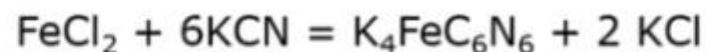


Związki kompleksowe

- **Jon centralny** (Me^{n+}), atom centralny: metale, pierwiastki bloku d, zwykle cięższe pierwiastki powyżej 4 okresu w układzie okresowym posiadające nieobsadzone orbitale ($Cu^{2+}, Cr^{3+}, Fe^{3+}, Pb^{2+}$),
- **Ligand** (LI): cząsteczka obojętna lub jon posiadające wolną parę elektronową ($Cl^-, Br^-, OH^-, CN^-, H_2O, NH_3$),
- Liczba ligandów związanych z centralnym atomem w kompleksie tworzą **strefę koordynacyjną** atomu centralnego.



$K_4[Fe(CN)_6]$ – heksacyjnożelazian potasu

zewnątrzna

wewnętrzna

sfera koordynacyjna



Związki kompleksowe

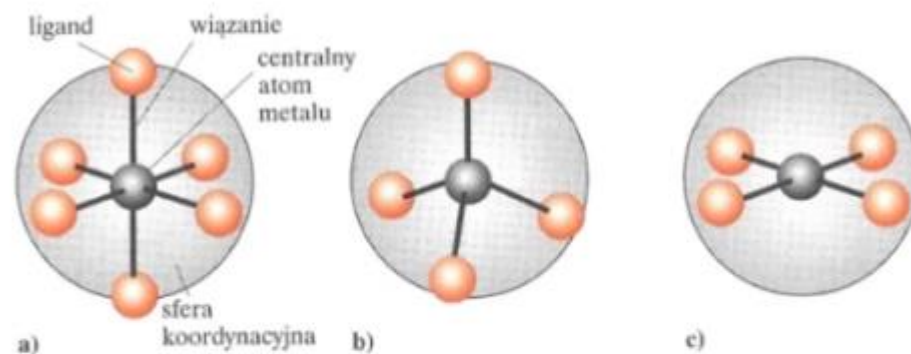
Liczba ligandów związanych z centralnym atomem metalu nosi nazwę **liczby koordynacyjnej**.

LK od 2 do 8

LK = 2 $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^{2+}$ (liniowa)

LK = 4 $[\text{Ni}(\text{CO})_4]$ (tetraedr)

LK = 6 $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$ (oktaedr)



Związki kompleksowe

Jak tworzyć nazwy związków kompleksowych?

- Najpierw kation
- Ligandy przed jonem centralnym metalu
- Ligand = anion \Rightarrow dodaj „o” np. fluoro-, hydrokso-
- Ligand = cz. obojętna \Rightarrow nie zmieniaj nazwy, amina, akwa,
- Ligand ≥ 1 przedrostki mono-, di-, tri-, itd.
- Stopień utlenienia jonu centralnego metalu (rzymskie cyfry I) np. jon kobaltu (III)
- Jeżeli jest więcej niż jeden rodzaj ligandu to obowiązuje kolejność alfabetyczna, np. pentaaminachloro.

Nazwa ligandu	Wzór ligandu
amina	NH_3
akwa	H_2O
bromo	Br^-
chloro	Cl^-
cyjano	CN^-
fluoro	F^-
hydrokso	OH^-
karbonyl	CO
okso	O^{2-}
tio	S^{2-}

$[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]_2(\text{SO}_4)_3$ – siarczan(VI)
heksaaminakobaltu (III)

