MŰEGYETEM 1782

WE CONNECT CHIPS AND SYSTEMS

Elektronikai anyagtudomány

2. előadás

Dr. Bonyár Attila, egyetemi docens
bonyar.attila@vik.bme.hu

Budapest, 2025.02.20.

BMEETT
ELEKTRONIKAI TECHNOLÓGIA TANSZÉK

BUDAPEST UNIVERSITY OF TECHNOLOGY AND ECONOMICS
DEPARTMENT OF ELECTRONICS TECHNOLOGY

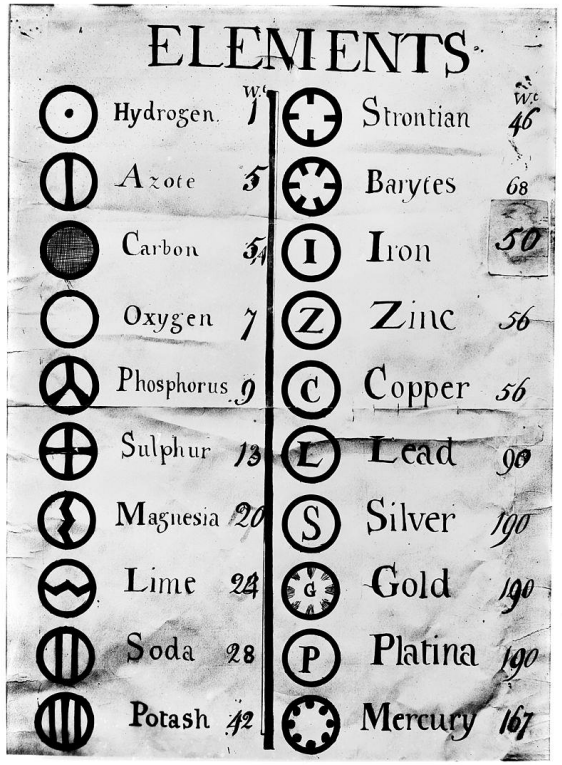
Áttekintés (az első három előadás)

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

3. A periódusos rendszer

A periódusos rendszer története

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



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

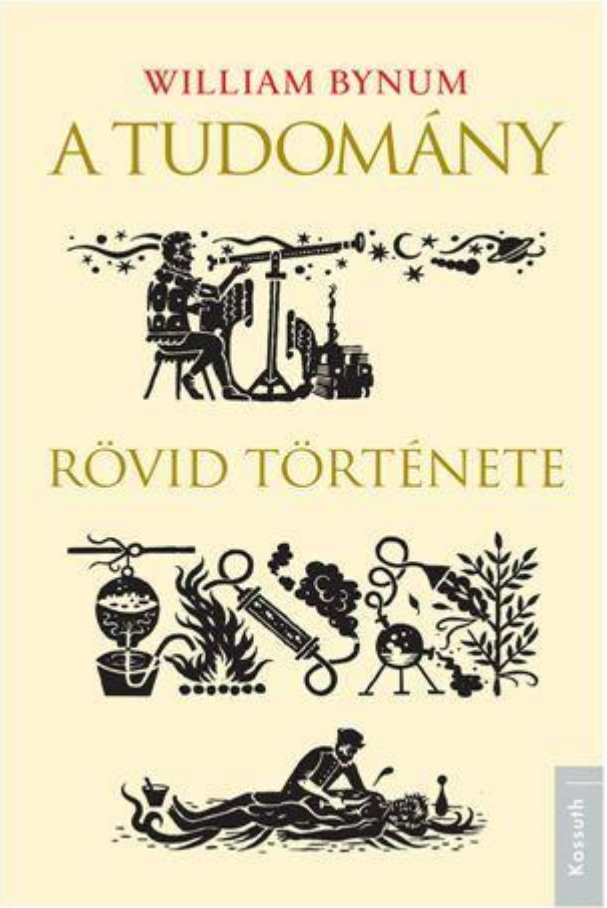
BMEETT

WE CONNECT CHIPS AND SYSTEMS

3. A periódusos rendszer

A periódusos rendszer története

Könyvajánló: Akit érdekel a teljes történet



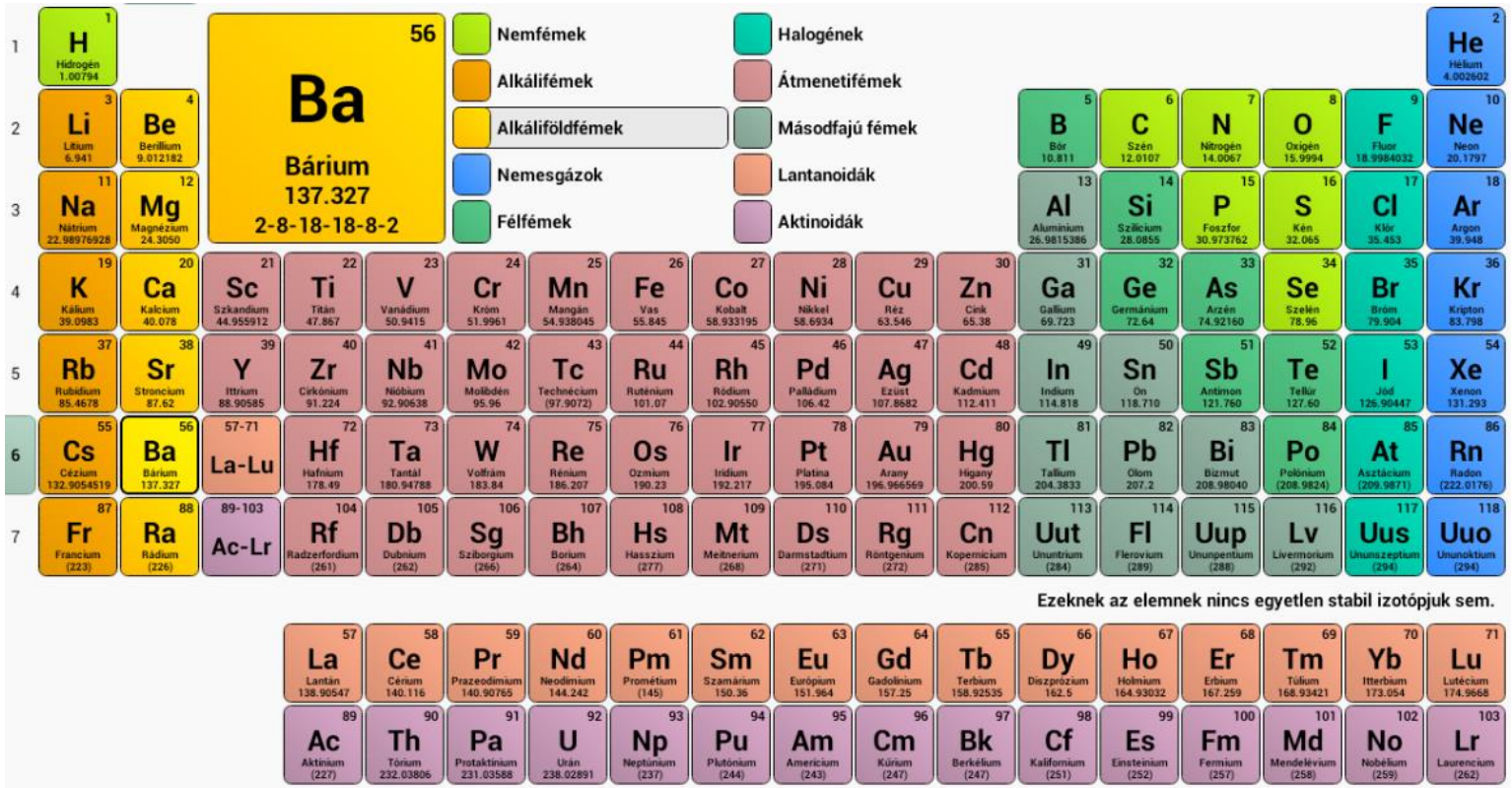
- 1860: Első nemzetközi kémikus konferencia Kalrsruheban, (Kekulé, Cannizzaro, **Mengyelejev**). Cél: megegyezni a különböző elemekre használt rendszerekben, elkezdeni a rendszerezést a relatív atomtömegeken keresztül.
- 1869: Mengyelejev, rendszerezte az elemeket hasonló viselkedés szerint (Journal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

3. A periódusos rendszer

Az elemek periódusos rendszere

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

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



WE CONNECT CHIPS AND SYSTEMS

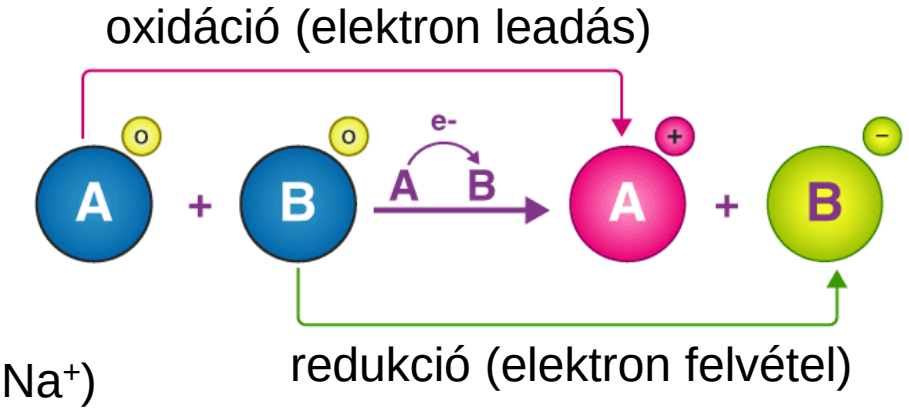
3. A periódusos rendszer

Ionizáció

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

Redoxi-folyamat: elektron felvétellel vagy leadással járó folyamat

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



Fémek: elektronok leadására hajlamosak - > **kationok** lesznek (Na -> Na^+)
Nemfémek: elektron felvételére hajlamosak -> **anionok** lesznek (Cl -> Cl^-)

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

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

3. A periódusos rendszer

Ionizáció

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

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

Figyeljük meg az elektronnegativitás és az ionizációs potenciál közötti korrelációt!

