

### 3. Struktura a vlastnosti prvků a sloučenin

Snahou všech systémů, tedy i atomů, je dosáhnout stavu s co nejnižší energií a co největší stabilitou. Nejstabilnější elektronová konfigurace atomů je se zcela zaplněnými nebo se zcela prázdnými valenčními orbitaly. Tohoto stavu mohou atomy dosáhnout:

- přijetím nebo odevzdáním elektronů a tvorbou iontů
- sdílením elektronů s jiným atomem a vznikem větších útvarů – molekul

**MOLEKULA** je elektroneutrální skupina dvou nebo více atomů spojených navzájem chemickou vazbou. Je to základní stavební částice řady látek. Molekuly mohou být:

- stejnojaderné (homonukleárni) obsahující pouze atomy téhož prvku, např. H<sub>2</sub>
- různojaderné (heteronukleárni) obsahující různé atomy, např. HCl

Kromě elektroneutrálních molekul existují také **MOLEKULOVÉ IONTY**, což jsou molekuly s kladným nebo záporným nábojem, např. NH<sub>4</sub><sup>+</sup>; jsou stálé ve vodním prostředí nebo v krystalové struktuře.

**RADIKÁLY** jsou vysoce reaktivní částice obsahující jeden nebo více nepárových elektronů, např. ·CH<sub>3</sub>.

#### Chemická vazba

**CHEMICKÁ VAZBA** je interakce, která k sobě navzájem poutá sloučené atomy prvků v molekule (nebo ionty v krystalu) prostřednictvím valenčních elektronů.

Obecně platí:

- chemické vazby vznikají a zanikají při chemických reakcích
- při tvorbě chemické vazby se uvolňuje energie, tzv. vazebná energie
- pro rozštěpení chemické vazby je nutno dodat energii, tzv. disociační energii
- energie vazebná a disociační mají stejnou velikost, liší se pouze znaménkem a udávají se v kJ·mol<sup>-1</sup>; čím je vazebná (disociační) energie větší, tím je vazba pevnější
- podmírkou vzniku chemické vazby je dostatečné přiblížení atomů, které mají dostatečně vysokou energii a správnou prostorovou orientaci
- délka vazby je vzdálenost jader atomů vázaných v molekule

#### Druhy chemických vazeb

##### Kovalentní vazba

**KOVALENTNÍ VAZBA** je založena na společném sdílení dvojic elektronů (vazebních elektronových párů) oběma atomy. Oba elektrony jsou společně oběma atomům a mají opačný spin (podle Pauliho principu). Každý z atomů spojených kovalentní vazbou dosahuje stabilní elektronové konfigurace nejbližšího vzácného plynu.

#### Osnova kapitoly

- **Chemická vazba**
- **Druhy chemických vazeb**
  - **Kovalentní vazba**
    - Vaznost
    - Vazba  $\sigma$  a  $\pi$
    - Násobnost kovalentní vazby
    - Polarita kovalentní vazby
  - **Iontová vazba**
    - Kation
    - Anion
  - **Koordinačně kovalentní vazba**
  - **Kovová vazba**
  - **Slabé vazebné interakce**
    - van der Waalsovy sily
    - Vodíková vazba
- **Vliv chemické vazby na vlastnosti látek**
- **Struktura krystalů**
  - Iontové krystaly
  - Atomové krystaly
  - Molekulové krystaly

#### Poznámky



Některé organické látky tvoří obrovské molekuly obsahující až statisíce atomů, tzv. **makromolekuly**, např. bilkoviny, nukleové kyseliny, syntetické polymery.



Pouze vzácné plyny jsou za běžných teplot a tlaků tvořeny nesloučenými atomy, neboť jejich valenční orbitaly jsou úplně zaplněny osmi elektryny, a mají proto velmi stabilní uspořádání.



V tabulkách najdeme obvykle vazebnou energii jako **molární vazebnou energii** (vztaženou na 1 mol vazeb). Vazebná energie roste srostoucí násobností vazeb mezi stejnou dvojicí atomů.

