

# Chemická vazba

Důvody pro vazbu = **menší energie** atomů ve vázaném stavu než energie jednotlivých oddělených atomů

Mechanismus tvorby vazby = sdílení, předávání nebo redistribuce **valenčních elektronů**

Model **lokalizovaných** elektronových párů  
(Lewis, VB, VSEPR, hybridizace)

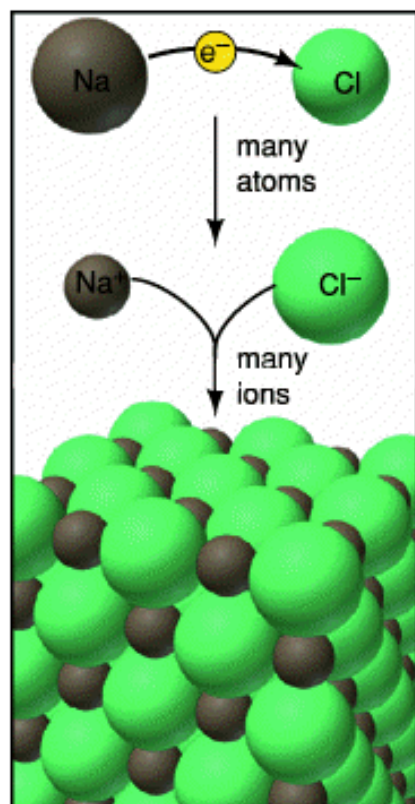
Model **delokalizovaných** elektronů (MO)

# Chemická vazba

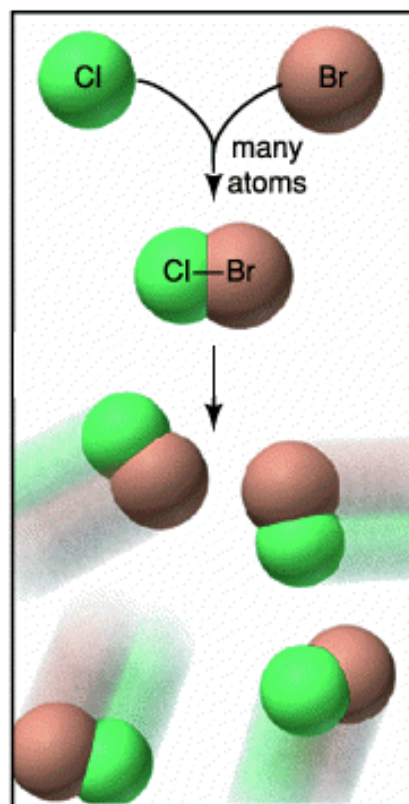
Iontová

Kovalentní

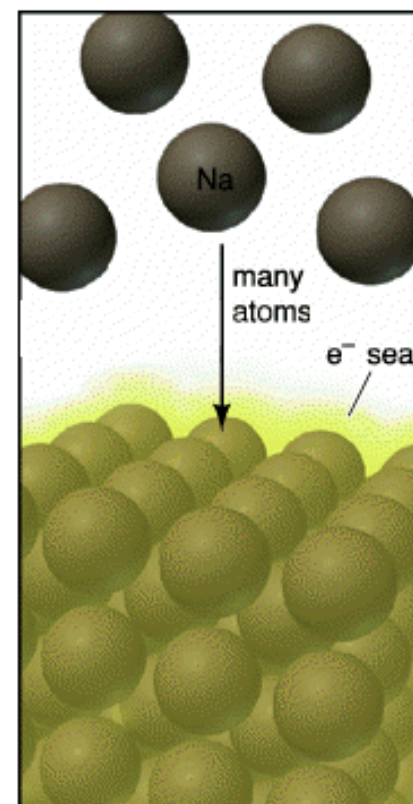
Kovová



A Ionic bonding



B Covalent bonding



C Metallic bonding

## Typy chemických vazeb

**Kovalentní** = sdílení elektronů (e páru, 1e H<sub>2</sub><sup>+</sup>) několika atomy (2, 3, 4....), třicenterní-dvouelektronová vazba

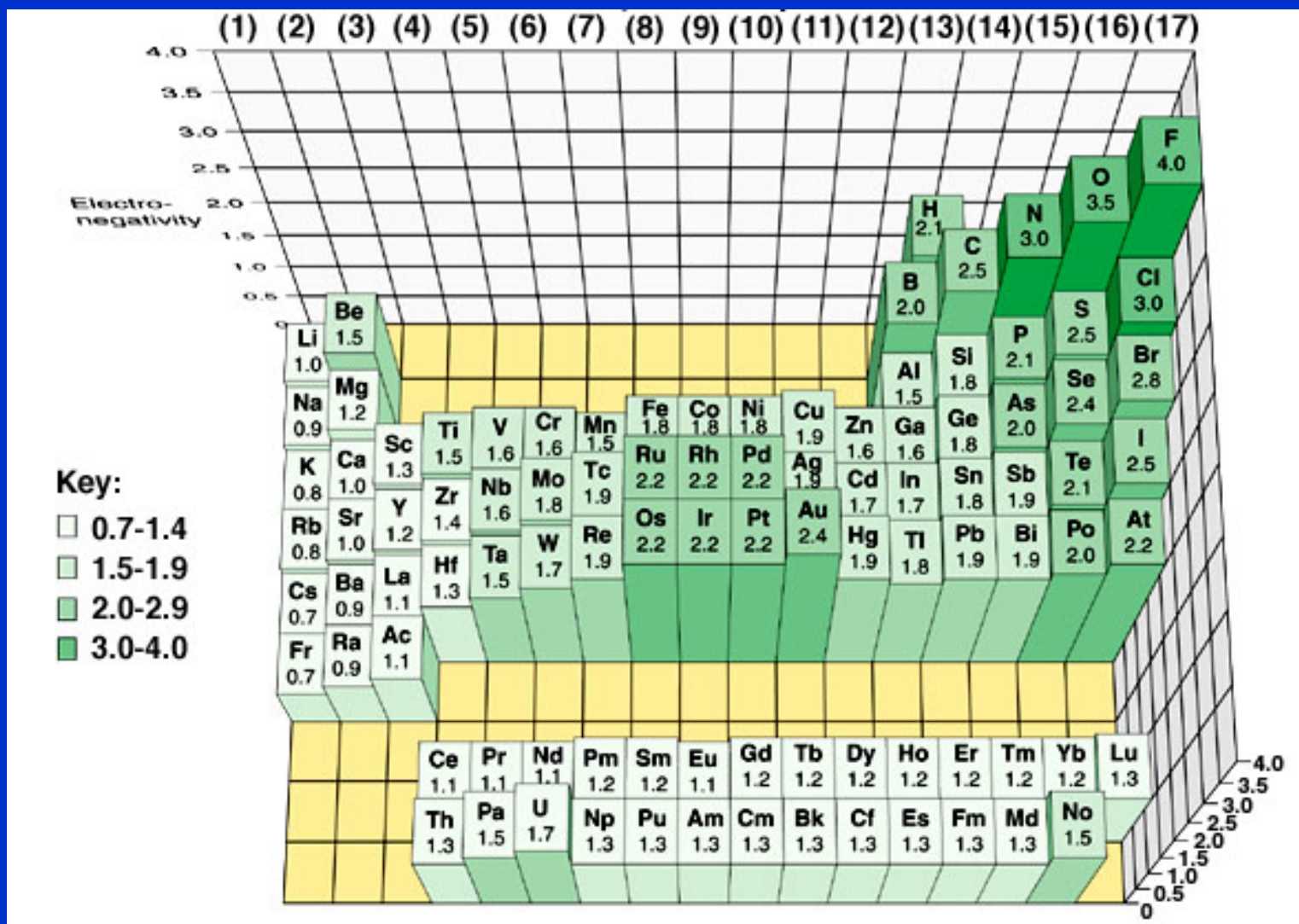
**Kovová** = sdílení elektronů mezi mnoha atomy, pásová teorie

**Iontová** = předání elektronů, tvorba iontů, Coulombovské přitažlivé síly mezi opačně nabitými ionty

**Van der Waalsova** = Coulombovské přitažlivé síly mezi dočasnými náboji (dipóly)

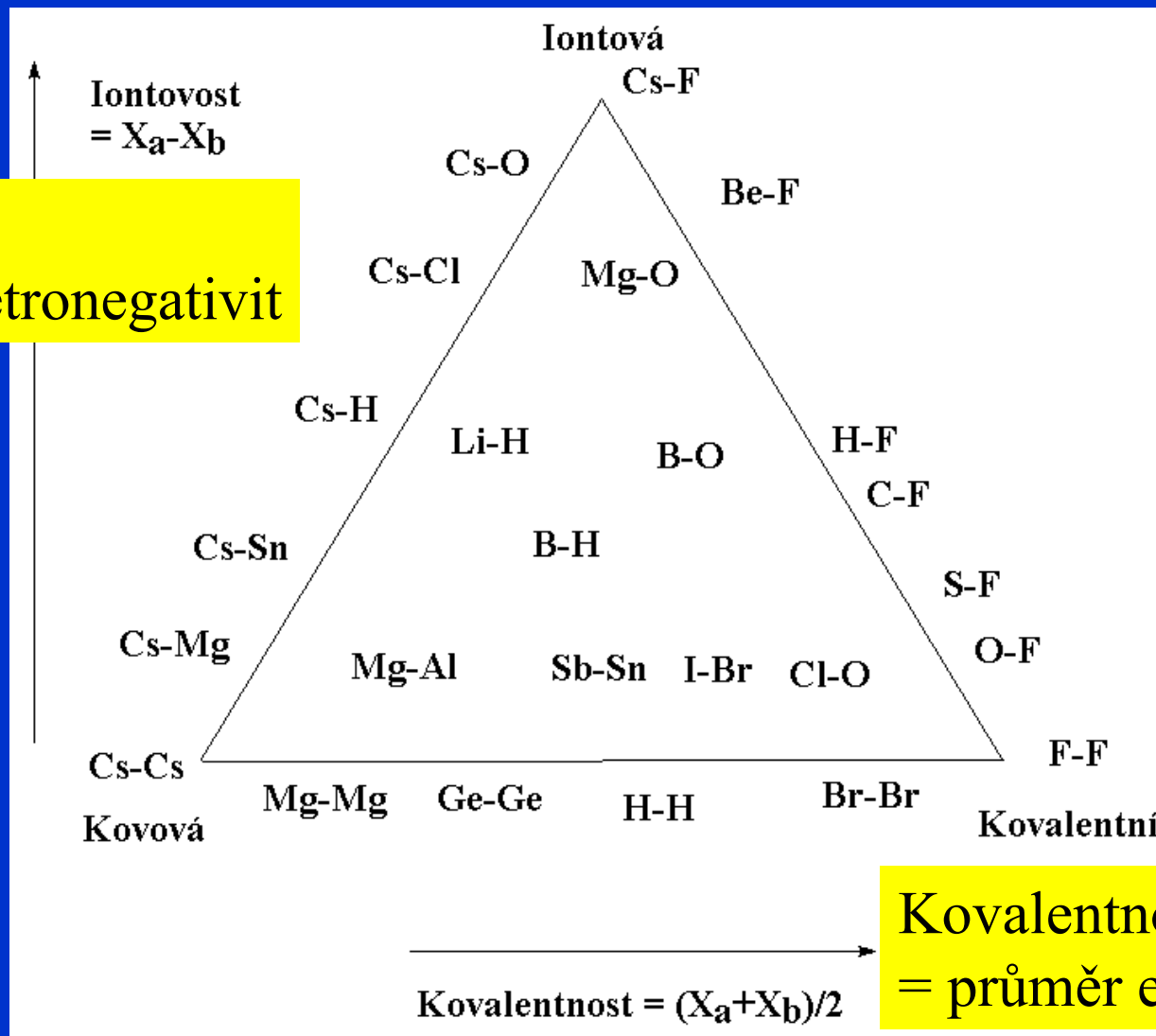
**Topologická** = mechanické spojení molekul (rotaxeny, katenany, karcerandy)

# Elektronegativita podle Paulinga

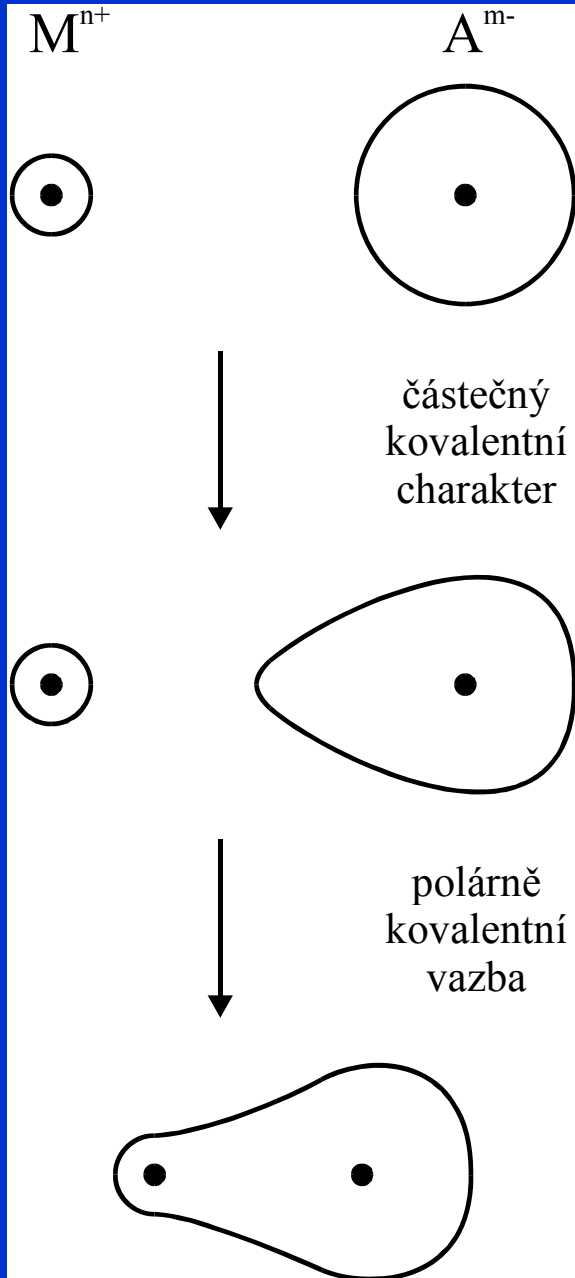


# Van Arkelův trojúhelník

Iontovost  
= rozdíl elektronegativit



Kovalentnost  
= průměr elektronegativit

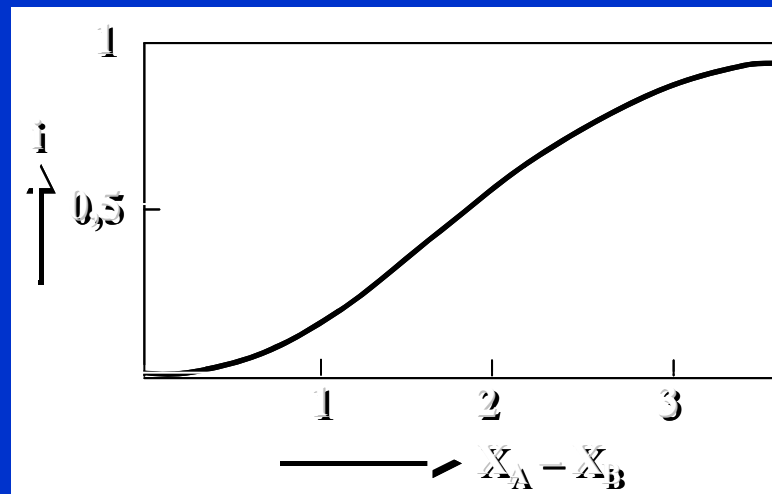


Žádná vazba není zcela iontová.  
 Přechod od kovalentní k iontové vazbě je spojitý a většina sloučenin leží mezi oběma extrémy

$$\Delta\chi = (\chi_A - \chi_B)$$

Iontovost vazby

$$i = 1 - \exp[-0.21(\chi_A - \chi_B)^2]$$



## Iontová a kovalentní vazba



Stoupá kovalence

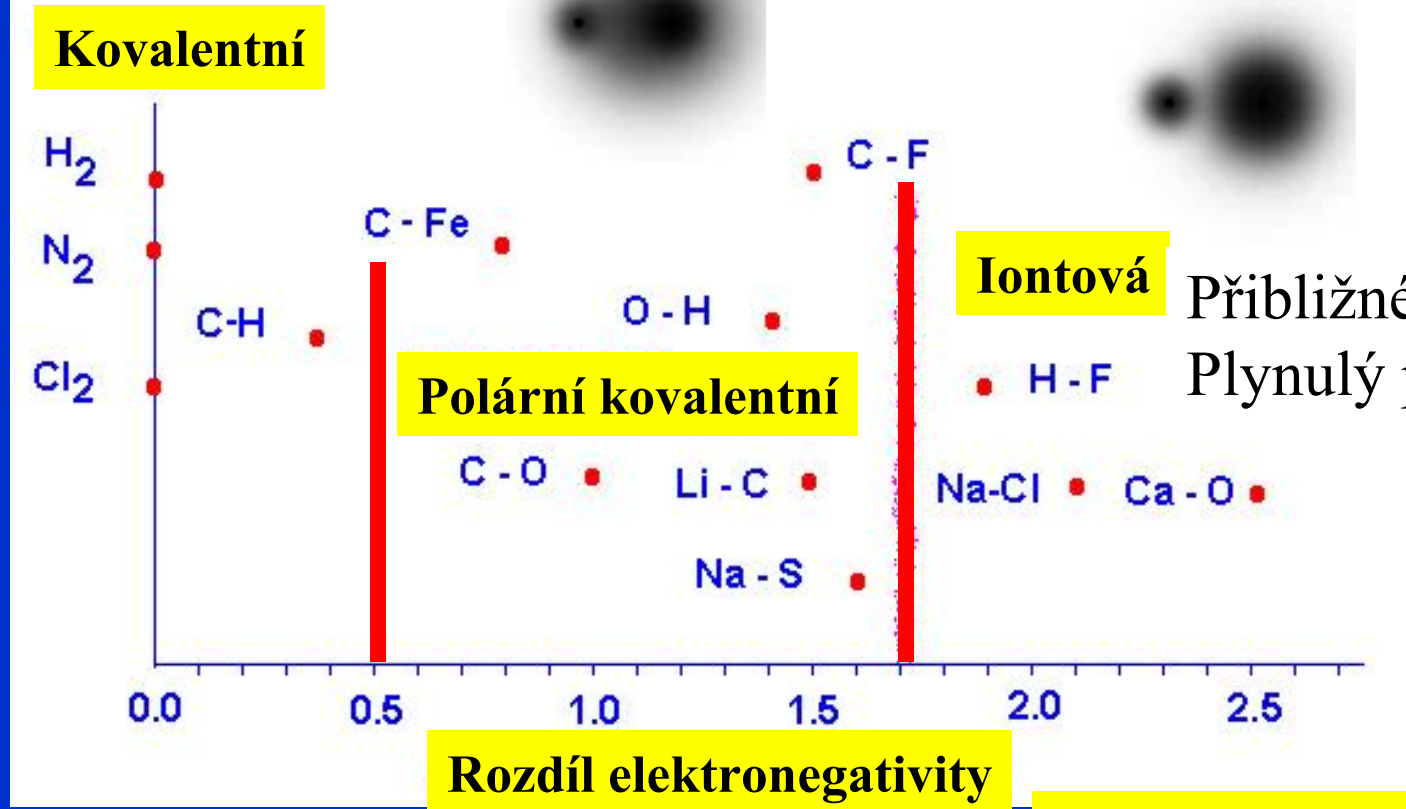


Stoupá kovalence



Stoupá iontovost

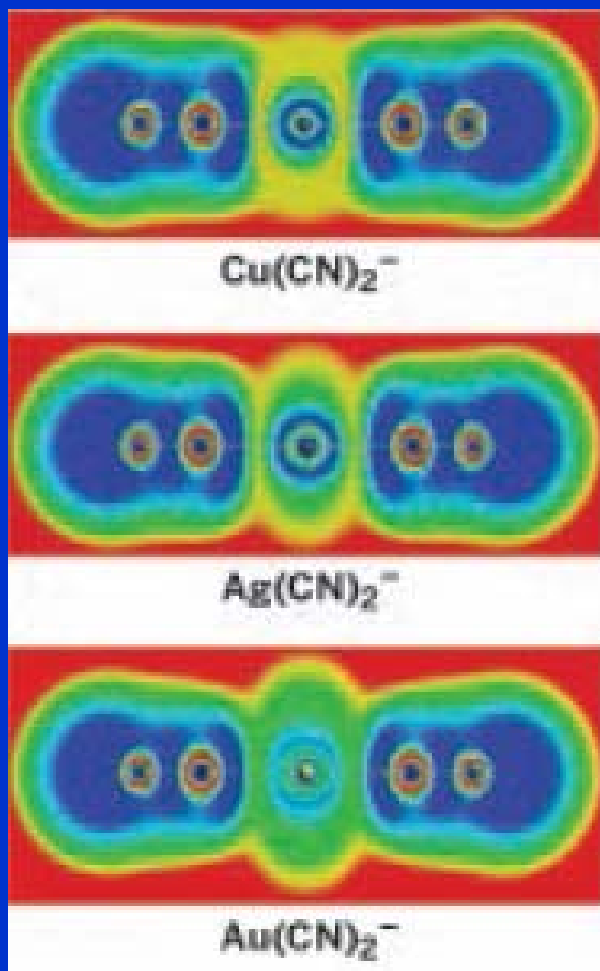
# Iontová a kovalentní vazba



$$\Delta\chi = (\chi_A - \chi_B)$$



## Iontová a kovalentní vazba

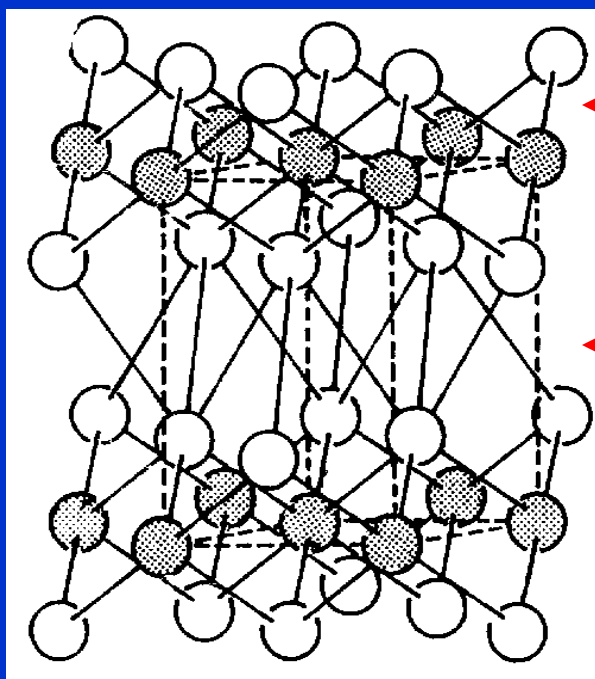


Stoupá kovalence



Kyanidová těžba zlata

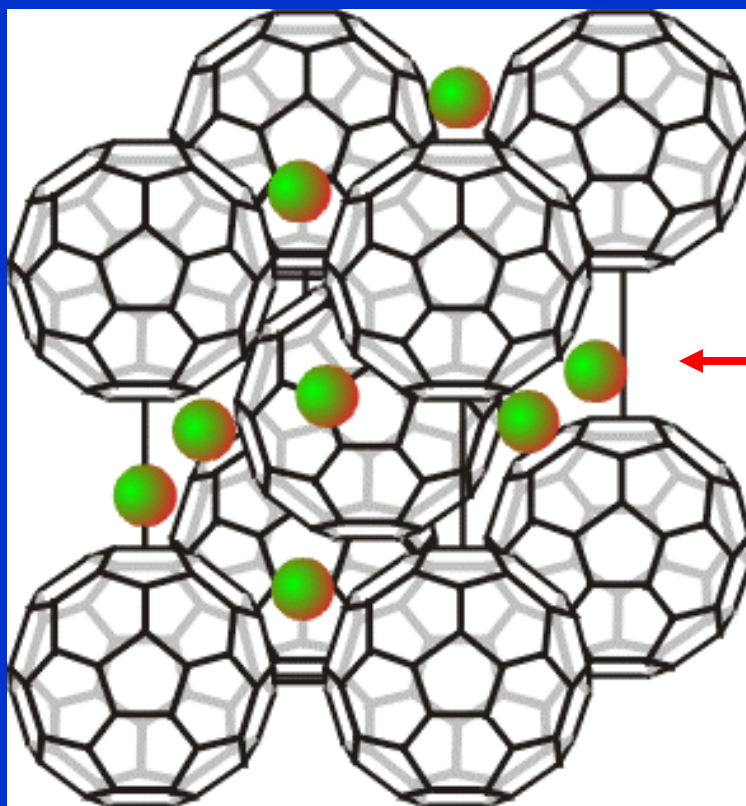
# Různé typy chemické vazby v jedné sloučenině



kovalentní

Van der Waalsova

## Různé typy chemické vazby v jedné sloučenině

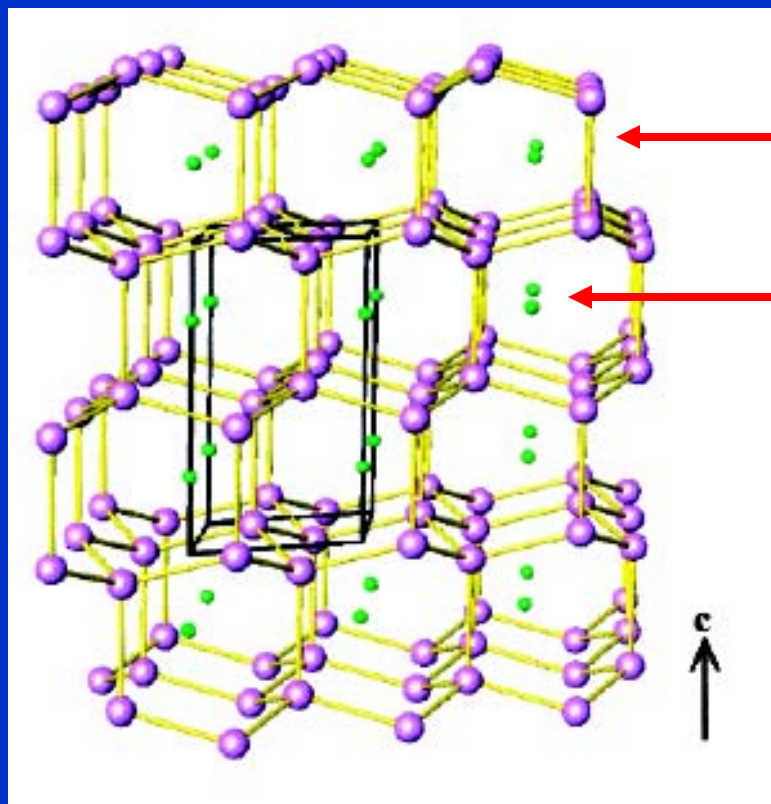


Kovalentní

Iontová

$K^+$  a  $(C_{60})^{3-}$

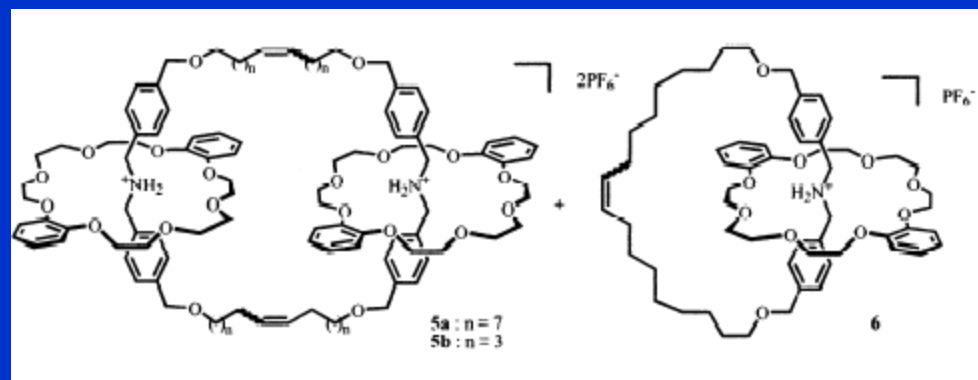
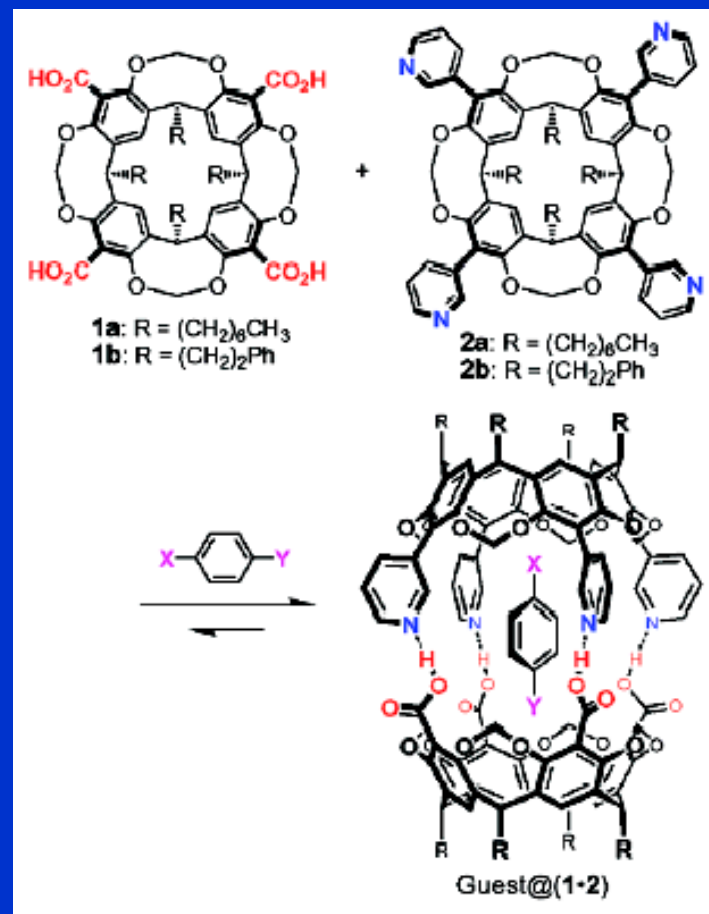
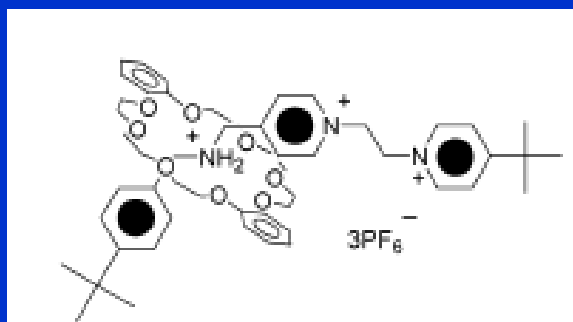
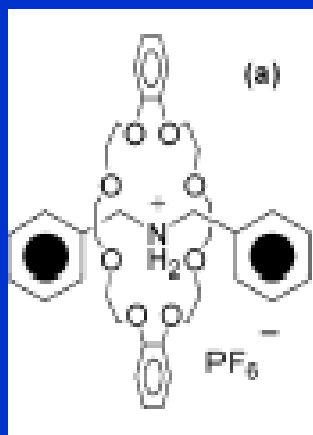
## Různé typy chemické vazby v jedné sloučenině



