

## *Az anyagismeret kémiai- szerkezeti alapjai*

### 1.1. Az atomok elektronszerkezete

Az anyag alapvető építőkövei az atomok. Részben ezek szerkezete, részben egymáshoz való kapcsolódásuk szabja meg az anyagok makroszkópikus tulajdonságait. Az atomon belül az atommagban van a proton és a neutron. A proton hordozza a pozitív elemi töltést, a neutron semleges. Tömegük közel egyenlő és kb. 2000 szerese az elektron tömegének. Az elektron a negatív elemi töltés hordozója és ez veszi körül az atommagot.

Az elektron tulajdonságainak leírására a klasszikus fizika már nem volt alkalmas. A kvantummechanika a mikrovilágról gyökeresen új képet alkotott. Részletesebb megismerésére a Fizika tárgyban lesz lehetőség. Néhány fontosabb megállapítása a következő:

- Az elektron (és a mikrovilág többi tagja) kettős természetű, azaz részecske és hullám-tulajdonságot egyaránt mutatnak. Így az elektron terjedésének hullámhossza is megadható:

$$\lambda = h/mv \quad (\text{de Broglie}) \quad (1.1.)$$

ahol  $h$  a Planck állandó.

- Az elektron állapotát (helyzetét és energiáját) egy hullámfüggvénnyel írhatjuk le, ez a Schrödinger egyenlet. Megoldása egy olyan függvénysorozat, amely megadja az elektron megtalálási valószínűségét és az ezekhez tartozó energiaértékeket.

- Egy mikrorészecske (elektron) helybizonytalansága és impulzusbizonytalansága nem csökkenthető minden határon túl

$$\Delta x \Delta p_x \geq h/2\pi$$

Ez a Heisenberg-féle határozatlansági reláció.

- Egy atom kötelékében (vagy akár szabadon) levő elektron energiája nem lehet tetszőleges értékű, csak meghatározott (diszkrét) energiaszinteken létezik (*kvantált*) és ezeknek megfelel egy-egy elektronpálya. Két szint közötti átmenet csak pontosan a különbségnek megfelelő ( $\Delta E$ ) energia felvételével (ill. leadásával) történhet. A kvantummechanikára alapozva a valósághoz jobban közelítő képet kapunk az atomokról, kémiai kötésekről, így végül az anyagok viselkedéséről.

Az elektron állapota *kvantumszámokkal* jellemezhető: Ezek:

• **Főkvantumszám:** a magtól való távolságra, potenciális energia durva értékére utal.

Értéke  $N: 1, 2, 3, 4, \dots$  stb. Jelölés: K, L, M, N

• **Mellékvantumszám:** a pálya alakját adja meg.

Maximális értéke  $l = n-1$  Jelölés: s, p, d, f

Az 1. ábra az s, p, és d pályákon levő elektronfelhő alakját mutatja.

- **Mágneses kvantumszám:** a pályák külső mágneses térhez viszonyított irányát adja meg, lehetséges értéke  $m = -1 \dots 0 \dots +1$

- **Spin kvantumszám:** az elektron saját impulzuszórára utal.

Lehetséges értéke:  $s = \pm 1/2$

Az 1. ábra az s, p és a d elektronpályák alakját mutatja.

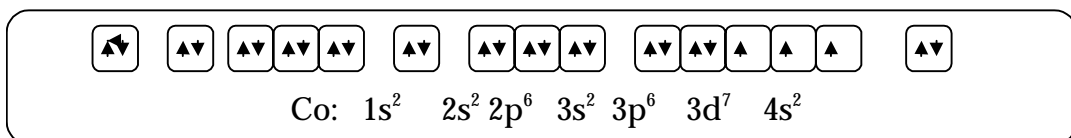
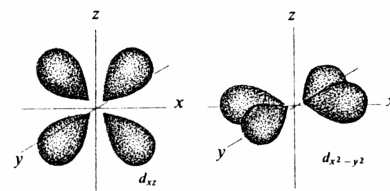
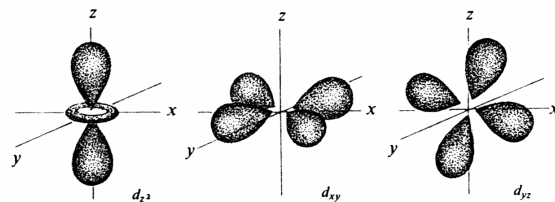
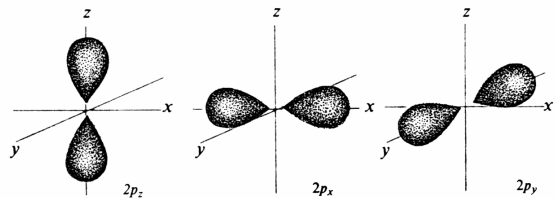
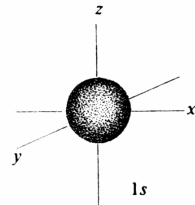
Az elektronokra is érvényes az energiaminimum elv, de ez nem jelenheti azt, hogy minden elektron alapállapotban van, mert az alapállapot egy adott térbeli elhelyezkedést is jelent, emiatt nincs minden elektron számára hely az alapállapotú pályán. Ennek általános megfogalmazása a **Pauli elv**, mely szerint **egy rendszeren belül nem lehet két elektron ugyanabban a kvantumállapotban.**

