

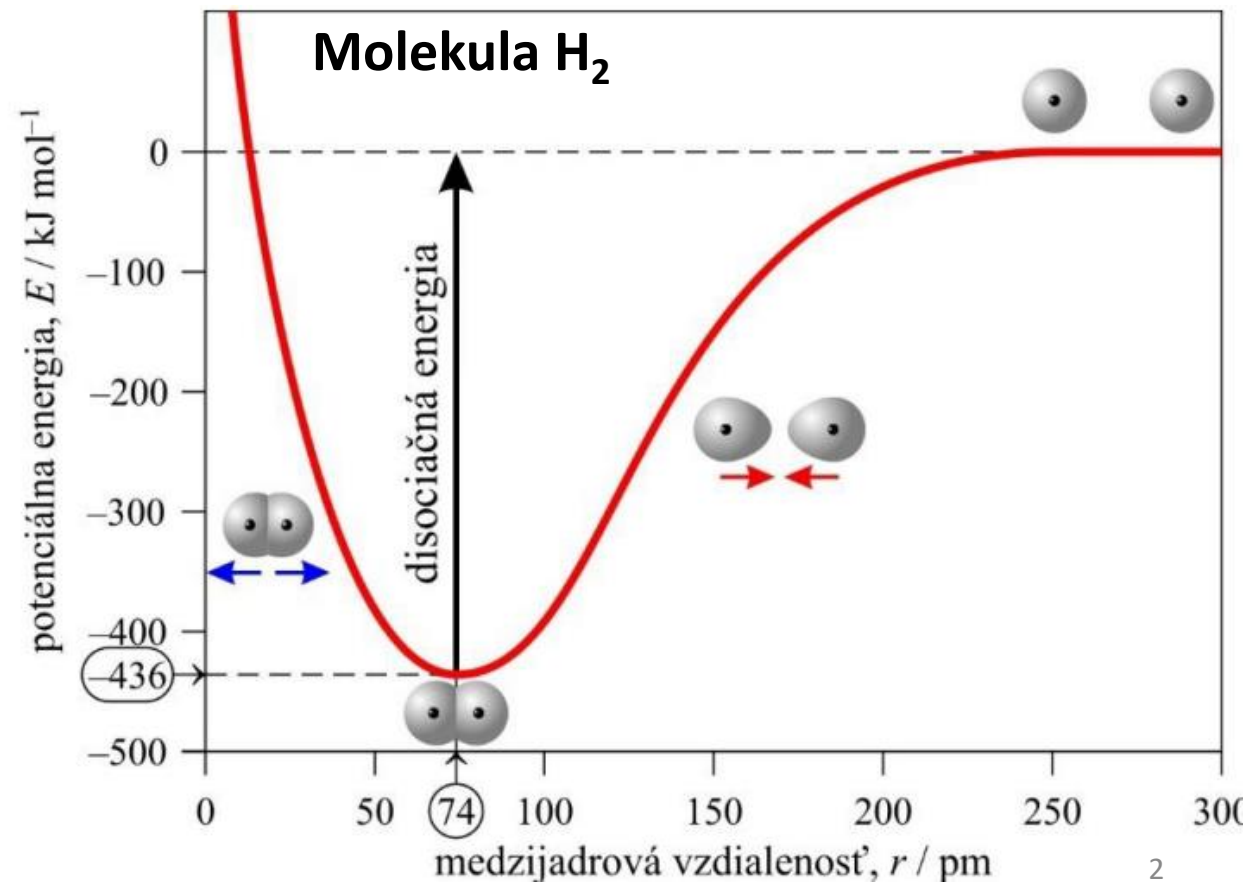
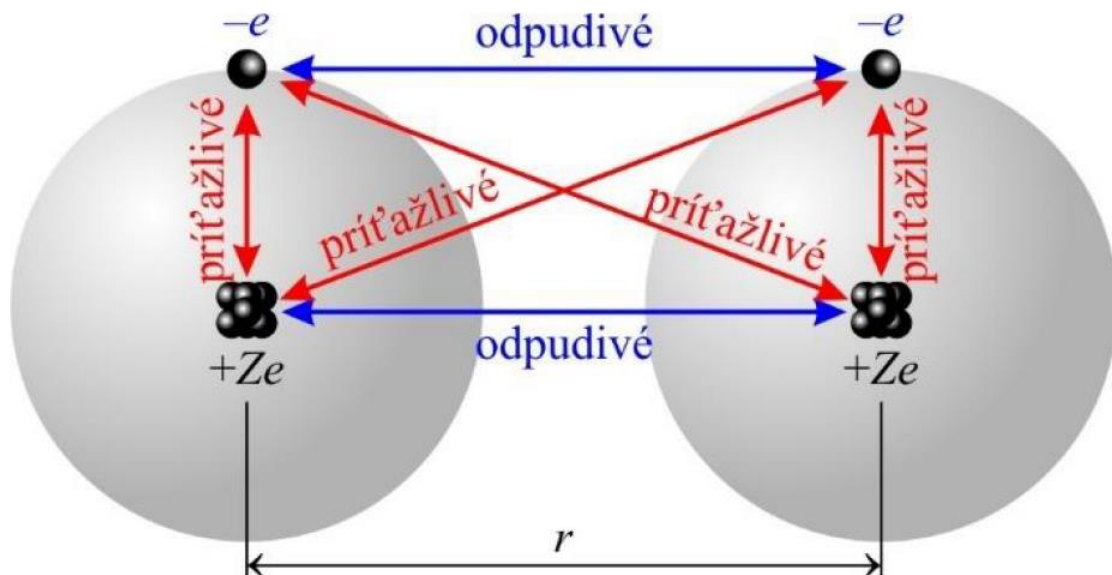
CHEMICKÁ VÄZBA

Chemická väzba (CHV) je elektromagnetická interakcia medzi súčasťami zložitejších útvarov nazývaných viazané systémy, ktorá spôsobuje existenciu týchto viazaných systémov a ovplyvňuje ich zloženie, štruktúru a vlastnosti. Viazané systémy = molekuly, viacjadrové ióny. CHV vo viazaných systémoch existuje medzi 2 alebo viacerými atómami.

- Pri vzniku CHV
 - dochádza k poklesu celkovej energie systému
 - fyzikálne a chemické vlastnosti viazaného systému nie sú súčtom vlastností jeho zložiek
 - viazaný systém má charakteristickú časticovú štruktúru vyjadrenú usporiadaním atómových jadier v priestore (tvar, geometria častice) a rozdelením elektrónov v priestore (elektrónová konfigurácia).
- CHV je popísaná veličinami:
 - i) dĺžka chemickej väzby l [pm, Å]
 - ii) disociačná energia D chemickej väzby [J, cal, eV]

CHEMICKÁ VÄZBA

Podstatou chemickej väzby je zníženie celkovej energie pri tvorbe viazaného systému z jeho zložiek v dôsledku preusporiadania elektrónov a atómových jadier



CHEMICKÁ VÄZBA

1.KOVALENTNÁ VÄZBA

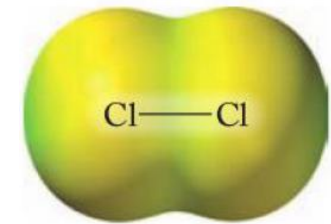
2.KOVOVÁ VÄZBA

3.IÓNOVÁ VÄZBA

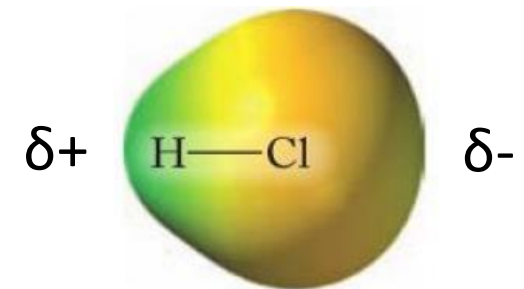
KOVALENTNÁ VÄZBA

1. Kovalentná väzba: predstavuje viazanie atómov **spoločne zdieľanými elektrónovými pármí**, ktoré priťahujú k sebe jadrá viacerých atómov. Elektróny podieľajúce sa na vytvorení kovalentnej väzby sú k viazaným atómom pútane približne rovnako pevne. Mierou pútania elektrónov je polarita (iónovosť) väzby.

a) **Nepolárna kovalentná väzba:** Tvorí ju atómy rovnakého (zvyčajne nekovového) prvku alebo atómy prvkov s blízkou hodnotou elektronegativity ($\chi \leq 0,4$). Napr: F_2 , O_3 , S_8 , Se_8 , CS_2 , P_4 , CH_4 ...



b) **Polárna kovalentná väzba:** tvoria atómy rôznych (väčšinou) nekovových prvkov s rozdielom Paulingovských elektronegativít ($\chi = 0,4-1,7$). Špeciálnym prípadom polárnej kovalentnej väzby je **koordinačná (donorno-akceptorná) väzba**.



Elektronegativita χ (čítaj chí)

je miera schopnosti kovalentne viazaného atómu priťahovať si väzbový elektrónový pár.

Mullikenom zavedená elektronegativita χ_M je definovaná vzťahom

$$\chi_M = 0,5(I - A)$$

Zmena vnútornej energie ΔU pri odoberaní elektrónu z častice (atóm, molekula, ión) je jej **ionizačná energia I** .



Zmena vnútornej energie pri prijatí elektrónu časticou je jej **elektrónová afinita A** .



$I(X)$ a $A(X)$ sa vyjadrujú v jednotkách energie elektrónvolt eV (prípadne aj v kJ mol⁻¹).

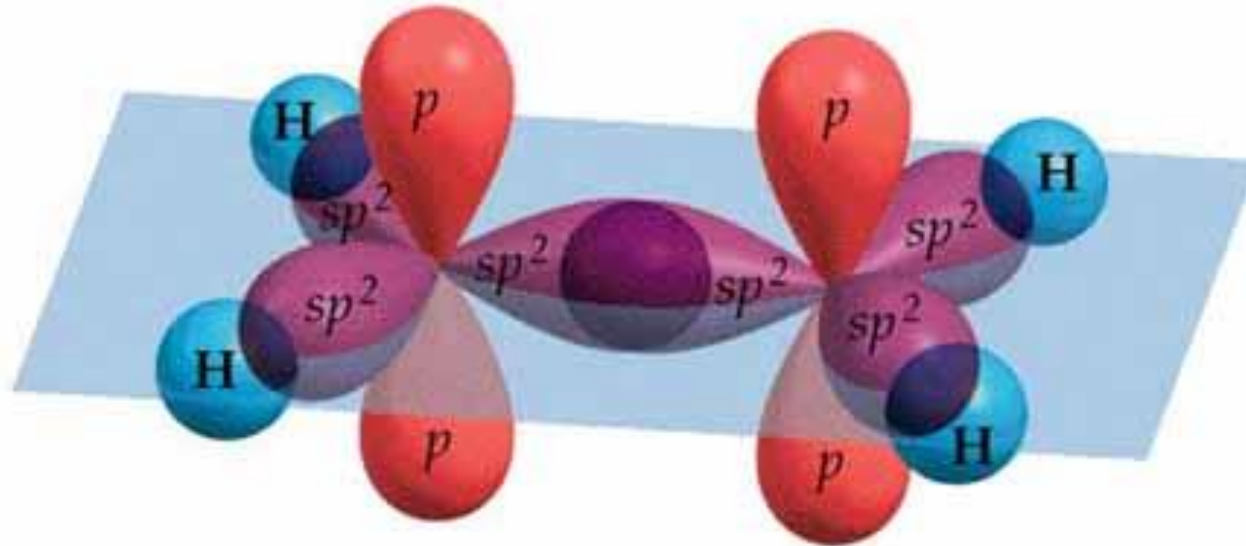
Pôvodná **Paulingovská** elektronegativita χ_P sa vypočítavala z disociačných energií väzieb D a uvádza sa ako bezrozmerná veličina. Približný vzťah medzi Paulingovskou a Mullikenovou elektronegativitou je

$$\chi_M \approx 3,15\chi_P$$

KOVALENTNÁ VÄZBA

Charakteristickými znakmi kovalentnej väzby sú:

- a) **Nasýtenosť** – každý atóm je viazaný obmedzeným a definovaným počtom ďalších atómov
- b) **Smerový charakter** – väzbové elektrónové páry majú definovanú priestorovú orientáciu
- c) **Násobnosť** – počet elektrónov zabezpečujúcich viazanie je definovaný



POPIS KOVALENTNEJ VÄZBY

Na teoretický popis kovalentnej väzby sa využívajú

a) Teória valenčných väzieb

b) Teória molekulových orbitálov (MO)

Teória valenčných väzieb

- Kovalentná väzba vzniká spárením dvoch nespárených elektrónov, ktorých spiny vo väzbovom elektrónovom páre musia byť opačné.
- K dosiahnutiu maximálnej väzbovosti sa využíva hybridizácia – excitácia elektrónov do voľných orbitálov počas vytvárania väzby.
- Tvar molekuly je výsledkom orientácie väzbových orbitálov na stredovom atóme.

