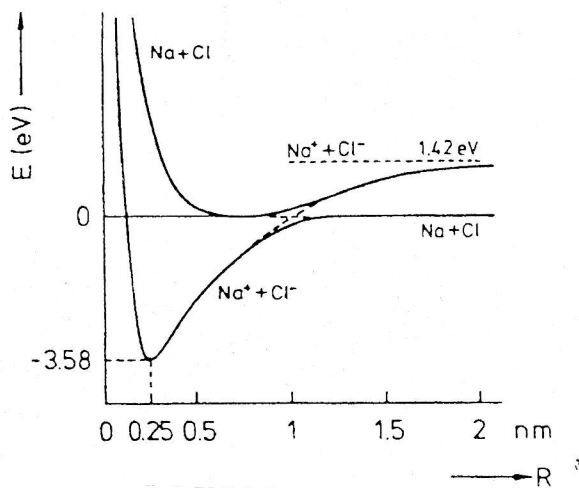
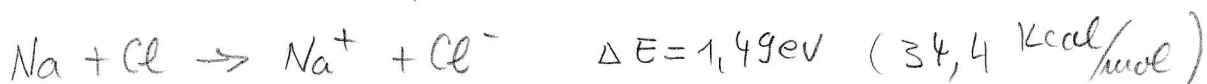
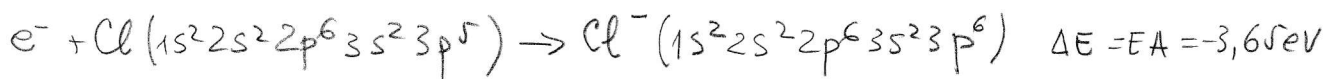
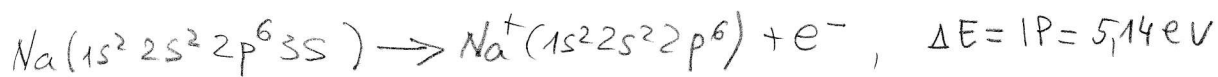


## Jonska veza

Potencijali jonizacije alkalnih metala su mali, dok je elektronski afinitet halogenih elementa relativno veliki. Dovolje, lako je formirati jone  $\text{Li}^+$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Rb}^+$ ,  $\text{Cs}^+$  kao i jone  $\text{F}^-$ ,  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{Br}^-$ ,  $\text{I}^-$ . Kada se približe, ova dva jona se jako privlače i vezuju jonskom vezom.

Pr.



Krive potencijalne energije za  $\text{NaCl}$  i  $\text{Na}^+\text{Cl}^-$  u funkciji rastojanja, u gasnoj fazi.

Na međuatomskom rastojanju od 1,2 nm, stanje u kome jedan elektron sa natrijuma može da pređe na atom hlora postaje energetski favorizovano i pri tom se putem razmene naelektrisanja (charge transfer) formira sistem  $\text{Na}^+ \text{Cl}^-$ .

Pamotetno rastojanje se postiže na 0,25 nm što odgovara i veličini molekula u gasnoj fazi.

Grubo govoreći postoje četiri vrste hemijskih sila koje vezuju atome u molekule

1. Jonska veza (elektrokovalentna ili heteropolarna veza)

2. Kovalentna veza (homeopolarna)

3. Van der Waalsova veza

4. Metalna veza

**Jonska veza** (elektrokovalentna ili **heteropolarna veza**) nastaje reakcijom izrazitih metala koji u valentnom nivou imaju mali broj elektrona (Ia i IIa grupa) i nemetala koji u valentnom nivou imaju veliki broj elektrona (VIIa grupa) periodnog sistema elemenata. Atomi metala otpuštaju elektrone koje primaju atomi nemetala. Broj primljenih elektrona jednak je broju otpuštenih elektrona. Ovaj proces otpuštanja i primanja elektrona naziva se oksido-redukcija.

