



1 i 2. Struktura elektronowa atomów, tworzenie wiązań chemicznych

1.1. Struktura elektronowa atomów

Rozkład elektronów na pierwszych czterech powłokach elektronowych

	1. powłoka	2. powłoka	3. powłoka	4. powłoka
Orbitale atomowe	s	s, p	s, p, d	s, p, d, f
Relatywna energia orbitali at.				
Liczba orbitali atomowych	1	1, 3	1, 3, 5	1, 3, 5, 7
Maksymalna liczba elektronów	2	2, 6	2, 6, 10	2, 6, 10, 14

Konfiguracja elektronowa atomów wybranych pierwiastków

Atom	L. atomowa	1s	2s	2p _x	2p _y	2p _z	3s
H	1	↑					
He	2	↑↓					
Li	3	↑↓	↑				
B	5	↑↓	↑↓	↑			
C	6	↑↓	↑↓	↑	↑		
N	7	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	
O	8	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	
F	9	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	
Na	11	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑

Zakaz Pauliego

- orbital atomowy może być obsadzony nie więcej niż dwoma elektronami,
- elektrony te muszą mieć przeciwny spin.

Reguła Hunda

Orbitale atomowe o tej samej energii są obsadzane kolejno pojedynczymi elektronami.

1.2. Rodzaje wiązań chemicznych

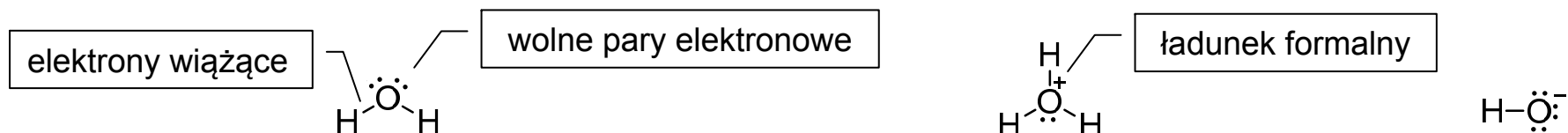
1A	2A	1B	2B	3A	4A	5A	6A	7A
H 2.1								
Li 1.0	Be 1.5			B 2.0	C 2.5	N 3.0	O 3.5	F 4.0
Na 0.9	Mg 1.2			Al 1.5	Si 1.8	P 2.1	S 2.5	Cl 3.0
K 0.8	Ca 1.0							Br 2.8
								I 2.5

Skala elektroujemności (relatywna)
wybranych atomów wg. Paulinga

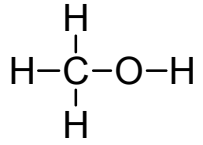
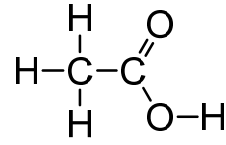
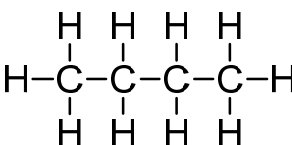
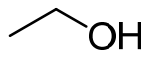
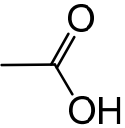

wiązanie X–Y	kowalencyjne niespolaryzowane	kowalencyjne spolaryzowane	jonowe
różnica elektroujemności między atomami tworzącymi wiązanie			
cecha wiązania	uwspólnienie elektronów w równym (prawie równym) stopniu przez oba jądra atomowe		przyciąganie przeciwnych ładunków elektrycznych
przykład	C–C, H–H	C–H, O–H, N–H	K ⁺ F ⁻ , Na ⁺ Br ⁻

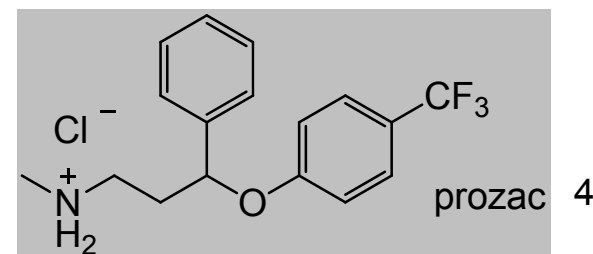
1.3. Rodzaje wzorów chemicznych

Wzory Lewisa – uwidocznione wolne pary elektronowe

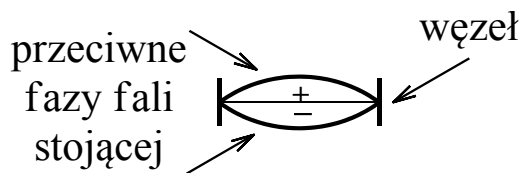
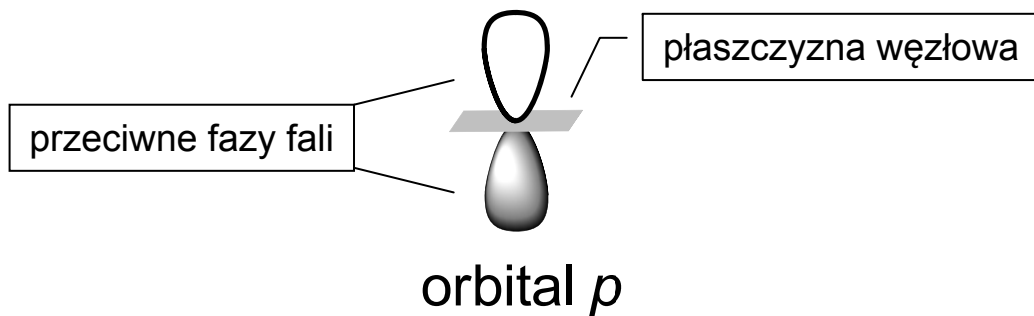
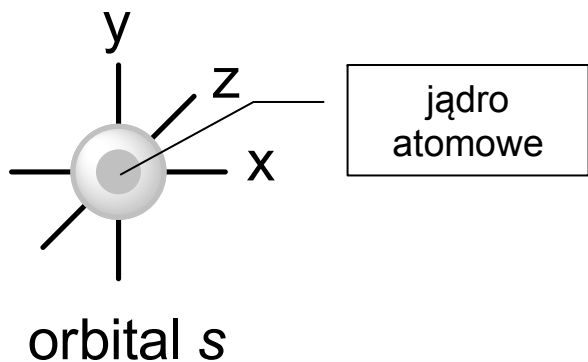


