

Σας ενημερώνουμε ότι τα μαθήματα που παρέχονται από το Γεωπονικό Πανεπιστήμιο Αθηνών, στο πλαίσιο της εξ αποστάσεως εκπαίδευσης μπορεί να βιντεοσκοποούνται. Η βιντεοσκόπηση πραγματοποιείται για σκοπούς εκπαιδευτικούς και αρχειακούς. Τα βίντεο μπορεί να αναρτηθούν στο διαδίκτυο.

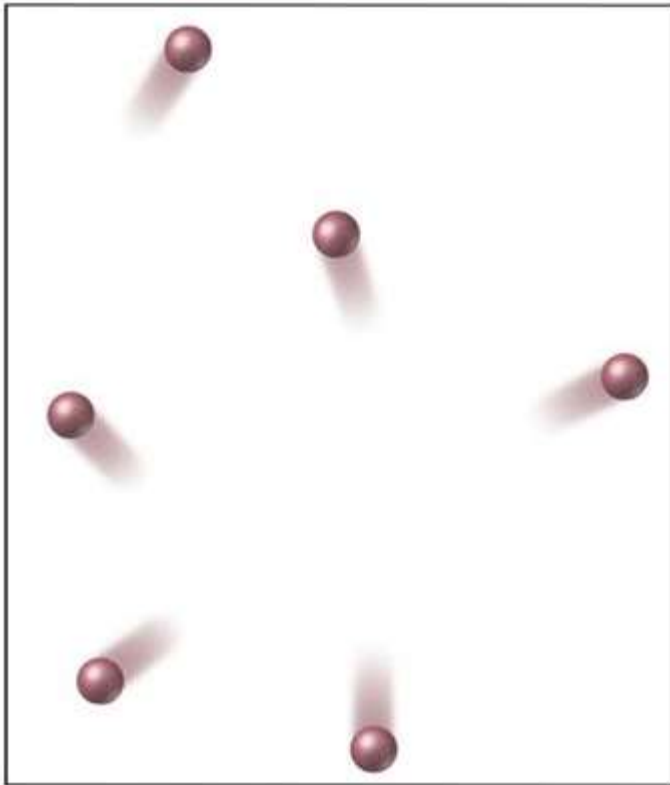
ΔΙΔΑΚΤΙΚΟΙ ΣΤΟΧΟΙ

- Να γνωρίσετε πως οδηγούμαστε από τα ιδανικά προς τα πραγματικά ρευστά λαμβάνοντας υπόψη τις διαμοριακές αλληλεπιδράσεις και ποιος είναι ο ρόλος τους.
- Μια σύντομη εισαγωγή στις διαμοριακές αλληλεπιδράσεις.
 - Γιατί χαρακτηρίζονται ως δυνάμεις «βραχείας εμβέλειας»
 - Πως περιγράφονται από το δυναμικό Lenard-Jones 6-12
- Να γνωρίσετε δύο σημαντικές ιδιότητες των ρευστών που οφείλονται στις διαμοριακές αλληλεπιδράσεις: την *Επιφανειακή τάση* και το *Ιξώδες*

ΠΡΟΣ ΤΑ ΠΡΑΓΜΑΤΙΚΑ ΡΕΥΣΤΑ

Ιδανικά αέρια

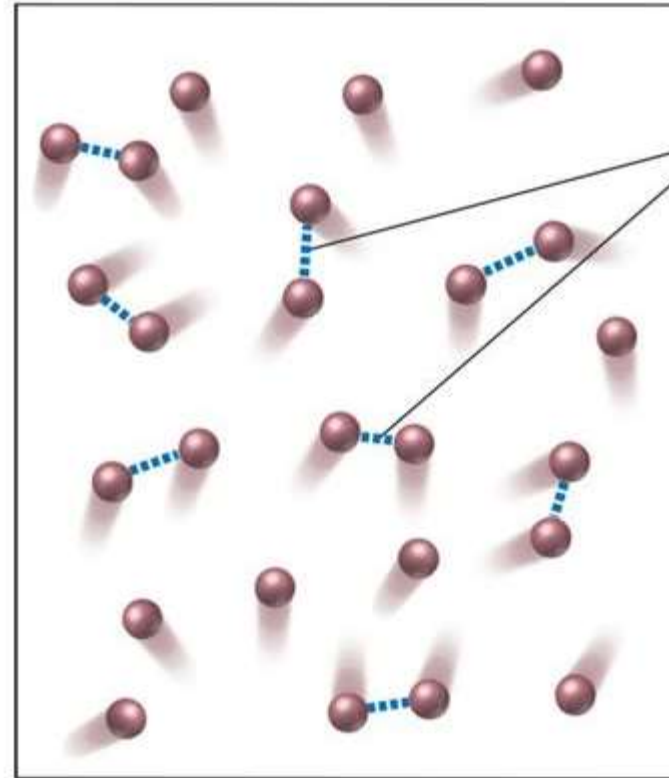
Συνθήκες: - Υψηλή θερμοκρασία
- Χαμηλή Πίεση



- Απόσταση μεταξύ των μορίων πολύ μεγαλύτερη από το μέγεθός τους
- Οι διαμοριακές αλληλεπιδράσεις είναι αμελητέες

Μη-ιδανικά αέρια

Συνθήκες: - Χαμηλή θερμοκρασία
- Υψηλή Πίεση



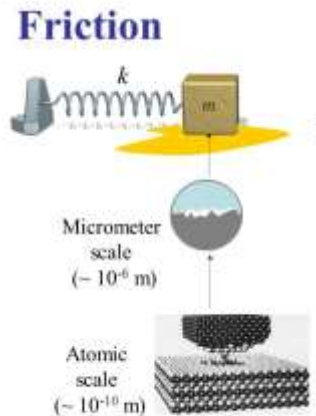
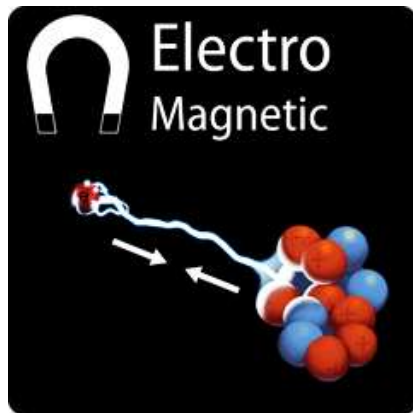
Διαμοριακές
αλληλεπιδράσεις

- Απόσταση μεταξύ των μορίων συγκρίσιμη με το μέγεθός τους
- Οι διαμοριακές αλληλεπιδράσεις δεν είναι αμελητέες

ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΙΣ ΣΤΟΝ ΜΙΚΡΟΚΟΣΜΟ

Ηλεκτρικές Δυνάμεις και Πεδία

- Εξαιρώντας τη βαρύτητα, τελικά όλες οι δυνάμεις με τις οποίες είμαστε εξοικειωμένοι, οφείλονται σε ηλεκτρομαγνητικές αλληλεπιδράσεις.
- Όλη η Χημεία (εκτός της Πυρηνικής Χημείας) είναι βασικά ηλεκτρομαγνητικής προέλευσης.



The Electromagnetic Force in Forming Matter

<p>Coulomb's Law Like charges repel, unlike charges attract. Protons repel each other, and the same is true for electrons, but the electromagnetic force attracts electrons to protons.</p>	<p>Electron Capture The electromagnetic force pulls electrons into orbit around positively charged atomic nuclei. The larger the nuclei, the more electrons are pulled in.</p>	<p>Atoms & Molecules The electromagnetic force holds atoms and molecules together. Electrons occupy energy levels around atomic nuclei balancing out positive and negative charges.</p>
--	---	--

ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΙΣ ΣΤΟΝ ΜΙΚΡΟΚΟΣΜΟ

ΗΛΕΚΤΡΙΚΟ ΦΟΡΤΙΟ ΚΑΙ ΔΙΑΤΗΡΗΣΗ ΤΟΥ ΦΟΡΤΙΟΥ

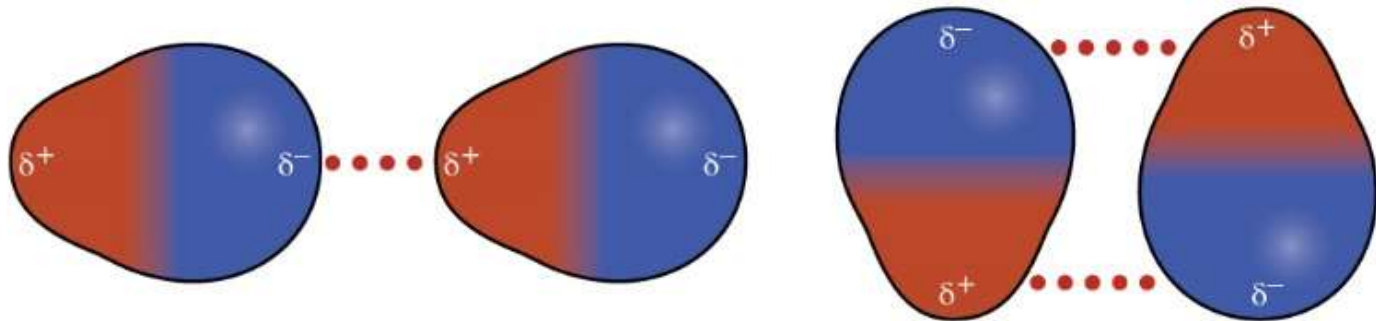
- Το ηλεκτρικό φορτίο είναι ιδιότητα των στοιχειωδών σωματιδίων και είναι δύο ειδών, θετικό και αρνητικό. Επίσης είναι μέγεθος κβαντισμένο, πάντα πολλαπλάσιο μίας διακριτής, ελάχιστης δυνατής μονάδας.
- Το κβάντο του ηλεκτρικού φορτίου είναι:

$$e = 1,6 \times 10^{-19} \text{ C}$$

και έχει μέτρο ίσο με το φορτίο του ηλεκτρονίου ή του πρωτονίου. Θεωρείται θετικό, άρα το φορτίο του ηλεκτρονίου είναι $-e$. Όλα τα γνωστά σωματίδια βρέθηκαν να έχουν ηλεκτρικά φορτία που είναι πολλαπλάσια του $\pm e$.

ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΙΣ ΣΤΟΝ ΜΙΚΡΟΚΟΣΜΟ

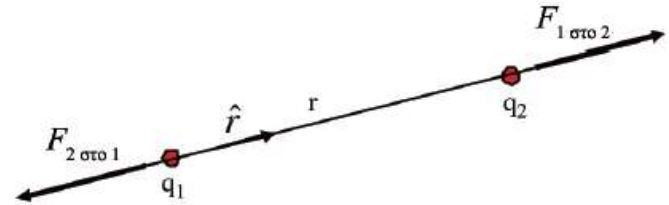
- Ακόμη, πολλά ουδέτερα μόρια έχουν τα κέντρα θετικού και αρνητικού φορτίου σε διαφορετικές θέσεις (λέγονται *πολικά μόρια*). Αυτή η διαφορά μπορεί να έχει μόνιμο χαρακτήρα, όπως στο νερό, ή να επάγεται μέσω ηλεκτρικής αλληλεπίδρασης με άλλα σώματα.
- Ουδέτερα μόρια μπορούν να αλληλεπιδρούν με καθαρά φορτία, ή ακόμη με άλλα πολικά μόρια, αν και οι δυνάμεις που παράγονται είναι ασθενέστερες από αυτές μεταξύ φορτισμένων μορίων.



ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΙΣ ΣΤΟΝ ΜΙΚΡΟΚΟΣΜΟ

Ο ΝΟΜΟΣ ΤΟΥ COULOMB

$$\vec{F}_{1 \text{ στο } 2} = k \frac{q_1 q_2}{r^2} \hat{r}$$



Αν τα δύο φορτία είναι στο κενό, η σταθερά k είναι:

$$k = 9,0 \times 10^9 \text{ N}\cdot\text{m}^2/\text{C}^2$$

αλλά η σταθερά μεταβάλλεται σε διαφορετικά μέσα.

Ο νόμος του Coulomb γράφεται συνήθως συναρτήσει μίας άλλης σταθεράς ϵ_0 , της διαπερατότητας του κενού, όπου

$$k = 1/4\pi\epsilon_0 \quad \text{ώστε: } \epsilon_0 = 8,85 \times 10^{-12} \text{ C}^2/\text{N}\cdot\text{m}^2$$

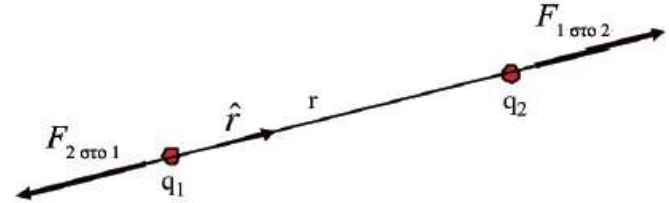
$$\vec{F}_{1 \text{ στο } 2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r^2} \hat{r}$$

Στην πραγματικότητα **οι δυνάμεις Coulomb δεν εκτείνονται απεριόριστα**, διότι πάντα υπάρχουν άλλα γειτονικά φορτία που τείνουν να περιορίσουν την εμβέλεια της δύναμης

ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΙΣ ΣΤΟΝ ΜΙΚΡΟΚΟΣΜΟ

Ο ΝΟΜΟΣ ΤΟΥ COULOMB

$$\vec{F}_{1 \text{ στο } 2} = k \frac{q_1 q_2}{r^2} \hat{r}$$



Ερώτηση:

Με ποιας μάζας το βάρος ισοδυναμεί η ηλεκτρική αλληλεπίδραση (ελκτική ή απωστική) δύο φορτίων 1 C το καθένα που απέχουν απόσταση 1 m;

Απάντηση:

$$F = 9,0 \times 10^9 \text{ N},$$

Βάρος $W = 9,0 \times 10^9 \text{ N}$ αντιστοιχεί σε μάζα: $mg = 9,0 \times 10^9 \text{ N} \Rightarrow$
 $m = 9,0 \times 10^8 \text{ kg} = 9,0 \times 10^5 \times 10^3 \text{ kg} =$
 $= 900.000 \text{ τόνων}$

ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΙΣ ΣΤΟΝ ΜΙΚΡΟΚΟΣΜΟ

Ηλεκτρική vs βαρυτική δύναμη (στον μικρόκοσμο)

Ανάμεσα σε πρωτόνιο και ηλεκτρόνιο που απέχουν 0,1 nm ασκείται ελκτική ηλεκτρική δύναμη με μέτρο :

$$F = k \frac{e^2}{r^2} = 9 \times 10^9 \frac{(1,6 \times 10^{-19})^2}{(10^{-10})^2} = 2,3 \times 10^{-8} \text{ N}$$

Πόσο ισχυρότερη είναι η ηλεκτρική δύναμη μεταξύ ενός πρωτονίου και ενός ηλεκτρονίου από τη μεταξύ τους βαρυτική δύναμη;

$$|Q_p| = |q_e| = e$$

$$m_e = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

$$m_p/m_e = 1836.15$$

$$G = 6.6743 \times 10^{-11} \text{ m}^3 \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{s}^{-2}$$

$$\frac{F_{\text{ηλεκτρ. πρωτ. σε ηλεκτρ.}}}{F_{\text{βαρυτ. πρωτ. σε ηλεκτρ.}}} = \frac{ke^2/r^2}{GMm/r^2} = \frac{ke^2}{GMm} = 2 \times 10^{39}$$

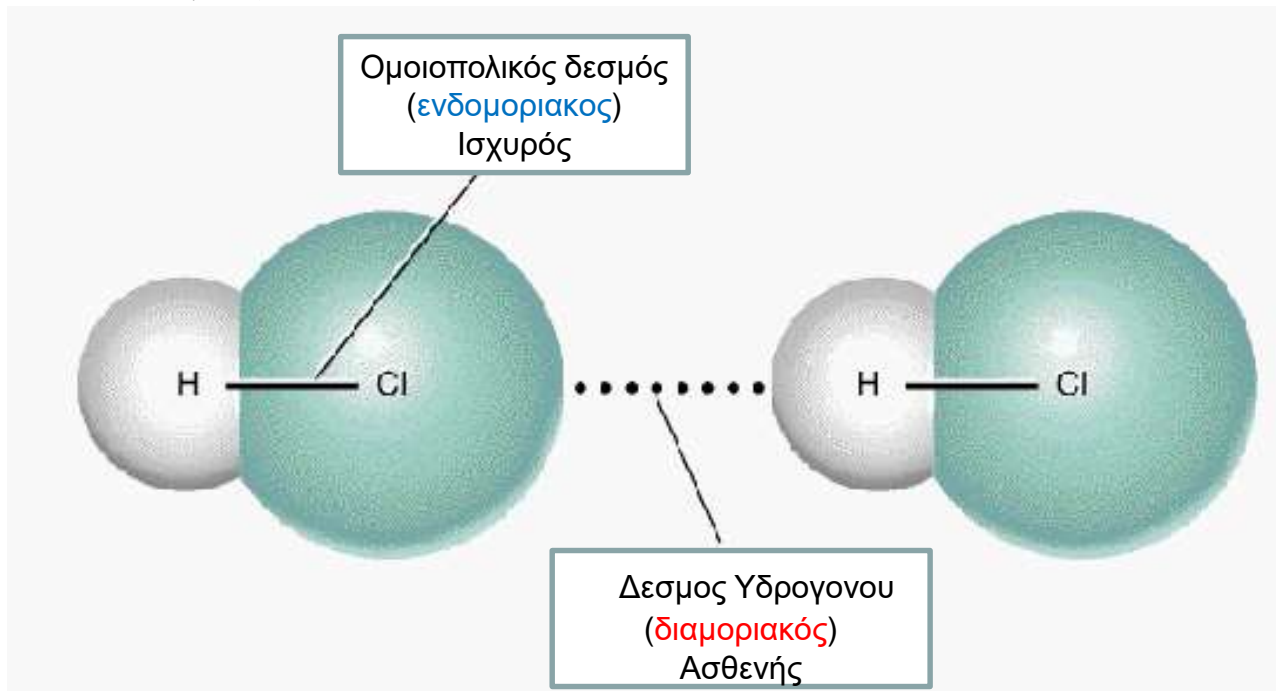
Όπου εμπλέκονται ηλεκτρικές δυνάμεις, οι βαρυτικές δυνάμεις μπορούν να παραλειφθούν εντελώς.

