

Kémiai kötések

A periódusos rendszerben megtalálható **elemek többsége nem atomos állapotban létezik** a Földön. Első közelítésben **minden atom arra törekszik, hogy elektronszerkezetével a nemesgázszerkezetet elérje**. Ahhoz, hogy ez sikerüljön, képesek egymással összeállni és úgynevezett kémiai kötést kialakítani. Ebben a fejezetben megismerkedünk a kémiai kötések fajtáival és azok tulajdonságaival.

A kémiai kötések alapvetően **két nagy kategóriába** sorolhatjuk. Léteznek **elsőrendű** és **másodrendű** kötések.

Elsőrendű kémiai kötések

Az elsőrendű kémiai kötések közvetlenül az **atomok között alakulnak ki**. Három fajtáját különböztetjük meg:

- **ionos kötés**
- **fémes kötés**
- **kovalens kötés**

Fémes kötés

A fémek olyan tulajdonságai, mint hogy vezetik az áramot és a hőt, valamint hogy szürkés színűek, közismertek. Amikor egy fémdarabot a kezünkben tartunk, bele sem gondolunk, hogy mi van abban az anyagi halmazban, amely a bőrünkkel érintkezik. Nézzünk bele!

A **fématomokra** jellemző a **kis ionizációs energia**, és **elektronegativitás** vagyis **elektronjaikat könnyen leadják, elhagyják**. Ennek köszönhetően **anyagi halmazukban** elektronjaikat hátrahagyják, és **pozitív töltésű**, úgynevezett **fématomtörzseket alkotnak**. **Az elektronok az egész halmazra kiterjedően delokalizálódnak**. A fémrácsot a **delokalizált elektronok és a pozitív töltésű fématomtörzsek közötti elektrosztatikus vonzerő** tartja össze, és ezt nevezzük **fémes kötésnek**.

A fémek a fémes kötésből létrejövő fémrácsuknak köszönhetően **sok hasznos tulajdonsággal** rendelkeznek. Ilyen az **áram- és hővezetés képessége**. Az áramvezetés legfontosabb feltétele, hogy az adott anyag szabadon mozgó, töltéssel rendelkező részecskéket tartalmazzon. Ez a fémeknél a delokalizált elektronok által adott. Áramvezetésük a hőmérséklet emelésével romlik. A hővezetés oka a következő: amikor elkezdünk egy fémrácsos anyagot melegíteni, akkor hőenergiát közlünk vele. A hőenergia nagy részét a delokalizált elektronok nyelik el, amelyek ennek hatására gyorsabban kezdenek el mozogni és nagyobb energiával ütköznek egymással. Ütközéskor átadnak egymásnak az energiátöbbletükből. Az az elektron is nagyobb energiával kezd el mozogni, amellyel energia lett közölve az ütközés által. Ez a folyamat nagyon sokszor ismétlődik, és mivel az elektronok nincsenek helyhez kötve, ezért ez az energiaátadás egy idő múlva az egész fémrácsra kiterjed, amiből mi annyit érzünk, hogy melegszik a fémdarab, amit fogunk.

A **fémek szürkés színüket** (kivéve réz, arany) annak köszönhetik, hogy **bármely hullámhosszúságú fényt képesek elnyelni**. Ha megcsiszolunk egy fémdarabot, akkor azt tapasztaljuk, hogy fényes lesz. Ennek oka nem más, mint hogy bizonyos hullámhosszúságú fényt képesek visszaverni: ez okozza a fényüket. **A fémek megmunkálhatók, kovácsolhatók, nyújthatók**, mert erőbehatásra (például ütésre) az atomok nem válnak el egymástól, csak az atomsíkok tolódnak el és ezek eltolódása nem változtatja meg egymáshoz való környezetüket. A későbbiekben még részletesebben szó lesz majd a fémrácsról, de a felsorolt tulajdonságokat a fémek fémes kötésüknek köszönhetik. *Régen a tudósok, amikor még nem volt ismeretes a fémes kötés, csupán az ionos és kovalens, nem tudták mivel magyarázni a fémek számos tulajdonságát.*

Kovalens kötés

A periódusos rendszerben található elemek között sűrűn találkozunk olyanokkal, melyek jellemzésekor nem szimplán az atomról beszélünk, hanem az önmagával alkotott legegyszerűbb molekuláról. Ezekre tipikus példák a halogének, hidrogén, oxigén, nitrogén és foszfor. Amikor ezek közül például az oxigént ismertetnünk kell, akkor az O atom helyett az O₂ molekulát írjuk le. Ez miért van így? Sok olyan elem van, amelynek az atomos állapota instabil, energetikailag kedvezőtlen, ezért keletkezésekor önmagával képez egy stabil

molekulát. Ezen molekulák között kovalens kötés van. **A molekula nem más, mint meghatározott számú atom egymáshoz való kötődése kovalens kötéssel.**

