

Intramolekylära krafter och intermolekylära krafter

Samverkan inom och mellan
molekyler...

Chang, kapitel 8.3 - 8.5, 9.5, 10.2 och
11.2



A chemist look at the macroscopic world - things we can see, touch, and measure directly - and visualize the particles and events of the microscopic world that we cannot experience without modern technology and our imagination.

~Raymond Chang

<http://highered.mcgraw-hill.com/sites/0073656011/>



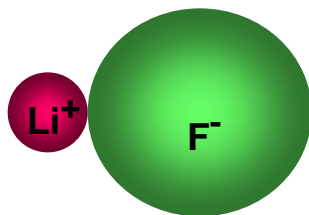
Intramolekylära krafter

- **Jonbindning**

- Li⁺ och F⁻ är jonbundna till varandra, det är de elektrostatiska krafterna som håller atomerna samman.

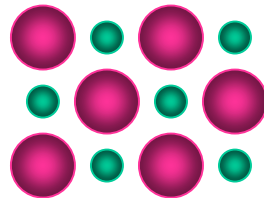
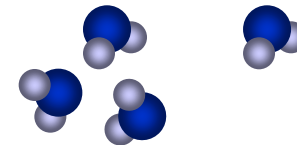
$$E = k \frac{Q_{Li^+} \times Q_{F^-}}{r}$$

Columbs lag



Jonbindning / Kovalent bindning

- I kovalenta molekyler verkar två krafter:
 - attraktion mellan atomerna i molekylen, som leder till bindning, så kallade **intramolekylära** krafter.
 - Attraktion mellan molekylerna, så kallade **intermolekylära** krafter.
- I salter verkar elektrostatiske krafter mellan jonerna. Alla joner hålls samman i nätverk.

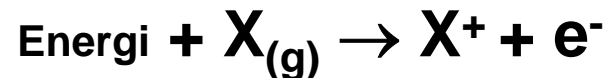


Joner

- Vilka atomer vill bli joner?

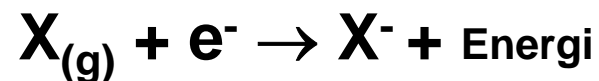
- Joniseringsenergi

- Om atomen endast har en valenselektron, är det relativt gynnsamt att ge bort denna, för att på så vis uppnå ädelgasstruktur. Energi krävs dock!



- Elektronaffinitet

- Om en valenselektron saknas för att det yttersta elektronskalet ska bli fullt, är det gynnsamt för atomen att plocka upp en elektron.



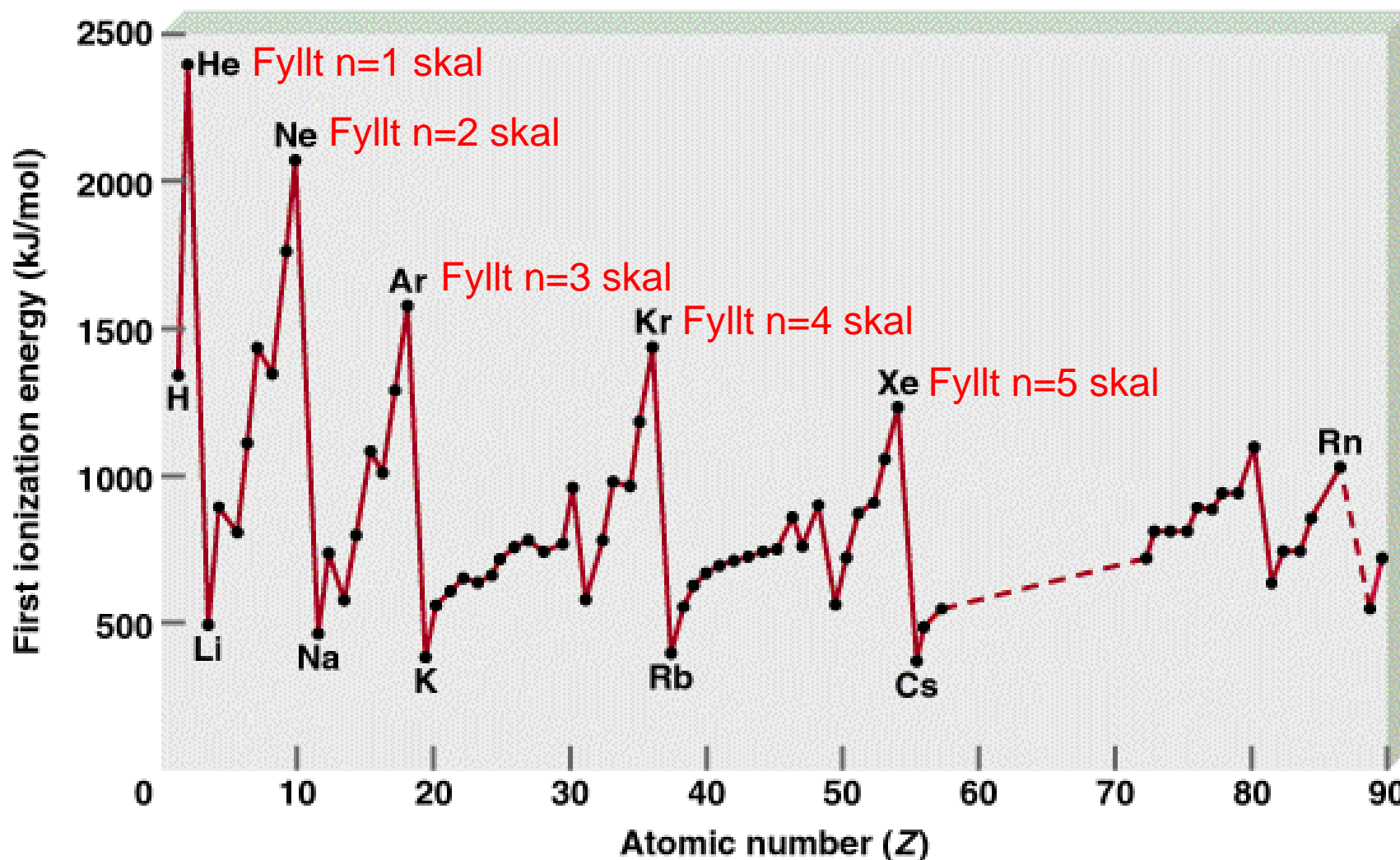
Det periodiska systemet

1 1A																			18 8A
1 H	2 2A																		2 He
3 Li	4 Be																		10 Ne
11 Na	12 Mg	3 3B	4 4B	5 5B	6 6B	7 7B	8 8B	9 8B	10 8B	11 1B	12 2B	13 3A	14 4A	15 5A	16 6A	17 7A		18 Ar	
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br		36 Kr	
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I		54 Xe	
55 Cs	56 Ba	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At		86 Rn	
87 Fr	88 Ra	89 Ac	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110	111	112	(113)	114	(115)	116	(117)		118	

