

Általános kémia
Gyógyszerészhallgatók számára
(kivonat az előadás anyagából)
(nem végleges verzió)
2006

2006. november 18.

Tematika

- Alapismeretek
- Atom- és molekulaszerekezet
- Reakciók és egyensúlyok (*még nem szerepel ebben az anyagban*)
- Termokémia, halmazállapotok, a termodinamika alapjai
- Bevezetés a reakciókinetikába, fotokémiába és az elektrokémiába

Tankönyvek, jegyzetek

- Dr. Kőrös Endre: Általános kémia (jegyzet, Semmelweis kiadó), Szervetlen kémia I. (jegyzet, Semmelweis kiadó)
- Dr. Sinkó Katalain, Igaz Sarolta: Általános, szervetlen és kvalitatív kémiai példatár (jegyzet, Semmelweis kiadó)
- Náray-Szabó Gábor: Kémia (Akadémiai kiadó)
- Bodonyi Ferenc, Pitter György: Kémiai Összefoglaló (Műszaki könyvkiadó)
- Gergely Pál: Általános és bioszervetlen kémia (Semmelweis kiadó)
- Szakács László, Mörtl Mária, Knausz dezső: Általános kémiai példatár (Eötvös kiadó)
- Darrell D. Ebbing: General Chemistry (Houghton Mifflin Company)
- William L. Masterton, Cecile N. Hurley: Chemistry: Principles and Reactions (Thomson)
- Whitten, Davis, Peck, Stanley: General Chemistry (Thomson)

Web

- A Veszprémi Egyetem jegyzetei: <http://vegic.vein.hu/education/supplementary.htm>
- Webelements (www.webelements.com)
- Scienceworld
scienceworld.wolfram.com/
- General Chemistry: starting points for students
www.chem1.com/chemed/genchem.html

A kémia klasszikus felosztása

- Szervetlen kémia
- Szerves kémia
- Fizikai kémia
- Analitikai kémia
- Biokémia

Az anyag megjelenési formái

- gázok (felveszik az edény alakját, térfogatuk változó, a részecskék szabadon mozognak)
- folyadékok (felveszik az edény alakját, állandó térfogatuk van, a részecskék szabadon mozognak de közöttük számottevő kölcsönhatás van)
- szilárd anyagok (állandó alakjuk és térfogatuk van, a részecskék nem mozognak szabadon, rezgő mozgást végeznek)
- plazma állapot: nagy mozgási energiájú részecskék (szabad elektronok, ionok, atomok, molekulák...) keveréke. (pl. Nap)

Anyag és energia

- Az energia megjelenési formái: mozgási ($E_{kin} = \frac{1}{2}mv^2$), helyzeti ($E_{pot} = mgh$), elektromágneses ($w_e = \frac{1}{2}(\epsilon\vec{E}^2 + \mu\vec{H}^2)$), belső energia, hő...
- Az anyag- és energia megmaradás törvénye: **Bármely folyamat (fizikai, kémiai, biológiai...) során az anyag és az energia mennyisége állandó marad.**
 $E = m \times c^2$

Feynman: „Van egy tény – ha úgy tetszik – törvény, amely az összes eddig ismert természeti jelenséget irányítja. . .

Ez az energia megmaradás törvénye, amely azt mondja ki, hogy van egy bizonyos, energiának nevezett mennyiség, amely változatlan marad a természetben végbemenő sokfajta változás során. . .

A fizika mai állása mellett valójában nem tudjuk, mi is az **energia**.”

Fizikai tulajdonságok

Olyan tulajdonságok amelyek nem kapcsolódnak anyag összetételének megváltozásához.

- Extenzív tulajdonságok: **tömeg, térfogat, vezetőképesség . . .**
- Intenzív tulajdonságok: **sűrűség, hőmérséklet, forráspont . . .**

Fizikai változásokon olyan folyamatokat értünk amelyek során az összetétel nem változik meg. Pl.: forrás, olvadás, fagyás . . .

Mértékegységek I.

SI alapmennyiségek

Hosszúság	méter	m	
<i>A méter annak az útnak a hosszúsága, amelyet a fény vákuumban a másodperc 299 792 458-ad része alatt megtesz.</i>			
Tömeg	kilogramm	kg	
<i>A kilogramm az 1889. évben, Párizsban megtartott 1. Általános Súly- és Mértékügyi Értekezlet által a tömeg nemzetközi etalonjának elfogadott; a Nemzetközi Súly- és Mértékügyi Hivatalban, Sèvres-ben őrzött platina-irídium henger tömege.</i>			
Idő	másodperc	s	
<i>A másodperc az alapállapotú cézium-133 atom két hiperfinom energiaszintje közötti átmenetnek megfelelő sugárzás 9 192 631 770 periódusának időtartama.</i>			
Elektromos áramerősség	amper	A	
<i>Az amper olyan állandó elektromos áram erőssége, amely két egyenes, párhuzamos végtelen hosszúságú, elhanyagolhatóan kicsiny kör keresztmetszetű és egymástól 1 méter távolságban, vákuumban elhelyezkedő vezetőben fenntartva, e két vezető között méterenként 2×10^{-7} newton erőt hozna létre.</i>			
Hőmérséklet	kelvin	K	
<i>A kelvin a víz hármaspontja termodinamikai hőmérsékletének 273,16-ad része.</i>			
Fényerősség	kandela	Cd	
<i>A kandela az olyan fényforrás fényerőssége adott irányban, amely 540×10^{12} hertz frekvenciájú monokromatikus fényt bocsát ki és sugárerőssége ebben az irányban 1/683-ad watt per szteradián.</i>			
Anyagmennyiség	mól	mol	
<i>A mól annak a rendszernek az anyagmennyisége, amely annyi elemi egységet tartalmaz, mint ahány atom van 0,012 kilogramm szén-12-ben. Ez körülbelül $6,022 \times 10^{23}$ darab részecske.</i>			

Mértékegységek II.

Néhány származtatott SI egység

Terület	négyzetméter	m^2	
Térfogat	köbméter	m^3	
Sűrűség	kilogramm/köbméter	kg/m^3	
Erő	newton	N	$kg \times m/s^2$
Nyomás	pascal	Pa	N/m^2
Energia	joule	J	$kg \times m^2/s^2$
Elektromos töltés	coulomb	C	$A \times s$
Elektromos feszültség	volt	V	$J/(A \times s)$

Mértékegységek III.

SI prefixumok

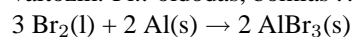
10^{12}	tera	T	10^{-1}	deci	d
10^9	giga	G	10^{-2}	centi	c
10^6	mega	M	10^{-3}	mili	m
10^3	kiló	k	10^{-6}	mikro	μ
10^2	hekto	h	10^{-9}	nano	n
10^1	deka	da	10^{-12}	piko	p
			10^{-15}	femto	f
			10^{-18}	atto	a

Kémiai tulajdonságok

Olyan tulajdonságok amelyek az anyag összetételének megváltozásához kapcsolódnak:

- sav-bázis tulajdonságok,
- redoxi tulajdonságok,
- komplex képzési hajlam...

Kémiai változásokon olyan folyamatokat értünk amelyek során az összetétel megváltozik. Pl.: oldódás, bomlás ...



Keverékek

- Jellemzőik: változó összetétel, az összetétellel változó tulajdonságok, fizikai módszerekkel szétválaszthatóak.
- Homogén keverékek (elegyek): a komponensek megkülönböztethetetlenek, térben állandó összetétel (oldatok, ötvözetek, levegő).
- Heterogén keverékek: a komponensek megkülönböztethetőek, térben változó összetétel (kő).

Tiszta anyagok

- Jellemzőik: állandó összetétel, fizikai módszerekkel nem választhatóak szét.
- Elemek: kémiai úton tovább nem bonthatóak.
- Vegyületek: kémiai úton elemeikre felbonthatóak.

Vegyületek

Állandó súlyviszonyok törvénye: **egy adott vegyület bármilyen mintája mindig ugyanazokat az elemeket és ugyanabban az összetételben tartalmazza.**

víz 11,1 % hidrogén 88,9 % oxigén
szén-dioxid 27,3 % szén 72,7 % oxigén

Többszörös súlyviszonyok törvénye: **ha két elem egymással többféle tömegarány szerint képezhet vegyületet, akkor az egyik elem változó mennyiségei, amelyek a másik**

elem állandó mennyiségeivel reagálnak, úgy viszonylanak egymáshoz, mint az egyszerű egész számok.

	nitrogén:oxigén	
N ₂ O	1:0,57	
NO	1:1,14	0,57:1,14=1:2
NO ₂	1:2,28	0,57:2,28=1:3

Néhány alapfogalom

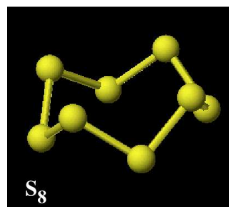
Atomok: az anyag legkisebb olyan építőelemei amelyek hordozzák annak kémiai tulajdonságait.

Az atomok felépítése:

- Az **atommag** protonokból és neutronokból áll, átmérője $\sim 10^{-15}$ m.
- Az **elektronfelhő** átmérője $\sim 10^{-10}$ m (0,1 nm).

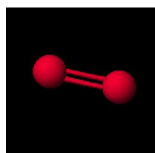
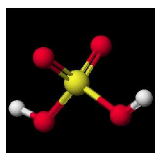
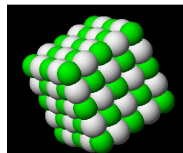
részecske	tömeg	töltés	
proton	$1,672 \times 10^{-27}$ kg	$+1,602 \times 10^{-19}$ C	$\frac{m(p^+)}{m(e^-)} \approx 1840$
neutron	$1,675 \times 10^{-27}$ kg	semleges	
elektron	$9,109 \times 10^{-31}$ kg	$-1,602 \times 10^{-19}$ C	

- Rendszám = protonok száma
- Tömegszám = protonok száma + neutronok száma
- Vegyjel: $\begin{matrix} \text{tömegszám} \\ \text{rendszám} \end{matrix} \text{X}, \begin{matrix} 12 \\ 6 \end{matrix} \text{C}$
- Izotópok: azonos rendszám de eltérő tömegszám.
- Atomi tömegegység: a $^{12}_6\text{C}$ atom tömegének 1/12 része (1 amu = $1,6606 \times 10^{-27}$ kg)
Például a hidrogén atomtömege: 1,00794 amu.
- Relatív atomtömeg: az atomtömeg osztva az atomi tömegegységgel, dimenziótlan szám.
Például a hidrogén relatív atomtömege: 1,00794.
- Kémiai kötés: a vegyületeket összetartó vonzó kölcsönhatás.
- Elsőrendű kötések: kovalens, ionos és fémes (50-100 kJ/mol).
- Másodrendű kötések: hidrogénkötés, dipol-dipol... (1-50 kJ/mol).



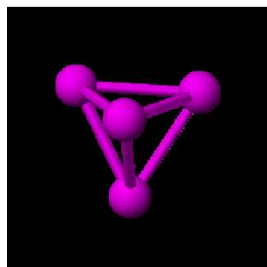
- A **molekulák** kettő vagy több atom kovalens kapcsolódásával létrejött vegyületek.

- Az **ionok** atomokból, vagy molekulákból elektron leadással (kationok) illetve felvétellel (anionok) jönnek létre.
- A **gyökök** olyan atomcsoportok amelyek párosítatlan elektront tartalmaznak.

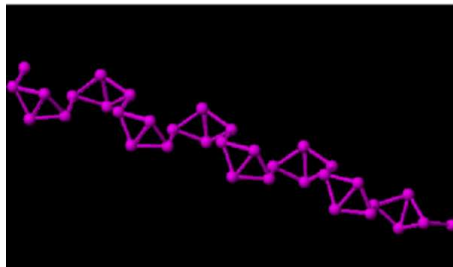
O₂H₂SO₄

NaCl

- Allotrópia: Ugyanolyan fizikai körülmények között egy adott elem több különböző formában is megjelenhet. (oxigén-ózon, grafit-gyémánt ...)



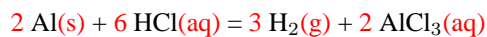
fehér foszfor



vörös foszfor

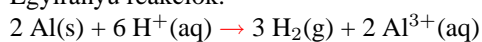
- Relatív molekulatömeg: a molekulát felépítő atomok relatív atomtömegének összege.
- Avogadro tétele: **azonos hőmérsékleten és nyomáson a különböző gázok azonos térfogatai azonos számú molekulát tartalmaznak.**
- A mól: annyi egyedi részecske (atom, molekula, ion. . .) amennyi atom található 0,012 kg tiszta ¹²₆C-ben. 1 mol = 6,022 × 10⁻²³
- Moláris tömeg: számértéke megegyezik a relatív atom vagy molekula tömeggel, mértékegysége: g/mol

Egyenletírás

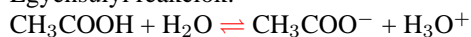


- Az anyagmegmaradás törvénye miatt az egyenlet jobb és bal oldalán az egyes atomok száma illetve a leadott és felvett elektronok száma meg kell hogy egyezzen.
- A töltésmegmaradás törvénye miatt a jobb és bal oldalon az össztöltésnek egyenlőnek kell lennie.

Egyirányú reakciók:

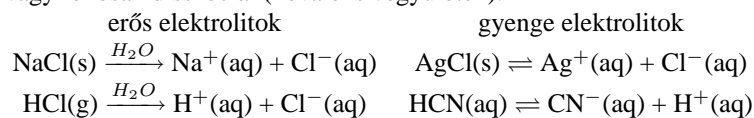


Egyensúlyi reakciók:

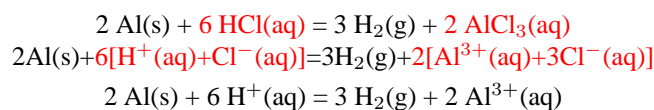


Vizes oldatban lejátszódó reakciók

A vízben való oldódás során az anyagok jelentős része ionjaira bomlik (ionos vegyületek) vagy ionosan disszociál (kovalens vegyületek).