elektronnegativitás

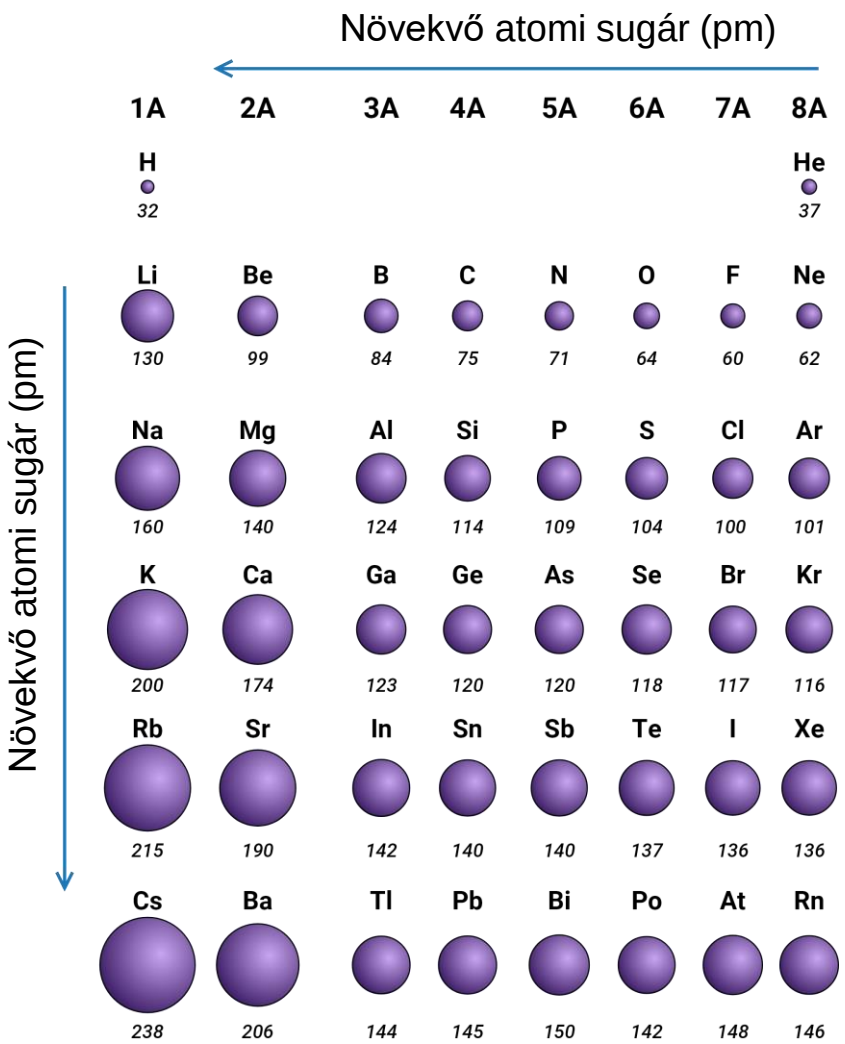
	IA	IIA											III	IV	V	VI	VII	VIII
1	1 H 2.20																	2 He 0
2	3 Li 0.98	4 Be 1.57											5 B 2.04	6 C 2.55	7 N 3.04	8 O 3.44	9 F 3.98	10 Ne 0
3	11 Na 0.93	12 Mg 1.31											13 Al 1.50	14 Si 1.80	15 P 2.19	16 S 2.58	17 Cl 3.16	18 Ar 0
4	19 K 0.82	20 Ca 1.00	21 Sc 1.36	22 Ti 1.54	23 V 1.63	24 Cr 1.66	25 Mn 1.55	26 Fe 1.83	27 Co 1.83	28 Ni 1.83	29 Cu 1.90	30 Zn 1.85	31 Ga 1.83	32 Ge 2.01	33 As 2.18	34 Se 2.55	35 Br 2.96	36 Kr 0
5	37 Rb 0.82	38 Sr 0.85	39 Y 1.22	40 Zr 1.33	41 Nb 1.6	42 Mo 2.13	43 Tc 1.9	44 Ru 2.2	45 Rh 2.28	46 Pd 2.20	47 Ag 1.93	48 Cd 1.69	49 In 1.78	50 Sn 1.96	51 Sb 2.05	52 Te 2.1	53 I 2.66	54 Xe 0
6	55 Cs 0.79	56 Ba 0.89	57 La 1.10	72 Hf 1.3	73 Ta 1.5	74 W 2.36	75 Re 1.9	76 Os 2.2	77 Ir 2.20	78 Pt 2.28	79 Au 2.54	80 Hg 2.00	81 Tl 2.04	82 Pb 2.33	83 Bi 2.02	84 Po 2.0	85 At 2.2	86 Rn 0
7	87 Fr 0.7	88 Ra 0.9	89 Ac 1.1															

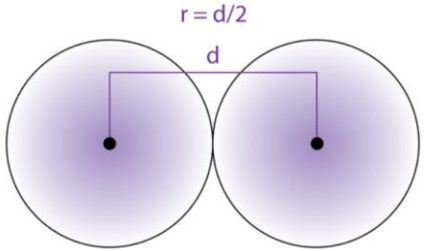
első ionizációs potenciál

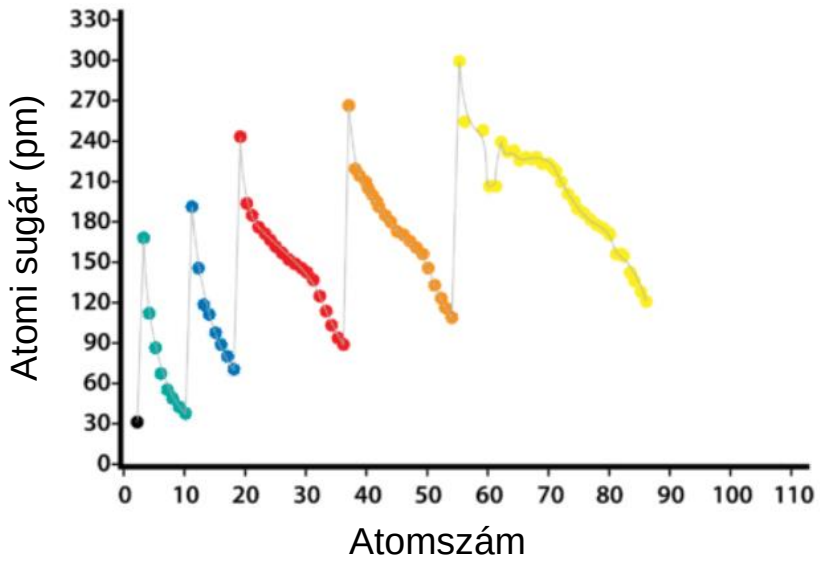
	IA	IIA											III	IV	V	VI	VII	VIII
1	1 H 13.598																	2 He 24.587
2	3 Li 5.392	4 Be 9.323											5 B 8.298	6 C 11.260	7 N 14.534	8 O 13.168	9 F 17.423	10 Ne 21.585
3	11 Na 5.139	12 Mg 7.646											13 Al 5.986	14 Si 8.152	15 P 10.487	16 S 10.360	17 Cl 12.968	18 Ar 15.760
4	19 K 4.341	20 Ca 6.113	21 Sc 6.561	22 Ti 6.828	23 V 6.746	24 Cr 6.767	25 Mn 7.434	26 Fe 7.902	27 Co 7.881	28 Ni 7.640	29 Cu 7.726	30 Zn 9.394	31 Ga 5.999	32 Ge 7.900	33 As 9.815	34 Se 9.752	35 Br 11.814	36 Kr 14.000
5	37 Rb 4.117	38 Sr 5.695	39 Y 6.217	40 Zr 6.634	41 Nb 6.759	42 M 7.092	43 Tc 7.28	44 Ru 7.361	45 Rh 7.459	46 Pd 8.337	47 Ag 7.576	48 Cd 8.994	49 In 5.786	50 Sn 7.344	51 Sb 8.64	52 Te 9.010	53 I 10.451	54 Xe 12.130
6	55 Cs 3.894	56 Ba 5.212	57 La 5.577	72 Hf 6.825	73 Ta 7.89	74 W 7.98	75 Re 7.88	76 Os 8.7	77 Ir 9.1	78 Pt 9.0	79 Au 9.226	80 Hg 10.438	81 Tl 6.108	82 Pb 7.417	83 Bi 7.289	84 Po 8.417	85 At 9.5	86 Rn 10.749
7	87 Fr	88 Ra 5.279	89 Ac 5.17	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Uun	111 Uuu	112 Uub						

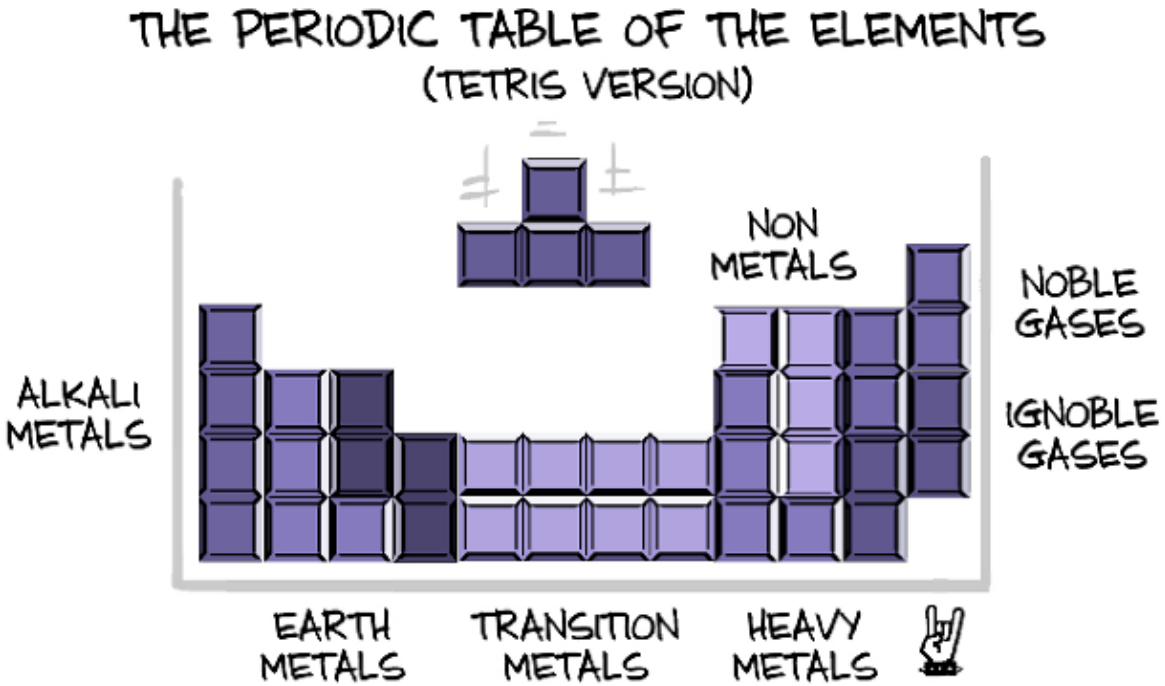
3. A periódusos rendszer

Érdekesség: Figyeljük meg az atomi sugár megváltozását!









https://flexbooks.ck12.org/cbook/ck-12-chemistry-flexbook-2.0/section/6.15/primary/lesson/periodic-trends%3A-atomic-radius-chem/

4. A kémiai kötések

A kémiai kötések csoportosítása

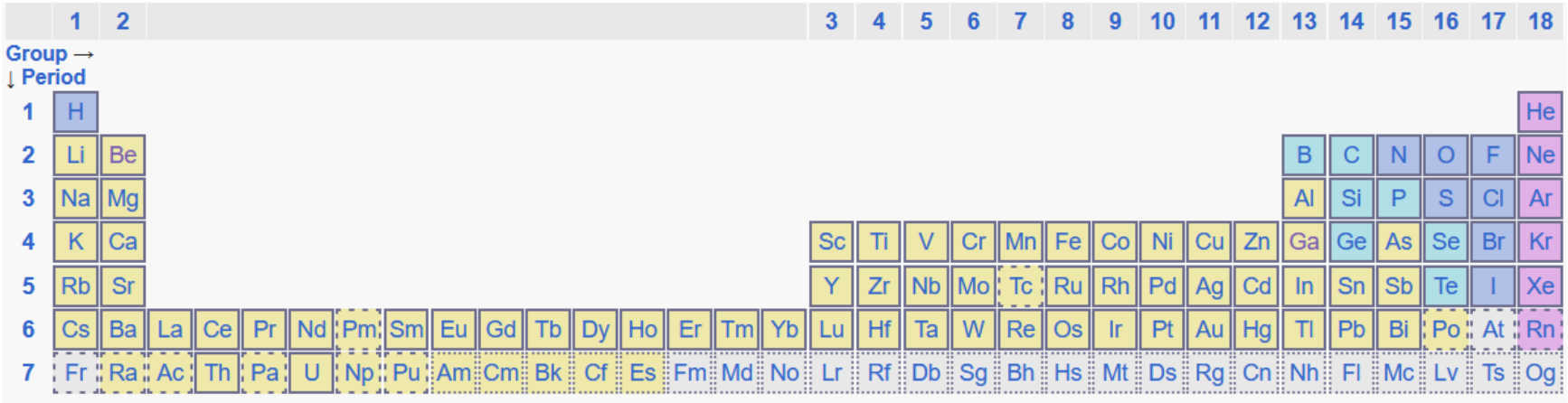
Elsődleges kötések:
- Ionos,
- Kovalens,
- Fémes.

Másodlagos kötések:
- Dipol-dipol kölcsönhatás,
- Hidrogén-hidak,
- Van der Waals kötések

(v. diszperziós, gyűjtőfogalom).