58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr



Joniseringsenergi



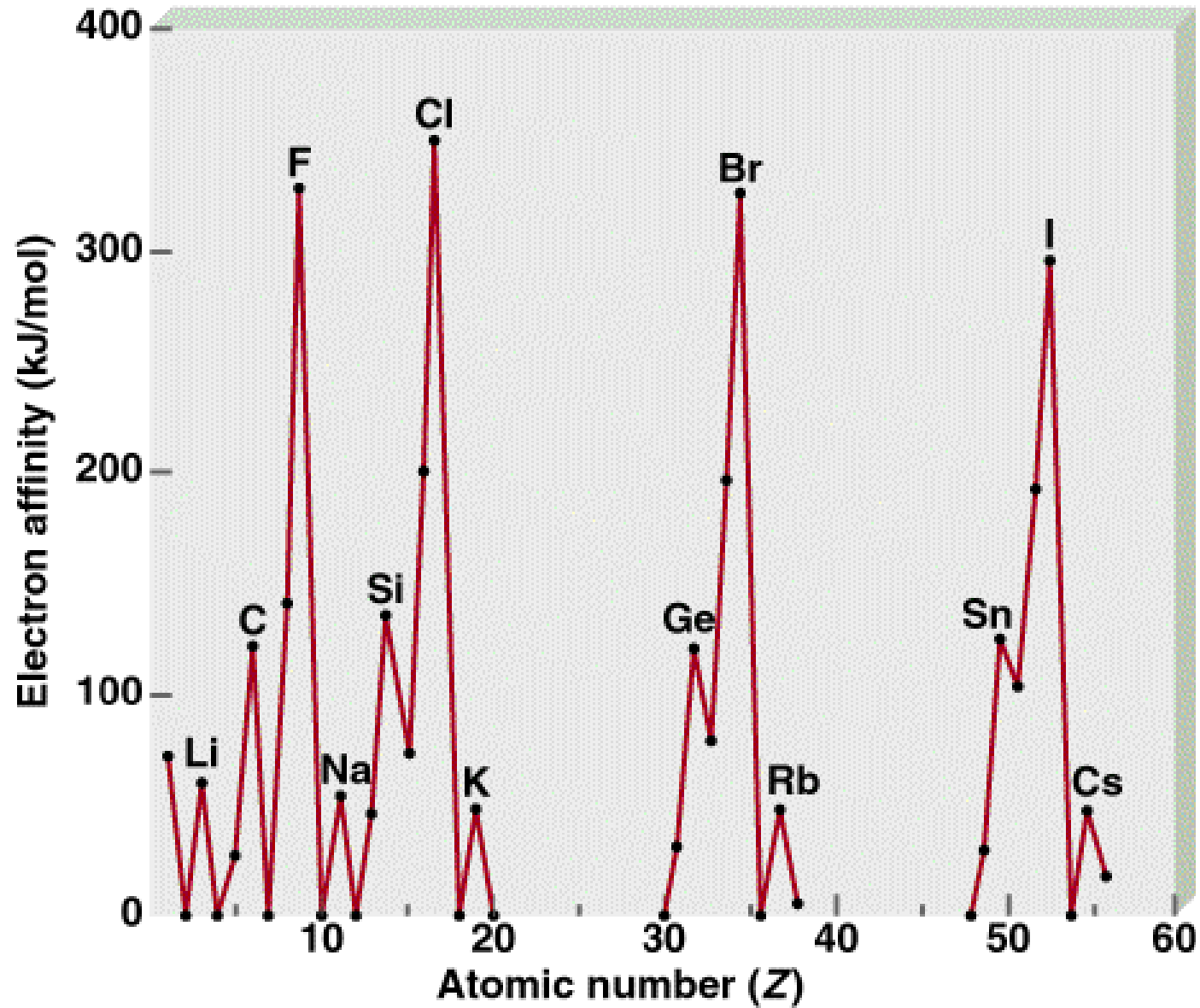
Det periodiska systemet

1 1A												18 8A					
1 H	2 2A											13 3A	14 4A	15 5A	16 6A	17 7A	2 He
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg	3 3B	4 4B	5 5B	6 6B	7 7B	8 8B		10	11 1B	12 2B	13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr	88 Ra	89 Ac	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110	111	112	(113)	114	(115)	116	(117)	118

58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr



Elektronaffinitet



Intramolekylära krafter

- Opolär kovalent bindning:



- Polär kovalent bindning:

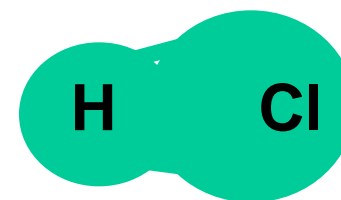
– Klor:

- Hög elektronaffinitet
- Hög joniseringsenergi
- Hög elektronegativitet



– Väte:

- Låg elektronaffinitet
- Måttlig joniseringsenergi
- Måttlig elektronegativitet



Intramolekylära krafter

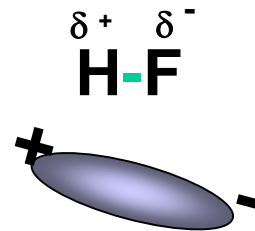
- I en **kovalent bindning** delas elektronerna av två atomer i en opolär eller polär bindning.
 - I en **opolär** bindning delas elektronerna lika mellan atomerna. Atomerna har samma elektronegativitet. Elektronerna ligger mitt i bindningen.
 - I en **polär** bindning har den ena atomen större elektronegativitet än den andra. Elektronerna i bindningen kommer att ligga förskjutna mot den atom som ”drar starkast”. Elektrondensiteten är störst kring atomen med störst elektronegativitet.



