

A kémiai kötés

A klasszikus alapokon nyugvóelektronoktett- elmélet

Az atomok többsége a nemesgázok kivétel a Földön **instabil**.

Vegyületeket képeznek úgy, hogy nyílt héjuk lezárttá (nemesgáz elektronkonfigurációjává) váljon.

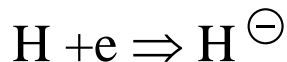
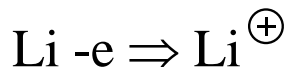
Pauling-féle elektronegativitási érték

	2.1								-
K-héj	H								He
L-héj	Li	Be	B	C	N	O	F		Ne
	1	1.5	2	2.5	3	3.5	4		

Hogy érik ezt el? A cél érdekében adott számú elektront

- adnak le,
- vesznek fel vagy
- tesznek a közösbe.

A) Az ionos kötés (ha a két atom között az elektronegativitás **különbsége nagy!**) következmény: **igen stabil** ionkristály



pl. **LiH** (ionkristály op. 680°)

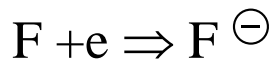
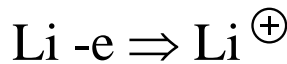
zárt héj mint a He

zárt héj mint a He

pl. **LiF** (ionkristály op. 845°)

zárt héj mint a He

zárt héj mint a Ne



A kötést létrehozó atomok elektronegativitási értékének (EN) ismeretében eldönthető hogy fémes, vagy ionos kötés jön létre:

Vegyünk két atomot és határozzuk meg a két atom elektronegativitásának

1) összegét: ΣEN_i

2) különbségét: ΔEN_i

Ha tehát

- ΣEN **kicsi** és ΔEN **kicsi**, akkor az atomok között **fémes kötés**,

- ΣEN **nagy** és ΔEN **kicsi**, akkor **kovalens kötés**,

ΔEN **nagy**, akkor **ionos kötés** jön létre.

Pl.

NaCl: 0,9 és 3,16, tehát $\Sigma EN=4,06$ és $\Delta EN=2,26$:

→ ΔEN **nagy** ezért ionos kötés

HCl: 2,2 és 3,16, tehát $\Sigma EN=5,36$ és $\Delta EN=0,96$:

→ $\Sigma EN=$ **nagy** (5,36) és $\Delta EN=$ **kicsi** (0,96) ezért kovalens a kötés

Zn-Zn: 1,65 tehát $\Sigma EN=3,3$ és $\Delta EN=0$:

→ $\Sigma EN=$ **kicsi** (3,3) és $\Delta EN=$ **kicsi** (0) ezért fémes a kötés

Cu-Zn: 1,9 és 1,65 tehát $\Sigma EN=3,55$ és $\Delta EN=0,25$:

→ $\Sigma EN=$ **kicsi** (3,55) és $\Delta EN=$ **kicsi** (0,25) ezért fémes a kötés a bronz ötvözetben.

memo: az **EN** segítségével határozható meg, hogy mely atom képes **hidrogénkötés** kialakítására.

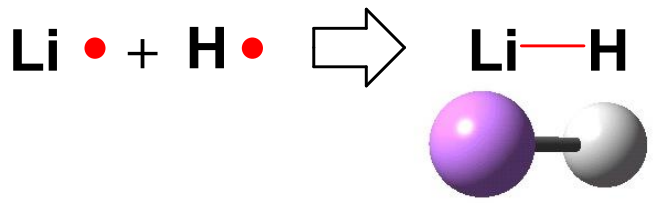
megfigyeés/tapasztalat: csak a három legnagyobb EN-ú elem, a F, O, N képes erre.

→ Atomsugár nő → Ionizációs energia nő → Elektronegativitás nő →

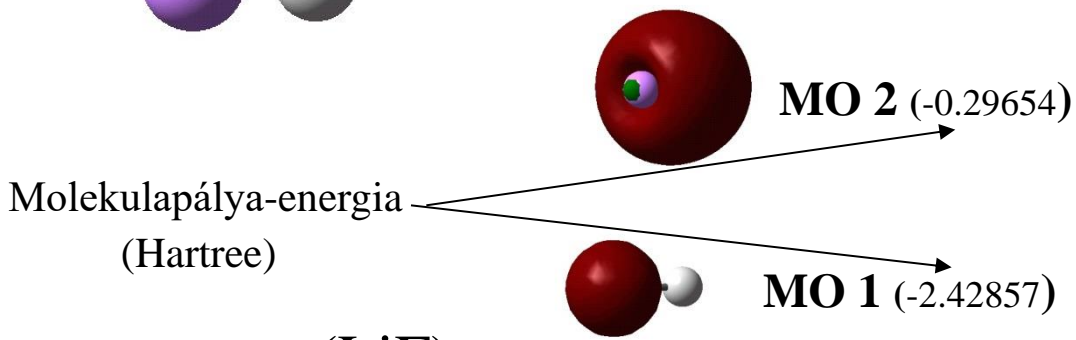
Csoport (oszlopok)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
1	H 2,20																	He 3,89	
2	Li 0,98	Be 1,57												B 2,04	C 2,55	N 3,04	O 3,44	F 3,98	Ne 3,67
3	Na 0,93	Mg 1,31												Al 1,61	Si 1,90	P 2,19	S 2,58	Cl 3,16	Ar 3,3
4	K 0,82	Ca 1,00	Sc 1,36	Ti 1,54	V 1,63	Cr 1,66	Mn 1,55	Fe 1,83	Co 1,88	Ni 1,91	Cu 1,90	Zn 1,65	Ga 1,81	Ge 2,01	As 2,18	Se 2,55	Br 2,96	Kr 3,00	
5	Rb 0,82	Sr 0,95	Y 1,22	Zr 1,33	Nb 1,6	Mo 2,16	Tc 1,9	Ru 2,2	Rh 2,28	Pd 2,20	Ag 1,93	Cd 1,69	In 1,78	Sn 1,96	Sb 2,05	Te 2,1	I 2,66	Xe 2,67	
6	Cs 0,79	Ba 0,89	*	Hf 1,3	Ta 1,5	W 2,36	Re 1,9	Os 2,2	Ir 2,20	Pt 2,28	Au 2,54	Hg 2,00	Tl 1,62	Pb 2,33	Bi 2,02	Po 2,0	At 2,2	Rn 2,2	
7	Fr 0,7	Ra 0,9	**	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo	
Lantanoidák	*	La 1,1	Ce 1,12	Pr 1,13	Nd 1,14	Pm 1,13	Sm 1,17	Eu 1,2	Gd 1,2	Tb 1,1	Dy 1,22	Ho 1,23	Er 1,24	Tm 1,25	Yb 1,1	Lu 1,27			
Aktinoidák	**	Ac 1,1	Th 1,3	Pa 1,5	U 1,38	Np 1,36	Pu 1,28	Am 1,13	Cm 1,28	Bk 1,3	Cf 1,3	Es 1,3	Fm 1,3	Md 1,3	No 1,3	Lr 1,291			

A litium-hidrid molekula (LiH)

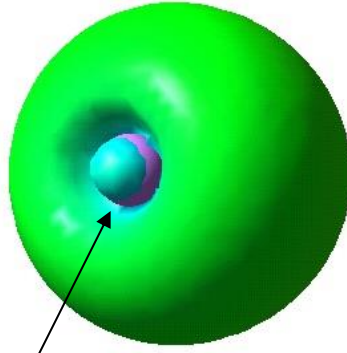
3+1 elektron \Rightarrow 2 betöltött MO
 $\mu = 5.99$ Debye (RHF/3-21G)



Jelentős töltés-elkülönülés: 1 \leftrightarrow 2.1



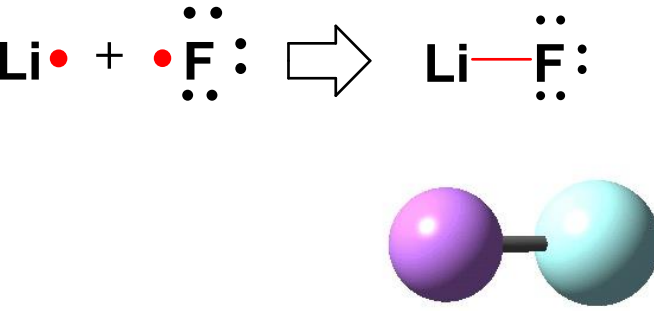
EPS
 $-1.40 \leq \text{töltés} \leq +1.40$



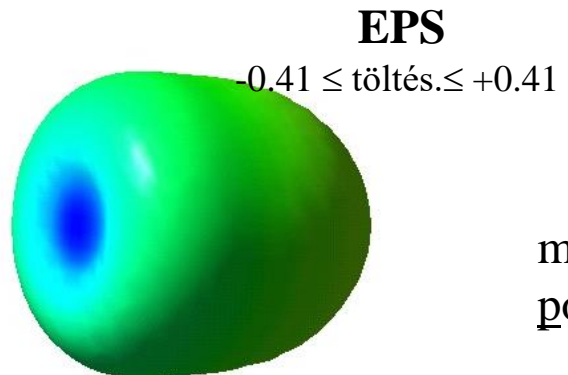
Pozitív rész :
 alig van elektronsűrűség

A litium-fluorid molekula (LiF)

3+9 elektron \Rightarrow 6 betöltött MO
 $\mu = 5.74$ Debye (RHF/3-21G)



Jelentős töltéselkülönülés: 1 \leftrightarrow 4

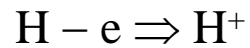


memo: **EPS** := electrostatic
potential surface

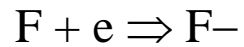
A szén nem tud 4 elektront leadni vagy 4 elektront felvenni ezért másként éri el a neonéhoz hasonló elektronszerkezetet

B) A kovalens kötés (ha a két atom között az elektron-negativitás különbsége kicsi)

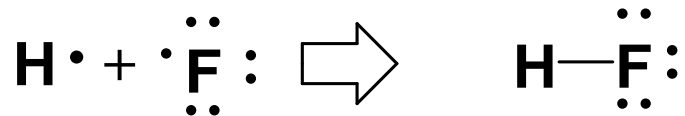
1) **HF** (nem ionos hanem kovalens kötés: **poláris jelleggel**)



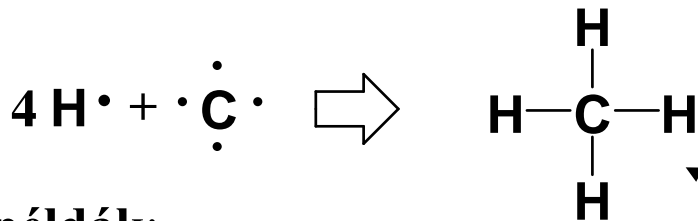
a protonnak nem lenne saját elektronja
ezért **nem is adja** azt teljesen le.



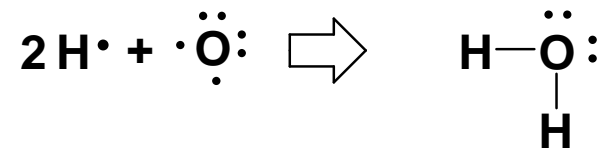
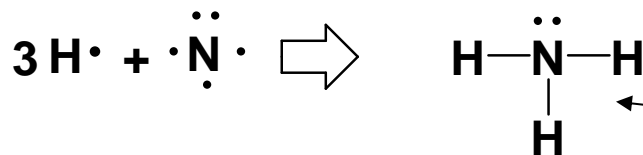
fluorid anion zárt héjú, mint a Ne



2) **CH₄** (kovalens kötés **apoláris jelleggel**)

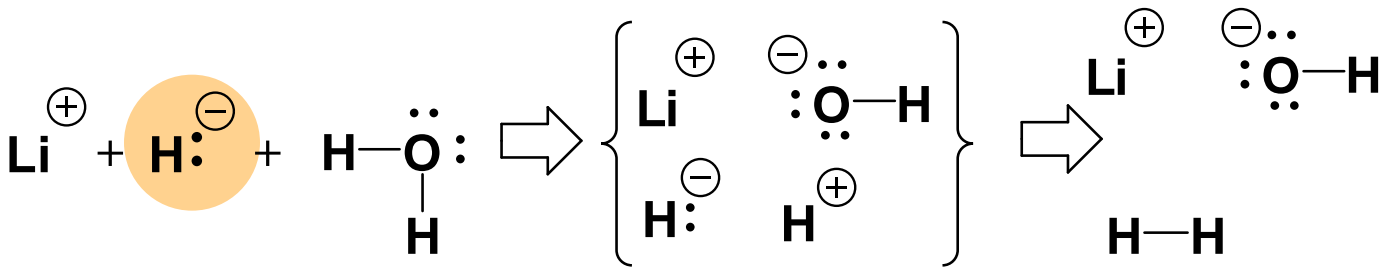


további példák:



Lewis-féle” szerkezet

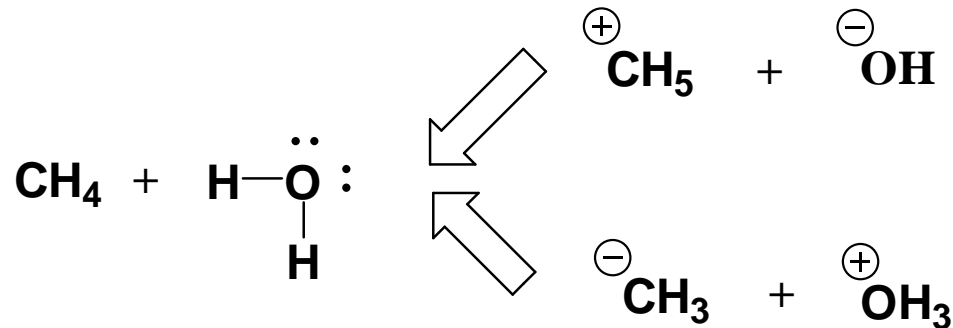
Kémiai reakció hajtóereje lehet pl. az ellentétes töltések vonzása:



A **hidridion** nehezen viseli a negatív töltést, ezért megkeresi pozitív párját a **protont** (H^+). A reakció sikeréhez az is kell, hogy

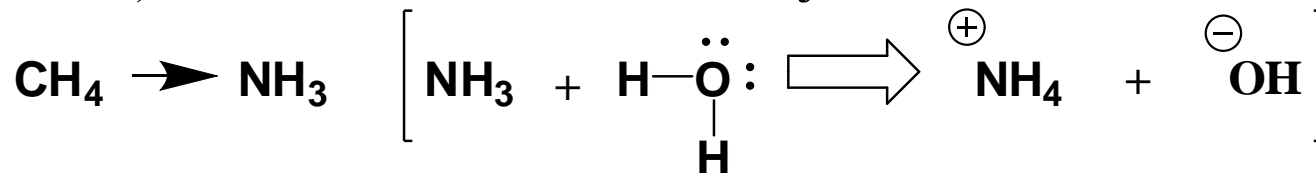
- 1) a protondonor poláris legyen (víz), valamint
- 2) deprotonált formában (OH^-) stabil legyen.

Variáció egy témára: ez a reakció **nem megy**, mert se a metán sem a víz **nem elég poláris**:



De a reakció persze eredményes,

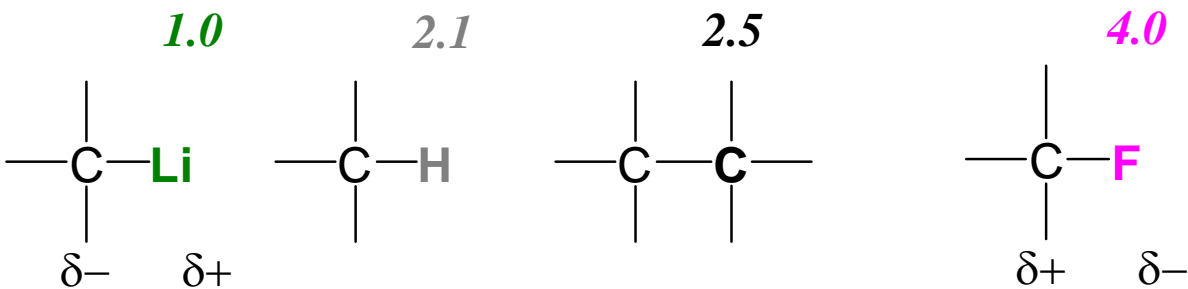
- 1) ha a metánt ammóniára cseréljük:



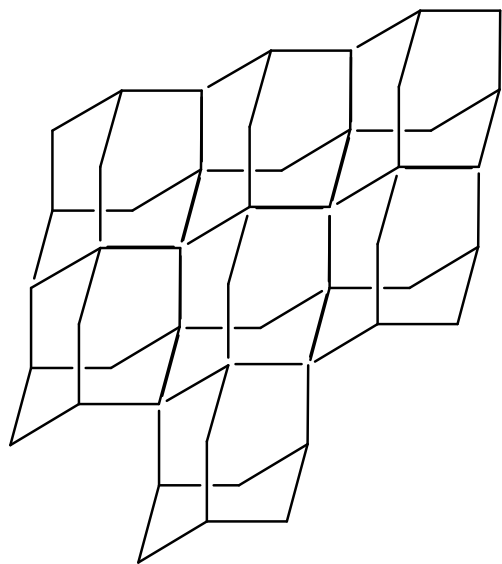
- 2) vagy ha a vizet mágikus savra cseréljük:



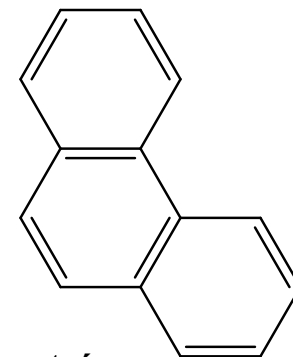
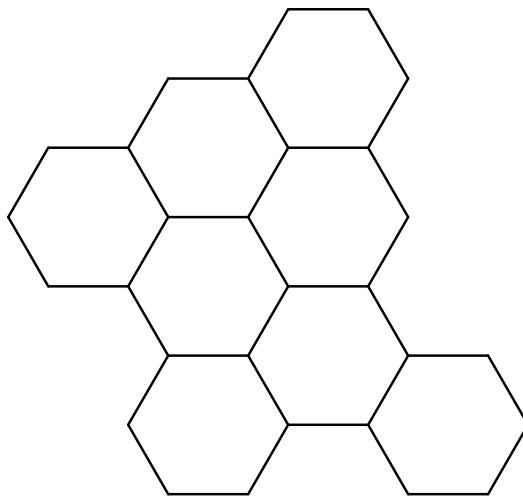
A szén önmagával és egy sor más eltérő elektron negativitású atommal képes kovalens kötések létesíteni:



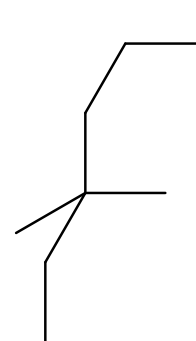
Gyémántrács (sp³ szenek)



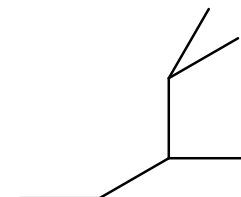
Grafitrács (sp² szenek)



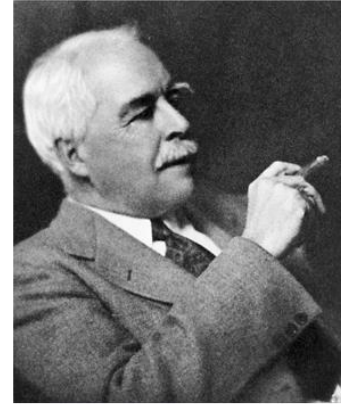
Fenantrén



3,3-dimetilhexán



2,3-dimetilpentán



John Hagemeyer. Reproduced from The Collections of the Library of Congress

„A képletírás” az atommagok

elrendeződését,

az elektronszerkezetet.

feladat: leírni

Mielőtt leírjuk a salétromsav Lewis képletét, azelőtt **tudnunk kell** az atommagok elrendeződését (**konnektivitását**) pl. HNO_3 -ban nincs H,N kötés.

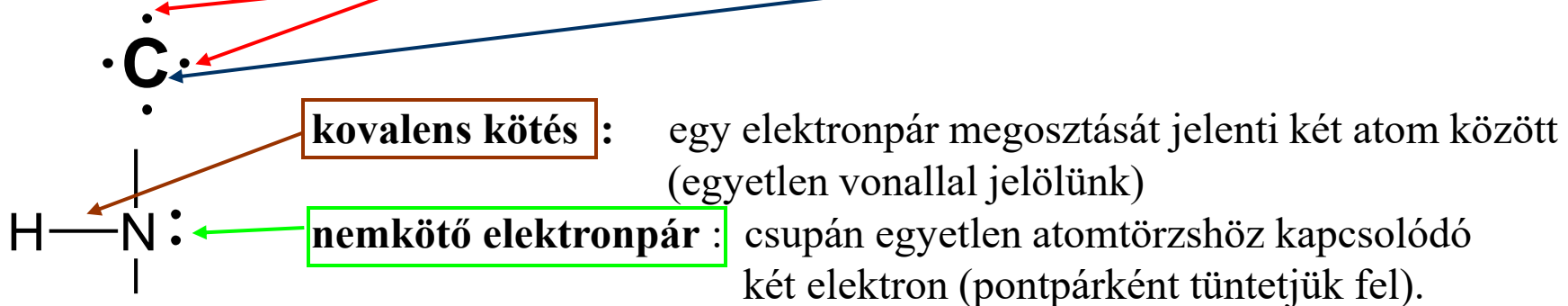
G.N. Lewis és W. Kössel (1916 azaz a kvantummechanika születése előtt)

A „Lewis-féle” szerkezet:

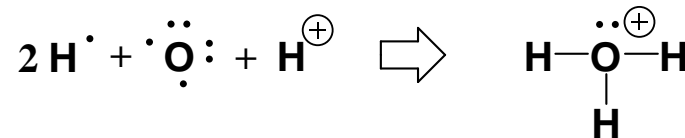
építőelemek:

- az elem **vegyjele** az atomtörzsét jelöli
(azaz vegyértékelektronok számának megfelelő pozitív töltést is a vegyjel szimbolizálja.)
pl. a „C” szimbólum négyszeresen pozitív.
- a **vegyértékelektronokat** egy-egy pont jelöli

A semleges atom tehát a **vegyértékelektronjaival** körülvevő **atomtörzs**

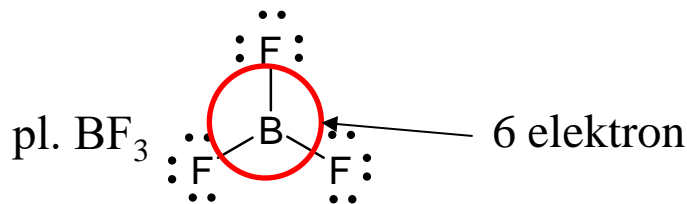


Oktettszabály: amikor Lewis-féle szerkezeteket írunk, akkor csak a **vegyértékelektronokat** tüntetjük fel. A második periódus elemeire a Ne **elektronkonfiguráció** eléréséhez maximum 8 vegyértékelektron szükséges. Ezt az állapotot a molekulát vagy iont felépítő atomok egyes vegyértékelektronjaik **közreadásával** érik el.



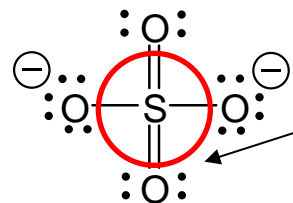
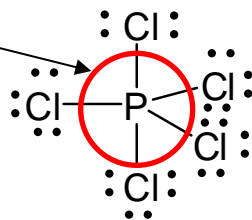
Kivételek az oktettszabály alól:

- az elektronhiányos atomok esete: pl. BF_3



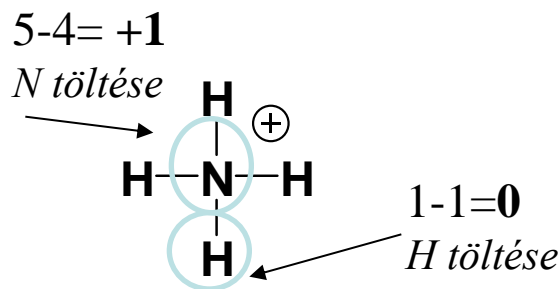
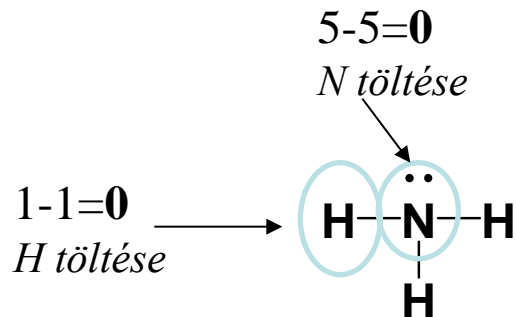
- a nem második periódusbeli atomok esete: pl. SO_4^{2-} vagy PCl_5

10 elektron



12 elektron

Töltés = (vegyértékelektronok száma) - (asszignált elektronok száma)

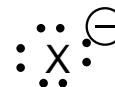
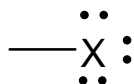
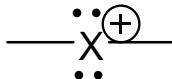
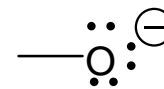
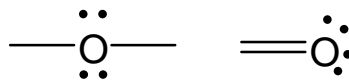
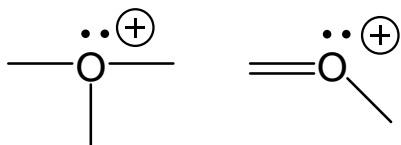
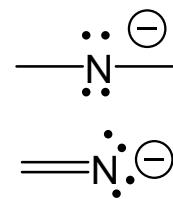
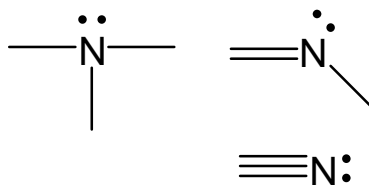
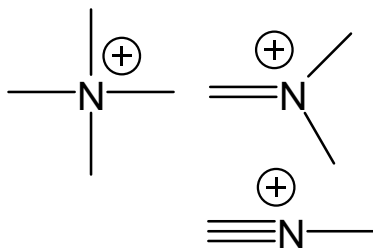
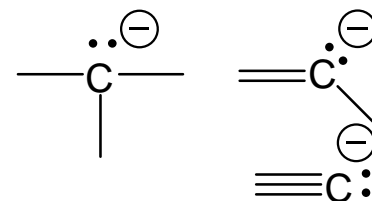
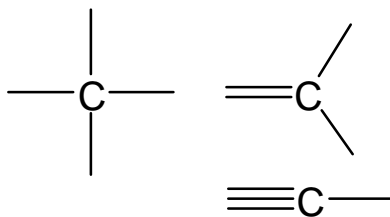
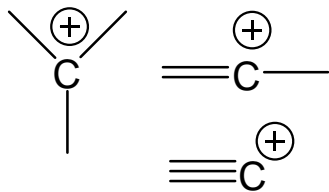
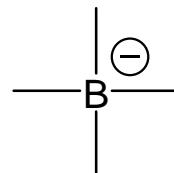
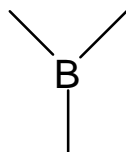


memo: az ammónium kationban a nitrogénhez csak 4 e rendelhető

+1 töltés

zeró töltés

-1 töltés



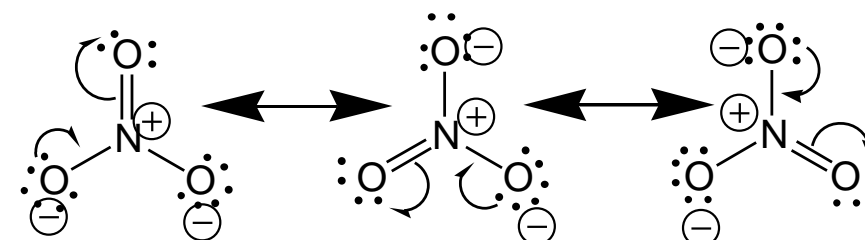
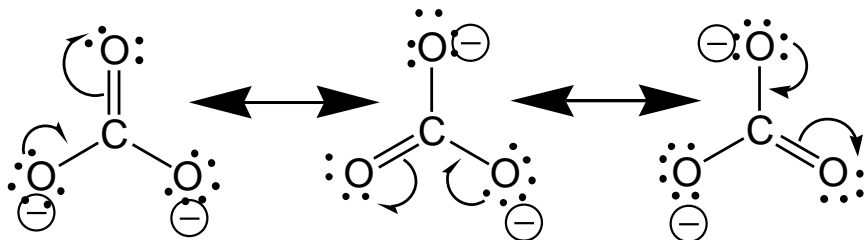
X = F, Cl, Br, J

Rezonancia vagy határszerkezetek: Bizonyos molekulák esetében **egyetlen Lewis-képlet nem** írja le helyesen az elektronszerkezetet. Ilyenkor jobb híján **több Lewis-szerkezetet** írunk fel, amelyek között egyenlő értékűek is találhatóak. A rezonanciaelmélet szerint ezek a szerkezetek **fiktívek**, amelyek közül a „valóságot” **önmagában egyikük sem** írja le helyesen. Ezeket határszerkezeteknek hívjuk és a tényleges molekulászerkezetet összességükkel jellemezzük.

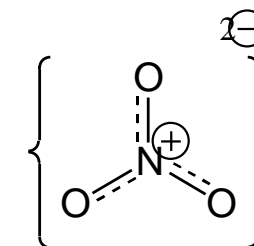
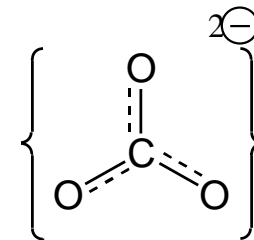
(Görbe nyilak az elektronpárok mozgását mutatják, azt ahogy a következő fiktív szerkezethez eljuthatunk.)

Ekvivalens határszerkezetek:

pl. CO_3^{2-} vagy NO_3^-



rezonancia vagy határszerkezetek



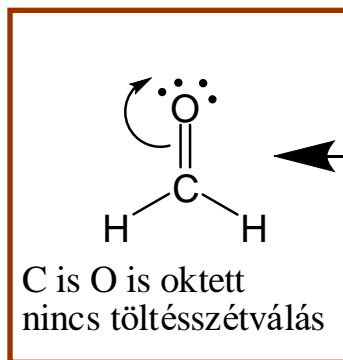
hibridszerkezet

Nem-ekvivalens határszerkezetek:

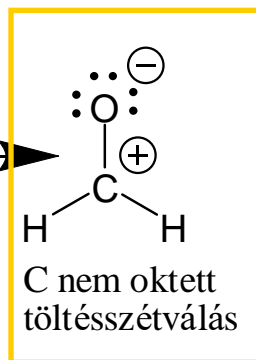
pl. H_2CO vagy CH_2NH_2^+

A) *neutrális*

(formaldehid)



fő határszerkezet

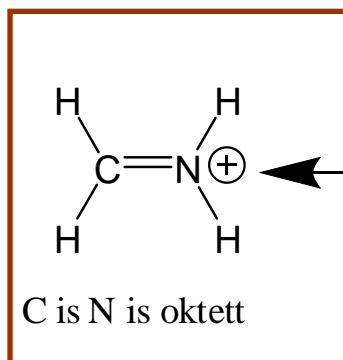


mellék határszerkezet

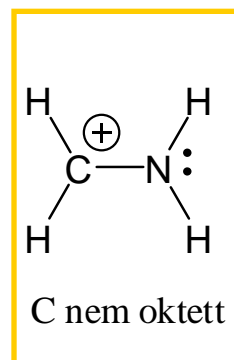
μ magyarázza a dipolt

B) *töltött*

(metilén-
ammónium kation)



fő határszerkezet



mellék határszerkezet

Bevezetés az atomok és részecskék világába

cél: pontszerű részecskék állapotának definiálása:

megoldás: két vektor megadása

1. pozíció vektor (\underline{r})

2. impulzus (lendület) vektor (\underline{p})

ahol $\underline{p} = m\underline{v}$

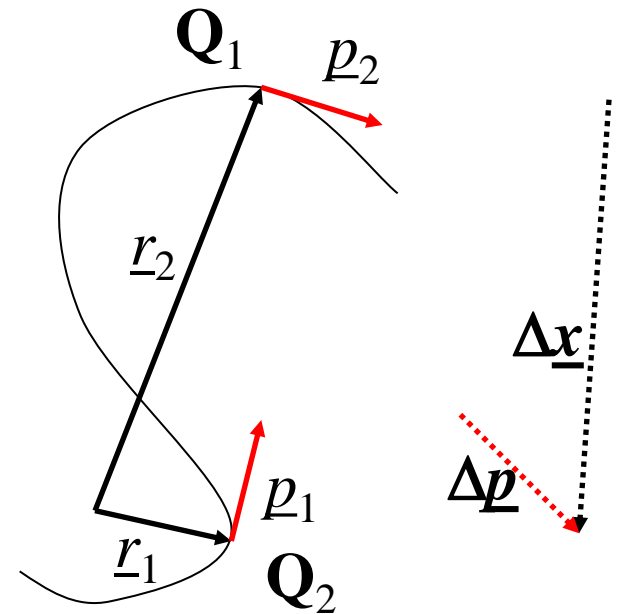
memo: az objektum lehet akár a hold, akár egy biliárdgolyó

példa: tekintsük egy adott röppályán tovahaladó

golyót a Q_1 és Q_2 pontokban

ahol $\Delta\underline{x} = \underline{r}_1 - \underline{r}_2$

és $\Delta\underline{p} = \underline{p}_1 - \underline{p}_2$



klasszikus világ:

rendre megfigyeljük a \underline{p} és az \underline{r} vektorok nagyságát és irányát, tehát bármilyen kicsi $\Delta\underline{x}$ és $\Delta\underline{p}$ értelmezett

Az anyagi részecskék három családja (fermionok)

	I	II	III	
tömeg →	2,3 MeV/c ²	1,27 GeV/c ²	173 GeV/c ²	125 GeV/c ²
töltés →	2/3	2/3	2/3	0
spin →	1/2	1/2	1/2	0
név →	u u-kvarc	c c-kvarc	t t-kvarc	H Higgs-bozon
	4,8 MeV/c ²	95 MeV/c ²	4,2 MeV/c ²	0
	-1/3	-1/3	-1/3	0
	1/2	1/2	1/2	0
	d d-kvarc	s s-kvarc	b b-kvarc	g gluon
	<2,2 eV/c ²	<0,17 MeV/c ²	<15,5 MeV/c ²	91,2 GeV/c ²
	0	0	0	0
	1/2	1/2	1/2	1
	ν_e elektron-neutrínó	ν_μ müon-neutrínó	ν_τ tau-neutrínó	Z Z-bozon
	0,511 MeV/c ²	105,7 MeV/c ²	1,777 GeV/c ²	80,4 GeV/c ²
	-1	-1	-1	±1
	1/2	1/2	1/2	1
	e elektron	μ müon	τ tau	W W-bozon

Bozonok (kölcshatások)

memo: ezt a megfigyelést megtehetjük akármilyen pontosan a rendszer „megzavarása” nélkül! Ha például a megfigyelést „fotonokkal” végezzük („tehát nézünk”), amelynek a golyókkal vett kölcsönhatásától eltekinthetünk, mert azok **méretei igen különbözők**, akkor valóban nincs „megzavarás”.

atomi világ: a \underline{p} és az \underline{r} vektor nagyságának és irányának megfigyelése csak **adott pozíciókülönbség (hiba)** ($\Delta\underline{x}$ és $\Delta\underline{p}$) mellett végezhető el.

memo: a rendszer elvileg sem figyelhető meg, annak „megzavarása” nélkül!

A megfigyelést pl. „fotonokkal” végezzük, amelyeknek az elektronokkal vett **kölcsönhatásától nem tekinthetünk el.**

A mérő-mérendő összevethetősége miatt egy adott szintű bizonytalanság mindig jelen van.

Heisenberg-féle bizonytalansági reláció : $\Delta\underline{x}\Delta\underline{p} \geq \hbar/2$

analógia: sötétben egy biliárdgolyó pozícióját az asztalon úgy szeretnénk meghatározni, hogy egy másik golyót gurítunk és figyelünk a reménybeli ütközés kori „koccanásra”. Világos hogy ekkor **beavatkozunk** a megfigyelés során **és** az eredeti állapot **megváltoztatjuk!** Ha a kölcsönhatás után „lámpát gyújtunk” akkor láthatjuk hogy elvileg is más kell legyen az új állapot, mint volt a megfigyelendő rendszer a megfigyelés előtt.

memo:

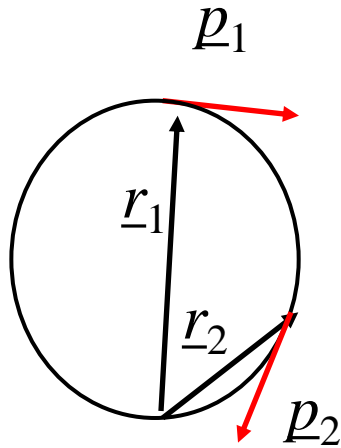
Planck-féle állandó $h \approx 6,6162 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$ ($\hbar = h/2\pi$)

elektron nyugalmi tömege: $\approx 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$

foton „tömege” adott hullámhosszú fény esetén ($h\nu = mc^2$ alapján)

klasszikus világ

a golyó egy s-típusú pálya mentén halad



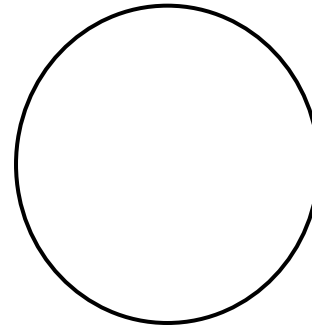
A hely- és impulzusvektorok összességének ismeretében a golyó “előfordulási valószínűsége” a pálya egy adott pontján megadható.

