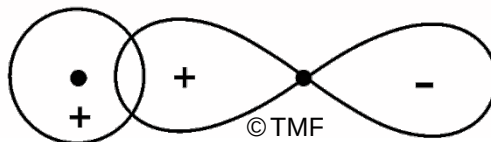
- obliku orbitala (s, p, d, f),
- njihovoj prostornoj usmerenosti (npr. p_x , p_y , p_z) i
- broju elektrona na orbitali (0, 1, 2).

Da bi došlo stvaranja zajedničkog elektronskog para mora doći do približavanja atoma i preklapanja atomskih orbitala!

Primeri nastanka σ -veza (primarnih veza):

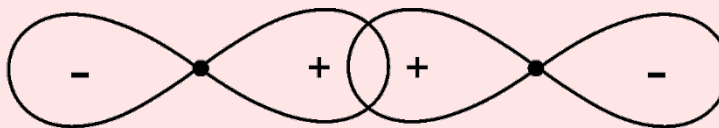


s- i p-orbitala

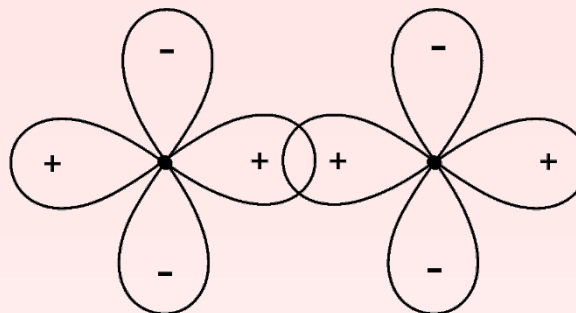


povećanje
elektronske
gustine između
jezgara!!!

dve p-orbitale



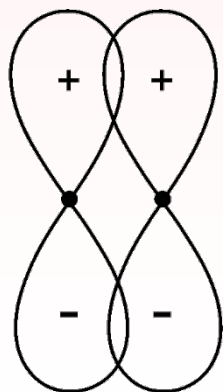
dve d-orbitale



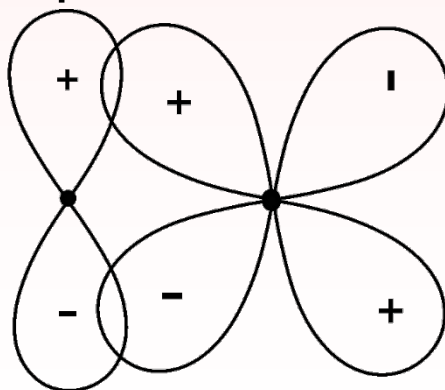
σ -veza nastaje preklapanjem orbitala **duž ose** koja prolazi kroz jezgra dva atoma (međunuklearne ose)!

Primeri nastanka π -veza (sekundarnih veza):

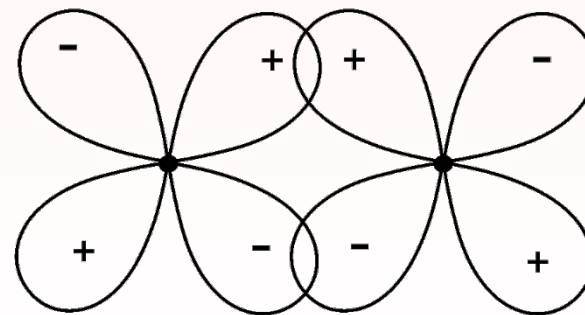
dve p-orbitale



p i d-orbitale



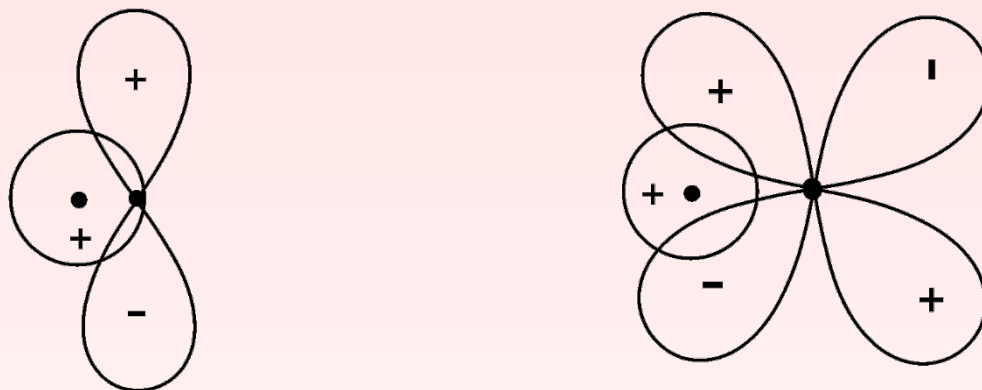
dve d-orbitale



π -veza nastaje **bočnim** preklapanjem orbitala, koje je manje efikasno (slabija veza)!

Postoji i δ -veza ($d_{z^2}-d_{z^2}$), ali je ona nebitna za nas.

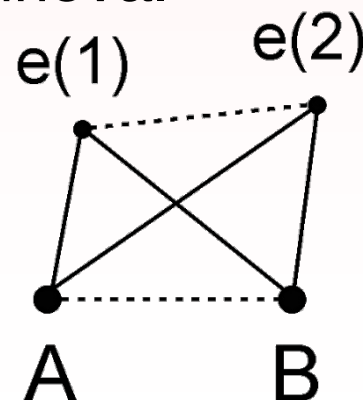
Nemoguće kombinacije (neto preklapanje jednako je nuli):



TEORIJA VALENTNE VEZE (VV, VB)

Molekul H_2 sastoji se od dva atoma sa jezgrima A i B, kao i elektronima $e(1)$ i $e(2)$ suprotnih spinova.

Sile privlačenja (4), prikazane punim linijama, jače su od sila odbijanja (2), prikazane isprekidanim linijama!!!



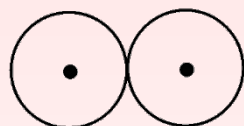
Objašnjenje Teorije VV (Hajtler i London, 1927. god)



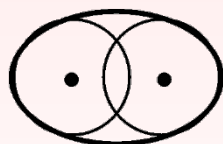
$$\Psi_A(1)$$

$$\Psi_B(2)$$

Energija izmene
elektrona koja je bitna
za stabilizaciju
molekula

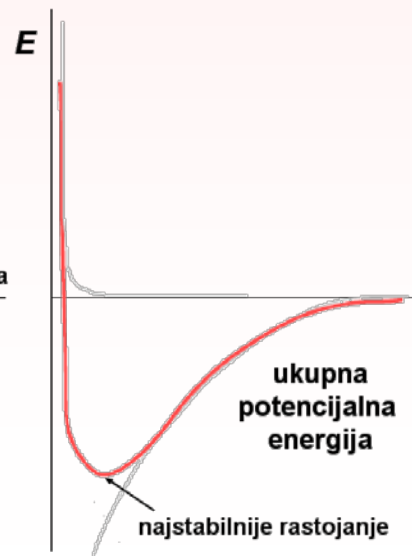
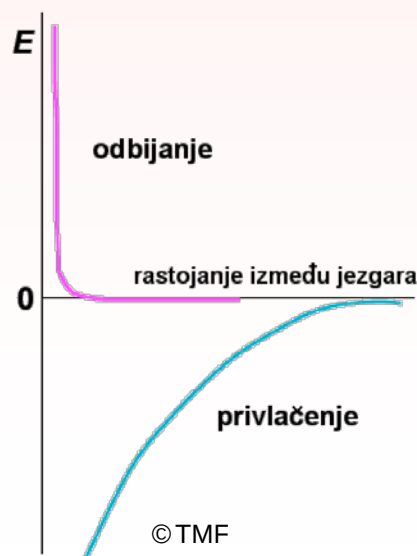


$$\Psi_A(1) \cdot \Psi_B(2)$$



$$\Psi_{VV} = \Psi_A(1) \cdot \Psi_B(2) + \Psi_A(2) \cdot \Psi_B(1)$$

Razmatranje
energetskih
promena:



Da bi se usaglasili eksperiment i teorija često treba uzeti u obzir da je veza polarna.

