

## Bevezetés

A világot és a világegyetemet rengeteg, több millió anyag építi fel. Vannak köztük elemek, vegyületek, keverékek, oldatok. Az elemekből vegyületek képződnek kémiai reakciók során, a vegyületek (és az elemek is) keverékeket és oldatokat képeznek. Az elemek azonos protonszámú atomok halmazai, melyeket kémiai úton tovább nem bonthatunk, a vegyületek bonyolultabb de azonos felépítésű részecskék összessége, melyek tovább bonthatók kémiai úton. A keverék olyan anyag, mely többféle vegyület és/vagy elem részecskéinek halmaza, melyeket fizikai úton szét tudunk választani egymástól\*. Az oldatok a keverékek speciális fajtái, melyben, egy folyékony oldószerben egy vagy több szilárd anyagot oldunk fel. Az anyagok legalapvetőbb építőkövei tehát az elemek. Az elemek atomokból, molekulákból, vagy épp ionokból állhatnak (fémek). Többségük fémes elem, de a magasabb számú főcsoportokban már a nemfémes elemek vannak többségben. A legtöbb elem szilárd, egy kis részük gáz, és csak egy vagy kettő folyékony van\*\*. A csillagokban, a hidrogén plazmaállapotban fordul elő. A vegyületek, oldatok és keverékek molekulákból, ritkán atomokból állnak. A vegyületek és keverékek 3 halmazállapotban léteznek földi körülmények közt.

\*\*:  
szobahőmérsékleten  
folyékony,  
állapotban, pedig gáz (op.:  
23°C)  
\*: kémiai bontás: például  
hidrolízis, mikor az anyag  
molekuláit atomjaira, vagy  
kisebb molekulákra bontjuk.  
Fizikai bontás: kémiai  
változás nélkül az egymással  
nem kémiai kontaktusban  
lévő részecskéket választjuk  
el egymástól, különböző  
fizikai adataik alapján  
(szűrés, desztilláció)

Ahhoz, hogy az elemekből vegyületeket kapjunk, vagy fordítva, kémiai átalakulásnak kell történnie. Hogy mi is a kémiai átalakulás, már tanulmányaink kezdetén tudjuk. Általános iskolában azt mondjuk, a régi anyagok megszűnnek létezni, és újak keletkeznek. Később azt tanuljuk, hogy a régi kémiai kötések helyébe újak lépnek. A legpontosabb megfogalmazás talán az, hogy a kémiai reakciók többsége során elektron átrendeződés történik. Sokféle kémiai reakció létezik, melyeket többféleképpen csoportosíthatunk. A főbb szempontok szerinti csoportosítások:

- A reakcióban részt vevő anyagok száma szerint (bomlás, egyesülés, addíció...)
- Kémiai jelleg szerint (sav-bázis, redoxi)
- Termodinamikai jelleg szerint (exoterm, endoterm)

Az elemek azért reagálnak egymással, hogy elektroszerkezetük elérje a nemesgázszerkezetet. Ez, az az állapot mikor a legkülső elektronhéjon 8 elektron helyezkedik el. Ebben az állapotban vannak a részecskék a legkisebb energiaszinten. Ez az állapot a nemesgázokról kapta a nevét. A nemesgázok (8. főcsoport) azok a gázok melyeknek már atomos állapotukban is telített a legkülső héjuk, ezért nem reakcióképesek, legalábbis maguktól nem lépnek semmivel reakcióba. Az atomok molekulákat alkotnak, vagy elektron leadása, felvétele után ionokká alakulnak. A molekulák olyan részecskék melyek több atommagot tartalmaznak, és a benne lévő atomtörzseket, kovalens kötések tartják össze. A közös elektronok kilépnek az atompályákról, ún. molekulapályákra. Egyes atomok viszont, úgy reagálnak egymással, hogy külső elektronjaikat leadják, vagy felvesznek még hozzá. Így ugyan meglesz a telített külső héj, de elvesztik semlegességüket, és elektromosan vonzódnak a reakciópartnerhez.

Azonban a folyamat melynek a során a részecskék külső pályája telítődik gyakran nem egyszerű folyamat, sőt néha kifejezetten bonyolult. Pályázatomban a kémiai reakciók lépéseiről, a reakciók feltételeiről, és csoportosításáról fogok írni.

# A kémiai reakciók mechanizmusa

## A kémiai reakciók

A reakció az elemek megmaradása mellett végbemenő valamennyi anyagi átalakuláshoz vezető elemek és/vagy vegyületek egymásra hatásának gyűjtőfogalma. Elkülönítünk kémiai reakciókat, melyben döntően az elektronfelhők mennek át változáson, és elkülönítünk az atommagok változásával járó ún. magreakciókat. Ha nem lennének kémiai reakciók, a világegyetemet csupán, száznál alig több anyag építené fel (elemek). Nem lennének vegyületek se oldatok, nem lennének élőlények, és még sok minden nem létezne. Kijelenthetjük tehát, hogy a kémiai reakciók megléte is fontos feltétele az életnek. Észre sem vesszük, de másodpercenként környezetünkben megszámlálhatatlanul sok reakció megy végbe. Testünk reakciók millióinak ad helyet. Vizsgáljuk meg, hogy eme jelenség miből is áll, hogyan is megy végbe, és mivel jár egy reakció lefolyása.

