

# A kémiai kötés; Másodrendű kötőerők

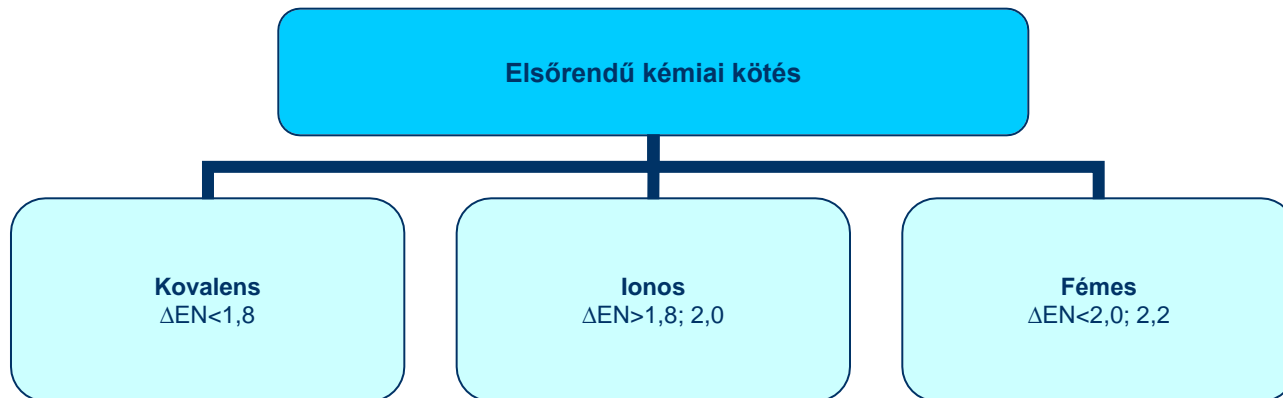
**Anyagtan; Környezeti elemek  
védelmének alkalmazott  
kémiaja 1.  
5. előadás**

# A kémiai kötés

## Kémiai kötés:

- a molekulát, vegyületet alkotó atomok, ionok közti kapcsolódás
- a vegyértékhéjon lévő elektronok hozzák létre
- célja: az ún. nemesgáz-konfiguráció kialakítása
- **Kémiai kötőerők:**
  - elektromos, illetve elektromágneses természetűek
  - mindkét atom tart. páratlan elektront
  - elektronpárokat létesítenek, így kötést hoznak létre
  - koordinációs vegy.-ben a nemkötő elektronpárok is részt vesznek a kötés létrehozásában

# A kémiai kötés



# A kémiai kötés

## Másodrendű kémiai „kötés”-kölsönhatás

Diszperziós köls.

Dipól-dipól köls.

Ion-poláris köls.

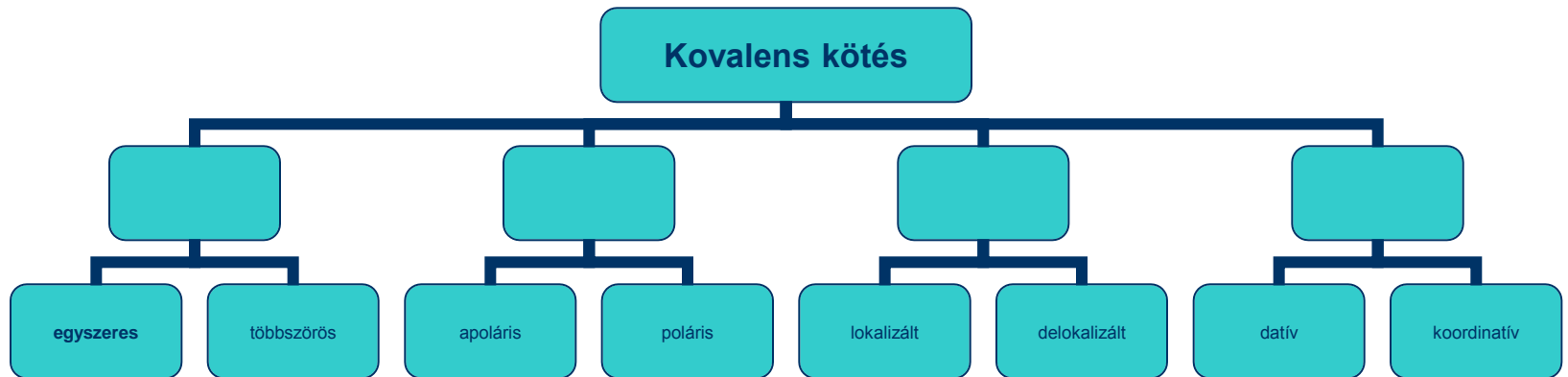
Hidrogén-kötés

# Kovalens kötés

~atomkötés

- 1 v. több **kötő elektronpár** hozza létre
- két atom ellentétes spinű elektronjai a két **+** atomtörzs vonzása következtében ún. **molekulapályára** kerülnek  
kialakul a **kötő e<sup>-</sup> pár**, amely mozgását, helyzetét mindkét !!! atomtörzs befolyásolja
- kötő e-pár jelölése.....
- a kötés kialakulása E felszabadulással jár
- **nemkötő e<sup>-</sup> párok**
  - a legkülső héj e<sup>-</sup> -jai, amelyek a kémiai kötésben nem vesznek részt
  - szintén a molekulapályára kerülnek
- **Kötéstávolság:**  
a kötésben résztvevő két atom atommagjának a távolsága (pm).
- **Kötési E:**  
1 mol molekulában a két atom közötti kötés felszakításához szükséges E.  
 $E_{\text{kötés}}$ ; KJ/mol

