

# Kemija 1. Kolokvij

## Osnovno o kemiji

Kemija je znanstvena disciplina, ki preučuje sestavo snovi in snovne spremembe.

Stehiometrija je nauk o kemijskem računanju

Lastnosti snovi:

- **Fizikalne** (niso povezane s spremembo substance v drugo substanco)
  - Barva, vonj, okus, trdota, gostota, topnost, tališče, vrelišče
- **Kemijske** (so povezane s spremembo sestave):
  - Elektroliza, rjavenje ipd.

Snovne spremembe:

- **Fizikalne** (ne spremenijo sestave snovi):
  - Taljenje, zmrzovanje, uparjevanje, kondenzacija, mletje
- **Kemijske** (spremenijo sestavo snovi):
  - Prevec za naštet
- **Jedrske** (en ali več elementov se spremeni v drug element)

Čiste snovi in zmesi

- **Cista snov**

Ima določeno in stalno sestavo. Vedno iste lastnosti pri določenih pogojih

- **Zmes**

Sestavljata dve ali več čistih snovi (fizikalna mešanica, ne reagirajo med sabo)

- **Heterogene** zmesi (komponente razvidne)
- **Homogene** zmesi (komponente nerazvidne) npr. Zrak, Cista morska voda ipd.

Elementi in spojine (pojmi)

- **Elementi** so osnovni gradniki snovi, ki jih ne moremo razstaviti s kemijskimi metodami.
- **Spojine** so čiste snovi, zgrajene iz dveh ali več kemijsko povezanih elementov v stalnem razmerju
- **Alotropija** je pojav, ko se en element pojavlja v dveh ali več oblikah, ki imajo različno zgradbo
- **94 naravnih elementov, 24 umetnih**

Kemijske formule

- **Molekulska formula** je v skladu z dejansko sestavo molekul. Razvidno število posameznih atomov, ki so v molekuli povezani s kovalentnimi vezmi (npr.  $H_2O$ )
- **Empirična** formula snovi je poenostavljen zapis molekulske formule, skrčen na najenostavnejše številčno razmerje med atomi (iz nje dobimo manj informacij)
- **Obstaja se skeletna, strukturna ipd.**

## Določanje oksidacijski števil

Oksidacijsko število je enako naboju, ki bi ga imel atom, če bi bila snov zgrajena iz ionov. Določimo ga s pomočjo pravil. Če si dve pravili nasprotujeta velja tisto, ki je navedeno prej.

Pravila:

- Oksidacijsko število atoma v **elementu** je **0**
- Vsota oksidacijskih števil atomov v nevtralni spojini je **0**
- Vsota oksidacijskih števil atomov v ionu je enaka naboju iona
- Oksidacijsko število atoma elementa **I. skupine** v spojinah je **+1**
- Oksidacijsko število elementa **II. skupine** v spojinah je **+2**
- Oksidacijsko število **fluora** v spojinah je **-1**
- Oksidacijsko število **vodika** v spojinah je **+1**
- Oksidacijsko število **kisika** v spojinah je **-2**
- Oksidacijsko število elementa **VII. skupine** v binarnih spojinah s kovinami je **-1**, **VI. skupine -2** in **V. skupine -3**

**Opomba:** Spojine vodika, v katerih ima ta oksidacijsko število -1, se imenujejo hidridi.

### Formule in imena nekaterih binarnih spojin.

Formula	Ime	Formula	Ime
NaCl	natrijev klorid	NO <sub>2</sub>	dušikov dioksid dušikov(IV) oksid
CaCl <sub>2</sub>	kalcijev klorid (brez di)	N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	didušikov oksid didušikov(IV) oksid
AlF <sub>3</sub>	aluminijev fluorid (brez tri)	B <sub>4</sub> C	tetraborov karbid
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	aluminijev oksid (brez di in tri)	SCl <sub>2</sub>	žveplov diklorid žveplov(II) klorid
Al <sub>4</sub> C <sub>3</sub>	aluminijev karbid (brez tetra in tri)	SeF <sub>6</sub>	selenov heksafluorid selenov(VI) fluorid
AlCl <sub>3</sub>	aluminijev klorid (brez tri)	IF <sub>7</sub>	jodov heptafluorid jodov(VII) fluorid
Be <sub>2</sub> Ge	berilijev germanid (brez di)	TiCl <sub>4</sub>	titanov tetraklorid titanov(IV) klorid
CrBr <sub>3</sub>	kromov tribromid kromov(III) bromid	WF <sub>6</sub>	volframov heksafluorid volframov(VI) fluorid
TiO <sub>2</sub>	titanov dioksid titanov(IV) oksid	HgI <sub>2</sub>	živosrebrov diiodid živosrebrov(II) jodid
As <sub>2</sub> S <sub>5</sub>	diarzenov pentasulfid diarzenov(V) sulfid	Mo <sub>4</sub> Cl <sub>20</sub>	tetramolibdenov ikozaklorid tetramolibdenov(V) klorid

