

Nem-konvencionálisnak  
gondolt, valójában nagyon is  
közönséges hidrogénkötések

(Dr. Pálinkó István – Dr. Sipos Pál)

Csapvíz arzénmentesítése  
otthon

(Dr. Galbács Zoltán)

Milyen szerepe van a kémiá-  
nak a kőolaj kitermelésében?

(Tabajdi Réka)

Kártyázzunk kvarkokkal  
a kémiaórán!

(Törökné Csörgő Judit)

# A KÉMIA TANÍTÁSA

módszertani folyóirat

## Szerkesztőség:

Főszerkesztő:

Németh Veronika

A szerkesztő munkatársai:

Dr. Adamkovich István

Dr. Tóth Zoltán

## Szerkesztőség címe:

6723 Szeged, Debreceni u. 3/B

Tel.: (62) 470-101,

FAX: (62) 554-666

## Kiadó:

MOZAIK Kiadó Kft.

Felelős kiadó: Török Zoltán

Tördelőszerkesztő: Forró Lajos

Borítóterv: Deák Ferenc

A Kémia Tanításában megjelenő valamennyi cikket szerzői jog védi. Másolásuk bármilyen formában kizárólag a kiadó előzetes írásbeli engedélyével történhet.

# TARTALOM

**Nem-kovencionálisnak gondolt, valójában nagyon is közönséges hidrogénkötések**

Dr. Pálinkó István egyetemi docens,

SZTE Szerves Kémiai Tanszék, Szeged;

Dr. Sipos Pál, SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Szeged

**Csapvíz arzénmentesítése otthon**

Dr. Galbács Zoltán ny. egyetemi docens,

SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Szeged

**Milyen szerepe van a kémiának a kőolaj kitermelésében?**

Tabajdi Réka doktorandusz hallgató,

SZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, Szeged

**Kémia, történelem, irodalom – Könyvismertetés**

Dr. Riedel Miklós ny. egyetemi docens,

ELTE Kémiai Intézet, Budapest

**Theodore Gray Kémiai elemek című könyvéről – Könyvismertetés**

Nánási Nikolett kémia BSc hallgató,

SZTE Kémiai Tanszékcsoport, Szeged

**Kártyázzunk kvarkokkal a kémiaórán!**

Törökne Csörgő Judit

tanárjelölt, ELTE TTK, Budapest

**Roadshow 2012**

**Örvendetes hírek**

Dr. Szalay Luca egyetemi adjunktus,

ELTE Kémiai Intézet, Budapest

---

Közlési feltételek:

A közlésre szánt kéziratokat gépelve (két példányban), floppy lemezen vagy e-mailen (kattila@mozaik.info.hu) küldjék meg a szerkesztőség címére. A kéziratok lehetőleg ne haladják meg a 8-10 gépelt oldalt (oldalanként 30 sorban 3100 karakter/oldal). A rajzokat, ábrákat, táblázatokat és fényképeket külön lapon megfelelő szövegezéssel kérjük ellátni. (A szövegrészben pedig zárójelben utaljanak rá.)

Kérjük, hogy a szövegbeli idézetek név- és évszámjelöléssel történjenek, míg a tanulmányok végén a felsorolt irodalom alfabetikus sorrendben készüljön. Kérjük szerzőtársainkat, hogy a kéziratok beküldésével egyidejűleg szíveskedjenek közölni pontos címüket, munkahelyüket és beosztásukat. A cikk megjelenése után a lemezeket visszaküldjük.

Dr. Pálinkó István – Dr. Sipos Pál

## Nem-kovencionálisnak gondolt, valójában nagyon is közönséges hidrogénkötések

### Másodlagos kötőerők fajtái, definíciók

A molekulák szilárd, folyadék és gáz halmazállapotban többé-kevésbé rendezett szerkezeteket alkothatnak. A rendezettség mértéke általában szilárd fázisban a legnagyobb (ezen belül a kristályos szerkezetekben) és gáz halmazállapotban a legkisebb (ha egyáltalán van). A molekulahalmazokat másodlagos kötőerők tartják össze. Ezek általában gyengébbek (0–65 kJ/mol), mint a molekulákat alkotó atomok, ionos vegyületek esetén az ionok között ható erők (90–420 kJ/mol). A másodlagos kötőerők energetikai szempontból tovább oszthatók: < 8 kJ/mol kötési energia esetén van der Waals, ennél nagyobb kötési energia esetén pedig egyéb nemkovalens (hidrogén-, dihidrogén, dihalogén-, dikalkogénhid- stb.) kölcsönhatásról beszélünk. Amint az látható, a másodlagos kötőerők általában gyengébbek, mint a kovalens kötés, de vannak kivételek: pl. ha a hidrogénhíd-kötés (vagy hidrogénkötés – a továbbiakban mindkét megnevezést használni fogjuk) egyik komponense ionos, akkor a kötéserősség akár a 40–190 kJ/mol tartományba eshet, amely már erősen átfed a kovalens kötésre jellemző energiatarományal.