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

Azonos elemek közötti kötések jellege a periódusos rendszerben



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

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

(1 kcal = 4.184 kJ)

BMEETT

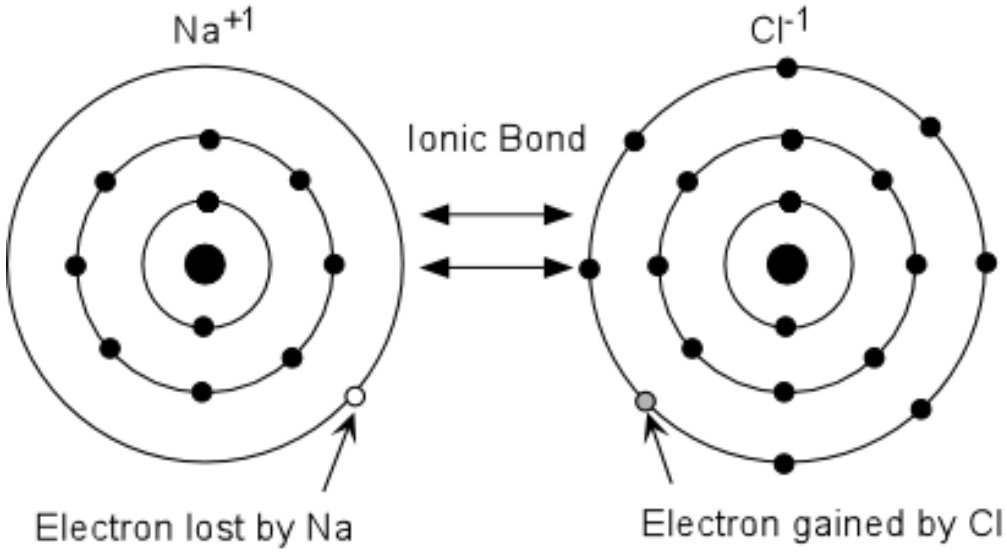
WE CONNECT CHIPS AND SYSTEMS

4. A kémiai kötések

Ionos kötés

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

Pl. NaCl



Tipikus ionos kötéssel rendelkező anyagok:

- Sók (pl. NaCl, KCl…)
- Bizonyos kerámiák (pl. Al_2O_3)

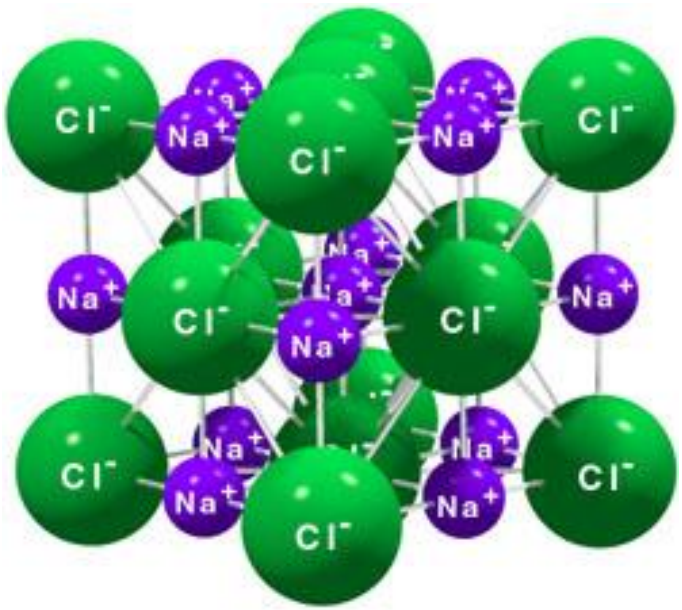
WE CONNECT CHIPS AND SYSTEMS

4. A kémiai kötések

Ionos kötés – ionos kristályok tulajdonságai:

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

Magyarázat:



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

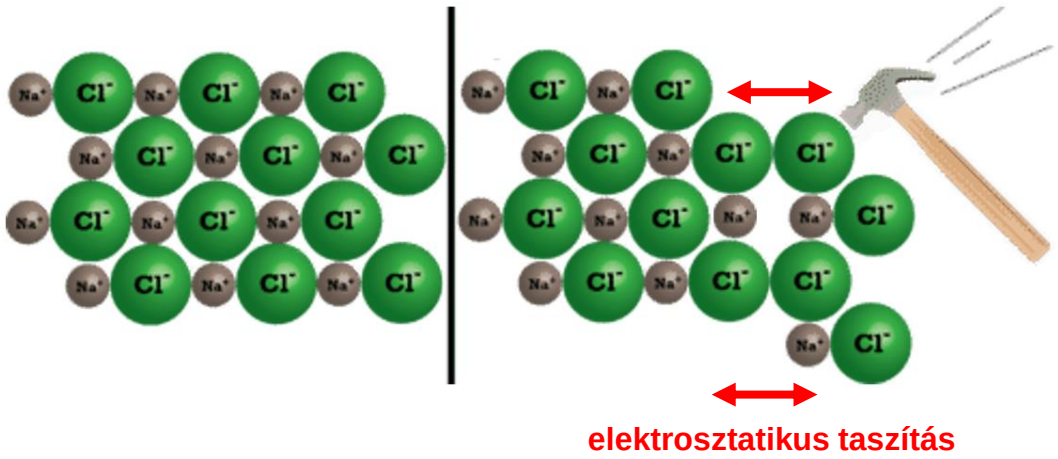
WE CONNECT CHIPS AND SYSTEMS

4. A kémiai kötések

Ionos kötés – ionos kristályok tulajdonságai:

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

Magyarázat:



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

BMEETT

WE CONNECT CHIPS AND SYSTEMS

4. A kémiai kötések

Ionos kötés – ionos kristályok tulajdonságai:

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

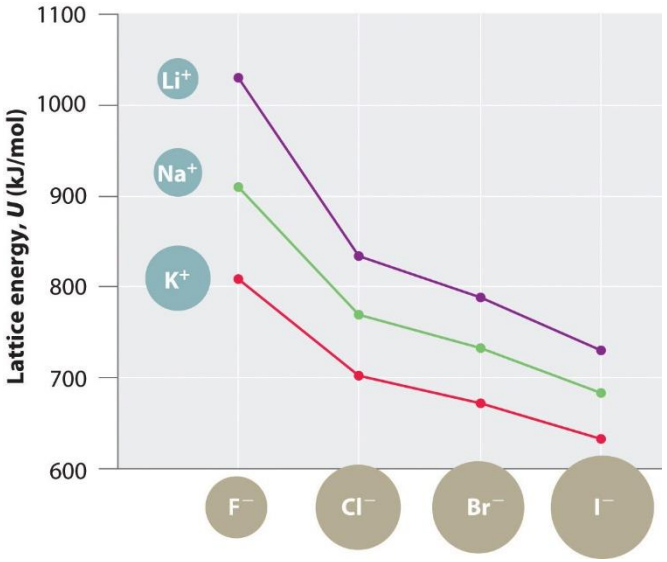
Magyarázat:

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

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

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

Az ionok méretének szerepe



A töltés szerepe

NaCl (+1, -1)
T_o=801°C

CaF_2 (+2, -1)
T_o=1418°C

MgO (+2,-2)
T_o=2852°C

WE CONNECT CHIPS AND SYSTEMS

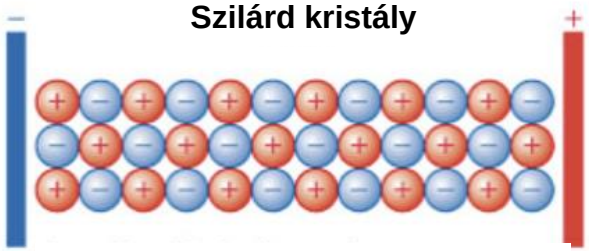
4. A kémiai kötések

Ionos kötés – ionos kristályok tulajdonságai:

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

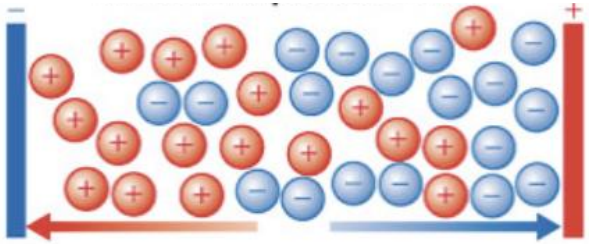
Magyarázat:

Szilárd kristály



Az ionok rögzítettek, nincs vezetés

Olvadék, vagy oldat (pl.vizes elektrolit)



Az ionok elmozdulásra képesek, van villamos vezetés

+ ionok a - elektródhoz

- ionok a + elektródhoz

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

BMEETT

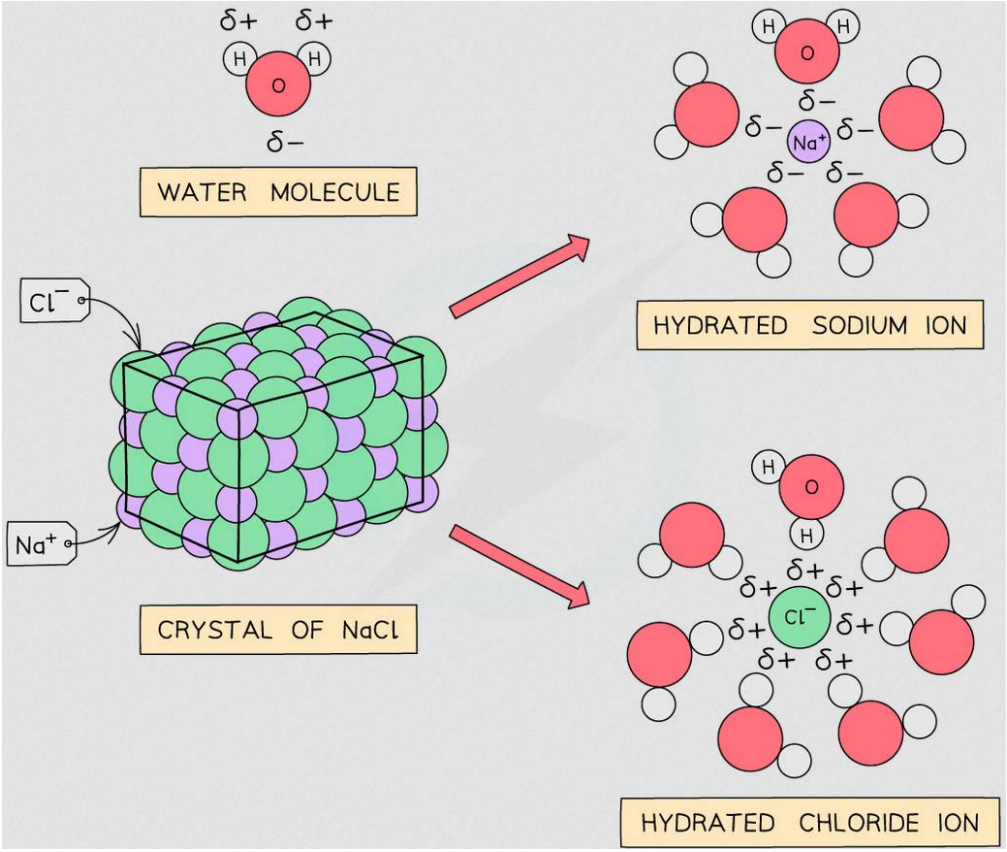
WE CONNECT CHIPS AND SYSTEMS

4. A kémiai kötések

Ionos kötés – ionos kristályok tulajdonságai:

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

Magyarázat:



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

BMEETT

WE CONNECT CHIPS AND SYSTEMS

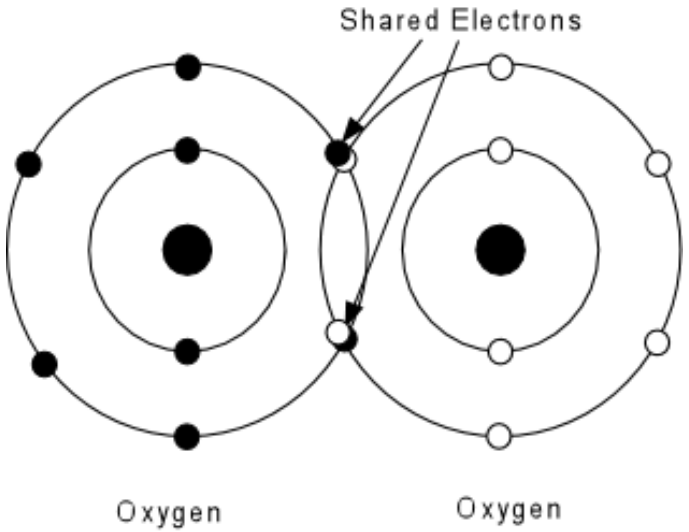
4. A kémiai kötések

Kovalens kötés

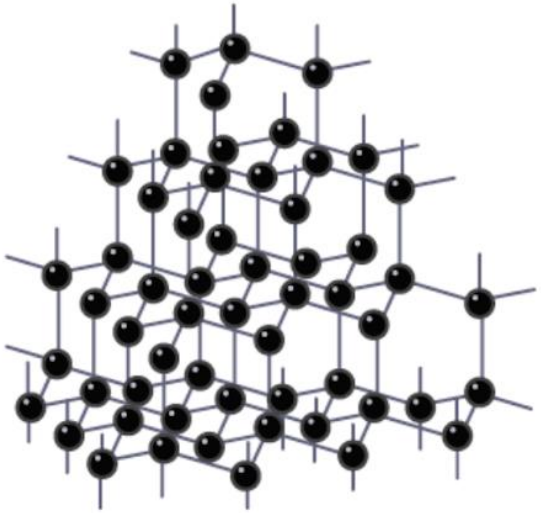
- Kialakulhat azonos atomok között és különböző atomok között is, ha elektronnegativitásuk különbsége kicsi.
- Megosztott elektronokon alapul a kötés, a közösített elektronok a résztvevő atomok külső héjait megosztva teszik teljessé, így stabilizálva azok elektronszerkezetét.