Primer: Natrijum Na  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$  je izrazit metal, a hlor Cl  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$  izrazit nemetal. Atom natrijuma u valentnom nivou sadrži jedan, a hlor sedam elektrona. Prilikom sudara atoma natrijuma i hlora, hlor privlači i prima valentni elektron natrijuma kako bi postigao oktet elektrona. Stabilan oktet elektrona natrijum postiže otpuštanjem jednog elektrona, jer u L sloju ima osam elektrona. Potpunim prelaskom elektrona sa atoma natrijuma (metal) na atom hlora (nemetal) dobijaju se naelektrisane čestice - joni. Atom natrijuma ostaje pozitivno naelektrisan, a atom hlora negativno naelektrisan jon. Između nastalih jona deluju elektrostatičke sile privlačenja. Ostvarena veza između atoma natrijuma i hlora, odnosno između izrazitog metala i izrazitog nemetala naziva se jonska veza. Joni natrijuma i hlora su u prostoru pravilno raspoređeni

Kod natrijum-hlorida, atom natrijuma daje svoj 3s elektron atomu hlora, popunjavajući prazninu u 3p nivou (podljusci) hlora. Odvajanje 3s elektrona od neutralnog atoma natrijuma zahteva 5,138 eV energije; ovo je poznato kao *energija jonizacije* ili *jonizacioni potencijal natrijuma*. Neutralni atom hlora može da privuče jedan elektron u prazninu u 3p nivou, time se delimično pridružio ostalim elektronima i tako je privučen ka jezgru. Ovakvo stanje ima 3,613 eV manje energije nego neutralni atom hlora i jedan slobodan elektron; 3,613 eV je veličina afiniteta hlora prema elektronu. Prema tome stvaranje razdvojenih  $Na^+$  i  $Cl^-$  zahteva dodatan unos od  $5,138 \text{ eV} - 3,613 \text{ eV} = 1,525 \text{ eV}$ . Kad se dva suprotno naelektrisana jona približe međusobnom interakcijom, veličina njihove negativne potencijalne energije je određena time koliko se oni približe jedan drugom. Ovo je ipak, ograničeno principom isključenja, koji zabranjuje široko preklapanje elektronskih omotača dva jona. Kako se rastojanje smanjuje, princip isključenja remeti elektronske omotače, pa joni više ne deluju kao tačkasta naelektrisanja i delovanje postaje odbojno.

Onaj atom, koji daje elektron, nazivamo elektron-donor (lat. donare = darovati), a onaj atom, koji prima elektron, nazivamo elektron-akceptor (lat. acceptare = primati). Prema tome, u navedenom je primeru natrijev atom elektron-donor, a hlorov elektron-akceptor.

Veza, dakle, između natrijeva i klorova atoma nastala je tako, da je elektron iz elektronske ljuske jednog atoma preskočio u elektronsku ljusku drugog atoma i time su nastali suprotno nabijeni ioni koji se međusobno privlače elektrostatskim privlačnim silama. Zbog toga se takva kemijska veza, koja nastaje izmjenom elektrona među vezanim atomima, naziva ionska veza ili heteropolarna veza (grčki heteros = drugi). Broj naboja nastalih iona određuje njihovu valenciju, koju u tom slučaju nazivamo ionskom valencijom ili elektrovalencijom.

Jonske veze su interakcije između naelektrisanja koja su gotovo sferno-simetrična; stoga one nisu mnogo direkcione. Mogu da uključuju i više atoma elektrona po atomu. Alkalni elementi formiraju jonske veze u kojima atom gubi dva elektrona; primer je  $Mg^{2+}(Cl)^-$ . Gubitak više od dva elektrona usled formiranja jonske veze je poprilično redak; u stvari, u tom slučaju se češće formira kovalentna veza.

U nekim drugim procesima atom ne predaje elektrone drugom atomu, već svaki od njih daje po jedan ili više elektrona i stvore jedan ili više zajedničkih elektronskih parova. Ova veza naziva se atomska ili kovalentna veza, osim toga koristi se i naziv veza elektronskog para i homeopolarna veza (grčki: homois = jednak), da se pokaže razlika od heteropolarne veze.

**Kovalentna veza (homeopolarna)** se obrazuje između atoma nemetala, stvaranjem zajedničkih elektronskih parova.<sup>[1][2]</sup> Kovalentna veza može biti polarna, nepolarna i koordinantna (u zavisnosti od toga atomi kojih hemijskih elemenata stupaju u vezu).<sup>[3]</sup>

- *Nepolarna kovalentna veza* podrazumeva da se elektronski parovi jednako privlače jezgru atoma u molekulu ( $O_2, N_2, CH_4, \dots$ )
- *Polarna kovalentna veza* podrazumeva da elektronski par privlači više jedno jezgro atoma od drugog. ( $HCl, HF, HBr, \dots$ )
- *Koordinantna veza* podrazumeva da elektronski par daje samo jedan atom (donor), drugi atom se naziva akceptor ( $NO, SO_2, SO_3, \dots$ )

