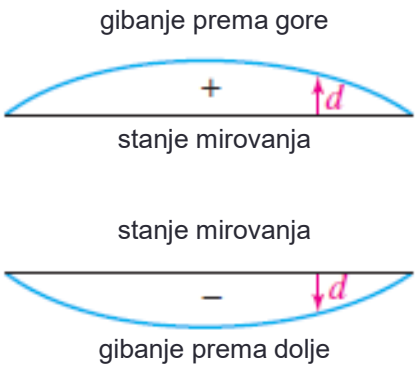
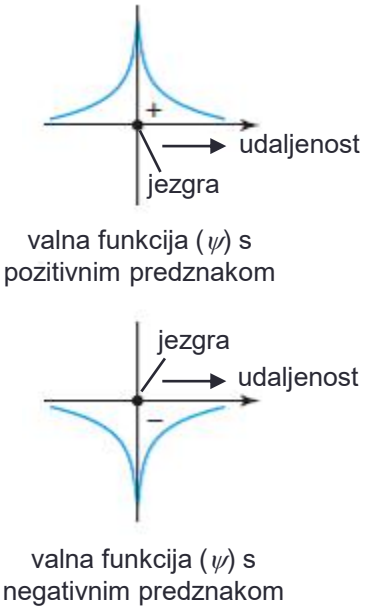
Valna svojstva elektrona u orbitalama

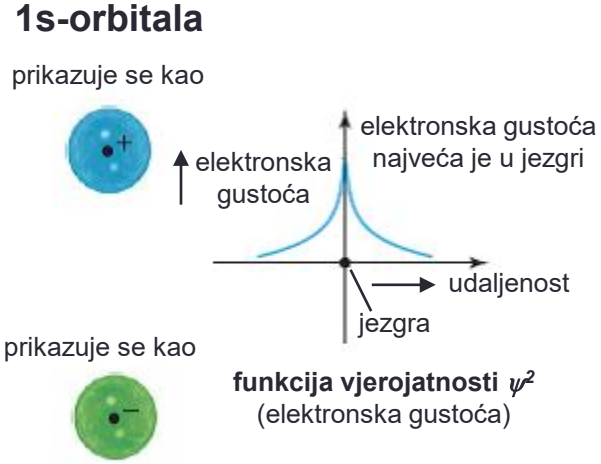
- Svojstva elektrona u atomima mogu se bolje opisati na osnovi njihove valne prirode (L. de Broglie).
- Ponašanje elektrona u atomu može se opisati Schrödingerovom jednadžbom čija rješenja su valne funkcije (ψ). Valna funkcija za elektron u atomu naziva se **atomska orbitala** (1s, 2s, 2p,…) (opisuje dio prostora u kojem postoji velika vjerojatnost pronalaženja elektrona).
- Elektron u atomskoj orbitali predočuje *stojni val* (stojni valovi titraju na određenom mjestu, npr. val koji nastaje trzanjem žice na gitari).

Stojni val (titranje žice na gitari) – osnovna vibracija žice na gitari



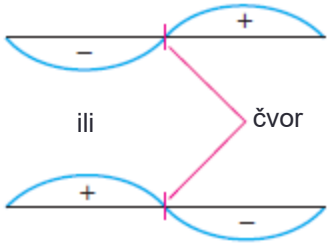


1s-orbitala



STRUKTURA I SVOJSTVA ORGANSKIH MOLEKULA

Prvi harmonik žice na gitari. Dvije polovice žice na gitari razdijeljene su *čvorom* (točkom u kojoj nema gibanja ni u + ni u – smjeru), a njihovo titranje je u protufazi

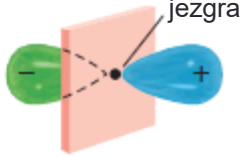


2p-orbitala

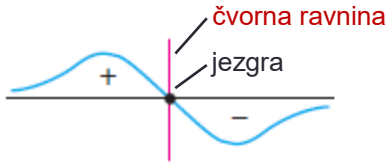


valna funkcija
(trenutačna slika)

prikazuje se kao

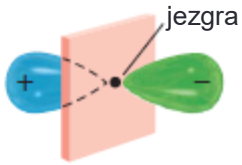


čvorna ravnina



ekvivalentna valna funkcija
(trenutačna slika)