Típusai:

Pl. O_2

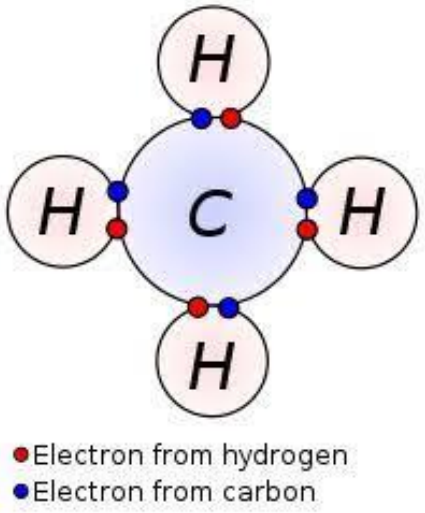


Hálózatos (giant covalent)



Pl. gyémánt, szilícium…

Molekuláris



Pl. gázmolekulák (CH_4, CO_2…)

WE CONNECT CHIPS AND SYSTEMS

4. A kémiai kötések

Kovalens kötés

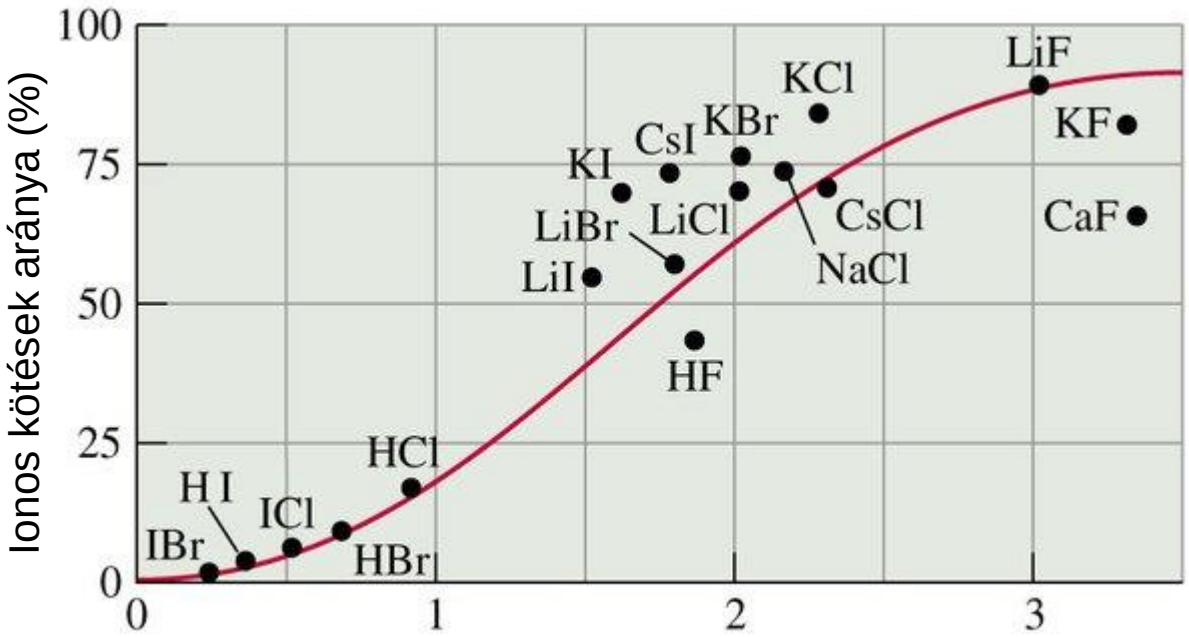
- A valóságban különböző atomok közötti kötések sosem tisztán kovalens vagy ionos jellegűek. A kettő arányát az elektronnegativitások különbsége határozza meg.

- Pl. NaCl (2.3), 75 % ionos
- Pl. NaF (3.05), ~90 % ionos
- Pl. Al_2O_3 (~2), ~ 60% ionos

- Azonos atomok esetén az elektronnegativitások különbsége 0, vagyis tisztán kovalens kötések jönnek létre. Pl. O_2 C-C.

- Bizonyos molekulák, pl. SiO_4^{-4} más atomokkal vagy molekulákkal kovalens vagy ionos kötéseket is tudnak létesíteni.

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



Az elektronnegativitások különbsége

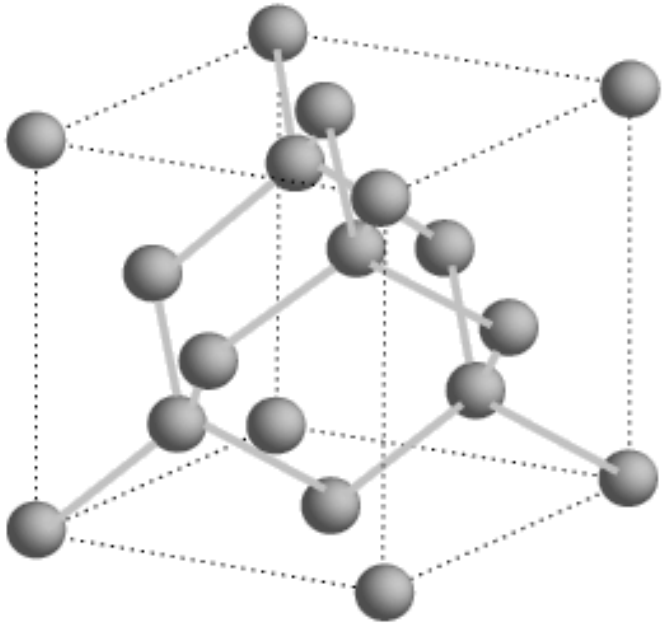
WE CONNECT CHIPS AND SYSTEMS

4. A kémiai kötések

Kovalens kötés – kovalens kristályok tulajdonságai:

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

Magyarázat:



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

BMEETT

WE CONNECT CHIPS AND SYSTEMS

4. A kémiai kötések

Kovalens kötés – kovalens kristályok tulajdonságai:

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

Magyarázat:

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

BMEETT

WE CONNECT CHIPS AND SYSTEMS

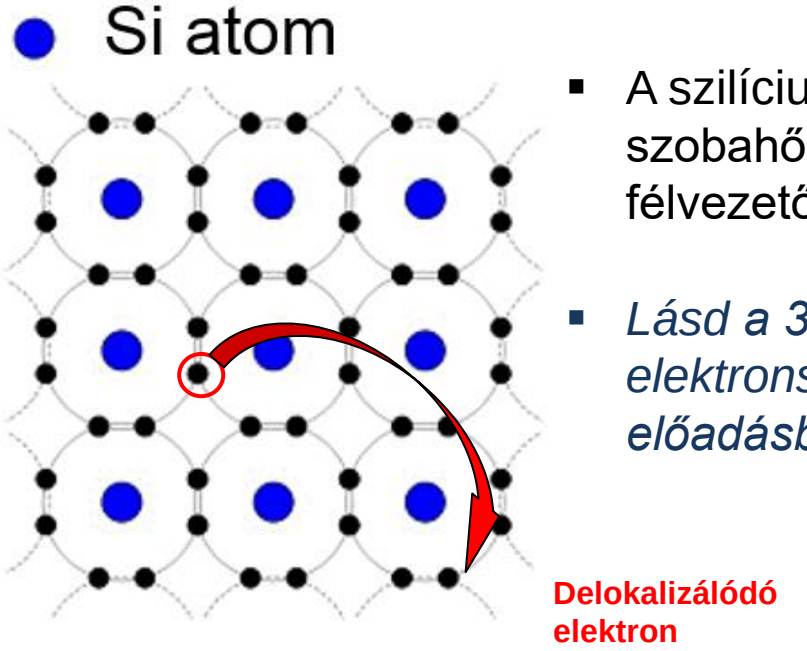
4. A kémiai kötések

Kovalens kötés – kovalens kristályok tulajdonságai:

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

Magyarázat:

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



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

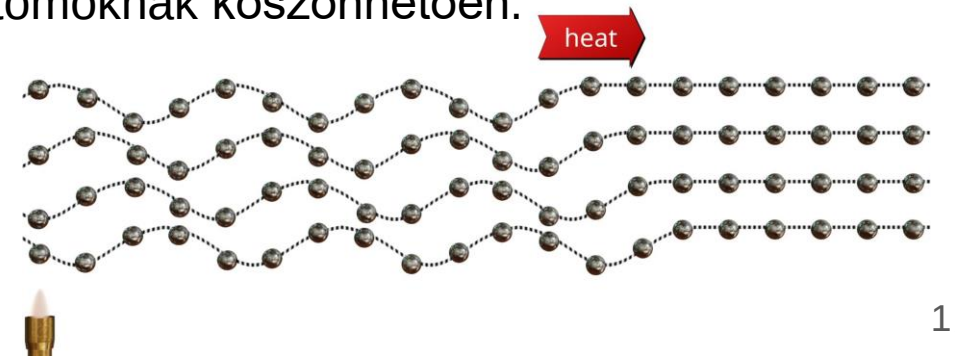
4. A kémiai kötések

Kovalens kötés – kovalens kristályok tulajdonságai:

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

Magyarázat:

- A hővezetési tényező (*k*) jellemzi egy anyagon belül a hőenergia terjedésének lehetséges mértékét (q: hőmérséklet fluxus, ∇T: hőmérséklet gradiens).
- A hővezetésnek két komponense van. Az első a **rácsrezgések** (fononok) közvetlen terjedése, a második az elmozdulni képes **elektronok** rácspontok közötti mozgásából, és ütközéseken keresztüli energiaátadásából áll.
- A rácsrezgés komponens nagyban függ a rácstípustól és az atomok méretétől. A gyémánt rekord jó hővezető (10x Al), a kis, szorosan kötött atomoknak köszönhetően.



