

## ***Molekulák térszerkezete***

---

A molekulák térszerkezete a molekulákat alkotó atomok térbeli elrendeződését jelenti. Mielőtt részletesebben elkezdénénk kivesézni, előtte érdemes lenne megismerkedni pár olyan fogalommal, amely elég jó alapot adhat a szerkezet kialakulásának megértésében.

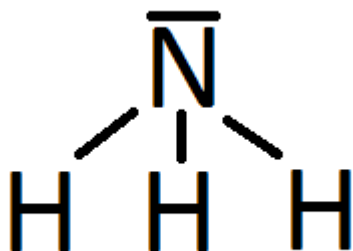
### ***Oktett-szabály***

Az oktett-szabály emelt szintű kémia érettségien nem tananyag (vagyis csak a lényege), azonban átnézése elkerülhetetlen annak érdekében, hogy közelebb kerüljünk a molekulák térszerkezetének megértéséhez.

Az oktett-szabály szerint a molekulákban az atomok úgy szeretnek kötést kialakítani, hogy körülöttük 8 elektron legyen, a hidrogén kivétel, ő kettőt szeretne. Ennek az az oka, hogy így érik el az atomok elektronszerkezeti a nemesgázok szerkezetét, ami stabilitást biztosít számukra. Ez egy elég jó szabály, azonban hamar megdől, konkrétan a foszfortól már nem érvényes (P, S, Cl, etc.). A foszfor, és a nagyobb rendszámú nemfémes elemek több elektront is el tudnak viselni maguk körül. Ennek az az oka, hogy a foszfor vegyértékelektron szerkezete  $3s^2 3p^3$ , vagyis a harmadik héjon végződik. Az atom című fejezetben már beszéltünk róla, hogy a harmadik elektronszerkezeti héjon már képes d alhéj is megnyílni, ezáltal a foszfor és az utána következő elemek mindegyikének lesz olyan alhéja, amit nem használ (foszfor esetében ez a 3d alhéj), de szükség esetén, ha kell, ha egy nála „erőszakosabb” atommal találkozik, akkor képes megnyitni.

Ennek értelmében az oktett-szabály a következő atomokra érvényesül, vagyis ezek az atomok a molekulákban mindig úgy próbálnak majd kötést kialakítani, hogy körülöttük a számukra nirvanát jelentő 8 elektron legyen: C, N, O, F, Si és H, de az ő esetében ez 2 elektron jelent, mert a He elektronszerkezetét szeretné megkaparintani.

Nézzünk egy példát hogyan is lehet ezt elképzelni, hogyan kell ezt leszámolni:



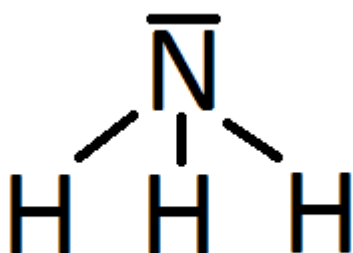
Az ammónia molekulájában mindegyik hidrogénnek van egy-egy kötő elektronpárja, így a hidrogének hozzáfértek a számukra szükséges 2-2 elektronhoz. A N atom esetében 3 kötő (ugyanis a kötő elektronpárt mind a két atomhoz hozzászámoljuk) és egy nem kötő elektronpár figyelhető meg. A nem kötő elektronpárt csak ahhoz az atomhoz számoljuk, akin van. Így a N atom  $3 \cdot 2 + 2 = 8$  elektronnal rendelkezik, vagyis számára is biztosítva van az oktett-szabály.

### „Vegyértékelektron-szabály”

A vegyértékelektron-szabály szerint a molekulákban az atomok körül közvetlenül annyi elektron kell, hogy legyen, mint ahány vegyértékelektronja van az adott atomnak. Ez a szabály a legtöbb esetben teljesen jól használható, természetesen kivételek mindig vannak, de ettől jelen jegyzetben eltekintünk.

Ez a szabály azért fontos, mert ezáltal fogjuk tudni megállapítani, hogy a molekulákban az egyes atomokon van-e és ha igen, akkor mennyi nem kötő elektronpár van. Ennek ismeret elengedhetetlen a molekulaszervezet megszerkesztésében, ugyanis a központi atomon lévő nem kötő elektronpár(ok) alapvetően befolyásolják a molekulák térszerkezetét.

