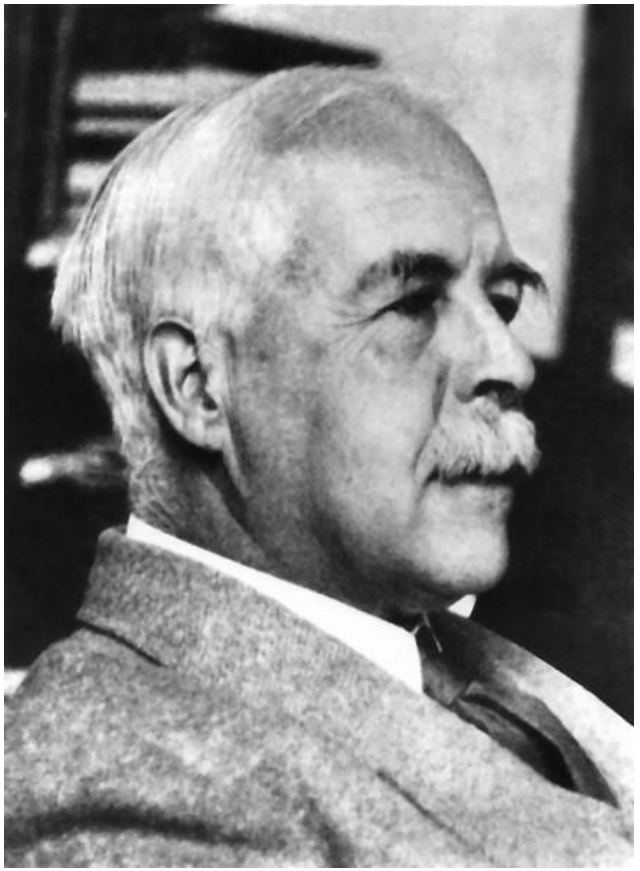
Kémiai kötés

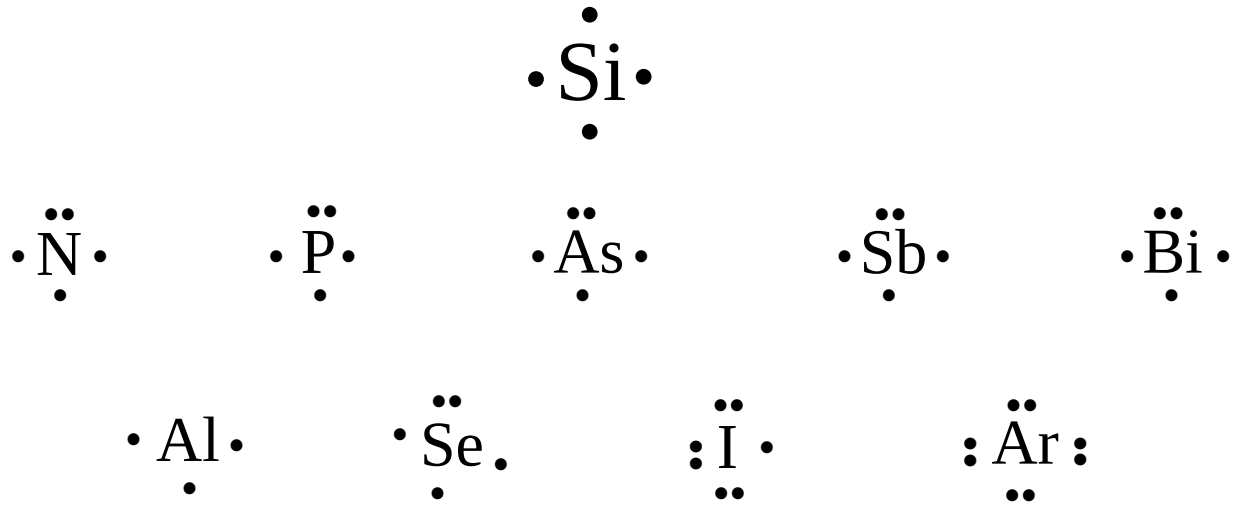
12-1 Lewis elmélet

- 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*.



