

## Kémiai kötések I.: elsőrendű kémiai kötések (4. fejezet)

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 **vegyérték elektronjaikat könnyen leadják, elhagyják**. Ennek köszönhetően **anyagi halmazukban** vegyérték elektronjaikat hátrahagyják, és **pozitív töltésű**, úgynevezett **fématomtörzseket alkotnak** (atomtörzs=atom – vegyértékelektronok). **Az elektronok az egész halmazra kiterjedően delokalizálódnak**. A fémrácsot a **delokalizált elektronok és a pozitív töltésű fématomtörzsek közötti elektrosztatikus vonzerő** tartja össze, és ezt nevezük **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 O<sub>2</sub> 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 (ez a közös térrész értelemszerűen mind a két atomra kiterjed). 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.



## Molekulapálya kialakulása

**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 kötést tudnak kialakítani. **A**

**kötés erősségét a kötési energia jellemzi. Ez az az energia, amely ahhoz szükséges, hogy egy mól gázalmazállapotú molekulában két atom közötti kovalens kötés felszakadjon.**

**Jele  $E_{\text{köt}}$  vagy  $E_{\text{kötés}}$ , mértékegysége kJ/mol. Mivel szükséges energia, ezért pozitív előjelű, azaz endoterm.**

**A kovalens kötést több szempontból is lehet csoportosítani**

- **kötések szám szerint**
- **kötés polaritása szerint**
- **kötés kialakulásának módja szerint**
- **lokalizáció szerint**

### ***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

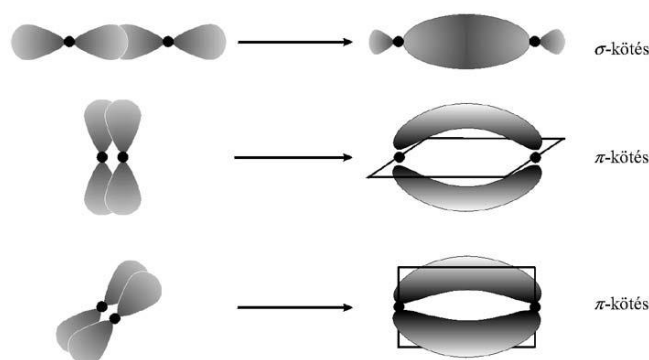
Az oxigénatom már képes kétszeres kötés kialakítására is, mert neki 2 elektron hiányzik a nemesgázszerkezethez. O=O. Az oxigén azonban úgy is jól érzi magát, ha 2 darab egyszeres kötést alakít ki, például C-O-H. A nitrogén elektronszerkezetéből adódóan önmagával háromszoros kötést alakít ki, de képes 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  $\sigma$ (szigma) kötés** van, mely esetében 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). *Érdekesség: A valóságban ez így nem teljesen igaz, hogy az elektronok a két atom között lévő tengelyen tartózkodnak csak! Pontosabban úgy lehetne fogalmazni, hogy legnagyobb rész a tengelyen tartózkodnak, attól távolodva egyre kevésbé fordulnak elő!*

A kettős és hármas kötésnél a szigma-kötés mellett  $\pi(\text{pi})$  kötések ( $\pi_1$  és  $\pi_2$ ) is kialakulnak, kettősnél egy, a hármasnál 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 nem egyenletes. A második kovalens kötés ( $\pi_1$ ) 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. (lásd 6. oldalon a táblázat)



### **Polaritás szerinti csoportosítás**

Polaritás szempontjából **poláris** és **apoláris** kovalens kötések különböztetünk meg. Azon atomok között lehet csak a kovalens kötés **apoláris**, melyek **elektronegativitás-különbsége nulla** (pl azonos atomok között, de akár különböző atomok között is előfordulhat), a többi esetben **maga a kötés poláris**. Maga a polaritást úgy lehet itt elképzelni, hogy a kötésben lévő nagyobb elektronegativitású atom a közös kötő elektronpárokat nagyobb mértékben vonzza maga köré, mint a kisebb elektronegativitású atom, így körülötte szívesebben **vannak a kötő elektronok** (nagyobb elektronegativitású atom körül nagyobb az elektronok megtalálási valószínűsége). **Ebből adódóan a kötés dipólusos** (két pólusú, azaz **poláris**) lesz,

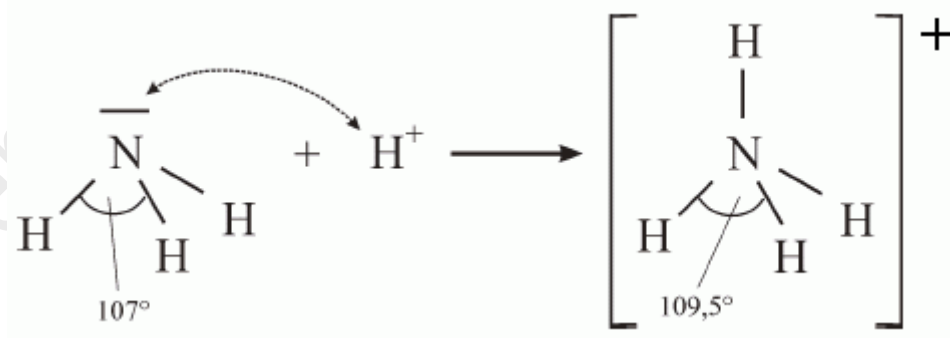
mert a **nagyobb elektronegativitású atom elektronban gazdagabb**, míg a **kisebb elektronegativitású atom pedig elektronban szegényebb lesz**. Ily módon a **nagyobb elektronegativitású atomnak negatív töltésjellege (parciálisan negatív töltése)**, a **kisebb elektronegativitású elektronban szegényebb atomnak pedig pozitív töltésjellege (parciálisan pozitív töltése)** lesz. Ezt szokás **deltával (+/-)** is jelölni:



### **Kialakulás módja**

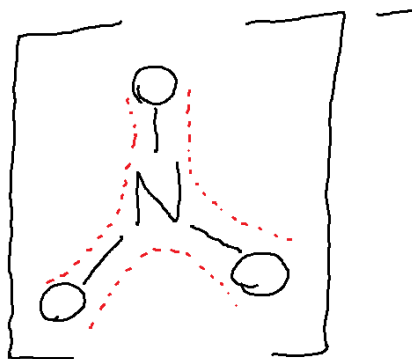
A kialakulás módja szerint a kovalens kötés lehet **kolligatív** illetve **datív**. **Kolligatív** kovalens kötésről a akkor beszélünk, amikor a **kötőelektronpár kialakításában mind a két atom részt vett**, azaz mind a ketten 1-1 elektronnal támogatták ezt.

**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. **Datív módon is természetesen ki tud alakulni szigma és pi kötés is**.



### Lokalizáció szerinti csoportosítás

Lokalizáció szerint a kovalens kötés lehet **lokalizált vagy delokalizált**. **Lokalizált kovalens kötés esetén a kötő elektronpár két atomtörzshöz tartozik** (csak két atom között van). **Delokalizált kovalens kötés**, ahogy nevéből is látható **nem helyhez kötött** (nem csak két atom között van), **azaz több atomtörzshöz is tartozik**. Ezt szaggatott vonallal szoktuk jelölni. A későbbiekben még elég sokszor fogunk róla hallani:



### 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 (*gondoljunk*

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)

Írta: Lénárt Gergely okl. vegyészmérnök, kémia magánoktató

Honlapcím: <https://www.emeltkemiaerettsegi.hu/>

4. fejezet: Kémiai kötések I.: elsőrendű kémiai kötések

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

Lénárt Gergely kémia magánoktató