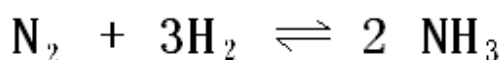
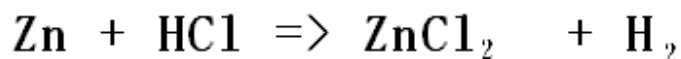


Ahhoz, hogy egy reakció létrejöhön szükségünk van kiindulási anyag(ok)ra. A reakció során a kiindulási anyagok koncentrációja csökken, a végtermékeké nő. A kiindulási anyagokból közvetlenül is keletkezhetnek a végtermékek, de keletkezhetnek ún. átmeneti vagy más néven közbenső termékek, melyek vagy a végtermékké alakulnak, vagy pedig újabb átmeneti termékekké. Ha a végtermék(ek) nem reagál(nak), megfordíthatatlan, egyirányú reakcióról beszélünk. A megfordítható reakciók során a végtermékek egymással reakcióba lépve, a kiindulási anyagokká alakulnak vissza. Ebben az esetben beszélünk megfordítható reakcióról, melyek során a kiindulási, és végtermékek közt egyensúly áll be. Bizonyos feltételek megléte mellett mind a kiindulási, mind a kezdeti anyagokból ugyanannyi van, ekkor beszélünk a dinamikus egyensúly beálltáról.

A kémiai reakciókra igazak bizonyos megmaradási törvények. Ezek közül az első, és talán legalapvetőbb a tömegmegmaradás törvénye, melyet Lavoisier mondott ki először. Ez a törvény kimondja, hogy a kiindulási, és végtermékek össztömege egyenlő. Ez a törvény számunkra evidensnek tűnik, de felfedezése mégis a 18. századig váratott magára, mikor Antoine Lavoisier az égési folyamatok tanulmányozás esetén észrevette, hogy a szilárd testek nem tűnnek el égés után, csupán új, gáz halmazállapotú vegyületekké alakulnak. Fontos a reakciók során a csak részben pontos állandó súlyviszonyok törvénye, mely kimondja, hogy a vegyületekben mindig állandó az elemek aránya. Ebből azt is gondolták, hogy az elemek mikor reagálnak egymással, azt mindig ugyanolyan arányban teszik. Dalton jött rá először, hogy ez nem igaz. A szén és az oxigén például két féle vegyületet is alkothat, a szén-dioxidot, és a szén-monoxidot. Dalton azt is felfedezte, hogy az ily módon különböző mennyiségben vegyülő elemek, bár nem mindig ugyanúgy vegyülnek, de az aránya a különböző mennyiségű elemnek minden esetben egy egész számmal írható le. Így például a már fent említett szén-dioxidot, és a szén-monoxidot alapul véve, láthatjuk hogy az oxigének aránya: 2:1. Ebből alkotta meg Dalton a többszörös súlyviszonyok törvényét. Gay-Lussac a vegyülő gázok térfogati arányával, dolgozott, és megfigyelte, hogy az mindig állandó. Egy térfogat oxigénnel mindig két térfogat hidrogén reagál. A kor egyik legnagyobb tudósa, a fizikával egyaránt foglalkozó Faraday alkotta meg a töltésmegmaradás, és az egyenértékűség törvényét. A töltésmegmaradás lényegében hasonló a tömegmegmaradás törvényéhez. Az egyenértékűség kimondja, hogy elektrolízises reakciók során az átmenő áram erőssége, és az idő arányos a kivált anyag mennyiségével.

## Jelölés

A reakciók folyamatok, melyek ugyanazon anyagok között mindig hasonló módon zajlanak le. Éppen ezért érdemes őket lejegyezni. Ha minden reakció esetében az anyagok nevét íránk le, az sok esetben nagyon hosszú lenne, nem volna praktikus. Emellett ha például egy angol felfedezéshez tartozó egyenletet olvasunk, utána kellene nézni a anyagoknak, egy szótárban. Éppen ezért a reakciók leírására egyenleteket használunk. A kémiai egyenletek a reakciók gyors és praktikus leírás módja, az anyagok nemzetközi képleteivel, vegyjeleivel, és arab számokkal dolgozik. Emellett feltüntetjük a reakciókban az átalakulás irányát is. Ha a reakció



megfordítható, akkor oda-vissza nyilat használunk. Az úgynevezett sztöchiometriai egyenletekben feltüntetjük a reagáló anyagok arányát is.

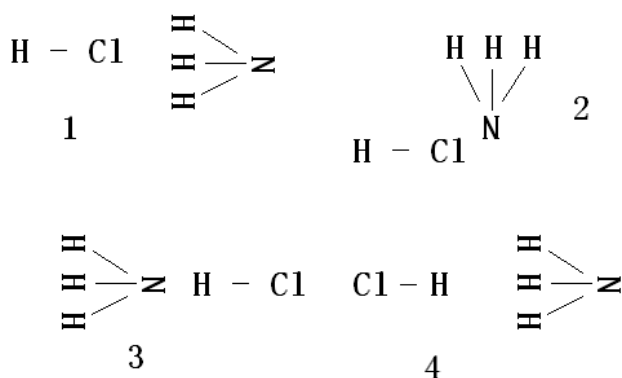
## A reakciók lépései

A kémiai reakciók papíron nem többek, mint az anyagok átalakulása, az elektronok átrendeződése. A valóságban viszont ennél sokkal többről van szó. A reakciók során a konkrét elektronátrendeződés előtt, még több lépésnek be kell következnie. Miután a reakció végbement, bizonyos követő lépések is bekövetkeznek.

