

A kémiai kötés; Másodrendű kötőerők

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

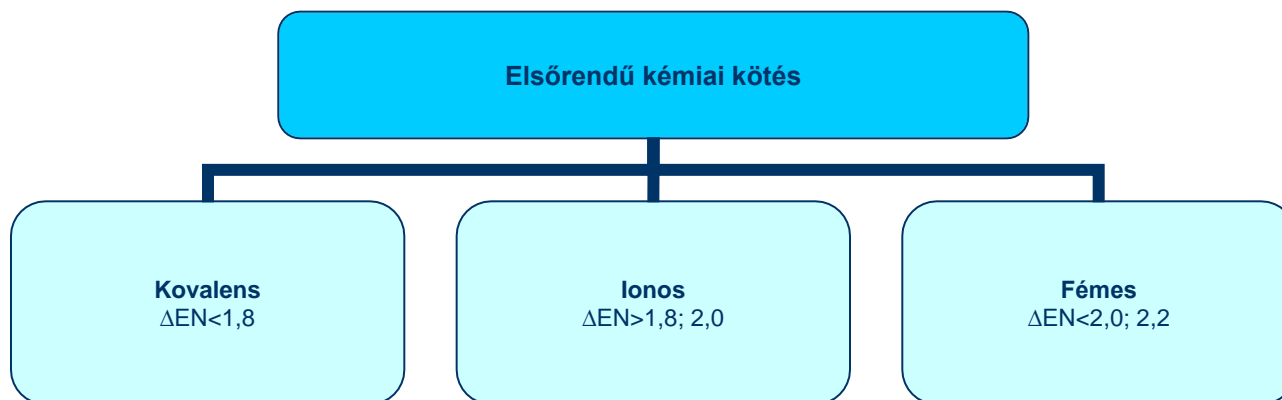
A kémiai kötés

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 kölcs.

Dipól-dipól kölcs.

Ion-poláris kölcs.

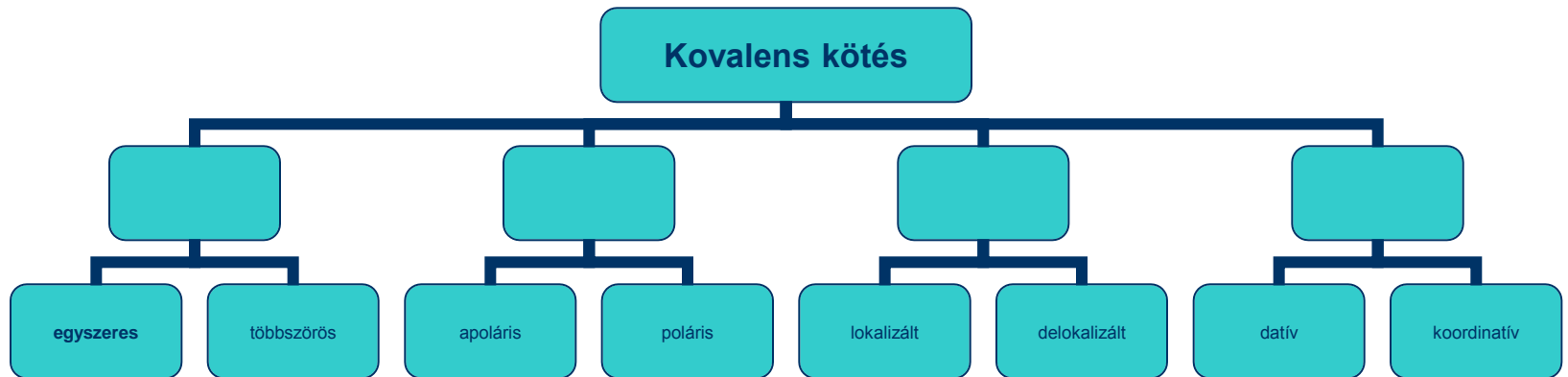
Hidrogén-kötés

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⁻ pár**, amely mozgását, helyzetét mindkét !!! atomtörzs befolyásolja
- kötő e-pár jelölése.....
- a kötés kialakulása E felszabadulással jár
- **nemkötő e⁻ párok**
 - a legkülső héj e⁻ -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

