

Hemijska veza

Kada su atomi povezani jedan sa drugim tada kažemo da između njih postoji hemijska veza

Generalno postoji tri vrste hemijske veze: Jonska, Kovalentna i Metalna

Luisovi simboli – veoma zgodan način predstavljanja s i p elemenata i veza između njih. Luisovi simboli nisu praktični za predstavljanje d elemenata.

Valentni elektroni se predstavljaju tačkicama na sve 4 strane od simbola elemenata (to je zgodna podudarnost jer s i p elementi imaju 4 orbitale u koje se smeštaju valentni elektroni – jednu s i tri p).



Hemijska veza

Dve tačkice predstavljaju popunjenu orbitalu a jedna polupopunjenu

d elektroni se ne predstavljaju Luisovim simbolima

Element	Electron Configuration	Lewis Symbol	Element	Electron Configuration	Lewis Symbol
Li	[He]2s ¹	Li·	Na	[Ne]3s ¹	Na·
Be	[He]2s ²	·Be·	Mg	[Ne]3s ²	·Mg·
B	[He]2s ² 2p ¹	·B·	Al	[Ne]3s ² 3p ¹	·Al·
C	[He]2s ² 2p ²	·C·	Si	[Ne]3s ² 3p ²	·Si·
N	[He]2s ² 2p ³	·N:	P	[Ne]3s ² 3p ³	·P:
O	[He]2s ² 2p ⁴	:O:	S	[Ne]3s ² 3p ⁴	:S:
F	[He]2s ² 2p ⁵	·F:	Cl	[Ne]3s ² 3p ⁵	·Cl:
Ne	[He]2s ² 2p ⁶	:Ne:	Ar	[Ne]3s ² 3p ⁶	:Ar:

Pravilo okteta

Elektronska konfiguracija plemenitih gasova je veoma stabilna. Oni imaju veliku jonizacionu energiju, mali afinitet prema elektronu i hemijski su inertni

Stoga ostali atomi se jedine u jedinjenja težeći da dobiju elektronsku konfiguraciju najbližeg plemenitog gasa. Iz ovog opažanja je proisteklo pravilo okteta:

"Atomi će gubiti ili dobijati ili deliti elektrone da bi postigli elektronsku konfiguraciju plemenitog gasa"

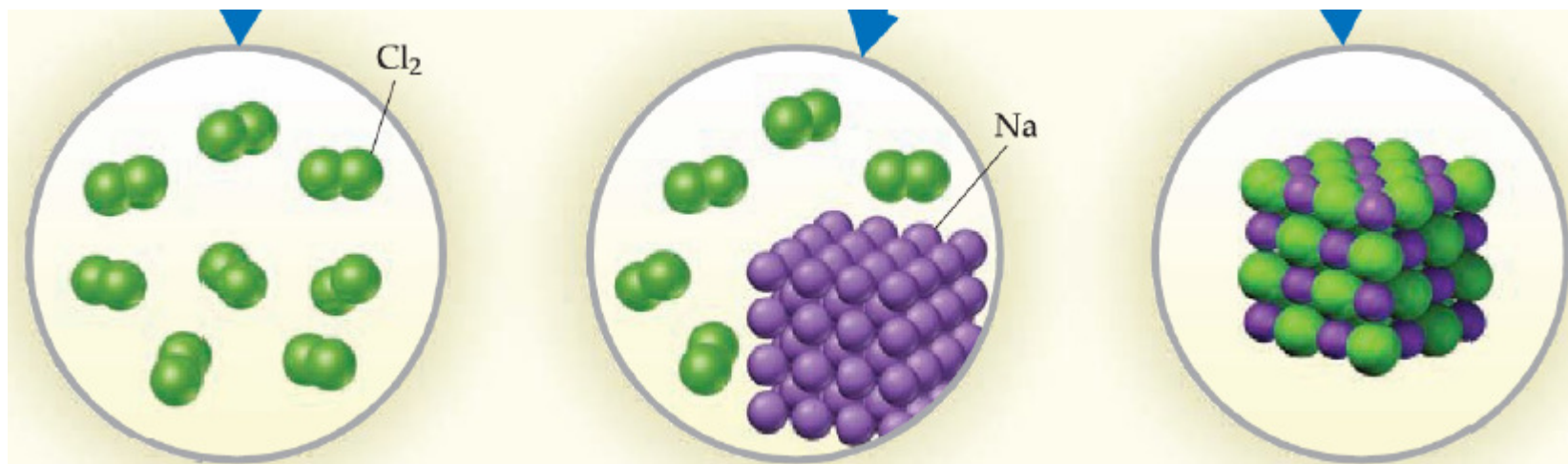
Ovo je pravilo, što znači da ima izuzetaka

Jonska veza

Jonska veza se tumači kao elektrostatičko privlačenje između različito naelektrisanih jona

