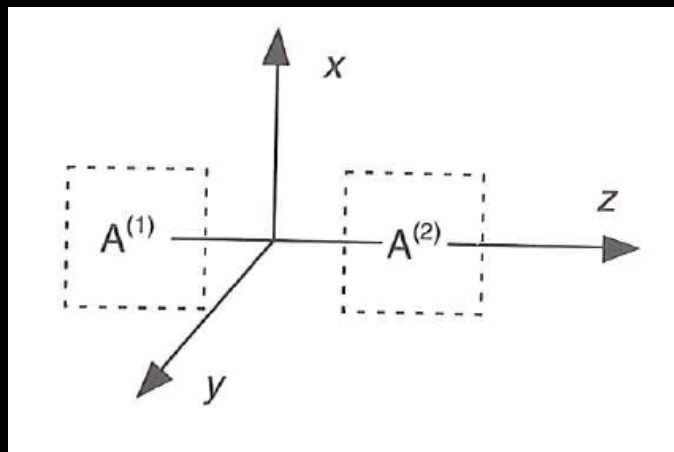


## 8. Přednáška

### Atkins FCH 10. Struktura molekul

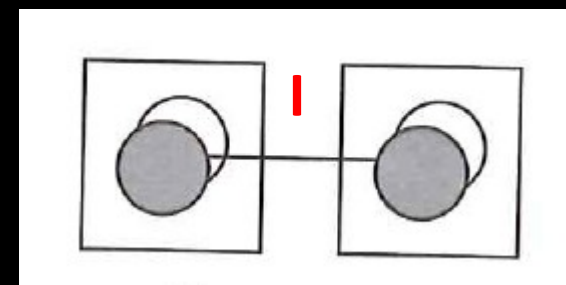
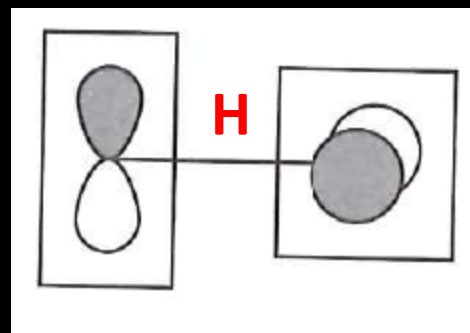
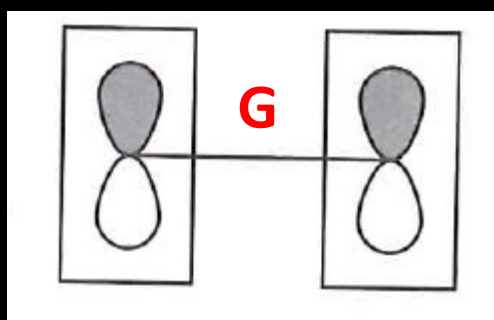
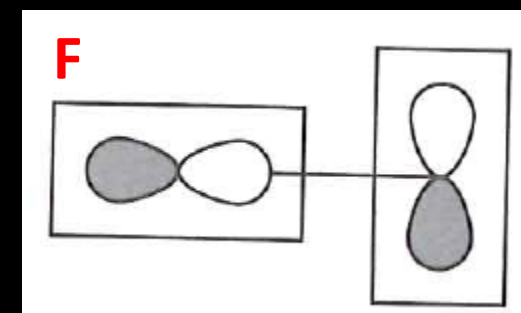
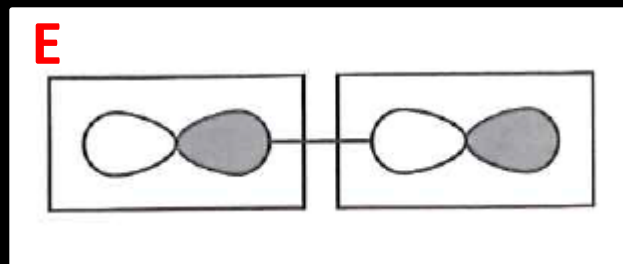
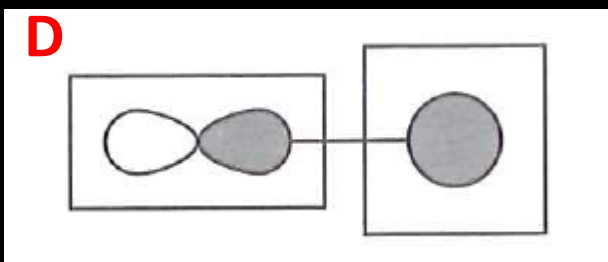
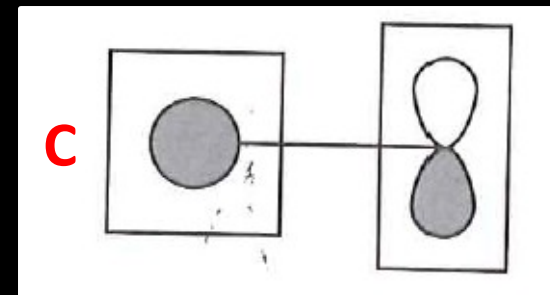
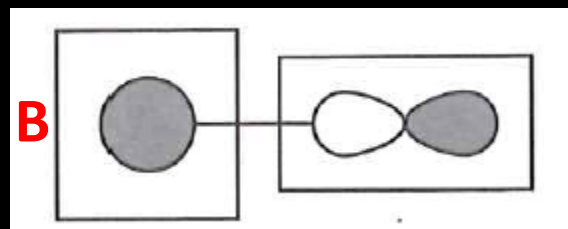
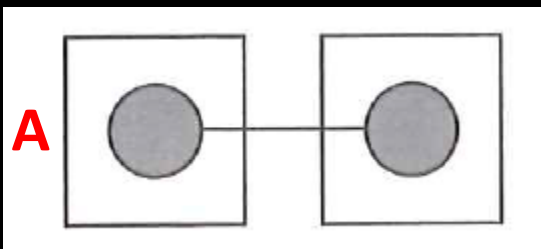
#### 10.3.2 Homonukleární biatomické molekuly



## 10.3.2 Výstavbový princip pro molekuly

Samostudium – body 1,2,3 str. 354 dole

# Nulové a nenulové překryvy

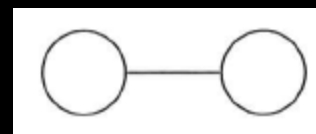
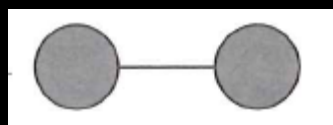


(Mimo Atkinse, umět): **Schematické znázornění MO**

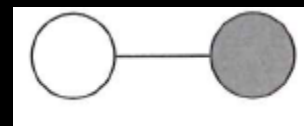
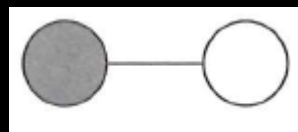
Vyjadřuje **relativní znaménka** a **relativní velikosti** koeficientů AO v MO.

