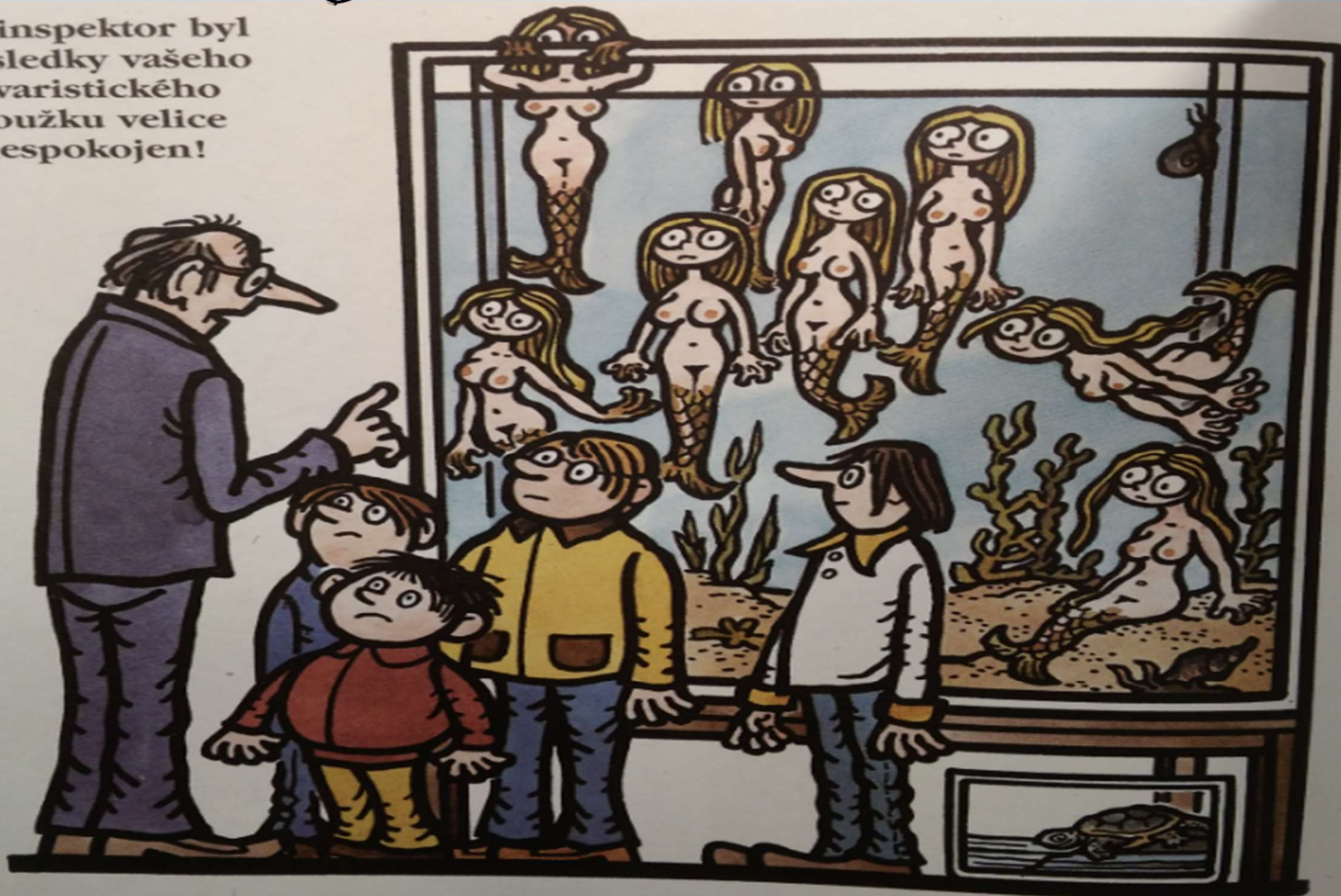


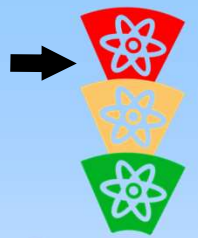
Pan inspektor byl  
s výsledky vašeho  
akvaristického  
kroužku velice  
nespokojen!

Jakub Wiener

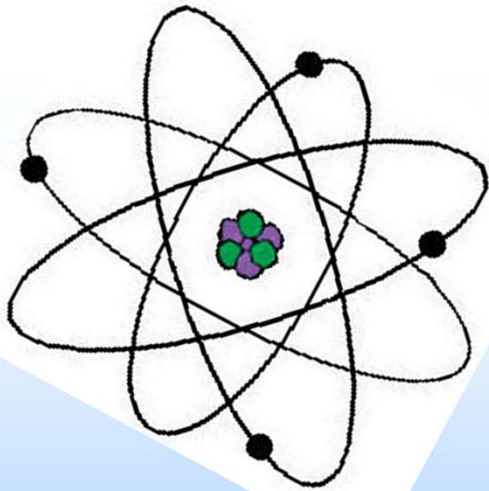




# Interakce mezi atomy

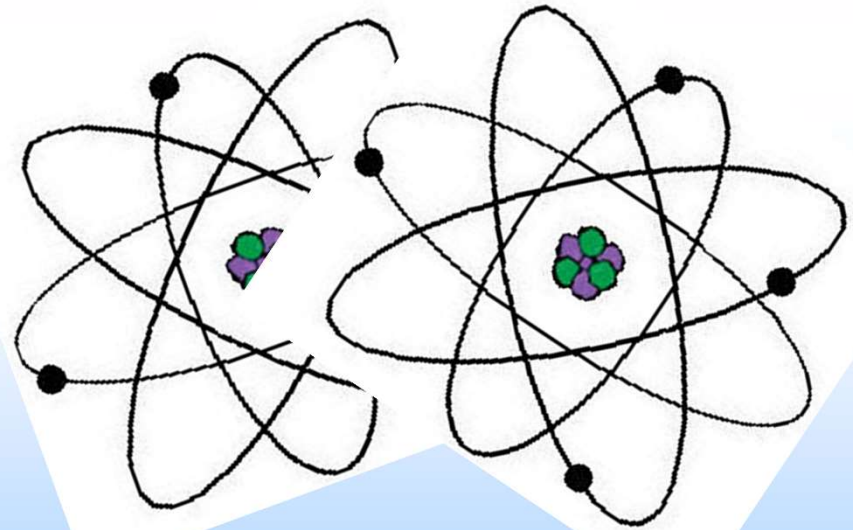


Atomy mohou existovat samostatně, nebo se vzájemně spojovat



**atom**

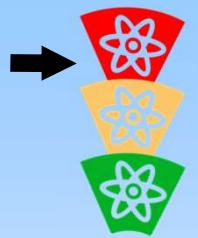
Existují atomy, které  
nesloučíte ani násilím!



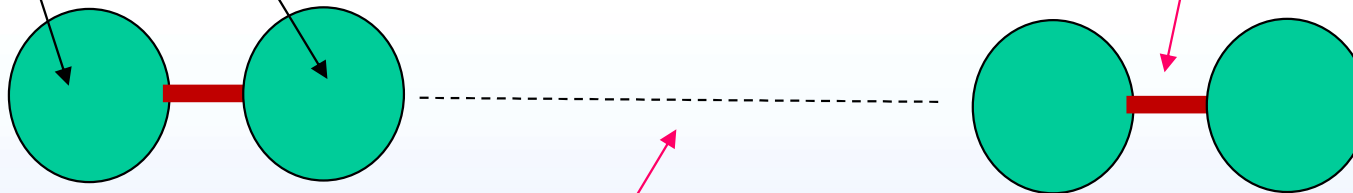
**molekula**



# Interakce mezi atomy



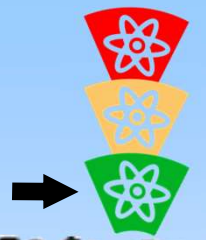
Mezi **atomy** může vzniknout pevná chemická vazba – tím vznikají molekuly (molekula je tvořena atomy spojenými chemickou vazbou)



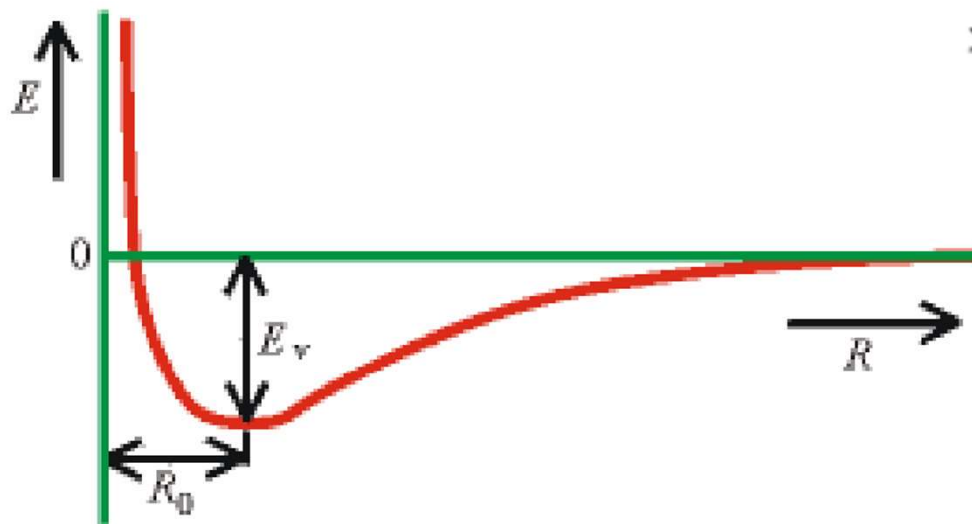
Mezi atomy nebo molekulami působí také slabší síly - slabé mezimolekulové interakce – tím dochází k shlukování částic (kapaliny, pevné látky)



# Graf potenciální energie

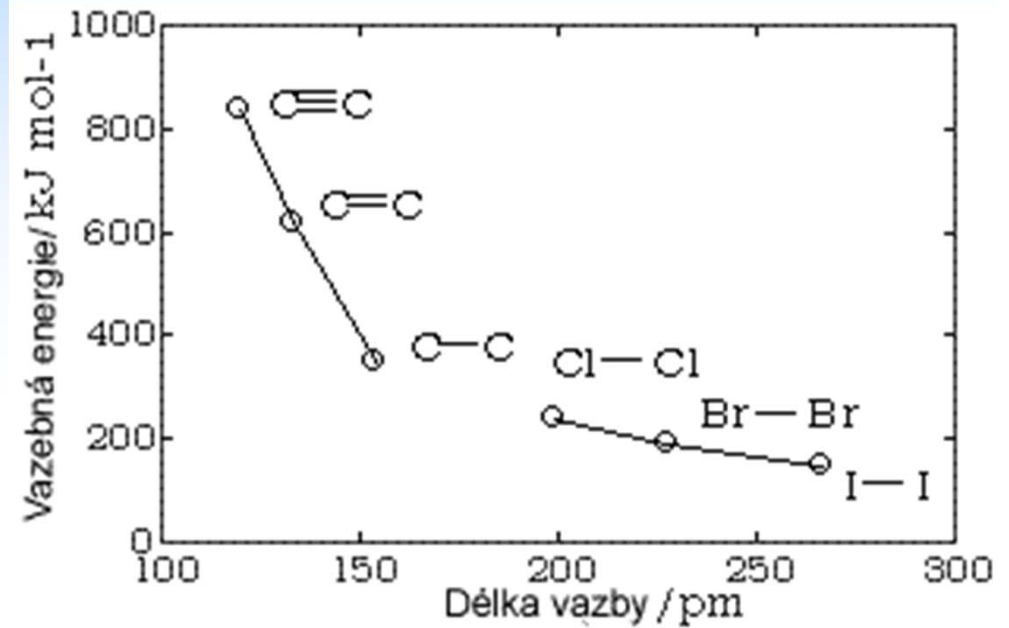


**Pevnost = molární vazebná energie = stabilita vazby**  
(čím je vyšší, tím více energie musíme dodat k jejímu přerušení)



Interakční energie dvouatomové molekuly

Závislost interakční energie (potenciálu) dvou atomů na jejich vzdálenosti. Vzdálenost  $R_0$  představuje délku vazby v dvouatomové molekule a  $E_v$  její vazebnou energii.