$\text{K}_3[\text{Co}(\text{CN})_6]$ – heksacyjanokobaltan (III) potasu

$\text{Na}_3[\text{Cu}(\text{CN})_4]$ – tetracyjanomiedzian (I) sodu

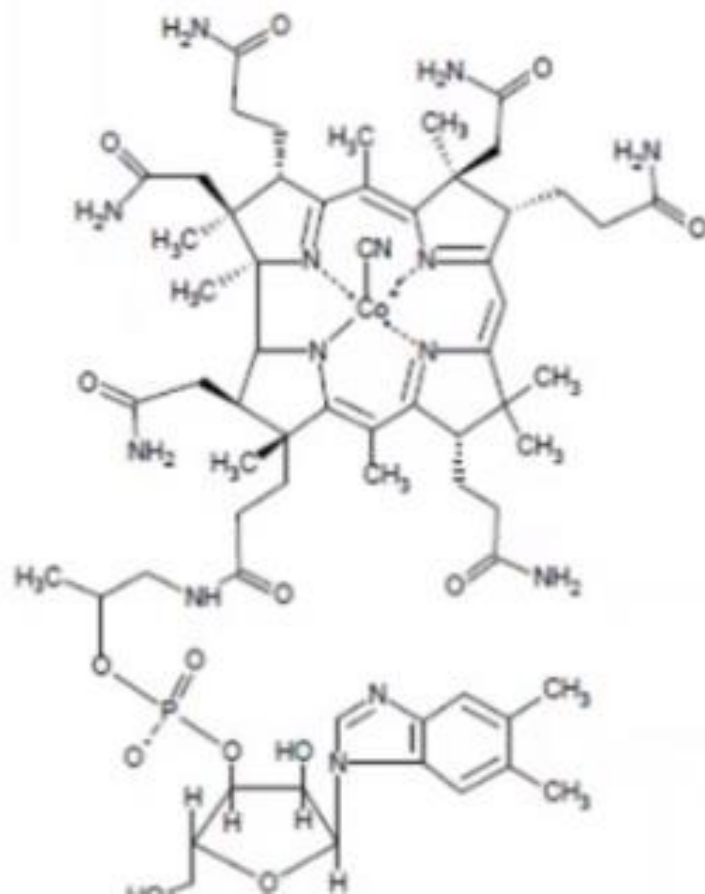
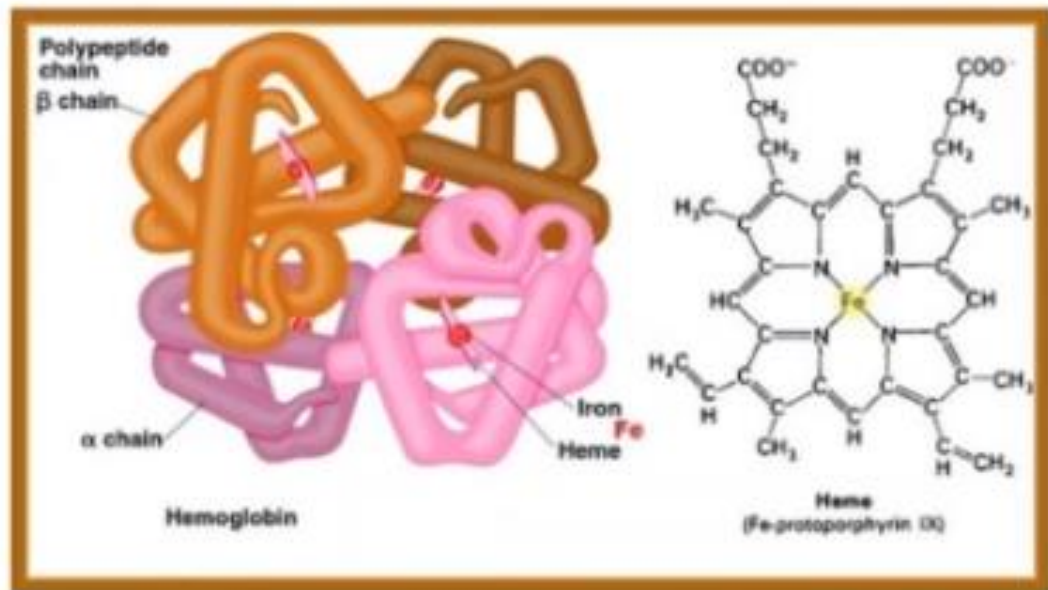
$\text{Na}_3[\text{Ag}(\text{S}_2\text{O}_3)_2]$ – tiosiarczanosrebrzan (I) sodu

$[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_6]\text{SO}_3$ – siarczan (IV)
heksaakwamiedzi (II)

$\text{K}_4[\text{NiF}_6]$ – heksafluoroniklan (II) sodu

Związki kompleksowe

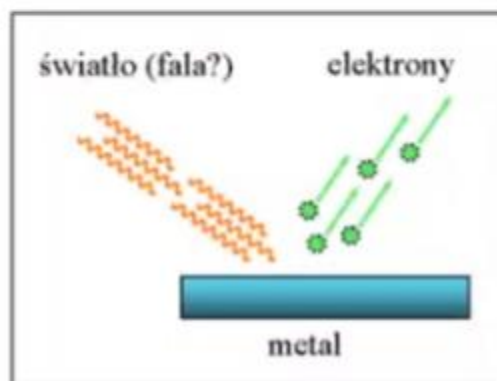
- hemoglobina – kompleks żelaza
- witamina B12 – kompleks kobaltu





Chemia kwantowa

Falowo-korpuskularny charakter elektronów



emisja elektronów z metali
pod wpływem padającego
światła



Wiązka elektronów o dużej energii przechodząc przez cienką złotą folię powoduje powstanie obrazu dyfrakcyjnego na ekranie

Hipoteza de'Broglie'a zakłada, że ruch cząstek elementarnych (elektrony, fotony...) w pewnych warunkach może być opisany jako ruch korpuskuły (o określonej masie), natomiast w pewnych warunkach – wyłącznie jako ruch fali.