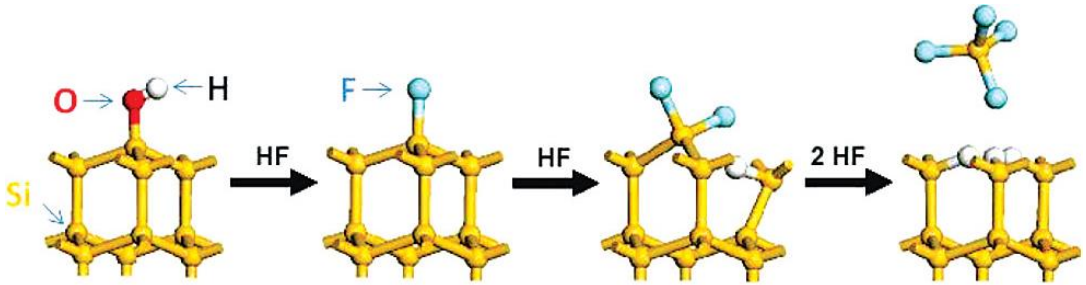
4. A kémiai kötések

Kovalens kötés – kovalens kristályok tulajdonságai:

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

Magyarázat:

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



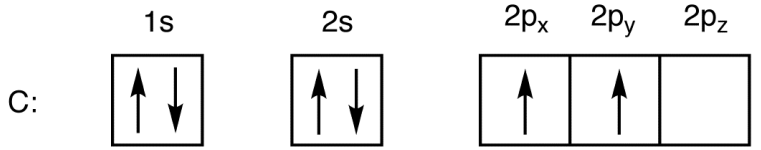
- *Lásd részletesen a 9. "Félvezető anyagok és technológiák" előadásban.*
- *A poláros/apoláros oldhatóság magyarázatát lásd később.*

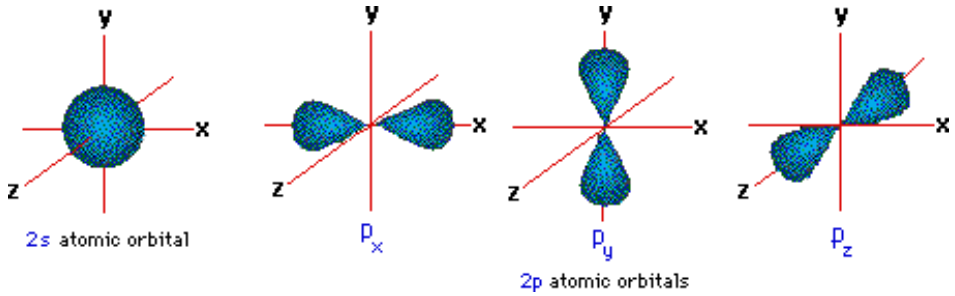
4. A kémiai kötések

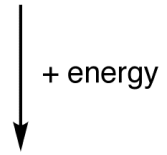
Az atompályák hibridizációja és a molekulák alakja

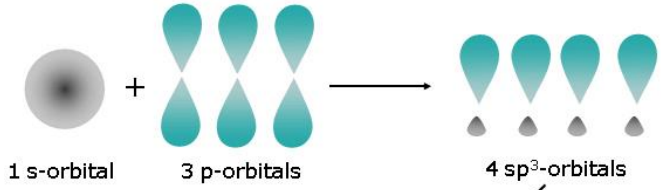
- A kovalens kötések irányítottak, mivel az atomoknak a megfelelő pozícióban kell elhelyezkedniük ahhoz, hogy a szükséges számú szomszéddal kötéseket tudjanak kialakítani. Ez az atompályák alakjának módosulását hozza magával (hibridizáció).
- Pl. A szénatom atompályái és azok hibridizációja

A szén alap konfigurációja (pl. egyedülálló atom):

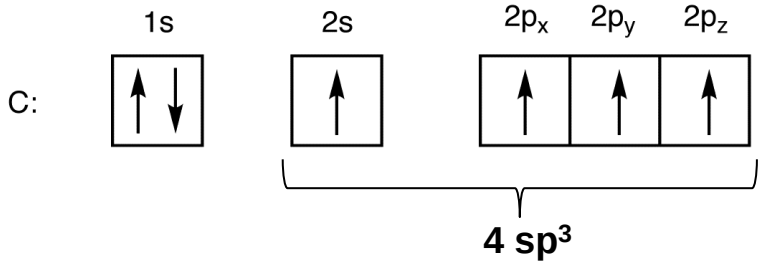


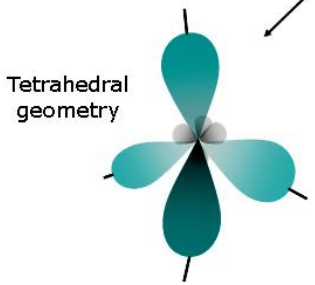






Az sp^3 hibridizáció (pl. gyémántrács, metán)



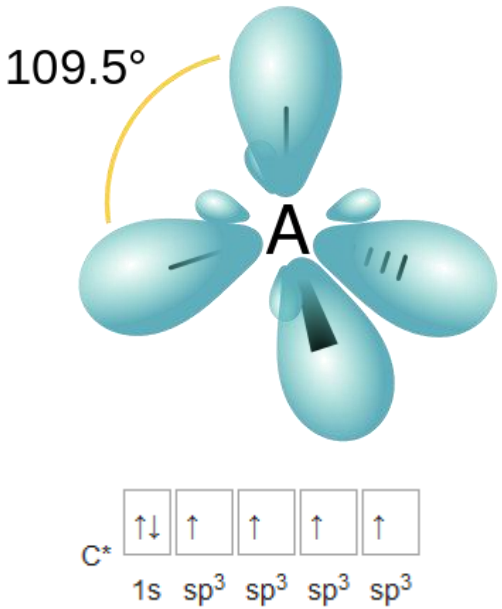


4. A kémiai kötések

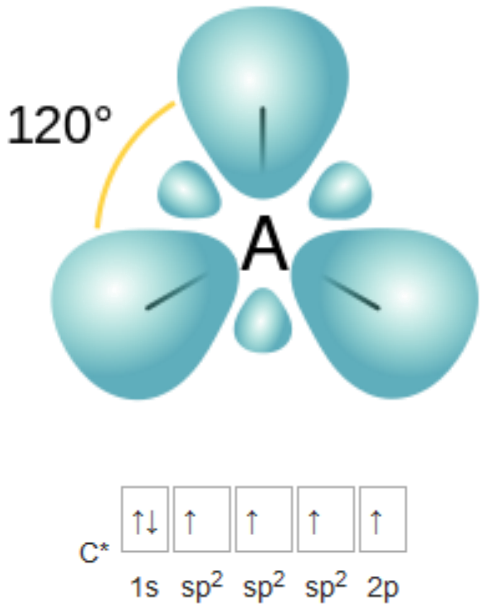
Az atompályák hibridizációja és a molekulák alakja

- Példa: a szénatom pályáinak lehetséges hibridizációi

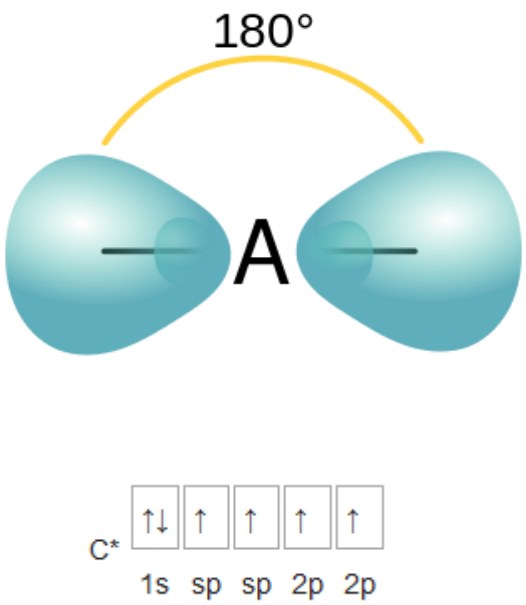
sp^3
Pl. gyémánt, CH_4,
(Si egykristály)



sp^2
Pl. grafén, etilén (C_2H_4)



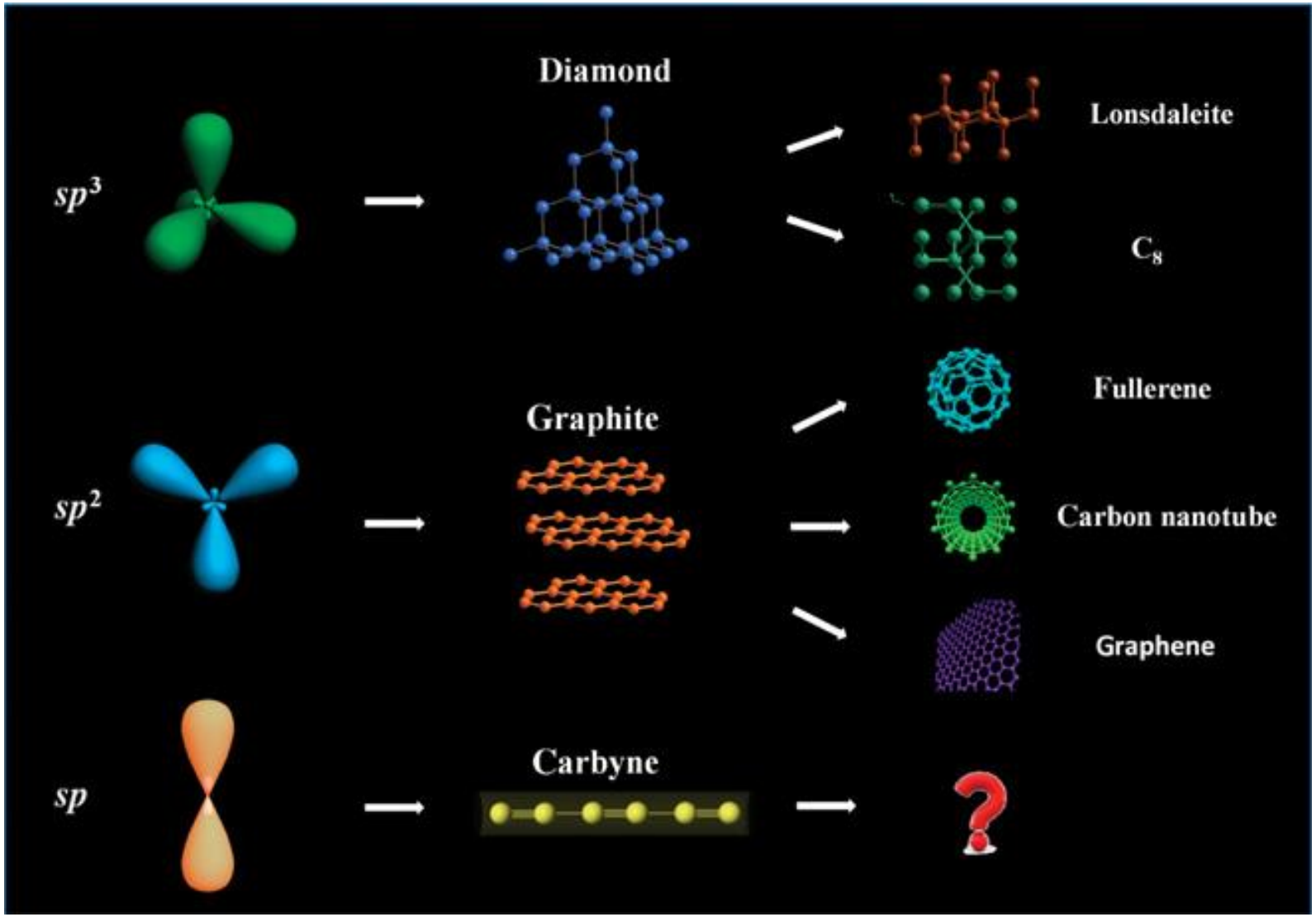
sp
Pl. carbin, acetilén (C_2H_2)



WE CONNECT CHIPS AND SYSTEMS

4. A kémiai kötések

Érdekesség: a szén allotrop módosulatainak kötései



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

Drasztikusan eltérőek lehetnek a makroszkopikus fizikai tulajdonságok. Példák:

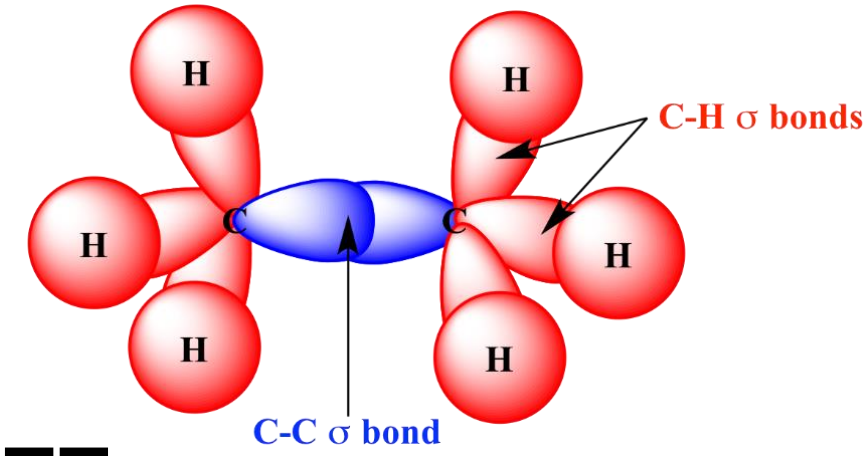
- A gyémánt kemény, a grafit kenhető.
- A gyémánt elektromos szigetelő, a grafit (és a grafén) rekord jó vezető.
- A grafénből (egy szénatomsor vastagságú háló) feltekert szén nanocsőből létezik vezető és félvezető tulajdonságú is.