λ - udeo jonske veze u kovalentnoj polarnoj vezi

$$\Psi_{vv} = (1-\lambda) [\Psi_A(1) \cdot \Psi_B(2) + \Psi_A(2) \cdot \Psi_B(1)] + \lambda [\Psi_A(1) \cdot \Psi_A(2) + \Psi_B(1) \cdot \Psi_B(2)]$$

Primena Teorije valentne veze

- Razmatraju se dve po dve atomske orbitale koje učestvuju u stvaranju veza – ostale ne razmatramo.
- Po potrebi (opet radi usaglašavanja sa eksperimentom) uzima se u obzir mogućnost **hibridizacije** – **kombinovanje atomskih orbitala čime se dobijaju nove, hibridizovane atomske orbitale jednake energije (degenerisane).** (Poling!)

Jednostavan primer - HCl

Prvi korak: napisati elektronsku konfiguraciju svih atoma.

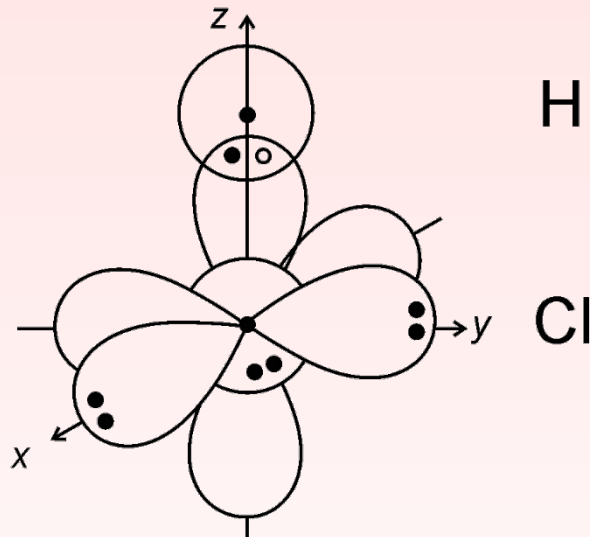
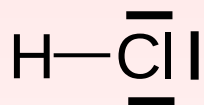
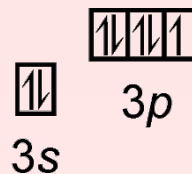
Drugi korak: nacrtati strukturnu formulu jedinjenja.

Treći korak: objasniti nastanak veza i geometriju molekula.

${}^1\text{H}: 1s^1$



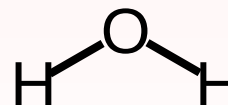
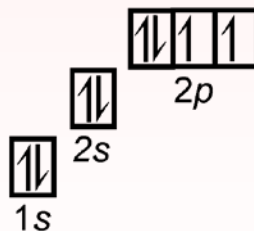
${}_{17}\text{Cl}: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$, tj. $[\text{Ne}]3s^2 3p^5$



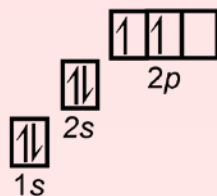
JEDNOSTAVNO!

H_2O

${}^8\text{O}: [\text{He}]2s^2 2p^4$



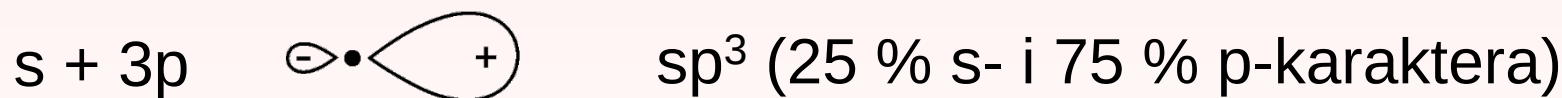
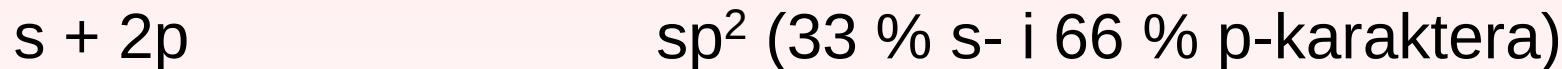
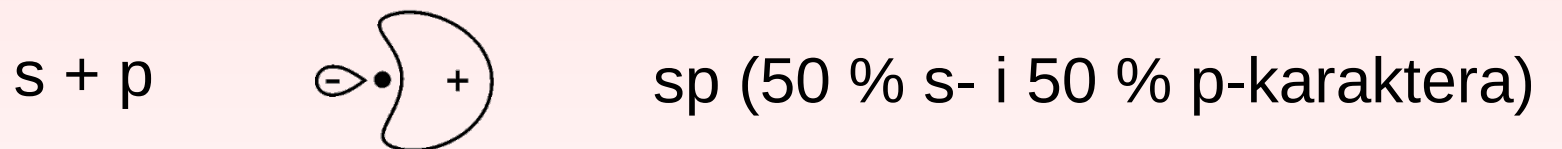
Pošto je ugao između p-orbitala 90° , ugao $\text{H}-\text{O}-\text{H}$ trebalo bi da bude 90° , on međutim iznosi $104,5^\circ$. **PROBLEM!**



Ugljenik bi trebalo da gradi samo dve veze. Opet problem!

Ti problemi se rešavaju upravo uvođenjem **hibridizacije**.

Oblik hibridizovanih orbitala?



Broj hibridnih orbitala?

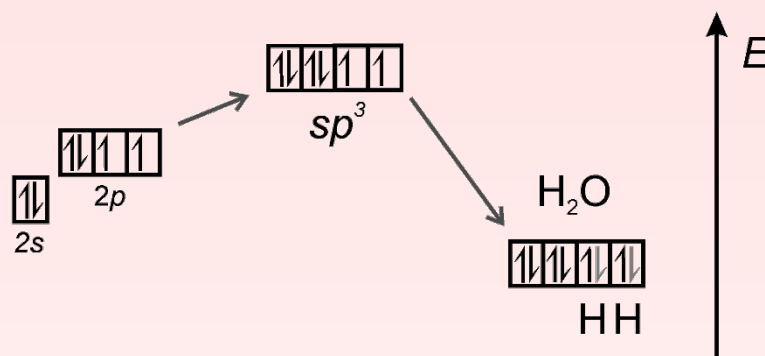
Broj σ -veza + broj slobodnih elektronskih parova.

