

Chemická vazba

Spojení atomů prvků v molekule
valenčními elektrony

1

Elektronová teorie

„Oktetové pravidlo“ (Kossel, Lewis, 1916)

- sdílení 2 valenčních e⁻ opačného spinu 2 atomy za vzniku stabilní elektronové konfigurace vzácného plynu

platí pro řadu sloučenin
prvků 2. a 3. periody

2

Pevnost vazby → vazebná energie

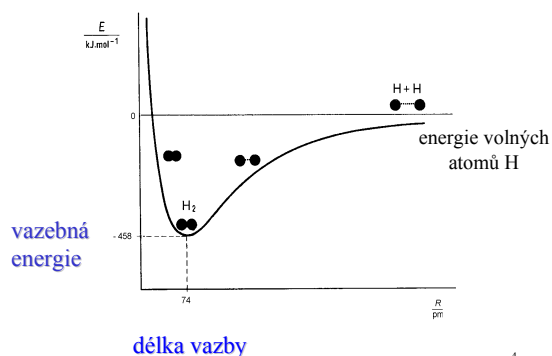
- uvolní se při vzniku chemické vazby
- molární vazebná energie: 150 – 1000 kJ/mol
- **disociační energie**: nutno dodat k rozštěpení vazby

Délka vazby

= rovnovážná vzdálenost mezi jádry atomů spojených chemickou vazbou

3

Molekula vodíku



4

Jak spolu souvisí násobnost, pevnost a délka chemické vazby?

Vazba	Vazebná energie (kJ/mol)	Délka vazby (nm)
C–C	347	0,154
C=C	598	0,133
C≡C	820	0,120

5

Vazebná energie

- vazby C=C < **dvojnásobek** vazby C–C
- vazby C≡C < **trojnásobek** vazby C–C

Délka vazby

- násobné < jednoduché
- dvojný > **polovina** jednoduché
- trojný > **třetina** jednoduché

Vazebná energie **klesá s délkou vazby.**

6

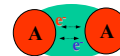
Vazebná energie mezi atomy uhlíku v ethenu je

- a) menší než energie jednoduché vazby
- b) menší než dvojnásobek energie jednoduché vazby
- c) rovna dvojnásobku energie vazby jednoduché
- d) větší než dvojnásobek jednoduché vazby

7

Základní typy chemické vazby

Kovalentní vazba (nekovové prvky)



Iontová vazba: elst. síly mezi kationtem a aniontem
v krytalové mřížce iontových sloučenin



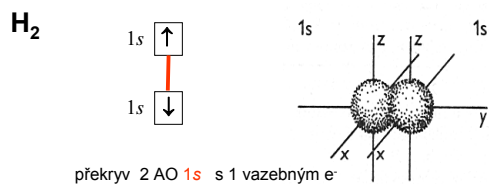
Kovová vazba: kationty kovů v prostorové mřížce udržované ve své poloze valenčními e- (tzv. „e- plynem“)

8

Typy kovalentní vazby dle vzniku vazby

a) Jednoduchá kovalentní vazba

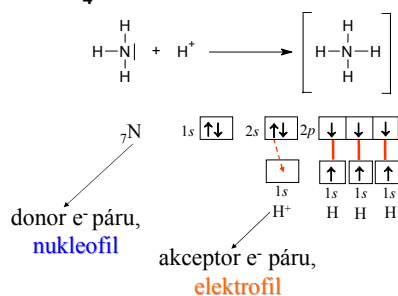
- sdílení 1 vazebného e- páru mezi 2 atomy
- každý atom poskytuje 1 vazebný e-



9

b) Koordinačně kovalentní (koordinační, dativní, donor-akceptorová)

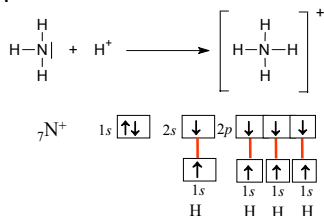
vznik **NH₄⁺**



10

b) Koordinačně kovalentní (koordinační, dativní, donor-akceptorová)

vznik **NH₄⁺**



11

Teorie molekulových orbitalů (MO)