Így az atomban az  $n = 1$  főkvantumszámú alapállapotban két ellentétes spinű elektron létezhet, mert  $l = 0$  és  $m = 0$ . Az egy héjon (azonos főkvantumszámú pályákon) elhelyezhető elektronok száma  $2n^2$ .

Ahogy az atomnak nő a rendszáma - nő az elektronok száma, amelyek sorban az egyre magasabb

energiájú pályákat töltik ki. Az így kialakult szerkezetet nevezzük **elektronkonfigurációnak.**

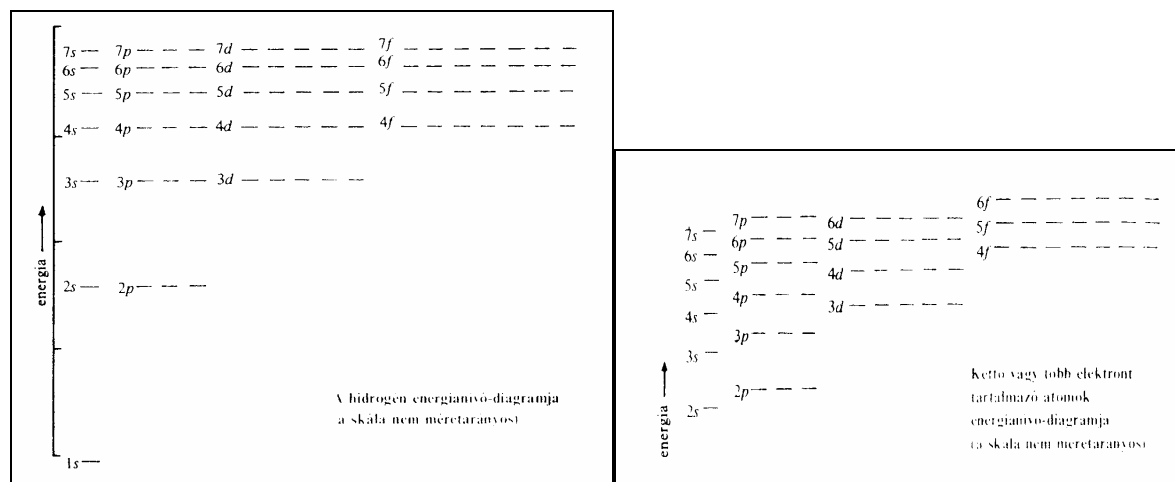
Az egyes pályák, elektronkonfigurációjának szemléltetésére többféle ábrázolás lehetséges. Ezekből mutat be kettőt a 2. ábra.



2. ábra: A kobalt elektronkonfigurációjának cellás ábrázolása. A nyilak a spint jelölik.

Alatta a pályák mellékkvantumszám szerinti jelölése

A 3. ábrán bal oldalt a H atom elektronjának lehetséges gerjesztett szintjeit láthatjuk, jobb oldalt pedig azt, hogyan változik meg ez a szintrendszer, ha egy atom kötelékében több elektron található.



## A periódusos rendszer

Mengyelejev - mint több kortársa a múlt század második felében - az addig megismert elemek között próbált valamilyen rendszert kialakítani. Ahogy sokan mások, ő is a növekvő atomsúly szerinti rendszerezést választotta. Az, hogy az utókor őt tiszteli a periódusos rendszer megalkotójaként, annak köszönheti, hogy a fenti mechanikus szabályt nem erőltette ott, ahol a kémiai tulajdonságokban megmutatkozó periodicitás ezzel nem volt összhangban. Azaz az elemek rendszámát kémiai és fizikai tulajdonságaik szabták meg.

