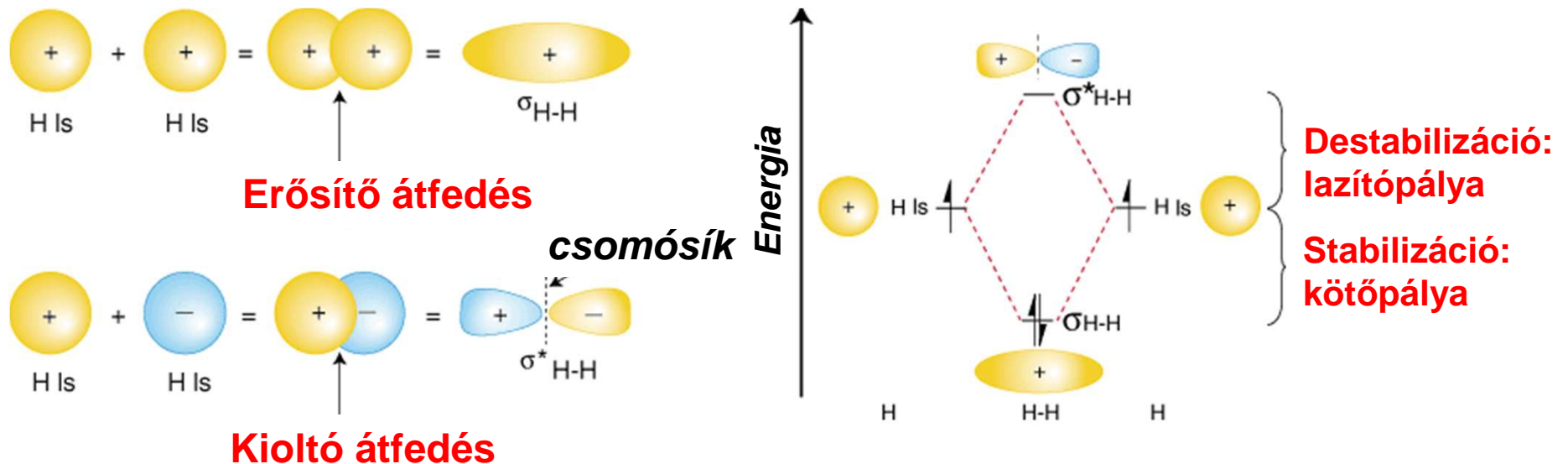


A hidrogénmolekula

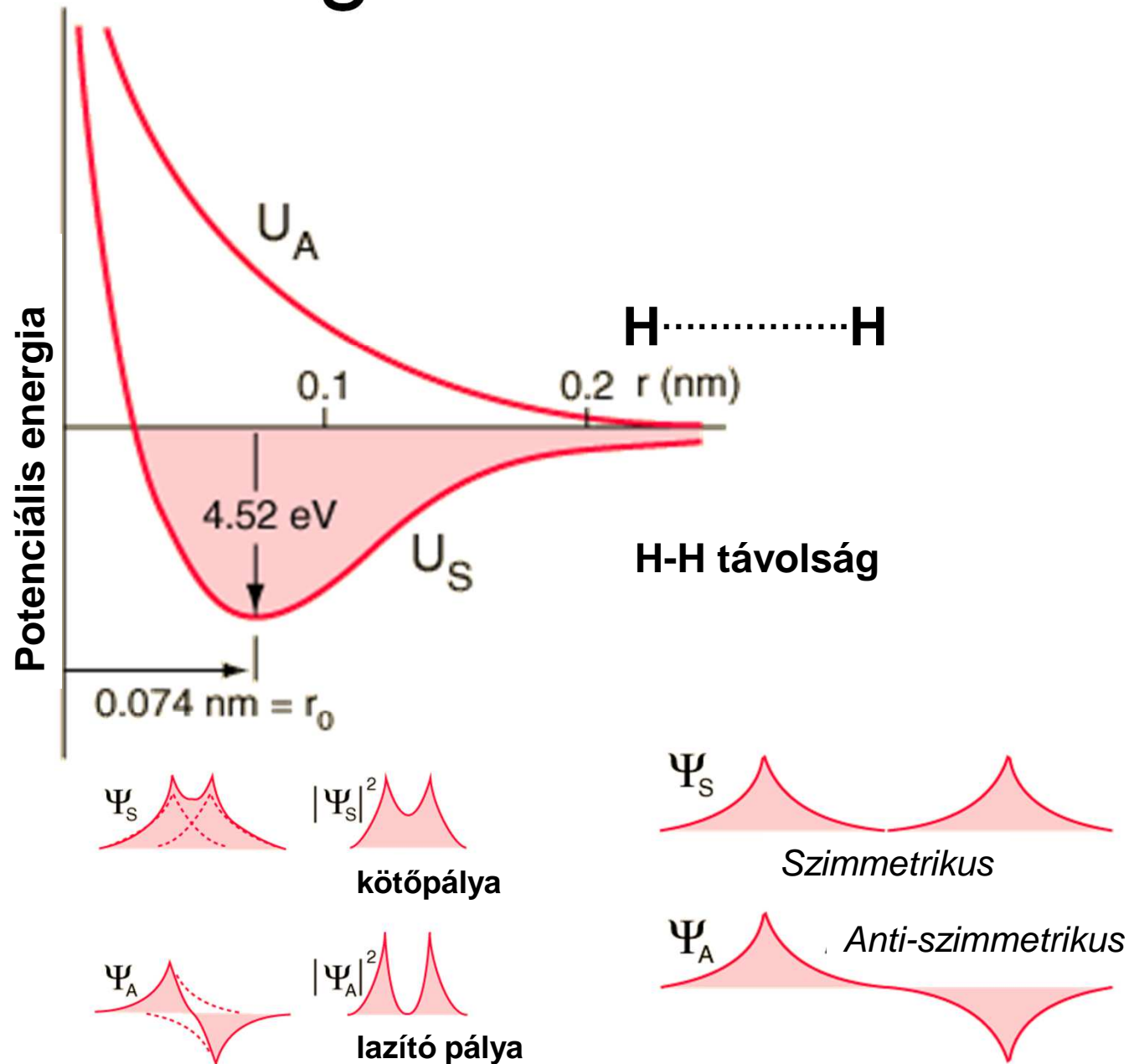
Emlékeztető: az atompályák hullámok (hullámfüggvények!)
A hullámokra érvényes a szuperpozíció (erősítés és kioltás) elve!

Ezt két H-atomra alkalmazva:

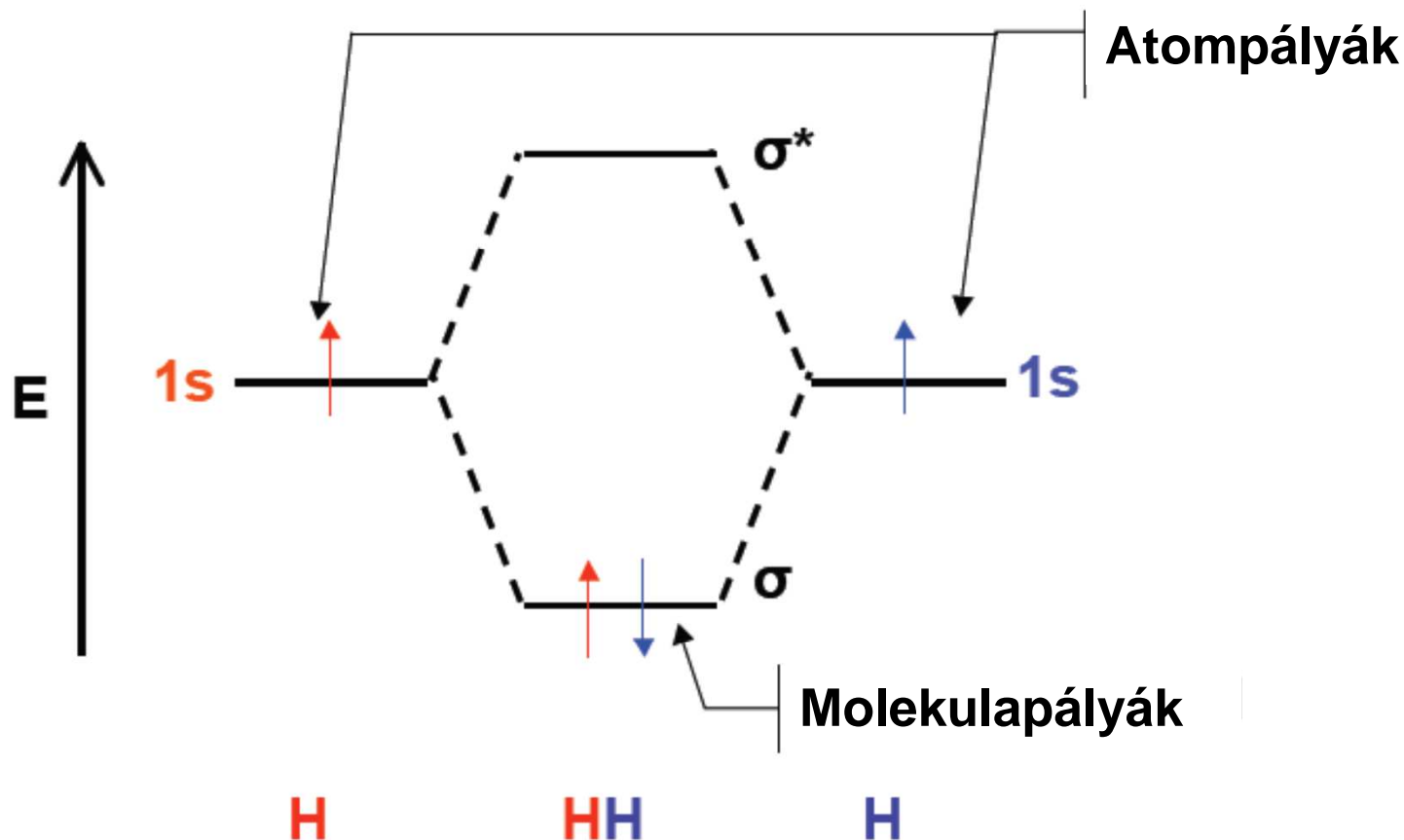


Azaz az atompályák (atomic orbitals: AO) lineár kombinációjával (linear combination: LC) (kötő, lazító [és nemkötő]) molekulapályákat (MO) kapunk:
LCAO-MO módszer

A hidrogénmolekula



A hidrogénmolekula MO-diagramja

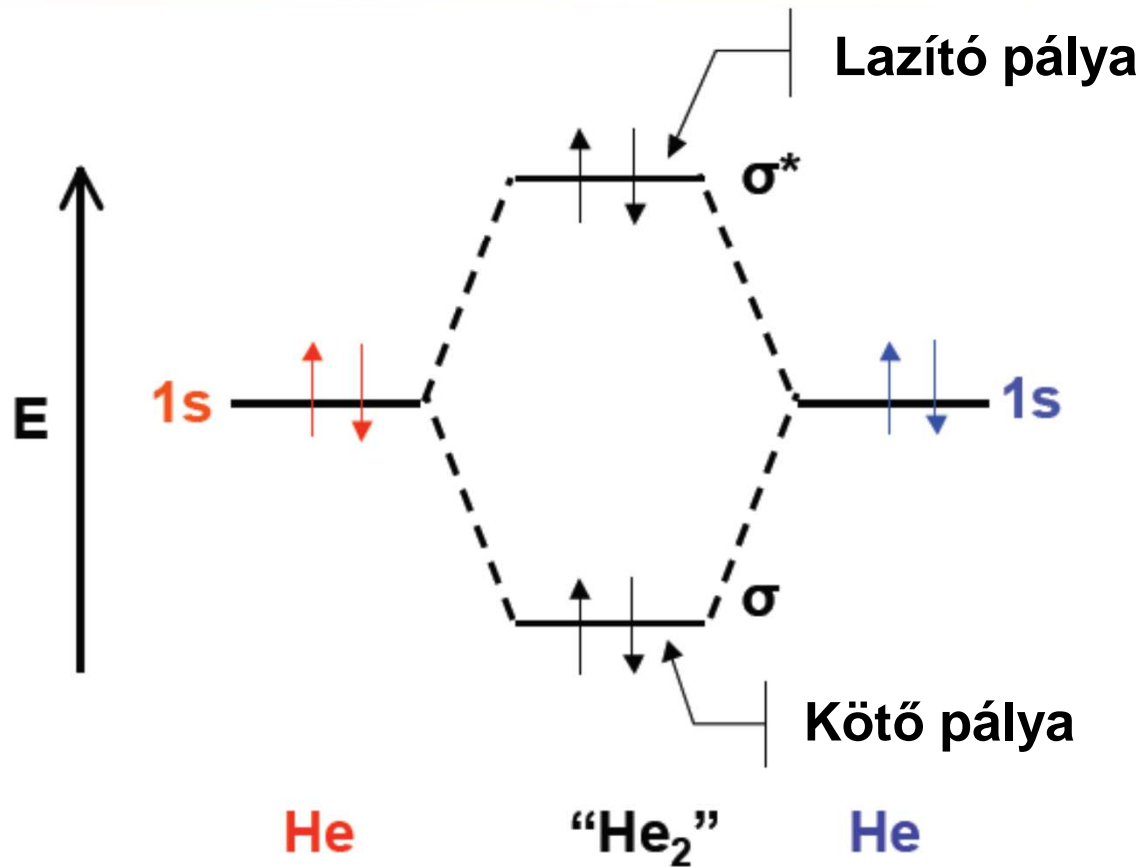


Atompályá: egyetlen atomon lokalizált

Molekulapályá: Az egész molekulára delokalizált. (Esetekben jó közelítéssel mondhatjuk, hogy kevesebb, pl. két atomon lokalizált.)

Kötésrend: $\frac{1}{2}(\text{elektronok száma kötő pályán} - \text{elektronok száma lazító pályán}) = 1$

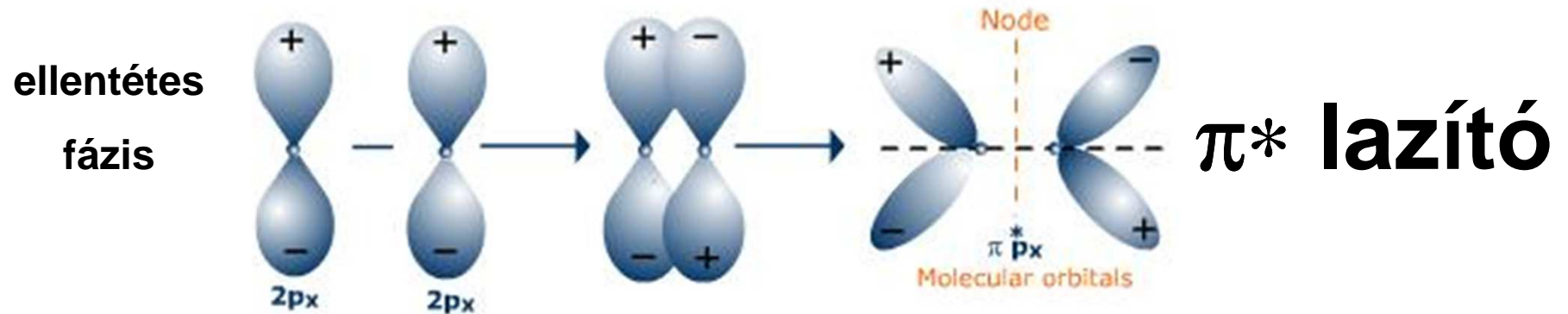
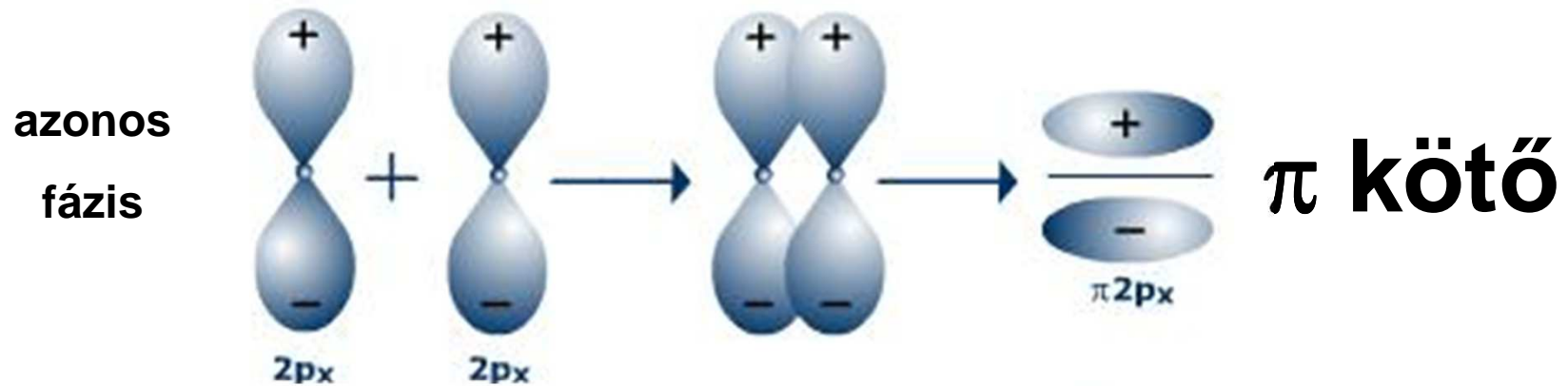
A hipotetikus „He₂” molekula



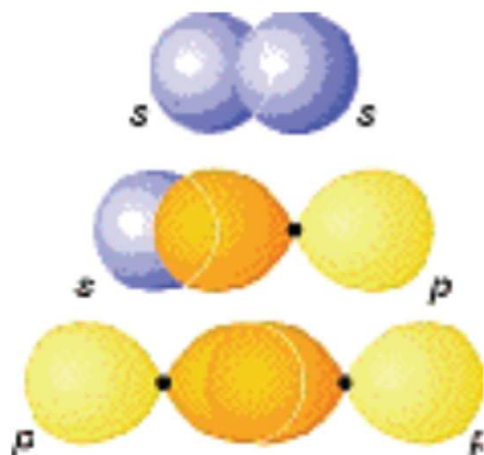
Kötésrend: $\frac{1}{2}(\text{elektronok száma kötő pályán} - \text{elektronok száma lazító pályán}) = 0$