Először vizsgáljuk meg részletesebben, hogy mikor az egyenletben leírt változás történik, valójában milyen folyamatok mennek végbe. Mikor az összes feltétel megtörtént, ami szükséges a reakcióhoz, az atomok/ molekulák közti kötések megszűnnek létezni, és új kötések keletkeznek. Tehát a kémiai reakció során a lényegi lépés egy elektron átrendeződés.

Ahhoz, azonban hogy ez az átrendeződés bekövetkezzék, teljesülni kell bizonyos feltételeknek, és be kell következnie több megelőző lépésnek is. Mivel ez a két dolog majdnem egy és ugyanaz, tárgyalhatjuk őket egyben is. Rengeteg ilyen tényező létezik, most a legfontosabbakat fogjuk áttekinteni.

Vegyük példának az ammónia és hidrogén-klorid gáz reakcióját. Egy lombikba tömény ammónia oldatot, egy másikba tömény sósavat rakunk. Egy vízszintes üvegcső két végéhez tartjuk a lombikok száját. Percekkel később fehér füstöt látunk az üvegcsőben. Egyik alapvető



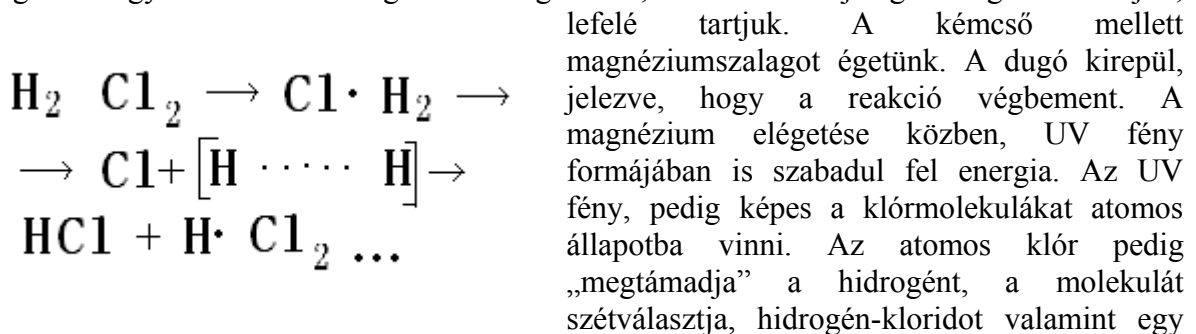
feltétele a reakció bekövetkeztének, hogy a részecskék találkozzanak. Ha részecskék nem találkoznak, nem is ütköznek, és nem is megy végbe reakció. A részecskék közti ütközés szükséges, de nem elégséges feltétele a reakció bekövetkezésének. Nem mindegy, hogy, hogyan ütköznek össze a részecskék. Tekintsük például az ammónia és hidrogén-klorid gáz reakcióját. A képen feltüntetett ütközések közül, csak a 3. lesz eredményre vezető. Tehát a

részecskék ütközéséből nem mindig születik eredmény. Ahhoz hogy a részecskék közeledni tudjanak, fontos a megfelelő halmazállapot is. Például a szén-dioxid viszonylag jól oldódik

vízben, a reakció eredménye szén-sav lesz. Viszont a jég és a szárazjég nem fognak egymással reagálni, olyan tökéletesen, mint a víz és a szén-dioxid gáz.

A reakciók végbemenetele során fontos a megfelelő halmazállapot is. Két gáz például sokkal gyorsabban reagál egymással, mint egy szilárd anyag egy folyadékkal. Vegyük például, a hidrogén és klór reakcióját. A két anyag egy pillanat alatt reagál egymással. Ehhez képest ugyanolyan anyagmennyiségű cinkből és sósavból sokkal hosszabb idő alatt lesz teljesen cink-klorid. Az egynemű közegben végbemenő reakciókat homogénnek, a két különböző fázis határán végbemenő reakciókat pedig heterogén reakciónak nevezzük.

Az, hogy a reagáló partnerek megfelelő halmazállapotban, megfelelő közegben, találkozzanak, mind feltétele, hogy végbemenjen a kívánt reakció, de sok anyag közösleges körülmények közt még így sem hajlandó reakcióba lépni. A reakciók a kötések felszakadásával járnak. Ennek mindenképp be kell következnie, hogy az új kötések kialakulhassanak. A kötések felszakadásához energia szükséges. Azt az állapotot melybe a reakciópartnerek energiaközlés, és ez által a kötések felszakadása után kerülnek, aktivált állapotnak hívjuk. Az ehhez szükséges energiát, pedig aktiválási energiának hívjuk. Az aktiválási energia nagysága anyagspecifikus, van, hogy már szobahőmérsékleten beindul a reakció, van, hogy több ezer fok kell hozzá. Fontos kérdés viszont, hogy szükséges-e minden reakciópartnert aktiválni. Lehet hogy a két reagáló anyag közül, az egyiknek nagyon kevés, a másiknak viszont óriási energia kell az aktiválásához. Erre példa, a hidrogén és klór reakciója. Ugyan egyik anyagnak sincs elérhetetlenül magas aktiválási energia igénye, példának megfelelő. Egy kémcsőbe hidrogén és klórgáz van, a kémcső száját gumidugóval elzárjuk,



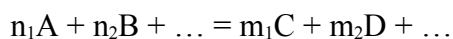
hidrogénatomot képez. A hidrogénatom megtámad egy klóratomot, és így tovább. Ezt a reakciótípust láncreakciónak nevezzük. Miután az anyagok elreagáltak, kialakulnak a kötések energia szabadul fel, majd oszlik el.

