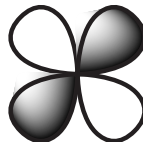
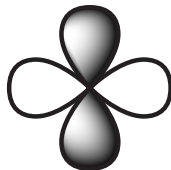
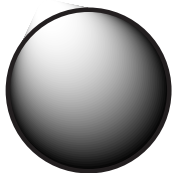


Orbitaly, VSEPR

Rezonanční struktury, atomové a molekulové orbitaly, hybridizace, určování tvaru molekuly pomocí teorie VSEPR, úvod do symetrie molekul, dipólový moment

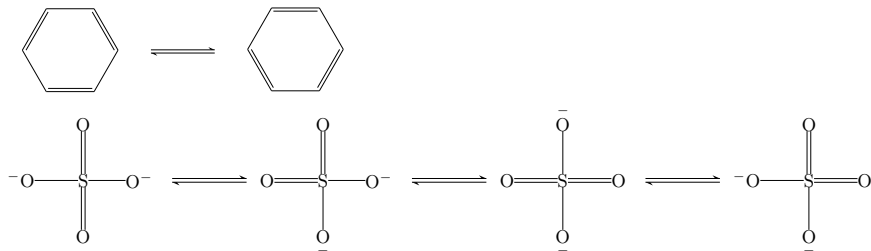


Formální náboj

- ▶ 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.
- ▶ H_3O^+ : H: 0; O: $6-5=+1$
- ▶ CH_3^+ : H: 0; C: $4-3=1$

Rezonanční struktury

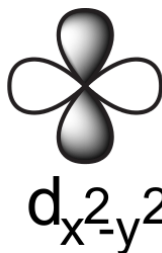
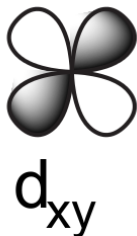
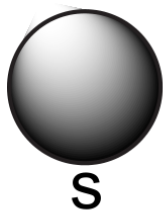
- ▶ Popisují polohu elektronů v molekulách.
- ▶ Vyjadřují jednotlivé limitní stavy.



- ▶ Funkce popisující prostorové rozložení pravděpodobnosti výskytu elektronu.
- ▶ Orbitály 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.

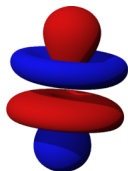
Atomové orbitály

- ▶ Orbital s - kulově symetrický, magnetické číslo je vždy rovno 0. Tyto orbitály 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.

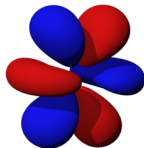


Atomové orbitaly

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



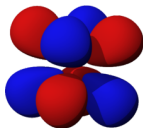
$m = 0$



$m = +1$



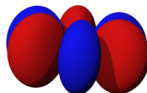
$m = -1$



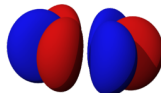
$m = +2$



$m = -2$



$m = +3$



$m = -3$

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

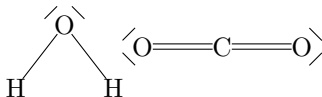
Autor: A2569875

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. 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 bočným 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

- ▶ 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.

Hybridizace

- ▶ Hybridizace atomových orbitalů — proces energetického mísení a směrového vyrovnání atomových orbitalů daného atomu
- ▶ Počet hybridních orbitalů odpovídá počtu mísených atomových orbitalů

Hybridizace	Geometrie molekuly
sp	lineární
sp ²	rovnostranný trojúhelník
sp ³	tetraedr
d ² sp ³	oktaedr
dsp ²	čtverec
dsp ³	trigonální bipyramida čtvercová pyramida

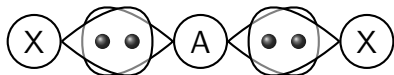
- ▶ **Valence Shell Electron Pair Repulsion**
- ▶ Tvar molekuly určíme na základě rozmístění elektronových párů v okolí centrálního atomu tak, aby jejich vzájemné odpuzování bylo co nejmenší.
- ▶ Tento model je vhodný převážně pro sloučeniny nepřechodných prvků.
- ▶ Uvažujeme pouze nevazebné elektronové páry - n a vazebné elektronové páry σ .
- ▶ **Základní pravidla VSEPRu**
 1. Elektronové páry centrálního atomu se v prostoru rozmístí tak, aby byly co nejdále od sebe a měly minimální energii.
 2. Nevazebný elektronový pár odpuzuje ostatní elektronové páry nejvíce, odpuzování vazebných elektronových párů je slabší a klesá v pořadí trojná vazba > dvojná vazba > jednoduchá vazba.
 3. Tvar molekuly je dán pouze polohou vazebných elektronových párů.

VSEPR

Dva elektronové páry na centrálním atomu

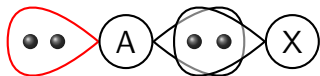
Pokud centrální atom (A) nese dva elektronové páry, je tvar molekuly vždy lineární. Pokud jsou oba vazebné (X), označujeme molekulu jako AX_2 , pokud je jeden nevazebný (E), označení je AXE.