# Kovalens kötés



# a.; Egyszeres és többszörös kovalens kötés

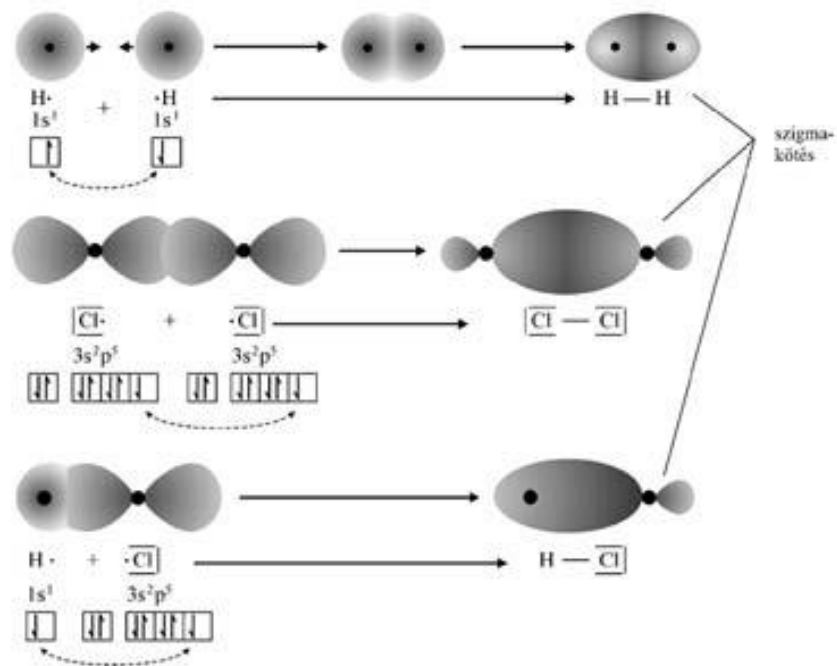
Olyan atomok között jön létre, amelyek:

- (több) párosítatlan  $e^-$ -nal rendelkeznek
- atomtörzsük kis méretű és „elég” nagy  $+$  töltésű ahhoz, hogy több  $e^-$  párt is az atomtörzs között tartson

## 1. kovalens kötés

### $\sigma$ -kötés

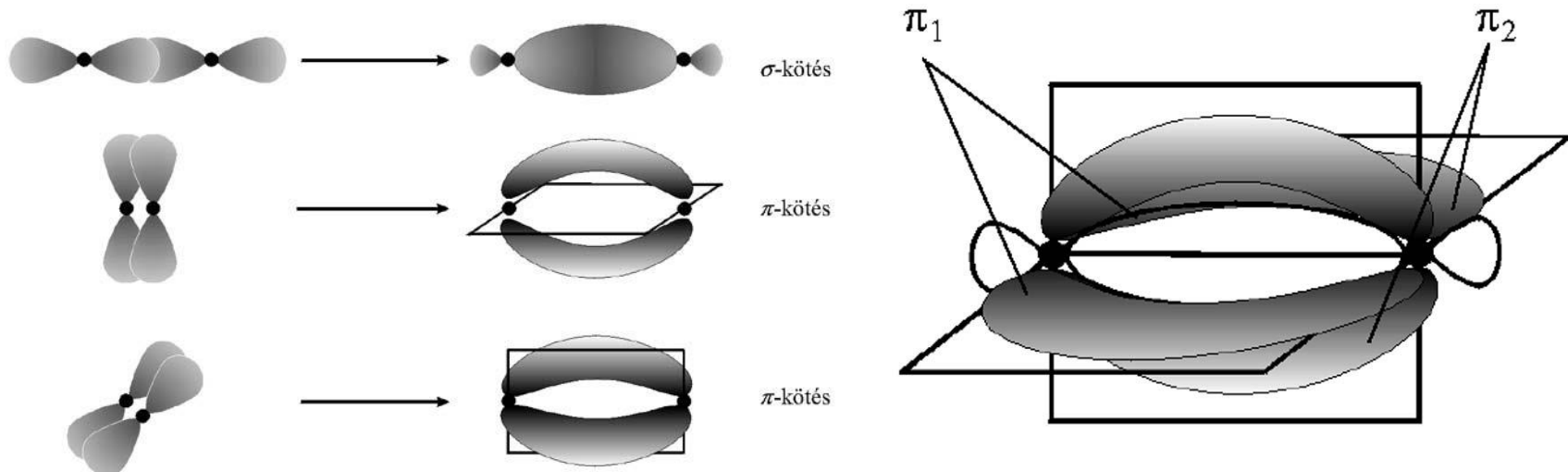
a kötésben résztvevő  $e^-$ -k az atomtörzsek között „tengelyszimmetrikusan” helyezkednek el nincs kitüntetett iránya a töltéseloszlásnak



# a.; Egyszeres és többszörös kovalens kötés

2. ; 3. kovalens kötés  $\Rightarrow$   $\pi_1$ - és  $\pi_2$ -kötés  
a töltéseloszlás nem egyenletes a kötéstengely körül

- a  $\pi_1$  -kötés a kötéstengelyen átfektetett sík alatt és fölött alakul ki
- a  $\pi_2$  -kötés a  $\pi_1$  -kötés síkjára merőlegesen alakul ki, a töltéseloszlása u.olyan, mint a  $\pi_1$ .



