

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

Tanulási célok	<ul style="list-style-type: none"> - ismeri a kémiai kötés típusait - le tudja írni a kovalens és ionos kötést az oktett elmélettel - ismeri az elektronegativitás változását a periódusos rendszerben - az elektronegativitás használatával meg tudja becsülni a várható kötéstípust - tud Lewis képletet írni - ismeri a kovalens kötéstávolság és energia közötti kapcsolatot - ismeri az oktettelmélet korlátait - érti kétatomos molekulák energiadiagramját - tud határszerkezeteket írni - ismeri az alapvető molekulaszervezeteket - meg tudja a molekulák alakját becsülni a VSEPR elmélet használatával - meg tudja becsülni molekulák polaritását - meg tudja becsülni a kémiai kötések alapján a létrejövő halmazok típusát
Fogalmak	kémiai kötés, kovalens kötés, ionos kötés, fémes kötés, oktett elmélet, elektronegativitás, apoláris és poláris kovalens kötés, az ionos kötés, az ionrács létrejöttének energiaviszonyai, Lewis szerkezetek, egyszeres és többszörös kovalens kötések jellemzői, kötéshossz, kötésszög, LCAO-MO módszer, szigma kötés, pi kötés, kötő pálya, lazító pálya, kétatomos molekulák energiadiagramja, lokalizált – delokalizált kötések, határszerkezetek, dipólusmomentum, kötéspolaritás, molekulapolaritás, VSEPR elmélet, ionrács, fémrács, atomrács, molekularács
Kapcsolódó feladatok	Példatár 8., 11. fejezet

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 szemléletesen: az atom molekulában kifejtett elektronvonzó képessége.

Többféle elektronegativitás skála létezik. **A legelterjedtebb a Pauling-féle.**

A flour elektronegativitását önkényesen 4,0-nak veszi.

Két elem (A és B) elektronegativitásának különbségét pedig az alábbi képlettel számolja:

$$\chi_A - \chi_B = \sqrt{\frac{D_{AB} - \sqrt{D_{AA} \cdot D_{BB}}}{96,48 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}}}$$

ahol D_{AA} , D_{AB} és D_{BB} az AA, AB illetve BB kötések bomlási energiája.

