MOLEKULI

***Mada se molekuli sastoje od električno neutralnih atoma, sile koje održavaju atome zajedno su po svojoj prirodi elektromagnetske. Teorijsko razmatranje građe molekula, njihovog energetskog spektra,električnih i magnetnih svojstava, interacije sa elektromagnetnim poljem itd, se u principu ne razlikuje od odgovarajućih pitanja vezanih za atome. Ali u teoriji molekula se koriste mnogi modeli, pojmovi, metodi računanja itd., koji su specifični za molekule i ne sreću se u teoriji atoma.***

Dvoatomski molekul

* Zašto neutralni atomi formiraju molekule i koja je priroda sila veze u molekulu?
* Koja je unutrašnja energetska struktura u molekulu, koja ne zavisi samo od raspodele elektrona u atomima nego i od pozicije i kretanja nuklearnih jezgara­­?
* Kako se hemijske reakcije i prema tome biološki procesi mogu objasniti na molekulskom nivou?

*Rekapitulacija:*

Prosti način dobijanja Šredingerove jednačine

Talasna jednačina

Pri harmonijskoj zavisnosti talasne funkcije od vremena dobijamo

 jednačinu Helmholca koja na univerzalan način opisuje kordinatnu zavisnost karakeristika harmonijskih talasa. Ovde je ⍵ konstantno i može se primeniti za de Broljeve talase koji karakterišu česticu u potencijalnom polju gde je

Iz imamo

 dobijamo stacionarnu Šredingerovu jednačinu.

Šredingerova jednačina zavisna od vremena

Predstavimo talasnu funciju zavisnu od vremena u obliku

gde smo rekli da je rešenje stacionarne Šredingerove jednačine

Diferencirajući po talasnu jednačinu, dobićemo očiglednu jednakost

I tako dobijamo konačno

*Šredingerovu jednačinu zavisnu od vremena*

Najprostiji slučajevi kretanja mikročestica

***Karakter energetskog spektra čestica se u prvom redu određuje oblašću kretanja-za konačnu oblast on je diskretan, za beskonačnu-neprekidan. Spektar drugih dinamičkih promenljivih takođe zavisi od oblasti njihove promene. Potencijalna barijera za mikročesticu ne predstavlja nesavladivu prepreku.***

Slobodno kretanje čestice

***Spektar energije slobodne čestice je neprekidan.***

Čestica u beskonačno dubokoj potencijalnoj jami



Granični uslov daje Iz graničnog uslova sledi da je , . Ovaj uslov kvantuje kretanje čestice. Iz sledi izraz za energetske nivoe

Ova formula pokazuje da postoji neka minimalna energija koja nije jednaka nuli

koja odgovara osnovnom stanju kretanja čestice. Talasna funkcija tog stanja je

Uslov normiranja talasne funkcije daje:



***Energetski nivoi i sopstvene funkcije čestice u potencijalnoj jami sa beskonačno visokim zidovima***

1. ***Sopstvene funkcije kao stojeći talasi b) gustina verovatnoće nalaženja čestice u prostoru***

*Jedno dimenziona jama konačne dubine*



Jednačina Šredingera u oblastima i ima oblik

**Slučaj**

Rešenja u različitim oblastima se mogu zapisati na sledeći način

Iz uslova sledi da je , a uslov neprekidnosti talasnih funkcija i njenih izvoda

 i

daju izraze za koefijente i

.

Ovi uslovi se uvek mogu ispuniti. Zato u slučaju , spektar energija je kontinualan , čestica pri svom kretanju nije lokalizovana u određenom prostoru.

**Slučaj**

Šredingerova jednačina u oblasti II tada glasi:

U oblasti *I* rešenje je nepromenjeno a u oblasti *II* glasi:

Pošto talasna funkcija svuda mora biti konačna a neograničeno raste za to koeficijent u gornjoj formuli mora biti jednak nuli. Iz uslova neprekidnosti talasnih funkcija i njihovih izvoda sledi:

Ako podelimo drugu jednačinu sa prvom, dobijamo uslov za kvantovanje energije:

Da bi grafički rešili ovu jednačinu pogodno ju je transformisati kao:

Jedan od načina rešavanja ove transcedente jednačine je grafičko kao što je prikazano na slici ispod. Treba primetiti da se u svojstvu rešenja ne uzimaju sve tačke preseka prave sa sinusoidom

, već samo te koje su saglasne sa znakom u jednačini t.j, tačke preseka u parnim četvrtinama.