Intramolekylära krafter

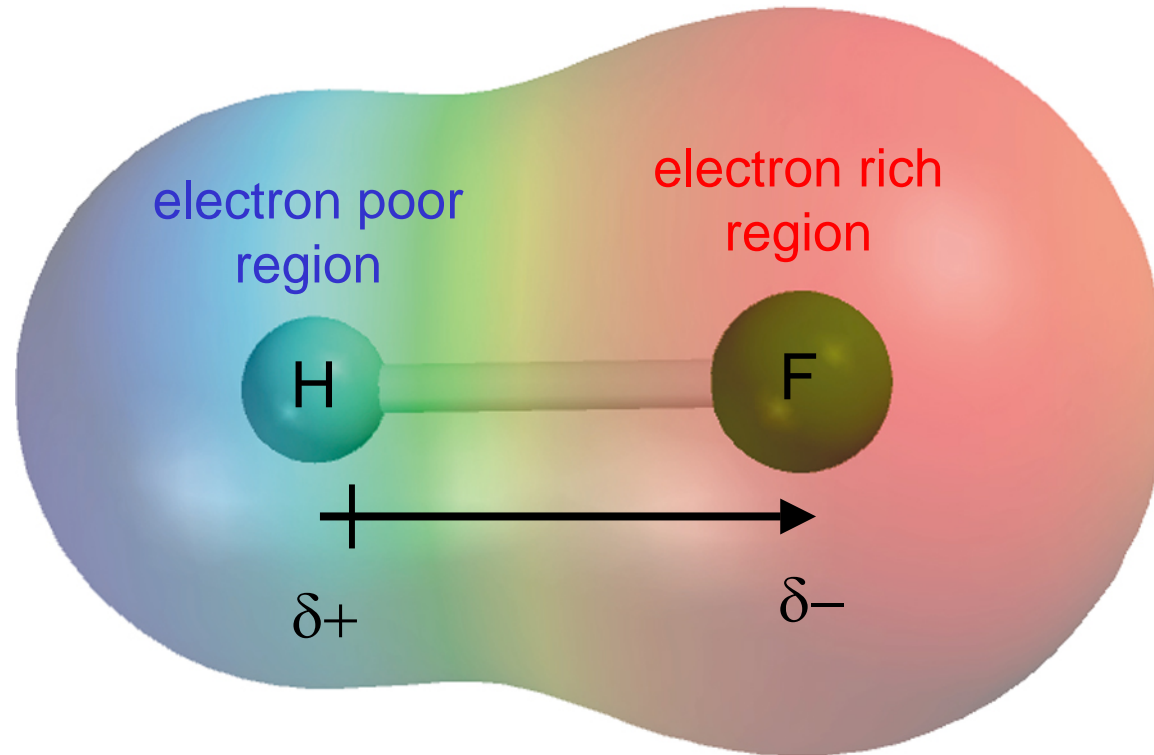
- **Dipolmoment**

- Polära molekyler sägs ha ett dipolmoment, det vill säga elektronerna i molekylen är förskjutna så att man utifrån kan se en partiellt positiv och en partiellt negativ ände (eller positiva och negativa områden).



Dipolmoment

13



$$\mu = Q \times r$$

Q är laddning (I en diatomig molekyl är $Q = \delta^+$ och δ^-)

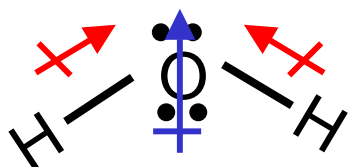
r är avståndet mellan laddningarna

$$1 \text{ D} = 3.36 \times 10^{-30} \text{ C m}$$

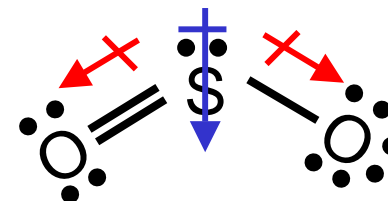




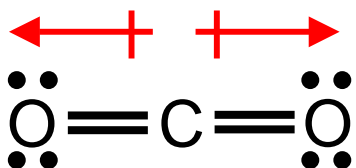
Vilka av följande molekyler har ett dipolmoment (H_2O , CO_2 , SO_2 , och CH_4)? ¹⁴



