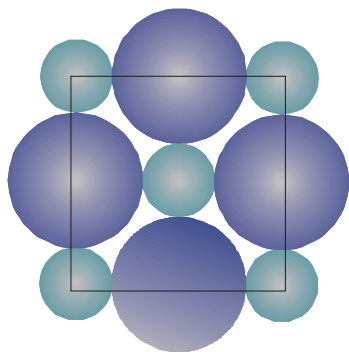


KEMIJSKA VEZA

- Elektronska teorija valencije (lat. valentia = moć, kapacitet)
- svojstvo atoma nekog elementa da se spaja s atomima drugog ili istog elementa
 - 1811. Berzelius, dualistička teorija
 - 1891. Stoney, elementarna jedinica elektrike elektron
 - 1913. Bohr, kvantna teorija
 - 1916. Lewis, Kossel, elektronska teorija valencije
 - 1919. Langmuir
 - 1927. Heitler i London primjenjuju kvantno mehaničku teoriju na vezu između atoma, dalje razvili Pauling i Slater
 - 1932. Hund, Mulliken, Huckel i Lennard-Jones, teorija molekulskih orbitala

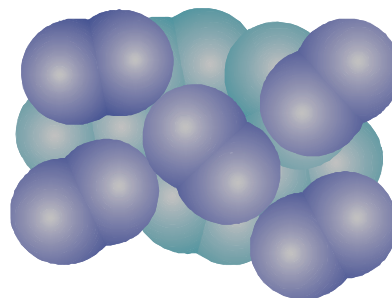
- Tipovi kemijske veze:

a) ionska



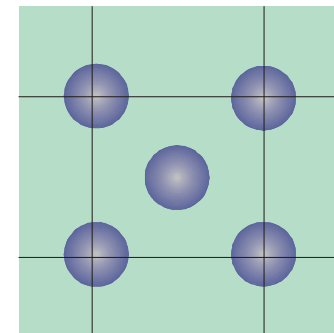
kristalna struktura
natrijeva klorida, Na^+Cl^-

b) kovalentna



molekulska kristalna
struktura joda, I_2

c) metalna



kristalna struktura
metala

- Za prirodu veze odlučujuća je raspodjela elektrona koji sudjeluju u vezi (valentni elektroni)
- kod ionske gustoća elektrona u prostoru između iona je neznatna
- u kovalentnoj vezi gustoća elektronskog oblaka znatna je u području veze
- u metalnoj vezi gustoća elektronskog oblaka svuda je po kristalu veća od nule

Elektronska teorija valencije

- Elektronska konfiguracija valentnih ljuski određuje valentnost atoma elementa (monovalentni, polivalentni i multivalentni elementi)
- Valentni elektroni služe za vezivanje atoma
- Unutarnji elektroni ne sudjeluju u kemijskoj vezi
- Spajanjem atoma postize se ***energetski stabilniji sustav***, pri tom atomi prelaze u drugacije elektronske konfiguracije stvaranjem:
pozitivno i negativno nabijenih iona → ionska veza
zajedničkog elektronskog para → kovalentna veza

IONSKA VEZA

heteropolarna veza uslijed dva suprotna električna pola

metali, mala energija ionizacije, elektron-donori → nastaju *kationi*

nemetali, veliki elektronski afinitet, elektron-akceptori → nastaju *anioni*



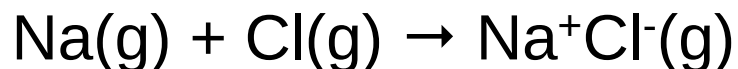
- Nabojni broj iona određuje valenciju - ionska valencija

Energija ionskog para je energija koja se oslobodi kada se atomi A i B spoje u ionski par A^+B^-

Sastoji se od

- energije ionizacije atoma A – $E_{\text{ion}}(A)$
- elektronskog afiniteta atoma B – $E_{\text{el.af.}}(B)$
- energije elektrostatskog (kulonskog) privlačenja iona A^+ i B^-
- energije odbijanja elektronskih oblaka iona koji su u dodiru

Atomi se međusobno vežu jer veza omogućuje spojenim atomima da postignu niže energetska stanje



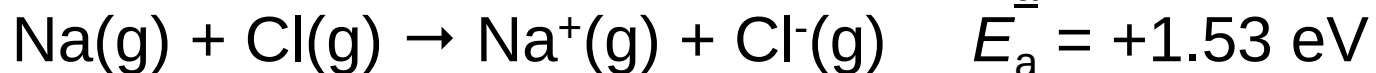
- za uklanjanje elektrona iz Na(g) treba utrošiti energiju ionizacije

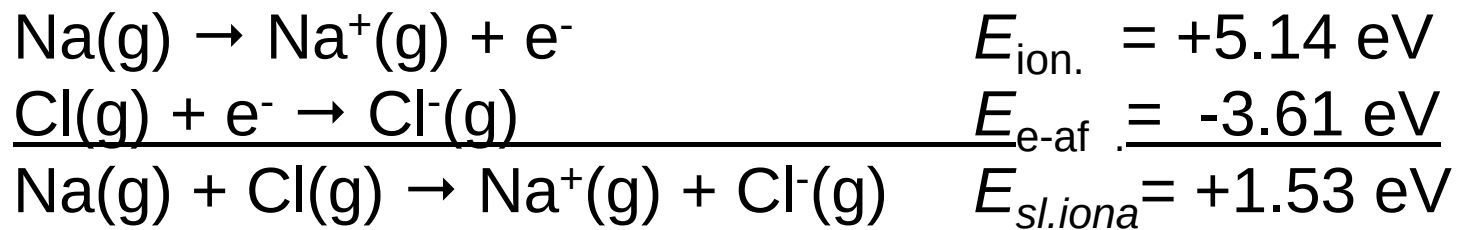


- pri vezivanju elektrona za atom klora oslobađa se energija jednaka elektronskom afinitetu klora i iznosi $E_a = 3.61 \text{ eV}$



Ako ne bi nastao ionski par $\text{Na}^+\text{Cl}^-\text{(g)}$ energija nastajanja iona Na^+ i Cl^- iz njihovih atoma bila bi jednaka zbroju jednadžbi (1) i (2)





Sustav slobodnih atoma je stabilniji od sustava slobodnih iona usprkos njihovoj stabilnijoj elektronskoj konfiguraciji

Međutim nastali ioni $\text{Na}^+(\text{g})$ i $\text{Cl}^-(\text{g})$ ne ostaju slobodni već se radi suprotnih naboja vežu u ionski par $\text{Na}^+\text{Cl}^-(\text{g})$, a pri tome se oslobađa energija jednaka

$$E_p = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{(z^+e) \times (z^-e)}{r_0} = -5.3 \text{ eV}$$

ϵ_0 - dielektrična konstanta prostora

e - elementarni naboj elektrona, $1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$

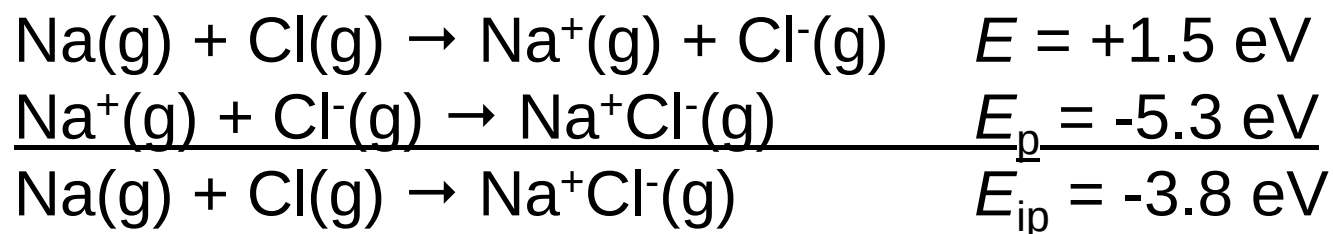
z^+ - nabojni broj pozitivnog iona, 1 za Na^+

z^- - nabojni broj negativnog iona, 1 za Cl^-

r_0 - udaljenost između jezgri spojenih iona, za Na^+ i Cl^- $2.76 \times 10^{-10} \text{ m}$, određena spektroskopskim mjerenjem

E_p - potencijalna energija koja se oslobađa prilikom nastajanja ionskog para, $E_p = F \times r$;

F - elektrostatička (Coulombova) sila između dva točkasta naboja upravo je razmjerna umnošku veličine oba naboja i obrnuto razmjerna kvadratu udaljenosti r između njih



- Nastajanjem ionskog para $\text{Na}^+\text{Cl}^-\text{(g)}$ iz atoma Na(g) i Cl(g) oslobađa se energija od -3.8 eV , te je ionski par $\text{Na}^+\text{Cl}^-\text{(g)}$ stabilniji od ne povezanih atoma Na(g) i Cl(g)
- Za stvaranje stabilne ionske veze najvažniji faktor je elektrostatsko privlačenje suprotno nabijenih iona

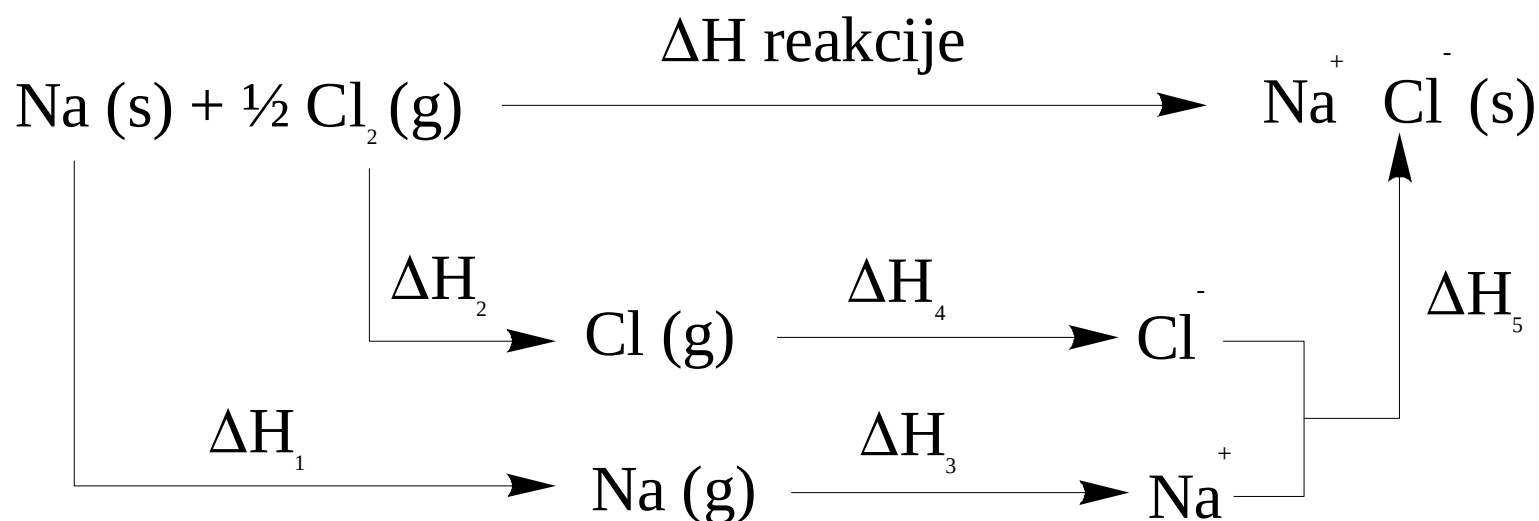
Elektrostatsko privlačenje između "+" i "-" iona predstavlja ionsku vezu, odnosno vezu koja drži ione zajedno.

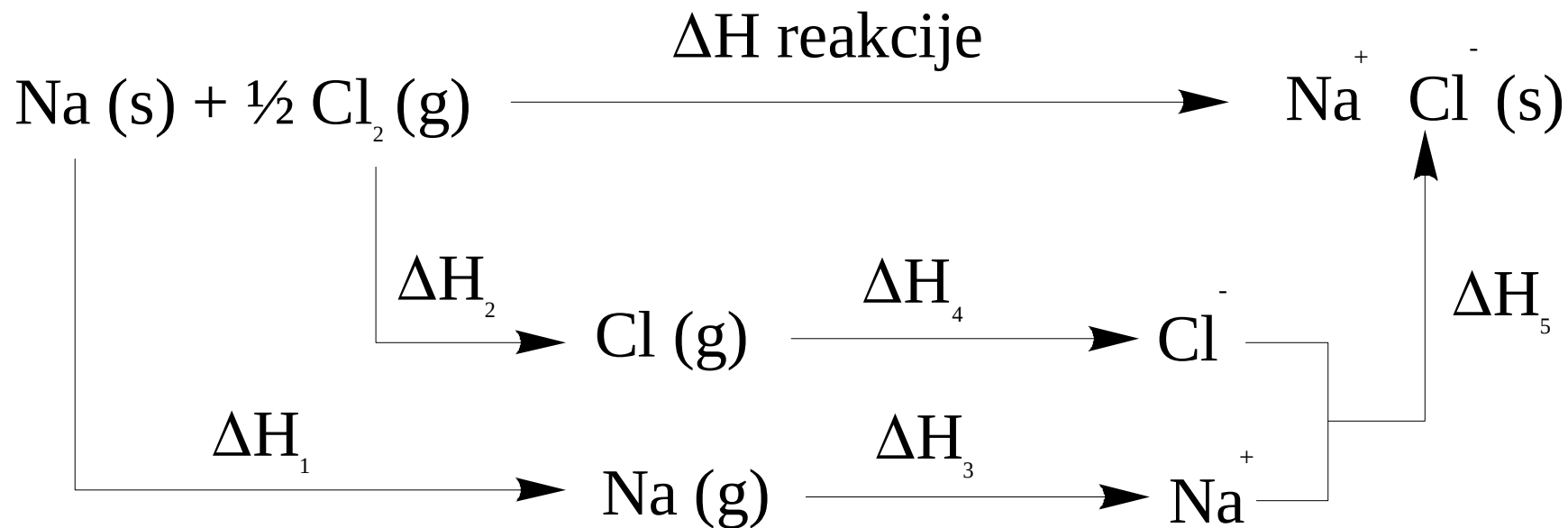
Energija kristalne rešetke ionskog spoja

Na sobnoj temperaturi ionski su spojevi kristalizirane krutine

- energija kristala je puno niža od energije plinovitog stanja
- energija veze u ionskim kristalima je veća od energije veze u ionskom paru tvari
- energija koja se oslobodi pri nastajanju 1 mola kristala iz pojedinačnih iona u plinovitom stanju naziva se ***energija kristalne rešetke*** i ona je mjera stabilnosti iona u kristalnom stanju

- eksperimentalno je nemoguće odrediti energiju kristalne rešetke
- određuje se Born-Haberovim kružnim procesom ili ciklusom Hessova zakona:
 - prilikom prijelaza nekog kemijskog sustava iz određenog početnog stanja u određeno konačno stanje, oslobođena ili apsorbirana količina topline ne ovisi o putu reakcije, tj. ona je ista bez obzira na to zbiva li se reakcija u jednom ili u više stupnjeva.





$$\Delta H_{\text{reakcije}} = \Delta H_1 + \Delta H_2 + \Delta H_3 + \Delta H_4 + \Delta H_5 = -411 \text{ kJ/mol}$$

ΔH_1 - energija isparavanja natrija, 107.32 kJ/mol

ΔH_2 - energija atomiziranja klora, 121.68 kJ/mol

ΔH_3 - energija ionizacije natrija, 496.00 kJ/mol

ΔH_4 - elektronski afinitet klora, -349 kJ/mol

ΔH_5 - energija rešetke NaCl(s), -774.7 kJ/mol

glavni faktori o kojima ovisi energija kristalne rešetke su:

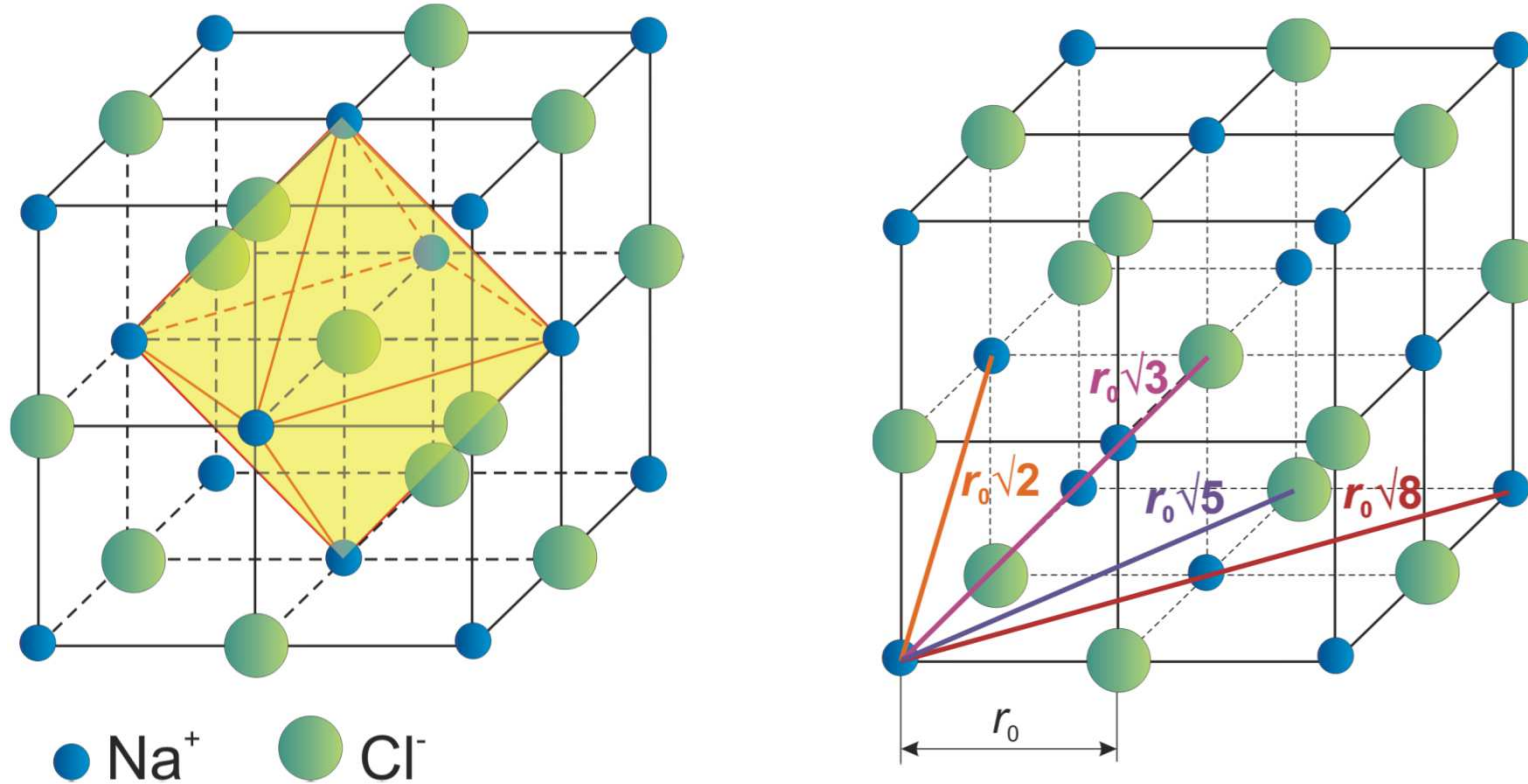
1. veličina naboja iona (z^+ i z^-)
2. ravnotežna udaljenost najbližih susjednih iona ($r_0 = r^+ + r^-$)
3. međusobni utjecaj svih iona u kristalu
4. odbojne sile naboja elektronskih oblaka koji su u međusobnom „dodiru”

molarna energija je

$$E_{p, m} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \times \frac{(z^+ e) \times (z^- e)}{r_0} N_A$$

Na promatrani ion djeluju Coulombovim silama svi ioni u kristalnoj rešetki, te energija mora biti veća.

U kristalu svaki ion osjeća potencijalno polje iona koji ga okružuju



$$E_{p,m} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_0} N_A M$$

$$M = \left(\frac{6}{\sqrt{1}} - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}} - \frac{6}{\sqrt{4}} + \frac{24}{\sqrt{5}} - \frac{24}{\sqrt{6}} + \dots \right)$$

M - Madelungova konstanta – ne ovisi o naboju iona već o njihovom broju i razmještaju

tip rešetke	M
NaCl	1.74756
CsCl	1.76267
CaF ₂	2.51939
ZnS (sfalerit)	1.63805
ZnS (vurcit)	1.64132
TiO ₂ (rutil)	2.408
CdI ₂	2.36
α -Al ₂ O ₃	2.36

▪ Born-Landé jednadžba

$$E_{p,m} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_0} N_A M \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

- n - Bornov eksponent – uzima u obzir odbijanje elektronskih oblaka ima vrijednosti za ione konfiguracije [He] 5, [Ne] 7, [Ar] 9, [Kr] 10 i [Xe] 12
- npr za $\text{Na}^+\text{Cl}^- = [\text{Ne}][\text{Ar}] \rightarrow (7+9)/2 = 8$

Spoj	Izračunata energija krist. rešetke	Eksperimentalno određena energija krist. rešetke
NaCl	−756 kJ/mol	−787 kJ/mol
LiF	−1007 kJ/mol	−1046 kJ/mol
CaCl ₂	−2170 kJ/mol	−2255 kJ/mol

spoj	energija kristalne rešetke (kJ/mol)	temp. tališta (°C)
LiF	1017	845
LiCl	828	610
LiBr	787	550
LiI	732	450
NaCl	788	801
NaBr	736	750
NaI	686	662
KCl	699	772
KBr	689	735
KI	632	680
MgCl ₂	2527	714
Na ₂ O	2570	Sub*
MgO	3890	2800

•raste porastom naboja i opadanjem međuionske udaljenosti

•usporediti energiju kristalne rešetke i:

- naboje iona koji čine ionsku krutinu

- veličinu ionskog radijusa

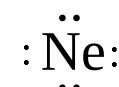
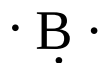
$$E \propto \frac{Q_{\text{Li}^+} Q_{\text{F}^-}}{r}$$

Svojstva ionskih spojeva posljedica su ionske veze

1. veza između iona posve je električne prirode
2. ionska veza nije usmjerena u prostoru
3. ionski spojevi su tvrdi s visokim talištem i vrelištem, obično lako topljivi u vodi
4. ionski spojevi su elektroliti, odnosno vodici drugog reda

KOVALENTNA VEZA

- homopolarna veza ili veza elektronskog para ili kemijska veza
- Valentni elektroni nekog atoma prikazuju se Lewisovim točkastim simbolima

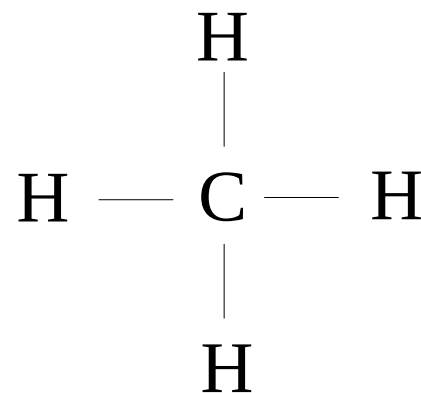
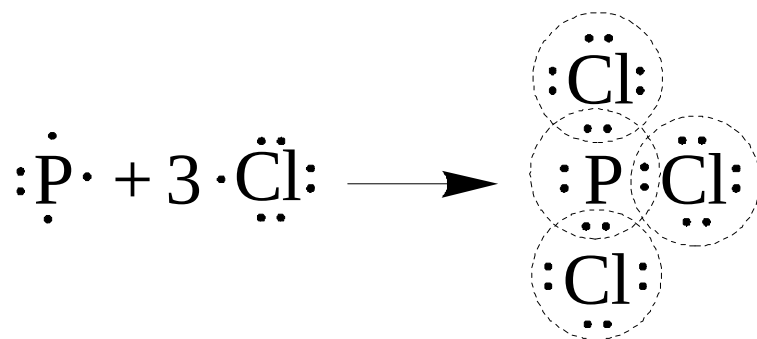
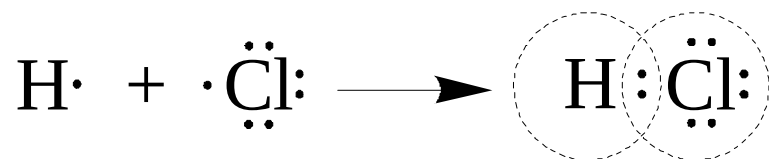
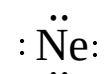


1 1A	2 2A											13 3A	14 4A	15 5A	16 6A	17 7A	18 8A
•H												•B•	•C•	•N•	•O•	•F•	He:
•Li	•Be•											•Al•	•Si•	•P•	•S•	•Cl•	•Ar•
•Na	•Mg•	3 3B	4 4B	5 5B	6 6B	7 7B	8 8B	9 8B	10 8B	11 1B	12 2B	•Ga•	•Ge•	•As•	•Se•	•Br•	•Kr•
•K	•Ca•											•In•	•Sn•	•Sb•	•Te•	•I•	•Xe•
•Rb	•Sr•											•Tl•	•Pb•	•Bi•	•Po•	•At•	•Rn•
•Cs	•Ba•																
•Fr	•Ra•																

ns^1 ns^2

ns^2 : np^1 np^2 np^3 np^4 np^5 np^6

- točke predstavljaju valentne elektrone (oni mogu sudjelovati u stvaranju veze)
- atomu klora nedostaje jedan elektron da bude izoelektričan s argonom



Osnovne postavke

- ***zajednički elektronski*** par čini jednu kovalentnu vezu (crtica)
- ***pravilo okteta*** - struktura plemenitog plina
- ***oktetna struktura*** je posljedica, a ne uzrok kemijske veze
- ***veza*** nastaje zbog povoljnijeg (nižeg) energetskog stanja
- ***slobodni elektronski par*** ne sudjeluje u kemijskoj vezi

usporedba svojstava ionskog i kovalentnog spoja

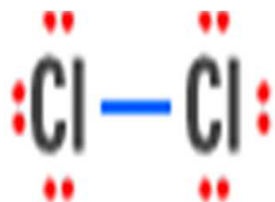
svojstvo	NaCl (ionski spoj)	CCl ₄ (kovalentni spoj)
izgled	bijela krutina	bezbojna tekućina
talište (°C)	801	-23
vrelište (°C)	1413	76.5
gustoća (g cm ⁻³)	2.17	1.59
topljivost u vodi	velika	vrlo slaba
električna vodljivost		
čvrsto	slaba	slaba
talina ili otopina	dobra	slaba

Karakteristike veze

- red veze
- duljina i kut veze
- jakost (energija) veze

Karakteristike veze

- **red veze** - broj zajedničkih elektronskih parova u molekuli podjeljen s brojem atoma vezanih na centralni atom



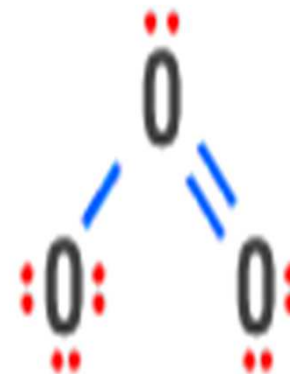
1



2



3

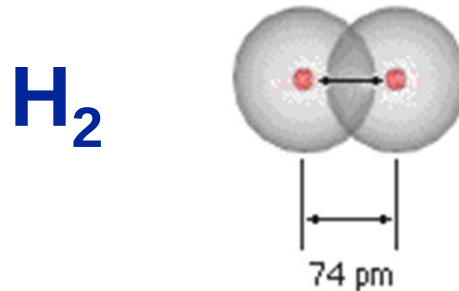


1.5

Karakteristike veze

- ***duljina veze*** - udaljenost između jezgri dvaju atoma koji sudjeluju u vezi ($\pm 10\%$)

ovisi o ***veličini atoma*** koji sudjeluju u vezi i ***red*** ***veze***

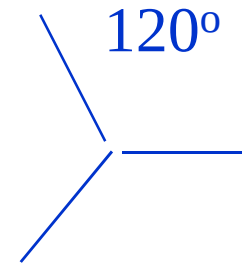
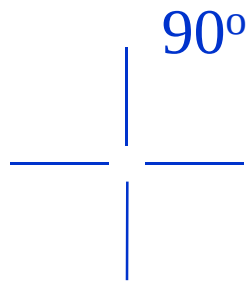


C – B	C – C	C – N	C – O	C – F
167 pm	154 pm	147 pm	143 pm	141 pm

C – F	C – Cl	C – Br	C – I
141 pm	177 pm	194 pm	213 pm

C – C	C = C	C ≡ C
154 pm	134 pm	121 pm

- ***kut veze*** - kut što ga međusobno zatvaraju dvije veze



Karakteristike veze

- ***jakost veze*** - energija koju je potrebno dovesti da bi se veza prekinula

C – C
346 kJ/mol

C = C
602 kJ/mol

C ≡ C
835 kJ/mol

C – B
356 kJ/mol

C – N
305 kJ/mol

C – O
358 kJ/mol

C – F
485 kJ/mol

C – F
485 kJ/mol

C – Cl
327 kJ/mol

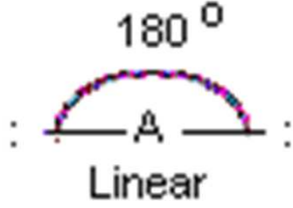
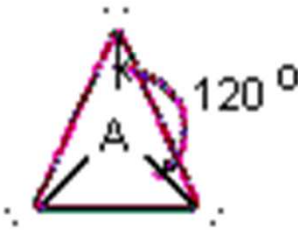
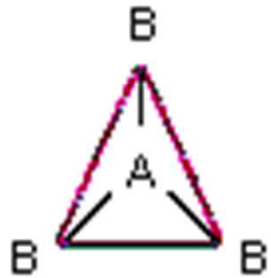
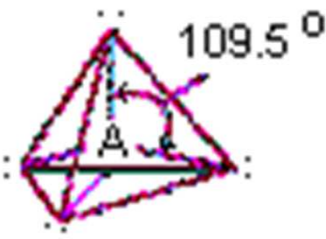
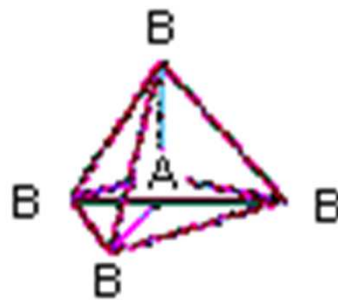
C – Br
285 kJ/mol

C – I
213 kJ/mol

Geometrija molekule

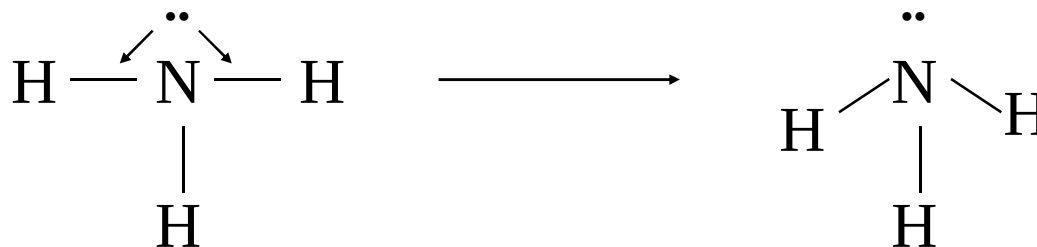
- elektronski parovi u valentnoj ljusci atoma međusobno se odbijaju, što uzrokuje da njihova međusobna udaljenost bude maksimalna
- ovakav pristup naziva se izvorno VSEPR - Valence-Shell Electron-Pair Repulsion model

A) na centralnom atomu imamo samo zajedničke elektronske parove

Broj elektronskih parova	razmještaj elektronskih parova	geometrija molekule	primjer
2	 180° Linear	$B - A - B$ Linear	BeCl ₂ , HgCl ₂
3	 120° istostranični trokut	 istostranični trokut	BF ₃
4	 109.5° Tetraedar	 Tetraedar	CH ₄ , NH ₄ ⁺

B) na centralnom atomu imamo jedan ili više zajedničkih elektronskih parova zajedno s jednim ili više slobodnih elektronskih parova

najjače se međusobno odbijaju slobodni elektronski parovi, zatim slobodni elektronski par i zajednički elektronski par, a najslabije se međusobno odbijaju zajednički elektronski parovi



- fizikalna i kemijska svojstva, kao što su talište, vrelište, gustoća, vrste reakcija u kojima molekula učestvuje, proizlaze iz geometrije molekule.
- geometrija se ne može uvijek predvidjeti iz Lewisove strukture, duljina veza i kut među njima mora se odrediti eksperimentalno.

