



ÁLTALÁNOS KÉMIA

⊙ ATOMSZERKEZET

Atom

Az **atom** atommagból és az azt körülvevő elektronfelhőből (elektronburokból) álló semleges kémiai részecske. Az atomokat **elemi részecskék** (protonok, neutronok és elektronok) építik fel.



EMELT SZINT

Az atommagot felépítő elemi részecskéket összefoglaló néven **nukleonoknak** („magot alkotónak”) is nevezzük.

Elemi részecske	Jele	Relatív tömege	Relatív töltése
Proton	p^+	1	+1
Neutron	n^0	1	0
Elektron	e^-	$\frac{1}{1836}$	-1

Az atomban a protonok száma mindig megegyezik az elektronok számával, ezért elektromosan semleges az atom.

Az atom jelölésére **vegyjelt** használunk. A vegyjel mellett gyakran feltüntetjük az atom két fontos jellemző adatát: a rendszámot (Z) és a tömegszámot (A). Az atom minőségét az atommagban található protonok száma, azaz a rendszám (Z) határozza meg. Mivel az atom tömegét lényegében csak az atommagot alkotó protonok és neutronok tömege határozza meg, ezért a protonok és a neutronok számának összegét tömegszámnak (A) nevezzük. **Rendszám** (Z): az *egy atomban* lévő protonok száma. **Tömegszám** (A): az *egy atomban* lévő protonok és neutronok számának összege.

tömegszám 16

rendszám 8

vegyjel

Az atom jelölése és jellemző adatai

Például: a 23-as tömegszámú és 11-es rendszámú nátriumatomban 11 proton és $23 - 11 = 12$ neutron található. Mivel atomról van szó, ezért az elektronok száma is 11.

Elem

Az azonos rendszámú atomokból felépülő anyagi rendszereket **elemeknek** nevezzük. Az elemeket is vegyjellel jelöljük, például a P vegyjel jelöli a foszfort mint elemet és a foszforatomot is.



EMELT SZINT

A vegyjel az elem latin nevének egy vagy két kezdőbetűje. A ma használatos vegyjeleket Berzelius (1779–1848) svéd kémikus javaslatára vezették be.



Az azonos rendszámú, de különböző tömegszámú atomok egymás **izotópatomjai**. Például: az 1-es rendszámú hidrogénatomnak három, különböző tömegszámú izotópatomja van:

Jel	Név	Természetes előfordulás
${}^1_1\text{H}$	hidrogén, prócium	99,985%
${}^2_1\text{H}$, ${}^2_1\text{D}$	deutérium, nehézhidrogén	0,0115%
${}^3_1\text{H}$, ${}^3_1\text{T}$	trícium	< 0,003%

Az izotópatomok egy része nem stabilis, hanem radioaktív sugárzás kibocsájtása közben spontán bomlik (stabilizálódik), egy másik atommá alakul át. A radioaktivitás – a radioaktív izotópok – alkalmazásának három legfontosabb területe:

- A különböző stabilitású atommagok stabilisabb atommagokká alakulása **energia-felszabadulással** jár. Az így nyert hatalmas energiát békés célokra (atomerőművekben) és pusztításra (atombombában, hidrogénbombában) lehet felhasználni.
- A radioaktív sugárzás élettani hatásán alapszik a **radiológia**, a radioaktív sugárzás gyógyászati alkalmazása.
- A radioaktív izotópokat sugárzásuk mérésével lehet nyomon követni. Ezen alapszik a **radioaktív nyomjelzés** és a **radiokarbon kormeghatározás**.

A radioaktív izotópokkal történő nyomjelzés kidolgozásáért egy magyar vegyész, Hevesy György (1885–1966) kapott kémiai Nobel-díjat 1943-ban. Nevéhez fűződik a hafnium felfedezése is.



EMELT SZINT

A radioaktivitás felfedezésében, új radioaktív anyagok előállításában alapvető szerepe volt a Curie-házaspárnak (Pierre Curie-nek és feleségének, Marie Curie-Skłodowskanak, „Madam Curie”-nek), akik munkásságukért összesen három fizikai, illetve kémiai Nobel-díjat kaptak.

A tömegszám számértéke közel azonos a relatív atomtömeg számértékével. A **relatív atomtömeg** (A_r) a vizsgált atom tömegének és az atomi tömegegységnek a hányadosa.

(Az atomi tömegegység: a szén 12-es tömegszámú izotópja tömegének $\frac{1}{12}$ -ed része.)



EMELT SZINT

Mivel számos elemnek különböző tömegszámú izotópatomjai találhatóak meg a természetben, ezért az atom relatív atomtömegét ezeknek az izotópatomoknak a tömegszáma és előfordulási gyakorisága alapján számíthatjuk ki. Például a klóratomnak két különböző tömegszámú izotópja van: Cl-35 és Cl-37. A természetben mindkettő előfordul, mégpedig a következő arányban: a klóratomok (kerekítve) 75%-a Cl-35, 25%-a Cl-37. Mivel a klór, amivel dolgozunk, általában

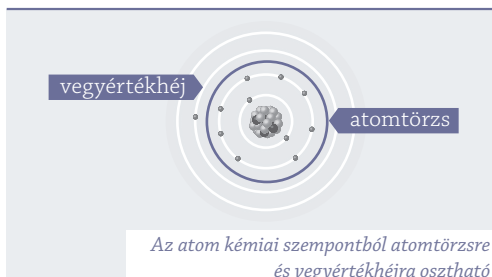


nem egy, és még csak nem is néhány, hanem nagyon sok klóratomot tartalmaz, ezért jellemző relatív atomtömegként az előfordulási gyakoriságot is figyelembe vevő átlagértéket szoktuk használni. Egyszerűsítve a következőképpen számíthatjuk ki: vegyünk 100 klóratomot, amelyben van 75 Cl-35 és 25 Cl-37. Ezek

$$(\text{súlyozott}) \text{ átlaga: } \frac{75 \cdot 35 + 25 \cdot 37}{100} = 35,5.$$

Elektronszerkezet

Az egyik legegyszerűbb atommodell, a Bohr-féle modell szerint az atomban az elektronok meghatározott energiájú **elektronhéjakon** helyezkednek el. Egy-egy elektronhéjon maximálisan $2n^2$ számú **elektron** foglalhat helyet, ahol n az elektronhéj sorszáma. **Telített a héj**, ha azon maximális számú elektron található, **telítetlen a héj**, ha a rajta található elektronok száma kisebb a maximálisnál. Az atommag és a körülötte lévő telített héjak alkotják az **atomtörzset**. Azt az elektronhéjat, amely nem telített, **vegyértékhéjnek**, a rajta lévő elektronokat **vegyértékelektronoknak** nevezzük. A legstabilisabb az a vegyértékhéj, amelyen 8 elektron található. Ezt nevezzük **nemesgázszerkezetnek**.



Az atomban lévő elektronok az atommaghoz a lehető legközelebb helyezkednek el, ugyanis ez a legkisebb energiájú állapot. Ezt mondja ki az **energiaminimum elve**. Az ilyen atomot **alapállapotú atomnak** nevezzük.



EMELT SZINT

A gerjesztett állapotú atomban egy vagy több elektron távolabb kerül az atommagtól, mint az alapállapotú atomban. Az ilyen atomot **gerjesztett atomnak** nevezzük.

Az elektronhéjak **alhéjakra** tagozódnak. Az alhéjakat s-, p-, d- és f-betűkkel jelöljük. Az alhéjak atompályákból épülnek fel. **Atompályának** nevezzük az atommag körül azt a legkisebb térrészt, ahol az elektronok 90%-os valószínűséggel megtalálhatók. A **Pauli-elv** értelmében egy atompályán legfeljebb két (ellentétes mágneses tulajdonságú) elektron foglalhat helyet (párosított elektronok, elektronpár). A **Hund-szabály** szerint, ha egy alhéj telítetlen, azon az elektronok úgy helyezkednek el, hogy a lehető legtöbb párosítatlan legyen. Párosítatlan (pár nélküli) elektronról beszélünk, ha az atompályán csak egy elektron található.