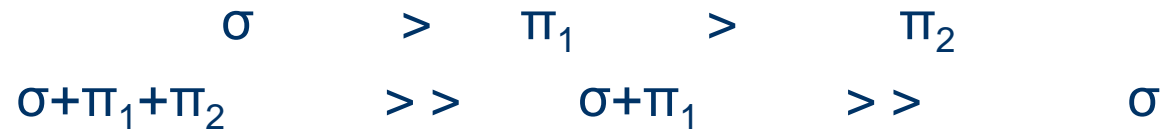


# a.; Egyszeres és többszörös kovalens kötés

- **Kötéstávolság:**

- többszörös kötés esetén  $\ll$  egyszeres kötés esetén

- **Kötési E:**



- **Elfordulás a kötéstengely körül:**

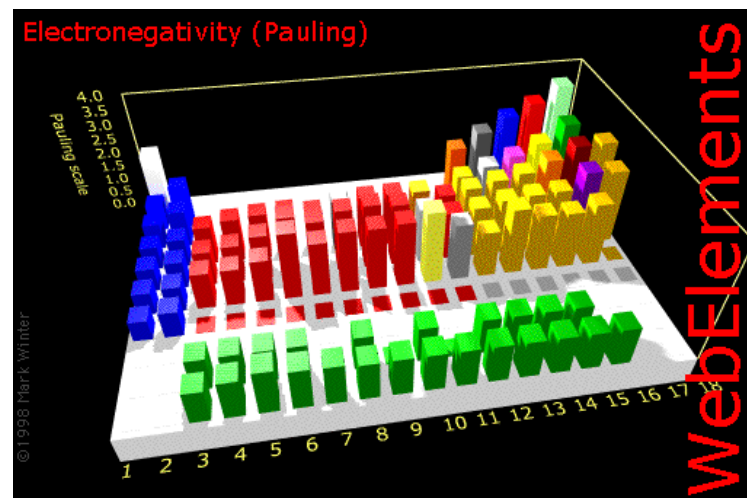
$\sigma$  : lehet

$\sigma + \pi_1$  : nem

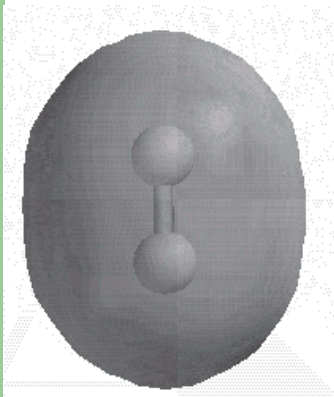
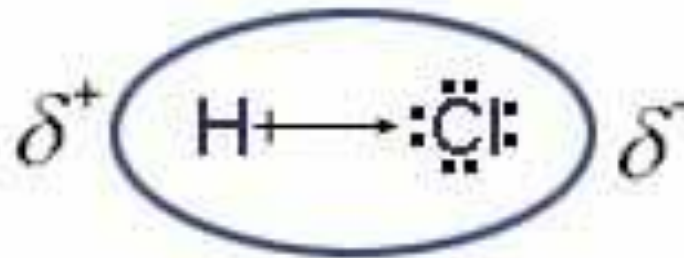
$\sigma + \pi_1 + \pi_2$ : nem

## b.; Apoláris és poláris kovalens kötés

- A kötésben résztvevő atomok EN-tól függ:
  - apoláris
    - a kötés azonos atomok között alakul ki
    - a kötés különböző atomok között alakul ki, de azok  $\Delta E \sim 0$
  - poláris
    - A kötést létesítő atomok EN-je különböző

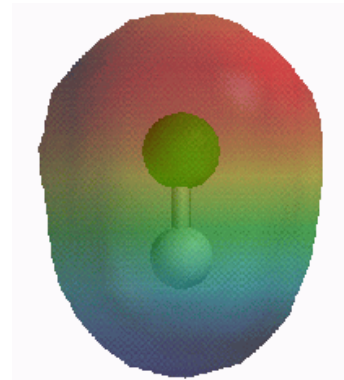


- **Kötés polaritás**



**H-H**  
apoláris

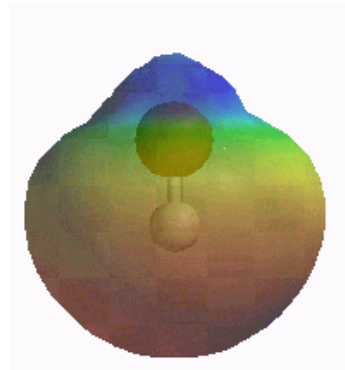
*nem dipólusos  
molekula*



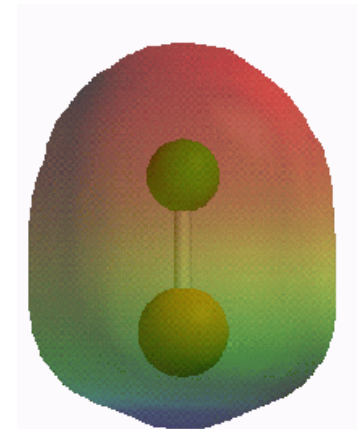
**H-F**  
poláris

*dipólusos  
molekula*

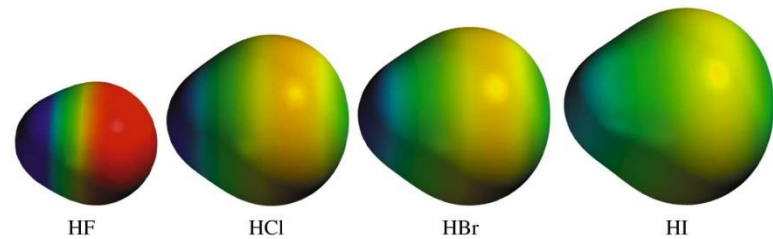
**Li-H**  
poláris



**Li-F**  
ionos



# Kötés polaritás

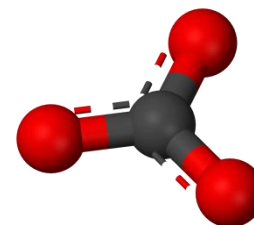
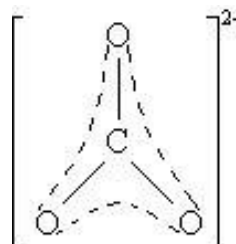


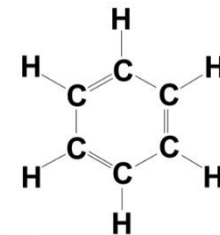
	$\Delta EN$	Polaritás
H <sub>2</sub>	0	apoláris
HI	~0,5	gyengén poláris
HBr	~0,7	poláris
HCl	~0,9	erősen poláris
HF	~1,9	igen erősen poláris
NaCl	~2,1	ionos

## c.; Lokalizált és delokalizált kovalens kötés

- lokalizált:
  - a kötő  $e^-$  -párok molekulapályáját csak a kötésben résztvevő két atom atomtörzse befolyásolja
- delokalizált:
  - a kötő  $e^-$  -pár mozgását nemcsak a ....., hanem más atomtörzsek is befolyásolják
  - a delokalizált kötésben ált. a  $\pi e^-$  -k vesznek részt v. a nemkötő  $e^-$  párok