Orbitals			Type of hybridization	Number of hybrid orbitals	Resulting molecular geometry
<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>			
1	1	0	<i>sp</i>	2	Linear
1	2	0	<i>sp</i> ²	3	Trigonal planar
1	3	0	<i>sp</i> ³	4	Tetrahedral
1	3	1	<i>sp</i> ³ <i>d</i>	5	Trigonal bipyramidal
1	3	2	<i>sp</i> ³ <i>d</i> ²	6	Octahedral

TEÓRIA MOLEKULOVÝCH ORBITÁLOV

Podstatou tejto teórie je vytváranie molekulových orbitálov (MO) z atómových orbitálov (AO) metódou lineárnej kombinácie atómových orbitálov (LCAO)

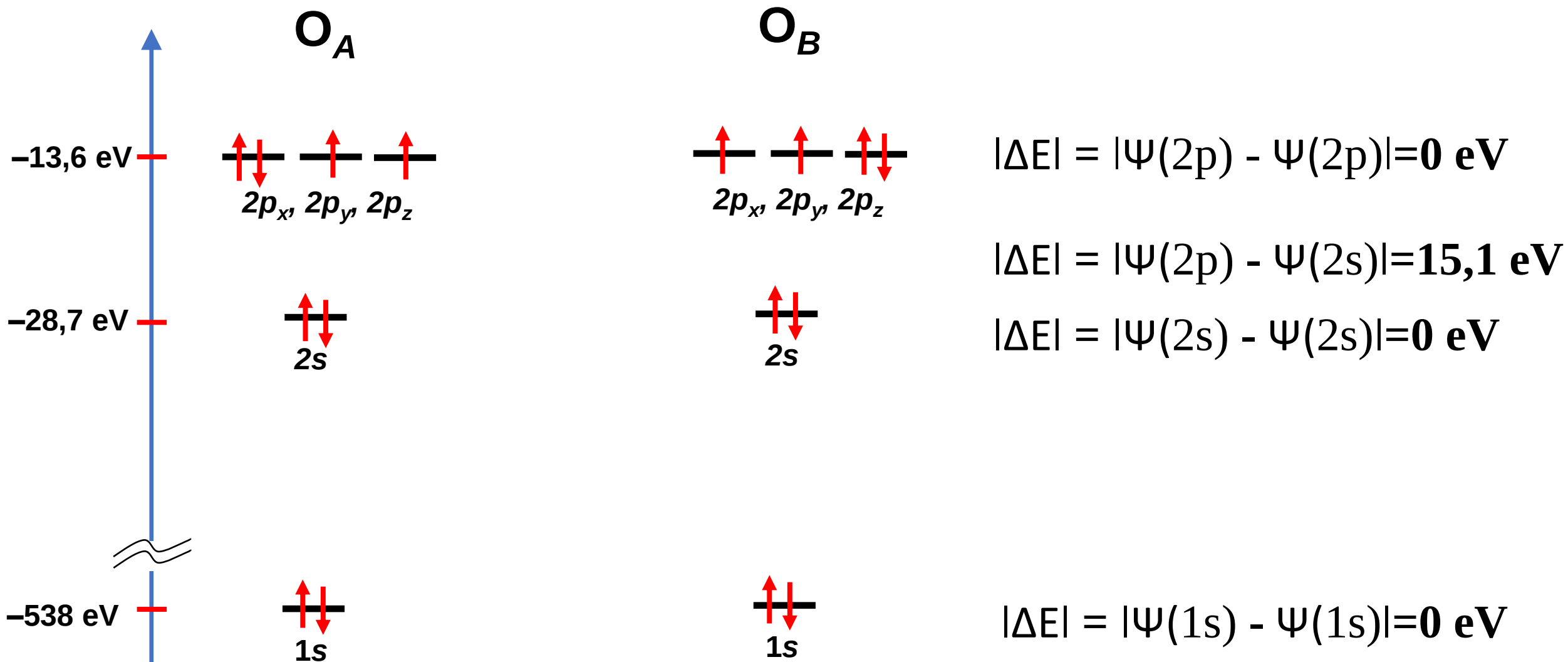
MO je jednoelektrónová vlnová funkcia opisujúca stav elektrónu priťahovaného viacerými atómovými jadrami a odpudzovaného ostatnými elektrónmi viazaného systému.

n MO Φ možno vytvoriť z n AO Ψ ak platí:

- Polohy atómových jadier atómov A a B sú také, že dochádza k prekryvu priestorov opísaných funkciami Ψ_A a Ψ_B (prekryvu atómových orbitálov),
- rozdiel energie ΔE prekrývajúcich sa AO je malý;
 $|\Delta E| = |E(\Psi_A) - E(\Psi_B)| < 10 \text{ eV};$
- integrál prekryvu atómových orbitálov $S = \int \Psi_A \Psi_B dV$ je rôzny od nuly ($S \neq 0$).

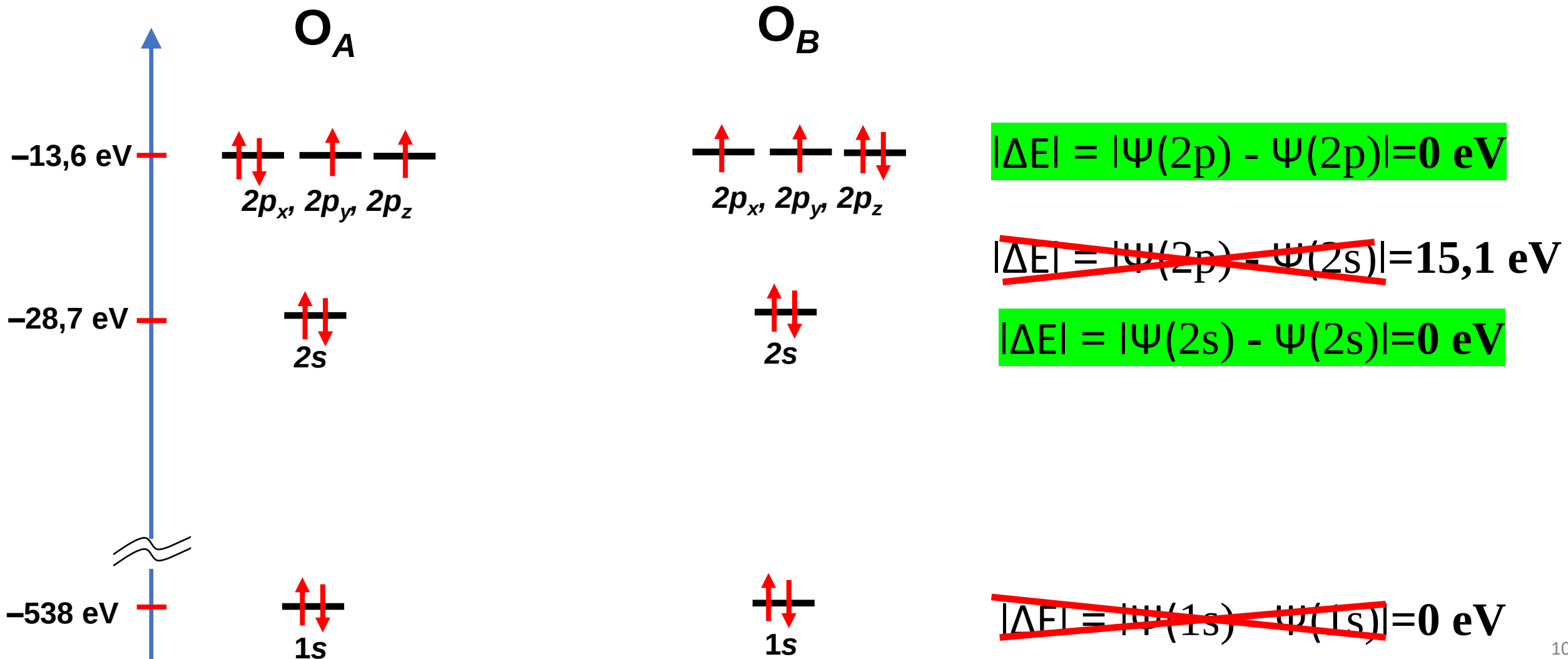
TEÓRIA MOLEKULOVÝCH ORBITÁLOV

Význam uvedených podmienok si znázorníme na príklade prekryvu niektorých orbitálov v molekule dikyslíka O_2 . Orbitálové energie AO sú takéto: $E(O1s) = -538$ eV; $E(O2s) = -28,7$ eV; $E(O2p) = -13,6$ eV. Súradnicový systém sa konvenčne volí tak, že spojnicou jadier prechádza os z.



TEÓRIA MOLEKULOVÝCH ORBITÁLOV

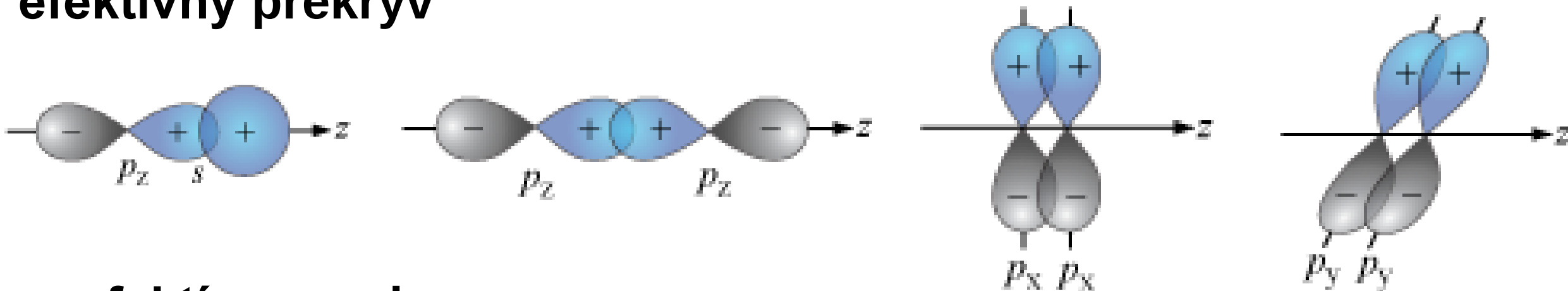
Význam uvedených podmienok si znázorníme na príklade prekryvu niektorých orbitálov v molekule dikyslíka O_2 . Orbitálové energie AO sú takéto: $E(O1s) = -538$ eV; $E(O2s) = -28,7$ eV; $E(O2p) = -13,6$ eV. Súradnicový systém sa konvenčne volí tak, že spojnicou jadier prechádza os z.



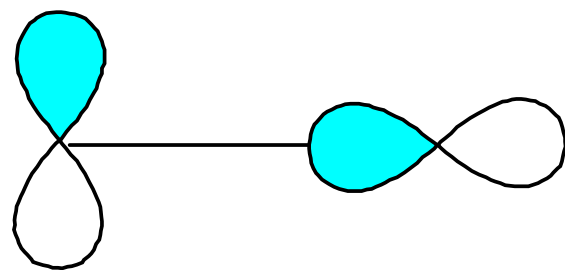
TEÓRIA MOLEKULOVÝCH ORBITÁLOV

Význam uvedených podmienok si znázorníme na príklade prekryvu niektorých orbitálov v molekule dikyslíka O_2 . Orbitálové energie AO sú takéto: $E(O1s) = -538$ eV; $E(O2s) = -28,7$ eV; $E(O2p) = -13,6$ eV. Súradnicový systém sa konvenčne volí tak, že spojnica jadier prechádza os z.

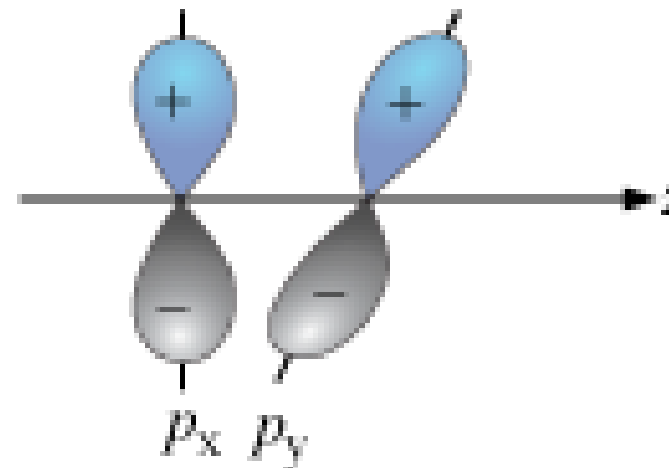
efektívny prekryv



neefektívny prekryv



$p_{x(y)} + p_z$



Tvorba MO – Lineárna kombinácia atómových orbitálov

Molekulové orbitály (MO) sa vytvárajú z atómových orbitálov (AO) pomocou lineárnej kombinácie atómových orbitálov (LCAO). Z princípov matematiky vyplýva, že počet orbitálov sa lineárnou kombináciou nemení. **Koľko atómových orbitálov Ψ kombinujeme, toľko molekulových orbitálov Φ musíme vytvoriť.**

Teda z n atómových orbitálov Ψ ($\Psi_A, \Psi_B, \dots, \Psi_n$) vytvoríme n molekulových orbitálov Φ ($\Phi_1, \Phi_2, \dots, \Phi_n$) nasledovne ($n=A, B, C, \dots$; $n=1, 2, 3, \dots$)

$$\begin{aligned}\Phi_1 &= c_{1A} \cdot \Psi_A + c_{1B} \Psi_B + \dots + c_{1n} \cdot \Psi_n \\ \Phi_2 &= c_{2A} \cdot \Psi_A + c_{2B} \Psi_B + \dots + c_{2n} \cdot \Psi_n \\ &\text{atď. až po } \Phi_n\end{aligned}$$

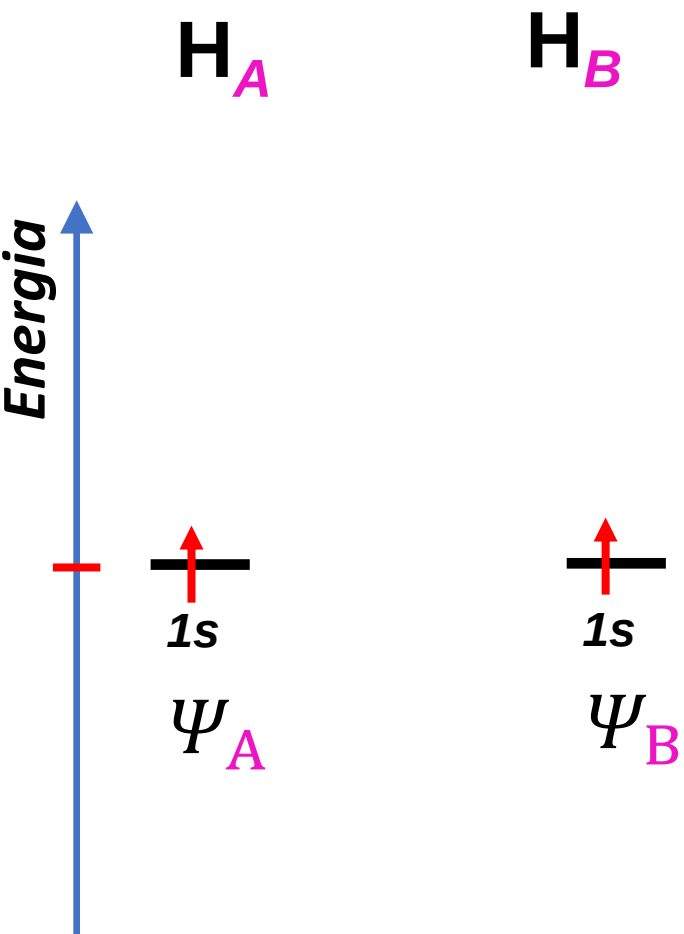
kde c_{nn} sú kombinačné koeficienty (symbol n pre MO, n pre AO).

