

Általános és szervetlen kémia - 3. hét

Az előző órán elsajátítottuk, hogy ...

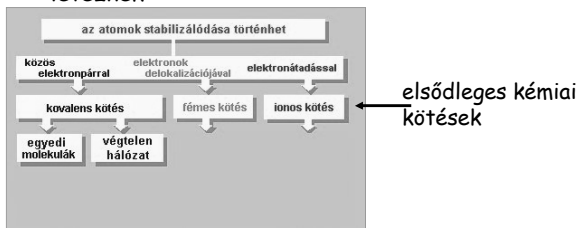
- milyen a kvantummechanikai atommodell
- hogyan épül fel a periódusos rendszer
- melyek a periodikus tulajdonságok

Mai témakörök

- elsődleges kémiai kötések
 - kovalens, ionos és fémes kötés
- másodlagos kémiai kötések
 - Van der Waals és hidrogén kötés

Kémiai kötések

- Az elemek és vegyületek halmazai az atomok kapcsolódásával - kémiai kötések kialakításával - jönnek létre
 - szabad atomként csak a nemesgázatomok léteznek

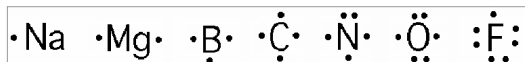


Kötések kialakítása - oktett elmélet

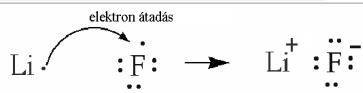
- 1916-19 Lewis-Langmuir-Kossel:
 - az atomok legkülső (vegyérték) elektronhéján lévő elektronok hozzák létre a kötések
 - egyik atomtól a másiknak átadott elektronok pozitív és negatív ionokat hoznak létre; a közöttük ható elektrosztatikus kölcsönhatás = ionos kötés
 - az atomok között egy vagy több elektrópár megosztásával kovalens kötés létesül
 - az elektronok átadásával vagy megosztásával minden atom körül nemesgáz konfiguráció alakul ki - 8 külső elektronnal - oktett

Lewis-képlet és Lewis szerkezet

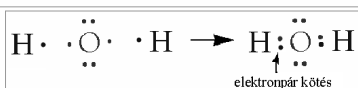
- az atomok vegyértékhéján az oszlopszám utolsó jegyének megfelelő számú elektron az elektronokat pöttyök (egyedi és páros)



- ionos kötés

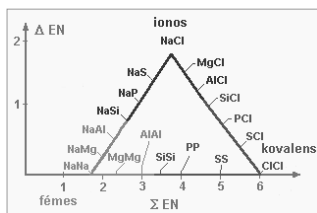


- kovalens kötés



Kémiai kötések típusa

- A kötések típusát a kapcsolódó atomok elektronegativitása (összege és különbsége) határozza meg



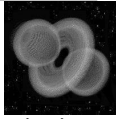
kötéstípus	ΔEN	ΣEN
kovalens	apoláris	$0 > x > 4$
	poláris	$0 < x < 1,7$
ionos	$1,7 < x$	≈ 4
fémies	$0 \leq x \leq 1,7$	< 4

Kémiai kötések típusa

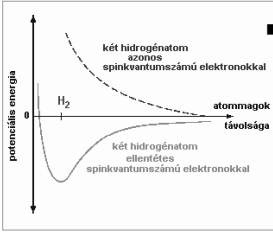
kapcsolódó atomok		ΔEN	ΣEN	
Na 0,9	Cl 3,0	2,1	3,9	ionos kötés
H 2,1	F 4,0	1,9	6,1	poláris kovalens kötés
C 2,5	S 2,5	0	5,0	apoláris kovalens kötés
Au 2,4	Ag 1,9	0,5	4,3	fémies kötés



Kovalens kötés kialakulása



- két atom között - az egyes atomok párosítatlan, ellentétes spínkvantumszámú elektronjai közös elektrópárt hoznak létre



- az elektronok mindkét magot körülvevő erőterben - kisebb energiájú molekula-pályára kerülnek



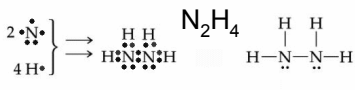
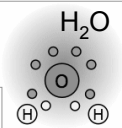
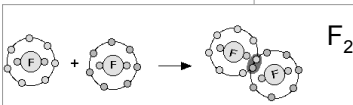
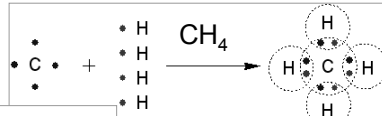
Kovalens kötés leírása