Stínovaný orbital značí znaménko +, prázdný orbital značí znaménko -.

**Vazebný AO**

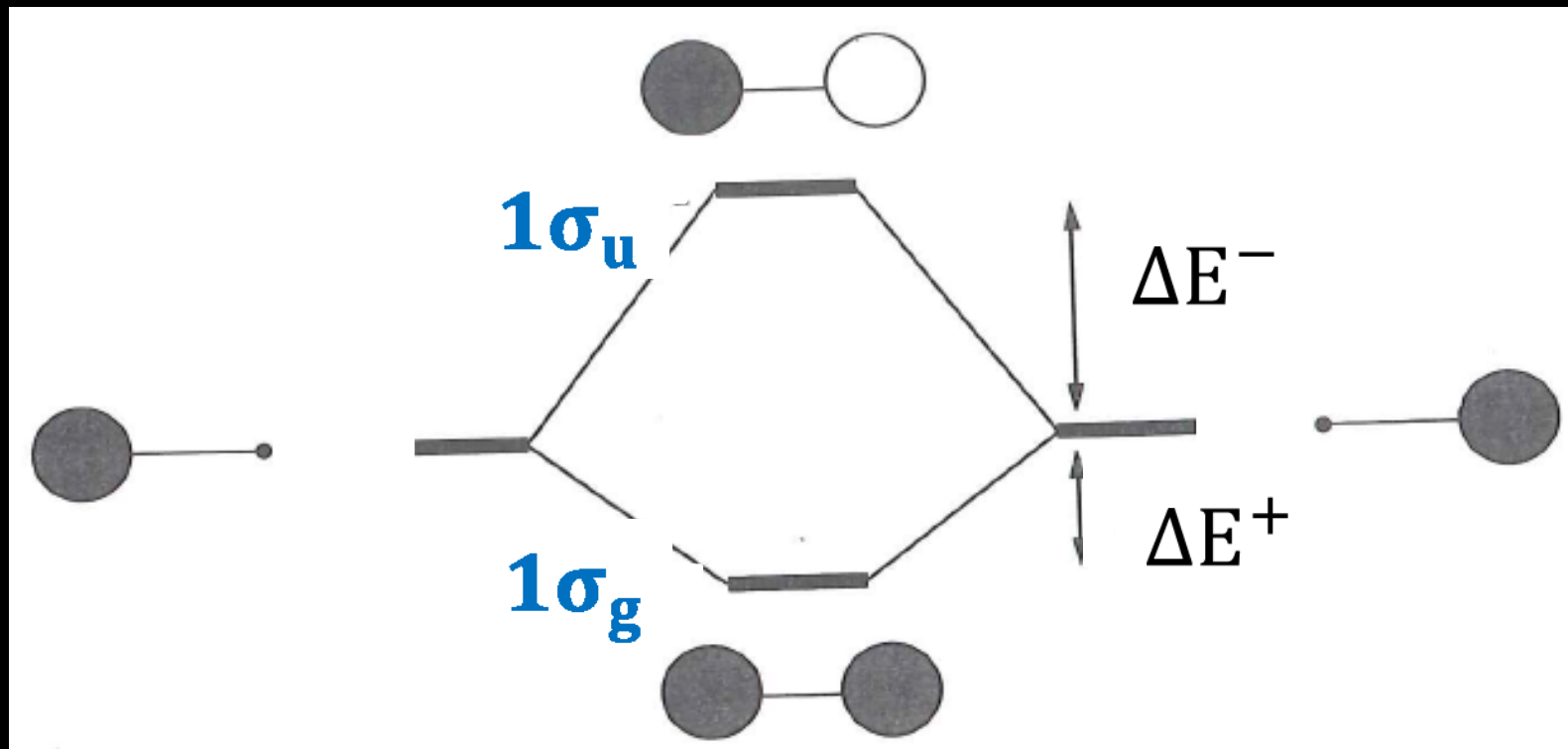


**Protivazebný AO**



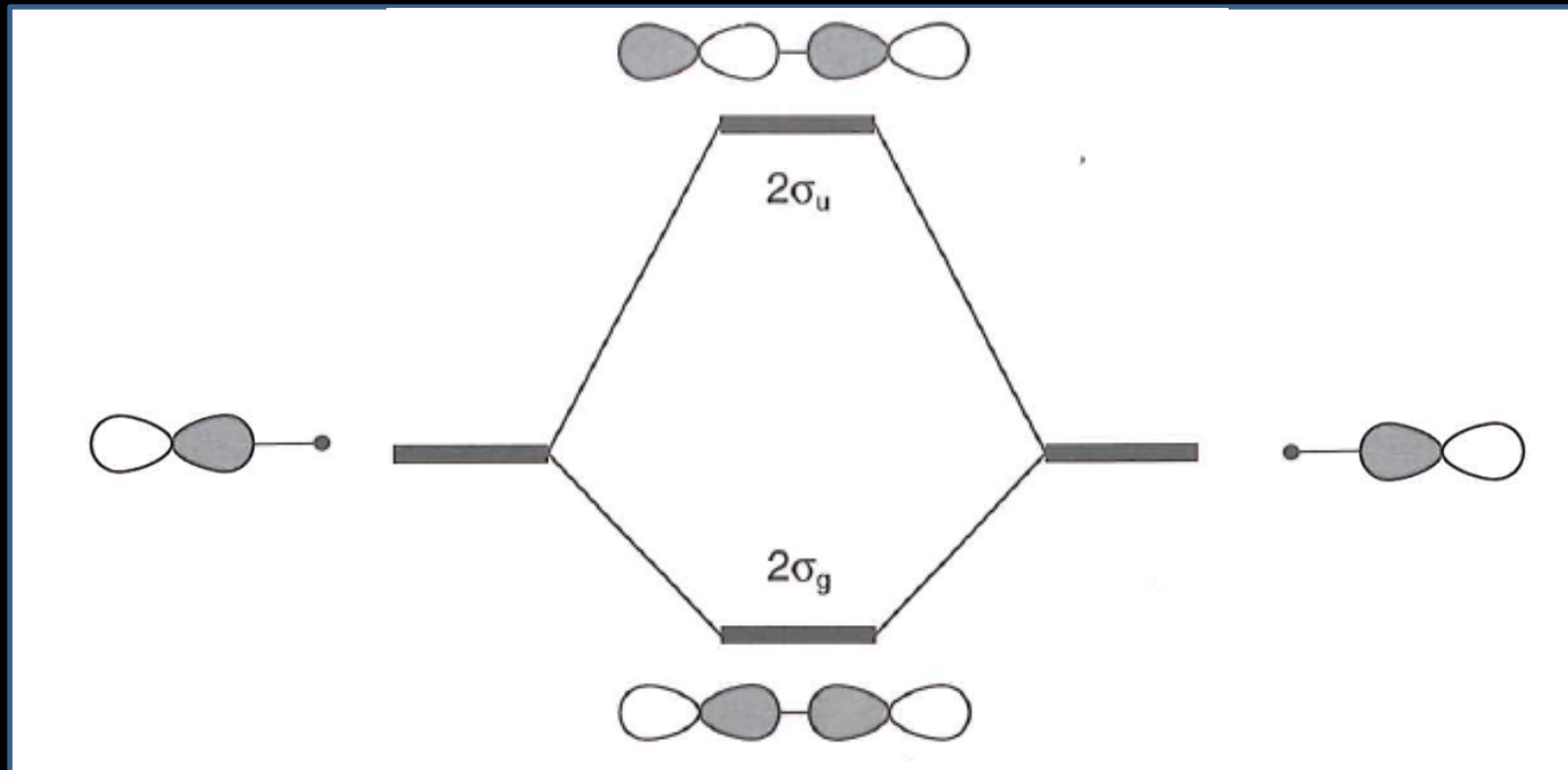