### Poznámky



Vaznost atomu nemůžeme posuzovat jen podle jeho elektronové konfigurace v základním stavu. Např. to, že uhlík je ve svých organických sloučeninách čtyrvazný, odvodíme podle jeho konfigurace v excitovaném stavu.



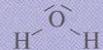
Oktetové pravidlo nelze uplatnit u prvků vyšších period a některých sloučenin fosforu, siry a chloru.



Pro obsazování molekulových orbitalů elektrony plní stejná pravidla jako pro obsazování atomových orbitalů, tzn. Pauliho princip, Hundovo pravidlo i výstavbový princip.



Tvar molekul tvořených třemi a více atomy určuje směr kovalentní vazby (totožný se směrem spojnice vázáných atomů). Vazebné elektronové páry se navzájem odpuzují, a proto vazby vycházející z jednoho (centrálního) atому jsou orientovány tak, aby byly co nejdál od sebe. Úhel mezi nimi nazýváme vazebný. Vliv na směr vazby mají také volné elektronové páry na centrálním atomu. Např. triatomové molekuly tak mohou být lineární, např. chlorid beryllnatý  $\text{Cl}-\text{Be}-\text{Cl}$ , nebo lomené, např. voda



Počet kovalentních vazeb vycházejících z atomu prvku ve sloučenině neboli počet vazebních elektronových párů, které atom sdílí s jinými atomy, se nazývá **VAZNOST** atому (prvku).

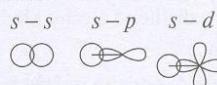
Pro určení vaznosti prvků 2. a 3. periody se používá **OKTETOVÉ PRAVIDLO**: Atomy vytvářejí tolik vazeb, aby sdílením elektronů dosáhly stabilní konfigurace vzácného plynu ( $s^2 p^6$ ). Elektrony zprostředkující vazbu se počítají do valenční vrstvy obou atomů.

Např. kyslík má 6 valenčních elektronů  $s^2 p^4$  a do stabilní elektronové konfigurace nejbližšího vzácného plynu (Ne) mu chybějí 2 elektrony. Tyto dva elektrony získá jejich sdílením s jiným atomem (nebo atomy) za tvorby dvou jednoduchých nebo jedné dvojné vazby, např.  $\cdot\ddot{\text{O}}\cdot + 2 \cdot \text{H} \rightarrow \text{H} \cdots \ddot{\text{O}} \cdots \text{H}$ , je tedy dvojvazný.

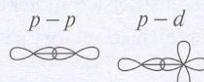
Přiblžením dvou atomů dochází k průniku jejich valenčních orbitalů a vzniká energeticky výhodnější (energeticky chudší) **MOLEKULOVÝ ORBITAL**. V molekulových orbitalech se elektrony vyskytují stejně jako v atomových orbitalech ve stavech s určitou energií. Systém elektronových stavů v molekulách je složitější než v atomech. Každý molekulový orbital je podobně jako atomový orbital charakterizován určitým prostorovým rozložením elektronové hustoty, má určitý tvar. Podle tvaru rozlišujeme orbitaly typu  $\sigma$  a  $\pi$ .

- Obsazením molekulového orbitalu  $\sigma$  vzniká **VAZBA  $\sigma$**  (sigma), ježí elektronová hustota je největší na spojnici jader atomů (s níž je totožná osa souměrnosti molekulového orbitalu  $\sigma$ ). Molekulový orbital  $\sigma$  může vzniknout překrytím:

- dvou orbitalů  $s$ ,  $s$  a  $p$  nebo  $s$  a  $d$



- dvou orbitalů  $p$  nebo  $p$  a  $d$

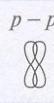


- dvou orbitalů  $d$



- Obsazením molekulového orbitalu  $\pi$  vzniká **VAZBA  $\pi$**  (pi), ježí elektronová hustota je největší mimo spojnici jader atomů, ale v rovině touto spojnici procházející. Vazba  $\pi$  vzniká až po vzniku vazby  $\sigma$  a podílí se na vzniku násobných vazeb, je slabší než vazba  $\sigma$ , proto sloučeniny s násobnou vazbou jsou reaktivnější než sloučeniny s vazbami jednoduchými. Molekulový orbital  $\pi$  může vzniknout překrytím:

- dvou orbitalů  $p$



- orbitalů  $p$  a  $d$



- dvou orbitalů  $d$



## Násobnost kovalentní vazby

- **JEDNODUCHÁ VAZBA** je kovalentní vazba uskutečněná sdílením pouze jednoho elektronového páru, je tvořena vazbou  $\sigma$  a je delší a slabší než násobné vazby (dvojná a trojná)
- **DVOJNÁ VAZBA** je kovalentní vazba uskutečněná sdílením dvou elektronových párů, tvoří ji jedna vazba  $\sigma$  a jedna vazba  $\pi$ , dvojná vazba je kratší a pevnější než jednoduchá vazba
- **TROJNÁ VAZBA** je kovalentní vazba uskutečněná sdílením tří elektronových párů, tvoří ji jedna vazba  $\sigma$  a dvě vazby  $\pi$ , trojná vazba je nejkratší a nejpevnější

## Polarita kovalentní vazby

**ELEKTRONEGATIVITA X** je schopnost atomu přitahovat vazebné elektrony (elektrony účastníci se vazby). Elektronegativnější atom (atom s vyšší X) ve vazbě k sobě poutá elektronový pár silněji než druhý elektropozitivnější atom (atom s nižší X).

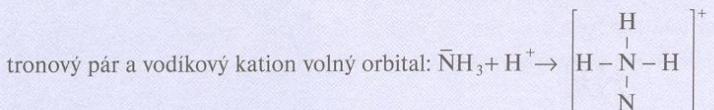
- **VAZBA KOVALENTRNÍ NEPOLÁRNÍ** vzniká mezi dvěma stejnými atomy (nebo atomy, jejichž rozdíl elektronegativit  $\Delta X$  nepřevyšuje 0,4), rozdělení elektronové hustoty mezi oběma atomy je zcela (nebo přibližně) rovnoměrné, obě jádra přitahují vazebné elektrony stejnou (nebo přibližně stejnou) silou.
- **VAZBA KOVALENTRNÍ POLÁRNÍ** vzniká mezi dvěma různými atomy (rozdíl jejich elektronegativit  $\Delta X$  je větší než 0,4, ale menší než 1,7), v okolí atomu s vyšší elektronegativitou je elektronová hustota vyšší než v okolí druhého, u atому s vyšší elektronegativitou převládá záporný náboj, u druhého atому kladný, molekula má záporný a kladný pól a tvoří tzv. **DIPÓL**. Ve vzorcích polárních molekul označujeme kladný pól horním indexem  $\delta^+$  a záporný pól horním indexem  $\delta^-$ , např.  $H^{\delta^+} - Cl^{\delta^-}$ . U složitějších molekul s více polárními vazbami se dipoly jednotlivých vazeb skládají jako vektory a výsledný dipol závisí na souměrnosti molekuly.

## Iontová vazba

**IONTOVÁ VAZBA** je extrémní případ polární kovalentní vazby (přechod polární kovalentní vazby k iontové je plynulý). Rozdíl elektronegativit vázaných atomů prvků je větší než 1,7. Sdílené elektrony patří téměř úplně do elektronového obalu elektropozitivnějšího atomu. Elektropozitivnější atom tak předá elektron druhému atomu a vznikne kladně nabité ion – **KATION** a záporně nabité ion – **ANION**. Ionty v iontových sloučeninách jsou vzájemně přitahovány elektrostatickými silami.

## Koordinačně kovalentní vazba

V **KOORDINAČNĚ KOVALENTRNÍ VAZBĚ** jeden atom – **DONOR** (dárce) poskytuje oba elektrony, druhý atom **AKCEPTOR** (příjemce) má ve valenční vrstvě volný orbital a přijme oba elektrony. Tako vzniklá vazba se svými vlastnostmi neliší od vazby kovalentní. Např. při vzniku amonného iontu poskytuje dusík v amoniaku volný elek-



## Poznámky



Podrobněji se odhadem tváru molekul nízkomolekulárních látek zabývá teorie hybridizace, nověji přepracovaná a rozšířená na tzv. teorii VSEPR.



