

5. A kémiai reakciók típusai, sztöchiometria

Kémiai reakciók – egyéb folyamatok

nem kémiai reakciók: papír összegyűrése, alumínium lemez szétvágása, víz elpárolgása, cukor oldódása

kémiai reakciók: a papír elégetése, az alumínium lemez oldása savban, a víz bontása hidrogénre és oxigénre, a cukor karamellizálása

Hogyan definiáljuk? Egy **kémiai reakció** során kémiai kötések szakadnak fel és esetleg új kémiai kötések jönnek létre.

A kémiai reakcióegyenletek

A kémiai reakciókat reakcióegyenlettel írjuk le.

a reakcióegyelet: az egymással maradék nélkül reagáló anyagok mennyiségi arányát fejezi ki (sztöchiometriai egyenlet)

pl. $2\text{Ca} + \text{O}_2 = 2\text{CaO}$

mennyiségi és minőségi információ:

reaktánsok – termékek: a reaktánsok az egyenlet bal, a termékek a jobb oldalán szerepelnek

szstöchiometriai szám: a reakcióegyenletben az egyes anyagok képlete előtt álló szám

molekulaegyenlet – ionegyenlet: ahol ionok szerepelnek azt ionegyenletnek nevezzük

az egyenlőségjel jelentése: az egyes atomok számának összege a két oldalon meg kell egyezzen (az elemek kémiai reakciókban nem alakíthatók át, anyagmegmaradás)

Ha nem ez a helyzet **rendezni kell** az egyenletet:

$\text{H}_2 + \text{O}_2 = \text{H}_2\text{O}$ minőségileg helyes az egyenlet, de mennyiségileg nem az, mert a bal oldalon 2 O-atom van, jobb oldalon 1 →

$\text{H}_2 + \text{O}_2 = 2\text{H}_2\text{O}$, most a H atomok száma nem stimmel (2, 4) →

$2\text{H}_2 + \text{O}_2 = 2\text{H}_2\text{O}$

Részletesen lásd később.

A kémiai reakciók csoportosítása:

sokféleképpen lehet, mi csak a fő szempontok szerinti csoportosítással ismerkedünk meg

a tapasztalt változás szerint:

- gázfejlődéssel járó reakciók
- színváltozással járó reakciók
- csapadékképződéssel járó reakciók
- komplexképződéssel járó reakciók

a reaktánsok és termékek száma szerint

- egyesülés: több anyagból egy anyag keletkezik
 - addíció: olyan egyesülés, amikor főleg az egyik reaktáns érdekel minket
 - dimerizáció: két azonos molekula egyesülése
 - trimerizáció: három azonos molekula egyesülése
 - polimerizáció: sok azonos molekula egyesülése
- bomlás: egy anyagból több anyag keletkezik
 - elimináció: olyan bomlás, amikor főleg az egyik reaktáns érdekel minket
 - disszociáció: olyan bomlás, ami megfordítható
- izomerizáció: a vegyület átalakulása más szerkezetű vagy térbeli elrendeződésű anyaggá (izomerré)
- helyettesítés (szubsztitúció): az egyik reaktáns egy atomjának vagy atomcsoportjának a helyére egy új atom(csoport) lép be
 - kettős helyettesítés (cserebomlás): a reagáló partnerek kicserélik egymással atomjaikat, atomcsoportjaikat
 - semlegesítés: speciális cserebomlás, savak és bázisok sőt képeznek

Speciális eset:

- szolvólízis: reakció az oldószerrel
- hidrolízis: reakció vízzel, mint oldószerrel

a részecskeátmenet minősége szerint

- protonátmenettel járó reakciók (sav-bázis reakciók)
- elektronátmenettel járó reakciók (redoxi reakciók)
- egyéb transzferens reakciók (pl. ligandum)

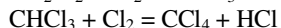
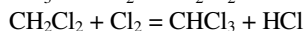
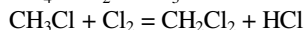
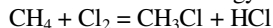
egyensúlyi – nem egyensúlyi reakciók

teljesen végbemenő reakciók esetén legalább az egyik reaktáns elfogy, pl. $\text{C} + \text{O}_2 = \text{CO}_2$

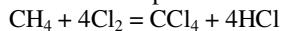
egyensúlyra vezető reakciók – soha nem mennek teljesen végbe, mindig marad a reaktánsokból, pl. $N_2 + H_2 = NH_3$

A több reakcióból álló rendszerek legegyszerűbb esetei:

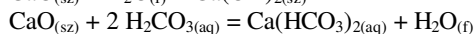
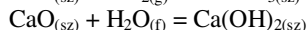
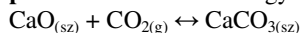
sorozatos reakciók: egymás után játszódnak le



A sorozatos lépések összeadhatók, így kaphatjuk meg a bruttó reakció egyenletét:



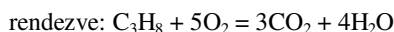
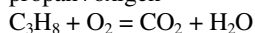
párhuzamos reakciók: egyszerre, egymással párhuzamosan játszódnak le



Ennek lépései NEM adhatók össze.