Hogyan alakulnak ki a molekulák? Vegyük a legegyszerűbb esetet, a hidrogén gázt (H_2). Két hidrogén atom, amikor kellőképpen közel kerül egymáshoz, az elektronjaikra kihat a mindkét atom magvonzása. Mivel a hidrogénatomok szeretnék elérni a periódusos rendszerben hozzájuk legközelebb lévő nemesgáz (He) szerkezetét, ezért elektronjaik – egymáshoz kellő közelségben – eredeti atompályájukat elhagyva kialakítanak egy közös térrészt, ami nem más, mint egy molekulapálya. Őket hívjuk kötőelektronoknak. **A molekulapálya az a térrész, ahol a közös kötő elektronpárok 90%-os valószínűséggel megtalálhatók.** Az eredeti atompálya, amelyen az elektronok voltak, megszűnik. Ennek az a hajtóereje, hogy a molekulapályán lévő elektronok kedvezőbb energetikai állapotba kerülnek. Természetesen **a molekulapályára is érvényes a Pauli-elv, amely szerint maximálisan két ellentétes spinű elektron lehet egy pályán.** A molekulapálya létrejöttével kialakul a kovalens kötés.

A kovalens kötés olyan elsőrendű kémiai kötés, melyet egy vagy több közös kötő elektronpár hoz létre molekulapálya kialakításával a fent tárgyalt módon

A kovalens kötés jellemzése

Kovalens kötés csak olyan atomok között jöhet létre, amelyeknek elektronegativitás-különbsége nem nagyobb kettőnél, vagyis tipikusan nemfémek között. A kötést kialakító atomok természetesen nem tudják egymást tetszőlegesen megközelíteni (hiszen atommagjaik taszítják egymást), hanem csak bizonyos távolságra. **Azt a távolságot hívjuk kötéshossznak, ami a kovalens kötésben részt vevő atomok atommagjai között van.** Különböző atomok egymással különböző erősségű kovalens kötetést tudnak kialakítani. **A kötés erősségét a kötési energia jellemzi. Ez az az energia, amely ahhoz szükséges, hogy egy mól gázhalmazállapotú molekulában két atom közötti kovalens kötés felszakadjon. Jele $E_{köt}$ vagy $E_{kötés}$, mértékegysége kJ/mol. Mivel szükséges energia, ezért pozitív előjelű, azaz endoterm.**

A kovalens kötetést három szempontból szokás csoportosítani:

- kötések szám
- kötés polaritása

- **kötés kialakulásának módja**

Kötésszám szerinti csoportosítás

A kötések száma szerint a kovalens kötés lehet **egyszeres, kétszeres és háromszoros**. Az, hogy melyik alakul ki, az a kötésben részt vevő atomok minőségétől függ. A halogénatomokra (fluorra csak ez) és a hidrogénre például jellemző az egyszeres kötés, hiszen nekik csak egy elektron kell a nemesgázszerkezet eléréséhez. Ily módon közöttük csakis egyszeres kovalens kötés fog létrejönni és kétatomos molekulát alkotnak: H-Cl

Az oxigénatom már képes kétszeres kötés kialakítására is, mert neki 2 elektron hiányzik a nemesgázszerkezethez. O=O. Az oxigén azonban úgy is jól érzi magát, ha 2 darab egyszeres kötést alakít ki, például C-O-H. A nitrogén elektronszerkezetéből adódóan önmagával háromszoros kötést alakít ki, de képes egyszeres és kétszeres kötésre is, lényegében csak arra törekszik, hogy összesen 3 kovalens kötése legyen.

Mi a helyzet akkor, amikor két olyan atom találkozik, amelyek különböző kötésszámokra képesek, mint például az oxigén és a hidrogén? Az oxigén kétszeres kötésre képes, de a hidrogén mindenképp csak egyszeresre. Ilyenkor a nagyobb kötésszám kialakítására képesnek alkalmazkodnia kell a kisebbhez, vagyis az oxigén két darab egyszeres kötést fog kialakítani két hidrogénatommal (lásd víz szerkezete).

Az **egyszeres** kovalens kötésben **egy tengelyszimmetrikus, úgynevezett σ (szigma) kötés** van, ami azt jelenti, hogy a **kötésben lévő elektronok a két atomtörzs között lévő tengelyen helyezkednek el. E kötés mentén az atomok képesek rotálódni** (forogni), tehát azoknál a molekuláknál, amelyeknél csak egyszeres kötés van, ezt figyelembe kell venni (pl. alkánok konformációja, lásd később).