Riešením Schrödingerovej rovnice pre konkrétnu funkciu Φ získame energiu pre daný MO.

$$\hat{H}\Phi = E\Phi \implies \begin{aligned} E(\Phi^b) &< \frac{1}{n} \sum E(\Psi) \implies \Phi^b \text{ väzbový orbitál} \\ E(\Phi^*) &> \frac{1}{n} \sum E(\Psi) \implies \Phi^* \text{ protiväzbový orbitál} \\ E(\Phi^n) &\cong E(\Psi) \implies \Phi^n \text{ neväzbový orbitál} \end{aligned}$$

MO - LCAO

Molekula H₂



$$\begin{aligned}\Phi_1 &= c_{1A} \cdot \psi_A + c_{1B} \psi_B \\ \Phi_2 &= c_{2A} \cdot \psi_A + c_{2B} \psi_B\end{aligned} \Rightarrow \hat{H}\Phi = E\Phi$$

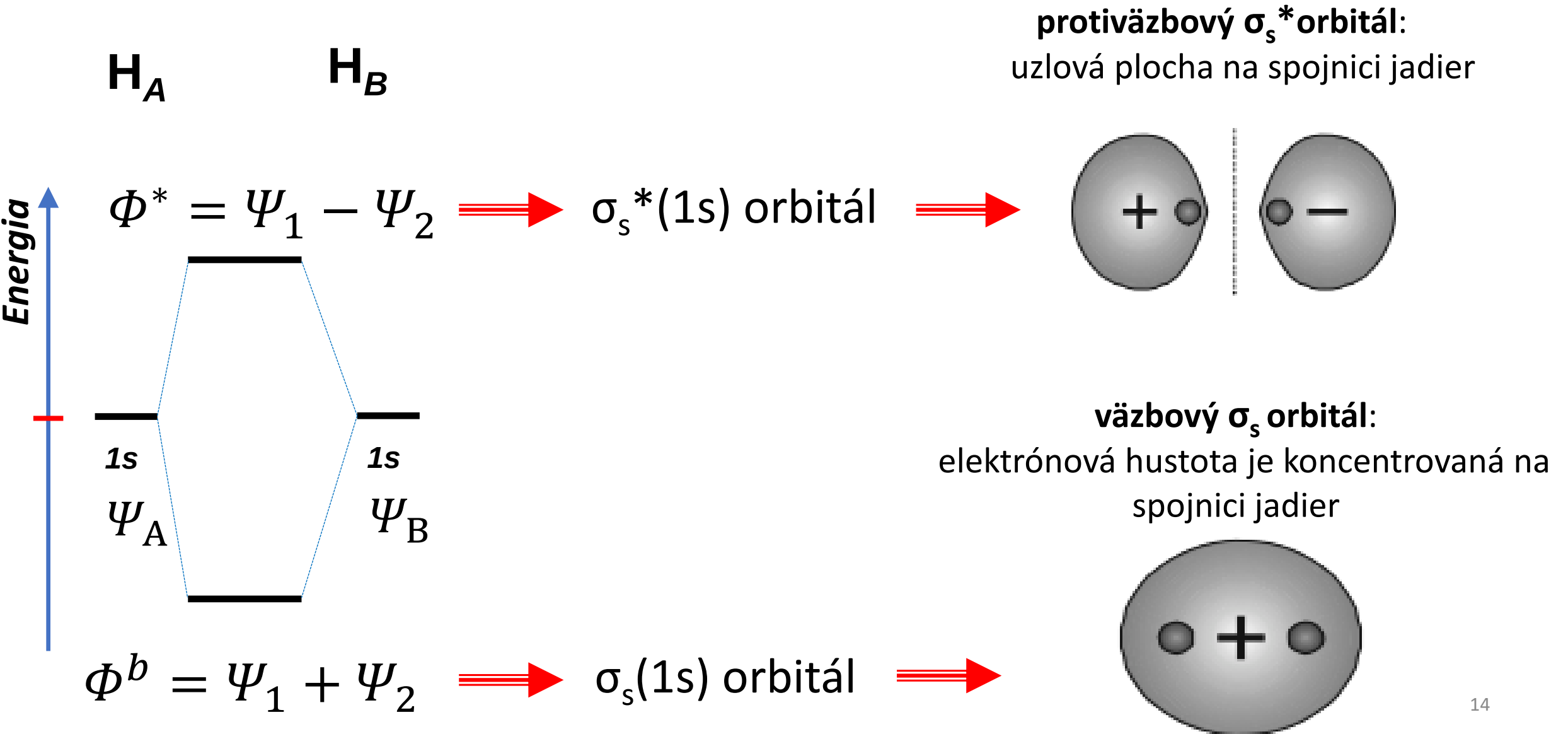
väzbový orbitál $E(\Phi^b) < \frac{1}{n} \sum E(\Psi) \quad \Phi^b = \psi_1 + \psi_2$

protiväzbový orbitál $E(\Phi^*) > \frac{1}{n} \sum E(\Psi) \quad \Phi^* = \psi_1 - \psi_2$

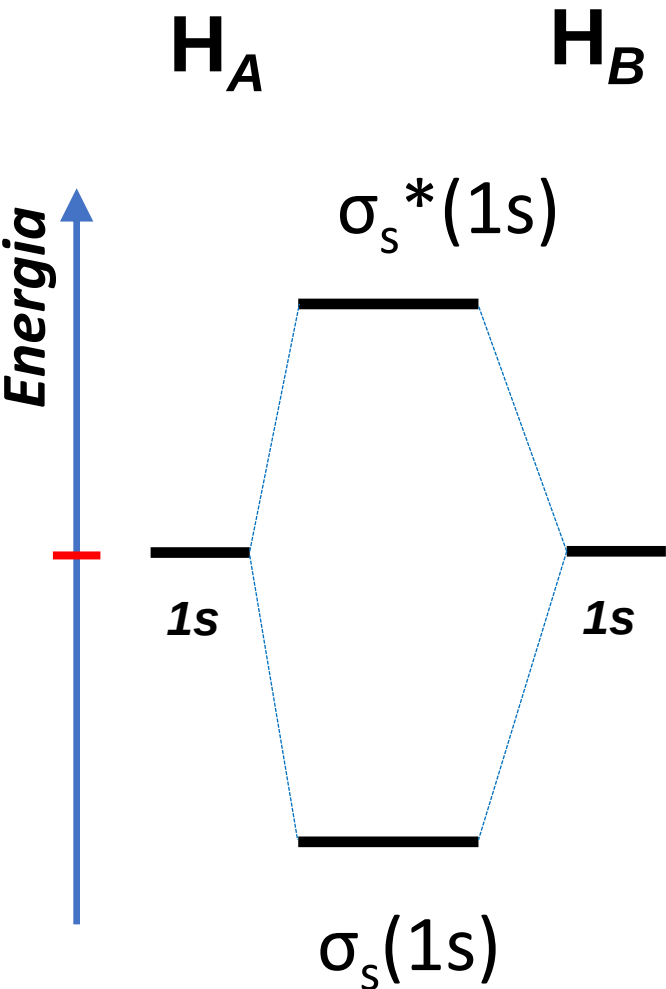
Riešením Schrödingerovej rovnice pre H₂ sa zistia hodnoty kombinačných koeficientov a energie prislúchajúce orbitálom k danému elektrónu. V prípade H₂ sú: $c_{1A}=c_{1B}=1$ a $c_{2A}=1, c_{2B}=-1$.

MO - LCAO

Molekula H₂



Molekula H₂ - elektrónová konfigurácia



Pri vytváraní elektrónovej konfigurácie vo viazaných systémoch platí **výstavbový princíp**, **Pauliho vylučovací princíp** a **Hundovo pravidlo maximálnej multiplicity**.

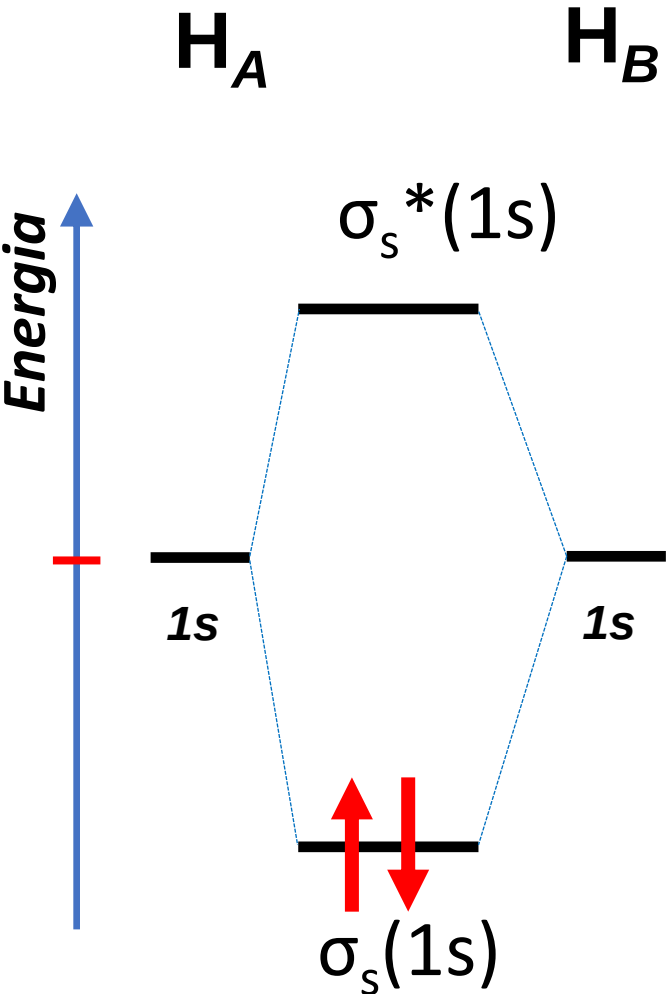
Väzbový poriadok: kovalentné väzby sa klasifikujú podľa svojej násobnosti

$$\text{väzbový poriadok } N = \frac{1}{2}[\Sigma e^-(\Phi^b) - \Sigma e^-(\Phi^*)]$$

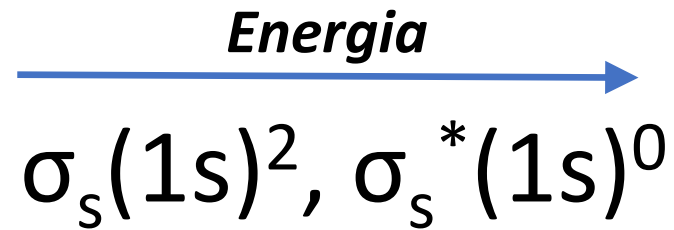
kde $\Sigma e^-(\Phi^b)$ je celkový počet elektrónov vo väzbových MO,
a $\Sigma e^-(\Phi^*)$ je celkový počet elektrónov v protiväzbových MO.

MO - LCAO

Molekula H₂ - elektrónová konfigurácia

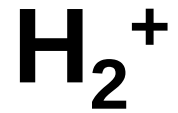


poradie MO podľa vzrastajúcej energie:



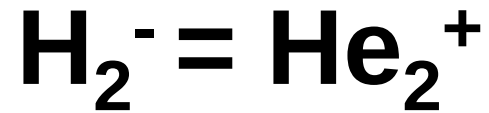
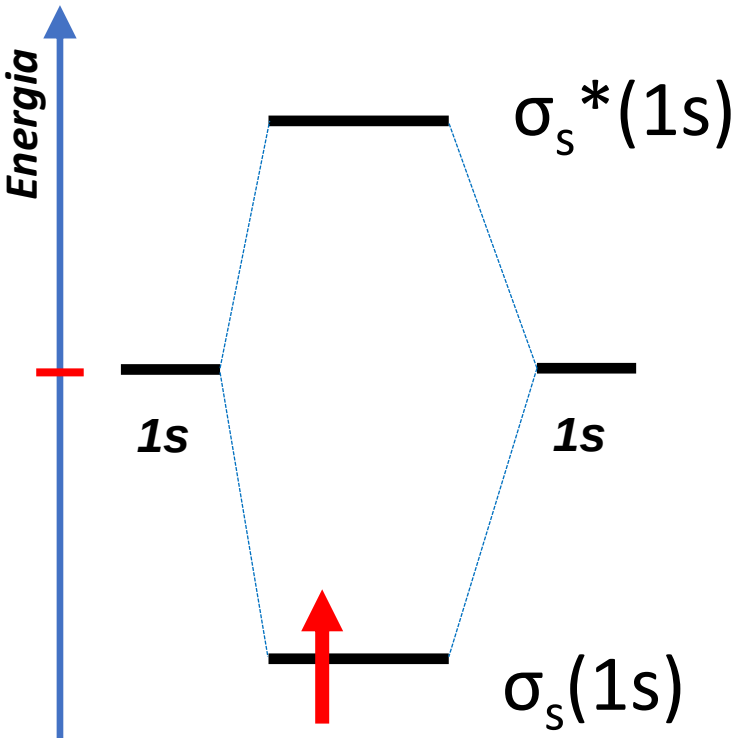
$$N = \frac{2 - 0}{2} = 1 \implies \text{jednoduchá väzba}$$

