

SRP - Kemi & Fysik

Sebastian Borgund Hansen
3r, Nørre Gymnasium

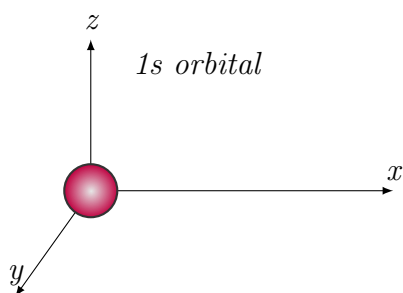
8. december 2016

1 Kovalente bindinger i organiske molekyler

Under visse omstændigheder vil to atomer der mødes danne et molekyle, hvor de to atomer er bundet sammen af en kovalent binding. I dette afsnit skal vi undersøge hvilke betingelser der netop gælder om denne type bindinger, der er grundlæggende for forståelsen af hvordan IR-spektra forekommer.

1.1 Orbitaler

For at forstå hvorfor to atomer vælger at gå sammen om at danne en binding hvori de deler deres elektroner er vi nødsaget til lige at betragte et enkelt atoms elektronkonfiguration. De subatomare entiteter som elektroner er opfører sig ikke lige så pænt som Bohr formulerede i hans atommodel, hvor elektronerne bevæger sig i cirkulære baner, eller skaller, rundt omkring atomets kerne. Ifølge nyere MOT (Læs: Molekylær Orbital Teori) har elektronerne en chance for at eksistere i visse områder omkring atomet. Disse områder er bestemt af hvor mange elektroner atomet har. Idéen om skallerne er ikke fuldstændig, men den molekylære orbital teori udbygger de enkelte skaller, der behandles i Bohr model, med nogle undergrupper, som kaldes orbitaler. Det laveste energiniveau en elektron kan befinde sig i, når det bevæger sig rundt om atomkernen er kugleformet og har tildelt navnet 1s orbitalen. Figur 1 er en skitse af 1s orbitalen.

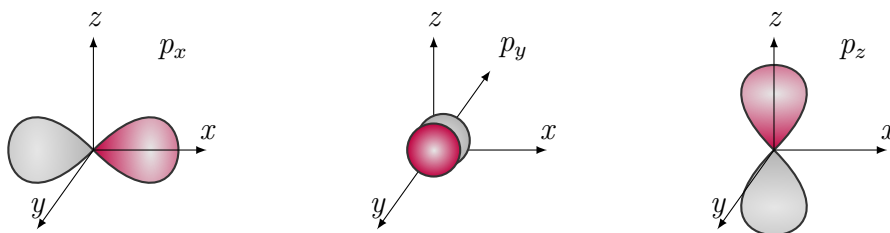


Figur 1: 1s orbital

I s-orbitalerne er der plads til netop 2 elektroner. At den første orbital hedder 1s henviser til at den tilhører skal 1. I 2. skal tilhører elektronerne 2s orbitalen. s fordi at orbitalen er kugleformet og 2 fordi orbitalen knytter sig til 2. skal. Orbitalen ligner 1s orbitalen til forveksling, men vil have en større radius da elektronerne der befinder sig i denne orbital har mere energi. Da vi ved, at der skal være 8 elektroner i den 2. skal for, at oktetreglen er opfyldt og atomerne derfor er stabile mangler vi stadigvæk at placere 6 elektroner. Disse elektroner vil befinde sig i de såkaldte p-orbitaler. Der eksisterer 3 forskellige p-orbitaler, som ligner sløjfer og som hver især indeholder 2 elektroner. De tre p-orbitaler benævnes respektivt p_x , p_y og p_z , da de er

ortogonale på hinanden og ligger langs hhv. x, y og z akser. De er på figur 2 illustreret i et kartesisk koordinatsystem.