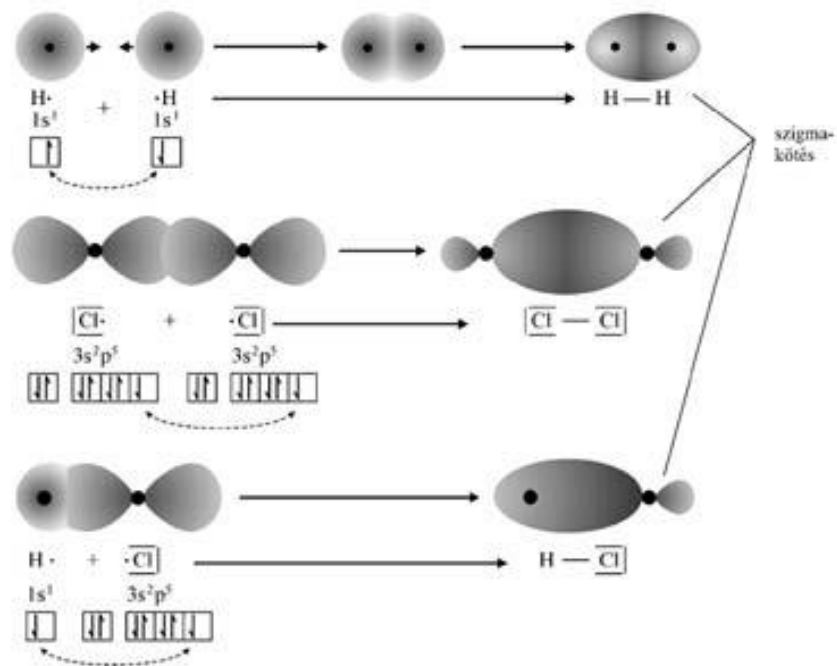
Olyan atomok között jön létre, amelyek:

- (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

σ -kötés

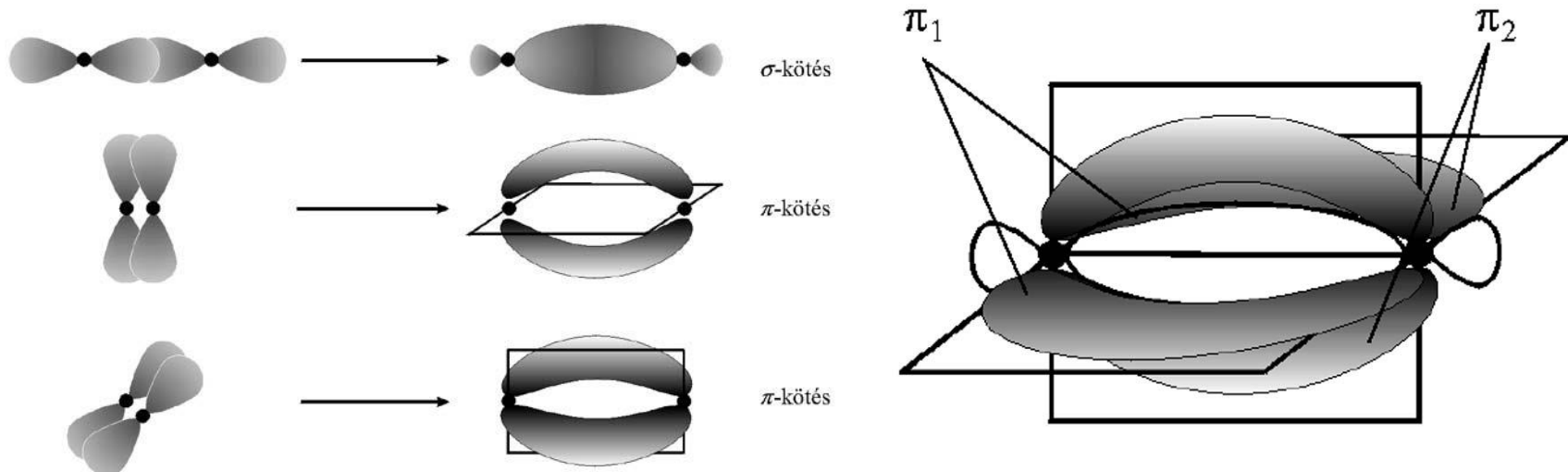
a kötésben résztvevő e^- -k az atomtörzsek között „tengelyszimmetrikusan” helyezkednek el nincs kitüntetett iránya a töltéseloszlásnak



a.; Egyszeres és többszörös kovalens kötés

2. ; 3. kovalens kötés \Rightarrow π_1 - és π_2 -kötés
a töltéseloszlás nem egyenletes a kötéstengely körül

- a π_1 -kötés a kötéstengelyen átfektetett sík alatt és fölött alakul ki
- a π_2 -kötés a π_1 -kötés síkjára merőlegesen alakul ki, a töltéseloszlása u.olyan, mint a π_1 .

