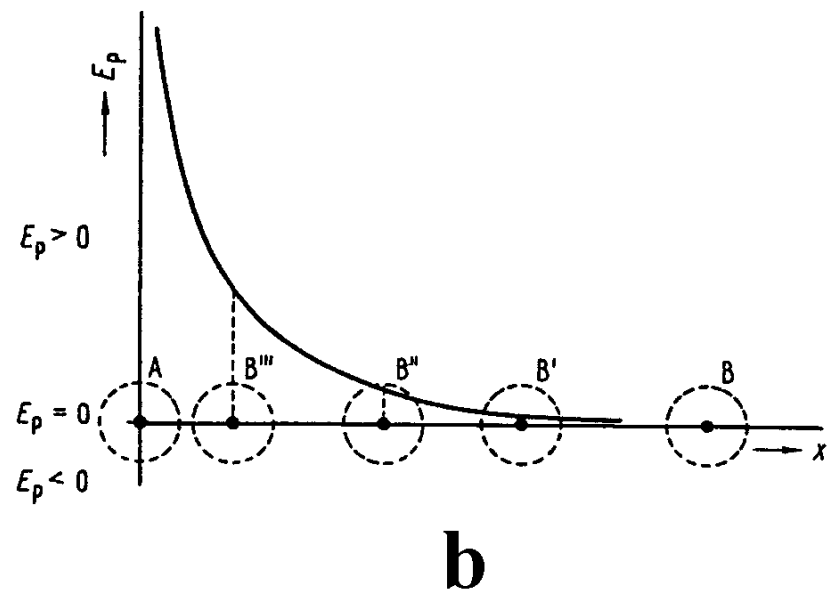
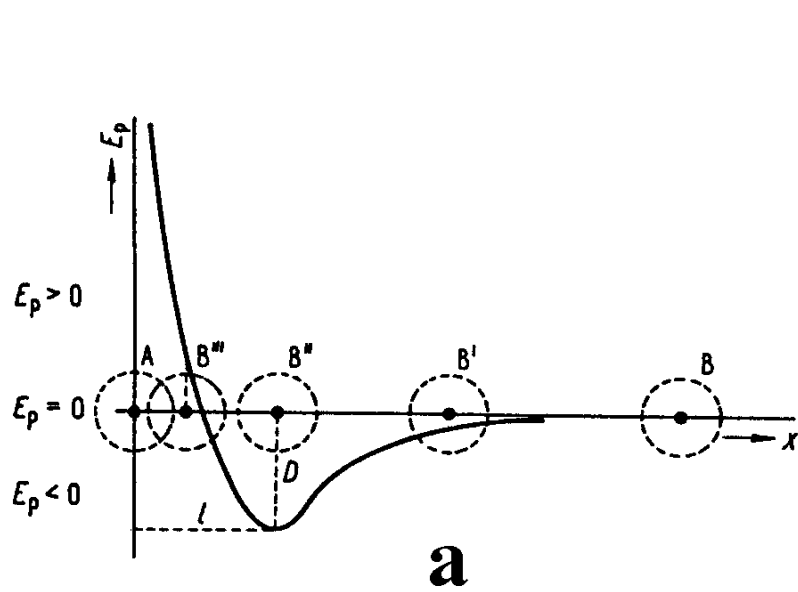


Chemická vazba

Chemická vazba

Předpokladem průnik
elektronových obalů a snížení
potenciální energie systému



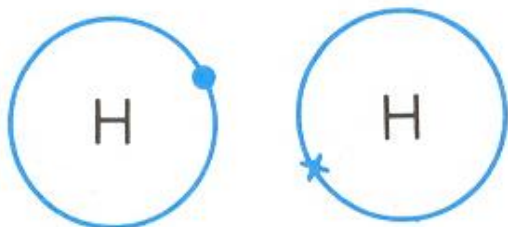
l délka vazby [pm]

D disociační energie vazby

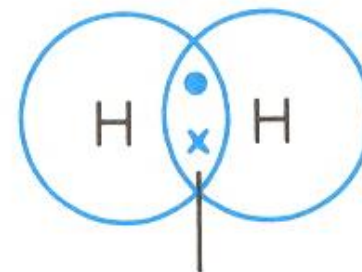
(vazebná energie) [kJ.mol⁻¹]

