

Chemická vazba 2

slabé vazebné interakce

FC 3806

Jaro 2021

- 1) Určete a zdůvodněte, jaké vazby existují v následujících látkách: oxid uhlíčitý, oxid křemičitý, fluorid rubidný, polyethylen, cín, fenol, naftalen, chlorid amonný, hydrid sodný. Vybírejte všechny správné odpovědi z následujících nabídek (v jednom případě je více správných odpovědí):
 1) kovalentní nepolární, 2) kovalentní polární, 3) iontová, 4) kovová.

Úkol: **CHEMICKÉ VAZBY**

1) **OXID UHLÍČITÝ** = CO_2 C-O
 elektronegativita: $3,44 - 2,55 =$
 $\Delta X = 3,44 - 2,55 = 0,89$
 = VAZBA KOVALENTNÍ POLÁRNÍ

2) **OXID KŘEMIČITÝ** = SiO_2 Si-O
 elektronegativita: $\Delta X = 3,44 - 1,9 = 1,54$
 = VAZBA KOVALENTNÍ POLÁRNÍ

3) **FLUORID RUBIDNÝ** = RbF Rb-F
 elektronegativita: $\Delta X = 3,98 - 0,82 = 3,16$
 = IONTOVÁ VAZBA

4) **POLYETHYLEN** = $(\text{C}_2\text{H}_4)_n$ C-H
 elektronegativita: $\Delta X = 2,55 - 2,2 = 0,35$
 = VAZBA KOVALENTNÍ NEPOLÁRNÍ

5) **CÍN**

6) **FENOL** = $\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}$ C-O, O-H
 C-O elektronegativita: $\Delta X = 3,44 - 2,55 = 0,89$
 = VAZBA KOVALENTNÍ POLÁRNÍ
 O-H elektronegativita: $\Delta X = 3,44 - 2,2 = 1,24$
 = VAZBA KOVALENTNÍ POLÁRNÍ

7) **NAFTALEN** = C_{10}H_8 C-H
 C-H elektronegativita: $\Delta X = 2,55 - 2,2 = 0,35$
 = VAZBA KOVALENTNÍ NEPOLÁRNÍ

8) **CHLORID AMONNÝ** = NH_4Cl H-N⁺-H Cl⁻
 N-H: elektronegativita: $3,04 - 2,2 = 0,84$
 = KOVALENTNÍ VAZBA POLÁRNÍ

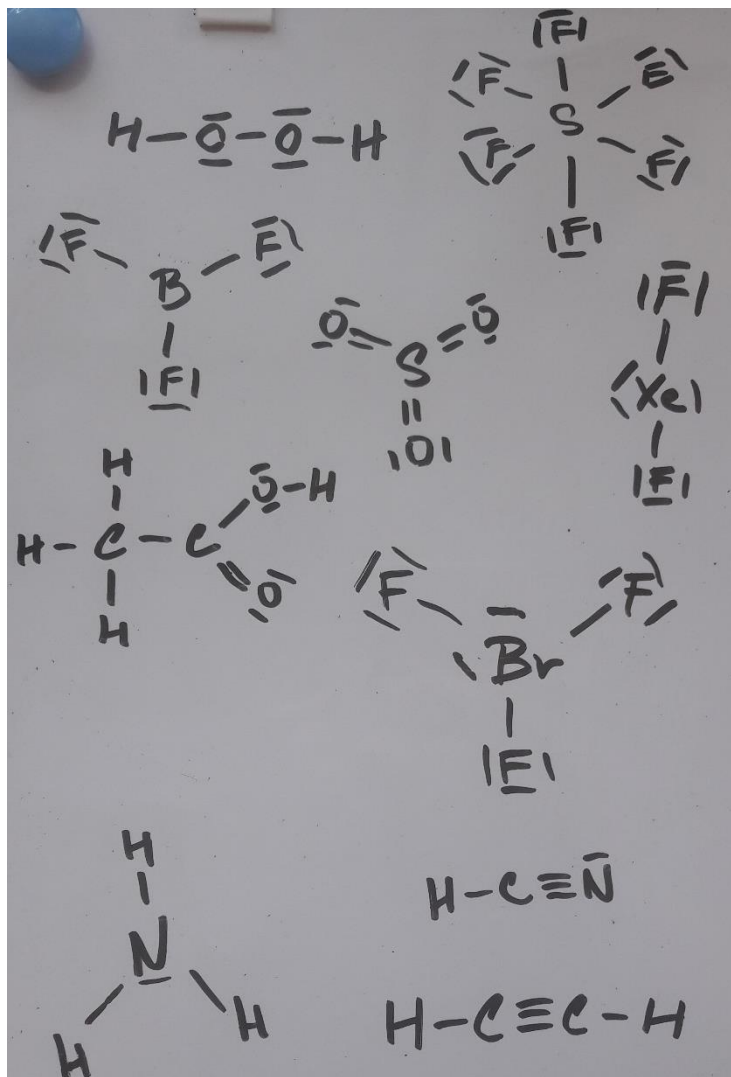
9) **HYDRID SODNÝ** = NaH Na-H
 elektronegativita: $2,2 - 0,93 = 1,27$
 = KOVALENTNÍ VAZBA POLÁRNÍ