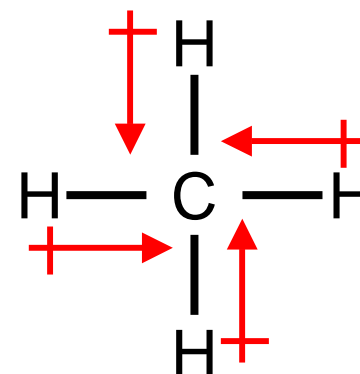
dipolmoment
polär molekyl



dipolmoment
polär molekyl



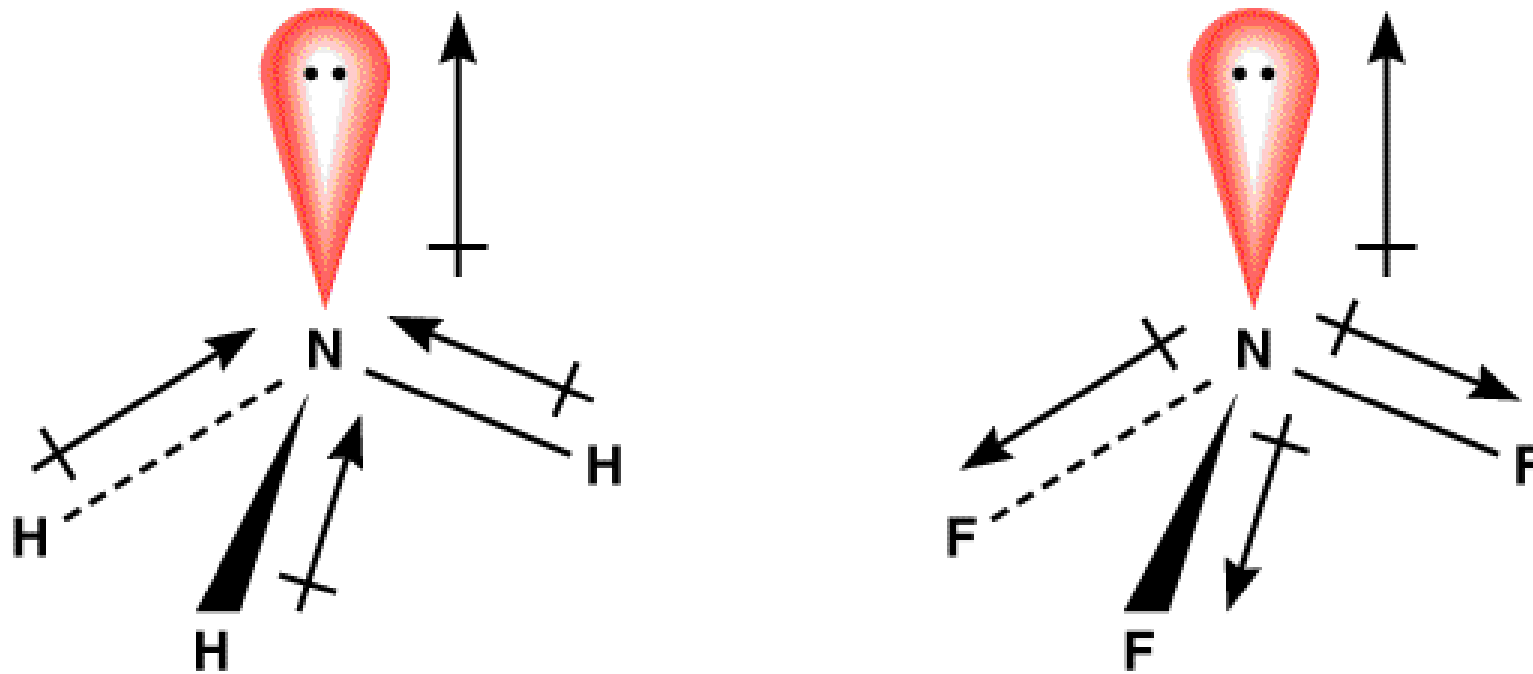
inget dipolmoment
ej polär molekyl



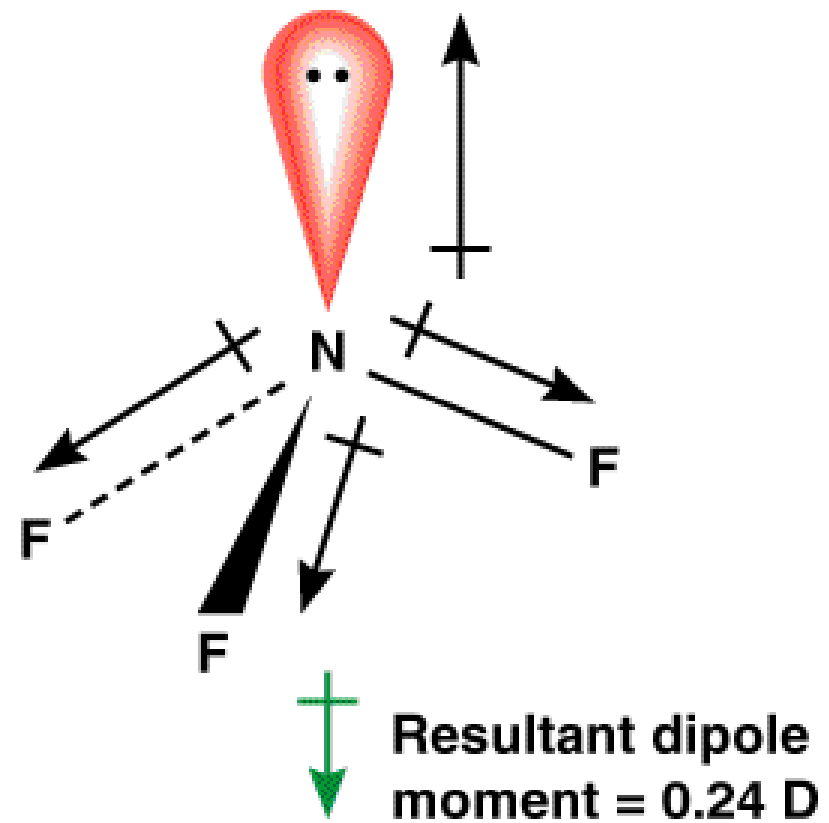
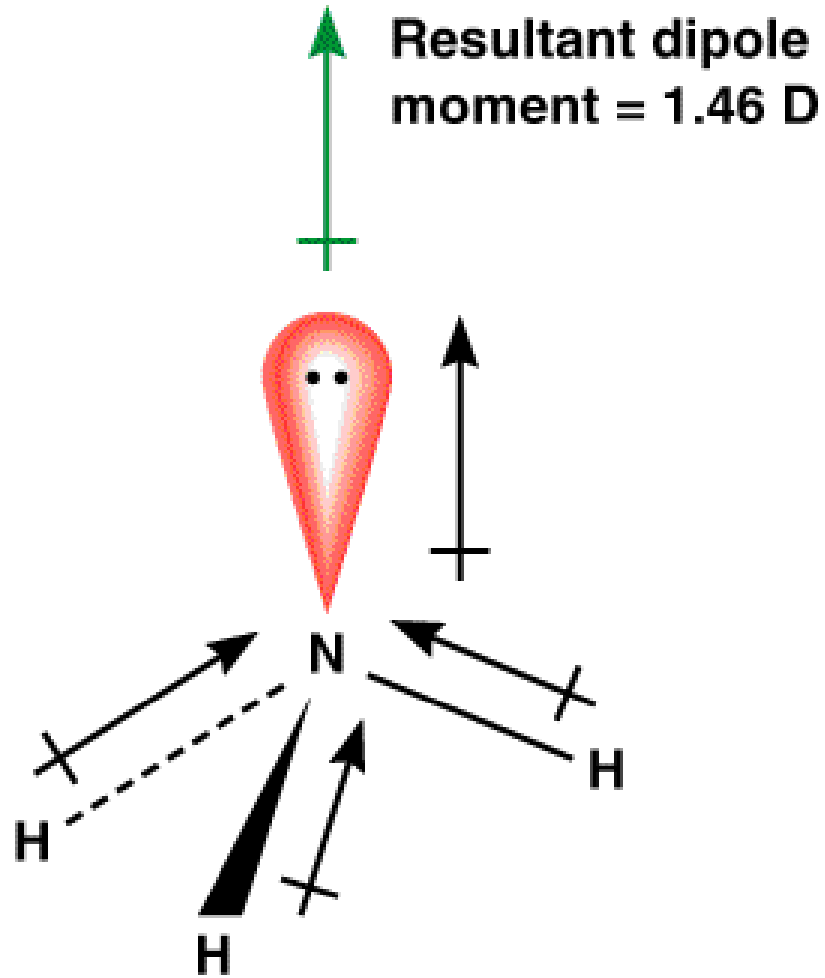
inget dipolmoment
ej polär molekyl