Az elektronszerkezet jelölése kétféleképpen történhet: a **kitevős jelöléssel** (pl. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$) és a **cellás jelöléssel** $\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \quad \uparrow$.

A nemesgázszerkezet jelölése: $s^2 p^6$ vagy $\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$.



Az alapállapotú atom elektronszerkezetének kiépülését az **alhéjak energiasorrendje** alapján állapíthatjuk meg: $1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f < 5d \dots$

Az elektronhéj		Az alhéj		Atompályák száma	Az elektronok maximális száma	
sorszám	betűjele	betűjele	jelölése			
1	K	s	1s	1	2	2
2	L	s	2s	1	2	8
		p	2p	3	6	
3	M	s	3s	1	2	18
		p	3p	3	6	
		d	3d	5	10	
4	N	s	4s	1	2	32
		p	4p	3	6	
		d	4d	5	10	
		f	4f	7	14	

A 33-as rendszámú, alapállapotú arzénatom elektronszerkezete: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^3$ vagy K L M $4s^2 4p^3$ vagy [Ar] $4s^2 3d^{10} 4p^3$. A telített héjak száma 3 (K, L, M), a telített alhéjak száma 7. A párosítatlan elektronok száma 3.

A 16-os rendszámú, alapállapotú kénatom elektronszerkezete: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$ vagy K L $3s^2 3p^4$ vagy [Ne] $3s^2 3p^4$. A telített héjak száma 2 (K, L), a telített alhéjak száma 4. A párosítatlan elektronok száma 2.

A periódusos rendszer

Az elemek és az elemeket felépítő atomok csoportosításának természetes rendszere a **periódusos rendszer**. Az elemek periódusos rendszerét Mengyelejev orosz tudós alkotta meg 1869-ben. Ez a periódusos rendszer fizikai és kémiai tulajdonságaik alapján rendszerezi az elemeket.



TÖBBLETTARTALOM

Az **elemek periódusos rendszere** tartalmazza az elemre vonatkozó legfontosabb adatokat: halmazállapot, sűrűség, olvadáspont, forráspont, fémes vagy nemfémes jelleg, kristályszerkezet. A ma használatos periódusos rendszerben a rendező elv az atomok elektronszerkezete, tehát helyesebb az atomok periódusos rendszerének nevezni. Az **atomok periódusos rendszere** az atomok jellemző adatait tartalmazza: rendszám, relatív atomtömeg, elektronszerkezet, atom-sugár, ionizációs energia, elektronegativitás, vegyérték.



atommag határozza meg, az atom mérete elsősorban az elektronburoktól függ. (Az atom mérete kb. 100 000-szer nagyobb az atommag méreténél.) Ennek megfelelően az atomok mérete a **főcsoportokban nő** a rendszámmal, hiszen egyre több elektronehéj található az elektronburokban. Például a brómatom mérete nagyobb, mint a klóratomé, de kisebb, mint a jódatomé, vagy a nátriumatom mérete nagyobb, mint a lítiumatomé, de kisebb, mint a káliumatomé.

Egy **perióduson belül** azonban az atomok mérete **csökken** a rendszámmal. Mert igaz, hogy egyre több elektron épül be a vegyértékhéjra, de az elektronehéjak száma változatlan, és a protonok elektronekora gyakorolt vonzó kölcsönhatása nagyobb mértékben nő, mint az elektronek egymásra gyakorolt taszító kölcsönhatása, ami a méret csökkenését eredményezi. Például az oxigénatom mérete nagyobb, mint a fluoratomé vagy a neonatomé, de kisebb, mint a nitrogén-, a szén- vagy a lítiumatomé.

Az ionok

Az **ionok** elektromos töltéssel rendelkező kémiai részecskék. A pozitív töltésű iont **kationnak**, a negatív töltésű iont **anionnak** nevezzük. Atomokból elektroneleadással kationok, elektronefelvétellel anionok képződnek. Például: $\text{Na} \rightarrow \text{Na}^+ + \text{e}^-$; $\text{O} + 2\text{e}^- \rightarrow \text{O}^{2-}$. Az ionokat képlettel jelöljük, pl. Mg^{2+} , Cl^- , Na^+ , Al^{3+} , O^{2-} , S^{2-} . (Az atomból képződött anionok elnevezéskor -id végződést kapnak. Például: kloridion, oxidion, szulfidion.)



TÖBBLETTARTALOM

Összetétel alapján az ionokat két csoportra oszthatjuk. **Egyszerű** (egy atommagot tartalmazó) ionok (pl. K^+ , Br^-), és **összetett** (több atommagot tartalmazó) ionok (pl. OH^- , SO_4^{2-}). Az egyszerű ionok atomokból képződhetnek elektroneleadással vagy elektronefelvétellel, az összetett ionok molekulákból képződhetnek pl. hidrogénion (proton) leadásával vagy hidrogénion (proton) felvételével.



EMELT SZINT

Az ionok méretét az **ionsugárral** jellemezhetjük. Az anion ionsugara mindig nagyobb, mint azé az atomé, amelyikből keletkezett, ugyanis ugyanannyi proton több elektront kell, hogy megtartsa. A kation sugara mindig kisebb, mint azé az atomé, amelyikből keletkezett, ugyanis ugyanannyi proton kevesebb elektront kell, hogy megtartsa. Például: $r(\text{H}^+) < r(\text{H}) < r(\text{H}^-)$, vagy $r(\text{Fe}^{3+}) < r(\text{Fe}^{2+}) < r(\text{Fe})$. Az azonos elektronszámú (izoelektronos) ionok és atomok közül mindig a legnagyobb pozitív töltésű a legkisebb méretű, és a legnagyobb negatív töltésű a legnagyobb méretű. Például: $r(\text{Al}^{3+}) < r(\text{Mg}^{2+}) < r(\text{Na}^+) < r(\text{Ne}) < r(\text{F}^-) < r(\text{O}^{2-}) < r(\text{N}^{3-})$.

A pozitív ion képződésének energiáját az ionizációs energiával jellemezzük. Az **ionizációs energia** (E_i) az az energia, amely ahhoz szükséges, hogy 1 mol gázállapotú és alapállapotú atomból a legkönnyebben leszakítható elektront



eltávolítsuk ($A(g) \rightarrow A^+(g) + e^-(g)$). Mértékegysége $\frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$, előjele mindig pozitív.

Az ionizációs energia is periodikusan változik a periódusos rendszerben a rendszámmal. A periódusokban a rendszám növekedésével nő, a főcsoportokban a rendszám növekedésével csökken. A negatív ion képződésének energiáját az elektronaffinitással jellemezzük. Az **elektronaffinitás** (E_a) az az energia, amely akkor szabadul fel, amikor 1 mol alapállapotú szabad atomból egyszerűen negatív töltésű iont képezünk ($A(g) + e^-(g) \rightarrow A^-(g)$). Mértékegysége $\frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$, előjele negatív.

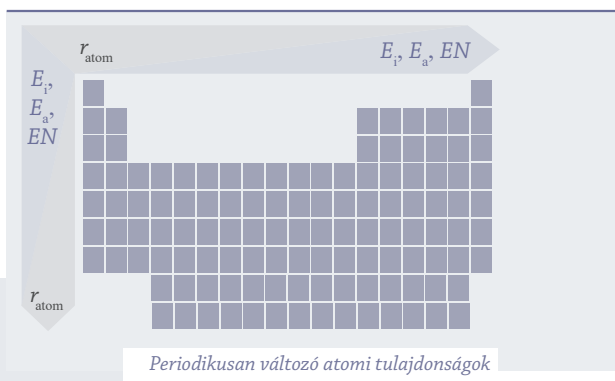
Elektronegativitás

A kémiai kötésben lévő atom elektronvonzó képességét az **elektronegativitással** (EN) jellemezzük. (Az általunk használt elektronegativitás-skálát Linus Pauling amerikai vegyész dolgozta ki.)