Pl. kinetikus energia?

$$T = \underline{p}^2/2m \text{ (mennyiség)}$$

kvantum rendszer

az elektron a s-típusú atompálya akár „belső akár külső” tér-részében **bárhon** lehet,



de nem azonos valószínűséggel:

hullámfüggvényt használunk a helyvektor szerepkörében.

$$T = -\frac{1}{2} \nabla^2 \text{ (operátor)}$$

ahol

$$\nabla^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$$

Fizikai modell

•Állapot

•Fizikai mennyiség

•Mérés

•Időfejlődés

Klasszikus mechanika

\underline{r} : koordináta

\underline{p} : lendület

$f(\underline{r}, \underline{p})$

$\langle f \rangle = f(\underline{r}, \underline{p})$

Newton egyenlet: $F = m \frac{d^2}{dt^2} r$

Fizikai modell

•Állapot

$\Psi(\underline{r}_1, \dots, \underline{r}_N)$, komplex függvény

$$\int \Psi^* \Psi d\underline{r}_1, \dots, \underline{r}_N < \infty$$

•Fizikai mennyiség

$$\hat{f} = f(\hat{r}, \hat{p})$$

$$\hat{r} \Rightarrow \underline{r} \quad \hat{p} \Rightarrow -i\hbar \nabla = -i\hbar \sum_{\alpha=1}^3 e_{\alpha} \frac{\partial}{\partial r_{\alpha}}$$

•Mérés

$$\langle \hat{f} \rangle = \int \Psi^* f(\hat{r}, \hat{p}) \Psi d\underline{r}$$

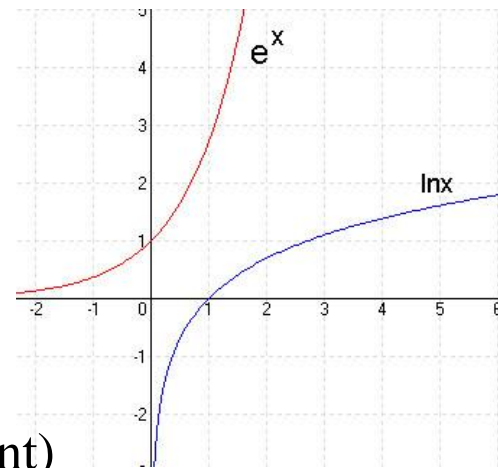
•Időfejlődés

Schrödinger egyenlet: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H\Psi$

Sajátérték, sajátfüggvény

függvény: egy számhoz egy számot rendel

operátor: egy függvényre hatva egy új függvényt hoz létre



$$\text{operátor} \cdot (\text{függvény}) = \text{új függvény}$$

Pl. legyen az operátor a d/dx (**memo:** deriválás x változó szerint)

legyen a függvény a $\sin(x)$: $d/dx[\sin(x)] = \cos(x)$

Egy operátorhoz tartozhatnak olyan függvények is(!), amelyek az **operátor hatása után** a kiindulási függvénytől **csak egy konstansban** különböznek. Ezek a **függvények az operátor un. sajátfüggvényei**.

$$\text{operátor} \cdot (\text{függvény}) = \text{konst. (függvény)}$$

Pl. legyen az operátor a d/dx

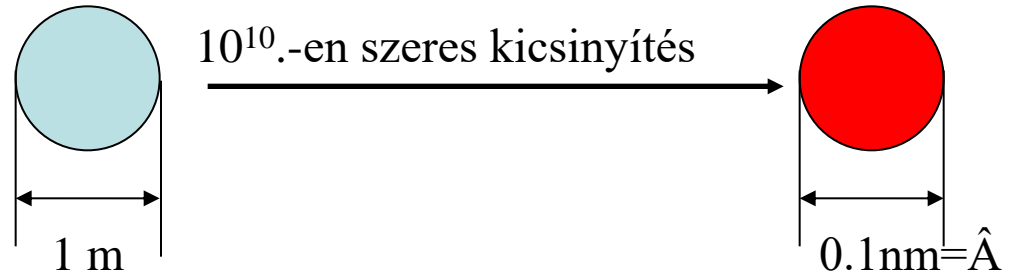
legyen a függvény az $\exp(ax)$: $d/dx[\exp(ax)] = a \exp(ax)$

memo: $d/dx[\sin(ax)] = a \cos(ax) \neq \text{konst} \sin(ax)$

Tehát a $\sin(ax)$ **nem** sajátfüggvénye a d/dx differenciál operátornak. **Viszont** az $\exp(ax)$ sajátfüggvénye a d/dx operátornak, és az „ a ” konstans az operátor sajátértéke.

A kémiai kötés leírása kvantumkémiai alapokon

Bohr féle atommodell:
egy negatív korpuszkula kering
a pozitív magok erőterében.

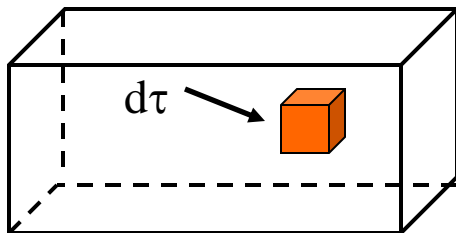


„hétköznapi” világ:
egy test impulzusa és helye
egyszerre megadható
tetszőszerinti pontossággal

atomi mérettartomány:
egy részecskék impulzusa és
helye **nem** adható meg egyszerre
tetszőszerinti pontossággal

megjegyzés: az **atommagot klasszikus** részecskéként kezeljük de
az **elektront nem klasszikus** részecske!
Az elektron nem „hagyományos” objektum.

kísérlet: tegyünk egy elektront egy dobozba (**potenciál (V)** fal).
a rossz kérdés: **hol** lesz az elektron?
a jó kérdés: **mekkora a valószínűsége** annak, hogy az elektron a
 $d\tau$ térfogatelemben van?



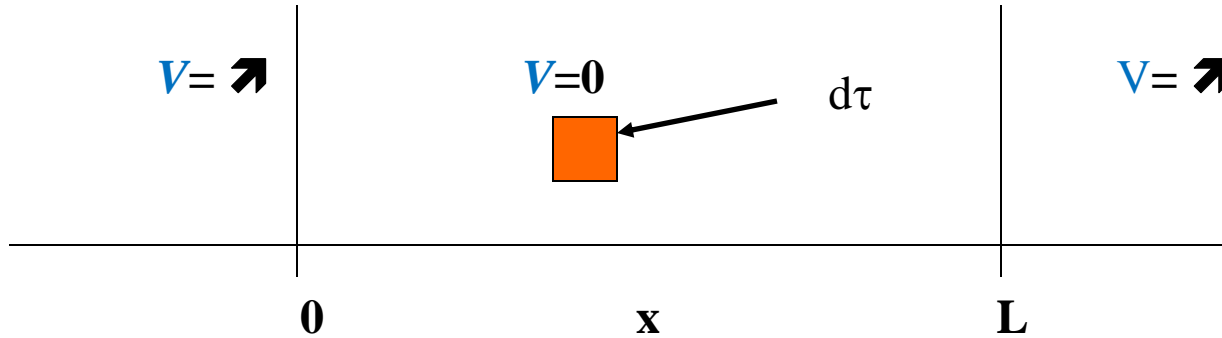
Mekkora a kinetikus energiája (E)?

$$E = mv^2/2 = p^2/2m$$

ahol v a részecske sebessége,
 p annak impulzusa

de Broglie:
 $p = nh/2L$

Az 1D modell



$$E = p^2/2m$$

$$de$$

$$p = nh/2L$$

ezért

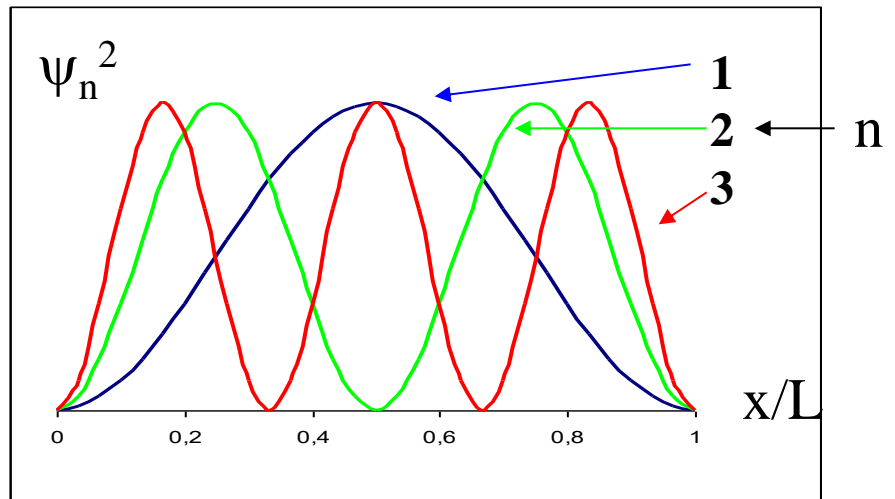
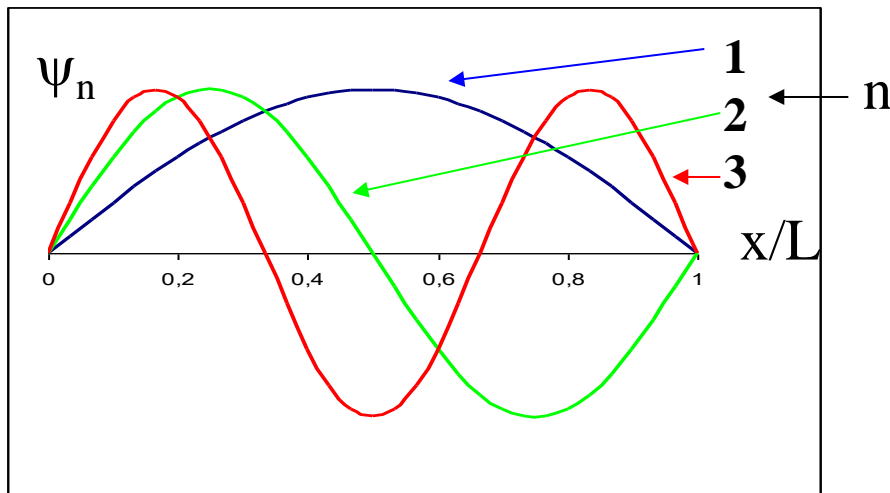
peremfeltétel: a részecskének a „falon” belül csak kinetikus energiája van.

részecske jellemzése :

- kinetikus energia $E_n = n^2 h^2 / 8mL^2 \quad n=1,2,\dots$
- hullámfüggvény $\psi_n = (2/L)^{1/2} \sin(n\pi x/L)$
- hullámfüggvény négyzete $(\psi_n)^2$ ami megadja a $d\tau$ térfogatelemben a részecske tartózkodásának valószínűségét.

fizikai állandók: h (Planck állandó = $6.62608 \cdot 10^{-34}$ Js)

változók: n (kvantumszám), L (1D doboz mérete) és m (részecske tömege)



következmények: 1. a részecske mindig mozog

($E > 0$ hiszen a zéró pont energia $E_n = h^2/8mL^2$),

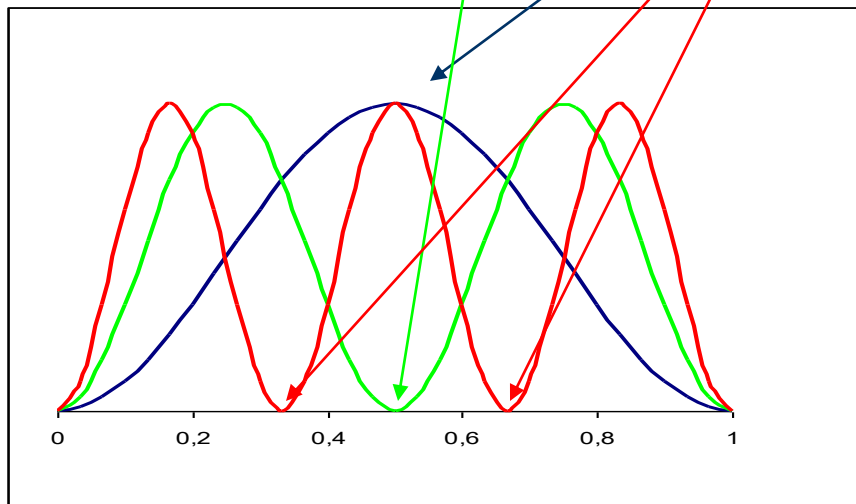
2. a részecske energiája kvantált (nem gerjeszthető akárhogy),

3. az állapotok nem-degeneráltak,

$n=1$ (alapállapot) legnagyobb valószínűséggel középen van a részecske,

$n=2$ (gerjesztett állapot) középen soha nincs a részecske,

$n=3$ (a következő gerjesztett állapot) már két csomósík van, azaz már két hely is van ahol soha sincs a részecske,



$V = \nearrow$

$V = 0$

$V = \nearrow$

0

x

L

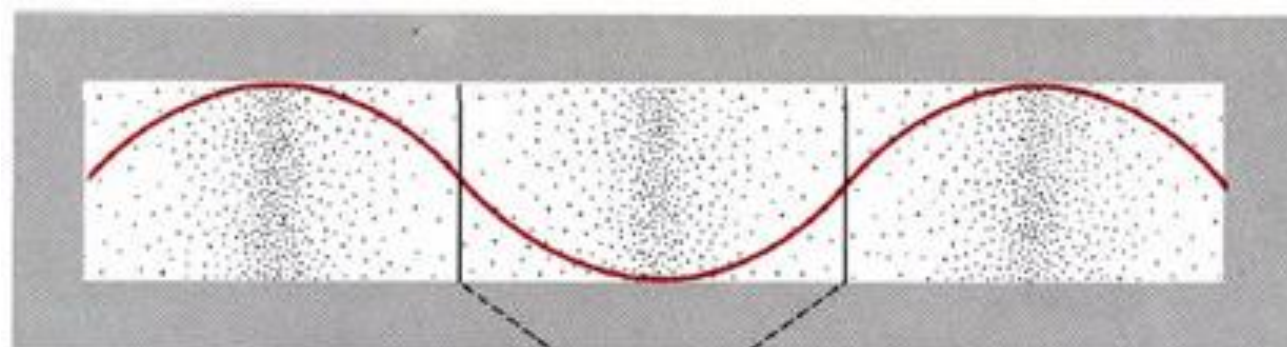


$d\tau$

4. ha L csökken akkor a kinetikus energia nő,

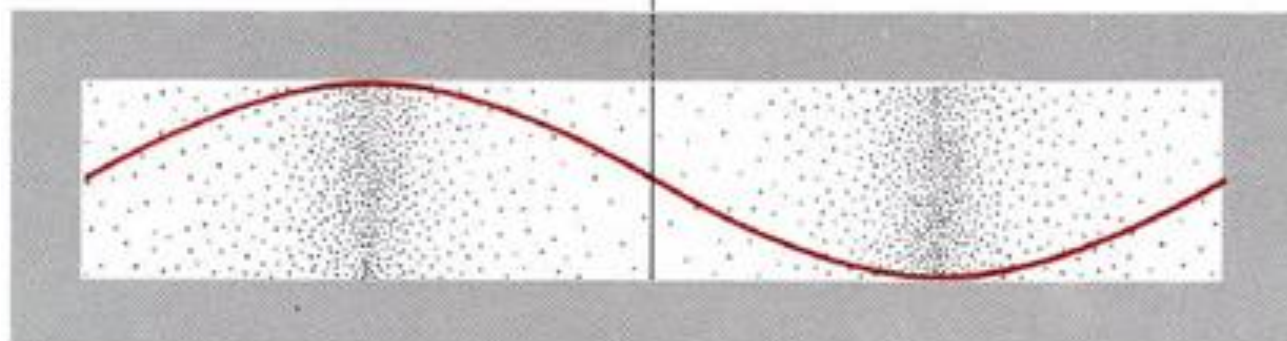
5. Ha n (kvantumszám) értéke nő

akkor az L mentén **egyre egyenletesebb** lesz a részecske eloszlása.

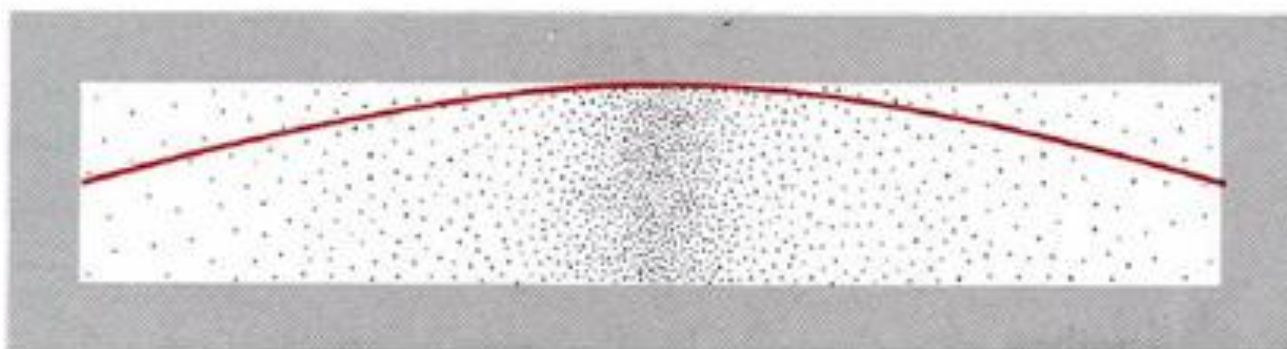


$n = 3$

Nodes



$n = 2$



$n = 1$

megjegyzés: a részecske hullám természetű, ezért tartozik hozzá egy λ . Az 1D-dobozba akkor „fér bele” a részecske, ha az $n \cdot \lambda/2 = L$ feltétel teljesül: stacionárius megoldás; állóhullám.

(Furulya: $n=1,2,3$, felhangok a furulyán ha L a légoszlop hossza.)

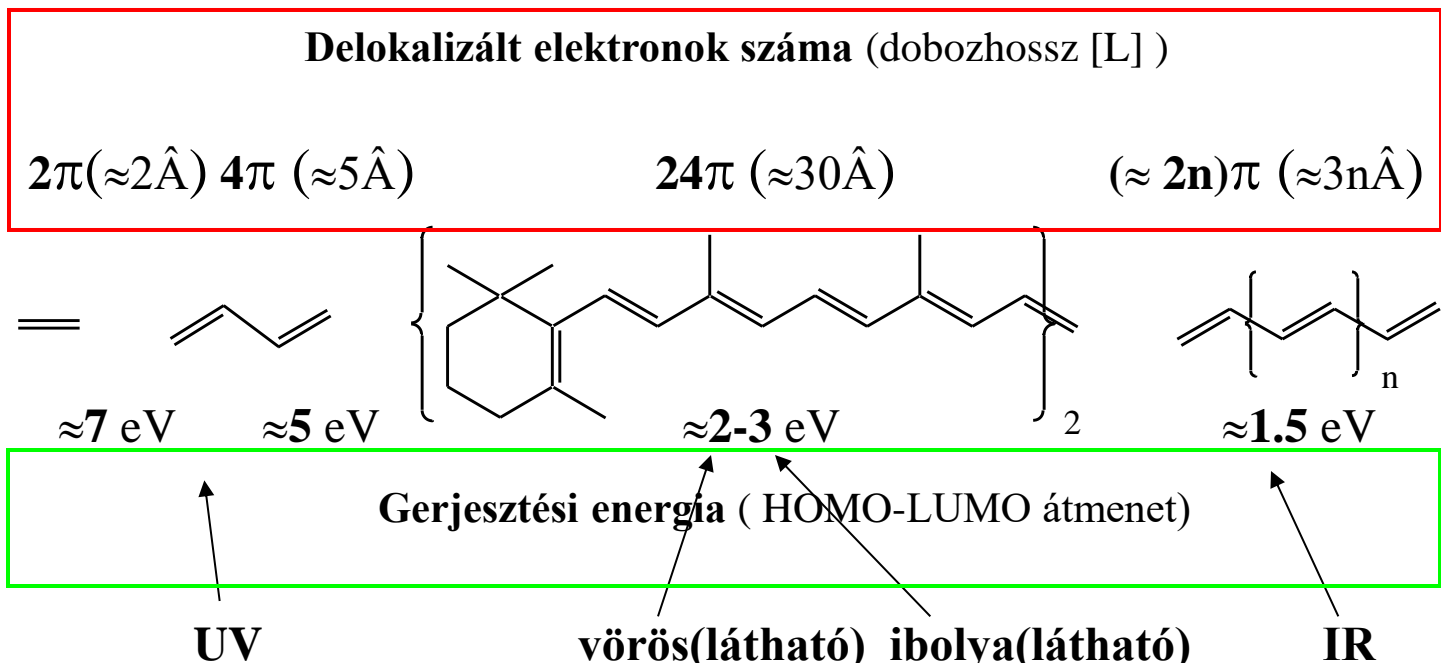
Hullámfüggvény $s = A \sin(\omega t)$ és $\omega = 2\pi/T = 2\pi f = 2\pi c/\lambda$
 $s = A \sin(2\pi ct/\lambda)$ de $ct = x$
 $s = A \sin(2\pi x/\lambda)$ de $\lambda = 2L/n$
 $s = A \sin(\pi x n/L)$

tehát ezért ilyen alakú az $s = s(x)$ függvény azaz a részecske hullámfüggvénye

$$\psi_n = (2/L)^{1/2} \sin(n\pi x/L)$$

példa: $E_{n-m} = (n^2 - m^2)(h^2/8mL^2)$

E_{n-m} n-ről m-re történő gerjesztés energiája csak L-től függ!



A nem-klasszikus atommodell: az elektronok állapota a **magok erőterében térbeli állóhullámok** segítségével írható le.

Schrödinger féle hullámegyenlet megoldása ad: sajátfüggvényeket sajátértékeket.

A közelítő sajátfüggvény (ψ) atomok esetén az atompályákból (AO [*atomic orbital*]), molekulák esetén a molekulapályákból (MO [*molecular orbital*]) épülnek fel.

ψ előjeles mennyiség
a tér minden pontjában van értéke,
de **nincs fizikai jelentése.**

ψ^2 mindig pozitív,
a tér minden pontjában van értéke,
fizikai jelentése az **elektronsűrűség.**

A) Az atomok elektronszerkezete

A hidrogén szerű atom (van egzakt megoldás)

A hidrogén atomra felírt Schrödinger egyenlet sajátfüggvényei adják a hidrogén atompályáit, sajátértékei a pályae energiákat.

Sajátfüggvények: $\psi = \mathbf{R}(r)\mathbf{Y}(\Theta, \Phi)$ (r, Θ, Φ polárkoordináták)

s pályák esetén $\mathbf{Y}(\Theta, \Phi) = \text{konstans} = (1/4\pi)^{1/2}$

$\psi = \mathbf{R}(r)(1/4\pi)^{1/2}$ amiből az \mathbf{R} :

radiális hullámfüggvények:

$n=1 \Rightarrow 1s \Rightarrow s(r) = 2 (Z/a_0)^{3/2} \exp(-2Zr/2a_0)$

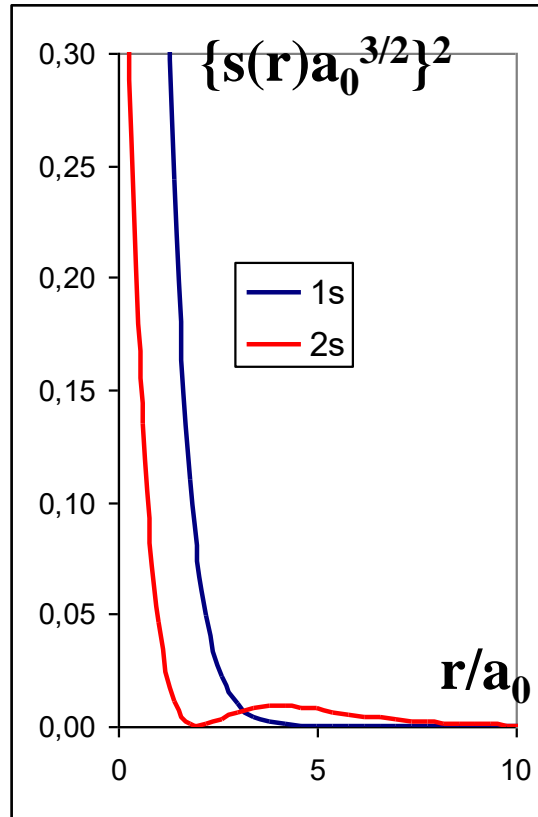
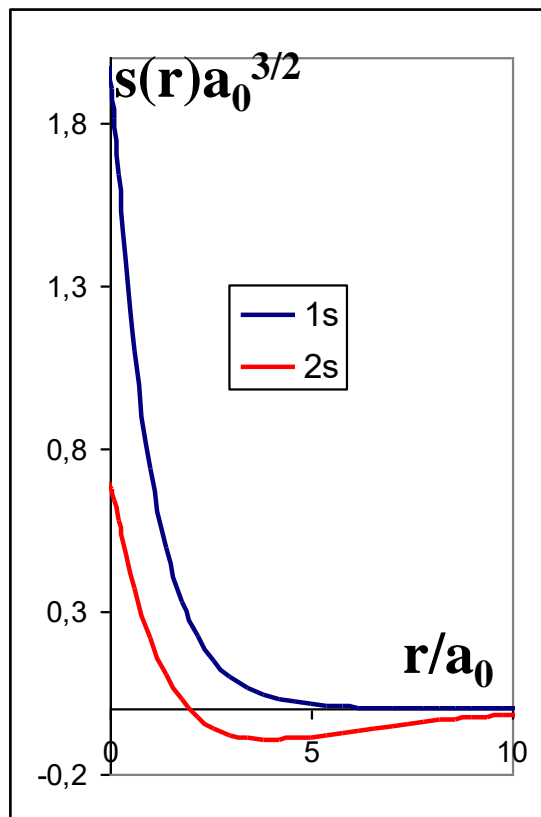
$n=2 \Rightarrow 2s \Rightarrow s(r) = 1/8^{1/2} (Z/a_0)^{3/2} (2 - Zr/a_0) \exp(-Zr/2a_0)$

$n=3 \Rightarrow 3s \dots\dots$

Z = rendszám (atomic number) és a_0 = Bohr rádius ($5.2917 \cdot 10^{-11}$ m)

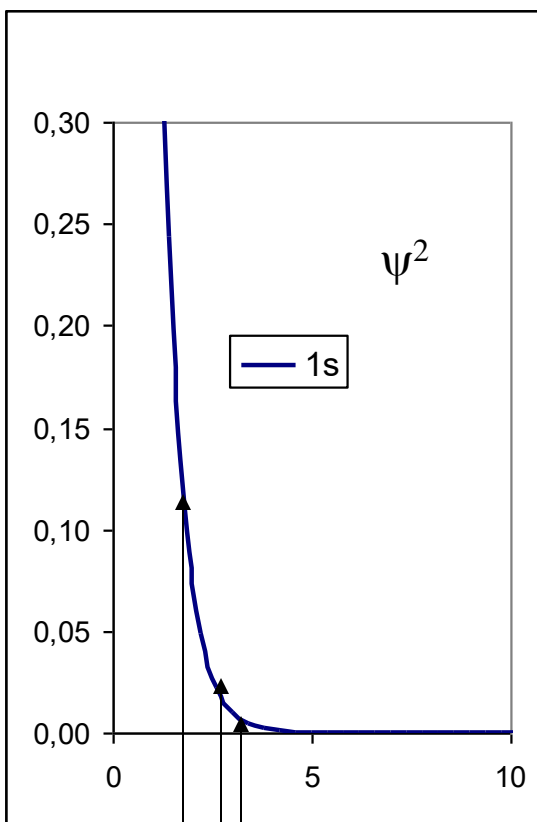
Ha $Z=1$ akkor: $1s \Rightarrow s(r)a_0^{3/2} = 2 \exp(-r/a_0)$

$2s \Rightarrow s(r)a_0^{3/2} = 1/8^{1/2} (2 - r/a_0) \exp(-r/2a_0)$

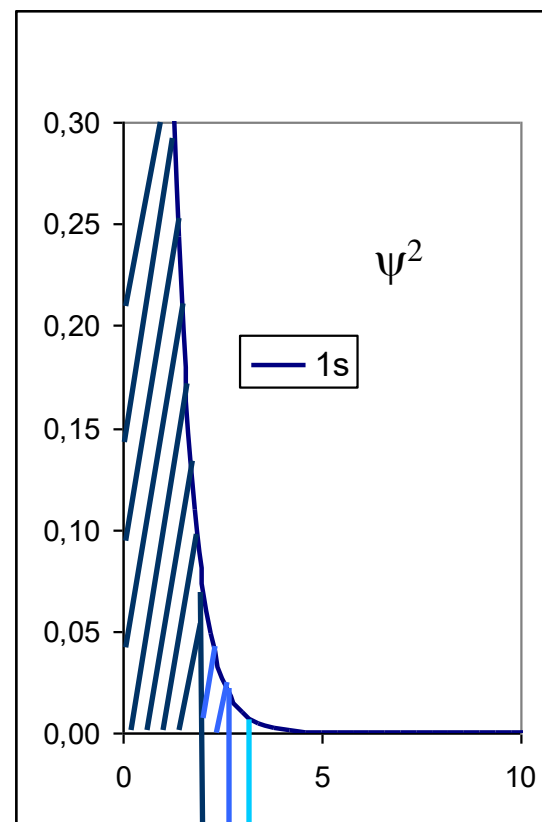
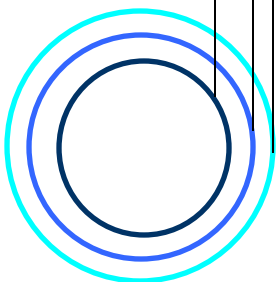


következmények:

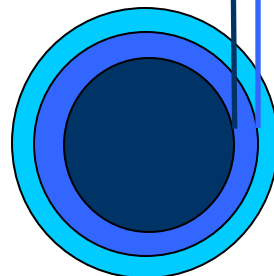
1. a magnál ($r/a_0=0$) mindig nagy az elektronsűrűség,
2. csomósíkok jelennek meg,
3. ψ^2 megadja az elektronsűrűség értékét adott r/a_0 -nál,
4. ψ^2 alatti terület (integrálja) a 0 és r/a_0 érték között megadja az r/a_0 gömbbe eső teljes elektronsűrűség értékét.



Koncentrikus gömbhéjak, ahol az elektronsűrűség a ψ^2 értéke (izofelület).



Koncentrikus gömbök amelyen belül az elektronsűrűség a $[0, r/a_0]$ értékre számított $\int \psi^2$ értéke.



Sajátfüggvények: $\psi = \mathbf{R}(r)\mathbf{Y}(\Theta, \Phi)$ (r, Θ, Φ polárkoordináták)

p pályák

radiális hullámfüggvények:

$2p \Rightarrow p(r) = 1/(2 \cdot 6^{1/2})(Z/a_0)^{3/2} (Zr/a_0) \exp(-Zr/2a_0)$

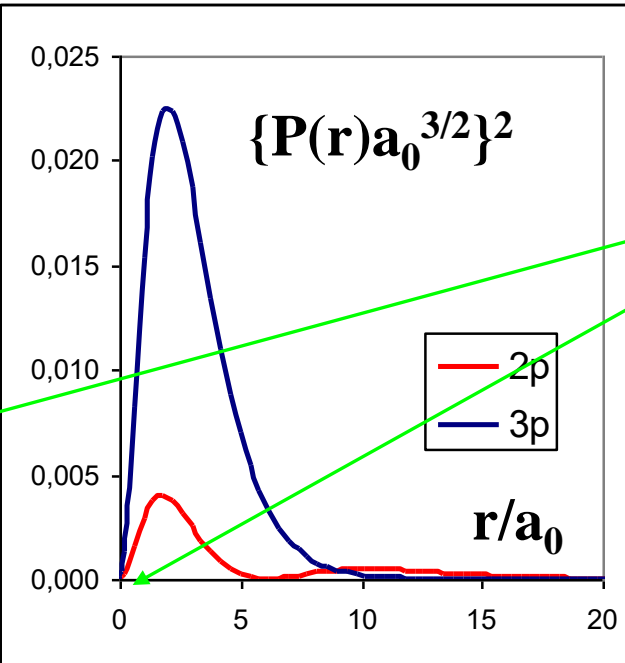
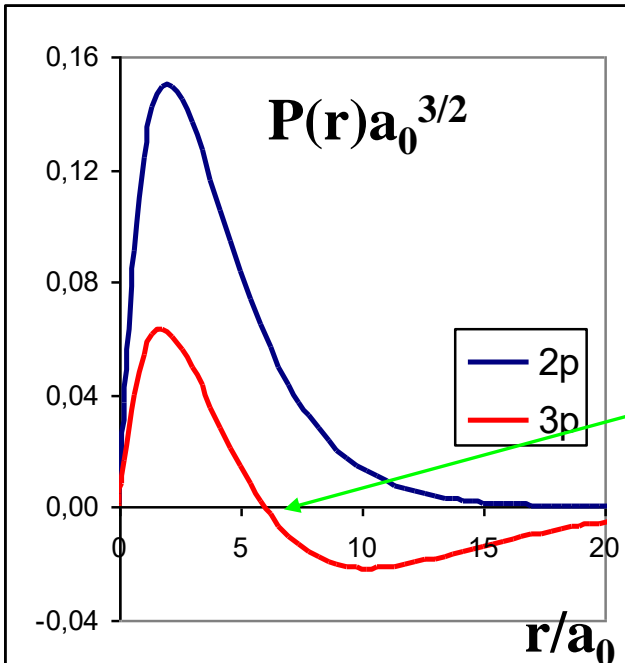
$3p \Rightarrow p(r) = 1/(9 \cdot 6^{1/2})(Z/a_0)^{3/2} (4 - 2Zr/3a_0)(2Zr/3a_0) \exp(-Zr/3a_0)$

$n=4 \Rightarrow 4p \dots\dots$

$Z =$ rendszám (atomic number) és $a_0 =$ Bohr rádius ($5.2917 \cdot 10^{-11}$ m)

Ha $Z=1$: $n=2 \Rightarrow 2p \Rightarrow p(r)a_0^{3/2} = 1/(2 \cdot 6^{1/2}) (r/a_0) \exp(-r/2a_0)$

$n=3 \Rightarrow 3p \Rightarrow p(r)a_0^{3/2} = 1/(9 \cdot 6^{1/2})(4 - 2r/3a_0)(r/2a_0) \exp(-r/3a_0)$



következmények:

- 1. a magnál ($r/a_0=0$) mindig zéró az elektronsűrűség,
- 2. csomósíkok jelennek meg.

figyelem:

1. ez csak a radiális tényező, ebből még nem lesz súlyzó alak, csak ha az anguláris tényezőt is figyelembe vesszük.

