

I.9. A kémiai kötés egyszerű (Lewis-féle) elmélete

I.9.1. Az ionos kötés (ionkristályok) és az oktett-elv

Az ionos kötés NEM néhány részecske között jön létre, nincsenek egyedi molekulák, hanem *a teljes, makroszkopikus* (elvben végtelen) **KRISTÁLY** alkot egységet, melyet a **rácsenergia** tart össze; annak értelmezéséhez, hogy milyen alkotó ionok jöhetnek létre, az **oktett-elv** hasznos segítséget nyújt.

Nézzük meg részletesen, ez mit jelent:

Az oktett-elv értelmezése a Born-Haber körfolyamat alapján (Energia: kJ/mol)

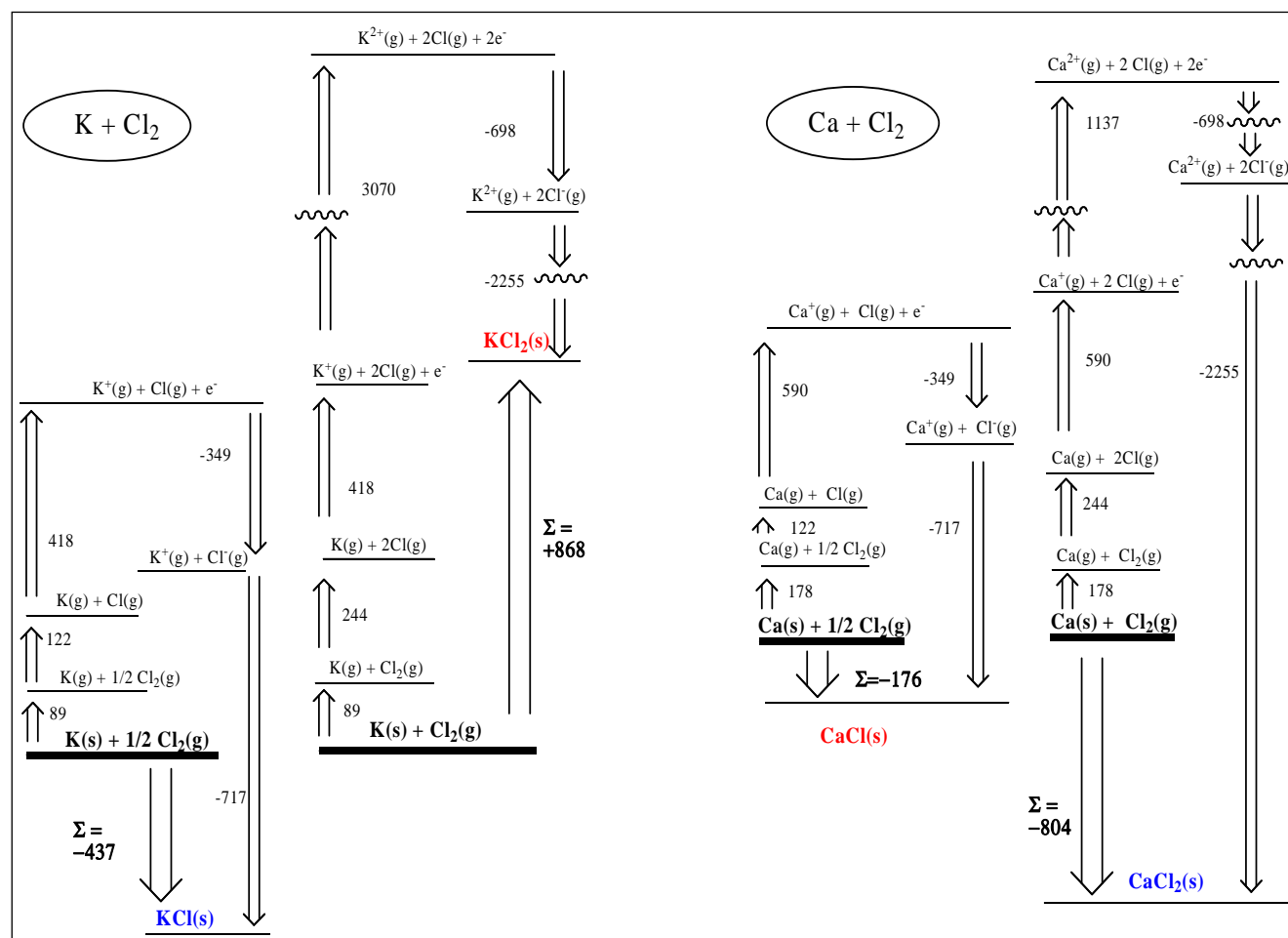
Értelmezzük:

Kálium + klór: miért áll meg a KCl-nál (K^+), s nem lesz KCl_2 (K^{2+}); viszont kalciummal: nem áll meg a $CaCl$ -hanem $CaCl_2$ -ig (Ca^{2+}) megy a folyamat.

Látjuk, hogy a K^+ ion képződéséhez szükséges (*IE*), melyet nem pótol a Cl^- felszabaduló energia (*EA*). Az egész lesz energetikailag kedvező (exoterm), kialakulása során, az ionok közti elektrosztatikus, Coulomb-vonzás jelentős energiafelszabadulást jelent (**rácsenergia**). elektron

leszakadása a K^+ -ról – az **oktett szerkezet** miatt – már akkora energiát igényelne, elképzelt KCl_2 nagyobb rácsenergiája sem *Gondoljuk végig hasonló módon a $CaCl_2$ hasonlítsuk össze a K^+ és a Ca^+ ionizációs (oktettet kell megbontani, ill. épp oktett*

Megj.: a táblázat néhány adata – ahol érték – becslés: pl. a fiktív KCl_2 a $CaCl_2$ -ével azonosnak vettük.



nál (Ca^+),
energia
képződésénél
folyamat azért
mert a rács

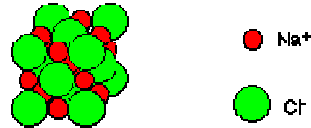
Egy további

stabilitása
melyet az
pótol.
esetét is,
energiáját!!
alakul ki).

nincs kísérleti
rácsenergiáját

Ionos kötés (folyt.):

A kötés NEM két ion között van, hanem: az egész (végtelen) rácsot tartja össze az ionok közti elektrosztatikus vonzás: rácsenergia



Az atomból lehetőleg zárt elektronhéjú ion (kation, anion) alakul ki. Az „oktett”-elv tehát legtisztábban ionkristályokra fogalmazható meg (l. Born-Haber fent).

De: a zárt héj jelentőségét ne abszolutizáljuk.

Pl. átmenetifémeknél igen sokféle d^n konfiguráció, nem feltétlenül zárt héj. Pl. zárt héj: Zn: [Ar] $3d^{10}4s^2 \rightarrow$

Zn²⁺: [Ar] $3d^{10}$; viszont, pl.. V(II) és V(III) ionokra:

V²⁺: [Ar] $3d^3$, V³⁺: [Ar] $(3d)^2$.

(Megj.: látjuk, először a 4s elektronok válnak le).

(Komplexeik elektronszerkezetét l. alább.)

Modellünk tehát ionos vegyületekre: az ionok között NEM alakul ki elektronok által képviselt kötés (ld. lentebb, a kovalens kötést); egyszerűen pozitív és negatív „golyók” közti vonzás tartja össze a rácsot. (A Coulomb-törvény szerint az erő: $F = \text{const. } q_1q_2/r^2$; q a töltés, r a távolság).