Kovalentna veza je svojstvena po ujednačenijem učešću dva atoma nego kod jonske veze. Najprostija kovalentna veza je kod atoma vodonika, sistema sa dva protona i dva elektrona. Kako pojedinačni atomi prilaze jedan drugom, talasne funkcije elektrona postaju deformisane i koncentrisane u regionu između dva protona. Ukupno privlačenje elektrona svakom protonu je jače od odbijanja dva protona ili dva elektrona. Privlačna sila je dobijena od para elektrona, po jednog iz svakog atoma, sa naelektrisanjem koje je koncentrisano u regionu između dva atoma. Energija kovalentne veze u molekulu vodonika  $H_2$  je  $-4.48 \text{ eV}$ .<sup>[4]</sup>

Princip isključenja dozvoljava da se dva elektrona nalaze u istom delu prostora (tj. da budu u istom prostornom kvantnom stanju) samo kad imaju suprotne spinove. Kada su spinovi paralelni, princip isključenja ne dozvoljava molekularno stanje koje bi bilo najpovoljnije iz aspekata energije (sa oba elektrona u regionu između atoma). Suprotni

### Dipolni moment i polarizacija

Za slučaj NaCl molekole jone tretiramo kao tačkaste naelektrisane, Na naelektrisana +q na rastojanju  $R_e$  od Cl sa -q, vektor električnog dipol. momenta je usmeren od - ka + a intenzitet mu je:

$$P_{el} = q R_e$$

Jedinica za el. dip. mom. je Cm, a često se iz istorijskih razloga koristi Debye D:  $1D = 3,336 \cdot 10^{-30} \text{ Cm}$  [Cm  $\equiv$  Asm]

Dva el. naelektrisana na rastojanju od 1Å imaju el. dip. m. 4,8D.

Ovo je red veličine molekulskih el. dipolnih momenta.

Molekuli sa konačnim el. dip. mom. nazivaju se polarni pr. HCl; NaCl.

Simetrični molekuli, kao što su  $H_2, O_2, N_2$  su nepolarni tj. nemaju permanentni el. dip. m. Međutim, oni mogu imati indukovani el. dip. moment u spoljašnjoj električnoj polju.

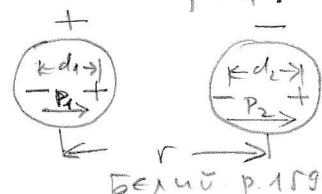
El. dip. moment za NaCl molekul iznosi:

$$P_{el} = 2R_e = 11,34D$$

što je za 30% više od eksp. određenoj vrednosti od 9,0D.

Treba uvažiti činjenicu da je raspored naelektrisane perturbovan. Oba elektronska oblaka su deformisana u odnosu na slučaj izolovanih atoma. Međutim kada su blizu jon hlora je više deformisan nego jon natrijuma, može se reći da je  $Cl^-$  polarizovan od strane  $Na^+$  (jer je oblak ovog drugog manji i stoga jače vezan - stabilniji). Zbog toga, dakle, indukovani el. dip. moment, koji ima suprotan smer od neperturbovanog el. dipolnog momenta para  $Na^+ i Cl^-$  jona. Zato je ukupni dip. mom. umanjen.

Energija interakcije dipola je  $V_{P_1 P_2} = -\frac{P_1 P_2}{2\pi\epsilon_0 r^3}$



## Van der Waalsovo privlačenje (Londonova disperziorna sila) (Van der Waals)

Ova veza se odnosi na interakciju dva neutralna atoma sa zadržanim gibanjem, npr dva He atoma.

Pazljiva merenja odnosa pritiska - zapremina - temperatura za gas He pokazuju da postoji slaba privlačna komponenta interakcije među atomima. Otkriveno da se He otečnjava na 4,2K pokazuje da postoje privlačne sile među atomima, ali da su slabe, to su Van der V. sile (London disp. sile)

- Ove sile se pojavljuju kao razlog: prelaza gasovitog stanja u tečno pri zblizavanju molekula, stabilnosti molekularnih kristala
- V.d.V. sile su značajno slabije od sila hemijske veza.
- Za razliku od hemijskih sila Van der Waalsove sile se javljaju kao aditivne u mnogim slučajevima i ne poseduju osobinu zasícenja [Лабтєн, с. 617]

