

STRUKTURA ORGANSKIH MOLEKULA: VEZIVANJE UGLJENIKA U MOLEKULIMA HIBRIDIZACIJA ATOMA UGLJENIKA U MOLEKULIMA GEOMETRIJSKE OSOBINE ATOMA UGLJENIKA U MOLEKULIMA

NAPOMENE:

- 1. OVAJ PDF FAJL SADRŽI VEĆI BROJ LINKOVA NA DRUGE PDF FAJLOVE, KOJI PRIKAZUJU AKTIVNE 3D MODELE. KLIKOM NA SLIKU U OSNOVNOM PDF FAJLU, OTVARAJU SE ODGOVARAJUĆI 3D MODELI, KAO POSEBNI PDF FAJLOVI, GDE IH JE MOGUĆE ROTIRATI, UVEĆAVATI/UMANJIVATI, POMERATI, KAO I PRIVREMENO MODIFIKOVATI (MENJATI OSVETLJENJE, VIDLJIVOST, PODLOGU I DR.).**
- 2. ZBOG SUŠTINSKIH OGRANIČENJA I NESAVRŠENOSTI TRANSPARENTNIH ELEMENATA U 3D PDF FAJLOVIMA, ZAVISNO OD UGLA GLEDANJA (PRI ROTACIJI), POJEDENI ELEMENTI SE POJAVLJUJU ILI NESTAJU, A TAKOĐE SE JAVLJAJU I ARTEFAKTI U OBLIKU PIKSELIZACIJE NEKIH POVRŠINA. TI NEDOSTACI MOGU DA POSMATRAČA DOVEDU U NEDOUMICU I NA TO SE OVDE SKREĆE PAŽNJA. NETRANSPARENTNI ELEMNTI U MODELIMA PONAŠAJU SE NORMALNO.**
- 3. SVI LINKOVANI PDF FAJLOVI MORAJU BITI U ISTOM DIREKTORIJUMI SA OSNOVNIM FAJLOM, INAČE LINKOVI NE FUNKCIONIŠU.**
- 4. NIJE BILO MOGUĆE INKORPORIRATI LINKOVANE FAJLOVE U OSNOVNI FAJL, JER BI FAJL TADA BIO PREVIŠE VELIKI.**



KOVALECA JE POSEBAN TIP VEZE GDE SU DVA ATOMA MEĐUSOBNO POVEZANA PREKO JEDINOG ILI VIŠE ELEKTRONSKIH PAROVA, KOJI SU ZAJEDNIČKI ZA OBA ATOMA.

KOVALENCA IMA KARAKTERISTIČNE OSOBINE: **ENERGIJU**, **DUŽINU** KAO I **PROSTORNU USMERENOST** (ZAKLAPA ODREĐENI UGAO U PROSTORU SA DRUGIM KOVALENTNIM VEZAMA).

KOVALENCA JE REALNA FIZIČKA VELIČINA KOJA SE MOŽE PROUČAVATI RAZLIČITIM EKSPERIMENTALNIM METODAMA, A TAKOĐE I TEORIJSKI MODELOVATI KVANTNO-MEHANIČKIM SIMULACIJAMA.

KONSEKVENTNO, **KOVALENCA NIKADA NE MOŽE IMATI NEGATIVNU VREDNOST.**

KOVALENCA NEMA NIKAKVE VEZE ZA OKSIDACIONIM STANJEM (BROJEM), KOJI JE FORMALNA VELIČINA, DEFINISANA RADI RAČUNANJA STEHIOMETRIJE KOD OKSIDO-REDUKCIONIH PROCESA.

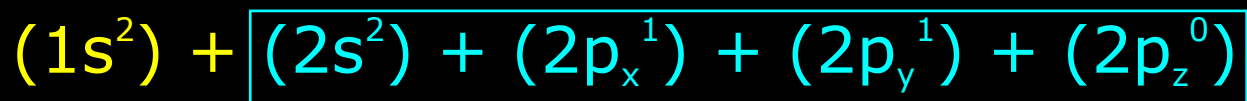
OKSIDACIONO STANJE JE, TAKOĐE FORMALNO, DEFINISANO I ZA RAZLIČITE UGLJENIKOVE ATOME U ORGANSKIM MOLEKULIMA. TAKO NPR. OKSIDACIONO STANJE UGLJENIKA U CH_4 JE **-4**, U ELEMENTARNOM UGLJENIKU (DIJAMANT, GRAFIT) JE **0** DOK JE U CO_2 **+4**. MEĐUTIM, U SVIM SLUČAJEVIMA, KOVALENCA UGLJENIKA JE ISTA, **4**.



UGLJENIKOV ATOM U MOLEKULIMA (ORGANSKIM I NEORGANSKIM) JE MAKSIMALNO I NAJČEŠĆE **ČETVORO-KOVALENTAN**.

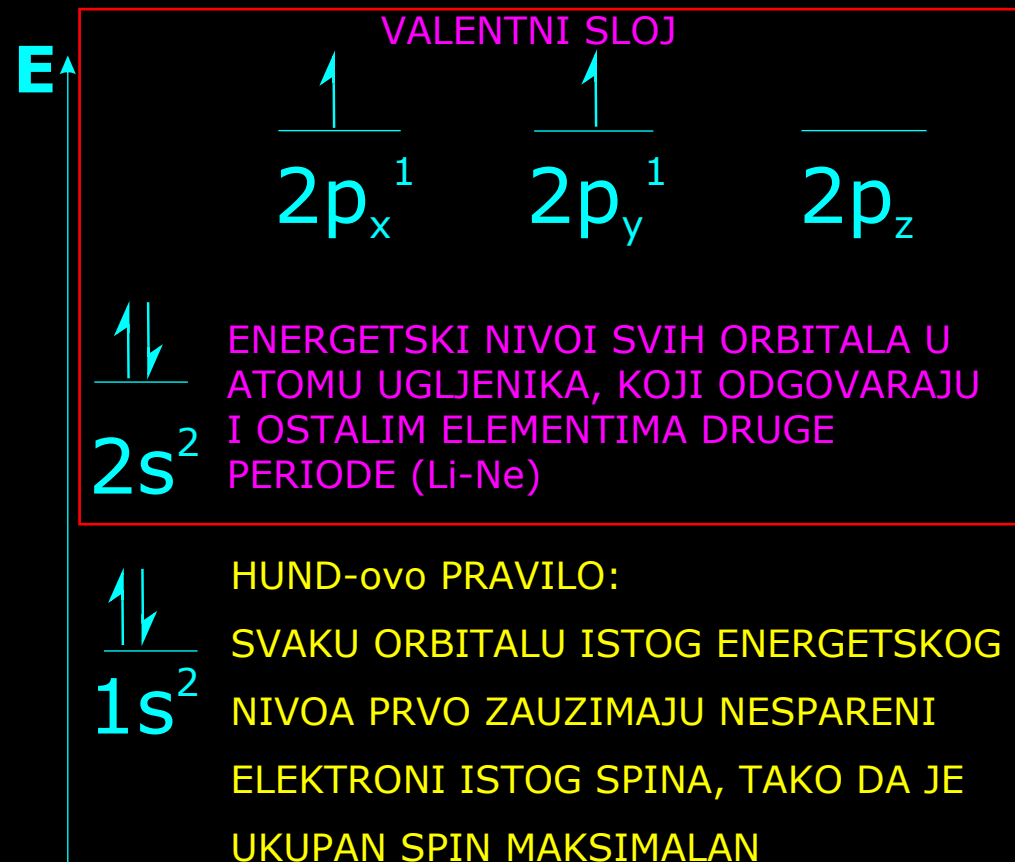
ZBOG POLOŽAJA U PERIODNOM SISTEMU, UGLJENIK, **NI TEORIJSKI NI PRAKTIČNO, NIKAKO NE MOŽE IMATI KOVALENCU VEĆU OD 4** (5 ILI VIŠE)!

ELEKTRONSKA KONFIGURACIJA UGLJENIKA U OSNOVNOM (NEHIBRIDIZOVANOM) STANJU:



ZA FORMIRANJE KOVALENTNIH VEZA, C-ATOMU STOJE NA RASPOLAGANJU 4 ELEKTRONA U VALENTNOM SLOJU. TIH 4 ELEKTRONA MOGU DA FORMIRAJU MAKSIMALNO 4 KOVALENTNE VEZE, ODN. 4 ELEKTRONSKA PARA.

ZA 5, 6 ILI VIŠE PAROVA NEMA MESTA, TJ. RASPOLOŽIVIH ORBITALA U VALENTNOM SLOJU, A TIME NI MOGUĆNOSTI FORMIRANJA UGLJEDNIČNIH JEDINJENJA KOJA BI BILA PETO-KOVALENTNA, ŠESTO-KOVALENTNA ITD.



PRIBLIŽNA STRUKTURA NEHIBRIDIZOVANOG C-ATOMA



PRIKAZANO JE JEZGRO (N), KAO I SVE ATOMSKE ORBITALE (UKUPNO 5) I ELEKTRONI (UKUPNO 6). VALENTNI SLOJ ČINE ČETIRI ORBITALE (JEDNA 2s I TRI 2p). KAKO SU SVE 3 2p ORBITALE JEDNAKE ENERGIJE, SVEJEDNO JE U KOJOJ SE NALAZE 2 ELEKTRONA. OVI ELEKTRONI SU NESPARENI I, KAO ŠTO JE REČENO, IMAJU ISTI SPIN PREMA HUND-ovom PRAVILU. PRI FORMIRANJU VEZA, VALENTNE ORBITALE SE MEŠAJU, TAKO DA POSTAJU HIBRIDIZOVANE ORBITALE:

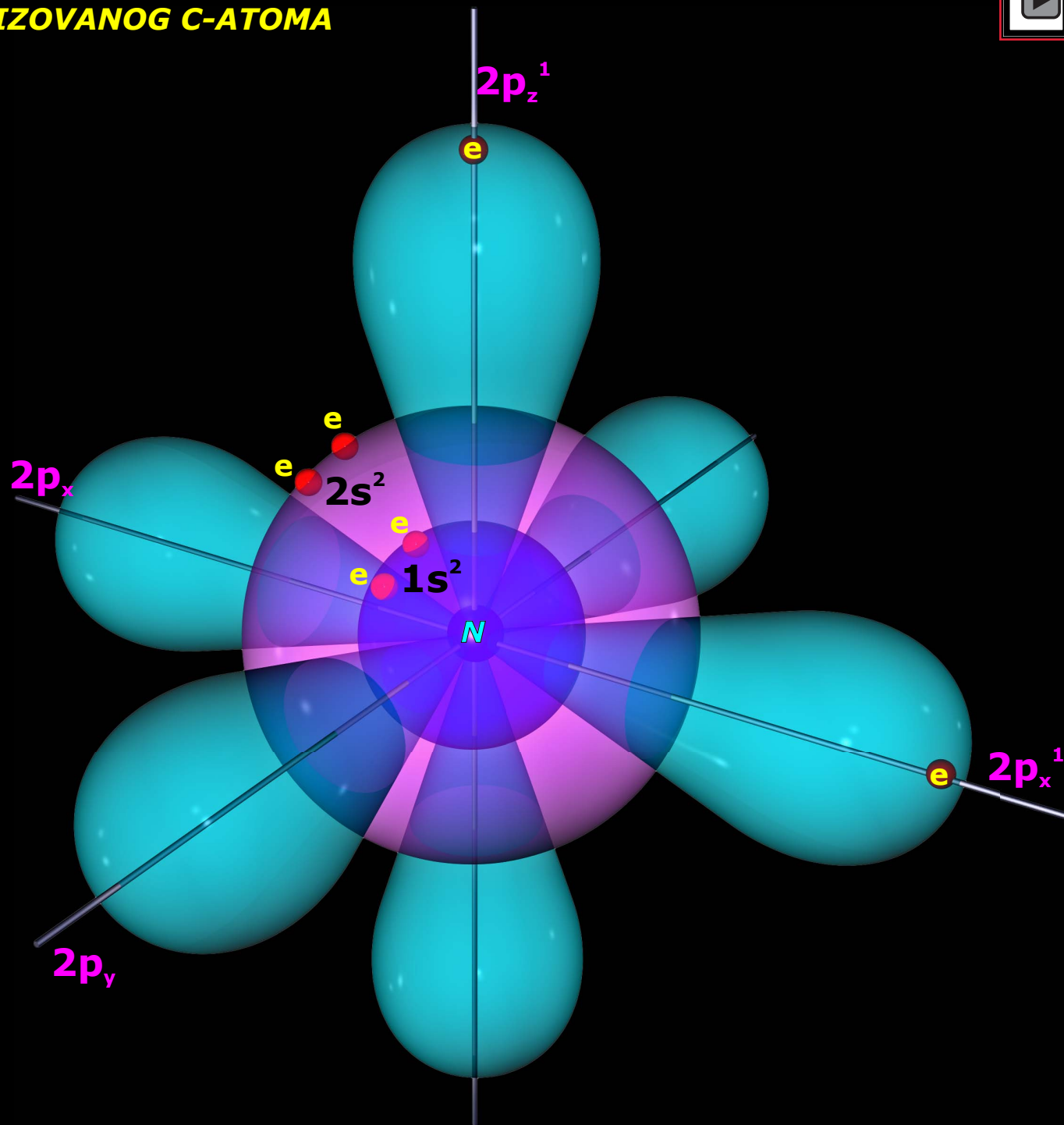
sp^3 HIBRIDIZACIJA: 4 $2sp^3$; ili

sp^2 HIBRIDIZACIJA: 3 $2sp^2$ + 1 $2p^1$;

sp HIBRIDIZACIJA) 2 $2sp$ + 2 $2p^1$;

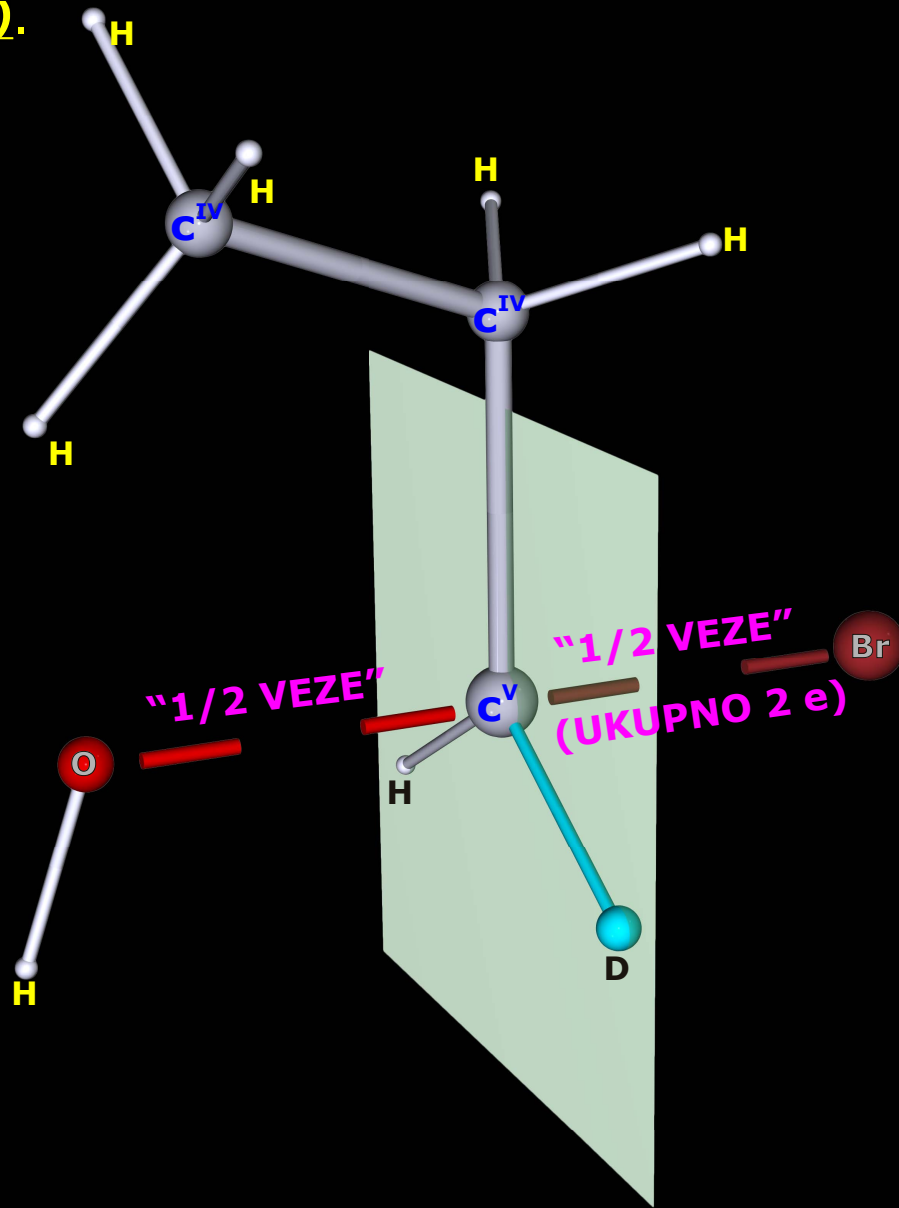
BITNO JE NAGLASITI DA JE

HIBRIDIZACIJA ISKLJUČIVO MATEMATIČKI MODEL I DA HIBRIDIZOVANI ATOMI FIZIČKI NE POSTOJE. ONO ĐTO POSTOJI JE GEOMETRIJA C-ATOMA U MOLEKULIMA, DAKLE TETRAEDARSKA, TRIGONALNO-PLANARNA I LINEARNA.

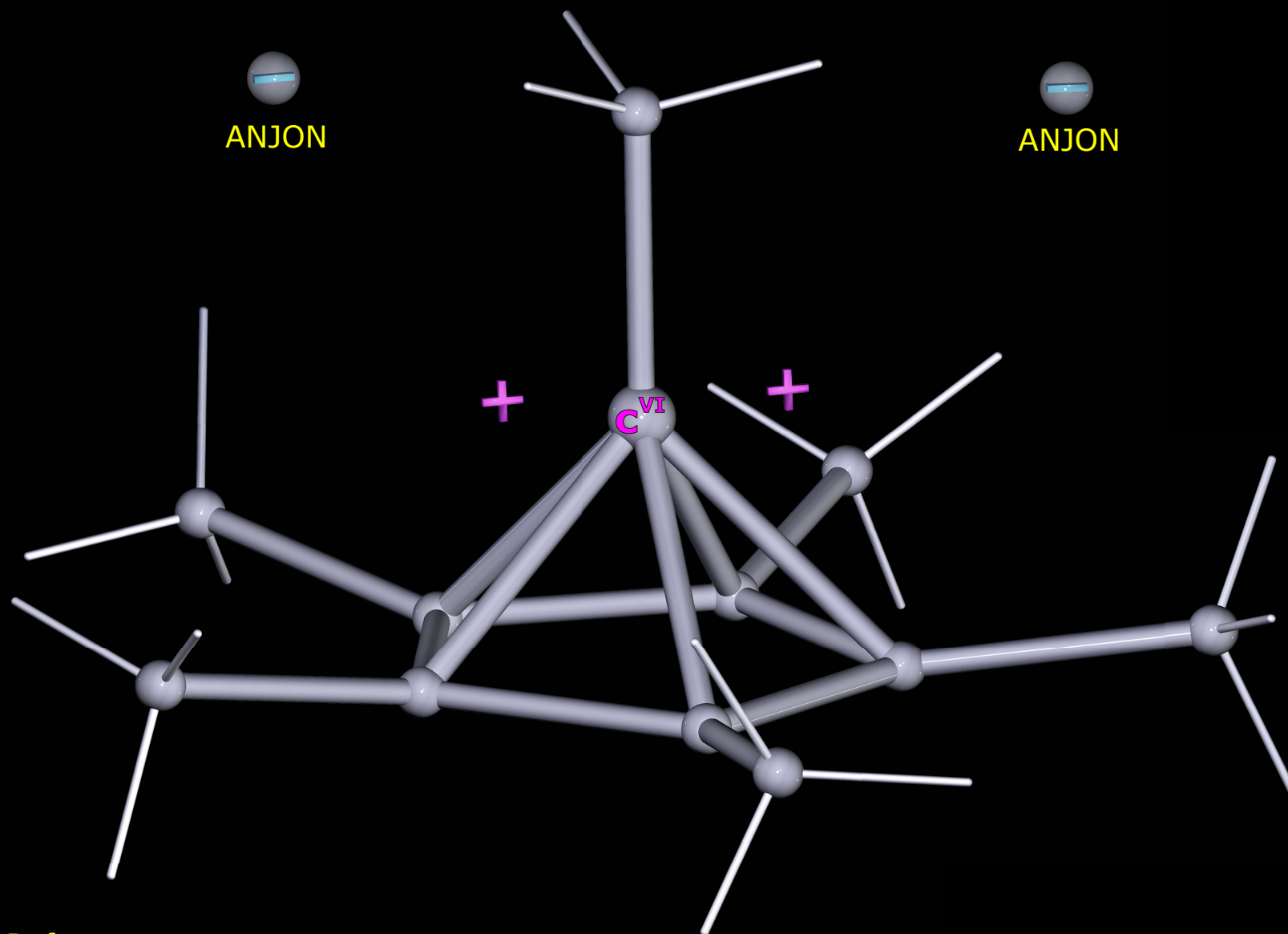


UGLJENIKOV ATOM MOŽE BITI KOORDINISAN (OKRUŽEN) I SA PET ILI ŠEST ATOMA, ŠTO JE POZNATO KAO PETO-KOORDINACIONI ILI ŠETO-KOORDINACIONI C-ATOM. MEĐUTIM, TAKAV ATOM JE I DALJE ČETVORO-KOVALENTAN, JER JE ZA STAVRANJE VEZA ANGAŽOVANO 4 ELEKTRONSKA PARA. U TIM SLUČAJEVIMA, JEDAN ELEKTRONSKI PAR JE RASPODELJEN PREKO TRI ATOMA, A NE DVA KAO ŠTO JE UOBIČAJENO.

PETO-KOORDINACIONI UGLJENIK: PRELAZNO STANJE U S_N2 SUPSTITUCIJAMA. PRIKAZANA ČESTICA REALNO POSTOJI ALI **TRAJE SAMO KOLIKO JEDAN CIKLUS VIBRACIJE VEZE (OKO 10^{-15} S).**



ŠETO-KOORDINACIONI UGLJENIK: RELATIVNO STABILNO KRISTALNO JEDINJENJE (DI-KATJON)
ČIJA JE STRUKTURA ODREĐENA RENGENO-STRUKTURNOM ANALIZOM.



PRIKAZANA SO
REALNO POSTOJI I
RELATIVNO JE
STABILNA NA NISKIM
TEMPERATURAMA.
MEĐUTIM C ATOM JE I
DALJE ČETVORO-
KOVALENTAN JER 4
ELEKTRONSKA PARA
POVEZUJU 6 C
ATOMA.

Referenca:

Crystal Structure Determination of the Pentagonal-Pyramidal Hexamethylbenzene Dication $C_6(CH_3)_6^{2+}$
Moritz Malischewski* and K. Seppelt. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2017, 56, 368–370

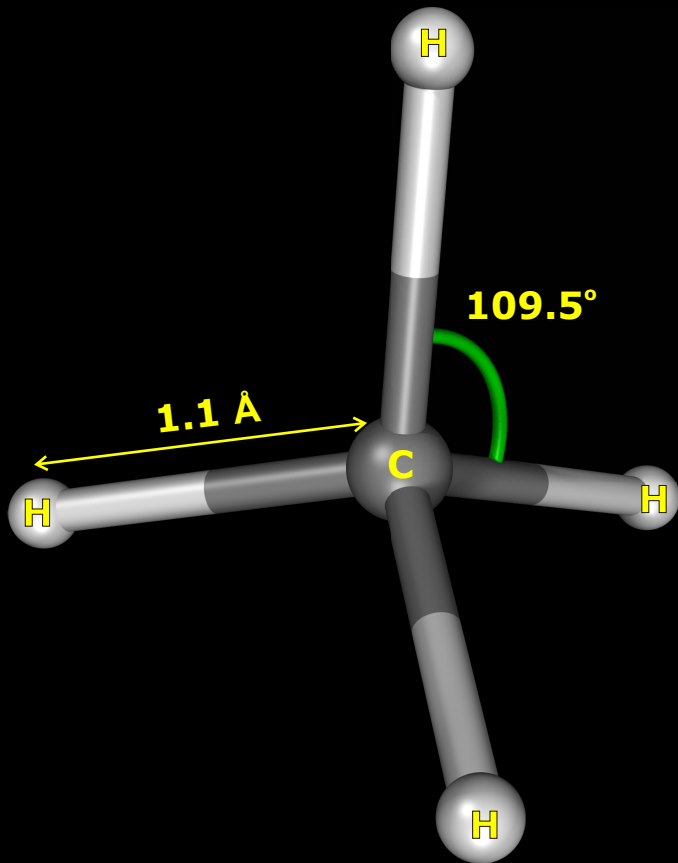


George Andrew Olah (22. V 1927. – 08. III 2017.).

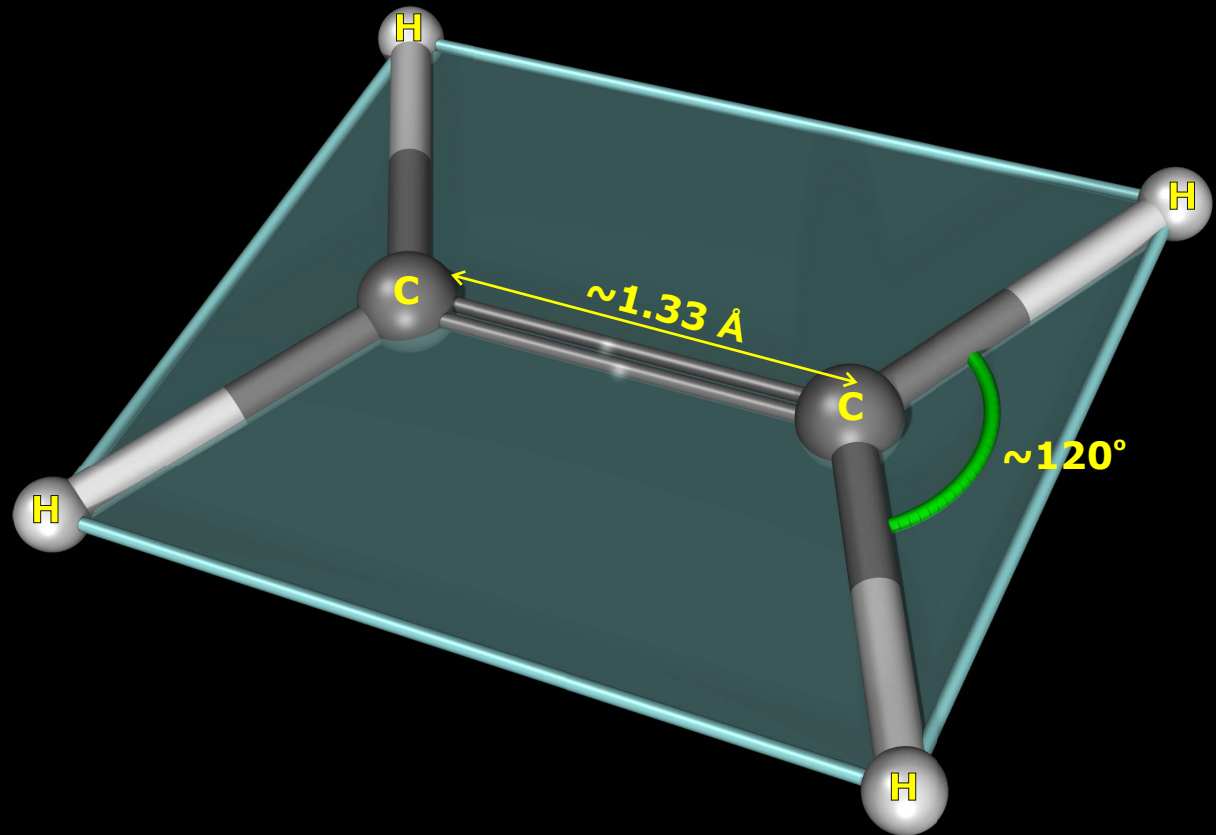
Mađarsko-Američli hemičar.

Za istraživanje u oblasti dobijanja i reaktivnosti karbokatjona (tokom 60-ih godina XX veka), dobio je Nobelovu nagradu za Hemiju 1994.

