

## Általános és szervetlen kémia - 4. hét

Előző héten elsajátítottuk, hogy ...

- a kovalens kötés hogyan jön létre, milyen elméletekkel lehet leírni
- milyen a molekulák alakja
- melyek a másodlagos kötések

Mai témakörök

- az elsődleges kötések további típusai
- a kristályok szerkezete

---

---

---

---

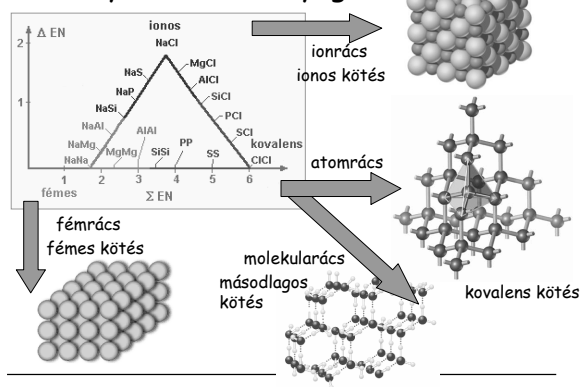
---

---

---

---

## Kristályos szilárd anyagok



---

---

---

---

---

---

---

---

## Szilárd halmazállapot

- A szilárd testekben az alkotó részecskéket nagy erők tartják össze - állandó térfogat és állandó alak
- szerkezetük szerint lehetnek
  - kristályos anyagok - a felépítő részecskék a test egészében szabályosan, rendezetten helyezkednek el
  - alaktalan anyagok - a felépítő részecskék csak kis körzetekben helyezkednek el rendezett módon

---

---

---

---

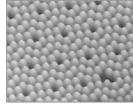
---

---

---

---

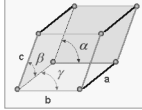
## Kristályos szilárd anyagok



### ■ jellemzői:

- meghatározott olvadáspont
- meghatározott olvadáshő
- meghatározott kristályszerkezet - a felépítő részecskék szabályos elrendeződése - kimutatása röntgendiffrakcióval

elemi cellák



szögállandóság törvénye: a lapok és élek által bezárt szög racionalitás törvénye: élek és lapok távolsága a középponttól

---

---

---

---

---

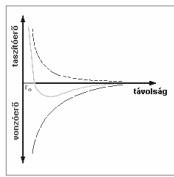
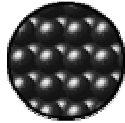
---

---

---

## Kristályrácsok

- a kristályrácsban a részecskék elhelyezkedése: közöttük a vonzó- és taszítóerő eredője nulla legyen
- $r_0$  - rácsállandó



- koordinációs szám: egy kiválasztott rácselemnek hány közvetlen szomszédja van

---

---

---

---

---

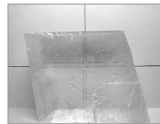
---

---

---

## Szilárd halmazállapot

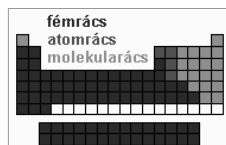
- anizotróp sajátságok: a fizikai tulajdonságok iránytól függően változhatnak - a növekedés sebessége nem azonos



- pl. kettőtörő sajátság

### ■ felépítő részecskék:

- fématomok
- nemfém- félfém atomok
- molekulák
- ionok



---

---

---

---

---

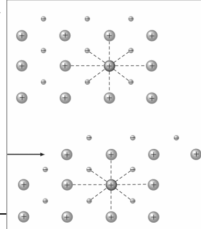
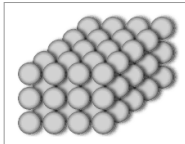
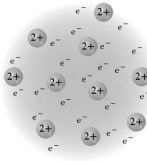
---

---

---

## Fémes kötés

- kötés kialakulása a delokalizált elektronfelhő és a fématom-törzsek között
  - nincs elegendő elektron, hogy minden szomszédal kötés jöjjön létre
- a fématom-törzsek szoros illeszkedése




---

---

---

---

---

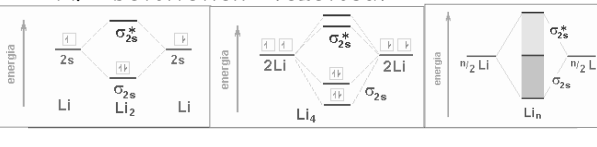
---

---

---

## Fémes kötés

- delokalizált molekulapályák, a kötés nem irányított
- N számú atom kapcsolódása N molekulapályát eredményez, amelyek energiája nagyon közel van egymáshoz
- N/2 telített - vegyértéksáv
- N/2 betöltetlen - vezetősáv