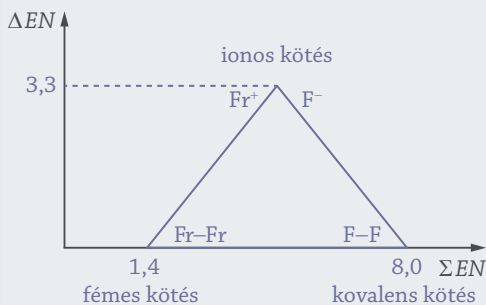


EMELT SZINT

Az elektronegativitás is periodikusan változik a rendszámmal. A periódusokban a rendszám növekedésével nő, a főcsoportokban a rendszám növekedésével csökken. Például: a legkisebb elektronegativitású atom a periódusos rendszer bal alsó sarkában található francium (Fr), míg a legnagyobb elektronegativitású a jobb felső sarokban található fluor (F). (A nemesgázokra nem értelmezzük az elektronegativitást.)



Periodikusan változó atomi tulajdonságok



A kötés jellege és a EN kapcsolata

Az elektronegativitásnak fontos szerepe van abban, hogy megbecsülhessük: két atom kölcsönhatásakor köztük milyen kapcsolat (kémiai kötés) jöhet létre.



⊕ KÉMIAI KÖTÉSEK

Kémiai kötés két kémiai részecske (atom, molekula, ion) között kialakuló kapcsolat.



TÖBBLETTARTALOM

A kémiai kötés erősségét a kötési energiával jellemezzük. **Kötési energia** az az energia, amely ahhoz szükséges, hogy 1 mol anyagban a kémiai részecskék közötti kötést felszakítsuk. Jele: E_k , mértékegysége $\frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$, előjele mindig pozitív.

A kémiai kötések energiájuk alapján két csoportba oszthatjuk: elsőrendű és másodrendű kémiai kötések. Az elsőrendű kötések energiája általában nagy, $80 - 1000 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$ közötti érték. A másodrendű kötések energiája általában kicsi, $0,08 - 50 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$ között változik.

Az elsőrendű kémiai kötések alapvetően befolyásolják az anyagok fizikai és kémiai tulajdonságait. A másodrendű kémiai kötések elsősorban az anyagi rendszerek fizikai tulajdonságait határozzák meg.

Elsőrendű kémiai kötések

Elsőrendű kémiai kötések: az ionos kötés, a kovalens kötés és a fémes kötés. Az **ionos kötés** az ellentétes töltésű ionok között létrejövő, vonzó (elektrosztatikus) kölcsönhatás. A **kovalens kötés** egy vagy több közös elektronpárral megvalósuló kapcsolat. A **fémes kötés** során az egész halmazra kiterjedően delokalizálódott, negatív töltésű elektronfelhő tartja össze a pozitív töltésű atomtörzseket.

A kötés milyensége szempontjából alapvető a kötést létesítő atomok elektronegativitása. Vizsgáljuk meg például két azonos vagy közel azonos, nagy elektronegativitású atom (pl. két klóratom) közötti kötés kialakulását! Mindkét klóratomnak nagy az elektronegativitása ($EN = 3,0$), és 7-7 vegyértékelektronja van. Akkor érik el a stabilis nemesgázszerkezetet, ha közös elektronpárt (ún. kötő elektronpárt) hoznak létre. A két klóratom között tehát egyszeres kovalens kötés (σ -kötés) alakul ki. Amennyiben a két atomnak nagyon eltérő az elektronegativitása, mint például a nátrium- és a klóratomoknak ($EN(\text{Na}) = 0,9$; $EN(\text{Cl}) = 3,0$), akkor a nagyobb elektronegativitású (klór)atom elektronfelvétellel negatív ionná alakul, a kisebb elektronegativitású (nátrium)atom pedig elektronleadással pozitív ionná alakul, és így tesznek szert nemesgázszerkezetre. Az így létrejött ellentétes töltésű ionok közötti vonzó kölcsönhatás az ionos kötés.



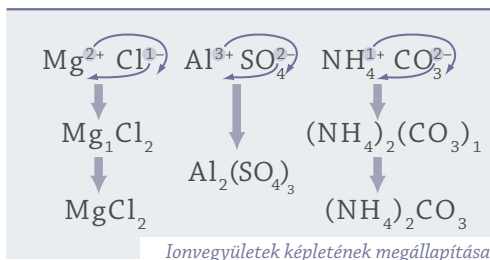
TÖBBLETTARTALOM

Két atom közötti kapcsolatot azzal is jellemezhetünk, hogy mi történik az atomok vegyértékelektronjaival ebben a kapcsolatban. Ha egy nagyon kicsi és egy nagyon nagy elektronegativitású atom lép egymással kapcsolatba, akkor a kisebb elektronegativitású atom egy vagy több vegyértékelektronja átkerül a nagyobb



elektronegativitású atom vegyértékelektron-héjára. Az **elektronátadás** révén ellentétes töltésű ionok keletkeznek, és a közöttük fellépő vonzó kölcsönhatás az **ionos kötés**. Ha mindkét atomnak nagy az elektronvonzó képessége, akkor csak közös elektronpárral kapcsolódhatnak össze. Ilyen **elektronmegosztással** jön létre a **kovalens kötés**. Ha mindkét atomnak nagyon kicsi az elektronegativitása, akkor a vegyértékelektronok nem maradnak a két atomtörzs erőterében, hanem az egész halmazra kiterjedően mozognak. Az **elektron-delokalizáció** során keletkezett „elektronfelhő” tartja össze a pozitív töltésű atomtörzseket. Ez a **fémes kötés** lényege.

Az **ionvegyületek** (tapasztalati) **képletét** az ellentétes töltésű ionok töltésszámának figyelembevételével szerkeszthetjük meg. Az ionvegyületben a kationok együttes töltése meg kell, hogy egyezzen az anionok együttes töltésének abszolút értékével. Például az Al^{3+} -ion és a SO_4^{2-} -ion 2:3 arányban képeznek egymással vegyületet. Az így létrejött alumínium-szulfát tapasztalati képlete: $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$.



Másodrendű kémiai kötések

Másodrendű kémiai kötések a semleges kémiai részecskék (atomok, molekulák) között kialakuló vonzó kölcsönhatások. Fajtái: diszperziós kölcsönhatás, dipólus-dipólus kölcsönhatás és hidrogénkötés.

Az apoláris molekulák (és különálló atomok) között kialakuló gyenge elektromos vonzást **diszperziós kölcsönhatásnak** nevezzük. Oka: az atommagok rezgőmozgása, illetve az elektronfelhő deformálódása miatt kialakult időleges aszimmetrikus töltésseloszlás. Ilyen kölcsönhatás jellemző például az elemi gázokra (hidrogénre, oxigénre, nitrogénre, klórra, nemesgázokra) vagy a szénhidrogénekre (metánra, eténre, etinre, benzolra).

A dipólusmolekulák között fellépő elektromos vonzást **dipólus-dipólus kölcsönhatásnak** nevezzük. Az egyik molekula negatív polározottságú része vonzza a másik molekula pozitív polározottságú részét. Ez a legerősebb kölcsönhatás például a hidrogén-klorid, a kis szénatomszámú aldehidek (pl. formaldehid, acetaldehid) és ketonok (pl. acetón) molekulái között.

Amennyiben két dipólusmolekula egy hidrogénatomon keresztül kapcsolódik egymáshoz, **hidrogénkötés** jön létre. A hidrogénkötés kialakulásának **szerkezeti feltételei** a következők:

1. legyen az egyik molekulában olyan hidrogénatom, amely kisméretű, nagy elektronegativitású (F-, O- vagy N-) atomhoz kapcsolódik, és



2. legyen a másik molekulában olyan kisméretű, nagy elektronegativitású (F-, O- vagy N-) atom, amelynek van nemkötő elektronpárja.