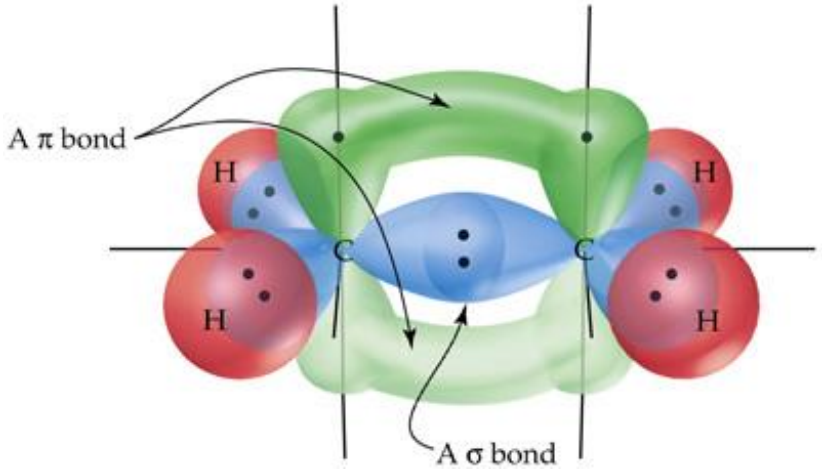
WE CONNECT CHIPS AND SYSTEMS

4. A kémiai kötések

Kovalens kötések – molekuláris pályák

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





WE CONNECT CHIPS AND SYSTEMS

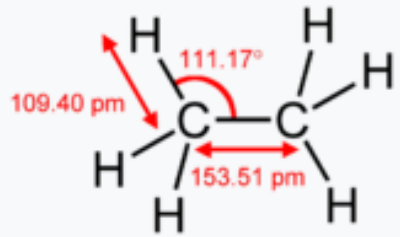
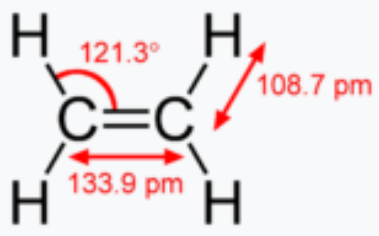
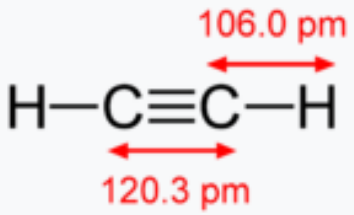
4. A kémiai kötések

A kovalens kötések következményei (1):

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

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

Comparison of bond-lengths in simple structures

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

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

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

Források:
http://www.wiredchemist.com/chemistry/data/bond_energies_lengths.html
wikipedia

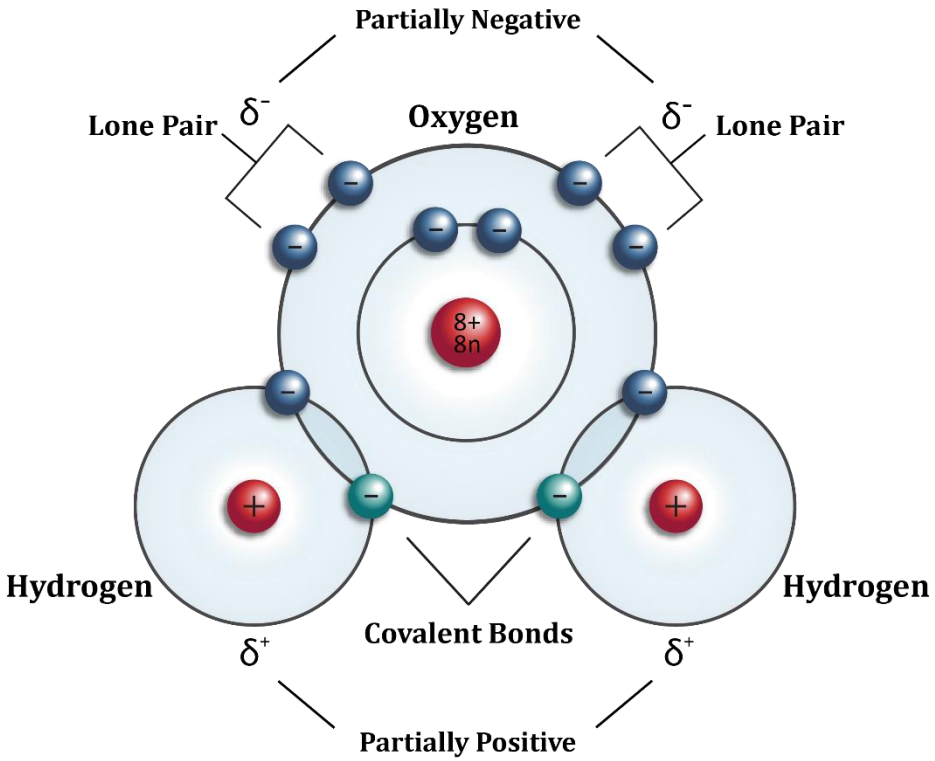
WE CONNECT CHIPS AND SYSTEMS

4. A kémiai kötések

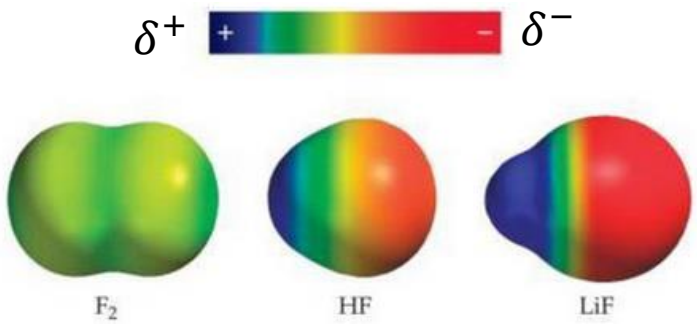
A kovalens kötések következményei (2):

Poláros és apoláros molekulák

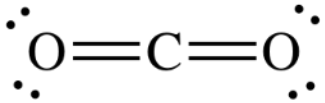
Tipikus poláros példa: H_2O

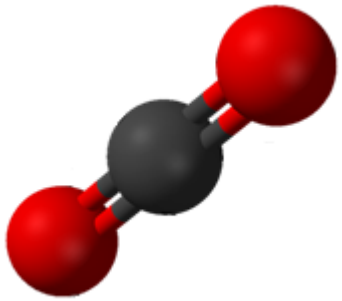


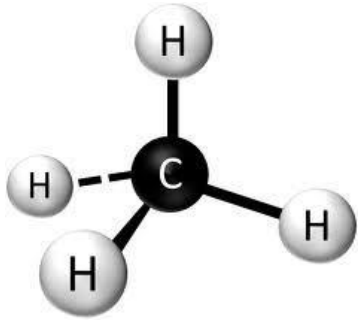
Poláros kovalens kötés: amennyiben az elektronnegativitások különbsége nagy (de még nem ionos a kötés) parciálisan pozitív és negatív részek alakulnak ki (δ^+, δ^-).
Poláros molekula (dipólusmolekula): poláros kövalens kötés és asszimmetrikus kötési elrendezés esetén.



Apoláros molekula: azonos elemek közötti nempoláros kovalens kötés, <u>vagy</u> poláros kovalens kötés, de szimmetrikus elrendezésben (nincs elektromos dipólusmomentum)
Pl. CO_2, CH_4







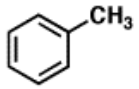
4. A kémiai kötések

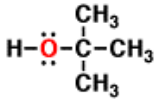
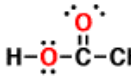
A kovalens kötések következményei (3):

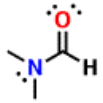
Az anyagok eltérő **oldhatósága** -> poláros, apoláros oldószerek, hidrófób, hidrofil, amfifil tulajdonságok.
Ökölszabályok:

A szénláncokból, széngyűrűkből álló oldószerek általában apolárosak.

Az oxigént tartalmazó oldószerek általában polárosak.

Nonpolar solvents		Dielectric constant	Dipole Moment
	Pentane	1.8	0.00 D
	Hexane	1.9	0.00 D
	Cyclohexane	2.0	0.00 D
	Benzene	2.4	0.00 D
	Toluene	2.3	0.36 D
$CHCl_3$	Chloroform	4.8	1.04 D

Polar Protic Solvents		Dielectric constant	Dipole Moment
$:NH_3$	*Ammonia*	~25	1.4 D
	*t-Butanol*	12	1.7 D
$H-\ddot{O}-CH_2CH_2CH_3$	*n-Propanol*	20	1.68 D
$H-\ddot{O}-CH_2CH_3$	*Ethanol*	25	1.69 D
$H-\ddot{O}-CH_3$	*Methanol*	33	1.70 D
	*Acetic acid*	6.2	1.74 D
$H-\ddot{O}-H$	*Water*	80	1.85 D

Polar aprotic solvents		Dielectric constant	Dipole Moment
	Acetone	21	2.88 D
	*N,N*-Dimethylformamide (DMF)	38	3.82 D
$H_3C-C\equiv N:$	Acetonitrile (MeCN)	37	3.92 D
	Dimethyl sulfoxide (DMSO)	47	3.96 D

BMEETT

WE CONNECT CHIPS AND SYSTEMS

4. A kémiai kötések

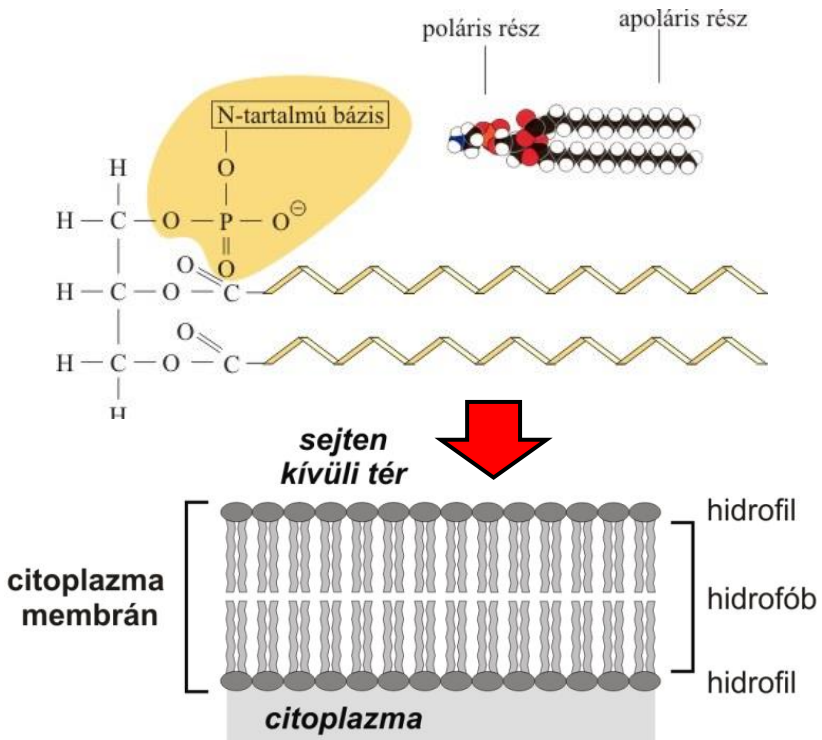
A kovalens kötések következményei (3): oldhatóság

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

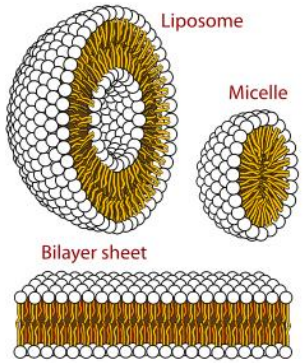
- Hidrofil: (felület vagy molekula) vizet szerető (poláros), vízben oldódó. A víz nedvesíti a hidrofil felületet.
- Hidrofób: vizet nem szerető (apoláros), vízben nem oldódó. A víz nem nevesíti a hidrofób felületet.
- Amfifil molekula: egy hidrofób (apoláros) és egy hidrofil (poláros) résszel rendelkezik.

