



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Szerkesztette:

BENKŐ ZOLTÁN

Írta:

**BENKŐ ZOLTÁN,
KŐMÍVESNÉ TAMÁS IBOLYA,
STANKOVICS ÉVA**

Lektorálta:

IGAZ SAROLTA

KÉMIAI ALAPOK

Egyetemi tananyag

2011



COPYRIGHT: © 2011-2016, Dr. Benkő Zoltán, Kőművesné Tamás Ibolya, Dr. Stankovics Éva, BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

LEKTORÁLTA: Dr. Igaz Sarolta, OKKER Zrt.

KÖZREMŰKÖDÖTT: Fekete Csaba, Könczöl László

Creative Commons NonCommercial-NoDerivs 3.0 (CC BY-NC-ND 3.0)

A szerző nevének feltüntetése mellett nem kereskedelmi céllal szabadon másolható, terjeszthető, megjelentethető és előadható, de nem módosítható.

TÁMOGATÁS:

Készült a TÁMOP-4.1.2-08/2/A/KMR-2009-0028 számú, „Multidiszciplináris, modulrendszerű, digitális tananyagfejlesztés a vegyészmérnöki, biomérnöki és vegyész alapképzésben” című projekt keretében.



KÉSZÜLT: a [Typotex Kiadó](#) gondozásában

FELELŐS VEZETŐ: Votisky Zsuzsa

AZ ELEKTRONIKUS KIADÁST ELŐKÉSZÍTETTE: Waizinger József

ISBN 978-963-279-479-2

KULCSSZAVAK:

általános kémia, szervetlen kémia, szerves kémia, anyagszerkezet, kémiai reakciók, kémiai egyensúlyok, elektrokémia, matematikai és fizikai alapismeretek

ÖSSZEFOGLALÁS:

A Kémiai alapok című elektronikus tananyag 12 fejezetre tagolódik. Az első fejezet tartalmazza későbbiek megértéséhez elengedhetetlenül szükséges matematikai és fizikai fogalmakat, összefüggéseket. Ezután egy igen terjedelmes általános kémiai rész következik, mely ismerteti az atomszerkezet, molekulaserkezet alapjait, a különböző halmazállapotok és halmazállapot-változások legfontosabb jellemzőit. A koncentrációkkal, oldatokkal és híg oldatok törvényszerűségeivel foglalkozó fejezetek nemcsak a középiskolai tananyagot, hanem az egyetemek első félévében tanított ismereteket is tárgyalják. A Kémiai reakciók című fejezetben az Olvasó megismerkedhet a kémiai egyenletek rendezésével, a sztöchiometria alapjaival, a termokémia legfontosabb törvényszerűségeivel, valamint a reakciókinetika alapfogalmaival. A Kémiai egyensúlyok című fejezet többek között tárgyalja a homogén és heterogén fázisú egyensúlyokat, az elektrolitegyensúlyokat (pH-egyensúlyok, komplexképződési egyensúlyok, oldhatósági egyensúlyok), valamint a megoszlási egyensúlyokat. Az általános kémiával foglalkozó részt az Elektrokémia című fejezet zárja. A jegyzet utolsó fejezetei röviden ismertetik a legfontosabb szervetlen és szerves kémiai ismereteket, végül az érdeklődő Olvasó az utolsó fejezetben található példatár gyakorlófeladatain önállóan ellenőrizheti felkészültségét.

TARTALOMJEGYZÉK

ELŐSZÓ.....	5
1. MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI ALAPOK.....	6
1.1. Matematikai alapok.....	6
1.2. Fizikai alapismeretek.....	33
1.3. A görög ábécé.....	43
2. AZ ATOMOK SZERKEZETE.....	44
2.1. Az atommodellekről dióhéjban.....	44
2.2. Az atomok felépítése.....	44
2.3. Az atomok elektronszerkezete.....	48
2.4. A kvantumszámok.....	56
2.5. Az elemek periódusos rendszere.....	57
2.6. Tulajdonságok változása a periódusos rendszerben.....	62
2.7. Gyakorlókérdések, -feladatok:.....	73
3. KÉMIAI KÖTÉSEK ÉS A MOLEKULÁK SZERKEZETE.....	75
3.1. Kémiai kötések.....	75
3.2. A molekulák alakja.....	90
4. HALMAZOK, HALMAZÁLLAPOTOK.....	104
4.1. Alapfogalmak: elemek, vegyületek, keverékek.....	104
4.2. Az anyagi halmazok csoportosítása.....	106
4.3. Halmazállapotok, halmazállapot-változások.....	106
4.4. Gyakorlókérdések:.....	129
4.5. Számítási feladatok gáztörvényekkel.....	130
5. KONCENTRÁCIÓK, OLDHATÓSÁG, ÁTKRISTÁLYOSÍTÁS.....	148
5.1. Tört-, illetve százalékjellegű mennyiségek.....	148
5.2. Koncentráció jellegű mennyiségek.....	149
5.3. A ppm- és ppb-koncentrációk:.....	150
5.4. A koncentrációk átszámítása.....	151
5.5. Az oldhatóság.....	166
5.6. Műveletek oldatokkal.....	168
5.7. Kristályvizes sók.....	182
5.8. Gyakorlókérdések:.....	191
6. HÍG OLDATOK TÖRVÉNYEI.....	193
6.1. A forráspont-emelkedés és fagyáspontcsökkenés törvénye.....	193
6.2. A van 't Hoff-faktor.....	194
6.3. Az ozmózisnyomás.....	197
7. KÉMIAI REAKCIÓK.....	208
7.1. Bevezetés.....	208
7.2. A kémiai reakciók fajtái.....	209
7.3. Sav-bázis (protolitikus) reakciók, sav-bázis elméletek.....	212
7.4. Oxidációfok, redoxireakciók rendezése.....	215
7.5. Sztöchiometria.....	251
7.6. A kémiai reakciókat kísérő hőváltozások – Termokémia.....	272
7.7. A kémiai reakciók sebessége.....	292
7.8. Gyakorlókérdések.....	305
8. KÉMIAI EGYENSÚLYOK.....	310
8.1. A tömeghatás törvénye és az egyensúlyi állandó.....	310
8.2. A reakcióegyenlet és az egyensúlyi állandó kapcsolata.....	321
8.3. Az egyensúly eltolása: a legkisebb kényszer elve.....	324
8.4. Homogén gázfázisú reakciók.....	333
8.5. Heterogén fázisú egyensúlyok.....	344
8.6. Elektrolitegyensúlyok.....	350

8.7. Megoszlási egyensúlyok.....	502
9. ELEKTROKÉMIA.....	513
9.1. Bevezetés.....	513
9.2. Az elektródpotenciál függése a hőmérséklettől, koncentrációtól és nyomástól	516
9.3. Galvánelemek.....	531
9.4. Koncentrációs elemek	534
9.5. Az elektródpotenciálok és a redoxireakciók iránya.....	537
9.6. Az elektródpotenciálok és a kémiai egyensúlyi állandó kapcsolata	542
9.7. Az elektrolízis.....	548
9.8. Elektrolitok vezetése	564
10. A SZERVETLEN KÉMIA ALAPJAI.....	580
10.1. A szervetlen vegyületek csoportosítása	580
10.2. Savak	582
10.3. Bázisok	588
10.4. Sók.....	590
10.5. Komplex vegyületek.....	591
10.6. Elemek és vegyületek szisztematikus elnevezése	592
10.7. Gyakorlókérdések.....	596
11. SZERVES KÉMIA.....	600
11.1. Bevezetés.....	600
11.2. Alkánok	616
11.3. Cikloalkánok	621
11.4. Alkének	622
11.5. Alkinek	628
11.6. Aromás vegyületek.....	631
11.7. Halogéntartalmú szénhidrogének	636
11.8. Alkohokok.....	639
11.9. Fenolok.....	644
11.10. Éterek	646
11.11. Aldehidek és ketonok	648
11.12. Karbonsavak.....	653
11.13. Észterek	661
11.14. Nitrovegyületek.....	662
11.15. Aminok.....	664
11.16. Savamidok	667
11.17. Aminosavak.....	669
11.18. Fehérjék.....	674
11.19. Szénhidrátok.....	681
11.20. Heterociklusok.....	688
11.21. Nukleinsavak.....	690
12. PÉLDATÁR	693
12.1. Gáztörvények.....	693
12.2. Koncentrációk	694
12.3. Híg oldatok törvényei.....	695
12.4. Sztöchiometria.....	696
12.5. Termokémia.....	699
12.6. Kémiai egyensúlyok	700
12.7. Elektrolitegyensúlyok.....	701
12.8. Elektrokémia	703
12.9. Megoldások	705
FELHASZNÁLT IRODALOM	712
ÁBRÁK, ANIMÁCIÓK, VIDEÓK JEGYZÉKE	713
Ábrák.....	713
Animációk, videók	717

ELŐSZÓ

A *Kémiai alapok* című elektronikus jegyzet alapvető célja a vegyész, vegyészmérnöki és biomérnöki kémiaoktatáshoz szükséges elméleti alapok megteremtése, ám haszonnal forgathatják az érdeklődő középiskolások is. A legfontosabb alapfogalmak ismertetése mellett igyekszünk bemutatni a fontosabb alkalmazásokat, gyakorlati ismereteket is, így a jegyzet több száz részletesen kidolgozott mintafeladattal, számos videóval és animációval segíti az Olvasót az anyag mélyebb megértéséhez.

Ezen elektronikus tananyag 12 fejezetre tagolódik. Az első fejezet tartalmazza későbbiek megértéséhez elengedhetetlenül szükséges matematikai és fizikai fogalmakat, összefüggéseket. Ezután egy igen terjedelmes általános kémiai rész következik, mely ismerteti az atomszerkezet, molekulaserkezet alapjait, a különböző halmazállapotok és halmazállapot-változások legfontosabb jellemzőit. A koncentrációkkal, oldatokkal és híg oldatok törvényszerűségeivel foglalkozó fejezetek nemcsak a középiskolai tananyagot, hanem az egyetemek első félévében tanított ismereteket is tárgyalják. A *Kémiai reakciók* című fejezetben az Olvasó megismerkedhet a kémiai egyenletek rendezésével, a sztöchiometria alapjaival, a termokémia legfontosabb törvényszerűségeivel, valamint a reakciókinetika alapfogalmaival. A *Kémiai egyensúlyok* című fejezet többek között tárgyalja a homogén és heterogén fázisú egyensúlyokat, az elektrolitegyensúlyokat (pH-egyensúlyok, komplexképződési egyensúlyok, oldhatósági egyensúlyok), valamint a megoszlási egyensúlyokat. Az általános kémiával foglalkozó részt az Elektrokémia című fejezet zárja. A jegyzet utolsó fejezetei röviden ismertetik a legfontosabb szervetlen és szerves kémiai ismereteket, végül az érdeklődő Olvasó az utolsó fejezetben található példatár gyakorlófeladatain önállóan ellenőrizheti felkészültségét.

Ezúton szeretnénk köszönetet mondani az ábrák, animációk és videók elkészítésében nyújtott segítségért Könczöl Lászlónak és Fekete Csabának, valamint köszönet illeti Krámos Balázst és Véghelyi Ádámot, akik értékes ábrákkal színesítették a jegyzetet.

Lelkiismeretes munkájukért köszönettel tartozunk Benkő Zoltánnak, Hargittai Istvánnak és Szűcs Júliának, akik a jegyzet egyes fejezeteit átolvasták, és hasznos tanácsaikkal segítették munkánkat.

Szeretnénk köszönetet mondani Nyulászi Lászlónak, Kovács Ilonának és Szieberth Dénesnek az értékes tanácsokért.

Elismeréssel mondunk köszönetet a könyv szakmai lektorának, Igaz Saroltának a számtalan hasznos javaslatért és segítségért.

1. MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI ALAPOK

Ebben a bevezető jellegű fejezetben az első féléves Kémiai alapok és Általános kémia gyakorlat elsajátításához szükséges legfontosabb matematikai és fizikai összefüggéseket vesszük sorra.

1.1. Matematikai alapok

1.1.1. A mérések és számítások pontossága

A mérhető mennyiségeknek két nagy csoportját különböztethetjük meg. Az egyik az úgynevezett diszkrét változóval leírható mennyiség, melyeket pontosan számszerűsíteni tudunk. Ilyen például a darabszám, ismerünk olyat, hogy egy darab alma vagy négy darab alma, de nincs túl sok értelme 2,54 darab almáról beszélni. A másik csoportba olyan mennyiségek tartoznak, melyek értéke folytonosan változhat, azaz nem csak adott egész értékeket vehet fel. Ilyen például a tömeg, a terület, az áramerősség, az anyagmennyiség, és így tovább. Ezekre jellemző, hogy értékük bármilyen – nem feltétlenül egész – értéket felvehet. Ennek van egy rendkívül fontos következménye: az ilyen mennyiségek mérésekor elkövetett hiba befolyásolja a mérés pontosságát.