A van der Waals kölcsönhatások három típusát különböztetjük meg. A legerősebb (~8 kJ/mol) a dipól-dipól (Keesom-féle) kölcsönhatás, gyengébb a dipól-indukált dipól (~5 kJ/mol) és a leggyengébb (~2 kJ/mol) az indukált dipól-indukált dipól kölcsönhatás. Az utóbbi kettőt Debye-féle, illetve diszperziós vagy London-féle kölcsönhatásnak is nevezzük.

A van der Waals erők gyengék, nagy hatótávolságúak, jelenlétük fontos szerkezetalkító hatású, igen nagy szerepük van molekulakristályok létrehozásában, például a London-erők teszik lehetővé a He cseppfolyósítását is.

A hidrogénhíd-kötés szerkezetalkító, esetenként szerkezetmeghatározó szerepének tárgyalását kezdjük a kötés definiálásával. Aakerőy és Seddon közleményének [1] második oldala ilyen definíciók felsorolását és kritikus értékelését tartalmazza. A szerzők megmutatják, hogy egyik definíció sem tökéletes, ők maguk sem tudnak ilyet adni, de a definíciókban mutatkozó ötletek együttese ad egy jól használható képet. Két definíciót idemácsolunk (fordításban), az egyiket történeti okokból [2], és azért, hogy megmutassuk, hogy milyen messze kerültünk ettől a definíciótól, a másikat [3] azért, mert ma ez a legjobban használható meghatározás.

Pauling (1940) [2]

*Mostanában ismerték fel azt, hogy bizonyos körülmények között a hidrogénatom meglehetősen erősen vonzódik egyszerre két atomhoz, azaz mindkét kölcsönhatás kötésnek tekinthető. Ez a hidrogénkötés. Mostanra már felismerték [...], hogy a hidrogénkötés nagymértékben ionos jellegű, és kialakulása csak két nagy elektronegativitású atom között lehetséges. [...] Bár a hidrogénkötés nem egy erős kötés (a kötési energia [...] csak kb. 5 kcal/mol), mégis nagy szerepe van az anyagok tulajdonságainak meghatározásában.*

Pimentel és McClellan (1960) [3]

*A hidrogénkötés egy A-H funkciós csoport és egy B atom között akkor jöhet létre – a B*

atom lehet ugyanabban vagy egy másik molekulában –, ha

- (a) bizonyíték van arra, hogy kötés jött létre (asszociátum jött létre vagy kelátképződés történt),
- (b) bizonyíték van arra, hogy ebben az új kötésben az A atomhoz kötött hidrogénatom valóban részt vesz.

Az „A” atomot a hidrogénkötésben résztvevő hidrogénatom donorjának, a „B” atomot a hidrogénatom akceptorjának nevezzük. Donorok a C, N, P, O, S, F, Cl, Br, és I, míg akceptorok a C=C, C≡C, arének, N, P, O, S, Se, F, Cl, Br és I atomok vagy atomcsoportok lehetnek.

Vegyük észre, hogy a Pauling-féle definícióhoz képest nagyon fontos változás az, hogy a szénatom szerepelhet donorként, és az olefin- és acetilénkötés, valamint az aromás rendszerek lehetnek akceptorok. Ha a kettőt kombináljuk, akkor kapjuk a CH...π kölcsönhatásokat. A CH...π kölcsönhatásokkal a továbbiakban nem foglalkozunk, csak annyit kívánunk megjegyezni, hogy szerkezetépítő szerepük nagyon fontos.

### A C–H...O(N, S, Se, halogén) „nem-konvencionális” hidrogénkötések

Amnapóság oktatott középiskolás, sőt egyetemi tananyag fényében is meglepő lehet az a kijelentés, hogy a szénatom képes hidrogénhid-kötés donoratomjaként szerepelni. Pedig a C–H...O, C–H...N, C–H...S, CH...Se, C–H...Cl és C–H...F kölcsönhatásokról már régen bebizonyították, hogy léteznek, hogy azok hidrogénhidak, és hogy fontos szerkezetépítő szerepük van főként szilárd, de esetenként folyadék fázisban is. Sutor volt az első, aki először állította, hogy C–H...O kölcsönhatás létezik, és az hidrogénkötés [4, 5]. A két úttörő közlemény 1962-ben, illetve 1963-ban jelent meg. Több, mint két évtizednek kellett eltelnie, hogy a megállapítást és annak kiterjesztését más akceptorokra (N, Cl) a tudományos közvélemény elfo-

gadja. Ma már azonban az is jól ismert, hogy a C–H...S, C–H...Se és C–H...F hidrogénhid-kötések is léteznek, és fontos szerepük van a kristályszerkezetek kialakításában.