Postojanje V.d.V. sila među atomima i molekulama prvo se objašnjavao čisto elektrostatičkim interakcijama, uslovljenim asimetričnom raspodelom <sup>poz.</sup> elektronskih jezgara i neg.  $e^-$  tj. postojanjem dipolnih ili kvadrupolnih momenata. Priroda međumolekularnih sila povezana je sa polarizabilnošću molekula. Molekul koji poseduje dipolni moment privlači drugi polarizovani molekul elektrostatičkim silama. Osim toga, molekul sa postojanim dipolnim momentom indukuje u nepolarizovanom molekulu dip. moment, pa će se opet javiti sila privlačenja između postojanog i indukovano dipola.

V.d.V. sile interakcije postoje takođe između nepolarizovanih molekula i atoma inertnih gasova. Pri tome te sile interakcije su u potpunosti uporedive sa silama polarizovanih molekula. Oscilirajući dipoli molekula izazivaju disperziju svetlosti, što se Londonove sile nazivaju dispersione.



Neica su pozitivna nael. fiksirana u ravni položaj.  
 š. j. za dva oscilatora:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_2^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0$$

m. reducirana masa svakog oscilatora?

$$U = V_x + V_e$$

$$V_x = \frac{1}{2} k x_1^2 + \frac{1}{2} k x_2^2$$

$$V_e = e^2 \left( \frac{1}{R} + \frac{1}{R+x_2-x_1} - \frac{1}{R-x_1} - \frac{1}{R+x_2} \right) \text{ za dati raspored nael. kao na slici.}$$

Ukoliko je  $x_2 - x_1 \ll R$

$$V_e \approx e^2 \left[ \frac{2}{R} - \frac{2R}{(R-x_1)(R+x_2)} \right] \approx - \frac{2x_1 x_2 e^2}{R(R-x_1)(R+x_2)}$$

ako uzamemo da je  $R \gg x_1, R \gg x_2$  imamo:

$$V_e = - \frac{2x_1 x_2 e^2}{R^3}$$

$$U = \frac{1}{2} k (x_1^2 + x_2^2) - \frac{2x_1 x_2 e^2}{R^3}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_2^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{1}{2} k x_1^2 - \frac{1}{2} k x_2^2 + \frac{2x_1 x_2 e^2}{R^3} \right) \psi = 0$$

Kada nebi bilo interakcije (Kulomove) svaki bi oscilator  
 sopstvenom frekvencijom  $\gamma_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$

Smeena:  $z_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + x_2) ; z_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 - x_2)$

$x_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(z_1 + z_2) ; x_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(z_1 - z_2)$

$x_1 x_2 = \frac{1}{2}(z_1^2 - z_2^2)$

$\Rightarrow \frac{\partial^2 \psi}{\partial z_1^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z_2^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{1}{2} k_1 z_1^2 - \frac{1}{2} k_2 z_2^2 \right) \psi = 0$

$k_1 = k - \frac{2e^2}{R^3} ; k_2 = k + \frac{2e^2}{R^3}$

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial z_1^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E_1 - \frac{1}{2} k_1 z_1^2 \right) \psi_1 &= 0 \\ \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial z_2^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E_2 - \frac{1}{2} k_2 z_2^2 \right) \psi_2 &= 0 \end{aligned} \right\}$$

$$\left. \begin{aligned} \psi &= \psi_1(z_1) \psi_2(z_2) \\ E &= E_1 + E_2 \end{aligned} \right\}$$

$$\left. \begin{aligned} E_1 &= \hbar \nu_1 \left( n_1 + \frac{1}{2} \right) \\ E_2 &= \hbar \nu_2 \left( n_2 + \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \right\} (n_1, n_2 = 0, 1, 2, 3, \dots)$$

$E = \left( n_1 + \frac{1}{2} \right) \hbar \nu_1 + \left( n_2 + \frac{1}{2} \right) \hbar \nu_2$

gde je  $\nu_1 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k_1}{m}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m} \left( 1 - \frac{2e^2}{kR^3} \right)} = \nu_0 \sqrt{1 - \frac{2e^2}{kR^3}}$

$\nu_2 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k_2}{m}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m} \left( 1 + \frac{2e^2}{kR^3} \right)} = \nu_0 \sqrt{1 + \frac{2e^2}{kR^3}}$

Kada odsustujuju Kul. interakcije (za velika rastojanja) oba oscilatora osciluju sa  $\nu_0$ , dok za mala rastojanja frekvencija se cepa na dve  $\nu_1$  i  $\nu_2$  pri tome  $\nu_1 < \nu_0 < \nu_2$ .