Kovalens kötés – π -kötés

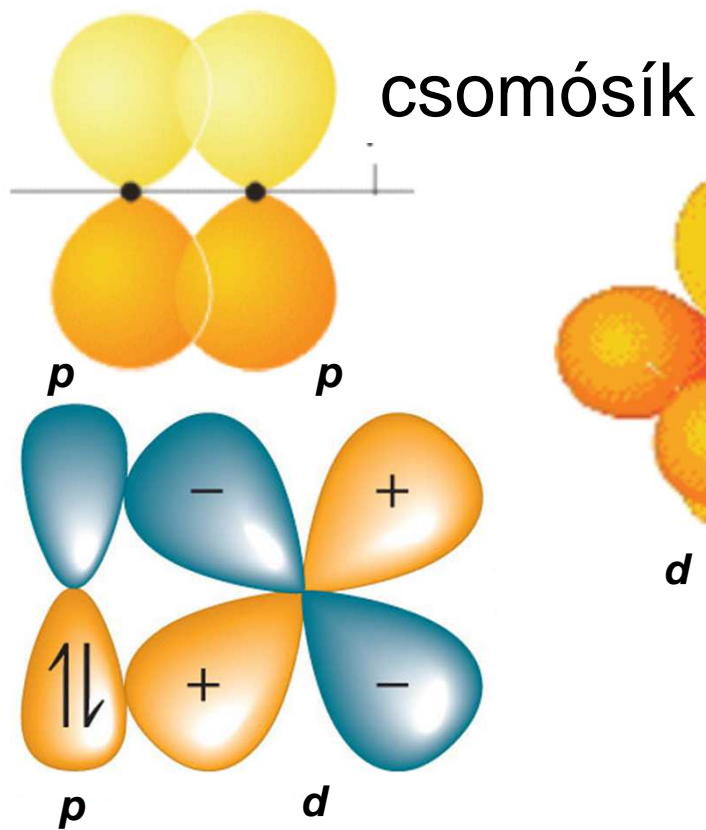
atomi p-pályákból



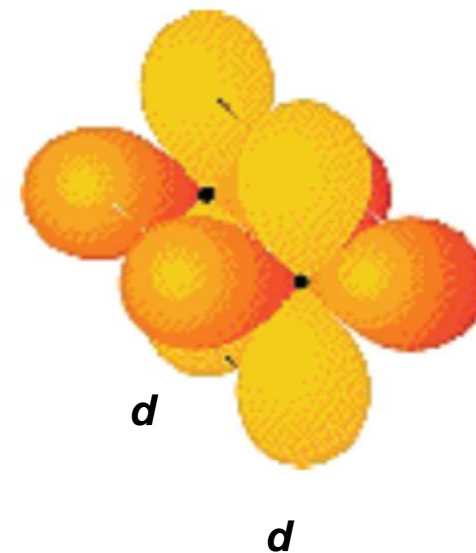
Kémiai kötés



σ -kötés

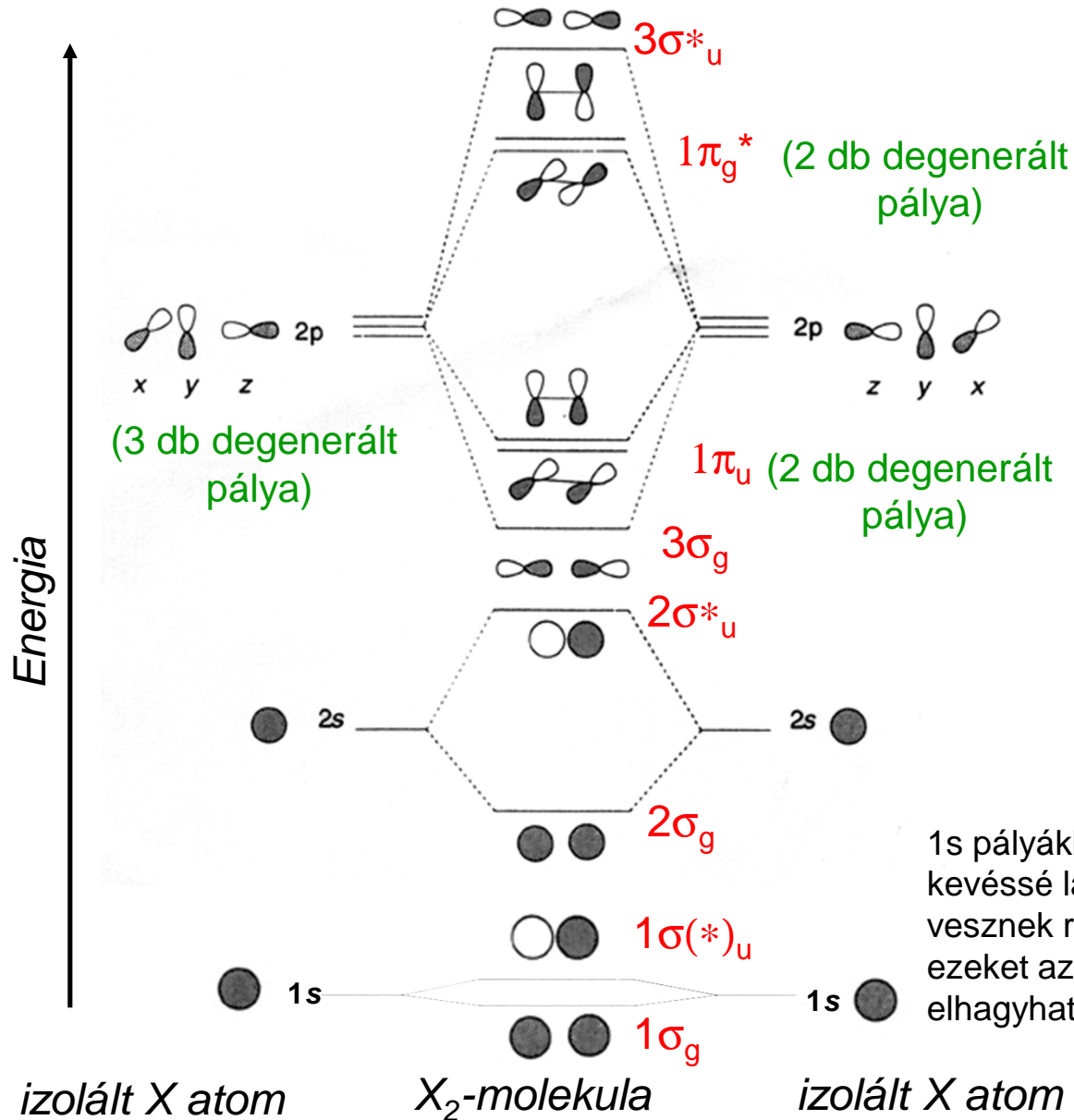


π -kötés



δ -kötés

2. periódusbeli X_2 molekula



g alsó index: „gerade”
középpontos tükrözésre
szimmetrikus pálya

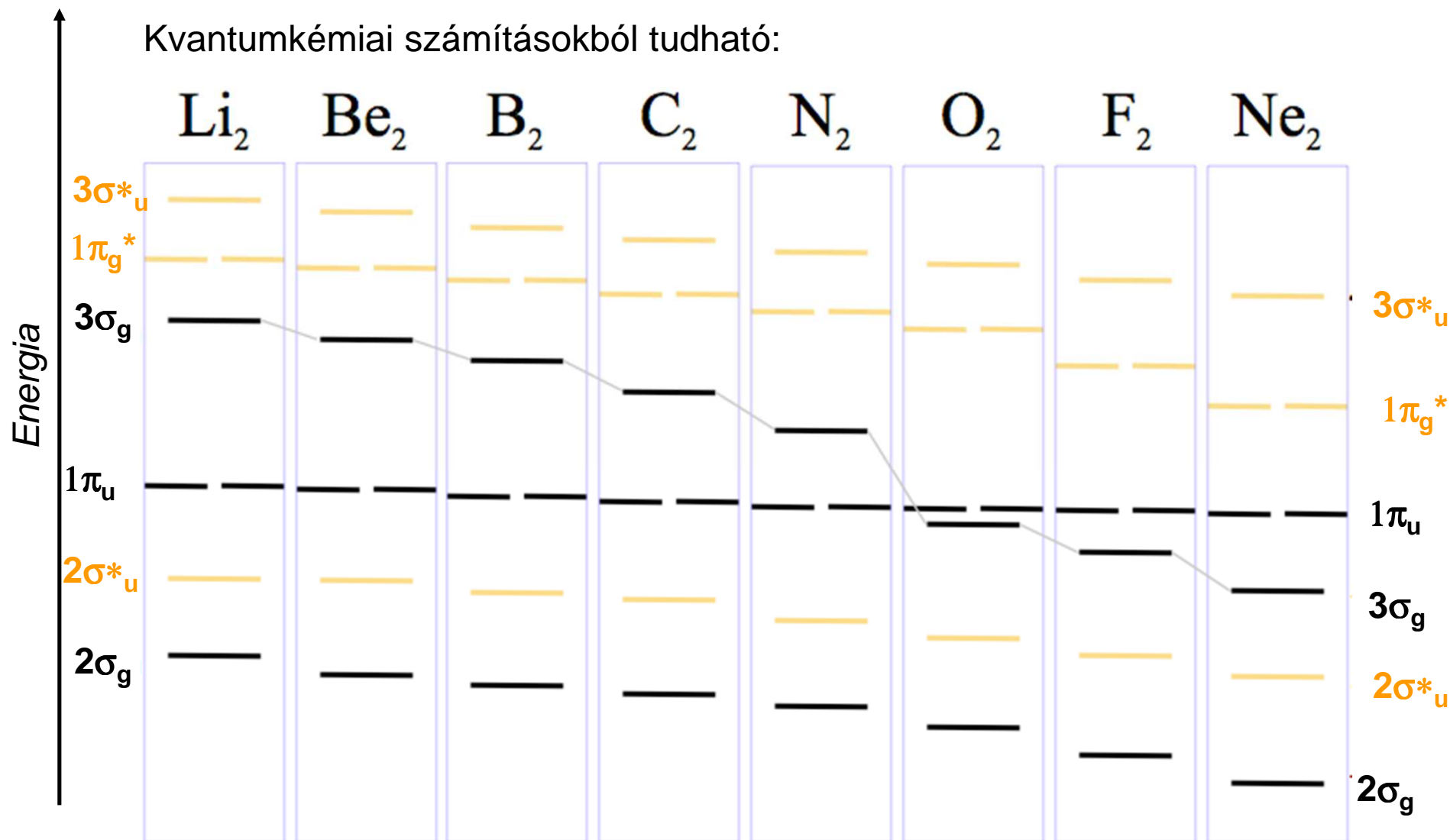
u alsó index: „ungerade”
középpontos tükrözésre
antiszimetrikus pálya
(azaz az alak szimmetrikus
de előjelet vált)

számozás: azonos típusúakat
csoportosítva, legkisebb
energiájuktól indulva

1s pályákból létrejövő „MO”-k kevésbé kötnek és kevésbé lazítanak (pici az energiafelhasadás), nem vesznek részt a kötés kialakításában, tekinthetjük ezeket az atom lokalizált atomi pályáknak is, elhagyhatjuk az MO diagramból.

2. periódusbeli X_2 molekula

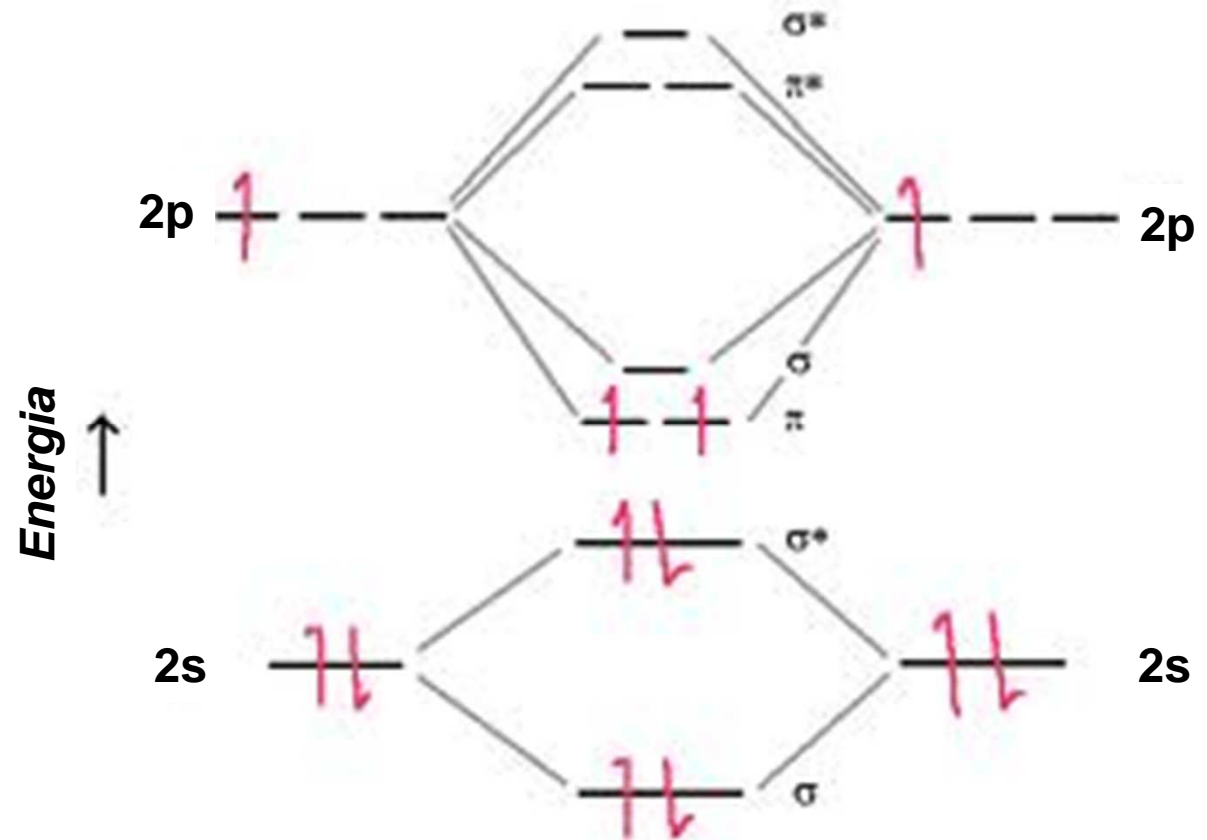
Kvantumkémiai számításokból tudható:



B₂ MO diagram

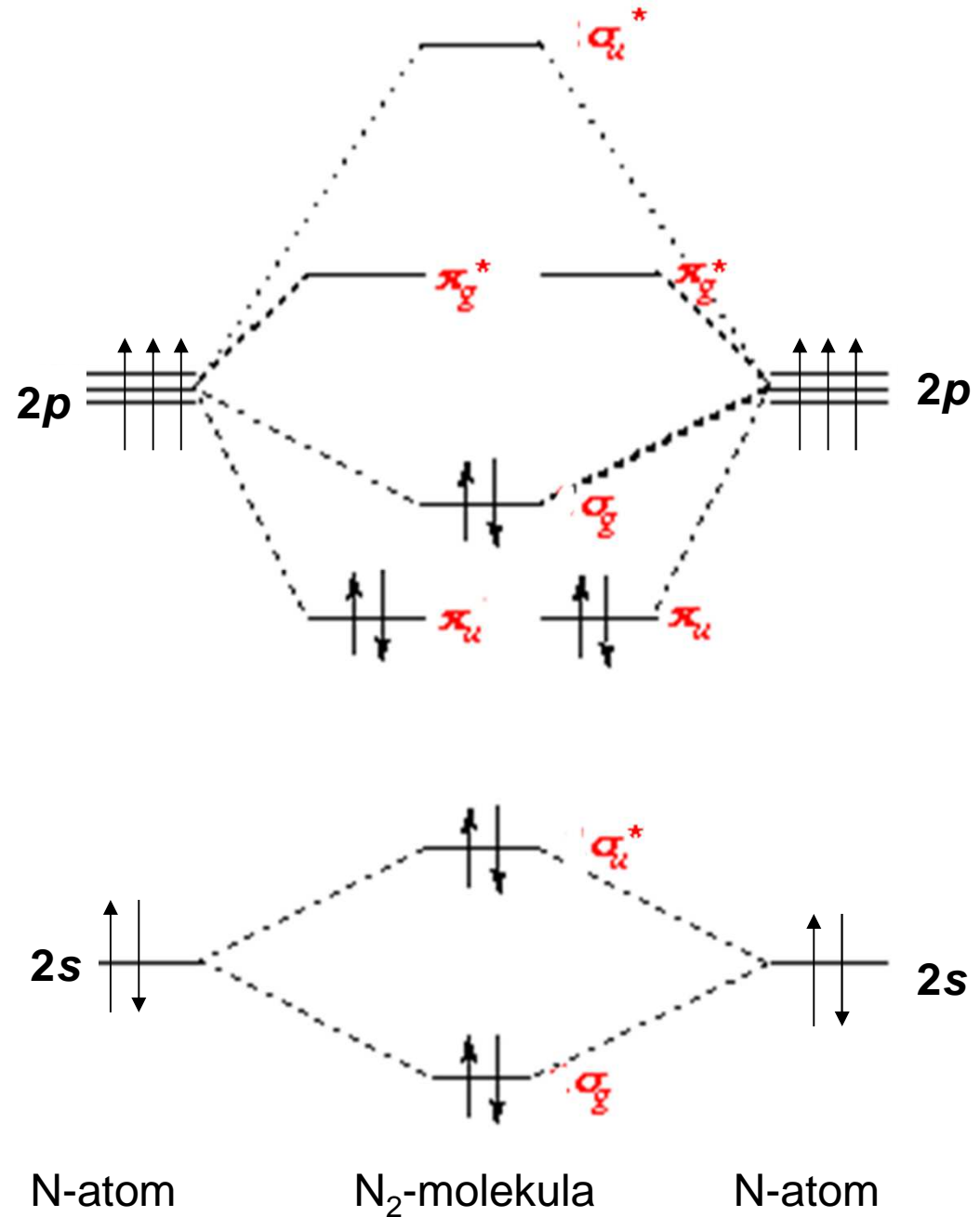
Paramágneses

Kötésrend = 1



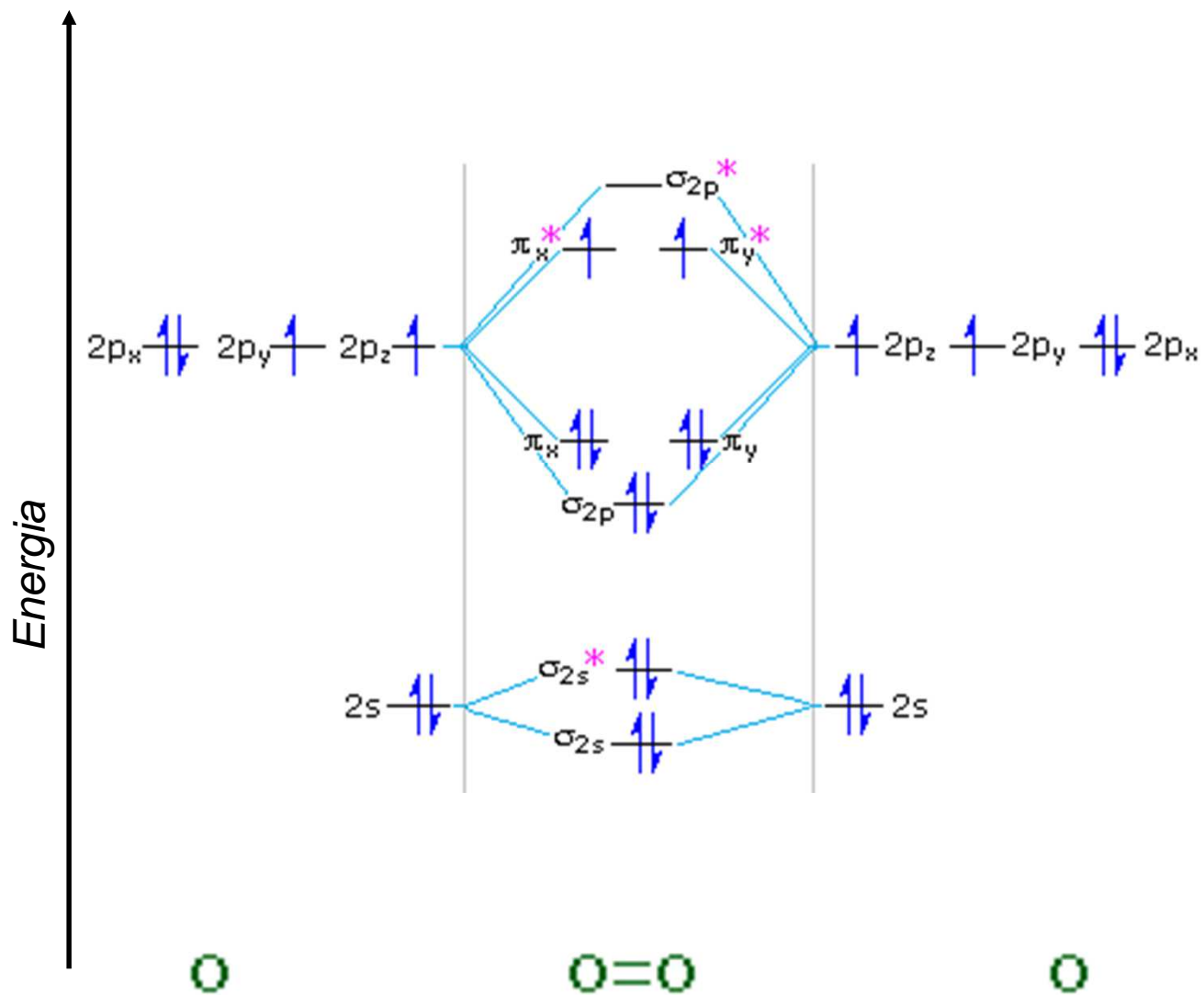
N₂ MO diagram

Kötésrend = 3
diamágneses

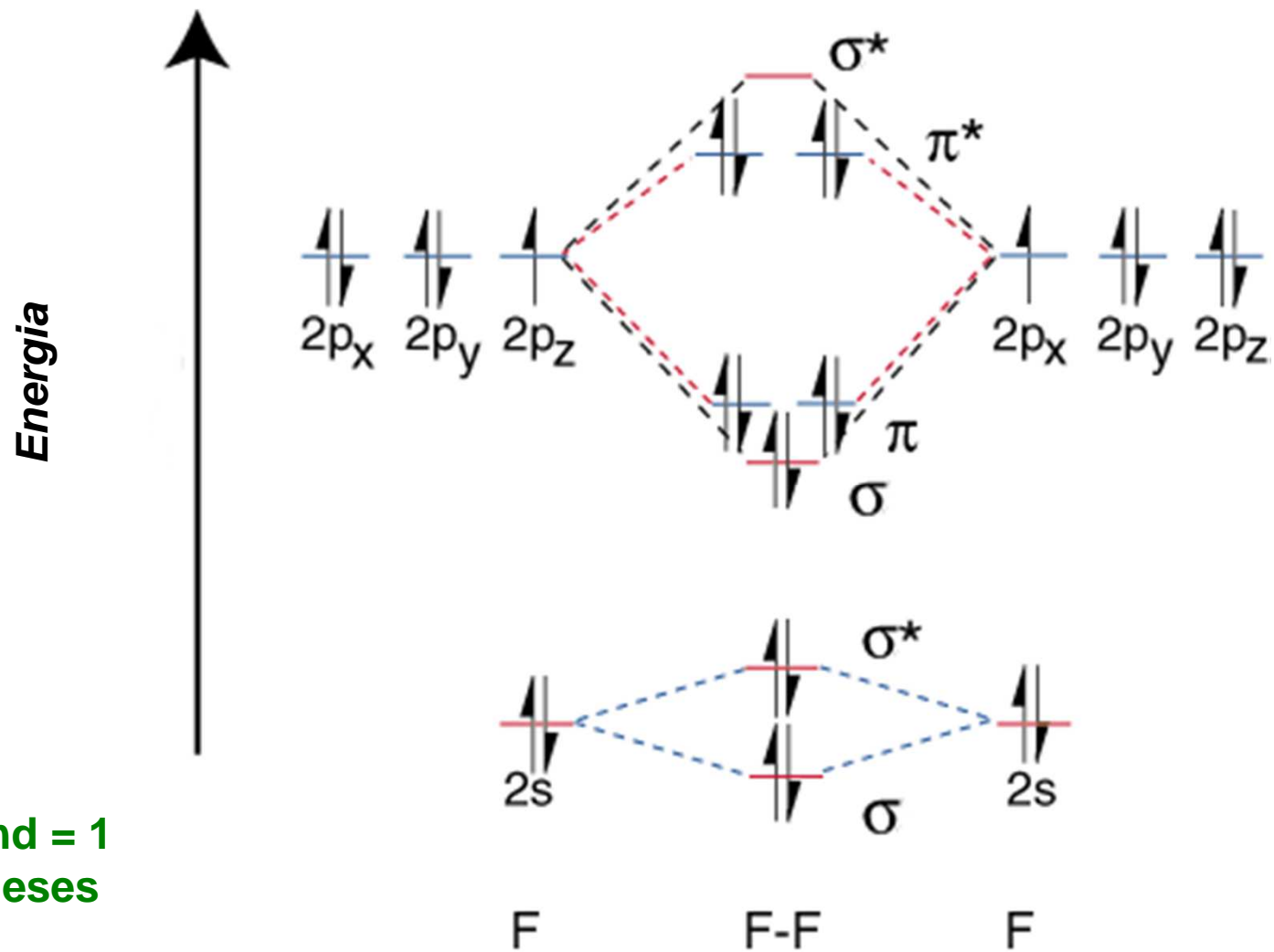


O₂ MO diagram

Kötésrend = 2
paramágneses



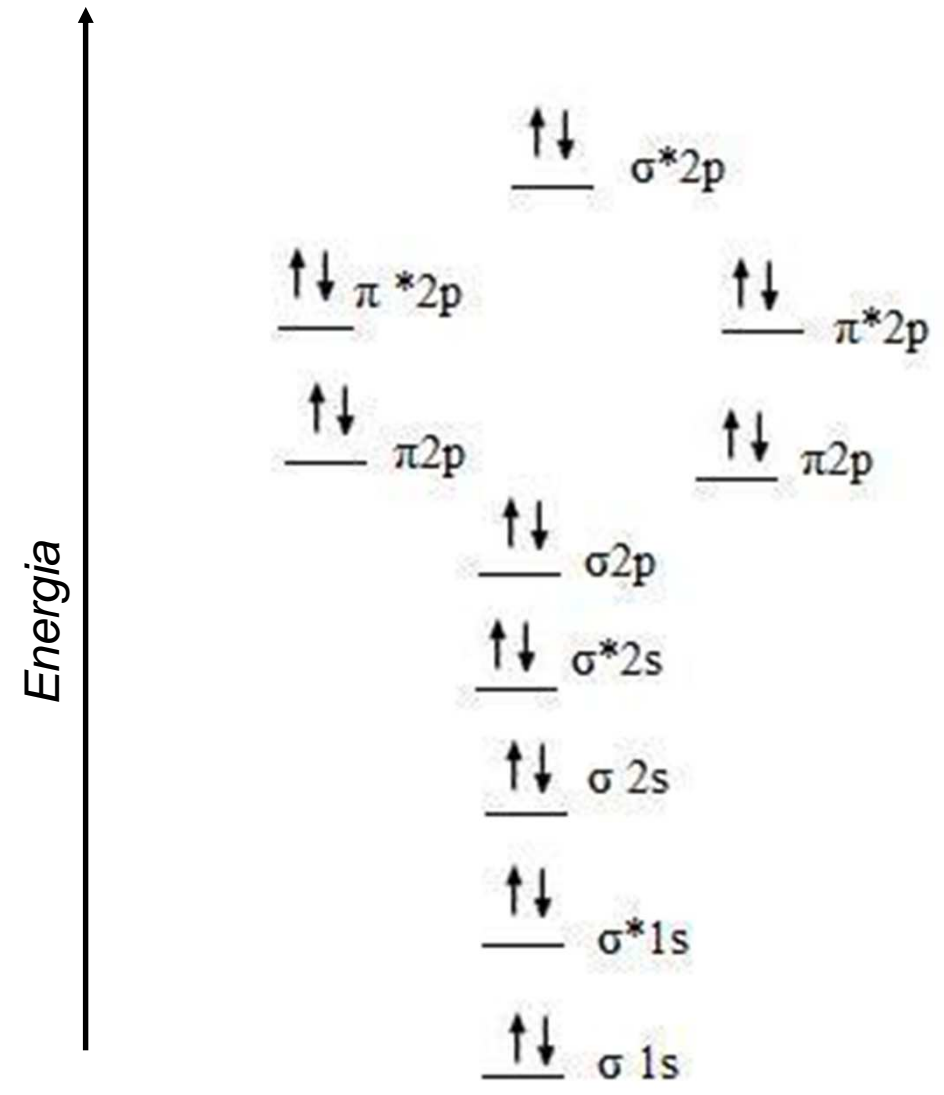
F₂ MO diagram



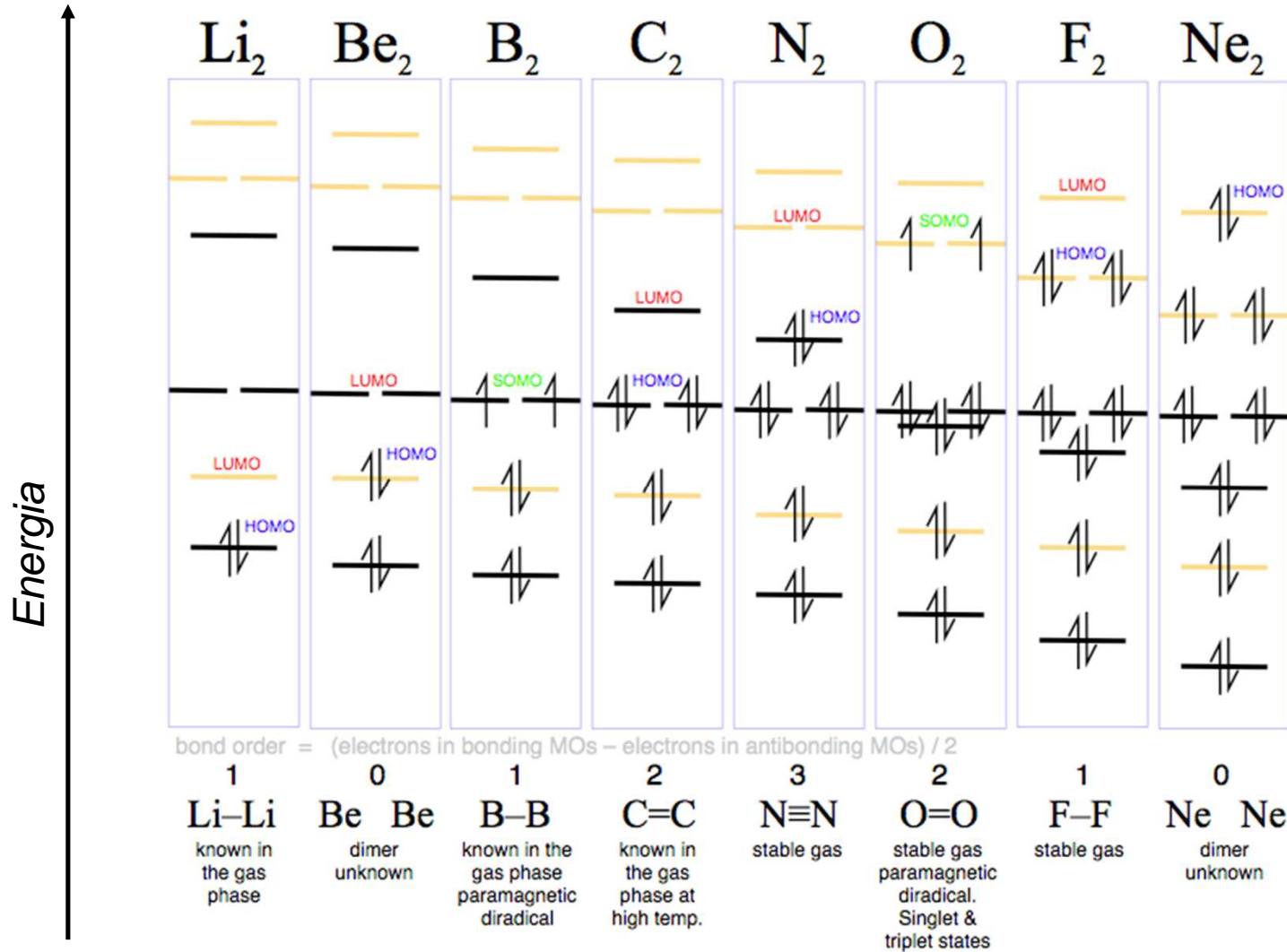
Kötésrend = 1
diamágneses

Ne₂ MO diagram

Kötésrend = 0
nem létező molekula



A 2. periódus dimerei

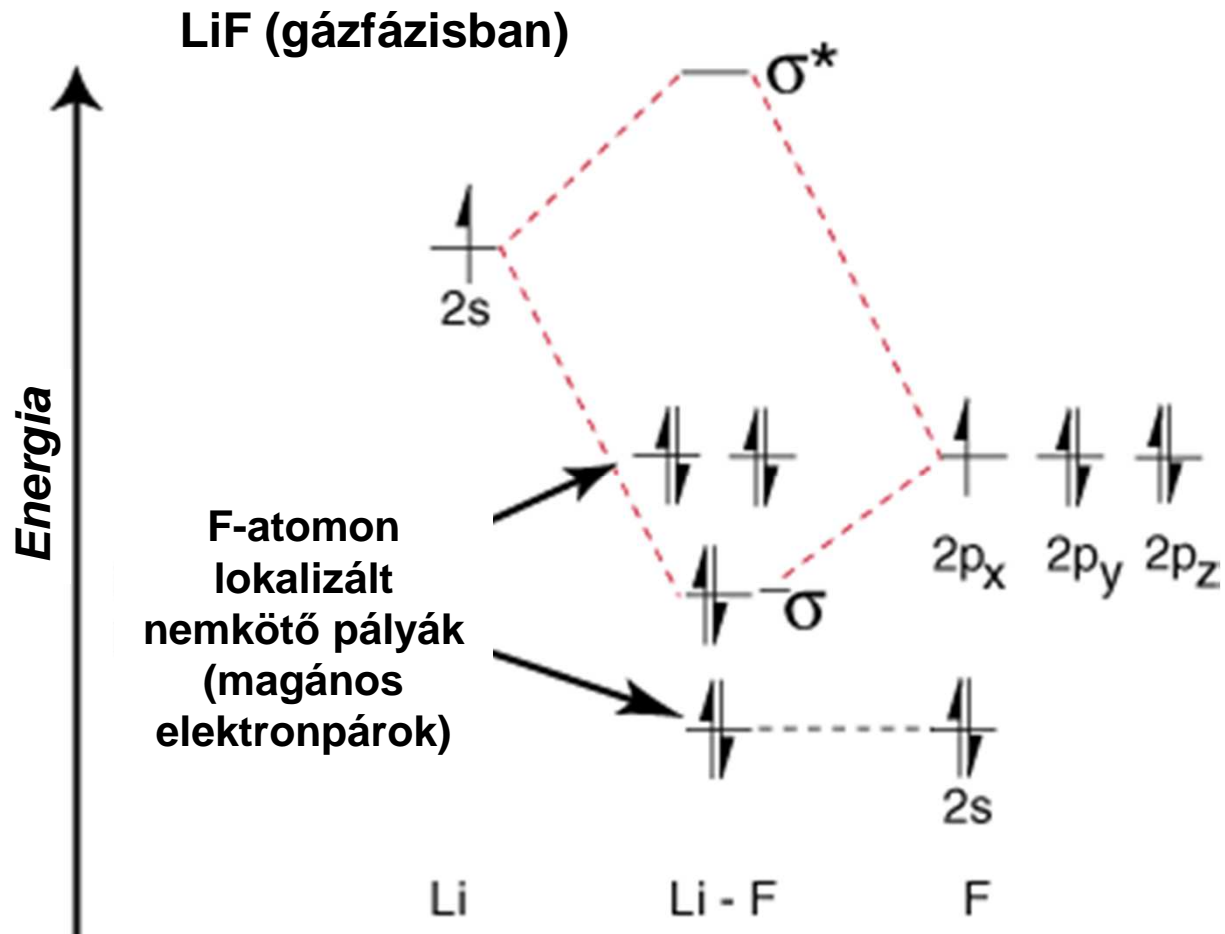


HOMO: Legmagasabb energiájú betöltött molekulapálya (Highest occupied molecular orbital)

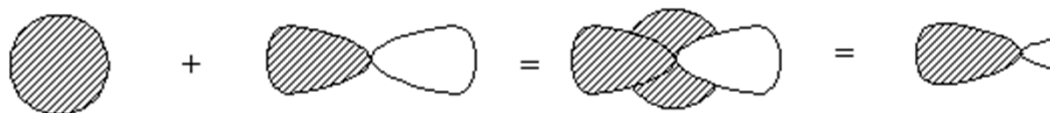
LUMO: Legkisebb energiájú be-nem-töltött MO (Lowest unoccupied MO)