Formula	Ime	Formula	Ime
NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>	amonijev	H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	dihidrogenfosfatni
N <sub>2</sub> H <sub>5</sub> <sup>+</sup>	hidrazinijev (diazanijev)	HPO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	hidrogenfosfatni
PH <sub>4</sub> <sup>+</sup>	fosfanijev	PO <sub>4</sub> <sup>3-</sup>	fosfatni
OH <sup>-</sup>	hidroksidni	ClO <sup>-</sup>	hipokloritni
CN <sup>-</sup>	cianidni	ClO <sub>2</sub> <sup>-</sup>	kloritni
O <sub>2</sub> <sup>2-</sup>	peroksidni (dioksidanijev)	ClO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	kloratni
HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	hidrogenkarbonatni	ClO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	perkloratni
CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	karbonatni	CH <sub>3</sub> COO <sup>-</sup>	acetatni (etanoatni)
HSO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	hidrogensulfatni	MnO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	permanganatni
SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	sulfatni	Cr <sub>2</sub> O <sub>7</sub> <sup>2-</sup>	dikromatni(VI)

### Formule in imena nekaterih spojin z večatomnimi kationi/anioni.

Formula	Ime	Formula	Ime
KOH	kalijev hidroksid	K <sub>2</sub> (HPO <sub>3</sub> )	kalijev hidrogenfosfonat
Ca(CN) <sub>2</sub>	kalcijev cianid	Mg(CH <sub>3</sub> COO) <sub>2</sub>	magnezijev acetat
NH <sub>4</sub> Br	amonijev bromid	N <sub>2</sub> H <sub>5</sub> (HSO <sub>4</sub> )	hidrazinijev hidrogensulfat
Ca(ClO) <sub>2</sub>	kalcijev hipoklorit	Al <sub>2</sub> (Cr <sub>2</sub> O <sub>7</sub> ) <sub>3</sub>	aluminijev dikromat(VI)

## Imenovanje koordinacijskih spojin

- Kation poimenujemo pred anionom
- Ligande poimenujemo pred kovinskim ionom v kompleksnem ionu
- Ligandi dobijo končnico **-o** za anion:
  - Fluorido, klorido, nitrito, hidroksido, cianido
- Brez končnice so nevtralni ligandi
  - Izjeme: Voda- Akva, NH<sub>3</sub> amin, CO karbonil, NO nitrozil
- S predponami di- tri- ipd. označimo število ligandov (lahko tudi bis- tris- za bolj komplicirane ali ko že imamo di-, tri-)
- Oksidacijsko število centralnega kovinskega iona navedemo z rimsko številko v oklepaju ali pa navedemo nabojno število iona z arabsko številko in predznakom
- Več različnih ligandov imenujemo po abecedi (predpone ne vplivajo na vrstni red)
- Če je kompleksni ion negativno nabit, dobi kovina končnico **-at**
  - Nikelat, ferat, kuprat, stanat

## Flogistonska teorija

Prva, a napačna teorija o kemijski reakciji

Pravi, da gorljive snovi vsebujejo **flogiston**, ki se sprošča med gorenjem. Teorija temelji na pomanjkljivem opazovanju. S pazljivim tehtanjem lahko ugotovimo, da pri gorenju kovin teza narašča. (Danes vemo, da gre tu za oksidacijo kovine)

## Zakon o ohranitvi mase (A. Lavoisier)

S pomočjo tehtanja ugotovil, da s segrevanjem kovin na zraku nastajajo težji produkti (spajanje s kisikom)

**Celotna masa snovi se pri kemijski reakciji ne spremeni**

## Zakon o stali sestavi (J. Proust)

**Masno razmerje, v katerem se elementi spajajo, je vselej isto, stalno in neodvisno od načina, kako reakcijo izvedemo.**

## Zakon o mnogokratnem masnem razmerju (J. Dalton)

Razširil Proustov zakon v primeru elementov, ki tvorijo med seboj več spojin:

**Mase elementa, ki se v raznih spojinah spaja z enako maso drugega elementa, s v celoštevilčnem razmerju.**

Primer: dušikovi oksidi

		masi O : N
dušikov(I) oksid	N <sub>2</sub> O	0.571 : 1 = (1 × 0.571) : 1
dušikov(II) oksid	NO	1.142 : 1 = (2 × 0.571) : 1
dušikov(III) oksid	N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	1.713 : 1 = (3 × 0.571) : 1
dušikov(IV) oksid	NO <sub>2</sub>	2.284 : 1 = (4 × 0.571) : 1
dušikov(V) oksid	N <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	2.855 : 1 = (5 × 0.571) : 1

## Zakon o prostorninskih odnosih pri kemijski reakciji (J. L. Gay-Lussac)

**Prostornine plinov, ki med seboj zreagirajo, in prostornine plinastih reakcijskih produktov, merjene pri enakih pogojih (tlak, temperatura), so v razmerju naravnih števil.**

Npr. => 2 vol. H<sub>2</sub> + 1 vol. O<sub>2</sub> => 2 vol. H<sub>2</sub>O

## Avogardrov zakon (A. Avogadro)

**Enake prostornine plinov vsebujejo pri enakih pogojih enako število molekul.**

## MOL- Enota za množino snovi

1 mol je množina snovi, ki vsebuje toliko delcev kot je atomov v 12g ogljikovega izotopa <sup>12</sup>C oz.

