

Dr. Csicsák Dóra

rezidens

SE Gyógyszerésztudományi Kar

# MOLEKULÁK, ÖSSZETETT IONOK

---

# MOLEKULÁK KIALAKULÁSA

- **Molekula:** kettő vagy több atomból álló semleges részecske, melyben az atomok kovalens kötéssel kapcsolódnak.
- A kovalens kötés kialakulásakor a vegyértékelektronok az atompályákról a molekulapályákra kerülnek.
- **Nem kötő elektronpárok:** a kötésben részt nem vevő elektronpárok

pl. klórmolekula: egy kötő elektronpár, 3-3 nem kötő elektronpár



# MOLEKULÁK KIALAKULÁSA

- **A molekulák összetételét képlettel adjuk meg.**
  - Molekulaképlet (összegképlet): a molekulát alkotó atomok vegyjelét egymás mellé írjuk, a vegyjel utáni alsó indexbe írt szám pedig azt jelöli, hány atom van belőle a molekulában
  - Szerkezeti képlet: az atomok egymáshoz való kapcsolódását is megmutatja

## Pl. szén-dioxid

Összegképlet:  $\text{CO}_2$

Szerkezeti képlet: 

# KOVALENS KÖTÉS

- A molekulákat összekapcsoló kovalens kötést képezheti 1, 2 vagy 3 elektronpár, ennek megfelelően beszélhetünk egyszeres vagy többszörös (kétszeres, háromszoros) kovalens kötésről.

Pl.:



# TÖBBSZÖRÖS KOVALENS KÖTÉS

- Többszörös kovalens kötés esetén az első kötés mindig úgynevezett  $\sigma$ -kötés (az elektronsűrűség e körül a kötés körül a legnagyobb), a második és harmadik kovalens kötések pedig  $\pi$ -kötések, melyek merőlegesek a  $\sigma$ -kötés tengelyére

- Kialakulásának feltétele:

- Kis atomsugár

- Nagy elektronegativitás

Pl.: nitrogén- és foszformolekula: azonos főcsoport, de különböző szerkezet



- Speciális esetek:

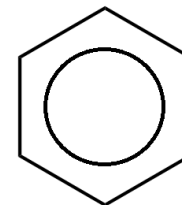
- Datív (koordinatív) kötés: az egyik atom adja mindkét kötő elektront

Pl.: CO



- Delokalizált kötés: a kötetést létesítő elektronpár kettőnél több atomtörzs vonzása alatt áll

Pl. benzol – 6 szénatom, 6 elektron    3 delokalizált  $\pi$ -kötés



# KOVALENS KÖTÉS JELLEMZŐI

- **Kötési energia**: a kötés erősségét jellemzi. Egy mol molekulában két adott atom közötti kötés felszakításához szükséges energia

Mértékegysége: kJ/mol

- **Kötéstávolság**: a kötést létesítő atomok atommagjai közötti távolság

- Értéke függ a kapcsolódó atomok méretétől
- Azonos atomok közötti egyszeres, ill. többszörös kötés: kötések számának növekedésével a kötéstávolság csökken, a kötés energiája nő (pl.: etán – etén – etin)

- **Kötésszög**: a kapcsolódó atomok kötése által bezárt szög. Befolyásolja a molekula téralkatát


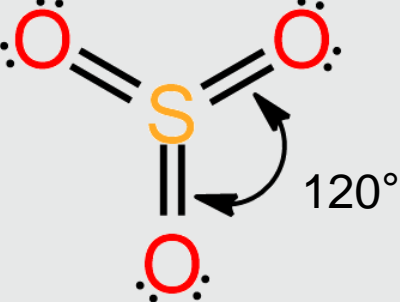
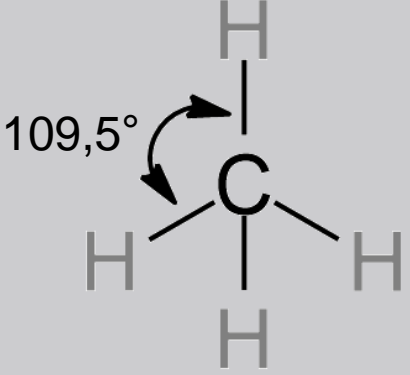
- **Kötéspolaritás**: a kötésben részt vevő atomoktól függ

- Azonos atomok: egyenlő erővel vonzzák a kötő elektronpárt, a kötés **apoláris**
- Különböző atomok: különböző elektronegativitás miatt az egyik atom jobban vonzza a kötő elektronpárt, így a kötés **poláris**