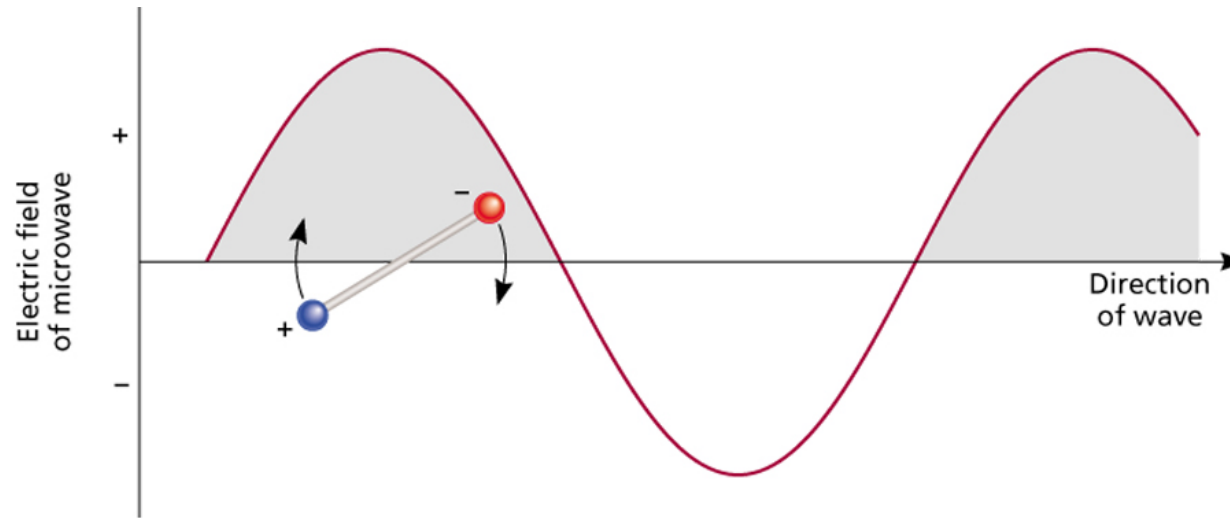
Dipolmoment



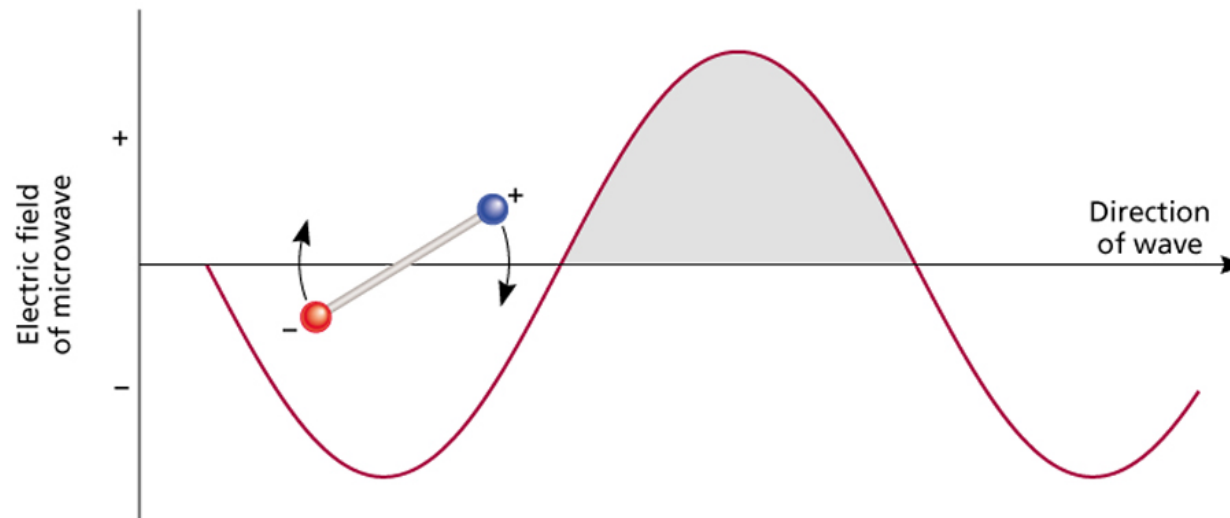
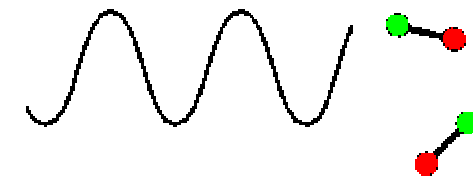
Dipolmoment



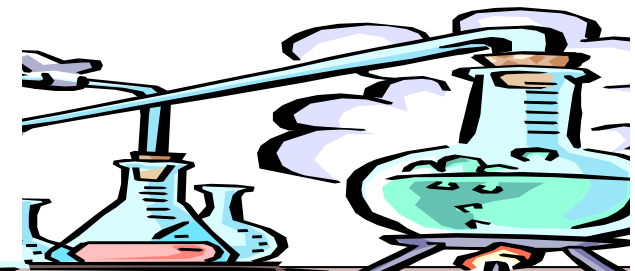
Dipolmoment och mikrovågor



(a)



(b)



Intermolekylära krafter

18

Intermolekylära krafter är attraktiva krafter mellan molekyler

Intramolekylära krafter håller atomerna samman i en molekyl

Intermolekylära vs Intramolekylära

- 41 kJ för att förångas 1 mol vatten (**inter**)
- 930 kJ för att bryta alla O-H bindningar i 1 mol vatten (**intra**)



Intermolekylära
krafter är i
allmänhet
svagare än
intramolekylära
krafter



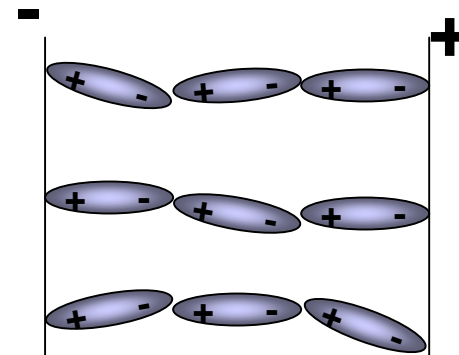
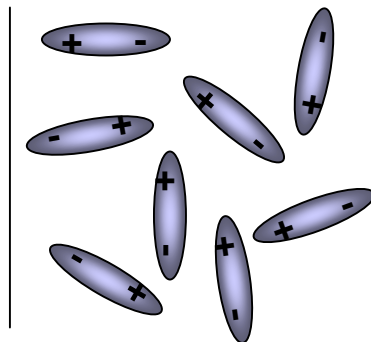
Intermolekylära krafter

- **van der Waals-krafter**
 - dipol - dipol
 - dipol - inducerad dipol
 - dispersionskrafter (Londonkrafter)
- **jon - dipol**
- **vätebindning** (specialfall av dipol - dipol)



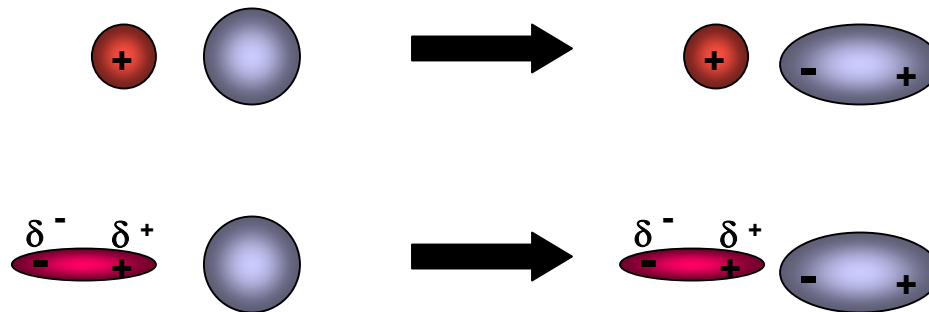
Intermolekylära krafter

- **dipol-dipol**
 - I ett fast ämne ordnas dipolerna som små magneter.