Rozdíly elektronegativit atomů prvků spojených kovalentní nepolární vazbou (0 až 0,4) a kovalentní polární vazbou (více než 0,4, méně než 1,7) jsou určeny definicí.



V periodické tabulce na obálce jsou uvedeny hodnoty elektronegativit podle A. L. Allreda a E. G. Rochova.



Jestliže hodnotíme polárnost složitějších molekul, musíme dipoly jednotlivých vazeb skládat. Výsledný dipol souvisejí se souměrností molekuly. Např. lomená molekula vody je polární, protože dipoly jednotlivých vazeb se neruší, lineární molekula oxida uhličitého je nepolární, protože dipoly jejich vazeb se navzájem ruší.



Kationy tvoří snadno prvky s malou ionizační energií, např. alkalické kovy. Anionty tvoří snadno prvky s velkou elektronovou afinitou, např. halogeny.



Koordinačně kovalentní vazba umožnuje vznik koordinačně kovalentních (komplexních) sloučenin. Je považována za zvláštní druh kovalentní vazby, od níž se liší pouze mechanismem vzniku.

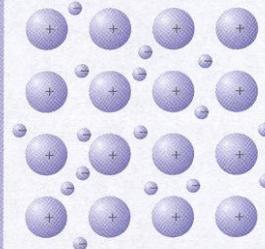
## Poznámky



Valenční elektrony v kovech nazýváme také **elektronový plyn**, protože svým chováním připomínají částice plynu.

Schéma kovové vazby:

### kovová vazba



Vodíková vazba představuje silnější spojení než van der Waalsovy síly, ale slabší než kovalentní vazba (vazebná energie vodíkové vazby se pohybuje mezi  $10\text{--}30 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ , u jednoduché kovalentní vazby činí asi  $150\text{--}300 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ ).



Vodíková vazba ve sloučenině zvyšuje její bod varu oproti analogickým sloučeninám bez vodíkových můstků.



Vedení elektrického proudu v roztocích iontových sloučenin umožňuje volně pohyblivé ionty.



Iontové sloučeniny jsou pevné krystalické látky s vysokou teplotou tání a varu, např. teploty tání dosahují  $600$  až  $2\,000\text{ }^{\circ}\text{C}$ . Nepolární látky mají často nízké teploty tání a varu, ale např. diamant tvořící tzv. atomové krystaly má teplotu tání až  $3\,800\text{ }^{\circ}\text{C}$ .

## Kovová vazba

**KOVOVÁ VAZBA** vzniká mezi atomy kovu v tuhému stavu a je způsobena elektrostatickou přitažlivostí kationtů kovů a volně se pohybujících valenčních elektronů. Každý atom ve struktuře kovu je obklopen větším počtem atomů, než je počet jeho valenčních elektronů, které se podílejí na vzniku vazeb. Elektrony se tak mohou volně pohybovat kolem kationtů kovu rozmístěných v pravidelné mřížce.

## Slabé vazebné interakce

Kromě výše uvedených pevných vazeb existují i slabší vazebné síly, které také ovlivňují vlastnosti látek:

- **VAN DER WAALSOVY SÍLY** vznikají na základě vzájemného působení molekulových dipólů a projevují se přitahováním opačných polů molekul nebo nábojů iontů (u nepolárních molekul, např.  $\text{H}_2$ , se může dipól vytvořit jako důsledek okamžitých nerovností v rozložení elektronů v molekule)
- **VODÍKOVÁ VAZBA** (vodíkový můstek) se vyskytuje u sloučenin vodíku s prvkem o vysoké elektronegativitě a nevazebným elektronovým párem (F, O, N), kde atom vodíku jedné molekuly vytváří slabou vazbu s volným elektronovým párem elektronegativnějšího prvku druhé molekuly, ve vzorcích ji značíme tečkováním, např. fluorovodík  $\text{H}-\text{F}\dots\text{H}-\text{F}\dots\text{H}-\text{F}$