Vizes oldatban az *erős savakat és bázisokat* illetve a *jól oldódó sókat* ionos formában célszerű felírni:



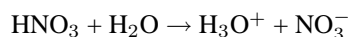
Reakciótípusok

- Egyesülés
 $\text{CaO}_2(\text{s}) + \text{CO}_2(\text{g}) \rightarrow \text{CaCO}_3(\text{s})$
- Bomlás
 $2 \text{HgO(s)} \rightarrow 2 \text{Hg(s)} + \text{O}_2(\text{g})$
- Helyettesítés (szubsztitúció)
 $\text{Zn(s)} + \text{CuSO}_4(\text{aq}) \rightarrow \text{Cu(s)} + \text{ZnSO}_4(\text{aq})$
- Cserebomlás
 $\text{CaCl}_2(\text{aq}) + \text{Na}_2\text{CO}_3(\text{aq}) \rightarrow \text{CaCO}_3(\text{s}) + 2 \text{NaCl(aq)}$
- Sav-bázis reakciók
 $\text{CH}_3\text{COOH} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{COO}^- + \text{H}_3\text{O}^+$
- Redoxi reakciók
 $4 \text{Fe(s)} + 3 \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow 2 \text{Fe}_2\text{O}_3(\text{s})$
- Csapadékképződési reakciók
 $\text{Ag}^+ + \text{Cl}^- \rightleftharpoons \underline{\text{AgCl}}$
- Komplexképződési reakciók
 $\text{Cu}^{2+} + 4 \text{NH}_3 \rightleftharpoons \text{Cu}(\text{NH}_3)_4^{2+}$

Szervetlen vegyületek

SAVAK–BÁZISOK–SÓK

A **savak** olyan vegyületek amelyek proton (hidrogénion) leadásra képesek.



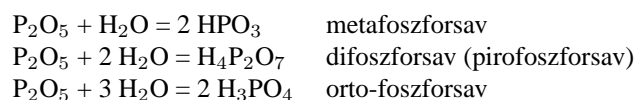
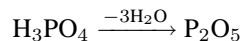
A leadott hidrogénionok száma szerint megkülönböztetünk:

Egyértékű savakat: **HClO₄, HCl, HNO₃**...

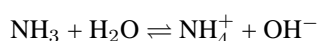
Kértékű savakat: **H₂SO₄, H₂CO₃, H₂SiO₃**...

Többértékű savakat: **H₃PO₄, H₃AsO₄, H₃AsO₃**...

Oxosavak: hidrogénen és savképző elemen kívül csak oxigént tartalmaznak. Ha az összes savi hidrogént elvonjuk víz formájában **savanhidridet** kapunk.



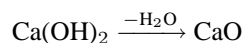
A **bázisok** olyan vegyületek amelyek hidrogénion felvételre képesek.



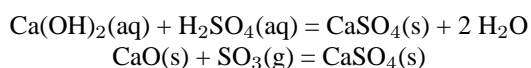
Erős bázisok: **NaOH, KOH, Ba(OH)₂, Ca(OH)₂**

Gyenge bázisok: **NH₃, Mg(OH)₂, Fe(OH)₃**

Ha a bázisokból elvonjuk az összes hidrogént víz formájában **bázisanhidridet** kapunk.



A **sók** savak (savanhidridek) és bázisok (bázisanhidridek) reakciójában keletkeznek.

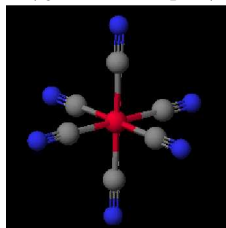
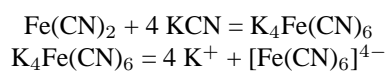


Szabályos sók: **NaCl, FeCl₃, Fe₂(SO₄)₃**

Savanyú sók: **CaHPO₄, KHSO₄**

Bázisos sók: **Bi(OH)(NO₃)₂**

Kettős sók: **AlK(SO₄)₂** A **komplex sók** képződése két egyszerű sóból vezethető le. A keletkezett vegyület azonban nem ugyanazokra az ionokra disszociál mint az őt alkotó egyszerű sók.



Nevezéktan

Kationok szisztematikus elnevezése:

- Egyszerű kationok: az elem neve és zárójelben a vegyérték.
Például: **Fe²⁺ vas(II)-ion, Fe³⁺ vas(III)-ion.**
- Összetett kationok: -il végződéssel képezzük az elem teljes, rövidített vagy latin nevéből.
Például: **CO²⁺ karbonil, NO⁺ nitrozil, NO₂⁺ nitril, SO₂²⁺ szulfonil.**
Kivételek: **PH₄⁺ foszfónium, NH₄⁺ ammónium, H₃O⁺ oxónium.**

Anionok szisztematikus elnevezése:

- Egyszerű anionok: az elem teljes, rövidített vagy latin neve + -id végződés.
Pl.: Cl^- kloridion, O^{2-} oxidion, O_2^{2-} peroxidion.
- Összetett kationok: először a kapcsolódó atomok száma görög számnévvel majd a kapcsolódó atomok neve -o végződéssel és végül a központi atom neve -át végződéssel és az oxidációs szám zárójelben.
Pl.: SO_4^{2-} tetraoxo-szulfát(VI)-ion,
 NO_3^- trioxo-nitrat(V)-ion.
Kivételek: OH^- hidroxidion, CN^- cianidion, HS^- hidrogén-szulfidion.

Komplexvegyületek elnevezése:

- Kation típusú vagy töltés nélküli komplexek: a koordinációs szám görög neve + a ligandum neve (anionos ligandum + o) + a központi atom magyar neve.
Pl.: $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$ hexaamin-kobalt(III), HgCl_2 dikloro-higany(II).
- Anion típusú komplexek: a koordinációs szám görög neve + a ligandum neve (anionos ligandum + o) + a központi atom latin neve + át.
Pl.: $[\text{HgI}_4]^{2-}$ tetrajodo-merkurát.

Savak	Szisztematikus név	Triviális név
HOCl	hidrogén-oxo-klorát(I)	hipoklórossav
HClO_2	hidrogén-dioxo-klorát(III)	klórossav
HClO_3	hidrogén-trioxo-klorát(V)	klórsav
HClO_4	hidrogén-tetraoxo-klorát(VII)	perklórsav
H_2SO_4	hidrogén-tetraoxo-szulfát(VI)	kénsav

Atom és molekulaszervezet

Standard modell

Alapvető részecskék (6 kvark és 6 lepton és ezek antirészecskéi)

	Kvarkok	Q/e	Leptonok	Q/e
1. generáció	<i>d</i> (down)	-1/3	elektron	-1
	<i>u</i> (up)	+2/3	elektron neutrínó	0
2. generáció	<i>s</i> (strange)	-1/3	müion	-1
	<i>c</i> (charme)	+2/3	müion neutrínó	0
3. generáció	<i>b</i> (bottom)	-1/3	tau	-1
	<i>t</i> (top)	+2/3	tau neutrínó	0

Alapvető kölcsönhatások

kölcsönhatás	kölcsönható részecskék	
erős	kvarkok	
elektromágneses	elektromos töltések	$F_{el} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Q_1 \cdot Q_2}{r^2}$
gyenge	leptonok és hadronok	
gravitációs	minden részecske	$F_g = G \cdot \frac{M_1 \cdot M_2}{r^2}$

Alapvető kölcsönhatások

kölcsönhatás	relatív erősség	hatótávolság	közvetítő részecske
erős	1	$\approx 10^{-15}$	gluon <i>g</i>
elektromágneses	10^{-2}	∞	foton γ
gyenge	10^{-14}	$\approx 10^{-18}$	bozonok W^\pm, Z^0
gravitációs	10^{-38}	∞	graviton

Nukleonok

	proton	neutron
	{u,u,d}	{d,u,d}
tömeg (kg)	$1,672 \times 10^{-27}$	$1,675 \times 10^{-27}$
töltés (C)	$+1,602 \times 10^{-19}$	0
spin (\hbar)	1/2	1/2
mágneses momentum	$+2,793 \times \mu_K$	$-1,913 \times \mu_K$

$n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$ β^- -bomlás

A szabad neutron élettartama ≈ 889 s)

$p \rightarrow n + e^+ + \nu_e$ β^+ -bomlás (pozitron emisszió)

(A szabad proton élettartama $\geq 10^{31}$ év)

Az atommag

- Az atommag protonokból és neutronokból épül fel.
- Az izotópok olyan magok amelyekben megegyezik a protonok száma, de a neutronok száma különbözik. A **radioaktív izotópok** nemstabil magok, amelyek radioaktív sugárzás kibocsátásával bomlanak el.
Pl. a $^{12}_6\text{C}$ és a $^{13}_6\text{C}$ stabil, a $^{14}_6\text{C}$ radioaktív izotóp.

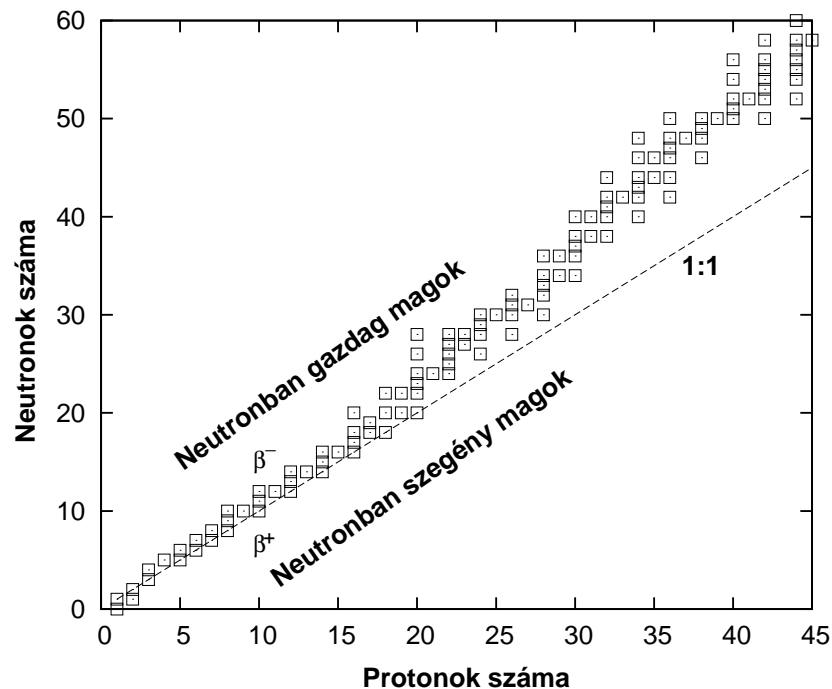
- A különböző elemekben az atommag sűrűsége közelítőleg megegyezik: $2,4 \times 10^{24} \text{ g/cm}^3$.
- Az atommag kötési energiája kiszámítható a tömeg-deffektus alapján: $B = (Z \cdot m_p + (A - Z) \cdot m_n - m_{\text{mag}}) \cdot c^2$

Az atommag kötési energiája

- $^{35}_{17}\text{Cl}$: 17 proton, 17 elektron és 18 neutron.
 protonok: $17 \times 1,0073 \text{ amu} = 17,124 \text{ amu}$, elektronok: $17 \times 0,00054858 \text{ amu} = 0,0093 \text{ amu}$, neutronok: $18 \times 1,0087 \text{ amu} = 18,157 \text{ amu}$
- számolt tömeg: 35,290 amu, mért érték: 34,9689, $\Delta m = 0,321 \text{ amu}$ vagy g/mol
- $BE = \Delta m \times c^2 = 3,21 \times 10^{-4} \text{ kg/mol} \times (3,00 \times 10^8 \text{ m/s})^2 = 2,89 \times 10^{13} \text{ J/mol}$
 $^{35}_{17}\text{Cl}$ atom

Az atommag

- Kis rendszámú elemek stabil izotópjában a protonok és neutronok számának aránya közel 1:1.
- A legtöbb természetes atommagban a protonok és/vagy a neutronok száma is páros.
- 83-as rendszám felett minden atommag radioaktív.

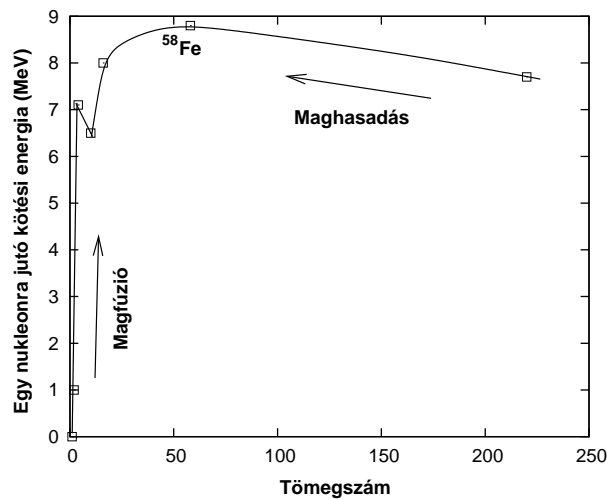


Radioaktivitás

- α -sugárzás: elsősorban a „nehéz” ($N > 80$) magokra jellemző
 ${}_{84}^{210}\text{Po} \rightarrow {}_{82}^{206}\text{Pb} + {}_2^4\text{He}$
- β^- -sugárzás: elsősorban a neutronban gazdag magokra jellemző
 ${}_{6}^{14}\text{C} \rightarrow {}_{7}^{14}\text{N} + e^- + \bar{\nu}_e$ ($T_{1/2} = 5730$ év)
- β^+ -sugárzás: elsősorban a neutronban szegény magokra jellemző
 ${}_{8}^{15}\text{O} \rightarrow {}_{7}^{15}\text{N} + e^+ + \nu_e$
- γ -sugárzás: $X^* \rightarrow X + \gamma$

Maghasadás, magfúzió

- Maghasadás:
 ${}_{92}^{235}\text{U} + {}_0^1n \rightarrow {}_{92}^{236}\text{U}$
 ${}_{92}^{236}\text{U} \rightarrow {}_{62}^{160}\text{Sm} + {}_{30}^{72}\text{Zn} + 4 {}_0^1n + \text{energia}$
 ${}_{92}^{236}\text{U} \rightarrow {}_{57}^{146}\text{La} + {}_{35}^{87}\text{Br} + 3 {}_0^1n + \text{energia}$
 ${}_{92}^{236}\text{U} \rightarrow {}_{56}^{141}\text{Ba} + {}_{36}^{92}\text{Kr} + 3 {}_0^1n + \text{energia} \dots$
- Magfúzió:
 ${}_{1}^2\text{H} + {}_{1}^3\text{H} \rightarrow {}_{2}^4\text{He} + {}_{0}^1n + \text{energia}$
 ${}_{1}^2\text{H} + {}_{2}^3\text{He} \rightarrow {}_{2}^4\text{He} + {}_{1}^1p + \text{energia}$



Atomszerkezet

Előzmények

- Az elektron felfedezése: J. J. Thomson, 1897 (töltés/tömegarány)

- Millikan olajcsepp kísérlete, 1909 (az elektron töltése)

$$F_g = F_e$$

$$m \cdot g = E \cdot Q$$

$$Q = \frac{m \cdot g}{E}$$

$$m = \frac{4}{3} \cdot r^3 \cdot \pi \cdot \rho$$

$$E = \frac{V}{d}$$

$$Q = n \cdot e$$

$$n = 1, 2, 3 \dots$$

- Rutherford α -szórási kísérlete, 1909. (az atomban a pozitív töltés kis helyen koncentrálódik, amelyet egy relative nagy elektronburok vesz körül)

- A proton felfedezése: E. Rutherford és J. Chadwick, 1919

- A neutron felfedezése: J. Chadwick, 1932

- M. Planck kvantum hipotézise:

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

- Fotoelektromos effektus

- Elektronok csak megfelelő hullámhosszú fény hatására lépnek ki, függetlenül a megvilágítás erősségétől és időtartamától. A hullámhossz határértéke fémről fémmé változik.
- A kilépő elektronok száma nem függ a hullámhossztól csak az intenzitástól, ha az előző pont szerinti határértéknél rövidebb hullámhosszú fényt használunk.