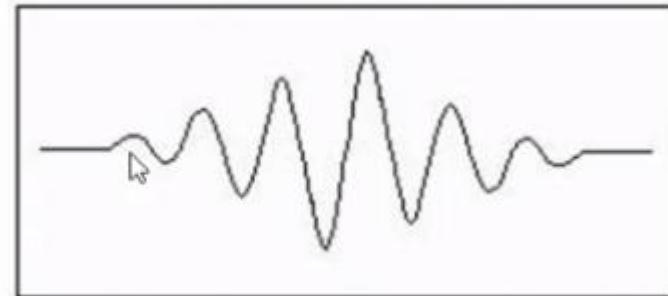
Zależność między korpuskularną i falową naturą cząstek:

$$\lambda = \frac{h}{m \cdot v} = \frac{h}{p}$$

$h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$ stała Plancka

m - masa cząstki

v - prędkość poruszającej się cząstki



Fala de Broglie'a, odpowiadająca jakościowo jakiemuś obiektowi o skończonych rozmiarach



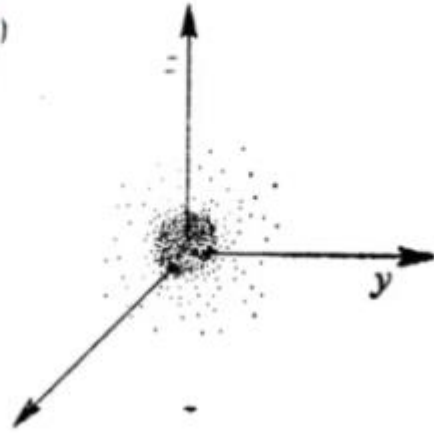
Zasada Heisenberga

Konsekwencją dualistycznego (korpuskularno-falowego) charakteru materii jest *zasada nieoznaczoności Heisenberga*, która stwierdza, że nie jest możliwe równoczesne określenie położenia i pędu cząstki z dowolną dokładnością

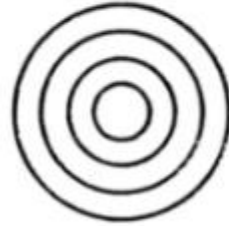
$$\Delta x \cdot \Delta p \geq h$$

Zasada nieoznaczoności położenia i pędu (także energii i czasu) głosi, że nie jest możliwe **jednoczesne i dokładne wykonanie pomiarów wielkości fizycznych**, przy czym niepewność tych oznaczeń wynika nie z niedoskonałości aparatury badawczej, ale z natury mikroświata.

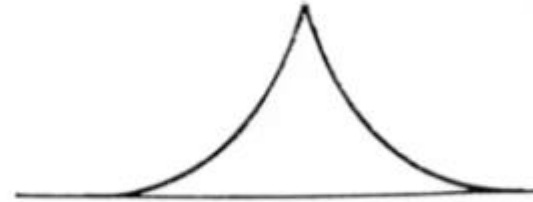
Oznacza to, że nie można wyznaczyć parametrów fizycznych, których znajomość byłaby rozstrzygająca o fazowej lub korpuskularnej naturze cząstek.



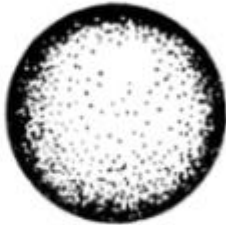
b)



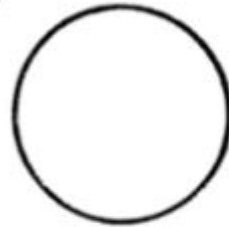
c)



d)



e)



Różne sposoby graficznego przedstawienia chmury ładunku elektronowego, czyli rozkładu prawdopodobieństwa znalezienia elektronu w różnych obszarach przestrzeni



Mechanika kwantowa zamiast określić położenie cząstki zakłada istnienie określonego prawdopodobieństwa napotkania cząstki w danym miejscu w przestrzeni.

