

### 3) Vazba a struktura

Na [www.studijni-svet.cz](http://www.studijni-svet.cz) zaslal(a): Lenka

**CHEMICKÍ VAZBA** = síly, kterými jsou k sobě navzájem vázány sloučené atomy v molekule, popř. v krystalové struktuře

- v převážné většině jde o sdílení dvojic elektronů s opačným spinem neboli vazebných elektronových párů

- pouze vzácné plyny jsou tvořeny volnými, nesloučenými, atomy

- ke vzniku a štěpení chem. vazeb dochází při chemických reakcích

- *disociační energie* = energie potřebná k rozštěpení chem. vazby

- *vazebná energie* = energie, která se uvolní při vzniku vazby

- př. H<sub>2</sub> - přechod elektronů z atom. orbitalu do molekulového orbitalu při vzniku molekuly z volných atomů je spojen se snížením energie systému, které je příčinou chemické vazby (takový mol. orbital je **vazebný**) – obsazením 2. mol. orbitalu by vedlo ke zvýšení energie (ke snížení hustoty mezi jádry) (tzv. **protivazebný** neboli **antivazebný** orbital)

- **délka vazby** = mezijaderná vzdálenost

- **vznik chem. vazby:**

I. dojde k přiblížení -> sražení -> průniku obaly

II. uplatňují se přitažlivé síly jádra do míst s vyšší e<sup>-</sup> hustotou

III. uplatňují se i odpuzivé síly mezi jádry

IV. dojde k vyrovnání příslušných atomových jader a elektronů

- **2 základní typy vazeb:**

1) *vazba iontová* – její podstatou jsou elektrostatische síly působící mezi opačně nabitými ionty

2) *vazba kovalentní* – oba atomy sdílí společně 1 vazebný elektronový pár, kdy každý partner poskytne 1 elektron s opačným spinem

- hodnota vazebné energie závisí na tom, jakých dalších vazeb se účastní atomy spojené posuzovanou vazbou

- **rozdělení vazeb násobnosti:**

1) *jednoduché* – každý atom poskytne 1 valenční elektron (tzn. vznikne 1 elektronový pár)

- je to téměř vždy vazba  $\sigma$  (=sigma) – výjimkou je třeba molekula B<sub>2</sub> (existuje za vysokých teplot), v níž je nutno předpokládat jednoduchou vazbu  $\pi$

2) *dvojná* – každý atom poskytne 2 valenční elektrony (tzn. vzniknou 2 elektronové páry)

- vazba  $\sigma$  a  $\pi$

3) *trojná* – každý atom poskytne 3 valenční elektrony

$N \equiv N$

- vazba  $\sigma$ ,  $\pi$  a  $\pi$

### 3) Vazba a struktura

4) *čtverná* – pouze u komplexních sloučenin rhodia a molybdenu

- **vaznost** – udává číslo, vyjadřující kolik kovalentních vazeb daný atom vytváří
- vazba  $\sigma$  – vzniká pravděpodobně na spojnici jader, kde je nejvyšší hustota valenčních elektronů
  - vyznačuje se osovou souměrností
  - je podmíněna obsazením vazebného molekulového orbitalu  $\sigma$
  - může vzniknout překryvem 2 orbitalů  $s$ , nebo kombinací 2 orbitalů  $p$ , popř. orbitalu  $p$  a orbitalu  $s$
- vazba  $\pi$  – je symetricky rozložena nad spojnici jader
  - může vzniknout z překryvu 2 orbitalů  $p$
- pevnost chemické vazby roste s násobností
- **kovalentní vazba** = vzniká překryvem 2 orbitalů – každý poskytne 1 elektron
  - výsledkem vzájemného přitahování elektronů a jader je potom přitahování jader k místům se zvýšenou elektronovou hustotou – tzn. k sobě navzájem
- **elektronegativita** –  $X$ 
  - schopnost atomu přitahovat vazebné elektrony
  - její hodnota závisí na tom, se kterým atomem a jakým způsobem (ox. číslo, hybridizace) je daný atom vázán
  - *prvky*: - elektropozitivní
    - elektronegativní
  - v molekule složené ze dvou atomů s různou elektronegativitou převládá u atomu s větší elektronegativitou záporný náboj a u druhého kladný -> vytváří tzv. **dipól**
- **polarita kovalentní vazby**
  - ve stejnojaderných dvouatomových molekulách působí obě jádra na elektrony naprosto stejně => prostorové rozdělení el. hustoty je v okolí obou jader stejné
  - *nepolární vazba* – rozdíl elektronegativit je menší než 0,4
    - nejčastější sloučeniny  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $N_2$
  - *polární vazba* – rozdíl elektronegativit je od 0,4 do 1,7
    - $H_2O$ ,  $HCl$
  - *iontová vazba* – extrémně polární – př. chlorid sodný  $Na^+Cl^-$ 
    - valenční elektron jednoho atomu je vtažen do valenční vrstvy druhého a vzniká elektronicky nabytá částice
    - mezi atomy, jejichž elektronegativity se liší aspoň o 1,7
- **koordinačně-kovalentní vazba** (donor akceptorová nebo také dativní vazba)
  - donor = dárce, akceptor = příjemce
  - liší se ve vzniku
  - ve vlastnostech se neliší od kovalentní
  - při vzniku má 1 reaktant volný celý elektronový pár a 2. pouze přijímá (má volný orbital)
  - př. reakce trimethylaminu s kationtem vodíku
- **kovová vazba** – elektronový plyn – kov vytvoří krystalovou mřížku a ten plyn vytvoří volné valenční elektrony -> elektrony jsou delokalizovány