ładunek formalny	=	I. elektronów walencyjnych	-	(I. elektronów w obecnych wolnych parach elektronowych	+	½ I. elektronów obecnych w wiązaniach)
0 (H ₂ O)	=	6	-	(4	+	½ x 4)
+1 (H ₃ O ⁺)	=	6	-	(2	+	½ x 6)
-1 (OH ⁻)	=	6	-	(6	+	½ x 2)

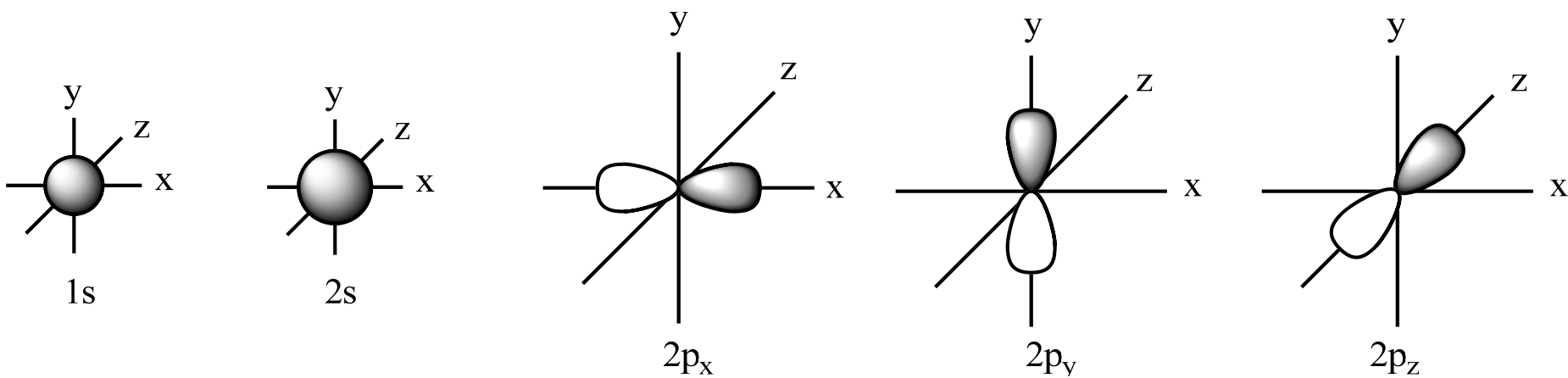
Wzory Kekulego – nieuwidocznione wolne pary elektronowe			
Wzory skondensowane	<chem>CH3CH2OH</chem> 	<chem>CH3CO2H</chem> 	<chem>CH3-CH2-CH2-CH3</chem> lub <chem>CH3-(CH2)2-CH3</chem> 



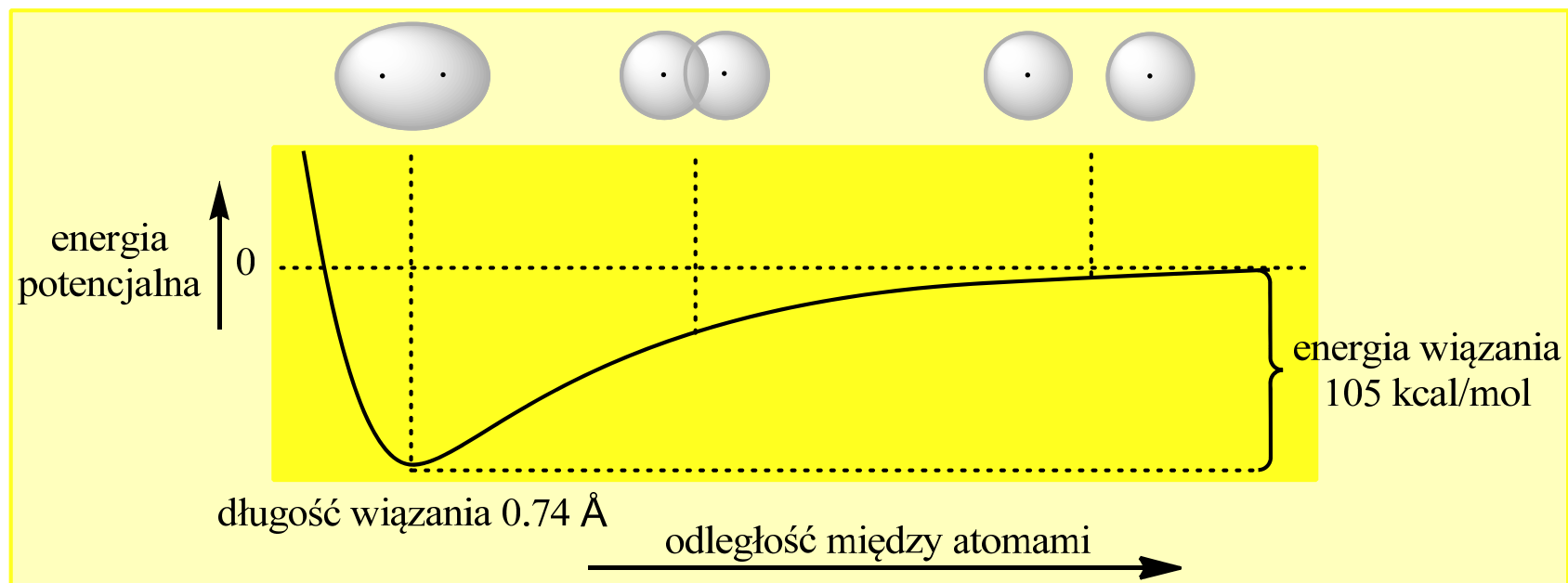
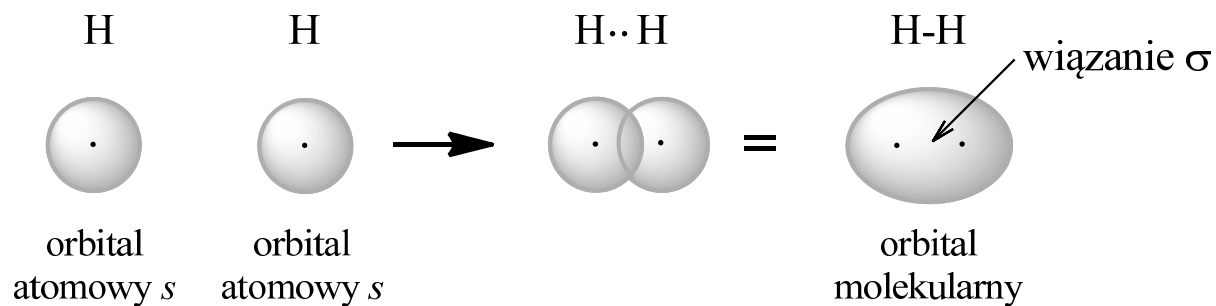
1.4. Wprowadzenie do teorii orbitali atomowych – kontury orbitali atomowych



płaszczyzna węzłowa: przestrzeń o zerowym prawdopodobieństwie występowania elektronu