Tim vrednostima kojih ima konačan broj, odgovaraju energije:

Na taj način u potencijalnoj jami konaćne dubine ima konačan broj sopstvenih vrednosti energija.

Ako je dubina jame suviše mala, može se desiti da ne postoji ni jedna sopstvena vrednost energije, tj, stacionarno kretanje čestice u konačnoj oblasti ne postoji.

U klasičnoj mehanici pri , čestica ne može prodreti u oblast U kvantnoj mehanici sve je drugačije. Talasna funkcija pri ima oblik

Ova funcija brzo opada pri udaljavanju od tačke na stranu uvećavanja ali nije jednaka nuli za

 . To znači da postoji neka verovatnoća da se čestica sa energijom nađe u oblasti Taj efekat objašnjava važnu kvantnu pojavu-***prolaženje mikročestice kroz potencijalnu barijeru.***

Tipovi hemijskih veza

Pri razmatranju molekula, pre svega se javlja pitanje o prirodi sile koja drži zajedno neutralne atome koji obrazuju molekul, tj., obezbeđuju među sobom vezu atoma. One se nazivaju ***hemijske veze.*** Postoje dva tipa hemijskih veza : ***jonska i kovalentna.***Jonska veza se ničim ne razlikuje od privlačenja među naelektrisanjima suprotnog znaka.

Na primer, jon natrijuma i jon hlora privlače jedan drugog i obrazuju molekul Treba samo objasniti, zašto se oni kada obrazuju molekul i dalje ponašaju kao joni.

Ali pomoću jonske veze se nemože objasniti građa svih molekula. Na primer, nemože se razumeti zašto dva atoma vodonika obrazuju molekul (zbog njihove identičnosti nemože se smatrati da je jedan jon vodonika pozitivan , a drugi negativan ). Ova se veza može objasniti samo osobinama kvantno-mehaničke interakcije i naziva se ***kovalentna veza.***  Ova veza omogućava potpuno objašnjenje valentnosti atoma, savršeno neobjašnjiva u oviru klasične teorije interakcije naelektrisanja, zato što je pojam *zasićenja* potpuno stran prirodi uzajamnog dejstva po zakonima klasične fizike.

* Jonska veza

Najstabilnija elektronska konfiguracija atoma se sastoji iz zatvorenih elektronskih ljuski u kojima su sva elektronska stanja popunjena.

Atomi sa nezatvorenim spoljašnjim elektronskim ljuskama ili gube elektrone ili dobijaju dodatne elektrone da bi spoljašnja ljuska bila zatvorena. Kao rezultat se obrazuju pozitivni ili negativni joni.

Energija koja je neophodna za udaljavanje elektrona iz atoma je ***energija jonizacije.*** Ona predstavlja kvantitativnu meru jačine veze elektrona koji su najudaljeniji od jezgra atoma. Kao rezultat jonizacije atom postaje jon. Pri obrazovanju spoljašnje zatvorene ljuske dodavanjem elektrona ka atomu, oslobođena energija se naziva ***energijom srodstva ili afiniteta ka elektronu,****i* predstavlja meru jačine veze elektrona sa negativnim jonom.

Zatvorenim elektronskim ljuskama se odlikuju plemeniti (inertni) gasovi (helijum, neon, argon itd,) i upravo se sa zatvorenim ljuskama i objašnjava njihova inertnost stupanja u hemijske reakcije sa drugim elementima.

