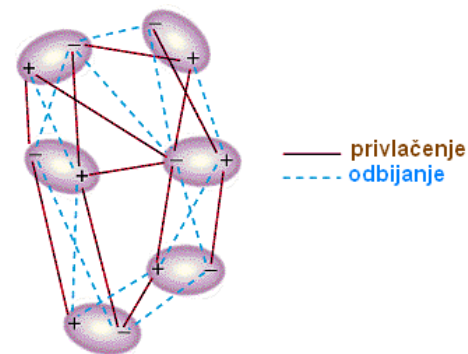


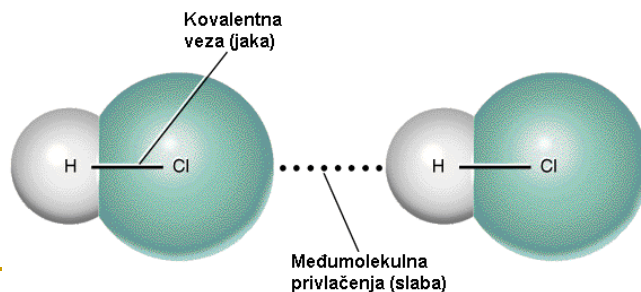
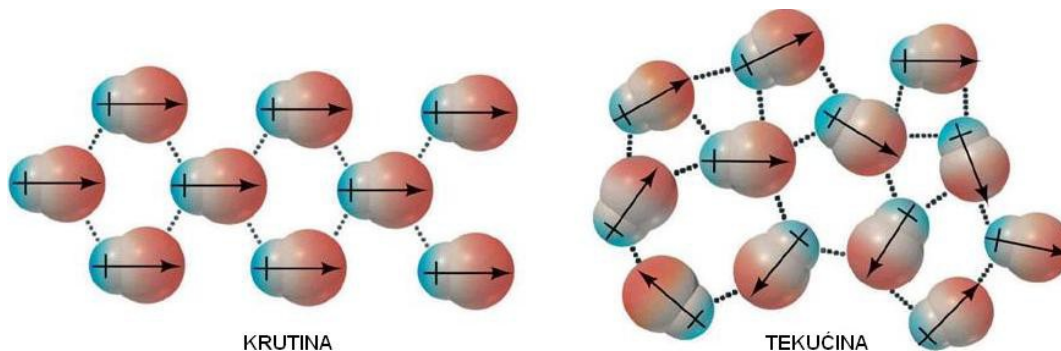
13. predavanje:

MEĐUMOLEKULNE SILE

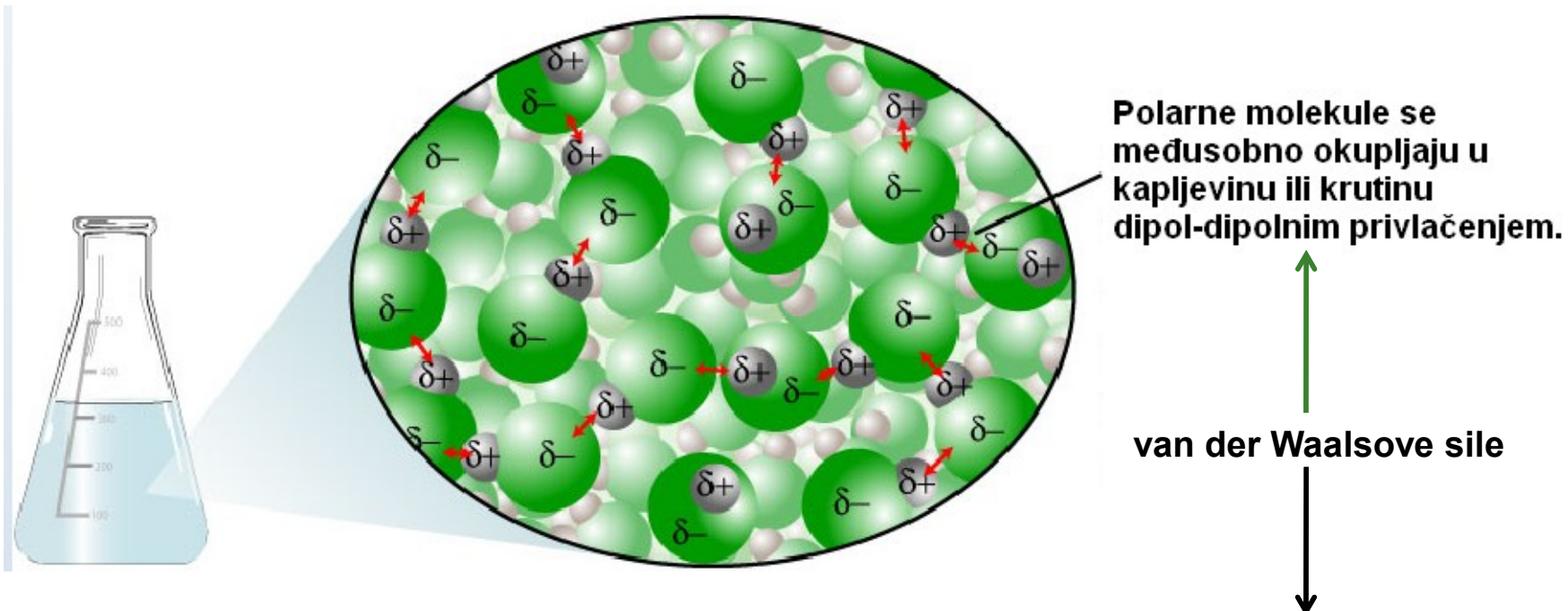
Molekule su načinjene od **električki nabijenih** dijelova, elektrona i jezgara, te njihovim približavanjem dolazi do međusobnog **privlačenja** i odbijanja.



Sile i veze koje su odgovorne za postojanje tekućeg i krutog stanja tvari zovemo **međumolekulne** ili **intermolekulne sile**, kao što je na sljedećoj slici to pokazano za *klorovodik* (HCl)



13. predavanje:



Sile koje djeluju među električki nabijenim česticama je moguće *približno izračunati*.

$$F_{\text{naboj-naboj}} = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad \leftarrow \text{naboj čestice}$$

Jednadžbu je lako primijeniti na **ione** \Rightarrow naboj se nalazi na jednoj čestici i jednak je **$n(\pm e)$** , gdje je **e** jedinični naboj (elektrona), **$1.16 \times 10^{-19} \text{ C}$** .

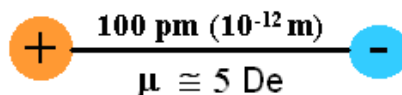
Polarne molekule posjeduju razdvojene (**parcijalne**) naboje i **stalan dipolni moment** (**$\mu \neq 0$**).
Parcijalni naboji u molekulama su manji od naboja iona **ne** (napr. u $\text{HCl} \approx +0,2e$ i $-0,2e$) i ovise o **strukturi** molekule.

13. predavanje:

Dipolni moment

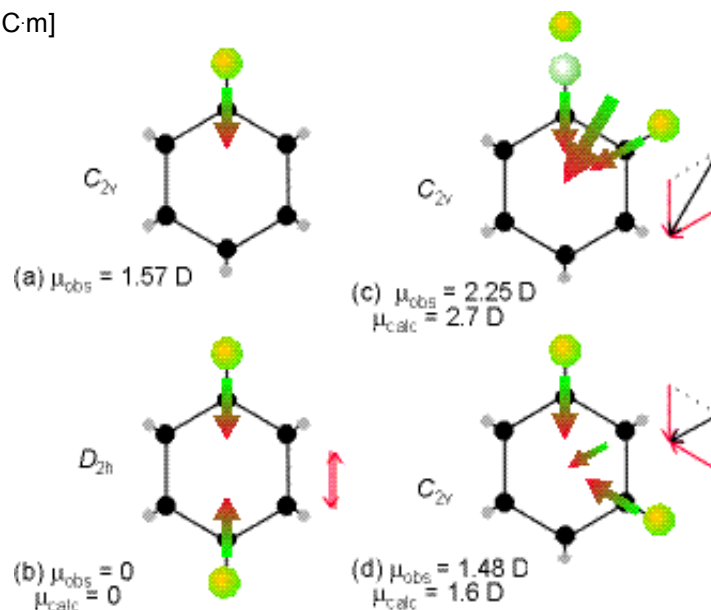
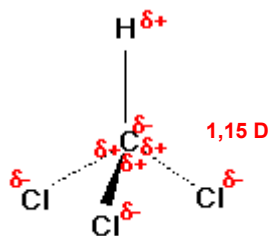
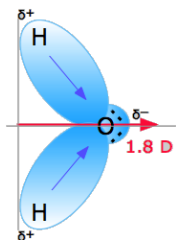
Dipolni moment – težište naboja i mase se ne *poklapaju*, u čestici postoje *dva pola* određenog naboja Q^\pm razdvojena na udaljenosti r .