Gęstość prawdopodobieństwa:

$$\rho = \frac{W}{dv}$$

W – prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w objętości dv

Prawdopodobieństwo $W = \rho dv$ napotkania cząstki jest różne w różnych miejscach, co oznacza, że gęstość prawdopodobieństwa też będzie zależna od miejsca.

$$\rho = \rho(x, y, z)$$

Skala prawdopodobieństwa od 0 do 1



Równanie Schrödingera

Podstawowym równaniem mechaniki kwantowej opisującym ruch cząstek w przestrzeni jest równanie Schrödingera:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \Psi = 0$$

Ψ - amplituda fali de Broglie'a, funkcja zmiennych x, y, z

m - masa

h - stała Plancka ok. 10^{-34} J·s

E - całkowita energia elektronu

V - energia potencjalna



Kwadrat amplitudy fali de Broglie'a, gęstość prawdopodobieństwa $\rho(x, y, z)$ są wyznaczone przez kwadrat bezwzględnej wartości funkcji ψ

$$\rho(x, y, z) = |\psi(x, y, z)|^2$$

Prawdopodobieństwo napotykania elektronu w objętości dv znajdziemy z równania:

$$W = \rho(x, y, z) dv = |\psi(x, y, z)|^2 dv$$



Równanie Schrödingera

Znając orbital Ψ można obliczyć:

- rozkład prawdopodobieństwa znalezienia elektronu w atomie (gdzie elektron można znaleźć najczęściej gdzie rzadziej),
 - jaką elektron ma energię.
-



Liczby kwantowe

$\Psi (n \ l \ m)$ – *funkcja falowa*

Energia elektronu w atomie:

$$E = -\frac{m_e e^4}{8\varepsilon^2 h^2 n^2}$$

m_e – masa elektronu

e – ładunek elektronu

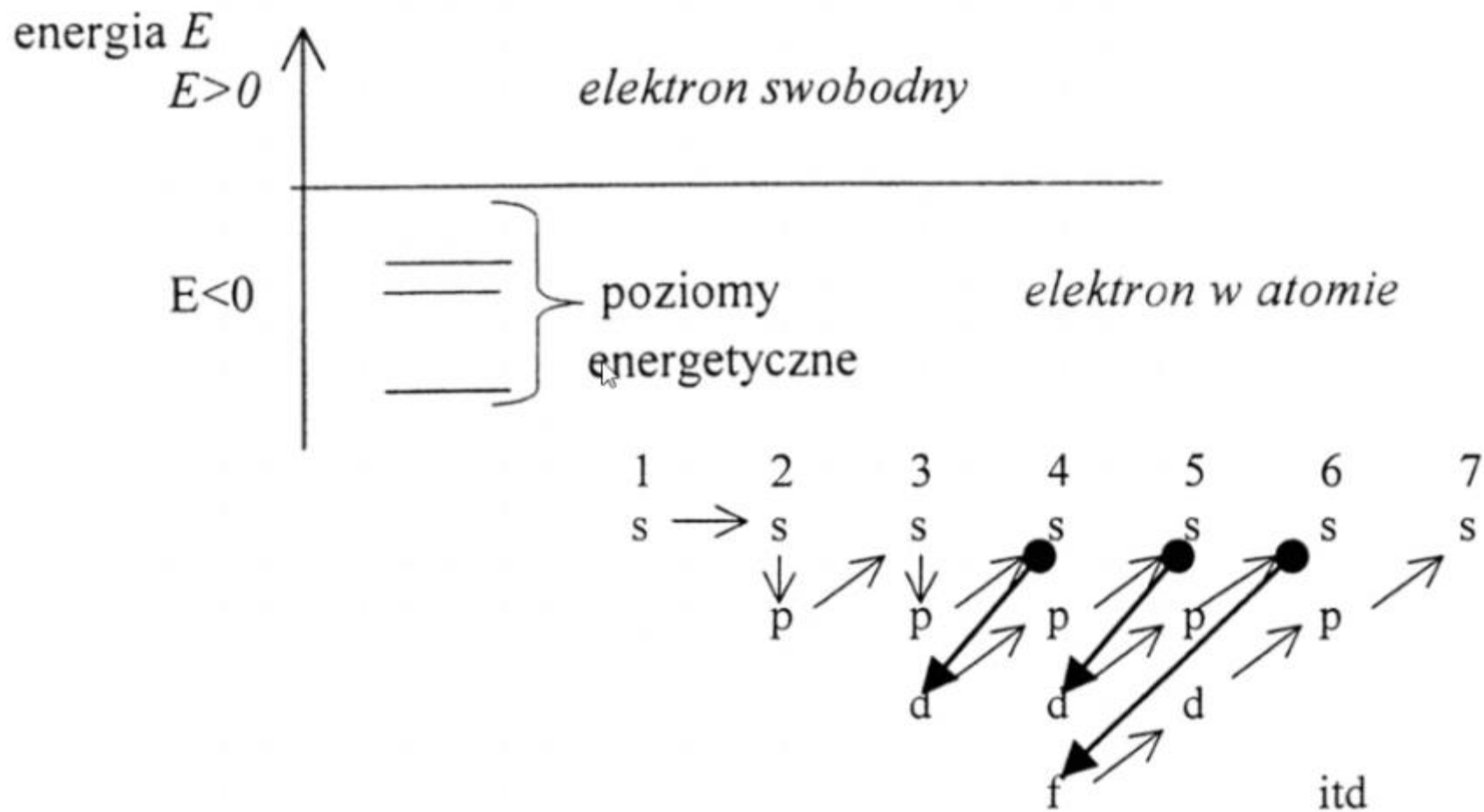
ε - przenikalność elektryczna próżni $8,85 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2\text{m}^{-1}\text{J}^{-1}$