Molekula vodíku

dva atomy vodíku



molekula vodíku



sdílený elektronový pár



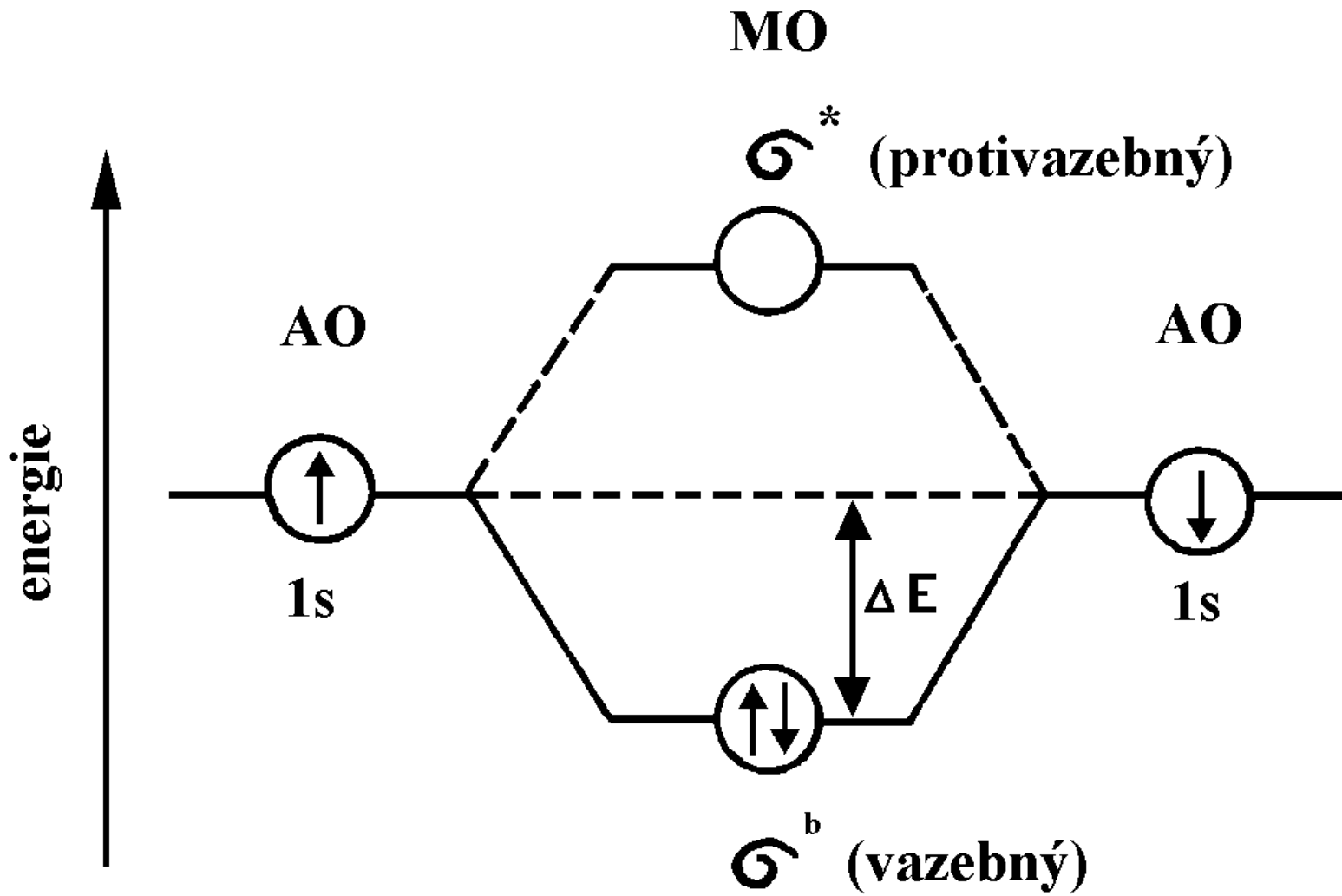
Teorie molekulových orbitalů

Vazba typu σ a vazba typu π

Ze dvou AO dva MO různé energie

MO vyšší energie = orbital protivazebný σ^*

MO nižší energie = orbital vazebný σ^b



Vazba typu σ

**vznik překrytím AO orientovaných
ve směru spojnice jader (s, p_z)**

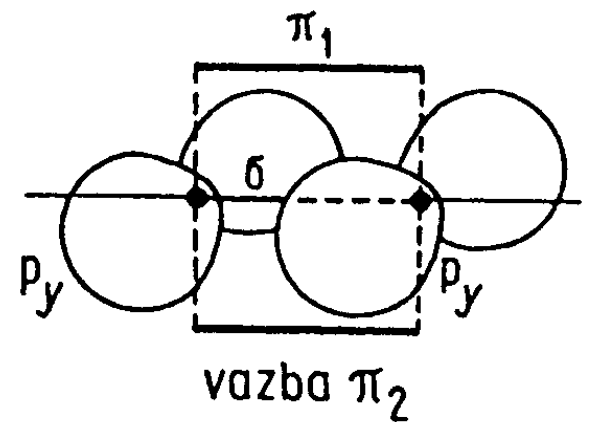
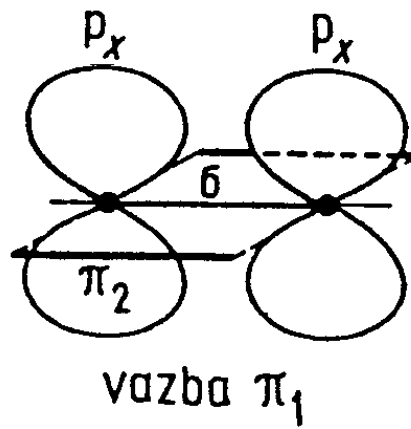
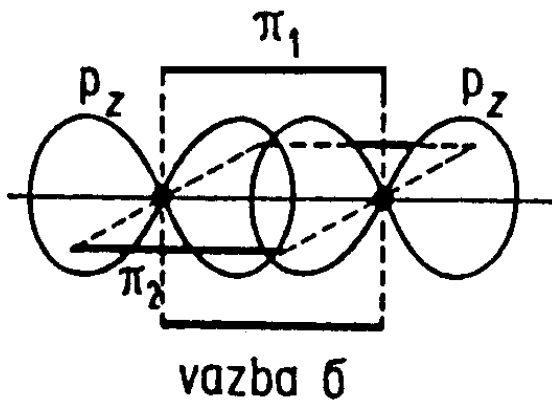
**Mezi dvěma atomy může být pouze
jedna σ vazba**

Vazba typu π

vznik překrytím AO orientovaných osami
mimo spojnici jader (p_y, p_y)

Mezi dvěma atomy mohou být až dvě vazby
typu π (jsou pouze pootočeny o 90°)

Molekula N₂

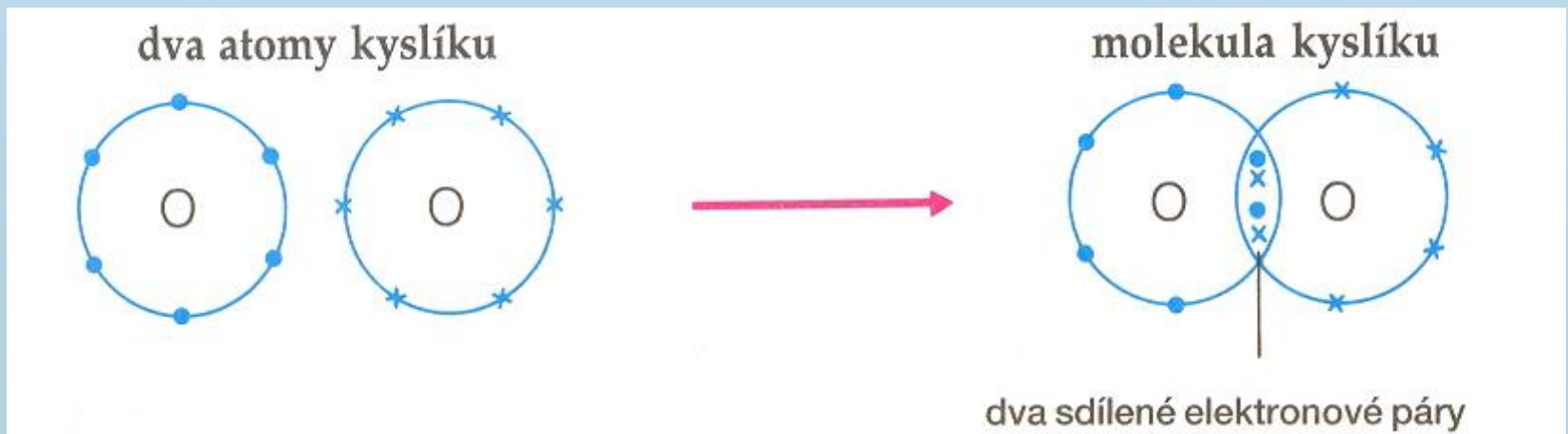


Druhy chemické vazby

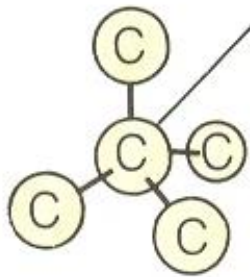
- a) kovalentní (nepolární, polární)
- b) iontová
- c) koordinačně - kovalentní
- d) kovová

podstata vzniku vazby je stejná

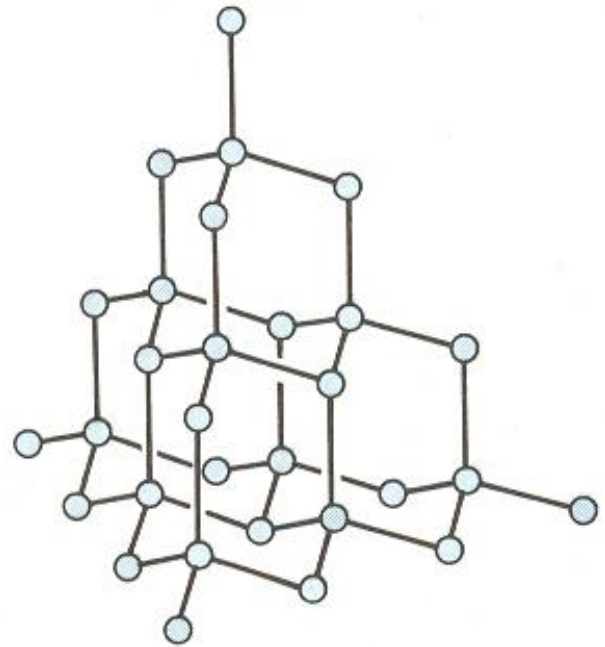
Kovalentní vazba



Diamant



z centrálního atomu vycházejí
čtyři kovalentní vazby



Prostorový tvar molekul

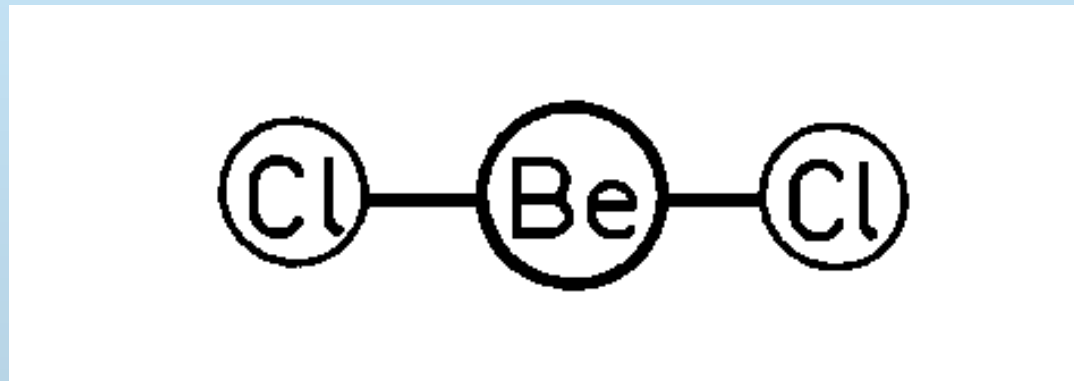
Elektronové páry okolo centrálního atomu se uspořádají tak, aby jejich elektrostatické odpuzování bylo minimální (tj. co nejdále od sebe)

Pro tvar molekuly je důležitý součet počtu σ vazeb a nevazebných elektronových párů ve valenční sféře