Vegyünk egy egyszerű példát! Tömegmérésnél egyáltalán nem mindegy, milyen „fajta” mérleget használunk, hogy például tehermérésre használatos „mázsán”, személymérlegen, konyhai mérlegen vagy a laboratórium analitikai mérlegén mérjük meg egy tárgy tömegét. A különböző mérlegeket különféle méréshatárookra tervezték, és eltérő pontossággal is rendelkeznek. Például míg egy mázsa vagy egy személymérleg pontossága $\pm 0,1$ kilogramm, addig egy analitikai mérleg pontossága többnyire $\pm 0,0001$ gramm vagy akár még ennél kisebb is lehet. Mit is jelent ez a pontosság kifejezés? Ha egy digitális személymérleg pontossága $\pm 0,1$ kilogramm, és a mérleg 76,4 kilogrammot mutat, akkor a tényleges tömegről annyit tudunk, hogy igen nagy valószínűséggel a 76,3 kilogramm és 76,5 kilogramm között van. És ebből az is következik, hogy 76,4 kilogrammnak látjuk tömegünket akkor is, ha az 76,359 kilogramm vagy akár 76,432 kilogramm, mivel a mérleg nem képes pontosabban kijelezni az értéket.

Vegyünk egy másik példát! Egy seprűnyél hosszának meghatározását végezzük, és kétféle mérőszalag áll rendelkezésünkre: az egyik centiméter-beosztás van, a másikon a millimétereket is feltüntették, az előzőt kisebb pontosságúnak, az utóbbit nagyobb pontosságúnak tekintjük. A seprűnyél hosszát egy nagyon pontos méréssel is megmértük, és 168,314 centiméternek adódott. Ha megmérjük ezt a tárgyat a milliméter-beosztású mérőszalaggal, milliméter pontossággal ismerjük a tárgy hosszát, mely 168 centiméter és 3 milliméter. Ha azonban a másik, centiméter-beosztású mérőszalaggal mérjük meg a seprűnyélünk hosszát, csak a centiméteregységeket tudjuk leolvasni, ami esetünkben 168, esetleg szemre tudjuk becsülni a harmad centiméternyi távolságot. Ebben az esetben azonban nem adhatjuk meg a seprűnyélünk hosszát 168,3 centiméternek, mert a mérőszalag beosztása ezt nem teszi lehetővé! A centiméter pontosságú mérőszalaggal mérve a helyesen megadott mennyiség 168 centiméter.

Tegyük fel, hogy a fentebb említett seprűnyelet megmérjük a milliméter-beosztású mérőszalag segítségével, és hosszát egészen pontosan 168,3 centiméternek olvassuk le, azaz szemre nem érzékelünk eltérést a milliméteregységben. Ilyenkor azonban nem adhatjuk meg a seprűnyél hosszát az alábbi alakban: 168,300 centiméter, de még így sem: 168,30 centiméter, mivel a mérőeszköz pontossága ezt nem teszi lehetővé. A helyes megadási mód a következő: 168,3 centiméter!

Akár laboratóriumban dolgozunk, akár számítási feladatot oldunk meg, gyakran előfordul, hogy az adatok pontosságát is figyelembe kell vennünk. Ha mérést végzünk, általában ismerjük a mérés pontosságát, és ebből meg tudjuk állapítani, milyen pontossággal célszerű megadnunk az eredményt. Viszont a számítási feladatok is általában kísérleti eredményeken alapulnak, ezért ott is fontos szem előtt tartani az eredmények pontosságát. A fentiek alapján jelentős különbség van például az $1,0 \text{ dm}^3$ és az $1,0000 \text{ dm}^3$ között. Az első esetben csak az első tizedesjegyben lehetünk biztosak, a valóságban lehet, hogy $1,02 \text{ dm}^3$ vagy $0,98 \text{ dm}^3$ az érték. A második esetben azonban biztosak lehetünk abban, hogy négy tizedesjegy pontossággal ismerjük az értéket! Természetesen egy adott térfogatot nem csak

dm^3 -ben, hanem más mértékegységben is megadhatunk, azaz $1,0000 \text{ dm}^3$ megegyezik $1000,0 \text{ cm}^3$ -rel. Innen láthatjuk, hogy nem a tizedesjegyek száma számít!

Az **értékes jegy** fogalmát a pontosság definiálására vezették be. Értékes jegynek tekintjük a szám számjegyeit, kivéve az egynél kisebb számok elején található nullát, illetve nullákat (azon nullákat, melyek csak a helyi értéket jelzik). Az $1,0 \text{ dm}^3$ felírásban 2 értékes jeggyel adtuk meg a pontosságot, az $1,0000 \text{ dm}^3$ esetén pedig 5 értékes jegyről beszélünk. Viszont a $0,02 \text{ dm}^3$ esetén problémába ütközünk. Ebben az esetben az első két nulla nem számít értékes jegynek, csupán a 2-es számjegy. A legegyszerűbb módja az értékes jegyek megállapításának, hogy a mennyiséget átírjuk normál alakba, és megállapítjuk, hogy hány számjegyet tartalmaz a 10 megfelelő hatványa előtt álló szorzó tényező. A fenti példában $0,02 \text{ dm}^3 = 2 \cdot 10^{-2} \text{ dm}^3$, azaz 1 értékes jegy pontossággal ismerjük a térfogatot. Az értékes jegyek megállapítására az alábbi szabályokat ismerjük:

- ❖ Az egynél kisebb számokban az első nem zérus számjegyet megelőző nullák nem számítanak értékes jegynek. Például $0,000060 \text{ g} = 6,0 \cdot 10^{-5} \text{ g}$, azaz két értékes jegyet tartalmaz.
- ❖ Bármely más esetben (azaz ha van előtte nem zérus számjegy) a nulla is értékes jegynek számít. Például a $1,0000 \text{ dm}^3$ -ben 5 értékes jegy található.
- ❖ A nullától eltérő minden számjegy értékes jegynek számít.

Fontos megjegyezni, hogy a mértékegységek átváltása nem okozhat változást az értékes jegyek számában, azaz sem nem növekedhet, sem nem csökkenhet az értékes jegyek száma. Így például: $0,067060 \text{ km} = 67,060 \text{ m} = 6706,0 \text{ cm} = 67060 \text{ mm} = 6,7060 \cdot 10^{-2} \text{ km}$, mint látjuk, minden esetben 5 értékes jegy a pontosság.

Ha számítási feladatokat oldunk meg, számológépünkkel általában igen sok tizedes jegy pontosságra képesek vagyunk meghatározni az eredményeket. Azonban a sok-sok tizedes jegy megadása gyakran teljesen felesleges. A következőkben azt vizsgáljuk meg, hogy egy számítási feladat megoldása során milyen pontossággal célszerű a számításokat elvégezni, és a végeredményt megadni.

A számítások során célszerű a lehető legpontosabban számolni, mivel így tudjuk lecsökkenteni a kerekítésekkel adódó hibákat. Ha rendelkezésre áll számológép, akkor érdemes az adatokat megtartani a számológépben, és azokkal számolni tovább.

Ha a feladat végére értünk, a végeredmény megadását a következőképp célszerű végezni: vizsgáljuk meg a feladat szövegében található adatok pontosságát, azaz állapítsuk meg, melyik hány értékes jegyre van megadva. Ezután meg kell állapítanunk, hogy melyik mennyiség tartalmazza a legkevesebb értékes jegyet, azaz melyik van a legpontatlanabban megadva. A számítások során csupán matematikai műveleteket végzünk, és így nem tudunk javítani az eredmények pontosságán! Tehát a végeredmény pontosságát a legpontatlanabban megadott kiindulási adat pontossága szabja meg: a végeredményt (legfeljebb) annyi értékes jegy pontosságra adjuk meg, mint a legpontatlanabban megadott kiindulási adat értékes jegyeinek száma! A számológép adatait a megfelelő értékes jegyekre kell kerekítenünk, azaz az 1, 2, 3 és 4 számjegyeket lefelé, az 5, 6, 7, 8 és 9 számjegyeket pedig felfelé kerekítjük. Egy zárthelyi dolgozat esetén természetesen a részeredményeket sem célszerű lejegyezni az összes létező tizedesjeggyel, ilyenkor is érdemes ésszerűen kerekítenünk a megfelelő értékes jegyre! Amennyiben az eredmény egy nagyon kicsi vagy nagyon nagy szám, mindenképp érdemes normálalakban megadni az eredményt. Ennek további előnye, hogy az értékes jegyek számát is ellenőrizni tudjuk!

1.1. példa:

Egy téglatest éleinek hossza: $a = 6,37 \text{ cm}$, $b = 0,14570 \text{ m}$ és $c = 32,01 \text{ cm}$. Adjuk meg a téglatest térfogatát m^3 egységben!

Megoldás:

Írjuk át az összes adatot méter mértékegységre, és állapítsuk meg, melyik hány értékes jegyet tartalmaz!

$$\begin{aligned} a &= 6,37 \text{ cm} = 0,0637 \text{ m} && 3 \text{ értékes jegy} \\ b &= 0,14570 \text{ m} && 5 \text{ értékes jegy} \\ c &= 32,01 \text{ cm} = 0,3201 \text{ m} && 4 \text{ értékes jegy} \end{aligned}$$

A téglatest térfogata:

$$V = a \cdot b \cdot c = (0,0637 \text{ m}) \cdot (0,14570 \text{ m}) \cdot (0,3201 \text{ m}) = 0,00029708769 \text{ m}^3$$

Mivel igen kicsi számértékről van szó, célszerű átírunk normálalakra: $V = 2,9708769 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3$.

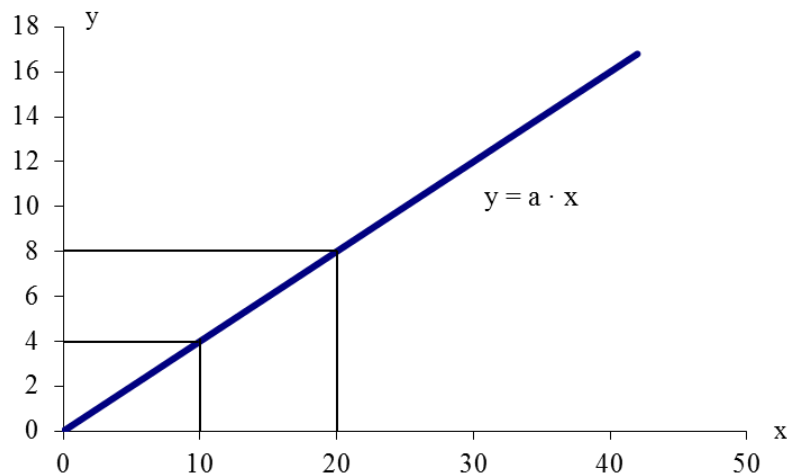
Mint fentebb ismertettük, a végeredményt szabályosan a legpontatlanabbul, azaz legkevesebb értékes jeggyel megadott adat értékes jegyre lehet megadni, azaz jelen esetben 3 értékes jegynél többet nem érdemes megadunk. A végeredmény helyes pontosságban megadva:

$$V = 2,97 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3.$$

1.1.2. Alapvető matematikai összefüggések

Egyenes arányosság: két mennyiség között egyenes arányosság áll fenn, ha az egyik mennyiséget valahányszorosára változtatjuk, akkor a másik mennyiség is ugyanannyiszorosára változik.

Ha az egyenes arányosságot függvényként fejezzük ki, így írhatjuk le: $y = a \cdot x$, ahol y és x a két kérdéses mennyiség, a pedig egy állandó. Ebből a felírásból látszik, hogy két mennyiség között akkor beszélhetünk egyenes arányosságról, ha a két mennyiség aránya állandó, jelen esetben ez megegyezik a -val. Grafikonban ábrázolva egy origón átmenő egyenest kapunk:



1.1.2.1. ábra: Az egyenes arányosság

Az egyenes arányosság függvénye a lineáris függvények egy speciális esete: a tengelymetszet zérus, azaz az egyenesnek az origón kell átmennie.

Az egyenes arányosságra számtalan példát tudunk a mindennapi életből és a természettudományokból egyaránt. A fizikai és kémiai tartalmú példákkal a későbbiekben ismerkedünk meg részletesen, azonban következzen egy igen egyszerű példa. Ennek célja elsősorban az, hogy megismerhessük a különböző megoldási módszereket, hogy ki-ki maga eldönthesse, hogy melyiket alkalmazza könnyebben.

1.2. példa:

Ha 2 kilogramm rézgálic 1800 forintba kerül, akkor mennyibe kerül 3 kilogramm rézgálic?

Megoldás:

A) Felírás egyenes arányossággal, szövegesen:

Ha 2 kilogramm rézgálic 1800 forint,
akkor 3 kilogramm rézgálic x forint.

