

Inovace studia molekulární a buněčné biologie reg. č. CZ.1.07/2.2.00/07.0354

Investice do rozvoje vzdělávání



INVESTICE
DO ROZVOJE
VZDĚLÁVÁNÍ

Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.

Předmět: LRR/CHPB1/Chemie pro biology 1

Investice do rozvoje vzdělávání



Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.

Chemická vazba

Mgr. Karel Doležal Dr.

Investice do rozvoje vzdělávání



Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.

Cíl přednášky: seznámit posluchače s principem a druhy chemických vazeb

Klíčová slova: klasifikace chemických látek, klasifikace prvků, periodická soustava prvků, charakter prvků, elektronegativita, iontová vazba

Investice do rozvoje vzdělávání



evropský
sociální
fond v ČR



EVROPSKÁ UNIE



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



OP Vzdělávání
pro konkurenceschopnost

INVESTICE
DO ROZVOJE
VZDĚLÁVÁNÍ

Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.

Klasifikace chemických látek

- Chemické látky – formy hmoty vystavené z atomů (ne např. paprsek neutronů nebo proud elektronů) – prvky, sloučeniny a jejich směsi
- Chemický prvek – první definice 1661 Boyle – látka kterou nelze dále chemicky rozložit na látku jednodušší
- Dnes přesnější definice, přihlíží k atomové struktuře hmoty – chemický prvek je látka, jejíž všechny atomy mají stejné protonové číslo
- Chemické individuum – každý chemický prvek nebo sloučenina
- Čistá látka – urč. strukturní modifikace – stejné druhy částic stejným způsobem uspořádané – v přírodě a praxi jen zřídka, pracujeme s látkami které se tomuto stavu blíží

Investice do rozvoje vzdělávání



Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.

- Praxe – čistá látka – jejím další čistěním se již nemění její charakteristické vlastnosti
- Míra čistoty – vyjadřuje se číselným určením relativního množství nečistot v ní obsažených nebo zařazením látky do určité uzanční třídy čistoty (puriss, purum, p. a....)
- Dělení látek – využití fyzikálních (filtrace, sedimentace, destilace, sublimace) nebo chemických vlastností komponent (srážení, chromatografie). Postup čištění sledujeme stanovením některých fyzikálních konstant nebo chemickou analýzou (elementární analýza, chromatografie, NMR...).
- Kvalita chemické látky – charakteristika, odlišení od všech ostatních chemických látek, zároveň identifikace jiného vzorku téže látky – podmíněna chemickým složením a způsobem uspořádání stavebních jednotek – strukturou. Stejné složení, jiná struktura – izomery.
- Vlastnosti čistých látek – nspecifické (hmotnost, zrnitost, pórovitost) a **specifické** – nezávislé na velikosti, množství a tvaru, důležité pro určování kvality – fyzikální (barva, hustota, tvrdost, bod tání, magnetická susceptibilita) a chemické (způsob reakce s vodou, kyselinami, stálost, acidobazické vlastnosti atd.)



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



OP Vzdělávání
pro konkurenceschopnost

INVESTICE
DO ROZVOJE
VZDĚLÁVÁNÍ

- Soustava – ohraničená část prostoru
- Izolovaná – látka ani energie nepřechází v žádném směru
- Uzavřená – může přecházet energie, ne látkové formy
- Otevřená – systém, jehož hranicemi volně prochází jak látky tak energie
- Homogenní – specifické vlastnosti ve všech bodech stejné nebo se mění spojitě (může být i směs)
- Heterogenní – více druhů homogenních fází, odděleny ostrým rozhraním, vlastnosti se mění skokem – nemísitelné kapaliny, směs skupenských stavů... koloidní – velmi jemné částice

Investice do rozvoje vzdělávání

- (angličan **John Newlands** 1864 zákon oktáv)
- **Dmitrij Ivanovič Mendělejev** 1869
- periodický zákon prvků – „**Chemické a mnohé fyzikální**
- **vlastnosti prvků jsou periodickou funkcí jejich atomových čísel. Periodicitu vlastností nacházíme i v řadách homologických sloučenin.**“ 62 tehdy známých prvků rozdělil podle vzrůstající atomové hmotnosti a umístil paralelně tak aby se analogické prvky dostaly do přímého sousedství – **periodická soustava prvků**. Příbuznost – srovnávání mocenství. Předpověděl s velkou přesností vlastnosti dosud neznámých prvků.

Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.