A reakcióegyenlet egyik fontos felhasználása: a sztöchiometriai számítások

propán+oxigén



mit jelent ez? Néhány példa:

- propán oxigénnel reagálva szén-dioxidot és vizet ad
- 1 mol propán 5 mol oxigénnel reagál
- 1 mol propánból 3 mol szén-dioxid és 4 mol víz keletkezik
- 5 mol oxigénből 3 mol szén-dioxid és 4 mol víz keletkezik
- 1 mol szén-dioxid 1/3 mol propánból és 5/3 mol oxigénből keletkezik
- 1 mol víz 1/4 mol propánból és 5/4 mol oxigénből keletkezik

A reakció során 6 mol szén-dioxid képződik. Ehhez hány mól oxigén kell? 10 mol

3 mol oxigénből hány mól víz képződik a reakció során? 12/5 mol

Anyagmennyiséggel egyszerű, mert az egyenletből az arányok közvetlenül leolvashatók. Tömegekkel kicsit nehezebb:

32g oxigén reagál a fenti egyenlet szerint. Hány g széndioxid, illetve víz képződik?

$$32g O_2 \text{ 1 mol (} 32g / 32g/mol = 1 \text{ mol)}$$

1 mol O_2 -ből 3/5 mol CO_2 illetve 4/5 mol H_2O keletkezik

$$m(CO_2) = n(CO_2) * M(CO_2) = 3/5 \text{ mol} * 44 \text{ g/mol} = \mathbf{26,4 \text{ g}}$$

$$m(H_2O) = n(H_2O) * M(H_2O) = 4/5 \text{ mol} * 18 \text{ g/mol} = \mathbf{14,4 \text{ g}}$$

Hány g vas reagál 10,00g kénporral, és hány g vas(II)-szulfid keletkezik?

reakcióegyenlet felírása: $Fe + S = FeS$

$$n_S = 10 \text{ g} / 32,06 \text{ (g/mol)} = 0,3119 \text{ mol}$$

$$m_{Fe} = 0,3119 \text{ mol} * 55,85 \text{ (g/mol)} = 17,42 \text{ g}$$

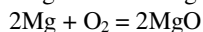
$$m_{FeS} = 0,3119 \text{ mol} * 87,91 \text{ (g/mol)} = 27,42 \text{ g}$$

Amikor a reaktánsok olyan arányban vannak, hogy a reakcióegyenlet szerint teljesen elfogyhatnak a reakció során, akkor **SZTÖCHIOMETRIKUS ÖSSZETÉTEL**ről beszélünk.

Gyakran nem ez a helyzet, ekkor valamelyik reaktáns **FELESLEG**ben van. Ebben az esetben a reakció teljes lejátszódása után is marad valamelyik reaktánsból valamennyi (ez a reaktáns volt feleslegben).

A redoxi reakciók

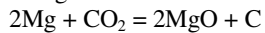
Magnézium szalag égethető levegőben:



régen: oxidáció = oxigénfelvétel, redukció = oxigénleadás

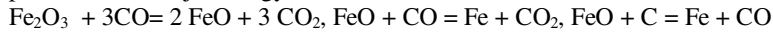
Azaz a magnézium oxidálódott.

De égethető szén-dioxidban is:



Az oxidáció nagyon elterjed folyamat a természetben (fa, szén égése, vas rozsdásodása, vaj avasodása) redukció is van! szén keletkezése, fotoszintézis, fémek gyártása

pl. a vas redukciója a vasgyártás során



általánosítsunk: a Mg-ból Mg^{2+} lett, azaz elektront adott le, a Fe^{3+} -ből Fe lett, azaz elektront vett fel, tehát oxidáció = elektronleadás, redukció = elektronfelvétel
azaz a redoxireakciók elektronátmenettel járó reakciók

Redox reakciók összefoglalás:

Az oxidálószer

- Oxidál
- Elektront nyer
- Redukálódik

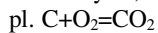
A redukálószer

- Redukál
- Elektront veszít
- Oxidálódik

oxidálódott vagy redukálódott az adott elem? Mennyire?