Pár évtizeddel később, megismerve az atomok szerkezetét, a periodicitás oka is nyilvánvalóvá lett, a rendszám megegyezik az atom protonjainak ill. elektronjainak a számával. A hasonló tulajdonságok oka az, hogy a kémiai jellemzőket döntően meghatározó legkülső elektronszféra lévő elektronok száma és alakja (mellékkvantumszáma) minden új héjon újra kezdődve ismétli az előzőt.

A ma legelterjedtebb felírás az ún. hosszú periódusos rendszer. Ez 8 főcsoportot (oszlopot) és 10 mellékcsoportot tartalmaz. A vízszintes sorokat periódusoknak nevezzük. Az első periódusban csak kettő elem lehet, mert az első héjra is csak két elektron fér.

A második és harmadik periódusban 8-8 elem van. ( A második héjra 8, a harmadikra 18 elektron férne, de a 3 pálya feltöltődése csak a 4 periódusban kezdődik.) 18-18 elem van a 4-6 periódusban.

A periodusos rendszer felosztható aszerint is, hogy épp melyik alhéj épül az adott csoportban. Eszerint léteznek

<b>s mező elemek</b>	Az első két oszlop,	fém tulajdonságúak..
<b>p mező elemek</b>	3-8 főcsoport elemei	nemfémes és átmeneti tulajdonságúak
<b>d mező elemek</b>	1-8 mellékcsoport elemek	átmeneti fémek
<b>f mező elemek</b>		- ritkaföldfémek

A rokon tulajdonságok legjobban az oszlopokon belül mutatkoznak meg, hiszen ezekben azonos a külső elektronok konfigurációja.

*Az első oszlop tagjai az alkáli fémek, elektronkonfigurációjuk  $s^1$ . Ezt az egy elektront könnyen le tudják adni, így egyszerűen pozitív töltésű ionokat képeznek. (Formailag itt van a H is, de sajátos tulajdonságai miatt nem sorolható egyik csoportba sem).*

*A második oszlopban található az  $s^2$  konfigurációjú alkáli földfémek. Kétszeresen pozitív iont képezhetnek, már kissé nehezebben -- azaz kevésbé reakcióképesek mint az alkáli fémek.*

*A p mező hat oszlopában sorra eggyel több p elektron van a legkülső héjon. Az utolsó oszlopban, a 6 p elektron nagyon zárt, szimmetrikus szerkezetet alkot, amely igen nehezen bontható meg, ezért nem reakcióképesek a **nemesgázok**. Ugyanezt a konfigurációt érhetik el a **halogénelemek** egy elektron felvételével és ezért alakíthatók könnyen egyszerűen negatív ionná.*

*Az **oxigén-csoport** elemeinek már két elektron hiányzik a telített pályához, ez azonban kétszeresen negatív ion képződésével ritka, gyakoribb, hogy az elemek kovalens kötéssel szerzik meg a nemesgázszerkezethez szükséges elektronokat.*

*A **nitrogéncsoportban**  $s^2p^3$  a jellemző konfiguráció, azaz figyelembe véve a Hund szabályt, három párhuzamos spinű elektron helyezkedik el a  $p_x p_x p_z$  pályákon. Ez hasonlóan szimmetrikus, mint a nemesgázoké, azért ezek az elemek kevésbé reakcióképesek, mint a szomszédaik.*

*A **széncsoport** elemei közepes reakcióképességgel csak kovalens kötésre képesek, illetve az oszlop alsó elemei már fémes tulajdonságúak, így fémes kötést is alkothatnak.*

*A harmadik oszlopban a földfémek találhatóak, itt a fémes jelleg az erősebb, de a reakciópartnertől függően bármilyen kötést létrehozhatnak.*

*A technológiai szempontból vett fémek a d mező elemek között találhatóak. Mindhárom sorban 10-10 elem található, mivel összesen 5 d pálya lehetséges, amelyre 10 elektron fér el. A d elektronok fölötti héjon általában 2 db s elektron is van (kivéve, ha egy s elektron átlépésével elérhető a  $d^5$  vagy  $d^{10}$ -es szimmetrikus konfiguráció, mint pl. a Mn, Cu, Ag esetében). Emiatt ezek az elemek fő fizikai, kémiai tulajdonságaikban hasonlóak, változó vegyértékűek.*