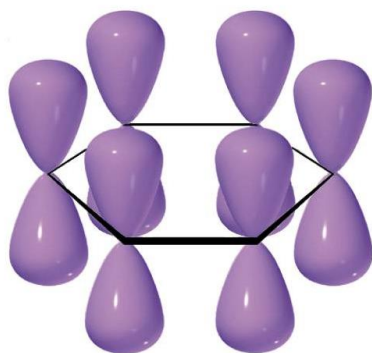
karbonátion





# Benzol (C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>): Delokalizált kovalens kötés

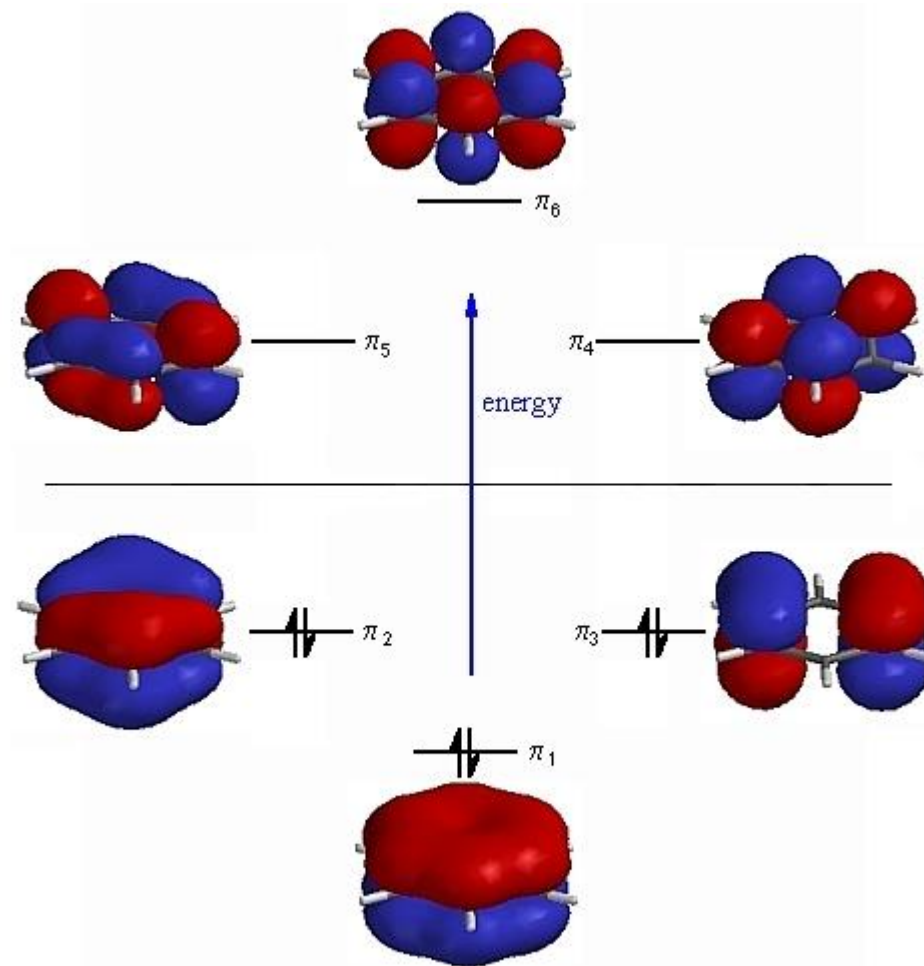
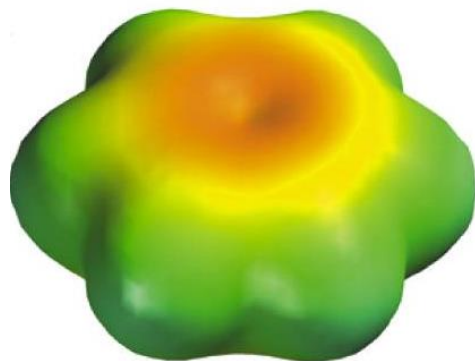
atomi p-pályák



delokalizált π<sub>1</sub>-molekulapálya



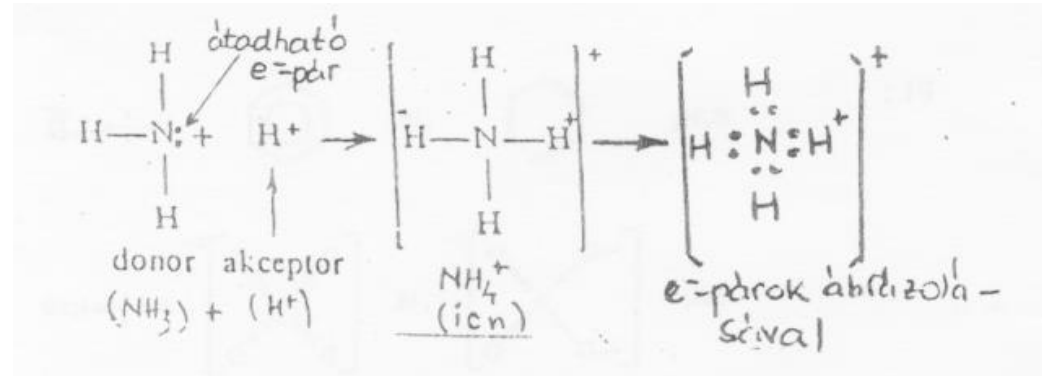
teljes elektronsűrűség



## d.; Datív és koordinatív kötés

- Datív kötés:

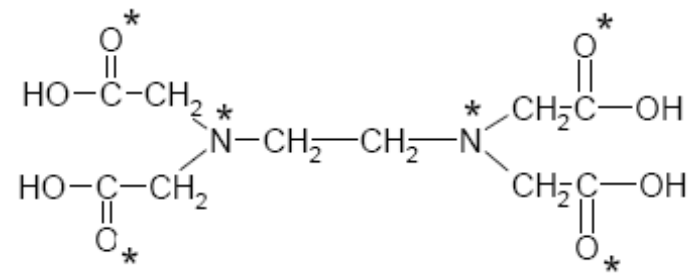
- A kovalens kötetést létesítő e<sup>-</sup>-k mindegyikét ugyanaz az atom adja
- Például:  $\text{NH}_4^+$



