**Chemická väzba**

1. **Elektrónová teória chemickej väzby**

* autormi sú Kossel a Lewis
* podľa tejto teórie chemická väzba medzi atómami vzniká vtedy, ak dôjde k takému prerozdeleniu elektrónov v ich valenčných vrstvách, že vznikne u každého z nich stabilnejšia elektrónová konfigurácia.

1. ***Iónová väzba –*** atóm odovzdá elektrón druhému atómu, s ktorým interaguje a tým získa elektrónovú konfiguráciu vzácneho plynu, napr.

* atóm prijme elektrón od iného atómu, s ktorým interaguje a tým nadobudne elektrónovú konfiguráciu vzácneho plynu, napr.
* medzi vzniknutými iónmi pôsobia silné elekrostatické príťažlivé sily

1. ***Kovalentná väzba*** – atómy, ktoré vytvárajú molekulu, spoločne vlastnia jeden alebo viac svojich valenčných elektrónov – tak, aby každý z interagujúcich atómov mal vo svojej valenčnej vrstve elektrónový oktet.

Elektrónová teória chemickej väzby tým, že vychádzala z klasickej predstavy o elektróne ako častici, mala hlavne popisný kvalitatívny charakter. Rozvojom kvantovej mechaniky a vznikom kvantovomechanického modelu atómu bola vypracovaná všeobecnejšia kvantovomechanická teória.

1. **Kvantovomechanické teórie chemických väzieb**

**Teória valenčných väzieb** – pod chemickou väzbou rozumieme také vzájomné interakcie medzi atómami, ktorých podstatou je prerozdelenie elektrónovej hustoty valenčných elektrónov v oblasti medzi jadrami viažucich sa atómov. Príčinou väčšej stálosti zlúčenín v porovnaní s atómami prvkov, ktoré ich tvoria, je skutočnosť, že pri tvorbe chemických zlúčenín sa uvoľňuje energia. Táto energia sa nazýva **väzbová energia**. Naopak, na rozštiepenie chemickej väzby je potrebné energiu dodať. Energia, ktorá je na to potrebná, sa nazýva **disociačná energia**. Absolútne hodnoty väzbovej energie a disociačnej energie sú rovnaké (líšia sa iba znamienkom). Čím viac energie sa pri vzniku chemickej väzby uvoľní, tým je väzba pevnejšia (zlúčenina je stálejšia).

**Kovalentná väzba** je sprostredkovaná dvoma elektrónmi patriacimi do valenčnej sféry obidvoch viazaných atómov, takzvaným väzbovým elektrónovým párom. Pri tomto type väzby sa pri priblížení atómov prekrývajú ich vonkajšie časti elektrónových obalov.

Aby medzi atómami vznikla kovalentná väzba, musia byť splnené nasledujúce podmienky:

1. atómy sa musia k sebe dostatočne priblížiť, tak, aby sa prekryli ich valenčné orbitály,
2. atómy musia mať elektróny v orbitáloch usporiadané tak, aby z nich mohli vzniknúť väzbové elektrónové páry,
3. atómy musia mať dostatočnú energiu pre vznik chemickej väzby,
4. atómy musia mať vhodnú priestorovú orientáciu pre vznik chemickej väzby.

Kovalentná väzba, na ktorej sa zúčastňuje len jeden väzbový elektrónový pár, sa nazýva **jednoduchá väzba**, napríklad v molekule fluóru F2 (F–F) alebo v molekule chlorovodíka HCl (H–Cl).

Väzbu medzi atómami v molekule môžu tvoriť aj dva, prípadne tri väzbové elektrónové páry. Napríklad väzbu medzi atómami uhlíka v molekule eténu C2H4 tvoria dva väzbové elektrónové páry (H2C=CH2), **väzba** sa nazýva **dvojitá.** V molekule dusíka N2 väzbu medzi atómami dusíka vytvárajútri väzbové elektrónové páry (N≡N), **väzba** sa nazýva **trojitá**. Dvojitá a trojitá väzba sa nazývajú **násobná kovalentná väzba**.

**Polarita kovalentnej väzby**

Ak je molekula tvorená len atómami toho istého prvku, napríklad chlór Cl2 alebo dusík N2 , hustota elektrónov väzbového elektrónového páru (a teda aj elektrický náboj) je rovnomerne rozložená medzi jadrami viazaných atómov. Vtedy ide o takzvanú **nepolárnu kovalentnú väzbu**.