Hidrogénkötés alakulhat ki például a víz-, az ammónia-, az ecetsav- és az etanolmolekulák között. Nem alakulhat ki hidrogénkötés a HBr-molekulák között (két feltétel hiányzik), a kén-dioxidmolekulák között (1. feltétel hiányzik) vagy a pirrolmolekulák között (2. feltétel hiányzik).

Azonos (vagy közel azonos) molekulatömeg esetén a másodrendű kötések **energia-sorrendje** a következő: $E(\text{diszperzós kölcsönhatás}) < E(\text{dipólus-dipólus kölcsönhatás}) < E(\text{hidrogénkötés})$.

☉ MOLEKULÁK, ÖSSZETETT IONOK

Molekula

A **molekula** két vagy több atomból felépülő elektromosan semleges kémiai részecske. A molekulát képlettel (ún. molekulaképlettel) jelöljük (pl. N_2 , O_3 , H_2O , CH_4 , HCl). A **molekulaképlet** megadja a molekulát felépítő atomok minőségét és mennyiségét (számát) is. A molekula képződésekor az atomok vegyértékelektronjaiból **kötő és nemkötő elektronpárok** alakulnak ki.



TÖBBLETTARTALOM

Összetétel szerint a molekulák lehetnek azonos rendszámú atomokból felépülő **elemmolekulák** (pl. H_2 , P_4 , S_8) és különböző rendszámú atomokból felépülő **vegyületmolekulák** (pl. HF , NH_3 , H_2SO_4 , C_6H_6).

A kovalens kötés

Az atomok között kötő elektronpárral vagy elektronpárokkal létrejövő kapcsolatot **kovalens kötésnek** nevezzük.



TÖBBLETTARTALOM

Kovalens kötés található a molekulákban, az összetett ionokban, valamint az atomrácsos anyagokban.

Az atomok	és a molekula	
elektronszerkezeti képletének jelölése		
$\text{H} \cdot \cdot \text{H}$	$\text{H} \cdot \cdot \text{H}$	$\text{H} - \text{H}$
$:\ddot{\text{Cl}} \cdot \cdot \ddot{\text{Cl}}:$	$:\ddot{\text{Cl}} \cdot \cdot \ddot{\text{Cl}}:$	$ \ddot{\text{Cl}} - \ddot{\text{Cl}} $
$\cdot \ddot{\text{N}} \cdot \cdot \ddot{\text{N}} \cdot$	$:\text{N}::\text{N}:$	$ \text{N} \equiv \text{N} $
$\text{H} \cdot \cdot \ddot{\text{Cl}}:$	$\text{H} \cdot \cdot \ddot{\text{Cl}}:$	$\text{H} - \ddot{\text{Cl}} $

A kovalens kötést létesítő atomok vegyértékelektronjaiból jönnek létre a kötő és a nemkötő elektronpárok



A két atom között létrejött kötő elektronpárok száma szerint megkülönböztetünk **egyszeres és többszörös kovalens kötést**. Egyszeres kovalens kötés található például a H_2 -, a H_2O -, az NH_3 - és a CH_4 -molekulákban, többszörös kovalens kötés van például az O_2 -, a N_2 -, a CO_2 - és az C_2H_2 -molekulákban.



EMELT SZINT

Ha két atomtörzs vonzásában egynél több kötő elektronpár tartózkodik, akkor azt, amelyik legközelebb van az atomtörzsekhez – tehát amelyekre legnagyobb az atomtörzsek vonzó hatása –, **szigma-elektronpárnak** nevezzük, és a görög σ betűvel jelöljük. A σ -elektronpárral megvalósuló kovalens kötést röviden σ -kötésnek is nevezzük. A σ -kötések tengelyszimmetrikusak. Az atomtörzsektől távolabb elhelyezkedő kötő elektronpárok pedig a **pi-elektronpárok**, melyek jelölésére a görög π betűt használjuk. π -elektronpárok létesítik a π -kötéseket. A π -kötések síkszimmetrikusak. **π -kötések kialakulását** akkor várhatjuk, ha az atom mérete kicsi, elektronegativitása pedig nagy, azaz az atomtörzs meg tudja tartani a térben kedvezőtlenebb helyzetben lévő π -elektronokat. Ezzel értelmezhető, hogy a második periódusban található C-, N- és O-atomok könnyen alakítanak ki π -kötéseket (pl. $\text{O}=\text{O}$, $\text{N}\equiv\text{N}$, $\text{C}\equiv\text{O}$, $\text{O}=\text{C}=\text{O}$, $\text{HC}\equiv\text{CH}$), a harmadik periódus megfelelő atomjai viszont többnyire csak szigma-kötéseket alakítanak ki (pl. S_8 , P_4 , SiO_2).

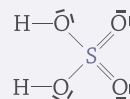
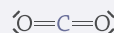
Ugyanazon két atom között megvalósuló kötések esetén a többszörös kötések erősebbek, mint az egyszeres kötések, pl. $E(\text{C}-\text{C}) < E(\text{C}=\text{C}) < E(\text{C}\equiv\text{C})$.



EMELT SZINT

A kovalens kötés erősségét a kötési energiával jellemezzük. A **kovalens kötés energiája** a két atom közötti kötés felbontásához szükséges moláris energia. Mértékegysége: $\frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$.

Azt, hogy egy atom hány kovalens kötéssel kapcsolódik más atomhoz, atomokhoz, az atom **kovalens vegyértékének** nevezzük. A H-atom kovalens vegyértéke mindig 1, az O-atomé általában 2, a C-atomé általában 4.



A H-, az O- és a C-atom különböző molekulákban



EMELT SZINT

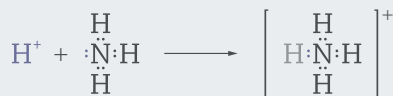
A kémiai kötésben lévő két atom atommagja közötti távolságot **kötéstávolságnak** (d) nevezzük. A kötéstávolság függ az atommérettől és a kötés erősségétől is. A kötéstávolság az atomok méretével nő, a kötés erősségével pedig csökken, pl. $d(\text{C}-\text{C}) > d(\text{C}=\text{C}) > d(\text{C}\equiv\text{C})$.



Molekula	H-Cl	H-Br	H-I
Modellje			
Kötéstávolság (pm)	127	141	160
Kötési energia $\left(\frac{\text{kJ}}{\text{mol}}\right)$	431	366	298

Molekula	Molekula szerkezete	Képlete	A szénatomok közti kötések	Kötéstávolság (pm)	Kötési energia $\left(\frac{\text{kJ}}{\text{mol}}\right)$
Etán		$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$	1 σ	155	344
Etilén		$\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$	1 σ és 1 π	135	615
Acetilén		$\text{HC}\equiv\text{CH}$	1 σ és 2 π	120	812

Az esetek többségében a kötő elektronpár a két atom vegyértékelektronjaiból jön létre (kolligatív kötés), de bizonyos esetekben az egyik atom nemkötő elektronpárja válik kötő elektronpárrá. Így jön létre a **datív kötés**. Datív kötés található például a szén-monoxid-molekulában, az oxóniumionban és az ammóniumionban is.



Az ammóniumionban datív kötés is található

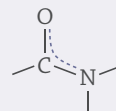
Ha a két atomtörzs a kötő elektronpárokat azonos mértékben vonzza, akkor a kovalens kötetést **apolárisnak** nevezzük. Amennyiben a kapcsolódó atomok elektronvonzása különböző mértékű, a kötő elektronpárok vagy az egyik, vagy a másik atomtörzs felé tolódnak el. Így jön létre a **poláris kovalens kötés**. A kötés polaritására általában következtethetünk a kötésben lévő két atom elektronegativitás-különbségéből. Minél nagyobb ez a különbség, annál polárisabb a kovalens kötés. Például a hidrogén-halogenidekben a kötéspolaritás a halogénatom elektronegativitásának függvényében változik: $\text{H}-\text{F} > \text{H}-\text{Cl} > \text{H}-\text{Br} > \text{H}-\text{I}$ ($EN(\text{F}) = 4,0$; $EN(\text{Cl}) = 3,0$; $EN(\text{Br}) = 2,8$; $EN(\text{I}) = 2,5$).

