

Elektronikai anyagtudomány

2. előadás

Dr. Bonyár Attila, egyetemi docens

bonyar.attila@vik.bme.hu

Budapest, 2023.03.09.

Áttekintés (az első három előadás)

1. Bevezetés: A négy alapelemtől a standard modelling
2. Az atom felépítése – atommodellek
3. **Az elemek periódusos rendszere – innen folytatjuk ma**
4. Kémiai kötések és a makroszkopikus fizikai tulajdonságok kapcsolata
5. Az anyagok elektronszerkezete

3. A periódusos rendszer

A periódusos rendszer története

- Ókori görögök két irányvonala. Atomisták (**Demokritosz**) és a folytonos, négy őselem (**Arisztotelész**).
- **Paracelsus** (~1530): féretette az ókori görögök őselem teóriáját, szerinte három principium volt (só – forma és szilárdság, *kén* – éghetőség, *higany* – halmazállapot).
- **Boyle** (~1660): megcáfolta az ókoriak őselem elméletét, valamint Paracelsus princípiumait is. Bevezette a korpuszkula fogalmát és az ezekből álló elemeket, ami az ókori atomistákra emlékeztet.
- **Lavoisier** (1789): “Elemi értekezés a kémiáról”, egy évszázad pneumatikus kémia után. Primitív elemeket definiált, amelyeket nem lehet tovább bontani (hidrogén, oxigén stb.) különbség az elemek és vegyületek között.
- **Dalton** (~1808): A **modern atomfogalom** megteremtője. **Kémiai jelölések** bevezetése (kartondarabok). **Relatív atomtömegek** megmérése.
- **Berzelius** (1818): Kémiai táblázat 45 elem atomtömegével és kb. 2000 vegyülettel. Új jelölésrendszer bevezetése. (Ehhez hozzájárult a nedves kémia fejlődése, pl. Volta oszlop).

ELEMENTS	
Hydrogen. 1	Strontian 46
Azote 5	Barytes 68
Carbon 5	Iron 50
Oxygen 7	Zinc 56
Phosphorus 9	Copper 56
Sulphur 13	Lead 90
Magnesia 20	Silver 190
Lime 24	Gold 190
Soda 28	Platina 190
Potash 42	Mercury 167

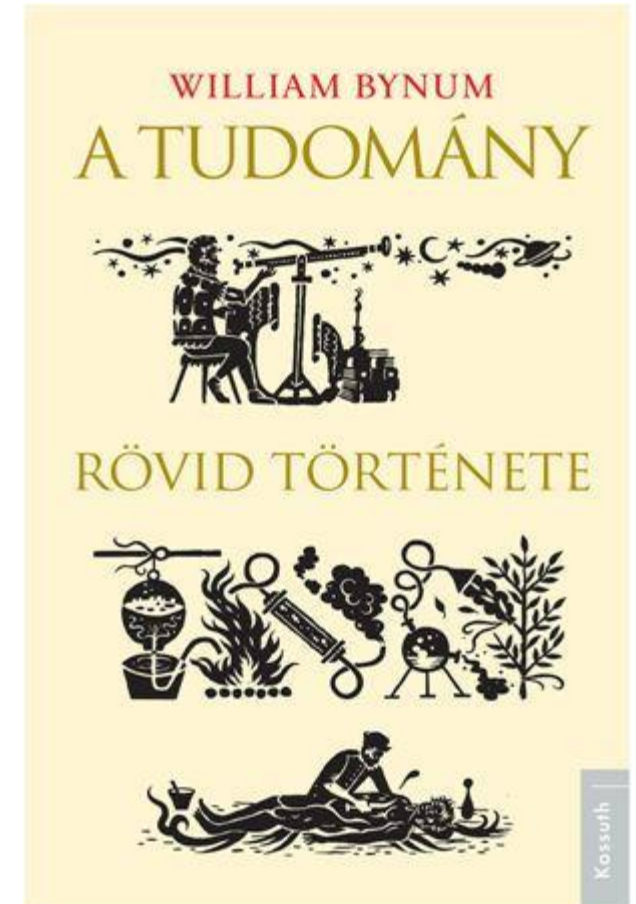
Dalton 1806, majd 1808 A
*New System of Chemical
Philosophy*

3. A periódusos rendszer

A periódusos rendszer története

Könyvajánló: Akit érdekel a teljes történet

- 1860: Első nemzetközi kémikus konferencia Kalrsruheban, (Kekulé, Cannizzaro, **Mengyelejev**). Cél: megegyezni a különböző elemekre használt rendszerekben, elkezdni a rendszerezést a relatív atomtömegeken keresztül.
- 1869: Mengyelejev, rendszerezte az elemeket hasonló viselkedés szerint (Journal of the Russian Chemical Society), a vegyérték fogalma csak később alakult ki. Sok elem hiányzott (pl. nemesgázok (1890-), gallium).
- 1884: Először használják a Valencia (vegyérték) fogalmát ("combining power of an element").
- 1897: **Thomson** – elektron felfedezése: az atom nem is oszthatatlan, magyarázat a valenciára.
- 1911: **Rutherford** – pozitív atommag felfedezése, 1913 Bohr modell, 1913: van den Broek, Rutherford az atomszám fogalmának bevezetése.



3. A periódusos rendszer

Az elemek periódusos rendszere

A rendezés szempontja, hogy az egy oszlopban lévő elemek azonos külső elektronszám konfigurációval rendelkeznek. Pl.:

- 1. főcsoport – 1 elektron a külső héjon (s alhéjon) – **alkálifémek**
- 2. főcsoport – 2 elektron a külső héjon (s alhéjon) – **alkáli földfémek**
- 2-3 főcsoportok között, részlegesen betöltött d alhéjjal – **átmeneti fémek**
- Részlegesen betöltött 4f alhéj – **ritkaföldfémek**
- 7. főcsoport – **halogének**
- 8. főcsoport – **nemesgázok**
- 3-6 főcsoportok: **fémek, félfémek és nemfémek.**

The periodic table is color-coded by groups: **Nemfémek** (light green), **Alkálifémek** (orange), **Alkáliföldfémek** (yellow), **Nemesgázok** (blue), **Félfémek** (light green), **Halogének** (teal), **Átmenetifémek** (pink), **Másodfajú fémek** (grey), **Lantanoidák** (orange), and **Aktinoidák** (purple). The table includes element symbols, names, atomic numbers, and atomic weights. A large yellow box highlights Barium (Ba) with its atomic number 56, atomic weight 137.327, and electron configuration 2-8-18-18-8-2. A note at the bottom right states: "Ezeknek az elemeknek nincs egyetlen stabil izotópjuk sem." (These elements do not have a single stable isotope).

3. A periódusos rendszer

Ionizáció

Amikor az atomban a protonok és az elektronok száma nem egyezik meg **ionokról** beszélünk.

Redoxi-folyamat: elektron felvétellel vagy leadással járó folyamat

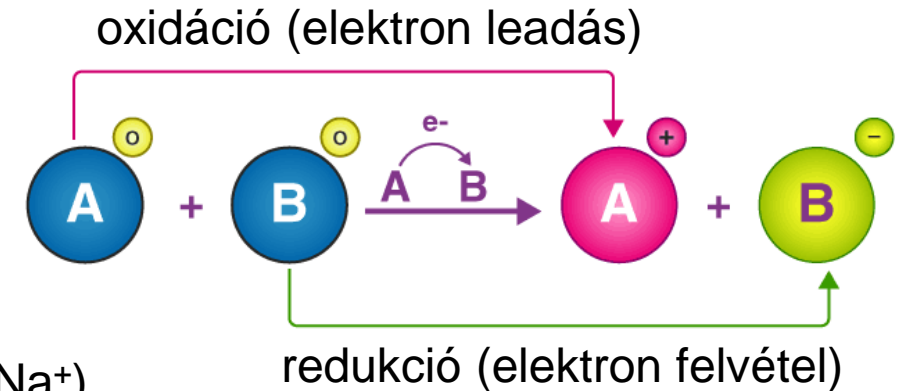
Oxidáció: elektron leadása - **Redukció:** elektron felvétele

Fémek: elektronok leadására hajlamosak - > **kationok** lesznek ($\text{Na} \rightarrow \text{Na}^+$)

Nemfémek: elektron felvételére hajlamosak -> **anionok** lesznek ($\text{Cl} \rightarrow \text{Cl}^-$)

Ionizációs potenciál: az energia ami ahhoz szükséges, hogy leszakítsunk egy elektront az atomról. Általában az elemek első ionizációs potenciálját adják meg.

Ha az ionizációs potenciál magas, az elem nem szívesen ad le elektront (pl. nemesgázok, halogének). A fémek (pl. alkálifémek) alacsony ionizációs potenciálja arra utal, hogy könnyen leadnak elektront.



SYSTEMS

Elektronnegativitás: komplementer fogalom, azt adja meg egy elem mennyire képes egy elektront bevonítani a külső héjára. Ha magas: könnyen elvesz elektront másoktól (oxigén, fluor, klór), ha alacsony könnyen lead elektront (könnyen vesz el tőle más, pl. nátrium, kálium stb.).

Atomok találkozásakor az elektronegativitásaik különbsége határozza meg a kialakuló kötés jellegét!

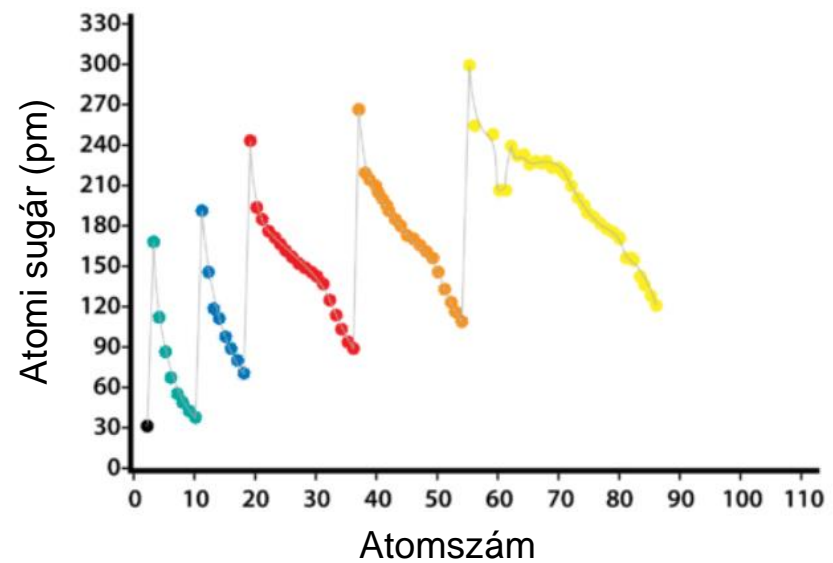
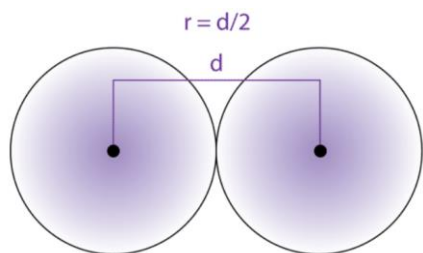
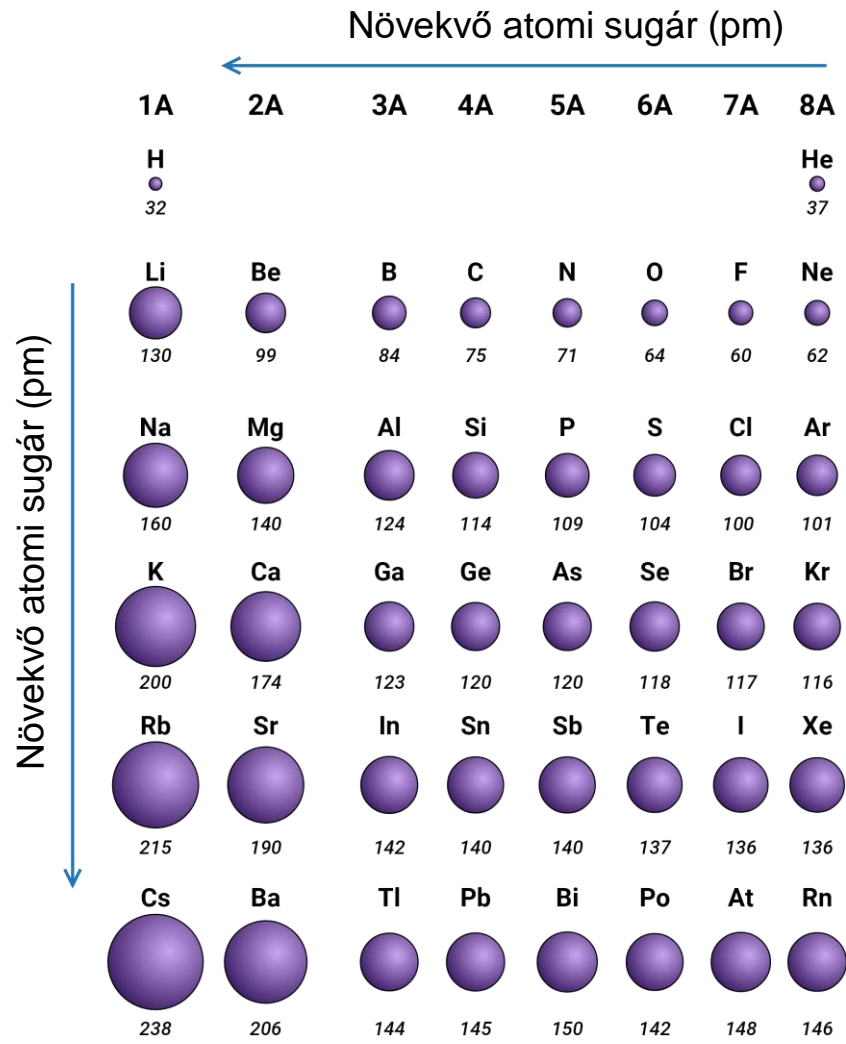
Figyeljük meg az elektronegativitás és az ionizációs potenciál közötti korrelációt!

