

CHEMICKÁ VÄZBA A ŠTRUKTÚRA MOLEKUL

Molekuly - celkový atómový ion z viacajednotkových jadier a elektrónov.

Najjednoduchšie väzby:

- iónová (možno vysvetliť i klasicky)
- kovalentná (1927, Heitler, London; Lewis'ach QM.)

iónová väzba

Najčastejšia a najjednoduchšia príklad NaCl, KCl

Na: $11e^- (1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^1$
 $n=1, n=2$ zaplnené, jediný e^- v stavu $(3s)^1$

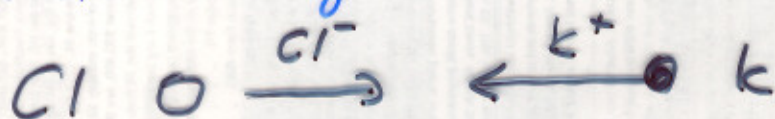
K: $19e^- (1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6(4s)^1$

$(3d)$ je vyprázdnené

4s a preto sa obsadzujú najskôr 4s kde má jeden voľný e^- udr. úplným 1s, 2s, 2p, 3s, 3p

Cl $17e^- (1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^5$
Chýba mu jeden e^- do zaplnenia $(3p)$ hľadí

Vytvoríme molekulu KCl



1) K iniciácia K^+ $E_{ion}^K = 4.34 eV$; e^-, K^+

2) $e^- + Cl \rightarrow Cl^- + 3.61 eV$ z elektrónov, afinita

3) Cl^- a K^+ približme na vzdialenosť rovnú svetlu vlnke ich polomerov $\sim 1.5 \times 10^{-10} m$

$$\Rightarrow r = 3 \times 10^{-10} m$$

$$\text{Prík. energia } E_c = k e^2 / r$$

$$E_c = 4.8 eV$$

Bilancia energií
 $- 4.34 + 3.61 + 4.8 [eV] = \underline{\underline{4.07 eV}}$ - väzbová energia KCl