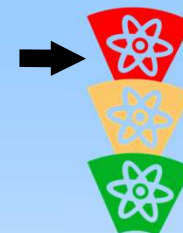


**Délka a pevnost vazby**

$$\text{pm} = 10^{-12} \text{ m}$$

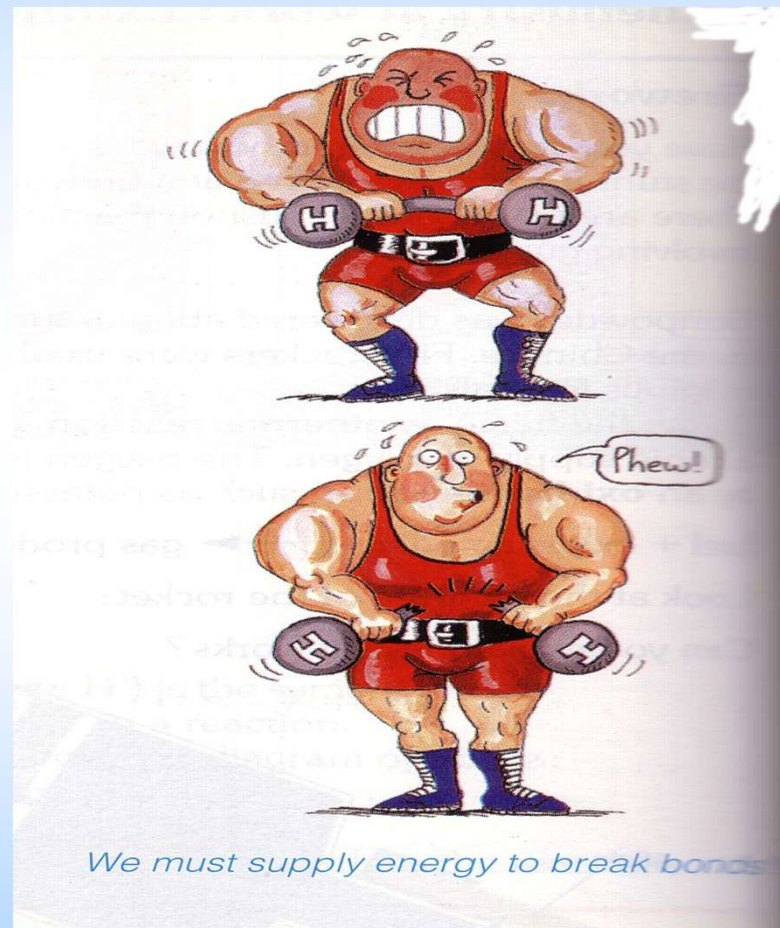


# Pevnost (energie) vazby



**Vyjadřuje se jako energie potřebná k jejímu přerušení (rozštěpení)**

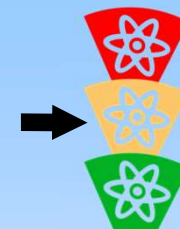
- je stejné velikosti jako energie uvolněná při vzniku téže vazby
- udává se vazebná energie vztažená na 1 mol vazby, tj. **molární vazebná energie** v jednotkách **J . mol<sup>-1</sup>** respektive **kJ . mol<sup>-1</sup>**



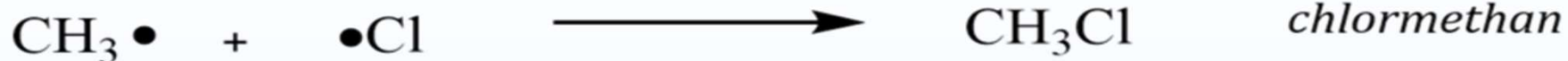
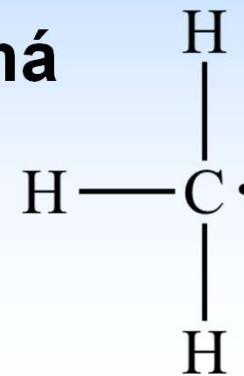
**Stabilní vazba se vytvoří jedině tehdy, dojde-li při jejím vzniku k uvolnění energie**



# Radikály



Radikál je v chemii vysoce reaktivní částice, která má jeden nebo více nepárových elektronů

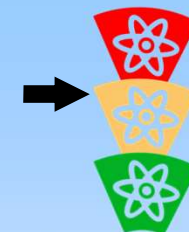


**Nevázaný elektron radikálu se v chemickém zápisu obvykle označuje tečkou  $\text{CH}_3\cdot$**

*„Chemii máme v rodině,“ chlubí se Pepíček, „můj tatínek je radikál!“*



# Chemické vazby



***Chemickou vazbu* - tvoří společné valenční („povrchové“) elektrony jednotlivých atomů**

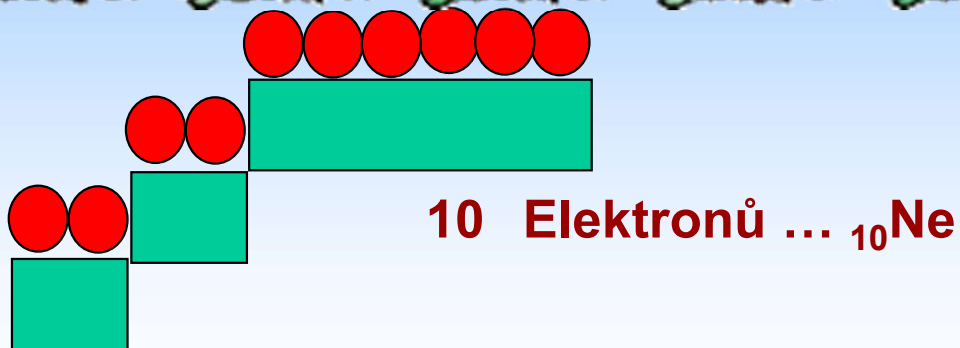
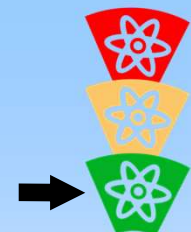
**Vytvoří se vazebný elektronový pár, který leží v tzv. molekulovém orbitalu**

## **Podmínky vzniku vazby:**

- atomy musí mít dostatečnou energii
- musí se přiblížit dostatečně blízko, aby došlo k překrytí jejich valenčních orbitalů
- elektrony musí mít vhodné prostorové uspořádání

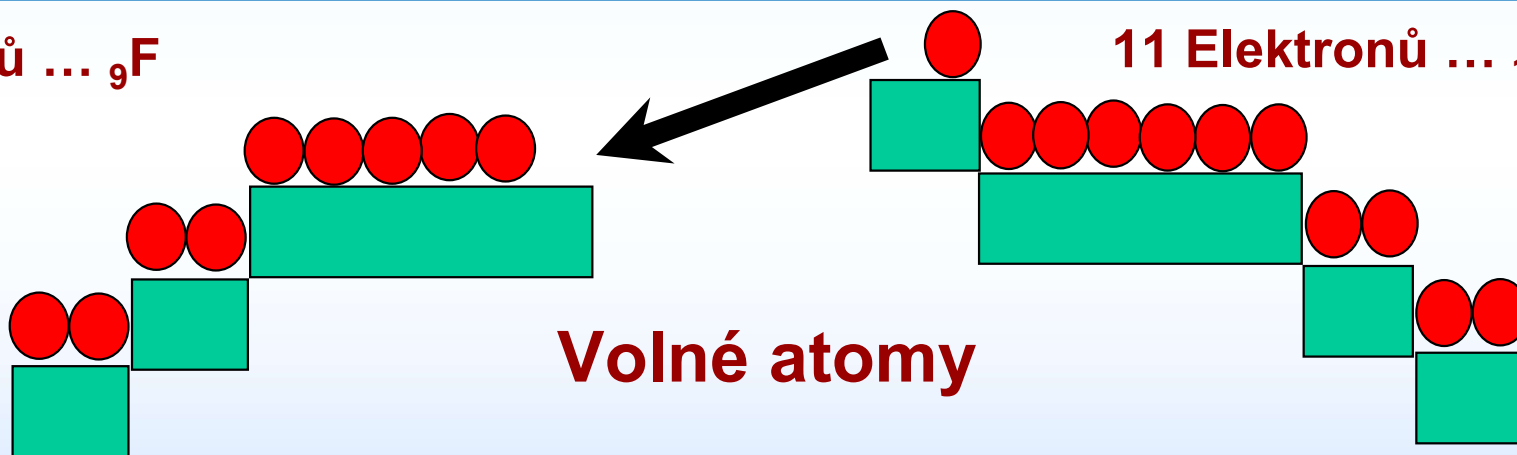


# Chemické vazby



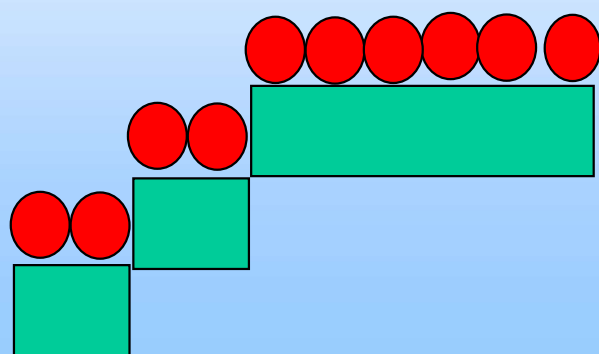
9 Elektronů ...  $_9\text{F}$

11 Elektronů ...  $_{11}\text{Na}$

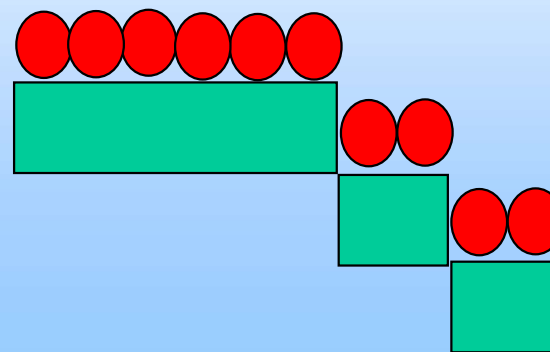


10 Elektronů ...  $_9\text{F}^-$

10 Elektronů ...  $_{11}\text{Na}^+$



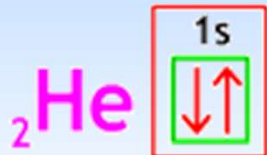
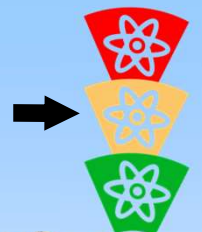
$\text{NaF}$



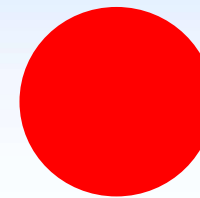
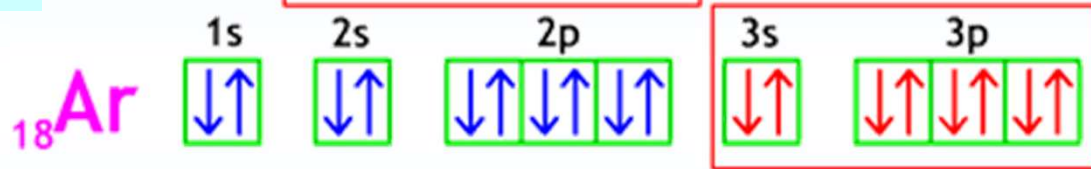