Zašto nastaju?

Dobija se sistem sa nižom energijom, to jest sa jačim kovalentnim vezama (bolje preklapanje orbitala).

Kako nastaju?

osnovno $\Rightarrow$ pobuđeno $\Rightarrow$ molekul
stanje stanje



Najvažniji tipovi hibridizacije i prostorni raspored orbitala?

$s+p \Rightarrow$ **dve** sp

linearan

$s+2p \Rightarrow$ **tri** sp²

trougao (trigonalni)

$s+3p \Rightarrow$ **četiri** sp³

tetraedarski

$d+s+2p \Rightarrow$ **četiri** dsp²

kvadratni (retko)

$d+s+3p \Rightarrow$ **pet** dsp³ ili sp³d

trigonalno-bipiramidalni

$2d+s+3p \Rightarrow$ **šest** d²sp³ ili sp³d²

oktaedarski

$4d+s+3p \Rightarrow$ **osam** d⁴sp³ ili sp³d⁴

kubni (kocka)

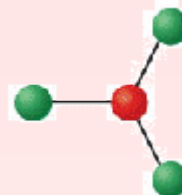
Najvažniji tipovi hibridizacije i odgovarajuća geometrija:

sp

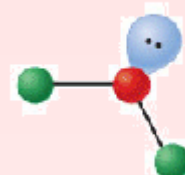


linearan

sp^2

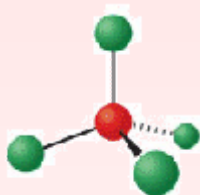


trougao

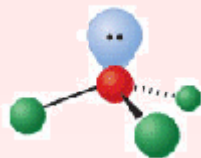


ugaoni

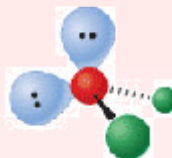
sp^3



tetraedarski



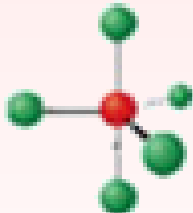
trigonalno-piramidalni



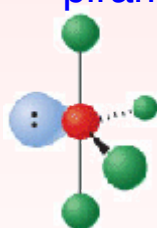
ugaoni

dsp^3
ili

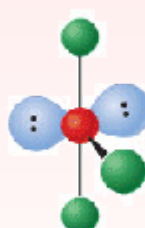
sp^3d



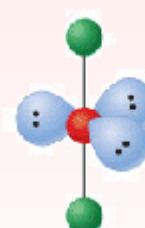
trigonalno-bipiramidalni



oblik klackalice



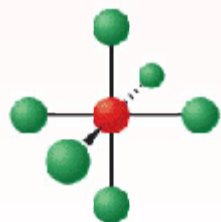
oblik slova T



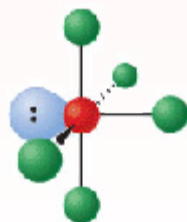
linearan

d^2sp^3
ili

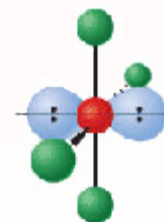
sp^3d^2



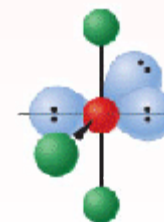
oktaedarski



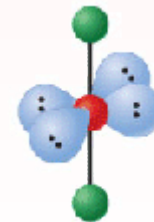
kvadratno-piramidalni



kvadratno-planarni



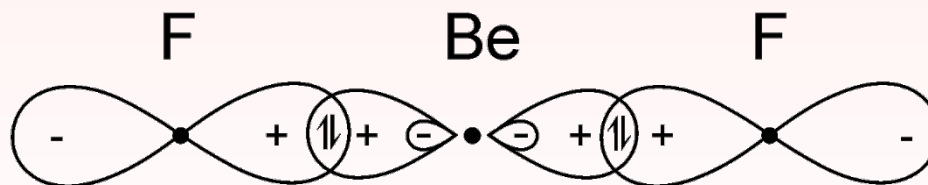
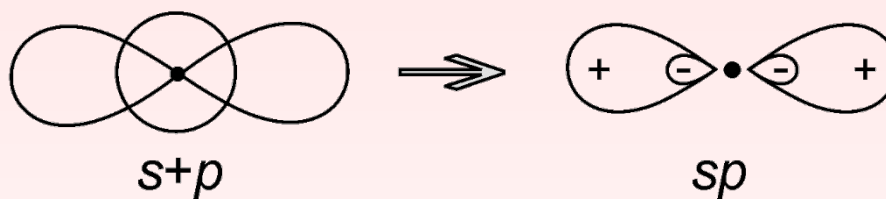
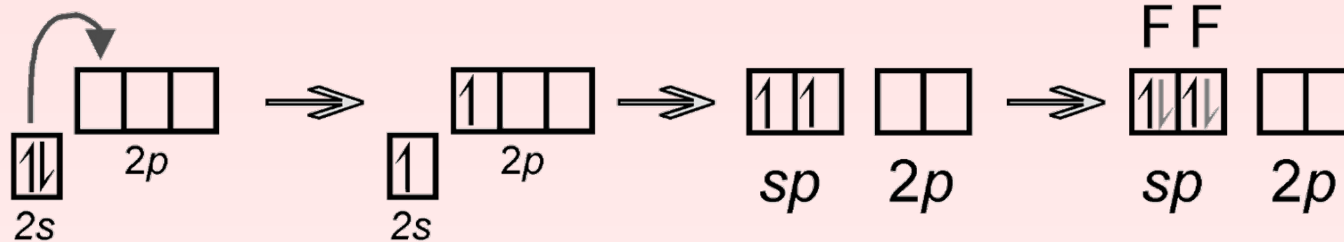
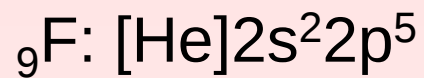
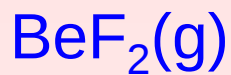
oblik slova T



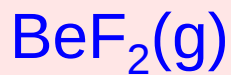
linearan

Elektronski parovi,
bilo da su slobodni,
bilo da su u
vezama,
međusobno se
odbijaju i teže da se
maksimalno udalje
jedni od drugih!