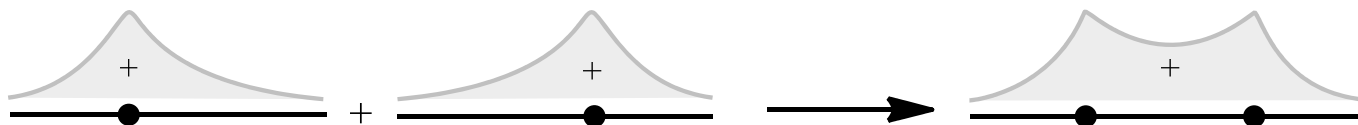


1.5. Wprowadzenie do teorii orbitali molekularnych – tworzenie wiązania H–H

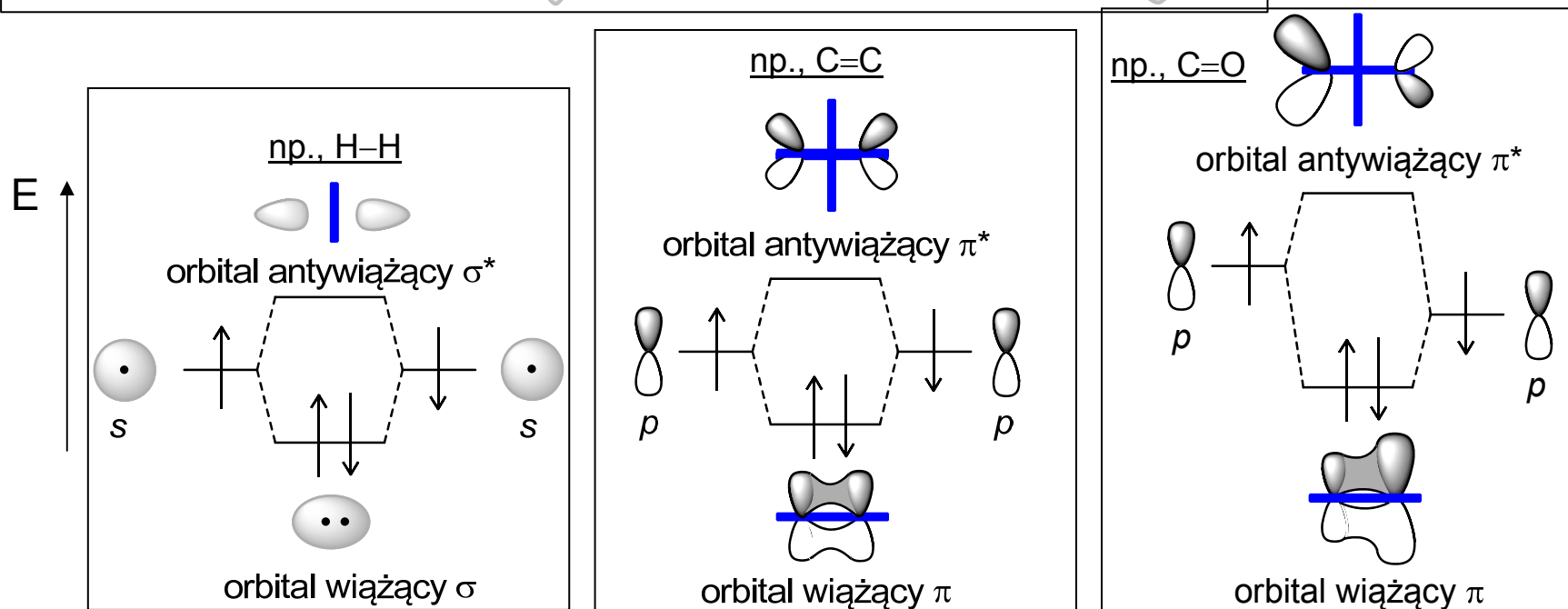
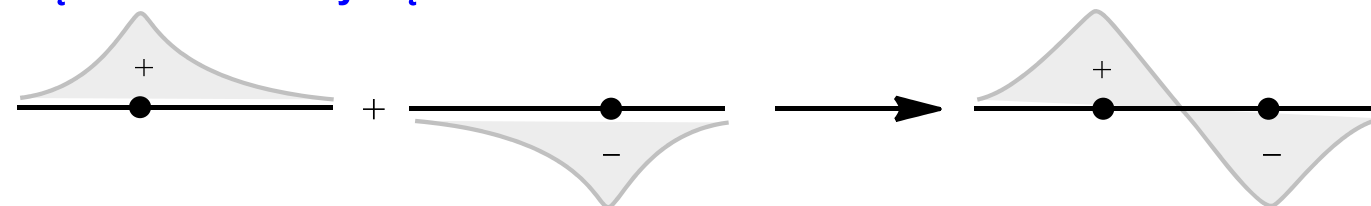


