

# Fizikalna anorganska kemija

## Seminar I

Nikola Bedeković  
Soba -029 (minus etaža)  
[nbedekovic@chem.pmf.hr](mailto:nbedekovic@chem.pmf.hr)

# Plan (pa što bude...)

- Procjena radijusa atoma i iona
- Relativistički efekti u teškim atomima
- Duljina veze
- Red veze
- Kationi i anioni (hidratacija, kiselost i bazičnost)
- VSEPR i LCP

# Procjena radijusa atoma i iona — Slaterova pravila i $Z_{\text{eff}}$

- 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**

<b><math>n</math></b>	1	2	3	4	5	6
<b><math>n^*</math></b>	1	2	3	3,7	4,0	4,2

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

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

**Zadatak 3.** Procijenite duljine veza u sljedećim molekulama:

Si-O u  $\text{SiO}_2$       163 pm

Si-F u  $\text{SiF}_4$       155 pm

P-F u  $\text{PF}_3$       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:

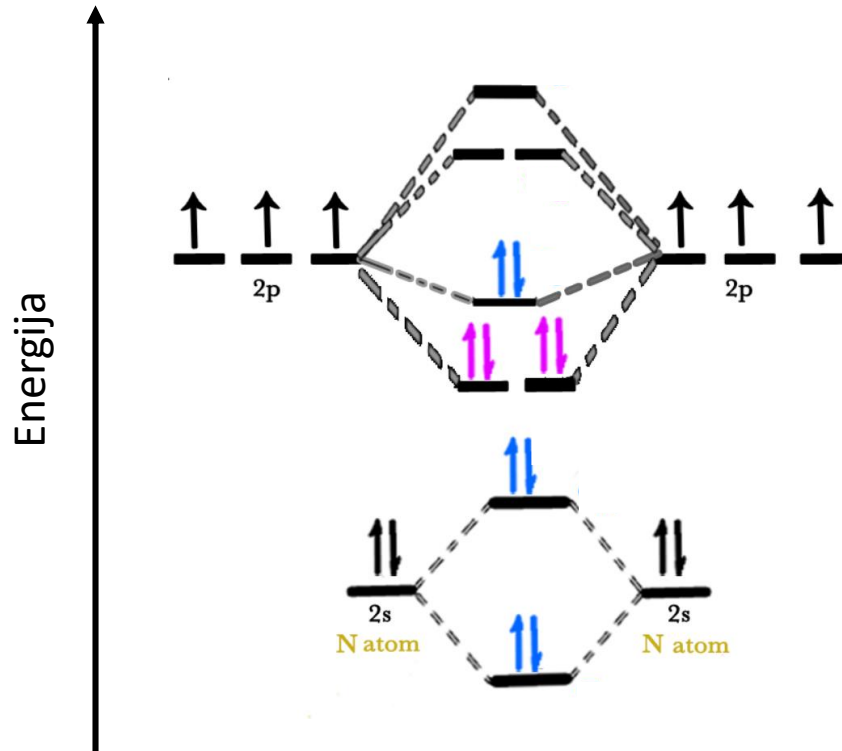
$$\text{red veze} = \exp[(d_0 - d) / b]$$

$d_0$  – 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 4.** 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  $1,39 \text{ \AA}$ .



# Monoatomni kationi

- u vodi solvatirani molekulama otapala

$$\Delta_{\text{solv}}H \approx [ (-60900 \cdot Z^2) / (r + 50) \text{ pm} ] \text{ kJ/mol}$$

- veliki naboj ( $Z$ ) i mali radijus ( $r$ ): kemijska veza između kationa i molekula vode, ponašaju se kao kiseline

$$\text{p}K_{\text{a}} \approx 15,14 - 88,16 [(Z^2 / r) + 0,096 (\chi_{\text{p}} - 1,50)]$$

# Monoatomni anioni

- u vodi solvatirani molekulama otapala

$$\Delta_{\text{solv}}H \approx [ (- 57000 (Z^2/r) \text{ pm} ] \text{ kJ/mol}$$

- veliki naboj ( $Z$ ) i mali radijus ( $r$ ) – jake baze

$$\text{p}K_{\text{b}} \approx 29 - 1200 \text{ pm} \times (Z^2 / r)$$

**Zadatak 5.** Izračunajte entalpije hidratacija sljedećih kationa:

a)  $\text{Li}^+$  (90 pm),  $\text{Na}^+$  (116 pm),  $\text{K}^+$  (152 pm),  $\text{Rb}^+$  (166 pm)

b)  $\text{K}^+$  (152 pm),  $\text{Zn}^{2+}$  (88 pm;  $\chi_p = 1,65$ ),  $\text{Al}^{3+}$  (67 pm  $\chi_p = 1,61$ )

i objasnite opažene trendove.