- Vodorovné řady – periody. Číslo periody = hlavní kvantové číslo
 - Počet prvků v periodě = počet elektronů o který se liší konfigurace dvou vzácných plynů periodu ohraničujících
- 1. perioda $1s^1, 1s^2$ 2 prvky
- 2. perioda $2s^1 2p^0 - 2s^2 2p^6$ 8 prvků
- 3. perioda $3s^1 3p^0 - 3s^2 3p^6$ 8 prvků
- 4. perioda $4s^1 3d^0 4p^0 - 4s^2 3d^{10} 4p^6$ 18 prvků
- 5. perioda $5s^1 4d^0 5p^0 - 5s^2 4d^{10} 5p^6$ 18 prvků
- 6. perioda $6s^1 4f^0 5d^0 6p^0 - 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^8$ 32 prvků
- Prvky analogických vlastností – pod sebou – **skupiny**. Hlavní a vedlejší, některé označovány triviálními názvy. Přechodné prvky (vedlejší skupiny) – zaplněny orbitaly d a f.
- Určit umístění prvku v tabulce z jeho atomového čísla je snadné. Postačí si zapamatovat čísla vzácných plynů a čísla period:
- 1. 2. 3. 4. 5. 6. 7. perioda
- ${}^2\text{He}$ ${}^{10}\text{Ne}$ ${}^{18}\text{Ar}$ ${}^{36}\text{Kr}$ ${}^{54}\text{Xe}$ ${}^{86}\text{Ra}$
- Příklad: Prvek $Z=12$ Patří do 3. periody vymezené zleva ${}^{10}\text{Ne}$ a zprava ${}^{18}\text{Ar}$. Ve srovnání s elektronovou konfigurací neonu více o dva elektrony, patří do skupiny 2A, hořčík

- Oxidační stavy prvků a stechiometrické složení jejich sloučenin – významná periodicitu
- Stabilní ta oxidační čísla vyjadřující vazebné poměry, za nichž bude u atomů prvků dosaženo stálé elektronové konfigurace
- Nejstálejší konfigurace $ns^2 np^6$, $ns^2 np^6 nd^{10}$, $ns^2 np^6 nd^{10} (n+1) s^2$
- Prvky nikdy nepřijímají ani neuvolňují větší počet elektronů než je třeba k dosažení této konfigurace
- Maximální pozitivní oxidační číslo = číslo skupiny ve které prvek leží
- Také možnost dosažení konfigurace s tzv. inertním elektronovým párem – např. prvky skupiny 4B dosáhnou oxidačního čísla II
 - (přechodné kovy – větší proměnlivost oxidačních stavů, stabilita vyšších oxidačních stavů stoupá směrem dolů
- $Ge^{II} < Ge^{IV}$
- $Sn^{II} = Sn^{IV}$
- $Pb^{II} > Pb^{IV}$
- Maximální negativní oxidační číslo = 8 - číslo skupiny



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



OP Vzdělávání
pro konkurenceschopnost

INVESTICE
DO ROZVOJE
VZDĚLÁVÁNÍ

Kovový a nekovový charakter prvků

- Charakter prvků dán poměrem hodnot ionizační energie a elektronové afinity (nízká ionizační energie – kovy)
- Empirické pravidlo: prvek je kovem, jestliže počet elektronů jeho nejvyšších zaplňovaných orbitalů (téhož hlavního a vedlejšího kvantového čísla) je menší nebo roven číslu periody, do níž prvek patří
- Klasifikace látek (sloučenin) pak odrazem struktury a uspořádání chemických vazeb

Chemická vazba

Atomy jen vyjímečně setrvávají v izolovaném stavu (pouze atomy vzácných plynů)

Vznik vazby – při zmenšování vzdálenosti mezi atomy, začnou mezi nimi působit nezanedbatelné přitažlivé síly, které nutí atomy k dalšímu přibližování. Druhá fáze – přibližování ustane, atomy setrvávají v kontaktu (oscilují) na urč. vzdálenost – vznikla chem. vazba. **Soustava původně izolovaných atomů se po vzájemné přiblížení ocitne v energetickém minimu.** Pro další přibližování (hlubší pronikání elektronových obalů) by bylo potřeba značné množství práce (systém setrvává ve stavu, který je pro něj energeticky nejvýhodnější)

Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.

elektronegativita

- Empiricky nalezené číslo vyjadřující schopnost atomu prvku přitahovat vazebné elektrony kovalentní vazba (američan Linus Carl Pauling 1932 (1954 Nobelova cena) – z experimentálně naměřených disociačních energií vazeb)

Druhy vazeb:

- Elektropozitivní prvek + elektronegativní prvek = iontová vazba
- Elektronegativní prvek + elektronegativní prvek = kovalentní vazba
- (polymery (prostorové, rovinné, lineární) – kovalentní vazby + slabé vazebné interakce)
- Elektropozitivní prvek + elektropozitivní prvek = kovová vazba

Investice do rozvoje vzdělávání



Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.