# Chemické vazby



Vzácné plyny mají zcela zaplněné valenční orbitály



Ideální zaplnění orbitalu

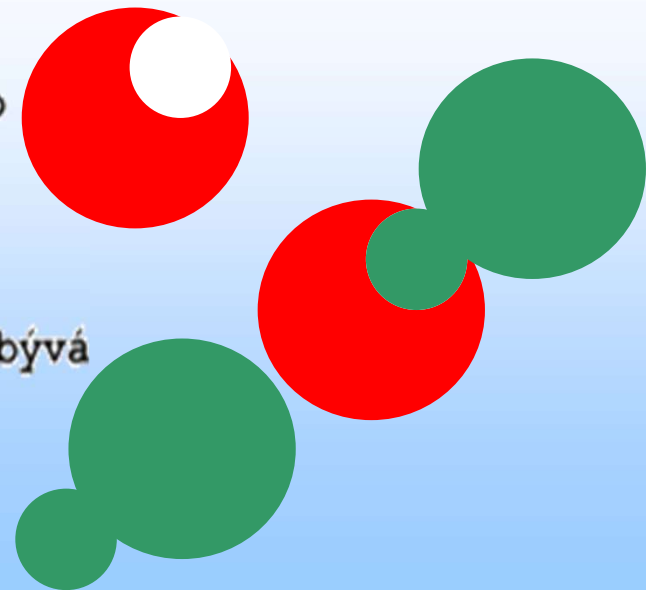


Fluoru chybí do elektronového

oktetu jeden elektron,

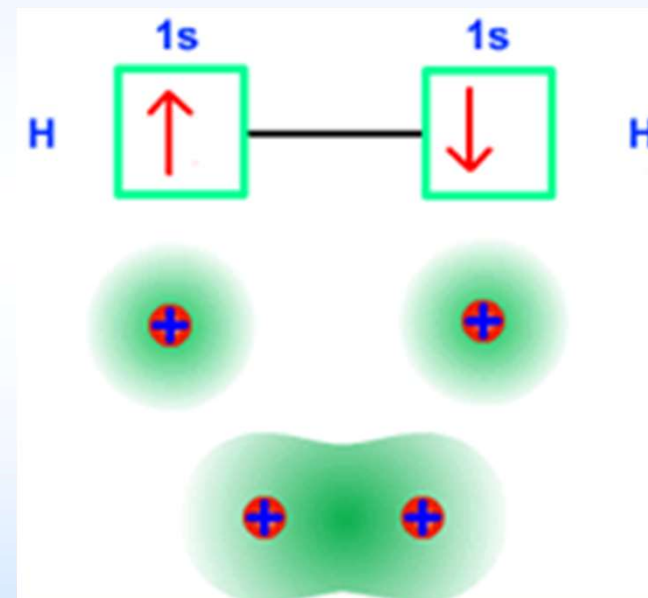
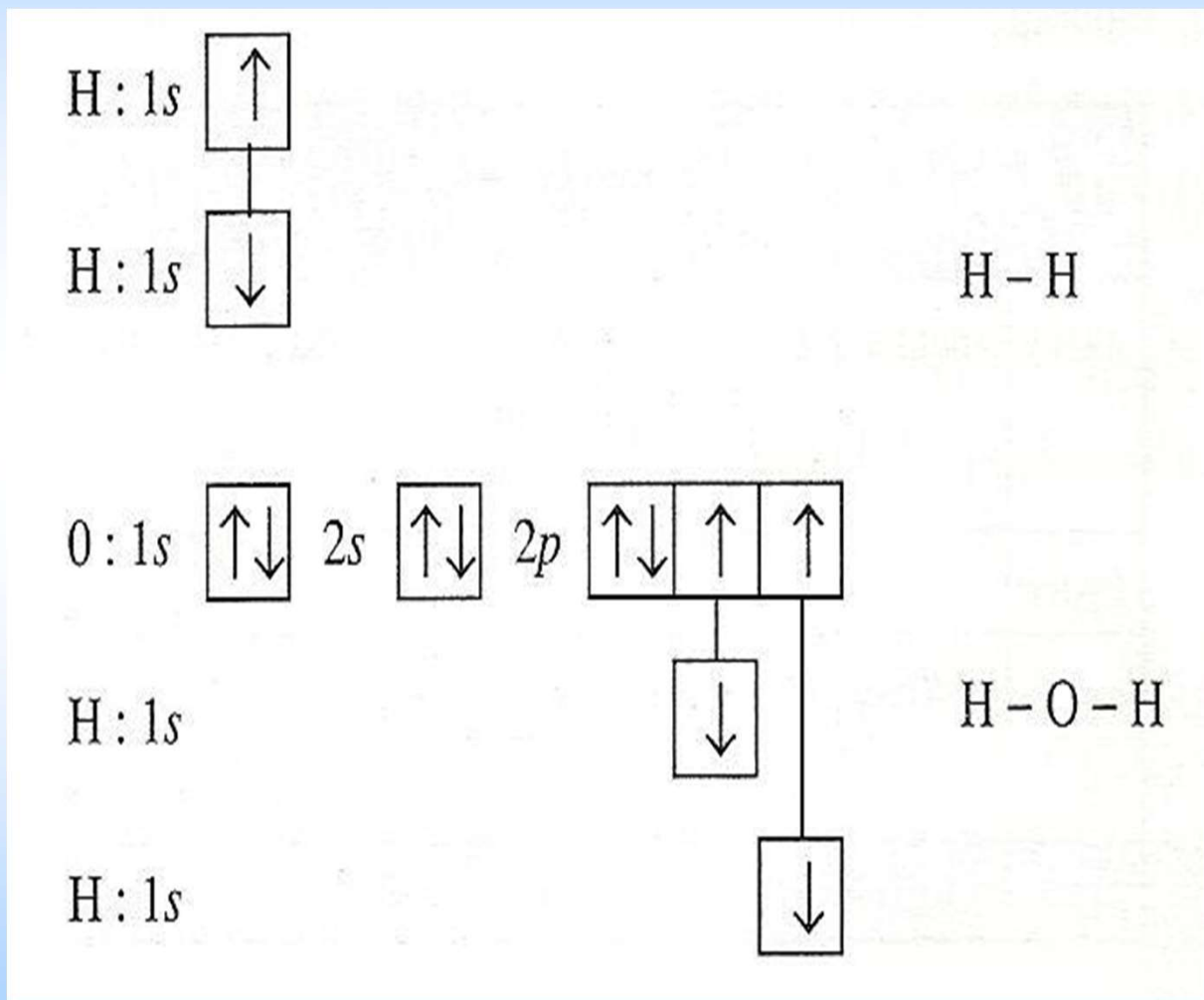
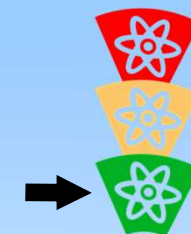


sodíku naopak jeden elektron přebývá





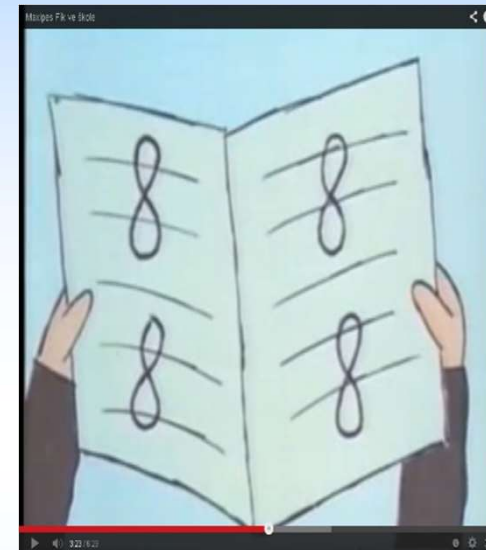
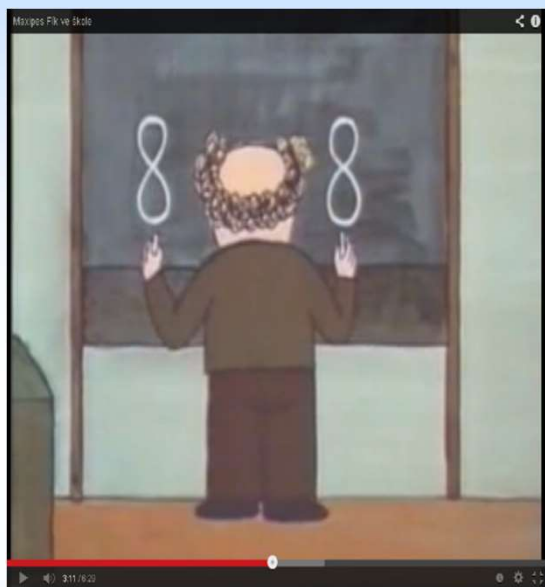
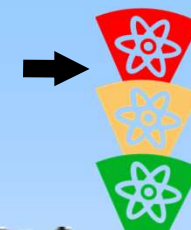
# Chemické vazby



charakteristickým rysem chemické vazby je sdílení vazebných elektronových párů oběma vázanými atomy



# Počet vazeb atomů v organických sloučeninách



Jedna „ruka“

H, Cl, F,  
Br...

Dvě „ruce“

O

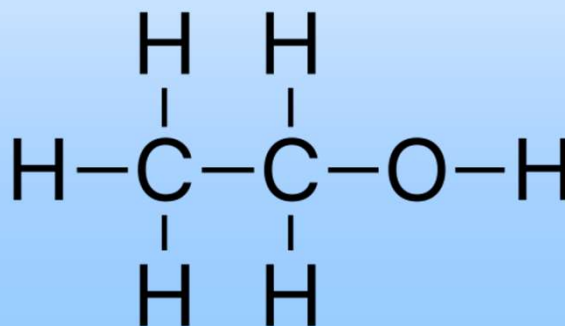
Tři „ruce“

N

Čtyři „ruce“

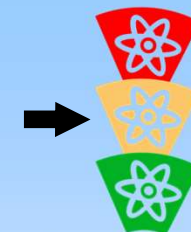
C

**Příklad:**





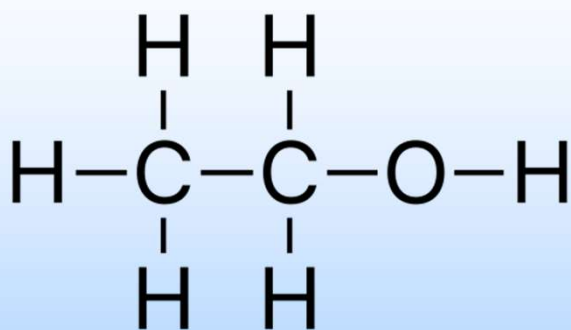
# Chemické vzorce



Chemické vzorce = vizualizace a zápis struktury molekuly

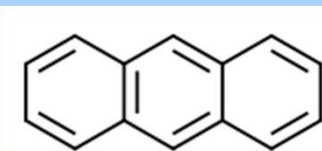
1 chemický vzorec = jedna molekula

jeden vzorec = atomy (kvantita a kvalita) obsažené v jedné molekule – jen pro jednoduché molekuly  
příklady: O<sub>2</sub>, Cl<sub>2</sub>



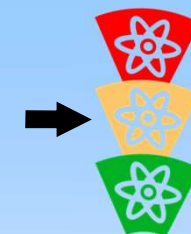
Některé molekuly jsou složitější a jejich vlastnosti jsou dané uspořádáním atomů v molekule (zejména u organických molekul) – při zápisu se vychází z uspořádání atomů v molekule  
příklady: NaOH, CH<sub>3</sub>COOH

Některé molekuly jsou „řádkově“ nezapsatelné – zejména složitější organické molekuly  
Příklad: antracen

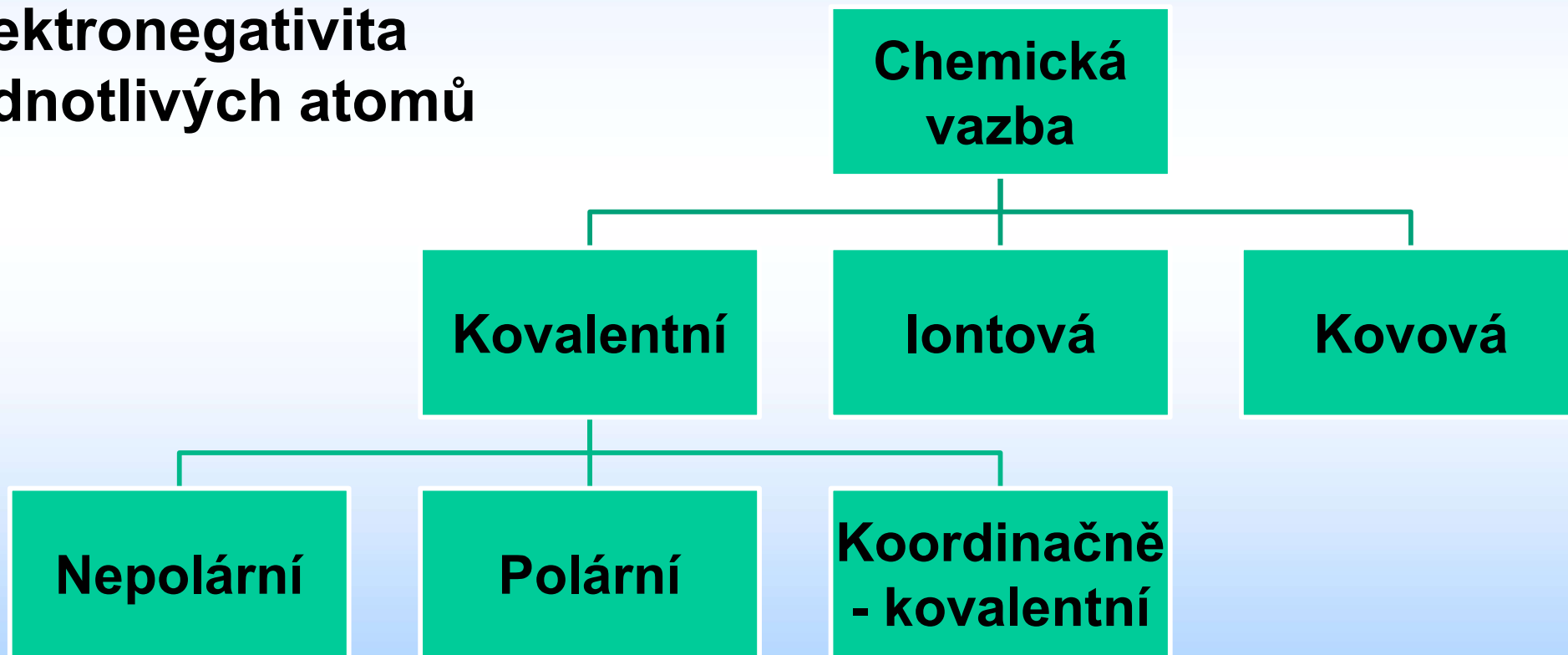




# Typy chemické vazby

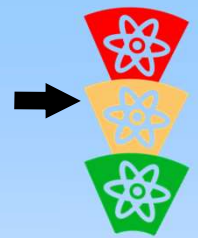


O polaritě vazby  
rozhodují  
elektronegativita  
jednotlivých atomů





# Elektronegativita atomů



- je to schopnost atomu přitahovat vazebný elektronový pár
- schopnost přitahovat vazebný elektronový pár je u atomů rozdílná, vyjadřuje se číselně, lze ji najít v tabulkách.
- čím je hodnota větší, tím má atom větší schopnost přitahovat vazebné elektrony

