

A KÉMIAI KÖTÉS KIALAKULÁSA I...

atom $\xrightarrow{\text{kötés}}$ molekula

A *kötés jellegét* befolyásolja:

A *kötés milyensége* megszabja:

A KÉMIAI KÖTÉS KIALAKULÁSA II...

Kérdések:

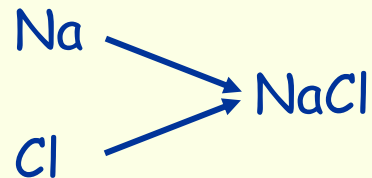
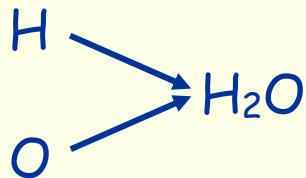
Miért csak *a vegyérték-elektronokról beszélünk?*

Mi az *általános cél?*

Hogyan teszik ezt?

A KÉMIAI KÖTÉS KIALAKULÁSA III...

Az *atomi sajátságok* és a *molekulák sajátságai* lényegesen *eltérnek* egymástól:



A kémiai kötések osztályozása:

elsőrendű...

másodrendű...

kötések száma szerint...

AZ IONOS KÖTÉS KIALAKULÁSA I...

Az *ionos* és a *kovalens* kötések kialakulása...

Kossel - 1916:

kationok...

Miért?

AZ IONOS KÖTÉS KIALAKULÁSA II...

Kossel - 1916:

anionok...

Miért?

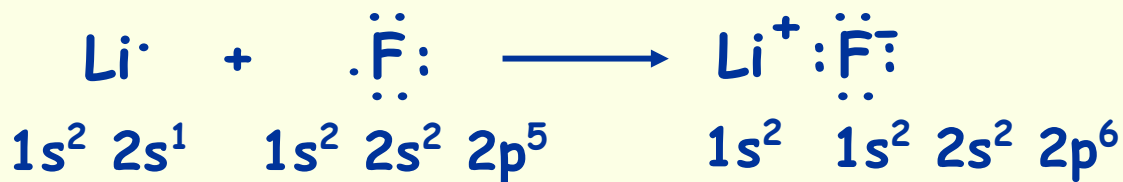
IONOS KÖTÉSŰ VEGYÜLETEK KELETKEZÉSE I...

A kémiai kötés kialakulásának magyarázatára az ún.

LEWIS vegyjelet használjuk:

pl.: $H\cdot$, $He:$, $\ddot{O}:$, stb.

Hogyan keletkezik egy IONOS VEGYÜLET?



IONOS KÖTÉSŰ VEGYÜLETEK KELETKEZÉSE II...

Az ionokat összetartó vonzás a...
...*Coulomb kölcsönhatási* energia:

...ahol

$$E = k \cdot \frac{Q_{\text{Li}^+} \cdot Q_{\text{F}^-}}{r}$$

Mivel $Q_{\text{Li}^+} > 0$ és $Q_{\text{F}^-} < 0$, ezért $Q_{\text{Li}^+} \times Q_{\text{F}^-} < 0$, így $E < 0$...

...vagyis

IONOS KÖTÉSŰ VEGYÜLETEK KELETKEZÉSE III...

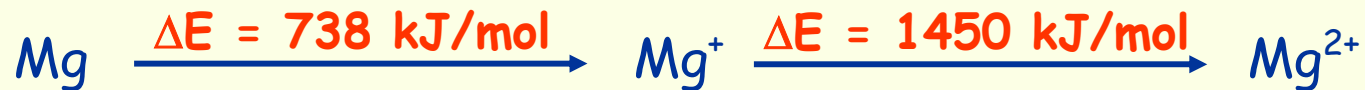
- a per. rendszerben az ionizációs energia

- *nemesgáz-konfiguráció* -ra való törekvés...

IONOS KÖTÉSŰ VEGYÜLETEK KELETKEZÉSE IV...

- beszéltünk már az ionizációs energiáról

- **kérdés:** miért képez pl. az Mg kétszeres töltésű ionos vegyületet?



Az Mg^{2+} nemesgáz konfigurációjú, de ez önmagában NEM magyarázza az MgCl_2 létezését!!!

Magyarázat:

az MgCl_2 keletkezése során $E = 2527 \text{ kJ/mol}$ **energia szabadul fel**, ami...

...**FEDEZI** a $738 + 1450 = 2188 \text{ kJ/mol}$ **ionizációs energiát!**

IONOS KÖTÉSŰ VEGYÜLETEK ÁLTALÁNOS JELLEMZŐI...

A KOVALENS KÖTÉS I...

MIK AZOK A MOLEKULÁK:....?

...a molekulák létezését már a XVII. században megjósolták, de...

...az atomokat összetartó erők magyarázatára a XX. sz. -ig kellett várni...

