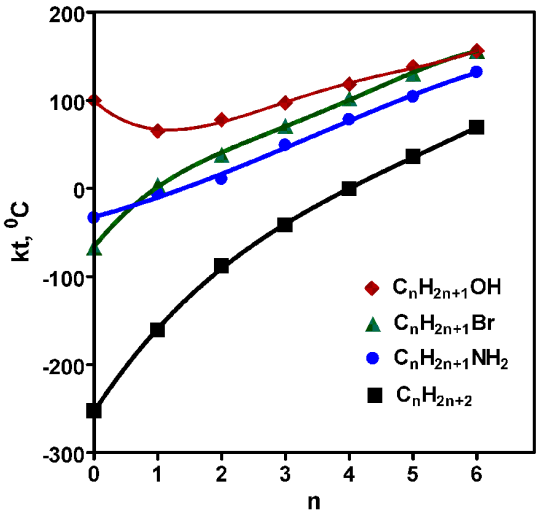
Keemistemperatuuri sõltuvus molekuli stuktuurist

Orgaaniliste ühendite keemistemperatuuri struktuurist sõltuvuse korral võib esile tuua kolm suundumust.

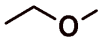
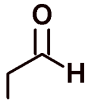
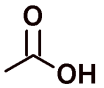
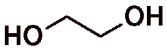
Esiteks, **sama ühendite klassi piires kasvab keemistemperatuur süsivesinikahela pikkuse suurenedes** Seda suundumust saab illustreerida graafikul, mille telgedeks on keemistemperatuur (kt^oC) ja süsinikahela pikkust tähistav süsiniku aatomite arv n. Andmed on toodud nelja ühendite rea jaoks: C_nH_{2n+2} (süsivesinikud), $C_nH_{2n+1}Br$ (1-bromoalkaanid), $C_nH_{2n+1}OH$ (alkoholid) ning $C_nH_{2n+1}NH_2$(aminoalkaanid).



See graafik näitab, et vee (H-OH) keemistemperatuur ei järgi üldist suundumust ning on oluliselt kõrgem, kui võiks oodata. Samasugune kõrvalekalle esineb ka ammoniaagi (H-NH_2) korral, ainult siin on selle kõrvalekalde suurus väike. Neid kõrvalekaldeid tingivad vesiniksidemed, mis seovad omavahel vee või ammoniaagi molekule. Vees on vesiniksidemetel eriti oluline osa, sest need tekitavad vee molekulidest kaootilise võrgustiku, mis meenutab jää struktuuri. See võrgustik selgitab vee ainulaadseid füüsikalisi omadusi ning määrab ainete lahustuvuse vees.

Teiseks, **funktsionaalsete rühmade olemasolu tugevdab vastastikmõjusid orgaanilise aine molekulide vahel.** Tugevamate vastastikmõjude korral on aine oleku muutuseks vajalik temperatuur kõrgem. Seda näeme ka graafikust, kus alkaane kirjeldav sõltuvus on allpool halogeeniühendeid, alkohole ja amiine kirjeldavaid sõltuvusi ning keemistemperatuuride erinevused on enam kui 100^oC. Osaliselt on see nähtus selgitatav sellega, et funktsionaalsed rühmad sisaldavad aatomeid, mille elektronegatiivsus erineb süsiniku elektronegatiivsusest. Selle tõttu on sidemed funktsionaalsetes rühmades polaarsed ja molekulis tekivad osalised laenguid. Osalaengud tekivad seepärast, et erineva elektronegatiivsusega aatomite vahelise sideme elektronpaar on nihutatud suurema elektronegatiivsusega aatomi poole. Nii on näiteks halogeeni ja süsiniku vaheline side polaarne, sest sideme elektronpaar on liikunud halogeeni suunas ja annab sellele aatomile negatiivse osalaengu. Süsiniku aatom saab seevastu positiivse osalaengu. Erinevates molekulides esinevad osalised laengud tugevdavad molekulide vahelist vastastikmõju ning see suurendab ka keemistemperatuuri. Lisaks elektrostaatilistele toimetele on võimalik ka molekulide vastastikuse toime tugevnemine vesiniksideme moodustumise tõttu. See mõju on väga tugev vee korral, mille keemistemperatuur on anomaalselt kõrge võrreldes teiste sarnaste ühenditega, näiteks H_2S ja NH_3.

Aineosakeste vastastiktoimete sõltuvust molekulide struktuurist iseloomustab järgmine tabel, kus on võrreldud sarnase molekulmassiga ühendite keemistemperatuure. See tabel iseloomustab molekulide vastastiktoimeid erinevatesse aineklassidesse kuuluvate ühendite korral ning kinnitab vesiniksidemete väga olulist osa keemistemperatuuri määramisel.

Ühendi struktuur	Molekulmass	Keemistemperatuur, ^{o}C
	**58**	**0**
	**60**	**11**
	**64**	**12**
	**60**	**32**
	**58**	**49**
	**58**	**56**
	**60**	**82**
	**60**	**97**
	**62**	**118**
	**62**	**198**

Kolmandaks on teada, et **süsinikahela hargnemine nõrgendab molekulide vastastikmõjusid.** See selgitab hargnenud süsinikahelaga ühendite madalamat keemistemperatuuri kui seda võrrelda sama süsiniku arvuga aga mittehargnenud ahelaga ühendite keemistemperatuuriga. Seetõttu on näiteks pentaani kt = 36^{o}C, 2-metüülbutaani kt= 28^{o}C ja 2,2-dimetüülpropaani kt= 9^{o}C, kuigi kõik need ühendid sisaldavad 5 süsiniku aatomit. Nende ühendite molekulimudelitest on ilmne, et süsinikahela hargnemine vähendab molekulide omavahelise kokkupuute pinda ja mõjutab seda, kui tihedasti saab neid molekule kokku pakkida. See põhjustab molekulide vastastikmõjude nõrgenemise. Samasugused seaduspärasused iseloomustavad ka kaksiksidet omavaid molekule, sest nende *cis* ja *trans* isomeeride vahelised vastastikmõjud on erinevad tänu molekulide kokkupuutepinna erinevusele.

Õppematerjalid on valminud Eesti Teadusagentuuri programm TeaMe raames ning rahastatud Euroopa Sotsiaalfondist. TeaMe on teadust ja tehnoloogiat populariseeriv programm, mille üheks eesmärgiks on uute loodus-, täppis- ja tehnikateaduste valdkonna õppematerjalide väljatöötamine üldhariduskoolile. Lisainfo: www.etag.ee/teame

Eesti Teadusagentuur
Estonian Research Council

TeaMe

Euroopa Liit
Euroopa Sotsiaalfond

Eesti tuleviku heaks