**množina snovi, ki vsebuje Avogadrovo število delcev**

**Množina je osnovna veličina, ki omogoča najenostavnejši kvantitativni način spremljanja poteka kemijskih reakcij**

$$n = \frac{m}{M} = \frac{N}{N_A}$$

## Molska masa [g/mol]

Masa enega mola snovi. Ima enako številčno vrednost kot relativna molekulska masa, ki je vsota relativnih mas elementov. Pove, kolikokrat je masa neke molekule večja od 1/12 mase atoma <sup>12</sup>C

- A<sub>r</sub> = relativna atomska masa
- M<sub>r</sub> = relativna molekulska masa (vsota vseh A<sub>r</sub>)

## Limitni reaktant

**Tisti reaktant, ki se najprej porabi in tako omeji količino nastalih produktov**

## Izkoristek kemijske reakcije

Določí učinkovitost reakcije. V % glede na teoretično vrednost.

## Plini

**Idealni plin** vezi med molekulami so zelo šibke. Interakcije med delci plina so zanemarljive.

## Plinski zakoni

- Boyle, Mariotte: PV = konst. (pri konst. T, n)
- Gay-Lussac, Charles: V/T = konst. (pri konst. P, n)
- Avogadro, Cannizaro: n/V = konst. (pri konst. T, P)

**Vsi zakoni skupaj dajo splošno plinsko enačbo (za idealne pline) PV = nRT**

**R = 8,314 kPa L/mol K**

**Normalni pogoji:**

- P = 101,3 kPa
- T = 273 K

## Plinske zmesi

**Tlak plinske zmesi je enak vsoti parcialnih tlakov plinov, ki zmes sestavljajo.**

Parcialni tlak => tlak, ki bi ga imel plin če bi sam zavzemal vso prostornino. Odvisne od prostorninskega deleža plina v zmesi.

Povprečna molska masa plinske zmesi

$$\bar{M} = \sum X_i M_i$$

$X_i$  => množinski delež

$M_i$  => molska masa

Pretvorba masnega deleža (w) v množinski delež (x)

Npr. 100g zmesi: 76g N<sub>2</sub>, 23g O<sub>2</sub>, 1g Ar

$n(\text{N}_2) = 27/28 = 2,71 \text{ mol} \Rightarrow n(\text{O}_2) = 0.72 \text{ mol}$ ,  $n(\text{Ar}) = 0.025 \Rightarrow$  Skupaj 3,46 mol

$x(\text{N}_2) = 2,71/3,46 = 0.78$  in tako se za ostale

## Kinetična teorija plinov

Velja za idealne pline:

- Med delci v plinu ni nobenih medsebojnih sil
- Prostornina delcev je zanemarljiva v primerjavi s prostornino posode
- Delci plina imajo maso, v povprečju se gibljejo zelo hitro in naključno, med samimi delci plina in delci ter steno posode prihaja do številnih elastičnih trkov (gibalna količina se po trku ohranja)

Kaj se zgodi

- Manjši volumen => več trkov s steno => pritisk se poveča
- Temperatura naraste => hitrejši delci => več in močnejši trki => V. konst, pritisk se poveča
- -| |- samo, da če je P konst. Se poveča volumen
- Večja množina plina => povečanje prostornine za P konst. Oz. povečanje P za V konst.

## Hitrost gibanja molekul

$$\bar{v} = v_{rms} = \sqrt{\frac{3RT}{M}}$$

**Pri večji temperaturi je več trkov in zato večji razpon porazdelitve hitrosti molekul.**

## Difuzija in efuzija

**Difuzija** je proces prehajanja delcev iz območja z višjo koncentracijo v območje z nižjo koncentracijo (poteka v plinih in tekočinah)

**Efuzija** je izhajanje plina skozi majhno luknjico v evakuiran prostor

**Pri konst. P, V** je hitrost difuzije oz. efuzije:

$$\frac{v_1}{v_2} = \frac{\sqrt{M_2}}{\sqrt{M_1}}$$

$$v \propto \sqrt{\frac{1}{M}}$$

## Realni plini

Idealni plin je hipotetični model. Ne obstaja zares. Upoštevamo korekcije ko je pritisk visok ali pa temperatura nizka, takrat ko je koncentracija plina velika ali pa med molekulske sile postanejo pomembne.