[illegible]

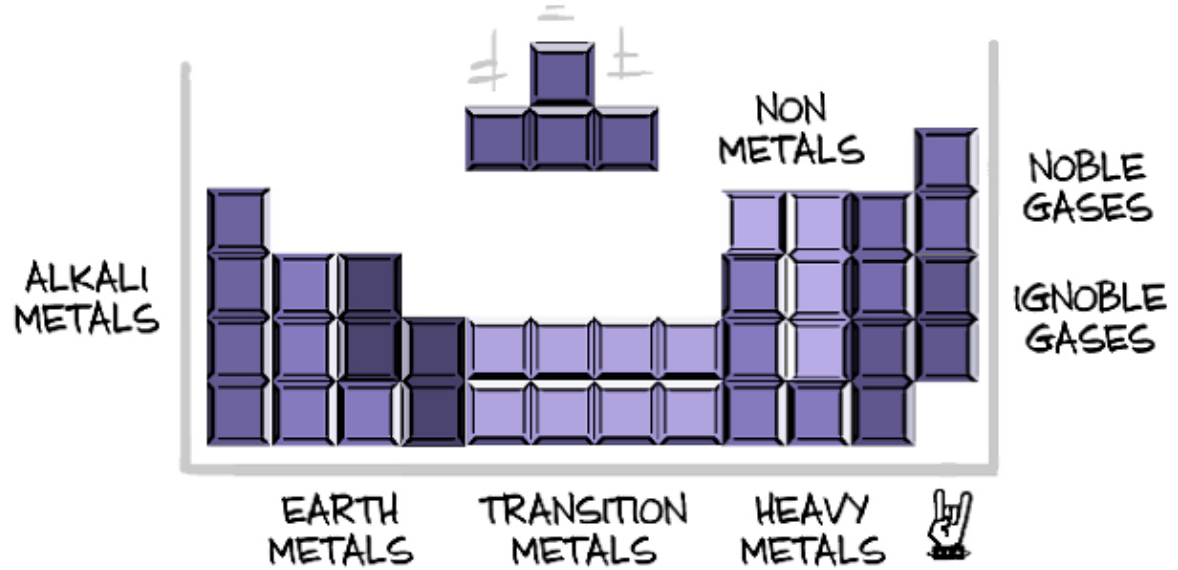
IA										IIA										III										IV										V										VI										VII										VIII									
1	1	H	1.3598	2	3	Li	5.392	4	4	Be	9.323	5	5	B	8.298	6	6	C	11.260	7	7	N	14.534	8	8	O	13.168	9	9	F	17.423	10	10	Ne	21.589																																												
2	11	Na	5.139	12	12	Mg	7.646	13	13	Al	5.986	14	14	Si	8.152	15	15	P	10.487	16	16	S	10.360	17	17	Cl	12.968	18	18	Ar	15.760																																																
3	19	K	4.341	20	20	Ca	6.113	21	21	Sc	6.561	22	22	Ti	6.828	23	23	V	6.648	24	24	Cr	6.767	25	25	Mn	7.434	26	26	Fe	7.902	27	27	Co	7.881																																												
4	37	Rb	4.117	38	38	Sr	5.695	39	39	Y	6.217	40	40	Zr	6.634	41	41	Nb	6.759	42	42	M	7.092	43	43	Tc	7.28	44	44	Ru	7.361	45	45	Rh	7.459																																												
5	55	Cs	3.894	56	56	Ba	5.212	57	57	La	5.577	58	58	Ce	6.825	59	59	Pr	7.89	60	60	Nd	7.98	61	61	Pm	7.88	62	62	Sm	8.7	63	63	Eu	9.1																																												
6	87	Fr	6.279	88	88	Ra	5.17	89	89	Ac	5.17	90	90	Th	6.825	91	91	Pa	7.89	92	92	U	7.98	93	93	Np	7.88	94	94	Pl	8.7	95	95	Am	9.1																																												
7	111	Uub		112	112	Uub		113	113	Uut		114	114	Uuq		115	115	Uup		116	116	Uuh		117	117	Uus		118	118	Uuo		119	119	Uuhs																																													

3. A periódusos rendszer

Érdekesség: Figyeljük meg az atomi sugár megváltozását!



THE PERIODIC TABLE OF THE ELEMENTS (TETRIS VERSION)



4. A kémiai kötések

A kémiai kötések csoportosítása

Elsődleges kötések:

- Ionos,
- Kovalens,
- Fémes.

Másodlagos kötések:

- Dipol-dipol kölcsönhatás,
- Hidrogén-hidak,
- Van der Waals kötések (v. diszperziós, gyűjtőfogalom).

Lényeges különbség van a kötési energiákban! Disszociációs energia = mekkora energiára van szükség a kötés felbontásához.

Azonos elemek közötti kötések jellege a periódusos rendszerben

	1	2																	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Group →																																		
↓ Period																																		
1	H																											He						
2	Li	Be																											B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg																											Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	K	Ca																	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr																	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn		
7	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og		

Fémes, kovalens (hálózat), molekuláris kovalens, különálló atomok

Bond type	Dissociation energy (kcal/mol) ^[8]
Ionic lattice	250–4000 ^[9]
Covalent bond	30–260
Hydrogen bond	1–12
Dipole–dipole	0.5–2
London dispersion forces	<1 to 15

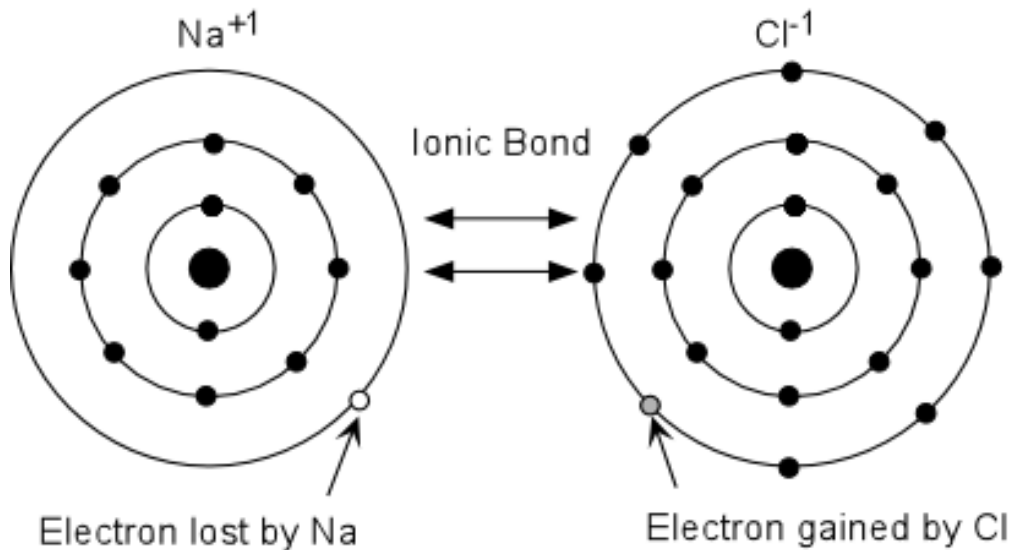
(1 kcal = 4.184 kJ)

4. A kémiai kötések

Ionos kötés

- Akkor alakul ki, ha a találkozó atomok elektronegativitásai közötti különbség nagy.
- A nagyobb elektronegativitású atom elveszi a másik elektronját. A kötés a kialakuló, ellentétes töltésű ionok közötti vonzóerő következménye.

Pl. NaCl



Tipikus ionos kötéssel rendelkező anyagok:

- Sók (pl. NaCl, KCl...)
- Bizonyos kerámiák (pl. Al₂O₃)

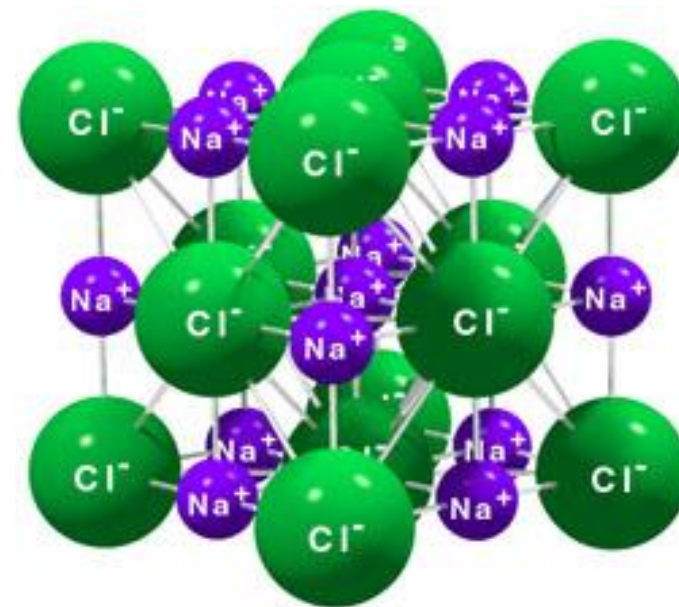


4. A kémiai kötések

Ionos kötés – ionos kristályok tulajdonságai:

- Az ionos kötésnek nincs irányítottsága, a vonzóerő a tér minden irányába azonos erővel hat.
- Nagyfokú szimmetriával rendelkező kristályokat alkotnak.
- Kemények, de könnyen hasadnak (ridegek).
- Magas olvadáspont.
- Rossz elektromos és hővezető képesség.
- Könnyen oldódnak poláros oldószerekben pl. vízben.

Magyarázat:



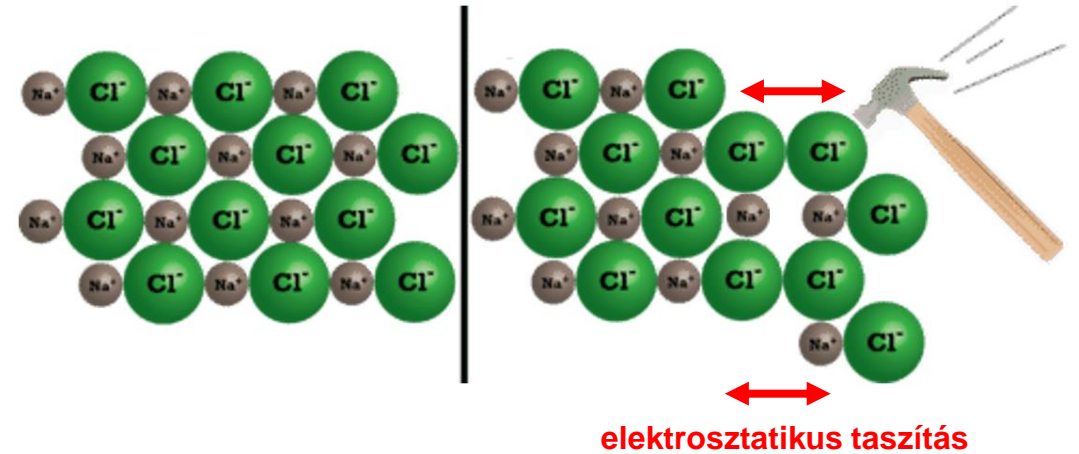
- Erős vonzóerő az ionok között -> szoros rácsot alkotnak.
- Példa: NaCl: ez két egymásba tolt felületen középpontos köbös rács (FKK).
Lásd a 4. "Kristályszerkezet" előadásban.

