

Struktura a vlastnosti prvků a sloučenin

Snahou všech systémů je dosáhnout nejnižší energie a nejvyšší stability

Nejstabilnější je atom, pokud má zcela zaplněné nebo zcela prázdné valenční orbitály, tohoto stavu atomy dosahují:

- Přijetím nebo odevzdáním elektronů a tvorbou iontů
- Sdílením elektronů s jiným atomem a vznikem větších útvarů

Molekula je elektroneutrální skupina dvou nebo více atomů spojených navzájem chemickou vazbou

Molekuly dělíme na:

- Molekuly prvku- obsahují atomy jednoho prvku (H_2)
- Molekuly sloučenin- obsahují různé atomy (HCL)

Kromě neutrálních molekul existují i molekulové ionty- jsou stálé ve vodním prostředí nebo krystalové struktuře

Radikály- vysoce reaktivní částice- obsahují jeden nebo více nepárových elektronů

Chemická vazba

Chemická vazba- interakce, která k sobě navzájem poutá sloučené atomy prvků v molekule prostřednictvím valenčních elektronů

Obecně platí:

- Chemické vazby vznikají a zanikají při chemických reakcích
- Při tvorbě vazby se uvolňuje energie (vazebná energie)
- Pro rozštěpení vazby je nutné dodat energii (disociační energie)
- Disociační a vazebná energie mají stejnou velikost, liší se pouze znaménkem- udávají se v kJ/mol- čím je vazebná/disociační energie vyšší, tím je vazba pevnější
- Podmínkou pro vznik vazby je dostatečné přiblížení atomů, které mají vhodnou energii a správnou prostorovou orientaci
- Délka vazby je vzdálenost jader atomů vázaných v molekule

Druhy chemických vazeb

Kovalentní vazba

Jde o společné sdílení dvojice elektronů (vazebných elektronových párů) oběma atomy

Oba elektrony jsou společné oběma atomům a mají opačný spin (Pauliho princip)

Každý z atomů spojených kovalentní vazbou dosahuje stabilní elektronové konfigurace nejbližšího vzácného plynu

Vaznost prvku (atomu)- počet kovalentních vazeb vycházejících z atomu prvku ve sloučenině- počet vazebných elektronových párů, které atom sdílí

Pro určení vaznosti 2. a 3. prvku (kromě sloučenin fosforu, síry a chloru) se užívá oktetové pravidlo- atomy vytvářejí tolik vazeb, aby sdílením dosáhly stabilní konfigurace vzácného plynu (s^2p^6)- elektrony zprostředkovávající elektronovou vazbu se počítají do elektronových obalů obou elektronů

Např. kyslík má 6 valenčních elektronů (s^2p^4) a do stabilní konfigurace neonu mu chybí 2 elektrony- tyto elektrony získá jejich sdílením s jinými atomy- vytvoření dvou jednoduchých vazeb nebo jedné dvojité vazby- kyslík je tedy dvojitý

Vaznost nelze posuzovat pouze podle elektronové konfigurace v základním stavu

Přiblížením dvou atomů dochází k průniku jejich atomových orbitalů- vznikají dva molekulové orbitály- jeden z nich (vazebný) má energii nižší- druhý (protivazebný) má energii vyšší

V molekulových orbitalech se elektrony vyskytují, stejně jako v atomových orbitalech, ve stavech s určitou energií

Každý molekulový orbital je také charakterizován určitým prostorovým rozložením elektronové hustoty

Podle tvaru rozlišujeme orbitály typu σ (sigma) a π (pí)

- Vazba σ - vzniká obsazením molekulového orbitalu jehož elektronová hustota je největší na spojnici jader atomů (s ní je zároveň totožná osa souměrnosti molekulového orbitalu σ)- molekulový orbital σ může vzniknout překrytím:
 - o Dvou orbitalů s, s a p nebo s a d
 - o Dvou orbitalů p nebo p a d
 - o Dvou orbitalů d
- Vazba π - vzniká obsazením molekulového orbitalu, jehož nejvyšší hustota leží mimo spojnici jader atomů, ale v rovině touto spojnici procházející- vazba π vzniká až po vazbě σ a podílí se na vzniku násobných vazeb- je slabší než vazba σ - proto sloučeniny jsou s touto vazbou reaktivnější než sloučeniny s vazbami jednoduchými- molekulový orbital π vzniká překrytím:
 - o 2 orbitalů p
 - o Orbitalů p a d
 - o 2 orbitalů d

Pro obsazování molekulových orbitalů také platí Hundovo pravidlo, Pauliho princip a výstavbový princip

Tvar molekul tvořený třemi a více atomy určuje směr kovalentní vazby (směr spojnice vázaných atomů)- vazebné páry se navzájem odpuzují- a proto vazby vycházející z jednoho (centrálního) atomu jsou orientovány tak, aby byly co nejdále od sebe- svírají tzv. vazebný úhel- vliv na směr vazby mají také volné elektronové páry v centrálním atomu

Existuje ještě vazba δ (delta)- je tvořena překryvem orbitalů d- vyskytuje se ve sloučeninách přechodných kovů

Násobnost kovalentní vazby

- Jednoduchá vazba- kovalentní vazba je uskutečněna sdílením pouze jednoho elektronového páru- je tvořena vazbou σ a je delší a slabší než násobné vazby (dvojná a trojná)
- Dvojná vazba- kovalentní vazba uskutečněná sdílením dvou elektronových párů- tvoří ji jedna vazba σ a jedna vazba π - dvojná vazba je kratší a pevnější než jednoduchá

- Trojná vazba- kovalentní vazba uskutečněná sdílením tří elektronových párů, tvoří ji jedna vazba σ a dvě vazby π - trojná vazba je nejkratší a nejpevnější

