

Część 2

Budowa materii:

od mikrocząstek do układów (supra) molekularnych

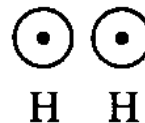
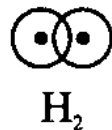
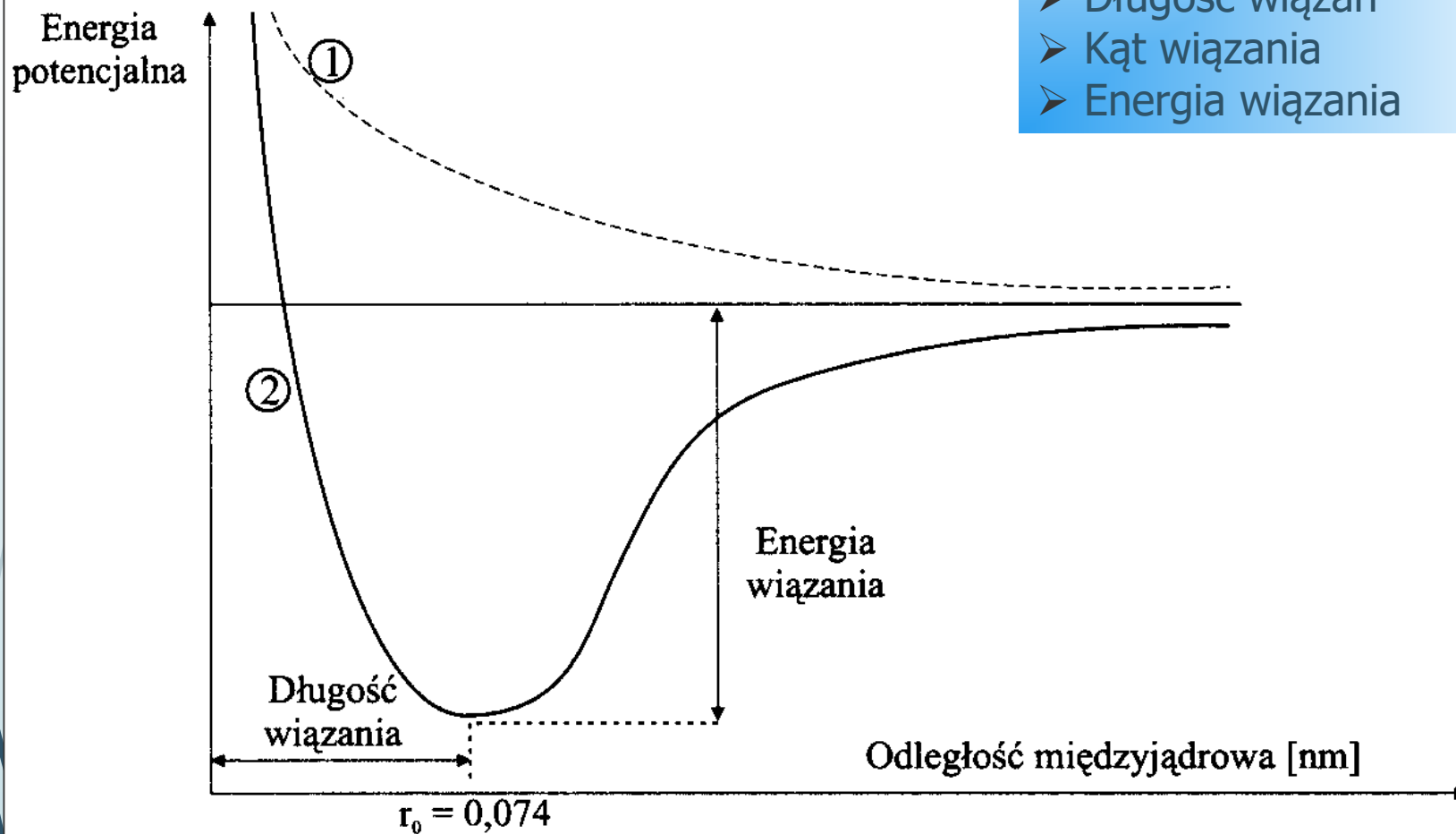
- 2.1. Dowody na nieciągłość materii oraz istnienia stanów kwantowych
- 2.2. Modele budowy atomu
- 2.3. Nowe cechy mikroświata - nowa terminologia
- 2.4. Współczesne rozumienie budowy atomu
- 2.5. Budowa cząsteczek**
- 2.6. Wiązania chemiczne i oddziaływania międzycząsteczkowe

BUDOWA CZĄSTECZEK

2.5.2

Budowa cząsteczki:

- Kształt cząsteczki
- Konfiguracja elektronowa
- Ilość i rodzaj wiązań
- Długość wiązań
- Kąt wiązania
- Energia wiązania



