

# Vodikova veza

« Fizika čvrstog stanja »

Ivo Batistić

Fizički odsjek, PMF  
Sveučilište u Zagrebu

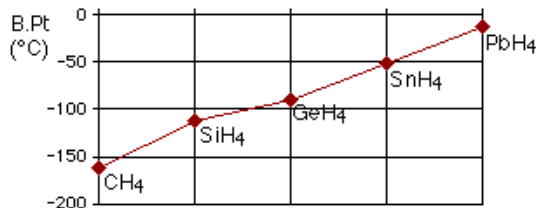
predavanja 2014/2015 (zadnja inačica 5. siječnja 2015.)

Vodikova veza

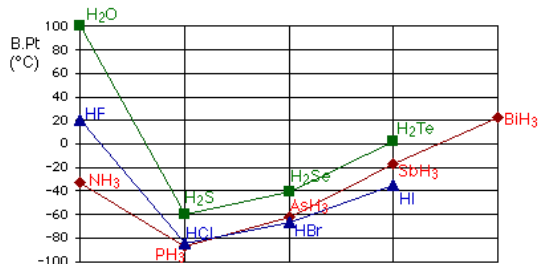
# Vodikova veza

- ▶ Vodikova veza se pojavljuje kao **dodatna vrsta veze** u tvarima građenim od vodika i elektronegativnih elemenata (F,Cl,N,O...).
- ▶ Vodikova veza je jača od VdW veze, energija vezanja je reda veličine 0.1-0.5 eV (desetina jačine kovalentne veze).
- ▶ Vodikova veza ima osobinu usmjerenosti ( $\sim$  kovalentna veza).
- ▶ Vodik može stvoriti samo jednu kovalentnu vezu. Druga veza koju vodik stvara s drugim atomom jest **vodikova veza**.
- ▶ Jedna od posebnosti vodika je da je u ioniziranom stanju (proton) dimenzije  $10^{-5}$  puta manji od drugih atoma.  
⇒ može prići blizu drugim negativno nabijenim ionima.

# Vodikova veza



Temperatura vrenja za 4. grupu elemenata s vodikom (XH<sub>4</sub>)



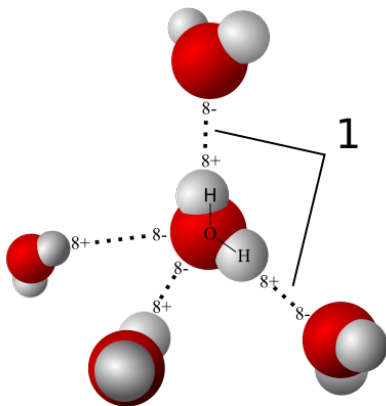
Temperatura vrenja za 5., 6. i 7. grupu elemenata s vodikom (XH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>X, HX)

# Vodikova veza

- ▶ Uočava se da je temperatura vrenja za spojeve  $\text{NH}_3$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{HF}$  povećana što je indikacija jače veze među molekulama.
- ▶ U tim je spojevima vodik je kovalentno vezan drugim elektronegativnim ionom. Ipak elektroni u vezi pretežno se nalaze na elektronegativnim ionima, a vodik djeluje kao točkasti pozitivni naboj.
- ▶ Elementi N, O i F imaju dodatne elektronske parove koji **ne sudjeluju u kovalentnim vezama** a usmjereni su približno u vrhove tetraedra.
- ▶ Točkasti vodikov atom može se kulonski vezati s **neiskorištenim** elektronskim oblacima (parovima) okolnih molekula.
- ▶ Vezanje može biti jako jer proton može prići blizu drugoj molekuli.

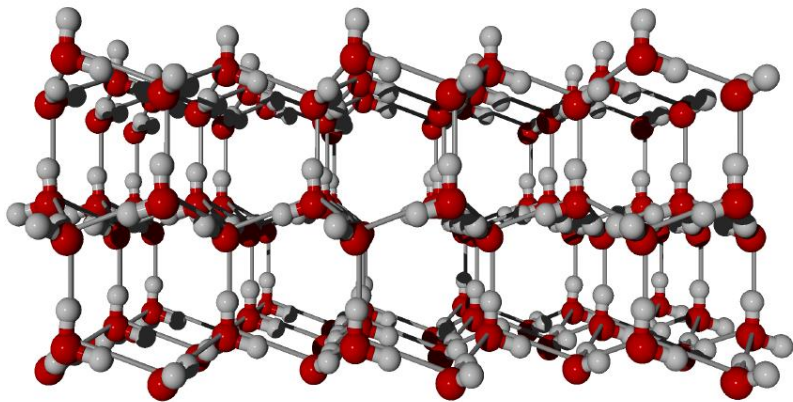
# Vodikova veza

Voda je idealni spoj za stvaranje vodikove veze: dva vodika na dva elektronska oblaka na kisicima.