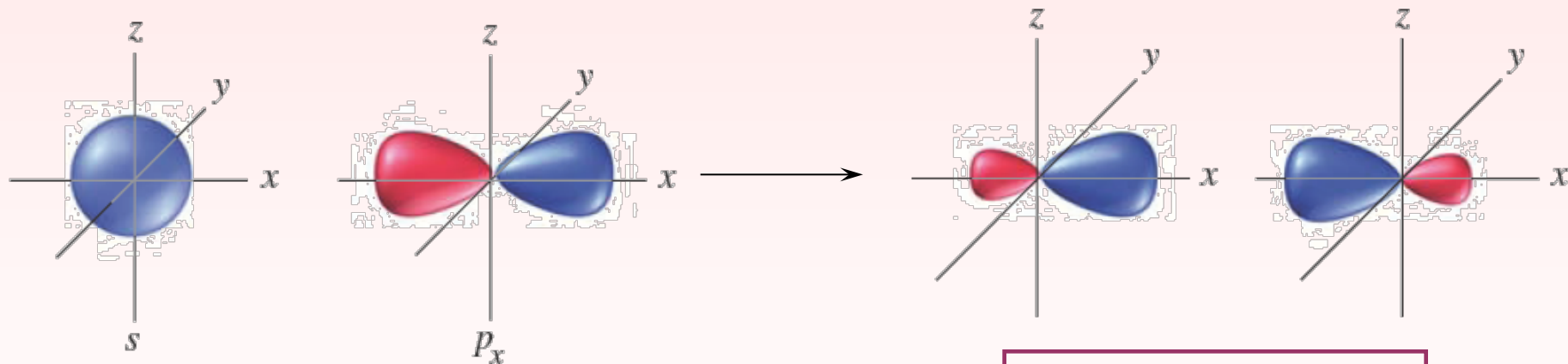
Za objašnjenje geometrije molekula postoji i **VSEPR-metoda**
(**V**alence **S**hell **E**lectron **P**airs **R**epulsion).



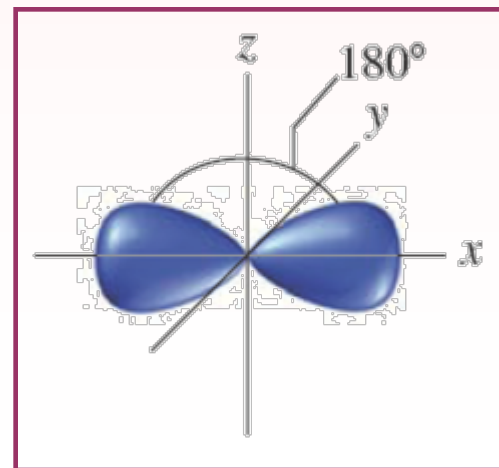
ugao: 180° (linearan molekul)

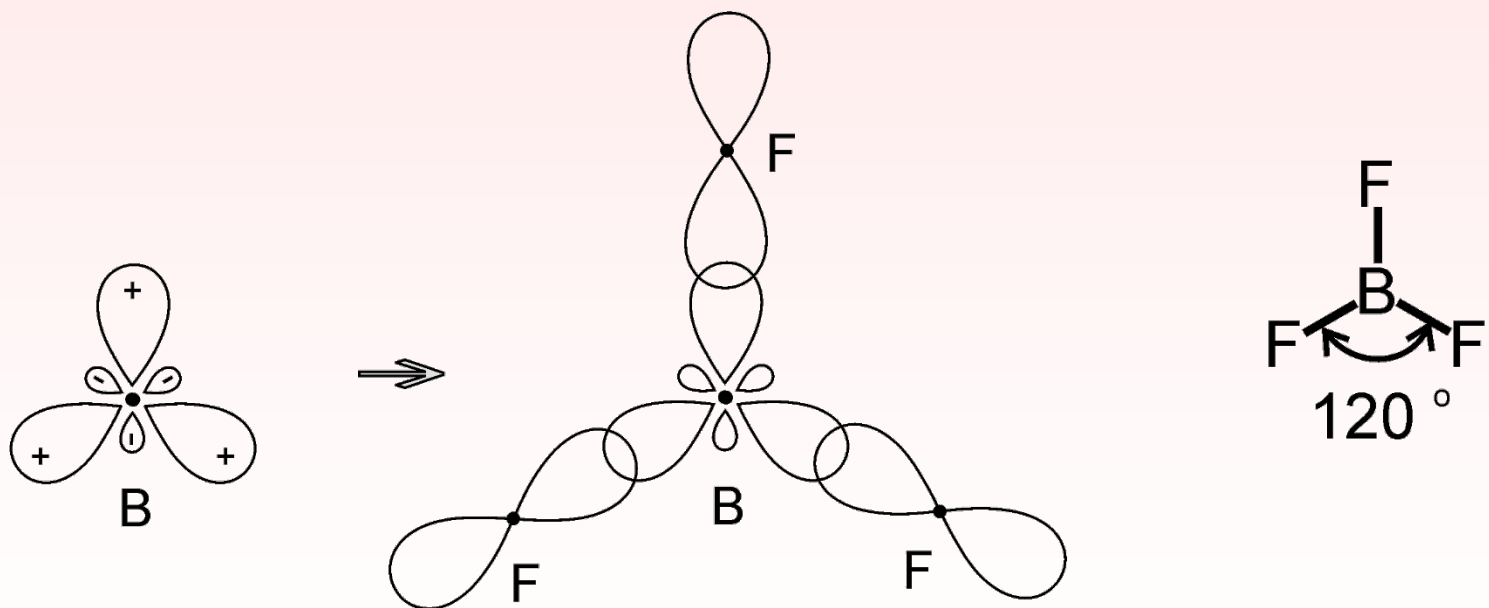
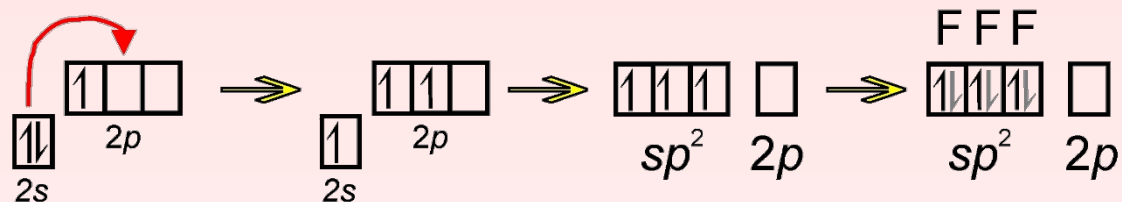
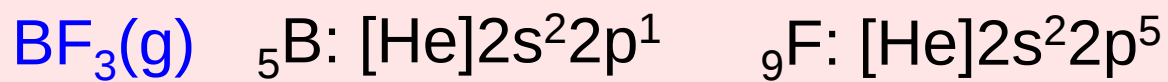


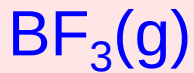
hidridizacija: jedna s-orbitala + jedna p-orbitala $\rightarrow$ dve **sp-hibridne orbitale**