2) Najděte v tabulkách délku vazeb v těchto sloučeninách: KI, CaF₂, H₂S, CH₄, SiH₄. Nalezené údaje uveďte v jednotkách: metry, nanometry, pikometry, angströmy.

Sloučenina	Délka vazby			
KI	$3,04 \times 10^{-10}$ m	0,304 nm	304 pm	3,04 Å
CaF ₂	$1,33 \times 10^{-10}$ m	0,133 nm	133 pm	1,33 Å
H ₂ S	$1,34 \times 10^{-10}$ m	0,134 nm	133,6 pm	1,34 Å
CH ₄	$1,09 \times 10^{-10}$ m	0,109 nm	109 pm	1,09 Å
SiH ₄	$1,48 \times 10^{-10}$ m	0,148 nm	148 pm	1,48 Å

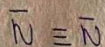
$$1 \text{ Å} = 100 \text{ pm}$$

3) Napište elektronové strukturní vzorce následujících látek: H_2O_2 , SF_6 , BF_3 , SO_3 , CH_3COOH , XeF_2 , BrF_3 , C_2H_2 , NH_3 , HCN

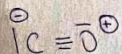


4) Napište elektronové strukturní vzorce následujících látek: N₂, CO, CS₂, PCl₃, PF₅, HCN, CH₃OH, SiO₂, O₂, O₃

