Molekul vodonika

Talasne funkcije

Molekul vodonika koji se sastoji od dva protona i dva elektrona spada u jedan od najprostijih (slika niže). Njegova kvantno-mehanička teorija je relativno prosta. Označavaćemo protone sa i , a elektrone sa i . Ako rastojanje među protonima nije veliko, tada se talasne funkcije atoma koji ga čine, značajno prekrivaju. To znači, da svaki od elektrona pripada obojici atoma, tj, među atomima proizilazi razmena elektronima. Zahvaljujući tome nastaju ***sile razmene*** koje i čine kovalentnu vezu.

Zadatak teorije se sastoji u izračunavanju energije uzajamnog dejstva u funkciji rastojanja između jezgara. Ako ta energija, u zavisnosti od rastojanja među protonima ima minimum, tada ovaj sistem od dva protona i dva elektrona obrazuju stabilan sistem. Energija interakcije ovog sistema se može izračunati pomoću teorije perturbacija.

U svojstvu neperturbovanog stanja prirodno je uzeti osnovna stanja dva atoma vodonika koja ne dejstvuju međusobno:

,

gde je talasna funkcija elektrona 1 u polju jezgra , a talasna funkcija elektrona 2 u polju jezgra . Rastojanje između jezgara je . Očigledno, talasna funkcija dva elektrona se može predstaviti kao . Uračunavajući identičnost elektrona, oni mogu da zamene mesta a da se ništa u sistemu ne dogodi. Prema tome je takođe talasna funkcija. Dalje, iz identičnosti elektrona talasna funkcija mora biti ili simetrična ili antisimetrična. Na taj način u svojstvu neperturbovanih funkcija sistema od dva elektrona možemo uzeti sledeće:

.

Energija interakcije se sastoji iz četiri dela:

gde je energija interakcije između protona, energija interakcije između elektrona; energija interakcije elektrona 1 sa protonom , energija interakcije elektrona 2 sa protonom .

Treba primetiti da su energije interakcije elektrona 1 sa protonom i elektrona 2 sa protonom , uračunati pri nalaženju funcije neperturbovanog stanja.



Zato je energija , energija perturbacije za stanje koje se opisuje neperturbovanom talasnom funkcijom . Ako se neperturbovano stanje opisuje talasnom funkcijom , to se energija perturbacije dobija zamenom elektrona, tj,

.

Energija interakcije

Razmatrajući energiju interakcije kao prvu popravku energije sistema po teoriji perturbacija, može se napisati:

gde je , jer je talasna funkcija realna. Pod operatorom u gornjem izrazu, treba podrazumevati za kombinaciju i izraz za kombinaciju . Na taj način, uzimajući za talasnu funkciju ,

ili

može se pisati

U poslednjem članu postoji mešoviti proizvod i na prvi pogled nije jasno koji izraz za energiju perturbacije treba uzeti. Ali, nije teško videti da se mogu uzeti i i jer se dobija isti rezultat.

Uvedimo sledeće označavanje

Talasne funkcije i se odnose na različite atome čija jezgra su u različitim tačkama prostranstva. Zato za njih ne važi teorema o ortonormiranosti. Isto važi i za i . Smatrajući da su talasne funkcije i normirane na 1, vidimo, ako je rastojanje među jezgrima 0, tj, , tada je =1.

Ako se rastojanje među jezgrima uvećava, stepen prekrivanja funkcija i se umanjuje. Odavde zaključujemo da je gornji integral uvek mnogo manji od jedinice, isključujući slučaj za male vrednosti , kada je blizu jedinice.

Dakle, energiju perturbacije možemo predstaviti kao:

.

Kao što se i očekivalo, energije interakcije za simetrične i antisimetrične funkcije su različite. Pri razmatranju atoma helijuma i Paulijevog principa je bilo pokazano da je totalna talasna funkcija elektrona sa uračunavanjem spina mora uvek biti antisimetrična. Prema tome, izrazu

dobijenom za simetričnu prostornu funkciju, odgovara antisimetrična spinska funkcija. To znači da je energija interakcije, kada su spinovi dvaju elektrona molekula vodonika antiparalelni. Analogno se pokazuje da je energija interakcije kada su spinovi dvaju elektrona molekula vodonika paralelni (slika niže).