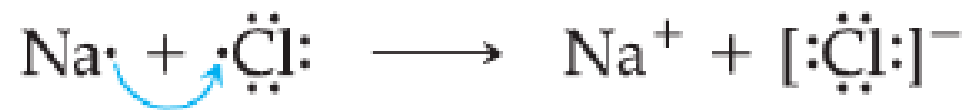
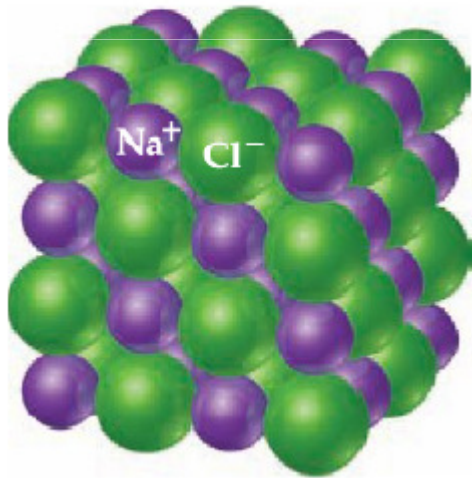
Uglavnom nastaje između katjona metala i anjona nemetala

Kada metalni Na reaguje sa gasovitim Cl nastaje jonska veza



Jonska veza

Ova veza se tumači kao da je elektron sa atoma natrijuma prešao potpuno na atom hlora. Nastali katjoni i anjoni su se udružili u trodimenzionalnu kristalnu rešetku i povezani su samo elektrostatičkim silama



Jonska veza

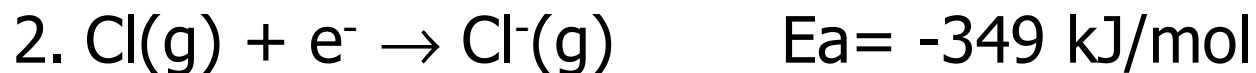
Standardne entalpije nastajanja svih jonskih jedinjenja su veoma negativne – nastajanje jonskih jedinjenja je egzoterman proces

Prilikom nastajanja jonkih jedine sa dešavaju tri stvari:

1. Uklanja se elektron sa atoma metala da bi nastao katjon. Za ovo je potrebno utošiti energiju jonizacije – to je uvek endotermno
2. Dodaje se elektron atomu nemetala da bi se dobio anjon – afinitet prema elektronu - uglavnom egzoterman proces (elementi koji imaju mali ili pozitivan afinitet prema elektronu ne grade anjone)
3. Nastali katjon i anjon se spajaju u čvrsto jonsko jedinjenje

Jonska veza

Energije sva tri procesa prilikom građenja NaCl iz natrijuma i hlora su:



ΔH u trećoj reakciji se naziva energija kristalne rešetke i ona se definiše kao energija koju je potrebno uložiti da bi se potpuno razdvojio jedan mol čvrstog kristalnog jonskog jedinjenja na jone u gasovitom stanju



Jonska veza

Energija kristalne rešetke zavisi isključivo od naelektrisanja, veličine i načina pakovanja jona koji čine jonsko jedinjenje.

$$E_{el} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q_1 Q_2}{d}$$

Što su joni manji i više naelektrisani i energija kristalne rešetke će rasti. Pakovanje jona u rešetku zavisi od brojnih faktora od kojih je najvažniji odnos između veličina katjona i anjona. Generalno, ako su katjon i anjon približno istih veličina pakovanje će biti gušće i energija kristalne rešetke veća.

Joni prelaznih metala

Ne ponašaju se u skladu sa pravilom okteta, jer moraju da otpuste ili prime previše elektrona da bi postigli elektronsku konfiguraciju plemenitog gasa. Npr. gvožđe

Fe: $[\text{Ar}]3d^64s^2$

bi moralo da otpusti 8 elektrona da bi postiglo elektronsku konfiguraciju argona ili da primi 10 elektrona da bi postiglo elektronsku konfiguraciju kriptona. To je nemoguće jer najčešće srećemo katjone koji su 1+, 2+ i 3+ i anjone koji su 1-, 2- i 3-.

Joni prelaznih metala

Veoma važno pravilo kod određivanja elektronske konfiguracije jona prelaznih metala:

“kada se stvara katjon uvek se elektron uzima iz onog podnivoa koji ima veći glavni kvantni broj n”

Tako će kod gvožđa prvo se jonizovati 4s elektroni pa tek onda 3d elektroni. Inače gvožđe gradi stabilne 2+ i 3+ katjone



Kovalentna veza

Mnogo više ima jedinjenja sa kovalentnom nego sa jonskom vezom.

Dok su jonska jedinjenja uglavnom čvrste supstance velike tačke topljenja kovalentna jedinjenja su mnogo raznovrsnija

Luis je zaključio da atomi ne moraju da otpuštaju ili primaju elektrone da bi postigli elektronsku konfiguraciju plemenitog gasa već da mogu i dele elektrone.