A C–H...X (ahol X lehet O, N, Cl, F, S, Se vagy π-rendszer) hidrogénhidak gyengék, a kötésenergiáik a 2–17 kJ/mol tartományba esnek. Bár e hidrogénkötések pontos kötési energiája erősen függ a kapcsolódás környezetétől, azaz a kölcsönhatásban résztvevő molekulától, annyi elmondható, hogy a C–H...O és C–H...N hidrogénhidak az energiatartomány felső, a többiek, különösen a C–H...Se, C–H...F és a C–H...π hidrogénhidak inkább az alsó részébe tartoznak. Az is látható, hogy a kötési energiatartomány alsó részén erős az átfedés a van der Waals kötések energiatartományával.

Természetesen az nem igaz, hogy hidrogénkötés feltétlenül kialakul, ha egy vagy több molekulában van C–H molekularészlet és O, N, Cl stb. akceptor. Ha valamilyen, például sztérikus okok miatt nem kerülnek a csoportok egymáshoz kellően közel, akkor nem alakulhat ki ilyen kölcsönhatás. Világos, hogy szükség van olyan kritérium(ok)ra, amely(ek) teljesülése esetén azt mondhatjuk, hogy valóban hidrogénkötéssel állunk szemben. A teljesítendő követelmény(ek) megfogalmazhatók energetikai alapon – eddig csak így tárgyaltuk a hidrogénkötéseket –, csak az a baj, hogy az esetleg létrejövő ilyen kötések energiája igen nehezen mérhető. Számolni lehetne ugyan, de a kapott eredmények erősen függenek a módszertől és a számolt molekulahalmaz méretétől is. Jóval egyszerűbb, és könnyebben ellenőrizhető követelmények fogalmazhatók meg geometriai paraméterek segítségével. Lényegében a kristályszerkezetekből nyert geometriai adatokkal dolgoztak a C–H...X hidrogénhidak létét kétségbevonhatatlanul bizonyító kutatók is (Kennard, Leiserowitz, Desiraju, Steiner és munkatársaik).

E kutatók munkáinak alapján **egy A–H...B kölcsönhatást hidrogénhid-kötésnek tekintünk, ha (i) a nehézatomok (a donor és**

**az akceptor) közötti távolság kisebb, mint a nehézatomok van der Waals sugaraik összege, és (ii) ha az A-H-B szög nagyobb, mint  $90^\circ$ .**

A két kritérium egyike a nehézatomok közötti távolságot hasonlítja a nehézatomok van der Waals sugaraik összegéhez. A hidrogén semmilyen paramétere sem szerepel. Ennek oka az, hogy a nehézatomok pozíciója könnyen meghatározható valamilyen diffrakciós technikával, míg a hidrogénatomoké nem. A röntgen-diffrakció „látja” a hidrogénatom elektronfelhőjét, míg a neutron-diffrakció az atommagot. Egyik sem „látja” azonban az egész hidrogénatomot. A nehézatomok van der Waals sugaraival az a probléma, hogy az irodalomban többféle érték található ugyanarra az atomra. Kialakult azonban egy olyan közmegegyezés, amely szerint a Bondi által közölt van der Waals sugarakat [6] használja (1. táblázat) a kutatók döntő többsége a hidrogénkötések, és a feltehetőleg ilyen kötésekkel összetartott rendszerek vizsgálatakor.

C	N	O	F	Cl
170	155	152	147	175

1. táblázat

*Néhány atom van der Waals sugara pm-ben, Bondi szerint [6]*

Érzelhető, hogy a távolságkritérium nagyon szigorú. Meg is próbálták ezt enyhíteni, azaz a hidrogénkötés és a van der Waals kölcsönhatás közötti határt „elmosni”, messze nem minden jelentős, e területen (is) ténykedő kutató öröme. A vita nyilván nem zárult le, a tanulság az lehet, hogy a hidrogénkötés és a van der Waals kölcsönhatás között az átmenet nem ugrásszerű, hanem folyamatos.