4. A kémiai kötések

Ionos kötés – ionos kristályok tulajdonságai:

- Az ionos kötésnek nincs irányítottsága, a vonzóerő a tér minden irányába azonos erővel hat.
- Nagyfokú szimmetriával rendelkező kristályokat alkotnak.
- **Kemények, de könnyen hasadnak (ridegek).**
- Magas olvadáspont.
- Rossz elektromos és hővezető képesség.
- Könnyen oldódnak poláros oldószerekben pl. vízben.

Magyarázat:



- Ha az erő elég a deformációhoz, egy ionsor eltolása közben a szembekerülő azonos töltések elektrosztatikus taszítása szétválasztja a kristályt.

4. A kémiai kötések

Ionos kötés – ionos kristályok tulajdonságai:

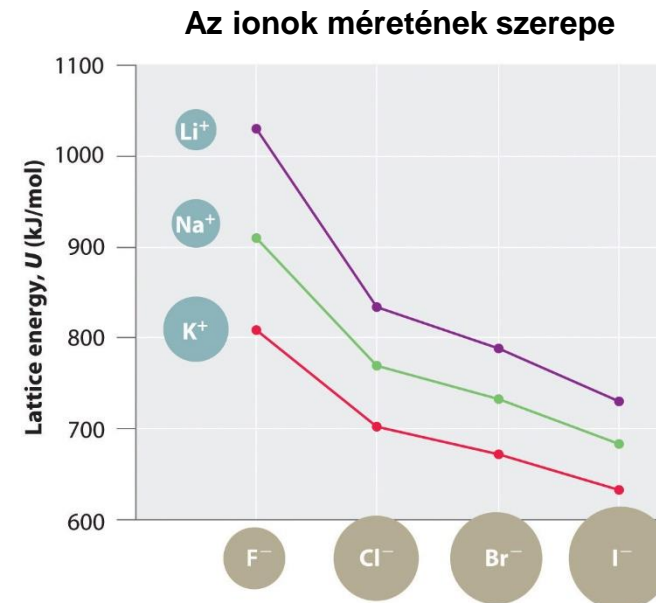
- Az ionos kötésnek nincs irányítottsága, a vonzóerő a tér minden irányába azonos erővel hat.
- Nagyfokú szimmetriával rendelkező kristályokat alkotnak.
- Kemények, de könnyen hasadnak (ridegek).
- **Magas olvadáspont.**
- Rossz elektromos és hővezető képesség.
- Könnyen oldódnak poláros oldószerekben pl. vízben.

Magyarázat:

- Az olvadáspont (és a forráspont) attól függ, mekkora a rácsot összetartó erő.
- Ez ionos kristály esetén Coulomb-vonzás, ami a töltések erősségétől (Q_1 , Q_2) és távolságától (d) függ.

$$E_c = k \frac{Q_1 Q_2}{d}$$

- A rácsenergia (lattice energy) 1 mol szilárd kristály légneműsítéséhez szükséges energia.



A töltés szerepe
NaCl (+1, -1)
 $T_o=801^{\circ}\text{C}$

CaF₂ (+2, -1)
 $T_o=1418^{\circ}\text{C}$

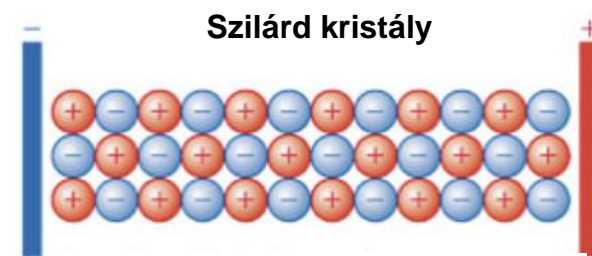
MgO (+2,-2)
 $T_o=2852^{\circ}\text{C}$

4. A kémiai kötések

Ionos kötés – ionos kristályok tulajdonságai:

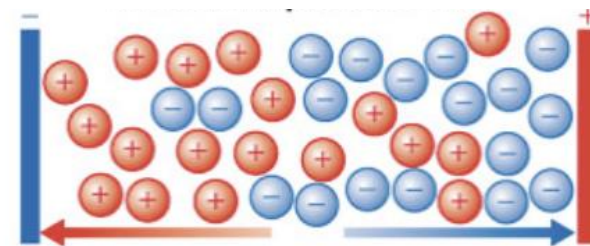
- Az ionos kötésnek nincs irányítottsága, a vonzóerő a tér minden irányába azonos erővel hat.
- Nagyfokú szimmetriával rendelkező kristályokat alkotnak.
- Kemények, de könnyen hasadnak (ridegek).
- Magas olvadáspont.
- **Rossz elektromos és hővezető képesség.**
- Könnyen oldódnak poláros oldószerekben pl. vízben.

Magyarázat:



Az ionok rögzítettek, nincs vezetés

Olvadék, vagy oldat (pl.vizes elektrolit)



Az ionok elmozdulásra képesek, van villamos vezetés

+ ionok a
- elektródhoz

- ionok a
+ elektródhoz

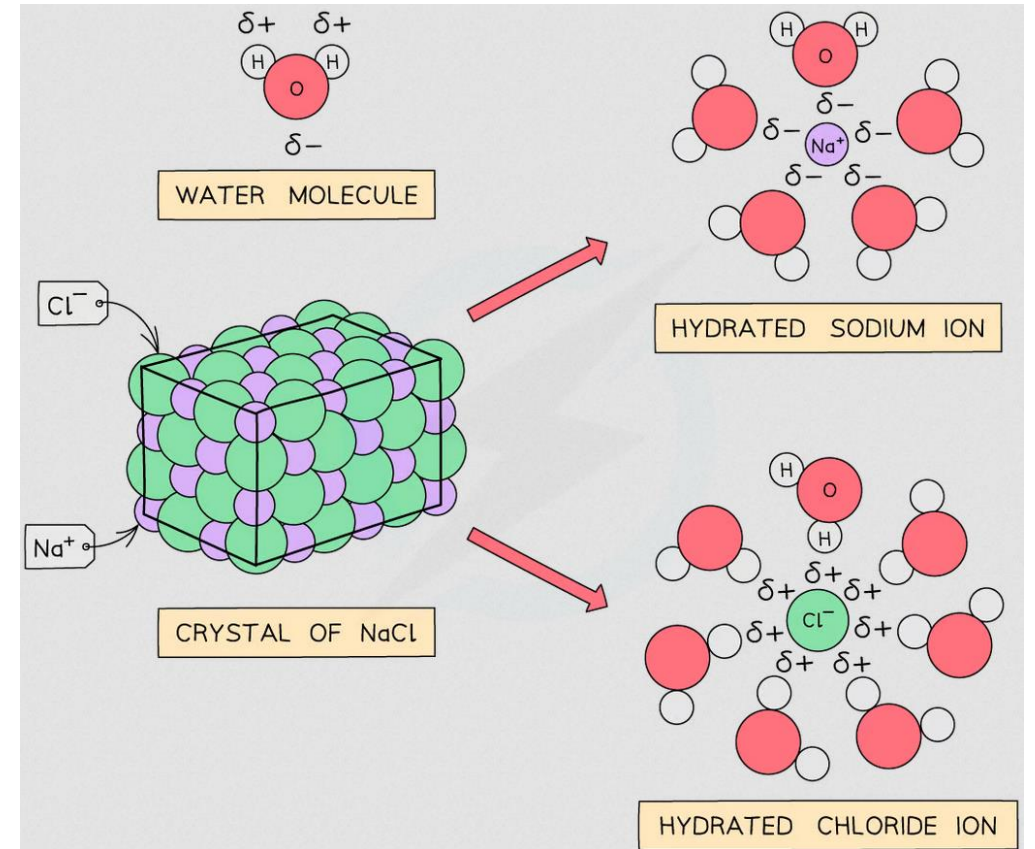
- A hővezetés egyik lényeges komponense az elmozdulásra képes töltéshordozók, ami itt nincs. Részletes magyarázat a kovalens kötésnél.

4. A kémiai kötések

Ionos kötés – ionos kristályok tulajdonságai:

- Az ionos kötésnek nincs irányítottsága, a vonzóerő a tér minden irányába azonos erővel hat.
- Nagyfokú szimmetriával rendelkező kristályokat alkotnak.
- Kemények, de könnyen hasadnak (ridegek).
- Magas olvadáspont.
- Rossz elektromos és hővezető képesség.
- Könnyen oldódnak poláros oldószerekben pl. vízben.

Magyarázat:



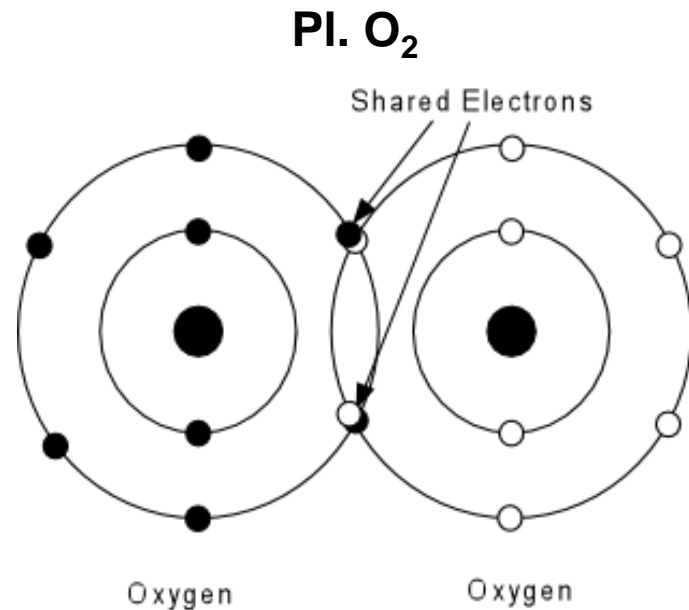
- A poláros-apoláros oldószer definíciót lásd a kovalens kötés következményeinél.

4. A kémiai kötések

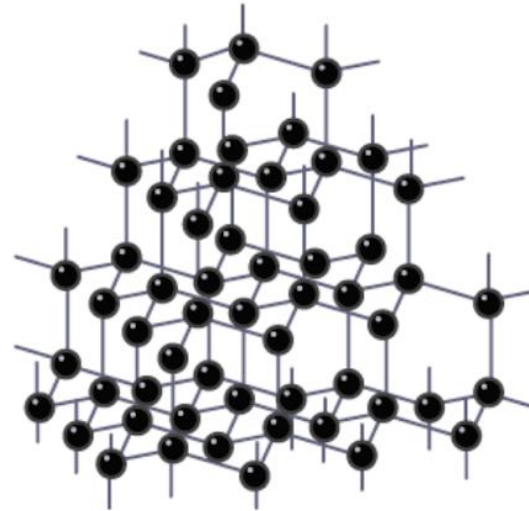
Kovalens kötés

- Kialakulhat azonos atomok között és különböző atomok között is, ha elektronegativitásuk különbsége kicsi.
- Megosztott elektronokon alapul a kötés, a közösített elektronok a résztvevő atomok külső héjait megosztva teszik teljessé, így stabilizálva azok elektronszerkezetét.

Típusai:

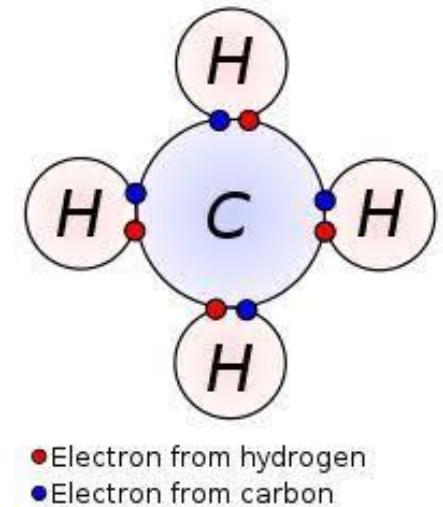


Hálózatos (giant covalent)



Pl. gyémánt, szilícium...