■ KVANTNO-MEHANIČKA TEORIJA VALENCIJE

- sila koja međusobno povezuje atome u molekuli je ***elektrostatska sila privlačenja*** između pozitivnog naboja jezgara i negativnog naboja elektrona (*jednako kao i u atomu*).
- u atomu u odnosu na molekulu ne postoji elektrostatsko obijanje između pozitivno nabijenih jezgara (postoji samo odbijanje elektrona)!
- da bi molekula postojala sile privlačenja moraju prevladavati nad silama odbijanja $\Rightarrow$ Energija molekule manja je od energije razdvojenih atoma

Primjenom kvantne mehanike na teoriju kemijske veze razvile su se dvije teorije

teorija valentne veze - Heitler i London (1927)
prilikom nastajanja molekule dolazi do preklapanja samo nekih atomskih orbitala

teorija molekulskih orbitala - Hund i Mulliken (1928)
prilikom nastajanja molekule dolazi do preklapanja svih atomskih orbitala

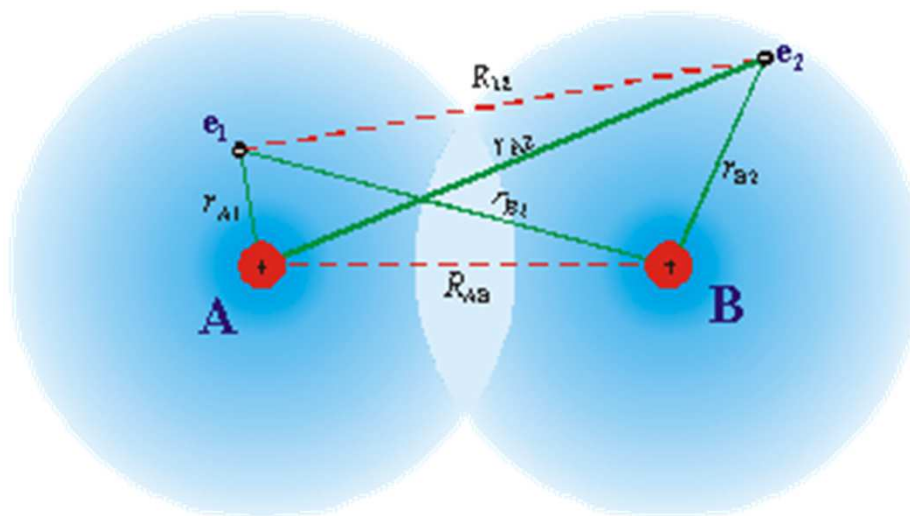
Teorija valentne veze

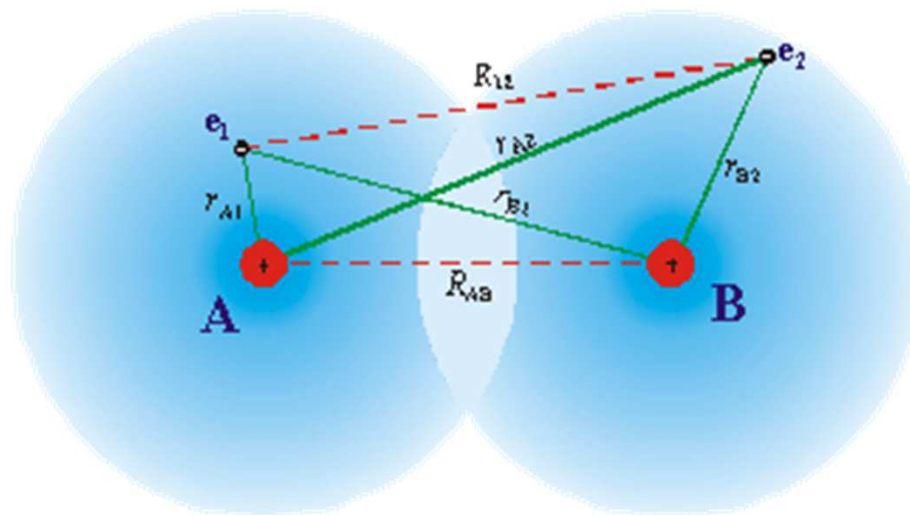
Dvoelektronska valna funkcija dva dovoljno razdvojena vodikova atoma je

$$\psi = \psi_{A(1)} \psi_{B(2)}$$

$$R_{AB} \rightarrow \infty$$

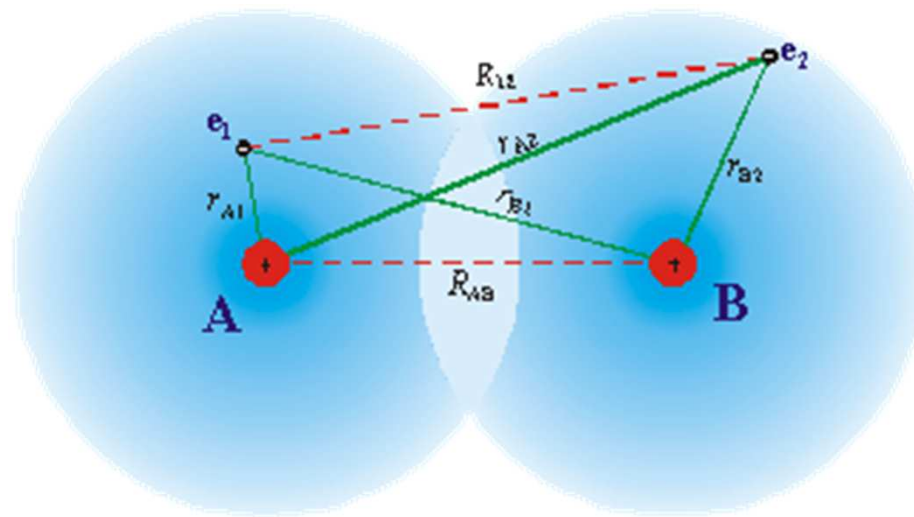
Približavanjem atoma počnu djelovati međusobno jezgre **A** i **B** i elektroni **e₁** i **e₂** Coulombovim privlačnim (zeleno) i odbojnim silama (crveno):





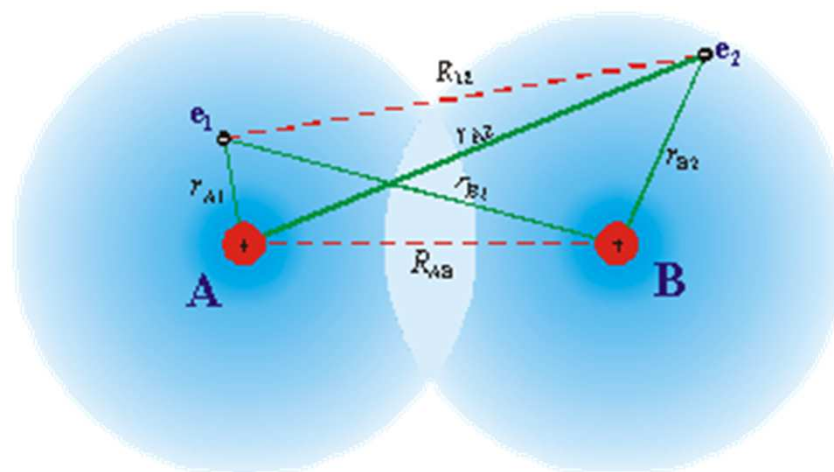
- Približavanjem atoma dolazi do njihovog spajanja u molekulu i oba elektrona jednako pripadaju i jednoj i drugoj jezgri.
- Više ne možemo govoriti o elektronu e_1 koji pripada samo atomu **A** i elektronu e_2 koji pripada samo atomu **B** (Heitler i London), pa je molekulska valna funkcija sada:

$$\psi = \psi_{A(1)}\psi_{B(2)} + \psi_{A(2)}\psi_{B(1)}$$



Približavanjem atoma djeluju međusobno jezgre **A** i **B** i elektroni **e_1** i **e_2** Coulombovim privlačnim (zeleno) i odbojnim silama (crveno):

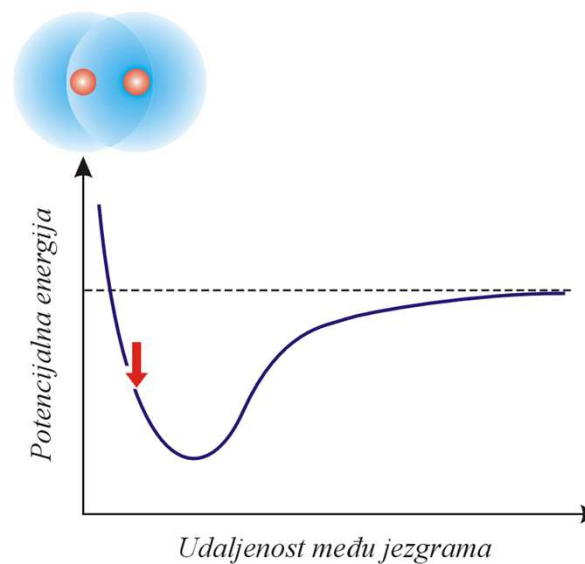
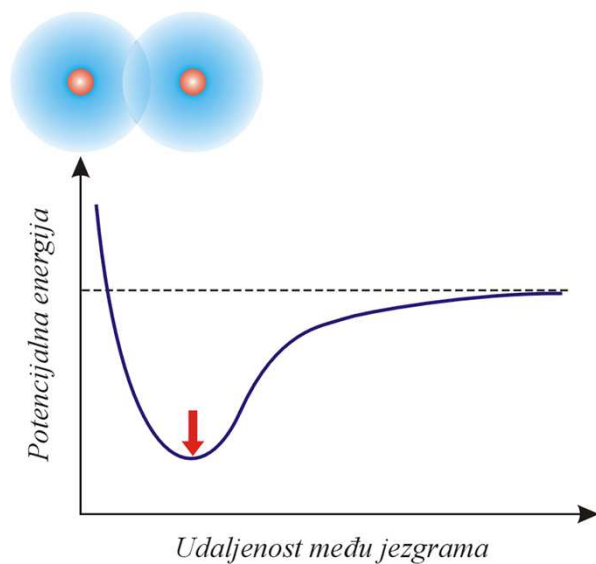
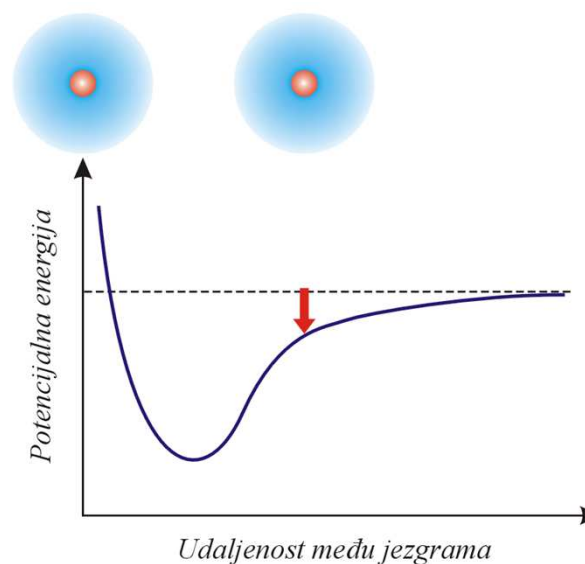
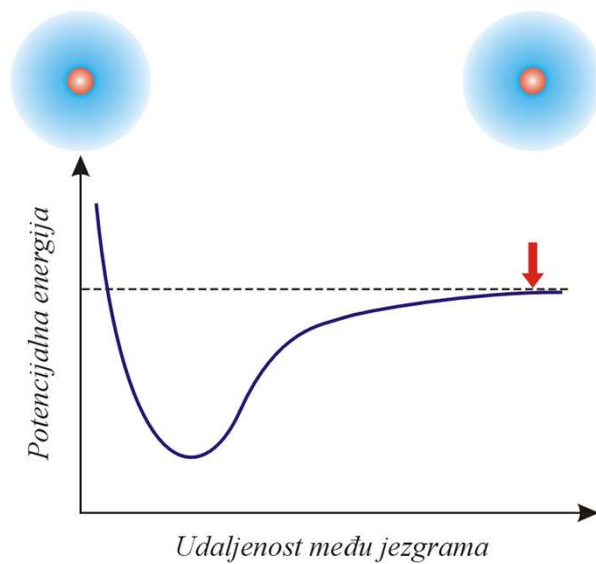
- a) međusobno privlačenje jezgre **A** i elektrona **e_1**
- b) međusobno privlačenje jezgre **A** i elektrona **e_2**
- c) međusobno privlačenje jezgre **B** i elektrona **e_2**
- d) međusobno privlačenje jezgre **B** i elektrona **e_1**
- e) međusobno odbijanje elektrona **e_1** i **e_2**
- f) međusobno odbijanje jezgara **A** i **B**



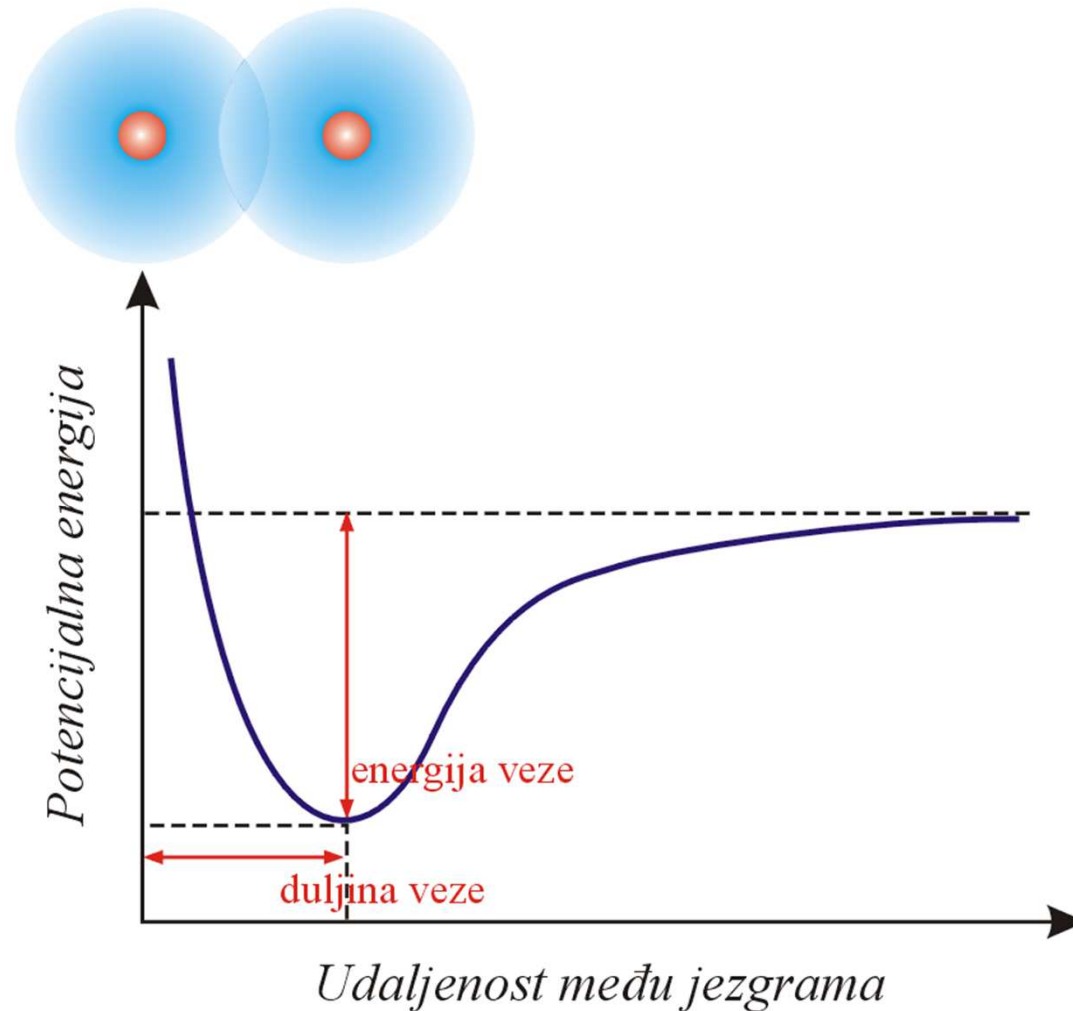
- Kako se približavanjem atoma smanjuje razmak među jezgrama **A** i **B**, zbog međusobnog privlačenja od a) do d), pada energija sustava. Međutim, daljim smanjivanjem razmaka među jezgrama raste energija sustava zbog međusobnih odbijanja pod e) i f).
- Potencijalna energija promatranog sustava ovisna je o tim međudjelovanjima prema izrazu:

$$V = -\frac{e^2}{r_{A1}} - \frac{e^2}{r_{B1}} - \frac{e^2}{r_{A2}} - \frac{e^2}{r_{B2}} + \frac{e^2}{R_{AB}} + \frac{e^2}{R_{12}}$$

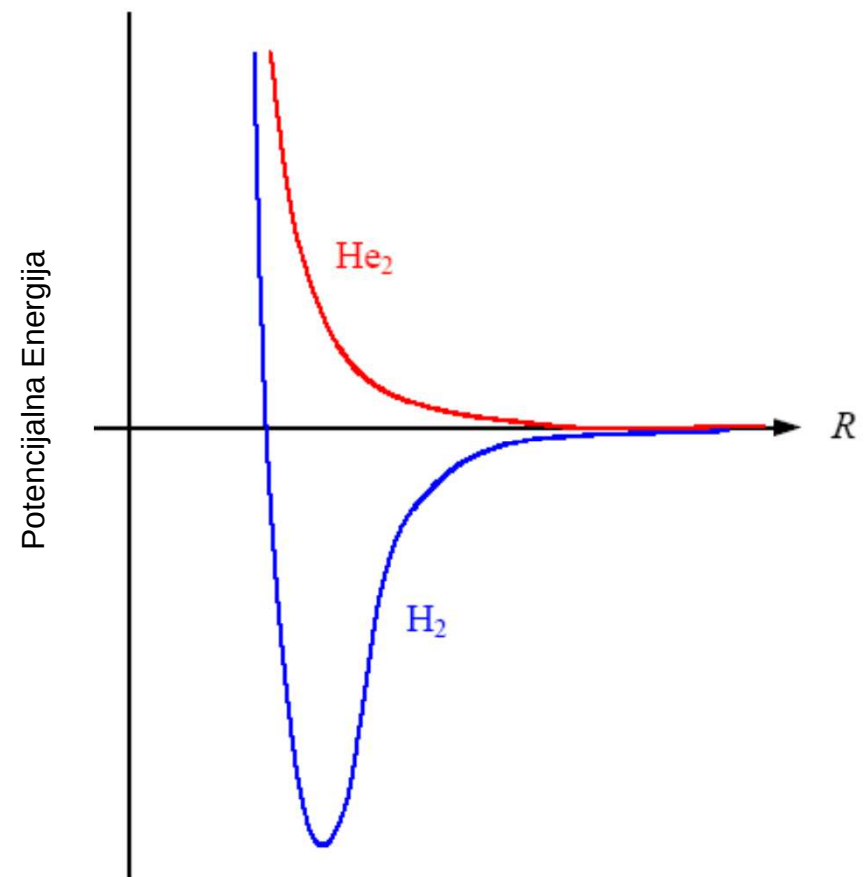
Rješenje molekulske valne funkcije daje ovisnost energije sustava o razmaku između jezgara.