n – **główna liczba kwantowa** $n = 1, 2, 3, \dots$

Energia elektronu w atomie nie może przyjmować wartości ciągłych, lecz tylko wartości określone główną liczbą kwantową. Najniższy poziom energetyczny odpowiada liczbie kwantowej $n = 1$.



Energia elektronu w atomie



Moment pędu elektronu

$$M = \sqrt{l(l+1)} \frac{h}{2\pi}$$

l - poboczna liczba kwantowa $l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$

Jeżeli $n = 1$ to $l = 0$, dla $n = 2$ to $l = 0, 1$

Wartościom liczby kwantowej l przypisujemy symbole:

$l = 0$	1	2	3
s	p	d	f

Moment pędu elektronu

$$M = \sqrt{l(l+1)} \frac{h}{2\pi}$$

l - poboczna liczba kwantowa $l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$

Jeżeli $n = 1$ to $l = 0$, dla $n = 2$ to $l = 0, 1$

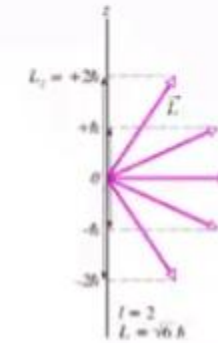
Wartościom liczby kwantowej l przypisujemy symbole:

$l = 0$	1	2	3
s	p	d	f

Wartość składowej M_z wektora momentu pędu

$$M_z = m \frac{h}{2\pi}$$

m - magnetyczna liczba kwantowa $-l \leq m \leq l$



Każdy orbital atomowy ma inny zestaw wartości liczb kwantowych.

Podanie liczb kwantowych **n, l, m** oznacza jednoznaczne określenie orbitalu atomowego.



Dla orbitali atomowych o liczbach kwantowych $n = 4$ oraz $l = 1$, wartość magnetycznej liczby kwantowej może wynosić -1 lub 0 lub 1

Zapis orbitali

$4p_{-1}$ $4p_0$ $4p_1$

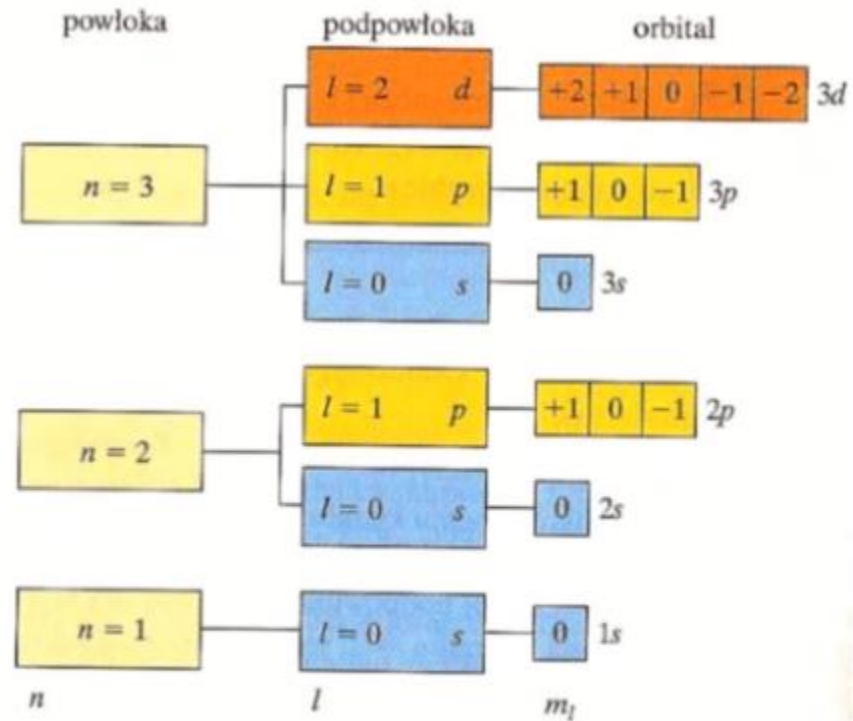
Uproszczony zapis:

$4p$

Mówiąc „orbital 4p” ma się na myśli trzy orbitale.

Elektrony opisane orbitalami 4p są nazywane „elektronami 4p”.

Orbital jest określany przez trzy liczby kwantowe; orbitale są zorganizowane w powłoki i podpowłoki.