Increasing Electronegativity

H																			He
2.1																			--
Li	Be																		Ne
1.0	1.6																		--
Na	Mg																		Ar
0.9	1.3																		--
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr		
0.8	1.3	1.4	1.5	1.6	1.7	1.6	1.8	1.9	1.9	1.9	1.7	1.8	2.0	2.2	2.6	2.8	--		
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe			
0.8	1.0	1.2	1.3	1.6	2.2	2.1	2.2	2.3	2.2	1.9	1.7	1.8	2.0	2.1	2.1	2.7	2.6		
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn			
0.8	0.9	1.1	1.3	1.5	1.7	1.9	2.2	2.2	2.4	1.9	2.0	2.3	2.0	2.0	2.2	--			
Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Uun	Uuu	Uub		Uuq						
0.7	0.9	1.1	--	--	--	--	--	--	--	--	--								

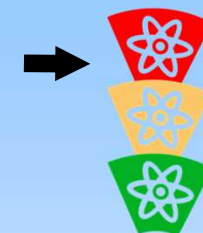
Fluorine is the most electronegative atom

Inert Gases: EN=0  
- have full energy level  
- don't need electrons

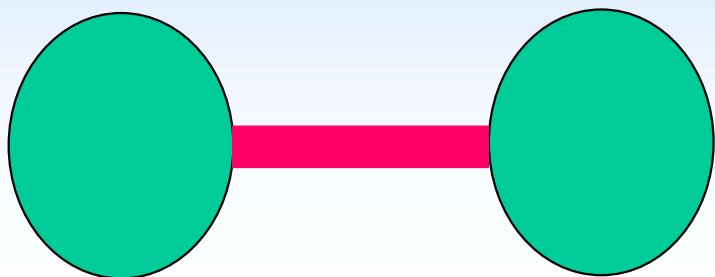
Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr



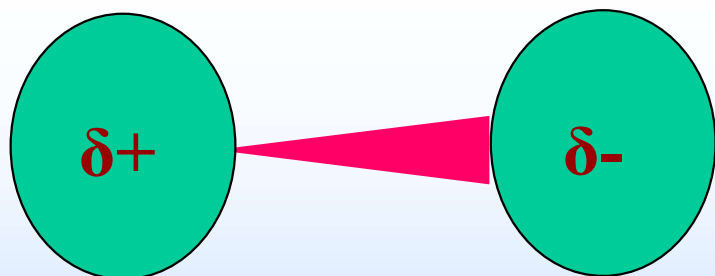
# Polárnost vazby



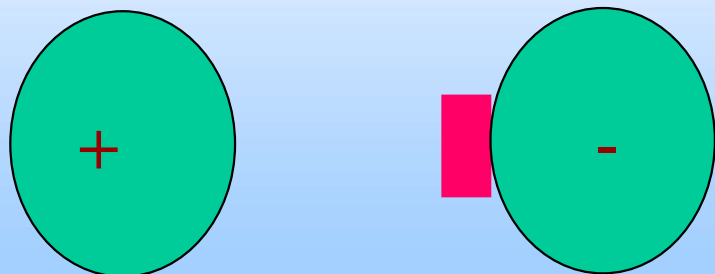
$\delta$ - ... parciální (částečný) náboj – menší než náboj elektronu



**Vazba nepolární – sdílený elektronový pár je rovnoměrně rozložen mezi atomy**  
 $\Delta X < 0,4$



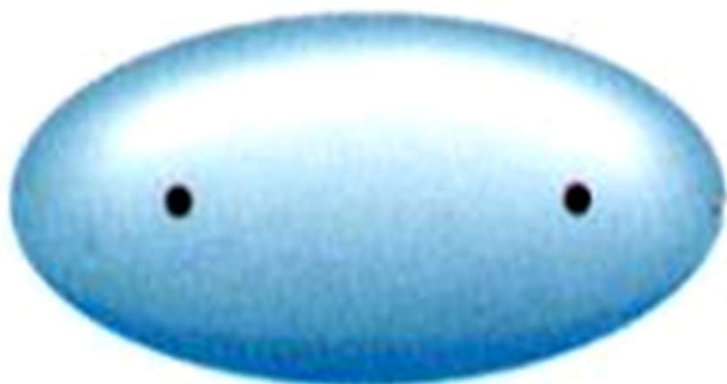
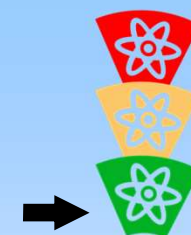
**Vazba polární – sdílený elektronový pár je NErovnoměrně rozložen mezi atomy**  
 $0,4 \leq \Delta X \leq 1,7$



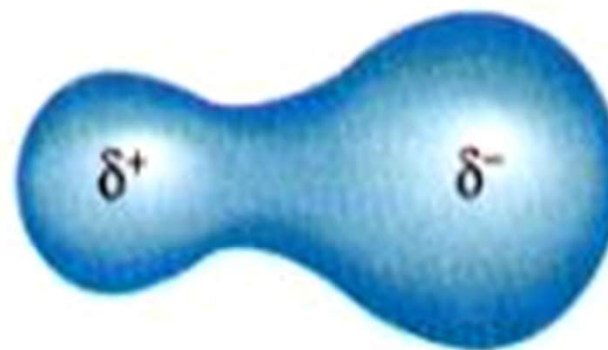
**Vazba iontová – sdílený elektronový pár se přesunul k jednomu z atomů**  
Atomy přecházejí na elektricky nabitě částice IONTY, které jsou k sobě poutány elektrostatickými silami  $\Delta X > 1,7$



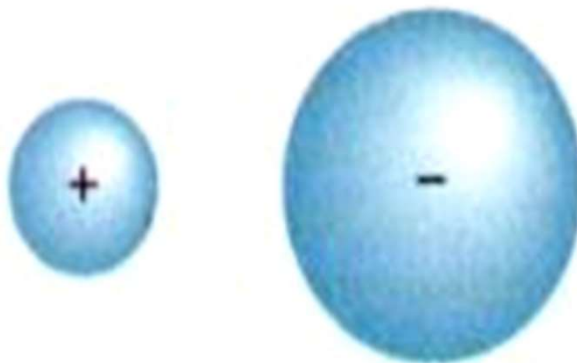
# Polárnost vazby



Nonpolar covalent bond



Polar covalent bond



Ionic bond





# Elektronegativita atomů



Jaká je vazba v molekule:

CH<sub>4</sub>

NH<sub>3</sub>

N<sub>2</sub>

O<sub>2</sub>

NaCl

**Increasing Electronegativity**

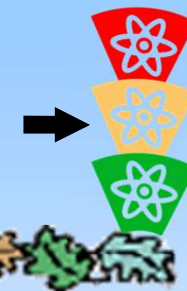
H 2.1																			He --
Li 1.0	Be 1.6													B 2.0	C 2.5	N 3.0	O 3.5	F 4.0	Ne --
Na 0.9	Mg 1.3												Al 1.6	Si 1.9	P 2.2	S 2.6	Cl 3.0	Ar --	
K 0.8	Ca 1.3	Sc 1.4	Ti 1.5	V 1.6	Cr 1.7	Mn 1.6	Fe 1.8	Co 1.9	Ni 1.9	Cu 1.9	Zn 1.7	Ga 1.6	Ge 2.0	As 2.2	Se 2.6	Br 2.8	Kr --		
Rb 0.8	Sr 1.0	Y 1.2	Zr 1.3	Nb 1.6	Mo 2.2	Tc 2.1	Ru 2.2	Rh 2.3	Pd 2.2	Ag 1.9	Cd 1.7	In 1.8	Sn 2.0	Sb 2.1	Te 2.1	I 2.7	Xe 2.6		
Cs 0.8	Ba 0.9	La 1.1	Hf 1.3	Ta 1.5	W 1.7	Re 1.9	Os 2.2	Pt 2.2	Au 2.4	Hg 1.9	Tl 2.0	Pb 2.3	Bi 2.0	Po 2.0	At 2.2	Rn --			
Fr 0.7	Ra 0.9	Ac 1.1	Rf --	Db --	Sg --	Hs --	Mt --	Uun --	Uuu --	Uub --		Uuq --							

Fluorine is the most electronegative element.

Inert Gases: EN= --  
- have full energy  
- don't need electrons



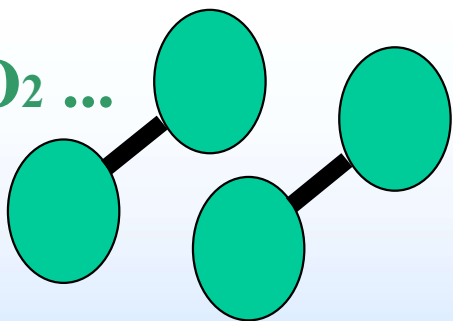
# Chemické látky s kovalentní vazbou



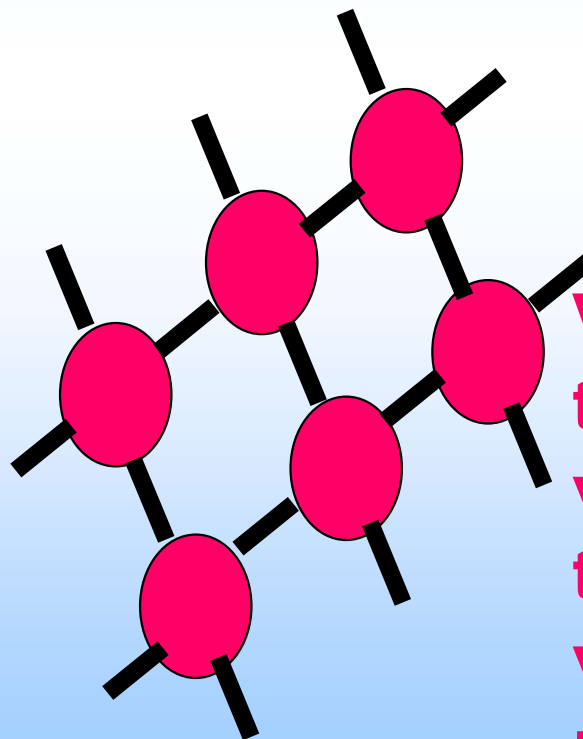
**Kovalentní vazba je vysoce stabilní – většinou i při teplotách nad 1000 °C**

**Teplota tání a varu? Mechanické vlastnosti?**

**H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub> ...**



**Malé molekuly, tání bez přerušování vazeb = nízká teplota tání, varu, malá pevnost v pevném stavu**

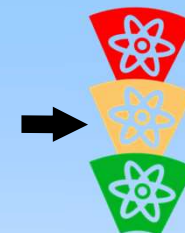


**SiO<sub>2</sub>, C ...**

**Velké molekuly, tání za přerušování vazeb = vysoká teplota tání, varu, vysoká pevnost v pevném stavu**



# Chemické látky s kovalentní vazbou



Běžnější – nízkomolekulární sloučeniny

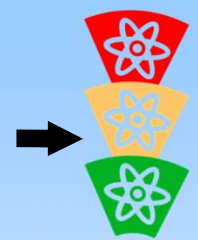
- Nejčastěji v plynném a kapalném skupenství (slabé přitažlivé síly mezi molekulami)
- Rozpustnost ve vodě a v organických rozpouštědlech podle polaridy vazeb
- Elektricky nevodivé (platí i pro jejich roztoky a taveniny)