# MOLEKULÁK TÉRSZERKEZETE

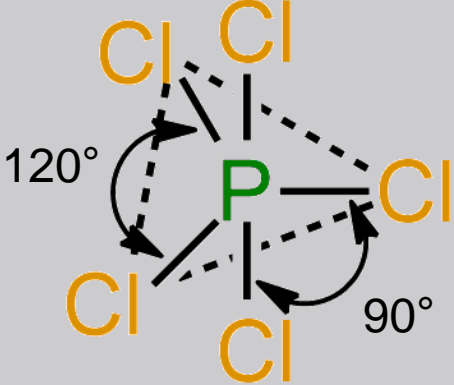
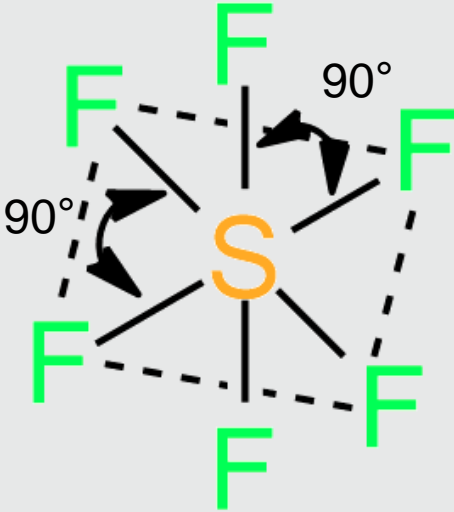
- **Központi atom:** az az atom a molekulában, melyhez több másik kapcsolódik
- **Ligandum:** a központi atomhoz kapcsolódó atomok vagy atomcsoportok
- **Térszerkezetet meghatározó fő tényezők:**
  - Központi atomhoz tartozó kötő elektronpárok száma
  - Központi atomhoz tartozó nemkötő elektronpárok száma
  - Ligandumok száma
  - Központi atomhoz tartozó kötéstípusok (egyszeres, ill. többszörös)

# MOLEKULÁK TÉRSZERKEZETE

A molekula általános képlete	Kötő elektron-párok száma	Térszerkezet	Alak	Kötésszög
$AX_2$	2		lineáris	$180^\circ$
$AX_3$	3		síkháromszög	$120^\circ$
$AX_4$	4		tetraéder	$109,5^\circ$



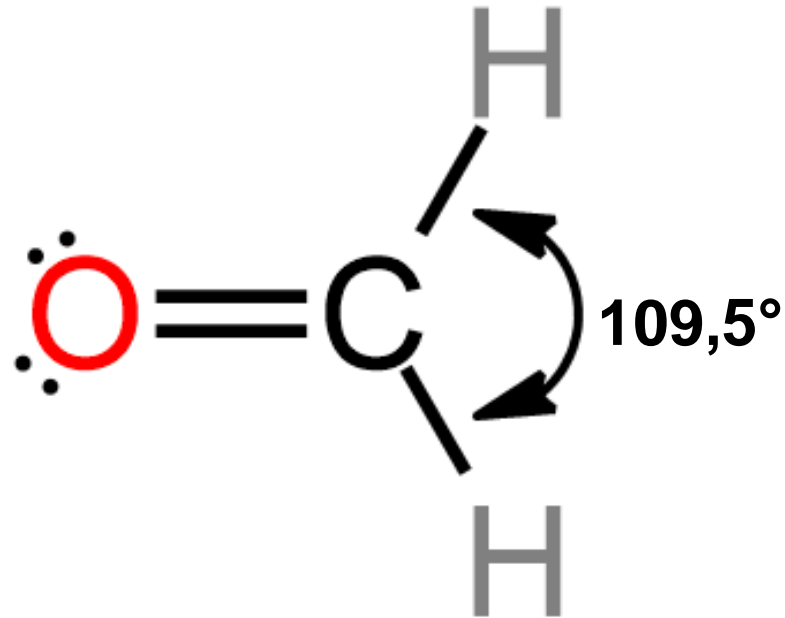
# MOLEKULÁK TÉRSZERKEZETE

A molekula általános képlete	Kötő elektron-párok száma	Térszerkezet	Alak	Kötésszög
$AX_5$	5		trigonális bipiramis	90° és 120°
$AX_6$	6		oktaéder	90°