1. oktett-elmélet: a kötések (elektronpárok) kialakulása a nemesgáz szerkezetre törekvés eredménye
2. elektronpár taszítási elmélet (VSEPR): milyen a kötésben résztvevő és magányos elektronpárok térbeli elhelyezkedése
3. vegyértékkötés elmélet (VB): az atompályák kombinálódásával (hibridizáció) és átfedésével jön létre a kötés
4. molekulapálya módszer (MO): a kapcsolódó elektronok az atompályák felhasadásakor kialakuló kötő és lazító pályákon lehetnek

A kovalens kötés rendűsége

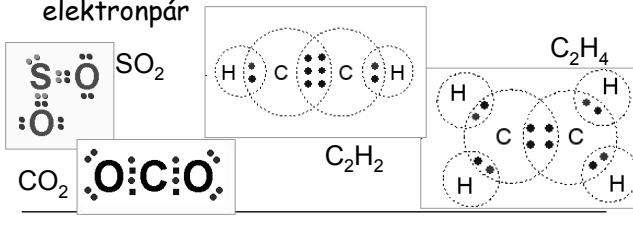
- Egyszeres kötés - két atom között egy elektrópár hozza létre a kötést -

σ -kötés (szigma)



A kovalens kötés rendűsége

- Többszörös kötés: két atom között két vagy három elektronpár hozza létre a kötést (kettős- és hármas kötés)
- σ-kötés (szigma) az első kötő elektronpár
- π-kötés (pi) a második és a harmadik kötő elektronpár

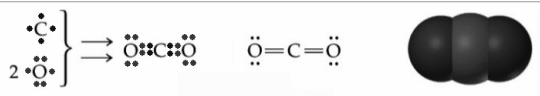


A kovalens kötés rendűsége

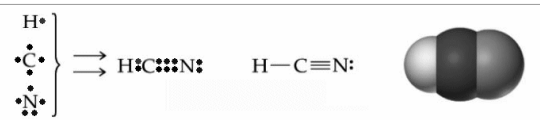
- Többszörös kötés

CO₂

-másod- és harmadrendű



HCN



A kovalens kötés

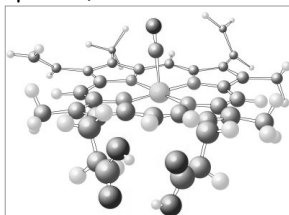
- datív kötés - a kötő elektronpár mindkét elektronja ugyanattól az atomtól származik a kötés létrejötte után nem megkülönböztethető

- koordinatív kötések (komplexek)

- oxóniumion

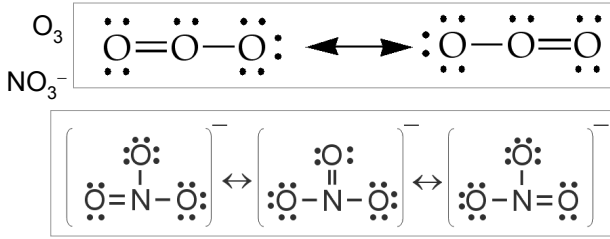


- szén-monoxid



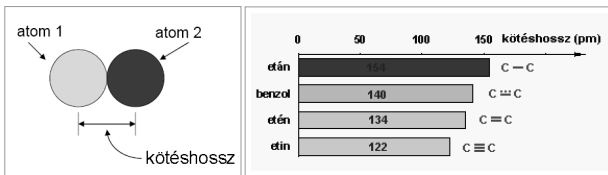
A kovalens kötés kialakulása

- delokalizált kötés - az elektronpár nem csak két atom erőterében lokalizálódik (található) - csak π -kötés lehet
 - rezonancia-képlettel jelölve



A kovalens kötés jellemzői

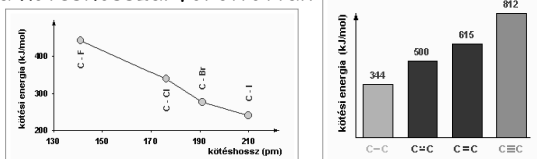
- Kötéshossz - kovalens kötésben lévő két atom magja közötti távolság
 - atomok kovalens sugara - azonos atomok egyszeres kötésben
 - többszörös kötés esetén egyre rövidebb a kötéshossz



