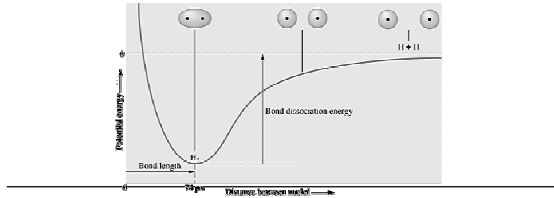


Általános és szervetlen kémia – 4. hét

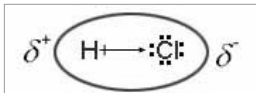
Kovalens kötés

- A kovalens kötés kialakulásakor szabad atomokból molekulák jönnek létre.
- A molekulák létrejötte mindig energia csökkenéssel jár.



A kovalens kötés polaritása

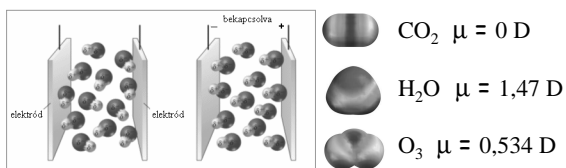
- Apoláris kovalens kötés:
 - két atom körüli elektron sűrűség azonos lesz (nem alakul ki töltéeloszlás)
- Poláris kovalens kötés:
 - a nagyobb elektronegativitású atomnál kialakul egy parciális negatív (δ^-) töltés, míg a kisebb elektronegativitású atom körül egy részleges pozitív (δ^+) töltés



Molekulák polaritása

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

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

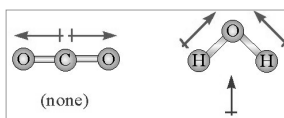


Molekulák polaritása

- Apoláris molekula
 - ha a kovalens kötés apoláris akkor a molekulának nincs dipólus momentuma
 - ha kovalens kötés poláris és szimmetrikus molekula az azonos nagyságú de ellentétes irányítottágú dipólusmomentumok kioltják egymást

- Poláris molekula

ha a poláris kötések nem szimmetrikusan helyezkednek el a molekulának lesz dipólus momentuma

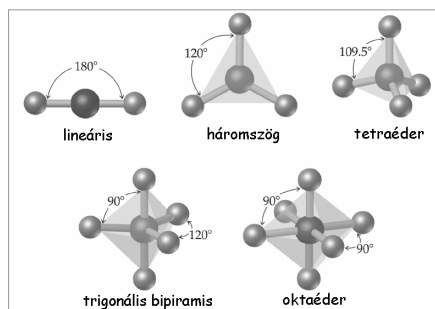


A kovalens kötés elmélete

Vegyértékelektronpár taszítási elmélet (VSEPR)

- az atomok kötő és nemkötő elektronpárjai úgy helyezkednek el a térben, hogy egymástól minél távolabb legyenek
- A központi atom körül milyen elektron-csoport elrendeződés alakul ki - szabályos térbeli geometriák
 - nemkötő elektronpárok megléte torzítani fogja a molekulát, a kötésszöget

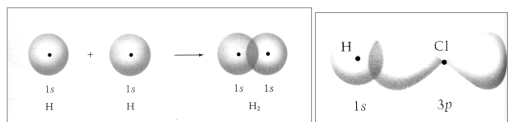
Vegyértékelektronpár taszítási elmélet (VSEPR)



A kovalens kötés elmélete

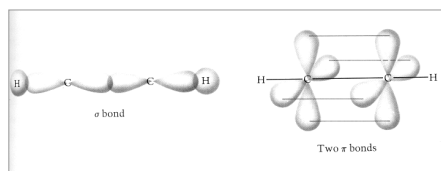
Vegyértékkötés – elmélet (VB)

- a kötés az atompályák átfedésével jön létre
- egyszeres kötés jöhet létre a kötéstengely mentén, ahol az elektronsűrűség a két atom közötti térben a legnagyobb (σ -kötés)
 - s-s, s-p és p-p átfedés lehetséges