A másik követelmény a hidrogénkötés térbeli irányítottságát fejezi ki. A távolságkritériummal szemben az, hogy az A-H-B szög  $90^\circ$ -nál nagyobb legyen, nagyon könnyen teljesíthető, gyenge térbeli irányítottságot megkövetelő kri-

térium. Így nyilvánvalóan a távolságkritérium teljesülése a fő szelekciós tényező akkor, amikor egy kötésről el kell dönteni, hogy az hidrogénkötés-e vagy sem.

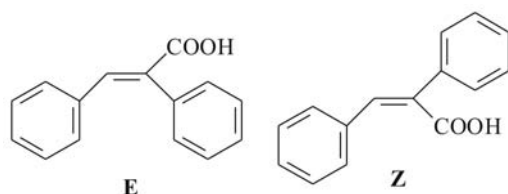
Amint azt már említettem, geometriai paramétereiket legegyszerűbben egykristályszerkezetekből lehet nyerni. Kisebb szerves molekulák egykristályainak röntgenszerkezetét a Cambridge Structural Database (CSD) gyűjti [7]. A kristályszerkezetek térítés ellenében hozzáférhető, és különféle szoftverekkel (köztük a Cambridge Crystallographic Data Centre [CCDC] által kidolgozott és folyamatosan frissített programcsomag) akár az egyedi kristályszerkezetek is vizsgálható, akár statisztikai elemzések is készíthetők. Az adatbázis sok esetben egy anyag különféle polimorfjainak egykristályszerkezetét is tartalmazza. A polimorfok igen eltérő szerkezetűek is lehetnek: ha hidrogénkötések a szerkezetmeghatározó erők, akkor a kötésrendszer is lényegesen eltérő lehet. Nyilvánvalóan a hidrogénkötések vizsgálatának egyik alapforrása az adatbázisban összegyűjtött egykristályszerkezetek voltak régebben, és azok mostanában is.

Az eddigiekből talán látható, hogy hidrogénkötések vizsgálata leggyakrabban kristályszerkezetek tanulmányozásával folyt és folyik, az alkalmazott módszer pedig az egykristály röntgen- és/vagy neutron-diffrakció, de hidrogénkötések előfordulására nincs fáziskorlát, és vizsgálatukra is jónéhány egyéb eszköz áll rendelkezésre. A diffrakciós módszerek közül az elektrondiffrakció ad geometriai adatokat gázfázisú kölcsönható, akár hidrogénkötés(ek)kel összetartott molekulákról. Az NMR (mágneses rezonancia) spektroszkópia nagyon alkalmas mind szilárd-, mind folyadékfázisú aggregátumok vizsgálatára. A rezgési spektroszkópiák (Raman és infravörös) nagyon jól használhatók hidrogénhidakkal összetartott rendszerek tanulmányozására szilárd-, folyadék- és gázfázisban egyaránt. A rotációs spektrumok is hasznos információkat szolgáltatnak az adduktok geometriai adatairól. Az aggregátumok szerkezetéről

különösen sok mindent megtudhatunk, ha a rendszert többfajta kísérleti módszerrel is megvizsgáljuk, például elektrongerjesztési, szilárd NMR és röntgendiffrakciós módszerekkel egyaránt. A vizsgálatok információtartalma még tovább nőhet, ha a kísérleti módszereket molekulamodelllezési számításokkal egészítjük ki.

### Példák C–H...O hidrogénhidakkal összetartott rendszerekre

A hidrogénhíd-kötések szerkezetalkító szerepét  $\alpha$ -fenil-fahéjsav izomer (*E*- és *Z*-2,3-difenilpropénsav) modelleken mutatjuk be (1. ábra).



1. ábra  
Az  $\alpha$ -fenil-fahéjsav izomerek

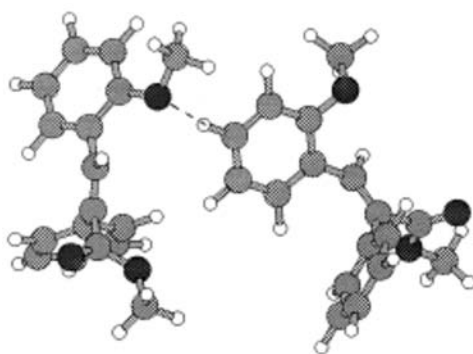
A molekulák könnyen előállíthatók módosított Perkin-kondenzációval. A termékelegy az *E*-izomerből mindig jóval többet tartalmaz, mint a *Z*-ből.

Oldatban semelyik izomer sem képez C–H...O intermolekuláris hidrogénhíd-kötéssel összetartott aggregátumot. Természetesen a karboxilcsoportok között van O–H...O hidrogénhíd oldatban és szilárd állapotban egyaránt.