Ennek eldöntése ionok képződésekor egyszerű (az elektron teljesen átadódott).

Mi a helyzet, ha nem képződnek ionok, azaz az elektron a reakció során nem adódik át teljesen?



Az oxidáció foka: az oxidációs szám

nem a reális töltést tükrözi, csak segít az oxidáció/redukció megállapításában

Gondolatban rendeljük a kötő elektronokat ahhoz az atomhoz, amelyikhez inkább tartozik (ha egyformán tartozik két atomhoz, akkor osszuk meg őket): ez az **oxidációs szám**

az oxidációs számot az előjel után írt arab számmal jelöljük (pl. +2) (nem keverendő össze az ionok töltésének jelölésével, amely fordított, pl. 2+)

oxidáció során egy atom oxidációs száma nő, redukció során csökken

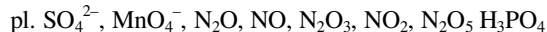
hogyan állapítsuk meg egy elem oxidációs számát?

3 alapszabály:

1) elem: mindig zérus pl. H_2 , O_2 , N_2 , Cl_2

2) egyszerű (egyatomos) ionok: az oxidációs szám = iontöltés pl. Cl^- esetén -1 , Na^+ esetén $+1$, Mg^{2+} esetén $+2$

3) molekulában és összetett ionban: az oxidációs számok összege = töltés

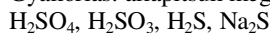


gyakorlati szabály: általában a 1) fluor -1 , 2) hidrogén $+1$, 3) oxigén -2 .

ezt a fenti sorrendben kell használni, azaz először az elsőt kell alkalmazni

pl. F_2O ; sőt: H_2O_2 ;

Gyakorlás: állapítsuk meg az egyes atomok oxidációs számát a következő vegyületekben!



Sav-bázis reakciók

Arrhenius-szerint:

sav: ami a vizes oldat hidrogén-ion koncentrációját növeli

bázis: ami a vizes oldat hidroxid-ion koncentrációját növeli

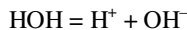
sav+bázis egymással reagálva **sót** és **vizet** ad, ez a **semlegesítés**

Ha savat adunk vízhez, akkor az oldat kémhatása **savas** lesz.

Ha bázist adunk vízhez, akkor az oldat kémhatása **lúgos** lesz.

Ezt jól látható színváltozással jelzik bizonyos anyagok, az indikátorok.
(pl. fekete tea + citromlé)

A kémhatás kapcsolatban van az oldat hidrogén és hidroxid-ion tartalmával. Igazából ezen anyagok koncentrációja nem független egymástól, ugyanis a víz öndisszociációra képes:



(szerkezeti képlettel megmutatni, és megbeszélni az ionok képződését)

Ez a reakció egyensúlyra vezet. A hidrogén és hidroxid ionok koncentrációja adott körülmények között állandó.

Sav hatására hidrogénion-többség, bázis hatására hidroxidion többség alakul ki. Azaz savas a kémhatás, ha a hidrogénionok koncentrációja nagyobb, mint a hidroxidionoké. Lúgos a kémhatás, ha a hidroxidionok koncentrációja nagyobb, mint a hidrogénionoké. Amennyiben a kettő megegyezik az oldat semleges kémhatású.

Tiszta vízben 25°C-on $[\text{H}^+] = [\text{OH}^-] = 1,0 \cdot 10^{-7} \text{ mol/dm}^3$.

Egyensúlyi reakciók

A reaktánsok és termékek koncentrációja egy idő után nem változik, de jobban megvizsgálva a rendszert a termék képződése nem áll le, viszont ugyanakkora sebességgel megy a visszaalakulás is (dinamikus egyensúly).

ezt tükröző jelölés: az oda-vissza nyíl

akkor használjuk, ha hangsúlyozni szeretnénk a folyamat egyensúlyi mivoltát

Végezzük el a következő gondolat kísérletet!