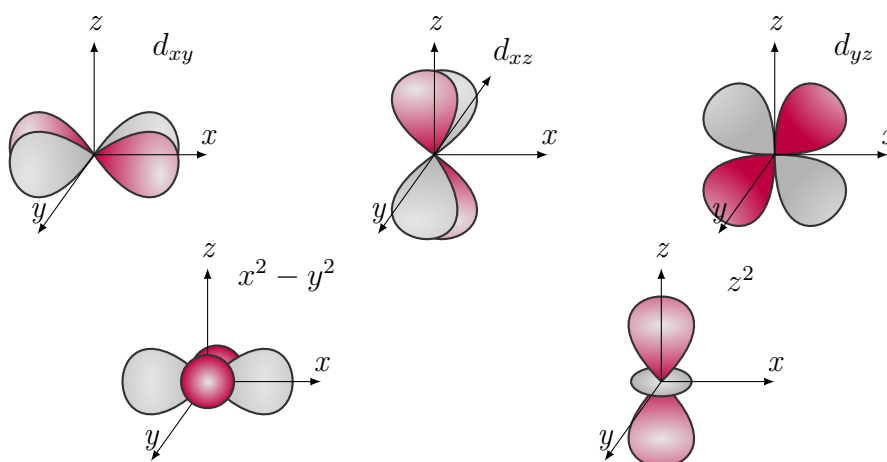
TEST



Figur 2: $2p_x$, $2p_y$, $2p_z$ orbital

I 3 skal kan der være 18 elektroner. Disse elektroner bliver først fyldt ind i en 3s orbital, der ligner både 1s og 2s orbitalen i og med, at den er kugleformet. Radius på 3s orbitalen er større end på 2s orbitalen grundet det højere energiniveau. 6 af de resterende 16 elektroner kan dernæst findes i 3p orbitalerne. Der er, ligesom 2p-orbitalerne, også tre 3p-orbitaler - $3p_x$, $3p_y$ og en $3p_z$ orbital. For det illustrative formål kan vi bare betragte 2p-orbitalerne. 3p-orbitalerne ligner dem, men elektronerne kan bare befinde sig i større sløjfer end 2p-orbitalerne.

Nu har vi kigget på de simpleste af orbitalerne, s- og p-orbitalerne. Der eksisterer også d og f orbitaler. f-orbitalerne vil jeg ikke beskæftige mig med, men p-orbitalerne er illustreret figur 3. (Se figur 3 og 4)



Figur 3: d_{xy} , d_{xz} , d_{yz} , $x^2 - y^2$, z^2 orbitalerne

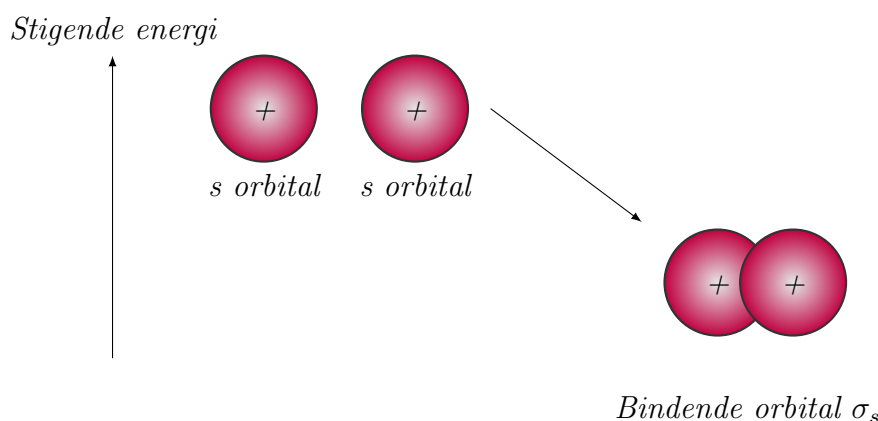
1.2 MO-teori

I molekylær orbital teori, forkortet MO-teori, ses der på fordelingen af elektroner i molekyler på samme måde som vi ser på molekyler i atomer (FODNOTE TIL GENERAL CHEMISTRY s.149 mangler). Måden hvorpå vi bestemmer hvordan en elektron opfører sig på i et molekyle er ved hjælp af kvantemekanik og en bølgefunktion Ψ . På denne måde kan energien af en elektron og formen på det område hvori en elektron bevæger sig i bestemmes. Dette vil jeg kun berøre sporadisk. Som vi i afsnit 1.1 fandt ud af at elektroner i forskellige energiniveauer havde størst chance for at eksistere i forskellige områder som vi kaldte orbitaler, ligeså har elektroner i molekyler også orbitaler som de har en stor chance for at eksistere i. Forskellen

er bare, at i molekyler kan elektronerne findes nær kernen på en hvilken som helst kerne, der indgår i molekylet; hvilket er hvorfor vi kalder disse orbitaler for molekylære elektronorbitaler eller bare molekylære orbitaler. Ligesom atomare orbitaler er molekylære orbitaler også fyldt når de indeholder præcist 2 orbitaler med modsat spin.

