



FAKULTA ELEKTROTECHNIKY
A KOMUNIKAČNÍCH **ústav teoretické**
TECHNOLOGIÍ **a experimentální elektrotechniky**

Model atomu uhlíku C, ionizační a vazebné energie

Ing. Pavel Werner

Práce vznikla jako navazující podpůrný text (skripta) předchozích publikací v oblasti modelování struktury hmoty pro doktorský stupeň studia pro předměty numerického modelování UTEE FEKT VUT v Brně.

© Pavel Werner 2021

ISBN 978-80-87342-24-4

MODEL ATOMU UHLÍKU C, IONIZAČNÍ A VAZEBNÉ ENERGIE

Pavel Werner

pwerner@volny.cz

www.ringtheory.eu

Obsah

Model atomu uhlíku C, ionizační a vazebné energie	3
1 Úvod.....	4
2 Model atomu uhlíku C podle RT	4
2.1 Poloměr, vzdálenost a ionizační energie elektronu 2p atomu uhlíku C	6
2.2 Poloměr, vzdálenost a ionizační energie elektronu 2s atomu uhlíku C	8
3 Sekvenční ionizační energie elektronů atomu uhlíku C podle modelu RT.....	13
3.3 Ionizační energie elektronu 2p ¹ iontu atomu uhlíku C ⁺	13
3.4 Ionizační energie elektronu 2s ² iontu atomu uhlíku C ⁺⁺	16
3.5 Ionizační energie elektronu 2s ¹ iontu atomu uhlíku C ⁺⁺⁺	18
4 Vazebná energie vazby C-H v molekule CH ₄	21
4.1 Vazebná energie jednoduché vazby 2p atomu uhlíku C a 1s atomu vodíku H	23
4.2 Vazebná energie jednoduché vazby 2s atomu uhlíku C a 2s atomu vodíku H.....	26
5 Ortho a para vazba C-C.....	31
5.1 Vazebná délka a energie jednoduché vazby 2p-2p atomů uhlíku C-C.....	32
5.2 Vazebná délka a energie jednoduché vazby 2s-2p atomů uhlíku C-C	35
6 Vazebná energie dvojné vazby atomů uhlíku C=C.....	38
6.1 Vazebná energie jednoduché vazby 2s-2s atomů uhlíku C-C	39
7 Vazebná energie trojné vazby atomů uhlíku C≡C	42
8 Závěr	43
9 Poděkování.....	43
10 Literatura	43

1 Úvod

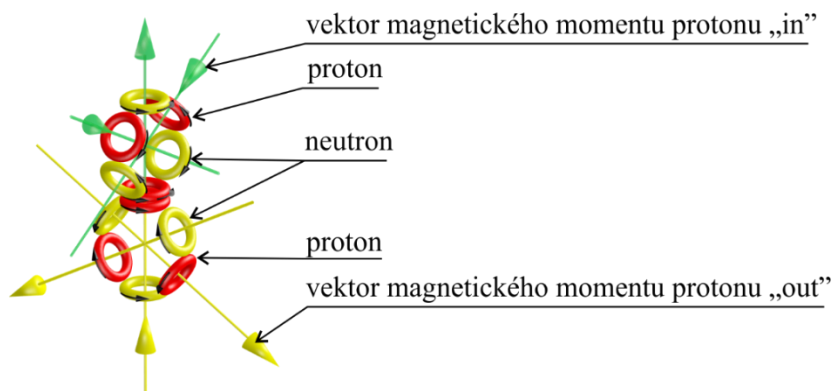
Tento příspěvek se snaží ukázat, že využitím prstencové struktury modelu elementárních částic, modelu struktury jader atomů a modelů molekul podle Prstencové teorie (RT) za využití základních zákonů a vlastností elektromagnetických (EMG) polí a jednoduchou matematikou lze poměrně přesně určit poloměry atomů a jejich ionizační energii, vzdálenost atomů v jednoduché kovalentní homonukleární vazbě i jejich vazebnou energii. V tomto článku se budeme zabývat modelem atomu uhlíku C.

2 Model atomu uhlíku C podle RT

Uhlík (chemická značka C, latinsky Carboneum) je chemický prvek, který se v periodické tabulce prvků nachází ve 14. skupině, 2. periody [12]. Jeho elektronová konfigurace je [He] $2s^2 2p^2$.

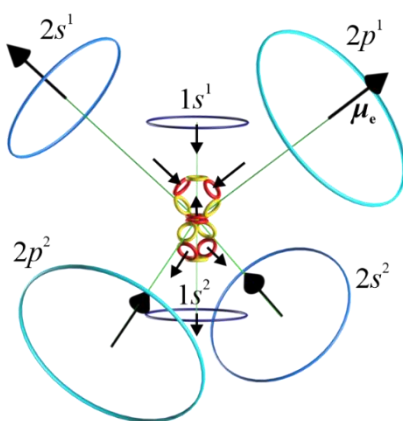
Podle RT [1] je pro jeho vlastnosti nejdůležitější struktura jeho jádra, která určuje pozici a vlastnosti elektronů vázaných k protonům v jádře atomu. Model struktury jádra atomu uhlíku se skládá ze dvou globulí [1], které jsou tvořeny třemi protony a třemi neutrony, obr.1. K sobě jsou vázány přes protonový můstek a drženy silou elektromagnetického pole obou protonů. Roviny těchto globulí jsou na sebe kolmé [1].

Jedním z nejdůležitějších prvků struktury modelu jádra je rozložení a orientace magnetických momentů prstenců protonů μ_p . V jedné globuli směřují vektory magnetických momentů protonů radial- interior globule a ve druhé globuli směřují vektory magnetických momentů protonů radial- exterior (obr. 1) [1].

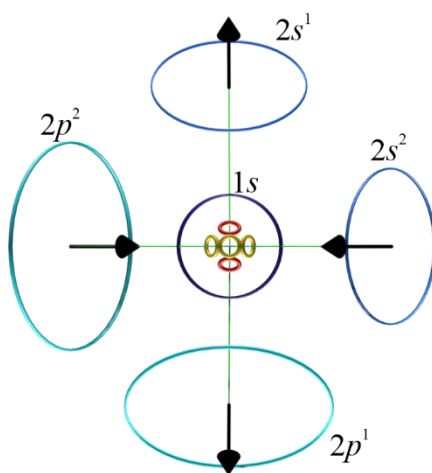


Obr. 1. Model prstencové struktury jádra atomu uhlíku C a jeho magnetické momenty μ_p .

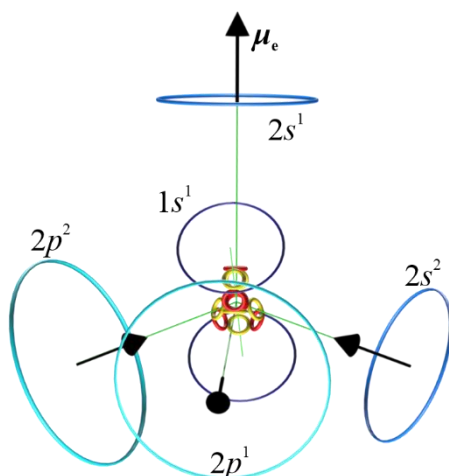
Tato struktura jádra má vliv na orientaci magnetických momentů elektronů μ_e , které jsou vázány k jednotlivým protonům jádra, ale vůči vektorům magnetických momentů „svých“ řídicích protonů mají antiparalelní směr. Proto mají každý z vazebných elektronů $2p$ i $2s$ opačný vektor magnetického momentu μ_e vůči jádru atomu (obr. 2, 3 a 4). Takovéto uspořádání elektronů umožňuje atomům uhlíku vytvářet různé druhy vazeb s jinými atomy.



Obr. 2. Model prstencové struktury elektronů atomu uhlíku C a jejich magnetické momenty μ_e .



Obr. 3. Model prstencové struktury elektronů atomu uhlíku C a jejich magnetické momenty μ_e , pohled v ose jádra atomu.



Obr. 4. Model prstencové struktury elektronů atomu uhlíku C jejichž středy tvoří tetrahedrální strukturu.

Pro popis vlastností modelu atomu uhlíku podle RT budeme potřebovat určit poloměr r_e prstence elektronu $2p$ a $2s$ a jejich vzdálenost d_e od atomového jádra (atomový poloměr).

2.1 Poloměr, vzdálenost a ionizační energie elektronu 2p atomu uhlíku C

Podle publikované práce modelu hmoty pomocí RT [1] poloměr r_e elektronu 2p atomu uhlíku C, dobu rotace náboje t_e a proud elektronu i_e , který vzniká rotací elektrického náboje q_e po obvodu elektronu za jednu otáčku vypočteme podle vztahů [1]:

$$r_{e2p2} = \frac{2}{3} \cdot \frac{T_n \cdot \alpha}{2\pi \cdot n^2} = \frac{2}{3} \cdot \frac{k_{re}}{E_{ie2p2} \cdot n^2} = 2.1344 \cdot 10^{-11} \text{ m}, \quad (1)$$

kde $E_{ie2p2} = 11.260 \text{ eV}$ [3] a konstanta k_{re} :

$$k_{re} = \frac{h \cdot c \cdot \alpha}{2 \cdot \pi} = \frac{4.1357 \cdot 10^{-15} \cdot 2.9979 \cdot 10^8}{2 \cdot 3.1416 \cdot 137.04} = 1.4421 \cdot 10^{-9}. \quad (2)$$

$$t_e = \frac{h \cdot c}{E_{ie2p2} \cdot c \cdot \alpha} = \frac{4.1357 \cdot 10^{-15} \cdot 137.04}{11.260} = 5.0317 \cdot 10^{-14} \text{ s}, \quad (3)$$

$$i_e = \frac{q_e}{t_e} = \frac{1.6021 \cdot 10^{-19}}{5.0317 \cdot 10^{-14}} = 3.1840 \cdot 10^{-6} \text{ A}. \quad (4)$$

Dynamická rovnovážná vzdálenost elektronu 2p u atomu uhlíku C je dána rovnováhou mezi elektrickou silou přitažlivou $F_{el,z}$ a magnetickou silou odpudivou $F_{mg,z}$ na ose mezi prstencem protonu jádra a prstencem elektronu na společné ose [1]:

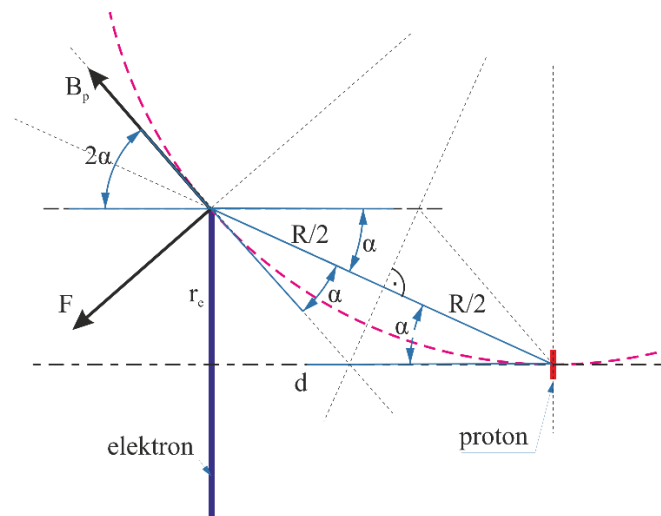
$$F_{el,z} = F_{mg,z} \quad (5)$$

Pokud vyjdeme z předpokladu, že chemická vazba je silová interakce, pak potřebnou elektrickou sílu v ose z vyjádříme vztahem odvozeným z Coulombova zákona [1]:

$$F_{el,z} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q_e^2}{r^2} \cdot \cos\theta, \quad (6)$$

a magnetickou sílu v ose z vyjádříme vztahem odvozeným z Biot-Savartova zákona (obr. 5) [1]:

$$F_{mag,z} = \frac{i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p}{4\pi \cdot r^3} \cdot \sin 2\theta. \quad (7)$$



Obr. 5. Grafické zobrazení působení magnetické síly v modelu atomu uhlíku C v ose z [1].

Pro vyjádření složky síly pouze v ose prstenců z platí

$$r = \sqrt{r_e^2 + d^2}, \quad (8)$$

$$F_{elz} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q_e^2 \cdot d}{\sqrt{(r_e^2 + d^2)^3}}, \quad (9)$$

$$F_{magz} = \frac{i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot 2d \cdot r_e}{4\pi(\sqrt{d^2 + r_e^2})^5}, \quad (10)$$

kde i_e je proud elektronu, r_e je poloměr elektronu, μ_p je magnetický moment protonu a d je vzdálenost protonu a elektronu na jejich společné ose, obr.5. Pokud vztah (5) vyjádříme pomocí vztahů (9) a (10) pak

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q_e^2}{r^2} \cdot \cos\theta = \frac{i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot \sin 2\theta}{4\pi \cdot r^3}, \quad (11)$$

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q_e^2 \cdot d}{\sqrt{(r_e^2 + d^2)^3}} = \frac{i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot 2 \cdot r_e \cdot d}{4\pi \cdot \sqrt{(r_e^2 + d^2)^5}}, \quad (12)$$

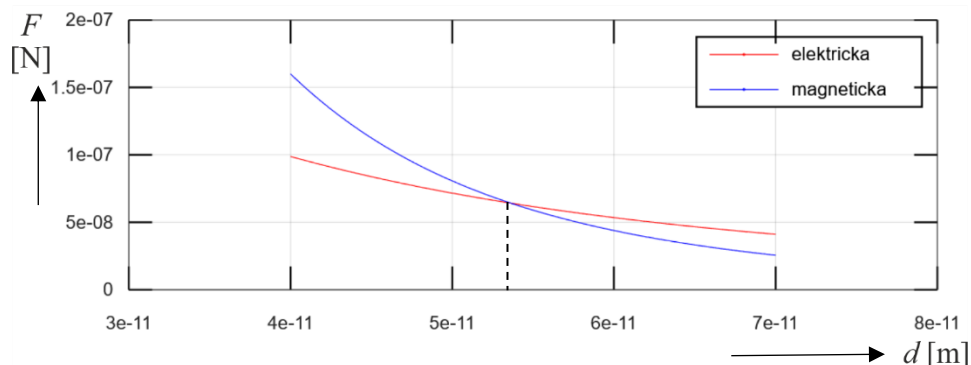
můžeme z těchto vztahů vyjádřit levitační vzdálenost d_l :

$$d_l^2 = \frac{i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot \epsilon_0 \cdot 2 \cdot r_e}{q_e^2} - r_e^2, \quad (13)$$

$$d_l = \left(\frac{4 \cdot 3.18 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.41 \cdot 10^{-26} \cdot 8.85 \cdot 10^{-12} \cdot 2 \cdot 2.13 \cdot 10^{-11}}{(1.602 \cdot 10^{-19})^2} - (2.13 \cdot 10^{-11})^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (14)$$

Po dosazení známých konstant a vypočtených hodnot dostaneme rovnovážnou polohu sil – levitační vzdálenost elektronu $2p^2$ od protonu atomu uhlíku, tedy atomový poloměr atomu C z obr. 6 je:

$$d_l = 5.3 \cdot 10^{-11} \text{ m} \quad (15)$$



Obr. 6. Grafické vyjádření rovnovážné vzdálenosti d elektronu pomocí rovnováhy EMG sil elektronu $2p$ atomu uhlíku C.

Atomový poloměr je veličina, která není přesně fyzikálně kvantifikována a která není konstantní za všech okolností [4]. Souvisí s koncepcí modelu atomu. Hodnota přiřazená poloměru atomu je závislá

na zvolené definici atomového poloměru r_a . Definice existuje větší množství a každá definice je vhodná pro jinou situaci. V literatuře nejčastěji uváděná hodnota atomového poloměru uhlíku $r_a = 67\text{--}77$ pm.

U atomu uhlíku se vazební energie W_v mezi protonem a elektronem $2p$ rovná ionizační energii W_i , která je potřebná k odtržení elektronu $2p$ od protonu a rovná se rozdílu mezi energií elektrického pole W_{el} a magnetického pole W_{mag} mezi elektronem a protonem v rovnovážné poloze d .

Rovnice pro vyčíslení energie vazby elektronu $2p$ atomu C bude mít tvar

$$W_i = W_{el} - W_{mag} \quad (16)$$

Energii elektrického pole vyčíslíme podle vztahu

$$W_{el} = \frac{1}{2} \frac{q_e^2 \cdot d^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r^3}, \quad (17)$$

$$W_{el} = \frac{(1.60 \cdot 10^{-19})^2 \cdot (5.30 \cdot 10^{-11})^2}{2 \cdot 4\pi \cdot 8.85 \cdot 10^{-12} \cdot \left(\sqrt{(5.30 \cdot 10^{-11})^2 + (2.13 \cdot 10^{-11})^2} \right)^3} = 1.73 \cdot 10^{-18} \text{ J}. \quad (18)$$

Energii magnetického pole vyčíslíme podle vztahu

$$W_{mag} = \frac{i_{el} \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot 2 \cdot r_e \cdot d^2}{4\pi \cdot r^5}, \quad (19)$$

$$W_{mag} = \frac{4 \cdot 3.18 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.41 \cdot 10^{-26} \cdot 2 \cdot 2.13 \cdot 10^{-11} \cdot (5.30 \cdot 10^{-11})^2}{4\pi \cdot \left(\sqrt{(5.30 \cdot 10^{-11})^2 + (2.13 \cdot 10^{-11})^2} \right)^5} = 3.53 \cdot 10^{-18} \text{ J}. \quad (20)$$

Vyčíslená ionizační energie elektronu $2p2$ atomu uhlíku C podle výrazu (16) je

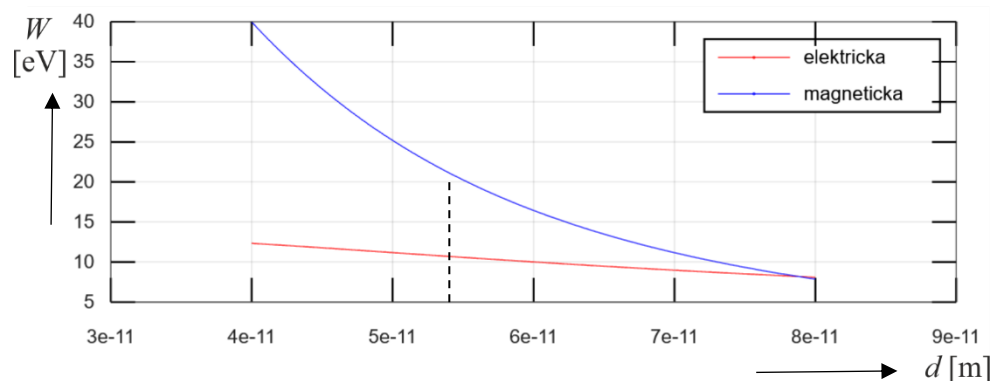
$$W_{C2p2} = (1.73 - 3.53) \cdot 10^{-18} \text{ J} = -1.80 \cdot 10^{-18} \text{ J} = -11.23 \text{ eV}. \quad (21)$$

Experimentálně naměřená hodnota ionizační energie elektronu $2p2$ atomu uhlíku C je $W_i = -11.26 \text{ eV}$, podle práce [3].

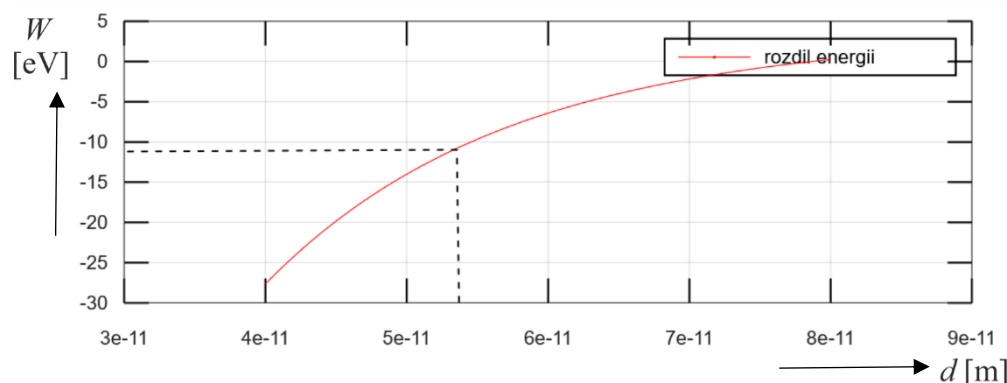
Grafické vyjádření průběhu funkcí energií EMG polí mezi protonem a elektronem $2p$ modelu atomu uhlíku v závislosti na vzdálenosti d je znázorněno na obr. 7. Rozdíl těchto energií ve vyčíslené vzdálenosti d (15) tvoří vazebnou (ionizační) energii elektronu $2p2$ atomu uhlíku C (obr. 8).