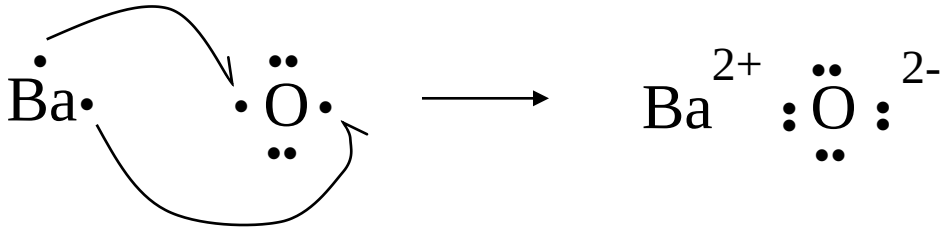
Lewis szimbólumok

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

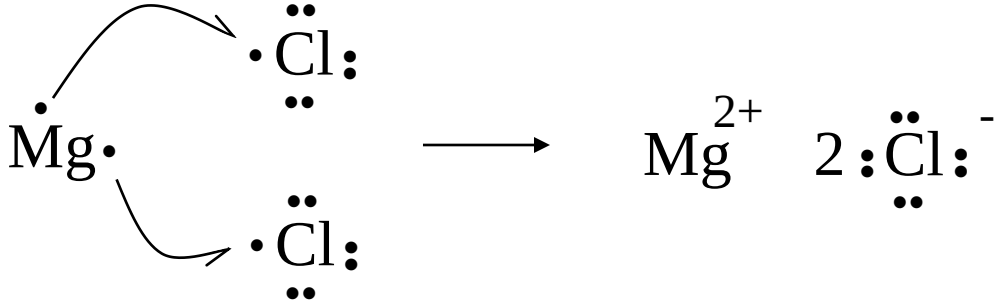


Lewis szerkezetek: ionos vegyületek

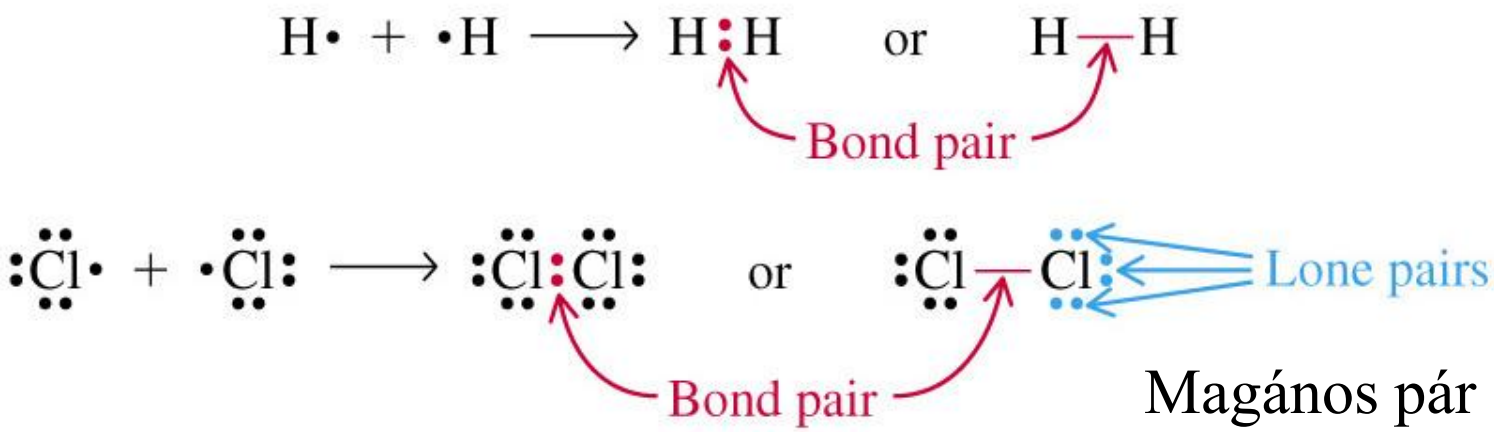
BaO



$MgCl_2$



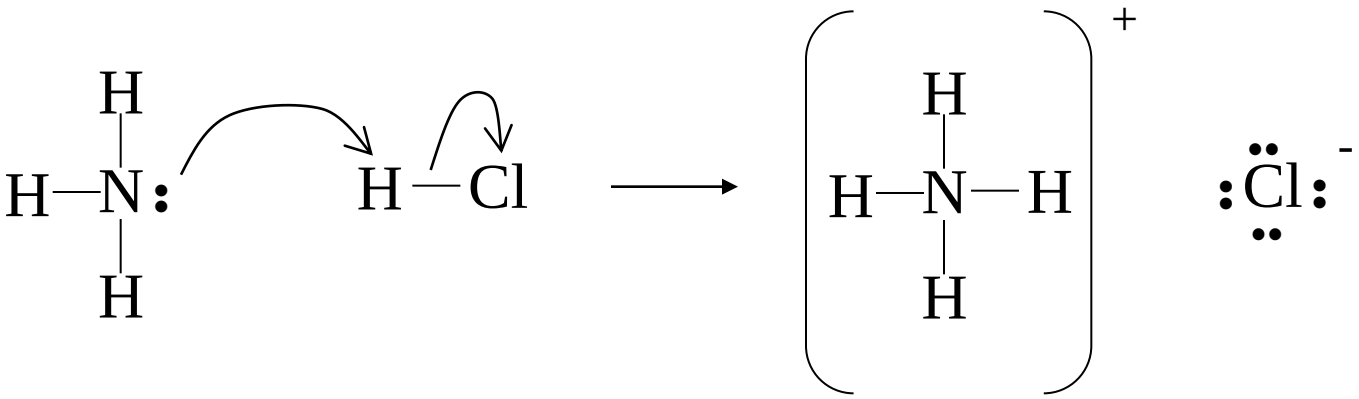
12-2 Kovalens kötés: bevezetés



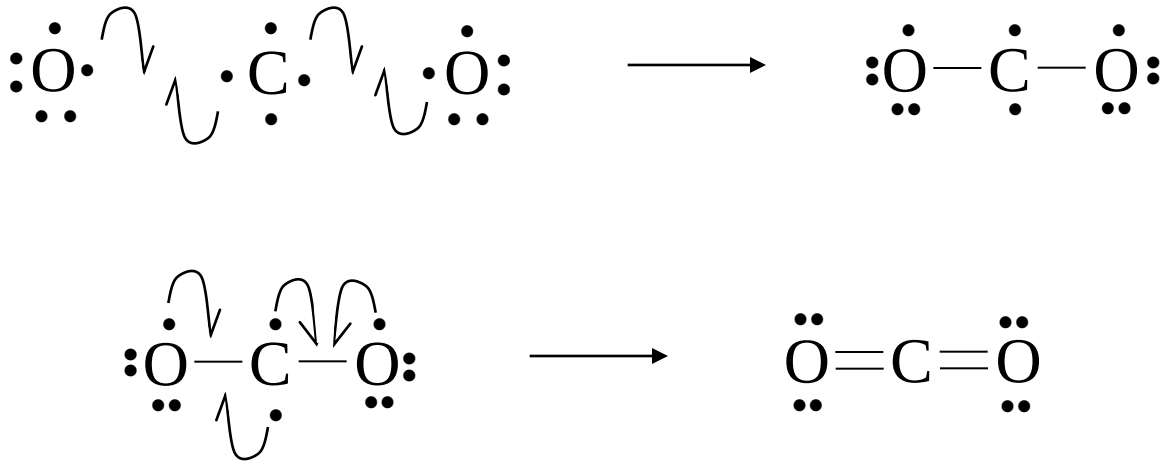
Magános pár

Kötő pár

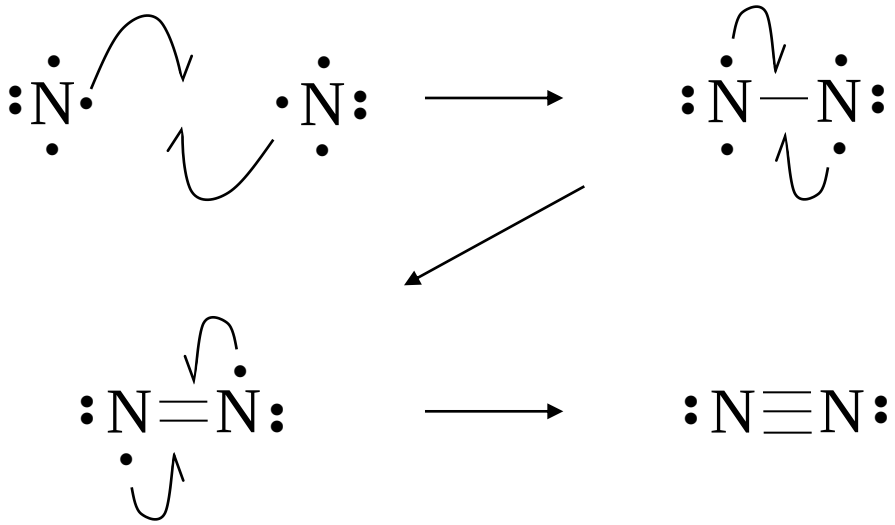