Amennyiben a kötő elektronpár(ok) csak két atomtörzs erőterébe tartozik(nak), **lokalizált kovalens kötésről** beszélünk. Ha a kötő elektronpárok kettőnél több atom erőterében mozognak, **delokalizált a kovalens kötés**. Ilyen található az aromás vegyületekben (pl. benzolban), a grafitban, valamint számos összetett ionban (pl. CO_3^{2-} -ionban). A delokalizált kötések szaggatott vonallal (az aromás vegyületek esetén folytonos görbe vonallal) jelöljük.



TÖBBLETTARTALOM

A delokalizált kötésben általában a többszörös kovalens kötés második vagy harmadik kötő elektronpárja (pi-kötések), illetve nemkötő elektronpárok vesznek részt.

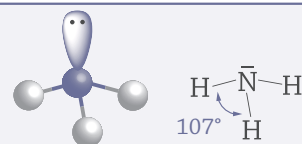


Delokalizált kötés jelölése

A molekulák térszerkezete

A **molekula alakján** az atommagok által meghatározott geometriai alakzatot értjük. Ez leggyakrabban lehet lineáris, (sík)háromszög, V-alak, háromszög alapú piramis, tetraéder, oktaéder. Egy molekula alakját a **vegyértékelektronpár-taszítási elmélet** alapján állapíthatjuk meg. Eszerint a központi atomtörzs körül a ligandumok (σ -kötő elektronpárok) és a nemkötő elektronpárok úgy helyezkednek el, hogy azok minél távolabb kerüljenek egymástól. A **központi atomtörzs** a molekulában az az atomtörzs, amelyhez a legtöbb kötő elektronpár tartozik (a legnagyobb kovalens vegyértékű atomtörzs). A központi atomtörzshöz kapcsolódó atomtörzseket, atomcsoportokat **ligandumoknak** nevezzük.

Például az **ammóniamolekulában** valamennyi hidrogénatom egy-egy kötő elektronpárral kapcsolódik a nitrogénatomhoz. A nitrogénatom öt vegyértékelektronjából tehát három vesz részt a kötés kialakításában, két elektron pedig nemkötő elektronpárt alkot. A központi atom körül tehát négy elektronpár van. Ezek elhelyezkedése szintén tetraéderes. Ligandum viszont csak a három kötő elektronpárhoz kapcsolódik, ezért ezt a molekulaalakot **háromszög alapú piramisnak** vagy **trigonális piramisnak** nevezzük.



Ammónia molekula



EMELT SZINT

A molekulalak fontos jellemzője a **kötésszög**, amelyen az ugyanahhoz az atomhoz tartozó két szigma-kötés kötéstengelye által bezárt szöget értjük.

Alakzat								
Alakja	lineáris	háromszög	V-alak	tetraéder	háromszög alapú piramis	V-alak	hexaéder	oktaéder
Példák	BeCl ₂ , CO ₂	SO ₃	SO ₂	CH ₄ , CCl ₄	NH ₃	H ₂ O	PCl ₅	SF ₆
Kötésszög	180°	120°	< 120°	109,5°	< 109,5°	90°, 120°	90°, 120°	90°

A molekulák alakját alapvetően két tényező határozza meg: a központi atomhoz kapcsolódó **ligandumok száma** és a központi atom **nemkötő elektronpárjainak száma**. Például 2 ligandum és 1 nemkötő elektronpár esetén a szigma-elektronpárok és a nemkötő elektronpár akkor kerül egymástól legtávolabb, ha



háromszög alakzatszerűen helyezkednek el a központi atom körül. Mivel a nemkötő elektronpár csak egy atomtörzs erőterébe tartozik, ezért lazábban kötött, mint a kötő elektronpárok („nagyobb a térigénye”), ezért a kötésszög kisebb lesz, mint a szabályos háromszög alakú molekula esetén várható 120° . A molekula V-alakú lesz (pl. SO_2). 2 ligandum és 2 nemkötő elektronpár esetén (pl. H_2O , H_2S) a szabályos alakzat, amelyhez viszonyítunk, a szabályos tetraéder, amelyben a kötésszög $109,5^\circ$. A nemkötő elektronpárok miatt a molekula V-alakú, és a kötésszög kisebb $109,5^\circ$ -nál (a vízmolekula esetében $104,5^\circ$).

Aszerint, hogy a molekulában az elektronok eloszlása követi-e a protonok által képviselt pozitív töltés eloszlását, megkülönböztetünk apoláris és poláris (dipólus) molekulákat. Az **apoláris molekulákban** a pozitív és a negatív töltések súlypontja egybeesik. Ilyenek az elemmolekulák (pl. N_2 , H_2 , Cl_2 , P_4 , S_8), vagy a CO_2 , SO_3 , CH_4 , C_6H_6 . A **dipólusmolekulákban** a pozitív és a negatív töltések súlypontja nem esik egybe, így a molekulának lesz egy negatívabb és egy pozitívabb része. Ilyen pl. a H_2O , SO_2 , NH_3 , HCl .

A molekulák polaritását alapvetően **két tényező** befolyásolja: a téralkat és a kötéspolaritás. Apoláris kötések esetén többnyire apoláris a molekula is (pl. O_2 , S_8). Poláris kötések esetén a molekula lehet apoláris, amennyiben a poláris kötések szimmetrikusan helyezkednek el a központi atom körül (pl. SO_3 , CH_4 , CO_2), de lehet poláris (dipólus) is, amennyiben a poláris kötések elrendeződése nem szimmetrikus (pl. H_2O , NH_3 , SO_2).



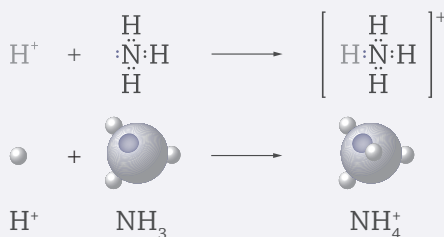
TÖBBLETTARTALOM

Apoláris molekulában a kötéspolaritás-vektorok vektori összege nulla, dipólus molekulákban a kötéspolaritás-vektorok nem oltják ki egymást. Valójában a kötéspolaritás mellett a központi atomon lévő nemkötő elektronpárokat is figyelembe kell venni a molekulapolaritás megállapításánál. Például a NCl_3 molekulában ugyan apolárisak a N–Cl kötések ($EN(\text{N}) = EN(\text{Cl}) = 3,0$), de a N-atomon található nemkötő elektronpár miatt mégsem egyenletes a töltéseloszlás. (Némi leegyszerűsítéssel azt is mondhatjuk, hogy szinte biztos, hogy dipólus a molekula, ha a központi atomján nemkötő elektronpár található.) Néhány kivétel: ClF_3 , XeF_4 , XeO_2 .)

Összetett ionok

A két vagy több atomból álló, elektromos töltéssel rendelkező kémiai részecskék az **összetett ionok**. Az összetett ionok általában protonfelvétellel vagy protonleadással keletkeznek molekulákból vagy más ionokból. Például az ammóniumion ammóniamolekulából képződik protonfelvétellel.

A vízmolekulából egy proton felvételével alakul ki az oxóniumion (H_3O^+).



Az ammóniumion képződése ammóniamolekulából



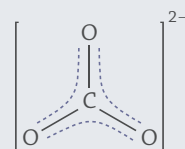
Számos összetett ion képződhet oxosavakból protonleadással.