1.2.1 π - & σ -orbitaler

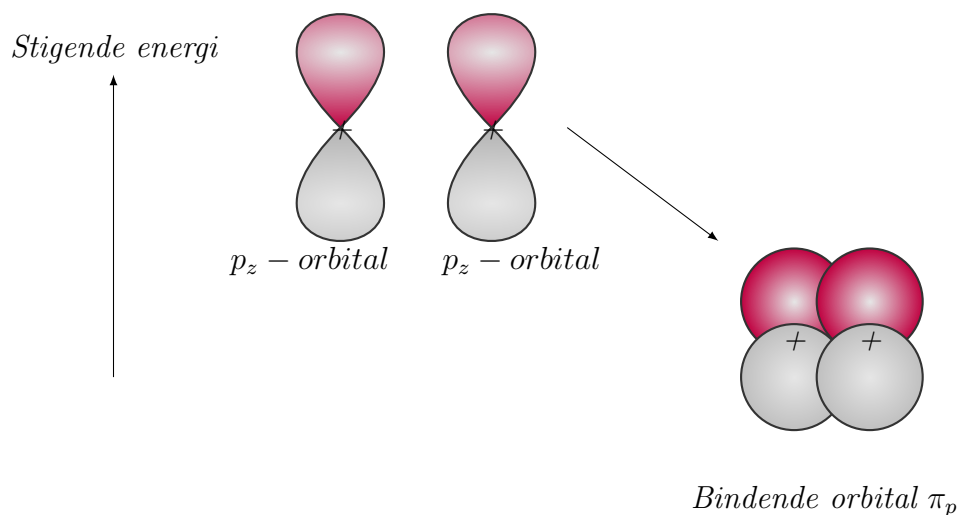
Da vi så de atomare orbitaler gav vi dem navnene, s,p,d og f. Molekylære orbitaler har også navne, men jeg vil i denne opgave primært have fokus på hhv. π -orbitaler og σ -orbitaler. Vi betragter et eksempel med et homonukleært diatomisk molekyle som H_2 . De to hydrogenatomer der er bundet sammen har hver deres egen elektron, men når de er sig tilpas tæt nok på hinanden vil elektronerne mere eller mindre befinde sig mellem de to kerner. Da elektronerne er negativt ladede og de 2 hydrogenkerner er positivt ladede, vil elektronerne blive tiltrukket af begge kerner og have et lavere niveau af energi end de ville have isolerede (MANGLER NOTE GENERAL CHEMISTRY SIDE 150). Da elektronerne søger at have en så lav energi som muligt vil de befinde sig mellem de to kerner og stabilisere molekylet. Denne slags orbitaler kaldes **bindende** orbitaler, da de som navnet antyder binder molekylet sammen. På figur 4 er det illustreret hvordan to atomare orbitaler går sammen om at danne en bindende σ_s orbital.