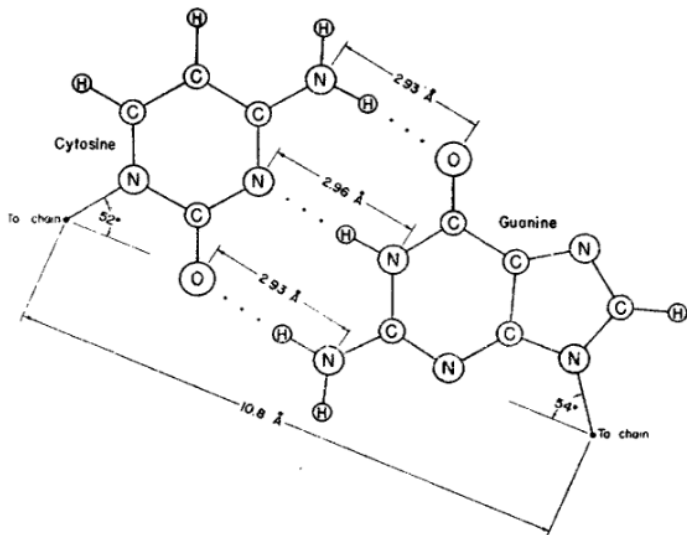
# Vodikova veza u kristalu leda

Na slici je jedna od mnogobrojnih kristalnih struktura leda u čijem formiranju sudjeluje vodikova veza.



Vodikova veza se pojavljuje u velikom broju organskih spojeva, uključujući i DNA.

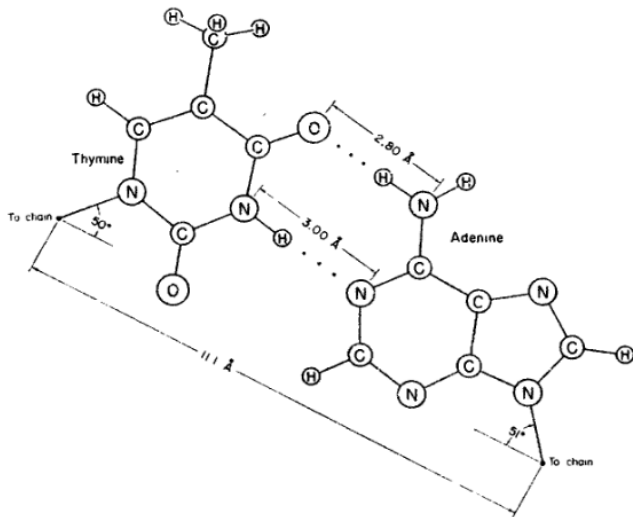
# Vodikova veza u DNA



Vežanje molekule citozina i gvanina preko triju vodikovih veza u DNA.



# Vodikova veza u DNA



Vežanje molekule adenina i timina preko dvije vodikove veze u DNA.

# Vodikova veza

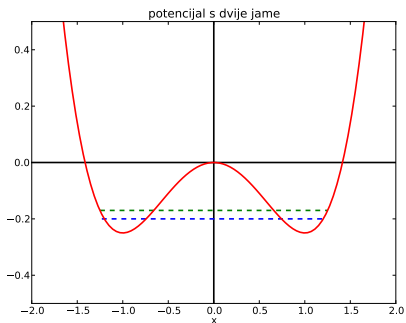
- ▶ Ne postoje čiste kovalentne ili ionske veze
- ▶ Valna funkcija sadrži kao linearnu kombinaciju i kovalentnu i ionsku konfiguraciju. (Primjer  $H_2$ ).
- ▶ Ionski karakter H-O veze u vodi je oko 39%.
- ▶ Prilikom stvaranja vodikove veze s drugom molekulom (s elektronskim oblakom na kisiku) vodik se može dijelom i kovalentno vezati razmjenjujući elektrone.

Moguća su ova kvantna stanja:

1.  $O - H \quad :O$     kovalentna - ionska
2.  $O: H^+ \quad :O$     ionska - ionska
3.  $O: H - O$     ionska - kovalentna

Vodikova veza je linearna kombinacija svih tih mogućih stanja. Težinski udio pojedinih stanja u valnoj funkciji ovisi o sustavu.

# Vodikova veza



U vodikovoj vezi sam vodik ne mora biti statičan, nego se može gibati između dvaju ekvivalentnih pozicija ( $\text{H}_2\text{O}$ ). Potencijalna energija ima dvije jame. Tunneliranje dovodi do cijepanja degeneriranih stanja što doprinosi energiji kohezije.

- ▶ Potencijal u kojem se giba proton može biti simetrična dvostruka jama ( $\text{H}_2\text{O}$ ).
- ▶  $\text{H}-\text{C}\equiv\text{N} - \text{H}-\text{C}\equiv\text{N} \rightarrow$  vodikov potencijal je asimetričan.
- ▶  $(\text{HF}_2)^-$  vodik je u sredini  $\rightarrow$  simetrični potencijal s jednom jamom