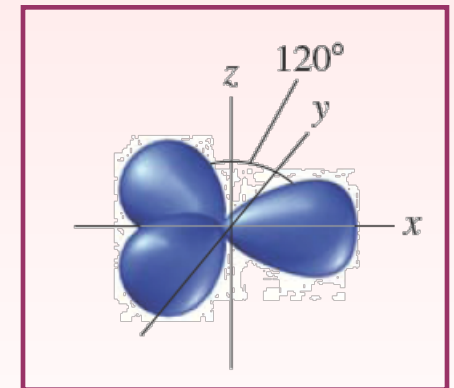
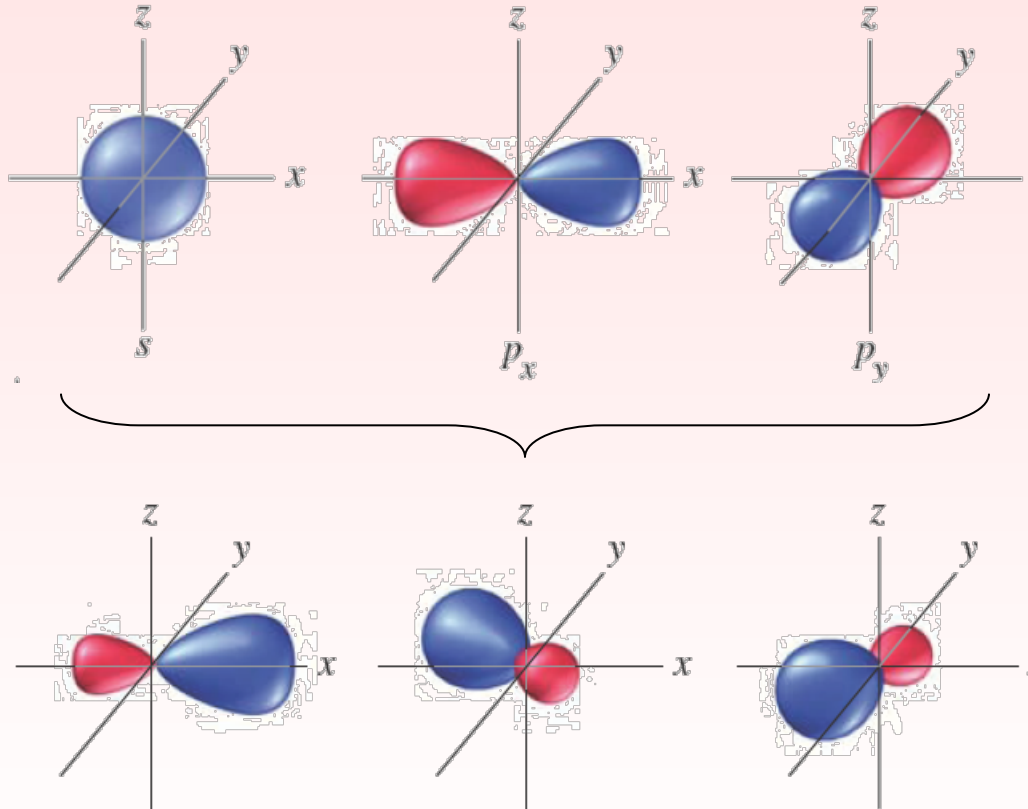
sp hibridizovani
atom Be







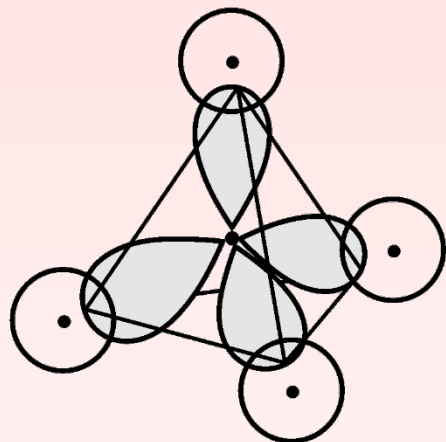
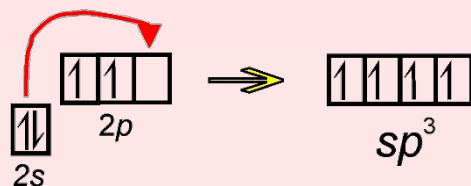
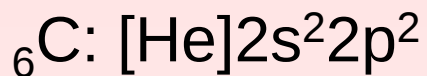
hidridizacija: jedna s-orbitala + dve p-orbitale $\rightarrow$ tri **sp^2 -hibridne orbitale**



sp^2 hibridizovani
atom B

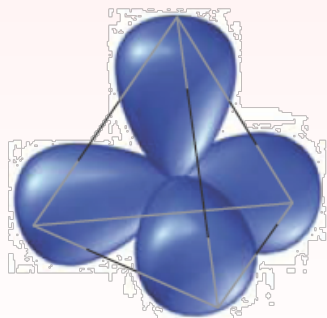
jon $[\text{BF}_4]^-$?????

Ima jednu praznu orbitalu – sposoban da bude akceptor elektronskog para, kada postaje sp^3 -hibridizovan.

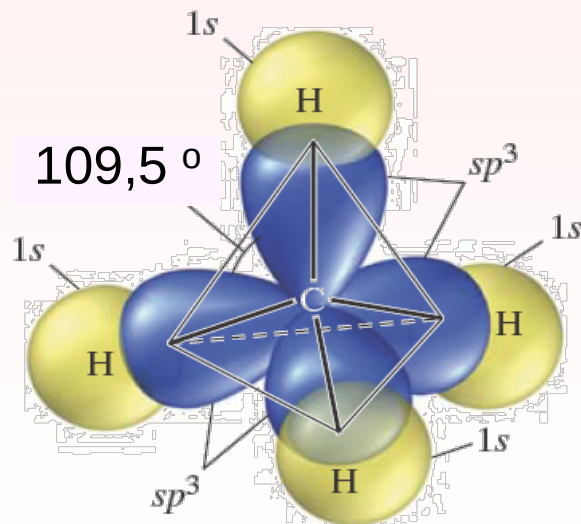


ugao H–C–H: $109,5^\circ$

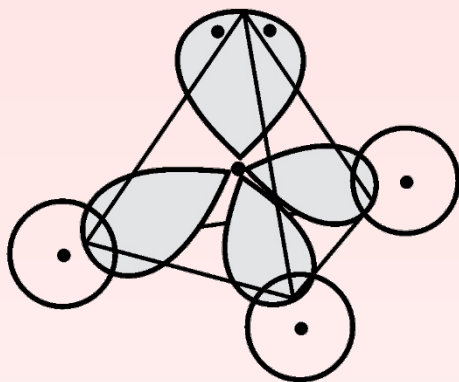
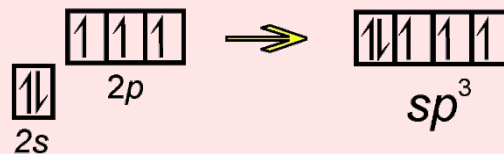
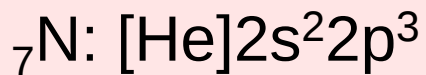
hidridizacija: jedna s-orbitala + tri p-orbitale $\rightarrow$ četiri **sp^3 -hibridne orbitale**



sp^3 hibridizovani atom C

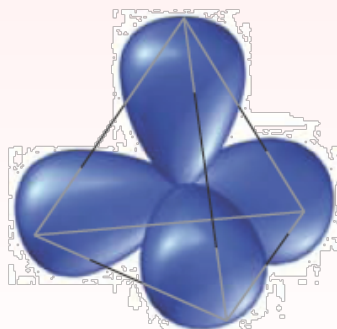


slično CCl_4 , CF_4 , CHCl_3 ,
 CHBrCl , CCl_2F_2 , $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$ itd.

