

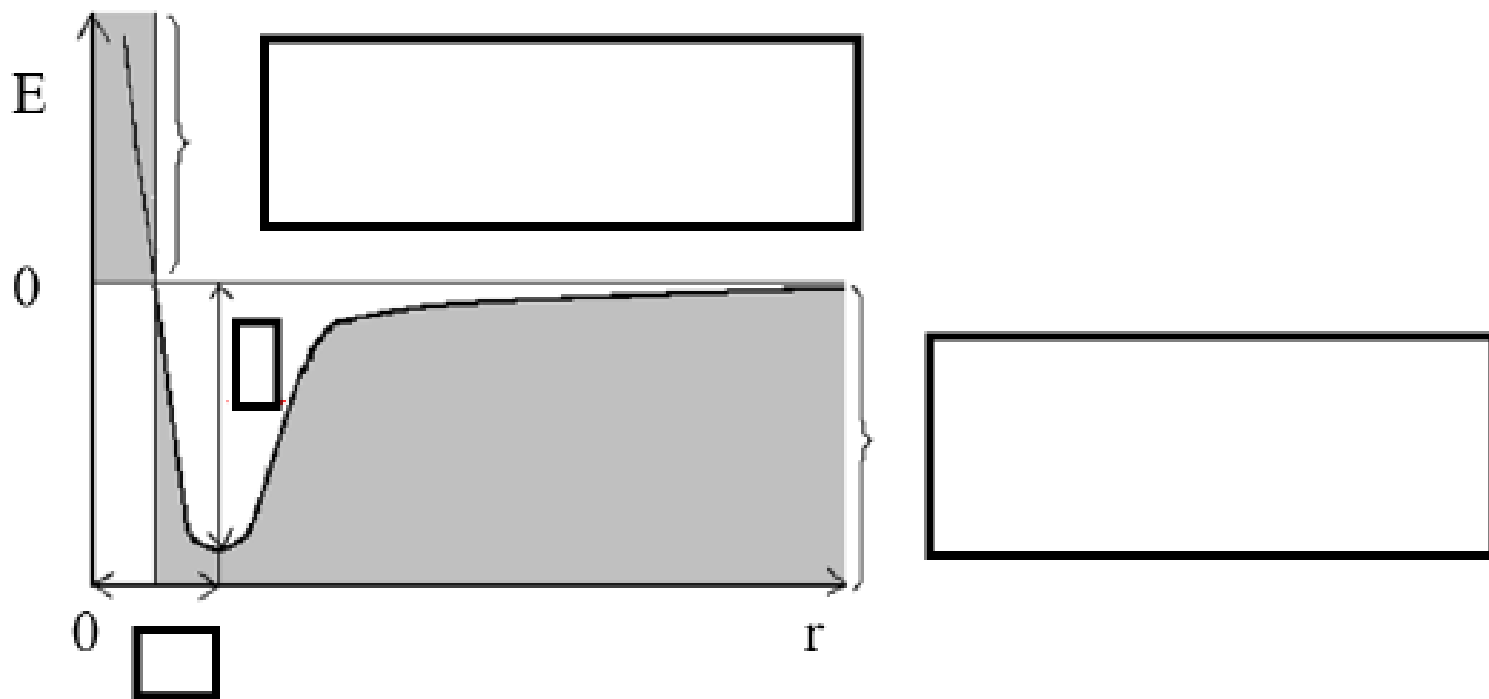
Chemická vazba

Molekulové orbitály

FC 3806

Jaro 2021

Obrázek znázorňuje závislost potenciální energie soustavy dvou atomů E na vzdálenosti těchto atomů r . Do prázdných polí doplňte správné vysvětlivky a) až d).



- a) převládající meziatomové přitažlivé síly
- b) převládající meziatomové odpudivé síly
- c) délka chemické vazby
- d) vazebná energie

Vyřešte:

- Vyberte vazbu, která je nejvíce polární: Ge–F, C–F, Si–F.
- Ve skupině vazeb vyberte vazbu s nejdelší a s nejkratší meziatomovou vzdáleností: O–H, S–H, Se–H.
- Odhadněte, která látka v uvedené dvojici má vyšší bod tání: NaCl, NaBr.