---

---

---

---

---

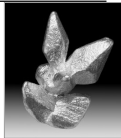
---

---

---

## Fémes kötésű kristályok

- a fémes jelleg:
  - fémfény - delokalizált elektronok
  - olvadáspont tág határok között
  - puha, nyújtható, jól megmunkálható
  - vagy kemény, rideg
  - jó hő- és elektromos vezetés
  - vízben és közönséges oldószerekben nem oldható



szerkezetből

---

---

---

---

---

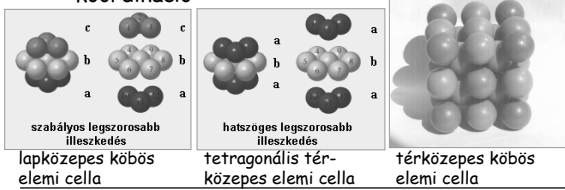
---

---

---

## Fémes kötésű kristályok

- Fémrácsban azonos méretű atomok - gömbilleszkedés
  - szabályos és hatszöges legszorosabb illeszkedés - 12-es koordináció
  - négyzetes szoros illeszkedés - 8 (+6) koordináció




---

---

---

---

---

---

---

---

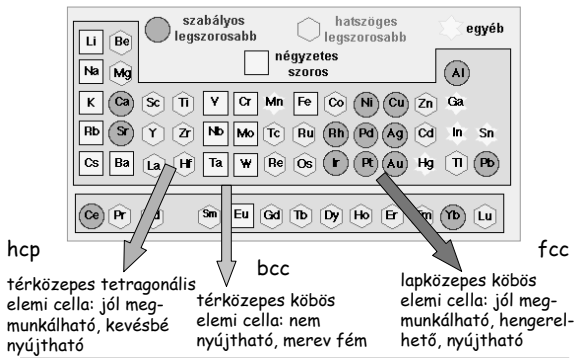
---

---

---

---

## Fémes kötésű kristályok szerkezete




---

---

---

---

---

---

---

---

---

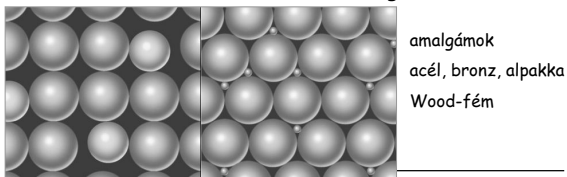
---

---

---

## Ötvözetek

- Kristályrácsba idegen atomok beépülése - homogén vagy heterogén elegy
  - helyettesítéses: hasonló méretű atomok - rács hibák
  - intersticiális: a fématomok közötti lyukakba kisebb atomok (bór, szén, hidrogén)




---

---

---

---

---

---

---

---

---

---

---

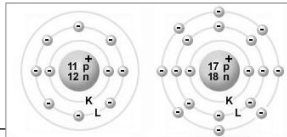
---

## Ionos kötés

- ellentétes töltések között kialakuló elektrostatikus kölcsönhatás - csak vegyületekben
- értelmezése a Bohr-féle atommodell alapján
  - Lewis-képlet
  - kationok és anionok képződése
  - ionizációs energia, elektron affinitás



Walther Kossel




---

---

---

---

---

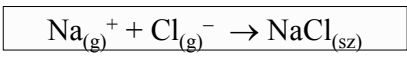
---

---

---

## Ionos kötés erőssége

- az ionkristály rácsenergiája ( $E_r$ ) olyan folyamat során bekövetkező energiaváltozás, amikor gáz halmazállapotú kationokból és anionokból 1 mol szilárd ionos kötésű kristály képződik (kJ/mol)




---

---

---

---

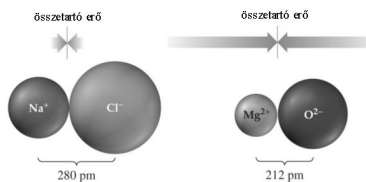
---

---

---

---

## Ionos kötés erőssége



$$E_r = -A \cdot \frac{z_1 \cdot z_2 \cdot e^2}{r}$$

A Madelung-állandó  
 $z_1$  és  $z_2$  az ionok töltése  
 $r$  az atommagok távolsága