Molekuláris



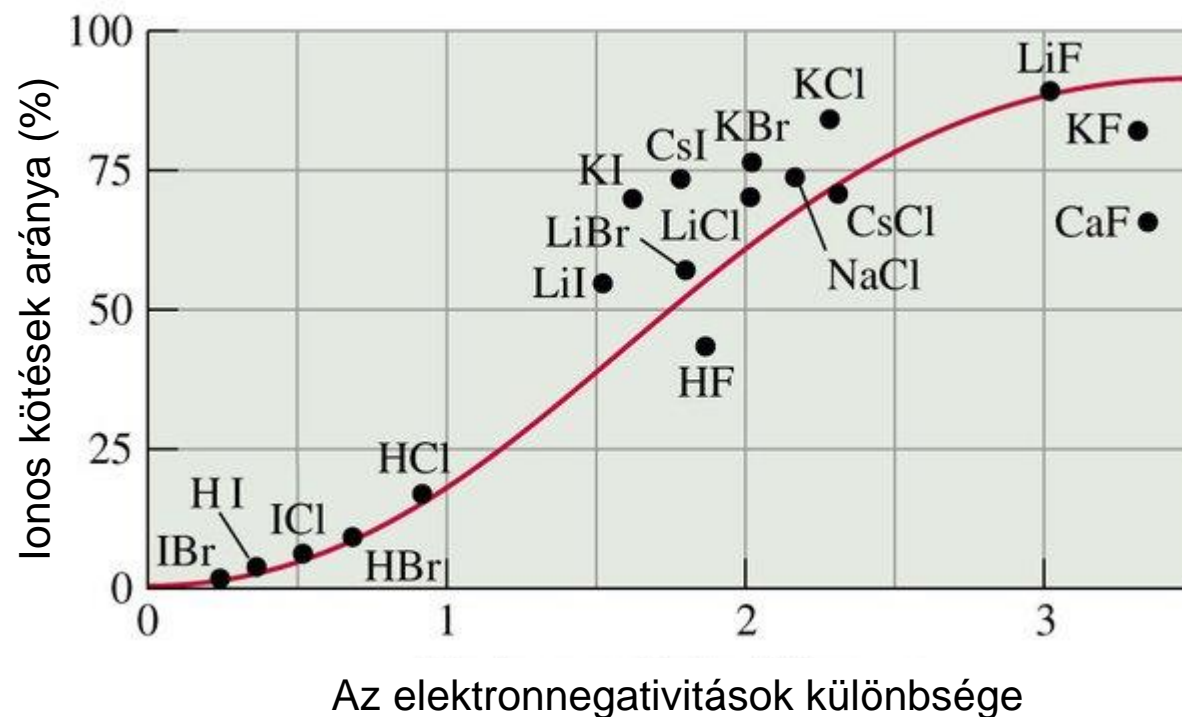
Pl. gázmolekulák (CH_4 , CO_2 ...)

4. A kémiai kötések

Kovalens kötés

- A valóságban különböző atomok közötti kötések sosem tisztán kovalens vagy ionos jellegűek. A kettő arányát az elektronegativitások különbsége határozza meg.
- Pl. NaCl (2.3), 75 % ionos
- Pl. NaF (3.05), ~90 % ionos
- Pl. Al_2O_3 (~2), ~ 60% ionos
- Azonos atomok esetén az elektronegativitások különbsége 0, vagyis tisztán kovalens kötések jönnek létre. Pl. O_2 C-C.
- Bizonyos molekulák, pl. SiO_4^{4-} más atomokkal vagy molekulákkal kovalens vagy ionos kötések is tudnak létesíteni.

Linus Pauling: $\text{Ionos arány (\%)} = \left(1 - e^{-\frac{(\chi_A - \chi_B)^2}{4}}\right) * 100\%$

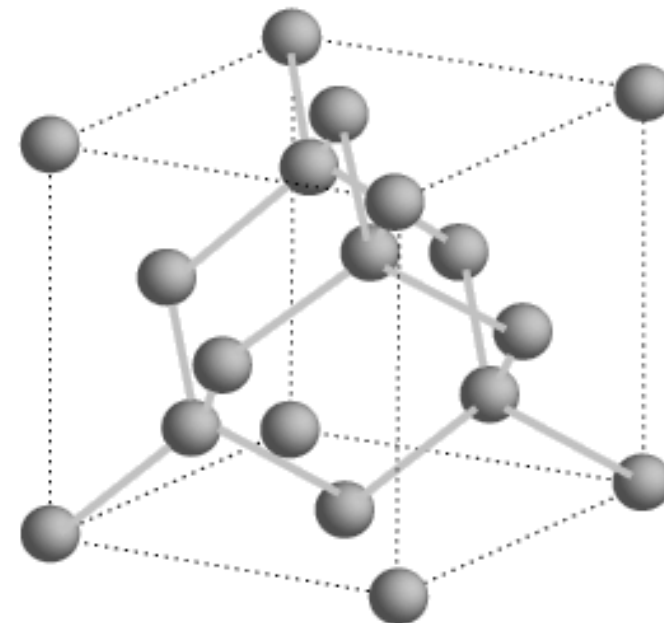


4. A kémiai kötések

Kovalens kötés – kovalens kristályok tulajdonságai:

- A kovalens kötések térben irányítottak.
- Alacsony szimmetriával rendelkező kristályokat alkotnak.
- Nagy keménység.
- Magas olvadáspont.
- Általánosan rossz elektromos és hővezetők. (kivétel a gyémánt...)
- Viszonylag nehezen oldódnak vízben vagy poláros oldószerekben.

Magyarázat:



- Az osztott atompályák meghatározzák az atomtörzsek (rácspontok) egymáshoz képesti irányát, távolságát.
- Példa: gyémántrács (tetraéderes)
Lásd a 4. “Kristályszerkezet” előadásban.

4. A kémiai kötések

Kovalens kötés – kovalens kristályok tulajdonságai:

- A kovalens kötések térben irányítottak.
- Alacsony szimmetriával rendelkező kristályokat alkotnak.
- **Nagy keménység.**
- **Magas olvadáspont.**
- Általánosan rossz elektromos és hővezetők.
(kivétel a gyémánt...)
- Viszonylag nehezen oldódnak vízben vagy poláros oldószerekben.

Magyarázat:

- Mindkettő a nagy kötési energia és a stabil kristályszerkezet következménye.
- A legkeményebb ismert anyagok a földön.
 - gyémánt (115 GPa),
 - köbös bór-nitrid (62 GPa).
- Olvadáspontok:
 - gyémánt (~3500-4000°C),
 - bór-nitrid (2970°C),
 - szilícium (1414°C).



4. A kémiai kötések

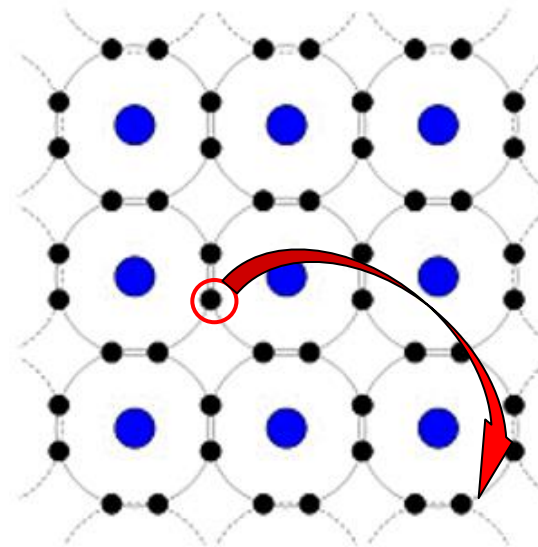
Kovalens kötés – kovalens kristályok tulajdonságai:

- A kovalens kötések térben irányítottak.
- Alacsony szimmetriával rendelkező kristályokat alkotnak.
- Nagy keménység.
- Magas olvadáspont.
- **Általánosan rossz elektromos és hővezetők. (kivétel a gyémánt...)**
- Viszonylag nehezen oldódnak vízben vagy poláros oldószerekben.

Magyarázat:

- A kovalens rácsban $T = 0\text{K}$ hőmérsékleten minden elektron részt vesz a kötésben, nincs elmozdulásra képes töltéshordozó.
- Ha $T \neq 0\text{K}$, a szabadenergia ki tud ugrasztani elektronokat a kötésből, szabadelektronok jönnek létre. Ezek mennyisége az elektronszerkezet (és a hőmérséklet) függvénye.

● Si atom



- A szilíciumból így lesz szobahőmérsékleten félvezető.
- *Lásd a 3. “Anyagok elektronszerkezete” előadásban.*

Delokalizálódó elektron

4. A kémiai kötések

Kovalens kötés – kovalens kristályok tulajdonságai:

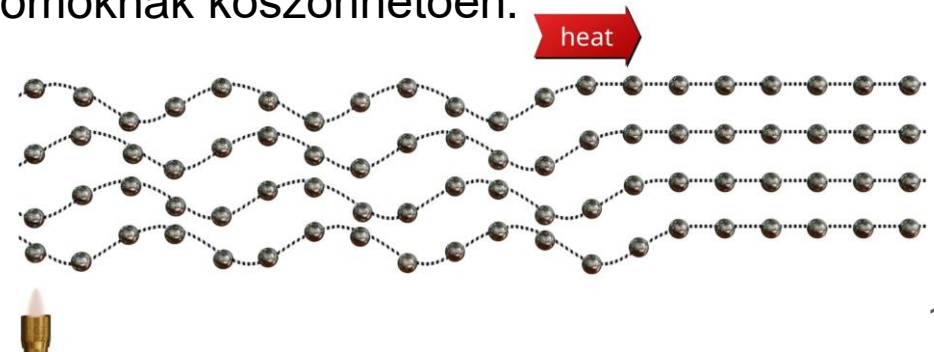
- A kovalens kötések térben irányítottak.
- Alacsony szimmetriával rendelkező kristályokat alkotnak.
- Nagy keménység.
- Magas olvadáspont.
- **Általánosan rossz elektromos és hővezetők. (kivétel a gyémánt...)**
- Viszonylag nehezen oldódnak vízben vagy poláros oldószerekben.

Magyarázat:

- A hővezetési tényező (k) jellemzi egy anyagon belül a hőenergia terjedésének lehetséges mértékét (q : hőmérséklet fluxus, ∇T : hőmérséklet gradiens).

$$\mathbf{q} = -k\nabla T$$

- A hővezetésnek két komponense van. Az első a **rácsrezgések** (fononok) közvetlen terjedése, a második az elmozdulni képes **elektronok** rácspontok közötti mozgásából, és ütközéseken keresztüli energiaátadásából áll.
- A rácsrezgés komponens nagyban függ a rács típustól és az atomok méretétől. A gyémánt record jó hővezető (10x Al), a kis, szorosan kötött atomoknak köszönhetően.