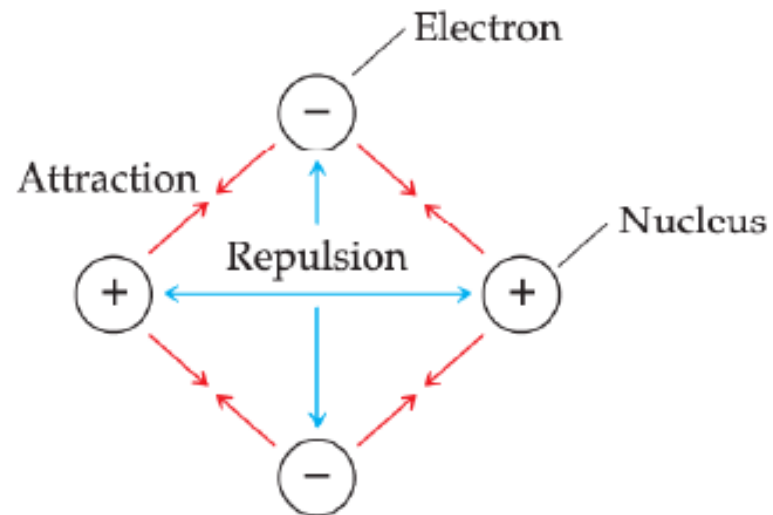
Na primer, vodonik ima jedan elektron u 1s orbitali. Najbliži plemeniti gas je helijum sa dva elektrona u 1s orbitali. Znači, dva atoma vodonika mogu da udruže svoje elektrone i postignu elektronsku konfiguraciju helijuma



Kovalentna veza

Nastajanje kovalentne veze – sve sile koje učestvuju:

- Privlačenje između jezgra jednog atoma i elektrona drugog atoma
- Odbijanje između elektrona dva atoma
- Odbijanje između jezgara dva atoma

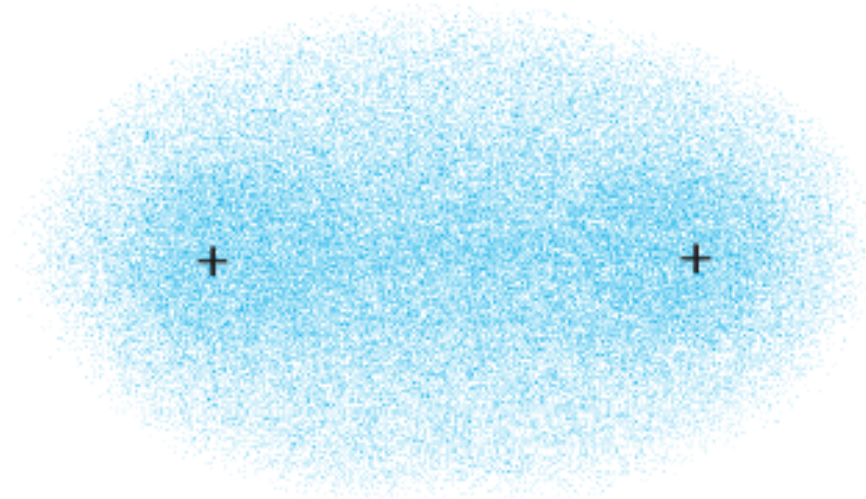


Kovalentna veza

Kvantno mehanički proračuni na H_2 molekulu su pokazali da dolazi do nagomilavanja elektronske gustine između dva jezgra.

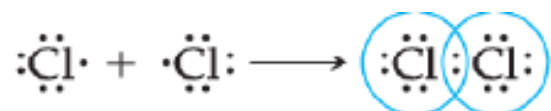
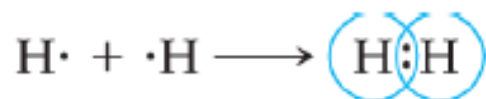
Znači molekul H_2 postoji zato što su dva jezgra elektrostatički privučena za koncentrovano negativno naelektrisanje (elektrone) između njih.

Zajednički elektronski par ustvari deluje kao "lepak" koji drži jezgra zajedno



Kovalentna veza

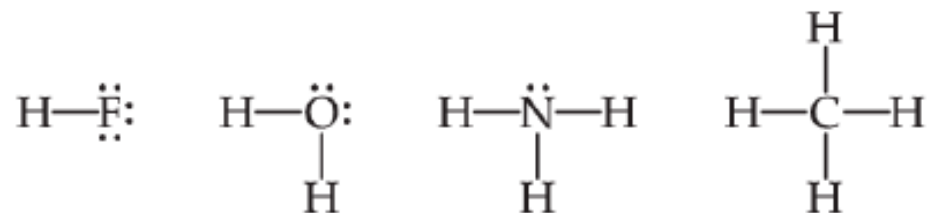
Prikazivanje kovalentne veze Luisovim simbolima



Zajednički elektronski par se u Luisovim strukturama obično predstavlja crticom



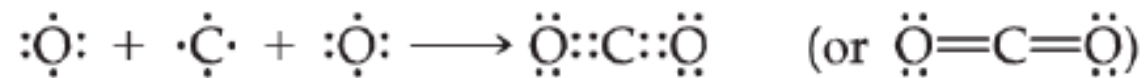
Kiseoniku trebaju 2 elektrona da bi dobio elektronsku konfiguraciju neona pa će se jedinica sa dva atoma vodonika, azotu trebaju 3 elektrona, ugljeniku 4...