### 3) Vazba a struktura

- asi 80% prvků jsou kovy
- krystal kovu se skládá z kationtů, uspořádaných v krystalové mřížce – kationty jsou ve svých polohách udržovány nábojem volně pohyblivých valenčních el.

#### • slabé vazebné interakce

- **van der waalsovy síly** – př. molekula grafitu
  - jejich podstatou je vzájemné působení molekulových dipólů jak stálých tak indukovaných
  - u molekul nebo atomů, které nemají stálý dipól, mohou vést okamžité nerovnoměrnosti v rozložení elektronů ke vzniku dočasných dipólů, jejichž vzájemné působení má za následek přitahování molekul
- **vodíkové můstky** – vznikají mezi H + F, O, N
  - zakresluje se: F-H.....F-H (2 molekuly kys. fluorovodíkové)
  - ovlivňují fyzikální vlastnosti látek (var, tání, rozpustnost)
  - mají větší sílu než van der waalsovy síly

#### - vliv chemické vazby na vlastnosti látek:

- látky s kovalentní nepolární vazbou jsou nerozpustné ve vodě a rozpustné v nepolárních rozpouštědlech a nevedou el. proud
- látky s polární a iontovou vazbou jsou rozpustné ve vodě a nerozpustné v polárních rozpouštědlech – v roztoku nebo tavenině vedou el. proud
- látky s kovovou vazbou vedou el. proud a teplo, jsou kujné a tažné

#### - struktura krystalů:

- pevné látky, které mají pravidelné uspořádání základních částic (atomů, molekul nebo iontů) čili *krystalovou strukturu*, mohou vytvářet souměrná tělesa nazývaná **krystaly**
- krystaly se většinou vyskytují jako **polykrystaly** složení z velkého počtu malých krystalků, v nichž jsou částice uspořádány pravidelně, ale poloha krystalků je nahodilá
  - **monokrystaly** – krystalické látky, které se vyskytují jako jednotlivé krystaly větších rozměrů
- pravidelný tvar krystalů je projevem zákonitosti jejich *vnitřního uspořádání*
- povrch krystalů je složen z rovinných *krystalových ploch*, protínajících se v hranách a hrany se stýkají ve vrcholech
  - 2 plochy svírají vždy stejný úhel
- podle souměrnosti se krystaly rozdělují do 7 *krystalových soustav*: jednoklonné, trojklonné, kosočtverečné, klencové, šesterečné, čtverečné, krychlové
- *základní buňka* – jednoduché seskupení částic tvořících stavební jednotku krystalu
- **krystaly**:
  - 1) *iontové* – vysoká teplota
    - vedou v roztoku el. proud (umožňuje to pohyblivé ionty), v pevném skupenství jsou nevodivé
    - jsou křehké
    - většinou se rozpouštějí v rozpouštědlech z polárních molekul
  - 2) *atomové* (kovalentní)
    - velmi tvrdé, nerozpustné
    - nevedou el. proud
    - vysoká teplota tání
    - diamant
  - 3) *molekulové* – spojené van der waalsovými silami nebo můstky
    - tvoří molekuly prvků (př. N<sub>2</sub>), jednoduché oxidy, hydridy, četné organické molekuly a makromolekuly

### 3) Vazba a struktura

- nízká teplota tání, těkavé, nevodivé, rozpustné v nepolárních rozpouštědlech

4) *něco mezi atomovými a molekulovými* = vrstevnaté

5) *kovové* – uspořádání:

- krychlová plošně centrovaná základní buňka (př. Al)

- šesterečná základní b. (př. Mg)

- krychlová těsně centrovaná b. (př. alkalické kovy)

- **alotropie** – prvky, které mohou mít několik různých krystalových forem

- př. diamant nebo grafit popř. fosfor

- **polymorfie** – alotropie u sloučenin

- př. uhličitán vápenatý

- **izomorfni** (stejnотvaré) **látky** – krystalizují společně ze směsi svých nasycených roztoků nebo travenin a vytváří tak **směsné krystaly**, ve kterých se mohou vyskytovat v libovolných poměrech