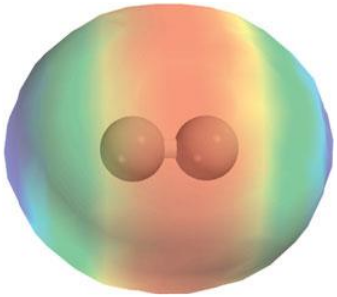
prikazuje se kao



čvorna ravnina

- Zbrajanjem i oduzimanjem valnih funkcija atomskih orbitala dobivaju se valne funkcije novih orbitala i taj se postupak naziva **linearna kombinacija atomskih orbitala** (LCAO).
- Kombinacijom orbitala **različitih** atoma nastaju **molekulske orbitale** (MO) koje pokazuju vezna ili protuvezna međudjelovanja.
- Kombinacijom orbitala **istoga** atoma nastaju **hibridne atomske orbitale** kojima je definirana geometrija veza.
- Broj nastalih orbitala (molekulskih ili hibridnih) jednak je broju početnih orbitala.

Molekulske orbitale



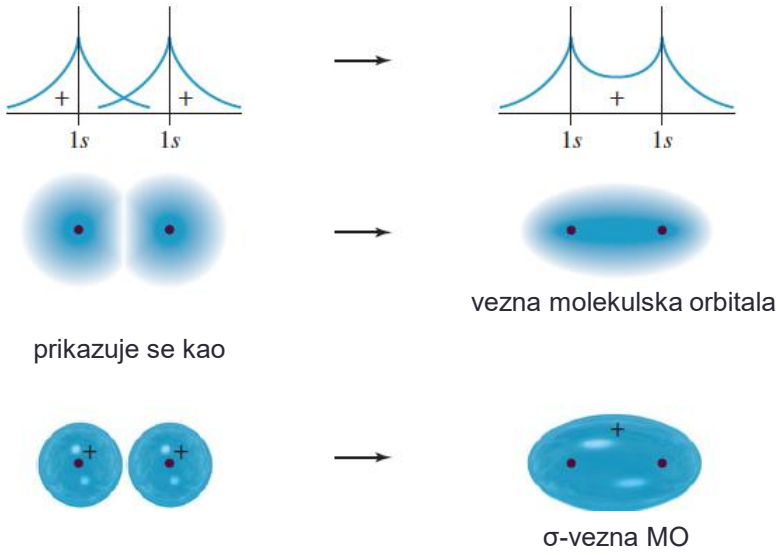
Mapa elektrostatskog potencijala (MEP) molekule vodika

- **Duljina veze** – optimalna udaljenost između jezgara pri kojoj su privlačenja i odbijanja uravnotežena, a sadržaj energije najmanji.

Molekula vodika – sigma (σ) veza

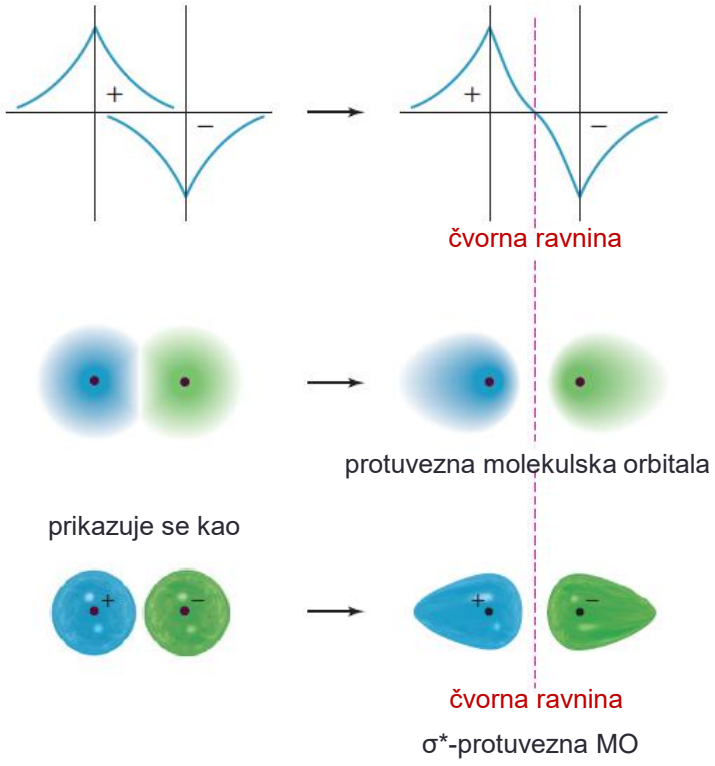
- Valne funkcije 1s vodikovih atoma mogu se kombinirati *konstruktivno* i *destruktivno*.
- *Konstruktivnim* prekrivanjem valnih funkcija vodikovih atoma nastaje **vezna molekulska orbitala** (vezna MO).