Sajátértékek:

$$E_n = -(Z^2 \mu e^4 / 32 \pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2) 1/n^2 \quad n=1,2,3,\dots$$

ahol Z ; a rendszám, μ ; a redukált tömeg, e ; az elemi töltés ($1.602177 \cdot 10^{-19}$ C), ϵ_0 ; a vákuum permeabilitása ($8.85419 \cdot 10^{-12} \text{ J}^{-1} \text{ C}^2 \text{ m}^{-1}$) \hbar ; a Planck állandó/ 2π ($1.05457 \cdot 10^{-34}$ Js).

minden energiaszint n^2 -szer degenerált (elfajult) ahol n a főkvantumszám:

$E_1 \Rightarrow$ 1-szeres degeneráltság 1s

$E_2 \Rightarrow$ 4-szeres degeneráltság 2s, $2p_x$, $2p_z$, $2p_y$

$E_3 \Rightarrow$ 9-szeres degeneráltság 3s, $3p_x$, $3p_z$, $3p_y$, 5db. 3d

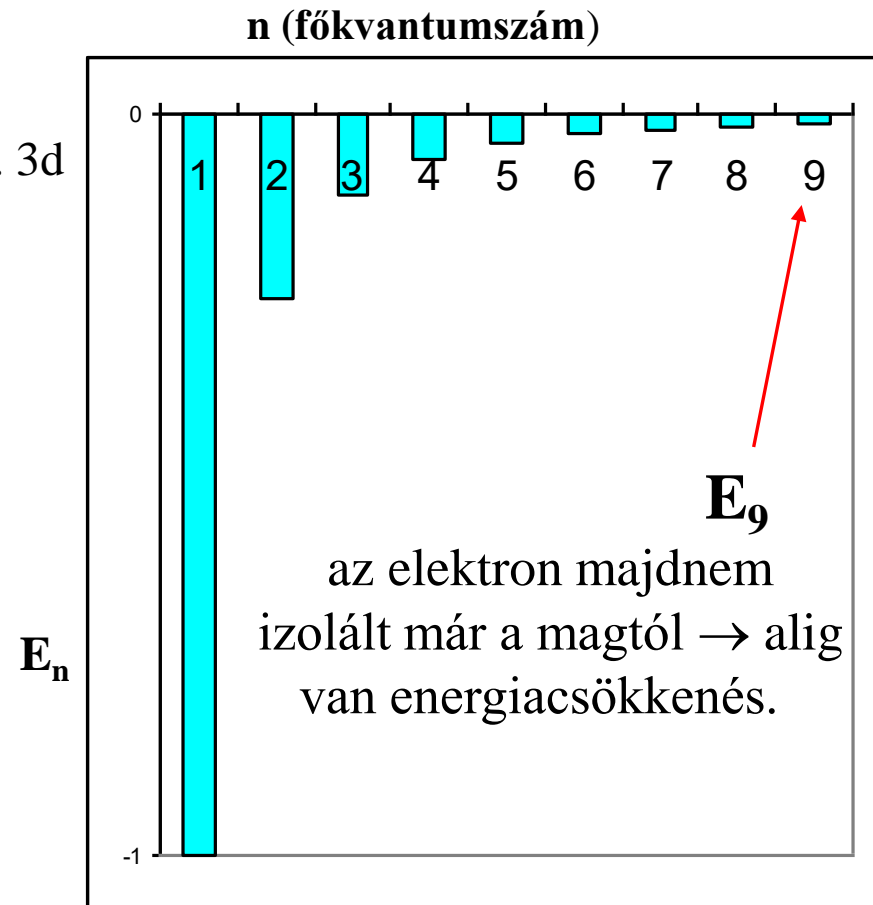
memo.: ez az elfajulás csak a H, He⁺, Li²⁺, ...

sorra igaz, ahol nincs elektron-elektron taszítás.

Ha van, akkor a 2s már nem elfajult a 2p-pályákkal, s a 3s, sem a 3p sem a 3d pályákkal stb.

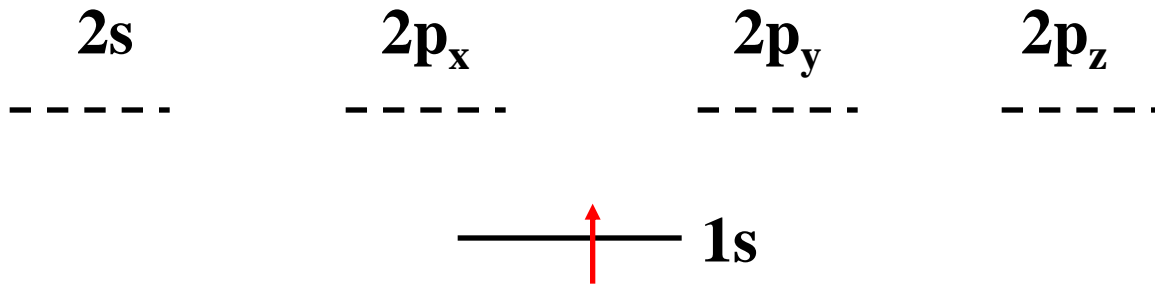
De azok önmagukban (3db. 2p, 5db. 3d, stb.) továbbra is elfajultak maradnak:

$$E_{2p_x} = E_{2p_y} = E_{2p_z}$$



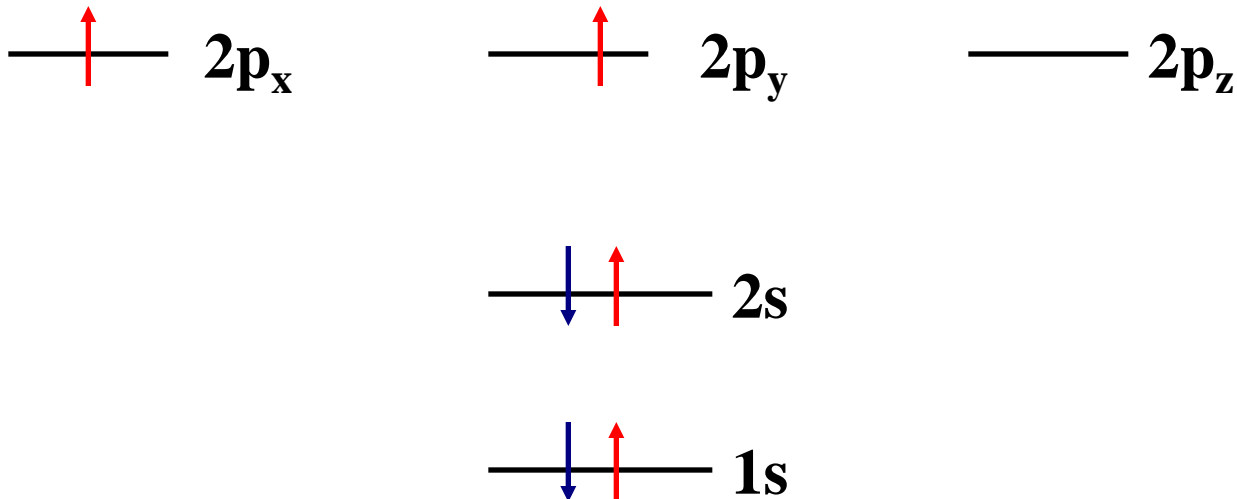
A hidrogénatom (H)

1 elektron

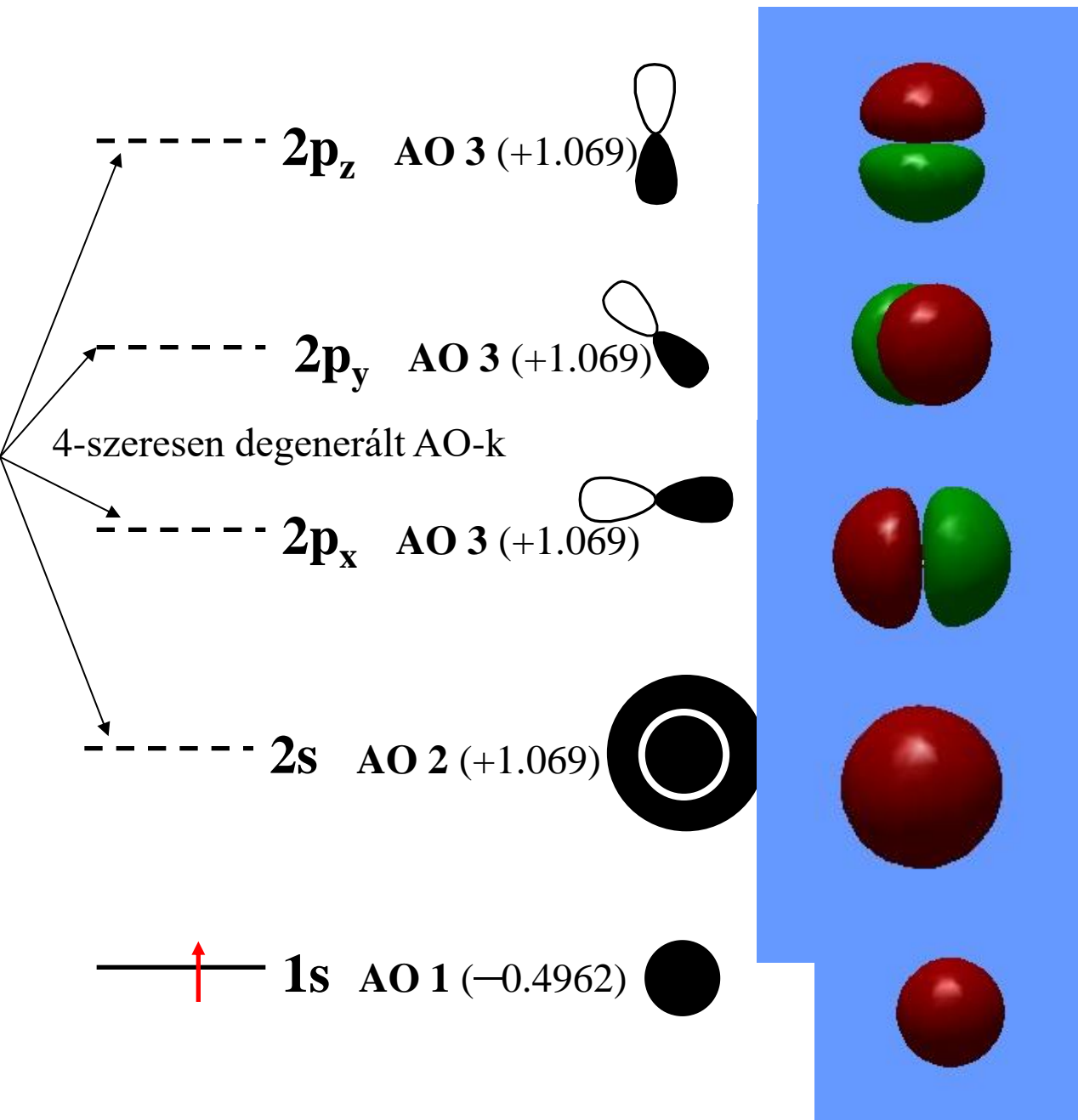


A szénatom (C)

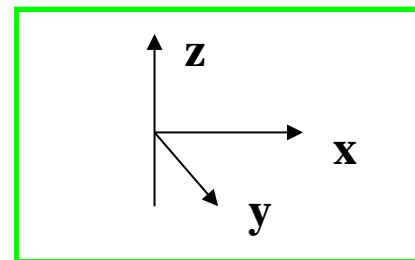
6 elektron



A hidrogénatom (H) : 1 elektron \Rightarrow 1 betöltött AO



$E(\text{RHF}/3\text{-}21\text{G}) = -0.4962$ Hartree



Bonyolultabb atomok (nincs egzakt megoldás)

Az adott atomra felírt Hartree-Fock egyenlet sajátfüggvényei adják meg az atom atompályáit, sajátértékei a pályaenergiákat.

Pauli elv: a H-szerű AO-ra az elektronok **párosával és ellentétes spinnel** kerülnek fel, de maximum kettő.

Hund-szabály: **degenerált** AO-k esetén először minden AO-ra **csupán egy** elektron kerül.

Born-Oppenheimer-közelítés: a magokat nyugvó tömegpontoknak és pontszerű töltésnek tekintjük amelyek erőterében mozognak az elektronok.

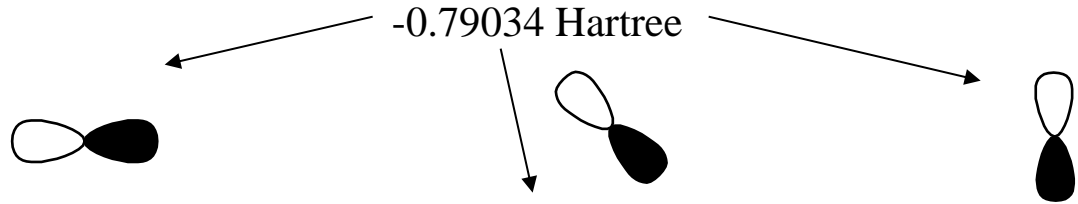
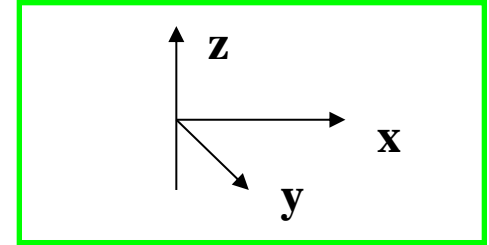
stratégia: az „összelektron-hullámfüggvényt” (bonyolult atomok hullámfüggvényeit) egyetlen elektron állapotait leíró úgynevezett „egyelektron-hullámfüggvényekből” építjük fel.

A *Born-Oppenheimer-közelítés* értelmében a hullámfüggvény csak az elektronrendszer állapotaira vonatkozik.

molekulapálya-módszer: egy molekula elektronszerkezetét különböző molekulapályákat elfoglaló elektronpárok alkotják. A **molekulapályák egyelektron-hullámfüggvények**: egyetlen elektron állapotát adják meg az **összes mag** és az **összes többi elektron** erőterében.

A neonatom (Ne) 10 elektron \Rightarrow 5 betöltött AO

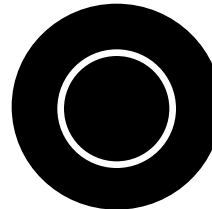
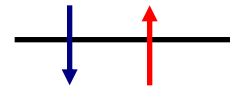
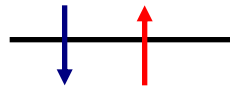
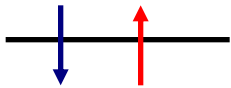
$E(\text{RHF}/3\text{-}21\text{G}) = -127.80382031$ Hartree



$2p_x$ AO 3

$2p_y$ AO 4

$2p_z$ AO 5



→ Atomsugár n^0 → Ionizációs energia n^0 → Elektronegativitás n^0

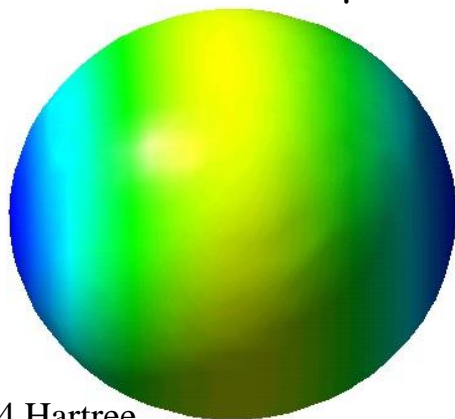
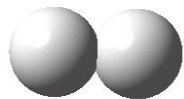
Csoport (oszlopok)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18				
Periódus (sorok)																						
1	H 2,20																		He 3,89			
2	Li 0,98	Be 1,57															B 2,04	C 2,55	N 3,04	O 3,44	F 3,98	Ne 3,67
3	Na 0,93	Mg 1,31													Al 1,61	Si 1,90	P 2,19	S 2,55	Cl 3,16	Ar 3,15		
4	K 0,82	Ca 1,00	Sc 1,36	Ti 1,54	V 1,63	Cr 1,66	Mn 1,55	Fe 1,83	Co 1,88	Ni 1,91	Cu 1,90	Zn 1,65	Ga 1,81	Ge 2,01	As 2,18	Se 2,55	Br 2,96	Kr 3,49				
5	Rb 0,82	Sr 0,95	Y 1,22	Zr 1,33	Nb 1,6	Mo 2,16	Tc 1,9	Ru 2,2	Rh 2,28	Pd 2,20	Ag 1,93	Cd 1,69	In 1,78	Sn 1,96	Sb 2,05	Te 2,1	I 2,66	Xe 2,67				
6	Cs 0,79	Ba 0,89	* 1,3	Hf 1,5	Ta 2,36	W 1,9	Re 2,2	Os 2,28	Ir 2,28	Pt 2,54	Au 2,00	Hg 1,62	Tl 2,33	Pb 2,02	Bi 2,0	Po 2,2	At 2,2	Rn 2,2				
7	Fr 0,7	Ra 0,9	** 1,3	Rf 1,5	Db 2,36	Sg 1,9	Bh 2,2	Hs 2,28	Mt 2,54	Ds 2,00	Rg 1,62	Uub 2,33	Uut 2,02	Uuq 2,0	Uup 2,2	Uuh 2,2	Uus 2,2	Uuo 2,2				
	Lantanoidák																					
	Aktinoidák																					
*	La 1,1	Ce 1,12	Pr 1,13	Nd 1,14	Pm 1,13	Sm 1,17	Eu 1,2	Gd 1,2	Tb 1,1	Dy 1,22	Ho 1,23	Er 1,24	Tm 1,25	Yb 1,1	Lu 1,27							
**	Ac 1,1	Th 1,3	Pa 1,5	U 1,38	Np 1,36	Pu 1,28	Am 1,13	Cm 1,28	Bk 1,3	Cf 1,3	Es 1,3	Fm 1,3	Md 1,3	No 1,3	Lr 1,291							

A Pauling-féle elektronegativitási állandók periódusos rendszere

A hidrogénmolekula (H₂)

2 elektron \Rightarrow 1 betöltött MO

$\mu = 0$ Debye

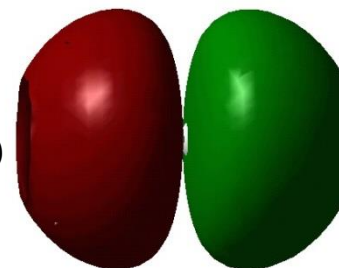


EPS

$-0.007 \leq \text{töltés} \leq 0.007$

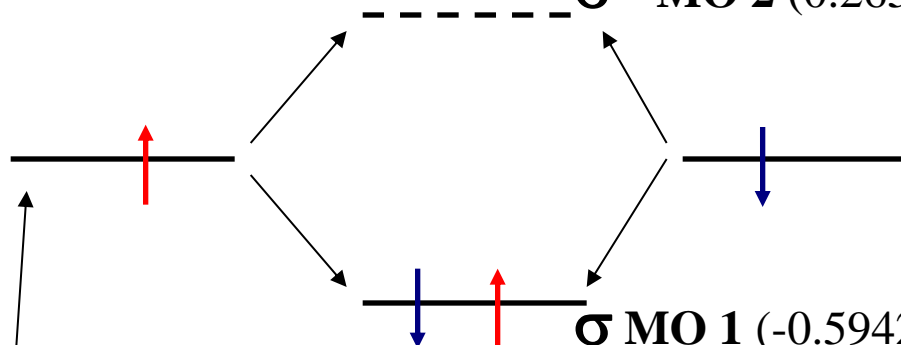
E(RHF/3-21G) = -1.12295984 Hartree

(LUMO)

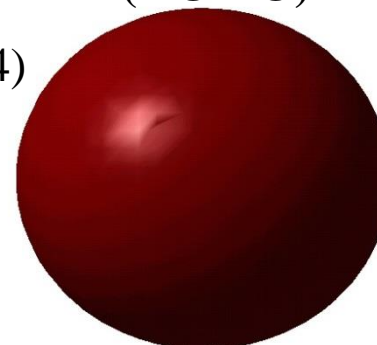


hidrogénmolekula lazító pályája

σ^* MO 2 (0.26570)



(HOMO)



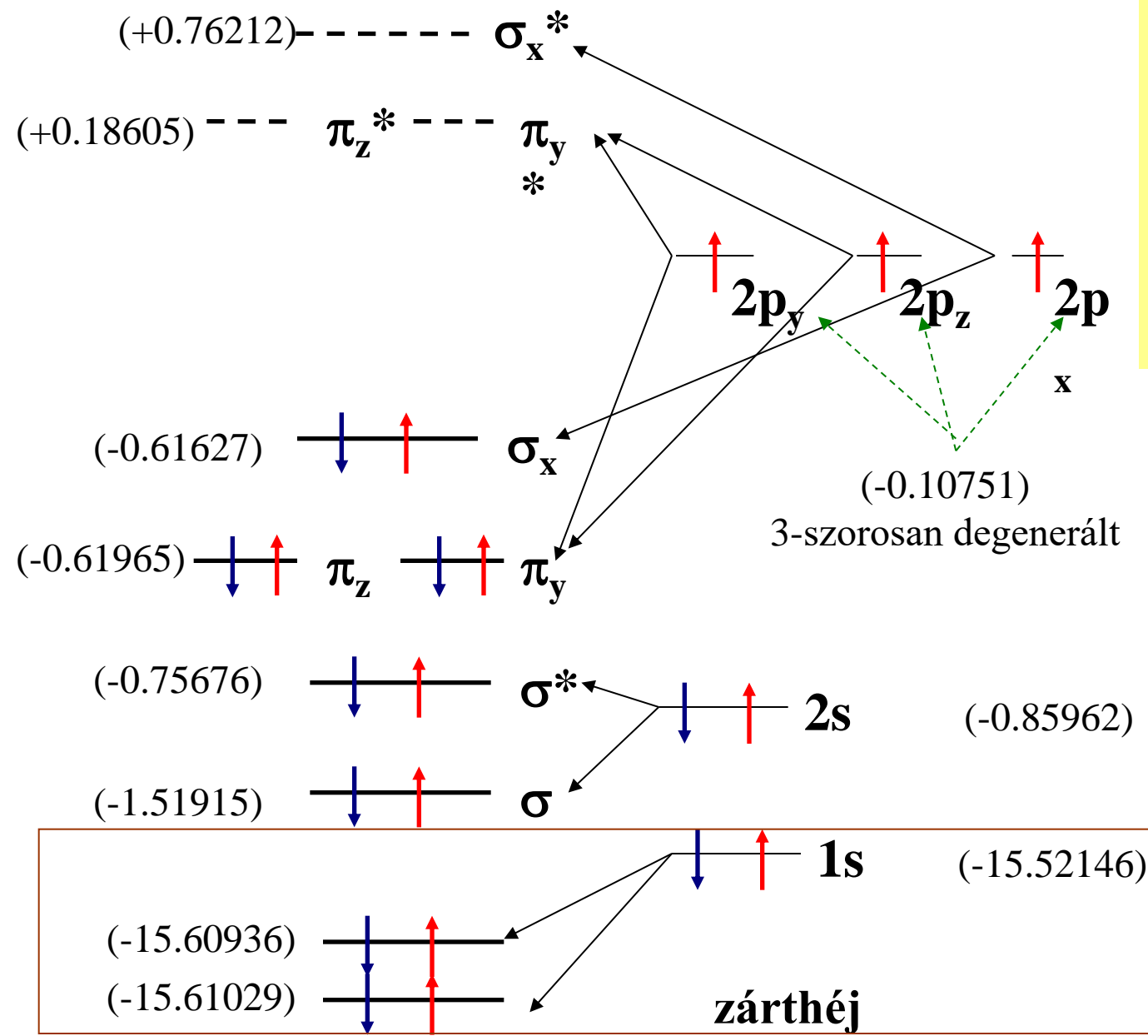
hidrogénmolekula kötő pályája

1s AO 1 (-0.4962)

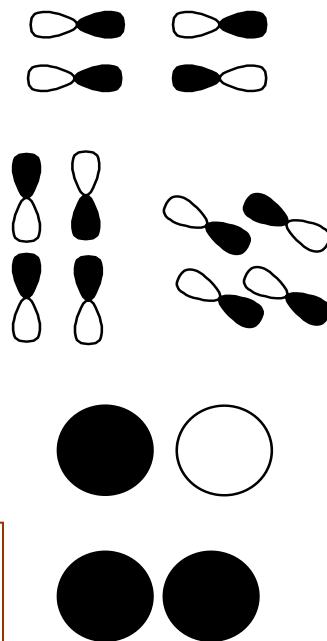
hidrogén atompályája

Az N₂ 7 (2*(2+5) elektron) MO-jának származtatása

RHF/3-21G szinten számított értékek Hartree-ban

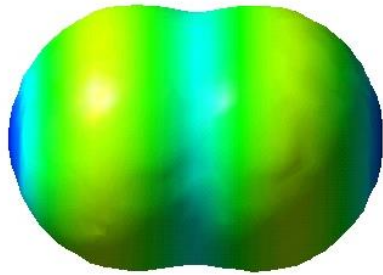


Ahogy a N atom 3 db p-pályája, úgy az N₂ molekula mindkét π-pályája degenerált. A kétatomos molekula betöltött MO-i rendre alacsonyabb energiájúak mint a megfelelő AO-k. Ezért stabil az N₂.



Memo: csak az egyik N atom AO-i vannak felrajzolva

Kéttomos homonukleáris molekulák: N_2

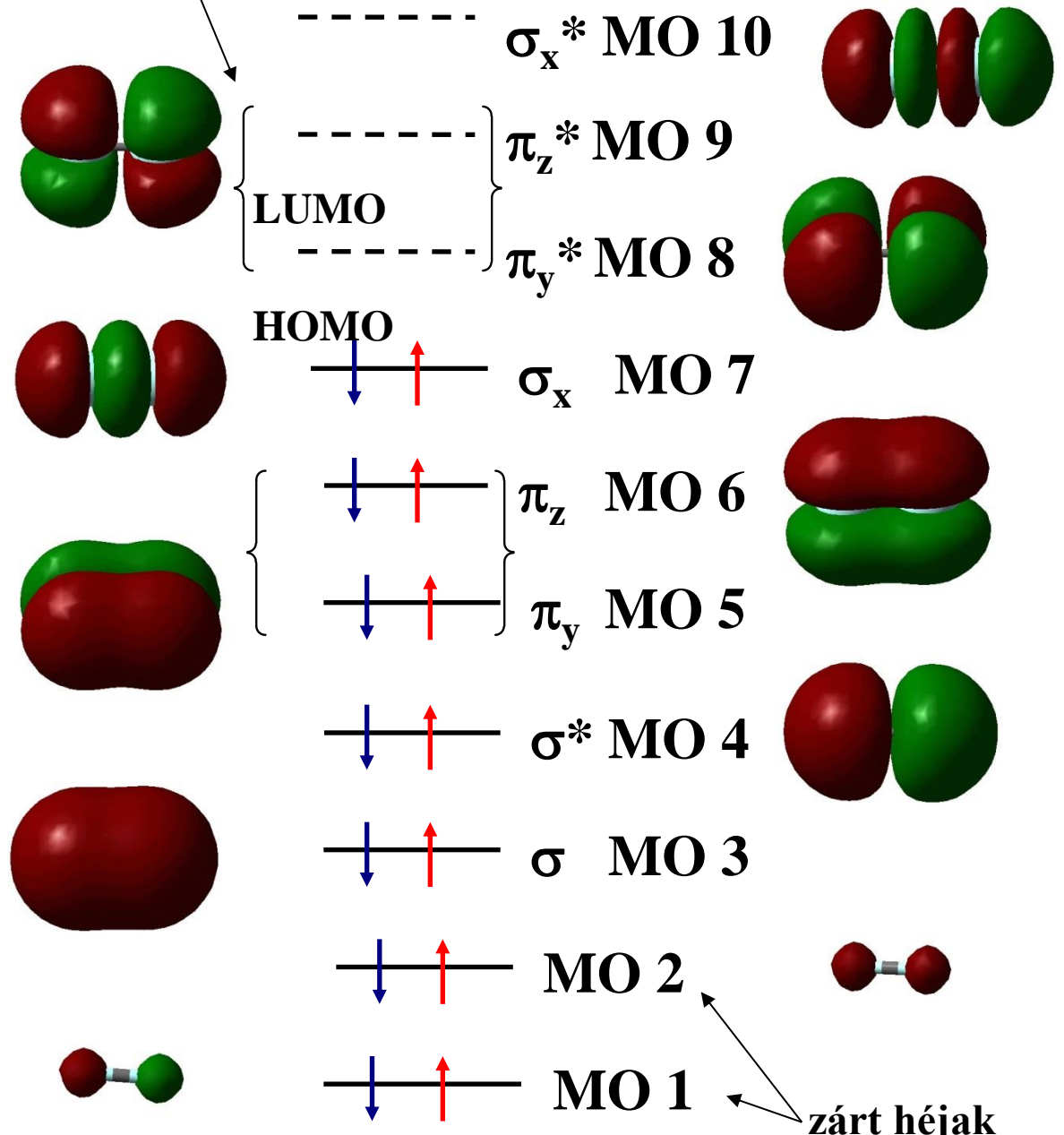


EPS

$-0.01 \leq \text{töltés} \leq 0.01$

$\mu = 0$ Debye

degenerált MO-k



Memo.:

• $2 \cdot (2+5)$ elektron \Rightarrow
összesen 7 betöltött MO

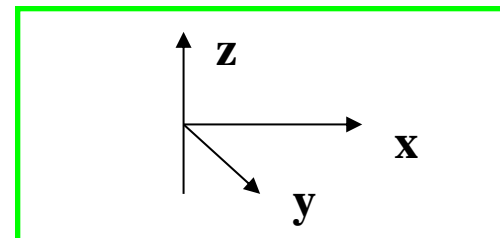
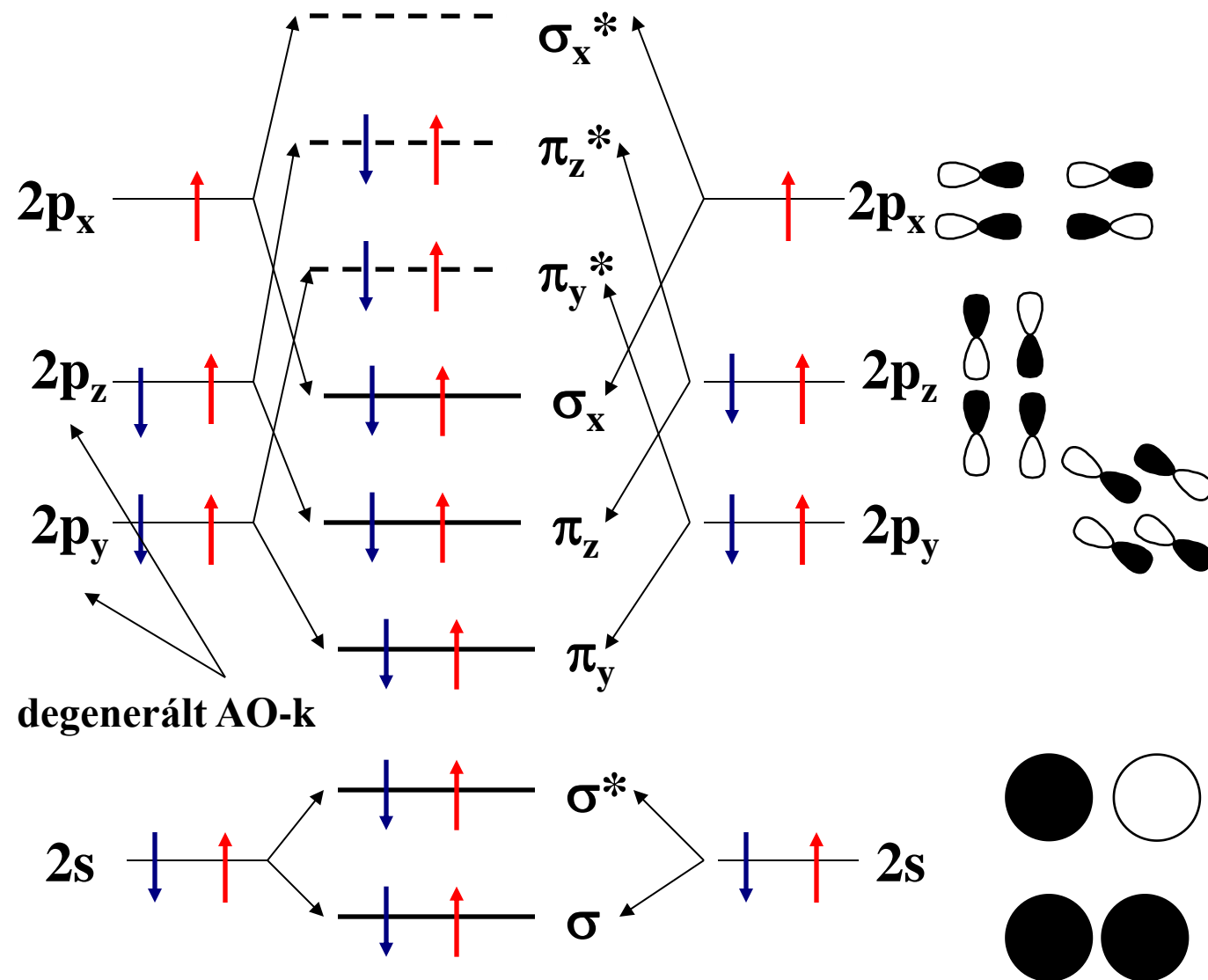
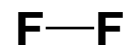
• 3 lazító pálya üres
azaz hármás kötés van



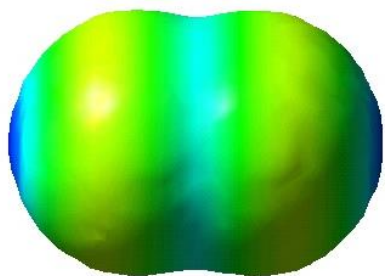
Az F_2 7 MO-jának származtatása

$2 \cdot (2+7)$ elektron \Rightarrow összesen **9** betöltött MO

Memo.: 1 lazító pálya üres
azaz 1-es kötés van



Kétatomos homonukleáris molekulák: F_2

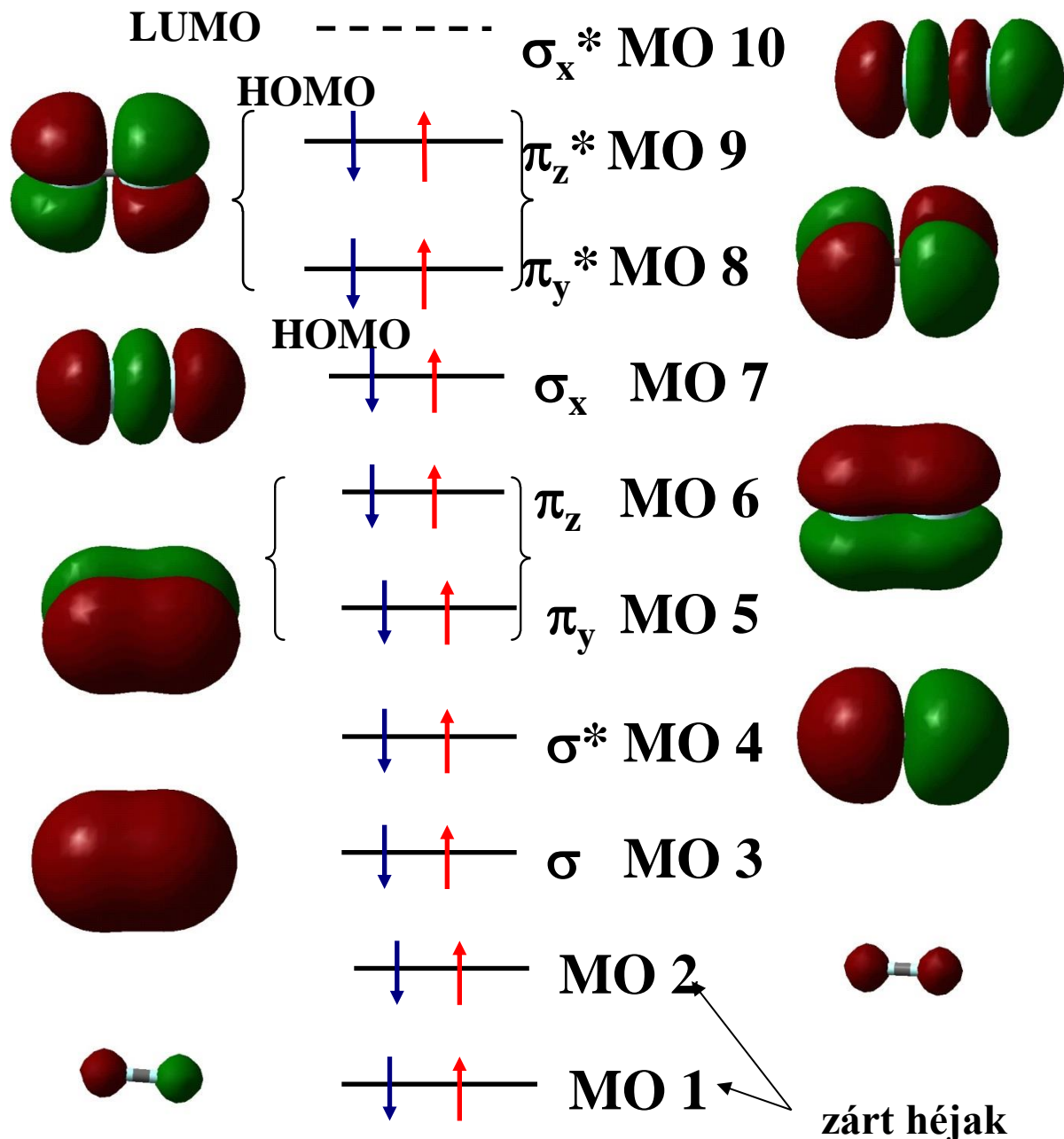


EPS

$-0.01 \leq \text{töltés.} \leq 0.01$

$\mu = 0$ Debye

Memo.: (F_2) 18 elektron
 \Rightarrow 9 betöltött MO

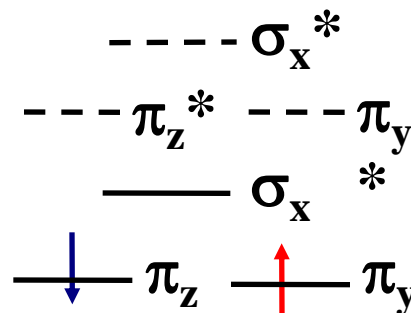


Multiplicitás (Atkins 235)

memo: $2S+1$ ahol S a párosítatlan e- száma * $\frac{1}{2}$

B₂ :

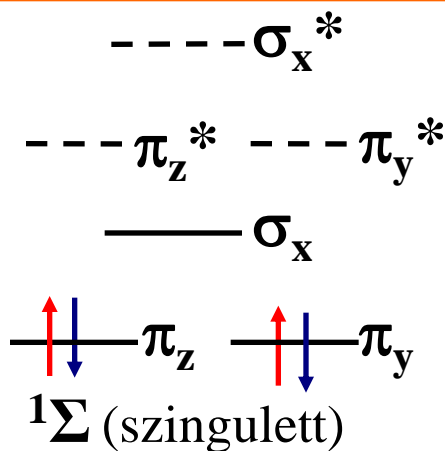
párosítatlan e- száma = 0
 1Σ (szingulett)



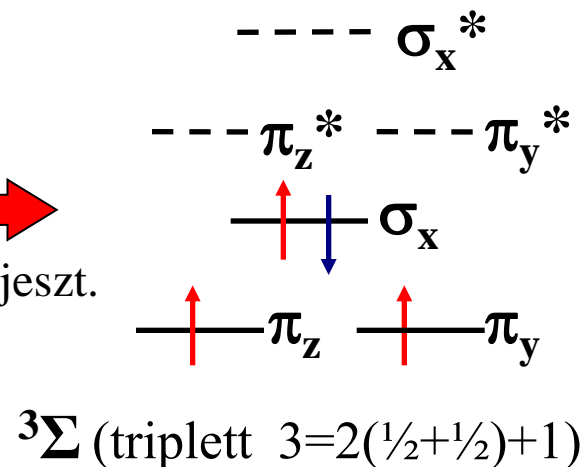
C₂ :

(pl. desztíl. grafit
 gáz halmazállapotú szén)

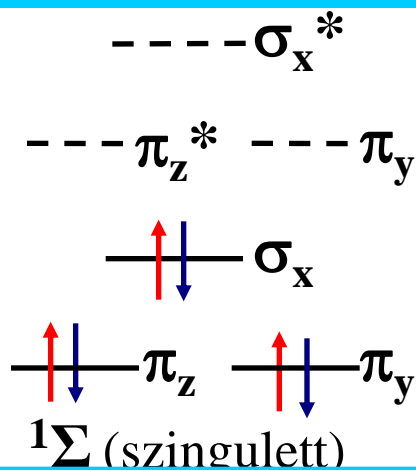
memo: ezt kiegészíti az
 a szingulett, amikor az
 egyik π e- spinje átfordul



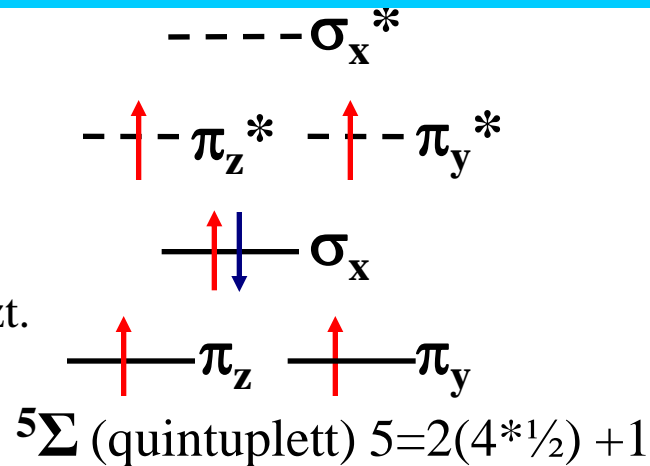
dupla gerjeszt.