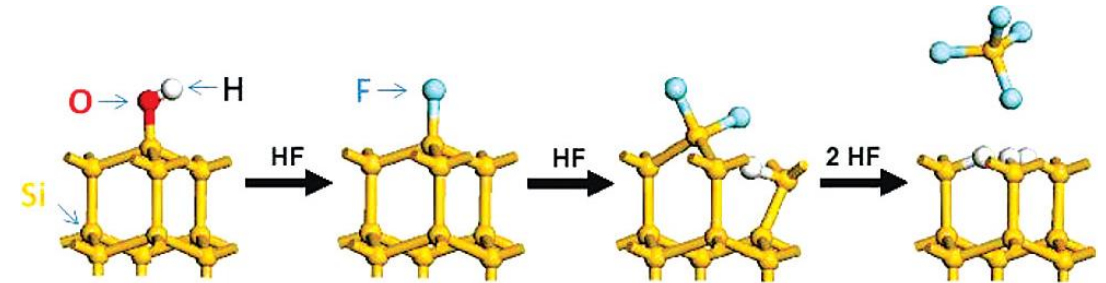
4. A kémiai kötések

Kovalens kötés – kovalens kristályok tulajdonságai:

- A kovalens kötések térben irányítottak.
- Alacsony szimmetriával rendelkező kristályokat alkotnak.
- Nagy keménység.
- Kiemelkedően magas olvadáspontúak.
- Általánosan rossz elektromos és hővezetők. (kivétel a gyémánt...)
- **Viszonylag nehezen oldódnak vízben vagy poláros oldószerekben.**

Magyarázat:

- A kovalens kristályokat általában csak erős savakban/lógokban lehet oldani.
- Példa: szilícium nedves kémiai marása HF marószerrel:



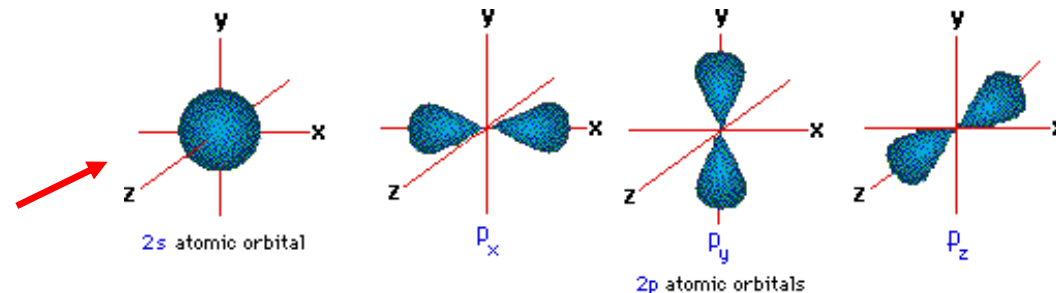
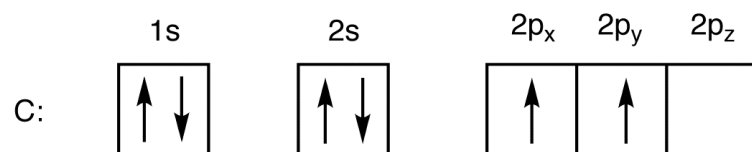
- *Lásd részletesen a 9. “Félvezető anyagok és technológiák” előadásban.*
- *A poláros/apoláros oldhatóság magyarázatát lásd később.*

4. A kémiai kötések

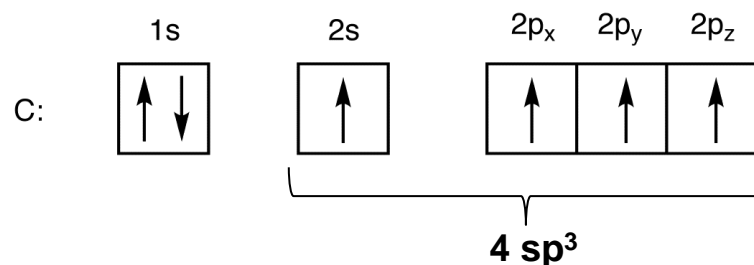
Az atompályák hibridizációja és a molekulák alakja

- A kovalens kötések irányítottak, mivel az atomoknak a megfelelő pozícióban kell elhelyezkedniük ahhoz, hogy a szükséges számú szomszédal kötések tudjanak kialakítani. Ez az atompályák alakjának módosulását hozza magával (hibridizáció).
- Pl. A szénatom atompályái és azok hibridizációja

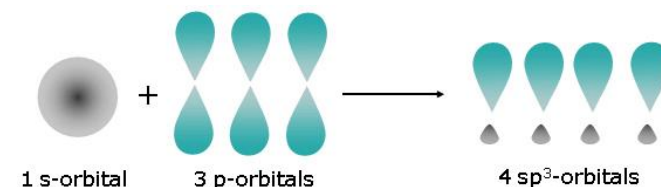
A szén alap konfigurációja (pl. egyedülálló atom):



Az sp^3 hibridizáció (pl. gyémántrács, metán)



+ energy



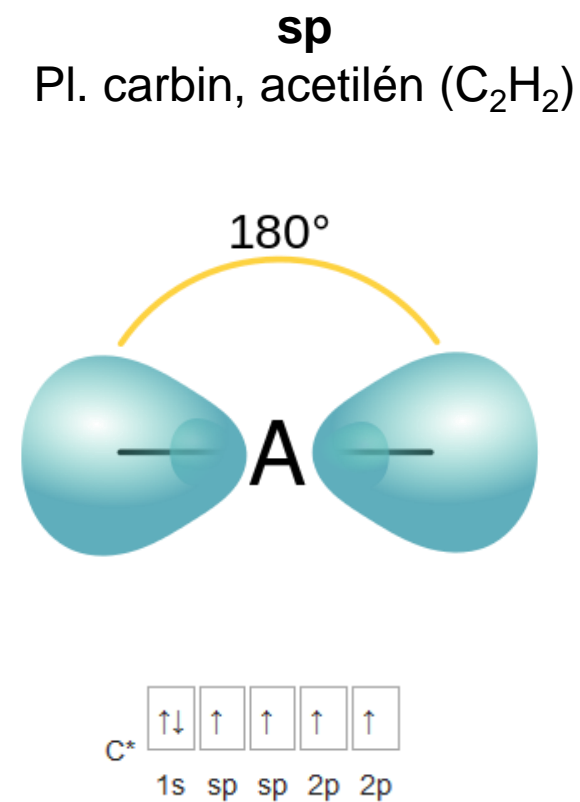
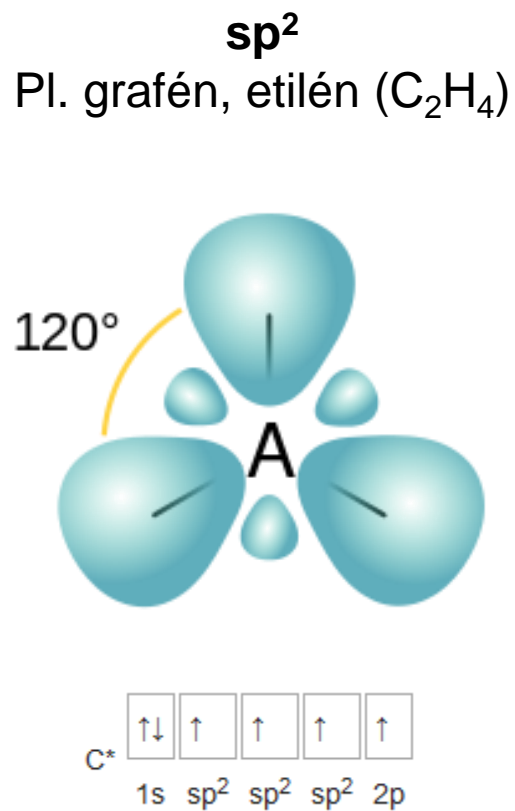
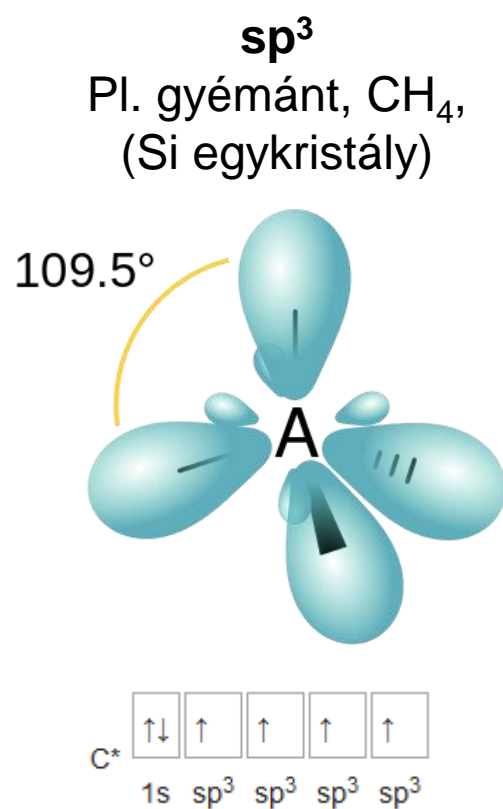
Tetrahedral geometry



4. A kémiai kötések

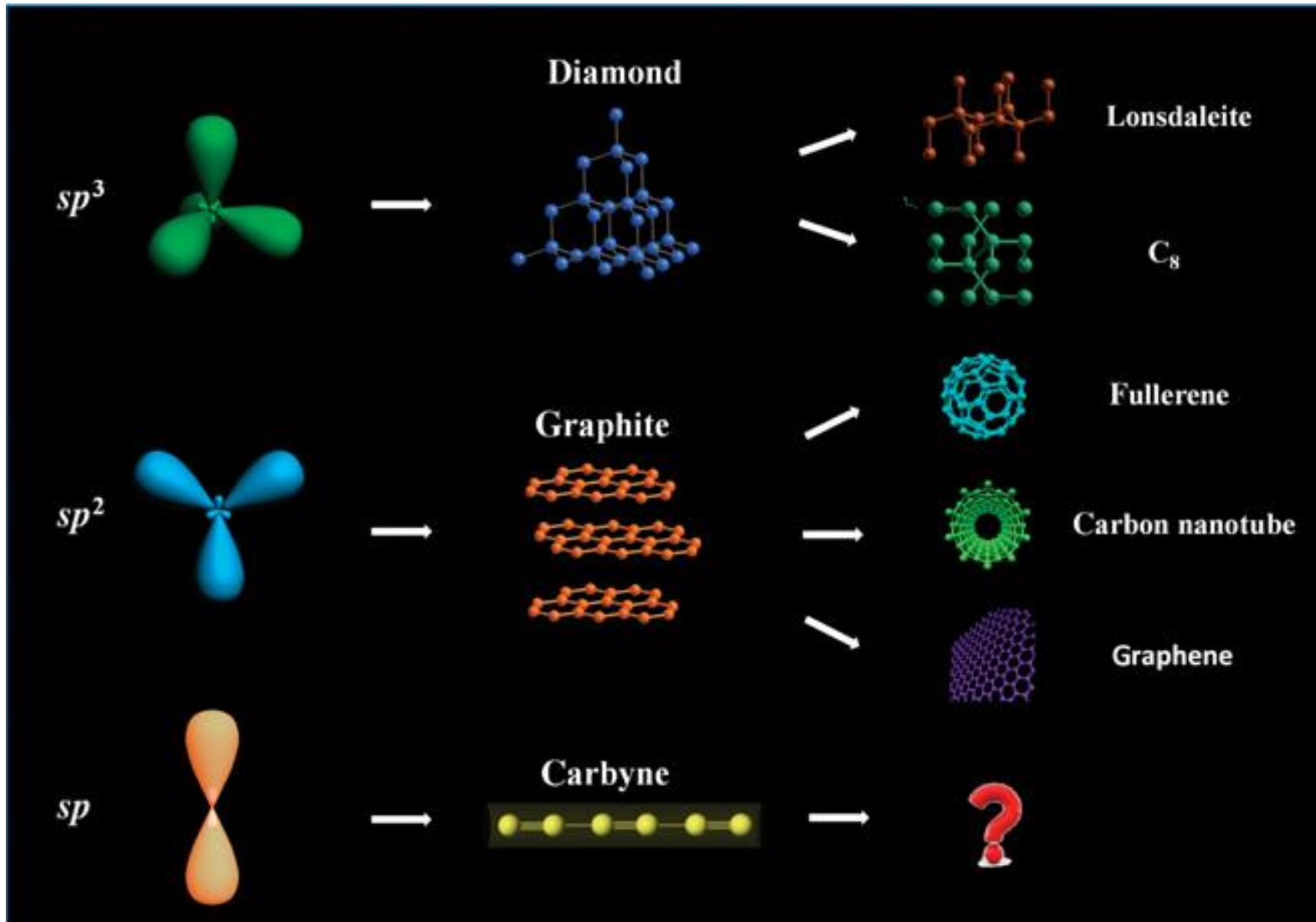
Az atompályák hibridizációja és a molekulák alakja

➤ Példa: a szénatom pályáinak lehetséges hibridizációi



4. A kémiai kötések

Érdekesség: a szén allotrop módosulatainak kötése



Allotrop módosulat: egy kémiai elem, azonos halmazállapotú, de eltérő kristály- vagy molekulaszervezetű módosulatai (allotrópia).