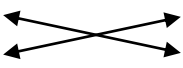
Ezt többféleképpen lehet megoldani:
Felírhatjuk, hogy a mennyiségek aránya állandó:

$$\frac{1800\text{forint}}{2\text{ kg}} = \frac{w\text{ forint}}{3\text{ kg}}$$

Ebből könnyedén megkapjuk, hogy $w = 2700$ forint.

Egy másik megoldás, ha az úgynevezett keresztbeszorzást alkalmazzuk, melyet sok helyen tanítanak középiskolákban, elsősorban kémiaórán:

Ha 2 kilogramm rézgálic 1800 forint,
akkor 3 kilogramm rézgálic w forint.



Azaz $2\text{ kg} \cdot w\text{ forint} = 3\text{ kg} \cdot 1800\text{ forint}$, melyből egyszerűen adódik, hogy $w = 2700$ forint, hasonlóan az előző megoldás eredményéhez.

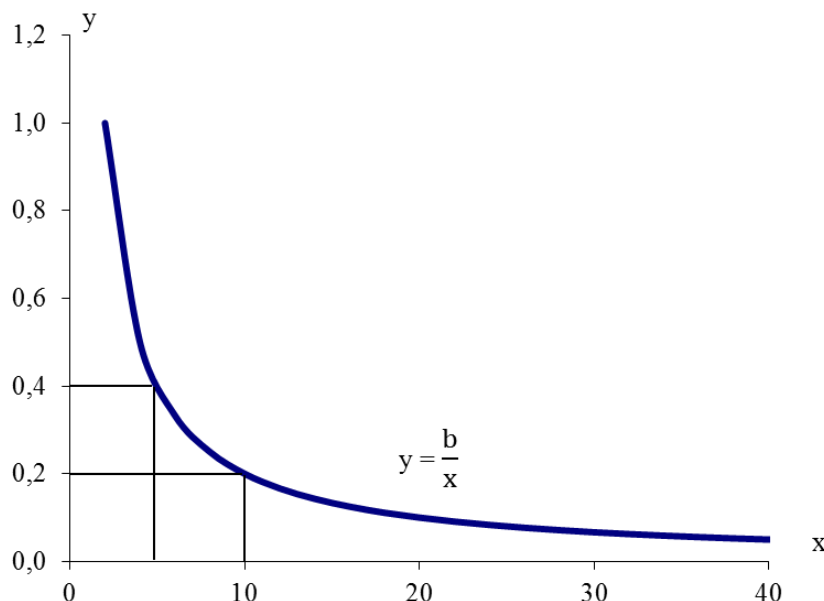
B) Kiszámíthatjuk az arányossági tényezőt az $y = a \cdot x$ egyenlet alapján: ez tulajdonképpen az 1 kilogramm rézgálic ára:

$$a = \frac{\text{ár}}{\text{tömeg}} = \frac{1800\text{forint}}{2\text{ kg}} = 900 \frac{\text{forint}}{\text{kg}}$$

Így az egységárból könnyedén megkaphatjuk a 3 kilogramm rézgálicért fizetendő árat: $w = a \cdot x = (900\text{ forint / kg}) \cdot (3\text{ kg}) = 2700\text{ forint}$.

Fordított arányosság: ha az egyik mennyiséget valahányszorosára növeljük, a másik mennyiség ugyanannyi részére csökken.

Ha a fordított arányosságot függvényként fejezzük ki, a következőképp írhatjuk fel: $y = b / x$, ahol y és x a két kérdéses mennyiség, b pedig egy állandó. Ebből a felírásból látszik, hogy két mennyiség között akkor beszélhetünk egyenes arányosságról, ha a két mennyiség szorzata állandó, jelen esetben ez megegyezik b -vel. Grafikonban ábrázolva egy úgynevezett hiperbolát kapunk (amennyiben a negatív mennyiségekről is van értelme beszélni, a hiperbolának van egy negatív tartományban található szára is):



1.1.2.2. ábra: A fordított arányosság

Természetesen fordított arányosságra is számtalan példát lehet találni, melyekkel a későbbiekben ismerkedünk meg. Ismét egy igen egyszerű példa:

1.3. példa:

Kétféle tisztaságú rézgálicot forgalmaz a vegyszerkereskedő. A rosszabb minőségű, több szennyeződést tartalmazó ára kilogrammonként 1800 forint, ám van egy tisztább is, melynek ára 2400 forint kilogrammonként. Hány kilogrammnyit tudunk venni a jobb minőségű rézgálic 12 kilogrammjának árából, ha azt rosszabb minőségű rézgálicra költjük?

Megoldás:

A) Aránypárral:

Ha 2400 Ft/kg áru rézgálicból 12 kg-ot tudunk venni,
akkor az 1800 Ft/kg áru rézgálicból z kg-ot tudunk venni.

Fordított arányosság esetén a mennyiségek szorzata állandó:

$$(2400 \text{ Ft/kg}) \cdot (12 \text{ kg}) = (1800 \text{ Ft/kg}) \cdot (z \text{ kg})$$

Ebből $z = 16$ kilogramm.

B) Függvénnyel:

Mivel a fordított arányosság felírható úgy, hogy $y = b / x$, ebből következik, hogy $b = y \cdot x$, tehát $b = (2400 \text{ Ft/kg}) \cdot (12 \text{ kg}) = 28\,800 \text{ Ft}$, azaz ennyi a rendelkezésre álló pénzüsszeg. Ebből kiszámítható, hogy az olcsóbb rézgálicból mennyit tudunk venni:

$$y = (28\,800 \text{ Ft}) / (1800 \text{ Ft/kg}) = 16 \text{ kg.}$$

Másodfokú egyenlet megoldása:

A másodfokú egyenlet megoldóképletének alkalmazásához az egyenletet az alábbi formára kell hozni:

$$a \cdot x^2 + b \cdot x + c = 0.$$

Ekkor az a , b és c paraméterek függvényében a másodfokú egyenlet két megoldása:

$$x_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4 \cdot a \cdot c}}{2 \cdot a} \quad \text{és} \quad x_2 = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4 \cdot a \cdot c}}{2 \cdot a}.$$

A négyzetgyök alatti kifejezést diszkriminánsnak nevezzük: $D = b^2 - 4 \cdot a \cdot c$.

A diszkrimináns előjeléből következtethetünk arra, hogy hány valós megoldása van a másodfokú egyenletnek. Ha a diszkrimináns pozitív, két valós gyököt kapunk, ha a diszkrimináns negatív, nincsen valós megoldása az egyenletnek. Abban az esetben, ha a diszkrimináns értéke nulla, x_1 és x_2 gyökök megegyeznek, azaz a másodfokú egyenletnek egyetlen megoldása van.

1.4. példa:

Oldjuk meg a következő egyenletet!

$$(x - 2) \cdot (x + 5) = 8$$

Megoldás:

Elvégezve a szorzást:

$$x^2 - 2 \cdot x + 5 \cdot x - 10 = 8.$$

Nullára rendezve:

$$x^2 + 3 \cdot x - 18 = 0.$$

Tehát $a = 1$, $b = 3$ és $c = -18$. Behelyettesítve a megoldóképletbe (itt a fenti két képlet egy közös képletté van összeolvasztva):

$$x_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4 \cdot a \cdot c}}{2 \cdot a} = \frac{-3 \pm \sqrt{3^2 - 4 \cdot 1 \cdot (-18)}}{2 \cdot 1} = \frac{-3 \pm \sqrt{81}}{2} = \frac{-3 \pm 9}{2},$$

azaz
$$x_1 = \frac{-3 + 9}{2} \quad \text{és} \quad x_2 = \frac{-3 - 9}{2} = -6.$$

1.5. példa:

Oldjuk meg a következő egyenletet!

$$16 \cdot x^2 - 104 \cdot x + 169 = 0$$

Megoldás:

A nullára rendezett formából $a = 16$, $b = -104$ és $c = 169$. Behelyettesítve a megoldóképletbe:

$$x_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4 \cdot a \cdot c}}{2 \cdot a} = \frac{-104 \pm \sqrt{104^2 - 4 \cdot 16 \cdot 169}}{2 \cdot 16} = \frac{-104 \pm \sqrt{0}}{32} = -\frac{13}{4}.$$

Mivel az egyenlet diszkriminánsa (a négyzetgyök alatt álló kifejezés: $D = b^2 - 4 \cdot a \cdot c$) zérus, az egyenlet két gyöke ugyanaz, tehát egy megoldása van az egyenletnek: $x = -\frac{13}{4}$.

Összegek és szorzatok felírása:

Egy összeg kifejtése:
$$\sum_{i=1}^n a_i = a_1 + a_2 + \dots + a_n .$$

Egy szorzat kifejtése:
$$\prod_{i=1}^m b_i = b_1 \cdot b_2 \cdot \dots \cdot b_m .$$

Legfontosabb hatványozási és gyökvonási azonosságok:

$$(a + b)^2 = a^2 + 2ab + b^2$$

$$(a - b) \cdot (a + b) = a^2 - b^2$$

$$a^n \cdot b^n = (a \cdot b)^n$$

$$a^n : b^n = (a : b)^n \quad (b \neq 0)$$

$$a^n \cdot a^m = a^{n+m}$$

$$a^n : a^m = a^{n-m} \quad (a \neq 0)$$

$$(a^n)^m = (a^m)^n = a^{n \cdot m}$$

$$\sqrt[n]{a} = a^{\frac{1}{n}} \quad (a \geq 0, \text{ ha } n \text{ páros}),$$

mely alapján a fenti hatványozási azonosságok alkalmazhatóak a gyökvonásra is!

$$\sqrt[n]{a^m} = (\sqrt[n]{a})^m = a^{\frac{m}{n}} \quad (a \geq 0, \text{ ha } n \text{ páros})$$

$$\sqrt[m]{\sqrt[n]{a}} = \sqrt[n]{\sqrt[m]{a}} = \sqrt[n \cdot m]{a} \quad (a \geq 0, \text{ ha } n \text{ vagy } m \text{ páros})$$

Hatványozás – gyökvonás – logaritmus:

Adott a következő hatvány (legyen a és b is pozitív): $c = a^b$

Ekkor c hatványértékét úgy kaphatjuk meg, ha az a hatványalapot a b hatványkitevőre emeljük. A hatványozásnak vagy két megfordított (úgynevezett inverz) művelete: a gyökvonás és a logaritmus.

Ha az a hatványalap értékét szeretnénk megkapni c és b ismeretében, akkor gyökvonást kell végeznünk: a egyenlő c b -edik gyökével: $a = \sqrt[b]{c}$.

Ha ismert az a hatványalap és c hatványérték, a kérdéses b kitevőt logaritmusszámítással kaphatjuk meg: $b = \log_a c$.

Azaz az a -alapú logaritmus c ($\log_a c$) az a kitevő, melyre a -t emelve éppen c -t kapjuk.

Logaritmusazonosságok:

Legyen a , b és c pozitív:

$$a^{\log_a b} = b$$

$$\log_a (b \cdot c) = \log_a b + \log_a c$$

$$\log_a (b : c) = \log_a b - \log_a c$$

$$\log_a(b^c) = c \cdot (\log_a b).$$

Áttérés logaritmusalapok között:

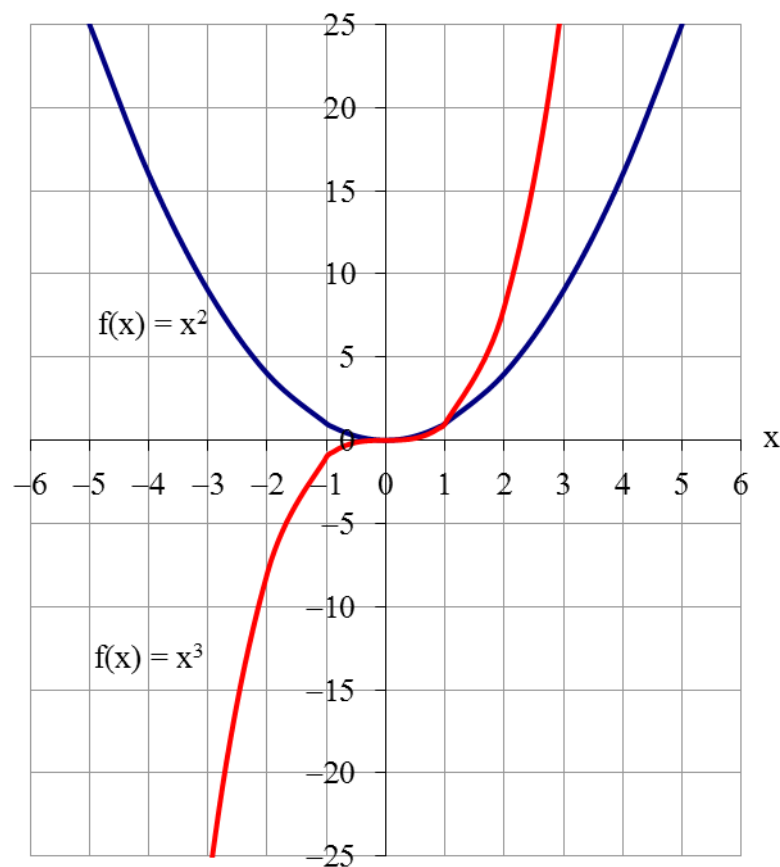
$$\log_a b = \frac{\log_c b}{\log_c a}.$$

1.1.3. A hatvány-, gyök-, exponenciális és logaritmusfüggvények

Hatványfüggvények nevezzük a következő alakú függvényeket: $f(x) = x^n$, ahol n egy pozitív egész. A függvény minden valós x -re értelmezve van.