Interpretacija veličina i je analogna interpretaciji i kod atoma helijuma. Veličina predstavlja energiju Kulonovske interakcije naelektrisanja molekula vodonika. Veličina se javlja kao rezultat razmene elektrona među stanjima i naziva se ***energija razmene.*** Upravo je taj član odgovoran za pojavu privlačnih sila i obrazovanje molekula.



**Zavisnost potencijalne energije u funkciji od rastojanja među jezgrima atoma u molekulu vodonika**

Kvalitativno objašnjenje zavisnosti potencijalne energije od rastojanja može biti sledeće:

Na vrlo velikim rastojanjima, funkcije se praktično ne prekrivaju a veličine i su jako velike. Prema tome, veličine i su vrlo male tj,

.

Pri srednjim rastojanjima među nukleusima, tj, rastojanjima reda veličine Borovskog radijusa elektrona, prekrivanje talasnih funkcija je značajno. Prema tome, gustina elektronskog oblaka razmene je velika. Osim toga ta velika gustina razmene se nalazi u nekim tačkama blizu nukleusima i zahvaljujući sili privlačenja ka njima daje veliki negativni udeo u integral . Srednje rastojanje različitih delova gustine razmene jednih od drugih je veliko i prema tome pozitivni udeo od njih je mali. Veliko je takođe i srednje rastojanje među jezgrima. Na taj način, za srednja rastojanja veličina je negativna.

Na slici šematskog prikaza molekula vodonika se takođe vidi da je pri zadatom , srednje rastojanje elektronskog oblaka 1 od jezgra i elektronskog oblaka 2 od jezgra , veće od srednjeg rastojanja gustine razmene od jezgara. Osim toga, rastojanje među elektronskim oblacima je takođe relativno veliko. To znači da je brojno znatno manje od . Prema tome, pri srednjim rastojanjima među jezgrima je negativno a pozitivno tj, doprinosi privlačenju među atomima a odbijanju.

Za vrlo mala rastojanja talasne funkcije prekrivaju jedna drugu vrlo jako. U tom slučaju glavni doprinos u energiji interakcije je usled Kulonovskog odbijanja jezgara atoma, jer energija u oba slučaja ima red veličine . Na taj način za mala rastojanja javlja se da je ukupan efekat odbijanje među jezgrima kako za tako i za .

Kao zaključak možemo navesti da se energija interakcije ponaša kao na slici više, ako u svojstvu nulte energije uzmemo energiju na beskonačnosti.

***Znači da se dva atoma vodonika privlače i čine molekul kada su im spinovi antiparalelni. U tom slučaju energija interakcije ima minimum pri rastojanju između protona reda veličine Borovog radijusa. U slučaju paralelnih spinova među atomima dejstvuju sile odbijanja na svim rastojanjima i obrazovanje molekula je nemoguće.***

**Ravnotežno rastojanje**: je rastojanje među atomima u molekulu pri kom ukupna energija ima minimum a odgovarajuća energija se zove ***energija disocijacije molekula vodonika.*** Iz eksperimentalnih podataka imamo da je to rastojanje a energija disocijacije .

**Ukupan spin molekula:** Pošto je obrazovanje molekula vodonika moguće samo pri antiparalelnim spinovima elektrona, ukupan spin molekula vodonika mora biti jednak nuli. Odavde sledi i da ukupni magnetni momenat molekula vodonika mora biti jednak nuli. Zato se molekuli vodonika ponašaju kao diamagnetici što je potvrđeno i eksperimentom.