$$\mu = Q r$$

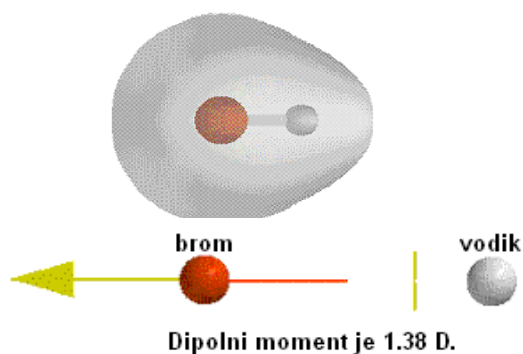


$$\mu = (1.60 \times 10^{-19} \text{ C})(1.00 \times 10^{-10} \text{ m}) = 1.60 \times 10^{-29} \text{ C}\cdot\text{m}$$

$$[1 \text{ debye (D)} = 3.336 \times 10^{-30} \text{ C}\cdot\text{m}]$$



13. predavanje:



Iz mjerenog dipolnog momenta tvari može se izračunati udio ionskih svojstava u vezi prema sljedećem izrazu:

$$\text{Udio ionskih svojstava veze} = \frac{\text{određeni dipolni moment veze}}{\text{teorijski dipolni moment veze}}$$

Primjer: HCl

Dužina H-Cl veze je 127 pm.

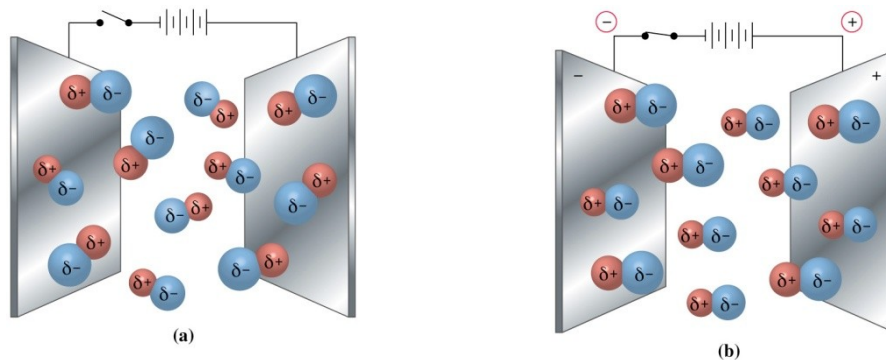
$$\mu = 1.03 \text{ D (izmjereni).}$$

Ako je veza 100% ionska, može se izračunati $\mu = 6.09 \text{ D}$.

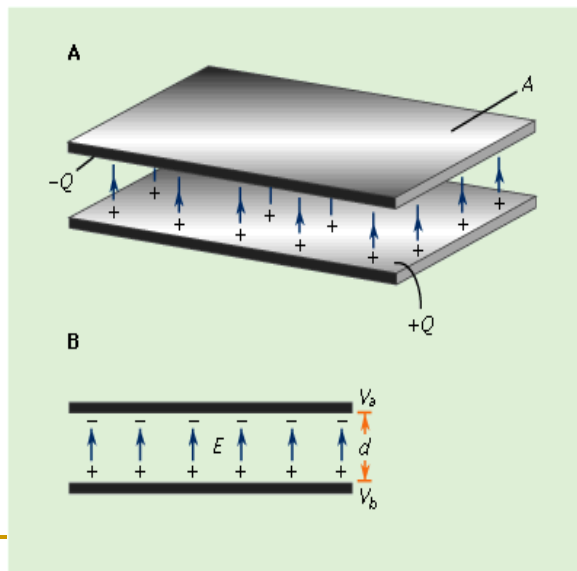
$$\% \text{ ionskog karaktera} = (1.03/6.09) \times 100 = \mathbf{17\%}$$

13. predavanje:

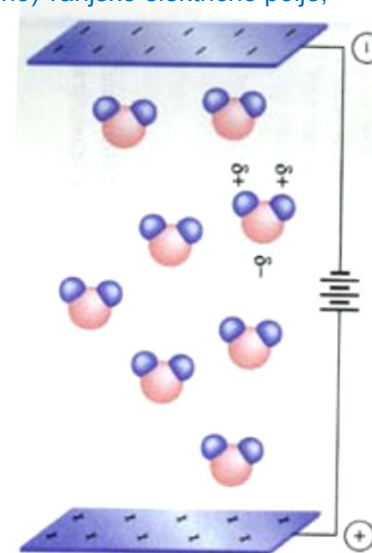
Dipolni moment se može *odrediti eksperimentalno*, mjerenjem **kapaciteta električnog kondenzatora**.



Ponašanje polarnih molekula u prostoru gdje ne djeluje (lijevo) i gdje djeluje (desno) vanjsko električno polje,



Shematski prikaz kondenzatora.



13. predavanje:

Ovisnost vrelišta tvari o masama molekula.

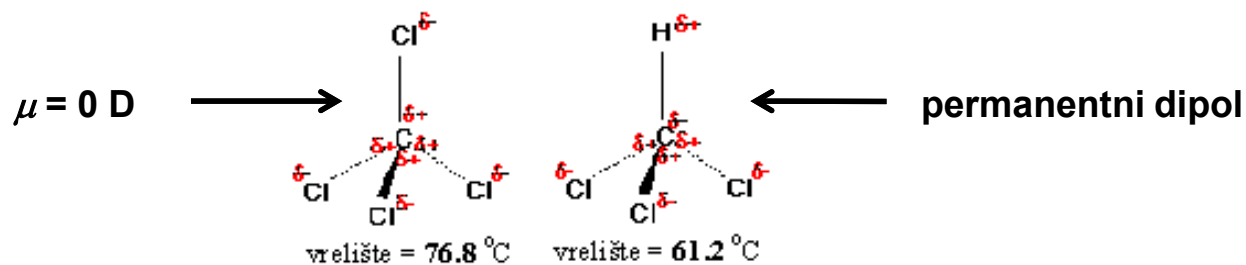
Tvar	Molna masa $M/\text{g mol}^{-1}$	Normalno vrelište $T_v/[\text{K}]$
Propan	44	231
Dimetil eter	46	248
Klorometan	50	249
Acetaldehid	44	294
Acetonitril	41	355

13. predavanje:

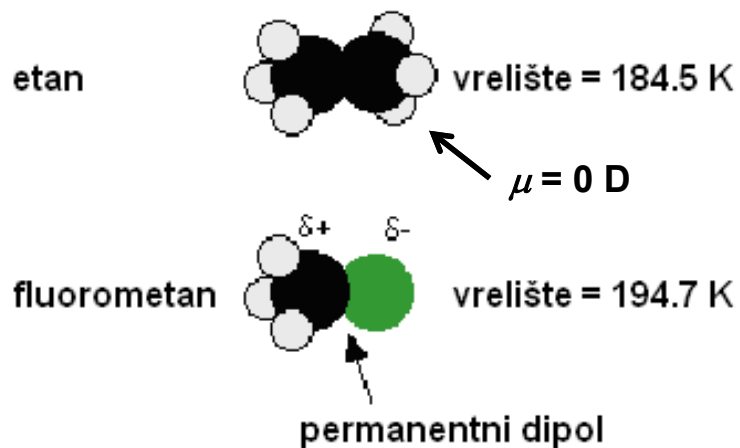
Ovisnost vrelišta tvari o njihovom stalnom (permanentnom) dipolnom momentu koji nastaje kao posljedica razdvajanja naboja u molekulama odnosno djelovanja međumolekulnih sila.

