



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 **vegyjellel** 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.

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.

tömegszám

16

vegyjel

rendszám

8

Az atom jelölése és jellemző adatai

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 kibocsátása 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.



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



EMELT SZINT

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** $\boxed{\uparrow\downarrow} \boxed{\uparrow\downarrow} \boxed{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow} \boxed{\uparrow}$.

A nemesgázszerkezet jelölése: $s^2 p^6$ vagy $\boxed{\uparrow\downarrow} \boxed{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}$.

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.



TÖBBLETARTALOM

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, atomsugár, ionizációs energia, elektronegativitás, vegyérték.

A periódusos rendszer periódusokból (vízszintes sorokból) és csoportokból (függőleges oszlopokból) áll. Minden **periódusban** egy új elektronhéj kezd kiépülni, és a periódus egy nemesgázzal zárul. Az egymás alá, egy csoportba kerülő atomok vegyérték-héj-szerkezete hasonló, ezért a nekik megfelelő elemek kémiai tulajdonságai is



hasznosak. A periódusos rendszer 8 főcsoportból (I. A–VIII. A) és mellékcsoportokból épül fel. A **főcsoportok** a következők: alkálifémek, alkáliföldfémek, földfémek, szén-csoport, nitrogén-csoport, oxigén-csoport, halogének és nemesgázok. A **mellékcsoportokban** találjuk az átmenetifémeket és a ritkaföldfémeket.



EMELT SZINT

Aszerint, hogy a vegyértékhéj melyik alhéjának kiépülése történik meg, a periódusos rendszert mezőkre is tagolhatjuk. Az s-mezőben (I. A–II. A) az s-alhéj feltöltődése folyik, és mivel azon maximum 2 elektron lehet, ezért az s-mező két főcsoportból áll. Ugyanilyen okok miatt 6 főcsoportot tartalmaz a p-mező (III. A–VIII. A), 10 csoportot tartalmaz a d-mező (átmenetifémek), és 14 csoportot tartalmaz az f-mező (ritkaföldfémek).