- Koordinatív kötés:

- komplex ionoknál, vegyületeknél kötés
- központi atom + ligandum(ok)

~datív



## d.; Datív és koordinatív kötés

- Központi atom:
  - kisméretű atom ill.  $+$  töltésű ion
  - $e^-$ -pár akceptorok
- Ligandum:
  - nemkötő  $e^-$  párral rendelkező molekulák v. ionok
  - 1 fogú; több fogú
  - száma: koordinációs szám
- a központi atom v. ion üres atompályáira a ligandumok kötnek be datív kötéssel
- a komplex ion töltését a központi ion és a ligandumok töltésének algebrai összege adja
- Pl.:  $K_4[Fe(CN)_6]$   $[Cu(NH_3)_4]SO_4$



# Komplexek elnevezése

- A komplex ion nevét és képletét szögletes zárójelben adjuk meg.
- A képletbe
  - a pozitív töltésű a komplex előre ( $[\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_6]\text{Cl}_2$ )
  - a negatív töltésű hátra kerül ( $\text{K}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]$ ).
  - a zárójel után mindig a központi atom vagy ion vegyjele kerül
  - ezt követik a negatív töltésű ligandumok
  - majd a semleges ligandumok
- Az elnevezés mindig a ligandumok felsorolásával kezdődik, alfabetikus sorrendben. Ezt követi a központi fémion neve, a központi fém atom/ion vegyértéke római számmal kerek zárójelben.
- A negatív töltésű ligandumok -o végződést kapnak (kloro, fluoro, hidroxo, ciano, nitráto).

# Komplexek elnevezése

anion neve	ligandum neve
bromid ( $\text{Br}^-$ )	bromo
karbonát ( $\text{CO}_3^{2-}$ )	karbonáto
cianid ( $\text{CN}^-$ )	ciano
hidroxil ( $\text{OH}^-$ )	hidroxo
oxid ( $\text{O}^{2-}$ )	oxo
szulfát ( $\text{SO}_4^{2-}$ )	szulfáto
tioszulfát ( $\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$ )	tioszulfáto
oxalát ( $\text{C}_2\text{O}_4^{2-}$ )	oxaláto

**A semleges és kation ligandumok neve változatlan (kivételek a következő molekulák)**

molekula	ligandum neve
víz ( $\text{H}_2\text{O}$ )	akva
szén-monoxid ( $\text{CO}$ )	karbonil
ammónia ( $\text{NH}_3$ )	ammin
nitrogén-monoxid ( $\text{NO}$ )	nitrozil

# Komplexek elnevezése

- A komplex ionban vagy molekulában a részecskék arányait görög tőszámnevekkel jelöljük
  - mono-, di-, tri-, tetra- penta-, ehxa-, hepta, okta- nona- deka-
  - Ha a ligandumokban van már tőszámnév, akkor a sorszámneveket használjuk. (pl. bisz, trisz stb.)

## Komplexek elnevezése

Ha a komplexion negatív töltésű akkor a fémion latin neve **-át** végződést kap.

magyar név	latin név	anionban a neve
réz	cuprum	kuprát
vas	ferrum	ferrát
arany	aurum	aurát
ezüst	argentum	argentát
ólom	plumbum	plumbát
higany	mercurium	merkurát
ón	stannum	sztannát

# Molekulák térbeli szerkezete

- $e^-$  pár taszítási elmélet írja le
  - a kp-i atomtörzset körülvevő  $e^-$  párok egymástól a legtávolabb helyezkednek el
- Kötésszög
  - a kapcsolódó atomok kötésirányai által bezárt szög

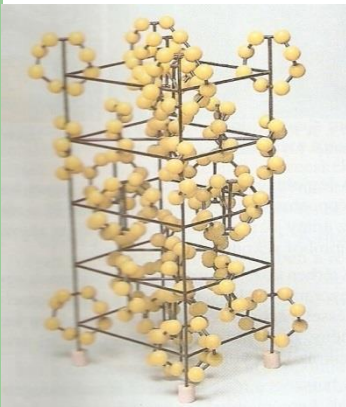
# Rácstípusok

- RácsE:
  - az az E, amely szükséges ahhoz, hogy 1 mol kristályos anyagot szabad részecskékre bontsunk (KJ/mol)
  - a rács típusai: molekularács; atomrács; (ionrács; fémrács)

# Rácstípusok kovalens kötés esetén

- Molekularács:

- a rácspontokon két-vagy többatomos molekulák
- köztük másodrendű erők hatnak
- vízben kevésbé oldódnak
- jellemzőik:
  - alacsony  $\sigma_p$ ,  $f_p$
  - kis keménység
  - szublimáció is előfordulhat

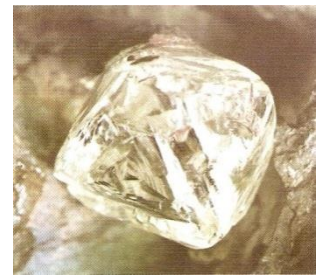
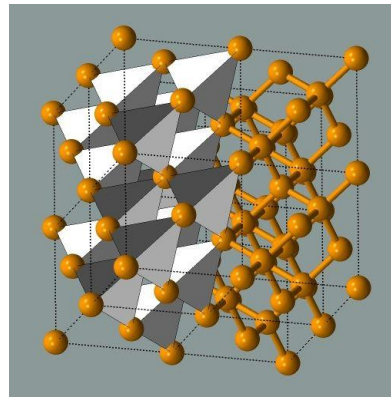


