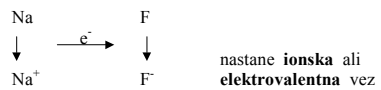
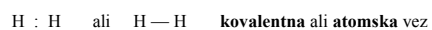


KEMIJSKA VEZ

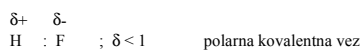
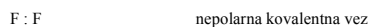
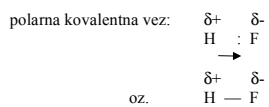
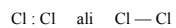
1916 Kossel



1916 Lewis: skupni elektronski par

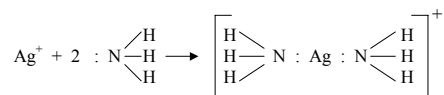


skupne ali vezne elektronske pare lahko označimo s "___"



Koordinacijske spojine

ligand - donator e⁻ para, centralni atom - akceptor e⁻ para



- ionska vez - **prostorsko neusmerjena**

↙
predvsem v ionskih kristalih (ni molekul !!)

NaCl CaO ; NaCl CsCl (podobnosti in razlike)

- kovalentna vez - **prostorsko usmerjena**

HF, H₂O, NH₃, CH₄

- Teorija valenčne vezi (VV) ; 1927
- Teorija molekularskih orbital (MO) ; 1928

Podatki o molekulah:

- oblika molekule (iz difrakcije, spektroskopije ...)
- dipolni moment $\vec{\mu} = \sum Z \cdot \vec{r}$, enota Cm (stara enota D)
- CO₂ SO₂ ; BF₃ NH₃
- magnetne lastnosti (paramagnetne, diamagnetne snovi)
- energija vezi (nastanek vezi je vedno eksotermen proces!)

TEORIJA VALENČNE VEZI

- princip linearne kombinacije ; LCAO
- variacijski princip

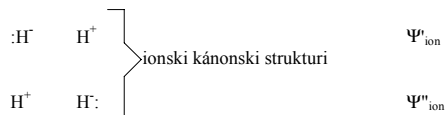
$$\Psi = c_1 \cdot \Psi_1 + c_2 \cdot \Psi_2 + \dots + c_n \cdot \Psi_n$$

minimiziramo energijo

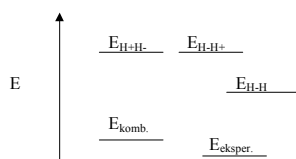
Primer:

molekula H₂

kánonske strukture



$$\Psi = \Psi_{\text{kov}} + c' \Psi'_{\text{ion}} + c'' \Psi''_{\text{ion}}$$



rezonanca

Prekrivanje atomskih orbital

čim močnejše je prekrivanje, tem močnejša je kemijska vez

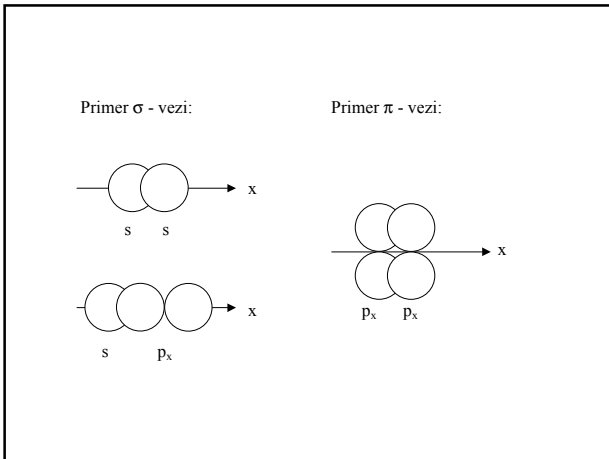
najintenzivneje je **čelno** prekrivanje: **σ - vez**

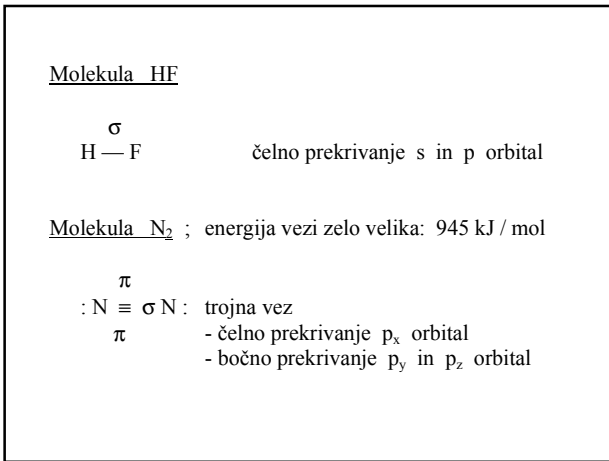
obstoja tudi **bočno** prekrivanje: **π - vez**

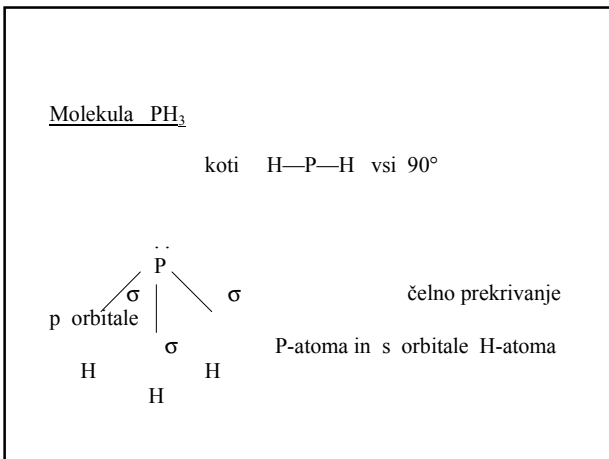
ter **bočno** prekrivanje
dveh d orbital: **δ - vez**