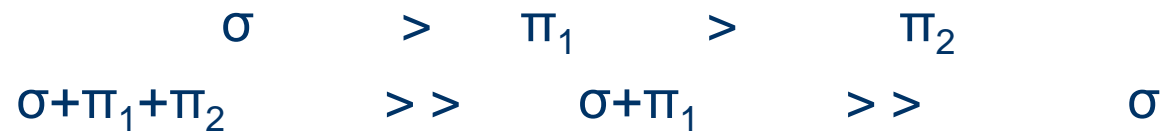


a.; Egyszeres és többszörös kovalens kötés

- **Kötéstávolság:**

- többszörös kötés esetén \ll egyszeres kötés esetén

- **Kötési E:**



- **Elfordulás a kötéstengely körül:**

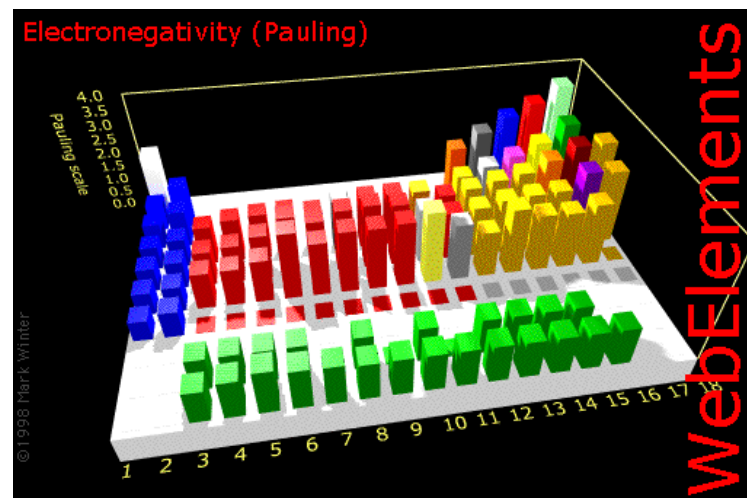
σ : lehet

$\sigma + \pi_1$: nem

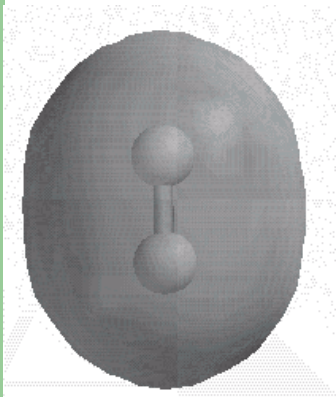
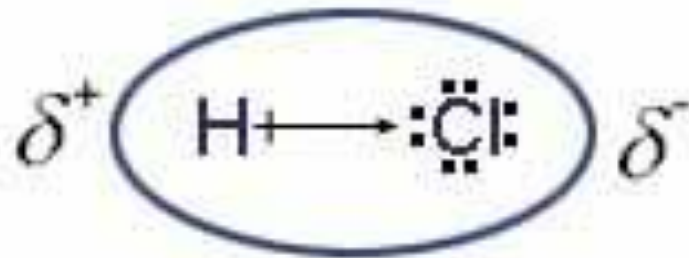
$\sigma + \pi_1 + \pi_2$: nem

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

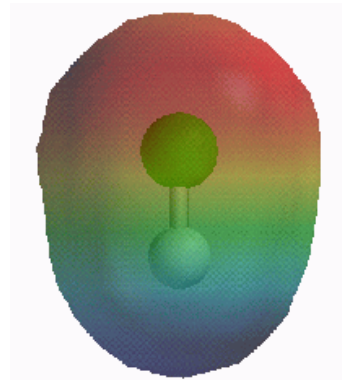


- Kötés polaritás



H-H
apoláris

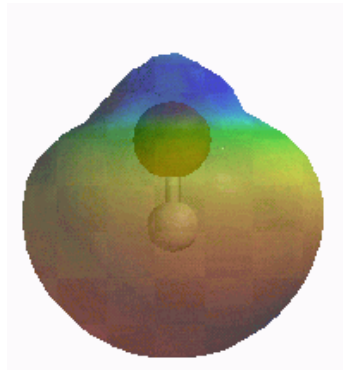
*nem dipólusos
molekula*



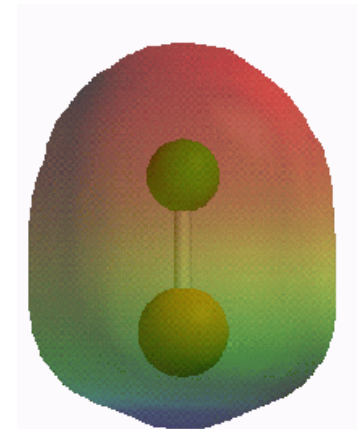
H-F
poláris

*dipólusos
molekula*

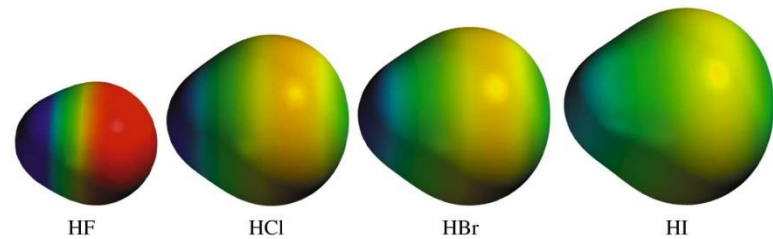
Li-H
poláris



Li-F
ionos



Kötés polaritás

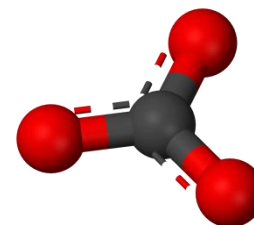
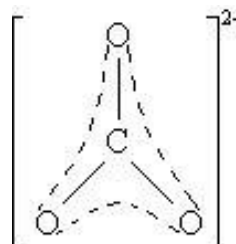