---

---

---

---

---

---

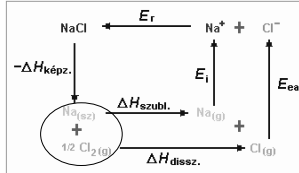
---

---

## Ionkristály rácsenergiája

- meghatározása - Born - Haber körfolyamat  
elemi állapotú kiindulási anyagok részlépésekre bontott reakcióinak energiája

Max Born    Fritz Haber




---

---

---

---

---

---

---

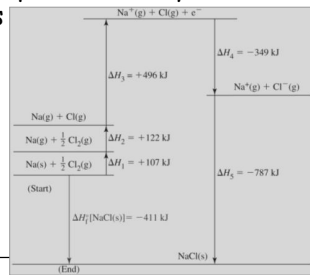
---

## Hess tétele

- egy vegyületből egy másikat előállítva, a folyamatban bekövetkező hőváltozás független attól, hogy hány lépésben és milyen úton történik az előállítás



Germain Henri Hess




---

---

---

---

---

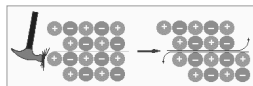
---

---

---

## Ionos kötésű kristályok jellemzői

- elektrosztatikus összetartó erő - rács-pontokban váltakozva pozitív és negatív töltésű ionok
- jellemző:
  - magas olvadáspont
  - nagy keménység
  - kristályaik könnyen hasadnak
  - jól oldódnak poláris oldószerekben (vízben)
  - elektromos vezetés csak olvadékokban vagy oldatokban




---

---

---

---

---

---

---

---

### Ionos kötésű kristályok szerkezete

- A vegyület összetétele és az alkotó ionok méretaránya határozza meg a koordinációs számot és az elemi cella típusát

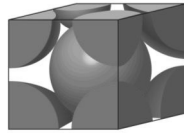
- MA összetétel

- $0,732 < r_{\text{kation}}/r_{\text{anion}}$

- 8-as koordináció

- térközepes köbös elemi cella

- 1 kation és 1 anion az elemi cellában



cézium-klorid

---

---

---

---

---

---

---

---

### Ionos kötésű kristályok szerkezete

- MA összetétel

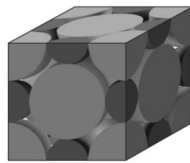
- $0,414 < r_{\text{kation}}/r_{\text{anion}} < 0,732$

- 6-os koordináció

- lapközepes köbös elemi cella

- a kationok az elemi cella oktaédres lyukaiban

- az elemi cellában 4 kation és 4 anion



nátrium-klorid

---

---

---

---

---

---

---

---

### Ionos kötésű kristályok szerkezete

- MA összetétel

- $0,225 < r_{\text{kation}}/r_{\text{anion}} < 0,414$

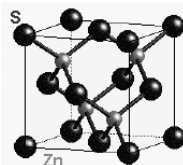
- 4-es koordináció

- lapközepes köbös elemi cella

- a kationok az elemi cella tetraédres lyukaiban

- erősödő kovalens jelleg

- az elemi cellában 4 kation és 4 anion



cink-szulfid (szfalerit)

---

---

---

---

---

---

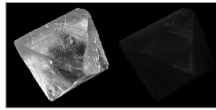
---

---

## Ionos kötésű kristályok szerkezete

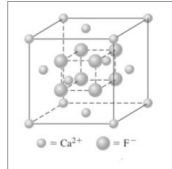
### ■ $MA_2$ vagy $M_2A$ összetétel

- eltérő koordinációs szám a kationra és az anionra



### ■ Fluorit ( $CaF_2$ )

- Ca - lapközepes köbös elemi cella - 4 kation
- F - a  $Ca^{2+}$  elemi cellán belül mindegyik térfolycadban - 8 anion



---

---

---

---

---

---

---

---

## Kovalens hálózat

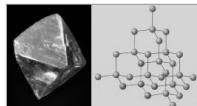
### ■ kovalens kötéssel kapcsolódó atomok három dimenziós hálózata

- a kötések térben irányítottak
- a közvetlen szomszédok száma kicsi
- C - gyémánt, Si, Ge,  $SiO_2$



### ■ jellemző:

- nagyon magas olvadáspont
- nagy keménység
- nincs fizikai oldószerük
- elektromos szigetelő vagy félvezető tulajdonság