Jellemzője, hogy páros függvény, ha n páros, és páratlan függvény, ha n páratlan, és ez utóbbi esetben szigorúan monoton növekvő.

$x = 0$ helyen a hatványfüggvény értéke 0.

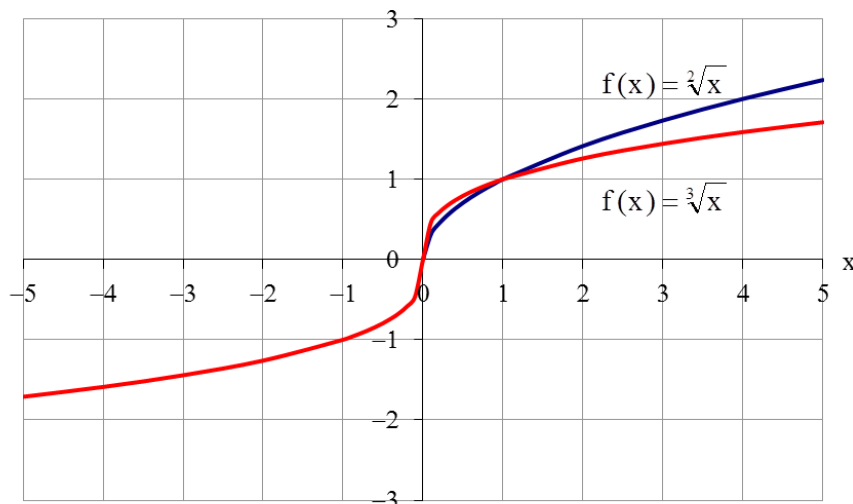


1.1.3.1. ábra: Hatványfüggvények

A **gyökfüggvények** általános alakja: $f(x) = \sqrt[n]{x} = x^{\frac{1}{n}}$, ahol n pozitív egész szám.

Értelmezési tartomány: ha n páros, minden nemnegatív x -re értelmezve van, ha n páratlan, minden valós x -re értelmezve van. A gyökfüggvények szigorúan monoton növekedők.

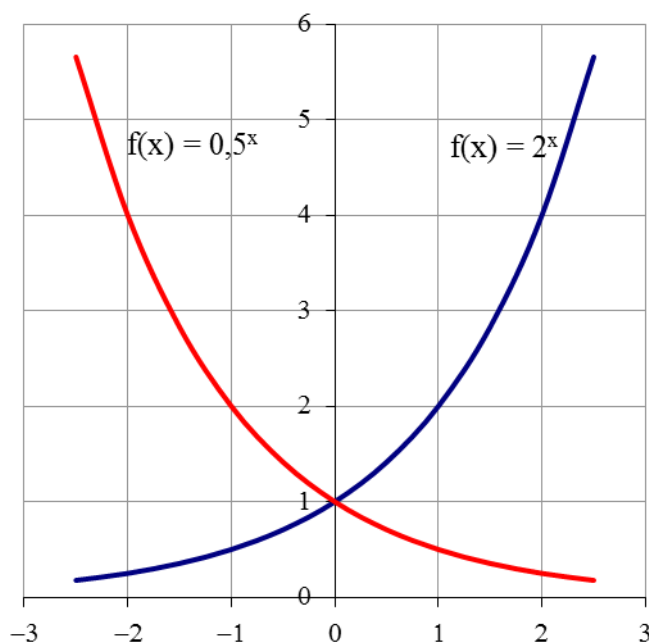
A páratlan gyökkitevőjű gyökfüggvények páratlanok.



1.1.3.2. ábra: Gyökfüggvények

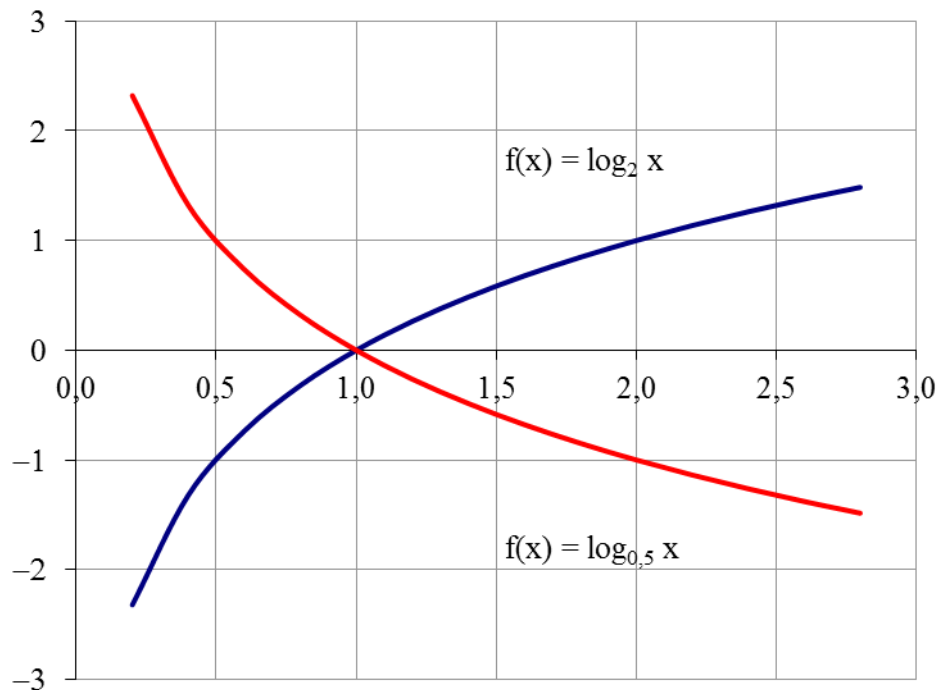
Az **exponenciális függvény** alakja: $f(x) = a^x$, ahol „a” egy pozitív szám. A függvény minden valós x esetén értelmezve van.

Amennyiben $a > 1$, a függvény monoton növekvő, ha $0 < a < 1$, akkor monoton csökkenő. Az exponenciális függvény mindig a $(0 ; 1)$ pontban metszi az y tengelyt. Egy-egy példa az exponenciális függvényekre:



1.1.3.3. ábra: Exponenciális függvények

A **logaritmusfüggvényt** a következőképpen definiálhatjuk: $f(x) = \log_a x$, ahol „a” egy pozitív szám. A függvény csak pozitív x értékekre van definiálva. Amennyiben $a > 0$, a függvény monoton növekvő, ha $0 < a < 1$, a függvény csökkenő. A logaritmusfüggvény az x tengelyt mindig az $(1 ; 0)$ pontban metszi.



1.1.3.4. ábra: Logaritmusfüggvények

1.1.4. Log-log diagramok és társaik

A mérnöki-kémiai gyakorlatban sok összefüggést hatványfüggvényként jeleníthetünk meg. A logaritmus egyik igen fontos alkalmazása, hogy meg tudjuk vele állapítani egy hatványfüggvény ismeretlen kitevőjét:

1.6. példa:

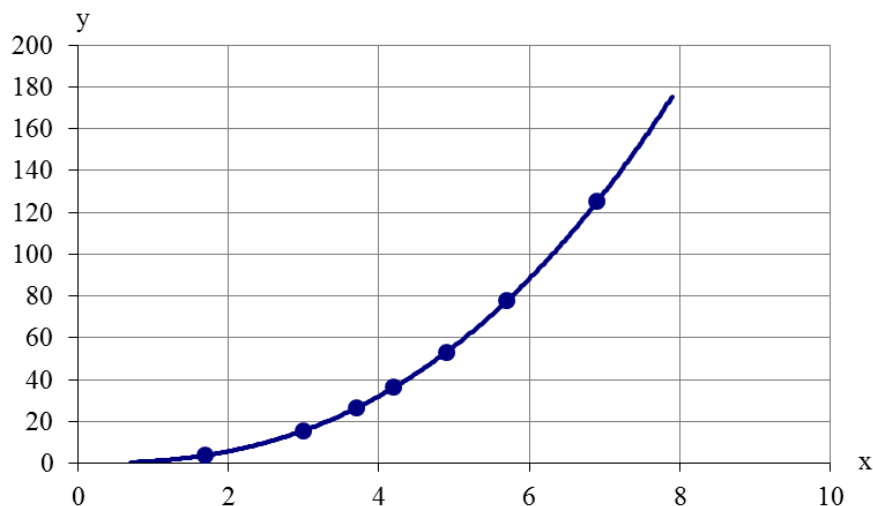
Adott két mérhető mennyiség, x és y , és tudjuk, hogy a két mennyiség közötti összefüggés az alábbi alakú: $y = x^n$. A méréseink során a következő értékpárokat kapjuk:

x	y
1,7	3,77
3,0	15,59
3,7	26,33
4,2	36,15
4,9	53,15
5,7	77,57
6,9	125,06

Állapítsuk meg az n hatványkitevőt!

Megoldás:

Az értékpárokat derékszögű koordináta-rendszerben ábrázolva, a következő grafikont kapjuk:

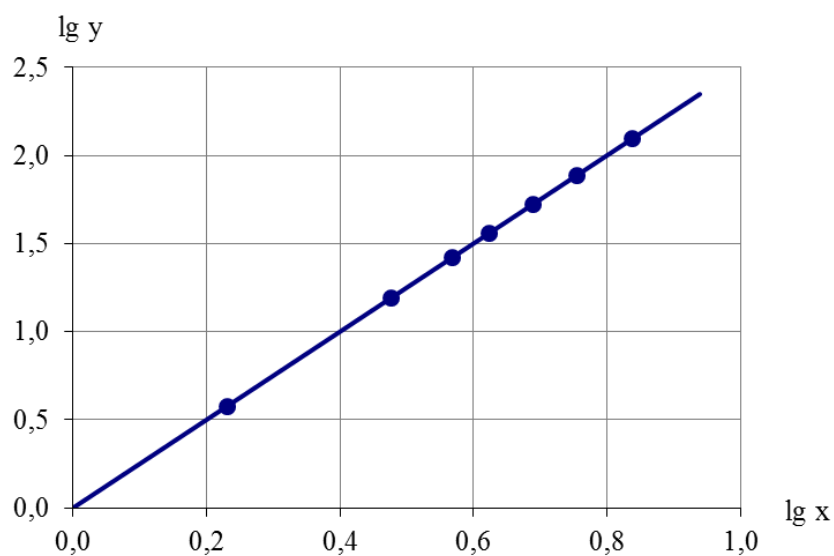


1.1.4.1. ábra: A két változó közti kapcsolat

A fenti ábrából igen nehéz megállapítani a hatványkitevőt. Mivel a két változó (x és y) közötti kapcsolat hatványfüggvénnyel írható le, $y = x^n$, pozitív x és y esetén $\log_a y = \log_a x^n = n \cdot \log_a x$. Ezért vegyük az x és y értékek 10-es alapú logaritmusát!

$\lg x$	$\lg y$
0,2304	0,5761
0,4771	1,1928
0,5682	1,4205
0,6232	1,5581
0,6902	1,7255
0,7559	1,8897
0,8388	2,0971

A fenti értékpárokat szintén ábrázolhatjuk derékszögű koordinátarendszerben:

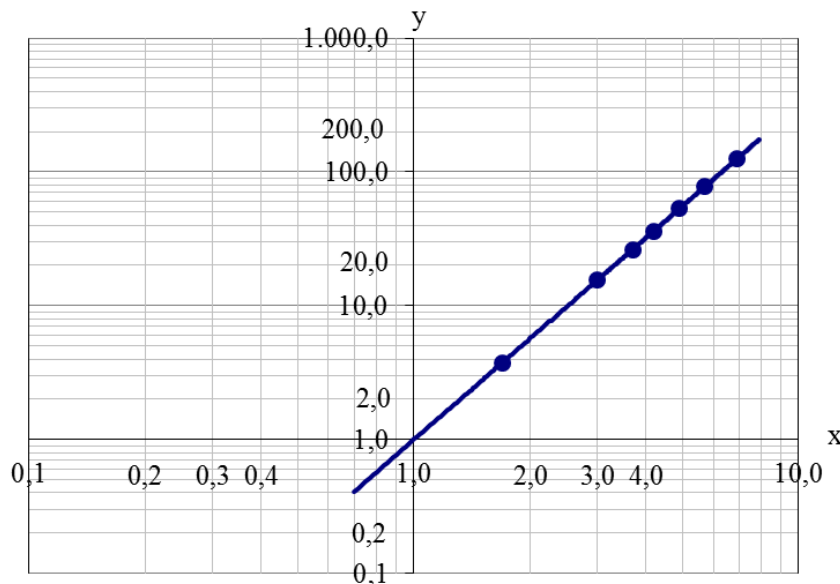


1.1.4.2. ábra: A két változó logaritmusai közti kapcsolat

Mint látható, az értékek logaritmusai közötti kapcsolat már egyenes arányossággal írható le, könnyen megállapíthatjuk az egyenes meredekségét (iránytangensét) is: $n = 2,5$. (Ezt akár a grafikonról leolvassuk, akár a megfelelő logaritmusok hányadosaként megkaphatjuk.)