Energija sustava u ovisnosti o razmaku između jezgara mora imati minimum



minimum krivulje određen je energijom i duljinom veze.

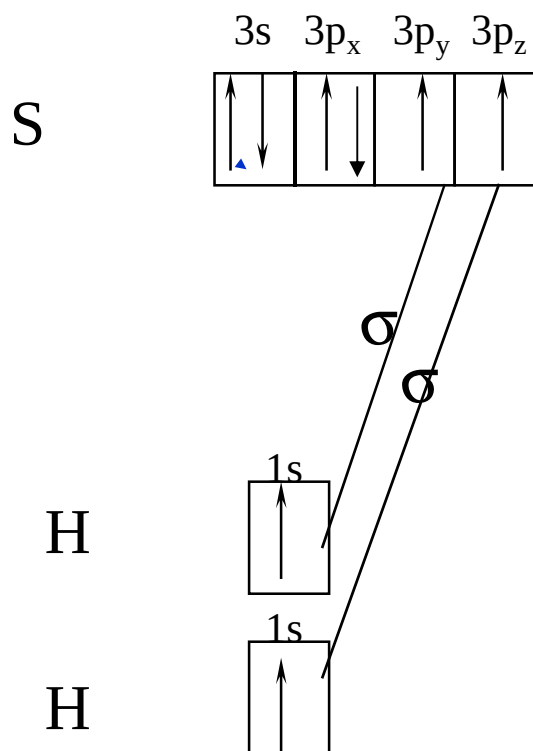


Teorija valentne veze

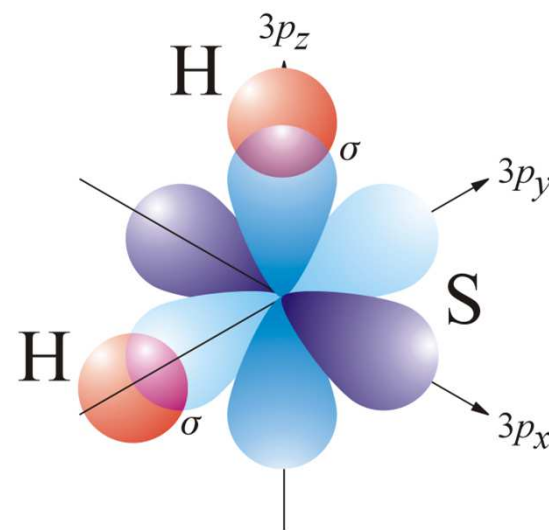
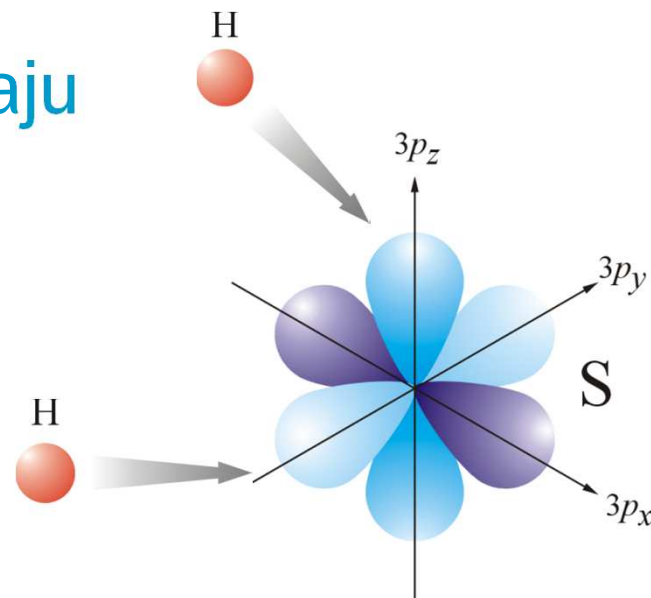
- TVV predpostavlja da elektroni u molekuli zauzimaju atomske orbitale pojedinih atoma u vezi
- pri nastanku veze po jedna valentna orbitala dvaju atoma što stupaju u vezu međusobno se djelomično preklope
- dva elektrona, suprotnog spina, smještaju se u preklopljene orbitale
- elektronski par u preklopljenim orbitalama zove se zajednički elektronski par jer na njega djeluju obje jezgre čineći vezu

Teorija valentne veze

- Preklapanjem orbitala nastaju lokalizirane veze među atomima



Obje veze su σ veze

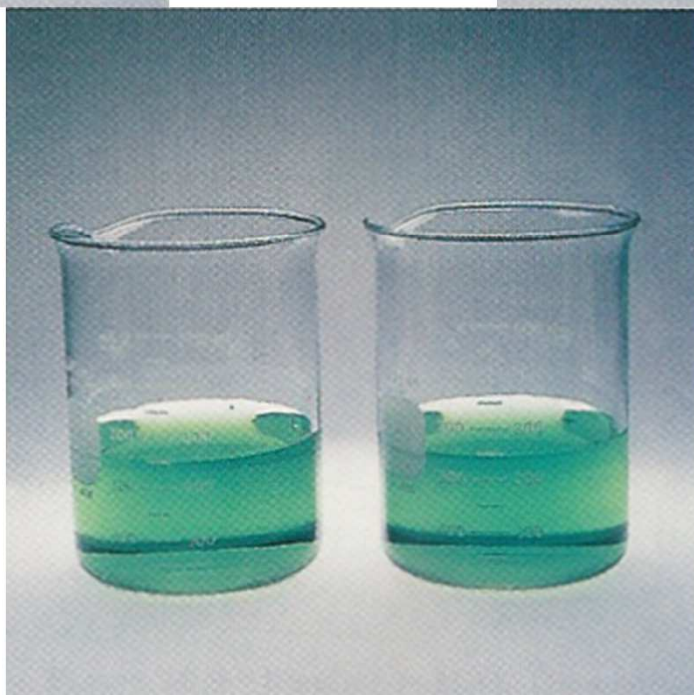
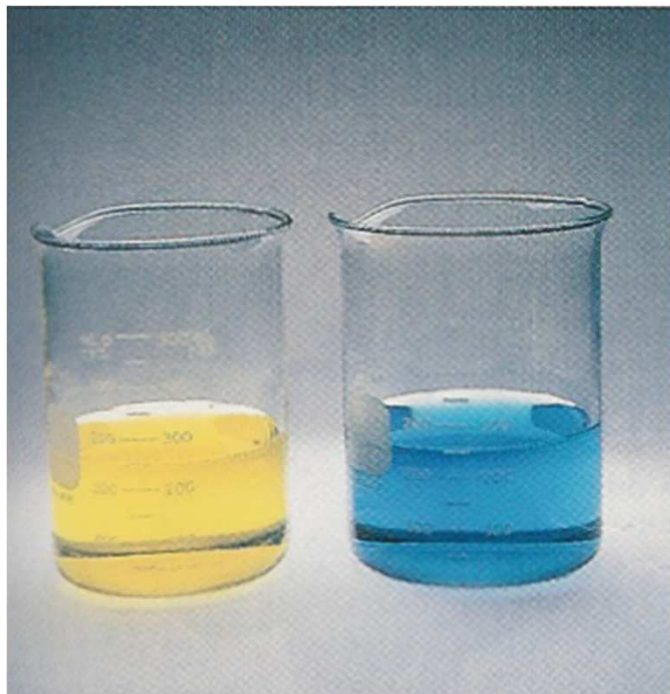


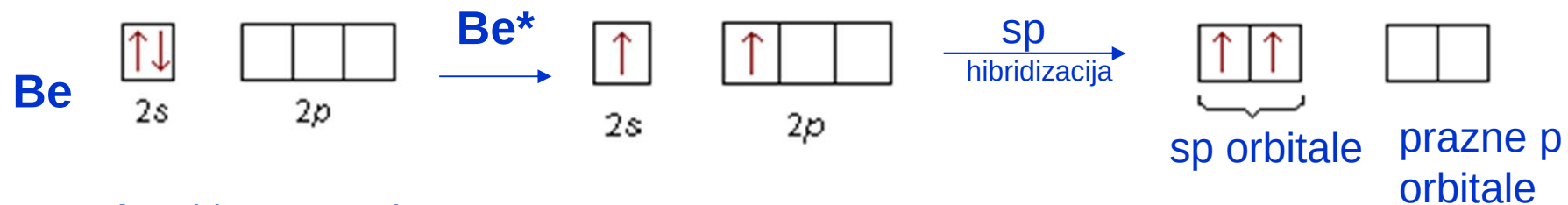
Teorija valentne veze

- veza koja nastaje preklapanjem atomskih orbitala duž osi koja povezuje jezgre atoma zove se σ (sigma) veza
- veza koja nastaje preklapanjem atomskih orbitala tako da se one preklapaju bočno, odnosno iznad i ispod osi koja povezuje jezgre atoma zove se π (pi) veza

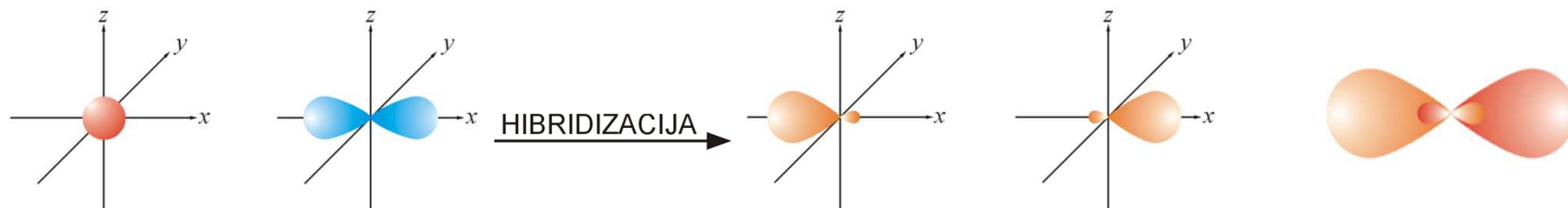
Teorija valente veze

- Dvoatomne molekule se mogu prikazati jednostavnim preklapanjem atomskih orbitala
- da se objasne veze u složenim molekulama TVV se koristi pojmom hibridnih orbitala

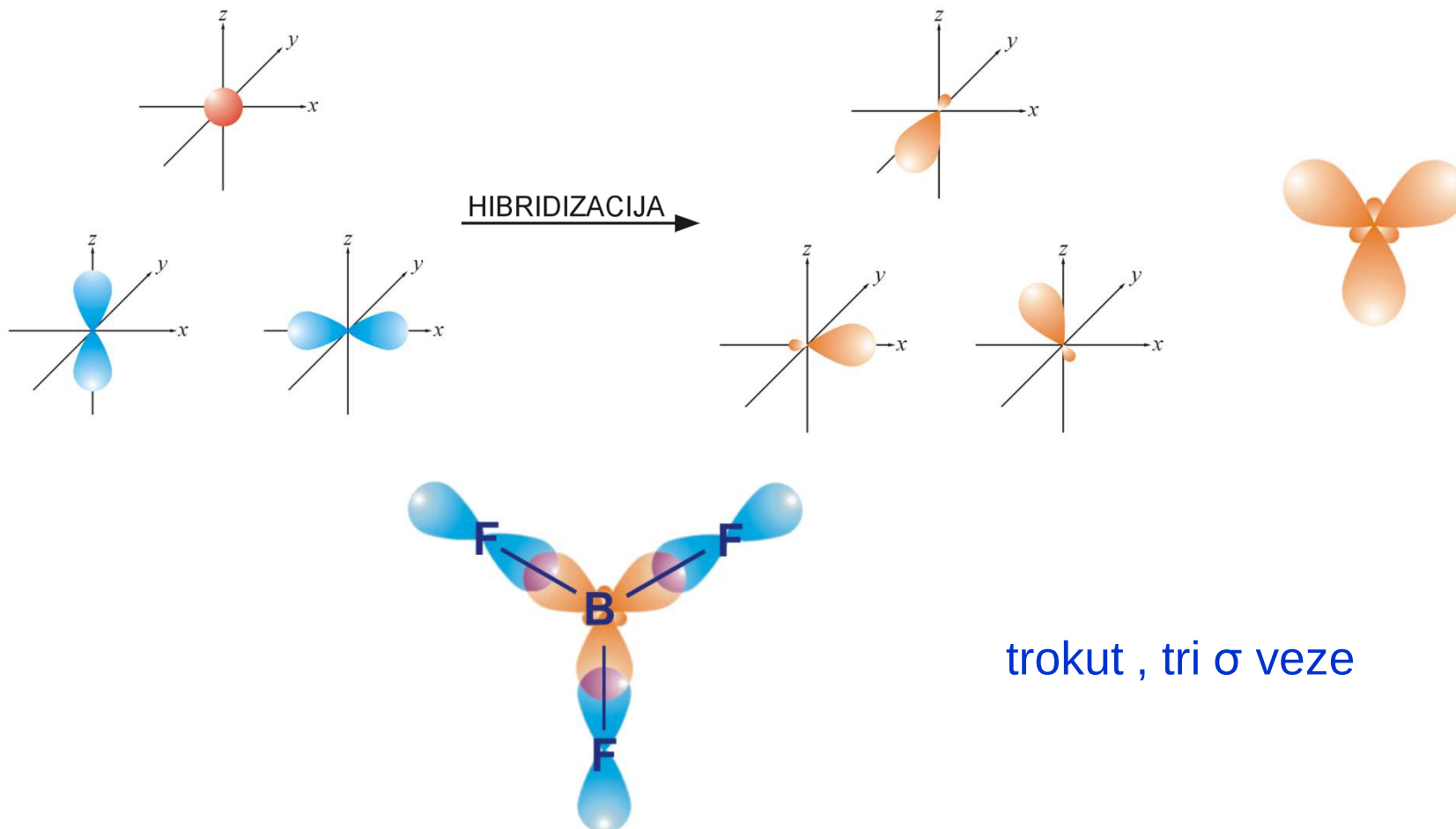
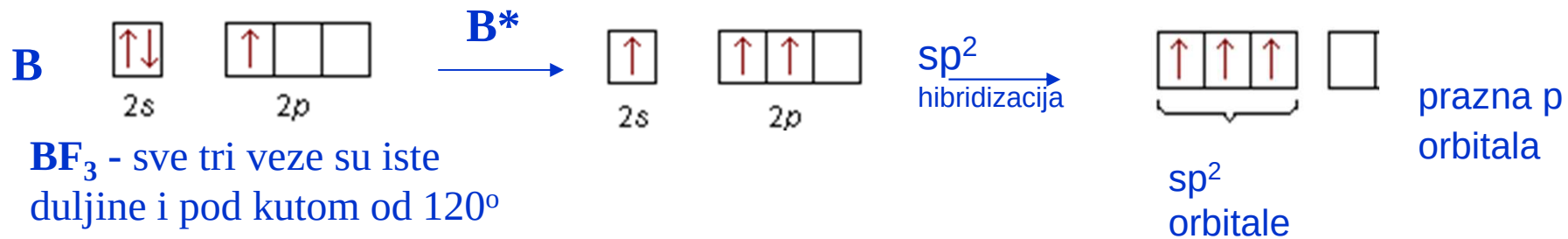