Častice H_2^+ , H_2^- , He_2 , He_2^+



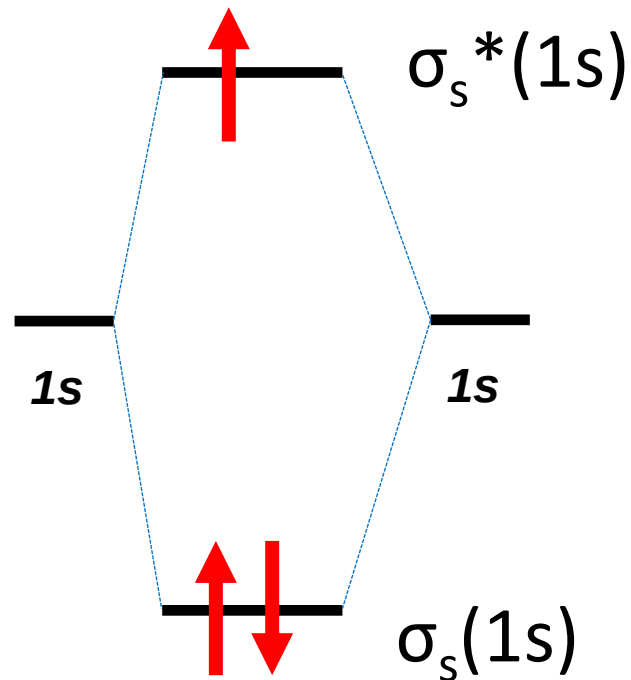
$$\sigma_s(1s)^1, \sigma_s^*(1s)^0$$

$$N = \frac{1 - 0}{2} = 1/2$$



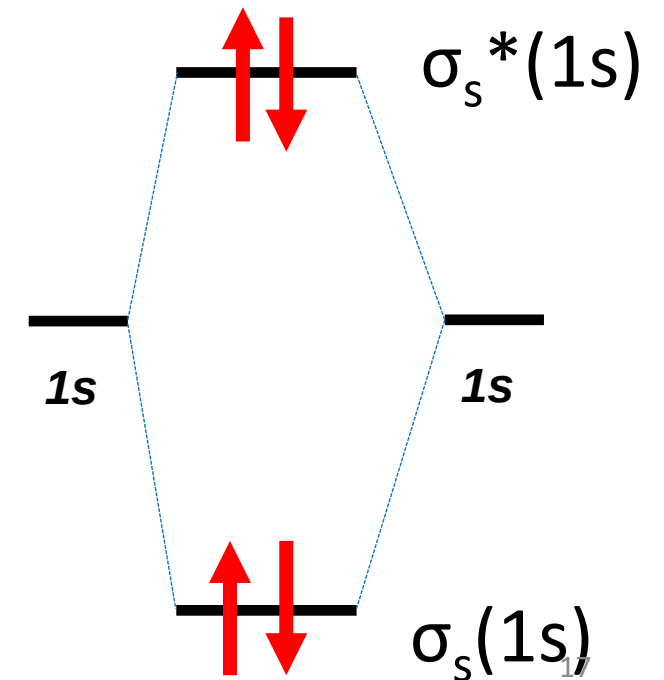
$$\sigma_s(1s)^2, \sigma_s^*(1s)^1$$

$$N = \frac{2 - 1}{2} = 1/2$$

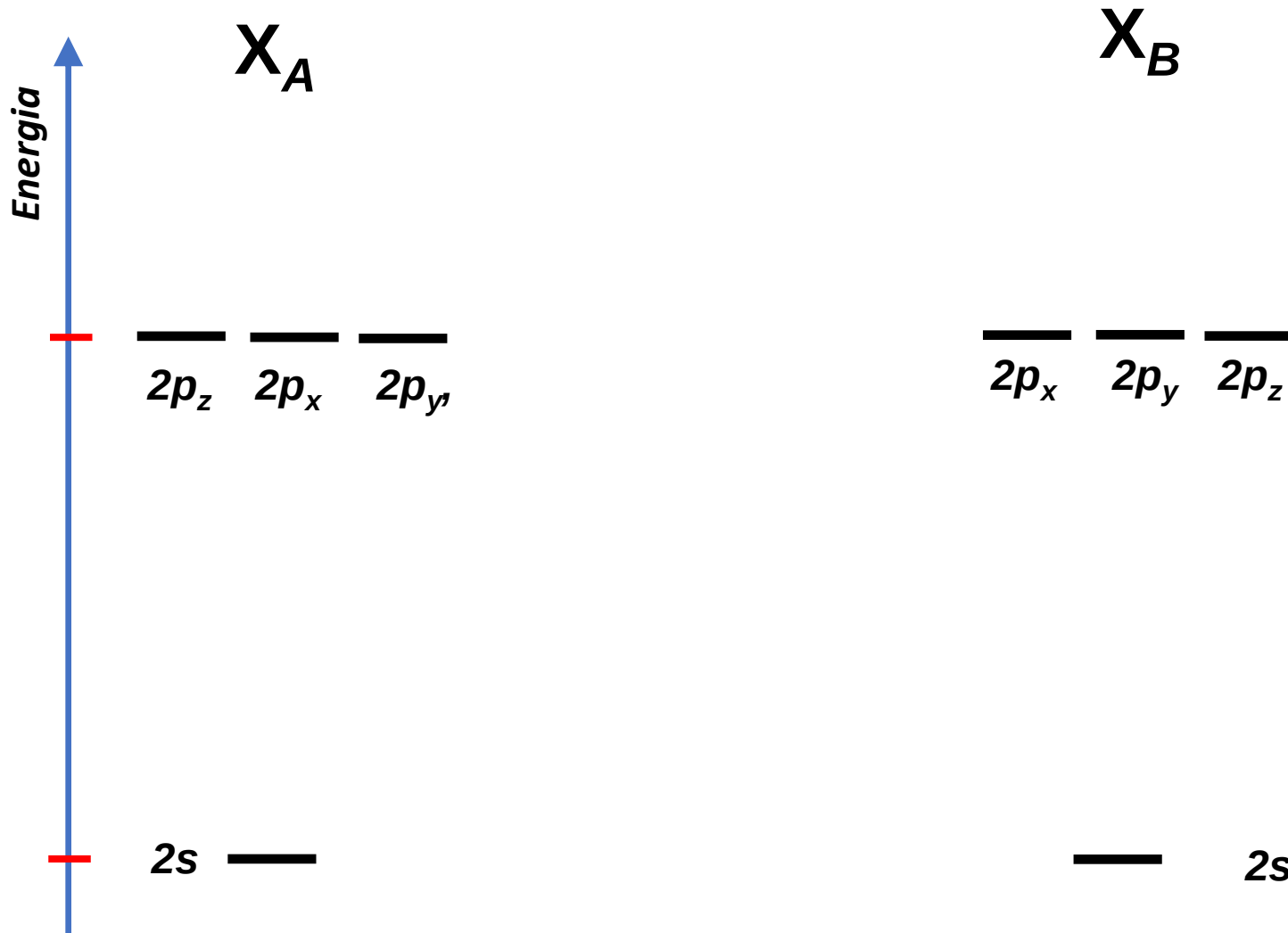


$$\sigma_s(1s)^2, \sigma_s^*(1s)^2$$

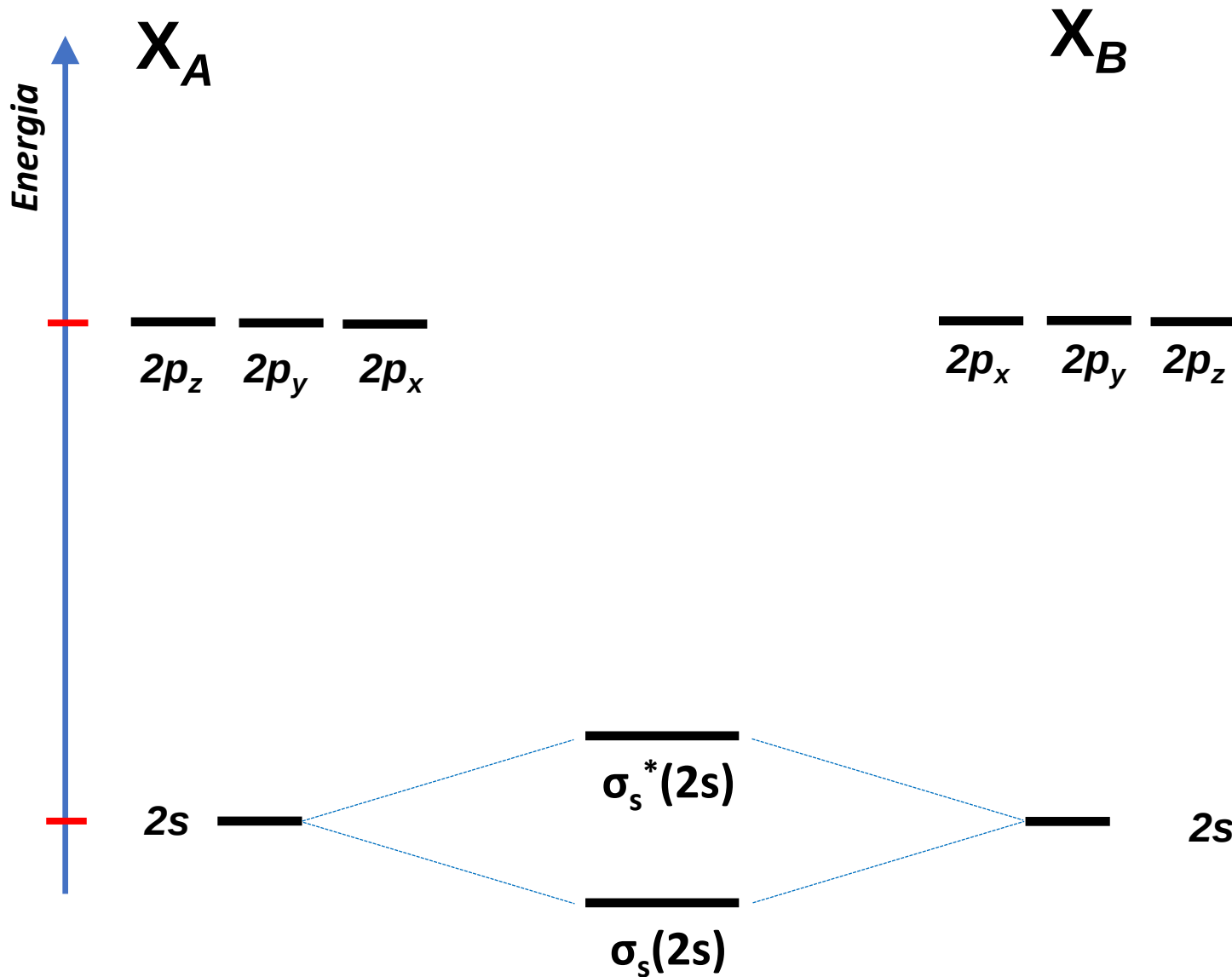
$$N = \frac{2 - 2}{2} = 0$$



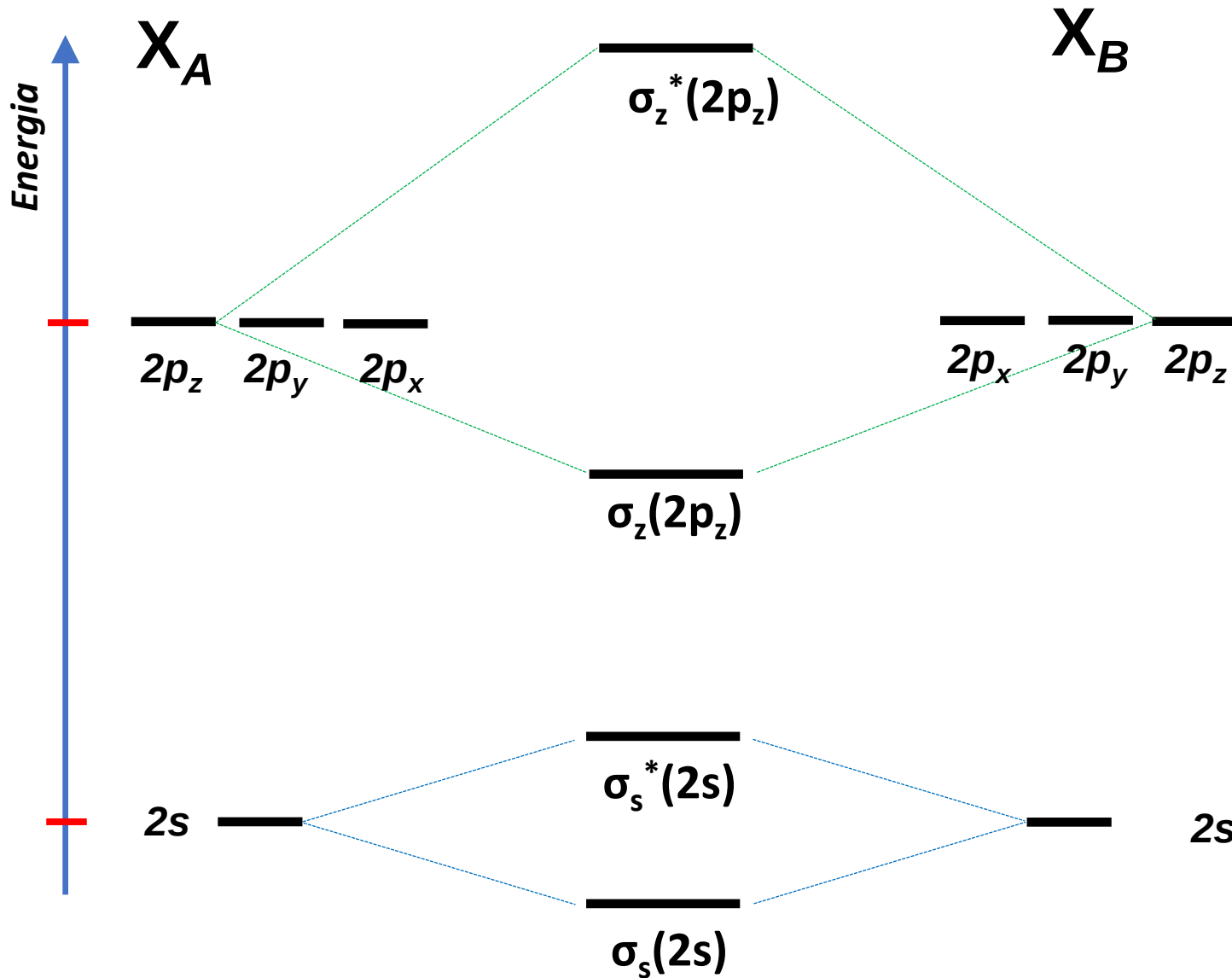
Elektrónová konfigurácia častíc X_2^q (X=prvok 2. periódy)



