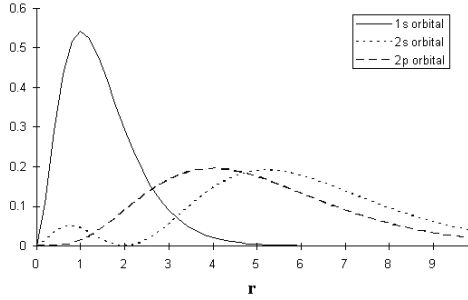


H-atom (folyt.)

Példa: mi a valószínűsége annak, hogy az elektron a magtól r távolságban van? ("radiális eloszlás")

Egy $4\pi r^2$ gömbfelületet kell tekintsünk:

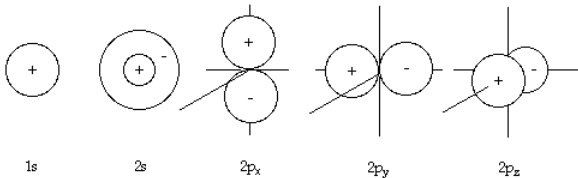
Pl. az 1s állapotban: $W(r) \sim (e^{-r})^2 4\pi r^2$



Maximum éppen a bohr-sugárnál!

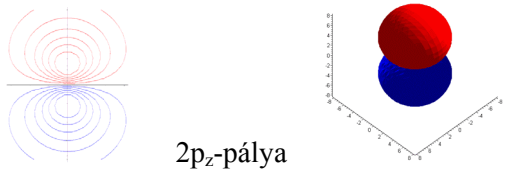
1. Iránydiagramok:

A tér egy adott irányába a függvény értékével arányos hosszúságú vektort húzunk, vegpontokat összekötve:

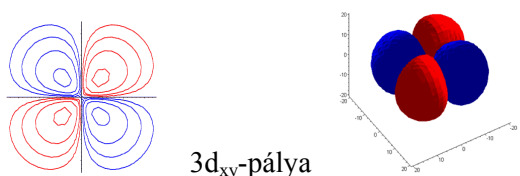


2. Szintvonalak (izofelületek)

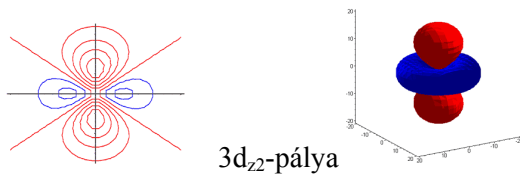
<http://www.catalysis.nl/~chembond/notes/Hatom/Hatom3.html>



2p_z-pálya

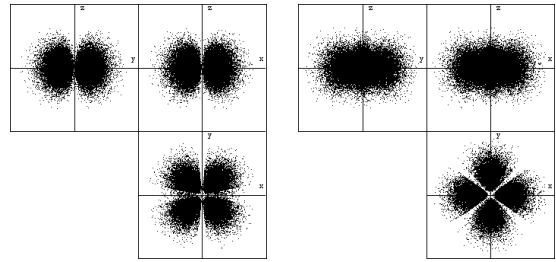
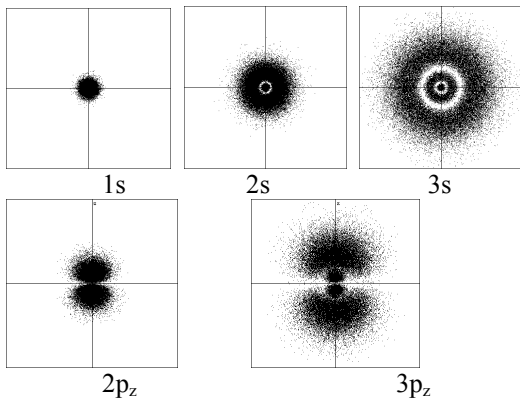


3d_{xy}-pálya

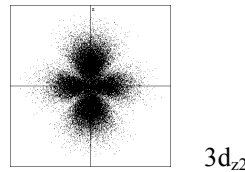


3d_{z2}-pálya

3. Sűrűség pontozással:

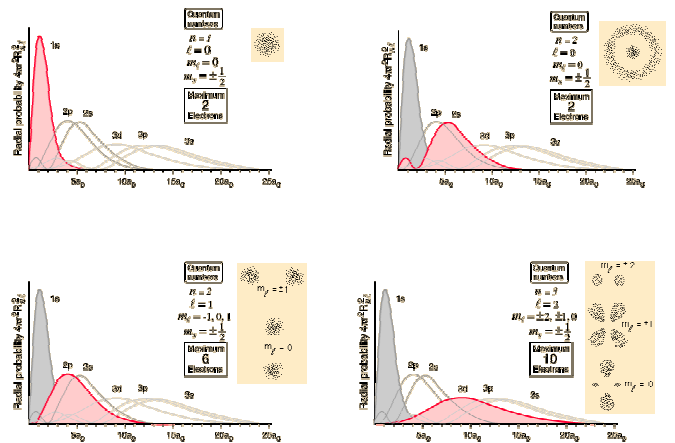


A. 3d_{xy}; 3d_{xz} és 3d_{yz} hasonlóak, csak a tengelyek szerepet váltanak. B. 3d_{x²-y²}. Az ábrák 3 síkmetszetet mutatnak.