Dva elektronové páry

2 elektrony ve valenční sféře

lineární molekula s dvojicí vazeb σ

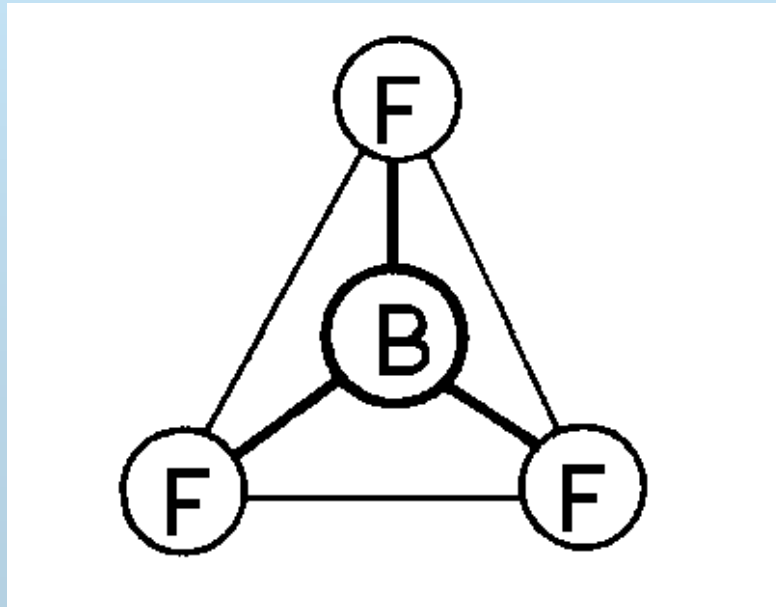


acetylen (etin C_2H_2), oxid uhličitý (CO_2), kyanovodík (HCN)

Tři elektronové páry

3 elektrony ve valenční sféře

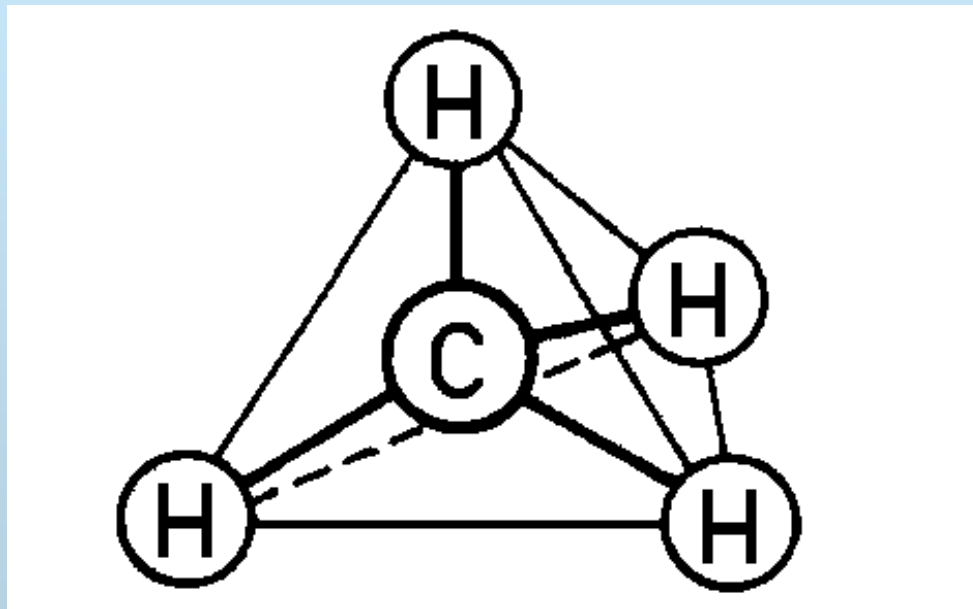
trigonální planární molekula, tři vazby σ ,
úhel 120°



eten (etylen C₂H₄)

Čtyři elektronové páry

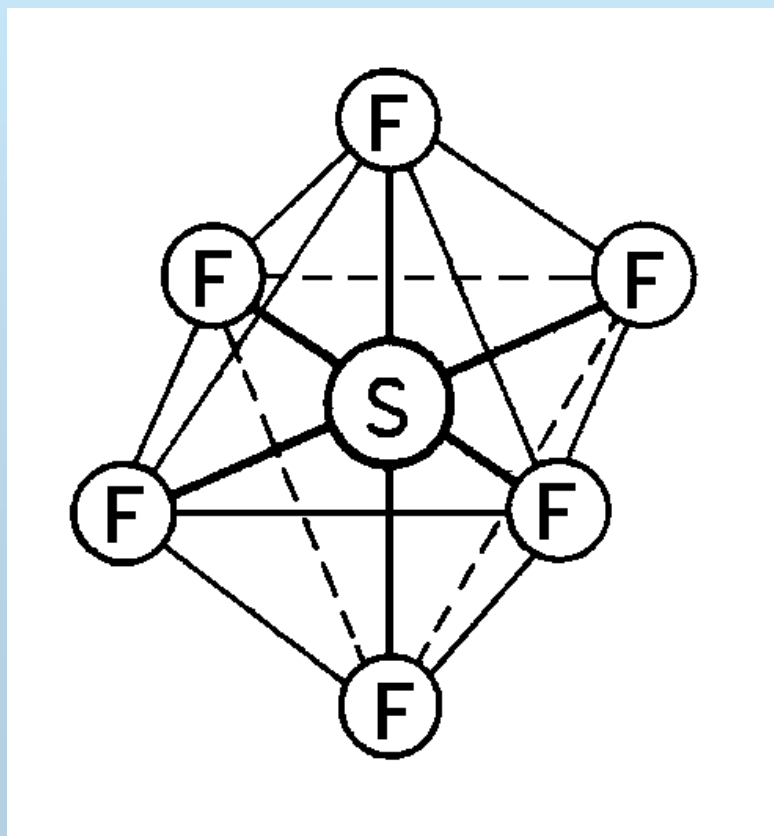
4 elektrony ve valenční sféře, **nejdůležitější**
tetraedrická prostorová molekula, úhel $109,5^\circ$



skupiny SiO_4 a TiO_4 v křemičitanech a titaničitanech,
uhlovodíky, NH_4^+ , diamant

Šest elektronových párů

oktaedrická prostorová molekula



Delokalizované π vazby

nenasyčené uhlovodíky s konjugovanými
dvojnými vazbami (-C=C-C=C-)

(například 1,3-butadien)

aromatické uhlovodíky

(benzen)