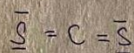
N₂



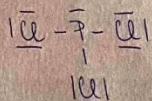
CO



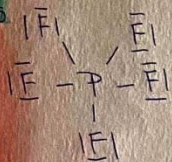
CS₂



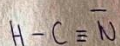
PCl₃



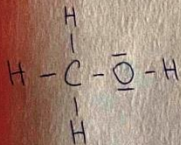
PF₅



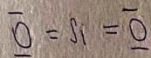
HCN



CH₃OH



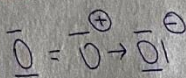
SiO₂



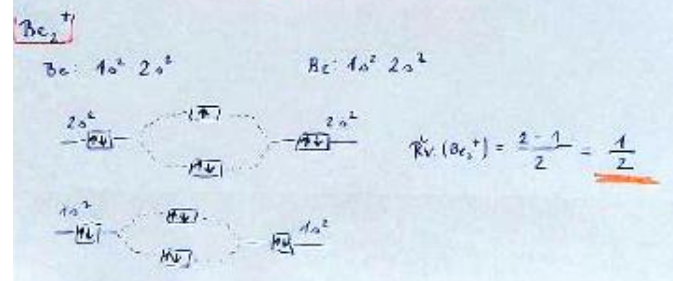
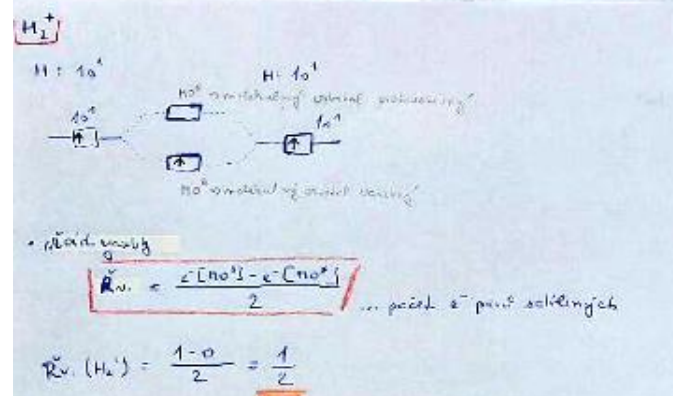
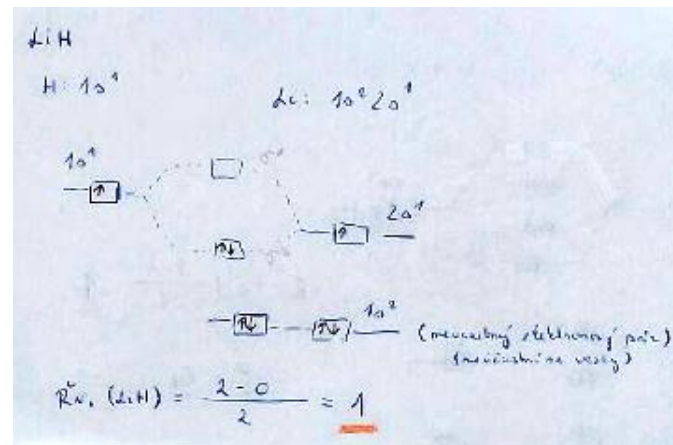
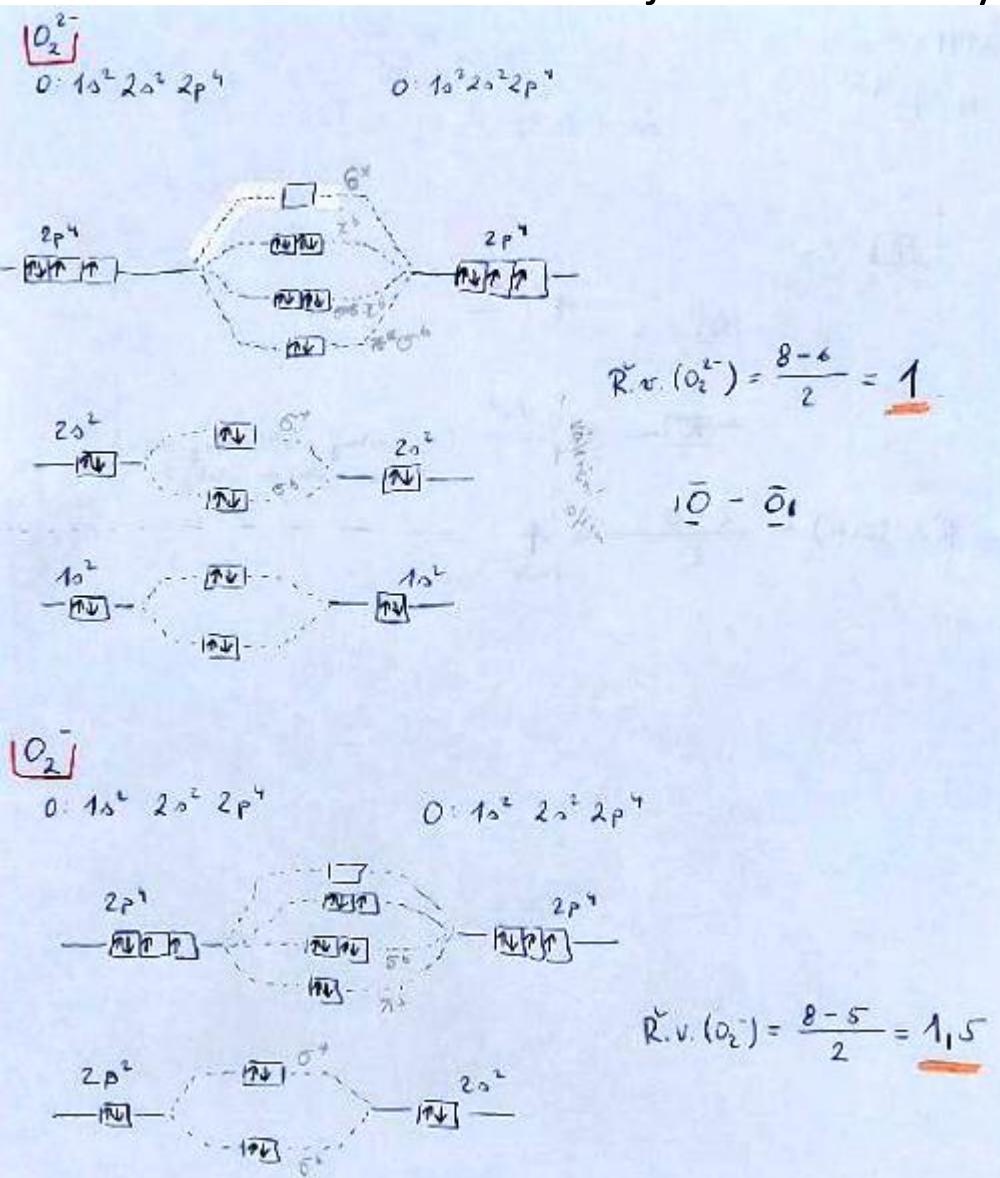
O₂