**Příklady:**  $\text{Cl}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{C}_2\text{H}_4$

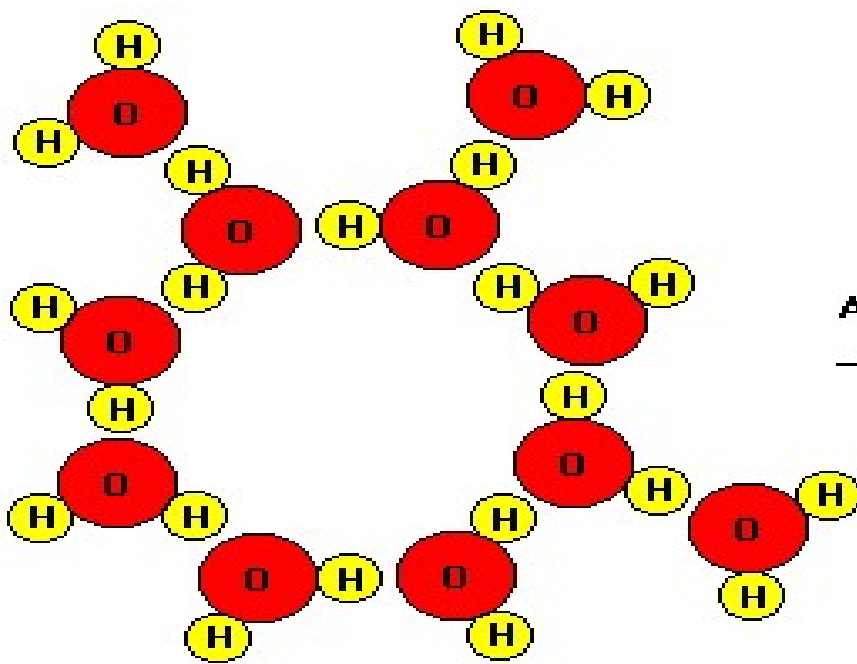


# Chemické látky s kovalentní vazbou

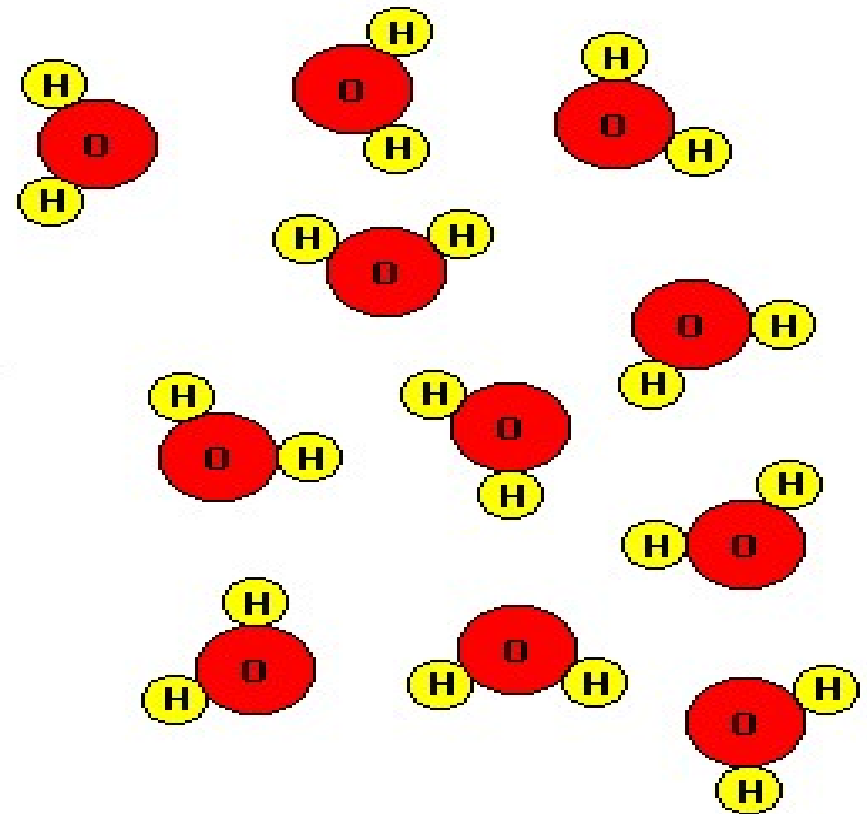
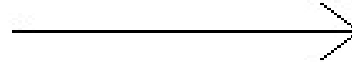
## Tavení nízkomolekulární látky



Covalent (molecular) crystal lattice, melting to form freely-moving molecules



Addition of heat

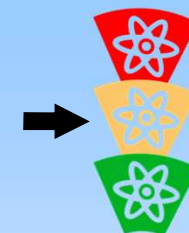


**Covalent Crystal Lattice:** molecules of water are attracted to each other with InterMolecular Attractive Forces. These hold the molecules together in a regular geometric pattern. Since IMAF are weaker than ionic attractions, these crystal lattices tend to be weak, and therefore soft and easy to melt.

When melted, the molecules separate from each other. The covalent bonds do not break, just the IMAF. The molecular liquid does not have charged particles like ionic liquids do, therefore molecular liquids cannot conduct electricity.



## Chemické látky s iontovou vazbou



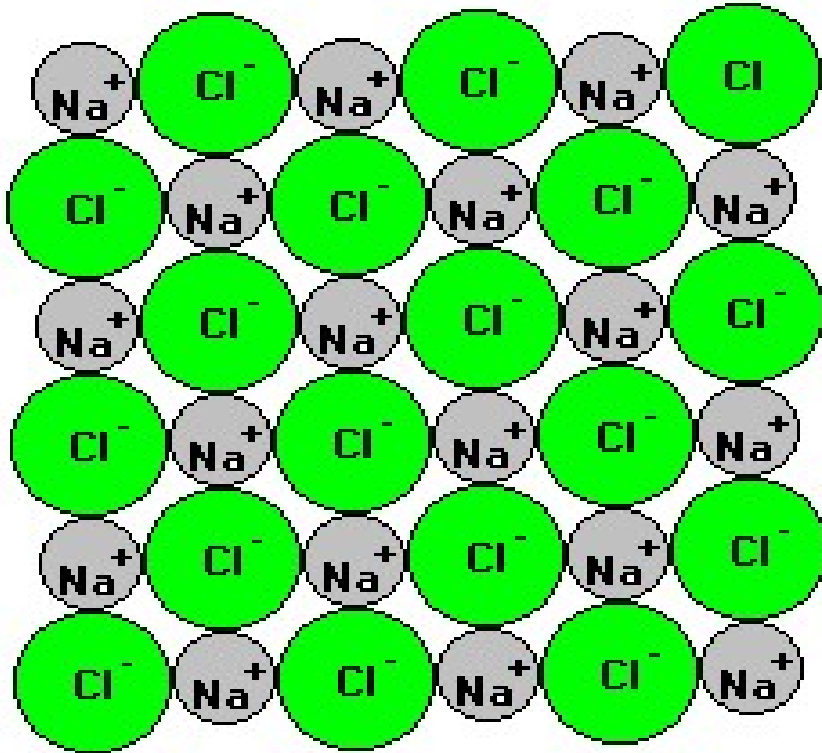
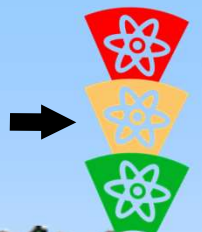
- zpravidla pevné látky (značné přitažlivé síly mezi kationty a anionty)
- mají většinou vysoké teploty tání a varu – vazby mezi „molekulami“ (spíše jednotlivými ionty) jsou pevné – jde o 3D provázanou strukturu
- obvykle rozpustné ve vodě
- taveniny a vodné roztoky jsou elektricky vodivé (ionty jsou v tavenině i vodném roztoku volně pohyblivé)

příklady: NaCl, KF, Na<sub>2</sub>S  
- **křehké**



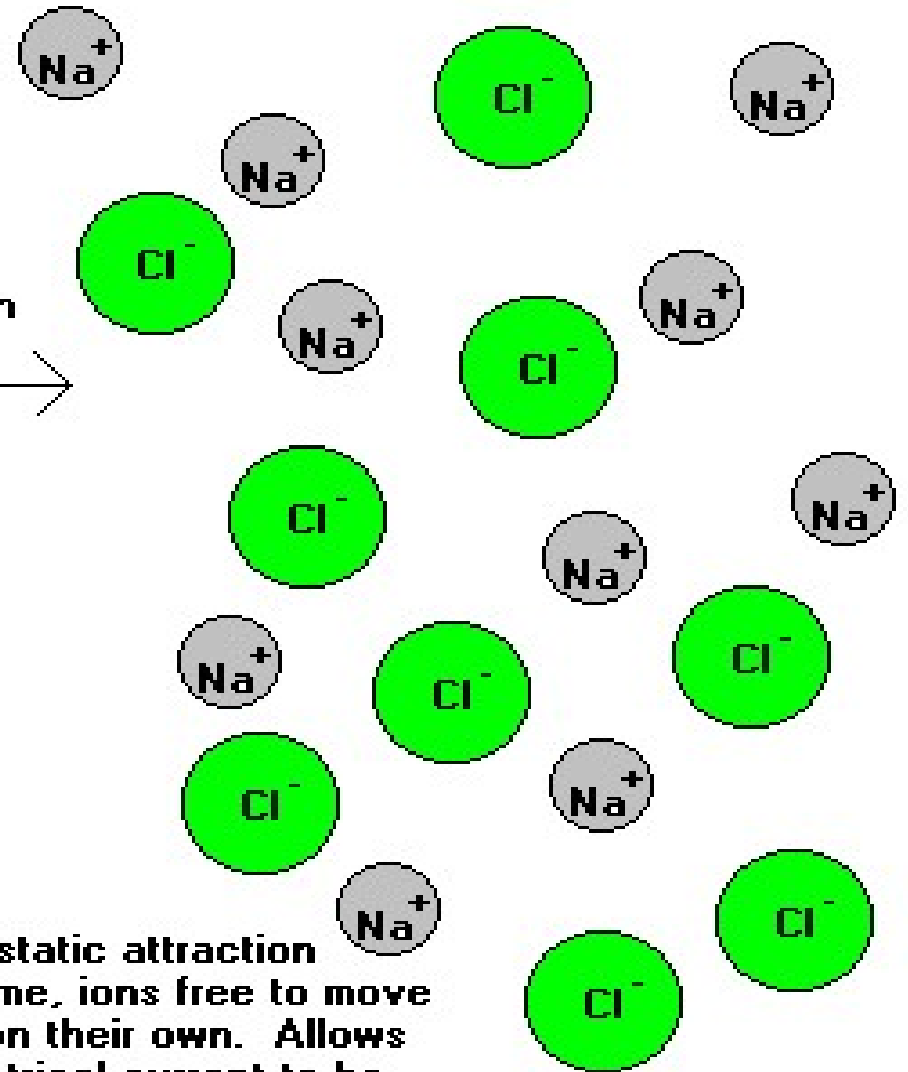


# Chemické látky s iontovou vazbou



Ionic crystal: alternating + and - ions held in place by electrostatic attraction

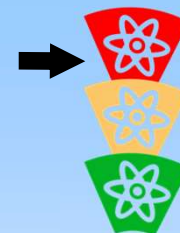
Melting or Dissolving in Water



Electrostatic attraction overcome, ions free to move about on their own. Allows for electrical current to be conducted.

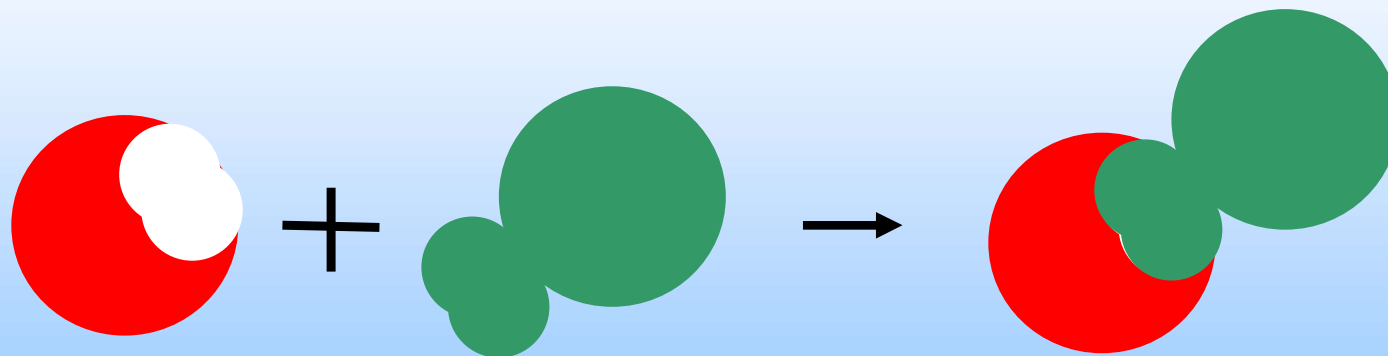


## Koordinační vazba (koordinačně kovalentní)



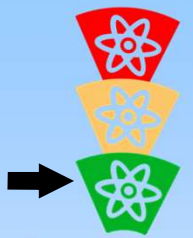
Za zvláštní typ kovalentní vazby - Oba elektrony zprostředkovávající vazbu poskytuje jeden z vázících se atomů – to je možné pouze u atomů, které mají **volný elektronový pár** – tj. pár valenčních elektronů dosud se neúčastnící vazby

Atom poskytující elektrony na tuto vazbu se nazývá **donor (dárce)** elektronového páru, druhý vazebný partner, tj, atom, který elektrony přijímá, musí mít *volný orbital* – je to **akceptor (příjemce)** elektronového páru