## Vliv chemické vazby na vlastnosti látek

Látky s kovalentní nepolární vazbou:

- nerozpustné ve vodě, rozpustné v nepolárních rozpouštědlech
- nevedou elektrický proud

Látky s polární a iontovou vazbou:

- rozpustné ve vodě, nerozpustné v nepolárních rozpouštědlech
- v tavenině nebo v roztoku vedou elektrický proud

Látky s kovovou vazbou:

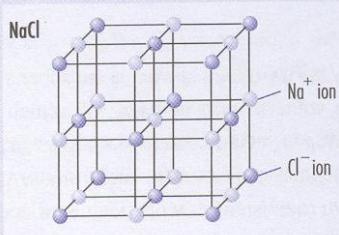
- vedou elektrický proud a teplo
- jsou kujné a tažné

## Struktura krystalů

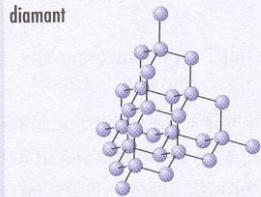
Pevné látky, které mají pravidelné uspořádání základních částic (iontů, atomů nebo molekul), mohou tvořit souměrná tělesa – **KRYSTALY**. Krystal je geometrické těleso omezené krystalovými plochami, které se stýkají v hranách, a ty se sbíhají ve vrcholech. Základní stavební jednotkou krystalu je základní buňka, což je nejjednodušší seskupení částic. Celá struktura je pak složena z velkého počtu souměrně uspořádaných základních buněk.

Rozlišujeme:

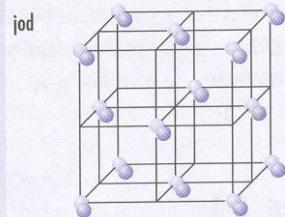
- **IONTOVÉ KRYSTALY** jsou složené z iontů, každý ion je obklopen co největším počtem iontů opačně nabitéch, mají typické vlastnosti iontových sloučenin – jsou křehké, mají vysoké teploty tání, v roztocích a taveninách vedou elektrický proud, např. NaCl



- **ATOMOVÉ** (kovalentní) **KRYSTALY** jsou složené z pravidelně uspořádaných kovalentně vázaných atomů, mají vysoké teploty tání, jsou velmi tvrdé, nerozpustné v běžných rozpouštědlech a nevedou elektrický proud, např. diamant



- **MOLEKULOVÉ KRYSTALY** jsou složené z pravidelně uspořádaných molekul navzájem vázaných van der Waalsovými silami nebo vodíkovými můstky, mají nízké teploty tání, nevedou elektrický proud, např. jod



Pevné látky mohou existovat nejen ve formě krystalů, ale mohou být i **AMORFNÍ** (beztvaré), např. sklo, saze. Uspořádání částic v amorfálních látkách je nepravidelné.

### Poznámky



Významnou vlastností krytalů je jejich souměrnost, podle níž rozlišujeme 7 krytalových soustav: trojklonná, jednoklonná, kosočtverečná, čtverecná, krychlová, šestekraticná a klencová.



Některé látky mohou krystalovat v různých krytalových soustavách a vytvářejí tak různé krytalové formy

#### – modifikace.

U sloučenin se tento jev nazývá **polymorfie** (např. CaCO<sub>3</sub> krystaluje jako aragonit v kosočtverečné soustavě nebo jako kalcit v soustavě klencové).

U prvků se tento jev nazývá **alotropie** (např. uhlík krystaluje v soustavě šesterečné jako grafit nebo v soustavě krychlové jako diamant).



**Izomorfie** je schopnost různých látek krystalovat ve stejných krytalových soustavách a tvořit spolu směsne krytal (společně krytalovat ze směsi svých nasycených roztoků nebo tavenin). V krytalové mřížce se částice izomorfních látek mohou vzájemně za stupovat, např. siran hořecnatý, zinečnatý a nikelnatý krytalizují jako heptahydryty.



Existují také **kovové krystaly**, které si modelově můžeme představit jako co nejtěsněji uspořádané koule (atomy kovu) v krychlové buňce.