Tvar	Molna masa $M/\text{g mol}^{-1}$	Dipolni moment $\mu/[\text{D}]$	Normalno vrelište $T_v/[\text{K}]$
Propan	44	0.1	231
Dimetil eter	46	1.3	248
Klorometan	50	2.0	249
Acetaldehid	44	2.7	294
Acetonitril	41	3.9	355

13. predavanje:



Zašto tako mala razlika u vrelištima?



Zašto tako mala razlika u vrelištima?

13. predavanje:

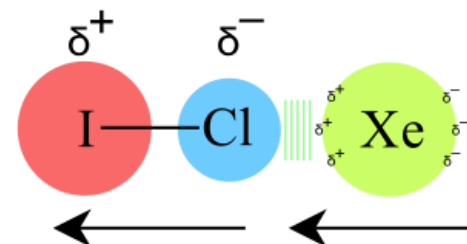
Induktivne sile i disperzija (Londonove disperzijske sile)



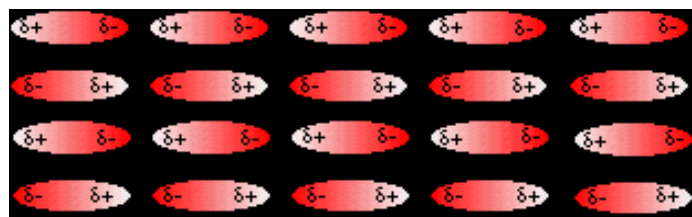
↑
kratkoživući
dipol



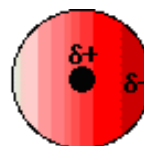
↑
kratkoživući
dipol



13. predavanje:



neon



kсенon

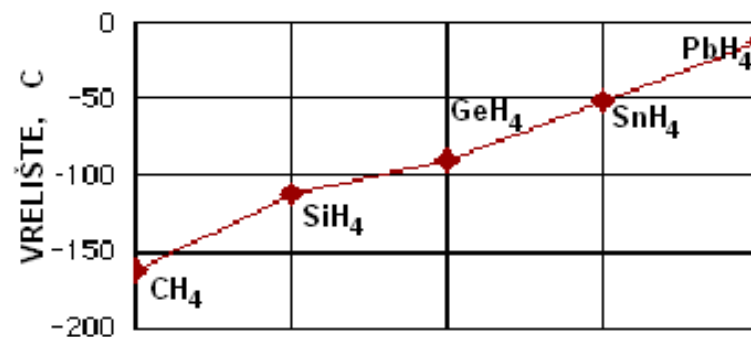
Element

Helij
Neon
Argon
Kripton
Ksenon
Radon

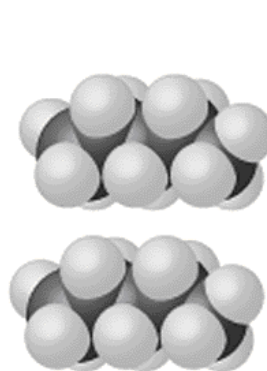
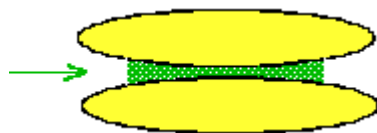
Vrelišče, °C

-269
-246
-186
-152
-108
-62

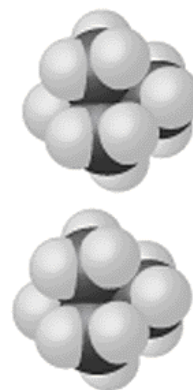
13. predavanje:



Područje dodira



n-Pentan
(t.v. = 309.4 K)



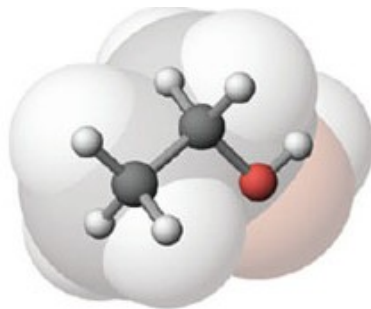
Neopentan
(t.v. = 282.7 K)



Područje dodira

13. predavanje:

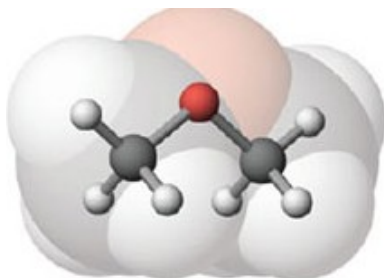
etanol



vrelišče = **78.5** °C

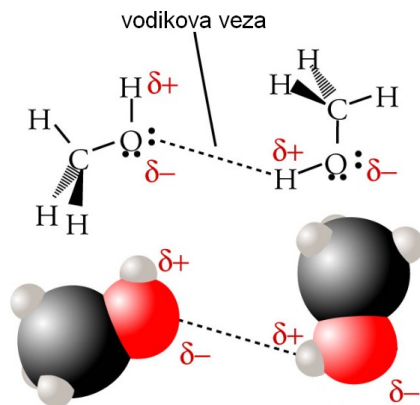
Zašto?