Tehát a keresett függvénykapcsolat: $y = x^{2,5}$.

A mérnöki gyakorlatban elterjedt az úgynevezett log-log diagramok használata is. Ekkor nem a logaritmusértékeket ábrázoljuk a hagyományos beosztású tengelyeken, hanem a tényleges értékeket úgynevezett logaritmikus beosztású tengelyeken ábrázoljuk:



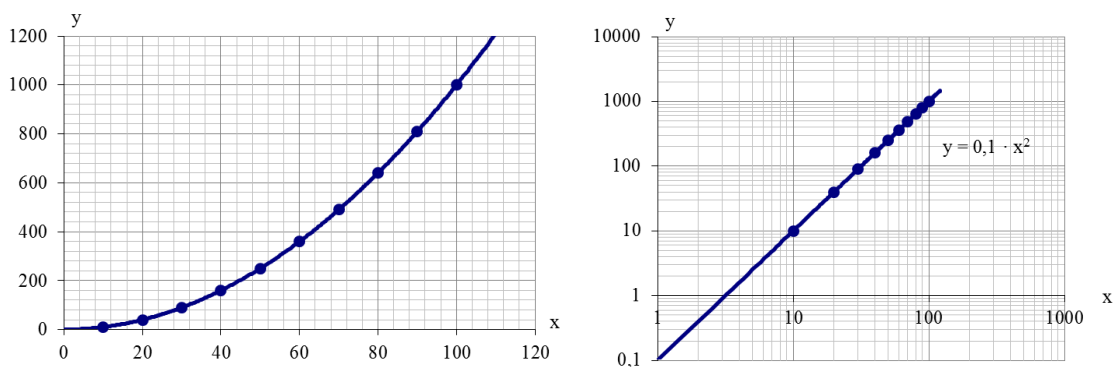
1.1.4.3. ábra: A két változó közti kapcsolat log-log diagramon ábrázolva

A mért értékeket (nem a logaritmusukat!) ilyen beosztású koordináta-rendszerben ábrázolva szintén egyenes arányosságot kapunk. Érdeemes megfigyelni a segédrácsokat, ezek nem egyenlő távolságban helyezkednek el egymás mellett!

A fenti példa általánosítható, hasonló módon nemcsak a hatványfüggvények, hanem egyéb függvénykapcsolatok is felderíthetők. Figyelem! Attól függően, hogy milyen függvénykapcsolat áll fenn x és y között, nem mindig log-log diagramot kell alkalmazni, gyakran elég csak az x vagy y változót logaritmusos beosztású tengelyen ábrázolni (lásd lentebb)!

A teljesség igénye nélkül néhány példa:

- ❖ $y = f(x) = a \cdot x^n$, mely log-log diagramban lineáris függvényt ad: $\lg y = \lg a + n \cdot \lg x$

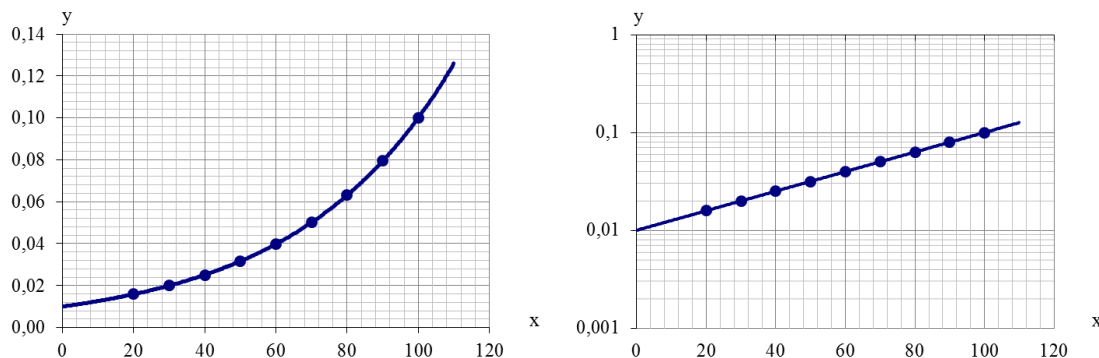


1.1.4.4. ábra: Az $y = f(x) = a \cdot x^n$ függvény

❖ $y = f(x) = a \cdot 10^{b \cdot x}$, mely átalakítható a következő összefüggéssé:

$$\lg y = \lg(a \cdot 10^{b \cdot x}) = \lg a + \lg 10^{b \cdot x} = \lg a + b \cdot x.$$

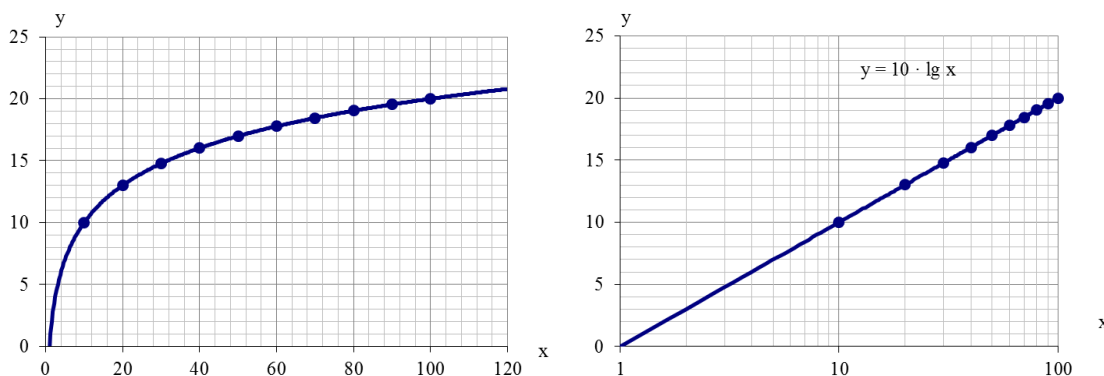
Ekkor az x változó függvényében (és nem $\lg x$ függvényében!) kell ábrázolni $\lg y$ -t, és a tengelymetszetből megkapjuk $\lg a$ -t, melyből számítható „ a ”, valamint az egyenes meredeksége megadja a b paramétert. A jobb oldali diagramon az x tengely (abszcissza) lineáris léptékű, míg az y tengely (ordináta) logaritmikus léptékű.



1.1.4.5. ábra: Az $y = f(x) = a \cdot 10^{b \cdot x}$ függvény

A jobb oldali diagramon az x tengely (abszcissza) lineáris léptékű, míg az y tengely (ordináta) logaritmikus léptékű. Az exponenciális függvény paramétereit a meredekségből és tengelymetszetből könnyen leolvashatjuk.

❖ $y = f(x) = a \cdot \lg x$. Ekkor egyszerűen y -t ábrázoljuk $\lg x$ függvényében, és meghatározhatjuk az ismeretlen „ a ” paramétert.



1.1.4.6. ábra: Az $y = f(x) = a \cdot \lg x$ függvény

Tehát ebben az esetben az abszcissza (x tengely) léptéke logaritmikus, míg az ordináta (y tengely) léptéke lineáris.

Ez a módszer akkor is segítségünkre lehet, ha nem ismerjük az összefüggést a két mennyiség (x és y) között, viszont az ábrázolásból reménykedhetünk, hogy az összefüggés nem túl bonyolult függvénnyel írható le. Ilyenkor érdemes kipróbálni a fenti átalakításokat, és abban a szerencsés esetben, ha az így keletkezett transzformált változók között lineáris összefüggést kapunk, meg tudjuk határozni a szükséges paramétereket.

1.1.5. Lineáris interpoláció és extrapoláció

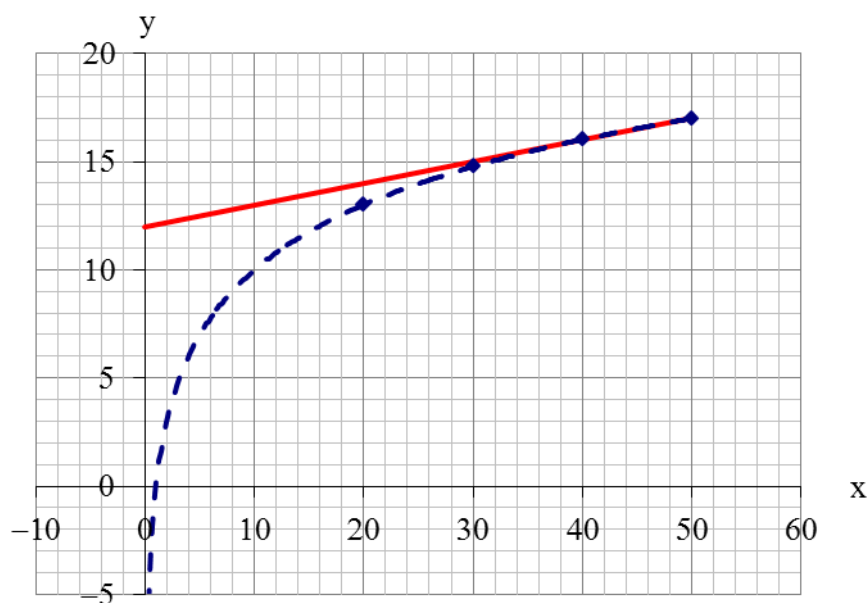
Mérési eredményeket tartalmazó táblázatok használata során gyakran előfordul, hogy egy olyan adatra van szükségünk, melyre éppen nincs mérési eredmény. Erre egy egyszerű példa (például y mennyiséget mérjük x függvényében):

x	y
0,0	12,0
5,0	16,0
10,0	20,0

Tehát ismerjük y értékét $x = 0,0$, $x = 5,0$ és $x = 10,0$ esetén. Tegyük fel, hogy nekünk történetesen szükségünk van $x = 7,0$ esetén y értékére! Ekkor több lehetőségünk van:

- megmérjük kísérletileg $x = 7,0$ esetén y értékét
- ábrázoljuk y-t x függvényében, és grafikusan próbálunk következtetni y értékére $x = 7,0$ esetén
- matematikai úton „kiokoskodjuk” y értékét az $x = 7,0$ helyen.

Az első megoldásra gyakran nincs lehetőség, noha valószínűleg az lenne a legpontosabb. A grafikus megoldás általában hosszadalmas és a leolvasás pontatlan, ezért általában az úgynevezett lineáris interpolációt alkalmazzuk ilyen esetekben. Természetesen ehhez az szükséges, hogy a két vizsgált változó között lineáris összefüggés álljon fenn. A módszer gyakran olyankor is alkalmazható, ha a két mennyiség között nem lineáris az összefüggés, viszont igen jó közelítéssel lineárisnak tekinthető az adott tartományban, ezért nem okoz túl nagy hibát az, ha lineárisnak vesszük az összefüggést. Ezt természetesen az adott probléma jellege határozza meg, és csak bizonyos esetekben használható. Amennyiben két mérési pont közötti értéket szeretnénk meghatározni, interpolációról beszélünk (lásd fent). Ha a mérési pontok alapján egy olyan pontot szeretnénk meghatározni, mely a mérési tartományon kívül esik, azaz a fenti táblázat alapján például $x = 15,0$ esetén szeretnénk meghatározni y értékét, extrapolációról van szó. Figyelem! Míg az interpoláció a linearitás feltételezésével helyes eredményt ad, az extrapoláció gyakran vezet olyan eredményhez, mely nem felel meg a valóságnak. Ennek oka, hogy attól, hogy egy bizonyos tartományban joggal alkalmazhatunk lineáris összefüggést, gyakran más tartományokban már nagy hibát okozhat a lineáris viselkedéstől való eltérés. Erre egy szemléletes példát mutat az alábbi ábra:



1.1.5.1. ábra: Az extrapoláció hibái

Mint látható, az $x = 40 \dots 50$ tartományban az összefüggés lineárisnak tekinthető, tehát például az $x = 42$ vagy $x = 46$ pontokban viszonylag pontosan becsülhetjük y értékét. Ám ha az $x = 40$ és $x = 50$ pontok alapján próbálunk extrapolálni $x = 10$ értékre a piros színű egyenes alapján (lineáris függvényt feltételezve), igen nagy hibát követünk el!

