

4. Molekulák, ionok, kémiai alapelvek, a kémiai kötés típusai

A kötések kialakulásának oka: energianyereség.

A kémiai kötés típusai:

- ionos kötés
- kovalens kötés
- fémes kötés

Kötések kialakítása - oktett elmélet (1916-19 Lewis-Langmuir-Kossel):

- az atomok legkülső (vegyérték) elektronhéján lévő elektronok hozzák létre a kötések
- egyik atom elektron(oka)t ad át egy a másiknak, így pozitív és negatív ionok jönnek létre; közöttük elektrosztatikus kölcsönhatás hat: ionos kötés
VAGY az atomok között egy vagy több elektronpár megosztásával kovalens kötés létesül
- az elektronok átadásával vagy megosztásával minden atom körül nemesgáz konfiguráció alakul ki - 8 külső elektronnal –ez az oktett

Várhatóan milyen kémiai kötés alakul ki két atom között?

Fémek: **kis** E_i és **kis** E_{ea} , így könnyebben adnak le elektront, mint vesznek fel.

Nemfémek: **nagyobb** E_i és **nagyobb** E_{ea} , így inkább felvesznek elektront.

De valóban megtörténik az elektronátadás? Hogyan lehet ezt megjósolni?

Segít az atomok elektronegativitása!

Az elektronegativitás: az atom molekulában kifejtett elektronvonzó képessége.

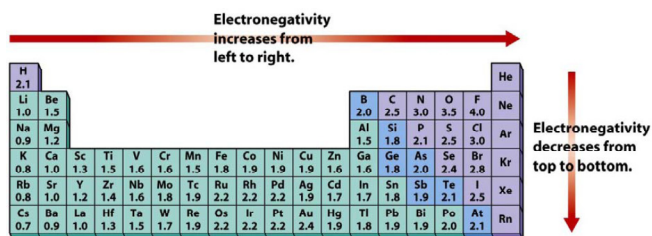


Figure 7-4 Chemistry, 5/e
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

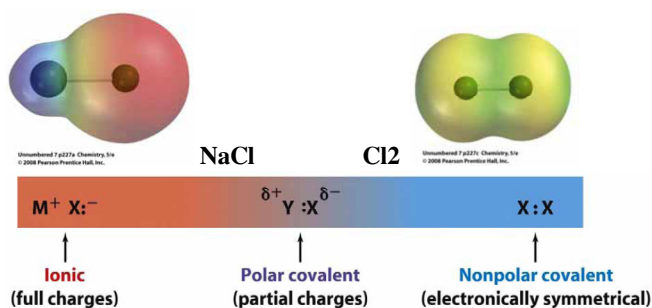
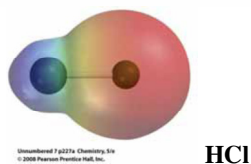


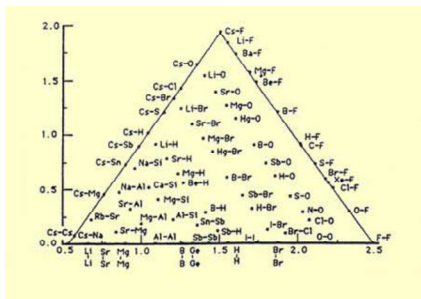
Figure 7-3 Chemistry, 5/e
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.



Általánosságban:

- két atom elektronegativitása nagyon különbözik: ionos kötés, ionrácsos anyagok
- két atom elektronegativitása azonos vagy nem nagyon különbözik ÉS az elektronegativitás értéke nagy: kovalens kötés
- két atom elektronegativitása azonos vagy nem nagyon különbözik ÉS az elektronegativitás értéke kicsi: fémes kötés

A kötéstípusok között nincs éles határ!