PRIMERI STRUKTURE RAZLIČITIH MOLEKULA UGLJENIKA



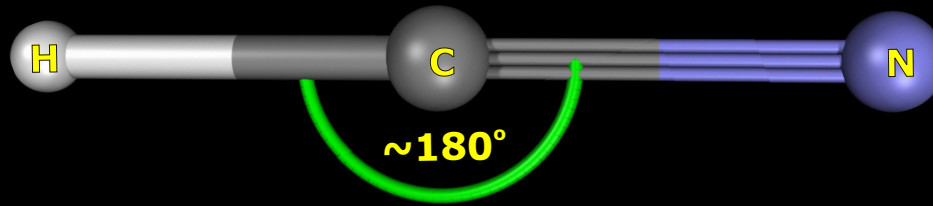
METAN: KOVALENCA 4;
STRUKTURA:TETRAEDAR;
OKSIDACIONI BROJ: -4



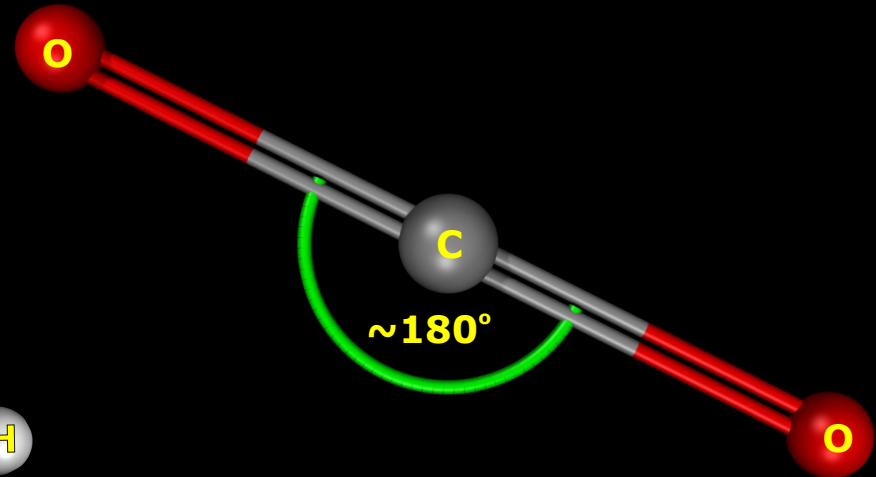
ETEN: KOVALENCA 4;
STRUKTURA:TRIGONALNO-PLANARNA
OKSIDACIONI BROJ: -2

NAPOMENA: SVI OKSIDACIONI BROJEVI SU FORMALNE ("FIKTIVNE") VELIČINE, DEFINISANE ISKLJUČIVO KONVENCIJOM, IZ PRAKTIČNIH RAZLOGA

PRIMERI STRUKTURE RAZLIČITIH MOLEKULA UGLJENIKA



CIJANOVODONIK: KOVALENCA 4;
STRUKTURA: LINEARNA
OKSIDACIONI BROJ: +2

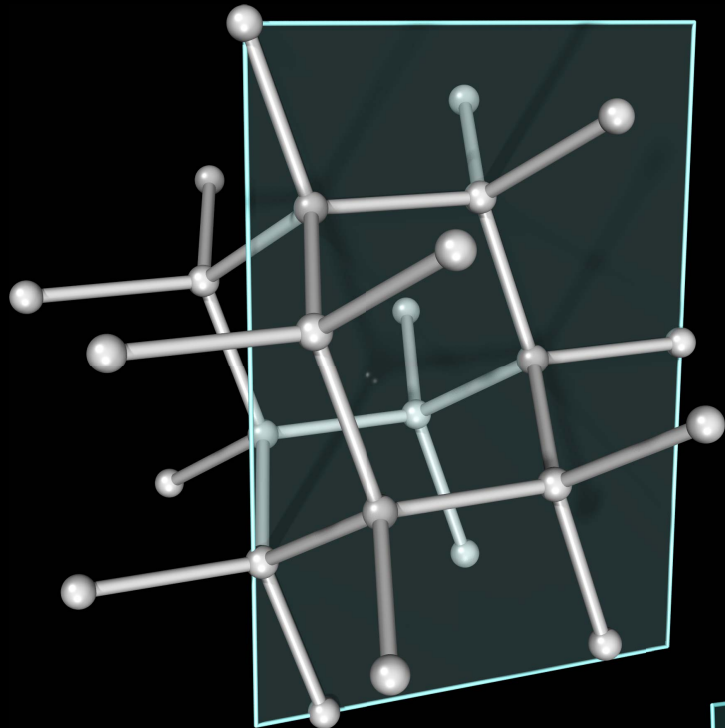


UGLJEN-DIOKSID: KOVALENCA 4;
STRUKTURA: LINEARNA
OKSIDACIONI BROJ: +4



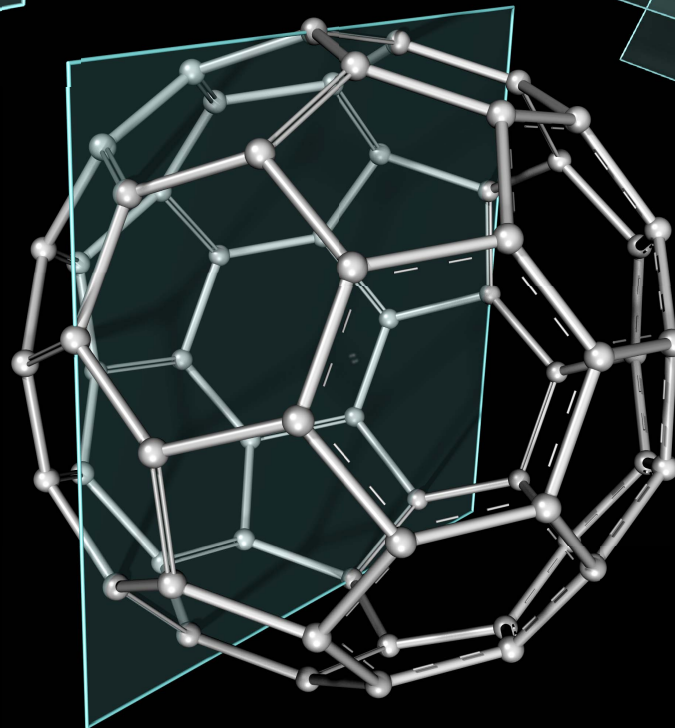
ETIN: KOVALENCA 4; STRUKTURA: LINEARNA
OKSIDACIONI BROJ: -1

PRIMERI STRUKTURE RAZLIČITIH MOLEKULA UGLJENIKA

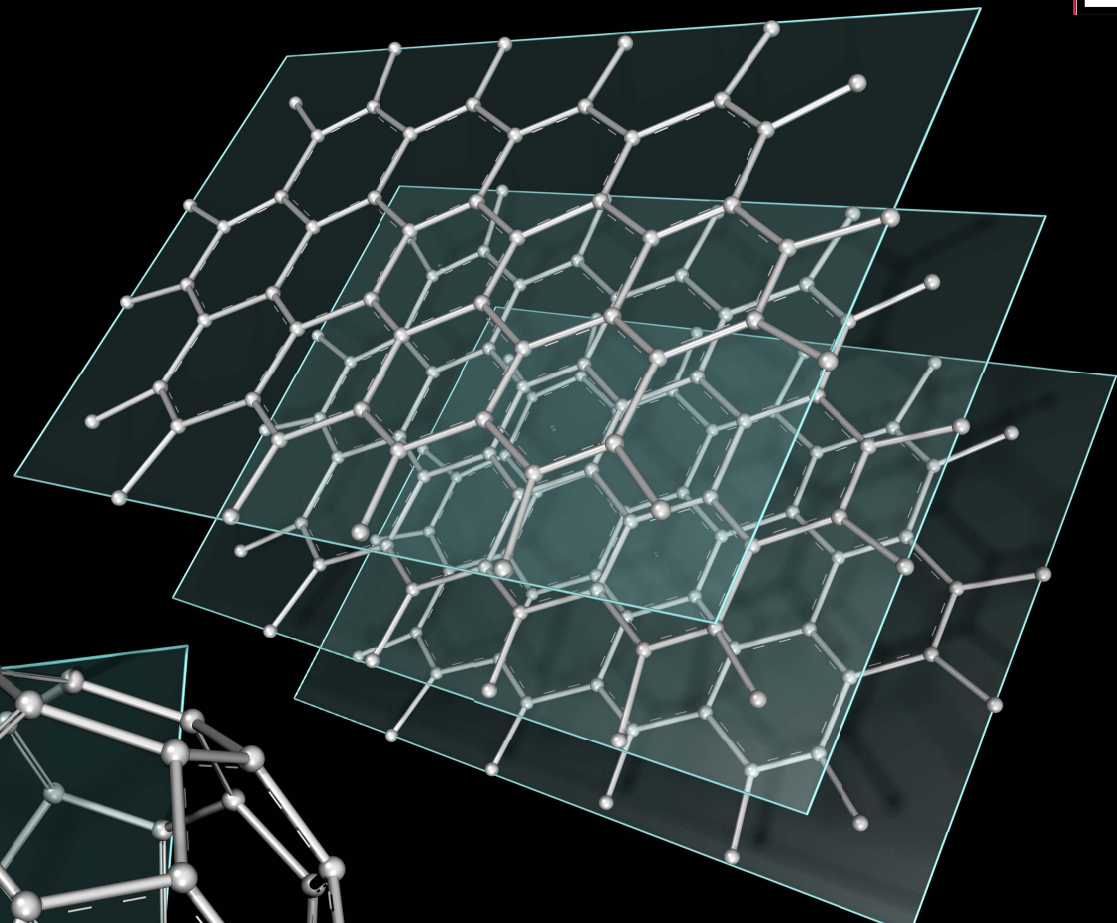


ELEMENTARNI UGLJENIK
(DIJAMANT): KOVALENCA 4;
STRUKTURA: TETRAEDARSKA
HIBRIDIZACIJA: sp^3

ELEMENTARNI UGLJENIK
(FULERENI): KOVALENCA 4;
STRUKTURA: SFEROIDNA
(KONDENZOVANI PETOČLANI I
ŠESTOČLANI PRSTENOVI)
HIBRIDIZACIJA: sp^3



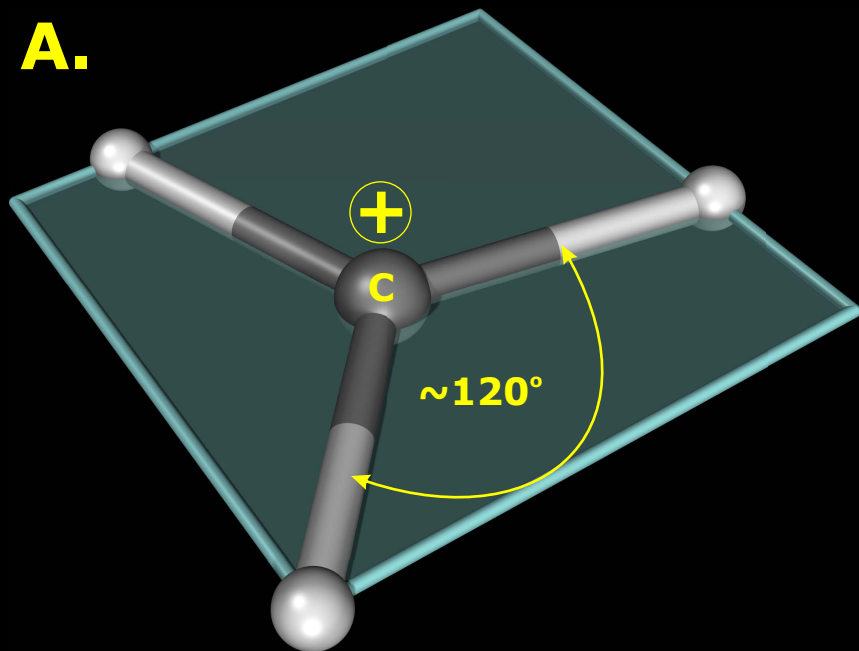
SVI IMAJU OKSIDACIONI BROJ: 0



ELEMENTARNI UGLJENIK (GRAFIT):
KOVALENCA 4; STRUKTURA:
PLANARNA (KONDENZOVANI
BENZENOVI PRSTENOVI)
HIBRIDIZACIJA: sp^2

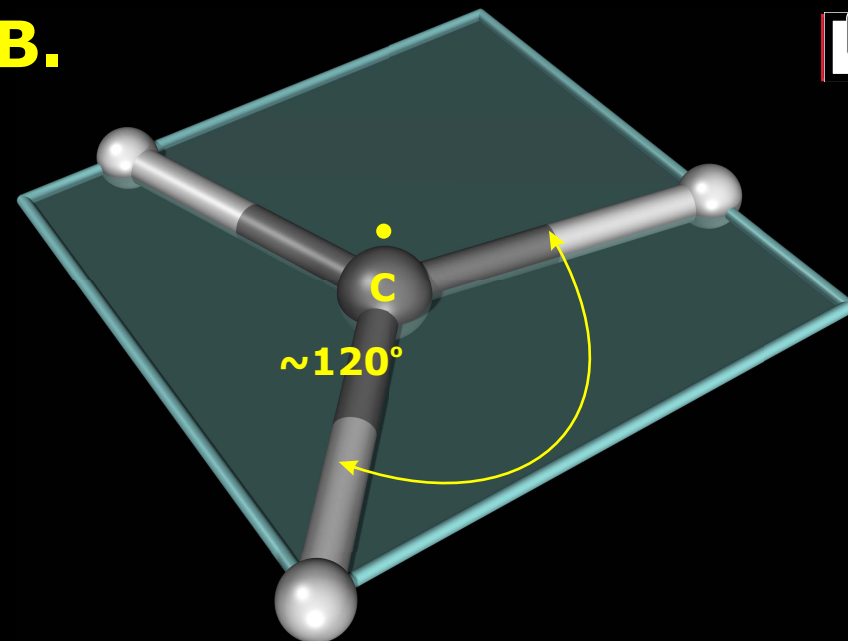
UGLJENIK MOŽE IMATI NIŽU KOVALENCU OD 4: 3 (KARBOKATJONI, RADIKALI I KARBANJONI)

A.



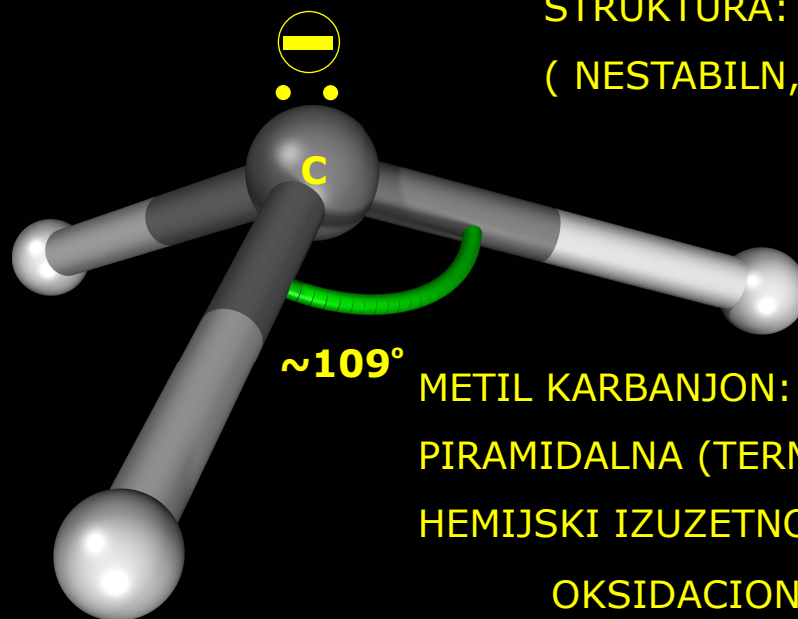
METIL KARBOKATJON: KOVALENCA 3;
STRUKTURA: TRIGONALNO-PLANARNA
(EKSTREMNO NESTABILN, PRAKTIČNO
NE POSTOJI). MEĐUTIM POSTOJE
MNOGI DRUGI KARBOKATJONI,
IAKO SU I ONI NESTABILNI
OKSIDACIONI BROJ: -2

B.



METIL RADIKAL: KOVALENCA 3;
STRUKTURA: TRIGONALNO-PLANARNA
(NESTABILN, ALI POSTOJI)
OKSIDACIONI BROJ: -3

C.



METIL KARBANJON: KOVALENCA 3; STRUKTURA:
PIRAMIDALNA (TERMODINAMIČKI STABILAN, ALI
HEMIJSKI IZUZETNO REAKTIVAN)

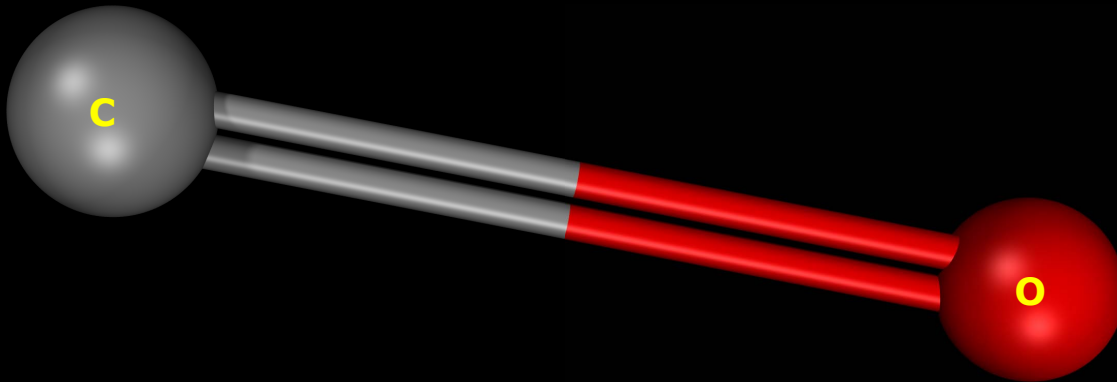
OKSIDACIONI BROJ: -4

UGLJENIK MOŽE BITI I DVOKOVALENTAN



KOVALENCA 2 (UGLJEN MONOKSID, **KARBENI***)

KOVALENCA 1 ILI 0 PRAKTIČNO SE NIKADA NE JAVLJA (KOVALENCA 0 ODGOVARA IZOLOVANOM ATOMU UGLJENIKA).



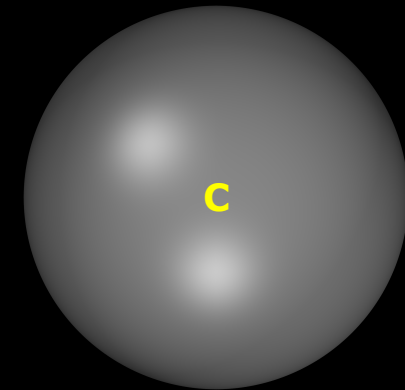
UGLJEN MONOKSID: KOVALENCA 2;

STRUKTURA: LINEARNA

(RELATIVNO STABILAN, VRLO TOKSIČAN)

HIBRIDIZACIJA: sp^2

OKSIDACIONI BROJ: +2



IZOLOVANI ATOM UGLJENIKA:

KOVALENCA 0;

POSTOJI SAMO U GASNOJ FAZI,
NA VISOKIM TEMPERATURAMA

OKSIDACIONI BROJ: 0

* **KARBENI NISU DEO OVOG KURSA**

ALKANI (PARAFINI) - MOLEKULI SA ISKLJUČIVO JEDNOSTRUKIM VEZAMA, (C-C, C-H). STRUKTURA, OSOBINE, PODELA. HIBRIDIZACIJA ATOMSKIH ORBITALA UGLJENIKA : sp^3 HIBRIDIZACIJA.

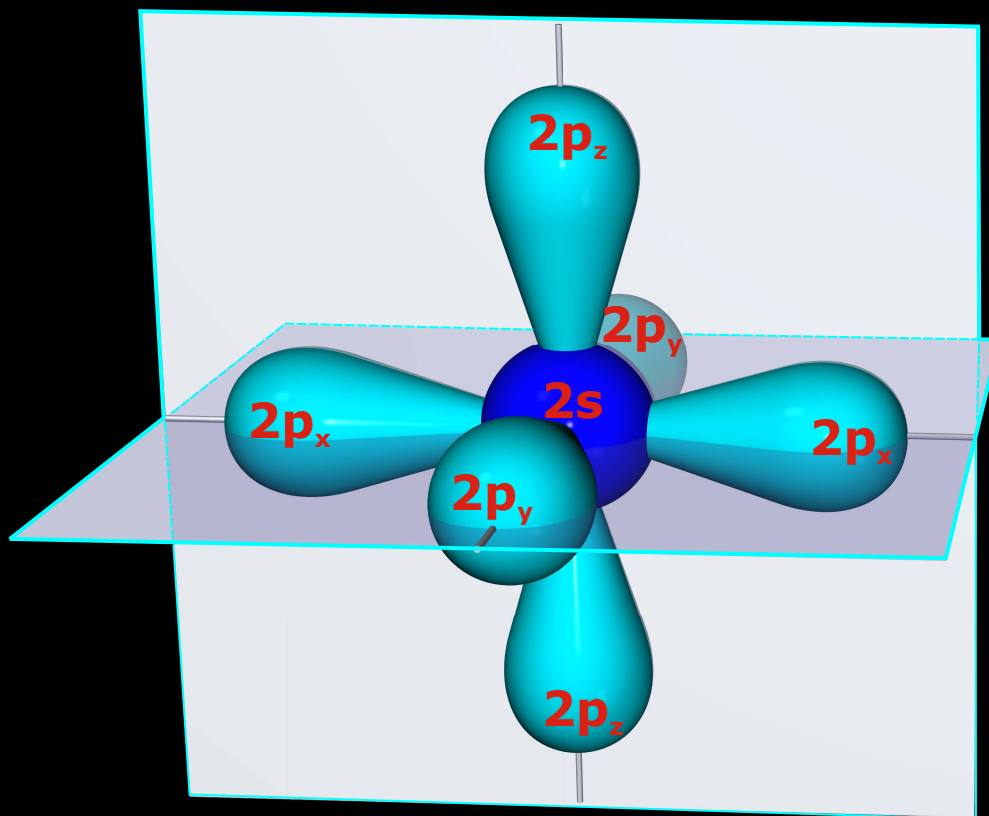


PRIMER ETANA : **FORMALNI PROCES** POSTAJANJE ETANA IZ ELEMENATA - **C** I **H** ATOMA.

(U REALNIM USLOVIMA ETAN I DRUGA ORGANSKA JEDINJENJA PRAKTIČNO NIKADA NE POSTAJU DIREKTNO IZ ELEMENATA).

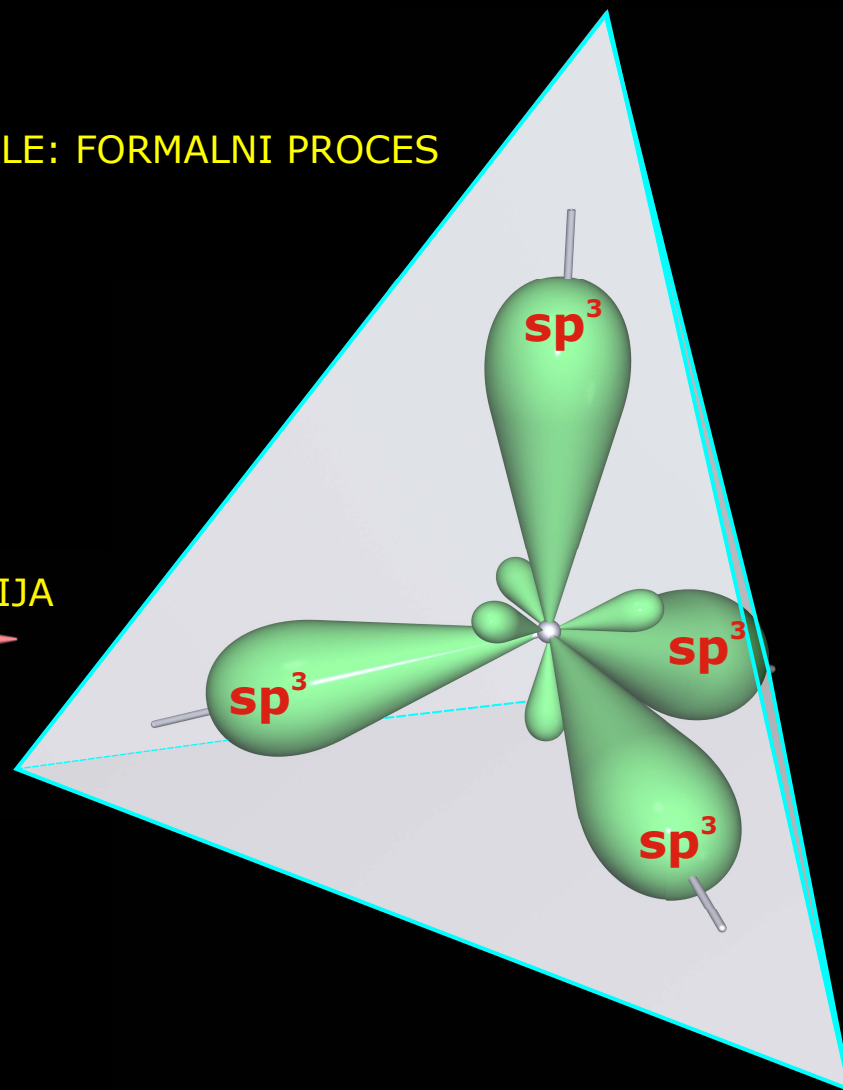
I. sp^3 HIBRIDIZACIJA ATOMSKIH ORBITALA UGLJENIKA

$(2s^2) + (2p_x^1) + (2p_y^1) + (2p_z^0) = 4$ $2sp^3$ HIBRIDIZOVANE ORBITALE: FORMALNI PROCES



NEHIBRIDIZOVANE ORBITALE **C** ATOMA U VALENTNOM SLOJU: $2s^2, 2p_x^1, 2p_y^1, 2p_z$

sp^3
HIBRIDIZACIJA

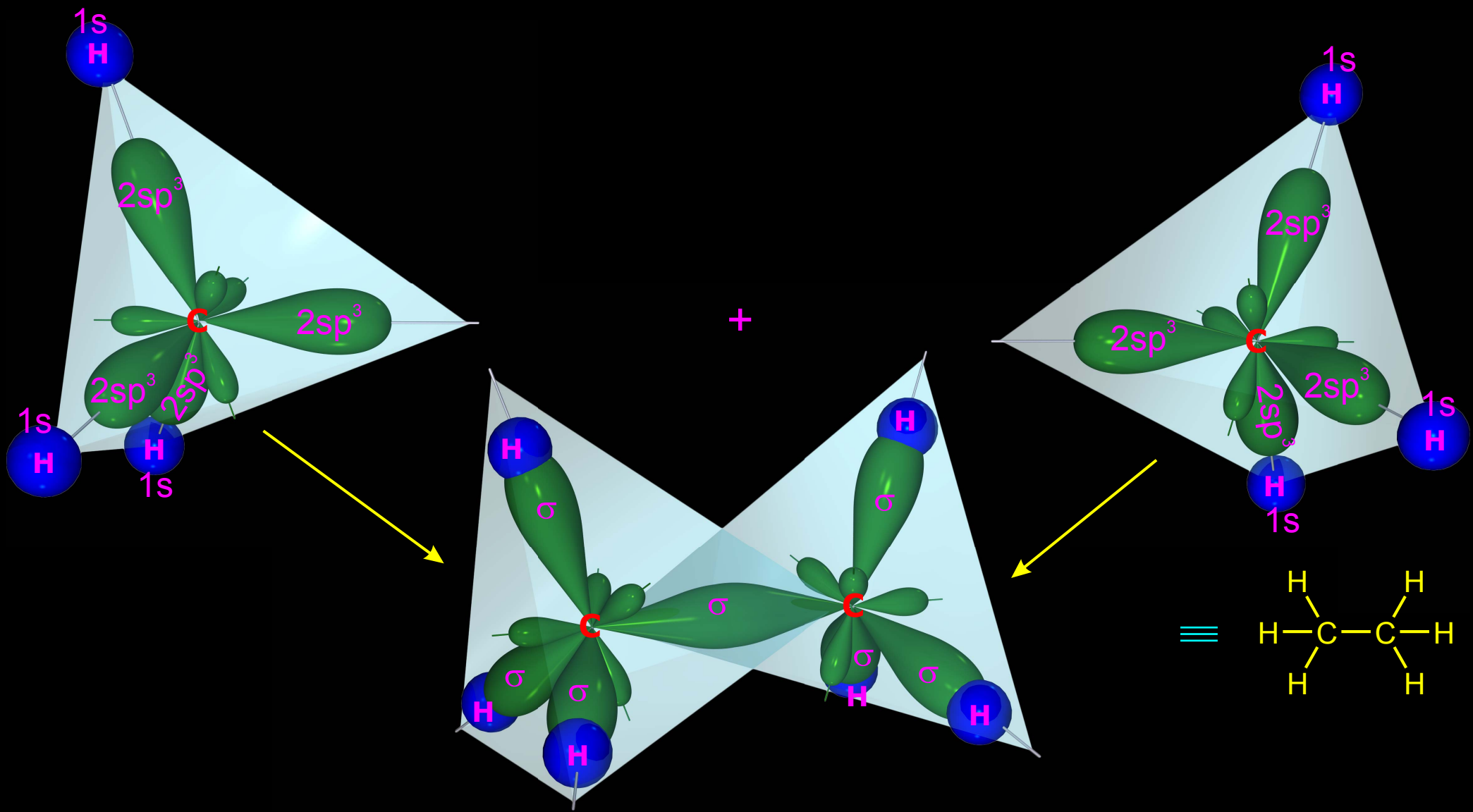


4 sp^3 HIBRIDIZOVANE ORBITALE **C** ATOMA



FORMALNO POSTAJANJE ETANA IZ ELEMENATA (C i H).

