

MT 5 : CHEMICKÁ VÄZBA A ŠTRUKTÚRA LÁTOK

Snahou všetkých systémov je dosiahnuť stav s **čo najnižšou energiou** a **čo najväčšou stabilitou**. Najstabilnejšia elektrónová konfigurácia atómov má valenčné orbitály celkom zaplnené alebo prázdne. Takýto stav atómy dosiahnu ak **príjmu alebo odovzdajú elektrón – vytvorí ión** alebo **vytvoria spoločný elektrónový pár s iným atómom – vznik molekuly**

Molekula je elektroneutrálna skupina dvoch alebo viacerých atómov navzájom spojených chemickou väzbou. Molekuly rozdeľujeme na homonukleárne, ktoré obsahujú iba jeden druh prvku (H_2 , O_2 ,...) a heteronukleárne, ktoré obsahujú rôzne atómy ($NaCl$, HCl ,...)

Molekulové ióny sú kladne alebo záporne nabité molekuly stále vo vodnom roztoku alebo v kryštalickej štruktúre (NH_4^+)

Chemická väzba je interakcia pútajúca k sebe zlúčené atómy prvkov v molekule (alebo iónov v kryštáli) prostredníctvom **valenčných elektrónov**. Chemické väzby vznikajú a zanikajú počas chemických reakcií pri čom sa **pri ich tvorbe uvoľní väzbová energia**. Na rozštiepenie chemickej väzby je potrebné dodať **disociačnú energiu**. Kvantitatívne sa väzbová energia rovná disociačnej (zákon zachovania energie) ale odlišujú sa znamienkom. Ich spoločnou mernou jednotkou je $kJ.mol^{-1}$. **Čím je väzbová energia väčšia, tým je väzba stabilnejšia.**

Podstatou vzniku je vytvorenie **spoločného elektrónového páru** na valenčnej vrstve z nespárených atómov, ktorý je **spoločný pre všetky atómy chemickej väzby**. **Voľné elektrónové páry** sa nepodieľajú na chemickej väzbe.

Vznik chemickej väzby podmieňuje:

1. Atómy sa musia k sebe priblížiť natoľko, aby došlo k prekrytiu **valenčných orbitálov**.
2. Elektróny v elektrónovom obale musia byť usporiadané tak, aby mohlo dôjsť k vytvoreniu väzbových elektrónových párov – musia mať **opačný spin**.

Molekula H_2 je tvorená dvoma atómami vodíka. **H – H**

H_1 prvý vodík má v elektrónovom obale jeden elektrón ↓

H_2 druhý vodík má v elektrónovom obale tiež len jeden elektrón ale s opačným spinom ↑

Tieto dva elektróny s opačným spinom sa spárujú a vytvorí medzi dvoma vodíkmi chemickú väzbu.

Väzbový uhol je uhol medzi väzbami (spojnicami jadier viazaných atómov) vychádzajúcich z toho istého atómu

Elektrónová teória chemickej väzby

Podľa elektrónovej teórie chemická väzba vzniká vtedy **ak dôjde k prerozdeleniu elektrónov v ich valenčných vrstvách**. U každého atómu, ktorý sa zúčastňuje chemickej väzby vznikne **stabilná elektrónová konfigurácia** (oktet alebo dublet, ak ide o molekulu vodíka H_2).

Vznik chemickej väzby opisujú mnohé teórie:

Kvantovomechanická teória chemických väzieb vychádza z kvantovo mechanického modelu atómu. Pod chemickou väzbou rozumieme také **vzájomné interakcie medzi atómami, ktorých podstatou je prerozdelenie elektrónovej hustoty valenčných elektrónov v oblasti, ktorá sa nachádza medzi atómovými jadrami viažucich sa atómov**. Pri vzniku chemickej väzby dochádza k uvoľňovaniu energie. Molekula má nižšiu energiu ako atómy, z ktorých vznikla.

E_0 – je **väzbová energia**, ktorá sa uvoľní pri vzniku chemickej väzby.

d_0 – **dĺžka chemickej väzby**. Je to vlastne vzdialenosť medzi dvoma atómovými jadrami, medzi ktorými väzba vznikla. Najčastejšie sa vyjadruje v nm (v nanometroch).

V sústave, ktorá je charakterizovaná väzbovou energiou E_0 a medzijadrovou vzdialenosťou d_0 je molekula vodíka H_2 najstabilnejšia. V oblasti, ktorá sa nachádza medzi jadrami dochádza k zväčšeniu **elektrónovej hustoty**. Elektrónová hustota sa **zväčšuje v dôsledku prekryvania valenčných orbitálov** (vodíka H_1 a H_2). Elektróny už nie je možné rozlišovať, sú pod vplyvom oboch jadier v rovnakej miere – medzi atómami vodíka vznikla kovalentná väzba H-H.