- A hidrogén vonalas színképe

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

R : Rydberg állandó

Kvantummechanikai leírás

Az elektron hullámtermészete

- A fény (az elektromágneses sugárzás) az energiáját csomagokban hordozza (fotoelektromos effektus).
- Louis de Broglie sejtése szerint minden részecskéhez rendelhető egy hullámhossz: $\lambda = h/mv$.

Egy elektron hullámhossza, amelyet 1 V feszültséggel gyorsítottunk fel, $1,23 \times 10^{-9}$ m, míg egy golyóké ($v = 25$ m/s) $5,8 \times 10^{-34}$ m. A golyóké esetében ez nem nyilvánul meg semmilyen megfigyelhető módon, míg egy kristályrácsan elektronnyalábot bocsátva át interferencia kialakulását észlelhetjük.

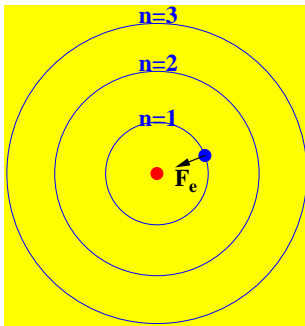
A Heisenberg féle határozatlansági reláció

$\Delta p \geq \hbar/2$ a helyzet illetve az impulzus meghatározásának bizonytalansága

- A kvantummechanikában újra kell értelmezni a pálya fogalmát.
- A mérés során a mérőeszköz mindig befolyásolja az e

Bohr modell

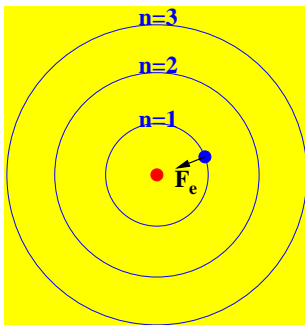
I. posztulátum Az atomon belül léteznek olyan stacionárius pályák, amelyeken mozogva az elektron nem bocsájt ki elektromágneses sugárzást.



$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2} = \frac{m_e v^2}{r}$$

Coulomb erő = centripetális erő (hidrogén atom)

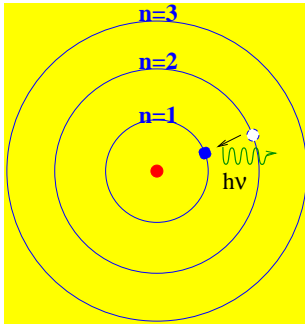
II. posztulátum Az elektron impulzummomentuma a stacionárus pályakon csak \hbar egész számú többszöröse lehet.



$$l = m_e \cdot v_n \cdot r_n = n \cdot \hbar$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

III. posztulátum Az atom elektromágneses sugárzást bocsájt ki amikor az elektron egy n_2 pályáról egy n_1 pályára ugrik ($n_2 > n_1$).



$$h\nu = E_{n_2} - E_{n_1}$$

Bohr modell

Eredmények:

Az elektronpályák sugara a hidrogénatomban:

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e^2} n^2$$

$$r_n = a_0 n^2$$

$$a_0 = 0,53 \times 10^{-10} \text{ m}$$

Az alapállapotú hidrogén atom sugara $0,46 \times 10^{-10} \text{ m}$.

Eredmények:

Az elektronpályák energiája a hidrogénatomban:

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{8h^2 \epsilon_0^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

$$E_n = 2,18 \times 10^{-18} \text{ J} \cdot \frac{1}{n^2}$$

A hidrogén spektrum vonalainak hullámhossza:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

Hiányosságok, problémák:

- Csak egyelektronos rendszerek (H atom, He^+ , Li^{2+}) leírására alkalmas.
- Nem tudja megmagyarázni a spektrumok finomszerkezetét illetve a vonalak mágneses térben való felhasadását.
- Az atomot síkbeli alakzatként írja le.

Kvantummechanikai leírás

Egy részecske állapotának leírására a Schrödinger egyenletet alkalmazhatók:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(\vec{r}, t)$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$$

$|\psi(\vec{r}, t)|^2$ a részecske megtalálási valószínűsége
Stacionárius állapotban (ψ nem függ az időtől):

$$\hat{H} \psi = E \psi$$

A kvantumszámok

- A kvantummechanikai leírás négy kvantumszám segítségével adja meg az elektron lehetséges állapotait az atomban.
- Atompályának nevezzük azt a térrészt ahol az elektron megtalálási valószínűsége nagy.

A kvantumszámok

- A főkvantumszám az atompályák méretét és energiáját* írja le. Az azonos főkvantumszámhoz tartozó pályákat közösen elektronhéjnak nevezzük

$$n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

- A mellékkvantumszám az atompályák alakját adja meg. Az azonos mellékkvantumszámú pályák alkotják az alhéjakat.

$$l = 0, 1, 2, \dots, (n - 1)$$

A kvantumszámok

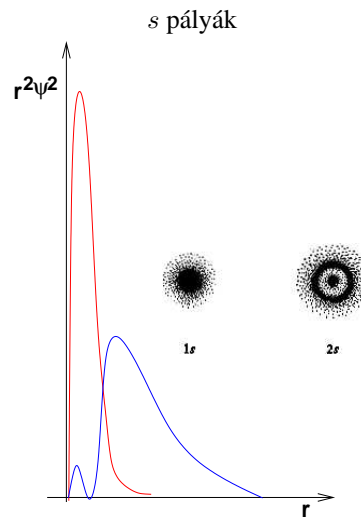
- A mágnesekvantumszám egy adott alhéjhoz tartozó pályákat különbözteti meg.

$$m_l = (-l), \dots, 0, \dots, (+l)$$

- Spinquantumszám (relativisztikus kvantummechanika, Dirac egyenlet)

$$m_s = \pm \frac{1}{2}$$

Atompályák



p pályák



d pályák



Atompályák

héj n	alhéjak száma n	atompályák száma n^2	elektronok száma $2n^2$
1	1	1 (1s)	2
2	2	4 (2s, 2p _x , 2p _y , 2p _z)	8
3	3	9 (3s, három p, öt d)	18
4	4	16	32
5	5	25	50

Elektronszerkezet

- A mag körül olyan elektronok szerkezet alakul ki amelynél az atom energiája a lehető legkisebb.
- Pauli-elv: Az atomon belül nem lehet két olyan elektron amelynek minden kvantumszáma megegyezne.
- Hund szabály: az alhéjak olyan módon töltődnek fel, hogy minél nagyobb legyen a párosítatlan elektronok száma.
- A legtöbb esetben a beépülés növekvő $(n + l)$ értékek szerint megy végbe.

Pauli-elv

Az atomon belül nem lehet két olyan elektron amelynek minden kvantumszáma megegyezne.

Ez az elv vezet a periódusos rendszer változatosságához

Beépülési sorrend

	1s			
H	\uparrow	$1s^1$		
He	$\uparrow\downarrow$	$1s^2$		
	1s	2s	2p	
Li	$\uparrow\downarrow$	\uparrow		[He] $2s^1$
Be	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$		[He] $2s^2$
B	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	[He] $2s^2 2p^1$
C	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow \uparrow	[He] $2s^2 2p^2$
N	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow \uparrow \uparrow	[He] $2s^2 2p^3$
O	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ \uparrow \uparrow	[He] $2s^2 2p^4$
F	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ \uparrow	[He] $2s^2 2p^5$
Ne	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	[He] $2s^2 2p^6$
		3s	3p	
Na	[Ne]	\uparrow		[Ne] $3s^1$
Mg	[Ne]	$\uparrow\downarrow$		[Ne] $3s^2$
Al	[Ne]	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	[Ne] $3s^2 3p^1$
Si	[Ne]	$\uparrow\downarrow$	\uparrow \uparrow	[Ne] $3s^2 3p^2$
P	[Ne]	$\uparrow\downarrow$	\uparrow \uparrow \uparrow	[Ne] $3s^2 3p^3$
S	[Ne]	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ \uparrow \uparrow	[Ne] $3s^2 3p^4$
Cl	[Ne]	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ \uparrow	[Ne] $3s^2 3p^5$
Ar	[Ne]	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	[Ne] $3s^2 3p^6$

		3d	4s	4p	
K	[Ar]		\uparrow		[Ar]4s ¹
Ca	[Ar]		$\uparrow\downarrow$		[Ar]4s ²
Sc	[Ar]	\uparrow	$\uparrow\downarrow$		[Ar]3d ¹ 4s ²
Ti	[Ar]	\uparrow \uparrow	$\uparrow\downarrow$		[Ar]3d ² 4s ²
V	[Ar]	\uparrow \uparrow \uparrow	$\uparrow\downarrow$		[Ar]3d ³ 4s ²
Cr	[Ar]	\uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow	\uparrow		[Ar]3d ⁵ 4s ¹
Mn	[Ar]	\uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow	$\uparrow\downarrow$		[Ar]3d ⁵ 4s ²
Fe	[Ar]	$\uparrow\downarrow$ \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow	$\uparrow\downarrow$		[Ar]3d ⁶ 4s ²
Co	[Ar]	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ \uparrow \uparrow \uparrow	$\uparrow\downarrow$		[Ar]3d ⁷ 4s ²
Ni	[Ar]	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ \uparrow \uparrow	$\uparrow\downarrow$		[Ar]3d ⁸ 4s ²
Cu	[Ar]	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	\uparrow		[Ar]3d ¹⁰ 4s ¹
Zn	[Ar]	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$		[Ar]3d ¹⁰ 4s ²
		3d	4s	4p	
Ga	[Ar]	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹
Ge	[Ar]	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow \uparrow	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ²
As	[Ar]	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow \uparrow \uparrow	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ³
Se	[Ar]	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ \uparrow \uparrow	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴
Br	[Ar]	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ \uparrow	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵
Kr	[Ar]	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶

Spektroszkópiai átmenetek

Kiválasztási szabályok (hidrogénszerű atomokra):

$$\Delta l = \pm 1$$

$$\Delta m_l = 0, \pm 1$$

Milyen pályákra irányulhat sugárzással járó átmenet a 4d elektronok esetében?

4d ($l = 2$) \rightsquigarrow np ($l = 1$) ($\Delta m_l = 0, \pm 1$)

4d ($l = 2$) \rightsquigarrow nf ($l = 3$) ($\Delta m_l = 0, \pm 1$)

Melyek a tiltott átmenetek?

4d ($l = 2$) \nrightarrow ns ($l = 0$)

4d ($l = 2$) \nrightarrow nd ($l = 2$)

Mágneses tulajdonságok

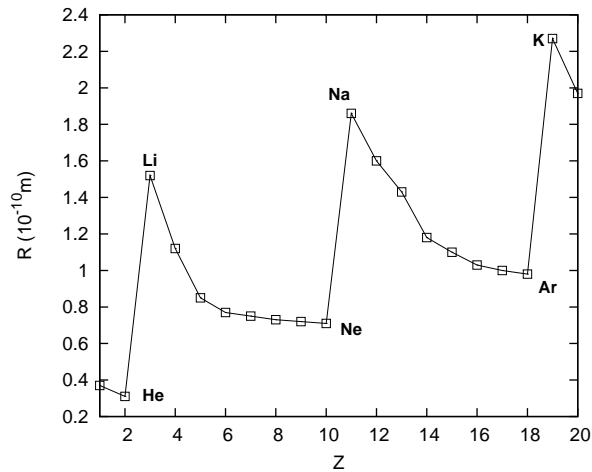
- **Diamágnesesség:** olyan elemeknél figyelhető meg, amelyeknek minden elektronja párosított ($\mu_r < 1$). Külső mágneses térbe helyezve a diamágneses anyagokon belül gyengül a mágneses tér. Pl.: Cu, Bi, Au, Ag, H₂
- **Paramágnesesség:** olyan elemeknél figyelhető meg, amelyek párosítatlan elektronnal rendelkeznek ($\mu_r > 1$). Külső mágneses térbe helyezve a paramágneses anyagokon belül a rendezetlenül álló atomi mágneses momentumok a külső tér irányába rendeződnek. Pl.: Al, O₂, W, Pt, Sn, Cu²⁺, Cr³⁺, Fe³⁺
- **Ferromágnesesség:** az ilyen anyagok kristályaiban rendezett atomi mágneses momentumokkal bíró régiók találhatók (10 μ m – 1mm) amelyek a külső tér hatására annak irányába rendeződnek ($\mu_r \gg 1$). Pl.: Fe, Co, Ni