# MOLEKULÁK TÉRSZERKEZETE

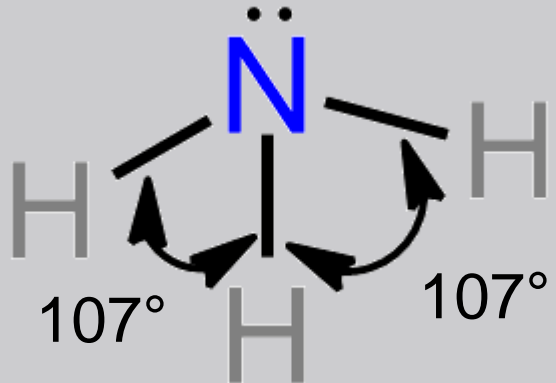
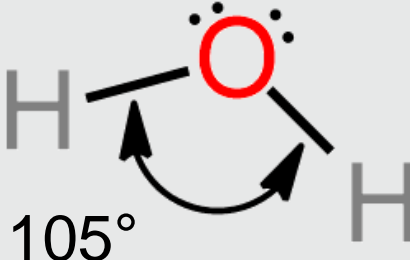
- A központi atomhoz egyszeres és többszörös kötés is kapcsolódik:

Pl.: formaldehid



# MOLEKULÁK TÉRSZERKEZETE

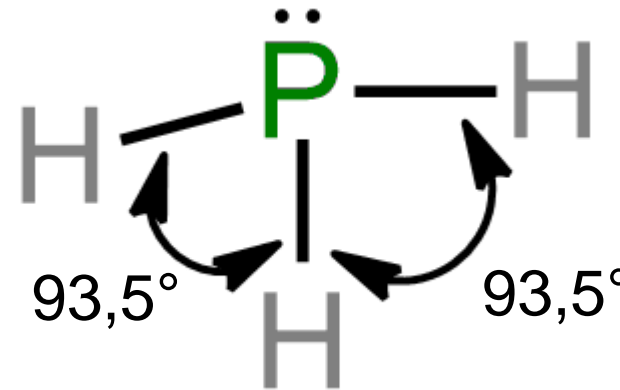
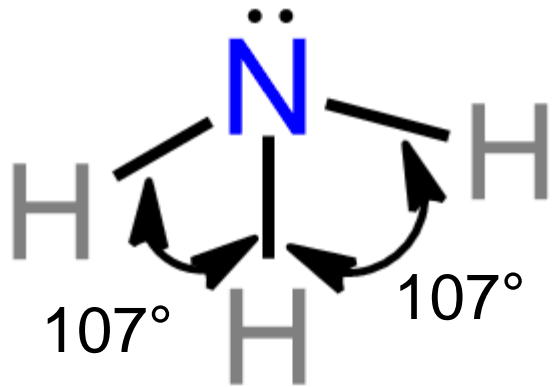
- A központi atomnak van egy vagy több nem kötő elektronpárja

A molekula általános képlete	Kötő elektron-párok száma	Nemkötő elektron-párok száma	Térszerkezet	Alak
$AX_3E$	3	1		háromszög alapú piramis
$AX_3E_2$	2	2		V alak

# MOLEKULÁK TÉRSZERKEZETE

- Központi atom méretének a hatása:

Pl. ammónia ( $\text{NH}_3$ )  $\longleftrightarrow$  foszfor-hidrogén ( $\text{PH}_3$ )



# MOLEKULÁK POLARITÁSA

- **Elemmolekula: azonos atomok kapcsolódásával jön létre, mindig apoláris**
- **Különböző atomokból létrejövő molekulák: a polaritást a molekula alakja és a kötéspolaritás együttesen határozza meg**
  - Két különböző atomból álló molekulák: mindig polárisak pl. HCl
  - Többatomos molekulák:
    - Apoláris:  
*pl.: CO<sub>2</sub> vagy BeCl<sub>2</sub> – annak ellenére, hogy kötéseik polárisak, maga a molekula apoláris, mivel a lineáris szerkezetnek köszönhetően a töltéspolaritások kioltják egymást*  
*pl.: CH<sub>4</sub> – szabályos tetraéder, a kötéspolaritások kioltják egymást*
    - Poláris:  
*pl.: H<sub>2</sub>O – a vízmolekulában a nem kötő elektronpárok helyigénye nagyobb, mert csak egy atommag vonzása alatt állnak. A töltéspolaritások nem oltják ki egymást, a molekula dipólus lesz*  
*pl.: CH<sub>3</sub>Cl – a klórmétánban a kötéspolaritások nem oltják ki egymást*