Kovalentna veza – višestruke veze

Kovalentna veza između dva atoma koji dele jedan zajednički elektronski par se zove prosta kovalentna veza ili samo prosta veza koja se predstavlja jednom crticom

Kada dva atoma dele dva elektronska para tada nastaje dvostruka veza koja se predstavlja sa dve crtice



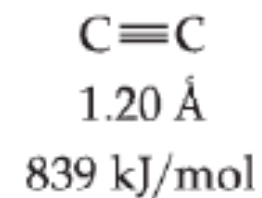
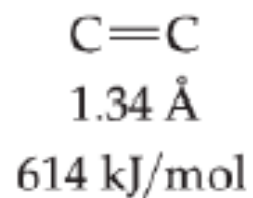
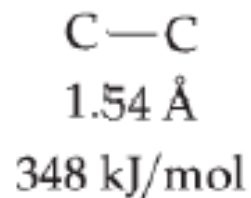
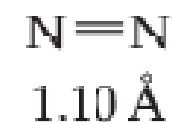
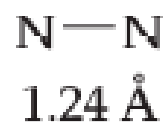
Ukoliko atomi dele tri elektronska para tada nastaje trostruka veza



Kovalentna veza – višestruke veze

Pravilo:

Dvostruka veza je uvek jača i kraća od proste veze a trostruka je jača i kraća i od dvostruke i od proste!!!



Polarnost kovalentne veze

Postoje dve vrste kovalentne veze po polarnosti:

- Polarna kovalentna veza
- Napolarna kovalentna veza

Napolarna kovalentna veza nastaje između atoma istog elementa. U H_2 molekulu oba atoma podjednako dele zajednički elektronski par

Polarna kovalentna veza nastaje između atoma različitih elemenata. Tu jedan atom jače privlači zajednički elektronski par nego drugi atom. Zbog toga su elektroni pomereni ka atomu koji ih jače privlači i on postaje delom negativno naelektrisan dok atom koji slabije privlači elektrone postaje delom pozitivno naelektrisan.

Jonska veza se može posmatrati kao drastični primer polarne kovalentne veze gde su oba elektrona iz para kompletno prešla na atom koji ih jače privlači

Elektronegativnost - Polarnost kovalentne veze

Kako mi da znamo koji atom jače privlači elektrone?

Usvojen je pojam elektronegativnosti koji se definiše kao:

"Elektronegativnost je sposobnost atoma da u molekulu privuče elektronski par"

Što je veća elektronegativnost atoma to će jače privlačiti zajednički elektronski par.

Mulliken je odredio elektronegativnost atoma svakog elementa na osnovu energije jonizacije i afiniteta prema elektronu

$$\chi = \frac{I_1 + E_A}{2}$$

Elektronegativnost - Polarnost kovalentne veze

$$\chi = \frac{I_1 + E_A}{2}$$

Jonizaciona energija nam govori koliko dati atom "čvrsto drži" svoje elektrone

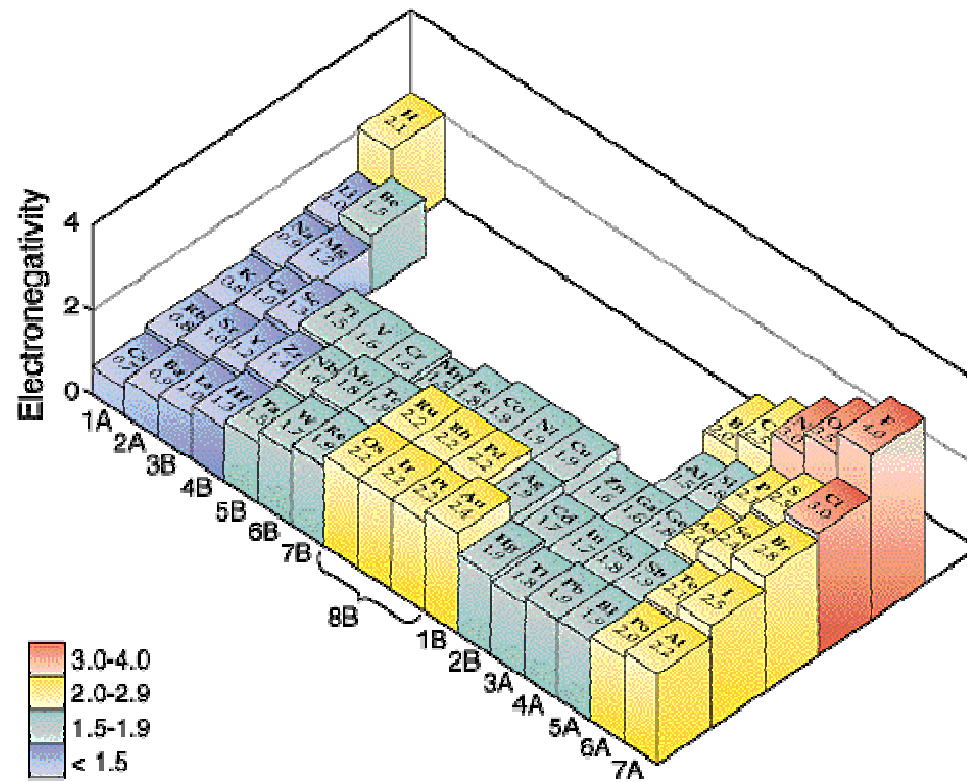
Afinitet prema elektronu nam govori koliko dati atom "želi" da privuče druge elektrone