Copyright © 2008 Pearson Prentice Hall, Inc. Chapter 6/39

Ionos kötés és az ionrácsok

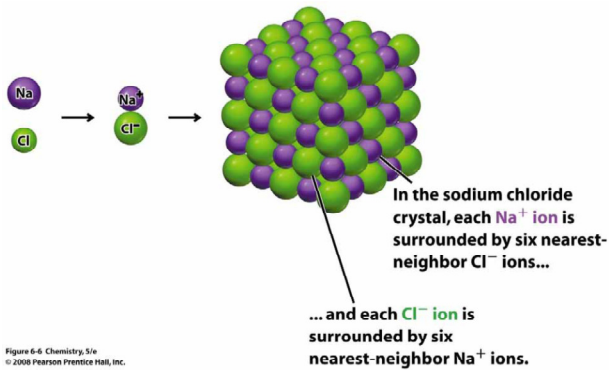
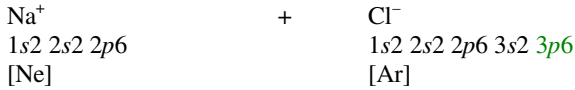


Figure 6-6 Chemistry, 5/e
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

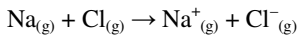
Kötések energiaviszonyai, a kötések erőssége

Az ionos kötés

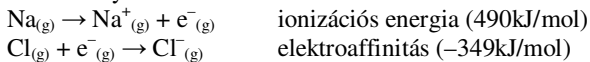
ionok → elektrosztatikus kölcsönhatás
amennyire lehet közel kerülnek az ellentétes töltésű ionok, ionrács alakul ki

az ionos kötés létrejöttének energetikája a nátrium és a klór reakcióján keresztül

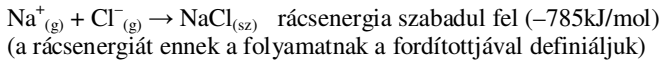
Kezdjük egy egyszerűsített képpel:



két részfolyamat:

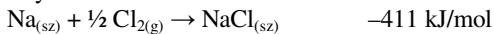


A keletkezett ionok ionrácsot alkotnak:



Így a teljes folyamatra: $490 \text{ kJ/mol} + (-349 \text{ kJ/mol}) + (-785 \text{ kJ/mol}) = -644 \text{ kJ/mol}$

A valóságban nem gáz állapotú ionokból indulunk ki, hanem szilárd nátriumból és klórgázból (kétatomos molekulák), így a következő folyamatot kell felírni:



miből adódik a különbség? a nátrium atomok elpárolgásához és a klórmolekulákban lévő kötés felbontásához szükséges energiából

Az ionos kötés általában nagy kötési energiájú, így erős, ezért nehéz felbontani.

kísérlet: konyhasó olvasztása

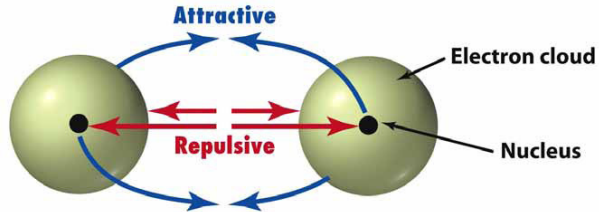
Az ionrácsban a töltéssel rendelkező részecskék rögzítettek, ezért rossz hő és elektromos vezetők, de olvadékban jó elektromos vezetőkké válnak.

Az ionok méretétől és töltésétől függ, hogy milyen típusú rács alakul ki.

ionizációs energia + elektroaffinitás – rácsenergia: sok esetben energetikailag kedvezőtlen, így ionos kötés / ionrács nem képződik

A kovalens kötés

Taszítások és vonzások az elektronok és az atommagok között



The nucleus–electron attractions are greater than the nucleus–nucleus and electron–electron repulsions, resulting in a net attractive force that binds the atoms together.

Figure 7-1 Chemistry, 5/e
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

Copyright © 2008 Pearson Prentice Hall, Inc. Chapter 67/32

Lewis-szerkezetek többatomos molekulákban

1. Vegyértékelektronok

- A molekula minden atomjának vegyértékelektronjait összeszámoljuk.
- Negatív töltés (anion) - több, pozitív töltés (kation) – kevesebb elektron.

