
POLARITET OCH INTERAKTIONER

Denna övning bygger på att det kan finnas skillnader i elektronegativitet mellan atomer i en molekyl. Elektronegativiteten är ett mått på en atoms förmåga att dra åt sig elektroner från omgivande atomer.

Lärandemål:

- Att förstå hur begreppen elektronegativitet, partiell laddning och elektrontäthet (kallas *elektrondensitet* i simuleringen) hänger samman.
 - Att förstå hur bindningskaraktären hos bindningen i en diatomär molekyl (som består av två atomer) påverkas av dessa egenskaper.
 - Utveckla en förståelse för elektriska fält och hur molekyler pga. sin laddningsfördelning växelverkar med dessa.
 - Förstå att elektronegativitet och molekylers form (symmetri) avgör om de är dipoler, samt storlek och riktning på det s.k. *dipolmomentet* som i så fall uppkommer (kallas "molekyldipol" i simuleringen).
1. Gå in på: https://phet.colorado.edu/sims/html/molecule-polarity/latest/molecule-polarity_sv.html, och välj sedan fliken med samma namn som respektive övning nedan.

Fliken *Two atoms*

2. Ta några minuter och testa simuleringen (t.ex. ändra på reglage, flytta runt atomer, pröva de olika alternativ som finns under "Vy"). Det elektriska fältet ska sedan vara avstängt. Notera att molekylen sitter fast i bindningen mellan atomerna A och B, så att den endast kan rotera runt denna punkt och inte flyttas i sidled.

3. Justera värdena för atomernas elektronegativitet, och testa att kombinera olika värden.
 - När är bindningskaraktären som mest kovalent ("more covalent")? När är den mest av jonkaraktär ("more ionic")?
Vad beror detta på? (tänk på vad kovalent-, respektive jonbindning innebär)
4. Fyll i tabell 1 med olika värden på elektronegativitet, och motsvarande utslag på skalan "bindningskaraktär".
OBS: skalan för elektronegativitet i simuleringen sträcker sig från 0 till 1 (mittenstrecket visar värdet 0,5), så varje steg på skalan motsvarar en skillnad på 0,1 i elektronegativitet.
 - Finns det olika inställningar som ger samma bindningskaraktär?

Tabell 1:

Elektronegativitet för atom A, respektive atom B	Bindningskaraktär (<i>more covalent, more ionic</i> eller <i>mittemellan</i>)
<i>T.ex. A: 0,6. B: 0,3</i>	

5. Sätt på det elektriska fältet. Åt vilket håll (mot vilken pol i ett elektriskt fält) rör sig områden med hög elektrondensitet (elektrontäthet) i en molekyl?
 - Varför gör de det? Stäng nu av det elektriska fältet igen.
6. Vad påverkar storleken på partiella laddningar?
 - Med vilka inställningar i simuleringen försvinner de (eller blir så små att de inte syns)?

Fliken *Three atoms*

7. Ta några minuter och prova att arbeta med simuleringen. Notera att atom B sitter fast, så att molekylens endast kan rotera runt denna atom.

8. Fortsätt att fylla i tabell 2 genom att kombinera olika värden för elektronegativitet, samt undersöka storlek och tecken (plus/minus) på de partiella laddningar som uppstår. Gör en egen bedömning av om varje laddning är *stor*, *medel* eller *liten* och anteckna detta i tabellen.

Tabell 2:

Atom A		Atom B		Atom C	
Elektronegativitet	Partiell laddning	Elektronegativitet	Partiell laddning	Elektronegativitet	Partiell laddning
<i>T.ex. 0,8</i>	<i>Negativ, medel</i>	<i>0,0</i>	<i>Positiv, stor</i>	<i>0,3</i>	<i>Negativ, liten</i>

9. Vad påverkas dipolmomentet av? (den gula pilen, "molekyldipol") Skriv färdigt meningarna.

a. Dipolmomentet blir större (= längre pil) om _____

_____.

b. Pilen pekar åt det håll där _____

_____.

c. och försvinner (dvs. molekylens är ingen dipol) om _____

_____.

10. Testa att kombinera olika (eller samma) värden på elektronegativitet för atomerna.

För varje kombination, rita av i tabell 3: molekylen, samt pilarna för polär kovalent bindning (svarta, kallas "dipolbindning" i simuleringen) och dipolens riktning (gul). Ange atomernas elektronegativitet i den vänstra kolumnen.

11. Hur kan man ändra längd och riktning på den gula pilen (dipolmomentet), annat än med reglagen för elektronegativitet?

Finns det olika inställningar som gör att den försvinner (så att molekylen inte är en dipol)?

Tabell 3:

Elektronegativitet atom A/atom B/atom C	Bild av molekylen inkl. pilar för polära kovalenta bindningar och dipolens riktning
<i>T.ex. 0,8/0,1/0,4</i>	