SOMO: Félig betöltött MO

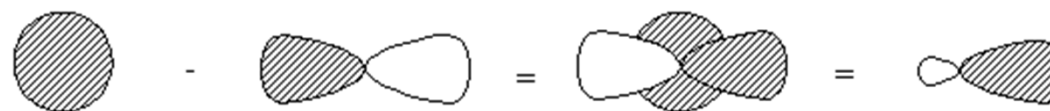
Heteronukleáris kétatomos molekulák



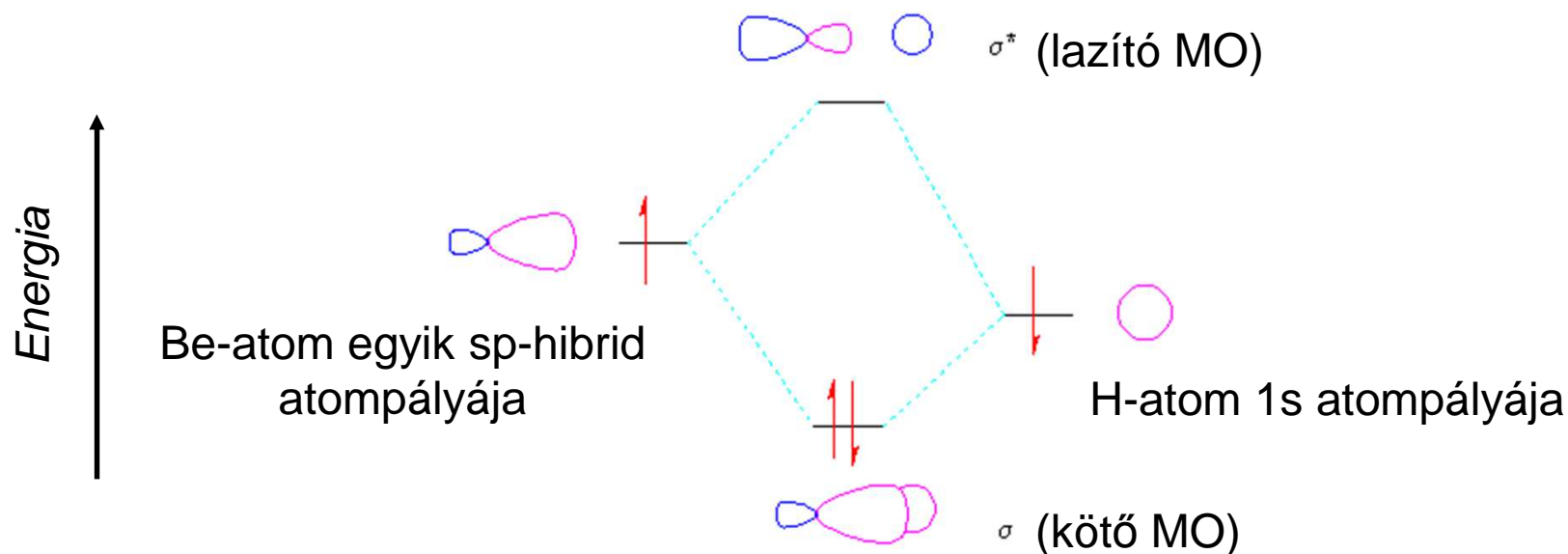
Hibridizáció



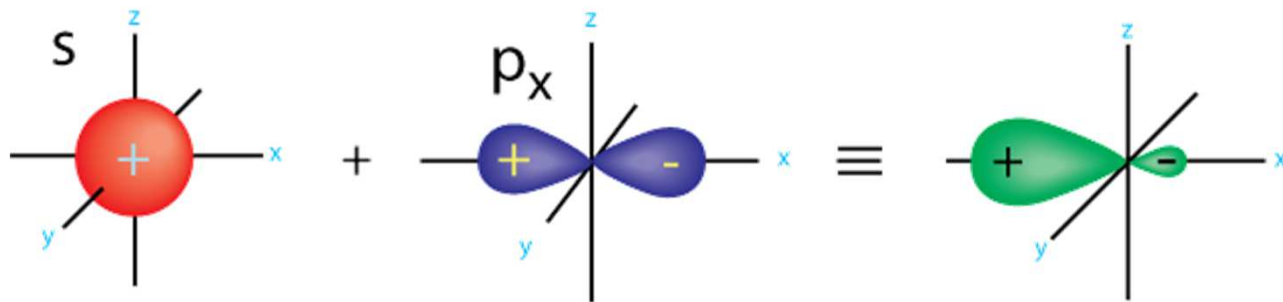
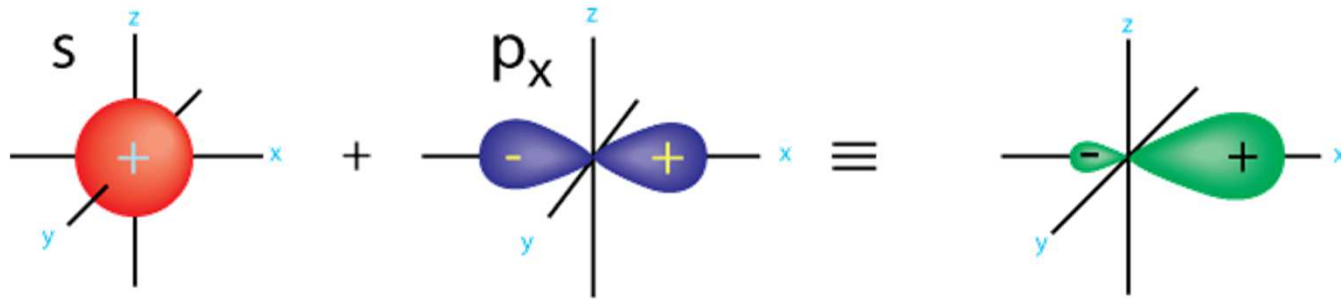
sp-hibrid pályák



Nem valós fizikai folyamat, csak kötéselméleti modellekhez előre kikeverjük az atompályákat és utána a különböző atomokon levő hibrid (és nem hibrid) pályákat keverjük molekulapályákká. (Mindezt egy lépésben is tehetnénk, de az nem szemléletes! A hibridpályákkal a térszerkezetet is könnyen megérthetjük.)

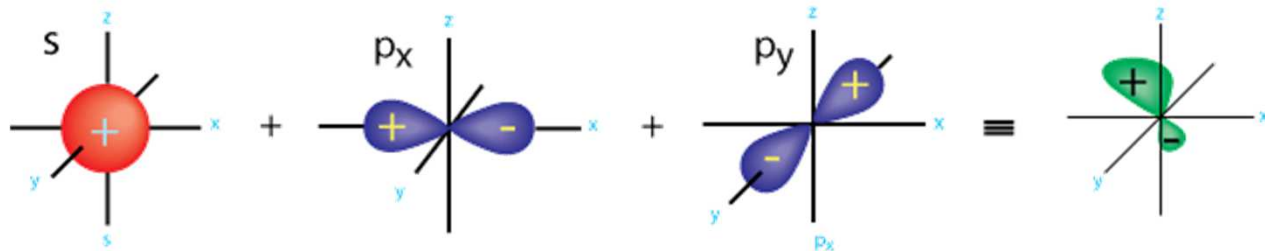
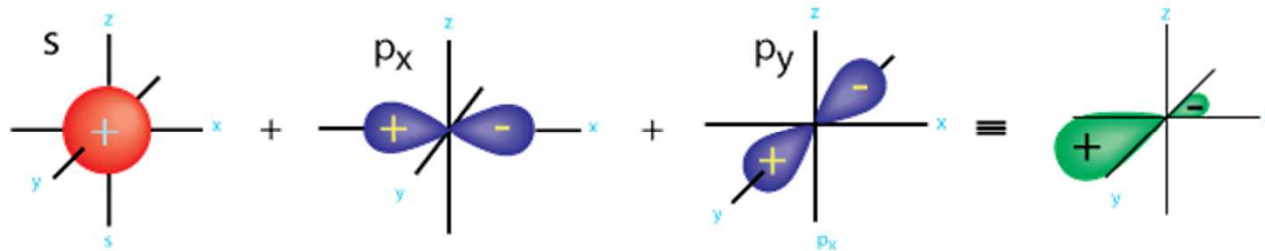