σ - vez: (s-s, s-p, s-d, p-p, p-d in d-d)

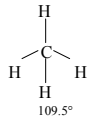
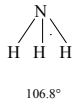
π - vez: (p-p, p-d, d-d)







Istega principa vedno ne moremo uporabiti :



promocija e⁻:
C : $1s^2 2s^2 2p^2$
C : $1s^2 2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$

Koncept hibridizacije orbital:

- iz določenega števila atomskih orbital dobimo z linearno kombinacijo enako število hibridnih orbital
- hibridiziramo le orbitale podobne energije
- hibridne orbitale so maksimalno vsaksebi
- tip hibridizacije izberemo glede na eksperimentalno določeno obliko molekule

Najvažnejši tipi hibridizacije

sp	linearna	BeCl_2 (plin)
sp ²	trigonalna	BCl_3
sp ³	tetraedrična	SiCl_4
dsp ²	kvadratna	PtCl_4
sp ³ d	trigonalno-bipiramidalna	PF_5
sp ³ d ²	oktaedrična	SF_6

Razlaga zgradbe molekul



s pomočjo hibridnih orbital

Vezi v molekulah:



Hibridiz. C-atoma:



Vpliv neveznih elektronskih parov na zgradbo molekule:

razpored e⁻ parov okrog centralnega atoma je takšen,
da omogoča maksimalni razmik le-teh

Zato je molekula:

BeCl₂ linearna 2 e⁻ para

BCl₃ trikotno-planarna 3 e⁻ pari

H₂O, NH₃, CH₄ tetraedrična 4 e⁻ pari

PCl₅ trigonalno-bipiramidalna 5 e⁻ parov

SF₆ oktaedrična 6 e⁻ parov



IF₇ pentagonalno-bipiramidalna 7 e⁻ parov

Gillespie - Nyholm

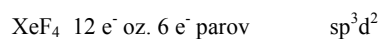
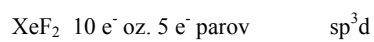
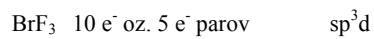
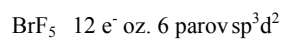
- teorija o odboju valenčnih e⁻ parov

nevezni ↔ nevezni > nevezni ↔ vezni > vezni ↔ vezni

Stereokemijsko aktivni elektronski par

zato zmanjšanje kota  v vodi in  v molekuli NH₃

Dodatni primeri:



Teorija molekularnih orbital (MO)

molekula O_2 , teorija VV odpove

MO teorija predpostavi niz molekularnih orbital okrog vseh jeder v molekuli

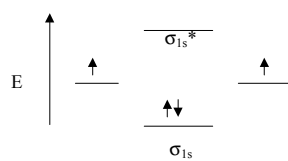
upošteva vse elektrone, ne le zunanjih

z LCAO (linearna kombinacija atomskih orbital) določenega števila atomskih orbital dobimo isto število molekularnih orbital

Molekula vodika

$$\Psi_1 = N_1 (\Psi_A + \Psi_B) \equiv \sigma_{1s} \quad \text{vezna}$$

$$\Psi_2 = N_2 (\Psi_A - \Psi_B) \equiv \sigma_{1s}^* \quad \text{razvezna}$$

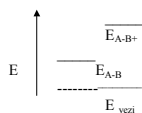


Elektronegativnost je sila, s katero atom v molekuli privlači elektrone

a) **Paulingova definicija** polamo vez med atomoma A in B opišemo s 3 kánonskimi strukturami:



(če je A bolj elektronegativen od B, je prispevek 3. strukture majhen)



Pauling je energijo kovalentne vezi A—B izrazil kot

$$E_{A-B} = \frac{E_{A-B} + E_{B-B}}{2}$$

$$\Delta = E_{vezi} - E_{A-B} = E_{vezi} \frac{E_{A-A} + E_{B-B}}{2}$$

aditivne so vrednosti $\sqrt{\Delta}$ in ne Δ , zato je definiral razliko v elektronegativnosti kot

$$\kappa_A - \kappa_B = K \cdot \sqrt{\Delta}$$

vse elektronegativnosti so preračunane na območje 1 do 4

2.16

a) **Mullikanova definicija**

elektronegativnost definiral kot povprečje ionizacijske energije in elektronske afinitete

enačba za preračun na Paulingovo skalo:

$$\kappa = 0.168 (IE + EA - 1.23)$$

a) **Allred - Rochow**

Elektronegativnost računa neposredno iz podatkov o atomu

$$F = \frac{Z^* e^2}{r}$$

Z^* zasenčitevna konstanta - izračunamo jo iz valovnih funkcij
 r - povprečna razdalja e^- od jedra

Enačba za preračun na Paulingovo skalo:

$$\kappa = 0.359 \frac{Z^*}{r} + 0.744$$

Najbolj elektronegativni element je fluor. (NO, toda OF_2)