1 1 A 2 18 VIII A

1 1s II A 13 III A 14 IV A 15 V A 16 VI A 17 VII A

2 2s 2p

3 3s 3p 3d 4s 4p 4d 5s 5p 5d 6s 6p 6d 7s 7p 7d 8s 8p 8d 9s 9p 9d 10s 10p 10d 11s 11p 11d 12s 12p 12d 13s 13p 13d 14s 14p 14d 15s 15p 15d 16s 16p 16d 17s 17p 17d 18s 18p 18d 19s 19p 19d 20s 20p 20d 21s 21p 21d 22s 22p 22d 23s 23p 23d 24s 24p 24d 25s 25p 25d 26s 26p 26d 27s 27p 27d 28s 28p 28d 29s 29p 29d 30s 30p 30d 31s 31p 31d 32s 32p 32d 33s 33p 33d 34s 34p 34d 35s 35p 35d 36s 36p 36d 37s 37p 37d 38s 38p 38d 39s 39p 39d 40s 40p 40d 41s 41p 41d 42s 42p 42d 43s 43p 43d 44s 44p 44d 45s 45p 45d 46s 46p 46d 47s 47p 47d 48s 48p 48d 49s 49p 49d 50s 50p 50d 51s 51p 51d 52s 52p 52d 53s 53p 53d 54s 54p 54d 55s 55p 55d 56s 56p 56d 57s 57p 57d 58s 58p 58d 59s 59p 59d 60s 60p 60d 61s 61p 61d 62s 62p 62d 63s 63p 63d 64s 64p 64d 65s 65p 65d 66s 66p 66d 67s 67p 67d 68s 68p 68d 69s 69p 69d 70s 70p 70d 71s 71p 71d 72s 72p 72d 73s 73p 73d 74s 74p 74d 75s 75p 75d 76s 76p 76d 77s 77p 77d 78s 78p 78d 79s 79p 79d 80s 80p 80d 81s 81p 81d 82s 82p 82d 83s 83p 83d 84s 84p 84d 85s 85p 85d 86s 86p 86d 87s 87p 87d 88s 88p 88d 89s 89p 89d 90s 90p 90d 91s 91p 91d 92s 92p 92d 93s 93p 93d 94s 94p 94d 95s 95p 95d 96s 96p 96d 97s 97p 97d 98s 98p 98d 99s 99p 99d 100s 100p 100d 101s 101p 101d 102s 102p 102d 103s 103p 103d 104s 104p 104d 105s 105p 105d 106s 106p 106d 107s 107p 107d 108s 108p 108d 109s 109p 109d 110s 110p 110d 111s 111p 111d 112s 112p 112d 113s 113p 113d 114s 114p 114d 115s 115p 115d 116s 116p 116d 117s 117p 117d 118s 118p 118d 119s 119p 119d 120s 120p 120d 121s 121p 121d 122s 122p 122d 123s 123p 123d 124s 124p 124d 125s 125p 125d 126s 126p 126d 127s 127p 127d 128s 128p 128d 129s 129p 129d 130s 130p 130d 131s 131p 131d 132s 132p 132d 133s 133p 133d 134s 134p 134d 135s 135p 135d 136s 136p 136d 137s 137p 137d 138s 138p 138d 139s 139p 139d 140s 140p 140d 141s 141p 141d 142s 142p 142d 143s 143p 143d 144s 144p 144d 145s 145p 145d 146s 146p 146d 147s 147p 147d 148s 148p 148d 149s 149p 149d 150s 150p 150d 151s 151p 151d 152s 152p 152d 153s 153p 153d 154s 154p 154d 155s 155p 155d 156s 156p 156d 157s 157p 157d 158s 158p 158d 159s 159p 159d 160s 160p 160d 161s 161p 161d 162s 162p 162d 163s 163p 163d 164s 164p 164d 165s 165p 165d 166s 166p 166d 167s 167p 167d 168s 168p 168d 169s 169p 169d 170s 170p 170d 171s 171p 171d 172s 172p 172d 173s 173p 173d 174s 174p 174d 175s 175p 175d 176s 176p 176d 177s 177p 177d 178s 178p 178d 179s 179p 179d 180s 180p 180d 181s 181p 181d 182s 182p 182d 183s 183p 183d 184s 184p 184d 185s 185p 185d 186s 186p 186d 187s 187p 187d 188s 188p 188d 189s 189p 189d 190s 190p 190d 191s 191p 191d 192s 192p 192d 193s 193p 193d 194s 194p 194d 195s 195p 195d 196s 196p 196d 197s 197p 197d 198s 198p 198d 199s 199p 199d 200s 200p 200d 201s 201p 201d 202s 202p 202d 203s 203p 203d 204s 204p 204d 205s 205p 205d 206s 206p 206d 207s 207p 207d 208s 208p 208d 209s 209p 209d 210s 210p 210d 211s 211p 211d 212s 212p 212d 213s 213p 213d 214s 214p 214d 215s 215p 215d 216s 216p 216d 217s 217p 217d 218s 218p 218d 219s 219p 219d 220s 220p 220d 221s 221p 221d 222s 222p 222d 223s 223p 223d 224s 224p 224d 225s 225p 225d 226s 226p 226d 227s 227p 227d 228s 228p 228d 229s 229p 229d 230s 230p 230d 231s 231p 231d 232s 232p 232d 233s 233p 233d 234s 234p 234d 235s 235p 235d 236s 236p 236d 237s 237p 237d 238s 238p 238d 239s 239p 239d 240s 240p 240d 241s 241p 241d 242s 242p 242d 243s 243p 243d 244s 244p 244d 245s 245p 245d 246s 246p 246d 247s 247p 247d 248s 248p 248d 249s 249p 249d 250s 250p 250d 251s 251p 251d 252s 252p 252d 253s 253p 253d 254s 254p 254d 255s 255p 255d 256s 256p 256d 257s 257p 257d 258s 258p 258d 259s 259p 259d 260s 260p 260d 261s 261p 261d 262s 262p 262d 263s 263p 263d 264s 264p 264d 265s 265p 265d 266s 266p 266d 267s 267p 267d 268s 268p 268d 269s 269p 269d 270s 270p 270d 271s 271p 271d 272s 272p 272d 273s 273p 273d 274s 274p 274d 275s 275p 275d 276s 276p 276d 277s 277p 277d 278s 278p 278d 279s 279p 279d 280s 280p 280d 281s 281p 281d 282s 282p 282