Identický fyzikální význam

## 10.3.2.1 Orbitaly : (a) lineární kombinace AO typu s

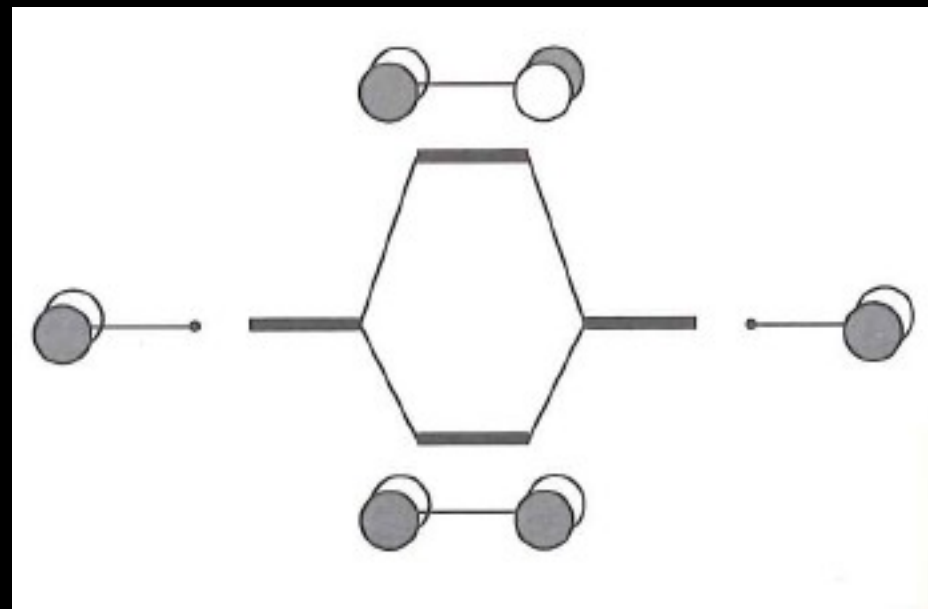
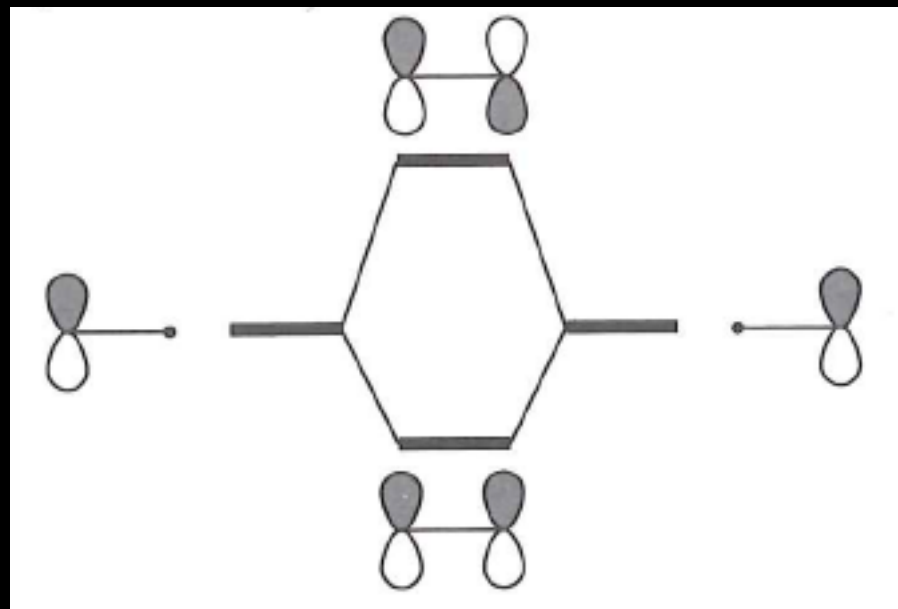