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_2^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{1}{2} k x_1^2 - \frac{1}{2} k x_2^2 + \frac{2x_1 x_2 e^2}{R^3} \right) \psi = 0$$

$$x_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (z_1 + z_2), \quad x_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (z_1 - z_2)$$

$$z_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (x_1 + x_2), \quad z_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (x_1 - x_2)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial z_1}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial z_1} + \frac{\partial z_2}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial z_2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\partial}{\partial z_1} + \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\partial}{\partial z_2}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1 \partial z_2} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_2^2}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_2} = \frac{\partial z_1}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial z_1} + \frac{\partial z_2}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial z_2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\partial}{\partial z_1} - \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\partial}{\partial z_2}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial z_1 \partial z_2} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_2^2}$$

$$x_1 x_2 = \frac{1}{2} (z_1^2 - z_2^2)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial z_1^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z_2^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E - \frac{1}{2} k \frac{1}{2} (z_1^2 + z_2^2 + z_2^2 + z_1^2) - \frac{1}{2} k \frac{1}{2} (z_1^2 - z_1^2 - z_2^2 + z_2^2) + \frac{(z_1^2 - z_2^2) e^2}{R^3} \right] \psi = 0$$

$$-11- \quad + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E - \frac{1}{2} \left( k - \frac{2e^2}{R^3} \right) z_1^2 - \frac{1}{2} \left( k + \frac{2e^2}{R^3} \right) z_2^2 \right] \psi = 0$$

$$-k x_e = eE \quad x_e = -\frac{eE}{k}$$

$$P_{ind} = -e x_e = \frac{e^2}{k} E$$

$$P_{ind} = \alpha E \quad \alpha = \frac{e^2}{k}$$

$$x = e^2 \sum \frac{u_i}{T \omega_i}$$

$$\Delta E = -\frac{3}{4} \ln^2 \frac{\alpha^2}{R^6}$$



Za  $n_1 = n_2 = 0$

$$E_0 = \frac{1}{2} h (\nu_1 + \nu_2) = \frac{1}{2} h \nu_0 \left( \sqrt{1 - \frac{2e^2}{kR^3}} + \sqrt{1 + \frac{2e^2}{kR^3}} \right)$$

Kada je  $\xi = \frac{2e^2}{kR^3}$  neveliko  $\sqrt{1 \pm \xi} = 1 \pm \frac{1}{2} \xi - \frac{1}{8} \xi^2 \pm \dots$

$$E_0 = h \nu_0 \left( 1 - \frac{1}{2} \frac{e^4}{k^2 R^6} \right)$$

multa energija neinteragujudili oscilatora je  $E_0' = h \nu_0$   
pa je energija veze dva oscilatora

$$\Delta E(R) = E_0 - E_0' = - \frac{1}{2} \frac{h \nu_0 e^4}{k^2 R^6}$$

To je energija interakcije oscilirajudili dipola u zavisnosti od rastojanja. Znac "-" ucazuje da se dipoli privlače.

Slicnim postupkom moze se pokazati da energija interakcije dva trodimenzionalna izotropna oscilatora je

$$\Delta E(R) = - \frac{3}{4} \frac{h \nu_0 e^4}{k^2 R^6} \quad (X)$$

u SI sistemu javljuje se svuda  $\frac{e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2}$  umesto  $e^4$

Jednostavan model za polarizabilnost

Polarizabilnost je uvedena kao empirijski parametar. Procena moze ovako:  $U = \frac{kx^2}{2}$ . Ako duz x-ose deluje ipofe E tada je sila  $F = -kx - eE$ , u ravnoteznom poloziqy su izjednačene sile tj.  $x_e = -eE/k$ . Indukovani elektricni moment je

$$P_{ind} = -ex_e = \frac{e^2}{k} E ; \text{ kako je } P_{ind} = \alpha E \text{ sledi}$$

$\alpha = \frac{e^2}{k}$ . Za slucaj da atom ima više  $e^-$ , pretpostavljajući da su nezavisni, ukupna polarizabilnost je  $\alpha = e^2 \sum_i \frac{n_i}{k_i}$   
 $n_i$  - broj  $e^-$  sa restitucionom konstantom  $k_i$ .