Stav e- v molekule: popisuje vlnová funkce = MO

Vazebné MO – nižší energie než původní AO

Antivazebné MO* – vyšší energie než původní AO

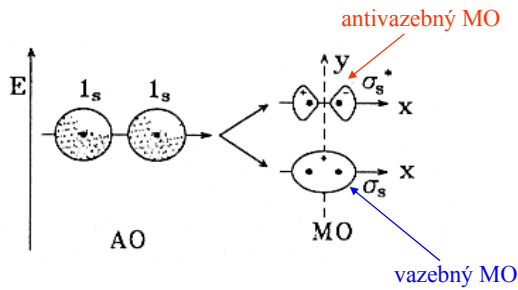
Nevazebné MO – energie ≈ stejná jako původních AO

Počet MO ≈ počtu AO podílejících se na vzniku vazby

- Platí stejná pravidla jako při zaplňování AO

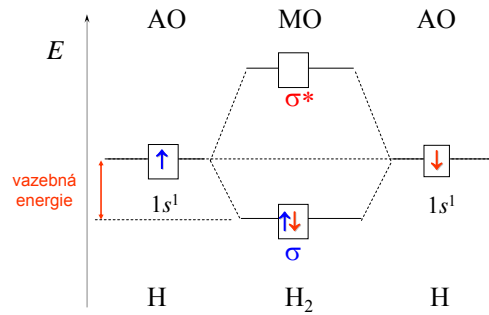
12

Vznik MO v molekule vodíku



13

Vznik MO v molekule vodíku



14

Řád vazby = $\frac{1}{2}$ (počet e^- v MO – počet e^- v MO*)

• udává násobnost vazby, tzn. i její pevnost

H_2 :

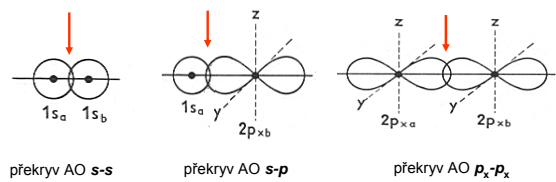
MO: $(\sigma 1s)^2$

Řád vazby $H_2 = \frac{1}{2} (2 - 0) = 1 \dots$ jednoduchá vazba: H-H

15

Kovalentní vazba

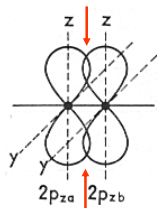
vazba σ – max. překryv vazebných e^- na spojnici jader atomů



16

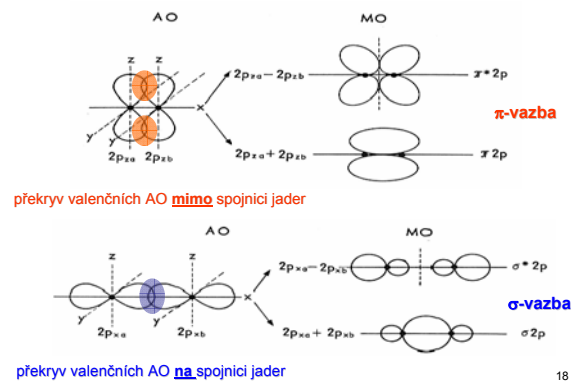
Kovalentní vazba

vazba π – max. překryv vazebných e^- mimo spojnici jader atomů



17

MO vzniklé překryvem valenčních p-AO



18

Kovalentní vazba

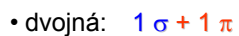
Jednoduchá

- sdílení 1 vazebného e⁻ páru mezi 2 atomy



Násobná

- sdílení 2 či 3 vazebných e⁻ párů mezi 2 atomy



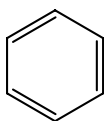
19

- Jaké typy vazeb se vyskytují v molekule dusíku?

molekula dusíku N_2

20

- Kolik π -elektronů obsahuje molekula benzenu?



21

- Kolika svými valenčními elektrony se podílí každý z atomů uhlíku v molekule ethynu na vzniku kovalentních vazeb ?

22

- Na kolika kovalentních vazbách σ se podílí každý z atomů uhlíku v molekule ethenu?

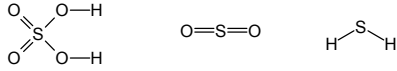
23

Vaznost atomu (prvku)

- počet kovalentních vazeb, na nichž se atom (prvek) v dané sloučenině podílí
- počet vazebných e⁻ párů

24

🔥 Určete vaznost síry v následujících sloučeninách.