Van der Waalsova enačba

$$\left[ P_{observed} + a \left( \frac{n}{V} \right)^2 \right] \cdot (V - nb) = nRT$$

**a in b** sta korekcijska faktorja, značilna za določen plin

Prvi del popravi tlak (pravi tlak = tlak na stene + privlak med molekulami)

Drugi del popravi volumen (pravi volumen = V posode – V molekul zaradi odbojnih sil)

## Žlahtni plini

Nereaktivne snovi z visokimi ionizacijskimi energijami

Enoatome molekule plinov

Kemijske reakcije sprva možne le pri Kr in Xe, sedaj tudi znana spojina s He

Pridobivanje preko frakcionarne destilacije utekočinjenega zraka

## Snovne spremembe in energija

**Termodinamika** je veda, ki preučuje energijske spremembe pri kemijskih reakcijah in fizikalnih procesih. **Termokemija** je del termodinamike in obravnava energijske spremembe pri kemijskih reakcijah.

1 cal = 4184 J => količina toplote, ki je potrebna, da spremenimo temp. 1g vode za 1°C

**Snovne spremembe** so vedno povezane s sprejemanjem ali oddajanjem energije. Pri kem. reak. Se sprošča/porablja toplota, lahko pa dobimo tudi električno delo ali svetlobo.

Do porabe/sproščanja pride zaradi nastanka ali prekinitve vezi.

**Pri nastanku vezi se energija sprošča, pri razcepu vezi pa se energija porablja.**

Sistem je tisto kar opazujemo. Opišemo ga s spremenljivkami:

- P(tlak) =>funkcija stanja
- V(prostornina) => funkcija stanja
- T(temperatura)
- n(množina)

Ce se spremeni ena od teh spremenljivk, se spremeni stanje sistema. **Funkcija stanja** je tista spremenljivka, ki je odvisna samo od stanja v katerem je sistem, ne pa od poti ali načina, po katerem je to stanje dosegel.

Vsak sistem ima določeno notranjo energije (vsota vseh energij v sistemu). Vrednosti te, ne moremo izmeriti, lahko pa izmerimo **spremenbo notranje energije**. *Notranja energija je funkcija stanja.*

- **Eksotermne reakcije**  
Notranja energija produktov je **nižja** od notranje energije reaktantov (energija se sprosti)
- **Endotermne reakcije**  
Notranja energija produktov je **višja** od notranje energije reaktantov (energija se porablja)

Energijo sistema spremenimo tako, da ga segrevamo ali ohlajamo oz. da na sistemu opravljamo delo ali pa sistem opravlja delo (**prvi stavek termodinamike**)

$$\Delta E = Q + A$$

**Delo pri spremembi prostornine (sistem opravi delo proti zunanji sili)**

$$A = -P\Delta V$$

**Delo pri v = konst. (npr. v kalorimeterski bombi) => sprememba notranje energije**

$$\Delta E = Q$$

Večina reakcij pa poteka pri **p = konst.**

$$\Delta E = Q - P\Delta V$$

Sprememba notranje energije se loči od sprejete/oddane toplote za delo proti zunanji sili.

Vpelje se novo funkcijo stanja, ki že upošteva delo proti zunanji sili.

$$\Delta H = Q$$

**Toplota, ki jo sistem prejme/odda pri konstantnem tlaku, je enaka spremembi entalpije H sistema.**

Ce se prostornina med kemijsko reakcijo ne spreminja (ne v plinih), načeloma velja  $\Delta H \approx \Delta E$

Pri plinih pa je to  $\Delta H = \Delta E + P\Delta V$  pri katerem, je  $P\Delta V = (\Delta n)RT$

Sprememba množine tu pomeni razlika med  $n$  plinastih produktov in  $n$  plinastih reaktantov.

Dogovori za entalpijo:

- Ker je H odvisna od pogojev, se podaja pri točno določenih pogojih
  - **Standardni pogoji:**
    - P = 100 kPa
    - T = 25 °C = 298K

H° je entalpija pri standardnih pogojih, ti. **standardna entalpija**

- Entalpija elementov v standardnem stanju je 0
- Entalpija nastanka 1 mol spojine iz elementov se imenuje **tvorbena entalpija**  $\Delta H_t$
- Sprememba entalpije pri reakciji se imenuje **reakcijska entalpija**  $\Delta H_r$
- Sprememba entalpije pri popolnem sežigu 1 mol snovi je **sežigna entalpija**  $\Delta H_{sež}$

*° pri katerikoli od teh entalpij pomeni, da poteka pri standardnih pogojih*

Hessov zakon

**Entalpije vmesnih reakcij lahko seštevamo in odštevamo.**

Ce gre za reakcijo v več stopnjah (lahko ne dejansko), je entalpija za celoten proces enaka vsoti entalpijskih sprememb za posamezne stopnje.

Izračun reakcijskih entalpij za poljubno kemijsko reakcijo

Izračunamo iz tvorbenih entalpij reaktantov in produktov:

$$\Delta H_r^\circ = \sum n_p \Delta H_t^\circ(\text{produkti}) - \sum n_r \Delta H_t^\circ(\text{reaktanti})$$

Zgradba atoma

Atomos = nedeljiv

Temelj so zakoni:

- Zakon o ohranitvi mase
- Zakon o stalni sestavi
- Zakon o mnogokratnem masnem razmerju

Pomembni eksperimenti:

- Geißlerjeva cev
- Millikanov eksperiment z oljnimi kapljicami
- Rutherfordov eksperiment



Atom je sestavljen iz jedra, kjer so nukleoni (protoni + nevtroni) in elektronske ovojnice z elektroni. Kemijske lastnosti so neposredno povezane z zgradbo elektronske ovojnice. Praktično vsa masa atoma je zbrana v jedru

Osnovne oznake lastnosti atoma:

- **Z – vrstno(atomsko) število** => število protonov oz. število elektronov (elektro nevtralnost)
- **A – Masno število** => število protonov + število nevtronov = število nukleonov

Izotopi

Element ki ima enako st. protonov oz. elektronov a različno število nevtronov.