ΜΟΡΙΑΚΕΣ ΔΥΝΑΜΕΙΣ

- Οι ομοιοπολικοί δεσμοί που συγκρατούν τα άτομα σε ένα μόριο είναι **ενδομοριακές (intramolecular) δυνάμεις**
- Οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ μορίων (μη-ομοιοπολικοί δεσμοί) ονομάζονται **διαμοριακές (intermolecular) δυνάμεις**

Οι διαμοριακές δυνάμεις είναι πολύ ασθενέστερες από τις ενδομοριακές (π.χ. 16 kJ/mol έναντι 431 kJ/mol για το HCl)

Όταν ένα υλικό τήκεται ή βράζει οι διαμοριακές δυνάμεις σπάνε (συνήθως όχι οι ομοιοπολικοί δεσμοί)



ΔΙΑΜΟΡΙΑΚΕΣ ΔΥΝΑΜΕΙΣ

Διαμοριακές δυνάμεις εμφανίζονται τόσο μεταξύ ομοειδών όσο και ετεροειδών μορίων. Οι διαμοριακές δυνάμεις μεταξύ






- ομοειδών μορίων ονομάζονται **δυνάμεις συνοχής**,
 - ετεροειδών μορίων ονομάζονται **δυνάμεις συνάφειας**
- Για να σπάσει ο δεσμός που συνδέει δύο μόρια πρέπει να προσφερθεί αρκετή ενέργεια, ώστε τα μόρια αυτά να βρεθούν σε μεγάλη απόσταση (θεωρητικά άπειρη) το ένα από το άλλο, δηλαδή σε τέτοια απόσταση ώστε οι διαμοριακές δυνάμεις να είναι μηδενικές. Η απαραίτητη αυτή ενέργεια ονομάζεται **ενέργεια διαχωρισμού**

ΣΤΕΡΕΟ: Κινητική Ενέργεια \ll Δυναμική Εν. Διαμοριακών αλληλ.

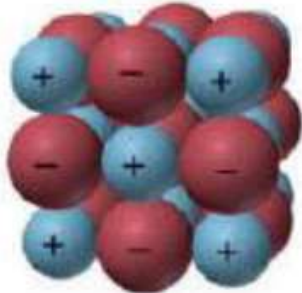
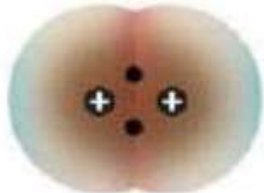
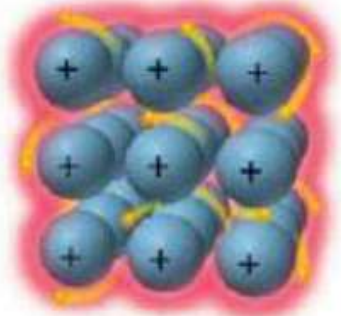
ΥΓΡΟ : Κινητική Ενέργεια \sim Δυναμική Εν. Διαμοριακών αλληλ.

ΑΕΡΙΟ : Κινητική Ενέργεια \gg Δυναμική Εν. Διαμοριακών αλληλ. (*Πραγματικό*)
(Διαμοριακές δυνάμεις ≈ 0 *Ιδανικό*)

ΔΙΑΜΟΡΙΑΚΕΣ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΙΣ

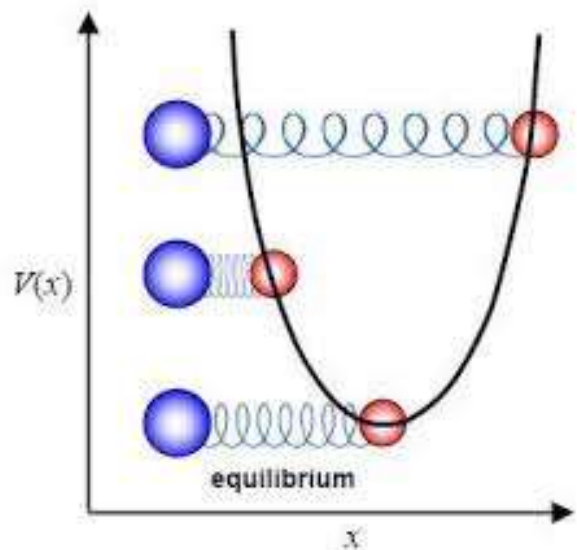
Force	Model	Basis of Attraction	Energy (kJ/mol)	Example
<i>Intermolecular</i>				
Ion-dipole		Ion charge– dipole charge	40–600	$\text{Na}^+ \cdots \text{O} \begin{array}{l} \diagup \\ \diagdown \end{array} \begin{array}{l} \text{H} \\ \text{H} \end{array}$
H bond	$\delta^- \quad \delta^+ \quad \delta^-$ $-\text{A}-\text{H} \cdots \cdots \text{:B}-$	Polar bond to H– dipole charge (high EN of N, O, F)	10–40	$\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{O}}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array} \cdots \cdots \begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{O}}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$
Dipole-dipole		Dipole charges	5–25	$\text{I}-\text{Cl} \cdots \cdots \text{I}-\text{Cl}$
Ion–induced dipole		Ion charge– polarizable e^- cloud	3–15	$\text{Fe}^{2+} \cdots \cdots \text{O}_2$
Dipole–induced dipole		Dipole charge– polarizable e^- cloud	2–10	$\text{H}-\text{Cl} \cdots \cdots \text{Cl}-\text{Cl}$
Dispersion (London)		Polarizable e^- clouds	0.05–40	$\text{F}-\text{F} \cdots \cdots \text{F}-\text{F}$

ΜΗ ΔΙΑΜΟΡΙΑΚΕΣ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΙΣ

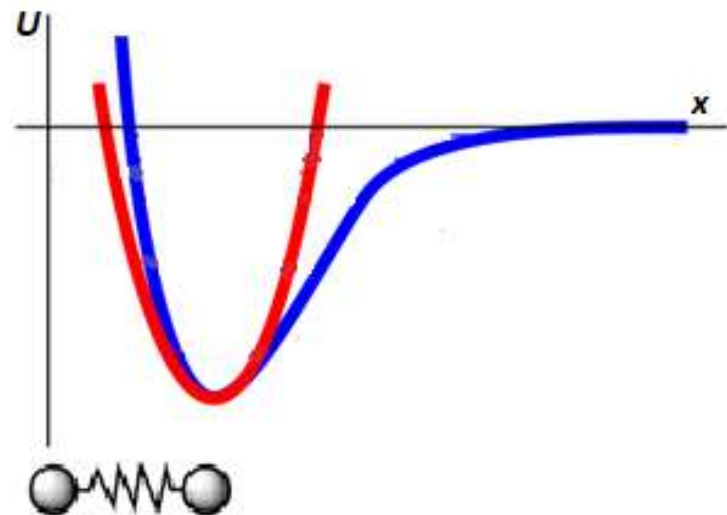
Force	Model	Basis of Attraction	Energy (kJ/mol)	Example
<i>Bonding</i>				
Ionic		Cation–anion	400–4000	NaCl
Covalent		Nuclei–shared e^- pair	150–1100	H—H
Metallic		Cations–delocalized electrons	75–1000	Fe