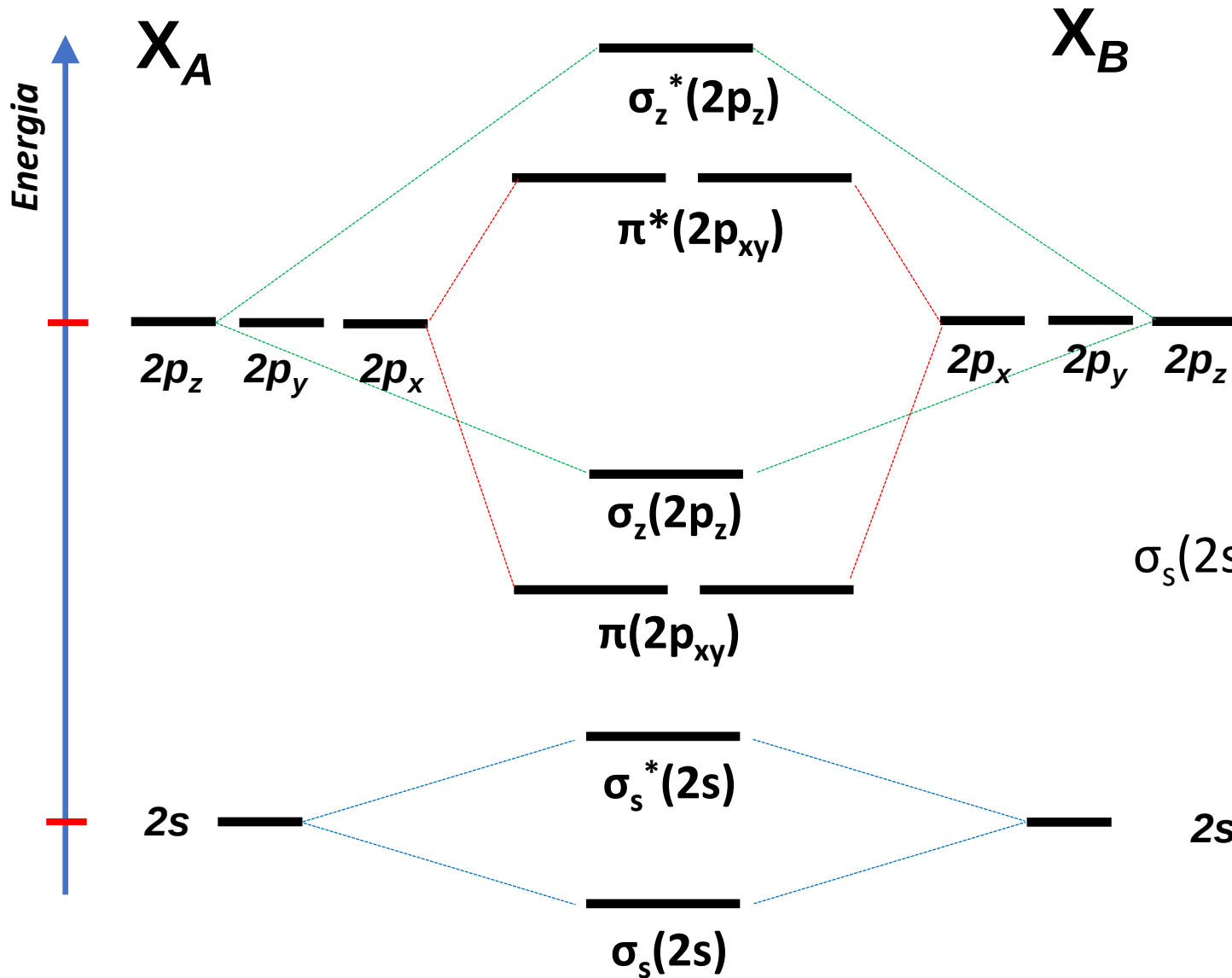
Elektrónová konfigurácia častíc X_2^q (X=prvok 2. periódy)



Elektrónová konfigurácia častíc X_2^q (X=prvok 2. periódy)



Elektrónová konfigurácia častíc X_2^q (X =prvok 2. periódy)

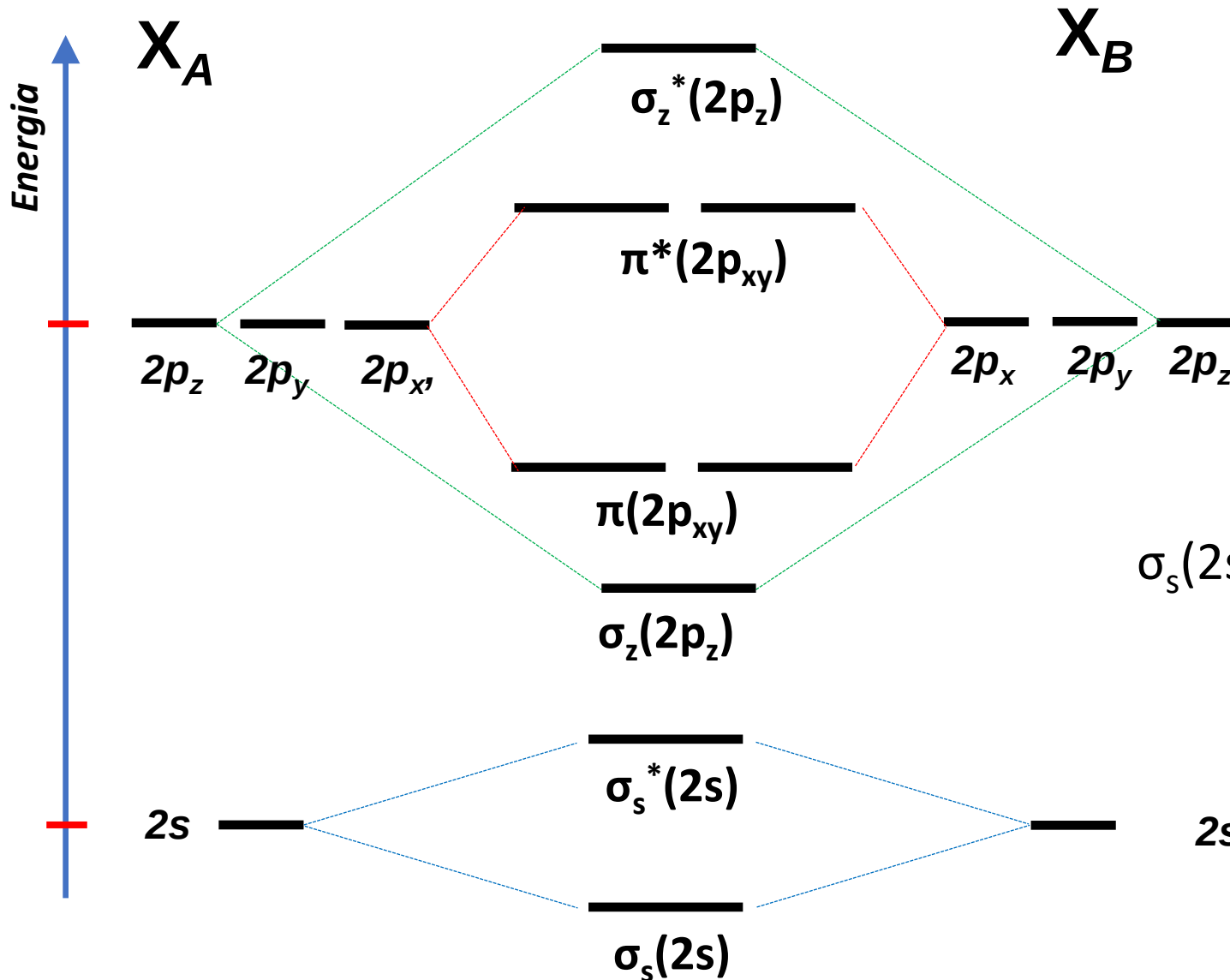


pre častice X_2^q ($X=\text{Li} - \text{N}$) je
poradie MO podľa vzrastajúcej energie:

$\sigma_s(2s), \sigma_s^*(2s), \pi(2p_{xy}), \sigma_z(2p_z), \pi^*(2p_{xy}), \sigma_z^*(2p_z)$

→ E

Elektrónová konfigurácia častíc X_2^q (X =prvok 2. periódy)

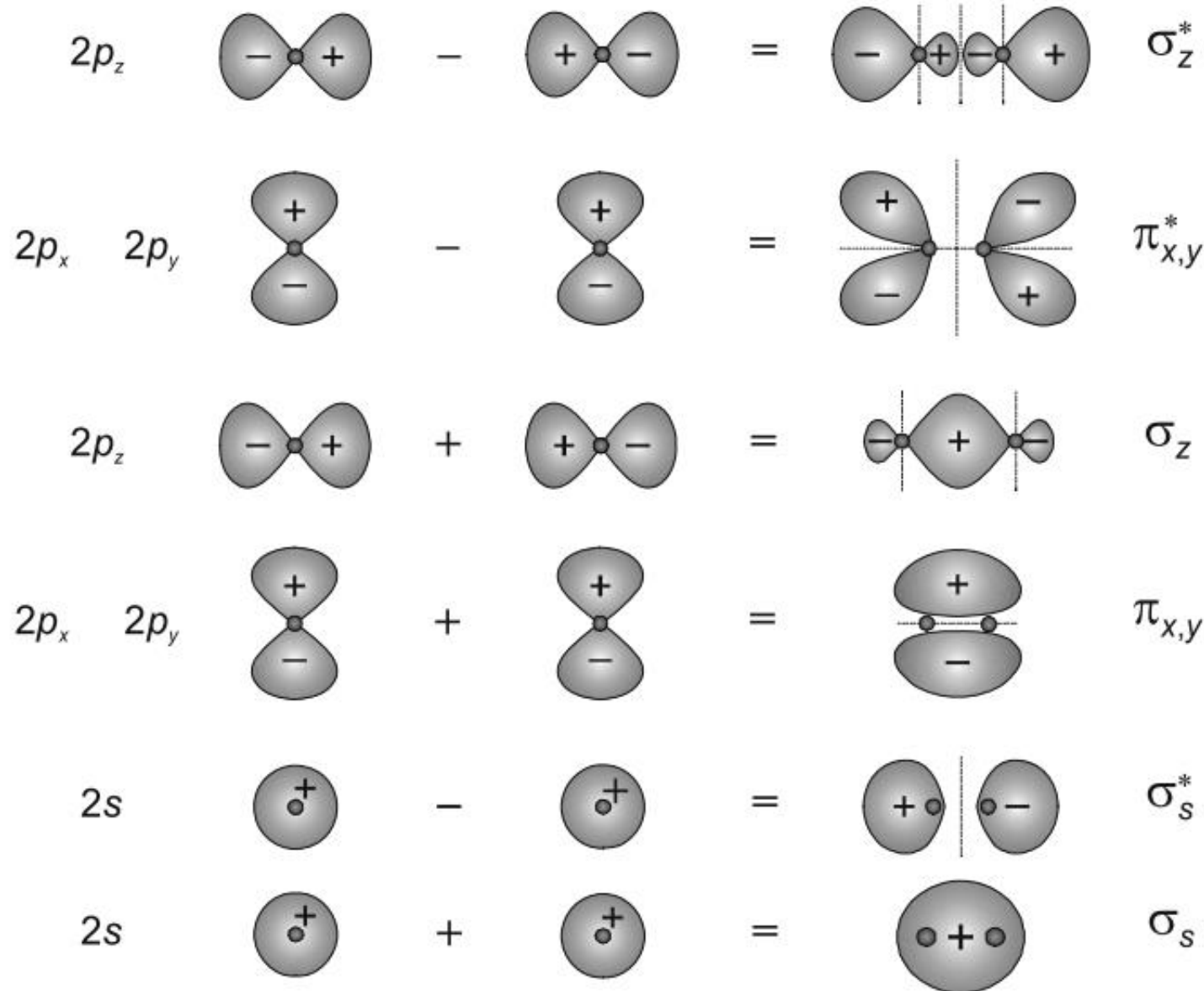


pre častice X_2^q ($X = \text{O} - \text{Ne}$) je
poradie MO podľa vzrastajúcej energie:

$\sigma_s(2s), \sigma_s^*(2s), \sigma_z(2p_z), \pi(2p_{xy}), \pi^*(2p_{xy}), \sigma_z^*(2p_z)$

→ E

Elektrónová konfigurácia častíc X_2^q (X =prvok 2. periódy)



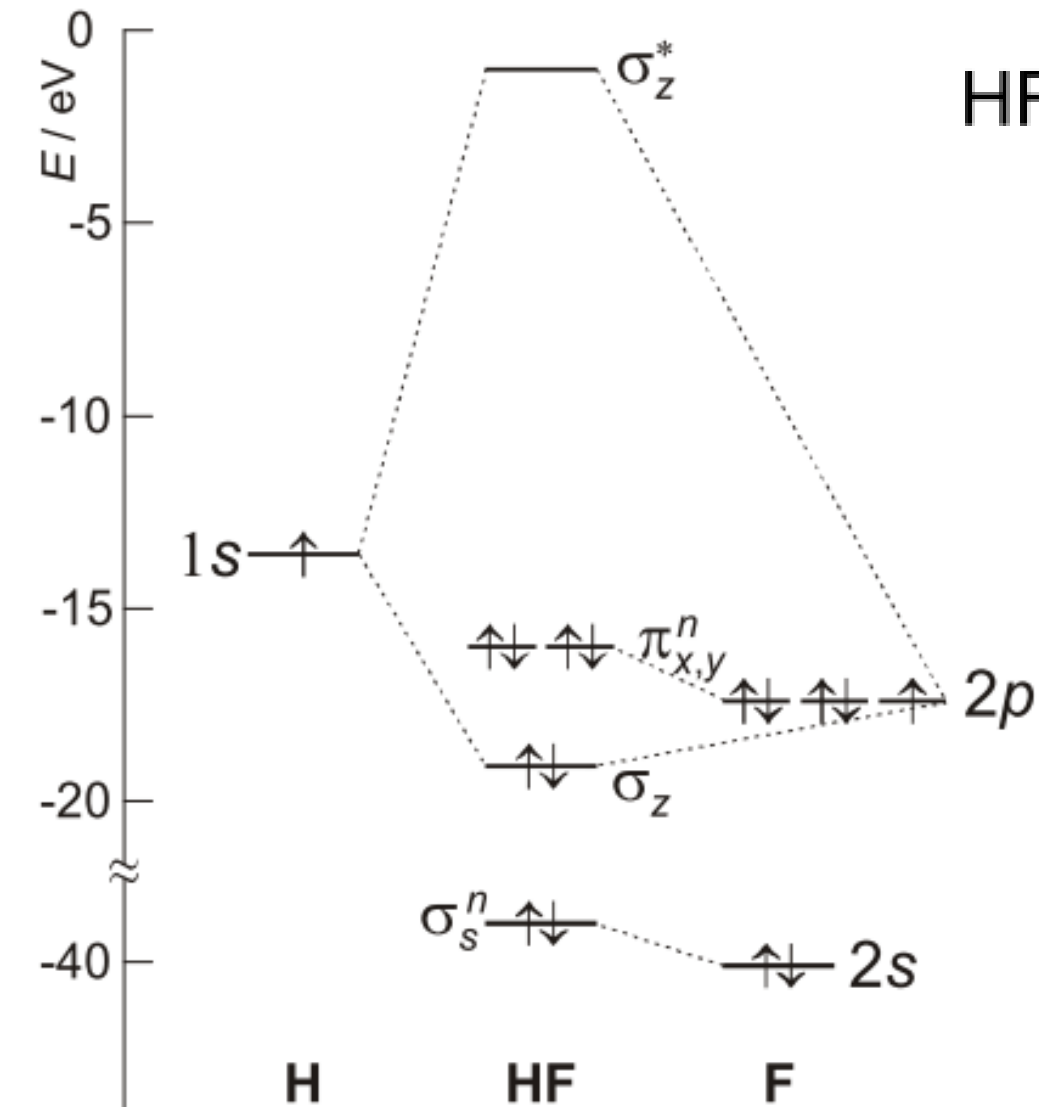
π a π^* orbitály majú maximum elektrónovej hustoty mimo spojnice jadier

σ a σ^* orbitály majú maximum elektrónovej hustoty na spojnici jadier a σ_s^* má 1 uzlovú plochu

Elektrónová konfigurácia heteroatómových častíc

MO pre HF (a aj pre HCl, HBr, HI, OH⁻, HS⁻)

HF: $(\sigma_s^n)^2 (\sigma_z)^2 (\pi_{x,y}^n)^4$ väzbový poriadok N=1



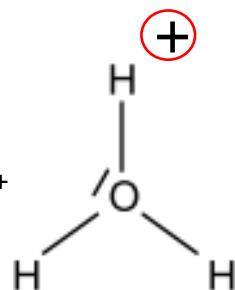
Elektrónové štruktúrne vzorce

Elektrónový štruktúrny vzorec je definovaný ako grafické znázornenie tvaru častice a rozdelenia valenčných elektrónov na **jednocentrové neväzbové elektrónové páry (NEP)**, **dvojcentrové väzbové elektrónové páry (VEP)** a nespárené elektróny (ak sú prítomné).