Typy chemických väzieb

Kovalentná väzba je tvorená dvoma elektrónmi, ktoré majú opačné spiny. Pri vzniku kovalentnej väzby **dochádza k prekrytiu valenčných atómových orbitálov viazaných atómov**. V oblasti medzi jadrami sa zväčšuje elektrónová hustota. V dôsledku zväčšenia elektrónovej hustoty sa znižuje energia systému - vzniká stabilná molekula (molekula je stabilnejšia ako voľné atómy). Kovalentná väzba má **smerný charakter – orientuje sa do smeru maximálneho prekrytia atómových orbitálov viažúcich sa atómov**. Atómy, ktoré tvoria molekulu **spoločne vlastnia jeden alebo viacej valenčných elektrónov**, tak aby každý z interagujúcich atómov mal vo svojej valenčnej vrstve **elektrónový oktet** (8 elektrónov). Kovalentná väzba vzniká medzi rovnakými atómami (H_2 , Cl_2), a medzi rôznymi atómami, (HCl , H_2O , NH_3)

Kovalentnú väzbu rozdeľujeme na **jednoduchú** – napríklad v molekule Cl_2 ($Cl-Cl$) **Dvojitú** – napríklad v molekule O_2 ($O=O$) a **trojitú** – napríklad v molekule N_2

Počet väzbových párov toho istého atómu udáva **väzbovosť**, chlór je v molekule Cl_2 **jednoväzbový** – je viazaný jednou väzbou, kyslík v molekule O_2 je **dvojjväzbový** – je viazaný dvojitou väzbou, dusík v molekule N_2 je **trojjväzbový**, pretože sa viaže trojitou väzbou, v molekule metánu CH_4 je uhlík **4 – väzbový** pretože sa viaže so 4 väzbami a vodík je **jednoväzbový**.

Elektronegativita vyjadruje schopnosť atómu pútať väzbový elektrónový pár. Čím má prvok vyššiu hodnotu elektronegativity, tým má vyššiu schopnosť pútať väzbový elektrónový pár. Rozdiel hodnôt elektronegativít viazaných prvkov určuje či je väzba:

Nepolárna – rozdiel elektronegativít je ΔX je z intervalu $< 0 - 0,4$). Napríklad: O_2 , Cl_2

Polárna – rozdiel elektronegativít je ΔX je z intervalu $< 0,4 - 1,7$). Napríklad: H_2O

Iónová - rozdiel elektronegativít je ΔX je väčší ako 1,7. Napríklad: $NaCl$.

Iónová väzba sa chápe ako extrémny prípad polárnej kovalentnej väzby. Iónová väzba nie je smerovo orientovaná.

Napríklad $NaCl$. Molekula $NaCl$ je tvorená iónmi Na^+ a Cl^- . Medzi vzniknutými iónmi sú silné elektrostatické príťažlivé sily, ktoré sú podstatou vzniku iónovej väzby $Na^+ + Cl^- \rightarrow NaCl$. Väzbový elektrónový pár patrí výlučne elektronegatívnejšiemu atómu.

Kovalentná väzba sigma σ a pí π

σ väzba vzniká prekrytím atómových orbitálov, ktoré sú **lokalizované na spojnici jadier viažúcich sa atómov**. Elektrónová hustota je **lokalizovaná okolo spojnice jadier**. Vzniká prekrytím orbitálov **s a s, s a p, p a p**.

Väzba π vzniká prekrytím atómových orbitálov **mimo spojnice atómových jadier - nad a pod alebo pred a za spojnicou atómových jadier**. Elektrónová hustota je **lokalizovaná mimo spojnice jadier**. Na spojnici jadier je elektrónová hustota nulová. Táto väzba vzniká pri prekryvaní orbitálov **p a p, p a d, d a d**, ktoré sú orientované kolmo na spojnicu jadier atómov.

Ak sú atómy v molekule viazané **jednoduchou väzbou jedná sa o väzbu sigma**. Ak sú atómy viazané **násobnou väzbou napríklad dvojitou, jedna z väzieb je sigma a druhá pí väzba**. Ak sú atómy viazané **trojitou väzbou, jedna väzba je sigma a dve sú pí väzby**.

Rozdiel medzi väzbou sigma a väzbou pí spočíva v pevnosti (dôsledok rôznej veľkosti prekrytia atómových orbitálov). **Väzba pí je slabšia ako väzba sigma**.

Koordináčna väzba vzniká pri **prekrytí orbitálu jedného atómu, ktorý obsahuje elektrónový pár s prázdny orbitálom druhého atómu**. Častica, ktorá poskytuje elektrónový pár – **donor**. Častica, ktorá prijíma elektrónový pár – **akceptor** – preto koordináčnu väzbu nazývame aj **donorno – akceptorná väzba**. Vytvárajú ju hlavne d – prvky. Koordináčnou väzbou sa vytvára štruktúra, ktorá má **v strede centrálny atóm**, na ktorý sú **naviazané skupiny atómov koordináčnou väzbou**.