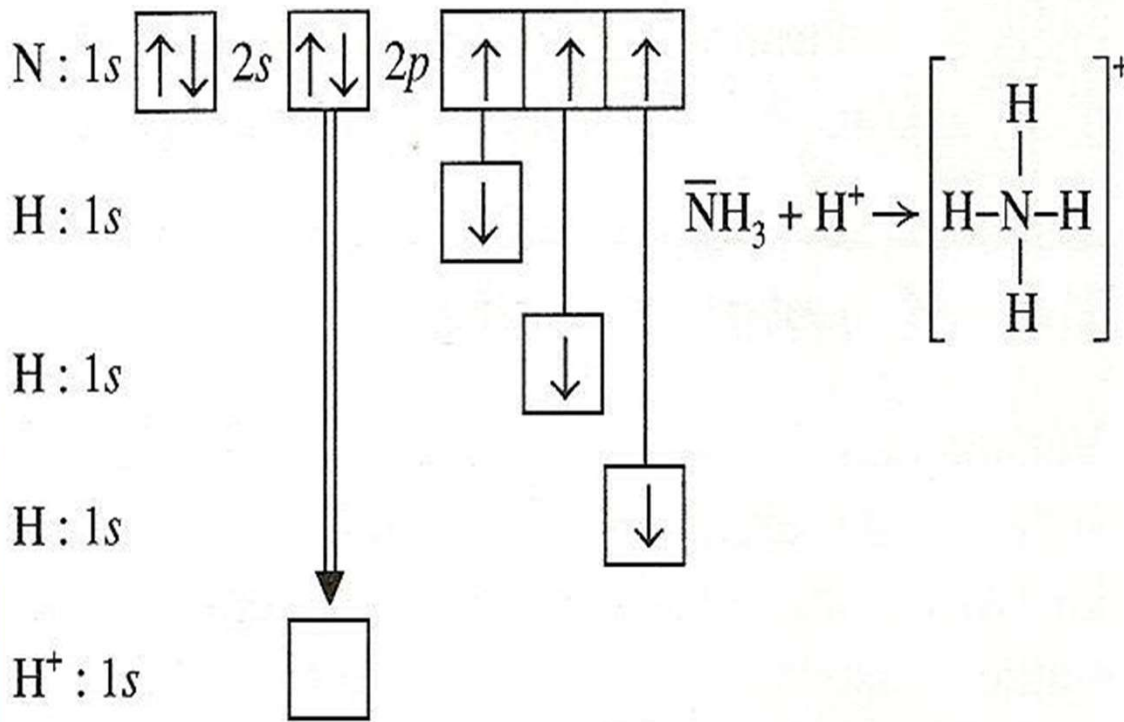




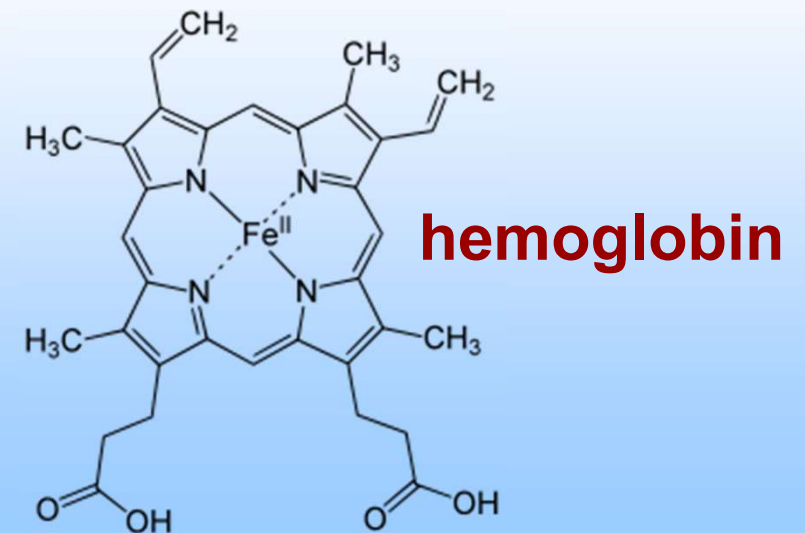
# Koordinační vazba (koordinačně kovalentní)



Schematicky můžeme vznik amonného kationtu znázornit takto:



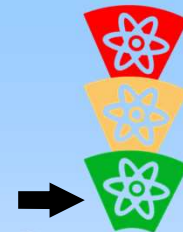
Výsledná vazba se ani pevností, ani jinými vlastnostmi neliší od běžné kovalentní vazby.







## Příklady komplexních sloučenin



**Umělá krev** = kůži natřeme roztokem thiokyanatanu draselného (=rhodanid draselný, KSCN) a Nůž namočíme do slabého roztoku chloridu železitého.

Tahem nože (tupou stranou ! – jinak nejde o chemickou reakci !) vzniknou „krvavé“ stopy



reakci thiokyanatanu s chloridem železitým vzniká komplexní sloučenina **hexathiokyanatoželezitan draselný**  $K_3[Fe(SCN)_6]$ , který má krvavě červenou barvu. Tato reakce se používá v analytické chemii pro důkazy železa.





# Kouříte ?



Rhodanidy jsou v lidských slinách kuřáků -  
Tvoří se z kyanidů v tabákovém kouři. U  
nekuřáků se vyskytne pouze tehdy,  
pohybuje-li se v zakouřeném prostředí.

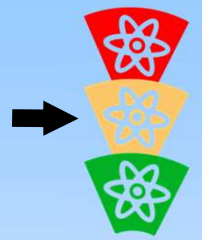
Po přidavku železa u pravidelných kuřáků  
vznikne rudé zbarvení slin, u občasných  
kuřáků a nekuřáků s pohybem v zakouřených  
prostředích vzniká oranžové či slabě  
červené.



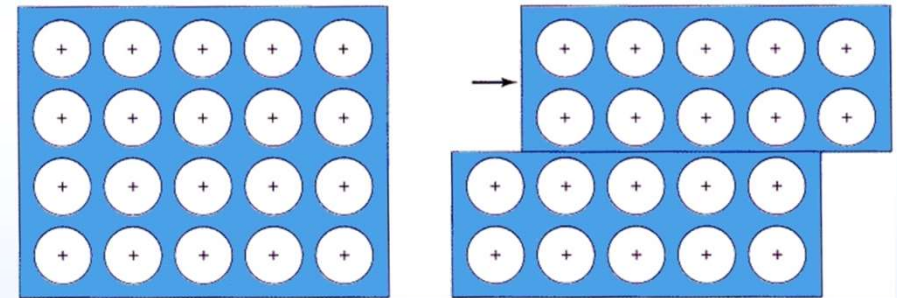
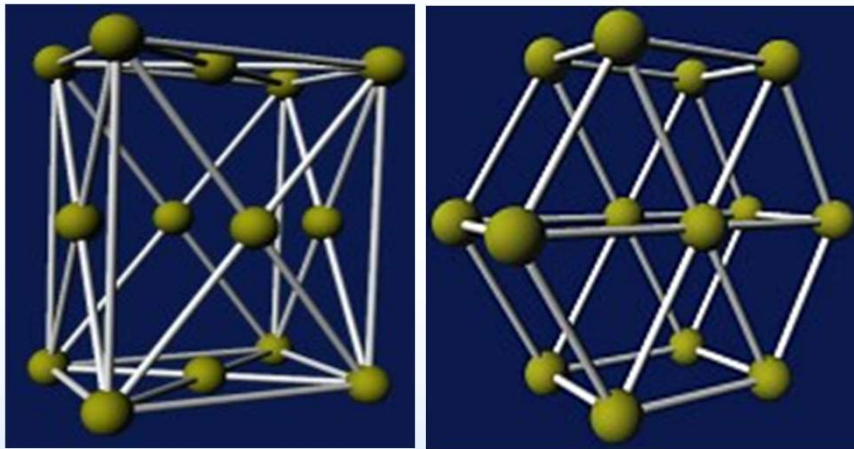
**Zkuste si to při laboratorním cvičení ...**



# Kovová vazba



Atomy kovů v pevném skupenství jsou spojeny v krystalové mřížce, každý atom je zpravidla obklopen 8 nebo 12 sousedními atomy, s nimiž je bezprostředně vázán.

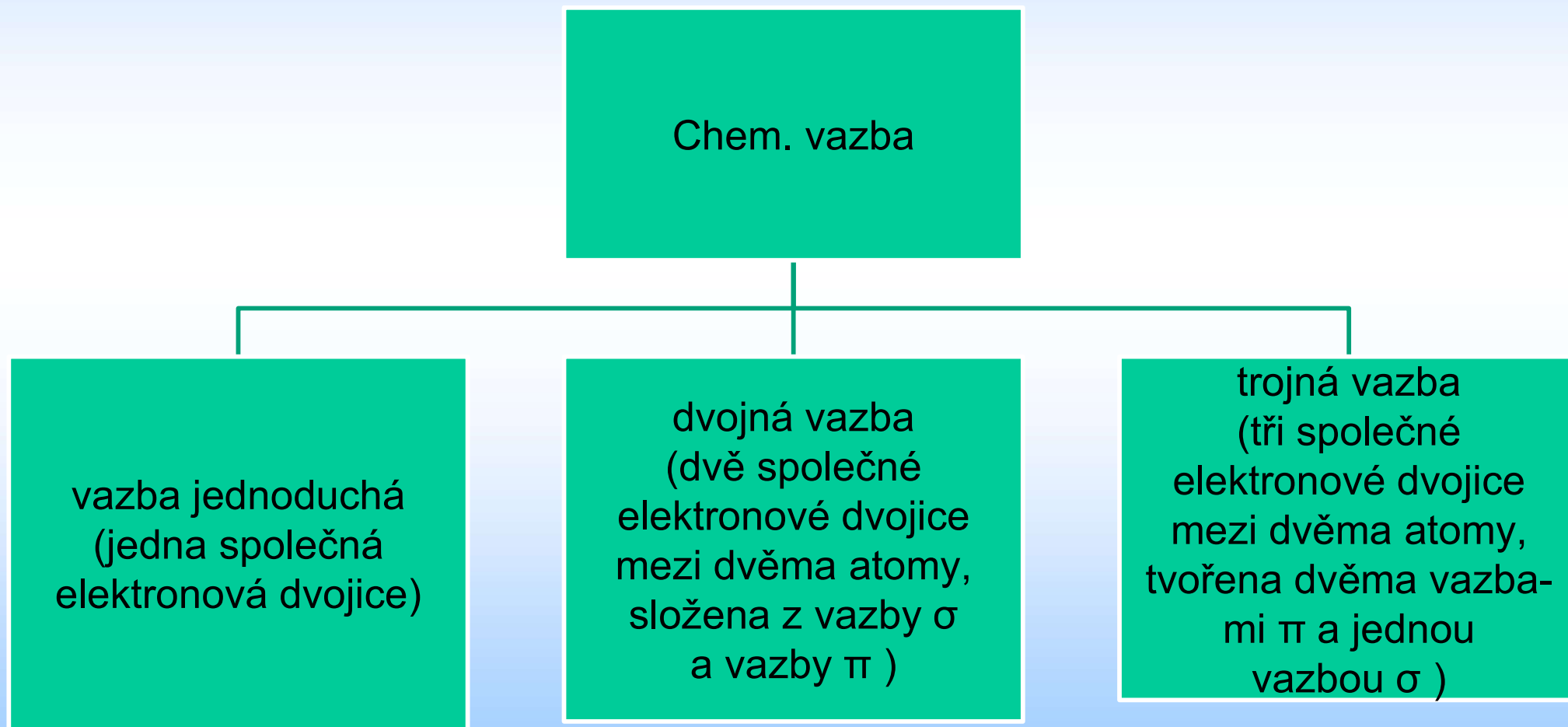
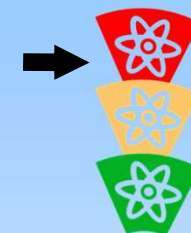


Uvolněné elektrony se pohybují po celém objemu krystalové mřížky a způsobují vazbu mezi zbytky atomů.