Koordinációs kovalens kötés



Többszörös kovalens kötés

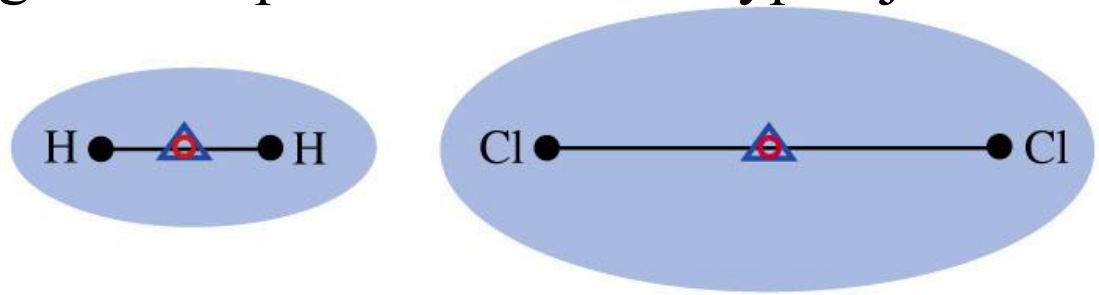


Többszörös kovalens kötés

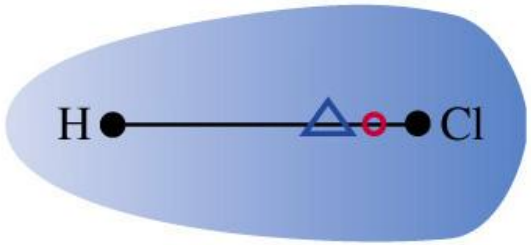


12-3 Poláros kovalens kötés

A negatív és a pozitív töltések súlypontja elválik



(a) Nonpolar covalent bonds



(b) Polar covalent bond

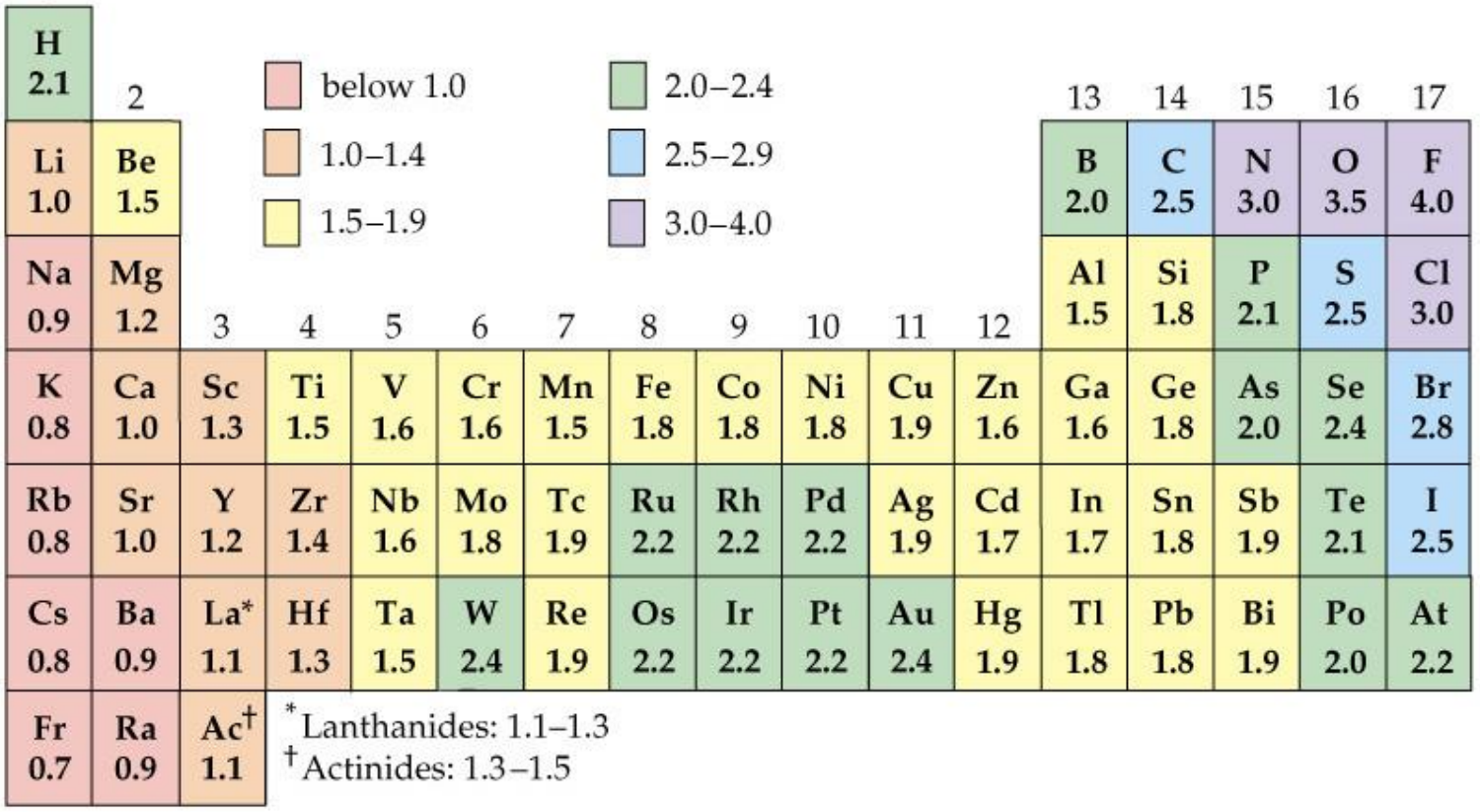
$\overset{\delta+}{H}-\overset{\delta-}{Cl}$