Kovalentní mezi Tl-Tl

Iontová mezi  $\text{Sr}^{2+}$  a  $(\text{Tl}_2)^{2-}$

# Topologická vazba: rotaxeny, katenany, karcerandy

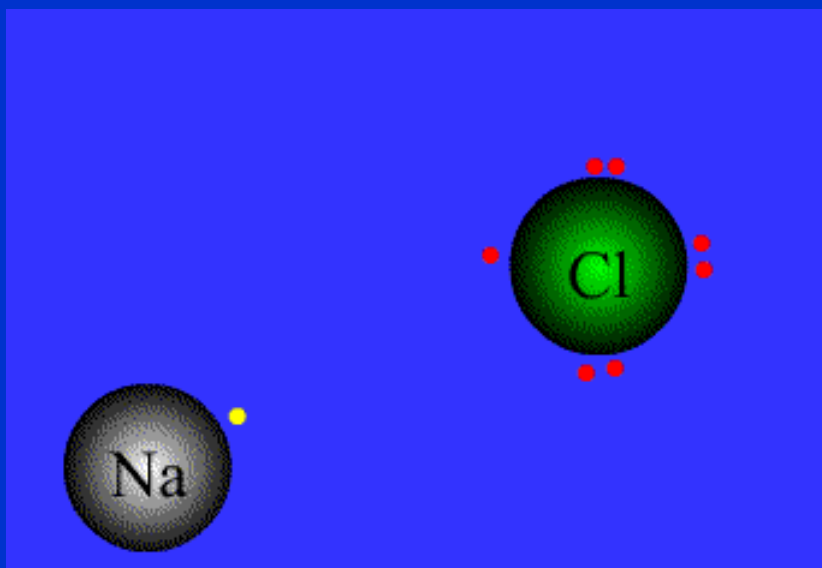


## Iontová vazba



$$\Delta H_f^0 = -410.9 \text{ kJ mol}^{-1}$$

Uvolněné reakční teplo



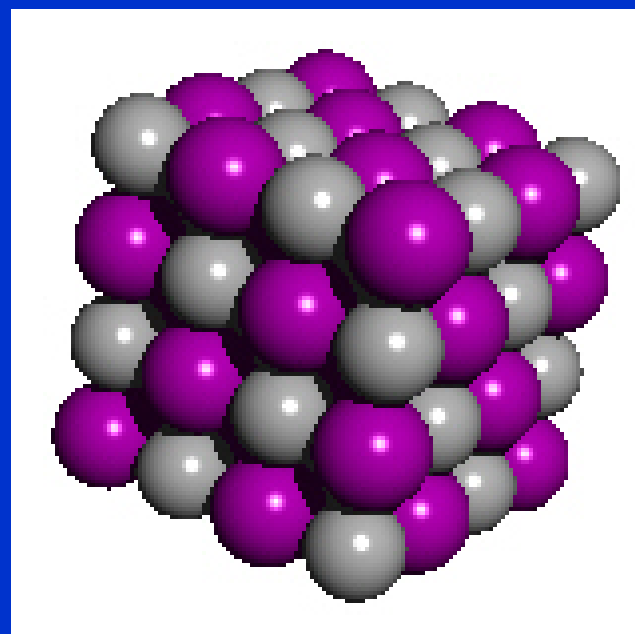
Vytvoření oktetu pro  $\text{Na}^+$  i  $\text{Cl}^-$

## NaCl - iontová sloučenina

Neexistuje molekula NaCl

Vzorcová jednotka

Nekonečná mřížka uspořádaných  
kationtů a aniontů



## Mřížková energie, L

Mřížková energie je energie, která se **uvolní** při vytvoření jednoho molu pevné iontové sloučeniny z iontů v plynném stavu

Coulombovská přitažlivá síla mezi dvěma ionty

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_+ Z_- e^2}{r^2}$$

Mřížková energie L [kJ mol<sup>-1</sup>]

Coulombovské přitažlivé a dopudivé síly mezi 1 molem iontů

Z = náboje iontů  
r = vzdálenost iontů

$$L = N_A M \frac{Z_+ Z_- e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

M = Madelungova konstanta udává geometrii krystalové mřížky (NaCl, CsCl, CaF<sub>2</sub>, ZnS,....)



## Mřížkové energie halogenidů alkalických kovů

L [kJ mol <sup>-1</sup> ]	F	Cl	Br	I
Li	1037	862	785	729
Na	918	788	719	670
K	817	718	656	615
Rb	784	694	634	596
Cs	729	672	603	568

$$L = N_A M \frac{Z_+ Z_- e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \approx k \frac{Z_+ Z_-}{r}$$

## Mřížkové energie a fyzikální vlastnosti

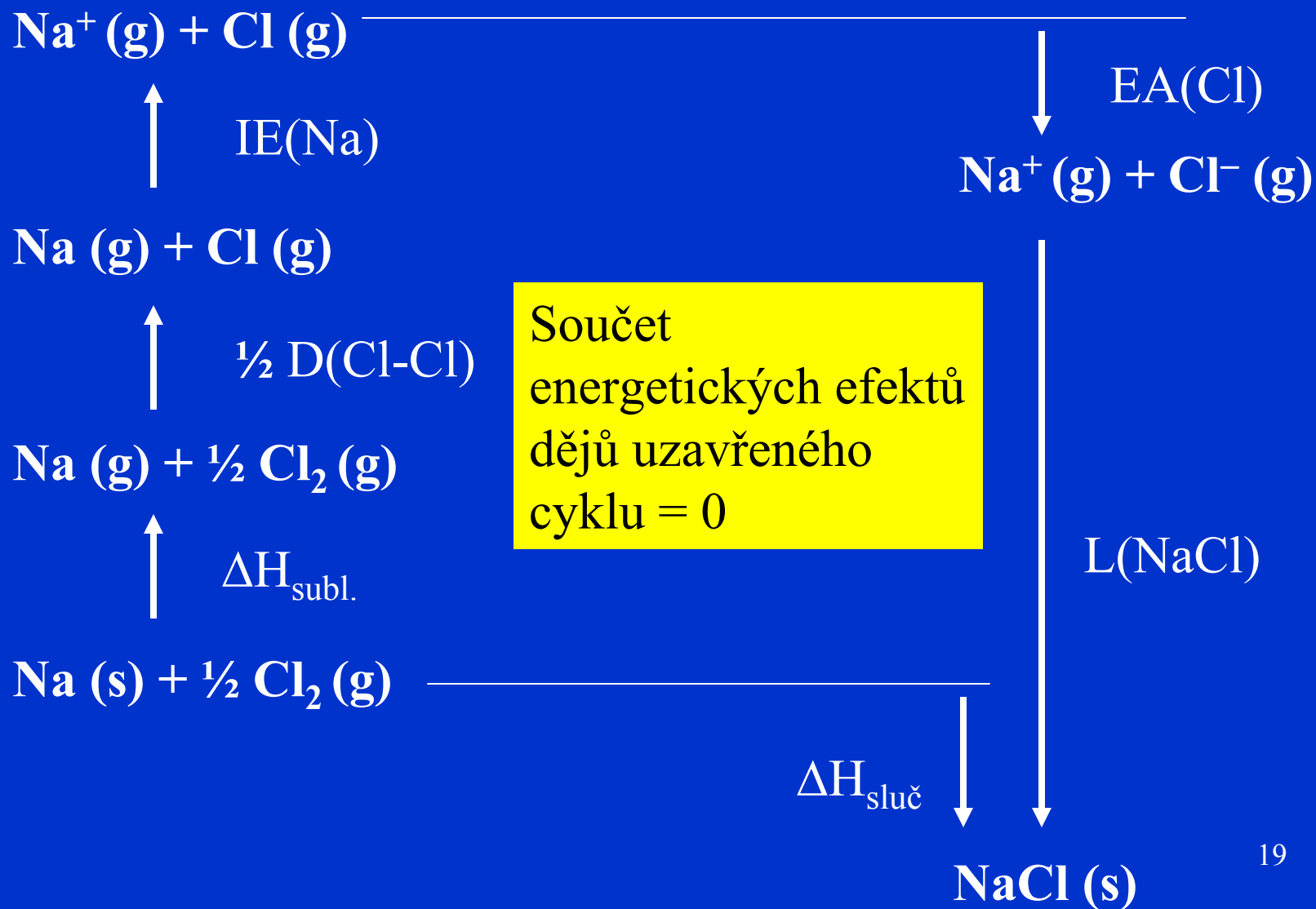
	L [kJ mol <sup>-1</sup> ]	T <sub>t</sub> [°C]		L [kJ mol <sup>-1</sup> ]	T <sub>t</sub> [°C]
NaF	913	996	KF	808	857
NaCl	778	801	KCl	703	770
NaBr	737	747	KBr	674	742
NaI	695	660	KI	636	682

$$L \approx k \frac{Z_+ Z_-}{r}$$



	L [kJ mol <sup>-1</sup> ]	T <sub>t</sub> [°C]	Mohs
MgCl <sub>2</sub>	2326	714	-
MgO	3920	2642	6.0
CaO	3513	2570	4.5
SrO	3283	2430	3.5
BaO	3114	1925	3.3
ScN	7547	-	-

## Born – Haberův cyklus



## Born – Haberův cyklus



$$\Delta H_{\text{subl.}} = 107.3 \text{ kJ mol}^{-1}$$



$$\frac{1}{2} D(\text{Cl-Cl}) = 122 \text{ kJ mol}^{-1}$$



$$\text{IE}(\text{Na}) = 496 \text{ kJ mol}^{-1}$$



$$\text{EA}(\text{Cl}) = -349 \text{ kJ mol}^{-1}$$

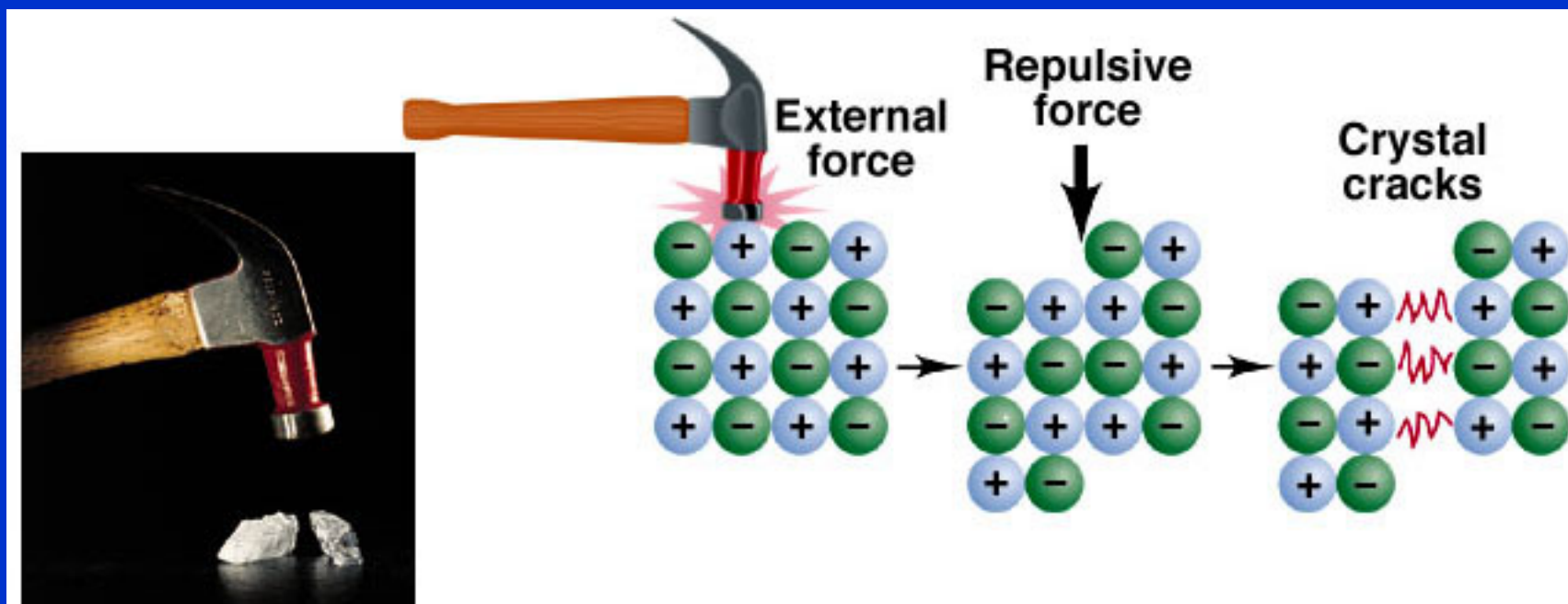


$$L(\text{NaCl}) = -778 \text{ kJ mol}^{-1}$$



$$\Delta H_{\text{sluč}} = -401.7 \text{ kJ mol}^{-1}$$

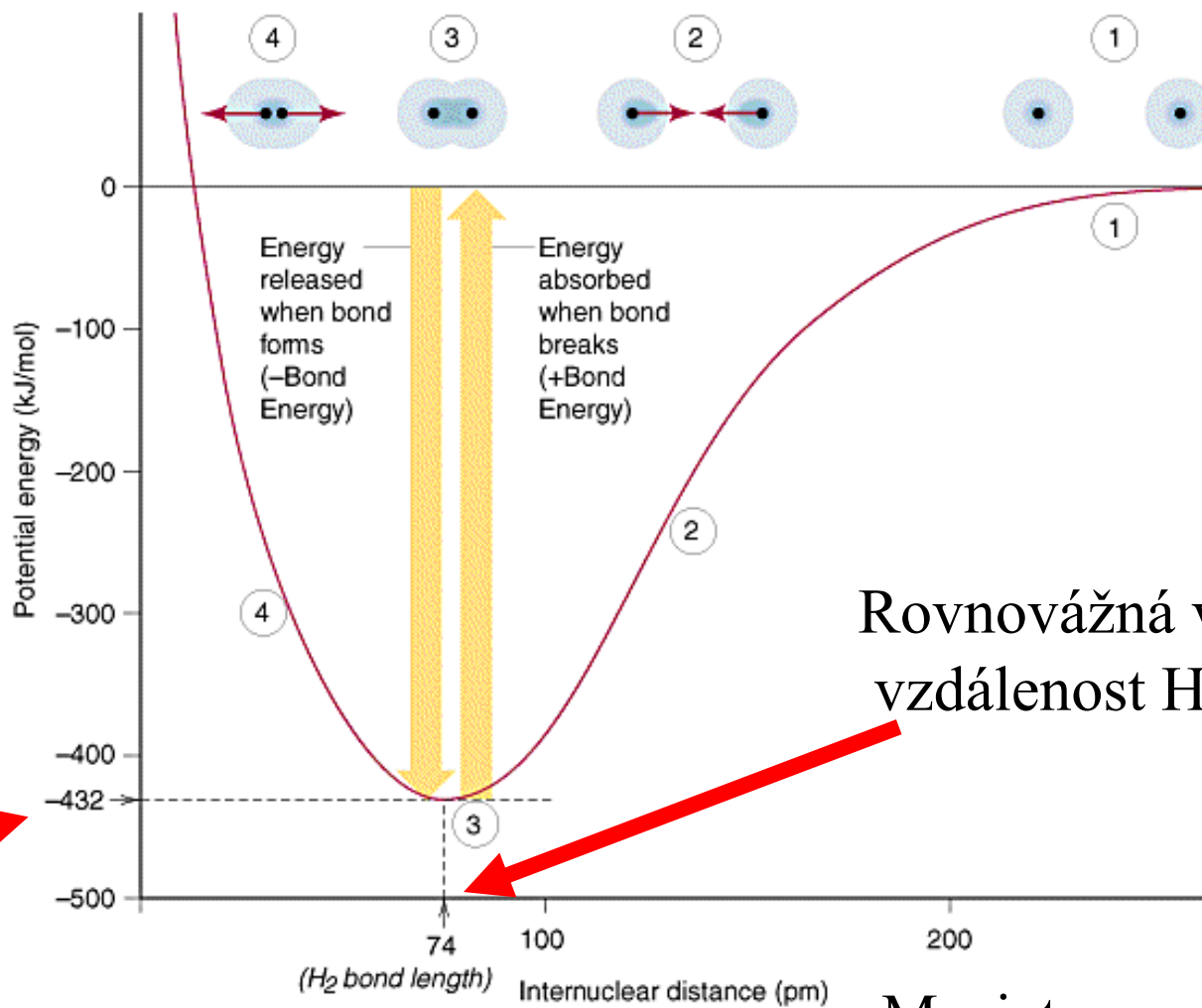
# Mechanické vlastnosti iontových sloučenin



# Kovalentní vazba



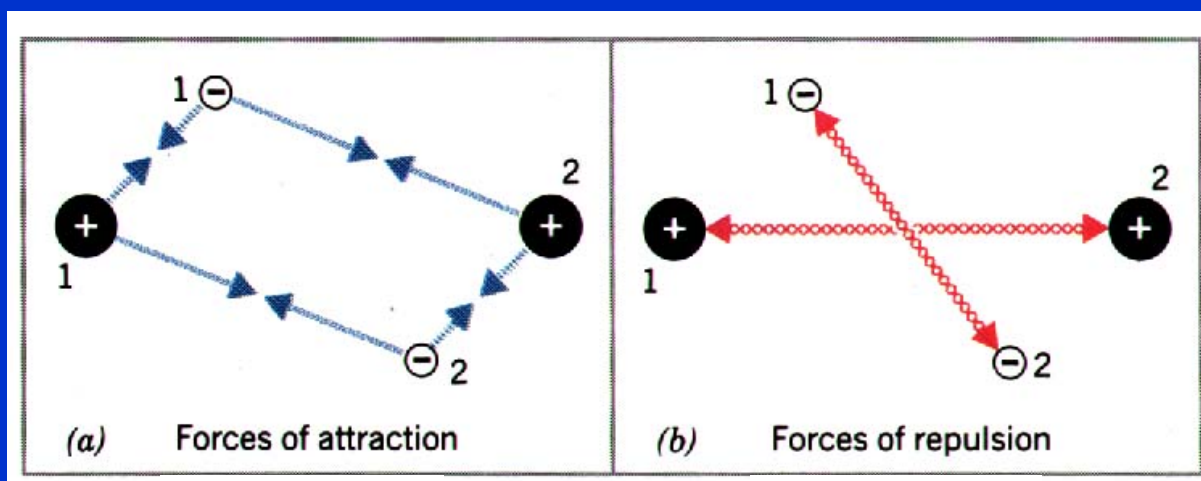
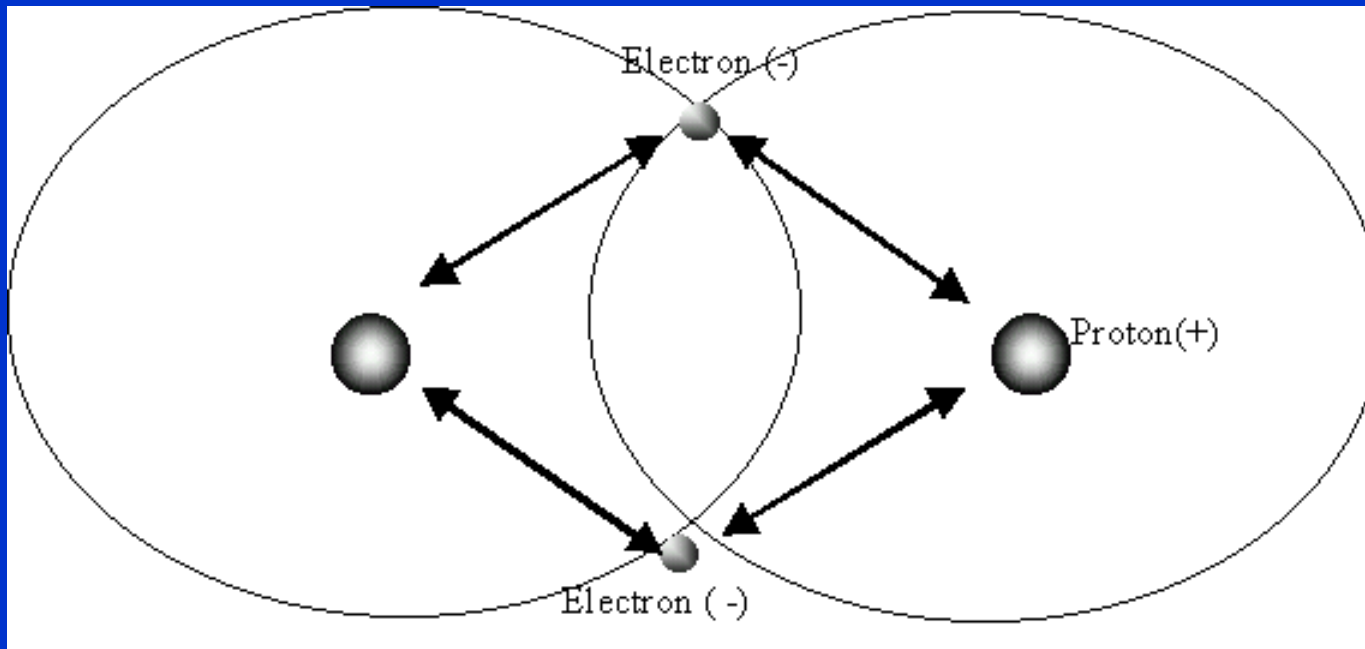
# Kovalentní vazba v molekule vodíku H<sub>2</sub>



Vazebná energie H-H

Rovnovážná vazebná vzdálenost H-H

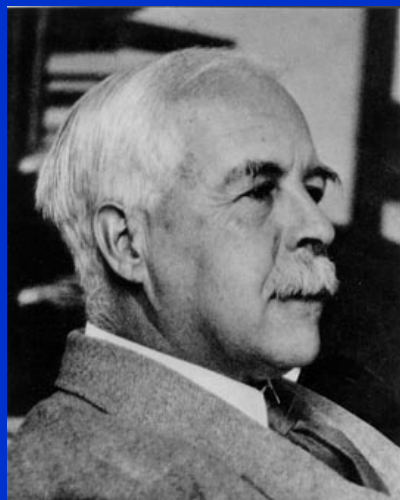
Meziatomová vzdálenost



Přitažlivé

Odpudivé

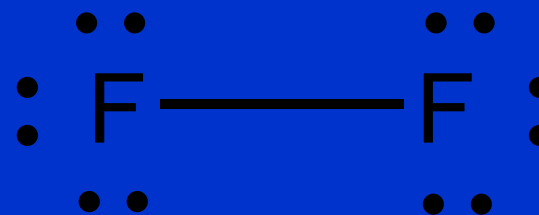
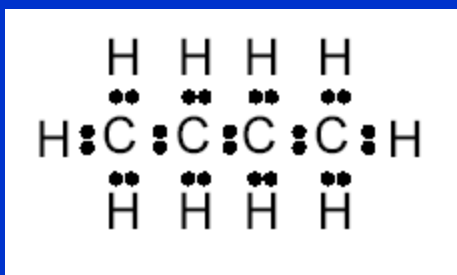
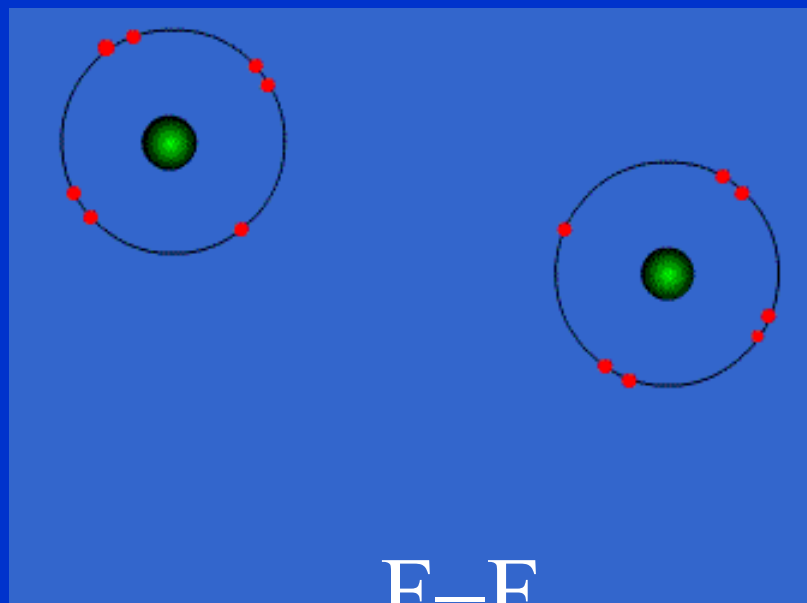













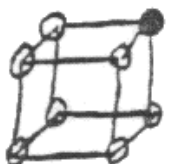
Gilbert N. Lewis  
(1875-1946)

## Kovalentní vazba

Atomy se sdílením elektronových párů snaží doplnit svou valenční sféru na elektronový oktet



# Oktetové pravidlo

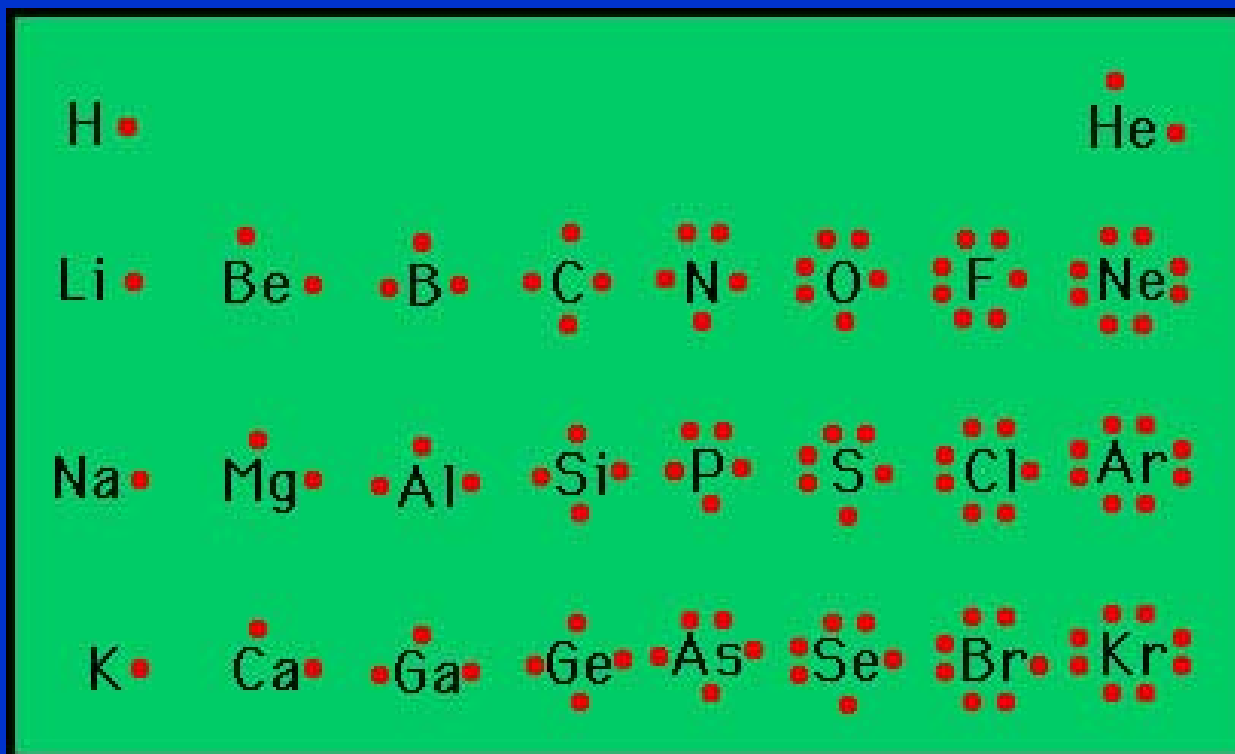
*Li*  *Helium*   
*Be Mg*  *and the*  
*B Al*  *may be*  
*C Si*  *parts of Na row*  
*N P*  *Probably some kernel inside the atom thus*  
*O S*    
*F Cl*   
*Na Cl* 

(a)  $\overset{+}{\text{Na}}$   $\overset{++}{\text{Mg}}$  --  $\overset{++++}{\text{Cl}}$   
 (b)  $\overset{---}{\text{Na}}$   $\overset{===}{\text{Mg}}$   $\overset{\bar{c}}{\text{Cl}}$

Gilbert N. Lewis  
 1902



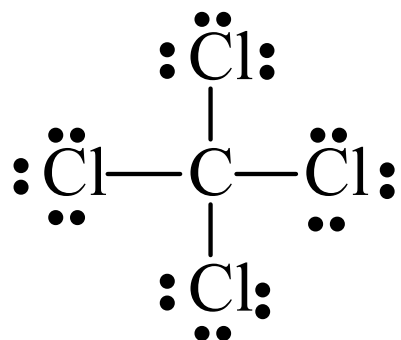
# Lewisovy struktury



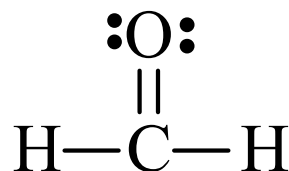
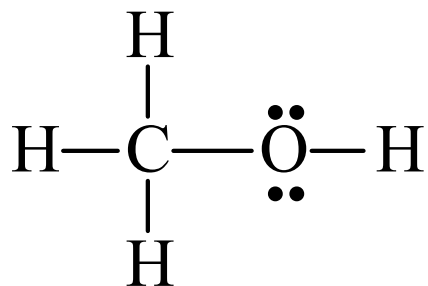
## Lewisovy struktury

- Tvorba stabilní sloučeniny ( $n$  atomů) = atomy dosáhnou konfigurace vzácného plynu.
- Sečti valenční elektrony všech atomů,  $\pm$  náboj =  $E$ .
- Pro oktety potřebujeme  $8n$  elektronů.  $8n - E$  musí být sdíleno.
- Použij dvojice elektronů k vytvoření jednoduchých vazeb mezi atomy (=  $S$ ).
- Zbývající sdílené elektrony ( $P = 8n - E - S$ ) umísti tak, aby byl vytvořen duet pro H atomy a oktet pro C, N, O, F.
- Nesdílené elektrony rozmísti jako volné elektronové páry.
- Sloučeniny prvků skupiny Be a B mohou být elektronově deficitní.
- Prvky 3. a vyšších period mohou překročit oktet.
- Elektrony převyšující oktet umísti na centrální atom.