...1916 - Gilbert, Lewis →

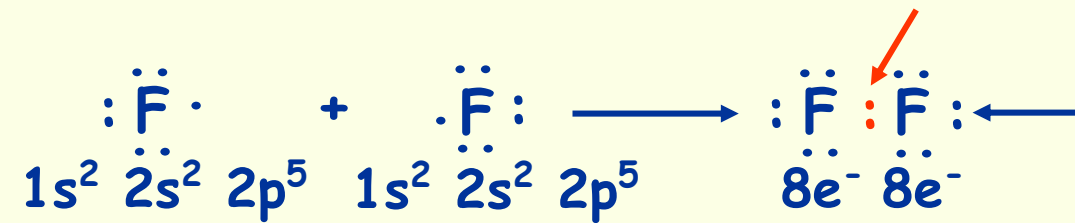
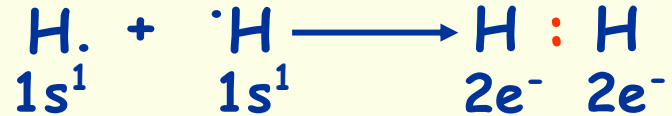
...a *Kossel-elmélet korlátja:*

A KOVALENS KÖTÉS II...

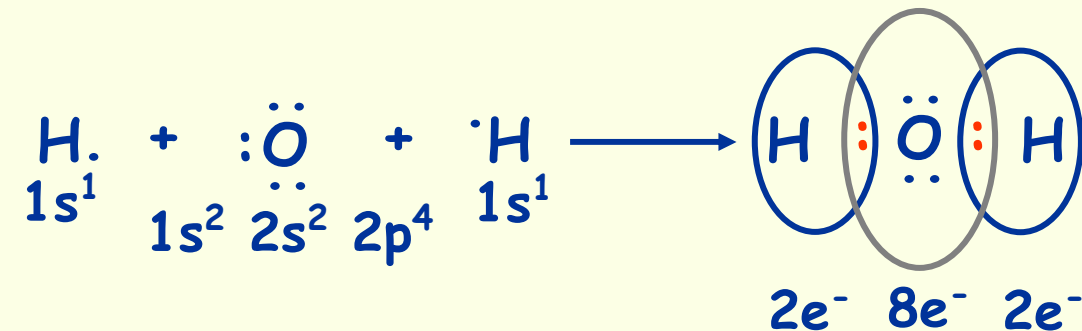
AZ ELMÉLET KIALAKULÁSA SORÁN FELMERÜLŐ KÉRDÉSEK:

A KOVALENS KÖTÉS III...

Molekulák kialakulása LEWIS szerint...

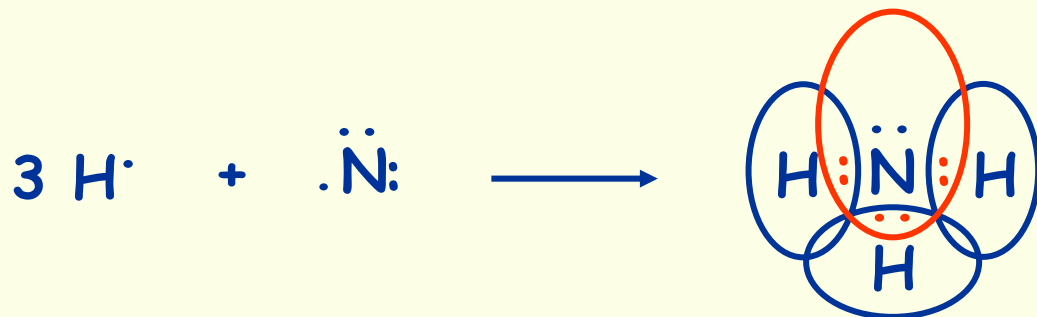


...csak a $2s^2 \ 2p^5$ (-) vesz részt
...a kötés kialakításában

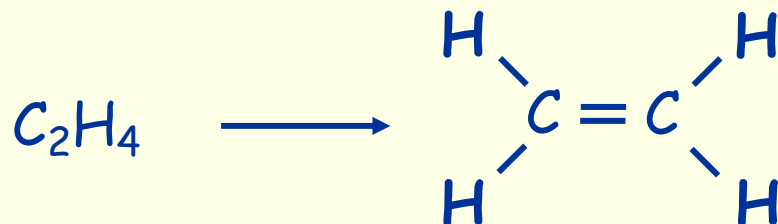
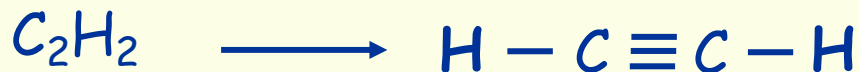
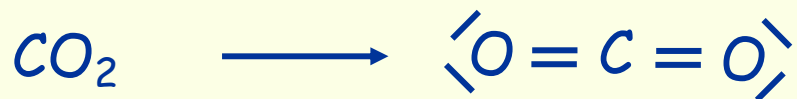


A KOVALENS KÖTÉS IV...

az ammónia molekula kialakulása:



H → hélium szerkezet
N → neon szerkezet
egy magános (-)párral



A KOVALENS KÖTÉS V...

Az eddigiek alapján...

...két atomhoz tartozhat...

egy elektronpár

két elektronpár

három elektronpár

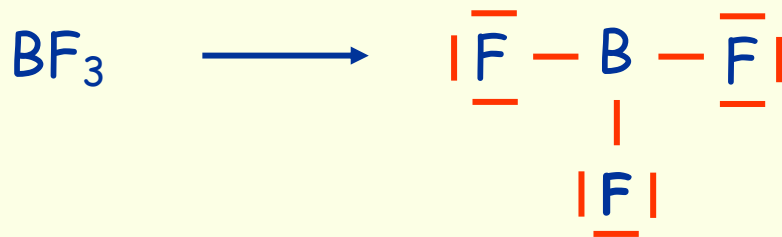
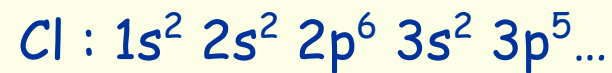
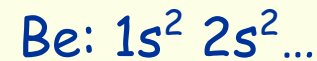
A KOVALENS KÖTÉS VI...