U OVOM FORMALNOM PROCESU, **ČEONO SE PREKLAPAJU** sp^3 HIBRIDIZOVANE ATOMSKE ORBITALE 2 sp^3 C ATOMA KAO I 1s (NEHIBRIDIZOVANE) ATOMSKE ORBITALE 6 H ATOMA. PRI TOME, POSTAJU NOVE, JEDNOSTRUKÉ C-C I C-H VEZE, KOJE SE OZNAČAVAJU KAO σ (SIGMA) VEZE.

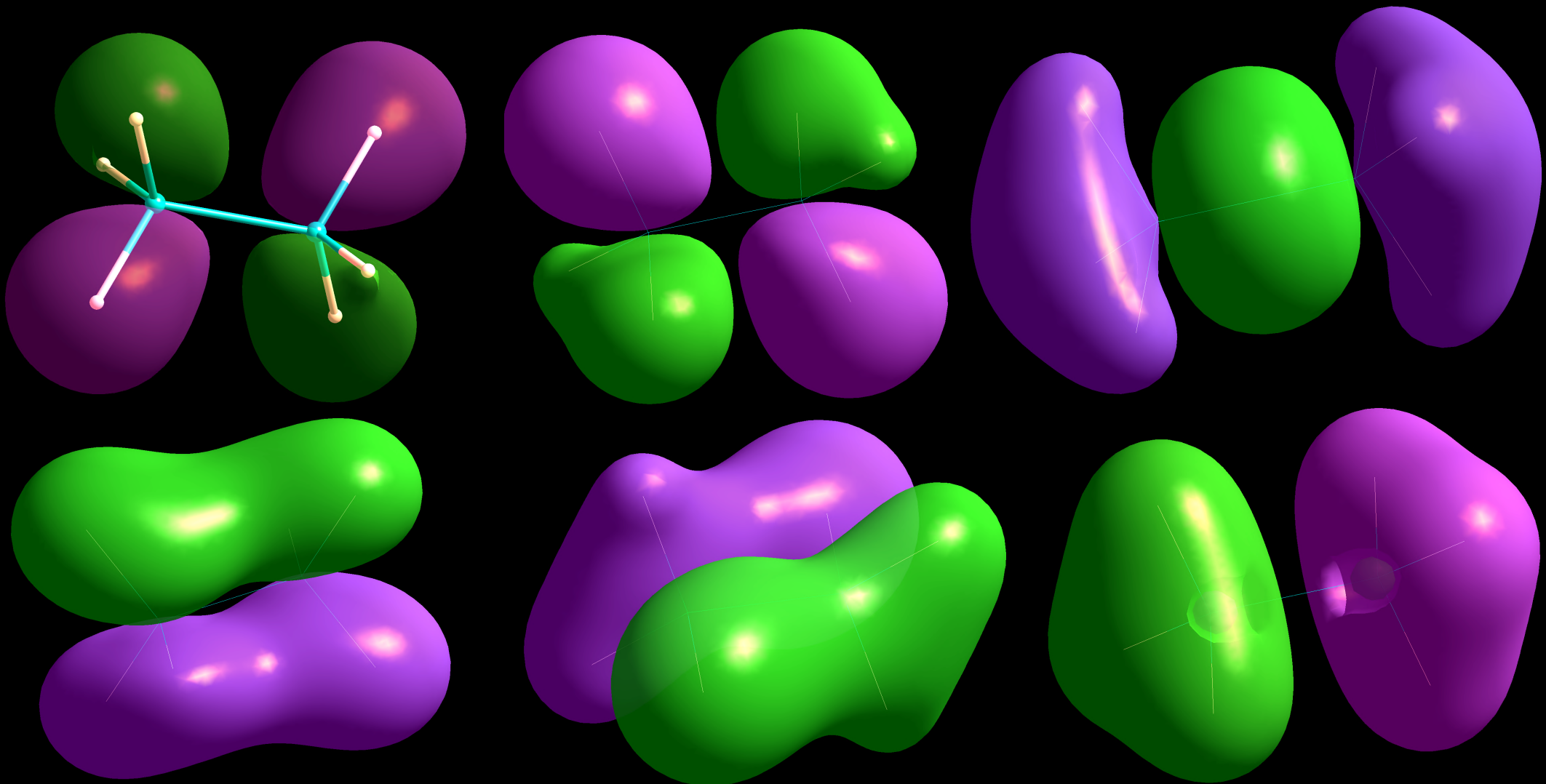


SLIKE PRIKAZUJU MOLEKULSKE ORBITALE ETANA, KOJE SU 3D FUNKCIJE, DOBIJENE KVANTNO-MEHANIČKIM PRORAČUNOM, PRIMENOM MOLEKULSKO-ORBITALNE TEORIJE.

POSTAJU KAO REŠENJA JEDNAČINA, KADA SE PREKLAPAJU ATOMSKE ORBITALE (2 C sp^3 i 6 H 1s).

-IMAJU POZITIVNE I NEGATIVNE REGIONE (ZELENO ODN. LJUBIČASTO).

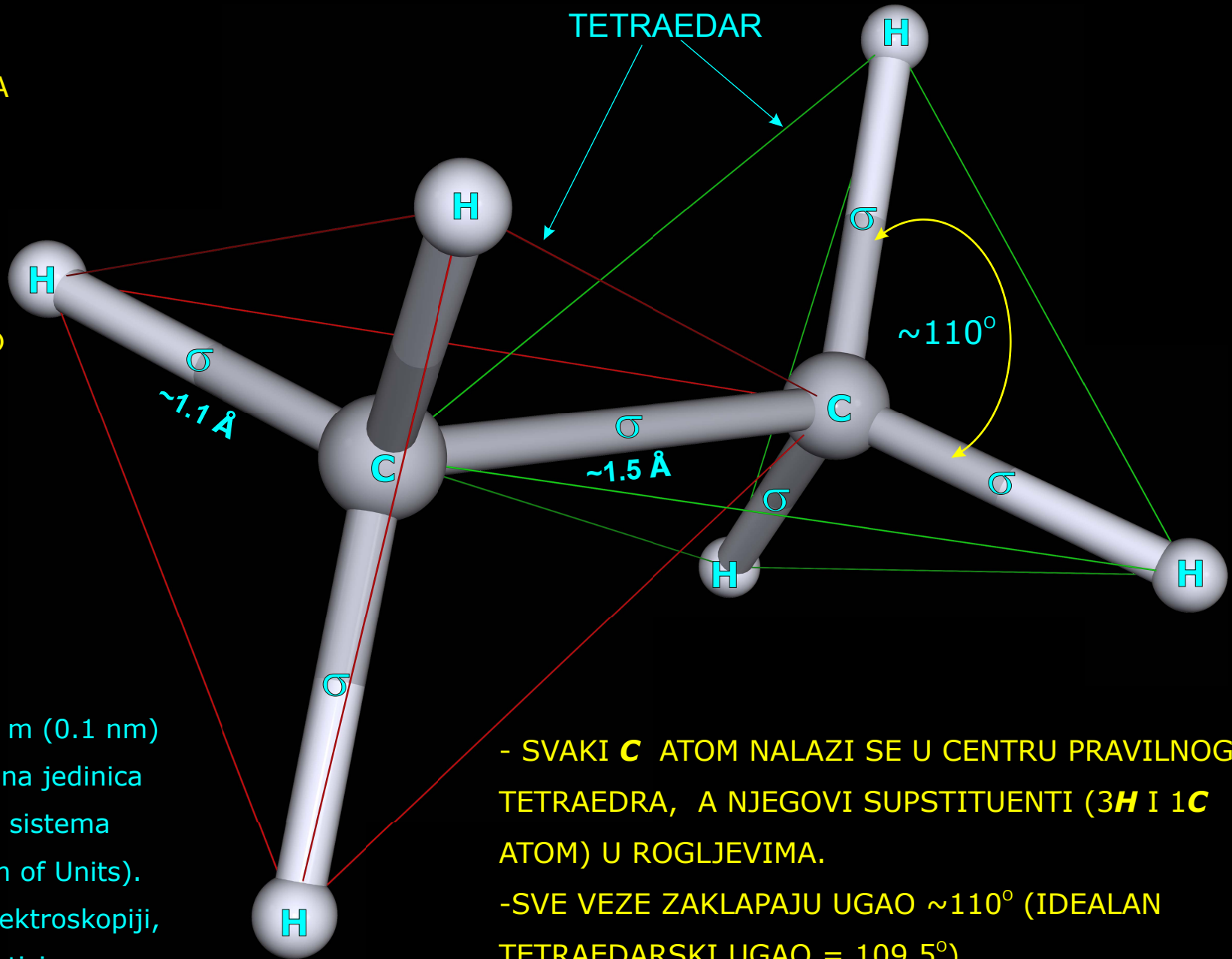
-UGLAVNOM NEMAJU DIREKTNO FIZIČKO ZNAČENJE, ALI SE ŠIROKO SE PRIMENJUJU U RAZLIČITIM KVANTNO-MEHANIČKIM PRORAČUNIMA, KAO ŠTO JE SPEKTROSKOPIJA.





IZGLED, GEOMETRIJA I FIZIČKE OSOBINE MOLEKULA ETANA

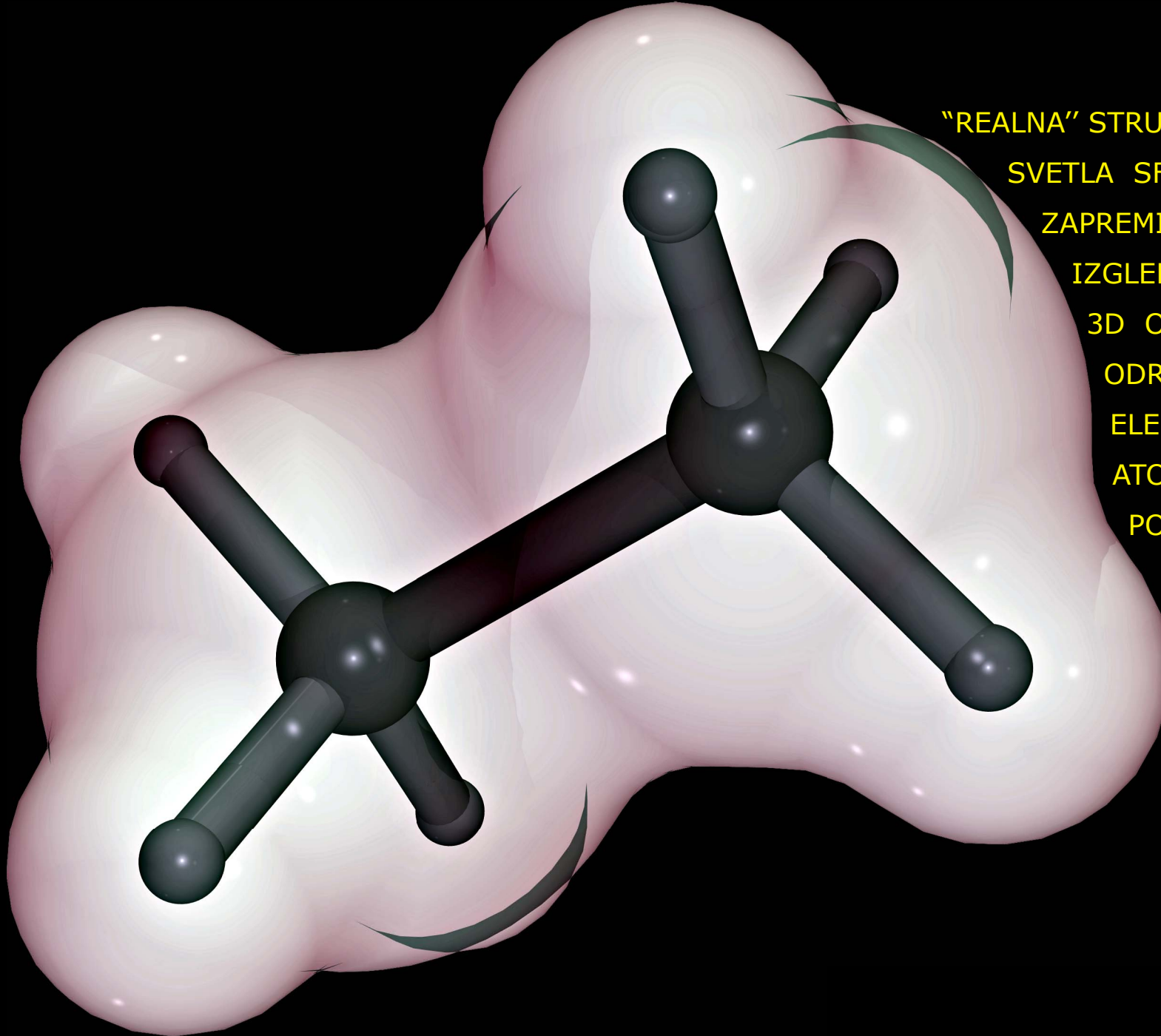
STRUKTURA
ETANA- PRIKAZANA
JE GEOMETRIJA
MOLEKULA KAO
MEHANIČKOG
MODELA
SASTAVLJENOG OD
SFERA (ATOMA) I
CILINDARA
(JEDNOSTRUKIH
VEZA)



Ångström = $\text{Å} = 10^{-10} \text{ m}$ (0.1 nm)
Angstrom je dozvoljena jedinica
dužine ali nije deo SI sistema
(International System of Units).
Široko se koristi u spektroskopiji,
kristalografiji i atomistici.

- SVAKI **C** ATOM NALAZI SE U CENTRU PRAVILNOG TETRAEDRA, A NJEGOVI SUPSTITUENTI (3**H** I 1**C** ATOM) U ROGLJEVIMA.
- SVE VEZE ZAKLAPAJU UGAO $\sim 110^\circ$ (IDEALAN TETRAEDARSKI UGAO = 109.5°)
- DUŽINA **C-C** VEZE $\sim 1.5 \text{ \AA}$; DUŽINA **C-H** VEZE $\sim 1.1 \text{ \AA}$

IZGLED I FIZIČKE OSOBINE MOLEKULA ETANA

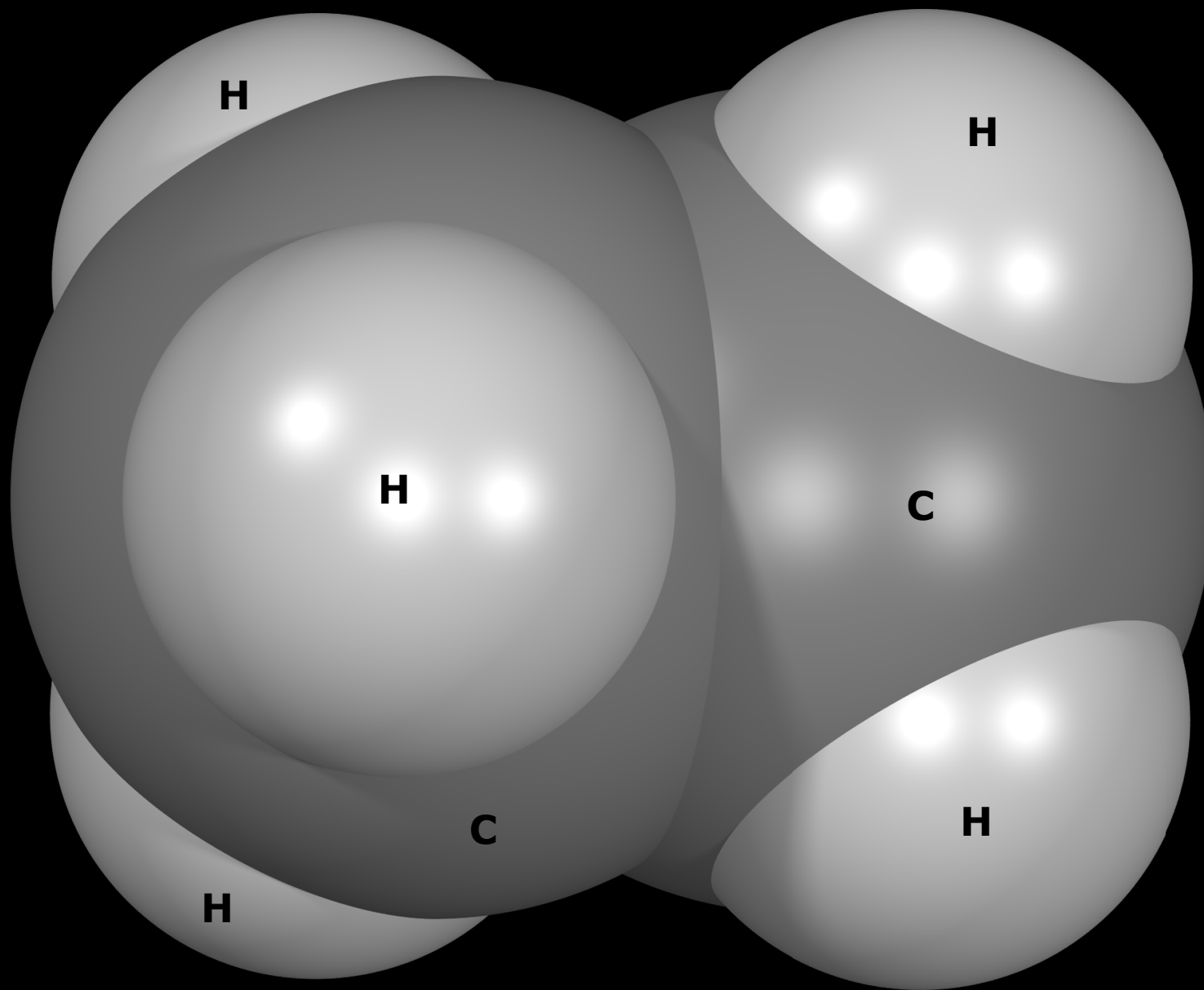


"REALNA" STRUKTURA ETANA.

SVETLA SFERA IMA PRIBLIŽNU ZAPREMINU I PRIBLIŽAN 3D IZGLED MOLEKULA.

3D OBLIK MOLEKULA ODREĐEN JE GUSTINOM ELEKTRONSKOG OBLAKA SVIH ATOMA U MOLEKULU. TAKOĐE, POJEDNOSTAVLJENI 3D OBLIK MOLEKULA PREDSTAVLJEN JE I "CPK" MODELIMA NA SLEDEĆOJ STRANI.

"CPK" (COREY-PAULING-KOLTUN) MODEL ETANA; PRIBLIŽNO ODGOVARA REALNOJ ZAPREMINI MOLEKULA.
KORISTI PRIBLIŽNE KOVALENTNE POLUPREČNIKE ATOMA. (ZA **C** ATOM: $r_{\text{KOV}} \sim 0.75 \text{ \AA}$, ODN. $d_{\text{KOV}} \sim 1.5 \text{ \AA}$)



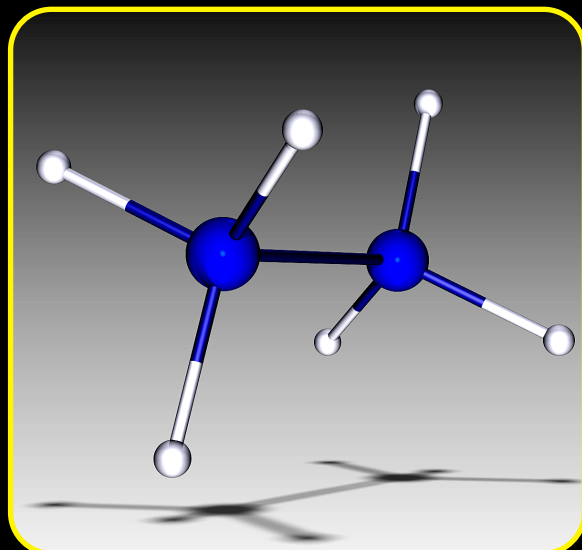
RANIJE SU PROIZVOĐENI I FIZIČKI MODELI OVOG TIPRA. IAKO DOBRO PRIKAZUJU ZAPREMINU MOLEKULA, GEOMETRIJA SE TEŠKO UOČAVA, ČAK I KOD JEDNOSTAVNIH MOLEKULA. U NOVIJE VREME SE RETKO KORISTE.

RAZLIČITI NAČINI PRIKAZIVANJA ORGANSKIH MOLEKULA U DVE DIMENZIJE (2D):

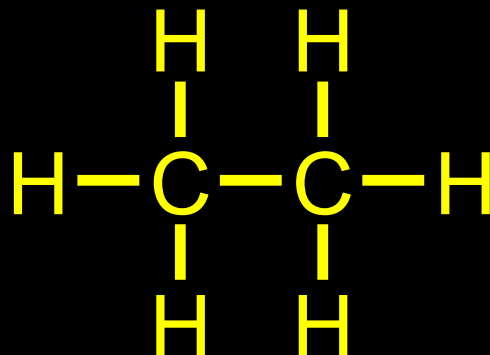


PRIMER: ETAN

1. "FOTOGRAFIJA" 3D MODELA

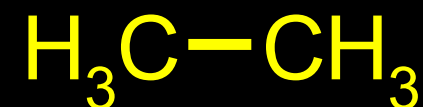


2. KEKULEOVA STRUKTURA



SVAKI ATOM I SVAKA VEZA
PRIKAZANI SU EKSPPLICITNO

3. RACIONALNE STRUKTURE



SVAKI ATOM KAO I **C-C** VEZA
PRIKAZANI SU EKSPPLICITNO, DOK
SU C-H VEZE PRIKAZANE
IMPLICITNO

5. LINIJSKE STRUKTURE (STRUKTURA VEZA-CRTICA)

SVI ATOMI I SVE C-H VEZE PRIKAZANI SU
IMPLICITNO, DOK JE **C-C** VEZA PRIKAZANA
EKSPPLICITNO



4.

ILI

SVI ATOMI PRIKAZANI SU
EKSPPLICITNO, DOK SU SVE
VEZE PRIKAZANE IMPLICITNO

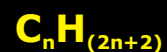


HOMOLOGNA SERIJA LINEARNIH ALKANA

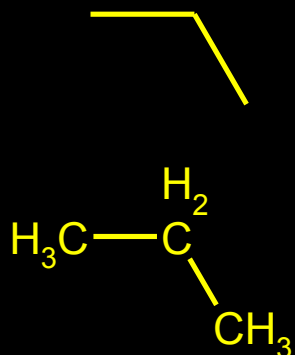


LINEARNI (NORMALNI) NIZ: SVAKI UGLJENIK VEZAN JE ZA SAMO ZA **DVA** DRUGA UGLJENIKA ILI SAMO ZA JEDAN UGLJENIK (AKO JE NA KRAJU NIZA)

OPŠTA FORMULA:



3.

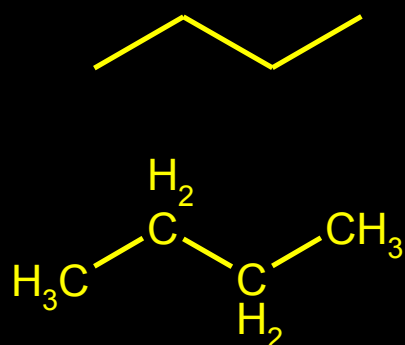


PROPAN

Propane

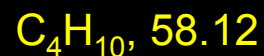


4.

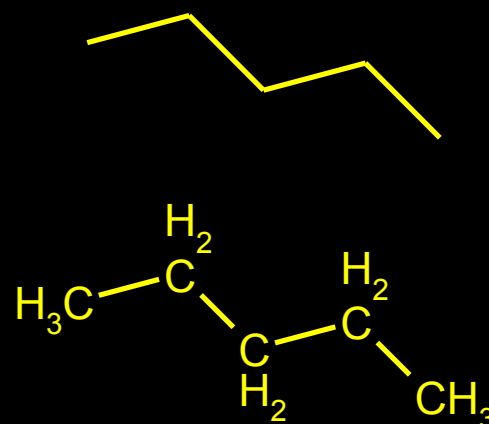


BUTAN

Butane



5.

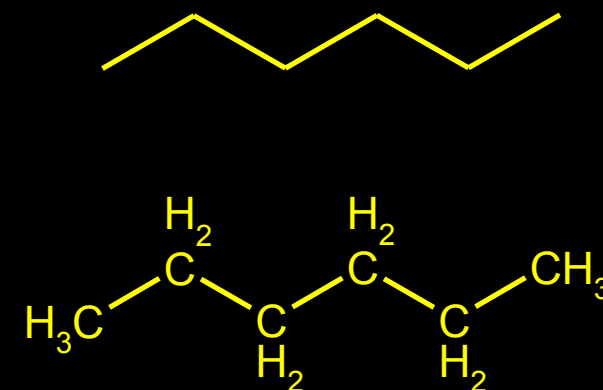


PENTAN

Pentane



6.



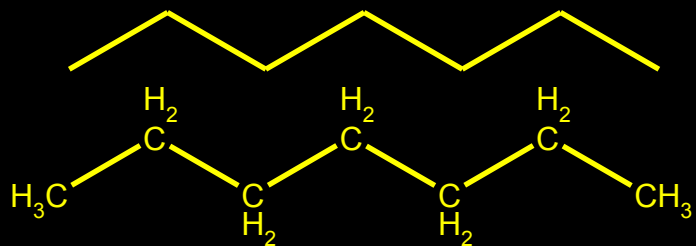
HEKSAN

Hexane



HOMOLOGNA SERIJA LINEARNIH ALKANA - nastavak

7.

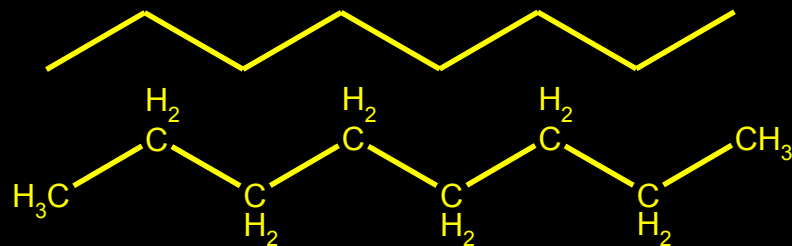


HEPTAN

Heptane

C₇H₁₆, 100.21

8.

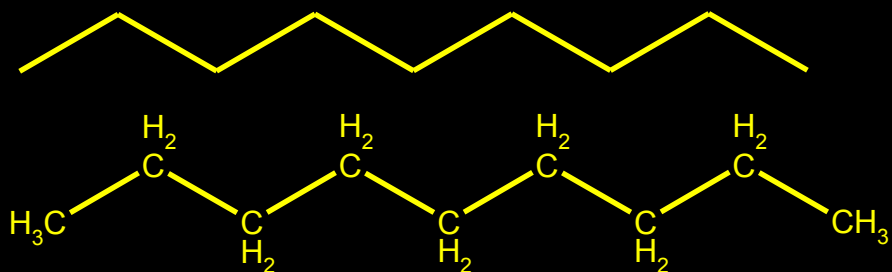


OKTAN

Octane

C₈H₁₈, 114.23

9.