Dodavanjem jednog elektrona zatvorenoj ljusci plemenitih elemenata dovodi do obazovanja elektronskih konfiguracija alkalnih metala (litijuma, natrijuma, kalijuma itd.). Toj grupi periodnog sistema elemenata pripada i atom vodonika, kod koga se elektronska konfiguracija sastoji od jednog elektrona. Alkalni metali lako gube taj dopunski elektron i transformišu se u jednostruko naelektrisane pozitivne jone itd. Udaljavanjem jednog elektrona iz zatvorene ljuske plemenitih gasova vodi ka obrazovanju elektronske konfiguracije *halogena* (fluor, hlor, brom, jod, itd.). Halogeni teže da prisajedine sebi jedan elektron i tako se transformišu u jednostruko naelektrisane negativne jone

Energija jonizacije alkalnih metala opada sa rastom rednog broja elemenata (kod oni su jednaki ). To se objašnjava time što se spoljašnji elektron nalazi u polju naelektrisanog jezgra , koje je ekranirano sa naelektrisanjem zatvorenih unutrašnjih ljuski, tj., u efektivnom polju jednog te istog naelektrisanja ali ne na jednom te istom rasojanju od centra. Sa uvećanjem rednog broja elementa se to rastojanje uvećava i prema tome, energija jonizacije se smanjuje.

Energija srodstva halogena ka elektronu se takođe umanjuje sa rastom rednog broja elemenata (kod one su ). Objašnjenje te zavisnosti je analogno smanjenju energije jonizacije alkalnih elemenata sa rastom rednog broja elementa.

U granicama svakog perioda u Mendeljejevom periodnom sistemu elemenata, pri prelazu od alkalnog metala ka plemenitom gasu, proizilazi postepeno punjenje spoljne ljuske dok ne postane zatvorena. Zato iz spoljne ljuske mogu biti udaljeni 2, 3 itd., elektrona. Na primer, elektroni u spoljnoj ljusci litijuma, berilijuma, bora i ugljenika, nalaze se u efektivnom polju naelektrisanja, . Ako se u granicama jednog perioda ide od inertnog gasa ka alkalnom metalu, to se može govoriti o uvećanju broja nedostajućih elektrona za dobijanje zatvorene ljuske. Sa rastom broja nedostajućih elektrona, smanjuje se energija srodstva ka elektronu, što se objašnjava analogno rastu energije jonizacije pri prelasku ka težim elementima u granicama jednog te istog perioda.

Jonska veza se može javiti među atomima samo u tom slučaju kada je ukupna energija sistema od dva jona koji obrazuju molekul, manja od ukupne energije dva atoma koji čine taj molekul, tj., kada je za delenje molekula potrebno potrošiti energiju.

Na primer ako se joni i nalaze na rastojanju jedan od drugog, to za njihovo razdvajanje na beskonačno rastojanje, potrebno je potrošiti energiju . Pošto je energija jonizacije natrijuma , a energija srodstva hlora ka elektronu , pri razmeni elektrona između i oslobađa se energija od i obrazuju se atomi i . Prema tome, za prelaz iz sistema jona i , koji se nalaze na rastojanju jedan od drugoga, ka atomima i treba potrošiti energiju od , tj., sistem od i na rastojanju , je vezan i može da čini molekul . Ali to ne označava da se stabilno stanje molekula ostvarauje upravo na rastojanju . Pri smanjenju , Kulonovska energija veze jona raste i prema tome, za uvećanje stabilnosti molekula pogodno je umanjiti rastojanje između jona tj., uvećati ulogu sile privlačenja između njih. Osim sile privlačenja treba uzeti u obzir i silu odbijanja usled interakcije elektronskih ljuski jona.

Za mala rastojanja, elektronske ljuske jona počinju da se prekrivaju i njih je sada neophodno razmatrati kao jedinstveni elektronski sistem u kome se u jednom te istom stanju nalazi sada već više od jednog elektrona. Po Paulijevom principu neki elektroni sada moraju preći u druga, energetski viša stanja, koja su do tada bila nezauzeta. Znači, za to je potrebno trošiti energiju i prema tome, pri prekrivanju elektronskih ljuski među jonima javljaju se odbojne sile.

Stabilna stanja molekula se javljaju pri jednakosti tih sila odbijanja i sila privlačenja. Zavisnost potencijalne energije od rastojanja sa uračunavanjem tih sila je dato niže.



Stabilno stanje odgovara minimumu potencijalne energije. Za molekul taj minimum je na , a potencijalna energija je pri tom jednaka To znači da je za razlaganje molekula na atome i potrebno potrošiti energiju od .