A megfigyelések általánosítása:

...általánosítva ezt **OKTETT SZABÁLY**-nak nevezik

A KOVALENS KÖTÉS VII...

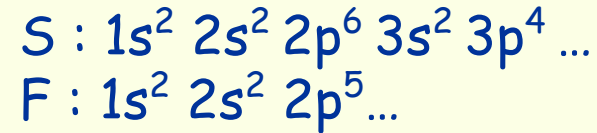
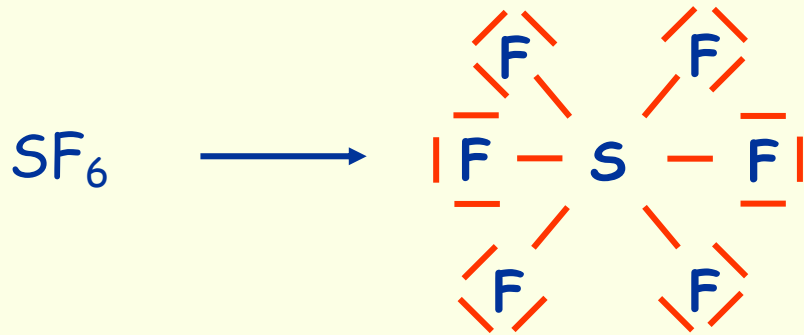
Kivételek az oktett szabály alól...



OKA:

A KOVALENS KÖTÉS VIII...

Kivételek az oktett szabály alól...



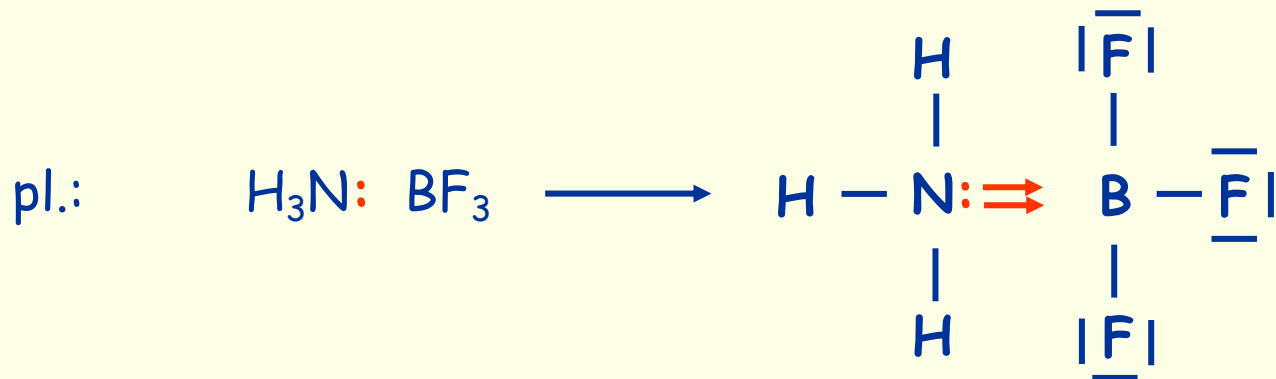
...a 3s pálya elektronjai,
...a 3p pálya elektronjai és
...a 3d pálya elektronjai vesznek részt a kötés kialakításában

KOVALENS KÖTÉSEK TÖBBELEKTRONOS RENDSZEREKBEN...

A kovalens kötésben a vegyérték (-) -k vesznek részt...

kovalens kötés:

- kolligáció*
- koordináció*
datív kötés



KOVALENS VEGYÜLETEK SAJÁTSÁGAI...

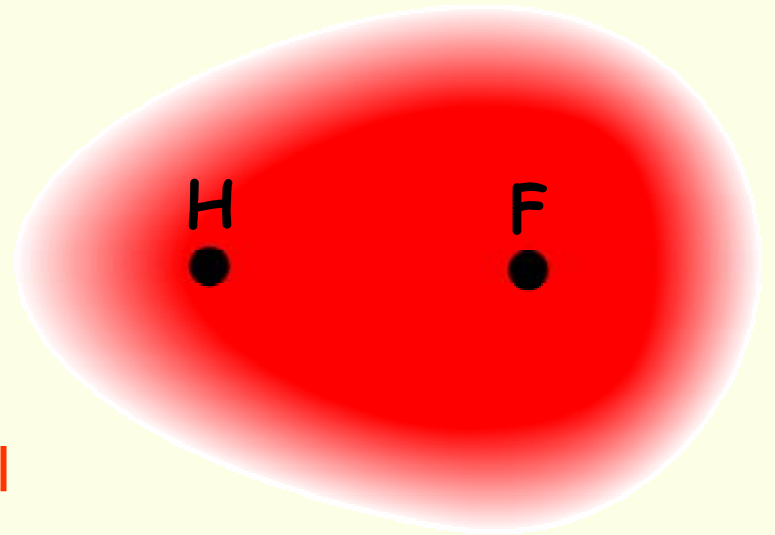
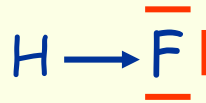
A kovalens vegyületekre jellemző...