Az oxosav		Az összetett ion	
képlete	neve	képlete	neve
H ₂ CO ₃	szénsav	HCO ₃ ⁻	hidrogén-karbonát
		CO ₃ ²⁻	karbonát
HNO ₃	salétromsav	NO ₃ ⁻	nitrát
H ₂ SO ₄	kénsav	SO ₄ ²⁻	szulfát
		HSO ₄ ⁻	hidrogén-szulfát
H ₃ PO ₄	foszforsav	PO ₄ ³⁻	foszfát
		HPO ₄ ²⁻	hidrogén-foszfát
		H ₂ PO ₄ ⁻	dihidrogén-foszfát
H ₂ SO ₃	kénessav	SO ₃ ²⁻	szulfít
		HSO ₃ ⁻	hidrogén-szulfít
HNO ₂	salétromossav	NO ₂ ⁻	nitrit
HOCl	hipoklórossav	OCl ⁻	hipoklorit
HCOOH	hangyasav	HCOO ⁻	formiát
CH ₃ COOH	ecetsav	CH ₃ COO ⁻	acetát



EMELT SZINT

Azokban az összetett ionokban, amelyekben a központi atomhoz csak O-atomok kapcsolódnak (pl. CO₃²⁻, PO₄³⁻, SO₄²⁻), az oxocsoporthoz tartozó pi-elektronpár delokalizálódik, így valamennyi O-atom egyenértékű. Ennek következtében a karbonátion síkháromszög alakú, a szulfát- és a foszfátionok szabályos tetraéderes térszerkezetűek.



A karbonátionban egy pi-kötés delokalizálódik, így egy síkháromszög alakú ion jön létre

A **komplex ionokban** a ligandumok (ionok, atomok, molekulák) nemkötő elektronpárjukkal létesítenek datív kovalens kötést a központi fémionnal. A komplexion töltését a központi fémion és a ligandumok együttes töltése határozza meg, ilyen például a [hexaakva-alumínium(III)]-ion ([Al(H₂O)₆]³⁺), a [tetraammin-réz(II)]-ion ([Cu(NH₃)₄]²⁺), a [diammin-ezüst(I)]-ion ([Ag(NH₃)₂]⁺) vagy a [tetrakloro-kobalt(II)át]-ion ([CoCl₄]²⁻).



⊙ ANYAGI HALMAZOK

Anyagi halmaz

A nagyszámú kémiai részecskéből felépülő anyagi rendszereket **anyagi halmazoknak** nevezzük. Az anyagi halmaz kémiaileg egységes alkotója a **komponens**. **Egykomponensű** az anyagi rendszer, ha csak egy elem vagy vegyület alkotja (pl. gyémánt, ezüst, víz, nátrium-klorid). A komponensek anyagi minősége szerint megkülönböztetünk elemeket és vegyületeket. **Kémiai elemnek** nevezzük az azonos rendszámú atomok halmazát (pl. hidrogén, nátrium, szén). A **vegyület** két vagy több elem atomjaiból felépülő, meghatározott összetételű anyag, melynek tulajdonságai jelentősen eltérnek az alkotó elemek tulajdonságaitól (pl. víz, kénsav, metán, szőlőcukor). A **többkomponensű** rendszereket többféle elem vagy vegyület alkotja (pl. levegő, cukros víz, jódzott konyhasó). A **keverék** többféle elemből vagy vegyületből felépülő anyagi halmaz, melyben az alkotó komponensek többé-kevésbé megtartják eredeti tulajdonságaikat (pl. homokos víz, sóoldat, levegő).



EMELT SZINT

Az anyagi halmaz azonos fizikai és kémiai tulajdonságú részeit **fázisoknak** nevezzük. **Egyfázisú** az anyagi halmaz, ha benne sem szabad szemmel, sem mikroszkóppal nem látható határfelület (pl. levegő, víz, cukor, jég). **Többfázisú** a rendszer, ha benne különböző fázisok találhatók (pl. jeges víz, víz és benzin együttese).

A komponensek eloszlása szerint az anyagi halmazok lehetnek homogének és heterogének. **Homogén** az anyagi rendszer, ha benne az anyag eloszlása egyenletes, tehát a legfontosabb fizikai tulajdonságok (sűrűség, szín, koncentráció) a rendszer minden részében azonosak. Homogén rendszer például a cseppfolyós víz, a jól összekevert cukoroldat és a jég. **Heterogén** rendszer esetén az anyag tulajdonságai nem azonosak a halmaz különböző pontjaiban, hanem a határfelületeken ugrásszerű változást mutatnak. Ilyen heterogén rendszer például az olaj-víz rendszer vagy a jeges víz.

Anyagi halmaz	Komponensek száma szerint	Komponensek minősége szerint	Fázisok száma szerint	Komponensek eloszlása szerint
Cukoroldat	Kétkomponensű	Vegyület(ek)	Egyfázisú	Homogén
Benzin-víz	Kétkomponensű	Vegyület(ek)	Kétfázisú	Heterogén
Vízben jégkockák	Egykomponensű	Vegyület	Kétfázisú	Heterogén
Nátrium-amalgám	Kétkomponensű	Elem(ek)	Egyfázisú	Homogén
Durranógáz	Kétkomponensű	Elem(ek)	Egyfázisú	Homogén



Állapotjelzők

Az anyagi halmazok tulajdonságait befolyásoló külső tényezők az **állapotjelzők** (hőmérséklet, nyomás, térfogat). A **hőmérséklet** – valamely halmaz hőállapotát jellemző mennyiség – jele: T , SI mértékegysége a kelvin (K). Használatos még a Celsius-fok ($^{\circ}\text{C}$) is: $T(\text{K}) = t(^{\circ}\text{C}) + 273$. A **nyomás** – az egységnyi felületre merőlegesen ható nyomóerő – jele: p , SI mértékegysége a pascal (Pa). A **térfogat** jele: V , SI mértékegysége a köbméter (m^3); használatos még a köbdeciméter (dm^3) vagy a köbcentiméter (cm^3).

Halmazállapotok, halmazállapot-változások

Az anyagi halmazt felépítő részecskék közötti kölcsönhatás, valamint a részecskék hőmozgásának energiája alapján három halmazállapotot különböztetünk meg: légnemű vagy gáz halmazállapotot, folyadék vagy cseppfolyós halmazállapotot és szilárd halmazállapotot.

A **gázokat** alkotó kémiai részecskék (molekulák, esetleg atomok) között – az ún. ideális gázok esetében – a kölcsönhatások elhanyagolhatók. A részecskék állandó mozgásban vannak, mozgás közben egymással és az edény falával ütköznek. Ebből következik, hogy a gázoknak nincs állandó alakja és térfogata (nagyértékben összenyomhatók), egyenletesen kitöltik a rendelkezésükre álló térfogatot.

Az **Avogadro-törvény** szerint azonos nyomáson és hőmérsékleten a különböző gázok térfogata csak a molekulák számától függ, és független a gáz anyagi minőségétől.

Ebből a törvényből következik, hogy a gázok moláris térfogata $\left(V_m = \frac{V}{n}\right)$, független a gáz anyagi minőségétől, csak a hőmérséklettől és a nyomástól függ. A gázok moláris térfogata $25\text{ }^{\circ}\text{C}$ -on és $101,3\text{ kPa}$ (standard) nyomáson: $V_m = 24,5 \frac{\text{dm}^3}{\text{mol}}$.

A **folyadékokat** alkotó kémiai részecskék között van vonzó kölcsönhatás, többnyire másodrendű kémiai kötés, de a részecskék továbbra is rendezetlenül helyezkednek el. A részecskék állandó mozgásban vannak, egymáshoz képest elmozdulhatnak. Ezért a folyadékoknak már van állandó térfogata, de nincs állandó alakja, felveszik a tároló-edény alakját, gyakorlatilag összenyomhatatlanok.

A gázok (és a folyadékok) részecskéinek állandó mozgása és a koncentrációkülönbség miatt létrejövő anyagáramlást **diffúzió**nak nevezzük. A diffúzió sebességét befolyásolja a részecskék tömege, valamint a hőmérséklet. A diffúzió annál gyorsabb, minél kisebb a részecskék tömege, és minél magasabb a hőmérséklet.