Valentnost

Na primeru molekula vodonika se vidi da je objedinjavanje atoma u molekul moguće samo u tom slučaju ako se elektron jednog atoma razmeni sa elektronom drugog atoma koji ima antiparalelni spin. Na taj način pitanje se svodi na to, ima li elektrona u atomu sa slobodnim spinovima. Ako su svi elektroni atoma objedinjeni u parove sa antiparalelnim spinovima, to ni jedan od elektrona ne može da se razmeni sa elektronom drugog atoma sa antiparalelnim spinom i prema tome, nemoguće je obrazovanje molekula. Kao primer, možemo navesti plemenite gasove, gde su svi elektroni upareni sa elektronima sa antiparalelnim spinom, tako da je ukupni spin atoma jednak nuli. Zato atomi plemenitih gasova nemaju niti jednog elektrona sa slobodnim spinom koji bi se mogao razmeniti sa elektronom drugog atoma sa antiparalelnim spinom. Tako se i objašnjava zašto se plemeniti gasovi zovu *inertni.*

**Valentnost:** Valentnost atoma u odnosu na vodonik se određuje brojem elektrona sa slobodnim spinovima koji mogu da se razmene sa odgovarajućim brojem elektrona drugog atoma. Elektroni spoljašnje ljuske mogu obrazovati različite konfiguracije. Valentnost za različite konfiguracije može biti različita. Valentnost atoma u pobuđenom stanju se može razlikovati od valentnosti u osnovnom stanju. Obično se pod pojmom valentnost podrazumeva osnovno stanje.

**Metod valentnih veza:** U pitanjima obrazovanja složenih molekula preglednu sliku daje metod valentnih veza koji se bazira na sledećim pretpostavkama: Molekul je u celini predstavljen kao sistem odvojenih atoma, tj, jasno odvojenih jedan od drugog. Odvojeni atomi su povezani među sobom dobro lokalizovanim kovalentnim vezama. Svaku kovalentnu vezu obezbeđuju dva elektrona koji pripadaju različitim atomima i imaju antiparalelne spinove. Elektroni koji čine kovalentnu vezu većinu svog vremena borave između tih atoma. Zato i svaku valentnu vezu možemo razmatrati odvojenu jedne od druge, a orbitale svakog od atoma koji obezbeđuju kovalentnu vezu, se smatraju identičnim orbitalama izolovanih atoma. Samo pri kvantitativnom računu se mora voditi računa o modifikaciji orbitala, uzrokovanim različitim vidovima interakcije.

Struktura molekula

**Metod molekularnih orbitala:** Dakle, potpuno suprotan pristup od metode valentnih veza, ovaj metod od početka razmatra molekul kao sistem čiji spoljašnji elektroni pripadaju čitavom molekulu a ne orbitalama odvojenih atoma. Opstanak molekula se obezbeđuje koncentracijom elektronske gustine među atomima. Obrazovanje kovalentne veze sa stanovišta metode molekularnih orbitala se svodi na to da se pri prekrivanju atomskih orbitala, u slučaju suprotno orijentisanih spinova, gustina elektronskog oblaka uvećava, a pri istom smeru spinova i po Paulijevom principu to se ne događa.

**Predstavljanje strukture metodom valentnih veza:** Svaki par elektrona koji obrazuju kovalentnu vezu se predstavljaju linijom koja spaja odgovarajuće atome. Na primer, analiza spoljašnjih ljuski pokazuje da u atomima molekula i u obrazovanju kovalentne veze učestvuje jedan, dva i tri para elektrona, tako da strukturne formule izgledaju .

U skladu sa Hundovim pavilom u elektronskoj podljusci sa datim momentom impulsa, maksimalan mogući broj elektrona ima istu orijentaciju spina. Zato, u nepopunjenoj ljusci uvek ima nesparenih elektrona koji mogu da učestvuju u obrazovanju kovalentnih veza. Ti elektroni se nazivaju *valentni elektroni.* Odavde zaključujemo da svi elementi sa nepopunjenim spoljnim elektronskim ljuskama mogu obrazovati hemijska jedinjenja. Posmatrajmo naprimer, kako se obrazuju strukture . Struktura atoma vodonika je , i zato je struktura molekula vodonika . U atomu kiseonika je struktura . U spoljašnjoj nepopunjenoj ljusci ima četiri elektrona u stanju. Ljuska ima tri različita koordinatna stanja koja se karakterišu sa . Tri elektrona popunjavaju ta stanja sa istim pravcem i smerom spina, a jedan mora biti sa antiparalelnim spinom i kao rezultat imamo dva elektrona sa istim pravcem i smerom spina koji mogu sa elektronima drugih atoma da čine kovalentnu vezu. Valentnost atoma kiseonika je 2, a struktura molekula kiseonika je . Elektronska konfiguracija atoma azota je . Zato u koordinatnim stanjima u spoljašnjoj ljusci imamo tri elektrona sa paralelnim spinovima, sposobnih za sparivanje. Valentnost atoma azota je 3, a struktura molekula azota je .