grafit

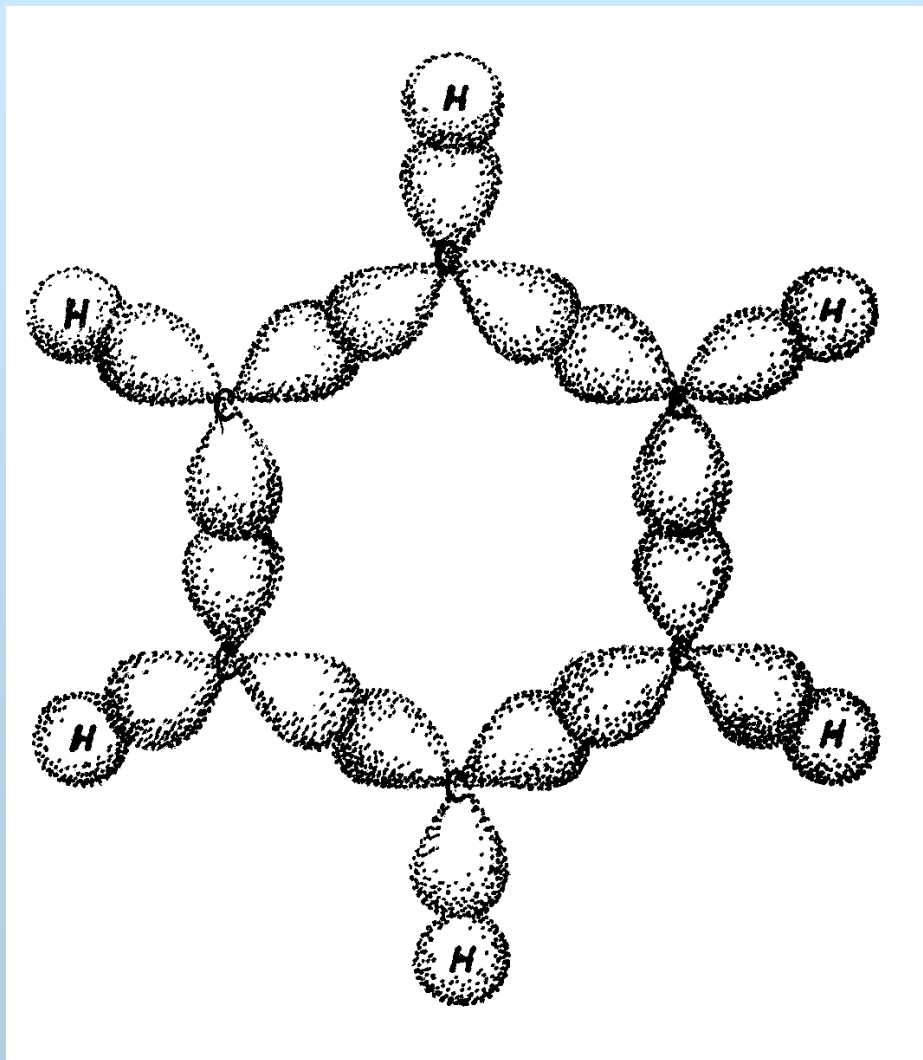
všechny atomy leží v jedné rovině

Benzen C_6H_6

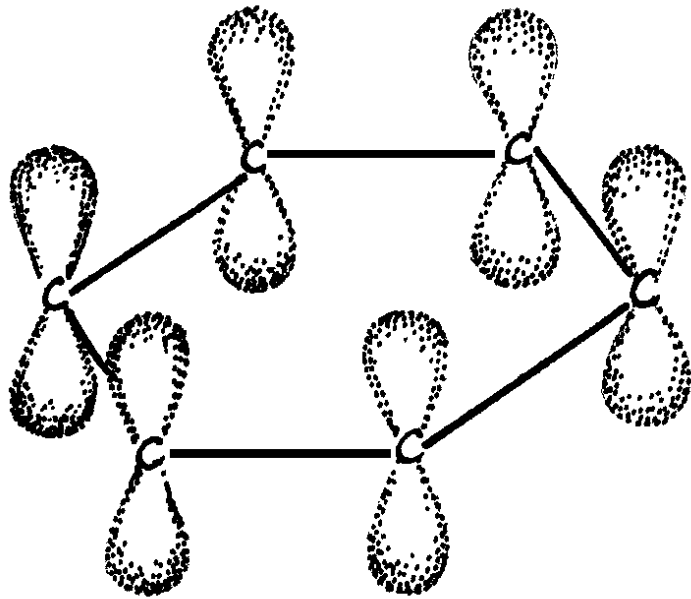
všech dvanáct atomů leží v jedné rovině

delokalizovaný systém se rozprostírá nad a pod rovinou, ve které leží atomy uhlíku a vodíku

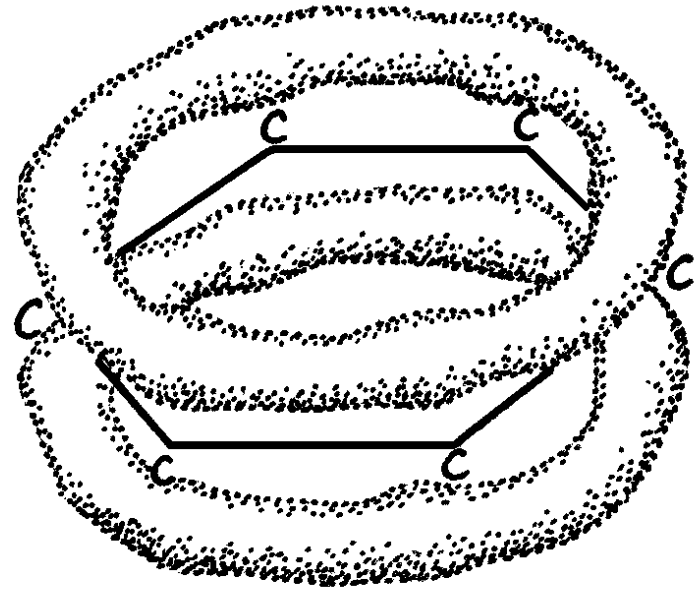
Benzen σ vazby



Benzen π vazby

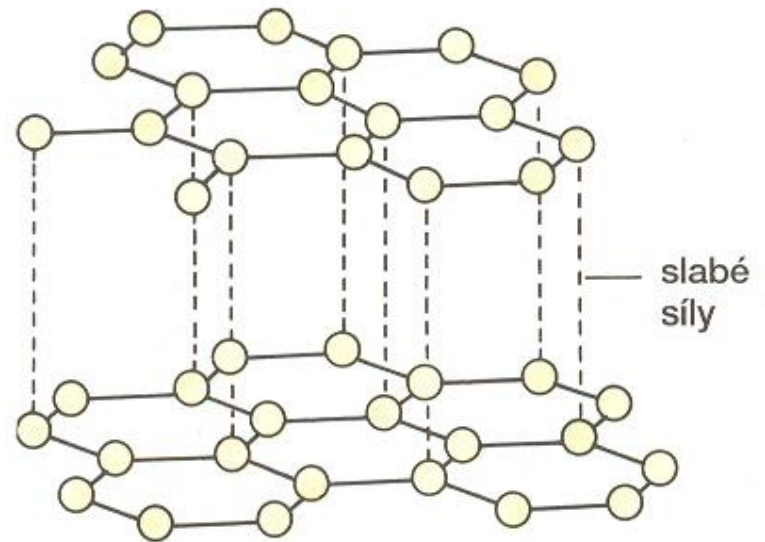
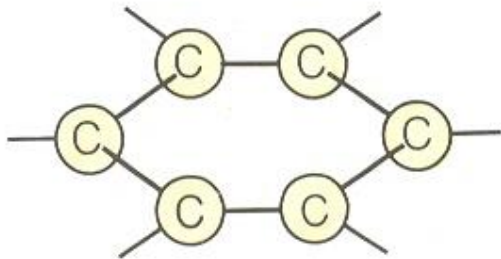


a



b

Grafit



Polarita chemické vazby

stejné atomy

oba atomy se podělí o vazebné elektrony stejným dílem a elektronová hustota je v molekule symetricky rozdělena

různé atomy

dochází k menšímu nebo většímu posunu elektronové hustoty k atomu s vyšší hodnotou elektronegativity

Důsledky

**vznik kovalentní polární vazby
s parciálními náboji a dipólem
zesílení vazby elektrostatickou
přitažlivou silou
plynulý přechod do iontové
vazby**

Rozdíl elektronegativit

malý rozdíl

vazba prakticky nepolární, dipól můžeme zanedbat (příklad methan)

střední rozdíl

vazba kovalentní polární, dipól je významný (příklad HCl)

velký rozdíl

iontovost nad 50 %, vazba iontová

Dipólmoment

velikost závisí na parciálních nábojích na atomech a na délkách vazeb, má vektorový charakter

dipólmomenty se vektorově sčítají

Dipólmoment

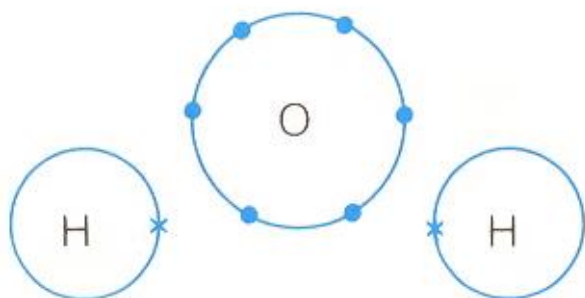
molekula bez polárních vazeb
nemůže mít dipólmoment

molekula s polárními vazbami
nemusí mít dipólmoment

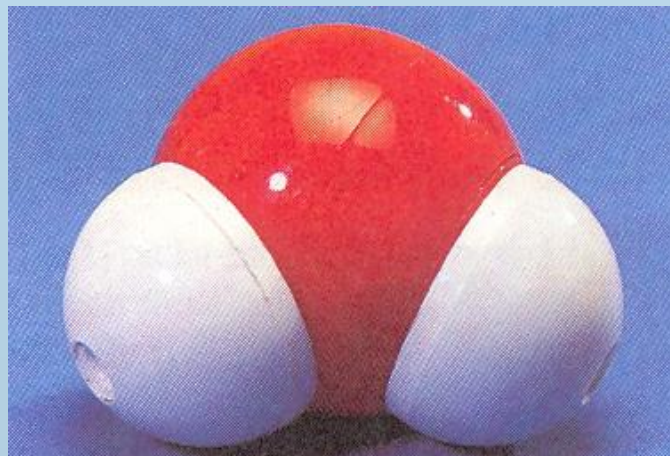
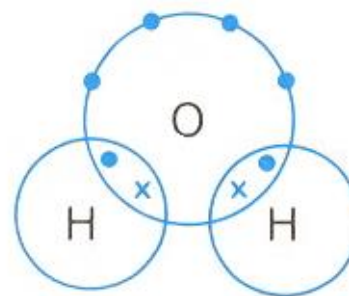
ve vysoce symetrické molekule se
dipólmomenty vektorově vyruší
(příklady SF_6 , CO_2)