2.2 Poloměr, vzdálenost a ionizační energie elektronu $2s$ atomu uhlíku C

Abychom mohli určit poloměr elektronu $2s^2$ atomu uhlíku C, potřebujeme znát vlnovou délku fotonu, který by ionizoval tento elektron. V databázi spekter NIST [5] však takový foton nenajdeme. Můžeme zkusit získat vlnovou délku fiktivního fotonu postupnými kroky přes excitaci elektronu $2s^2$ na energetickou hladinu $2p^2$ a následnou ionizaci elektronu $2p^2$.



Obr. 7. Grafické vyjádření průběhu funkcí energií v závislosti na vzdálenosti v RT modelu atomu mezi protonem a elektronem $2p$ modelu atomu uhlíku C v závislosti na vzdálenosti d .



Obr. 8. Grafické vyjádření průběhu funkce rozdílu energií v závislosti na vzdálenosti modelovaných elementů podle RT elektronu $2p$ atomu uhlíku C.

Podle databáze spekter NIST [5] je potřeba pro excitaci elektronu $2s^2 2p^2$ na $2s 2p^3$ foton o vlnové délce $\lambda_{s-p} = 94.518746 \cdot 10^{-9} m$, což představuje energii $E_{s-p} = 5.833638 eV$. Ionizační energie elektronu $2p^2$ atomu uhlíku je $E_{iC} = 11.260288 eV$. Součet těchto dvou energií $E_{i_{2s}} = 17.093926 eV$ představuje energii virtuálního ionizačního fotonu o vlnové délce $\lambda_{i_{2s}} = 72.581349 \cdot 10^{-9} m$. Z této vlnové délky fotonu můžeme vyčíslit poloměr elektronu $r_{e_{2s}}$ podle vztahu [1] jako:

$$r_{e_{2s}} = \frac{1}{3} \cdot \frac{\lambda \cdot \alpha}{2\pi \cdot n^2}, \quad (22)$$

$$r_{e_{2s}} = \frac{1}{3} \cdot \frac{72.581349 \cdot 10^{-9}}{2 \cdot 3.14 \cdot 4 \cdot 137} = 0.703013 \cdot 10^{-11} m, \quad (23)$$

a proud elektronu $i_{e_{2s}}$ vyčíslit podle vztahu

$$i_{e_{2s}} = \frac{q \cdot c \cdot \alpha}{\lambda}, \quad (24)$$

$$i_{e_{2s}} = \frac{1.602 \cdot 10^{-19} \cdot 3 \cdot 10^8}{72.581349 \cdot 10^{-9} \cdot 137} = 4.833238 \cdot 10^{-6} A. \quad (25)$$

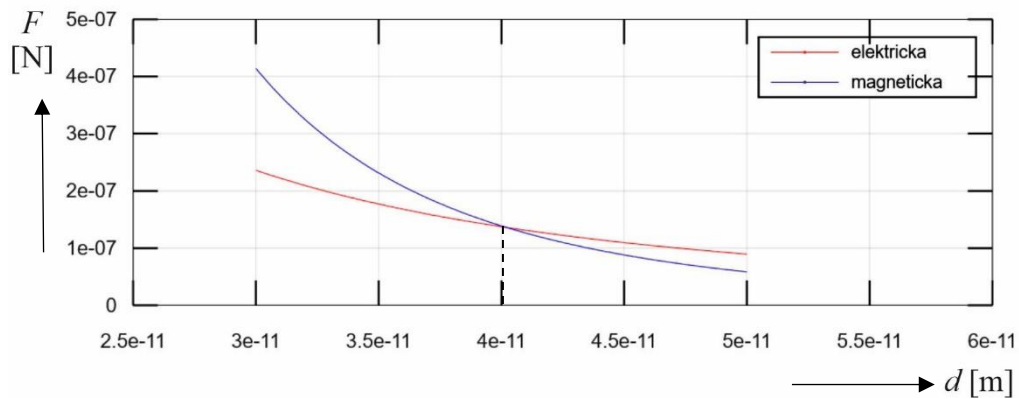
Z těchto vztahů můžeme vyjádřit levitační vzdálenost d_l elektronu $2s$ atomu uhlíku od jeho jádra

$$d_l^2 = \frac{4 \cdot i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot \varepsilon_0 \cdot 2 \cdot r_e}{q_e^2} - r_e^2, \quad (26)$$

$$d_l = \left(\frac{4 \cdot 4.83 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.41 \cdot 10^{-26} \cdot 8.85 \cdot 10^{-12} \cdot 2 \cdot 7.03 \cdot 10^{-12}}{(1.6 \cdot 10^{-19})^2} - (7.03 \cdot 10^{-12})^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (27)$$

Po dosazení známých konstant a vypočtených hodnot dostaneme rovnovážnou polohu sil – levitační vzdálenost elektronu 2s od protonu modelu atomu uhlíku (obr. 9):

$$d_{12s} = 4.01 \cdot 10^{-11} \text{ m} \quad (28)$$



Obr. 9. Grafické vyjádření rovnovážné vzdálenosti elektronu d pomocí rovnováhy EMG sil elektronu 2s atomu uhlíku C.

U atomu uhlíku se vazební energie W_v mezi protonem a elektronem 2s rovná ionizační energii W_i , která je potřebná k odtržení elektronu 2s od protonu a rovná se rozdílu mezi energií elektrického pole W_{el} a magnetického pole W_{mag} mezi elektronem a protonem.

Rovnice pro vyčíslení energie vazby elektronu 2s atomu C bude mít tvar

$$W_i = W_{el} - W_{mag}. \quad (29)$$

Energii elektrického pole vyčíslíme podle vztahu

$$W_{el} = \frac{1}{2} \frac{q_e^2 \cdot d^2}{4\pi\varepsilon_0 \cdot r^3}, \quad (30)$$

$$W_{el} = \frac{(1.6 \cdot 10^{-19})^2 \cdot (4.01 \cdot 10^{-11})^2}{2 \cdot 4\pi \cdot 8.85 \cdot 10^{-12} \cdot \left(\sqrt{(4.01 \cdot 10^{-11})^2 + (7.03 \cdot 10^{-12})^2} \right)^3} = 2.74 \cdot 10^{-18} \text{ J}. \quad (31)$$

Energii magnetického pole vyčíslíme podle vztahu

$$W_{mag} = \frac{4 \cdot i_{el} \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot 2 \cdot r_e \cdot d^2}{4\pi \cdot r^5}, \quad (32)$$

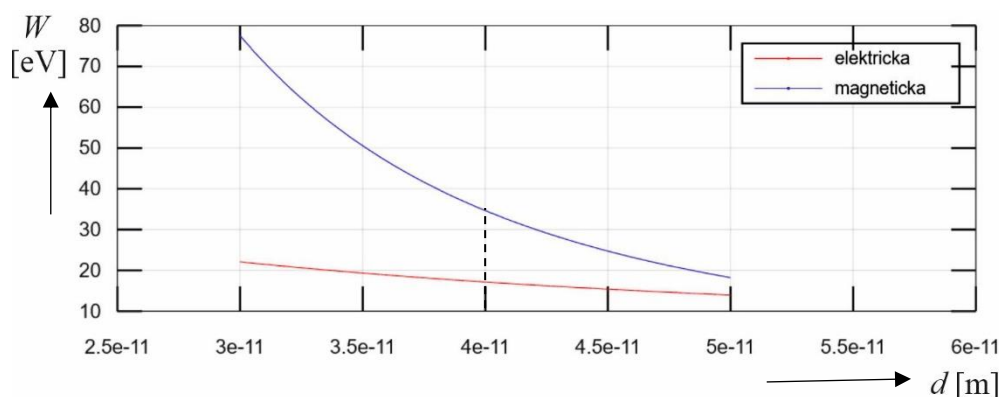
$$W_{\text{mag}} = \frac{4 \cdot 4.83 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.41 \cdot 10^{-26} \cdot 2 \cdot 7.03 \cdot 10^{-12} \cdot (4.01 \cdot 10^{-11})^2}{4\pi \cdot \left(\sqrt{(4.01 \cdot 10^{-11})^2 + (7.03 \cdot 10^{-12})^2} \right)^5} = 5.50 \cdot 10^{-18} \text{ J} . \quad (33)$$

Vyčíslená ionizační energie elektronu $2s^2$ atomu uhlíku C podle výrazu (29) je

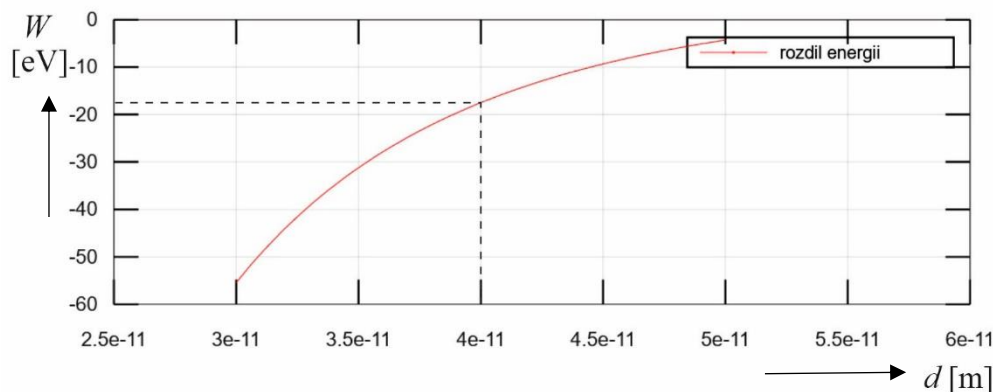
$$W_{C_{2s^2}} = (2.74 - 5.50) \cdot 10^{-18} \text{ J} = -2.76 \cdot 10^{-18} \text{ J} = -17.2 \text{ eV} . \quad (34)$$

Hodnota virtuální ionizační energie výše určeného virtuálního fotonu je $W_{i_{2s}} = 17.1 \text{ eV}$.

Grafické vyjádření průběhu funkcí energií EMG polí mezi protonem a elektronem $2s$ modelu atomu uhlíku v závislosti na vzdálenosti d je znázorněno na obr. 10. Rozdíl těchto energií ve vyčíslené vzdálenosti d podle relace (28) tvoří vazebnou (ionizační) energii elektronu $2s$ atomu uhlíku C, obr. 11.



Obr. 10. Grafické vyjádření průběhu funkcí energií v závislosti na vzdálenosti v RT modelu atomu mezi protonem a elektronem $2s$ modelu atomu uhlíku v závislosti na vzdálenosti d .

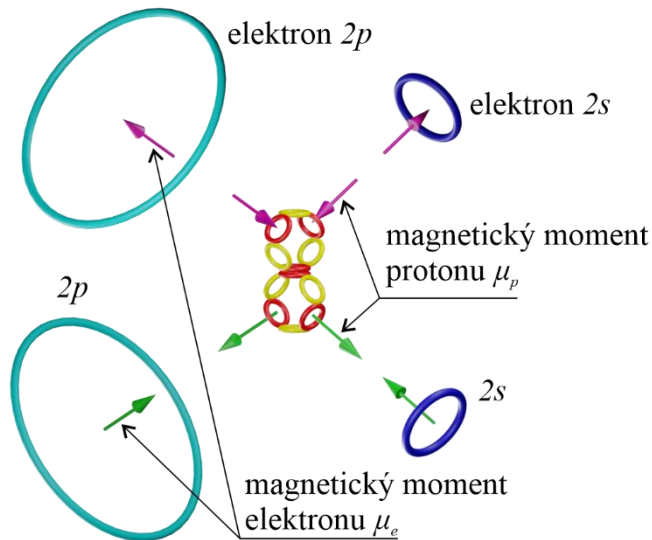


Obr. 11. Grafické vyjádření průběhu funkce rozdílu energií W v závislosti na vzdálenosti podle modelu RT elektronu $2s$ atomu uhlíku C.

Na základě výše vyčíslených hodnot si můžeme znázornit model atomu uhlíku C v základním izolovaném stavu. Jeho dva stejné prstencové elektrony $2p$ o poloměru $r_{e_{2p2}} = 2.13 \cdot 10^{-11} \text{ m}$ s opačnými vektory magnetických momentů vůči protonům v jádře atomu se nacházejí v dynamicky rovnovážné poloze ve vzdálenosti $d_l = 5.3 \cdot 10^{-11} \text{ m}$ od jádra atomu. Dva prstencové elektrony $2s$ o

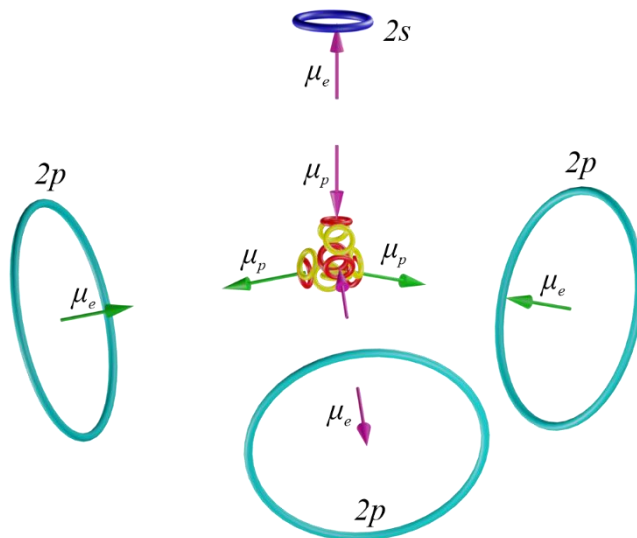
poloměru $r_{e2s} = 0.703 \cdot 10^{-11} m$ s opačnými vektory magnetických momentů vůči protonům v jádře se nacházejí v dynamicky rovnovážné poloze ve vzdálenosti $d_{12s} = 4.01 \cdot 10^{-11} m$ s ionizační energií $W_{ie2s} = -17.2 eV$. Protože elektrony $2p$ a $2s$ mají jinou vzdálenost, velikost i energii, nevytvářejí v modelu strukturu pravidelné trigonální pyramidy.

Grafická podoba modelu atomu uhlíku C v základním izolovaném stavu je znázorněna na obr. 12.



Obr. 12. Grafická schématická podoba modelu atomu uhlíku C v základním izolovaném stavu.

Teprve po excitaci elektronu $2s$ na elektron $2p$ se stává struktura atomu pravidelnou tetrahedrání vůči zbývajícím elektronu $2s$ (obr. 13).

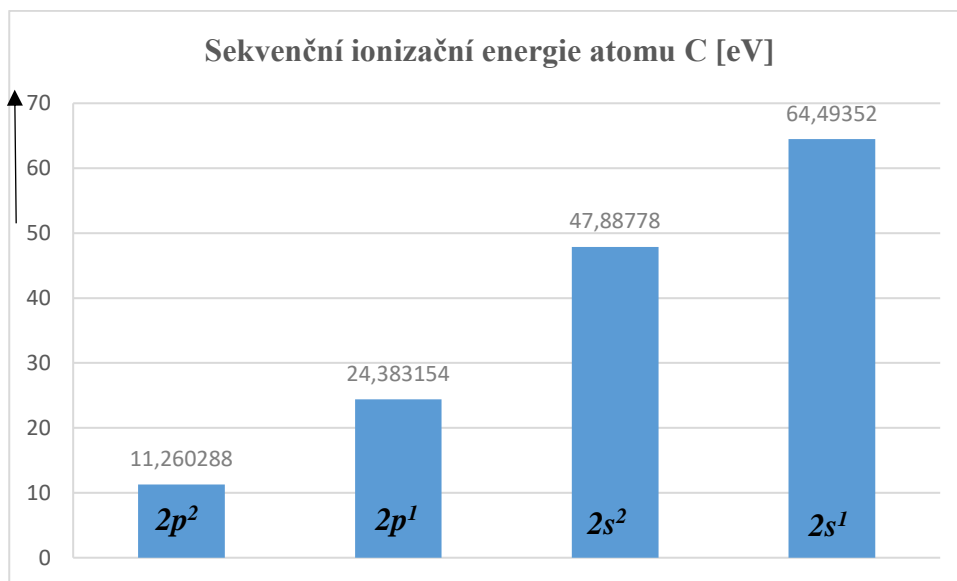


Obr. 13. Grafická schématická podoba modelu atomu uhlíku C s excitovaným elektronem $2s$ na $2p$.

3 Sekvenční ionizační energie elektronů atomu uhlíku C podle modelu RT

Pokud z atomu uhlíku „odtrháváme“ elektrony, mění se u zbývajících elektronů jejich ionizační energie W_i , protože na zbývající elektrony působí více elektromagnetické energie jádra. Pomocí vyčíslení elektrické a magnetické síly F_e , F_m a energie W podle RT můžeme tyto sekvenční ionizační energie W_i vypočítat. Energie neroste lineárně ani exponenciálně ale skokově, protože elektrony $2s$ a $2p$ mají odlišné charakteristiky.

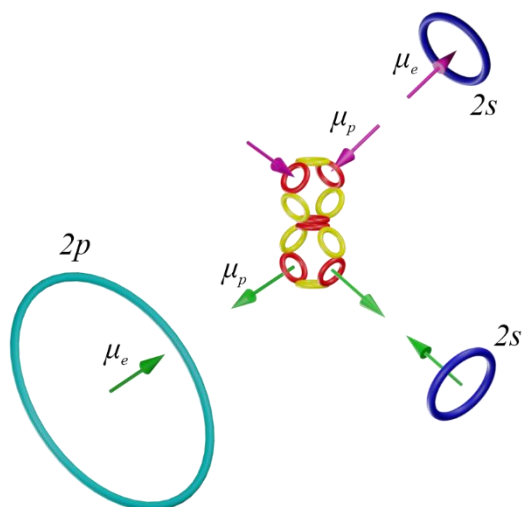
Ionizační energii pro první elektron $2p^2$ jsme vyčíslili v předchozí části na hodnotu $W_{C2p^2} = -11.23 \text{ eV}$. V následující části vyčísleme hodnotu ionizační energie i u ostatních elektronů,



Obr. 14. Sekvenční ionizační energie W atomu uhlíku C podle NIST Database Ionization Energies [3].

3.3 Ionizační energie elektronu $2p^1$ iontu atomu uhlíku C^+

Po odtržení elektronu $2p^2$ vznikne iont atomu uhlíku C^+ (obr. 15). Jeho elektron $2p^1$ je však již ovlivněn uvolněnou energií jádra po elektronu $2p^2$, což se projeví ve změně poloměru elektronu r_e a jeho vzdálenosti d_l od jádra atomu.



Obr. 15. Grafická podoba schéma modelu iontu atomu uhlíku C^+ .