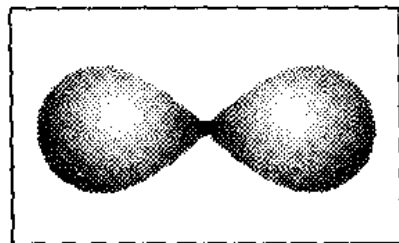
Typy orbitali molekularnych

2.5.3

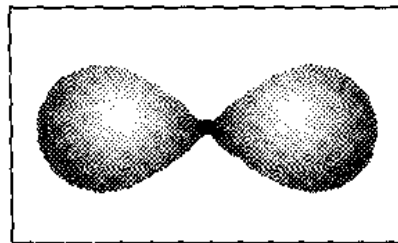
Orbitale atomowe



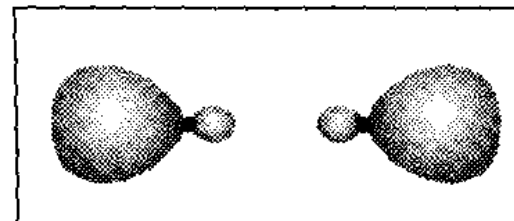
Orbitale molekularne



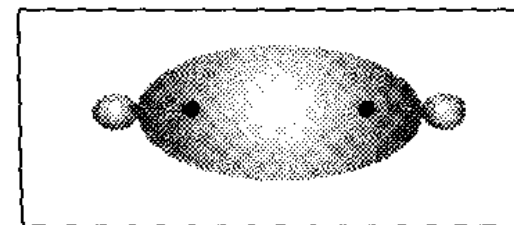
p_y



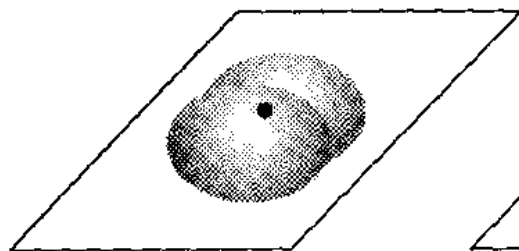
p_y



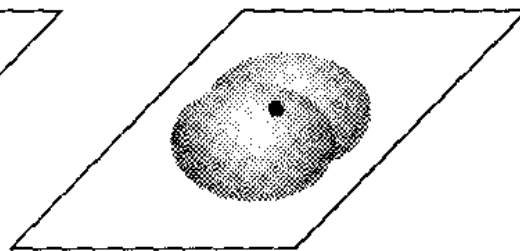
$\sigma^* p_y$



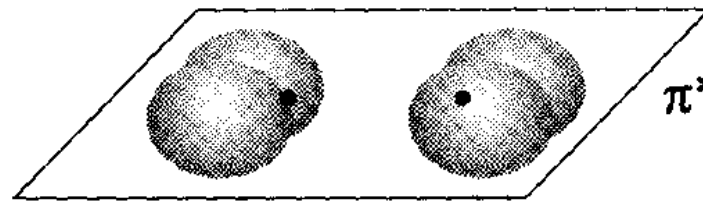
σp_y



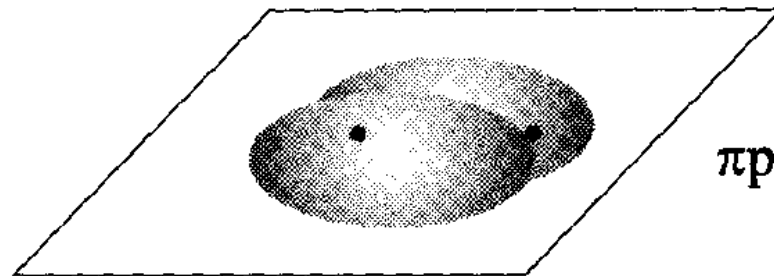
p_x



p_x



$\pi^* p_x$



πp_x

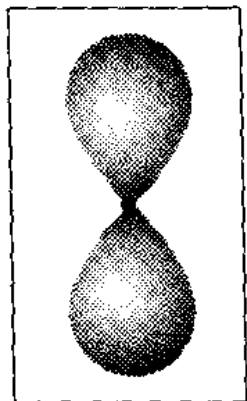
Typy orbitali molekularnych

2.5.4

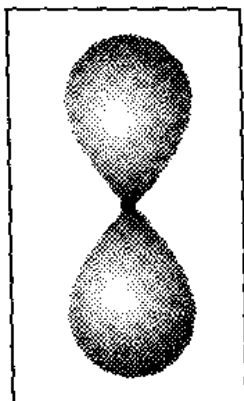
Orbitale atomowe



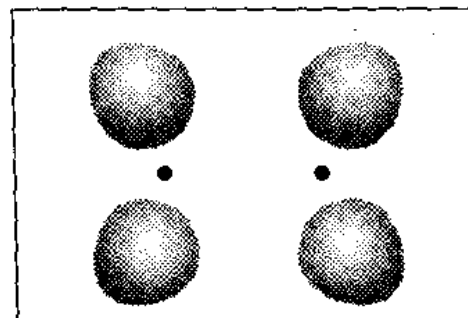
Orbitale molekularne



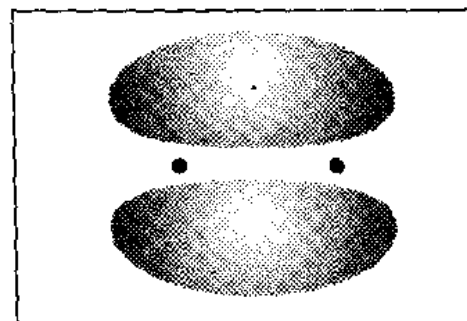
p_z



p_z



$\pi^* p_z$



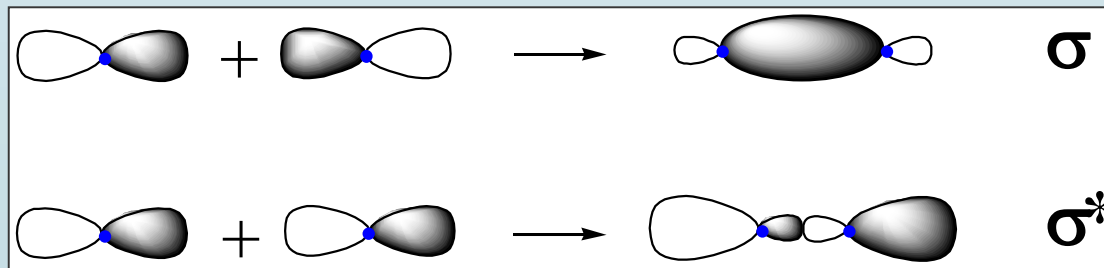
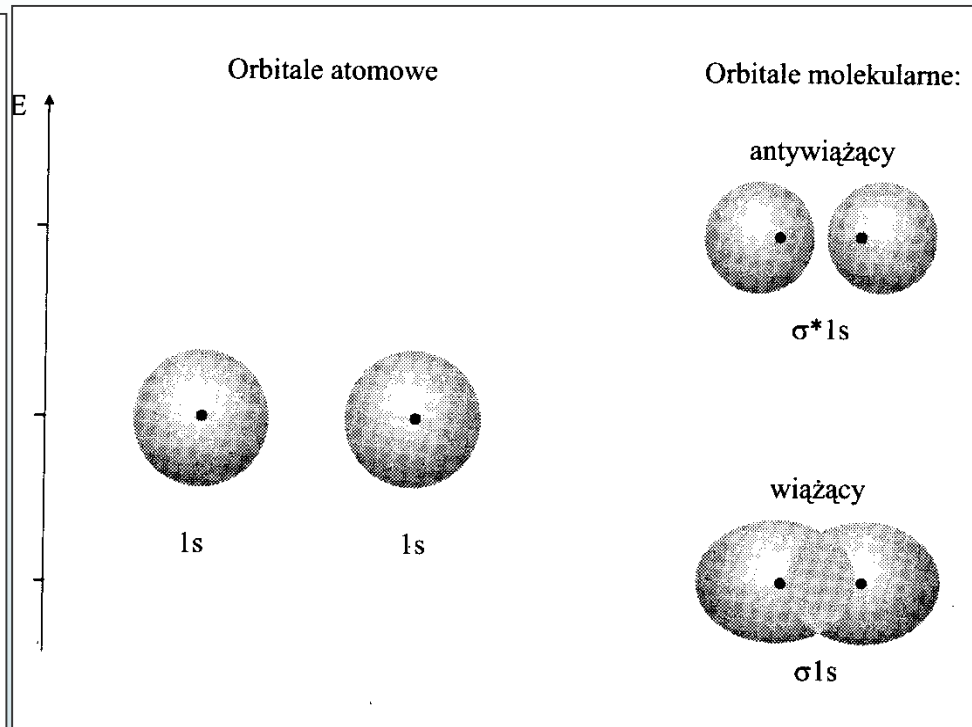
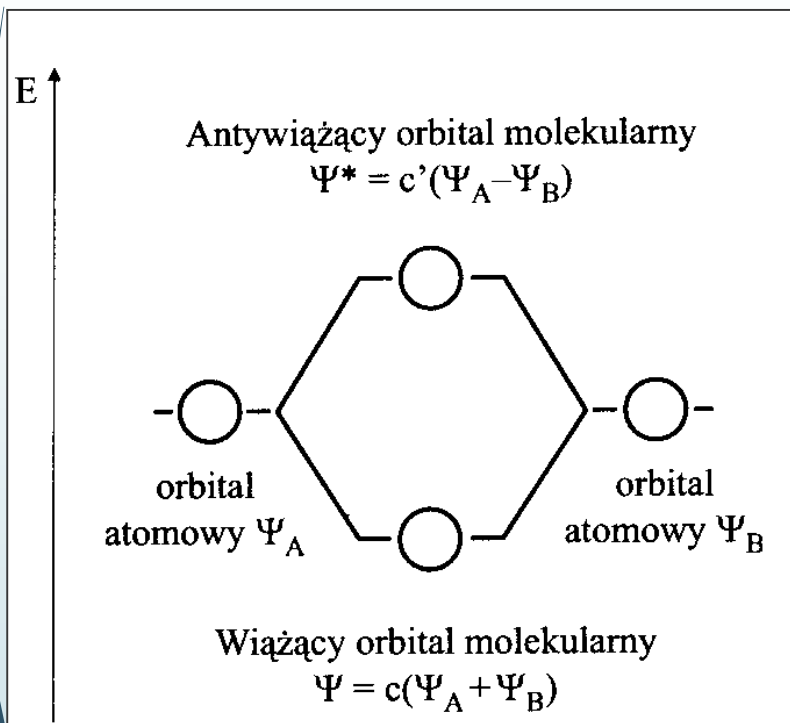
πp_z

Typy orbitali molekularnych

2.5.5

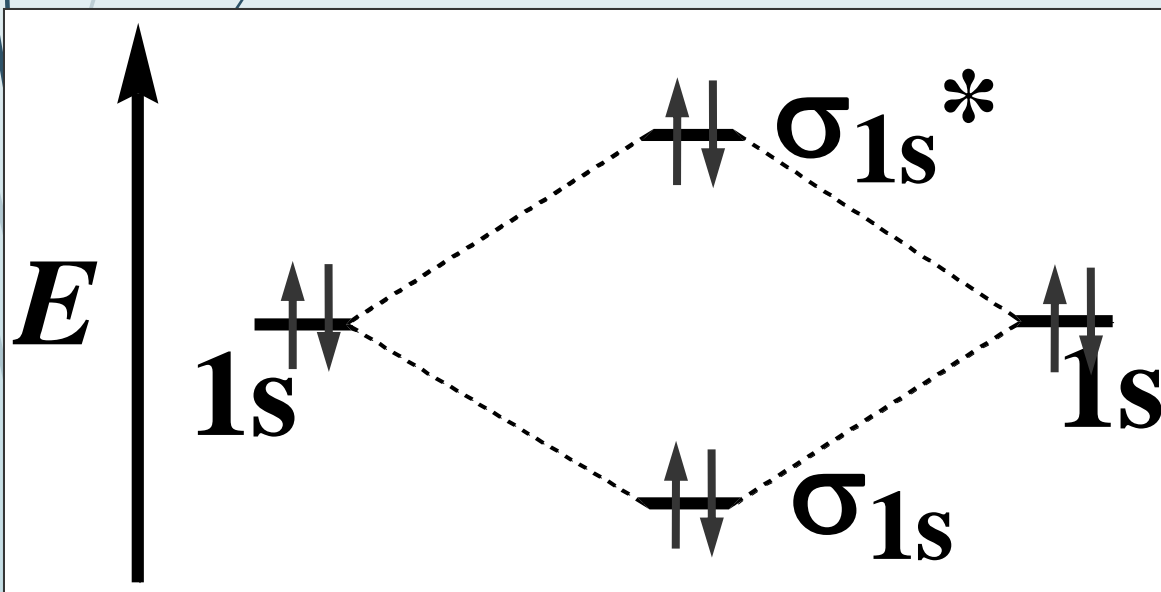
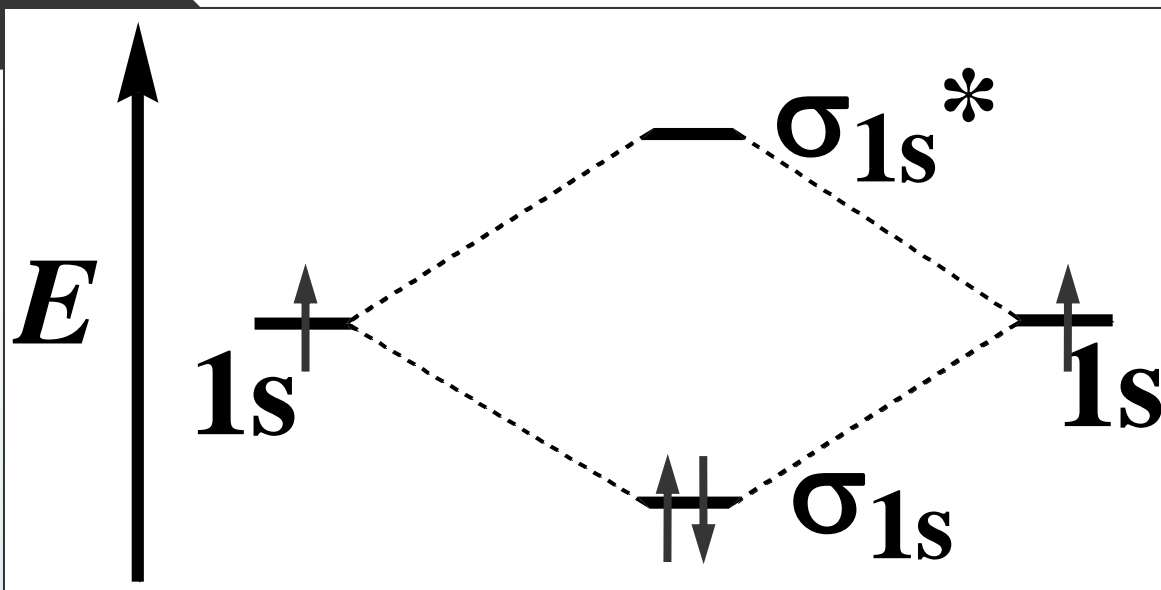
$$\Psi = c_A \Psi_A + c_B \Psi_B$$

$$\Psi^* = c'_A \Psi_A - c'_B \Psi_B$$



BUDOWA CZĄSTECZEK DWUATOMOWYCH

CZĄSTECZKI WODORU I HELU (HIPOTETYCZNEJ)



Rząd wiązania

$= \frac{1}{2}$ (liczba elektronów wiążących – liczba elektronów antywiązących)

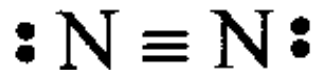
$$\text{H}_2 = \frac{1}{2} (2 - 0) = 1$$

$\text{He}_2 = \frac{1}{2} (2 - 2) = 0$
molekuła niestabilna
(nie istnieje)

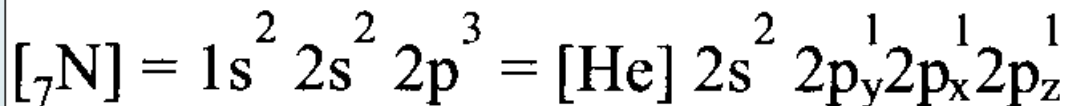
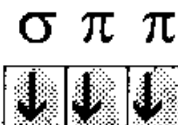
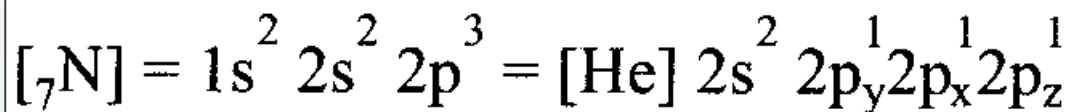
BUDOWA CZĄSTECZEK DWUATOMOWYCH