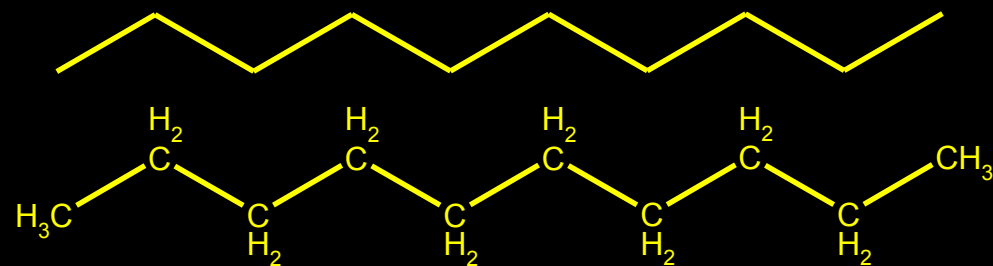


NONAN

Nonane

C₉H₂₀, 128.26

10.

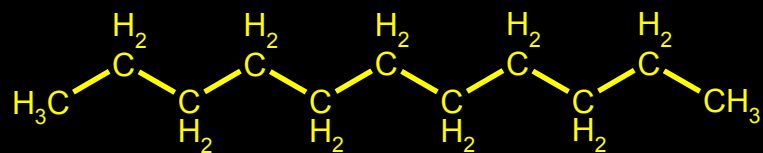


DEKAN

Decane

C₁₀H₂₂, 142.29

11.

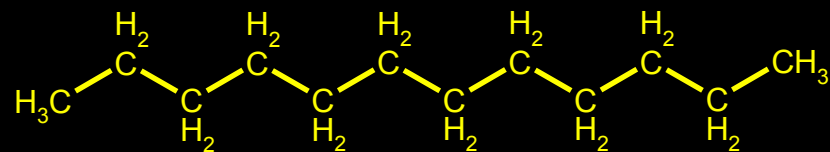


UNDEKAN

Undecane

$\text{C}_{11}\text{H}_{24}$; 156.31

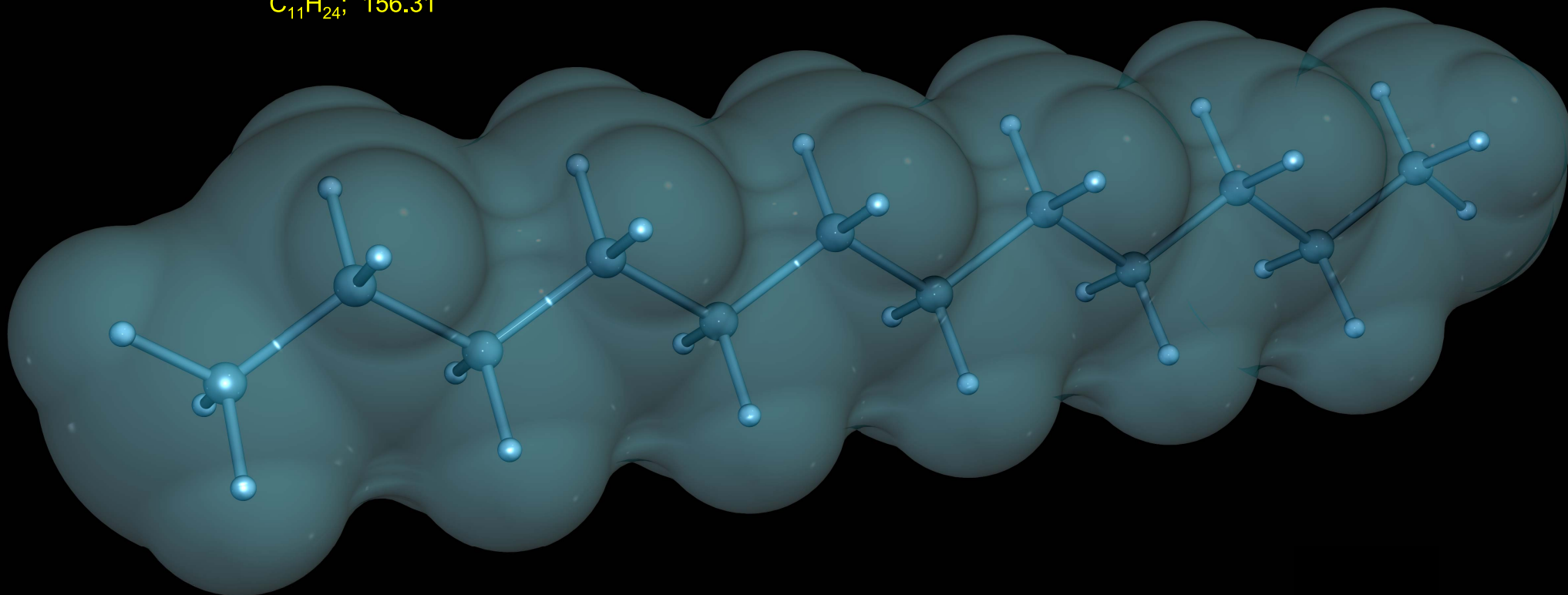
12.



DODEKAN

Dodecane

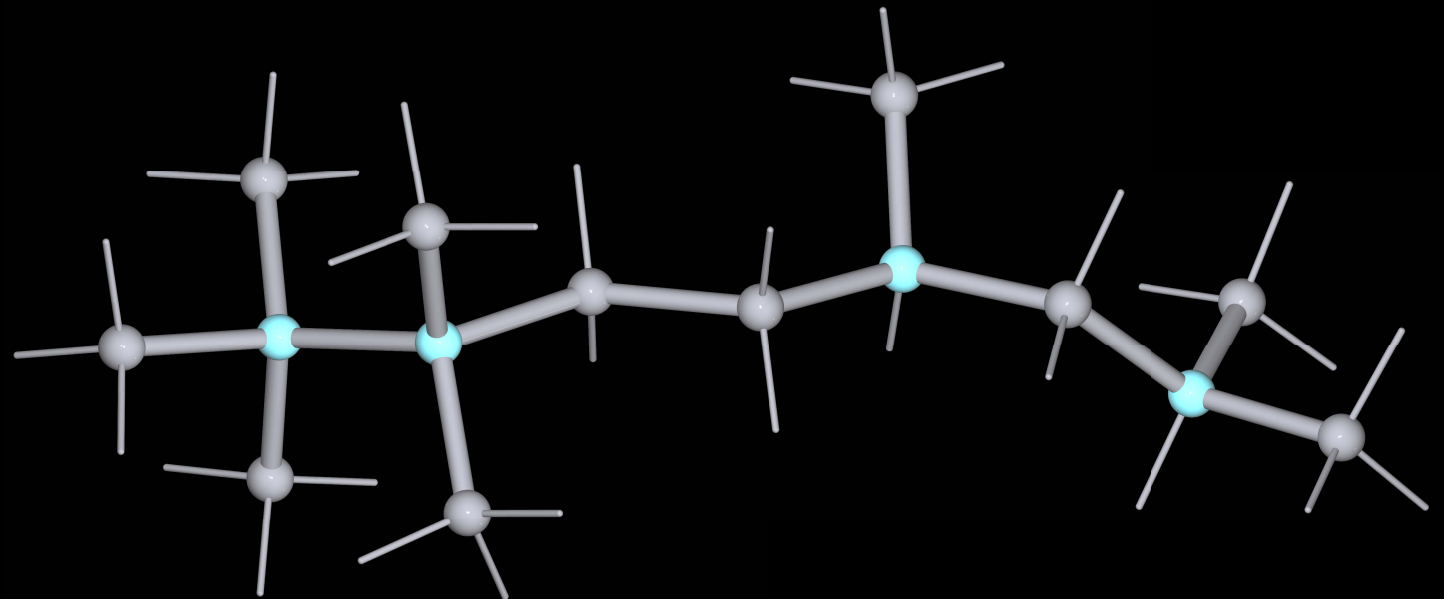
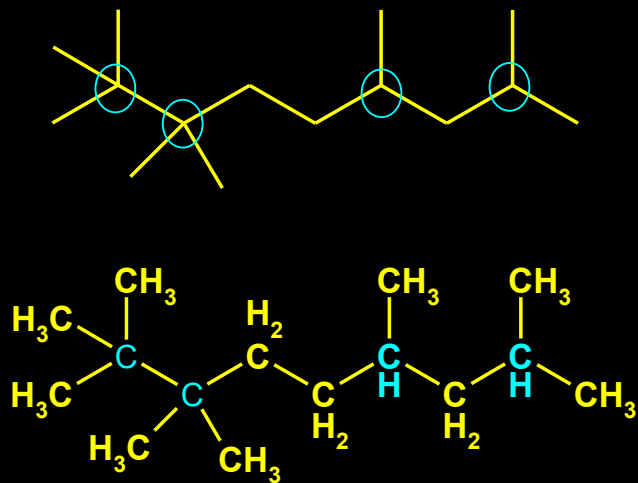
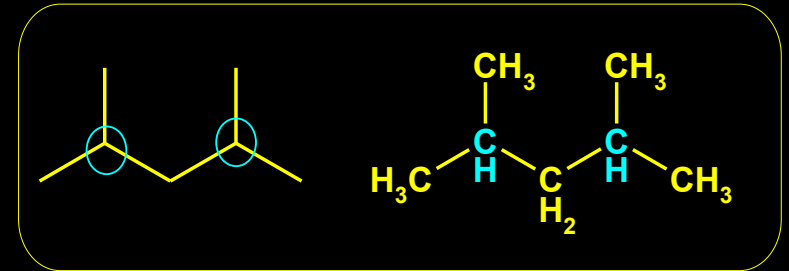
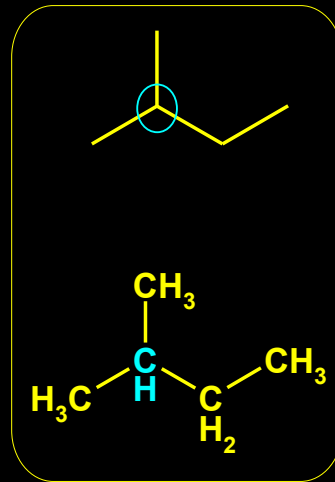
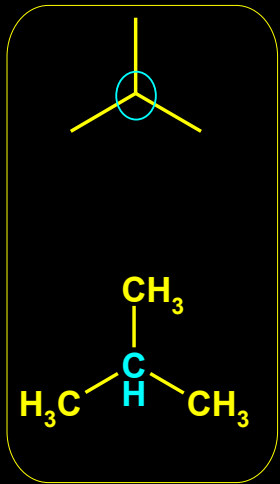
$\text{C}_{12}\text{H}_{26}$; 170.34



ALKANI RAČVASTOG (IZO) NIZA: UGLJENIKOV ATOM U ČVORNOJ TAČKI (MESTO U MOLEKULU GDE DOLAZI DO GRANANJA) VEZAN JE ZA 3 ili 4 SUSEDNA UGLJENIKOVA ATOMA

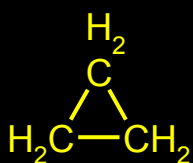


OPŠTA FORMULA: $C_nH_{(2n+2)}$

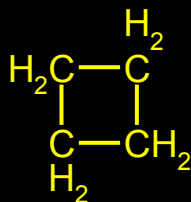


CIKLOALKANI- UGLJENIKOVI ATOMI VEZANI SU TAKO DA ČINE PRSTEN

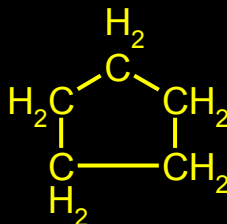
OPŠTA FORMULA: C_nH_{2n} (samo za jedinjenja sa jednim prstenom)



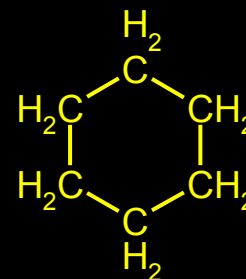
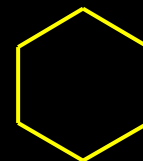
CIKLOPROPAN



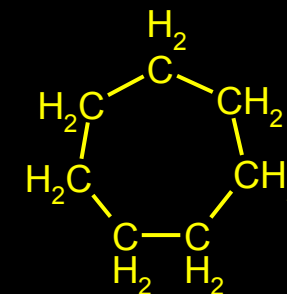
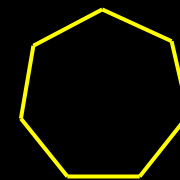
CIKLOBUTAN



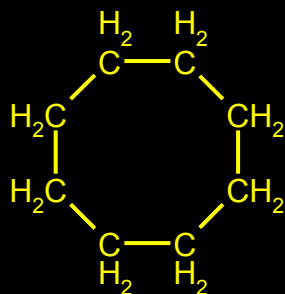
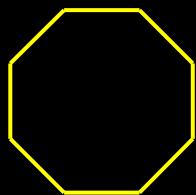
CIKLOPENTAN



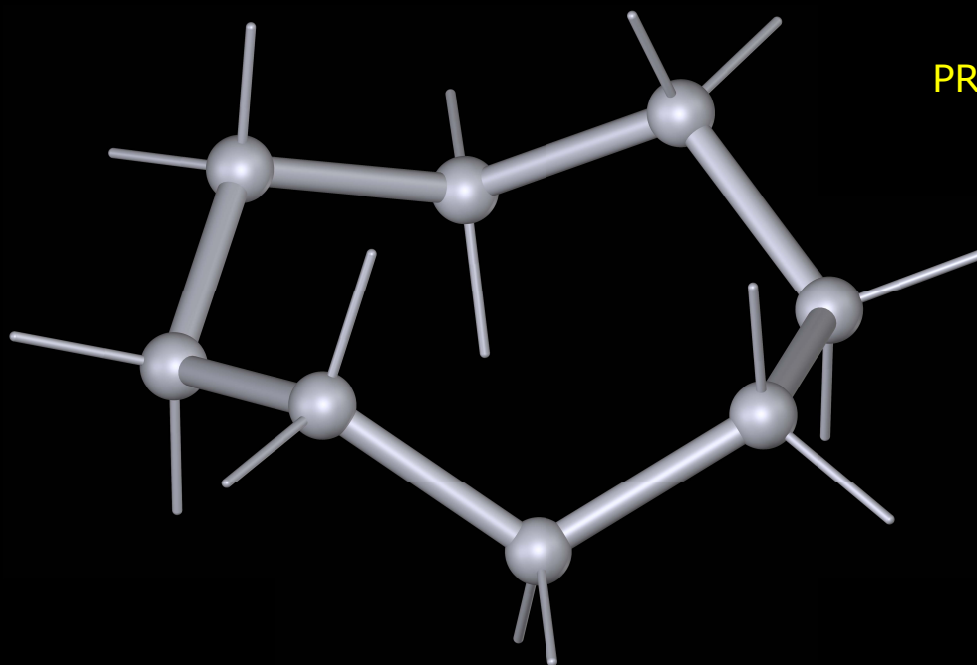
CIKLOHEKSAN



CIKLOHEPTAN



CIKLOOKTAN



PRIBLIŽNO REALNA,

3D GEOMETRIJA

MOLEKULA

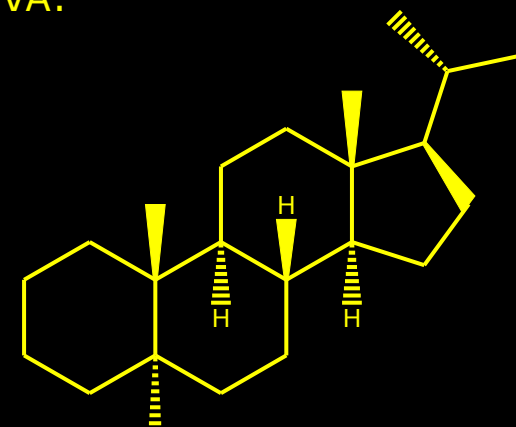
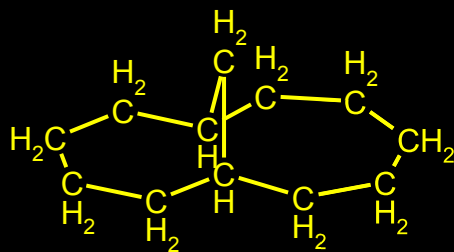
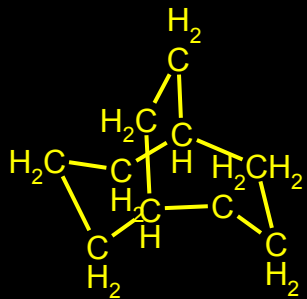
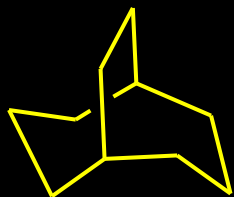
CIKLOOKTANA

CIKLOALKANI- UGLJENIKOVI ATOMI VEZANI SU TAKO DA ČINE PRSTEN

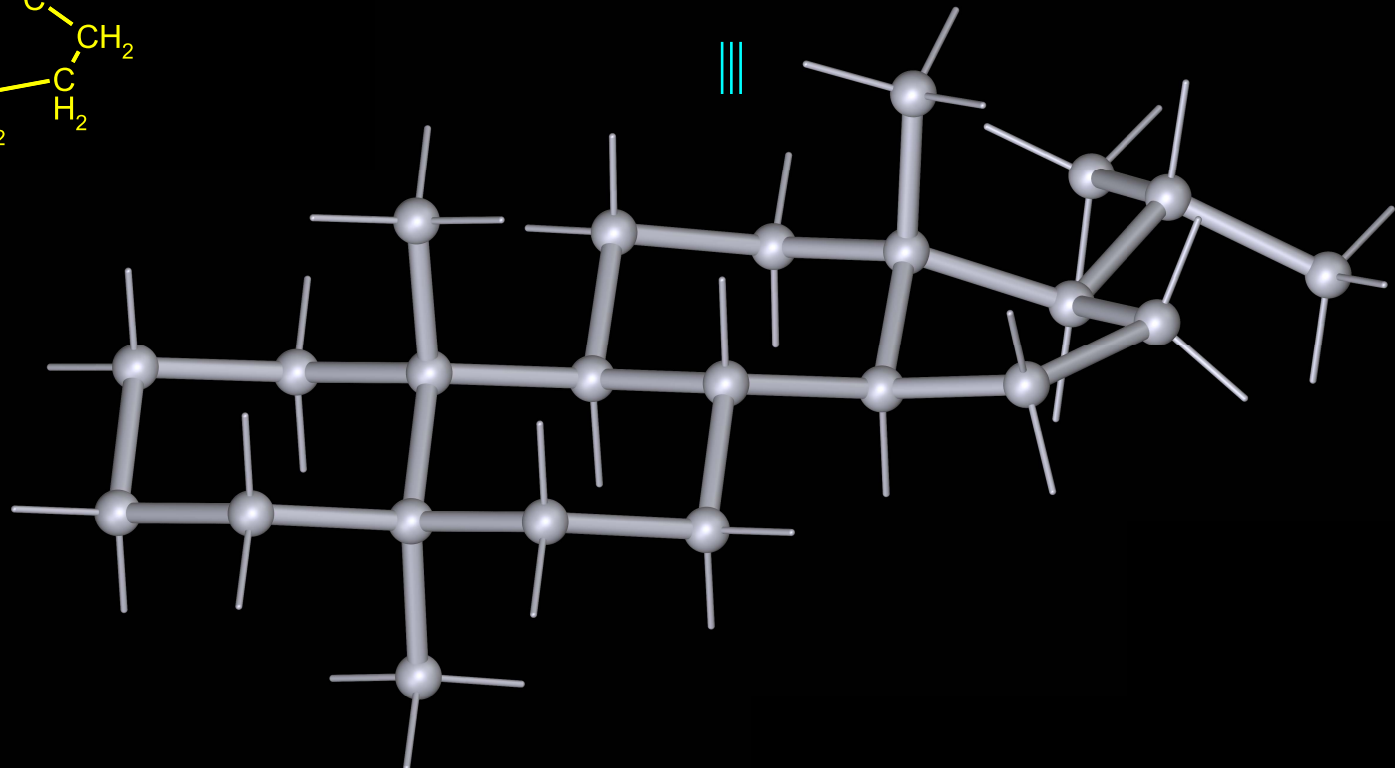


OPŠTA FORMULA: C_nH_{2n} (samo za jedinjenja sa jednim prstenom)

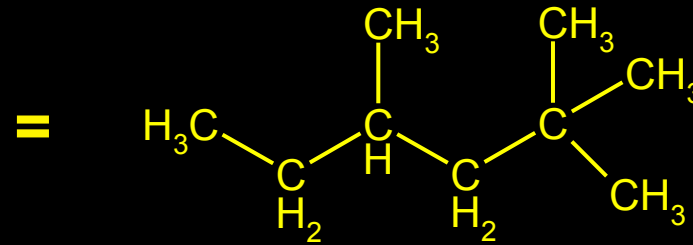
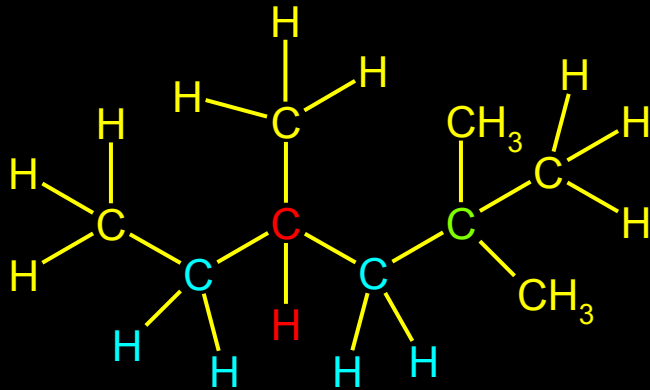
PRIMERI CIKLIČNIH ALKANA SA VIŠE PRSTENOVA:



POLICIKLIČNI ALKAN: SKELET STEROIDNOG MOLEKULA



PODELA UGLJENIKOVIH ATOMA PREMA TOME KAKO SU SUPSTITUISANI



2,2,4-Trimetil-heksan; 2,2,4-Trimethyl-hexane

H = primarni vodonikov atom

C = primarni ugljenikov atom (**P**)

H = sekundarni vodonikov atom

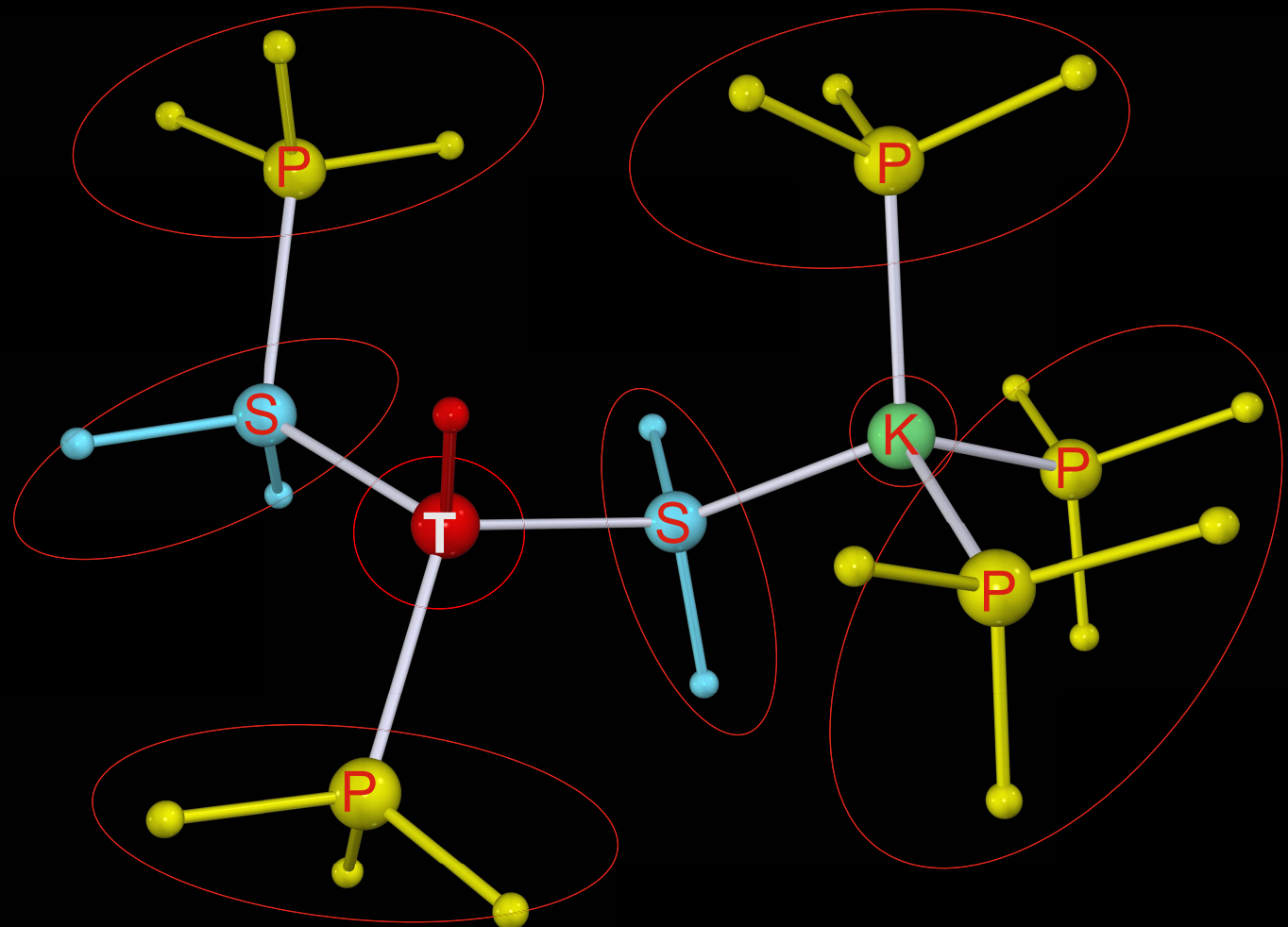
C = sekundarni ugljenikov atom (**S**)

H = tercijerni vodonikov atom

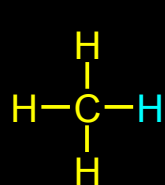
C = tercijerni ugljenikov atom (**T**)

C = kvaternerni ugljenikov atom (**K**)

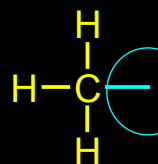
NAPOMENA: SVE BOJE SU
PROIZVOLJNE



ALKIL GRUPE: FORMALNIM UDALJAVANJEM ATOMA VODONIKA IZ MOLEKULA ALKANA DOBIJA SE OSTATAK KOJI SE NAZIVA ALKIL GRUPA. OVE GRUPE NISU REALNE VRSTE (MOLEKULI; JONI; RADIKALI) I FIZIČKI NE POSTOJE IZOLOVANO

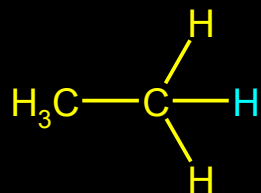


METAN

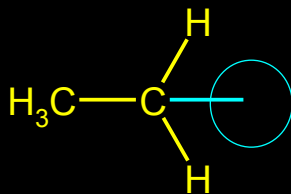


METIL GRUPA

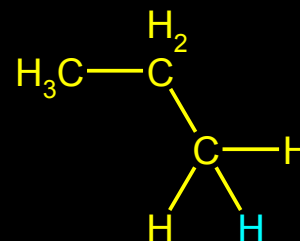
OTVORENA
VALENCA



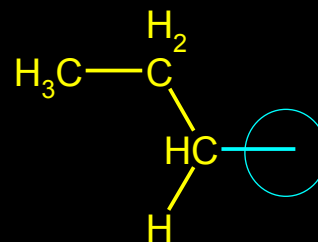
ETAN



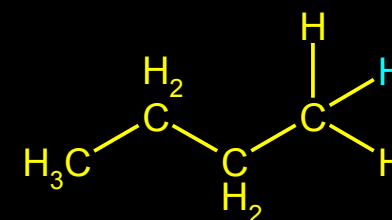
ETIL GRUPA



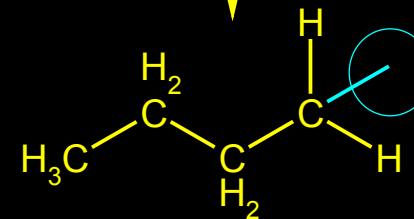
PROPAN



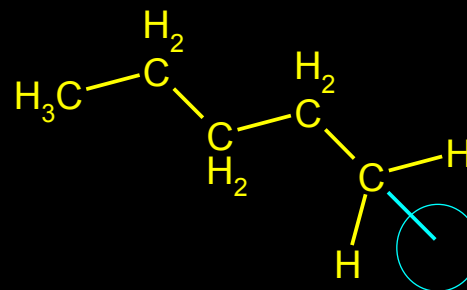
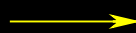
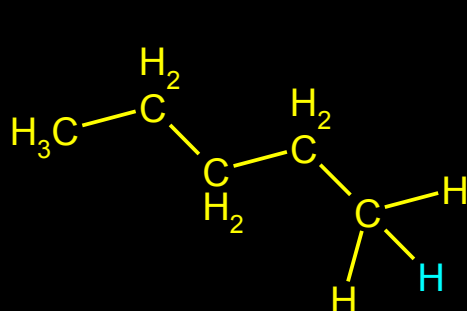
PROPIL GRUPA