2. Atomok összekötése

- Vonalakkal jelezzük a kötéseket
- H és 2. periódus – a megadott számú kötés
- Magasabb periódusokban az oktett-szabálynál több kötés is lehet.
- Általában a legkevésbé elektronegatív a központi.

3. Elektronokat a végatomokon elosztani

- A kötésekben elhasználtakkal csökken az elektronok száma.
- Egészítsük ki az oktettjeiket (kiv. H).

4: Központi atom

- Ha maradt elektron, a központi atomra kerül.

5. Többszörös kötés

- Ha nem maradt elektron, de a központi atomnak nincs oktettje, a nem kötő párokkal kétszeres vagy háromszoros kötést létesítünk.

Példák:

H₂O

1. $2 \cdot 1 + 6 = 8$ elektron

2. H–O–H

3. $8 - 4 = 4$ elektron maradt. H-atomok a végeken, nem teszünk hozzá további elektronokat

4. A maradék 4 elektront elosztjuk az O-en nemkötő elektronpárok formájában.

5. Az O-nek meg van az oktettje, nincs többszörös kötés.

Kovalens kötések erőssége

egyszeres kovalens kötések: a kötést egy elektronpár alkotja

többszörös kovalens kötések: a kovalens kötést egynél több elektronpár alkotja

példa:	etán	etén	etin
kötés típusa:	egyszeres	kétszeres	háromszoros
kötéshossz:	154 pm	134 pm	120 pm
kötés erősség:	348 kJ/mol	614 kJ/mol	839 kJ/mol

TABLE 7.1 Average Bond Dissociation Energies, D (kJ/mol)

H-H	436 ^a	C-H	410	N-H	390	O-H	460	F-F	159 ^a
H-C	410	C-C	350	N-C	300	O-C	350	Cl-Cl	243 ^a
H-F	570 ^a	C-F	450	N-F	270	O-F	180	Br-Br	193 ^a
H-Cl	432 ^a	C-Cl	330	N-Cl	200	O-Cl	200	I-I	151 ^a
H-Br	366 ^a	C-Br	270	N-Br	240	O-Br	210	S-F	310
H-I	298 ^a	C-I	240	N-I	—	O-I	220	S-Cl	250
H-N	390	C-N	300	N-N	240	O-N	200	S-Br	210
H-O	460	C-O	350	N-O	200	O-O	180	S-S	225
H-S	340	C-S	260	N-S	—	O-S	—		
Multiple covalent bonds^b									
C=C	611	C≡C	835	C=O	732	O=O	498 ^a	N≡N	945 ^a

^a Exact value

^b We'll discuss multiple covalent bonds in Section 7.5.

Table 7-1 Chemistry, 5/e
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

Copyright © 2008 Pearson Prentice Hall, Inc. Chapter 67/34

A kovalens kötésre jellemző mennyiségek:

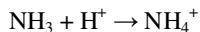
- kötéshossz: két atom egyensúlyi távolsága
- kötésszög: két, ugyanazon atomhoz tartozó kötés által bezárt szög
- kötésrend: hány elektronpár hozza létre a kötet

kötéstípus – kötéshossz – kötéserősség összefüggés: a többszörös kötések erősebbek és rövidebbek, mint a megfelelő egyszeres kötések

kötéspolaritás: nem azonos atomok között a kötő elektronok nem egyenlő mértékben oszlanak meg
apoláris kötés
poláris kötés – parciális (részleges) töltés az atomokon!

	ΔEN	Polaritás
H ₂	0	apoláris
HI	~0,5	gyengén poláris
HBr	~0,7	poláris
HCl	~0,9	erősen poláris
HF	~1,9	igen erősen poláris
NaCl	~2,1	ionos

Speciális kovalens kötés: előfordul, hogy a kötő elektronpárt csak az egyik elektron adja. Ez a **koordinációs vagy datív kötés**.



nézzük az ammónium ion!

a proton nem vitt elektront, de az ammónium-ion négy kötése egyenértékű

CO

háromszoros kötés, ebből kettő „normál”, egy datív, csak az oxigén adja a kötő elektronokat

problémák az oktettelmélettel:

párosítatlan elektront tartalmazó vegyületek

A nitrogén-monoxid paramágneses anyag, ami látszik a Lewis-képletből, mert a N-nél nincs oktett
Az oxigén szintén paramágneses anyag, de az oktett-elmélet szerint nincs párosítatlan elektronja!