Poloměr r_e elektronu $2p^1$ iontu atomu uhlíku C^+ , dobu rotace náboje t_e a proud elektronu i_e , vypočteme podle vztahů z práce [1]:

$$r_{e2p1} = \frac{1}{3} \cdot \frac{T_{C^+} \cdot \alpha}{2\pi \cdot n} = \frac{1}{3} \cdot \frac{50.88 \cdot 10^{-9}}{2 \cdot 3.14 \cdot 2 \cdot 137} = 0.986 \cdot 10^{-11} m, \quad (35)$$

kde T_{C^+} se rovná vlnové délce fotonu odpovídající ionizační energii elektronu $2p^1$ podle NIST *Database Ionization Energies* [3]. Potom z práce [1] model RT

$$t_e = \frac{T_{C^+}}{c \cdot \alpha} = \frac{50.88 \cdot 10^{-9} \cdot 137}{3 \cdot 10^8} = 2.324 \cdot 10^{-14} s, \quad (36)$$

$$i_e = \frac{q_e}{t_e} = \frac{1.602 \cdot 10^{-19}}{2.324 \cdot 10^{-14}} = 6.893 \cdot 10^{-6} A. \quad (37)$$

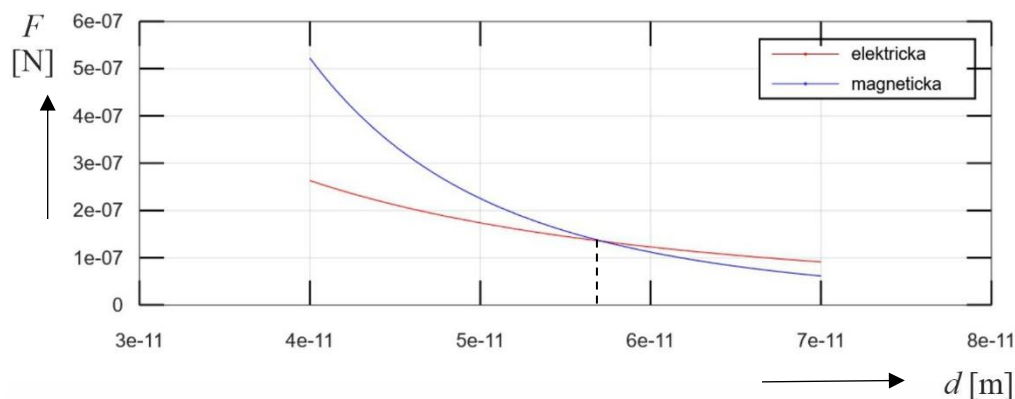
Z těchto výše uvedených hodnot můžeme vyjádřit levitační vzdálenost d_l dosazením do vztahu:

$$d_l = \sqrt{\frac{i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot \varepsilon_0 \cdot 2 \cdot r_e}{q_e^2} - r_e^2}, \quad (38)$$

$$d_l = \left(\frac{4 \cdot 6.89 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.41 \cdot 10^{-26} \cdot 8.85 \cdot 10^{-12} \cdot 2 \cdot 9.86 \cdot 10^{-12}}{(1.60 \cdot 10^{-19})^2} - (9.86 \cdot 10^{-12})^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (39)$$

Po dosazení známých hodnot konstant a vypočtených hodnot dostaneme rovnovážnou polohu sil – levitační vzdálenost elektronu $2p^1$ od protonu atomu iontu uhlíku C^+ , obr. 16 jako:

$$d_l = 5.68 \cdot 10^{-11} m. \quad (40)$$



Obr. 16. Grafické vyjádření rovnovážné vzdálenosti d elektronu $2p^1$ pomocí rovnováhy EMG sil.

Rovnice pro vyčíslení ionizační energie W_{C^+} vazby elektronu $2p^1$ iontu atomu C^+ bude mít tvar:

$$W_{C^+} = 2 \cdot W_{el} - 2 \cdot W_{mag}. \quad (41)$$

Energii elektrického pole vyčíslíme podle vztahu

$$2 \cdot W_{el} = \frac{2}{2} \frac{q_e^2 \cdot d^2}{4\pi\varepsilon_0 \cdot r^3}, \quad (42)$$

$$2 \cdot W_{el} = \frac{2 \cdot (1.60 \cdot 10^{-19})^2 \cdot (5.68 \cdot 10^{-11})^2}{2 \cdot 4\pi \cdot 8.85 \cdot 10^{-12} \cdot \left(\sqrt{(5.68 \cdot 10^{-11})^2 + (9.86 \cdot 10^{-12})^2} \right)^3} = 3.87 \cdot 10^{-18} \text{ J} . \quad (43)$$

Energii magnetického pole vyčíslíme podle vztahu

$$2 \cdot W_{mag} = \frac{2 \cdot i_{el} \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot 2 \cdot r_e \cdot d^2}{4\pi \cdot r^5} , \quad (44)$$

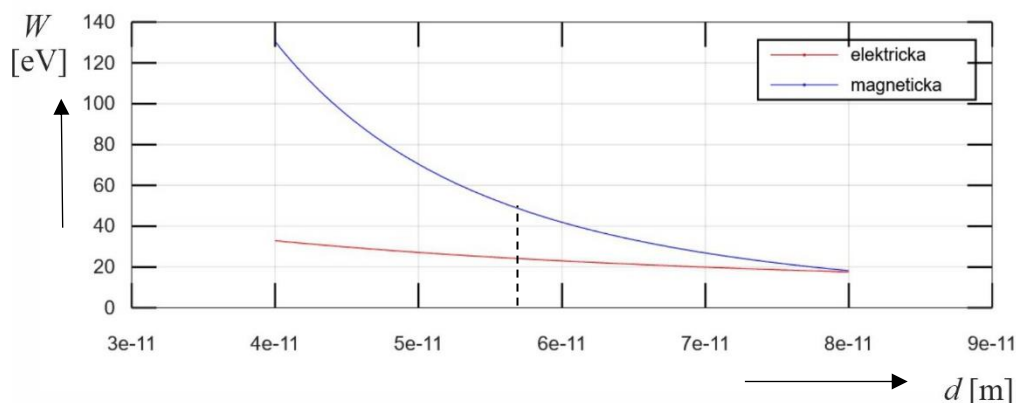
$$2 \cdot W_{mag} = \frac{2 \cdot 4 \cdot 6.89 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.41 \cdot 10^{-26} \cdot 2 \cdot 9.86 \cdot 10^{-12} \cdot (5.68 \cdot 10^{-11})^2}{4\pi \cdot \left(\sqrt{(5.68 \cdot 10^{-11})^2 + (9.86 \cdot 10^{-12})^2} \right)^5} = 7.73 \cdot 10^{-18} \text{ J} . \quad (45)$$

Výsledná energie elektronu $2p^1$ iontu atomu uhlíku C^+ podle výrazu (41) je

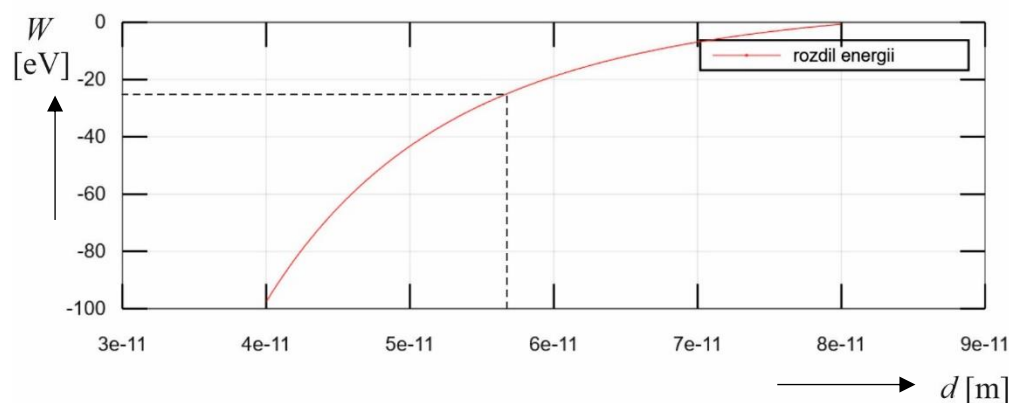
$$W_{C^+} = (3.87 - 7.73) \cdot 10^{-18} \text{ J} = -3.86 \cdot 10^{-18} \text{ J} = -24.1 \text{ eV} \quad (46)$$

Experimentálně naměřená hodnota ionizační energie atomu uhlíku C je $W_i = -24.38 \text{ eV}$ [3].

Grafické vyjádření průběhu funkcí energií EMG polí mezi protonem a elektronem $2p^1$ modelu atomu uhlíku v závislosti na vzdálenosti d je znázorněno na obr. 17. Rozdíl těchto energií ve vyčíslené vzdálenosti d (40) tvoří vazebnou (ionizační) energii elektronu $2p^1$ iontu atomu uhlíku C^+ , obr. 18.



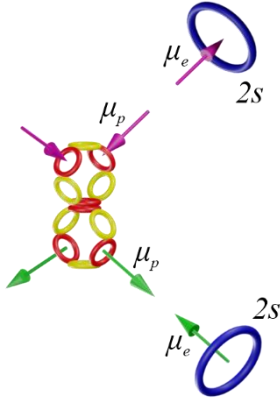
Obr. 17. Grafické vyjádření průběhu funkcí energií elektronu $2p^1$ v závislosti na vzdálenosti v RT modelu iontu atomu uhlíku C^+ .



Obr. 18. Grafické vyjádření průběhu funkce rozdílu energií elektronu $2p^1$ v závislosti na vzdálenosti v RT.

3.4 Ionizační energie elektronu $2s^2$ iontu atomu uhlíku C^{++}

Pokud z iontu atomu C^+ odstraníme i elektron $2p^1$, dostaneme iont atomu uhlíku C^{++} se dvěma elektrony $2s$ (obr. 19). Absence dvou elektronů $2p$ ovlivní velikost poloměrů a vzdálenost zbývajících elektronů $2s$.



Obr. 19. Grafická podoba schéma modelu iontu atomu uhlíku C^{++} .

Poloměr r_e elektronu $2s^2$ iontu atomu uhlíku C^{++} , dobu rotace náboje t_e a proud elektronu i_e , vypočteme podle vztahů [1]:

$$r_{e2s^2} = \frac{2}{3} \cdot \frac{T_{C^{++}} \cdot \alpha}{2\pi \cdot n} = \frac{2}{3} \cdot \frac{25,90689 \cdot 10^{-9}}{2 \cdot 3,14 \cdot 2 \cdot 137} = 1,004 \cdot 10^{-11} m, \quad (47)$$

kde $T_{C^{++}}$ se rovná vlnové délce fotonu odpovídající ionizační energii elektronu $2s^2$ podle NIST *Database Ionization Energies* [3].

$$t_e = \frac{T_{C^{++}}}{c \cdot \alpha} = \frac{25,90689 \cdot 10^{-9} \cdot 137}{3 \cdot 10^8} = 1,183 \cdot 10^{-14} s, \quad (48)$$

$$i_e = \frac{q_e}{t_e} = \frac{1,602 \cdot 10^{-19}}{4 \cdot 1,183 \cdot 10^{-14}} = 3,385 \cdot 10^{-6} A. \quad (49)$$

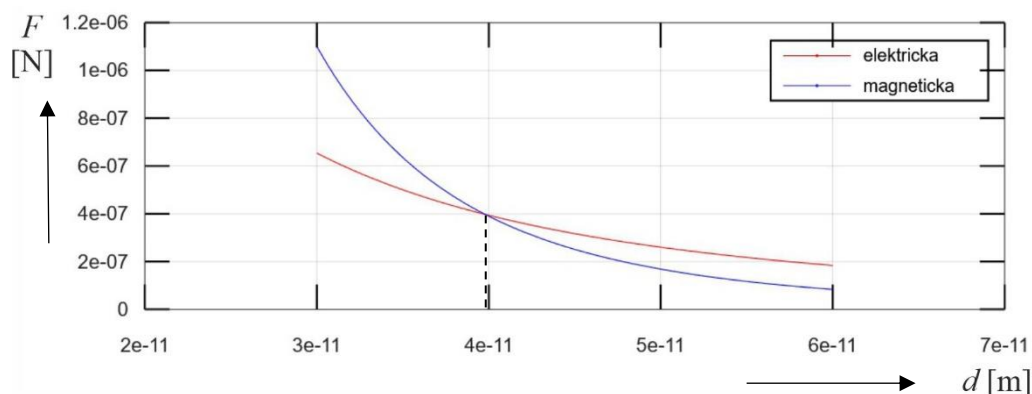
Z těchto výše uvedených hodnot můžeme vyjádřit levitační vzdálenost d_l dosazením do vztahu:

$$d_l = \sqrt{\frac{i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot \varepsilon_0 \cdot 2 \cdot r_e}{q_e^2} - r_e^2} \quad (50)$$

$$d_l = \left(\frac{4 \cdot 3,385 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1,410 \cdot 10^{-26} \cdot 8,854 \cdot 10^{-12} \cdot 2 \cdot 1,004 \cdot 10^{-11}}{(1,6 \cdot 10^{-19})^2} - (1,004 \cdot 10^{-11})^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (51)$$

Po dosazení známých konstant a vypočtených hodnot dostaneme rovnovážnou polohu sil – levitační vzdálenost elektronu $2s^2$ od protonu iontu atomu uhlíku C^{++} :

$$d_l = 3,96 \cdot 10^{-11} m. \quad (52)$$



Obr. 20. Grafické vyjádření rovnovážné vzdálenosti d elektronu $2s^2$ pomocí rovnováhy EMG sil modelu iontu atomu uhlíku C^{++} .

Rovnice pro vyčíslení ionizační energie vazby elektronu $2s^2$ iontu atomu C^{++} bude mít tvar:

$$W_{C^{++}} = 3 \cdot W_{el} - 3 \cdot W_{mag}. \quad (53)$$

Energii elektrického pole vyčíslíme podle vztahu

$$3 \cdot W_{el} = \frac{3 \cdot q_e^2 \cdot d^2}{2 \cdot 4\pi\epsilon_0 \cdot r^3}, \quad (54)$$

$$3 \cdot W_{el} = \frac{3 \cdot (1.60 \cdot 10^{-19})^2 \cdot (4.0 \cdot 10^{-11})^2}{2 \cdot 4\pi \cdot 8.85 \cdot 10^{-12} \cdot \left(\sqrt{(4.0 \cdot 10^{-11})^2 + (1.0 \cdot 10^{-11})^2} \right)^3} = 7.88 \cdot 10^{-18} J. \quad (55)$$

Energii magnetického pole vyčíslíme podle vztahu

$$3 \cdot W_{mag} = \frac{3 \cdot i_{el} \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot 2 \cdot r_e \cdot d^2}{4\pi \cdot r^5}, \quad (56)$$

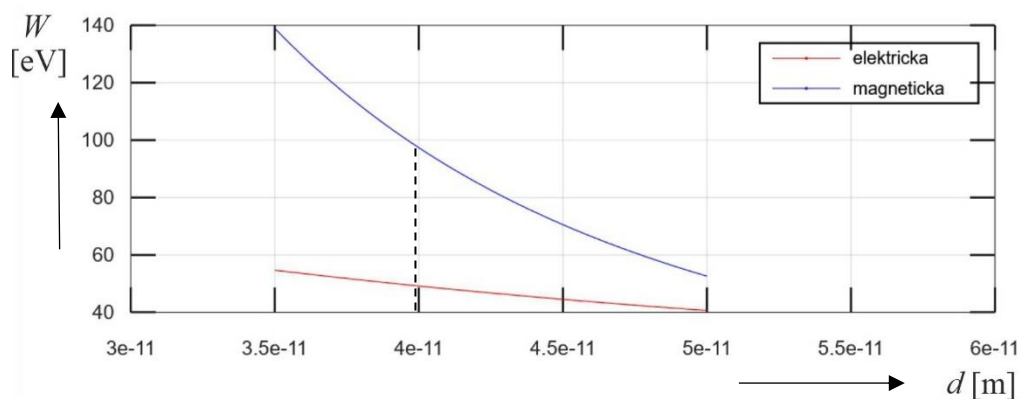
$$3 \cdot W_{mag} = \frac{3 \cdot 4 \cdot 3.38 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.41 \cdot 10^{-26} \cdot 2 \cdot 1.0 \cdot 10^{-11} \cdot (4.0 \cdot 10^{-11})^2}{4\pi \cdot \left(\sqrt{(4.0 \cdot 10^{-11})^2 + (1.0 \cdot 10^{-11})^2} \right)^5} = 15.41 \cdot 10^{-18} J. \quad (57)$$

Výsledná ionizační energie elektronu $2s^2$ iontu atomu uhlíku C^{++} podle výrazu (53) je:

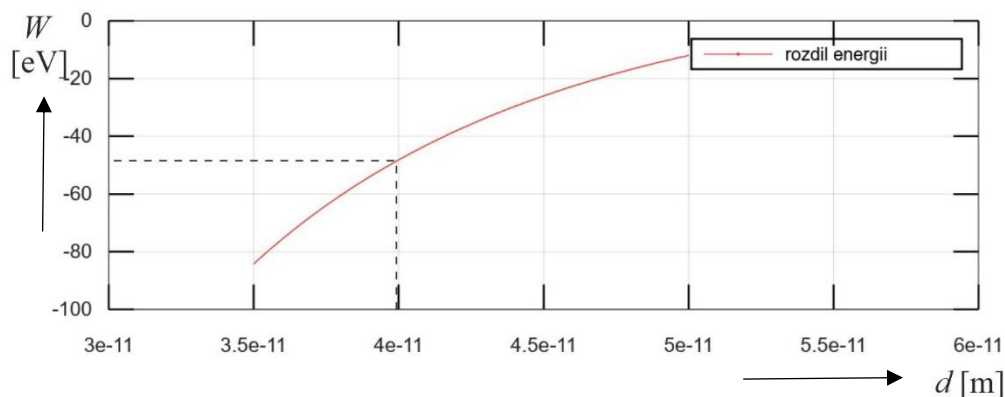
$$W_{C^{++}} = (7.88 - 15.41) \cdot 10^{-18} J = -7.53 \cdot 10^{-18} J = -46.99 eV \quad (58)$$

Experimentálně naměřená hodnota ionizační energie elektronu $2s^2$ iontu atomu uhlíku C^{++} je $W_i = -47.89 eV$ podle práce [3].

Grafické vyjádření průběhu funkcí energií EMG polí mezi protonem a elektronem $2s^2$ modelu iontu atomu uhlíku C^{++} v závislosti na vzdálenosti d je znázorněno na obr. 21. Rozdíl těchto energií (58) ve vyčíslené vzdálenosti d tvoří vazebnou (ionizační) energii elektronu $2s^2$ iontu atomu uhlíku C^{++} (obr. 22).



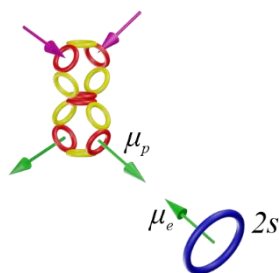
Obr. 21. Grafické vyjádření průběhu funkcí energií elektronu $2s^2$ v závislosti na vzdálenosti d v RT modelu iontu atomu uhlíku C^{++} .



Obr. 22. Grafické vyjádření průběhu funkce rozdílu energií elektronu $2s^2$ v závislosti na vzdálenosti v RT.

3.5 Ionizační energie elektronu $2s^1$ iontu atomu uhlíku C^{+++}

Po odtržení tří elektronů z elektronového obalu zůstane poslední elektron $2s^1$ a vznikne iont atomu uhlíku C^{+++} . I když na tento elektron působí přitažlivá síla elektrického pole čtyř protonů, přesto odpuzivá síla magnetických polí protonů a neutronů dokáže udržet elektron $2s^1$ v patřičné vzdálenosti od jádra iontu. Je však k tomu potřebná značná energie, kterou v následující části vyčíslíme.



Obr. 23. Grafická podoba schéma modelu iontu atomu uhlíku C^{+++} .