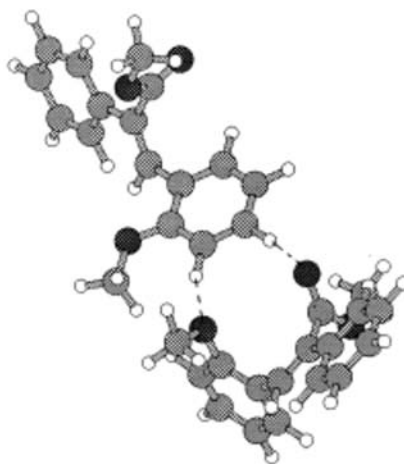
Szilárdfázisban többféle kísérleti módszerrel kimutatható hosszútávú rendezettség. Az alapegységként funkcionáló dimereket (aromás) C–H...(karbonil)O intermolekuláris hidrogénkötések tartják össze, de nincs jele (olefinés) C–H...(karbonil)O hidrogénkötésnek.

A CSD adatbázisban [7] összegyűjtött fahéjsav-származékok kristályszerkezeteit tanulmányozva kiderül, hogy savak esetén az alapegység mindig a két O–H...O hidrogénkötéssel összetartott dimer (ezt persze így is vártuk). A dimer egységek (aromás)C–H...O hidrogénhidakkal kapcsolódnak, ahol az akceptor vagy

a karbonil-, vagy az alkoholos hidroxilcsoport oxigénje. Az olefinés proton csak akkor lép C–H...O intermolekuláris hidrogénhidas kölcsönhatásba, ha a  $\beta$ -fenilcsoporton van oxigéntartalmú szubsztituens (például nitrocsoport). Észterek esetén (nyilván) nincs dimerizáció, de itt is van C–H...O hidrogénkötésekkel vezérelt hosszútávú rendezettség. A C–H egység szénatomja lehet aromás, alkoholos és itt olefinés is. Intermolekuláris (aromás)C–H...O hidrogénkötést mutat be  $\alpha$ -fenil-fahéjsav metilészterekben a 2. ábra.



(a)

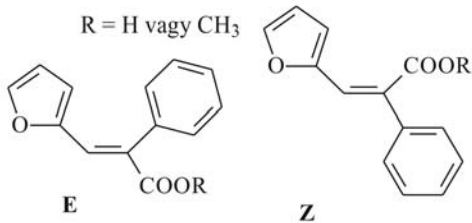


(b)

2. ábra

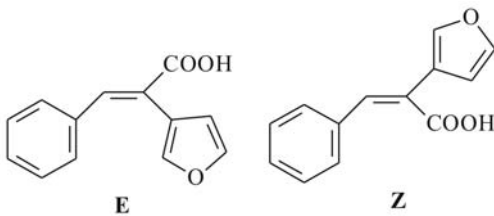
Intermolekuláris (aromás)C–H...O hidrogénkötések metoxiszubsztituált  $\alpha$ -fenil-fahéjsav metilészterekben: (a) *E*-izomer: akceptor a metoxicssoport oxigénatomja, (b) *Z*-izomer: akceptor a metoxicssoport és a karbonilcsoport oxigénatomjai

Az intermolekuláris C–H...O hidrogénkötések szerkezetformáló tulajdonságai tovább tanulmányozhatók úgy, hogy az aromás csoportokkal szubsztituált akrilsavak, illetve akrilsav metilészterek családján belül maradván az egyik fenilcsoportot furilcsoportra cseréljük (3. és 4. ábra).



3. ábra

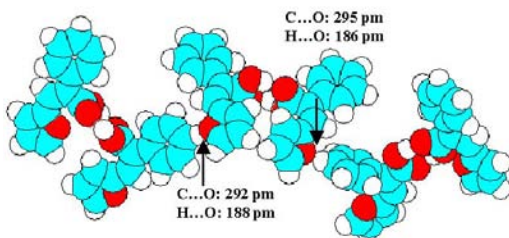
A 2-fenil-3(2'-furyl)propénsav és metilészter sztereoisomerek



4. ábra

A 2(3'-furyl)-3-fenilpropénsav sztereoisomerek

A 2-fenil-3(2'-furyl)-propénsav Z izomerje például szilárdfázisban mutat hosszútávú rendeződést: több dimer alapegység is összekapcsolható (aromás)C–H...O(furil) hidrogénkötéssel (5. ábra).