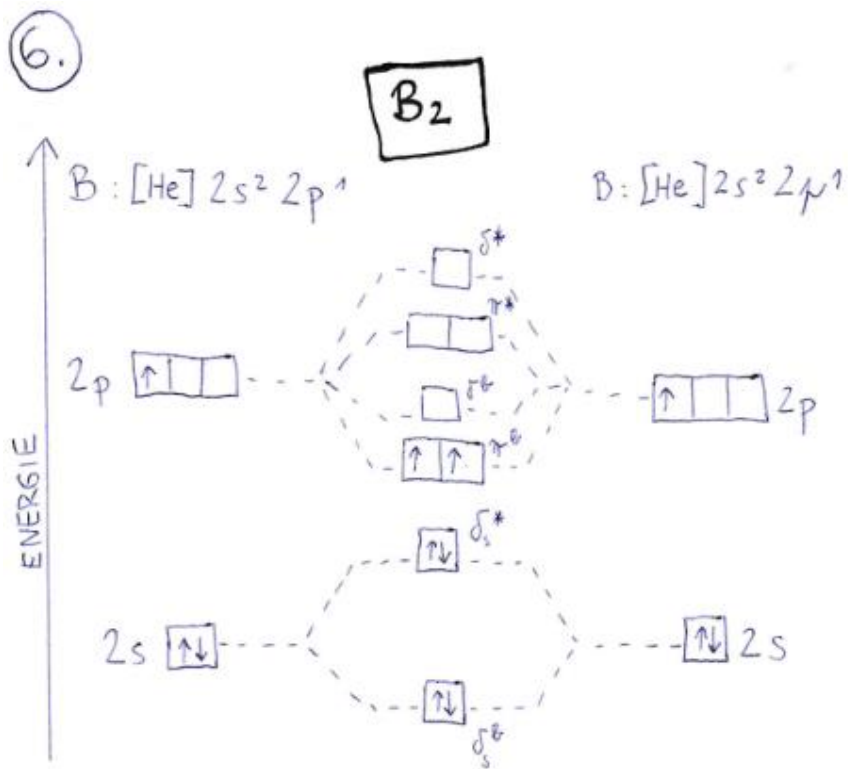
O₃



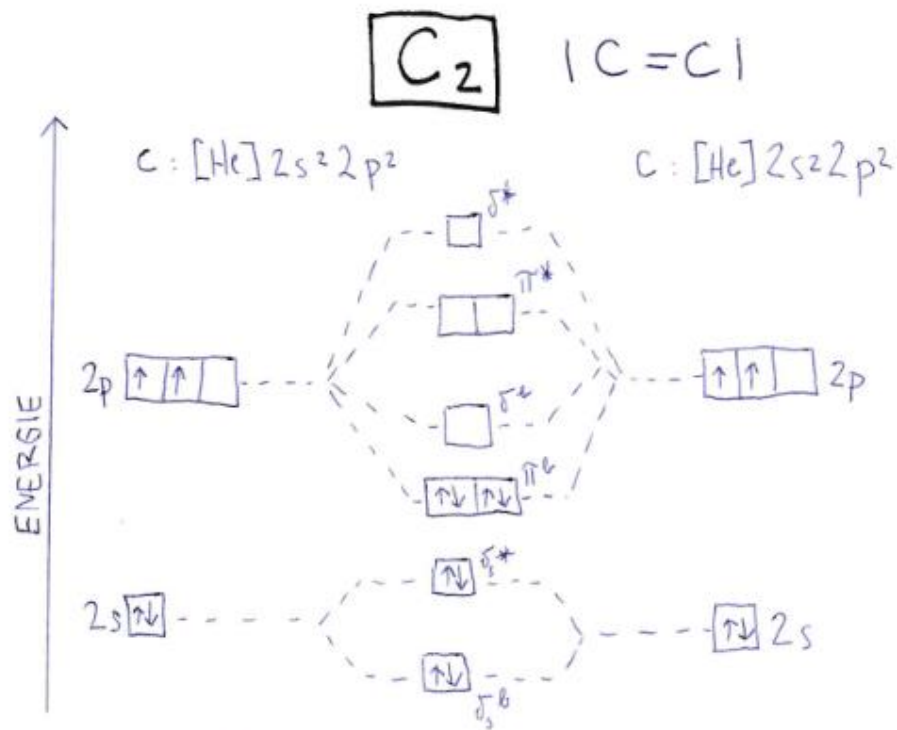
5) Pro následující částice nakreslete energetické digramy molekulových orbitalů a zjistěte řád vazby: H_2^+ , Be_2^+ , O_2^{2-} , O_2^- , LiH .