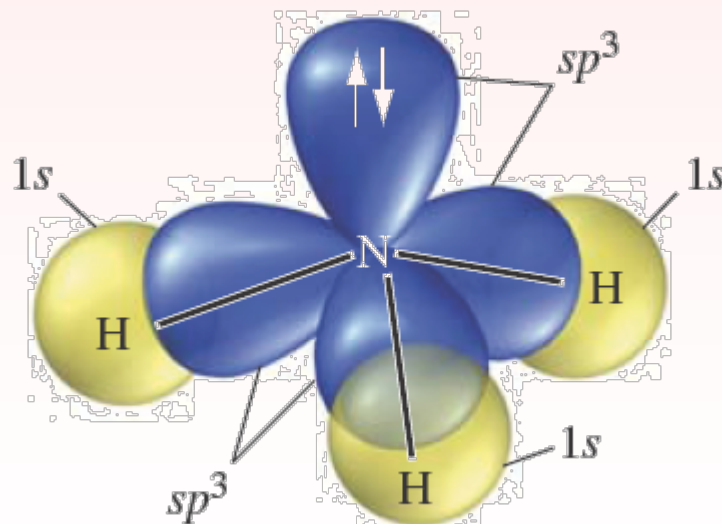


ugao H–N–H: 107°

hidridizacija: jedna s-orbitala + tri p-orbitale $\rightarrow$ četiri **sp^3 -hibridne orbitale**

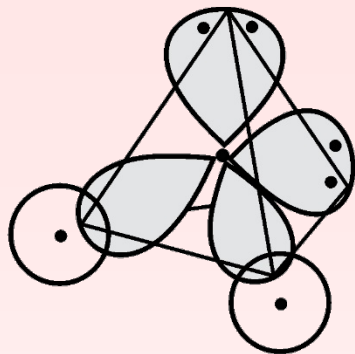
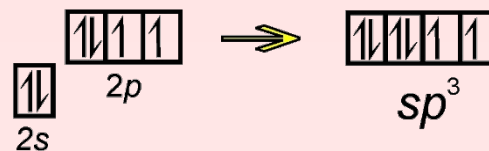
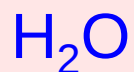


sp^3 hibridizovani atom N



u hibridnim orbitalama se nalaze slobodni elektronski parovi!

slično NCl_3 , NH_2OH , $\text{H}_2\text{N}-\text{NH}_2$ itd.



ugao H–O–H: $104,5^\circ$

Kod H_2S ugao H–S–H iznosi 93° – nema hibridizacije!

Ugao H–E–H opada sa povećanjem broja slobodnih elektronskih parova!

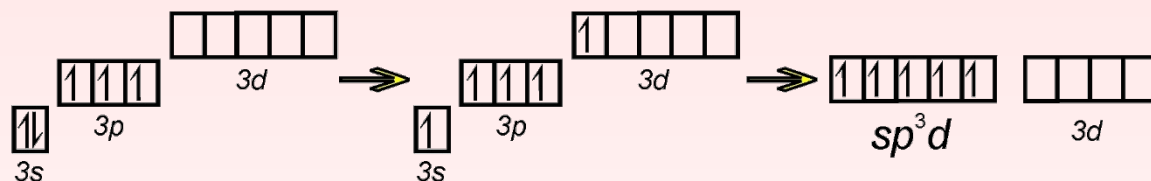
Zaključak:

Slobodni elektronski parovi zauzimaju veći deo prostora od elektronskih parova koji čine hemijsku vezu.

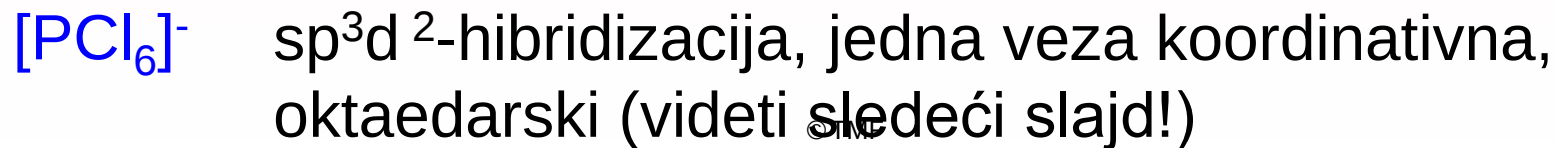
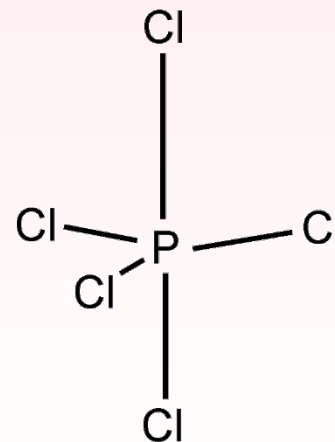
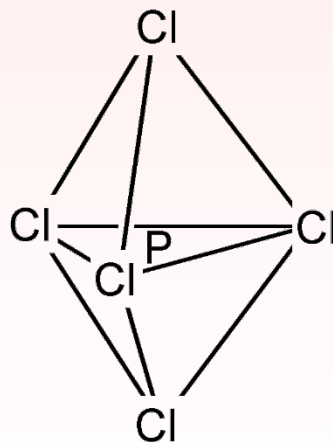
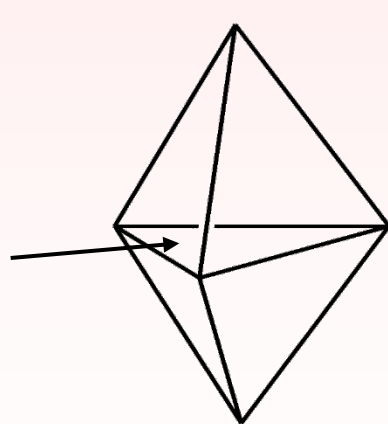
Radi se o tome da slobodni elektronski parovi pripadaju samo jednom atomu (elektronski parovi koji čine hemijsku vezu podeljeni su između dva atoma), tako da se nalaze bliže jezgri centralnog atoma.

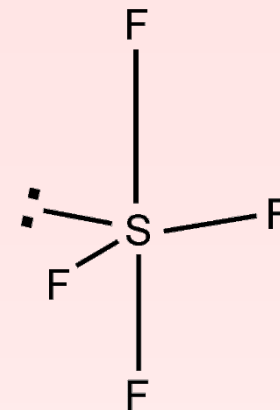
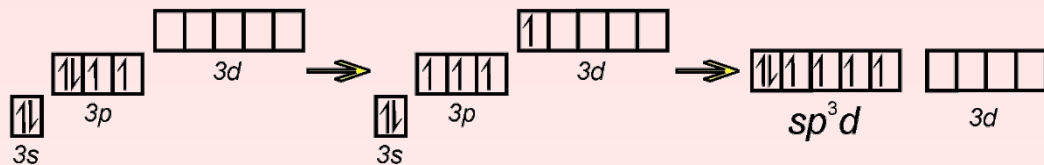


Analogija NH_3 , ugao Cl-P-Cl iznosi oko 100° .