Ενέργεια διαμοριακών αλληλεπιδράσεων

Μοντέλο Απλού
Αρμονικού Ταλαντωτή

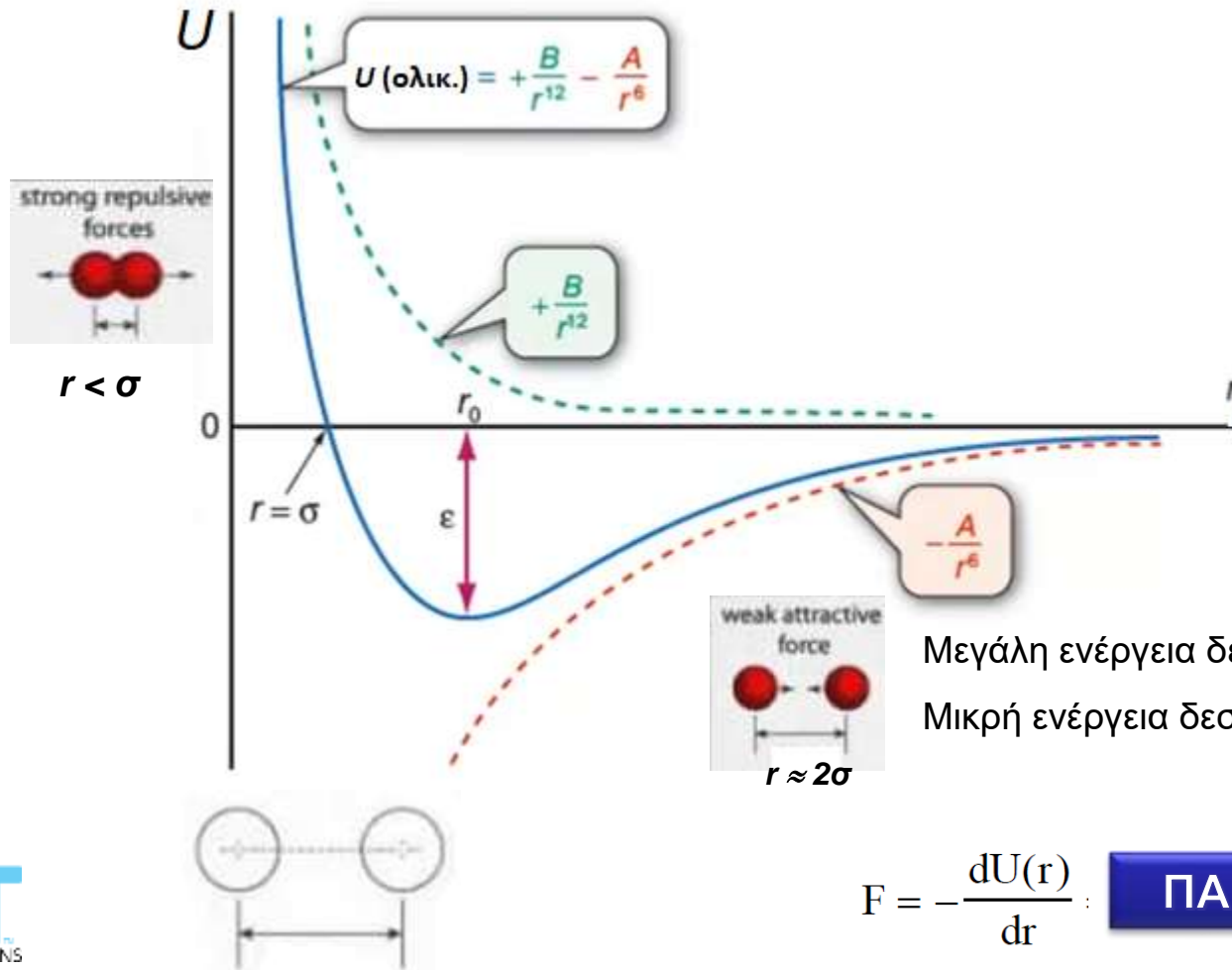


Βελτιωμένο Μοντέλο



Ενέργεια διαμοριακών αλληλεπιδράσεων Lennard - Jones 6-12

$$U_{ολικ} = U(\alpha\pi\omega\sigma\tau.) + U(\epsilon\lambda\kappa\tau\iota\kappa.) = +\frac{B}{r^{12}} - \frac{A}{r^6}$$



$$F = -\frac{dU(r)}{dr}$$

Συνέπειες της ύπαρξης διαμοριακών αλληλεπιδράσεων στα ρευστά

Επιφανειακή τάση

- Η συνισταμένη των ελκτικών διαμοριακών δυνάμεων που ασκούνται στα μόρια της επιφάνειας ενός υγρού διαφέρει από αυτήν των διαμοριακών δυνάμεων που ασκούνται στα εσωτερικά του μόρια.

Ιξώδες

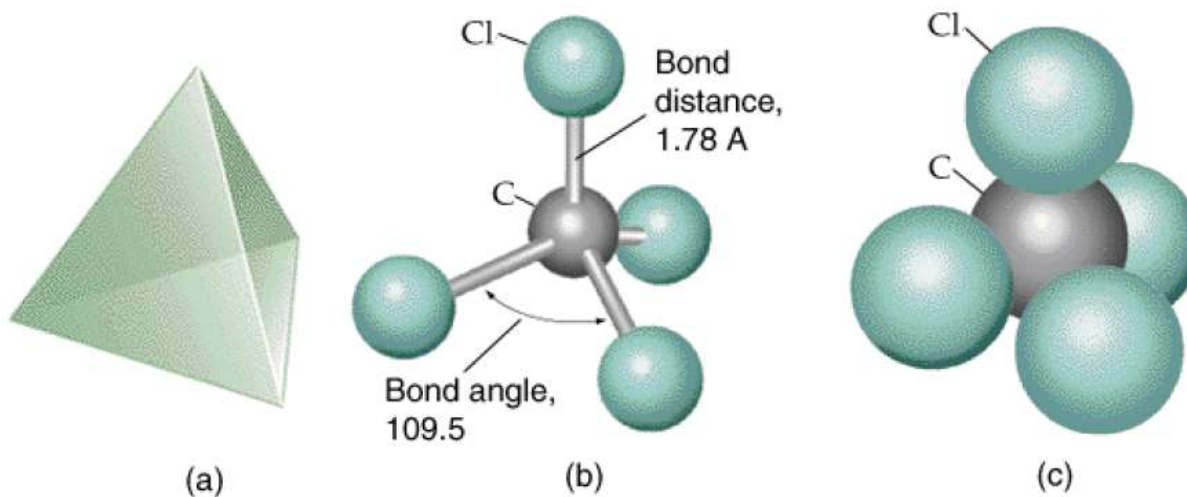
- Όταν ένα υγρό ρέει, τα μόρια του δεν κινούνται ελεύθερα το ένα ως προς το άλλο. Εξαιτίας των διαμοριακών αλληλεπιδράσεων (ελκτικών) μεταξύ γειτονικών μορίων, η ροή συναντά «αντίσταση» που εκφράζεται ως το ιξώδες του υγρού. Όσο ισχυρότερες είναι οι διαμοριακές αλληλεπιδράσεις τόσο μεγαλύτερο ιξώδες θα εμφανίζει ένα υγρό.

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Ι

Η ΦΥΣΗ ΤΩΝ ΔΙΑΜΟΡΙΑΚΩΝ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΩΝ

ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ ΜΟΡΙΟΥ

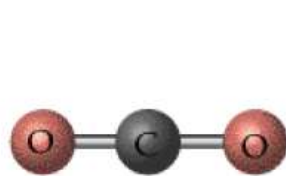
- Η Γεωμετρία του μορίου καθορίζεται από τις γωνίες των δεσμών του
- Π.χ CCl_4 : πειραματικά βρίσκουμε ότι όλες οι Cl-C-Cl γωνίες των δεσμών είναι 109.5° .
 - Γι' αυτό το μόριο δεν μπορεί να είναι επίπεδο.
 - Όλα τα άτομα Cl βρίσκονται στις κορυφές τετραέδρου με το άτομο του C στο κέντρο του.



Η ΦΥΣΗ ΤΩΝ ΔΙΑΜΟΡΙΑΚΩΝ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΩΝ

ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ ΜΟΡΙΟΥ

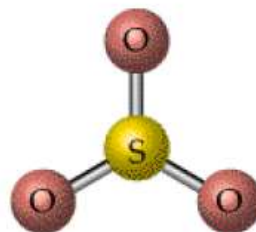
Για να προβλέψουμε τη γεωμετρία του μορίου στηρίζομαστε στην υπόθεση ότι τα ηλεκτρόνια σθένους απωθούνται μεταξύ τους. Γι' αυτό το μόριο αποκτά τέτοια γεωμετρία ώστε να ελαχιστοποιεί αυτήν την άπωση.