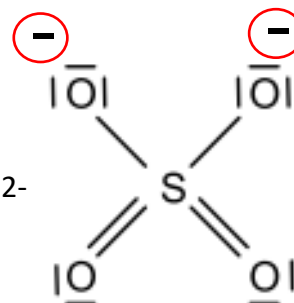
HCN



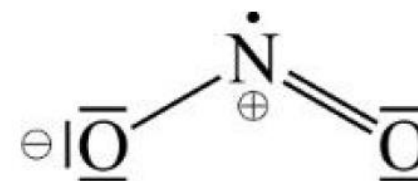
H₃O⁺



SO₄²⁻



NO₂



Elektrónové štruktúrne vzorce

Pravidlá pre písanie elektrónových štruktúrnych vzorcov

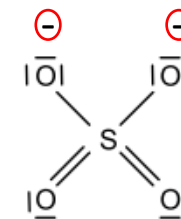
1. V prvom kroku určíme celkový počet valenčných elektrónov v častici. Treba mať na pamäti, že atómy prvkov 1. periódy (reálne atóm vodíka) majú k dispozícii na tvorbu väzieb len jeden energeticky vhodný, valenčný AO (1s) a môžu byť teda maximálne jednoväzbové (zdieľať jeden elektrónový pár); atómy prvkov druhej periódy majú k dispozícii štyri valenčné AO (2s, 3 x 2p) a môžu byť teda maximálne štvorväzbové, resp. zdieľať štyri elektrónové páry (väzbové + neväzbové); atómy prvkov 3. periódy majú k dispozícii síce deväť valenčných AO (3s, 3 x 3p, 5 x 3d), ale zvyčajne z nich môžu využiť maximálne šesť a byť teda maximálne šesťväzbové, resp. zdieľať šesť elektrónových valenčných párov (väzbových + neväzbových); väzbové elektrónové páry sa „vytvárajú“ z nespárených elektrónov koncových atómov a stredového atómu, v prípade aniónov aj z elektrónov určujúcich náboj).

H, F – jednoväzbový (okrem niekoľkých výnimiek napr. B_2H_6 , H_2F^+)

O – dvojitväzbový (okrem niekoľkých výnimiek napr. O_3 , H_3O^+), alebo jednoväzbový so záporným nábojom

B, C, N – štvorväzbové

Atómy 3. periódy - maximálne šesťväzbové



Elektrónové štruktúrne vzorce

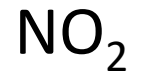
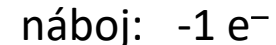
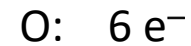
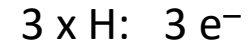
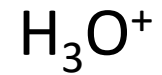
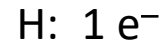
Pravidlá pre písanie elektrónových štruktúrnych vzorcov

2. V druhom kroku určíme stredový atóm (atómy) a koncové atómy. Treba vedieť, ktoré atómy sú vzájomne viazané, pričom atóm s najväčšou väzbovosťou nazývame stredový atóm, ostatné atómy (zvyčajne naviazané na stredový atóm) sú koncové atómy. Čím väčším počtom väzieb sú atómy viazané, tým je častica stálejšia, takže **stredový atóm sa snaží dosiahnuť maximálnu väzbovosť a spravidla má najnižšiu elektronegativitu.**

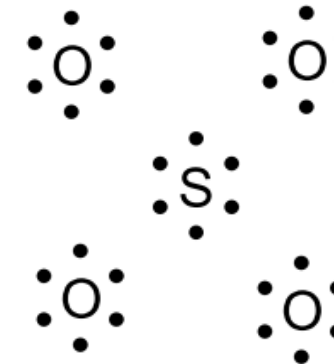
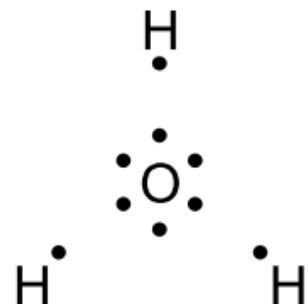
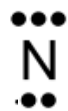
3. Ak majú častice zložené z atómov s-prvkov a p-prvkov (a my sa budeme zaoberať zatiaľ iba takýmito časticami) párny počet elektrónov, všetky elektróny sú spárené, pri nepárnom počte elektrónov bude jeden elektrón nespárený.

Elektrónové štruktúrne vzorce

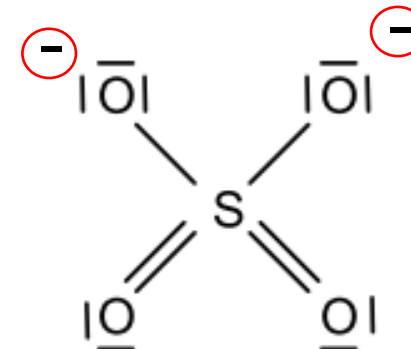
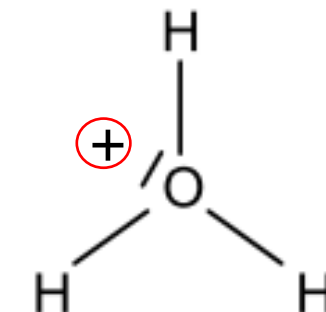
1. Počet elektrónov



2.



3.



Tvar troj- a viacjadrových častíc

Tvar kovalentne viazaných častíc popisuje metóda **VSEPR** (Valence Shell Electron Pair Repulsion). Najstabilnejším usporiadaním atómov v priestore je také usporiadanie pri ktorom sa dosiahne najmenšie odpudzovanie valenčných elektrónov viazaných atómov.

- Väzbové elektrónové páry (VEP) si možno predstaviť ako záporný náboj koncentrovaný na spojnici jadier a neväzbový elektrónový pár (NEP) ako záporný náboj nasmerovaný od jadra atómu do priestoru.
- Koncové atómy sa usporiadajú okolo stredového atómu tak, aby odpudzovanie elektrónových párov bolo čo najmenšie, teda aby uhly, ktoré zvierajú väzbové a neväzbové valenčné elektrónové páry stredového atómu boli čo najväčšie.
- Čím je záporný náboj koncentrovaný v istom priestore väčší, tým je jeho odpudivá sila proti ostatným záporným nábojom väčšia. Odpudivá sila zvyčajne vzrastá v poradí:

nespárený elektrón < jednoduchá väzba < dvojité väzba < trojitá väzba < neväzbový elektrónový pár

Polarita kovalentnej väzby

*V prípade molekúl nám elektrónový štruktúrny vzorec a z neho odvodený tvar molekúl umožní predpovedať ich **polaritu***

Polarita kovalentnej väzby je miera nerovnomernosti rozdelenia náboja elektrónov v obsadených väzbových a protiväzbových molekulových orbitáloch

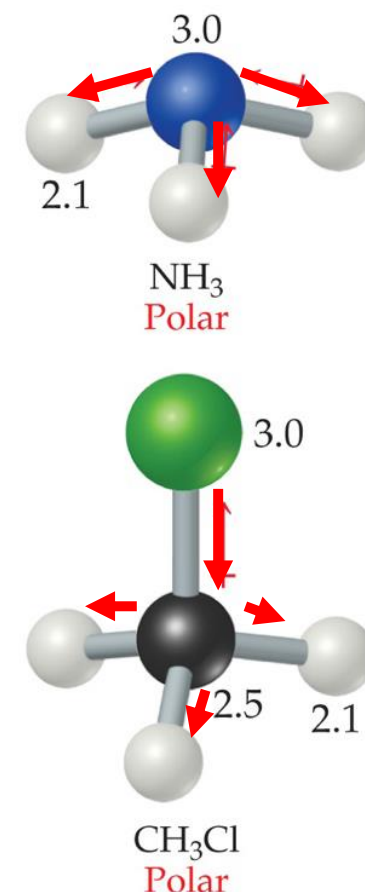
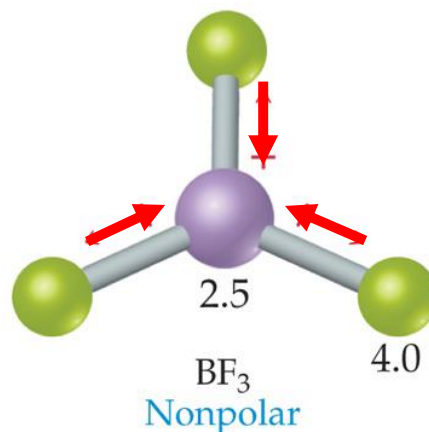
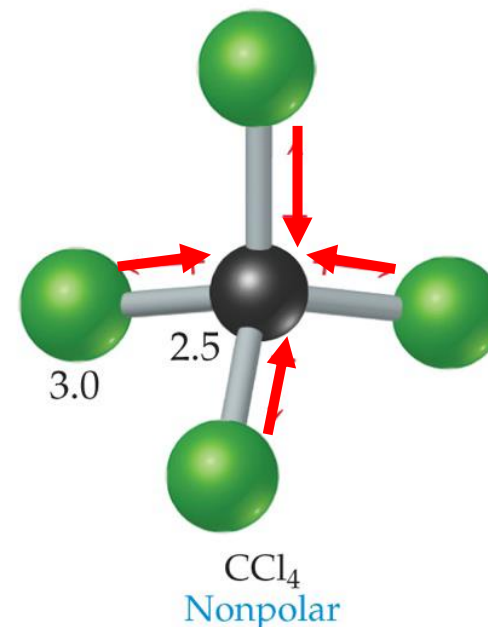
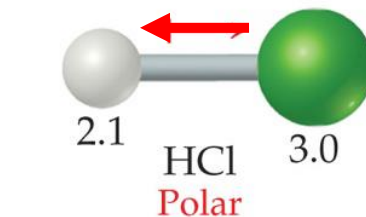
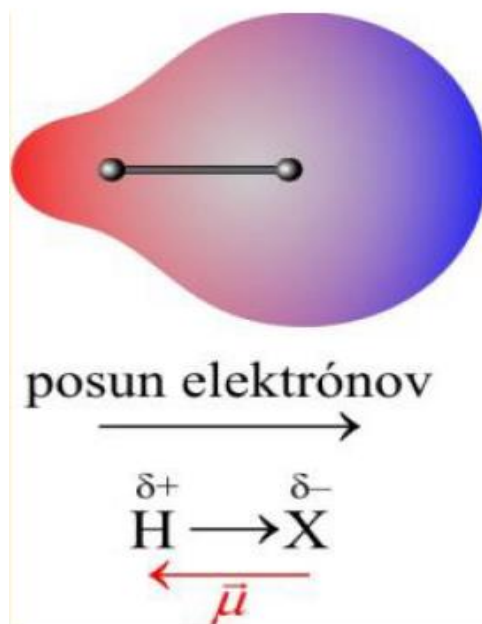
$$\Phi = c_A \cdot \psi_A + c_B \psi_B \quad c_A, c_B \text{ sú koeficienty lineárnej kombinácie AO}$$

- ak c_A, c_B , elektróny patria obom viazaným atómom a väzba je **nepolárna**.
- ak $c_A > c_B$, elektróny v obsadenom orbitáli sú silnejšie priťahované atómom A a väzba je **polárna**.
- ak $c_B = 0$, ide o hraničný prípad kedy väzbový elektrónový pár patrí len atómu A a väzba je prakticky úplne **iónová**.