N₂ :

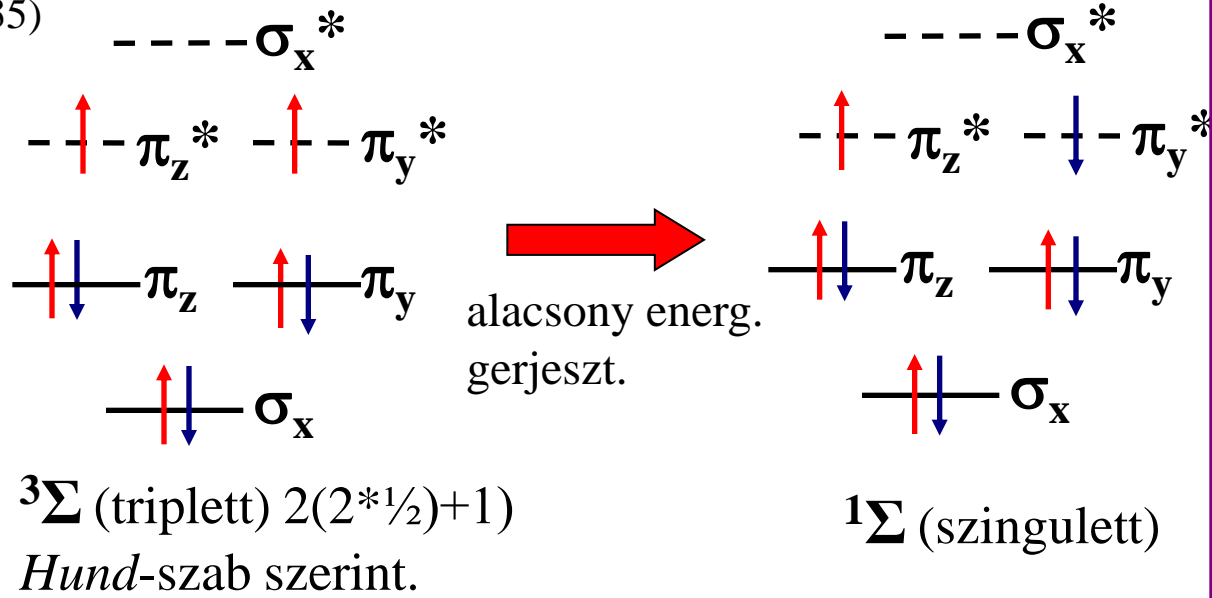


dupla gerjeszt.

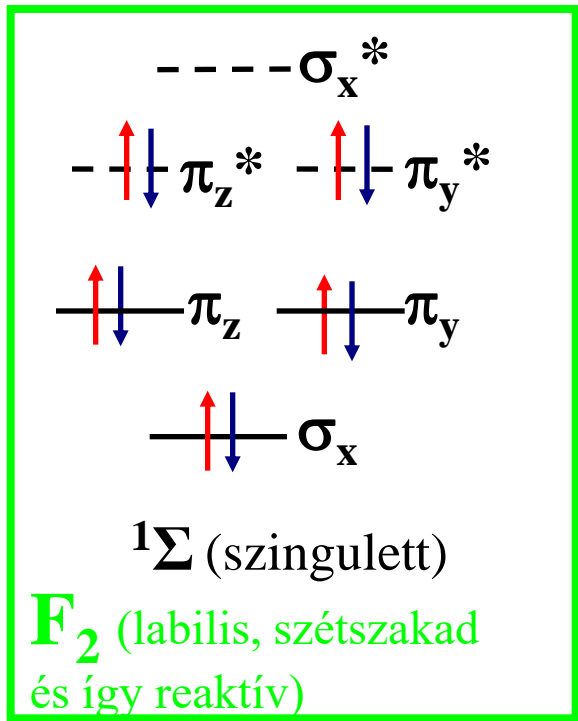


Multiplicitás (Atkins 235)

O₂ (labilis tehát reaktív) :



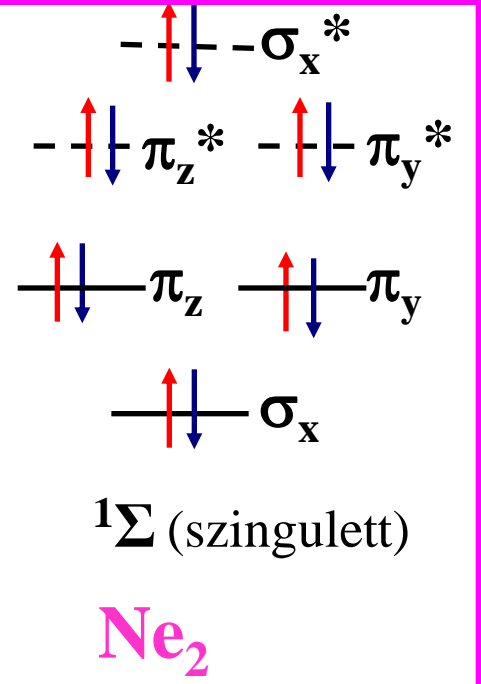
memo:
 $\pi_{y,z}$ és σ_x MO-k sorrendje felcserélődik.



nincs amitől együtt maradjon két Ne atom (ugyanannyi kötő mint ahány lazító MO)

de: Ne gáz cseppfolyósítható (fp = -246C°) (lop egy kevés elektront a szomszédától)

Ne → CH₄ analógja, VDW (hidrofób-hidrofób) kcs. → fehérje fold.

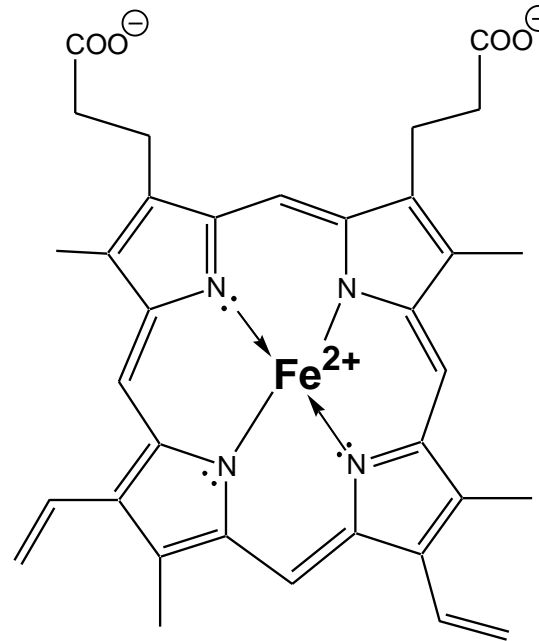
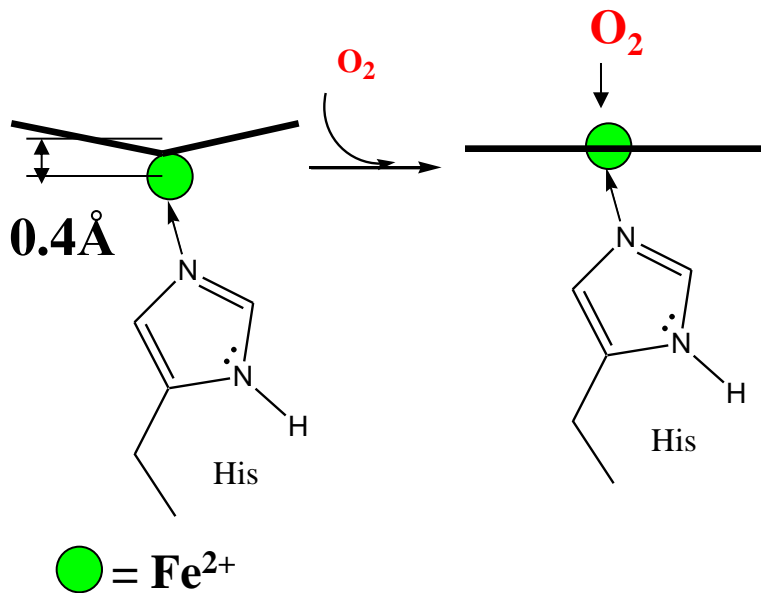


Az oxigén speciális reaktivitása (élet és halál)

A kétatomos oxigén nyílt héjú molekula, amely triplett állapotú és így reaktívabb mint zárthéjú N_2 (N_2/O_2 :78/21)

- memo:**
- az oxigén az egy kettős gyök avagy „diradikál”
 - oxigén úgy is reaktív hogy nem szakad ketté, mint az F_2

„élet” (oxigén transzport)



..

Memo: az oxigén bekötése szerkezeti átrendeződést indukál
 O_2 behúzza a His-t, ami elmozdítja az α -helixet,
ami további átrendeződéseket indukál.

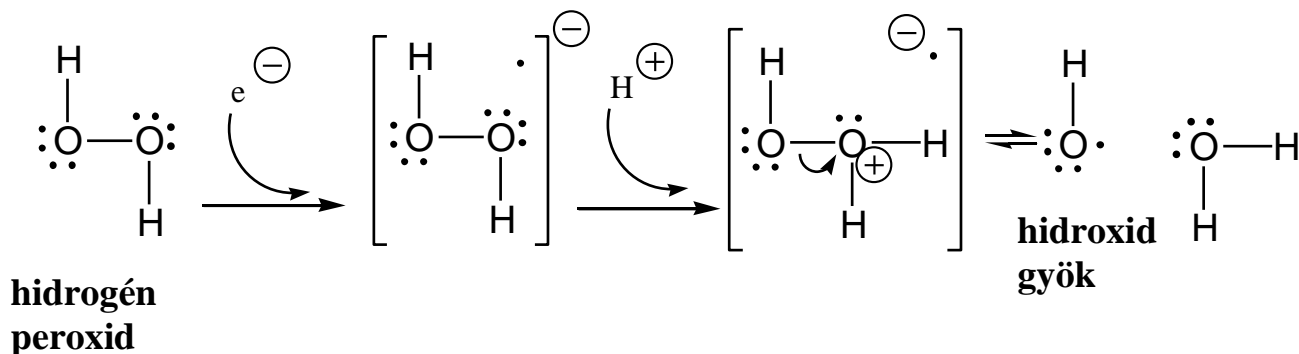
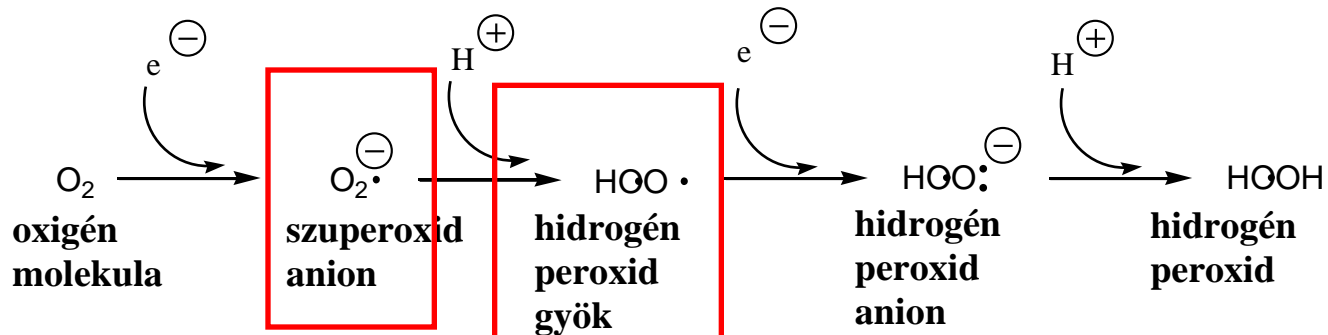
(Streyer 270)

A fő gond tehát a szabadgyökök képződése

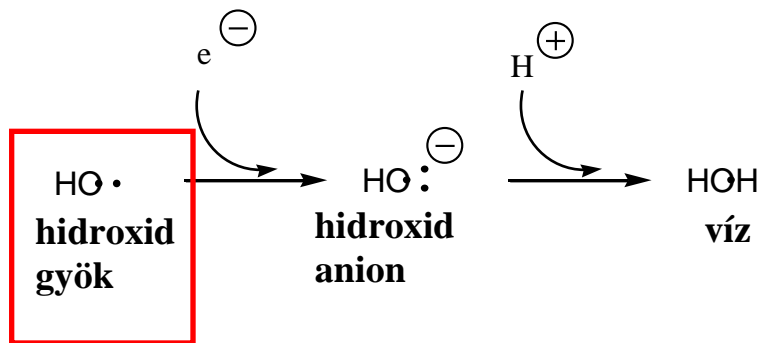
A bruttó egyenlet:



A részletek:



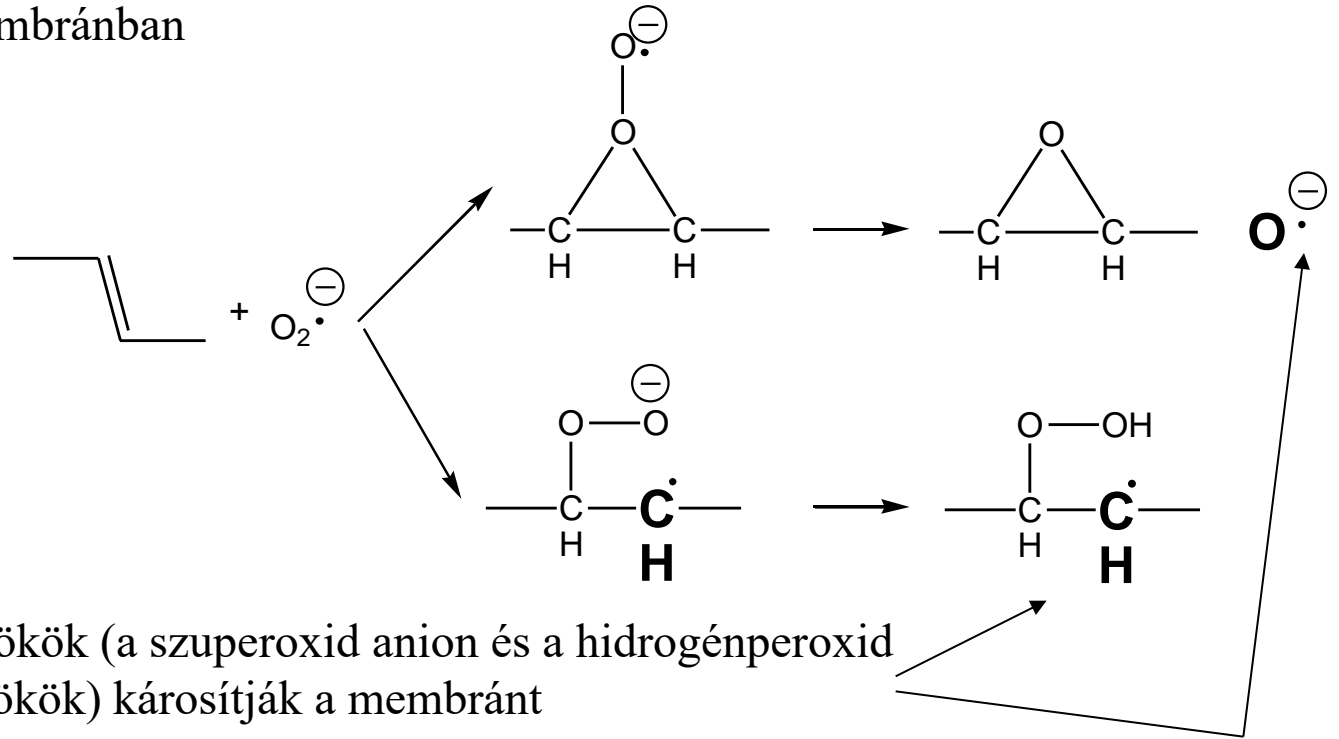
 különösen reaktív ágens



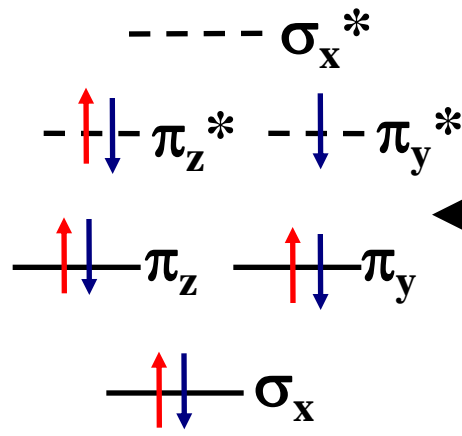
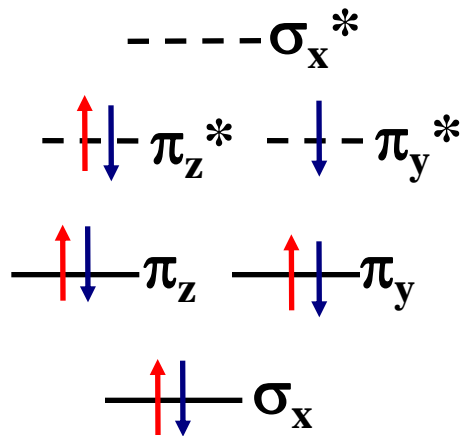
kérdés: „hol” rombolnak a szabadgyökök?

válasz: például a membránban

pl. tipikus telítetlen zsírsavrészlet:



különösen reaktív gyökök (a szuperoxid anion és a hidrogénperoxid gyökök) károsítják a membránt



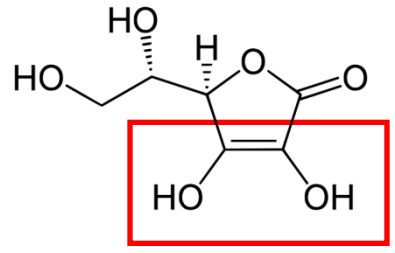
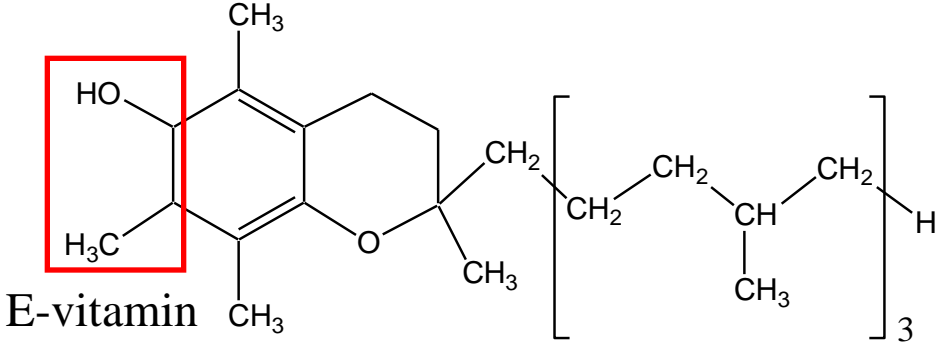
igen reaktív, valódi gyökök

HO_2^{\bullet} hidrogénperoxid gyök
 $^1\Sigma$ (doublett)

$O_2^{\bullet-}$ szuperoxid anion
 $^1\Sigma$ (doublett)

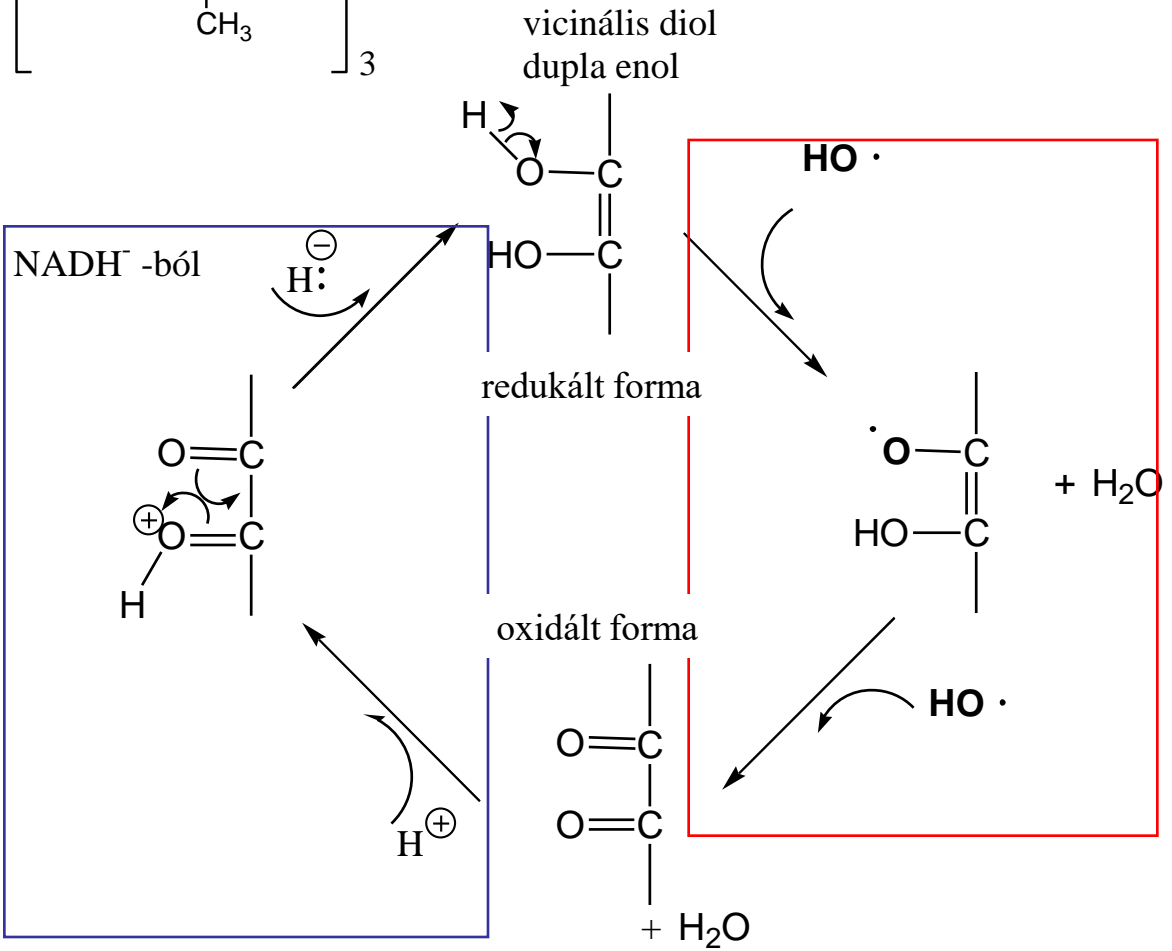
kérdés: kivédhető-e a „rombolás”?

válasz: igen, pl. C- és E-vitamin, szuperoxid dizmutáz ($O_2^- \rightarrow H_2O_2 + O_2$)
 kataláz ($H_2O_2 \rightarrow H_2O + O_2$), peroxidáz ($H_2O_2 \rightarrow H_2O$)



megvalósulás:
 egy redoxi ciklus

nagy szerencse hogy az oxidáció gyökös mechanizmussal, de a redukció ionos mechanizmussal megy.
 Tehát egy NADH- molekula két gyököt iktat ki.

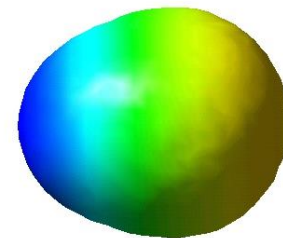
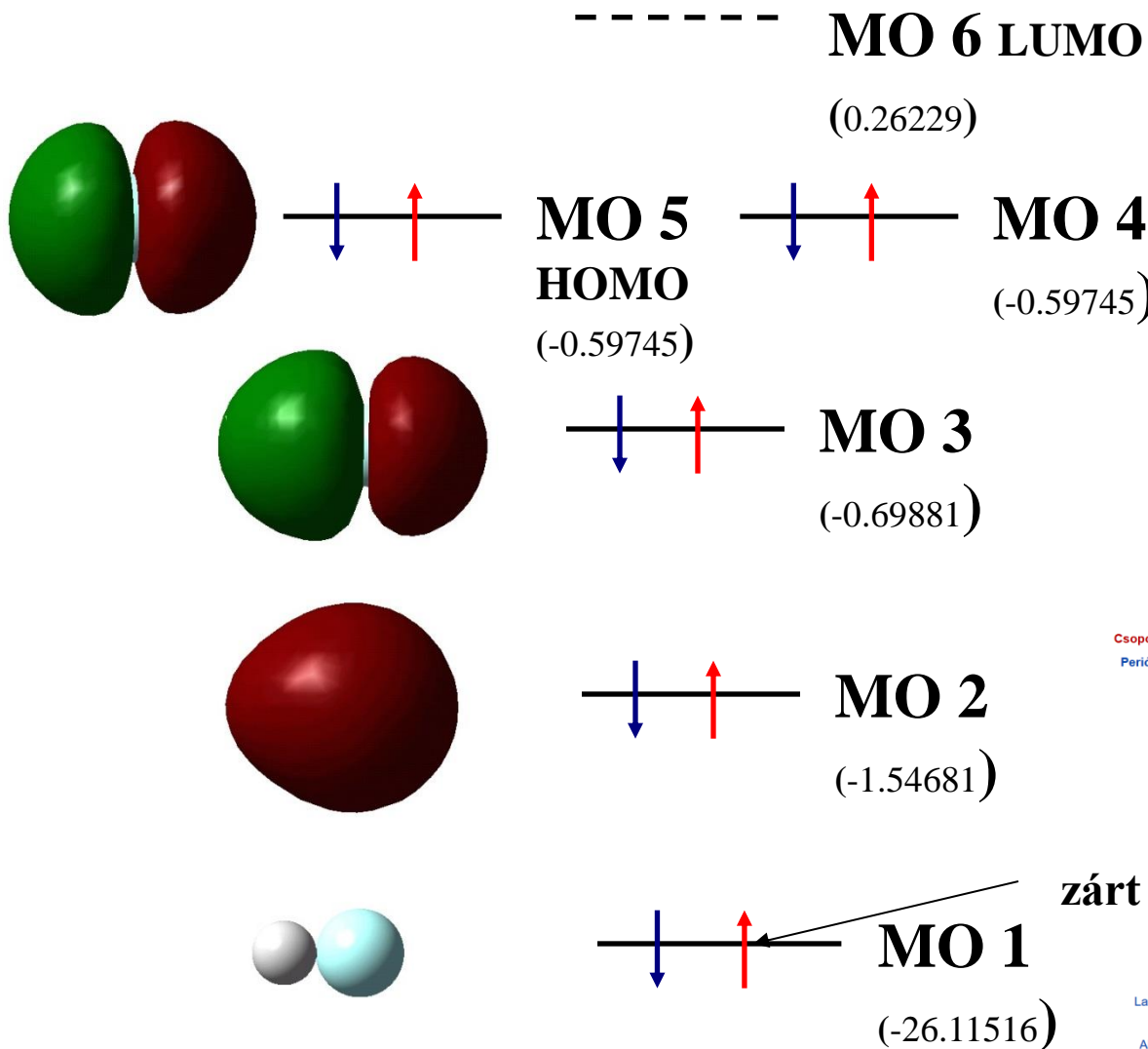


Kétatomos heteronukleáris molekulák

(HF) 10 elektron \Rightarrow 5 betöltött MO

EPS

-0.09 \leq töltés. \leq 0.09



$\mu = 2.1736$ Debye

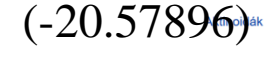
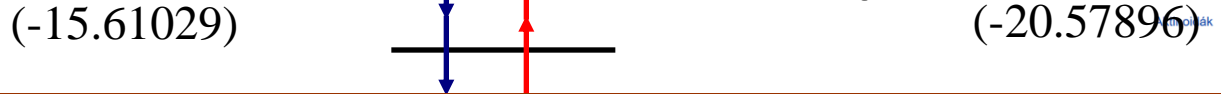
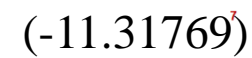
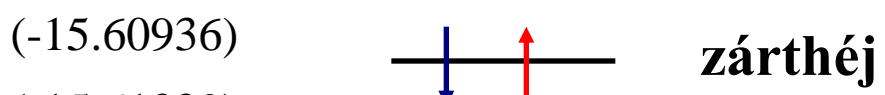
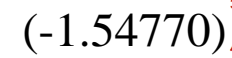
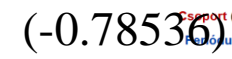
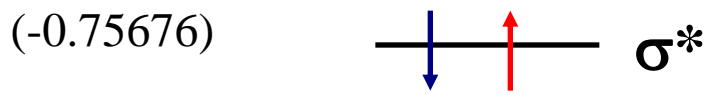
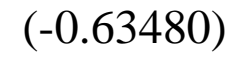
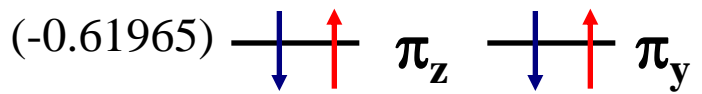
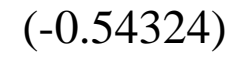
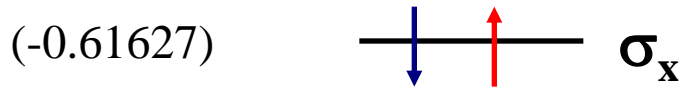
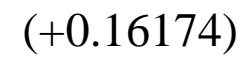
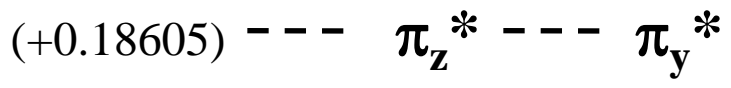
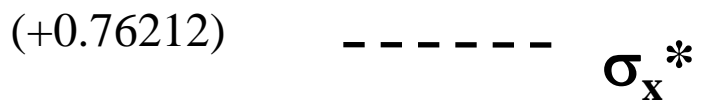
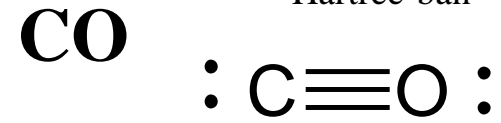
Degenerált
MO-k

→ Atomsugár nő → Ionizációs energia nő → Elektronegativitás nő →

Csoport (oszlopok)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
1	H 2,20																	He 3,89	
2	Li 0,98	Be 1,57												B 2,04	C 2,55	N 3,04	O 3,44	F 3,98	Ne 3,67
3	Na 0,93	Mg 1,31												Al 1,61	Si 1,90	P 2,19	S 2,58	Cl 3,16	Ar 3,3
4	K 0,82	Ca 1,00	Sc 1,36	Ti 1,54	V 1,63	Cr 1,66	Mn 1,55	Fe 1,83	Co 1,88	Ni 1,91	Cu 1,90	Zn 1,65	Ga 1,81	Ge 2,01	As 2,18	Se 2,55	Br 2,96	Kr 3,00	
5	Rb 0,82	Sr 0,95	Y 1,22	Zr 1,33	Nb 1,6	Mo 2,16	Tc 1,9	Ru 2,2	Rh 2,28	Pd 2,20	Ag 1,93	Cd 1,69	In 1,78	Sn 1,96	Sb 2,05	Te 2,1	I 2,66	Xe 2,67	
6	Ce 0,79	Ba 0,89	*	Hf 1,3	Ta 1,5	W 2,36	Re 1,9	Os 2,2	Ir 2,20	Pt 2,28	Au 2,54	Hg 2,00	Tl 1,62	Pb 2,33	Bi 2,02	Po 2,0	At 2,2	Rn 2,2	
7	Fr 0,7	Ra 0,9	**	Rf 1,3	Db 1,5	Sg 2,36	Bh 1,9	Hs 2,2	Mt 2,20	Ds 2,28	Rg 2,54	Uub 2,00	Uut 1,62	Uuq 2,33	Uup 2,02	Uuh 2,0	Uus 2,2	Uuo 2,2	
Lantanoidák	*	La 1,1	Ce 1,12	Pr 1,13	Nd 1,14	Pm 1,13	Sm 1,17	Eu 1,2	Gd 1,2	Tb 1,1	Dy 1,22	Ho 1,23	Er 1,24	Tm 1,25	Yb 1,1	Lu 1,27			
Aktinoidák	**	Ac 1,1	Th 1,3	Pa 1,5	U 1,38	Np 1,36	Pu 1,28	Am 1,13	Cm 1,28	Bk 1,3	Cf 1,3	Es 1,3	Fm 1,3	Md 1,3	No 1,3	Lr 1,291			

A Pauling-féle elektronegativitási állandók periódusos rendszere

A CO összes MO-ja (vö. N₂ MO-val): RHF/3-21G szinten számított értékek Hartree-ban



memo: a σ , σ^* és a σ_x alkotják mindkét molekulában a szigmakötés és a két nemkötő e.pár megfelelőit (kanonikus pályák ↔ lokalizált pályák)

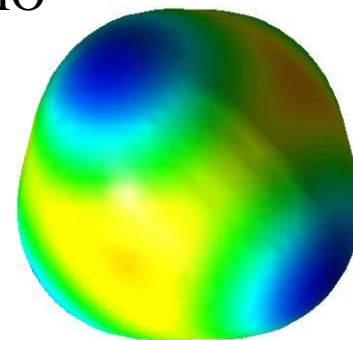
→ Atomsugár nő → Ionizációs energia nő → Elektronegativitás nő →