Intermolekylära krafter

- **dipol - inducerad dipol**
 - En jon eller en polär molekyl som placeras bredvid en opolär molekyl kan påverka denna. Elektronerna i den opolära molekylen kommer att skifta, för att temporärt skapa en dipol.



Intermolekylära krafter

- **dispersionskrafter (Londonkrafter)**
 - Momentana dipoler kan spontant uppstå i opolära molekyler. Den temporära dipolen inducerar en dipol i grannmolekylen, så att en attraktionskraft uppstår. Kraften är svag.
 - Hög polariserbarhet ger starka dispersionskrafter



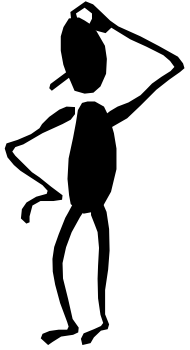
Intermolekylära krafter

- jon - dipol
 - Den intermolekylära kraften mellan en jon och en polär molekyl beror av laddningen och storleken hos jonen.



Starkare





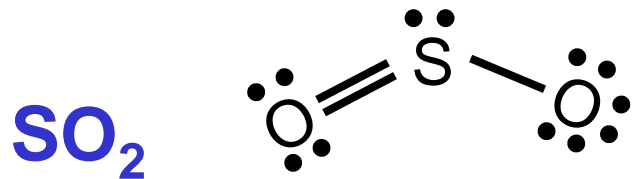
Vilka typer av intermolekylära krafter finns mellan dessa molekyler?

HBr

HBr är en polär molekyl: dipol-dipol krafter. Det finns även svaga dispersionskrafter mellan HBr molekyler.

CH₄

CH₄ är en icke-polär molekyl: dispersionskrafter.

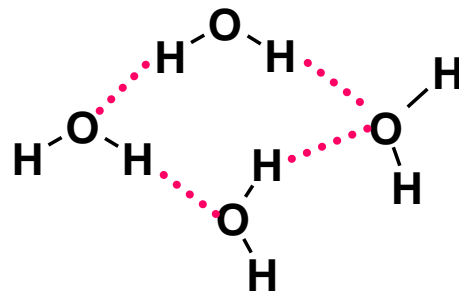


SO₂ är en polär molekyl: dipol-dipol krafter. Det finns även svaga dispersionskrafter mellan SO₂ molekyler.