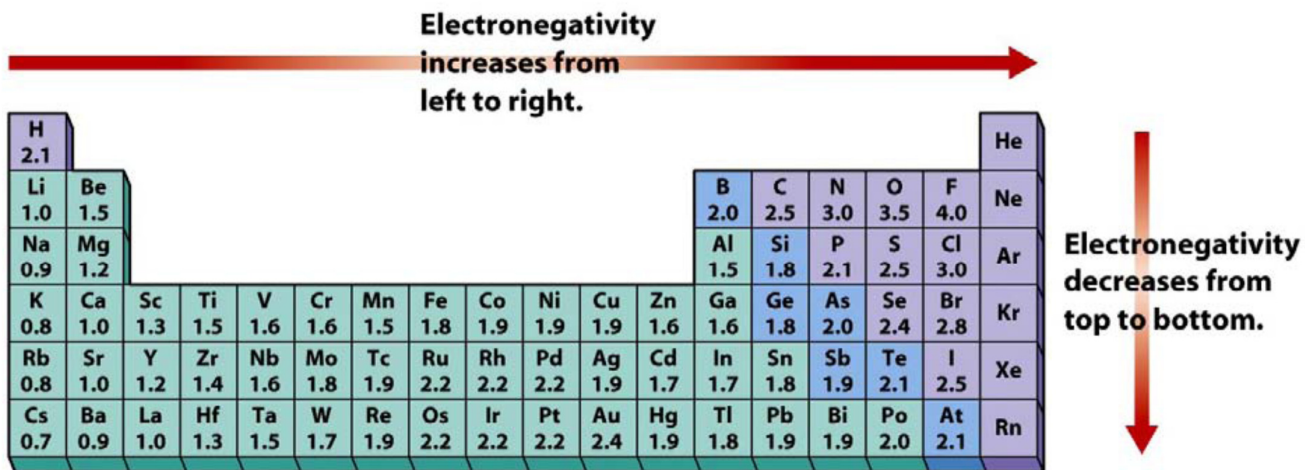


Figure 7-4 Chemistry, 5/e
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

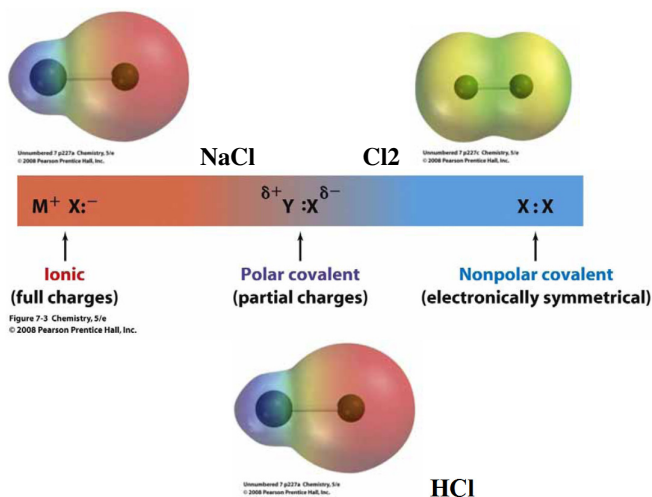
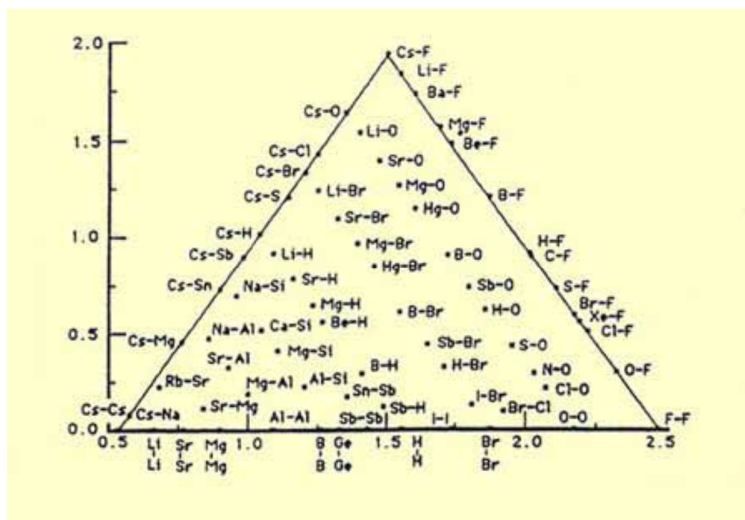


Figure 7-3 Chemistry, 5/e
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

Általánosságban:

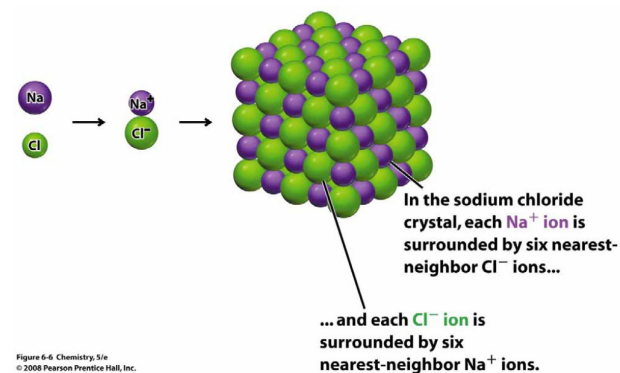
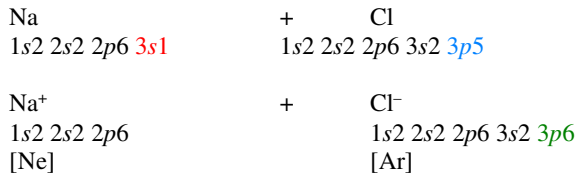
- két atom elektronegativitása nagyon különbözik: ionos kötés, ionrácsos anyagok
- két atom elektronegativitása azonos vagy nem nagyon különbözik ÉS az elektronegativitás értéke nagy: kovalens kötés
- két atom elektronegativitása azonos vagy nem nagyon különbözik ÉS az elektronegativitás értéke kicsi: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

A kötéstípusok között nincs éles határ!