BUTAN



BUTIL GRUPA

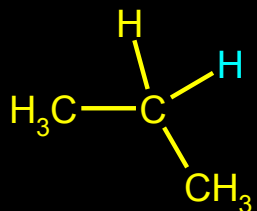


PENTIL GRUPA

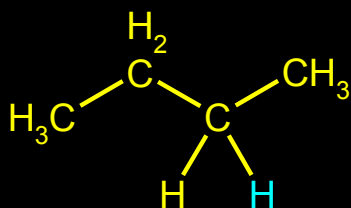
ALKIL GRUPE: -nastavak



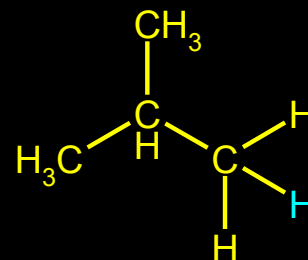
RAČVASTE (RAZGRANATE) ALKIL GRUPE



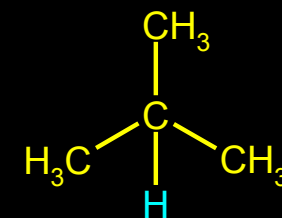
PROPAN



BUTAN

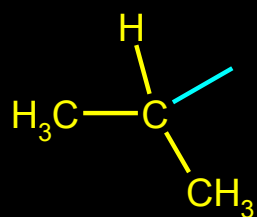


2-METIL PROPAN
(*izo*-BUTAN)

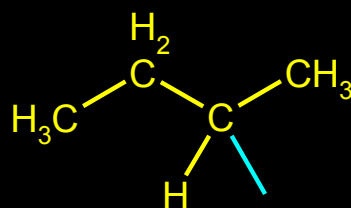


2-METIL PROPAN
(*izo*-BUTAN)

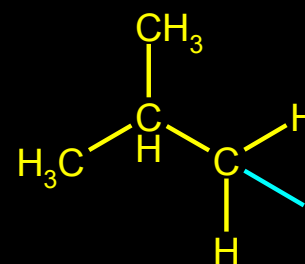
OTVORENA
VALENCA



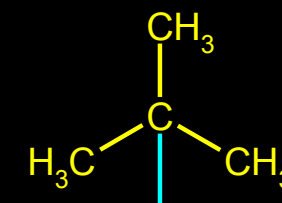
2-PROPIL
ili *izo*-PROPIL



2-BUTIL
ili *sec*-BUTIL



2-METIL PROPIL
ili *izo*-BUTIL



1,1-DIMETIL-ETIL
(*terc*-BUTIL)

OVA GRUPA NEMA RAČVANJE NA OTVORENOJ
VALENCI VEĆ U SUSEDNOM POLOŽAJU

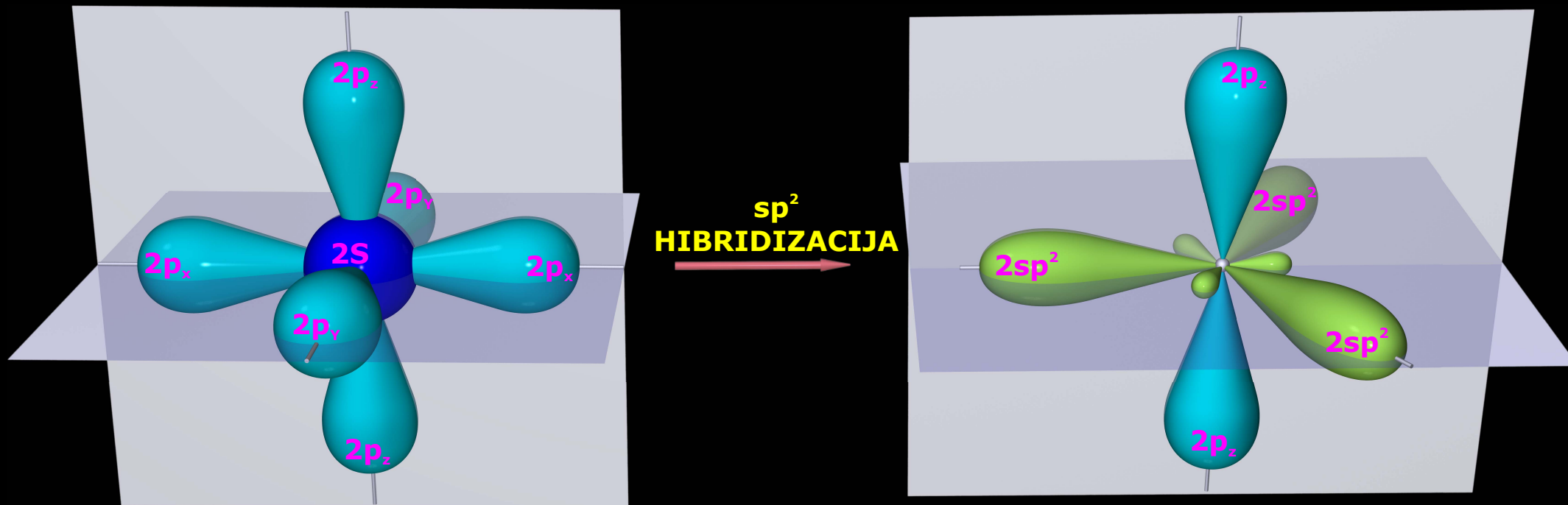
ALKENI (OLEFINI) - MOLEKULI SA DVOSTRUKOM VEZOM, (C=C), KAO FUNKCIONALNOM GRUPOM; STRUKTURA, OSOBINE, PODELA



PRIMER ETENA : **FORMALNI PROCES** POSTAJANJE ETENA IZ ELEMENATA - **C I H** ATOMA (U REALNIM USLOVIMA ETEN I DRUGA ORGANSKA JEDINJENJA PRAKTIČNO NIKADA NE POSTAJU DIREKTNO IZ ELEMENATA).

I. sp^2 HIBRIDIZACIJA ATOMSKIH ORBITALA UGLJENIKA

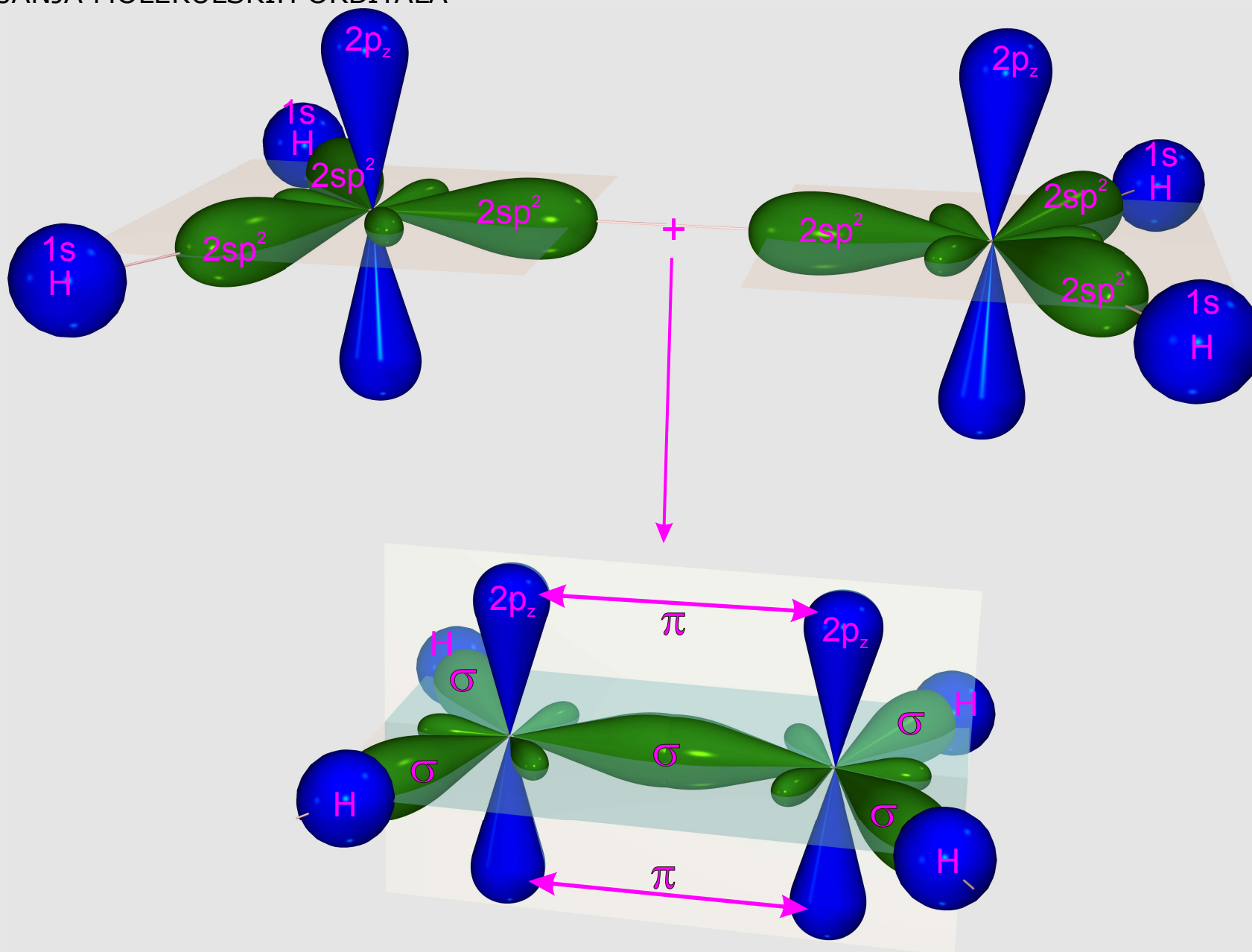
$(2s^2) + (2p_x^1) + (2p_y^1) + (2p_z^0) =$ TRI sp^2 HIBRIDIZOVANE ORBITALE + JEDNA NEHIBRIDIZOVANA $2p_z^1$



NEHIBRIDIZOVANE ORBITALE C ATOMA U VALENTNOM SLOJU: $2s^2, 2p_x^1, 2p_y^1, 2p_z$

TRI sp^2 HIBRIDIZOVANE ORBITALE ATOMSKE ORBITALE C ATOMA + JEDNA NEHIBRIDIZOVANA ORBITALA ($2p_z$)

PREKLAPANJE ATOMSKIH ORBITALA **2 C** ATOMA (3 HIBRIDIZOVANE sp^2 KAO I JEDNE NEHIBRIDIZOVANE $2p_z$, ZA SVAKI **C** ATOM) I $1s$ ATOMSKIH ORBITALA **4 H** ATOMA - PROCES FORMIRANJA NOVIH HEMIJSKIH VEZA I POSTAJANJA MOLEKULSKIH ORBITALA

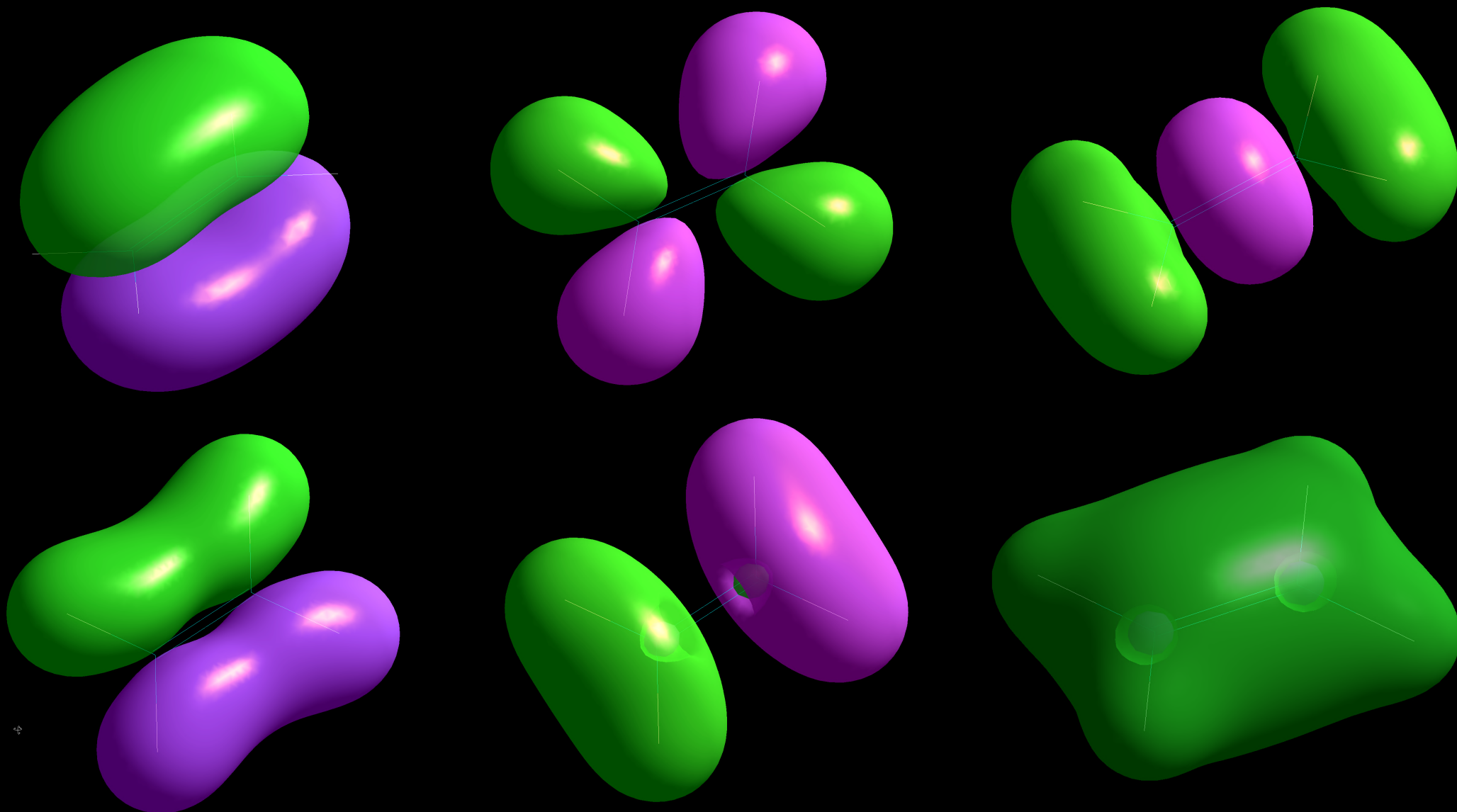


PRIBLIŽAN IZGLED POJEDINIHK MOLEKULSKIH ORBITALA ETENA- 3D FUNKCIJA POSTALIH MEŠANJEM HIBRIDIZOVANIH I NEHIBRIDIZOVANIH ATOMSKIH ORBITALA (2 C sp^2 , 2 C $2p_x$ i 4 H $1s$).



-IMAJU POZITIVNE I NEGATIVNE REGIONE (ZELENO ODN. LJUBIČASTO).

-UGLAVNOM NEMAJU DIREKTNO FIZIČKO ZNAČENJE, ŠIROKO SE PRIMENJUJU U RAZLIČITIM KVANTNO-MEHANIČKIM PRORAČUNIMA

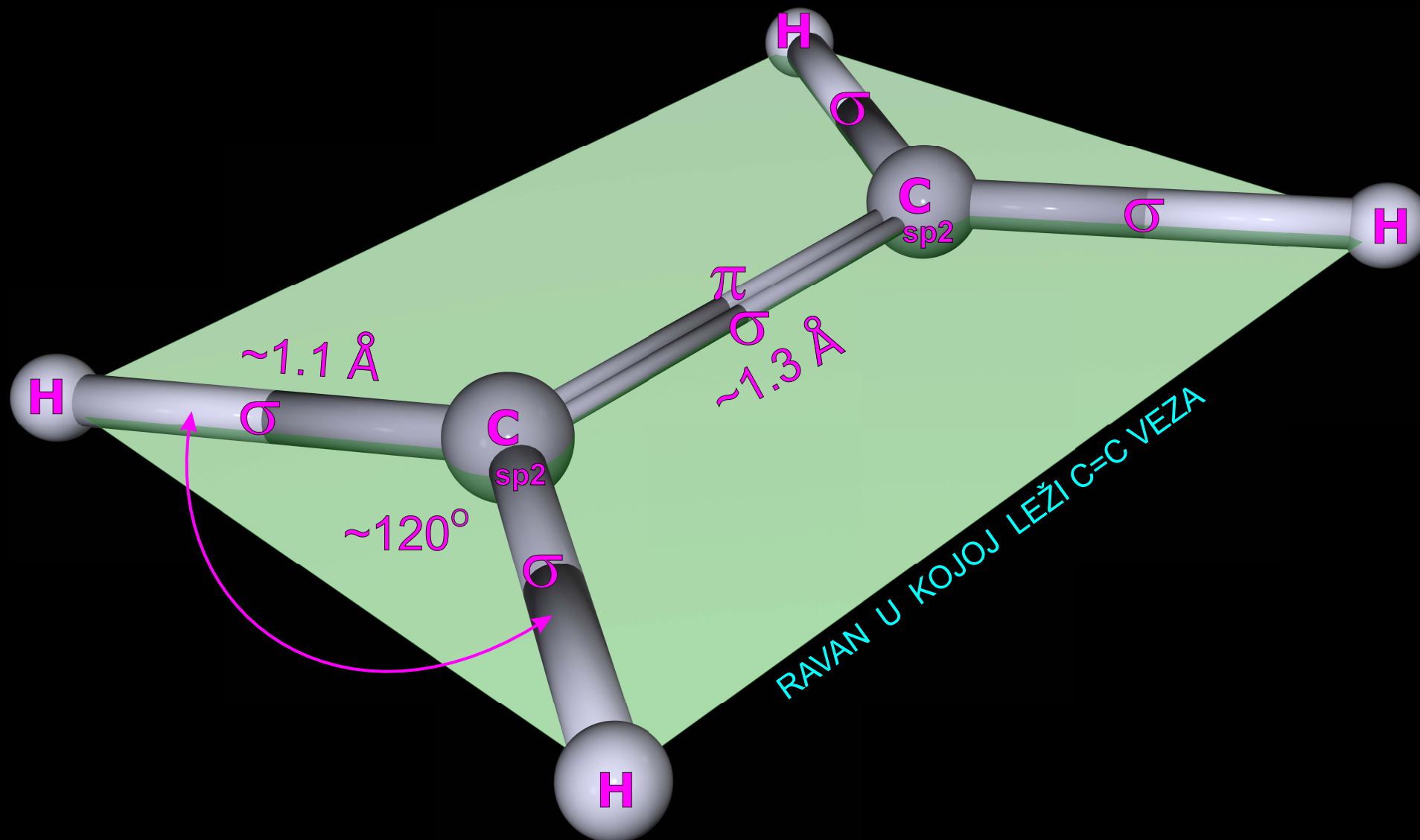


STRUKTURA ETENA- PRIKAZANA JE GEOMETRIJA MOLEKULA KAO MEHANIČKOG MODELA SASTAVLJENOG OD SFERA (ATOMA) I CILINDARA (JEDNOSTRUKIH I DVOSTRUKIH VEZA)

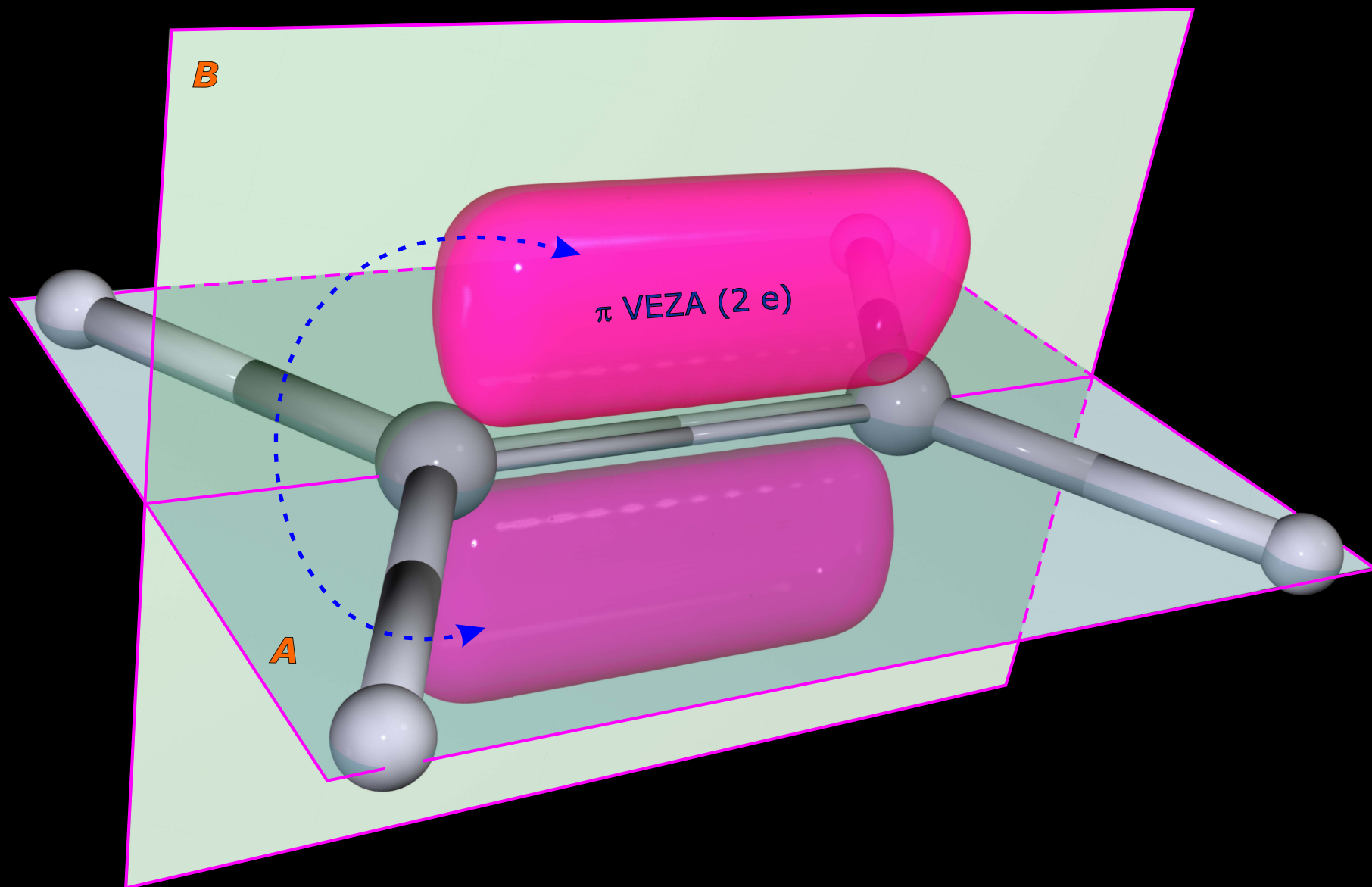


- SVAKI **C** ATOM LEŽI U RAVNI, ISTO KAO I NJEGOVI SUPSTITUENTI (2**H** I 1**C** ATOM)

-SVE VEZE ZAKLAPAJU UGAO $\sim 120^\circ$, DUŽINA **C=C** VEZE $\sim 1.3 \text{ \AA}$, DUŽINA **C-H** VEZE $\sim 1.1 \text{ \AA}$



STRUKTURA ETENA- PRIKAZANA JE GEOMETRIJA π VEZE U 3D. PRIBLIŽAN PROSTOR U KOME SE NALAZI ELEKTRONSKI PAR π VEZE, PRIKAZAN JE LJUBIČASTO. π VEZA LEŽI U RAVNI **B** KOJA JE ORTOGONALNA NA RAVAN C=C VEZE, **A**.

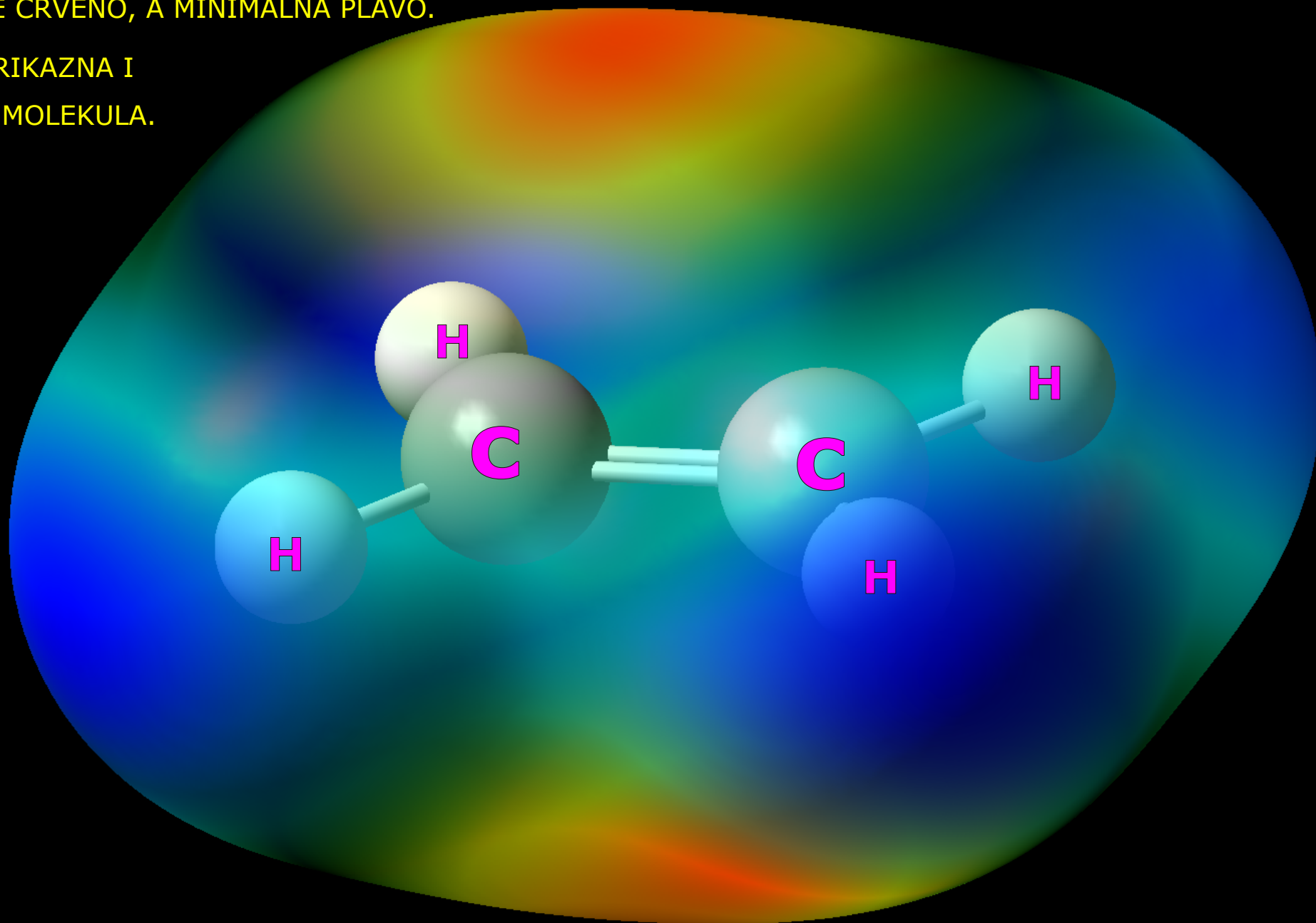


STRUKTURA ETENA- *Ab initio* KVANTNO-MEHANIČKA SIMULACIJA.