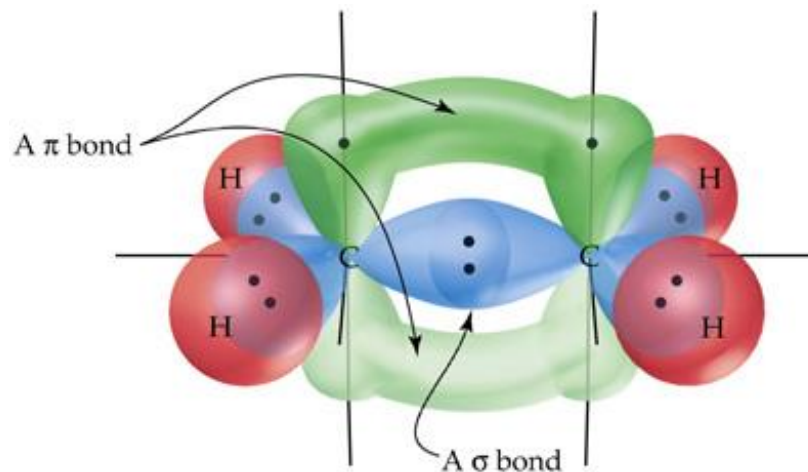
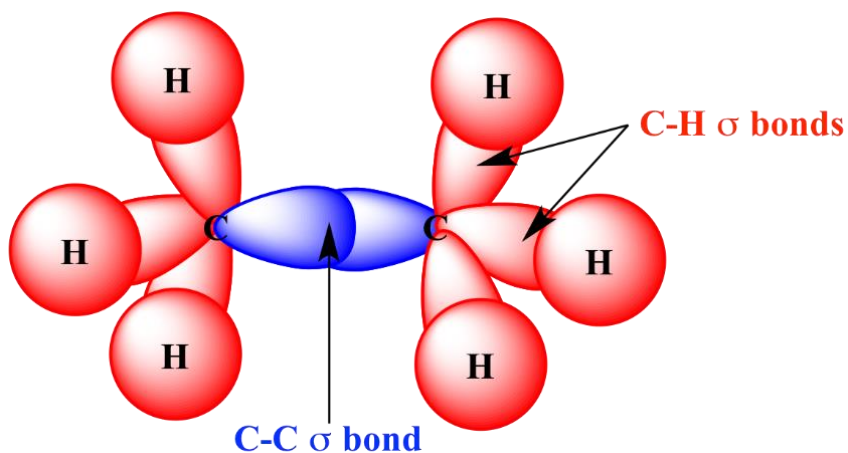
Drasztikusan eltérőek lehetnek a makroszkopikus fizikai tulajdonságok. Példák:

- A gyémánt kemény, a grafit kenhető.
- A gyémánt elektromos szigetelő, a grafit (és a grafén) rekord jó vezető.
- A grafénből (egy szénatomsor vastagságú háló) feltekert szén nanocsőből létezik vezető és félvezető tulajdonságú is.

4. A kémiai kötések

Kovalens kötések – molekuláris pályák

- A **molekulapályák** az atompályák matematikai (lineáris) kombinációjával létrehozott pályák. A molekulapályát, mint hullámfüggvényt az őt létrehozó atompályák hullámfüggvényeinek súlyozott összegeként kapjuk meg.
- **Sigma-kötés** (σ): olyan kovalens kötés, amelyben a kémiai kötést létrehozó elektronpár a kötés tengelyére nézve forgásszimmetrikus molekulapályán helyezkedik el. Ennek a legnagyobb a kötőereje, mindig ez alakul ki először, gyakorlatilag a molekulapályák direkt kombinációja.
- **Pí-kötés** (π): kovalens kötés, amelyet párhuzamos tengelyű p-orbitálok képeznek. Abban az esetben beszélhetünk pi-kötésről, ha a kötés síkszimmetrikus és a szigma-kötés tengelye a pi-kötés szimmetriasíkján fekszik. Csak abban az esetben jön létre, ha a kötésben részvevő két atom között már kialakult egy szigma-kötés.



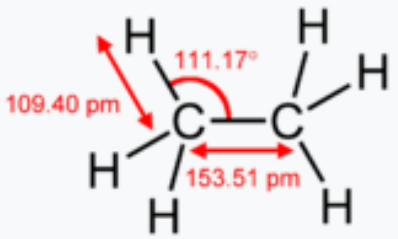
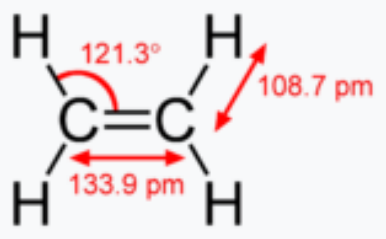
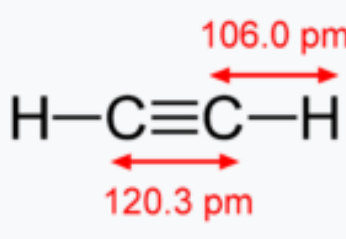
4. A kémiai kötések

A kovalens kötések következményei (1):

- A kötések ereje (energiája), hossza (atomok közötti távolság) és iránya pontosan definiált és ismert!
- Ezek kvantumkémiai módszerekkel elméletileg is meghatározhatóak.

Példa: a kötési energia és távolság kapcsolata C-C kötések esetén.

Comparison of bond-lengths in simple structures

		
ethane (1 σ bond)	ethylene (1 σ bond + 1 π bond)	acetylene (1 σ bond + 2 π bonds)

Bond	D (kJ/mol)	r (pm)
C-C	346	154
C=C	602	134
C≡C	835	120
C-Si	318	185

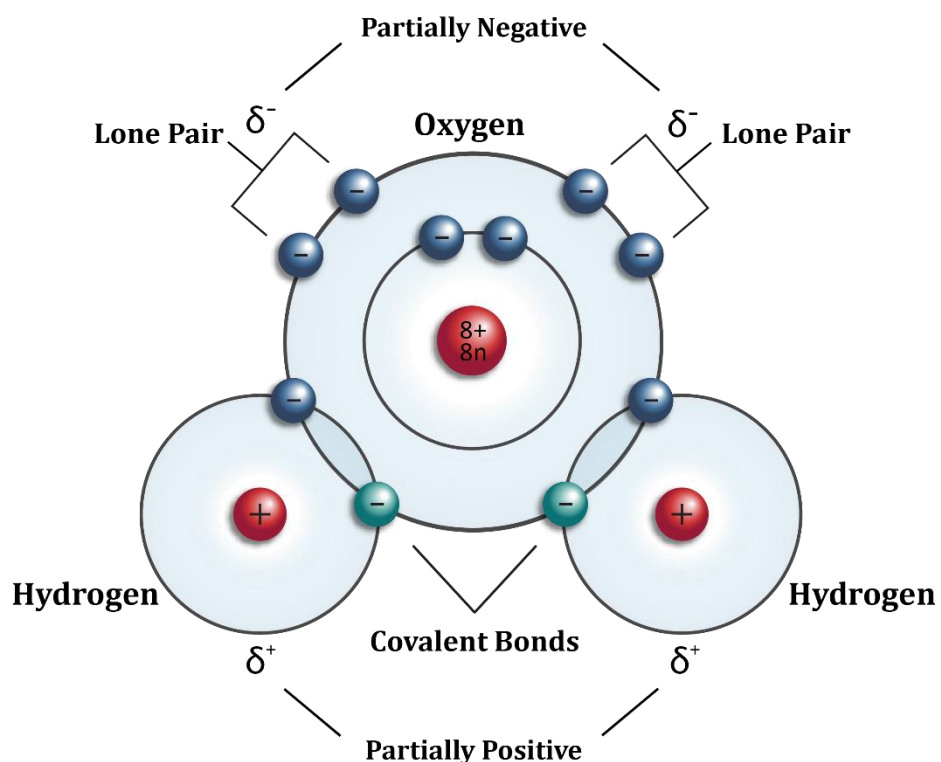
Bond	D (kJ/mol)	r (pm)
Si-Si	222	233
Si-N	355	
Si-O	452	163
Si-S	293	200

4. A kémiai kötések

A kovalens kötések következményei (2):

Poláros és apoláros molekulák

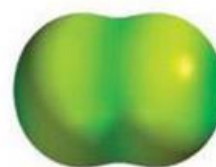
Tipikus poláros példa: H₂O



Poláros kovalens kötés: amennyiben az elektronegativitások különbsége nagy (de még nem ionos a kötés) parciálisan pozitív és negatív részek alakulnak ki (δ^+ , δ^-).

Poláros molekula (dipólusmolekula): poláros kovalens kötés és asszimmetrikus kötési elrendezés esetén.

δ^+  δ^-



F₂



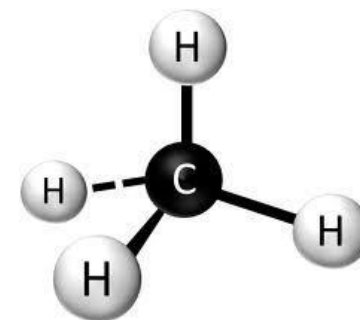
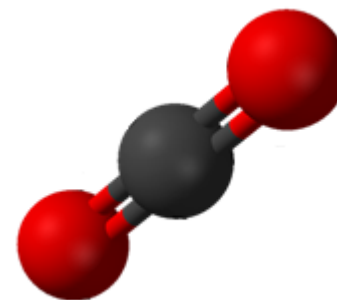
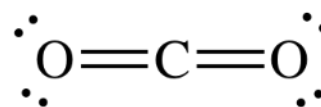
HF



LiF

Apoláros molekula: azonos elemek közötti nempoláros kovalens kötés, vagy poláros kovalens kötés, de szimmetrikus elrendezésben (nincs elektromos dipólusmomentum)

Pl. CO₂, CH₄



4. A kémiai kötések





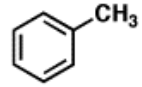

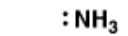
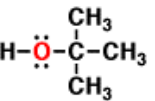
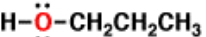
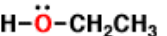
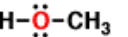
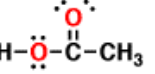
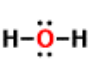

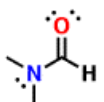
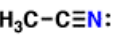

A kovalens kötések következményei (3):

Az anyagok eltérő **oldhatósága** -> poláros, apoláros oldószerek, hidrofób, hidrofí, amfifil tulajdonságok.

Ökölszabályok:

A szénláncokból, széngyűrűkből álló oldószerek általában apolárosak.

Az oxigént tartalmazó oldószerek általában polárosak.

Nonpolar solvents		Dielectric constant	Dipole Moment	
	Pentane	1.8	0.00 D	
	Hexane	1.9	0.00 D	
	Cyclohexane	2.0	0.00 D	
	Benzene	2.4	0.00 D	
	Toluene	2.3	0.36 D	
	Chloroform	4.8	1.04 D	
Polar Protic Solvents		Dielectric constant	Dipole Moment	
	Ammonia	~25	1.4 D	
	t-Butanol	12	1.7 D	
	n-Propanol	20	1.68 D	
	Ethanol	25	1.69 D	
	Methanol	33	1.70 D	
	Acetic acid	6.2	1.74 D	
	Water	80	1.85 D	
Polar aprotic solvents		Dielectric constant	Dipole Moment	
	Acetone	21	2.88 D	
	N,N-Dimethylformamide (DMF)	38	3.82 D	
	Acetonitrile (MeCN)	37	3.92 D	
	Dimethyl sulfoxide (DMSO)	47	3.96 D	

4. A kémiai kötések

A kovalens kötések következményei (3): oldhatóság

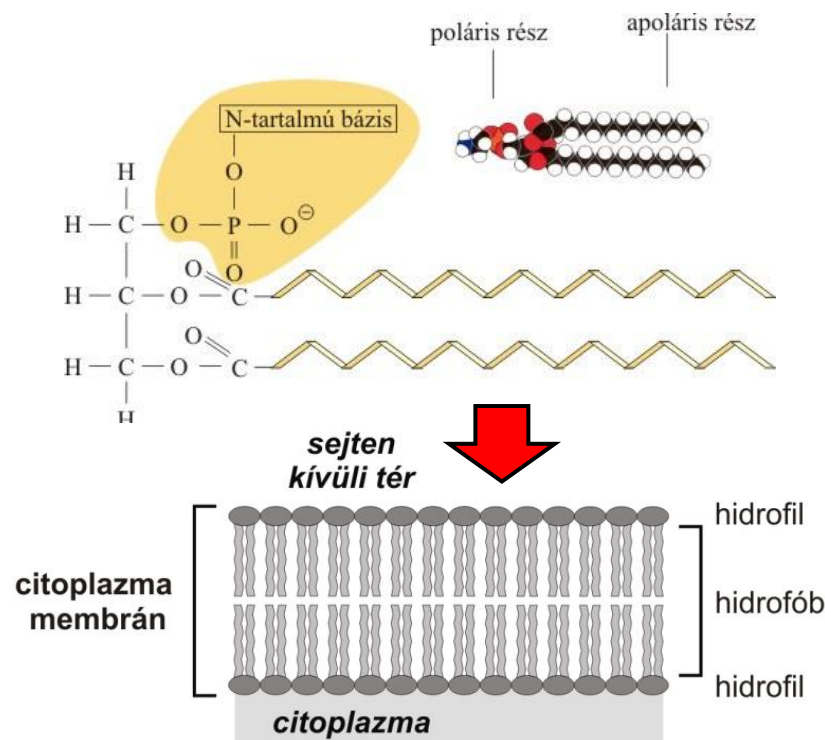
Érdekességek: a szerves anyagok és az oldhatóság - hogyan használják ki az élő szervezetek?