---

---

---

---

---

---

---

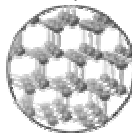
---

## Kovalens hálózat

### - atomrácsos kristályok

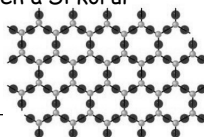
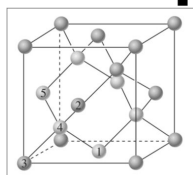
### ■ gyémánt, szilícium, germánium

- lapközepes köbös elemi cella, a tetraédes lyukakban további C-, Si- vagy Ge-atomok



### ■ Szilícium-dioxid

- Si - gyémánt elrendeződésű
- O - tetraédesen a Si körül



---

---

---

---

---

---

---

---



## Molekulárcsos kristályok

- másodlagos kötésekkel kapcsolódó molekulák - gyenge kölcsönhatás
- jellemző:
  - alacsony olvadáspont - szublimáció
  - kis keménység
  - nem vezet az elektromos áramot
  - jól oldódnak hasonló sajátságú oldószerben
  - vizes oldatban a poláris kötésű molekulák elektrolitikus disszociációra hajlamosak

---

---

---

---

---

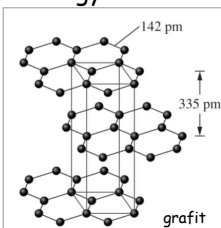
---

---

---

## Átmeneti jellegű kötéstípusok

- a részecskék réteges elrendeződése jöhet létre
- leggyakoribb a kovalens - fémes átmenet, vagy kovalens - ionos kötés



A grafitban három rács típus jellemző sajátsága fedezhető fel:

atomrács: 3 C-atom kapcsolódik közvetlenül, azonos síkban egyszeres kovalens kötésű hálózatot alkot.

fémrács: minden szénatomon marad egy elektron, amely a síkban delokalizálódik.

molekulárcs: a síkokat diszperziós erők tartják össze.

---

---

---

---

---

---

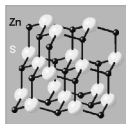
---

---

## Polimorfia

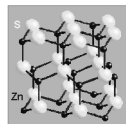
- az a jelenség, amikor egy anyag két- vagy több különböző kristályrendszerben kristályosodik

szfalerit



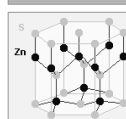
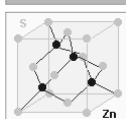
kén - lapközéppontos köbös

cink - az anionok mellett tetraéderez lyukakban



wurtzit

egymáshoz képest elcsúsztatva mind a két ion térközéppontos tetragonális



---

---

---

---

---

---

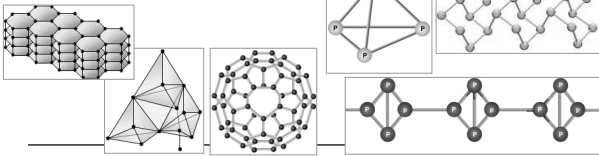
---

---

## Polimorfia - Allotrópia

- Allotrópia: a kémiai elemek azon tulajdonsága, hogy különböző kristályszerkezetű vagy molekulatömegű módosulatban fordulnak elő

- szén: grafit, gyémánt, fullerén
- foszfor: fehér, vörös és fekete
- oxigén:  $O_2$ ,  $O_3$



---

---

---

---

---

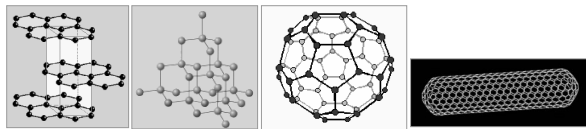
---

---

---

## A szén allotróp módosulatai

- grafit
  - kenőanyag, elektrokémia
- gyémánt
  - mesterséges: vágószerszámok, csiszolás
- fullerén -  $C_{60}$ , buckyball, nanocsövek
  - mikroelektronika



---

---

---

---

---

---

---

---

## Polimorfia

- A módosulatok egymásba alakulása a rácselemek átrendeződésével jár
  - enantiotrop polimorfia - kölcsönösen egymásba alakíthatók
    - rombos kén → monoklin kén átalakulás
  - monotrop polimorfia - az átalakulás csak egy irányban tud végbemenni
    - grafit → gyémánt (mesterséges gyémánt előállítás)
    - 1300-1500 °C, ~ 5 GPa,

---

---

---

---

---

---

---

---