Masa atomov

Dejansko atomske mase nimajo popolnoma celoštevilčnih vrednosti. Masa atoma ni masa njegovih elementarnih delcev, ker se nekaj njihove mase pretvori v energijo. Mase določimo z eksperimentom oz. z masnimi spektrometri. Enota za atomsko maso je  $m_u$  oz.  $1/12$   $^{12}\text{C}$

**Relativna atomska masa elementa je povprečna relativna atomska masa vseh naravnih izotopov.**

*Te podatke preverja in popravlja IUPAC.*

Elektronska struktura atomov

**Spektroskopija** je analiza svetlobe in drugih vrst sevanj, ki jih oddajajo ali absorbirajo različne snovi. Osnovna ideja **Korpuskularne (zrnate) narave svetlobe**: atomi lahko emitirajo ali absorbirajo energijo samo v določenih kvantih – ta energija je enaka energiji fotona svetlobe, ki ga atom emitira ali absorbira in jo lahko izračunamo iz Planckove enačbe.

$$\Delta E = h \nu$$

- Kontinuirni spekter => vse barve mavrice => svetloba skozi prizmo
- Črtasti spekter => vsaka črta ustreza določeni valovni dolžini
- Pri plamenskih reakcijah dobimo emisijske spektre in s tem karakteristične barve elementov I. in II. skupine periodnega sistema.

Bohrov modela atoma (planetarni model)

1. Elektron kroži okoli jedra brez izgube energije po orbitah z določenim radijem

Dovoljena energetska stanja/Energijski nivoji oz. kvantizirana energija elektrona:

$$E_n = -B/n^2$$

2. Atom lahko absorbira ali emitira energijo le v kvantih, pri čemer elektron preskoči iz ene krožnice na drugo

V vodikovem atomu:

a)  $n = 5$  na  $n = 2$

modra,  $\lambda = 434 \text{ nm}$

b)  $n = 4$  na  $n = 2$

zelena,  $\lambda = 486 \text{ nm}$

**c)  $n = 3$  na  $n = 2$**

oranžno-rdeča,  $\lambda = 656 \text{ nm}$

## Serije v spektru vodika

### Rydberg - Ritzeva enačba:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

$R_H = 1.097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$  (Rydbergova konstanta)

Za različne n-je:

- $n = 1 \Rightarrow$  Lymanova serija  $\rightarrow$  v UV delu spektra
- $n = 2 \Rightarrow$  Balmerjeva serija  $\rightarrow$  v vidnem delu spektra
- $n = 3, 4, 5, 6 \Rightarrow$  Paschen, Brackett, Pfund, Humphrey (serija)  $\rightarrow$  v IR delu spektra

**Bohrov model dobro pojasni vodikov atom (in eno elektronske ione), pri več elektronskih pa odpove.**

Nov pristop k razlagi strukture atoma  $\Rightarrow$  Valovno mehanski model

Razlika je, da Bohrov model natančno določi radij gibanja elektrona, valovno mehanski pa nam pove, kje je največja verjetnost, da se ta nahaja.

## Valovno-mehanski model atoma

### 1. Heisenbergov princip nedoločljivosti

Položaja in energije (hitrosti) elektrona ne moremo istočasno določiti (izmeriti)

$$\Delta x \cdot \Delta(mv) \geq \frac{h}{4\pi}$$

### 2. De Brogliejeva relacija

Dvojna narava (wave/particle duality) ni značilna le za svetlobo, ampak tudi za delce

Iz  $E = mc^2$  in  $E = h \cdot \text{frekv.}$

$$\lambda = \frac{h}{m \cdot v} = \frac{h}{p}$$

$P =$  gibalna količina delca

Za vsak gibajoči se delec (z maso  $m$  in hitrostjo  $v$ ) lahko **izračunamo valovno dolžino in obratno**. Vendar je to smiselno le za **zelo majhne delce z veliko hitrostjo**.

### 3. Schrödingerjeva enačba

Elektron opišemo s pomočjo valovne enačbe (ki opisuje elektron kot 3D stojno valovanje in kot delec z določano maso in energijo) Rešitve valovne enačbe imenujemo **valovne funkcije ( $\Psi$ ) = orbitale** (v ožjem pomenu besede)

$$\nabla^2 \Psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \Psi = 0$$

Pri reševanju enačbe je potrebno vpeljati tri celoštevilčne parametre (kvantna števila) ( $n, l, m$ ). Za vsako trojico števil dobimo eno rešitev enačbe,  $\Psi_{n,l,m}$

Kasneje ugotovijo, da ima elektron tudi spin, označen s spinskim kvantnim številom  $s$ .