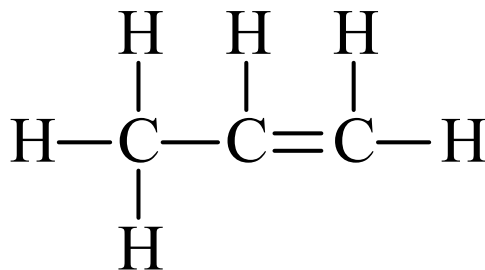
# Lewisovy struktury



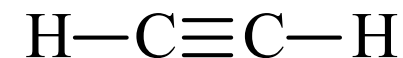
$n = 5$ ,  $E = 32$  (počet elektronů)  
 $8n - E = 40 - 32 = 8$  sdíleno  
 $S = 8$  (4 jednoduché vazby)  
 $P = 8n - E - S = 0$  (násobné vazby)  
 $E - S - P = 24$  (volné el. páry = 12)



$n = 4$ ,  $E = 12$  (počet elektronů)  
 $2 \cdot 2 + 2 \cdot 8 - E = 20 - 12 = 8$  sdíleno  
 $S = 6$  (3 jednoduché vazby)  
 $P = 8n - E - S = 2$  (1 násobná vazba)  
 $E - S - P = 4$  (volné el. páry = 2)



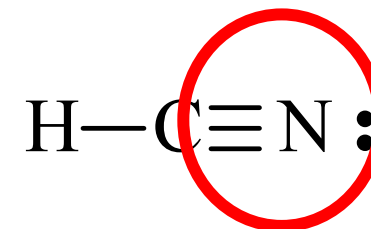
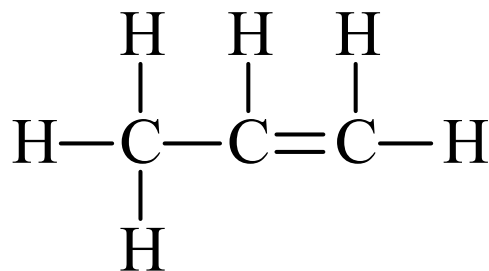
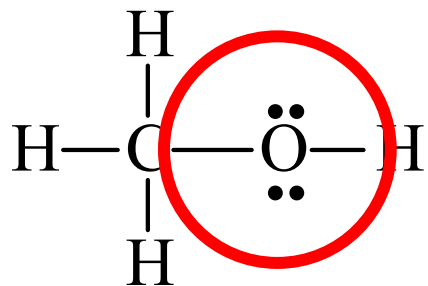
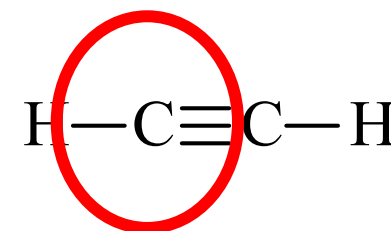
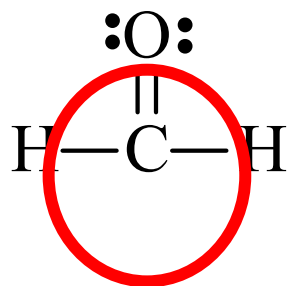
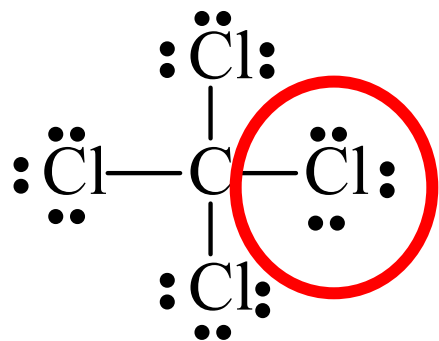
$n = 4$ ,  $E = 10$  (počet elektronů)  
 $2 \cdot 2 + 8 \cdot 2 - E = 20 - 10 = 10$  sdíleno  
 $S = 6$  (3 jednoduché vazby)  
 $P = 8n - E - S = 4$  (2 násobné vazby)  
 $E - S - P = 0$  (volné el. páry = 0)



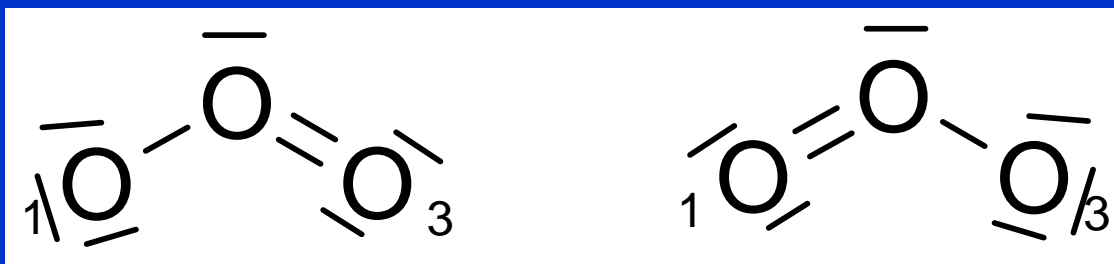
$n = 3$ ,  $E = 10$  (počet elektronů)  
 $2 \cdot 1 + 8 \cdot 2 - E = 18 - 10 = 8$  sdíleno  
 $S = 4$  (2 jednoduché vazby)  
 $P = 8n - E - S = 4$  (2 násobné vazby)  
 $E - S - P = 2$  (volné el. páry = 1)



## Lewisovy struktury - oktety



# Lewisovy struktury

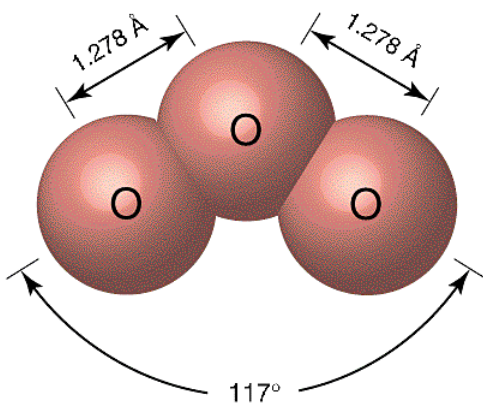
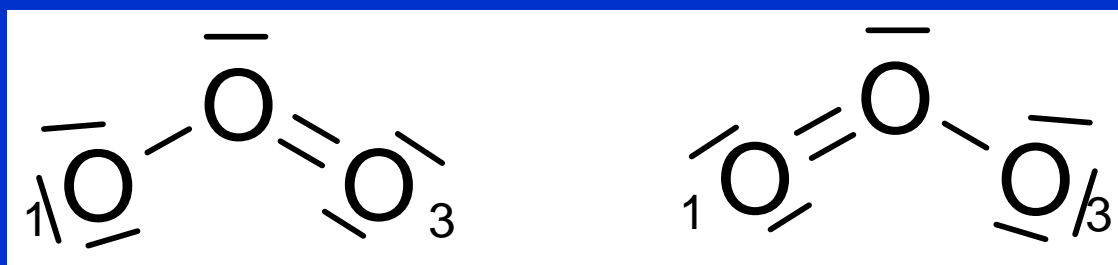


$n = 3$ ,  $E = 18$  (počet elektronů)  
 $8n - E = 24 - 18 = 6$  sdíleno  
 $S = 4$  (2 jednoduché vazby)  
 $P = 8n - E - S = 2$  (1 násobná vazba)  
 $E - S - P = 12$  (volné el. páry = 6)

## Rezonanční struktury

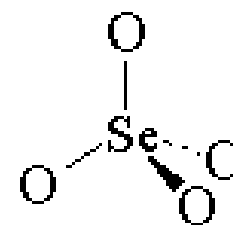
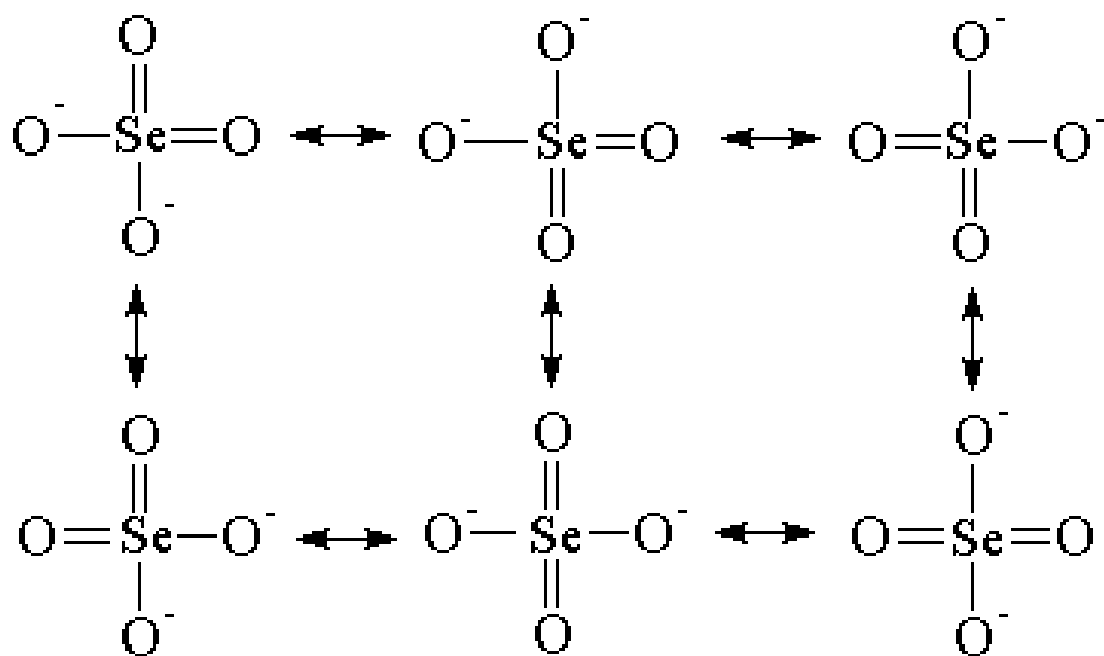
Poloha jader se nemění, umístění elektronů je odlišné.

Popis skutečné situace není ani jedna z možných struktur, není to ani rychlý přechod mezi jednotlivými strukturami, ale superpozice všech.





# Rezonanční struktury

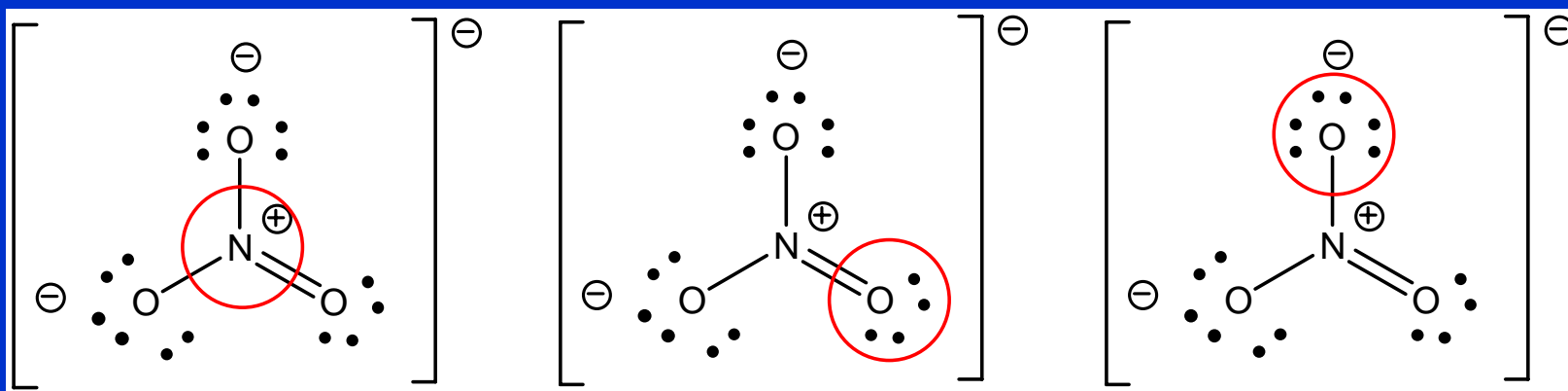


řád vazby = 1,5  
náboj na O = -0,5

## Formální náboj

**Oxidační číslo** = všechny e k elektronegativnějšimu prvku  
Formální oxidační stav pro výpočet výměny e v redoxních reakcích.  
Není to skutečný náboj na daném atomu.

**Formální náboj** = rozdíl mezi počtem valenčních elektronů na volném atomu a valenčními elektrony přiřazenými atomu v molekule: volné páry patří celé danému atomu, vazebné páry jsou rozděleny mezi partnery.



## Formální náboj

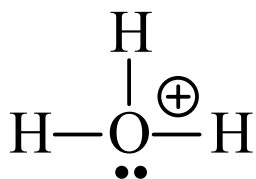
Formální náboj = rozdíl mezi počtem valenčních elektronů na volném atomu a valenčními elektrony přiřazenými atomu v molekule: volné páry patří celé danému atomu, vazebné páry jsou rozděleny mezi partnery.

Atomy se snaží dosáhnout minimálního formálního náboje, nejlépe nula.

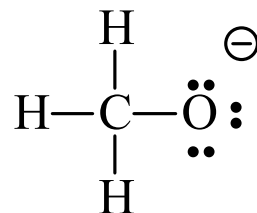
**Negativní formální náboj** je umístěn na **nejelektronegativnějším** atomu.

**Součet formálních nábojů** v molekule (iontu) musí být roven **celkovému náboji** na dané částici.

## Formální náboj v $\text{H}_3\text{O}^+$ , $\text{CH}_3\text{O}^-$ , $\text{CH}_3^+$ , $\text{CO}$ , $\text{N}_3^-$

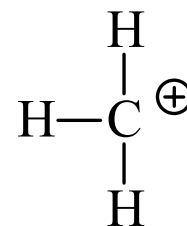


$$\text{O}: 6 - 5 = +1$$

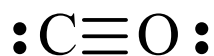


$$\text{C}: 4 - 4 = 0$$

$$\text{O}: 6 - 7 = -1$$

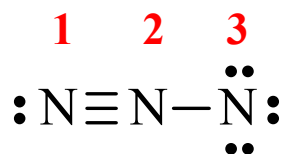


$$\text{C}: 4 - 3 = +1$$



$$\text{C}: 4 - 5 = -1$$

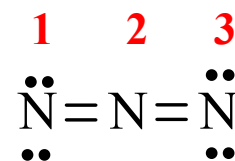
$$\text{O}: 6 - 5 = +1$$



$$\text{N}_1: 5 - 5 = 0$$

$$\text{N}_2: 5 - 4 = +1$$

$$\text{N}_3: 5 - 7 = -2$$

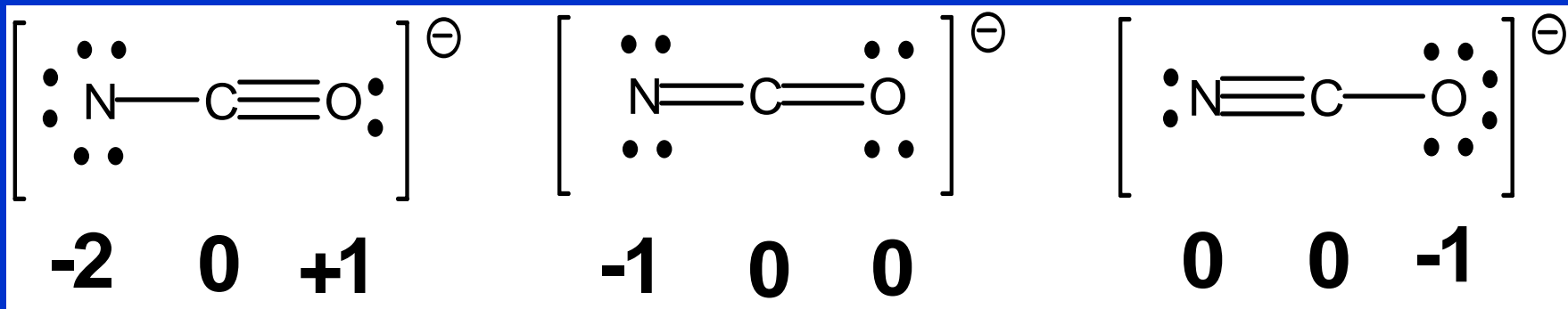


$$\text{N}_1: 5 - 6 = -1$$

$$\text{N}_2: 5 - 4 = +1$$

$$\text{N}_3: 5 - 6 = -1$$

## Formální náboj

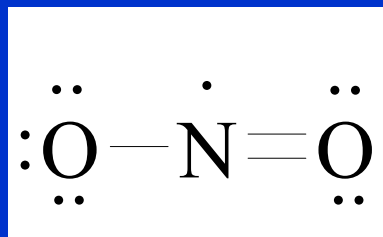
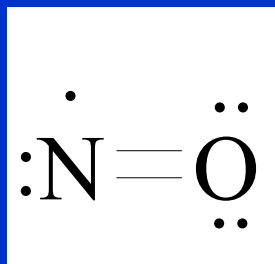


velké hodnoty  
formálního náboje

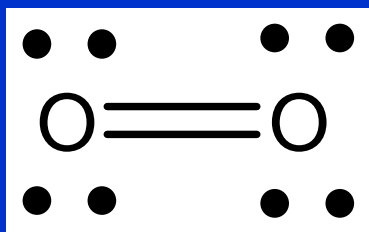
záporný náboj na méně  
elektronegativním prvku

nejlepší vzorec

## Molekuly s nepárovými elektrony



Dimerizace NO<sub>2</sub>·



O<sub>2</sub>

paramagnetická molekula = má nepárové elektrony

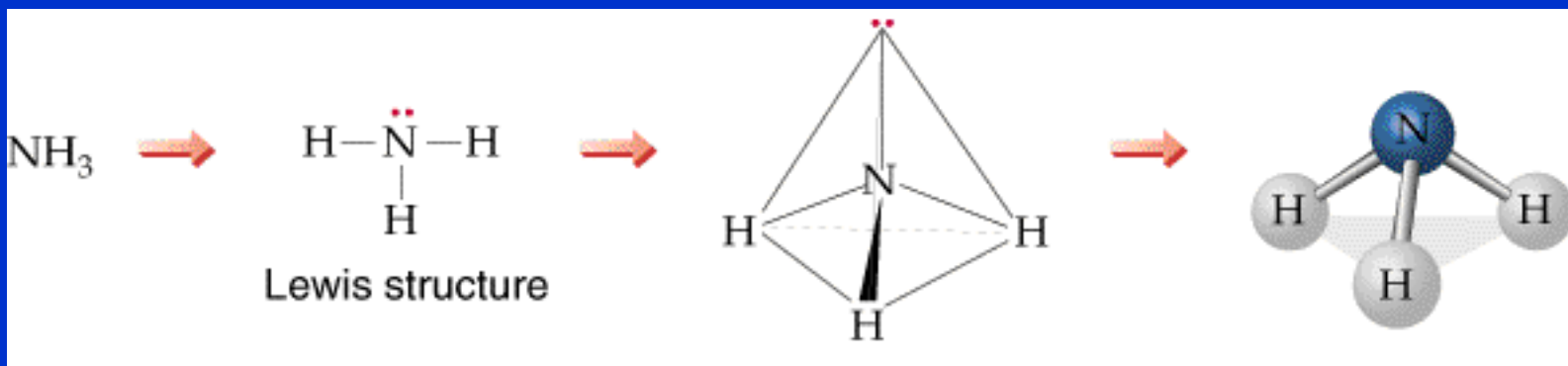
= Lewisovy struktury nevystihují  
realitu zcela dokonale

# VSEPR

VSEPR = valence shell electron repulsion

Odpuzování elektronových párů ve valenční vrstvě

**Empirický** soubor pravidel, podle kterého lze snadno určit tvar koordinační sféry atomů a tedy tvar molekul, iontů a molekulových fragmentů prvků hlavních skupin nebo přechodných kovů s elektronovou konfigurací  $d^0$  nebo  $d^{10}$ .



# VSEPR

Molekula = centrální atom + ligandy + volné elektronové páry

ligandy = jiné atomy nebo skupiny

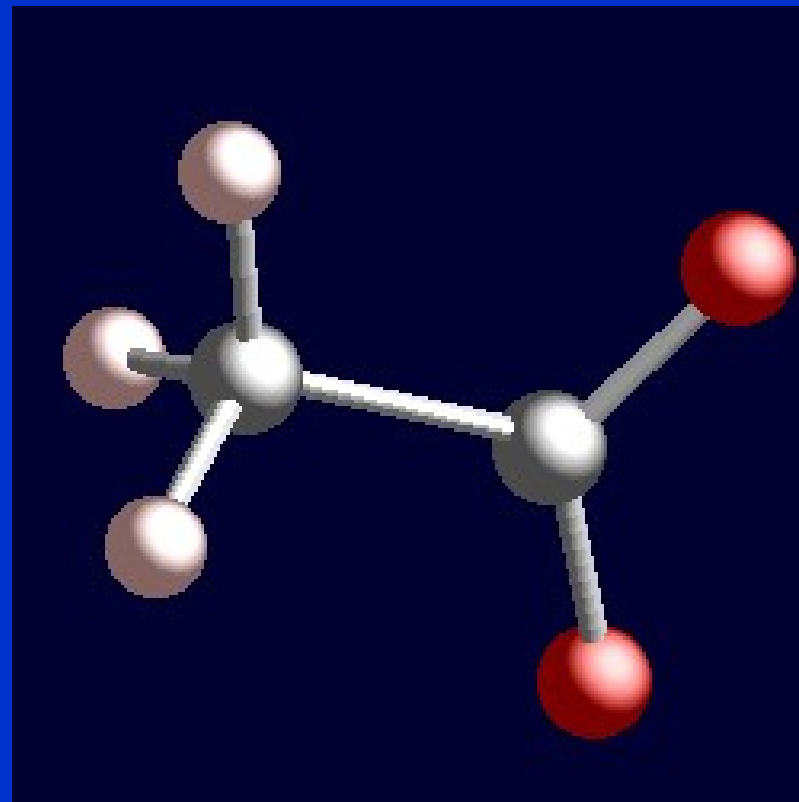
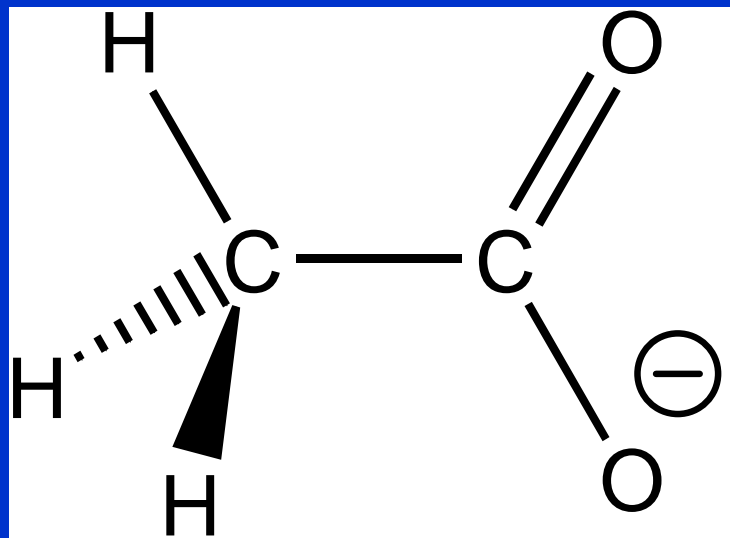
Ligandy mají obvykle vyšší elektronegativitu než centrální atom  
(ne H nebo kovy)

Valenční elektrony uspořádány do dvojic:

- Vazebné elektronové páry
- Vlné (nevazebné) elektronové páry

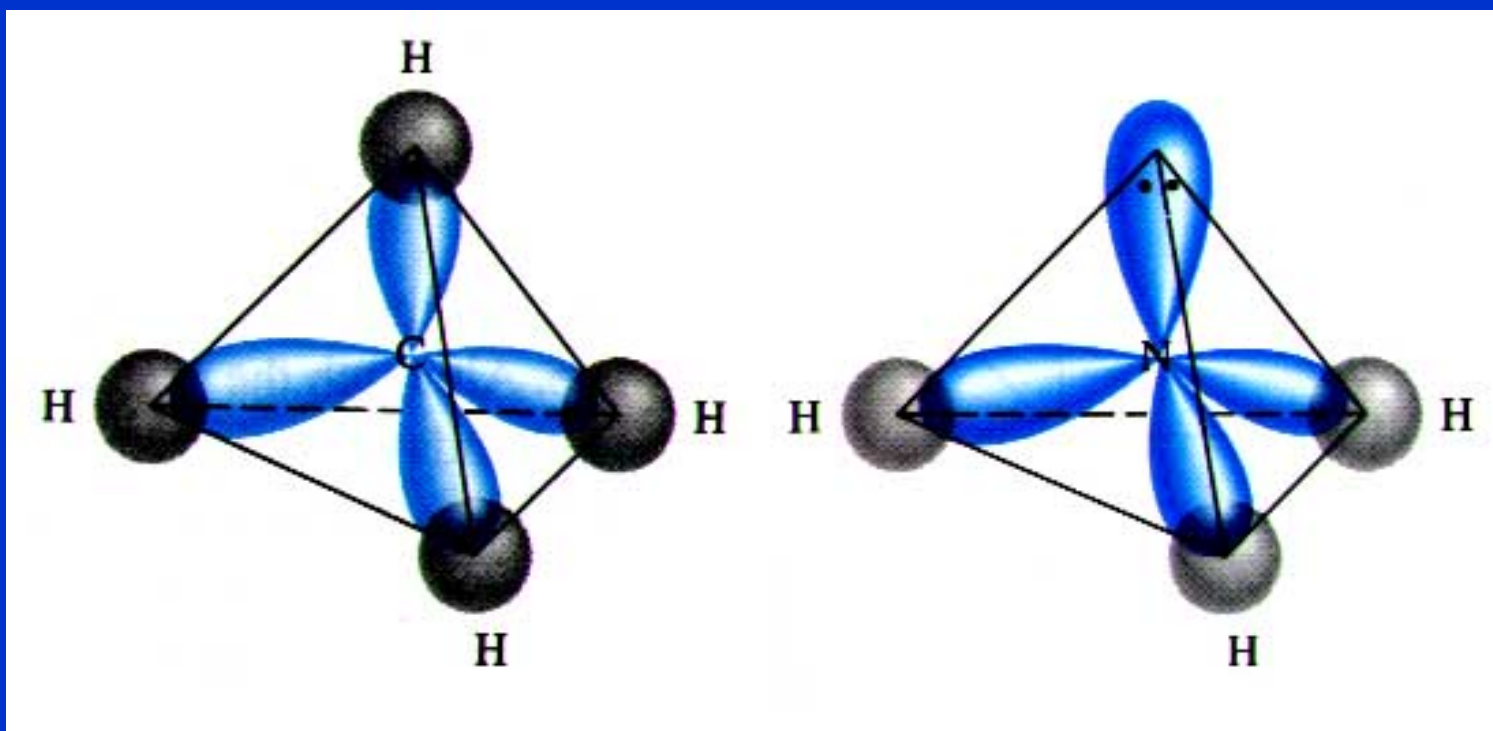


## Centrální atom - ligand



# VSEPR

Pro určení základního tvaru koordinační sféry atomu je důležitý počet obsazených **směrů** = počet volných elektronových párů a počet vazeb (bez ohledu na násobnost !!)