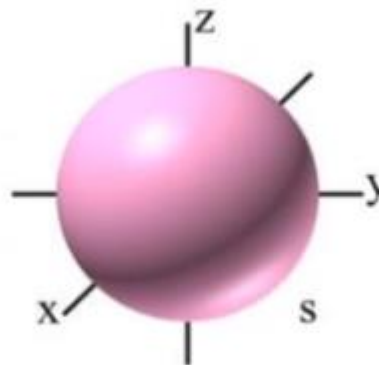


Orbitale atomowe dla wartości liczby kwantowej $n = 1, 2, 3$

Główna liczba kwantowa n	Poboczna liczba kwantowa l	Magnetyczna liczba kwanowa m	Orbital	Ilość elektronów	Maksymalna ilość elektronów
$n = 1$	$l = 0$	$m = 0$	1s	2	2
$n = 2$	$l = 0$	$m = 0$	2s	2	8
	$l = 1$	$m = -1$	$2p_x$	6	
		$m = 0$	$2p_y$		
$m = 1$		$2p_z$			
$n = 3$	$l = 0$	$m = 0$	3s	2	18
	$l = 1$	$m = -1$	$3p_x$	6	
		$m = 0$	$3p_y$		
		$m = 1$	$3p_z$		
	$l = 2$	$m = -2$	$3d_{z^2}$	10	
		$m = -1$	$3d_{x^2-y^2}$		
$m = 1$		$3d_{xy}$			
$m = 2$		$3d_{xz}$ $3d_{yz}$			

Graficzny zapis orbitalu s

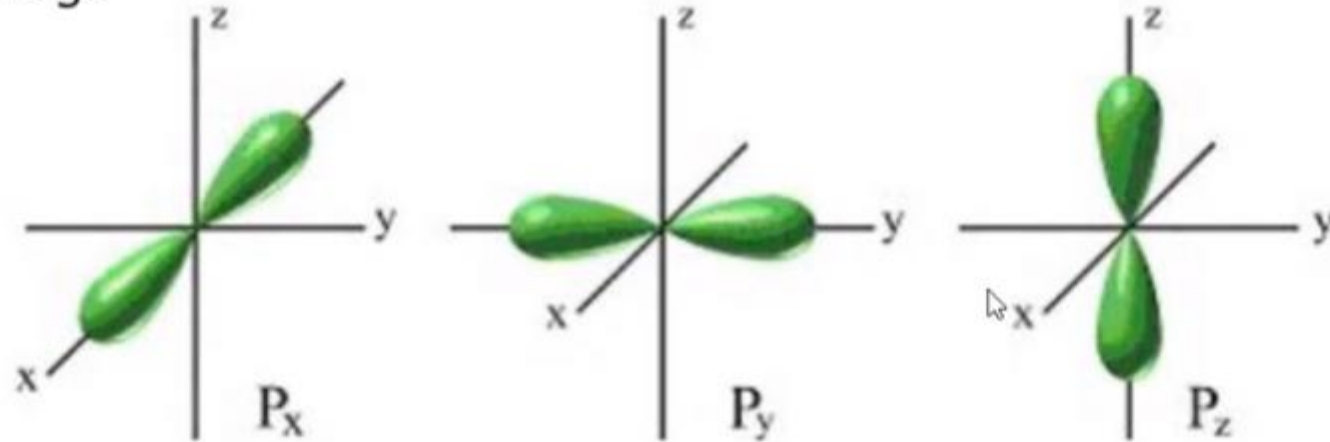
- Obrazem graficznym orbitalu jest fragment przestrzeni, w której prawdopodobieństwo znalezienia elektronu jest duże
- Każdy orbital ma inny kształt i orientację przestrzenną, a zajmujący go elektron charakteryzuje się inną energią
- Orbital przedstawia się zwykle jako **powierzchnię graniczną** otaczającą najgęstsze obszary chmury; prawdopodobne jest znalezienie elektronu tylko wewnątrz obszaru otoczonego powierzchnią graniczną orbitalu