APOLÁROS - POLÁROS KÖTÉS I...

Megfigyelés:...

APOLÁROS kötés...

POLÁROS kovalens beszélünk...



APOLÁROS - POLÁROS KÖTÉS II...

...a poláros kötés átmenet az apoláros és az ionos kötés között

...a kötések megkülönböztetése:

APOLÁROS - POLÁROS KÖTÉS III...

Elektronaffinitás...

Elektronnegativitás...

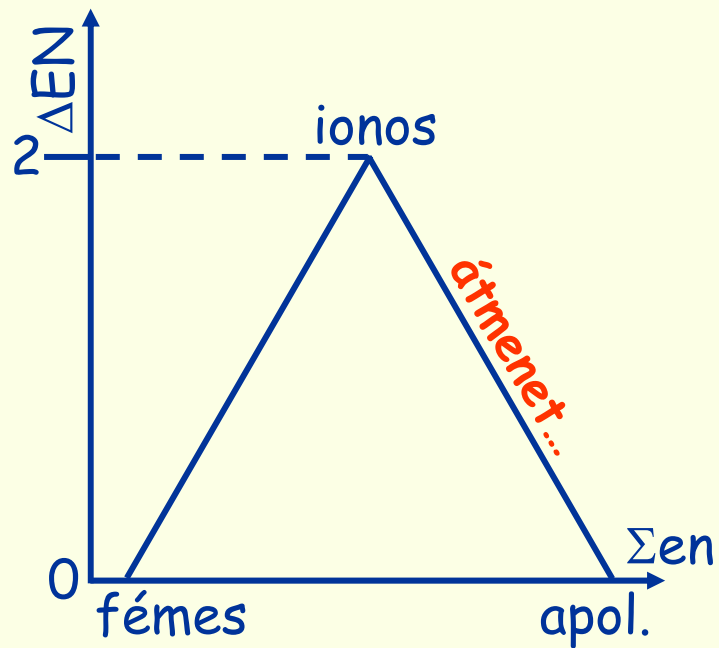
Pauling...

APOLÁROS - POLÁROS KÖTÉS IV...

...HIPOTÉZIS:

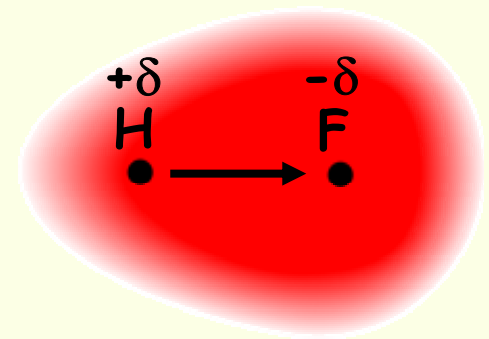
...az elektronegativitás...

APOLÁROS - POLÁROS KÖTÉS V...



...az EN alapján **becsülhető**
a képz. molekula **ionos v. kovalens jellege**

...két atom között a **kötés erőssége** függ ΔEN -től



APOLÁROS - POLÁROS KÖTÉS VI...

...töltés szétválással DIPÓLUS molekula képződik...

...a dipólus momentum (vektori mennyiség...) jellemző a dipólus nagyságára

...SZIMMETRIKUS molekulák:

pl.: CO_2 , CCl_4 , CH_4 , C_2H_2 ...

...ASZIMMETRIKUS molekulák:

pl.: HF , HCl , H_2O , HOCl ...

APOLÁROS - POLÁROS KÖTÉS VII...

...az apoláros kötés \neq apoláros molekula

...apoláros kötés...

...poláros kötés...

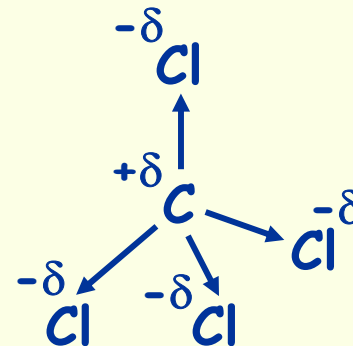
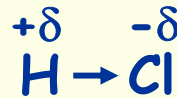
...A) szimmetrikus molekula:

...B) aszimmetrikus molekula:

APOLÁROS - POLÁROS KÖTÉS VIII...

...az apoláros kötés \neq apoláros molekula

Példa:



... ΔEN :

...töltés szétválás:

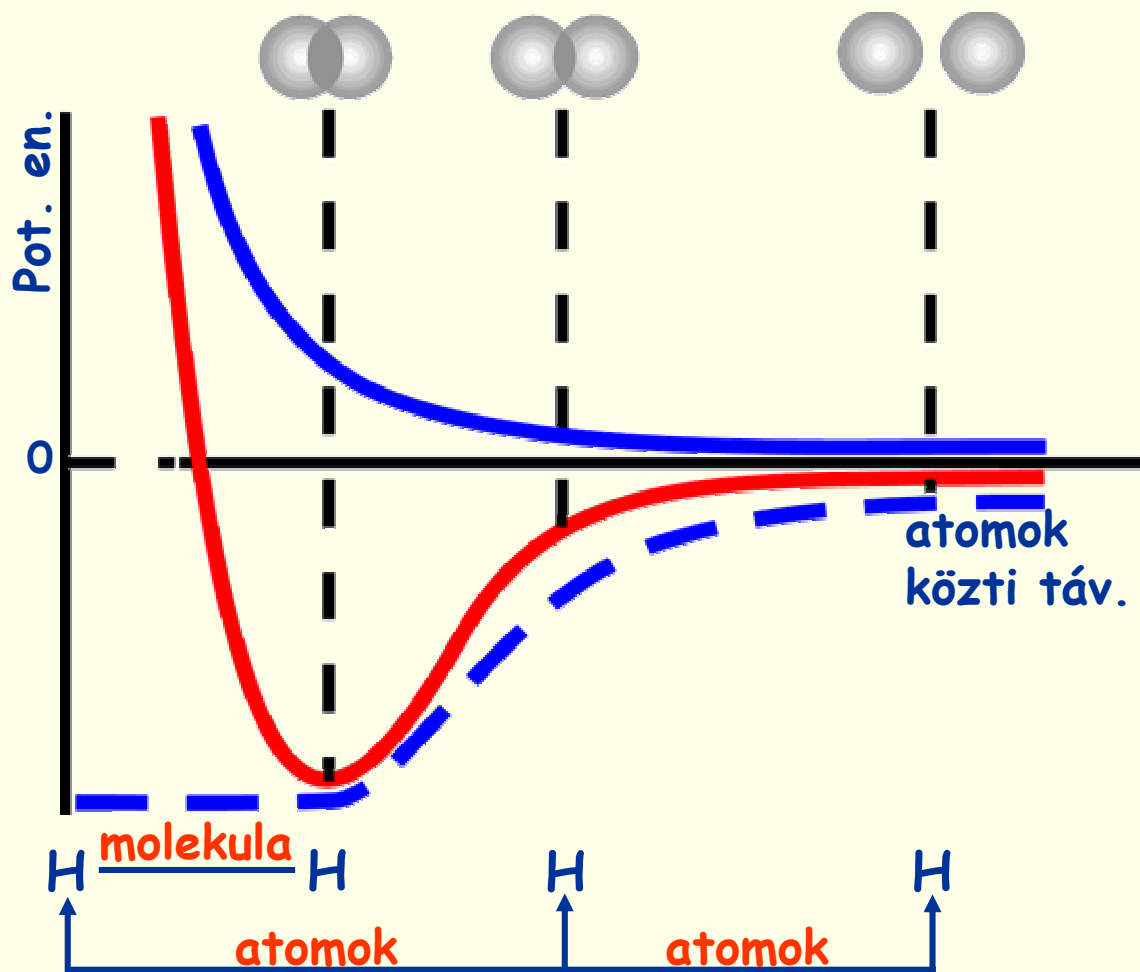
...dipólusok léte:

... Σ dip. momentum:

...a molekula kifelé:

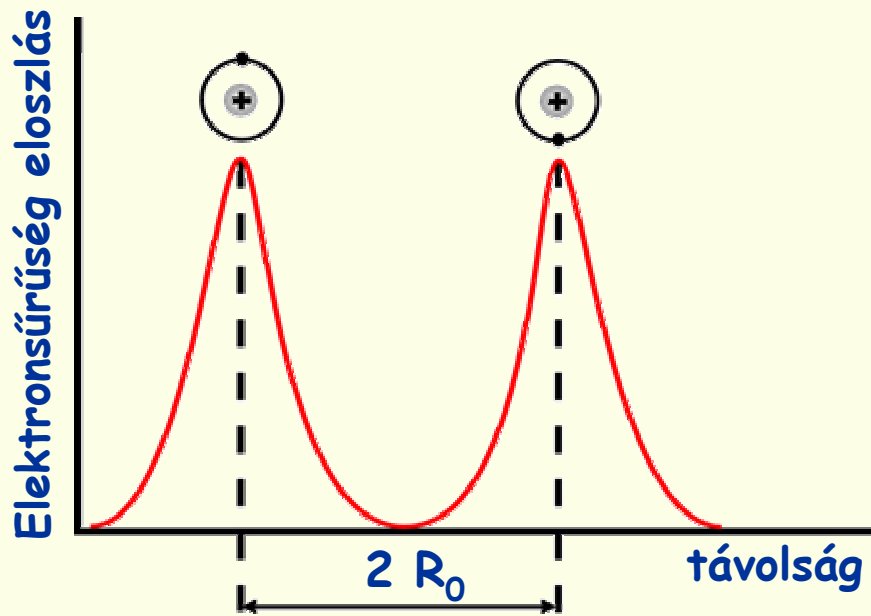
A VEGYÉRTÉKKÖTÉS ELMÉLET...

...feltételezés: ...a molekulában az (-) -ok atompályákon mozognak...