A periódusos rendszer

1 H 1.00794																	1 H 1.00794	2 He 4.002602
3 Li 6.941	4 Be 9.012182											5 B 10.811	6 C 12.0107	7 N 14.00674	8 O 15.9994	9 F 18.9984032	10 Ne 20.1797	
11 Na 22.989770	12 Mg 24.3050											13 Al 26.981538	14 Si 28.0855	15 P 30.973761	16 S 32.066	17 Cl 35.4527	18 Ar 39.948	
19 K 39.0983	20 Ca 40.078	21 Sc 44.955910	22 Ti 47.867	23 V 50.9415	24 Cr 51.9961	25 Mn 54.938049	26 Fe 55.845	27 Co 58.933200	28 Ni 58.6934	29 Cu 63.546	30 Zn 65.39	31 Ga 69.723	32 Ge 72.61	33 As 74.92160	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 Kr 83.80	
37 Rb 85.4678	38 Sr 87.62	39 Y 88.90585	40 Zr 91.224	41 Nb 92.90638	42 Mo 95.94	43 Tc (98)	44 Ru 101.07	45 Rh 102.90550	46 Pd 106.42	47 Ag 107.8682	48 Cd 112.411	49 In 114.818	50 Sn 118.710	51 Sb 121.760	52 Te 127.60	53 I 126.90447	54 Xe 131.29	
55 Cs 132.90545	56 Ba 137.327	57 La 138.9055	72 Hf 178.49	73 Ta 180.9479	74 W 183.84	75 Re 186.207	76 Os 190.23	77 Ir 192.217	78 Pt 195.078	79 Au 196.96655	80 Hg 200.59	81 Tl 204.3833	82 Pb 207.2	83 Bi 208.98038	84 Po (209)	85 At (210)	86 Rn (222)	
87 Fr (223)	88 Ra (226)	89 Ac (227)	104 Rf (261)	105 Db (262)	106 Sg (263)	107 Bh (262)	108 Hs (265)	109 Mt (266)										

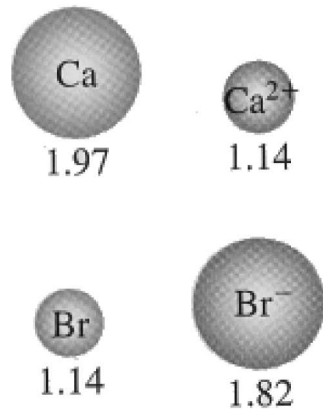
58 Ce 140.116	59 Pr 140.90765	60 Nd 144.24	61 Pm (145)	62 Sm 150.36	63 Eu 151.964	64 Gd 157.25	65 Tb 158.92534	66 Dy 162.50	67 Ho 164.93032	68 Er 167.26	69 Tm 168.93421	70 Yb 173.04	71 Lu 174.967
90 Th 232.0381	91 Pa 231.03588	92 U 238.0289	93 Np (237)	94 Pu (244)	95 Am (243)	96 Cm (247)	97 Bk (247)	98 Cf (251)	99 Es (252)	100 Fm (257)	101 Md (258)	102 No (259)	103 Lr (262)

Atomsugár, ionsugár



1	H	2	He																																
3	Li	4	Be	5	B	6	C	7	N	8	O	9	F	10	Ne																				
11	Na	12	Mg	13	Al	14	Si	15	P	16	S	17	Cl	18	Ar																				
19	K	20	Ca	21	Sc	22	Ti	23	V	24	Cr	25	Mn	26	Fe	27	Co	28	Ni	29	Cu	30	Zn	31	Ga	32	Ge	33	As	34	Se	35	Br	36	Kr
37	Rb	38	Sr	39	Y	40	Zr	41	Nb	42	Mo	43	Tc	44	Ru	45	Rh	46	Pd	47	Ag	48	Cd	49	In	50	Sn	51	Sb	52	Te	53	I	54	Xe
55	Cs	56	Ba	57	La	58	Hf	59	Ta	60	W	61	Re	62	Os	63	Ir	64	Pt	65	Au	66	Hg	67	Tl	68	Pb	69	Bi	70	Po	71	At	72	Rn
87	Fr	88	Ra	89	Ac	90	Th	91	Pa	92	U	93	Np	94	Pu	95	Am	96	Cm	97	Bk	98	Cf	99	Es	100	Fm	101	Md	102	No	103	Lr		

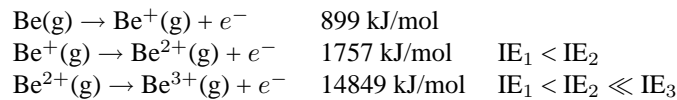
58	Ce	59	Pr	60	Nd	61	Pm	62	Sm	63	Eu	64	Gd	65	Tb	66	Dy	67	Ho	68	Er	69	Tm	70	Yb	71	Lu
90	Th	91	Pa	92	U	93	Np	94	Pu	95	Am	96	Cm	97	Bk	98	Cf	99	Es	100	Fm	101	Md	102	No	103	Lr



Ionizációs energia

Az első ionizációs energia: egy gázállapotú atomból a legkönnyebben leszakítható elektron eltávolításához szükséges energia.

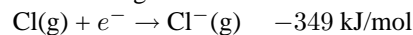
1	H	2	He																																
3	Li	4	Be	5	B	6	C	7	N	8	O	9	F	10	Ne																				
11	Na	12	Mg	13	Al	14	Si	15	P	16	S	17	Cl	18	Ar																				
19	K	20	Ca	21	Sc	22	Ti	23	V	24	Cr	25	Mn	26	Fe	27	Co	28	Ni	29	Cu	30	Zn	31	Ga	32	Ge	33	As	34	Se	35	Br	36	Kr
37	Rb	38	Sr	39	Y	40	Zr	41	Nb	42	Mo	43	Tc	44	Ru	45	Rh	46	Pd	47	Ag	48	Cd	49	In	50	Sn	51	Sb	52	Te	53	I	54	Xe
55	Cs	56	Ba	57	La	58	Hf	59	Ta	60	W	61	Re	62	Os	63	Ir	64	Pt	65	Au	66	Hg	67	Tl	68	Pb	69	Bi	70	Po	71	At	72	Rn
87	Fr	88	Ra	89	Ac	90	Th	91	Pa	92	U	93	Np	94	Pu	95	Am	96	Cm	97	Bk	98	Cf	99	Es	100	Fm	101	Md	102	No	103	Lr		



58	Ce	59	Pr	60	Nd	61	Pm	62	Sm	63	Eu	64	Gd	65	Tb	66	Dy	67	Ho	68	Er	69	Tm	70	Yb	71	Lu
90	Th	91	Pa	92	U	93	Np	94	Pu	95	Am	96	Cm	97	Bk	98	Cf	99	Es	100	Fm	101	Md	102	No	103	Lr

Elektronaffinitás

Az elektronaffinitás: egy gázállapotú atomból egyszeresen negatív töltésű ion keletkezését kísérő energia változás.



Az ionok típusai

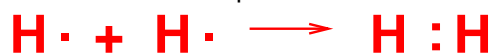
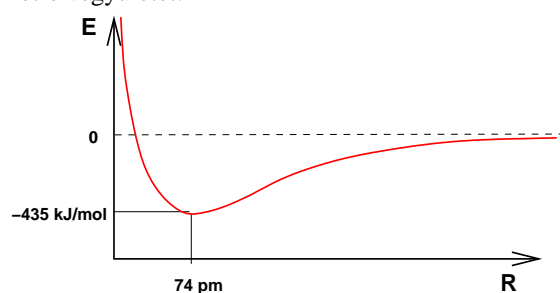
- Nemesgáz konfiguráció
 s^2 : H^- , Li^+ , Be^{2+}
 s^2p^6 : pl. Na^+ , Ca^{2+} , Sc^{3+} , Cl^- , O^{2-} ...
- d^{10} konfiguráció
 $Zn ([Ar]3d^{10}4s^2) \rightarrow Zn^{2+} ([Ar]3d^{10}) + 2e^-$
 Cu^+ , Ag^+ , Cd^{2+} , Tl^{3+} , ...
- $d^{10}s^2$
 $Sn ([Kr]4d^{10}5s^25p^2) \rightarrow Sn^{2+} ([Kr]4d^{10}5s^2) + 2e^-$
 Tl^+ , Pb^{2+} , Bi^{3+} , ...

Átmenetifémek ionjai

- $3s^23p^63d^1$: Ti^{3+}
- $3s^23p^63d^2$: V^{3+}
- $3s^23p^63d^3$: Cr^{3+}
- $3s^23p^63d^4$: Mn^{3+}
- $3s^23p^63d^5$: Mn^{2+} , Fe^{3+}
- $3s^23p^63d^6$: Fe^{2+} , Co^{3+}
- $3s^23p^63d^7$: Co^{2+}
- $3s^23p^63d^8$: Ni^{2+}
- $3s^23p^63d^9$: Cu^{2+}

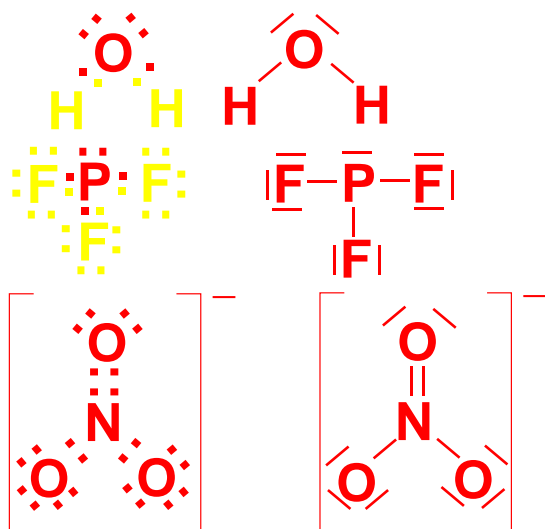
Kovalens kötés

Kovalens kötésről akkor beszélünk, ha két atom közös elektronpár(ok) kialakításával hoz létre vegyületet.

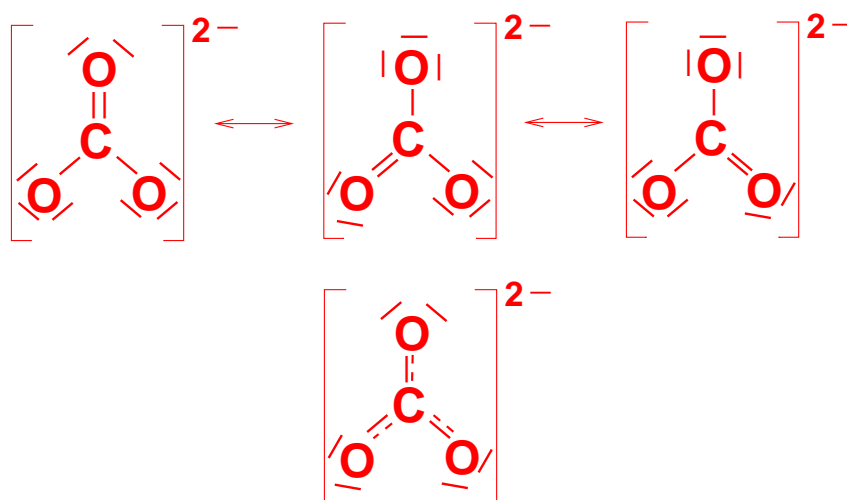


Lewis szerkezet, oktettszabály

Az s és p mező elemei vegyületeikben a nemesgáz konfiguráció (8 elektronos) elérésére törekednek.



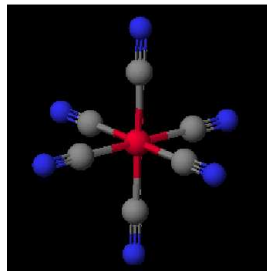
Rezonancia szerkezetek, delokalizált kötések



Datív kötés

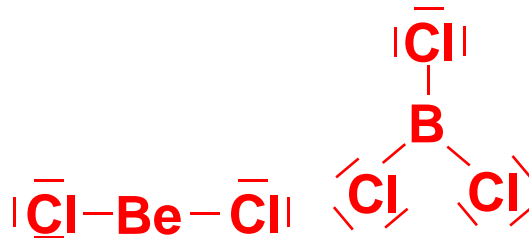
A kovalens kötés egy speciális esete, amikor a kötőelektronpárt az egyik atom szolgáltatja. Ilyen kötések találunk a komplex vegyületekben is.



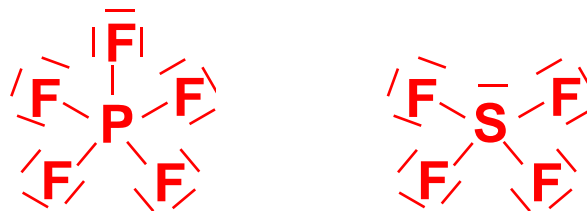


Eltérések az oktettszabálytól

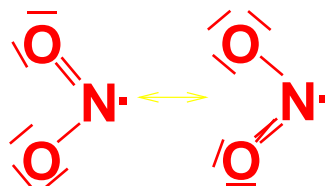
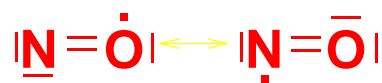
Elektronhiányos vegyületek



A központi elem körül 8-nál több elektront tartalmazó vegyületek (3. periódustól a d pályák megjelenése miatt)



Párosítatlan számú elektront tartalmazó vegyületek



Kötésrend

- egyszeres kötés (σ kötés [$s - s$, $s - p$, $p - p$])



- kétszeres kötés (1 σ kötés + 1 π kötés [$p - p$])



- háromszoros kötés (1 σ kötés + 2 π kötés)



Kötéstávolság, kötési energia

	kötéstávolság (pm)	kötési energia (kJ/mol)
H–H	74	436
C–C	154	347
N–N	140	159
O–O	132	138
F–F	128	159
Si–Si	234	176
C=C	134	611
O=O	121	498
C≡C	121	837
N≡N	110	946

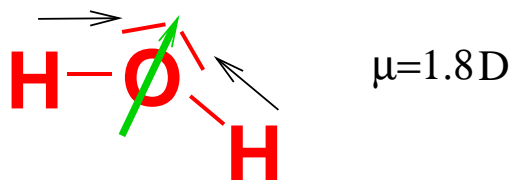
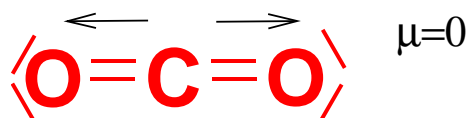
Kötéspolaritás, dipólmomentum

$$\vec{\mu} = Q \cdot \vec{d}$$

	HF	HCl	HBr	HI
ΔEN	1.9	0.9	0.7	0.4
$\mu(\text{D})$	1.91	1.03	0.79	0.38

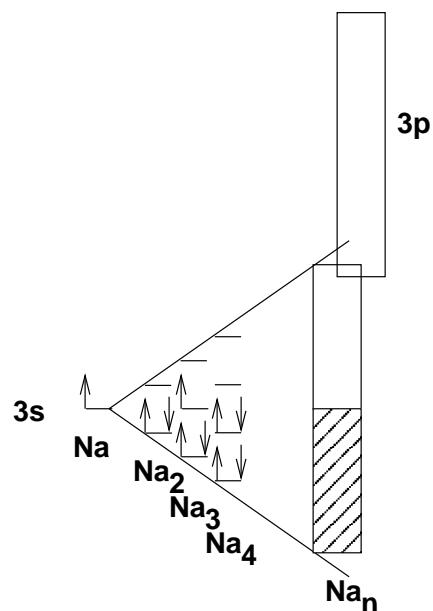
Molekulapolaritás

$$\vec{\mu} = Q \cdot \vec{d}$$



Fémes kötés

A rácspontokban lévő pozitív töltésű fémionokat közös, delokalizált elektronrendszer tartja össze.