sp-hibridpályák



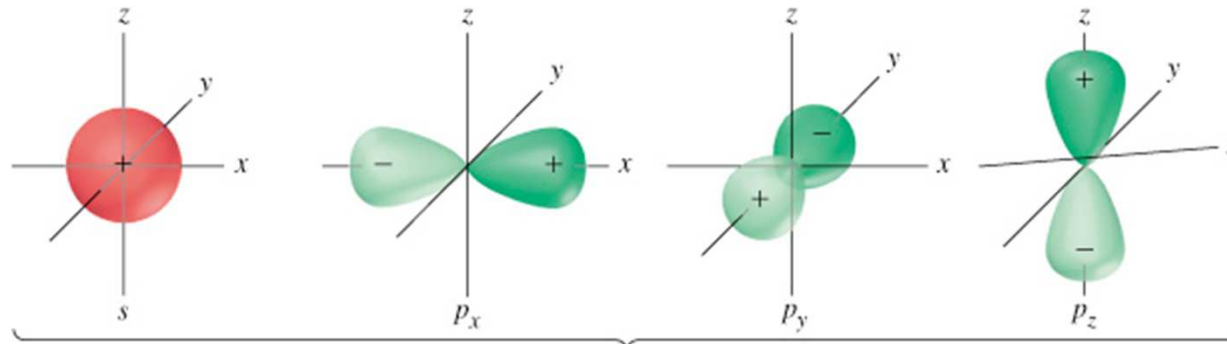
lineáris
elrendeződés

sp²-hibridpályák

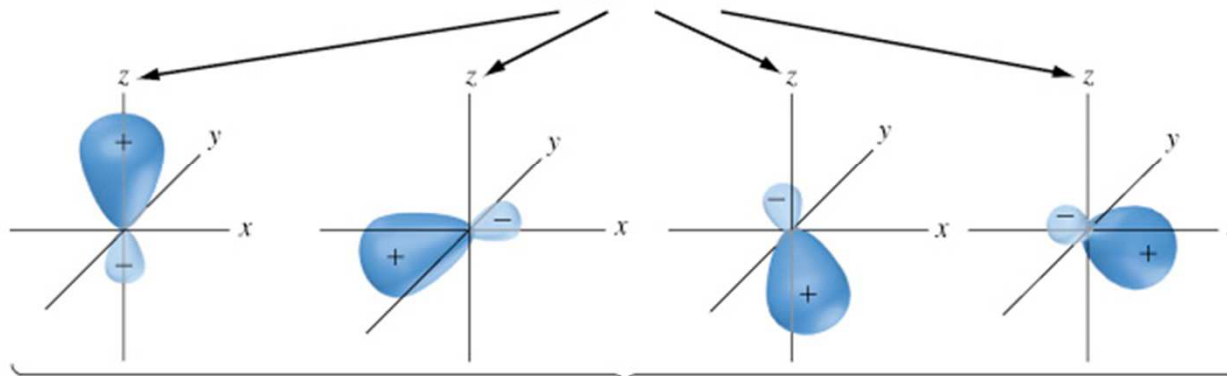


síkháromszög
elrendeződés

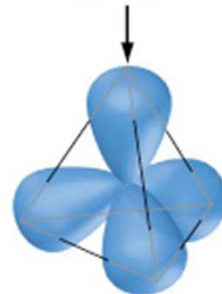
sp^3 -hibridpályák



Combine to generate
four sp^3 orbitals

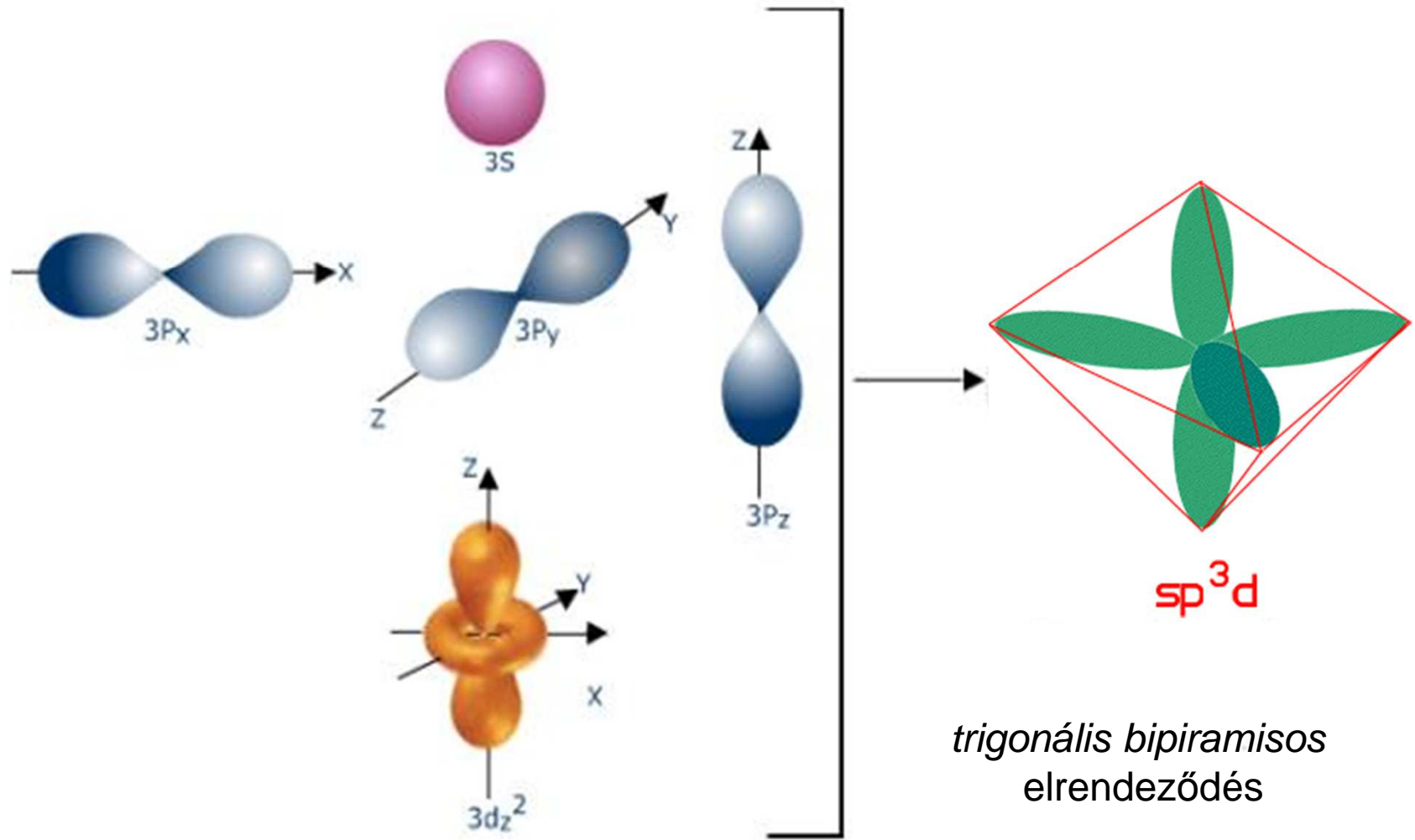


Which are represented
as the set



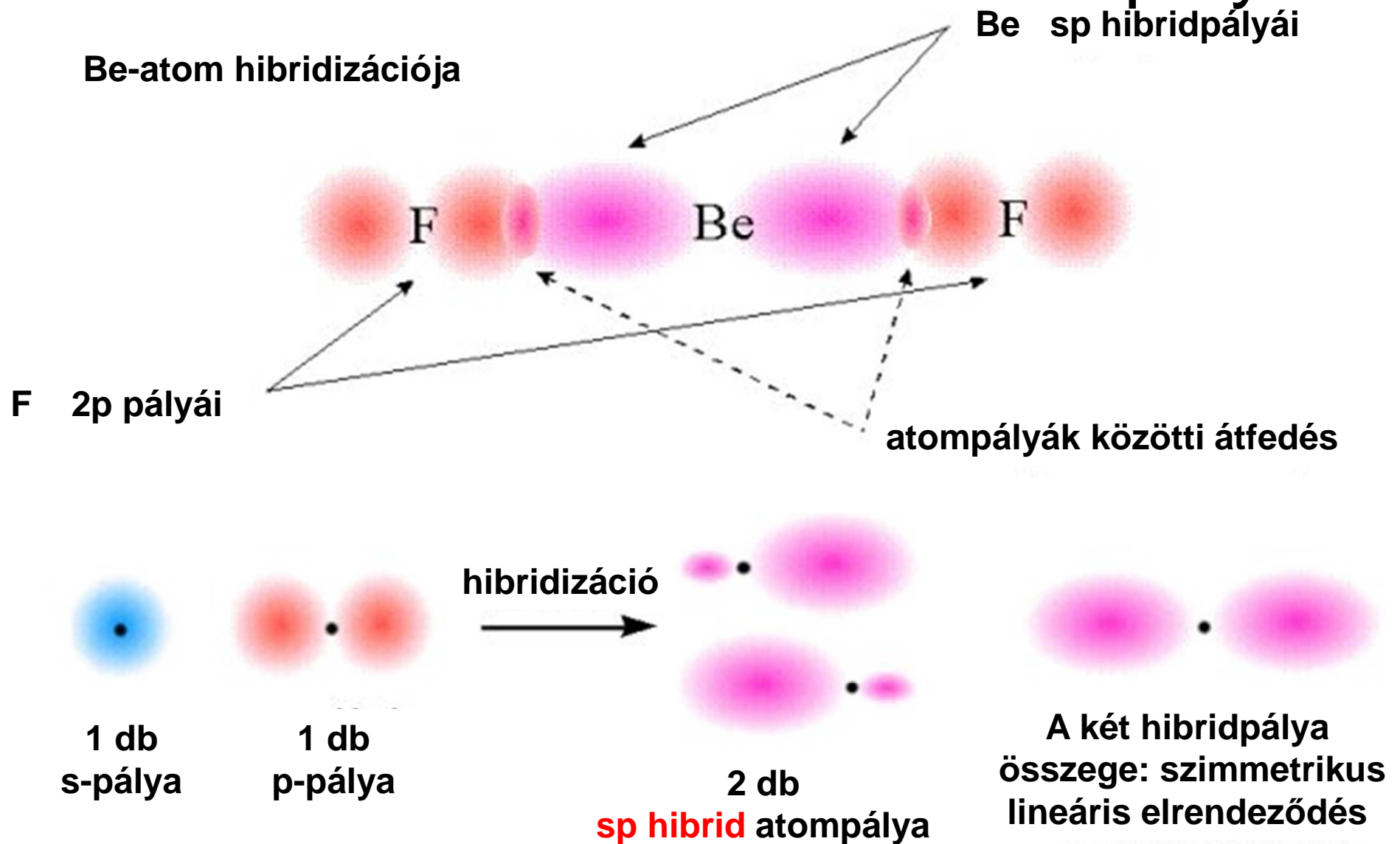
tetraéderez
elrendeződés

sp^3d -hibridpálya



Kovalens kötés

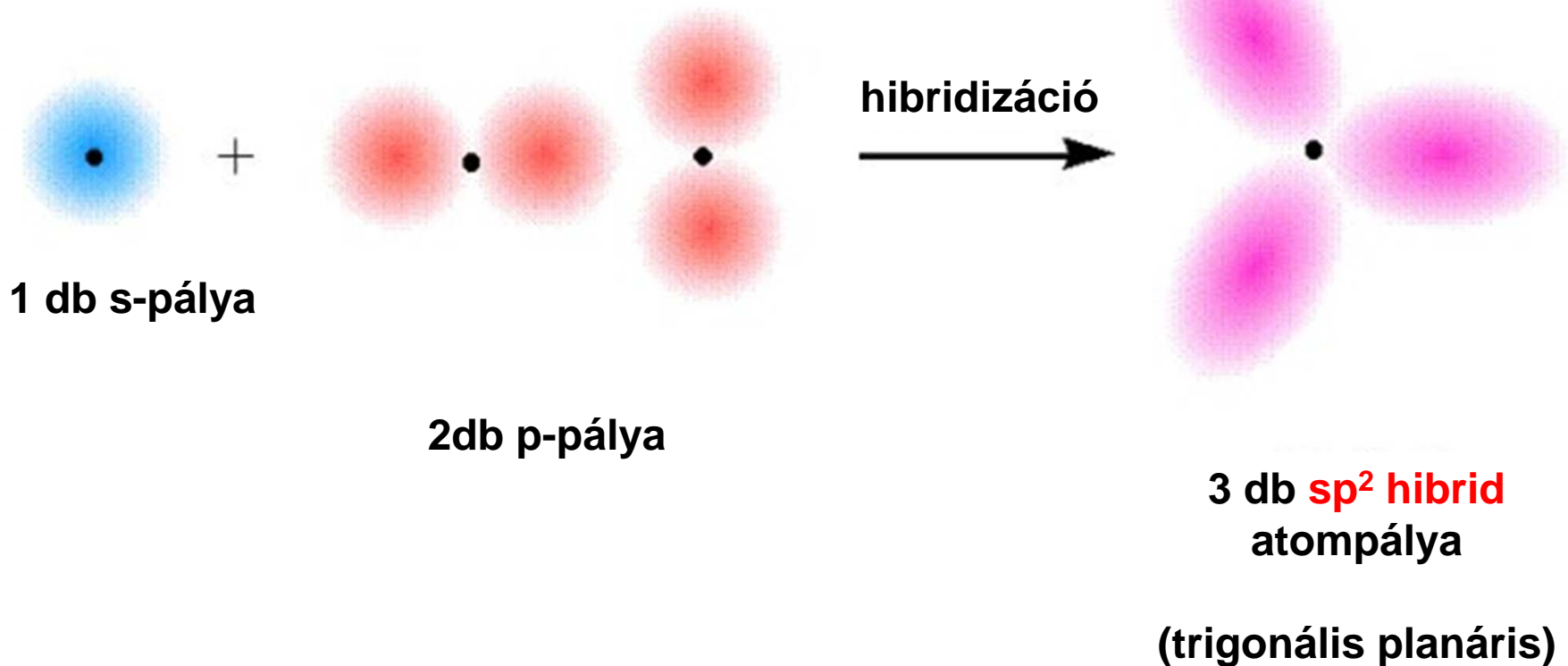
többatomos molekulák – hibridpályák



Kovalens kötés többatomos molekulák – hibridpályák

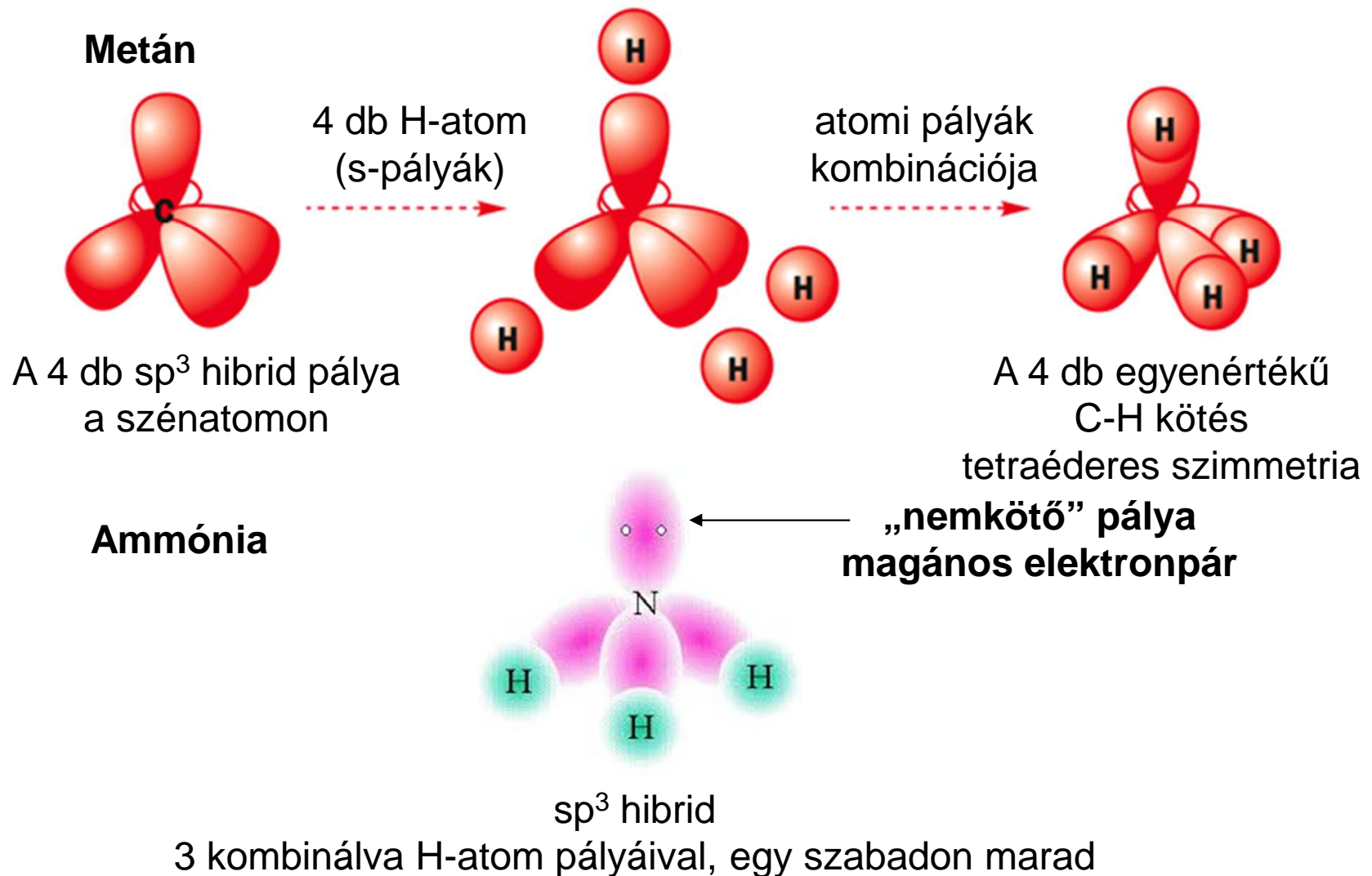


B-atom hibridizációja



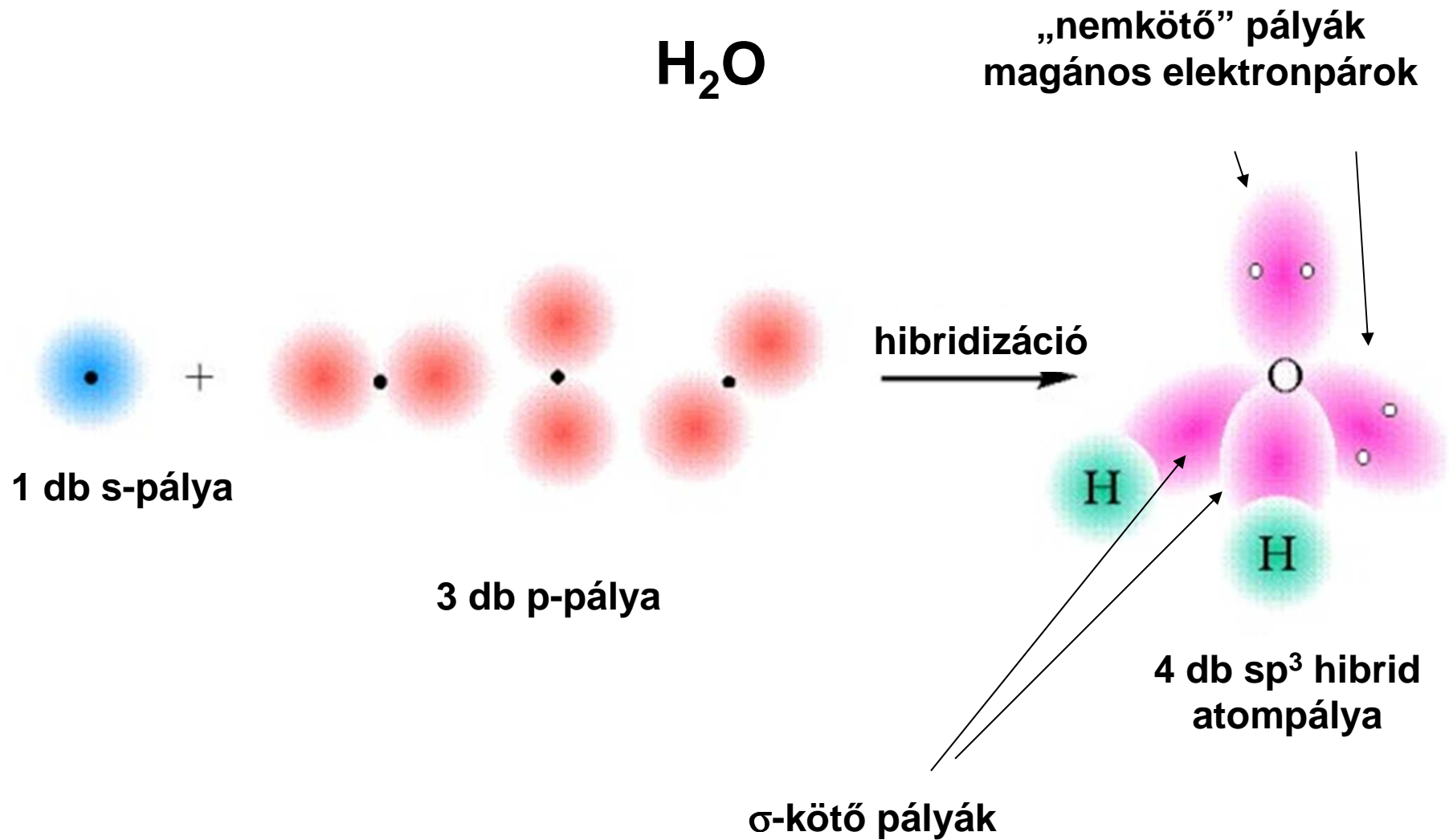
Kovalens kötés

többatomos molekulák – hibridpályák



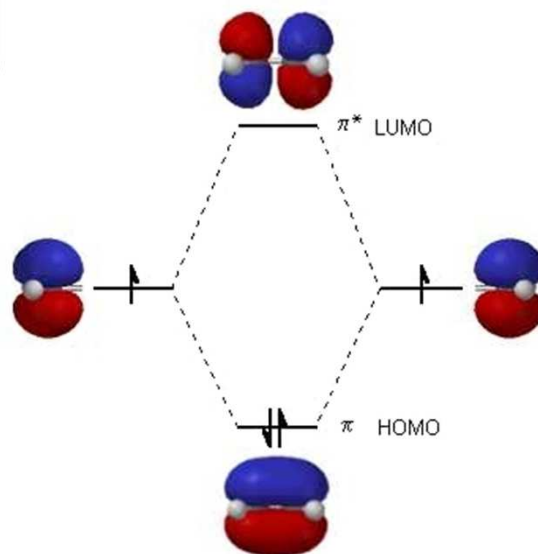
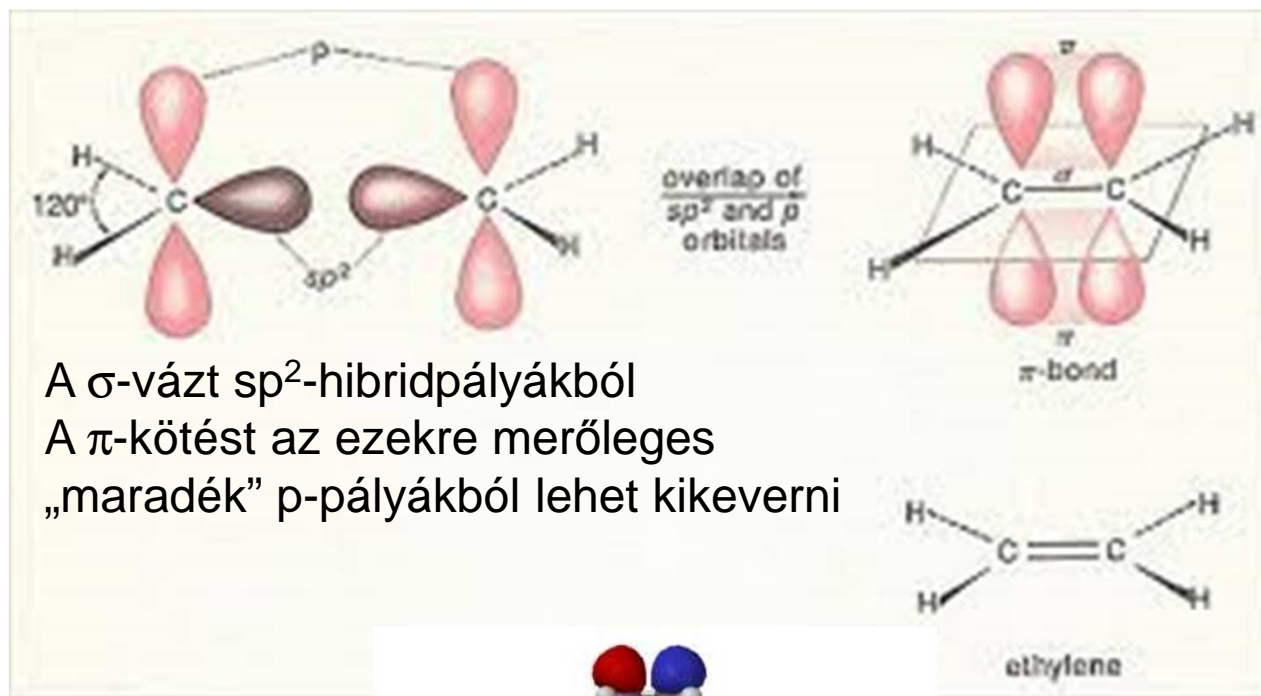
Kovalens kötés

többatomos molekulák – hibridpályák



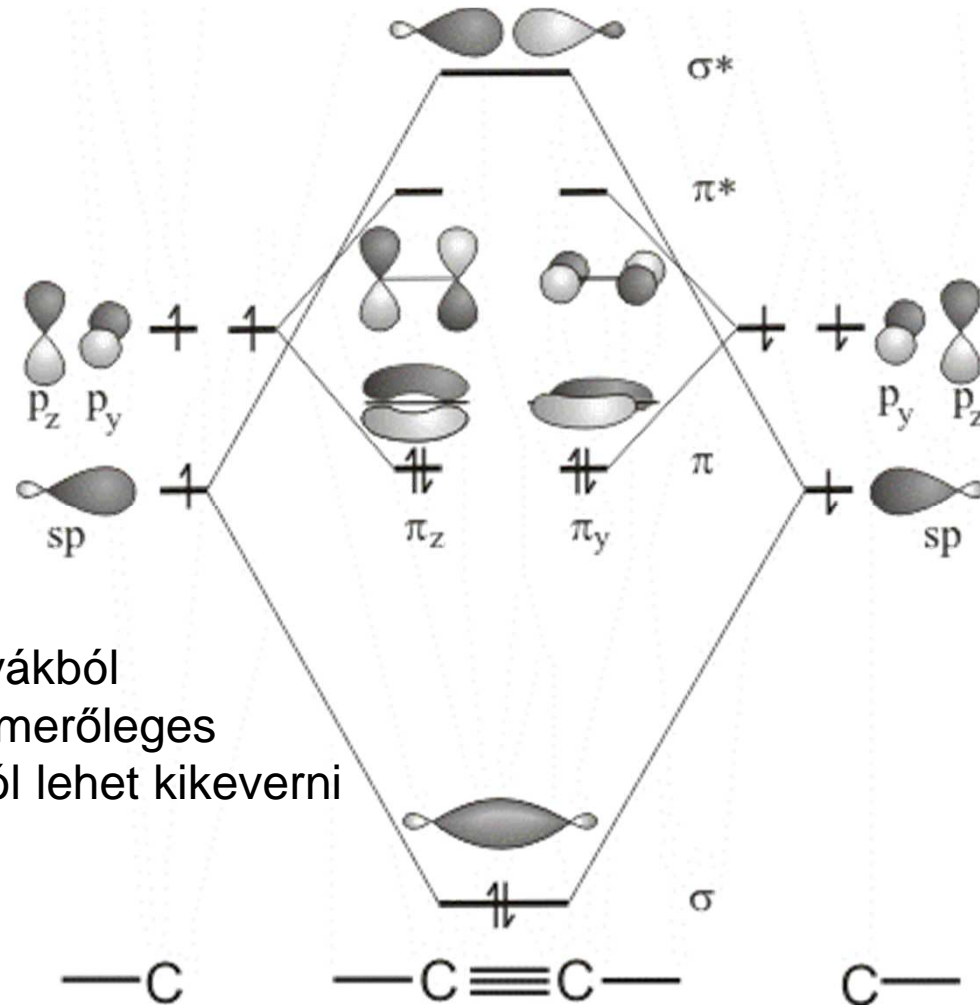
Kovalens kötés

többatomos molekulák – π -kötés: etilén



Kovalens kötés

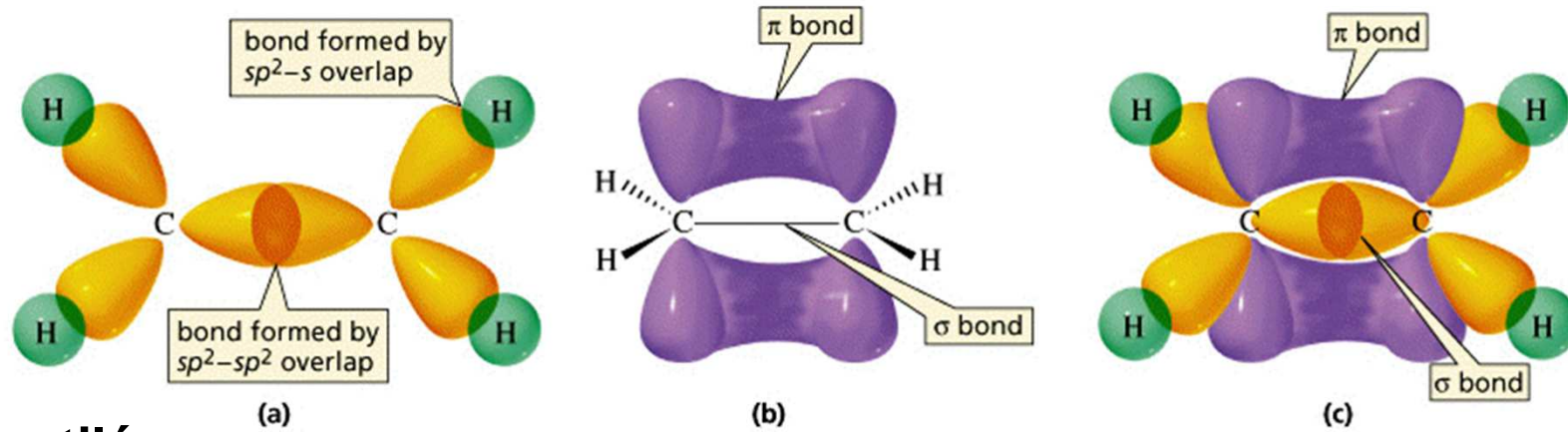
többatomos molekulák – π -kötés: acetilén