Pl.: jég;  
száraz jég;  
paraffinok

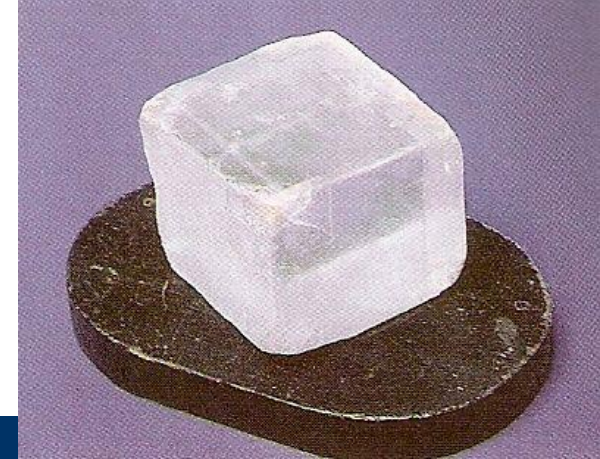


- Atomrács:

- a rácspontokon atomok találhatóak
- köztük kovalens kötés hat
- a kötések irányítottak
- jellemzőik:
  - magas  $\sigma_p$ ,  $f_p$
  - nagy rácse
  - nagy keménységűek
  - kémiai hatásoknak ellenállóak
  - a **valódi** atomrács nem vezeti az elektromos áramot



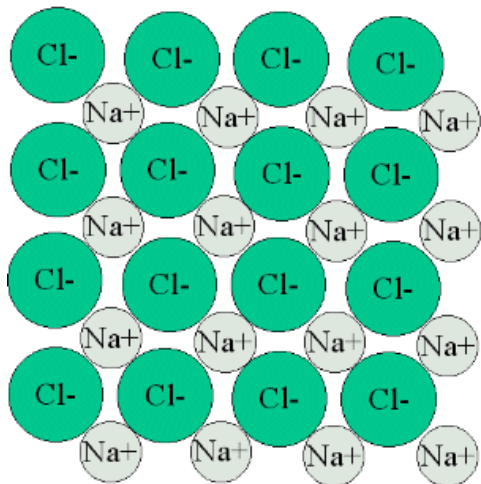
# Ionos kötés



A képződött vegyületet az ellentétes töltésű ionok között működő elektrosztatikus erők tartják össze

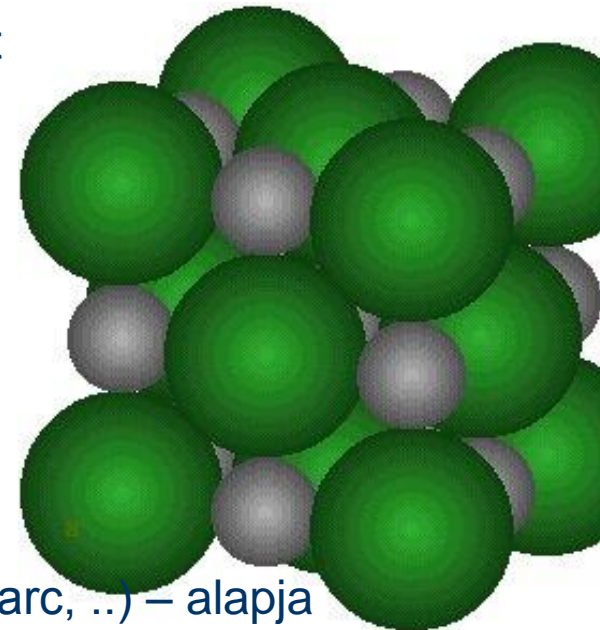
A kristályokban ionok sztöchiometriai arányú halmazai fordulnak elő, nem molekulák!