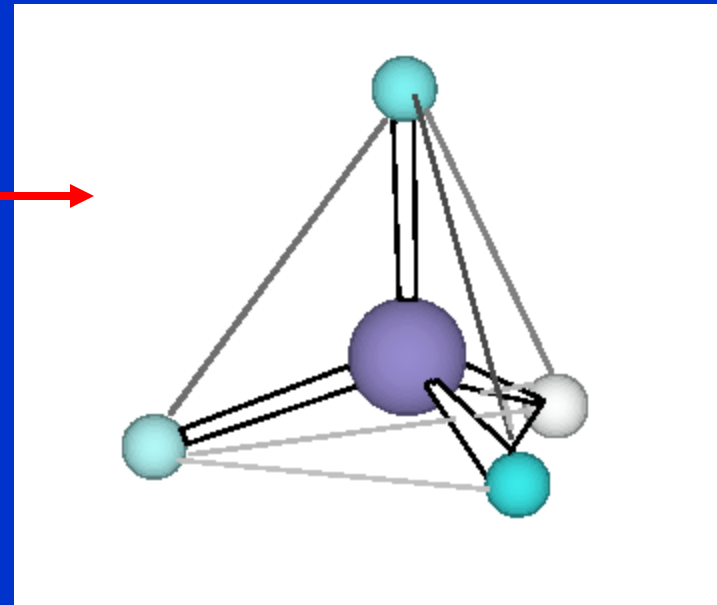
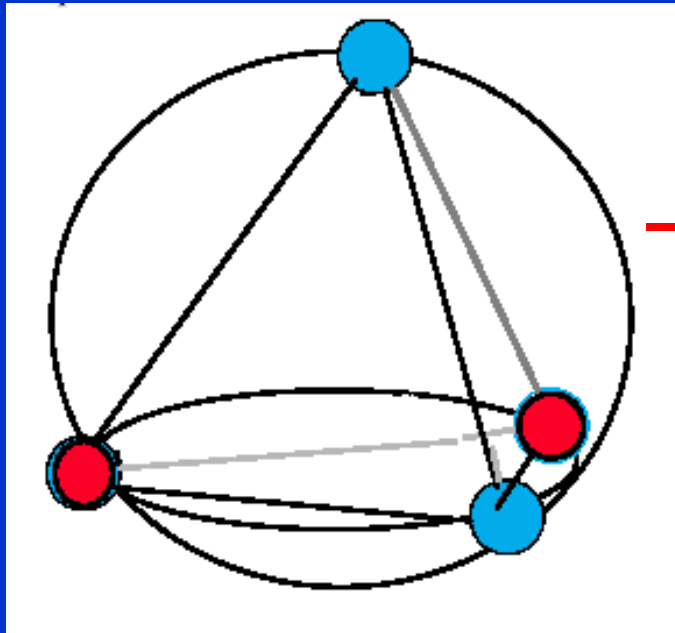
# VSEPR

Každý elektronový pár zaujímá určitý prostor kolem centrálního atomu a „zabraňuje“ přístupu ostatním elektronům (odpuzuje je) = Pauliho princip výlučnosti.

Elektronové páry se uspořádají v prostoru kolem centrálního atomu **co nejdále od sebe**, aby se co nejméně odpuzovaly.

**Volné** elektronové páry „zaujímají“ **větší** část prostoru kolem centrálního atomu a jsou mu blíže než **vazebné** elektronové páry.

## Tetraedrická molekula methanu $\text{CH}_4$



Umístit 4 body na povrchu koule tak, aby měly mezi sebou maximální vzdálenost → tetraedr

# VSEPR

Volné elektronové páry a jednotlivé vazby zaujmou v prostoru kolem centrálního atomu uspořádání s nejnižší energií, tj. s nejmenším odpuzováním mezi elektronovými páry:

centrální atom + 2 ligandy

centrální atom + 3 ligandy

centrální atom + 4 ligandy

centrální atom + 5 ligandů

centrální atom + 6 ligandů

centrální atom + 7 ligandů

lineární

rovnostranný trojúhelník

tetraedr

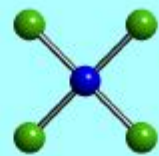
trigonální bipyramida nebo

čtvercová pyramida

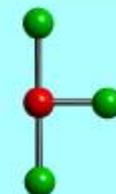
oktaedr

pentagonální bipyramida

# VSEPR



6



5

4



3



2



# VSEPR

Pro pojmenování výsledného tvaru molekuly uvažujeme jen polohy jader, NE volné elektronové páry

Objem obsazený vazebnými el.páry klesá v řadě :

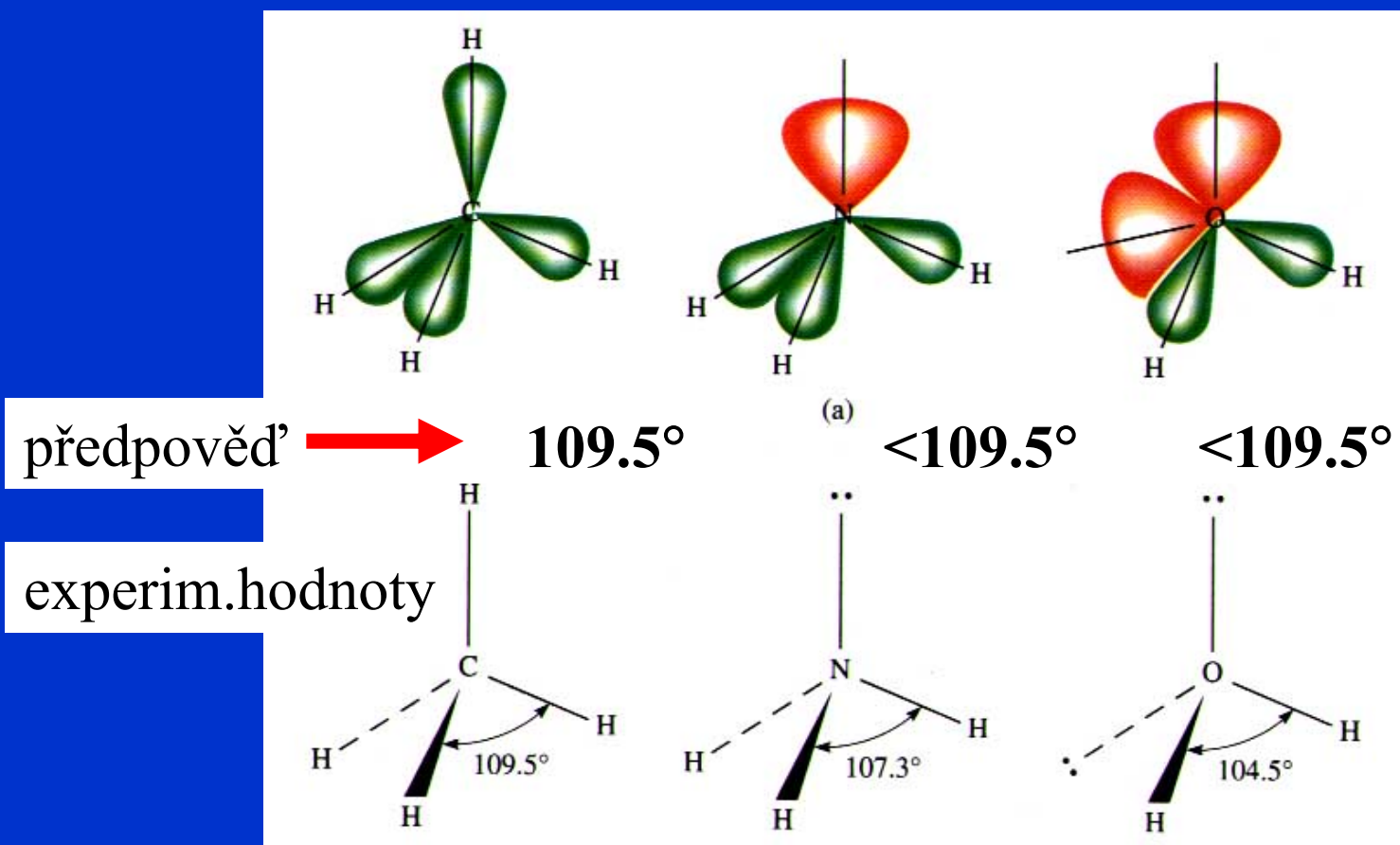
trojná vazba > dvojná vazba > jednoduchá vazba.

Odpuzování mezi el.páry klesá v řadě:

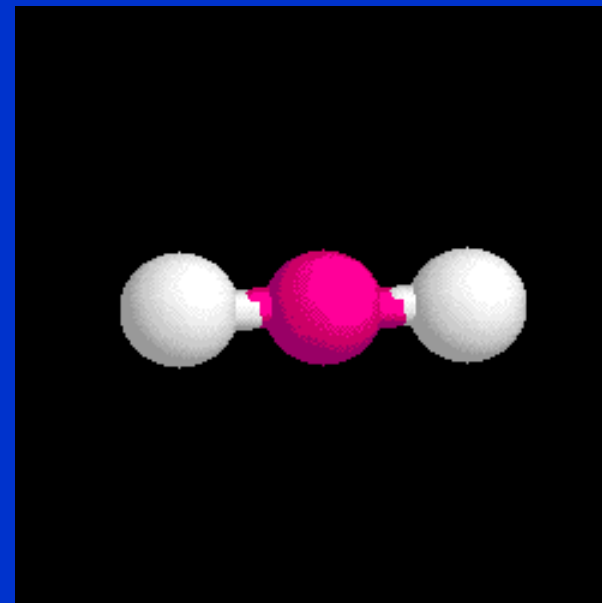
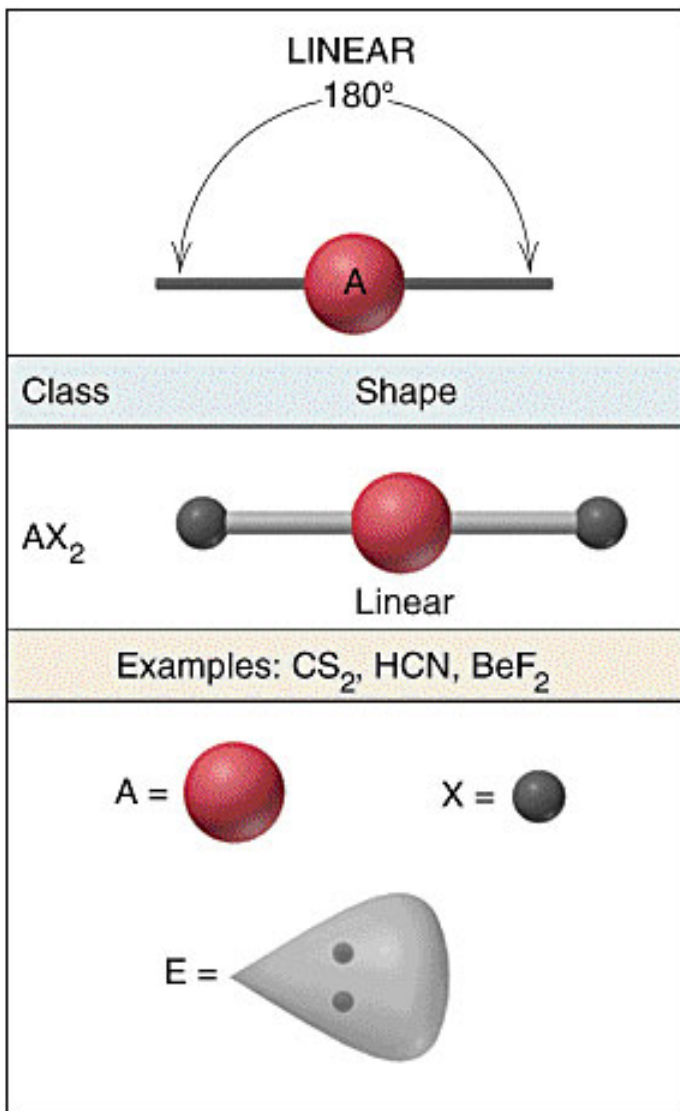
volný-volný > volný-vazebný > vazebný-vazebný

## Změny vazebných úhlů

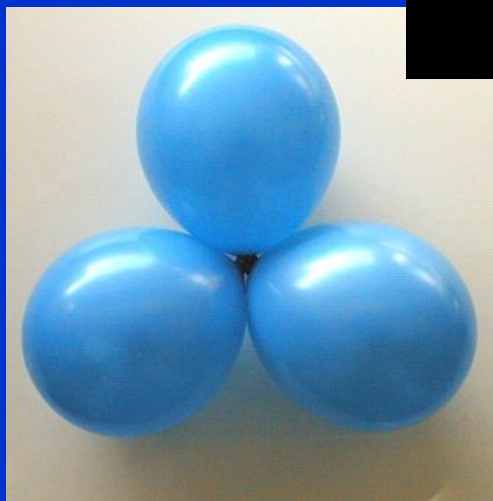
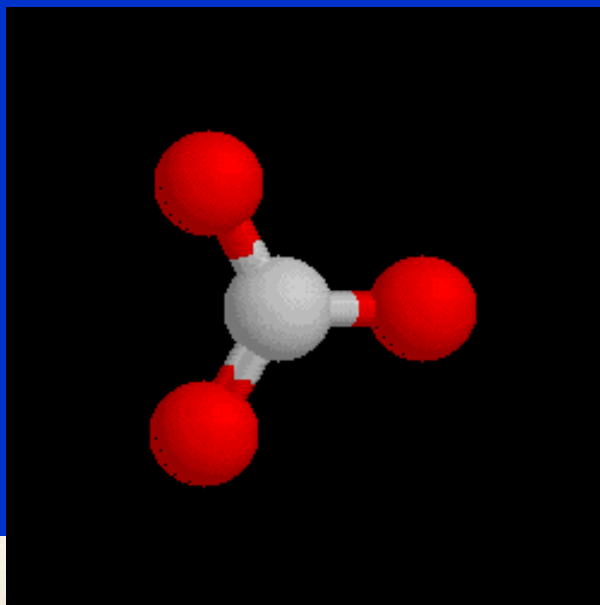
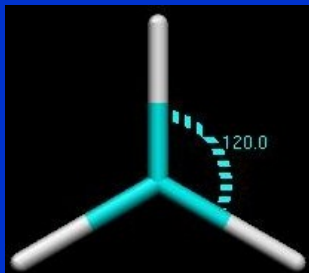
VSEPR předpovídá změnu vazebného úhlu od ideální hodnoty  
Ne však numerickou hodnotu vazebného úhlu







AX<sub>2</sub>  
Vazebný úhel = 180°

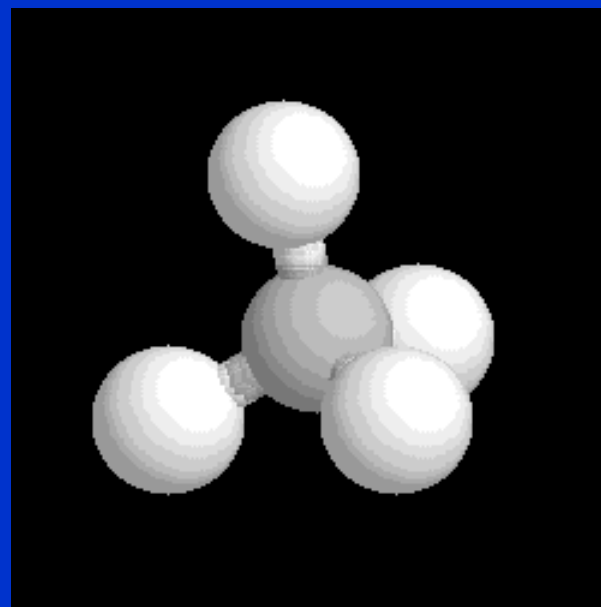
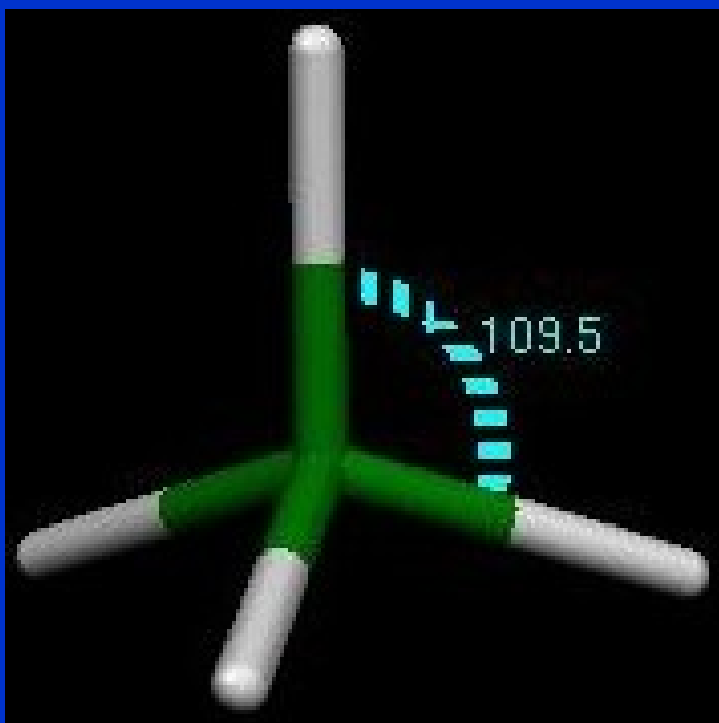


$AX_3$  : Vazebný úhel =  $120^\circ$

$AEX_2$  : Vazebný úhel  $< 120^\circ$

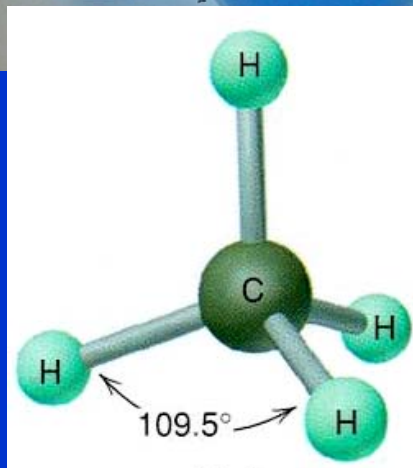
TRIGONAL PLANAR	
Class	Shape
$AX_3$	<p>Trigonal planar</p>
Examples: $SO_3$ , $BF_3$ , $NO_3^-$ , $CO_3^{2-}$	
$AX_2E$	<p>Bent (V shaped)</p>
Examples: $SO_2$ , $O_3$ , $PbCl_2$ , $SnBr_2$	

## Tetraedrický vazebný úhel

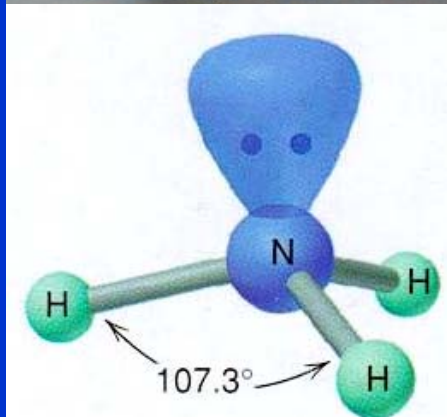


Tetraedrický vazebný úhel =  $109.5^\circ$

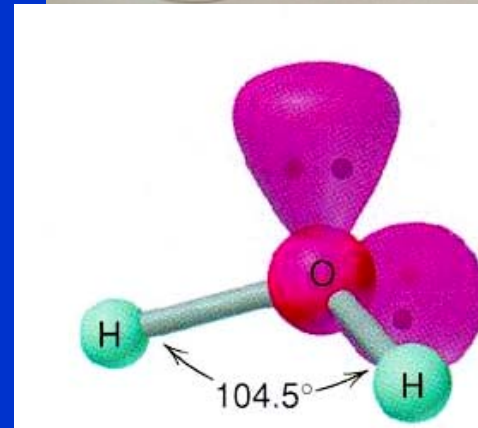
## Deformace vazebných úhlů



Tetraedr



Trojboká pyramida



Lomená

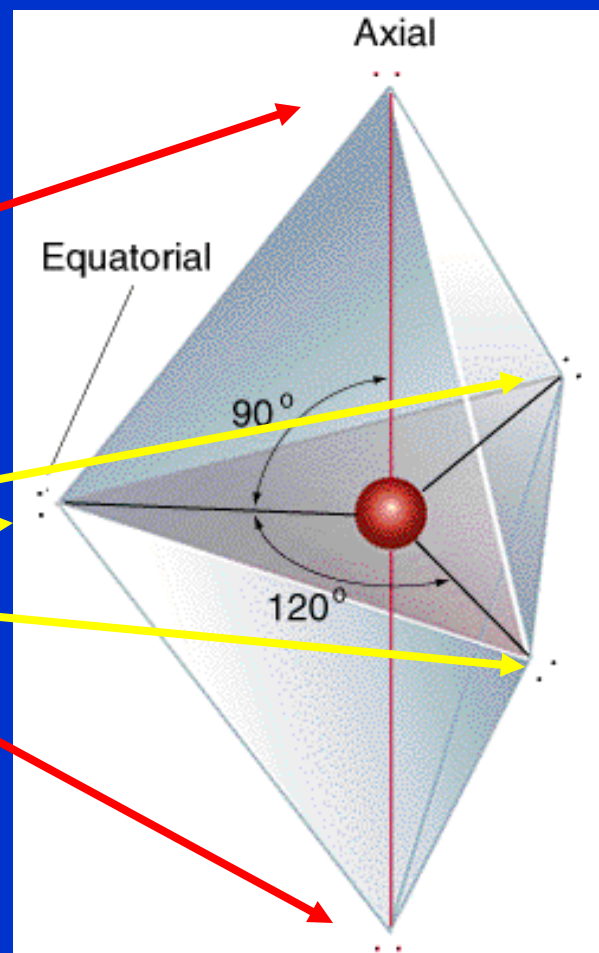
# Trigonální bipyramida

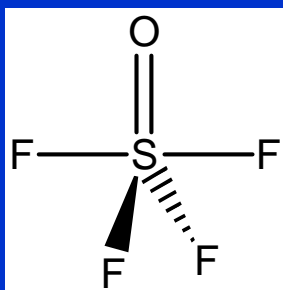
TBP má dva různé typy vrcholů =  
dva chemicky odlišné typy  
substituentů, pozic

Dvě axiální

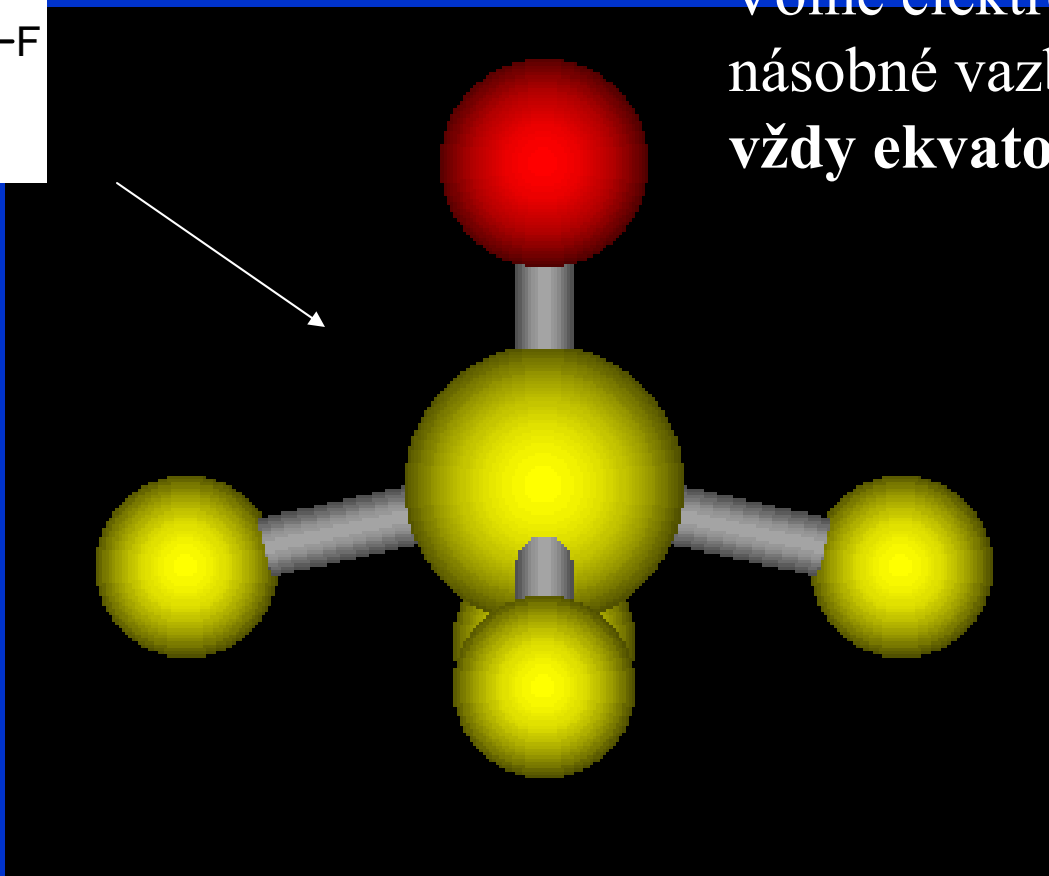
Tři ekvatoriální

Volné elektronové páry a  
násobné vazby obsazují vždy  
ekvatoriální polohy

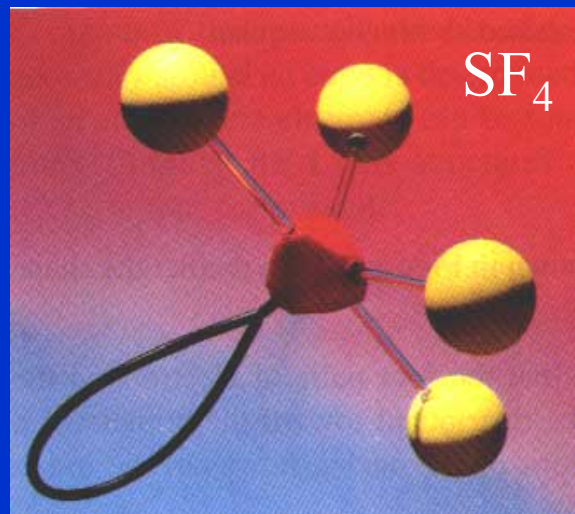
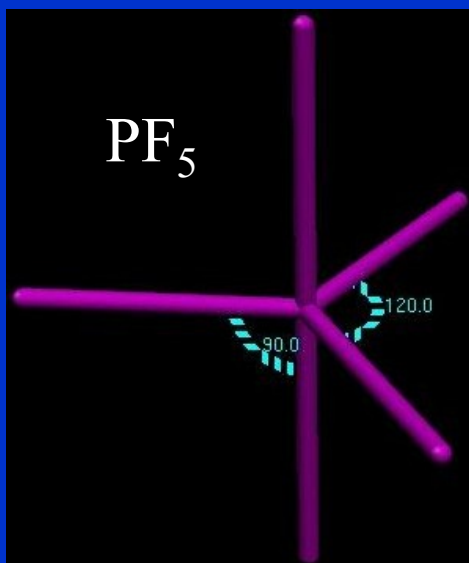