25

🔥 Jaká je vaznost dusíku v NH_4^+ ?

26

Struktura molekul

Teorie hybridizace

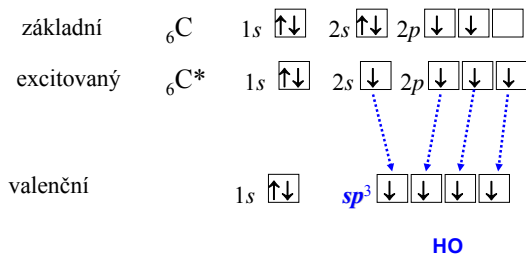
27

Hybridní orbitaly (HO)

- získáme matematicky lineární kombinací AO (LCAO) valenční vrstvy centrálního atomu
- jsou **degenerované**
- počet HO = počtu původních AO
- **mají jinou prostorovou orientaci než původní AO**

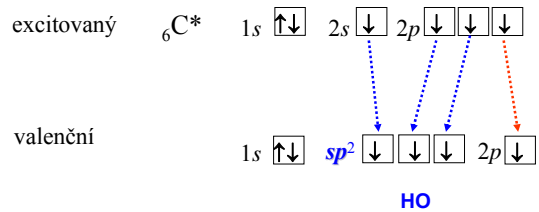
28

Stavy atomu C



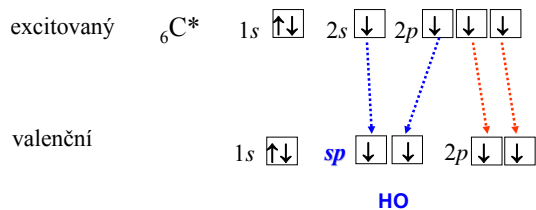
29

Stavy atomu C



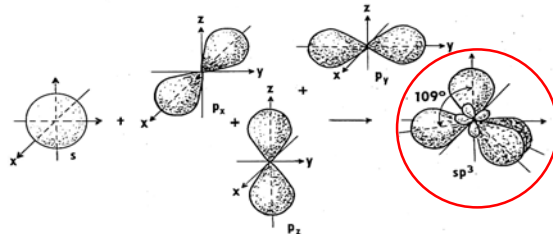
30

Stavy atomu C



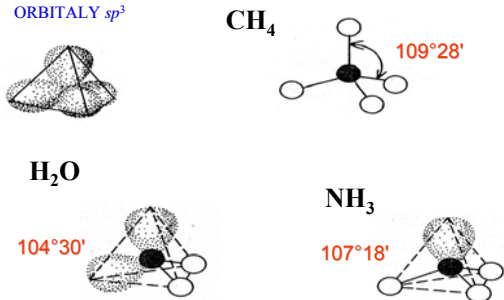
31

Hybridizace sp^3



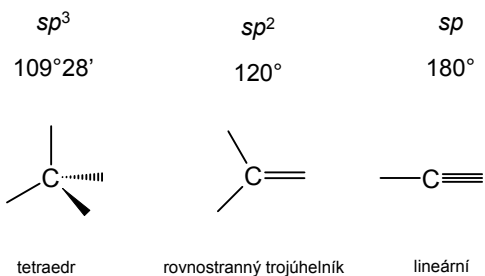
32

HYBRIDNÍ ORBITALY sp^3



33

Hybridizace sloučenin uhlíku



34

Hybridizace valenčních orbitalů středového atomu typu sp podmiňuje tvar molekuly

- lineární
- planární
- tetraedrální
- bipyramidální

35

Elektronegativita X

- míra schopnosti atomu přitahovat sdílený e^- pár

	H			
	2,2			
Li		C	N	O
1,0		2,5	3,1	3,5
				F
				4,1
				Cl
				3,0
	Ca			
	1,0			
Cs				
0,7				

36

🔥 Který ze čtyř uvedených prvků má nižší hodnotu elektronegativity než ostatní tři?