Nézzük ismét az ammónia esetét:



A hidrogénatomok egy vegyértékelektronnal rendelkeznek ( $1s^1$ ), emiatt ők a kötés kialakításakor is ennyit szeretnének közvetlenül maguk körül tudni. Ez itt teljesül is, hiszen a kötésben lévő kötő elektronpárokat el kell felezni képzeletben és az egyiket az egyik atomnak, a másikat a másik atomnak adni. Mivel mindegyik hidrogénnek egy kovalens kötése van, ami  $2/2=1$  elektront jelent közvetlenül maga körül, így vegyérték-szabály terén rendben vannak. A N atom esetében 3 kötő elektron pár van, ami  $6/2=3$  elektront jelent és egy csak hozzá tartozó nem kötő, ami plusz kettő, így a N atomnak

összesen 5 elektronja van. A N vegyértékelektron szerkezete  $2s^2 2p^3$ , azaz öt elektront tartalmaz, ebből következik, hogy a nitrogén atom is rendben van a vegyérték elektronok számának terén az ammónia molekulában, tehát mindenki boldog.

Felmerülhet a kérdés, hogy azokkal az atomokkal mi a helyzet, akikre nem érvényes az oktett-szabály. A vegyértékelektron-szabály ezeknél az atomoknál is játszik, ebből kifolyólag például a foszfor képes 5, a kén 6 a klór pedig 7 kötés kialakítására.

### ***Mitől függ, hogy két atom között hány szoros kovalens kötés alakulhat ki?***

Vannak olyan atomok, amelyeknek vegyértékelektron szerkezete gátolja, hogy relatíve sok kötést alakítsanak ki. Ilyenek az első és második periódus elemei. Ezeknek az elemeknek csak s illetve s és p alhéjuk van, míg a harmadik periódustól kezdve minden elemnek van d alhéja is. Emiatt az első két periódus elemeinek nem adott az a lehetőség, hogy egy esetlegesen üres d alhéjat használjanak kötés kialakítása céljából. Ezek az atomok ebből következően viszonylag erélyesek a kötések kialakítása terén, ugyanis arra törekednek, hogy az oktett- és a vegyértékelektron-szabály is érvényesüljön rájuk és ezt csak kevés kötés kialakításával képesek megoldani. A fenti megfontolás alapján a következő atomok a legtöbb esetben csak a következő számú kovalens kötés kialakítására képesek (másképp fogalmazva ennyi lehet maximálisan a kovalens vegyértékszámuk):

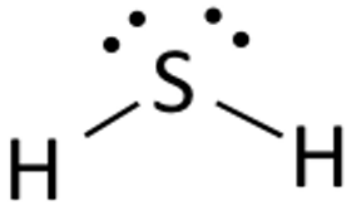
- H és F csak egy darab kötés (egy darab egyszeres)
- O 2 db kötés ( egy darab kétszeres vagy két darab egyszeres)
- N és 3 db kötés (egy darab háromszoros, vagy 3 db egyszeres vagy 1 db kétszeres és egy darab egyszeres)
- C és Si 4 db kötés (egyszeres-kétszeres-háromszoros kötések úgy, hogy négy legyen nekik összesen)

Akkor most maximálisan hányas kötés alakulhat ki két atom között? Annyi amennyit a legkevesebb kötést kialakító atom el tud viselni. Például oxigén és hidrogén között soha nem lesz kétszeres kötés, mert a hidrogén csakis egy darab egyszeres kötésre képes, így oxigén és hidrogén mindig úgy fog egymással vegyülni, hogy két darab egyszeres kötést alakít ki az oxigén atom a hidrogénnel (lásd víz).

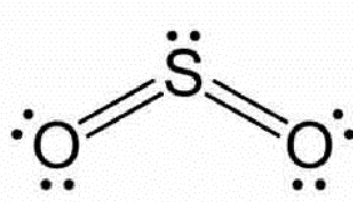
Másik példában, szén és nitrogén között kialakulhat egyszeres, kétszeres és háromszoros kötés is, lévén a nitrogénnek 3 kötés kell, a szénnek 4.

## Kovalens vegyérték

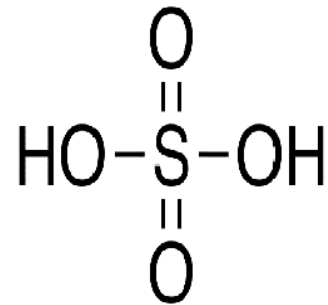
A kovalens vegyérték azt jelenti, hogy egy molekulában az adott atomnak hány darab kovalens kötése van. Nézzük a kén-hidrogén, kén-dioxid és kénsav esetében a kén atom hány kovalens vegyértékkel rendelkezik:



2 vegyérték



4 vegyérték



6 vegyérték

## Molekulák polaritása és térszerkezete

A molekula olyan semleges töltéssel rendelkező részecske, amely kettő vagy több atomból épül fel és az atomokat kovalens kötés tartja össze. Központi atomnak (jele: A) azt az atomot hívjuk, amelyik a legtöbb kovalens vegyértékkel rendelkezik a molekulában, vagyis akinek a legtöbb kötése van, a többi hozzá kapcsolódó atom neve ligandum (jele: X).