Jonska veza je slaba i često se molekuli spoljašnjim silama lišavaju svoje identičnosti. Tako na primer, molekul održava svoju identičnost samo u gasovitom stanju. U kristalima se molekuli raspadaju na jone i , koji zauzimaju svoja mesta u čvorovima kristalne rešetke. U kristalima bilo kojih dimenzija, se nalazi isti broj jona i , ali nema ni jedne strukture koju bi mogli nazvati molekulom Takav tip kristala se naziva *jonskim.*

* Kovalentna veza

Da bi svatili prirodu kovalentne veze, najprostije je poći od jedno-dimenzionog modela. U rekapitulaciji smo opisali jedno-dimenzionu jamu konačne dubine (vidi gore). Sada razmatrajmo kretanje elektrona u dve takve jame kao na slici niže, koje su odvojene barijerom konačne širine. Širina potencijalne barijere je



Jasno je da za imamo dve izolovane jame, opisane gore. U tom slučaju se talasne funkcije elektrona ne prekrivaju i možemo reći da elektron boravi u jednoj ili drugoj potencijanoj jami a energetske nivoe određujemo kao u gore datom primeru. Za konačnu širinu , već se nesme govoriti o potpuno izolovanim potencijalnim jamama. Kao rezultat tunelskog efekta, elektron prelazi iz jedne jame u drugu. Taj efekat je izraženiji ako je širina barijere manja. U tom slučaju, predstava o boravku elektrona u bilo kojoj konkretnoj jami je neodrživa- *elektron je zajednički,* on se kreće u obema jamama a energetski nivoi elektrona se menjaju. Ta promena energetskih nivoa pri postojanju nekoliko potencijalnih jama je u osnovi prirode kovalentne veze. Pojasnimo to na primeru niže:

**Slučaj**

Analogno prethodnom slučaju odmah pišemo rešenja za talasne funcije u oblastima i kao:

Uslovi neprekidnosti talasnih funkcija i njihovih izvoda daju:

Isključujući i iz gornjih jednačina dobijamo:

Za postojanje netrivijalnih rešenja ovog sistema jednačina u odnosu na i potrebno je da determinanta sistema bude jednaka nuli. Iz tog uslova sledi:

Iz gornje jednačine se određuju energetski nivoi. Za desna strana je jednaka nuli i jednačina se pretvara u jednačinu koju smo imali kod jedne potencijalne jame, kako i treba da bude. Postojanje dva znaka na desnoj strani jednačine pokazuje da, za konačno , svaki nivo energije u izolovanoj jami se „cepa“ na dva nivoa. To cepanje nivoa ima veliki značaj. Da bi pojasnili njegov karakter i karakteristike talasnih funkcija, koje su povezane sa svakim od ovih nivoa, posmatrajmo slučaj kada je i , tj, slučaj kada je energija čestice mnogo manja od visine potencijalne barijere čija širina nije vrlo mala. Pri tim uslovima na desnoj strani jednačine možemo zameniti sa izrazom koji se dobija kada tj, smatrati da je . Zahvaljujući tome gornja jednačina dobija oblik

Ili sa istom tačnošću

Pošto je to je gornju jednačinu lakše rešavati metodom sukcesivnih aproksimacija. U nultoj aproksimaciji

*,*

U sledećoj aproksimaciji

gde je

.

U gornjoj jednačini za energiju prva dva člana ne zavise od i daju približne vrednosti energija za česticu u izolovanoj potencijalnoj jami. Poslednji član predstavlja „cepanje“ nivoa energije, uslovljeno uzajamnim dejstvom dveju potencijalnih jama.

Nađimo talasne funkcije koje odgovaraju tim nivoima.

Iz uslova simetrije potencijalnog polja u kome se kreće čestica, sledi da talasne funkcije, koje odgovaraju gornjim energetskim nivoima, moraju biti ili *simetrične* ili *antisimetrične*  u odnosu na tačku .Pokazuje se da je funkcija simetrična u odnosu na tačku a funkcija antisimetrična u odnosu na tu tačku.