- a) N b) O c) P d) S

37

Polarita vazeb a molekul

Polarita vazby → iontový charakter vazby

ΔX	Vazba
$< 0,4$	nepolární (< 5 % iontovosti)
$0,4 - 1,7$	polární
$> 1,7$	iontová (> 50 % iontovosti)

ΔX ... rozdíl elektronegativit vázaných atomů

38

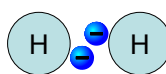
🔥 Určete typicky iontovou sloučeninu:

- a) HCl b) CO₂ c) H₂O d) CaO

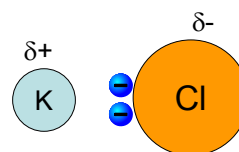
- a) HBr b) SiO₂ c) KBr d) H₂S

39

Rozdělení elektronové hustoty kolem jader



souměrné



nesouměrné

40

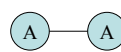
🔥 Pro polaritu vazby je rozhodující

- a) počet sdílených elektronů
b) energie vazebných elektronů
c) délka kovalentní vazby
d) rozdíl elektronegativit atomů

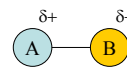
41

Dipólový moment

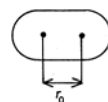
• míra polarity $\mu = r_0 \cdot q$



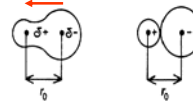
$\Delta X = 0$



$\Delta X > 0$



nepolární



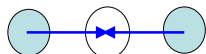
polární $\vec{\mu} > 0$ iontová

42

Polarita 3 a víceatomových molekul

- vektorové skládání dipólů vazeb

• CO₂

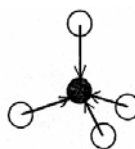


$$\Delta X = (3,5 - 2,5) = 1,0 \quad \text{vazba C=O polární}$$

$$\mu = 0 \quad \text{molekula nepolární}$$

43

• CCl₄



$$\mu = 0 \quad \text{molekula nepolární}$$

$$\Delta X = (3,0 - 2,5) = 0,5$$

$$\text{vazba C-Cl polární}$$

44

• HCN



$$\mu = \mu_{\text{H-C}} + \mu_{\text{C}\equiv\text{N}} \neq 0 \quad \text{molekula polární}$$

vazba

C-H nepolární $\Delta X = 0,3$

C≡N polární $\Delta X = 0,6$

45

• Je molekula vody polární?

46

Mezimolekulové síly

- slabé nevazebné interakce**

energie interakcí \ll energie jednoduché kovalentní vazby
(150 – 300 kJ/mol)

- vodíkové můstky**
- van der Waalsovy síly** (elektrostatické síly + disperzní síly)
- hydrofobní interakce** (mezi nepolárními molekulami ve vodném prostředí)

47

Vodíkové vazby/můstky

- nejsilnější z nevazebných interakcí (10 – 30 kJ/mol)
- sloučeniny s atomem H vázaným na atom **N, O, F**
- silná polarita vazeb H-F, H-O, H-N
- důsledek: $\uparrow T_t$, $\uparrow T_v$, objemová kontrakce ethanolu, rozpustnost, párování bází (A = T, G \equiv C)

48

Reakční kinetika

Rychlost chemických reakcí

55

Srážková teorie (Arrhenius)

Reakce proběhne dojde-li

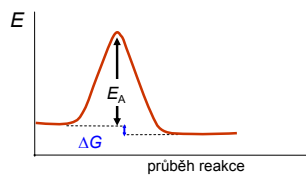
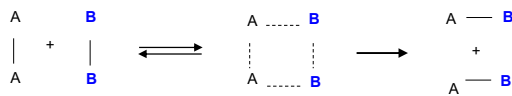
- k vzájemné srážce molekul výchozích látek
- vhodně prostorově orientovaných
- s kinetickou energií větší než aktivační energie

Platí pro reakce spontánní ($\Delta G < 0$) !

56

Teorie aktivovaného komplexu

• přechodný vznik nestálého „aktivovaného komplexu“



57

Rychlost chemické reakce



$$v = -\frac{\Delta n_A}{a \cdot \Delta t} = -\frac{\Delta n_B}{b \cdot \Delta t} = \frac{\Delta n_C}{c \cdot \Delta t} = \frac{\Delta n_D}{d \cdot \Delta t}$$

$\Delta t \rightarrow 0$ okamžitá (aktuální) rychlost
 $\Delta t >> 0$ průměrná rychlost

Proč minus?