„hiányos” oktettek

NO nincs oktett a N-nél, csak 7 elektron

BF₃ csak 6 elektron

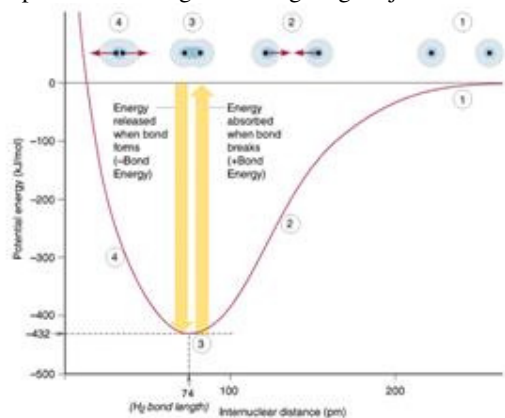
„kiterjesztett” oktettek

PCl₃ ok, PCl₅ nem, mert 10 elektron van a foszfor körül

SF₆ már 12 elektron!

Mi a megoldás? a kvantummechanika

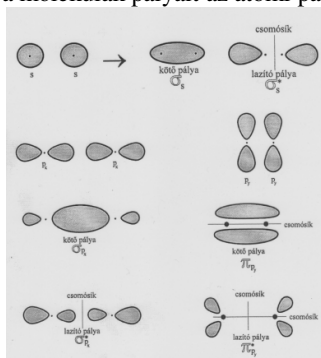
a H₂ potenciális energia-távolság diagramja



a kötéstávolságot, a kötési energia

LCAO-MO módszer (Linear Combination of Atomic Orbitals – Molecular Orbitals)

a molekulák pályáit az atomi pályák kombinálásával állítjuk elő (csak közelítés, de elég szemléletes)



Két atomi pálya kombinációjából két molekulapálya lesz. Az egyik alacsonyabb energiájú, ez a kötő pálya. A másik magasabb energiájú, ez a lazító pálya.

Az atomi pályákhoz hasonlóan viselkednek a molekulapályák (elektronokkal való feltöltődés, legfeljebb két ellentétes spinű elektron, maximális multiplicitás).

Ha az elektroneloszlás hengersizmetrikus a két atommagot összekötő egyesre nézve: **szigma pálya, jele σ** .

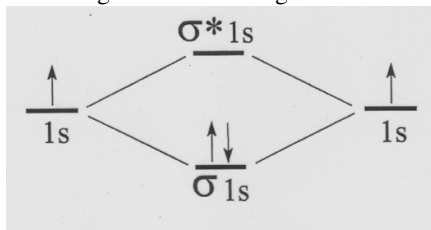
Ha az elektroneloszlás nem hengersizmetrikus a két atommagot összekötő egyesre nézve, de van egy sík (egy csomósík) amelyre nézve az: **pí pálya, jele π** .

$$\text{kötésrend: } k = (n_{\text{kötő}} - n_{\text{lazító}}) / 2$$

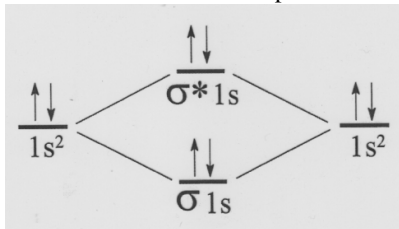
Ha a kötésrend nulla a molekula nem jön létre.