Molekula vody

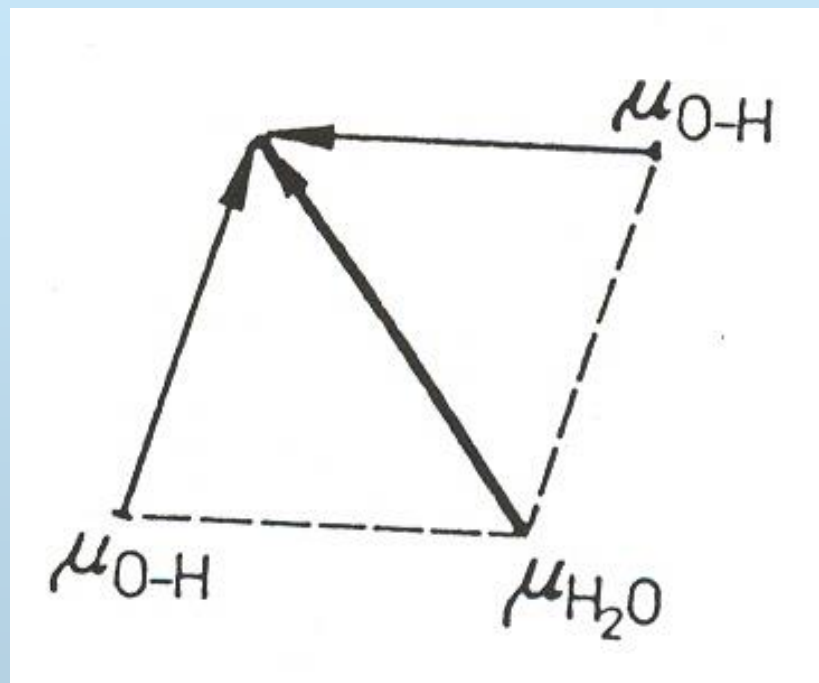
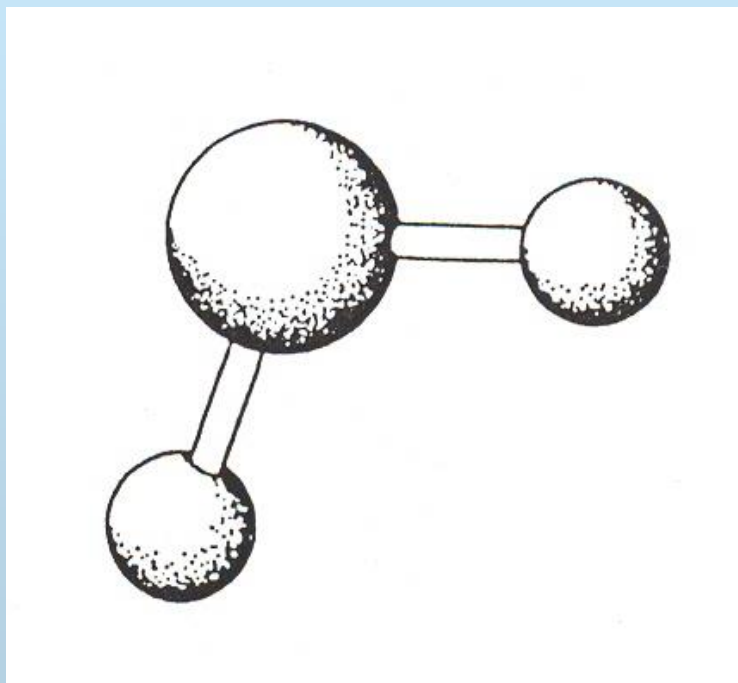
atom kyslíku
a dva atomy vodíku



molekula vody, H_2O



Voda



Příklady dipólmomentu

HF	$6,08 \cdot 10^{-30} \text{ C m}$	LiH	$19,64 \cdot 10^{-30} \text{ C m}$
HCl	$3,57 \cdot 10^{-30} \text{ C m}$	KI	$30,86 \cdot 10^{-30} \text{ C m}$
HBr	$2,64 \cdot 10^{-30} \text{ C m}$	H₂O	$6,15 \cdot 10^{-30} \text{ C m}$
HI	$1,27 \cdot 10^{-30} \text{ C m}$	H₂S	$3,67 \cdot 10^{-30} \text{ C m}$
CO	$0,40 \cdot 10^{-30} \text{ C m}$	NH₃	$4,88 \cdot 10^{-30} \text{ C m}$
CO₂	$0 \cdot 10^{-30} \text{ C m}$	CH₄	$0 \cdot 10^{-30} \text{ C m}$

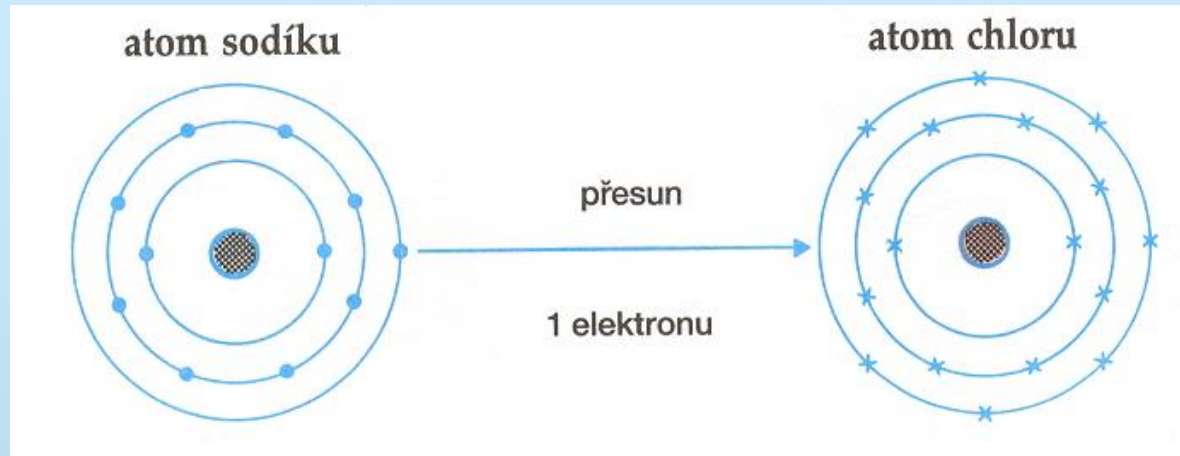
Iontová vazba

**zjednodušená představa o úplném
přenosu náboje a elektrostatickém
charakteru vazby**

**(přitahování opačně nabitých iontů a
odpuzování shodně nabitých iontů)**

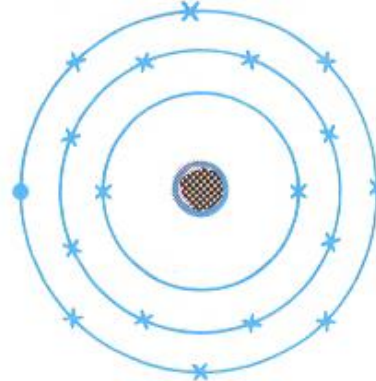
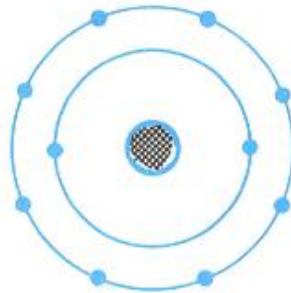
kovalentní podíl vazby je zanedbán

Vznik iontů



sodný kation, Na^+

chloridový anion, Cl^-



ionty se zcela zaplněnými valenčními vrstvami

Oxidoredukční děj

Oxidace

děj, při kterém atomy
ztrácejí elektrony

Redukce

děj, při kterém atomy
získávají elektrony

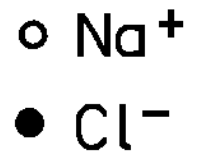
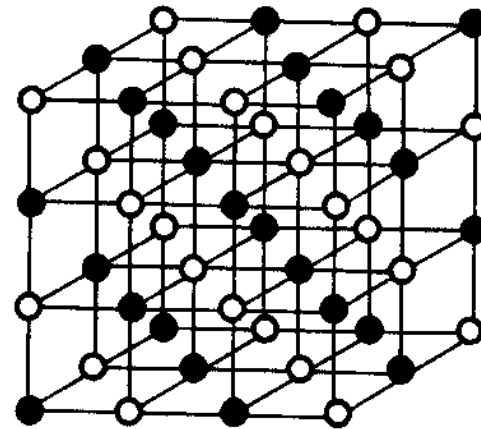
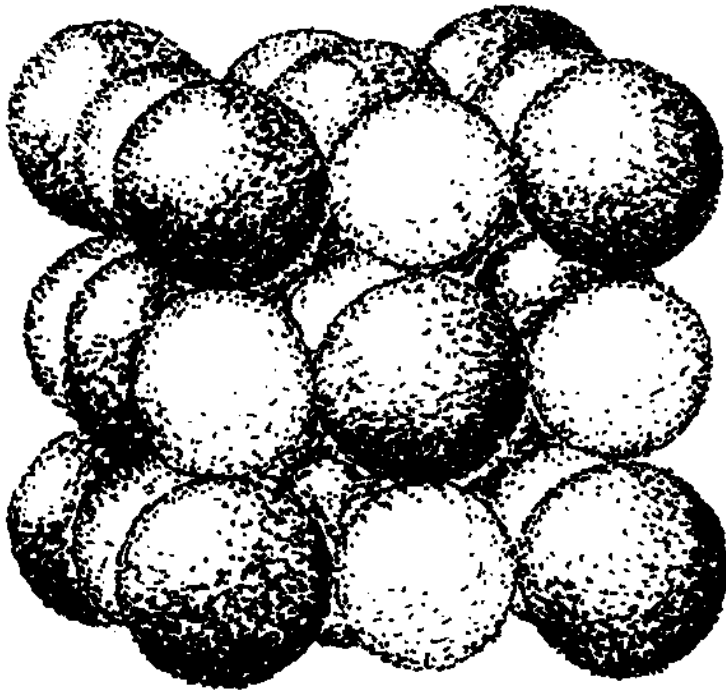
Iontová vazba

