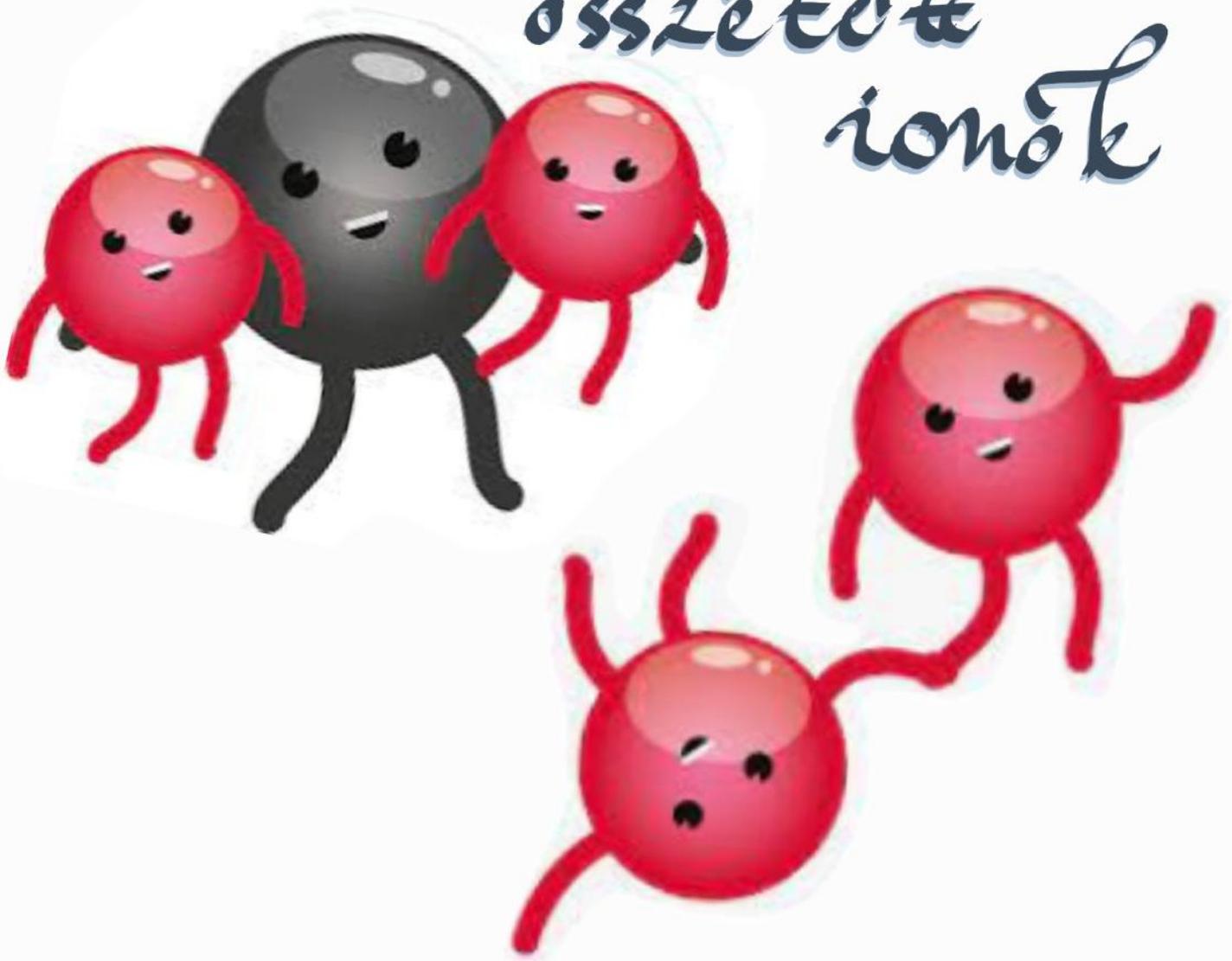


Molekulák,
összetett
ionok



MOLEKULA



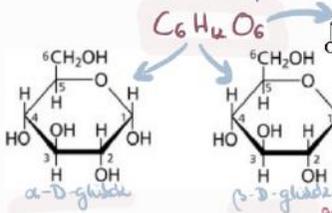
MOLEKULA két vagy több atomból kovalens kötéssel képződő semleges részecske