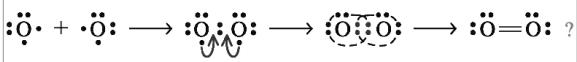
A kovalens kötés jellemzői

- Kötéserősség - adott kovalens kötés felszakításához szükséges energia (kJ/mol)

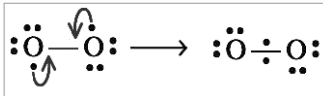
- annál nagyobb, minél nagyobb az atompályák átlapolódása
- σ kötésé nagyobb, mint a π kötéseké
- a kötéshosszal fordítottan



A kovalens kötés jellemzői



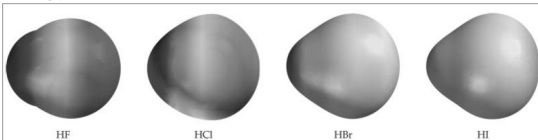
- az oxigén molekula mágneses térben irányba rendeződik - paramágneses tulajdonság párosítatlan elektron jelenléte okozza



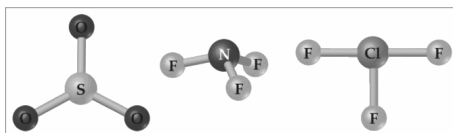
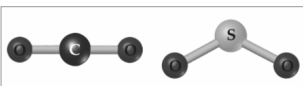
A kovalens kötés jellemzői

- A kötés polaritása - a kötésben lévő atomok elektronegativitásbeli különbsége

- a molekula polaritása a kötések összegéből
 - kéttomos molekulák mind polárisak, ha a kötés az dipólus molekulák
 - többatomos molekuláknál a kötés és a szimmetria együttes hatása



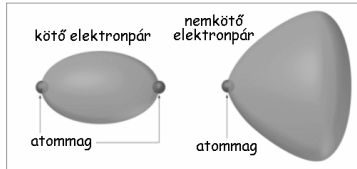
Kovalens kötésű molekulák geometriája



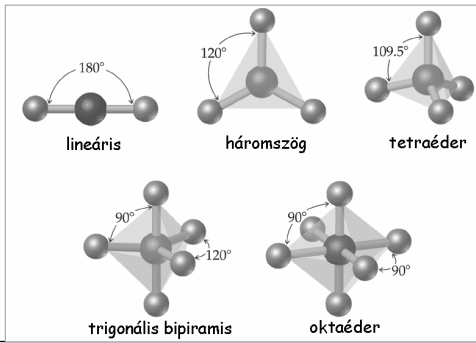
- elektronpár taszítási elmélet (VSEPR): az atomok kötő és nemkötő elektronpárjai úgy helyezkednek el a térben, hogy egymástól minél távolabb legyenek

Molekula geometria

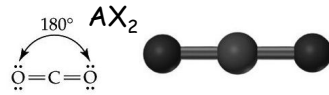
- AXE jelöléssel a molekulák általános képlete
 - A - központi atom
 - X - a kapcsolódó további atomok (ligandumok)
 - E - a központi atomon lévő nemkötő (magányos) elektronpárok
- a nemkötő elektronpárnak nagyobb a térigénye



- A központi atom körül milyen elektroncsoport elrendeződés alakul ki - szabályos térbeli geometriák (X és E összege szerint)

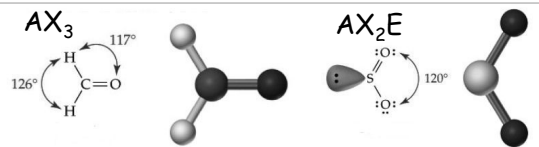


- két elektroncsoport
lineáris elrendeződés
CO₂, HCN, BeCl₂,



- három elektroncsoport

- AX₃ - egyenlő oldalú (szárú) háromszög
HCHO, BF₃, AlCl₃, SO₃, NO₃⁻,
- AX₂E - V-alak SO₂, NO₂⁻, SnCl₂