PRIKAZAN JE PRIBLIŽNO REALNI, 3D OBLIK MOLEKULA. MAKSIMALNA GUSTINA ELEKTRONA (IZ π VEZE), OZNAČENA JE CRVENO, A MINIMALNA PLAVO.

TAKOĐE JE PRIKAZNA I GEOMETRIJA MOLEKULA.

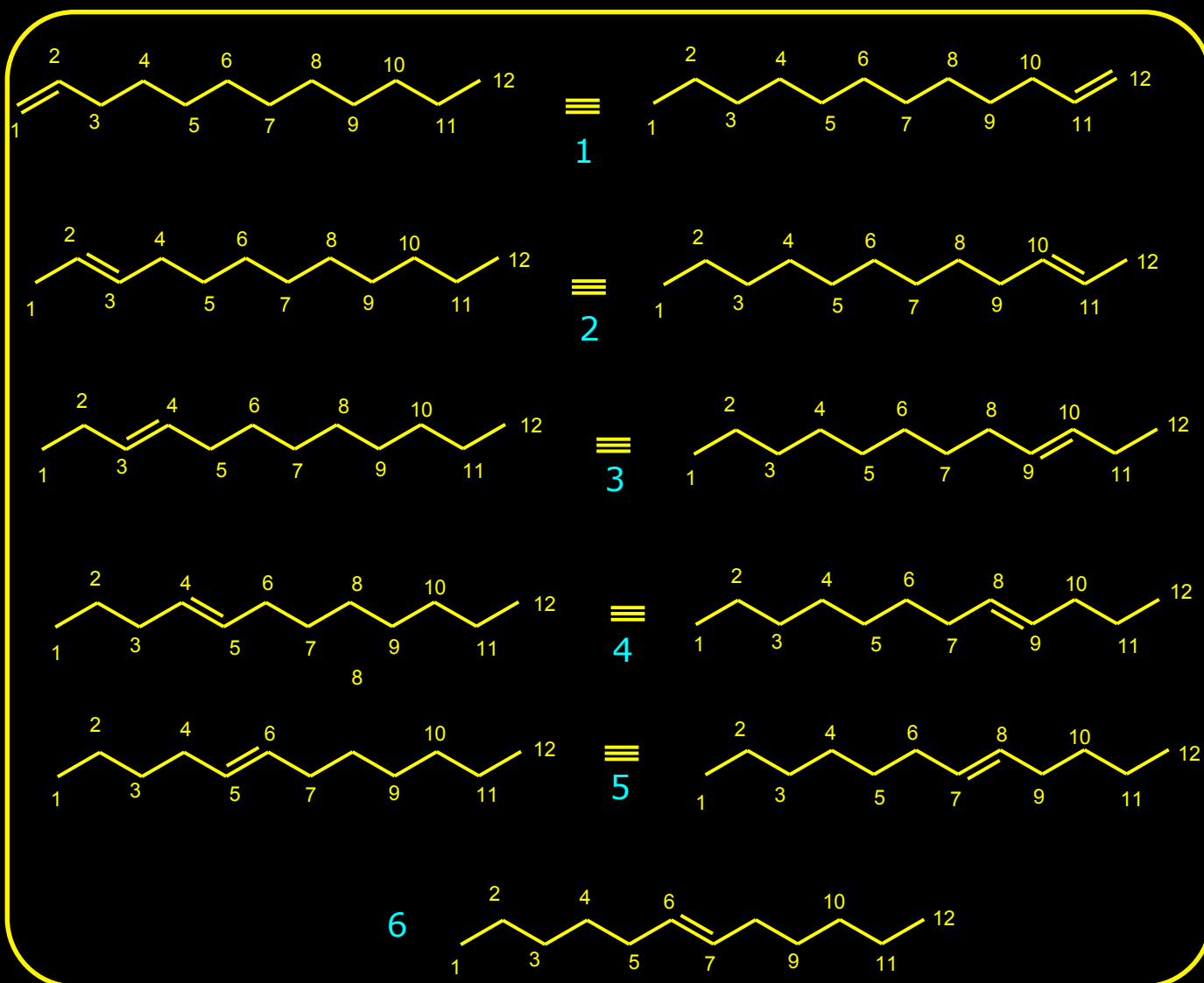
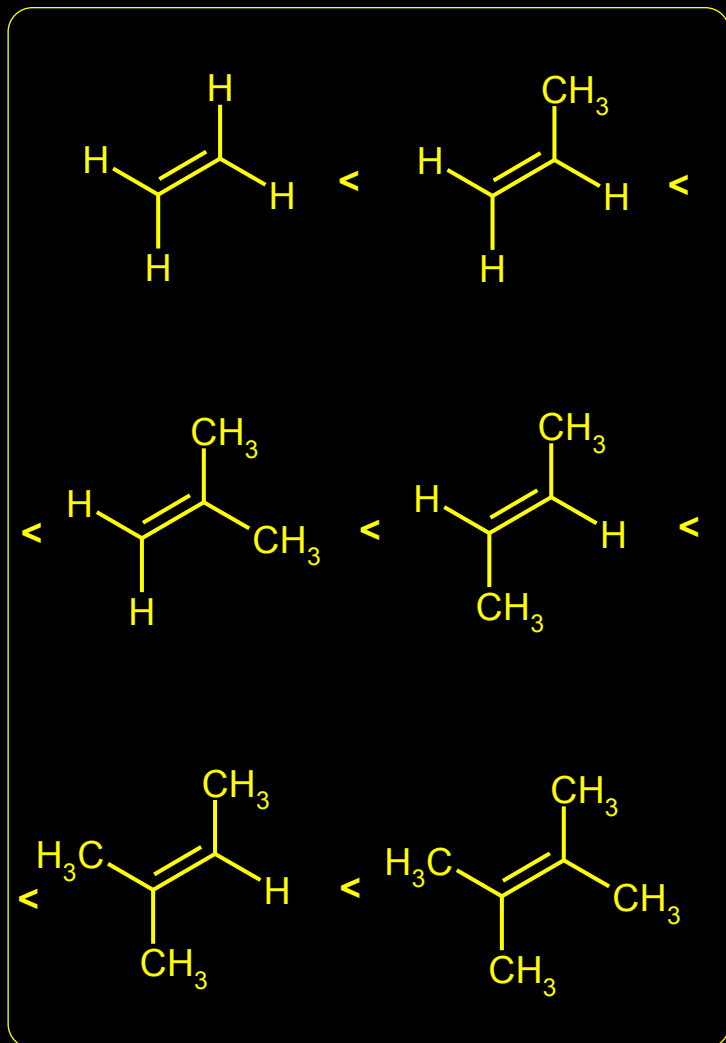


PODELA ALKENA PREMA STEPENU SUPSTITUCIJE I POLOŽAJU U NIZU



STEPEN SUPSTITUCIJE C=C VEZE
RASTE U NIZU:

REGIOIZOMERIJA: POLOŽAJ C=C VEZE U NIZU. PRIKAZANA
JEDINJENJA 1-6, MEĐUSOBNO SE RAZLIKUJU SAMO PO POLOŽAJU
DVOSTRUKE VEZE U NIZU. MEĐUTIM, IMAJU RAZLIČITE FIZIČKE,
HEMIJSKE, SPEKTROSKOPSKE I, EVENTUALNO, FARMAKOLOŠKE
OSOBINE.



PRIMER sp HIBRIDIZACIJE: FORMALNI PROCES POSTAJANJE ETINA IZ ELEMENATA -



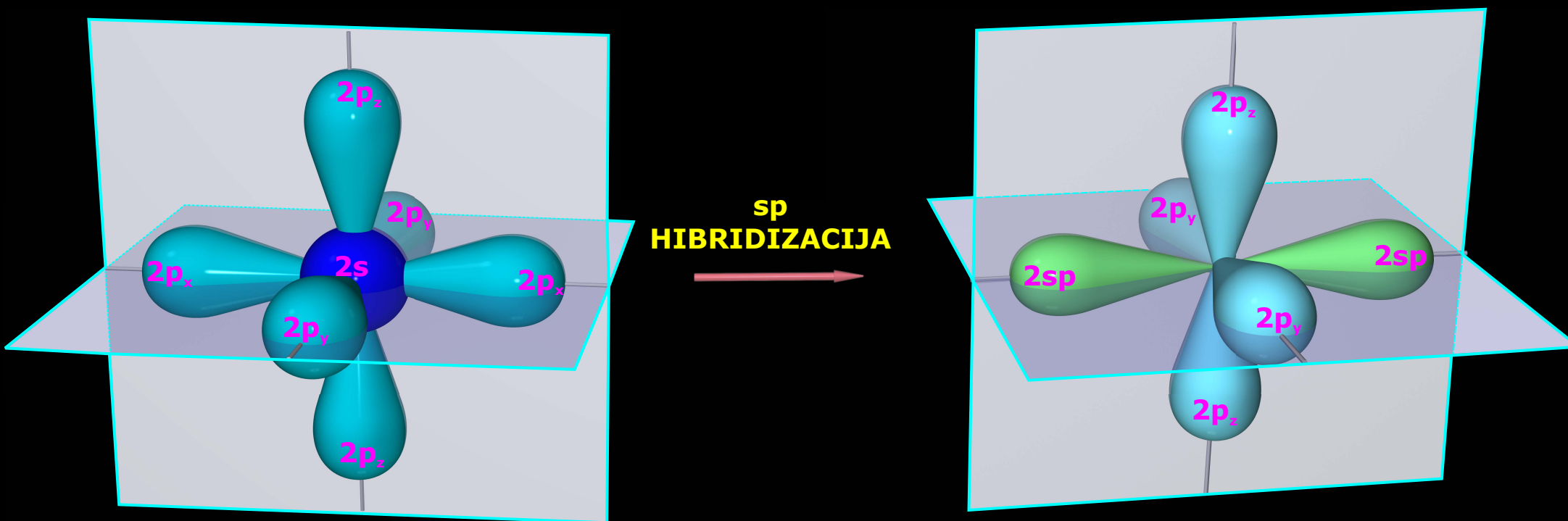
2 C ATOMA I 2 H ATOMA

HIBRIDIZACIJA ATOMSKIH ORBITALA UGLJENIKA

PRIMER ETINA : **FORMALNI PROCES** POSTAJANJE ETINA IZ ELEMENATA - **C** I **H** ATOMA (U REALNIM USLOVIMA ETIN I DRUGA ORGANSKA JEDINJENJA PRAKTIČNO NIKADA NE POSTAJU DIREKTNO IZ ELEMENATA).

I. sp HIBRIDIZACIJA ATOMSKIH ORBITALA UGLJENIKA

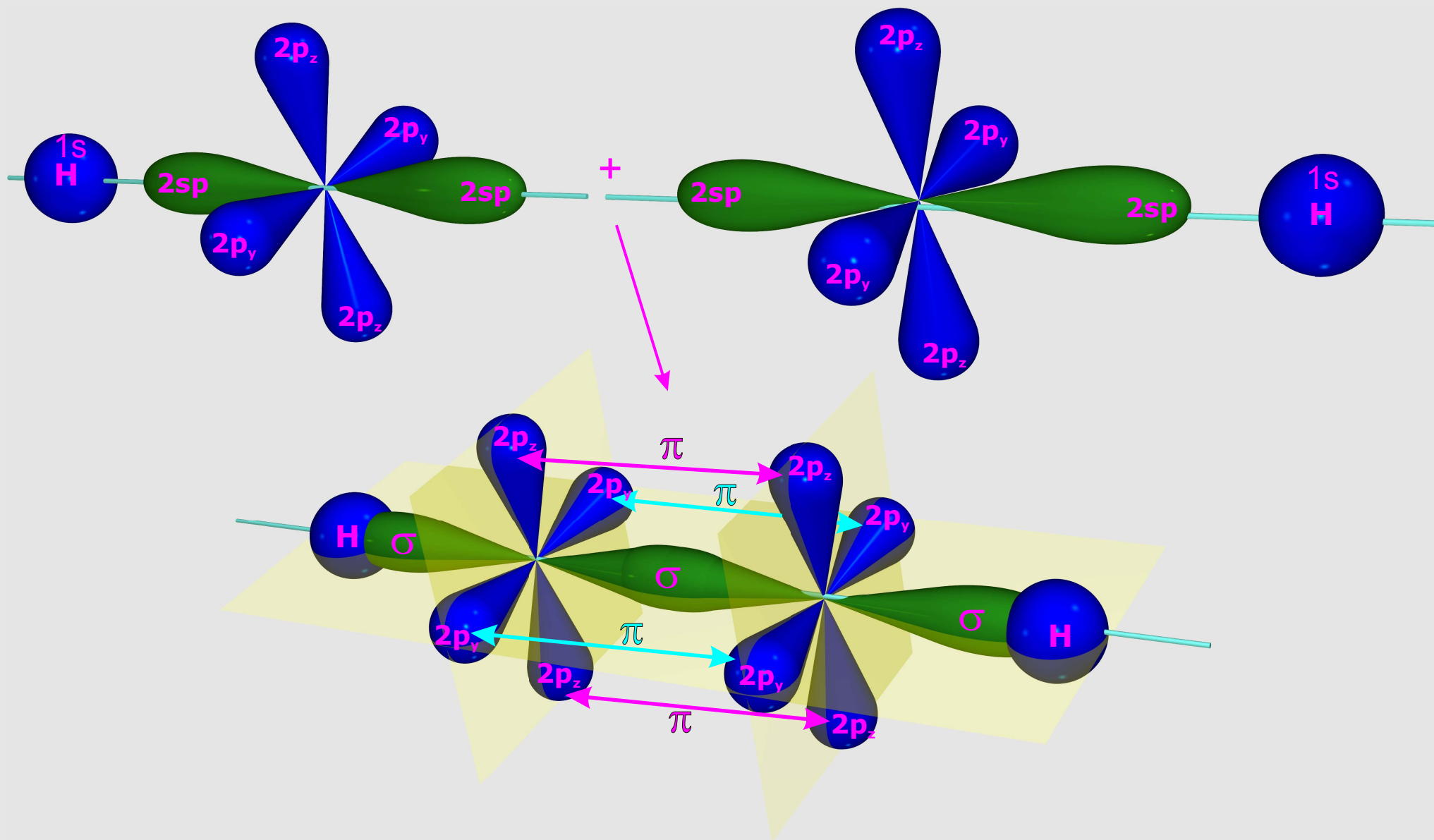
$(2s^2) + (2p_x^1) + (2p_y^1) + (2p_z^0) =$ DVE sp HIBRIDIZOVANE ORBITALE + DVE NEHIBRIDIZOVANE $2p_z^1$ I $2p_y^1$



NEHIBRIDIZOVANE ORBITALE C ATOMA U VALENTNOM SLOJU: $2s^2, 2p_x^1, 2p_y^1, 2p_z$

DVE sp HIBRIDIZOVANE ATOMSKE ORBITALE + DVE NEHIBRIDIZOVANE ORBITALE ($2p_y + 2p_z$) C ATOMA

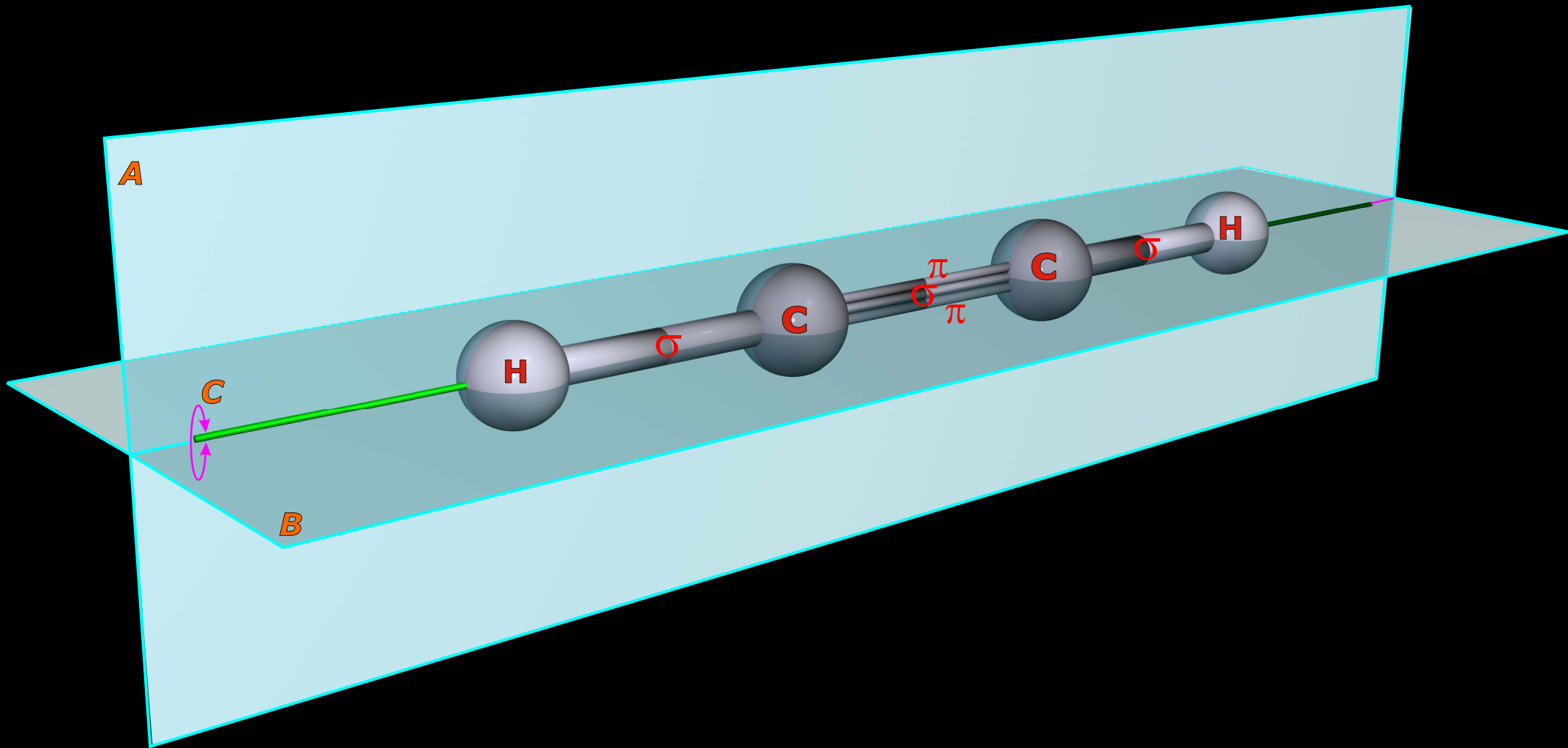
PREKLAPANJE ATOMSKIH ORBITALA **2 C** ATOMA (DVE $2sp$ HIBRIDIZOVANE KAO I DVE NEHIBRIDIZOVANE, $2p_x$ I $2p_z$ ORBITALE, SVAKOG C ATOMA POJEDINAČNO) I $1s$ ATOMSKIH ORBITALA **2 H** ATOMA - PROCES POSTAJANJA MOLEKULSKIH ORBITALA I FORMIRANJA NOVIH HEMIJSKIH VEZA (σ I π).



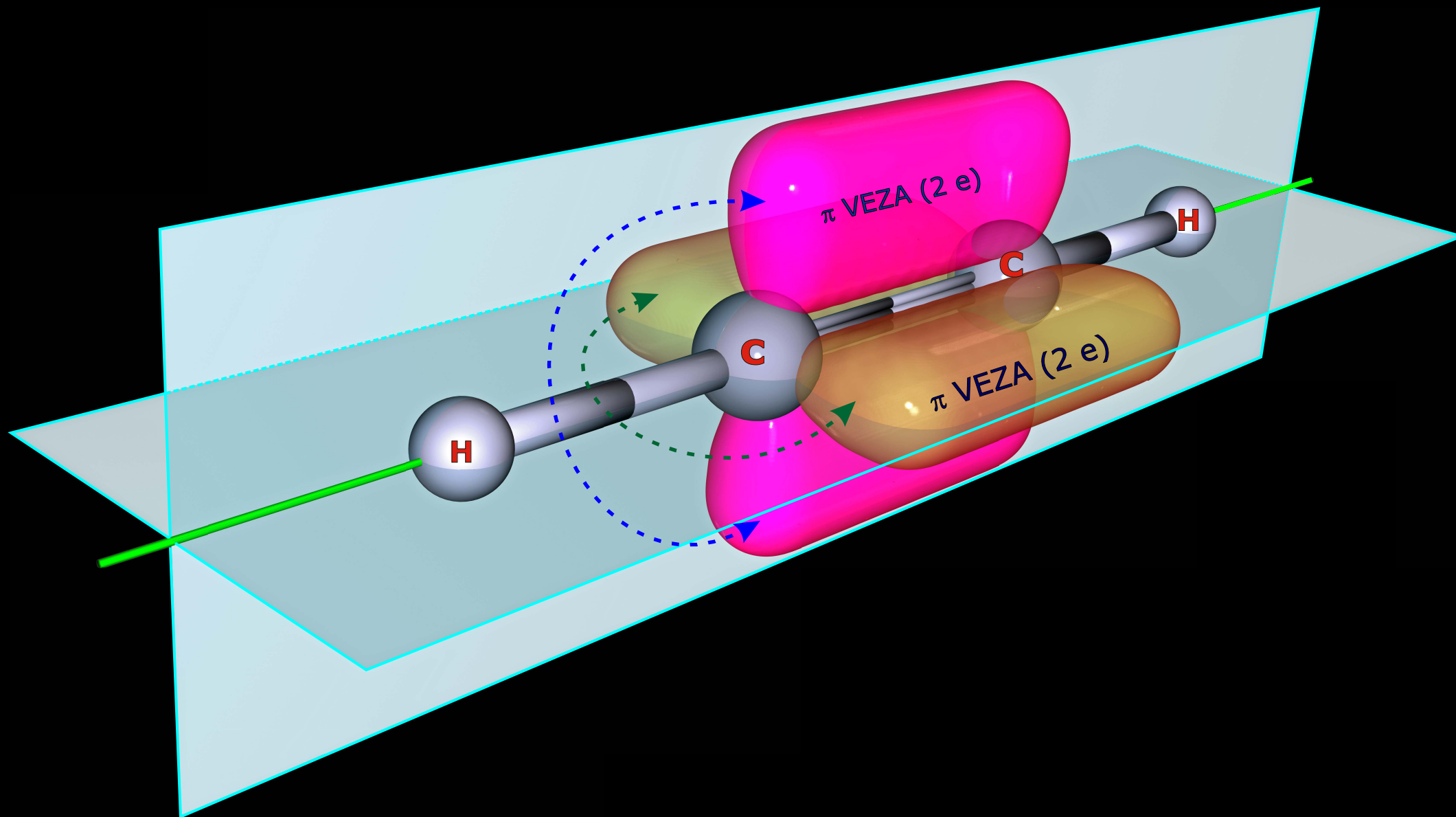
ALKINI (ACETILENI) - MOLEKULI SA TROSTRUKOM VEZOM UGLJENIK-UGLJENIK KAO FUNKCIONALNOM GRUPOM



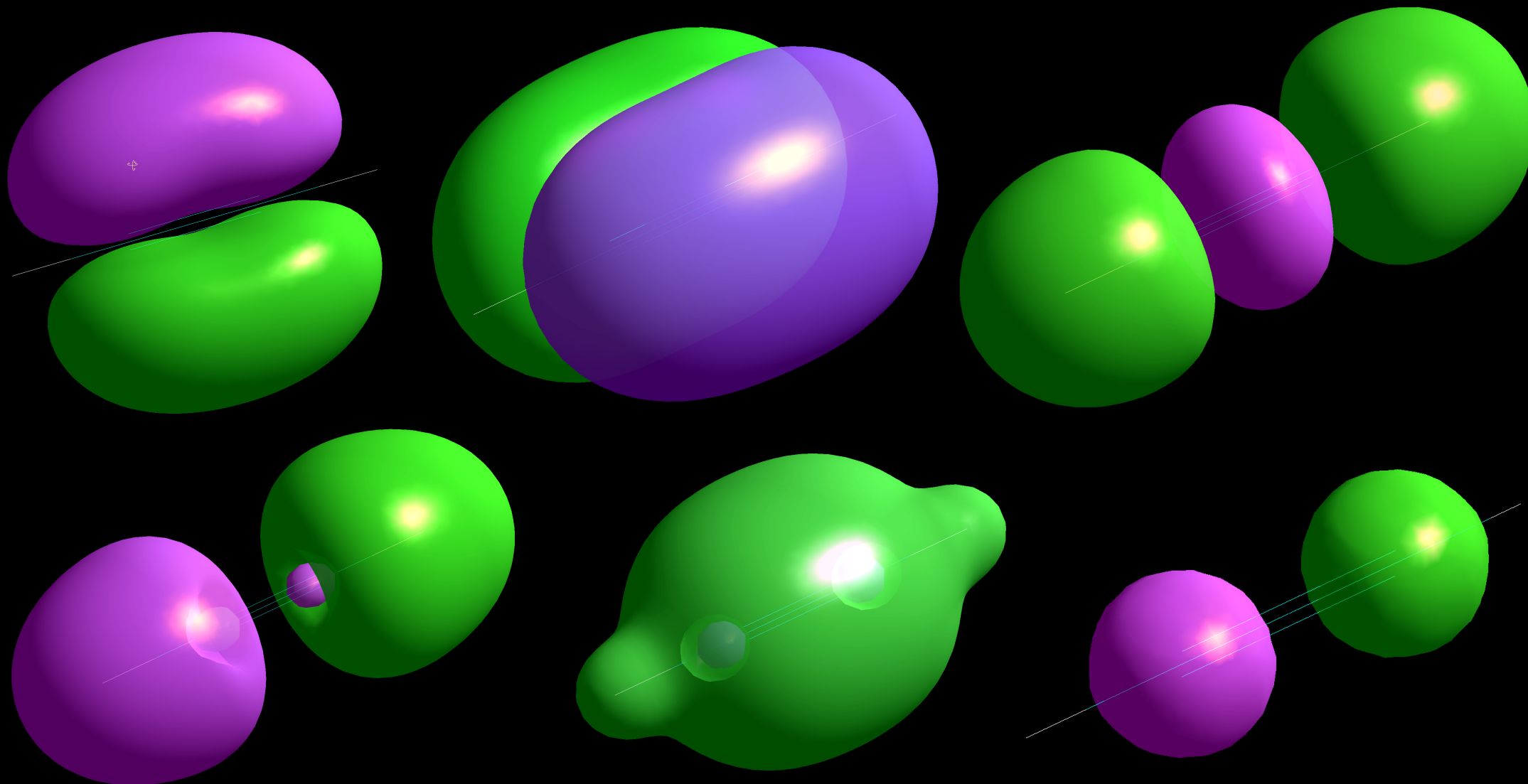
STRUKTURA ETINA- PRIKAZANA JE GEOMETRIJA MOLEKULA KAO I DVE π VEZE KOJE LEŽE U MEĐUSOBNO ORTOGONALNIM RAVNIMA **A** I **B**. MOLEKUL TAKOĐE IMA I OSU SIMETRIJE **C** (ZELENA LINIJA), KOJA JE ZAJEDNIČKA ZA OBE RAVNI.



STRUKTURA ETINA- PRIKAZANA JE GEOMETRIJA DVE π VEZE U 3D. PRIBLIŽAN PROSTOR U KOME SE NALAZE ELEKTRONSKI PAROVI π VEZA, PRIKAZANI SU LJUBIČASTO ODN. ORANŽ.



