

Fizikalna anorganska kemija

Seminar I

Nikola Bedeković
Soba -029 (minus etaža)
nbedekovic@chem.pmf.hr

Plan (pa što bude...)

- Procjena radijusa atoma i iona
- Relativistički efekti u teškim atomima
- Duljina veze
- Red veze
- VSEPR i LCP

Procjena radijusa atoma i iona — Slaterova pravila i Z_{eff}

- pojedini elektron zasjenjen je od jezgre ostalim elektronima
- svaki elektron s istim n i l (s i p elektroni se tretiraju kao da su istog n i l) — za **0,35**
- svaki s ili p elektron zasjenjen je elektronima iz $n-1$ stanja za **0,85**, a svim ostalim elektronima bližim jezgri za **1**
- svaki d ili f elektron zasjenjen je elektronima iz $n-1$ i svim ostalim elektronima bližim jezgri za **1**
- svi elektroni iz $n-2$ i više zasjenjuju za **1**

n	1	2	3	4	5	6
n^*	1	2	3	3,7	4,0	4,2

Zadatak 1. Procijenite radijuse atoma ugljika, silicija i germanija. Komentirajte uočene trendove.

Zadatak 2. Izračunajte brzinu elektrona u prvoj Bohrovoj orbiti te radijus prve Bohrove orbite u atomu zlata ($Z = 79$).

Zadatak 3. Radijus zlatovog(III) kationa je 99 pm. Procijenite radijuse sljedećih jedinki uzevši u obzir da je prirast između polumjera različitih jedinki 60 pm.

- a) Kovalentni radijus
- b) Anionski radijus
- c) Metalni radijus
- d) van der Waalsov radijus

Zadatak 4. Objasnite zašto relativistički efekti u atomu zlata omogućuju postojanje:

- a) nižih oksidacijskih stanja u odnosu na oksidacijska stanja bakra i srebra (npr. u spoju CuAu)?

- b) viših oksidacijskih stanja u odnosu na oksidacijska stanja bakra i srebra (npr. +5 u AuF₅ ili +7 u AuF₇)?

Zadatak 5. Procijenite duljine veza u sljedećim molekulama:

Si-O u SiO_2 163 pm

Si-F u SiF_4 155 pm

P-F u PF_3 154 pm

Elektronegativnost (Pauling) i duljine X-X veza:

Si 1,90 234 pm

O 3,44 130 pm

F 3,98 120 pm

P 2,19 220 pm

Red veze

- broj veznih elektronskih parova između dva atoma

- TMO:

$$\text{Red veze} = \frac{N(e)_{\text{vezni}} - N(e)_{\text{nevezni}}}{2}$$

- koristeći duljinu veze:

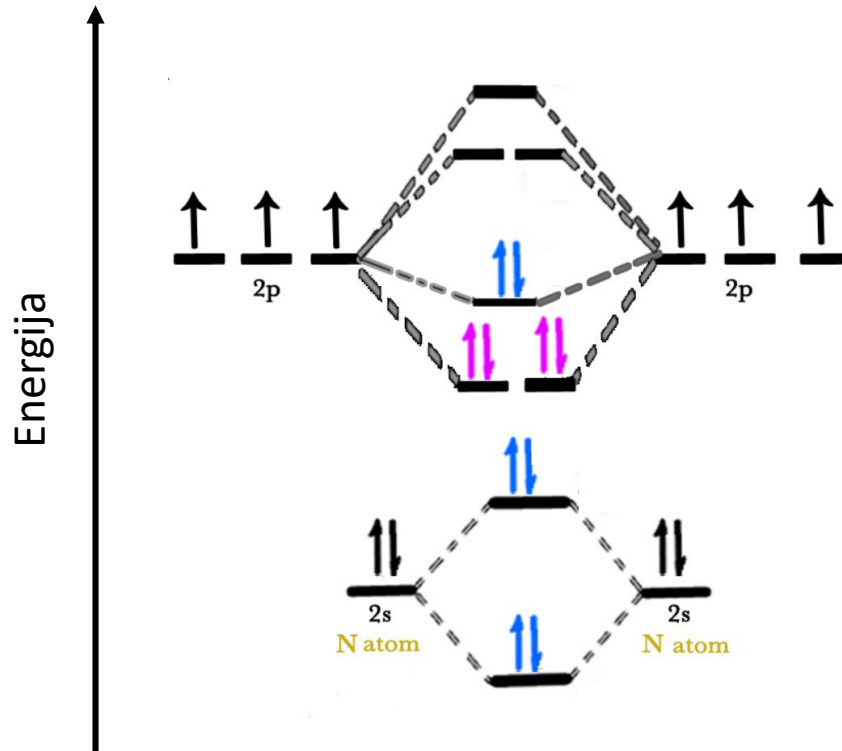
$$\text{red veze} = \exp[(d_0 - d) / b]$$