Vegyértékkötés – elmélet (VB)

- kettős vagy hármas kötés (π -kötések) szimmetrikusan veszik körül a magokat összekötő tengelyt
 - csak p-p átfedéssel valósulhat meg
 - a molekula alatt és felett, illetve a molekula előtt és mögött a legnagyobb az elektronsűrűség

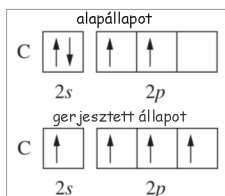


Vegyértékkötés – elmélet (VB)

- nagyobb átfedésű kötések jönnek létre, ha az atompályák kombinálódnak – hibridizáció
 - A hibridorbitálok önállóan nem léteznek, azonban formális felhasználásuk nagyban megkönnyítik a molekulák elektronhéj szerkezetének leírását.

Vegyértékkötés elmélet (VB)

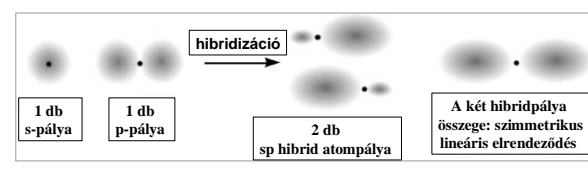
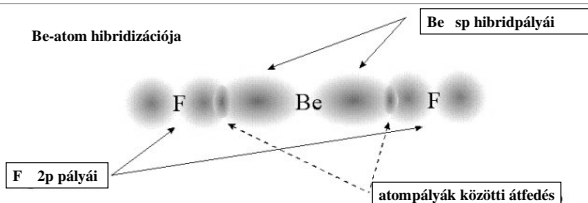
- az atompályák kombinálódása azok előzetes gerjesztődésével jár
- annyi hibridpálya keletkezik, ahány atom-pálya vett részt a kombinálódásban



- 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

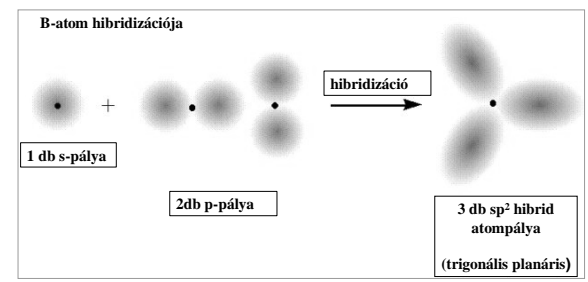
Be-atom hibridizációja



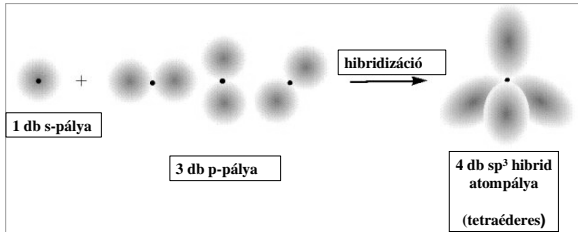
Hibridpályák és kötések kialakulása



B-atom hibridizációja



Hibridpályák és kötések kialakulása



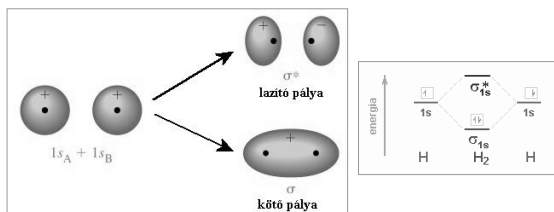
Molekulaorbitál elmélet (MO)

- az elektronok a molekulákban olyan módosult pályákon helyezkednek el, amelyek a molekula egészéhez tartoznak
- a molekulapályák az eredeti atompályák kombinálásával jönnek létre
- a kapcsolódó elektronok az atompályák felhasadásakor kialakuló kötő és lazító pályákon helyezkednek el
LCAO (atompályák lineáris kombinációja)