Čtverná vazba- vyskytuje se vzácně u přechodných kovů- tvořena 1σ , 2π a 1δ

Polarita kovalentní vazby

Elektronegativita (X)- schopnost přitahovat vazebné elektrony- atom s vyšší elektronegativitou ve vazbě poutá silněji atom s nižší elektronegativitou

Kovalentní nepolární vazba- rozdíl elektronegativit $\Delta X=0-0,4$

Kovalentní polární vazba- rozdíl elektronegativit $\Delta X=0,4-1,7$

- Kovalentní vazba nepolární- vzniká většinou mezi dvěma stejnými atomy- rozdělení elektronové hustoty mezi oběma atomy je zcela/přibližně stejně, obě jádra přitahují vazebné elektrony stejnou/přibližně stejnou silou
- Kovalentní vazba polární- vzniká většinou mezi dvěma různými atomy- v okolí atomu s vyšší elektronegativitou je elektronová hustota vyšší- převládá záporný náboj- u druhého atomu (nižší X) převládá kladný- molekula má tedy kladný a záporný pól a tvoří tzv. dipól- ve vzorcích se označuje horním kladným/záporným indexem δ^-/δ^+

Iontová vazba

Extrémní případ polární kovalentní vazby- rozdíl elektronegativit $X>1,7$ - sdílené elektrony téměř úplně patří pouze atomu s vyšším X- elektropozitivnější tak předá elektron atomu s vyšším X a vznikne kladně nabitý kation a záporně nabitý anion- ionty v iontových sloučeninách jsou navzájem přitahovány elektrostatickými silami

Koordináčně kovalentní vazba

V koordináčně kovalentní vazbě je jeden atom donor (dárce)- poskytne oba elektrony- a druhý akceptor- má ve valenční vrstvě volný orbital a přijme oba elektrony

Tato vazba se vlastnostmi nijak neliší od vazby kovalentní- liší se pouze mechanismem vzniku

Kovová vazba

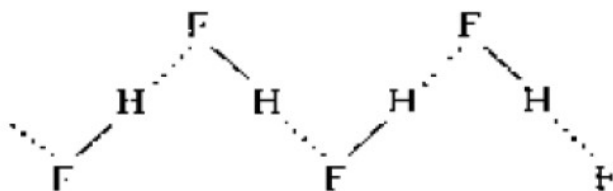
Vzniká mezi atomy kovu v tuhém stavu a je způsobena elektrostatickou přitažlivostí kationtů kovů a volně se pohybujících valenčních elektronů

Každý atom ve struktuře kovu je obklopen větším množstvím atomů, než je počet jeho valenčních elektronů, které se podílejí na vzniku vazeb- elektrony se tudíž mohou volně pohybovat kolem kationtů kovu rozmístěných v pravidelné mřížce

Slabé vazebné interakce

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

- Van der Waalsovy síly- vznikají vzájemným působením molekulových dipólů- projevují se přitahováním opačných pólů molekul nebo nábojů iontů- u nepolárních molekul se může dipól vytvořit jako důsledek okamžitých nerovností v rozložení elektronů v molekule (např. H_2)
- Vodíková vazba (vodíkový můstek)- vyskytuje se u sloučenin vodíku s prvkem o vysoké elektronegativitě a nevazebným elektronovým párem (např. F, O, N)- atom vodíku jedné molekuly vytváří slabou vazbu s volným elektronovým párem elektronegativnějšího prvku druhé molekuly (např. fluorovodík)- ve vzorcích značíme tečkováním



Podle síly vazby- kovalentní vazba>vodíková vazba>van der Waalsovy síly

Vliv chemické vazby na vlastnosti látek

Nepolární látky (platí pouze pro malé molekuly, které obsahují 1 nebo 2 vazby):

- Nerozpustné ve vodě
- rozpustné v nepolární 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 (vedení proudu v roztocích umožňují volně pohyblivé ionty)

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, molekul) mohou tvořit souměrná tělesa (krystaly)

krystal je geometrické těleso omezené krystalovými plochami, které se stýkají v hranách- ty se sbíhají ve vrcholech

základní stavební jednotkou krystalu je základní buňka- nejmenší část krystalu- jejím periodickým opakováním ve všech třech rozměrech lze sestavit krystal- celá struktura je složena z velkého počtu souměrně uspořádaných základních buněk

rozlišujeme:

- iontové krystaly- složené z iontů- každý ion je obklopen co největším počtem iontů opačného náboje
 - o typické vlastnosti: křehké, vysoké teploty tání, v roztocích a taveninách vedou elektrický proud (např. NaCl)
- atomové (kovalentní) krystaly- složené z pravidelně uspořádaných kovalentně vázaných atomů
 - o typické vlastnosti: velmi tvrdé, nerozpustné v běžných rozpouštědlech, nevedou elektrický proud (např. diamant)
- molekulové krystaly- složené z pravidelně uspořádaných molekul, navzájem vázaných van der Waalsovými silami nebo vodíkovými můstky
 - o typické vlastnosti: nízké teploty tání, nevedou elektrický proud (jod)

pevné látky mohou existovat:

- ve formě krystalů- podle osy souměrnosti se dělí na:
 - o trojklonné
 - o jednoklonné
 - o klencové
 - o kosočtverečné
 - o šesterečné
 - o čtverečné
 - o krychlové
- jako amorfni (beztvaré)- uspořádání částic je nepravidelné (sklo, saze)

některé látky mohou krystalizovat v různých soustavách- vytvářejí tak různé formy- modifikace (uhlík jako grafit-šesterečná nebo jako diamant-krychlová)

izomorfie- schopnost různých látek krystalovat ve stejných krystalových soustavách a tvořit směsné krystaly