A lineáris interpolációt legszemléletesebben egy példa alapján érthetjük meg:

1.7. példa:

A magnézium-szulfát vizes oldatának a sűrűsége és az oldat tömeg%-os összetétele között gyakorlatilag lineáris az összefüggés. Az alábbi táblázat különböző tömeg%-os összetételű magnézium-szulfát-oldatok sűrűségét tartalmazza $20\text{ }^\circ\text{C}$ hőmérsékleten. Becsüljük meg lineáris interpolációval a 11 tömeg%-os magnézium-szulfát-oldat sűrűségét!

MgSO ₄ -tartalom (tömeg%)	sűrűség (g/cm ³)
6	1,0602
10	1,1034
14	1,1484
18	1,1955

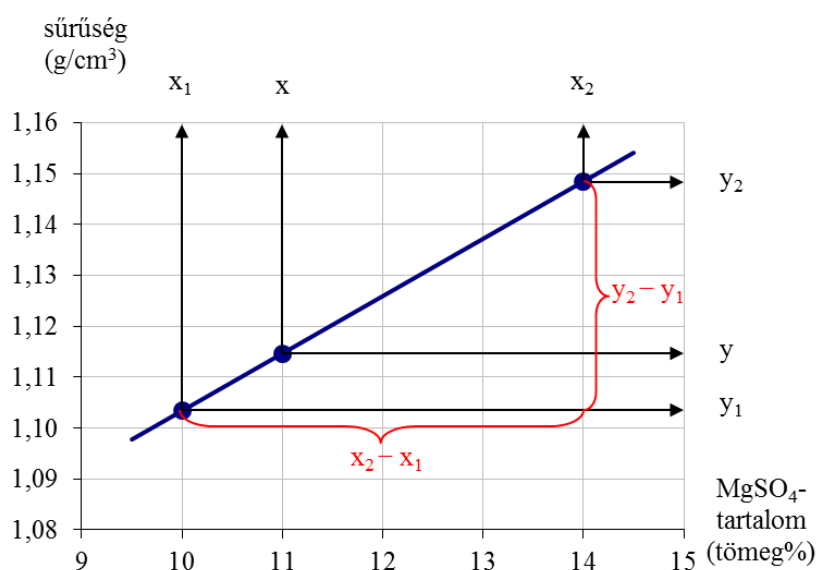
Megoldás:

Az első lépés megkeresni, hogy mely pontok között célszerű az interpolációt végezni, azaz meg kell állapítani, mely mérési pontok közé esik a kérdéses pont. A 11 tömeg%-os oldat a 10 és a 14 tömeg%-os oldat összetétele közé esik, tehát ebben az intervallumban célszerű a lineáris interpolációt elvégezni. (Elvileg ugyan más pontok között is tudnánk végezni interpolációt, ám a legszűkebb intervallumot célszerű kiválasztani, mert a linearitás feltételezése itt a leghelytállóbb.)

Lineáris interpoláció esetén az y mennyiséget (a sűrűséget) x mennyiség (a MgSO₄-tartalom tömeg%-ban) függvényében a következő összefüggéssel írhatjuk le:

$$y = a \cdot x + b.$$

Az alábbi diagramon láthatók a 10 tömeg%-os (x_1) és a 14 tömeg%-os (x_2) összetételhez tartozó pontok (a megfelelő sűrűségek rendre y_1 és y_2), illetve a kérdéses sűrűség (y) a 11 tömeg%-os pontban (melyet a vízszintes tengelyen x -nek rövidítettünk).

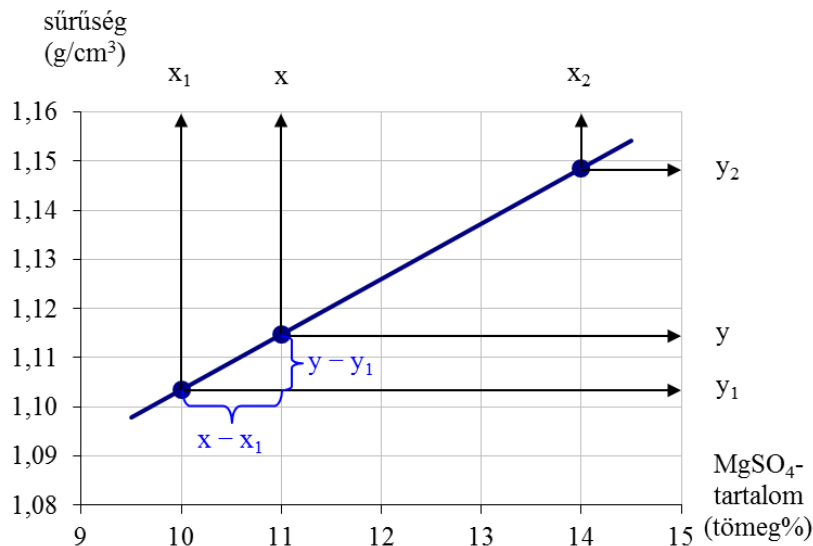


1.1.5.2. ábra: Az oldat sűrűsége a tömegszázalék függvényében

Tehát az $(x_1; y_1)$ és $(x_2; y_2)$ pontok közé behúzott egyenes meredeksége:

$$a = \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1}.$$

Mivel a növekmények (Δy és Δx) között egyenes arányosság áll fenn, az „a” meredekség ugyanakkora a 10 tömeg%-os (x_1) és a 11 tömeg%-os (x) összetétel esetén is, mint ahogyan a következő ábrán is látható:



1.1.5.3. ábra: A sűrűség számítása interpolációval

Azaz felírható ismét, hogy Δy és Δx aránya állandó, méghozzá a fenti „a” érték:

$$a = \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{y - y_1}{x - x_1}.$$

Mivel az „a” meredekség mindkét esetben ugyanakkora, felírhatjuk a következő kifejezést:

$$a = \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} = \frac{y - y_1}{x - x_1}.$$

Ezt a képletet érdemes megjegyezni, ám ha nem megy olyan könnyedén, akkor a fenti gondolatmenettel bármikor igen könnyen eljuthatunk hozzá. Mivel a fenti egyenletben csupán az y az ismeretlen, könnyen kifejezhető:

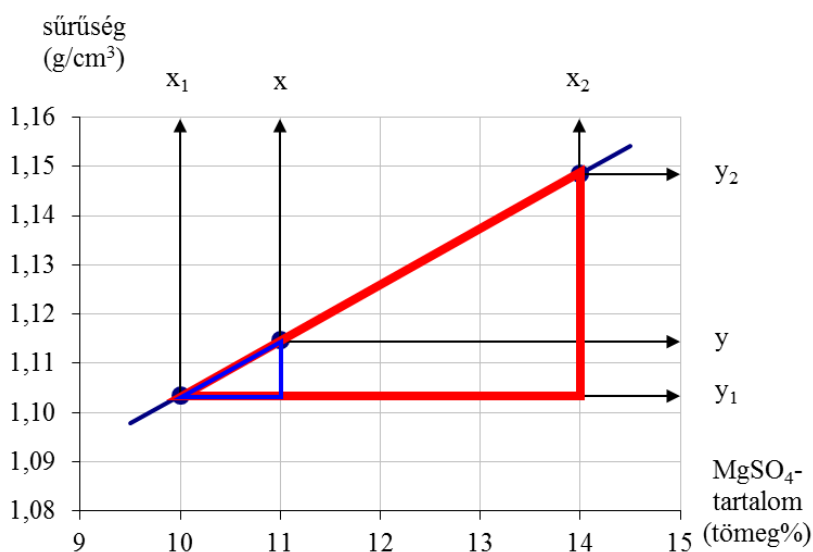
$$y - y_1 = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} \cdot (x - x_1) \Rightarrow y = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} \cdot (x - x_1) + y_1.$$

Behelyettesítve a képletbe x , x_1 , x_2 , y_1 és y_2 értékét (mértékegységek nélkül):

$$y = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} \cdot (x - x_1) + y_1 = \frac{1,1484 - 1,1034}{14 - 10} \cdot (11 - 10) + 1,1034 = 1,11465 \approx 1,1147.$$

Tehát a 11 tömeg%-os magnézium-szulfát-oldat sűrűsége $1,1147 \text{ g/cm}^3$.

Megjegyzés: ugyanehhez az eredményhez eljuthatunk kicsit más úton is. Az alábbi ábrán bejelölt két háromszög hasonló egymáshoz, így az oldalaik aránya is állandó.



1.1.5.4. ábra: Az interpoláció szemléltetése hasonló háromszögekkel

1.8. példa:

Egy kísérlet során megmértük egy ismeretlen magnézium-szulfát oldat sűrűségét, mely $1,1600 \text{ g/cm}^3$ -nek adódott. Lineáris interpoláció segítségével állapítsuk meg az oldat magnézium-szulfát-tartalmát tömeg%-ban! A feladat megoldásához használjuk az előző példában megadott táblázatot!

Megoldás:

A lineáris összefüggés lehetőséget terem arra, hogy a sűrűség (y) ismeretében az ismeretlen tömeg%-os összetételt (x) is meghatározhassuk. Mivel az $1,1600 \text{ g/cm}^3$ sűrűség-érték a $1,1484$ és $1,1955 \text{ g/cm}^3$ értékek között található, a 14 és 18 tömeg%-os összetételhez tartozó pontok közt kell interpolálni. Az előző példában megismert összefüggést kell alkalmaznunk:

$$\frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} = \frac{y - y_1}{x - x_1}$$

Ebből most x -et kell kifejeznünk x_1 , x_2 , y_1 , y_2 , és y függvényében:

$$x - x_1 = (y - y_1) \cdot \frac{x_2 - x_1}{y_2 - y_1} \Rightarrow x = (y - y_1) \cdot \frac{x_2 - x_1}{y_2 - y_1} + x_1$$

Behelyettesítve a megfelelő értékeket:

$$x = (y - y_1) \cdot \frac{x_2 - x_1}{y_2 - y_1} + x_1 = (1,1600 - 1,1484) \cdot \frac{18 - 14}{1,1955 - 1,1484} + 14 = 14,98 \approx 15$$

Tehát az $1,1600 \text{ g/cm}^3$ sűrűségű magnézium-szulfát-oldat körülbelül 15 tömeg%-os.

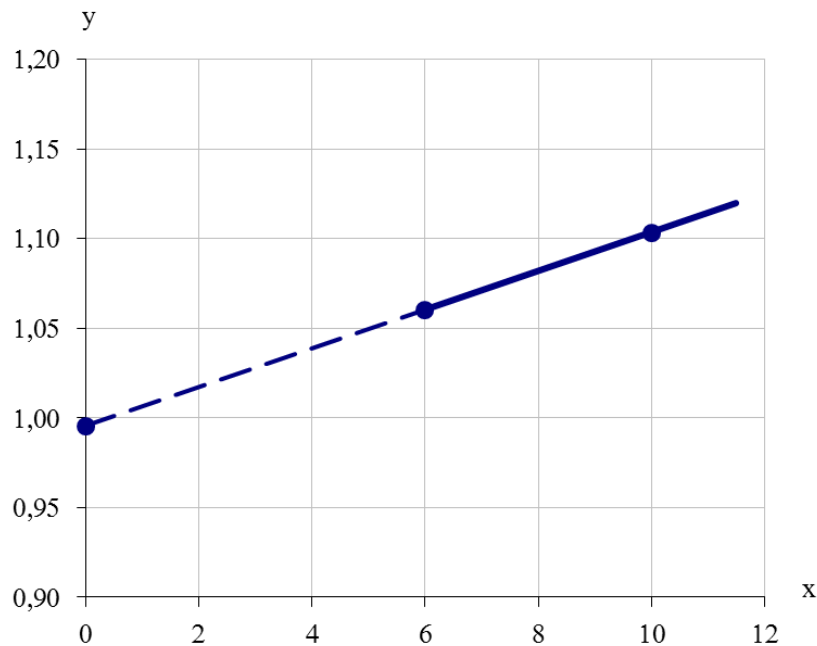
Mint említettük, az extrapoláció során mindig fokozott figyelemmel kell eljárni, mivel gyakran előfordul, hogy az extrapolált érték nem jó becslése a valódi értéknek. Következzen egy példa az extrapolációra:

1.9. példa:

A magnézium-szulfát-oldatra bemutatott 6 és 10 tömeg%-os adatok alapján extrapoláljunk 0 tömeg%-os összetételre!