Obr. 10.24 bez obsazení, doplněný o znázornění MO

# Orbitaly : (b) lineární kombinace AO typu $p_z$

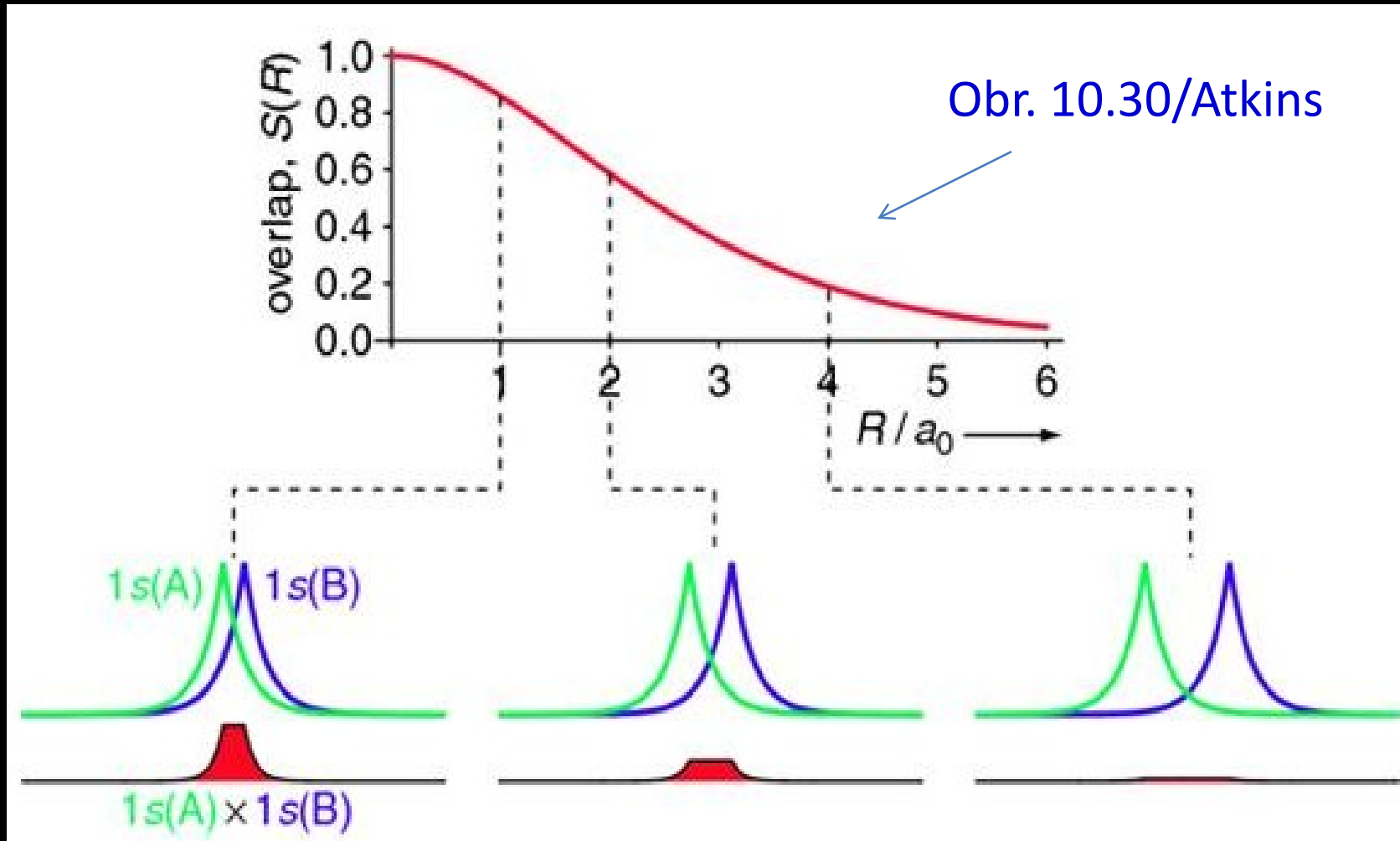


## 10.3.2.2 Orbitaly $\pi$



2 navzájem různé orbitaly  $\pi$