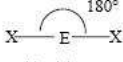
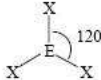
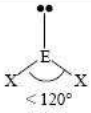
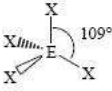

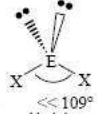
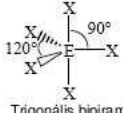
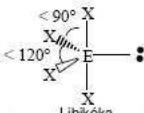
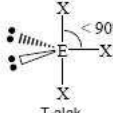
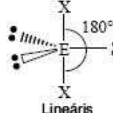
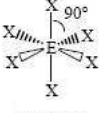
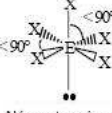
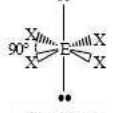
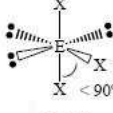
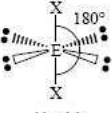
Átmenet a kötéstípusok között

$\Delta EN = 0$	apoláros kovalens vagy fémes kötés
$0 < \Delta EN < 2$	poláros kovalens vagy fémes kötés
$2 < \Delta EN$	ionos kötés

Elektronpártaszítási-elmélet (VSEPR)

A központi atom külső elektronhéján lévő (kötő vagy nemkötő) elektronpárok taszítják egymást. Ez olyan geometriai elrendeződéshez vezet amelyben ezek az elektronpárok a lehető legtávolabb kerülnek egymástól.

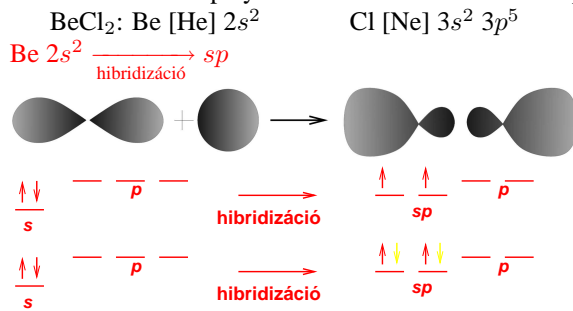
Jelölés: A: központi atom, X: kötő elektronpárok, E: nemkötő elektronpárok. A nemkötő-elektronpárok térigénye nagyobb mint kötőelektronpároké.

VSEPR					
X+E	E ₀	E ₁	E ₂	E ₃	E ₄
2	 Lineáris				
3	 Síkháromszög	 V-alak			
4	 Tetraéder	 V-alak	 V-alak		
5	 Trigonális bipiramis	 Libikóka	 T-alak	 Lineáris	
6	 Oktaéder	 Négyzetes piramis	 Síknégyzet	 T-alak	 Lineáris

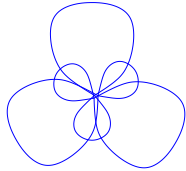
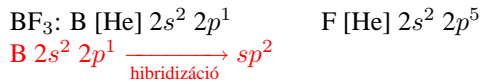
AX ₂	BeCl ₂ , CdI ₂ , HgBr ₂	lineáris
AX ₃	BF ₃ , BF ₃ , NO ₃ ⁻	síkháromszög
AX ₂ E	SO ₂ , NO ₂ ⁻	V-alak
AX ₄	CH ₄ , CCl ₄ , NH ₄ ⁺	tetraéder
AX ₃ E	NH ₃ , SO ₃ ²⁻	trigonális piramis
AX ₂ E ₂	H ₂ O	V-alak
AX ₅	PF ₅ , SbCl ₅	trigonális bipiramis
AX ₄ E	SF ₄	libikóka
AX ₃ E ₂	ClF ₃	T-alak
AX ₂ E ₃	XeF ₂ , I ₃ ⁻	lineáris
AX ₆	SF ₆ , SeF ₆	oktaéder
AX ₅ E	BrF ₅	négyzet alapú piramis
AX ₄ E ₂	XeF ₄	síknégyzet

Vegyértékkötés-elmélet (VB)

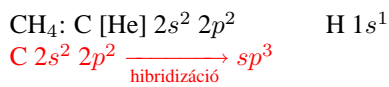
A kovalens kötés az atompályák átfedésével jön létre. A megfelelő átfedés és geometria eléréséhez az atompályák kombinálásával ún. hibrid pályák kialakulását feltételezzük.



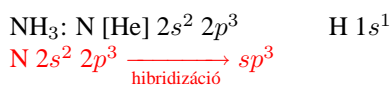
Síkháromszög alakú molekulák

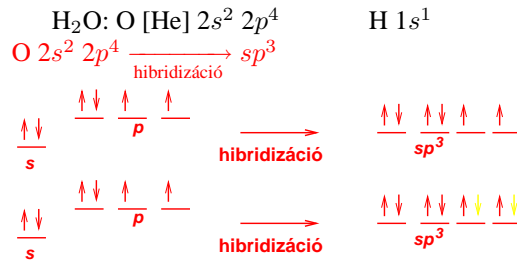
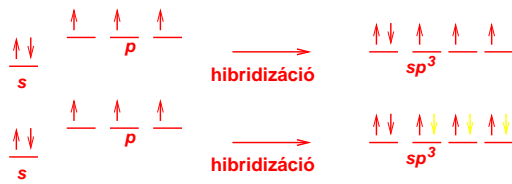


Tetraéder alakú molekulák

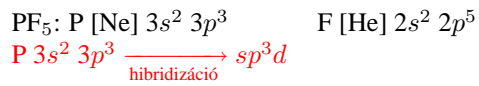


Piramis és V-alakú molekulák

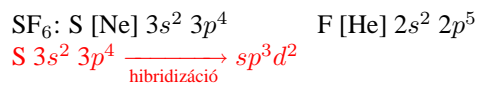




Trigonális bipiramis alakú molekulák

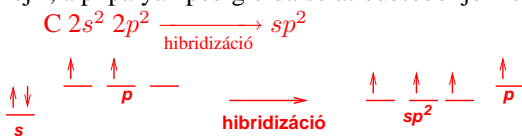


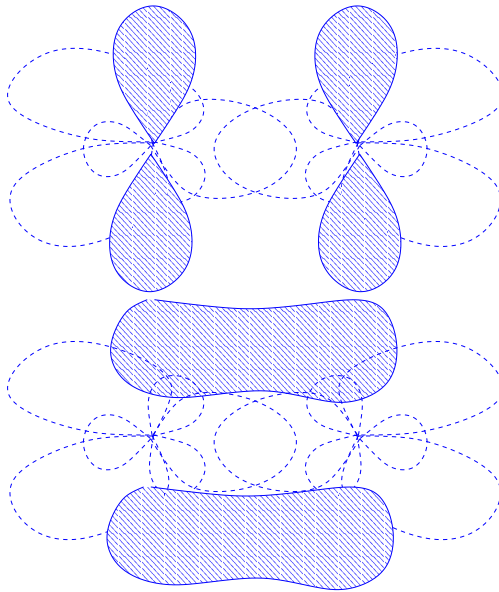
Oktaéder alakú molekulák



Kettős kötés

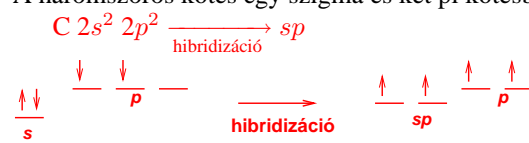
A kettős kötés egy szigma és egy pi kötésből áll. A szigma kötés az atompályák „fej-fej”, a pi pályák pedig oldalsó átfedéséből jönnek létre.





Háromszoros kötés

A háromszoros kötés egy szigma és két pi kötésből áll.



Molekulapálya-elmélet (MO)

A molekulapálya elmélet szerint az atompályákból olyan molekulapályák jönnek létre amelyeken lévő elektronok a molekula egészéhez tartoznak.

Kötőpályák: az ilyen pályák energiája kisebb mint azon eredeti atompályáké amelyek kombinációjából kialakultak.

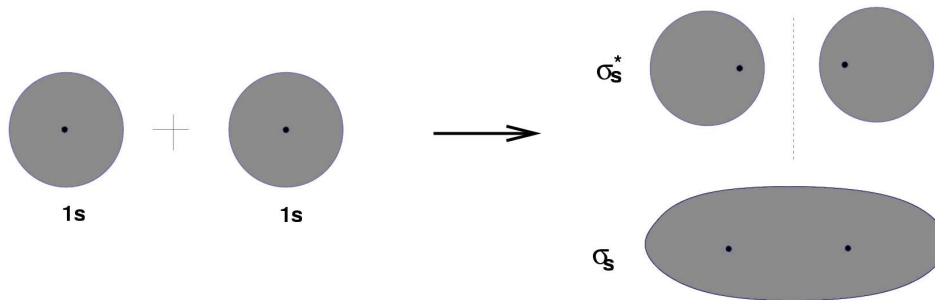
Lazítópályák: az ilyen pályák energiája nagyobb mint azon eredeti atompályáké amelyek kombinációjából kialakultak.

Kötésrend:

$$\frac{(\text{kötőpályán lévő elektronok száma}) - (\text{lazítópályán lévő elektronok száma})}{2}$$

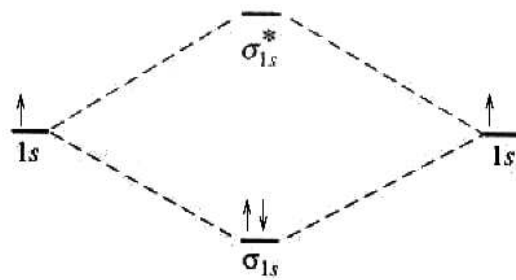
A nagyobb kötésrend rövidebb és erősebb kötés kialakulását jelzi.

Molekulapálya-elmélet (MO)



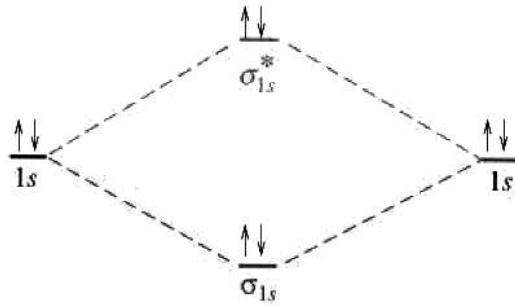
Molekulapálya-elmélet (MO)

Hidrogén H₂



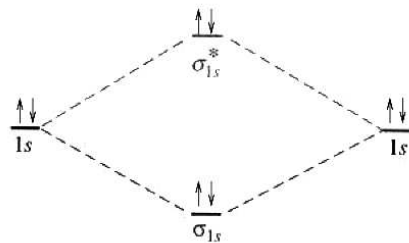
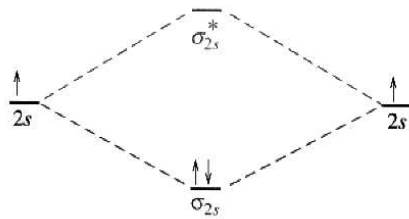
Stabil:	igen
Kötésrend:	1
Paramágneses:	nem

Hélium He₂



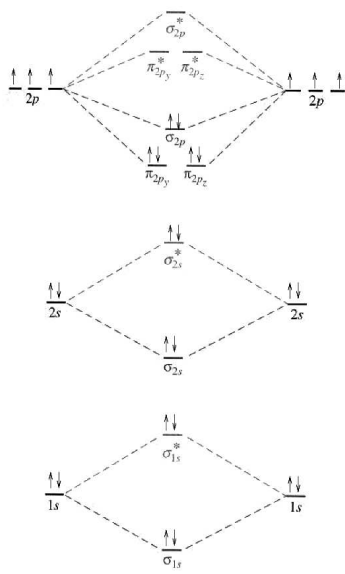
Stabil: nem
 Kötésrend: 0
 Paramágneses: nem

Lithium Li_2



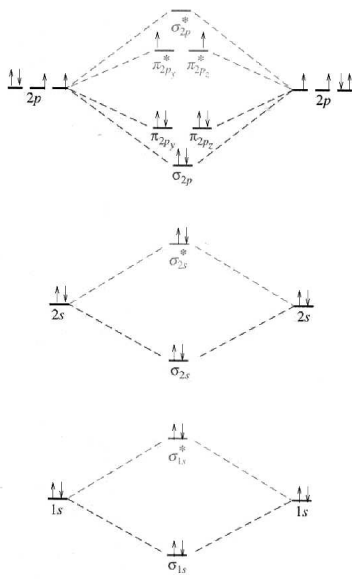
Stabil: igen
 (csak gázfázisban létezik)
 Kötésrend: 1
 Paramágneses: nem

Nitrogén N_2



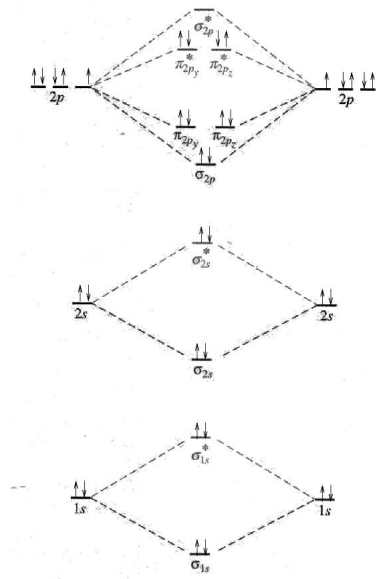
Stabil: igen
 Kötésrend: 3
 Paramágneses: nem

Oxigén O₂



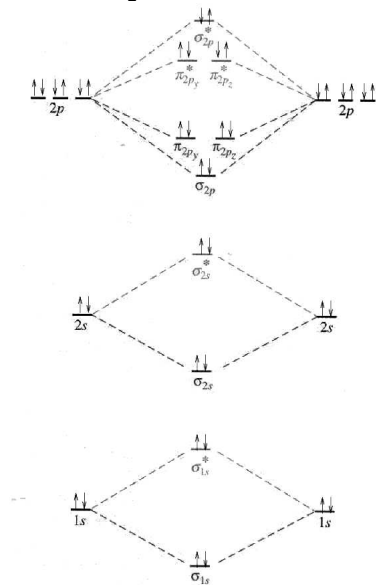
Stabil: igen
 Kötésrend: 2
 Paramágneses: igen

Fluor F₂



Stabil: igen
 Kötésrend: 1
 Paramágneses: nem

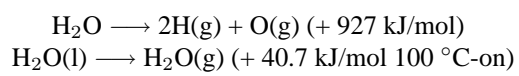
Neon N₂



Stabil: nem
 Kötésrend: 0
 Paramágneses: nem

Intermolekuláris kötések

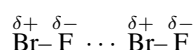
- Molekulák közötti kölcsönhatások
- Gyengébbek az elsődrendű kötéseknel.