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

Ionos kötés és az ionrácsok



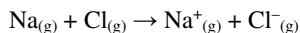
Kötések energiaviszonyai, a kötések erőssége

Az ionos kötés

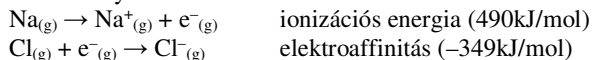
ionok → elektrosztatikus kölcsönhatás
amennyire lehet közel kerülnek az ellentétes töltésű ionok, ionrács alakul ki

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

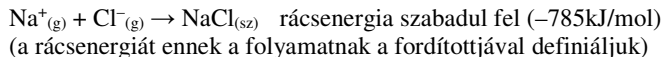
Kezdjük egy egyszerűsített képpel:



két részfolyamat:

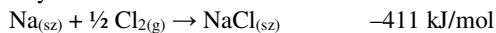


A keletkezett ionok ionrácsot alkotnak:

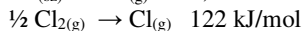
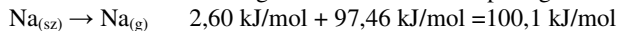


Így a teljes folyamatra: $490 \text{ kJ/mol} + (-349 \text{ kJ/mol}) + (-785 \text{ kJ/mol}) = -644 \text{ kJ/mol}$

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



(A felhasznált adatok pontatlanságából adódó eltéréstől tekintsünk el.)

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

kísérlet: konyhasó olvasztása

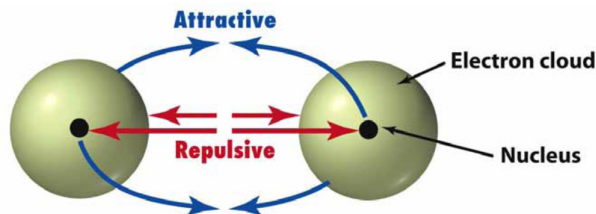
Az ionrácsban a töltéssel rendelkező részecskék rögzítettek, ezért rossz hő és elektromos vezetők, de olvadékból jó elektromos vezetőkkel válnak.

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, 5th

© 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 kötések
- 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

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

	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

A kovalens kötésre jellemző mennyiségek:

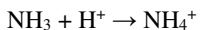
- kötéshossz: két atom egyensúlyi távolsága
- kötésszög: két, ugyanazon atomhoz tartozó kötés által bezárt szög
- kötésrend: hány elektronpár hozza létre a kötet

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 iont!

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

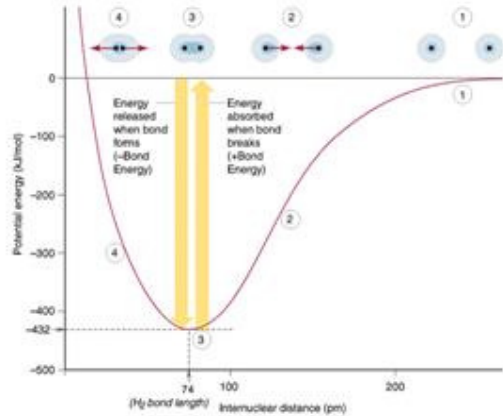
BF₃ csak 6 elektron

„kiterjesztett” oktettek

PCl₃ ok, PCl₅ nem, mert 10 elektron van a foszfor körül
 SF₆ már 12 elektron!

Mi a megoldás? a kvantummechanika

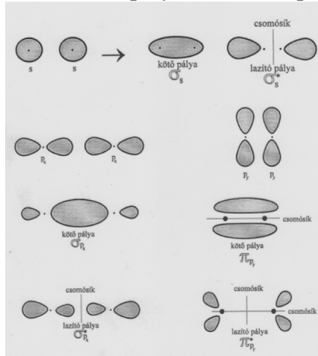
a H₂ potenciális energia-távolság diagramja



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**.

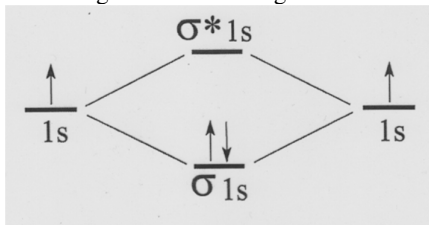
Ha az elektroneloszlás nem hengersizmetrikus a két atommagot összekötő egyesre nézve, de van egy sík (egy csomósík) amelyre nézve az: **pí pálya, jele π**.

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

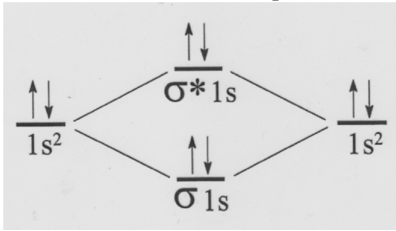
Ha a kötésrend nulla a molekula nem jön létre.