***Izvlačenjem rezimea iz gornje analize dolazimo do zaključka da postojanje dve potencijalne jame dovodi do cepanja nivoa energije elektrona. Energija elektrona sa antisimetričnom talasnom funkcijom se povećava a u stanjima sa simetričnom talasnom funkcijom se smanjuje. Ovaj zaključak ima opšti karakter i odnosi se na na potencijalne jame bilo kakvog oblika.***

Cepanje nivoa zavisi od rastojanja među jamama: sa povećanjem rastojanja cepanje se smanjuje, težeći nuli pri beskonačnom rastojanju između jama (slika niže). Svojstvo cepanja nivoa pri postojanju niza potencijalnih jama igra ogromnu ulogu u zonskoj teoriji čvrstog tela. Mi ovde možemo konstatovati da pri postojanju tri potencijalne jame svaki energetski nivo bi se rascepio na tri podnivoa. U opštem slučaju postojanja jama svaki nivo bi se cepao na podnivoa.

Posmatrajmo dva tačkasta pozitivna naelektrisanja koja se nalaze na međusobnom rasojanju , i elektron koji se kreće u polju tih naelektrisanja. Elektron se kreće u dvema potencijalnim jamama, napravljenim prisustvom pozitivnih naelektrisanja kao na slici niže.



Ako dalje dopustimo da su ta tačkasta naelektrisanja protoni dobijamo molekularni jon vodonika. Mada u ovom slučaju potencijalne jame nisu pravougaone, opšti rezultati koje smo ranije dobili važe i sada. Energiju elektrona u nekom stanju, pri beskonačnom rastojanju jezgara označimo sa Pri konačnom rastojanju između jezgara taj se nivo cepa na dva: energija elektrona u stanju, opisanom simetričnom talasnom funkcijom, i energija elektrona u stanju, opisanom antisimetričnom talasnom funkcijom.

Zavisnost i od je data na slici niže.



Jasno je da se pri beskonačnom rastojanju važi jednakost

Ukupna energija sistema je jednaka energiji interakcije odbijajućih pozitivno naelektrisanih jezgara i energija elektrona:

Ponašanje ukupne energije u zavisnosti od rastojanja za simetričnu i asimetričnu talasnu funkciju je pokazano na slici niže.



Pri smanjenju rastojanja između jezgara, za antisimetrične talasne funkcije, ukupna energija raste. To znači da za zbližavanje jezgrara treba utrošiti neku spoljnu energiju. Sledi, da u ovom slučaju dejstvuju odbojne sile koje sprečavaju približavanju jezgara. Pošto totalna energija prilikom približavanja jezgara raste brže od energije uzajamnog dejstva jezgara bez prisustva elektrona, to prisustvo elektrona sa antisimetričnom talasnom funkcijom uvećava silu odbijanja između jezgara. Jasno je da se pri tom nikakvi molekuli ne mogu obrazovati.

Potpuno drugačija situacija se javlja kod elektrona u stanju koje se opisuje simetričnom talasnom funkcijom. Kao što se vidi na slici gore, totalna energija se se umanjuje sa umanjenjem rastojanja između jezgara, ako je to rastojanje veće od Na taj način pri smanjenju rastojanja između jezgara se oslobađa energija a to znači da između jezgara dejstvuje privlačna sila. Za među jezgrima deluje odbojna sila. Jezgra se nalaze u stabilnom stanju na rasojanju jedan od drugoga; pri se javljaju odbojne sile, koje teže da uvećaju rastojanje da bude ; pri se javljaju privlačne sile koje teže da umanje to rastojanje da bude Prema tome postoji stabilno stanje dva jezgra i elektrona, tj., obrazovao se molekul.

Veza u molekulu koja se pravi zajedničkim elektronima se zove ***kovalentna veza.***

Fizička suština kovalentne veze je u sledećem: elektron se u polju jezgara nalazi u određenom kvantnom stanju sa određenom energijom. Ako se rastojanje među jezgrima menja, menja se i stanje kretanja elektrona i njegova energija. Između jedara deluje odbojna sila i prema tome i energija interakcije među njima raste smanjenjem rastojanja. Ali, ako energija elektrona, pri smanjenju rastojanja, opada brže od uvećanja energije interakcije između jezgara, to se ukupna energija smanjuje sa približavanjem jezgara. To znači da u sistemu sa dva odbijajuća jezgra i elektrona dejstvuju sile koje teže da smanje rastojanje između jezgara, tj, deluju privlačne sile koje i čine kovalentnu vezu u molekulu. Te veze se ostvaruju zahvaljujući zajedničkom elektronu, tj, razmenom elektrona među jezgrima i prema tome nazivaju se ***kvantnim silama razmene.***