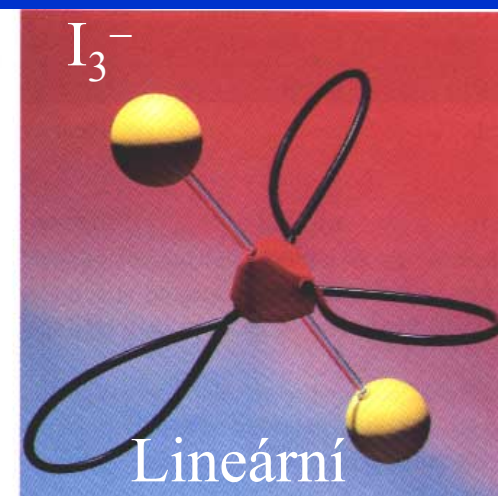
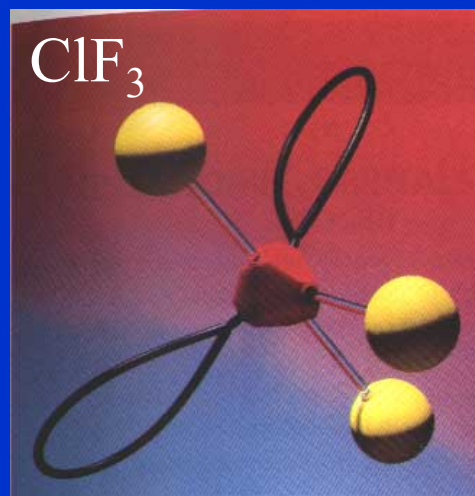
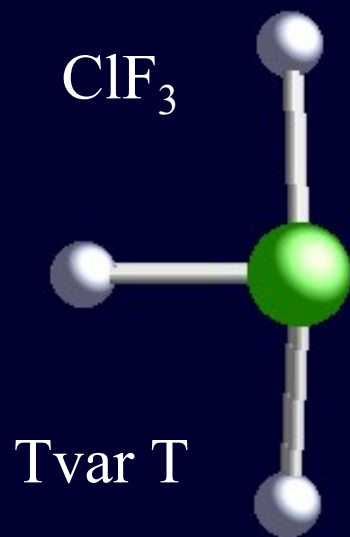
Volné elektronové páry a násobné vazby obsazují vždy ekvatoriální polohy



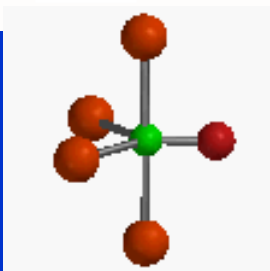
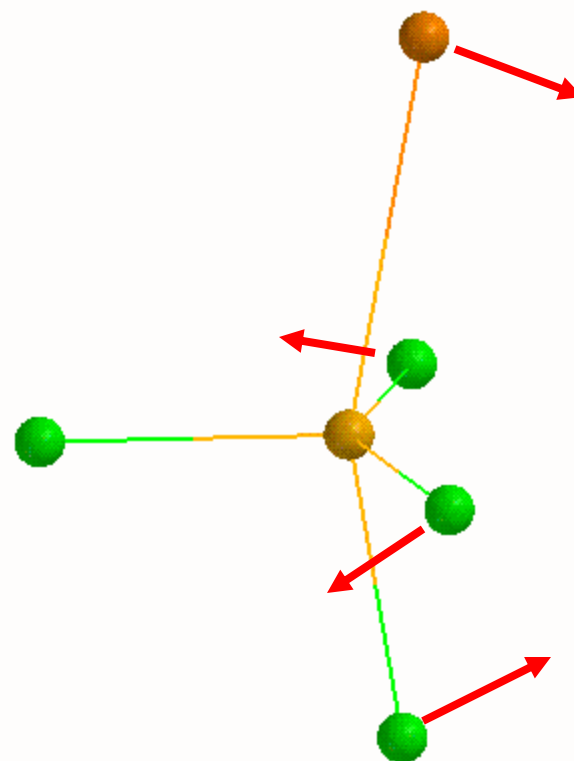
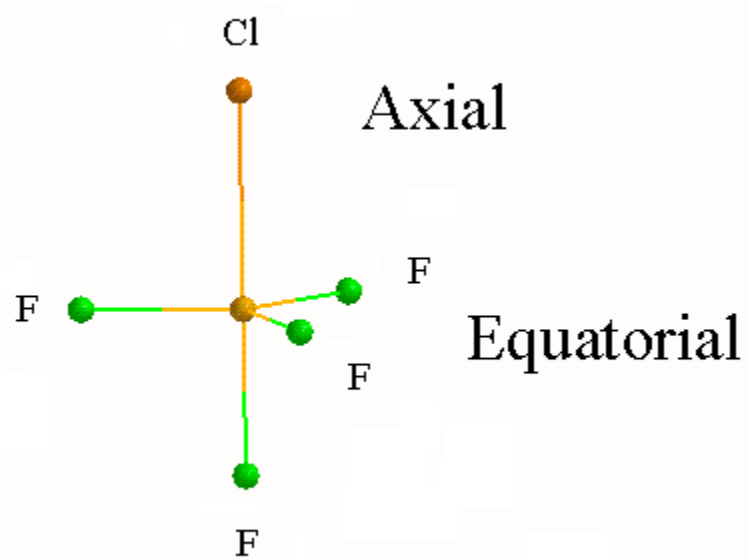
## Trigonální bipyramida



Výsledný název tvaru molekuly určuje poloha jader, neuvažujeme volné elektronové páry

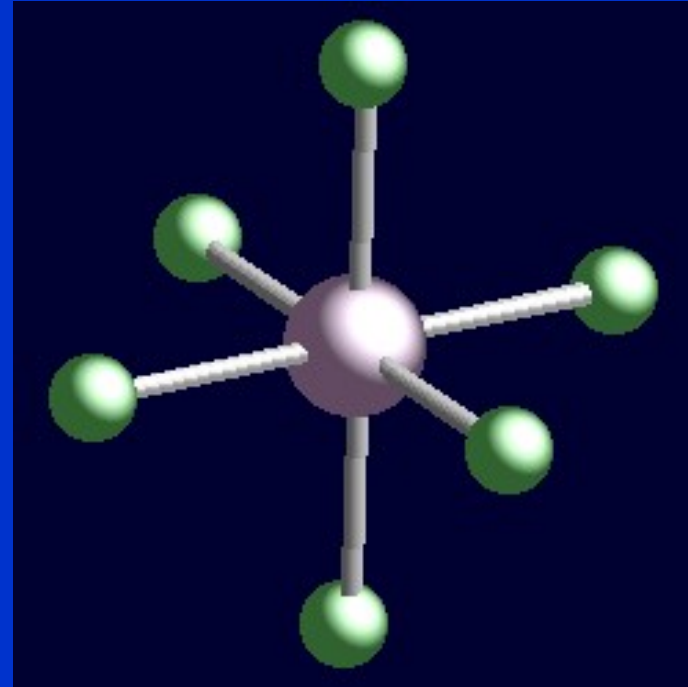
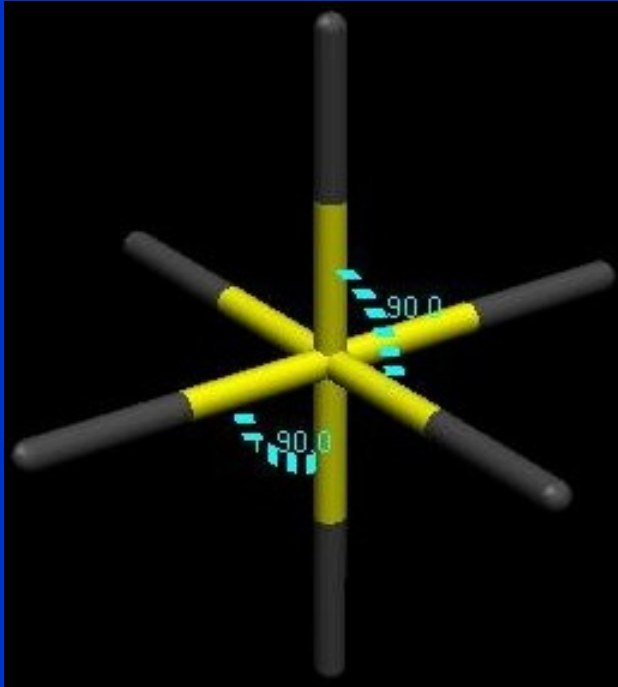


# Trigonální bipyramida (TBP) a čtvercová pyramida (SP)



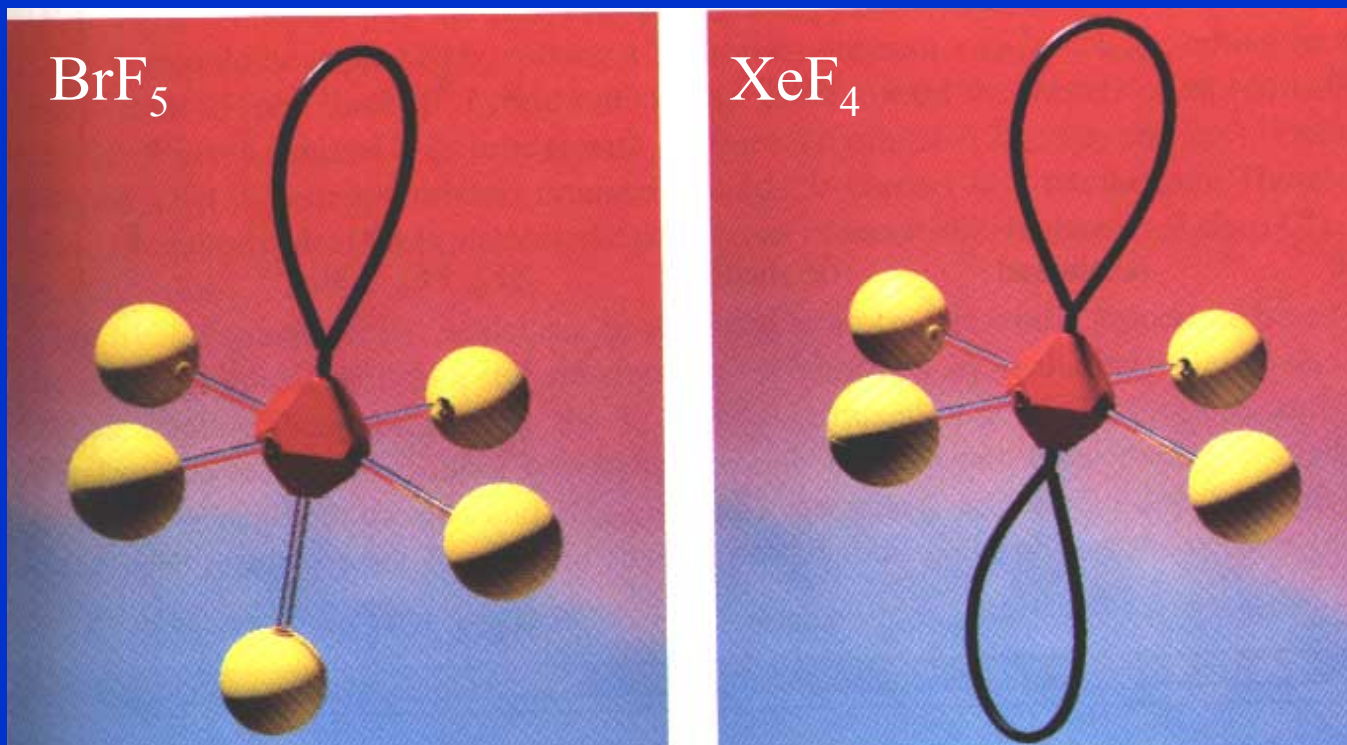


# Oktaedr



Oktaedrický vazebný úhel =  $90^\circ$

# Oktaedr



Čtvercová pyramida

Čtverec

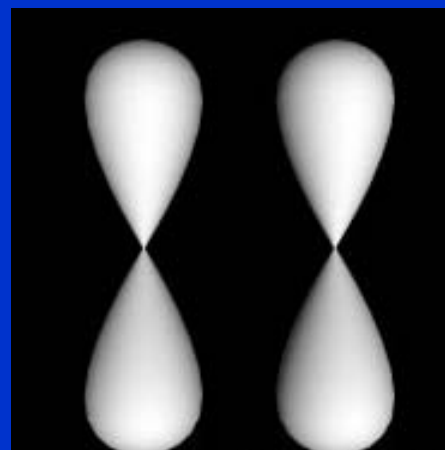
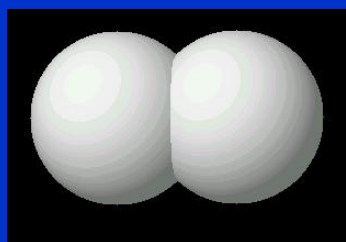
## Překryv orbitalů

Vznik vazby překryvem orbitalů na dvou různých atomech A, B  
Obsazeno dvojicí elektronů

$$\Psi = \Psi_A \times \Psi_B$$

Podmínky překryvu:

- Vhodná symetrie, znaménko vlnové funkce
- Vhodná energie, srovnatelná, ne velmi rozdílná

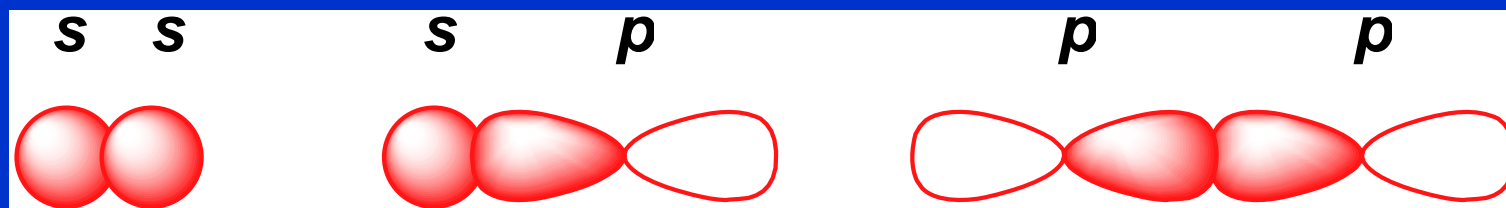


## Typy překryvu orbitalů

### Sigma vazba, $\sigma$

Elektronová hustota lokalizována na spojnici jader

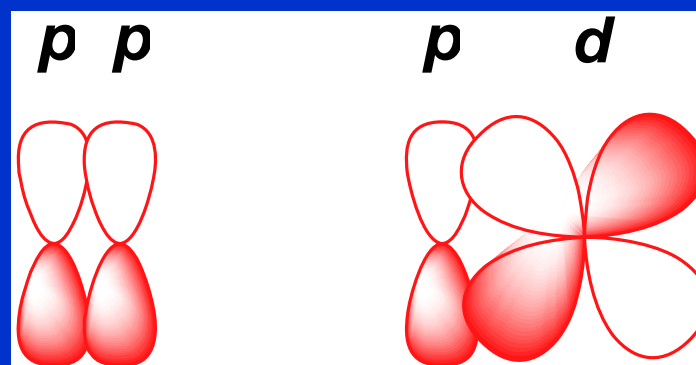
Spojnicí jader obvykle značíme jako osu  $z$



### Pi vazba, $\pi$

Elektronová hustota lokalizována mimo spojnici jader

Jedna uzlová rovina

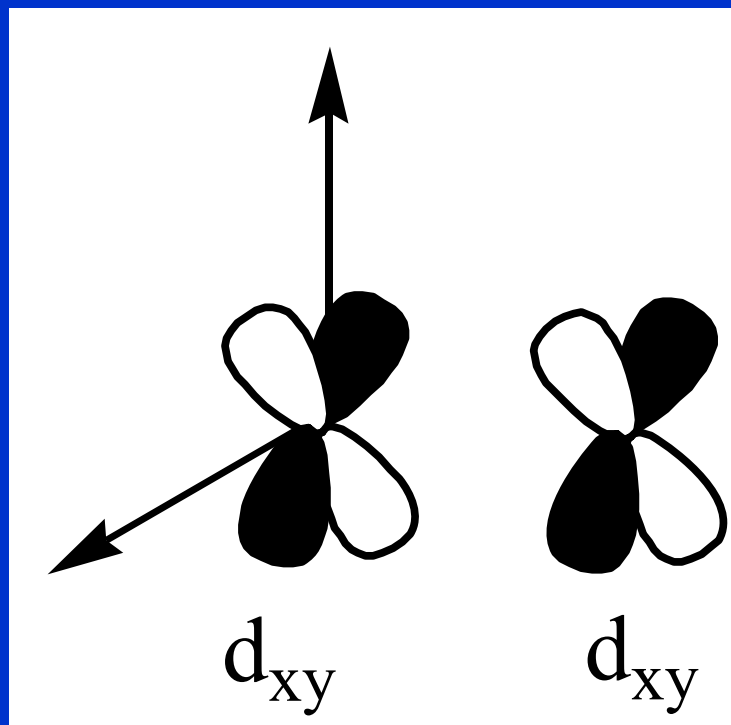


## Typy překryvu orbitalů

### Delta vazba, $\delta$

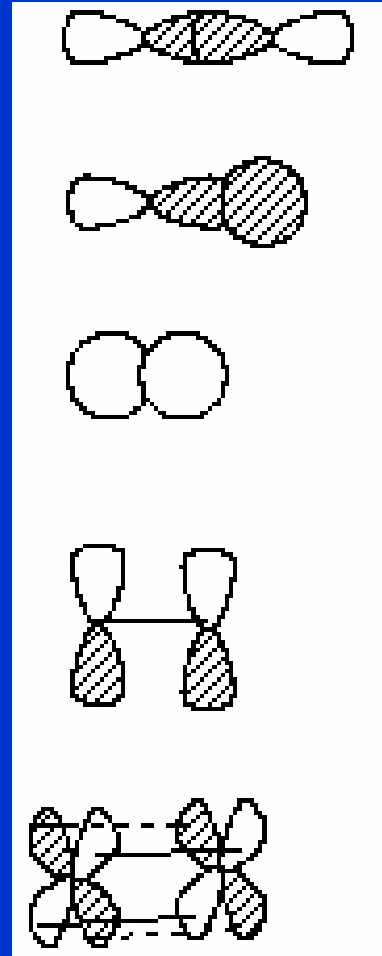
Elektronová hustota lokalizována mimo spojnici jader

Dvě uzlové roviny

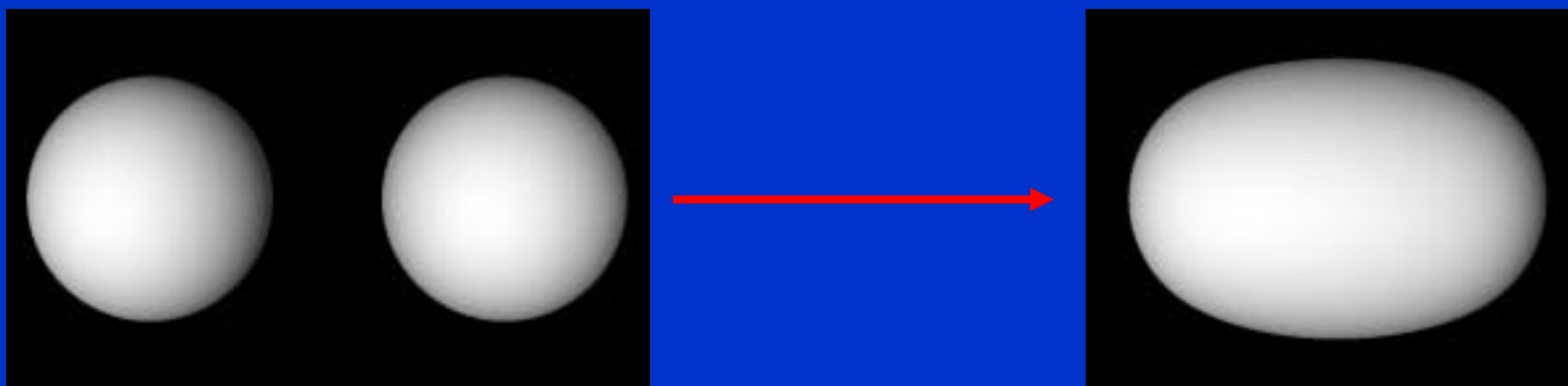


# Typy překryvu orbitalů

Překryv klesá  
slabší vazba



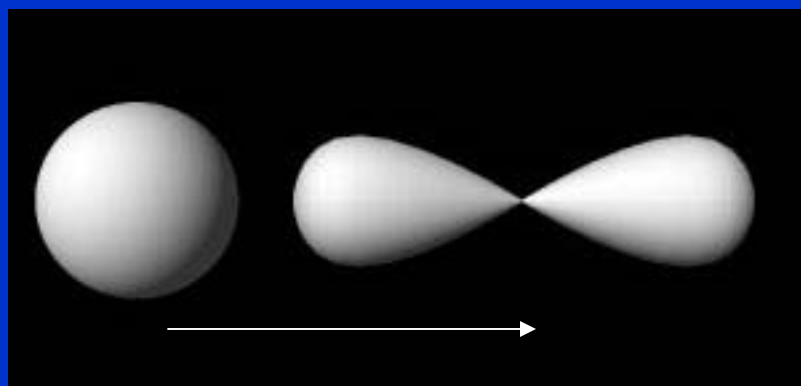
## Sigma vazba, $\sigma_{ss}$



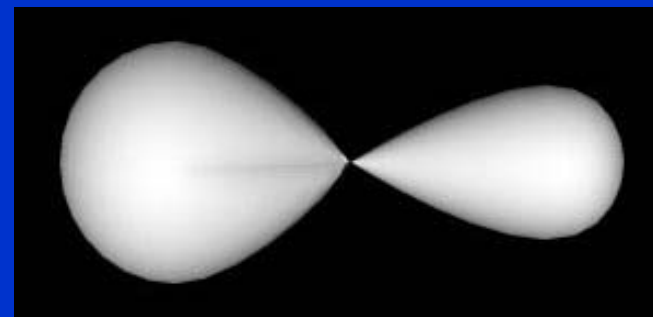
$\sigma_{ss}$

Elektronová hustota lokalizována na spojnici jader

# Sigma vazba, $\sigma_{sp}$



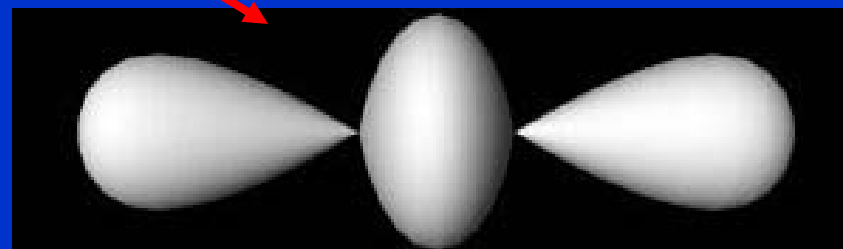
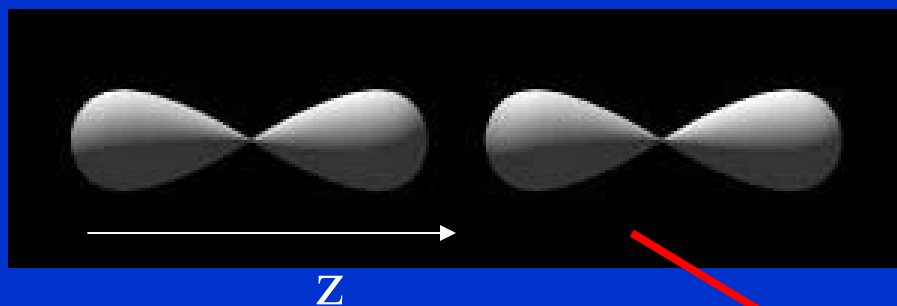
Z



$\sigma_{sp}$



# Sigma vazba, $\sigma_{pp}$

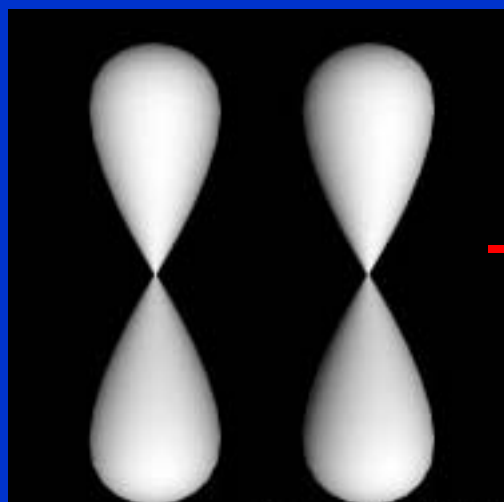


$\sigma_{pp}$

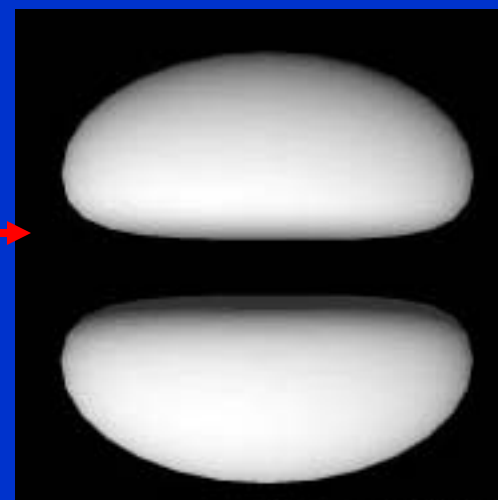
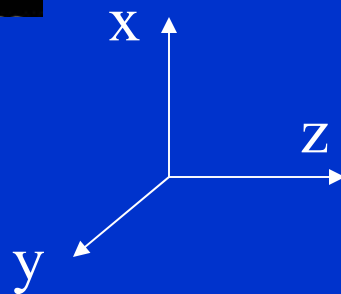
## Pi vazba, $\pi$

Elektronová hustota lokalizována mimo spojnici jader

Jedna uzlová rovina



Stejně pro  $p_x$  a  $p_y$



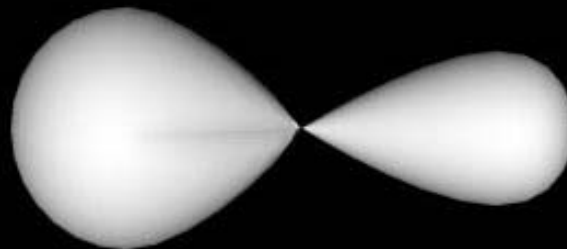
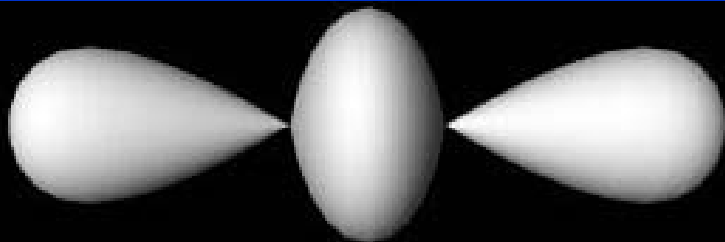
$2 \times \pi_{pp}$

# Účinnost překryvu orbitalů

Kratší vzdálenost = lepší překryv

Při stejné vzdálenosti jader:  $\sigma > \pi > \delta$

Pro  $\sigma$ :  $p_z-p_z > p_z-s > s-s$



## Vazebné parametry


Anion	Řád vazby	Vazebná délka, Å
$\text{ClO}^-$	1.0	1.67
$\text{ClO}_2^-$	1.50	1.58
$\text{ClO}_3^-$	1.67	1.49
$\text{ClO}_4^-$	1.75	1.43
$\text{ClO}_2^+$	2.0	1.39

Řád vazby roste

Vazebná délka klesá

## Vazebné parametry

vazba	délka [ $\text{\AA}$ ]	energie [ $\text{kJ mol}^{-1}$ ]
C–C	1.54	348
C=C	1.34	612
C≡C	1.20	837
C–O	1.43	360
C=O	1.23	743
C≡O	1.13	1074
N–N	1.47	163
N=N	1.24	409
N≡N	1.10	944