Nastajanje σ-vezne MO

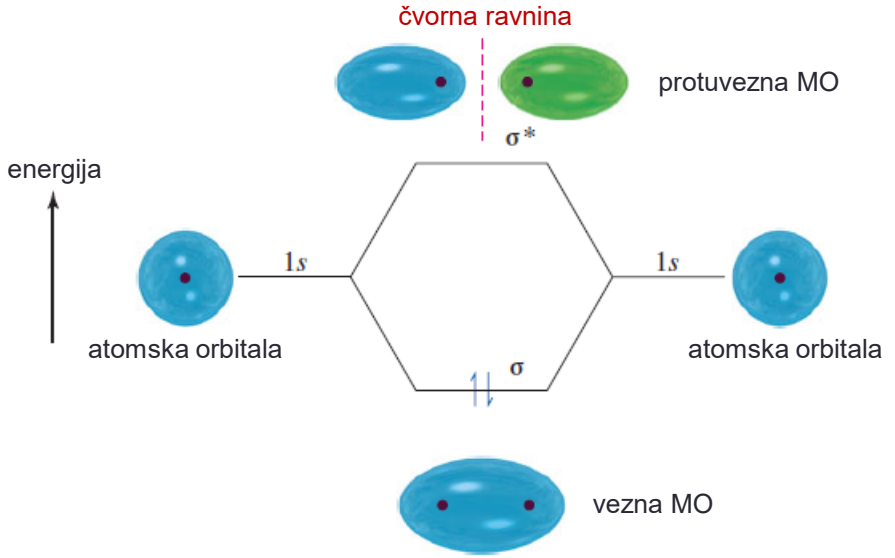


- *Destruktivnim* prekrivanjem valnih funkcija vodikovih atoma nastaje **protuvezna molekulska orbitala** (protuvezna MO).