# 10.3.2.3 Překryvový integrál

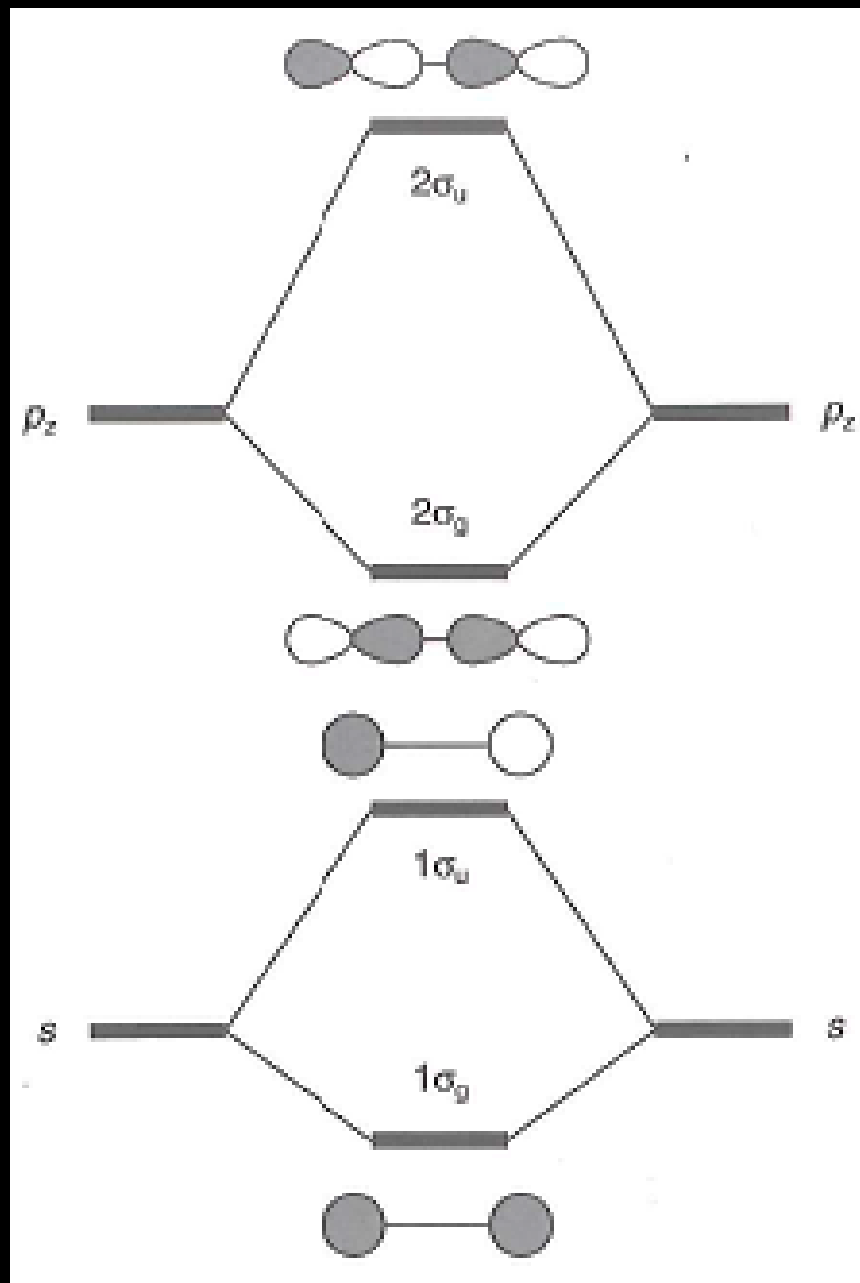




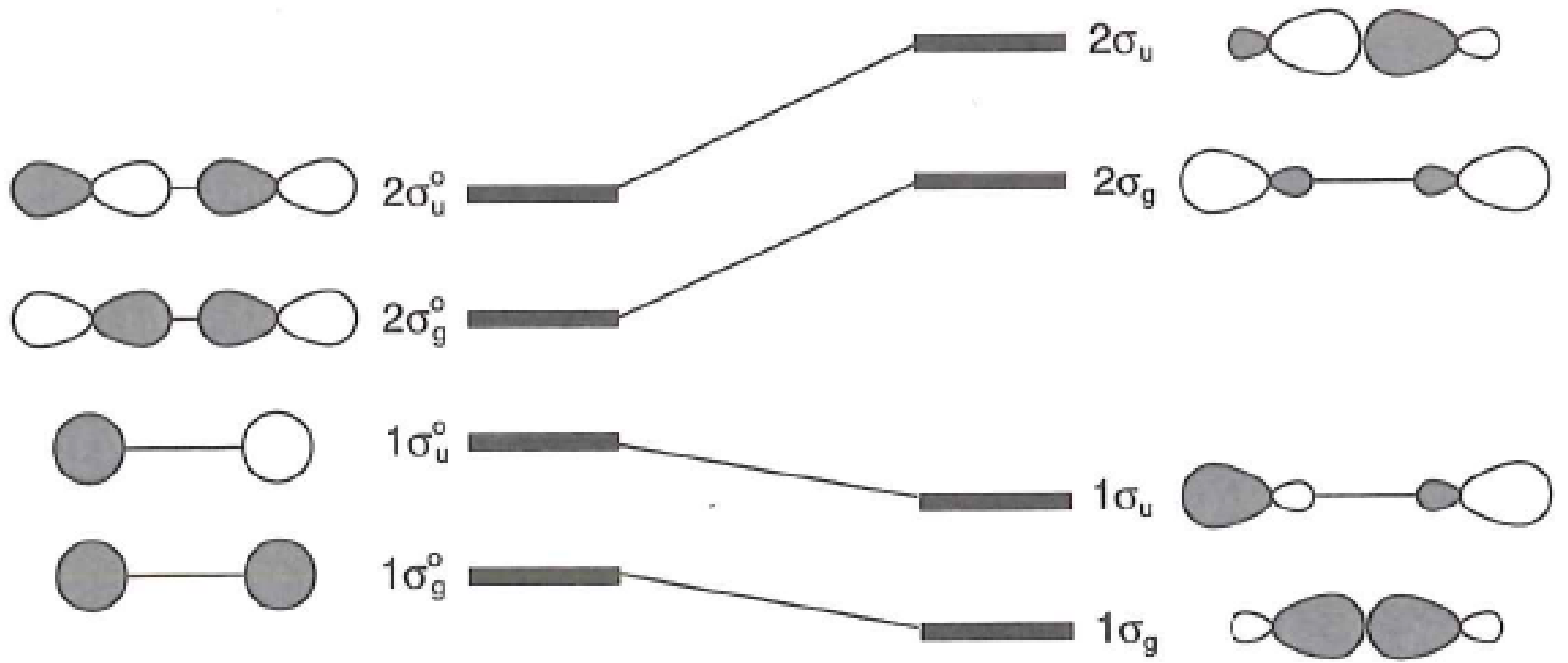
## 10.3.2.4 Elektronová struktura homonukleárních biatomických molekul