## Verjetnostna porazdelitev elektronske gostote

Schrödingerjeva enačba se rešuje v polarnem koordinatnem sistemu, ki je definiran z radijem  $r$  in kotoma  $\theta$  in  $\phi$ . Kvadrat valovne funkcije je sorazmeren verjetnosti nahajanja elektrona v diferencialno majhnem prostoru v atomu ( $dV$ ).

## Pomen in zveze med kvantnimi števili

Ime	Simbol	Vrednosti	Pomen
Glavno	$n$	1,2,3...	-energija in velikost orbitale -oddaljenost od jedra <b>-lupina</b> = skupina orbital z istim $n$
Stransko	$l$	0, 1, ..., $n-1$	-oblika orbitale -energija orbitale <b>-podlupina</b> => sk. Orbital z istim $n$ in $l$ $l = 0, 1, 2, 3, \dots \Rightarrow s, p, d, f$
Magnetno	$m$	$l, l-1, \dots, 0, \dots, -l$	-usmerjenost orbitale v prostoru -določa orbitalo v podlupini
Spinsko	$s$	$+1/2, -1/2$	-določa spin elektrona

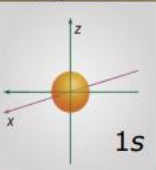
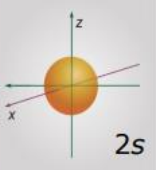
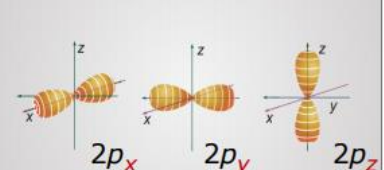



**Table 7.2** | Quantum Numbers for the First Four Levels of Orbitals in the Hydrogen Atom

$n$	$\ell$	Sublevel Designation	$m_\ell$	Number of Orbitals
1	0	1s	0	1
2	0	2s	0	1
	1	2p	-1, 0, +1	3
3	0	3s	0	1
	1	3p	-1, 0, 1	3
	2	3d	-2, -1, 0, 1, 2	5
4	0	4s	0	1
	1	4p	-1, 0, 1	3
	2	4d	-2, -1, 0, 1, 2	5
	3	4f	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	7

© Cengage Learning. All Rights Reserved.

Za vsako orbitalo je mogoče izračunati energijo. Če ima skupna orbital enako energijo, pravimo, da so **degenerirane**.

**Orbitala** (v širšem pomenu besede) je **omejeni prostor, kjer je največja verjetnost (0,95) da se elektron nahaja**.

		podlupine		
		$l = 0$ orbitala $s$ $m_l = 0$	$l = 1$ orbitale $p$ $m_l = \{-1, 0, +1\}$	$l = 2$ orbitale $d$ $m_l = \{-2, -1, 0, +1, +2\}$
lupine	$n = 1$			
	$n = 2$			
	$n = 3$			

Valovno mehanska interpretacija zgradbe težjih atomov-več elektronski sistemi  
**Zaradi naboja se elektroni izogibajo drug drugemu, prav tako če imajo paralelne (vzporedne) spine.**

Paulijev princip (empirično pravilo)

**V atomu ne moreta imeti niti dva elektrona enakih vseh štirih kvantnih števil.**

Hundovo pravilo (maksimalne multiplicitete) (empirično pravilo)

**V osnovnem stanju zasedejo elektroni vselej maksimalno število praznih energijsko enakovrednih (degeneriranih) orbital s paralelnimi spini.**

Energija orbital v atomih z več elektroni

S orbitale so mnogo bolj zgoščene pri jedru kot p ali d. Elektron je manj zasenčen pred vplivom jedra => **nižja energija s orbitale.**

Posledica prodiranja in senčenja  $E = f(n + l)$

Energija orbitale narašča z naraščajočo vrednostjo vsote  $(n+l)$

**Elektronska konfiguracija** = zgradba elektronske ovojnice atoma. Zapis št elektronov v orbitali kot eksponent

Period	Group												
	1A	2A						3A	4A	5A	6A	7A	8A
1	1s												1s
2	2s												2p
3	3s												3p
4	4s				3d								4p
5	5s				4d								5p
6	6s	La			5d								6p
7	7s	Ac			6d								7p
									4f				
									5f				

## Konfiguracije kovinskih ionov d-bloka:

**Najprej se praznijo s orbitale!** To pomeni, da je energija d orbital nižja od energije s orbital.

## Periodične lastnosti (v periodnem sistemu elementov)

### Atomski radij

Pada po periodi, ker se zunanji elektroni slabo senčijo vse večji naboj jedra pa jih privlači