- 80 % všech známých prvků jsou kovy
- v poslední vrstvě elektronového obalu mají malý počet elektronů a nízké hodnoty elektronegativity

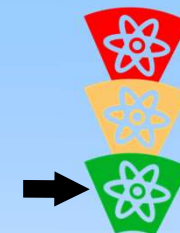


# Typy chemických vazeb - násobné



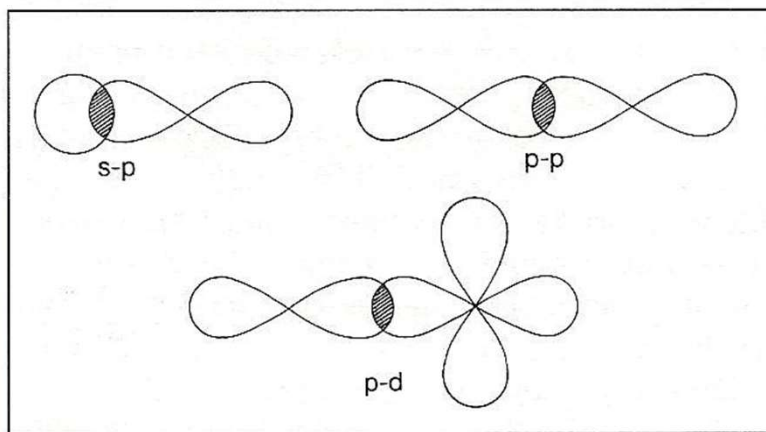


# Chemické vazby



## Vazba $\sigma$

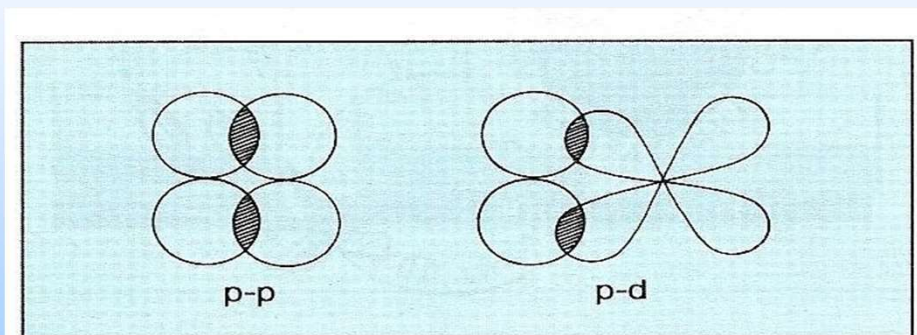
- vazba  $\sigma$  je podmíněna obsazením **vazebného molekulového orbitalu  $\sigma$**



19 Překryvy orbitalů  $s-p$ ,  $p-p$  a  $p-d$  při vzniku vazby sigma

## Vazba $\pi$

- překryvem dvou orbitalů  $p$  také může vzniknout **vazebný molekulový orbital  $\pi$** , jehož obsazením může vzniknout **vazba  $\pi$**  - pohyblivá (delokalizovaná),
- velká elektronová hustota je *nad a pod spojnicí jader*



20 Překryv orbitalů  $p-p$  a  $p-d$  při vzniku vazby pí

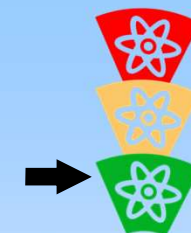


# Mezimolekulové interakce





# Mezimolekulové interakce



- Působí na sebe jednotlivé molekuly ?

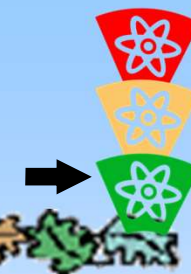
**Ano – důkazem je, že existují kapaliny a pevné látky !**

**Molekuly se musí vzájemně přitahovat**

**Tím lze vysvětlit i rozpustnost látek v rozpouštědle – pokud jsou zde vzájemné interakce, tak dojde k rozpuštění (smísení molekul)**

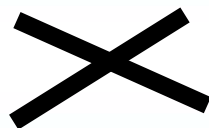


# Rozpustnost látek



**Polarita vazeb v molekule rozhoduje o jejich rozpustnosti**

**Pokud jsou v molekule jen vazby nepolární (resp. tyto vazby výrazně převládají) tak se bude dobře rozpouštět s nepolárními rozpouštědly (např. chlorované uhlovodíky, alkany...)**



**Pokud jsou v molekule jen vazby polární (resp. tyto vazby výrazně převládají) tak se bude dobře rozpouštět s polárními rozpouštědly (např. voda, etanol ...)**

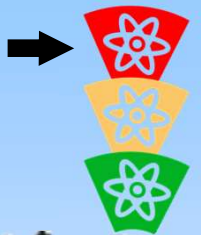
**Víte proč je podle chemiků lední medvěd rozpustný ve vodě?  
Protože je polární.**







# Mezimolekulové interakce



Mezimolekulové  
interakce

Vodíkové vazby

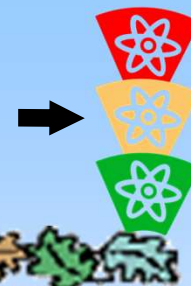
van der Waalsovy síly

Hydrofobní  
interakce

**Nevazebné interakce** (= mezimolekulární síly) jsou v podstatě relativně slabé *fyzikální síly*. Fyzikální mezimolekulární přitažlivé síly jsou **snadno zrušitelné** – bez změny chemického složení

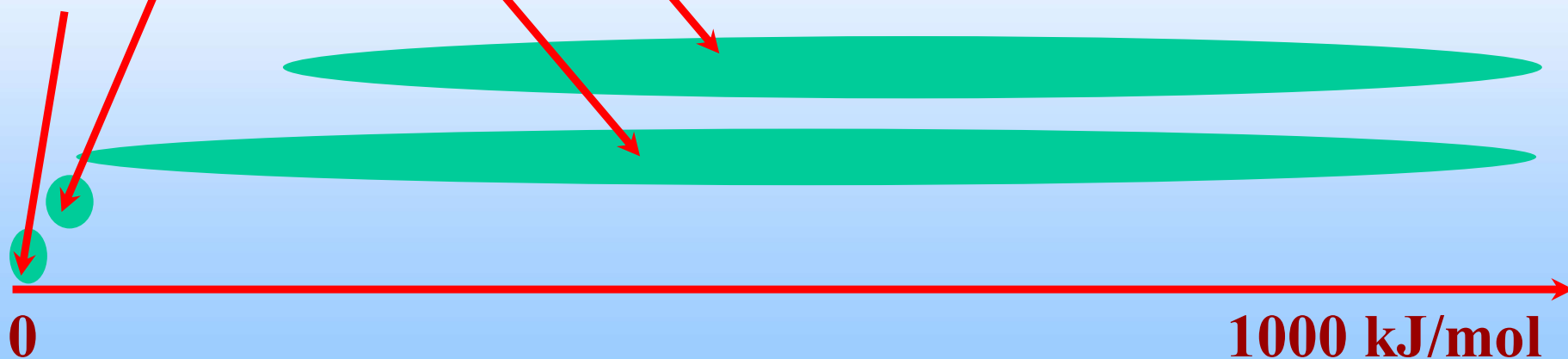


# Srovnání energie vazeb



**Obvyklá energie vazeb  
(polymery, sorbce..)**

<b>kovalentní vazba</b> ( 200 - 1000)	<b>400</b>	<b>kJ/mol</b>
<b>iontová vazba</b> (20 – 1000)	<b>60</b>	<b>kJ/mol</b>
<b>vodíková vazba</b> (10 – 30)	<b>20</b>	<b>kJ/mol</b>
<b>van der Waalsova interakce</b> (0,1 - 10)	<b>4</b>	<b>kJ/mol</b>

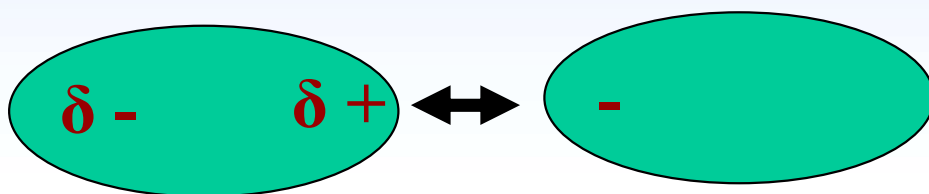




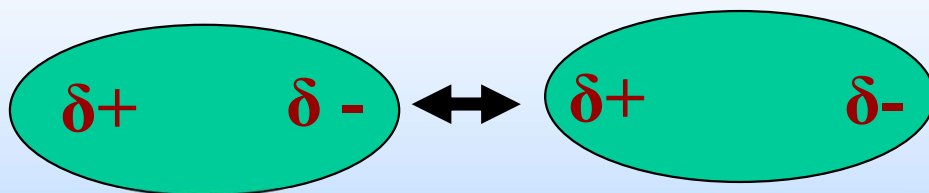
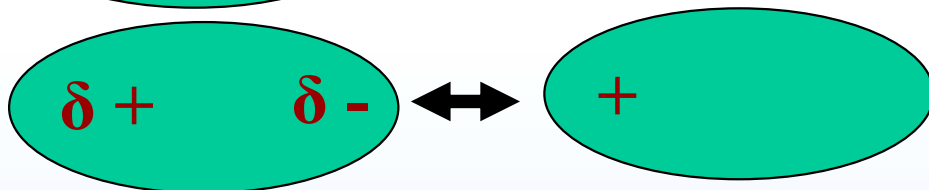
# v.d.Waalsovy Coulombické síly



Coulombické síly = přitažlivost opačných nábojů, klesá s kvadrátem vzdálenosti



**Dipól-iontové síly**



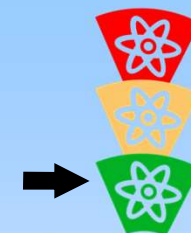
**Dipól-dipolové síly**



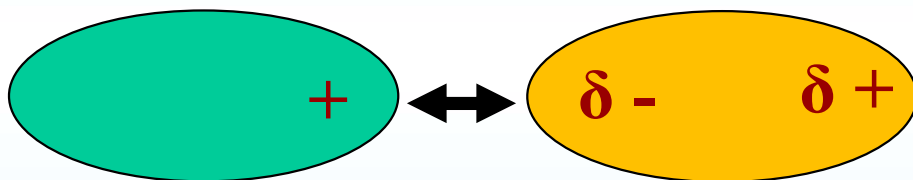
**Síla vazby klesá s druhou mocninou vzdálenosti**



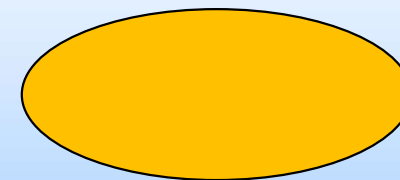
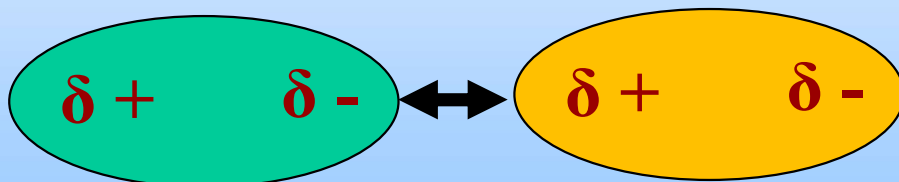
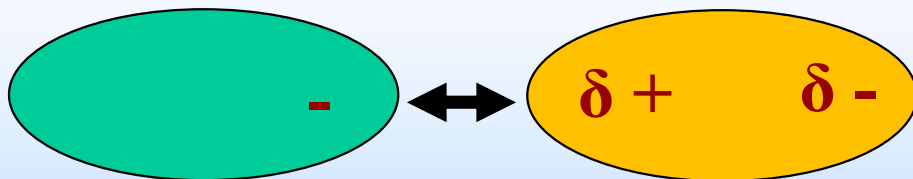
# v.d.Waalsovy Coulombické síly



Indukční síly = parciální náboje (dipól) lze v molekule indukovat přiblížením jiné částice s nábojem



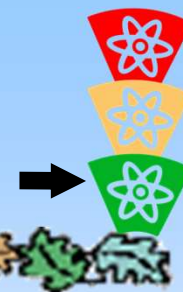
**Dipól-indukovaný dipól**



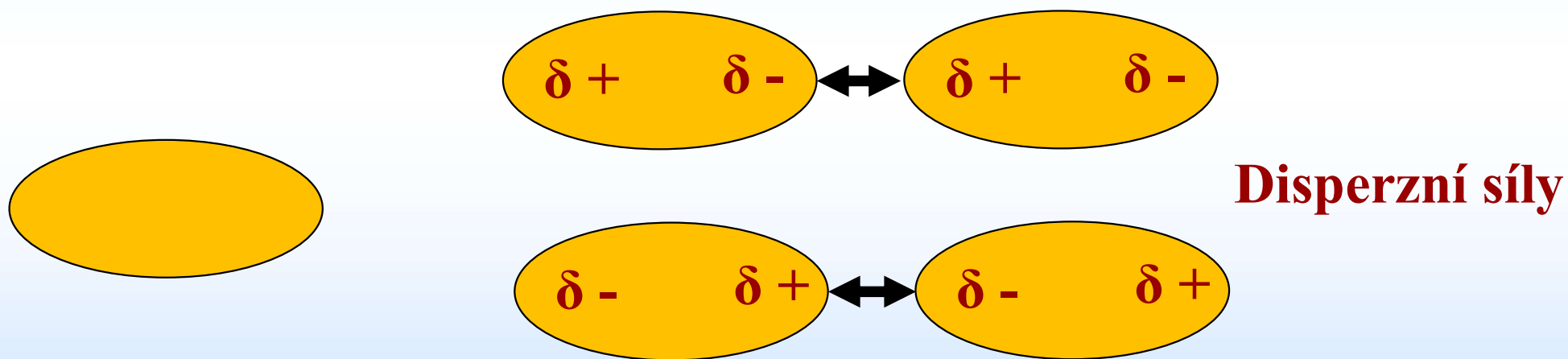
**Částice bez náboje  
i bez parciálních  
nábojů**



# v.d.Waalsovy Disperzní síly



Disperzní síly = parciální náboje (dipól) v nepolárních molekulách rychle vznikají a zanikají díky pohybu elektronů v orbitalu, mezi částicemi, které nemají permanentní dipól



Četnost výskytu je značná, vazebná energie nízká: 0,1 až 4 kJ.mol<sup>-1</sup>. Působí do vzdálenosti až 0,4 nm (tj. přibližně dvojnásobek délky vazby kovalentní!), avšak pevnost vazby se velmi silně snižuje se vzdáleností (se šestou mocninou vzdálenosti!).