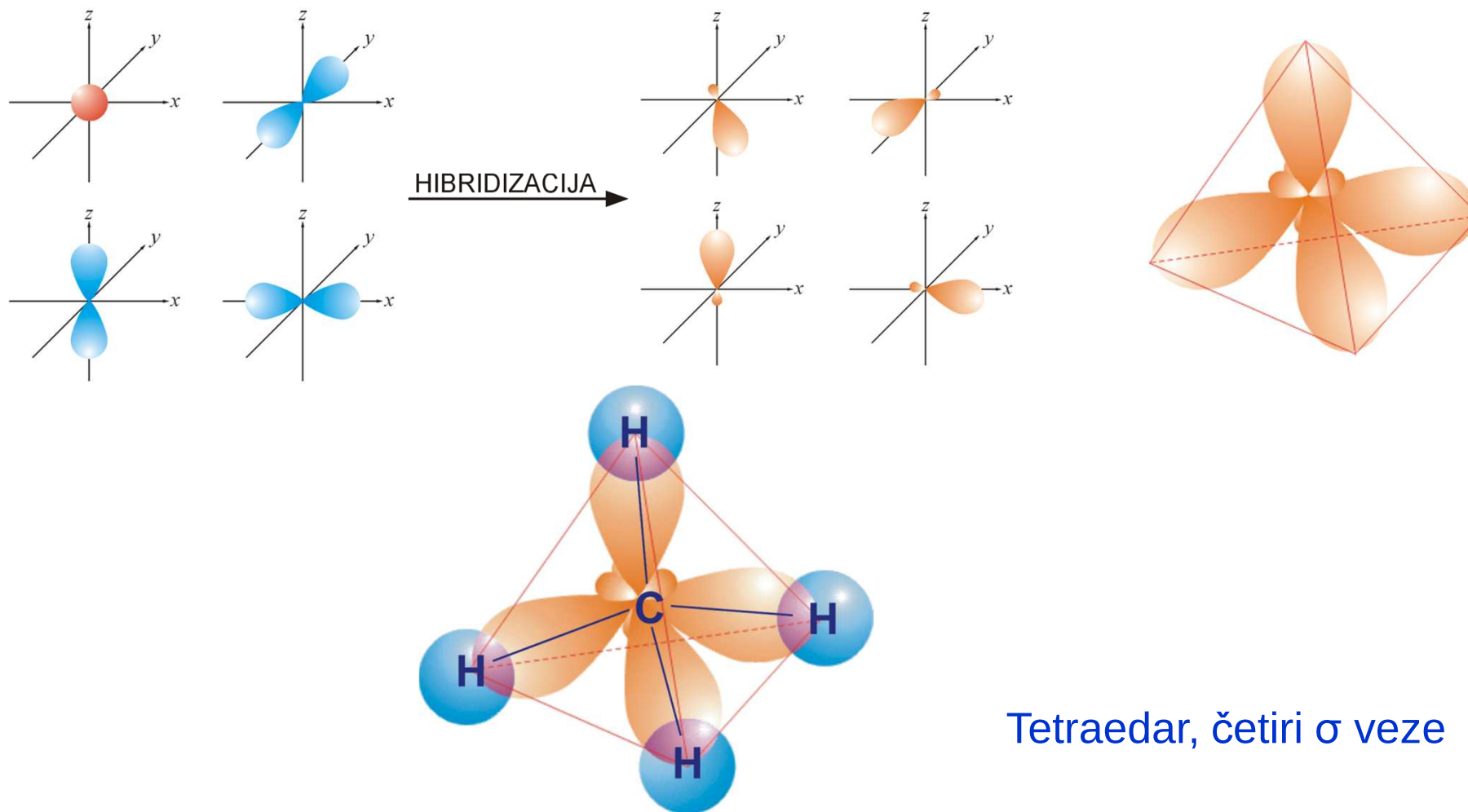
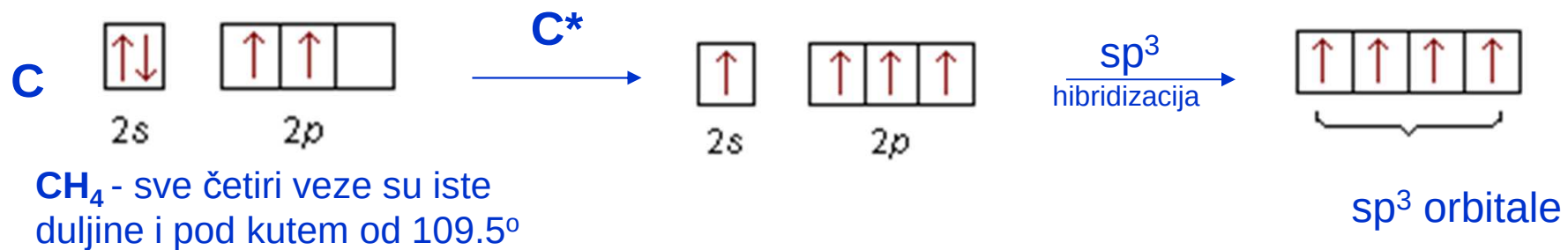


BeCl_2 - obje veze su iste
 i pod kutem od 180°



linearna molekula, dvije σ veze





Tetraedar, četiri σ veze

Hibridizacija atomskih orbitala

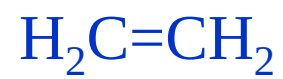
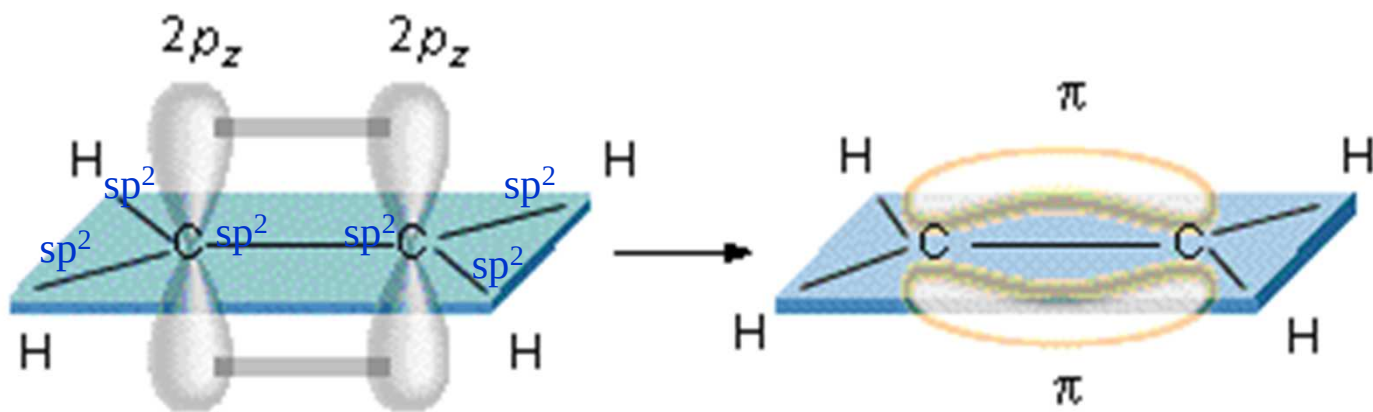
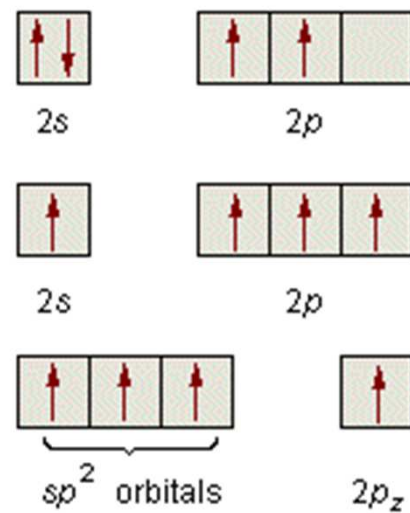
- mješanjem ili hibridizacijom teorija valentne veze tumači postojanje energijski ekvivalentnih σ -veza
- sp - hibridizacija 2 energijski iste veze $\rightarrow$ pravac
- sp^2 - hibridizacija 3 energijski iste veze $\rightarrow$ trokut
- sp^3 - hibridizacija 4 energijski iste veze $\rightarrow$ tetraedar
- sp^3d - hibridizacija 5 energijski istih veza $\rightarrow$ trigonska bipiramida
- sp^3d^2 - hibridizacija 6 energijski istih veza $\rightarrow$ oktaedar

Višestruka kovalentna veza

- dvostruka veza $\rightarrow$ C_2H_4 eten, jedna π i jedna σ veza
- trostruka veza $\rightarrow$ C_2H_2 etin, jedna σ i dvije π veze

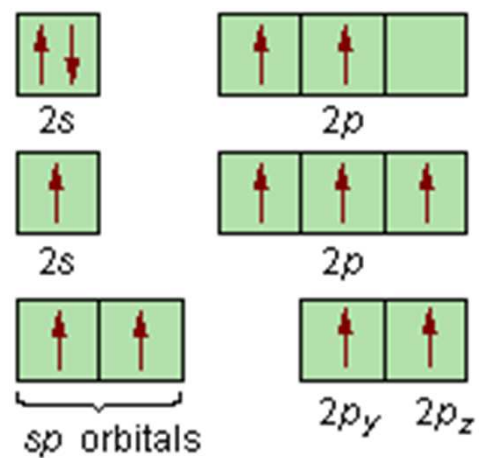


C

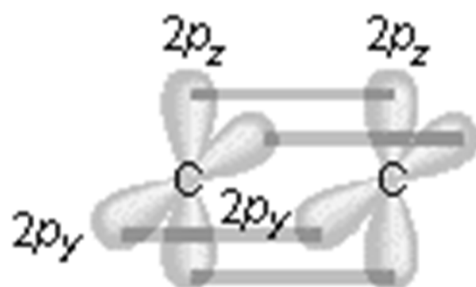




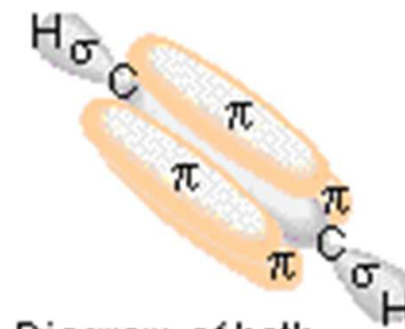
C



pogled odzgo



pogled sa strane



Teorija molekularnih orbitala

- molekularna orbitala opisuje način na koji se elektroni rasprostiru preko svih atoma u molekuli i tako ih vezuju zajedno
- **molekularne orbitale nastaju preklapanjem atomskih orbitala koje imaju sličnu energiju**
- u molekuli se preklapaju sve atomske orbitale

- *Kada je elektron u blizini jezgre jednog atoma onda njegova valna funkcija sliči atomskoj orbitali tog atoma.*
- *Zbrajanjem atomskih orbitala elektrona dobiva se početna aproksimacija molekulske orbitale.*
- *Takva molekulska orbitala je linerna kombinacija atomskih orbitala s različitim težinskim koeficijentima pa se aproksimacija zove **LCAO (Linear Combination of Atomic Orbitals)** aproksimacija.*
- *U osnovnom obliku TMO koristi samo orbitale valentne ljuske povezanih atoma*

- molekulska orbitala energijom niža od atomskih orbitala koje sudjeluju u njenom stvaranju zove se **vezna molekulska orbitala** (ψ_+ ili ψ_{MO}), a nastala je *konstruktivnom interferencijom* atomskih orbitala, tj.

$$\psi_{\text{MO}} = \psi_A + \psi_B$$

- molekulska orbitala energijom viša od atomskih orbitala koje sudjeluju u njenom stvaranju zove se **protuvezna molekulska orbitala** (ψ_- ili ψ_{MO}^*), a nastala je *destruktivnom interferencijom* atomskih orbitala, tj.

$$\psi_{\text{MO}}^* = \psi_A - \psi_B$$

Vjerojatnost nalaženja elektrona dobije se kvadriranjem valne funkcije:

- vezna MO

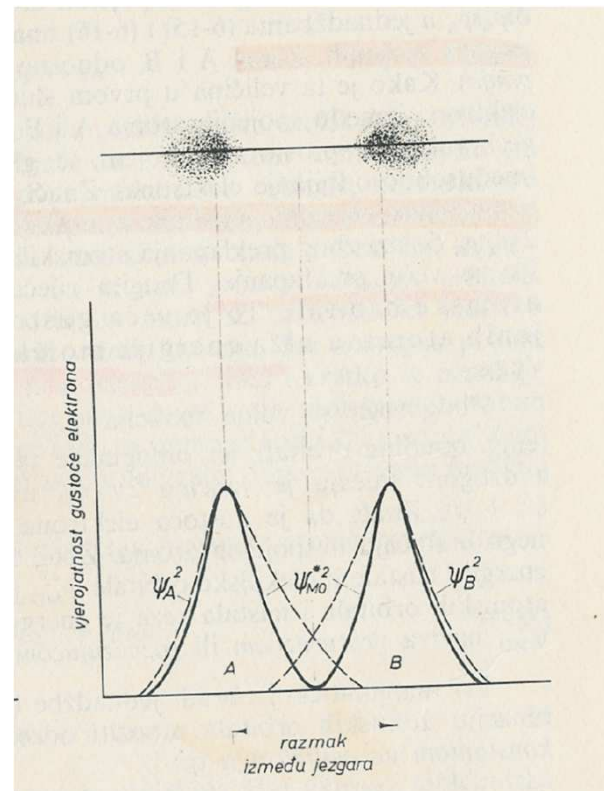
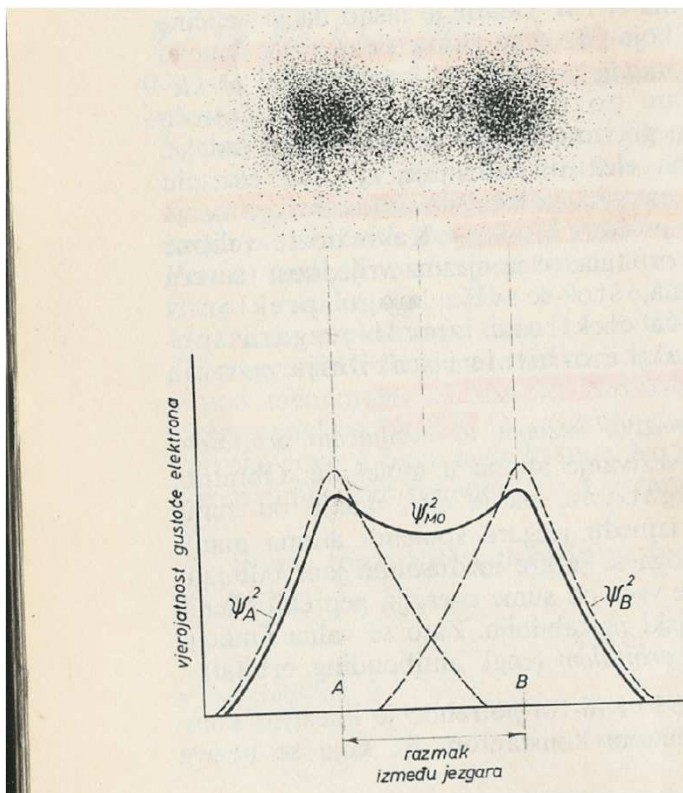
- $\psi_{MO}^2 = (\psi_A + \psi_B)^2$

- $\psi_{MO}^2 = \psi_A^2 + 2\psi_A \psi_B + \psi_B^2$

- protuvezna MO

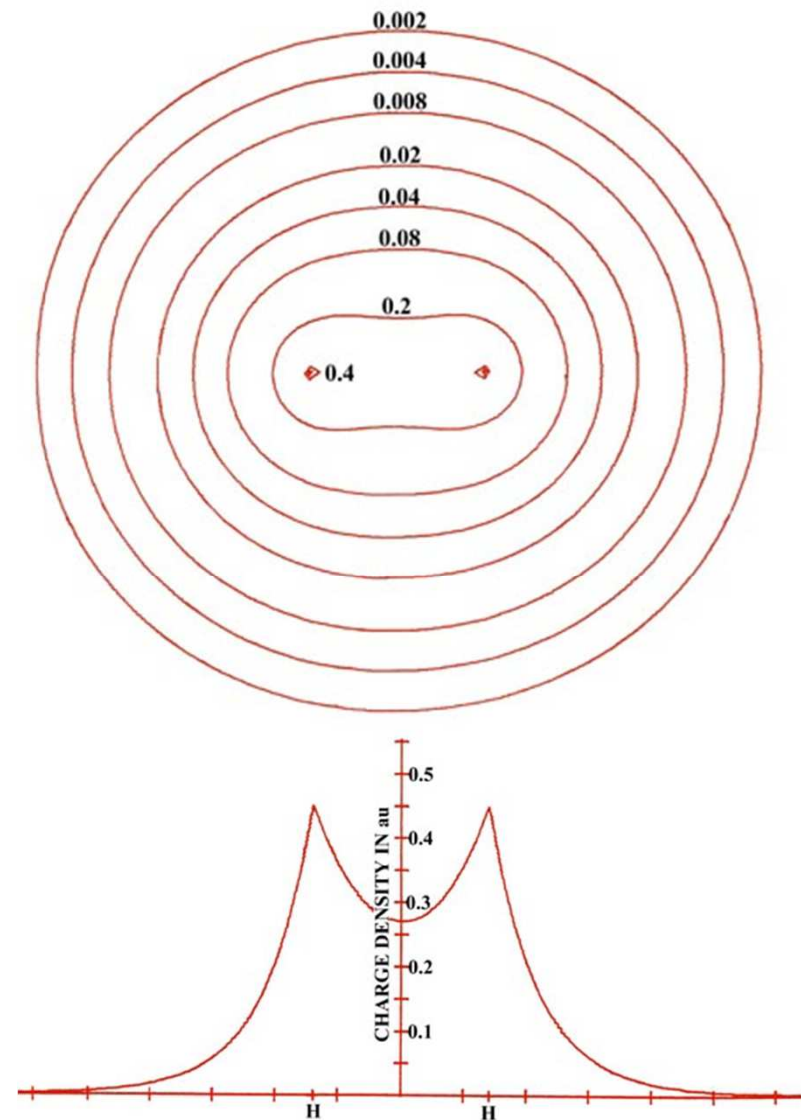
- $\psi_{MO}^{*2} = (\psi_A - \psi_B)^2$