Poloměr r_e elektronu $2s^1$ atomu uhlíku C, dobu rotace náboje t_e a proud elektronu i_e vypočteme podle vztahů uvedených v práci [1]:

$$r_{e_{2s^1}} = \frac{2}{3} \cdot \frac{T_{C^{+++}} \cdot \alpha}{2\pi \cdot n} = \frac{2}{3} \cdot \frac{19.2364 \cdot 10^{-9}}{2 \cdot 3.14 \cdot 2 \cdot 137} = 0.745 \cdot 10^{-11} m, \quad (59)$$

kde $T_{C^{+++}}$ se rovná vlnové délce fotonu odpovídající ionizační energii elektronu $2s^1$ podle NIST *Database Ionization Energies* [3].

$$t_e = \frac{T_{C^{+++}}}{c \cdot \alpha} = \frac{19.2364 \cdot 10^{-9} \cdot 137}{3 \cdot 10^8} = 0.878 \cdot 10^{-14} \text{ s}, \quad (60)$$

$$i_e = \frac{q_e}{t_e} = \frac{1.602 \cdot 10^{-19}}{4 \cdot 0.878 \cdot 10^{-14}} = 4.559 \cdot 10^{-6} \text{ A}. \quad (61)$$

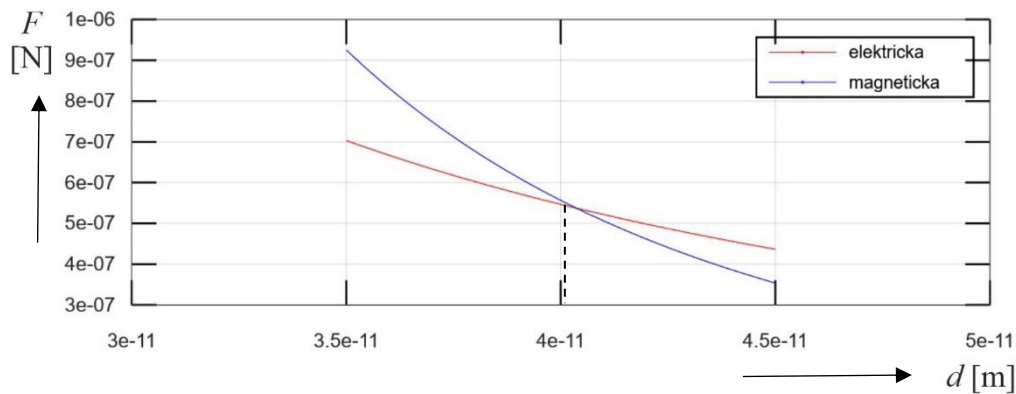
Z těchto výše uvedených hodnot můžeme vyjádřit levitační vzdálenost d_l dosazením do vztahu:

$$d_l = \sqrt{\frac{i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot \varepsilon_0 \cdot 2 \cdot r_e}{q_e^2} - r_e^2}, \quad (62)$$

$$d_l = \left(\frac{4 \cdot 4.559 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.410 \cdot 10^{-26} \cdot 8.854 \cdot 10^{-12} \cdot 2 \cdot 0.745 \cdot 10^{-11}}{(1.602 \cdot 10^{-19})^2} - (0.745 \cdot 10^{-11})^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (63)$$

Po dosazení známých konstant a vypočtených hodnot dostaneme rovnovážnou polohu sil – levitační vzdálenost elektronu $2s^1$ od protonu iontu atomu uhlíku C^{+++} :

$$d_l = 4.01 \cdot 10^{-11} \text{ m}. \quad (64)$$



Obr. 24. Grafické vyjádření rovnovážné vzdálenosti d elektronu $2s^1$ pomocí rovnováhy EMG sil modelu iontu atomu uhlíku C^{+++} .

Rovnice pro vyčíslení energie vazby elektronu $2s^1$ iontu atomu C^{+++} bude mít tvar

$$W_{C^{+++}} = 4 \cdot W_{el} - 4 \cdot W_{mag}. \quad (65)$$

Energii elektrického pole vyčíslíme podle vztahu

$$4 \cdot W_{el} = \frac{4 \cdot q_e^2 \cdot d^2}{2 \cdot 4\pi \varepsilon_0 \cdot r^3}, \quad (66)$$

$$4 \cdot W_{el} = \frac{4 \cdot (1.60 \cdot 10^{-19})^2 \cdot (4.01 \cdot 10^{-11})^2}{2 \cdot 4\pi \cdot 8.85 \cdot 10^{-12} \cdot \left(\sqrt{(4.01 \cdot 10^{-11})^2 + (0.74 \cdot 10^{-11})^2} \right)^3} = 10.98 \cdot 10^{-18} \text{ J}. \quad (67)$$

Energii magnetického pole vyčíslíme podle vztahu

$$4 \cdot W_{\text{mag}} = \frac{4 \cdot i_{el} \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot 2 \cdot r_e \cdot d^2}{4\pi \cdot r^5}, \quad (68)$$

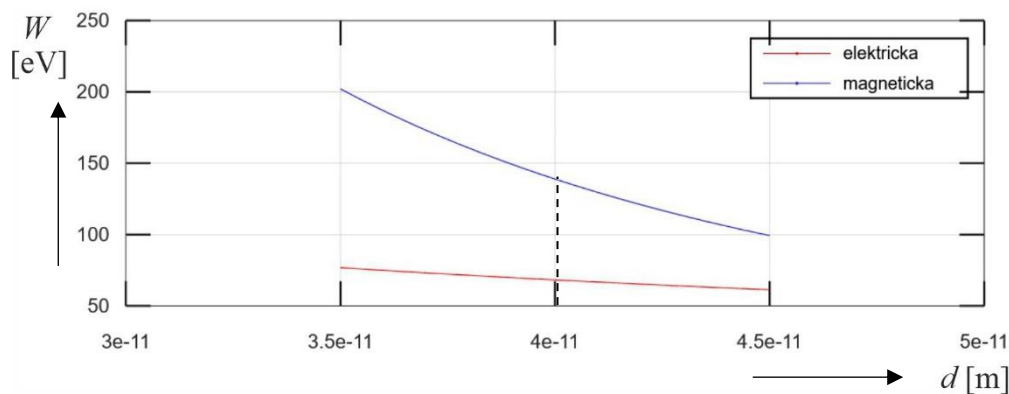
$$4 \cdot W_{\text{mag}} = \frac{4 \cdot 4 \cdot 4.55 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.41 \cdot 10^{-26} \cdot 2 \cdot 0.74 \cdot 10^{-11} \cdot (4.01 \cdot 10^{-11})^2}{4\pi \cdot \left(\sqrt{(4.01 \cdot 10^{-11})^2 + (0.74 \cdot 10^{-11})^2} \right)^5} = 21.87 \cdot 10^{-18} \text{ J}. \quad (69)$$

Výsledná ionizační energie elektronu $2s^1$ iontu atomu uhlíku C^{+++} podle výrazu (65) je

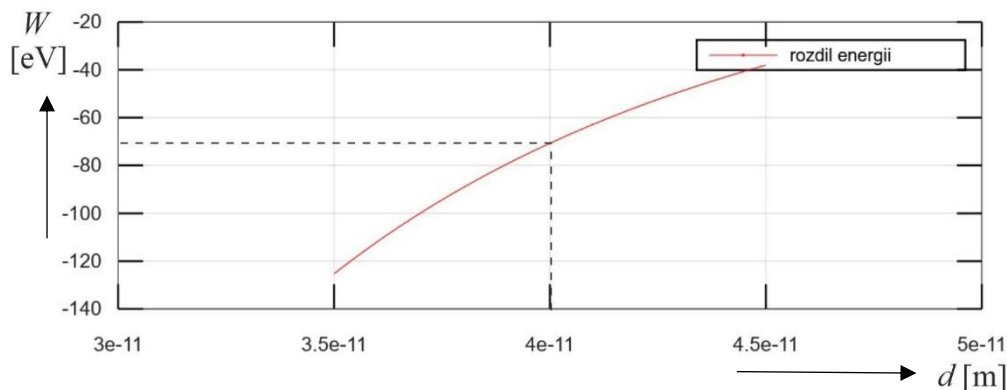
$$W_{C^{+++}} = (10.98 - 21.87) \cdot 10^{-18} \text{ J} = -10.89 \cdot 10^{-18} \text{ J} = -67.96 \text{ eV}. \quad (70)$$

Experimentálně naměřená hodnota ionizační energie elektronu $2s^1$ iontu atomu uhlíku C^{+++} je $W_i = -64.50 \text{ eV}$ z práce [3].

Grafické vyjádření průběhu funkcí energií EMG polí mezi protonem a elektronem $2s^1$ modelu iontu atomu uhlíku C^{+++} v závislosti na vzdálenosti d je znázorněno na obr. 25. Rozdíl těchto energií ve vyčíslené vzdálenosti d (64) tvoří vazebnou (ionizační) energii elektronu $2s^1$ iontu atomu uhlíku C^{+++} z obr. 26.



Obr. 25. Grafické vyjádření průběhu funkcí energií elektronu $2s^1$ v závislosti na vzdálenosti v RT modelu iontu atomu uhlíku C^{+++} .



Obr. 26. Grafické vyjádření průběhu funkce rozdílu energií v závislosti na vzdálenosti v RT.

V tabulce Tab.1 jsou shrnuty výsledky vyčíslených hodnot poloměrů, proudů a vzdáleností elektronů při postupném (sekvenčním) odstraňování elektronů z elektronového obalu atomu uhlíku. Tyto hodnoty však nelze porovnat s žádným experimentem. Přesto nám umožňují vyčíslit pomocí základních EMG zákonů a jednoduché matematiky ionizační energii jednotlivých elektronů při jejich

postupném odstraňování. Z tabulky Tab1. můžeme porovnat shodu/rozdíl ionizační energie jednotlivých elektronů mezi experimentem a uvedeným modelem RT, je velmi dobrá.

Tabulka 1 Srovnání hodnot poloměrů, proudů, vzdáleností a ionizačních energií elektronů při sekvenčním odstraňování elektronů od atomu uhlíku.

Elektron-typ	r_e [10^{-11} m]	I_e [10^{-6} A]	d_e [10^{-11} m]	E_{ion} [eV] výpočet	E_{ion} [eV] experiment
2p ²	2.134	4x3.184	5.34	11.23	11.26
2p ¹	0.986	4x6.895	5.69	24.10	24.38
2s ²	1.004	4x3.385	3.96	46.99	47.89
2s ¹	0.745	4x4.559	4.01	67.96	64.50

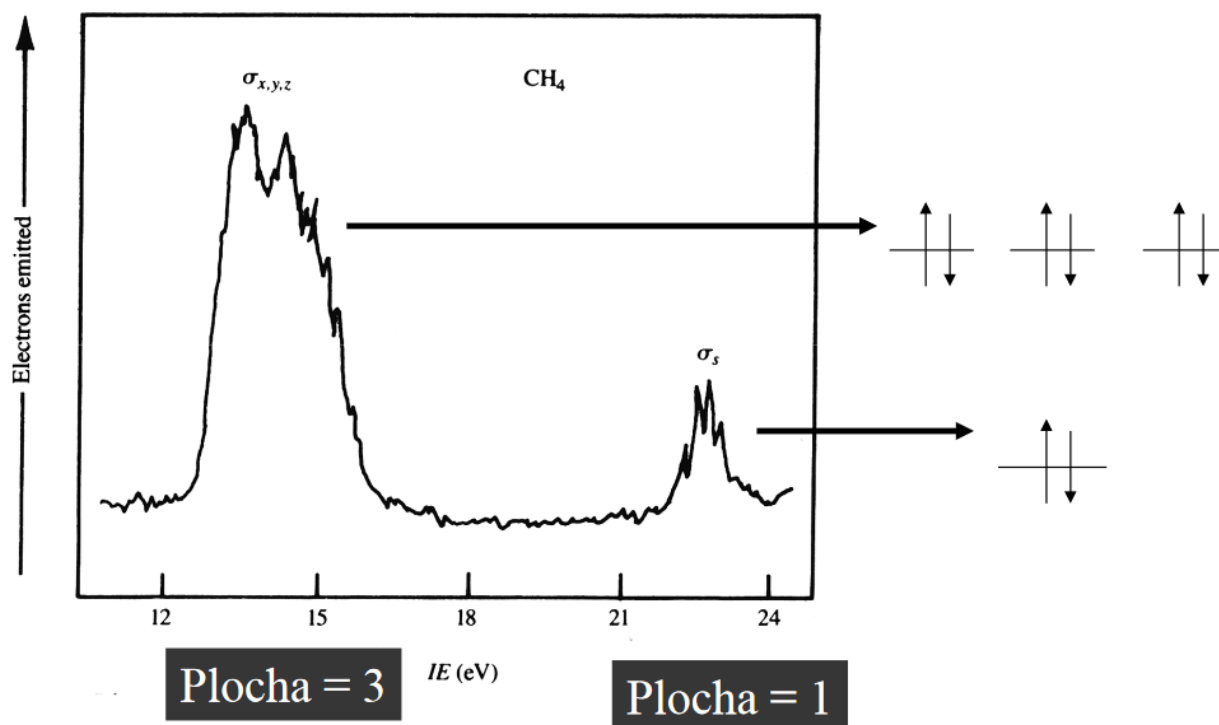
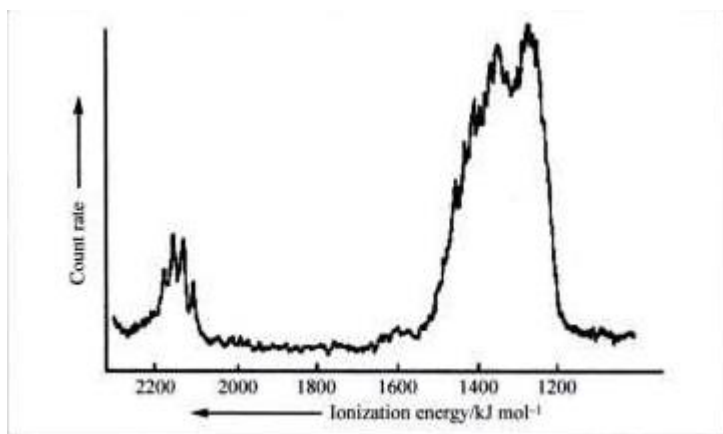
4 Vazebná energie vazby C-H v molekule CH₄

Na začátku této kapitoly si připomeňme, jak vypadá kvantově mechanický popis atomu uhlíku C a molekuly methanu CH₄ [11]. Atomové orbitály 2s a 2p byly založeny na výpočtech pro atomy vodíku. Tyto jednoduché 2s a 2p orbitály, pokud jsou brány samostatně, neposkytují uspokojivý model pro čtyřmocný – čtyřstěnný uhlík v methanu CH₄. Avšak uspokojivý model struktury methanu, který je založen na kvantové mechanice [11], lze získat přístupem zvaným orbitální hybridizace. Představu hybridizace orbitalů navrhl v roce 1931 americký chemik Linus Pauling (1901-1994) [6], [7].

Orbitální hybridizace není nic víc než matematický přístup, který zahrnuje kombinaci jednotlivých vlnových funkcí pro s a p orbitály k získání vlnových funkcí pro nové orbitály [8]. Hybridní atomové orbitály, které zohledňují strukturu methanu, lze odvodit z s a p orbitalů druhé slupky uhlíku. Předpokládá se, že jeden elektron z orbitalu 2s je excitován do prázdného orbitalu 2p. Vlnové funkce pro 2s, 2p_x, 2p_y a 2p_z orbitály základního uhlíku jsou pak smíchány tak, aby vytvořily čtyři nové ekvivalentní 2sp³ hybridní orbitály o stejné energii. Označení sp³ znamená, že hybridní orbital má jednu část s orbitálního charakteru a tři části p orbitálního charakteru. Matematickým výsledkem je, že čtyři 2sp³ orbitály jsou vzájemně orientovány v úhlech 109.5 °. To přesně odpovídá orientaci čtyř atomů vodíku methanu CH₄ [8].

Takovýmto matematickým postupem se sice vyřeší prostorová struktura molekuly methanu a jeho vazebné energie C-H, ale zanikne fyzikální podstata energetického a strukturálního rozdílu mezi elektrony typu s a p. Hybridizované atomy uhlíku neumožňují uspokojivě vysvětlit různé délky vazeb konjugovaných, aromatických a ani vazeb dvojných a trojných. Všechny tyto teoretické úvahy o hybridizaci atomových orbitalů jsou užitečné pro pohodlný popis chemických vazeb pomocí vztahů – relací. Hybridizace však není příčinou pozorovaných jevů [12].

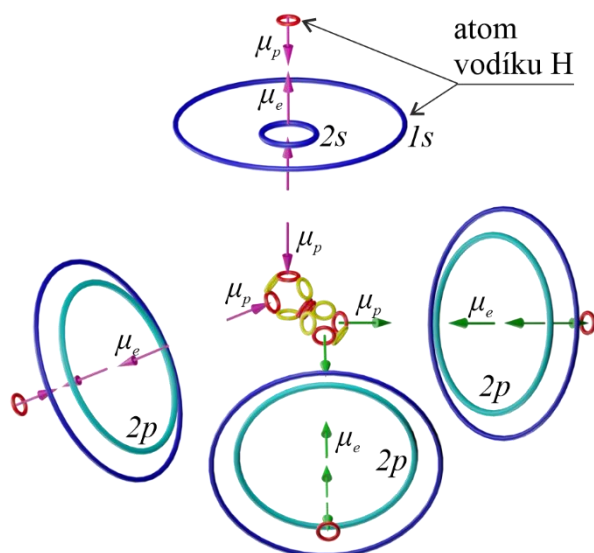
Dokonce ani experimentální výsledky fotoelektronové spektroskopie methanu nesouhlasí s uváděnou teorií hybridizace a naznačují jinou strukturu methanu CH₄, než udává teorie hybridizace.



42

Obr. 27. Fotoelektronová spektroskopie molekuly methanu CH₄ [10].

Prstencová teorie předkládá jiný model struktury a energetického sjednocení vazeb C-H v molekule methanu než kvantová mechanika. Základní struktura molekuly vychází ze struktury jádra atomu uhlíku, která udržuje elektrony v tetrahedrální struktuře. Elektrony uhlíku zůstávají v základním stavu ve složení $2s^2$ a $2p^2$. Atomy uhlíku a vodíku se slučují do molekul methanu při teplotě okolo 600°C. Při této teplotě se předpokládá, že jeden elektron $2s$ excituje na vyšší energetickou hladinu $2p$. Můžeme vyslovit domněnku, že i atom vodíku může excitovat ze základní energetické úrovně $1s$ na vyšší úroveň $2s$ nebo $2p$. V následujícím textu se pokusíme jednoduchým výpočtem prokázat možnost existence tohoto předpokladu o rovnocenných vazebných energiích a vazebných délkách.



Obr. 28. Model molekuly methanu CH₄ podle RT.

4.1 Vazebná energie jednoduché vazby 2p atomu uhlíku C a 1s atomu vodíku H

Poloměr a elektrický proud vazebných elektronů 2p atomu uhlíku C budou podle [1]

$$r_{eC} = 2.134 \cdot 10^{11} m \text{ podle (1),} \quad (71)$$

$$i_{eC} = 4 \cdot 3.184 \cdot 10^{-6} A \text{ podle (4).} \quad (72)$$

Poloměr a elektrický proud vazebných elektronů 1s atomu vodíku H budou podle [1]

$$r_{eH} = 2.650 \cdot 10^{11} m, \quad (73)$$

$$i_{eH} = 3.846 \cdot 10^{-6} A. \quad (74)$$

Protože musíme zohlednit rozdílnost energií, poloměrů a vzdáleností jednotlivých elektronů atomů uhlíku a vodíku bude mít rovnice dynamických rovnovážných sil pro určení rovnovážného stavu vzdálenosti d_{eH} vazby C-H tvar

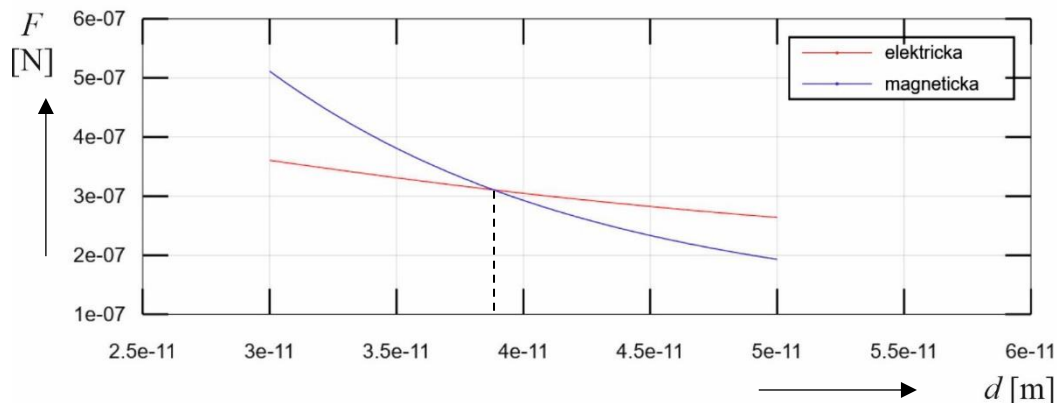
$$2 \cdot \mathbf{F}_{elCC+-} + 2 \cdot \mathbf{F}_{elCH+-} + \mathbf{F}_{elHH+-} + \mathbf{F}_{elHC+-} - 2 \cdot \mathbf{F}_{ppCH++} = 2.5 \cdot \mathbf{F}_{mgCC+-} + 2.5 \cdot \mathbf{F}_{mgCH+-} + \mathbf{F}_{mgHH+-} + \mathbf{F}_{mgHC+-}. \quad (75)$$

Koeficient „2“ v relaci (75) u elektrického pole říká, že jádro uhlíku se na přitažlivé síle podílí velikostí dvou nábojů protonů. Koeficient „2.5“ u magnetického pole říká, že na odpudivé síle se podílí 2.5 intenzity magnetického pole protonů i částečně neutronů jádra uhlíku.