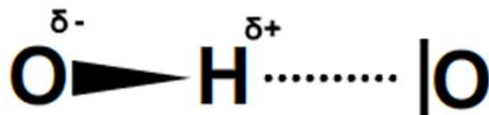


# Vodíková vazba (vodíkový můstek)



Jde o důležitou – relativně dosti silnou – fyzikální interakci mezi hydrofilními úseky molekul, která má značný význam i při barvení vláken. Také sorpce molekul vody při bobtnání vláken vodou probíhá prostřednictvím těchto vodíkových můstků

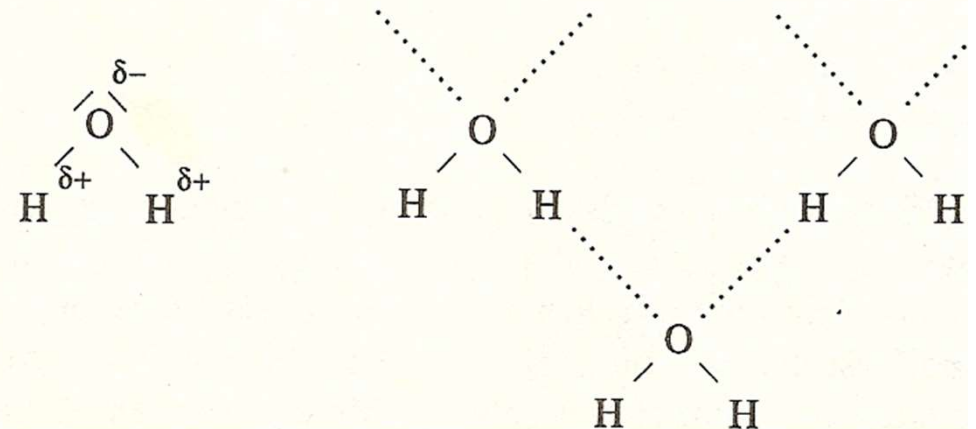
## Vodíková vazba



Vazebný elektronový pár je do té míry posunut k atomu kyslíku, že atom vodíku může vytvořit vazbu s volným elektronovým párem dalšího atomu.



Podobně tento jev pozorujeme u vazby vodíku s dusíkem a fluorem.

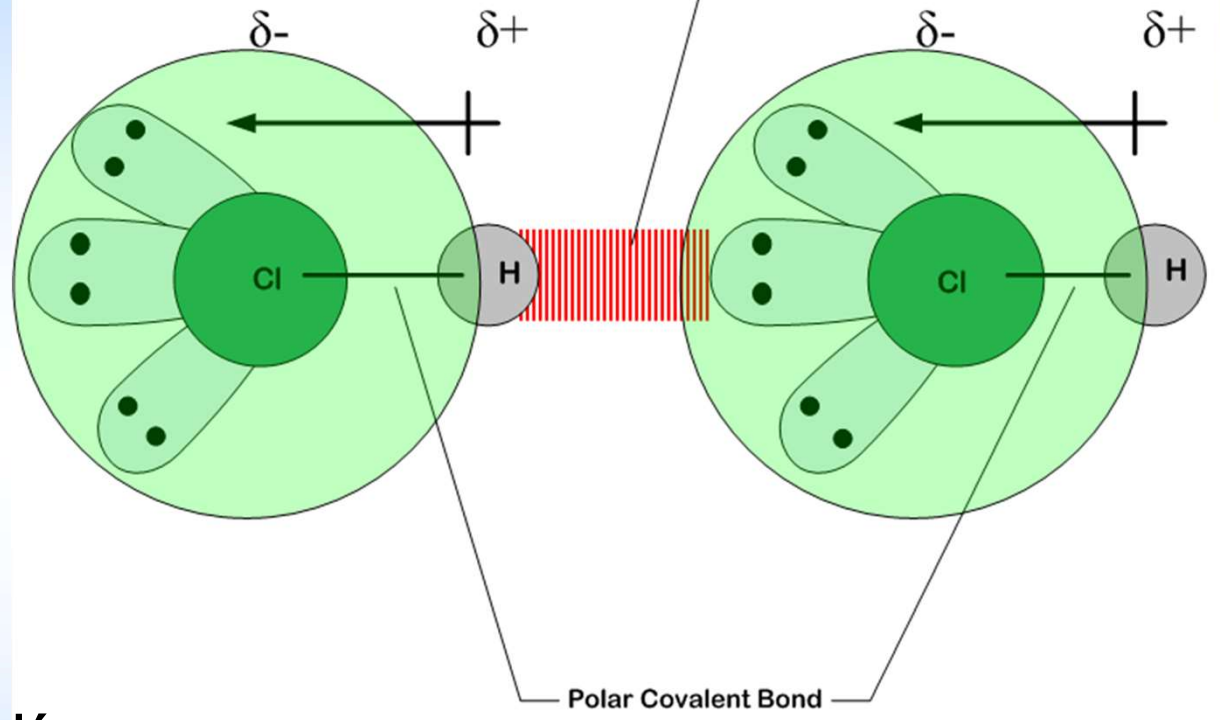
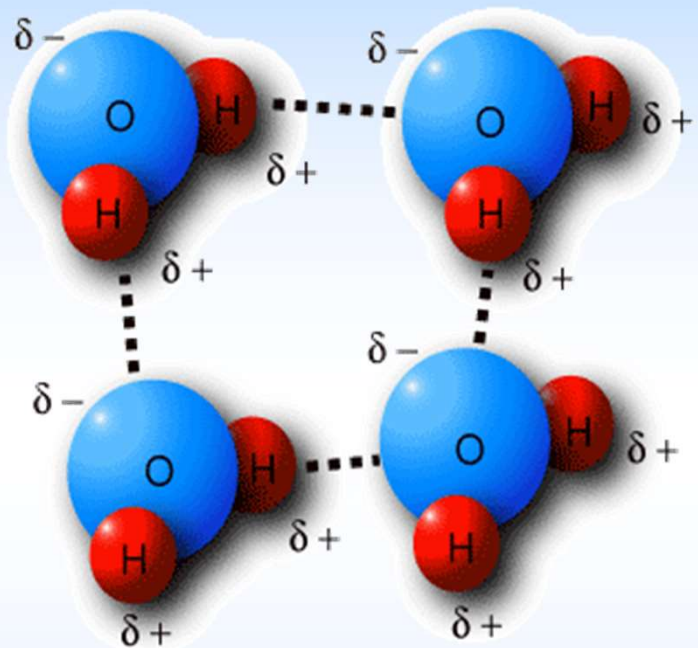
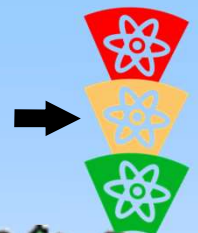


Vyskytuje se zejména u sloučenin H s F, O a N. Vysvětluje se *silnou polaritou vazeb* HF, OH a NH.

Vazebný el. pár je do té míry posunut elektronegativnějším atomu, že atom vodíku může vytvořit slabou vazbu s volným el. párem na atomu další molekuly.



# Vodíková vazba (můstek)

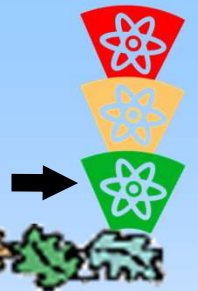


Vodíkové můstky podmiňují:

- stálost prostorového uspořádání bílkovin a nukleových kyselin.
- způsobuje také, že voda je kapalina za podmínek, kdy jí podobné sloučeniny jsou plynné.
- ovlivňuje i vlastnosti karboxylových kyselin, alkoholů a dalších organických sloučenin.



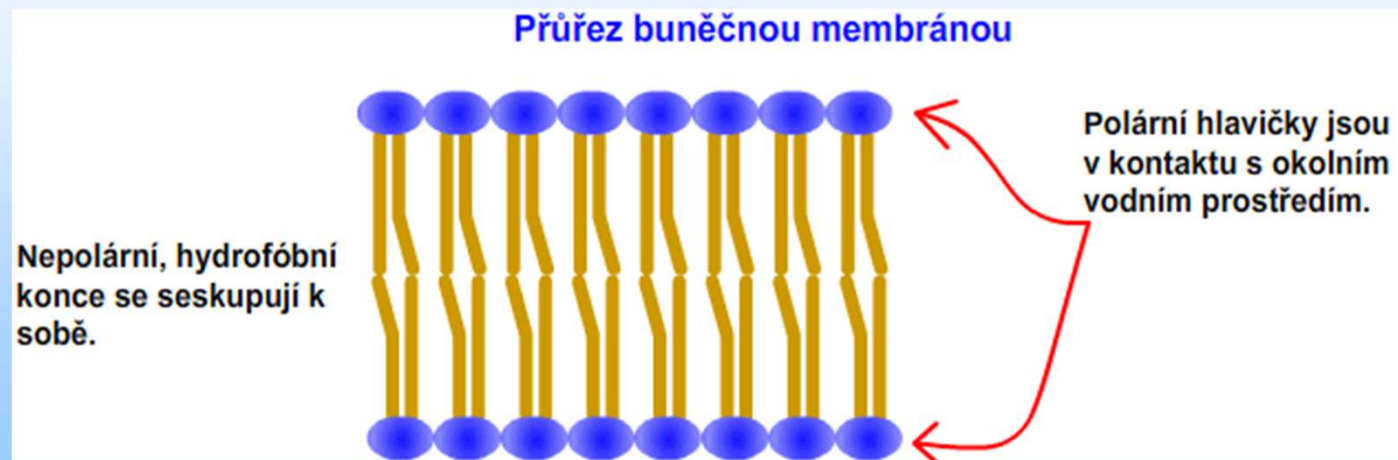
# Hydrofóbní interakce



**Hydrofóbní interakce** se uplatňují pouze ve vodném prostředí a jejich nositely jsou **nepolární úseky molekul** (především alkyly, méně výrazně i aryly) bez afinity k vodě a tedy projevující tendenci vzájemně se seskupovat a snižovat tak stykový povrch s vodným prostředím.

Čím vyšší teplota – tím je entropický přínos větší

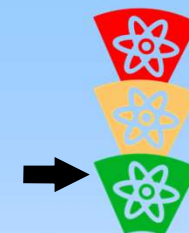
Hydrofobní vazby obecně přispívají ke stabilizaci nadmolekulární struktury proteinů ve vodném prostředí. Projevují se při barvení vlny a přírodního hedvábí kyselými barvivy.







# Interakce barvivo - polymer

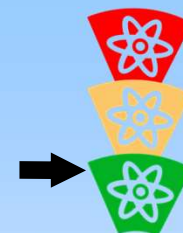


čím větší molekula - tím víc interakcí fyzikálního charakteru  
čím víc iontových vazných bodů na molekule – tím více se  
problematizuje nalezení vhodné konfigurace sorpčních míst  
v polymeru

běžně se uplatňuje několik typů interakcí vedle sebe, např.  
polární úseky molekuly se adsorbují polárními vazbami, u  
nepolárních úseků se uplatní disperzní síly a navíc příp.  
i hydrofobní interakce, ionizovaná sulfoskupina se současně  
váže na vlákno iontově.



# Interakce barvivo - polymer



Barvivo A

Barvivo B

Barvivo C

u kulovitých molekul - většina vazeb působí mezi vlastními segmenty molekuly barviva (intramolekulárně) bez vlivu na okolí – intenzita vazeb např. s polymerem je omezena  
u plochých a lineárních molekul - většina vazeb působí na segmenty cizích molekul v okolí molekuly barviva (tj. intermolekulárně).



PUH-LEASE,  
SPARE US.  
WE'VE ALREADY  
SEEN IT ON THE  
INTERNET.

**Děkuji za  
pozornost !**