- $\psi_{MO}^{*2} = \psi_A^2 - 2\psi_A \psi_B + \psi_B^2$



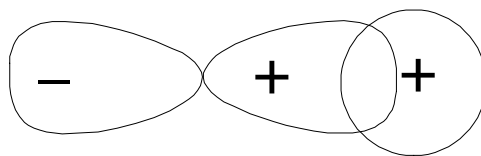
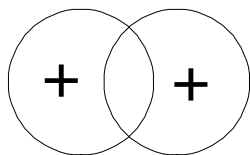
- Raspodjela elektronske gustoće se prikazuje ***konturnim mapama***

- Kao i u atomu, najveće gustoće negativnog naboja su u prostoru oko jezgara a nakon toga u prostoru između jezgara.
- *Elektronske gustoće* dva atoma su povezane zajedno oko dviju jezgara pri stvaranju molekule.
- Prostor uklopljen u vanjske konturne krivulje predstavlja 99% elektronskog naboja molekule

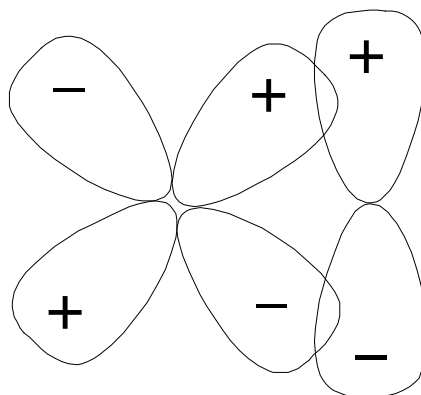
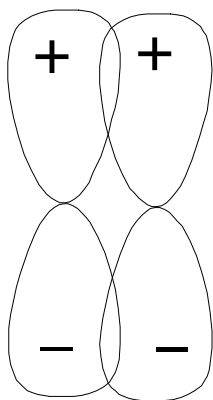


preklapanje može biti:

pozitivno preklapanje $\rightarrow$ nastaje vezna MO

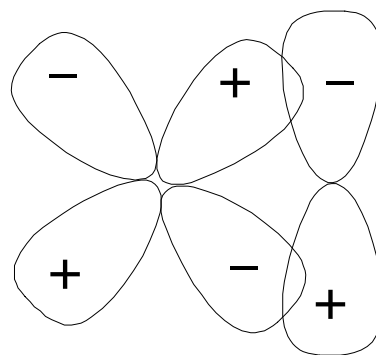
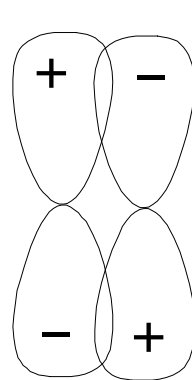
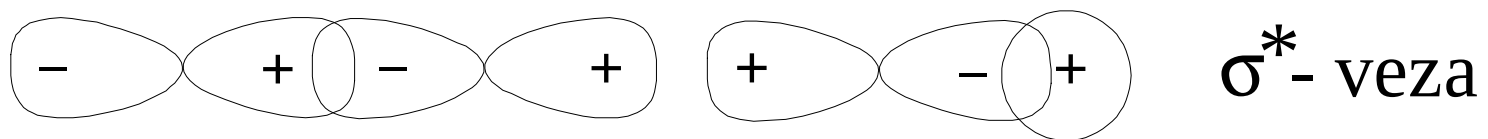


σ - veza



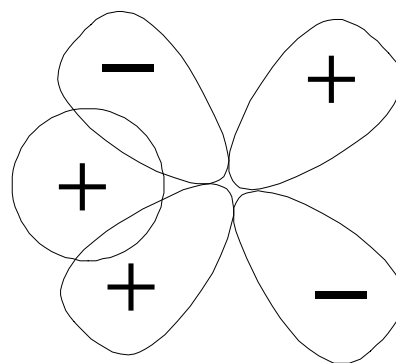
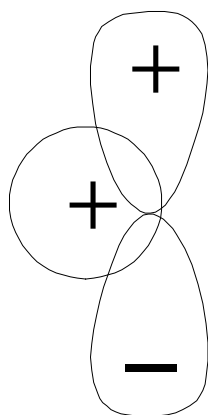
π - veza

negativno preklapanje $\rightarrow$ nastaje protuvezna MO



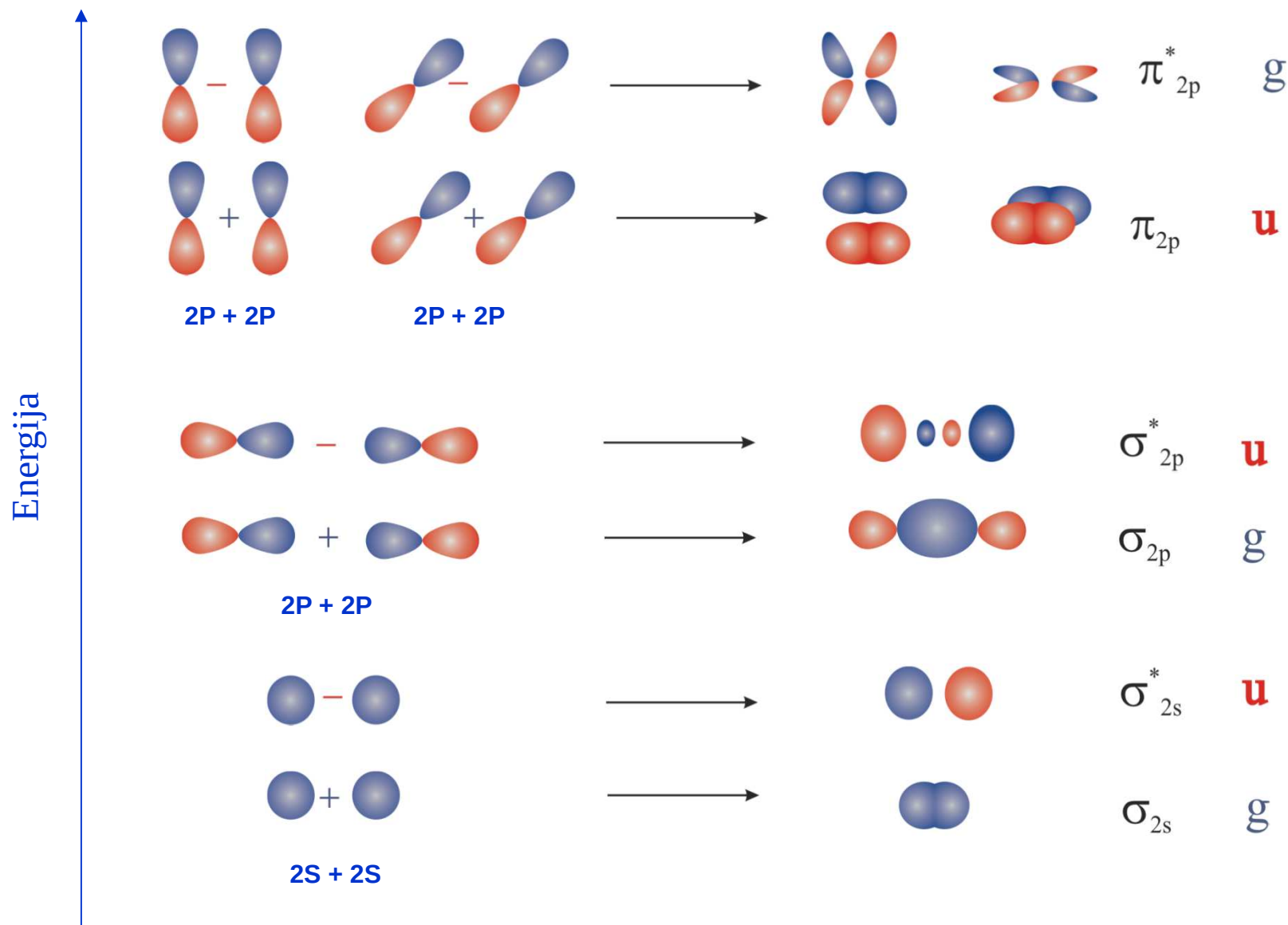
π^* - veza

nulto preklapanje $\rightarrow$ nevezna MO

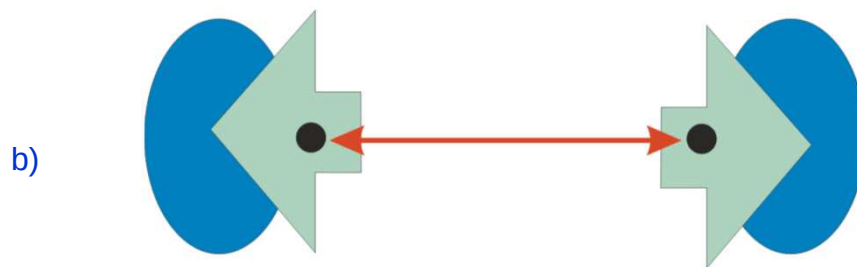
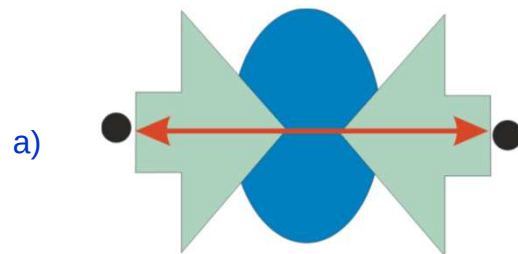


Preklapanje atomskih i nastajanje molekulskih orbitala,

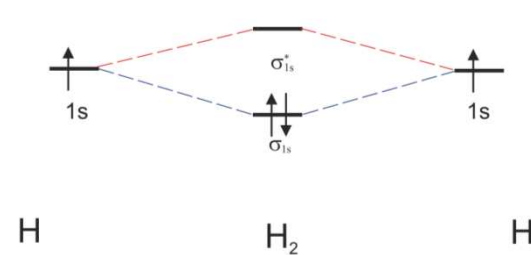
Mogu se preklapati samo atomske orbitale iste simetrije i slične energije



- elektron koji popunjava veznu molekulsku orbitalu ima *povećanu vjerojatnost* nalaženja u prostoru *između* dva povezana atoma **(a)**
- elektron koji popunjava protuveznu molekulsku orbitalu je iz tog prostora *isključen* **(b)**

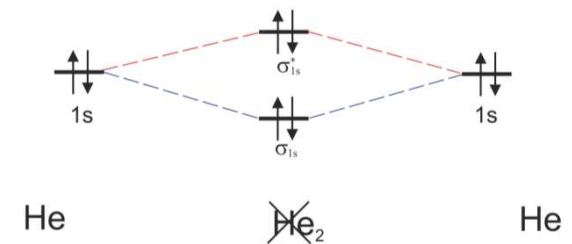


Korelacijski dijagrami atomskih i molekulskih orbitala **homonuklearnih dvoatomnih molekula**

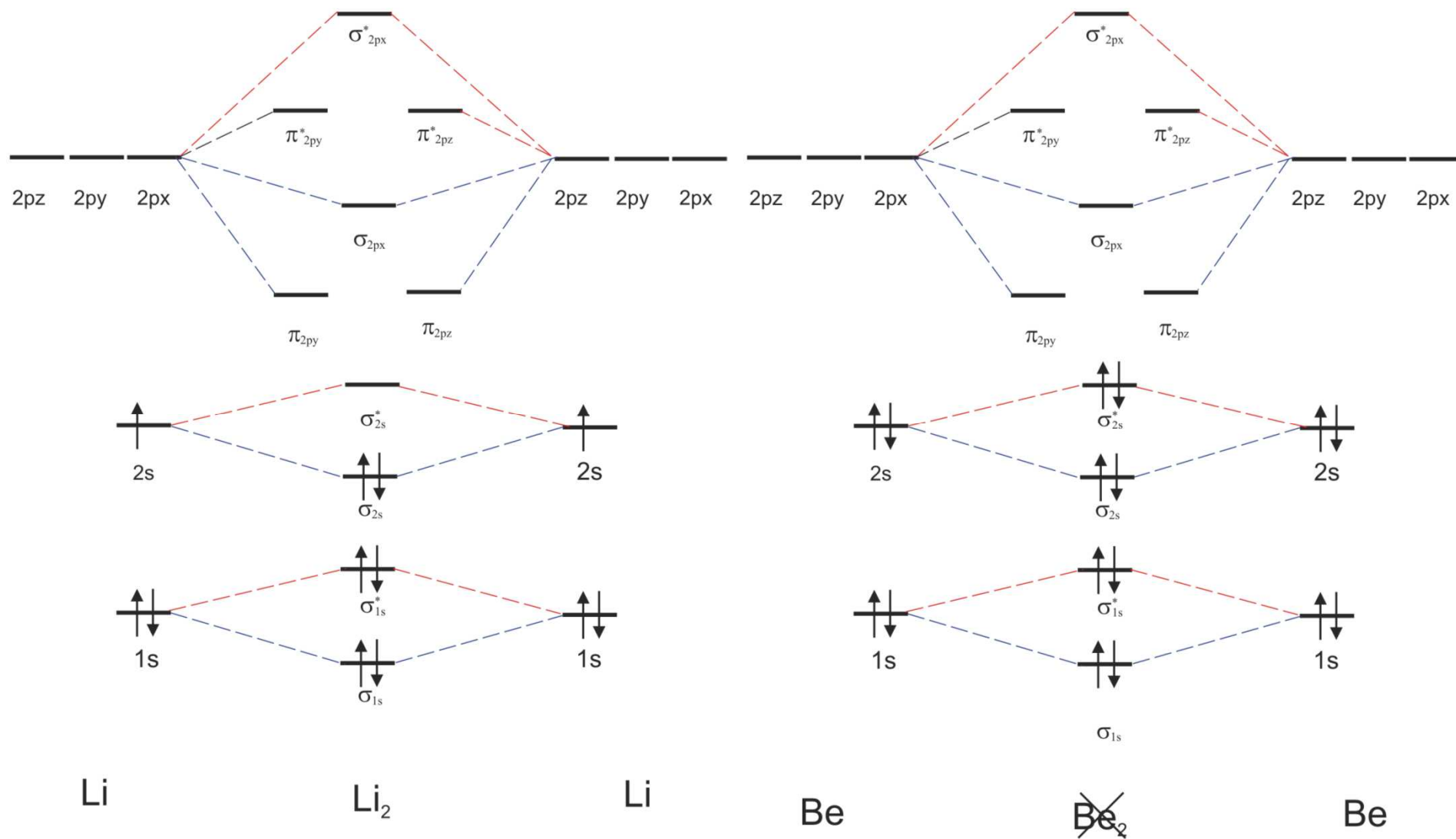


Red veze
duljina veze, pm
jakost veze, kJ/mol
magnetska svojstva

1
74
431
dijamagnetik



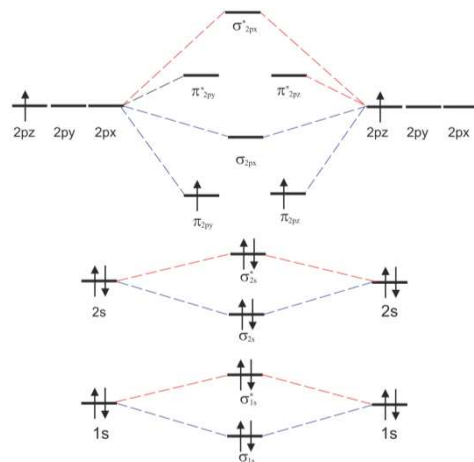
ne postoji



Red veze
duljina veze, pm
jakost veze, kJ/mol
magnetska svojstva

1
267
104.6
diamagnetik

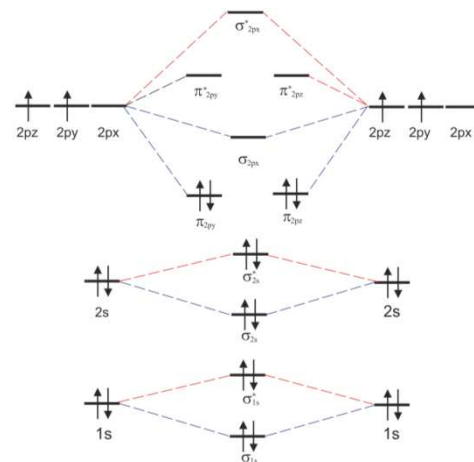
ne postoji



B B_2 B

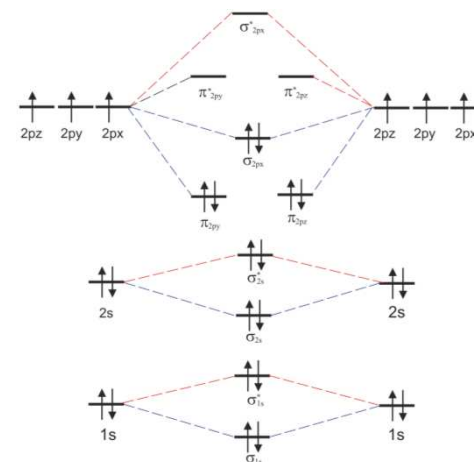
Red veze
duljina veze, pm
jakost veze, kJ/mol
magnetska svojstva