● = Atomic nucleus
△ = Center of positive charge
o = Center of negative charge

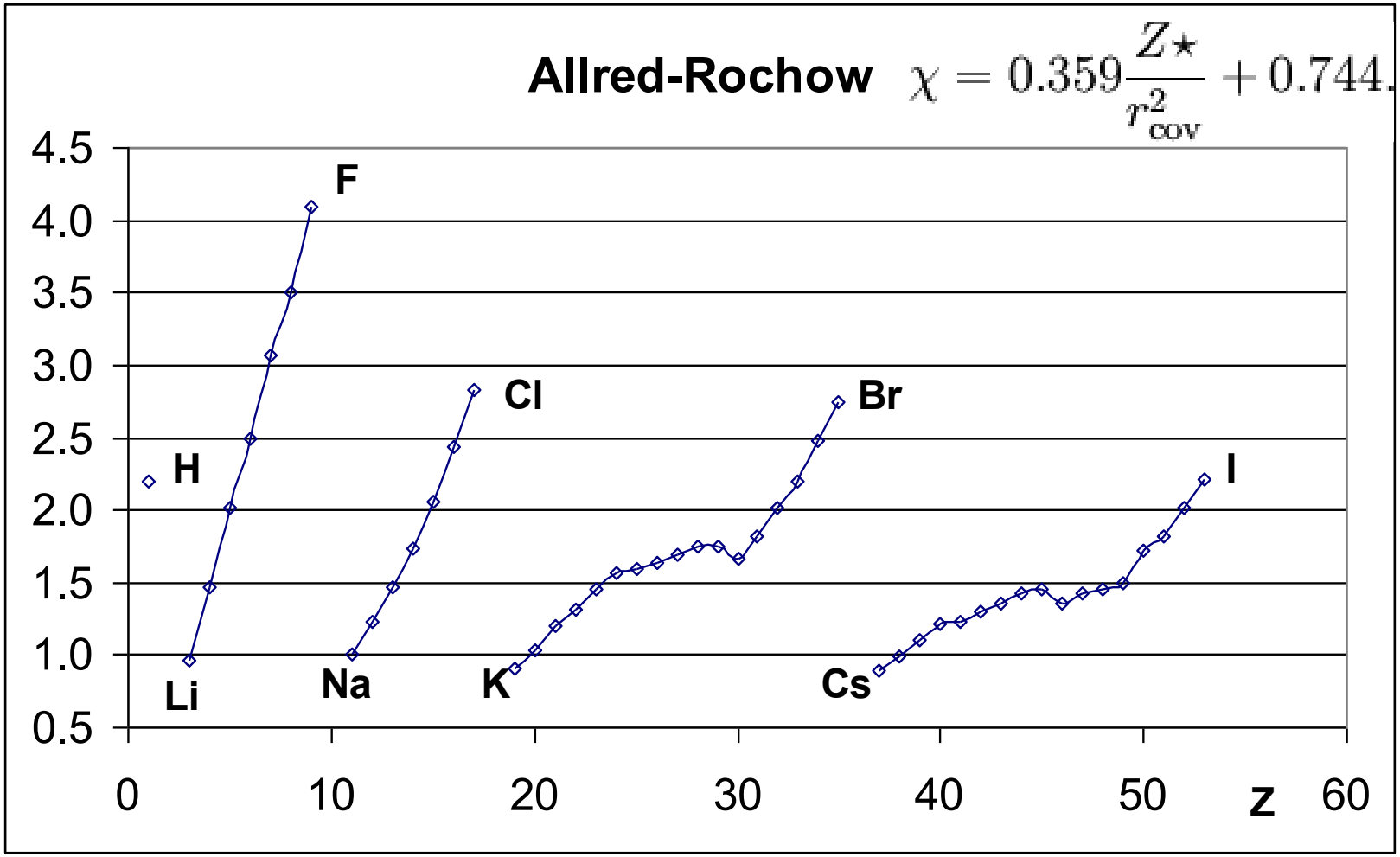
Elektronegativitás

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

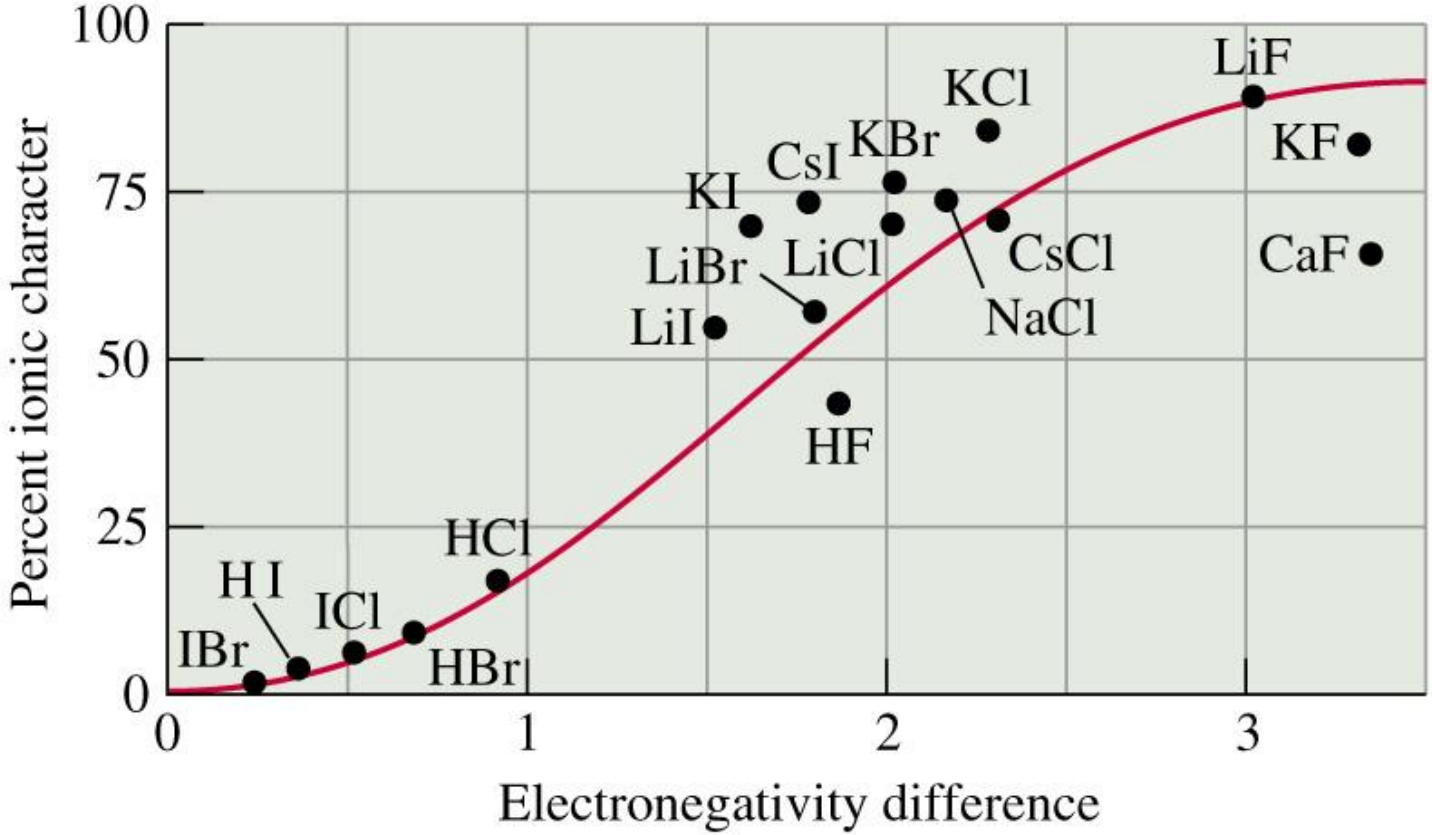
Pauling (1932): empírikus, Allred-Rochow (1958): Z^*_{eff}



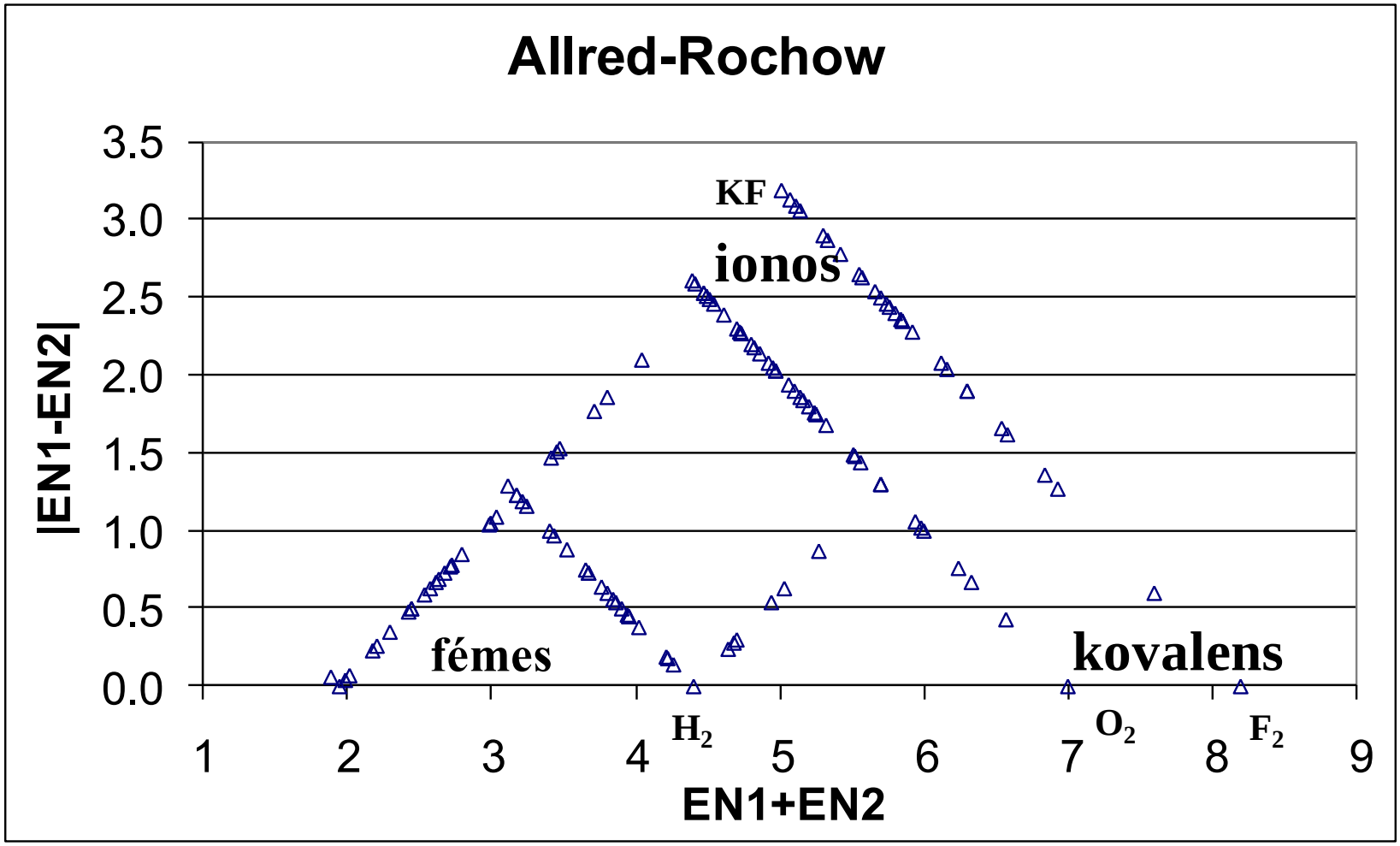
Az atomok elektronegativitása



Ionos karakter százaléka

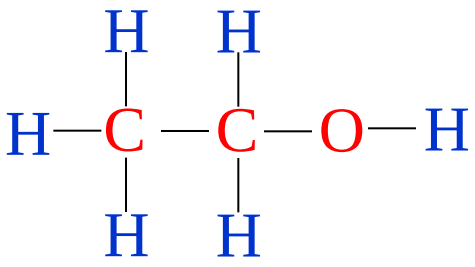


A vegyületek osztályozása, háromszög



12-4 Lewis: Szerkezeti képlet - váz

- központi és terminális atomok.



Lewis-szerkezetek felírása

1. Vegyértékelektronok összeszámlálása. (*N*) (vegyértékhéj elektronjai [Z – 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

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

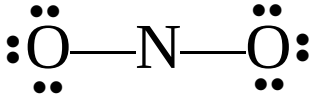
Több lehetőség esetén :
hipotetikus REZONANCIASZERKEZETEK

Példa

Lewis szerkezet: nitronium ion, NO_2^+.

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

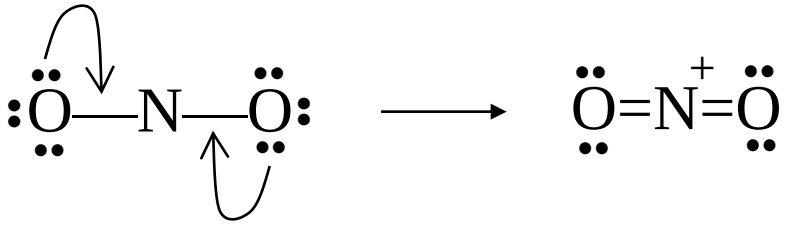
2: Váz szerkezet: O—N—O

3: e^- a terminális atomokra: 

4: Maradék e^-: 16 – 4 – 12 = 0

Példa

5: Többszörös kötések, az oktett szabály szerint.



