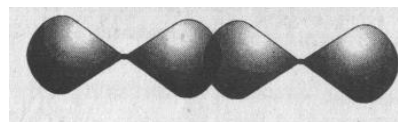
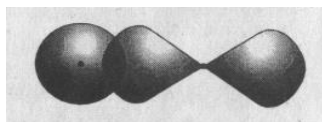
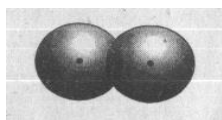


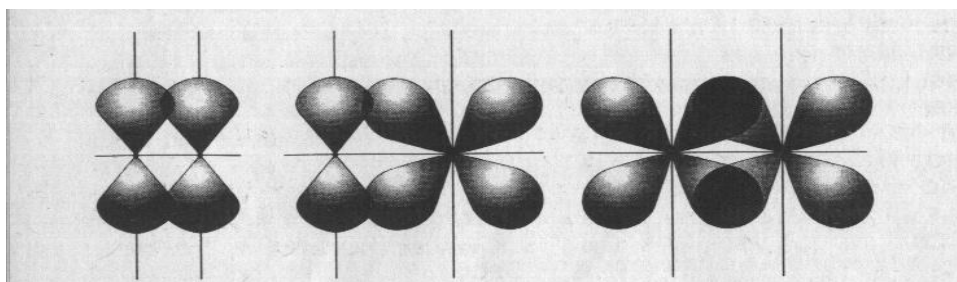
Kovalentná väzba σ a π

[Spracoval: M. Kozák]

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 prekryvaní 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 $2p_x$ vznikne väzba σ . Atómové orbitály $2p_y$ a $2p_z$ sú kolmé na os x, potom prekrytím dvoch orbitalov $2p_y$ vznikne jedna π väzba a prekrytím ďalších dvoch atómových orbitalov $2p_z$ vznikne druhá π väzba. V molekule N_2 je trojitá kovalentná väzba $N \equiv N$.

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 prevláda kladný náboj a v druhej záporný. Takéto molekuly tvoria dipóly. Príkladom je napr. molekula HF:

Polaritu molekúl možno kvantitatívne charakterizovať dipólovým momentom $\mu = Q \cdot l$, kde Q = náboj, l = vzdialenosť nábojov. Dipólový moment je vektorová veličina, udáva sa v jednotkách C.m, avšak v literatúre sa častejšie uvádza jednotka D (Debye), pričom platí $1D = 3,33 \cdot 10^{-30} \text{ C.m}$.

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	CO ₂	0
HCl	1,03	CS ₂	0
HBr	0,79	NH ₃	1,46
HI	0,38	PH ₃	0,55
NO	0,13	AsH ₃	0,15
H ₂ O	1,84	SO ₃	0
H ₂ S	0,93	CH ₄	0
HCN	2,88	CCl ₄	0
SO ₂	1,61	PCl ₅	0

Príklady

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

Molekula H₂O má $\mu = 1,84$ D $\neq 0$ D, z čoho vyplýva, že táto molekula nie je lineárna, ale má zalomený tvar.

Molekula CCl₄ má $\mu = 0$ 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 orbitály, ktoré sa potom zúčastňujú s inými atómami na tvorbe kovalentných väzieb v molekulách.

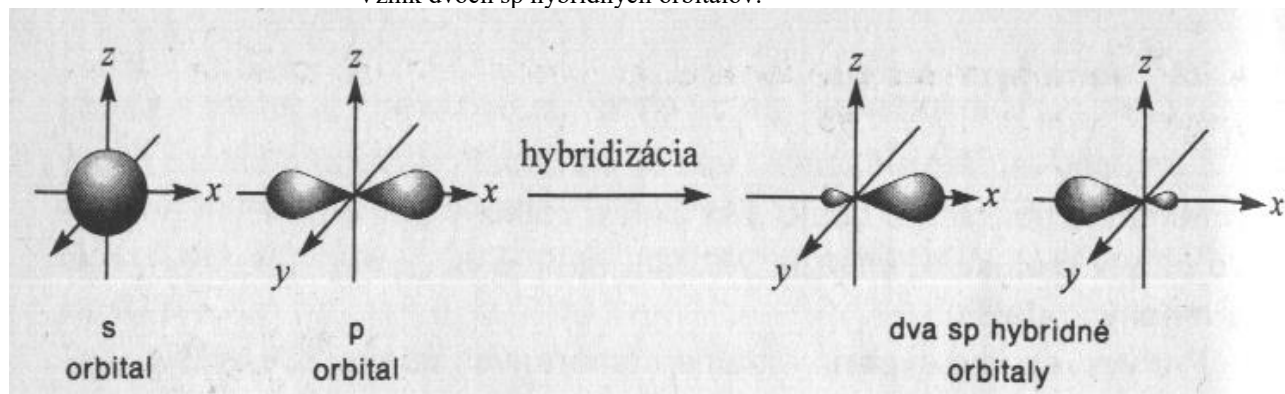
Pri tvorbe hybridných orbitalov platia tieto pravidlá:

- 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 orbitály.
- Hybridné orbitály môžu vzniknúť lineárnou kombináciou len energeticky blízkych atómových orbitalov**. Napr. hybridné orbitály môžu vzniknúť z 2s a 2p atómových orbitalov, ale nemôžu sa kombinovať atómové orbitály 1s a 2p, pretože sú energeticky značne rozdielne.
- Hybridné orbitály majú iné tvary ako pôvodné atómové orbitály, 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.

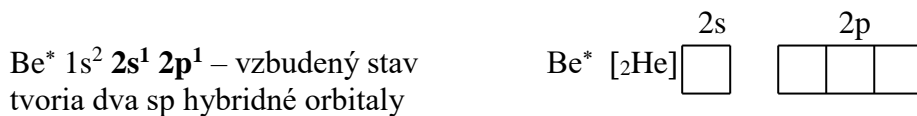
Hybridizácia SP

Lineárnou kombináciou jedného atómového orbitalu s a jedného atómového orbitalu p vzniknú dva energeticky rovnocenné hybridné orbitály – sp. V priestore sú umiestnené pozdĺž priamky – lineárne, zvierajú uhol 180°.

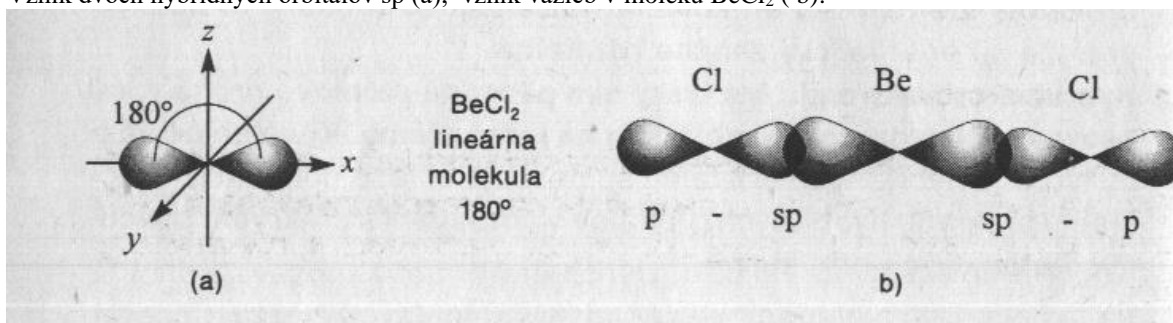
Vznik dvoch sp hybridných orbitalov:



Hybridizácia SP umožňuje vysvetliť vznik väzieb v molekule BeCl_2 . Atóm berýlia má v základnom stave vo valenčnej vrstve len spárené elektróny ($2s^2$). Vznik dvoch rovnocenných väzieb, ktoré vznikajú v priebehu reakcie $\text{Be} + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{BeCl}_2$ možno vysvetliť takto:



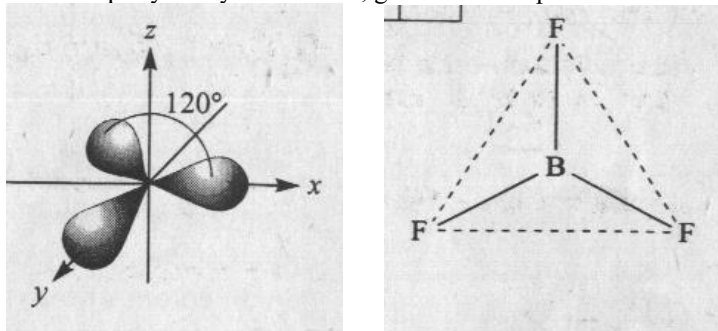
Vznik dvoch hybridných orbitalov sp (a), vznik väzieb v molekule BeCl_2 (b):



Hybridizácia SP^2

Lineárnou kombináciou jedného atómového orbitalu s a dvoch atómových orbitalov p vzniknú tri energeticky rovnocenné hybridné orbitály – sp^2 . V priestore majú trigonálne (trojuholníkové) usporiadanie a navzájom zvierajú uhly 120° .