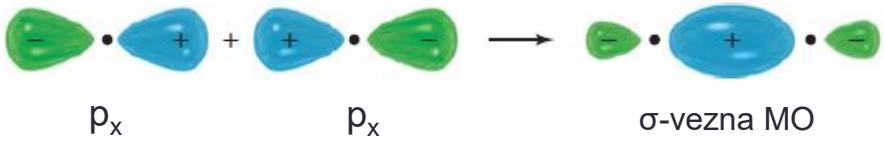
Nastajanje σ*-protuvezne MO



Relativne energije atomskih i molekulskih orbitala molekule H_2

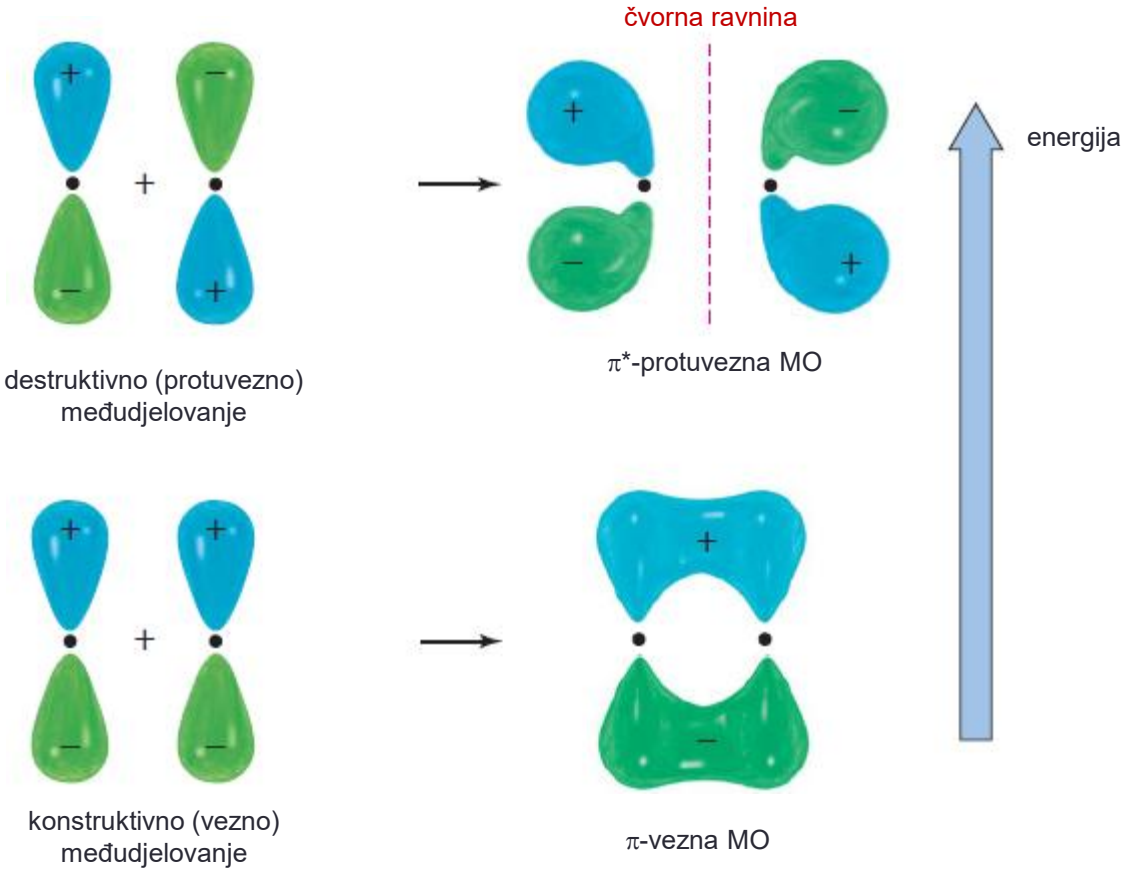


σ-prekrivanje p-orbitala



Pi (π) veza

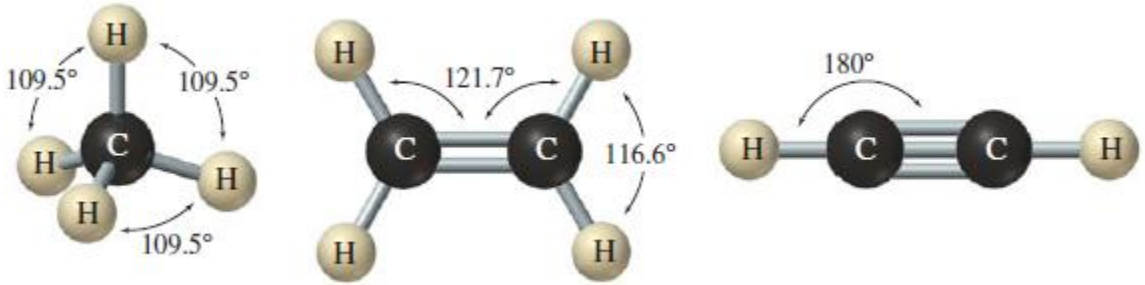
π-vezne i protuvezne molekulske orbitale



- Dvostruku vezu čine jedna σ- i jedna π-veza.

Hibridizacija i oblici molekula

Uobičajeni vezni kutovi u organskim spojevima (oko 109°, 120° ili 180°)



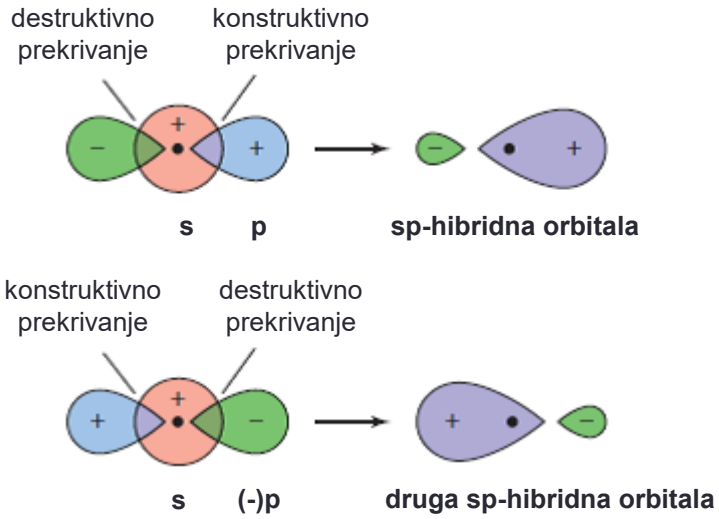
metan (109,5°) **eten (~120°)** **etin (~180°)**

- **Teorija odbijanja elektronskih parova valentne ljuske ili teorija VSEPR** (*engl.* valence-shell electron-pair repulsion theory) – elektronski parovi se uzajamno odbijaju pa su veze i osamljeni elektronski parovi razmaknuti za najveće moguće kutove.