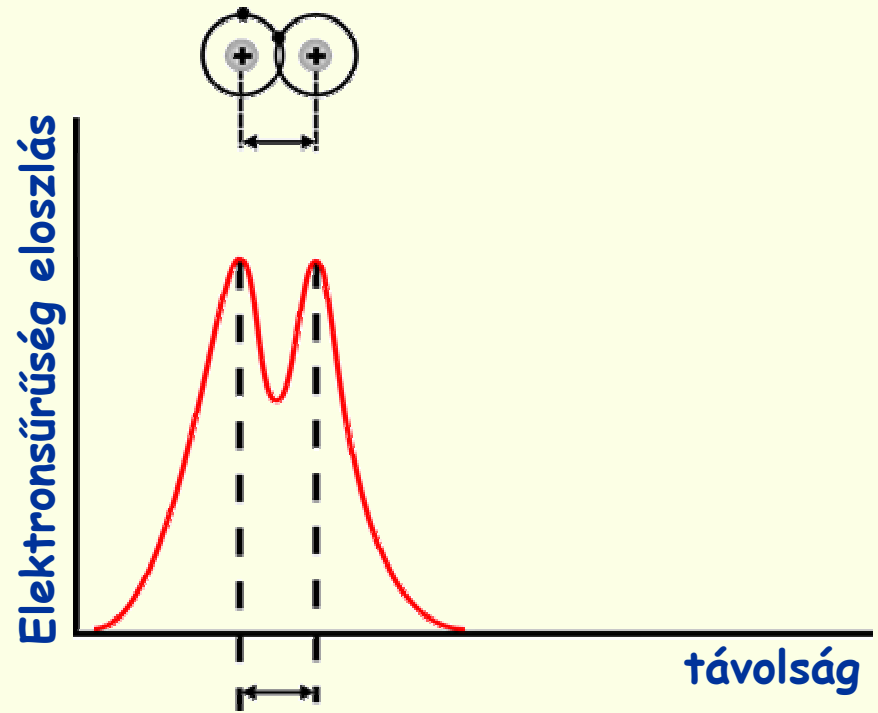


AZ ELEKTRONSŰRŰSÉG ELOSZLÁS VÁLTOZÁSA...

...A HIDROGÉN MOLEKULA KELETKEZÉSE SORÁN



hidrogén atomok



hidrogén molekula

Kémia I. - 5. rész

Anyagi halmazok

ANYAGI HALMAZOK I...

...korábban beszéltünk atomokról, molekulákról és most...

...*molekula halmazok* -ról → a makroszkópikus világot építik fel

...a molekulák →

...*anyagi halmazok*... ...igen *sok molekulából* felépülő rendszerek

...tulajdonságait meghat.

ANYAGI HALMAZOK II...

...az anyagok háromféle halmazállapotban léteznek...

ANYAGI HALMAZOK III...

...a szilárd és folyadék molekulák között *kevés szabad (üres) hely* van...

...következmény:

...folyadékok:

...szilárd anyagok

ANYAGI HALMAZOK IV...

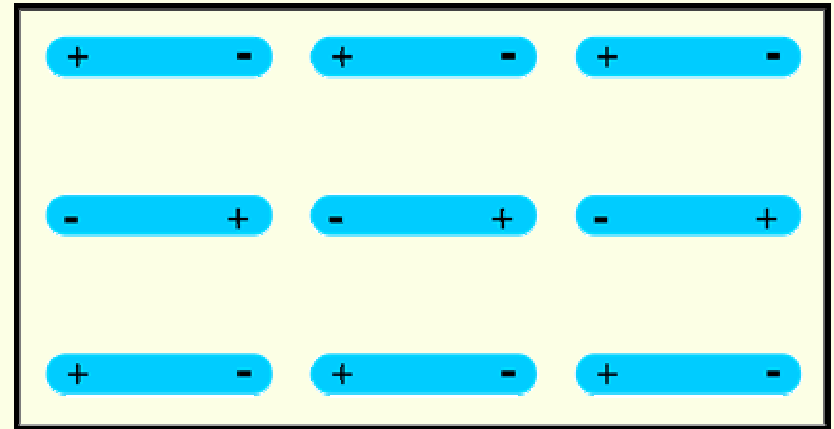
...a halmazokat *másodrendű kötések* tartják össze...

...fajtái: -

...*másodrendű kötések*...

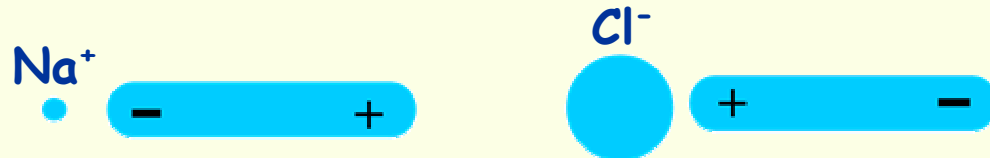
ANYAGI HALMAZOK, Van der Waals ERŐK I...

A) orientáció (DIPÓL - DIPÓL) erők



ANYAGI HALMAZOK, Van der Waals ERŐK II...

B) indukciós erők (ION - DIPÓL erők)... (1)



ANYAGI HALMAZOK, Van der Waals ERŐK III...