2.5.7

CZĄSTECZKA AZOTU: N₂

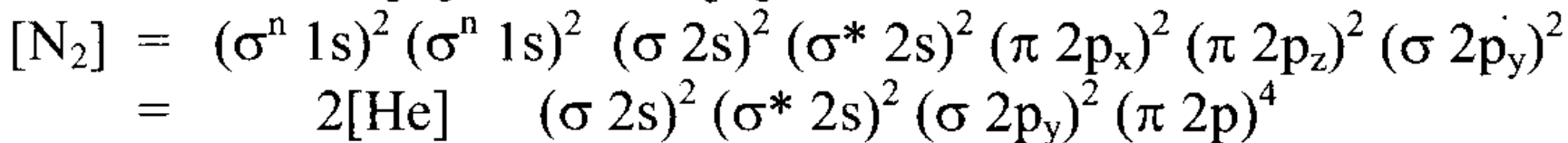


Konfiguracja elektronowa cząsteczki azotu:

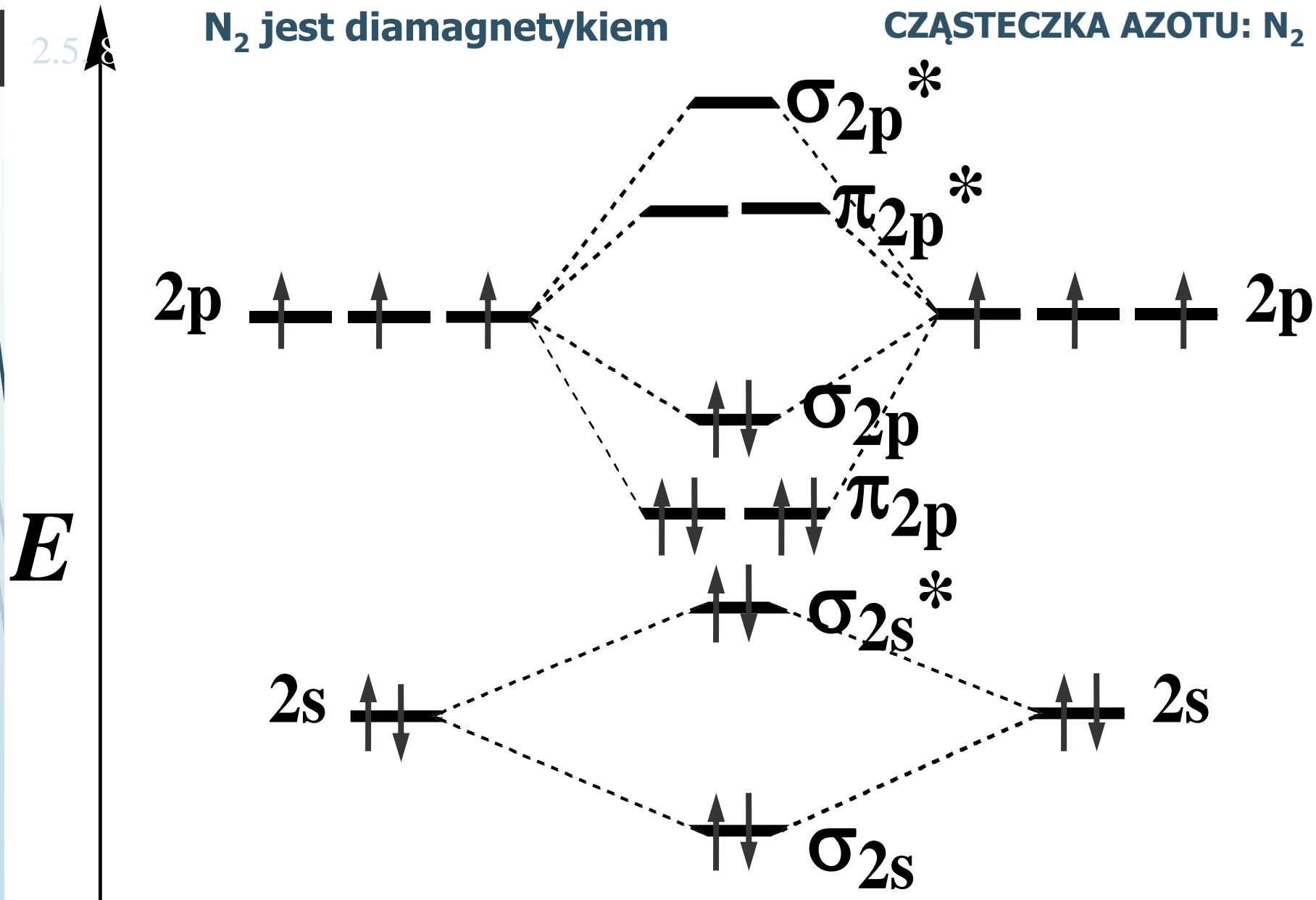


niewiążące

wiążące



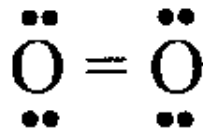
BUDOWA CZĄSTECZEK DWUATOMOWYCH



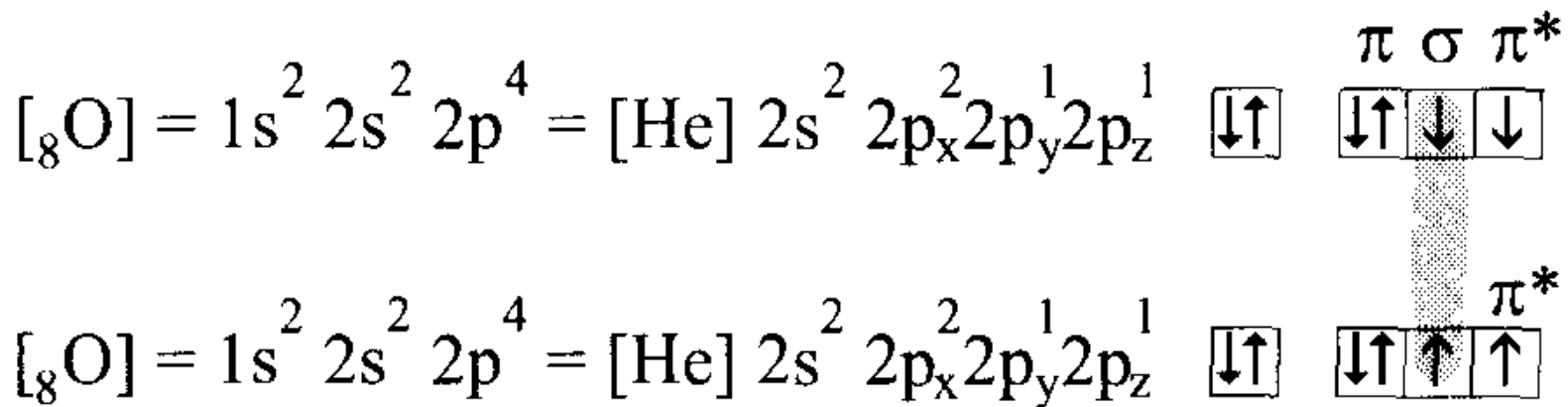
BUDOWA CZĄSTECZEK DWUATOMOWYCH

2.5.9

CZĄSTECZKA TLENU: O₂

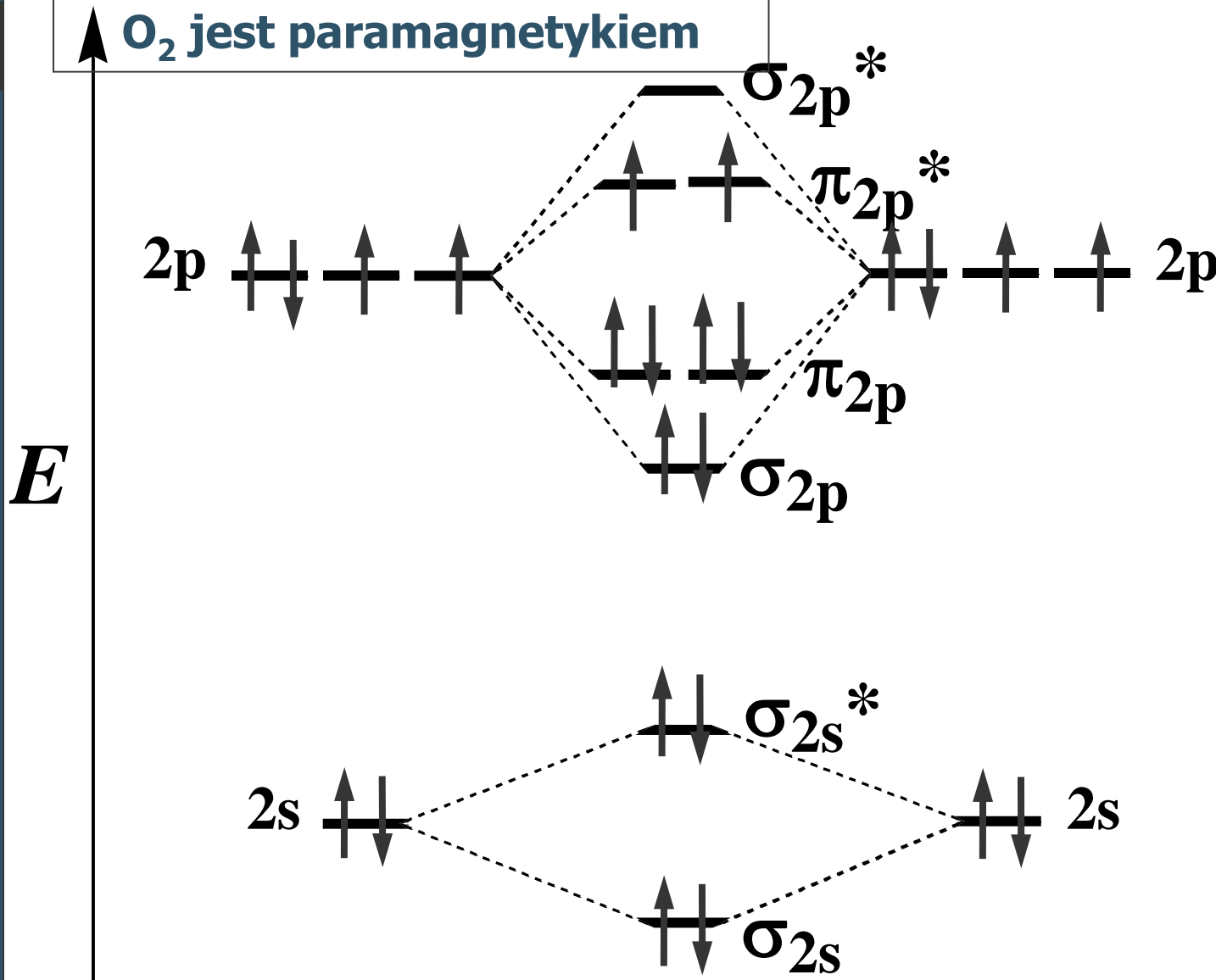


Konfiguracja elektronowa cząsteczki tlenu:



BUDOWA CZĄSTECZEK DWUATOMOWYCH

CZĄSTECZKA
TLENU: O_2



BUDOWA CZĄSTECZEK DWUATOMOWYCH

2.5. 11

**Konfiguracja
elektronowa cząsteczki
tlenu:**

Multipletowość:

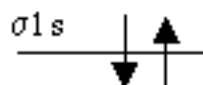
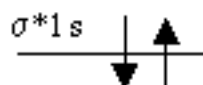
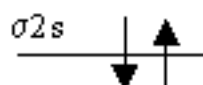
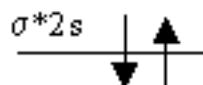
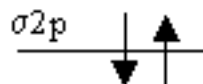
$$M = 2 \cdot S + 1$$

**Reagujące cząsteczki m
muszą być o tej samej
multipletowości !**

tlenu trypletowy



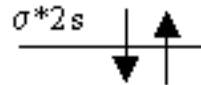
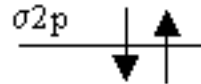
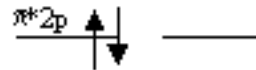
σ^*2p



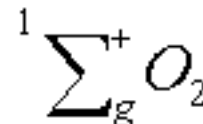
tlenu singletowy



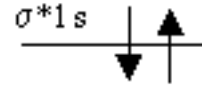
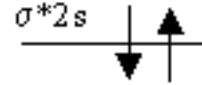
σ^*2p



tlenu singletowy



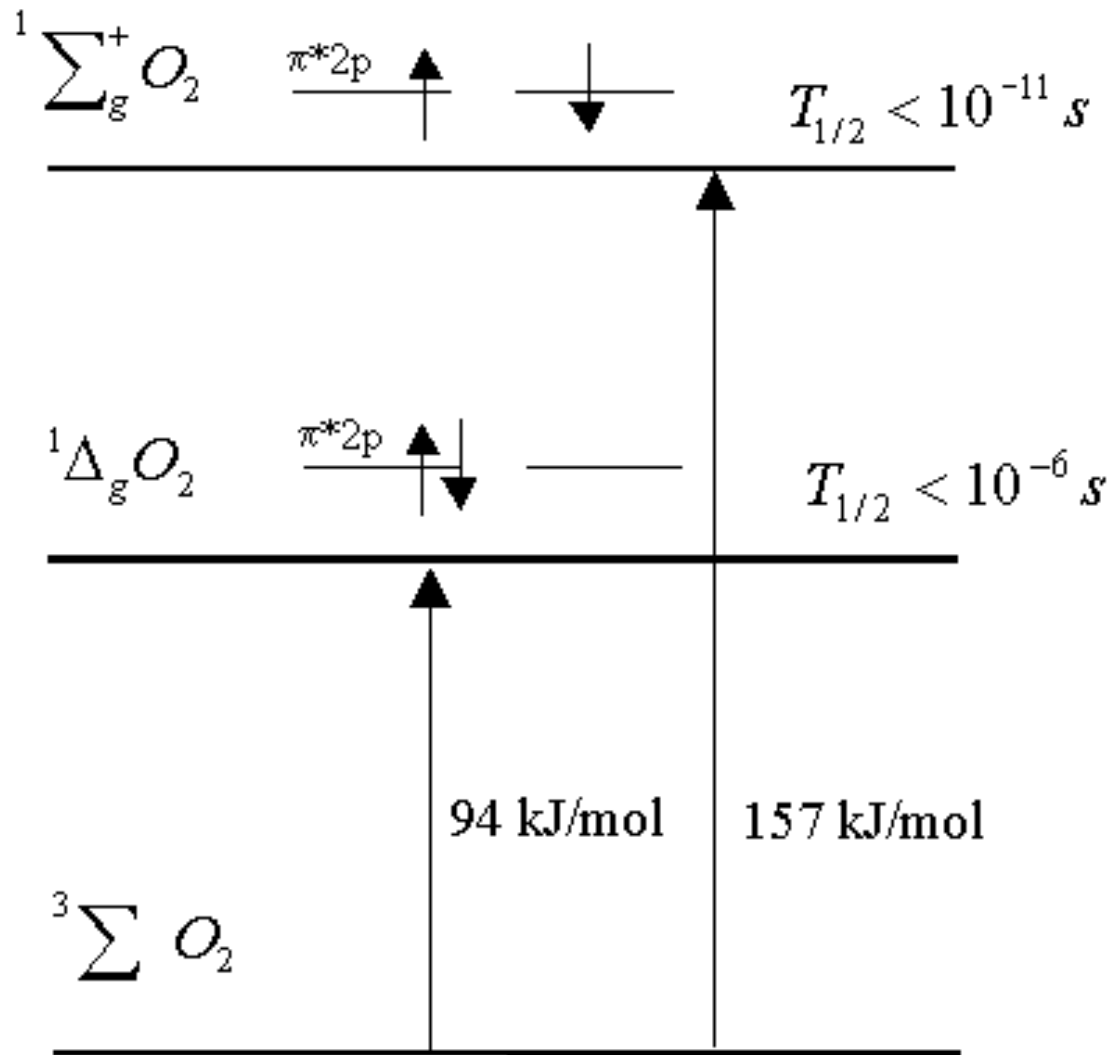
σ^*2p



BUDOWA CZĄSTECZEK DWUATOMOWYCH

2.5. 12

Energie i okresy półtrwania form tlenu w rozworach wodnych

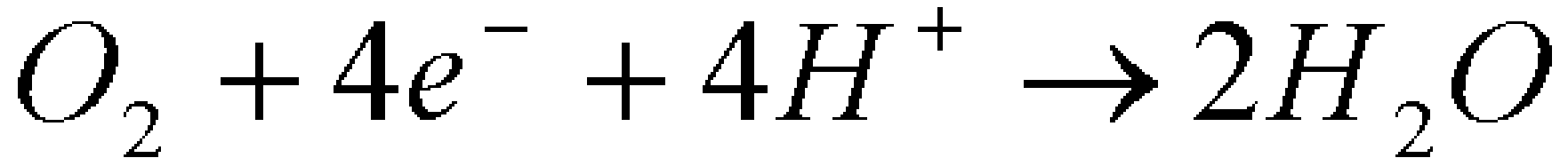


BUDOWA CZĄSTECZEK DWUATOMOWYCH

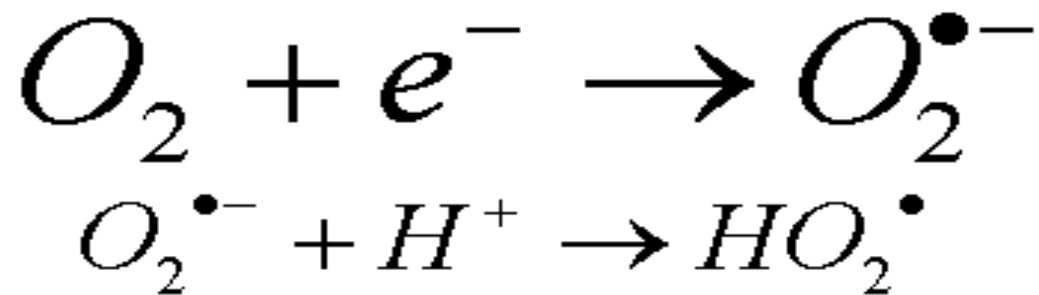
2.5. 13

Co jest źródłem energii w procesach życiowych komórek?