Az atom elektronszerkezete és a periódusos rendszerben elfoglalt helye között szoros kapcsolat van. Például a nitrogénatom az ötödik főcsoportban található, tehát 5 vegyértékelektronja van. A kénatomnak 6 vegyértékelektronja van, és a kénatom a hatodik főcsoportban található.



EMELT SZINT

A nitrogénatom vegyértékelektron-szerkezete: $2s^2 2p^3$. Ez alapján megállapíthatjuk, hogy a nitrogénatom a p-mezőben, az ötödik főcsoportban és a második periódusban található. A kénatom a p-mezőben, a harmadik periódusban és a hatodik főcsoportban foglal helyet, vegyértékelektron-szerkezete tehát: $3s^2 3p^4$. A 26-os rendszámú vas a d-mezőben a negyedik periódus hatodik csoportjának eleme. Vegyértékelektron-szerkezete: $3d^6 4s^2$.

Az atomok mérete

Az atomok egyik fontos, a periódusos rendszerben periodikusan (nem monoton) változó tulajdonsága az **atomméret**, melyet a gömb alakúnak tekintett szabad atom sugarával (atomsugárral) jellemzünk. Amíg az atom tömegét elsősorban az 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 elektronhéj található az elektronburokban. Például a brómatom mérete nagyobb, mint a klóratómé, de kisebb, mint a jódatómé.



EMELT SZINT

Egy **perióduson belül** azonban az atomok mérete **csökken** a rendszámmal. Mert igaz, hogy egyre több elektron épül be a vegyértékhéjra, de az elektronhéjak száma változatlan, és a protonok elektronokra gyakorolt vonzó kölcsönhatása nagyobb mértékben nő, mint az elektronok egymásra gyakorolt taszító kölcsönhatása, ami a méret csökkenését eredményezi. Például az oxigénatom mérete nagyobb, mint a fluoratómó vagy a neonatómó, de kisebb, mint a nitrogén-, a szén- vagy a lítiumatómó.

Az ionok

Az **ionok** elektromos töltéssel rendelkező kémiai részecskék. A pozitív töltésű iont **kationnak**, a negatív töltésű iont **anionnak** nevezzük. Atomokból elektronleadással kationok, elektronfelvétellel 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 elektronleadással vagy elektronfelvétellel, 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 gáz-állapotú és alapállapotú atomból a legkönnyebben leszakítható elektront eltávolítsuk ($\text{A}(\text{g}) \rightarrow \text{A}^+(\text{g}) + \text{e}^-(\text{g})$). Mértékegysége $\frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$, előjele mindig pozitív. Az

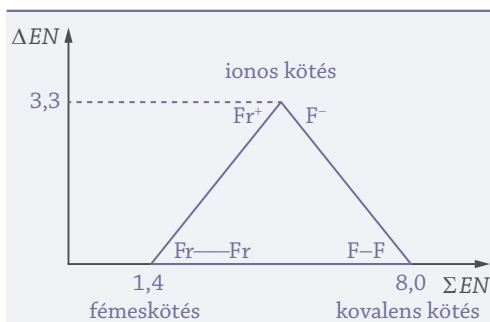
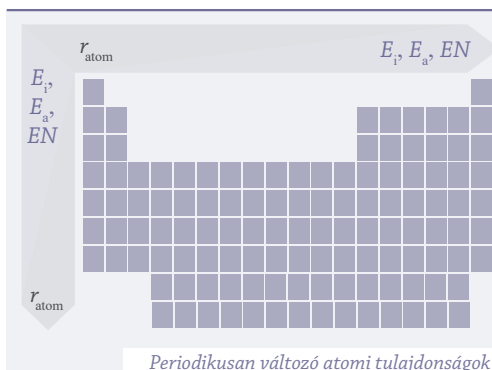