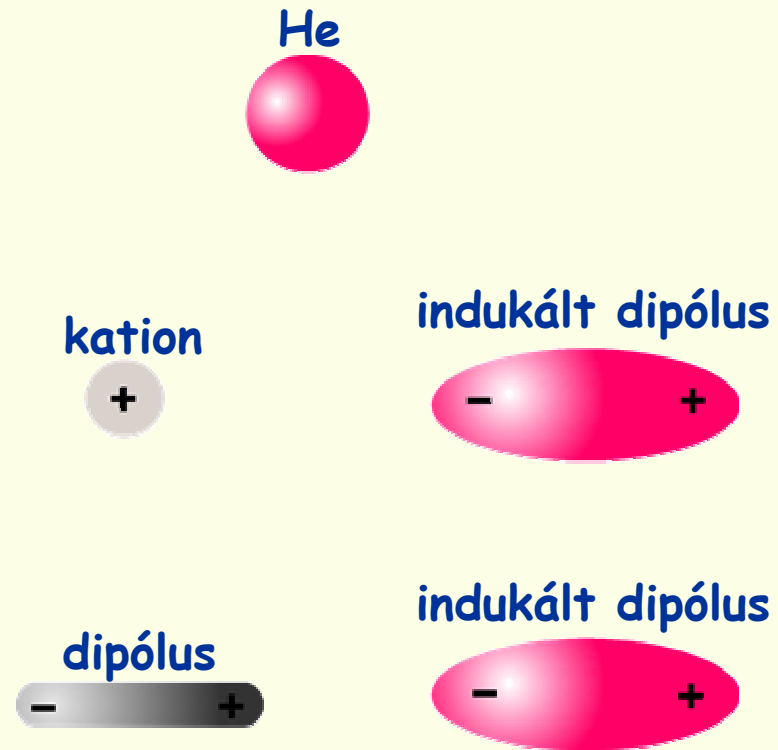
B) indukciós erők... (2)

ANYAGI HALMAZOK, Van der Waals ERŐK IV...

B) indukciós erők... (3)

ANYAGI HALMAZOK, Van der Waals ERŐK V...

C) diszperziós erők... (1)



ANYAGI HALMAZOK, Van der Waals ERŐK VI...

C) diszperziós erők... (2)

- kifelé semleges, apoláros molekulák között is létezhetnek (pl. hélium)

ANYAGI HALMAZOK, Van der Waals ERŐK VII...

C) diszperziós erők... (3)

a diszperziós kölcsönhatások lehetnek...

ANYAGI HALMAZOK, Van der Waals ERŐK VIII...

általában...

a diszperziós erők gyengék (igaz He esetére) *DE...*

ANYAGI HALMAZOK, Van der Waals ERŐK IX...

a diszperziós erők...

...sok atomos, sok elektronos molekulák között képződnek fel

...a diszperziós erők következményeként...

HIDROGÉN-HÍD KÖTÉS I...

...*SPECIÁLIS* dipól - dipól kölcsönhatás...

...*vegyületek forráspontjának* tanulmányozásakor ismerték fel

HIDROGÉN-HÍD KÖTÉS II...

...megfigyelés:

...a forrpon t a per. rendszerben
felülről lefelé nő,
a *moltömeg növekedése* okozza:

F₂: - 180 °C

Cl₂: - 30 °C

Br₂: + 45 °C

I₂: + 140 °C

...ezzel szemben:

H - N

H - O

H - F között

igen nagy az EN -beli különbség

HIDROGÉN-HÍD KÖTÉS III...

...a *Van der Waals* kötések energiája ált. *2 - 15 kJ/mol*

...a *H-híd* kötések energiája *~40 kJ/mol*

HIDROGÉN-HÍD KÖTÉS IV...

Kérdés: ...miért forr magasabb hőmérsékleten a víz, mint a HF?

...az *EN különbség miatt* az *várható*, hogy a hidrogén-fluorid forrponja magasabb, mint a vízé.

...a mérések ennek fordítottját mutatják.

OKA:

A VÍZ SZERKEZETE ÉS TULAJDONSÁGAI I...

...a víz annyira *közönséges*, hogy *különleges sajátságai* fel sem tűnnek...

...sok ionos anyag kitűnő *oldószer*

...*hidrogén-hidak kialakítására* képes anyagokat jól oldja...

...nagy a *hőkapacitás* -a

OKA: a hidrogén-hidakat *szét kell szakítani* ahhoz, hogy...
...a vízmolekulák *átlagos kinetikus energiáját növelni* tudjuk
...*emiatt sok hőt nyel el*, de hőmérséklete nem változik jelentősen

FORD.: ...*sok hőt ad le*, de *hőmérséklete nem csökken* számottevően
(lásd az óceánok *hőmérséklet-kiegyenlítő hatás* -át...)

A VÍZ SZERKEZETE ÉS TULAJDONSÁGAI II...

...a jég sűrűsége kisebb, mint a vízé, azért mert...

...az oxigén körül a hidrogén atomok tetraéderesen hely. el, **3D szerkezet**

... 2 hidrogén atom kovalens kötést képez...