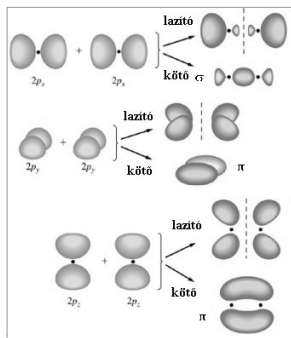
Molekulapálya-elmélet (MO)

- a molekulapályák feltöltődésére ugyanazok a szabályok érvényesek, mint az atompályáknál

□ energiaminimum elve, Pauli-elv, Hund szabály

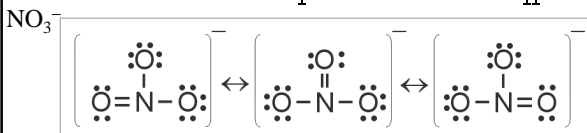
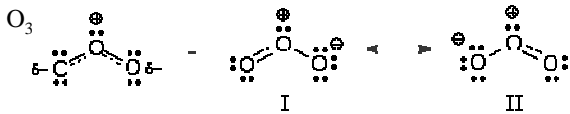


Molekulapálya elmélet



Delokalizált kötés

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

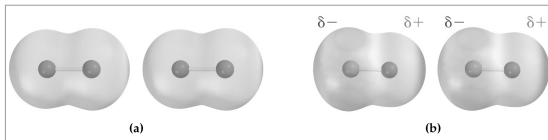


Másodlagos kémiai kötések

- 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 kötött hidrogén-atom és egy másik N, O, F magányos elektronpárja között létrejött kapcsolat

Diszperziós hatás – London-féle erők

- apoláris molekulák között lép fel
- molekulák között fellépő pillanatnyi polarizáció okozza
 - annál erősebb, minél könnyebben polarizálható a molekula



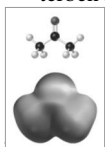
Indukciós effektus

- dipólus molekula és apoláris molekula között kialakuló kölcsönhatás - indukált dipólus jön létre
- rövid távolságokon belül hat
- nagyon kis energiájú
- pl. I_2 és H_2O

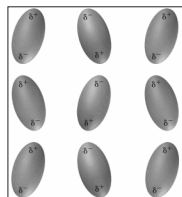


Orientációs hatás – dipól-dipól kölcsönhatás

- 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

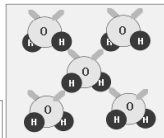
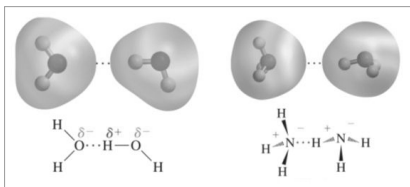


- meghatározó a dipólusmomentum



Hidrogén-kötés

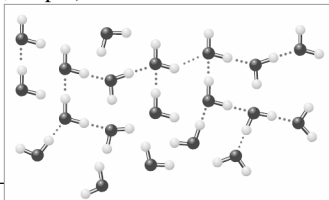
- nagy EN atomhoz (O, N, F) kötött H-atom és egy másik O, N vagy F-atom magányos elektronpárja között alakul ki
- donor és akceptor molekulák között - datív kötés



A hidrogén-kötés jellemzői

- térben irányított kötések – a központi atomok magányos elektronpárjának iránya miatt
 - a $\text{H}\cdots$ kötések legtöbbször lieárisak
- kötéshossza sokkal nagyobb, mint a kovalens N-H, O-H és F-H kötéseké (100, 97, 92 pm)

O-H \cdots O 276 pm
O-H \cdots N 288 pm
N-H \cdots O 304 pm
N-H \cdots N 310 pm



A hidrogén-kötés jellemzői

- a kötés energiája kisebb (10-40 kJ/mol), mint a kovalensé (150-500 kJ/mol), de nagyobb, mint a Van der Waals kötéseké (1-10 kJ/mol)
- intermolekuláris és intramolekuláris kapcsolat is lehet