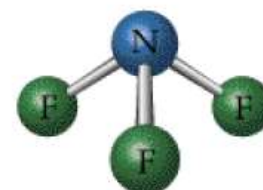
Linear



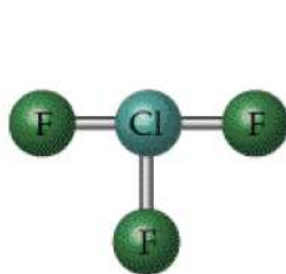
Bent



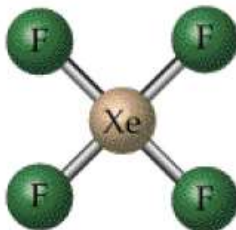
Trigonal
planar



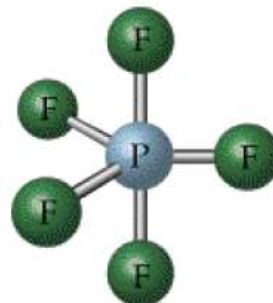
Trigonal
pyramidal



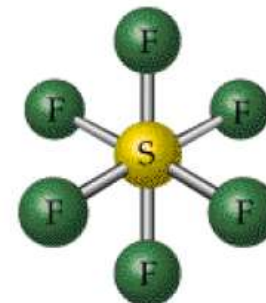
T-shaped



Square
planar



Trigonal
bipyramidal

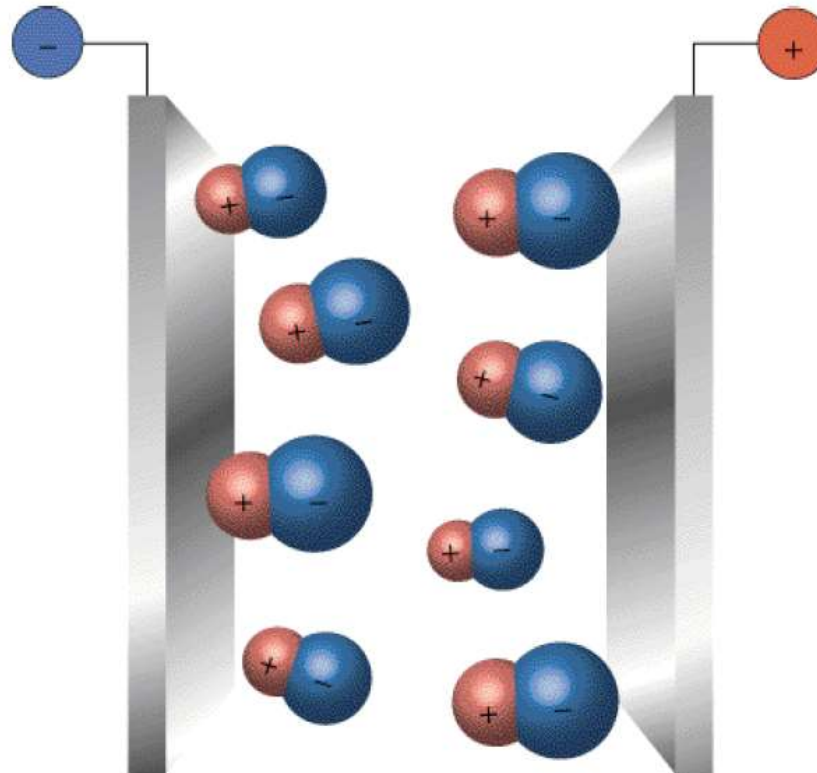


Octahedral

Η ΦΥΣΗ ΤΩΝ ΔΙΑΜΟΡΙΑΚΩΝ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΩΝ

Πόλωση Μορίων

Τα πολωμένα μόρια αλληλεπιδρούν με τα ηλεκτρικά πεδία. Στα εντελώς συμμετρικά μόρια (π.χ βενζόλιο ή αιθάνιο), το κέντρα του θετικού και του αρνητικού φορτίου συμπίπτουν. Αλλά υπάρχουν και μόρια, όπως το μόριο του νερού, όπου τα δύο αυτά κέντρα δεν συμπίπτουν, τα οποία λέγεται ότι αποτελούν *ηλεκτρικά δίπολα*.



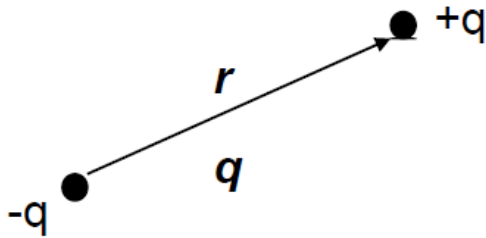
Η ΦΥΣΗ ΤΩΝ ΔΙΑΜΟΡΙΑΚΩΝ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΩΝ

Πόλωση Μορίων – Ηλεκτρική ροπή

Τα ηλεκτρικά δίπολα και χαρακτηρίζονται από την **ηλεκτρική ροπή**.
Αν δύο αντίθετα φορτία q βρίσκονται σε απόσταση r , τότε ορίζεται ως ηλεκτρική ροπή το διάνυσμα \mathbf{p} :

$$\mathbf{p} = q\mathbf{r}$$

και έχει εξ ορισμού φορά από το αρνητικό φορτίο προς το θετικό.



Διπολική ροπή σε πολυατομικά μόρια

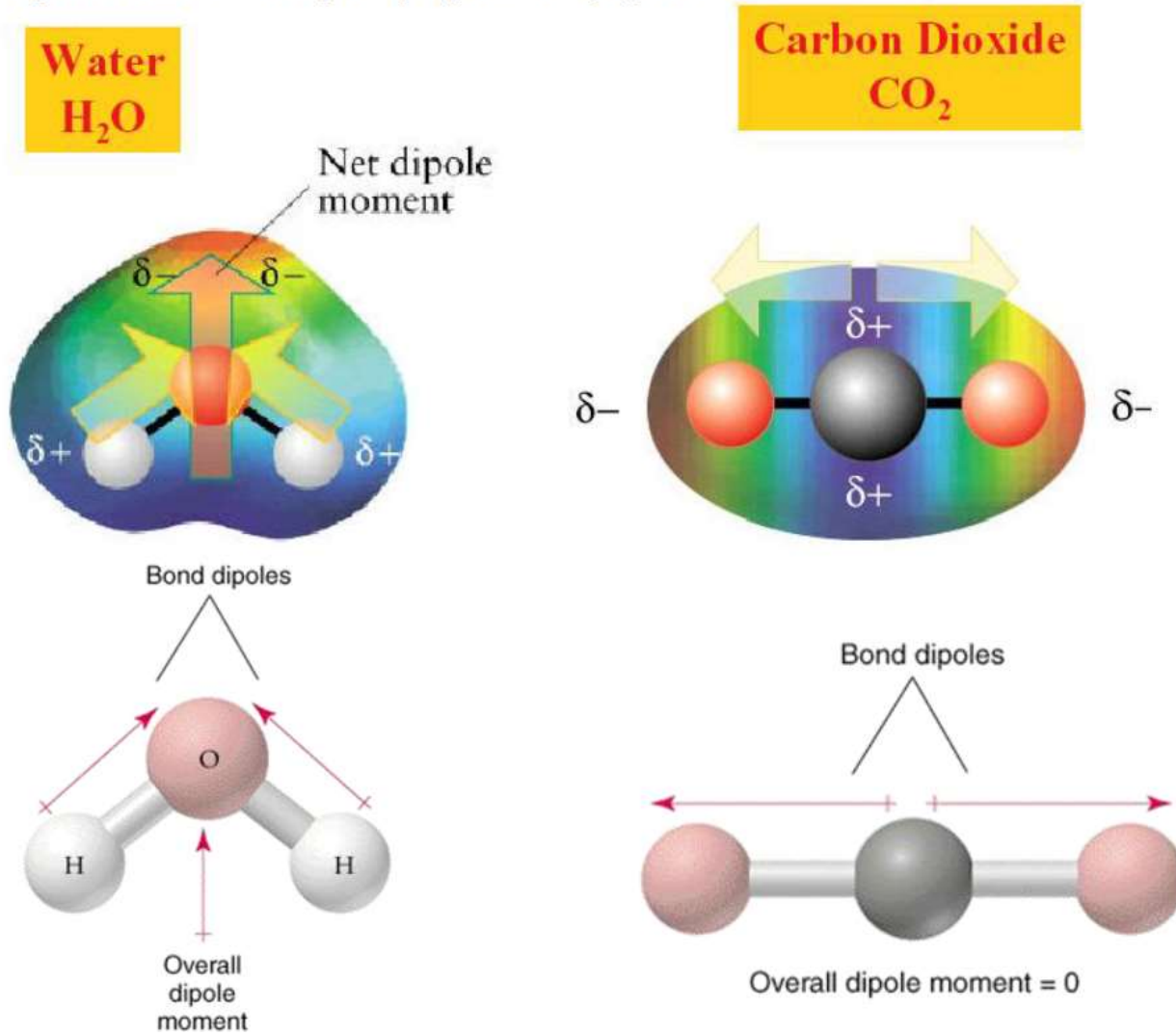
Σε ένα πολυατομικό μόριο κάθε δεσμός μπορεί να είναι δίπολο.

Ο προσανατολισμός αυτών των επιμέρους δίπολων καθορίζει εάν υπάρχει και πόση είναι η διπολική ροπή για όλο το μόριο συνολικά.

Όταν τα μόρια που δεν διαθέτουν μόνιμη ηλεκτρική ροπή βρεθούν κάτω από την επίδραση ηλεκτρικού πεδίου, τα θετικά και αρνητικά φορτία μετατοπίζονται κατά αντίθετες φορές, τα κέντρα τους παύουν να συμπίπτουν και έτσι επάγεται εκ μέρους του πεδίου ηλεκτρική ροπή.

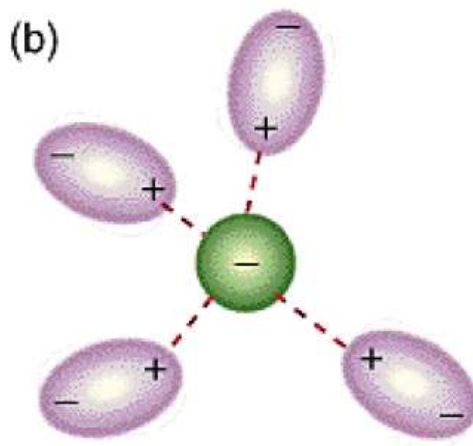
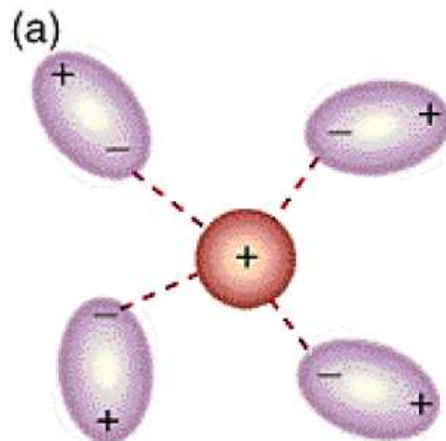
Η ΦΥΣΗ ΤΩΝ ΔΙΑΜΟΡΙΑΚΩΝ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΩΝ

Παράδειγμα: στο CO_2 , οι ηλεκτρικές ροπές των C-O είναι αντίθετες και αναιρούνται επειδή το μόριο είναι γραμμικό. Στο H_2O , οι ηλεκτρικές ροπές H-O δεν αναιρούνται επειδή το μόριο "λυγίζει".