Danas se koristi Poulingova skala elektronegativnosti koja se zasniva na merenju energije disocijacije veza

Uzeto je da je elektronegativnost fluora (najelektronegativnijeg elementa) 4,0 a cezijuma (najmanje elektronegativnog) 0,7

Elektronegativnost - Polarnost kovalentne veze

Paulingova skala elektronegativnosti



Elektronegativnost - Polarnost kovalentne veze

Paulingova skala elektronegativnosti

Vrednost elektronegativnosti raste po periodi a opada u grupi

Electronegativity

1		2												3		4	5	6	7	8
														(13)	(14)	(15)	(16)	(17)	(18)	
0.5 - 0.9		1.0 - 1.4												2.5 - 2.9		3.0 - 3.5	3.6 - 3.9	4.0+		
2.0 - 2.4																				

H																			He
2.1																			--
Li	Be												B	C	N	O	F		Ne
1.0	1.6												2.0	2.5	3.0	3.5	4.0		--
Na	Mg	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)	(8)	(9)	(10)	(11)	(12)	Al	Si	P	S	Cl		Ar	
0.9	1.3											1.6	1.9	2.2	2.5	3.0		--	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br		Kr	
0.8	1.3	1.4	1.5	1.6	1.7	1.6	1.8	1.9	1.9	1.9	1.7	1.6	2.0	2.2	2.6	2.8		--	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I		Xe	
0.8	1.0	1.2	1.3	1.6	2.2	2.1	2.2	2.3	2.2	1.9	1.7	1.8	2.0	2.1	2.1	2.7		2.6	
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At		Rn	
0.8	0.9	1.1	1.3	1.5	1.7	1.9	2.2	2.2	2.2	2.4	1.9	2.0	2.3	2.0	2.0	2.2		--	
Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Uun	Uuu	Uub		Uuq						
0.7	0.9	1.1	--	--	--	--	--	--	--	--	--								
			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu			
			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr			

Elektronegativnost - Polarnost kovalentne veze

Sada kada znamo pojam elektronegativnosti možemo na osnovu razlika elektronegativnosti da odredimo koja će veza biti polarna a koja nepolarna

Npr.

Jedinjenje	F ₂	HF	LiF
Razlika elektroneg.	4,0 - 4,0 = 0	4,0 - 2,1 = 1,9	4,0 - 1,0 = 3,0
Tip veze	nepolarna	polarna	jonska

U jedinjenju HF je polarna veza jer je zajednički elektronski par pomeren ka atomu fluora tj. elektronska gustina oko elektronegativnijeg fluora je veća.

Elektronegativnost - Polarnost kovalentne veze

Zbog toga će u delu prostora oko fluora biti višak elektrona i to će biti negativno naelektrisani deo molekula HF. U delu oko atoma vodonika će biti manjak elektrona i to će biti pozitivno naelektrisani deo molekula HF

Ovakva raspodela naelektrisanja se predstavlja kao:

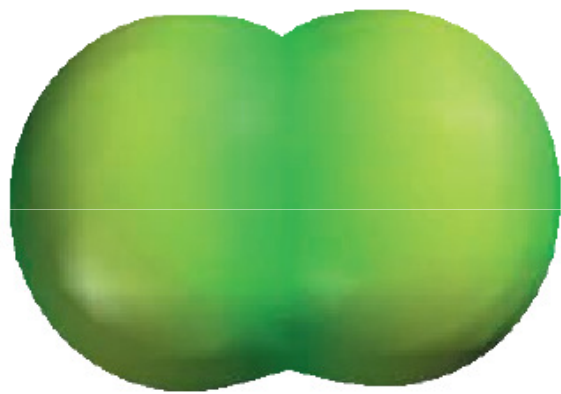


Gde simboli $\delta+$ i $\delta-$ predstavljaju parcijalno pozitivna i parcijalno negativna naelektrisanja.