dimetil eter



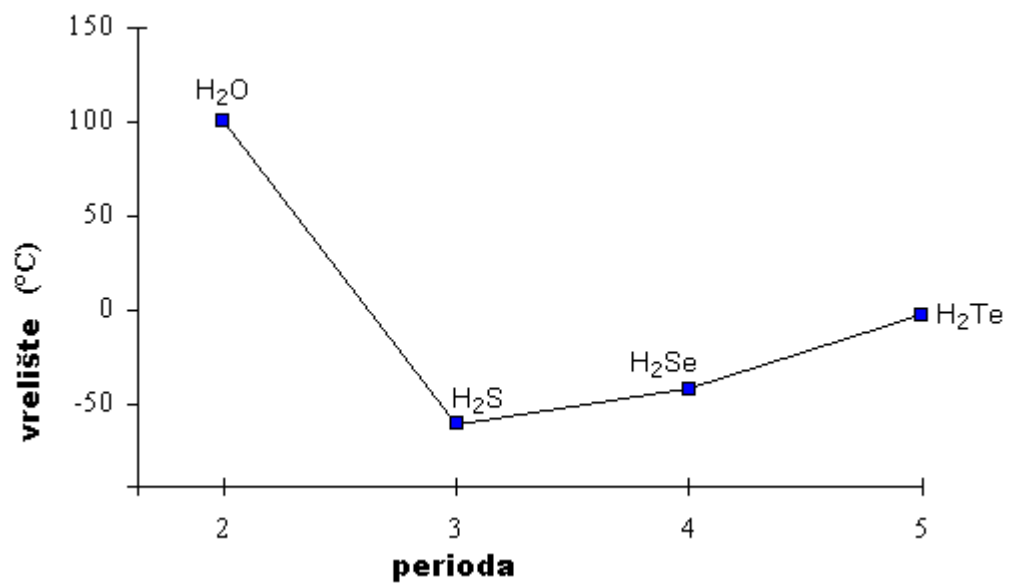
vrelišče = **-24.8** °C

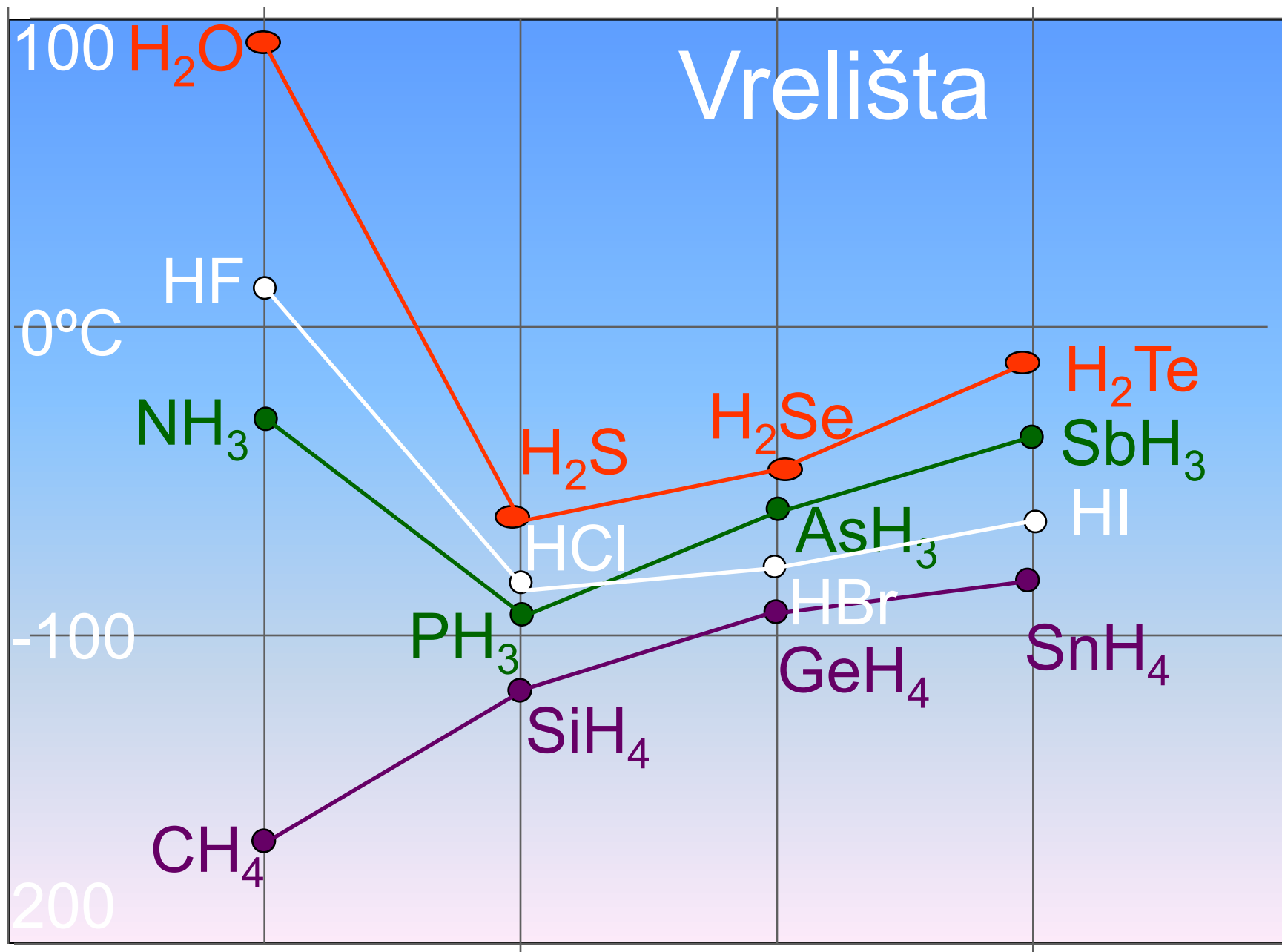
U alkoholu se stvaraju vodikove veze.



13. predavanje:

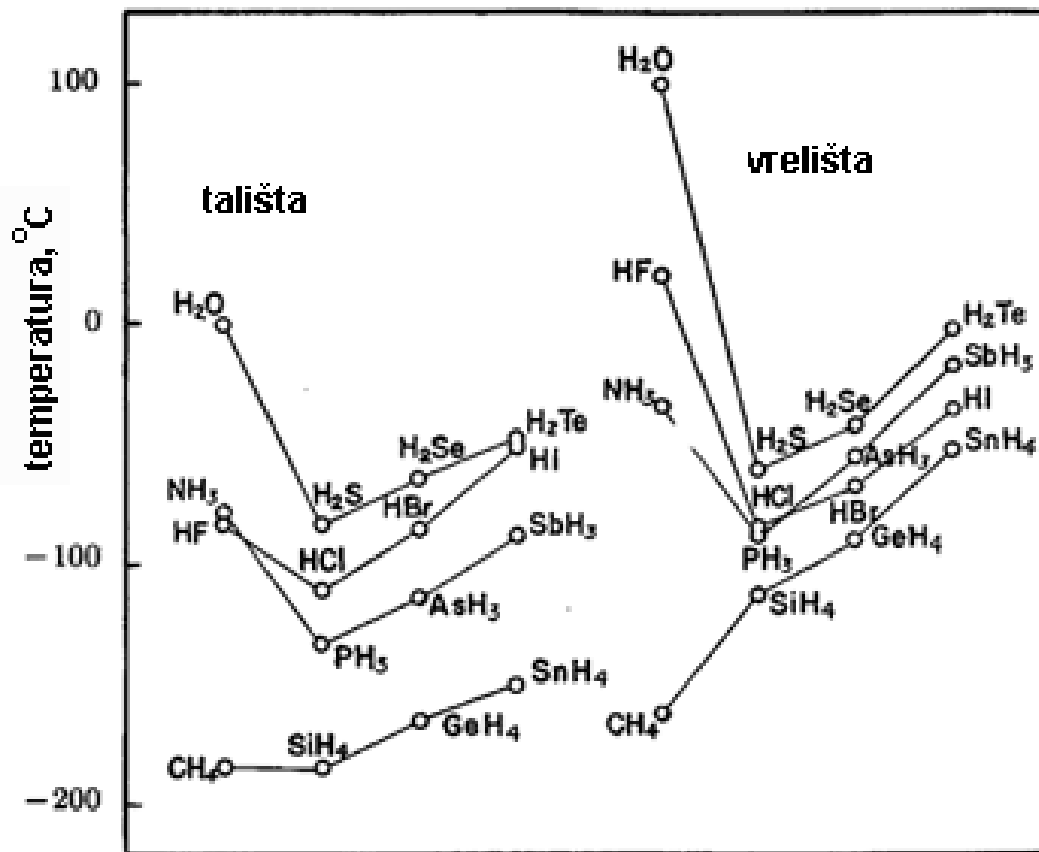
Vrelišta spojeva homolognog niza malih molekula koje sadrže vodikove atome.





13. predavanje:

Tališta i vrelišta spojeva pokazuju koje međumolekulne sile djeluju između molekula homolognih nizova malih molekula koje sadrže vodikove atome.



Odstupanja od linearnosti su posljedice **vodikovih veza**.

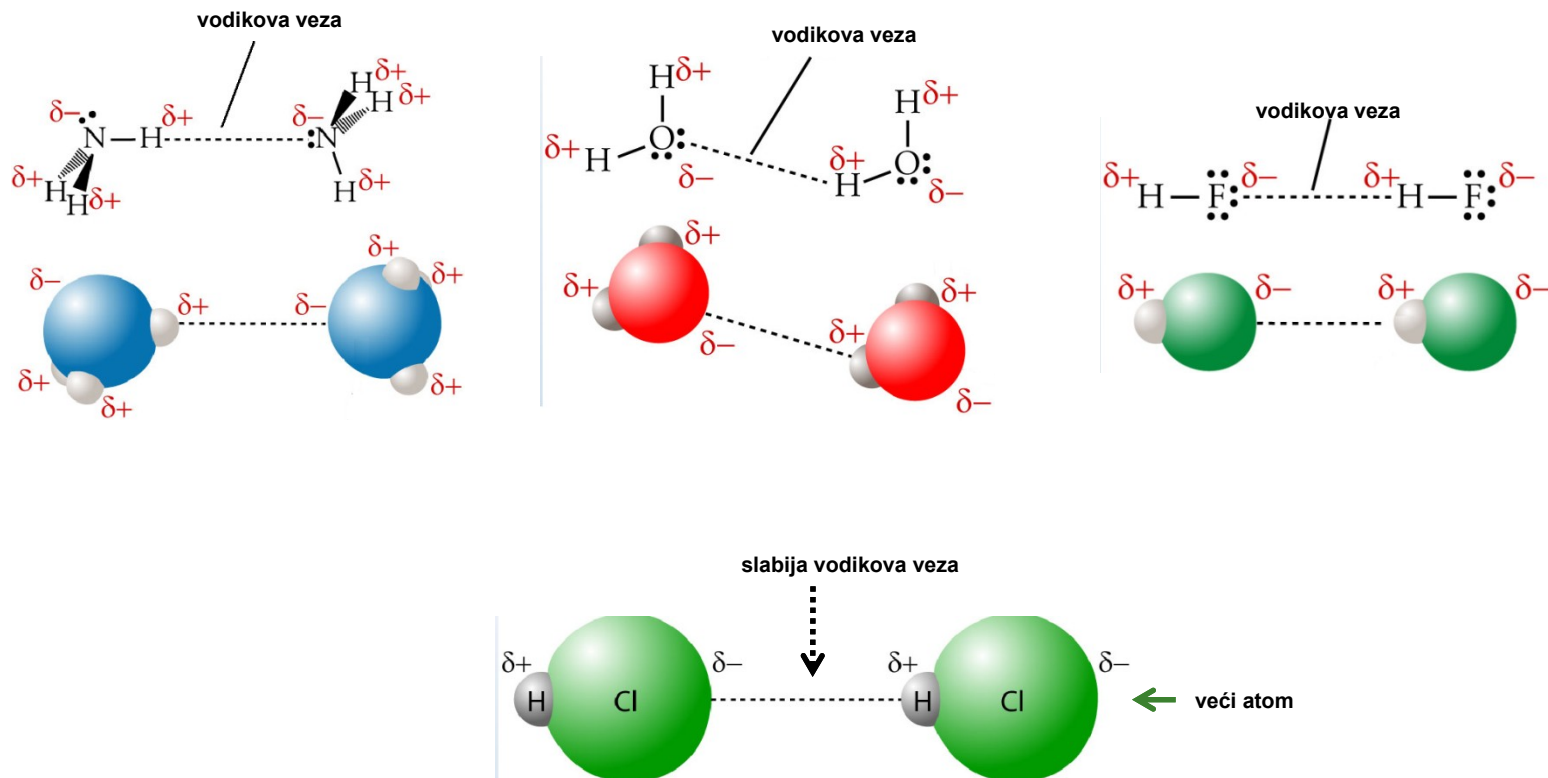
13. predavanje:

Vodikove veze

Vodikove veze čine spojevi u kojima je vodikov atom vezan na atom elementa **Va**, **VIIa** ili **VIIIa** skupine periodnog sustava elemenata, s kojim vodikov atom tvori izrazito polarnu vezu.

S elementima druge periode; **N**, **O**, **F**, vodik pravi izrazito polarnu vezu zato jer:

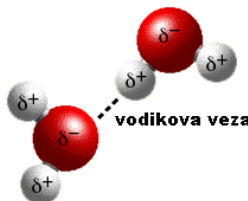
1. N, O i F imaju **veliku elektronegativnost**
2. atomi N, O i F su **maleni** pa im se vodik može dovoljno približiti.



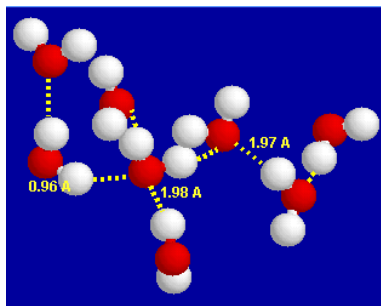
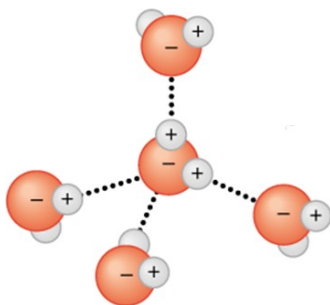
13. predavanje:

Zbog male energije vezivanja od samo $\sim 10\text{-}20 \text{ kJ mol}^{-1}$, vodikova veza je obično svrstavana u **nekemijske** veze.

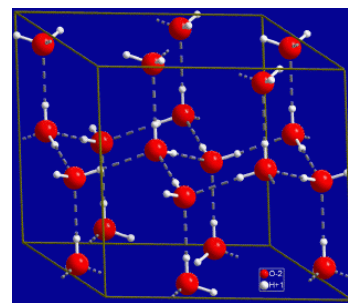
Moderno razumijevanje kemije vodika smješta klasičnu vodikovu vezu u ekstrem **pravog, kemijskog vezivanja vodika s više nego jednim atomom**, a vezivanje dviju molekula vode možemo promatrati kao stvaranje $(\text{H}_2\text{O})_2$ a ne kao međumolekulno (*intermolekulno*) povezivanje dviju molekula.



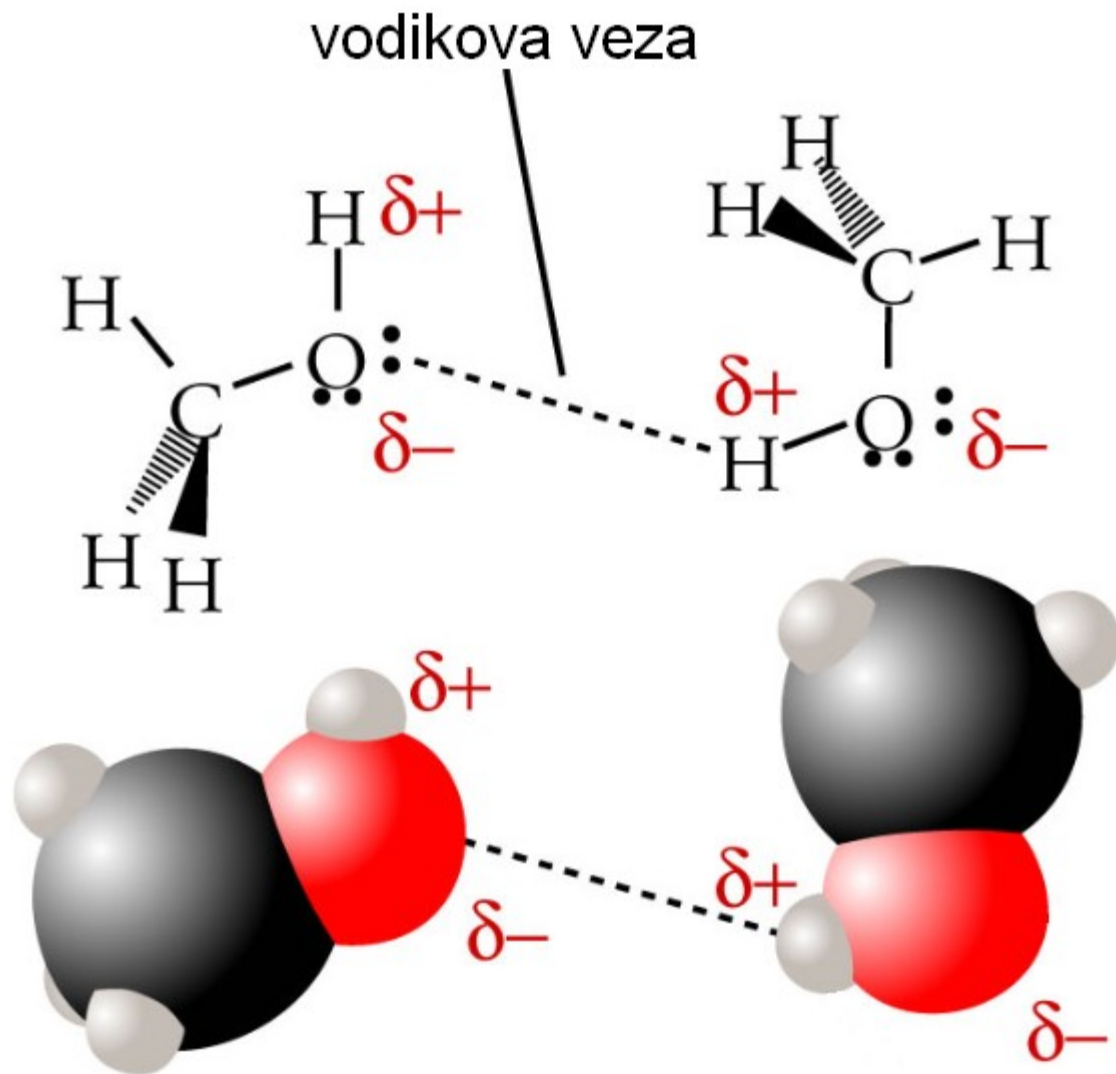
Vodikove veze mogu biti usmjerene i **prostorno**



