

Kémiai kötés

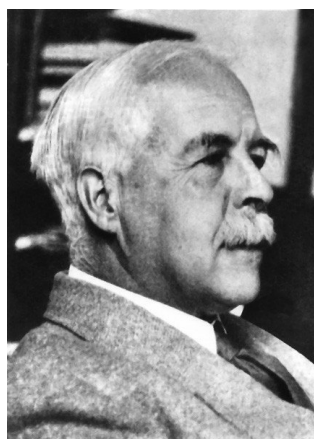
- 10-1 Lewis elmélet
- 10-2 Kovalens kötés: bevezetés
- 10-3 Poláros kovalens kötés
- 10-4 Lewis szerkezetek
- 10-5 A molekulák alakja
- 10-6 Kötésrend, kötéstávolság
- 10-7 Kötésenergiák

Általános Kémia, szerkezet

Slide 1 /39

10-1 Lewis elmélet

- Vegyérték e^- - alapvető szerepe van a kémiai kötés kialakításában.
- e^- átvitel *ionos kötés*.
- Elektronok megosztása: *kovalens kötés*.
- e^- átvitele során az atomok nemesgáz konfigurációra törekszenek.
 - *az oktet szabály*.

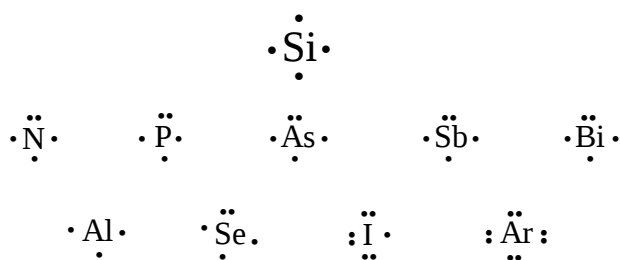


Általános Kémia, szerkezet

Slide 2 /39

Lewis szimbólumok

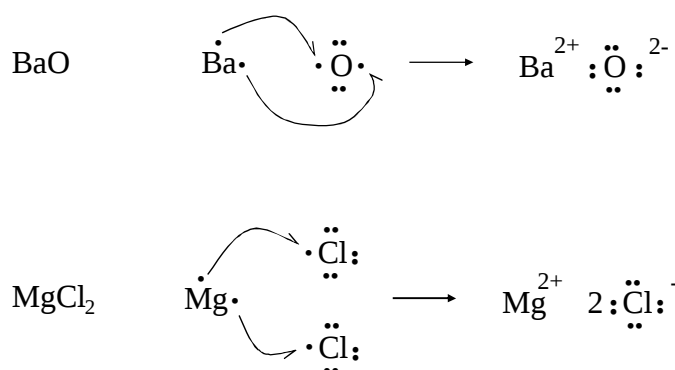
- Egy vegyjel jelenti az atomot és a törzs elektronokat.
- A vegyjel körüli pontok a *vegyérték e⁻*.



