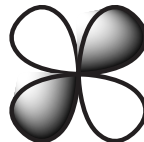
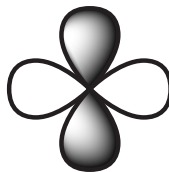
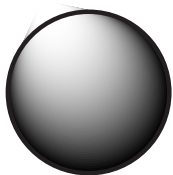


# Chemická vazba

Rezonanční struktury, atomové a molekulové orbitaly, hybridizace

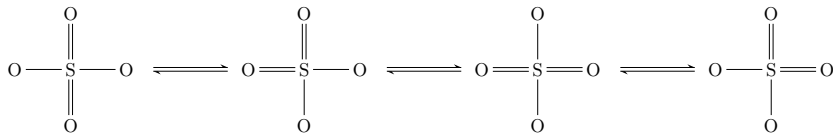


# Formální náboj

- ▶ Rozdíl mezi počtem valenčních elektronů ve volném atomu a valenčních elektronů ve vázaném atomu.
- ▶ Záporný náboj je umístěn na nejelektronegativnějším atomu.
- ▶ Součet formálních nábojů všech atomů v molekule je roven jejímu náboji.
- ▶  $\text{H}_3\text{O}^+$ : H: 0; O: +1
- ▶  $\text{H}_3\text{CO}^-$ : H: 0; C: 0; O: -1

# Rezonanční struktury

- ▶ Popisují polohu elektronů v molekulách.
- ▶ Vyjadřují jednotlivé limitní stavy.

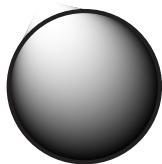


# Atomové orbitaly

- ▶ Funkce popisující prostorové rozložení pravděpodobnosti výskytu elektronu.
- ▶ Orbitaly jsou popsány třemi kvantovými čísly.
  - ▶ Hlavní kvantové číslo ( $n$ ) - popisuje příslušnost orbitalu do elektronové slupky – velikost orbitalu. Nabývá hodnot větších než 0.
  - ▶ Vedlejší kvantové číslo ( $l$ ) - popisuje tvar orbitalu. Často se používá označení pomocí písmen: s, p, d, f, g, h, ... Nabývá hodnot v intervalu  $\langle 0, n - 1 \rangle$ .
  - ▶ Magnetické kvantové číslo ( $m$ ) - popisuje prostorovou orientaci orbitalu. Nabývá hodnot v intervalu  $\langle -l; l \rangle$ .
  - ▶ Spinové kvantové číslo ( $s$ ) - nepopisuje orbital, ale spin elektronu v orbitalu. Nabývá hodnot  $\pm \frac{1}{2}$ .
- ▶ **Nodální rovina** - rovina, kde je pravděpodobnost výskytu elektronu nulová, vlnová funkce orbitalu mění při průchodu touto rovinou znaménko.

# Atomové orbitaly

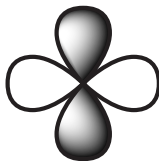
- ▶ Orbital s - kulově symetrický, magnetické číslo je vždy rovno 0. Orbitaly s mají  $n - 1$  kulových nodálních ploch.
- ▶ Orbital p - středově symetrický tvar, skládající se ze dvou laloků. V místě spojení laloků je nodální plocha, kde vlnová funkce popisující orbital mění znaménko. Magnetické kvantové číslo pro orbital p nabývá hodnot: -1, 0, 1.
- ▶ Orbital d - existuje pět typů orbitalů d, tři meziosé, jejichž laloky leží mezi osami souřadného systému -  $d_{xy}$ ,  $d_{xz}$  a  $d_{zy}$ . Orbital  $d_{x^2-y^2}$  má čtyři laloky umístěné v osách x a y. Poslední orbital,  $d_{z^2}$  má dva laloky umístěné v ose z a prstenec, ležící v rovině xy.



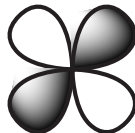
s



p



$d_{x^2-y^2}$



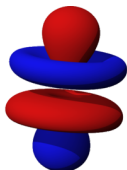
$d_{xy}$



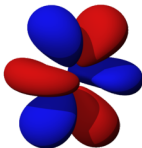
$d_{z^2}$

# Atomové orbitaly

- ▶ Orbital f - existuje sedm degenerovaných orbitalů typu f. Tyto orbitaly jsou obsazovány elektrony až u vnitřně přechodných prvků.



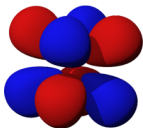
$m = 0$



$m = +1$



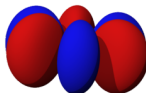
$m = -1$



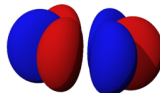
$m = +2$



$m = -2$



$m = +3$



$m = -3$

[https://commons.wikimedia.org/wiki/File:F\\_orbital.png](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:F_orbital.png)

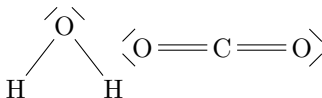
Autor: A2569875

# Molekulové orbitály

- ▶ Teorie LCAO-MO - Linear Combination of Atomic Orbitals - Molecular Orbital
- ▶ Molekulové orbitály vznikají lineární kombinací atomových orbitalů
- ▶ Kombinací dvou AO vznikají dva MO - vazebný a protivazebný. Protivazebné orbitály se označují hvězdičkou, např.  $\sigma^*$
- ▶ Aby byl překryv úspěšný musí mít vlnové funkce orbitalů v místě překryvu stejná znaménka
- ▶ Protivazebný orbital má o jednu nodální plochu více než vazebný a pokud je obsazen elektronovým párem, snižuje řád vazby o jedna. Obsazený vazebný orbital naopak řád vazby zvyšuje.
- ▶ Vazba  $\sigma$  - vzniká osovým překryvem orbitalů.
- ▶ Vazba  $\pi$  - vzniká bočním překryvem orbitalů, je přítomna v násobných vazbách.
- ▶ Vazba  $\delta$  - vzniká překryvem všech čtyř laloků d-orbitalu, je přítomna ve čtverné vazbě např. v  $[\text{Re}_2\text{Cl}_8]^{2-}$ .

# Řád vazby

- ▶ Řád vazby popisuje počet elektronových párů, které tvoří vazbu mezi atomy.
- ▶ Lze jej odvodit z Lewisovského vzorce molekuly nebo z diagramu MO.



- ▶ Řád vazby lze spočítat z počtu elektronů ve vazebných a protivazebných orbitalech.
- ▶ 
$$RV = \frac{\text{vazebne elektrony} - \text{protivazebne elektrony}}{2}$$
- ▶ Neobsazené molekulové orbitály neovlivňují ani řád vazby, ani energii systému.



1. [www.chemguide.co.uk/atoms/properties/atomorbs.html](http://www.chemguide.co.uk/atoms/properties/atomorbs.html)
2. Molecular Orbital Theory