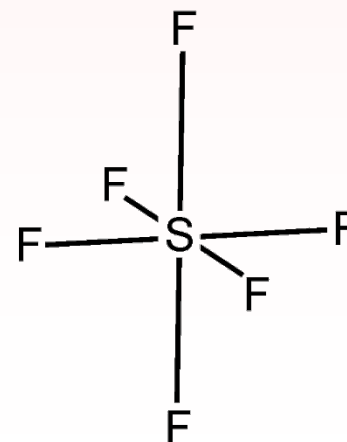
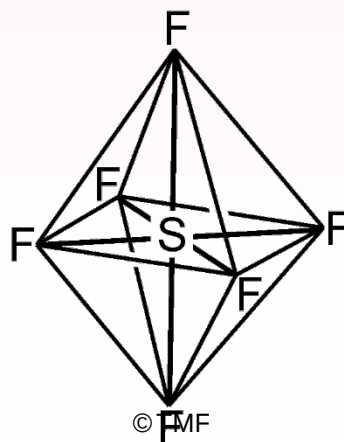
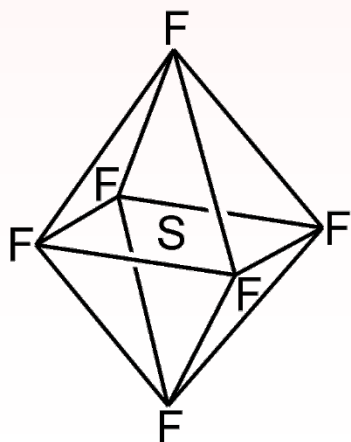
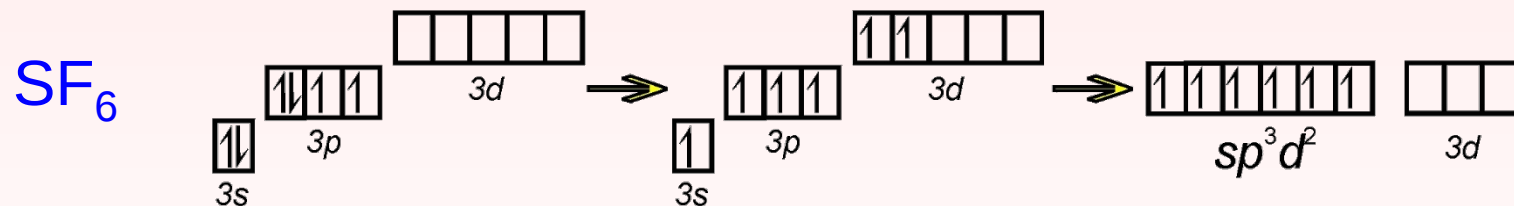


ekvatorijalna
ravan





Slobodan elektronski par uvek se smešta u ekvatorijalnu ravan, jer je tako odbijanje manje!!!!!!!



OGRANIČENJA

Tokom hibridizacije mogu se kombinovati samo orbitale bliskih energija (ako dolazi do hibridizacije, orbitale moraju biti iz istog ili susednih energetske nivoa).

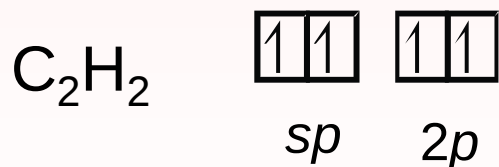
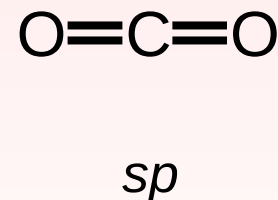
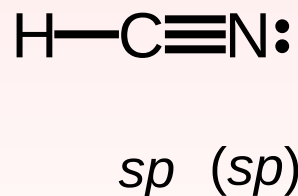
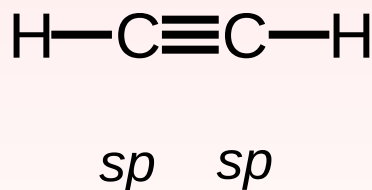
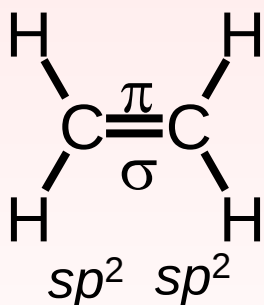
Posledice:

- | | |
|-----------------------|---|
| 1. perioda: H, He | nema hibridizacije |
| 2. perioda: Li ... Ne | samo s- i p-orbitale (sp , sp^2 , sp^3) |
| 3, 4. ... perioda | svi tipovi hibridizacije |

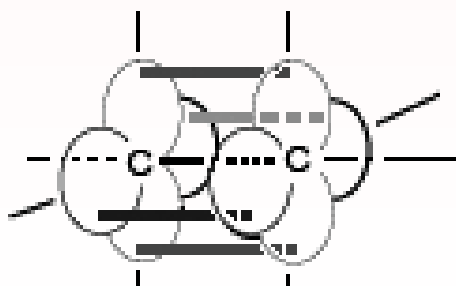
VIŠESTRUKÉ VEZE

Tipične za elemente druge periode, manje zastupljene kod elemenata treće periode, manje-više nebitne kod elemenata ostalih perioda.

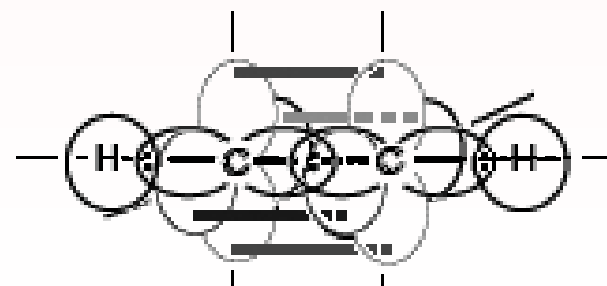
ZAŠTO? Višestruku vezu mogu da grade samo atomi kod kojih su posle hibridizacije (sp ili sp^2) zaostale nehibridizovane p -orbitale!



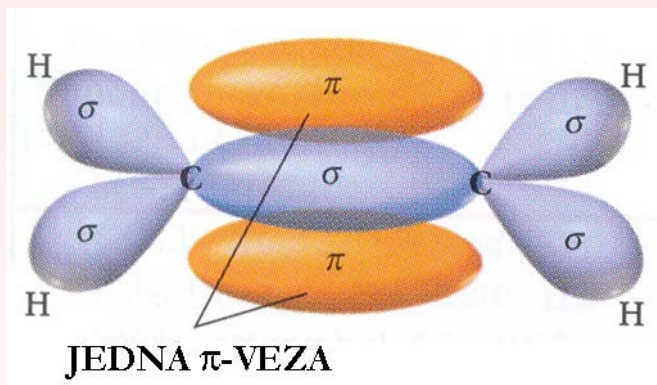
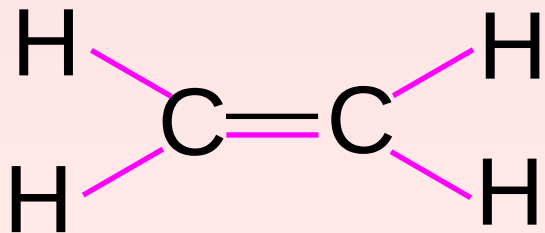
σ -veza