Általános Kémia, szerkezet

Slide 3 /39

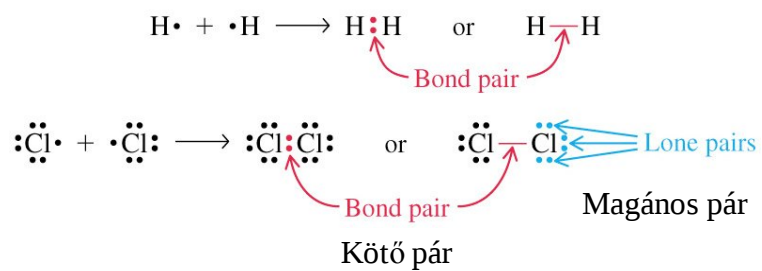
Lewis szerkezetek: ionos vegyületek



Általános Kémia, szerkezet

Slide 4 /39

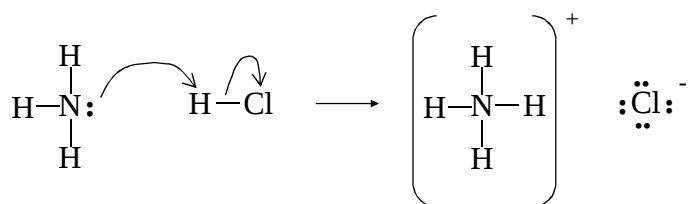
10-2 Kovalens kötés: bevezetés



Általános Kémia, szerkezet

Slide 5 /39

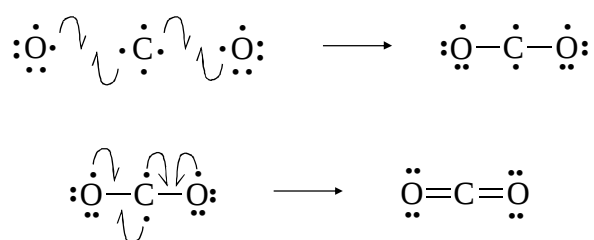
Koordinációs kovalens kötés



Általános Kémia, szerkezet

Slide 6 /39

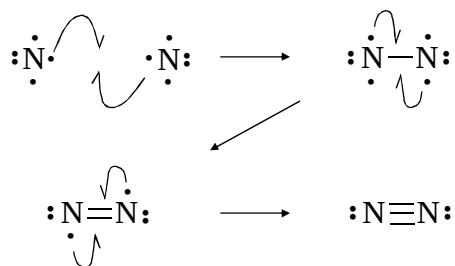
Többszörös kovalens kötés



Általános Kémia, szerkezet

Slide 7 /39

Többszörös kovalens kötés

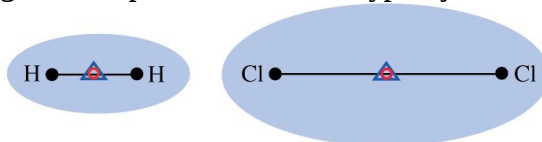


Általános Kémia, szerkezet

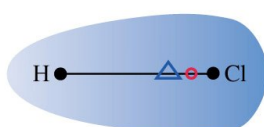
Slide 8 /39

10-3 Poláros kovalens kötés

A negatív és a pozitív töltések súlypontja elválk

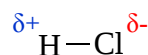


(a) Nonpolar covalent bonds



(b) Polar covalent bond

- = Atomic nucleus
- △ = Center of positive charge
- = Center of negative charge



Általános Kémia, szerkezet

Slide 9 /39

Elektronegativitás

Mulliken: $EN = (I_1 + A_1)/2$ (csak 57 elemre ismert)

Pauling (1932): empirikus, Allred-Rochow (1958): Zeff

H 2.1																	B 2.0	C 2.5	N 3.0	O 3.5	F 4.0	
Li 1.0	Be 1.5																	Al 1.5	Si 1.8	P 2.1	S 2.5	Cl 3.0
Na 0.9	Mg 1.2																	Ga 1.6	Ge 1.8	As 2.0	Se 2.4	Br 2.8
K 0.8	Ca 1.0	Sc 1.3	Ti 1.5	V 1.6	Cr 1.6	Mn 1.5	Fe 1.8	Co 1.8	Ni 1.8	Cu 1.9	Zn 1.6											
Rb 0.8	Sr 1.0	Y 1.2	Zr 1.4	Nb 1.6	Mo 1.8	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.2	Pd 2.2	Ag 1.9	Cd 1.7	In 1.7	Sn 1.8	Sb 1.9	Te 2.1	I 2.5						
Cs 0.8	Ba 0.9	La* 1.1	Hf 1.3	Ta 1.5	W 2.4	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.2	Pt 2.2	Au 2.4	Hg 1.9	Tl 1.8	Pb 1.8	Bi 1.9	Po 2.0	At 2.2						
Fr 0.7	Ra 0.9	Ac† 1.1																				