1.6. Wprowadzenie do teorii orbitali molekularnych – orbitale cząsteczkowe

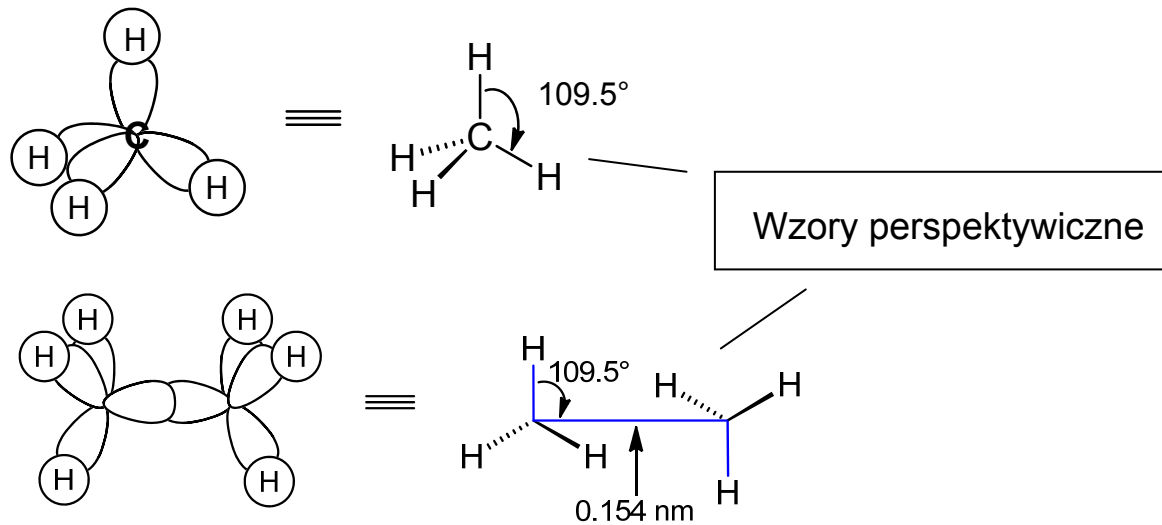
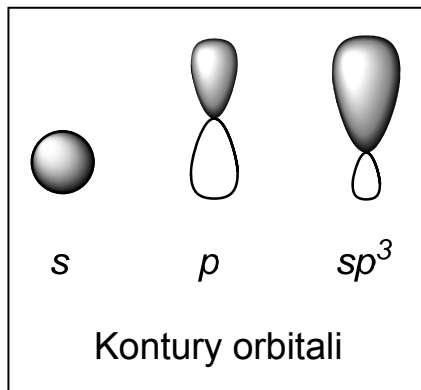
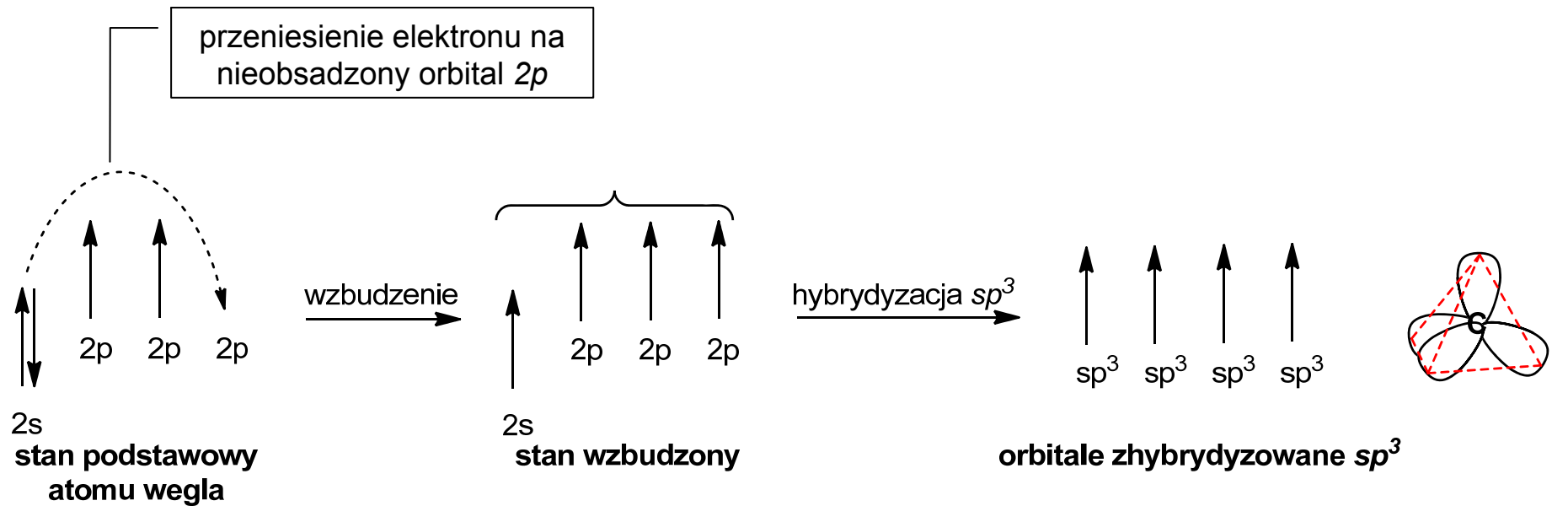
nakładanie się fal o tej samej fazie = wzmocnienie fali, korzystna kombinacja, **utworzenie wiązania**



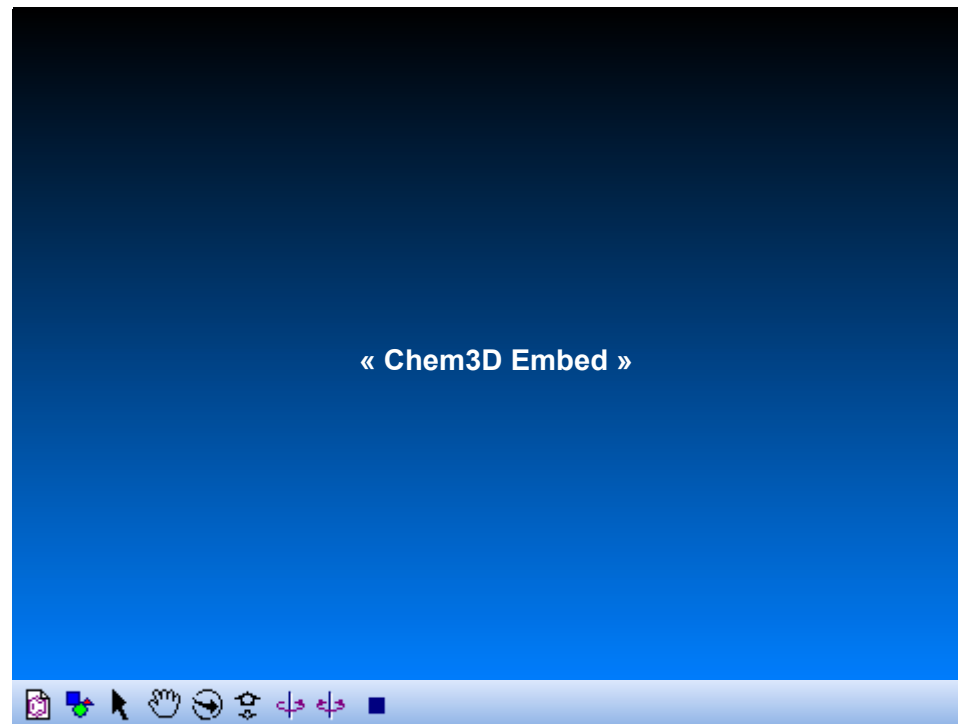
nakładanie się fal o przeciwnej fazie = wygaszenie fali, niekorzystna kombinacja, **wiązanie nie tworzy się**



