

Az elektronegativitás, kovalens kötés

1

Kémiai kötések

Elsőrendű kötések:

- kovalens
- ionos
- fémes

Másodrendű kötések:

- hidrogénkötés
- dipólus-dipólus kötés
- diszperziós kötés

2

Elektronegativitás: (EN)

- A kötésben lévő atomok elektronvonzó képességét jellemző számadat
- Viszonyszám, Me: nincs
- Pauling, Nobel-díjas amerikai vegyész
- $EN_{Fr} = 0,7 \leq EN \leq 4 = EN_F$

3

Elektronegativitás

- Az elemek vegyjele mellett a jobb felső sarokban
- A nemesgázoknak nincs értelmezve
- Balról jobbra nő, mert...
- Fentről lefelé csökken, mert... (a főcsoportokban)
- franciumtól fluorig nő

4

Változása a periódusos rendszerben

IA		IIA												II											IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA
Li		Be												B	C	N	O	F											
1,0	1,5											2,0	2,5	3,0	3,5	4,0													
Na		Mg												Al	Si	P	S	Cl											
0,9	1,2											1,5	1,8	2,1	2,5	3,0													
K		Ca		Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br											
0,8	1,0	1,3	1,5	1,6	1,6	1,5	1,8	1,7	1,8	1,9	1,6	1,6	1,6	1,8	2,0	2,4	2,8												
Rb		Sr		Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I											
0,8	1,0	1,2	1,4	1,6	1,7	1,9	2,2	2,2	2,2	1,9	1,7	1,7	1,7	1,8	1,9	2,1	2,5												
Cs		Ba		La-Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At											
0,7	0,9	1,1-1,2	1,3	1,5	1,7	1,9	2,2	2,2	2,2	2,4	1,9	1,8	1,8	1,9	2,0	2,2													
Fr		Ra		Ac-No																									
0,7	0,9	1,1-1,7																											

5

Hidrogén molekula

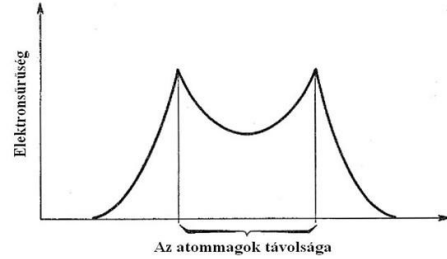
6

Kovalens kötés (Molekulák)

- Az atomos állapot nem stabil (kivételek: nemesgázok) \rightleftharpoons Molekula képződik pl.: H_2
- Mindkét atommag vonzza a másik e^- -jét
- Az e^- -felhők átfedik egymást, \rightleftharpoons kötő elektronpárt képez
- Atompályából \rightleftharpoons molekulapálya
- Össze nem olvadnak, mert az azonos töltések taszítják egymást

7

Elektronsűrűség a H_2 molekulában



<http://www.fisika.elte.hu/~fizika/fizika/kozep/szervezet/elektromos/atomfizika/h2/h2.html>

8

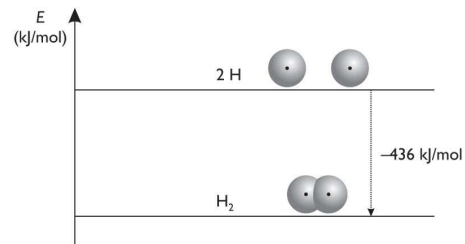
Definíciók

- A **molekulapálya** az a térrész a molekulában, ahol az elektronpár legalább 90%-os valószínűséggel tartózkodik.
- Azt a kötést, amelyben a kötő e^- -pár sűrűsége a kötés tengelye mentén a legnagyobb, **σ -kötésnek** nevezzük.
- Egyszeres kovalens kötés jött létre.

9

Miért???

- Energiaminimumra való törekvés!!



10

10

Miért???

- A stabil nemesgázszerkezet eléréséhez mindkét hidrogénatomnak 1 e^- -ra van szüksége



11

11

Klór molekulá

- Vegyértékháj szerkezete: $3s^2 3p^5$
- Mindkét atom számára 1 e^- szükséges a nemesgázszerkezet eléréséhez
- Ezt közös e^- -pár segítségével, egyszeres kovalens kötés létrehozásával éri el
- Mindkét atom körül 3 nemkötő e^- -pár is van

12

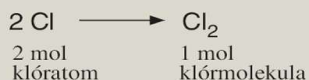
12

Klór molekula

A klórmolekula képződése:



Az elektronpárokat vonalakkal jelölve:

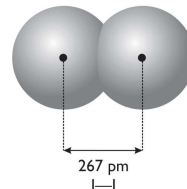
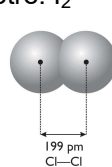


13

13

Jód molekula

- Vegyértékj szerkezete: $5s^2 5p^5$
- A klórhoz hasonló szerkezetű molekula jön létre: I_2



14

14

Cl_2 és I_2



Erősen mérgező, a szerves anyagokat roncsolja, oxidálja. Az I. világháborúban harci gáz!!

A jódgőzök mérgezőek!

15

15

Klór és jód előállítása

- KClO_3 (fehér kristály közepén)
- KI (fehér kristály körben)
- $\text{KClO}_3 + 6\text{HCl} = \text{KCl} + 3\text{H}_2\text{O} + 3\text{Cl}_2$
- $\text{Cl}_2 + 2\text{KI} = \text{I}_2 + 2\text{KCl}$

16

16

HCl molekula képződése

- H atom: $1s^1$
- Cl atom: $3s^2 3p^5$
- Mindkét atomnak $1 e^-$ szükséges a nemesgázszerkezet eléréséhez
- Egyszeres kovalens kötés jön létre



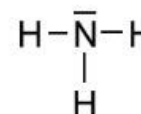
hidrogén-klorid-molekula

17

17

NH_3 molekula képződése

- N atom: $2s^2 2p^3$
- 3 e^- szükséges a nemesgázszerkezet eléréséhez
- Ezt 3 hidrogénatom adja



18

18

Poláris, apoláris kovalens kötés

- A kötésben lévő atommagok vonzzák a kötő e^- -párokat
 - Ha azonosak az atomok (EN azonos) a kötő e^- -párokat egyformán vonzzák egyenletes az e^- -felhő eloszlása:
apoláris kötés H_2, Cl_2
 - Ha EN különböző, az e^- -felhő eltolódik az elektronegatívabb atom felé:
poláris kovalens kötés, dipólus molekula HCl

https://realia.educatio.hu/01_gyomurolgasok/anyelvegysejtes/hasznalt-es-alkalmazott-chemia/02_funkcionalis-csoportok/41-kovalens-kotes-2019-02-27

19

19

Definíciók

- **Kovalens vegyérték:** Egy adott molekulában az egy atomhoz tartozó kötő e^- -párok száma
- **Kötéshossz:** A kötést létesítő két atom atommagja közötti távolság a molekulában.
Jele: d Me: pm/nm
- **Kötési energia:** A kovalens kötés erősségét jellemzi, 1 mol molekulában két adott atom közötti kötés felszakításához szükséges energia.
Me: kJ/mol Előjele: pozitív

20

20

Kötéshossz, kötési energia

Kötés	Kötési energia ($\frac{kJ}{mol}$)	Kötéshossz (nm)
Cl – Cl	243	0,198
Br – Br	193	0,228
I – I	151	0,266
H – Cl	432	0,127
H – Br	366	0,141
H – I	299	0,161
C – H	415	0,109
C – Cl	328	0,177

21

21