*Az f mező elemek  $2 \times 14$  tagja oly mértékben hasonlít egymáshoz, hogy mind a lantán. ill. az aktínium. kockájában lehetnének. Ennek oka, hogy az épülő f héj fölött még egy d és két s elektron árnyékolja ezt a változó számú héjat, így annak hatása, hogy az f héjon 5,- 8 vagy 13 elektron van, alig vehető észre. Ezért pl. fizikai- kémiai tulajdonságaik nagyon hasonlóak, ugyanakkor az f elektronok védettsége következtében érdekes optikai tulajdonságai lesznek ezeknek az elemeknek (pl. laser).*

Hosszan lehetne sorolni az elektronkonfigurációból, a periodusos rendszerből levonható következtetéseket. A továbbiakban megfordítjuk a logikai sorrendet, és egyes jelenségek bemutatása során utalunk annak atomszerkezeti okaira.

### **Az atomok, ionok mérete**

*A szilárd testek sok fizikai - kémiai tulajdonsága függ attól, hogy milyen kristályszerkezet alakul ki az anyagban. Ennek pedig egyik fontos meghatározója az, hogy az alkotó atomok, ionok egymáshoz viszonyított mérete milyen. (Ne feledjük azonban az elektronok helybizonytalanságáról mondottakat. Egy atom határa pontosan nem állapítható meg. A legtöbb méretadat szilárd minták rácsparamétereinek méréseiből származik.)*

*A semleges atomok mérete szintén mutat periodicitást. Minden periódusban a legelső elem, az alkálifém a legnagyobb és a halogén elem a legkisebb átmérőjű. Az egyensúlyi méret kialakulása több ellentétes hatás eredménye.*

- *A növekvő magtöltés nagyobb vonzóereje összességében húzná az elektronfelhőt.*
- *Az elektronok egymást taszítva egyre távolabb törekszenek egymástól.*
- *A lezárt héjak árnyékoló hatást fejtenek ki a mag vonzóerejére.*
- *Ha kémiai folyamatban pozitív ionok keletkeznek, általában a legkülső héj összes elektronja távozik az atomtörzsről, így ennek következtében a kationok sokkal kisebbek, mint a semleges atom. Természetesen fordított a helyzet az anionoknál. Bár az egy-két elektron már meglevő pályára épül be (ezzel válik ez nemesgázkonfigurációjúvá), a többlet negatív töltés taszító hatására ennek a héjnak a mérete jelentősen megnő.*

## A spektroszkópia alapjai

A spektroszkópiai az analitikai kémia ma már klasszikus ága. Lényege, hogy az anyag tulajdonságairól optikai úton szerezzünk információkat, méghozzá úgy, hogy az anyag által kibocsátott vagy elnyelt fény (általánosabban sugárzás) hullámhossz szerinti intenzitás-eloszlását vizsgáljuk.

Mindennek alapja, hogy az elektronok (és minden mikrorészecske) energiafelvétele és leadása kvantált. Azaz

- a részecske alap és gerjesztett állapotai nagyon állandó szintek,
- jellemzőek az anyagra és
- közöttük nem folytonos, hanem kvantumugrásokkal történő átmenet lehetséges.

A stabil  $E_0$  alapállapotból gerjesztés során kerülhet az elektron (részecske) magasabb energiaállapotba. Ez az állapot nem stabil, ezért általában azonnal megtörténik a visszaugrás és a két szint energiakülönbségét elektromágneses sugárzás formájában adja le az anyag.

$$\Delta E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

$\nu$ : az emittált foton frekvenciája

$h$ : a Planck állandó

$\lambda$ : a fény hullámhossza

$c$ : a fénysebesség

Látható, hogy az anyagra jellemző  $\Delta E$  egyértelmű függvénykapcsolatban van a jól mérhető hullámhosszal.

Az elmúlt kb. másfél évszázad alatt igen sok módoszata alakult ki a spektroszkópiának.

A két alaptípus:

### **- *Emissziós spektroszkópia***

Az anyagot gerjesztett állapotba hozzuk, (általában termikus úton) és a kibocsátott sugárzást elemezzük. A hullámhosszból az anyag minőségére, az intenzitásból az adott komponens mennyiségére lehet következtetni.

### **- *Abszorpciós spektroszkópia***

Ez esetben fényel (elektromágneses sugárzással) átvilágítva az anyagot az átterestett fény elemzését végzik el. A gerjesztő sugárzásból az anyag elnyelődni (abszorbeálódni), amelynek energiája pont alkalmas arra, hogy a minta egyes komponenseit gerjesztett állapotba hozza.

