

I.9.2. A kovalens kötés

Eredeti megfogalmazás még a kvantummechanika előtt,
Gilbert N. Lewis 1916! (ld. illusztrációs anyag).

Individuális molekulákban (és atomrácsokban): két elektron a két atom közös erőterében tartózkodva alkot egy kötetést. Tehát, kötés = közös elektronpár.

Az oktett-elv itt is érvényesül; ilyenkor a közös elektronokat mindkét atomnál elszámoljuk.

További elektronok: magános elektronpár, ill. gyökökben párosítatlan elektron. Megj.: mai szemléletünkben hozzáteszük, hogy a fentiek mind a vegyérték-elektronokra vonatkoznak.

Lewis-szerkezetek (-képletek)

Alapelvek:

- Igyekezünk lehetőleg minden atom körül oktettet (zárt héjat) kialakítani; kevesebb elektron megengedett, de - a 2. periódusban (C, N, stb.) - 8-nál több NEM!
- Töltésszétválás megengedett (l. lentebb, 6.).
- Gyakran előfordul, hogy a kötésviszonyokat nem lehet csupán szabályos egyszeres, kétszeres, stb. kötésekkel leírni. Ilyenkor *rezonanciáról*, vagy *mezomériáról* beszélünk és *rezonanciaszerkezetek-et* (*határszerkezetek-et*) írunk, melyek együtt jellemzik a rendszert; a valóság a határszerkezetek elképzelt átlaga

Segítségét jelentenek formális szabályok:

- Determine the number of valence electrons.
- Connect the central atom to the other atoms with single bonds.
- Complete the valence shell of the outer atoms.
- Place any remaining electrons on the central atom. If the valence shell of the central atom is complete, you have drawn an acceptable Lewis structure.
- If the valence shell of the central atom is not complete, use a lone pair on one of the outer atoms to form a double bond between that outer atom and the central atom. Continue this process ... until the valence shell of the central atom is complete.
- Megállapítjuk az atomok formális töltését.** Ált. a kisebb töltésszétválás kedvező.

Alappéldák: H₂O, CH₄, NH₃ ...

HCN és BrCN: utóbbinál már kétféle szerkezet írható fel, vizsgáljuk meg a formális töltéseket!

2011/12

A szén- dioxid, CO₂ :

Az oktett- szabály nem szigorú!

Elektronhiányos molekulák, pl.: BeCl₂, BF₃

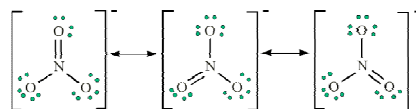
Oktettnél *több* elektron: a 3. periódustól megengedett, pl. PCl₅, SF₆, etc.

Példák csak rezonancia-szerkezetekkel leírható kötésekre:

Equivalent Lewis structures are called resonance structures

Ozone : *is described by an average of the two Lewis structures.*

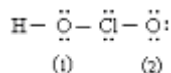
nitrát-ion:



Fentiek delokalizált kötéssel is írhatók. Pl. a benzol

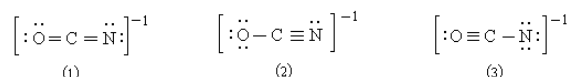
Néhány gyakorló feladat:

Mekkora a formális töltés az oxigén atomokon ?



Az OCN⁻-ion melyik szerkezete a legvalószínűbb?

(vizsgáljuk a formális töltéseket!)



Fenti példa alapján írjuk fel a ciánsav (HO-CN) és *tautomerje*, az izociánsav (HNCO) lehetséges szerkezeteit is!

A szulfátionban a kísérletek szerint egyfajta SO-kötéstávolság van; írjon fel egy rezonancia-szerkezetet! Összesen hány ilyen, ekvivalens szerkezet írható fel? Formális töltések?

Írjunk Lewis-képleteket, jelölve a formális töltéseket is:

PO₄³⁻, ClO₃⁻, BrO₂⁻, SO₃, kénsav, COCl₂ (foszgén);

N₂O, dinitrogén-oxid; miért valószínűbb az NNO, mint az NON szerkezet?

HN₃ (nitrogénhidrogénsav; sói az azidok): írjunk fel két Lewis-szerkezetet, hármaskötéssel, ill. a nélkül.

Írjunk fel a BeCl₂ -ra (l. fent) olyan szerkezetet, melyben *teljesül* az oktett-szabály! Miért NEM plauzibilis ez?

Az NO (nitrogén-monoxid) természetesen párosítatlan elektront tartalmaz (ritka jelenség molekuláknál).

Kvantum- mechanikai számítások szerint ez az elektron nagyjából egyforma valószínűséggel van a két atomon; írja fel azokat a rezonanciaszerkezeteket, melyek ezt kifejezik!

NO₂: írjunk határszerkezeteket, melyekben a párosítatlan elektron a N-, ill. az O-atomon van

Az N₂O₄ molekulában régi könyvek még 5-vegyértékű N-atomot írtak fel, ezt ma nem fogadjuk el (hiszen 8-nál több elektron lenne a N körül). Írjunk fel a helyes képletet (rezonanciaszerkezetek).

Az N₂O₅-ben a kísérletek (pl. elektrondiffrakció) szerint összesen kétféle NO-kötéstávolság van, írjunk fel a megfelelő Lewis-képlete(ke)t!

A formamid (HCONH₂, a hangyasav amidja) szokásos szerkezeti képletében C=O és C-N kötés van. Írjunk fel olyan Lewis-határszerkezetet, mely megmutatja, hogy a CN kötésnek valójában részleges kettőskötés jellege van.

Az enolát anion (szerves kémia) szerkezetét így szokás írni: [H₂C=C(H)-O]⁻. Írjunk fel azt a határszerkezetet is, melyben a kettőskötés az oxigén felé alakult ki: [H₂C-C(H)=O]⁻.