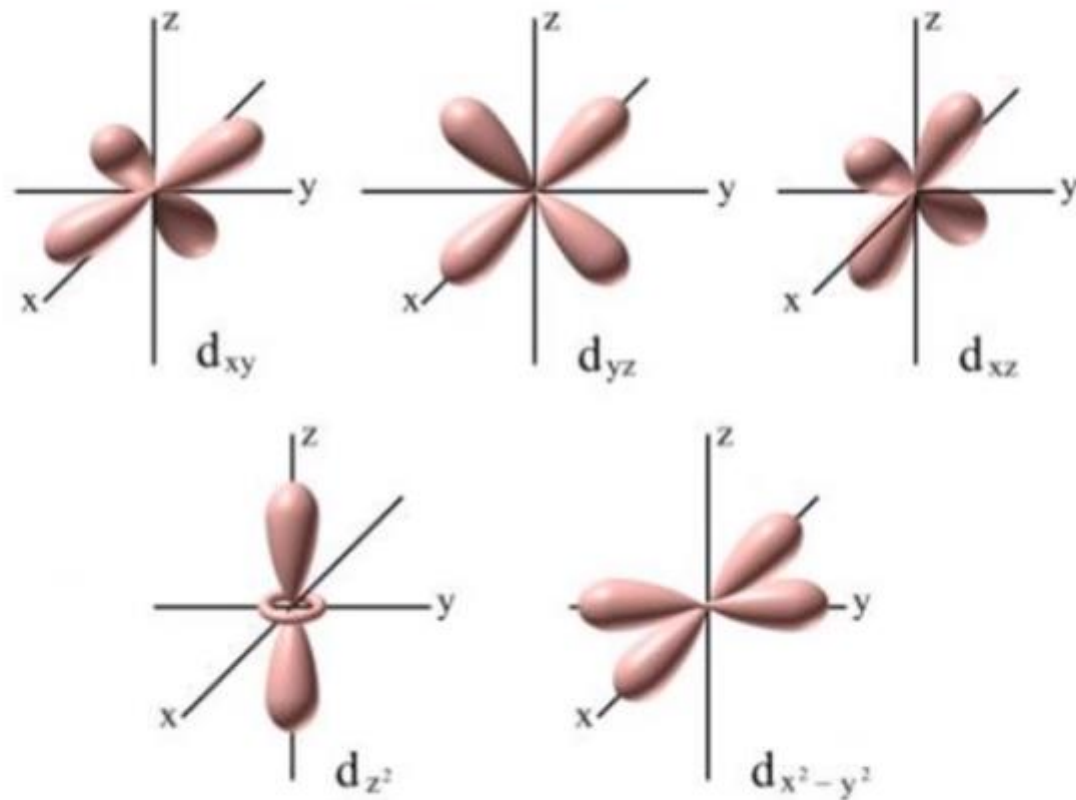
Orbital typu s.

Graficzny zapis orbitali typu p

- Orbital p jest chmurą z dwoma płatkami po przeciwnych stronach jądra.
- Płaty te są rozdzielone przez **płaszczyznę węzłową**, przecinającą jądro - elektron p nigdy nie znajdzie się na tej płaszczyźnie.
- Orbital p może być skierowany w każdym z trzech prostopadłych kierunków, istnieją więc trzy orbitale p o danej energii