Raste po skupini ker so v zunanjih orbitalah vedno bolj zasenčeni pred jedrom

**Kation je vedno manjši od atoma iz katerega je nastal.**

**Anion je vedno večji od atoma iz katerega je nastal**

### Ionizacijska energija (IE)

**Je energija potrebna da odstranimo en elektron iz izoliranega atoma. Proces je endotermen.**

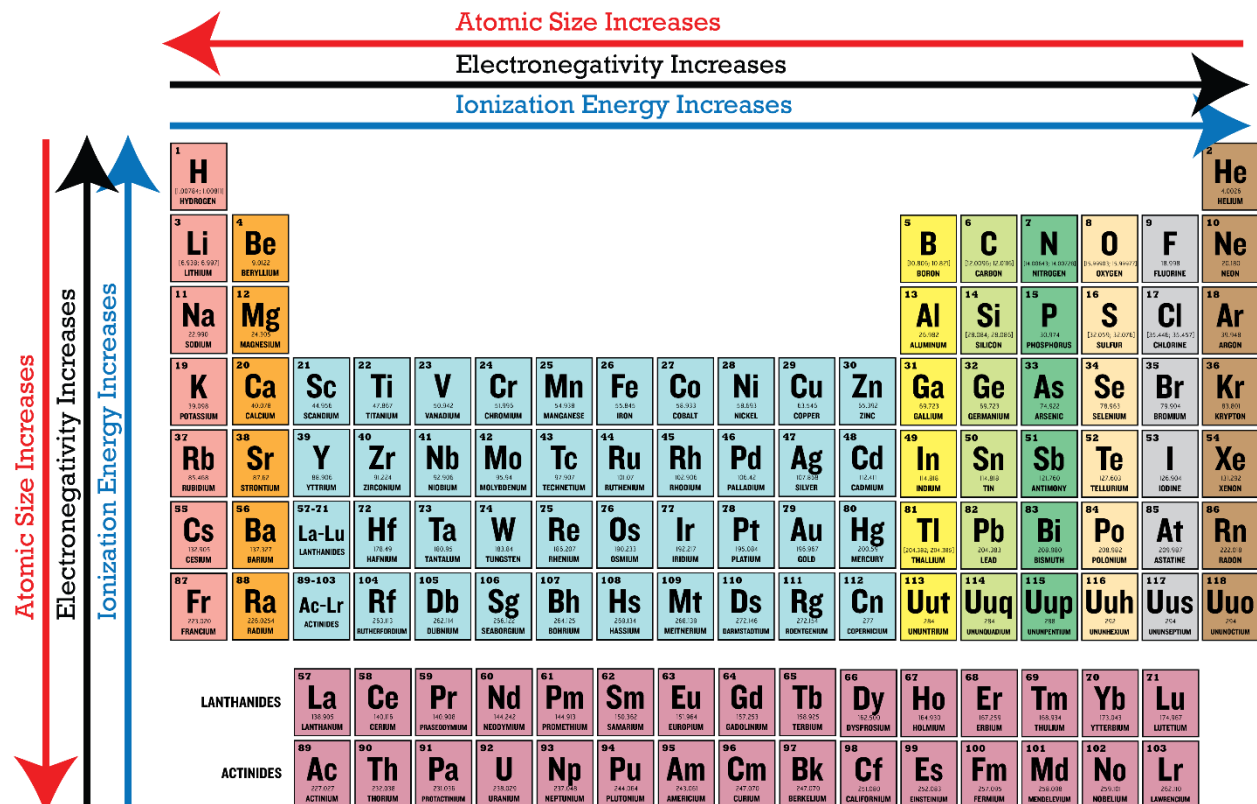
Obstajajo izjeme(tiste ki so blizu oz. imajo pol polno podlupino)

### Elektronska afiniteta

**Je energija, ki se sprošča ali porablja, če izoliran atom sprejme en elektron. Proces je običajno eksotermen.**

Obstajajo podobne izjeme kot pri IE

Na spodnji sliki narašča tako kot elektro negativnost.



## Kemijska vez

### Nastanek kemijske vezi je eksotermen proces

- Ionska vez (med kationi in anioni)
- Kovalentna vez (skupni elektronski par)
- Koordinacijska vez
- Kovinska vez

## Ionska vez

Električno polje med ioni je sferično. Ionska vez je prostorsko neusmerjena. Kation odda elektrone, ki jih anion sprejme. Oba nastala iona dobita konfiguracijo žlahtnega plina. V ionih ni molekul.

## Kovalentna vez

Za njen nastanek so pomembni valenčni elektroni. Atoma si »delita« skupni elektronski par (vezni elektronski par)

### Kako narišemo Lewisovo strukturo

1. Preštejemo vse valenčne elektrone atomov, iz katerih je sestavljena zvrst
2. To število delimo z 2 in dobimo število valenčnih elektronskih parov (VIEP)
3. Narišemo skelet zvrsti. Pri tem pazimo, da je v sredini molekule atom, ki ima najmanjšo elektronsko afiniteto oz. elektronegativnost
4. Vse atome med seboj povežemo z eno sigma vezjo
5. Pogledamo koliko VIEP smo porabili za vezi, ostale dodajamo na zunanje atome, da dosežejo oktet
6. Preostale VIEP damo na centralni atom
7. Če v okolici centralnega atom ni 8 elektronov, kakšen zunanji par predelamo v se eno vez (da bo npr. dvojna)
8. Atomom določimo formalni naboj:  
$$\text{Naboj} = \text{St. Valencnih Elektronov} - \text{Neveznih elektronov na atomu} - \text{Vezi na atom}$$
9. Določena razporeditev opredeli resonančno strukturo zvrsti.. Najbolj stabilne so tiste strukture, ki imajo naboj smiselno porazdeljen (bolj elektronegativni bolj negativen in vice versa) oz. je formalni naboj povsod 0.

