

SEC III	Chemická väzba
SEC III.1	Chemická väzba

Cieľové požiadavky

Obsahový štandard: Chemická väzba, väzbová (disociačná) energia, dĺžka väzby. Väzbový elektrónový pár, neväzbový (voľný) elektrónový pár. Polarita väzby, väzbový uhol. Kovalentná väzba, nepolárna väzba, polárna väzba, iónová väzba, jednoduchá väzba, násobná väzba (dvojitá, trojitá, σ väzba, π väzba. Koordináčna, akceptor, donor. Vodíková väzba, medzimolekulové sily. Kovová väzba.

Výkonový štandard:

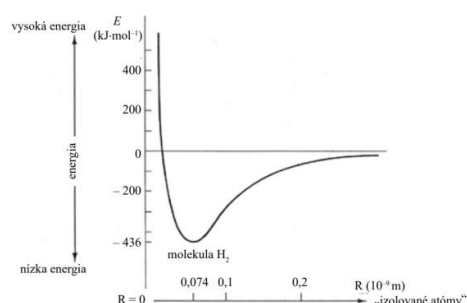
- Vysvetliť energetické zmeny spojené so vznikom a zánikom väzby v molekule vodíka (väzbová energia, disociačná energia, dĺžka väzby).
- Určiť väzbovosť atómu prvku v molekule, porovnať s teoretickým predpokladom z PSP.
- Porovnať polaritu kovalentných väzieb v molekulách (rozdiel elektronegativít).
- Vysvetliť princíp vzniku kovalentnej väzby, polárnej, nepolárnej, iónovej,
- Vysvetliť princíp vzniku koordináčnej väzby na vzniku amónneho a oxóniového katiónu.
- Uviesť príklady molekúl, v ktorých sa nachádzajú jednoduché, dvojitá alebo trojitá väzby (H_2 , O_2 , N_2).
- Určiť typ chemickej väzby na základe rozdielu hodnôt elektronegativít viazucich sa atómov prvkov.
- Vysvetliť vznik iónovej väzby v zlúčenine NaCl.

Chemická väzba

- **Vzájomné silové pôsobenie(interakcia) medzi atómami v molekule**
- Pri približovaní 2 jadier dochádza k odpudivým a príťažlivým silám, pri chemickej väzbe sú sily v rovnováhe a molekula má najnižšiu vnútornú energiu (najstabilnejšia)
- Vznik väzby- energia sa uvoľňuje (väzbová), zánik väzby- energia sa spotrebuje (disociačná)
- Dochádza k spárovaniu nespárených elektrónov
- Prekryvom atómových orbitálov vznikajú molekulové orbitály

Energetické zmeny spojené so vznikom a zánikom väzby v molekule vodíka

- priblížením jadier dochádza k prieniku a spojeniu elektrónových obalov, môže dochádzať k výmene elektrónov (elektróny sú lokalizované medzi jadrami, na spojnici, väzba je pevnejšia)
- Elektróny sú priťahované jadrami, zvýši sa elekt. hustota medzi jadrami
- Jadrá a elektróny sa navzájom priťahujú aj odpudzujú (závisí to od medzijadrovej vzdialenosti)
 1. vzdialenosti malé- prevláda odpudzovanie
 2. vzdialenosti väčšie- prevláda priťahovanie
 3. r_0 vzdialenosť
 - priťahovanie a odpudzovanie v rovnováhe
 - pri atómovoch vodíka $r_0 = 0,074 \text{ nm}$
 - molekula stabilná s minimálnou energiou (pri zmene vzdialenosti potrebné dodať energiu)
 - dĺžka väzby



Dôležité pojmy

Disociačná energia

- Energia potrebná na rozštiepenie väzby (kJ/mol)

Väzbová energia

- Energia, ktorá sa uvoľní pri vzniku väzby (čím vyššia, tým väzba pevnejšia)
- Rovnako veľká ako disociačná, no opačné znamienko
- Rozdiel energie voľných a viazaných atómov

Elektronegativita (X)

- miera schopnosti kovalentne viazaného atómu priťahovať väzbový elektrónový pár
- $X = \text{konšt} (I+A)$, bezrozmerné číslo
- V PSP smerom hore a napravo stúpa

Ionizačná energia (I)

- Energia potrebná na odtrhnutie elektrónu z atómu alebo iónu v plynnom stave (vznik katiónu)
- Prvky ľahko tvoriace katióny majú nízku ionizačnú energiu, napr. alkalické kovy
- V PSP smerom napravo a hore stúpa

Elektrónová afinita (A)

- Energia, ktorá sa uvoľní pri prijatí elektrónu atómom v plynnom stave (vznik aniónu)
- Prvky ľahko tvoriace anióny majú vysokú afinitu, napr. halogény
- V PSP smerom napravo hore stúpa