Vegyünk ecetsavat és etanolt! A reakció az észterképződés.

ecetsav + etanol = etil-acetát + víz

nem alakul át az összes! 1 mol etanol + 1 mol ecetsavból lesz 2/3 mol észter, 2/3 mol víz, de marad 1/3 mol etanol és 1/3 mol ecetsav

Egyszerű reakcióknál a reakció sebessége arányos a reaktáns pillanatnyi koncentrációjával. Az ezt leíró összefüggés a sebességi egyenlet. A reakció sebessége megadható, mint egy reaktáns koncentrációjának idő szerinti deriváltja.

a képződési reakció sebessége: $v_1 = \frac{dc_{\text{észter}}}{dt} = k_1 \cdot c_{\text{ecetsav}} \cdot c_{\text{etanol}}$ ez kezdetben nagy, mert sok ecetsav és etanol van

a visszaalakulási reakció sebessége: $v_2 = \frac{dc_{\text{etanol}}}{dt} = k_2 \cdot c_{\text{észter}} \cdot c_{\text{víz}}$ ez kezdetben nulla, mert nincs észter, illetve víz a rendszerben

egyensúlyban egyenlők lesznek: $v_1 = v_2$

$$k_1 \cdot c_{\text{ecetsav}} \cdot c_{\text{etanol}} = k_2 \cdot c_{\text{észter}} \cdot c_{\text{víz}}$$

jelöljük az egyensúlyi koncentrációkat []-el:

$$k_1 \cdot [\text{ecetsav}] \cdot [\text{etanol}] = k_2 \cdot [\text{észter}] \cdot [\text{víz}]$$

rendezzük át az egyenletet: $\frac{k_1}{k_2} = \frac{[\text{észter}] \cdot [\text{víz}]}{[\text{ecetsav}] \cdot [\text{etanol}]}$

k_1, k_2 sebességi együtthatók adott hőmérsékleten állandók, így hányadosuk is az!

Nevezük ezt egyensúlyi állandónak: $K = \frac{k_1}{k_2} = \frac{[\text{észter}] \cdot [\text{víz}]}{[\text{ecetsav}] \cdot [\text{etanol}]}$

Erre a reakcióra: $K = (2/3 \cdot 2/3) / (1/3 \cdot 1/3) = 4$

Általánosítva:

Guldberg és Waage (1867) **tömeghatás törvénye**: egyensúly esetén a reakcióban keletkező termékek egyensúlyi koncentrációinak a sztöchiometriai számnak megfelelő hatványon vett szorzatát elosztva a kiindulási anyagok egyensúlyi koncentrációinak megfelelő hatványon vett szorzatával adott hőmérsékleten állandó értéket kapunk. (tömeghatás: régen tömegekkel írták fel)

általánosan felírva:

$$K = \prod_i c_i^{v_i}, \text{ ahol } v_i \text{ az előjelesen értelmezett sztöchiometriai szám, } c_i \text{ az } i. \text{ anyag egyensúlyi koncentrációja}$$

Ez a tört nem csak egyensúlyban írható fel! Tetszőleges esetben (azaz nem egyensúlyi koncentrációkkal) felírva a neve tömeghatástört.

Mi történik, ha hirtelen etanolt adunk a rendszerhez?

Ezzel az észterképződési reakció sebessége megnő és ezzel párhuzamosan a tömeghatástört értéke nem lesz egyenlő az egyensúlyi állandóval.

A meginduló reakció csökkenti az etanolfelesleget és végül beáll egy új egyensúly.

Egyensúlyi rendszerek ilyen jellegű viselkedésére fogalmazták meg a **Le Chatelier-Braun-elvet**:

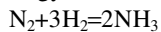
Ha külső hatás az egyensúlyi rendszer állapotát megváltoztatja, akkor olyan változás indul meg a rendszerben, amely a külső hatás eredményét csökkenti.

Nagyon sokszor fel- és kihasználjuk ezt!

Például szeretnénk sok etil-acetátot termelni. Hogyan tolhatjuk el a reakciót ebbe az irányba? Vonjuk el a képződött vizet vízelvonó szerrel.

Az egyensúlyi állandó hőmérsékletfüggése: az egyensúlyra vezető reakciópár hőmérsékletfüggésén múlik ha a reakció endoterm, akkor a hőmérséklet emelése az odaalakulás irányába tolja el a reakciót
ha a reakció exoterm, akkor a hőmérséklet emelése a visszaalakulás irányába tolja el a reakciót

Vegyük az ammóniaszintézist!



alacsony hőmérsékleten: igen lassú
ötletek:

- emeljük a hőmérsékletet, így gyorsabb lesz!
A képződés exoterm, ezért ez a visszaalakulás irányába tolja el a reakciót:
300 °C: 10% termék, 600 °C: 0,5% termék, nem jó
- növeljük a nyomást, mivel a termékek anyagmennyisége kisebb, mint a kiindulási anyagoké!
Nagyon nagy nyomáson érhető el számottevő eredmény.
- használjunk katalizátort
melyik hatékony, olcsó, a szennyezésekre érzéketlen?

Sok technikai probléma után végül kidolgozták a Haber-Bosch-eljárást 450–500 °C, 200 atm nyomás, fémvas–vas-oxid katalizátor.