below 1.0

1.0–1.4

1.5–1.9

2.0–2.4

2.5–2.9

3.0–4.0

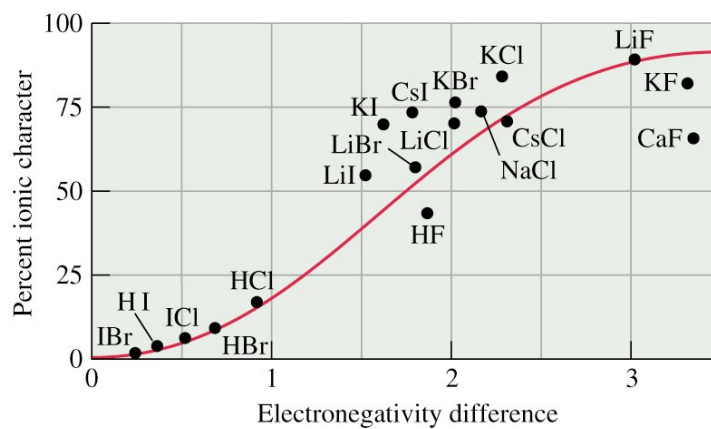
* Lanthanides: 1.1–1.3

† Actinides: 1.3–1.5

Általános Kémia, szerkezet

Slide 10 /39

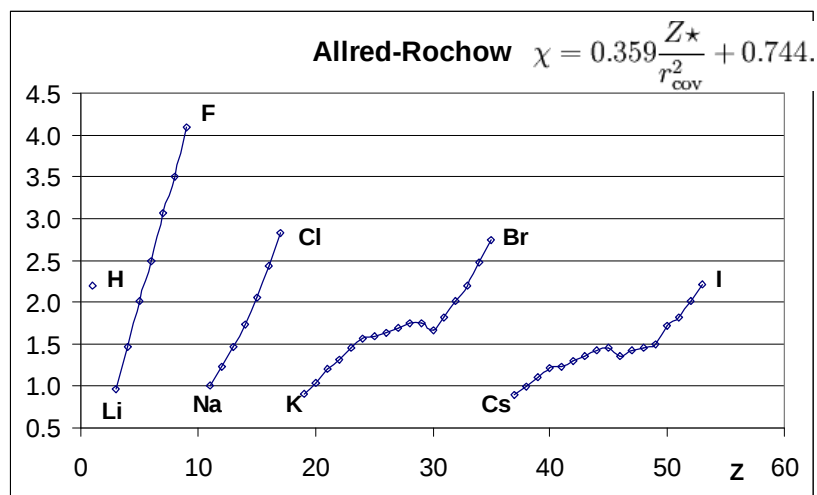
Ionos karakter százaléka



Általános Kémia, szerkezet

Slide 11 /39

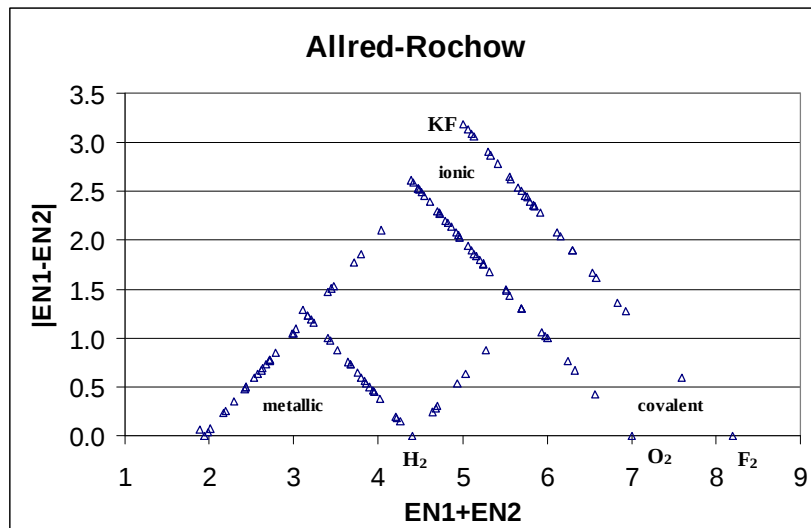
Az atomok elektronegativitása



Általános Kémia, szerkezet

Slide 12 /39

A vegyületek osztályozása, háromszög

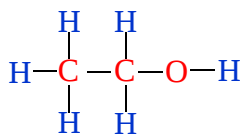


Általános Kémia, szerkezet

Slide 13 /39

10-4 Lewis: Szerkezeti képlet - váz

- **központi** és **terminális** atomok.