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

Példa amfifil molekulákra: foszfolipid membránok



Példa (2): szuperhidrofób felület



BMEETT

WE CONNECT CHIPS AND SYSTEMS

4. A kémiai kötések

Kötéserők összehasonlítása (wiki)

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

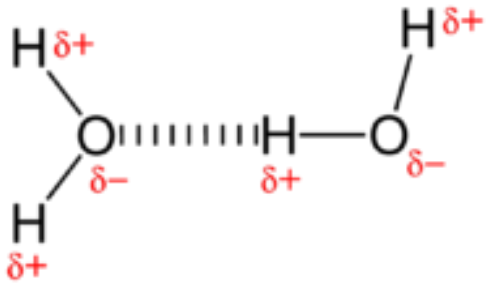
A kovalens kötések következményei (4):

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

Dipól-dipól

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

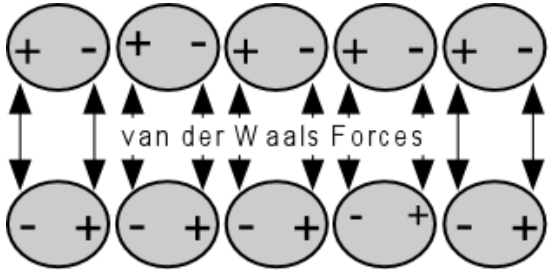
H-hidak



- Egy speciális, erős dipól-dipól típus.
- Térben irányított.
- Limitált számú kölcsönható fél van.

Következményei: fehérjék, nukleinsavak másodlagos, harmadlagos szerkezete stb…

Van der Waals erők



- Gyűjtőfogalom különböző (jellemzően gyenge) elektrosztatikus erőhatásokra (állandó vagy indukált dipólusok között).

Következményei: gázok adszorpciója felületekre, felületek makroszkopikusan is tapasztalható tapadása stb.

Részletesebben lásd pl: https://hu.wikipedia.org/wiki/K%C3%A9miai_k%C3%B6t%C3%A9s

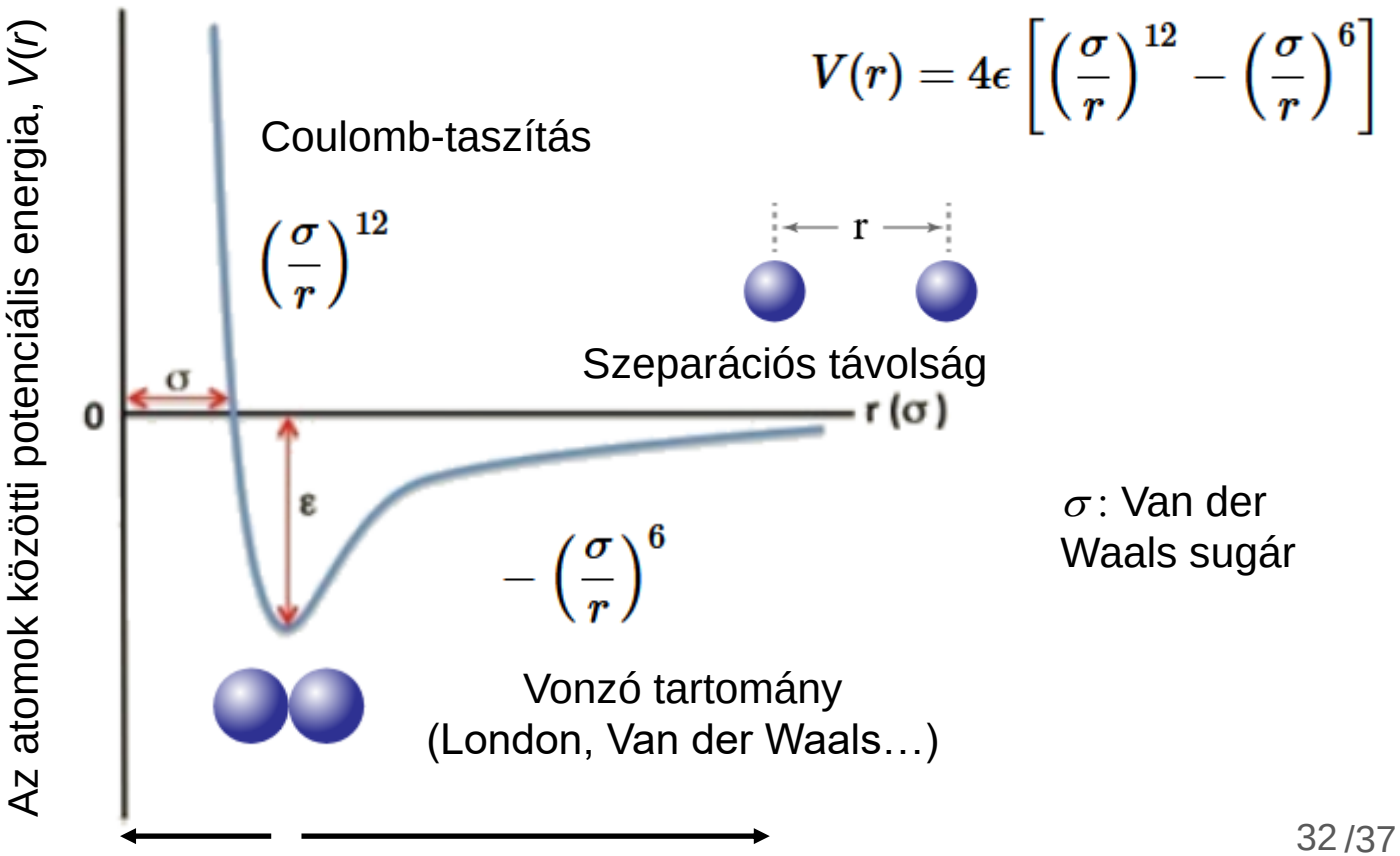
4. A kémiai kötések

A kovalens kötések következményei (5):

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

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

A Lennard-Jones-potenciál



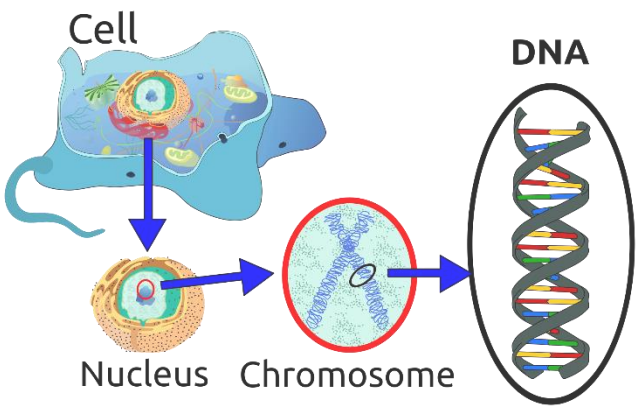
σ: Van der Waals sugár

WE CONNECT CHIPS AND SYSTEMS

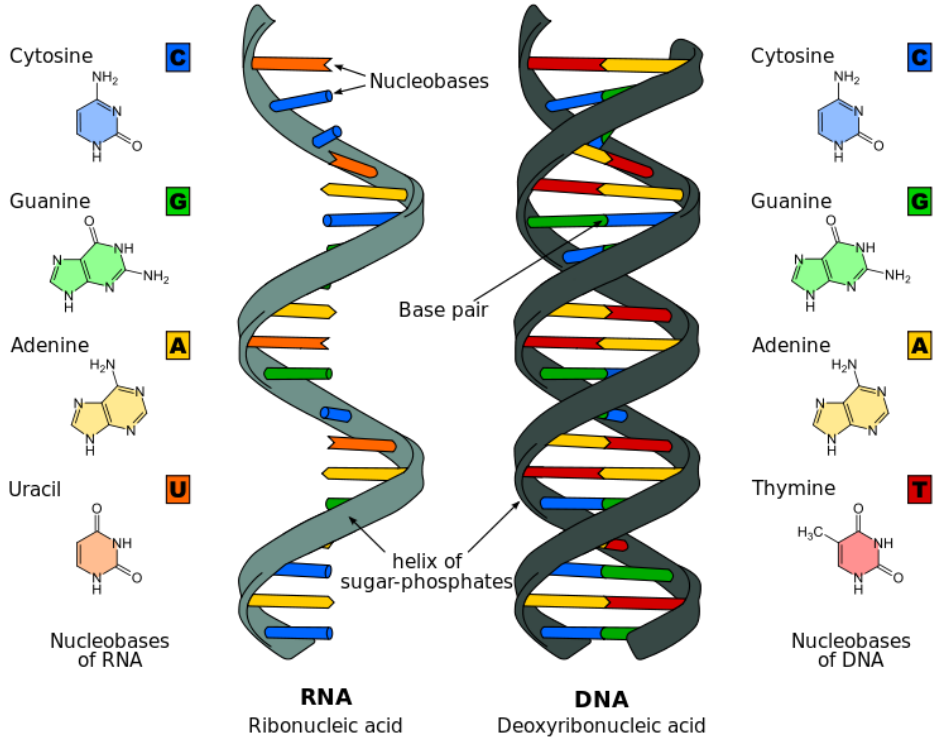
4. A kémiai kötések

A kovalens kötések következményei:

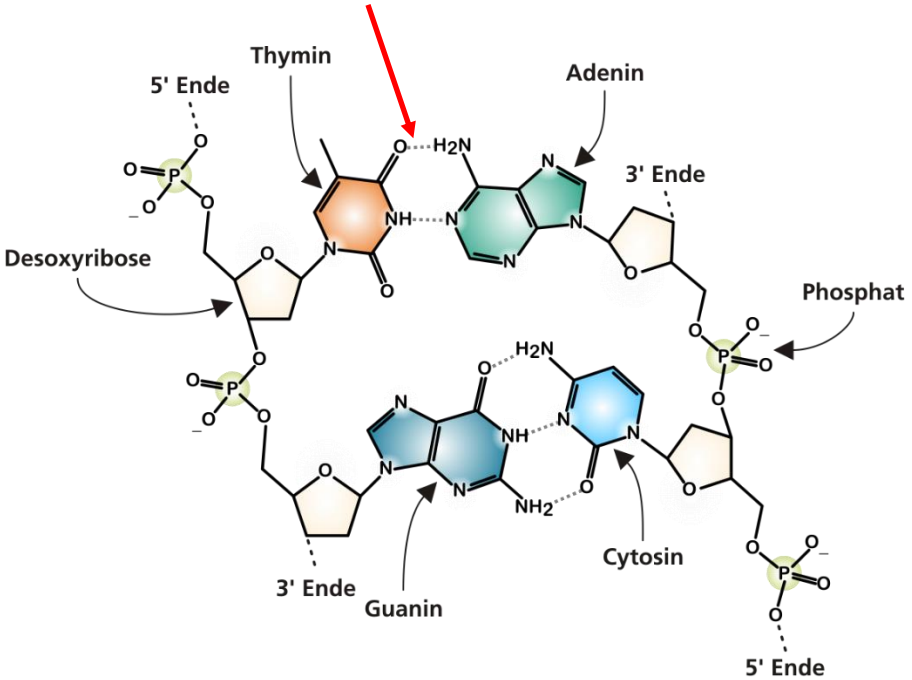
Érdekesség (1): Szerves molekulák magasabb rendű felépítése, kulcs-zár mechanizmusok