Egy kis és egy nagy EN-ú elem által alkotott vegyület



Na+

Cl-

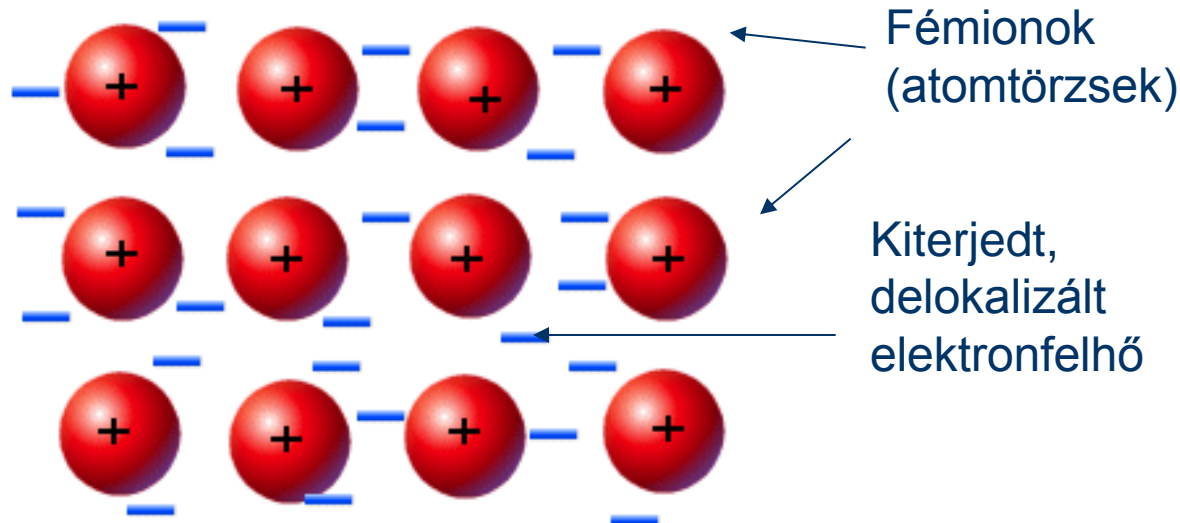


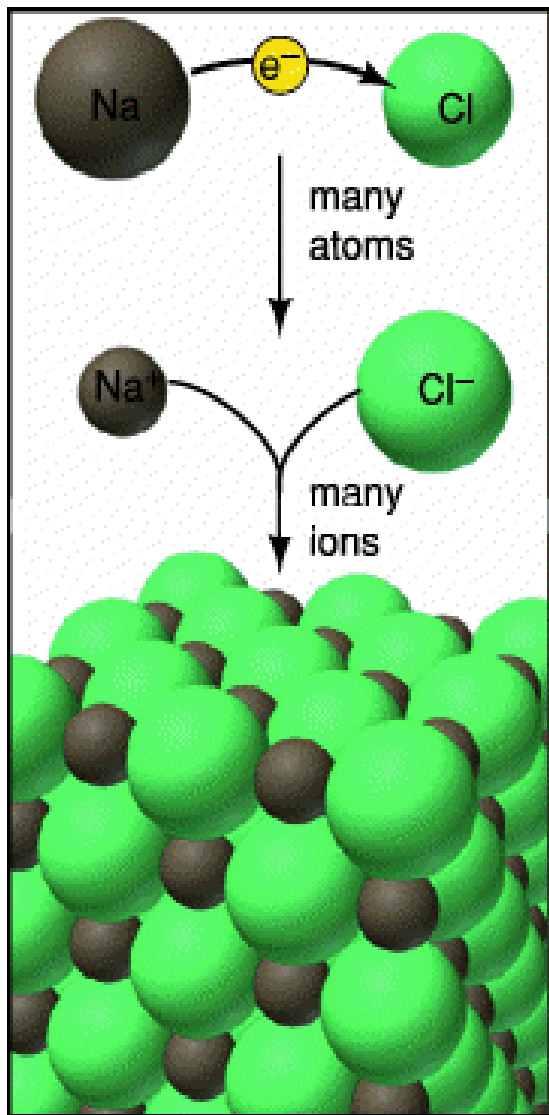
Pl.: NaCl; CaSO<sub>4</sub>; szilikátok (csillámok, földpátok, kvarc, ..) – alapja a SiO<sub>4</sub><sup>4-</sup> anion.



# Fémes kötés

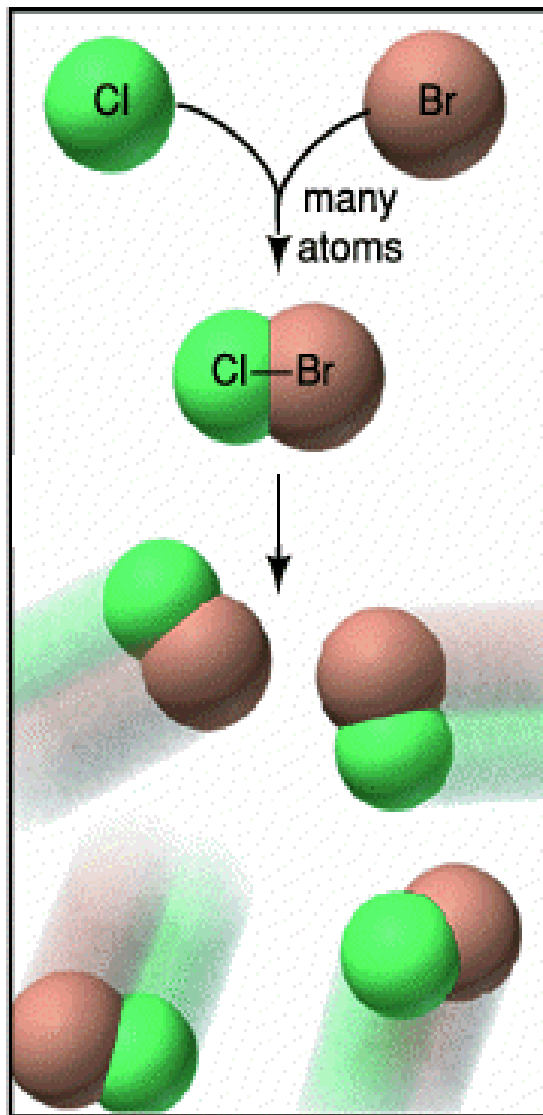
- Pozitív töltésű fémionokat
- Delokalizált elektronfelhő vesz körül
- A fématomok által leadott elektronok együttesen tartoznak az összes fémionhoz, nem irányított
- Jó hő- és elektromos vezetők





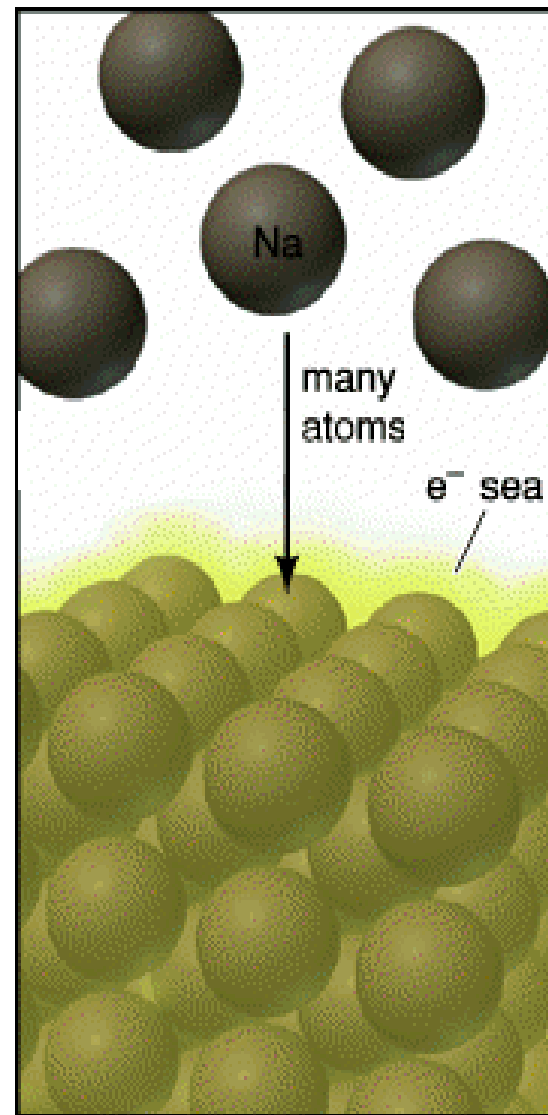
**A** Ionic bonding

Ionos kötés



**B** Covalent bonding



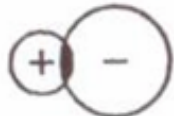
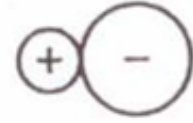
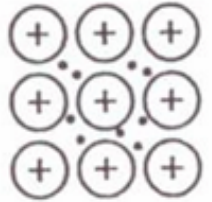
Kovalens kötés