Homonukleáris (azonos magú) kétatomos molekulák

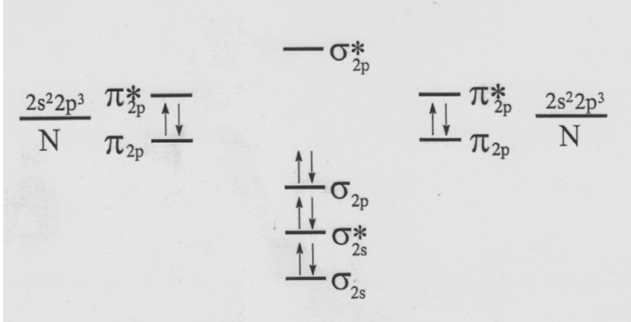
Két hidrogénatomból hidrogén-molekula képződik, a kötésrend 1 (2 kötő és 0 lazító elektron).



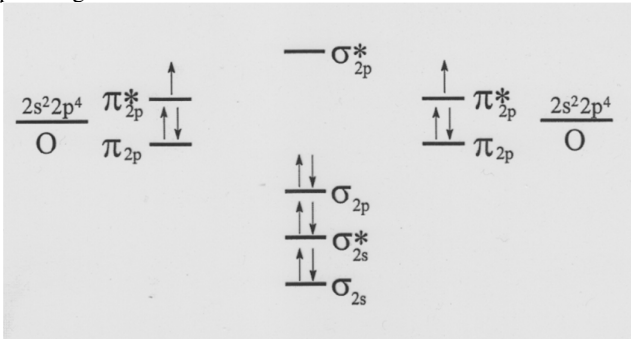
Két héliumatombból nem képződik kétatomos molekula, mert a kötésrend 0 (2 kötő és 2 lazító elektron).



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

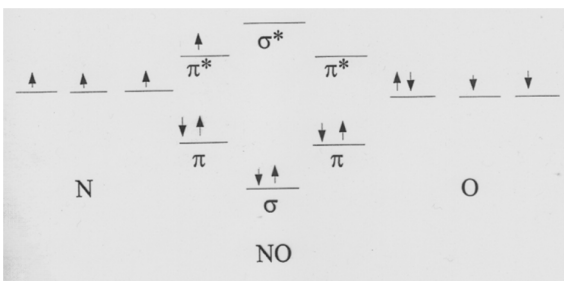


Két oxigénatomból oxigén-molekula képződik, a kötésrend 2 (8 kötő és 4 lazító elektron) és a párosítatlan elektronok miatt a molekula paramágneses.

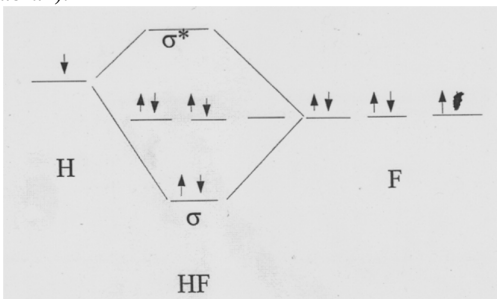


Heteronukleáris (különböző magú) kétatomos molekulák

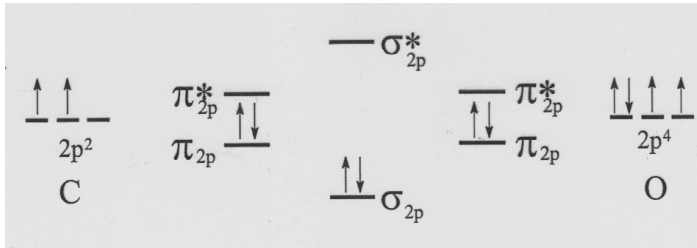
Egy nitrogén és egy oxigénatomból nitrogén-monoxid képződik, a kötésrend 2,5 (6 kötő és 1 lazító elektron) és a párosítatlan elektron miatt a molekula paramágneses.



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

C=O kötéshossz: 1,21 Å, C-O kötéshossz: 1,42 Å. A karbonát-ionban lévő CO kötéshossz: 1,31 Å.

kötéspolaritás – molekulapolaritás – molekula térbeli alakja közötti kapcsolat

Csak gáz fázisban lévő, egyedi molekulák polaritását tárgyaljuk!

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

Kéttomos 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 taszítási elmélet

- A vegyértékhéjén 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 kötésszöget mindig kisebb lesz, mintha csak kötőelektronpárok lennének a molekulában.