Pokud zvolíme pro dynamickou rovnováhu sil elektronu uhlíku vzdálenost $d_{eC} = 6.97 \cdot 10^{-11} m$, pak můžeme ze vztahů pro elektrickou a magnetickou sílu v ose prstenců protonů a elektronů (6 a 7) vyčíslit podle rovnice (75) levitační vzdálenost elektronu vodíku H d_{eH} , obr. 29 jako:

$$d_{eH} = 3.90 \cdot 10^{-11} m. \quad (76)$$

Což po sečtení obou vzdáleností činí $d_{C-H} = 10.87 \cdot 10^{-11} m$ a odpovídá experimentálně naměřené hodnotě délky vazby C-H u methanu [13] $d_{exp} = 10.87 \cdot 10^{-11} m$.



Obr. 29. Grafické vyjádření rovnovážné vzdálenosti elektronů d_H pomocí rovnováhy EMG sil vazby C-H modelu molekuly methanu CH_4 .

Vazebnou energii vazby $C_{2p}-H_{1s}$ vypočítáme jako rozdíl mezi energií vazby C-H a součtu energií samostatných atomů uhlíku C a vodíku H

$$W_{vaz} = W_C + W_H - W_{C-H} . \quad (77)$$

Rovnice pro určení energie vazby C-H bude mít tvar

$$W_{C-H} = 2 \cdot W_{elCC+-} + 2 \cdot W_{elCH+-} + W_{elHH+-} + W_{elHC+-} + 2 \cdot W_{ppCH++} - 2.5 \cdot W_{mgCC+-} - 2.5 \cdot W_{mgCH+-} - W_{mgHH+-} - W_{mgHC+-} . \quad (78)$$

Energii elektrického pole mezi dvěma elektrony a protonem atomu uhlíku vyčíslíme podle vztahu:

$$W_{el+-} = \frac{e^2}{2 \cdot 4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{d^2}{\left(\sqrt{d^2 + r_e^2}\right)^3} , \quad (79)$$

$$2 \cdot W_{elCC+-} = \frac{2 \cdot (1.602 \cdot 10^{-19})^2}{2 \cdot 4 \cdot 3.14 \cdot 8.854 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{(6.970 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(6.970 \cdot 10^{-11})^2 + (2.134 \cdot 10^{-11})^2}\right)^3} = 2.887 \cdot 10^{-18} J , \quad (80)$$

$$2 \cdot W_{elCH+-} = \frac{2 \cdot (1.602 \cdot 10^{-19})^2}{2 \cdot 4 \cdot 3.14 \cdot 8.854 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{(6.970 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(6.970 \cdot 10^{-11})^2 + (2.650 \cdot 10^{-11})^2}\right)^3} = 2.697 \cdot 10^{-18} J . \quad (81)$$

Energii elektrického pole mezi dvěma elektrony a protonem atomu vodíku vyčíslíme:

$$W_{elHH+-} = \frac{(1.602 \cdot 10^{-19})^2}{2 \cdot 4 \cdot 3.14 \cdot 8.854 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{(3.90 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(3.90 \cdot 10^{-11})^2 + (2.650 \cdot 10^{-11})^2}\right)^3} = 1.670 \cdot 10^{-18} J , \quad (82)$$

$$W_{elHC+-} = \frac{(1.602 \cdot 10^{-19})^2}{2 \cdot 4 \cdot 3.14 \cdot 8.854 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{(3.90 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(3.90 \cdot 10^{-11})^2 + (2.134 \cdot 10^{-11})^2}\right)^3} = 1.992 \cdot 10^{-18} J. \quad (83)$$

Vyčíslení energie elektrického pole mezi oběma protony uhlíku a vodíku:

$$2 \cdot W_{ppCH++} = \frac{2 \cdot e^2}{2 \cdot 4 \pi \epsilon_0} \cdot \frac{1}{(d_{eC} + d_{eH})}, \quad (84)$$

$$2 \cdot W_{ppCH++} = \frac{2 \cdot (1.602 \cdot 10^{-19})^2}{2 \cdot 4 \cdot 3.14 \cdot 8.854 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{1}{10.90 \cdot 10^{-11}} = 2.117 \cdot 10^{-18} J. \quad (85)$$

Vyčíslení energie magnetického pole mezi dvěma vazebnými elektrony a protony atomu uhlíku:

$$W_{magC+-} = \frac{i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot r_{eC} \cdot 2 \cdot d^2}{4\pi \left(\sqrt{d^2 + r_e^2}\right)^5}, \quad (86)$$

$$2.5 \cdot W_{magCC+-} = \frac{2.5 \cdot 4 \cdot 3.184 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.410 \cdot 10^{-26}}{4\pi} \cdot \frac{2.134 \cdot 10^{-11} \cdot 2 \cdot (6.970 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(6.970 \cdot 10^{-11})^2 + (2.134 \cdot 10^{-11})^2}\right)^5} = 4.523 \cdot 10^{-18} J, \quad (87)$$

$$2.5 \cdot W_{magCH+-} = \frac{2.5 \cdot 3.846 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.410 \cdot 10^{-26}}{4\pi} \cdot \frac{2.650 \cdot 10^{-11} \cdot 2 \cdot (6.970 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(6.970 \cdot 10^{-11})^2 + (2.650 \cdot 10^{-11})^2}\right)^5} = 1.515 \cdot 10^{-18} J, \quad (88)$$

Vyčíslení energie magnetického pole mezi dvěma vazebnými elektrony a protonem atomu vodíku:

$$W_{magHH+-} = \frac{3.846 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.410 \cdot 10^{-26}}{4\pi} \cdot \frac{2.650 \cdot 10^{-11} \cdot 2 \cdot (3.90 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(3.90 \cdot 10^{-11})^2 + (2.650 \cdot 10^{-11})^2}\right)^5} = 1.877 \cdot 10^{-18} J, \quad (89)$$

$$W_{magHC+-} = \frac{4 \cdot 3.184 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.410 \cdot 10^{-26}}{4\pi} \cdot \frac{2.134 \cdot 10^{-11} \cdot 2 \cdot (3.90 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(3.90 \cdot 10^{-11})^2 + (2.134 \cdot 10^{-11})^2}\right)^5} = 6.713 \cdot 10^{-18} J \quad (90)$$

Celková energie modelu vazby C-H je vyčíslena podle (78)

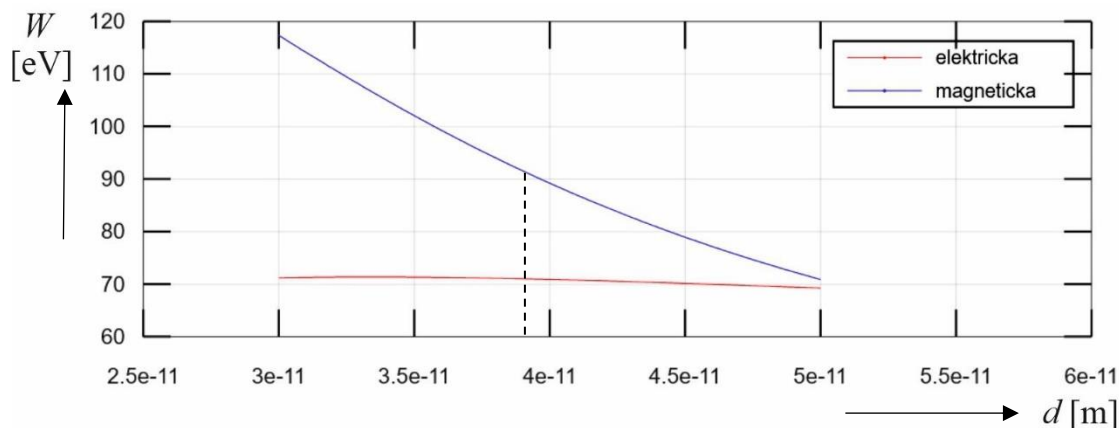
$$W_{C-H} = (11.363 - 14.628) \cdot 10^{-18} J = -3.265 \cdot 10^{-18} J, \quad (91)$$

$$W_{C-H} = -3.265 \cdot 10^{-18} \cdot 6.241 \cdot 10^{18} = -20.376 \text{ eV}, \text{ obr. 30.} \quad (92)$$

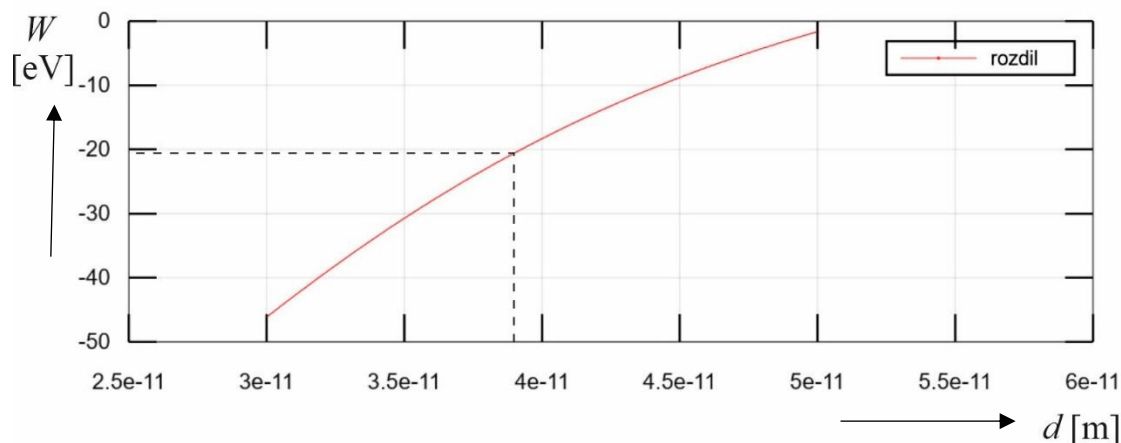
Velikost vazebné energie je dána rozdílem energií samostatného atomu uhlíku C a samostatného atomu vodíku H, které vstupovaly do reakce, a vyčíslenou energií vazby C-H podle (77)

$$W_{vaz} = W_C + W_H - W_{C-H} = 11.26 + 13.598 - 20.376 = 4.482 \text{ eV}, \quad (93)$$

$$W_{vaz} = 4.482 \cdot 96.48 = 432.4 \text{ kJ/mol}. \quad (94)$$



Obr. 30. Grafické vyjádření průběhu funkcí energií v závislosti na vzdálenosti v RT modelu vazby C-H.



Obr. 31. Grafické vyjádření průběhu funkce rozdílu energií vazby C-H v závislosti na vzdálenosti v RT.

Experimentálně naměřená hodnota vazebné energie $\text{CH}_3\text{-H}$ je z práce [9] $W_{vaz} = 4.553 \text{ eV} = 439.3 \text{ kJ/mol}$, což je ve velmi dobrém souladu s modelem vyčíslenou hodnotou.

4.2 Vazebná energie jednoduché vazby 2s atomu uhlíku C a 2s atomu vodíku H

Poloměr a elektrický proud vazebných elektronů 2s atomu uhlíku C budou

$$r_{eC} = 0.703 \cdot 10^{11} \text{ m} \text{ podle (23)}, \quad (95)$$

$$i_{eC} = 4 \cdot 4.834 \cdot 10^{-6} \text{ A} \text{ podle (25)}. \quad (96)$$

Pro excitaci atomu vodíku na vyšší energetickou hladinu najdeme v databázi atomových spekter NIST [5] hodnoty vlnových délek excitačních fotonů ze základní úrovně $1s$ na úroveň $2s$ a $2p$ velmi blízko sebe:

$$\lambda_{2s} = 121.56731 \cdot 10^{-9} \text{ m} ,$$

$$\lambda_{2p} = 121.56699 \cdot 10^{-9} \text{ m} .$$

Tento rozdíl je pro naše výpočty zanedbatelně malý, a proto budeme používat hodnotu pro excitaci elektronu z $1s$ na $2s$.

Poloměr a proud vazebných elektronů $2s$ atomu vodíku H budou

$$r_{eH} = 3.532 \cdot 10^{11} \text{ m} \text{ podle [2]}, \quad (97)$$

$$i_{eH} = 2 \cdot 2.885 \cdot 10^{-6} \text{ A} . \quad (98)$$

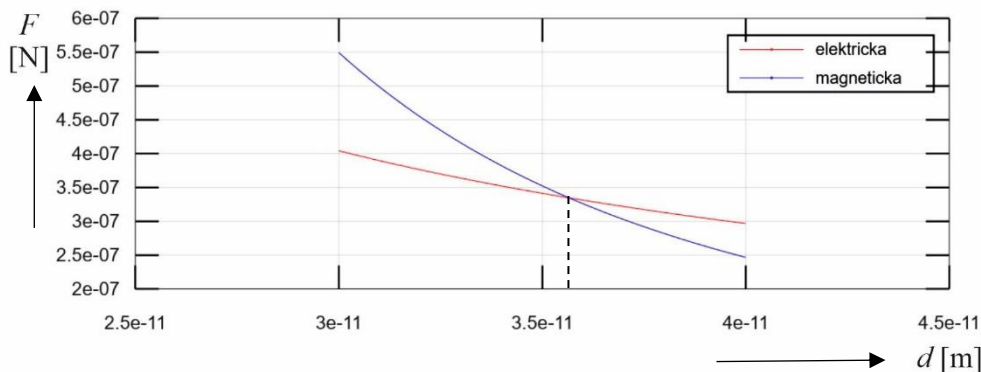
Rovnice dynamických rovnovážných sil pro určení rovnovážného stavu vzdálenosti d vazby C-H bude mít tvar

$$2 \cdot \mathbf{F}_{elCC+-} + 2 \cdot \mathbf{F}_{elCH+-} + \mathbf{F}_{elHH+-} + \mathbf{F}_{elHC+-} - 2 \cdot \mathbf{F}_{ppCH++} = 2.5 \cdot \mathbf{F}_{mgCC+-} + 2.5 \cdot \mathbf{F}_{mgCH+-} + \mathbf{F}_{mgHH+-} + \mathbf{F}_{mgHC+-} . \quad (99)$$

Pokud zvolíme pro dynamickou rovnováhu sil elektronu uhlíku vzdálenost $d_{eC} = 7.4 \cdot 10^{-11} \text{ m}$, pak můžeme ze vztahů pro elektrickou a magnetickou sílu v ose prstenců protonů a elektronů (6) a (7) vyčíslit podle rovnice (99) levitační vzdálenost elektronu vodíku H d_{eH} obr. 32 jako:

$$d_{eH} = 3.6 \cdot 10^{-11} \text{ m} . \quad (100)$$

Po sečtení obou vzdáleností činí $d_{C-H} = 11.0 \cdot 10^{-11} \text{ m}$ a téměř odpovídá experimentálně naměřené hodnotě délky vazby C-H u methanu [13]. $d_{\text{exp}} = 10.87 \cdot 10^{-11} \text{ m}$



Obr. 32. Grafické vyjádření rovnovážné vzdálenosti elektronu d pomocí rovnováhy EMG sil u vazby C-H.

Vazebnou energii vypočítáme jako rozdíl mezi energií vazby C-H a součtu energií samostatných atomů uhlíku C_{2s} a vodíku H_{2s} .

$$W_{vaz} = W_{C_{2s}} + W_{H_{2s}} - W_{C_{2s}-H_{2s}} . \quad (101)$$

Rovnice pro určení energie vazby C-H bude mít tvar

$$W_{C-H} = 2 \cdot W_{elCC+-} + 2 \cdot W_{elCH+-} + W_{elHH+-} + W_{elHC+-} + 2 \cdot W_{ppCH++} - 2.5 \cdot W_{mgCC+-} - 2.5 \cdot W_{mgCH+-} - W_{mgHH+-} - W_{mgHC+-} \quad (102)$$

Energii elektrického pole mezi dvěma elektrony a protony atomu C vyčíslíme podle vztahu (79) jako:

$$2 \cdot W_{elCC+-} = 2 \cdot \frac{(1.602 \cdot 10^{-19})^2}{2 \cdot 4 \cdot 3.14 \cdot 8.854 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{(7.40 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(7.40 \cdot 10^{-11})^2 + (0.703 \cdot 10^{-11})^2}\right)^3} = 3.069 \cdot 10^{-18} J \quad (103)$$

$$2 \cdot W_{elCH+-} = 2 \cdot \frac{(1.602 \cdot 10^{-19})^2}{2 \cdot 4 \cdot 3.14 \cdot 8.854 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{(7.60 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(7.60 \cdot 10^{-11})^2 + (3.532 \cdot 10^{-11})^2}\right)^3} = 2.287 \cdot 10^{-18} J \quad (104)$$

$$W_{elHH+-} = \frac{(1.602 \cdot 10^{-19})^2}{2 \cdot 4 \cdot 3.14 \cdot 8.854 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{(3.60 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(3.60 \cdot 10^{-11})^2 + (3.532 \cdot 10^{-11})^2}\right)^3} = 1.163 \cdot 10^{-18} J \quad (105)$$

$$W_{elHC+-} = \frac{(1.602 \cdot 10^{-19})^2}{2 \cdot 4 \cdot 3.14 \cdot 8.854 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{(3.60 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(3.60 \cdot 10^{-11})^2 + (0.703 \cdot 10^{-11})^2}\right)^3} = 3.023 \cdot 10^{-18} J \quad (106)$$

Vyčíslení energie elektrického pole mezi oběma protony podle vztahu (84):

$$2 \cdot W_{ppCH++} = \frac{2 \cdot (1.602 \cdot 10^{-19})^2}{2 \cdot 4 \cdot 3.14 \cdot 8.854 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{1}{11.0 \cdot 10^{-11}} = 2.093 \cdot 10^{-18} J \quad (107)$$

Vyčíslení energie magnetického pole mezi dvěma elektrony a protony C podle vztahu (86)

$$2.5 \cdot W_{magCC+-} = \frac{2.5 \cdot 4 \cdot 4.834 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.410 \cdot 10^{-26}}{4\pi} \cdot \frac{0.703 \cdot 10^{-11} \cdot 2 \cdot (7.40 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(7.40 \cdot 10^{-11})^2 + (0.703 \cdot 10^{-11})^2}\right)^5} = 2.312 \cdot 10^{-18} J \quad (108)$$

$$2.5 \cdot W_{magCH+-} = \frac{2.5 \cdot 2 \cdot 2.885 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.410 \cdot 10^{-26}}{4\pi} \cdot \frac{3.532 \cdot 10^{-11} \cdot 2 \cdot (7.40 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(7.40 \cdot 10^{-11})^2 + (3.532 \cdot 10^{-11})^2}\right)^5} = 2.126 \cdot 10^{-18} J \quad (109)$$

Vyčíslení energie magnetického pole mezi dvěma vazebnými elektrony a protonem atomu vodíku:

$$W_{magHH+-} = \frac{2 \cdot 2.885 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.410 \cdot 10^{-26}}{4\pi} \cdot \frac{3.532 \cdot 10^{-11} \cdot 2 \cdot (3.60 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(3.60 \cdot 10^{-11})^2 + (3.532 \cdot 10^{-11})^2}\right)^5} = 2.286 \cdot 10^{-18} J$$