## **Ionizációs energia, elektronaffinitás**

Azt az energiát, amely ahhoz szükséges, hogy egy semleges atomból egy elektront eltávolítsunk, az elem ionizációs energiájának ( $E_i$ ) nevezzük. Értékét 1 mól anyagra adjuk meg, így mértékegysége kJ/mól.

Az így keletkezett egyszeresen pozitív ionról újabb elektronok is eltávolíthatók, természetesen egyre több munka árán, hiszen ezek az elektronok már egy pozitív atomtörzsről lépnek le. Azaz a második- harmadik ionizációs energia mindig nagyobb, mint az első.

Akárcsak a többi olyan tulajdonság, amely az elektronkonfigurációtól függ, az elemek ionizációs energiái is periódikusan változnak. Legkisebb az alkálifémek ionizációs energiája (4-500 kJ/mól) és minden periódus végén a nemesgázoké a legnagyobb (1500-2500 kJ/mól).

A fordított folyamat, azaz egy elektron felvétele az elektronaffinitással ( $E_A$ ) jellemezhető. Definíció szerint az az energia, amely ahhoz kell, hogy egy egyszeresen negatív ionból semleges atom keletkezzen. Egysége ennek is kJ/mól. A meghatározás alapján azoknak az elemeknek lesz pozitív az elektronaffinitásuk, amelyek könnyen vesznek fel elektront. Ezek elsősorban a halogén elemek, hiszen azok így elérik a nemgázkonfigurációt. A többi elem esetében a negatív ion létrehozásához kell energiát befektetni.

A bevezetett két mennyiség ( $E_i$  és  $E_A$ ) alkalmas arra, hogy segítségükkel jellemezhesük azokat a folyamatokat, amelyek ionos kötés kialakulásával járnak.

Várhatóan a kis ionizációs energiájú fémek és a pozitív, vagy kis negatív elektronaffinitású nemfémes elemek alkothatnak stabil ionos kötésű vegyületet.

A vegyülési hajlam, és a kötéstípus jellemzésére általánosan azonban az elektronegativitás ( $E_N$ ) lesz a legalkalmasabb.

## **Elektronegativitás**

Annak az erőnek a jellemzésére alkalmas, amelyet az atomtörzs fejt ki a kötésben részt vevő elektronokra. Közvetlenül nem mérhető mennyiség, az első, Paulingtól származó skála gyakorlatilag teljesen spekulatív volt, a kötő elektronjához legkevésbé ragaszkodó alkálifém, a K elektronegativitása lett 1, a legnegatívabb F-é pedig 4, a többi elemé a két szélső érték között arányosan.

Később több próbálkozás volt, hogy az  $E_N$ -skálát mérhető mennyiségekből levezessék ( $E_i$ ,  $E_A$ , ionsugár, effektív magtöltés), de jelentős újtonságot ezek sem hoztak. Ugyanakkor széleskörű használhatósága miatt az  $E_N$  az elemek legfontosabb kémiai jellemző mennyisége lett. A periodusos rendszerben soronként az  $E_N$  folyamatosan növekszik, maximumát a

halogéneknél éri el. (Nemesgázoknál nem szokás értelmezni). Oszlopokban pedig felülről lefelé csökken, ahogy általában a fémes jelleg növekszik.

### A kémiai kötés

A különböző elemek, ha megfelelő körülményeket biztosítunk, többé kevésbé stabil, állandó szerkezetű vegyületet, molekulát képezhetnek. Az igen változatos tulajdonságokat mutató vegyületek végülis három kötéstípusra vezethetők vissza.

### Kovalens kötés

Ha a reakciópartnerek mindegyike erősen vonzza a vegyértékelektronjait, a kötés úgy is létrejöhét, hogy egy- kettő-, esetleg három elektronpár közös molekulapályára kerül. Így megvalósulhat a telített héj, a molekulát a két (több) pozitív atomtörzs, és a közöttük nagyobb valószínűséggel előforduló negatív kötő elektronfelhő tartja együtt.

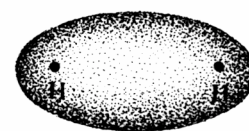
Legegyszerűbb példa a  $H_2$  molekula, amelynek szokásos ábrázolását mutatja a 4. ábra.

A kovalens kötés, ha két azonos atom között jön létre, szimmetrikus töltéeloszlású, un. **homopoláros kötés**.