### Obstaja par izjem tem pravilom:

- Elementi 2. periode (C, N, O, F): vedno velja oktetno pravilo
- B, Be: tvorita elektronsko deficitarne spojine
- Elementi 3. periode in težje: razširjano oktetno pravilo
- Resonančne strukture

## Oblika molekul in ionov

Oblika (povezava atomov, razporeditev atomov, dolžina vezi, koti med vezmi) opredelijo lastnosti spojine.

## Dipolni moment ( $\mu$ )

Je produkt med velikostjo naboja ( $z$ ) in razdaljo med središči pozitivnih in negativnih nabojev ( $r$ ). Iz dipolnega momenta lahko sklepamo na obliko ali polarnost. Dipolni moment je vektor.

$$\mu = z r$$

## Energije vezi

Tabelirano. V kJ/mol. Se porabi za razcep vezi in sprosti za nastanek.

## Dolžine vezi

Tabelirane

## Geometrijska oblika molekule

Number of Electron Pairs	Arrangement of Electron Pairs	Example
2	Linear	
3	Trigonal planar	
4	Tetrahedral	
5	Trigonal bipyramidal	
6	Octahedral	

Electron-Pair Arrangement	Molecular Structure
	 Tetrahedral
	 Trigonal pyramid
	 V-shaped (bent)

Electron-Pair Arrangement	Molecular Structure
	 Trigonal bipyramidal
	 See-saw
	 T-shaped
	 Linear

## Teorija o odboju med valenčnimi elektronskimi pari

Nevezni elektronski pari hočejo met več prostora. **Samo pri kotih večjih od 120°**. Razloži odstopanja kotov od idealnih kotov v molekulah (npr. 109,5° namesto 120°)

## Teorija valenčne vezi (Valence bond theory)

Pri teoriji valenčne vezi se vez med dvema sosednjima atomoma razloži s prekrivanjem dveh orbital. Razširjena teorija je podprta s teorijo hibridizacije in resonančnimi strukturami.

## Nastanek $\sigma$ vezi (ghetto razlaga)

Atoma se približujeta in orbitale se vedno bolj in bolj prekrivata. Elektronska gostota se pomika s centra atomov v prostor med obema atomoma. Sprosti se energija in nastane vez.

## Vrste prekrivanj

- **Čelno:** nastanek  $\sigma$ -vezi
- **Bočno:** nastanek  $\pi$ -vezi

Tm je završna se nek cancer o molekulah halogenov in halogenidov  $\text{X}_2$  /

Ta metoda ni popolna zato vpeljemo hibridizacijo

## Hibridizacija

**Je računski postopek, s katerim dobimo iz določenega števila atomskih orbital enako številom novih hibridnih orbital (linearna kombinacija valovnih funkcij istega atoma)**


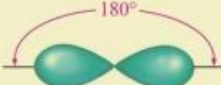

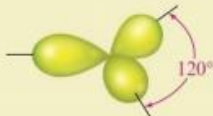

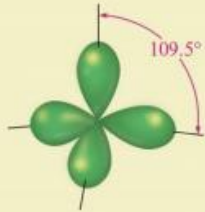

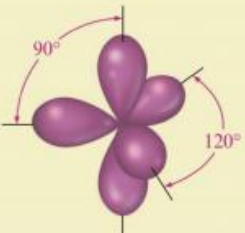

Hibridne orbitale so tako usmerjene, da so čim bolj narazen.

Hibridne orbitale se intenzivneje prekrivajo od izhodiščnih atomskih orbital => močnejše vezi

Npr. B :  $[\text{He}]2s^2 2p_x^1 2p_y^0 2p_z^0 \Rightarrow \text{B} : [\text{He}]2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^0 \Rightarrow sp^2$  hibridizacija

En atom smo premestili iz zasedene s orbitale v eno od p orbital, ki ima višjo energijo (**promocija**)

Multipla vez nastane zaradi bočnega prekrivanja dveh nehibridiziranih orbital. Nastane  $\pi$ -vez (obe vezi skupi sta dvojna vez recimo)

Number of Effective Pairs	Arrangement of Pairs	Hybridization Required
2	 Linear	$sp$ 
3	 Trigonal planar	$sp^2$ 
4	 Tetrahedral	$sp^3$ 
5	 Trigonal bipyramidal	$dsp^3$ 
6	 Octahedral	$d^2sp^3$ 