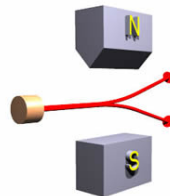
3d_{z2}

Még egyszer a radiális eloszlások és az el. sűrűség:



Az elektronspin

Két kísérleti tény: *Stern-Gerlach*, ill. a színkép finomszerk. <http://www.upscale.utoronto.ca/GeneralInterest/Harrison/SternGerlach/SternGerlach.html> An "electron gun" produces a beam of electrons. If the beam from the electron gun is directed to the magnets, as shown to the right, the beam is split into two parts. One half of the electrons in the beam are deflected up, the other half were deflected down. The amount of deflection up or down is exactly the same magnitude. Whether an individual electron is deflected up or down appears to be random. Stern and Gerlach did a version of this experiment in 1922.



Az elektronnak saját, a mozgásától független impulzus- (tehát egyben mágneses) momentuma van
spinkv. szám: s ; a spinvektor z-vetülete: m_s .

Az imp. mom. nagysága: $\sqrt{s(s+1)}(\hbar) = (\sqrt{3}/2)\hbar$

z- vetülete: $\pm (1/2)\hbar$

Ugyanakkor, adott mechanikai momentumhoz a spin esetében kétszer akkora mágn. mom. tartozik, mint a pályamozgás esetében (fent). Ha pl. a mech. momentum z-vetülete $\pm 1/2\hbar$, akkor $\mu_z = \pm \mu_b$

Többelektronos atomok elektronszerkezete

Minőségileg új a H-atomhoz képest: elektron-elektron kölcsönhatás. Leírás sokkal bonyolultabb.

Közelítő modellen alapszik a kémiában többnyire használt kép: *független elektron modell*
egy adott elektron a többi átlagos, gömbszimmetrikus térben mozog.

A hullámfv. legegyszerűbb matematikai alakja egy szorzatfüggvény, melynek tényezői a pályák.

$$\Psi(1,2,3, \dots n) = \psi_1(1)\psi_2(2)\psi_3(3) \dots \psi_n(n)$$

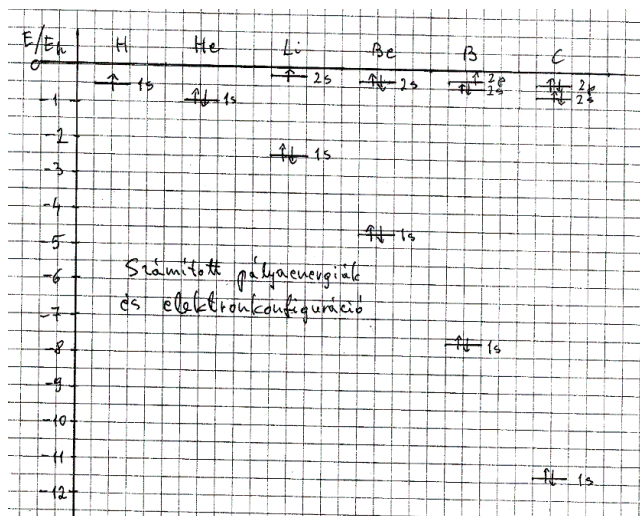
A ψ_i függvények a H-atom gerjesztett állapotaiként megismert pályák jellegét mutatják, melyeket itt is n, l, m kvantumszámok jellemeznek.

A szokásos jelölés most is:

1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, stb.

A pályákhoz pályaenergia tartozik. Ez - szemben a H-atommal - n és l kv.számoktól függ! Egyszerű képlet itt nincs, de számolhatók. Vigyázat: az atom teljes energiája nem egyszerűen a pályaenergiák összege!

Az atomokban, ahogy növekszik a rendszám, az elektronok az *Aufbau*-elv szerint növekvő energia sorrendjében töltik be a pályákat.



A feltöltés során érvényesül a Pauli elv: két elektronnak nem lehet mind a négy kvantumszáma azonos. Más szóval: ha n, l, m adott, m_s még kétféle lehet, vagyis egy pályán a kétféle spinirányítottságnak megfelelően max. két elektron lehet.

Héj:n; alhéj: n,l.

Fentiek szerint, egy alhéjon belül a pályák energiája azonos. (pl. a 3 db p-pálya, p_x, p_y, p_z .)

Elektronkonfiguráció:

megadjuk az elektronok számát mindenegyik alhéjon.

Hund-szabály: ..adott alhéjon maximális számú párosítatlan - azonos spinű - elektron.

H: $1s^1$; He: $1s^2$; Li: $1s^2 2s^1$; Be: $1s^2 2s^2$; B: $1s^2 2s^2 2p^1$;