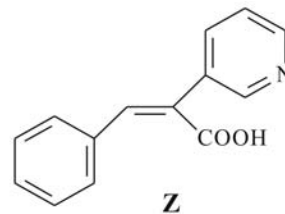
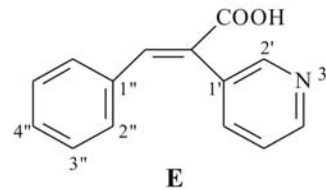


5. ábra

A Z-2-fenil-3(2'-furyl)propénsav dimerjeinek trimerjét összetartó C–H...O hidrogénkötések (a nyilakkal jelezve)

### C–H...N hidrogénhidakkal összetartott rendszerek

Az  $\alpha$ -fenil-fahéjsavak bármelyik aromás gyűrűjét, akár mindkettőt is kicserélhetjük nitrogéntartalmú heteroaromás, mondjuk piridilgyűrűre is. Ekkor elvi lehetőség nyílik C–H...N hidrogénhidak kölcsönhatások fellépésére. Nézzünk erre példát (6. ábra).

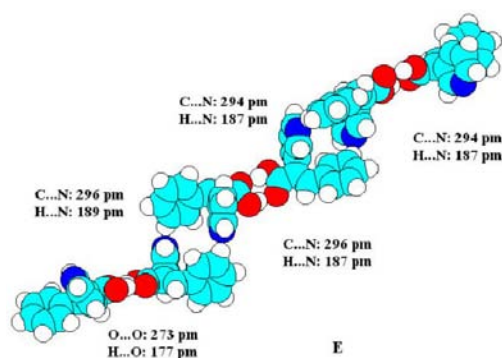


6. ábra

A 2-piridil-3-fenilpropénsav sztereoisomerek; a piridilcsoport nitrogénatomja a 3' helyzetben van

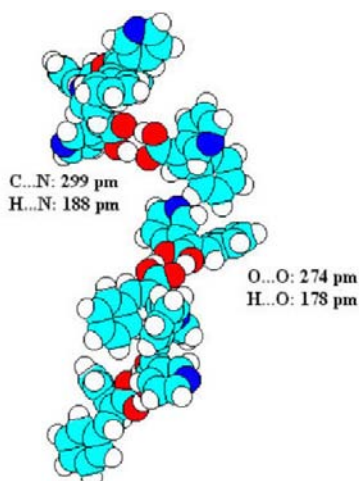
A 2-(3'-piridil)-3-fenilpropénsav mindkét sztereoiszomer dimerjéből készíthetők C–H...N hidrogénkötéssel összetartott oligomerek. Az E-izomer dimerjének trimerjéből többféle szerkezet is összeállítható. Ha a dimer egységek között (3''-aromás)C–H...N hidrogénhid van, akkor létra- vagy szalagszerű (7. ábra), ha (2''-aromás)C–H...N hidrogénhid a rendező erő, akkor cikk-cakk szerkezet nyerhető (8/a ábra). A Z-izomer dimerjének trimerjét akár (2''-aromás)C–H...N (8/b ábra), akár (4''-aromás)C–H...N (8/c ábra) hidrogénkötések tartják össze, cikk-cakk szerkezetet kapunk.

Ha az E-savdimer (2''-aromás)C–H...N kötésekkel összetartott trimerjéhez egy további dimert illesztünk, akkor helikális szerkezetet kapunk (9. ábra), amelyben az újonnan létrejött (2''-aromás)C–H...N kölcsönhatás is hidrogénkötés.



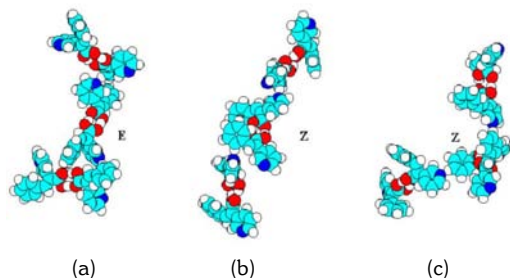
7. ábra

Létra- vagy szalagszerű szerkezet a (3"-aromás)C–H...N hidrogénkötésekkel összetartott E-2-(3'-piridil)-3-fenilpropénsav-dimerek trimerjénél



9. ábra

Helikális szerkezet E-2-(3'-piridil)-3-fenilpropénsav-dimerek (2"-aromás)C–H...N hidrogénkötésekkel összetartott tetramerjénél

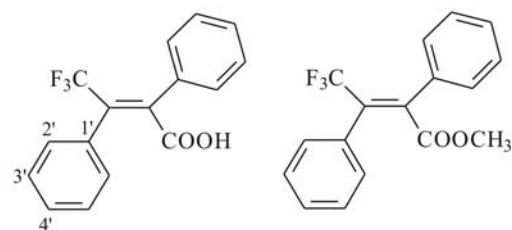


8. ábra

Cikk-cakk szerkezet 2-(3'-piridil)-3-fenilpropénsav-dimerek trimerjénél: (a) (2"-aromás)C–H...N hidrogénbíd, E-izomer, (b) (2"-aromás)C–H...N hidrogénbíd, Z-izomer és (c) (4"-aromás)C–H...N hidrogénbíd, Z-izomer.