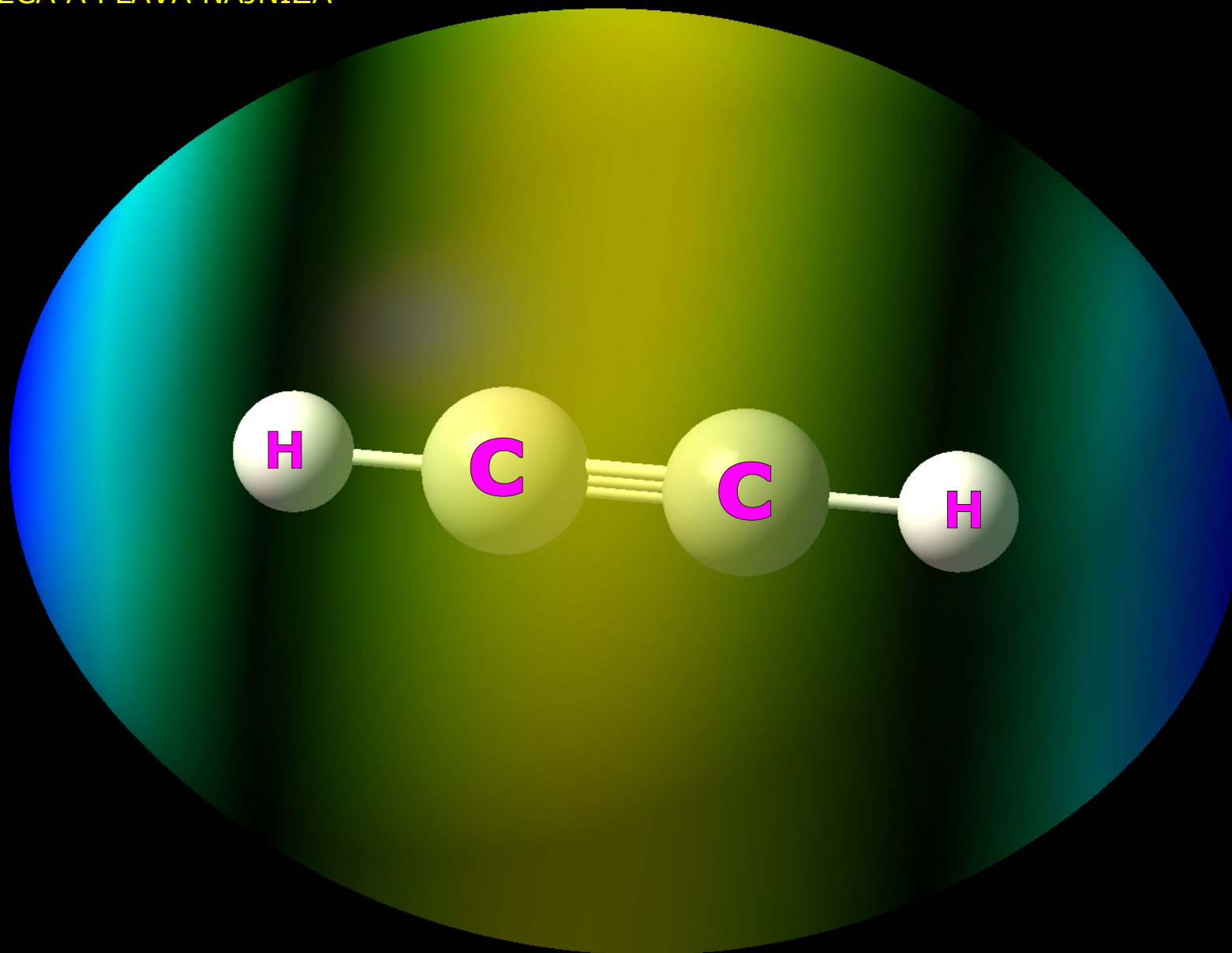
SLIKE PRIKAZUJU MOLEKULSKE ORBITALE ETINA, KOJE SU 3D FUNKCIJE, DOBIJENE KVANTNO-MEHANIČKIM PRORAČUNOM, PRIMENOM MOLEKULSKO-ORBITALNE TEORIJE. POSTAJU KAO REŠENJA JEDNAČINA, KADA SE PREKLAPAJU ATOMSKE ORBITALE (4 sp^2 ORBITALA IZ DVA C ATOMA, DVE $1s$ ORBITALA IZ 2H ATOMA I ČETIRI NEHIBRIDIZOVANE $2p$ ORBITALE IZ DVA C ATOMA). U SVAKOM POGLEDU DIREKTNO SU ANALOGNE MOLEKULSKIM ORBITALAMA ETANA I ETINA.



IZGLED I FIZIČKE OSOBINE MOLEKULA ETINA



AKTIVNI 3D MODEL ETINA- Ab initio KVANTNO-MEHANIČKA SIMULACIJA PRIKAZUJE PRIBLIŽNI, REALNI OBLIK MOLEKULA, UKLJUČUJUĆI I NJEGOVU ZAPREMINU. BOJE OZNAČAVAJU GUSTINU π ELEKTRONA, GDE JE ORANŽ NAJVEĆA A PLAVA NAJNIŽA



JONSKA I KOVALENTNA JEDINJENJA



H <u>2.2</u>	ATOMSKI POLUPREČNICI, (Å) JONSKI POLUPREČNICI, KATJONA ILI ANJONA, Å (L. PAULING)						He
Li 1.45; <u>0.98</u>	Be 1.05; 0.31 <u>1.57</u>	B 0.85; 0.20 <u>2.04</u>	C 0.70; <u>2.55</u>	N 0.65; <u>3.04</u>	O 0.60; <u>3.44</u>	F 0.50; 1.36 <u>3.98</u>	Ne
Na 1.80; 0.95 <u>0.93</u>	Mg 1.50; 0.65 <u>1.31</u>	Al 1.25; 0.50 <u>1.61</u>	Si 1.10; <u>1.9</u>	P 1.00; <u>2.19</u>	S 1.00; <u>2.58</u>	Cl 1.00; 1.81 <u>3.16</u>	Ar
K 2.20; 1.33 <u>0.82</u>	Ca 1.80; 0.99 <u>1</u>	Ga <u>1.81</u>	Ge <u>2.01</u>	As <u>2.18</u>	Se <u>2.55</u>	Br 1.15; 1.95 <u>2.96</u>	Kr
Rb 2.35; 1.48 <u>0.82</u>	Sr 2.00; 1.13 <u>0.95</u>					I 1.40; 2.16 <u>2.66</u>	Xe
Cs 2.60; 1.69 <u>0.79</u>	Ba 2.15; 1.35 <u>0.89</u>						Rn

ELEKTRONEGATIVNOST ELEMENTA, (0.79-3.98); SEMIKVANTITATIVNA MERA SPOSOBNOSTI ELEMENTA DA PRIMI ELEKTRON I POSTANE ANJON. METALI NE PRIMAJU ELEKTRONE VEĆ IH ODPUŠTAJU I **POSTAJU KATJONI**. HALOGENI LAKO PRIMAJU ELEKTRONE I **POSTAJU ANJONI**

ELEMENTI KAO ŠTO SU **B, C, N** I **O** NORMALNO NE GRADE JONE TIPA B^{3+}/B^{3-} , C^{4+}/C^{4-} , N^{3+}/N^{3-} , O^{2+}/O^{2-} VEĆ PRETEŽNO FORMIRAJU **KOVALENTNE VEZE**

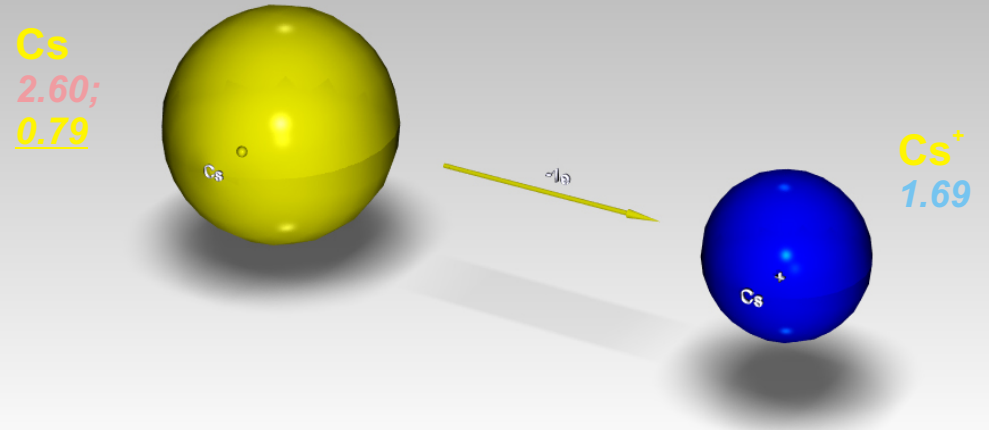
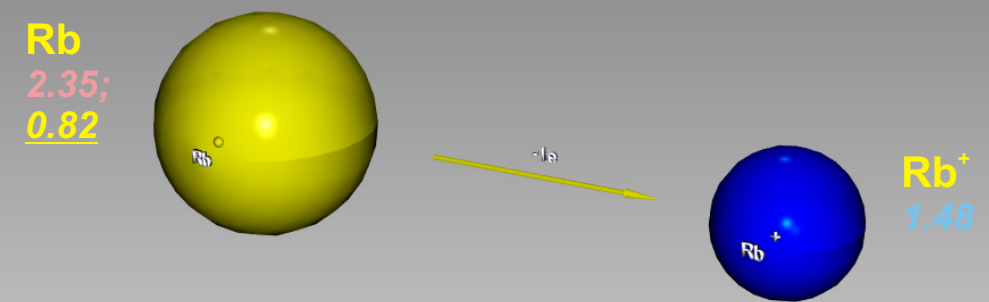
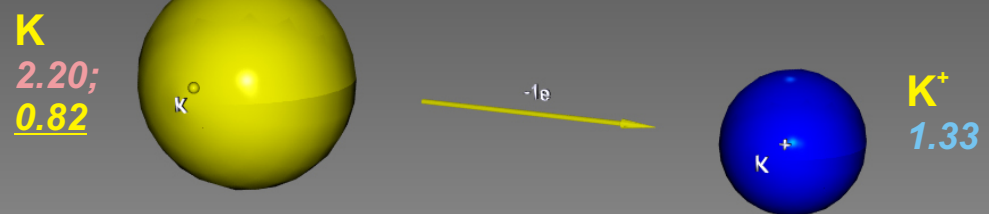
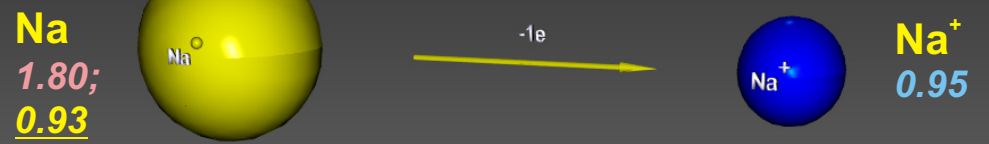
- **NEPOLARIZOVANA KOVALENTNA VEZA**: RAZLIKA U ELEKTRONEGATIVNOSTI DVA ATOMA $\sim < 0.3$

- **POLARIZOVANA KOVALENTNA VEZA**: RAZLIKA U ELEKTRONEGATIVNOSTI DVA ATOMA $\sim 0.3 - 2.0$

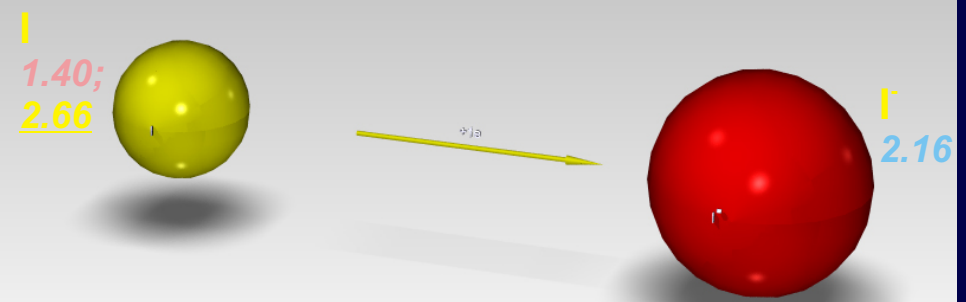
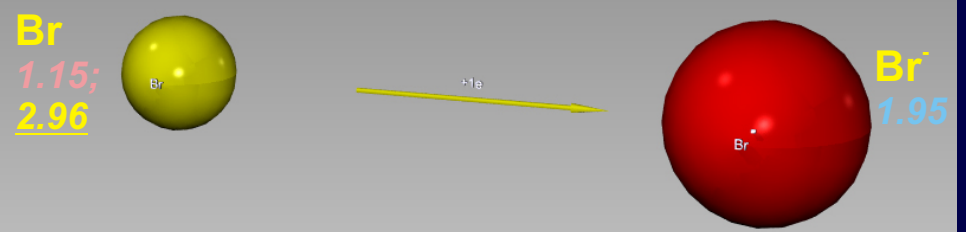
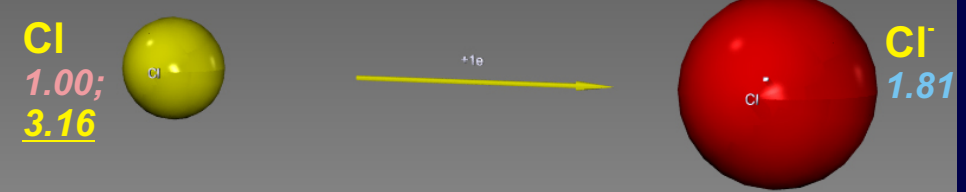
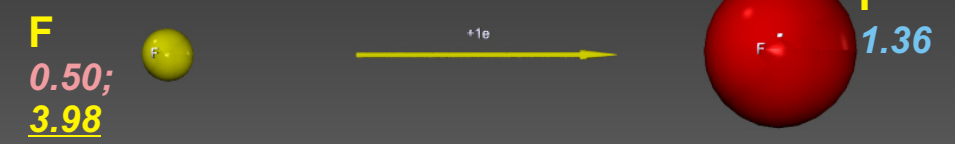
- **JONSKA VEZA**: RAZLIKA U ELEKTRONEGATIVNOSTI DVA ATOMA $\sim > 2.0$



POSTAJANJE KATJONA



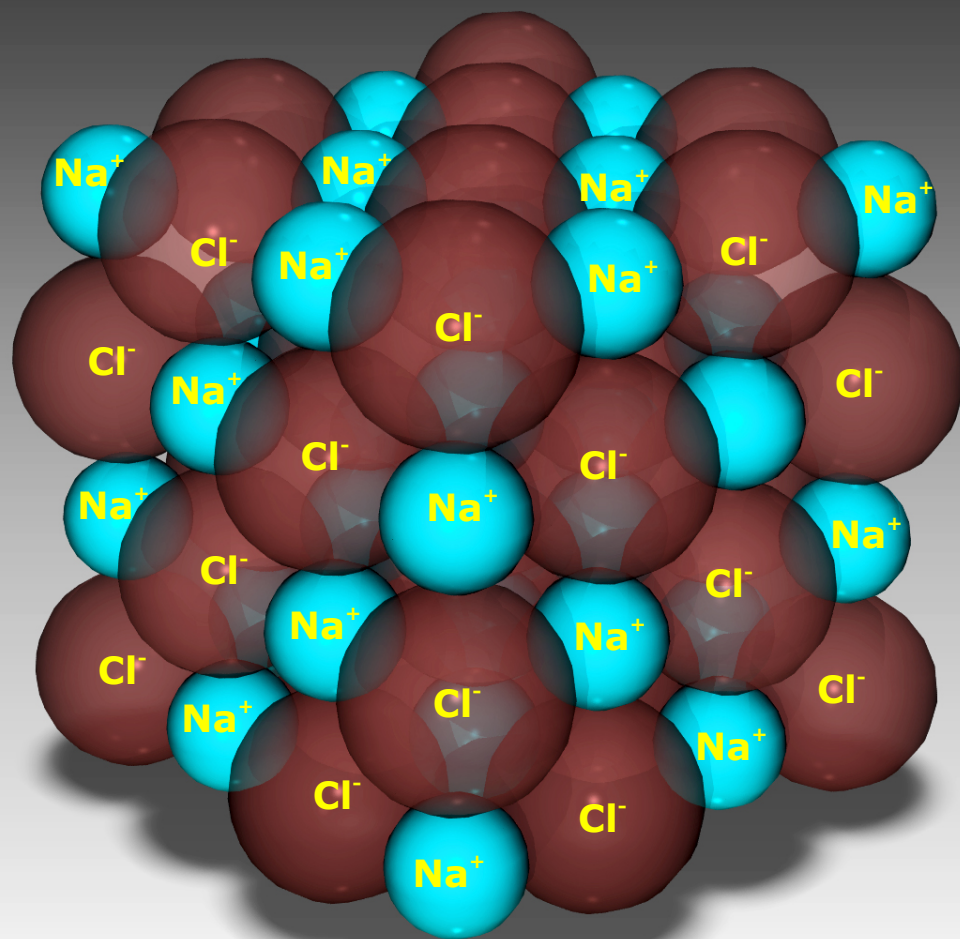
POSTAJANJE ANJONA



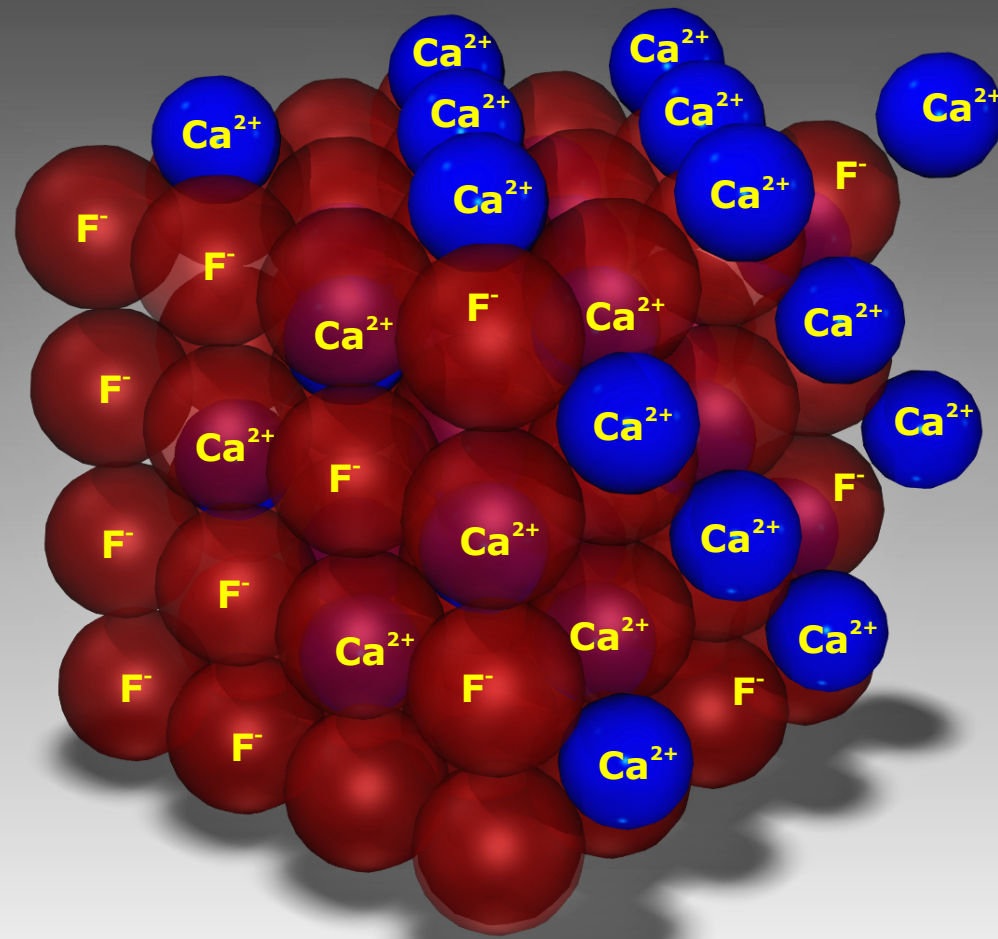
ČISTO JONSKA JEDINJENJA: SASTOJE SE OD KATJONA I ANJONA, VEZA MEĐU NJIMA JE SAMO ELEKTROSTATIČKA I NIJE PROSTORNO USMERENA.



JONSKA JEDINJENJA NE GRADE MOLEKULE - U ČVRSTOM STANJU FORMIRAJU 3D JONSKE KRISTALNE REŠETKE, SASSTAVLJENE OD NAIZMENIČNO RASPOREĐENIH KATJONA I ANJONA



KRISTALNA REŠETKA NaCl (jonska)

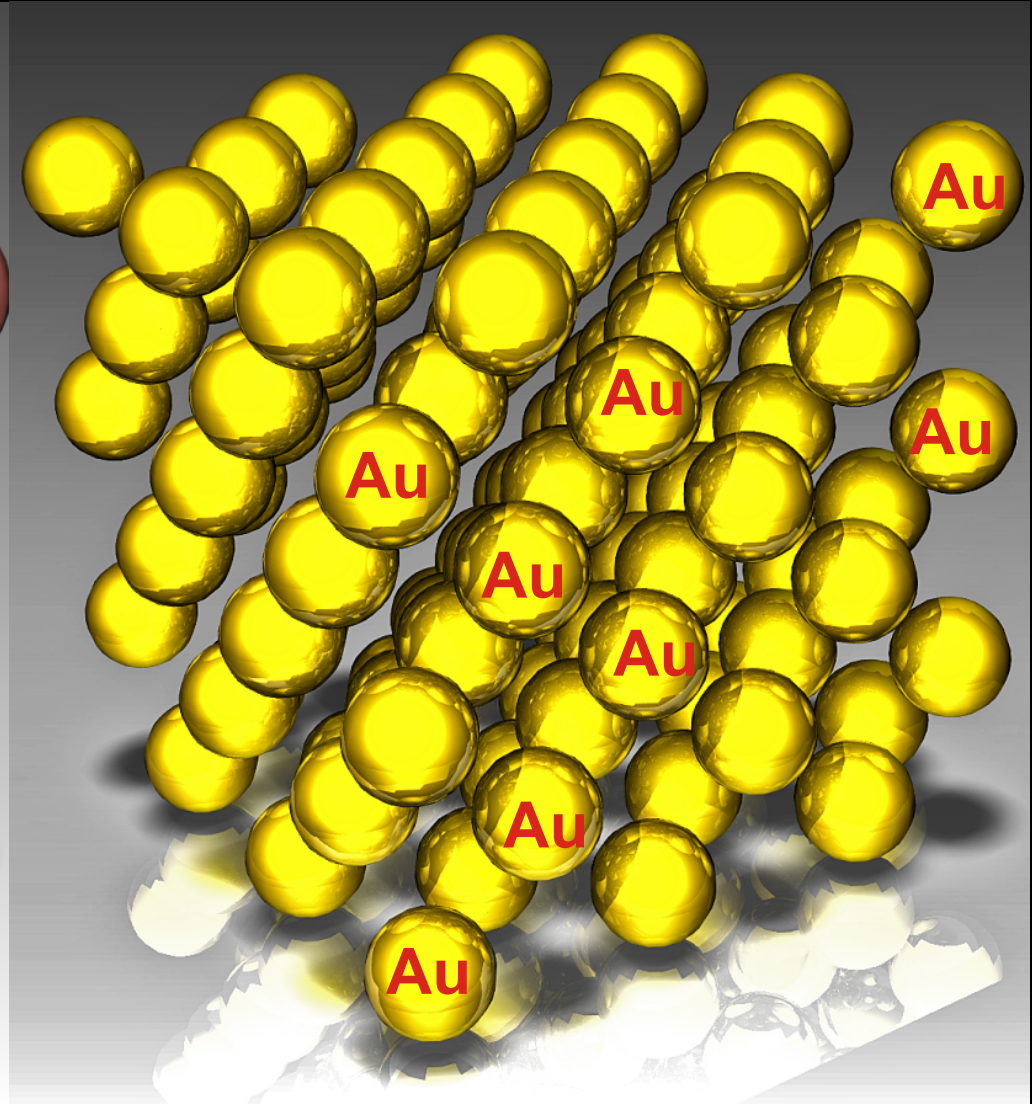
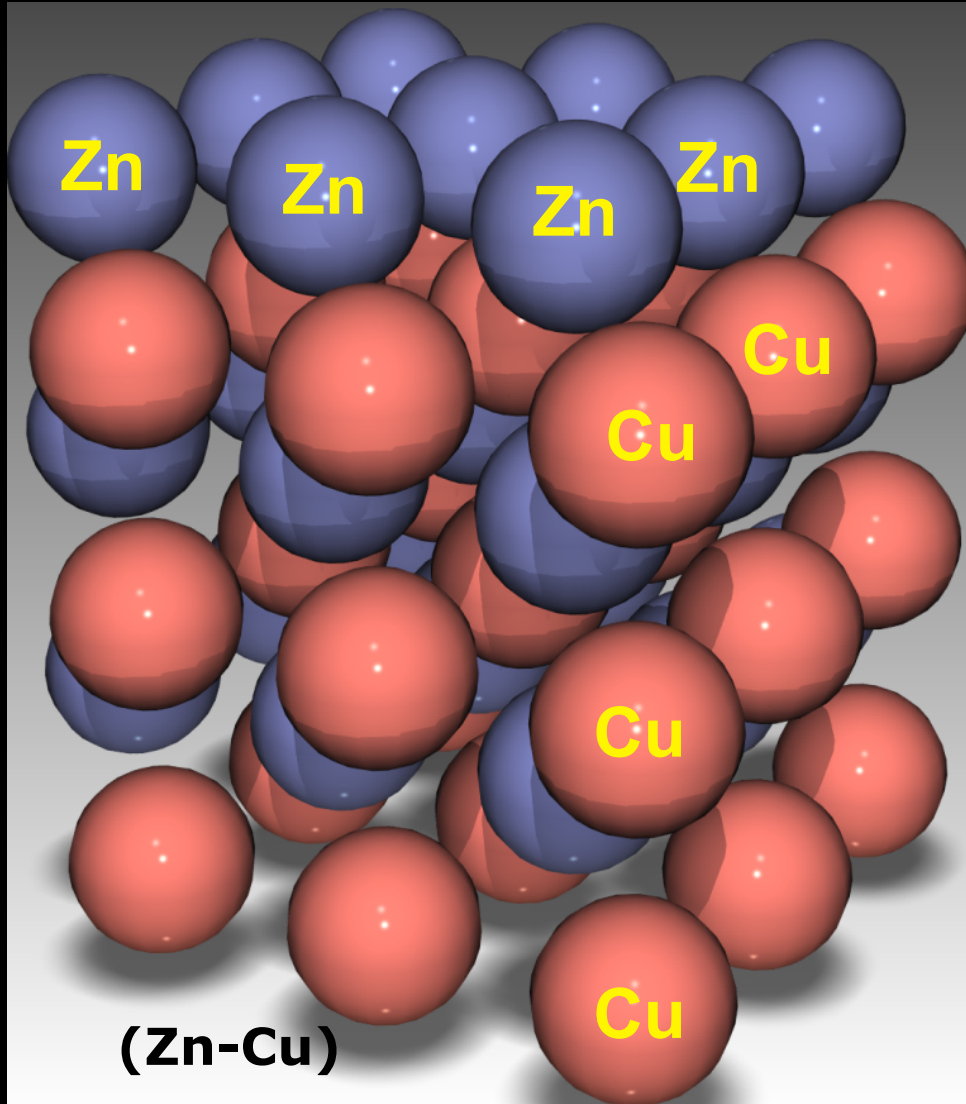


KRISTALNA REŠETKA CaF₂ (jonska)



**KRISTALNE REŠETKE NE MORAJU BITI JONSKE -
VEĆINA HEMIJSKIH ELEMENATA KAO I NAJRAZLIČITIJIH HEMIJSKIH JEDINJENJA TAKOĐE
FORMIRA KRISTALNE REŠETKE.**