Megoldás:

Az előzőekhez hasonlóan, 6 tömeg%-os összetételnél (x_1) a sűrűség $1,0602 \text{ g/cm}^3$, (y_1), 10 tömeg% (x_2) esetén pedig $1,1034 \text{ g/cm}^3$ (y_2). A feladat megbecsülni a sűrűséget (y) 0 tömeg% (x) esetén. Ismételten célszerű egy ábrát készíteni a megoldáshoz:



1.1.5.5. ábra: Példa a lineáris extrapolációra

Az előző feladatok megoldásához hasonlóan felírhatjuk az egyes pontokat összekötő egyenesek meredekségét, és a két meredekségnek meg kell egyeznie:

$$a = \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{y_1 - y}{x_1 - x} = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1}.$$

Kifejezve y -t x függvényében:

$$y_1 - y = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} \cdot (x_1 - x) \Rightarrow -y = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} \cdot (x_1 - x) - y_1 \Rightarrow y = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} \cdot (x - x_1) + y_1.$$

Érdeemes megfigyelni, hogy a kapott kifejezés ugyanaz, mint amit az interpolációnál kaptunk! Behelyettesítve az értékeket:

$$y = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} \cdot (x - x_1) + y_1 = \frac{1,1034 - 1,0602}{10 - 6} \cdot (0 - 6) + 1,0602 = 0,9954.$$

A desztillált víz sűrűsége 4°C -on $1,000 \text{ gramm/cm}^3$, 20°C -on pedig $0,998 \text{ gramm/cm}^3$, így az extrapolációval kapott $0,9954 \text{ gramm/cm}^3$ érték igen jól közelíti a valódi értéket. Ebből arra következtethetünk, hogy a magnézium-szulfát-oldat sűrűsége és összetétele közötti összefüggés igen jól közelíthető lineáris függvényvel.

1.1.6. Egyenletek közelítő megoldása iterációs úton

Gyakran előfordul, hogy egy egyenlet megoldására nem ismerünk megfelelő „képletet”, sőt nem ritka, hogy egy egyenletet csak közelítőleg tudunk megoldani. Ebben a részben bemutatunk egy egyszerű módszert, melynek segítségével könnyen megoldhatunk különféle egyenleteket.

1.10. példa:

Oldjuk meg közelítőleg a következő egyenletet!

$$\sqrt{x} + \lg x = 0$$

Megoldás:

Az egyenletet a pozitív számok halmazán kell megoldanunk.

Hozzuk az egyenletet a következő formára!

$$x = f(x)$$

Erre két lehetőségünk van, azaz:

$$\text{A) } -\sqrt{x} = \lg x$$

$$x = 10^{-\sqrt{x}} \Rightarrow f_A(x) = 10^{-\sqrt{x}}$$

$$\text{B) } \sqrt{x} = -\lg x$$

$$x = (-\lg x)^2 = (\lg x)^2 \Rightarrow f_B(x) = \lg^2 x.$$

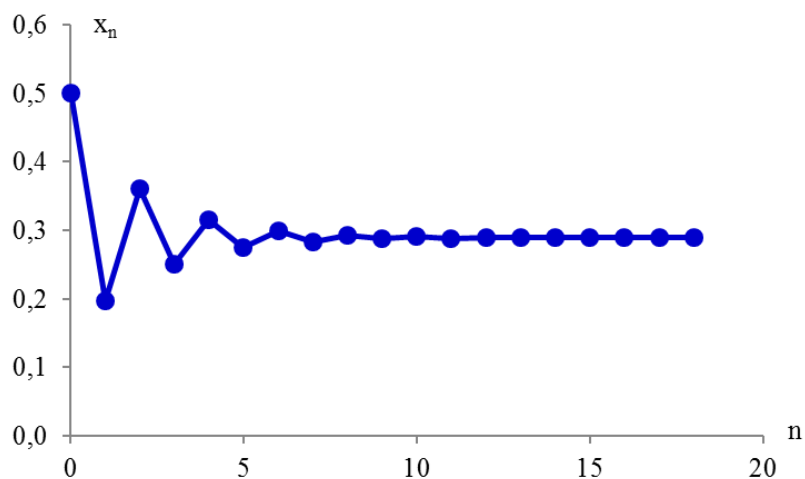
Ezután próbáljuk megoldani az egyenletet az A) illetve B) úton! Vegyünk egy kiindulási x_0 értéket, például $x_0 = 0,5$, ezután x_0 értékét behelyettesítjük az egyenlet jobb oldalán álló kifejezésbe, melynek eredménye $x_1 = f(x_0)$ lesz. Ezután x_1 -et behelyettesítjük a jobb oldali kifejezésbe, és megkapjuk $x_2 = f(x_1)$ értékét, majd ezt ismét behelyettesítjük az egyenlet jobb oldalába, és így tovább. Ha az egyenlet megoldható ezzel a módszerrel, azt kell tapasztalnunk, hogy az egymást követő $x_0, x_1 = f(x_0), x_2 = f(x_1), x_3 = f(x_2), \dots, x_{i+1} = f(x_i), \dots$ értékeknek közeledniük kell a megoldáshoz, mely így tetszőleges pontossággal kiszámítható. Most nézzük ezt meg az adott példán:

A)

$x_0 = 0,5$	$x_0 = 0,5000$
$x_1 = 10^{-\sqrt{x_0}} = 10^{-\sqrt{0,5000}}$	$x_1 \approx 0,1363$
$x_2 = 10^{-\sqrt{x_1}} = 10^{-\sqrt{0,1363}}$	$x_2 \approx 0,3605$
$x_3 = 10^{-\sqrt{x_2}} = 10^{-\sqrt{0,3605}}$	$x_3 \approx 0,2509$
$x_4 = 10^{-\sqrt{x_3}} = 10^{-\sqrt{0,2509}}$	$x_4 \approx 0,3156$
$x_5 = 10^{-\sqrt{x_4}} = 10^{-\sqrt{0,3156}}$	$x_5 \approx 0,2743$
$x_6 = 10^{-\sqrt{x_5}} = 10^{-\sqrt{0,2743}}$	$x_6 \approx 0,2994$
$x_7 = 10^{-\sqrt{x_6}} = 10^{-\sqrt{0,2994}}$	$x_7 \approx 0,2837$
$x_8 = 10^{-\sqrt{x_7}} = 10^{-\sqrt{0,2837}}$	$x_8 \approx 0,2933$

$x_9 = 10^{-\sqrt{x_8}} = 10^{-\sqrt{0,2933}}$	$x_9 \approx 0,2873$
$x_{10} = 10^{-\sqrt{x_9}} = 10^{-\sqrt{0,2873}}$	$x_{10} \approx 0,2910$
$x_{11} = 10^{-\sqrt{x_{10}}} = 10^{-\sqrt{0,2910}}$	$x_{11} \approx 0,2887$
$x_{12} = 10^{-\sqrt{x_{11}}} = 10^{-\sqrt{0,2887}}$	$x_{12} \approx 0,2902$
$x_{13} = 10^{-\sqrt{x_{12}}} = 10^{-\sqrt{0,2902}}$	$x_{13} \approx 0,2893$
$x_{14} = 10^{-\sqrt{x_{13}}} = 10^{-\sqrt{0,2893}}$	$x_{14} \approx 0,2898$
$x_{15} = 10^{-\sqrt{x_{14}}} = 10^{-\sqrt{0,2898}}$	$x_{15} \approx 0,2895$
$x_{16} = 10^{-\sqrt{x_{15}}} = 10^{-\sqrt{0,2895}}$	$x_{16} \approx 0,2897$
$x_{17} = 10^{-\sqrt{x_{16}}} = 10^{-\sqrt{0,2897}}$	$x_{17} \approx 0,2896$
$x_{18} = 10^{-\sqrt{x_{17}}} = 10^{-\sqrt{0,2896}}$	$x_{18} \approx 0,2896$
$x_{19} = 10^{-\sqrt{x_{18}}} = 10^{-\sqrt{0,2896}}$	$x_{19} \approx 0,2896$

Mint látjuk, az eredmények egy adott értékhez közelítenek, és ez az érték éppen az egyenlet megoldása!



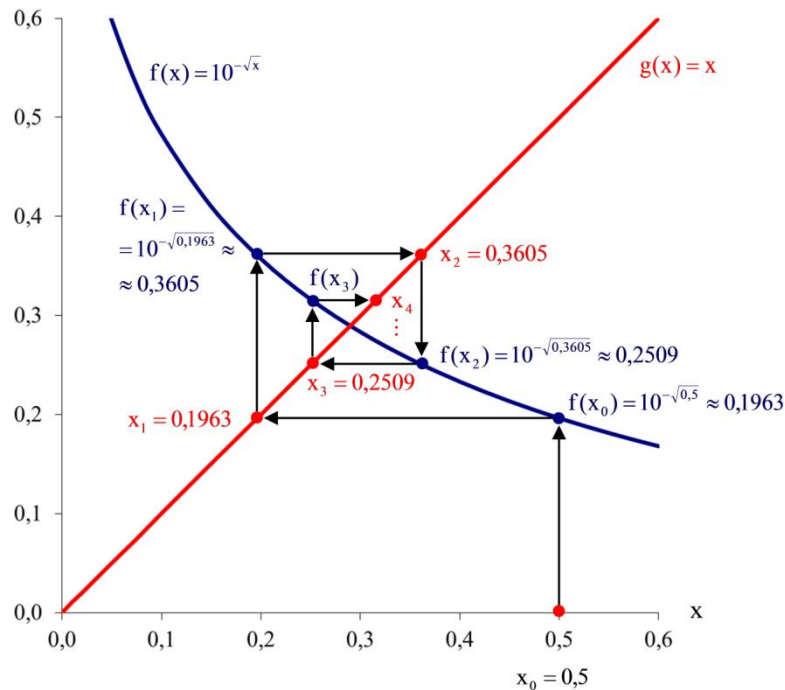
1.1.6.1. ábra: Az eredmények konvergenciája

Az eredményekből szépen látszik, hogy minél többször végezzük el a behelyettesítést, egyre pontosabban kapjuk meg az egyenlet eredményét. Ha két tizedesjegy pontossággal szeretnénk megoldani az egyenletet, akkor elég csak a 8. lépésig folytatni, ha az eredményre három tizedesjegy pontosságra vagyunk kíváncsiak, a 14. lépésig kell folytatnunk az iterációs eljárást. Az egyenlet pontos megoldása hét értékes jegy pontossággal: 0,2896232.

Megjegyzendő, hogy a módszer gyorsasága természetesen függ a kiindulási x_0 érték kiválasztásától. Az eljárást grafikusán az alábbi animáció segítségével szemléltethetjük:



1.1.6.1. animáció: Az iteráció



1.1.6.2. ábra: Az iterációs eljárás szemléltetése

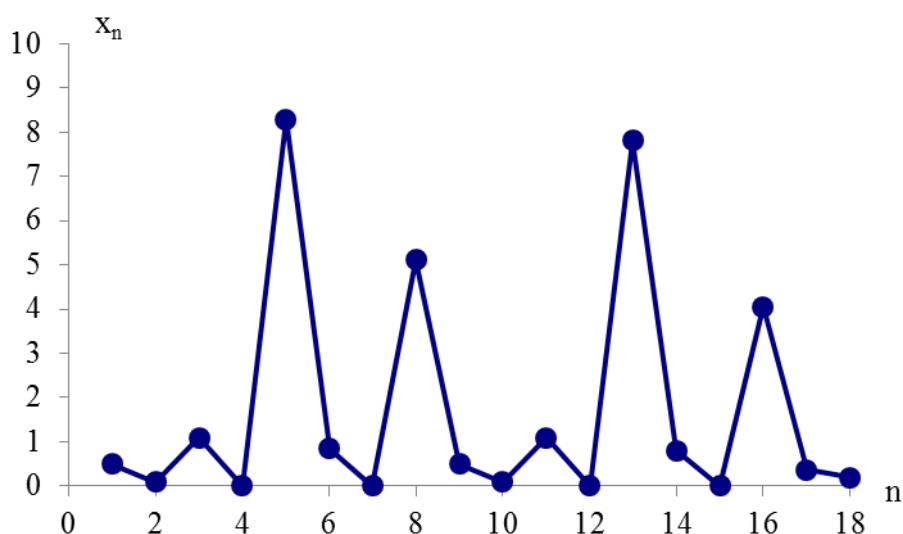
B)

Az előzőekhez hasonlóan legyen a kiindulási érték $x_0 = 0,5!$

$x_0 = 0,5$	$x_0 \approx 0,5000$
$x_1 = (\lg x_0)^2 = (\lg 0,5000)^2$	$x_1 \approx 0,0906$
$x_2 = (\lg x_1)^2 = (\lg 0,0906)^2$	$x_2 \approx 1,0874$
$x_3 = (\lg x_2)^2 = (\lg 1,0874)^2$	$x_3 \approx 0,0013$
$x_4 = (\lg x_3)^2 = (\lg 0,0013)^2$	$x_4 \approx 8,2837$
$x_5 = (\lg x_4)^2 = (\lg 8,2837)^2$	$x_5 \approx 0,8431$
$x_6 = (\lg x_5)^2 = (\lg 0,8431)^2$	$x_6 \approx 0,0055$
$x_7 = (\lg x_6)^2 = (\lg 0,0055)^2$	$x_7 \approx 5,1090$
$x_8 = (\lg x_7)^2 = (\lg 5,1090)^2$	$x_8 \approx 0,5017$
$x_9 = (\lg x_8)^2 = (\lg 0,5017)^2$	$x_9 \approx 0,0897$
$x_{10} = (\lg x_9)^2 = (\lg 0,0897)^2$	$x_{10} \approx 1,0965$
$x_{11} = (\lg x_{10})^2 = (\lg 1,0965)^2$	$x_{11} \approx 0,0016$
$x_{12} = (\lg x_{11})^2 = (\lg 0,0016)^2$	$x_{12} \approx 7,8140$

$x_{13} = (\lg x_{12})^2 = (\lg 7,8140)^2$	$x_{13} \approx 0,7972$
$x_{14} = (\lg x_{13})^2 = (\lg 0,7972)^2$	$x_{14} \approx 0,0097$
$x_{15} = (\lg x_{14})^2 = (\lg 0,0097)^2$	$x_{15} \approx 4,0555$
$x_{16} = (\lg x_{15})^2 = (\lg 4,0555)^2$	$x_{16} \approx 0,3697$
$x_{17} = (\lg x_{16})^2 = (\lg 0,3797)^2$	$x_{17} \approx 0,1867$
$x_{18} = (\lg x_{17})^2 = (\lg 0,1867)^2$	$x_{18} \approx 0,5311$

Mint ahogyan a fenti értékeket ábrázolva láthatjuk, az eredmények nem tartanak egy adott értékhez.