## Kémiai egyensúly

Egy kémiai reakció lefolyása homogén fázisban sohasem teljes, mindig marad egy kevés a reakciópartnerekből, vagy épp a termékből keletkezik csak kis mennyiség. Ez a folyamat egyensúlyra vezet, amely azt jelenti, hogy az oda és visszaalakulás sebessége idővel ugyanakkora lesz. A kémiai egyensúlyt minden hőmérsékleten és nyomáson a reakcióban részt vevő anyagok mennyisége jellemzi, tehát a kémiai egyensúly állapotjelzők függvénye.

Fontos megjegyezni, hogy a kémiai egyensúly nem statikus, hanem dinamikus. Ez azt jelenti, hogy az egyensúly beállta után a reakciók nem állnak le, hanem ugyanakkora sebességgel folyik az oda- és visszaalakulás.

Egy egyensúlyi reakció a következőképpen írható fel:



Tehát a sebességek a következőképpen írhatók fel:

$$v = k_1 c_A c_B \quad \text{és} \quad v' = k_2 c_C c_D$$

mivel, az oda és visszaalakulás sebesség egyenlő ezért:

$$v = v' \quad \text{tehát} \quad k_1 c_A c_B = k_2 c_C c_D$$

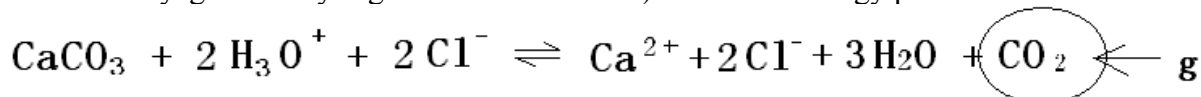
$k_1$  és  $k_2$  állandók, ezért arányukat felírhatjuk  $K_c$ -vel jelölve:

$$K_c = \frac{c_C c_D}{c_A c_B}$$

A  $K_c$  az az állandó, mely minden reakcióra jellemző.

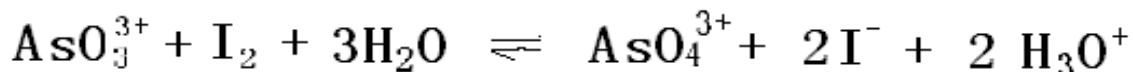
Ez a tömeghatás törvénye, melyet 1867-ben először mondtak ki Guldberg és Waage norvég kutatók. A  $K_c$  jelölést a mólkoncentrációval kifejezett egyensúlyi törtre használjuk, azonban ha a reakció a mólszám megváltozásával jár, megkülönböztetünk móltörttekkel kifejezett  $K_x$ , és nyomásokkal kifejezett  $K_p$  egyensúlyi állandókat is.

A sztöchiometriai egyenlet, és a reakció állandójának ismeretében az adott egyensúlyi reakciót a kívánt irányba tudjuk eltolni. Ha például, csökkentjük a keletkező anyag mennyiségét, vagy a magától másik fázisba lép, akkor a reakciót a keletkezés irányába tolhatjuk el. (Természetesen a reakció, keletkezés irányába való eltolása lehetséges a kiindulási anyagok mennyiségének növelésével is.) Nézzünk erre egy példát:



Mivel a keletkező szén-dioxid gáz formájában távozik a rendszerből, ezért a mészkő teljesen feloldódik, hisz a szén-dioxid nem oldódik vízben, a mennyisége folyamatosan csökken a rendszerben. Azonban ha például a cink-sósav reakciónál, ahol ugyanez játszódik le, nagy nyomású hidrogént vezetnénk a rendszerbe, fém cink kiválást tapasztalhatnánk.

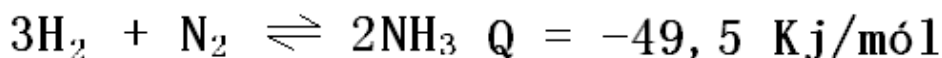
Egy másik példa a koncentráció megváltoztatásával történő egyensúly eltolásra az arzenionok reakciója jódos vízzel.



Ha a reakció gyengén lúgos közegben játszódik, a reakció a felső nyíl irányba tolódik el, mivel a hidroxidionok a keletkező oxóniumionokkal vizet alkotnak, így a jobb oldali  $[\text{H}_3\text{O}^+]$  csökken. Pont fordított a helyzet gyengén savas közegben. Ott a túlzott oxóniumion koncentráció miatt az egyensúly a baloldal irányába tolódik el.

A gázfázisban játszódó reakciókra érvényes a „legkisebb kényszer elve” (Le-Chatelier Braun elv 1897). Ez azt mondja ki, hogy a rendszer bármilyen zavaró hatással ellentétesen, a kényszer elkerülése érdekében reagál.

Vegyük példának az ammóniaszintézis reakcióját. Minden reakcióban egy bizonyos hőmérsékleten és nyomáson beáll egy dinamikus egyensúly, mikor az oda és visszaalakulás sebessége azonos, a mennyiségek pedig a sztöchiometriai egyenletben feltüntetett mennyiséggel egyeznek meg. Ez az ammóniaszintézisnél 500 Celsius fok körül áll be. Ha ehhez képest változtatjuk a nyomást és a hőmérsékletet a rendszer a változtatás ellenfogatni.