EMELT SZINT

A molekulák közötti vonzó kölcsönhatás miatt a folyadék felszínén lévő molekulákra a folyadék belseje felé mutató eredő erő hat, míg a folyadék belsejében lévőkre ható eredő erő nulla. Ez a szerkezeti oka a folyadékok **felületi**



feszültségének. A víz nagy felületi feszültségének következtében nem süllyednek le a víznél nagyobb sűrűségű, de méretüknél fogva kis tömegű tárgyak és vízi élőlények. Ugyancsak a folyadékok részecskéi közötti kölcsönhatás (belső súrlódás) befolyásolja azt, hogy a részecskék milyen könnyen tudnak egymáshoz képest elmozdulni. Erre a folyási tulajdonságra jellemző a **viszkozitás**. Viszonylag kicsi a viszkozitása az alkoholnak, a víznek, a higanynak, nagy viszkozitása a tömény kénsav és az olajok.

Szilárd halmazállapotban a részecskék között erős vonzó kölcsönhatás áll fenn, és a részecskék helyhez kötöttek, csak rezgő mozgást végeznek. A szilárd anyagoknak tehát meghatározott alakja és térfogata van.

Egy adott anyag egyik halmazállapotból a másikba történő átalakulása a **halmazállapot-változás**. Az **olvadás** és a **fagyás** a szilárd és a cseppfolyós halmazállapotok közötti átmeneteket jelenti.



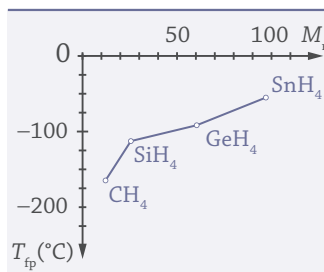
TÖBBLETTARTALOM

Olvadás során az anyag belső energiája nő, tehát az olvadás endoterm folyamat. Ennek a folyamatnak az energiaváltozását az olvadáshővel jellemezzük. Az **olvadáshő** az az energia, amely ahhoz szükséges, hogy 1 mol (vagy 1 kg) szilárd anyagot olvadáspontján megolvassunk. A fagyás során a cseppfolyós halmazállapotú anyag szilárd halmazállapotúvá alakul, és közben energia szabadul fel. A fagyás exoterm halmazállapot-változás.

Az **olvadáspont** (vagy fagyáspont) az a hőmérséklet, amelyen a szilárd anyag megolvad (vagy a cseppfolyós anyag megfagy). Olváspontja (vagy fagyáspontja) csak a kristályos szilárd anyagoknak van. Az amorf anyagok egy széles hőmérséklettartományban fokozatosan olvadnak meg, meglágyulnak. Az olvadáspont (vagy fagyáspont) nemcsak a részecskék közötti kölcsönhatás erősségétől, hanem a részecskék minőségétől és a kristályrács típusától is függ.

A **párolgás** és a **lecsapódás** a cseppfolyós halmazállapot és a gáz halmazállapot közötti átmeneteket jelenti. A **forrás** olyan halmazállapot-változás, amely során a folyadék nemcsak a felszínén, hanem a belsejében is párolog. Azt a hőmérsékletet, amelyen egy folyadék forr, **forráspontnak** nevezzük. Egy anyag forráspontját alapvetően két tényező, a részecskéi közötti kölcsönhatás erőssége (belső tényező) és a nyomás (külső tényező) határozza meg.

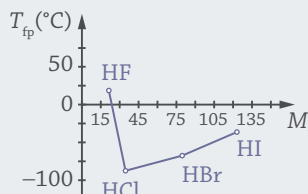
Például a IV. főcsoport elemei hidrogénnel képzett vegyületei apoláris molekulákból épülnek fel, ezért a molekulák között diszperziós kölcsönhatás van, melynek erőssége a molekulatömeggel nő.



A diszperziós kölcsönhatás erőssége a molekulatömeggel nő



A VII. főcsoport hidrogénvegyületei dipólusmolekulákból állnak. A HF-molekulák között azonban hidrogénkötés is kialakul, ezért a legkisebb moláris tömegű HF-nak a legnagyobb a forráspontja. A másik három hidrogén-halogenidben a molekulák között dipólus-dipólus kölcsönhatás van, így a forráspont a molekulatömeggel nő.



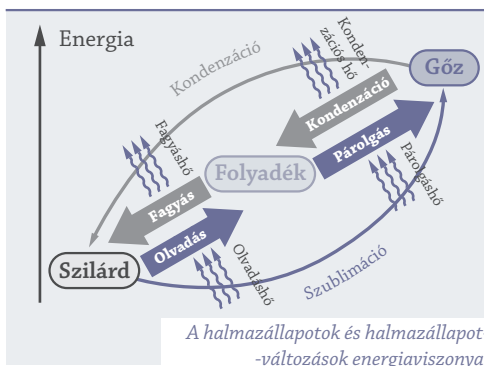
A HF kiugróan magas forráspontjának oka a molekulái közötti hidrogénkötés



TÖBBLETTARTALOM

Párolgás során energiafelvétellel a folyadékból gáz lesz. Párolgás során az anyag belső energiája nő, a párolgás tehát endoterm folyamat. Ennek a folyamatnak az energiaváltozását a párolgáshővel jellemezzük. A **párolgáshő** az az energia, amely ahhoz szükséges, hogy 1 mol (vagy 1 kg) cseppfolyós halmazállapotú anyagot adott hőmérsékleten elpárologtassunk. A lecsapódás során a gázhalmazállapotú anyag cseppfolyós halmazállapotúvá alakul, és közben energia szabadul fel. A lecsapódás exoterm halmazállapot-változás. A lecsapódást kondenzációnak is nevezik.

Szublimáció során a szilárd anyag közvetlenül gáz halmazállapotúvá alakul. A legismertebb ilyen anyagok: a szárazjég, a jód, a kámfor és a molyriasztásra is használt naftalin. A szublimáció endoterm halmazállapot-változás. A szublimációval ellentétes folyamatot lecsapódásnak (kondenzációnak) nevezzük.



A halmazállapotok és halmazállapot-változások energiaviszonyai

Egykomponensű anyagi rendszerek

Kristályrácsok

Vannak olyan szilárd anyagok, amelyek szerkezete szabályosan ismétlődő részekből (ún. elemi cellákból) áll. Az ilyen szabályosan ismétlődő egységekből felépülő térbeli szerkezetet **kristályrácsnak** nevezzük. Az ilyen szerkezetű anyagok a **kristályos anyagok**. Kristályos anyag például a konyhasó, a cukor, a vas, az arany. Azokat a szilárd anyagokat, amelyek szerkezete nem mutat szabályos ismétlődést, **amorf** (alakatlan) anyagoknak hívjuk. Amorf anyag például az üveg és számos műanyag.



ELEMEL SZINT

Elemi cellának nevezzük a kristályrács azon legkisebb egységét, amelyet a tér három irányában megsokszorozva megkapjuk magát a kristályrácsot. Azt, hogy egy kristályban egy kiszemelt részecskét hány másik részecske vesz körül azonos távolságban, **koordinációs számnak** nevezzük. A kristályrács stabilitását a



rácsenergiával jellemezzük. A **rácsenergia** az az energia, amely ahhoz szükséges, hogy 1 mol kristályos anyagot szabad kémiai részecskéire (szabad molekulákra, atomokra, ionokra) bontsunk. Jele: E_r , mértékegysége: $\frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$, előjele mindig pozitív.

A kristályos anyagokat aszerint, hogy a kristályrácsot milyen kémiai részecskék építik fel, és azok között milyen kémiai kötés van, négy alapvető csoportba sorolhatjuk.

Az **ionrácsban** a kristályrácsot ellentétes töltésű ionok alkotják, és az ionok között – elektrosztatikus vonzó kölcsönhatás – ionos kötés van. Ionrácsban csak vegyületek kristályosodhatnak. Ilyen például a konyhasó (NaCl), a mészkő (CaCO₃), a szódabikarbóna (NaHCO₃) és az égetett mész (CaO). Az ionrácsos anyagok annak ellenére, hogy töltéssel rendelkező részecskékből állnak, nem vezetik az elektromos áramot. Olvadékukban és vizes oldataikban viszont az ionok elmozdulhatnak, és így elektromosan vezetővé válnak. Az ionrácsos anyagok egy része vízben jól oldódik (pl. NaCl, KNO₃, Al(NO₃)₃, Na₂SO₄, MgCl₂).