### C–H...F hidrogénhidakkal összetartott rendszerek

A korábbiakból láthattuk, hogy (olefines) C–H...O hidrogénkötés a fahéjsavaknál nagyon ritkán vagy sosem fordul elő. Észterek esetén azonban már van ilyen kölcsönhatás. A két-fajta származék között az alapvető különbség az, hogy a savakból dimerek képződnek, majd ezek asszociálódnak, míg az észtereknél a monomer az aggregálódás alapegysége. A savdimerek oligomerizációja (olefines)C–H...O kötések potenciális szerkezetépítő képességének



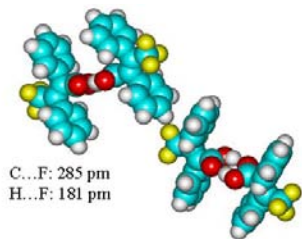
10. ábra

Az E-2,3-difenil-3-trifluormetilpropénsav és metilésztere

E két molekula különféle koncentrációjú oldatainak vizsgálataiból kiderült, hogy a sav – a várakozásoknak megfelelően – dimer formájában van jelen, ám nincs jele hidrogénhidak kölcsönhatásnak sem a dimerek, sem az észter

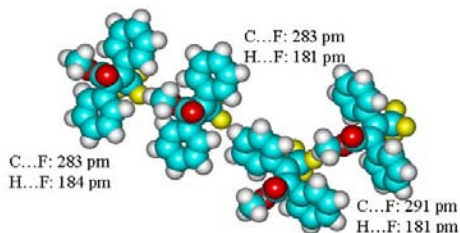


monomerek között. Szilárdfázisban azonban a savdimerek között van (aromás)C–H...F intermolekuláris hidrogénhid (11. és 12. ábra).



11. ábra

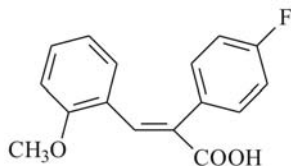
Az *E*-2,3-difenil-3-trifluormetilpropénsav dimerjének dimerje (4'-aromás)C–H...F hidrogénkötéssel összetartva



12. ábra

Az *E*-2,3-difenil-3-trifluormetilpropénsav metilészter tetramerje (4'-aromás)C–H...F és (metil)C–H...F hidrogénkötésekkel összetartva

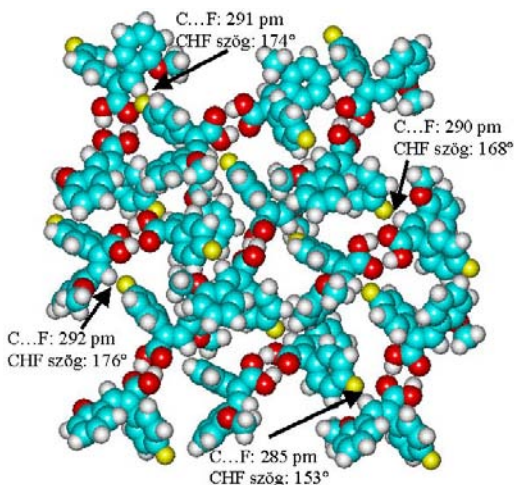
Az *E*-2-(4'-F-fenil)-3-(2'-metoxifenil)-propénsav (13. ábra) példáján azt mutatjuk meg, hogy a dimerek egy összetett síkszerű agglomerátumba szerveződnek (14. ábra).



13. ábra

Az *E*-2-(4'-F-fenil)-3-(2'-metoxifenil)-propénsav molekula

A fahéjsavszármazékok kristályos állapotban ténylegesen ilyen síkból állnak. Az alapegységeket hidrogénkötések szervezik kristálysíkká, a modellként használt molekula esetén a savdimereket C–H...O és C–H...F kölcsönhatások. A kristály háromdimenziós szerkezetét ilyen síkok



14. ábra

Az *E*-2-(4'-F-fenil)-3-(2'-metoxifenil)-propénsav molekula dimerjeinek C–H...O és C–H...F hidrogénkötésekkel összetartott kétdimenziós bázilázata

kötege építi fel. A síkok között gyenge van der Waals, illetve C–H... $\pi$  kötések vannak. Ezek annyira gyenge kölcsönhatások, hogy a síkok viszonylag kis erőhatásra elcsúsznak egymáson.