**C** Metallic bonding

Fémes kötés

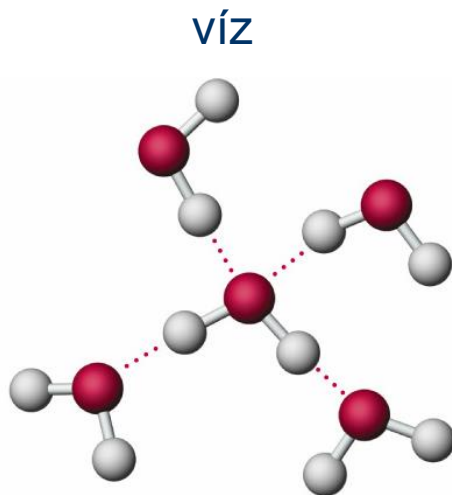
# Elsőrendű kémiai kötések

Kötés megnevezése	Apoláris kovalens kötés	Poláris kovalens kötés	Kovalensbe hajló ionos kötés	Ionos kötés	Fémes kötés
Példa	 $H:H$	 $H:\ddot{Cl}:$	 $AgI$	 $Na^+ Cl^-$	 $Cu$
Tulajdonságok	A kötő elektrópárt mind a két atomtörzs egyformán vonzza	A kötő elektrópárt az egyik atomtörzs jobban vonzza	A kisméretű kation vonzza a nagyméretű aniont és a két ion töltése átfedi egymást	Különálló anionok és kationok elektrosztatikus vonzása	Fématomokat összetartó delokalizált elektronok

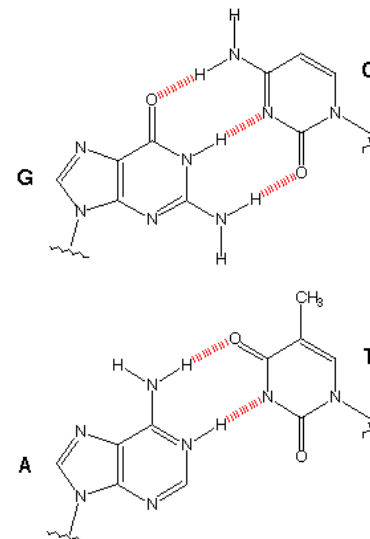
# Másodrendű kötőerők

## - Hidrogénkötés -

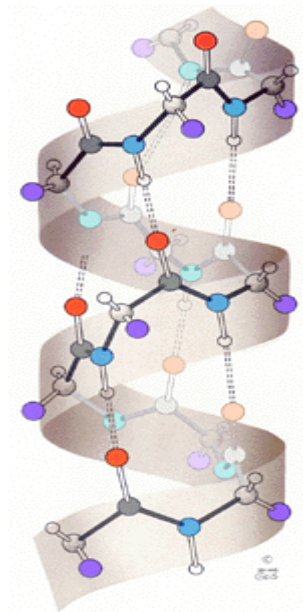
- Klasszikus H-kötés feltételei:
  - Nagy elektronegativitású atomhoz (F,O,N)
  - közvetlen kapcsolódó H-atom és *magános* elektronpár szintén nagy EN-ú atomon
- Nem-klasszikus: pl  $-C-H \dots O=C-$



DNS: bázispárok

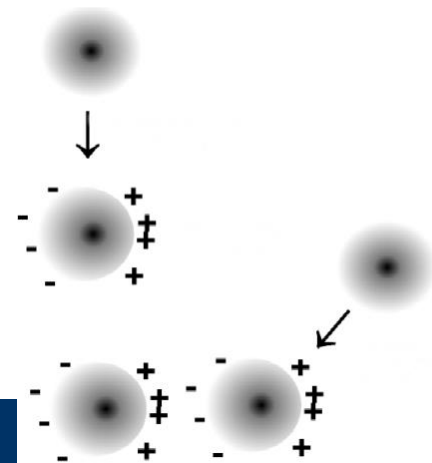


peptidek



# Másodrendű kötőerők

## - Van der Waals kötőerők -



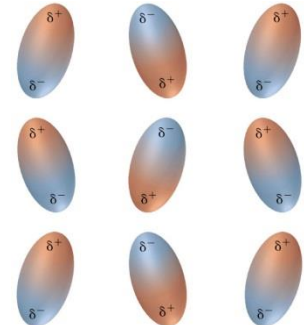
- Molekulák közötti kötés kapcsolat leggyakrabban ilyen
- Alapja: a molekulák a polarizáltságukból fakadóan bizonyos nagyságú (!) dipólusmomentummal rendelkeznek
- Ez eredményezi ezt az elektrosztatikus kölcsönhatást (3 féle effektus)



- Orientációs effektus: azonos nagyságú dipólusmomentummal rendelkező molekulák irányítódása



pl. éter (foly. áll.)



- Indukciós effektus: dipólus indukálja az eredetileg dipólusmomentum nélküli molekulákban a töltésaszimmetriát



- Diszperziós effektus: diszperziós erők által létrehozott kölcs., eredetileg töltésszimmetrikus molekulák között



# Irodalmak

- Dr. Berecz Endre: Kémia műszakiaknak. Tankönyvkiadó, Budapest, 1991
- Horváth Attila – Sebestyén Attila – Zábó Magdolna: Általános kémia, Veszprémi Egyetem, Veszprém, 1991
- Dr. Bot György: Általános és szerves kémia. Medicina, Budapest, 1987
- Dr. Németh Zoltán: Radiokémia. Veszprémi Egyetem, Veszprém, 1996
- Dr. Mészárosné dr. Bálint Ágnes (szerk.): Tanulási útmutató a Műszaki kémia tárgyhoz (pdf), SZIE Gépészmérnöki Kar, Gödöllő, 2008
- Csányi Erika: Oktatási segédanyag az építőkémia tárgyhoz. (pdf), BME



**Köszönöm a figyelmet!**