Figur 4: 1s orbital

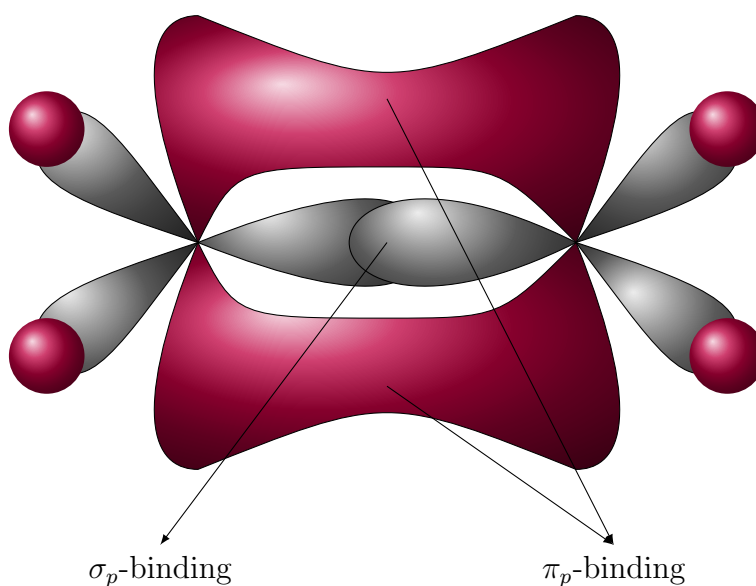
Denne bindende σ -orbital er faktisk det vi også kender som en σ -binding eller en kovalent binding. Kovalente bindinger er netop defineret som molekylære bindinger, der involverer at to atomer deler deres elektroner.

På samme måde som med σ -orbitalerne dannes π -orbitalerne ved, at to atomers befinder sig tæt på hinanden og elektronerne kan få en lavere energi ved at befinde sig i det sted hvor orbitalerne overlapper. π -orbitalerne adskiller sig alligevel fra σ -orbitalerne ved ikke at kunne blive dannet af overlap mellem s-orbitaler. En illustration af hvordan π -bindinger dannes ved et overlap af p-orbitaler: se figur 5.



Figur 5: 1s orbital

Nu har vi set på både σ -orbitaler /bindinger og π -orbitaler / bindinger - men hver for sig. Hvis de to orbitaler eksisterer samtidigt i et molekyle har vi faktisk en dobbeltbinding. Dobbeltbindinger er netop en σ - og en π -binding. Illustret som en tegning ville det se ud på følgende måde, se Figur 6:



Det er nemmelig ikke alle atomer, der har mulighed for at danne kovalente bindinger imellem sig. Når 2 atomer går sammen om at danne en kovalent binding er det fordi, at de hver især er ustabile. At de er ustabile er ens betydende med, at de ikke har deres orbitaler af højeste energiniveau fyldt ud.

2 Energipakkerne

2.1 Nabo- og singlepakker

Vi har lavet 6 forskellige pakker, som beboerne kan vælge. Disse er inddelt i to kategorier: Nabo- og singlepakker. I nabopakkerne kan man gå sammen med sin nabo om en fælles løsning for begge husstande, som er både pladsbesparende og er bedre for hele byens økonomi.

Hvis man ikke har lyst til at samarbejde med sin nabo, kan man vælge en af singlepakkerne. Her er man ikke afhængig af sin nabo, men man får selvfølgelig ikke de fordele som nabopakkerne giver.

2.2 Pakker med forskellige energityper

Når man har valgt om man vil have en nabo- eller en singlepakke, rådgiver vores flyer om hvilken energipakke der vil passe godt til en given husstand ud fra hvilken retning huset er bygget. Vi har valgt at kalde disse tre pakker for: Sol-, vind- og kombipakken ud fra hvilken energikilde der primært bruges til at producere energi. Der er nogle pakker der kun kan bruges af huse der vender rigtigt. Solpakken kan kun anvendes af brugere der bor meget sydvendt, men er tilgængelig billigere. På samme måde kan man ikke anvende kombipakken hvis man bor i direkte østlig eller vestlig retning. Den teoretiske baggrund for dette samt præcise vinkler et hus kan have i forholdt til østlig retning er angivet i et senere afsnit.