(110)

$$W_{magHC+-} = \frac{4 \cdot 4.834 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.410 \cdot 10^{-26}}{4\pi} \cdot \frac{0.703 \cdot 10^{-11} \cdot 2 \cdot (3.60 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(3.60 \cdot 10^{-11})^2 + (0.703 \cdot 10^{-11})^2}\right)^5} = 7.482 \cdot 10^{-18} J$$

(111)

Celková energie modelu vazby C-C je vyčíslena podle (102)

$$W_{C-H} = (11.635 - 14.206) \cdot 10^{-18} J = -2.571 \cdot 10^{-18} J,$$

(112)

$$W_{C-H} = 2.571 \cdot 10^{-18} \cdot 6.241 \cdot 10^{+18} = 16.045 eV, \text{ obr. 34.}$$

(113)

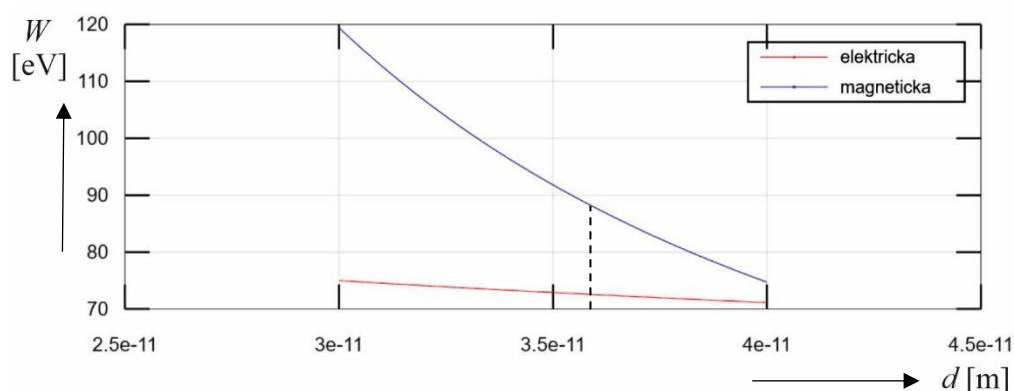
Velikost vazebné energie je dána rozdílem energií samostatného atomu uhlíku C_{2s} a samostatného atomu vodíku H_{2s} , které vstupovaly do reakce, a vyčíslenou energií vazby C-H (101)

$$W_{vaz} = W_C + W_H - W_{C-H} = 17.094 + 3.393 - 16.045 = 4.442 eV,$$

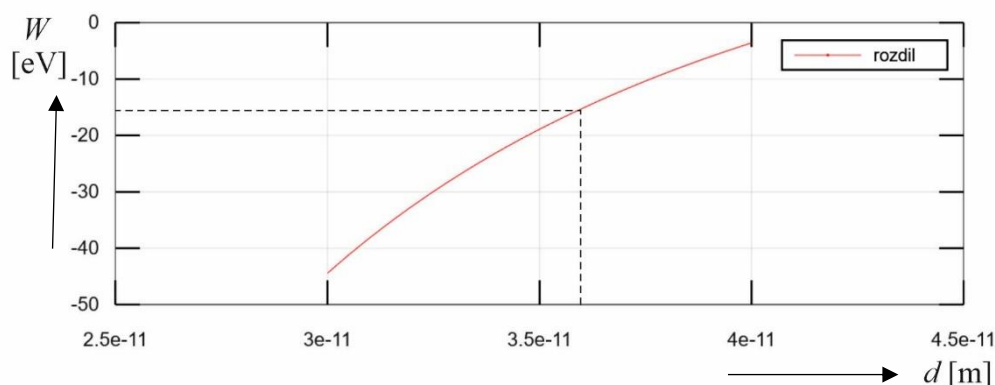
(114)

$$W_{vaz} = 4.442 \cdot 96.48 = 428.6 kJ/mol.$$

(115)



Obr. 33. Grafické vyjádření průběhu funkcí energií v závislosti na vzdálenosti v RT modelu vazby C-H.



Obr. 34. Grafické vyjádření průběhu funkce rozdílu energií v závislosti na vzdálenosti v RT modelu vazby C-H.

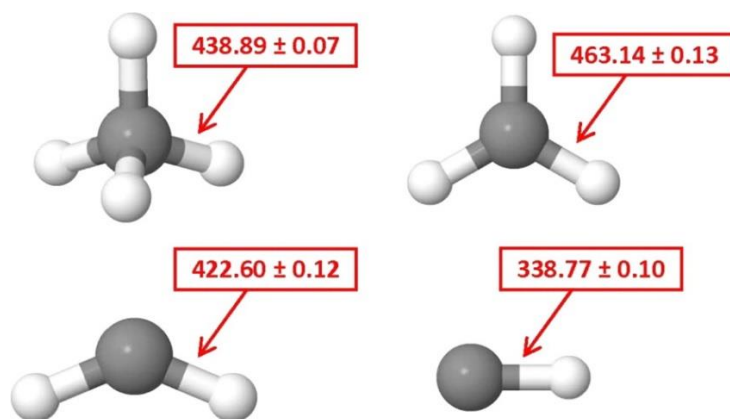
Experimentálně naměřená hodnota vazebné energie CH₃-H je [9] $W_{vaz} = 4.553 \text{ eV} = 439.3 \text{ kJ/mol}$.

Tabulka 2 Srovnání hodnot experimentálně zjištěných publikovaných [13, 9] vazebných délek a vazebných energií vazeb C-H u molekuly methanu CH₄ s vyčíslenými hodnotami podle modelu RT.

Typ vazby	d_C [10^{-11} m]	d_H [10^{-11} m]	d_{vazby} [10^{-11} m]	W_{vaz} [eV]	W_{vaz} [kJ/mol]
C-H experiment	-	-	10.87	4.553	439.3
C _{2p} – H _{1s}	6.97	3.90	10.87	4.482	432.4
C _{2s} – H _{2s}	7.40	3.60	11.00	4.442	428.6

Z hodnot tabulky 2 můžeme konstatovat, že vyčíslené hodnoty délky a energie vazby C-H v molekule methanu CH₄ jsou zcela srovnatelné s experimentem. Dále můžeme vyhodnotit, že tři vazby elektronů C_{2p} – H_{1s} a jedna vazba C_{2s} – H_{2s} jsou v délce a energii ekvivalentní, zcela srovnatelné a mohou vytvářet v molekule methanu CH₄ strukturu pravidelného tetraedru. Použití teorie hybridizace a její přerozdělování energií mezi elektrony je zcela neopodstatněné.

Při postupném (sekvenčním) odtrhávání atomů vodíků od atomu uhlíku v molekule methanu CH₄ dostaneme různé hodnoty disociační vazebné entalpie. Koncept průměrné entalpie vazby zavedl Pauling [6] [7], který ho ve velké míře používal k odvození významných poznatků o povaze chemické vazby. Nešťastným nezamýšleným důsledkem tohoto konceptu je to, že vytváří u nezasvěcených dojem, že čtyři po sobě jdoucí entalpie methanu jsou stejné, což zjevně není správné [8]. Hodnotu průměrné entalpie vazby C–H lze získat jako $\frac{1}{4}$ z celkové atomizační entalpie methanu $1663,397 \pm 0,067 \text{ kJ/mol}$ při $298,15^\circ \text{ K}$, což činí $415\,849 \pm 0,017 \text{ kJ/mol}$. Z experimentů [8] je zřejmé, že průměrná hodnota disociační vazebné entalpie C–H u molekuly methanu je významně nižší než thermochemicky správná hodnota pro jednu z prvních dvou hodnot entalpie methanu (o 23,043, respektive 47,29 kJ/mol), mírně nižší (6,75 kJ/mol) než třetí hodnota, ale mnohem vyšší (o 77,08 kJ/mol) než čtvrtá hodnota disociační vazebné entalpie u molekuly methanu CH₄, obr. 35 [8].



Obr. 35. Hodnoty disociační vazebné entalpie vazby C-H molekuly methanu CH₄ [8].

5 Ortho a para vazba C-C

Kvantová mechanika, která zavedením hybridizace smazává rozdíly mezi elektrony $2s$ a $2p$, neumožňuje uspokojivě vysvětlit různé typy vazeb mezi atomy uhlíku v organických sloučeninách.

Prstencová teorie – RT [1] ve svých modelech vazeb zachovává rozdílnost energetických a velikostních vlastností elektronů $2s$ a $2p$ a k objasnění vazeb využívá rozdílných orientací vektorů magnetických momentů elektronů μ_e a magnetických momentů protonů jádra μ_p . Dále RT předpokládá, že vazby mezi atomy jsou udržovány silami, jako důsledek vlastností EMG polí elementárních částic [1].

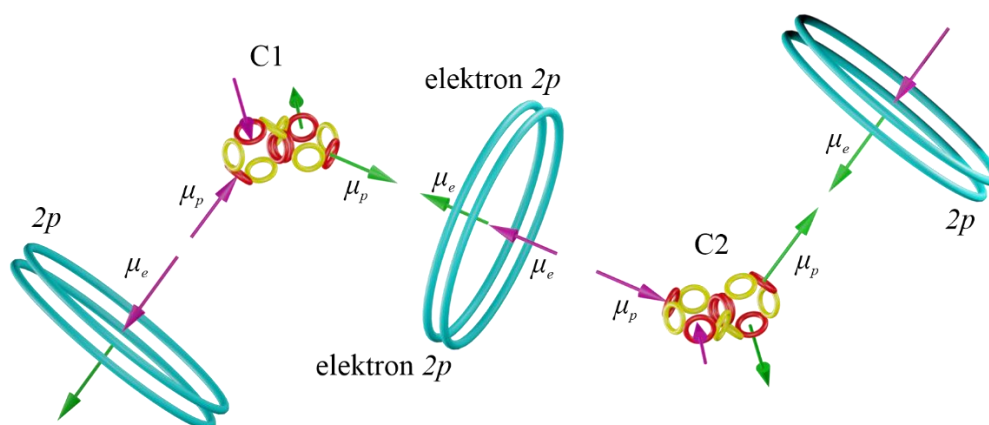
Důležitou rolí RT v utváření vazeb hraje prstencová struktura jádra atomu uhlíku. Jak již bylo ukázáno na začátku kapitoly 2 obr. 1, skládá se model jádra uhlíku ze dvou částí, v nichž v jedné části směřují vektory magnetických momentů protonů μ_p radial-interior u globule a ve druhé části jádra směřují vektory magnetických momentů protonů μ_p radial-exterior na povrchu globule. Tato vlastnost se přenáší na modely elektronů, které jsou k jednotlivým protonům vázány EMG silou svých polí, ale s opačným (antiparalelním) směrem magnetických momentů μ_e vůči protonům jádra. Ke každé globuli je vázán jeden elektron $2s$ a jeden elektron $2p$. Tato struktura umožňuje vytvářet tři typy vazeb mezi atomy uhlíku C-C.

Prvním a nejběžnějším typem modelu vazby (ortho vazba) je jednoduchá vazba $C_{2p} - C_{2p}$ jak je schematicky zobrazeno na obr. 36. Tato vazba propojuje proton s vektorem magnetického momentu μ_p směřujícího ven z povrchu globule, přes kovalentní vazbu elektronů $2p - 2p$, s protonem opačné globule jádra, kde vektor magnetického momentu μ_p směřuje dovnitř globule.

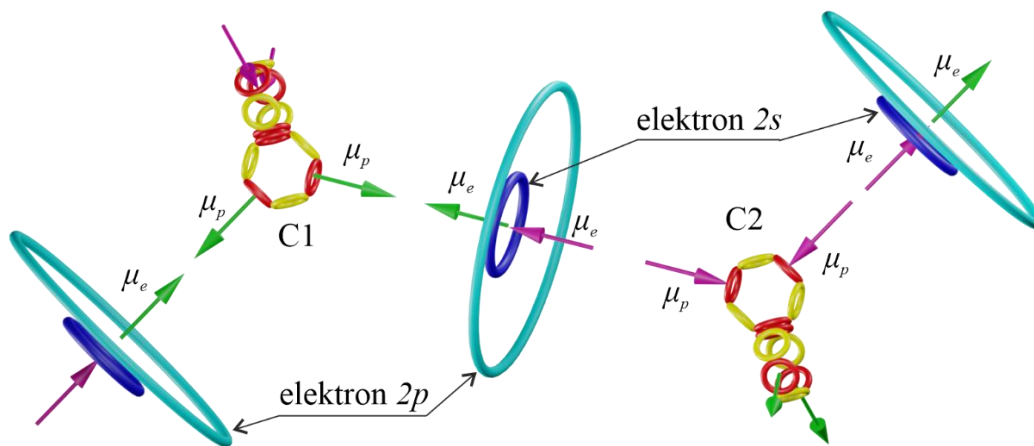
Druhým typem modelu vazby (para vazba) je jednoduchá vazba $C_{2s} - C_{2p}$, obr. 37. Tato vazba opět propojuje proton s vektorem magnetického momentu μ_p směřujícího ven z globule, přes kovalentní vazbu elektronů $2s - 2p$, s protonem opačné globule jádra, kde vektor magnetického momentu μ_p směřuje dovnitř globule. Tento typ vazby se uplatňuje v modelech aromatických molekul a konjugovaných vazbách, kde se může střídát s prvním typem vazby.

Třetím typem vazby je jednoduchá vazba $C_{2s} - C_{2s}$, která má stejnou strukturu jako předchozí vazby a uplatňuje se ve dvojných a trojných vazbách uhlíku.

U všech třech typů vazeb může následující vazba v řetězci vycházet buď z opačné globule, obr. 36, nebo ze stejné globule, obr. 37, což umožňuje vytvářet rozmanité prostorové struktury molekul.



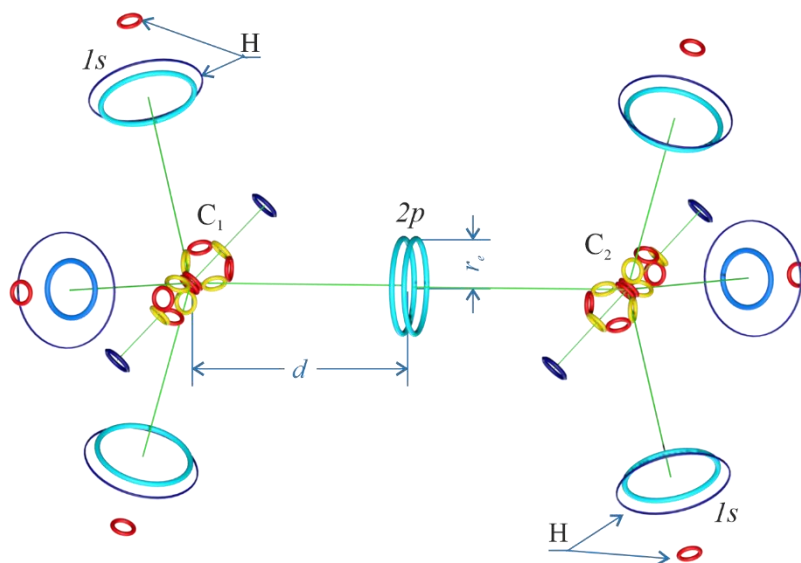
Obr. 36. Grafické znázornění schéma modelu vazby ortho $C_{2p} - C_{2p}$ podle RT.



Obr. 37. Grafické znázornění schéma modelu vazby para $C_{2s} - C_{2p}$ podle RT.

5.1 Vazebná délka a energie jednoduché vazby 2p-2p atomů uhlíku C-C

U vazby uhlíku $C_{2p} - C_{2p}$ předpokládáme čtyři shodné vazby mezi protonem jádra a elektronem $2p$ jednoho atomu uhlíku a mezi protonem jádra a elektronem $2p$ druhého atomu uhlíku.



Obr. 38. Schematický model vazby molekuly ethanu $CH_3 - CH_3$ podle RT.

Poloměr a elektrický proud vazebných elektronů $2p$ budou

$$r_e = 2.134 \cdot 10^{11} m \text{ podle (1),}$$

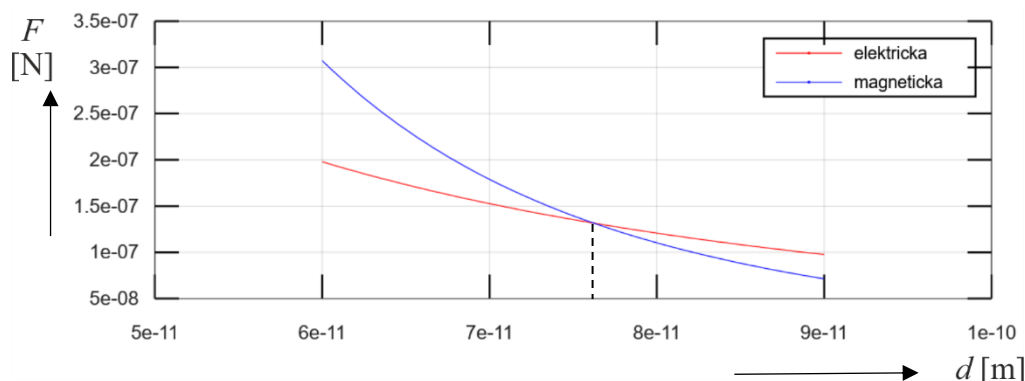
$$i_e = 4 \cdot 3.184 \cdot 10^{-6} A \text{ podle (4).}$$

Rovnice dynamických rovnovážných sil pro určení rovnovážného stavu vzdálenosti d vazby $C_{2p}-C_{2p}$ bude mít díky stejným elektronům zjednodušený tvar

$$4 \cdot F_{el12+-} - F_{pp++} = 7 F_{mg12+-}. \quad (116)$$

Ze vztahů pro elektrickou a magnetickou sílu v ose prstenců protonů a elektronů (4 a 5) vyčíslíme podle rovnice (116) levitační vzdálenost d_l obr. 39:

$$d_{p-e} = 7.675 \cdot 10^{-11} \text{ m} . \quad (117)$$



Obr. 39. Grafické vyjádření rovnovážné vzdálenosti elektronu d pomocí rovnováhy EMG sil.

Po sečtení dvou vzdáleností proton – elektron dostaneme délku vazby $C_{2p} - C_{2p} = 15.35 \cdot 10^{-11} \text{ m} .$

Experimentálně zjištěná délka jednoduché vazby je $C - C = 15.36 \cdot 10^{-11} \text{ m}$ [13].