- předpokladem izomorfie je stejný typ krystalové struktury a malé rozdíly ve velikosti iontů

- **amorfní** (beztvaré) **látky** – uspořádání částic je buď zcela nepravidelné nebo jsou vytvořeny velmi malé oblasti s pravidelnou strukturou

- podobné ztuhlým kapalinám

- př. sklo

#### MOLEKULA

- i pro molekulu existuje **orbitalový model**, ve kterém je chování jednotlivých elektronů v molekule popsáno pomocí jednoelektronových vlnových funkcí – molekulových orbitalů

- ke znázornění el. hustoty se používají hraniční plochy a mapy elektronových hustot neboli **vrstevnicové diagramy**

- i pro molekulu platí výstavbový princip, Pauliho princip a Hundovo pravidlo

- polovina rozdílů počtu elektronů ve vazebných a protivazebných orbitalech udává **řád vazby dvouatomových molekul** – veličinu charakterizující násobnost a pevnost vazby

- u tří atomových molekul se uplatňuje důležitá vlastnost kovalentní vazby – její **směr** – totožný se směrem spojnice atomových jader vázaných atomů

- **vazebný úhel** = úhel, který svírají 2 vazby vycházející z jednoho jádra

- jednoduchý odhad tvaru molekuly a velikosti vazebných úhlů je založený na představě **odpuování valenčních elektronových dvojic**

- jednoduchá kovalentní vazba představuje zhuštění elektronů na spojnici vázaných jader – protože se el. navzájem odpuují, tak jsou vazby vycházející z jednoho atomu orientovány tak, aby tato zhuštění byla co nejdále od sebe a vazebné úhly měly tak co největší hodnotu

- 2 vazebné elektronové páry – nejmenší energie odpovídá maximální vazebný úhel (180°) -> molekula je *lineární*

- 3 vazebné elektronové páry – atomová jádra jsou ve vrcholech rovnostranného trojúhelníku (v jeho středu je jedno jádro) – vazebný úhel je 120°

- některé molekuly (př. NH<sub>3</sub>) obsahuje ve valenční vrstvě centrálního atomu kromě vazebných el. párů i **volné (nevazebné) el. páry**

### 3) Vazba a struktura

- **metoda delokalizovaných molekulových orbitalů** – vychází z toho, že el. v molekulových orbitalech nejsou lokalizovány mezi dvojice atomů, ale jsou delokalizovány („rozprostřeny“) přes několik atomů – tím se liší klasické představě, že dva el. společně dvěma atomům odpovídají jedné chemické vazbě
- **metoda lokalizovaných molekulových orbitalů** – poskytuje názornější popis molekulové geometrie
  - používají se *hybridní orbitaly*, které jsou přizpůsobeny geometrii molekuly
  - **hybridní orbitaly** – získají se lineární kombinací (*hybridizací*) atomových orbitalů valenční vrstvy centrálního atomu
    - při výpočtu lokalizovaných molekulových orbitalů se hybridní atomové orbitaly centrálního atomu kombinují s atomovými orbitaly jiných atomů molekuly
  - **hybridizace:**
    - *type hybridizace:*
      - hybridizace sp (lineární neboli diagonální) - u tříatomových molekul
      - hybridizace sp<sup>2</sup>(trigonální)
      - hybridizace sp<sup>3</sup> (tetraedrická)
    - je to matematická metoda (ne reálný proces)
    - používají se at. orbitaly, které se příliš neliší energií
    - typ hybridizace se volí podle tvaru molekuly
    - hybridizací se nemění počet orbitalů
- **vaznost atomu** (neboli vaznost prvku) – je definována jako počet kovalentních vazeb, které z něho vycházejí
  - rozhoduje o ní snížení energie spojené s vytvořením daného počtu vazeb
  - pro určování vaznosti prvků 2. a 3. periody se používá **oktetové pravidlo** – zdůvodňuje stálost molekul tím, že vázané atomy sdílením elektronů nebývají relativně stálé konfigurace vzácného plynu
    - vytváří se tolik vazeb, aby vázané atomy měly právě tuto konfiguraci = **elektronový oktet**
  - k vazbě dochází tehdy, pokud vazebné účinky elektronů ve vazebných molekulových orbitalech nejsou kompenzovány obsazením protivazebných molekulových orbitalů
  - nelze vždy posuzovat jenom podle počtu atomových orbitalů obsazených jedním elektronem v jeho základním stavu
- **struktura složitějších molekul**
  - lineární – př. oxid uhličitý – všechny valenční elektrony atomu uhlíku se účastní vazby
  - lomená – př. oxid siřičitý – atom síry má volný elektronový pár
  - k mnohotvárnosti molekul význačně přispívá možnost řetězení atomů - důsledkem je existence izomerů (látky se stejným souhrnným vzorcem, ale lišícím se strukturou)