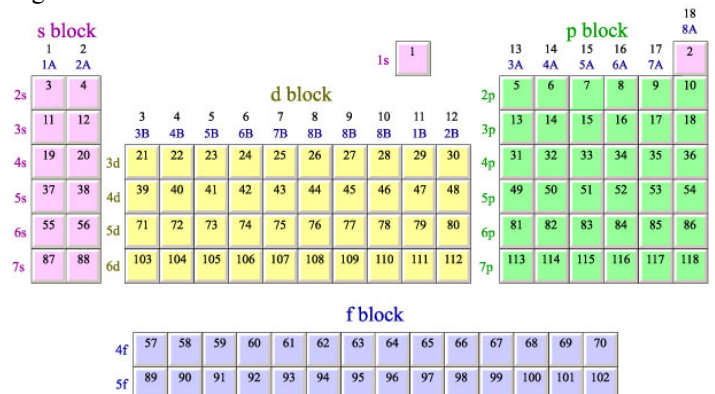
Hasonlóan : CN.....O

Elektronkonfigurációk

2005/10

Z	Symbol	Neutral	Positive ion
1	H	$1s^1$	-
2	He	$1s^2$	$1s^1$
3	Li	$[\text{He}] 2s^1$	$1s^2$
4	Be	$[\text{He}] 2s^2$	$[\text{He}] 2s^1$
5	B	$[\text{He}] 2s^2 2p^1$	$[\text{He}] 2s^2$
6	C	$[\text{He}] 2s^2 2p^2$	$[\text{He}] 2s^2 2p^1$
7	N	$[\text{He}] 2s^2 2p^3$	$[\text{He}] 2s^2 2p^2$
8	O	$[\text{He}] 2s^2 2p^4$	$[\text{He}] 2s^2 2p^3$
9	F	$[\text{He}] 2s^2 2p^5$	$[\text{He}] 2s^2 2p^4$
10	Ne	$[\text{He}] 2s^2 2p^6$	$[\text{He}] 2s^2 2p^5$
11	Na	$[\text{Ne}] 3s^1$	$[\text{He}] 2s^2 2p^6$
12	Mg	$[\text{Ne}] 3s^2$	$[\text{Ne}] 3s^1$
13	Al	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^1$	$[\text{Ne}] 3s^2$
14	Si	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^2$	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^1$
15	P	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^3$	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^2$
16	S	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^4$	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^3$
17	Cl	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^5$	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^4$
18	Ar	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^6$	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^5$
19	K	$[\text{Ar}] 4s^1$	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^6$
20	Ca	$[\text{Ar}] 4s^2$	$[\text{Ar}] 4s^1$
21	Sc	$[\text{Ar}] 3d^1 4s^2$	$[\text{Ar}] 3d^1 4s^1$
22	Ti	$[\text{Ar}] 3d^2 4s^2$	$[\text{Ar}] 3d^2 4s^1$
23	V	$[\text{Ar}] 3d^3 4s^2$	$[\text{Ar}] 3d^4$
24	Cr	$[\text{Ar}] 3d^5 4s^1$	$[\text{Ar}] 3d^5$
25	Mn	$[\text{Ar}] 3d^5 4s^2$	$[\text{Ar}] 3d^5 4s^1$
26	Fe	$[\text{Ar}] 3d^6 4s^2$	$[\text{Ar}] 3d^6 4s^1$
27	Co	$[\text{Ar}] 3d^7 4s^2$	$[\text{Ar}] 3d^8$
28	Ni	$[\text{Ar}] 3d^8 4s^2$	$[\text{Ar}] 3d^9$
29	Cu	$[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^1$	$[\text{Ar}] 3d^{10}$
30	Zn	$[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^2$	$[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^1$
31	Ga	$[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^2 4p^1$	$[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^2$
32	Ge	$[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^2 4p^2$	$[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^2 4p^1$
33	As	$[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^2 4p^3$	$[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^2 4p^2$
34	Se	$[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^2 4p^4$	$[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^2 4p^3$
35	Br	$[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^2 4p^5$	$[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^2 4p^4$
36	Kr	$[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^2 4p^6$	$[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^2 4p^5$

A modern periódusos rendszer s-, p-, d-mezőre tagolható:



Mágneses tulajdonságok – az elektronszerkezet

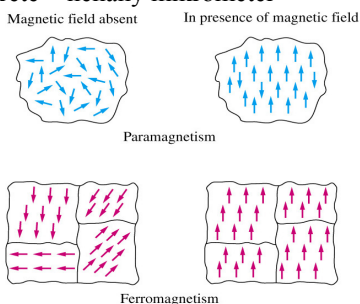
következménye: mozgó töltés - el. áram - mágnesség
 diamágneses anyagok: a mágneses tér taszítja; minden elektron párosított

paramágneses anyagok: a mágneses tér vonzza; egy vagy több párosítatlan elektron

A párosítatlan elektronok mágneses momentumának

közeli értéke: $\mu = \sqrt{n(n+2)} \mu_0$, ahol μ_0 a Bohr-magneton, n pedig a párosítatlan elektronok száma.

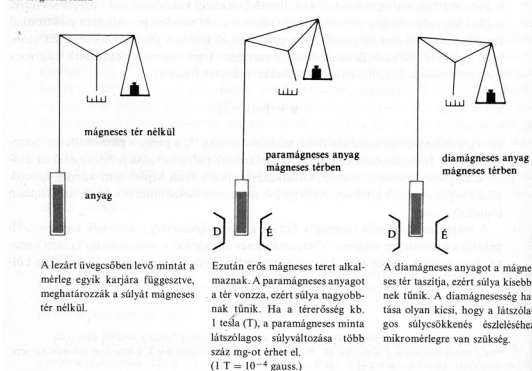
ferromágneses anyagok: a mágneses tér erősen vonzza; a jelenség csak kondenzált fázisban figyelhető meg. A szomszédos atomok párosítatlan elektronjai egy bizonyos tartományon belül igen erősen kölcsönhatásban vannak, doméneket alakítva ki. A domének a ferromágneses anyagok olyan tartományai, amelyekben az atomi mágneses dipólusok egy irányban állnak. Az egyes domének mérete ~ néhány mikrométer



Mágneses szuszceptibilitás: egységnyi mágneses térerő által az anyagban indukált mágneses momentum.

$M = \chi H$ M a momentum, H a térerő, χ a szuszceptibilitás.