Vazebnou energii vazby C-C vypočítáme jako rozdíl mezi energií vazby a součtu energií dvou samostatných atomů uhlíku C

$$W_{vaz} = 2 \cdot W_C - W_{C-C} . \quad (118)$$

Rovnice pro určení energie vazby C-C bude mít tvar

$$W_{C-C} = 4 \cdot W_{el12+-} + 2 \cdot W_{pp++} - 7 \cdot W_{mg12+-} . \quad (119)$$

Energii elektrického pole mezi dvěma elektrony mezi oběma protony vyčíslíme podle vztahu:

$$4 \cdot W_{el1+-} = 4 \cdot \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{d^2}{\left(\sqrt{d^2 + r_{el}^2}\right)^3} , \quad (120)$$

$$4 \cdot W_{el1+-} = 4 \cdot \frac{(1.602 \cdot 10^{-19})^2}{2 \cdot 4 \cdot 3.14 \cdot 8.854 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{(7.675 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(7.675 \cdot 10^{-11})^2 + (2.134 \cdot 10^{-11})^2}\right)^3} = 5.364 \cdot 10^{-18} \text{ J} . \quad (121)$$

Vyčíslení energie elektrického pole mezi oběma protony

$$2 \cdot W_{pp++} = 2 \cdot \frac{e^2}{2 \cdot 4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{2d} , \quad (122)$$

$$2 \cdot W_{pp++} = 2 \cdot \frac{(1.602 \cdot 10^{-19})^2}{2 \cdot 4 \cdot 3.14 \cdot 8.854 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{1}{2 \cdot 7.675 \cdot 10^{-11}} = 1.499 \cdot 10^{-18} \text{ J} . \quad (123)$$

Vyčíslení energie magnetického pole mezi dvěma elektrony a oběma protony

$$7 \cdot W_{mag1+-} = \frac{7 \cdot i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot r_{e1} \cdot 2 \cdot d^2}{4\pi \left(\sqrt{d^2 + r_{e1}^2} \right)^5}, \quad (124)$$

$$7 \cdot W_{mag1+-} = 7 \cdot k_{mag} \cdot \frac{2.134 \cdot 10^{-11} \cdot 2 \cdot \left(7.675 \cdot 10^{-11} \right)^2}{\left(\sqrt{\left(7.675 \cdot 10^{-11} \right)^2 + \left(2.134 \cdot 10^{-11} \right)^2} \right)^5} = 9.851 \cdot 10^{-18} J, \quad (125)$$

kde

$$k_{mag} = \frac{4 \cdot 3.184 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.410 \cdot 10^{-26}}{4\pi} \quad (126)$$

Celková energie modelu vazby C-C je vyčíslena podle (119)

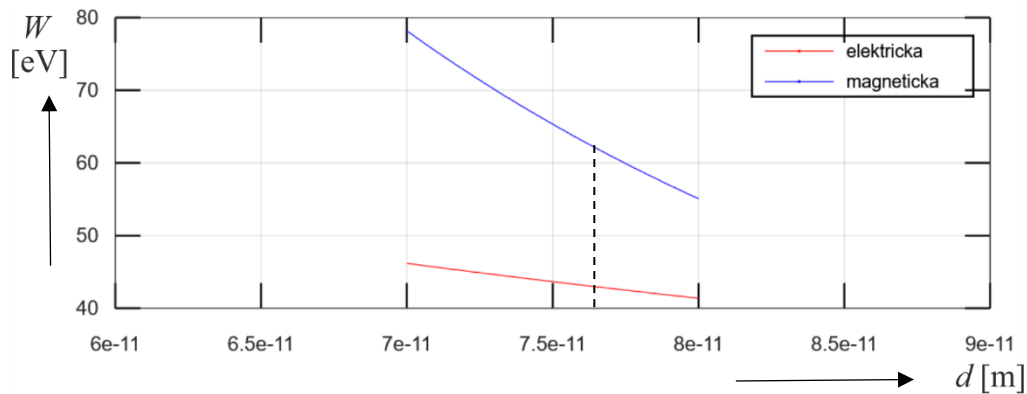
$$W_{C-C} = (5.364 + 1.499 - 9.851) \cdot 10^{-18} J = 2.988 \cdot 10^{-18} J, \text{ obr. 40}, \quad (127)$$

$$W_{C-C} = 2.988 \cdot 10^{-18} \cdot 6.241 \cdot 10^{+18} = 18.648 eV, \text{ obr. 41}. \quad (128)$$

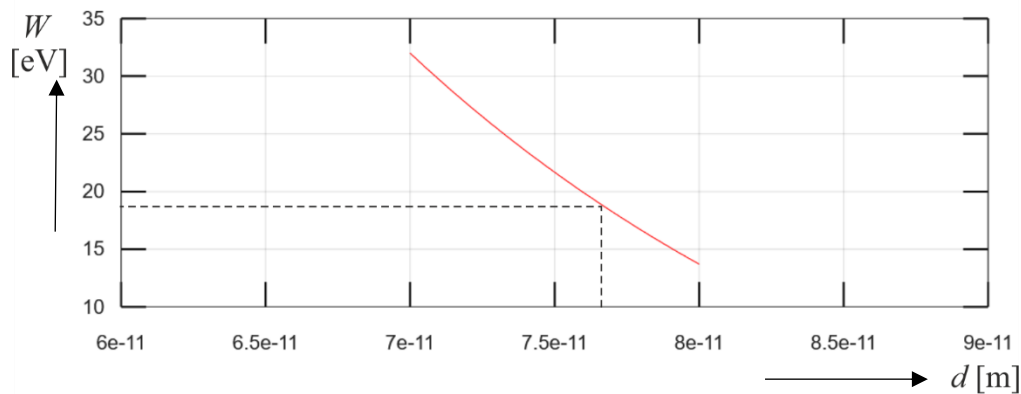
Velikost vazebné energie je dána rozdílem energií dvou samostatných atomů uhlíku C, které vstupovaly do reakce, a vyčíslenou energií vazby C-C (118)

$$W_{vaz} = 2 \cdot W_C - W_{C-C} = 2 \cdot 11.260 - 18.648 = 3.872 eV, \quad (129)$$

$$W_{vaz} = 3.872 \cdot 96.48 = 373.6 kJ/mol. \quad (130)$$



Obr. 40. Grafické vyjádření průběhu funkcí energií v závislosti na vzdálenosti v RT modelu vazby C-C



Obr. 41. Grafické vyjádření průběhu funkce rozdílu energií v závislosti na vzdálenosti v RT modelu vazby C-C

Experimentálně naměřená hodnota vazební energie ethanu $\text{CH}_3 - \text{CH}_3$ je podle zdroje [9]

$W_{\text{vaz}} = 3.911 \text{ eV} = 377.4 \text{ kJ/mol}$, což je ve velmi dobré shodě s výpočtem z navrženého RT modelu.

5.2 Vazební délka a energie jednoduché vazby 2s-2p atomů uhlíku C-C

Tento typ vazby se podle modelů RT uplatňuje např. u aromatických sloučenin a konjugovaných dvojných vazeb. Například struktura benzenové molekuly byla stanovena metodou elektronové difrakce v roce 1929 [7] a spektroskopická měření ukazují, že molekula benzenu je planární hexagon a že všechny jeho vazby C-C mají stejnou délku 140 pm. Tato hodnota je přiměřená pro vazbu mezi atomy uhlíku s 50 % znakem dvojné vazby ve srovnání s hodnotami 154 pm pro jednoduchou vazbu C-C a 133 pm pro dvojnou vazbu $\text{C} = \text{C}$. V nejjednodušším přiblížení lze vazby mezi nimi považovat střídavě za jednoduché a dvojně (tj. vazby konjugované), což však neodpovídá pravidelnému tvaru molekuly.

Rovněž grafit je složen z planárních hexagonálních sítí uhlíkových atomů se vzdáleností mezi atomy uhlíku uvnitř vrstvy 141.5 pm.

Pro vysvětlení těchto vazebních délek mezi atomy uhlíku byly vytvořeny teorie delokalizace elektronů nebo teorie vibračních struktur [11, 12]. Žádná však neodpovídá reálnému fyzikálnímu experimentálnímu stavu [13].

Tuto vazebnou délku a energii lze však vyčíslit pomocí navržených modelů RT a přístupů v práci [1].

Poloměr a elektrický proud vazebných elektronů 2p budou

$$r_e = 2.1343 \cdot 10^{11} \text{ m} \text{ podle (1),}$$

$$i_e = 4 \cdot 3.184 \cdot 10^{-6} \text{ A} \text{ podle (4).}$$

Poloměr a elektrický proud vazebných elektronů 2s budou

$$r_{e2s} = \frac{1}{3} \cdot \frac{72.581349 \cdot 10^{-9}}{2 \cdot 3.14 \cdot 4 \cdot 137} = 0.703013 \cdot 10^{-11} \text{ m} \text{ ze vztahu (23),} \quad (131)$$

$$i_{e2s} = \frac{1.602 \cdot 10^{-19} \cdot 3 \cdot 10^8}{72.581349 \cdot 10^{-9} \cdot 137} = 4.833238 \cdot 10^{-6} \text{ A} \text{ ze vztahu (25).} \quad (132)$$

V dalším vyjádření a vyčíslení musíme rozlišit dva druhy elektronů, a proto rovnice dynamických rovnovážných sil pro určení rovnovážného stavu vzdálenosti d vazby $\text{C}_{2s} - \text{C}_{2p}$ bude mít tvar

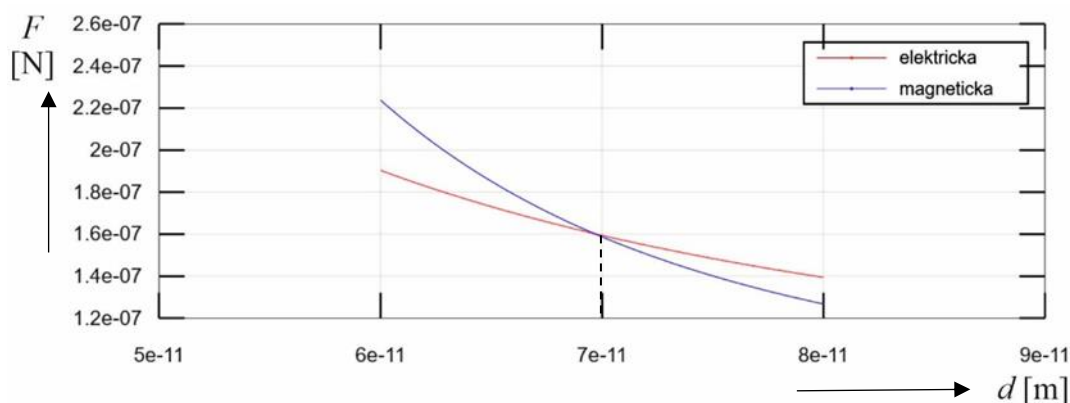
$$2 \cdot F_{el2s+-} + 2 \cdot F_{el2p+-} - F_{pp++} = 5 \cdot F_{mg2s+-} + 3.5 \cdot F_{mg2p+-} . \quad (133)$$

Ze vztahů pro elektrickou a magnetickou sílu v ose prstenců protonů a elektronů (4) a (5) vyčíslíme levitační vzdálenost d_l , obr. 42 jako:

$$d_{C_{2s}} = 7.0 \cdot 10^{-11} \text{ m} , \quad (134)$$

$$d_{C_{2p}} = 7.2 \cdot 10^{-11} \text{ m} . \quad (135)$$

Jejich součet představuje vzdálenost vazby $\text{C}_{2s} - \text{C}_{2p} = 14.2 \cdot 10^{-11} \text{ m}$.



Obr. 42. Grafické vyjádření rovnovážné vzdálenosti d elektronu $2s$ pomocí rovnováhy EMG sil

Vazebnou energii vazby $C_{2s}-C_{2p}$ vypočítáme jako rozdíl mezi energií vazby a součtu energií dvou samostatných atomů uhlíku C_{2s} a C_{2p} .

$$W_{vaz} = W_{C_{2s}} + W_{C_{2p}} - W_{C_{2s}-C_{2p}} \quad (136)$$

Rovnice pro určení energie vazby $C_{2s}-C_{2p}$ bude mít tvar

$$W_{C_{2s}-C_{2p}} = 2 \cdot W_{el_{2s+-}} + 2 \cdot W_{el_{2p+-}} + 2 \cdot W_{pp++} - 5 \cdot W_{mg_{2s+-}} - 3.5 \cdot W_{mg_{2p+-}} \quad (137)$$

Energii elektrického pole mezi protonem atomu C a dvěma elektrony $2s$ a $2p$ kovalentní vazby vyčíslíme podle vztahu:

$$2 \cdot W_{el_{2s+-}} = 2 \cdot \frac{e^2}{2 \cdot 4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{d_{2s}^2}{\left(\sqrt{d_{2s}^2 + r_{el_{2s}}^2}\right)^3}, \quad (138)$$

$$2 \cdot W_{el_{2s+-}} = \frac{2 \cdot (1.602 \cdot 10^{-19})^2}{2 \cdot 4 \cdot 3.14 \cdot 8.854 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{(7.0 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(7.0 \cdot 10^{-11})^2 + (0.703 \cdot 10^{-11})^2}\right)^3} = 3.239 \cdot 10^{-18} J \quad (139)$$

Energii elektrického pole mezi protonem atomu C a dvěma elektrony $2s$ a $2p$ kovalentní vazby vyčíslíme podle vztahu:

$$2 \cdot W_{el_{2p+-}} = 2 \cdot \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{d_{2p}^2}{\left(\sqrt{d_{2p}^2 + r_{el_{2p}}^2}\right)^3}, \quad (140)$$

$$2 \cdot W_{el_{2p+-}} = \frac{2 \cdot (1.602 \cdot 10^{-19})^2}{2 \cdot 4 \cdot 3.14 \cdot 8.854 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{(7.20 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(7.20 \cdot 10^{-11})^2 + (2.134 \cdot 10^{-11})^2}\right)^3} = 2.781 \cdot 10^{-18} J \quad (141)$$

Vyčíslení energie elektrického pole mezi oběma protony C-C

$$2 \cdot W_{pp++} = 2 \cdot \frac{e^2}{2 \cdot 4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{(d_{2s} + d_{2p})}, \quad (142)$$

$$2 \cdot W_{pp^{++}} = \frac{2 \cdot (1.602 \cdot 10^{-19})^2}{2 \cdot 4 \cdot 3.14 \cdot 8.854 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{1}{(7.0 + 7.2) \cdot 10^{-11}} = 1.338 \cdot 10^{-18} \text{ J} . \quad (143)$$

Vyčíslení energie magnetického pole mezi protonem atomu C a dvěma elektrony 2s a 2p

$$5 \cdot W_{mag\ 2s+-} = \frac{5 \cdot i_{e2s} \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot r_{e2s} \cdot 2 \cdot d_{2s}^2}{4\pi \left(\sqrt{d_{2s}^2 + r_{e2s}^2} \right)^5} , \quad (144)$$

$$5 \cdot W_{mag\ 2s+-} = 5 \cdot k_{mag\ 2s} \cdot \frac{0.703 \cdot 10^{-11} \cdot 2 \cdot (7.0 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(7.0 \cdot 10^{-11})^2 + (0.703 \cdot 10^{-11})^2} \right)^5} = 5.448 \cdot 10^{-18} \text{ J} , \quad (145)$$

kde

$$k_{mag\ 2s} = \frac{4 \cdot 4.833 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.410 \cdot 10^{-26}}{4\pi} \quad (146)$$

Vyčíslení energie magnetického pole mezi protonem atomu C a dvěma elektrony 2s a 2p

$$3.5 \cdot W_{mag\ 2p+-} = \frac{3.5 \cdot i_{e2p} \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot r_{e2p} \cdot 2 \cdot d_{2p}^2}{4\pi \left(\sqrt{d_{2p}^2 + r_{e2p}^2} \right)^5} , \quad (147)$$

$$3.5 \cdot W_{mag\ 2p+-} = 3.5 \cdot k_{mag\ 2p} \cdot \frac{2.134 \cdot 10^{-11} \cdot 2 \cdot (7.20 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(7.20 \cdot 10^{-11})^2 + (2.134 \cdot 10^{-11})^2} \right)^5} = 5.697 \cdot 10^{-18} \text{ J} , \quad (148)$$

kde

$$k_{mag\ 2p} = \frac{4 \cdot 3.184 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.410 \cdot 10^{-26}}{4\pi} \quad (149)$$

Celková energie modelu vazby C_{2s}-C_{2p} je vyčíslena podle relace (137) jako

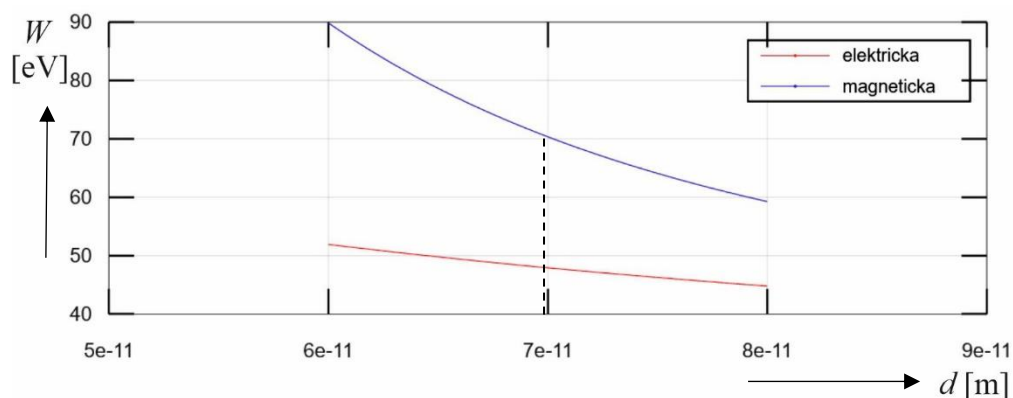
$$W_{C_{2s}-C_{2p}} = (3.239 + 2.781 + 1.338 - 5.448 - 5.697) \cdot 10^{-18} \text{ J} = -3.787 \cdot 10^{-18} \text{ J} , \quad (150)$$

$$W_{C-C} = 3.787 \cdot 10^{-18} \cdot 6.241 \cdot 10^{+18} = 23.63 \text{ eV} , \text{ doplněno v obr. 43, obr.44).} \quad (151)$$

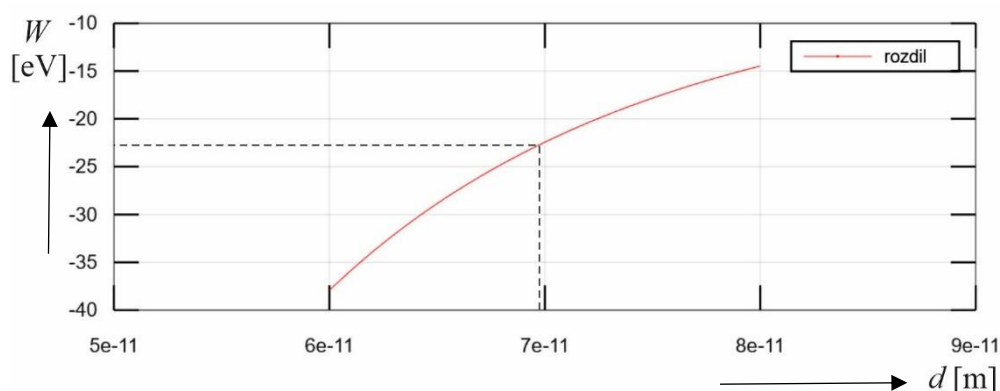
Velikost vazebné energie je dána rozdílem energií dvou samostatných atomů uhlíku C, které vstupovaly do reakce, a vyčíslenou energií vazby C_{2s}-C_{2p} (136)

$$W_{vaz} = W_{C_{2s}} + W_{C_{2p}} - W_{C_{2s}-C_{2p}} = 17.09 + 11.26 - 23.63 = 4.720 \text{ eV} , \quad (152)$$

$$W_{vaz} = 4.720 \cdot 96.48 = 455.4 \text{ kJ/mol} .$$



Obr. 43. Grafické vyjádření průběhu funkcí energií v závislosti na vzdálenosti v RT modelu atomu

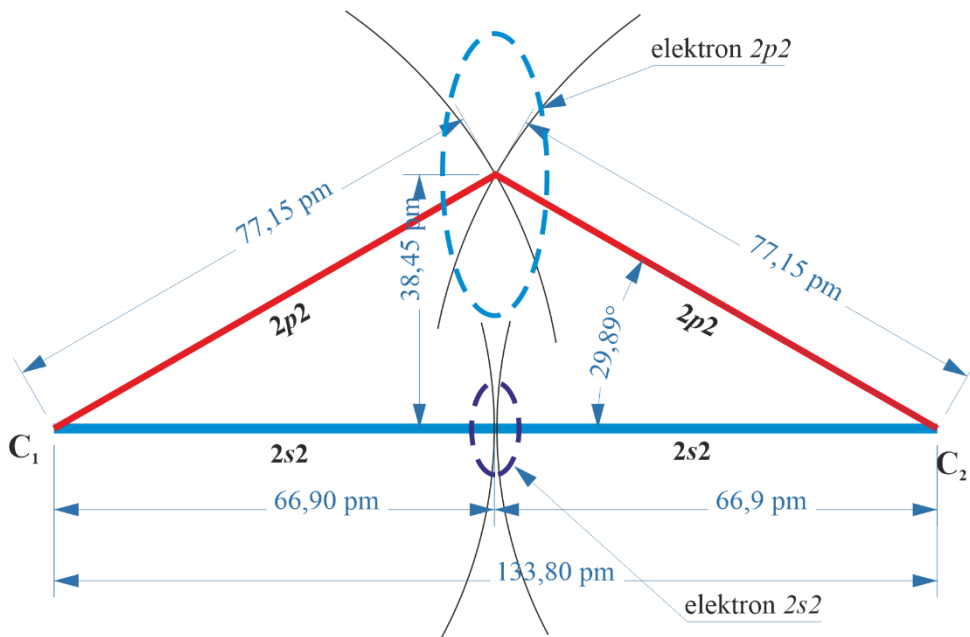


Obr. 44. Grafické vyjádření průběhu funkce rozdílu energií v závislosti na vzdálenosti v RT.