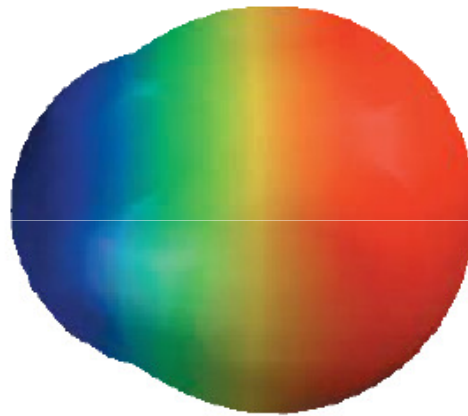
Elektronegativnost - Polarnost kovalentne veze

Ovo je potvrđeno i kvantno mehaničkim proračunima.

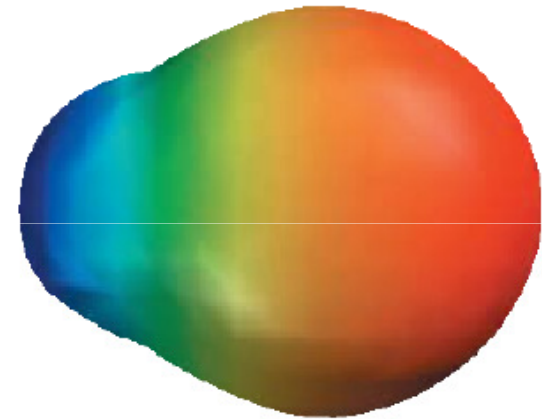
Kada se izračuna raspodela elektronske gustine za molekule F_2 , HF i HLi dobijaju se sledeće slike:



F_2



HF



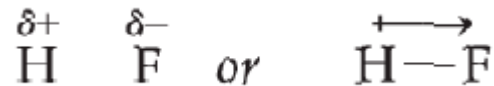
LiF

Plavom bojom su obeleženi regioni sa malom elektronskom gustinom a crvenom oni sa velikom elektronskom gustinom

Elektronegativnost - Polarnost kovalentne veze

Pošto molekul HF ima svoj pozitivan i negativan kraj za njega kažemo da je polaran molekul

Polarnost molekula HF se može prikazati na dva načina:



Polarnost je veoma važna osobina molekula i mnoge hemijske i fizičke osobine molekula zavise od njihove polarnosti

Ali da li postoji skala polarnosti, da li su neki molekuli polarniji od drugih?

Kako se može kvantitativno izraziti polarnost?

Elektronegativnost - Polarnost kovalentne veze

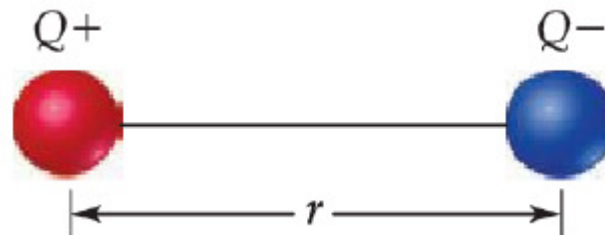
Dipolni momenat je mera za kvantitativno izražavanje polarnosti nekog molekula. Svaki polarni molekul ima i svoj dipolni momenat (μ)

Kada se dva jednaka i suprotna naelektrisanja Q nalaze na nekom rastojanju r tada je veličina dipolnog momenta takvog sistema data sa:

$$\mu = Qr$$

Dipolni momenat je vektorska veličina

Jedinica za dipolni momenat je kulon-metar (C·m) a češće se izražava u Debajima (D). Jedan Debaj iznosi $3,34 \times 10^{-30}$ kulon-metara



Elektronegativnost - Polarnost kovalentne veze

Dipolni momenat i razlika elektronegativnosti

Što je veća razlika elektronegativnosti između atoma koji čine dvoatomni molekul to će i dipolni momenat tog molekula biti veći

Compound	Bond Length (Å)	Electronegativity Difference	Dipole Moment (D)
HF	0.92	1.9	1.82
HCl	1.27	0.9	1.08
HBr	1.41	0.7	0.82
HI	1.61	0.4	0.44



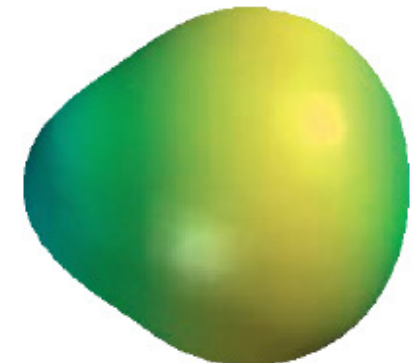
HF



HCl



HBr



HI

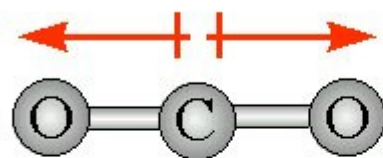
Elektronegativnost - Polarnost kovalentne veze

Dipolni momenat kod višeatomskih molekula veoma zavisi od geometrije molekula.