MOLEKULAKÉPLET (tárgyatlati képlet, összegképlet)

a valóságban létező molekula összetételét fejezi ki
 H_2O → a molekulát alkotó elemek egyenlő arányú mellett

→ **előjelek**: hány van az adott atomból a molekulában

MIKOR NEM ÉRVEZ A MOLEKULAKÉPLET?
 az adott atomok többféle szerkezeti elrendezésben kapcsolódhatnak össze

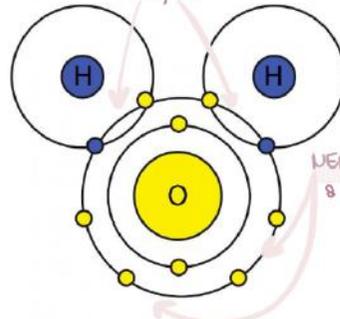


SZERKEZETI KÉPLET: az atomok egymással való kapcsolódását és magnumatját

RELATÍV MOLEKULATÖMEG: megmutatja, hogy az adott molekula hányszor nagyobb tömege a ^{12}C -atömeg tömegének 1/12-ed részének
 jelle: M_r
 mértékegysége: nincs
 értelme: a relatív atomtömegekből számítottó ki

KÖTŐ ELEKTRONPÁR

az az elektronpár, amely a kötést alakítja ki



MEKÖTŐ ELEKTRONPÁROK
 a kötésben részt nem vevő elektronpárok

Kovalens kötés

= a közös elektronpárral létrejövő kötés

a köté elektronpár csak ellentétes spinű elektronokból jöhet létre

MOLEKULAPÁLYA

a vegyértékelektronok atompályáiból molekulapályára kerülnek az a lény, ahol a köté elektronpár 3D-os térben úgy helyezkedik el, hogy a molekulapályák leendő elektronok legnagyobb energiájúak legyenek, mint az atomok voltak, azaz 2 elektron, ellentétes spinű

nagy EN-ű atomok képezik a köté elektronpárakat megtartókat

maguk körül
 → nem fényesek atomok
 → nagyok EN-ű felületek + egyes nem fényesek

KOVALENS VEGYÉRTÉK

egy atomhoz tartozó köté elektronpárok száma befolyásolja: vegyértékelektronok pozitíván elektronok száma

TOBBSZOROS KÖTÉS LEHETŐSÉGE

a kötést létrehozó atomok azonos vagy különböző energiájúak, de a kötés kialakításához szükséges a megfelelő pályák közötti kölcsönhatás
 → kisebb gömb együttható felületükre jutó nagy magföldök

O, N: többszörös kötés (2. periódus) $O=O$; $N=N$
P, S: nem alakít ki, csak egyszeres kötést (3. periódus)

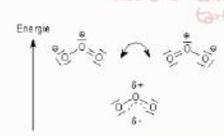
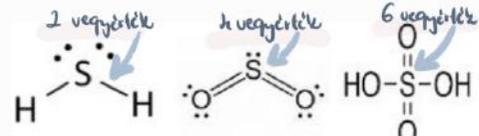
kis méretű atomok a nem fényes szerkezetbe való töltés

ÉLENYESSÉG

→ kötések száma attól függ, mennyi e^- kell a nem fényes résznek.
 $H \cdot \cdot C \cdot \cdot H$
 H
 sz. csoport: a pályák között van 2 pozitíván e^- -je van legfőbb az e^- vegyértékűek → hibridizáció

KÖTÉSI ENERGIA

= egy mol molekulában két atom közötti kötés felszakításához szükséges energia
 jelle: E_k
 mértékegysége: kJ/mol
 értelme: a kötés létrejöttkor felszabaduló energia ellentétes előjel