6) Pro následující částice nakreslete energetické digramy molekulových orbitalů a zjistěte řád vazby: B_2 , C_2 , CO , He_2 , He_2^+



$$\check{R}.V. = \frac{4-2}{2} = \underline{\underline{1}}$$



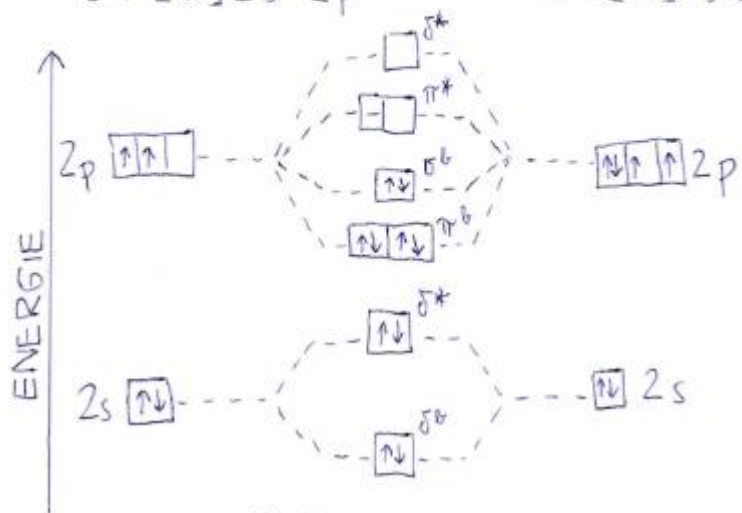
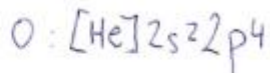
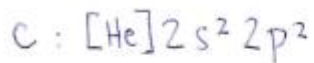
$$\check{R}.V. = \frac{6-2}{2} = \underline{\underline{2}}$$

↳ dvouatomový uhlík

CO



Zmenší velikost



$$\checkmark.V = \frac{8-2}{2} = \underline{\underline{3}}$$

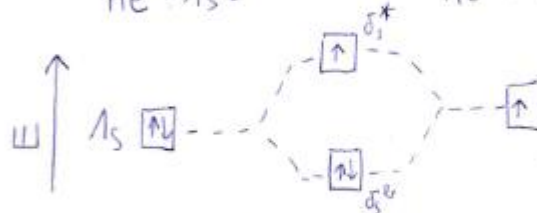
He₂



$$\checkmark.V. = \frac{2-2}{2} = \underline{\underline{0}}$$

↳ meexistuje

He₂⁺



$$\checkmark.V. = \frac{2-1}{2} = \underline{\underline{0,5}}$$

↳ dimer helia (nestabilní)

7) Které z uvedených molekul mají nenulový dipólový moment? Zdůvodněte:

H_2 , H_2S , BF_3 , CHF_3 , PCl_5 , CCl_4 , NH_3 , H_2O , F_2 , HF , o-, m- p- $C_6H_4Br_2$.

U dvouatomových molekul posoudíme rozdíl elektronegativit obou vázaných atomů. Je-li o atomy křivoč prvků, je vazba nepolární. Pokud jsou vázané stejné prvky, pak jde vždy o vazbu polární, tj. taková molekula má vždy dipólový moment.

Pokud je však rozdíl elektronegativit menší než 0,4, pak se definuje taková molekula proklamuje za nepolární.

např.: v případě vodíku a bromu je rozdíl elektronegativit 0,5, molekula HBr tedy má nenulový dipólový moment.

Nenulový dipólový moment mají: H_2S , CHF_3 , HF , o-, m-, p- $C_6H_4Br_2$.

8) Oxid uhelnatý má délku vazby $1,13 \cdot 10^{-10}$ m a dipólový moment $0,36 \cdot 10^{-30}$ C m. Oxid dusnatý má délku vazby $1,59 \cdot 10^{-10}$ m a dipólový moment $0,33 \cdot 10^{-30}$ C m. Která z těchto látek má větší parciální náboj na atomu kyslíku?

8

$$\text{CO: } l = 1,13 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$
$$\mu = 0,36 \cdot 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$$

$$\text{NO: } l = 1,59 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$
$$\mu = 0,33 \cdot 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$$

$$\mu = q \cdot l$$

$$\rightarrow q = \frac{\mu}{l}$$

$$q = \frac{0,36 \cdot 10^{-30}}{1,13 \cdot 10^{-10}}$$

$$q = 3,19 \cdot 10^{-21} \text{ e}$$

$$q = \frac{0,33 \cdot 10^{-30}}{1,59 \cdot 10^{-10}}$$

$$q = 2,08 \cdot 10^{-21} \text{ e}$$

$$q_{(\text{CO})} > q_{(\text{NO})}$$

Veškerý parciální náboj na kyslíku má oxid uhelnatý CO.