MO typu  $\pi$   
viz snímek 7

MO typu  $\sigma$  bez  
interakce s-p

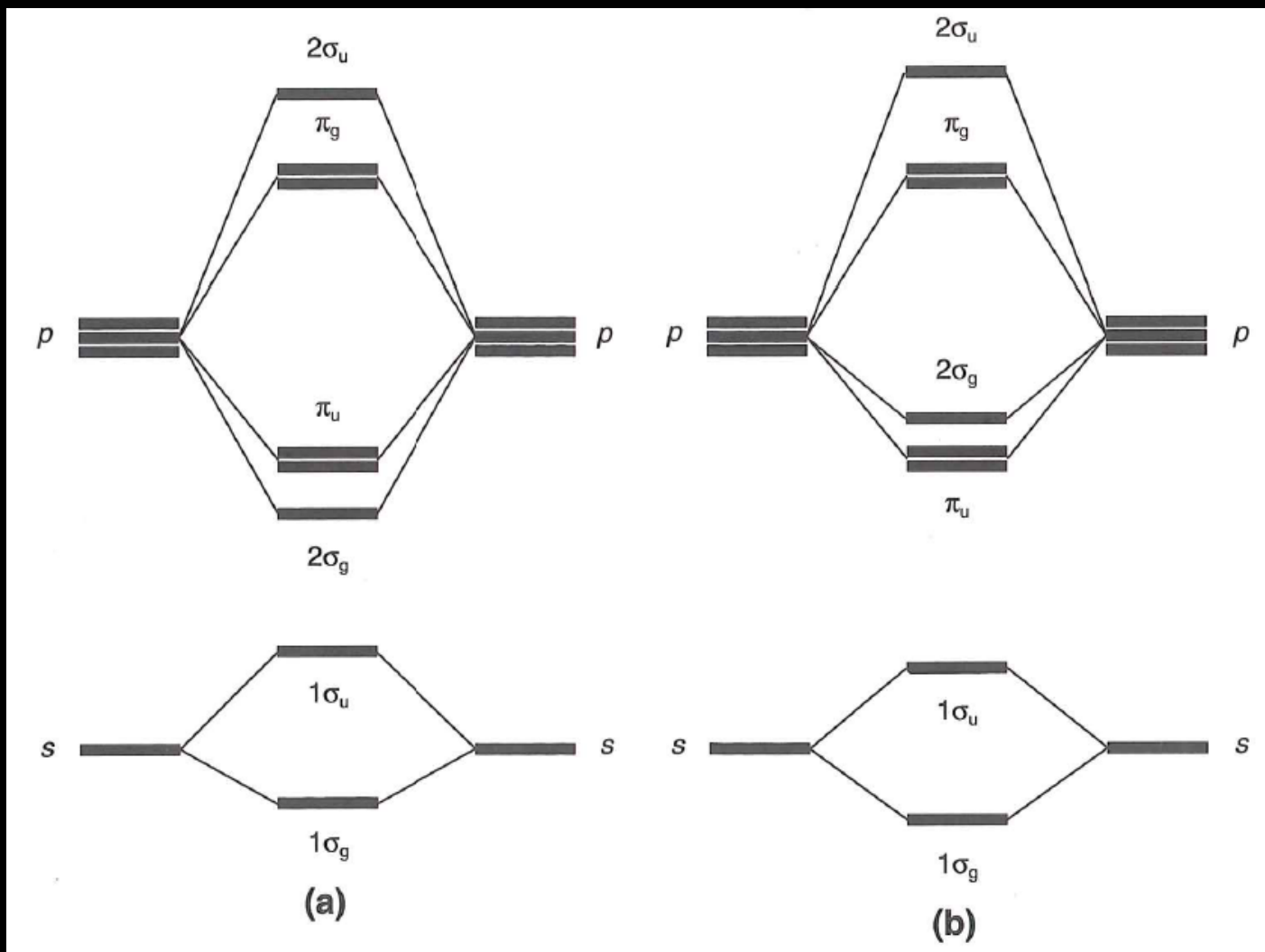


# MO typu [redacted] četně interakce s-p

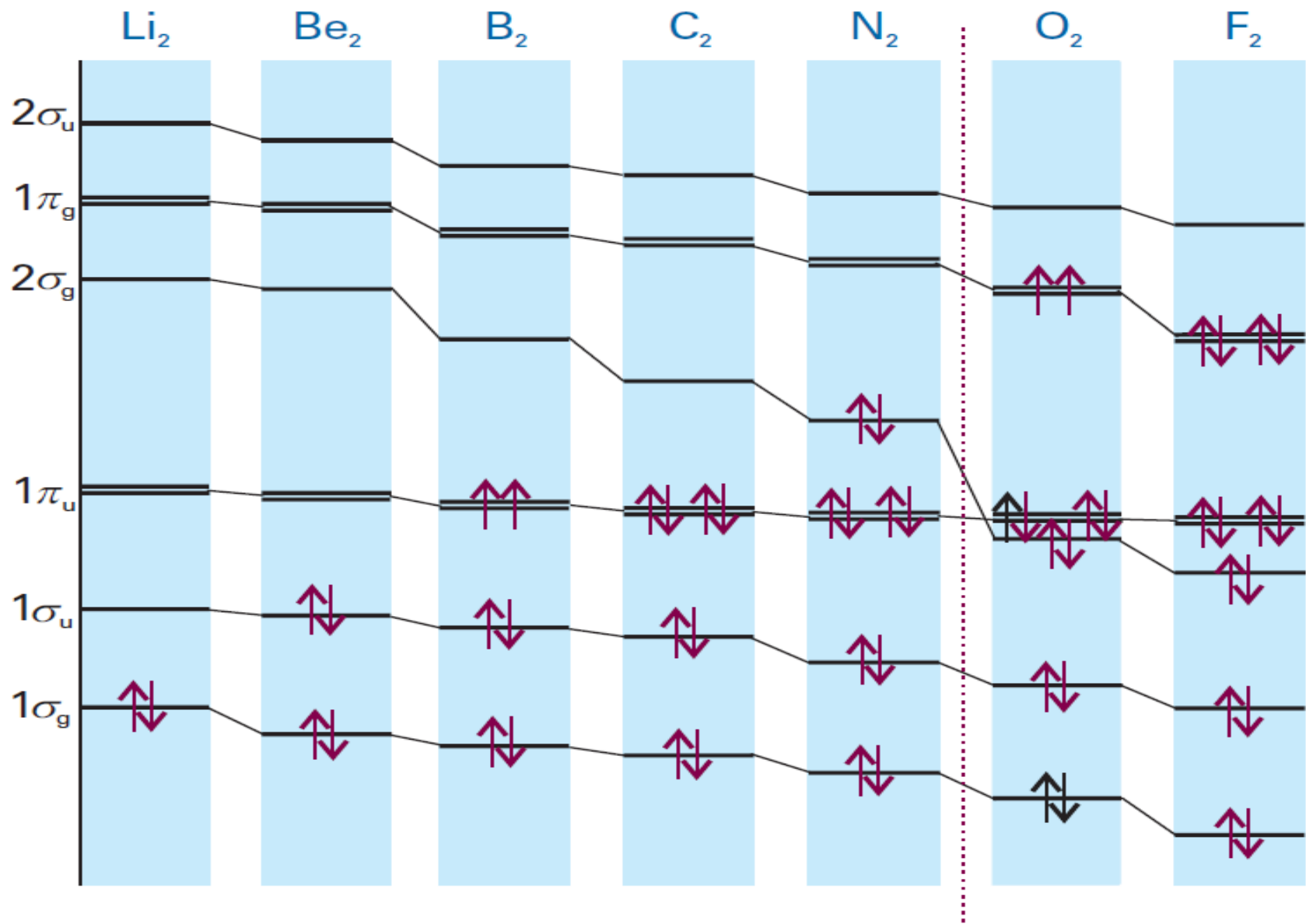


# Obrázek 10.32

# vs. 10.34



Které molekuly 2. periody jsou popsány obrázkem (a) resp. (b)?