Vazba	E, kJ mol <sup>-1</sup>	Polarita vazby
H-H	431	Nepolární
F-F	155	Nepolární
H-F	565	Polární
C-I	240	 Polarita vazby roste
C-Br	276	
C-Cl	339	
C-F	485	
t. tání, °C		
Ge-Ge	188	937
Si-Si	226	1412
C-C	347	3827

## Vazebné parametry

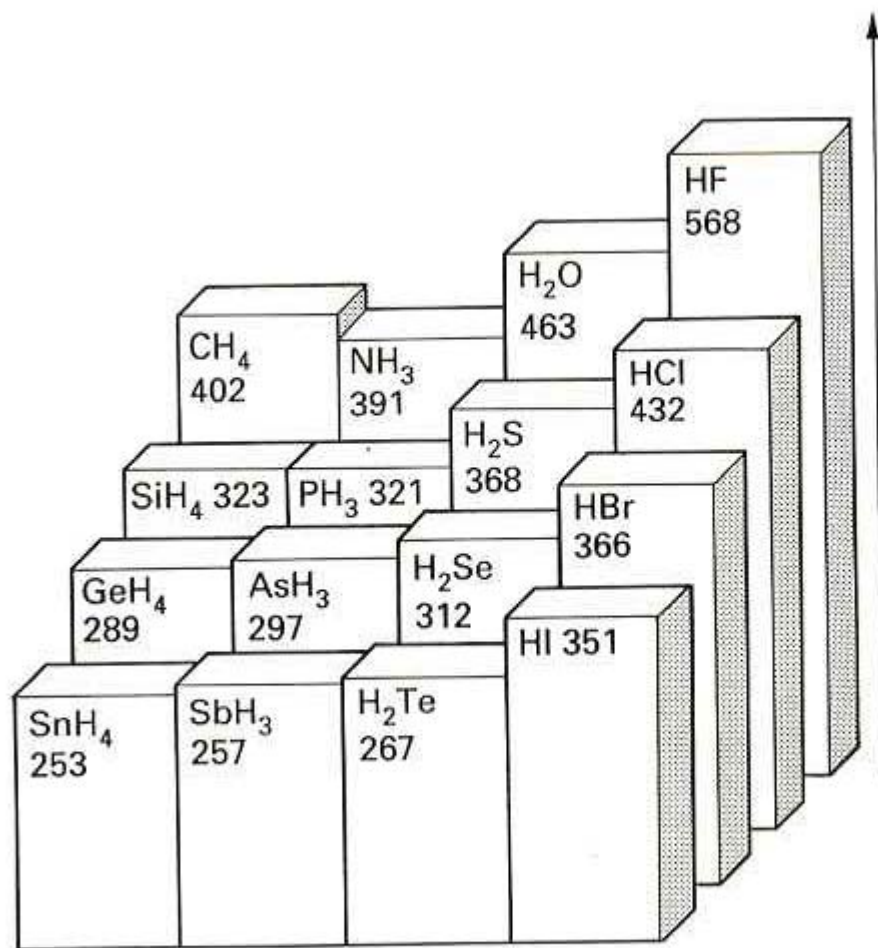
Vazba	E, kJ mol <sup>-1</sup>	délka, Å
C-I	240	2.16
C-Br	276	1.91
C-Cl	339	1.79
C-F	485	1.40

Pauling  $E_D(AB) = \{E_D(AA) \times E_D(BB)\}^{1/2} + \Delta$

$$\Delta = 96.48 (\chi_A - \chi_B)^2$$

Schomaker-Stevenson

$$r_{AB} = r_A + r_B - 0.09 |\chi_A - \chi_B|$$

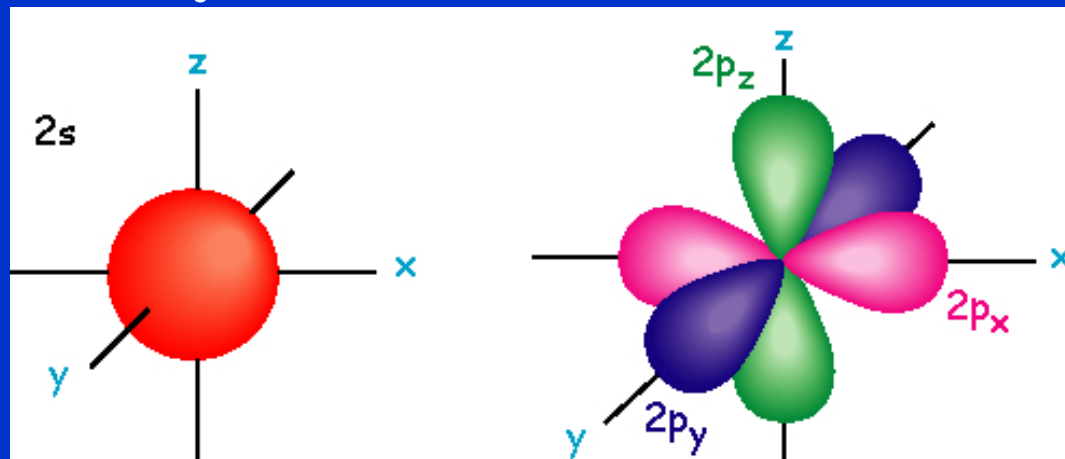


Vazebná energie  
kJ mol<sup>-1</sup>





## Hybridizace



Vazebné úhly  $90^\circ$  jsou vzácné (u prvků hlavních skupin), obvyklé úhly jsou  $109$ ,  $120$ ,  $180^\circ$

**Hybridizace** = energetické smíšení a směrové vyrovnání atomových orbitalů na **stejném** atomu

Počet hybridních orbitalů = počet smísených atomových orbitalů

# Hybridizace sp

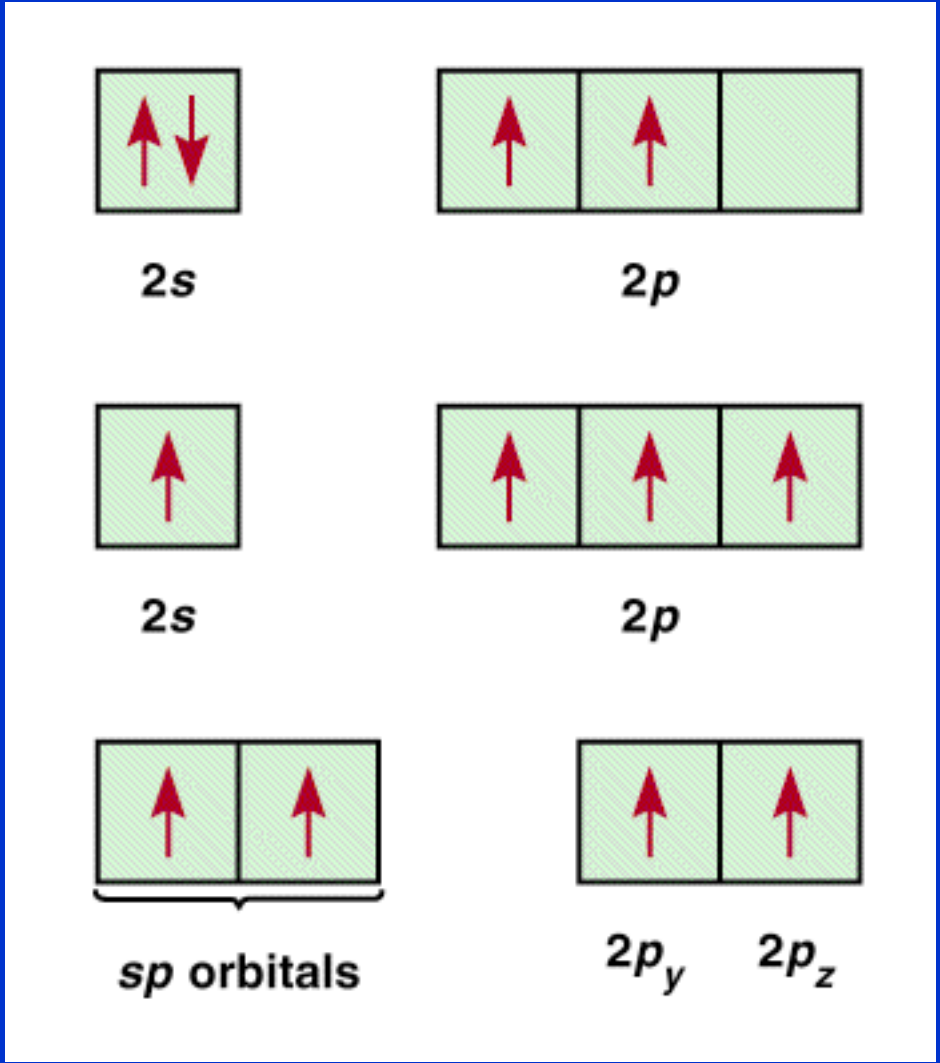
Základní stav



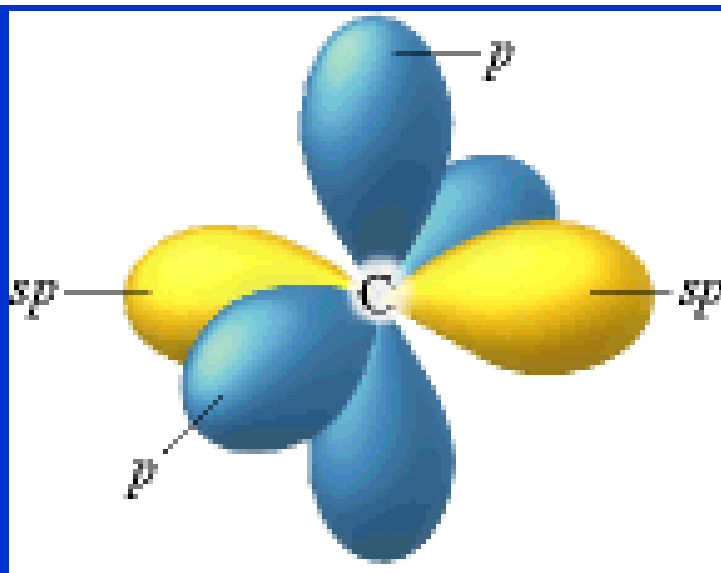
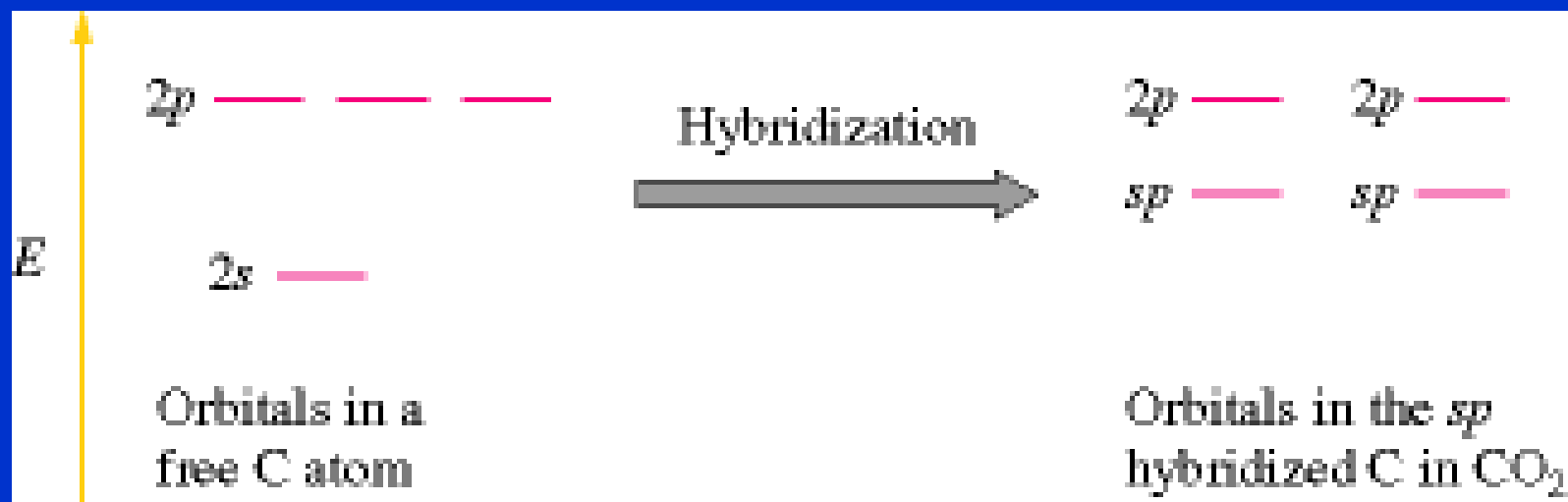
Excitovaný stav



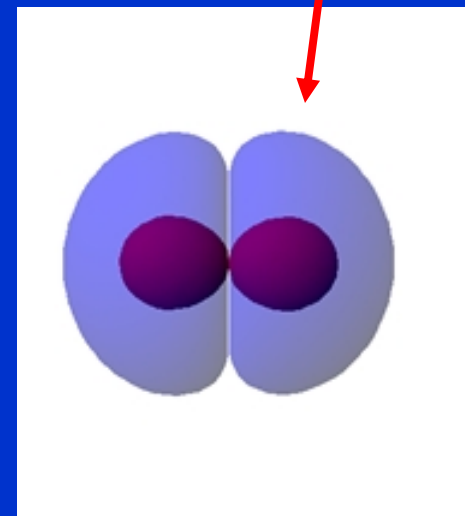
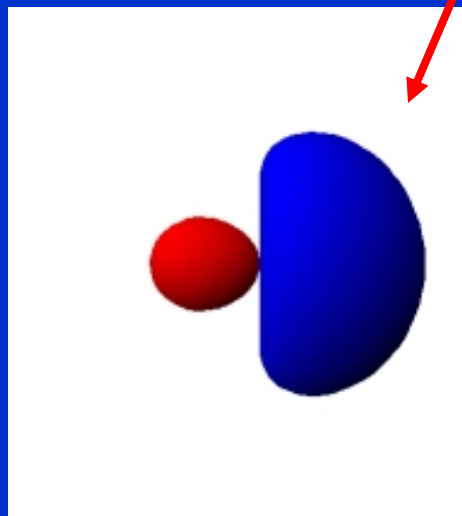
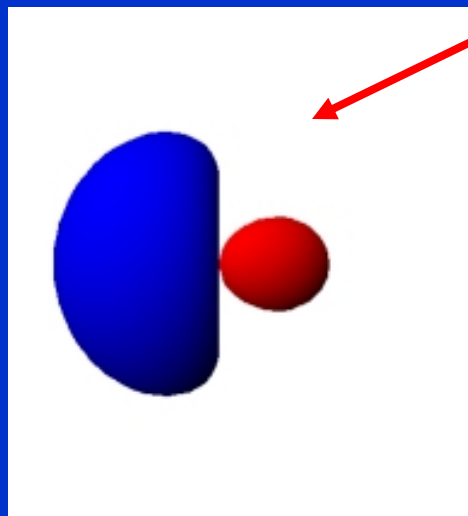
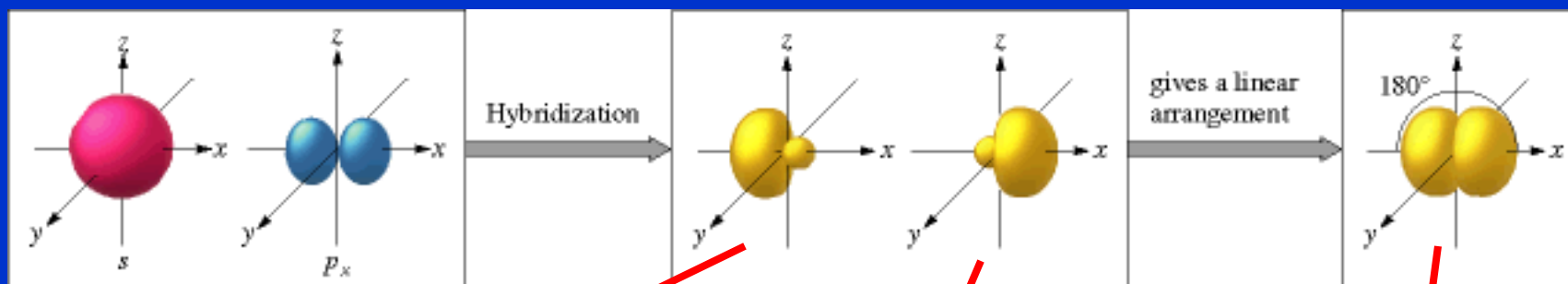
Hybridizovaný stav



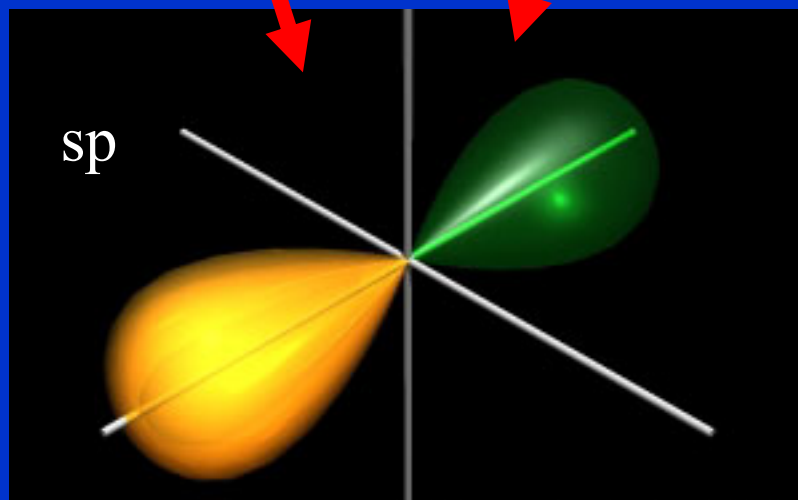
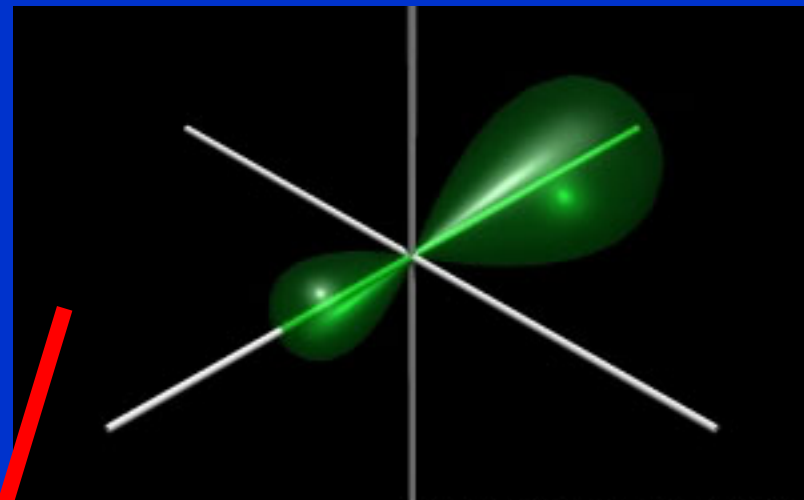
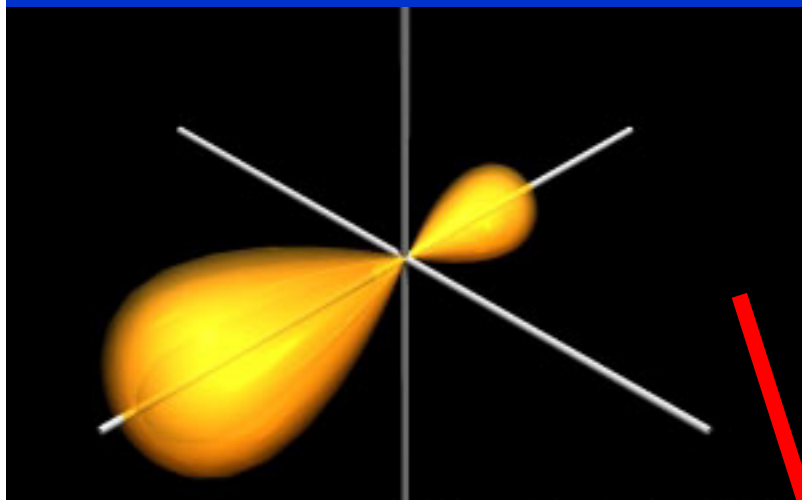
# Hybridize $sp$



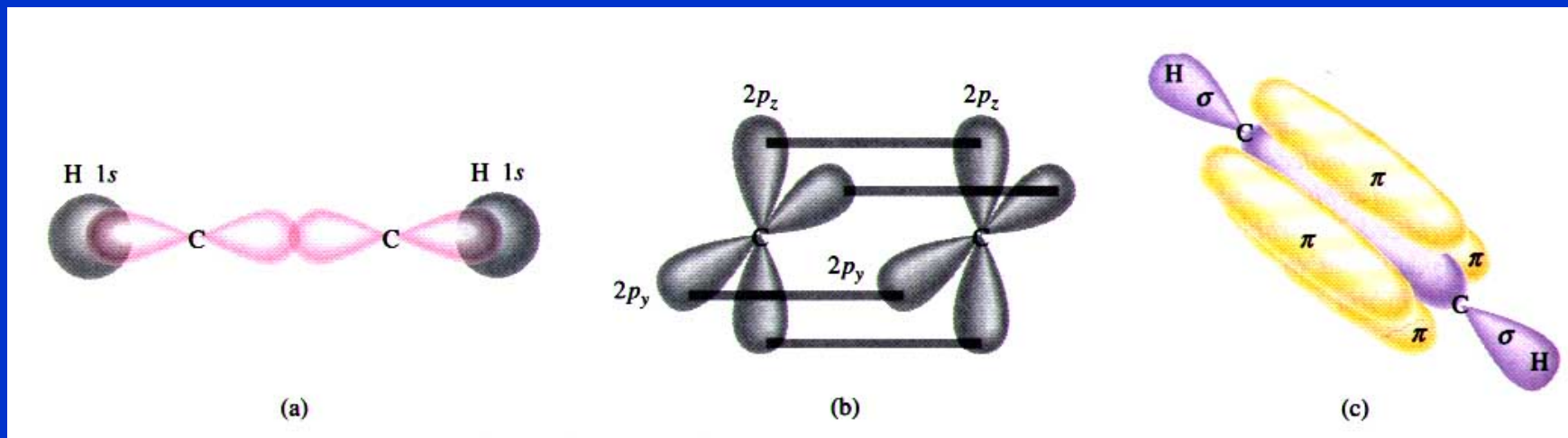
# Hybridizace sp



# Hybridizace sp

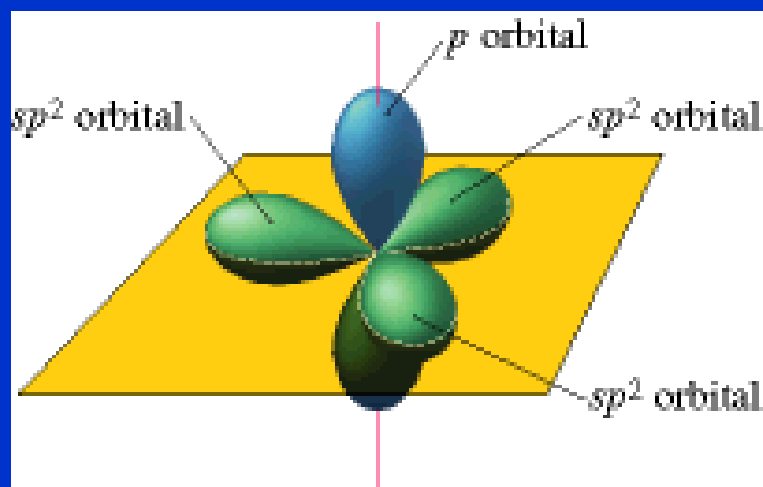
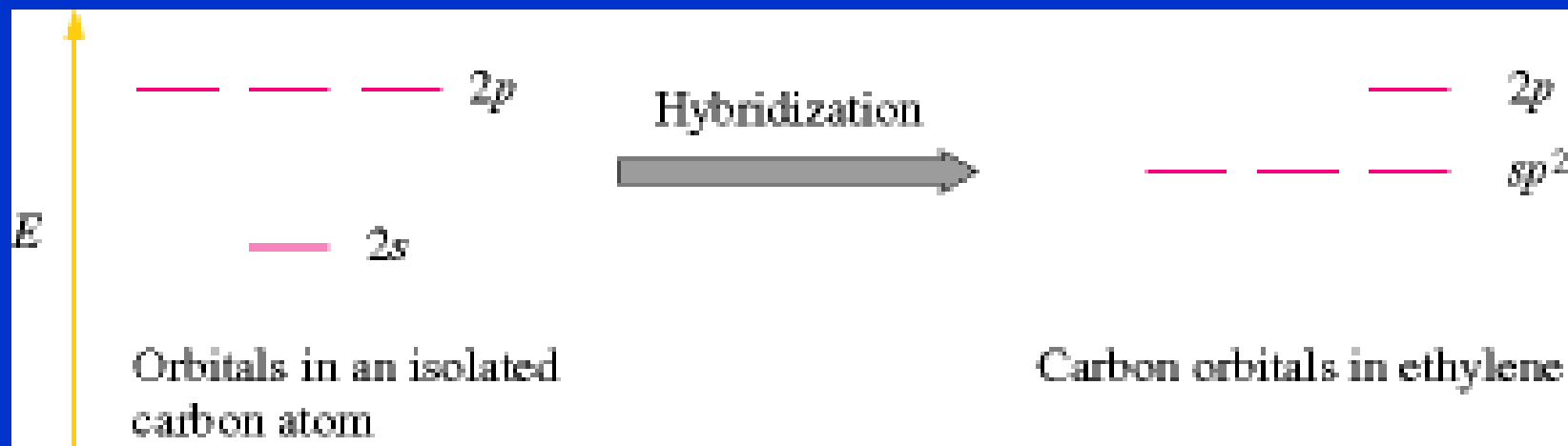


# Acetylen

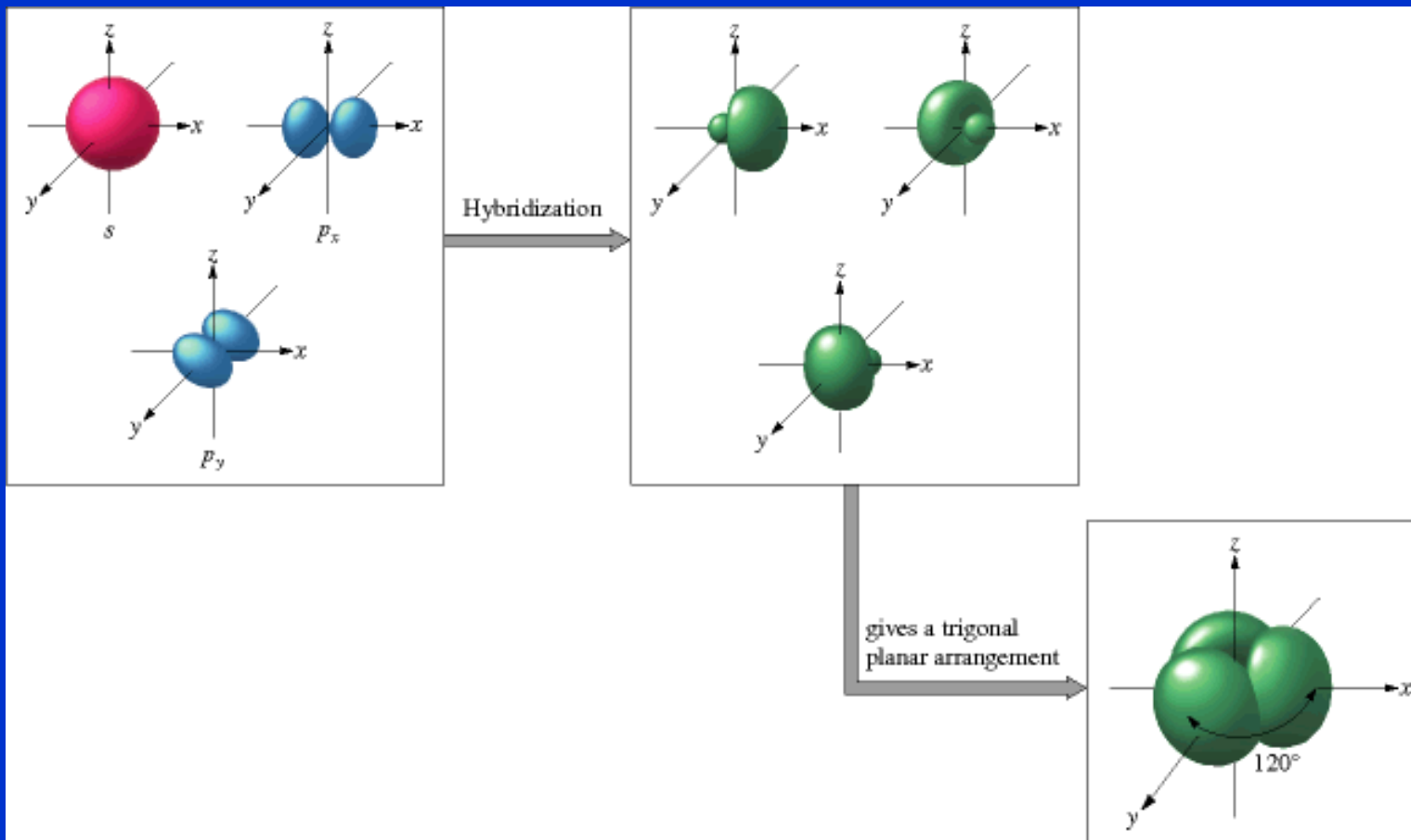


- 2  $\sigma$  vazby překryvem C(sp)–H(s)
- 1  $\sigma$  vazba překryvem C(sp)–C(sp)
- 2 navzájem kolmé  $\pi$ -vazby (x, y) překryvem C(p)–C(p)