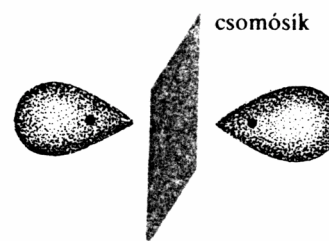
Két különböző atom esetén a nagyobb elektronegativitású jobban vonzza a kötő elektronokat, így azok nagyobb valószínűséggel fordulnak elő annak környezetében, így a molekulának az a fele enyhe negatív töltéstöbbletet mutat, míg a kisebb EN-ú partner oldala kissé pozitív. Ez a **heteropoláros** (vagy egyszerűen **poláros**) kötés. Ilyen pl. a  $H_2O$ ,  $HCl$ ,  $CO_2$  stb. Mindez megmutatkozik majd az anyagok fizikai tulajdonságaiban (pl. olvadáspont) dielektromos viselkedésében, oldhatóságában.

A kötések különbözhetnek abban is, hogy milyen mellékvantumszámú elektronok hozták létre. Az első elektronpár  $s$  vagy  $p$  elektronok között jöhet létre, és mindig tengelyszimmetrikus (ilyen pl a  $H_2$  molekula: jobbra). A második és harmadik kovalens kötés csak **párhuzamos állású  $p$**  elektronok között alakulhat ki, a molekulapálya tükörszimmetrikus lesz.

Az 5. ábra a  $p$  elektronok közötti kötő és lazító pályákat mutatja be. (ha a két partner több elektronnal akarja megvalósítani a kötést, a második elektronpár már nem fér a két mag közé, csak az ún. lazító pályákra.)