A mágneses szuszceptibilitás kísérleti meghatározása



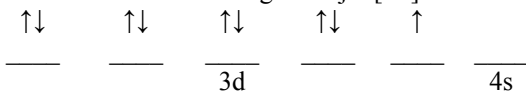
A lezárt üvegesóban levő mintát a mérleg egyik karjára függesztve, meghatározzák a súlyát mágneses tér nélkül. Ezután erős mágneses teret alkalmaznak. A paramágneses anyagot a tér vonzza, ezért súlya nagyobbak tűnik. Ha a térerősség kb. 1 tesla (T), a paramágneses minta látszólagos súlyváltozása több száz mg-ot érhet el. (1 T = 10⁴ gauss.) A diamágneses anyagot a mágneses tér taszítja, ezért súlya kisebbnek tűnik. A diamágnesség hatása olyan kicsi, hogy a látszólagos súlycsökkenés észleléséhez mikromérlegre van szükség.

Néhány ion számított és mért mágneses momentuma

ion	a párosítatlan elektronok száma	számított momentum (B. M.)	mért momentumok (B. M.)
V ⁴⁺	1	1,73	1,7–1,8
Cu ²⁺	1	1,73	1,7–2,2
V ³⁺	2	2,83	2,6–2,8
Ni ²⁺	2	2,83	2,8–4,0
Cr ³⁺	3	3,87	~ 3,8
Co ²⁺	3	3,87	4,1–5,2
Fe ²⁺	4	4,90	5,1–5,5
Co ³⁺	4	4,90	~ 5,4
Mn ²⁺	5	5,92	~ 5,9
Fe ³⁺	5	5,92	~ 5,9

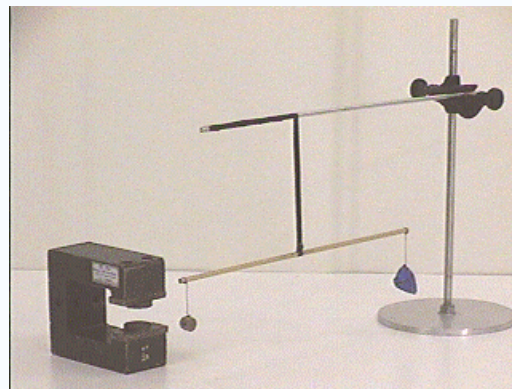
Várhatóan mekkora a Cu²⁺ ion mágneses momentuma?

A Cu²⁺ ion elektronkonfigurációja: [Ar] 3d⁹.



A Cu²⁺-nak tehát egy párosítatlan elektronja van:

$\mu = [1 \cdot (1+2)]^{1/2} \approx 1.73 \mu_0$



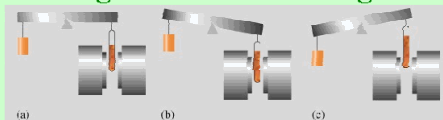
Bizmut: diamágneses, mágneses tér taszítja
 CuSO4 paramágneses, mágneses tér behúzza

magnetism is a phenomenon by which materials exert an attractive or repulsive force on other materials. Some well known materials that exhibit easily detectable magnetic properties are iron, some steels, and the mineral lodestone; however, all materials are influenced to one degree or another by the presence of a magnetic field, although in most cases the influence is too small to detect without special equipment.

Magnetic forces are fundamental forces that arise due to the movement of electrical charge. Thus, magnetism is seen whenever electrically charged particles are in motion. This can arise either from movement of electrons in an electric current, resulting in 'electromagnetism', or from the constant subatomic movement of electrons, resulting in what are known as 'permanent magnets'.

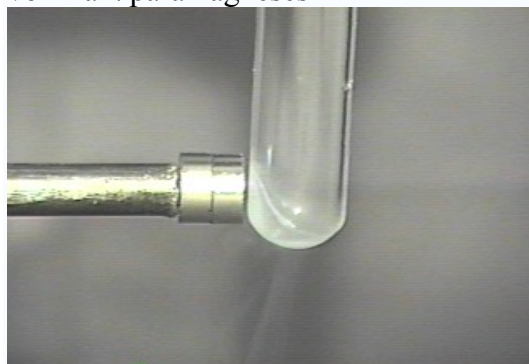
The physical cause of the magnetism of objects, distinct from electrical currents, is the atomic magnetic dipole. Magnetic dipoles, or magnetic moments, result on the atomic scale due to the two kinds of movement of electrons. The first is the orbital motion of the electron around the nucleus; this can be considered as a current loop, resulting in a magnetic moment along the axis of the nucleus. The second, much stronger, source of electronic magnetic moment is due to a quantum mechanical property called spin (although current quantum mechanical theory states that electrons do not actually physically spin, or orbit the nucleus for that matter).

Paramagnetism and Diamagnetism



- A species with unpaired electrons is paramagnetic and is pulled into a magnetic field; one without unpaired electrons is diamagnetic and is pushed out of a magnetic field.
- Paramagnetism and diamagnetism can be distinguished experimentally by an apparatus like that above.
 - (a) no magnetic field
 - (b) paramagnetic substance appears to weigh more.
 - (c) diamagnetic substance appears to weigh less.

