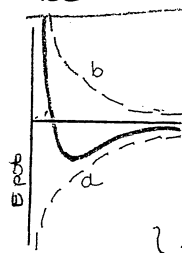


- elemek \rightarrow molekula \rightarrow kémiai kötés tartja össze
 - molekulán belül meghatározott pozíció \Rightarrow a rendszer E -ja minimumra nő ha a kötéstávolság változik

- kötéstávolság (= egyensúlyi távolság) \sim kötési E : felrakításához ...
 - pot. E függvény: vonzó + taszító kh.

$$E_{\text{pot.}} = E_{\text{vonzó}} + E_{\text{taszító}}$$



a: vonzó
b: taszító

- kötéstípusok:

- \rightarrow intra v. intermolekuláris
- \rightarrow erős v. gyenge (elsődleges v. másodlagos)

• KOVALENS KÖTÉS:

- 2 alkotó atommagra közösen kiterjedő e^- állapot ("közös e^- tartja össze")
- vegyérték-e⁻-k alakítják ki
- apoláris k.k.: \oplus és \ominus töltések súlypontja egybeesik
kevés toxita k.k. kötés (H_2 ; Cl_2 ; O_2)
- poláris k.k.: \oplus és \ominus töltés súlypontja eltolódik
elektrosztatikus kh. is
pl.: $HCl \rightarrow$ a H e^- -ja a Cl-hoz közelebb
elektromos dipólusmomentummal rendelkező poláris molekula

- közös e^- pár: fémek kötés

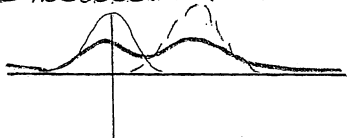
\rightarrow ϕ fémek klád - kristályok

\rightarrow egész rendszerre kiterjedő delokalizált vegyérték e^- -k

- több $eV \rightarrow$ erős

- elsődlegesen nem elektrosztatikus \rightarrow nem befolyásolja a környezetben poláris molekula

- kládok kötés (H_2)



- alapáll. H atom közelében: p^+
- egyensúly magbaurk \rightarrow állapotú. átszivároga p^+ fölé
- kettő között \rightarrow egyensúlyi áll. \rightarrow hullámhossz ingas E csökken

• ELEKTROSZTATIKUS KH

- poláris k.k. \rightarrow az e^- -t kül. vonzák

- Pauling: elektronnegativitás \rightarrow ionizációs E , e affinitás

\rightarrow • IONOS KÖTÉS

- Coulomb erőkből
- heteropoláris kötés kialakulása
- töltésettolódás kisebb, mint a feltételhez
- olyan atomok között: $|\Delta EN| > 2.1$
- alt. sokatomos rendszerek
- hosszú hatótávolság: Az E_{pot} vonzó tagja a távolságreciprokával arányos
- elektromosan töltött részecske megvalósítása \rightarrow disszociáció

DIP-DIP - néhány eV ; erős

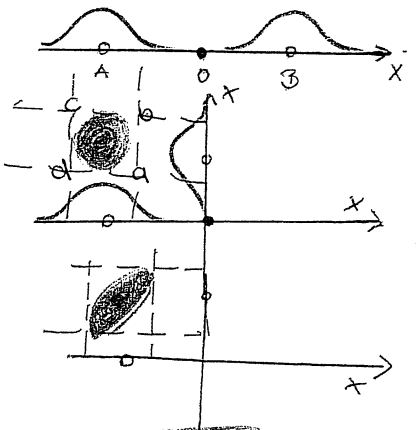
\rightarrow • a kh. az alacsonyabb energiájú dipólus felé töltéseloszlás miatt jár létre

vonzó kh. E -ja: $E_{\text{vonzó}} = \mu E$ \rightarrow elektromos tér erősege

taszító kh.: e^- felhő taszítása

• VAN DER WAALS KÖTÉSŰHATÁS (London-féle erő)

- apoláris molekulában (v. atomcsoport-ban) időlegesen kialakuló dipólus + másik molekul. indukált dipólus közti vonzó erő
- kialakulása:



- 2 egymástól távol lévő (H) atom
- x tengely 2-re, 90°-os forgatása (leértéktűtől)
- \bullet : 2e-rendszer kollektív mozgásáll.-a
- a.j.c.: egyező töltések fordítottak szűke helyzeti E_{ud}
- b.i.d.: ellentétes töltések kedvező E helyek elfoglalása
- a rendszer E növekedése
- növekedő p^+ távolság \rightarrow erősödik ($\frac{p^+ \cdot q^-}{r^2}$ köze - $\frac{1}{r^6}$)

- taszítóerő: ugaratadályozza, ha az e-pályák fedésbe kerüljenek
- energiaminimumnak ugr. távolság: Van der Waals sugárak összege (2 szomszédos görbe éppen érinti egymást)
- gyenge intermolekuláris kapcs.

• H-KÖTÉS (H-híd)

- a H atom 2 nagy EN-ű atom (pillératom) közt létesít kapcsolatot

$$\begin{matrix} & \downarrow & \\ & F_{ON} & \\ & \downarrow & \\ & \text{távolság, köt. E anyagi} \\ & \text{m.h. töe függ} & \end{matrix}$$
- kötés erősség: kilokalória, dipólus $<$ (kb 0.2e)
- többféle hh szerepet játszhat
- makromolekulák, víz

• HIDROFÓB KÖTÉS

- biológiai folyamatok: vizes közegben

$$\begin{matrix} & \downarrow & \\ & \text{HH kötés (2 donor, 2 akceptor)} & \end{matrix}$$
- poláris molekula: elkeverednek, elektrosztatikus hh
- hidrofób molekulák: együtt kötődnek \rightarrow víz kizárása

$$\begin{matrix} \downarrow \\ \text{gyeng. Vdk-kh} \rightarrow \text{tervezés E szétválasztása} \end{matrix}$$
- ~~szétválasztás~~

$$\begin{matrix} \rightarrow \text{víz - levegő határfelület: felszín közelében rendezettebb, kötés kialakítása csak a víz felé} \\ \rightarrow \text{ap. molekula közele: rendezettebb rendezettség} \\ \rightarrow \text{egyensúlyra törekvés: entropia növekedés} \\ \rightarrow \text{rendezettség növekedése: összehangják az ap. molekulákat} \\ \rightarrow \text{körülötük rendeztebb határfelület} \end{matrix}$$
- felhívják biológiai membránok