Kovová väzba vzniká v kovoch. V kovovej štruktúre **atómy strácajú zo svojej valenčnej vrstvy elektróny a stávajú sa kladne nabitými iónmi**. Valenčné elektróny vytvárajú **nové energetické hladiny**, ktoré sa rozprestierajú **po celej kryštálovej štruktúre a tvoria takzvané energetické pásy**. Väzbu v kryštálovej štruktúre kovu si môžeme predstaviť ako **množstvo pohyblivých elektrónov, ktoré sa nachádzajú okolo kladne nabitých iónov**. Kovová štruktúra je **pevná kvôli pôsobeniu príťažlivých síl medzi pohyblivými elektrónmi a kladnými iónmi**. Napríklad: v železe, v medi, v hliníku a podobne. Kryštály majú veľmi dobrú tepelnú a elektrickú vodivosť, povrchový lesk, v hrubších vrstvách sú nepriehľadné. Nedajú sa štiepiť, niektoré z nich sa vyznačujú dobrou kujnosťou a ťažnosťou.

Vodíkovú väzbu nazývame aj vodíkový mostík. Ide o istý druh slabej interakcie medzi molekulami. Je slabšia ako kovalentná, ale silnejšia ako väčšina medzimolekulových síl.

Vznik vodíkovej väzby: Vodík má iba jeden elektrón. Pri vytvorení väzby k elektronegatívnemu prvku dochádza k **značnému odhaleniu atómového jadra** vodíka. **Čiastočný kladný náboj**, ktorý vznikol takto na atóme vodíka **viaže neväzbové elektrónové páry okolitých molekúl** (v prípade intramolekulových väzieb ide o elektrónové páry rovnamej molekuly).

Vznik vodíkovej väzby je možný iba u veľmi elektronegatívnych prvkov, akými sú napríklad fluór, kyslík a dusík.

V dôsledku vodíkovej väzby sa **menia aj fyzikálne vlastnosti zlúčenín**. Mení sa **teplota varu, teplota topenia, viskozita a podobne**. Napríklad vodíková väzba je prítomná vo vode, kvôli tomu má voda vysokú teplotu varu. Vodíková väzba sa nachádza aj v amoniaku NH_3 alebo v HF – fluorovodíku. **Vďaka vodíkovým väzbám môžu vznikáť napríklad "dvojité závitnice" nukleových kyselín a môžu sa prenášať genetické informácie.**

V dôsledku vodíkových väzieb má tuhá voda (ľad) štruktúru s veľkými dutinami

Van der Waalsova väzba je slabá väzba typická pre **kryštály prvkov**, ktoré sú stabilné iba pri veľmi nízkych teplotách. Podstatou je **vzájomné pôsobenie molekulových dipólov**. Van der Waalsove sily sa prejavujú priťahovaním opačných pólův molekúl alebo priťahovaním nábojov iónův. Látky, v ktorých štruktúre dochádza k pôsobeniu Van der Waalsových síl, **sú prchavé, niekedy sublimujú z pevného skupenstva priamo do plynného skupenstva**. Takýmito látkami sú napríklad naftalén, jód, bróm.

Indukčný efekt (I) je posun elektrónov na σ - väzbách v molekule, vyvolaný prítomnosťou polárnej kovalentnej väzby. Záporný – I efekt spôsobuje atóm, ktorý je elektronegatívnejší ako atóm uhlíka, teda silnejšie priťahuje k sebe väzbové elektróny, v opačnom prípade ide o kladný indukčný efekt + I.)

Mezoméryny efekt (M) je posun elektrónov po π - väzbách v konjugovaných systémoch alebo v aromatických zlúčeninách.

Ak atóm alebo skupina atómov v organickej zlúčenine spôsobuje zvyšovanie elektrónovej hustoty medzi uhlíkmi a násobnou väzbou, hovoríme o kladnom + M efekte. V opačnom prípade, pri znižovaní elektrónovej hustoty medzi uhlíkmi aromatického systému, ide o záporný – M efekt.

Kryštál

Kryštalické látky sú charakterizované **pravidelným usporiadaním častíc** z ktorých sa skladajú. Monokryštály majú vo svojom vnútri častice usporiadané tak, že isté rozloženie častíc sa pravidelne opakuje v celom kryštáli. **Monokryštály** v prírode sú **napr. kamenná soľ, kremeň, diamant, granát**. Umelo vytvorené monokryštály sú napr. **germánium, kremík, umelé drahokamy**.