9) Chlorovodík má délku vazby $1,27 \cdot 10^{-10}$ m a dipólový moment $3,60 \cdot 10^{-30}$ C m. Jodovodík má délku vazby $1,60 \cdot 10^{-10}$ m a dipólový moment $1,27 \cdot 10^{-30}$ C m. Je silnější kyselina chlorovodíková, nebo jodovodíková? Odpověď podložte výpočtem efektivního náboje na atomu vodíku.

$$\text{HCl: } l = 1,27 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$
$$\mu = 3,60 \cdot 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$$

$$\text{HI: } l = 1,60 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$
$$\mu = 1,27 \cdot 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$$

$$\mu = Q \cdot l \rightarrow Q = \frac{\mu}{l}$$

$$\text{HCl: } \frac{3,60 \cdot 10^{-30}}{1,27 \cdot 10^{-10}} = 2,83 \cdot 10^{-20} \text{ C}$$

$$\text{HI: } \frac{1,27 \cdot 10^{-30}}{1,60 \cdot 10^{-10}} = 7,94 \cdot 10^{-21} \text{ C}$$

Silnější je kyselina jodovodíková.

10) V každé dvojici vyberte částici s větší meziatomovou vzdáleností, řešte pomocí MO: a) v N_2 nebo v N_2^+ b) v F_2 nebo v F_2^+

a) N_2 vs N_2^+

N_2 $7N$ $1s^2 2s^2 2p^3$ N_2^+ $7N$ $1s^2 2s^2 2p^3$
 $6N$ $1s^2 2s^2 2p^2$

$\text{ř.v.} = \frac{8-2}{2} = 3$ $\text{ř.v.} = \frac{7-2}{2} = 2,5$

> Větší atomová vzdálenost

b) F_2 vs F_2^+

F_2 $9F$ $1s^2 2s^2 2p^5$ F_2^+ $9F$ $1s^2 2s^2 2p^5$
 $8F$ $1s^2 2s^2 2p^4$

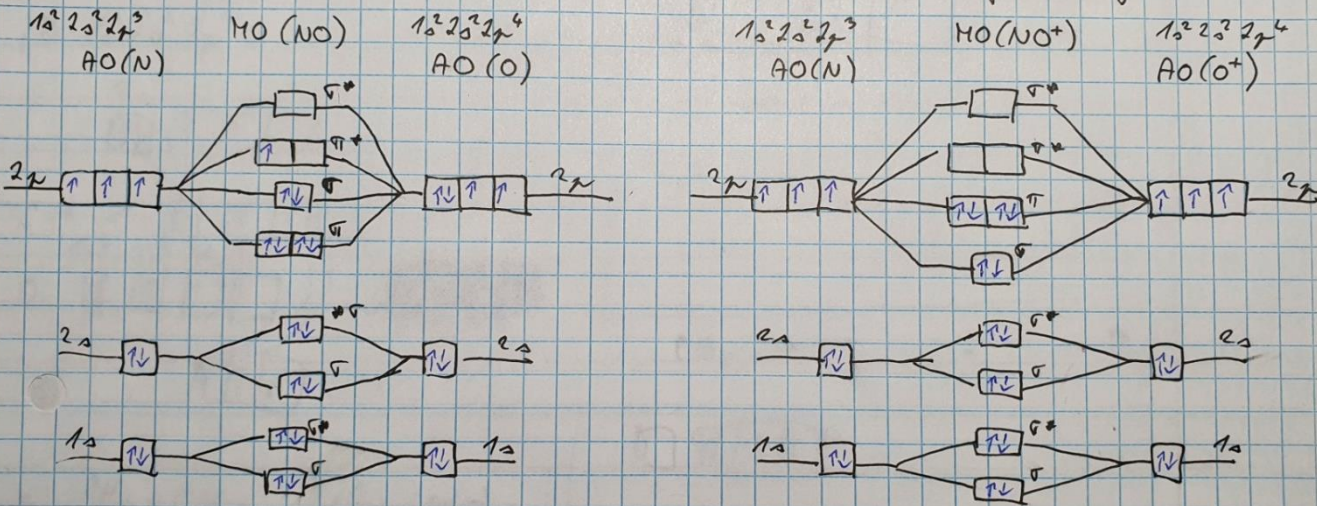
$\text{ř.v.} = \frac{8-6}{2} = 1$ $\text{ř.v.} = \frac{8-5}{2} = 1,5$

< Větší atomová vzdálenost

- 11) Nakreslete diagram molekulových orbitalů pro částice NO a NO⁺ a zjistěte pro každou z nich: a) vazebný řád b) zda délka vazby v NO je větší než délka vazby v NO⁺
- c) zda zvýšení počtu elektronů v MO znamená vždy i zvýšení energie vazby

PRÍKLAD 3

11) Nakreslete diagram molekulových orbitalů pro částice NO, NO⁺ a zjistěte pro každou z nich a) vazebný řád b) zda délka vazby v NO je větší než v NO⁺ c) zda zvýšení počtu elektronů v molekulových orbitalách znamená vždy i zvýšení energie vazby