Így például a nyomás növelése a képződés irányába tolja el a reakciót, a csökkentése a visszaalakuláséba. A hőmérsékletemelés a képződés, a csökkentés a visszaalakulás irányába mozgatja az egyensúlyt.

## Reakciók fajtái, tulajdonságai

A reakciókat sok szempont alapján lehet csoportosítani. A részt vevő anyagok száma, az energiaváltozás, a kémiai jelleg, a sebesség és még sok más tulajdonság lehet ilyen szempont. Egy reakcióról ezért számtalan dolgot tudunk elmondani, ezen szempontok alapján; emellett rengetegféleképpen tudjuk egy reakció típusát meghatározni. Ráadásul ezen szempontok közül van amelyre hatással vannak a külső körülmények, például a sebesség a hőmérséklet emelésével növelhető, vagy egy amúgy pillanatok alatt lejátszódó sav-bázis reakció időtartamát, két hétre is növelhetjük. A következőkben a reakciók osztályzásáról, fajtáiról, és tulajdonságairól lesz szó.

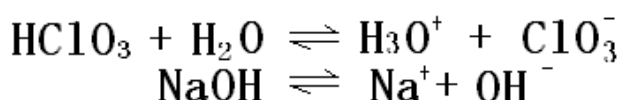
### **Kémiai jelleg szerinti csoportosítás**

A reakciókat kémiai jelleg szerint két nagyobb csoportra oszthatjuk, sav-bázis reakciókra, és redoxi reakciókra.

#### **-Sav-bázis reakciók.**

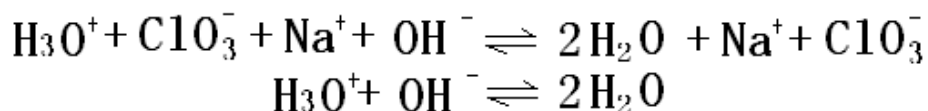
A 19. század óta a sók, savak, bázisok jelentik a legalapvetőbb szervesetlen vegyületeket. Arra, hogy mi a bázis és mi a sav már sok megfogalmazás, elmélet született, csakúgy, mint a köztük lejátszódó folyamatok körülményeinek leírására.

Az Arrhenius féle elektrolitos disszociációs elmélet, mely kísérletet tesz a savak és bázisok közti vizes oldatban történő reakciók leírására még ma is jók értelmezhető. Az elmélet szerint, a savak vizes oldatainak kationja az oxóniumion, a bázisok vizes oldatának anionja, pedig a

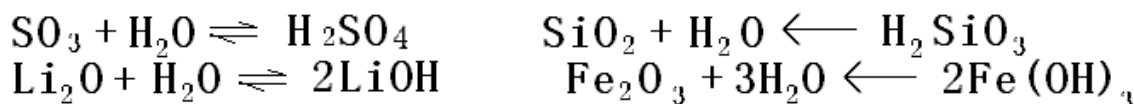


hidroxidion. A savak és bázisok egymással való reakciója a közömbösítés, melynek lényege, hogy a hidroxid és oxóniumionok vizet alkotnak, mely oldószerként funkcionál. A savból visszamaradó anionok, és a bázisból

visszamaradó kationok, pedig hidratált állapotban, az oldatban maradnak, vagy ha nem oldhatók, (vagy az oldat túltelített) kiválnak belőle. Ezt, a maradékokból összeálló vegyületet sónak nevezzük. Egy közömbösítési reakció tehát az Arrhenius féle elmélet szerint a következő:

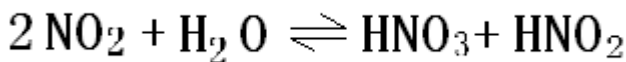


Az ezen értelemben vett savak nagy többsége nemfémes elemek oxidjaiból (savanhidridek), a bázisok többsége pedig, fémes elemek oxidjaiból (bázisanhidridek) állítható elő, úgy, hogy azokat egy megfordítható reakcióban vízzel reagáltatjuk. Beszélhetünk valódi savanhidridekről, és formális savanhidridekről, valamint valódi bázisanhidridekről, és formális bázisanhidridekről. A formális savanhidridek olyan nemfém-oxidok, melyek nem oldódnak vízben, ugyanígy a formális bázisanhidridek olyan fém-oxidok, melyek vízben oldhatatlanok. Így a reakcióegyenlet inkább a sztöchiometriai arányokra utal, és csak visszafelé játszódik le



Ezen reakciókban a központi atomok (S, Li, Fe, Si) oxidációfoka nem változik. A nemfém-oxidok között viszont előfordul olyan vegyület, melyben a központi atom oxidációfokának megfelelő sav nincs. Ilyen például a nitrogén-dioxid, melyben a nitrogén oxidációfoka +4, de ilyen oxidációs állapotú nitrogént tartalmazó sav nincs. Ilyenkor, ha az oxid reagál vízzel a központi atom diszproporciálódik. Azaz

a nitrogén-dioxid a vízzel kétféle savat ad. Az ilyen oxidok a kettős savanhidridek. Léteznek olyan formális