- s- i p-orbitale se kombiniraju u **hibridne orbitale** u kojima su elektronski parovi maksimalno udaljeni, a većina elektronske gustoće se nalazi između jezgara.

sp-hibridne orbitale

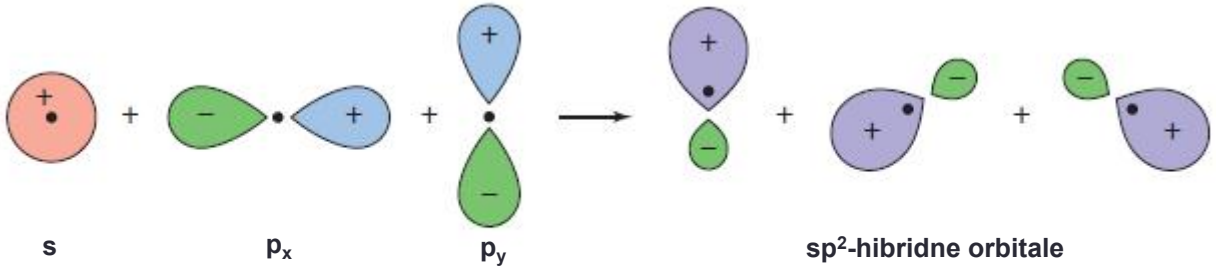
Nastajanje sp-hibridnih orbitala (linearna geometrija)

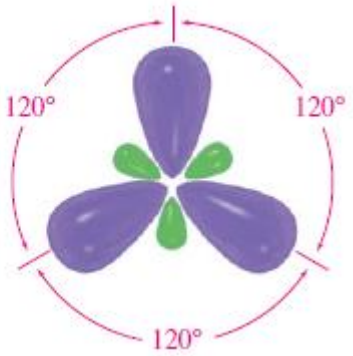


- Međudjelovanjem (hibridizacijom) jedne s- i jedne p-orbitale nastaje par suprotno usmjerenih sp-hibridnih orbitala.
- sp-hibridizacija rezultira linearnom geometrijom (vezni kutovi su 180°).

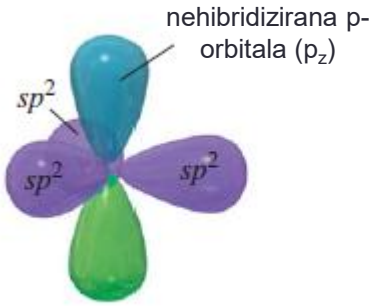
sp^2-hibridne orbitale

Nastajanje sp^2-hibridnih orbitala (trigonska geometrija)





tri ujedinjene sp^2-hibridne orbitale

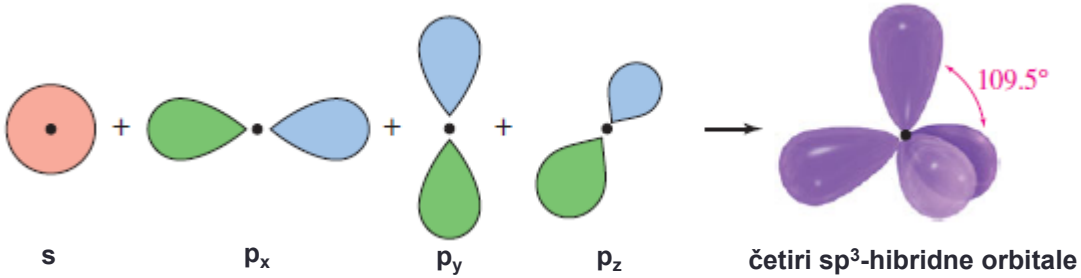


sp^2-hibridizirani ugljikov atom

- Međudjelovanjem (hibridizacijom) jedne s- i dvije p-orbitale nastaju tri sp^2-hibridne orbitale koje imaju planarnu trigonsku geometriju (vezni kutovi su oko 120°).