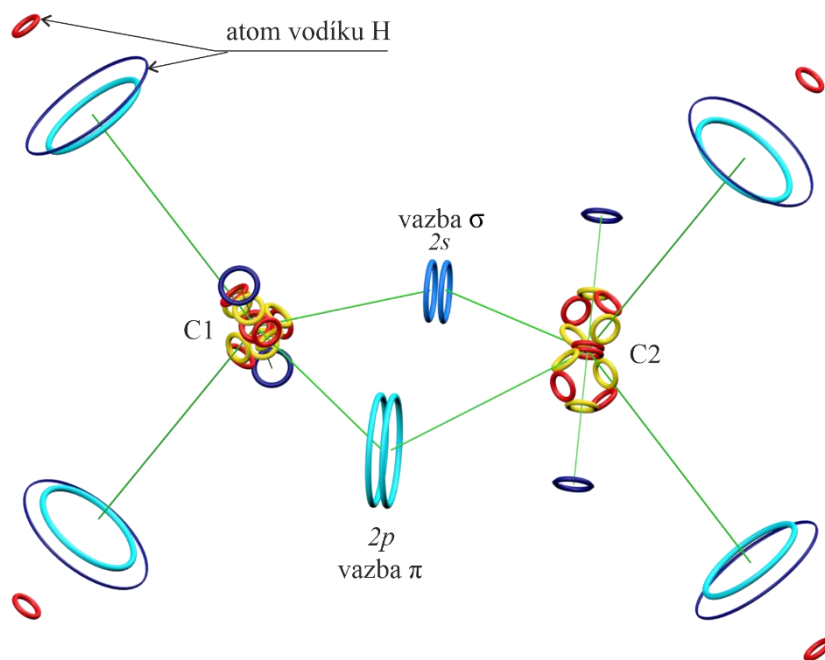
Experimentální zjištění hodnoty vazebné energie $C_{2s} - C_{2p}$ v tabulkách vazeb není [9]. Její hodnota 455.4 kJ/mol se však nachází mezi hodnotou 439.3 kJ/mol pro vazebnou energii jednoduché vazby $C_{2p} - C_{2p}$ a hodnotou 728.4 kJ/mol dvojně vazby atomů uhlíku $C=C$, což odpovídá očekávání výsledků z modelu RT.

6 Vazebná energie dvojně vazby atomů uhlíku $C=C$

Dvojná vazba atomů uhlíku $C=C$ je podle RT tvořena jednou vazbou elektrony typu $2s$, které vytvářejí pevnější vazbu σ (sigma), a jednou vazbou elektrony typu π (pí), obr. 45 a obr.46. Dvojná vazba vzniká při vyšší teplotě než 600 °C, a proto můžeme předpokládat, že jeden elektron atomu uhlíku $2s$ bude excitován na vyšší energetickou hladinu $2p$. Atomy uhlíku budou mít ve dvojně vazbě konfiguraci $2s2p^3$. V následující části vyjádříme a vyčíslíme vazebnou délku a vazebnou energii samostatné vazby atomů $C_{2s} - C_{2s}$.



Obr. 45. Schematické zobrazení dvojné vazby atomů uhlíku $C_{2s} - C_{2s}$ a $C_{2p} - C_{2p}$.



Obr. 46. Schematické zobrazení dvojné vazby molekuly ethenu $CH_2 = CH_2$.

6.1 Vazebná energie jednoduché vazby 2s-2s atomů uhlíku C-C

Podle práce [1] je poloměr

$$r_{e_{2s}} = \frac{1}{3} \cdot \frac{72.581349 \cdot 10^{-9}}{2 \cdot 3.14 \cdot 4 \cdot 137} = 0.703 \cdot 10^{-11} m, \quad (153)$$

a elektrický proud elektronu $i_{e_{2s}}$ vyčíslit podle vztahu

$$i_{e2s} = \frac{1.602 \cdot 10^{-19} \cdot 3 \cdot 10^8}{72.581349 \cdot 10^{-9} \cdot 137} = 4.833 \cdot 10^{-6} \text{ A} . \quad (154)$$

Z těchto vztahů můžeme vyjádřit levitační vzdálenost d_l elektronu 2s atomu uhlíku od jeho jádra

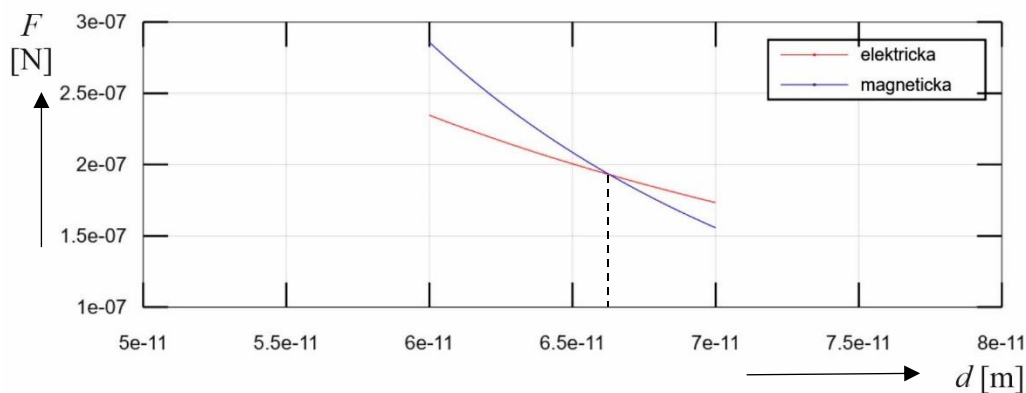
$$4 \cdot F_{el2s+-} - 2 \cdot F_{el2s-2s++} = 10 \cdot F_{mag2s+-} , \quad (155)$$

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{4 \cdot q_e^2 \cdot d}{\sqrt{(r_e^2 + d^2)^3}} - \frac{2 \cdot q_e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot d^2} = \frac{10 \cdot i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot 2 \cdot r_e \cdot d}{4\pi \cdot \sqrt{(r_e^2 + d^2)^5}} . \quad (156)$$

Po dosažení známých hodnot konstant a vypočtených hodnot můžeme vyčíslit rovnovážnou polohu sil – levitační vzdálenost elektronu $2p^2$ od protonu atomu uhlíku, obr. 47 jako:

$$d_l = 6.65 \cdot 10^{-11} \text{ m} , \quad (157)$$

což při dvojnásobné délce odpovídá vazebné délce C=C $d=133$ pm.



Obr. 47. Grafické vyjádření rovnovážné vzdálenosti elektronu d pomocí rovnováhy EMG sil.

Experimentálně zjištěná délka dvojné vazby je $C = C_{vaz} = 133.9 \cdot 10^{-12} \text{ m}$ [13].

Vazebnou energii vazby C=C vypočítáme jako rozdíl mezi energií vazby a součtu energií dvou samostatných atomů uhlíku C.

$$W_{vaz} = 2 \cdot W_C - W_{C2s-C2s} . \quad (158)$$

Protože jsou všechna čtyři vazby proton-elektron shodné, bude mít rovnice pro určení energie vazby $C_{2s}=C_{2s}$ zjednodušený tvar

$$W_{C2s-C2s} = 4 \cdot W_{el12+-} + 2 \cdot W_{pp++} - 10 \cdot W_{mg12+-} . \quad (159)$$

Energii elektrického pole mezi dvěma elektrony mezi oběma protony vyčíslíme podle vztahu:

$$4 \cdot W_{el1+-} = 4 \cdot \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{d^2}{\left(\sqrt{d^2 + r_{e1}^2}\right)^3} , \quad (160)$$

$$4 \cdot W_{el1+-} = \frac{4 \cdot (1.602 \cdot 10^{-19})^2}{8 \cdot 3.14 \cdot 8.854 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{(6.650 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(6.650 \cdot 10^{-11})^2 + (0.703 \cdot 10^{-11})^2}\right)^3} = 6.809 \cdot 10^{-18} \text{ J} . \quad (161)$$

Vyčíslení energie elektrického pole mezi oběma protony

$$2 \cdot W_{pp^{++}} = \frac{2 \cdot e^2}{2 \cdot 4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{2d}, \quad (162)$$

$$2 \cdot W_{pp^{++}} = \frac{2 \cdot (1.602 \cdot 10^{-19})^2}{2 \cdot 4 \cdot 3.14 \cdot 8.854 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{1}{2 \cdot 6.687 \cdot 10^{-11}} = 1.721 \cdot 10^{-18} \text{ J}. \quad (163)$$

Vyčíslení energie magnetického pole mezi dvěma elektrony a oběma protony

$$10 \cdot W_{mag1+-} = \frac{10 \cdot i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot r_{el} \cdot 2 \cdot d^2}{4\pi \left(\sqrt{d^2 + r_{el}^2} \right)^5}, \quad (164)$$

$$10 \cdot W_{mag1+-} = 10 \cdot k_{mag} \cdot \frac{0.703 \cdot 10^{-11} \cdot 2 \cdot (6.650 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(6.650 \cdot 10^{-11})^2 + (0.703 \cdot 10^{-11})^2} \right)^5} = 12.67 \cdot 10^{-18} \text{ J}, \quad (165)$$

kde

$$k_{mag} = \frac{4 \cdot 4.833 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.410 \cdot 10^{-26}}{4\pi} \quad (166)$$

Celková energie modelu vazby C=C je vyčíslena podle (159)

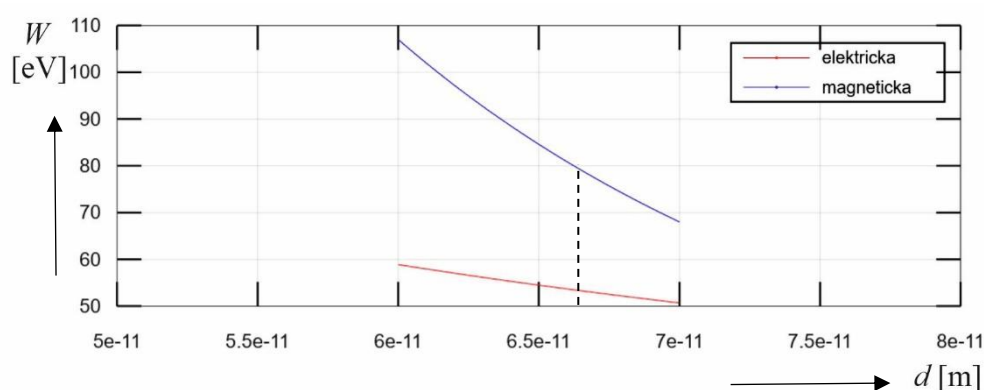
$$W_{C2s-C2s} = (6.809 + 1.721 - 12.67) \cdot 10^{-18} \text{ J} = -4.140 \cdot 10^{-18} \text{ J}, \text{ obr. 48.} \quad (167)$$

$$W_{C2s-C2s} = 4.140 \cdot 10^{-18} \cdot 6.241 \cdot 10^{+18} = 25.83 \text{ eV}, \text{ obr. 49.} \quad (168)$$

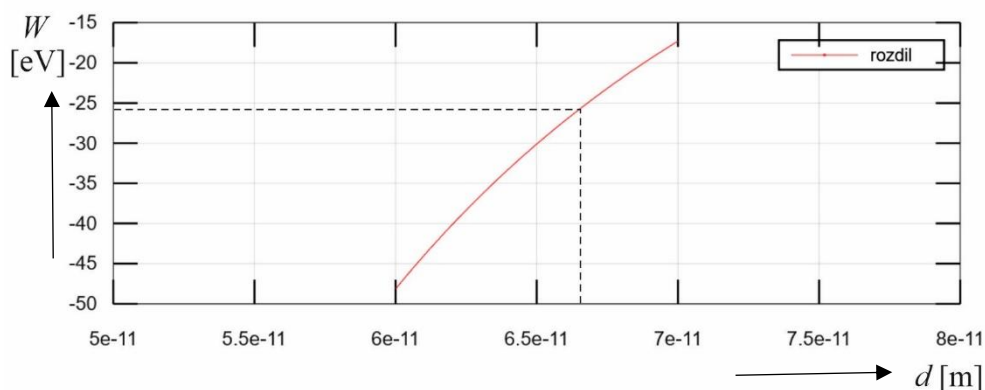
Velikost vazebné energie je dána rozdílem energií dvou samostatných atomů uhlíku C, které vstupovaly do reakce, a vyčíslenou energií vazby C=C (158)

$$W_{vaz} = 2 \cdot W_{C2s} - W_{C2s-C2s} = 2 \cdot 17.09 - 25.83 = 8.350 \text{ eV}, \quad (169)$$

$$W_{vaz} = 8.350 \cdot 96.48 = 805.6 \text{ kJ/mol}. \quad (170)$$



Obr. 48. Grafické vyjádření průběhu funkcí energií v závislosti na vzdálenosti v RT modelu vazby C-C



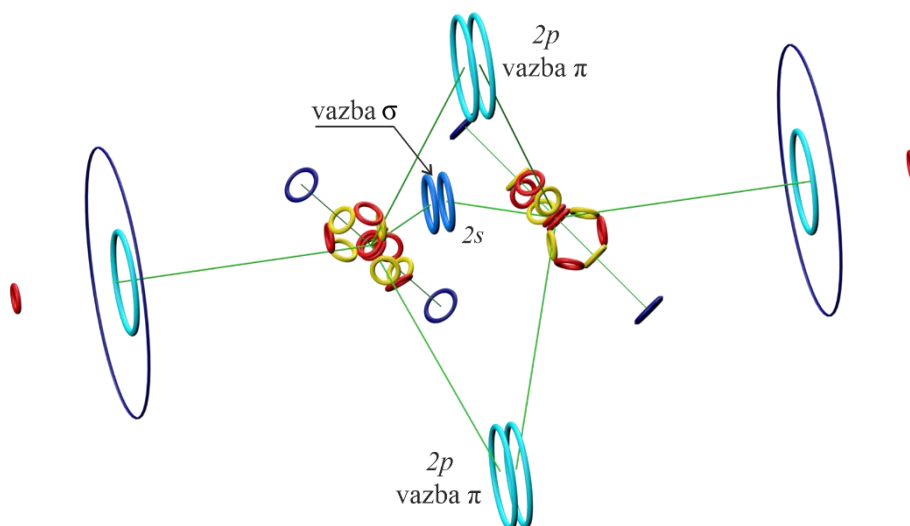
Obr. 49. Grafické vyjádření průběhu funkce rozdílu energií v závislosti na vzdálenosti d v RT modelu vazby atomů $C_{2s}-C_{2s}$.

Experimentálně naměřená hodnota vazební energie dvojně vazby atomů uhlíku je z práce [9] $W_{vaz} = 7.5494 \text{ eV} = 728.4 \text{ kJ/mol}$, což je velmi blízká hodnota a lze hodnotu z modelu dvojně vazby podle RT považovat za akceptovatelnou.

7 Vazební energie trojně vazby atomů uhlíku $C \equiv C$

Trojná vazba atomů uhlíku $C \equiv C$ je podle RT tvořena jednou vazbou elektrony typu $2s$, které vytvářejí pevnější vazbu σ , a dvěma vazbami elektrony typu π , obr. 50. Trojná vazba vzniká při vyšší teplotě než $1500 \text{ }^\circ\text{C}$, a proto můžeme předpokládat, že jeden elektron atomu uhlíku $2s$ bude excitován na vyšší energetickou hladinu $2p$. Atomy uhlíku budou mít ve trojně vazbě konfiguraci $2s^1 2p^3$. U trojně vazby se jedná o prostorovou strukturu tří vazeb, které vytváří vazebnou délku mezi atomy uhlíku 120.5 pm . Je to kratší vzdálenost než u dvojně vazby, a proto je i vazební energie větší.

Podle experimentálního zjištění je vazební energie $W_{vaz} = 9.887 \text{ eV} = 954.0 \text{ kJ/mol}$ z práce [9].



Obr. 50. Schematické zobrazení trojně vazby molekuly acetyleny $CH \equiv CH$.

8 Závěr

Tento příspěvek prokázal, že využitím prstencové struktury modelů elementárních částic, struktury jádra atomů a modelů atomů a molekul podle lze za využití základních zákonů a vlastností elektromagnetických polí a jednoduchou matematikou poměrně přesně určit poloměry atomů a jejich ionizační energii, vazebnou vzdálenost atomů v několika typech jednoduchých kovalentních vazeb i jejich vazebnou energii. Podobně jako u atomu uhlíku je možné tuto úvahu provést i u atomů dusíku a kyslíku, a tím se přiblížit k pochopení vlastností základních kamenů organické chemie. V tomto příspěvku není použita matematická složitost vlnových funkcí kvantové mechaniky ani jejich odvozených variant v podobě hybridizace, delokalizovaných elektronů nebo vibračních struktur.

Možná je zde namíste připomenout princip logické úspornosti zvaný Ockhamova břitva:

„*Pokud pro nějaký jev existuje vícero vysvětlení, je lépe upřednostňovat to nejméně komplikované.*“

9 Poděkování

Poděkování patří panu prof. Ing. Pavlu Fialovi, PhD., za metodické vedení při zpracování textů.

Výzkum byl prováděn na základě dílčích cílů grantu BD 2020-2020 FEKT-S-20-6360. Analýzy a zázemí nezbytných výzkumných aktivit bylo podpořeno infrastrukturou centra excellence SIX UTEE.

10 Literatura

- [1] Werner, P. (2019), *Modeling the basic ring structures in elementary particles of matter*, VUT ISBN 978-80-87342-23-7., <https://www.ringtheory.eu>
- [2] Werner, P. (2019), *Aplikace modelování prstencové struktury elementárních částic*. VUT ISBN 978-80-87342-21-3., <https://www.ringtheory.eu>
- [3] NIST Atomic Spectra Database Ionization Energies Form: <https://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/ionEnergy.html>
- [4] Cotton, F. A.; Wilkinson, G. (1988). *Advanced Inorganic Chemistry* (5th Edn). New York: Wiley. ISBN 0-471-84997-9. p. 1385
- [5] NIST Atomic Spectra Database Lines Form: <https://www.nist.gov/pml/atomic-spectra-database>
- [6] Pauling, L. (1960), *The Nature of the Chemical Bond*, 3rd ed.; Cornell University Press: Ithaca, NY, 1960.
- [7] Pauling, L. (1932), *The Nature of the Chemical Bond*. IV. The Energy of Single Bonds and the Relative Electronegativity of Atoms *J. Am. Chem. Soc.* 1932, 54, 3570–3582
- [8] Ruscic Branko, *Active Thermochemical Tables: Sequential Bond Dissociation Enthalpies of Methane, Ethane, and Methanol and the Related Thermochemistry*, *The Journal of Physical Chemistry A* 2015 119 (28), 7810-7837
- [9] Luo, Y.R. (2007), *Comprehensive Handbook of Chemical Bond Energies*. Hoboken, NJ : CRC Press, 2007. - 1687 p., ISBN 9781420007282.

- [10] <https://chemistry.stackexchange.com/questions/32038/are-the-bonding-orbitals-in-methane-equivalent-photoelectron-spectrum>
- [11] Solomons, T. W. Graham, (2011), *Organic chemistry*, index. ISBN 978-0-470-40141-5, Printed in the United States of America 10 9 8 7 6 5 4 3 2 1.
- [12] Svoboda, J. a kol. *Organická chemie I*. Praha: Vysoká škola chemicko-technologická, 2005, ISBN 80-7080-561-7.
- [13] NIST Computational Chemistry Comparison and Benchmark Database, NIST Standard Reference Database Number 101, Release 21, August 2020, Editor: Russell D. Johnson III, <http://cccbdb.nist.gov/> , DOI:10.18434/T47C7Z.

Autor Pavel Werner
UTEF FEKT VUT v Brně

Název Model atomu uhlíku C, ionizační a vazebné energie

Rok vydání 2021

Náklad 100

Tisk NOVAPRESS s.r.o.
nám. Republiky 15
614 00 Brno

ISBN 978-80-87342-24-4



9788087342244