Az egyensúlyi állandó felírható bármilyen koncentrációtípussal! Ezek számértékeileg nem egyeznek meg, de egymásba átszámíthatók.

Ha anyagmennyiség koncentrációval írjuk fel: K_c

Ha parciális nyomással írjuk fel: K_p

Az oldódás

Az oldódás folyamata: az oldószermolekulák körbeveszik a részecskét, kiszakítják a szilárd fázisból (például a kristályrácsból).

Az a folyamat a **szolvatáció** (ha az oldószer a víz: **hidratáció**).

Az egyes anyagok oldhatósága nagymértékben különbözik!

Alapelv: „Hasonló a hasonlót oldja”

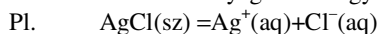
Azaz *poláris anyagok poláris anyagokat, apoláris anyagok apolárisakat oldanak jól.*

Például etán, benzol apoláris, vízben rosszul, apoláris szerves oldószerekben jól oldódik. Metanol poláris, vízben jól oldódik.

Az *oldhatóságot nagymértékben megnöveli, ha az oldószer és az oldandó anyag között kémiai reakciók játszódhatnak le.* Ekkor apoláris anyagok is jól oldódhatnak poláris anyagokban. Például a szén-dioxid apoláris, de vízzel reakcióba lép, ezért jól oldódik vízben.

oldhatóság: az adott komponens maximális elegybeli koncentrációja

Ha több oldott anyagot próbálunk feloldani, mint amennyit a folyadék képes, ez nem sikerül és marad az oldandó anyagból. Ekkor a szilárd és az oldott anyag között egyensúly alakul ki! (oldódás, kiválás sebessége megegyezik)



írjuk fel az egyensúlyi állandót erre a reakcióra!

$$K = \frac{[\text{Ag}^+] \cdot [\text{Cl}^-]}{[\text{AgCl}]}$$

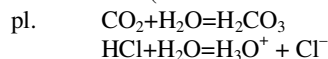
[AgCl] állandó, ezért megszorozva vele az egyenletet bal oldalán állandó értéket kapunk, mely neve az **oldhatósági szorzat**:

$$L = K[\text{AgCl}] = [\text{Ag}^+] \cdot [\text{Cl}^-]$$

Mire lehet ezt felhasználni? az oldhatósági egyensúly miatt az ezüst és a klorid-ionok koncentrációjának szorzata az oldatban nem lehet nagyobb egyszerűen, mint az oldhatósági szorzat. Ha ez mégis megtörténne, csapadék képződne!

Csak híg oldatokra ilyen egyszerű, töményebb oldatoknál más tényezőket is figyelembe kell venni.

A **szolvolízis** (víz esetén: **hidrolízis**) az oldhatóságot nagymértékben megnöveli!



Az oldódási folyamatok egy része disszociációs reakció, nemcsak a HCl esetén, hanem például $\text{NaCl}_{(sz)} = \text{Na}^+_{(aq)} + \text{Cl}^-_{(aq)}$

Poláris oldószerekben a vegyületek egy része ionokra disszociál, ez az **elektrolitos disszociáció**, az így viselkedő anyagok az **elektrolitok**.

Bizonyos anyagok teljesen disszociálnak: erős elektrolitok (pl. erős savak, erős bázisok, sók)

Más anyagok csak részben disszociálnak: gyenge elektrolitok (pl. gyenge savak, gyenge bázisok)

A disszociáció mértéke erősen függ az oldószertől!

Képlete	Az anyag neve	Oldószere* (A, V,)	A vizes oldat kémhatása** (S,N,L,-)
Cl_2	klór	A, V	S
P_4	fehérfoszfor	A	-
CO_2	szén-dioxid	A, V	S
CaO	kalcium-oxid	V	L
HNO_3	salétromsav	V	S
HCl	hidrogén-klorid	V	S
NaCl	nátrium-klorid, konyhasó	V	N
NH_4Cl	ammónium-klorid/szalmiáksó	V	S
Na_2CO_3	nátrium-karbonát/szóda	V	L
SiO_2	szilícium-dioxid	-	-
C_2H_6	etán	A	-
CCl_4	szén-tetraklorid	A	-
CH_3OH	methanol	A, V	N
HCOOH	hangyasav	V	S
C_6H_6	benzol	A	-

* apoláris (pl. szerves oldószerek: hexán, szén-tetraklorid stb.): A, ha vízben oldódik: V

** savas: S, semleges (neutrális): N, lúgos: L vagy nem értelmezett: -