ionizációs energia is periodikusan változik a periódusos rendszerben a rendszámmal. A periódusokban a rendszám növekedésével nő, a főcsoportokban a rendszám növekedésével csökken. A negatív ion képződésének energiáját az elektronegativitással jellemezzük. Az **elektronegativitás** (E_a) az az energia, 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 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.)

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



⊙ KÉMIAI KÖTÉSEK

Kémiai kötés két kémiai részecske (atom, molekula, ion) között kialakuló kapcsolat. A kémiai kötés erősségét a kötési energiával jellemezzük. **Kötési energia** az az energia, amely ahhoz szükséges, hogy 1 mol anyagban két kémiai részecske közötti kötést felszakítsunk. Jele: E_k , mértékegysége $\frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$, előjele mindig pozitív.



TÖBBLETTARTALOM

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.

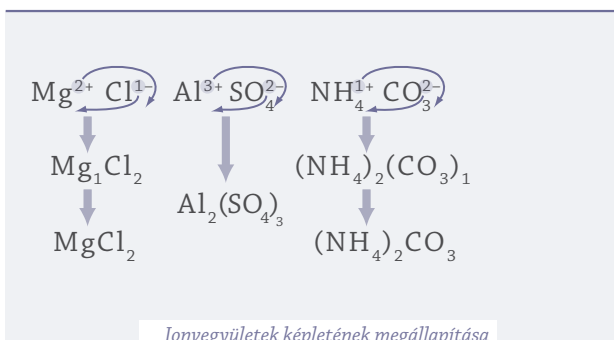


TÖBBLETTARTALOM

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 figyelembe vételével szerkeszthetjük meg. Az ionvegyületben a kationok együttes töltése meg kell, hogy egyezzen az anionok együttes töltésével. 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 (atomok) között kialakuló gyenge elektromos vonzást **diszperziós kölcsönhatásnak** nevezzük. Oka: az atommagok rezgőmozgása, illetve az elektronfelhő deformálódása miatt kialakult időleges aszimmetrikus töltéseloszlás. Ilyen kölcsönhatás a 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. aceton) 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: $E(\text{diszperziós kölcsönhatás}) < E(\text{dipólus-dipólus kölcsönhatás}) < E(\text{hidrogénkötés})$.

⊙ 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 párokkal 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		
$\text{H} \cdot \quad \cdot \text{H}$	$\text{H} \cdot \cdot \text{H}$	$\text{H} - \text{H}$
$\cdot \ddot{\text{Cl}} \cdot \quad \cdot \ddot{\text{Cl}} \cdot$	$\cdot \ddot{\text{Cl}} \cdot \cdot \ddot{\text{Cl}} \cdot$	$ \ddot{\text{Cl}} - \ddot{\text{Cl}} $
$\cdot \ddot{\text{N}} \cdot \quad \cdot \ddot{\text{N}} \cdot$	$\cdot \text{N} \cdot \cdot \text{N} \cdot$	$ \text{N} \equiv \text{N} $
$\text{H} \cdot \quad \cdot \ddot{\text{Cl}} \cdot$	$\text{H} \cdot \cdot \ddot{\text{Cl}} \cdot$	$\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 -ben, a H_2O -ban, az NH_3 - és a CH_4 -molekulákban, többszörös kovalens kötés van például az O_2 -ben, a N_2 -ben, a CO_2 - és az C_2H_2 -molekulákban.