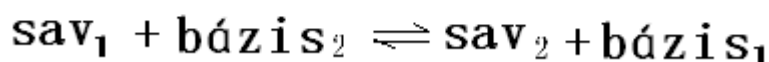
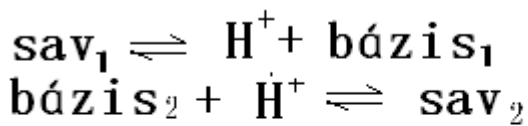
vegyes savanhidridek, melyek nem reagálnak vízzel ( $\text{ClO}_2$ ), viszont egy annál erősebb bázissal már igen. Vannak olyan savak, amelyeknek nincs savanhidridjük, mivel a savmaradékion nem tartalmaz oxigént (HCl). Emiatt, célszerű megkülönböztetni oxosavakat, és nem oxosavakat. Nem oxosavak pl. a HCl, HBr,  $\text{H}[\text{AuCl}_4]$   $\text{H}[\text{Fe}(\text{CN})_6]$ , oxosavak a kénsav, szénsav, foszforsav... A savak minden esetben tartalmaznak kémiai képletükben egy vagy több hidrogént, de nem biztos, hogy azt hajlandók mind leadni. A foszfinsav például vízben a következőképpen disszociálódik:



Ez azt is jelenti, hogy a foszfinsav „szabályos” sóiban  $\text{PH}_2\text{O}_2^-$  anionok vannak. A két vagy több bázisú savak lépcsőzetesen disszociálnak, ez azt jelenti, hogy létrehozható úgynevezett savanyú sók, melyekben még van más kationnal helyettesíthető hidrogén.

Az Arrhenius féle sav-bázis elmélet csupán vizes oldatokban lejátszódó reakciókra lehet értelmezni, ott, ahol a reakciópartnerek vizes oldataiban oxóniumionok, vagy hidroxidionok vannak. Brønsted és Lowry olyan sav-bázis elméletet dolgozott ki, amely sokkal általánosabban alkalmazható az oldatokban lejátszódó sav-bázis reakcióra. Az oldószerrel szemben csupán egy kikötés van, az, hogy képes legyen protont leadni, vagy felvenni. A definíció szerint azok az anyagok, melyek képesek protont felvenni a bázisok, a protonleadásra hajlamos anyagok a savak.

Ugyanazon protolitikus egyensúlyhoz tartozó savat és bázist korrespondáló sav-bázis párnak nevezzük. Számos vegyület (víz, ammónia) és részecske (hidrogénkarbonátion) lehet egyszerre sav és bázis. Az ilyen anyagokat amfoternek nevezzük. A proton önállóan nem létezik az oldatban, ezért a folyamat csak akkor jön létre, ha két különböző korrespondáló sav-bázis pár jelen van. Az oldott anyag attól függően lesz sav vagy bázis, hogy hogyan reagál az oldószerrel. Ha az oldószer



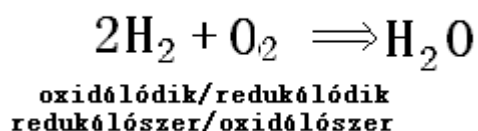
protont ad le neki, az oldott anyag bázis, ellenkező esetben pedig sav. Ezek szerint egy anyag bázikus vagy savas jellege nem sajátosság, hanem a reakcióban betöltött szereptől, és a reakciópartnertől függ. Erre példák az amfoter anyagok, vagy például az is, hogy a salétromsav vízzel szemben erős savként, kénsavval szemben bázisként viselkedik.

Ennél is kiterjedtebb elmélet a Lewis-féle sav-bázis elmélet, melyet már a komplexképződésre is értelmezni lehet. Az elmélet értelmében minden molekulát, iont bázisnak tekintünk mely elektronpár-donor lehet, az elektronpár-akceptorokat pedig savnak vesszük. Az elmélet már nemcsak a protolitikus oldószerekben végbemenő reakciókra értelmezhető, hanem a gázfázisban, a nem protolitikus oldószerben, a szilárd fázisban, és az olvadékban végbemenő reakciókra is érvényes.

### **-redoxi-folyamatok**

Régebben az oxidációt az elemi oxigén, a redukciót az elemi hidrogén hatására végbemenő reakciónak tartották. A redukció, és oxidáció fogalmi köre azóta már jelentősen kibővült. Redukciónak tartunk minden olyan reakciót, melyben az adott elem oxidációfoka csökken, oxidációnak tekintjük azokat a folyamatokat, melyekben az elem oxidációs száma nő. Úgyis definiálhatjuk, hogy a redukálódó anyag elektront vesz fel, az oxidálódó anyag elektront ad le. Azt hogy egy adott anyag atomja mennyire hajlamos elektronfelvételre vagy leadásra jól mérhető standard-potenciállal tudjuk kifejezni.

Az oxidáció és a redukció soha nem megy végbe egyedül, ha redukció van, kell, hogy történjen oxidáció, ez fordítva is így van. Ilyenkor a redukáló anyag oxidál, tehát ő az oxidálószer, az oxidálódó anyag redukál, tehát ő a redukálószer.



## **Termodinamikai jelleg szerinti csoportosítás**

Az energia fogalmát sokféleképpen lehet definiálni. A fizikában például egy testnek a belső energiája, a potenciális, és kinetikus energiájának összege. Mikor egy reakció végbemegy, az mindig jár valamilyen energiaváltozással, hőleadással, vagy hőfelvétellel. Ennek alapján megkülönböztethetünk exoterm (hőtermelő) és endoterm (hőleadó) folyamatokat. Előfordulhat, hogy a folyamat hőmérséklet-változás nélkül jár hőenergia eltűnésével, vagy felszabadulásával. Ebben az esetben látens hőről beszélünk.