Általános Kémia, szerkezet

Slide 14 /39

Lewis-szerkezetek felírása

1. Vegyértékelektronok összeszámlálása. (N) (vegyértékhéj elektronjai [$Z - \text{törzs } e^-$] + töltés)
2. Váz felrajzolása egyszeres kötésekkel.
3. Magános elektronpárok felrajzolása a nem-központi atomokra, az oktett szabály felhasználásával.
4. Felrajzolt elektronok összeszámlálása. (Egy kötés, illetve egy magános elektronpár 2-2 elektron.)
5. Ha az oktett szabály nem áll fenn a központi atomra, akkor a ligandumok magános elektronpárjaiból kötést kell formálni.
6. Formális töltések atomokhoz rendelése.

Formális töltés

$$FC = n_{\text{valence } e^-} - n_{\text{lonc pair } e^-} - \frac{1}{2} n_{\text{bond pair } e^-}$$

Több lehetőség esetén :

hipotetikus REZONANCIASZERKEZETEK

Példa

Lewis szerkezet: nitronium ion, NO_2^+ .

1: Vegyérték $e^- = 5 + 6 + 6 - 1 = 16 e^-$

2: Váz szerkezet: $\text{O}—\text{N}—\text{O}$

3: e^- a terminális atomokra: $\text{:}\ddot{\text{O}}—\text{N}—\ddot{\text{O}}\text{:}$

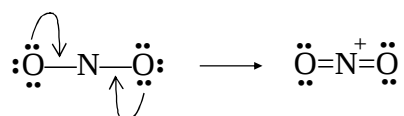
4: Maradék e^- : $16 - 4 - 12 = 0$

Általános Kémia, szerkezet

Slide 17 /39

Példa

5: Többszörös kötések, az oktett szabály szerint.



6: Határozzuk meg a formális töltést:

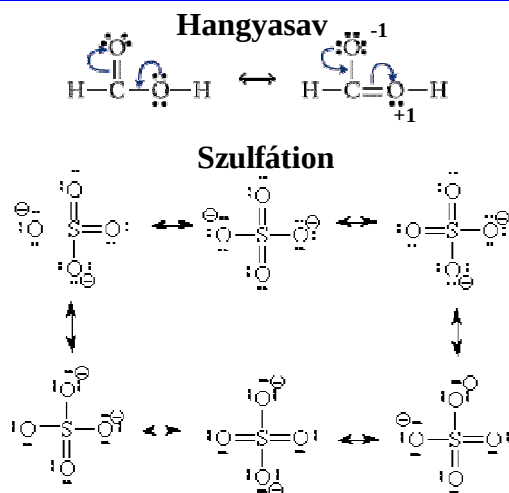
$$\text{FC}(\text{O}) = 6 - 4 - \frac{1}{2}(4) = 0$$