AX_2



Tvar: lineární; $\angle XAX = 180$; Příklad: CO_2 , BeF_2

AXE

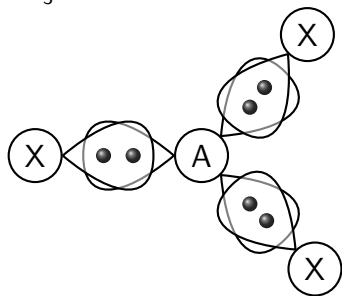


Tvar: lineární; $\angle AXE = 180$

VSEPR

Tři elektronové páry na centrálním atomu

AX_3

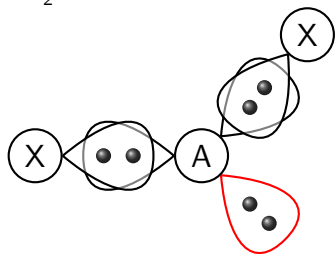


Tvar: rovnostranný trojúhelník; $\angle XAX = 120^\circ$ Příklad: BCl_3

VSEPR

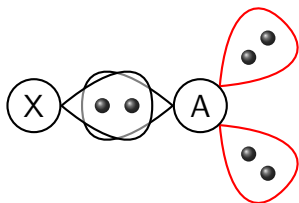
Tři elektronové páry na centrálním atomu

AX_2E



Tvar: lomený; $\angle XAX < 120^\circ$ Příklad: SO_2

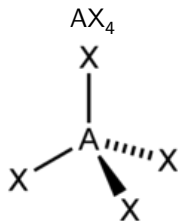
AXE_2



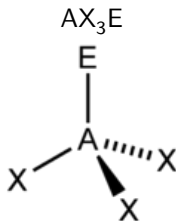
Tvar: lineární Příklad: O_2

VSEPR

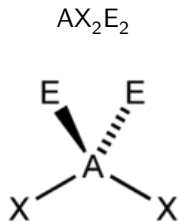
Čtyři elektronové páry na centrálním atomu



Tvar: tetraedr
 $\angle XAX = 109.5$
Příklad: SO_4^{2-}



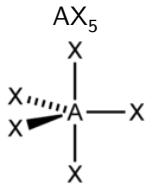
trigonální pyramida
 $\angle XAX < 109.5$
 PH_3



lomenný
 $\angle XAX \ll 109.5$
 $SeBr_2$

VSEPR

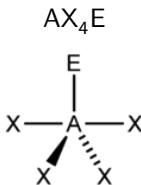
Pět elektronových párů na centrálním atomu



Tvar: trigonální
bipyramida

$$\angle \text{XAX} = 90 \text{ a } 120$$

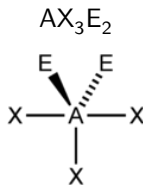
Příklad: AsF_5



houpačka

$$\angle \text{XAX} < 90 \text{ a } < 120$$

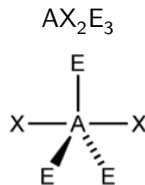
SeH_4



tvar T

$$\angle \text{XAX} = 90$$

ICl_3



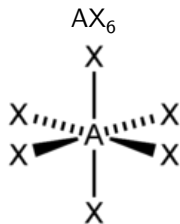
lineární

$$\angle \text{XAX} = 180$$

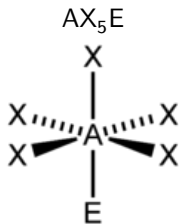
BrF_2^-

VSEPR

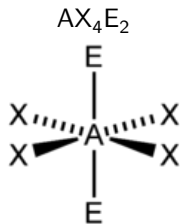
Šest elektronových párů na centrálním atomu



Tvar: oktaedr
 $\angle XAX = 90$
Příklad: SF_6



čtvercová pyramida
 $\angle XAX < 90$
 IF_5



čtverec
 $\angle XAX = 90$
 XeF_4

Symetrie molekul

- ▶ **Operace symetrie** - geometrická operace, jejímž provedením dostaneme objekt do polohy nerozlišitelné od výchozí.
- ▶ **Prvek symetrie** - body, jejichž poloha se v průběhu provádění operace symetrie nemění.
- ▶ U molekul existuje pět prvků symetrie.

Operace symetrie	Symbol	Prvek symetrie
Identita	E	Celý objekt
Rotace	C_n	Rotační osa
Zrcadlení	σ	Rovina symetrie
Inverze	i	Střed symetrie
Nevlastní osa	S_n	Rotačně-reflexní osa

Dipólový moment

- ▶ Vektor popisující rozložení elektrického náboje v molekule.
- ▶ Výsledný dipólmoment získáme vektorovým součtem dipólmomentů jednotlivých vazeb.