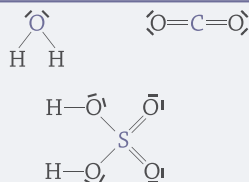
EMELT SZINT

Ha két atomtörzs vonzásában egymél 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. $O=O$, $N\equiv N$, $C\equiv O$, $O=C=O$, $HC\equiv CH$), 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. $E(C-C) < E(C=C) < E(C\equiv C)$. 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.

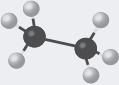
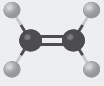


EMELT SZINT

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

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	Kötés-távolság (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

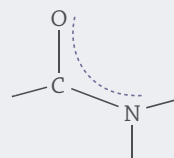
Ha a két atomtörzs a kötő elektronpárokat azonos mértékben vonzza, akkor a kovalens kötést **apolárisnak** nevezzük. Amennyiben a kapcsolódó atomok elektronvonzása különböző mértékű, a kötő elektronpárok vagy az egyik, vagy a másik atomtörzs felé tolódnak el. Így jön létre a **poláris kovalens kötés**. 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 kötéseket 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.

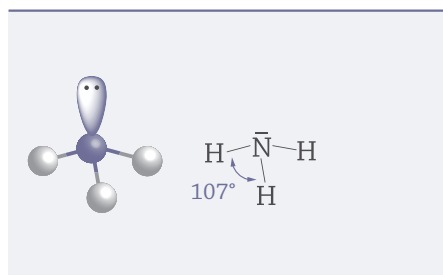




A molekulák térszerkezete

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. E szerint a központi atom körül a σ -kötő és a nemkötő elektronpárok úgy helyezkednek el, hogy azok minél távolabb kerüljenek egymástól. A **központi atom** a molekulában az az atom, amelyhez a legtöbb kötő elektronpár tartozik (a legnagyobb kovalens vegyértékű atom). A központi atomhoz kapcsolódó atomokat, 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.



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
Példa	BeCl_2	SO_3	SO_2	CH_4	NH_3	H_2O	PCl_5	SF_6
Kötésszög	180°	120°	$< 120^\circ$	$109,5^\circ$	$< 109,5^\circ$		$90^\circ, 120^\circ$	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 pedig V-alakú lesz (pl. SO_2). 2 ligandum és 2 nemkötő elektropár 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

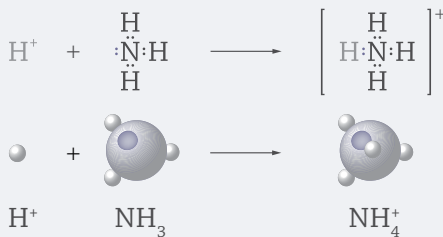
Valójában a kötéspolaritás mellett a központi atomon lévő nemkötő elektronpárokat is figyelembe kell venni a molekulapolaritás megállapításánál. Például a PCl_3 molekulában ugyan apolárisak a P–Cl kötések ($EN(P) = EN(Cl) = 3,0$), de a P-atomon található nemkötő elektronpár miatt mégsem egyenletes a töltéeloszlás. (Némi leegyszerűsítéssel azt is mondhatjuk, hogy szinte biztos, hogy dipólus a molekula, ha a központi atomján nemkötő elektronpár található.)

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^+).

Számos összetett ion képződhet oxosavakból protonleadással.