## Összefoglalás

A cikkben hidrogénhidakkal összetartott molekulákról/molekulahalmazokról esett szó, aromás csoportokkal szubsztituált akrilsavakat, illetve észtereiket használva példaként. A molekulahalmazok alapegységeit összetartó kölcsönhatások gyenge, de a szerkezetképzésben döntő jelentőségű nem konvencionális C–H...O(N, F) hidrogénkötések voltak. Ne higgyük azonban azt, hogy ilyen kölcsönhatások csak különféle akrilsavak agglomerációjakor lépnek fel; döntő szerepük van általában is a szerves molekula-kristályok kialakításában és összetartásában. Nyugodtan mondhatjuk azt, hogy ezek ugyanolyan közönséges hidrogénhidak, mint O–H...O, O–H...N, N–H...N stb. kölcsönhatások, és már igazán ideje lenne, ha bevonulnának először az egyetemi, majd kevés idő múlva a középiskolai tananyagba.

**Irodalom**

- [1] Aakeröy, C.B., Seddon, K.R. (1993): Chem. Soc. Rev. 22, 397.
- [2] Pauling, L. (1940): The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals – An Introduction to Modern Structural Chemistry, 2nd ed., Oxford University Press

- [3] Pimentel, G.C., McCellan, A.L. (1960): The Hydrogen Bond, Freeman
- [4] Sutor, D.J. (1962): Nature 68, 195.
- [5] Sutor, D.J. (1963): J. Chem. Soc. 1105.
- [6] Bondi, A. (1964): J. Phys. Chem. 68, 44
- [7] www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd.

Dr. Galbács Zoltán

## Csapvíz arzénmentesítése otthon

Az utóbbi időben ismételten ráirányult a figyelem a hazai csapvizek arzéntartalmára. Híradások, tudósítások sürgették a helyzet jobbítását, az arzéntartalom csökkentését. A kémia szakos tanároknak is lehet feladatuk az arzén-veszély ismertetésében és a megoldások keresésében, elterjesztésében.

Az arzén a földkéreg 53. előfordulási gyakoriságú eleme. Minden országban előfordul, ha nem is azonos mértékben.

Számos kőzet, ásvány tartalmaz arzént. A természetben előforduló arzén-ásványok összetétele: NiAs, (Co,Fe)As<sub>2</sub>, AsS, CoAsS, As<sub>2</sub>S<sub>3</sub>,

FeAsS, Fe(As,S)<sub>2</sub>, FeAs<sub>2</sub>, (Cu,Fe)<sub>12</sub>As<sub>4</sub>S<sub>13</sub>, Cu<sub>3</sub>AsS<sub>4</sub>, As<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, FeAsO<sub>4</sub> · 2H<sub>2</sub>O, (Ni,Co)<sub>3</sub>(AsO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> · 8H<sub>2</sub>O, Mg<sub>3</sub>(AsO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> · H<sub>2</sub>O, Fe(II)<sub>3</sub>(AsO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> · 8H<sub>2</sub>O, CaCu(AsO<sub>4</sub>)OH, KFe<sub>4</sub>(AsO<sub>4</sub>)<sub>3</sub>(OH)<sub>4</sub> · 6 – 7H<sub>2</sub>O.

Ország	A talaj arzéntartalma ( mg/kg )
Argentína	0,8–22
Kína	0,01–626
Franciaország	0,1–5
Németország	2,5–4,6
Olaszország	1,5–60
Japán	0,4–70
Mexikó	2–40
Dél-Afrika	3,2–3,7
Svájc	2–2,4
USA	1–20

A talaj arzéntartalma néhány országban

Esővíz	Arzéntartalom, µg/L
Kanada	0,01–5
Rhode Island	0,8
Seattle, Washington	17
Tavak vizében	Arzéntartalom, µg/L
Japán	0,2–1,9
Németország	20–25
Kalifornia	0–100
Michigan	2,4
Wisconsin	4–117
Lake Ohakuri, Új-Zéland	30–60
Tengervíz	Arzéntartalom, µg/L
világszerte	0,15–6
Csendes-óceán	1,4–1,8
Atlanti-óceán	1–1,5
Talajvíz	Arzéntartalom, µg/L
New Hampshire, USA	0,0003–180
Vietnam	1–3050

A különböző vizek arzéntartalma