Formální vyjadřování a klasifikace chemických vazeb

- Základní popis stálého uskupení atomů v prostoru – atomová konfigurace – vzájemná poloha atomů v prostoru – lze studovat experimentálně
- Elektronová konfigurace – uspořádání zúčastněných elektronů – rozložení elektronových hustot nebo (lépe) rozmístění elektronů na MO a jejich elektronovou posloupnost. Určité atomové konfiguraci může příslušet více elektronových konfigurací. Chemické vazby v molekule (iontu) navzájem závislé – přesný popis vazby znamená vždy popis elektronové konfigurace celé částice.
- (symbolika, typy vzorců – seminář, samostudium)

Investice do rozvoje vzdělávání



Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.

Základní vazebné situace

- oxidační stav atomu – charakterizován oxidačním číslem atomu – relativní elektrický náboj (náboj vyjádřený počtem elementárních nábojů) který by byl na atomu přítomen, kdybychom elektrony v každé vazbě z atomu vycházející přidělili elektronegativnějším z vazebných partnerů

- Pravidla: - izolované atomy a atomy v molekulách prvků 0
- - vázaný atom vodíku I, pouze v hydridech –I
- - ox. číslo jednoatomových iontů = jejich náboj
- - kyslík –II, kromě peroxidů a látek s vazbou O-F
- - neutrální molekuly – algebraický součet ox. čísel = 0

Investice do rozvoje vzdělávání



Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.

- Formální náboj – je dán rozdílem mezi počtem valenčních elektronů daného atomu v nesloučeném stavu a počtem valenčních elektronů, které mu formálně přísluší v dané sloučenině
- Základní chemické pojmy a zákonitosti
- Molekula je nejmenší část látky, která má chemické vlastnosti této látky a vyznačuje se přesně definovanou atomovou a elektronovou konfigurací
- hmotnost molekuly – relativní molekulová hmotnost (lze vypočítat prostým sečtením relativních atomových hmotností všech atomů, které molekulu tvoří)
- látkové množství – 1 mol
- Mol je takové látkové množství, které obsahuje právě tolik elementárních jednotek (entit), kolik je uhlíkových atomů v 0,012 kg uhlíku ^{12}C ($6,022045 \pm 0,000031 \cdot 10^{23}$ atomů)
- molární hmotnost – hmotnost takového množství látky, které obsahuje 1 mol elementárních jednotek (g mol^{-1})

Zákon stálých poměrů slučovacích

- Francouzský chemik **Joseph Louis Proust** 1799, nezávisle John Dalton (1803)
- Složení chemické sloučeniny je neměnné a nezávislé na cestě, již bylo použito k její přípravě
- (Pevné látky – ve struktuře časté poruchy, např. v krystalové mřížce, experimentálně prokazatelné)

Zákon násobných poměrů slučovacích

Pokud spolu dva prvky tvoří více sloučenin, pak hmotnosti jednoho prvku, který se slučuje se stejným množstvím druhého prvku, jsou vzájemně v poměrech, které je možné vyjádřit malými celými čísly

Iontová vazba

- rozdíl elektronegativit atomů přesahuje 1,7
- Asymetrické rozmístění vazebných elektronů, jeden atom k sobě přitáhne celý elektronový pár. Na atomech se vytvoří náboje, mění se v ionty. Vazba – elektrostatický charakter. Atom, který získává elektrony (elektronegativní, nabývá záporný náboj, aniont. Atom, který ztrácí elektrony (elektropozitivní – malá hodnota ionizační energie i elektronegativity, kovy) – kationt.
- Ztráta elektronů = oxidace, přijetí elektronů = redukce
- **Počet poskytovaných elektronů se musí vždy rovnat počtu elektronů přijímaných**, vzniklá sloučenina navenek elektroneutální
- $\text{Li} + \text{F} \rightarrow \text{Li}^+\text{F}^-$