Vznik troch sp^2 hybridných orbitalov, geometrické usporiadanie väzieb v molekule BF_3 :



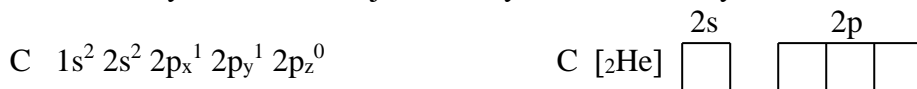
Hybridizácia SP^2 umožňuje vysvetliť vznik väzieb v molekule BF_3 .



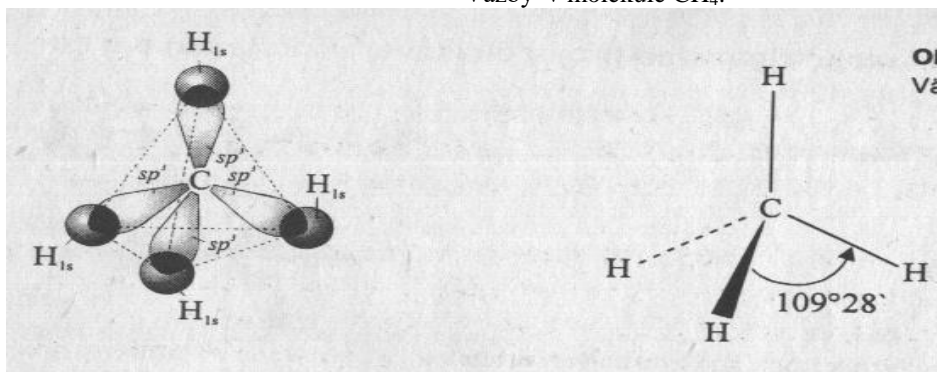
Hybridizácia sp^3

Lineárnou kombináciou jedného atómového orbitálu s a troch atómových orbitalov p vzniknú štyri energeticky rovnocenné hybridné orbitály – sp^3 . V priestore smerujú do vrcholov tetraédra (pravidelný štvorsten) a zvierajú uhly $109^\circ 28'$.

Príkladom hybridizácie sp^3 je vznik štyroch rovnocenných väzieb v molekule metánu CH_4 .

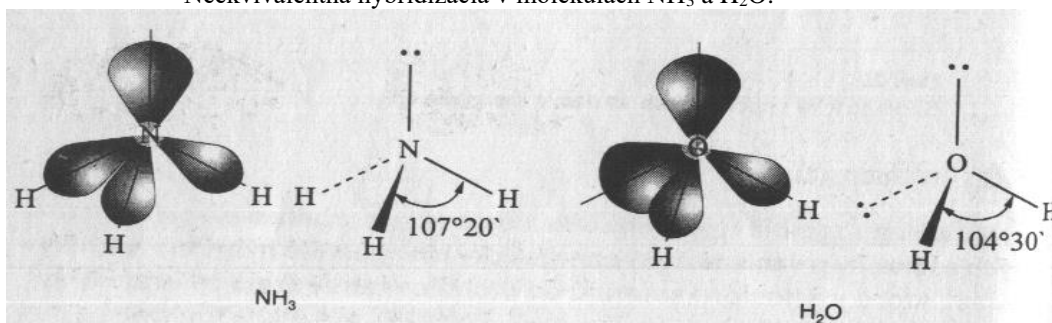


Väzby v molekule CH_4 :



Existuje aj **neekvivalentná hybridizácia sp^3** . Vyskytuje sa v molekulách NH_3 a H_2O . Centrálny atóm dusíka je v amoniaku v hybridizácii sp^3 , vytvára 4 hybridné orbitály, z ktorých tri použije vo väzbe s tromi atómami vodíka a štvrtý orbital obsahuje voľný elektrónový pár. Podobne kyslík je vo vode v hybridizácii sp^3 , dva hybridné orbitály použije do väzby s dvoma atómami vodíka a ďalšie dva hybridné orbitály obsahujú každý po jednom voľnom elektrónovom páre. Tieto voľné elektrónové páry v hybridných orbitloch spôsobujú deformáciu väzbových uhlov a tým zmenu priestorového tvaru molekuly.

Neekvivalentná hybridizácia v molekulách NH_3 a H_2O :



Existujú aj zložitejšie hybridizácie, kedy sa na hybridizácii v atóme zúčastňujú nielen atómové orbitály s a p, ale aj orbitály d a f.

Teória hybridizácie je vhodná na vysvetlenie vzniku väzieb v mnohých molekulách a na určenie priestorovej štruktúry molekúl, ale má aj svoje obmedzenia a je ťažko použiteľná pri zložitejších molekulách.

[Spracoval: M. Kozák]