Ak je molekula tvorená atómami rôznych prvkov, napríklad chlorovodík HCl alebo amoniak NH3, potom je väzbový elektrónový pár posunutý do blízkosti atómu toho prvku, ktorý má väčšiu schopnosť priťahovať elektróny. Na atómoch v molekule potom vznikajú čiastkové elektrické náboje a väzba medzi atómami sa nazýva **polárna kovalentná väzba**. Na atóme, ku ktorému je väzbový elektrónový pár bližšie, je čiastkový záporný náboj, na druhom atóme je čiastkový kladný náboj.

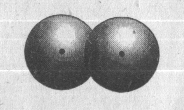
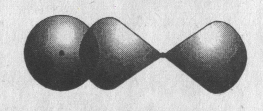
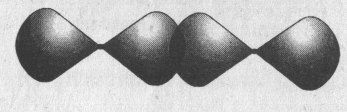
Schopnosť atómov pútať k sebe väzbový elektrónový pár odráža veličina, ktorá sa nazýva **elektronegativita.** Na základe rozdielu hodnôt elektronegativity atómov prvkov viazaných v molekule rozlišujeme teda dva typy kovalentnej väzby:

1. ak je rozdiel hodnôt elektronegativity atómov viazaných v molekule rovný nule alebo menší ako 0,4 , väzbu považujeme za **nepolárnu kovalentnú**,
2. ak je rozdiel hodnôt elektronegativity atómov viazaných v molekule z intervalu 0,4 – 1,7 , väzbu považujeme za polárnu kovalentnú~~.~~

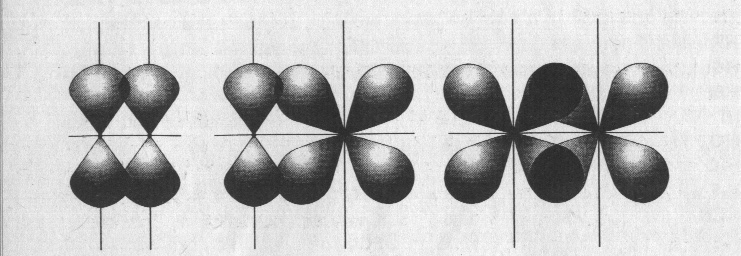
Ak je rozdiel hodnôt elektronegativity viazaných atómov rovný 1,7, väzba je na 50 % kovalentná a na 50 % iónová. Ak je rozdiel hodnôt elektronegativity viazaných atómov väčší ako 1,7 ,elektrónový pár patrí iba jednému z atómov zúčastnených na tvorbe väzby a väzbu považujeme za iónovú. Môže mať však určitý podiel kovalentnosti, podobne, ako má polárna kovalentná väzba určitý podiel iónovosti.

**Kovalentná väzba sigma a pí**

Väzba σ vzniká prekrytím atómových orbitalov lokalizovaných na spojnici jadier viažucich sa atómov. Vzniká prekrytím orbitalov s – s, s – p a p – p, ktoré sú orientované pozdĺž spojnice jadier:

**  **

Väzba π vzniká prekrytím atómových orbitalov lokalizovaných kolmo na spojnicu jadier viažucich sa atómov. Táto väzba vzniká pri prekrývaní orbitalov p – p, p – d, d – d orientovaných kolmo na spojnicu jadier viažucich sa atómov:



Ak sú atómy v molekule viazané jednou väzbou, je to väzba σ. Väzba π vzniká medzi atómami v molekule len vtedy, ak už medzi nimi existuje väzba σ. Keď sa atómy viažu jednou σ a jednou π väzbou, vzniká **dvojitá kovalentná väzba**. Keď sú atómy viazané jednou σ väzbou a dvoma π väzbami, vzniká **trojitá kovalentná väzba**. Väzby σ a π sa od seba líšia pevnosťou, čo je dôsledkom rôznej veľkosti prekrytia atómových orbitalov. **Väzba π je slabšia ako väzba σ**.

Ak je spojnicou jadier os x, potom prekrytím dvoch atómových orbitalov 2px vznikne väzba σ. Atómové orbitaly 2py a 2pz sú kolmé na os x, potom prekrytím dvoch orbitalov 2py vznikne jedna π väzba a prekrytím ďalších dvoch atómových orbitalov 2pz vznikne druhá π väzba. V molekule N2 je trojitá kovalentná väzba N ≡ N.