A molekulában az atomok mindig úgy próbálnak elhelyezkedni, hogy a kötő és az esetleges nem kötő elektronpárok a térben minél távolabb kerüljenek egymástól, ugyanis ezek elektromosan taszítják egymást.

A fenti gondolatból adódóan a molekulák térszerkezetét alapvetően befolyásolja:

- központi atomon lévő nem kötő elektronpárok száma
- ligandumok száma
- központi atom mérete
- központi atom és ligandum között hányas kötés van

A központi atomon lévő nem kötő elektronpárok száma azért befolyásolja erősen a térszerkezetet, mert a nem kötő elektronpár nagyobb térigényű, mint a kötő, így az torzítani fogja a szerkezetet, mert tőle a kötő elektronpárok nagyon távol szeretnének kerülni („lenyomja a kötéseket”). A ligandumok száma mondhatni triviális (egyértelmű), más ligandumszám más térbeli alak felöltését eredményezi. A központi atom mérete a kötésszöget fogja befolyásolni, minél nagyobb, annál kisebb a kötésszög. A kétszeres kötés felfogható úgy, mint egy nagyobb térigényű egyszeres kötés, emiatt, a picivel nagyobb térigény miatt a molekula szerkezetét ez is torzítani fogja.

A molekulákat polaritás szerint két csoportra oszthatjuk:

- apoláris molekulák
- poláris molekulák

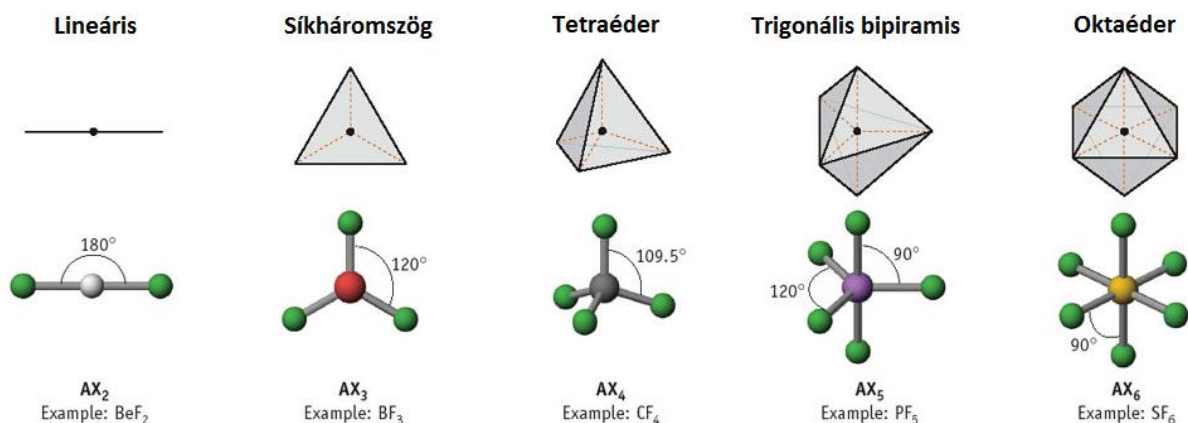
Apolárisak azok a molekulák, melyek töltéeloszlása szimmetrikus, azaz nem dipólusosak. Vigyázat a kötés és a molekula polaritását nem szabad keverni. A kovalens kötés polaritását csak két atom között értelmezzük, míg a molekula polaritását az egész molekulára nézzük. Legtöbb esetben az apoláris molekulák kötése polárisak (pl.: metán), azonban a kötés polaritások a szimmetrikus térszerkezet miatt kioltják egymást így a molekula végső soron apoláris lesz. Az apoláris molekulák szerkezete szimmetrikus. Szimmetrikus molekulakerkezet a következő feltételek mellett alakulhat ki:

- Kéttomos molekulák esetén a molekulát ugyanazon atomok építsék fel (összes elemmolekula ilyen és a nemesgázok is)
- Többatomos molekulák esetén:
  - a központi atomon ne legyen nem kötő elektronpár, mert az torzítja a nagyobb helyigénye miatt és
  - a ligandumok anyagi minősége megegyezzen (ugyanazok legyenek)