**převládá elektrostatický charakter vazby
(směrová nespecifičnost) nad
směrovostí kovalentní vazby**

Iontové krystaly

**nelze rozlišit molekuly, každý iont je
obklopen ionty opačně nabitými,
krystal je vlastně makromolekula**

Chlorid sodný



Koordináčně - kovalentní vazba

vazba donor - akceptorová

vzniká mezi atomy, molekulami nebo ionty

obdoba kovalentní vazby, liší se pouze vznikem

oba elektrony do MO poskytuje pouze jedna částice (donor), druhá částice (akceptor) poskytuje pouze prázdné AO

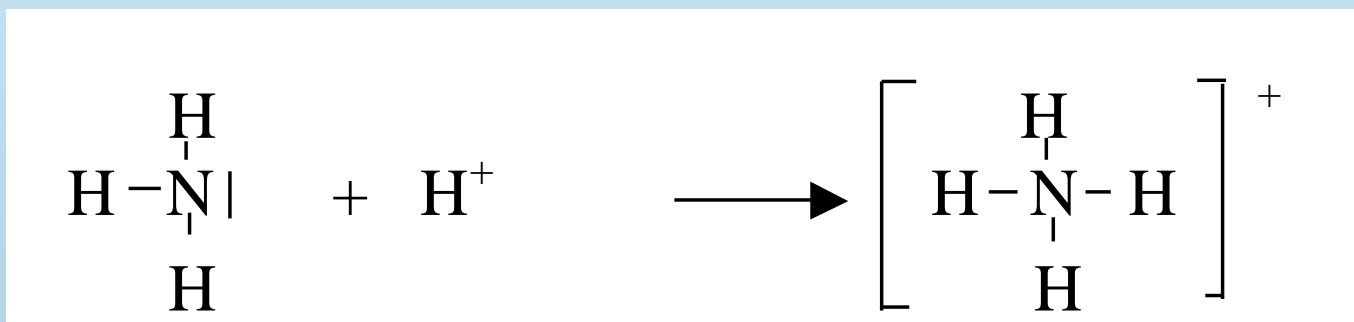
Uplatnění

koordinální (komplexní) sloučeniny, kde akceptorem je tzv. centrální atom (většinou atom přechodného kovu), donorem jsou ligandy (molekuly, ionty)

sloučeniny elektronově deficitních prvků (B, Al), molekuly s nevazebným elektronovým párem (NH_3)

Příklad kationt $[\text{NH}_4]^+$

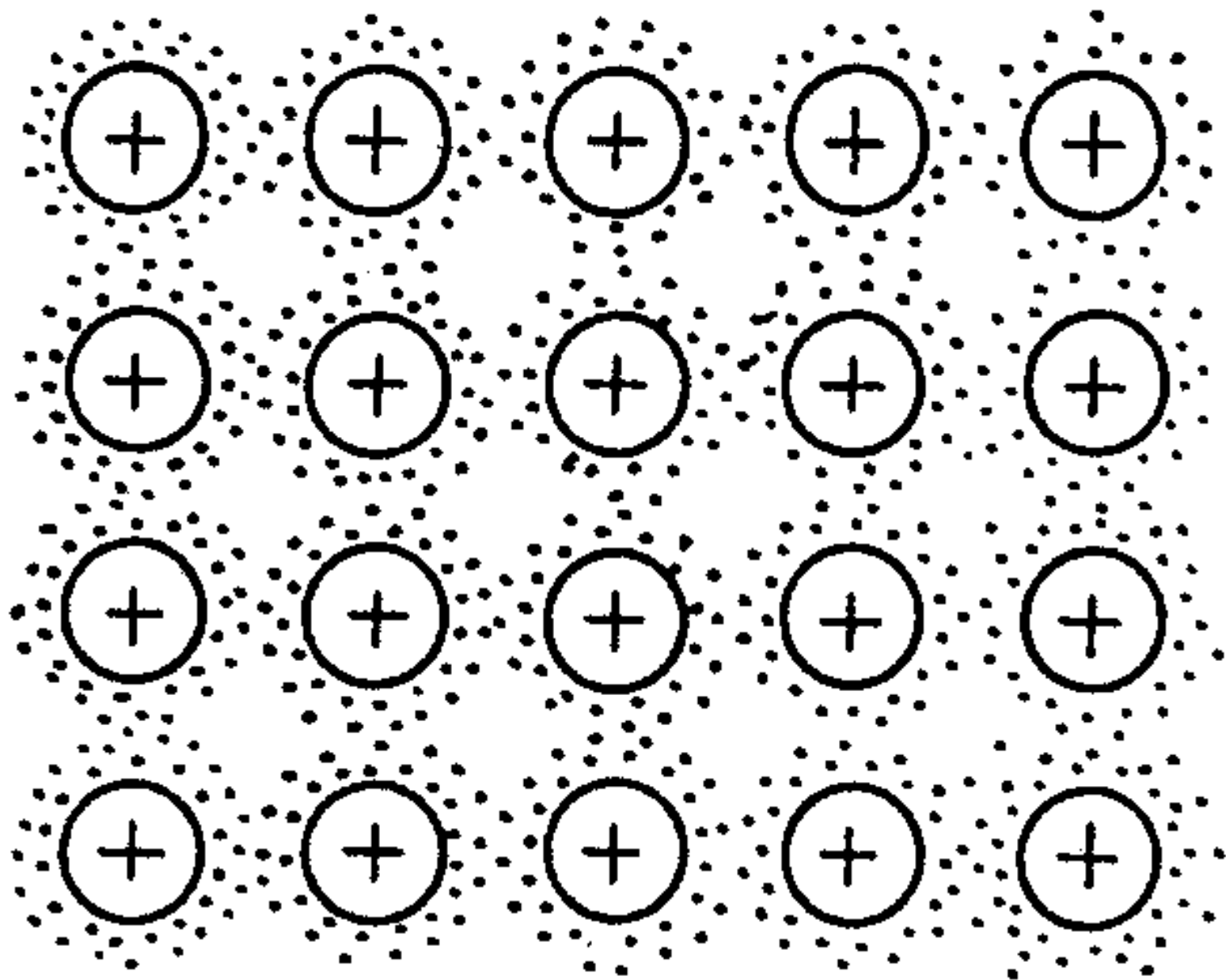
na dusíku je nevazebný elektronový pár,
iont H^+ má pouze prázdný AO 1s