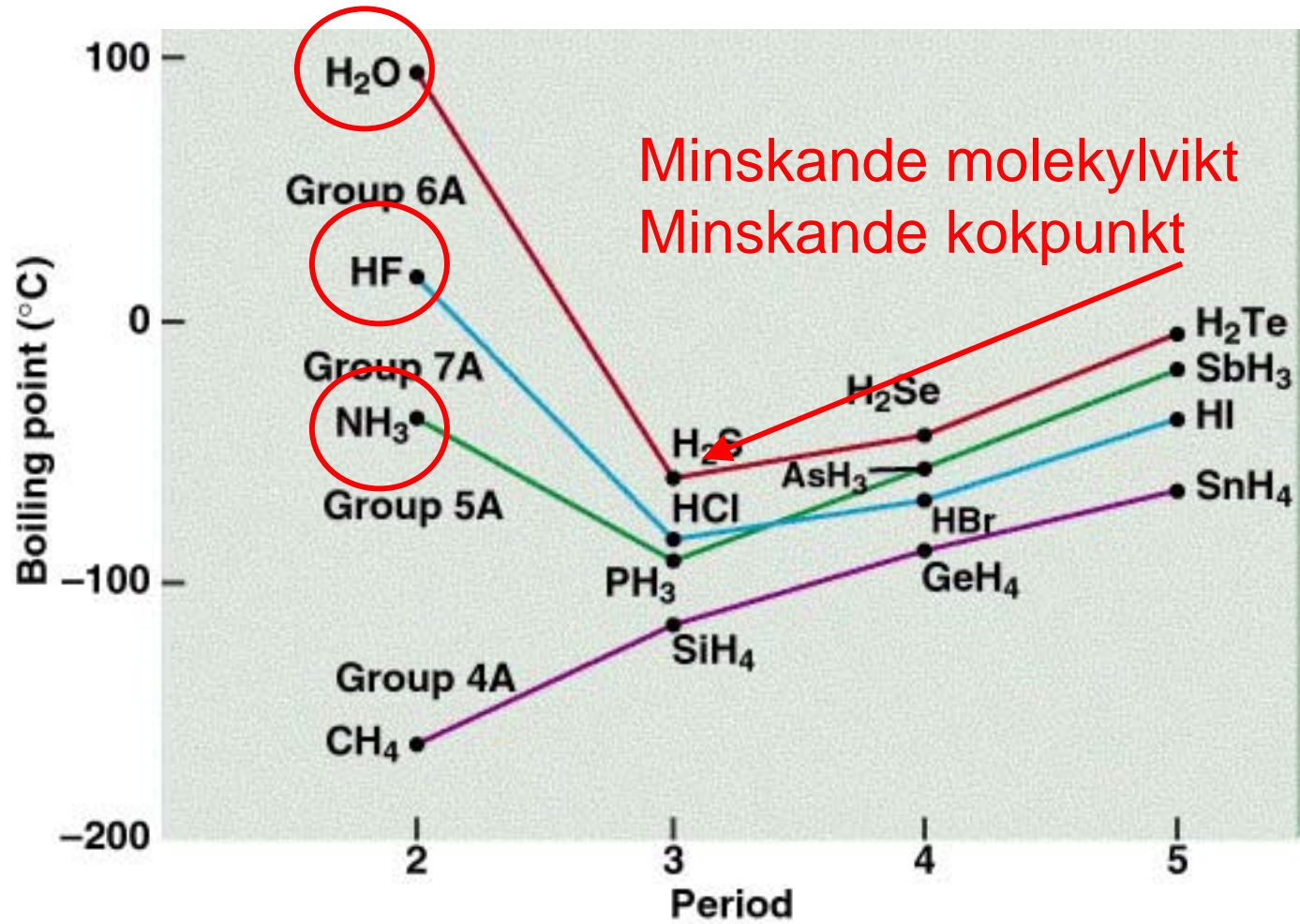


Intermolekylära krafter

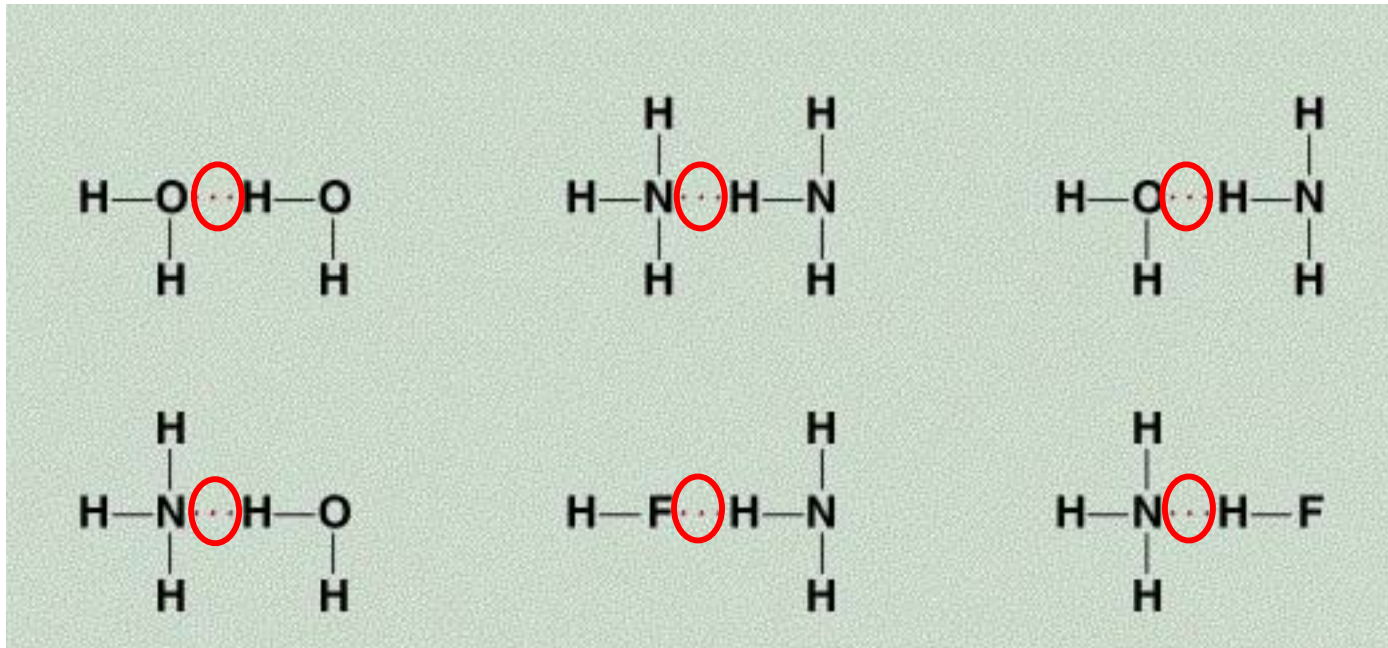
- **vätebindning**
 - Ett specialfall av dipol - dipolinteraktion. Uppkommer då väte interagerar med de elektronegativa atomerna O, N eller F.



Vätebindning

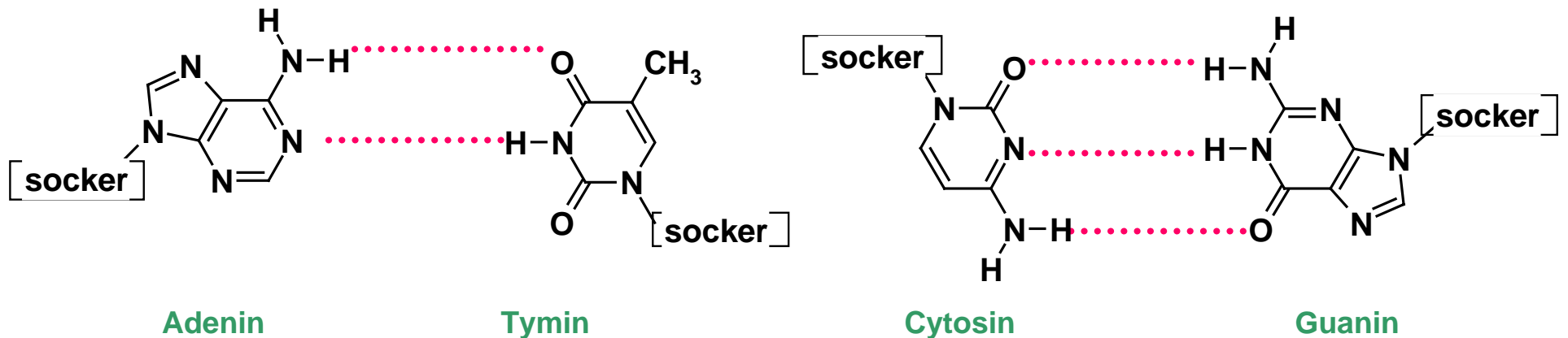


Vätebindning

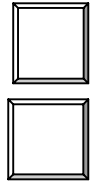


Intermolekylära krafter

- vätebindningar i DNA
 - Vätebindningarna mellan basparen svarar för DNA:s stabilitet och de leder också till att replikationen blir korrekt.



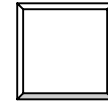
Makromolekyler



- **Det är de intermolekylära interaktionerna som ger de biologiska molekylerna deras flexibilitet och specificitet.**
 - vätebindningar
 - jonbindningar
 - van der Waals-interaktioner
 - hydrofoba interaktioner (opolära interaktioner)
 - repulsiva interaktioner



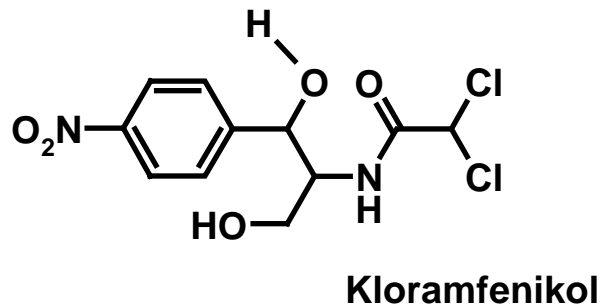
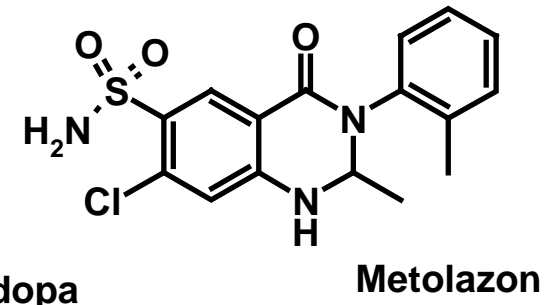
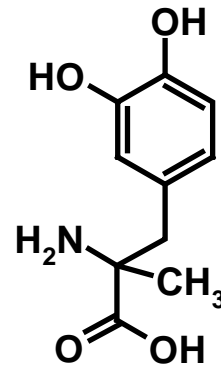
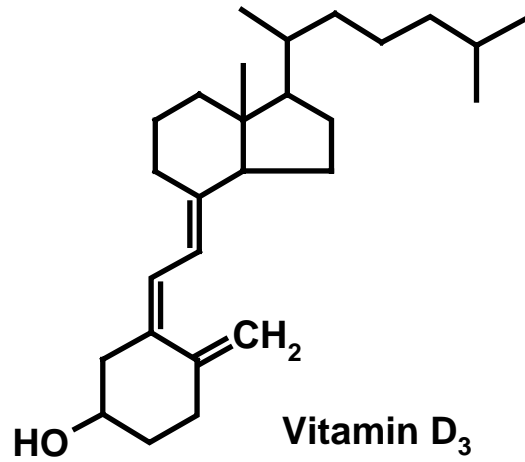
Makromolekyler