Tekintsünk pár fontosabb hőmennyiséget:

-oldáshő: Az 1 mól anyag oldása közben felszabaduló, illetve eltűnő energiát értjük. Az oldáshő endoterm oldás esetén pozitív, exoterm oldás esetén pedig negatív jelölést kap megegyezés szerint. (Ez minden hőre igaz). Az oldáshő abszolút értéke számértékileg megegyezik a rácsenergia (1 mól anyag rácsba rendezésénél felszabaduló energia), és a hidratációs energia (1 mól anyag hidratálásakor felszabaduló energia) abszolút értékeinek különbségével. Mértékegysége: KJ/mól

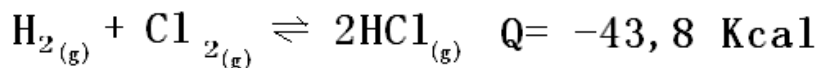
-A halmazállapot-változásoknál felszabaduló energiamennyiségek például a párolgáshő, a fagyáshő, az olvadáshő.... Ezeket KJ/kilogrammban mérjük.

-Égési hő: egy mól anyag elégetésekor felszabaduló hőmennyiség. Mértékegysége: KJ/mól, gyakorlatban KJ/Kg, vagy KJ/köbméter.

-Képződéshő. A kémiai reakciók szempontjából az egyik legfontosabb hőmennyiség. A definíció szerint az anyag képződéshője megegyezik azzal a hőmennyiséggel mely akkor szabadul fel, vagy tűnik el, ha az anyag az elemeiből képződik. Az elemek képződéshője



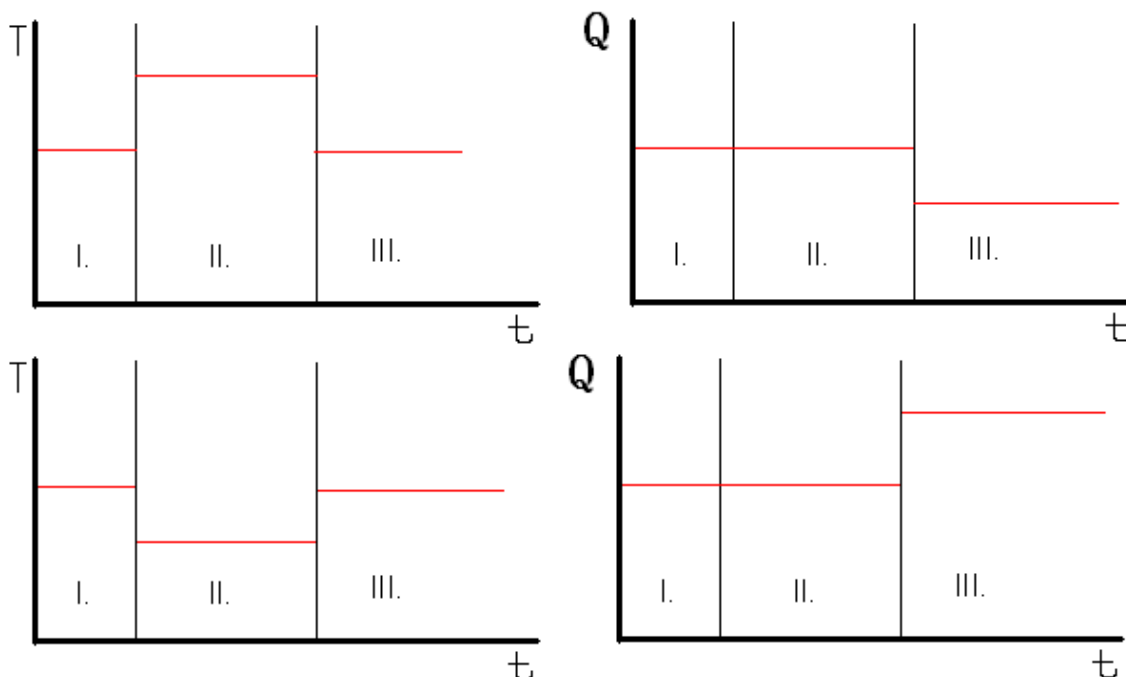
megállapodás szerint nulla. A sztöchiometriai egyenletből úgy képezhetünk termokémiai egyenletet, hogy feltüntetjük az anyagok halmazállapotát, valamint feltüntetjük a képződéshőket. Ha a jobb és bal oldalak képződéshőjét összeadjuk, megkapjuk az ún. reakcióhőt. Ha a reakcióhő negatív, a folyamat exoterm, pozitív reakcióhő esetén a folyamat endoterm.



Egy anyagot többféleképpen is elő lehet állítani. Ezeket a

folyamatokat mind-mind leírhatjuk termokémiai egyenletekkel. Szénből és oxigénből például szén-monoxidot lehet közvetlen előállítani, vagy pedig széndioxidon keresztül. Ha összegeznénk a reakcióhőket azonos anyagmennyiségek mellett, az jönne ki, hogy a két összeg egyenlő. Tehát a kémiai folyamatok reakcióhője csak a kezdeti és végállapottól függ. Hess ezt a tételt már az energia-megmaradás elvének ismerete előtt kimondta. Ennek következménye az, hogy a reakciók, mint algebrai egyenletek összeadhatók, kivonhatók egymásból. A Hess-tétel egyenértékű a termodinamika első főtételével, és nagy szerepe van a valóságban nem lejátszódó reakciók reakcióhőjének kiszámolásában.