- Primární příčina – vznik stabilní elektronové konfigurace
- Na $[\text{Ne}]3s^1 \rightarrow \text{Na}^+ [\text{Ne}]$
- (+ vzniklé ionty se sdružují do pravidelných prostorových mříží – iontových krystalů = další snížení celkové energie systému)
- Stabilní konfigurace – konfigurace vzácného plynu:
 - $1s^2$ (He) Be^{2+} , Li^+ , H^-
 - $n=2$ (Ne) Al^{3+} , Mg^{2+} , Na^+ , Cl^- , O^{2-}
 - - konfigurace tzv. pseudovzácného plynu
 - $ns^2 np^6 nd^{10}$ Zn^{2+} , Ag^+ , Cd^+
 - - konfigurace inertního elektronového páru
 - $ns^2 np^6 nd^{10} (n+1) s^2$ Pb^{2+} , Bi^{3+}
 - - nepravidelná elektronová konfigurace
 - Cu^{2+} , Fe^{3+}
- Vždy představuje optimální rozmístění valenčních elektronů, s minimálním obsahem energie

Stabilita iontů (Fajansova pravidla)

- 1924 **Kazimierz Fajans** , americký chemik polského původu
- Stabilita iontu – schopnost zachovat si svou elektronovou konfiguraci, nepodlehnout další oxidačně-redukční změně
- 1. Ion je tím indiferentnější, čím stabilnější je jeho elektronová konfigurace (vzácný plyn > pseudovzácný plyn > nepravidelná konfigurace)
- 2. čím menší má náboj $\text{Na}^+ > \text{Mg}^{2+} > \text{Al}^{3+} > \text{Si}^{4+}$
- 3. čím větší je atomové číslo atomu, z něhož vzniká kation $\text{Cs}^+ > \text{Na}^+$
- 4. čím menší je atomové číslo atomu, z něhož vzniká anion $\text{F}^- > \text{I}^-$

Investice do rozvoje vzdělávání



Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.

Poloměry iontů

- Elektronový obal difúzní, pojem poloměr iontu nemá přesný fyzikální smysl
- Mezijaderné vzdálenosti snadno zjistitelné – součet poloměru kationtu a aniontu → tabelované iontové poloměry (délky kovalentních vazeb ← tabulky kovalentních poloměrů)
- 1. velmi výrazný vliv náboje (mnohem větší než např. vliv atomového čísla) (H^- 154 pm, H 29 pm)
- 2. kationty vždy menší než odpovídající atomy (přebytek pozitivního náboje jádra stahuje orbitály blíže k jádru)
- 3. Anionty vždy větší (zvýšená repulze elektronů)
- 4. u obdobné elektronové konfigurace poloměr vzrůstá s rostoucím hlavním kvantovým číslem $Cs^+ > Rb^+ > K^+ > Na^+ > Li^+$
- $I^- > Br^- > Cl^- > F^-$
- 5. Tvoří-li atom více kationtů, je ion s největším nábojem nejmenší ($Fe^{2+} > Fe^{3+}$)
- 6. Poloměry kationtů přechodných prvků (obsahují d orbitály) s rostoucím Z se zvyšují jen nevýrazně
- 7. lanthanoidová kontrakce – se zvyšujícím se Z se poloměry mírně zmenšují – f orbitály vnitřní, ale rozte kladný náboj jader

Investice do rozvoje vzdělávání



Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.

Náboj iontů

- Reálné sloučeniny – téměř vždy určitý podíl kovalentnosti
- Efektivní náboj iontu – skutečný náboj, obtížně se měří, někdy se liší i výrazně
- Ověřeno experimentálně, že je přesto účelné připisovat iontům jejich formální náboj a jim odpovídající elektronové konfigurace a poloměry, v jednodušších úvahách nemají vliv na správnost závěrů

Kovalentní vazba – teorie molekulových orbitalů

- Teorie MO–LCAO (*Molecular Orbital – Linear Combination of Atomic Orbitals*) (molekulové orbitaly Friedrich Hund, Robert S. Mulliken 1927 – 1928, lineární kombinace atomových orbitalů - John Lennard-Jones 1929)
- popisuje vznik MO pomocí lineární kombinace atomových orbitalů (AO)
- Také soubory MO je možné hledat pomocí Schrödingerovy rovnice, ale řešení velmi obtížné, většinou se tvar a energie MO odvozuje z tvarů a energií AO těch atomů, které molekulu vytvářejí – představy o průniku AO – metoda lineárních kombinací AO – MO–LCAO (*Linear Combination of Atomic Orbitals*)

Investice do rozvoje vzdělávání



Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.