- Målet är att ett läkemedel ska passa in så bra som möjligt i den tänkta receptorn, som **hand i handske** eller **nyckeln i låset**.
- Läkemedlet ska ha gynnsamma intermolekylära interaktioner med receptorn. Läkemedlet designas för att bli **specifikt** och **aktivt**.



Funktionalitet



www.farmaci.uu.se~organisk



Funktionella grupper

De funktionella grupperna bestämmer molekylens egenskaper; t ex om molekylen är en syra, en neutral förening eller en bas.

Alkaner och cykloalkaner (C_xH_y) → Opolära och oreaktiva
saknar funktionella grupper



Funktionella grupper

33

Funktionell grupp

Struktur

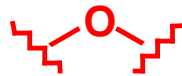
Klass

Hydroxylgrupp



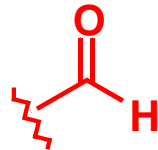
alkohol

Etergrupp



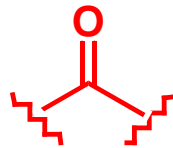
eter

Aldehydgrupp



aldehyd

Ketogrupp



keton



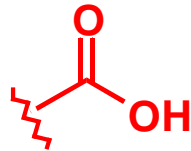
Funktionella grupper

Funktionell grupp

Struktur

Ämnesklass

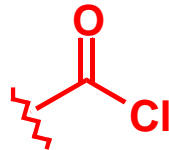
Karboxylsyregrupp



karboxylsyra

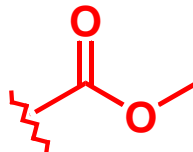
Sur!

Klorokarbonyl



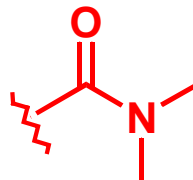
syraklorid

Alkoxikarbonyl



ester

Amidgrupp



amid



Funktionella grupper

Funktionell grupp **Struktur** **Klass**

Nitril-/cyanogrupp $\text{---C}\equiv\text{N}$ nitril

Aminogrupp ---NH_2 amin **Basisk!**

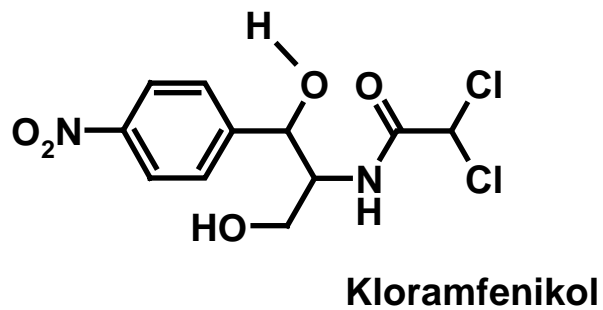
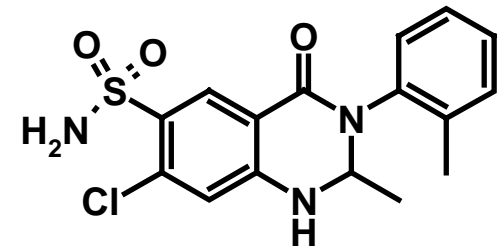
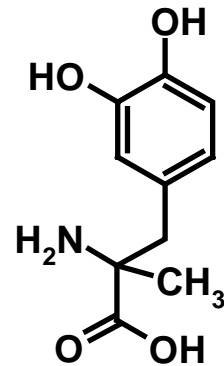
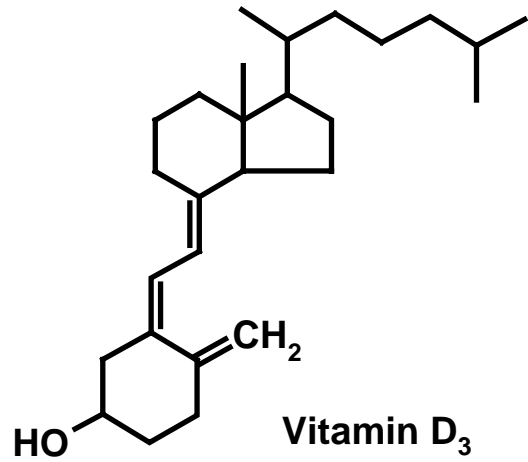
Merkapto/tiolgrupp ---SH merkaptan
el. tiol

Sulfidgrupp ---S--- sulfid
el. tioeter

Nitrogrupp ---NO_2 nitroförening



Funktionalitet



www.farmaci.uu.se~organisk



Löslighet

- Vilket lösningsmedel ska man välja?
 - NaCl
 - H_2O eller CCl_4 ?
 - Etanol
 - bensen eller vatten?



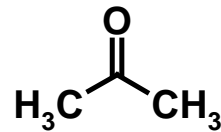
Löslighet

- **Lika löser lika:**
 - Ett polärt lösningsmedel löser en polär molekyl.
 - Ett opolärt lösningsmedel löser en opolär molekyl.

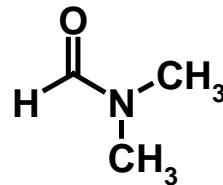


Löslighet

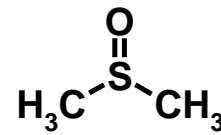
- Vissa lösningsmedel har förmågan att bilda vätebindningar, andra har det inte:
 - Metanol, etanol och vatten **kan** bilda vätebindningar, kallas **protiska** lösningsmedel.
 - Aceton, DMF, DMSO, hexan och bensen **kan inte** bilda vätebindningar, kallas **aprotiska** lösningsmedel.



Aceton



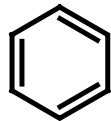
DMF, N,N-dimetylformamid



DMSO, Dimetylsulfoxid



Hexan



Bensen