$\text{H}_2\text{O}(\text{l})$

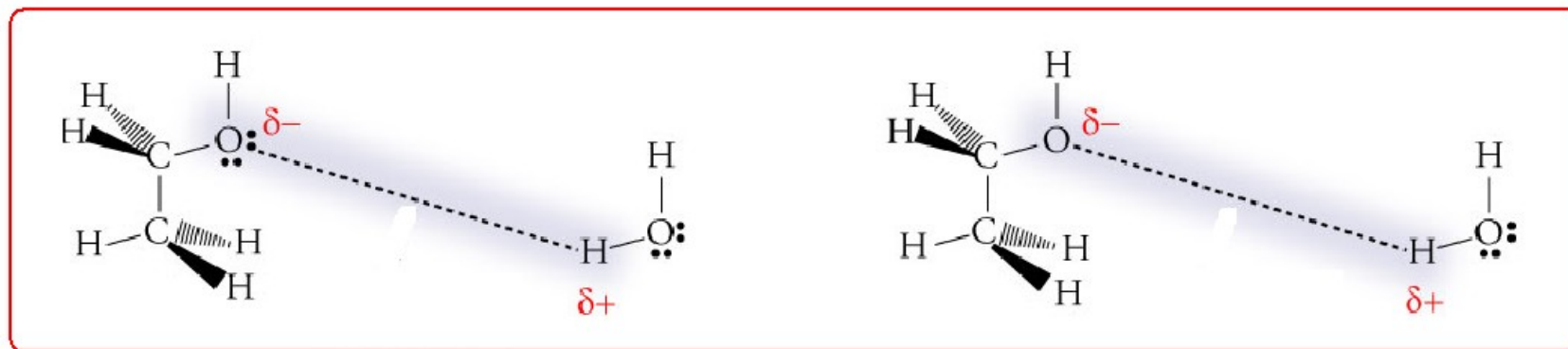
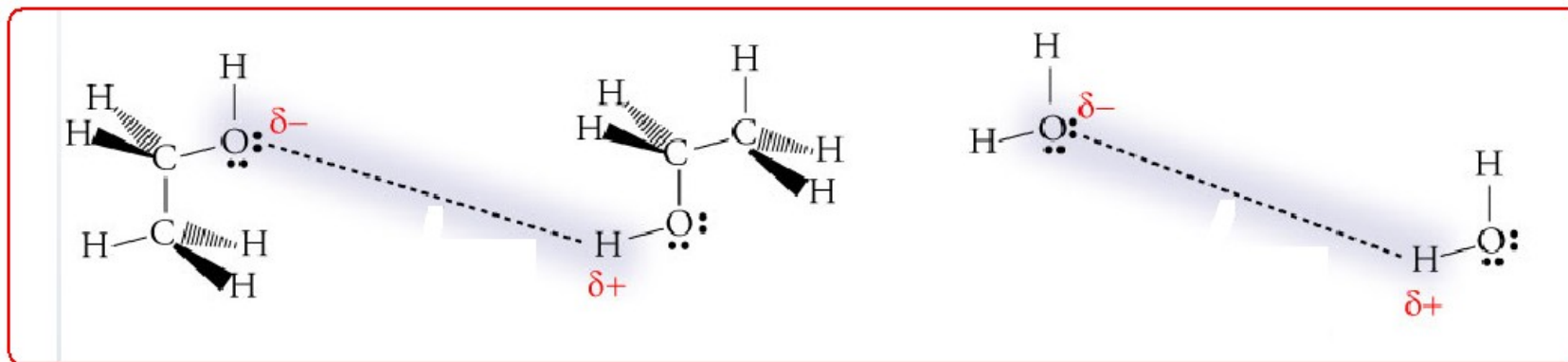


$\text{H}_2\text{O}(\text{s})$



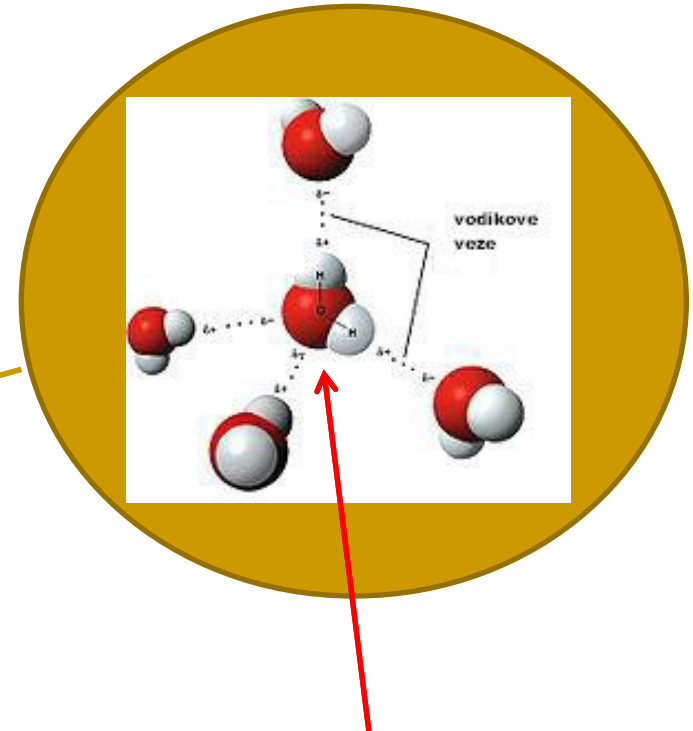
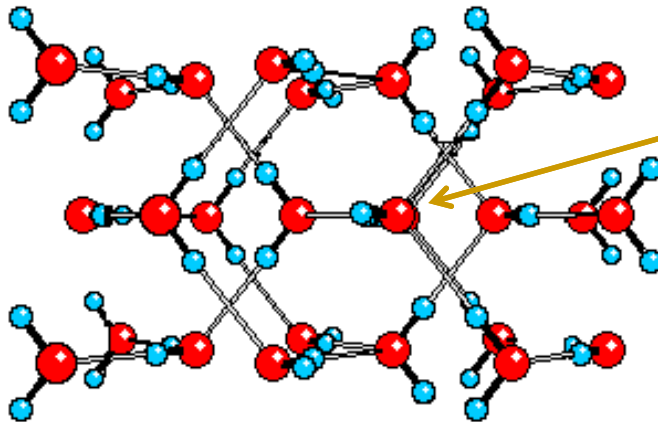
13. predavanje:

U smjesi etanola i vode, stvaraju se vodikove veze između istovrsnih i raznovrsnih molekula.



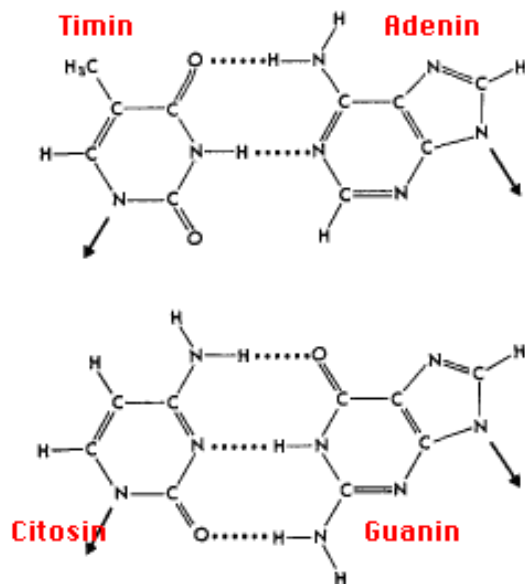
13. predavanje:

Nemoguće je prenatglasiti važnost vodikovih veza!