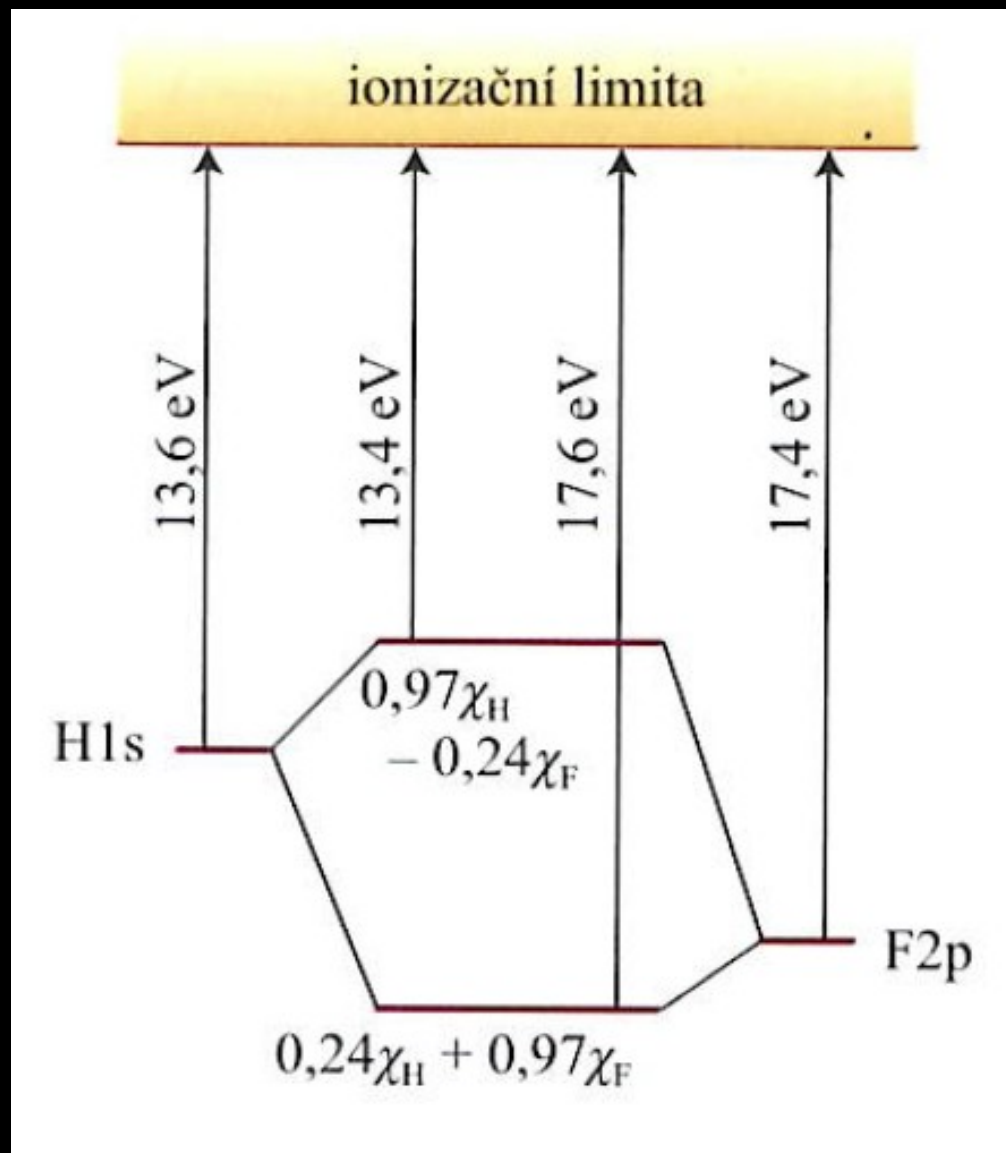
Atkins, Obr. 10.33

Elektronové konfigurace molekul,  
pojem řád vazby a korelace s experiment. daty

Samostudium str. 358

# 10.3.3 Heteronukleární biatomické molekuly

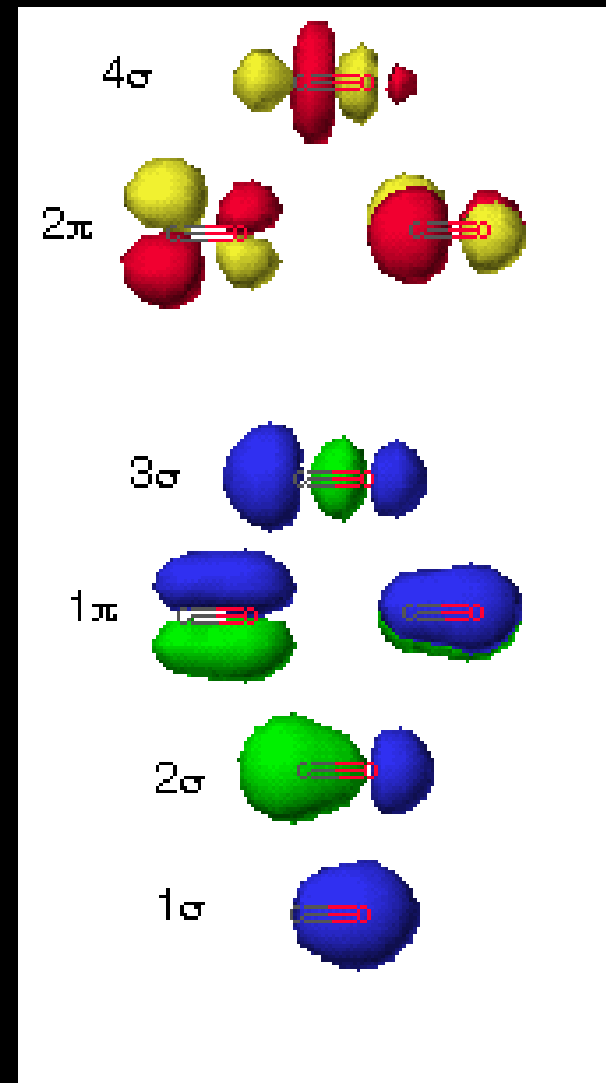
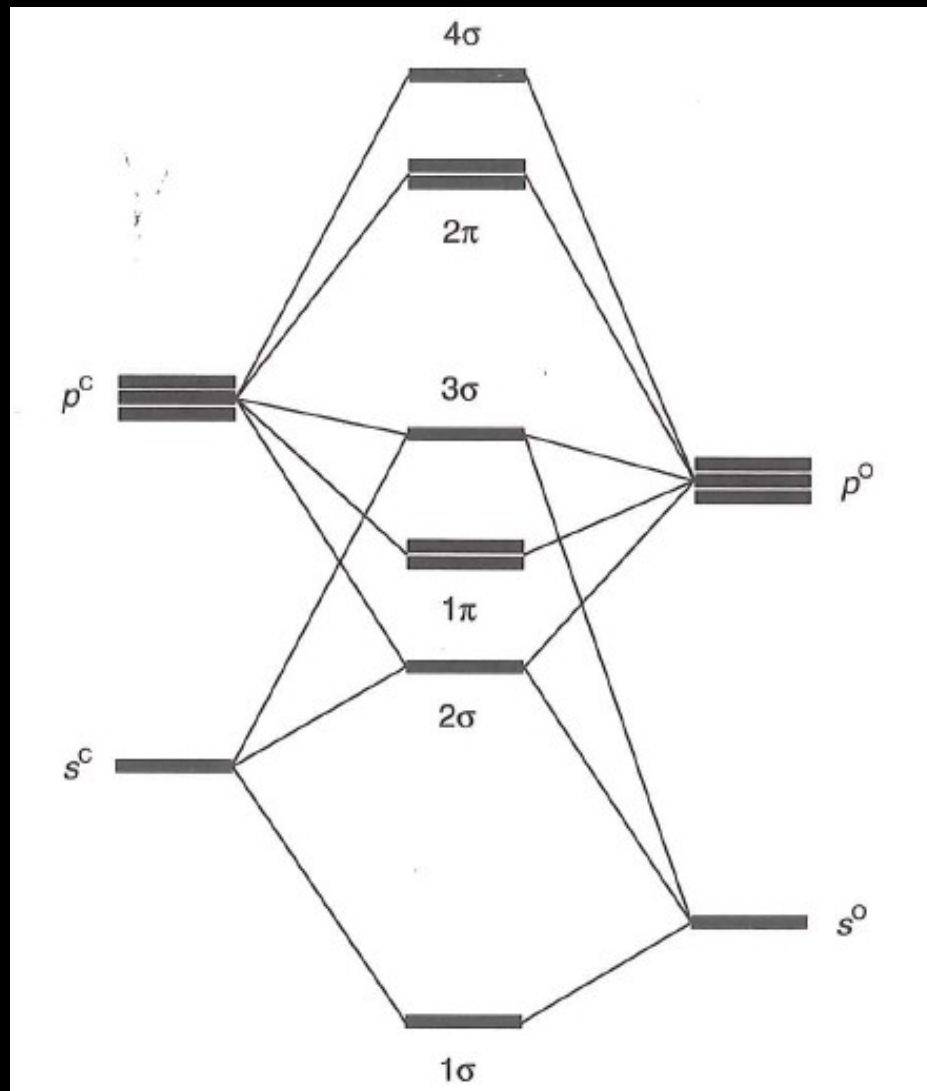
## 10.3.3.1 Polární vazby