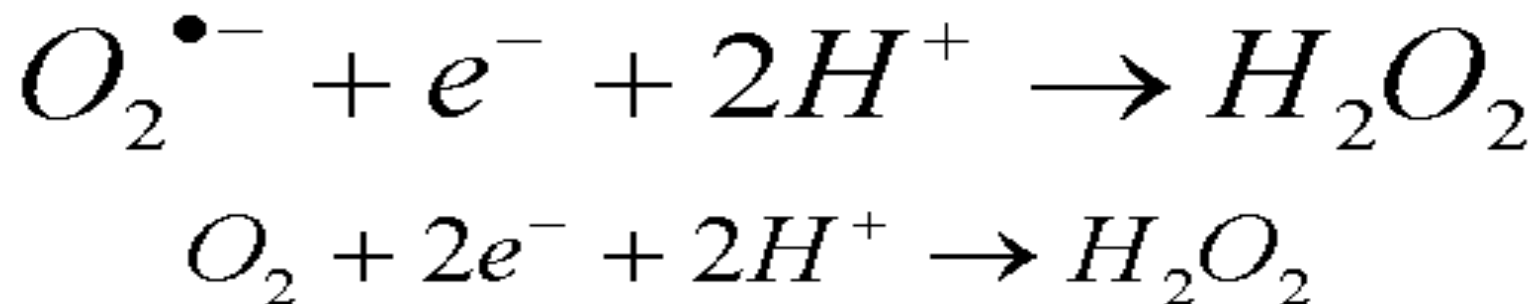
Reakcja redukcji tlenu cząsteczkowego



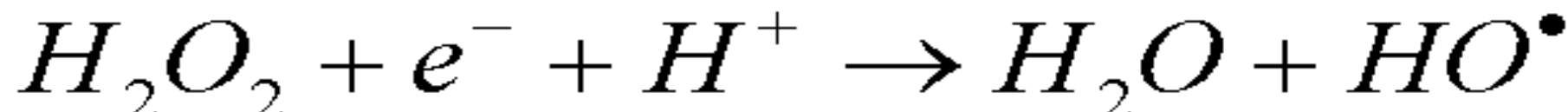
pierwszy elektron



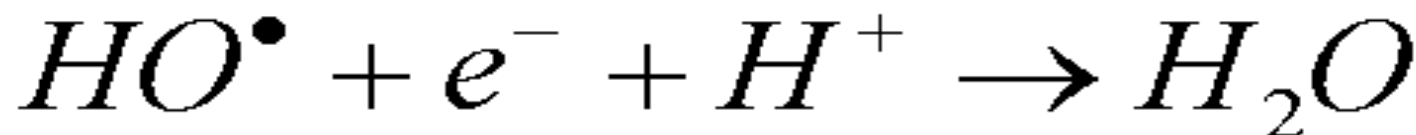
drugi elektron



trzeci elektron



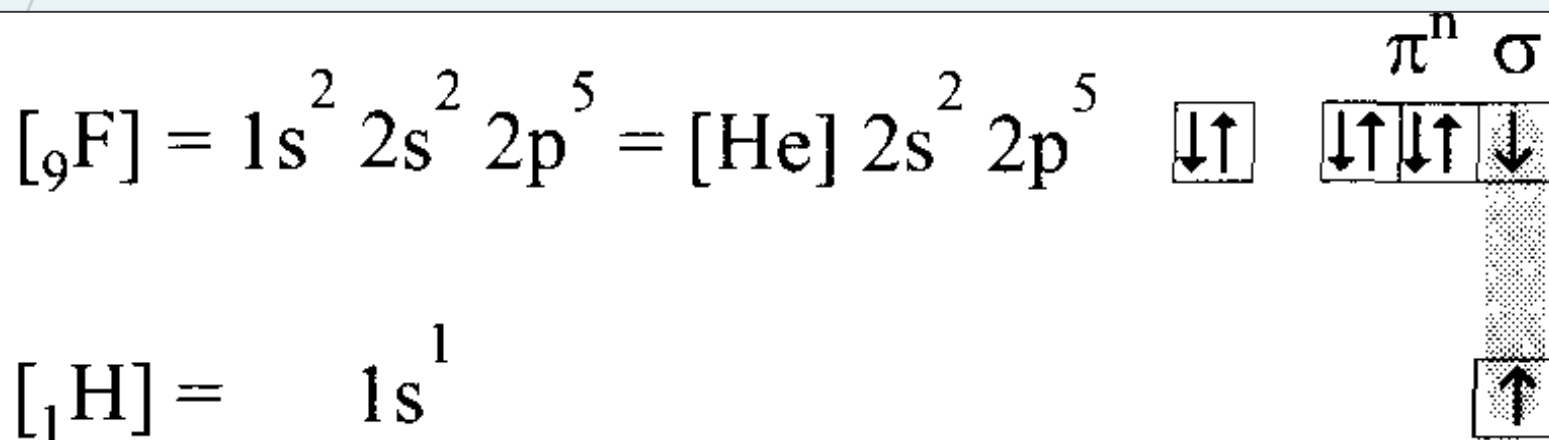
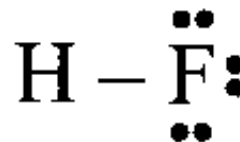
czwarty elektron

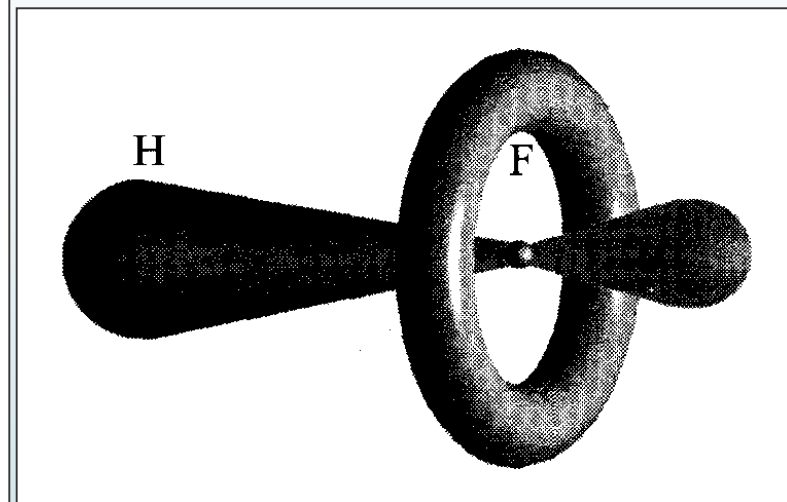
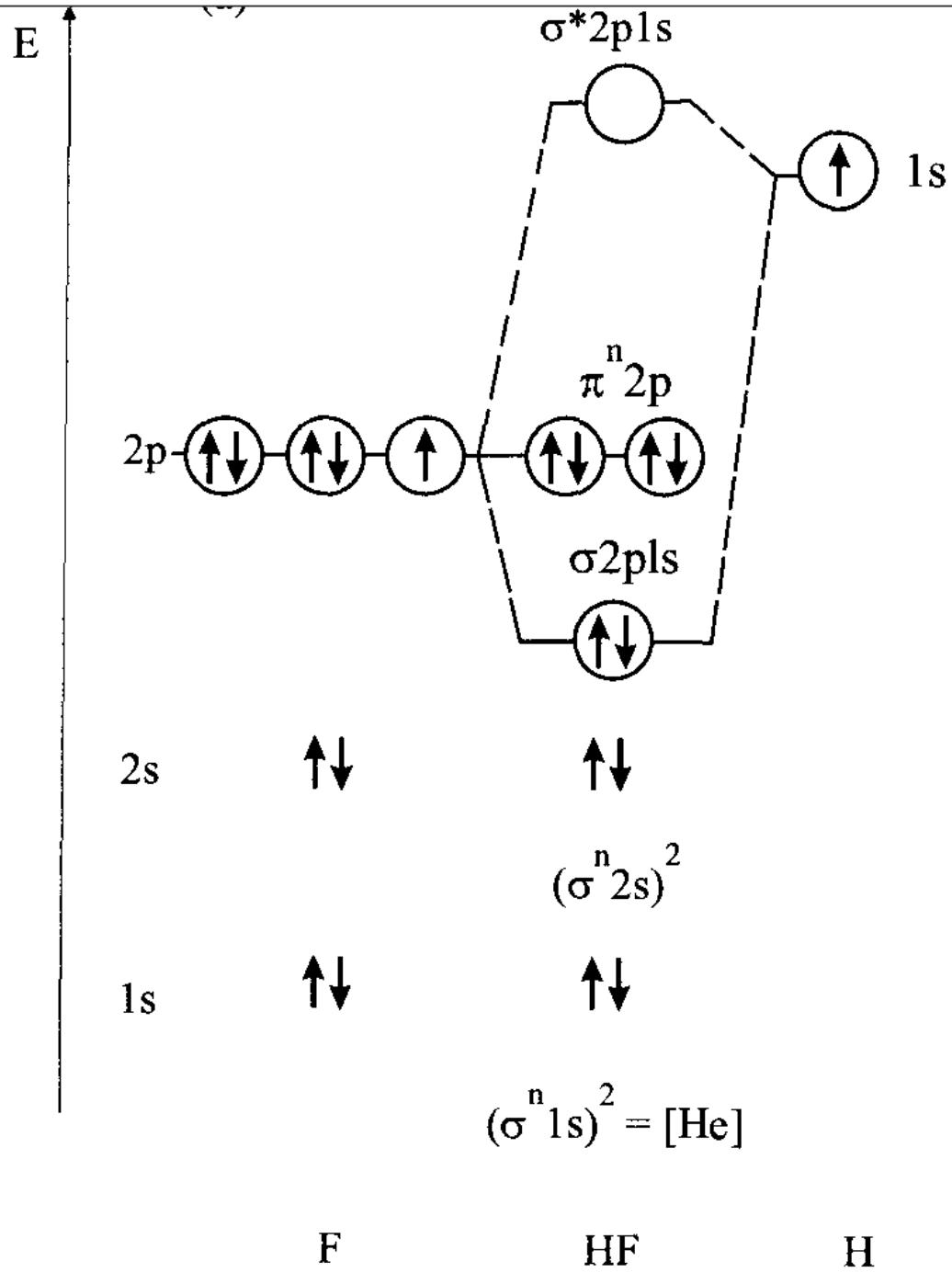


PRZYKŁAD CZĄSTECZEK HETEROATOMOWYCH

2.5. 15

CZĄSTECZKA FLUOROWODORU: HF

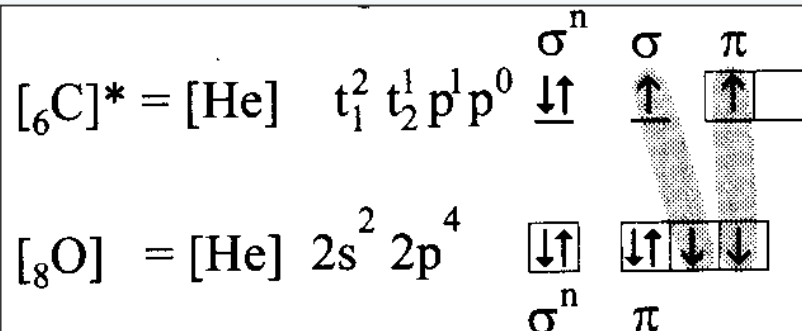
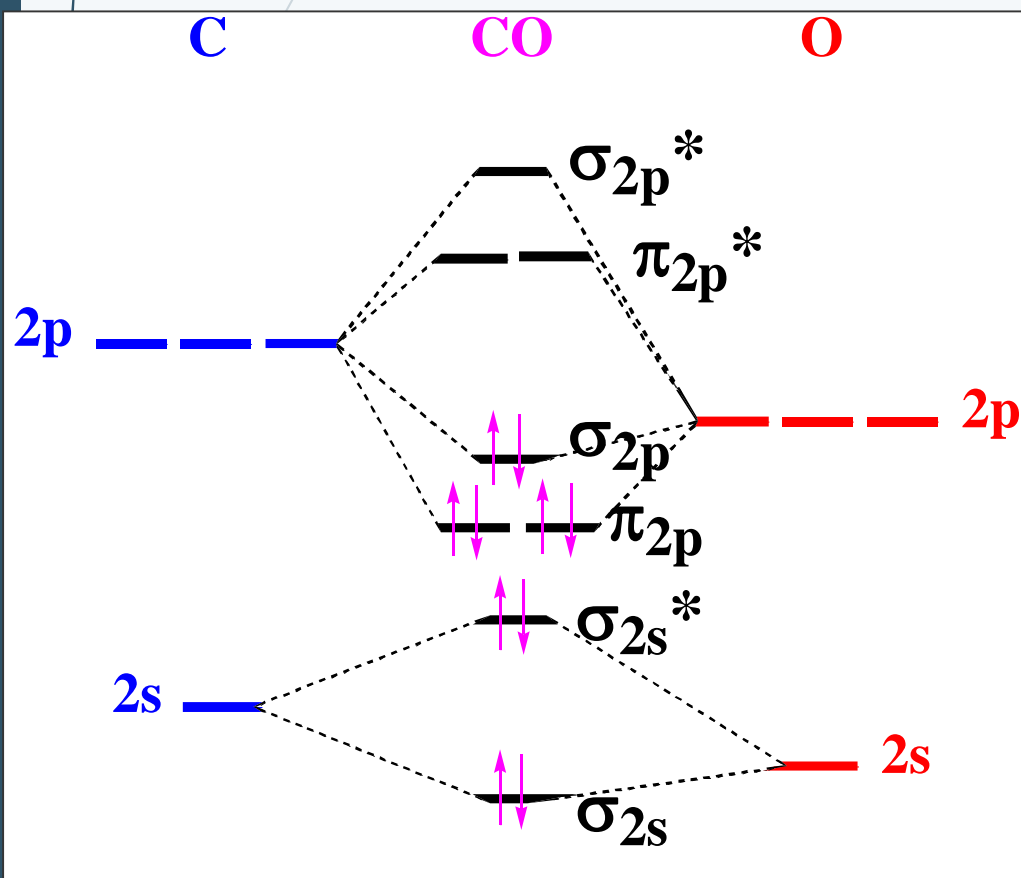
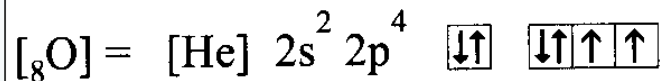
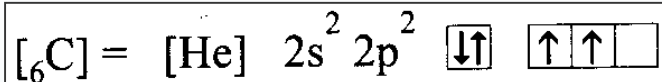
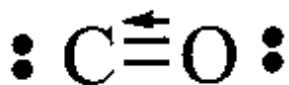