...ua. 2 hidrogén hidrogén-hidakat is képez

...ez csak a vízre jellemző

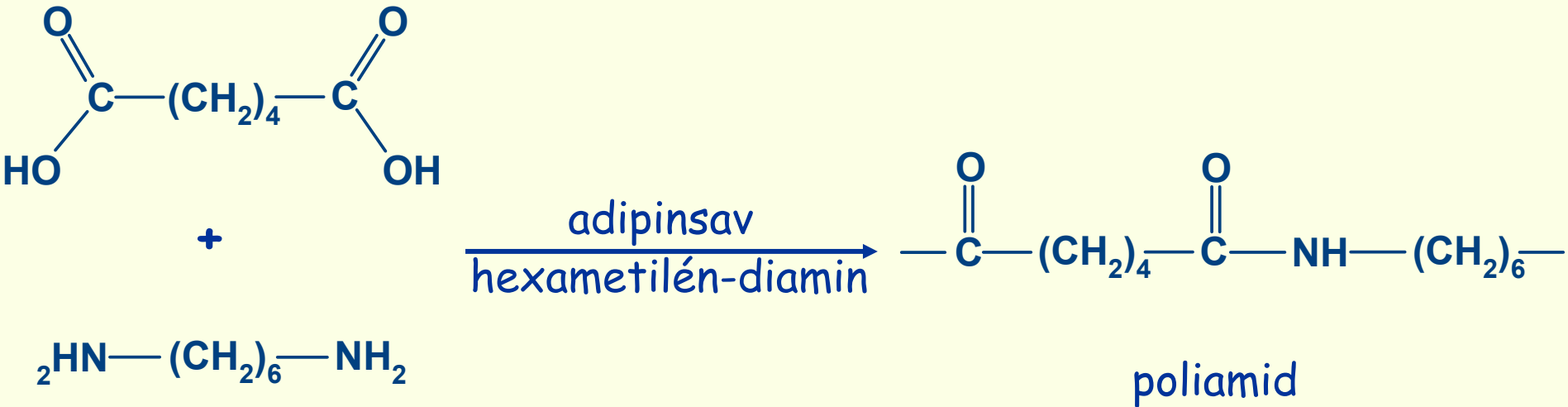
A VÍZ SZERKEZETE ÉS TULAJDONSÁGAI III...

...a *vízmolekulák* viszonylag *távol* vannak egymástól, sok *hely* van közöttük

...*olvadáskor* a 3D szerkezet csaknem érintetlen marad, *DE...*

HIDROGÉN-HIDAK A KÖRNYEZETÜNKBEN I...

...1928 - Dr. Wallace Carrothers (1896 - 1937)



- kémiaailag inert
- könnyű szálát húzni belőle

HIDROGÉN-HIDAK A KÖRNYEZETÜNKBEN II...

1939. október 24.

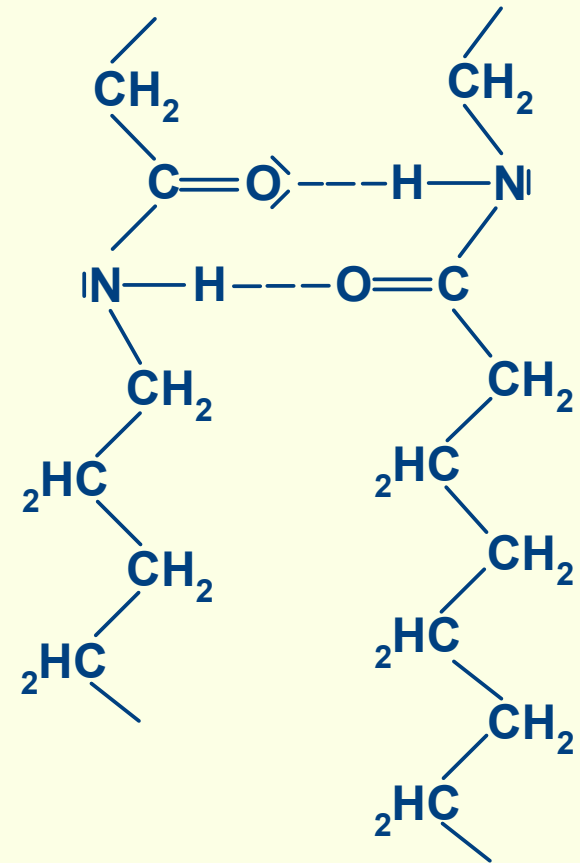
...elkészült az *első nylon harisnya*
USA, Wilmington, Delaware

...*JEGYRE* osztották

II. Vh. idején... ...nem harisnyát...

...hanem ejtőernyő zsinórt...

készítettek a poliamidból



...a szálak nyújthatóvá válnak,
ha azokat másodrendű kötésekkel
egymáshoz kötik...

HIDROGÉN-HIDAK A KÖRNYEZETÜNKBEN III...

Kozmetikai ipar...

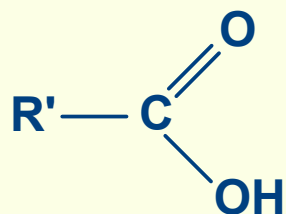
...a gyakori kézmosás lecsökkenti a bőr természetes zsírtartalmát...

...nincs, ami ott tartaná a vizet → a bőr kiszárad...

...célszerű lenne min. 10 % helyi víztartalom a kívánatos

...egy lehetőség a megoldásra: **lanolin-bázisú krémek** alkalmazása

...lanolin:

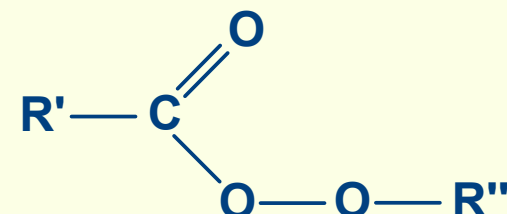


C 12 ÷ 16 zsírsav

+



C 12 ÷ 16 alkohol



C 24 ÷ 32 észter

HIDROGÉN-HIDAK A KÖRNYEZETÜNKBEN IV...

...a *szabad alkohol* és a *koleszterin adszorbeál* -ja a vizet...

...a *lanolin zsír-részei* a bőr lipofil (fehérje és zsírtartalmú) részében oldódnak...

...a *hidroxil csoportok* hidrogén-hidakat képeznek a vízmolekulákkal...

...ezáltal a vízmolekulák a bőr közelében maradnak → *hidratáció*