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
H 2,20																	He 3,89
Li 0,98	Be 1,57																Ne 3,67
Na 0,93	Mg 1,31																Ar 3,3
K 0,82	Ca 1,00	Sc 1,36	Ti 1,54	V 1,63	Cr 1,66	Mn 1,55	Fe 1,83	Co 1,88	Ni 1,91	Cu 1,90	Zn 1,65	Ga 1,81	Ge 2,01	As 2,18	Se 2,55	Br 2,96	Kr 3,00
Rb 0,82	Sr 0,95	Y 1,22	Zr 1,33	Nb 1,6	Mo 2,16	Tc 1,9	Ru 2,2	Rh 2,28	Pd 2,20	Ag 1,93	Cd 1,69	In 1,78	Sn 1,96	Sb 2,05	Te 2,1	I 2,66	Xe 2,67
Ce 0,79	Ba 0,89	*	Hf 1,3	Ta 1,5	W 2,36	Re 1,9	Os 2,2	Ir 2,20	Pt 2,28	Au 2,54	Hg 2,00	Tl 1,62	Pb 2,33	Bi 2,02	Po 2,0	At 2,2	Rn 2,2
Fr 0,7	Ra 0,9	**	Rf 1,3	Db 1,5	Sg 2,36	Bh 1,9	Hs 2,2	Mt 2,20	Ds 2,28	Rg 2,54	Uub 2,00	Uut 1,62	Uuq 2,33	Uup 2,02	Uuh 2,0	Uus 2,2	Uuo 2,2
*	La 1,1	Ce 1,12	Pr 1,13	Nd 1,14	Pm 1,13	Sm 1,17	Eu 1,2	Gd 1,2	Tb 1,1	Dy 1,22	Ho 1,23	Er 1,24	Tm 1,25	Yb 1,1	Lu 1,27		
**	Ac 1,1	Th 1,3	Pa 1,5	U 1,38	Np 1,36	Pu 1,28	Am 1,13	Cm 1,28	Bk 1,3	Cf 1,3	Es 1,3	Fm 1,3	Md 1,3	No 1,3	Lr 1,291		

A Pauling-féle elektronegativitási állandók periódusos rendszere

Metán (CH₄) 10 elektron ⇒ 5 betöltött MO

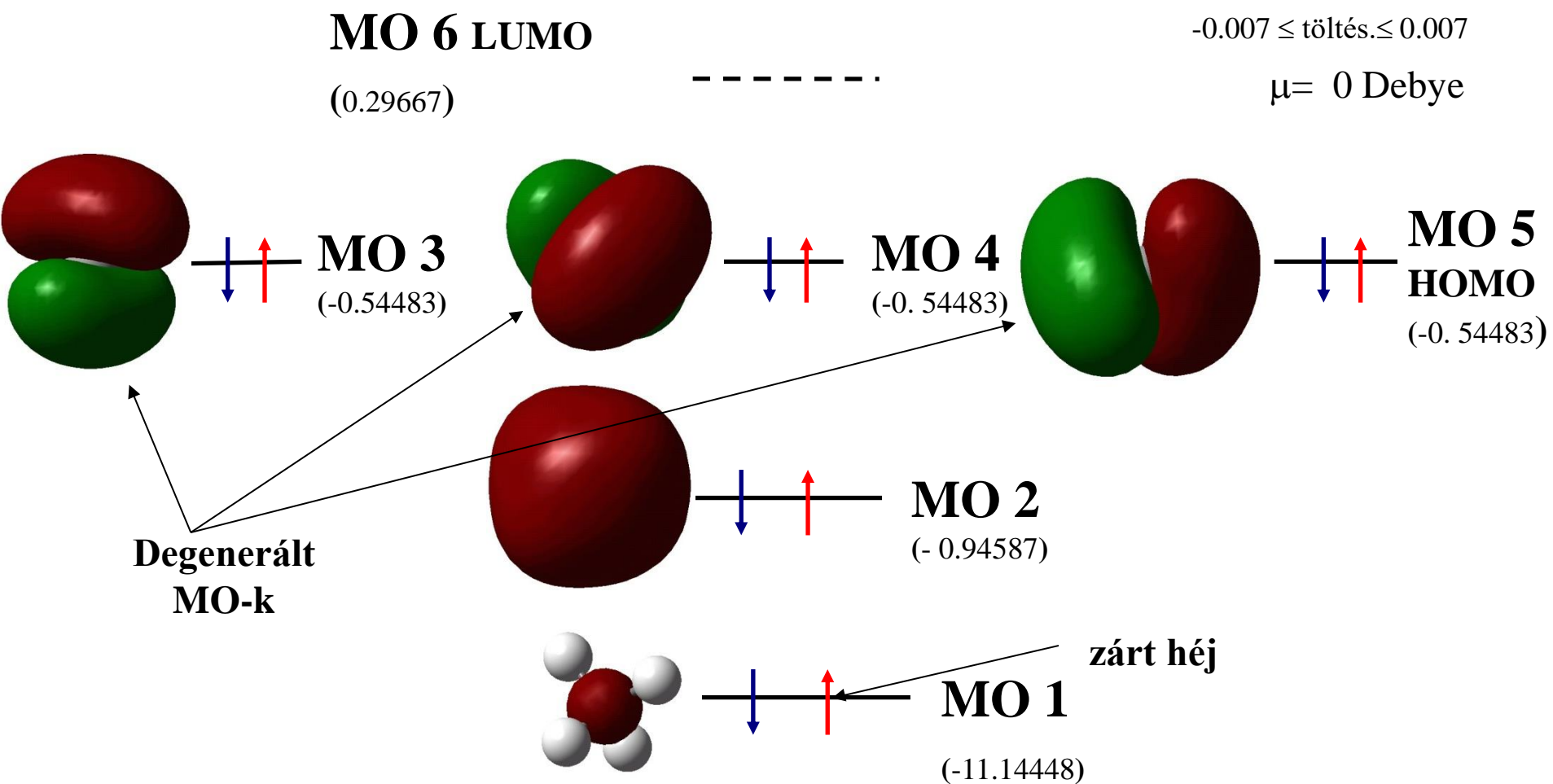
E(RHF/3-21G)= -39.97687756 Hartree



EPS

-0.007 ≤ töltés. ≤ 0.007

μ= 0 Debye



Az elektronrendszer többféle felosztása molekulapályákra:

- az elektronpárok mindegyike a molekulát alkotó összes mag erőterében oszlik el más-más szimmetria szerint:
ez a *kanonikus leírás*.
- egy-egy elektronpárt nagyjából két-két szomszédos mag erőterébe lokalizálunk: ez a *lokalizált leírás*.

közös a két leírásmódban:

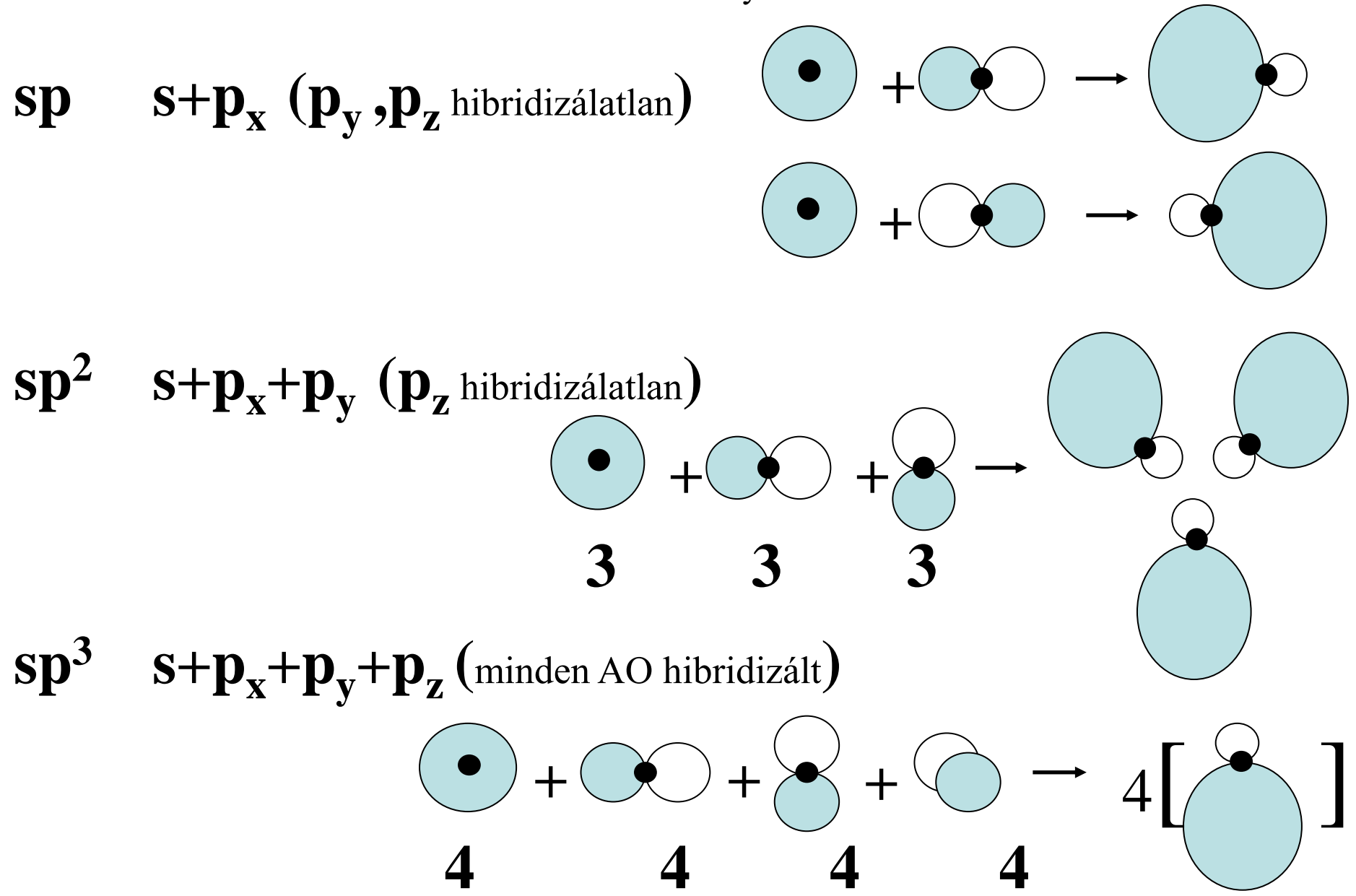
- a molekula összenergiájának és összelektronsűrűségének értéke.

eltérő a két leírásban:

- a lokalizált leírás során nyert MO-khoz nem tartozik pálya-energiaérték.

Hibridizáció

idealizált sémák súlyozás nélkül



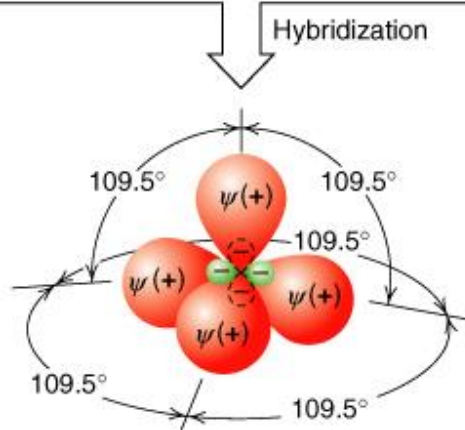
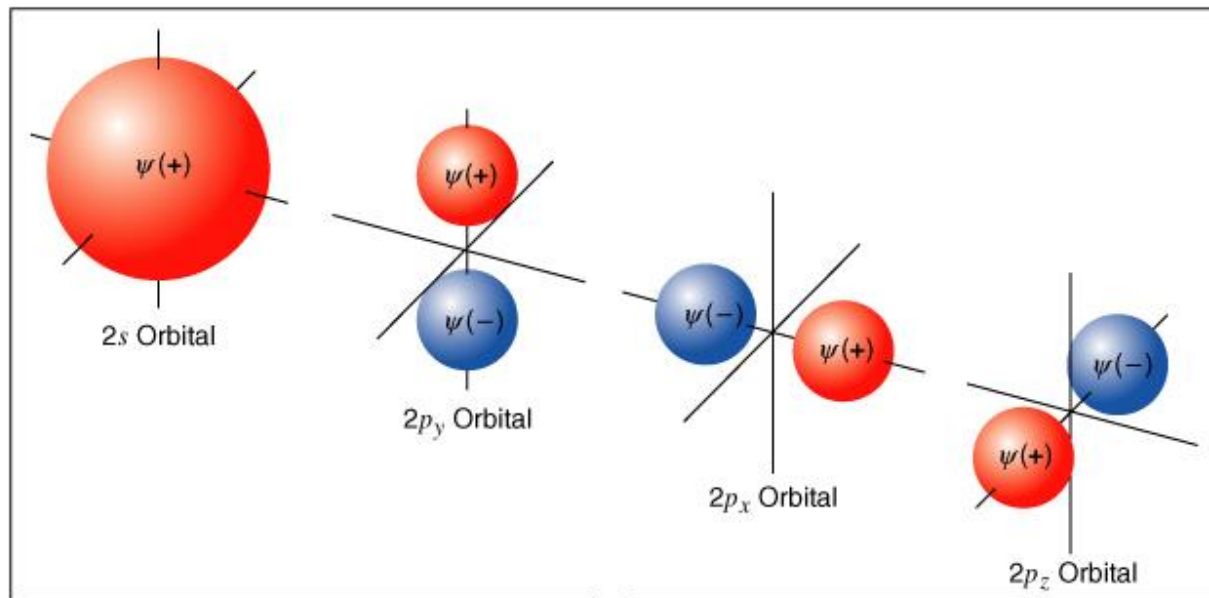


Figure 1.11 Hybridization of pure atomic orbitals of a carbon atom to produce sp^3 hybrid orbitals.

Copyright 2000 John Wiley and Sons, Inc.

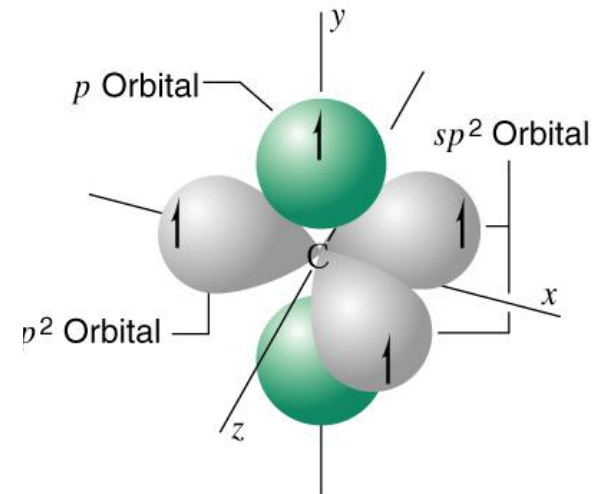


Figure 1.21 An sp^2 -hybridized carbon atom.
Copyright 2000 John Wiley and Sons, Inc.

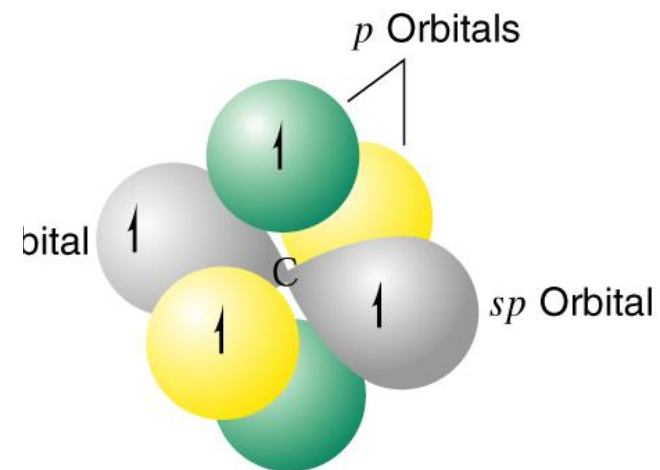


Figure 1.27 An sp -hybridized carbon atom.

Copyright 2000 John Wiley and Sons, Inc.

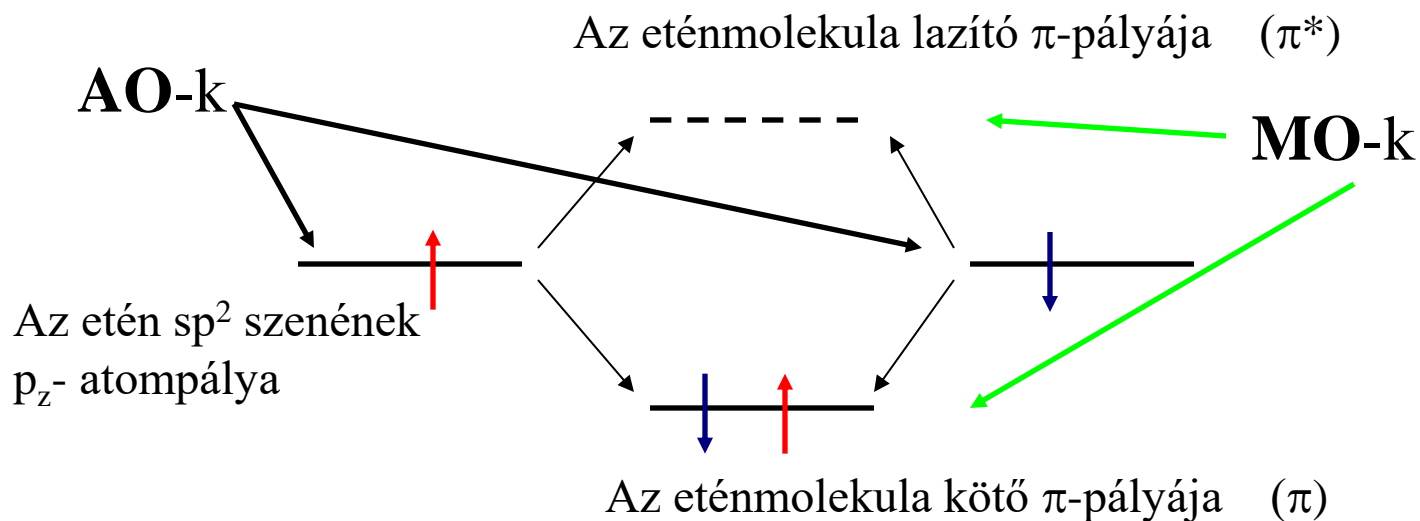
Telítetlen molekulák: σ -váz és π -elektronrendszer

Vannak **koordinatív telítetlen** szénatomokat (sp^2 , sp) is tartalmazó molekulák, melyekben az ilyen molekula részek alapállapotban **síkalkatúak**.

Ilyenkor az elektronok **feloszthatók** a σ -váz elektronjaira és π -elektronrendszer részét képezőkre.

(Az előzőek tipikusan atompárokra **lokalizált** MO-k, míg az utóbbiak a **delokalizált** π -molekulapályákat építik fel. A π -molekulapályák energiája nagyobb mint a σ -váz kanonikus MO-jainak energiája.)

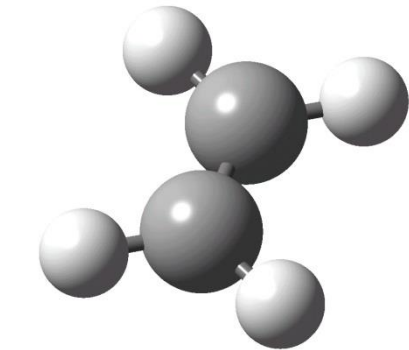
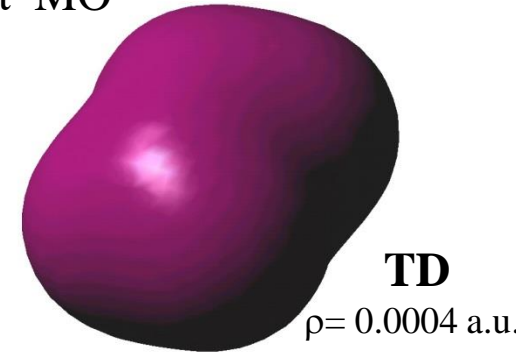
A π -elektronok **kisebb magvonzás** alatt vannak mint a σ -váz elektronjai ezért a **kémiai reakciók** és a **spektroszkópiai** "események" céltáblái.



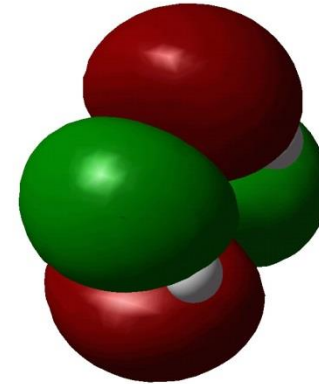
Etén (C₂H₄) 12+4=16 elektron ⇒ 8 betöltött MO

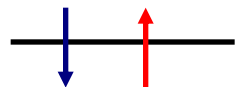
$\mu = 0$ Debye

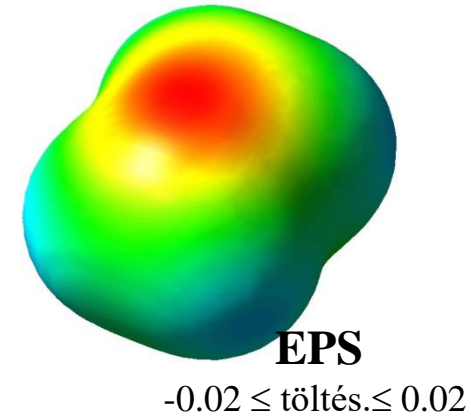
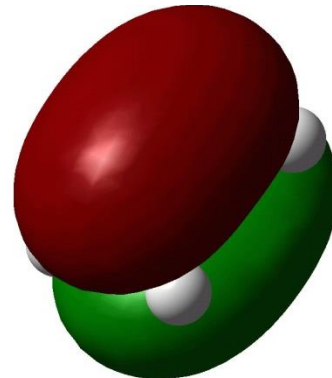
$E(\text{RHF}/3\text{-}21\text{G}) = -77.60098817$ Hartree



----- $\pi 2^*$ **MO 9** (0.18663)
(LUMO)



 $\pi 1$ **MO 8** (-0.37970)
(HOMO)



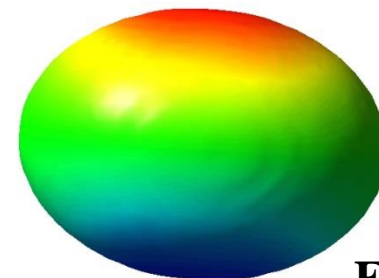
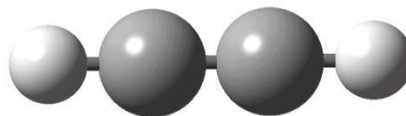
TD:=total electron density (ρ)

Etin (C_2H_2)

12+2=14 elektron \Rightarrow 7 betöltött MO

$\mu = 0$ Debye

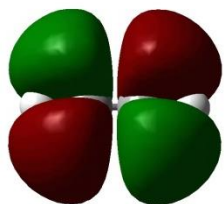
$E(\text{RHF}/3\text{-}21\text{G}) = -76.39595687$ Hartree



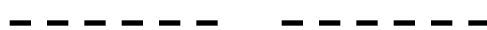
EPS

$0.01 \leq \text{töltés} \leq 0.0$

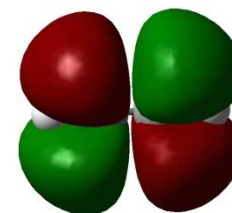
MO 8 (0.22577)
(LUMO)



$\pi 3^*$

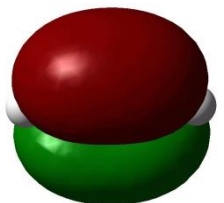


$\pi 4^*$

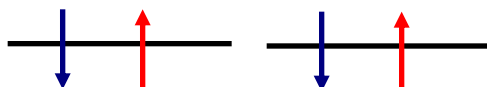


MO 9 (0.22577)

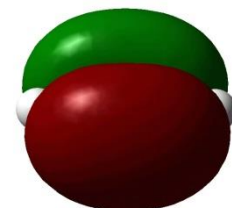
MO 6 (-0.41218)



$\pi 1$



$\pi 2$



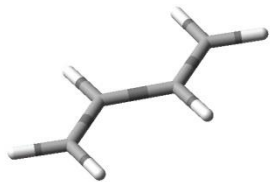
MO 7 (-0.41218)
(HOMO)

**Degenerált
MO-k**

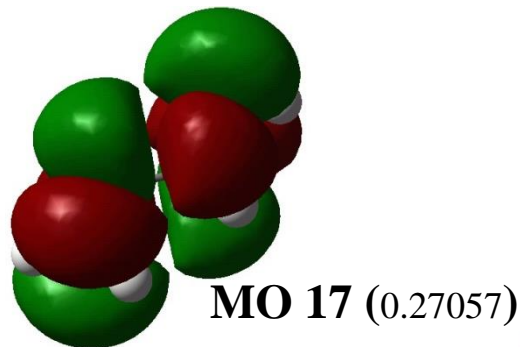
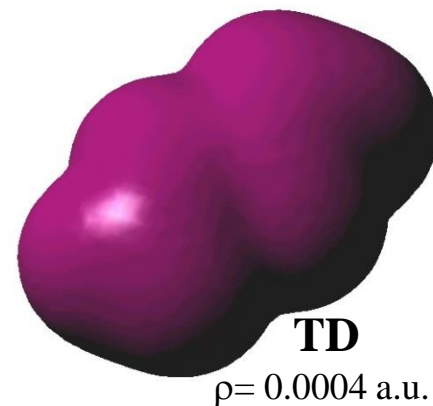
Butadién (C₄H₆)

24+6=30 elektron ⇒ 15 betöltött MO

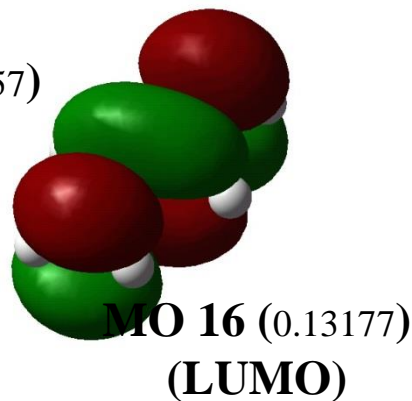
(Bruckner I/1 161) $\mu = 0$ Debye



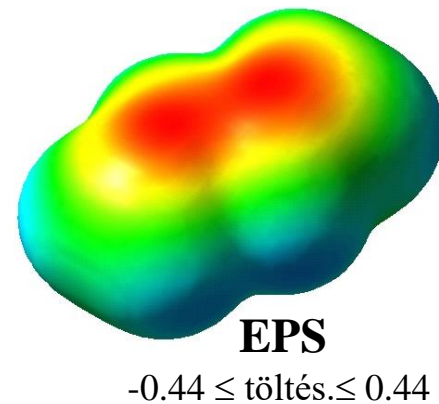
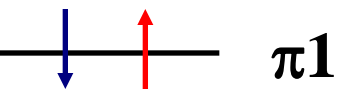
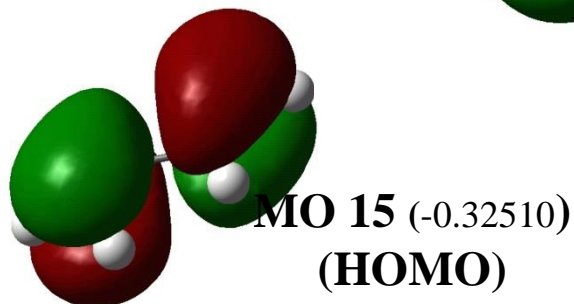
$E(\text{RHF}/3\text{-}21\text{G}) = -154.05945647$ Hartree



----- $\pi 4^*$

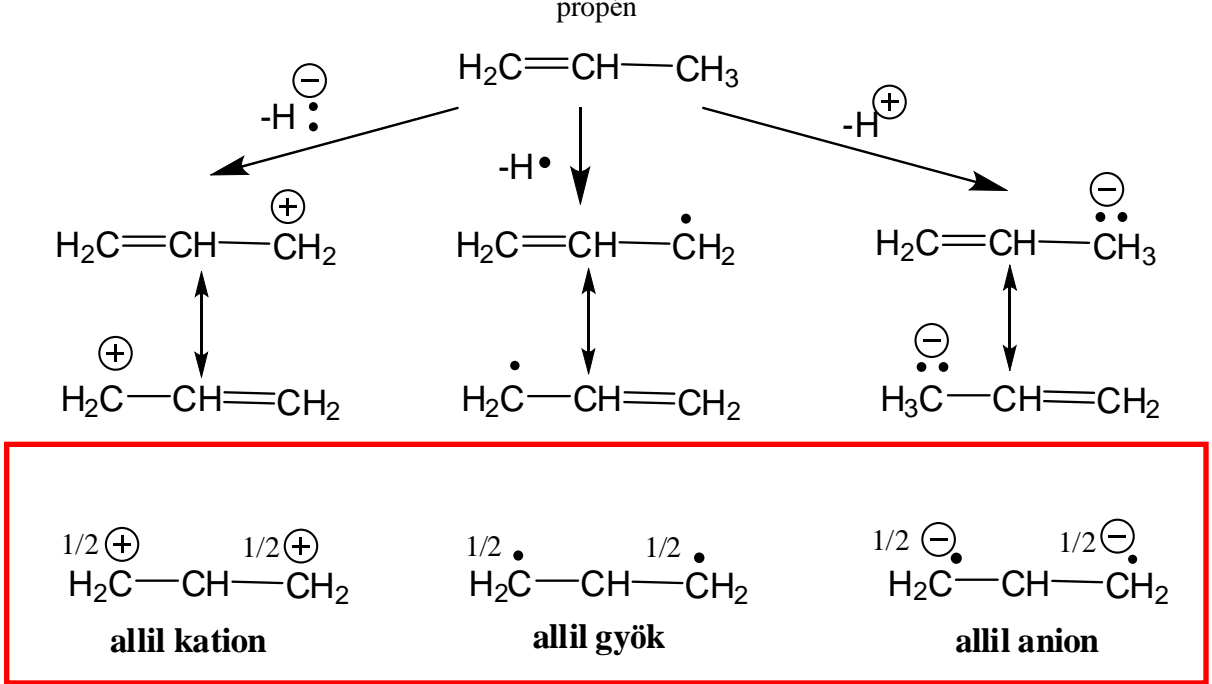


----- $\pi 3^*$

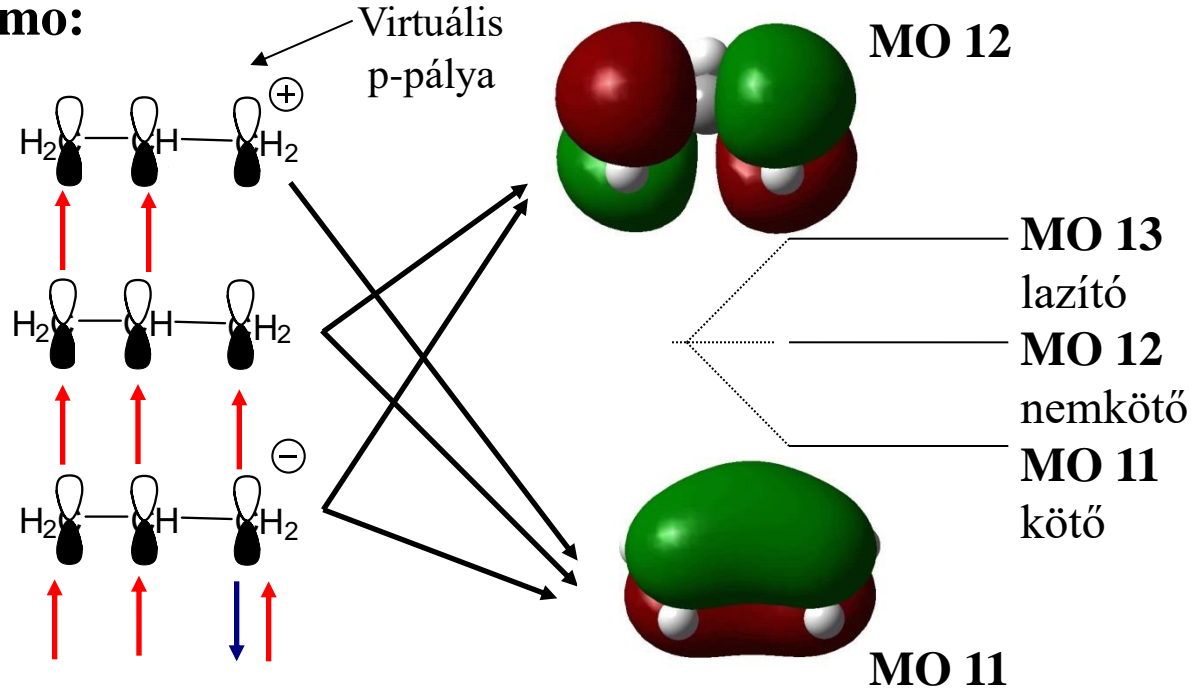


MO 14 (-0.44795)

Az allil-rendszerek elektronszerkezete



memo:

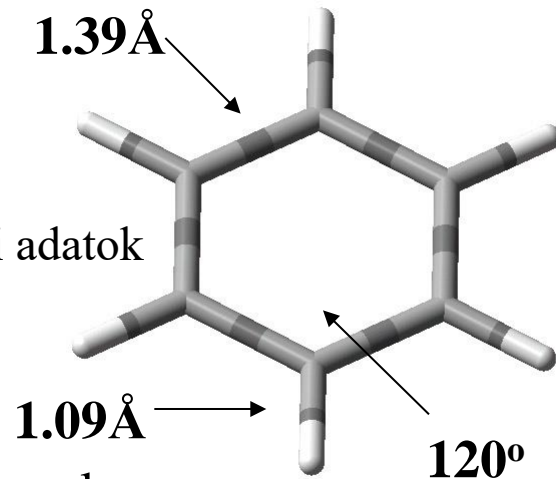


Benzol (aromás)

August Wilhelm Kekulé (1866)

Geometriai adatok: mikrohullámú spektroszkópiai adatok

memo: C-C 1.54 Å
C=C 1.34 Å

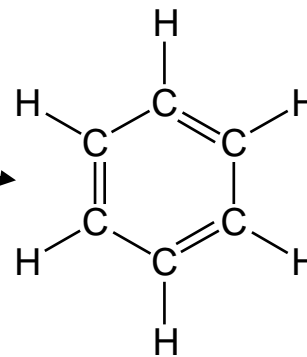


A benzol planáris és aromás összesen 6 delokalizált π -elektronnal.
Az aromacitás egyik feltétele a $(4n+2)$ delokalizált π -elektron.