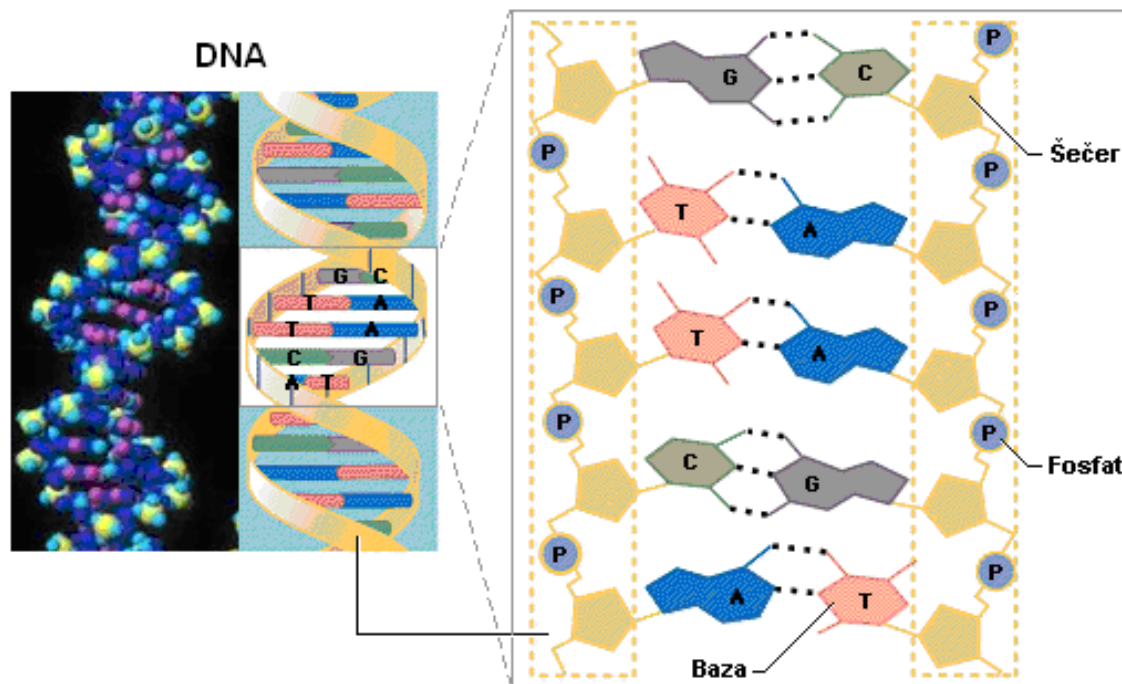


sp^3 hibridizacija kisikovog atoma u vodi.

13. predavanje:

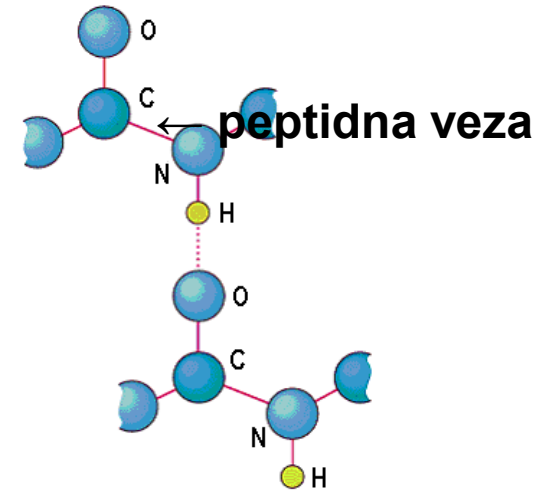
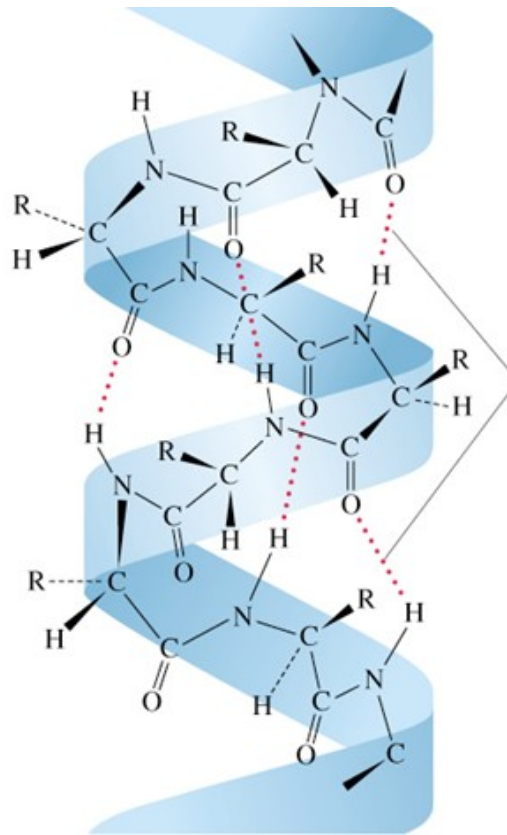
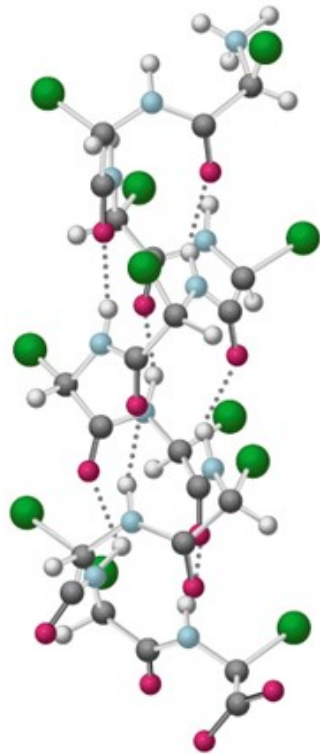


Vodikova veza ima izuzetnu važnost u *biološkim sustavima* gdje čini jedan od najvažnijih načina **međumolekulnog vezivanja** biološki važnih molekula kao što su *nukleotidne (dušične) baze u DNA*, *aminokiseline u peptidnim vezama bjelančevina*, itd.



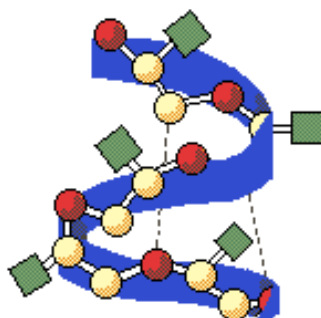
DNA molekula se sastoji od nosećeg **kostura** sačinjenog od **šećera i fosfata**, te **4 nukleotidne baze**: adenina (A), timina (T), citozina (C), i guanina (G). **Genetski kod je specificiran redom nukleotidnih baza**, a svaki gen posjeduje jedinstvenu sekvencu parova baza. Znanstvenici koriste te sekvence baza za smještanje gena na kromosomima i za konstruiranje mape cjelokupnog ljudskog genoma. **Heliksna struktura DNA temelji se na brojnim vodikovim vezama** kako je to pokazano na slici.

13. predavanje:



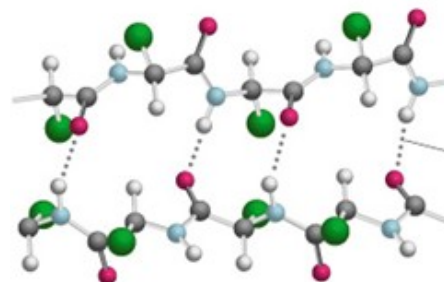
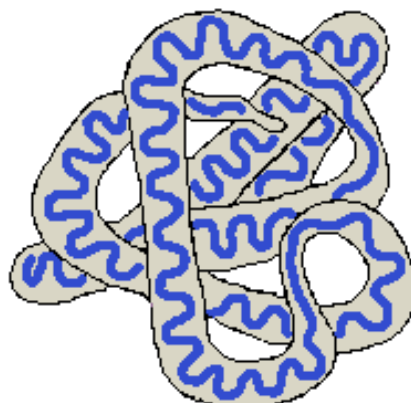
**intramolekulne
vodikove veze**

Aminokiselina

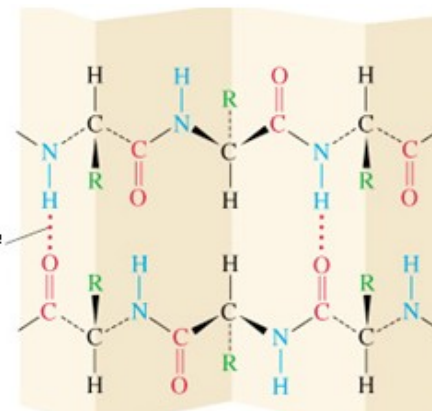


Bjelančevine se savijaju u **sekundarne** strukture stvaranjem vodikovih veza između susjednih amino-kiselina u polipeptidnim sekvencama (primarne strukture bjelančevina)