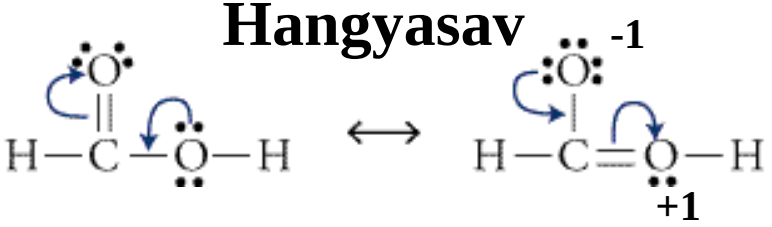
6: Határozzuk meg a formális töltést:

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

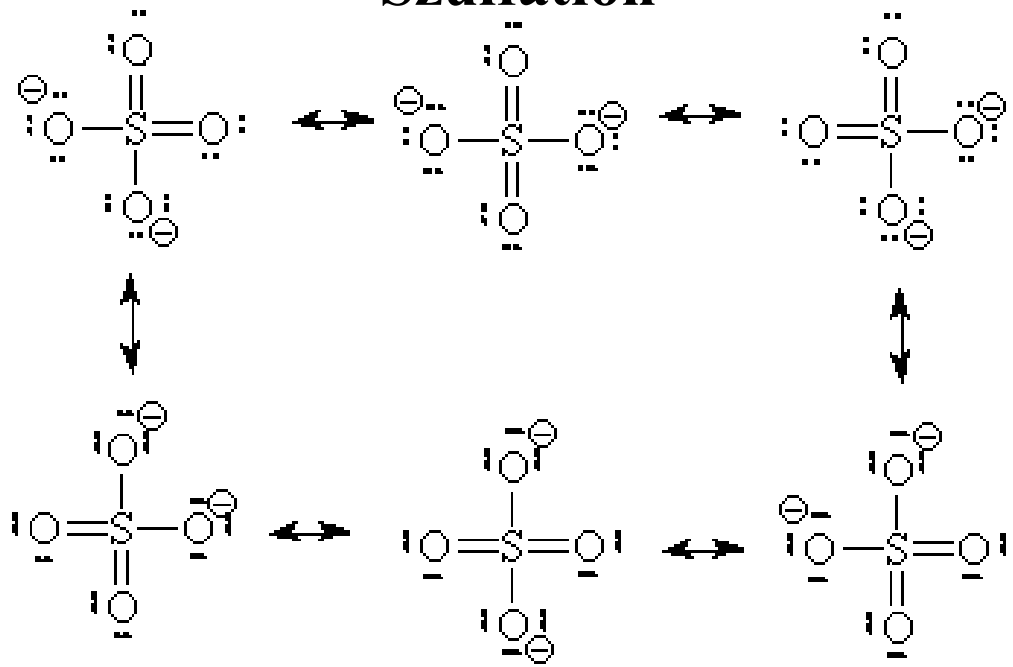
$$FC(N) = 5 - 0 - \frac{1}{2}(8) = +1$$

Hipotetikus REZONANCIASZERKEZETEK

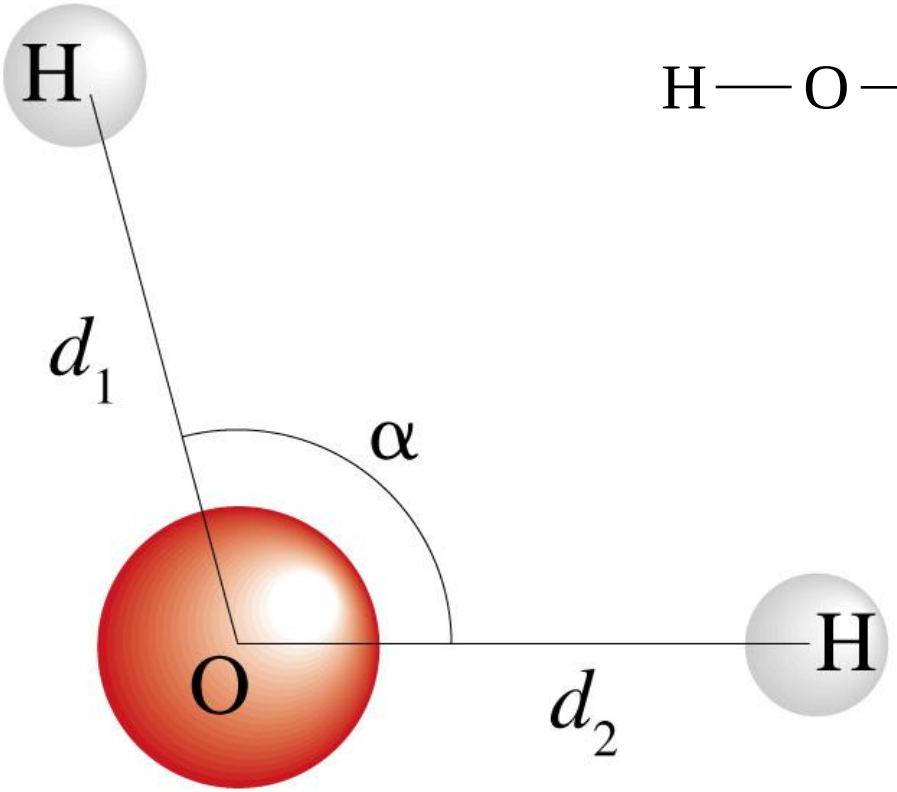
Hangyasav



Szulfátion



12-5 A molekulák alakja

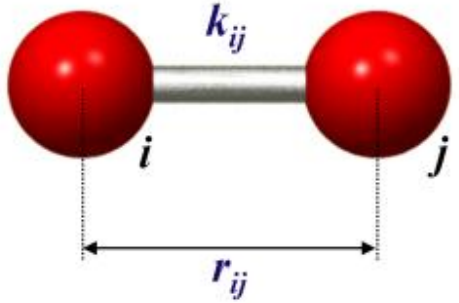


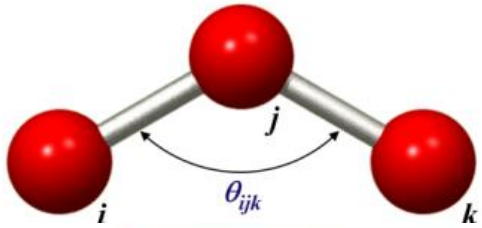
H—O—H

Terminológia

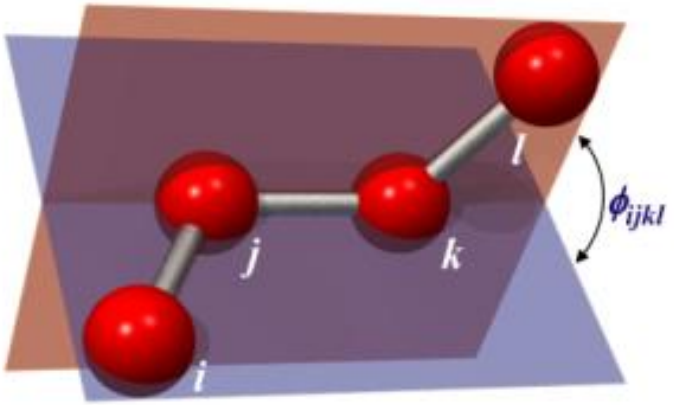
- Molekulageometria – a magok térbeli helyzete
- Kötéstávolság