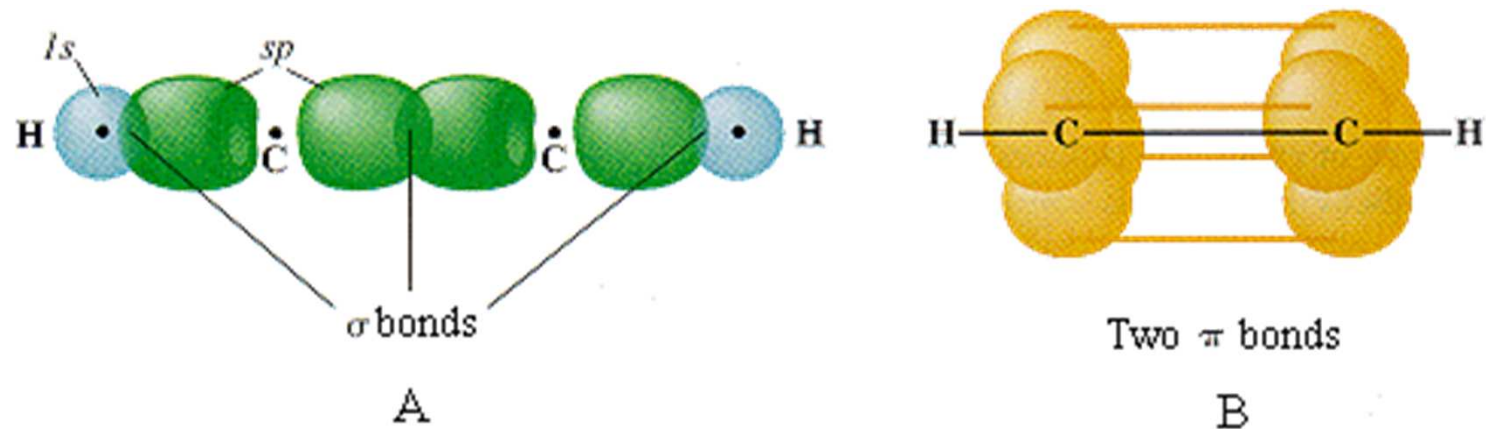
A σ -vázat sp-hibridpályákból
A π -kötést az ezekre merőleges
„maradék” p-pályákból lehet kikeverni

Etilén és acetilén

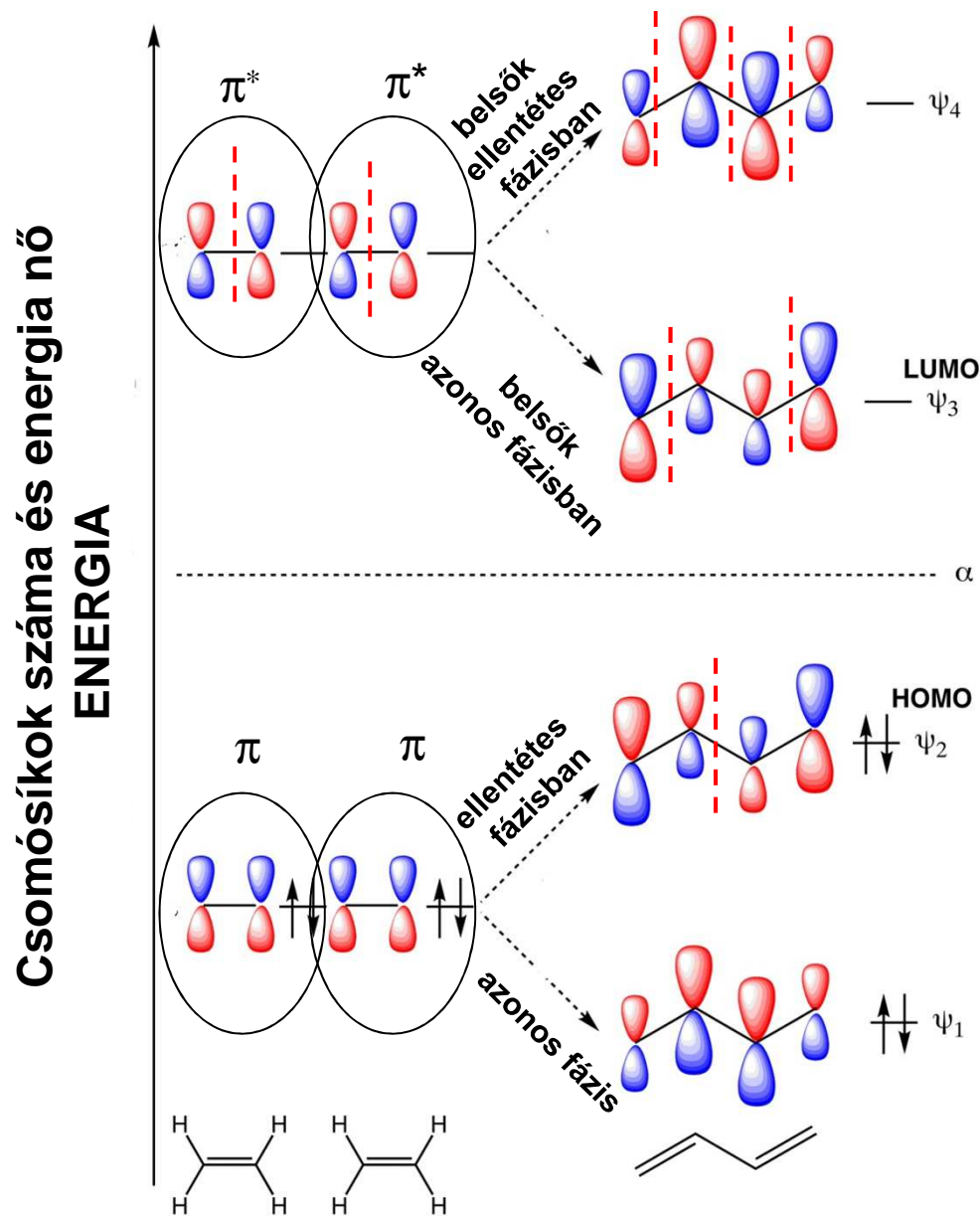
etilén



acetilén



Delokalizált kovalens kötés: 1,3-butadién



C-C-C-C síkra merőleges csomósíkok

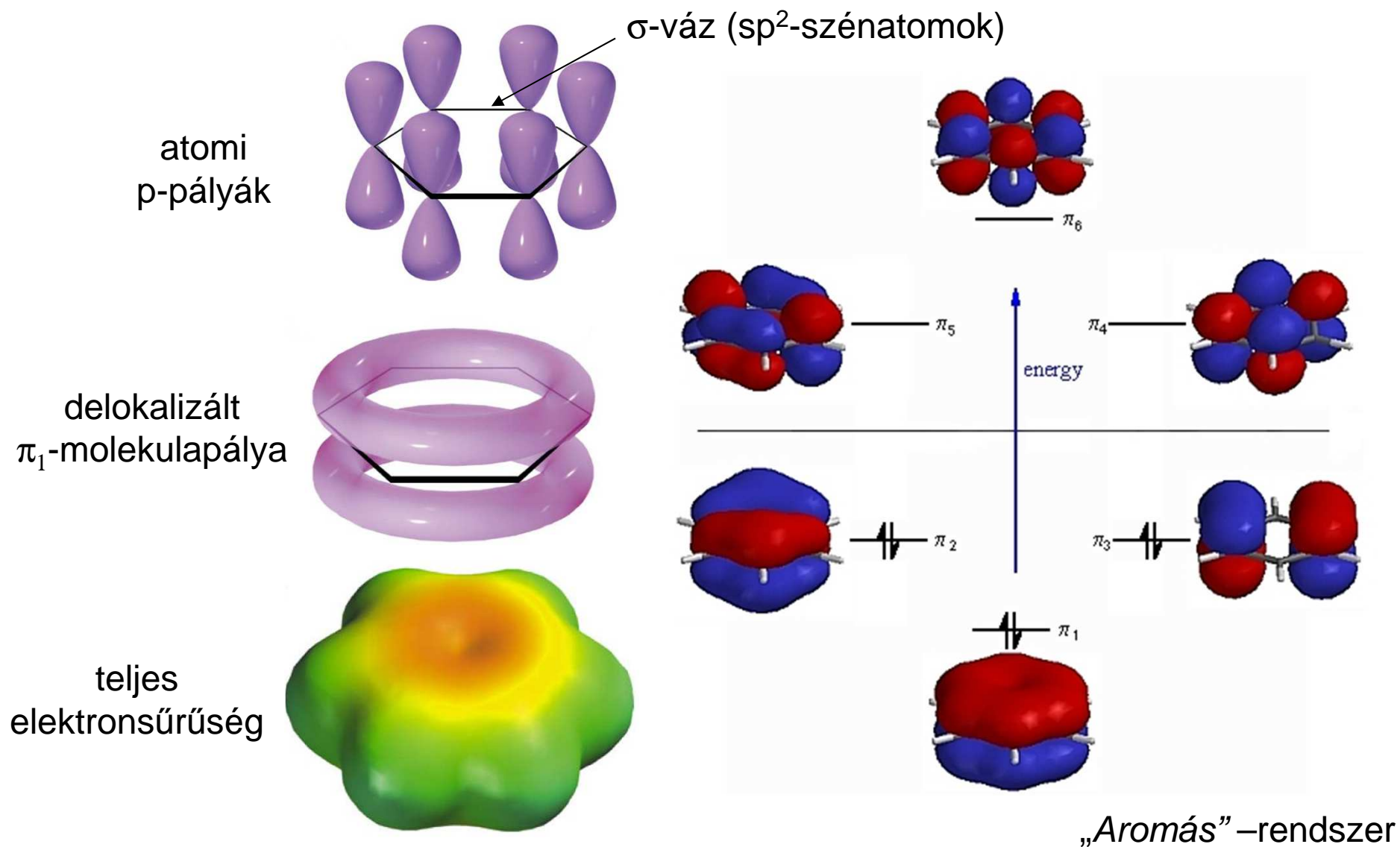
ψ_1 : 1 elektronpár 3C-C-re, azaz 1 C-C-re 1/3 elektronpár

ψ_2 : 1 elektronpár a 2 szélső C-C-re, azaz 1 szélső C-C-re 1/2 elektronpár

Szélső C-C-k:
 1 σ + 1/3 π + 1/2 π elektronpár
 kötésrend: 1.83, kötéshossz: 134 pm

Belső C-C:
 1 σ + 1/3 π elektronpár
 kötésrend: 1.33, kötéshossz: 145 pm

Delokalizált kovalens kötés: benzol (C₆H₆)

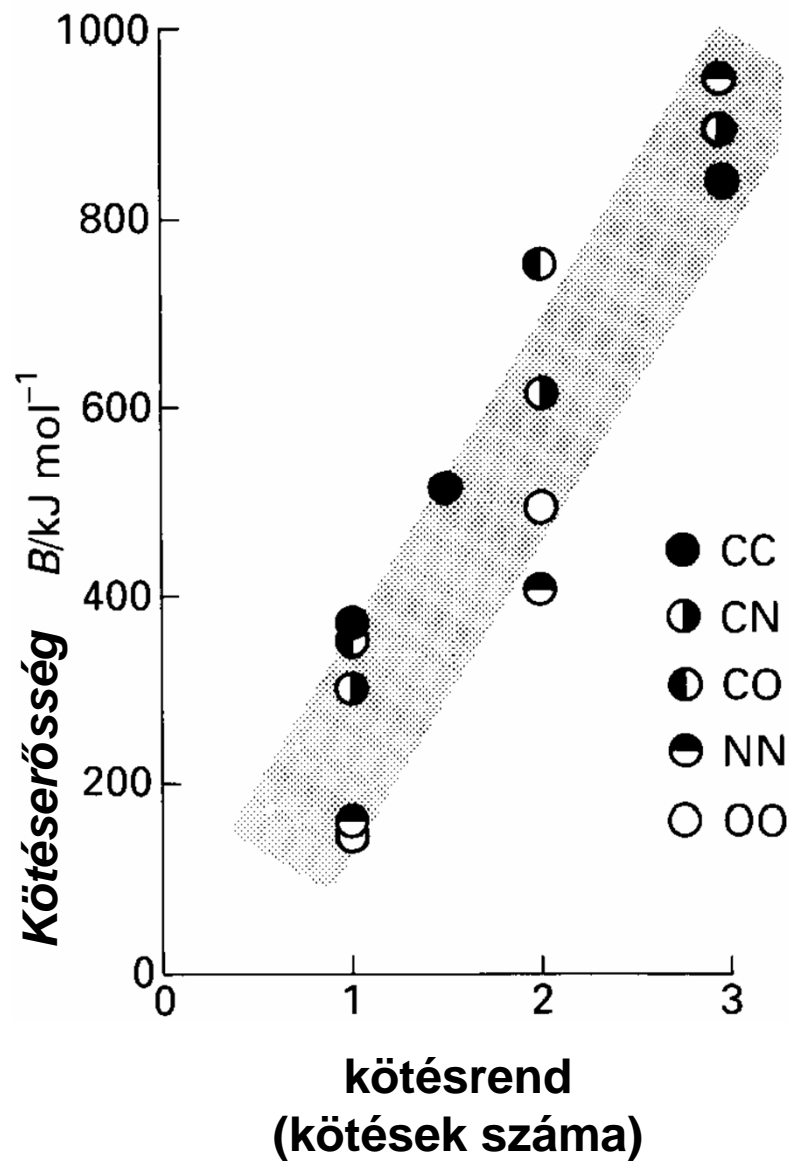


Kovalens kötés

- Kötések erőssége

	kJ/mol	hossz
C – C	-344	154 pm
C = C	+(-271)	133 pm
C ≡ C	+(-197)	120 pm
benzol	+(-156)	140 pm

Kovalens kötés



Néhány érdekesség



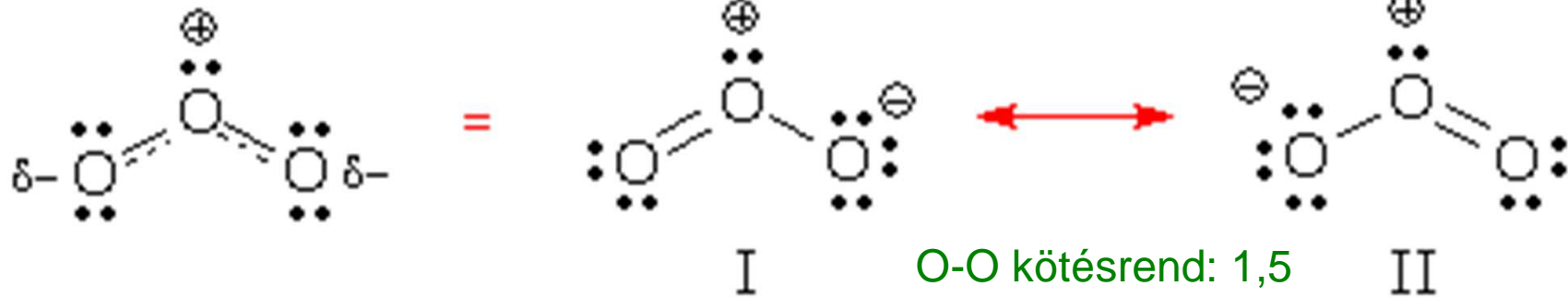
Lewis-szerkezetek rajzolása

- Számoljuk össze a vegyértékelektronokat (ionos esetben adjuk hozzá ha negatív a töltés, vonjuk le ha pozitív): $N!$
- Rajzoljuk fel a molekula vázát egyszeres kötésekkel!
- A nem központi atomok körül egészítsük ki a magános elektronpárokkal a vegyértéket, úgy, hogy megfeleljen az oktett szabálynak!
- Számoljuk össze a felrajzolt elektronokat (kettő kötésenként és elektronpáronként)! Ha ez kisebb N -nél, akkor adjunk annyi elektront a központi atomhoz, hogy elérjük N -t!
- Ha az oktett szabály nem elégül ki a központi atomra, akkor hozzunk létre kettős és/vagy hármas kötések a ligandumok magános elektronpárjaiból!
- Határozzuk meg a formális töltéseket! (Pl. oxigénatom 1 db egyes kötéssel negatív.)
- KIVÉTELEK:
 - 3. periódustól több, mint 8 elektron, pl. S, P
 - elektronhiányos molekulák kevesebb, mint 8 elektron, pl. B, Al
 - páratlan elektronszámú molekuláknál, pl. gyököknél szintén nem érvényes az oktett szabály (pl. $\cdot\text{CH}_3$)