# Dipólový moment .

V zlúčeninách s nepolárnou kovalentnou väzbou je ťažisko kladného a záporného náboja v jednom bode.

Polárne molekuly majú elektrický náboj rozložený nesymetricky, takže v jednej časti molekuly pevláda kladný náboj a v druhej záporný. Takéto molekuly tvoria dipóly. Príkladom je napr. molekula HF: Polaritu molekúl možno kvantitatívne charakterizovať dipólovým momentom **μ** = Q . I, kde

Q = náboj, I = vzdialenosť nábojov. Dipólový moment je vektorová veličina, udáva sa v jednotkách C.m, avšak v literatúre sa častejšie uvádza jednotka D (Debye), pričom platí   
1D = 3,33 .10–30 C.m.

Z hodnôt dipólových momentov možno získať rôzne dôležité informácie o molekulách, napr. o stupni iónovosti kovalentnej väzby v molekulách, alebo o štruktúre molekuly atď.

Dipólové momenty niektorých molekúl:

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Molekula | μ [D] | Molekula | μ [D] |
| HF | 1,91 | CO2 | 0 |
| HCl | 1,03 | CS2 | 0 |
| HBr | 0,79 | NH3 | 1,46 |
| HI | 0,38 | PH3 | 0,55 |
| NO | 0,13 | AsH3 | 0,15 |
| H2O | 1,84 | SO3 | 0 |
| H2S | 0,93 | CH4 | 0 |
| HCN | 2,88 | CCl4 | 0 |
| SO2 | 1,61 | PCl5 | 0 |

Príklady   
Z hodnoty dipólového momentu molekuly CO2 μ = 0 D vyplýva, že molekula CO2 je lineárna, pretože výsledný dipólový moment molekuly sa rovná vektorovému súčtu dipólových momentov jednotlivých väzieb.

Molekula H2O má μ = 1,84 D ≠ 0 D, z čoho vyplýva, že táto molekula nie je lineárna, ale má zalomený tvar.

Molekula CCl4 má μ = 0 D, lebo v symetrickom usporiadaní tetraedrickej štruktúry je súčet dipólových momentov jednotlivých väzieb rovný nule.

**Teória hybridizácie**.

Pomocou teórie valenčných väzieb sa nedali vysvetliť niektoré experimentálne namerané údaje o štruktúre veľkého počtu molekúl (väzbové uhly v molekule, energia väzieb),   
napr. BeCl2, BF3, CH4, NH3, H2O a mnohých ďalších. Preto bola vytvorená **teória hybridizácie. Jej základom je predstava, že atóm nevytvára väzbu pomocou rozdielnych atómových orbitalov vo valenčnej vrstve** (napr. s a p atómových orbitalov), **ale že   
vo valenčnej vrstve atómu sa lineárnou kombináciou energeticky rozdielnych atómových orbitalov vytvárajú energeticky rovnocenné hybridné orbitaly**, ktoré sa potom zúčastňujú s inými atómami na tvorbe kovalentných väzieb v molekulách.  
Pri tvorbe hybridných orbitalov platia tieto pravidlá:

a) **Počet vytvorených hybridných orbitalov sa rovná počtu pôvodných atómových   
 orbitalov**, z ktorých vznikli. Ak dochádza napr. k lineárnej kombinácii jedného s a troch   
 p atómových orbitalov, vzniknú štyri hybridné orbitaly.

b) **Hybridné orbitaly môžu vzniknúť lineárnou kombináciou len energeticky blízkych   
 atómových orbitalov.** Napr. hybridné orbitaly môžu vzniknúť z 2s a 2p atómových   
 orbitalov, ale nemôžu sa kombinovať atómové orbitaly 1s a 2p, pretože sú energeticky   
 značne rozdielne.

c) **Hybridné orbitaly majú iné tvary ako pôvodné atómové orbitaly, sú nesymetricky   
 rozložené vzhľadom na jadro atómu.** Kovalentné väzby tvorené hybridnými orbitalmi sú   
 pevnejšie, lebo dochádza k väčšiemu prekrytiu hybridných orbitalov v porovnaní   
 s prekrytím pôvodných atómových orbitalov.