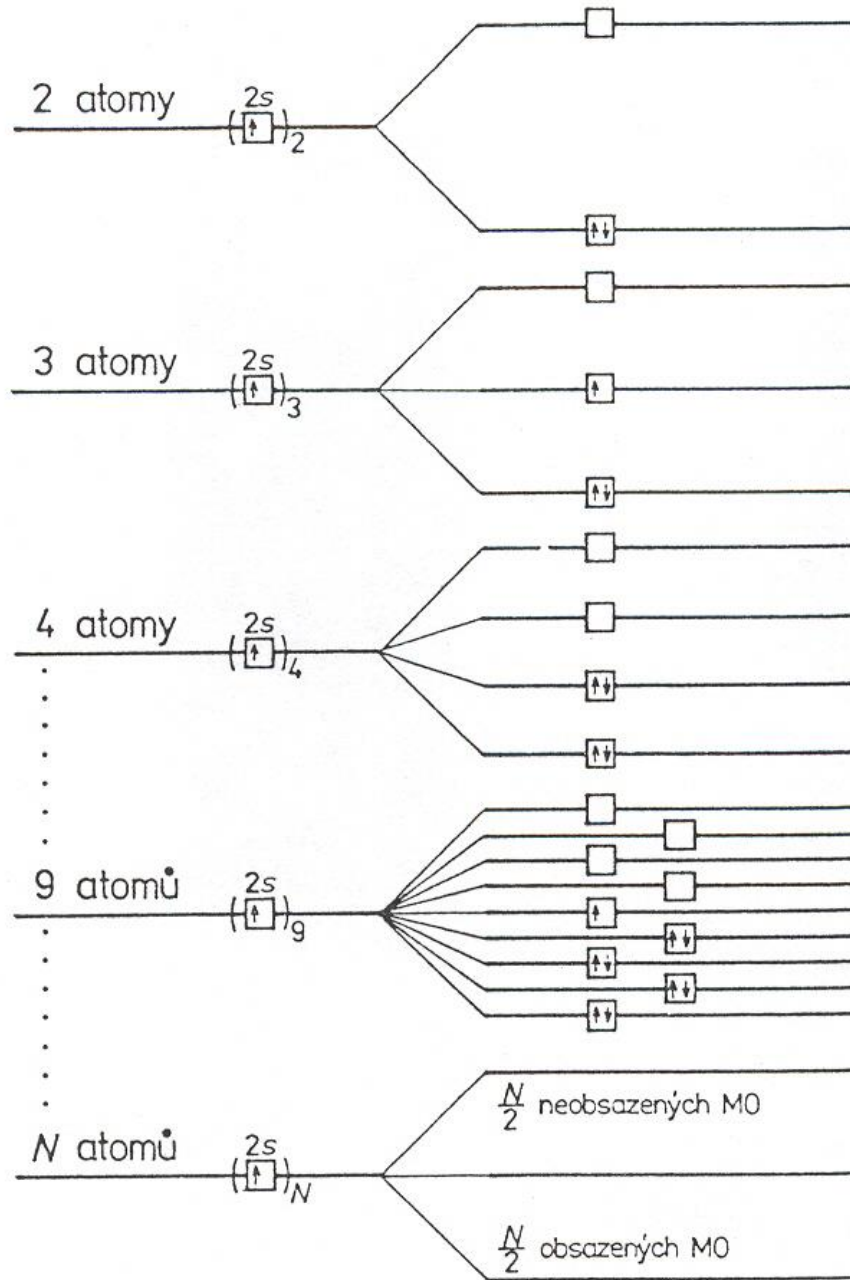


Všechny čtyři vazby N - H jsou ve výsledném kationtu ekvivalentní

Kovová vazba

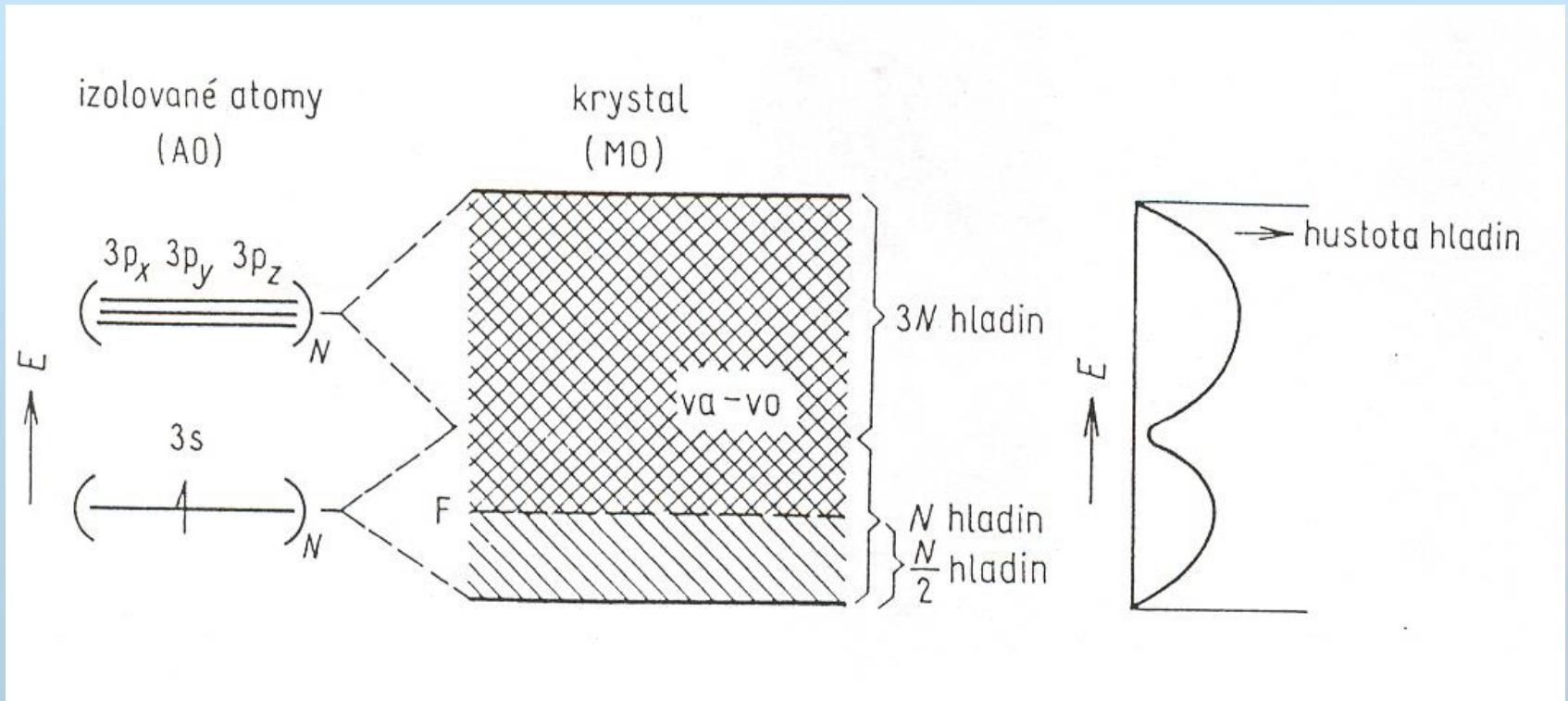
**Představa pravidelně uspořádaných
kationtů kovu obklopených
delokalizovanými elektrony
uvolněnými z valenčních vrstev
atomů (elektronový plyn)**



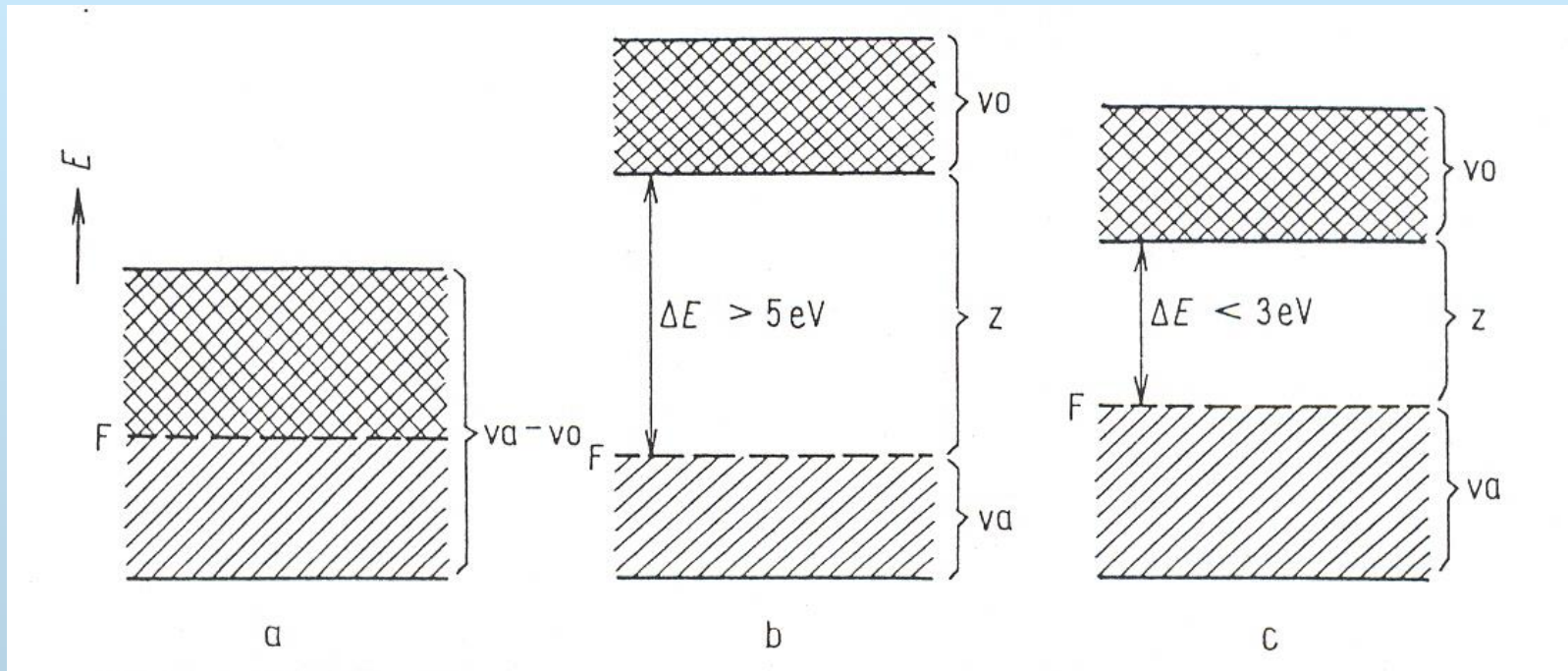


N blízkých energetických hladin splývajících v energetický pás

Sodík



Pásový model



kov

izolant

polovodič

Síla kovové vazby závisí na počtu elektronů, které se uvolní z atomu kovu do elektronového plynu