Az **atomrácsot** atomok (pontosabban atomtörzsek) építik fel, közöttük kovalens kötés létesíti a kapcsolatot. Atomrácsos például a gyémánt (C), a szilícium (Si) és a kvarc (SiO₂). Az atomrácsos anyagok rácsenergiája nagy, ezért magas olvadás- és forráspontúak, az elektromos áramot – általában – szilárd, és folyadék halmazállapotban sem vezetik, többnyire oldószerük sincs. (A szilícium például félvezető.) A gyémánt rácsában minden C-atomot négy másik C-atom vesz körül tetraéderesen. A C-atomokat egyszeres kovalens kötés kapcsolja össze.



EMELT SZINT

Az atomrácsos szilícium-dioxidban – ellentétben a molekularácsos szén-dioxiddal – a rácspontokban Si- és O-atomtörzsek találhatóak úgy, hogy minden Si-atomtörzset négy O-atomtörzs vesz körül tetraéderesen. Az atomtörzseket egyszeres kovalens kötés kapcsolja össze atomráccsá.

A **fémrácsot** fématomok (pontosabban atomtörzsek) építik fel, melyek között delokalizált elektronok létesítik a kapcsolatot (fémes kötés). Fémrácsban kristályosodnak a fémek (pl. vas, arany, réz, alumínium stb.) és a fémek egymással képzett vegyületei, illetve ötvözetek (pl. bronz, sárgaréz, acél stb.). A delokalizált elektronok miatt a fémrácsos anyagok jó elektromos- és hővezetők.



TÖBBLETTARTALOM

A fémrácsnak három alapvető típusát különböztetjük meg. A **lapon középpontos** (lapon centrált) **kockarácsot** olyan kockákból felépülő térbeli szerkezetnek képzelhetjük el, amelyeknek a csúcspontjában és a lapok középpontjában helyezkednek el a fématomok. Ebben a szerkezetben az atomok egymáshoz közel vannak, egy atomot 12 másik atom vesz körül. Emiatt az ilyen kristályrácsban kristályosodó fémek nagyon jól megmunkálhatók (alakíthatók, nyújthatók, kovácsolhatók). Ilyen például az alumínium, a réz, az ezüst és az arany. A **térben**



középpontos (térben centrált) **kockarács** esetén a képzeletbeli kockák csúcsain és közepén helyezkednek el az atomok. Ebben a rácsban egy kiszemelt atomot 8 másik atom vesz körül azonos távolságban. Térben középpontos kockarácsa van a nátriumnak, a káliumnak és a vasnak. Megmunkálhatóságuk rosszabb, mint a lapon középpontos kockarácsban kristályosodó fémeké. A fémrács harmadik típusa a **hexagonális** (hatszöges) **rács**. Ilyenkor egy képzeletbeli hatszög alapú hasáb csúcsain, a hatszögek középpontjaiban és a hasáb belsejében találunk fém-atomokat. Egy kiszemelt fématomot 12 másik vesz körbe azonos távolságban. Ilyen rácsban kristályosodik pl. a magnézium, a berillium, a cink. Az ilyen szerkezetű fémek ridegek, törekenyek.

Molekularácsról beszélünk abban az esetben, ha a kristályrácsot semleges kémiai részecskék (többnyire molekulák) építik fel, és a részecskék között másodrendű kémiai kötések vannak. Molekularácsban kristályosodik például a kén (S_8), az elemi gázok (H_2 , N_2 , O_2 , halogének, nemesgázok), a víz (H_2O), a répacukor ($C_{12}H_{22}O_{11}$), a szerves vegyületek többsége. A molekularácsos anyagok rácsenergiája kicsi, ebből következően olvadás- és forráspontjuk általában alacsony, és az elektromos áramot sem szilárd, sem folyadék halmazállapotban nem vezetik.

Átmenet a kötés- és rács típusok között

Vannak olyan szilárd anyagok, amelyek kristályrácsa két-három alaptípus jegyeit is mutatja. Ilyen anyag a **grafit** is. Kristályrácsa képzeletbeli hatszögeket tartalmazó síkokból áll, amelyek egymáshoz képest el vannak csúsztatva. A síkokon belül a szénatomokat kovalens kötés tartja össze. Ez az *atomrácsra* jellemző. A síkok között viszont gyenge diszperziós kölcsönhatás van, keménységük kicsi. Ez a *molekularácsra* jellemző. A grafit ezért hagy nyomot a papíron. Ugyanakkor a rácssíkok mentén a szénatomok negyedik vegyértékelektronjai mint delokalizált elektronok találhatók. Ez a *fémrácsra* jellemző. A grafit ezért jó elektromos vezető is.



TÖBBLETTARTALOM

Az olyan kristályrácsot, amelyben eltérő erősségű kötések találhatók a rácssíkokon belül és a rácssíkok között, rétegrácsnak nevezzük. A grafit **rétegrácsos** szerkezetű anyag.



EMELT SZINT

A **kovalens és az ionos kötés közötti átmenetre** következtethetünk a kötést létesítő atomok elektronegativitás-különbségéből. Például: a Cl_2 -molekulában ($\Delta EN = 0$) kovalens kötés, a HCl -molekulában ($\Delta EN = 0,9$) poláris kovalens kötés, a $NaCl$ -ban ($\Delta EN = 2,1$) ionos kötés található. Vagy az ezüst-halogenidekben: az AgF ($\Delta EN = 2,1$) ionvegyület, az $AgCl$ -ban ($\Delta EN = 1,1$), az $AgBr$ -ban ($\Delta EN = 0,9$) és az AgI -ban ($\Delta EN = 0,6$) egyre inkább kovalens jellegű a kötés, amely – többek között – a vegyületek vízoldhatóságát is csökkenti.



ELŐSZÓ	5
HASZNÁLATI UTASÍTÁS	6
ÁLTALÁNOS KÉMIA	7
ATOMSZERKEZET	7
KÉMIAI KÖTÉSEK	14
MOLEKULÁK, ÖSSZETETT IONOK	16
ANYAGI HALMAZOK	22
KÉMIAI ÁTALAKULÁSOK	33
SZERVETLEN KÉMIA	58
HIDROGÉN	58
NEMESGÁZOK	59
HALOGÉNELEMEK ÉS VEGYÜLETEIK	60
AZ OXIGÉNCSOPORT ELEMEI ÉS VEGYÜLETEIK	67
A NITROGÉNCSOPORT ELEMEI ÉS VEGYÜLETEIK	80
A SZÉNCSOPORT ELEMEI ÉS VEGYÜLETEIK	89
FÉMEK	97
SZERVES KÉMIA	110
A SZERVES VEGYÜLETEK ÁLTALÁNOS JELLEMZŐI	110
SZÉNHIDROGÉNEK	117
OXIGÉNTARTALMÚ SZERVES VEGYÜLETEK	138
NITROGÉNTARTALMÚ SZERVES VEGYÜLETEK	159
SZÉNHIDRÁTOK	169
FEHÉRJÉK	182
NUKLEINSAVAK	184
MŰANYAGOK	186
ENERGIAGAZDÁLKODÁS	189
KÉMIAI SZÁMÍTÁSOK	191
AZ ANYAGMENNYISÉG	192
GÁZOK	195
OLDATOK, ELEGYEK, KEVERÉKEK	197
SZÁMÍTÁSOK A KÉPLETEKKEL ÉS A KÉMIAI EGYENLETEKKEL	
KAPCSOLATBAN	206
TERMOKÉMIA	210
KÉMIAI EGYENSÚLY	213
KÉMHATÁS	215
ELEKTROKÉMIA	220