Koristeci  $\alpha = \frac{e^2}{k}$  j-na (X) postg-

$$\Delta E(R) = - \frac{3}{4} h \nu \frac{\alpha^2}{R^6} \quad (XX)$$

Remar: polarizabilnost se moze odrediti poviody indeksa prelamanja i formule:  $\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \frac{M}{\rho} = \frac{4}{3} \pi N_A \alpha$  Lorentz-ova jna  
 $M$  - molekularna težina  
 $\rho$  - gustina,  $N_A$  - Avogadro broj

Ovo je važan rezultat koji pokazuje da energija zavisi od  $\alpha^2$  i  $R^{-6}$ , kvadrat polarizabilnosti; sugeriše interpretaciju u smislu tzv. dva fluktuirajućeg dipola. Ako razmatramo He atom, koji ima nulti el. dip. moment zbog sferne simetrije naelektrisanja, može se reći da je u jednom trenutku vremena  $e^-$  lociran u određenoj tački u odnosu na jezgro i daje trenutčan električni dipolni moment. On indukuje moment u drugom atomu. Uсредnjavanjem po svim mogućim trenutčnim vrednostima daje totalnu energiju interakcije.

U realnoj aproksimaciji disperzione sile daju isti rezultat kao (XX) ali oscilatornu energiju  $h\nu_0$  treba zameniti potencijalom jonizacije (potencijalnom energijom jonizacije)  $h\nu_0 = I$ :

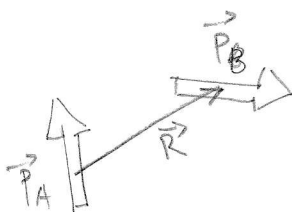
$$\Delta E_{dis}(R) = -\frac{3}{4} \frac{I \alpha^2}{R^6}$$

Iscusta pokazuju da tačnost ove j-me u mnogim slučajevima je sasvim zadovoljavajuća.

Za par nejednakih atoma A i B formula je:

$$\Delta E_{dis}(R) = -\frac{3}{2} \frac{I_A I_B}{I_A + I_B} \frac{\alpha_A \alpha_B}{R^6}$$

Ovu relaciju je prvi izneo London. Često se piše i u obliku  $\Delta E_{dis}(R) = -\frac{C_6}{R^6}$ ;  $C_6$  - tzv. van der Valsov koeficijent



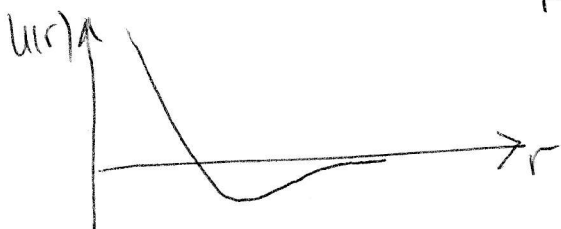
Pri približavanju dva atoma, njihove raspodele naelektrisanja se postepeno prekrivaju, a time se menja energija ovog sistema. Pri dovoljno malim rastojanjima energija prekrivanja je odbojna. Za atome sa popunjenim elektronskim ljuskama, energija prekrivanja može biti odbojna pri svim rastojanjima od interesa (recimo:  $0,5 \text{ \AA}$  do  $5 \text{ \AA}$ ) velikim delom zbog Paulijevog principa isključenja.

Ekperimentalni podaci za inertne gasove mogu biti dobro usaglašeni sa empirijskim odbojnim potencijalom oblika  $\frac{b}{R^{12}}$ , gde je  $b$  - pozitivna konstanta - kada se ovaj koristi zajedno sa spropomenjivim, privlačnim potencijalom  $-\frac{c}{R^6}$ .

Dakle, potencijalna energija interakcije između dva inertna atoma je

$$U_{ij}(r) = -\frac{c}{r_{ij}^6} + \frac{b}{r_{ij}^{12}}, \quad c, b > 0 \quad (**)$$

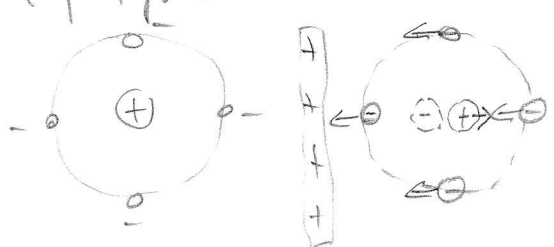
Potencijal odbijanja kao stepena f-ja rastojanja je rezultat prekrivanja elektronskih oblaka, a  $n=12$ , nema nekog fizikog osnova, ali se pokazao kao prista i dobra aproksimacija.