d_0 – duljina jednostruke veze

d – duljina veze

b – empirijski parametar ($\approx 0,37 \text{ \AA}$; $0,353 \text{ \AA}$ za C-C veze)

Red veze

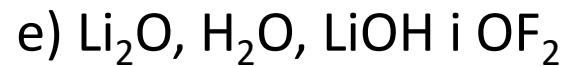
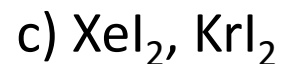
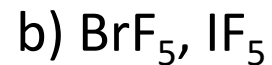
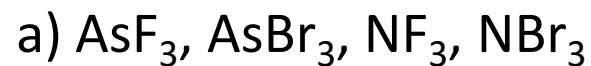


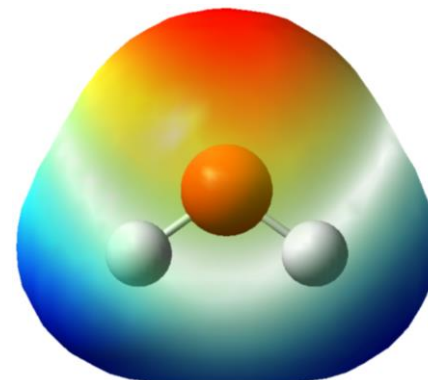
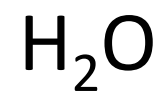
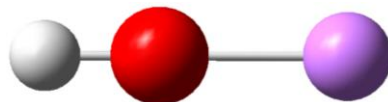
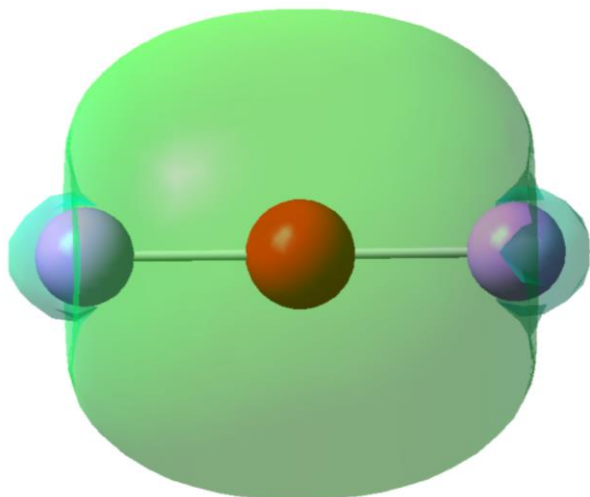
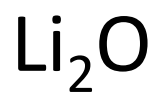
<https://madoverchemistry.com/2018/11/26/89-nature-of-chemical-bonding-36-covalent-bonding35-molecular-orbital-theory10/>

Zadatak 6. Izračunajte red C-C veze u molekuli benzena, ako je duljina jednostrukih C-C veza $1,54 \text{ \AA}$ a duljine veza između ugljikovih atoma u molekuli benzena $1,39 \text{ \AA}$.

VSEPR

Zadatak 7. Predvidite geometrije sljedećih molekula koristeći VSEPR teoriju.





Zadatak 8. Duljine Si-F veza u molekuli SiF₄ iznose 155,5 pm, a u heksafluorosilikatnom anionu 169,4 pm. Objasnite navedene razlike.

Zadatak 9. Objasnite kako će se mijenjati duljine C-X veza i međuvezni kutovi prilikom supstitucije jednog atoma fluora atomom klora u trifluorklormetanu.

Zadatak 10. Objasnite kako će se mijenjati međuvezni kutovi prilikom supstitucije jednog atoma fluora keto kisikom u molekuli tetrafluorofosfonijevog kationa.