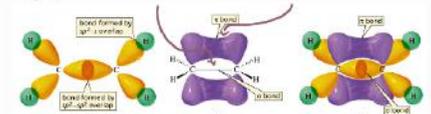
CSOPORTOSÍTÁSA

kolligatívul
 elektron nem kötött atomok
 $H \cdot + H \cdot \rightarrow H-H$
 (mindig ellentétes spinű!)

déli kötéssel
 egyik atom adja mind a köté elektronok: $C::O:$
 $H^- + H^+ \rightarrow H-H$

σ -kötés
 két kovalens kötés, legstabilabb
 C-vegyérték a leggyakoribb a legmagasabb lehetőség az atomok közötti jó kötések kialakítására

π -kötés
 2 C-S kovalens kötés
 a köté tengelyre merőleges pályák közötti kölcsönhatásból jön létre
 O-kötésnél gyengébb mint az azonos atomok közötti kötések



egyszeres kötés H-H
 egy elektronpár 1 σ -kötés

többszörös kötés
 $O=O$ kötés
 2/3 elektronpár 1 σ + 2 π -kötés

lokálist
 a köté elektronpár két atom között van

delokálist
 a köté elektronpár kettőnél több atom között van
 benzol (6 szénatom) → 6 e^- → delokálist π -kötés



apoláris
 azonos atomok kötése
 a köté elektronpár mind a köté e^- -párt

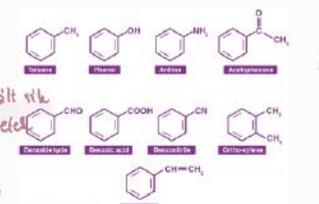
póláris
 két atom között van a köté e^- -párt
 függ a köté elektronok eloszlásától a köté elektronok között

A GRAFIT SZERKEZETE

hexagonális kötélek, a síkban van az atomok közötti kötés, a síkok között van az atomok közötti kötés
 egy szénatom 3 másikból alkot kovalens kötést a negyedik delokálist π -pályával
 → áramvezetés

AROMÁS VEGYÜLET

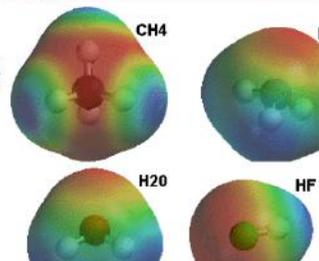
= konjugált síkgyűrűk tartalmazó szerves vegyületek
 → delokálist π -elektronok
 pl. benzol, uval
 feltételek: → gyűrűs atomok közötti kötés
 → a gyűrűt alkotó atomok mind egyenlő energiájúak
 → az atomok közötti kötés p-pályákkal



KÖTÉSÁLLÁS

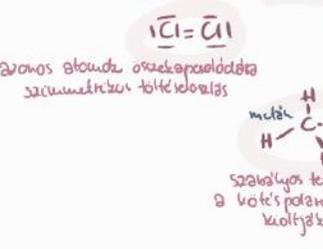
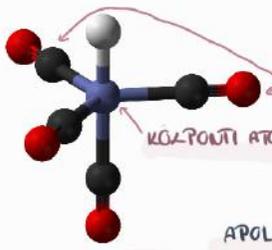
= a kötést létrehozó atomok közötti viszony
 értelme függ: → kapcsolódó atomok mérete (nagyobb atomok között több elektronpár, több szoros kötés)
 (közvetlen, nagyobb kötés energiája)

	ETÁN	ETÉN	ETIN
C_2H_6	H_3C-CH_3	C_2H_4	C_2H_2
E_k (kJ/mol)	348	642	812



A MOLEKULÁK TÉRSZERKEZETE

ELEKTRONPÁR-TASZÍTÁS EJMÉLET: az adott atom körüli vegyértékelektronpár taszítja egymás köztükös taszítás miatt úgy helyezkednek el, hogy minimalizálják a taszító hatást a lehető legtávolabbi helyzetkedés eléréig, azaz meghatározzák a molekula geometriáját