$$\text{FC}(\text{N}) = 5 - 0 - \frac{1}{2}(8) = +1$$

Általános Kémia, szerkezet

Slide 18 /39

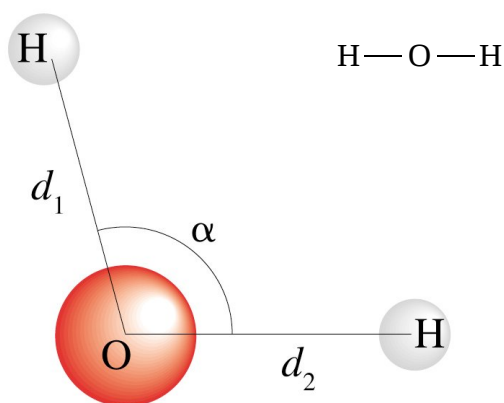
Hipotetikus REZONANCIASZERKEZETEK



Általános Kémia, szerkezet

Slide 19 /39

10-5 A molekulák alakja



Általános Kémia, szerkezet

Slide 20 /39

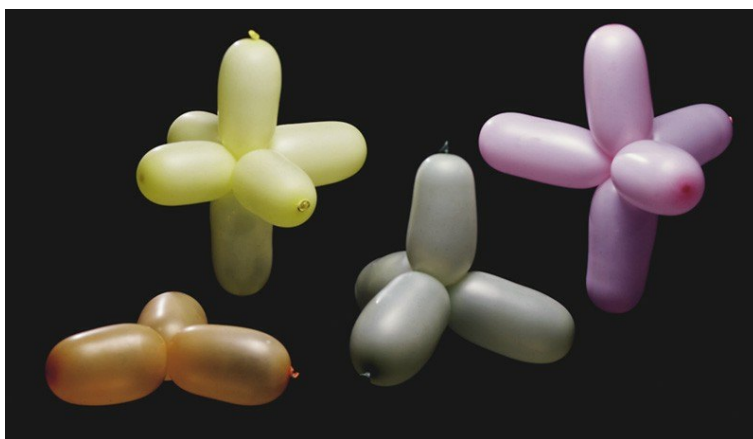
Terminológia

- Molekulageometria – a magok térbeli helyzete
 - Kötéstávolság – 2 atom - egyensúlyi távolság.
 - Kötésszög – 3 atom - szomszédos kötések szöge.
 - Torziós szög – 4 atom - 2 sík szöge
- VSEPR elmélet
 - Az a kötő (bond) és a magános (lone) elektronpárok taszítják egymást. Az elektronpárok olyan helyzetet vesznek fel, hogy a taszítást minimalizálják.
- Elektrongeometria – az elektronpárok eloszlása (a magok helyzetével szemben a Röntgen diffrakció ezt nem méri).

Általános Kémia, szerkezet

Slide 21 /39

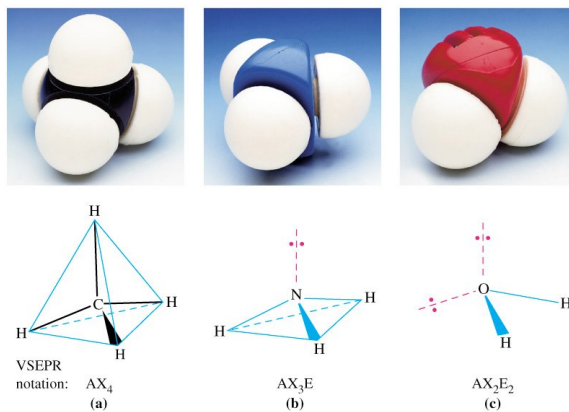
Lufi analógia



Általános Kémia, szerkezet

Slide 22 /39

Metán, ammónia és víz



Általános Kémia, szerkezet

Slide 23 /39

Kötésszögek

	CH_4	NH_3	H_2O
H-A-H	$109,5^\circ$	$107,3^\circ$	$104,5^\circ$
	SiH_4	PH_3	H_2S
H-A-H	$109,5^\circ$	$93,3^\circ$	$92,1^\circ$