1
159
288.7
paramagnetik



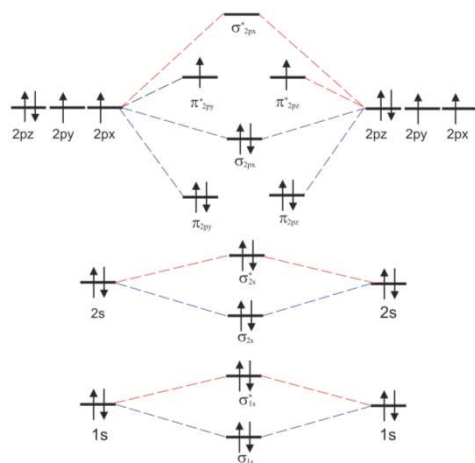
C C_2 C

2
131
627.6
diamagnetik



N N_2 N

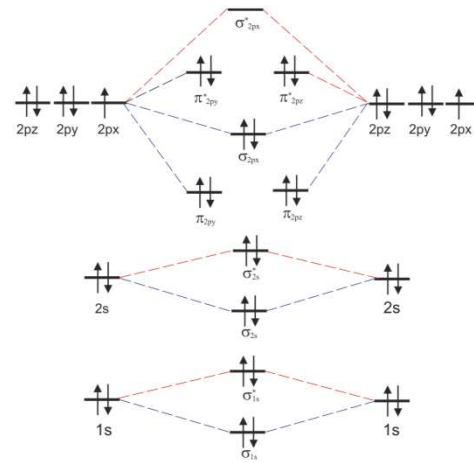
3
110
941.4
diamagnetik



O O_2 O

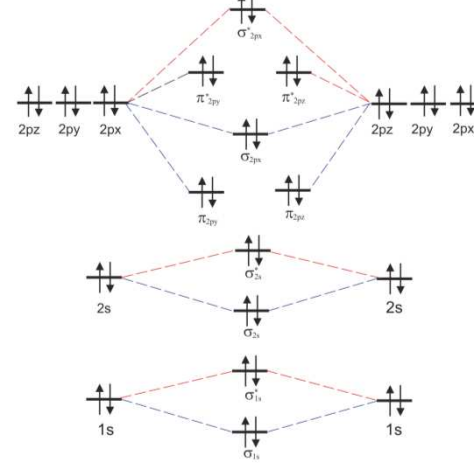
Red veze
duljina veze
jakost veze, kJ/mol
magnetska svojstva

2
121
498.7
paramagnetik



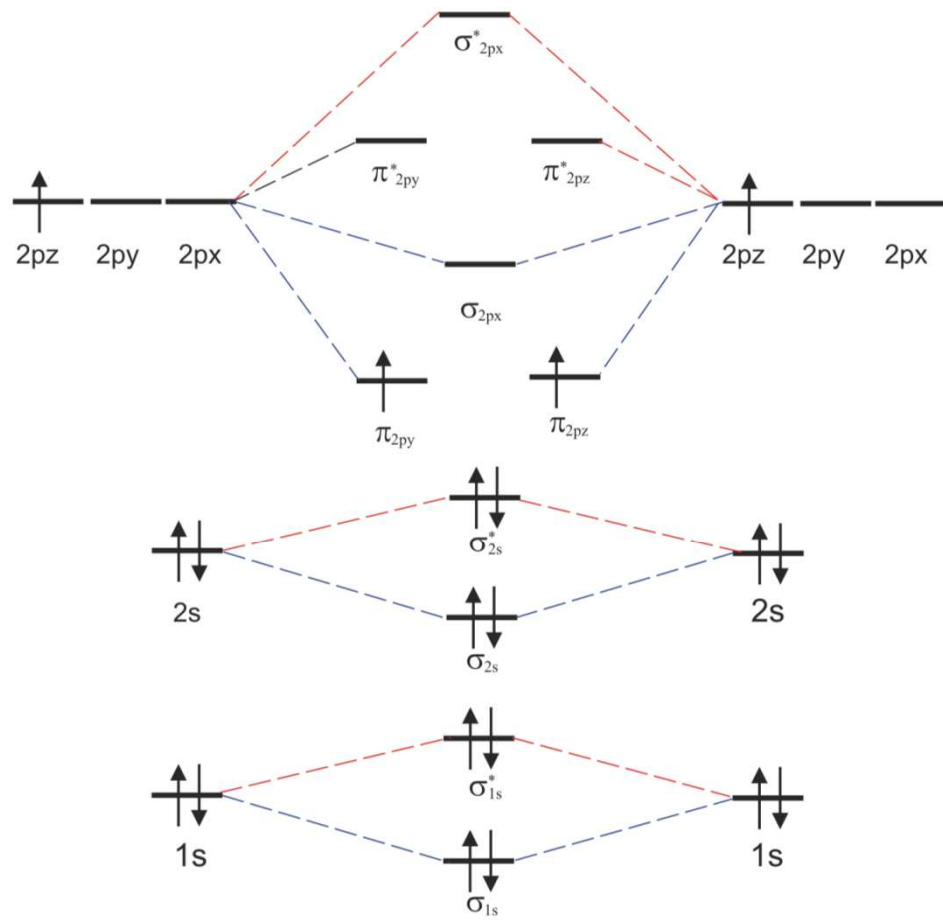
F F_2 F

1
142
150.6
diamagnetik



Ne ~~Ne_2~~ Ne

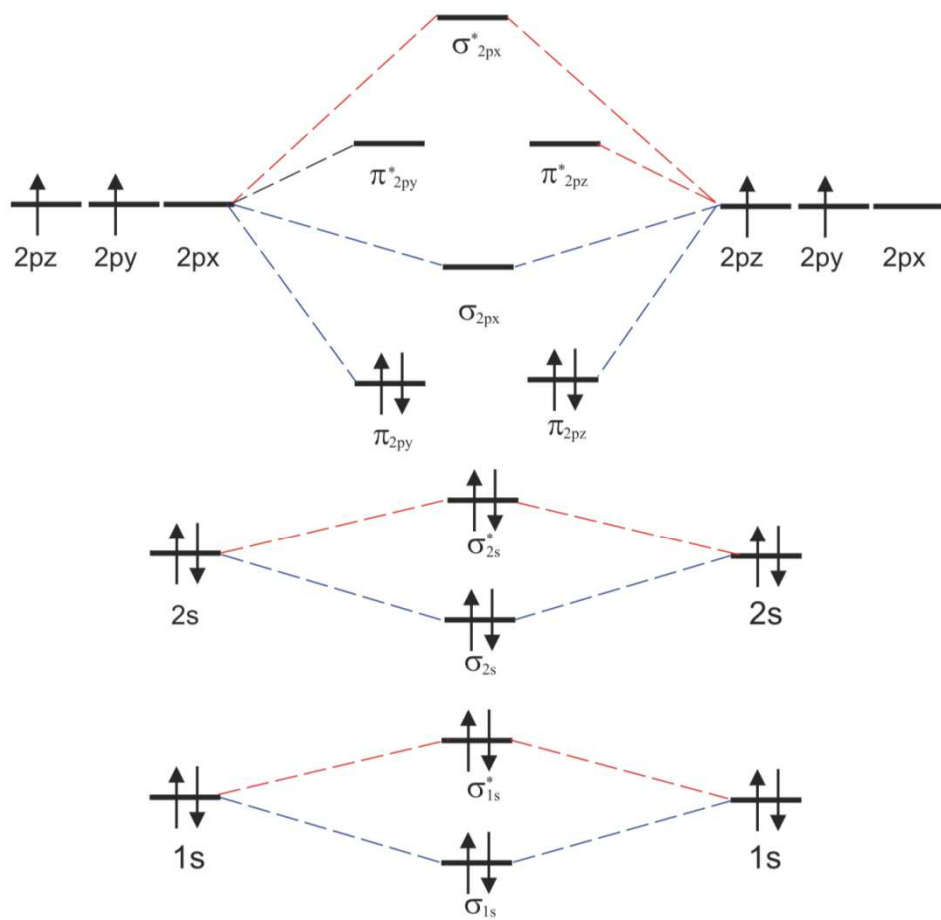
ne postoji



B

B_2

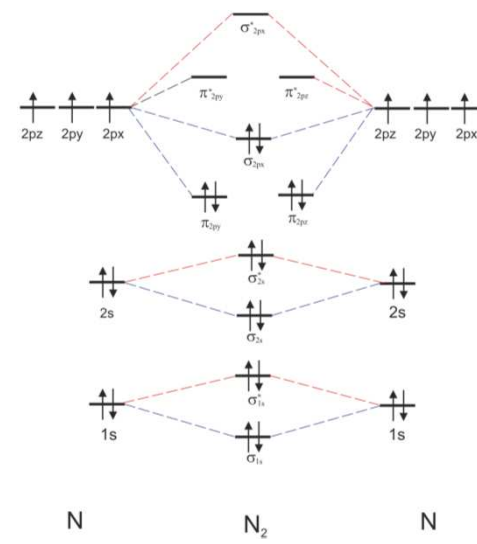
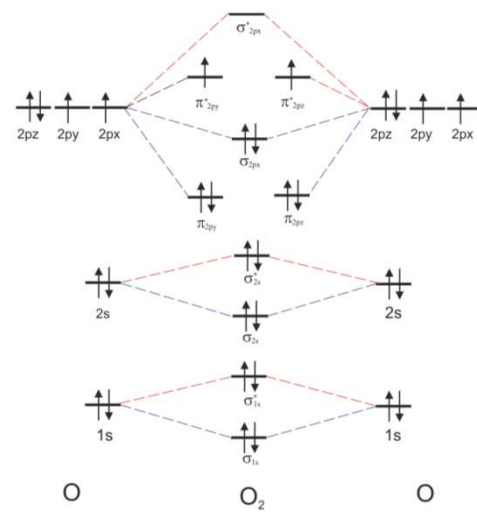
B

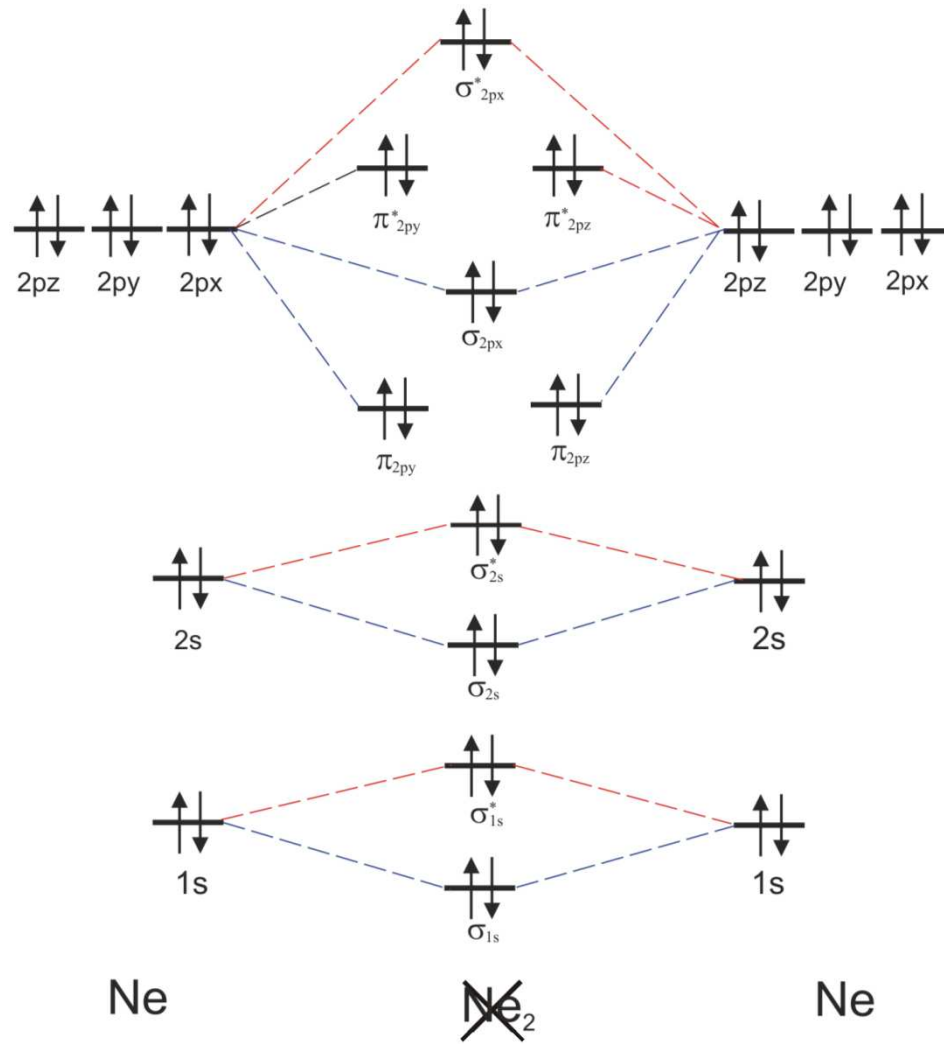
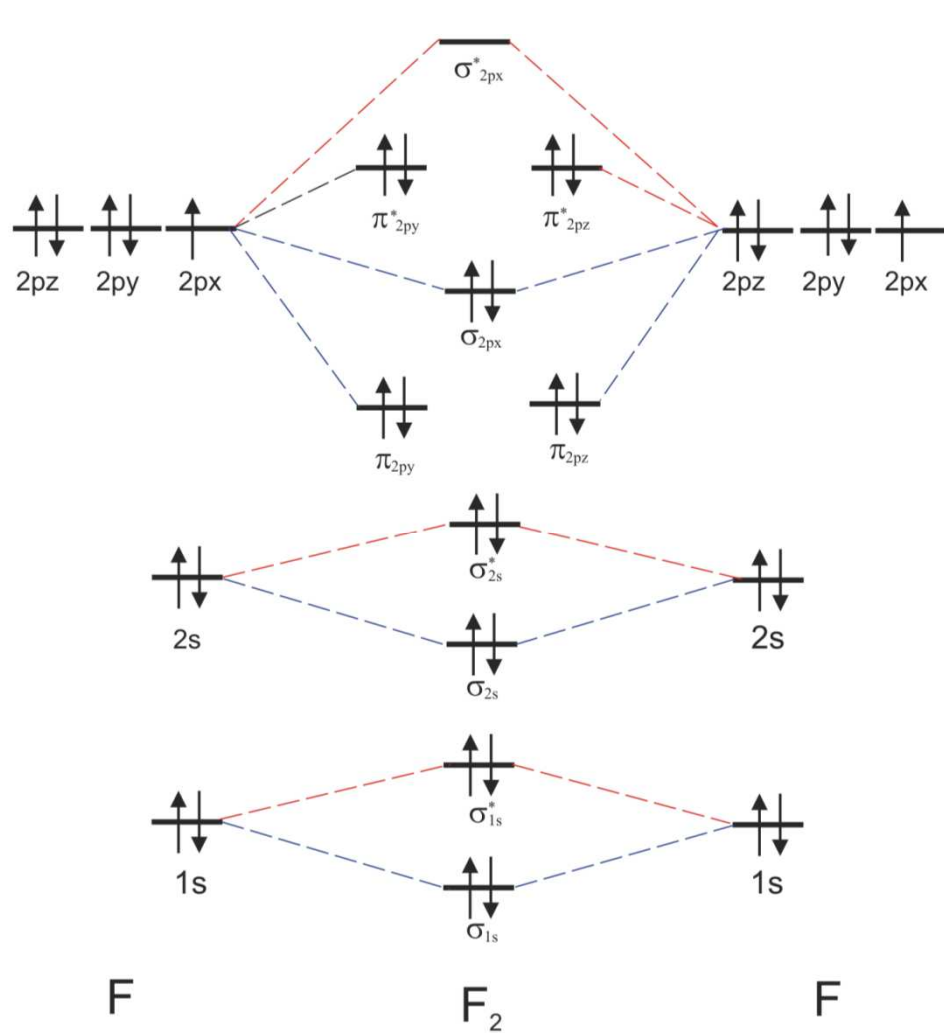