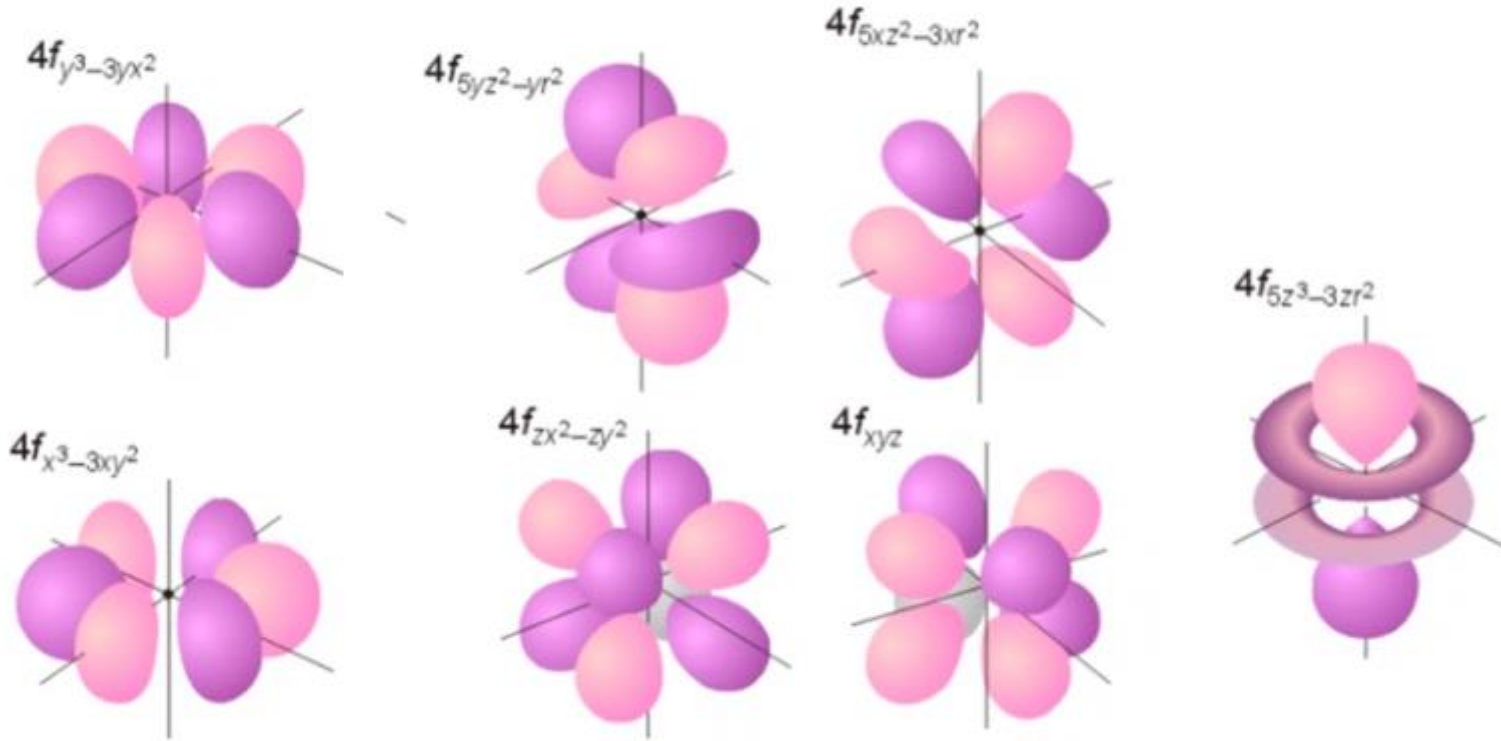


Graficzny zapis orbitali typu d



Orbitale typu d .

Graficzny zapis orbitali typu f



Do pełnego opisu zachowania się elektronu w atomie potrzebna jest znajomość:

- jego energii E
- orbitalnego momentu pędu M
- składowej zetowej orbitalnego momentu pędu M_z
- **spinu elektronu**

Spinowy moment pędu

Spinowy moment pędu opisany jest przez równanie:

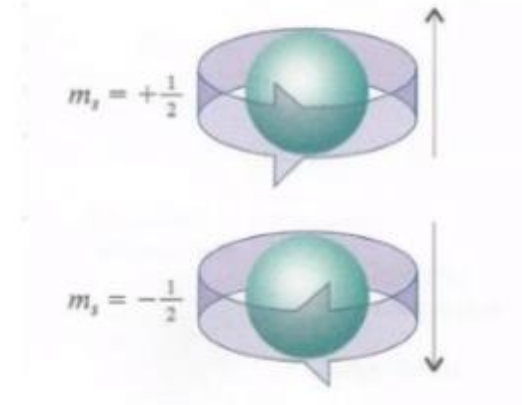
$$\sigma = \sqrt{s(s+1)} \frac{h}{2\pi}$$

s – spinowa liczba kwantowa $\frac{1}{2}$

Analogia do momentu pędu orbitalnego

$$M_z = m \frac{h}{2\pi} \quad \sigma_z = m_s \frac{h}{2\pi}$$

m_s – przyjmuje wartości od **-s** do **+s**, czyli $\frac{1}{2}$ i $-\frac{1}{2}$

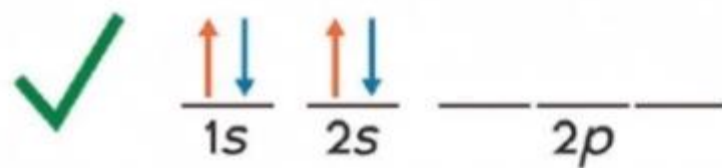
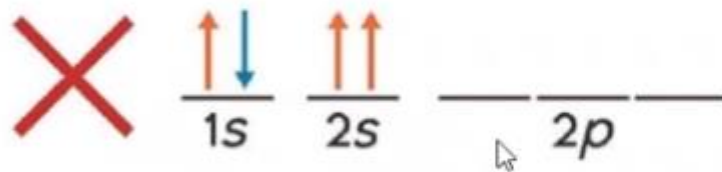




- W danym atomie nie mogą występować elektrony, które nie różnią się przynajmniej jedną liczbą kwantową, tzn. że jeden orbital może opisywać zachowanie się co najwyżej dwóch orbitali – reguła zwana **zakazem Pauliego**.
- W miarę przechodzenia do atomów o coraz większej liczbie atomowej poziomy energetyczne są zajmowane w tej samej kolejności, wg której wzrasta energia.
- Orbitale o tej samej energii przyporządkowane są kolejno elektronom w taki sposób aby liczba niesparowanych elektronów była w stanie podstawowym atomu możliwie jak największa.



Zakaz Pauliego



Reguła Hunda