Általános Kémia, szerkezet

Slide 24 /39

VSEPR

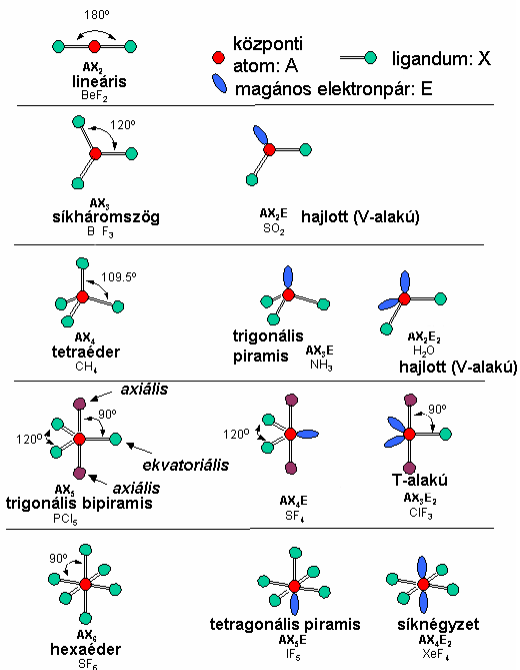
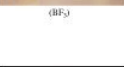
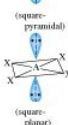
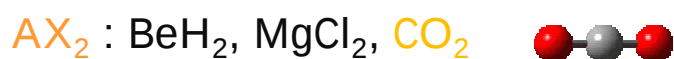


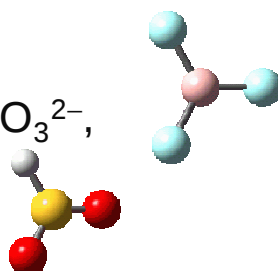
TABLE 11.1 Molecular Geometry as a Function of Electron Group Geometry							TABLE 11.1 (Continued)						
Number of Electron Groups	Electron-Group Geometry	Number of Lone Pairs	VSEPR Notation	Molecular Geometry	Ideal Bond Angles	Example	Number of Electron Groups	Electron-Group Geometry	Number of Lone Pairs	VSEPR Notation	Molecular Geometry	Ideal Bond Angles	Example
2	linear	0	AX ₂	X—A—X (linear)	180°	BeCl ₂ 	trigonal-bipyramidal	5	1	AX ₄ E ^a	 (see-saw)	90°, 120°	SF ₄
3	trigonal-planar	0	AX ₃	 (trigonal-planar)	120°	BF ₃ 	trigonal-bipyramidal	4	2	AX ₃ E ₂	 (T-shaped)	90°	ClF ₃
	trigonal-planar	1	AX ₂ E	 (angular)	120°	SO ₂ ^a 	trigonal-bipyramidal	3	3	AX ₂ E ₃	 (linear)	180°	XeF ₂
4	tetrahedral	0	AX ₄	 (tetrahedral)	109.5°	CH ₄ 	6	octahedral	0	AX ₆	 (octahedral)	90°	SF ₆ 
	tetrahedral	1	AX ₃ E	 (trigonal-pyramidal)	109.5°	NH ₃ 	octahedral	1	AX ₅ E	 (square-pyramidal)	90°	BrF ₅	
	tetrahedral	2	AX ₂ E ₂	 (angular)	109.5°	OF ₂ 	octahedral	2	AX ₄ E ₂	 (square-planar)	90°	XeF ₄	
5	trigonal-bipyramidal	0	AX ₅	 (trigonal-bipyramidal)	90°, 120°	PCl ₅ 	^a For a discussion of the structure of SO ₂ , see page 416. ^a For a discussion of the placement of the lone-pair electrons in this structure, see page 412.						

VSEPR

$$n + m = 2$$

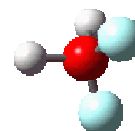
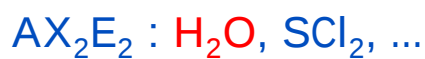
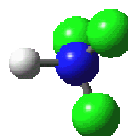
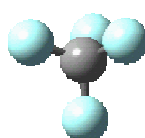
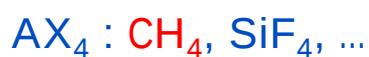