A **kettős és hármás kötésnél a szigma-kötés mellett π (pi) kötések (π_1 és π_2) is kialakulnak**, kettősnél egy, a hármásnál pedig kettő. Ezeknek a **pi-kötéseknek a kötési energiája kisebb, mint a szigma-kötésnek**, vagyis **könnyebb őket felszakítani**. A delokalizációt is ezek a kötések okozzák (lásd később részletesebben) **A pi-kötések töltéseloszlása – ellentétben a szigma kötésével – nem egyenletes. A második kovalens kötés (π_1) a szigma kötéstengelyen lévő sík alatt és felett helyezkedik el**, a síkban az elektronok tartózkodási valószínűsége nulla (csomósík). **A harmadik kovalens kötés a**

másodikhoz hasonló, de arra merőleges elhelyezkedésű. A többszörös kovalens kötések körül a **rotáció gátolt**, az **atomok kötéstávolsága kisebb**, mint egyszeres esetén, azonban **nem egyenesen arányosan** kisebb, hisz a pi-kötések gyengébbek, mint a szigma. **Kötési energiája a többszörös kötésnek nagyobb, de ez sem egyenesen arányos**

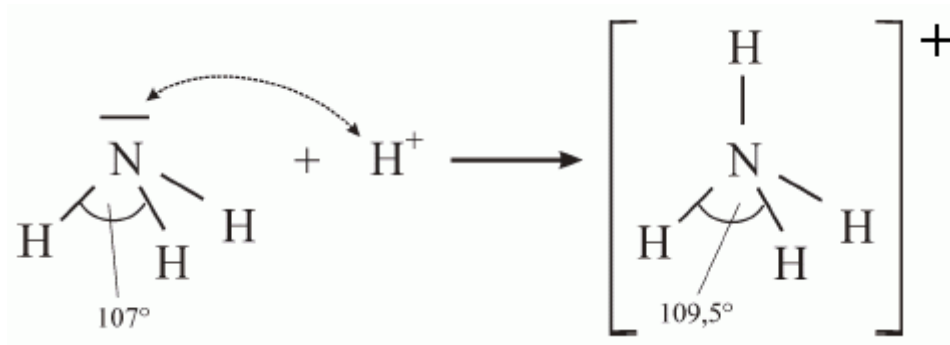
Polaritás szerinti csoportosítás

Polaritás szempontjából **poláris** és **apoláris** kovalens kötésekkel különböztetünk meg. Azon atomok között lehet csak a kovalens kötés **apoláris, melyek elektronegativitás-különbsége nulla**, a többi esetben **maga a kötés poláris**. Következésképpen **apoláris kovalens kötés azonos atomok között alakul ki**.

Kialakulás módja

A kialakulás módja szerint a kovalens kötés lehet **kolligatív** illetve **datív**. **Kolligatív** kovalens kötésről akkor beszélünk, amikor a **kötőelektronpár kialakításában mind a két atom részt vett**, azaz mind a ketten 1-1 elektronnal támogatták ezt.

Datív kötés esetében a **kötőelektronpárt csak az egyik atom adja**. Ilyenre képes például az ammónia nitrogénatomja, amikor protont vesz fel és kialakul az ammónium kation. Datív kötés jellemző még a komplexekre is, amelyekről részletesebben később lesz szó.



Kötéstávolság és kötési energia

A kötési energia és a kötési távolság erősen függ a kötést kialakító atomok méretétől. Minél kisebb a két atom mérete, annál erősebb a kötés és annál közelebb vannak egymáshoz (kötéstáv és kötési energia mindig fordítottan arányosak egymáshoz képest). Jó szemléltető példa a hidrogén-halogenidek:

kötéstávolság: $\text{HF} < \text{HCl} < \text{HBr} < \text{HI}$

kötési energia $\text{HF} > \text{HCl} > \text{HBr} > \text{HI}$

A kötési energia és távolság azonos atomok között a kötés számától is függ. Egyszeres kötés mindig nagyobb távolságú és kisebb energiájú lesz, mint a kétszeres illetve háromszoros

Kötés típusa	C,C kötéshossz, pm	Kötésszociációs energia, E, kJ/mol	Példa
C–C	154	350	Etán
C=C	134	620	Etén
C≡C	120	840	Etin (acetilén)

(gondoljunk bele, ha egy kézzel fogjuk egymást, akkor hamarabb eleresztjük a másikat, mintha két kézzel fognánk, vagy hárommal). Jó példa erre a szén-szénkötések.

Másodrendű kémiai kötések

A **másodrendű kémiai kötések** nem az atomok, hanem a **molekulák között fellépő kölcsönhatások**. Ezek körülbelül 1-2 nagyságrenddel gyengébbek, mint az elsőrendű kötések.