1. Vyberte vazbu, která je nejvíce polární: Ge–F, C–F, Si–F.

Řešení:

Polarita vazby roste s rozdílem elektronegativit vázaných atomů. V daném případě se jeden z prvků opakuje ve všech sloučeninách (fluor), stačí tedy porovnat elektronegativitu jeho vazebných partnerů. Protože fluor má velkou elektronegativitu, bude nejpolárnější ta vazba, kde vazebný partner fluoru má elektronegativitu nejmenší. Elektronegativity porovnáme analogicky jako v kapitole 8, část B, příklad 3. Z uvedených prvků (Ge, C, Si) má nejmenší elektronegativitu Ge. Vazba Ge–F je tedy z daných nabídek nejvíce polární.

2. Ve skupině vazeb vyberte vazbu s nejdelší a s nejkratší meziatomovou vzdáleností: O–H, S–H, Se–H.

Řešení:

Meziatomové vzdálenosti porovnáme pomocí porovnání atomových poloměrů. Vodík je všem třem zadaným vazbám společný, porovnáme tedy jen jeho reakční partnery (O, S, Se). Postupem probraným v kapitole 8 dojdeme ke zjištění, že nejmenší atomový poloměr z těchto prvků má kyslík, největší selen.

Nejkratší vazba je tedy O–H, nejdelší Se–H.

3. Odhadněte, která látka v uvedené dvojici má vyšší bod tání: NaCl, NaBr.

Řešení:

Vyšší bod tání bude mít ta látka, která má k sobě pevněji poutané ionty. Tuto sílu lze velmi přibližně odhadnout pomocí Coulombova zákona: Síla, kterou na sebe působí dva bodové elektrické náboje, je přímo úměrná součinu velikosti nábojů vázaných iontů a nepřímo úměrná druhé mocnině vzdálenosti jejich jader.

V daném případě jde u obou porovnávaných látek o jednomocné ionty, porovnáme tedy pouze meziatomové vzdálenosti (postup viz předchozí příklad). Vzdálenost mezi Na^+ a Cl^- je kratší než vzdálenost mezi Na^+ a Br^- , proto se ionty Na^+ a Cl^- přitahují větší silou než ionty Na^+ a Br^- . Proto NaCl taje při vyšší teplotě než NaBr.

- Uvažujte jednoduchou vazbu mezi atomy uhlíku v ethanu, dvojnou vazbu mezi atomy uhlíku v ethenu a trojnou vazbu mezi atomy uhlíku v ethynu. Vyjádřete se ke správnosti následujících tvrzení. Odůvodněte:
 - – Délka trojné vazby je menší než délka dvojně vazby.
 - – Dvojná vazba je tvořena buď dvěma vazbami σ , nebo dvěma vazbami π .
 - – Trojná vazba je tvořena jednou vazbou σ a dvěma vazbami π .

- V každé skupině vazeb vyberte vazbu s nejdelší a s nejkratší meziatomovou vzdáleností. Odůvodněte.
- a) C–C, C=C, C≡C
- b) C–F, C–Cl, C–Br, C–I

- Meziatomová vzdálenost v kovalentní chemické vazbě má hodnotu řádově:

- Odhadněte, která látka v uvedených dvojicích má vyšší bod tání:
- a) ZnO, ZnS
- b) BaO, MgO
- c) KCl, CaO

Řešení:

- Ano, ne (1 vazba σ a 1 vazba π), ano
- Nejdelší C–C, nejkratší C \equiv C
- Nejdelší C–I, nejkratší C–F
- 10^{-10} m
- ZnO, MgO, CaO

- Pro částice CN a CN⁻ vyřešte následující úkoly:
- a) určete řád vazby v každé z uvedených částic
- b) zjistěte, zda délka vazby v částici CN je větší než délka vazby v částici CN⁻

a) řád vazby: ř. v. = $\frac{\text{vazebné}-\text{antivazebné}}{2}$

ř. v. (CN) = $\frac{9-4}{2} = 2,5$... resp. $\frac{5-0}{2} = 2,5$

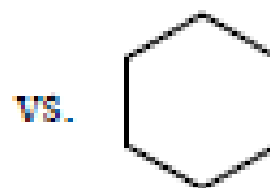
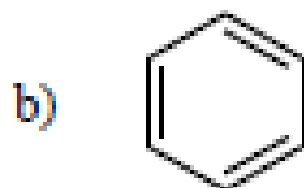
ř. v. (CN⁻) = $\frac{10-4}{2} = 3$... resp. $\frac{6-0}{2} = 3$

b) ř. v. (CN⁻) > ř. v. (CN) Proto je délka vazby v částici CN větší než délka vazby CN⁻.