**Zadatak 6.** Skicirajte predomnacijske dijagrame za kalcijev (114 pm) i aluminijev kation.

# Bazičnost oksoaniona

- raste s nabojem ( $pK_b$  pada za oko 10,2 za svaki dodatni negativni naboj)
- pada s brojem kisikovih atoma ( $pK_b$  raste za oko 5,7 za svaki dodatni kisikov atom)
- pada s porastom elektronegativnosti centralnog atoma

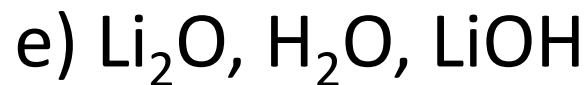
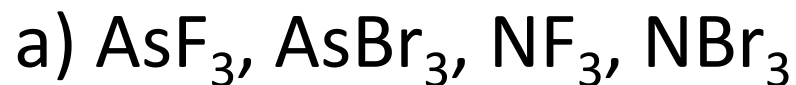


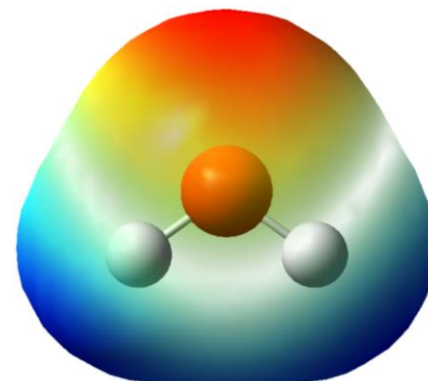
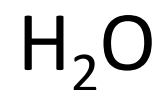
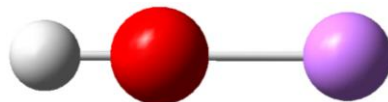
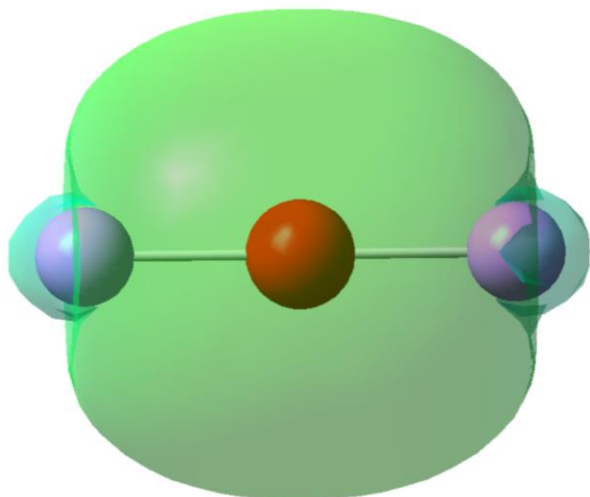
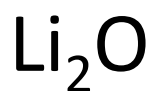
$$pK_b = 10 + 5,7x - 10,2y$$

**Zadatak 7.** Skicirajte predominacijski dijagram za fosfatni anion.

# VSEPR

**Zadatak 8.** Predvidite geometrije sljedećih molekula koristeći VSEPR teoriju. U slučajevima u kojima je to moguće, usporedite kutove između veza.





**Zadatak 9.** Duljine Si-F veza u molekuli SiF<sub>4</sub> iznose 155,5 pm, a u heksafluorosilikatnom anionu 169,4 pm. Objasnite navedene razlike.

**Zadatak 10.** Objasnite kako će se mijenjati duljine C-X veza i međuvezni kutovi prilikom supstitucije jednog atoma fluora atomom klora u trifluorklormetanu.

**Zadatak 11.** Objasnite kako će se mijenjati duljine C-F veza i međuvezni kutovi prilikom supstitucije jednog atoma fluora keto kisikom u molekuli tetrafluorofosfonijevog kationa.