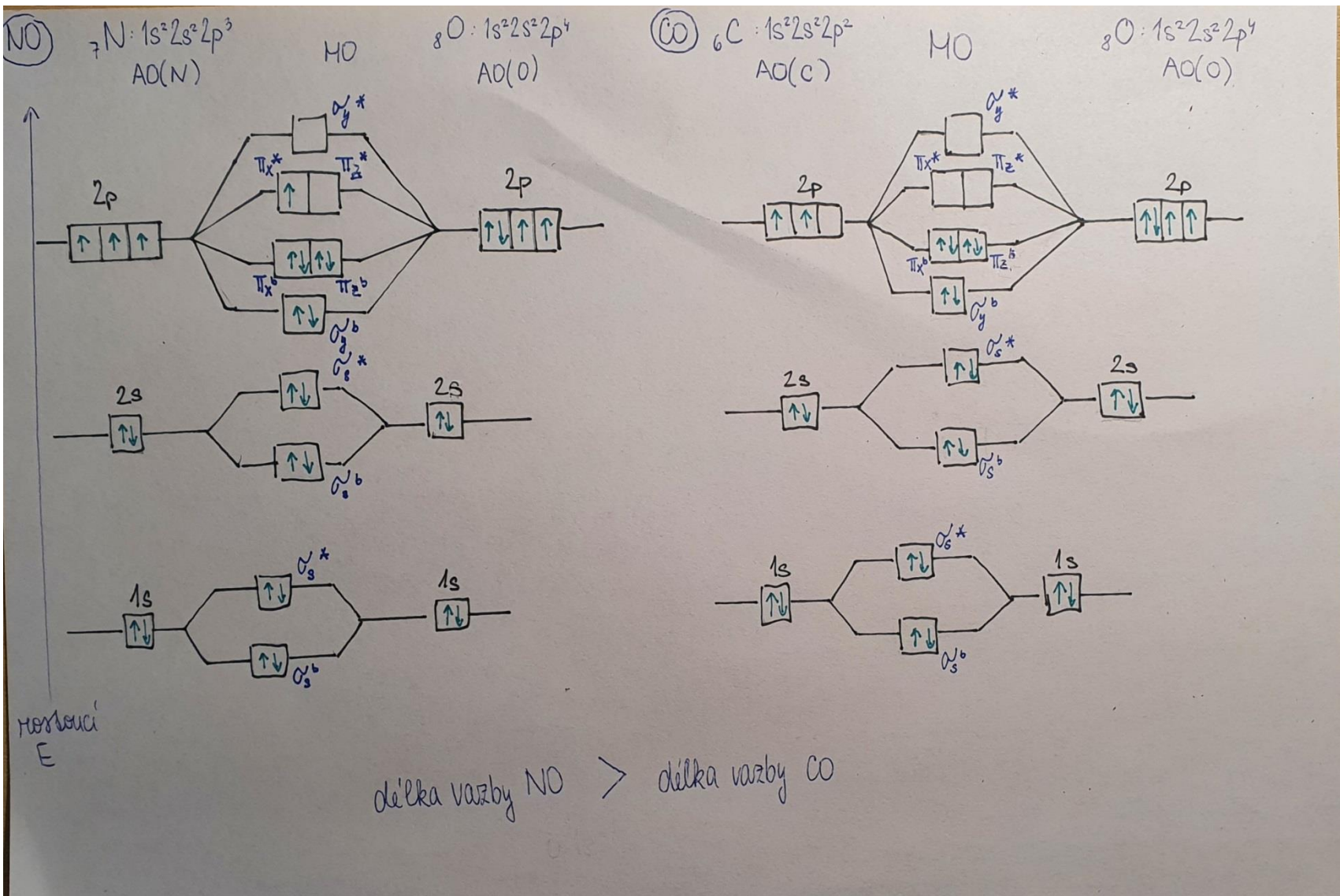
a) řád vazby (NO) = $\frac{\text{vaz.} - \text{nevaz.}}{2} = \frac{10 - 5}{2} = \underline{\underline{2,5}}$

a) řád vazby (NO⁺) = $\frac{\text{vaz.} - \text{nevaz.}}{2} = \frac{10 - 4}{2} = \underline{\underline{3}}$

b) délka vazby: (NO) < (NO⁺)

c) přidání elektronů automaticky neznamená zvýšení řádu vazby => i energie vazby

12) Pomocí diagramu molekulových orbitalů odhadněte, zda délka vazby je delší v molekule NO nebo CO.



Seřadte následující typy vazeb podle
vzrůstající síly: vazba dipól-dipól,
kovalentní vazba, Londonovy disperzní
síly, vodíková vazba.