2.3 anbefalinger af pakker

2.3.1 Teoretisk baggrund

For at anbefale forskellige husstande forskellige pakker, har vi været nødsaget til at finde en måde at beskrive %MY (læs: %maximal yield) har vi defineret en funktion: $Yield(v) : [0, 180] \rightarrow [0, 1]$ med forskriften: $19.35 \cdot \sin(0.01851x + 6.238) + 80$. Funktionen kan med god tilnærmelse beskrive %MY som funktion af vinklen som husstanden er roteret mod urets retning (Hvis linjen der måles vinklen til er trukket fra vest til øst). På baggrund af denne funktion, er det derfor nu muligt, at fortælle om det giver mening

2.3.2 Teoretisk udledning for tærskelværdierne

I multipakken (single) og solpakken (single) er der grænser for husets orientering. Der er selvfølgelig en bagvedliggende matematisk forklaring på dette. Vi har set på måneden hvor solindstrålingen er på sit laveste. Huset har selvfølgelig brug for sit gennemsnitlige forbrug af el året rundt dækket - dette ved vi er 300kWh (ud fra de 3600kWh på et år). Det kan oplagt blive et problem at en husholdning ikke har nok strøm med en kombination af en solcelle og vindenergi, hvis der effektiviteten af solcellen er for lav. For at sikre os at dette ikke sker, betragter vi en sammenhæng der må gælde for at husholdningen har strøm nok. Vi introducerer tre variable E_{vind} , E_{sol} og k som er hhv. energien fra vindmøller, den maksimale energi fra solcellen og effektiviteten af solcellen, der kan udregnes på baggrund af vinklen huset har:

$$E_{vind} + k \cdot E_{sol} = 300$$

Fra denne sammenhæng får vi oplagt $k = \frac{300 - E_{vind}}{E_{sol}}$. Her er k den minimale %MAY. k er så udregnet for de forskellige pakker. Det er dog kun multipakken (single) og solpakken (single) der har vist sig at give problemer, og derfor har en grænse. Vi har konverteret minimum %MAY til grader ud fra vores funktion, der er beskrevet i det teoretiske afsnit.

2.3.3 Praktisk forklaring

Vi vil nu betragte pakkerne og forklarer hvorfor vi har valgt at anbefale netop disse pakker ud fra husenes placering og orientering.

Lad os tage udgangspunkt i singlepakkerne:

Vindmøllepakken (single): Pakken indeholder en mellem vindmølle. Vi har vurderet at med en mellem vindmølle kan man holde sig selvforsynende på energi året rundt. Derfor er denne pakke tilgængelig for alle.

Multipakken (single): Pakken indeholder en small vindmølle og en small solcelle. Denne løsning er foreslået til dem, der ikke vil have en større vindmølle placeret i deres have. Dette er en muligvis hvis husets front er orienteret i en vinkel mellem 13.5 og 164 grader med vandret, hvor vandret er en streg der går fra øst mod vest. Den bagvedliggende grund for at der er en grænse for orienteringen ligger i teorien, der er beskrevet i forrige afsnit (Teoretisk baggrund). Solcellen skal sammen med vindmøllen kunne forsyne husstanden i vintermånederne, hvor solenergien er lav. Dette kan ikke lade sig gøre uden for de givne grader, da solindstrålingen ikke er høj nok dér.

Solpakken (single): Pakken indeholder en stor solcelle. Løsningen for dem, der ikke ønsker at have en vindmølle. Denne løsning er mulig for beboere med et hus, hvis front er orienteret mellem 57 og 118 grader med vandret, hvor vandret er en streg der går fra øst mod vest. I

denne solpakke er der også en grænse og forklaringen er den samme som i multipakken (single).

Nu kigger vi på nabopakkerne:

Nabopakkerne er pakker for dem, der ønsker i samarbejde med sin nabo, at dele en fælles grøn energi. Dette er altså en parløsning for 2 naboer.

Vindmøllepakken (nabo): Pakken indeholder én stor vindmølle. Pakken er for dem, der ikke har noget i mod, at have en stor vindmølle stående i haven. Den store vindmølle kan holde begge husstande forsynede året rundt. Vindmøllepakken har ikke nogle krav om orientering.

Multipakken (nabo): Pakken indeholder en mellem vindmølle og en lille solcelle. Den kan også forsyne begge husstande året rundt og har ikke nogle krav om hverken beliggenhed eller orientering.

3 Afrundning

Vi mener at vi med denne ordning, giver alle en mulighed for at vælge en løsning, som passer på deres behov, men hvor de samtidig ikke behøver at sætte sig ind i de tekniske begrundelser. Samtidig er vi sikre på med denne ordning, at alle har strøm hele året rundt.