Molekula geometria

□ négy elektroncsoport

AX_4 - tetraéder

CH_4 , $SiCl_4$, NH_4^+ , CH_2Cl_2 ,

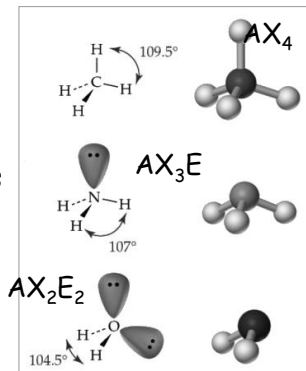
SO_2Cl_2 , $POCl_3$

AX_3E - trigonális piramis

NH_3 , H_3O^+ , PH_3 , $SOCl_2$

AX_2E_2 - V-alak

H_2O , ClO_2^- , H_2S



Molekula geometria

□ öt elektroncsoport

AX_5 - trigonális bipiramis

PCl_5 , PF_5 , SOF_4

AX_4E - mérleg-hinta

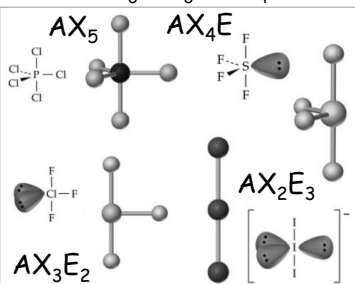
SF_4 , $TeCl_4$,

AX_3E_2 - T-alak

ClF_3 , BrF_3 ,

AX_2E_3 - lineáris

I_3^- , XeF_2 , ICl_2 ,



Molekula geometria

□ hat elektroncsoport

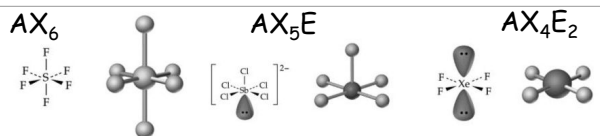
AX_6 - oktaéder

SF_6 , PF_6^- , IOF_5 ,

AX_5E - négyzetes piramis

$SbCl_5^{2-}$, $XeOF_4$, IF_5 ,

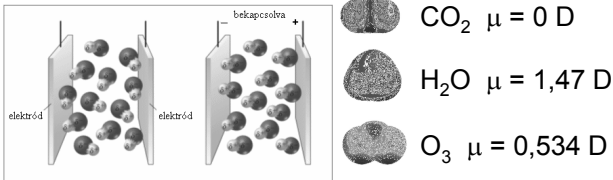
AX_4E_2 - négyzet XeF_4 , BrF_4^- ,



Molekulák polaritása

- a kötés-polaritás és a molekula alakja együttesen határozzák meg dipólus momentum: a parciális töltés és a távolság szorzata

$$\mu = \delta \cdot d \quad [D \text{ (debye)} = 3,336 \cdot 10^{-30} \text{ Cm}]$$

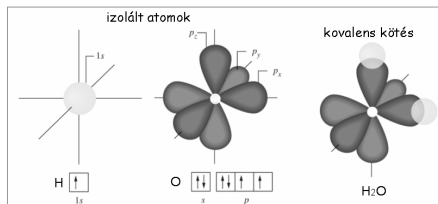


Vegyértékkötés elmélet (VB)

- a kötés az atompályák átfedésével jön létre a kötésszög megfelel az atompályák eredeti elektron-eloszlási szögének
- egyszeres kötés a kötéstengely mentén kialakított elektronpár átfedés (σ -kötés)
 - s-s, s-p és p-p átfedés lehetséges
- kettős vagy hármas kötés (π -kötések) szimmetrikusan veszik körül a magokat összekötő tengelyt
- csak p-p átfedéssel valósulhat meg

Vegyértékkötés elmélet (VB)

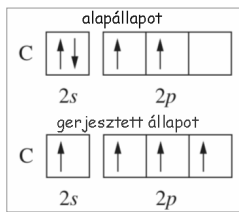
- a tapasztalt kötésszögek gyakran eltérnek a számított értékektől



- nagyobb átfedésű kötések jönnek létre, ha az atompályák kombinálódnak - hibridizáció

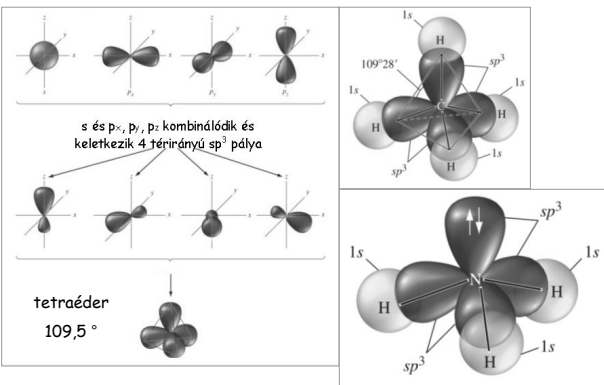
Vegyértékkötés elmélet (VB)