Homonukleáris (azonos magú) kétatomos molekulák

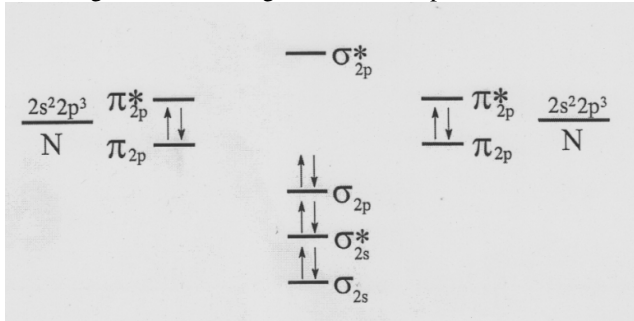
Két hidrogénatomból hidrogén-molekula képződik, a kötésrend 1 (2 kötő és 0 lazító elektron).



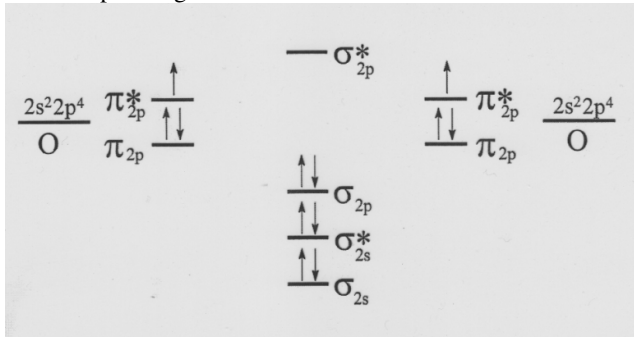
Két héliumatombból nem képződik kétatomos molekula, mert a kötésrend 0 (2 kötő és 2 lazító elektron).



Két nitrogénatomból nitrogén-molekula képződik, a kötésrend 3 (8 kötő és 2 lazító elektron).

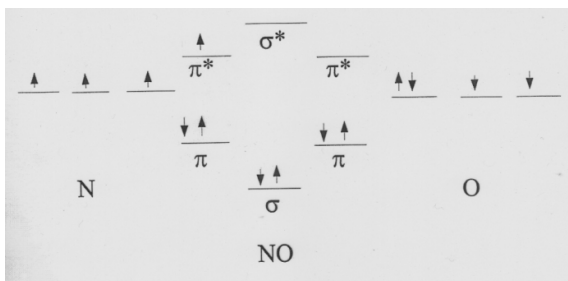


Két oxigénatomból oxigén-molekula képződik, a kötésrend 2 (8 kötő és 4 lazító elektron) és a párosítatlan elektronok miatt a molekula paramágneses.

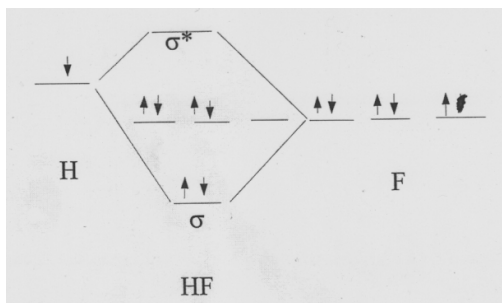


Heteronukleáris (különböző magú) kétatomos molekulák

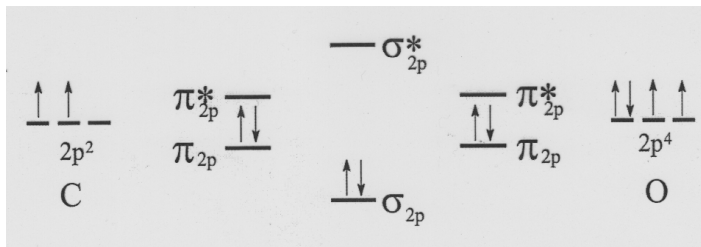
Egy nitrogén és egy oxigénatomból nitrogén-monoxid képződik, a kötésrend 2,5 (6 kötő és 1 lazító elektron) és a párosítatlan elektron miatt a molekula paramágneses.



Egy hidrogén és egy fluoratomból hidrogén-fluorid képződik, a kötésrend 1 (2 kötő, 0 lazító elektron és 4 nemkötő elektron látható az ábrán).