- Hidrofil: (felület vagy molekula) vizet szerető (poláros), vízben oldódó. A víz nedvesíti a hidrofil felületet.
- Hidrofób: vizet nem szerető (apoláros), vízben nem oldódó. A víz nem nevesíti a hidrofób felületet.
- Amfifil molekula: egy hidrofób (apoláros) és egy hidrofil (poláros) résszel rendelkezik.

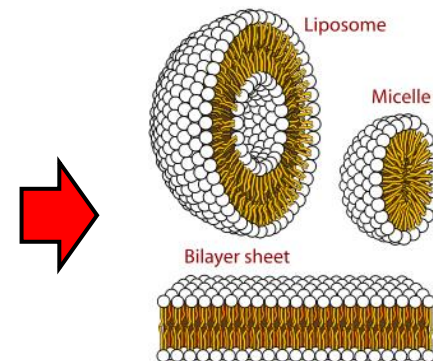


A zsírok (hosszú szénhidrogén láncok) nem oldódnak jól vízben (lásd pl. húslevest).

Példa amfifil molekulákra: foszfolipid membránok



Példa (2): szuperhidrofób felület



4. A kémiai kötések

A kovalens kötések következményei (4):

Másodlagos kötések: min. egy nagyságrenddel alacsonyabb kötési energia, dipólusok között. Jelentőségük a fizikai méretek csökkenésével fokozatosan nő!

Kötéserők összehasonlítása (wiki)

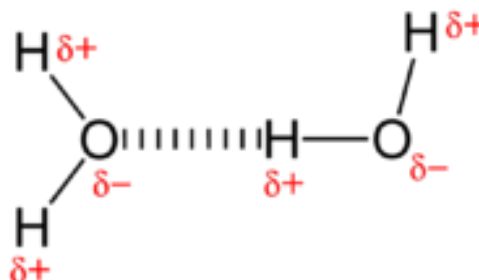
Bond type	Dissociation energy (kcal/mol) ^[8]
Ionic lattice	250–4000 ^[9]
Covalent bond	30–260
Hydrogen bond	1–12
Dipole–dipole	0.5–2
London dispersion forces	<1 to 15

Dipól-dipól



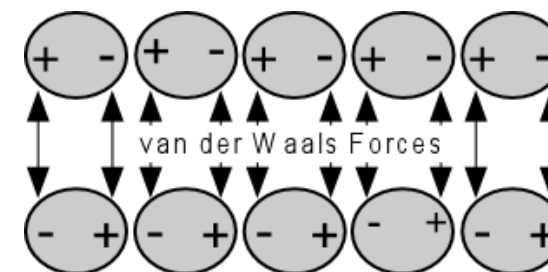
- Molekuláris dipólusok közötti elektrosztatikus kölcsönhatás.
- A vonzó-taszító erők hatására a molekulák rendeződnek.

H-hidak



- Egy speciális, erős dipól-dipól típus.
 - Térben irányított.
- Limitált számú kölcsönható fél van.
Következményei: fehérjék, nukleinsavak másodlagos, harmadlagos szerkezete stb...

Van der Waals erők



- Gyűjtőfogalom különböző (jellemzően gyenge) elektrosztatikus erőhatásokra (állandó vagy indukált dipólusok között).
Következményei: gázok adszorpciója felületekre, felületek makroszkopikusan is tapasztalható tapadása stb.

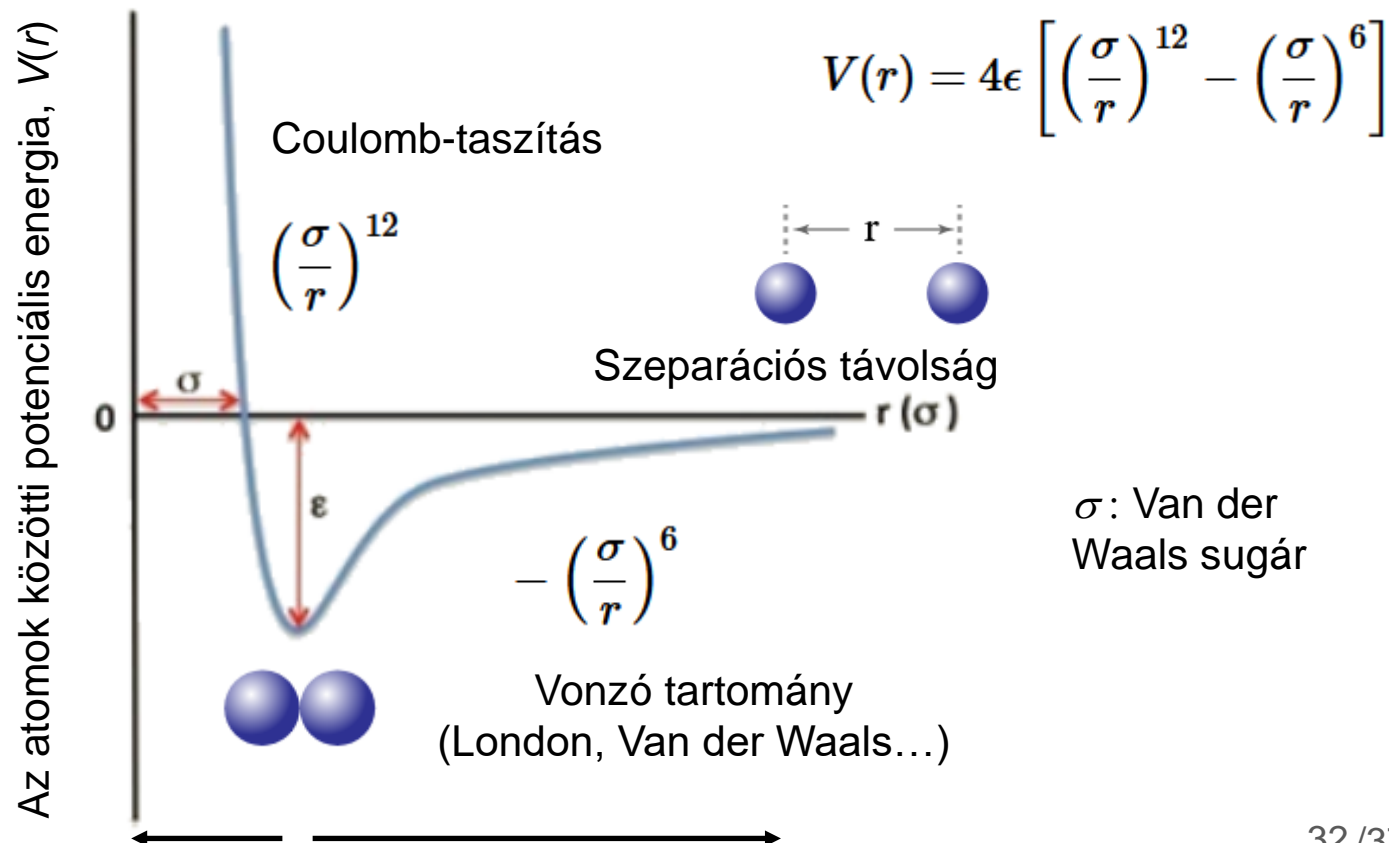
4. A kémiai kötések

A kovalens kötések következményei (4):

A diszperziós kötés (indukált dipól-dipól kölcsönhatás, London-féle erő):

- A leggyengébb másodlagos erő.
- Fluktuációk hatására teljesen szimmetrikus apoláros atomok (molekulák) is válhatnak pillanatnyilag dipólussá, és így képesek más dipólusok indukálására is.
- Ez felel a felületek közötti adszorpcióért (tapadásért), gázmolekulák felületi adszorpciójáért, stb.

A Lennard-Jones-potenciál

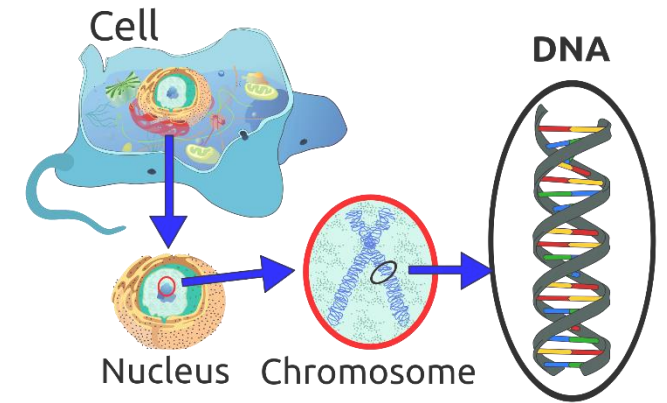


σ : Van der Waals sugár

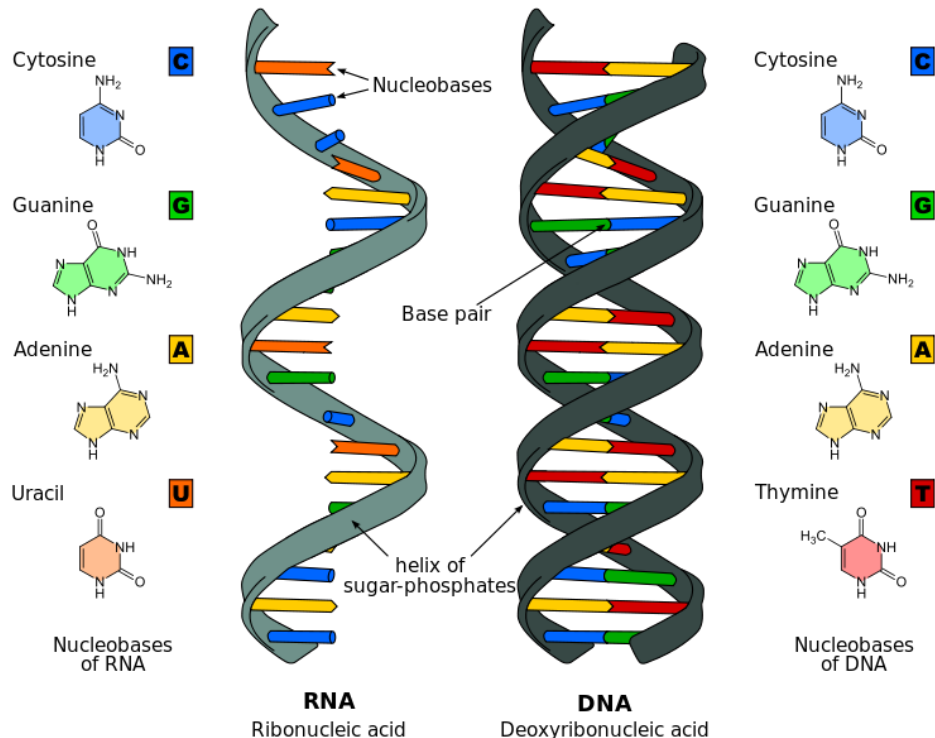
4. A kémiai kötések

A kovalens kötések következményei:

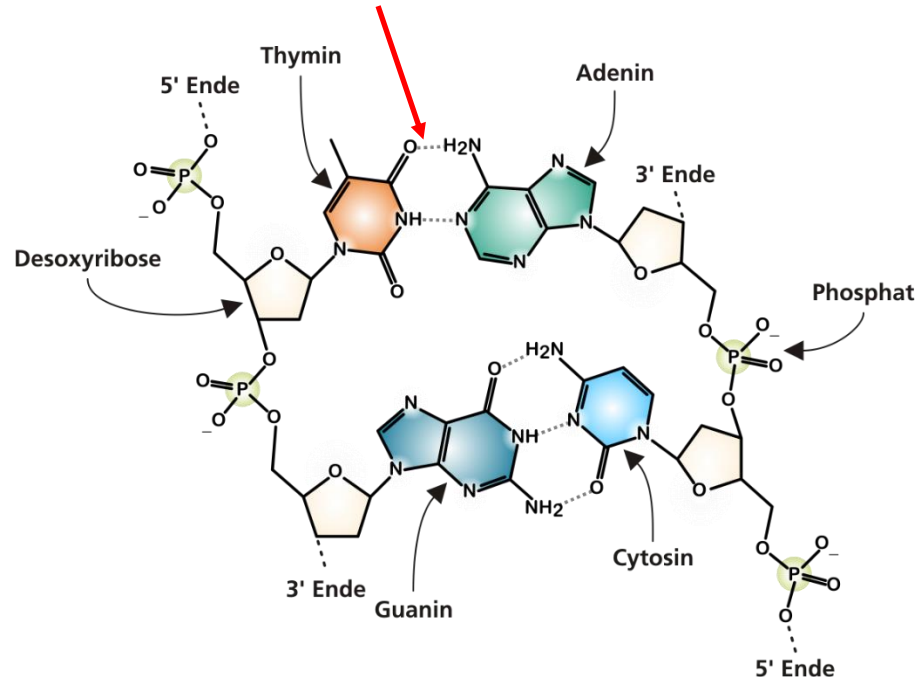
Érdekesség (1): Szerves molekulák magasabb rendű felépítése, kulcs-zár mechanizmusok



A DNS-molekulák felépítése:



A 3Ds struktúrát a kovalens kötések feszítik ki. A részek közötti (sokszor szelektív) összekapcsolódásért a **hidrogén kötések** felelnek.