Dipólus-dipólus és ion-dipólus kölcsönhatás

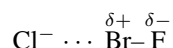
Dipólus-dipólus kölcsönhatás

- Poláris molekulák közötti elektrosztatikus kölcsönhatás, ahol az egyik molekula pozitív polaritású része a másik molekula negatív polaritású részére gyakorol vonzást.
- ≈ 4 kJ/mol.
- A dipólus-dipólus kölcsönhatások jelentősége csökken a hőmérséklet növelésével.



Ion-dipólus kölcsönhatás

Poláris molekulák és ionok közötti vonzó kölcsönhatás.



van der Waals-féle erők

Dipólusmomentummal nem rendelkező molekulák közötti kölcsönhatás. A van der Waals-féle erőket (diszperziós kölcsönhatás) a molekulák pillanatnyi polarizációja hozza létre. Minél nagyobb egy atom vagy molekula körül az elektronfelhő mérete annál könnyebben polarizálható.

- ion-indukált dipólus
- dipólus-indukált dipólus ($\text{Xe}\cdot\text{H}_2\text{O}$)
- indukált dipólus-indukált dipólus (nemesgázok kondenzációja)

Hidrogénkötés

A hidrogénkötés a egy speciális erős dipólus-dipólus kölcsönhatás. Kialakulásának feltétele hogy a molekulákban legyen olyan hidrogén ami egy nagy elektronegativitású de kis méretű atomhoz (F, O, N) kapcsolódik (a kötés rendkívül poláris) amelynek van nemkötő elektronpárja is.

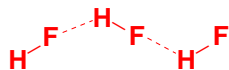
$\overset{\delta-}{\text{F}}-\overset{\delta+}{\text{H}} \cdots \overset{\delta-}{\text{F}}-\overset{\delta+}{\text{H}}$	
kötés	energia (kJ/mol)
ionos	$\approx 100 - 3800$
kovalens	$\approx 100 - 900$
hidrogénkötés	$\approx 10 - 40$
diszperziós erők	$\approx 0,1 - 10$

A hidrogénkötések kialakulásának bizonyítéka:

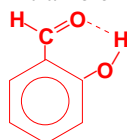
Várt viselkedés: a forráspont növekszik a moláris tömeg növekedésével.
 Tapasztalat: a hidrogénkötésre képes vegyületek forráspontja kiúróan magas.

Hidrogénkötés

- Intermolekuláris hidrogénkötés



- Intramolekuláris hidrogénkötés



- H₂O: a jég szerkezetében és tulajdonságaiban jelentős szerepet játszik.
- Rendkívül fontos a szerepe a biológia rendszerekben:fehérjék, DNS...

Másodlagos kötőerők

Molekula (atom)	Dipólus momentum	Dipólus-Dipólus energia	Diszperziós energia	Teljes energia
Ar	0	0	8,5	8,5
CO	0,1	≈0	8,7	8,7
HCl	1,03	3,3	17,8	21
H ₂ O	1,85	36 (hidrogénkötés)	10,9	47

Halmazállapotok

Szilárd anyagok

Ionrácsos vegyületek

- A rácspontokban anionok és kationok találhatóak.
- Elektrosztatikus kölcsönhatás
- Tulajdonságok: kemények, törékenyek, magas olvadási pont, rossz hő és áramvezetők.
- Példák: NaCl, LiF, MgO

CsCl-típusú: $1 < r^-/r^+ < 1,37$

NaCl-típusú: $1,37 < r^-/r^+ < 2,44$

ZnS-típusú: $2,44 < r^-/r^+ < 4,55$

Szilárd anyagok

Atomrácsos kristályok

- A rácspontokban atomok helyezkednek el.
- Összetartó erő: kovalens kötés.
- Tulajdonságok: kemények, magas olvadási pont, rossz hő és áramvezetők.

- Páldák: C (gyémánt), SiO₂ (kvarc)

Az **atomrácsos kristályokban** nincsenek egyedi molekulák voltaképpen az egész kristály egyetlen óriási molekulának tekinthető.

Szilárd anyagok

Molekularácsos vegyületek

- A rácspontokban egyedi molekulák (atomok) helyezkednek el.
- Összetartó erő: diszpeziós kölcsönhatás, dipólus-dipólus kölcsönhatás, hidrogénkötés
- Tulajdonságok: lágyak, alacsony olvadáspont, rossz hő és áramvezetők.
- Páldák: Ar, CO₂, I₂, H₂O

A **molekularácsos kristályokban** az egyedi molekulákon belül erő kovalens kötés van de a molekulák közötti kölcsönhatás jóval gyengébb.

Szilárd anyagok

Fémek

- A rácspontokban atomok találhatóak
- Fémes kötés
- Tulajdonságok: kemények vagy lágyak, alacsony vagy magas olvadáspont, jó hő és áramvezetők.
- Páldák: Na, Mg, Fe, Cu

Gázok jellemzése

A gázok jellemezhetőek a következő négy fizikai mennyiséggel:

- anyagmennyiség n
- hőmérséklet T
- térfogat V
- nyomás p

Gáztörvények

Boyle-törvény

Robert Boyle(1627-1691)

Állandó hőmérsékleten egy adott mennyiségű gáz térfogata fordítottan arányos a nyomásával.

$$p \propto \frac{1}{V} \text{ (ha } n, T \text{ állandó)}$$

$$p_1 V_1 = p_2 V_2 \text{ (ha } n, T \text{ állandó)}$$

Gay-Lussac-törvények

Állandó nyomáson egy adott mennyiségű gáz térfogata egyenesen arányos a hőmérsékletével.

$$V \propto T \text{ (ha } n, p \text{ állandó)}$$

$$\frac{V_1}{T_1} = \frac{V_2}{T_2} \text{ (ha } n, p \text{ állandó)}$$

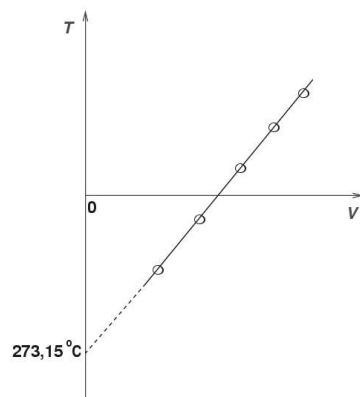
Állandó térfogaton egy adott mennyiségű gáz nyomása egyenesen arányos a hőmérsékletével.

$$p \propto T \text{ (ha } n, V \text{ állandó)}$$

$$\frac{p_1}{T_1} = \frac{p_2}{T_2} \text{ (ha } n, V \text{ állandó)}$$

A termodinamikai hőmérsékleti skála

Lord Kelvin (1824-1907)



$$K = ^\circ C + 273.15^\circ.$$

Avogadro tétele (1811)

Ugyanazon a hőmérsékleten és nyomáson azonos gáztérfogatokban azonos számú molekula van.

$$V \propto n \text{ (ha } p, T \text{ állandó)}$$

$$V_m = \frac{V}{n}$$

Standard hőmérsékleten (273.15 K) és nyomáson (1.01325×10^5 Pa):

$$V_m = 22,41 \text{ L/mol}$$

Tökéletes gázok állapotegyenlete

$$pV = nRT$$

$$R = 8,3145 \frac{\text{kPa} \cdot \text{dm}^3}{\text{mol} \cdot \text{K}}$$

Tökéletes gáznak nevezzük azt a gázt amely ennek az egyenletnek megfelelően viselkedik. Szobahőmérsékleten és közönséges nyomáson az egyenlet a legtöbb gázra kielégítően érvényes.

$$V_m = \frac{V}{n} = \frac{RT}{p}$$

Gázkeverékek

Dalton-törvénye: A tökéletes gázok keveréke által kifejtett nyomás egyenlő azon nyomások összegével, amelyet az egyes gázok akkor fejtenének ki, ha egyedül töltene ki az adott térfogatot.

$$p = p_A + p_B + p_C + \dots$$

$$p = \frac{nRT}{V} = \frac{n_A RT}{V} + \frac{n_B RT}{V} + \frac{n_C RT}{V} \dots$$

Parciális nyomás:

$$p_A = \frac{n_A}{n} p$$

Reális gázok

Ideális gáz:

1. az anyagi minőség nem befolyásolja a gáz viselkedését
2. nincs kölcsönhatás a gázcsepscikék között
3. a gázcsepscikék mérete elhanyagolható a köztük lévő távolsághoz képest

Az ideális viselkedéstől való eltérés különösen akkor jelentős, ha nagy a nyomás és alacsony a hőmérséklet, de különösképpen ha a gáz közel van a cseppfolyósodáshoz.

Reális gázok

Johannes van der Waals (1837-1923)

$$V - nb$$

Az nb korrekció a molekulák térfogatát veszi figyelembe. Nagyobb méretű molekulákhoz nagyobb b érték tartozik.

$$p + \frac{n^2a}{V^2}$$

Ebben a korrekcióban a nagyobb a érték erősebb kölcsönhatást jelent. van der Waals-egyenlet

$$\left(P + \frac{n^2a}{V^2}\right)(V - nb) = nRT$$

Az a és b mennyiségeket kísérletesen meghatározhatóak, és jellemzőek az adott gázra.

	$a/(\text{atmL}^2/\text{mol}^2)$	$b/(10^{-2}\text{L}/\text{mol})$
Ar	1,345	3,22
N ₂	1,390	3,913
NH ₃	4,17	3,71
CO ₂	3,592	4,267

Folyadékok

- Felveszik a tartóedény alakját
- Meghatározott térfogattal rendelkeznek, csak igen kis mértékben nyomhatóak össze.
- A részecskék között számottevő kölcsönhatás van.
- A részecskék eltávolodhatnak egymástól.
- A folyadékok jellemzői részecskék közötti másodlagos kötések jellegétől függenek.

Viszkozitás

A viszkozitás (belső súrlódás) a folyadékoknak a folyással szemben kifejtett ellenállása.

- Általánosságban az erősebb intermolekuláris kölcsönhatás nagyobb viszkozitást eredményez.
- A hőmérséklet növelésével csökken a viszkozitás.

Felületi feszültség

Az a munka amely egységnyi szabad folyadékfelszín létrehozásához be kell fektetni.

$$\gamma = \frac{\Delta W}{\Delta A}$$

- A legkedvezőbb állapot az amelyben minimális a felület.
- A hőmérséklet növelésével csökken a felületi feszültség:

Eötvös-szabály

$$\gamma V_m^{2/3} = k(T'_{kr} - T)$$

ahol γ a felületi feszültség, V_m a moláris térfogat, k az Eötvös-állandó, T'_{kr} a korrigált kritikus hőmérséklet.

Jellemző	Illékony foly. gyenge másodlagos kötőerők	Nem illékony foly. erős másodlagos kötőerők
viszkozitás	kicsi	nagy
felületi feszültség	kicsi	nagy
gőznyomás	nagy	kicsi
forráspont	alacsony	magas

Termodinamika és Termokémia

A termodinamika a természetben végbemenő folyamatok energetikai leírásával foglalkozik.

Feynman: „Van egy tény – ha úgy tetszik – törvény, amely az összes eddig ismert természeti jelenséget irányítja. . .

Ez az energia megmaradás törvénye, amely azt mondja ki, hogy van egy bizonyos, energiának nevezett mennyiség, amely változatlan marad a természetben végbemenő sokfajta változás során. . .

A fizika mai állása mellett valójában nem tudjuk, mi is az **energia**.”

- Mozgási energia:

$$E_{kinetic} = \frac{1}{2}mv^2$$

- Potenciális energia: pl.

$$E_{pot} = mgh$$

- Amennyiben a rendszer és környezete között lévő hőmérsékletkülönbség eredményezi a rendszer energiaváltozását, akkor azt mondjuk, hogy az energia *hő* formájában áramlott át.
- A rendszer a világnak az a része, ami iránt érdeklődünk (pl. egy reakcióedény, egy galvánelem. . .). A környezet mindaz ami a rendszert körbeveszi.
- A rendszer *termodinamikai állapotát* leíró fizikai mennyiségeket állapotjelzőknek hívjuk (p, V, T, n, \dots).
- A rendszer teljes energiáját belső energiának hívjuk (magenergia, a molekulák mozgási és potenciális energiája. . .).
- Azokat a folyamatokat amelyekben ez energia hő formájában szabadul fel, *exotermnek* nevezzük (pl. égések). Az energiát hőként abszorbeáló folyamatokat *endotermnek* nevezzük (pl. a víz párolgása).
- Azt a hőmennyiséget amely a rendszer hőmérsékletének 1 °C-kal való emeléséhez szükséges *hőkapacitásnak* hívjuk.
- Fajlagos hőkapacitás (fajhő) 1g anyag hőmérsékletének 1 °C-kal való emeléséhez szükséges hőmennyiség.
- Moláris hőkapacitás 1 mol anyag hőmérsékletének 1 °C-kal való emeléséhez szükséges hőmennyiség.

A termodinamika első főtétele

A rendszer belső energiája mindaddig állandó, míg azt munkavégzés, vagy hőcsere meg nem változtatja.

$$\Delta U = q + w$$

- q pozitív: a rendszer hőt von el a környezetétől.
- q negatív: a rendszer hőt ad át a környezetének.
- w pozitív: a környezet munkát végez a rendszeren.
- w negatív: a rendszer munkát végez a környezeten.