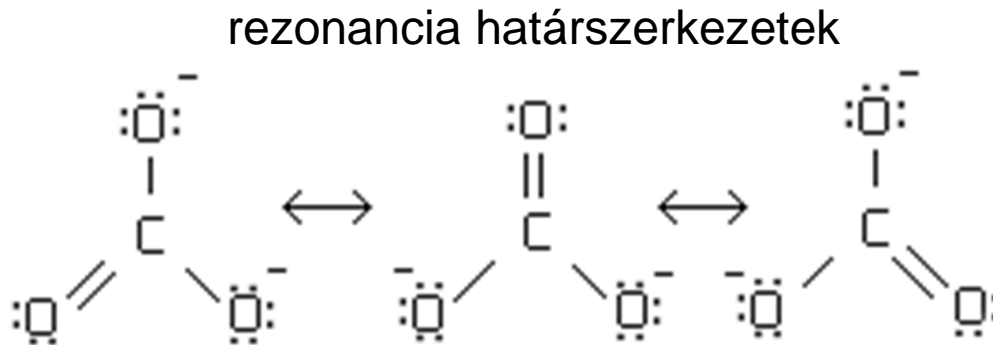
Lewis-modell

Delokalizált kötés Lewis-szerkezeti modellből

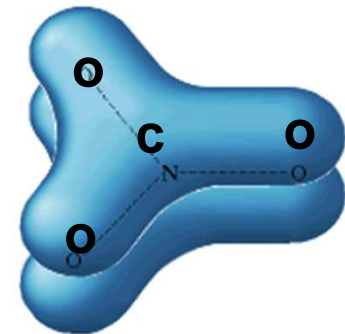
ózon



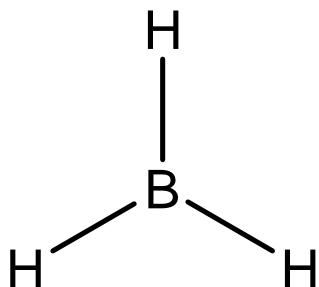
karbonát ion



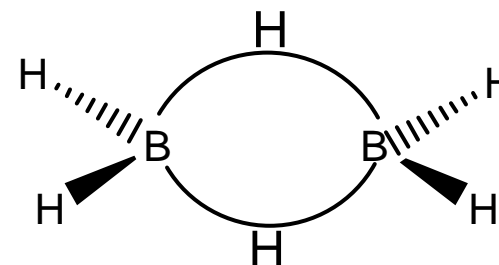
C-O kötésrend: 1,33



Elektronhiányos vegyületek

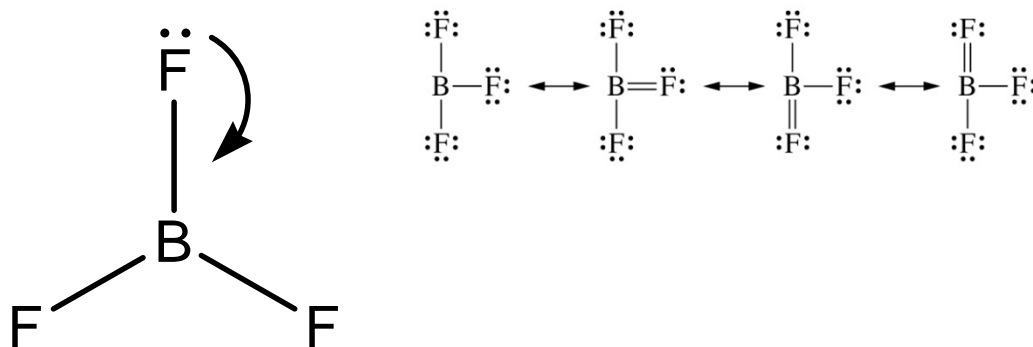


B-atom környezetében csak 6db (3 pár) elektron oktett szabály nem teljesül!

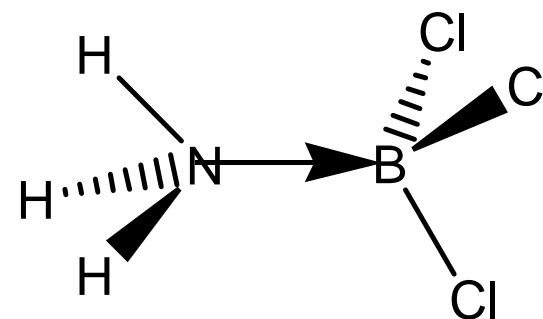


Három centrumos, két elektronos kötés

(e-pár delokalizálódik a két B- és egy H-atomra)



Az egyik ligandum magános elektronpárjának koordinációja

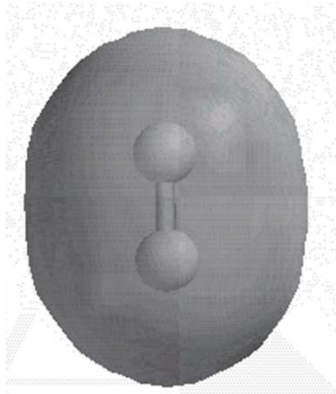
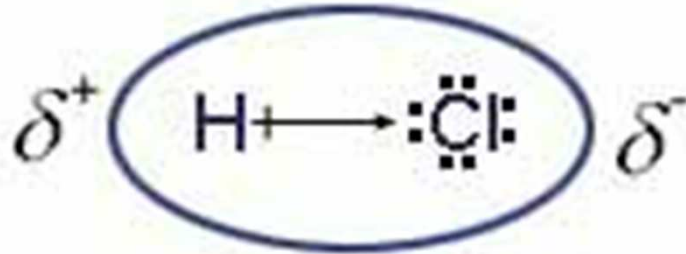


NH₃, N magános elektronpárja „koordinálódik”: datív kötés

Lewis-féle sav-bázis komplex

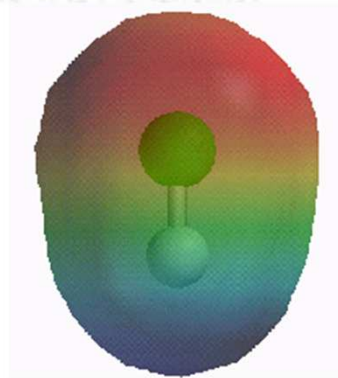
Kovalens kötés: polaritás

- Kötés polaritás



H-H
apoláris

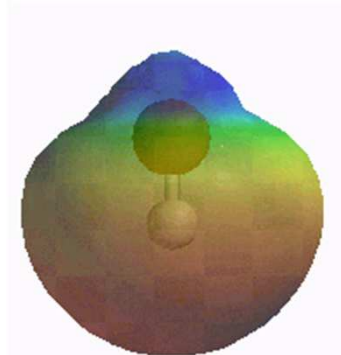
*nem dipólusos
molekula*



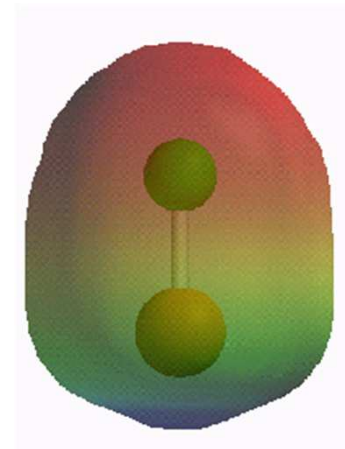
H-F
poláris

*dipólusos
molekula*

Li-H
poláris



Li-F
ionos

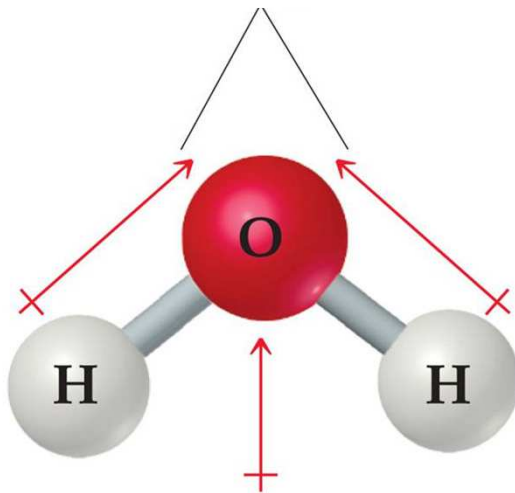


OXIDÁCIÓS SZÁM: Az a formális töltés, ami akkor lenne a molekula egy vizsgált atomján, ha a kötésekben levő elektronpárt teljesen a nagyobb EN-ú atomra helyeznénk. (Egyszerű ionnál megegyezik a töltéssel, elemeknél 0.)

Dipólusos és nem dipólusos többatomos molekulák

DIPÓLUSMOMENTUM (μ) $\mu = q \cdot d$
 q : töltés (szétvállás)
 d : szeparáció (vektora: kötéshossza és iránya)

A kötések dipólusmomentuma

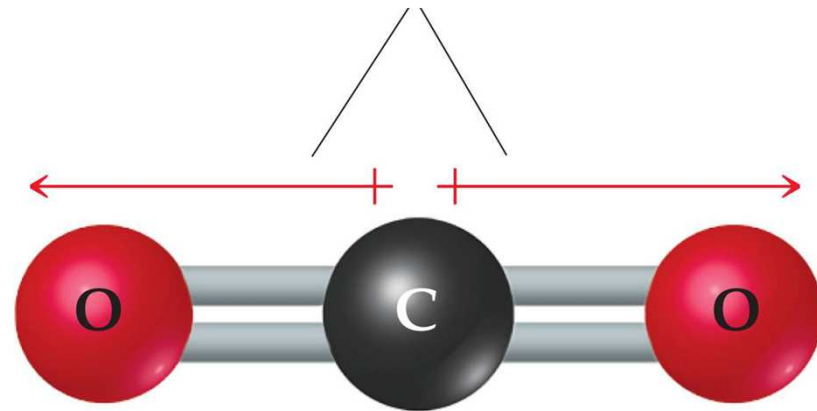


Eredő dipólusmomentum

(a)

Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

A kötések dipólusmomentuma



Eredő dipólusmomentum = 0

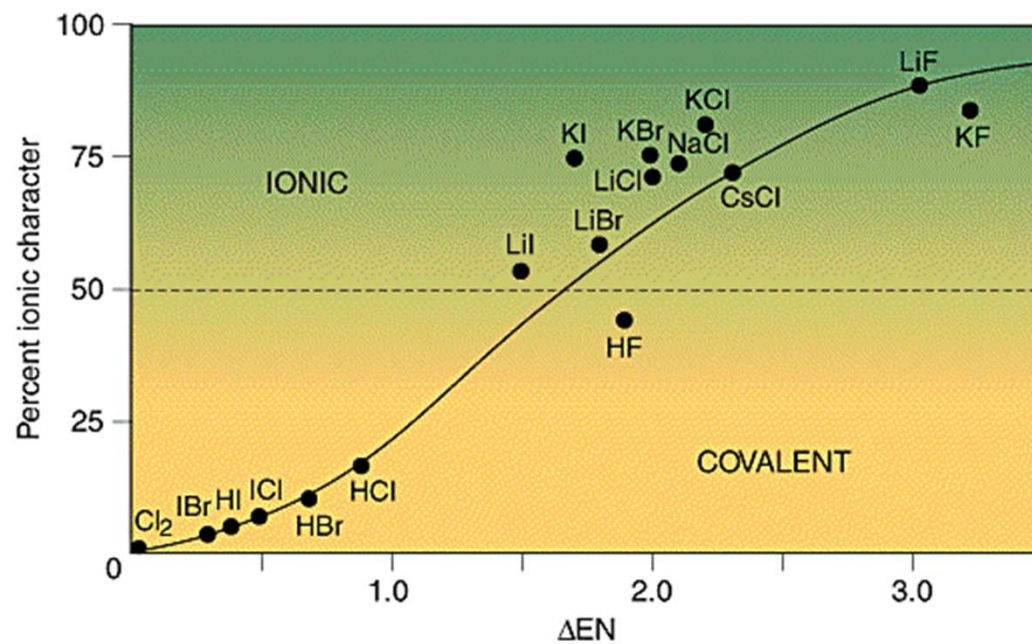
(a)

Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

Kovalens kötés

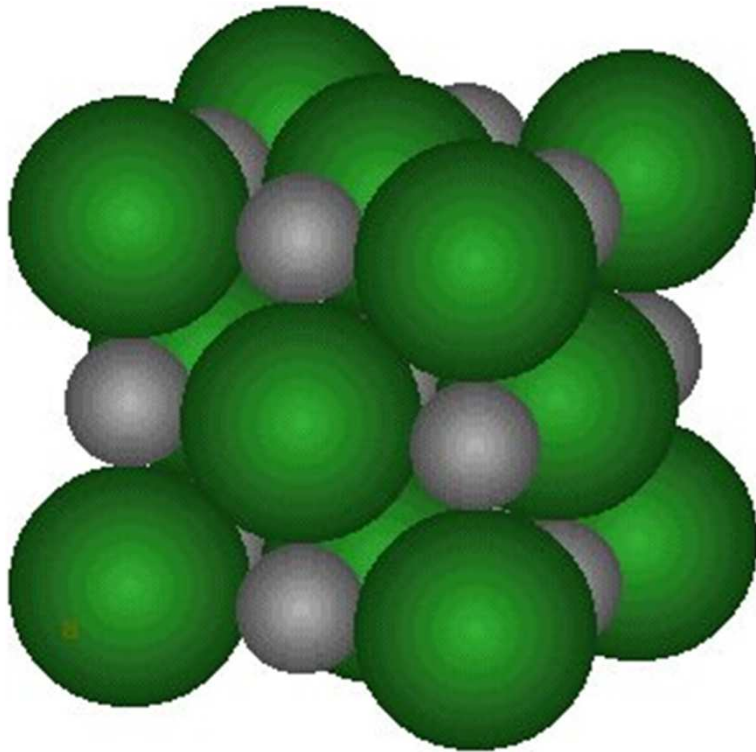
Kötés polaritás

	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



Ionos kötés

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



Na⁺

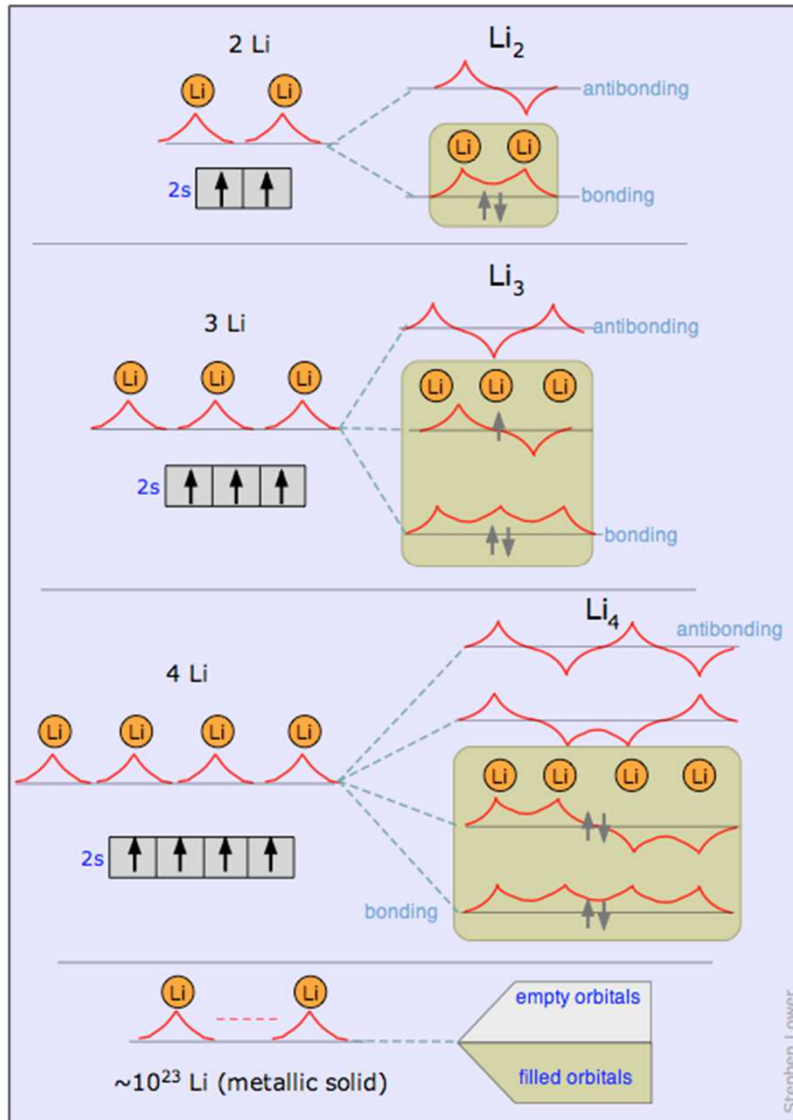
Cl⁻

Elektrosztatikus
köölcsönhatás
Rossz hő- és
elektromosvezetők

Miért jön létre az ionos kötés? $IE_1(\text{Na}) = 496 \text{ kJ/mol}$, $EA(\text{Cl}) = 355 \text{ kJ/mol}$

Azaz a $\text{Na} \rightarrow \text{Na}^+ + e^-$ nagyobb energiát igényel, mint amennyi energia felszabadul a $\text{Cl} + e^- \rightarrow \text{Cl}^-$ folyamatban! Ezért nem mondhatjuk, hogy az oktett elektronszerkezet kialakulása a „hajtóerő”. Energianyereség a ionrácsban a Coulomb- (elektrosztatikus) kölcsönhatás (rácsenergia) miatt van; ez a folyamat „hajtóerje”.

