

CHEMICKÉ VÄZBY

Osnova prednášky

1. Chemická väzba
2. Klasické teórie chemickej väzby (iónová a kovalentná väzba)
3. Elektronegativita
4. Donorno-akceptorná väzba (koordinačná)
5. Hybridizácia
6. Teória molekulových orbitálov
7. Kovová väzba
8. Vodíková väzba
9. Van der Waalsove sily
10. Kontrolné otázky

1. Chemická väzba

- **chemická väzba** - vzájomné viazanie atómov do zložitejších útvarov (molekúl)
- zmeny stavu elektrónov vo vonkajších, tzv. *valenčných vrstvách* zlučujúcich sa atómov
- podstatou je prerozdelenie (redistribúcia) elektrónovej hustoty valenčných elektrónov v oblasti jadier dvoch alebo viacerých atómov
- nevyhnutnou podmienkou vzniku chemických väzieb je, aby novovytvorené atómové sústavy mali v základnom stave nižší obsah energie vzhľadom na energiu voľných atómov.

- *Dĺžka väzby* – vzdialenosť medzi stredmi dvoch viazaných atómov v molekule – závisí od atómového polomeru a od násobnosti väzby.
- Stabilita molekuly sa dá kvantitatívne merať podľa veľkosti *disociačnej väzbovej energie* – energie potrebnej na rozrušenie 1 mólu dvojatómových plynných molekúl.

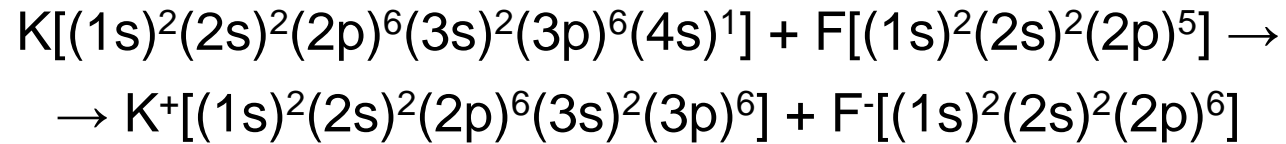
2. KLASICKÉ TEÓRIE CHEMICKEJ VÄZBY

IÓNOVÁ VÄZBA

- tendencia prvkov nadobudnúť elektrónové konfigurácie vzácnych plynov (**Kossel**)
- atóm, ktorý stráca elektróny, sa stáva kladne nabitým iónom (katiónom) a atóm, ktorý elektróny priberá, sa stáva záporne nabitým iónom (aniónom). Takto vzniknutá väzba sa nazýva **iónová** alebo **elektrovalentná väzba**

- *Ionizačná energia* – práca potrebná na odtrhnutie e^- z obalu, vzniká katión.
- *Elektrónová afinita* – energia uvoľnená pri pripojení e^- k atómu, vznik aniónu.
- *Elektronegativita* – schopnosť priťahovať a viazať valenčné e^- iných prvkov, jej mierou je aritmetický priemer ionizačnej energie a elektrónovej afinity.
- Zmenou atómu na ión sa zmení jeho veľkosť – anión je väčší, katión je menší.

- príklad: zlučovanie draslíka s fluórom



- počet elementárnych nábojov, pripadajúcich na ión, určuje jeho iónové mocenstvo, čiže nábojové číslo iónu. Napr. v KF je iónové mocenstvo draslíka +1 a fluóru -1, v CaF₂ je iónové mocenstvo vápnika +2 a fluóru -1.
- Kosselova teória - obmedzená len na katióny s vonkajšími elektrónovými obalmi, aké majú vzácne plyny (napr. Na⁺, Ca₂⁺, Al₃⁺)

KLASICKÉ TEÓRIE CHEMICKEJ VÄZBY

KOVALENTNÁ VÄZBA

- **Lewis** - niektoré elektróny môžu patriť obidvom atómom tvoriacim väzbu. Pri vzniku takejto **kovalentnej väzby** dva pôvodne nespárené elektróny vytvoria elektrónový pár, ktorý je spoločný obidvom viazaným atómom, okolo ktorých tak vzniká elektrónová konfigurácia atómu vzácneho plynu (napr. Cl-Cl)

Kovalentná väzba

- okrem jednoduchej kovalentnej väzby môžu zdieľaním viacerých elektrónových párov vznikáť aj väzby násobné a to dvojité a trojité ($O=O$, $N\equiv N$)

Polarita kovalentnej väzby

- **Nepolárna** kovalentná väzba – dva rovnaké atómy, napr. H_2 , Cl_2 , N_2 , hustota elektrónového náboja je rozložená súmerne vzhľadom na jadrá oboch atómov,
- **Polárna** kovalentná väzba spája rôzne atómy, elektrónový pár sa posúva k atómu, ktorý ho viacej priťahuje, je elektronegatívnejší ($\text{H}^{\delta+} \rightarrow \text{Cl}^{\delta-}$).

3. ELEKTRONEGATIVITA (x)

- každému prvku možno prisúdiť určitú hodnotu x tak, že pre atómy dvoch ľubovoľných prvkov A a B približne platí

$$x_A - x_B = \sqrt{\Delta_{A-B}}$$

- kde Δ_{A-B} je rozdiel medzi energiou jednoduchej väzby A-B a energiou tej istej väzby v prípade, že je čisto kovalentná nepolárna ($\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$)
- najelektronegatívnejším prvkom je F, po ňom nasleduje O, Cl, atď. Najmenej elektronegatívnymi prvkami sú Cs, Rb a K.