CO₂ uprkos velikoj razlici u elektronegativnosti između C (2,5) i O (3,5) nema dipolni momenat jer je linearan molekul i vektorski zbir dipola C=O veza je nula

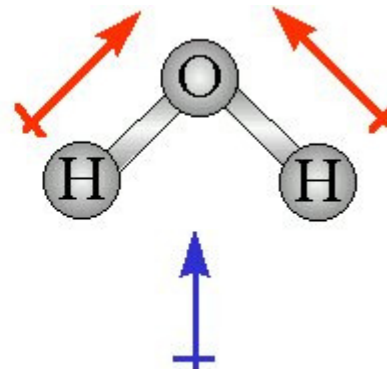
Voda koja nije linearan molekul ima veoma veliki dipolni momenat

Dipoles



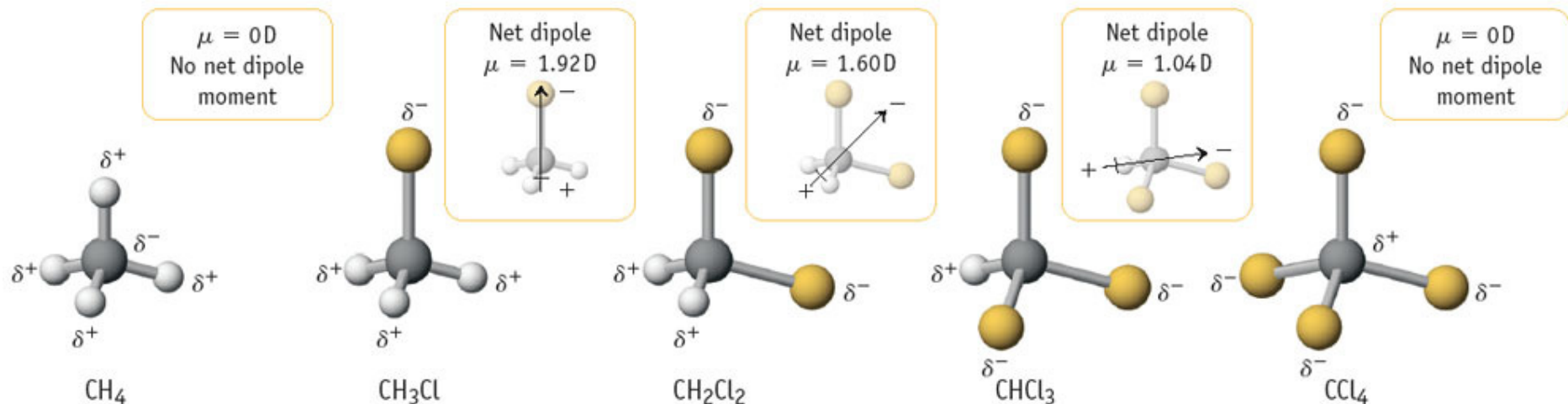
Overall
Dipole:

(none)



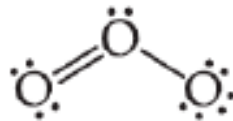
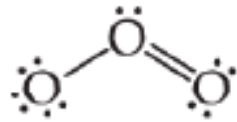
Elektronegativnost - Polarnost kovalentne veze

Slično je i za metan (CH_4). Kada se određuje ukupni dipolni moment celog molekula moraju se vektorski sabrati dipoli svih veza koje čine molekul



Rezonantne strukture

Za molekul ozona O_3 možemo napisati dve Luisove formule koje se u suštini ne razlikuju. Ovakve strukture koje se razlikuju samo po načinju smeštanja elektrona se zovu rezonantne strukture



Međutim precizna merenja su pokazala da u ozonu ne postoji jedna prosta i jedna dvostruka veza već da su obe veze po dužini i energiji negde između proste i dvostruke.

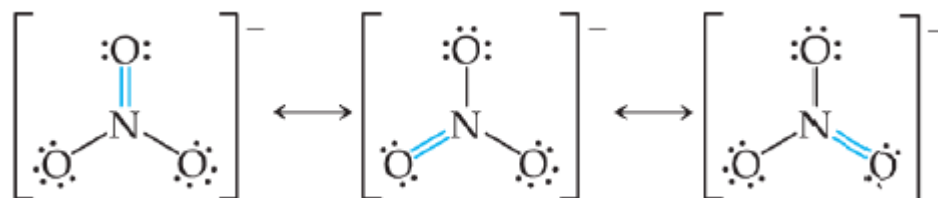
Znači ozon se nalazi negde između ove dve strukture (ne prelazi iz jedne u drugu već je upravo njihova mešavina – kao kad pomešamo plavu i žutu boju pa dobijemo zelenu – zelena nije čas plava čas žuta već je zelena). Ipak struktura ozona se pravilno prikazuje:

Rezonantne strukture



Ovo znači da je prava struktura ozona između ove dve rezonantne strukture

NO_3^- anjon ima tri rezonantne strukture



Izuzeci od pravila okteta

Već smo videli da pravilo okteta ne važi za jone prelaznih metala. Ima još izuzetaka od pravila okteta:

1. Molekuli sa neparnim brojem valentnih elektrona
2. Molekuli u kojima jedan atom ima manje od osam elektrona
3. Molekuli u kojima jedan atom ima više od osam elektrona

Izuzeci od pravila okteta

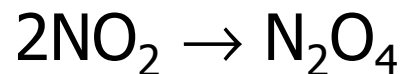
1. Molekuli sa neparnim brojem valentnih elektrona

Najpoznatiji primeri molekula sa neparnim brojem elektrona su ClO_2 , NO i NO_2

Kod ovih molekula je nemoguće izvršiti sparivanje elektrona i jedan atom uvek ostaje bez okteta. NO ima 11 valentnih elektrona i njegove Luisove formule su:



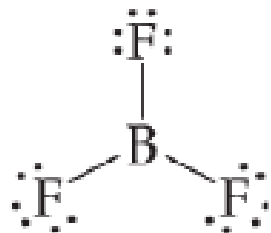
Ovakvi molekuli često podležu dimerizaciji da bi dostigli stabilnu elektronsku konfiguraciju



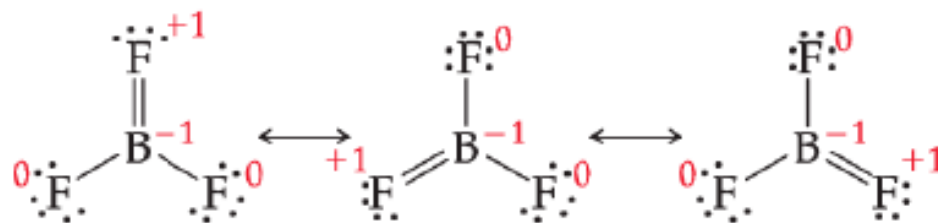
Izuzeci od pravila okteta

2. Molekuli u kojima jedan atom ima manje od osam elektrona

Ovakav slučaj odstupanja od pravila okteta se najčešće javlja kod jedinjenja bora i berilijuma. BF_3



Međutim možemo napisati i ovakve Luisove strukture gde je zadovoljeno pravilo okteta za sve atome ali se formalno pozitivno naelektrisanje nalazi na atomu fluora (najelektronegativniji atom) pa su ove strukture malo verovatne

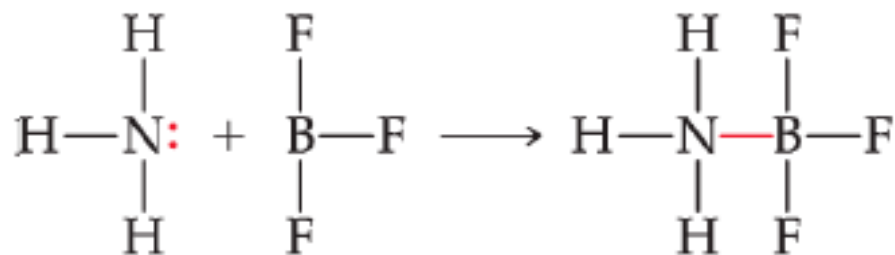


Izuzeci od pravila okteta

2. Molekuli u kojima jedan atom ima manje od osam elektrona

Ovi molekuli su Luisove kiseline jer na centralnom atomu postoji jedna prazna valentna orbitala. Oni će reagovati sa Luisovim bazama koje imaju na centralnom atomu jedan nevezivni elektronski par dajući soli.

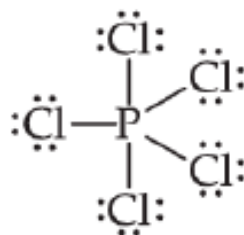
U solima svi atomi imaju pun oktet



Izuzeci od pravila okteta

3. Molekuli u kojima jedan atom ima više od osam elektrona

Najčešći tip odstupanja od pravila okteta. Primer PCl_5



Ovde oko atoma fosfora imamo 10 elektrona. Toliko elektrona ne može da stane u 3s i 3p orbitale fosfora. Moramo proširiti valentnu ljusku fosfora sa (praznim) 3d orbitalama koje su sledeće po energiji.

Ostali primer ovog narušavanja pravila okteta su SF_4 , AsF_6^- , ICl_4^- . Naravno odgovarajuća analogna jedinjenja sa centralnim atomom iz druge periode kao što su NF_5 ili OF_4 ne postoje. Zašto?