Másodrendű kötések csoportosítása:

- **diszperziós kölcsönhatás**
- **dipólus–dipólus kölcsönhatás**
- **hidrogénkötés**

Diszperziós kölcsönhatás

Diszperziós kölcsönhatás apoláris molekulák között alakul ki. Ezeknek a molekuláknak a **töltéseloszlása egyenletes**, vagyis a poláris molekulákkal ellentétben nekik nincs pozitív, illetve negatív részük. Amikor két apoláris molekula **egymáshoz közel kerül**, akkor **torzítják egymás elektronszerkezetét**, a molekula **töltéseloszlása megváltozik** (polarizálódik), nem lesz egyenletes. Kialakulnak **elektronban picivel gazdagabb és szegényebb részek**, vagyis a

molekula átmenetileg kismértékben dipólusossá válik. *(ezt másképpen melegítéssel is el lehet érni, mert magasabb hőmérsékleten a molekulák jobban rezegnek, ami dipólusossá teszi őket.)* Az elektronban gazdagabb rész (a molekula negatív része) átmenetileg kismértékben negatív töltésű lesz a több elektron miatt, a molekula elektronban szegényebb pozitív része pedig pozitív lesz az elektronhiány miatt. E két **ellentétes töltésű rész között fellépő elektrosztatikus vonzás a diszperziós kölcsönhatás.**

Mivel az apoláris molekula egyenletes töltéseloszlása külső behatásra (másik molekula, hőmérséklet) változik meg és válik egyenetlenné, ezért a diszperziós kölcsönhatást szokás indukált dipóluskötésnek is nevezni. Ez a **leggyengébb másodrendű kötés, kicsi hatótávolságú, és erőssége a részt vevő atomok méretének növekedésével nő.** Ennek bizonyítására jó példa a halogének forráspontjának a megvizsgálása. A kölcsönhatás **erőssége a molekulák térbeli alakjától is függ.** A benzol és a neopentán két hasonló moláris tömegű (78 és 72 g/mol) apoláris molekula, azonban forráspontjuk között körülbelül 70 °C különbség van. Ez azért van, mert a benzol lapos molekula, vagyis az indukált dipólusságból eredő elektrosztatikus vonzás nagyobb felületen érvényesül a molekulái között, mint a majdnem gömb alakú neopentán molekulái között.

Érdeemes tudni, hogy **diszperziós kölcsönhatás atomok között is létrejöhét.** Gondoljunk a **nemesgázokra.** Ők elektronszerkezetiileg annyira stabilak, hogy atomos állapotban is léteznek, emiatt ők olyanok, mintha egyatomos molekulák lennének. Közöttük is diszperziós kölcsönhatás van.

Dipólus-dipólus kölcsönhatás

Ez a kölcsönhatás az előzővel ellentétben **poláris molekulák között jön létre,** még hozzá olyan poláris molekulák között melyek nem képesek a hidrogénkötés kialakítására. Ezekben a molekulákban **külső behatás nélkül is található pozitív és negatív rész.** A kölcsönhatás pedig az **e részek közötti elektrosztatikus vonzerő.** A dipólus-dipólus kölcsönhatás **erősebb, mint a diszperziós,** mert a parciális töltések nagyobbak.

Hidrogénkötés

A hidrogénkötés a **legerősebb másodrendű** kötés. Ez csak bizonyos molekulák között alakulhat ki. Feltételei a következők:

- legyen a molekulában kis méretű, de nagy E_N értékű atom, ilyen a F, O, N
- Legyen a F, N, O atomokon nemkötő elektronpár
- legyen olyan hidrogén, amely kapcsolódik a F, N, O atomok valamelyikéhez

A kötés úgy alakul ki, hogy a **nagy elektronegativitású atomon lévő hidrogénatom magához vonzza a másik atom nemkötő elektronpárját**. Ennek az a magyarázata, hogy a hidrogénatom parciálisan eléggé pozitív, mert a mérete kicsi (vagyis az egységnyi pozitív töltés, ami a protonjából ered, jóval kisebb felületen oszlik el, mint például egy alkáli fémnél), nem rendelkezik nemkötő elektronpárral, és a nagy elektronegativitású atom még azt az egyetlen elektronját is megpróbálja tőle elcsalni, amit beadott a kovalens kötésbe. Az ilyen hidrogén képes más nemkötő elektronpárokra hatni. **A hidrogénkötés kötési energiája egy-két nagyságrenddel nagyobb a többi másodrendű kötéséhez képest**. Ennek számos következménye van. Az ilyen másodrendű kötéssel rendelkező molekulák:

- **forrás- és olvadáspontja a moláris tömegéhez képest nagy,**
- **viszkozitása és felületi feszültsége nagyobb (természetesen csak folyadékok esetében vizsgáljuk ezeket),**
- **hőkapacitása nagyobb.**