- az atompályák kombinálódása azok előzetes gerjesztődésével jár
- annyi hibridpálya keletkezik, ahány atompálya vett részt a kombinálódásban

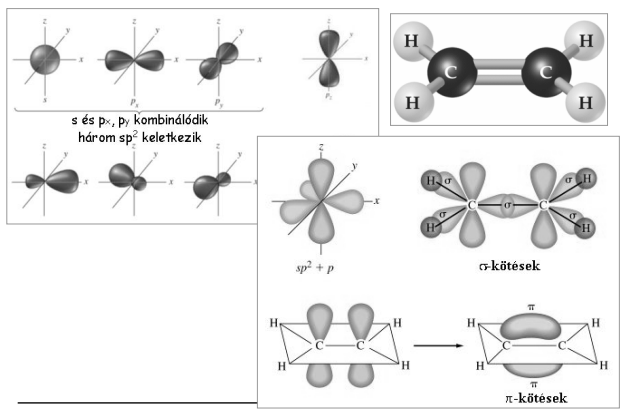


- a hibridpályák átfedésével a σ -kötések alakulnak ki
- a maradék p-pályákból jön létre a π -kötés
- a hibridpályák alakja megszabja a molekula-geometriát

Hibridpályák és kötések kialakulása

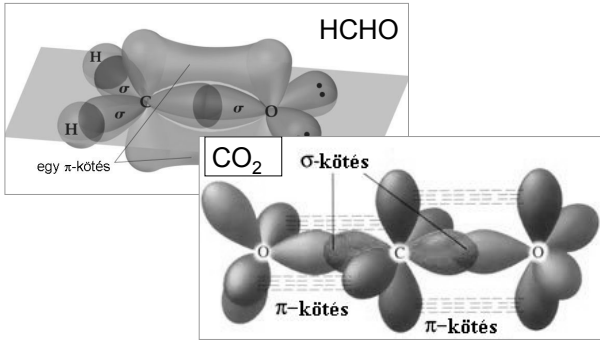


Hibridpályák és kötések kialakulása

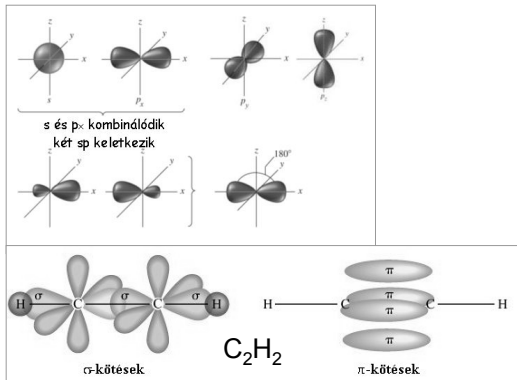


Hibridpályák és kötések kialakulása

■ Lokalizált π -kötések

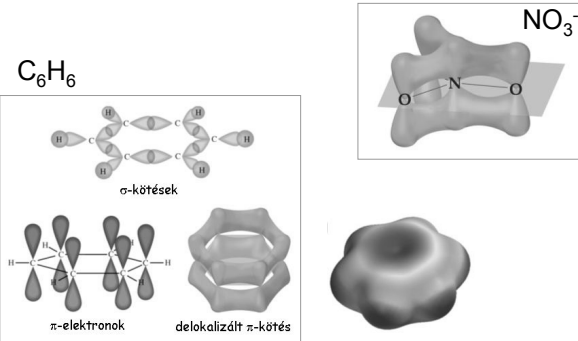


Hibridpályák és kötések kialakulása



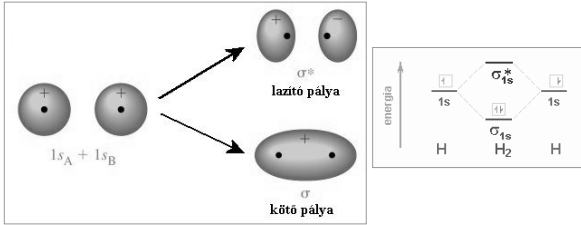
Hibridpályák és kötések kialakulása

■ Delokalizált π -kötések

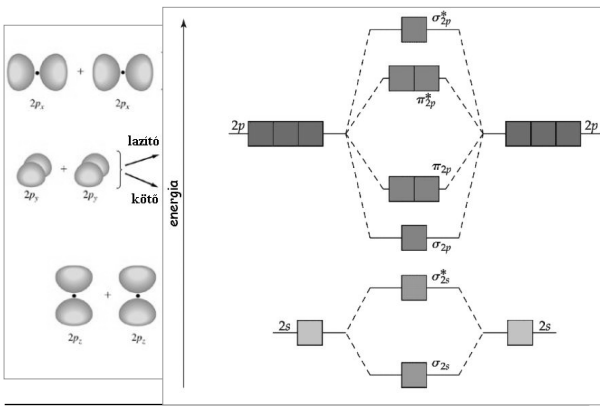


Molekulapálya elmélet

- a kapcsolódó elektronok az atompályák felhasadásakor kialakuló kötő és lazító pályákon lehetnek
LCAO (atompályák lineáris kombinációja)



Molekulapálya elmélet



Másodlagos kémiai kötések

- Van der Waals féle kötések - lezárt elektronhéjú atomok vagy molekulák között alakul ki -
 - diszperziós hatás (London-féle erők)
 - indukciós effektus
 - orientációs hatás (dipól-dipól kölcsönhatás)
- Hidrogénkötés - N, O vagy F atomhoz kapcsolódó hidrogén-atom és egy másik N, O, F magányos elektronpárja között létrejött kötés

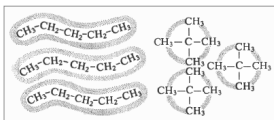


Johannes Diderich Van der Waals



Diszperziós hatás