Väzbovosť

- počet kovalentných väzieb, ktorými sa viaže atóm v zlúčenine
- väzbovosť atómov podľa oktétového pravidla
- závisí od počtu nespárených elektrónov na valenčnej vrstve
- elektróny väzbového páru sa započítavajú do valenčnej vrstvy oboj viazaným atómom

Oktétovo pravidlo

- snaha väčšiny prvkov dosiahnuť na valenčnej vrstve elektrónovú konfiguráciu najbližšieho vzácneho plynu (8 elektrónov na valenčnej vrstve)
- neplatí pri BeF_2 , BF_3 , molekuly s nepárnym počtom elektrónov NO, niektoré zlúčeniny S, P, Cl (podieľajú sa orbitály d)

Väzbový uhol

- uhol medzi väzbami vychádzajúci z toho istého atómu
- ak jadrá atómov v jednej rovine = rovinná molekula (BeCl_2 , CO_2 , H_2)
- 3 a viac atómov do priestoru = lomená molekula, odpudzovanie väzbových a neväzbových elektrónov, molekula sa deformuje ($\text{NH}_3 = 107^\circ$, $\text{H}_2\text{O} = 104,45^\circ$, $\text{CH}_4 = 109^\circ$)

Dipól

- Nerovnomerné rozmiestnenie nábojov medzi atómami v molekule
- Vznik záporného a kladného iónu

- Skladaním dipólov väzieb v molekule vzniká výsledný dipólový moment, ktorý vplýva na polaritu molekuly

Dĺžka väzby

- **Vzdialenosť dvoch navzájom viazaných jadier** (*odpudivé sily sa rovnajú príťažlivým, systém má minimálnu energiu*)- medzijadrová vzdialenosť r_0

Polarita väzba

- **Posun väzbového elektrónového páru k elektronegätivnejšiemu atómu**
- Miera polarity daná rozdielom elektronegätivit

Typy chemických väzieb

A. vnútromolekulové	B. medzimolekulové
1. kovalentná	1.vodíkové
2. iónová	2.van der Waalsovú
3. kovová	
4. koordinačná	

B. Vnútromolekulové sily

1.Kovalentná väzba

- **medzimolekulová väzba medzi atómami s rozdielom elektronegätivit**
- $\Delta x < 1,7$
- každý z atómov sa podieľa na väzbe jedným nespáreným elektrónom, elektrónový pár spoločný pre oba atómy
- smerový charakter
- je lokalizovaná



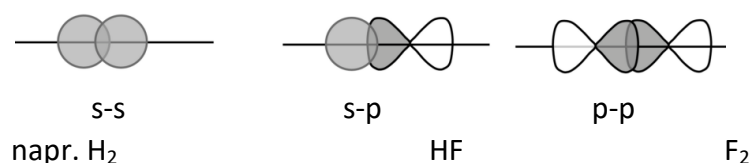
Rozdelenie kovalentnej väzby

I. Podľa počtu väzbových párov (prekryvu valenčných orbitálov)	
a. σ väzba	b. π väzba
II. Podľa polarity	
a. nepolárna	b. polárna

I.Podľa počtu väzbových párov (prekryvu valenčných orbitálov)

a. σ väzba

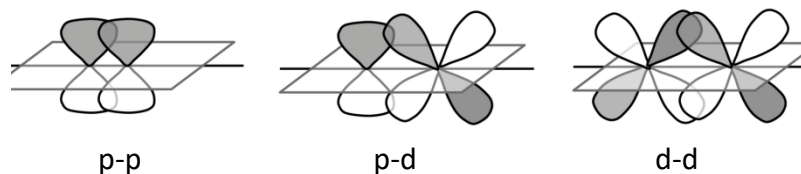
- vzniká prekryvom orbitálov s-s/ s-p/ p-p na spojnici jadier
- elektrónová hustota najväčšia na spojnici jadier



b. π väzba

- vzniká prekrytím p-p/p-d/ d-d orbitálov mimo spojnice jadier

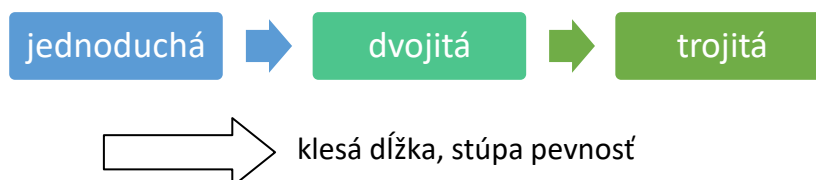
- elektrónové hustota najväčšia mimo spojnice jadier