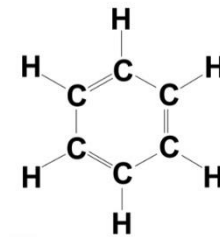
	ΔEN	Polaritás
H ₂	0	apoláris
HI	~0,5	gyengén poláris
HBr	~0,7	poláris
HCl	~0,9	erősen poláris
HF	~1,9	igen erősen poláris
NaCl	~2,1	ionos

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 πe^- -k vesznek részt v. a nemkötő e^- párok

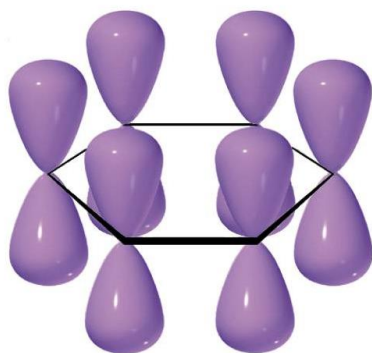
karbonátion





Benzol (C₆H₆): Delokalizált kovalens kötés

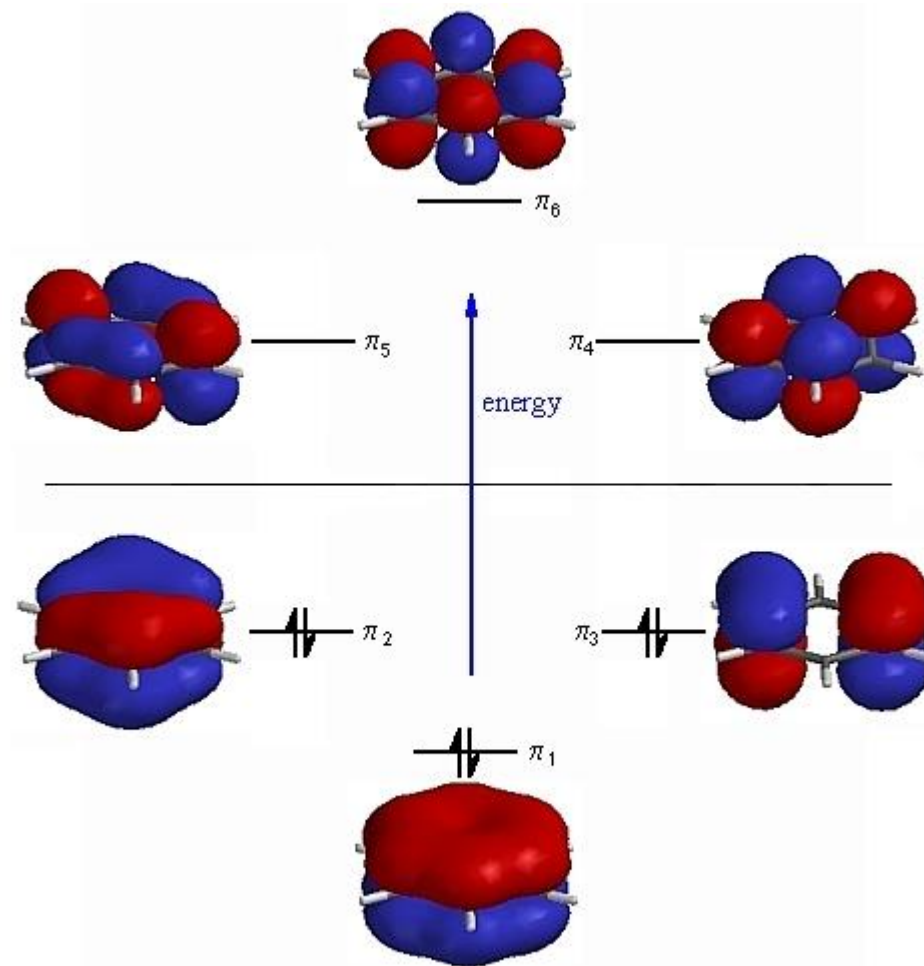
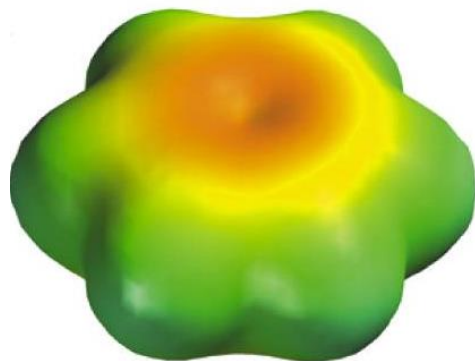
atomi p-pályák