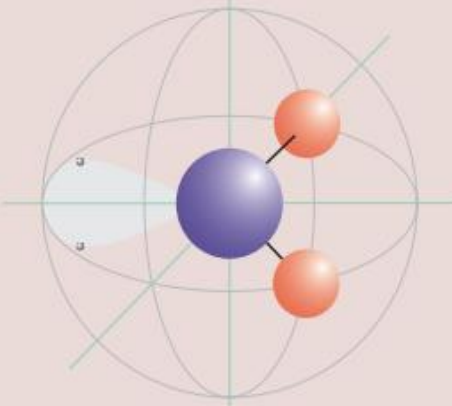
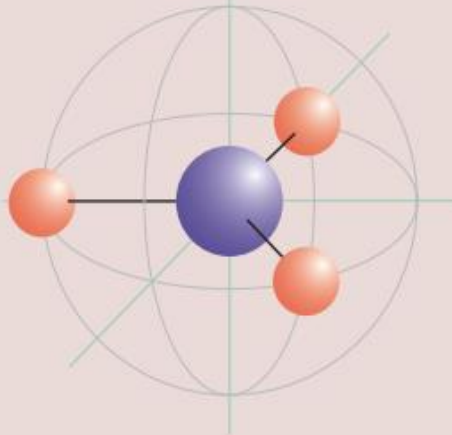
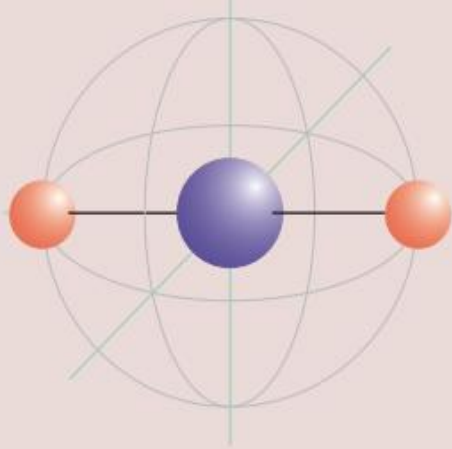
Polarita kovalentnej väzby

Mierou polarity molekúl je ich dipólový moment, $\vec{\mu}$ v jednotkách Debye ($1\text{D}=3,3356\cdot 10^{-30}\text{ C m}$). Ak $\mu = 0$, molekula je nepolárna, ak $\mu > 0$, molekula je polárna. Dipólový moment je definovaný ako súčin vektora vzdialenosti l medzi ťažiskami kladného a záporného náboja smerujúceho od ťažiska záporného náboja k ťažisku kladného náboja q :

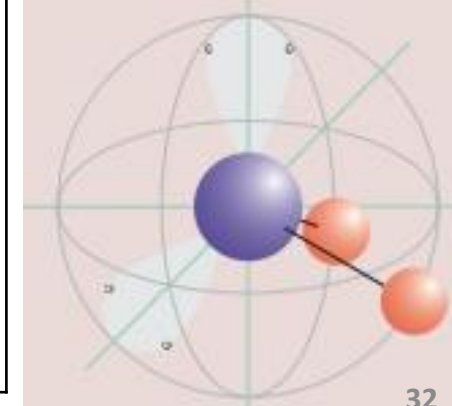
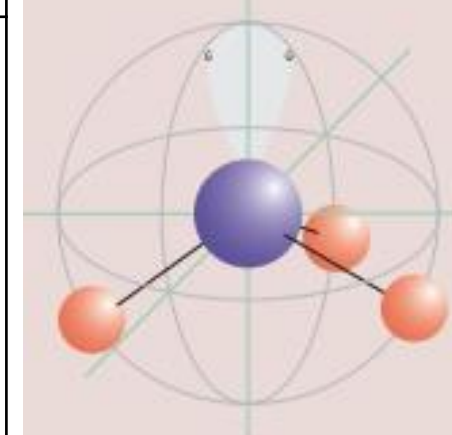
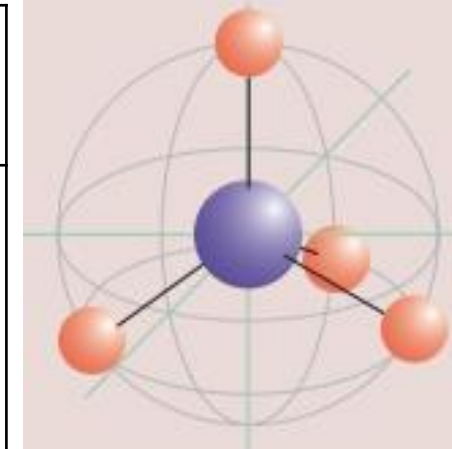
$$\vec{\mu} = q \cdot \vec{l}$$



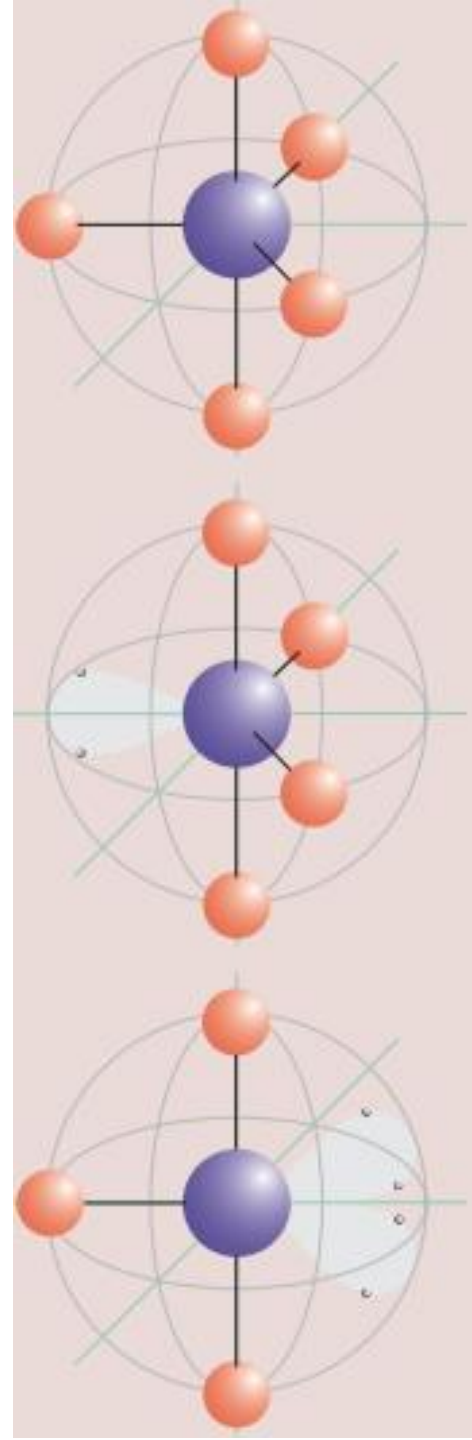
VEP σ -väzby	NEP	Tvar častice, uhol α
2	0	lineárny 1D $\alpha=180^\circ$ $\mu=0$
3	0	trigonálny 2D $\alpha=120^\circ$ $\mu=0$
2	1	zalomený 2D $\alpha<120^\circ$ $\mu\neq 0$



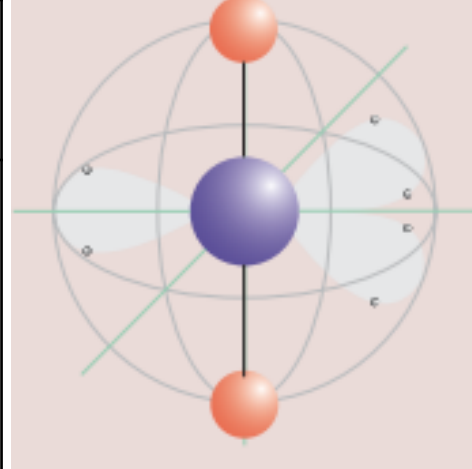
VEP σ -väzby	NEP	Tvar častice, uhol α
4	0	tetraéder 3D $\alpha=109,5^\circ$ $\mu=0$
3	1	trigonálne- pyramidálny 3D $\alpha<109,5^\circ$ $\mu\neq 0$
2	2	zalomený (2D), $\alpha<109,5^\circ$ $\mu\neq 0$



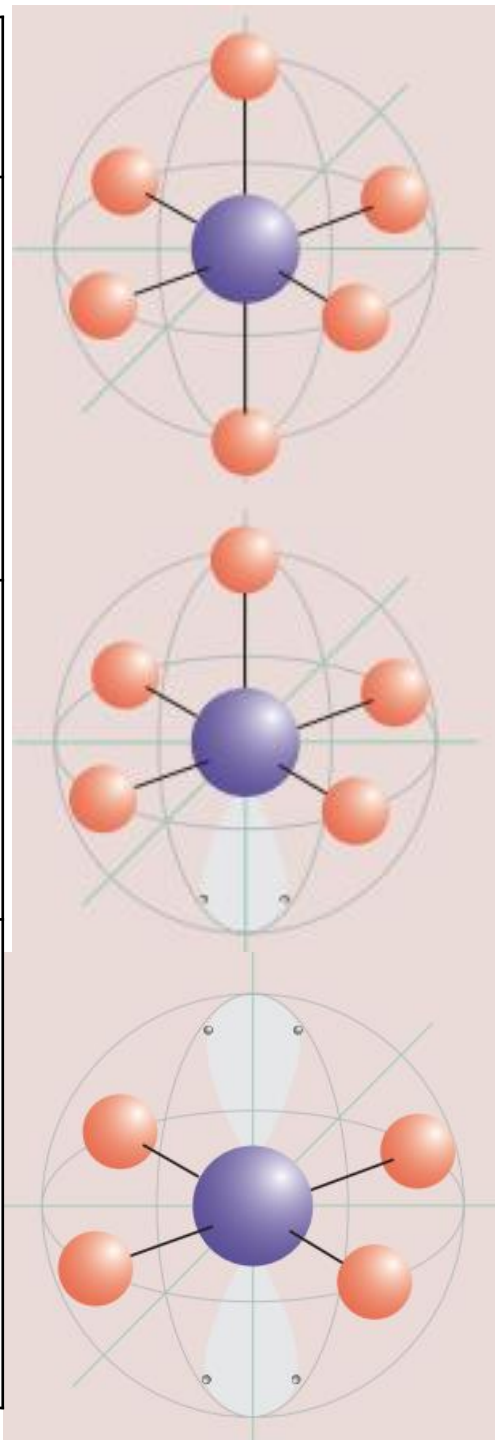
VEP σ -väzby	NEP	Tvar častice, uhol α
5	0	trigonálne- bipyramidálny 3D $\alpha=90^\circ, \beta=120^\circ$ $\mu=0$
4	1	Hojdačka 3D $\alpha<90^\circ, \beta<120^\circ$ $\mu\neq 0$
3	2	tvar písmena T 2D $\alpha<90^\circ$ $\mu\neq 0$



VEP σ -väzby	NEP	Tvar častice, uhol α
2	3	lineárny 1D $\alpha=180^\circ$ $\mu=0$

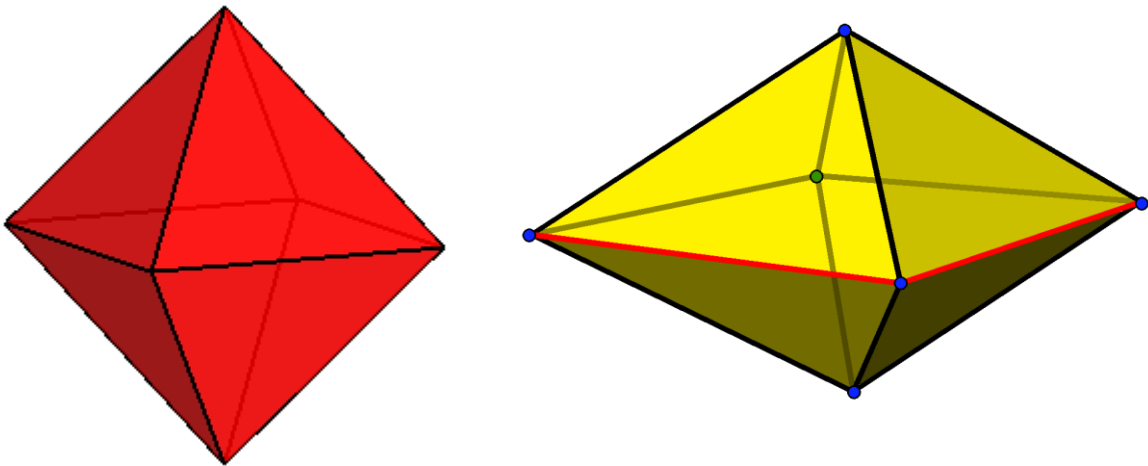


VEP σ -väzby	NEP	Tvar častice, uhol α
6	0	oktaéder 3D $\alpha=90^\circ$ $\mu=0$
5	1	štvorcovo- pyramidálny 3D $\alpha<90^\circ$ $\mu\neq 0$
4	2	štvorec 2D $\alpha=90^\circ$ $\mu=0$

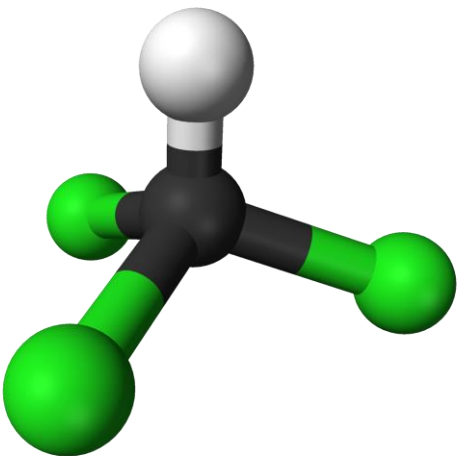


Deformácia ideálnych tvarov

predĺžená a sploštená tetragonálna bipiramína



deformovaný tetraéder



VEP σ -väzby	NEP	Hybri- dizácia	Tvar častice, uhol α	Príklady
2	0	sp	lineárny (1D), $\alpha=180^\circ$, $\mu=0$	BeCl ₂ (g), CO ₂ , N ₂ O, HCN, NCS ⁻
2	1	sp ²	zalomený (2D), $\alpha<120^\circ$, $\mu\neq 0$	SnCl ₂ , O ₃ , NO ₂ ⁻ , SO ₂
2	2	sp ³	zalomený (2D), $\alpha<109,5^\circ$, $\mu\neq 0$	H ₂ O, NH ₂ ⁻ , H ₂ F ⁺ , H ₂ S, SCl ₂
2	3	sp ³ d	lineárny (1D), $\alpha=180^\circ$, $\mu=0$	I ₃ ⁻ , XeF ₂ , ICl ₂ ⁻
3	0	sp ²	trigonálny (2D), $\alpha=120^\circ$, $\mu=0$	BCl ₃ , NO ₃ ⁻ , SO ₃ ,
3	1	sp ³	trigonálne-pyramidálny (3D), $\alpha<109,5^\circ$, $\mu\neq 0$	NH ₃ , PF ₃ , H ₃ O ⁺
3	2	sp ³ d	tvar písmena T (2D), $\alpha<120^\circ$, $\mu\neq 0$	ClF ₃
4	0	sp ³	tetraéder (3D), $\alpha=109,5^\circ$, $\mu=0$	CH ₄ , CCl ₄ , NH ₄ ⁺
4	1	sp ³ d	tvar hojdačky (3D), $\alpha<90^\circ$, $\beta<120^\circ$, $\mu\neq 0$	SF ₄
4	2	sp ³ d ²	štvorec (2D), $\alpha=90^\circ$, $\mu=0$	XeF ₄
5	0	sp ³ d	trigonálne-bipyramidálny (3D), $\alpha=90^\circ$, $\beta=120^\circ$, $\mu=0$	PCl ₅ , SbF ₅ , AsF ₅
5	1	sp ³ d ²	štvorcovo-pyramidálny (3D), $\alpha<90^\circ$, $\mu\neq 0$	BrF ₅ , IF ₅
6	0	sp ³ d ²	oktaéder (3D), $\alpha=90^\circ$, $\mu=0$	SF ₆ , PCl ₆ ⁻ , SiF ₆ ²⁻
6	0	sp ³ d ²	štvorcovo-bipyramidálny (3D), $\alpha=90^\circ$	trans-PCl ₄ F ₂ ⁻ , SCl ₅ F