Bjelančevinska trodimenzionalna **terma** struktura nastaje sličnim interakcijama aminokiselina na različitim mjestima namotaja sekundarne strukture

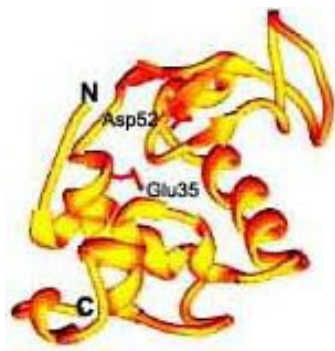


intermolekulne vodikove veze

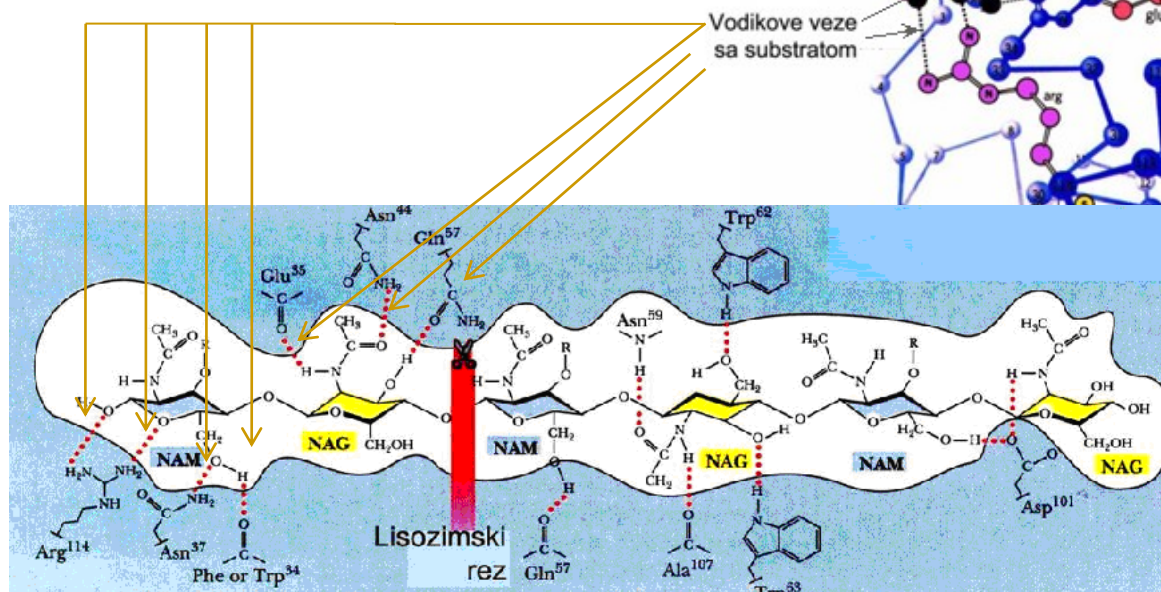
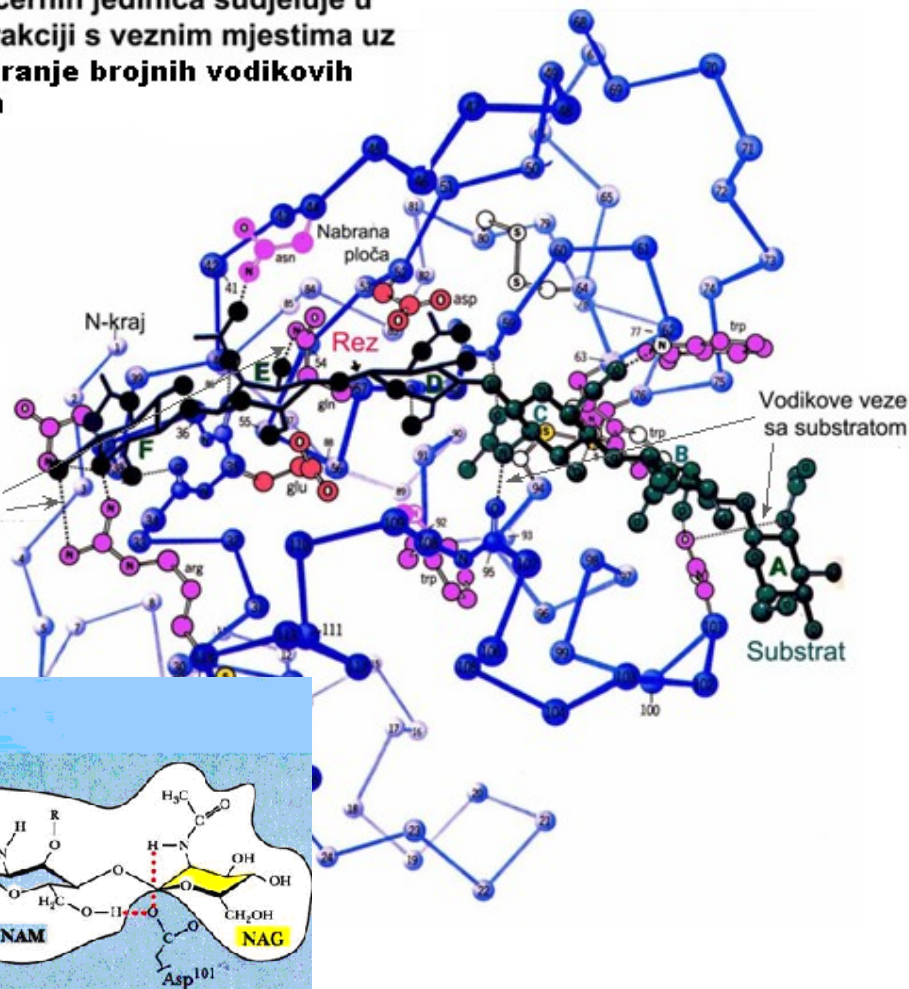


13. predavanje:

Lizozim je enzim koji specifično prepoznaje substrat i **kida glikozidnu vezu**.

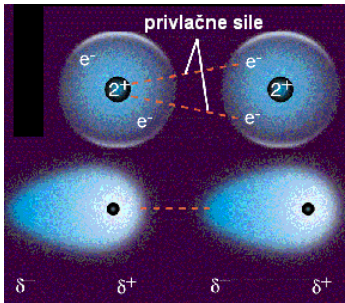


6 šećernih jedinica sudjeluje u interakciji s veznim mjestima uz stvaranje brojnih vodikovih veza



13. predavanje:

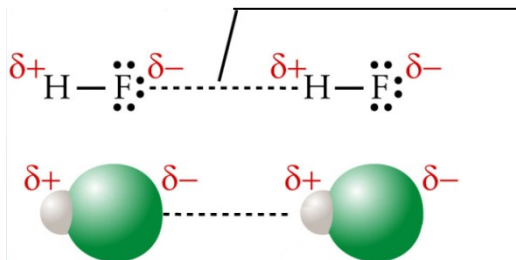
Međumolekulne (sile) veze



1. Inducirani dipolni moment – Londonove disperzijske sile.



2. Stalni dipolni moment – van der Waalsove sile.



3. Vodikove veze

13. predavanje:

Odnos energije međumolekulnih privlačenja (kJ mol ⁻¹) za neke jednostavne molekule						
MOLEKULA	μ/De	α^*	DIPOL-DIPOL	DIPOL- INDUCIRANI DIPOL	DISPERZIJA	UKU PNO
H ₂	0	0.80	-	-	1.6	1.6
Ar	0	1.63	-	-	8.5	8.5
N ₂	0	1.73	-	-	7.8	7.8
CH ₄	0	2.60	-	-	11.3	11.3
Cl ₂	0	4.50	-	-	30.9	30.9
CO	0.12	1.93	-	0.008	8.7	8.7
HI	0.38	5.40	0.025	0.113	25.8	26.0
HBr	0.78	3.58	0.685	0.502	21.9	23.1
HCl	1.03	2.63	3.30	1.00	16.8	21.1
NH ₃	1.5	2.21	13.30**	1.55	14.7	29.6
H ₂ O	1.84	1.48	36.30**	1.92	9.0	47.2

*Polarizabilnost

** Uključuje i vodikovu vezu.

13. predavanje:

Zaključno o međumolekulnim silama