delokalizált π₁-molekulapálya



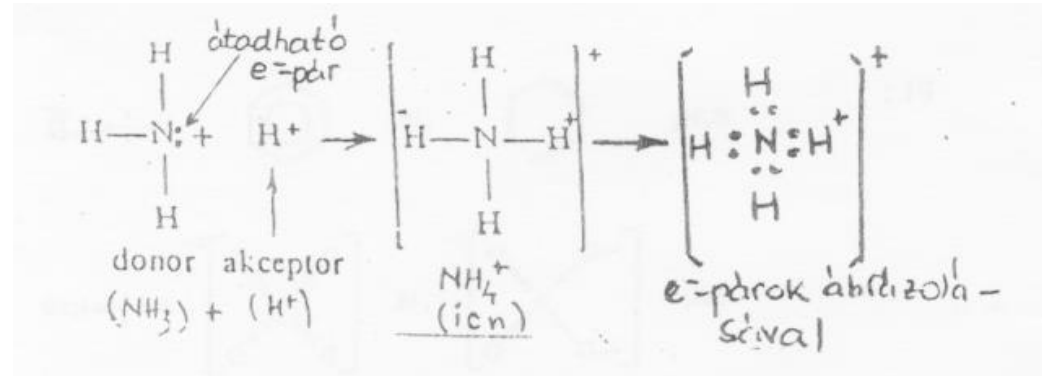
teljes elektronsűrűség



d.; Datív és koordinatív kötés

- Datív kötés:

- A kovalens kötetést létesítő e⁻-k mindegyikét ugyanaz az atom adja
- Például: NH_4^+



- Koordinatív kötés:

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

~datív

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 (Br^-)	bromo
karbonát (CO_3^{2-})	karbonáto
cianid (CN^-)	ciano
hidroxil (OH^-)	hidroxo
oxid (O^{2-})	oxo
szulfát (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 (H_2O)	akva
szén-monoxid (CO)	karbonil
ammónia (NH_3)	ammin
nitrogén-monoxid (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

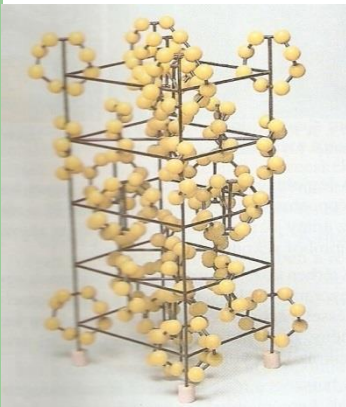
Rácstípusok

- 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 σ_p , f_p
 - kis keménység
 - szublimáció is előfordulhat

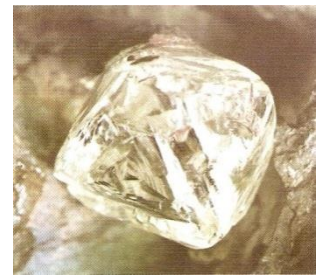
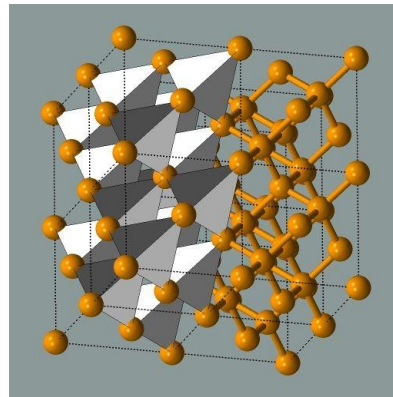


Pl.: jég;
száraz jég;
paraffinok

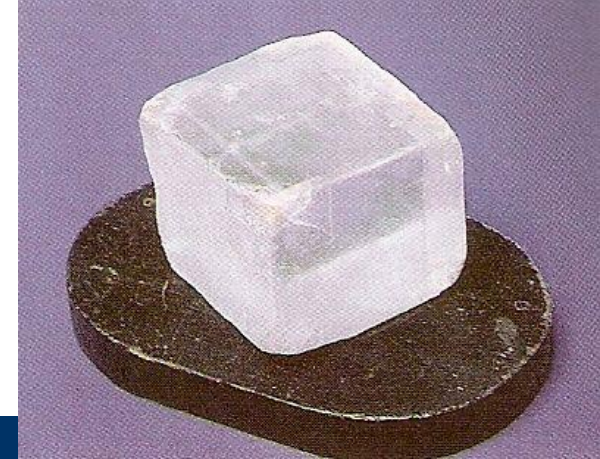


- Atomrács:

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



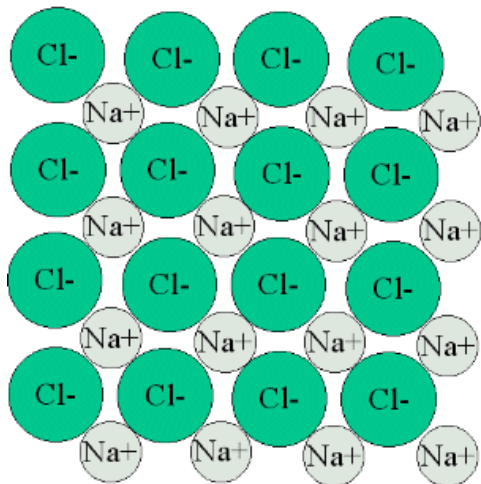
Ionos kötés



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

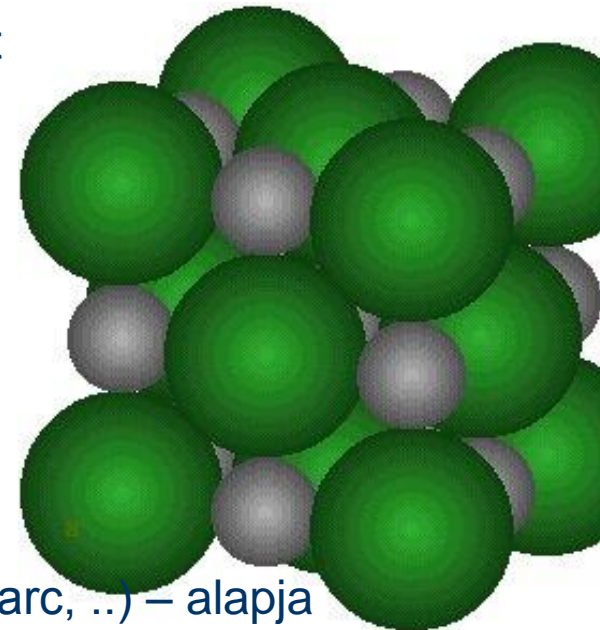
A kristályokban ionok sztöchiometriai arányú halmazai fordulnak elő, nem molekulák!