Egy szén és egy oxigénatomból szén-monoxid képződik, a kötésrend 3 (6 kötő, 0 lazító elektron). A közössé vált elektronokból 2-t ad a szén, négyet az oxigén (datív kötés).



Többatomos molekulák

LCAO-MO még inkább közelítés

minden molekulapálya minden atomra kiterjed

bizonyos pályákon az elektroneloszlás csak két atom környékén jelentős: lokalizált pályák

bizonyos pályákon az elektroneloszlás sok atom környékén jelentős: delokalizált pályák

delokalizált kötés: határszerkezetek

példa: CO_3^{2-}

kötésrend: 1,33

kötéspolaritás – molekulapolaritás – molekula térbeli alakja közötti kapcsolat

Ha van poláris kötés a molekulában, akkor a molekula poláris LEHET.

Kétatomos molekulában: egyértelmű, hiszen a két atom mindig egy egyenes mentén helyezkedik el, pl. HCl

dipólusmomentum: $p=q \cdot r$: 1.080 D

(Debye-ben (3.33564×10^{-30} coulomb * méter (pontosan 1×10^{-21} C m²/s osztva a fénysebességgel)))

Ugyanez felírható vektoriális formában is: a dipólus vektor a negatív töltésből a pozitív töltésbe mutat.

Egy molekula polaritását a dipólus vektorok összege mutatja meg:

Ezért a CO_2 , H_2O eltérő polaritás szempontjából:

szén-dioxid: 0 D

vízgőz: 1.85 D

A CCl_4 apoláris molekula!

szén-monoxid: 0.112 D

hidrogén-cianid: 2.98 D

Molekulák alakja

a vegyértékelektronok elhelyezkedése a fontos
VSEPR – vegyértékelektron-pár tasztítási elmélet

- A vegyértékhéjón levő elektronpárok úgy helyezkednek el, hogy a távolságuk maximális legyen.
- A molekulákban a kötő és nemkötő elektronpárok a lehető legtávolabb igyekeznek kerülni egymástól.
- A magányos (nemkötő) elektronpároktérigényei mindig nagyobbak, mint a kötő elektronpároké.
- Ha nemkötő elektronpárral rendelkezik az egyik atom, akkor a kötősszöget mindig kisebb lesz, mintha csak kötőelektronpárok lennének a molekulában.

Ha egy molekulában a központi atomnak nincs nemkötő elektronpárja, akkor,

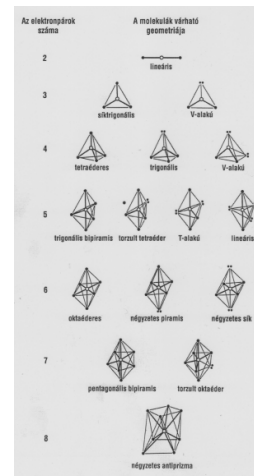
ha 2 a koordinációs szám, a molekula lineáris

ha 3 síkháromszög

ha 4 tetraéderes

ha 5 trigonális bipiramis

ha 6 oktaéder szerkezetű.



Nemkötő elektronpárok megléte torzítani fogja a molekulát, a kötősszöget.

A kialakuló alapvető szerkezetek:

TABLE 7.4 Molecular Geometry Around Atoms with 2, 3, 4, 5, and 6 Charge Clouds

Number of Bonds	Number of Lone Pairs	Number of Charge Clouds	Molecular Geometry	Example
2	0	2	Linear	$O=C=O$
3	0	3	Trigonal planar	$H_2C=O$
	1		Bent	$O=S$
4	0	4	Tetrahedral	CH_4
	1		Trigonal pyramidal	NH_3
	2		Bent	H_2O

Table 7-4 part 1 Chemistry, 5/e
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

TABLE 7.4 Molecular Geometry Around Atoms with 2, 3, 4, 5, and 6 Charge Clouds

Number of Bonds	Number of Lone Pairs	Number of Charge Clouds	Molecular Geometry	Example
5	0	5	Trigonal bipyramidal	PCl_5
4	1		Seesaw	SF_4
3	2		T-shaped	ClF_3
2	3		Linear	XeF_2

