

# Model molekuly benzenu C<sub>6</sub>H<sub>6</sub> podle RT

Pavel Werner

www.ringtheory.eu

## Obsah

1	Úvod.....	4
2	Rozbor vazeb v molekule benzenu .....	4
3	Vysvětlení vazeb v molekule benzenu pomocí teorie delokalizace.....	5
4	Struktura modelu molekuly benzenu C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> podle RT .....	6
4.1	Vazebná délka a energie jednoduché vazby 2s-2p atomů uhlíku C-C v RT modelu .....	11
4.2	Vazebná délka a energie jednoduché kovalentní vazby 2p atomu uhlíku C a 1s atomu vodíku H podle RT.....	14
4.3	Vyčíslení vzdálenosti nevazebného elektronu 2p <sup>2</sup> od protonu v atomu uhlíku.....	18
4.4	Magnetické pole modelu molekuly benzenu .....	19
5	Molekula benzenu ve vnějším magnetickém poli.....	21
6	Aromatické interakce podle RT .....	25
6.1	Vodíkové vazby molekul s molekulou benzenu.....	27
6.2	Benzenový dimer.....	36
6.3	Nekovalentní interakce benzenu C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> s kationty a anionty .....	43
7	Závěr .....	48
8	Poděkování.....	48
9	Literatura.....	49