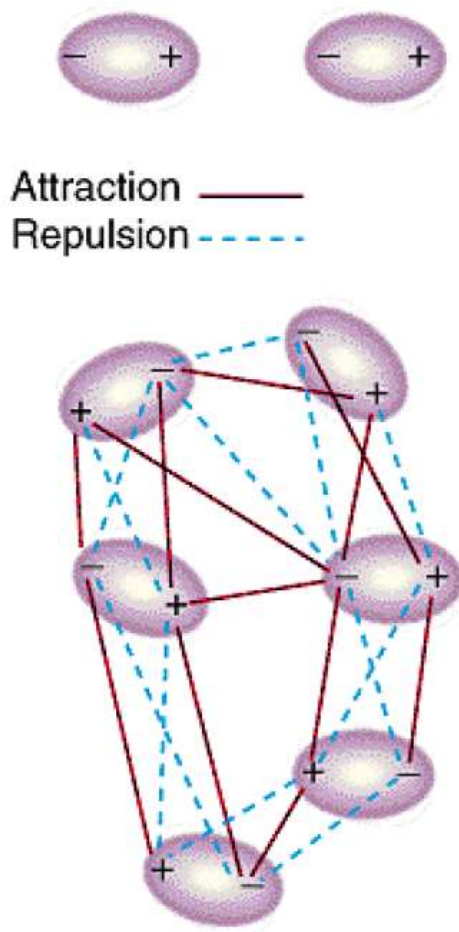
Η ΦΥΣΗ ΤΩΝ ΔΙΑΜΟΡΙΑΚΩΝ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΩΝ

Ελκτικές δυνάμεις μεταξύ ιόντος και διπόλου



Η ΦΥΣΗ ΤΩΝ ΔΙΑΜΟΡΙΑΚΩΝ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΩΝ

Ελκτικές δυνάμεις διπόλου - διπόλου

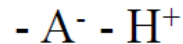


Η ΦΥΣΗ ΤΩΝ ΔΙΑΜΟΡΙΑΚΩΝ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΩΝ

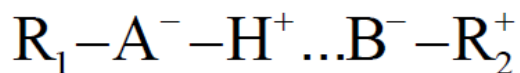
Ελκτικές δυνάμεις διπόλου - διπόλου

ΔΕΣΜΟΣ ΥΔΡΟΓΟΝΟΥ

- Ειδική περίπτωση δυνάμεων διπόλου - διπόλου.
- Πείραμα: Τα σημεία ζέσεως ενώσεων με H-F, H-O, και H-N δεσμούς είναι ιδιαίτερα υψηλά. → Οι διαμοριακές δυνάμεις είναι ιδιαίτερα ισχυρές.
- Ο δεσμός υδρογόνου εμφανίζεται μεταξύ μιας ομάδας A-H ενός μορίου και του ατόμου B του ιδίου ή άλλου μορίου, υπό την προϋπόθεση ότι τα άτομα A και B είναι ισχυρά ηλεκτραρνητικά, οπότε η ομάδα A-H εμφανίζει πολικότητα, γιατί το άτομο A έλκει προς αυτό τα ηλεκτρόνια του ομοιοπολικού δεσμού, με αποτέλεσμα να σχηματιστεί ένα δίπολο της μορφής:



Η παρουσία του ηλεκτραρνητικού ατόμου B έχει ως αποτέλεσμα την εμφάνιση ηλεκτρικής ροπής στο μόριο. Υπάρχουν λοιπόν δύο ηλεκτρικά δίπολα και μεταξύ των οποίων εμφανίζεται ηλεκτροστατική έλξη, γιατί το υδρογόνο έλκεται και από τα δύο άτομα A και B, με αποτέλεσμα τον σχηματισμό ενός είδους γέφυρας η οποία ονομάζεται γέφυρα ή δεσμός υδρογόνου:



Η ΦΥΣΗ ΤΩΝ ΔΙΑΜΟΡΙΑΚΩΝ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΩΝ

ΔΕΣΜΟΣ ΥΔΡΟΓΟΝΟΥ

- Η ονομασία “γέφυρα” οφείλεται στο ότι το άτομο του υδρογόνου “συνδέει” εν είδη γέφυρας τα άτομα A και B, τα οποία βρίσκονται σε σημαντικά μικρότερη απόσταση από την αντίστοιχη που εμφανίζεται στην περίπτωση των δεσμών διπόλου-διπόλου.
- Αν τα άτομα A και B είναι οξυγόνα η απόσταση A...B είναι μεταξύ των 2.7 και 3Å, ενώ η απόσταση H...B γύρω στα 1.8 Å. Τα άτομα A και B μπορεί να είναι, εκτός από οξυγόνο, άζωτο, θείο, αλογόνα κ.λπ (πάντως ηλεκτραρνητικά).
 - Τα ηλεκτρόνια στον δεσμό H-X (X = ηλεκτραρνητικό στοιχείο) βρίσκεται εγγύτερα του X από ότι στο H.
 - Το H έχει μόνο ένα ηλεκτρόνιο, έτσι στον H-X δεσμό, το δ⁺ H είναι ένα σχεδόν “γυμνό” πρωτόνιο προς το δ⁻ X. Για τον λόγο αυτό οι δεσμοί υδρογόνου εμφανίζονται ιδιαίτερα ισχυροί.

Η ΦΥΣΗ ΤΩΝ ΔΙΑΜΟΡΙΑΚΩΝ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΩΝ

Η σημασία του δεσμού υδρογόνου

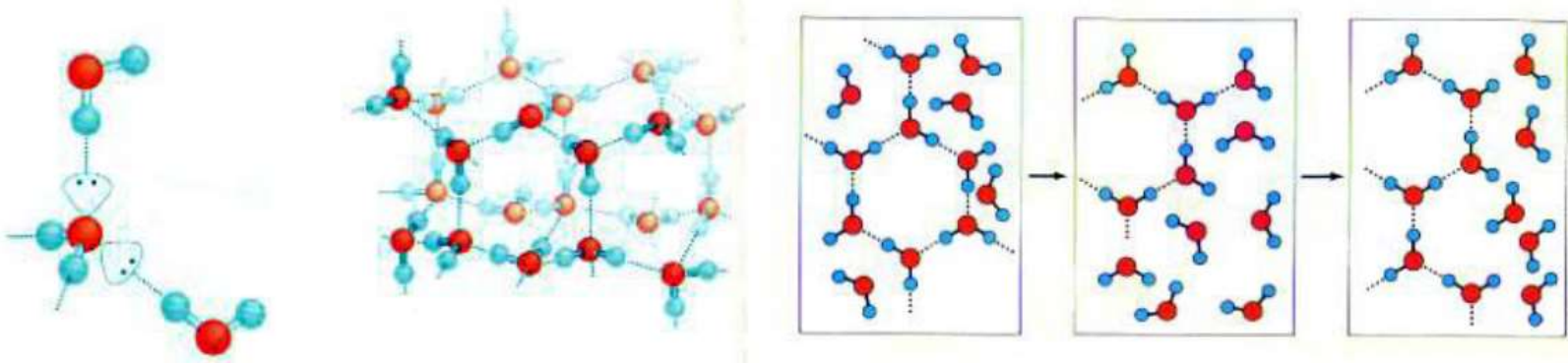
Ιδιότητες του νερού σε σύγκριση με άλλες ενώσεις παρόμοιου μοριακού βάρους

Ένωση	Μοριακό Βάρος	Σημείο τήξεως (°C)	Σημείο ζέσεως (°C)	Θερμότητα εξάτμισης (kJ/mol)
CH ₄	16.04	-182	-162	8.16
NH ₃	17.03	-78	-33	23.26
H ₂ O	18.02	0	+100	40.71
H ₂ S	34.08	-86	-61	18.66

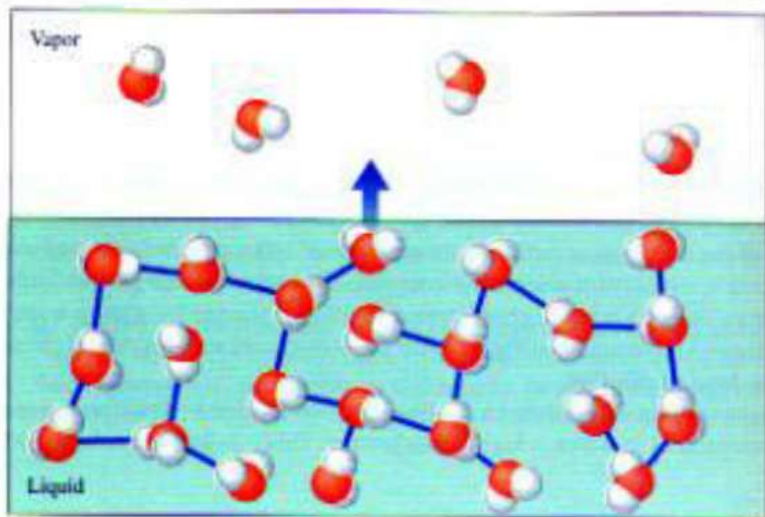
Η ΦΥΣΗ ΤΩΝ ΔΙΑΜΟΡΙΑΚΩΝ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΩΝ

ΔΕΣΜΟΙ ΥΔΡΟΓΟΝΟΥ – ΓΙΑΤΙ ΕΠΙΠΛΕΙ Ο ΠΑΓΟΣ

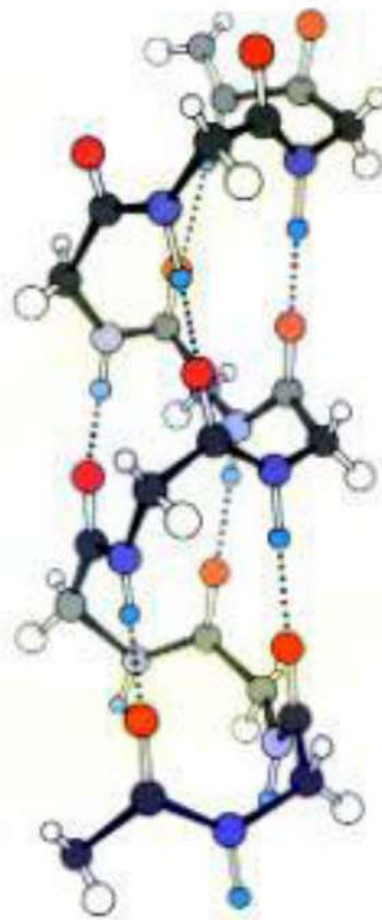
- Τα στερεά είναι συνήθως περισσότερο συμπιεσμένα από τα υγρά
- Γι' αυτό τα στερεά είναι πυκνότερα από τα υγρά
- Στον πάγο τα μόρια νερού διατάσσονται έτσι ώστε να βελτιστοποιούνται ενεργειακά οι δεσμοί υδρογόνου
- Κάθε άτομο οξυγόνου στον πάγο περιβάλλεται τετραεδρικά από 4 άλλα. Δεσμοί υδρογόνου συνδέουν κάθε ζευγάρι ατόμων οξυγόνου. Η διάταξη αυτή δημιουργεί μια "ανοικτή" δομή και γι' αυτό το λόγο ο πάγος είναι λιγότερο πυκνός από το νερό και επιπλέει σε αυτό.
- Όταν ο πάγος λιώνει, το κανονικό πλέγμα αποσυντίθεται και τα μόρια νερού έρχονται εγγύτερα το ένα με το άλλο με αποτέλεσμα το υγρό να εμφανίζει μεγαλύτερη πυκνότητα. Τα μόρια βρίσκονται συνεχώς σε κίνηση.
- Στο νερό το μήκος του δεσμού H-O είναι 1.0 Å.
- Το μήκος του O...H υδρογονικού δεσμού είναι 1.8 Å.



Η ΦΥΣΗ ΤΩΝ ΔΙΑΜΟΡΙΑΚΩΝ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΩΝ



Όταν τα μόρια νερού αφήνουν την υγρή φάση για να περάσουν στην αέρια, απορροφούν ενέργεια για να υπερνικήσουν τους διαμοριακούς δεσμούς υδρογόνου (μπλε γραμμές) της υγρής φάσης



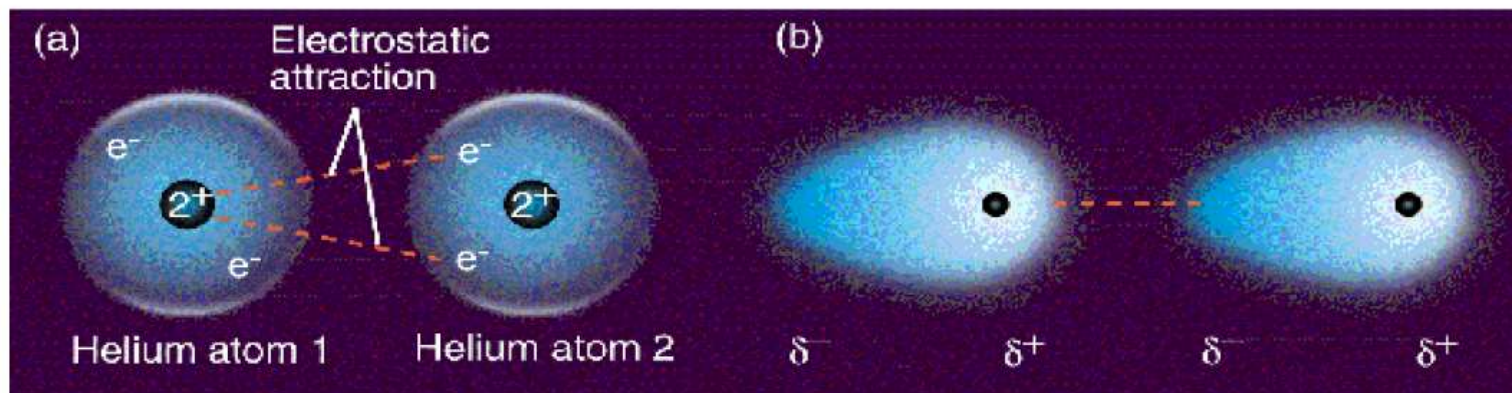
Δεσμοί υδρογόνου εμφανίζονται στις πρωτεϊνικές δομές, τους υδρογονάνθρακες και τα νουκλεϊκά οξέα. Οι ιδιότητες και οι λειτουργίες αυτών των βιολογικών μορίων εξαρτώνται σε μεγάλο βαθμό από τους δεσμούς υδρογόνου. Μικροί υδρογονάνθρακες όπως η γλυκόζη είναι ιδιαίτερα διαλυτά στο νερό εξαιτίας της ικανότητας τους να σχηματίζουν δεσμούς υδρογόνου με τα μόρια του νερού.

Η ΦΥΣΗ ΤΩΝ ΔΙΑΜΟΡΙΑΚΩΝ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΩΝ

Δυνάμεις διασποράς - London

- Ασθενέστερες όλων των διαμοριακών δυνάμεων.
- Μεταξύ μορίων που δεν παρουσιάζουν ηλεκτρική ροπή και που η ύπαρξή τους ερμηνεύεται με την παραδοχή της στιγμιαίας ανισοκατανομής του ηλεκτρικού φορτίου. Δεχόμαστε δηλαδή ότι το ηλεκτρονικό νέφος ταλαντούται με συχνότητα f , οπότε εμφανίζεται αντίστοιχα ηλεκτρική ροπή, που ταλαντούται με την ίδια συχνότητα, αλλά της οποίας η μέση τιμή ως προς το χρόνο είναι μηδενική Ένα στιγμιαίο δίπολο μπορεί να προκαλέσει εξ επαγωγής ηλεκτρική πόλωση σε γειτονικό μόριο (ή άτομο).
- Οι δυνάμεις μεταξύ στιγμιαίων διπόλων ονομάζονται **δυνάμεις διασποράς London**.
- Η ευκολία με την οποία ένα ηλεκτρονιακό νέφος ανισοκατανέμεται και επομένως η ικανότητα στιγμιαίας πόλωσης εκφράζεται από τον **συντελεστή πόλωσης α** .
- Όσο μεγαλύτερο είναι το μόριο (και επομένως μεγαλύτερος ο αριθμός των ηλεκτρονίων του) τόσο μεγαλύτερη η ικανότητα του πόλωσης.

Η ΦΥΣΗ ΤΩΝ ΔΙΑΜΟΡΙΑΚΩΝ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΩΝ

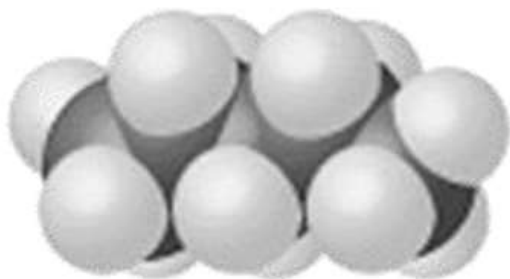
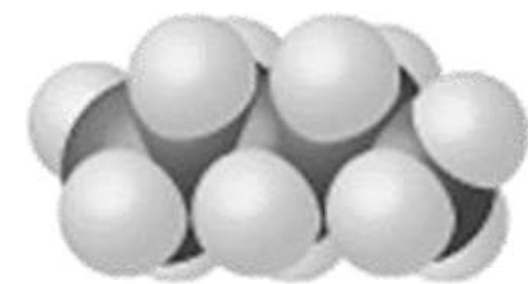


Δυνάμεις διασποράς London

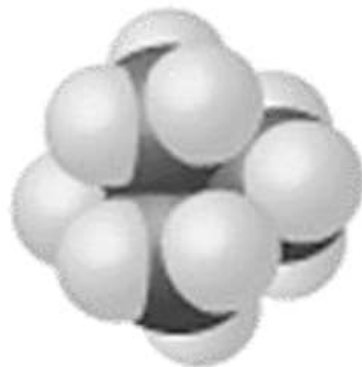
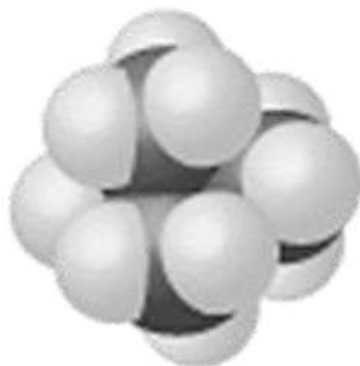
- Οι δυνάμεις διασποράς London γίνονται ισχυρότερες με την αύξηση του μοριακού βάρους.
- Οι δυνάμεις διασποράς London εμφανίζονται μεταξύ όλων των μορίων.
- Οι δυνάμεις διασποράς London εξαρτώνται από την γεωμετρία του μορίου.
- Όσο μεγαλύτερη είναι η διαθέσιμη επιφάνεια σύνδεσης τόσο ισχυρότερες είναι οι δυνάμεις διασποράς.
- Οι δυνάμεις διασποράς London είναι ασθενέστερες μεταξύ σφαιρικών μορίων συγκριτικά με αυτές μεταξύ μη-σφαιρικών μορίων.