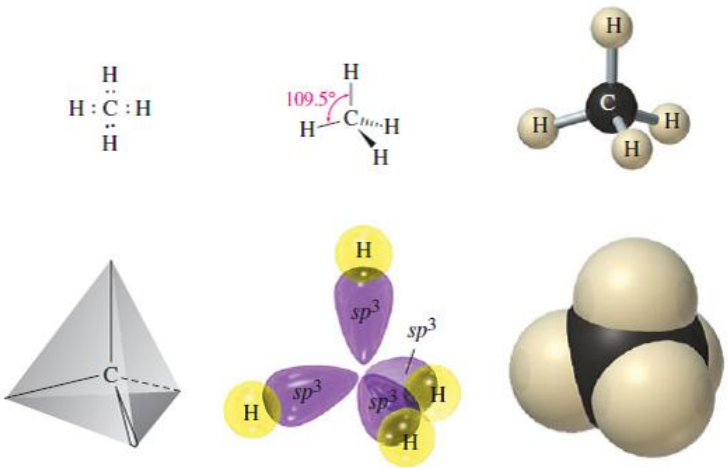
sp^3-hibridne orbitale

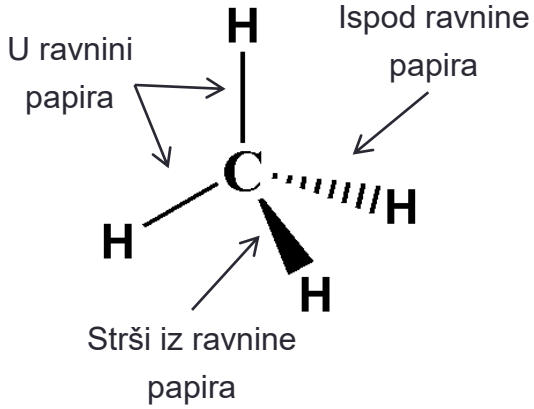
Nastajanje sp^3-hibridnih orbitala (tetraedarska geometrija)



- Međudjelovanjem (hibridizacijom) jedne s- i sve tri p-orbitale nastaju četiri sp^3-hibridne orbitale tetraedarske geometrije (vezni kutovi iznose 109,5°).

Prikazi tetraedarske geometrije metana





KLINASTA FORMULA

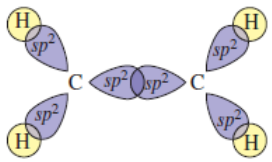
Opća pravila za hibridizaciju i geometriju

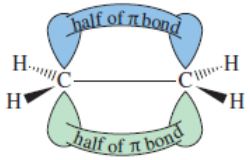
- U hibridnu orbitalu mogu ući σ-vezni elektroni i osamljeni elektronski parovi. Broj hibridnih orbitala može se izračunati zbrajanjem broja σ-veza i osamljenih elektronskih parova odgovarajućeg atoma.
- Na osnovi hibridizacije dobiva se uvid o najvećem mogućem veznom kutu (osamljeni elektronski parovi smanjuju odgovarajuće vezne kutove).

hibridne orbitale	hibridizacija	geometrija	približni vezni kutovi / °
2	sp	linearna	180
3	sp^2	trigonska	120
4	sp^3	tetraedarska	109,5

- Kod višestrukih veza, "prva" veza je σ-veza nastala prekrivanjem hibridnih orbitala. "Druga" veza je π-veza nastala bočnim prekrivanjem nehibridiziranih p-orbitala, a "treća" veza (uključena u trostruku vezu) je druga π-veza, koja je okomita na prvu π-vezu.

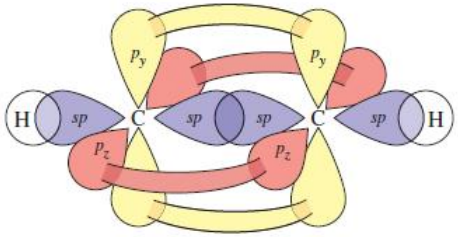
Planarna geometrija etena

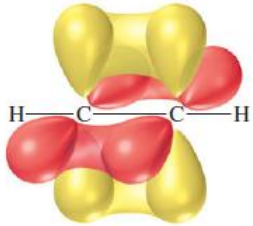






Linearna geometrija etina





Usporedba duljina i energija veza

veza	duljina (pm)	energija (kJ mol^{-1})
C-C	154	348
C=C	134	614
C≡C	120	839