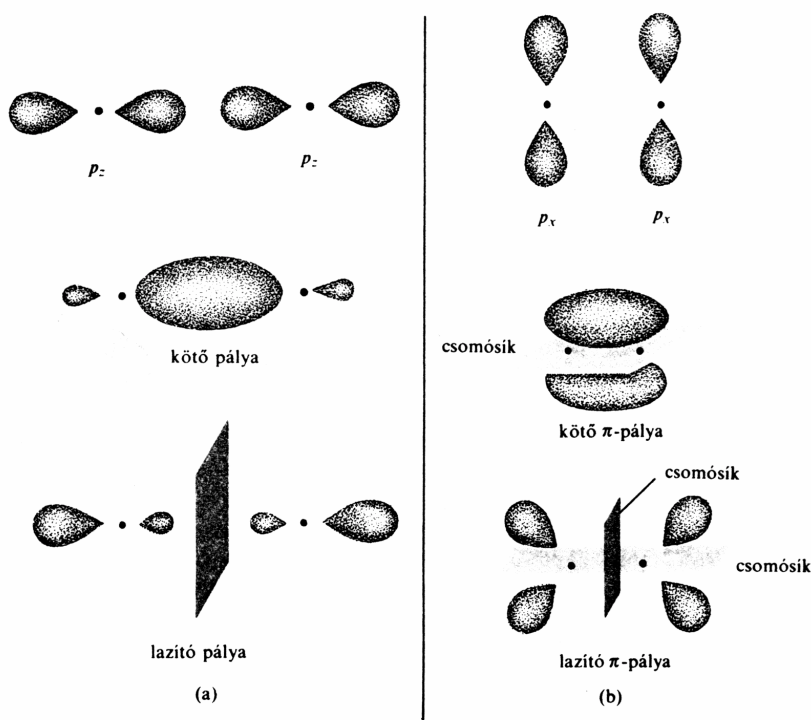


kötő pálya



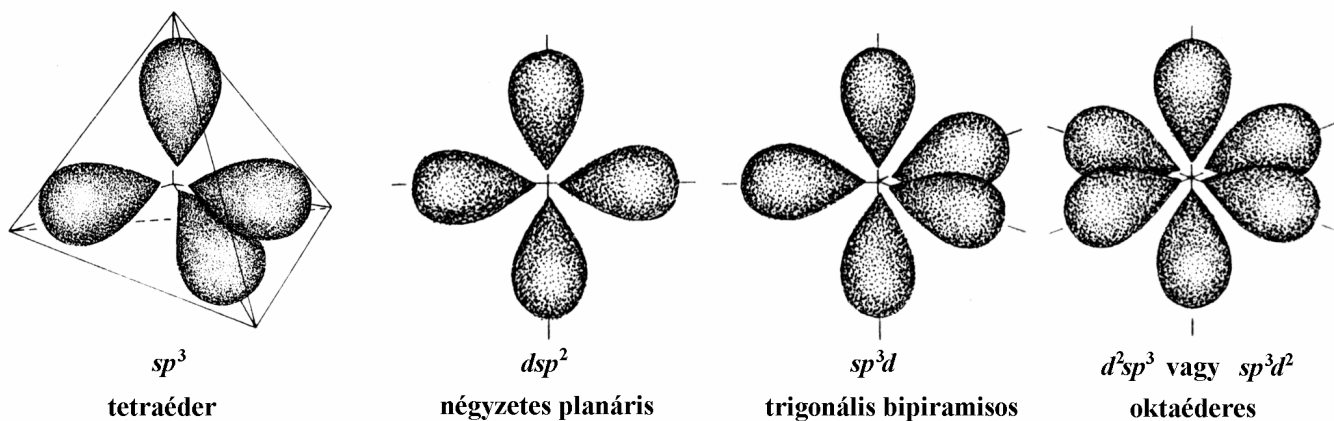
lazító pálya





Egy vegyület tulajdonságait a kötéstípus mellett sok esetben befolyásolja a molekula térbeli elrendeződése, amelyet a kötési szögek döntenek el. A molekulák számára általában kedvező, ha minél szimmetrikusabb szerkezet alakul ki. Ennek elérésére

gyakran a vegyértékelektronok átrendeződésére is szükség van. az  $s$  és  $p$  esetleg  $d$  "alakú" pályák helyett olyan *hibridpályák* alakulnak ki, amelyek egymással a lehető legnagyobb (vegyérték-) szöget zárják be és energetikailag egyenértékűek. Ilyen pl. a metánmolekulában (és minden telített C vegyületben) a C atom  $sp^3$  hibridállapota, amelyben a négy pálya egy tetraéder négy csúcsa irányába mutat, négy  $\sigma$  kötest hoz létre és így a vegyértékszög  $109^\circ 28'$ . Hasonló szerkezetű a vízben az oxigén is, de a tetraédernek itt csak két csúcsán található H, a másik két csúcs irányában egy-egy nem kötő elektronpár. Mivel ez utóbbiaknak nagyobb a helyigénye, a vegyértékszög a vízmolekulában  $105^\circ$ . A 6. ábrán a 4 - 6 elektronból kialakult hibridpályák láthatók.



Igen sok érdekes fizikai, optikai, biológiai hatással jár a  $\pi$  kötések delokalizációja. Ha egy lánc vagy gyűrűs molekulában minden második kötés lenne kettős, a  $\pi$  kötést alkotó elektronok többcentrumú molekulapályára kerülnek. Ennek következtében megnő a molekula stabilitása, megváltozhat a színe, több nagyságrenddel megnőhet elektromos vezetőképessége stb. Főképp szerves vegyületekben lehetséges, legjellegzetesebb képviselője a benzol, de pl. a karbonát vagy nitrát sók is annak köszönhetik sokkal nagyobb stabilitásukat a megfelelő savhoz képest, hogy ionos formában egy illetve két  $\pi$  elektronpár delokalizált pályára kerül, amely a savas formában kötött.

### Ionos kötés

Ionos kötés akkor alakulhat ki, ha az egyik reakciópartner képes leadni, a másik képes felvenni elektront vagy elektronokat a telített héj elérése érdekében. Az így kialakult ionokat egyszerű Coulomb erő tartja össze. A Coulomb erő minden irányban egyenletesen hat, nincs értelme kötési szögről, molekuláról beszélni, a kristály geometriai rendjét a töltésviszonyok és az ionok méretarányai döntenek el.