BUDOWA CZĄSTECZEK DWUATOMOWYCH

2.5. 17

CZĄSTECZKA TLENKU WĘGLA: CO



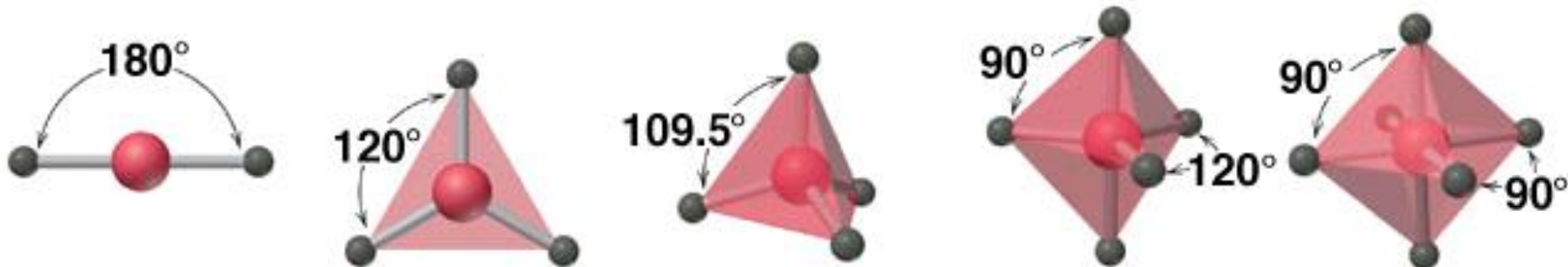
struktura o niewielkim momencie dipolowym, mimo dość znacznej różnicy elektroujemności pomiędzy atomami węgla i tlenu.

Budowa cząsteczek wieloatomowych HYBRYDYZACJA

2.5. 18

Rodzaj hybrydyzacji	Typ hybrydyzacji	Kształt cząsteczki
dygonalny	sp	liniowy
trygonalny	sp^2	trójkąt płaski
tetraedryczny	sp^3	czworościan foremny
tetragonalny płaski	dsp^2	kwadrat płaski
bipiramidalny	dsp^3	bipiramida o podstawie trójkąta
oktaedryczny	d^2sp^3	ośmiościenny
bipiramidalny	d^3sp^3	bipiramida o podstawie pięciokąta

Przestrzenne rozmieszczenie orbitali zhybrydowanych



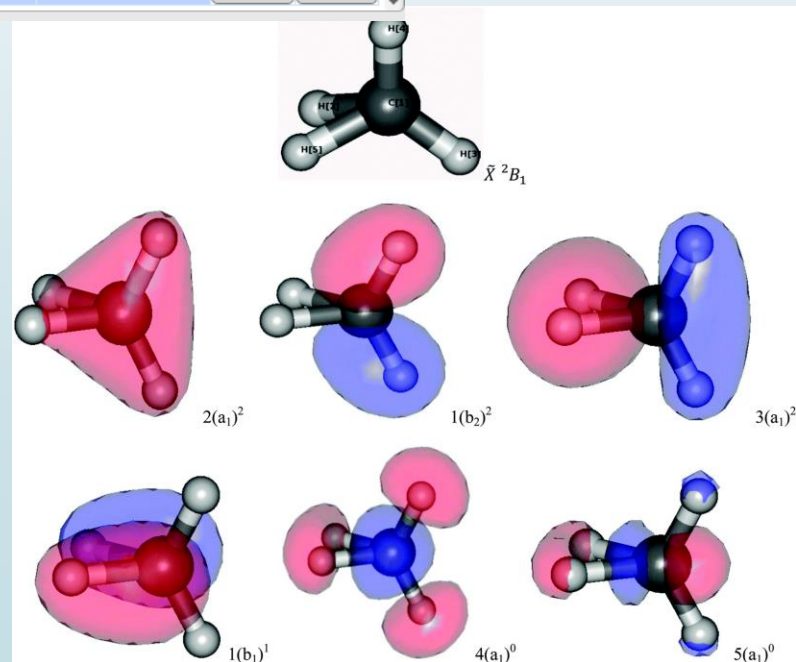
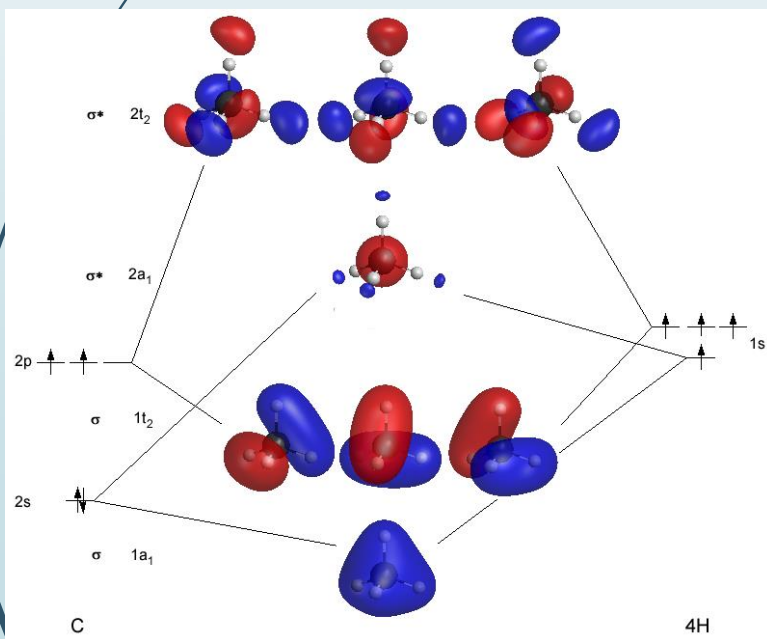
Ułomność terminu hybrydyzacja

2.5. 19

Przykład: Gęstości orbitalne cząsteczki metanu

Choose Molecular Orbital(s)

Sel.	No	Spin	Sym.	Energy[Hartr...	Deg.	Occ.	HOMO/LUMO	quick	hig...
<input type="checkbox"/>	9	ab	9a	0.1110	1	0	LUMO + 3		
<input type="checkbox"/>	8	ab	8a	0.1110	1	0	LUMO + 2		
<input type="checkbox"/>	7	ab	7a	0.1110	1	0	LUMO + 1		
<input type="checkbox"/>	6	ab	6a	0.0425	1	0	LUMO		
<input type="checkbox"/>	5	ab	5a	-0.3455	1	2	HOMO		
<input type="checkbox"/>	4	ab	4a	-0.3456	1	2	HOMO - 1		
<input type="checkbox"/>	3	ab	3a	-0.3456	1	2	HOMO - 2		
<input type="checkbox"/>	2	ab	2a	-0.6242	1	2	HOMO - 3		
<input type="checkbox"/>	1	ab	1a	-9.8756	1	2	HOMO - 4		