A molekula polaritása
 függ a kötéspolaritástól a molekula alakjától
 szimmetrikus/méretes molekuláknál a kötéspolaritásból kiejtődik egymást
KÖTÉSSZÖG: a kapcsolódó atomok vetítése által bezárt szög
 kiejtődik a szimmetriától
 kisebb, ha a központi atomhoz tartozó nemkötő elektronpár csak egy atomra van erősen hatással nagyobb, ha többszörös kötés

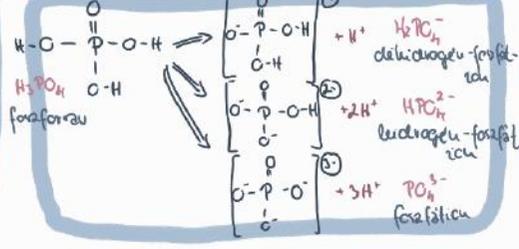
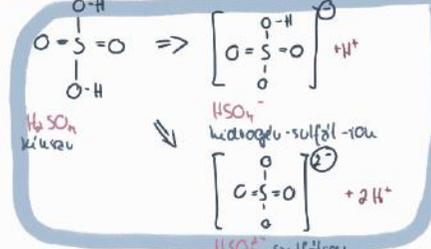
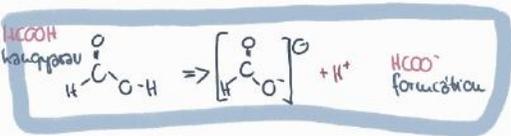
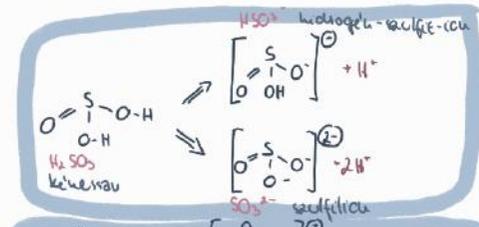
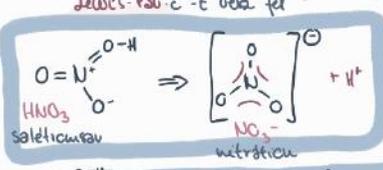
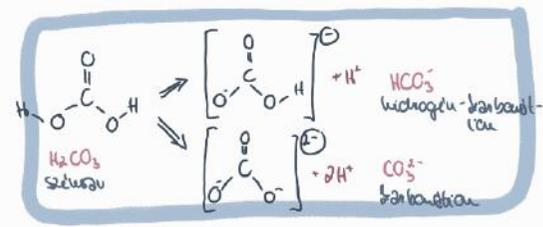
POLÁRIS/DIPÓLUS
 $EU = \sum \mu_i$
 kétatomos molekulák a kötés felé le dőlnek részlegesen \ominus a nagyobb felé le dőlnek részlegesen \ominus
 az oxigén két nemkötő e-párja vagy helyettesítő U-alakú molekula
 CH_3Cl klórmétán $\begin{matrix} Cl \\ | \\ H-C-H \\ | \\ H \end{matrix}$
 a kötéspolaritásból nem dőlnek ki egymást

$A-X$ AX_1		
$X-A-X$ AX_2		180°
$E-A-X$ AX_1E_1		
$X-A-X$ AX_3		120°
$X-A-X$ AX_2E		< 120°
$E-A-X$ AX_1E_2		
$X-A-X$ AX_4		109,5°
$X-A-X$ AX_3E		107°
$X-A-X$ AX_2E_2		105°
$A X_5$	TRIGONÁLIS BIPIRAMIS PCl_5	
$A X_6$	OKTÁÉDER SF_6	