# ÖSSZETETT IONOK

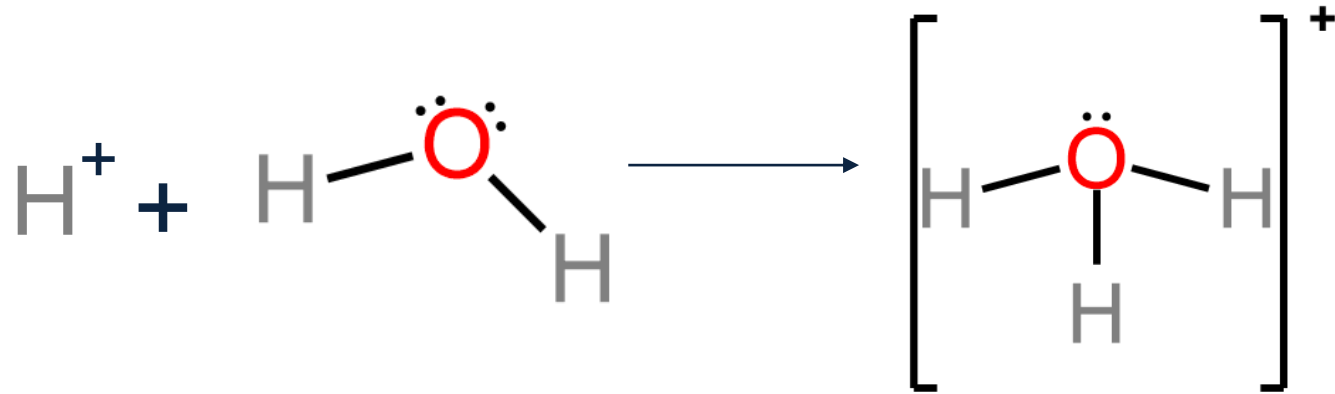
**Az összetett ionok olyan több atomból álló, pozitív vagy negatív töltésű részecskék, melyekben az atomok kovalens kötéssel kapcsolódnak**