Térfogati munka

Állandó nyomáson a térfogat V_1 -ről V_2 -re változik:

$$w = -p(V_2 - V_1) = -p\Delta V$$

Kompresszió: a környezet végez munkát a rendszeren. $V_2 < V_1$ így $\Delta V < 0$ és $w > 0$.

Kitágulás: a rendszer végez munkát a környezetén. $V_2 > V_1$ így $\Delta V > 0$ és $w < 0$.

A belső energia megváltozása

Állandó térfogaton $w = 0$, így a

$$\Delta U = q + w$$

egyenlet a következő formára egyszerűsödik:

$$\Delta U = q_v$$

Állandó térfogaton belső energia megváltozása egyenlő a rendszer által elnyelt vagy kibocsájtott hővel.

A belső energia megváltozása

A kémiai folyamatok gyakran vizsgáljuk állandó nyomáson (pl. légköri nyomáson).

Állandó nyomáson a

$$\Delta U = q + w$$

egyenlet a következő módon írható át:

$$\Delta U = q_p - p\Delta V$$

Az állandó nyomáson bekövetkezett hőcsere a rendszer H entalpiájának megváltozásával egyenlő.

$$q_p = \Delta H = \Delta U + p\Delta V \text{ (állandó } T, p)$$

Az entalpia

Definíciószerűen:

$$H = U + pV$$

$$\Delta H = \Delta U + p\Delta V \text{ (állandó } T, p)$$

Ideális gázokra:

$$p\Delta V = (\Delta n)RT$$

így,

$$\Delta H = \Delta U + (\Delta n)RT$$

Természetesen ha $\Delta n = 0$, akkor $\Delta H = \Delta U$.

Folyadékok és szilárd anyagok esetében a térfogatváltozás elhanyagolhatóan kicsi ezért ($\Delta H \approx \Delta U$).

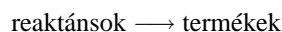
Standardállapot

Egy anyag **standardállapota** valamilyen adott hőmérsékleten (általában 25°C) tiszta formájában, 1 bar nyomáson valósul meg.

1. Tiszta folyadék vagy szilárd anyag számára a standardállapot a folyadék illetve a szilárd állapot (C(grafit), H₂O(l), CaCO₃(s)).
2. Gázok standard állapota a gázállapot 1 bar nyomáson; gázkeverékben az adott gáz parciális nyomásának kell, hogy 1 bar legyen.
3. Oldatokban a standard állapot az egységnyi molaritású oldatra vonatkozik.

Standardentalpia-változás

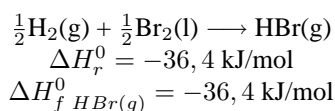
Egy reakció **standardentalpia-változása (reakcióhője)**, ΔH_r^0



az az entalpiaváltozás, amikor a standard állapotú reaktánsok standardállapotú termékekké alakulnak át.

A *standard képződési entalpia* (képződéshő), ΔH_f^0 , mólnyi mennyiségű anyag referenciaállapotú elemeiből való képződésének standardentalpia-változása. Egy elem referenciaállapotának az adott hőmérsékleten és nyomáson legstabilabb állapotát nevezzük. Az elemek standard képződési entalpiája referenciaállapotukban, valamennyi hőmérsékleten zérus.

Reakcióentalpia (reakcióhő)



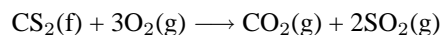
A standard-reakcióentalpiát (reakcióhőt) megkapjuk, ha termékek standard képződési entalpiáinak (képződéshő) összegéből kivonjuk a reaktánsok standard képződési entalpiáinak összegét.

$$\Delta H_r^0 = \sum \Delta H_f^0_{\text{termékek}} - \sum \Delta H_f^0_{\text{reaktánsok}}$$

Reakcióentalpia (reakcióhő)

Példa:

Számítsuk ki a szén-diszulfid égéshőjét.



$$\Delta H_f^0(\text{CO}_2(g)) = -393,5 \text{ kJ}, \quad \Delta H_f^0(\text{SO}_2(g)) = -296,8 \text{ kJ}$$

$$\Delta H_f^0(\text{CS}_2(f)) = +87,9 \text{ kJ}$$

$$\Delta H_r^0 = \sum \Delta H_f^0 \text{ termékek} - \sum \Delta H_f^0 \text{ reaktánsok}$$

$$\Delta H_r^0 = \Delta H_f^0(\text{CO}_2(g)) + 2\Delta H_f^0(\text{SO}_2(g)) -$$

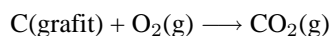
$$-(\Delta H_f^0(\text{CS}_2(f)) + 3\Delta H_f^0(\text{O}_2(f)))$$

$$\Delta H_r^0 = (-393,5 - 2 \cdot 296,8) - (87,9 + 0) = -1057 \text{ kJ}$$

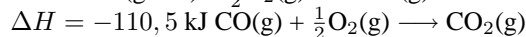
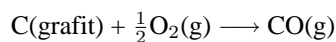
Hess tétele

G. H. Hess (1802-1850)

Az eredő reakcióentalpia (reakcióhő) csak a reaktánsok és a termékek minőségétől függ és független a kezdeti állapottól a végállapotig vezető úttól, vagyis attól, hogy a kémiai változás egy vagy több lépésben megy-e végbe.

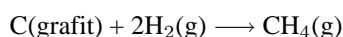


$$\Delta H = -393,5 \text{ kJ}$$



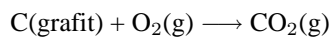
$$\Delta H = -283,0 \text{ kJ}$$

Számoljuk ki a következő reakció során bekövetkező standard entalpiaváltozást.

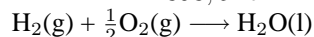


$$\Delta H = ?$$

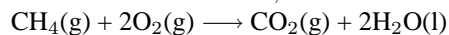
a következő adatokból:



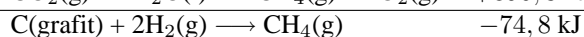
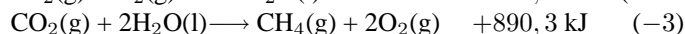
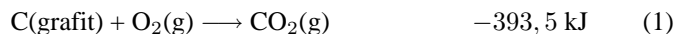
$$\Delta H = -393,5 \text{ kJ}$$



$$\Delta H = -285,8 \text{ kJ}$$



$$\Delta H = +890,3 \text{ kJ}$$



Kalorimetria

A belső energia változásnak mérésére szolgál a kalorimetria.

A kaloriméter ismert mennyiségű vizet tartalmazó hőszigetelt edényből, a vizet magában foglaló tartályból és a hőmérőt tartalmazó reakcióedényből áll.

A folyamat következtében a kaloriméter hőmérsékletében bekövetkező változás egyenesen arányos a felszabaduló vagy elnyelt hővel.

Termokémia

- Párolgáshő: egy mól folyadéknak a forráspontján történő elpárologtatásához szükséges hő (entalpia).
- Olvadáshő egy mól szilárd anyagnak az olvadáspontján történő megolvasztásához szükséges hő (entalpia).
- Semlegesítési hő: ekvivalens mennyiségű sav és bázis reakciójában felszabaduló hő (entalpia).
- Oldáshő egy mól anyag oldódását kísérő hő (entalpia változás).
- Égéshő: egy mól anyag oxigén jelenlétében történő elégetésekor felszabaduló hő.
- Átalakulási hő: egy mól anyag allotróp módosulatai közötti átalakulását kísérő entalpia változás (hő).

A termodinamika második főtétele

Mi határozza meg a spontán végbemenő folyamatok irányát?

- Hőfelszabadulás
- A rendezetlenség növekedése

A spontán változások irányát az **entrópia**, S , segítségével adjuk meg.

A második főtétel: Egy izolált rendszer entrópiája spontán, önként lejátszódó folyamat során növekszik:

$$\Delta S_{tot} > 0$$

Az entrópia

Spontán folyamatokban

$$\Delta S(\text{rendszer}) + \Delta S(\text{környezet}) > 0$$

Reverzibilis folyamatról akkor beszélünk ha a folyamat iránya az állapotjelzők végtelen kis megváltoztatásával megfordítható.

$$\Delta S_{rev} = \frac{q_{rev}}{T}$$

A reverzibilis folyamat idealizált határeset. Valós folyamatokban:

$$\Delta S > \frac{q}{T}$$

Állandó térfogaton:

$$\Delta U = q_v \leq T \Delta S$$

A termodinamika harmadik főtétele

A tiszta, tökéletes kristályos anyagok entrópiája abszolút nulla hőmérsékleten nulla.

$$\Delta S \rightarrow 0, \text{ ha } T \rightarrow 0$$

A standard reakcióentrópia: a tiszta, különálló termékek és kiindulási anyagok entrópiái közötti különbség, miközben valamennyi anyag standard állapotban van.

Néhány jelentő entrópiaváltozással járó folyamat:

- Fázisátalakulások (pl. olvadás $\Delta S(\text{rendszer}) > 0$, fagyás $\Delta S(\text{rendszer}) < 0$)
- Hőmérséklet illetve térfogatváltozás
- Elegyedés, oldódás
- Mólszámváltozással járó folyamatok (mólszámnövekedés esetén $\Delta S(\text{rendszer}) > 0$)

Gibbs függvény

Ha állandó nyomáson, hőátadás van és más munkavégzés nincs, mint térfogati munka, akkor

$$\Delta H = q_p$$

$$\Delta H \leq T \Delta S$$

Szabadentalpia (Gibbs-függvény):

$$G = H - TS$$

$$\Delta G = \Delta H - T \Delta S$$

Egy folyamatból állandó nyomáson és hőmérsékleten kinyerhető maximális hasznos munkát (nem térfogati, pl. elektromos) a folyamatra jellemző ΔG értéke adja meg.

$$\Delta H = q + w + p \Delta V \text{ (állandó } p)$$

Reverzibilis határesetben (T állandó)

$$q = T \Delta S$$

$$\Delta G = \Delta H - T \Delta S$$

$$\Delta G = T \Delta S + w + p \Delta V - T \Delta S$$

legyen

$$w = w_e - p \Delta V$$

így,

$$\Delta G = w_e - p\Delta V + p\Delta V$$

$$\Delta G = w_e \text{ (állandó } p, T)$$

Állandó nyomáson és hőmérsékleten a spontán változás kritériuma:

$$\Delta G \leq 0$$

1. Ha $\Delta G < 0$ a folyamat végbe mehet, a folyamat során hő fejlődik (exoterm)
2. Ha $\Delta G > 0$ a folyamat nem mehet végbe magától, a folyamat endoterm
3. Ha $\Delta G = 0$ a rendszer egyensúlyi állapotban van.

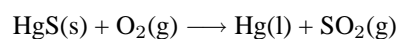
Reakciók spontaneitása

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S, \text{ (állandó } p, T)$$

ΔH	ΔS	
-	+	a reakció spontán minden hőmérsékleten
-	-	a reakció spontán egy meghatározott hőmérséklet alatt
+	+	a reakció spontán egy meghatározott hőmérséklet felett
+	-	a reakció nem megy végbe spontán módon

Feladat:

Végbemeget-e spontán módon a következő reakció:



	HgS(s)	O ₂ (g)	Hg(l)	SO ₂ (g)
ΔH_f^0 (kJ/mol)	-58,2	0	0	-296,8
S_f^0 (J/mol·K)	82,4	205,0	76,0	248,1

$$\Delta H_r^0 = 0 - 296,8 - (-58,2 + 0) = -238,6 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta S_r^0 = 76,02 + 248,1 - (82,4 + 205,0) = +36,7 \text{ J/molK}$$

Ez a reakció végbemeget spontán módon, függetlenül a hőmérséklettől

Egyensúlyi reakciók

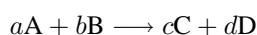
$$\Delta G_r^0 = -RT \ln K$$

$\Delta G_r^0 < 0$	$K > 1$	az egyensúly a termékek képződése felé van eltolva
$\Delta G_r^0 = 0$	$K = 1$	(nagyon ritka)
$\Delta G_r^0 > 0$	$K < 1$	az egyensúly a reaktánsok képződése felé van eltolva

Reakciókinetika

- A kémiai reakciók sebessége a pillanatszerű reakcióktól a végtelen lassú reakciókig terjed.
- A gyors reakciók a másodperc tört része alatt mennek végbe. Ilyenek például a robbanások, a sav-bázis reakciók vagy az egy-elektronváltózással végbemenő redoxi reakciók.
- A közepesen gyors reakciók néhány másodperc vagy óra alatt mennek végbe. Például ide tartozik az észterek lúgos hidrolízise.
- A lassú reakciók napok vagy évek alatt mennek végbe.
- Ha a reakcióban szereplő összes komponens azonos fázisban van akkor homogén reakcióról beszélünk.
- Ha a reakcióban szereplő komponensek különböző fázisban vannak akkor heterogén reakcióról beszélünk.
- A termodinamikai szempontból spontán reakciók nem feltétlenül mennek gyorsan végbe.
- Az erős savak és bázisok reakciója spontán reakció és pillanatszerű.
 $2\text{HCl}(\text{aq}) + \text{Mg}(\text{OH})_2(\text{s}) \longrightarrow \text{MgCl}_2(\text{aq}) + 2 \text{H}_2\text{O}(\text{l}) \quad \Delta G_r^0 = -97 \text{ kJ/mol}$
- A gyémánt égése is spontán termodinamikailag, de a tapasztalat szerint szobahőmérsékleten még igen hosszú idő alatt sem reagál a gyémánt az oxigénnel.
 $\text{C}(\text{gyémánt}) + \text{O}_2(\text{g}) \longrightarrow \text{CO}_2(\text{g}) \quad \Delta G_r^0 = -397 \text{ kJ/mol}$

A reakciósebesség



a kiindulási anyagokkal kifejezve:

$$\text{reakciósebesség} = -\frac{1}{a} \left(\frac{\Delta[\text{A}]}{\Delta t} \right) = -\frac{1}{b} \left(\frac{\Delta[\text{B}]}{\Delta t} \right)$$

a termékekkel kifejezve:

$$\text{reakciósebesség} = \frac{1}{c} \left(\frac{\Delta[\text{C}]}{\Delta t} \right) = \frac{1}{d} \left(\frac{\Delta[\text{D}]}{\Delta t} \right)$$

Mivel a reakciósebesség minden időpillanatban más és más ezért differenciálhányadosokkal írjuk fel:

$$v = -\frac{1}{a} \left(\frac{d[\text{A}]}{dt} \right) = -\frac{1}{b} \left(\frac{d[\text{B}]}{dt} \right) \dots$$

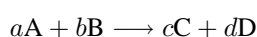
A reakciósebességet a következő tényezők befolyásolják:

- a reagáló anyagok természete
- a reagáló anyagok koncentrációja

- a hőmérséklet
- egyéb anyagok jelenléte
- heterogén reakcióknál a határfelület és annak minősége

A sebességi egyenlet

Guldberg és Waage (1864)

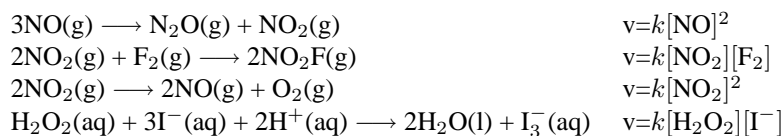


$$v = k[A]^x[B]^y$$

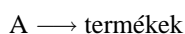
A k állandót az adott reakció *sebességi állandójának* nevezzük.