A cseppfolyós oxigént a mágnes vonzza ⇒ paramágneses



Atomi tulajdonságok

1. Ionizációs energia és elektronaffinitás

$$X = X^+ + e^- \quad \Delta H = I(\text{oniz.en.})$$

$$X + e^- = X^- \quad -\Delta H(\text{neg.}) = E.A.$$

mérésük : tömegsp., fotoelektron-spektr.
szám.: pályaenergiák

2. Az elektronegativitás (különböző definíciók)

1. Pauling

"Extraionos energia" : $\Delta = D_{AB} - 1/2(D_{AA} + D_{BB})$

elektronegativitás különbség : $X_A - X_B = \Delta^{1/2}$

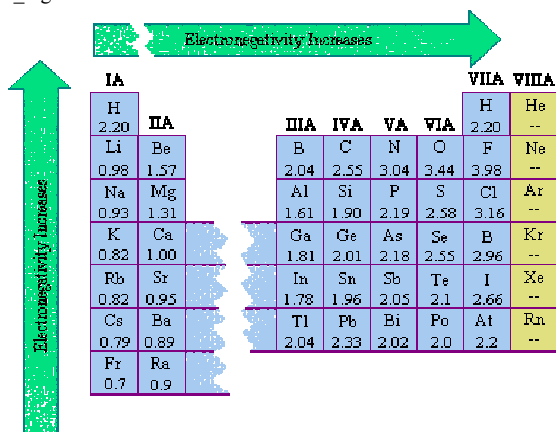
Fix pontok:

2. Mulliken $x = \text{const } 1/2 (I.E. + E.A.)$

3. Allred-Rochow $x = \text{const } Z_{\text{eff}} / (r_{\text{kov}})^2$

Hozzávetőleges értéktartományok rendszerben:

Leginkább a **főcsoportbeli** elemekre megbízhatóak
(bár a tábl. 2 tizedesjegye helyett realisabb lenne 1).
http://chemed.chem.purdue.edu/genchem/topicreview/bp/ch8/graphics/fig8_8.gif



Ionizációs energiákkal összevetve:

(K)

1												18			
H	He											He			
313 2.2	567											567			
First Ionization Energy (kcal/mol of atoms)															
Electronegativity*															
125	215	191	260	336	314	402	497	125	215	191	260	336	314	402	497
Li	Be	B	C	N	O	F	Ne	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
1.0	1.5	2.0	2.6	3.1	3.5	4.0	4.0	1.0	1.5	2.0	2.6	3.1	3.5	4.0	4.0
119	176	138	188	242	239	300	363	119	176	138	188	242	239	300	363
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
0.9	1.2	1.5	1.9	2.2	2.6	3.2	3.2	0.9	1.2	1.5	1.9	2.2	2.6	3.2	3.2
100	141	138	182	226	225	273	323	100	141	138	182	226	225	273	323
K	Ca	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	K	Ca	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
0.8	1.0	1.6	1.9	2.1	2.5	2.9	2.9	0.8	1.0	1.6	1.9	2.1	2.5	2.9	2.9
96	131	133	169	199	208	241	280	96	131	133	169	199	208	241	280
Rb	Sr	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	Rb	Sr	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
0.8	1.0	1.7	1.8	2.1	2.3	2.7	2.7	0.8	1.0	1.7	1.8	2.1	2.3	2.7	2.7
90	120	141	171	168	194	241	248	90	120	141	171	168	194	241	248
Cs	Ba	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Cs	Ba	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
0.7	0.9	1.8	1.8	1.9	2.0	2.2	2.2	0.7	0.9	1.8	1.8	1.9	2.0	2.2	2.2
Fr	Ra														
0.7	0.9														

* Arbitrary scale based on fluorine = 4.0

Egy teljesebb ábrázat:

1												13	14	15	16	17	
H	He											B	C	N	O	F	
2.1												2.0	2.5	3.0	3.5	4.0	
Li	Be											Al	Si	P	S	Cl	
1.0	1.5											1.5	1.8	2.1	2.5	3.0	
Na	Mg											Ga	Ge	As	Se	Br	
0.9	1.2											1.5	1.8	2.1	2.5	3.0	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	
0.8	1.0	1.3	1.5	1.6	1.6	1.5	1.8	1.8	1.8	1.9	1.6	1.6	1.8	2.0	2.4	2.8	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	
0.8	1.0	1.2	1.4	1.6	1.8	1.9	2.2	2.2	2.2	2.2	1.7	1.7	1.8	1.9	2.1	2.5	
Cs	Ba	La†	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	
0.8	0.9	1.1	1.3	1.5	2.4	1.9	2.2	2.2	2.2	2.4	1.9	1.8	1.8	1.9	2.0	2.2	
Fr	Ra	Ac†															
0.7	0.9	1.1															

† Lanthanides: 1.1-1.3
† Actinides: 1.3-1.5

3. Az atomrádiuszok kérdése

Valójában nem jól definiált. Különböző célokra különböző definíciók lehetségesek.