CHEMICKÁ VÄZBA

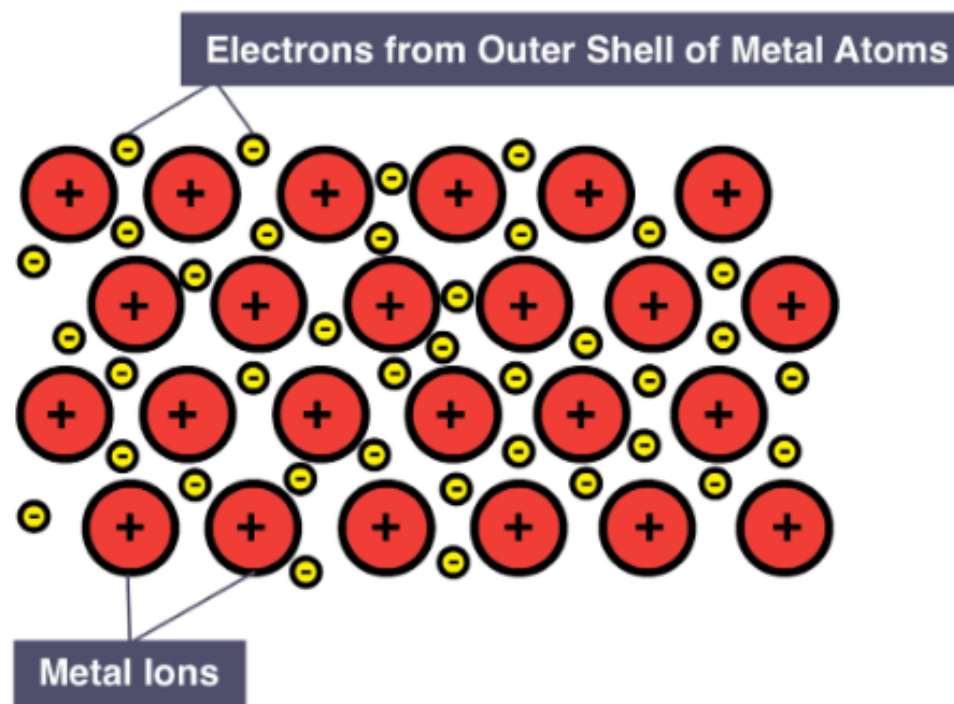
1.KOVALENTNÁ VÄZBA

2.KOVOVÁ VÄZBA

3.IÓNOVÁ VÄZBA

CHEMICKÁ VÄZBA

2. Kovová väzba: vyskytuje sa v atómoch kovových prvkov a v zliatinách. ***Jej podstatu vystihujú elektrostatické príťažlivé sily medzi trojrozmerné úplne delokalizovanými elektrónmi a kladne nabitými kationmi kovu usporiadanými v kryštálovej mriežke.*** Kovová väzba nemá smerový charakter ani násobnosť



CHEMICKÁ VÄZBA

1.KOVALENTNÁ VÄZBA

2.KOVOVÁ VÄZBA

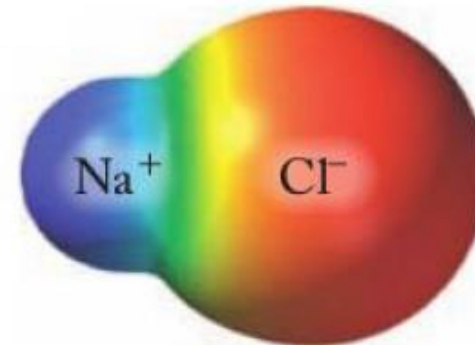
3.IÓNOVÁ VÄZBA

IÓNOVÁ VÄZBA

3. Iónová väzba: tvoria atómy rôznych (väčšinou) nekovových prvkov s veľkým rozdielom Paulingovských elektronegativít ($\chi > 1,7$). **Iónová väzba je elektrostatická príťažlivá interakcia medzi kationmi a aniónmi v tuhých iónových zlúčeninách.** Vyznačuje sa stratou smerového charakteru a násobnosti.

-Niet dôkazov o jestvovaní 100%-nej iónovej väzby a aj väzba v takých "klasických" prípadoch iónových zlúčenín, ako je napr. NaCl, má čiastočne kovalentný charakter. V praxi sa za iónovú väzbu považuje taká, ktorej polarita je aspoň 50 %.

	CH ₄		HCl		ScCl ₃		NaCl		CsF				
Polarita väzby	4 %		15 %		30 %		50 %		63 %		82 %		92 %
$\Delta\chi^{\text{P}}$	0,4		0,8		1,2		1,7		2,0		2,6		3,2



IÓNOVÁ VÄZBA

Vlastnosti iónov: iónový polomer r_i

vychádza z predstavy, že ióny sa považujú za tuhé **nestlačiteľné gule** s celistvým nábojom. V kryštálovej štruktúre sú usporiadané tak, že susediace opačne nabité **ióny sa vzájomne dotýkajú** a ich **medzijadrová vzdialenosť** je teda **súčtom ich iónových polomerov**.

V periodickej sústave prvkov vykazujú iónové polomery takéto trendy:

- iónový polomer izoelektrónových častíc vzrastá so zmenšovaním náboja, ako príklad možno uviesť postupnosť $r_i(\text{Ca}^{2+}) < r_i(\text{K}^+) < r_A(\text{Ar}) < r_i(\text{Cl}^-) < r_i(\text{S}^{2-})$
- v rámci skupiny iónový polomer vzrastá so zväčšovaním protónového čísla, ako príklad uvedieme
$$r_i(\text{F}^-) < r_i(\text{Cl}^-) < r_i(\text{Br}^-) < r_i(\text{I}^-), \text{ prípadne } r_i(\text{Li}^+) < r_i(\text{Na}^+) \ll r_i(\text{K}^+) < r_i(\text{Rb}^+) < r_i(\text{Cs}^+)$$
- v rámci periódy pre katióny prechodných alebo vnútorne prechodných prvkov s rovnakým nábojom iónový polomer klesá s protónovým číslom, príkladom je lantanoidová kontrakcia diskutovaná v kap. 11
- pre ióny jedného atómu iónový polomer klesá so zväčšovaním náboja, napr. $r_i(\text{Fe}^{3+}) < r_i(\text{Fe}^{2+})$.

IÓNOVÁ VÄZBA

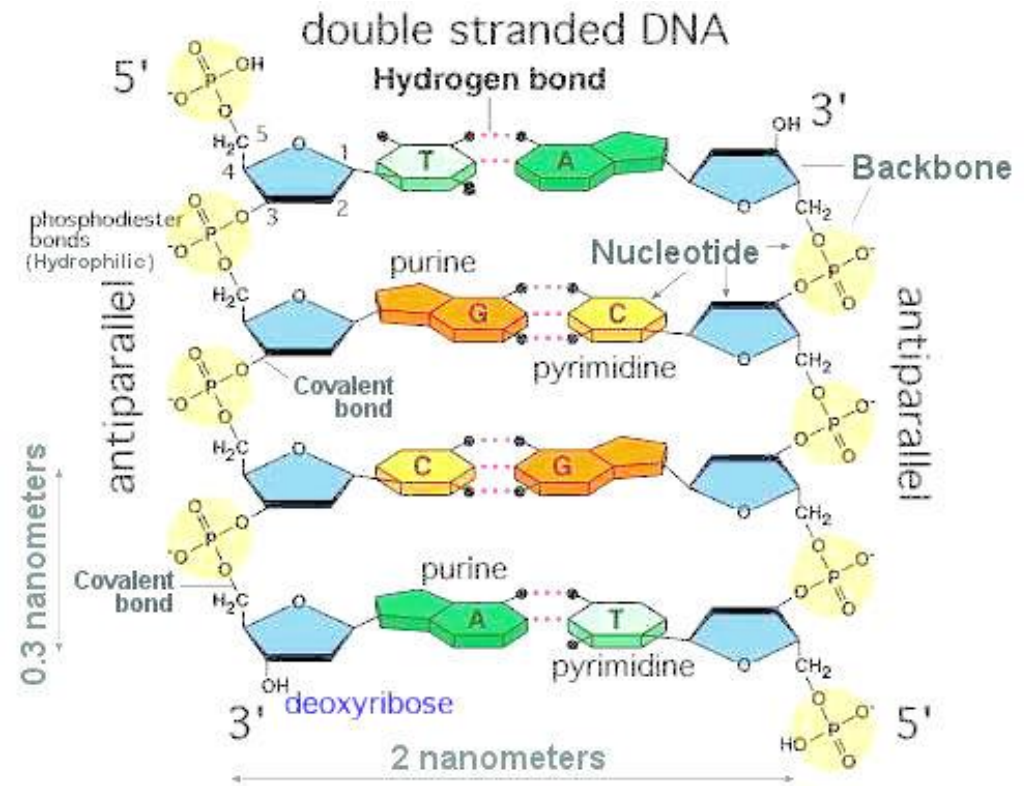
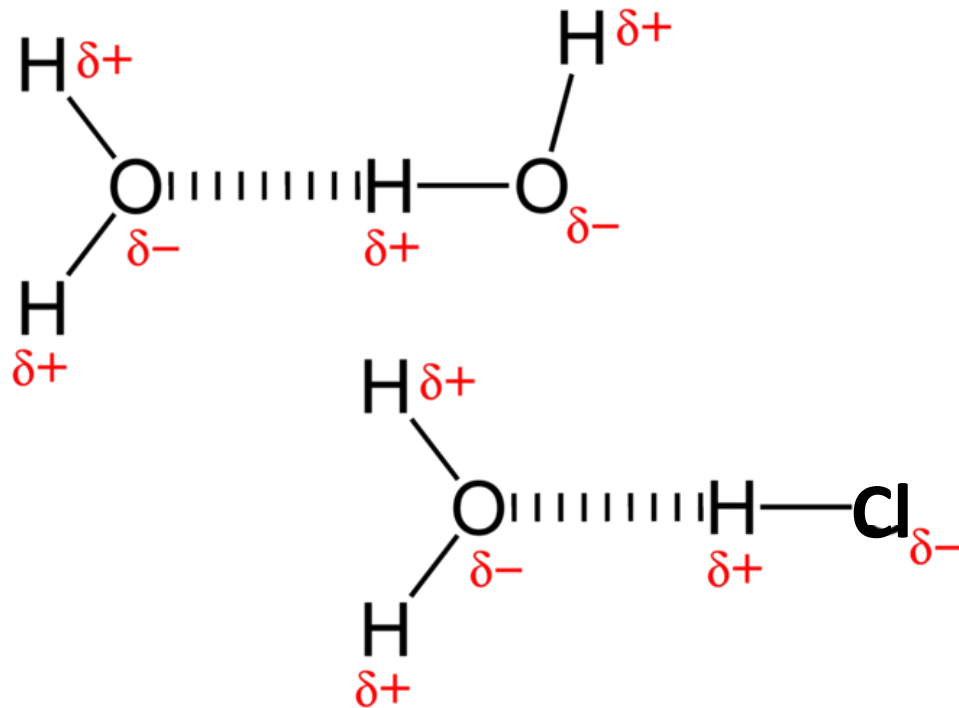
polarizovateľnosť častice α je dipólový moment indukovaný účinkom elektrostatického poľa s jednotkovou intenzitou. Polarizovateľnosť si možno predstaviť ako schopnosť iónu (najčastejšie aniónu), deformovať svoj elektrónový obal vplyvom vonkajšieho elektrického poľa. Preto sa niekedy polarizovateľnosť nahrádza pojmom **deformovateľnosť**.

Schopnosť iónu deformovať tvar inej častice svojím elektrickým poľom sa nazýva **polarizačný účinok** iónu a uvádza sa takmer výlučne v súvislosti s kationmi. Všeobecne platí, že **polarizačný účinok kationu je úmerný hustote kladného náboja na povrchu kationu**, čiže vzrastá s veľkosťou náboja a poklesom iónového polomeru.



NEKOVALENTNÉ INTERAKCIE

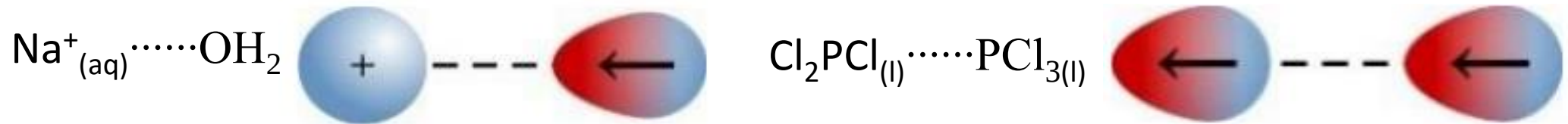
1. **Vodíková väzba:** je príťažlivá medzimolekulová interakcia, charakterom na prieniku chemickej väzby a fyzikálnych interakcií. Vytvára sa medzi atómom H kovalentne viazaného na atóm elektronegatívneho prvku X s iným atómom Y, na ktorom je lokalizovaný neväzbový valenčný elektrónový pár. Atómy X a Y sú často F, O, N a zriedkavejšie Cl a S. Energia vodíkovej väzby sa pohybuje v rozmedzí $E = 10\text{-}40 \text{ KJ/mol}$



NEKOVALENTNÉ INTERAKCIE

2. van der Waalsove interakcie: sily fyzikálnej povahy a v porovnaní s chemickou a vodíkovou väzbou sú podstatne slabšie. Delíme ich na

a) Coulombické: interakcie medzi trvalými (permanentnými) nábojmi, resp. dipólmi. Napr. interakcia ión-ión, ión-dipól (napr. $\text{Na}^+ - \text{H}_2\text{O}$) a dipól-dipól ($E=5-25 \text{ KJ/mol}$, napr. $\text{PCl}_3 - \text{PCl}_3$).



b) Indukčné: Ióny, resp. dipóly aj v nepolárnych molekulách indukujú dipólový moment a interakcie ión-indukovaný dipól ($E=3-15 \text{ KJ/mol}$, napr. $\text{OH}^- - \text{O}_2$) a dipól-indukovaný dipól ($E=2-10 \text{ KJ/mol}$, $\text{H}_2\text{O} - \text{O}_2$).



c) Disperzné: sú najslabšie interakcie ($E=0,05-4 \text{ KJ/mol}$) medzi indukovanými dipólmi v nepolárnych molekulách