A hatványkitevőket (x , y) az adott reaktánsra vonatkoztatott *reakciórendnek* nevezzük. Általánosságban x és y nem egyezik meg a sztöchiometria számokkal (a és b).

A sebességi egyenletben szereplő hatványkitevők összegét a **reakció bruttó rendjének** nevezzük.



Elsőrendű reakciók



$$v = \left(\frac{d[A]}{dt} \right) = k[A]$$

$$-\frac{d[A]}{[A]} = kdt$$

$$-\int_{[A]_0}^{[A]} \frac{d[A]}{[A]} = k \int_0^t dt$$

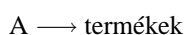
$$-(\ln[A] - \ln[A]_0) = k(t - 0)$$

$$\ln \frac{[A]_0}{[A]} = kt$$

$$[A] = [A]_0 e^{-kt}$$

Felezési idő ($t_{1/2}$)

A felezési idő az az idő, amely ahhoz szükséges, hogy a kiindulási anyagok fele átalakuljon.



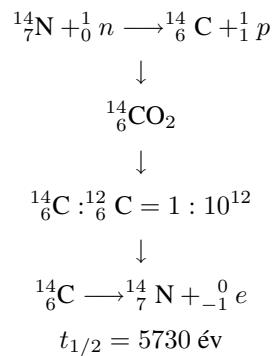
$$\ln \frac{[A]_0}{[A]} = kt$$

$$t_{1/2} = \frac{1}{k} \ln \frac{[A]_0}{\frac{1}{2}[A]_0}$$

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k} = \frac{0,693}{k}$$

Elsőrendű reakcióba a felezési idő nem függ a kiindulási koncentrációtól.

Radioaktív kormeghatározás



Feladat:

Egy ásatáson talált fadarab szén-14 aktivitása csak 63,6 %-a egy mai fadarabénak. Milyen idős lehet a lelet?

$$t_{1/2} = \frac{0,693}{k}$$

$$k = \frac{0,693}{t_{1/2}}$$

$$k = \frac{0,693}{5730} = 1,21 \times 10^{-4} \frac{1}{\text{év}}$$

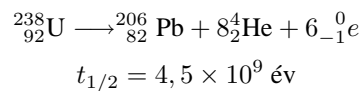
$$N = 0,636N_0$$

$$\ln \frac{N_0}{N} = kt$$

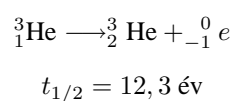
$$\ln \frac{N_0}{0,636N_0} = 1,21 \times 10^{-4}t$$

$$t = 3740 \text{ év}$$

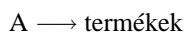
Kőzetek esetében:



Borok kormeghatározása:



Nulladrendű reakciók



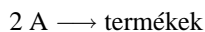
$$v = \left(\frac{d[A]}{dt} \right) = k[A]^0 = k$$

$$[A] = [A]_0 - kt$$

$$t_{1/2} = \frac{[A]_0}{2k}$$

Ilyen folyamat például a szilárd gyógyszerek felszívódása a szervezetben, ha a gyógyszer és az oldószere is feleslegben van.

Másodrendű reakciók

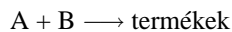


$$v = \left(\frac{d[A]}{dt} \right) = k[A]^2$$

$$\frac{1}{[A]} - \frac{1}{[A]_0} = kt$$

$$t_{1/2} = \frac{1}{k[A]_0}$$

Pszeudo-elsőrendű reakciók



$$v = \left(\frac{d[A]}{dt} \right) = k[A][B]$$

ha B nagy feleslegben, koncentrációja gyakorlatilag nem változik a reakció során:

$$[B] \approx [B]_0$$

$$v = k[A][B]_0$$

$$v = k'[A]$$

ahol,

$$k' = k[B]_0$$

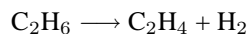
Például: $C_{12}H_{22}O_{11} + H_2O \longrightarrow 2C_6H_{12}O_6$

Molekularitás

Elemi reakciónak nevezzük azokat a reakciókat amelyek egy reakciólépésben mennek végbe. A molekularitás azt mutatja meg, hogy egy elemi reakcióban hány molekula vesz részt.

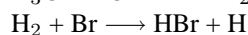
- Monomolekulás reakciók: a reakcióban egy részecske alakul át.

Például az etán bomlása etilénre és hidrogénre:



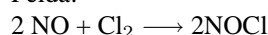
- Bimolekulás reakciók: a termékek két részecske reakciója során képződnek.

Példák:



- Trimolekulás reakciók: ezek nagyon ritkák, mivel három részecske egyidejű ütközésének a valószínűsége igen kicsi.

Példa:



A reakciók sebességének hőmérsékletfüggése

A tapasztalat szerint a reakciók sebessége kb. a kétszeresére nő 10°C hőmérséklet növelés hatására. Az átlagos kinetikus energia arányos a az abszolút hőmérséklettel, így magasabb hőmérsékleten több molekula rendelkezik a megfelelő kinetikus energiával ami a reakció sebességének növekedését eredményezi.

Arrhenius egyenlet:

$$k = A e^{-E_a/RT}$$

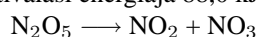
$$\ln k = \ln A - \frac{E_a}{RT}$$

Ha feltételezzük hogy az aktiválási energia és a preexponenciális faktor A nem függ a hőmérséklettől (ami egy nem túl széles hőmérséklet tartományban megtehető):

$$\ln \frac{k_2}{k_1} = \frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$$

Feladat:

A következő elsőrendű reakció sebességi állandója $9,16 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ $0,0^\circ\text{C}$ -on. Az aktiválási energiája $88,0 \text{ kJ/mol}$. Mennyi a sebességi állandó értéke $2,0^\circ\text{C}$ -on.



$$\ln \frac{k_2}{k_1} = \frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$$

$$\ln \frac{k_2}{9,16 \times 10^{-3}} = \frac{88,0}{8,314} \left(\frac{1}{273} - \frac{1}{275} \right) = 0,282$$

$$\frac{k_2}{9,16 \times 10^{-3}} = 1,32$$

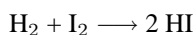
$$k_2 = 1,32(9,16 \times 10^{-3}) = 1,21 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1}$$

Reakciómechanizmusok

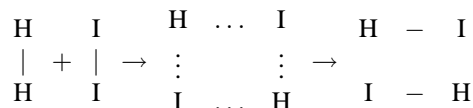
Egy összetett reakció elemi lépések sorozatából építhető fel, ezt nevezzük a reakció mechanizmusának.

1. példa:

A bruttó reakció:



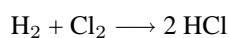
Mechanizmus:



Reakciómechanizmusok

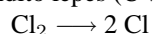
2. példa:

A bruttó reakció:

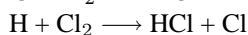
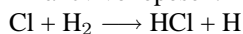


Mechanizmus:

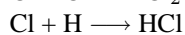
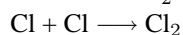
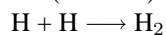
Láncindító lépés (UV fény):



Láncvivő lépések:



Lánclezáró (lánctörő) lépések:



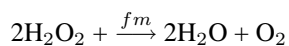
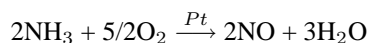
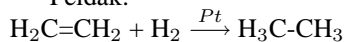
Katalízis

A katalizátor olyan anyag amely meggyorsítja a reakció végbemenetelét és a reakció végén változatlan formában és mennyiségben visszamarad. A katalizátor olyan módon éri el ezt a hatást, hogy egy kisebb aktiválási energiával rendelkező reakcióutat nyit meg.

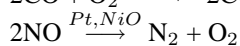
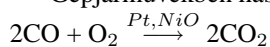
Heterogén katalízis

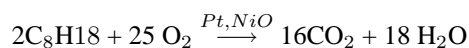
A katalizátor és a reaktánsok más fázisban vannak. A leggyakoribb példa a Pt katalizátor használata gázfázisú reakciókban.

Példák:



Gépjárművekben használatos katalizátorok:



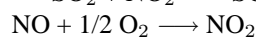
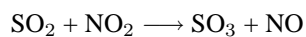
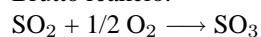


Homogén katalízis

A katalizátor és a reaktánsok azonos fázisban vannak.

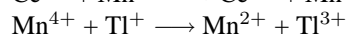
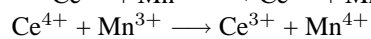
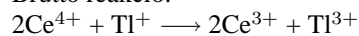
1. példa:

Bruttó reakció:



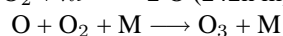
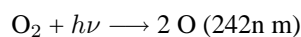
2. példa:

Bruttó reakció:

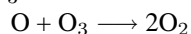
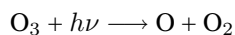


Az ózonréteg

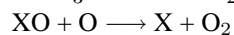
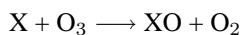
Az ózon termelése:



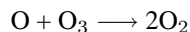
Az ózon természetes fogyása:



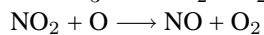
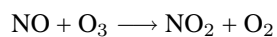
Az ózon katalitikus bomlása:



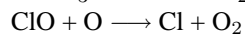
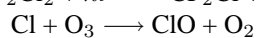
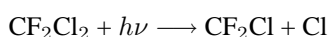
nettó reakció:



A hangsebességnél gyorsabb repülőgépek nagy mennyiségű NO-t bocsájtanak ki:



A klorofluorokarbonok (CFC) hatása:



Enzimkatalízis

Az enzimek a biológiai reakciók specifikus katalizátorai. Az enzim egy fehérje, amelynek harmadlagos szerkezete egymáshoz közel hoz bizonyos funkciók csoportokat és ezzel egy adott szubsztrátra specifikus kötőhelyet alakít ki.



$$K = \frac{[ES]}{[E][S]}$$

$$v = -\frac{d[S]}{dt} = k[ES] = kK[E][S]$$

$$K = \frac{[ES]}{[E][S]}$$

$$[ES] = [E]_T - [E]$$

$$K = \frac{[E]_T - [E]}{[E][S]}$$

$$K[E][S] = [E]_T - [E]$$

$$K[E][S] + [E] = [E]_T$$

$$[E] = \frac{[E]_T}{K[S] + 1}$$

$$v = kK[E][S]$$

$$[E] = \frac{[E]_T}{K[S] + 1}$$

$$v = \frac{kK[S][E]_T}{K[S] + 1}$$

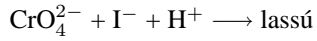
Michaelis-Menten-egyenlet:

$$v = \frac{k[S][E]_T}{[S] + (1/K)}$$

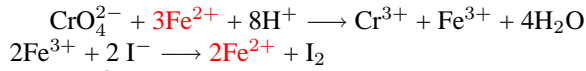
Ha $[S]$ kicsi akkor $v \approx k[E]_T$ (pszeudo elsőrendű reakció)

Ha $[S]$ nagy akkor $v \approx kK[E]_T[S]$ (másodrendű reakció)

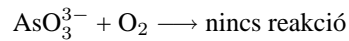
Indukált reakciók



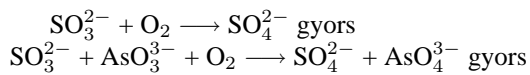
azonban Fe^{2+} jelenlétében:



A Fe^{2+} nem katalizátor hiszen fogyott a reakcióban.

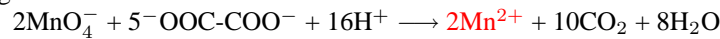


SO_3^{2-} jelenlétében:



Autokatalízis

A reakció maga termeli a katalizátorát. Az ilyen reakciók öngyorsuló jelleggel mennek végbe.



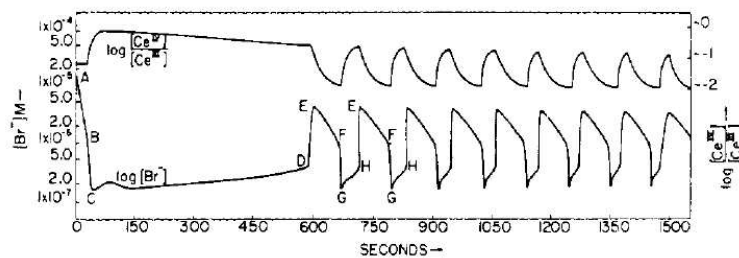
Oszilláló reakciók

Olyan reakciók amelyek során egy vagy több köztitermék koncentrációja periodikusan változik (oszillál).

Autokatalízis + negatív visszacsatolás

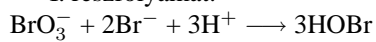
A Belouszov-Zsabotyinszkij reakció

A malonsav bromátos oxidációja kénsavas közegben egy megfelelő katalizátor jelenlétében (e.g. Ce^{4+} , vagy Mn^{3+}).

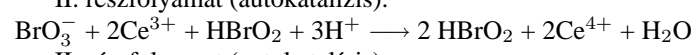


A Belouszov Zsabotyinszkij reakció kémiája:

I. részfolyamat:



II. részfolyamat (autokatalízis):



II. részfolyamat (autokatalízis):