- *Elektronegativita* - schopnosť kovalentne viazaného atómu priťahovať väzbový elektrónový pár. Neexistuje presná hranica medzi extrémne polárnou kovalentnou väzbou a iónovou väzbou, ale rozdiel elektronegativít atómov viazaných iónovou väzbou je väčší ako 1,7.

4. Donorno-akceptorná väzba (koordináčná)

- - atóm, ktorý má voľný elektrónový pár (**donor** elektrónov), ho môže poskytnúť na kovalentnú väzbu s iným atómom, ktorý má vo vonkajšej vrstve prázdny orbitál (**akceptor** elektrónov)



5. Hybridizácia

- Umožňuje vysvetlenie väzieb v polyatómových molekulách.
- Podstata *hybridizácie* je v tom, že sa vhodnými lineárnymi kombináciami pôvodných atómových funkcií (orbitálov) vytvoria nové atómové funkcie, ktoré sa označujú ako *hybridné orbitály* (HO).
- Jednoduché väzby: Hybridizácia: sp (180°) – BeCl_2 , sp^2 (120°) – BF_3 , sp^3 ($109^\circ28'$) – CH_4 ...

- Násobné väzby: etylén (C_2H_4 etén) – dva typy kovalentných väzieb,
- **σ -väzba** (prekrývanie orbitálov s-s, s-p a p-p), elektrónová hustota sústredená medzi atómové jadrá,
- **π -väzba** (prekrývanie orbitálov lokalizovaných kolmo na spojnicu jadier dvoch atómov p-p, p-d, d-d), elektrónová hustota je nad a pod rovinou jadier, C_2H_4 – *hybridizácia sp^2* , planárna molekula, medzi $C=C$ jedna σ a jedna π väzba.
- Acetylén (C_2H_2 etín) – *hybridizácia sp* , lineárna molekula, medzi $C\equiv C$ jedna σ a dve π väzby.

HYBRIDIZÁCIA

- možno ju aplikovať len na atómy viazané v molekule, nie na izolované,
- zmiešanie najmenej dvoch neekvivalentných atómových orbitálov (AO),
- počet vzniknutých HO je ekvivalentný počtu AO zapájajúcich sa do hybridizácie,
- všetky HO sú ekvivalentné, líšia sa len orientáciou v priestore,
- hybridizácia si vyžaduje dodanie energie, ale túto potrebu kryje tvorba väzieb,
- **výhody hybridizácie** – možnosť tvorby viacerých väzieb, väzby sú pevnejšie a stabilnejšie

Vznik σ - a π - väzieb

- **σ -väzba** sa najčastejšie tvorí prekrývaním orbitálov s-s, s-p a p-p
- **π -väzba**, vzniká prekrývaním orbitálov lokalizovaných kolmo na spojnicu jadier dvoch atómov (p-p, p-d, prípadne d-d.)

6. Teória molekulových orbitálov

- Podobne ako v atóme existujú rôzne atómové orbitály, podľa tejto teórie jestvujú v molekule **molekulové orbitály**, ktoré sú však na rozdiel od atómových orbitálov *viaccentrové*, t.j. elektróny, ktoré obsadzujú tieto orbitály, pohybujú sa v poli jadier niekoľkých atómov.

- Pre obsadzovanie jednotlivých molekulových orbitálov elektrónmi platia tie isté pravidlá, ako v prípade atómových orbitálov:
 1. molekulové orbitály sa zaplňajú postupne v tom poradí, v akom sa zvyšuje ich energia,
 2. na každý molekulový orbitál môžu vstúpiť podľa Pauliho princípu dva elektróny s opačnými spinmi.
- *Metóda LCAO* -molekulový orbitál možno opísať lineárnou kombináciou atómových funkcií, čiže orbitálov, prekrývajúcich sa pri vzniku väzby.

7. Kovová väzba

- priestorová mriežka, ktorej uzly sú obsadené katiónmi a v medzerách medzi nimi sa neusporiadane pohybujú odštiepené valenčné elektróny, tzv. *elektrónový plyn*. Elektróny majú prakticky úplnú voľnosť pohybu vo vnútri celého kryštálu, nemôžu sa ale bez vonkajšieho zásahu vzdialiť za jeho povrch.
- *novšie teórie* - extrémny prípad delokalizovanej väzby

8. VODÍKOVÁ VÄZBA

- interakcia medzi dipólmi , t.j. medzi vodíkovým atómom v polárnej väzbe O–H alebo N–H a elektronegatívnymi atómami, O, F alebo N, t.j. elektrostatické priťahovanie. Môže byť intermolekulová alebo intramolekulová. Energia vodíkovej väzby je $10\text{-}40 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$.
- Schematické znázornenie:
bodkami X–H \cdots Y

9. Van der Waalsove sily

- slabšie ako kovalentné väzby.
- Interakcia medzi:
 - a) polárnymi molekulami (vzájomná orientácia dipólov),
 - b) polárnymi a nepolárnymi molekulami (vznik indukovaného dipólu),
 - c) nepolárnymi molekulami – disperzné sily, dôsledok ustavičného pohybu elektrónov okolo jadier, vzrastajú so zväčšovaním sa molekúl.

10. Kontrolné otázky

1. *Definujte a na príklade vysvetlite podstatu a rozdiel iónovej a kovalentnej väzby.*
2. *Vysvetlite podstatu a význam elektronegativity.*
3. *Aký je rozdiel medzi nepolárnou a polárnou kovalentnou väzbou? Uved'te príklady.*
4. *Vysvetlite vznik hybridizácie, jej výhody, uved'te príklady.*
5. *Teória molekulových orbitálov – princíp.*
6. *Definujte a na príklade vysvetlite podstatu kovovej väzby a medzimolekulovej väzby vodíkovým mostíkom.*
7. *Vysvetlite podstatu van der Waalsových síl.*