- a London-féle kölcsönhatást befolyásolja
 - elektronfelhő nagysága
 - molekula alakja
- izomerek forráspontja eltér



36,1 °C

9,5 °C

Fritz Wolfgang
London



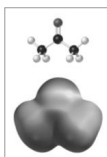
Indukciós effektus

- dipólus molekula és apoláris molekula között kialakuló kölcsönhatás - indukált dipólus jön létre
- rövid távolságokon belül hat
- nagyon kis energiájú
- pl. I₂ és H₂O

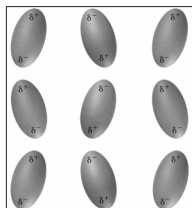


Orientációs hatás - dipól-dipól kölcsönhatás

- állandó dipólusú molekulák között alakul ki
- az egyik molekula dipólusának tere irányítja a többi molekulát - ellentétes töltésű pólusai kerüljenek egymás közelébe
- a molekulák szoros, térben közelebbi kapcsolata

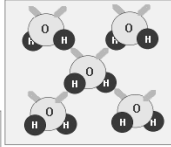
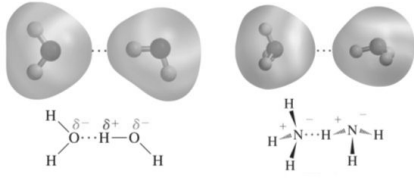


- meghatározó a dipólusmomentum



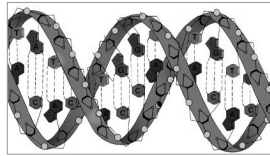
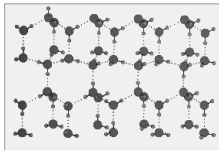
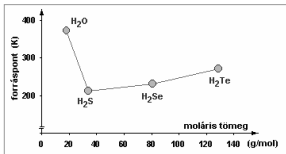
Hidrogén-kötés

- Kialakulása: O-hez, N-hez, F-hoz kötött H-atom és egy másik O, N vagy F-atom magányos elektronpárja között
- térben irányított
- donor és akceptor molekulák



Hidrogén-kötés

- rögzített szerkezetek kialakulása
- olvadáspont és forráspont módosulása



A mai órán megismertük ...

- az elsődleges kémiai kötések közül
 - a kovalens kötéset
- a másodlagos kémiai kötések
 - a Van der Waals és hidrogén kötéset

Következő témakör

- elsődleges kémiai kötések
 - a fémes és az ionos kötés, kristályrácsok