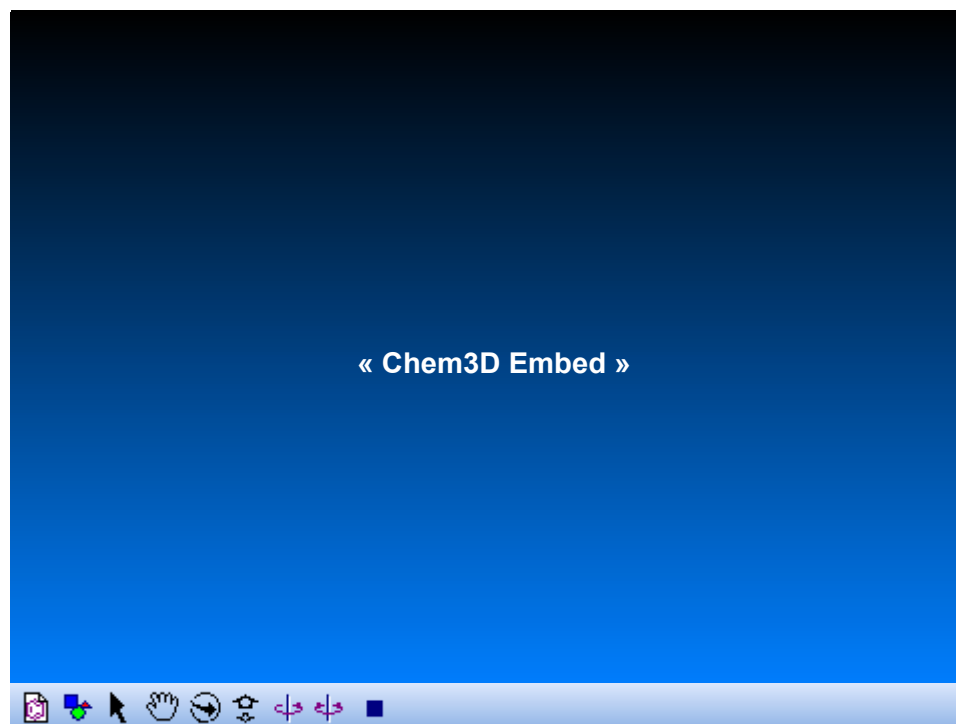
1.7. Powstawanie wiązania pojedynczego C–H i C–C



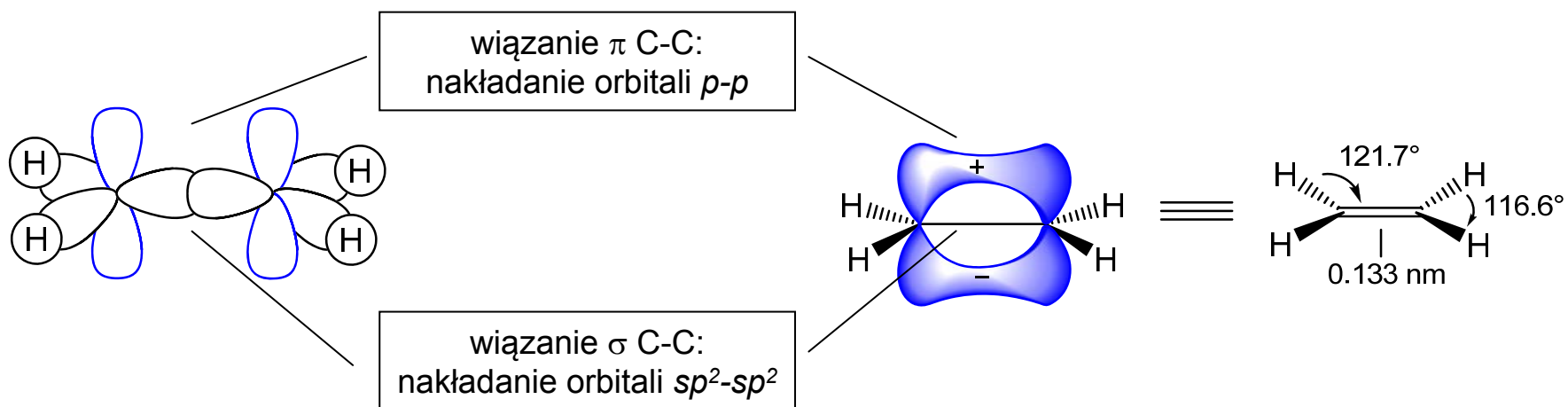
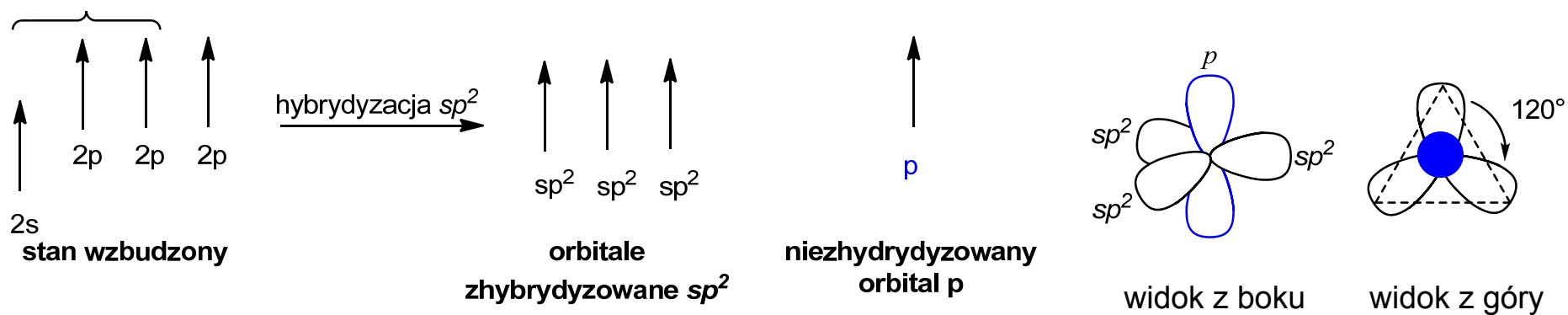
1.7.1. Wizualizacja tetraedrycznej budowy metanu



