AR Kémia: Molekulaszerkezet

# Molekulák kialakulása

Az atomok közös elektronpár kialakításával is elérhetik a nemesgázszerkezetet. Közös elektronpárral kialakult kötést **kovalens kötés**nek nevezzük. A kötésben részt vevő elektronpárokat **kötő elektronpárok**nak nevezzük, a kötésben részt nem vevőket pedig **nemkötő elektronpárok**nak.



1. ábra: Hidrogén molekula kialakulása H-atomokból

Két vagy több atomból kovalens kötéssel képződő semleges részecskét **molekulá**nak nevezzük. A molekulák összetételét **összegképlet**tel adjuk meg. A molekulát alkotó atomok vegyjelét egymás mellé írjuk. A vegyjel jobb alsó indexébe szereplő szám pedig megmutatja, hogy hány atom van belőle a molekulában. (Ha egyet írnánk a jobb alsó indexbe, akkor ezt elhagyjuk, nem szokás leírni.)

Az összegképlet megadása sokszor nem lesz elegendő (későbbi tanulmányaink során majd látjuk), ezért **szerkezeti képlet**et is használunk, amely megadja az atomok egymással való kapcsolódását is.

Aszerint, hogy mennyi elektronpár képezi a kovalens kötést, megkülönböztetjük

* az egyszeres (1 elektronpár)
* a kétszeres (2 elektronpár)
* a háromszoros (3 elektronpár) kovalens kötést

Az első kovalens kötés mindig az ún. **σ-kötés**. Ebben a kötésben az elektronok sűrűsége a kötés tengelye mentén a legnagyobb. A második és a harmadik kovalens kötést létesítő elektronpárok számára már nincs hely ebben a térrészben, ezért ezek az ún. **π-kötés**ek a kötés tengelyére merőleges síkban alakulnak ki.

*Pl.:* Háromszoros kötés esetén:1db σ-kötés+ 2 db π-kötés (szokásos jelölése: π1 és π2)

Többszörös kötés létrejöttének feltétele a kis atomsugár, és a nagy elektronegativitás.

Az egy atomhoz tartozó kovalens kötések számát kovalens **vegyérték**nek nevezzük.

**Datív kötés** az a kötés, amely úgy jön létre, hogy csak az egyik atom adja a kötő elektronpárt.(NH4+)

Egy speciális esetet kell még megemlíteni, amikor is a kötésben részt vevő elektronok több atomhoz tartoznak. (Pl. benzol)

Ha a kovalens kötés azonos atomok között jön létre, akkor az azonos atomok atommagjai egyenlő erővel vonzzák a kötő elektronpár(oka)t. Az ilyen kötést **apoláris kötés**nek nevezzük.

Ha különböző atomok között alakul ki a kovalens kötés, akkor a két atommag nem egyforma erővel vonzza a kötő elektronpárt. Minél nagyobb a magban lévő protonok száma, és minél kisebb az atom sugara, annál erősebb vonzást fejt ki. Ebben az esetben a kötés mindig poláris. Úgy is megfogalmazhatjuk, hogy különböző elektronegativitású atomok között kialakuló kötést **poláris kötés**nek nevezzük.

A kovalens kötés erősségét jellemzi a **kötési energia**. Definíciója: egy mol molekulában két adott atom közötti kötés felszakításához szükséges energiát kötési energiának nevezzük.

Jele: Ek, mértékegysége: $\frac{kJ}{mol}$

A kötést létesítő atomok atommagjai közötti távolság a **kötéstávolság**. Értéke függ a kapcsolódó atomok méretétől: nagyobb méretű atomok esetén nagyobb a kötéstávolság, de a kötési energia is kisebb lesz.

Ha azonos atomok kapcsolódnak kétszeres illetve háromszoros kötéssel, akkor a kötéstávolság kisebb, mint az egyszeres kötés esetében, a kötési energia viszont nagyobb. Jó példa az etán-, etén-, etinmolekulában a szén-szén kötéstávolság ill. a kötési energia.

A kapcsolódó atomok kötései által bezárt szöget **kötésszög**nek nevezzük.

# Molekulák térszerkezete

**Központi atom**: legtöbb kötést létesítő atom.

**Ligandum**: kapcsolódó atomok (atomcsoportok)

A molekula térszerkezetét a központi atomhoz tartozó kötő és nemkötő elektronpárok száma határozza meg. Ugyanakkor fontos a ligandumok száma is.

Néhány egyszerűbb térszerkezet:

* **Lieáris**: központi atomnak két kötő elektronpárja van, és két ligandum kapcsolódik hozzá. Kötésszög: 180º (**BeCl2**)

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

Cl

Cl

Be

* **Síkháromszög (síktrigonális)**: központi atomnak 3 kötő elektronpárja van, három ligandum kapcsolódik. Kötésszög: 120º (**BF3**)

|  |  |
| --- | --- |
| FFBF | patt007.png |

* **Tetraéder**: központi atomnak 4 kötő elektronpárja van, 4 ligandum kapcsolódik. Kötésszög: 109,5º (**CH4**)

|  |  |
| --- | --- |
| patt008.png | HHHHC |

* **Trigonális bipiramis**: központi atomnak 5 kötő elektronpárja van, 5 ligandum kapcsolódik. Kötésszög: 90º ill 120º (**PCl5**)

|  |  |
| --- | --- |
| PClClClClCl | patt009.png |

* **Háromszög alapú piramis**: központi atomnak 3 kötő elektronpárja, és 1 nemkötő elektronpárja is van, 3 kapcsolódó ligandum. Kötésszög: 107º (**NH3**)

|  |  |
| --- | --- |
| HHHN | patt010.png |

* **V-alak**: központi atomnak 2 kötő elektronpárja van, és van két nemkötő elektronpárja is. Kötésszög:<107º (**H2O**)

O

H

H

*Megjegyzés:* nemkötő elektronpár térigénye nagyobb, mint a kötőé. Térszerkezetet torzítja, ha a központi atomnak van nemkötő elektronpárja is.

# Molekulák polaritása

Azonos atomok kapcsolódásával létrejött elemmolekula mindig apoláris: töltéseloszlása szimmetrikus.

Különböző atomokból kovalens kötéssel kialakuló molekulák polaritását a kötéspolaritás és a molekula alakja együttesen határozza meg.

Kétatomos molekulák, ha különböző atomokból épülnek fel, akkor polárisak (dipólusnak is mondjuk).

Például a HCl-molekula: Klór elektronegativitása 3,0, a hidrogéné 2,1. Ebből adódóan a molekula Cl-felőli része elektronban gazdagabb, mint a H-felőli, ezért a HCl dipólus.

Háromatomos molekulát ha nézünk, pl. a CO2 molekulát, akkor tudjuk:$ ΔEN\_{C}=2,5,$ $ΔEN\_{O}=3,5$. Így a C-O kötések polárisak, de a molekula apoláris, mert szimmetrikus voltából a töltéspolaritások kioltják egymást.



7. ábra: Kísérlet: Nitrogén-trijodid instabilitásának bemutatása