  2 atom - egyensúlyi távolsága.
- Kötésszög – 3 atom - szomszédos kötések





- Torziós szög – 4 atom - 2 sík szöge

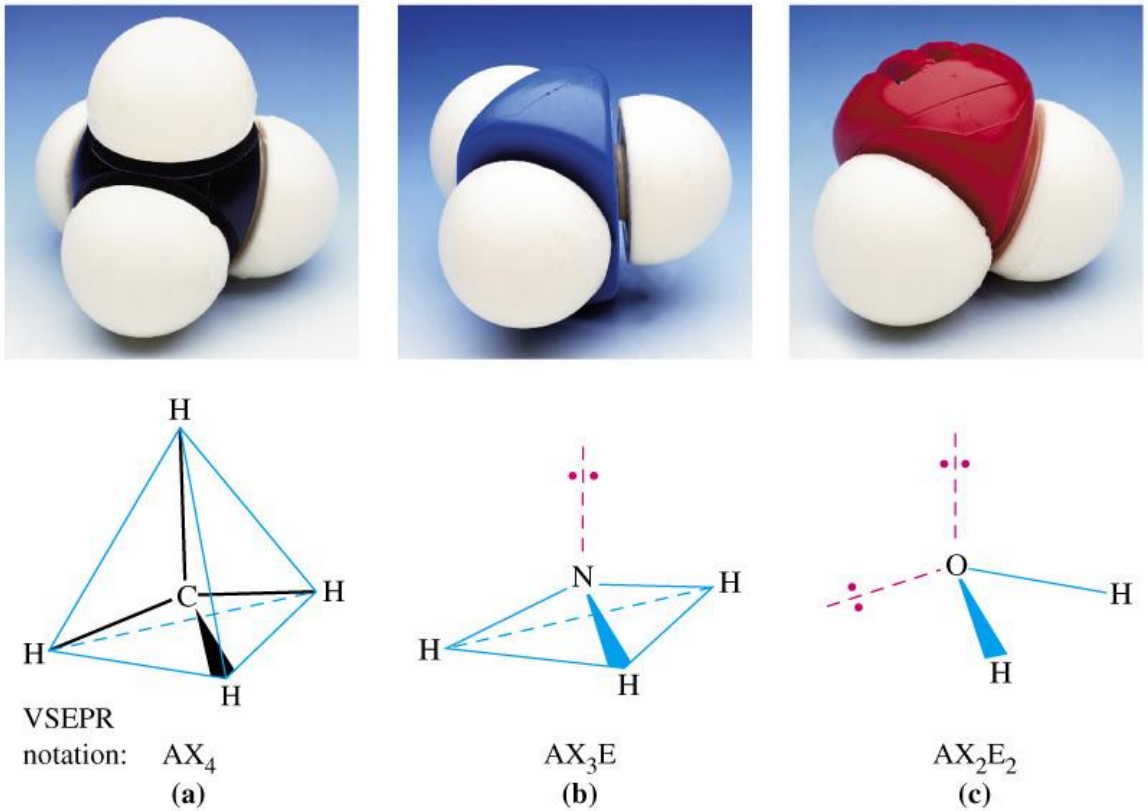


Terminológia

- VSEPR elmélet
  - A kötő (bond) és a magános (lone) elektronpárok taszítják egymást. Az elektronpárok olyan helyzetet vesznek fel, hogy a taszítást minimalizálják, igyekeznek maximális távolságra lenni egymástól.
- Elektrongeometria – az elektronpárok eloszlása (a magok helyzetével szemben a Röntgen diffrakció ezt nem méri).

Lufi analógia

Metán, ammónia és víz



Kötésszögek

	CH_4	NH_3	H_2O
H-A-H	109,5°	107,3°	104,5°
	SiH_4	PH_3	H_2S
H-A-H	109,5°	93,3°	92,1°

VSEPR

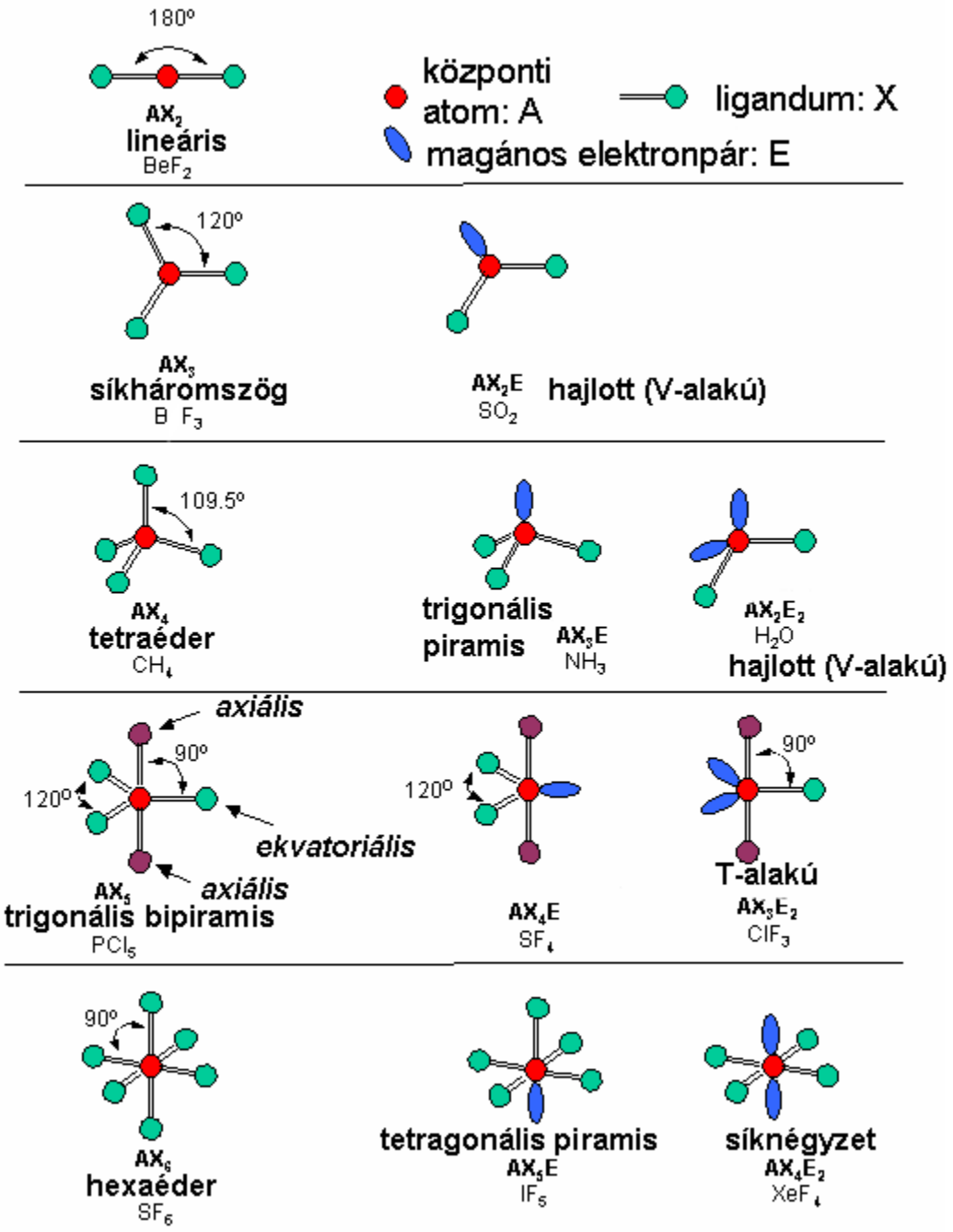

180°
AX2
lineáris
BeF2
központi atom: A
ligandum: X
magános elektronpár: E
120°
AX3
síkháromszög
B F3
AX2E
SO2
hajlott (V-alakú)
109.5°
AX4
tetraéder
CH4
trigonális piramis
AX3E
NH3
AX2E2
H2O
hajlott (V-alakú)
axiális
90°
120°
ekvatoriális
axiális
AX5
trigonális bipiramis
PCl5
120°
AX4E
SF4
90°
T-alakú
AX3E2
ClF3
90°
AX6
hexaéder
SF6
tetragonális piramis
AX5E
IF5
síknégyzet
AX4E2
XeF4

TABLE 11.1 Molecular Geometry as a Function of Electron Group Geometry

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°	$BeCl_2$
3	trigonal-planar	0	AX_3	(trigonal-planar)	120°	BF_3
	trigonal-planar	1	AX_2E	(angular)	120°	SO_2[a]
4	tetrahedral	0	AX_4	(tetrahedral)	109.5°	CH_4
	tetrahedral	1	AX_3E	(trigonal-pyramidal)	109.5°	NH_3
	tetrahedral	2	AX_2E_2	(angular)	109.5°	OH_2
5	trigonal-bipyramidal	0	AX_5	(trigonal-bipyramidal)	90°, 120°	PCl_5
	trigonal-bipyramidal	1	AX_4E[b]	(seesaw)	90°, 120°	SF_4
	trigonal-bipyramidal	2	AX_3E_2	(T-shaped)	90°	ClF_3
	trigonal-bipyramidal	3	AX_2E_3	(linear)	180°	XeF_2
6	octahedral	0	AX_6	(octahedral)	90°	SF_6
	octahedral	1	AX_5E	(square-pyramidal)	90°	BrF_5
	octahedral	2	AX_4E_2	(square-planar)	90°	XeF_4


(BeCl2)


(BF3)


(CH4)


(PCl5)


(SF6)

[a] For a discussion of the structure of SO_2, see page 416.
[b] For a discussion of the placement of the lone-pair electrons in this structure, see page 412.