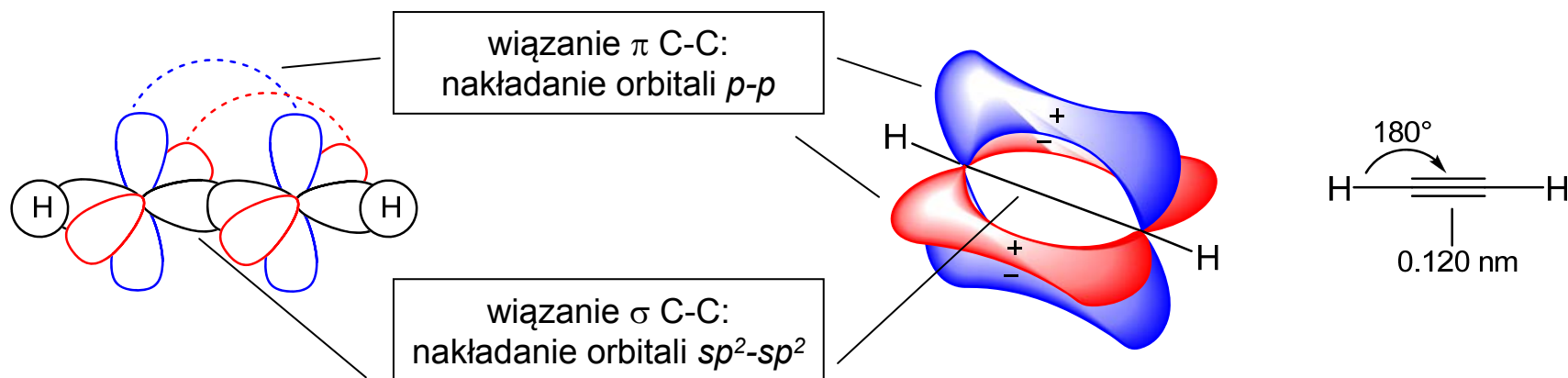
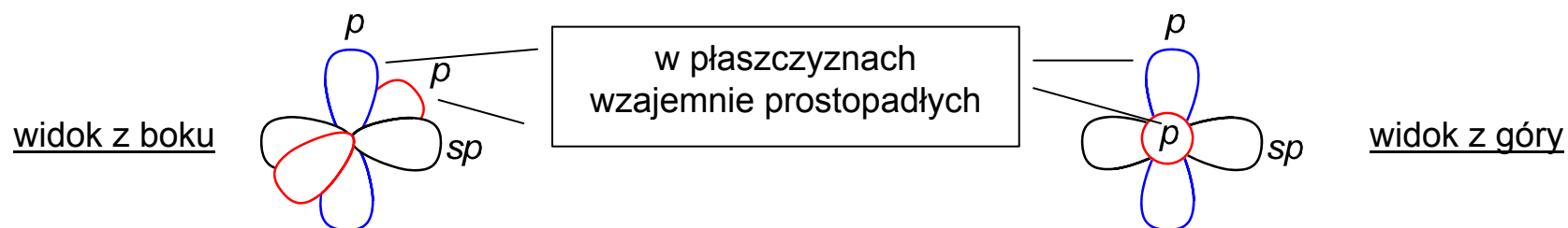
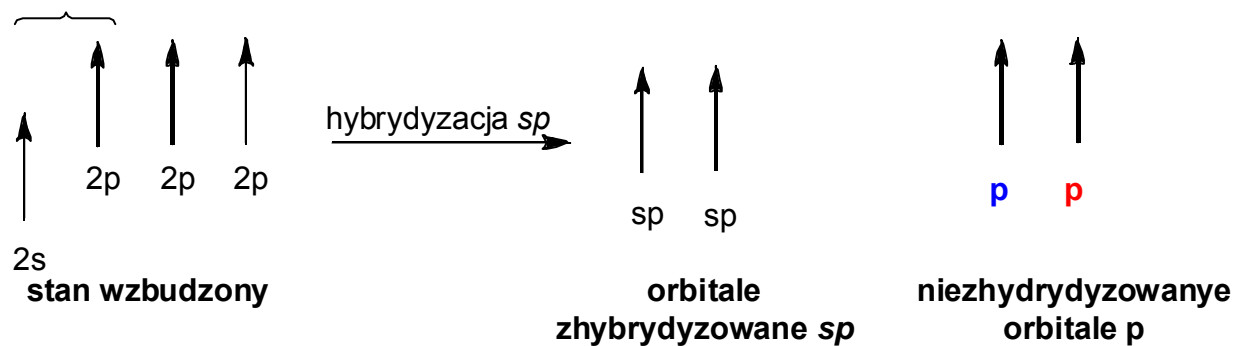
1.7.2. Wizualizacja propanu