Důsledky kovové vazby:

Vysoká elektrická vodivost

- klesá s růstem teploty

Vysoká tepelná vodivost (pohyb elektronů)

Absorpce fotonů - neprůhlednost

Mechanické vlastnosti - kujnost a tažnost

Faktory ovlivňující energii a délku vazby

**Energie vazby se udává v kJ mol^{-1}
a je přibližně úměrná řádu vazby**

**Energie vazby vzrůstá s klesající
hodnotou vazebné vzdálenosti
a obráceně.**

Vzdálenosti mezi atomy v organických látkách

	energie [kJ mol ⁻¹]	délka [nm]
C-C	343	0,154
C=C	616	0,133
C≡C	812	0,121
C-N	293	0,147
C=N	616	0,122
C≡N	879	0,115

Další vybrané vazby

	energie [kJ mol ⁻¹]
C-O	343
C=O	708
C-H	414
O-H	465
Si-O	368
Si-H	293
Si-C	289

Délka vazby

**Délka vazby je rovnovážná vzdálenost
mezi středy atomů spojených vazbou**

**Elektronový obal atomů a iontů je difúzní,
jejich poloměr nemá fyzikální smysl**

**Reálný význam má pouze vzdálenost
mezi jádry atomů**

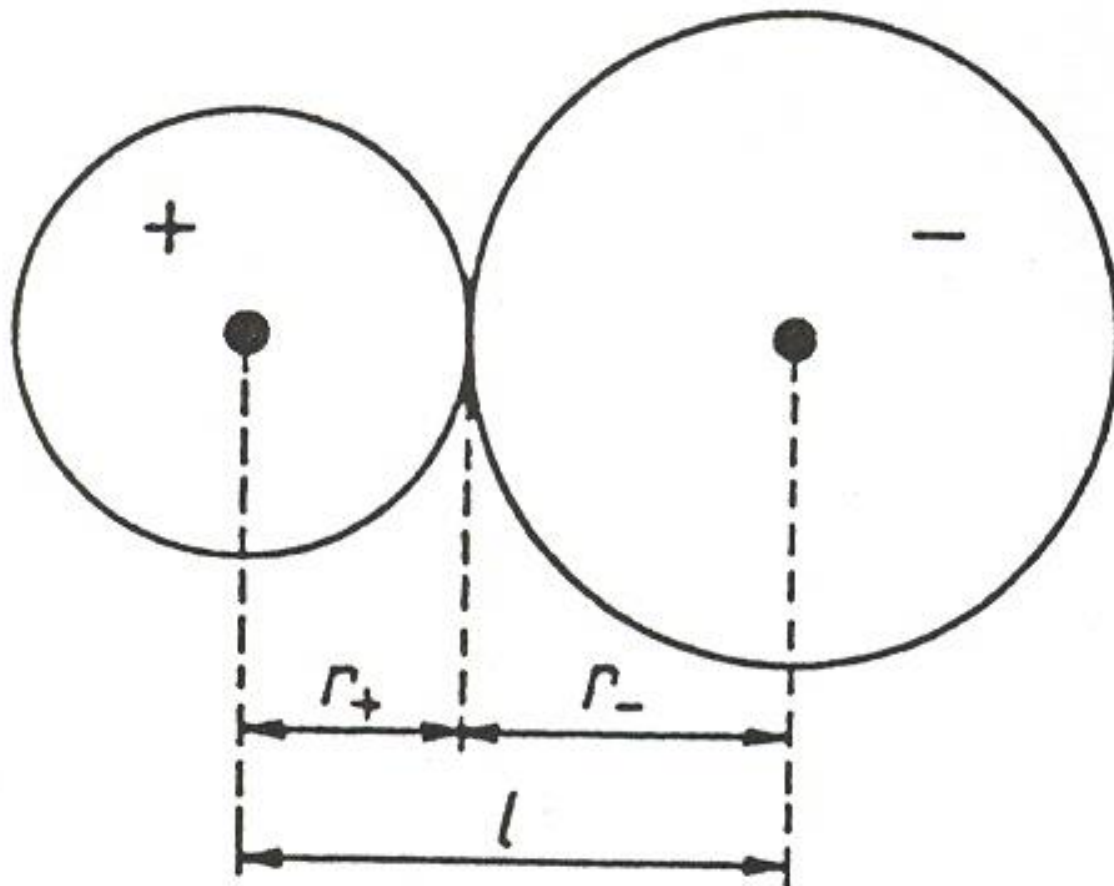
Délka vazby

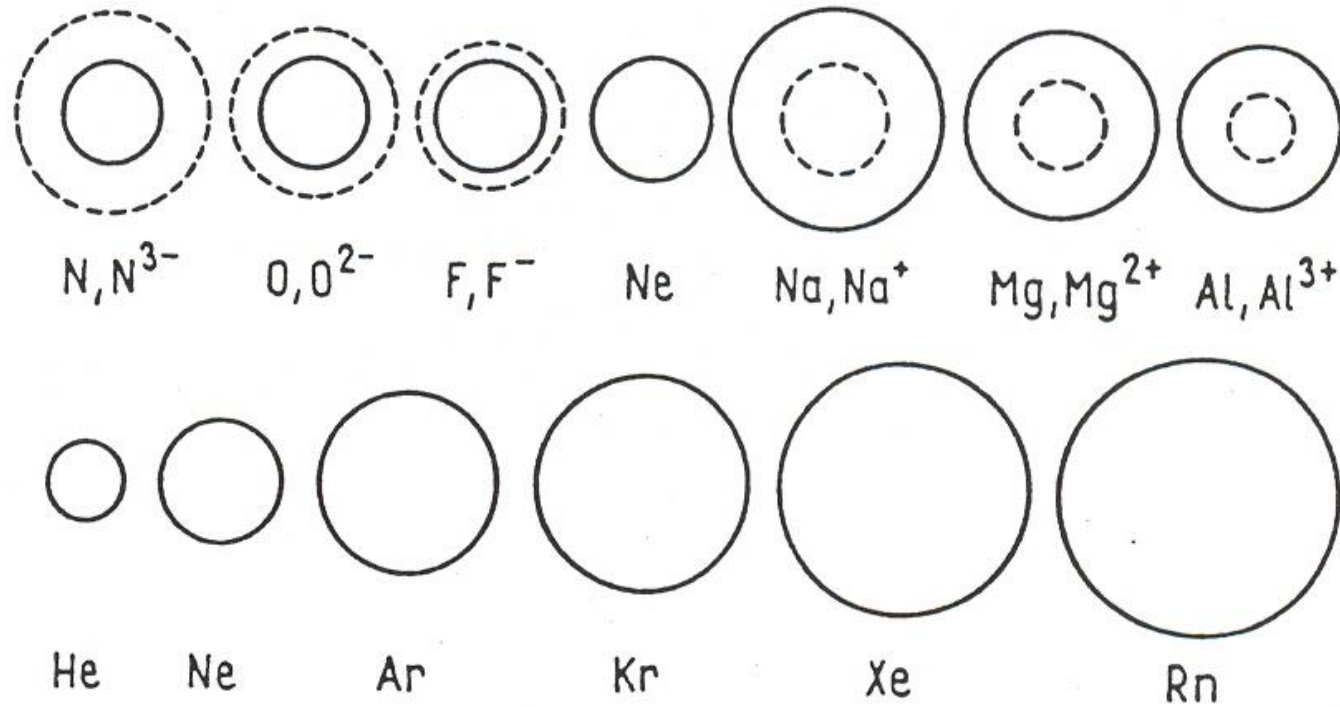
kovalentní sloučeniny

**součet kovalentních poloměrů
atomů (závislost na řádu vazby)**

iontové sloučeniny

součet iontových poloměrů





Neon 0,16 nm