

SEC III	Chemická väzba
SEC III.3	Hybridizácia a tvar molekúl

Cieľové požiadavky

Obsahový štandard: Polarita molekuly. Dipól. Väzbový uhol

Hybridizácia

- Teória vysvetľujúca vznik väzieb a tvar molekúl (*ťažko použiteľná pri zložitých molekulách*)

Podstata:

- vznik väzby lineárnou kombináciou energeticky blízkyh atómových orbitálov valenčnej vrstvy
- vznik energeticky rovnocenných **hybridných orbitálov** (*zúčastňujú sa tvorby kovalentných väzieb*)
- Počet hybridných orbitálov = počtu pôvodných atómových orbitálov (*1x s a 2x p= 3 hybridné orbitály*)
- Hybridné orbitály vznikajú iba lineárnou kombináciou energeticky blízkyh orbitálov (*áno 2s a 2p, nie 1s 2p*)
- Hybridné orbitály majú iné tvary ako pôvodné atómové orbitály
- Na vznik hybridných orbitálov potrebné excitované stavy
- Kovalentné väzby pevnejšie (*lepší prekryv ako u atómových orbitálov*)

Typy hybridizácie

a. ekvivalentná	b. neekvivalentná
na hybridizácii sa podieľajú iba σ väzby	hybridizácie sa zúčastňujú aj voľné elektrónové páry
	<ul style="list-style-type: none"> • Voľný elektrónový pár silne odpudzuje väzbové elektrónové páry • Dochádza k deformácii základného tvaru a zmenšeniu väzbového uhla

Typy hybridizácie

typy hybridizácie	z	základný tvar molekuly
sp	1,2	lineárny
sp ²	3	trigonálny (<i>rovnostranný trojuholník</i>)
sp ³	4	tetraéder (<i>štvorsten</i>)
sp ³ d	5	trojboká bipyramída
sp ³ d ²	6	oktaéder (<i>osemsten</i>)

a= počet sigma väzieb, b= počet voľných elektrónových párov, z= celkový počet elektrónových párov, ktoré ovplyvňujú tvar molekuly, s- počet s orbitálov, p- počet p orbitálov, d-počet d-orbitálov

Tvar molekuly

- Výsledok vzájomného odpudzovania elektrónových párov valenčnej vrstvy – *väzbových aj neväzbových elektrónov*
- Elektróny zaujmú miesto s najmenším možným vzájomným odpudzovaním (*najväčšie väzbové uhly*)
- Odpudzovanie voľných a väzbových párov väčšie ako medzi väzbovými párami
- Čím väčší počet voľných elektrónových párov, tým menší väzbový uhol

$$z = a + b$$

z- celkový počet elektrónových párov, ktoré ovplyvňujú tvar molekuly

a- počet sigma väzieb

b- počet voľných elektrónových párov

Polarita molekuly

Dipólový moment

- vektorová fyzikálna veličina (*má veľkosť a smer orientovaný vždy od δ^- k δ^+*)
- symbol μ (ní)
- jednotka **C. m** (*kulombmeter*) alebo **D** (*debye*)1D=3,34.10⁻³⁰ C.m

charakteristika

- Kvantitatívne vyjadrenie miery polarity
- Určuje polaritu danej chemickej väzby a celej molekuly
- Súčin vzdialenosti ťažísk nábojov a čiastkového náboja na atóme
- Výsledný dipólový moment viac atómových molekúl je daný súčtom dipólových momentov všetkých väzieb v molekule

Vzorec:

$$\mu = l \cdot Q$$

l- vzdialenosť ťažísk čiastkových nábojov viazaných atómov

Q- čiastkový elektrický náboj na danom atóme, hodnoty δ^- a δ^+ rovnaké líšia sa iba znamienkom)

Polarita molekuly

a. nepolárna	b. polárna
$\mu = 0$	$\mu \neq 0$

Príklady:

a. HCl

- polárna väzba H-Cl- vznik dipólov
- 1 polárna väzba= celá **molekula polárna**

$$\mu \neq 0$$

b. BeCl₂, CO₂

- Väzba Be-Cl, C-O polárna- vznik dipólov
- Rovnako veľké dipólové momenty, ale opačne orientované = **nepolárna molekula**
(aj napriek dvom polárnym väzbám)

$$\mu_1 + \mu_2 = 0$$

c. H₂O

- Väzba O-H polárna, vznik dipólov
- Rovnako veľké dipólové momenty inak orientované, súčet cez vektorový rovnobežník, prirátava sa aj dipólový moment voľných elektrónových párov=
polárna molekula

$$\mu_1 + \mu_2 \neq 0$$