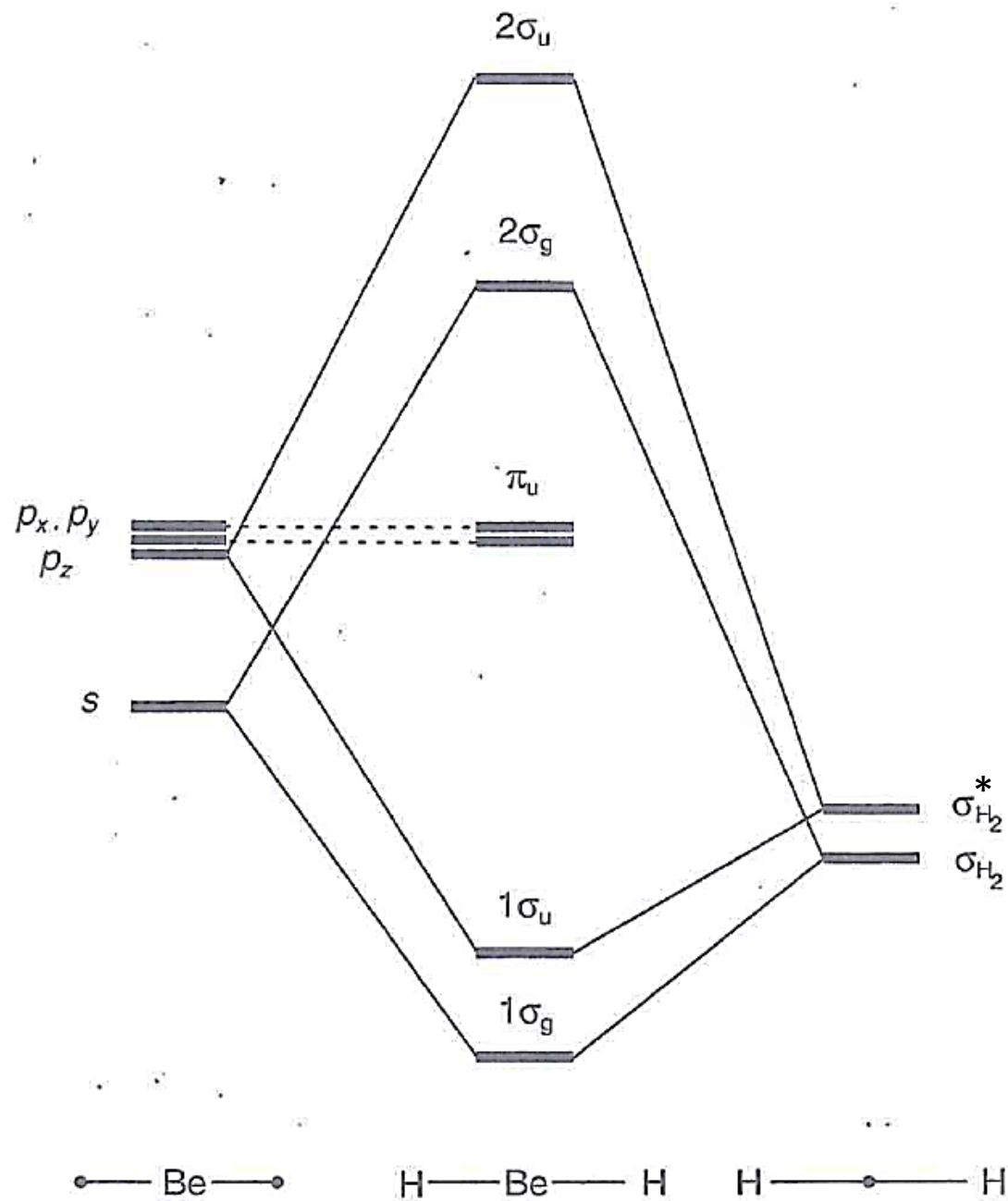
Obr. 10.39

# Mimo ZK.

## Diagram energetických hladin a MO molekuly CO



# Lineární molekuly $\text{AH}_2$





Mimo ZK, odpověď  
na dotaz ze semináře

# Lomené molekuly $AH_2$