(continues)

VSEPR

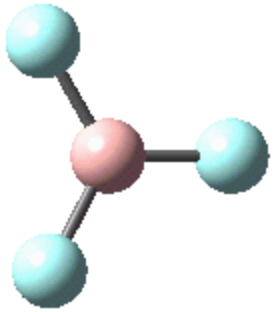
$n + m = 2$

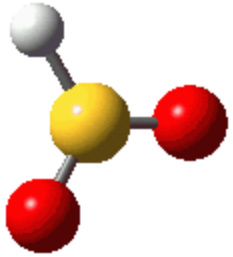
AX_2 : BeH_2, $MgCl_2$, CO_2

$n + m = 3$

AX_3 : BH_3, $AlCl_3$, CO_3^{2-},

AX_2E : O_3, SO_2



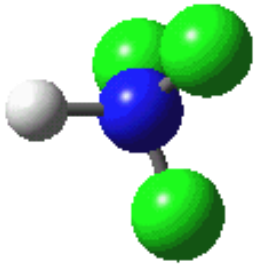


VSEPR

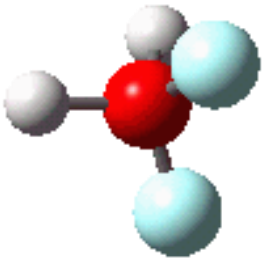
$n + m = 4$

AX_4 : CH_4, SiF_4, …

AX_3E : NH_3, PCl_3, …



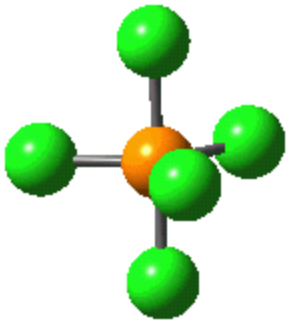
AX_2E_2 : H_2O, SCl_2, …



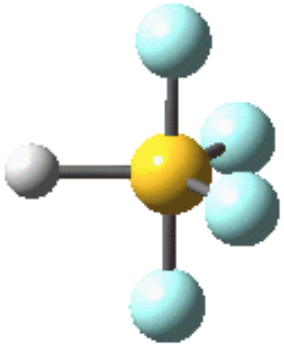
VSEPR

$n + m = 5$

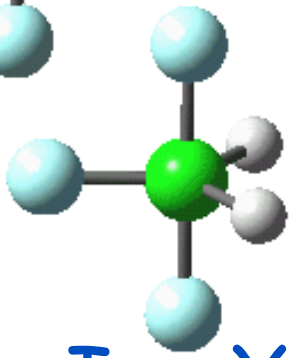
AX_5 : PCl_5, …



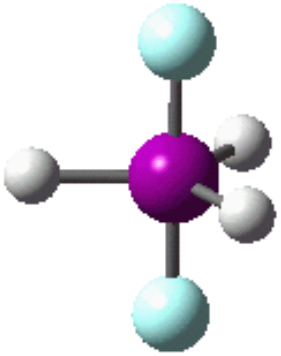
AX_4E : SF_4, …



AX_3E_2 : ClF_3, …



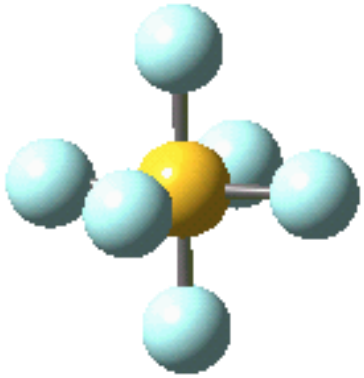
AX_2E_3 : IF_2^-, I_3^-, XeF_2…



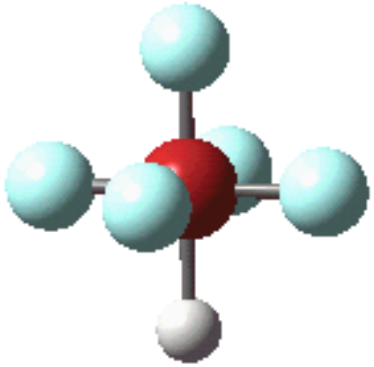
VSEPR

$n + m = 6$

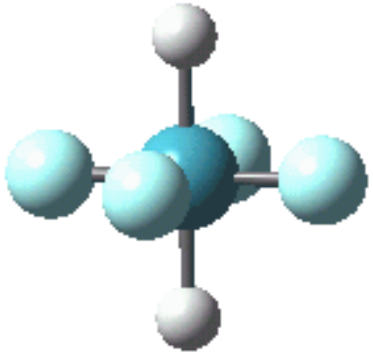
AX_6 : SF_6, …



AX_5E : BrF_5, …



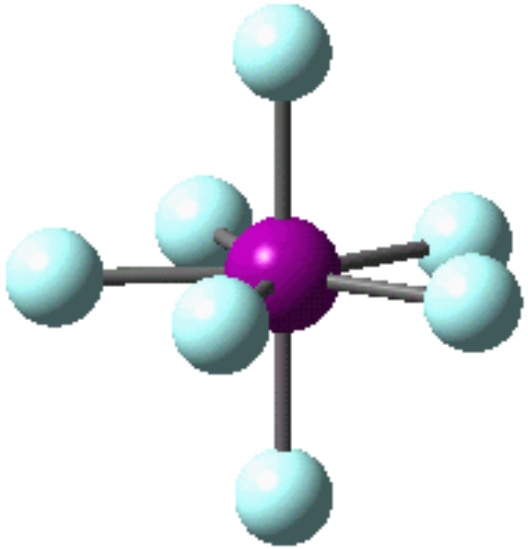
AX_4E_2 : XeF_4, …



VSEPR

$n + m = 7$

AX_7 : IF_7, …

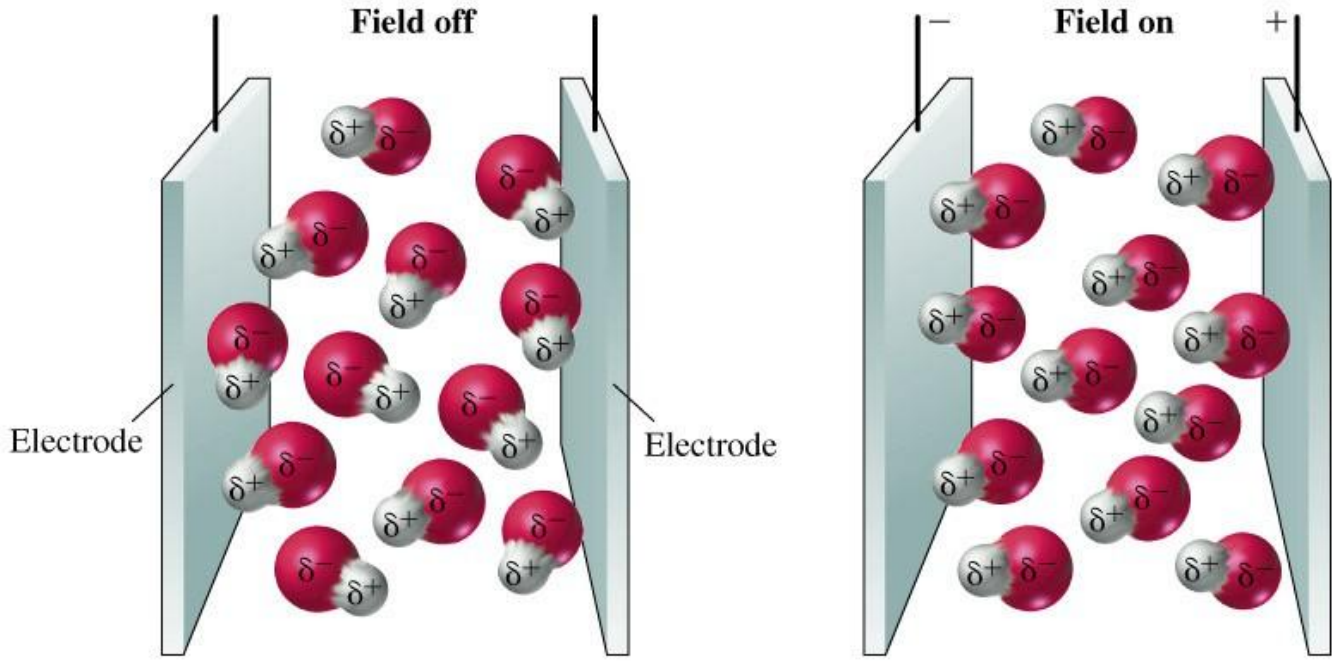


VSEPR elmélet alkalmazása

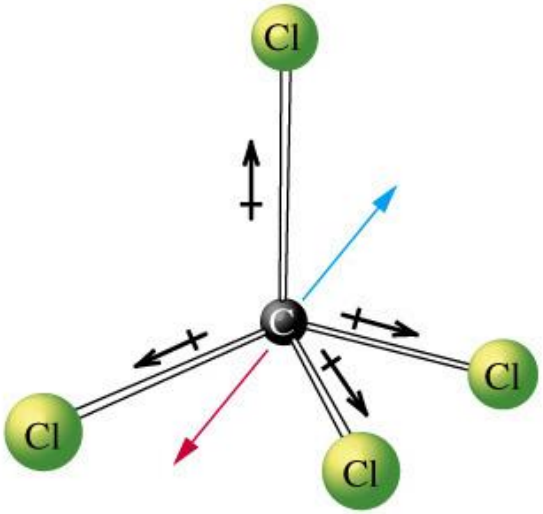
- Lewis szerkezeti képlet rajza.
- Határozzuk meg a magános és kötő párok számát.