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



Na+

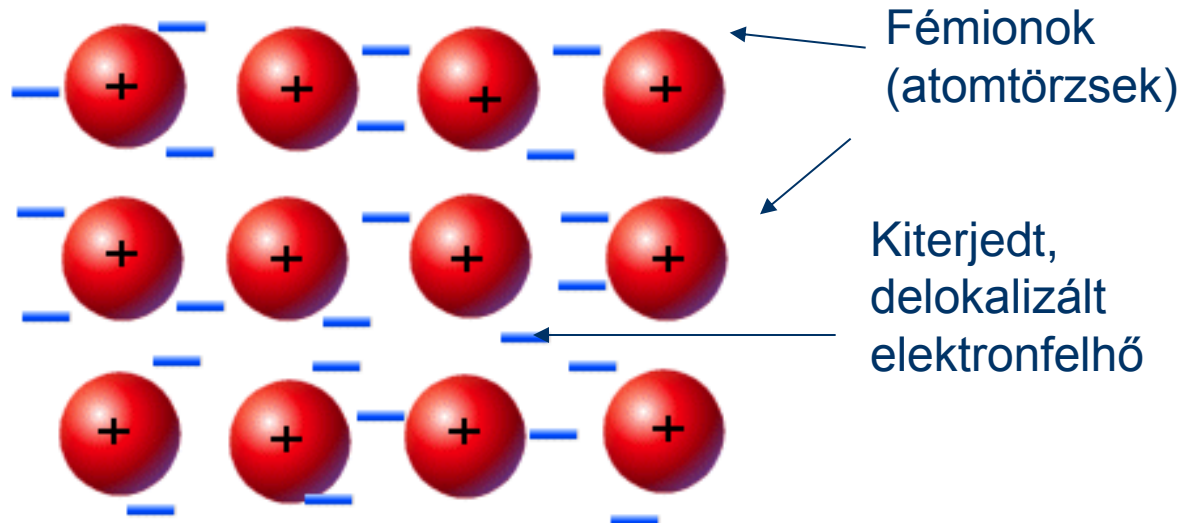
Cl-

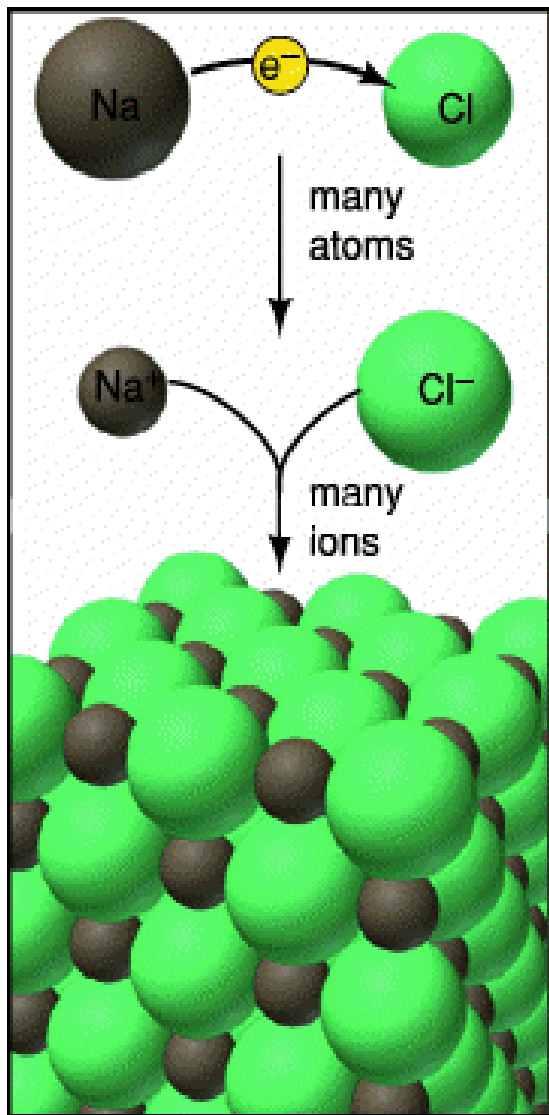


Pl.: NaCl; CaSO₄; szilikátok (csillámok, földpátok, kvarc, ..) – alapja a SiO₄⁴⁻ anion.

Fémes kötés

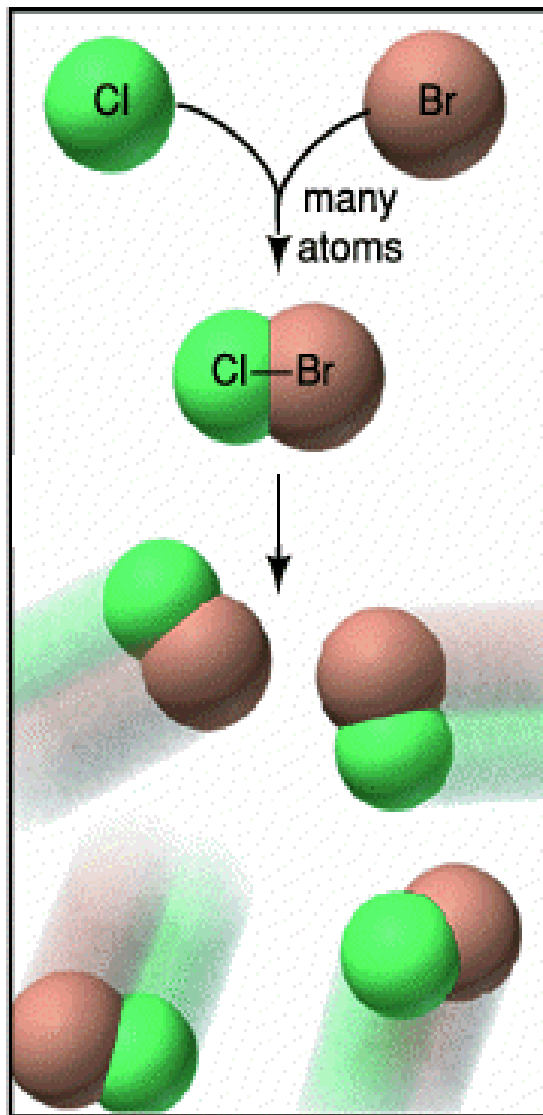
- Pozitív töltésű fémionokat
- Delokalizált elektronfelhő vesz körül
- A fématomok által leadott elektronok együttesen tartoznak az összes fémionhoz, nem irányított
- Jó hő- és elektromos vezetők





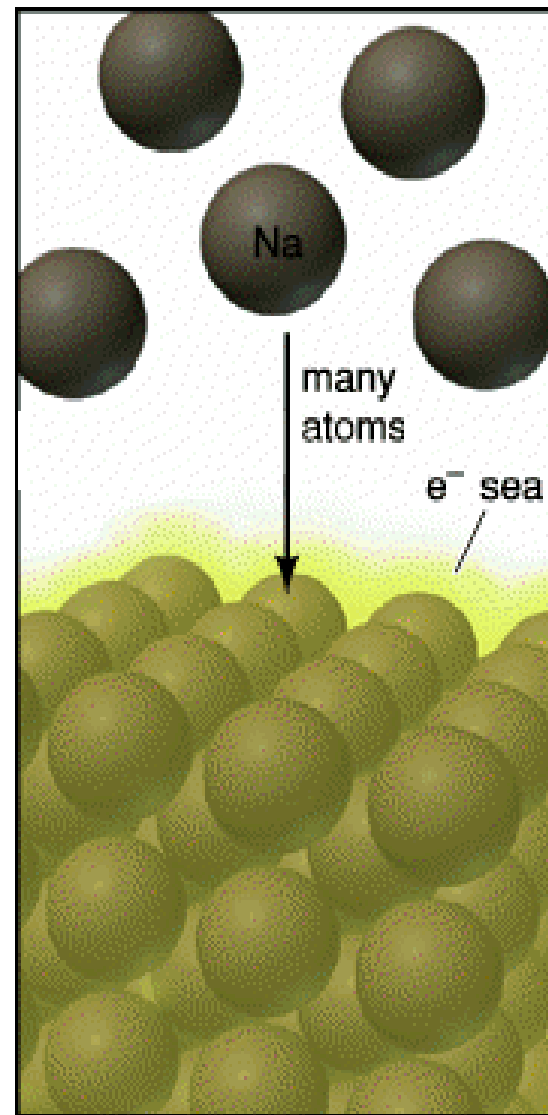
A Ionic bonding

Ionos kötés



B Covalent bonding



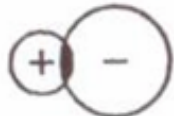
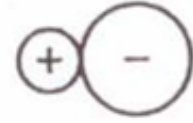
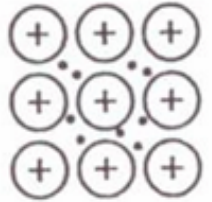
Kovalens kötés