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

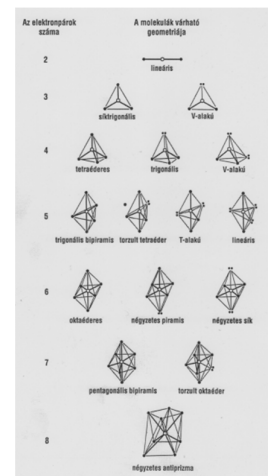
ha 2 a koordinációszám, a molekula lineáris

ha 3 síkháromszög

ha 4 tetraédes

ha 5 trigonális bipiramis

ha 6 oktaéder szerkezetű.



Nemkötő elektronpárok megléte torzítani fogja a molekulát, a kötésszöget.

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	$H-C=O$
	1		Bent	$O=S$
4	0	4	Tetrahedral	$H-C-H$
	1		Trigonal pyramidal	$H-N-H$
	2		Bent	$H-O-H$

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	$Cl-P-Cl$
4	1		Seesaw	$F-S-F$
3	2		T-shaped	$Cl-F$
2	3		Linear	$[F_3S]^-$

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	$F-S-F$
5	1		Square pyramidal	$[Cl-Sb-Cl]^{2-}$
4	2		Square planar	$F-Xe-F$

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

A központi atom elnevezés.

fémek kötés

kis elektronegativitású elemekre jellemző
atomtörzsek – delokalizált elektronok -> fémes tulajdonságok

- ⇒ jó hővezetés, áramvezetés
- ⇒ alakíthatóság, kedvező mechanikai tulajdonságok

a fémek kötés erőssége nagyon különböző lehet

Másodlagos kötések (NEM kémiai kötések!)

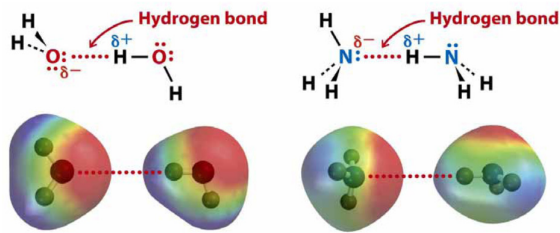
Az anyagi halmazok részecskéi között lépnek fel.

nézzük csökkenő kötési erősségi sorrendben!

hidrogénkötés:

a legerősebb másodlagos kötés

a klasszikus H-kötés feltételei: nagy elektronegativitású atomhoz (F,O,N) közvetlen kapcsolódó H-atom és magános elektrópár szintén nagy EN-ú atomon



Unnumbered 10 p331b 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 H_2S moláris tömege jóval nagyobb!)

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

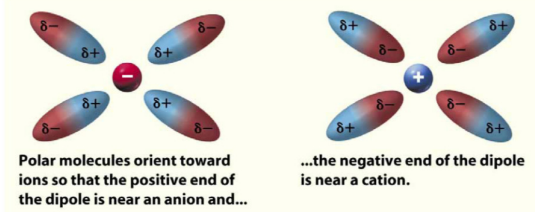


Figure 10-3 Chemistry, 5/e
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

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.

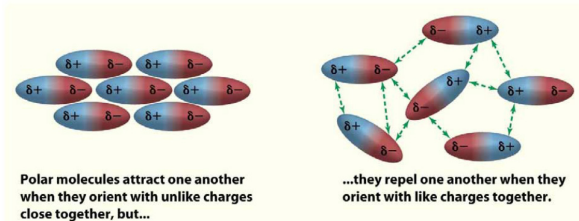


Figure 10-4 Chemistry, 5/e
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

diszperziós kölcsönhatás: Apoláris molekulák között is kialakul vonzókölcönhatás. 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.

Halmazok tulajdonságai

Szorosán összefügg a kémiai kötés típusával.

- ionos kötés: ionrács
- kovalens kötés: atomrács vagy molekularács
- fémes kötés: fémrács

Molekularács esetén a rácsösszetartó erők csak másodlagos kötőerők (hidrogénkötés, dipól-dipól kölcsönhatás vagy diszperziós kölcsönhatás), amelyek gyengébben a kémiai kötésnél.

Ha viszont „végtelen” sok atom kapcsolódik össze kovalens kötéssel, akkor már nem molekulának tekintjük, hanem atomrácsos kristálynak. Vigyázat: a nemesgázatomok nem alkotnak egymással molekulát, de molekularácsban kristályosodnak, hiszen az összetartó erő a diszperziós kölcsönhatás.