Table 7-4 part 2 Chemistry, 5/e
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

TABLE 7.4 Molecular Geometry Around Atoms with 2, 3, 4, 5, and 6 Charge Clouds

Number of Bonds	Number of Lone Pairs	Number of Charge Clouds	Molecular Geometry	Example
6	0	6	Octahedral	SF_6
5	1		Square pyramidal	$SbCl_5$
4	2		Square planar	XeF_4

Table 7-4 part 3 Chemistry, 5/e
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

A központi atom elnevezés.

fémek kötése

kis elektronegativitású elemekre jellemző
atomtörzsek – delokalizált elektronok -> fémek tulajdonságok
⇒ jó hővezetés, áramvezetés
⇒ alakíthatóság, kedvező mechanikai tulajdonságok
a fémek kötése erőssége nagyon különböző lehet

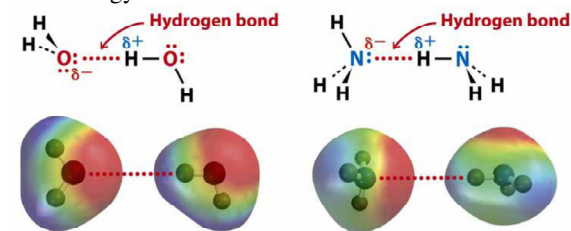
Másodlagos kötések (NEM kémiai kötések!)

Az anyagi halmazok részecskéi között lépnek fel.

nézzük csökkenő kötéserősségi sorrendben!

hidrogénkötés:

a legerősebb másodlagos kötés
a klasszikus H-kötés feltételei: nagy elektronegativitású atomhoz (F,O,N) közvetlen kapcsolódó H-atom és *magános* elektronpár szintén nagy EN-ű atomon



Utombeszéd 10 2011b Chemistry, 5/e
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

jelentős hatás, az élet szempontjából igen fontos (fehérjék térszerkezete, DNS, víz, szerves sav dimerek, intramolekuláris hidrogénhidak)

víz – kén-hidrogén forráspont összehasonlítás: 100°C, -60°C (miközben a H₂S moláris tömege jóval nagyobb!)

ion-dipól kölcsönhatás: ionok és a poláris molekulák között vonzás alakul ki. A hidratációnál fontos, pl. sók vizes oldata.

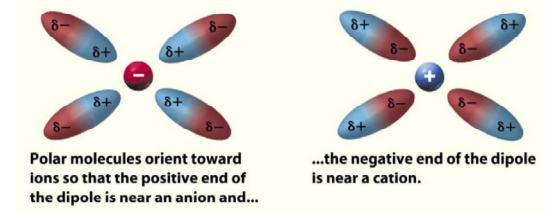


Figure 10-3 Chemistry, 5/e
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

dipól-dipól kölcsönhatás: A szomszédos molekulák dipólusai közt is elektromos kölcsönhatás alakul ki. Poláris molekuláknál lép fel és akkor meghatározó, ha nincs H-kötés és ion-dipól kölcsönhatás, pl. éter.

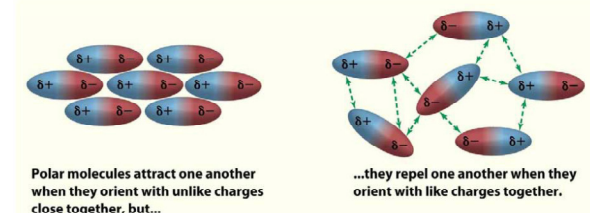


Figure 10-4 Chemistry, 5/e
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

diszperziós kölcsönhatás: Apoláris molekulák között is kialakul vonzó kölcsönhatás. A molekulák pillanatnyi polarizációja okozza. Nagyon gyenge, csak olyan esetekben fontos, ahol semmilyen más másodlagos kölcsönhatás nincs, pl. jód.

Kísérlet: jód szublimációja. Nagy molekulatömeg, ezért szilárd, de nagyon gyenge kölcsönhatás, így szublimál.