**Kialakulásuk: protonasszociációval (összetett kationok) vagy -disszociációval (összetett anionok)**

# ÖSSZETETT KATIONOK

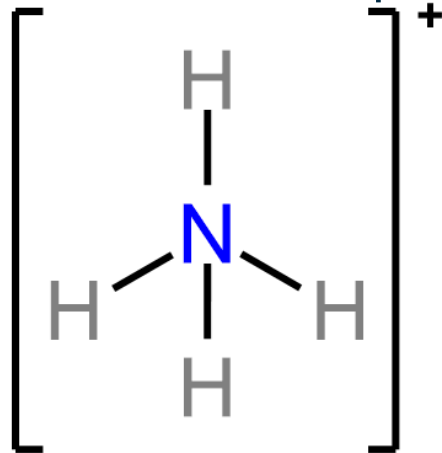
- **Oxóniumion**

Savak vizes oldatában alakul ki, a vízmolekula felvesz egy protont



- **Ammóniumion**

Az ammónia nitrogénjének nemkötő elektronpárja miatt képes protonfelvételre



# ÖSSZETETT ANIONOK

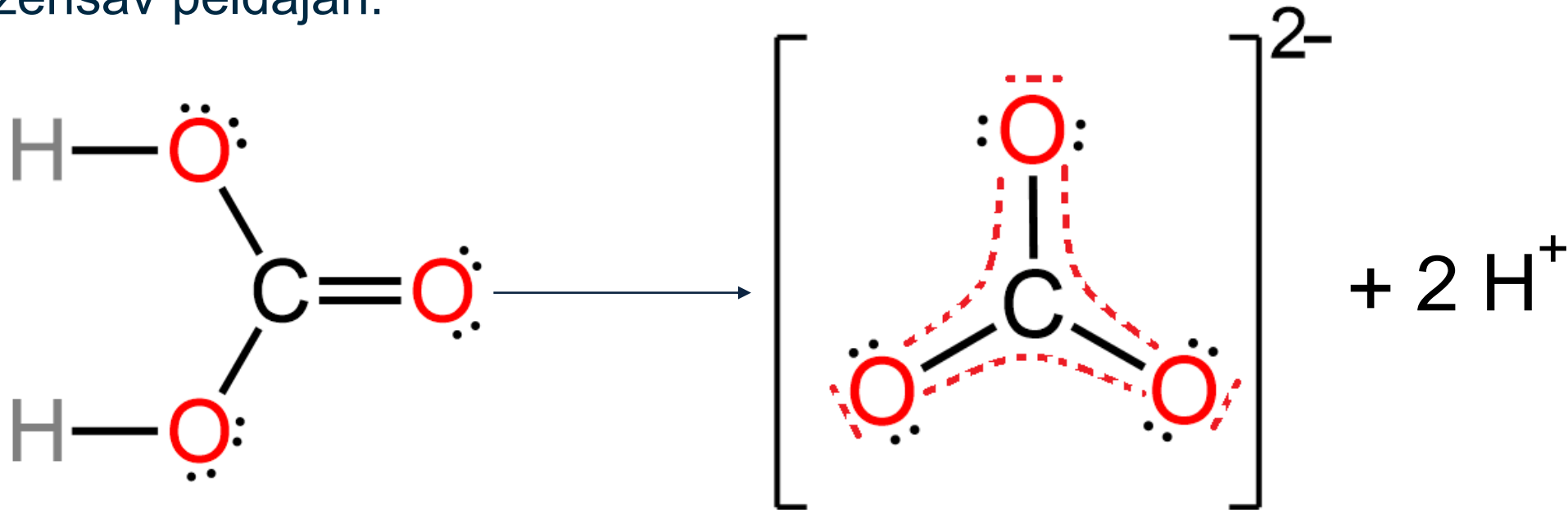
- **Hidroxidion**

A vízmolekulából protonleadással képződik



- **Oxosavak anionjai**

Szénsav példáján:





# ÖSSZETETT ANIONOK

A sav			A disszociációval képződött összetett ionok		
Neve	Képlete	Térszerkezete	Neve	Képlete	Térszerkezete
salétromsav	$\text{HNO}_3$	torzult síkháromszög	nitrátion	$\text{NO}_3^-$	síkháromszög
kénsav	$\text{H}_2\text{SO}_4$	torzult tetraéderes	szulfátion	$\text{SO}_4^{2-}$	tetraéderes
foszforsav	$\text{H}_3\text{PO}_4$	torzult tetraéderes	foszfátion	$\text{PO}_4^{3-}$	tetraéderes
szénsav	$\text{H}_2\text{CO}_3$	torzult síkháromszög	karbonátion	$\text{CO}_3^{2-}$	síkháromszög

Megjegyzés: többértékű savak esetén a táblázat a legdeprotonáltabb összetett aniont tartalmazza. A kétértékű savaknál egy proton leadásával képződő anion elnevezésekor *hidrogén-* előtagot, míg háromértékű sav esetén az egy proton leadásával képződő anion *dihidrogén-*, a két proton leadásával képződő anion *hidrogén-* előtagot kap.

# KOMPLEX IONOK

- A központi atom vagy ion vegyértékhéjának betöltetlen pályái vannak, így hajlamos a komplexképzésre

Jellemzően: d-mező fémei, pl.: réz, alumínium

- A ligandumok nem kötő elektronpárokkal rendelkeznek, ezek következtében tudnak datív kötéssel kapcsolódni a központi atomhoz.

Jellemzően: ammónia, vízmolekulák, hidroxidionok

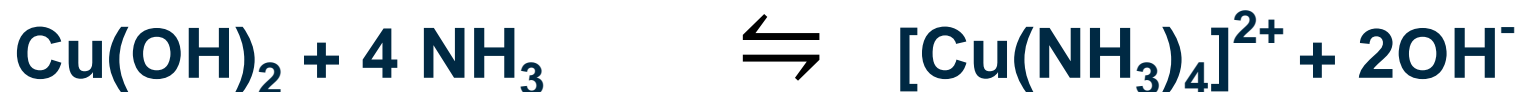
- Kialakulásuk gyakran jár színváltozással, az oldhatóság növekedésével, illetve az elektromos vezetés mértékének megváltozásával
- Jelölésük: szögletes zárójellel

# KOMPLEX IONOK

- d-mező fémei: általában vízmolekulákkal képzett akvakomplex formájában vannak az oldatokban



- réz(II)-hidroxid csapadék: ammóniaoldatban feloldódik



- Komplex ionok töltése: a központi ion és a ligandumok töltésének összeadásából jön létre. Mivel a víz-, illetve ammóniamolekulák semlegesek, így amin- és akvakomplexek esetén a komplex ion töltése megegyezik a központi ion töltésével.