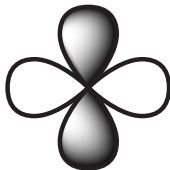
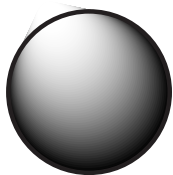


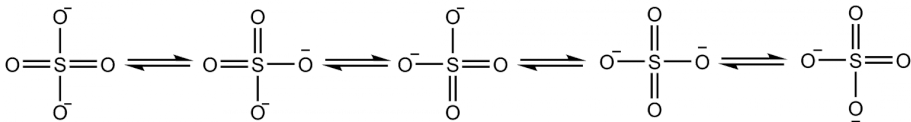
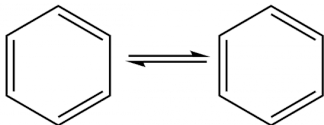
Chemická vazba

Rezonanční struktury, atomové a molekulové orbitály, hybridizace



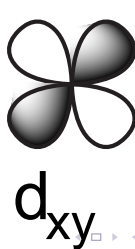
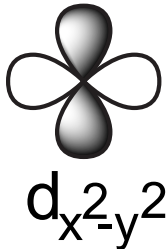
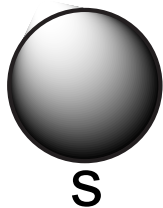
- Rozdíl mezi počtem valenčních elektronů ve volném atomu a valenčních elektronů ve vázaném atomu.
- Záporný náboj je umístěn na nejelektronegativnějším atomu.
- Součet formálních nábojů všech atomů v molekule je roven jejímu náboji.
- H_3O^+ : H: 0; O: +1
- H_3CO^- : H: 0; C: 0; O: -1

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

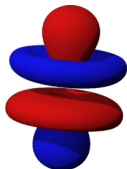


- Funkce popisující prostorové rozložení pravděpodobnosti výskytu elektronu.
- Orbitaly jsou popsány třemi kvantovými čísly.
 - Hlavní kvantové číslo (n) - popisuje příslušnost orbitalu do elektronové slupky – velikost orbitalu. Nabývá hodnot větších než 0.
 - Vedlejší kvantové číslo (l) - popisuje tvar orbitalu. Často se používá označení pomocí písmen: s, p, d, f, g, h, ... Nabývá hodnot v intervalu $< 0, n - 1 >$.
 - Magnetické kvantové číslo (m) - popisuje prostorovou orientaci orbitalu. Nabývá hodnot v intervalu $< -l; l >$.
 - 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.

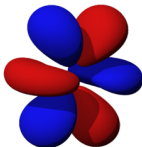
- Orbital s - kulově symetrický, magnetické číslo je vždy rovno 0. Orbitaly s mají $n - 1$ kulových nodálních ploch.
- Orbital p - středově symetrický tvar, skládající se ze dvou laloků. V místě spojení laloků je nodální plocha, kde vlnová funkce popisující orbital mění znaménko. Magnetické kvantové 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_{yz} . 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.



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



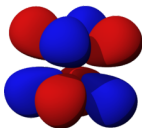
$m = 0$



$m = +1$



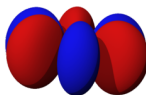
$m = -1$



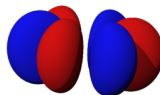
$m = +2$



$m = -2$



$m = +3$

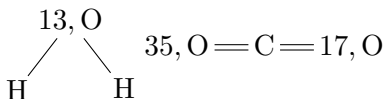


$m = -3$

https://commons.wikimedia.org/wiki/File:F_orbital.png Autor:
A2569875

- 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. σ^*
- 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 σ - vzniká osovým překryvem orbitalů.
- Vazba π - vzniká bočním překryvem orbitalů, je přítomna v násobných vazbách.
- Vazba δ - vzniká překryvem všech čtyř laloků d-orbitalu, je přítomna ve čtverné vazbě např. v $[\text{Re}_2\text{Cl}_8]^{2-}$.

- 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
- 2 Molecular Orbital Theory