*Most már érthető, hogy miért volt fontos átbeszélni az oktett- és vegyértékszabályt, ugyanis általuk meg fogjuk tudni állapítani, hogy az adott központi atom, az adott molekulában tartalmaz-e nem kötő elektronpárt.*

Apoláris molekulák a ligandumok számától függően a következő térbeli szerkezetet vehetik fel:

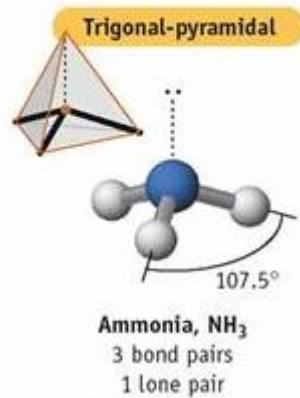
- 2 ligandum  $AX_2$ : lineáris, kötésszög  $180^\circ$  pl.: szén-dioxid
- 3 ligandum  $AX_3$  síkháromszög, kötésszög:  $120^\circ$  pl.: bór-triklorid és kén-trioxid
- 4 ligandum  $AX_4$  tetraéder, kötésszög:  $109,5^\circ$  pl.: metán, szén-tetraklorid
- 5 ligandum  $AX_5$  trigonális bipiramis pl.: pl.: foszfor-pentaklorid
- 6 ligandum  $AX_6$  oktaéder pl.: kén-hexafluorid



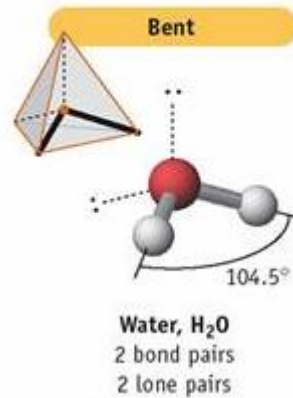
A poláris molekulák csoportját azok a molekulák képezik, amelyek töltéseloszlása nem szimmetrikus, azaz a molekulában vannak elektronban gazdagabb részek (ez a molekula parciálisan negatív része) és elektron szegényebb részek (ez a molekula parciálisan pozitív része). Ezeknek a molekuláknak a töltéseloszlása azért nem szimmetrikus, mert a szerkezetük sem az. Ebből adódóan az ilyen molekulák dipólusosak, szerkezetük a szimmetrikushoz képest torzult. Torzulást például a központi atomon lévő nem kötő elektronpár vagy a különböző anyagi minőségű ligandumok tudnak okozni. Néhány esete:

- $AX_2E$  és  $AX_2E_2$  ahol E a központi atomon lévő nem kötő elektronpárt jelenti. Az ilyen molekulák V alakot öltenek fel különböző kötésszöggel. Ilyen például a víz, kén-hidrogén, kén-dioxid.
- $AX_3E$  háromszög alapú piramis, jó példa erre az ammónia molekulája

## Háromszögalapú piramis



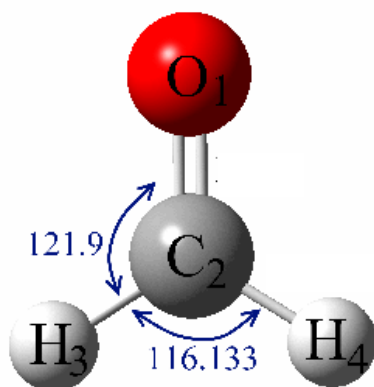
## V alak



Hogyan befolyásolja a központi atom mérete a kötésszöget?

Erre jó példa a víz és kén-hidrogén esete. A két molekula szerkezete  $\text{AX}_2\text{E}_2$ -nek megfelelően V alakot vesz fel, azonban nem ugyanolyan V alakot, a víz nagyobb kötésszöggel rendelkezik (nyitottabb), mint a kén-hidrogén. Ennek az az oka, hogy a vízben lévő oxigén atom mérete kisebb, mint a kén-hidrogénben lévő kén mérete. A központi atom mérete tehát tényleg befolyásolja a molekula szerkezetét, minél nagyobb, annál kisebb a kötésszög.

Mi a helyzet a formaldehiddel?



A formaldehid molekulájában lévő központi atom a szén nem tartalmaz nem kötő elektrópárt, azonban a molekula mégsem szimmetrikus síkháromszög alakot vesz fel, hanem egy picit torzított síkháromszöget. Ennek az az oka, hogy a szén-oxigén kettős kötés picit nagyobb térigényű, mint a szén-hidrogén egyszeres kötés. Emiatt a H-C-H kötés kötésszöge kisebb, mint  $120^\circ$ , csupán  $116^\circ$ . A molekula poláris. Ez a példa jól mutatja, hogy a kettős kötés hogyan befolyásolja a molekula szerkezetét.