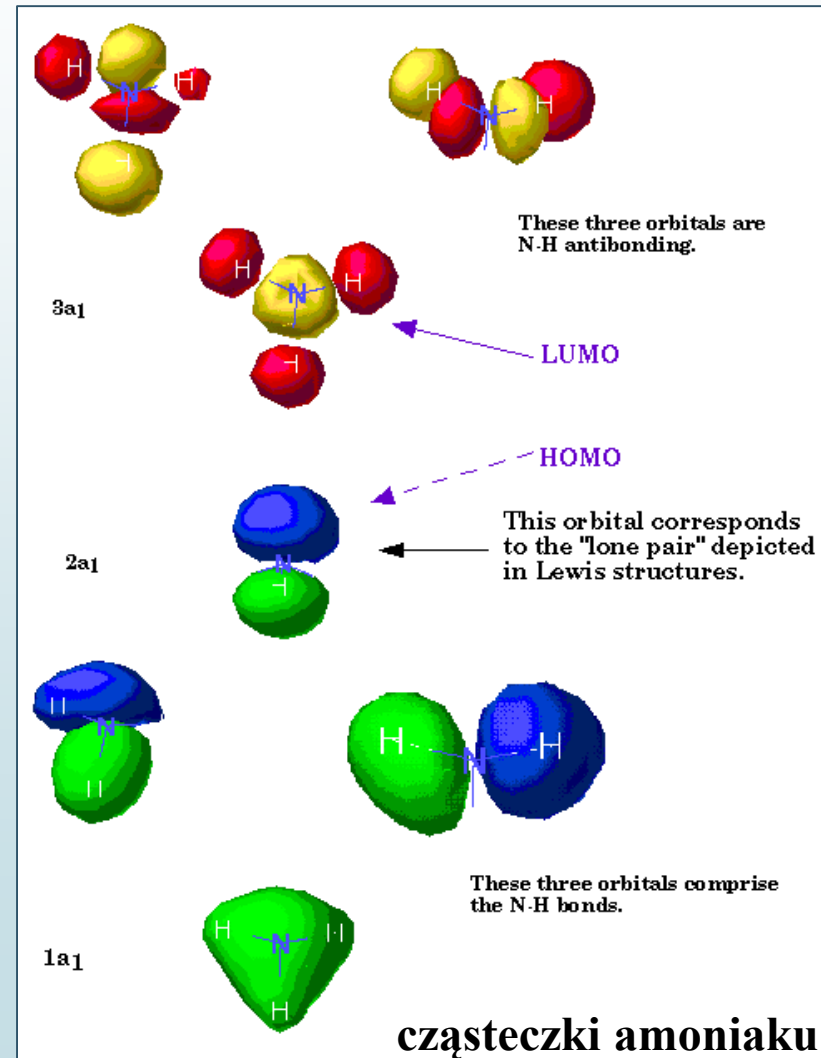
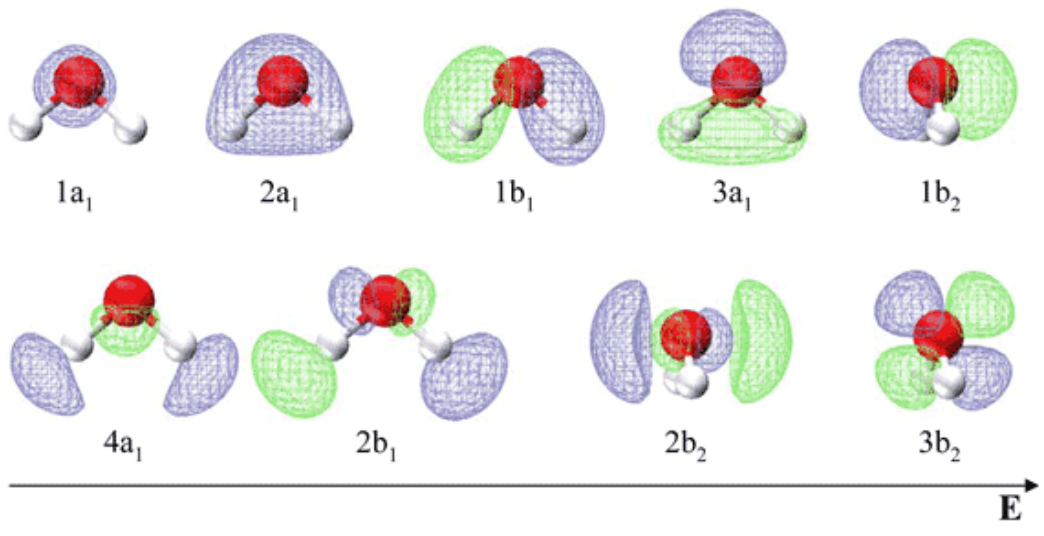


Ułomność terminu hybrydacja

2.5. 20

Przykład: Gęstości orbitalne

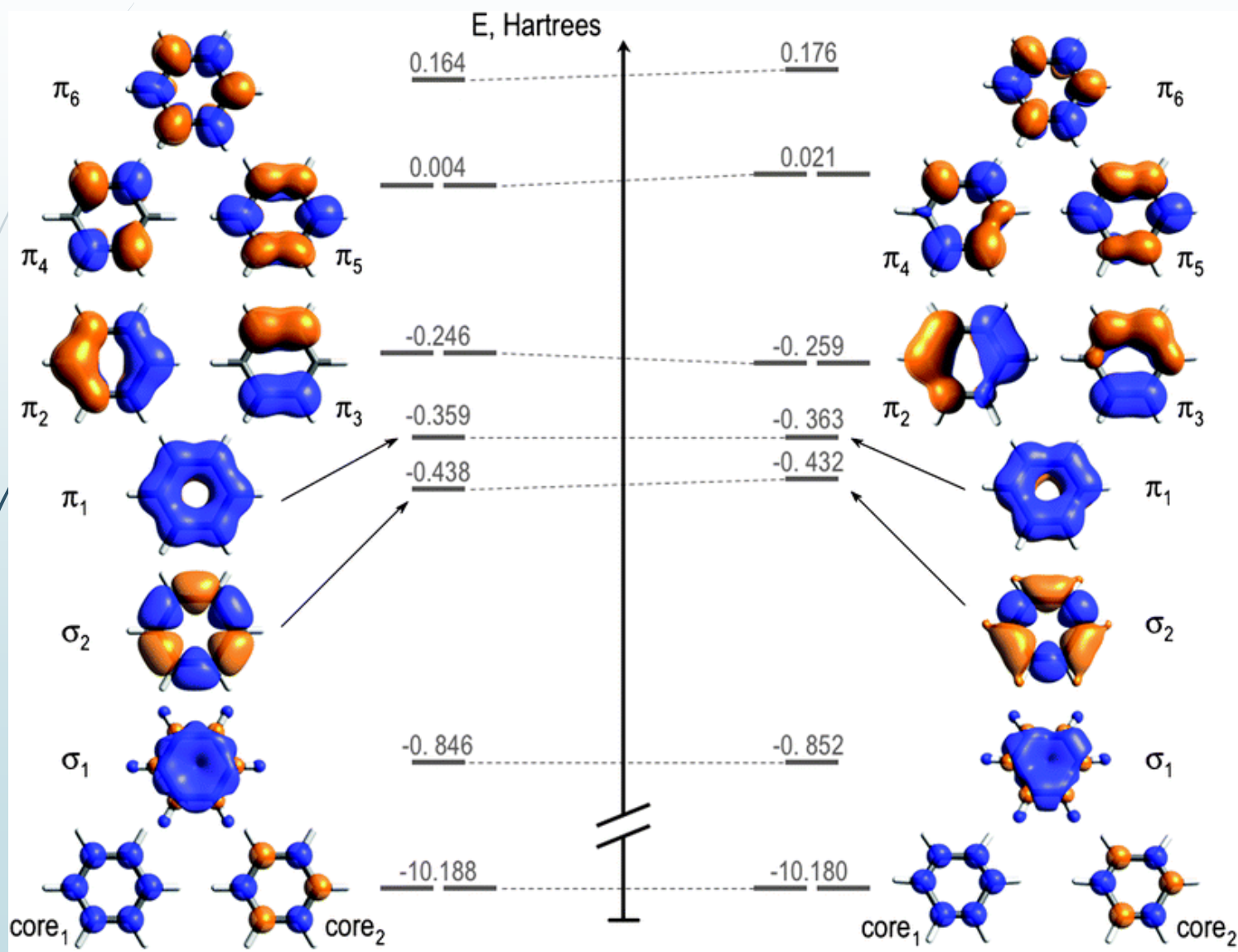
cząsteczki wody



Ułomność terminu hybrydacja

2.5. 21

Przykład: Gęstości orbitalne cząsteczki benzenu



Budowa cząsteczek wieloatomowych

2.5. 22

TEORIA VSEPR

Obliczanie liczby przestrzennej

$$L_p = \sigma PW + WPE = LH$$

σPW - liczba par elektronowych tworzących wiązanie σ i jest równa liczbie atomów B jest przyłączonych do atomu centralnego A

WPE - liczba wolnych par elektronowych atomu centralnego. Oblicza się ją odejmując od liczby elektronów walencyjnych atomu centralnego A, taką liczbę elektronów, jaka jest potrzebna do uzupełnienia konfiguracji wszystkich atomów B i dzieli się przez 2

$WPE = 1/2$ [liczby elektronów walencyjnych atomu A pomniejszona o liczbę elektronów potrzebną do uzupełnienia oktetów (lub dubletów dla wodoru) dla n atomów B]

np.: dla PCl_5 $\sigma PW = 5$, dla $COCl_2$ $\sigma PW = 3$, dla SO_4^{2-} $\sigma PW = 4$

Budowa cząsteczek wieloatomowych

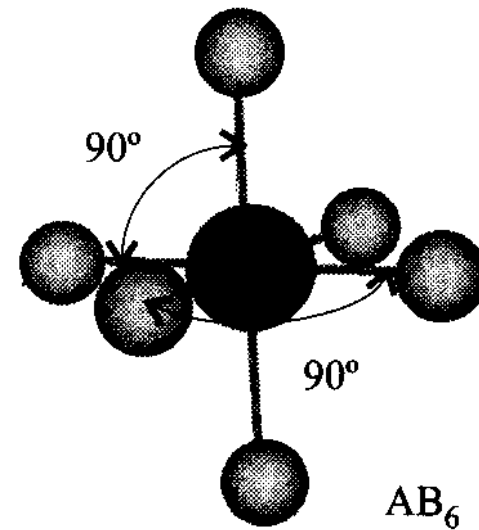
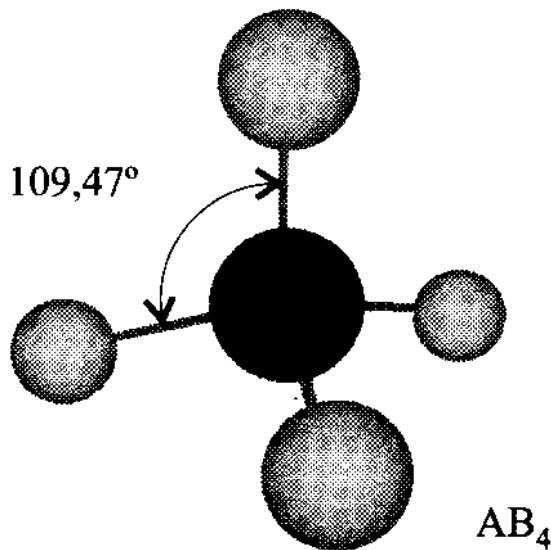
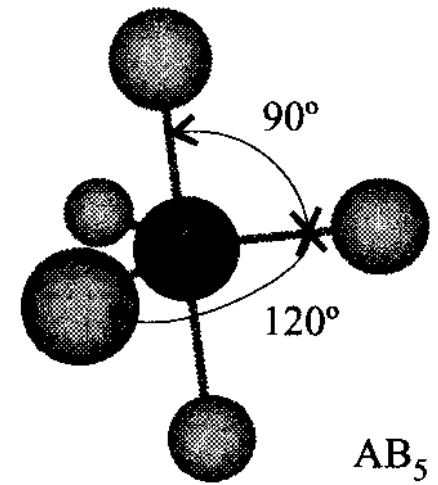
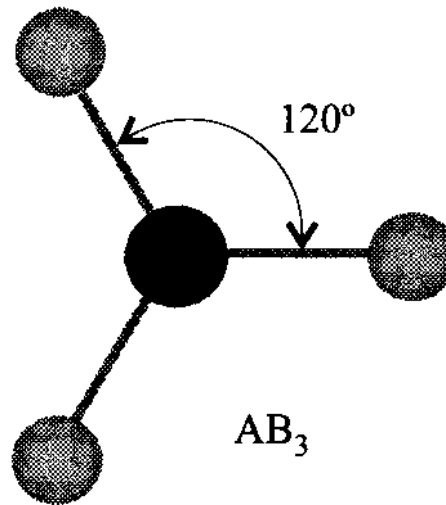
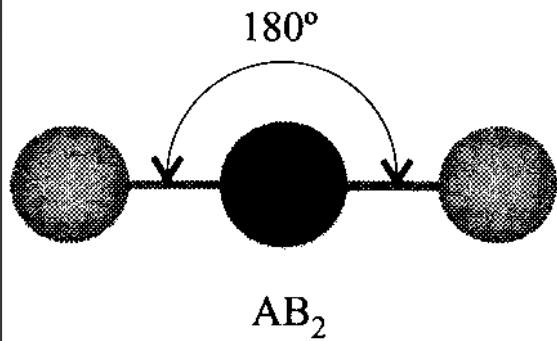
2.5. 23

Związek liczby przestrzennej z kształtem cząsteczki

Dla jonów ujemnych zwiększa się, a dla jonów dodatnich zmniejsza się liczbę elektronów walencyjnych o ładunek jonu.