$$n + m = 3$$



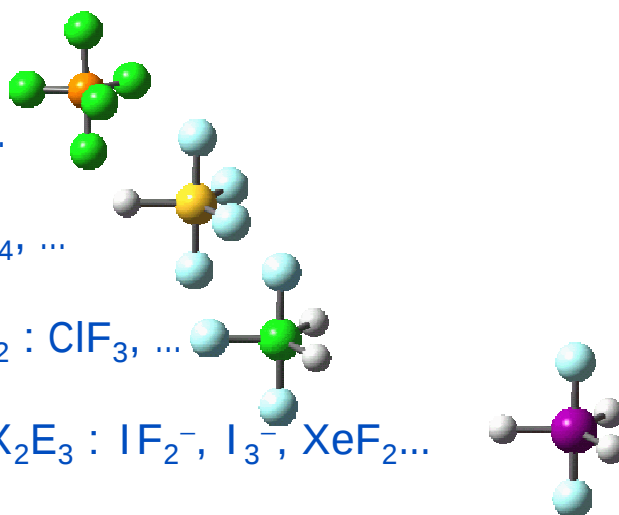
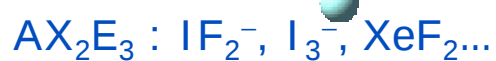
VSEPR

$$n + m = 4$$



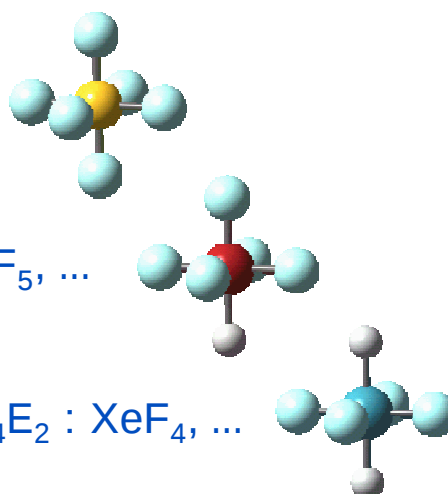
VSEPR

$$n + m = 5$$



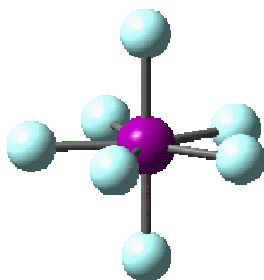
VSEPR

$$n + m = 6$$



VSEPR

$$n + m = 7$$

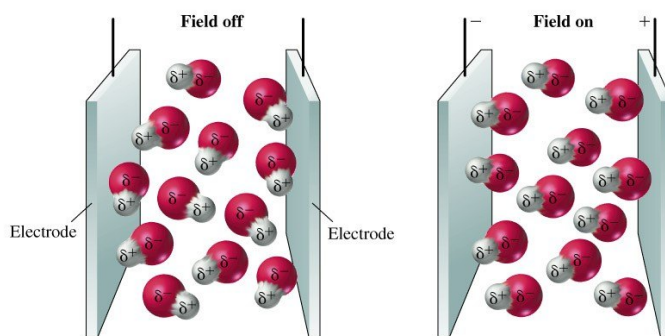


VSEPR elmélet alkalmazása

- Lewis szerkezeti képlet rajza.
- Határozzuk meg a magános és kötő párok számát.
- Határozzuk meg az elektronpárok geometriáját.
- Határozzuk meg a molekula geometriáját.

- A többszörös kötések egyszer számítandók (nagyobb térfogattal).
- Egynél több központi atom: egyenként kell kezelni őket.

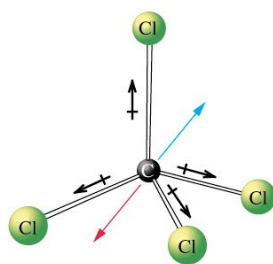
Dipolus momentum



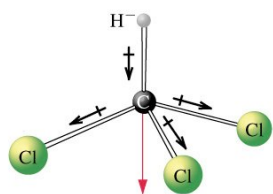
Általános Kémia, szerkezet

Slide 33 /39

Dipólus momentum



(a) CCl_4 : a nonpolar molecule



(b) CHCl_3 : a polar molecule

Általános Kémia, szerkezet

Slide 34 /39

10-6 Kötésrend, kötéstávolság

- Kötésrend
 - Egyszeres = 1
 - Kettős = 2
- Kötéstávolság
 - Két atommag távolsága
- Magasabb kötésrend
 - Rövidebb kötés
 - Erősebb kötés