Kovalens rádiusz <http://www.iumsc.indiana.edu/radii.html>

The following tables are graciously furnished by Nat Alcock, Department of Chemistry, University of Warwick, UK. Please see that proper citation is given if the data are used ... of the book *Bonding and Structure* by N. W. Alcock (Ellis Horwood, 1990). Paragraphs from this book relating to the **strategy for determining the radii are given at the end.**

A.1 Carbon-based Covalent Radii

A.1.1 Single bond radii (pm)

H : 29.9

Be	B	C	N	O	F
106	83.0	76.7	70.2	65.9	61.9
	Al	Si	P(III)	S(II)	Cl
	118	109.0	108.8	105.2	102.3
	Ga	Ge	As(III)	Se(II)	Br
	125	122	119.6	120.3	119.9
	In	Sn	Sb(III)	Te(II)	I
	141	139	137	139.1	139.5

Többszörös kötések (pm)

	C	N	O
Single	76.7	70.2	65.9
Double	66.1	61.8	54.9
Triple	59.1	54.5	

Van der Waals - rádiuszok (pm)

	N	O	F
	155	152	147
	Si	P	S
	210	180	180
	Ge	As	Se
	195	185	190
	Sn	Sb	Te
	210	205	206
			198

Fémekben: Metallic radii (12-coordinate) (pm)

Li	156.2	Be	112.8			
Na	191.1	Mg	160.2	Al	143.2	
K	237.6	Ca	197.4	Ga	141.1	
Rb	254.6	Sr	215.1	In	166.3	Sn
Cs	273.1	Ba	224.3	Tl	171.6	Pb
						175.0

Ionokban: (hasonlítsuk össze a semleges fémmel)

Cation radii (6-coordinate) (pm)

Li(+1)	90	Be(+2)	59	Al(+3)	67.5
Na(+1)	116	Mg(+2)	86.0	Ga(+3)	76.0
K(+1)	152	Ca(+2)	114	In(+3)	94.0

Néhány átmeneti fémre:

Ti	273.1	V	224.3	Cr	171.6	Mn	175.0
Fe	127.4	Co	125.2	Ni	124.6	Cu	127.8

Néhány átmeneti fém ionja:

Ti(+3)	81.0	V(+2)	93	Cr(+2)	87/94*	Mn(+2)	81/97.0*
Ti(+4)	74.5	V(+3)	78.0	Cr(+3)	75.5	Mn(+3)	72/78.5*

* Low spin and high spin values

Anionok:

.4.2 Anion radii (6-coordinate) (pm)

O (-2)	126	F (-1)	119
S (-2)	170	Cl (-1)	167
Se (-2)	184	Br (-1)	182
Te (-2)	207	I (-1)	206

Az atomrádiuszok meghatározásának különböző módjai

Figyeljük a megfontolások logikáját!

Procedures for radius calculations

5.7 Covalent Radii. ..., some generally quoted radii are not very satisfactory, leading to wild proposals for their correction. [Notably the Schomaker-Stevenson correction.

. The simplest values for covalent radii are therefore half the distances between identical singly bonded atoms. Unfortunately, these radii do not give very consistent results, particularly for the most electronegative atoms (sections 5.8.2 and 9.5). Instead, the most useful radii are those derived by subtracting the radius of carbon from C-X distances. The usefulness of these carbon-based radii seems to relate to three negative properties: carbon has no lone pairs, no empty p- or d-orbitals, and is not of high electronegativity. Each of these can perturb observed bond distances.

Subtraction of pairs of bond lengths can be used to examine the consistency of covalent radii. A simple example shows that the difference between the covalent radii of N and C is constant to about 1% of the N-C bond distance

NH ₂ -CH ₃	147.4	CH ₃ -CH ₃	153.4
NH ₃	101.5	CH ₄	109.3
difference	45.9	diff.	43.8 pm

The radius of carbon itself can be calculated from the bond distance in saturated hydrocarbon chains as 76.7 pm. Ideally, all single C-C bonds between sp³ hybridised atoms should be identical, but a detailed comparison (Allen et al. 1987) shows small systematic variations.

3.2.1 Metallic Radii

The metallic radii in these structures [close-packed structures] can easily be obtained, by taking half of the M-M distance. Standard metallic radii (tabulated in [Appendix A.3](#)) have been derived for 12-coordinate metals, though there has been no detailed study of the consistency of metallic radii from one structure to another.

4.5.1 Ionic radii scales. When we know one ionic radius, say for Na⁺, it is easy to obtain others, e.g. rCl⁻ = dNaCl - rNa⁺; rK⁺ = dKCl - rCl⁻, etc. A rather more sophisticated treatment avoids the arbitrary picking of NaCl+KCl rather than, say, NaF +KF to calculate rK⁺. We can express all the radii in terms of one unknown value and minimises the errors in the predicted interatomic distances (Waddington, 1966). The problem of finding this unknown value still remains. Various techniques have been used....

.... However, an extensive compilation of radii has been made by Shannon (1976), using the interatomic distances in fluorides and oxides. This has been presented in two forms, based respectively on rO²⁻ = 140 pm (rF⁻ = 133 pm) and on rF⁻ = 119 pm. The second set differ by only 1-2 pm from the ideal scale suggested above, and represent the best values currently available. [Appendix A.4](#) provides a range of these values for 6-coordinate ions. It is finally worth noting that ionic radii, like metallic radii, are affected by coordination number, though reliable ratios have not been derived.

7.2.1 Van der Waals radii. As with other interactions, the interatomic distances in non-bonded attractions can be characterised by the radii of the atoms involved, here the van der Waals radii. These are, of course much larger than any other radii, and the weakness of the van der Waals forces means that the distances are rather variable. However, radii can be assigned to those atoms which often come into contact with each other. Careful study by Bondi (1964) provided the figures in Appendix A.2 (p.xx). These values are most often used in relation to observed distances between atoms, to decide if van der Waals bonding alone is present, or if some stronger bond is likely. ...

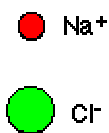
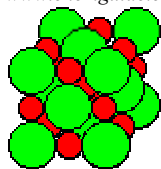
2005/14: xerox a Born-Haber körf.