# Hybridizace $sp^2$

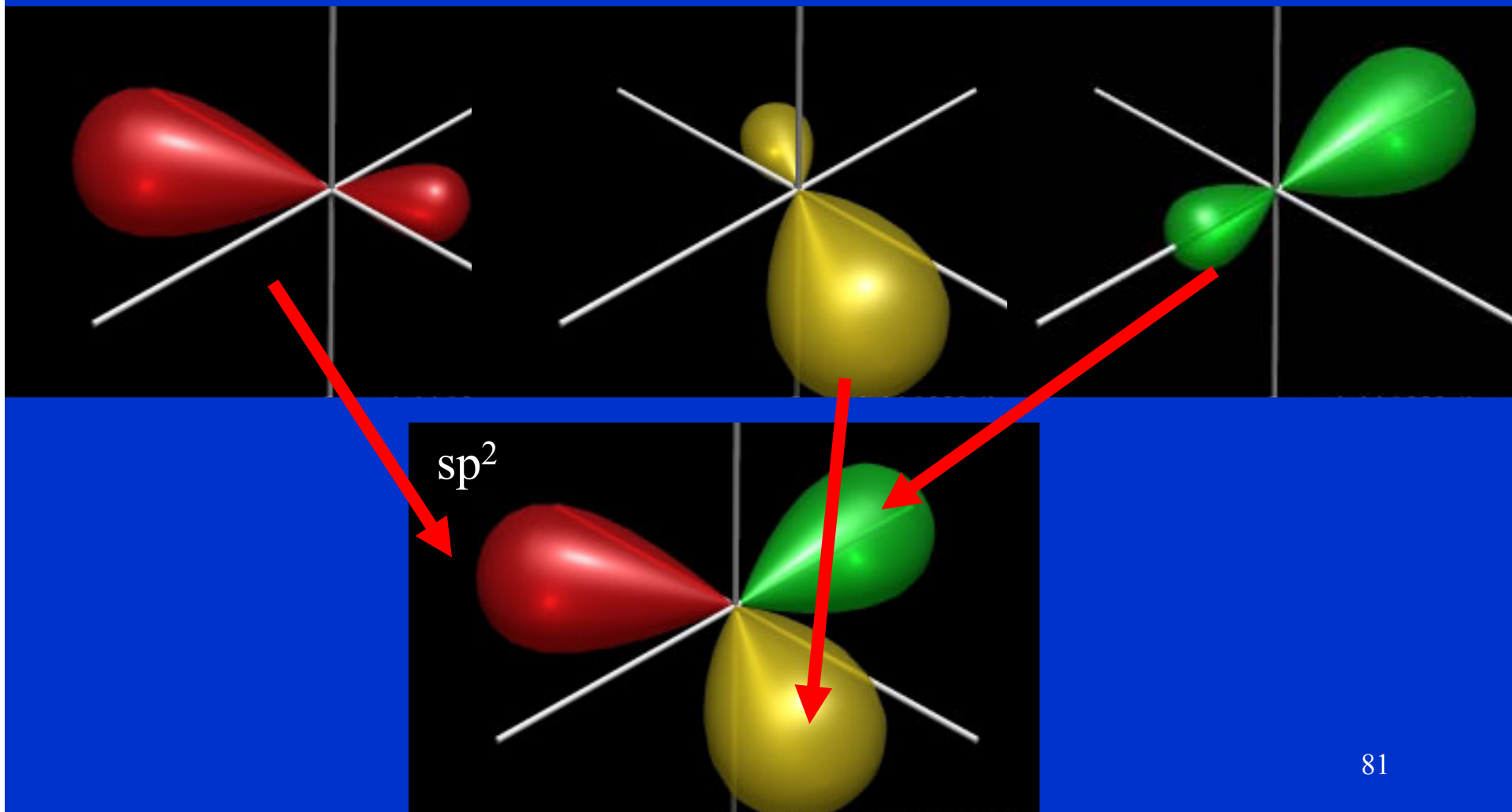


# Hybridizace $sp^2$

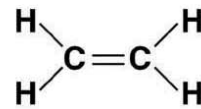




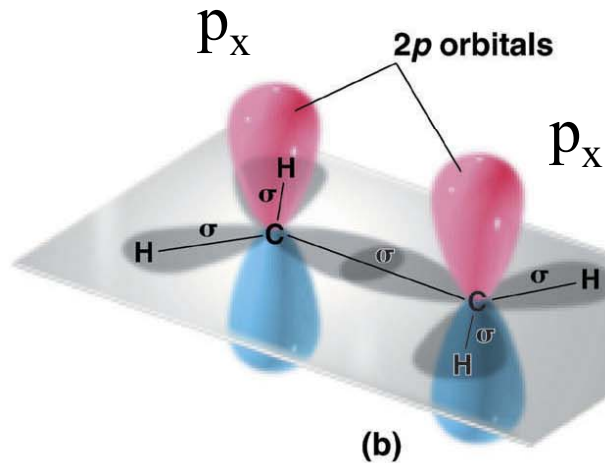
# Hybridizace $sp^2$



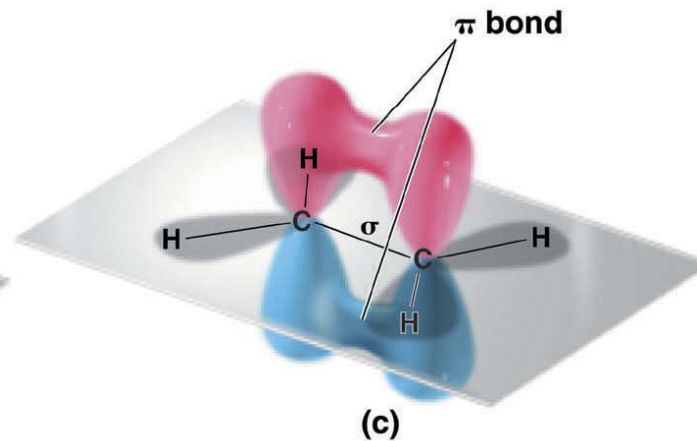
# Ethylen



(a)



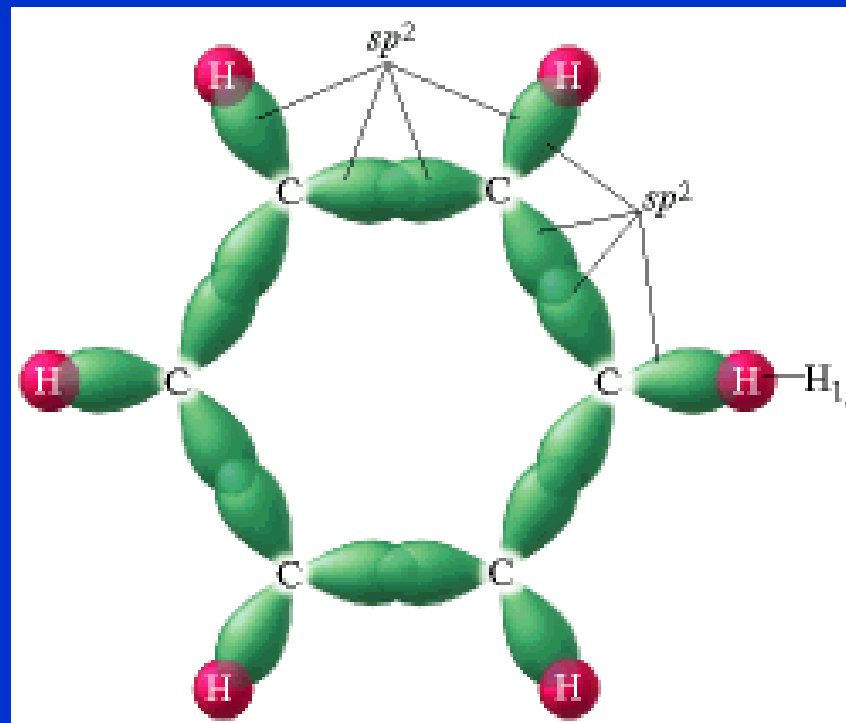
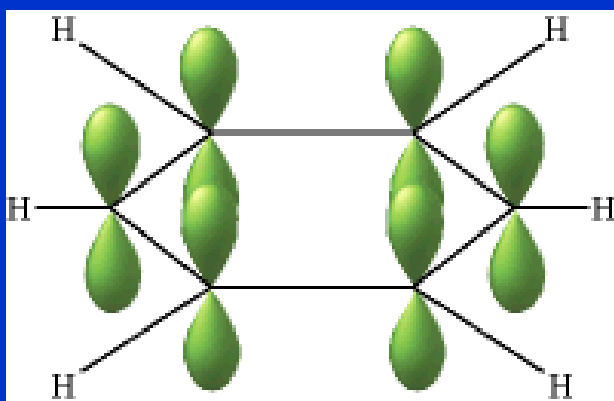
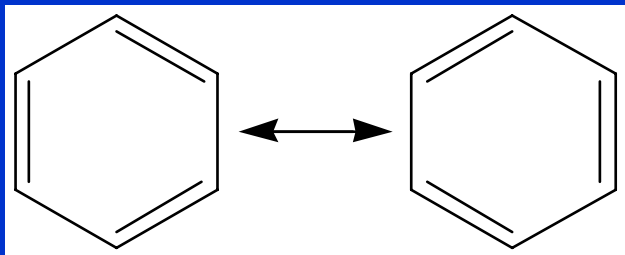
(b)



(c)

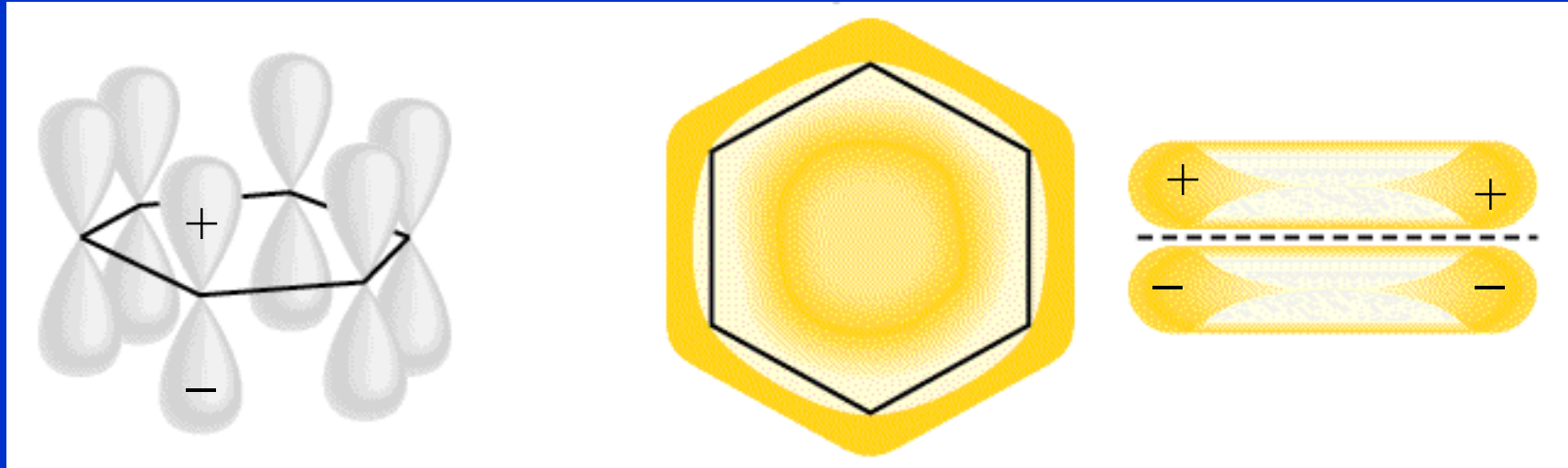
- 4  $\sigma$  vazby překryvem  $C(sp^2)-H(s)$
- 1  $\sigma$  vazba překryvem  $C(sp^2)-C(sp^2)$
- 1  $\pi$ -vazba překryvem  $C(p_x)-C(p_x)$

# Benzen

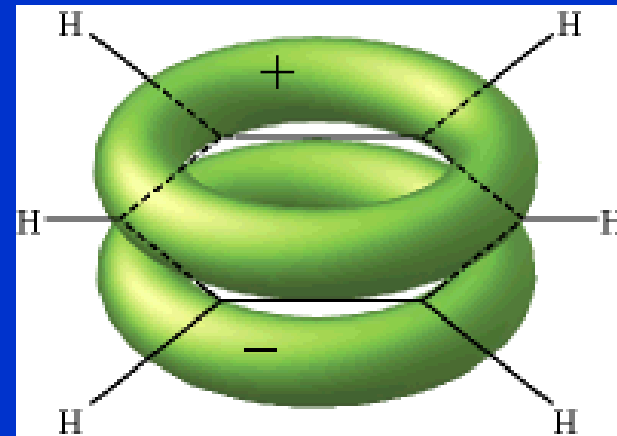


- Každý C použije 3  $sp^2$  orbitaly pro 3  $\sigma$ -vazby  
2 C – C vazby a 1 C – H vazba
- 1  $2p_x$  orbital na každém C zůstane nepoužitý (pro  $\sigma$ -vazby)

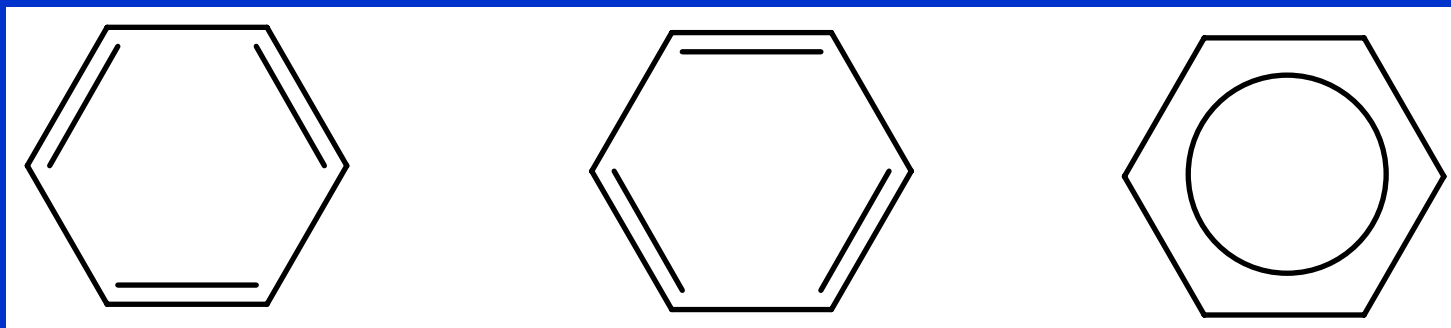
# Benzen



6 C  $2p_x$  orbitalů použito pro 3  $\pi$ -vazby



# Benzen



(a) Localized  $\pi$  bonds

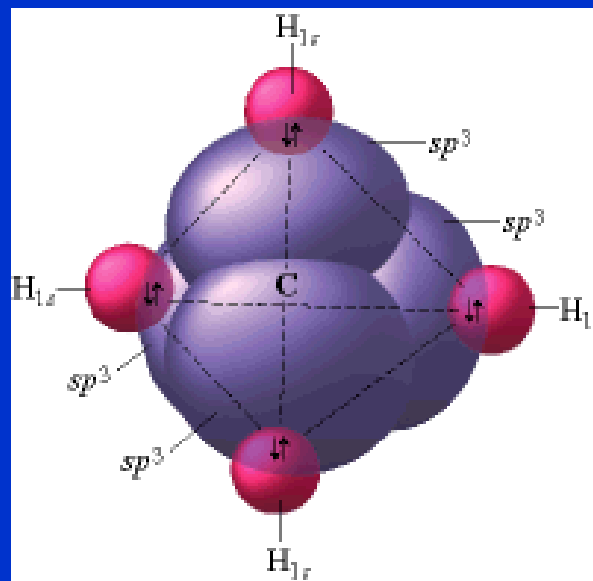
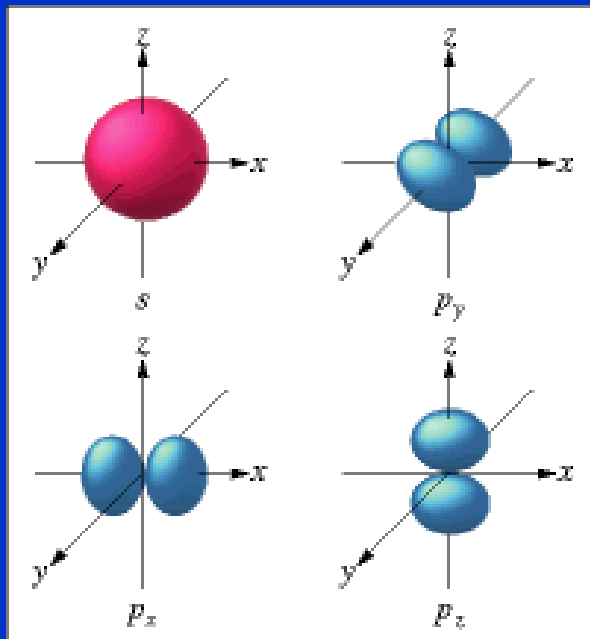
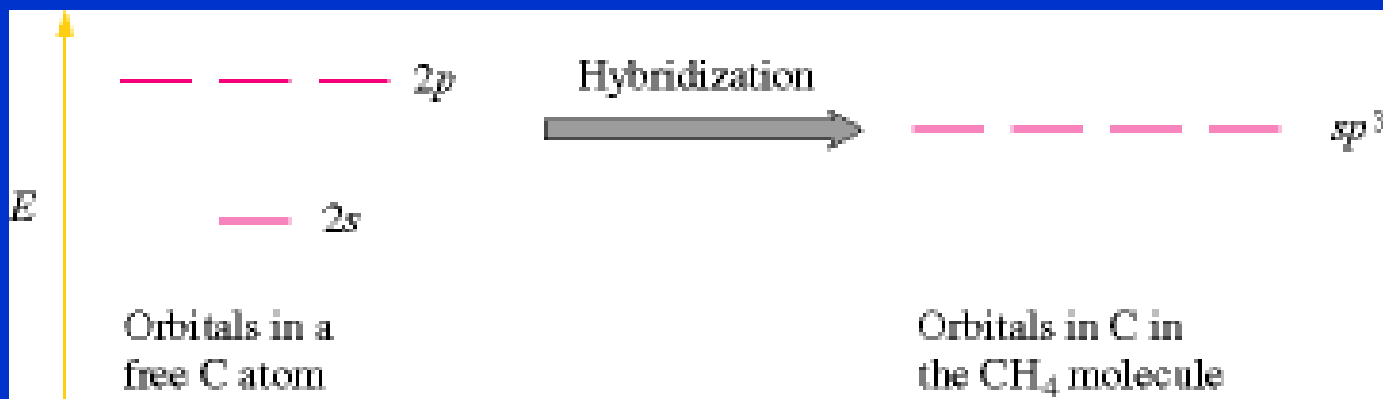


(b) Localized  $\pi$  bonds

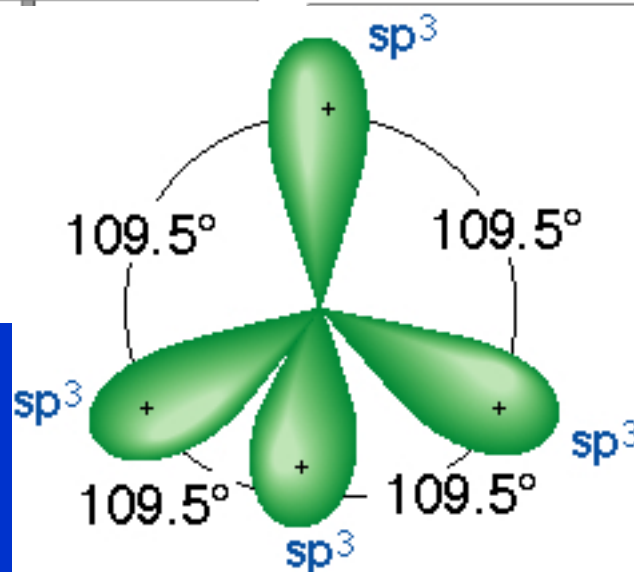
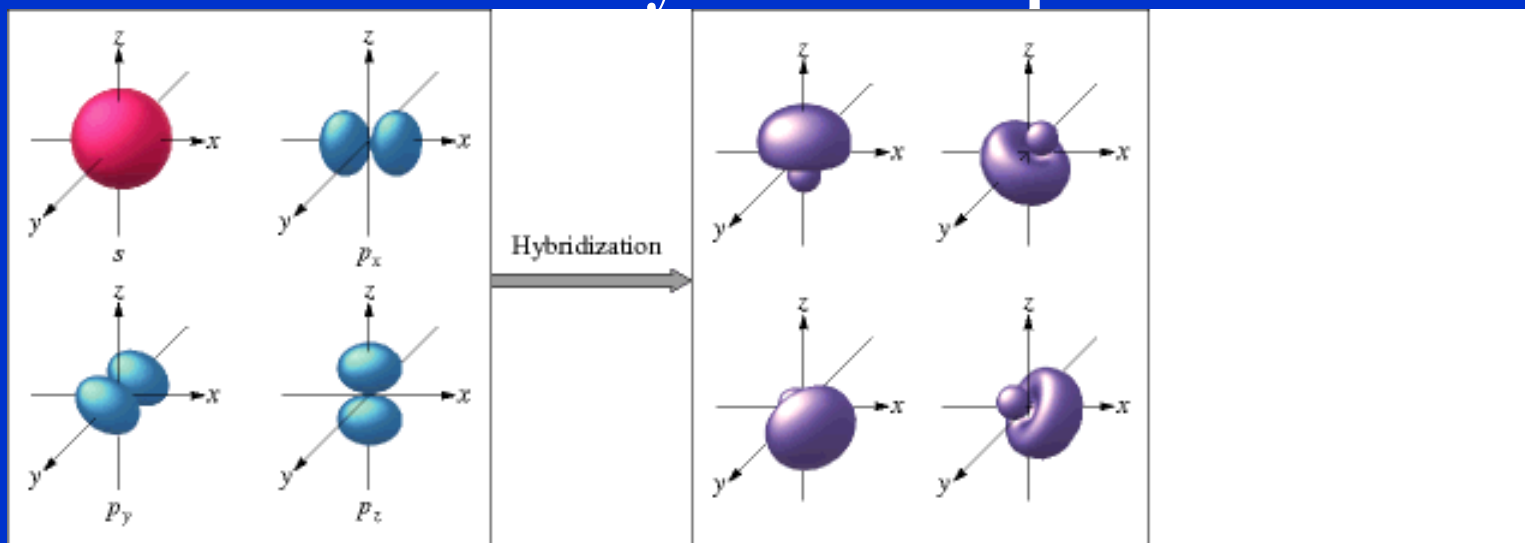


(c) Delocalized  $\pi$  bonds

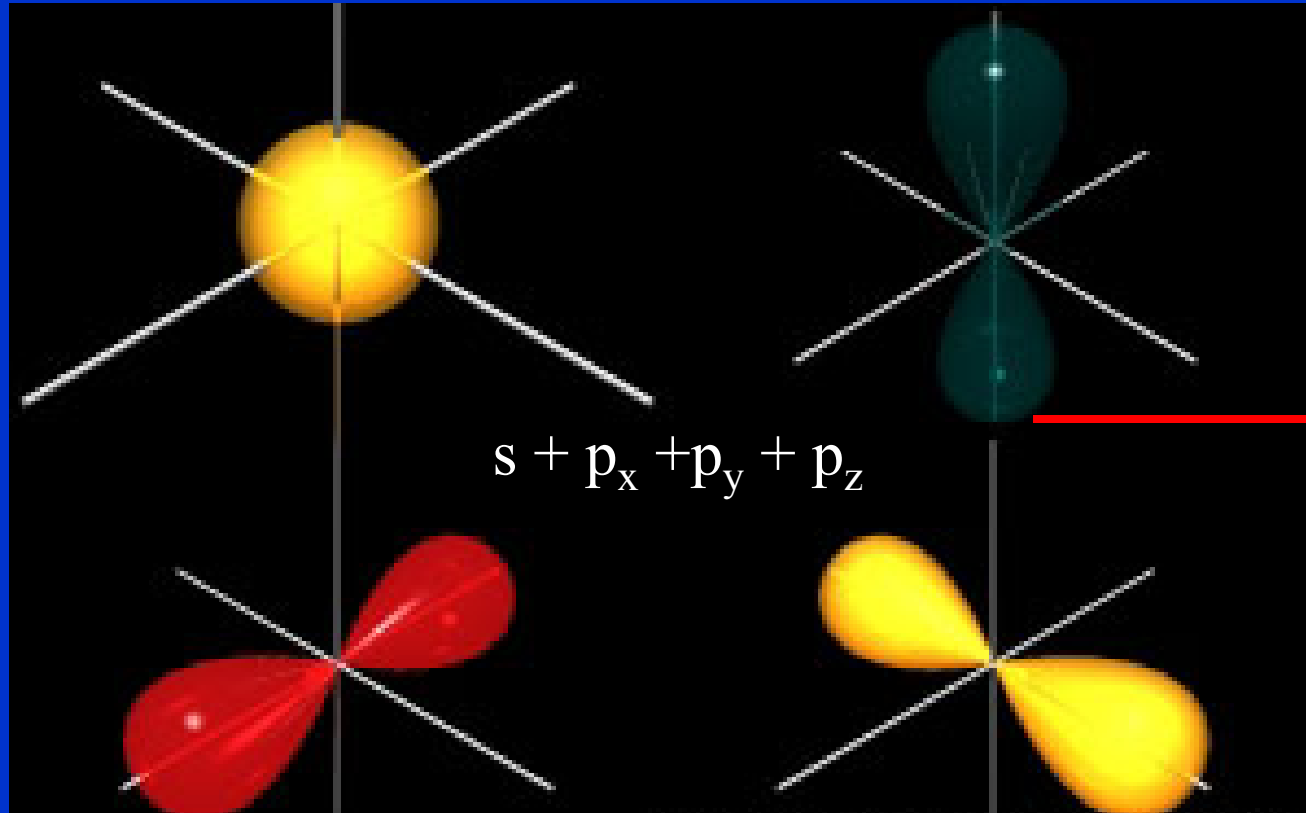
# Hybridizace $sp^3$



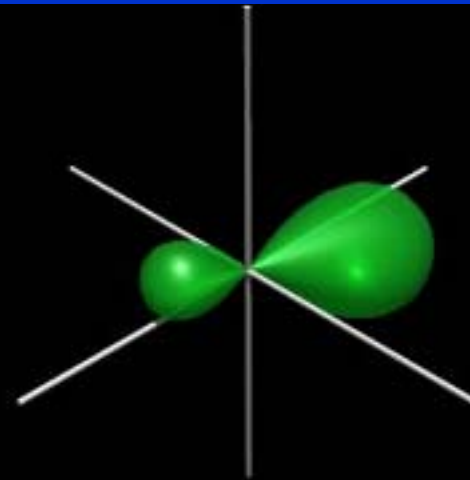
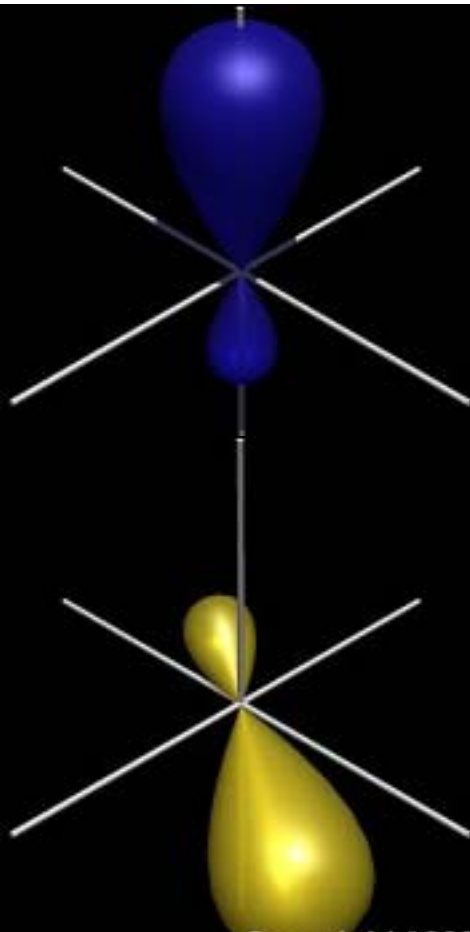
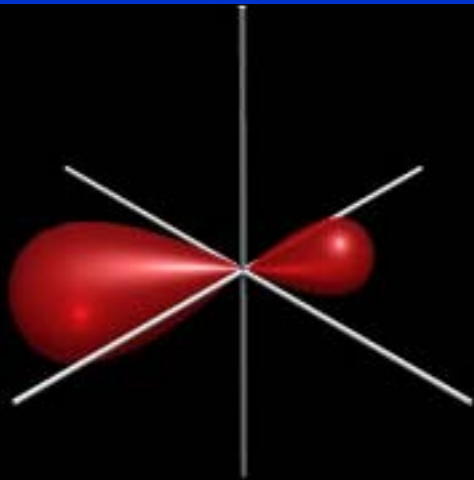
# Hybridizace $sp^3$