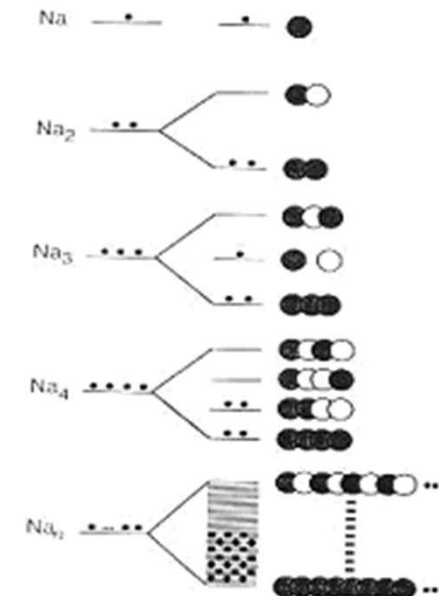
Fémes kötés



Kis EN-ú atomok esetében a külső pályán levő elektronok delokalizálódnak:

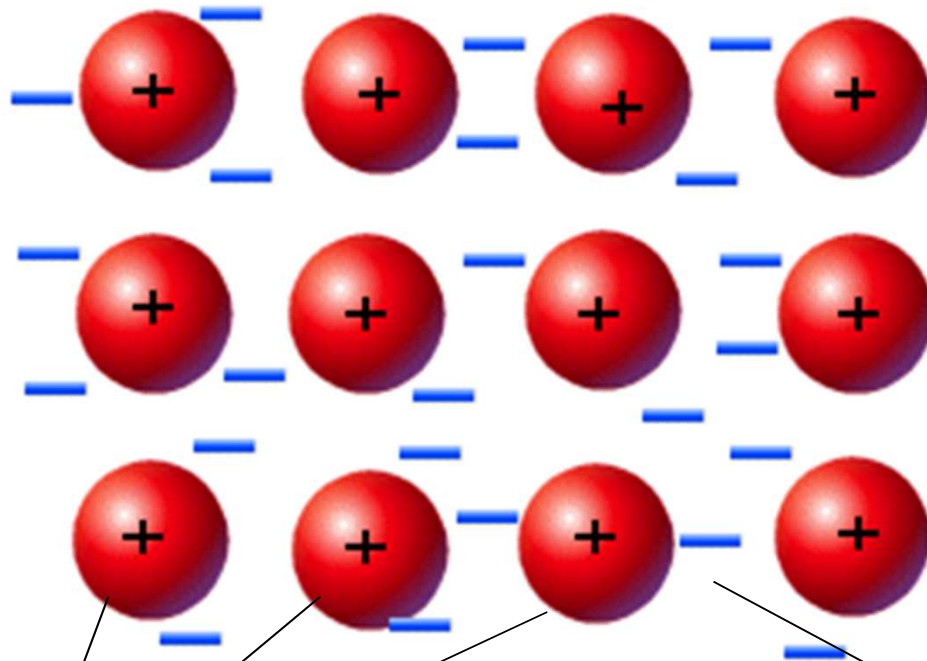
Atomok számának növelésével egyre több pálya
 → egyre sűrűbb energiaszintek

→ kis gerjesztési energia
 → jó elektromos és hővezetés



Fémes kötés

Kis elektronegativitású elemek



Jó hő- és
elektromos
vezetők

Fémionok
(atomtörzsek)

Kiterjedt, delokalizált
elektronfelhő

Elsődleges kémiai kötések

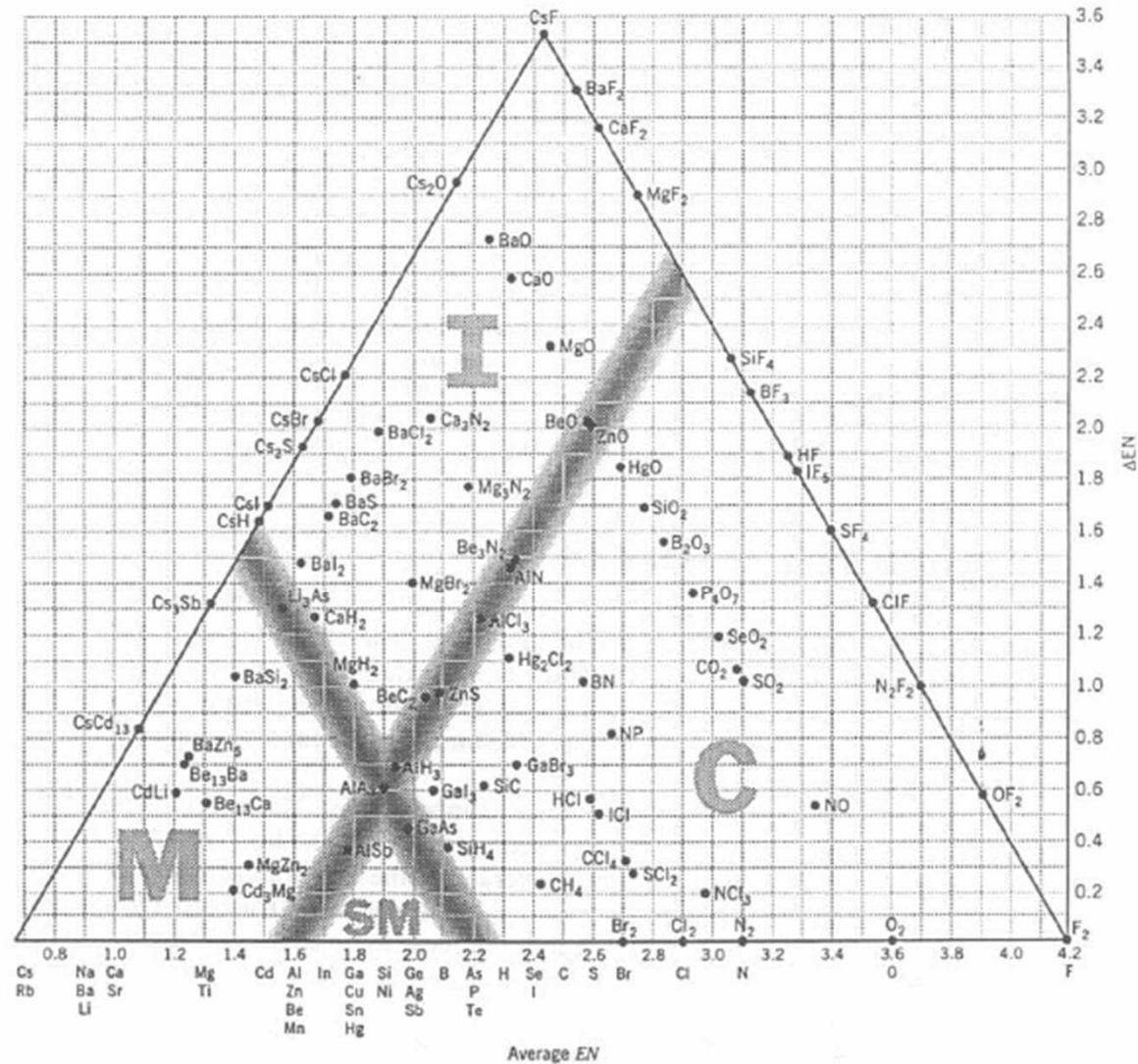
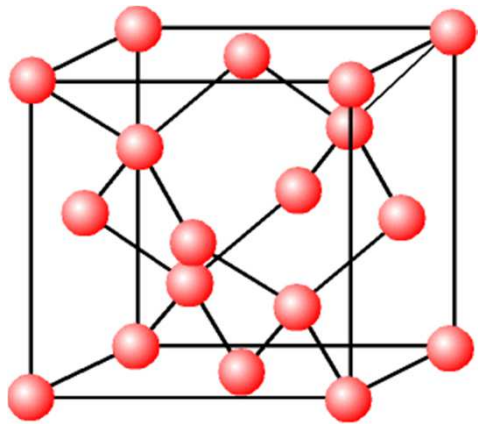


FIGURE 5.10 Bond type triangle for elements with electronegativities ranging from Cs to F. The lines separating the regions into ionic (I), metallic (M), covalent (C), and semimetallic compounds (SM) may be determined empirically and correspond approximately to lines parallel to the triangle sides drawn through Al and Te.

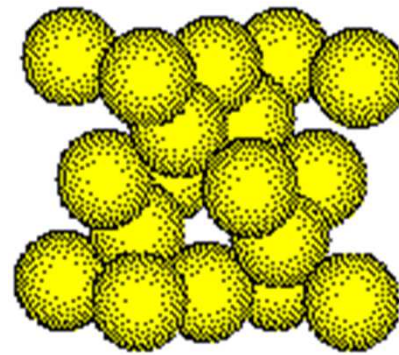
Elsődleges kémiai kötések



gyémánt:
kovalens kötések



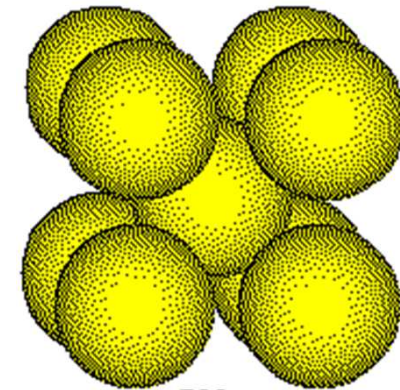
atomrács
szigetelő



500 μm

szilícium:

félvezető



500 μm

cézium:
fémes kötés



fémrács:
vezető

Kémiai kötések

```
graph TD; A[Kémiai kötések] --> B[ELSŐDLEGES]; A --> C[MÁSODLAGOS]; B --> D[KOVALENS]; B --> E[IONOS]; B --> F[FÉMES]; C --> G[HIDROGÉN-KÖTÉS]; C --> H["DIPÓL-DIPÓL, ION-DIPÓL, ..."]; C --> I["VAN DER WAALS v. DISZPERZIÓS"];
```

ELSŐDLEGES

MÁSODLAGOS

KOVALENS

IONOS

FÉMES

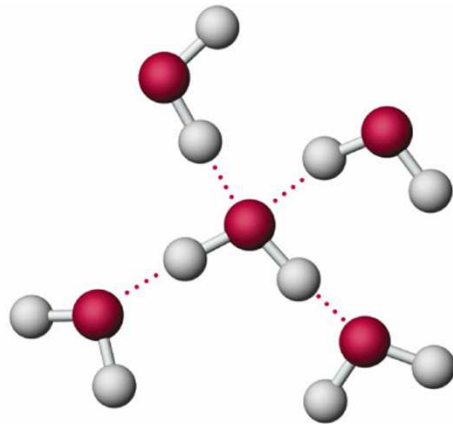
**HIDROGÉN-
KÖTÉS**

**DIPÓL-
DIPÓL,
ION-
DIPÓL, ...**

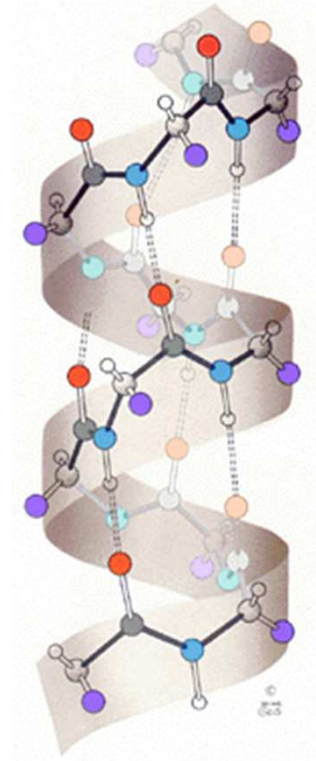
**VAN DER WAALS
v. DISZPERZIÓS**

Hidrogénkötés

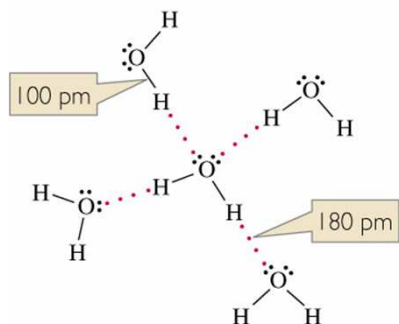
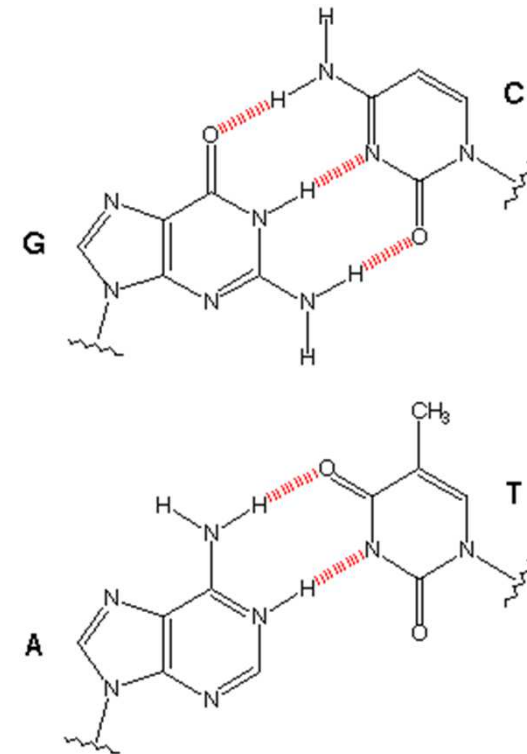
víz



peptidek



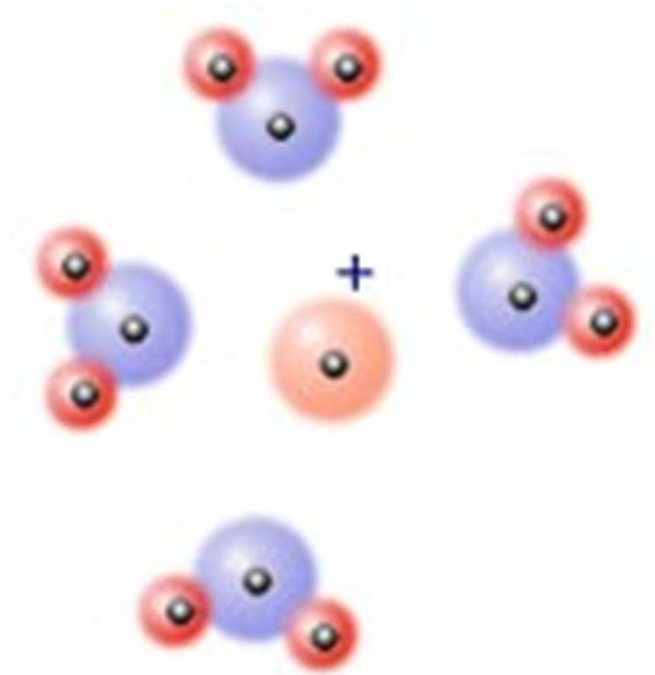
DNS: bázispárok



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...O=C-)

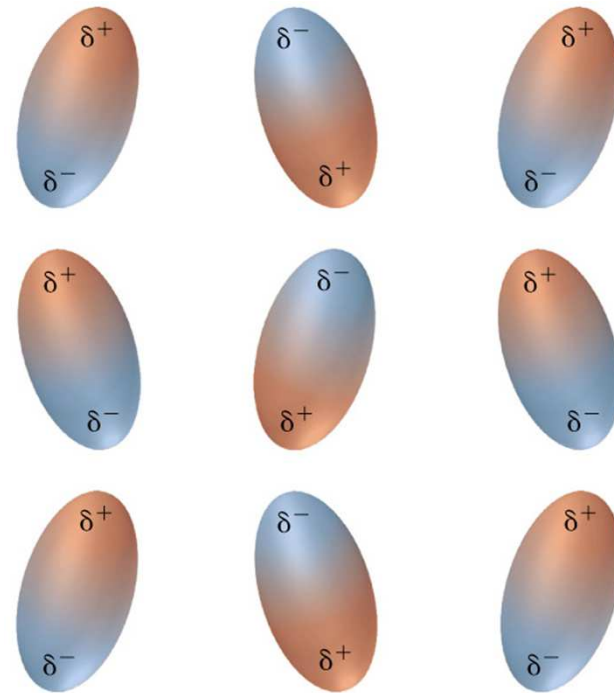
Dipól-dipól, ion-dipól kölcsönhatás

ion-dipól



pl. sók vizes oldata

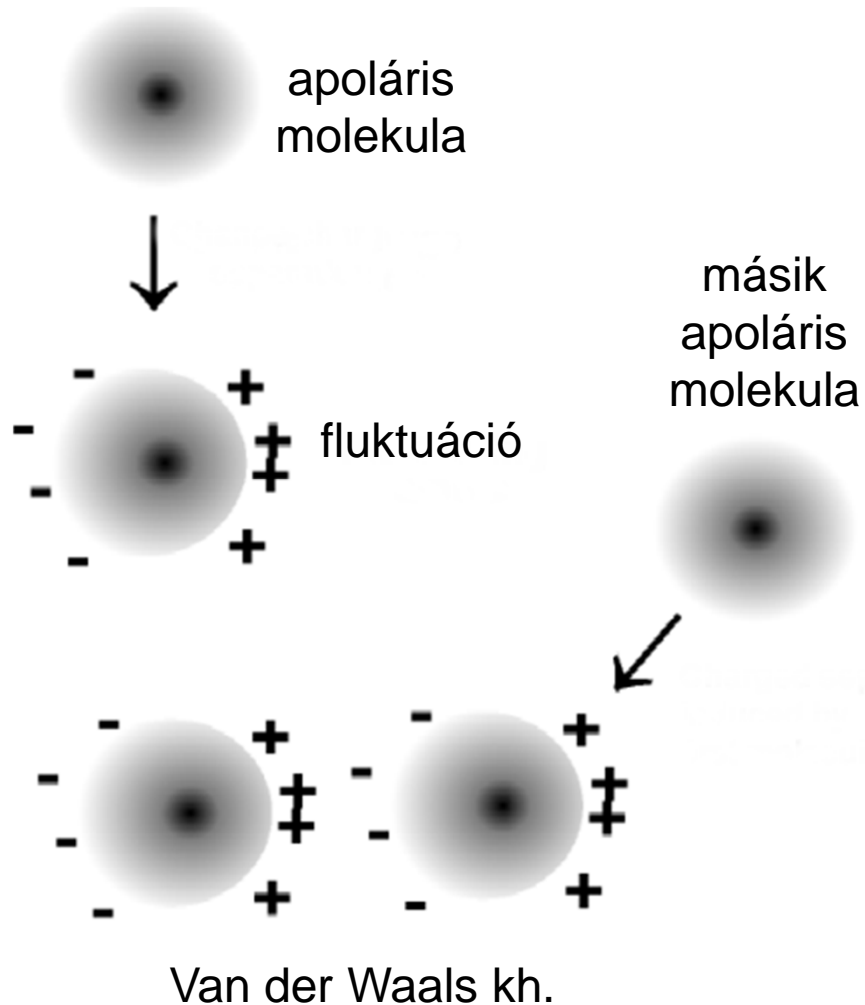
dipól-dipól



pl. éter (foly. áll.)

Van der Waals kölcsönhatás

pl. paraffin, kondenzált nemesgázok



Johannes Diderik van der Waals
(1837 – 1923)
Nobel-díj: 1910

Kémiai kötések