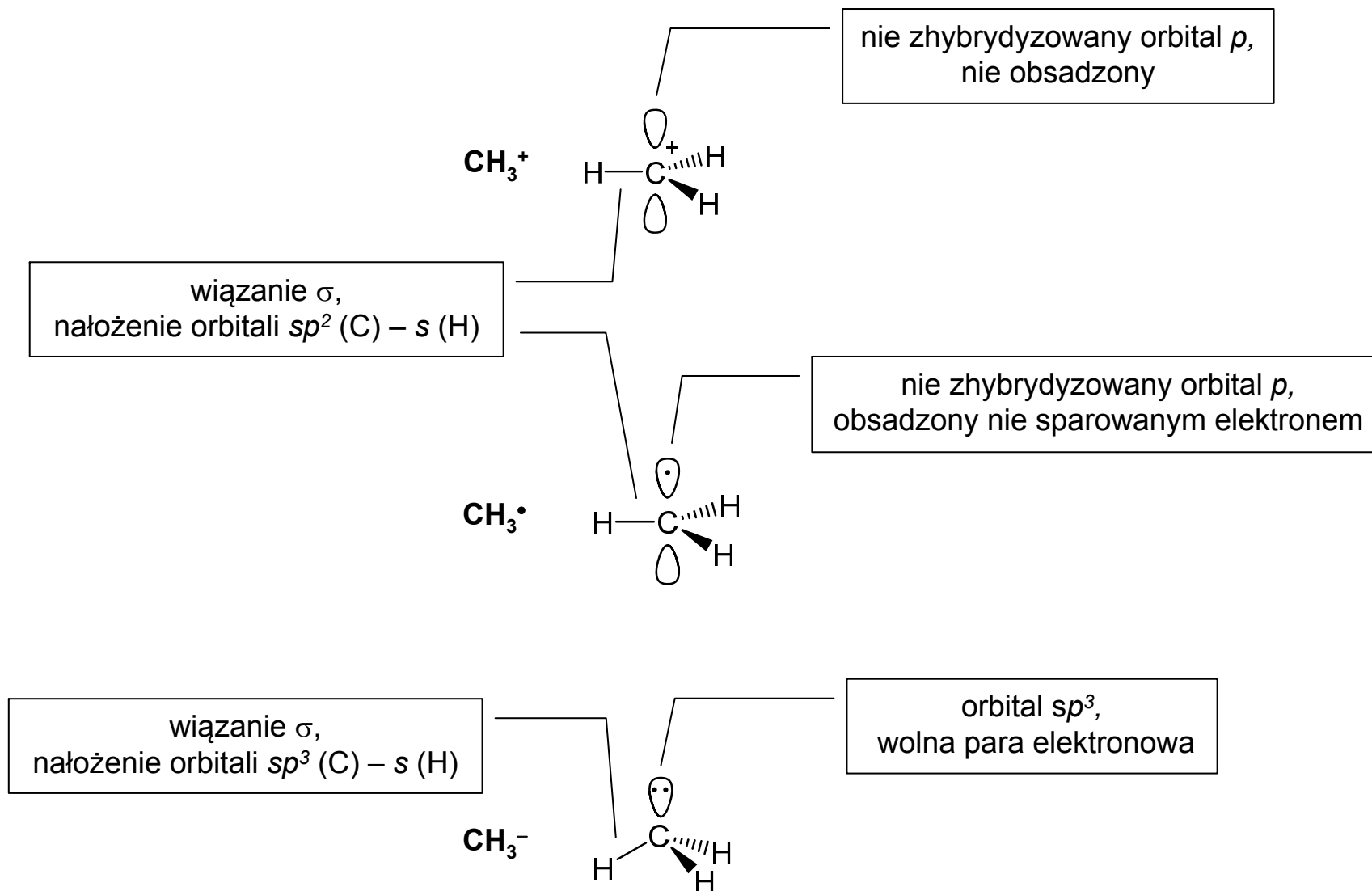
1.8. Powstawanie wiązania podwójnego C–C



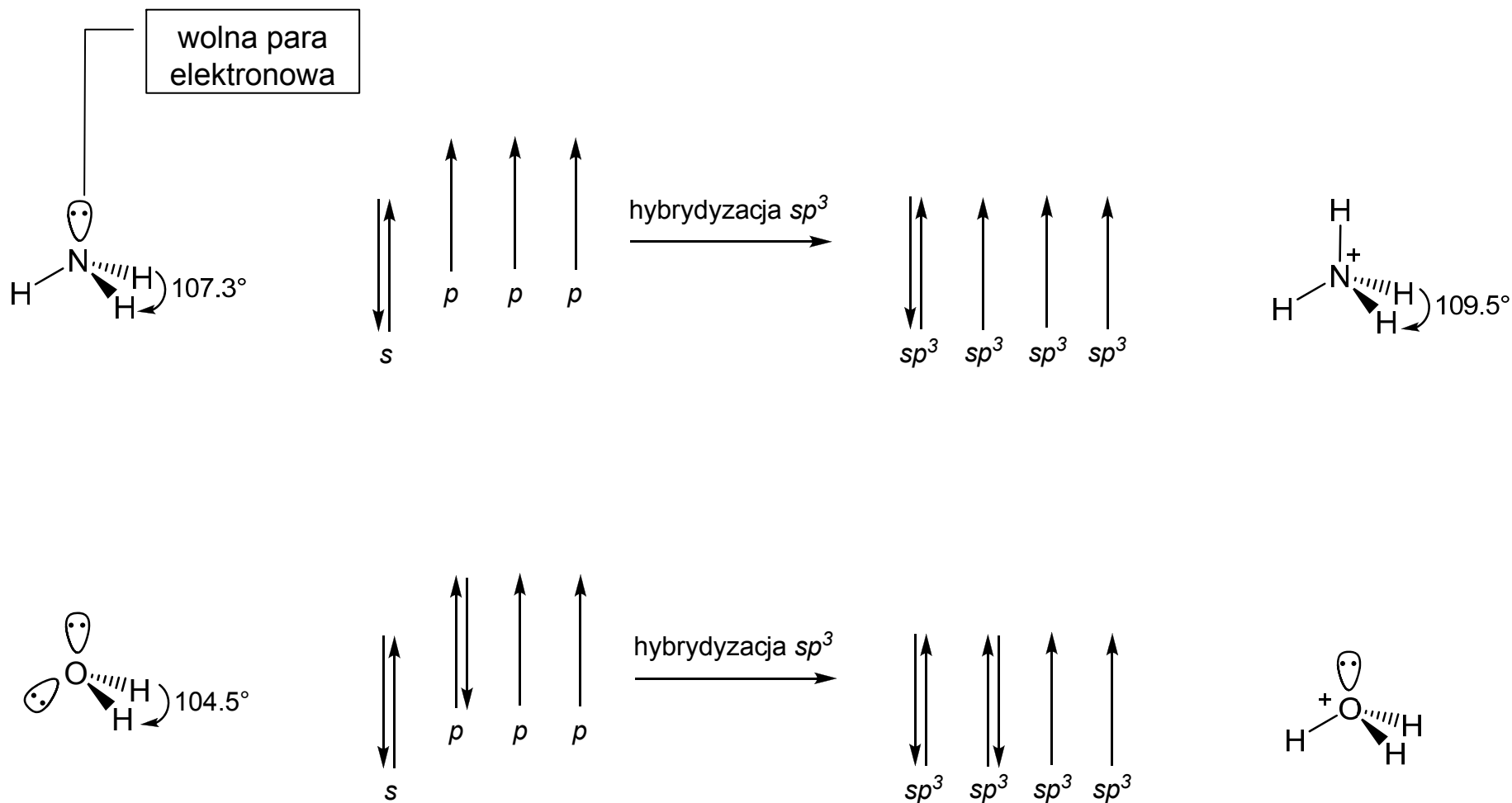
1.9. Powstawanie wiązania potrójnego C–C