Potencijal (\*\*\*) je pravo kao Lennard-Jones-ov potencijal

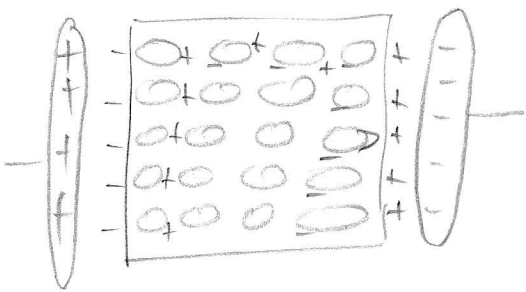
# Polarizacija dielektrika

U homogenu el. polju unesemo dielektrik (recimo staklo). Electrostatičke sile teže da razdvoje + i - naelektrisanje u atomima. Simbolični atom predstavimo kao + jezgro u centru sfernog elektronskog omotača.



Dejstvo stvarnog el. austaća biće kao da je celokupno naelektrisanje skraćeno u centru sfere gde se nalazi i poz. nael.

U el. polju atom će se deformisati, i atom će predstavljati dipol. Osa dipola je u pravcu polja. Tako da svi atomi dielektrika biće kao dipoli orijentisani



U unutrašnjosti dielektrika će svaka dva kraja dipola biti međusobno kompenzovana jer sadrže iste količine suprot. nael. Samo će na površinama tela prema pločama kondenzatora, krajevni dipoli biti nekompenzovani. Ovo daje

efekat kao da su ove površine dielektrika naelektrisanu istom količinom suprotnih nael. pa je ceo komad polarisan

Polarizacija dielektrika može da se javi i pod dejstvom okolnosti. Molekuli većih tela su sami po sebi dipoli. Najve pri spajanju atoma u molekule, dispozicija pozitivnih i negativnih nael. ostaje takva da odgovara dipolu iako se to telo ne nalazi u spolj. polju. Izratan primer je voda (mol. vode ima el. dip. moment  $6,1 \cdot 10^{-30} \text{ Cm}$ ). Usled termičnog kretanja molekula, ose ovih dipola su kaotično raspoređeni u svim pravcima tako da je telo kao celina nema osobine dipola.

Polarizacija je srazmerna polju  $\vec{P} = \alpha \vec{E}$ ;  $\alpha$ -polarizabilnost. U neizotropnim sredinama  $\vec{P}$  nema orijentacije  $\vec{E}$  pa je  $\alpha$ -tenzor. Polarizabilnost  $\alpha$  može prikazati  $\alpha = \epsilon_0 \chi$  ( $\epsilon_0$ -dielektrična konst.)  $\chi$ -električna susceptibilnost dielektrika, pa je  $\vec{P} = \chi \epsilon_0 \vec{E}$ .

Neki identifikuju susceptibilnost sa polarizabilnošću, tako da različite definicije daju različite formule

Čak i inertni gasovi mogu da formiraju dimer-e (homo ili hetero), trimer-e i male klastere. Primer za homo-dimer je  $He_2$ ,  $Ar_2$ , a tipični hetero-dimer  $ArNe$ . Oni se obično nazivaju dimeri a ne dvoatomski molekuli jer su vezani by only London dispersive force, i vezivna energija je tipično 2 reda veličine manja od tipične kovalentne veze. Primer H-H vezivna energija u  $H_2$  je oko 100 kcal/mol, a Ar-Ar vezivna energija je manja od 1 kcal/mol.

$He_2$  is largest and most weakly bound diatomic system [Tidze et al PRL 406, 033201 (2011.), Grisenti et al PRL 85, 2294 (2000)]  
 Postojanje između atoma je exp. utvrđeno  $\sqrt{2} \text{ \AA}$  (misir da ide do 200) vezivna energija 95 neV.

Teorija predviđa postojanje i osnovno stanje  ${}^4He_3$  i jednostruko pobuđeno stanje  ${}^4He_3^*$  (the three-body helium van der Waals molecule).

Fritz Wolfgang London je prvi objasnio privlačenje između atoma inertni gasova

1 kcal = 4186 J  
 1 cal - kol. top. 1 kg u treba dovođi  
 1 gr dest. vode da se topi do 1°C