Atom centralny	WPE	$L_p = \sigma PW + WPE$	Typ hybrydyzacji	Struktura cząsteczki
C w CH ₄	$\frac{1}{2}(4 - 4 \times 1) = 0$	$4 + 0 = 4$	sp ³	tetraedr
O w H ₂ O	$\frac{1}{2}(6 - 2 \times 1) = 2$	$2 + 2 = 4$	sp ³	tetraedr
N w NH ₃	$\frac{1}{2}(5 - 3 \times 1) = 1$	$3 + 1 = 4$	sp ³	tetraedr
S w SO ₂	$\frac{1}{2}(6 - 2 \times 2) = 1$	$2 + 1 = 3$	sp ²	trójkąt równoboczny
C w CO ₃ ²⁻	$\frac{1}{2}(4 - 3 \times 2 + 2) = 0$	$3 + 0 = 3$	sp ²	trójkąt równoboczny
C w CO ₂	$\frac{1}{2}(4 - 2 \times 2) = 0$	$2 + 0 = 2$	sp	liniowa

Struktury przestrzenne cząsteczek typu AB_n bez wolnych par elektronowych przy atomie centralnym.



Struktura cząsteczek w zależności od ilości wiążących i wolnych par

A - atom centralny, B - ligandy, E - wolne pary elektronowe

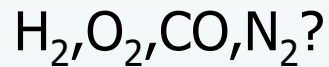
Liczba wiążących par elektronowych	Liczba wolnych par elektronowych	Kształt cząsteczki	Typ cząsteczki	Przykłady	Typ hybrydyzacji
2	0	liniowy	AB ₂	dwuatomowe: H ₂ , Cl ₂ , HF, CO ₂ , BeCl ₂ , HCN	sp
3	0	trójkąt płaski	AB ₃	BCl ₃ , SO ₃	sp ²
	1	kątowy (litery V)	AB ₂ E	SO ₂ , O ₃	
4	0	tetraedr	AB ₄	CH ₄ , CCl ₄ , SO ₄ ²⁻	sp ³
	1	piramida trygonalna	AB ₃ E	NH ₃ , H ₃ O ⁺ , PCl ₃	
	2	kątowy	AB ₂ E ₂	H ₂ O, H ₂ S, NO ₂	
	3	liniowy	ABE ₃		
5	0	bipiramida trygonalna	AB ₅	PCl ₅ , AsCl ₅	sp ³ d
	1	nieregularny tetraedr	AB ₄ E	SCl ₄ , SeCl ₄	
	2	litera T	AB ₃ E ₂	ClF ₃ , ICl ₃	
	3	liniowy	AB ₂ E ₃	ICl ₂	
6	0	oktaedr	AB ₆	SF ₆ , PCl ₆	sp ³ d ²
	1	piramida kwadratowa	AB ₅ E	BrF ₅ , IF ₅	
	2	kwadrat	AB ₄ E ₂	BrF ₄	
7	0	bipiramida pentagonalna	AB ₇	IF ₇	sp ³ d ³
	1	nieregularny oktaedr	AB ₆ E	IF ₆	



Przykładowe pytania

2.5. 26

Co sądzisz o momentach dipolowych cząsteczek:



- A.** są równe zero
- C.** są różne od zera

- B.** są równe zero dla H_2 i O_2
- D.** są równe zero dla $\text{O}_2, \text{H}_2, \text{N}_2$.

Odp.D

Jon NH_4^+ ma kształt:

- A.** tetraedyczny
- C.** trygonalny

- B.** liniowy
- D.** żaden z powyższych

Odp.A

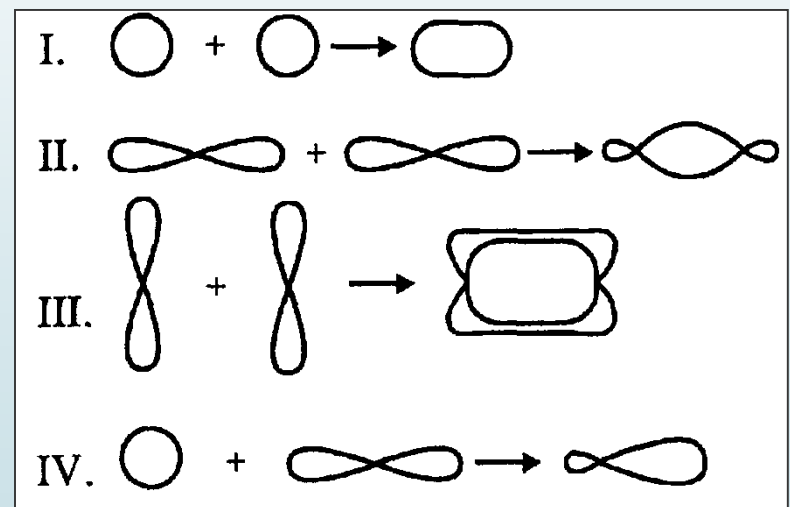


Przykładowe pytania

2.5. 27

Rysunki obrazują powstawanie orbitali molekularnych:

- A. typu σ - I, II, III i typu π - IV
- B. typu σ - I, III, IV i typu π - II
- C. typu σ - II, III, IV i typu π - I
- D. typu σ - I, II, IV i typu π - III



odp. D

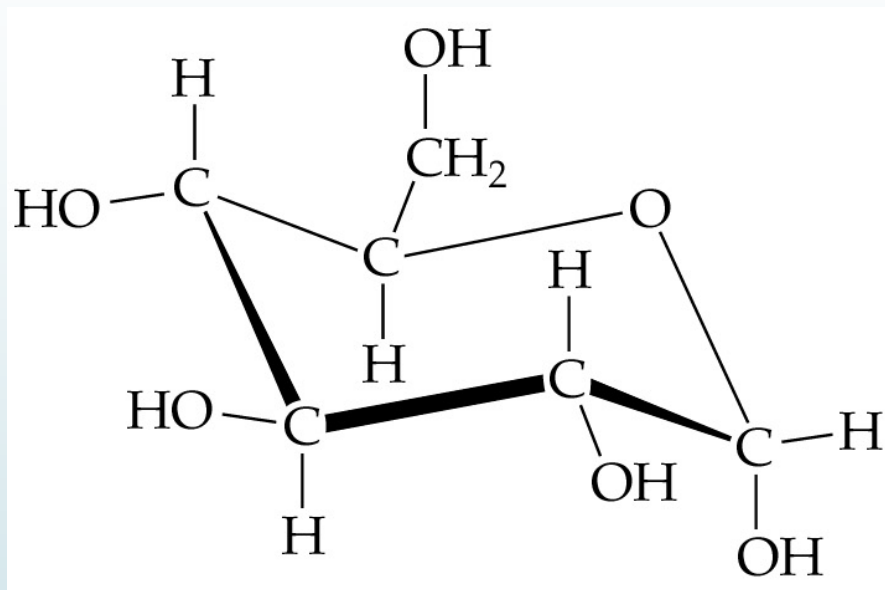


Przykładowe pytania

2.5. 28

W poniższej cząsteczce cukru prostego wskaź ilość atomów węgla o liczbie przestrzenne 4 (hybrydyzacja sp^3)

- A. 2
- B. 3
- C. 4
- D. 5
- E. 6



Które z poniższych zdań jest prawdziwe:

- A. wiązania C - C jest krótsze od wiązania C = C
- B. wiązanie C = C jest dłuższe od wiązania C \equiv C
- C. promień jonu Mg^{2+} jest większy od promienia atomu Mg
- D. promień atomu Cl jest mniejszy od promienia jonu Cl-

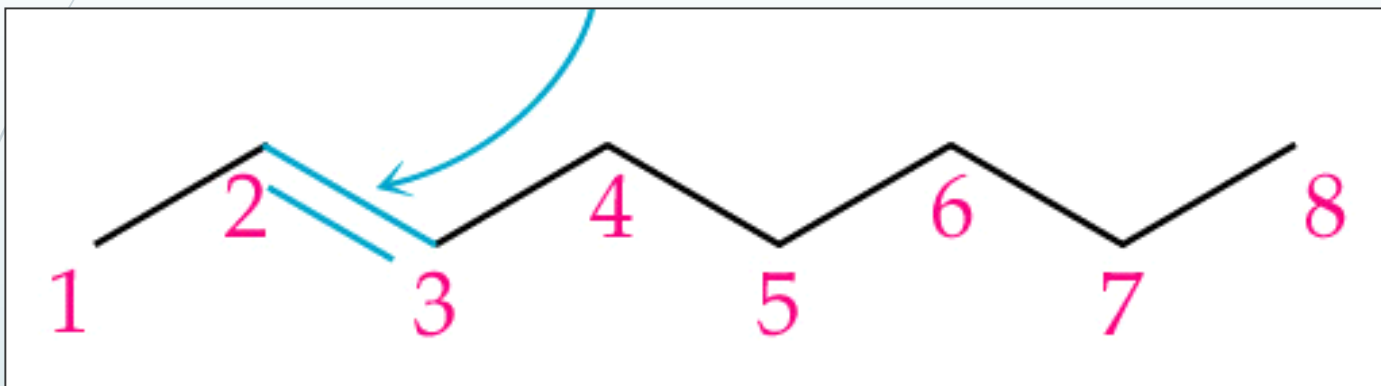
odp. E

odp. B, D

Przykładowe pytania

2.5. 29

Jaka jest liczba przestrzenna atomów 2 i 3 dla poniższego związku?



- A. 1
- B. 2
- C. 3
- D. 4
- E. 5

odp. D