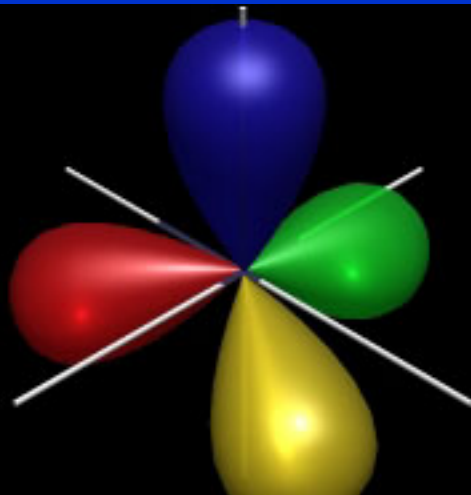
# Hybridizace $sp^3$





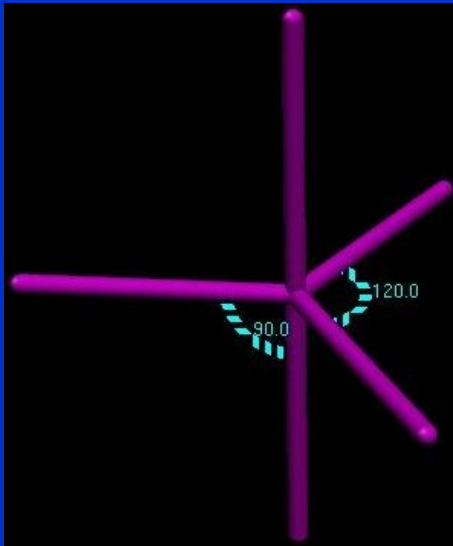


$sp^3$

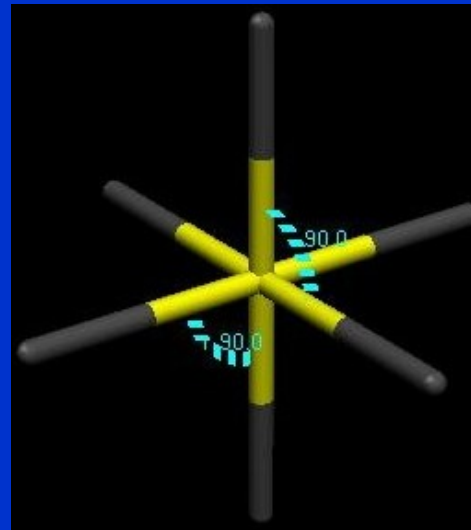


# Hybridizace

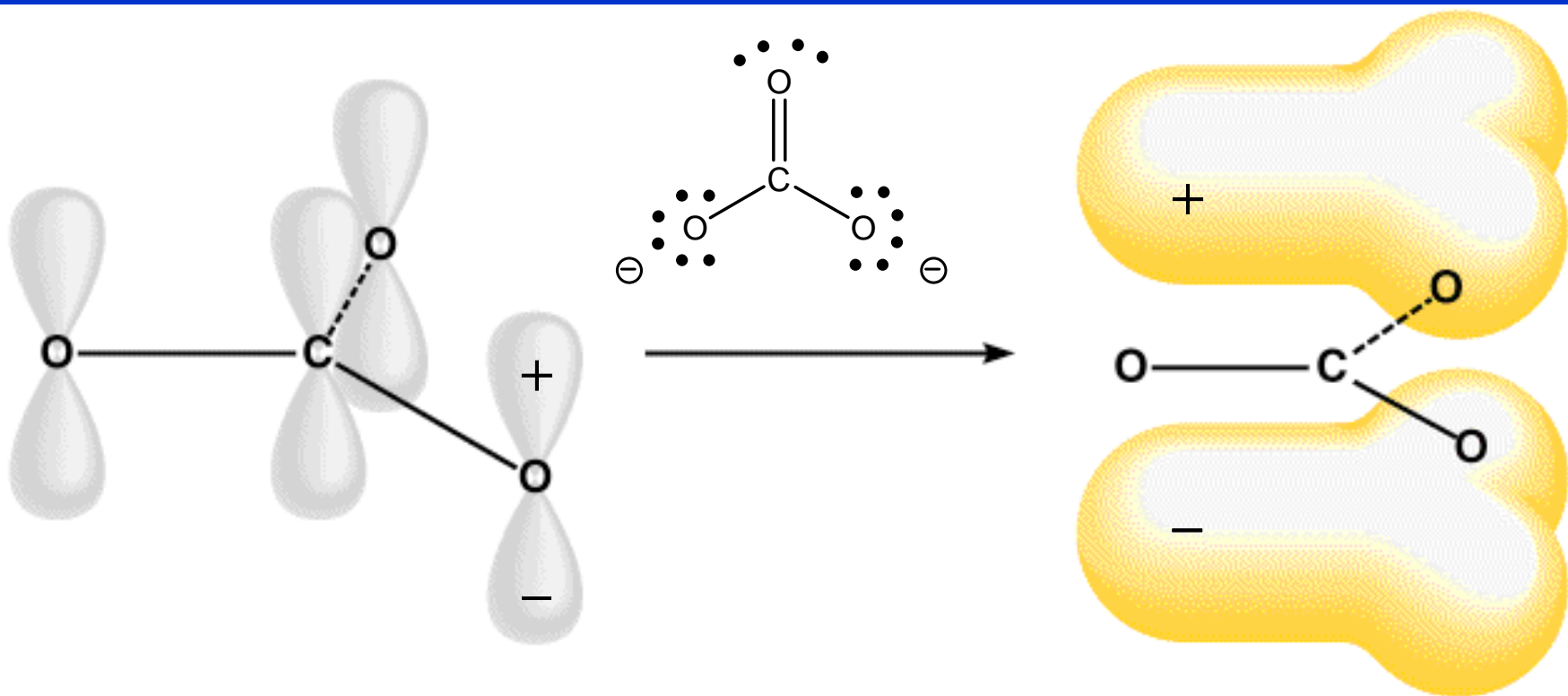
$sp^3d$



$sp^3d^2$



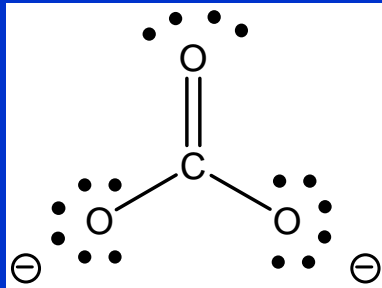
## Vazba v $\text{CO}_3^{2-}$ a $\text{NO}_3^-$



3  $\sigma$  vazby překryvem  $\text{C}(\text{sp}^2)\text{--O}(\text{sp}^2)$

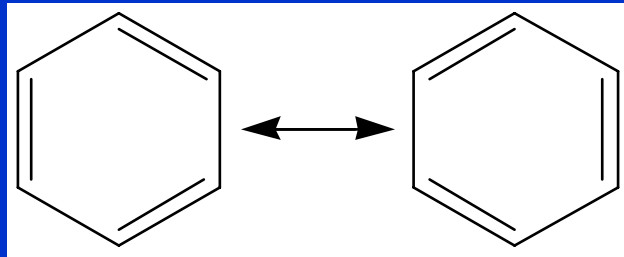
1  $\pi$ -vazba překryvem  $\text{C}(\text{p}_x)\text{--O}(\text{p}_x)$

## Řád vazby



4 (3+1) vazebné elektronové páry / 3 vazby

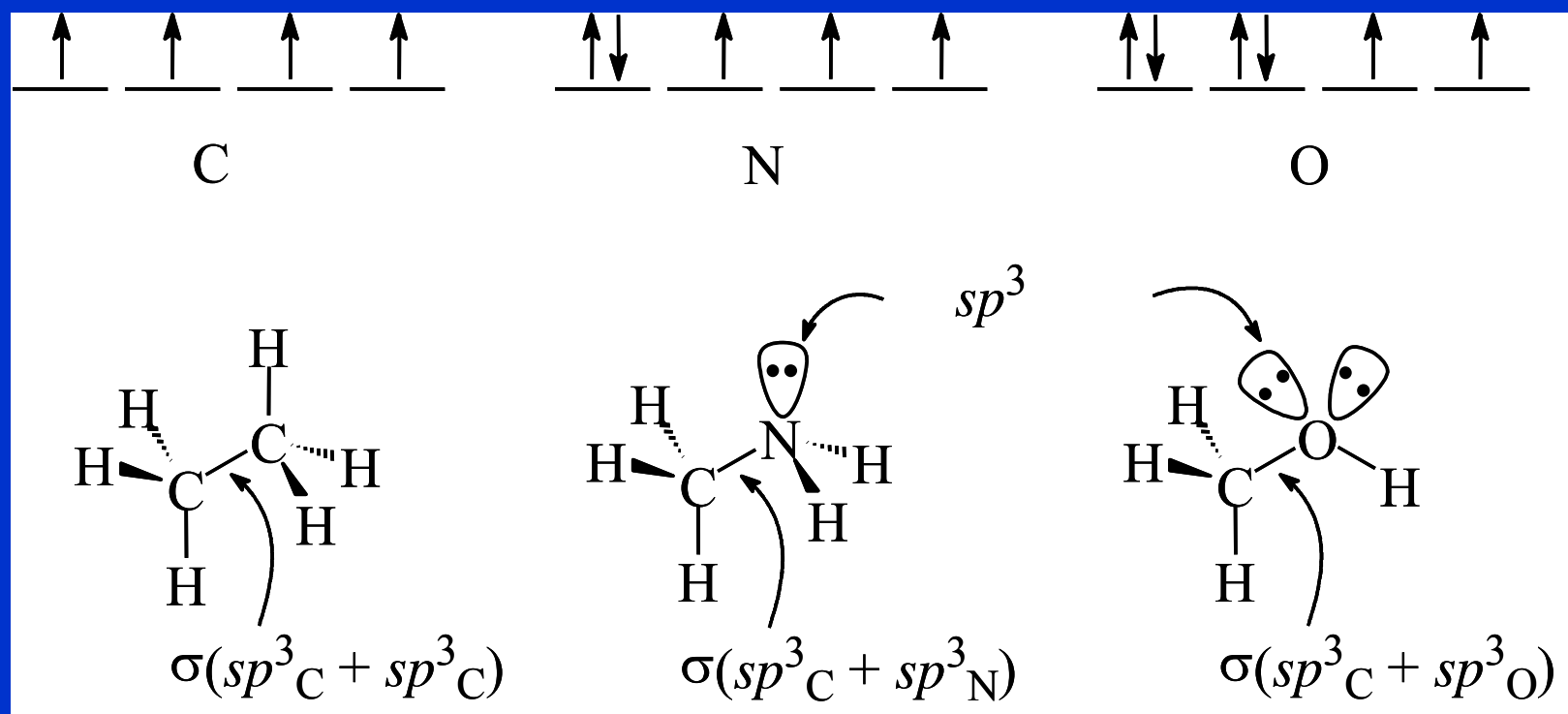
Řád vazby = 1.3333



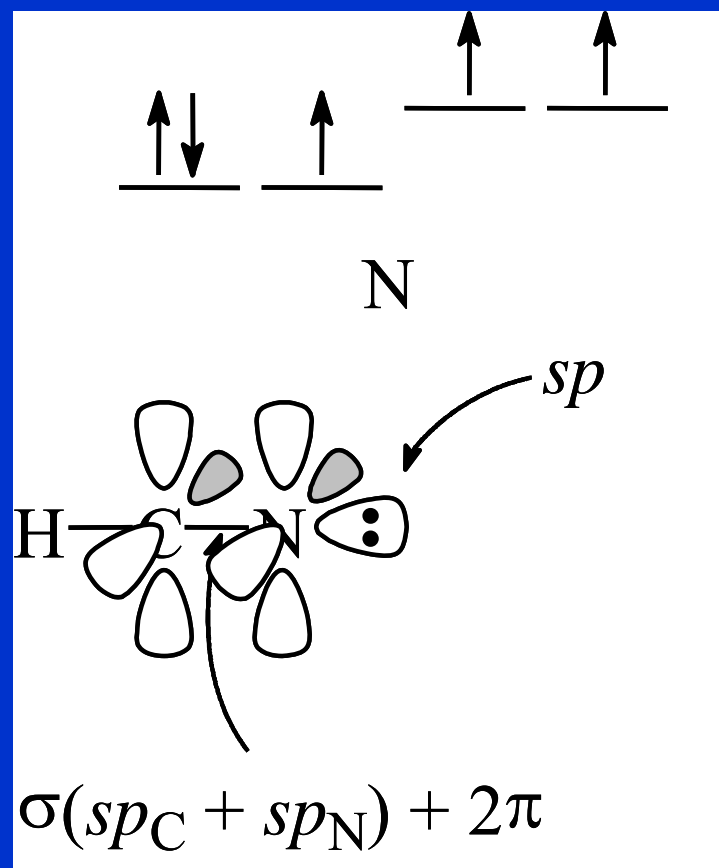
8 (2+3) vazebných elektronových párů / 6 vazeb

Řád vazby = 1.5

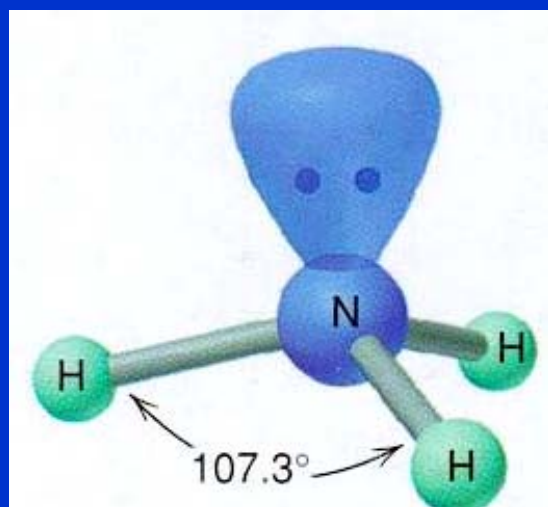
# Vazba v C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub> a CH<sub>3</sub>OH



## Vazba v HC≡N



# Elektronegativita a vazebné úhly



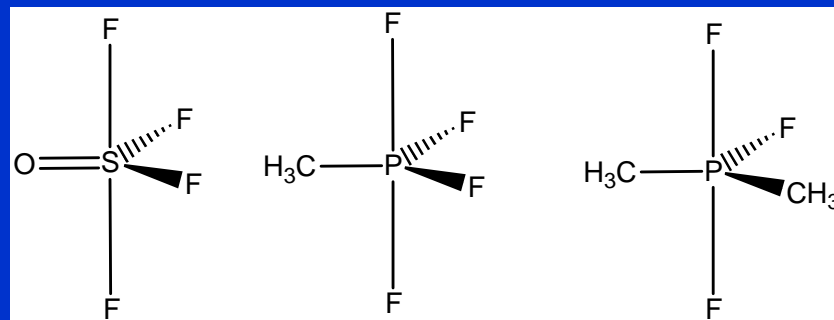
Vazebný úhel Hybridizace

NH <sub>3</sub>	107.3°	sp <sup>3</sup>
PH <sub>3</sub>	93.8°	
AsH <sub>3</sub>	91.8°	
SbH <sub>3</sub>	91.3°	
		s + 3p
NF <sub>3</sub>	102.5°	
OH <sub>2</sub>	104.5°	
OF <sub>2</sub>	103.2°	

Rostoucí  $\Delta\chi$  snižuje vazebné úhly

## Bentovo pravidlo

Elektronegativnější substituenty preferují hybridní orbitaly s menším s-podílem a naopak elektropozitivní substituenty (lepší donory) preferují hybridní orbitaly s větším s-podílem.



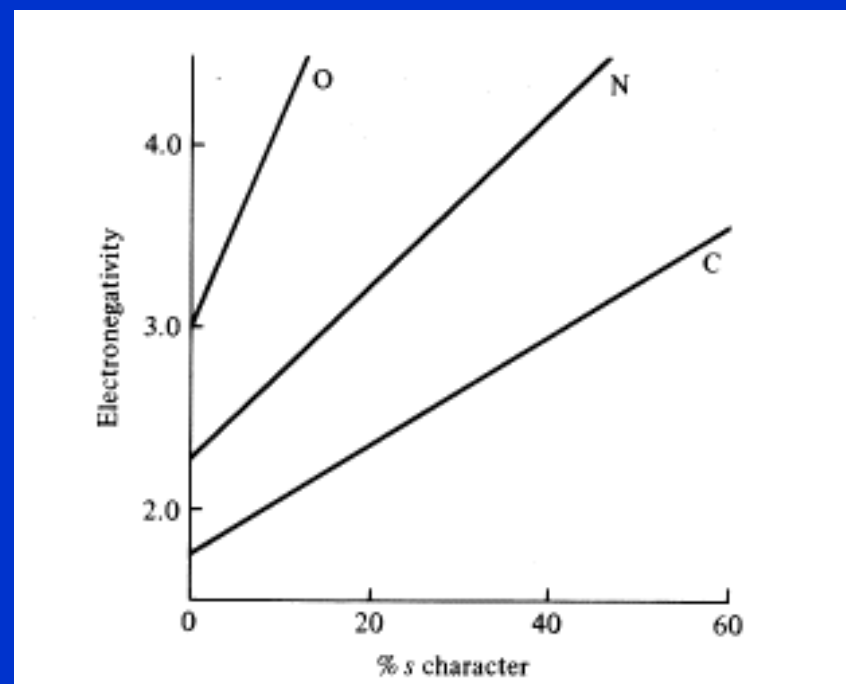
Lepší donory obsazují ekvatoriální rovinu v TBP a bazální rovinu v SP.

Volný elektronový pár je nejlepší donor = substituent s nulovou elektronegativitou



## Hybridizace a elektronegativita

Hybridizace	% s	% p
sp	50	50
sp <sup>2</sup>	33	66
sp <sup>3</sup>	25	75



↑  
s-charakter

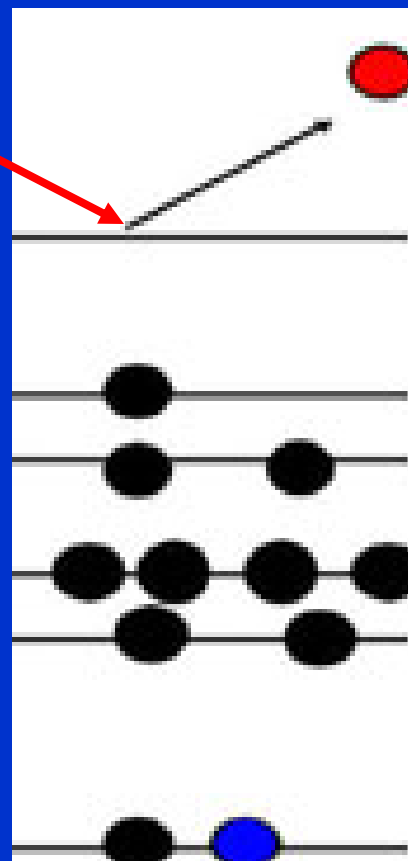
↑  
p-charakter

Elektron v s-orbitalu je vázán pevněji než v p-orbitalu  
Orbital s vyšším s-charakterem má vyšší elektronegativitu

# PES = Fotoelektronová spektroskopie

$$h\nu = IE + E_{\text{kin}}$$

$h\nu$



$E_{\text{kin}}$

měříme

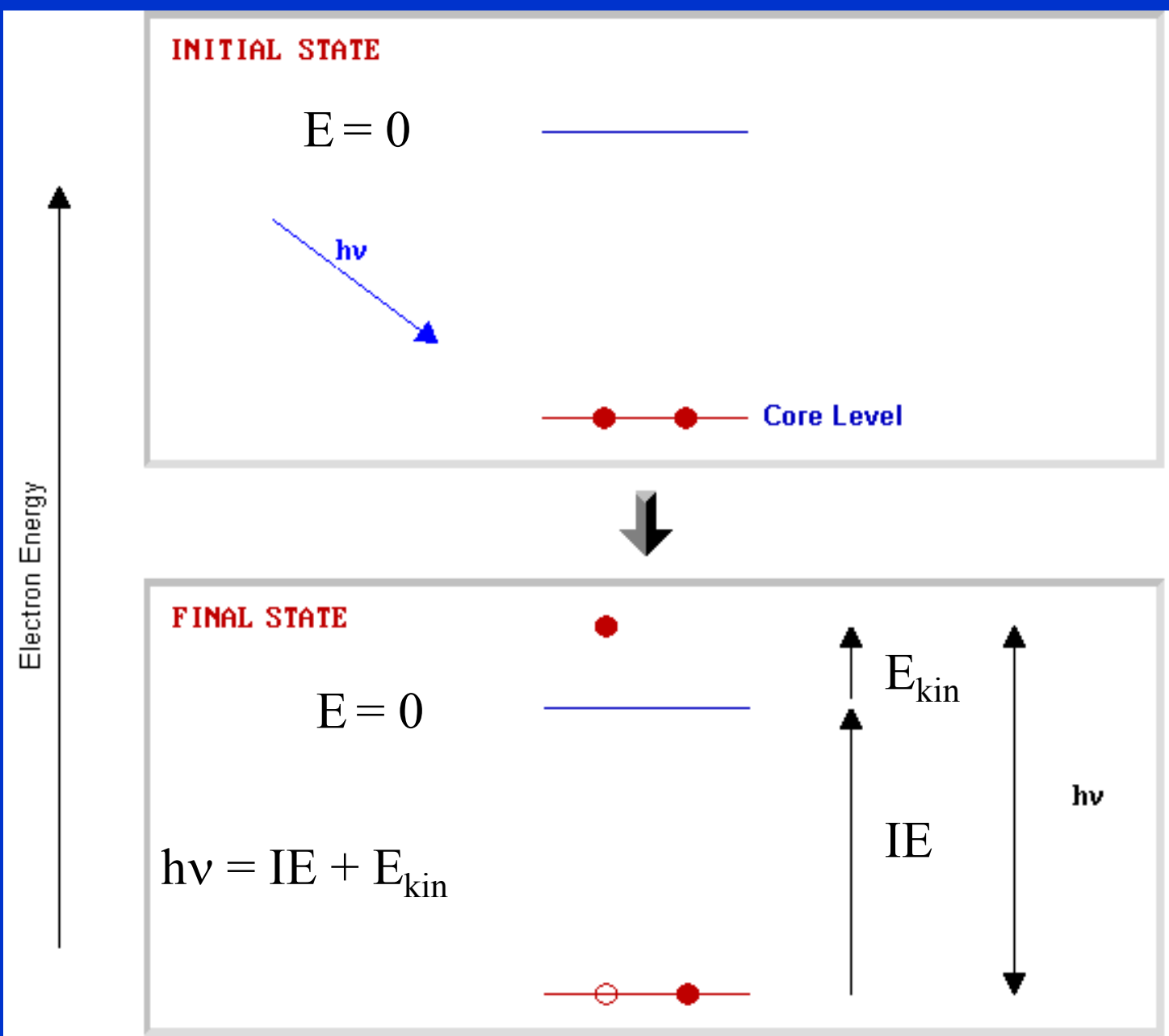
## X-ray Fotoelektronová Spektroskopie (XPS)

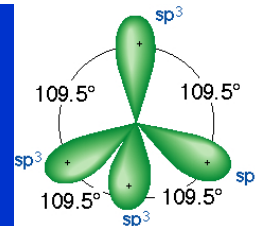
- měkké rtg. záření (200-2000 eV)

vyráží vnitřní e

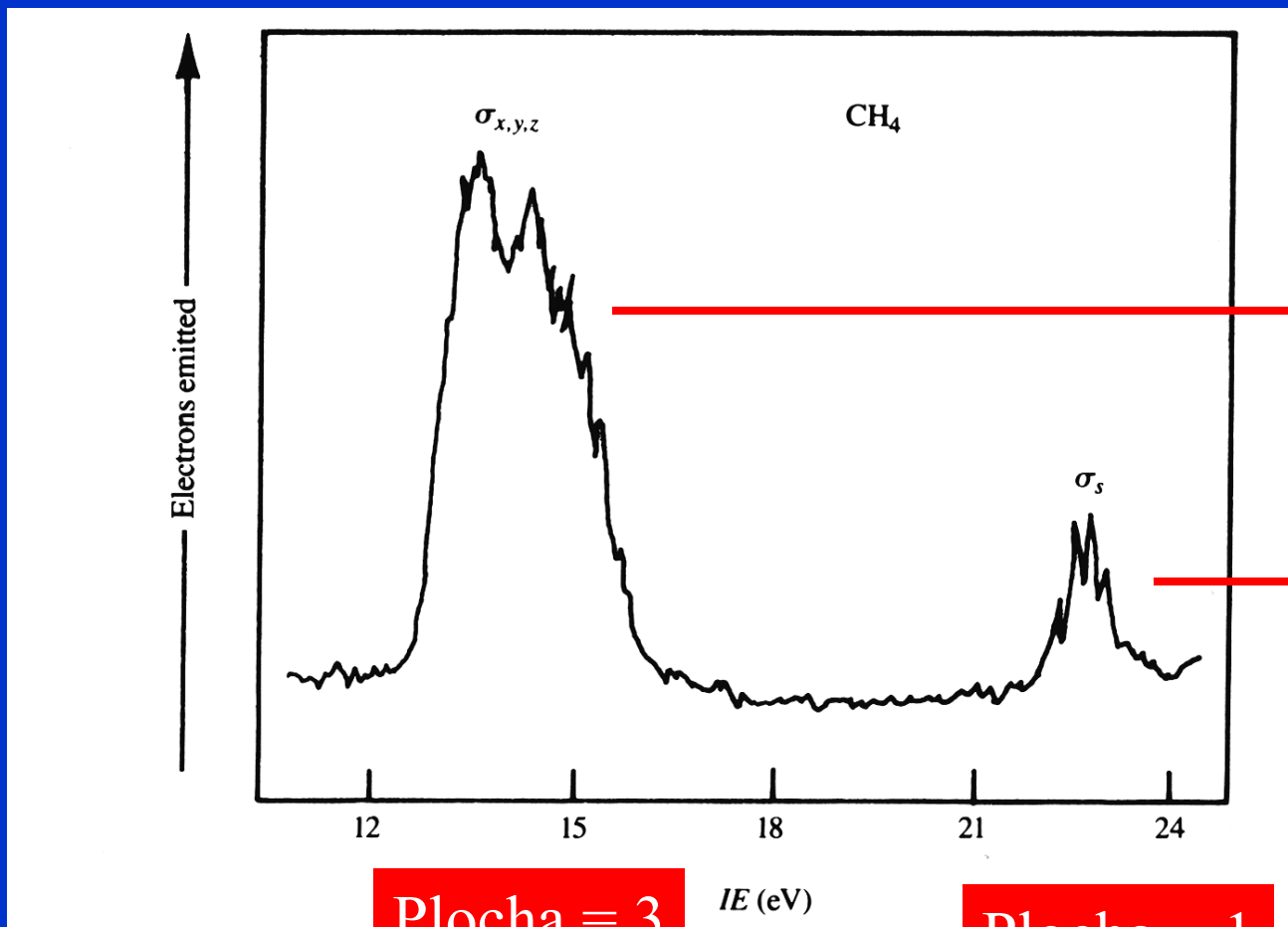
## UV Fotoelektronová Spektroskopie (UPS)

- vakuové UV záření (10-45 eV) vyráží valenční e.





# PES methanu nesouhlasí s modelem 4 $sp^3$



Plocha = 3

Plocha = 1