Elektronszerkezet:

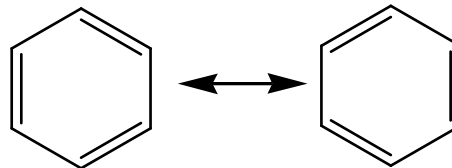
(memo: Hogyan rajzoljunk rezonancia
hibridet: σ -kötés érintetlen marad π -kötés alternál)

1 db. Kekulé szerkezet



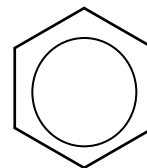
Apoláris határszerkezetek:

Kekulé-féle képletek (1865)



Robinson-féle

képlet (1925)



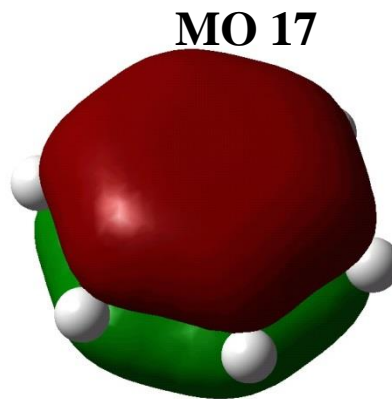
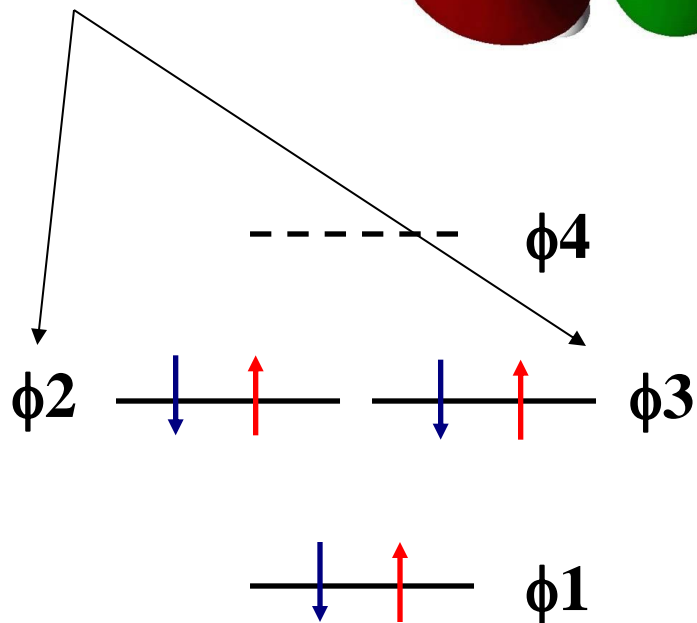
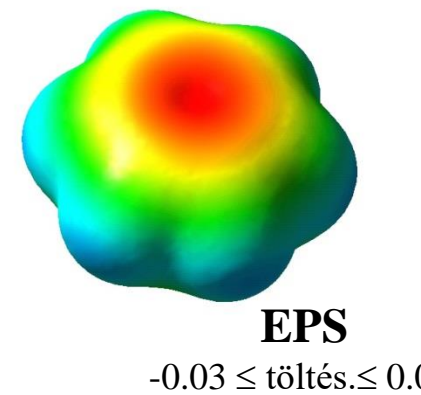
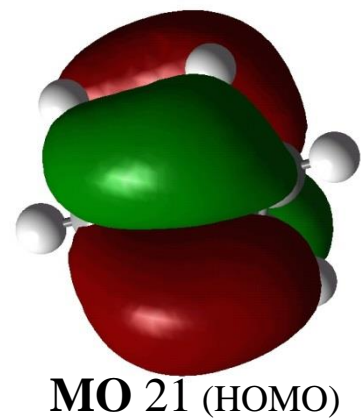
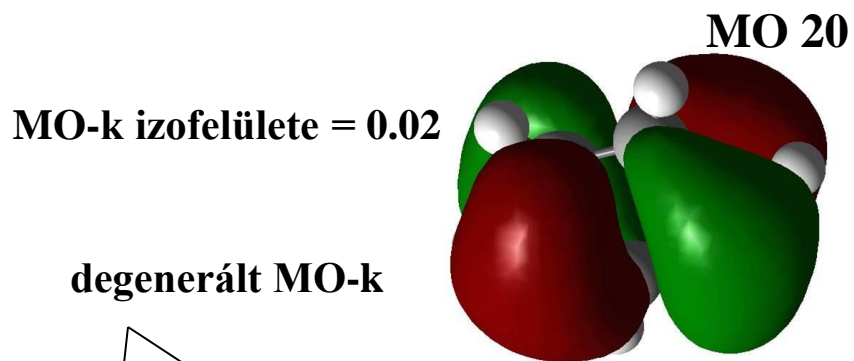
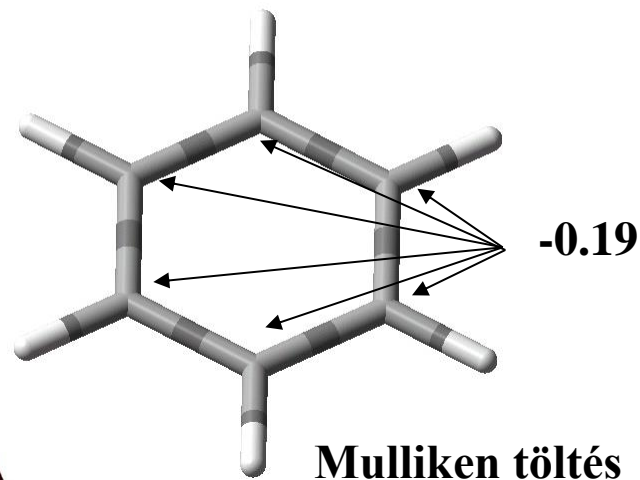
Representation of the benzene ring
in the reports of the
"thirsty chemical society" - in 1886



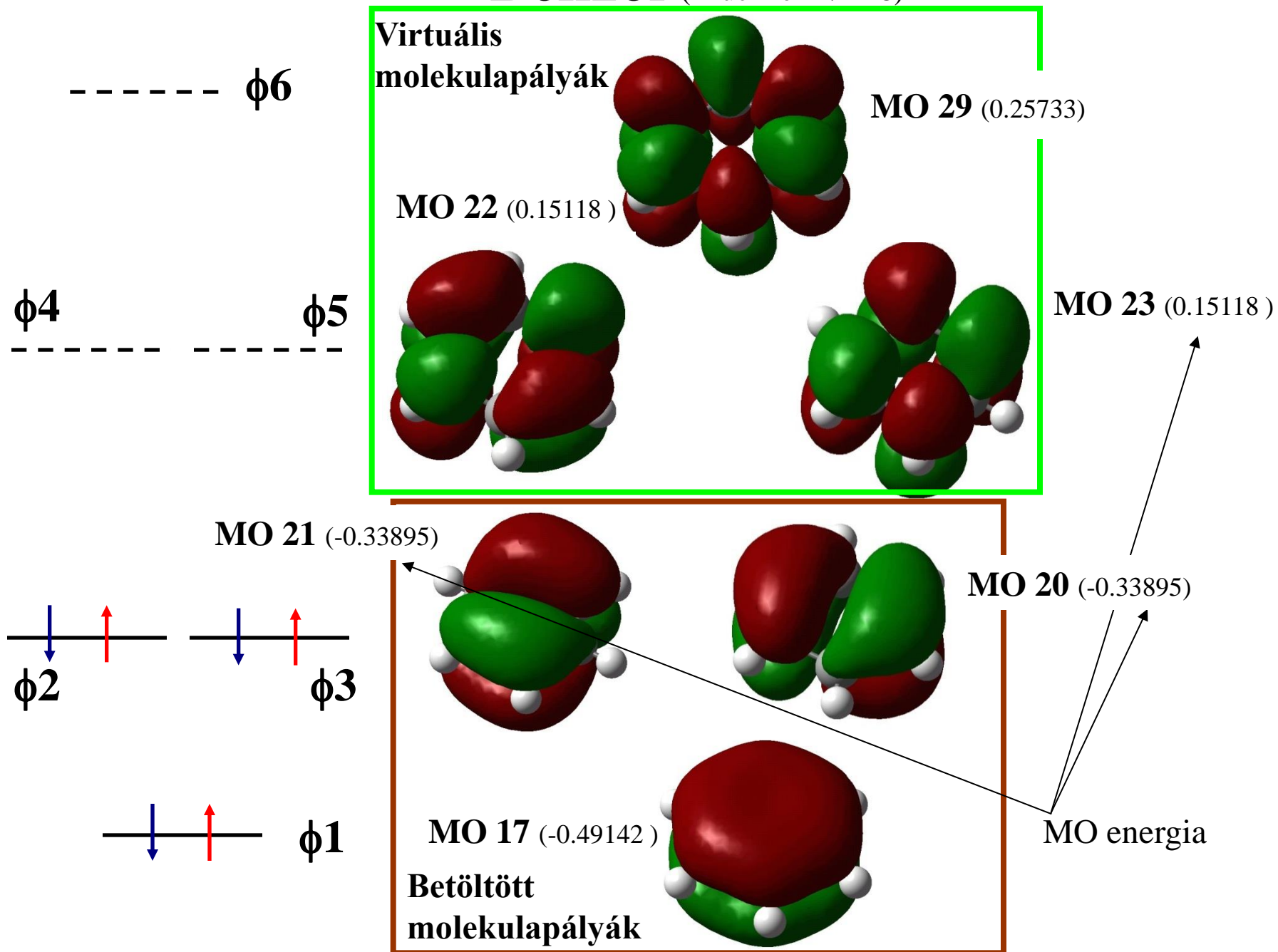
Benzol (Bruckner II/1 48)

$\mu = 0$ Debye

$E(\text{RHF}/6\text{-}311++\text{G}(\text{d},\text{p})) = -230.75684803$ Hartree



Benzol (Bruckner II/1 48)



Aromaticitás

A benzol és a belőle levezethető vegyületek különleges fizikai és kémiai tulajdonságainak együttese.

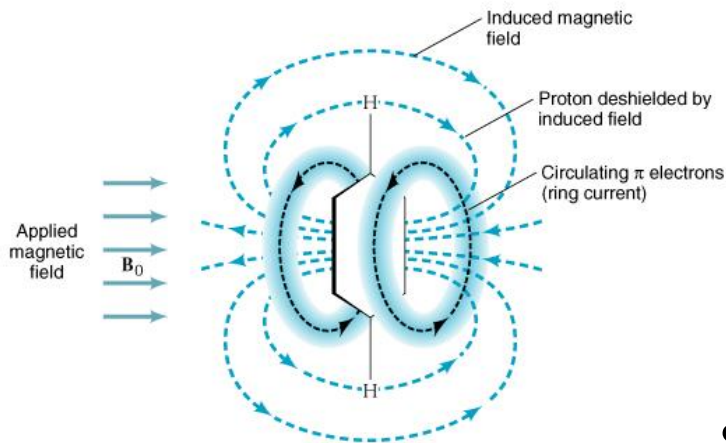


Figure 14.8 The induced magnetic field of the π electrons of benzene deshields the benzene protons. Deshielding occurs because at the location of the protons the induced field is in the same direction as the applied field.

Copyright 2000 John Wiley and Sons, Inc.



© The Nobel Foundation

Sir Robert Robinson

1) erős telítetlenség,

2) az erős telítetlenség ellenére, a nyítláncú hexatriéntől eltérően **addíciós reakcióra** (telítődésre) **kevésbé** hajlamos,

3) **szubsztitúciós** reakciók **készségesen** lejátszódnak érintetlenül hagyva a benzol aromás elektronrendszerét,

4) képződéshője jóval **nagyobb**, égéshője jóval kisebb mint a Kekulé-képlet alapján számolt érték,

5) a három π -kötés **nem** egymástól **független**, hanem egy egységes π -elektrorendszer (π -szextett) [Sir R. Robinson],

6) a 6 π -elektron delokalizációja miatt az aromás gyűrűn **diamágneses köráram** indukálódik,

7) a Hückel-szabály szerint azok a síkalkatú, egy-gyűrűs, folytonosan konjugált kötésrendszerű vegyületek aromásak amelyben a π -elektronok száma **$4n+2$** .

kérdés: hogyan lehet az aromás rendszerekre jellemző π -elektron-delokalizációt kimutatni?

válasz: $^1\text{H-NMR}$ spektroszkópiával, az árnyékolási tényező figyelembevételével

memo árnyékolás: az atommag körül mozgó elektronok a külső mágneses teret módosító hatása, (oldatban, a molekulák gyors reorientálódása miatt a külső B_0 tér irányától független)

kevés σ -elektr. \rightarrow kis árnyékolás,

sok σ -elektr. \rightarrow nagy árnyékolás

pl. aldehid H

kevés σ -elektr. \rightarrow ~ 10 ppm

alkán H

sok σ -elektr. \rightarrow ~ 1 ppm

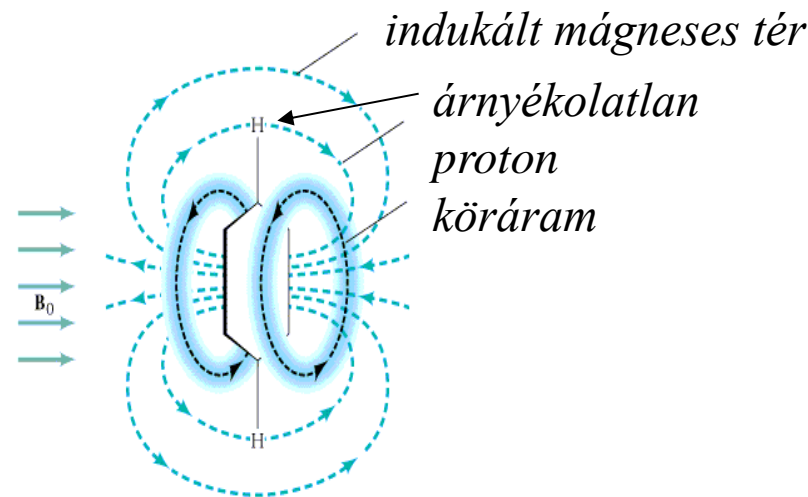
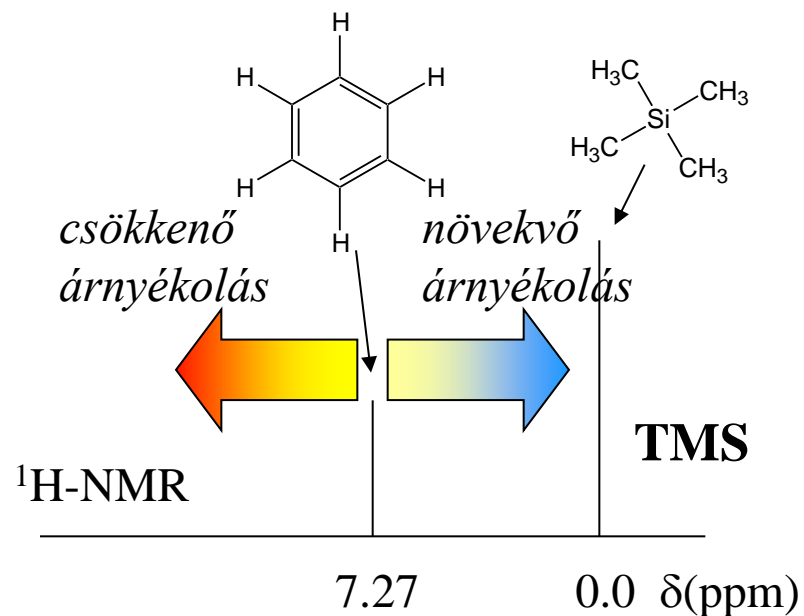
kérdés: miért van viszonylag alacsony mágneses térerőnél a benzol H-jele, ha van sok π -elektron körülötte?

megfigyelés:

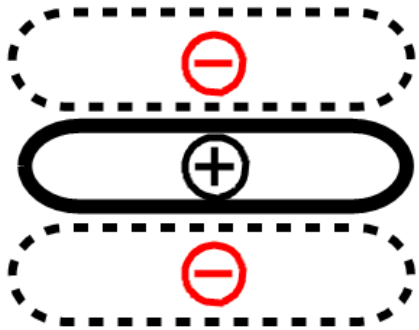
a spektrum egyetlen (hasítatlan) rezonanciafrekvencia, (egyetlen fajta kémiai-környezetben van mind a 6 H-atom)

válasz: a π -elektron szextett indukálta mágneses tér miatt

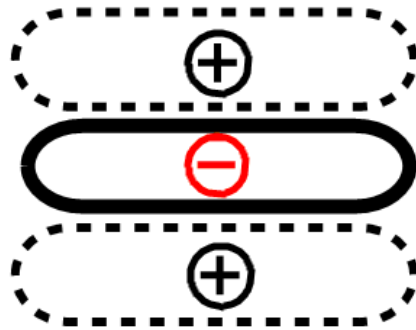
magyarázat: a benzol H-jai úgy helyezkednek el, hogy ott a π -elektronok okozta indukált mágneses tér hatására azok csökkenő árnyékolást éreznek



Quadrupole Moments

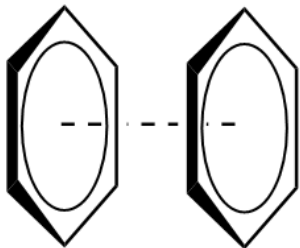


Benzene

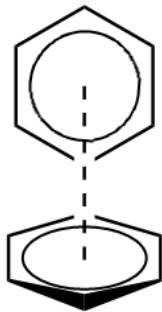


Hexafluorobenzene

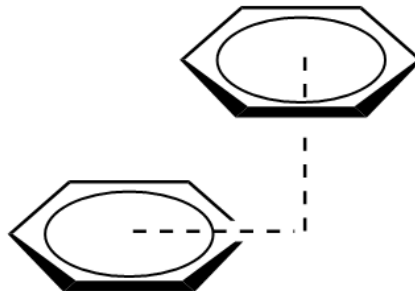
$\pi \leftrightarrow \pi$ stacking interaction types



Sandwich

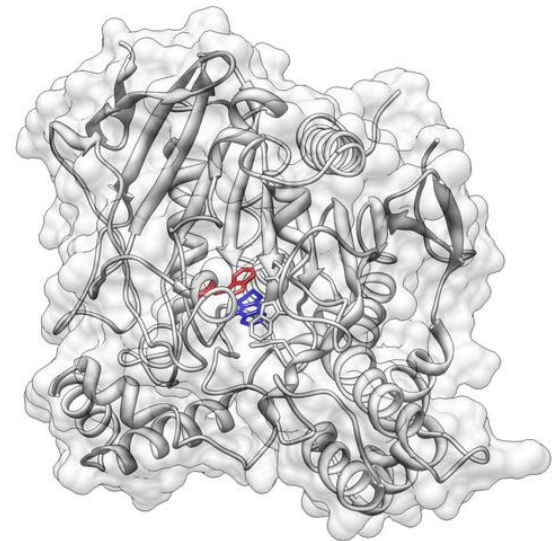


T-shaped



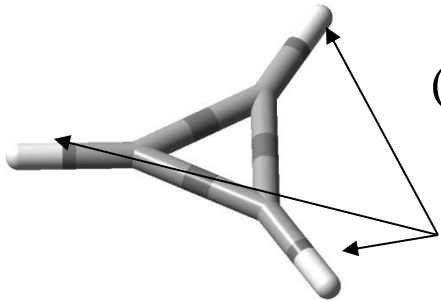
Parallel-displaced

A $\pi \leftrightarrow \pi$ stacking interaction in proteins



Ciklopropénium kation $[C_3H_3]^+$

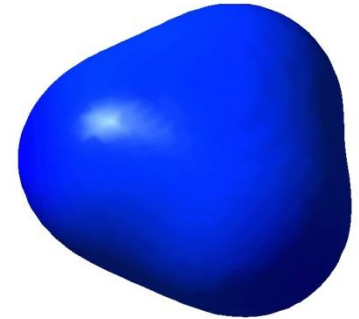
E(RHF/3-21G)=
-114.32956867 Hartree



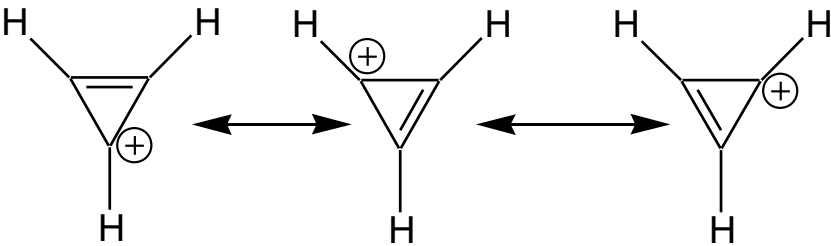
$18+3=21-1=20$ elektron \Rightarrow **10** betöltött MO
a legkisebb aromás rendszer a
($4n+2$) szabállyal összhangban, mivel itt $n=0$
ezért összesen **2** delokalizált π -elektron van.

+0.33 a hidrogéneken (Mulliken töltések)

EPS
-0.22 \leq töltés. \leq 0.22

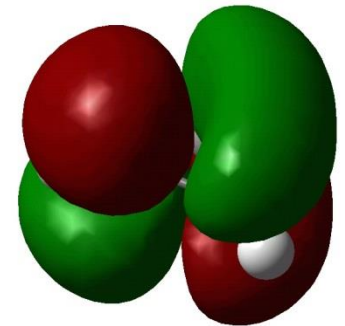



Elektronszerkezet: (memo: Hogyan rajzoljunk rezonancia hibridet: σ -kötés-váz érintetlen π -kötés alternál)

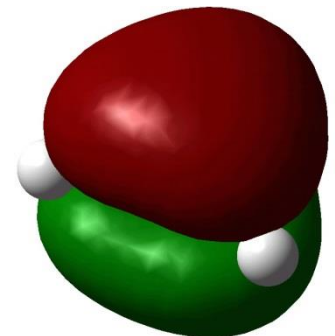


Poláris határszerkezetek

----- $\pi 2^*$ MO 11
(LUMO)



 $\pi 1$ MO 10
(HOMO)

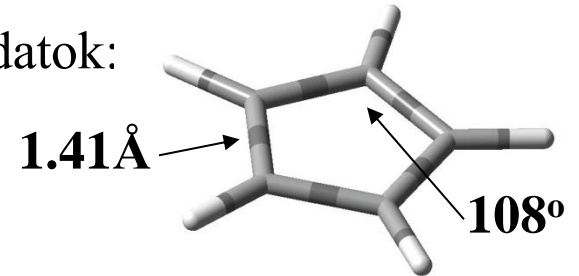


Ciklopentadienid anion

(C₅H₅⁻) (aromás)

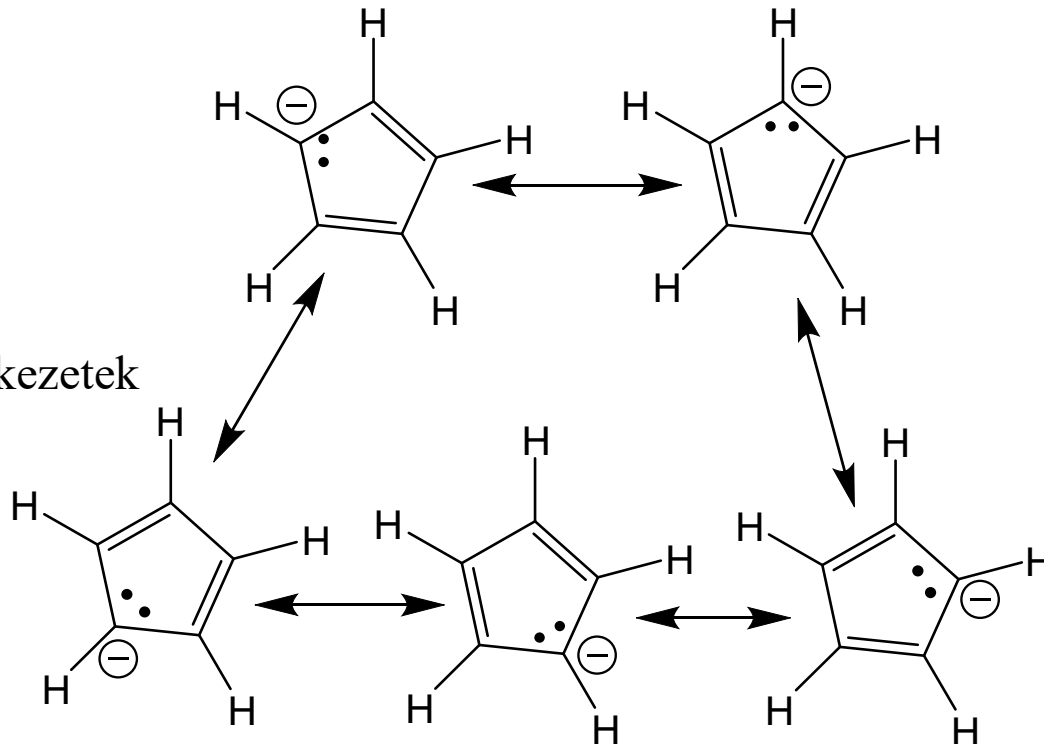
Aromacitás: (4n+2) szabállyal összhangban, mivel itt n=1; összesen 6 delokalizált π-elektron van.

Geometriai adatok: mikrohullámú spektroszkópiai adatok:
a molekula síkalkatú



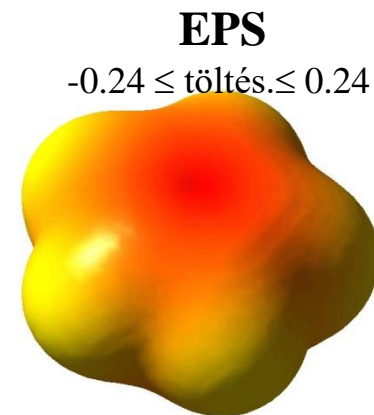
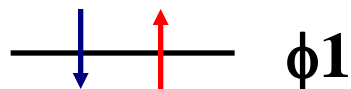
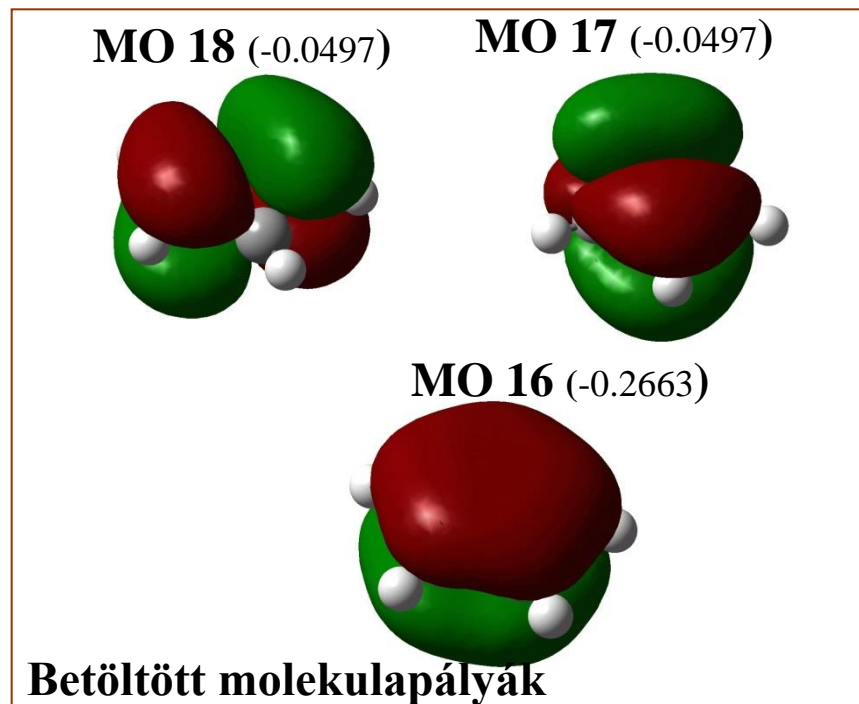
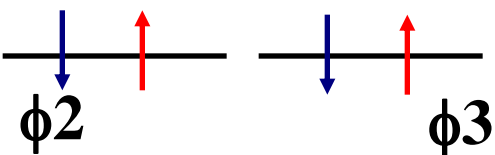
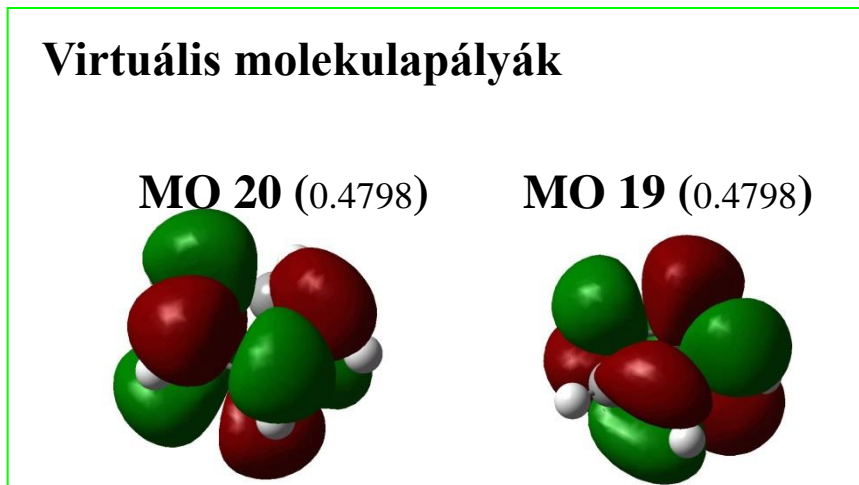
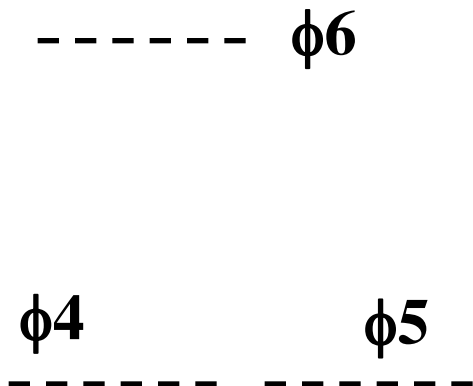
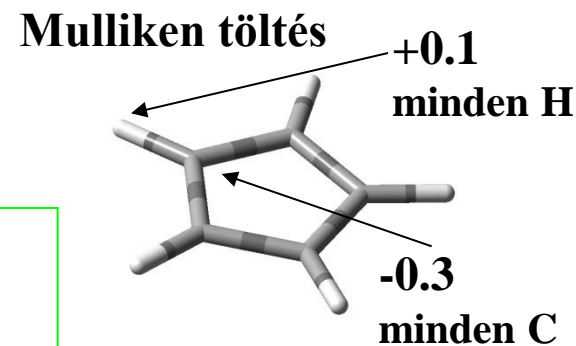
Elektronszerkezet:

Poláris határszerkezetek



Ciklopentadienid anion ($C_5H_5^-$)

$30+5+1=36$ elektron \Rightarrow 18 MO



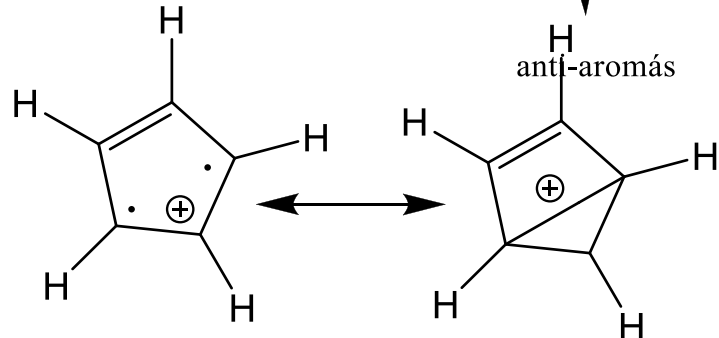
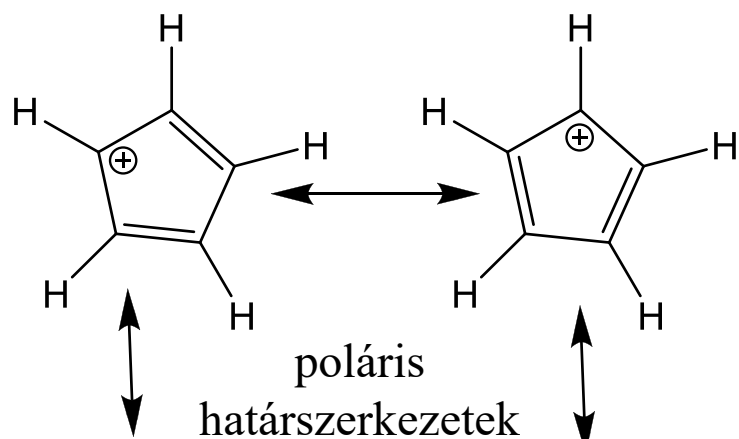
$E(\text{RHF}/3\text{-}21\text{G}) =$
 -191.10942265 Hartree

Ciklopentadienid kation

(C₅H₅⁺) (anti-aromás)

Anti-aromacitás: a $4n$ szabállyal összhangban, mivel itt $n=1$, tehát összesen **4** delokalizált π -elektron van 5 sp^2 -es C-en „szétkenve”.

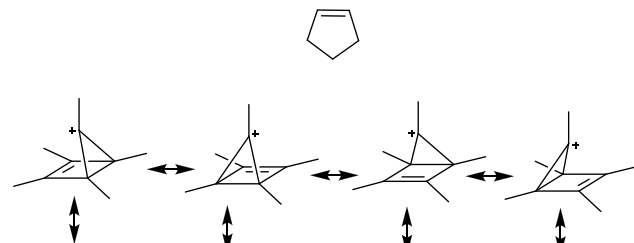
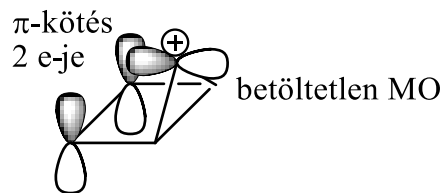
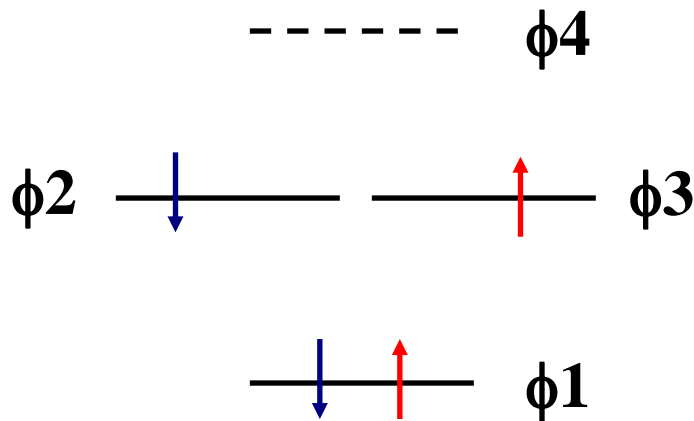
Elektronszerkezet:



mivel pi elektronszerkezete anti-aromás, ezért biradikál is lehet

mivel antiaromás ezért biciklo vegyület is lehet

kérdés: a molekula síkalkatú-e?
válasz: nem feltétlenül

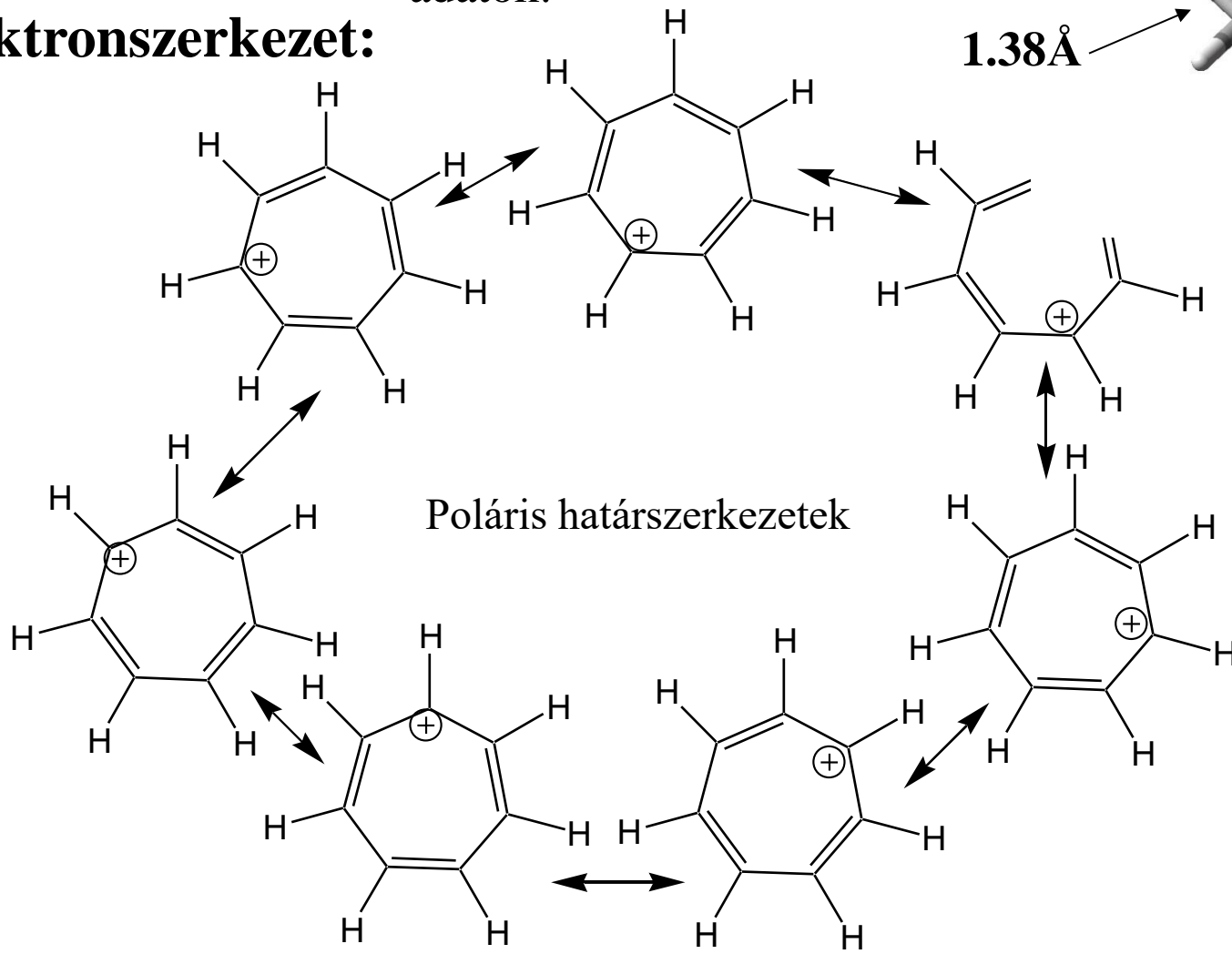
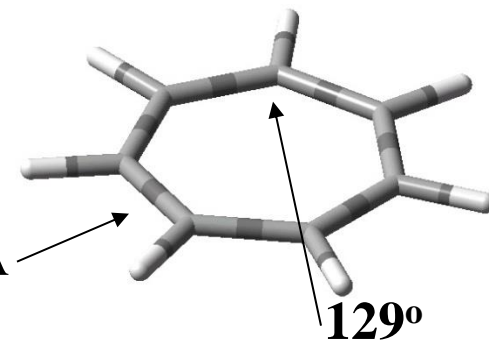


Ciklohepta -1,3,5- trienilium (tropilium) kation

($C_7H_7^+$, aromás, $n=1$)

Geometriai adatok: mikrohullámú spektroszkópiai adatok: a molekula síkalkatú

Elektronszerkezet:



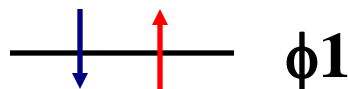
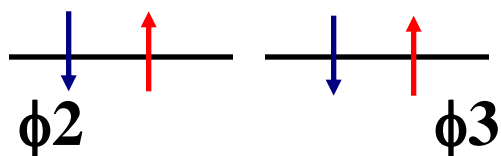
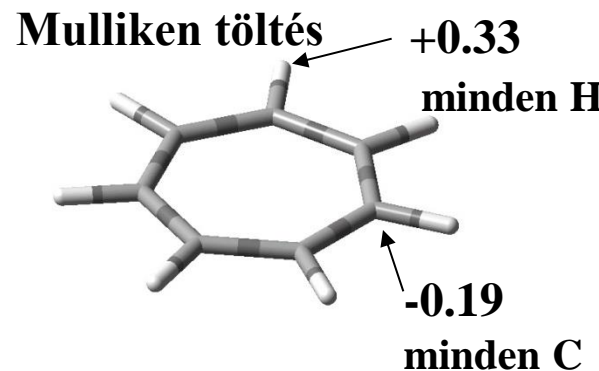
Ciklohepta -1,3,5- trienilium (tropilium) kation

($C_7H_7^+$, aromás, $n=1$)

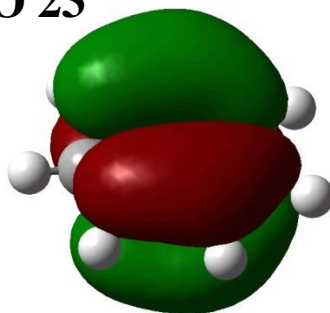
$42+7-1=48$ elektron \Rightarrow 24 MO



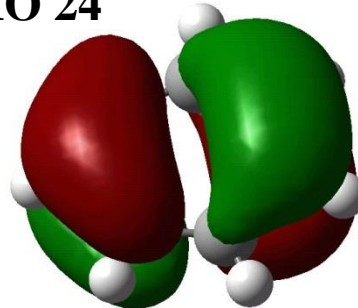
Virtuális molekulapályák



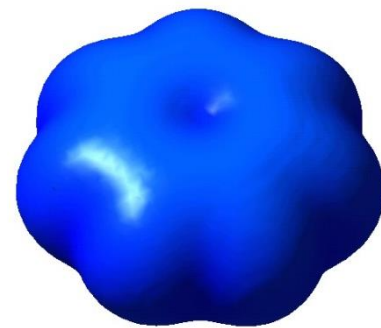
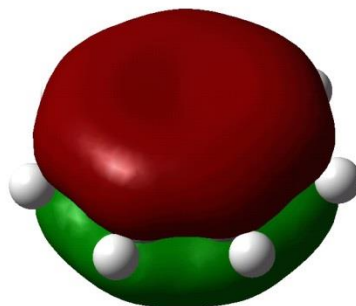
MO 23



MO 24



MO 20



EPS

$-0.17 \leq \text{töltés} \leq 0.17$

$E(\text{RHF}/3\text{-}21\text{G}) =$
 -191.10942265 Hartree

Betöltött molekulapályák

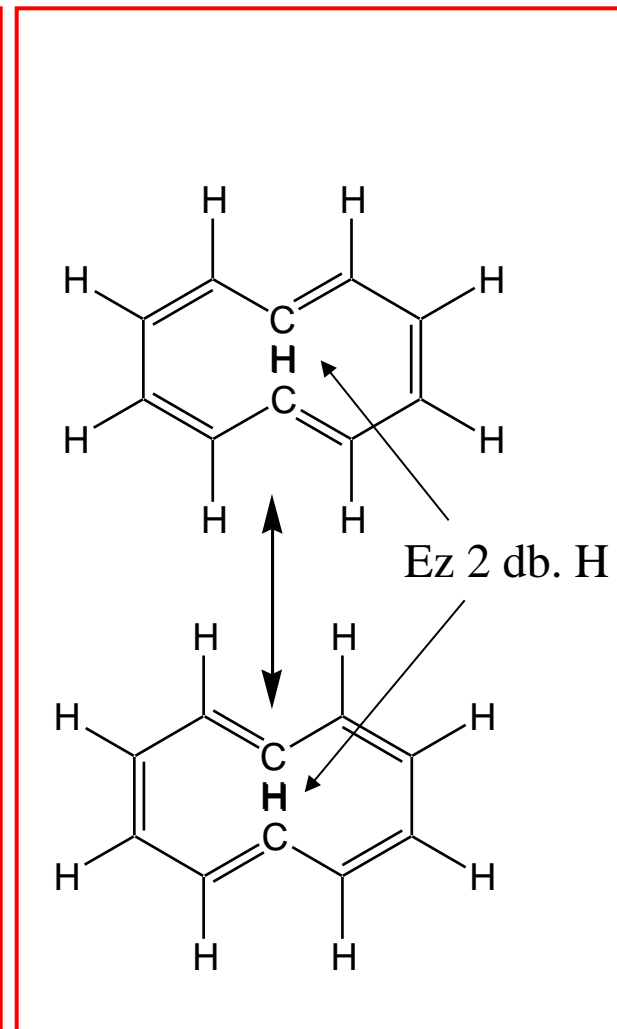
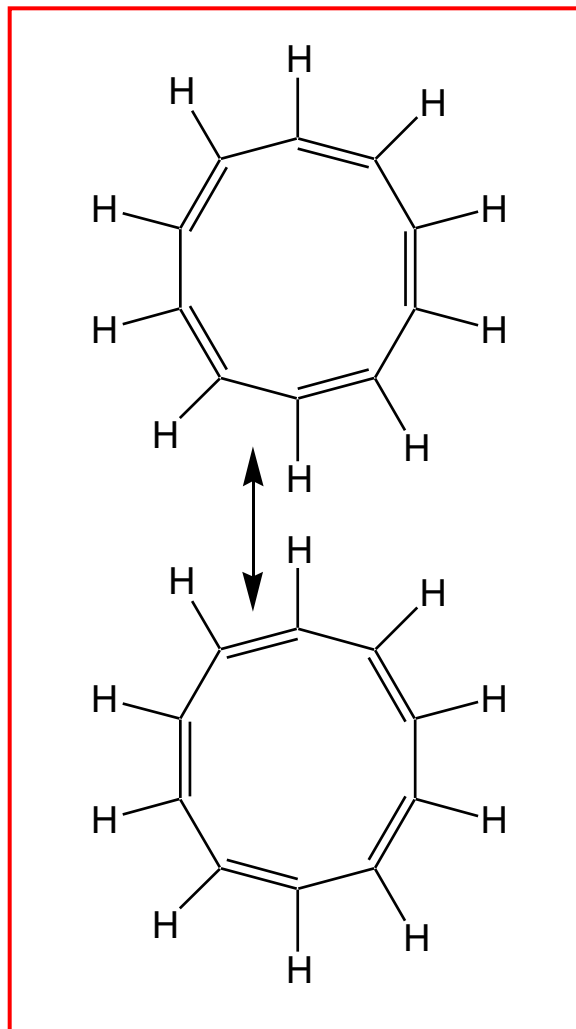
Ciklodeka-1,3,5,7,9-pentaén

aromás, nem aromás ? : $4n+2$, $n=2$

Elektronszerkezet:

Rezonancia hibrid

Apoláris határszerkezetek



(Poláris határszerkezetekre
nincs szükség)

Ciklodeka-1,3,5,7,9-pentaén

aromás, nem aromás ? : $4n+2$, $n=2$

Geometriai adatok:

!! alternáló kötéshosszak!!

„all”-cisz forma $E(\text{RHF}/3\text{-}21\text{Gd}) = -382.17599871$ Hartree

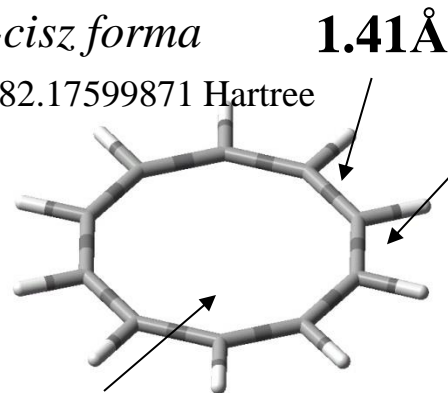
memo:

C-C 1.54Å

C=C 1.34Å

C \rightarrow C 1.39Å

benzol

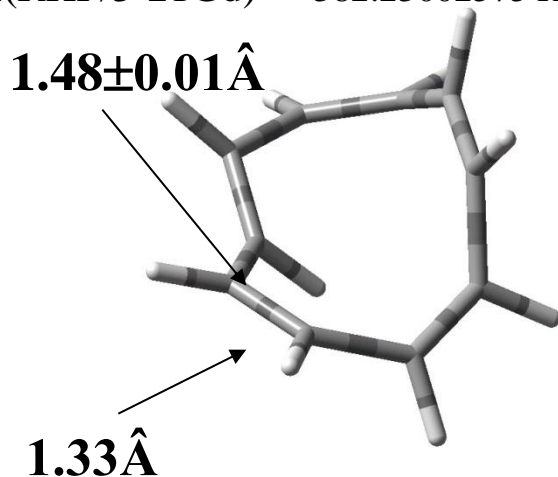


A molekula **planáris** hogy a körkörös π -kötés kialakuljon, **de** emiatt nagy lesz a szögfeszültség (144°).

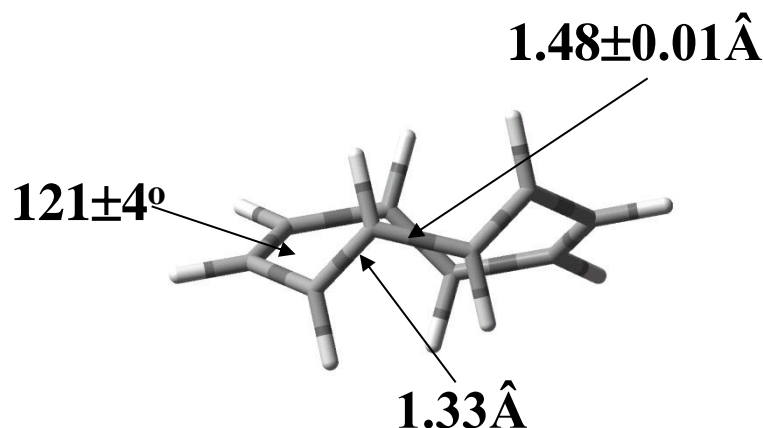
144°

Di-transz cisz forma

$E(\text{RHF}/3\text{-}21\text{Gd}) = -382.18813993$ Hartree



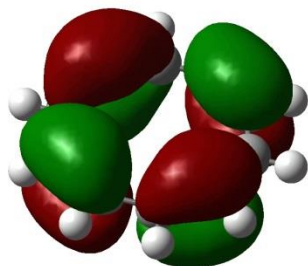
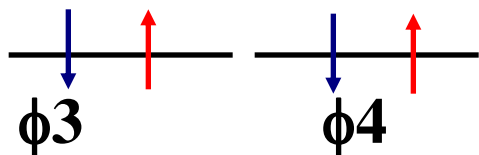
A molekula **nem planáris**



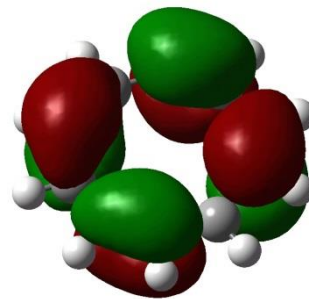
A molekula **nem planáris**

Ciklodeka-1,3,5,7,9-pentaén

„all”-cis forma

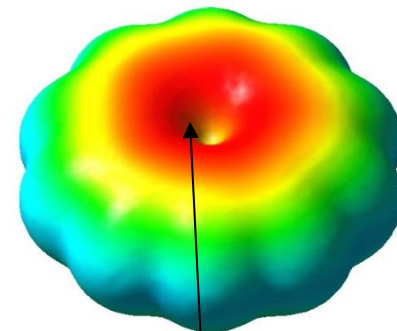


MO 34 (-0.2901)

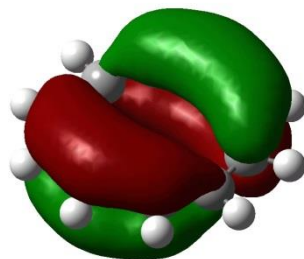
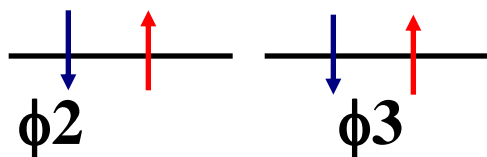


MO 35 (-0.2901)
(HOMO)

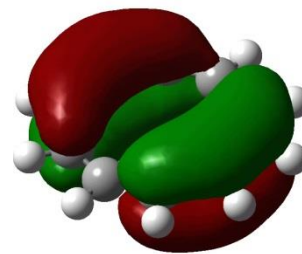
EPS
-0.03 ≤ töltés. ≤ 0.03



Nincs lyuk a közepén !

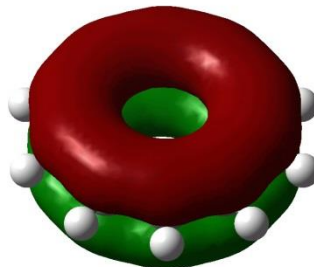
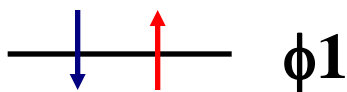


MO 32 (-0.4458)



MO 33 (-0.4458)

$E(\text{RHF}/3\text{-}21\text{Gd}) =$
-382.17599871 Hartree



MO 27 (-0.49764)

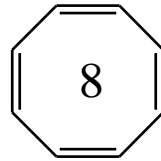
[N]Annulének

$N=(4n+2)$ vagy Hückel szabály

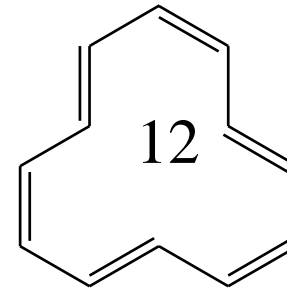
Annulének = **monociklusos telítetlen** szénhidrogének, amelyek **alternáló** egyes és kettős kötések segítségével írhatók le. Ezek egy része aromás molekula.

kérdés: melyik annulén aromás ?

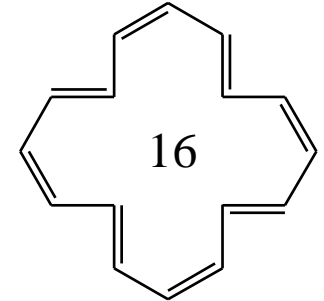
A [4]annulén, [8]annulén, [12]annulén,
[16]annulén, [20]annulén, stb.
a Hückel szabály szerint **nem aromás**



ciklooktatetraén



ciklododekahexaén



ciklohexadekaoktaén

B **semleges**

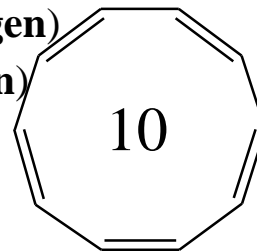
n=0 [2]annulén = etén (**nem gyűrűs**)

n=1 [6]annulén = benzol (**igen**)

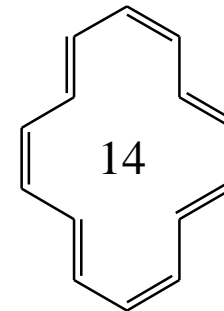
n=2 [10]annulén = ciklodekapentaén (**nem**)

n=3 [14]annulén = ciklotetradekaheptaén (**igen**)

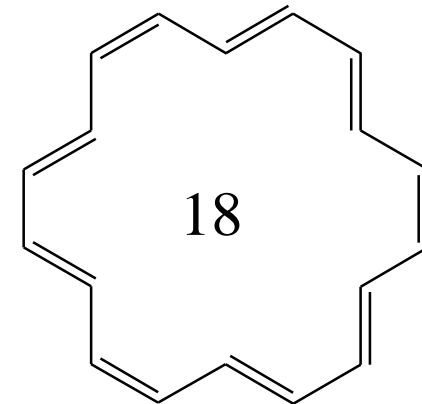
n=4 [18]annulén = ciklooktadekanonén (**igen**)



ciklodekapentaén



ciklotetradekaheptaén



ciklooktadekanonáén

töltött

ciklopropenilium kation (**igen**)

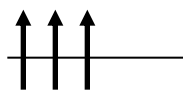
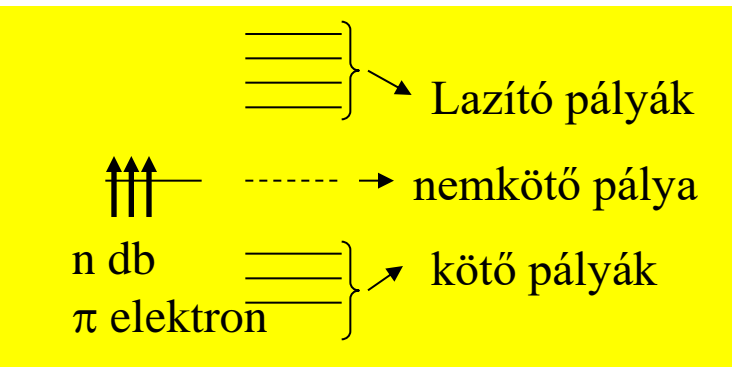
ciklopentadienid anion (**igen**)

cikloheptatrienilium kation (**igen**)

C Naftalin, antracén, fenantrén stb. **nem monociklusos** molekulák, s így Hückel-szerint nem aromásak, egy sor más kritérium teljesülése miatt ezek a molekulák **mégis aromás** rendszert alkotnak.

Miért éppen a $(4n+2)$ az aromás és miért pont a $(4n)$ rendszer az antiaromás? A **poligon-szabály**

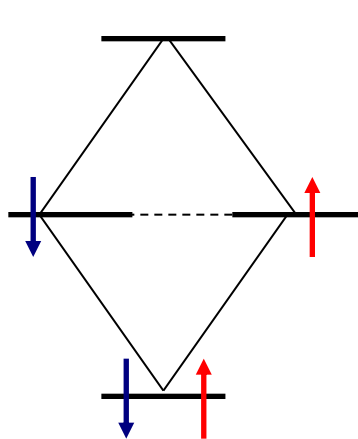
Kérdés: eldönthető-e az előző vagy más hasonló kérdés kvalitatív szinten, számítások nélkül?



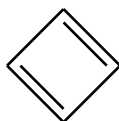
4π elektron
2 nemkötő pálya
1 kötő pálya

6π elektron
0 nemkötő pálya
3 kötő pálya

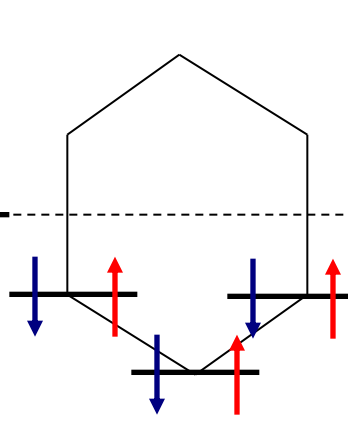
8π elektron
2 nemkötő pálya
3 kötő pálya



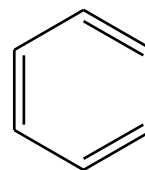
ciklobuta-1,3-dién
antiaromás



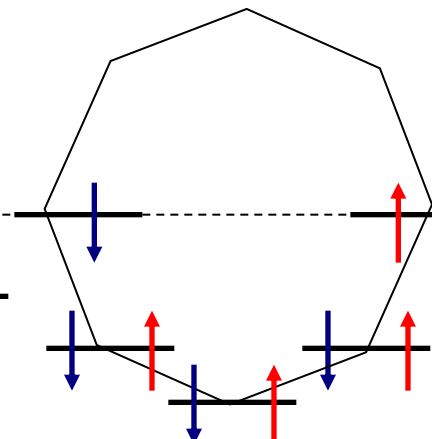
ciklobutadién



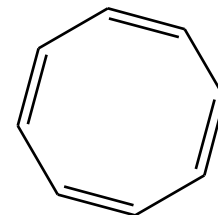
ciklohexa-1,3,5-trién
aromás



benzol



cikloookta-1,3,5,7-tetraén
antiaromás



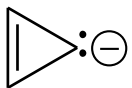
cikloooktatetraén

Összefoglaló

A) 2π elektron és aromás



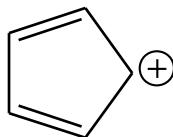
B) 4π elektron és antiaromás



ciklopropenid anion

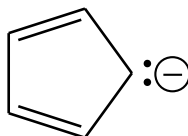


ciklobutadién

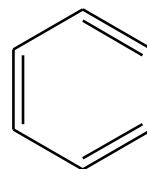


ciklopentadienium kation

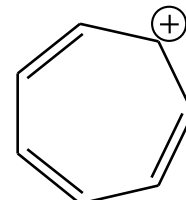
C) 6π elektron és aromás



ciklopentadienid anion

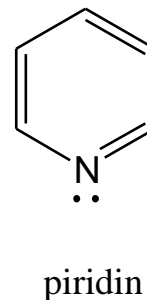
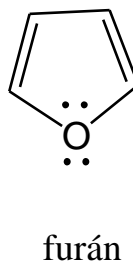
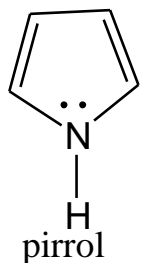
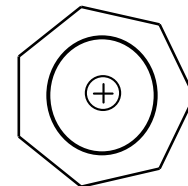
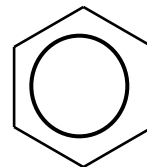
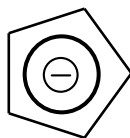


benzol

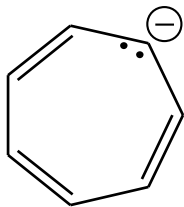


cikloheptatrienilium kation
(tropilium ion)

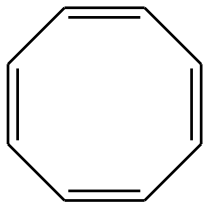
**Robinson féle
jelölés**



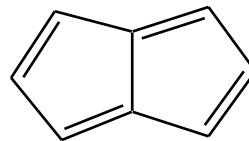
D) 8π elektron és antiaromás



cikloheptatrienid anion

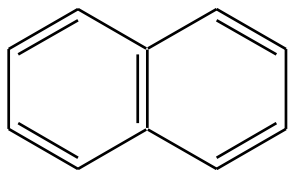


ciklooktatetraén

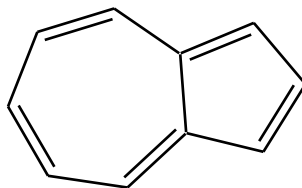


pentalén
bár nem annulén

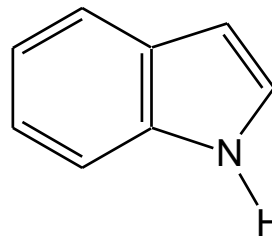
E) 10π elektron és aromás (bár nem annulén)



naftalin



azulén



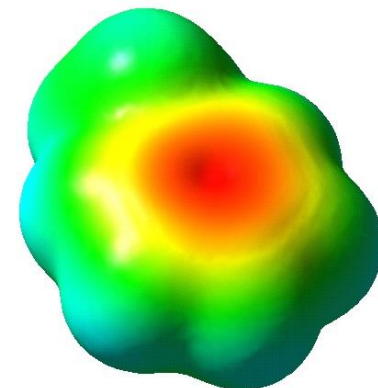
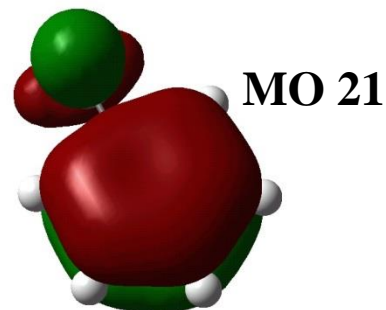
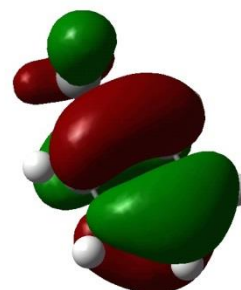
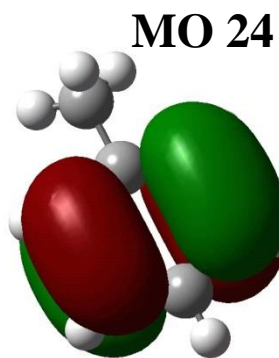
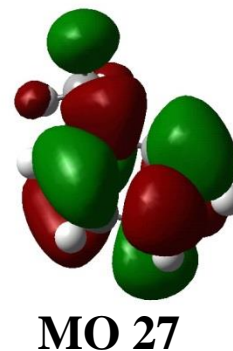
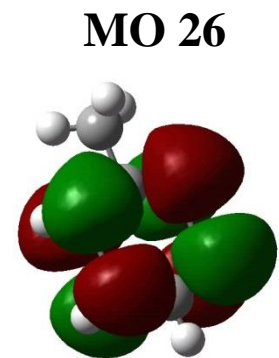
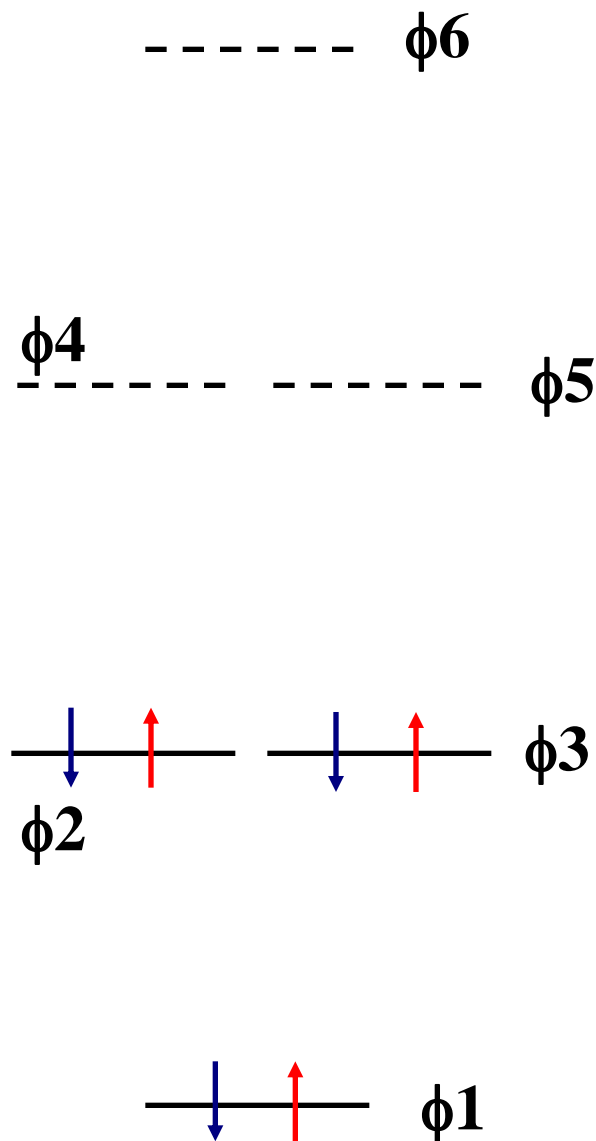
indol

Toluol (Bruckner II/1 476)

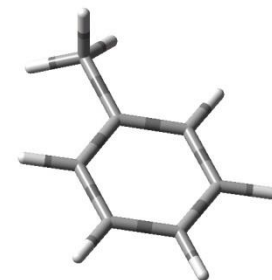
$\mu = 0.33$ Debye

EPS

$-0.04 \leq \text{töltés.} \leq 0.04$



E(RHF/3-21G=
-268.24021020 Hartree

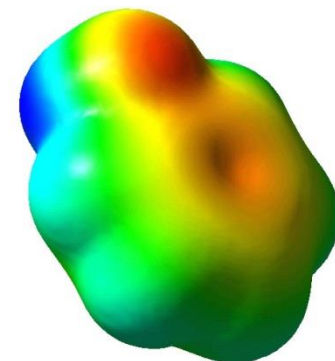
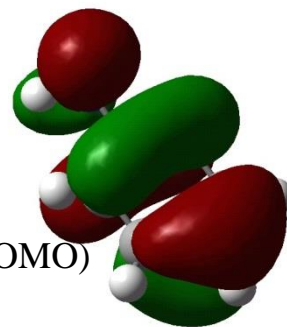


Anilin (Bruckner II/1 476)

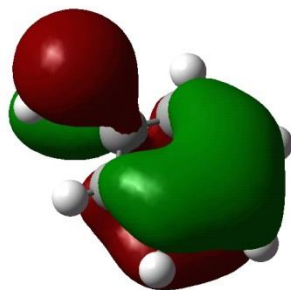
$\mu = 1.44$ Debye

EPS
 $-0.44 \leq \text{töltés} \leq 0.44$

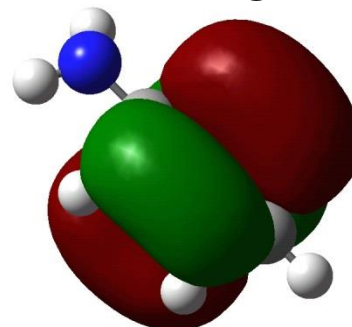
MO 25 (HOMO)



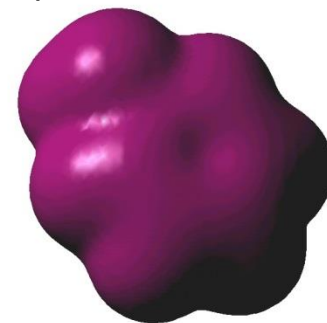
MO 23



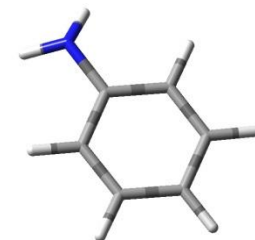
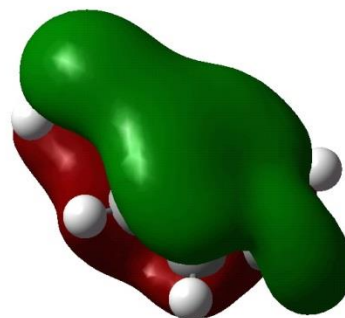
MO 24



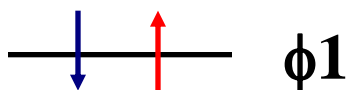
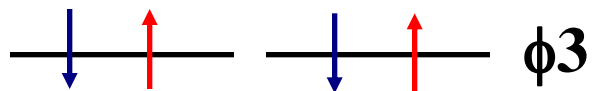
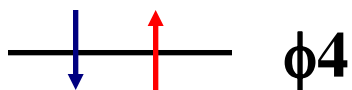
TD
 $\rho = 0.0004$ a.u.



MO 20



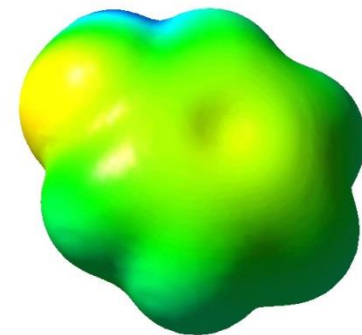
E(RHF/6-311++G(d,p)) =
-285.80565172 Hartree



Fenol (Bruckner II/1)

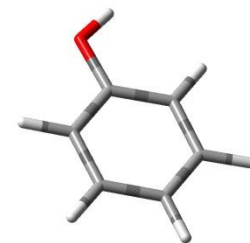
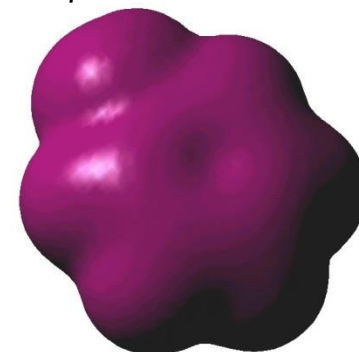
$\mu = 1.44$ Debye

EPS
 $-0.07 \leq \text{töltés.} \leq 0.07$



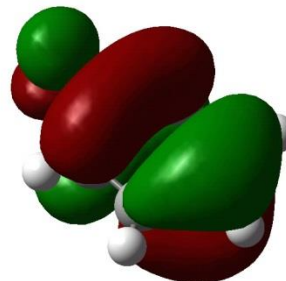
TD

$\rho = 0.0004$ a.u.



E(RHF/6-311++G(d,p)) =
-305.64001712 Hartree

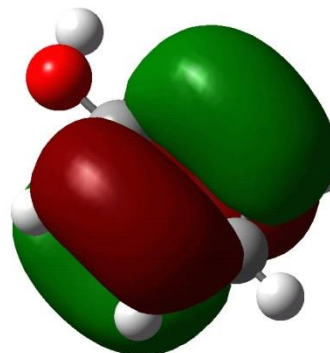
MO 25 (HOMO)



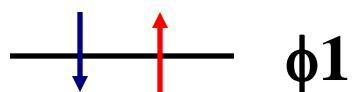
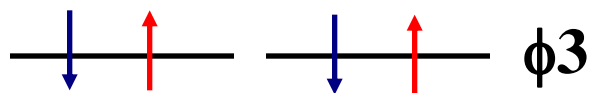
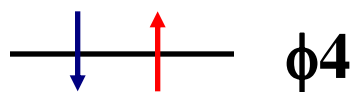
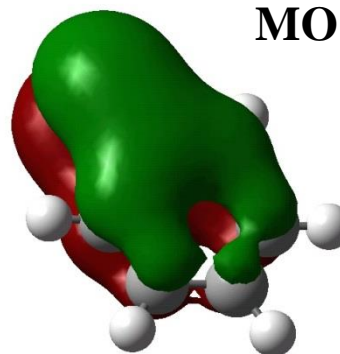
MO 23



MO 24



MO 18

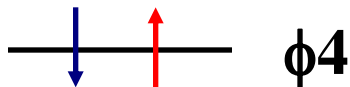
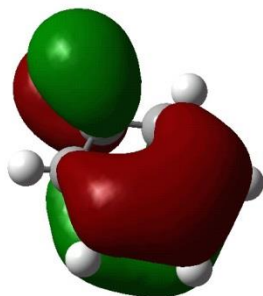


Fenolát anion (Bruckner II/1 311)

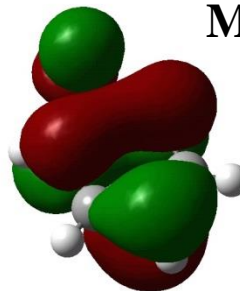
$\mu = 4.98$ Debye

memo: a benzil anion hasonló delokalizációjú π -elektronrendszert tartalmaz

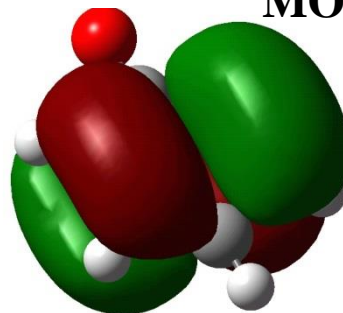
MO 22



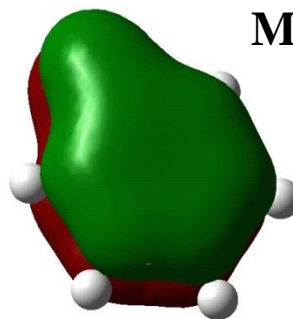
MO 25 (HOMO)



MO 24

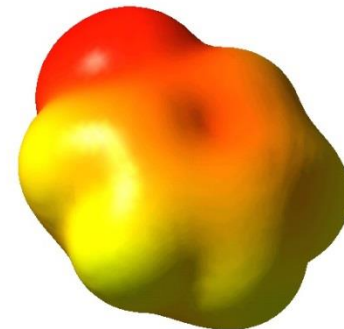


MO 19



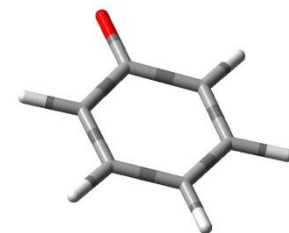
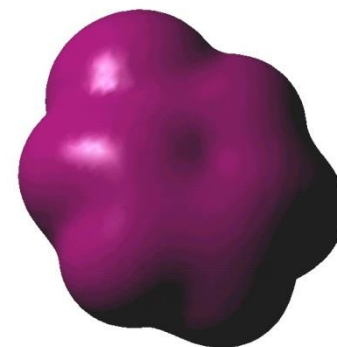
EPS

$-0.21 \leq \text{töltés} \leq 0.21$



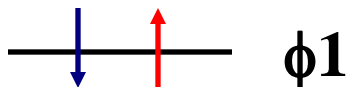
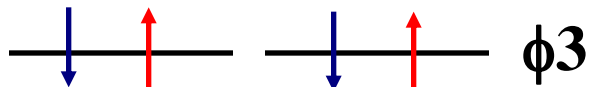
TD

$\rho = 0.0004$ a.u.