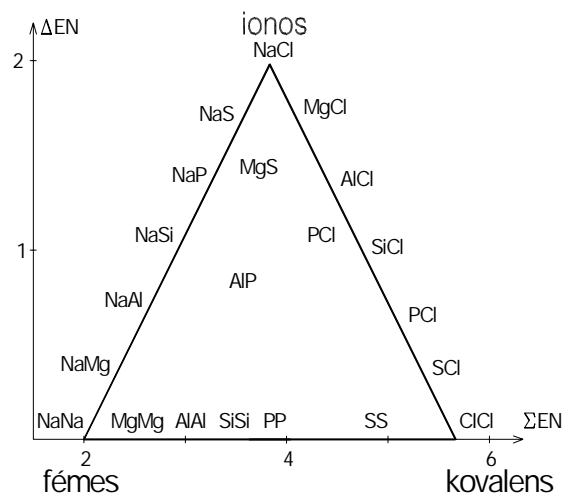
### Fémek kötés

A fémek kis elektronegativitásuk és kevés külső elektronjuk miatt úgy kerülhetnek stabilabb állapotba, ha leadnak elektront. Ha nincs olyan reakciópartnerük, amely ezeket felvonná, a rendszer úgy is alacsonyabb energiaállapotba kerülhet, ha a felszabadult elektronok egy közös, az egész kristályra kiterjedő kollektív pályára kerülnek. Ellentétben a másik két kötéstípussal, ezek az elektronok könnyen elmozdíthatók, innen ered a fémek villamos vezetése.

Az eddig vázolt három tiszta kötéstípus mellett létezhetnek különböző átmeneti jellegű kötések, bármely két alaptípus kombinációjából.

Nagyon jól szemléltethető a három alaptípus és az átmeneti jellegű kötések függése az alkotók elektronegativitásától, ha

a harmadik periodus eleminek lehetséges kapcsolódásait ábrázoljuk az EN-ok összegének és különbségének függvényében.

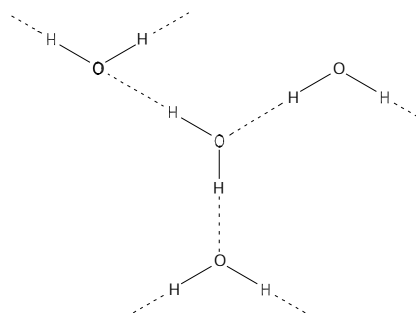


## Másodlagos kötések

Az eddig bemutatott három kötés közös jellemzője a viszonylag nagy kötési energia. (100... 600 kJ/mól) [Def.: **kötési energia: egy kötés szétszakításához szükséges munka**, illetve ennek  $6 \cdot 10^{23}$ -szorososa, így egysége kJ/mól]. Eszerint ezeket elsődleges kötéseknek is nevezzük. A másodlagos kötések főképp molekulák között, de néha molekulákon belül is létezhetnek, sokkal gyengébbek, mint az elsődlegesek, de gyakran ezek szabják meg az anyagok fizikai, biológiai tulajdonságait (pl. polimerek, oldatok, élőlények, természetes anyagok). Két fő típusuk van:

### **H híd:**

A  $H^+$  ion valójában egy proton, mérete jobban hasonlít egy elektronhoz, mint egy atomhoz. Viselkedésében is lehet néha hasonló. Ha két igen nagy EN-ú elem közé kerül (F, Cl, O lehet) és az egyikkel kovalens kötést képez, a másik szabad elektronpárjával olyan erős kölcsönhatásba kerülhet, hogy átlép arra és így az előző helyzet tükörképe alakul ki. Az ide-oda ugrálás helyett egy kötő elektronpárt utánozva egy kötő "protonfelhő" alakul ki, amely mindkét atomhoz tartozik. A kötési energia: 8 és 40 kJ/mol között van. Az ábrán a folytonos vonal a kovalens, a szaggatott a híd kötést mutatja a vízmolekulában.



### **Van der Waals kötések**

Azokat a *molekulák közötti* kötések soroljuk ide, amelyek a molekulán belüli töltésszimmetriából következnek. Viszonylag könnyen elképzelhető két dipól molekula vagy egy dipólus az egy apoláros molekula kölcsönhatása. Előbbit orientációs hatásnak nevezzük, mert a kedvező állapot irányába forgatják egymást, utóbbit indukciós hatásnak, mert a dipólus molekula elektromos megoszlást indukál az apolárosban, így már kialakulhat a vonzás. Csak kvantummechanikai alapon magyarázhatók az un. diszperziós erők, amelyek két apoláros molekulát tartanak együtt. Lényege, hogyha két atom közelít egymáshoz a két atommag és a két elektronfelhő taszítja egymást, míg az egyik mag és a másik elektronfelhő között vonzás lép fel. Ez még kevés lenne az összekapcsolódáshoz, az atomoknak olyan rezgésállapotot kell megvalósítani, amelyben a pozitív és negatív töltések súlypontja nem esik egybe és a vonzóerők eredője valamivel nagyobb, mint a taszítóerőké. Ez a fajta erő tartja össze pl. a nemesgázokat cseppfolyós állapotban, nagyon alacsony hőmérsékleten.