C Metallic bonding

Fémes kötés

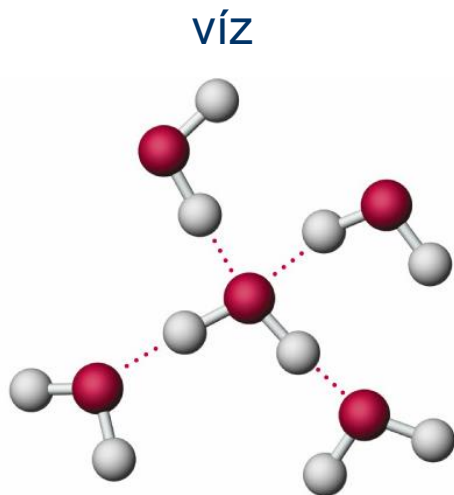
Elsőrendű kémiai kötések

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 elektronpárt mind a két atomtörzs egyformán vonzza	A kötő elektronpárt 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

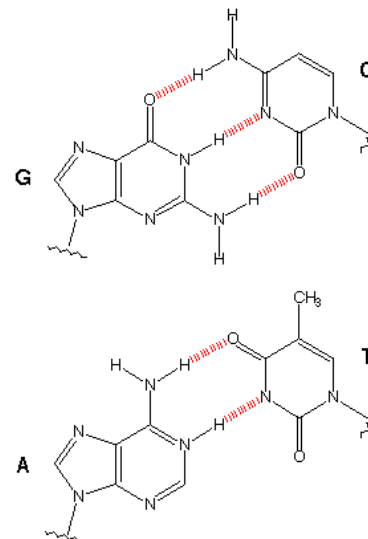
Másodrendű kötőerők

- Hidrogénkötés -

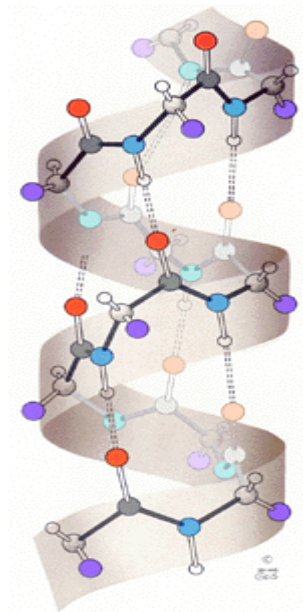
- Klasszikus H-kötés feltételei:
 - Nagy elektronegativitású atomhoz (F,O,N)
 - közvetlen kapcsolódó H-atom és *magános* elektronpár szintén nagy EN-ú atomon
- Nem-klasszikus: pl $-C-H\dots O=C-$



DNS: bázispárok

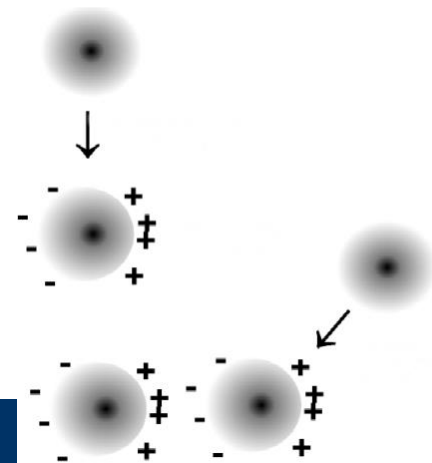


peptidek



Másodrendű kötőerők

- Van der Waals kötőerők -



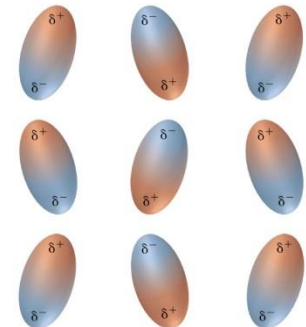
- Molekulák közötti kötés kapcsolat leggyakrabban ilyen
- Alapja: a molekulák a polarizáltságukból fakadóan bizonyos nagyságú (!) dipólusmomentummal rendelkeznek
- Ez eredményezi ezt az elektrosztatikus kölcsönhatást (3 féle effektus)



- 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

A decorative graphic on the left side of the slide, consisting of a light green vertical bar and a white rounded rectangle with a green top-left corner. A thick dark blue horizontal bar spans across the middle of the slide.

Köszönöm a figyelmet!