$E(\text{RHF}/6\text{-}311++\text{G}(\text{d},\text{p})) = -305.06013049$ Hartree

$\phi 2$

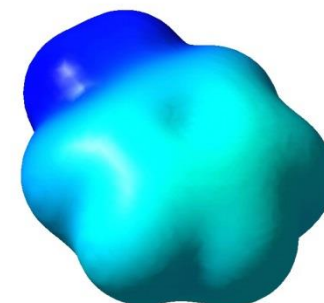


Anilinium kation (Bruckner II/1 311)

$\mu = 7.27$ Debye

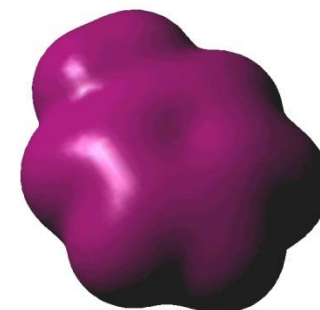
EPS

$-0.23 \leq \text{töltés.} \leq 0.23$



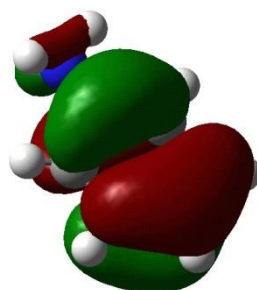
TD

$\rho = 0.0004$ a.u.

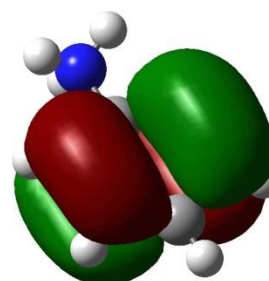


$E(\text{RHF}/6\text{-}311++\text{G}(\text{d},\text{p})) = -286.15985156$ Hartree

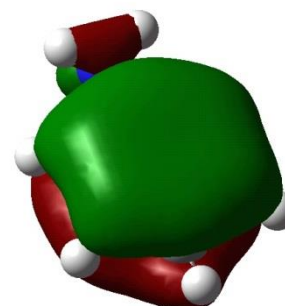
MO 24



MO 25 (HOMO)

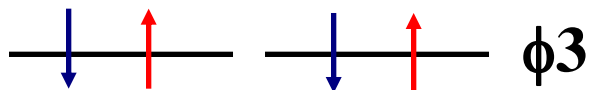


MO 21

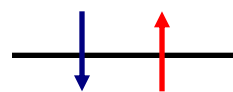


----- $\phi 4$

$\phi 2$



$\phi 1$

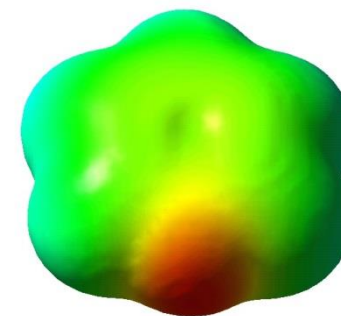


Piridin (Bruckner III/1 431)

$\mu = 2.4$ Debye

EPS

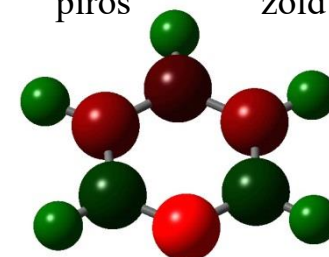
$-0.07 \leq \text{töltés.} \leq 0.07$



Mulliken töltés

$-0.7 \leq \text{töltés.} \leq 0.7$

piros zöld



-0.18

-0.34

-0.67

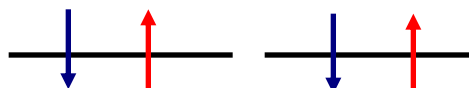
+0.13

E(RHF/3-21G)=

-245.31200551 Hartree

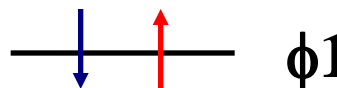
----- $\phi 6$

$\phi 4$ ----- $\phi 5$



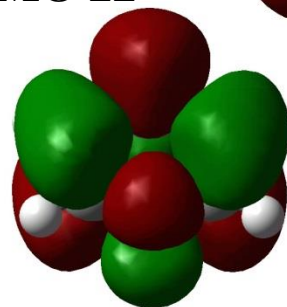
$\phi 2$

$\phi 3$

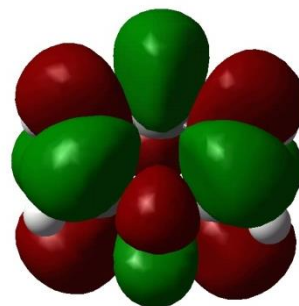


$\phi 1$

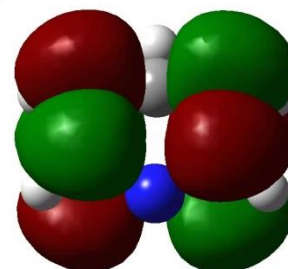
MO 22



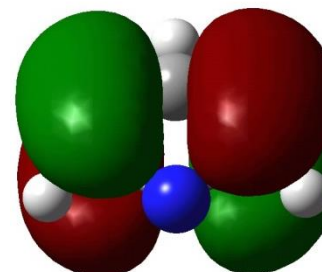
MO 28



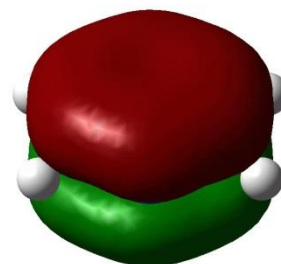
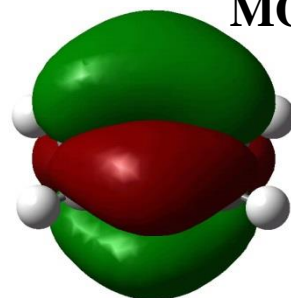
MO 23



MO 21



MO 20

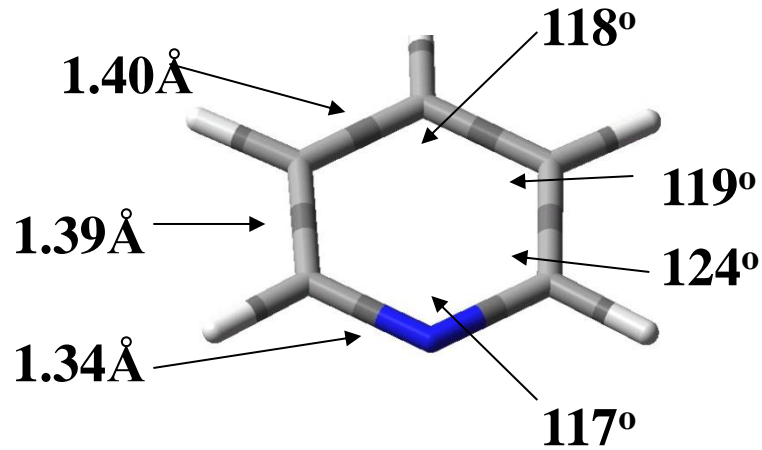


MO 17

Piridin (aromás)

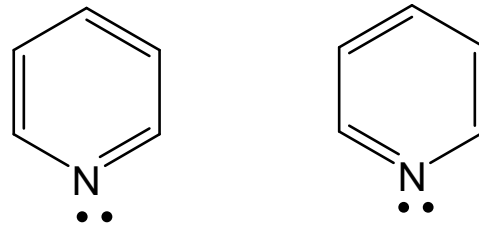
Geometriai adatok: mikrohullámú spektroszkópai adatok

A molekula planáris

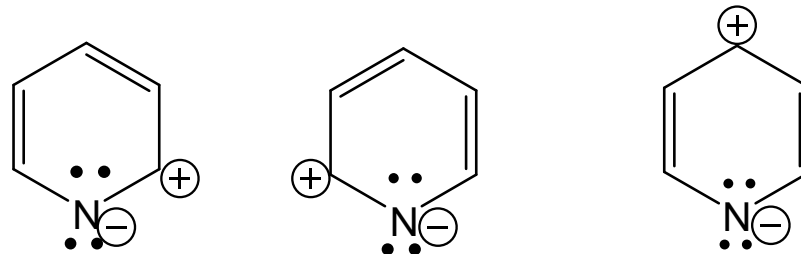


Elektronszerkezet: (memo: Hogyan rajzoljunk rezonancia hibridet: σ -kötés váz érintetlen marad π -kötés alternál)

Apoláris határszerkezetek



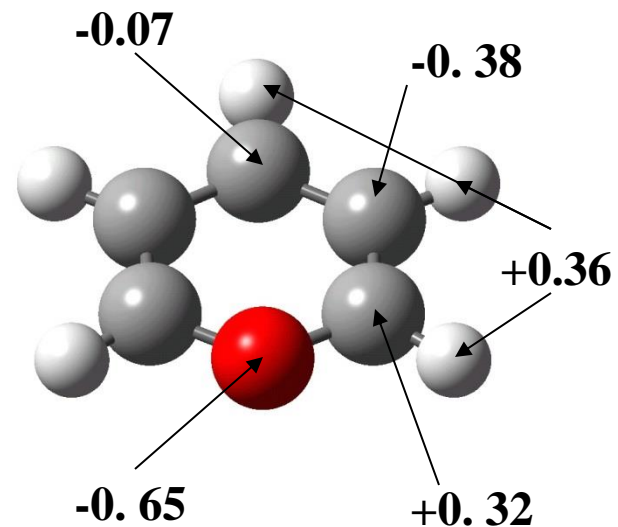
Poláris határszerkezetek



Pirilium kation

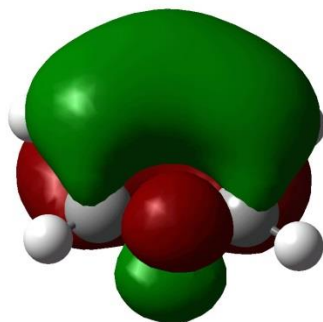
(Bruckner III/1 341) $\mu = 1.2$ Debye

----- $\phi 6$

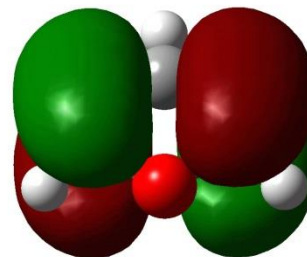


$\phi 4$ ----- $\phi 5$

MO 20

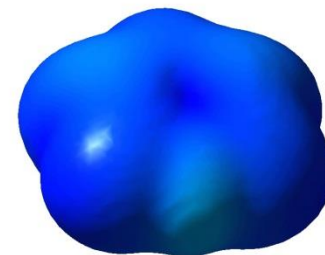


MO 21



Mulliken töltés

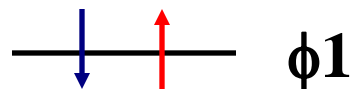
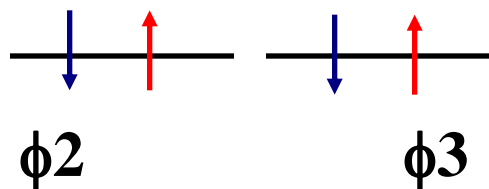
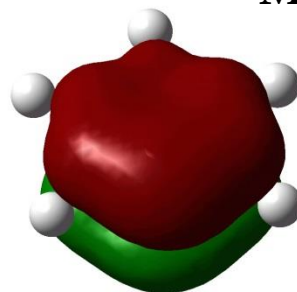
$-0.7 \leq \text{töltés} \leq 0.7$



EPS

$-0.19 \leq \text{töltés} \leq 0.19$

MO 15



$E(\text{RHF}/3\text{-}21\text{G}) =$

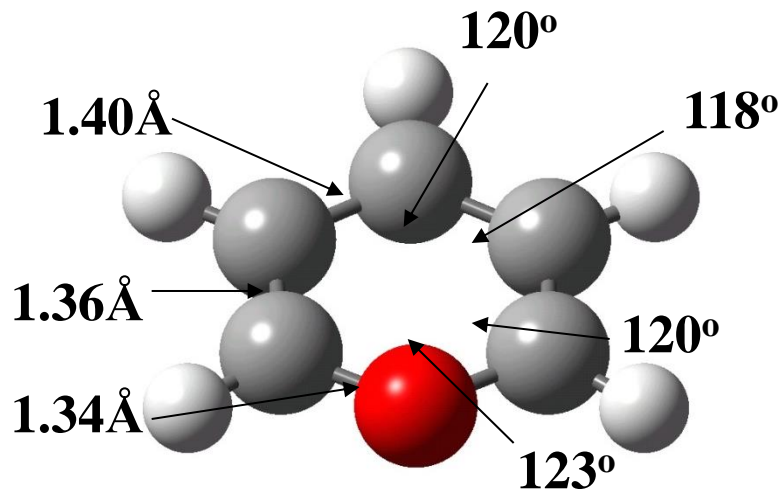
-265.36092562 Hartree

Pirilium kation (aromás)

(Bruk III/1 341) $\mu = 1.2$ Debye

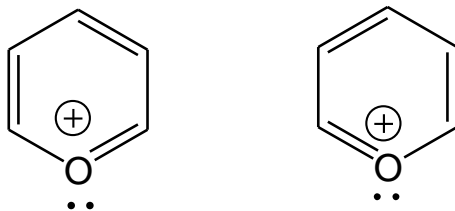
Geometriai adatok:

A molekula planáris

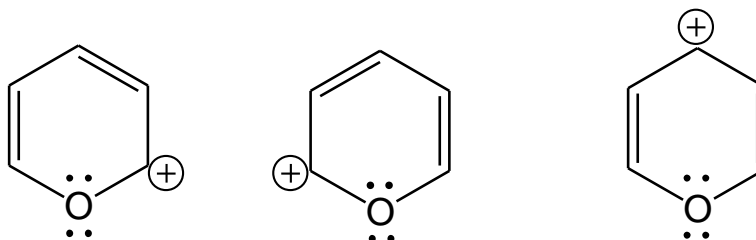


Elektronszerkezet: (memo: Hogyan rajzoljunk rezonancia hibridet: σ -kötés érintetlen marad π -kötés alternál)

Apoláris határszerkezetek: **nincs**



Poláris határszerkezetek:

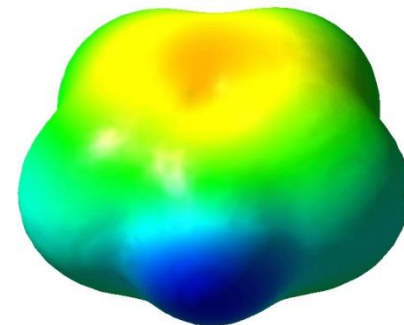


Pirrol (Bruckner III/1 121)

$\mu = 1.92$ Debye

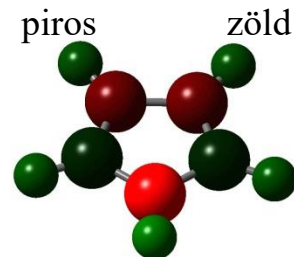
EPS

$-0.07 \leq \text{töltés.} \leq 0.07$



Mulliken töltés

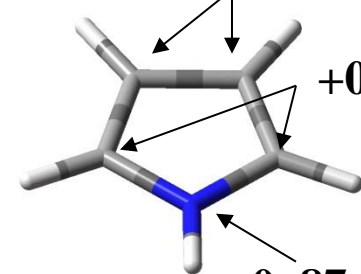
$-0.87 \leq \text{töltés.} \leq 0.87$



-0.33

+0.1

-0.87

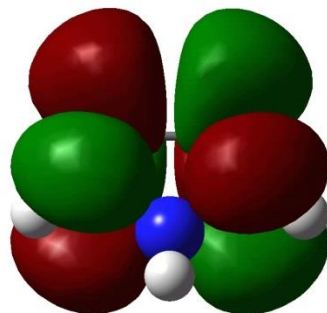


$E(\text{RHF}/3\text{-}21\text{G}) =$

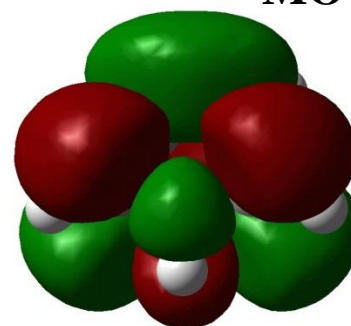
-207.64756554 Hartree

----- ϕ_6

MO 21

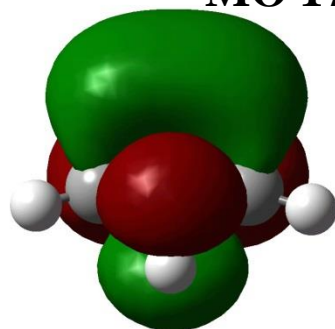


MO 19

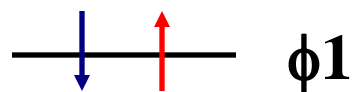
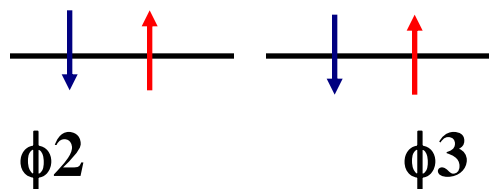
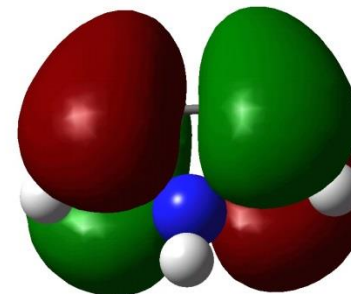


ϕ_4 ----- ϕ_5

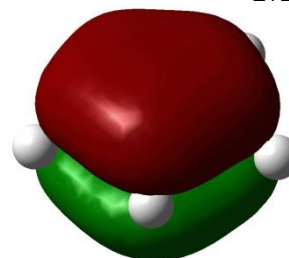
MO 17



MO 18



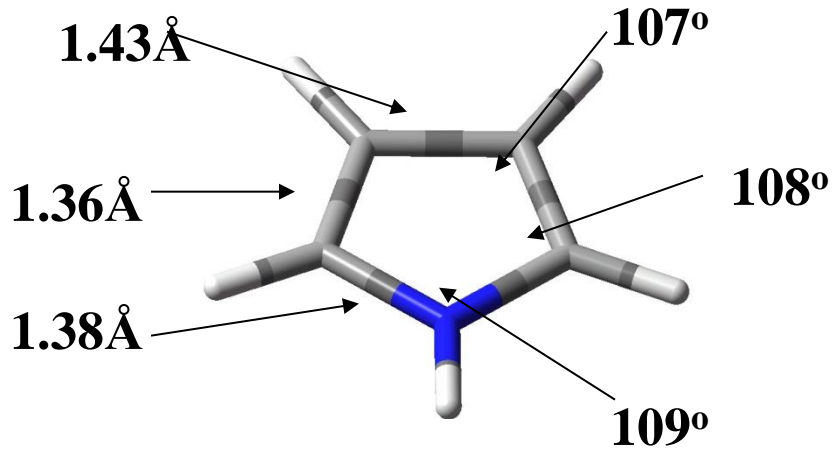
MO 14



Pirrol (aromás)

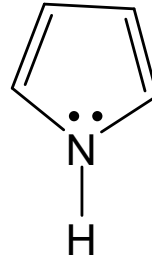
Geometriai adatok: mikrohullámú spektroszkópiai adatok

A molekula planáris

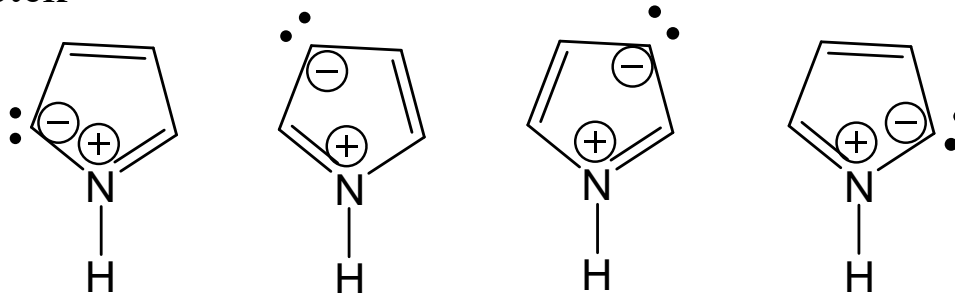


Elektronszerkezet:

Apoláris határszerkezetek



Poláris határszerkezetek

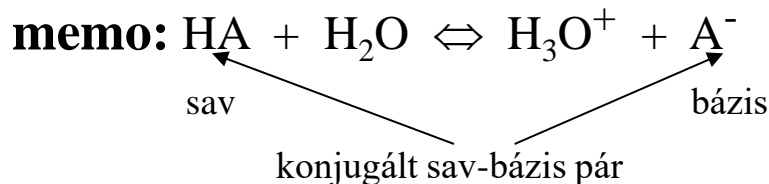
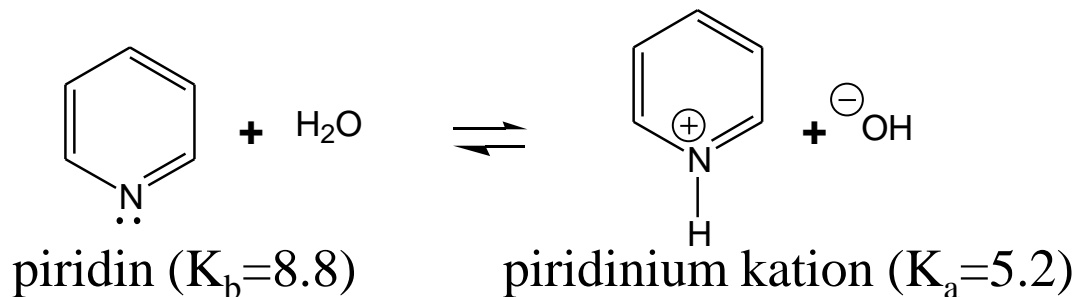
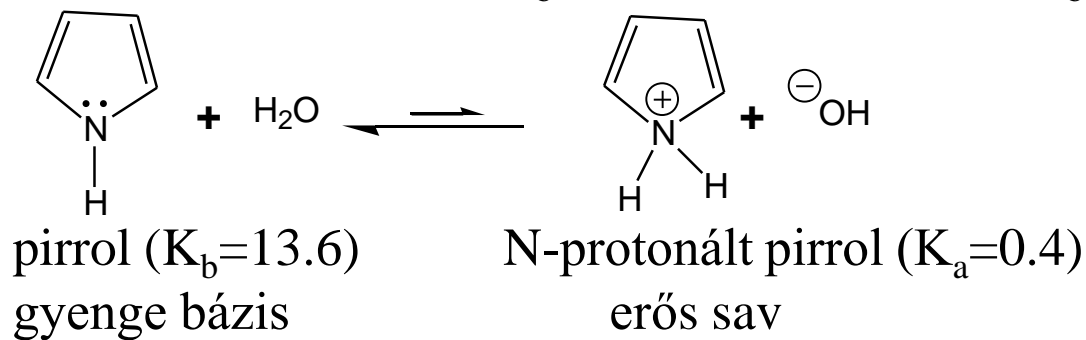


Bázicitás

(L.G.Wade Jr. 711)

kérdés: miért gyengébb bázis a pirrol ($K_b=13.6$) mint a piridin ($K_b=8.8$) ?

tapasztalat:



$$K_a = [H_3O^+].[A^-]/[HA]$$

ahol K_a a savi disszociációs állandó; $pK_a = -\log_{10}K_a$

magyarázat: a protonált formák stabilitása eltérő. Mindkét esetben a nitrogén nemkötő elektronpárja szükséges a proton megkötéséhez, de:

- piridin esetén **megmarad az aromás jelleg,**
- pirrol esetén **megszűnik az aromás jelleg.**

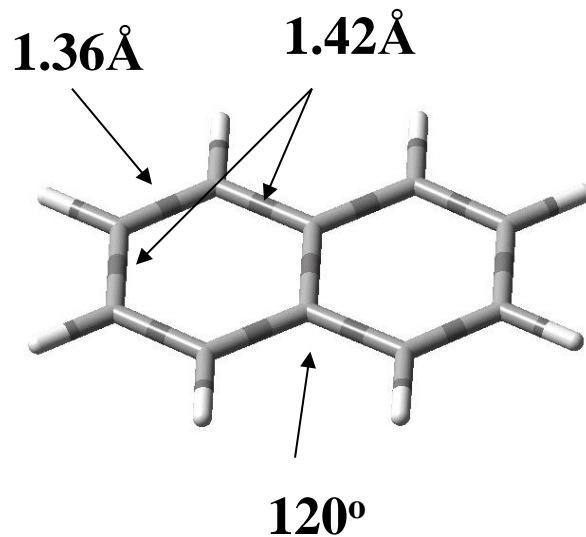
hf: az imidazol melyik nitrogénje mutat bázisos tulajdonságot és miért?

Naftalin (aromás)

Geometriai adatok:

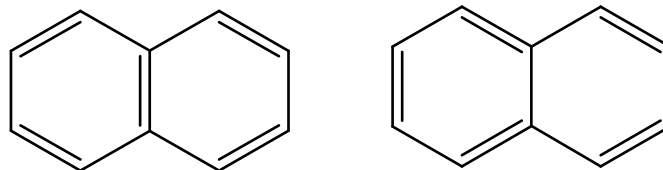
memo: C-C 1.54Å
C=C 1.34Å

A molekula planáris



Elektronszerkezet:

Apoláris határszerkezetek



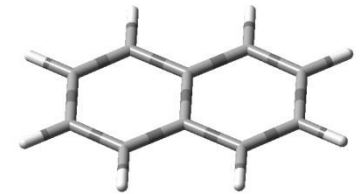
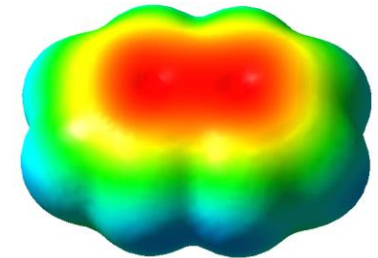
(Poláris határszerkezetekre nincs szükség)

Nafatlin ($C_{10}H_8$)

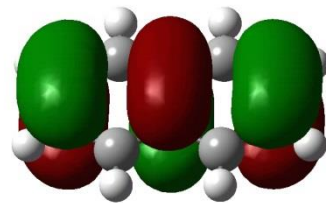
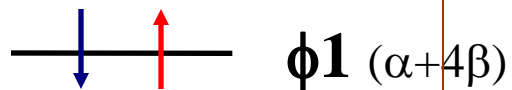
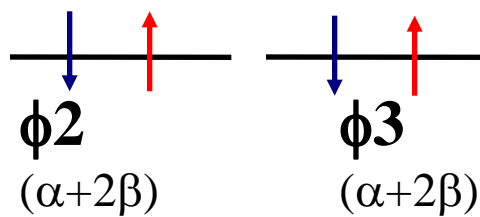
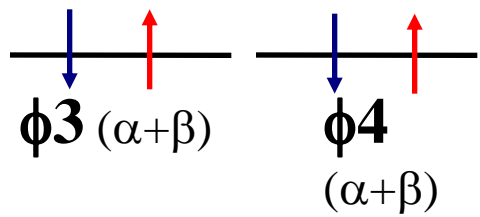
60+8=68 elektron \Rightarrow 34 MO

EPS

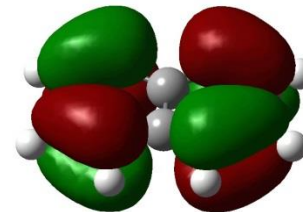
$-0.03 \leq \text{töltés.} \leq 0.03$



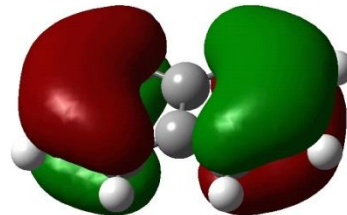
$E(\text{RHF}/3\text{-}21\text{G}) =$
 -381.21580808 Hartree



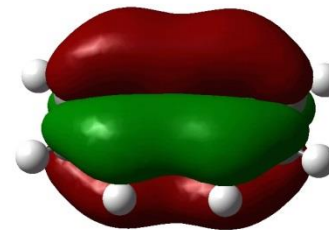
MO 33



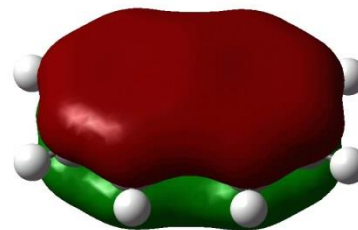
MO 34



MO 31



MO 32



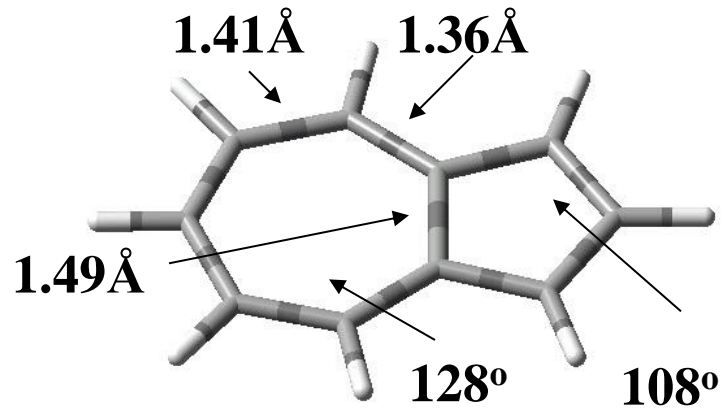
MO 27

Betöltött molekulapályák

Azulén (aromás) (Bruckner II/2 1375)

Geometriai adatok:

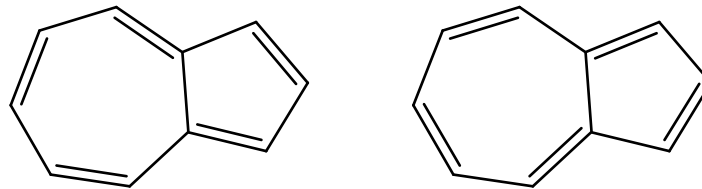
memo: C-C 1.54Å
C=C 1.34Å



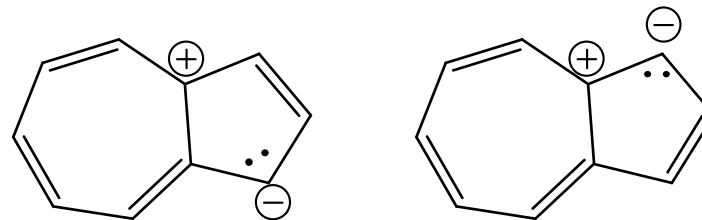
A molekula planáris

Elektronszerkezet:

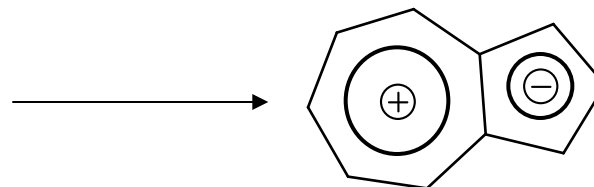
Apoláris határszerkezetek:



Poláris határszerkezetek:



Robinson féle jelölés

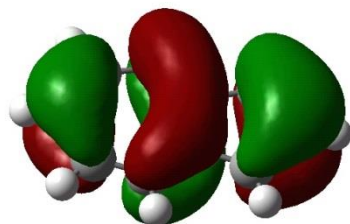
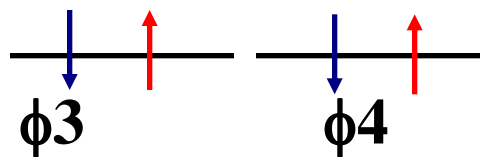


Azulén (C₁₀H₈)

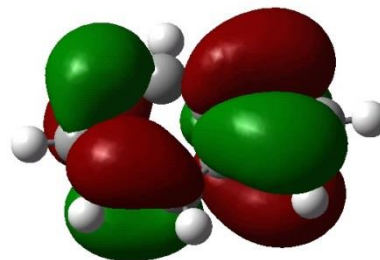
10*6+8*1=68 elektron ⇒ 34 MO

EPS

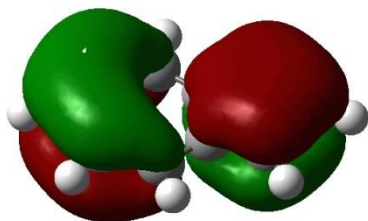
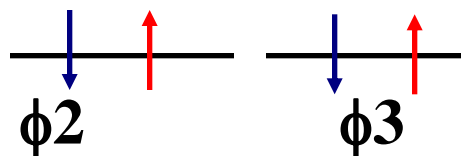
-0.04 ≤ töltés. ≤ 0.04



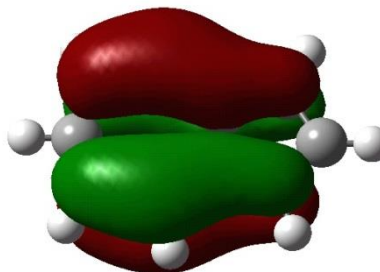
MO 33



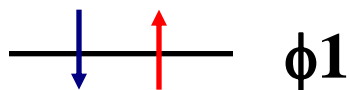
MO 34



MO 31

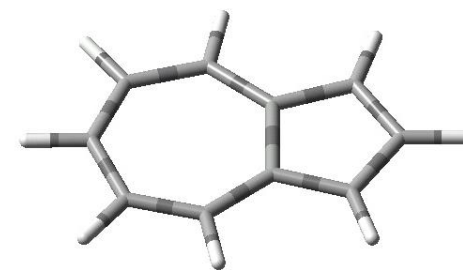
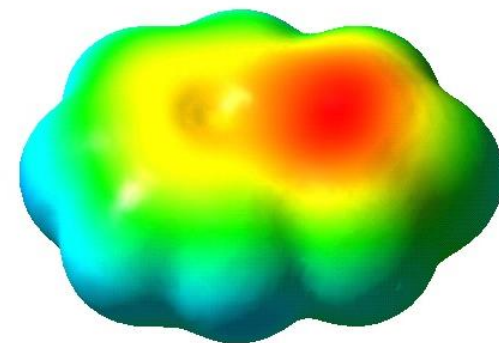


MO 32



MO 27

Betöltött molekulapályák



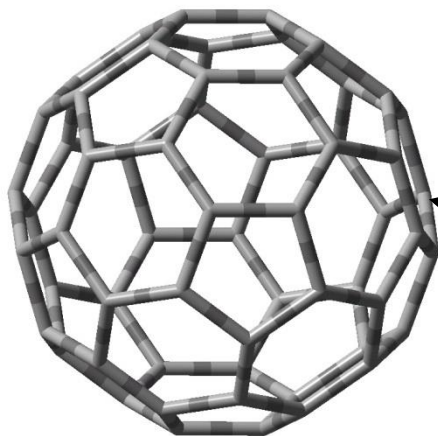
$E(\text{RHF}/3\text{-}21\text{G}) =$
-381.13789169 Hartree

Fullerén (C₆₀, C₇₀) aromás

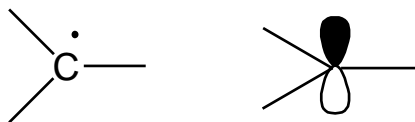
C₆₀ ⇒ 60 · 6 = 360 elektron ⇒ 180 MO 60 delokalizálható elektron

– nem alakul ki teljes delokalizáció

3D Hückel: 2(N+1)² ≠ 60, váltakozó kötéshosszak

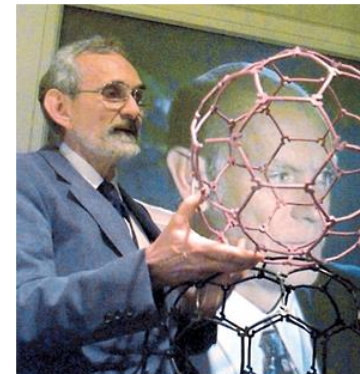


sp² hibridállapotú szén
3 σ- és 1 π-kötés szénenként



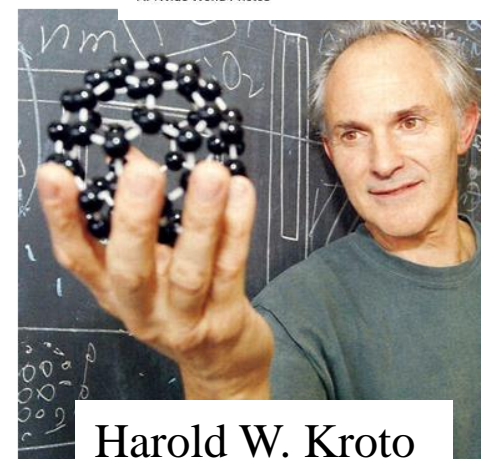
C₆₀ 12 ötszög és 20 hatszög

C₇₀ 12 ötszög és 25 hatszög



Robert F. Curl

AP/Wide World Photos

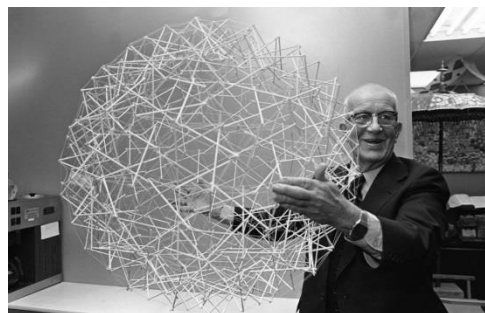


Harold W. Kroto

AP/Wide World Photos

Lézerrel előállított grafitgőzben (Curl, Kroto, Smalley 1996 Nobel díj)

K₃C₆₀ stabil kristály amely 18K-on szupravezető.



Richard Buckminster "Bucky" Fuller (1895 – 1983)



Richard E. Smalley