A kémiai kötés

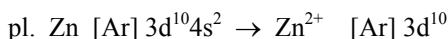
2005/15

1. Ionos kötés:

www.chemguide.co.uk/atoms/structures/ionicstruct.html



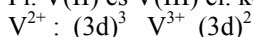
Az "oktett"-elv (saját megfogalmazásban): az ionrácsot alkotó ("ionkötésben" levő) ionok elektronszerkezete lehetőleg oktett, ill. általánosabban: zárt héj (v. alhéj).



De: jelentőségét ne abszolutilázzuk ...

Átmeneti fémeknél igen sokféle dⁿ konfiguráció (más kérdés, l. később: a héj betöltődése a *ligandumok* elektronjaival együtt válhat teljessé)

Pl. V(II) és V(III) el. konfiguráció:



Figyelem: láthatólag először a 4s el.ok válnak le ...

2. A kovalens kötés legegyszerűbb szimbolikája:

utólag: mivel én az ionos szerk.nél vezettem be az oktett-elvet, általánosítani kell itt

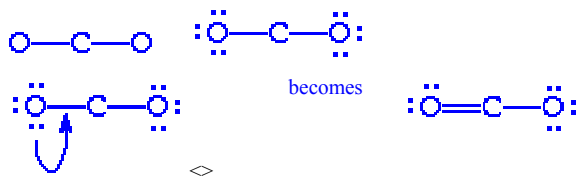
Lewis-szerkezetek

A formális szabályok, **emlékeztető**:

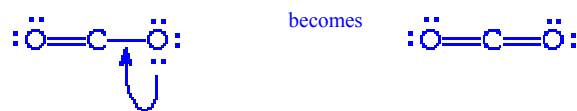
1. Determine the number of valence electrons to be used to connect the atoms. 2. Connect the central atom to the other atoms in the molecule with single bonds. 3. Complete the valence shell of the outer atoms in the molecule. 4. Place any remaining electrons on the central atom. If the valence shell of the central atom is complete, you have drawn an acceptable Lewis structure. 5. If the valence shell of the central atom is not complete, use a lone pair on one of the outer atoms to form a double bond between that outer atom and the central atom. Continue this process ... until the valence shell of the central atom is complete.

1. Alappéldák: H₂O, CH₄, NH₃ ..

2. Kettős-, hármaskötés: példa: CO₂



The central atom is still electron deficient, so share another pair.



Az oktett-szabály nem szigorú!

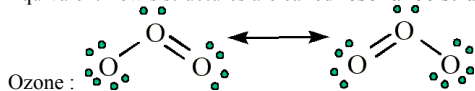
Elektronhiányos molekulák:



Oktettnél több elektron: PCl₅, SF₆, etc. 3. periódustól megengedett....

Rezonancia-szerkezetek

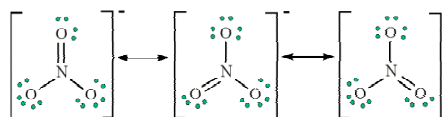
Equivalent Lewis structures are called resonance structures



is described by an average of the two Lewis structures.

Példák csak rezonancia-szerkezetekkel leírható kötésekre:

Nitrát-ion

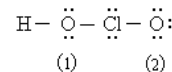


Fentiek delokalizált kötéssel is

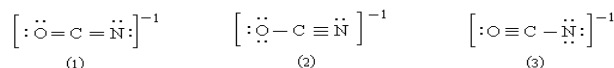
Benzol

Néhány gyakorlat:

Mekkora a formális töltés az oxigén atomokon ?



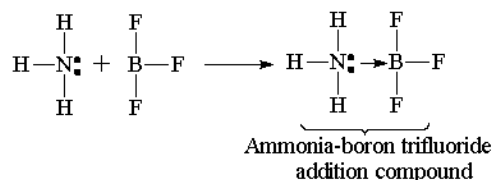
Az OCN⁻ ion melyik szerkeze a legvalószínűbb?



Ajánlott feladatok: PO₄³⁻, ClO₃⁻, BrO₂⁻, SO₃, kénsav.

Datív, koordinatív kötés

Addíciós vegyület:

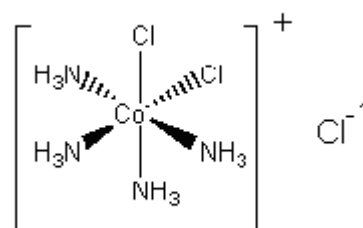


Koordinációs komplexek:

The coordination chemistry was pioneered by Nobel Prize winner [Alfred Werner](#) (1866-1919). He received the Nobel Prize in 1913 for his coordination theory of transition metal-amine complexes. At the start of the 20th century, inorganic chemistry was not a prominent field until Werner studied the metal-amine complexes such as [Co(NH₃)₆Cl₃]. Werner recognized the existence of several forms of cobalt-ammonia chloride. These compounds have different color and other characteristics. The chemical formula has three chloride ions per mole, but the number of chloride ions that precipitate with Ag⁺ ions per formula is not always three. He thought only **ionized chloride ions** will form precipitate with silver ion.