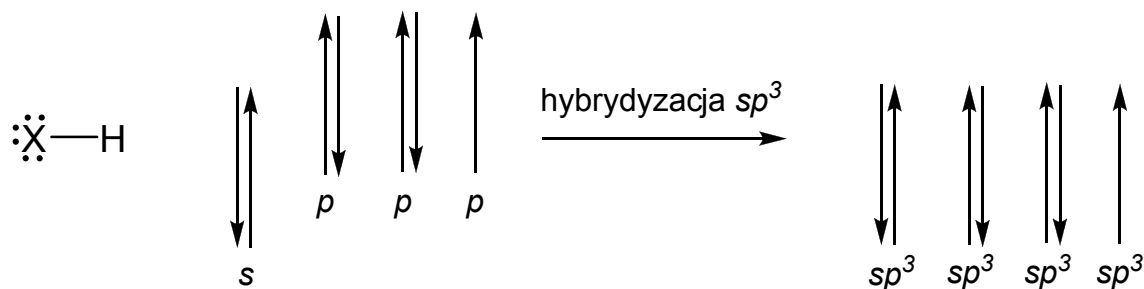
1.10. Budowa CH_3^+ , CH_3^\bullet i CH_3^-



1.11. Budowa cząsteczki NH_3 , NH_4^+ , H_2O i H_3O^+



1.12. Budowa cząsteczki HX (halogenowodoru)



H-X	$2sp^3$	$3sp^3$	$4sp^3$	$5sp^3$
	H-F	H-Cl	H-Br	H-I
Stopień nałożenia orbitali				
Długość wiązania [nm]	0.0917	0.1275	0.1415	0.1609
Moc wiązania [kcal/mol]	136	103	87	71

1.13. Podsumowanie – hybrydyzacja at. C a budowa cząsteczki

Cząsteczka			
Typ hybrydyzacji at. C	sp^3	sp^2	sp
% udział orbitalu s w orbitalu zhybrydowanym	25%	33.3%	50%
Kąty wiązań	109.5°	120°	180°
Długość wiązania C-C [nm]	0.154	0.133	0.120
Moc wiązania C-C [kcal/mol]	90.2	174.5	230.4
Długość wiązania C-H [nm]	0.110	0.108	0.106
Moc wiązania C-H [kcal/mol]	101.1	110.7	133.3

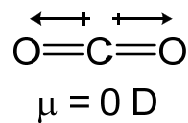
1.14. Moment dipolowy cząsteczki

Wypadkowa wartości momentów dipolowych spolaryzowanych wiązań kowalencyjnych obecnych w cząsteczce i kierunku tych dipoli.

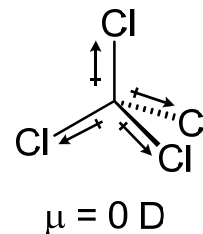
Moment dipolowy wiązania: $\mu =$ wartość ładunku cząstkowego zgromadzonego na jednym z atomów biorących udział w wiązaniu \times odległość między ładunkami

Wiązanie	Elektroujemność atomu	Moment dipolowy wiązania [D]
H-H	2.1	0
H-C	2.5 (C)	0.4
H-N	3.0 (N)	1.3
H-O	3.5 (O)	1.5
H-F	4.0 (F)	1.7
H-Cl	3.0 (Cl)	1.1
H-Br	2.8 (Br)	0.8
H-I	2.5 (I)	0.4

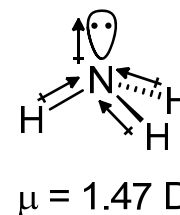
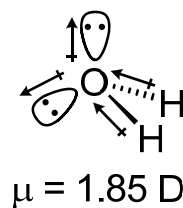
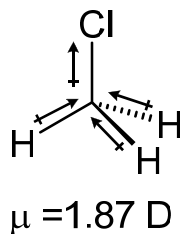
1.14.1. Moment dipolowy cząsteczki - przykłady



momenty dipolowe
wiązań równoważą się

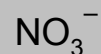


momenty dipolowe
wiązań równoważą się



Uzupełnienie

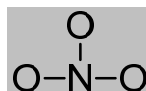
Rysowanie wzorów Lewisa (kiedy znany jest ładunek indywidualum chemicznego)



Krok 1. Zsumuj elektrony walencyjne wszystkich atomów.

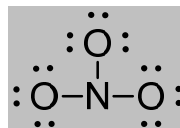
N	5
3 x O	18
ładunek (1-)	+ 1
suma elektr. walencyjnych	24

Krok 2. Połącz atomy wiązaniami pojedynczymi (po 2 elektrony) i oblicz pozostałą liczbę elektronów walencyjnych.

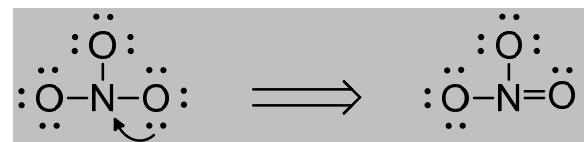


suma elektr. walencyjnych	24
3 x 2 (w wiązaniach)	- 6
	18

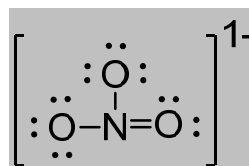
Krok 3. Rozmieść pozostałe elektrony walencyjne w postaci wolnych par elektronowych w taki sposób, aby jak największa liczba atomów zyskała oktet elektronowy, zacznij od atomu o największej elektroujemności.



Krok 4. Jeśli któryś z atomów nie posiada oktetu elektronowego, dodaj mu elektronów przez połączenie go wiązaniem podwójnym z sąsiednim atomem, który posiada wolną parę elektronową



Krok 5. Uzupełnij wzór o ładunek indywidualum



Krok 6. Określ formalne ładunki cząstkowe i sprawdź, czy ich suma jest zgodna z ładunkiem indywidualum (musi być zgodna)