Řešení:

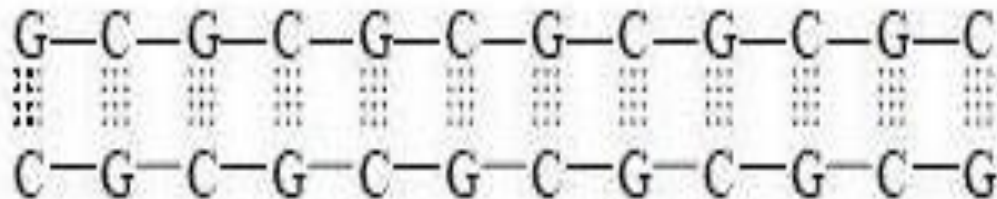
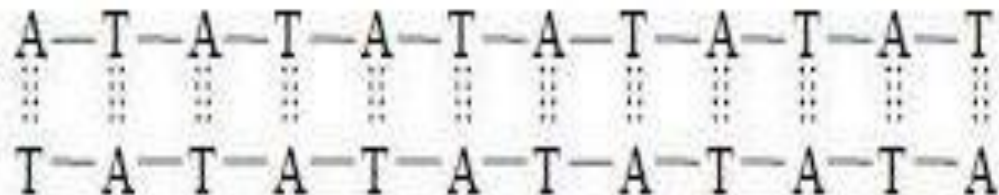
- Nejslabší jsou Londonovy disperzní síly (vznikají díky okamžitým malým nepravidelnostem v rozložení elektrického náboje v molekule, která je v průměru elektricky neutrální), o něco silnější je obvykle vazba dipól-dipól (parciální náboje na atomech polární molekuly jsou větší než při fluktuaci náboje v molekule nepolární), následuje vodíková vazba, nejsilnější z nabídky je vazba kovalentní.
- Pro ilustraci je zde uvedena tabulka s přibližnými energiemi uvedených typů vazeb:

Typ vazby	Energie (eV)
Londonovy disperzní síly	< 0,05
vazba dipól-dipól	0,02 – 0,1
vodíková vazba	0,1 – 0,5
kovalentní vazba	2 – 10

Teploty tání a varu CH_3COOH a $\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5$ shrnuje následující tabulka. Zdůvodněte, proč hodnoty teploty tání a teploty varu jsou u $\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5$ nižší než tyto hodnoty u CH_3COOH .

	teplota tání (°C)	teplota varu (°C)
CH_3COOH	17	118
$\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5$	-83,6	77

Obrázek schématicky znázorňuje fragmenty DNA včetně párování bází. Písmena A, T, C, G jsou zkratky pro deoxyribonukleotidy obsahující následující bázi:
A – adenin, T – thymin, C – cytosin, G – guanin.
Odhadněte a zdůvodněte, který z řetězců podlehne denaturaci při vyšší teplotě.



Vyberte NEsprávné tvrzení o mezimolekulových silách:

a) Vodíková vazba se může objevit ve struktuře proteinů (= bílkovin).

b) Mezi molekulami vody jsou přítomny vodíkové můstky.

c) Vodíkovou vazbu tvoří vodík jen s prvky s nízkou elektronegativitou.

d) Mezi atomy vzácných plynů a mezi nepolárními molekulami mohou působit Londonovy disperzní síly.

- Je možné, aby proběhla pouze oxidace nebo pouze redukce? Proč?
- Seřadte sloučeniny SO_2 , SF_2 , HI , OF_2 a H_2Se podle vzrůstajícího iontového charakteru jejich vazeb. Elektronegativity nalezněte v tabulkách.
- Bez použití tabelovaných hodnot elektronegativit určete v uvedených trojicích molekulu s nejvíce iontovým charakterem vazby.
- ICl , IBr , I_2
- HBr , HCl , HI

- Jedna z uvedených látek nemůže existovat. Která a proč? BrCl , ICl , IBr , ClI_3 , ClF_3 , IF_5 .
- Odhadněte, zda je lépe polarizovatelná molekula vodíku nebo molekula dusíku. Udejte, na základě čeho jste polarizovatelnost odhadli.
- Vysvětlete princip chladicí směsi.

- Víte o nějakém kovu, který při pokojové teplotě není kujný a tažný?
- Proč jsou kovy dobrými vodiči elektrického proudu a dobrými tepelnými vodiči?
- Víte o nějaké látce, která není kov, ale přesto v pevném skupenství dobře vede elektrický proud? Čím se to odůvodňuje?
- Čím jsou způsobeny rozdílné vlastnosti grafitu a diamantu?

- Odhadněte, zda molekula cyklopentanu je planární či nikoliv. Odůvodněte.
- Cyklopropan je velmi reaktivní sloučenina. Zdůvodněte, proč často reaguje za současného rozštěpení vazby C-C.