Solid	Color	Ionized Cl ⁻	Complex formula
CoCl ₃ 6NH ₃	Yellow	3	[Co(NH ₃) ₆]Cl ₃
CoCl ₃ 5NH ₃	Purple	2	[Co(NH ₃) ₅ Cl]Cl ₂
CoCl ₃ 4NH ₃	Green	1	<i>trans</i> -[Co(NH ₃) ₄ Cl ₂]Cl
CoCl ₃ 4NH ₃	Violet	1	<i>cis</i> -[Co(NH ₃) ₄ Cl ₂]Cl

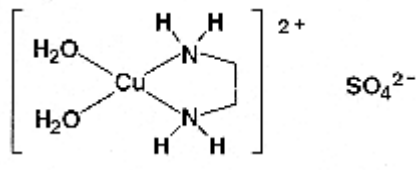
Egy kobalt-komplex szerkezete:



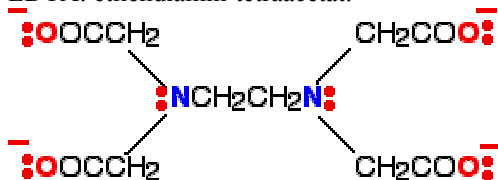
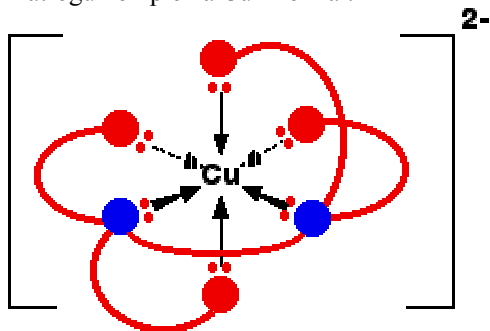
Többfogú ligandumok:Pl. etilén-diamin: $\text{H}_2\text{N}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{NH}_2$

Copper ethylenediamine complex; Use: Herbicide

Növényvédő-szer, kiszérelés pl. szulfátként



EDTA: etiléndiamin-tetraacetát:

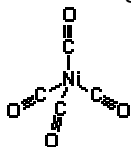
**the EDTA⁴⁻ ion**Hatfogú komplex a Cu^{2+} -ionnal:**the [Cu(EDTA)]²⁻ ion**

EDTA az élelmiszer-iparban:

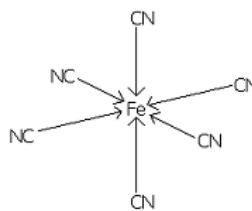
Under the brand name Dissolvine[®], Akzo Nobel offers a complete line of chelating agents for a wide range of food and non-food applications throughout the world. These include two FDA-approved food-grade EDTA chelating agents for direct and several other chelating agents for indirect food applications. One has also received EC approval. Whatever the application, there is a Dissolvine[®] specialty perfectly tailored to do the job.

Elektronszerkezet - és mágneses tulajdonságok: $\text{Ni}(\text{CO})_4$ Nikkel-tetrakarbonil.

Erősen mérgező, illékony folyadék. Szerkezet:

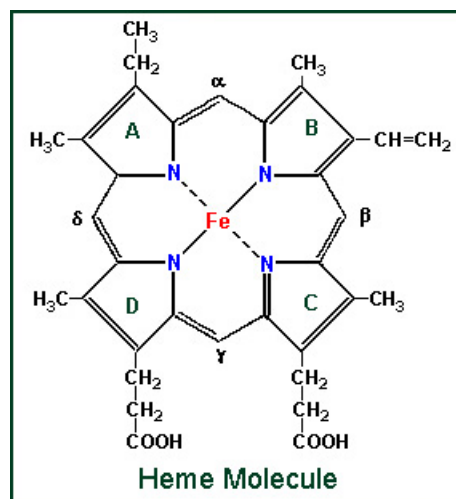


Elektronszerkezet: $3d^6 4s^2 + 4 \times 2 \text{ el.} = 18 \text{ el.}$ a Ni körül.
(Úgy képzelhetjük el, hogy a Ni körül $3d^6 4s^2 4p^6$ konfiguráció van.)
Igazi kovalens kötés, zárt elektronhéj > diamágneses.

Most tekintsük a Fe^{2+} ion komplexeit:a) $\text{Fe}(\text{CN})_6^{4-}$ hexacianoferrát(II):*diamágneses*. Előbbihez hasonlóan: $3d^6 + 6 \times 2 \text{ el.} = 18 \text{ el.}$ a Fe körül.(Berlini kék: $\text{Fe}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]_3$.)b) $\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_6^{2+}$ hexaakva-komplex:

paramágneses > párosítatlan elektron(ok). A koordinációs kötés nagyon gyenge, nagyjából a Fe^{2+} (perturbált) elektronszerkezete érvényesül - nyílt héj.

Komplexek a természetben:

Hemoglobin: *heme* + fehérje

A **Lewis-féle sav-bázis-elmélet** lényege elektronpár átadása; tipikus datív kötés:

$$\text{Na}_2\text{O} + \text{SO}_3 \quad ; \quad \text{O}^{2-} + \text{SO}_3 \rightarrow \text{SO}_4^{2-}$$

Elektronpárokkal ...

Gyakorlatban *Friedel-Crafts* katalizátorok:
$$\text{R}-\text{CH}_2-\text{Cl} + \text{AlCl}_3 \rightarrow \text{R}-\text{CH}_2^+ + \text{AlCl}_4^- \text{ "karbokation"}$$
Oláh György: szupersavak (*superacids*)Pl. SbF_5 és HF elegye;
$$\text{SbF}_5 + \text{HF} \rightarrow \text{SbF}_6^- + \text{H}^+$$

elektronpár átadása ..; Sb körül 12 elektron!