4. A kémiai kötések

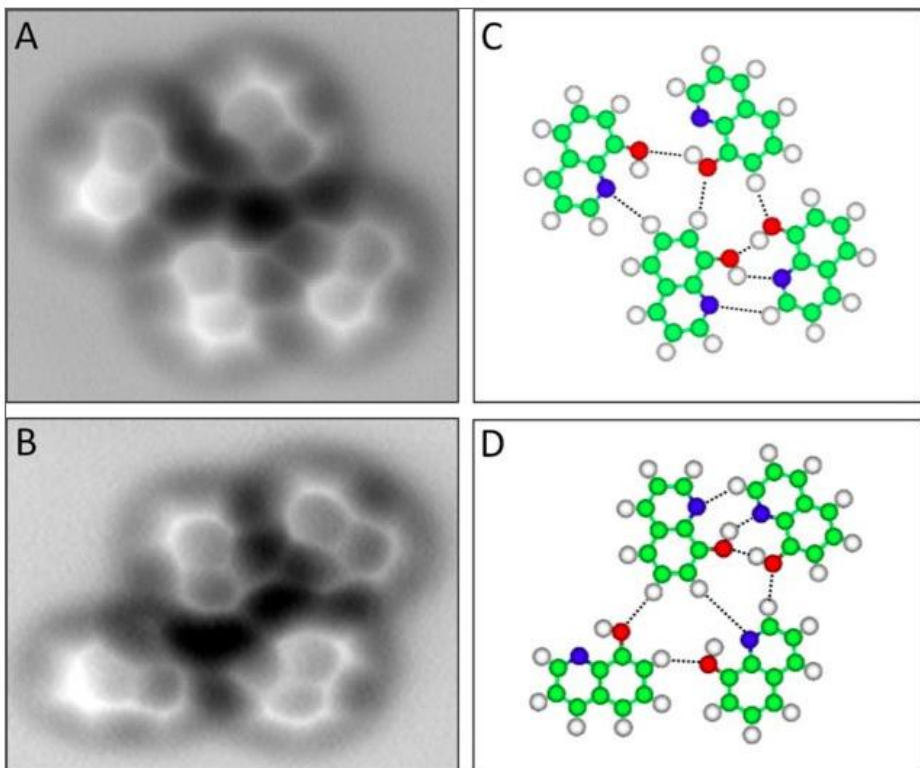
Érdekesség (2): A valóságban is úgy néznek ki a molekulák, ahogy lerajzoljuk őket a táblára?

Tudomány

Lefényképezték a hidrogénkötést

Index

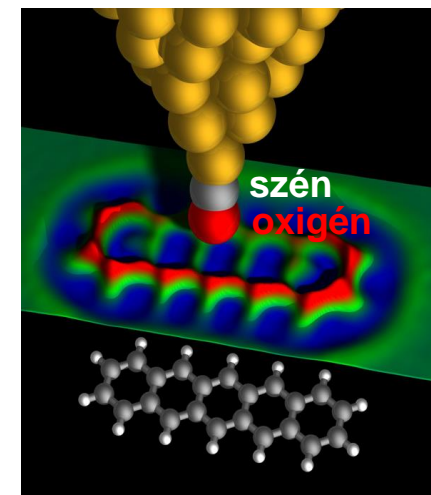
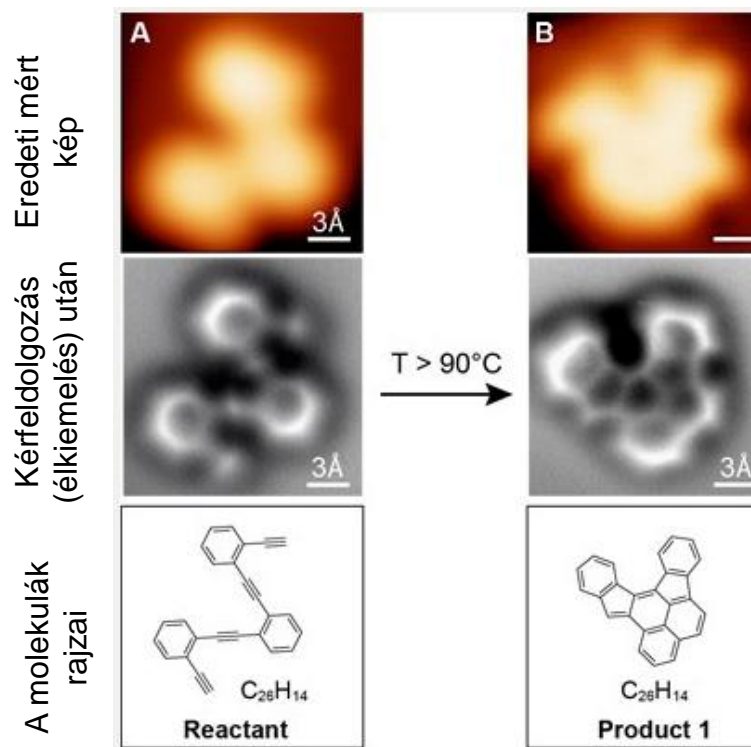
2013. október 1., kedd 08:54 | ☰ | 🖨



Egy korábbi cikk „Tényleg úgy néznek ki a molekulák, ahogy az iskolában tanultuk” címmel:

Mi kell ehhez?

- atomerő mikroszkóp,
- Ultranagy vákuum,
- Alacsony hőmérséklet (4K),
- Egyetlen atomban végződő tű...

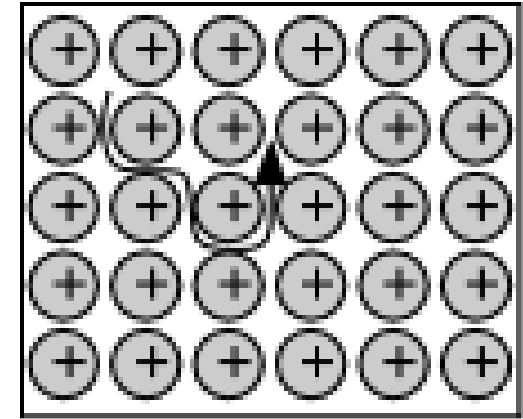
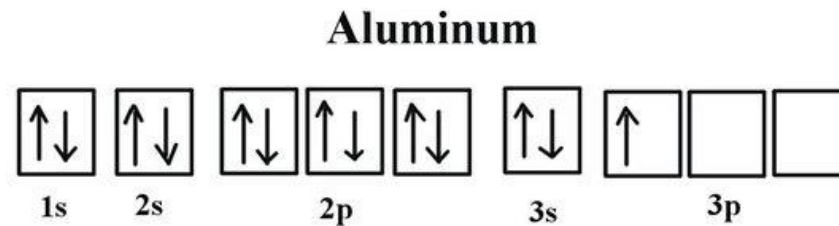
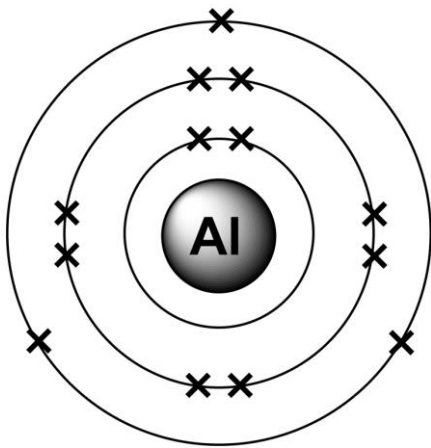


http://www.myscience.cc/wire/scientists_capture_first_images_of_molecules_before_and_after_reaction-2013-berkeley
http://www.zurich.ibm.com/st/atomic_manipulation/pentacene.html

4. A kémiai kötések

Fémes kötés

- Akkor jön létre, ha az atomoknak a külső elektronhéjon kevés elektronja van, így nem tudják egymás között kovalens kötéssel megoldani, hogy mindenki zárt elektronszerkezetre tegyen szert. Lásd pl. Al.
- Az atomok a vegyérték elektronjaikat bedobják a közösbe, az eredmény: rácsban rögzített **pozitív töltésű atomtörzsek** (= az atommag és a zárt elektronhéjak összessége), valamint **delokalizált, elmozdulásra képes elektronok** (elektronfelhő, vezetési elektronok).



4. A kémiai kötések

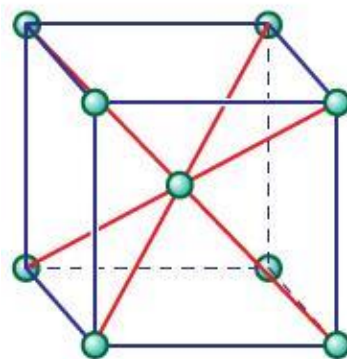
Fémes kötés – fémes kristályok tulajdonságai

- Jó elektromos és hővezető képesség,
- Alacsony, (max. közepes) keménység,
- Jellemzően jó megmunkálhatóság (alakíthatóság),
- Csak savakban oldhatóak,
- Nagyfokú szimmetriával rendelkező kristályokat alkotnak (TKK, FKK, hexagonális stb).

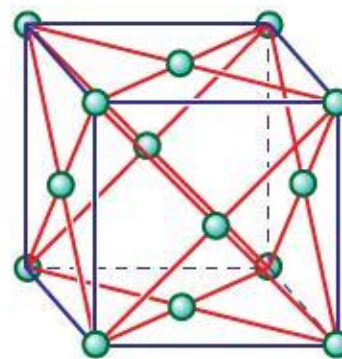
Lásd részletesen az alábbi előadásokban:

- 4. “Kristálytan”,
- 5. “Ötvözetek”,
- 6. “Fémek mechanikai tulajdonságai”,
- 7. “Fémek elektromos tulajdonságai”.

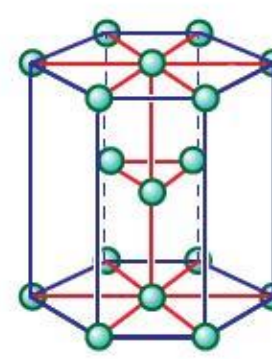
Common metallic crystal structures



body-centred cubic (bcc)



face-centred cubic (fcc)



hexagonal close-packed (hcp)

Ellenőrző kérdések

- **Alapfogalmak definiálása (pl.ionizáció, kation, anion, oxidáció, redukció, elektronegativitás, ionizációs potenciál, poláros-apoláros molekula, hidrofób-hidrofil stb.)**
- **A három elsőrendű kémiai kötés (kovalens, ionos, fémes) definíciója, és a belőlük felépülő kristályrácsok fontosabb makroszkopikus tulajdonságai, ezek magyarázata.**
- **A kovalens kötések fontosabb következményei (irányított kötések, molekulapályák, poláros-apoláros molekulák és oldhatóság, másodlagos kötések stb.).**

Példák igaz-hamis kérdésekre:

- Az ionos kötéssel rendelkező kristályok jellemzően jól vezetik az elektromos áramot (H).
- A kovalens kötésekkel felépülő anyagok jellemzően magas olvadáspontúak (I).
- Egy ionos kötésekkel álló kristályban bizonyos mértékben előfordulhatnak kovalens kötések is (I).
- Ha egy molekulában poláros kovalens kötések vannak, akkor a molekula is biztosan poláros lesz (H).
- Amelyik anyag jó elektromos vezető, az általában jó hővezető is (I).
- A dipól-dipól kölcsönhatások általában térben irányítottak, ezalól csak a hidrogénkötés a kivétel (H).