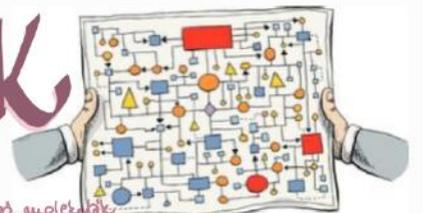
A molekula alakját meghatározó tényezők
 meghatározó az atomok és a központi atom nem tartozó nemkötő elektronpár
 a központi atomhoz tartozó nemkötő elektronok száma
 a nemkötő elektronok térfelülete vagyis a szabályos szerkezet felül
 ha a központi atomhoz egyenes és kettős kötés is kapcsolódik a kettős kötés két elektronpárra taszítja az egyenes kötését
 formálódik (CH_2O)
 pl. ammónia ↔ foszfén
 víz ↔ két-hidrogén
 $\begin{matrix} H \\ | \\ H-N-H \\ | \\ H \end{matrix}$ $\begin{matrix} H \\ | \\ H-P-H \\ | \\ H \end{matrix}$
 107,3° 93,5°
 104,5° 92,1°

ÖSSZETETT IONOK

ÖSSZETETT ION: több atomból álló, pozitív/negatív töltéssel rendelkező molekulák, amelyekben az atomok kovalens kötéssel kapcsolódnak
 kovalens deszoxidációval (H^+ -leadás)
 savak vizes oldata a kis méretű H^+ -ionok aktív kötéssel a vízmolekulák nemkötő elektronjához kapcsolódnak $\rightarrow H_3O^+$ (oxidiumion)
 hidroxidion vízmolekulából protonleadással $\rightarrow OH^-$
 oxosavak deszoxidációja (= H^+ -leadás) összevont aniont eredményez pl. szén-dioxid deszoxidációval a képződő karbonátion dehidratált π -kötéssel hevedelnek, kétféleképpen vegyül összevont aniont
 az oxosavakból levezethető összevont anionok
 savak: vegyületek, amelyek a vízmolekuláknak protonot adnak át a vizes oldat kémhatását savasabbá teszik a pH-t csökkentik
 Bronsted-sav: H^+ ad le a bázisnak
 x-főfokú kation sav (kötés H^+ -t képes elvonni)
 Lewis-sav: e^- vonz fel

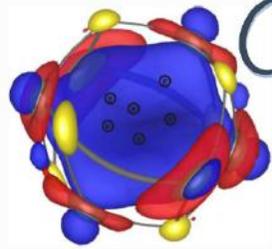
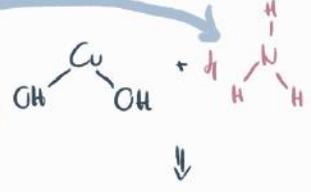
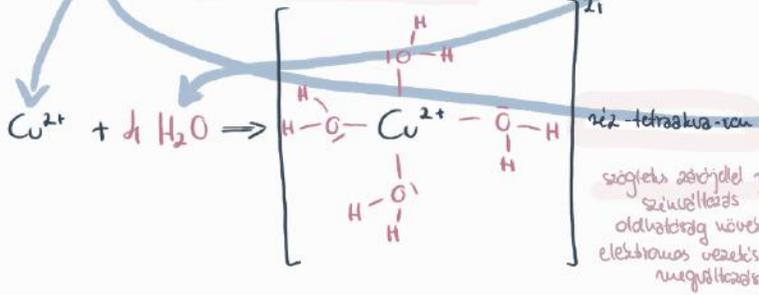


KOMPLEX IONOK



α d-vező fémei
 α külső réteget α-állójuk feltöltetlen pályák vannak
 hajlamosak a komplex képzésre
 általában vízrel képzett okta-komplex formájában

= α központi atom/ion vegyértékjelének betöltetlen pályái vannak
 nem kötő elektronnal rendelkező molekulák
 ligandumok, datív kötést képezhetnek a központi atommal/ionnal
 pl. Cl^- / ammónia



Összetett ionok szerkezetének megállapítása