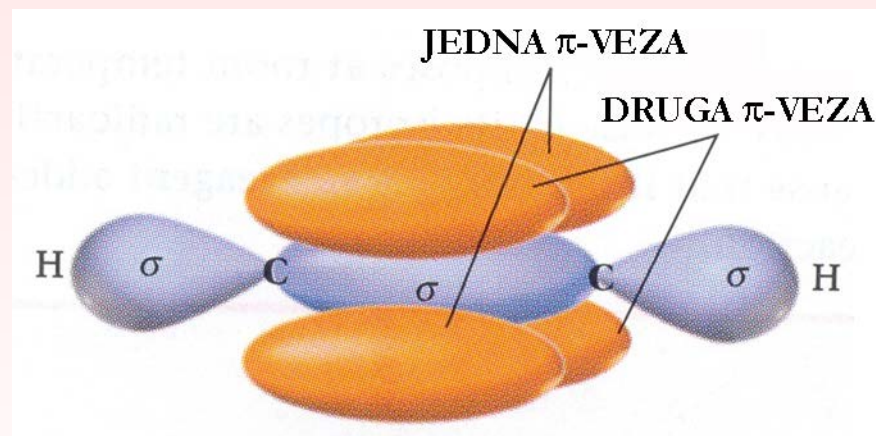
©TMF
 π -veza



ukupno



eten

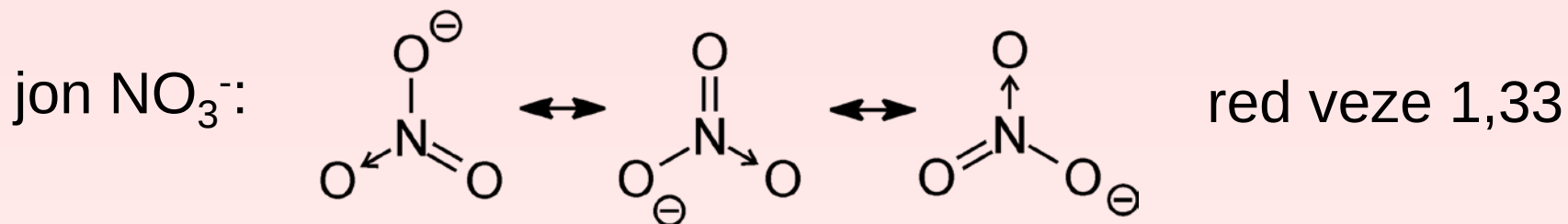


etin

Sve jednostruke veze su σ -veze.

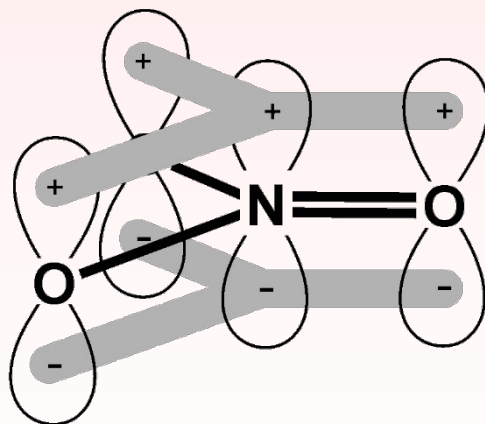
U višestrukoj vezi - jedan elektronski par čini σ -vezu, a ostali pripadaju π -vezama.

Rezonanca i delokalizacija elektrona



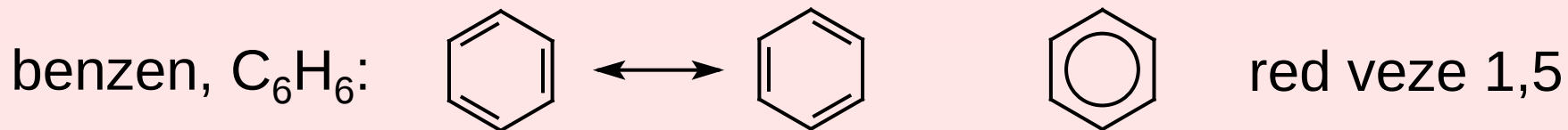
Do delokalizacije, u stvari, dolazi kada u stvaranju veze učestvuje više od dve atomske orbitale.

Atom N je sp^2 -hibridizovan. Šta to znači?

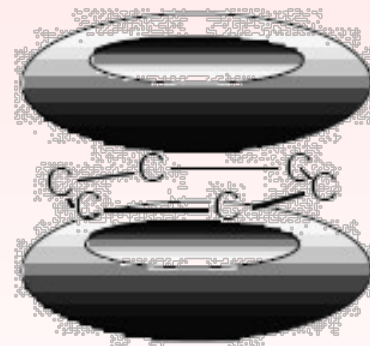
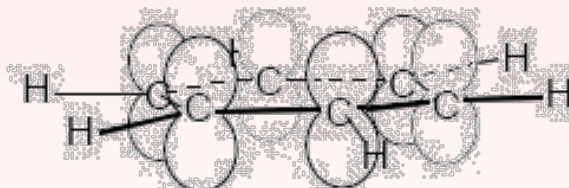
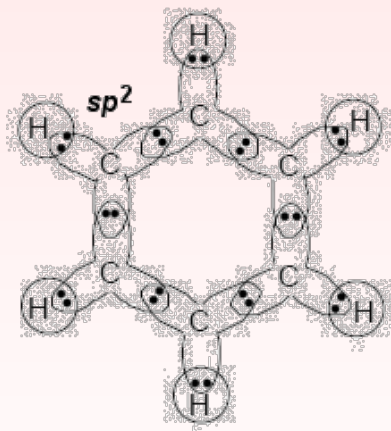


Jedan elektronski par delokalizovan je na tri veze, odnosno nalazi se u **molekulskoj** π -orbitali koju obrazuju četiri p -orbitale.

Delokalizacija doprinosi stabilizaciji molekula ili jona, nastaju sistemi sa nižim energijom.

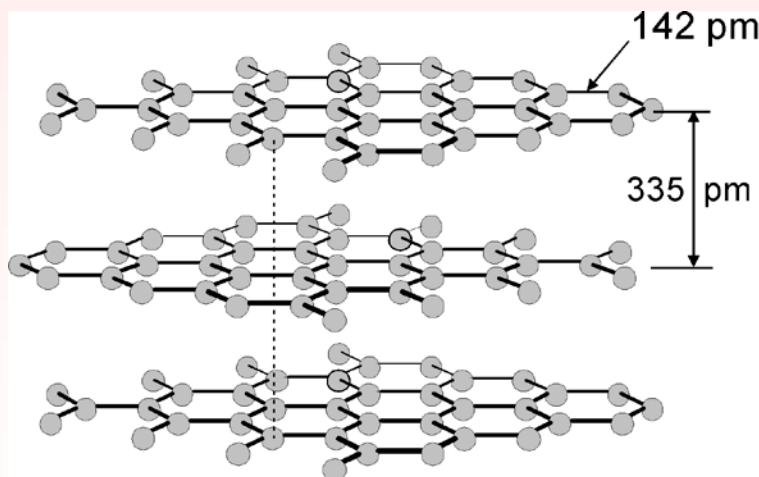


Atom C je sp^2 -hibridizovan.



Molekulska, π -orbitala nastaje bočnim preklapanjem šest p -orbitala ugljenika od kojih svaka sadrži po jedan elektron.

Grafit, alotropska modifikacija ugljenika, ima slojevitú strukturu. Svaki sloj sastoji se od beskonačnog broja kondenzovanih benzenskih jezgara. Zato grafit dobro provodi struju, ali samo paralelno sa slojevima.





KnjigE!

SREĆA!

Praktikum!