- Határozzuk meg az elektronpárok geometriáját.
- Határozzuk meg a molekula geometriáját.

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

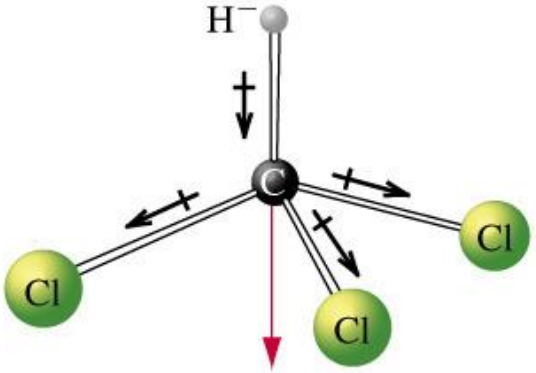
Dipolus momentum



Dipólus momentum



(a) CCl_4: a nonpolar molecule



(b) $CHCl_3$: a polar molecule

12-6 Kötésrend, kötéstávolság

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

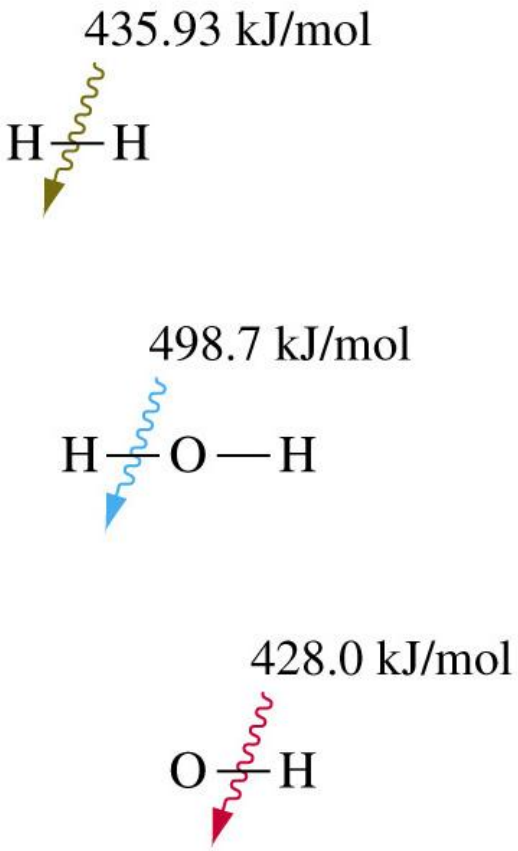
Kötéstávolságok

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

[a]Most 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 (H_2, N_2, HF, . . .) and is known more precisely.

12-7 Kötésenergiák



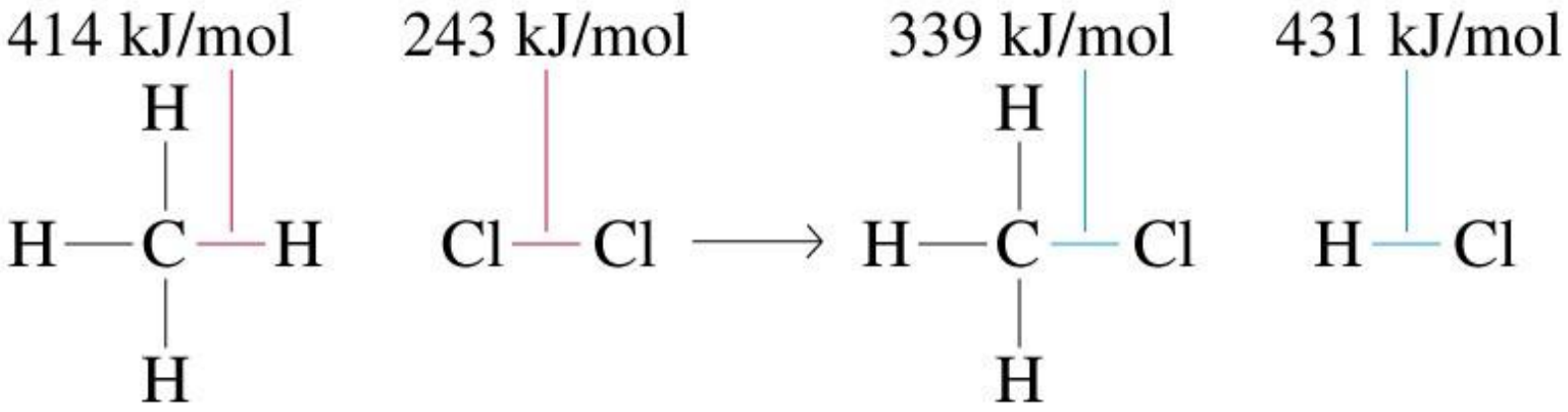
Kötés energiák

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: H_2, HF, HCl, HBr, HI, N_2 (N≡N), O_2 (O=O), F_2, Cl_2, Br_2, and I_2 are actually bond-dissociation energies, rather that average bond energies.
[b] The value for the C=O bonds in CO_2 is 799 kJ/mol.

Kötés energiák és reakció entalpiák



ΔH_{rxn} = -{Σ ΔH(termék köt.) - Σ ΔH(reagens köt.)}

= -{Σ ΔH keletkezett - Σ ΔH felbomlott kötések}

= -770 kJ/mol + (657 kJ/mol) = -113 kJ/mol