Az ammóniumion képződése ammóniamolekulából

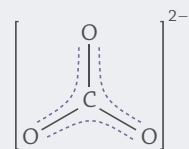


Az oxosav		Az összetett ion	
képlete	neve	képlete	neve
H_2CO_3	szénsav	HCO_3^-	hidrogén-karbonát
		CO_3^{2-}	karbonát
HNO_3	salétromsav	NO_3^-	nitrát
H_2SO_4	kénsav	SO_4^{2-}	szulfát
		HSO_4^-	hidrogén-szulfát
H_3PO_4	foszforsav	PO_4^{3-}	foszfát
		HPO_4^{2-}	hidrogén-foszfát
		H_2PO_4^-	dihidrogén-foszfát
H_2SO_3	kénessav	SO_3^{2-}	szulfit
		HSO_3^-	hidrogén-szulfit
HNO_2	salétromossav	NO_2^-	nitrit
HOCl	hipoklórossav	OCl^-	hipoklorit
HCOOH	hangyasav	HCOO^-	formiát
CH_3COOH	ecetsav	CH_3COO^-	acetát



EMELT SZINT

Azokban az összetett ionokban, amelyekben a központi atomhoz csak O-atomok kapcsolódnak (pl. CO_3^{2-} , PO_4^{3-} , SO_4^{2-}), az oxocsoporthoz tartozó pi-elektronpár delokalizálódik, így valamennyi O-atom egyenértékű. Ennek következtében például 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 elektrónpárjukkal 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 ($[\text{Al}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$), a [tetraammin-réz(II)]-ion ($[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$), a [diammin-ezüst(I)]-ion ($[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$) vagy a [tetrakloro-kobalt(II)]-ion ($[\text{CoCl}_4]^{2-}$).



⦿ ANYAGI HALMAZOK

Anyagi halmaz

A nagyszámú kémiai részecskéből felépülő anyagi rendszereket **anyagi halmazoknak** nevezzük. Az anyagi halmaz kémiai 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°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 sűrűlódás) 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 viszkozitású 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.



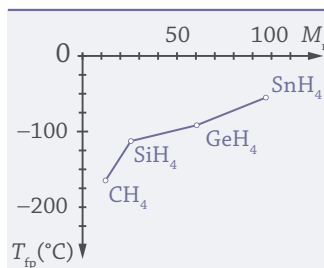
TÖBBLETTARTALOM

Olvasás 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). Olvadáspontja (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.

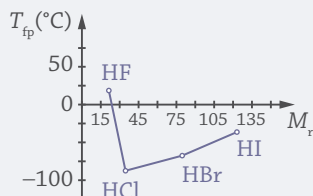
Például a IV. főcsoport elemei hidrogénnel képzett vegyületei apoláris molekulákból épülnek fel, ezért a molekulák között diszperziós kölcsönhatás van, melynek erőssége a molekulatömeggel nő.



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.



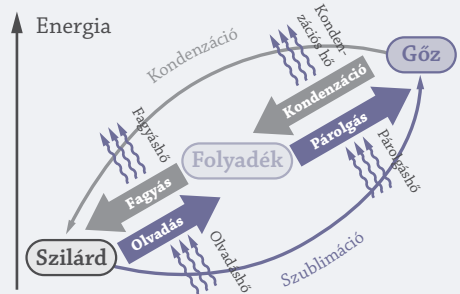
A HF kiugróan magas forráspontjának oka a molekulái közötti hidrogénkötés



TÖBBLÉTTARTALOM

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.



EMELT 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 (CaCO_3), a szódabikarbóna (NaHCO_3) 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 , KNO_3 , $\text{Al}(\text{NO}_3)_3$, Na_2SO_4 , MgCl_2).

Az **atomrácsot** atomok (pontosabban atomtörzsek) építik fel, közöttük kovalens kötés létesíti a kapcsolatot. Atomrácsos például a gyémánt (C), a szilícium (Si) és a kvarc (SiO_2). Az atomrácsos anyagok rácsenergiája nagy, ezért magas olvadás- és forráspontúak, az elektromos áramot sem szilárd, sem folyadék halmazállapotban nem vezetik, többnyire oldószerük sincs. 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-atomok találhatók úgy, hogy minden Si-atomot négy O-atom vesz körül tetraéderesen. Az atomokat 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 ötvözei (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 hatszögalapú 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 mutatják. 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.