Vizsgáljunk meg egy exoterm és egy endoterm reakciót a hőmérséklet, és energiaváltozás szempontjából. Az alábbi ábrák szemléltetik egy olyan rendszer energia és hőmérséklet változását, melyben endoterm, és egy olyanét, melyben exoterm változás ment végbe:



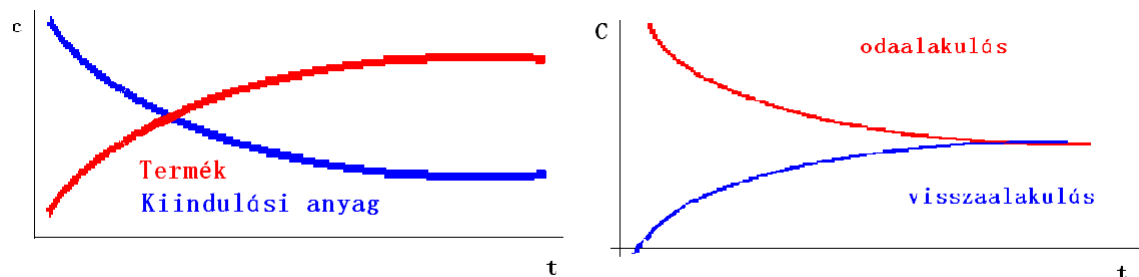
1. ábra; 2. ábra  
3. ábra; 4. ábra

I. szakasz: kiindulás anyagok állapota; II. szakasz: a rendszer energiája/hőmérséklete a reakció után; III szakasz: a rendszer energiája/ hőmérséklete miután az reagálva környezetével újra azzal azonos hőmérsékleten van.

1. ábra: exoterm reakció közben a rendszer hőmérsékletváltozása; 2. ábra: exoterm reakció közben a rendszer (izolált) energiaváltozása; 3. ábra: endoterm reakció közben a rendszer hőmérsékletváltozása; 4. ábra: endoterm reakció közben a rendszer (izolált) energiaváltozása.

## Reakciók sebessége, rendűsége

Zárásul ejtsünk szót a kémiai reakciók sebességéről, időigényéről is. Reakciósebesség alatt a reakcióban résztvevő anyagok koncentrációjának növekedését, illetve csökkenését értjük időegység alatt. Jelölve:  $dc/dt = v$ . A reakciósebesség értékét tekintve pozitívnak tekintjük reakciótermék koncentrációjának növekedését, és negatívnak a kiindulási anyag koncentrációjának csökkenését. Egy adott reakció során ezt a képletet elég csak az egyik anyagra alkalmazni, mivel a többi anyagra vonatkoztatott sebességet már ki tudjuk számolni a sztöchiometriai egyenlet segítségével is. Ahhoz hogy pontosabb képet kapjunk a reakciósebességről ismernünk, kell a reakció mechanizmusát. A reakciósebesség annál nagyobb, minél nagyobb az átalakulás mértéke. Az átalakulás mértéke a részecskék ütközésének számától függ. A részecskék ütközésének száma pedig arányos a koncentrációval, hisz több részecske több ütközést jelent. A reakciósebesség növeléséhez nem feltétlen kell mindkét anyag koncentrációját növelni. A reakció során az ütközések száma csökken, a koncentrációcsökkenés miatt. Azonban a két mennyiség aránya nem lineáris. Az alábbi ábrán a kiindulási, és keletkezett anyagok koncentrációja látható, egy egyirányú reakcióban. A második ábrán egy egyensúlyi reakcióba az oda s vissza-alakulás sebességének alakulása van feltüntetve.

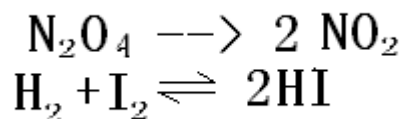


Tehát egy reakció sebességét befolyásoló tényező azonos körülmények között az, hogy a reagáló anyagokból mennyi van, egy térfogat egységen belül. Ezek szerint az A és B molekulák közt lejátszódó reakció sebessége arányos az A és B koncentrációjával. A reakció sebessége tehát felírható a következő alakban is:

$$Dc/dt = k \cdot c_A \cdot c_B$$

A  $k$  tényezőt nevezzük a reakció sebességi állandójának, melyet minden reakcióra külön kell megállapítani. A reakció rendűségén lényegében azt értjük, hogy hány anyag koncentrációja határozza meg a reakció sebességét. Elsőrendű reakció minden bomlási reakció, például a dinitrogén-tetroxid bomlása nitrogén-dioxidra. Másodrendű reakció az egyesülés, például a hidrogén és jód reakciója.

Reakciósebességet befolyásoló tényezők még a hőmérséklet, a halmazállapotok (homogén/heterogén reakció), az hogy milyen gyakran tudnak ütközni a részecskék....



Források:

- Észbontó előadás sorozat (ELTE)
- Erdey-Grúz Tibor: A fizikai kémia alapjai
- Bodor Endre: Szervetlen kémia I
- Náray-Szabó István: Kémia
- Römp: Kémiai kislexikon
- korábbi tanulmányaim