A. **Jednoduchá**- 1x σ väzba, jeden väzbový pár (napr. CH_4)

B. **Násobná**

- Dvojitá**- 1x σ a 1x π väzba, dva elektrónové páry (napr. $CH_2=CH_2$)
- Trojité**- 1x σ a 2x π väzba, tri elektrónové páry (napr. $HC\equiv CH$)



II. Podľa polarít

a. Nepochárna

- Rozdiel elektronegítvít atómov $\Delta x \leq 0,4$
- Spoločný elektrónový pár je lokalizovaný presne medzi atómami**
- Bez elektrického dipólu, náboje zanedbateľné
- Napr. H_2, CH_4, \dots

b. Polárna

- Rozdiel elektronegítvít atómov $0,4 < \Delta x < 1,7$
- Spoločný elektrónový pár je posunutý k elektronegítvnejšiemu prvku**
- vzniká elektrický dipól a čiastkové (parciálne) náboje
 - záporný čiastkový náboj δ^-** - na prvku s väčšou elektronegítvitou
 - kladný čiastkový náboj δ^+** - na prvku s nižšou elektronegítvitou
- Napr. H_2O, HCl

2. Iónová väzba

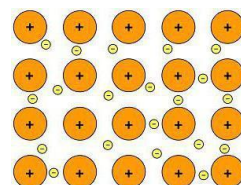
- Medzimolekulová väzba medzi atómami s rozdielom elektronegítvít $\Delta x \geq 1,7$**
- Posun spoločného elektrónového páru k elektronegítvnejšiemu prvku
- Vznik iónov** s príťažlivými elektrostatickými silami

$A + B \rightarrow A^+ + B^-$
- Nemá smerový charakter**
- vznikajú pravidelné trojrozmerné štruktúry navonok elektroneutrálne, s pravidelne sa opakujúcimi kationmi a aniónmi- **iónové kryštály**
- hraničný typ kovalentnej väzby
- Mimoriadne pevná

- Napr. NaCl, KCl

3. Kovová väzba

- Väzba medzi kovovými prvkami s nízkou elektronegativitou (*ľahko odovzdávajú elektróny*)
- Vznik trojrozmerného systému s pravidelne usporiadanými kationmi a voľne pohyblivými elektrónmi
- Valenčné elektróny sú spoločne zdieľané všetkými kationmi- vznik elektrónového plynu (*elektróny sú pohyblivé*)
- Prekryvom atómových orbitálov vznikajú elektrónové pásy, v ktorých sa pohybujú elektróny
- Nemá smerový charakter ani násobný charakter
- Priestorovo delokalizovaná (*tvorená všetkými atómami*) kovalentná väzba
- Čím viac elektrónov tvorí kovovú väzby, tým väzba pevnejšia
- napr. kovy a zliatiny (Li, Fe, Al, bronz, mosadz, Ag, Cu)...



4. Koordináčná (donorno- akceptorná)

- **podtyp kovalentnej väzby** (*líši sa spôsobom vzniku, nie vlastnosťami*), kde jeden z atómov poskytuje oba väzbové elektróny
 - Atómy rovnako zdieľajú väzbový elektrónový pár
 - A. **donor/ darca-ligand**- poskytuje celý elektrónový pár (*atómy s voľnými elektrónovými párami*)
 - B. **akceptor/príjemca**- centrálny atóm poskytuje voľný neobsadený orbitál (*D-prvky*)
 - Všetky väzby v koordináčnej zlúčenine sú rovnocenné
- $$A + B \rightarrow A-B$$
- Napr. zlúčeniny D- prvkov, NH_4^+ a H_3O^+ , modrá skalica v o vode

B. Medzimolekulové interakcie

1. van der Waalové sily

- Medzimolekulové sily elektrostatického charakteru
- **Vzájomné pôsobenie medzi čiastkovými nábojmi na atómoch v molekulách** (*dočasnými nábojom(dipólmi) v nepolárnych molekulách na atómoch alebo trvalými dipólmi v polárnych molekulách*)
- Energia väzby 100x menšia ako pri kovalentnej väzbe
- Napr. O_2 , N_2 , H_2 , HCl, HBr, H_2S , NaCl... H_2O , O_2 ... H_2O , tvorba molekulových a vrstevnatých kryštálov

2.Vodíková väzba(vodíkové mostíky)

- **Medzimolekulové väzby medzi zlúčeninami vodíka viazaného kovalentnou väzbou na vysoko elektronegatívny prvok (N, O, F) a voľným elektrónovým párom N, O, F susednej molekuly**
- Medzi kovalentnou a van der Waalsovými väzbami
- hodnota energie 10x menej ako kovalentná
- *napr. HF, H₂O, NH₃, amíny, alkoholy, karboxylové kyseliny, NK, tvorba molekulových kryštálov*