A DNS-molekulák felépítése:

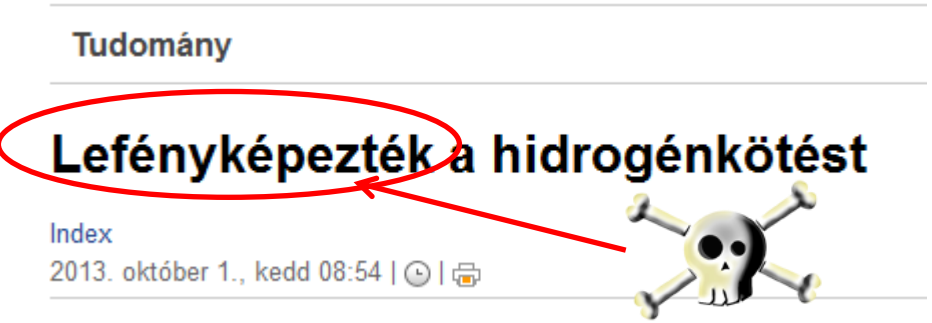


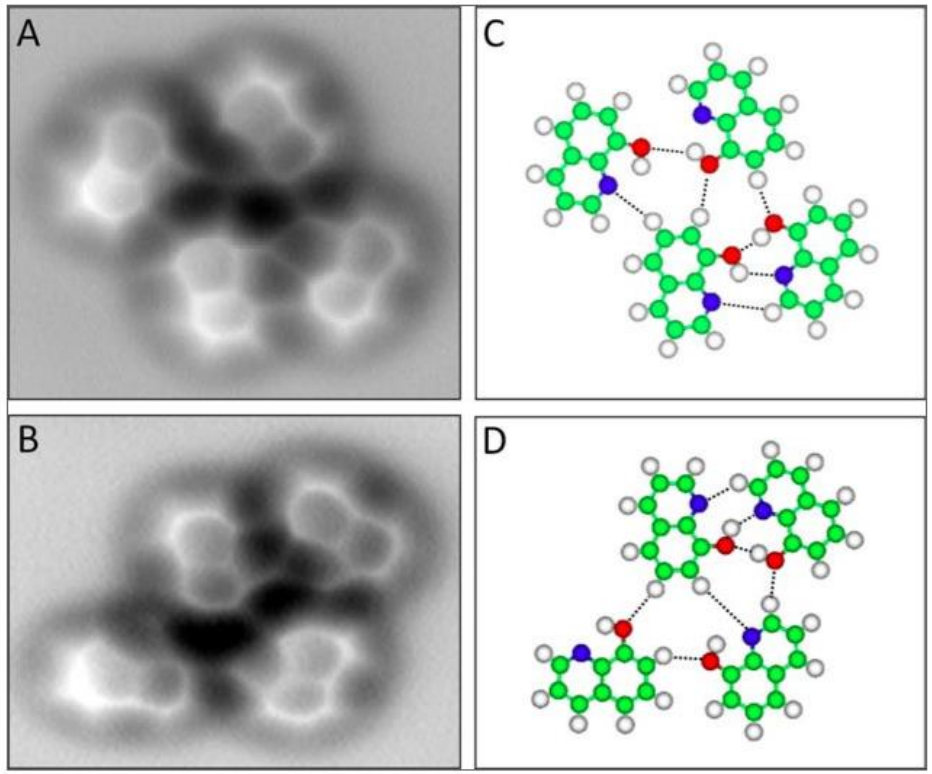
A 3Ds struktúrát a kovalens kötések feszítik ki. A részek közötötti (sokszor szelektív) összekapcsolódásért a hidrogénkötések felelnek.



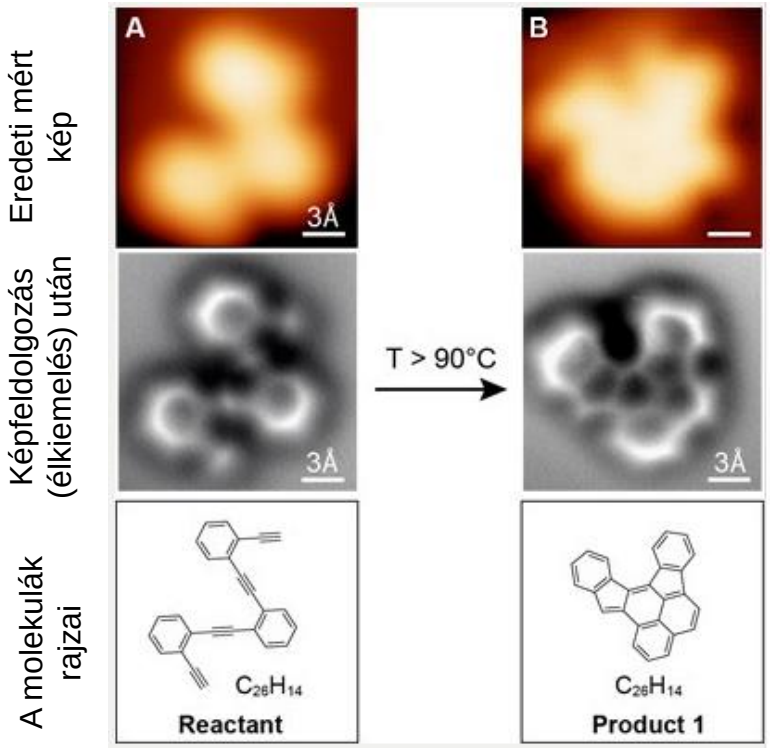
4. A kémiai kötések

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



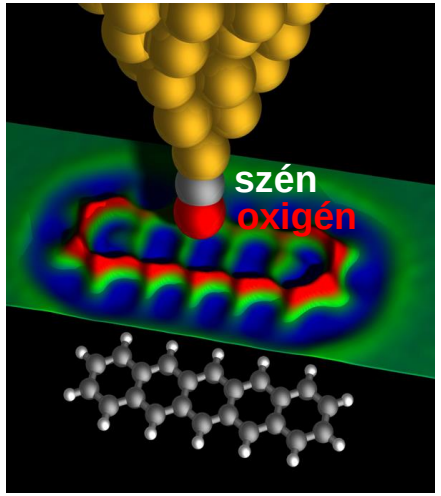


Egy korábbi cikk „Tényleg úgy néznek ki a molekulák, ahogy az iskolában tanultuk” címmel:



Mi kell ehhez?

- atomierő mikroszkóp (AFM),
- Ultranagy vákuum,
- Alacsony hőmérséklet (4K),
- Egyetlen atomban végződő tű…



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

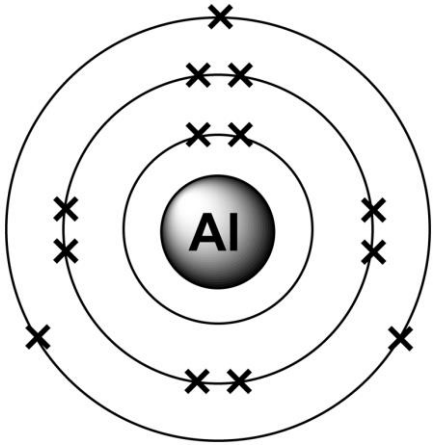
WE CONNECT CHIPS AND SYSTEMS

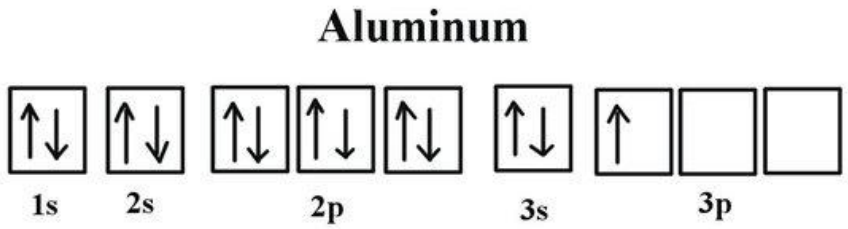
4. A kémiai kötések

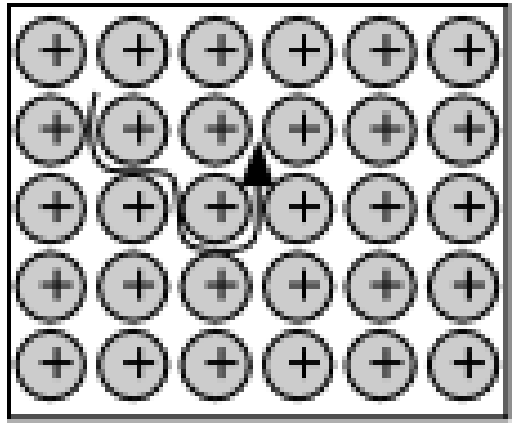
Fémes kötés

- Akkor jön létre, ha az atomoknak a külső elektronhéjon kevés elektronja van, így nem tudják egymás között kovalens kötéssel megoldani, hogy mindenki zárt elektronszerkezetre tegyen szert. Lásd pl. Al.

- Az atomok a vegyérték elektronjaikat bedobják a közösbe, az eredmény: rácsban rögzített **pozitív töltésű atomtörzsek** (= az atommag és a zárt elektronhéjak összessége), valamint **delokalizált, elmozdulásra képes elektronok** (elektronfelhő, vezetési elektronok).







WE CONNECT CHIPS AND SYSTEMS

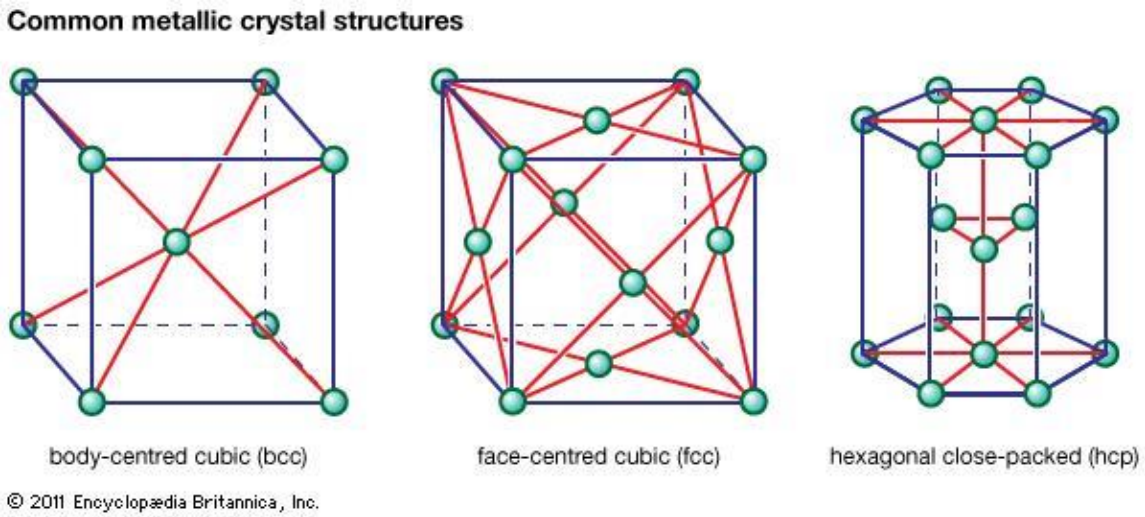
4. A kémiai kötések

Fémes kötés – fémes kristályok tulajdonságai

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

Lásd részletesen az alábbi előadásokban:

- *4. "Kristálytan",*
- *5. "Ötvözetek",*
- *6. "Fémek mechanikai tulajdonságai",*
- *7. "Fémek elektromos tulajdonságai".*



WE CONNECT CHIPS AND SYSTEMS

Ellenőrző kérdések

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

Példák igaz-hamis kérdésekre:

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