Általános Kémia, szerkezet

Slide 35 /39

Kötéstávolságok

TABLE 11.2 Some Average Bond Lengths^a

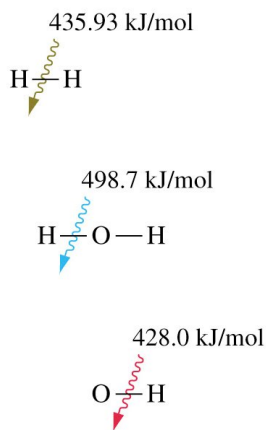
Bond	Bond Length, pm	Bond	Bond Length, pm	Bond	Bond Length, pm
H—H	74.14	C—C	154	N—N	145
H—C	110	C=C	134	N=N	123
H—N	100	C≡C	120	N≡N	109.8
H—O	97	C—N	147	N—O	136
H—S	132	C=N	128	N=O	120
H—F	91.7	C≡N	116	O—O	145
H—Cl	127.4	C—O	143	O=O	121
H—Br	141.4	C=O	120	F—F	143
H—I	160.9	C—Cl	178	Cl—Cl	199
				Br—Br	228
				I—I	266

^aMost values (C—H, N—H, C—H, ...) are averaged over a number of species containing the indicated bond and may vary by a few picometers. Where a diatomic molecule exists, the value given is the actual bond length in that molecule (H₂, N₂, HF, ...) and is known more precisely.

Általános Kémia, szerkezet

Slide 36 /39

10-7 Kötésenergiák



Általános Kémia, szerkezet

Slide 37 /39

Kötés energiák

TABLE 11.3 Some Average Bond Energies^a

Bond	Bond Energy, kJ/mol	Bond	Bond Energy, kJ/mol	Bond	Bond Energy, kJ/mol
H—H	436	C—C	347	N—N	163
H—C	414	C=C	611	N=N	418
H—N	389	C≡C	837	N≡N	946
H—O	464	C—N	305	N—O	222
H—S	368	C=N	615	N=O	590
H—F	565	C≡N	891	O—O	142
H—Cl	431	C—O	360	O=O	498
H—Br	364	C=O	736 ^b	F—F	159
H—I	297	C—Cl	339	Cl—Cl	243
				Br—Br	193
				I—I	151

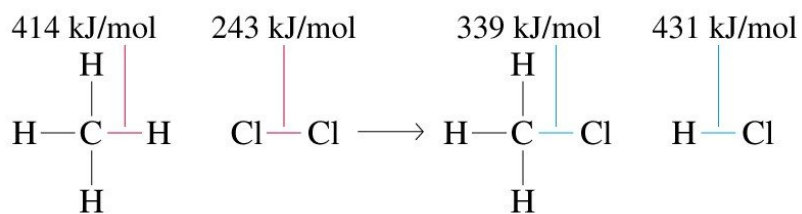
^a Although all data are listed with about the same precision (three significant figures), some values are actually known more precisely. Specifically, the values for the diatomic molecules: H₂, HF, HCl, HBr, HI, N₂ (N≡N), O₂ (O=O), F₂, Cl₂, Br₂, and I₂ are actually bond-dissociation energies, rather than average bond energies.

^b The value for the C=O bonds in CO₂ is 799 kJ/mol.

Általános Kémia, szerkezet

Slide 38 /39

Kötés energiák és reakció entalpiák



$$\begin{aligned}
 \Delta H_{\text{rxn}} &= -\{\Sigma \Delta H(\text{termék köt.}) - \Sigma \Delta H(\text{reagens köt.})\} \\
 &= -\{\Sigma \Delta H \text{ keletkezett} - \Sigma \Delta H \text{ felbomlott kötések}\} \\
 &= -770 \text{ kJ/mol} + (657 \text{ kJ/mol}) = -113 \text{ kJ/mol}
 \end{aligned}$$