Η ΦΥΣΗ ΤΩΝ ΔΙΑΜΟΡΙΑΚΩΝ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΩΝ

Δυνάμεις διασποράς - London



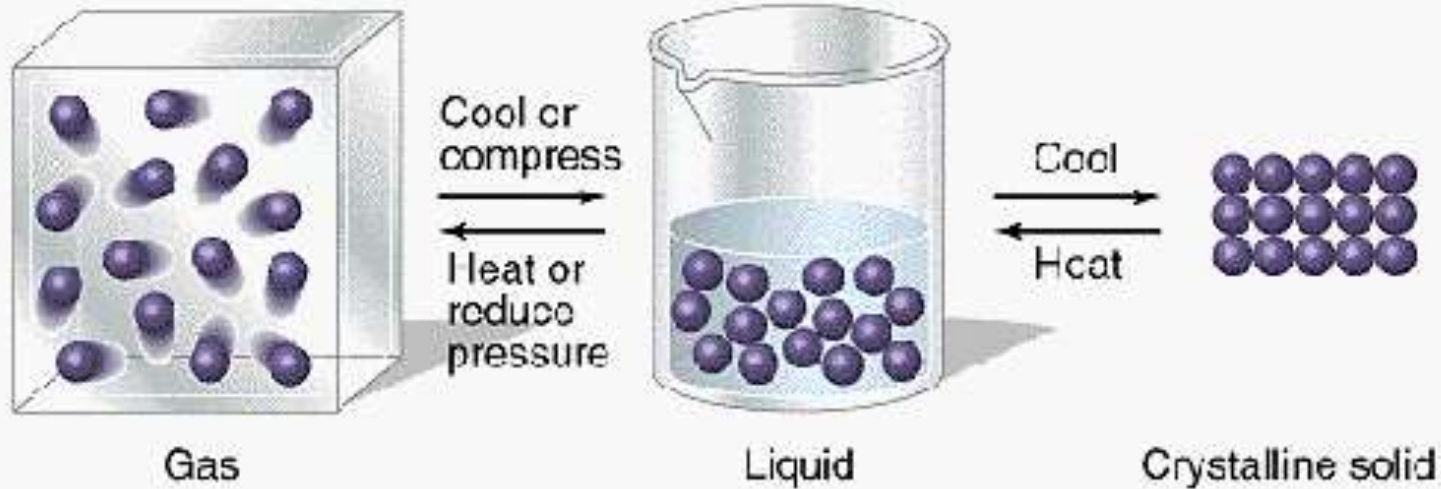
n-Pentane
(bp = 309.4 K)



Neopentane
(bp = 282.7 K)

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ ΙΙ

ΦΥΣΙΚΕΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΕΙΣ



Εντελώς αποδιατεταγμένα,
αρκετός "κενός" χώρος,
σωματίδια σε μεγάλες
μεταξύ τους αποστάσεις
με πλήρη ελευθερία
κίνησης

Αποδιατεταγμένα,
σωματίδια ή ομάδες
σωματιδίων κινούνται
ελεύθερα το ένα σε σχέση
με το άλλο, βρίσκονται σε
κοντινότερες μεταξύ τους
αποστάσεις

Διάταξη σωματιδίων,
βρίσκονται σε κοντινές
μεταξύ τους αποστάσεις
και ουσιαστικά σε
καθορισμένες θέσεις

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ ΙΙΙ

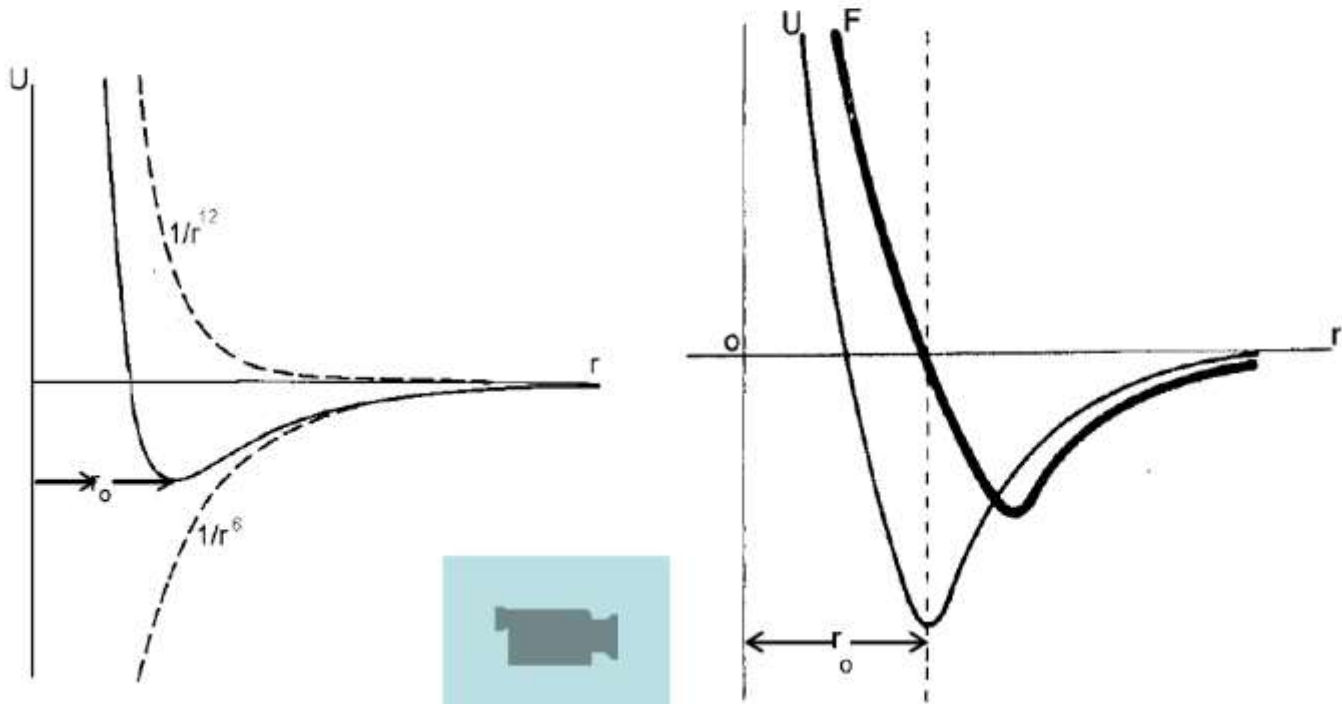
Ενέργεια διαμοριακών αλληλεπιδράσεων Lennard - Jones 6-12

Η αναλυτική μορφή της δυνάμεως δίνεται από την:

$$F = -\frac{dU(r)}{dr} = -\frac{An}{r^{n+1}} + \frac{Bm}{r^{m+1}}$$

Τα μόρια ισορροπούν σε απόσταση r_0 , στην οποία είναι ίσες οι απόλυτες τιμές των δύο δυνάμεων και στο οποίο αντιστοιχεί και η ελάχιστη τιμή της δυναμικής ενέργειας U_0 .

Δυναμικό Lennard-Jones 6-12



Ενέργεια διαμοριακών αλληλεπιδράσεων

Υπάρχουν, επομένως, δύο ανταγωνιστικές δυνάμεις που επιδρούν στο σύστημα των δυο μορίων. η ελκτική, που οφείλεται στην παρουσία των ηλεκτρικών διπόλων, και η απωστική, λόγω της επικάλυψης των ηλεκτρονικών νεφών των μορίων. Η συνολική δυναμική ενέργεια υπολογίζεται τελικώς ως το άθροισμα των δύο αυτών δυναμικών ενεργειών, για την οποία έχει προταθεί η εξής αναλυτική μορφή:

$$U(r) = \frac{A}{r^n} - \frac{B}{r^m}$$

όπου A και B σταθερές που εξαρτώνται από το είδος των μορίων. Τα m και n είναι ακέραιοι. Το m είναι 6 (ελκτικός όρος) ενώ το n παίρνει τιμές μεταξύ 9 και 12 (απωστικός όρος). Στην περίπτωση απλών μορίων το n παίρνει την τιμή 12 και η δυναμική ενέργεια ονομάζεται τότε **δυναμικό των Lenard-Jones 6-12**.

Ενέργεια διαμοριακών αλληλεπιδράσεων

- Επίσης η δυναμική ενέργεια $U(r)$ των διαμοριακών δεσμών είναι αντιστρόφως ανάλογη της αποστάσεως μεταξύ των διπόλων r υψωμένη κατά περίπτωση σε κάποια δύναμη. Αυτό σημαίνει ότι όταν η απόσταση r μεταξύ δύο μορίων μεγαλώνει, η αντίστοιχη δυναμική ενέργεια τείνει ασυμπτωτικά προς το 0.
- Λόγω των διαμοριακών δυνάμεων τα μόρια τείνουν να πλησιάσουν. Αλλά η μεταξύ τους απόσταση δεν μπορεί να μικρύνει πέρα από κάποιο όριο, γιατί το ηλεκτρονικό νέφος του ενός μορίου επικαλύπτεται από το αντίστοιχο του άλλου και εμφανίζεται ισχυρή άπωση. Τότε η αντίστοιχη δυναμική ενέργεια είναι θετική και τείνει προς το άπειρο όταν η απόσταση r μικραίνει και τείνει να μηδενισθεί.