Vyřešte:

- Seřadte uvedené částice podle vzrůstající pevnosti vazby: O_2 , O_2^+ , O_2^- , O_2^{2+} , O_2^{2-} .
- Vysvětlete (pomocí diagramu molekulových orbitalů), proč je v molekule N_2 trojná vazba ($N \equiv N$), ale v molekule F_2 je vazba jednoduchá ($F-F$).

Z uvedených dvojic systémů vyberte stabilnější. Svoji volbu odůvodněte



Řešení:

- O_2^{2-} , O_2^- , O_2 , O_2^+ , O_2^{2+}
- Vysvětlení na základě řádu vazby, v molekule dusíku je roven 3 a v molekule fluoru roven 1
- A) levý B) levý

Vypočítejte:

- Délka vazby v molekule fluorovodíku je $\ell = 0,916 \cdot 10^{-10}$ m. Experimentálně zjištěná hodnota dipólového momentu HF je $= 6,4 \cdot 10^{-30}$ C m. Vypočítejte velikost efektivního náboje Q na iontech H^+ , F^- . Kolikrát je tato hodnota menší než náboj formálně přítomný na uvedených atomech (tzv. formální náboj)?

1. Délka vazby v molekule fluorovodíku je $\ell = 0,916 \cdot 10^{-10}$ m. Experimentálně zjištěná hodnota dipólového momentu HF je $\mu = 6,4 \cdot 10^{-30}$ C m. Vypočítejte velikost efektivního náboje Q na iontech H^+ , F^- . Kolikrát je tato hodnota menší než náboj formálně přítomný na uvedených atomech (tzv. formální náboj)?

Řešení:

Dipólový moment $\vec{\mu}$ molekuly HF je definován vztahem $\vec{\mu} = Q \cdot \vec{\ell}$, pro velikosti $\mu = Q \cdot \ell$.

Po číselném dosazení:

$$6,4 \cdot 10^{-30} = Q_E \cdot 0,916 \cdot 10^{-10} \Rightarrow Q_E = \frac{6,4 \cdot 10^{-30}}{0,916 \cdot 10^{-10}} = 6,987 \cdot 10^{-20} \text{ C}$$

Vypočítaný údaj je absolutní hodnota **efektivního** (= skutečného) náboje na iontech H^+ a F^- .

Absolutní hodnota **formálního** náboje na jednotlivých iontech je $Q_T = \pm 1,602 \cdot 10^{-19}$ C. Pak:

$$\frac{Q_T}{Q_E} = \frac{1,602 \cdot 10^{-19}}{6,987 \cdot 10^{-20}} = 2,2928 \doteq 2,3$$

Efektivní náboj na iontech H^+ , F^- v molekule HF je asi $2,3 \times$ menší než náboj formální.

- Na základě indukčního efektu odhadněte, zda je silnější kyselinou kyselina octová, nebo kyselina trifluoroctová.

Opakování výpočtů

- 1) Kolika kg pentahydrátu bromičnanu draselného odpovídá 120 g bezvodého bromičnanu draselného?
- 2) Kolik procent krystalové vody obsahuje tetrahydrát hydrogensulfidu strontnatého?
- 3) Kolik gramů NaOH potřebujeme na přípravu 100 g NaCl, pokud reakce probíhá klasickou neutralizací kyselinou chlorovodíkovou?

- 4) Jaká je látková koncentrace kyseliny sírové, pokud v 0,558 litrech roztoku je obsaženo 1,04 gramů 96% kyseliny sírové?
- 5) Kolik ml vody musíme přidat ke 150 ml roztoku HBr o koncentraci 5 mol/l, aby měl nový roztok koncentraci 2 mol/l?
- 6) Jaká je koncentrace v mol/l roztoku NaCl, pokud 3 ml obsahují 15 mg NaCl?
- 7) Ke 200 ml HCl o $c = 0,03$ mol/l bylo přidáno 0,005 mol NaOH. Jaké látkové množství kyseliny nezreagovalo?

Řešení:

- 1) 0,1847 kg
- 2) 31,91 %
- 3) 68,43 g
- 4) 0,0182 mol/l
- 5) 225 ml
- 6) 0,086 mol/l
- 7) 0,001 mol