- METALI I LEGURE FORMIRAJU METALNE KRISTALNE REŠETKE



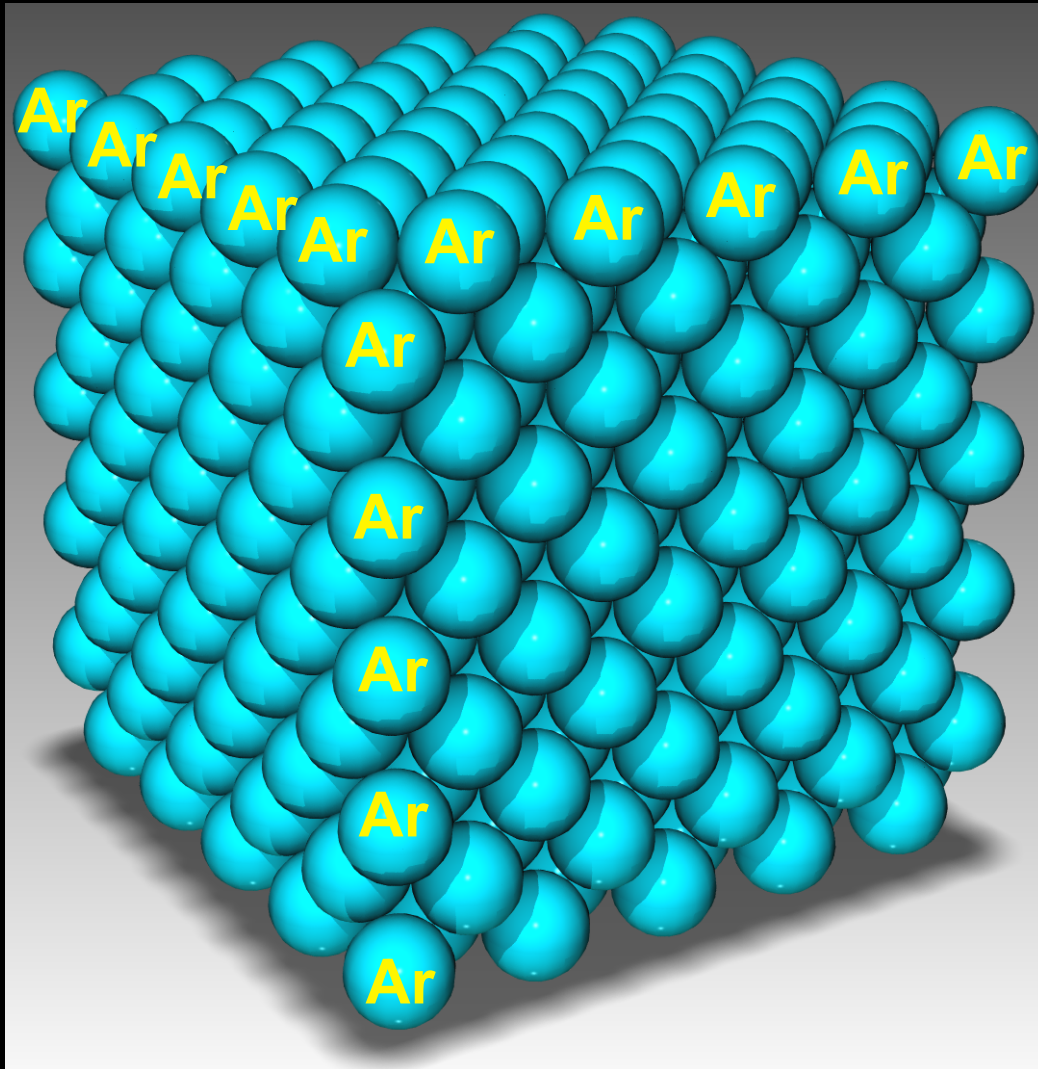
METALNA KRISTALNA REŠETKA BRONZE

METALNA KRISTALNA REŠETKA ZLATA

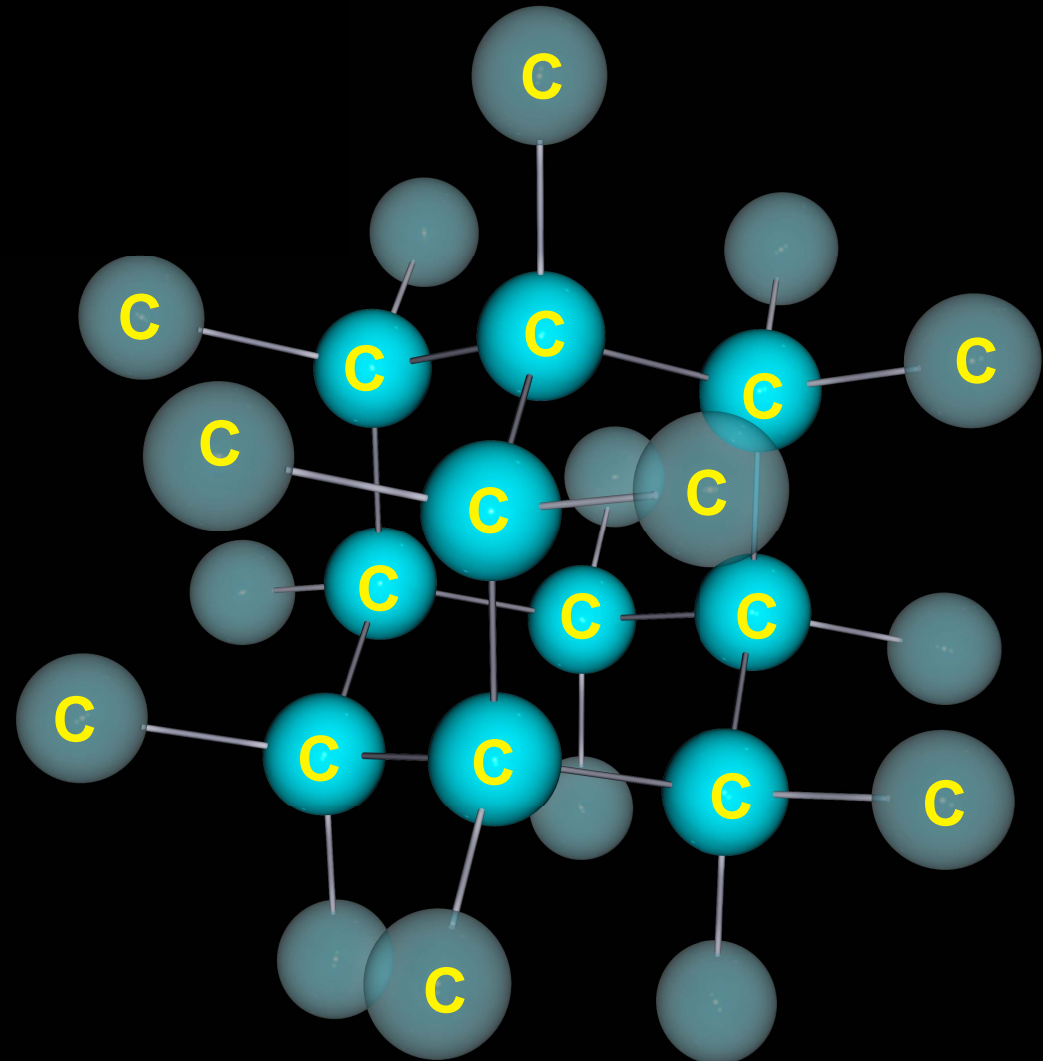
-PLEMENITI GASOVI FORMIRAJU MONOATOMNE KRISTALNE REŠETKE (U SMRZNUTOM STANJU) - PRIMER ARGONA. KRISTALNU REŠETKU DIJAMANTA ČINE KOVALENTNO POVEZANI ATOMI UGLJENIKA.



-VEĆINA ORGANSKIH MOLEKULA MOŽE DA KRISTALIŠE I FORMIRA MOLEKULSKE KRISTALNE REŠETKE



KRISTALNA REŠETKA ARGONA



KRISTALNA REŠETKA DIJAMANTA



KOVALENTNE VEZE

VEZA MEĐU ATOMIMA U MOLEKULU JE PROSTORNO USMERENA, IMA ODREĐENU DUŽINU I ENERGIJU, A SASTOJI SE OD ELEKTRONSKOG PARA KOJI DVA JEZGRA ZAJEDNIČKI DELE.

UKOLIKO JE RAZLIKA U ELEKTRONEGATIVNOSTI DVA ATOMA KOJI ČINE KOVALENTNU VEZU $\sim < 0.3$, TAKVA VEZA SE SMATRA NEPOLARNOM.

PRIMERI NEPOLARIZOVANIH

KOVALENTNIH VEZA:

ETEN, ETIN I BROM

(CRVENA BOJA OZNAČAVA

MAKSIMALNU GUSTINU

ELEKTRONA A PLAVA

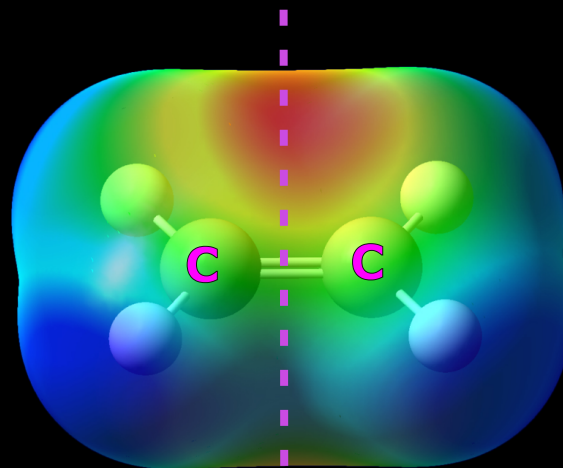
MINIMALNU;

U SVA TRI SLUČAJA,

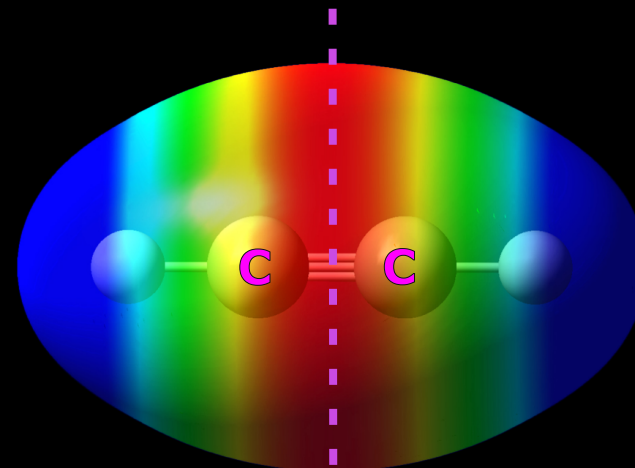
RASPODELA ŠARŽE JE

POTPUNO SIMETRIČNA I VEZE

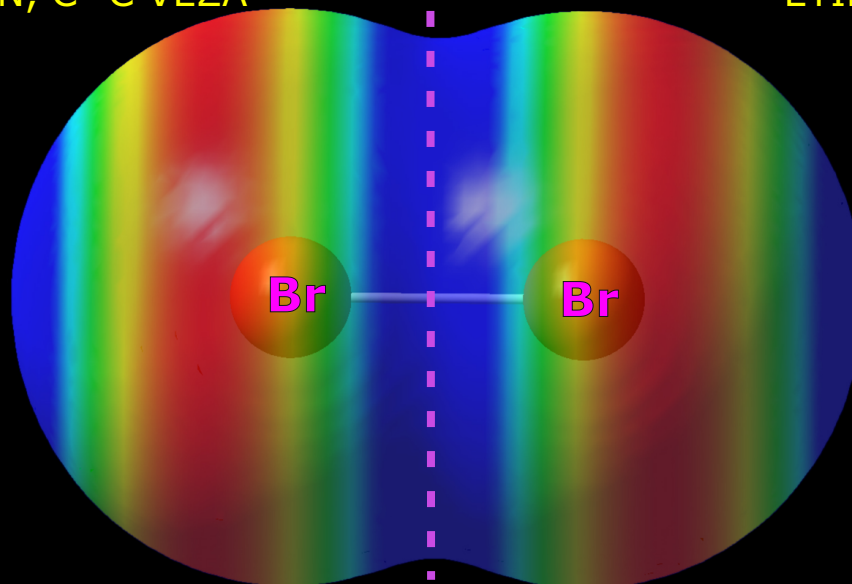
SU NEPOLARIZOVANE.



ETEN, C=C VEZA



ETIN, C≡C VEZA

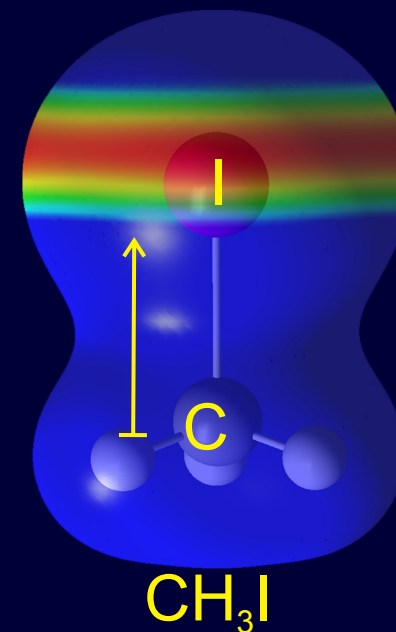
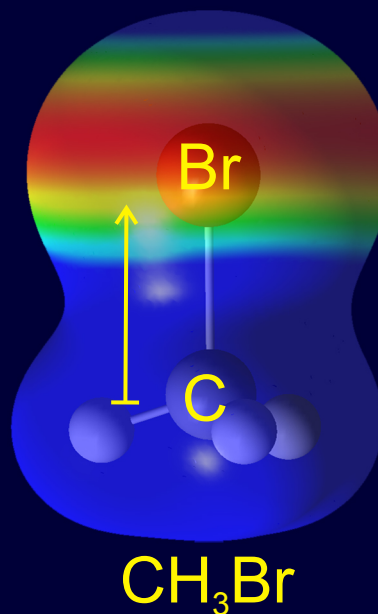
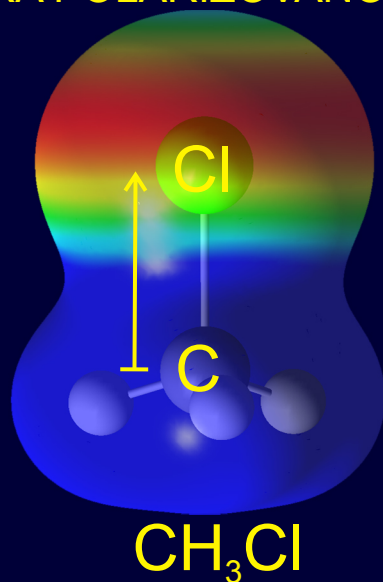
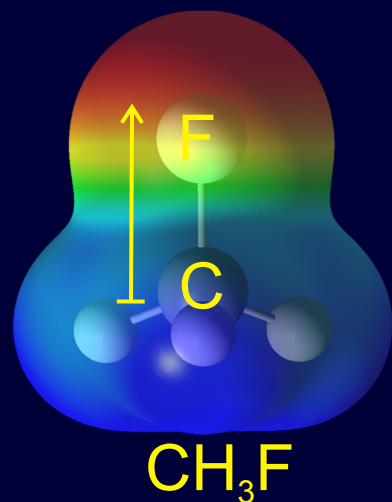


BROM, Br-Br VEZA

UKOLIKO JE RAZLIKA ELEKTRONEGATIVNOSTI DVA ATOMA KOJI ČINE KOVALENTNU U INTERVALU $\sim 0.3-2$, TAKVA VEZA SE SMATRA POLARIZOVANOM.

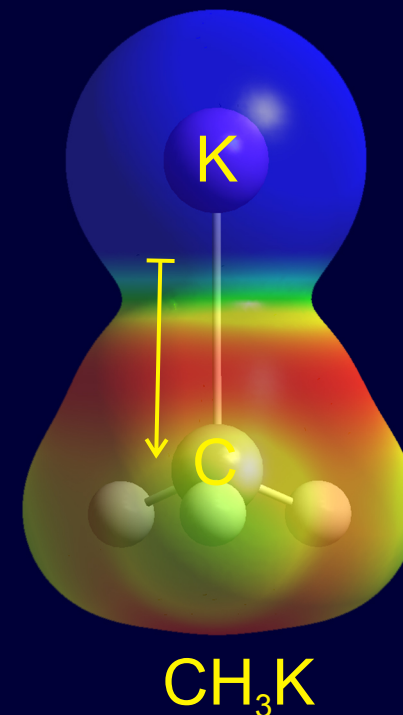
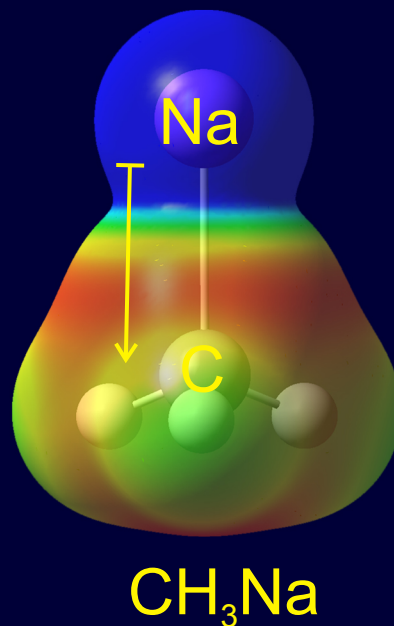
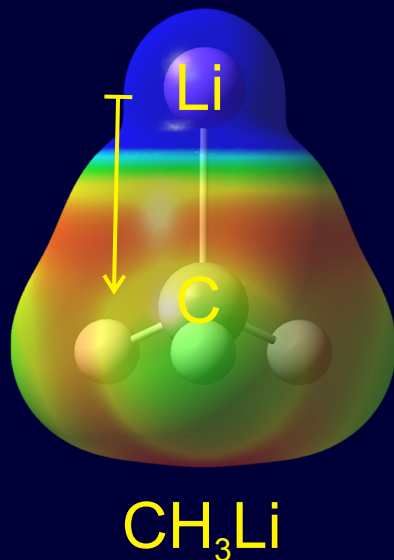


A.



PRIMERI ORGANSKIH MOLEKULA SA SMEROM DIPOLA OD C ATOMA (A) I KA C ATOMU (B).

B.

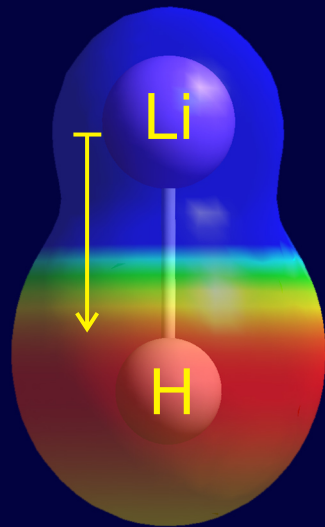


PRIMERI NEORGANSKIH MOLEKULA SA SMEROM DIPOLA KA H ATOMU

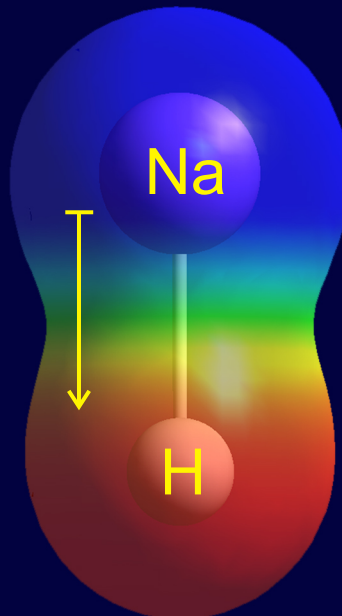
(A) I OD H ATOMA (B).



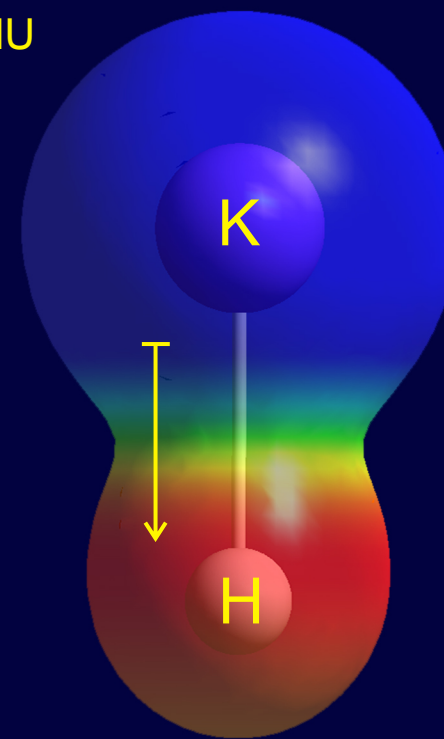
A.



LiH

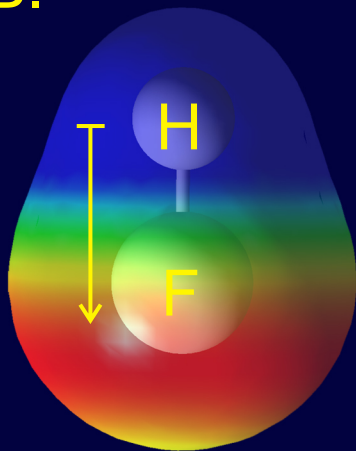


NaH

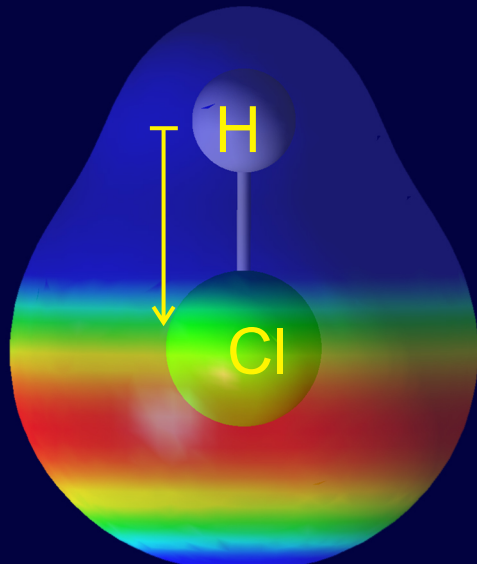


KH

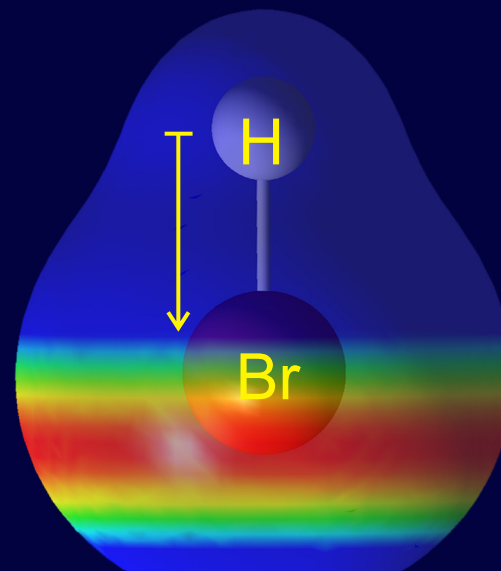
B.



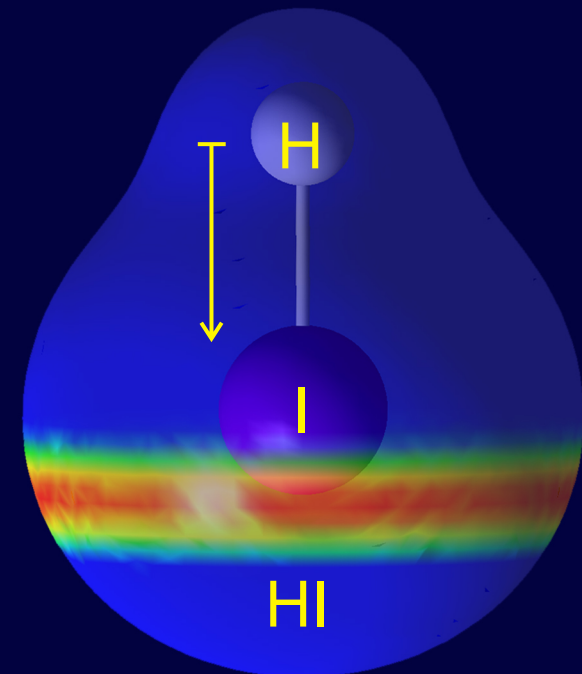
HF



HCl

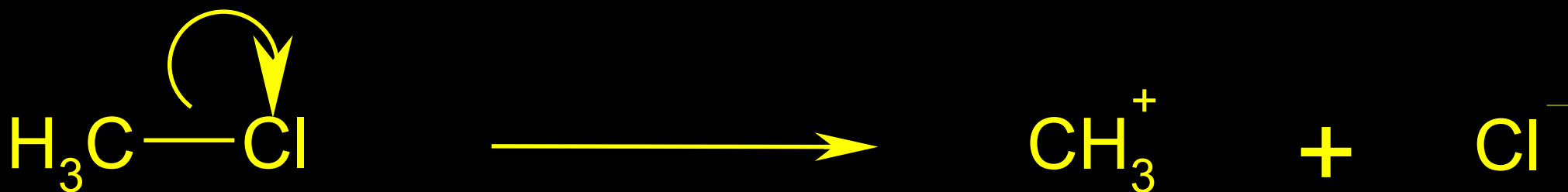
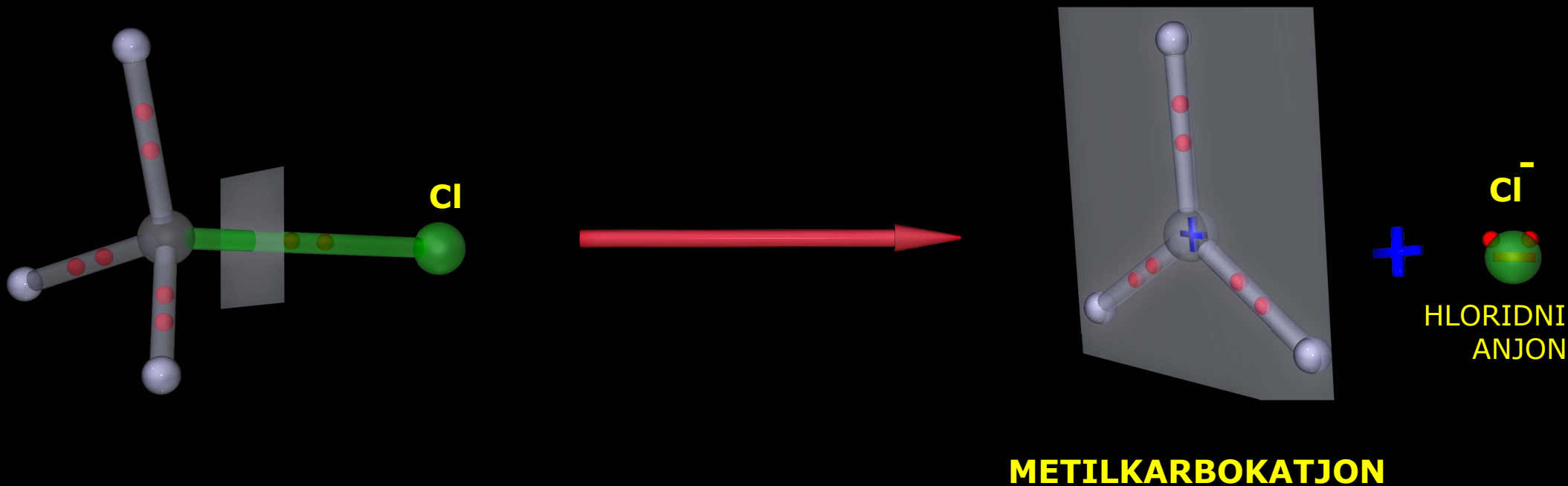



HBr



HI

HETEROLITIČKO RASKIDANJE KOVALENTNE VEZE: POSTAJU JONI
HETEROLITIČKIM RASKIDANJEM KOVALENTNE VEZE. ELEKTRONSKI PAR KOJI TU VEZU
ČINI PRELAZI SAMO NA JEDAN ATOM. TAKO POSTAJU KATJONI I ANJONI.
PRIMER: HETEROLITIČKO RASKIDANJE VEZE C-Cl U HLOR-METANU.
POSTAJE JONSKI PAR: KARBOKATJON (METILKARBOKATJON I HLORIDNI ANJON).



HOMOLITIČKO RASKIDANJE KOVALENTNE VEZE: POSTAJU RADIKALI
HOMOLITIČKIM (SIMETRIČNIM) RASKIDANJEM KOVALENTNE VEZE. ELEKTRONSKI PAR KOJI
TU VEZU ČINI SE "RASPARUJE" I PO JEDAN ELEKTRON PRELAZI NA JEDAN ODN. DRUGI 
ATOM. TAKO POSTAJU DVE ELEKTRO-NEUTRALNE ČESTICE KOJE SE OZNAČAVAJU KAO
RADIKALI (IMAJU JEDAN NESPARENI ELEKTRON). PRIMER: HOMOLITIČKO RASKIDANJE VEZE
C-Cl U HLOR-METANU. POSTAJU DVA RADIKALA: METIL RADIKAL I ATOM HLORA KOJI JE
UJEDNO I RADIKAL HLORA (IMA NESPARENI ELEKTRON).