58

Rychlost chemické reakce



kinetická rovnice

$$v = k [A]^a [B]^b$$

$$v = k [A]^\alpha [B]^\beta$$

kde k ... rychlostní konstanta

celkový řád reakce $r = \alpha + \beta$

59

☛ Kdy rychlost reakce se rovná rychlostní konstantě ($v = k$)?

$$v = k [A]^a [B]^b$$

60

Arrheniova rovnice

⇒ závislost rychlosti reakce na teplotě

$$k = A e^{-\frac{E_A}{RT}}$$

A srážkový faktor ($A = Z \cdot P$)

Z ... počet srážek mezi molekulami reaktantů

P ... pravděpodobnost vhodné orientace molekul při srážce

E_A aktivační energie, R plynová konstanta, T teplota

e základ přirozených logaritmů (2,718)

61

☞ Jak se změní rychlost reakce při zvýšení teploty o 10 °C (složení je konstantní)?

rychlost se
(van't Hoffovo pravidlo)

PROČ? ⇒ zvýší se počet účinných srážek mezi molekulami reaktantů

- platí pro exotermní i endotermní reakce
- neplatí však pro enzymové reakce

62

Celkový řád reakce

$A \rightarrow$ produkty

Reakce nultého řádu $v = k [A]^0 = k$

Reakce 1. řádu $v = k [A]$

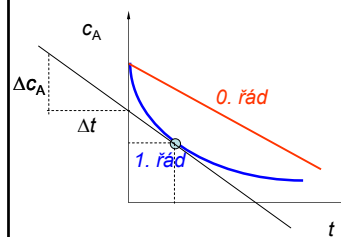
Počáteční rychlost (okamžitá rychlost na začátku reakce)

$$v_0 = k [A]_0$$

- nejvyšší rychlost v průběhu dané reakce

63

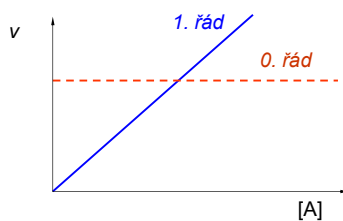
☞ Jak se mění koncentrace reaktantu s časem?



z kinetické křivky lze určit rychlost reakce $v = -\frac{\Delta c_A}{a \cdot \Delta t}$

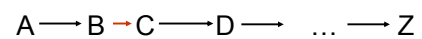
64

☞ Jak závisí rychlost na koncentraci reaktantu?



65

Rychlost celkové reakce $A \rightarrow Z$



Výslednou rychlost celkové reakce určuje nejpomalejší reakce.

66

Molekularita reakce

- počet částic, které se musí srazit, aby došlo k reakci
- **monomolekulární** $A \longrightarrow$ produkty
- **bimolekulární** reakce $A + B \longrightarrow$ produkty

67

Katalýza / inhibice

Ovlivnění rychlosti chemické reakce pomocí katalyzátoru / inhibitoru

68

Katalýza

Homogenní

- acidobazická (katalyzátor: H^+ nebo OH^-)
- autokatalýza (katalyzátor: produkt reakce)
- selektivní (katalyzátor: enzym)

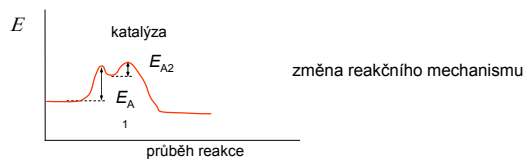
Heterogenní

- katalyzátor: - v jiné fázi (s) než reaktanty
- s velkým specifickým povrchem

69

Katalyzátory

- látky $\downarrow E_A$ a tím $\uparrow k$ a tedy $\uparrow v$



- neovlivňují rovnovážné složení soustavy ($K = \text{konst.}$)
- urychlí ustavení rovnovážného stavu

70

Inhibitory

- látky snižující rychlost reakce
- **stabilizátory** - inaktivují reaktivní meziprodukty (např. $\cdot OH$, $\cdot O_2^-$, $\cdot R$)
- **katalytické jedy** - inaktivují katalyzátor

71

Faktory ovlivňující rychlost chemické reakce

- **koncentrace reaktantů** ... kinetická rovnice
- **teplota** ... Arrheniova rovnice
- **tlak** ... reaktanty v plynné fázi
 $(\uparrow p \rightarrow \downarrow V(\text{reaktantů}) \rightarrow \uparrow c(\text{reaktantů}) \rightarrow \uparrow v)$
- **velikost reagujících částic** ... reaktanty v tuhé fázi
(menší částice – větší reakční povrch)
- **katalyzátory, inhibitory**

72