C

C_2

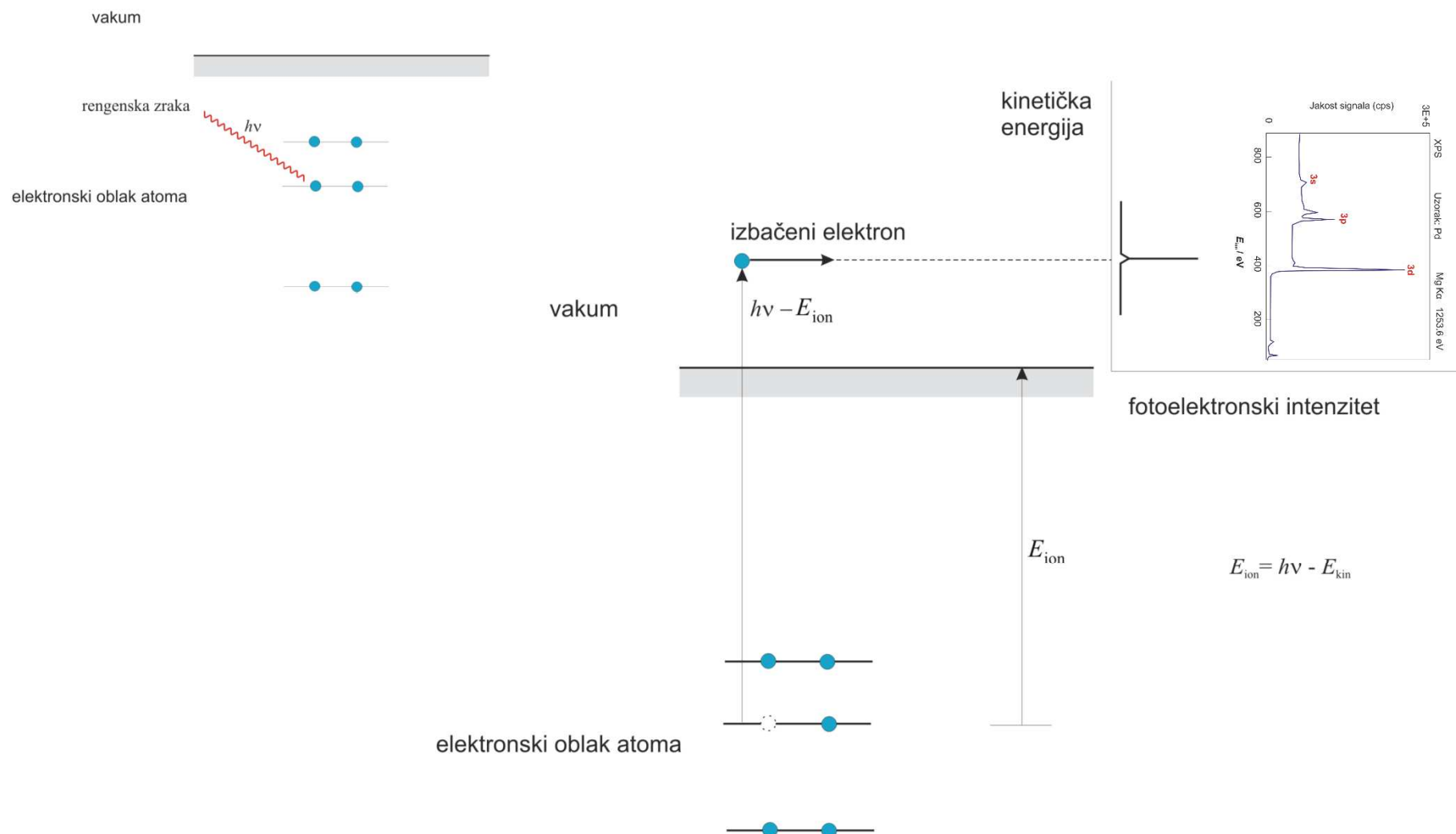
C

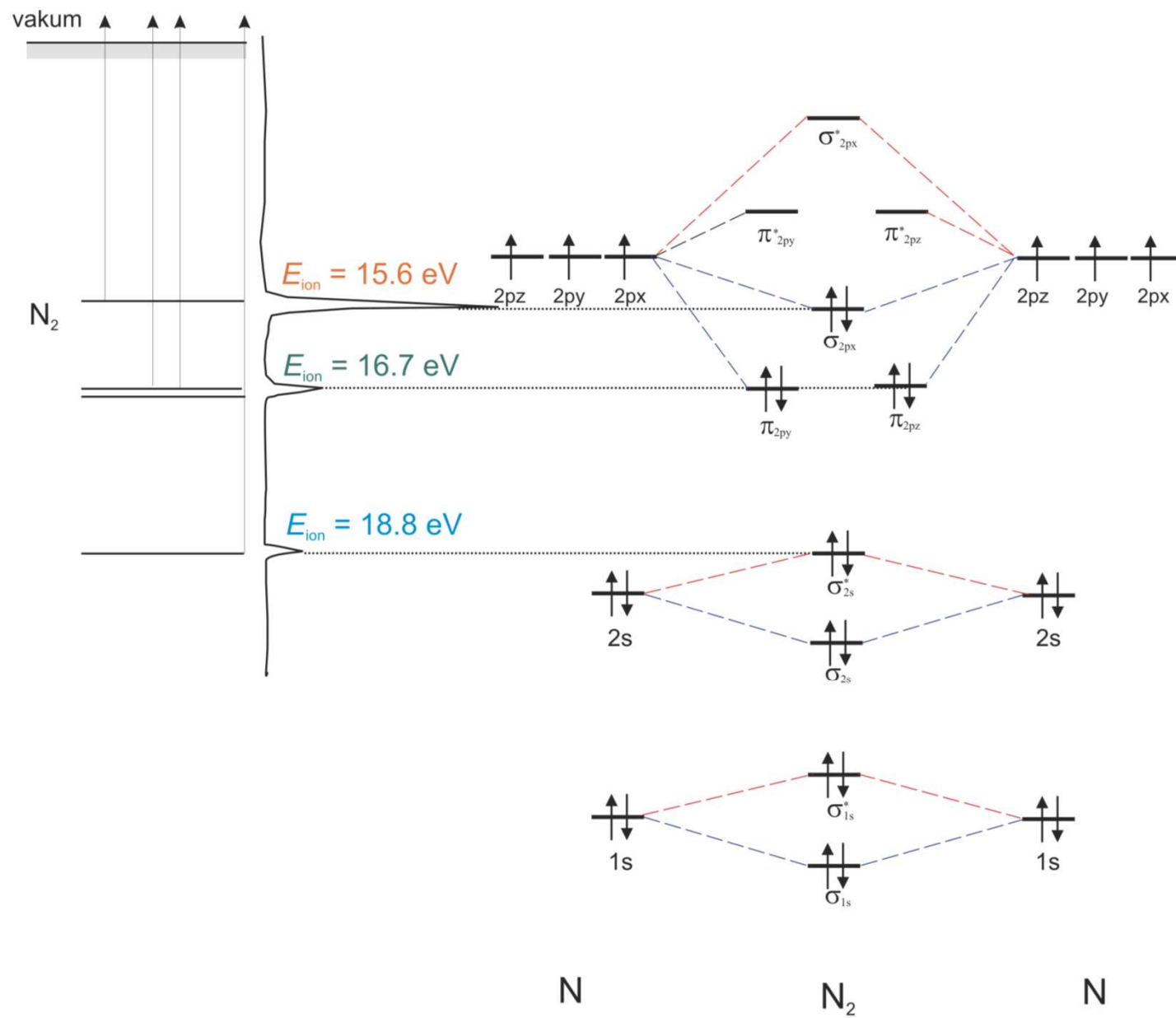




Energija molekulskih orbitala može se softverski izračunati, ali potvrda izračuna mora se izvršiti eksperimentom

FOTOELEKTRONSKA SPEKTROSKOPIJA (XPS)



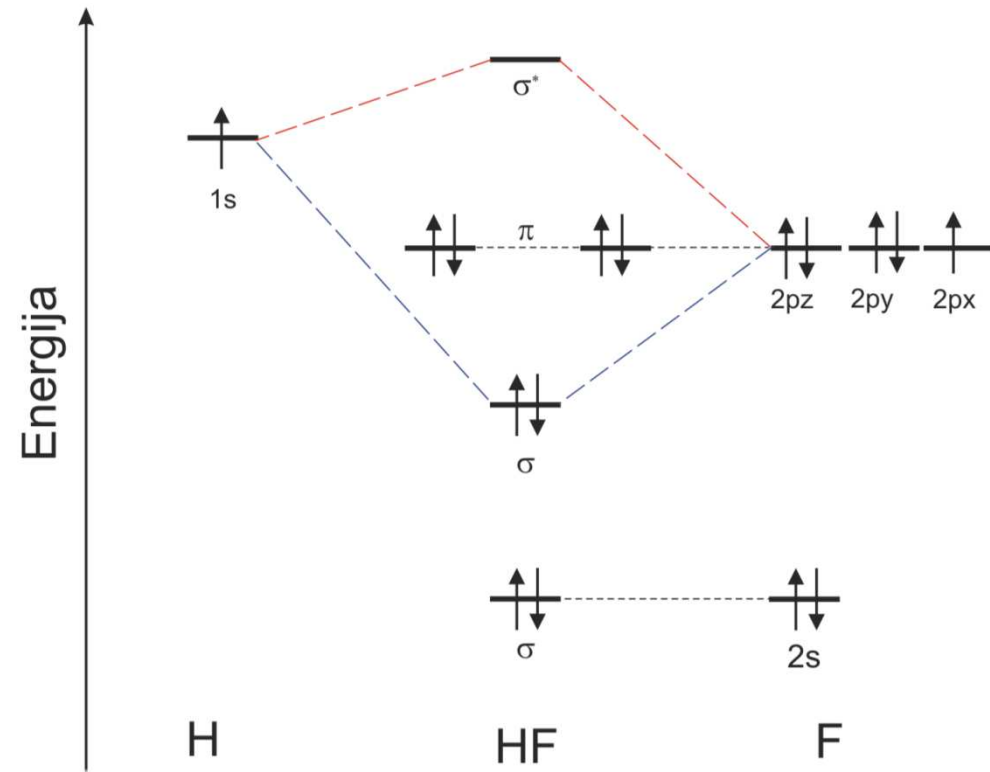


Heteronuklearne dvoatomne molekule

- Molekulske orbitale heteronuklerarnih dvoatomnih molekula razlikuju se od onih homonuklearnih dvoatomskih molekula u tome što nemaju isti doprinos (c) atomskih orbitala

$$\Psi = c_A \psi_A + c_B \psi_B \dots \quad c_A \neq c_B$$

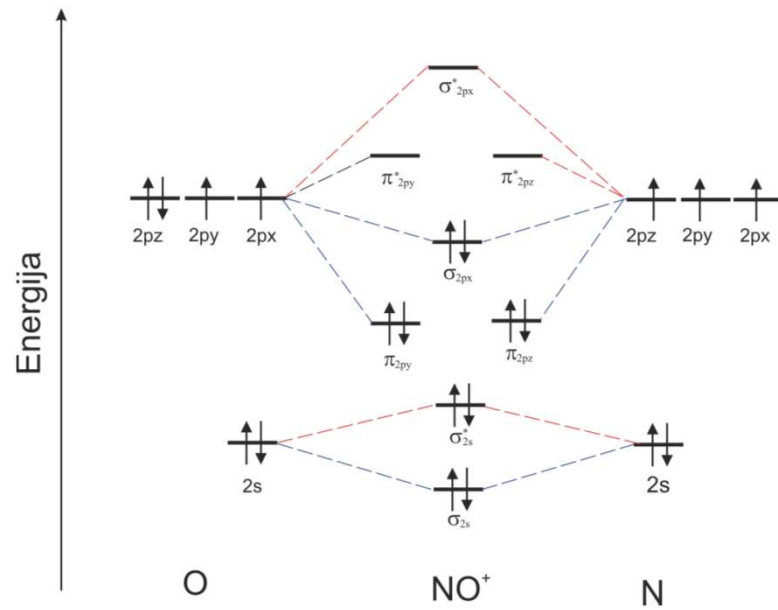
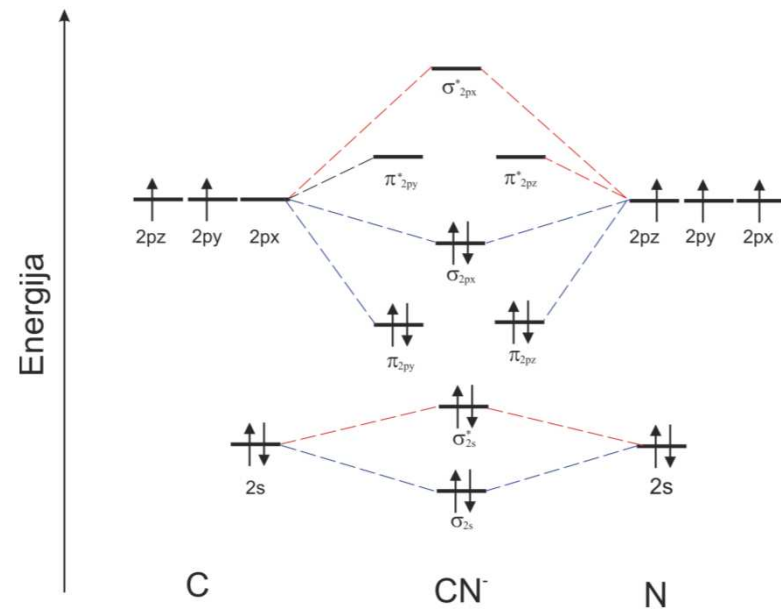
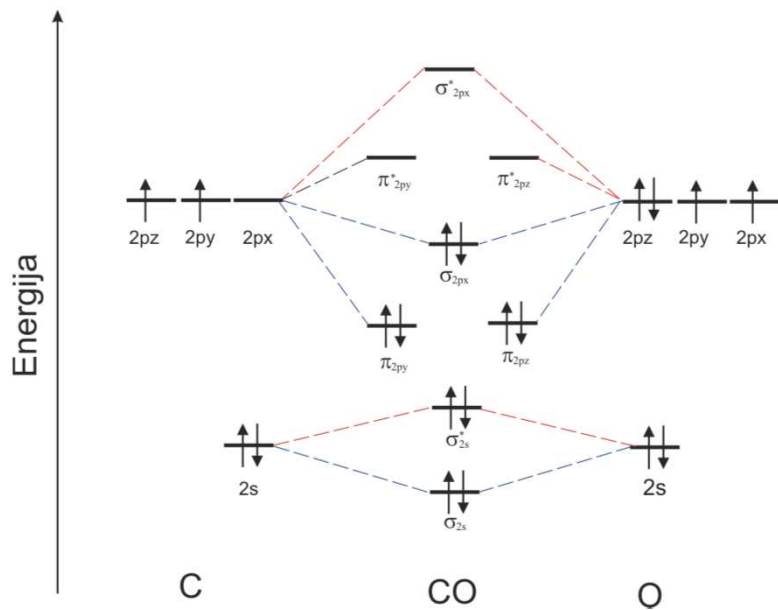
- Ako je c_A^2 veće od c_B^2 molekulska orbitala je sastavljena pretežno od ψ_A i elektron u toj molekulskoj orbitali će se vjerojatno nalaziti bliže atomu A nego atomu B



Heteronuklearne dvoatomne molekule

- Što se energije orbitala koje se preklapaju više razlikuju to je njihovo preklapanje slabije
- Ove molekule su polarne
- Preklapaju se orbitale slične energije i iste simetrije
- Vezni elektroni se nalaze na elektronegativnijem atomu a protuvezni na manje elektronegativnom atomu

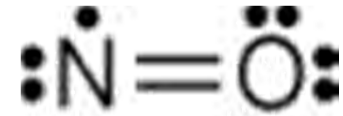
izoelektronske čestice



Sažetak TMO

- stabilnost molekule raste porastom viška veznih elektrona
- izoelektronska struktura - molekule ili ioni iste elektronske konfiguracije (N_2 i CO)
- stabilnija čestica nastaje (molekula iz iona ili ion iz molekule) ako uklonimo elektron iz protuvezne orbitale ili ga dodamo u veznu orbitalu
- čestica je stabilna ako ima više elektrona u veznim nego u protuveznim MO
- Molekula je jedinstveni elektronski sustav, čine ga sve jezgre i svi elektroni koje su donjeli atomi. Kad nastane molekula više ne postoje atomi i atomske orbitale
- red veze = $(\text{broj elektrona u VMO} - \text{broj elektrona u PMO})/2$

Po Lewisovom pristupu i prema teoriji valentne veze molekula NO bi trebala biti nestabilna (nema oktet i ima 1 nespareni elektron).



- Međutim molekula NO je prilično stabilna. Prema TMO red veze je čak 2.5, što objašnjava visoku stabilnost ove molekule