**Usmerenost valentnosti atoma.** Na osnovu analize eksperimentalnih podatala A.M. Butlerov je 1861. uveo pojam o strukturi molekula u smislu određene prostorne raspodele atoma koji ga čine. Na primer u molekulu atomi su raspoređeni na pravoj liniji a u molekuli vode-su u uglovima trougla. Da bi objasnili tu prostornu raspodelu neophodno je dopustiti da hemijska valentnost atoma ima određenu usmerenost.

Usmereni karakter valentnosti je uslovljen neizotropnom raspodelom gustine elektronskog oblaka valentnih elektrona atoma. Valentna veza se obrazuje u tom pravcu atoma u kome je gustina elektronskog oblaka maksimalna.

Svakako, o pravcu valentne veze se može govoriti samo tada kada imamo minimum dva valentna elektrona i zadatak se sastoji u određivanju uglova između pravaca valentnosti.

Na primer kod atoma azota u ljusci postoje tri nesparena elektrona, koji se nalaze u tri različita koordinatna stanja . Uglovna raspodela tih elektrona se određuje kvadratom modula talasnih funkcija, normiranih na jedinicu sfere jediničnog radijusa. Pomoću sobstvenih uglovnih funkcija rotatora znamo da su maksimalne gustine verovatnoće uglovnih raspodela tih elektrona obrazuju među sobom uglove od . Jasno je da i valentne veze, koje se ostvaruju odgovarajućim elektronima, zaklapaju jedna sa drugom pravi ugao. Taj zaključak se potvrđuje i eksperimentom. Na primer, molekul ima piramidalnu građu a uglovi među kovalentnim vezama su . Razlika od pravog ugla se objašnjava uzajamnim odbijanjem atoma vodonika.

Kod atoma kiseonika u ljusci se nalaze dva valentna elektrona koja se nalaze u stanjima, analognim stanjima kod atoma azota, pa tako i treba očekivati da zaklapaju prave uglove među sobom. To se potvrđuje eksperimentom. Tako na primer kod molekula , veze zaklapaju međusobno ugao od .

**Hibridizacija:** Prostorna struktura atomskih orbitala u kombinaciji sa predstavom o valentnim vezama omogućuje u mnogim slučajevima zadovoljavajuću predstavu o strukturi i molekulskim orbitalama. Ali prilikom obrazovanja hemijskih jedinjenja dolazi do prestrojavanja elektronskih ljuski atoma i zato se valentna stanja atoma u hemijskom jedinjenju razlikuju od stanja izolovanih stanja, ponekad značajno. Na primer, izolovani atom ugljenika, čija je konfiguracija , je dvovalentan. U hemijskim jedinjenjima on nastupa kao četvorovalentan atom i obrazuje takva jedinjenja kao itd. To se objašnjava na taj način, pošto se energije i stanja malo razlikuju, što se pri obrazovanju hemijskog jedinjenja takođe obrazuje i superpozicija stanja, koje sada ima četiri valentna elektrona. Ta pojava se zove *hibridizacija orbitala.*

**Višestruke veze među atomima:** Među atomima postoje višestruke veze koje nisu sve ekvivalentne. Na primer, kod azota dejstvuje trostruka veza koja se piše u obliku . Ali, valentne veze kod atoma azota usmerene pod , jedna u odnosu na drugu i trojna veza se ostvaruje na sledeći način: Liniju koja prolazi kroz atome ćemo obeležiti sa i duž nje je usmerena jedna valentna veza. Elektroni koji obezbeđuju tu vezu se nazivaju *elektronima.* Veza obično nastaje kao rezultat prekrivanja elektronskih gustina tih elektrona. Druge dve veze nastaju prekrivanjem elektronskih gustina koje imaju maksimume duž i pravca. Odgovarajući elektroni se nazivaju *elektronima.* Na taj način trostruku vezu u molekulu azota čine jedna veza i dve veze.