1.1.6.3. ábra: A nem megfelelő függvénykapcsolat következménye

A feladatot így a B) úton nem tudjuk megoldani, a megoldás csak az A) úton lehetséges. Annak magyarázatához, hogy miért csak az egyik úton jutottunk el a végeredményhez, felsőbb matematikai eszközök is szükségesek, ezért ezzel a kérdéssel itt nem foglalkozunk részletesen. Amennyiben egy átalakítási mód nem vezet megoldáshoz, érdemes megpróbálni az iterációs eljárást a függvény inverzével is!

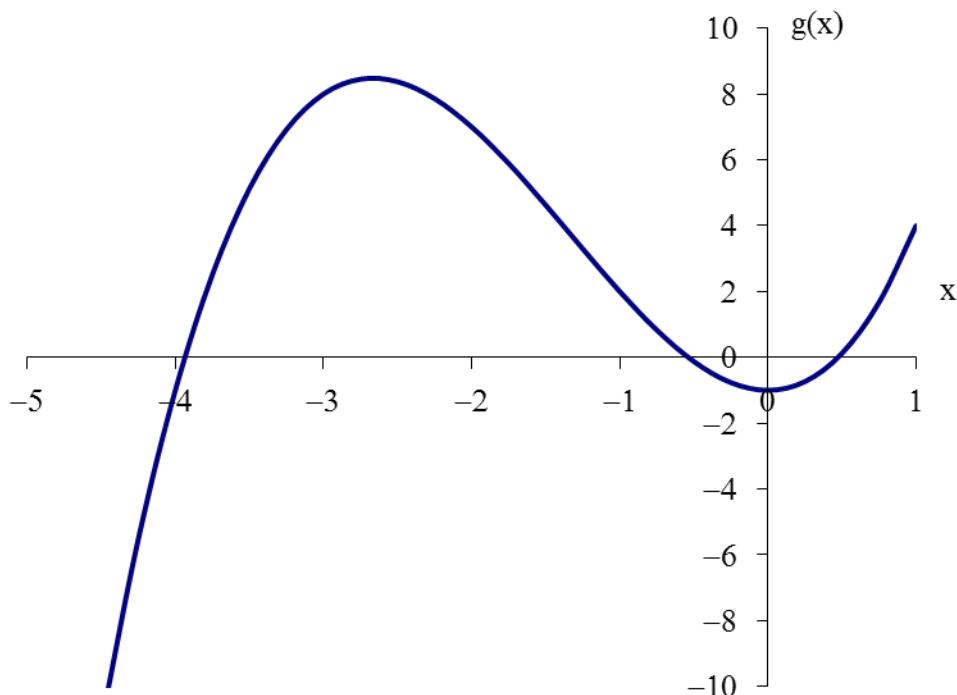
1.11. példa:

Oldjuk meg a következő egyenletet!

$$x^3 + 4 \cdot x^2 - 1 = 0$$

Megoldás:

Egy harmadfokú függvénynek egy, kettő vagy három gyöke lehetséges. A $g(x) = x^3 + 4 \cdot x^2 - 1$ függvényt ábrázolva a következő grafikont kapjuk:



1.1.6.4. ábra: A $g(x) = x^3 + 4 \cdot x^2 - 1$ függvény

Mint a fenti ábrából látható, a $g(x)$ függvénynek három zéruspontja van, így a $g(x) = 0$ egyenletnek három megoldása van. A grafikus megoldásból annyit megállapíthatunk, hogy egy gyök $x = -4$ környezetében, egy másik $x = -0,5$ környezetében, míg a harmadik $x = 0,5$ környezetében található.

Az iterációs eljárásához $x = f(x)$ alakra kell hozni az egyenletet. Erre több lehetőség is van:

A)

$$x = \sqrt[3]{1 - 4 \cdot x^2}$$

Az előző feladat megoldásának mintájára vegyünk egy kiindulási x_0 értéket, például $x_0 = 10$ (bármely más szám is lehetne)! Az iteráció első 32 lépésének x_n értéke a lépésszám függvényében a következő táblázatban található:

n	x_n	n	x_n	n	x_n
0	10,0000	11	-3,9848	22	-3,9361
1	-7,3619	12	-3,9688	23	-3,9359
2	-5,9981	13	-3,9580	24	-3,9357
3	-5,2282	14	-3,9507	25	-3,9356
4	-4,7671	15	-3,9458	26	-3,9356
5	-4,4798	16	-3,9424	27	-3,9355
6	-4,2958	17	-3,9402	28	-3,9355
7	-4,1758	18	-3,9387	29	-3,9355
8	-4,0966	19	-3,9376	30	-3,9355
9	-4,0439	20	-3,9369	31	-3,9355
10	-4,0085	21	-3,9364	32	-3,9354

Mint látható, az x_n értékek sorozata viszonylag lassan közelít a megoldáshoz. Az iterációs eljárást folytatva a megoldás hét értékes jegy pontossággal: $-3,935432$.

B)

$$x = \pm \frac{1}{4} \sqrt{1 - x^3}$$

Az iterálást tehát elvégezhetjük a pozitív és a negatív előjelű kifejezéssel is. Mivel a négyzetgyök alatti kifejezésnek nemnegatívnak kell lennie, teljesülnie kell, hogy $1 - x^3 \geq 0$, azaz $x^3 \leq 1$, mely teljesül, ha $x \leq 1$. Tehát az iterálást olyan kiindulási értékkel érdemes kezdeni, mely nem nagyobb, mint 1.

A pozitív előjelű kifejezéssel végezve az iterálást, ha $x_0 = 1$, akkor az eredmények sorozata:

n	x_n	n	x_n	n	x_n
0	1,000000	4	0,473732	8	0,472835
1	0,000000	5	0,472674	9	0,472834
2	0,500000	6	0,472862	10	0,472834
3	0,467707	7	0,472829	11	0,472834

Az eljárás ebben az esetben igen gyorsan közelít egy adott értékhez, és az eredmény: $x = 0,472834$.

Ha az iterációt a negatív előjelű kifejezéssel végezzük, a következő sorozatot kapjuk, ha $x_0 = 1$:

n	x_n	n	x_n	n	x_n
0	1,000000	5	-0,537118	10	-0,537401
1	0,000000	6	-0,537345	11	-0,537402
2	-0,500000	7	-0,537390	12	-0,537402
3	-0,530330	8	-0,537399	13	-0,537402
4	-0,535993	9	-0,537401	14	-0,537402

Az eredményt ismét igen gyorsan megkapjuk, ennek értéke: $-0,537402$.

Tehát a harmadfokú egyenlet megoldásai:

$$x_1 = -3,9354,$$

$$x_2 = 0,4728,$$

$$x_3 = -0,5374.$$

1.1.7. Síkidomok kerülete és területe

Az alábbiakban a legfontosabb síkidomok kerületének (K) és területének (T) számítására alkalmas összefüggéseket mutatjuk be:

Háromszög:

$$K = a + b + c,$$

$$T = \frac{a \cdot m_a}{2} = \frac{a \cdot b \cdot \sin \gamma}{2},$$

„a”, „b” és „c” a háromszög oldalai, m_a az „a” oldalhoz tartozó magasság, γ pedig az „a” és „b” oldal által bezárt szög.

Trapéz:

$$K = a + b + c + d,$$

$$T = \frac{a + c}{2} \cdot m,$$

„a” és „c” a trapéz párhuzamos oldalai, m a két párhuzamos oldal közötti távolság, azaz a trapéz magassága, „c” és „d” a trapéz szárjai.

Paralelogramma:

$$K = 2 \cdot (a + b),$$

$$T = a \cdot m_a = b \cdot m_b = a \cdot b \cdot \sin \gamma,$$

„a” és „b” a paralelogramma oldalai, m_a az „a” oldalhoz tartozó magasság, m_b az a oldalhoz tartozó magasság, γ pedig az „a” és „b” oldal által bezárt szög.

Téglalap:

$$K = 2 \cdot (a + b),$$

$$T = a \cdot b,$$

„a” és „b” a téglalap oldalai.

Négyzet:

$$K = 4a \cdot a,$$

$$T = a^2,$$

„a” a négyzet oldala.

Deltoid:

$$K = 2 \cdot (a + b),$$

$$T = \frac{1}{2} e \cdot f,$$

„a” és „b” a deltoid oldalai, „e” és „f” a deltoid átlói.

Rombusz:

$$K = 4 \cdot a,$$

$$T = a \cdot m_a = a^2 \cdot \sin \alpha,$$

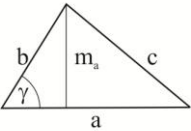
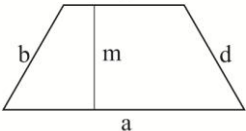
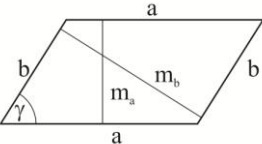
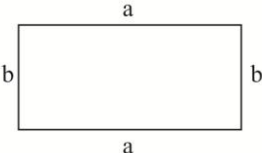
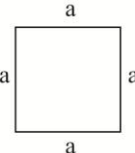
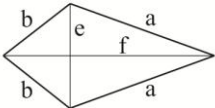
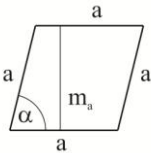
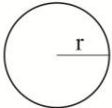
„a” a rombusz oldala, m_a a magassága, α pedig a rombusz két egymás melletti oldala által bezárt szög.

Kör:

$$K = 2 \cdot r \cdot \pi = d \cdot \pi,$$

$$T = r^2 \cdot \pi = \frac{1}{4} d^2 \cdot \pi,$$

„r” a kör sugara, „d” a kör átmérője.

Háromszög		$K = a + b + c$	$T = \frac{a \cdot m_a}{2} = \frac{a \cdot b \cdot \sin \gamma}{2}$
Trapéz		$K = a + b + c + d$	$T = \frac{a + c}{2} \cdot m$
Paralelogramma		$K = 2 \cdot (a + b)$	$T = a \cdot m_a = b \cdot m_b = a \cdot b \cdot \sin \gamma$
Téglalap		$K = 2 \cdot (a + b)$	$T = a \cdot b$
Négyzet		$K = 4a$	$T = a^2$
Deltoid		$K = 2 \cdot (a + b)$	$T = \frac{1}{2} e \cdot f$
Rombusz		$K = 4 \cdot a$	$T = a \cdot m_a = a^2 \cdot \sin \alpha$
Kör		$K = 2 \cdot r \cdot \pi = d \cdot \pi$	$T = r^2 \cdot \pi = \frac{1}{4} d^2 \cdot \pi$

1.1.8. Testek felszíne és térfogata

Az alábbiakban a legfontosabb testek felszínének (A) és térfogatának (V) számítására alkalmas összefüggéseket mutatjuk be:

Téglatest:

$$A = 2 \cdot (ab + bc + ac),$$

$$V = a \cdot b \cdot c,$$

„a”, „b” és „c” a téglatest élei.

Kocka:

$$A = 6 \cdot a^2,$$

$$V = a^3,$$

„a” a kocka éle.

Egyenes körhenger:

$$A = 2 \cdot r^2 \cdot \pi + 2 \cdot r \cdot \pi \cdot h = 2 \cdot r \cdot \pi \cdot (r + h),$$

$$V = r^2 \cdot \pi \cdot h = \frac{1}{4} d^2 \cdot \pi \cdot h,$$

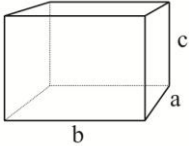
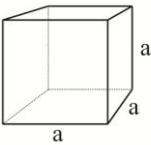
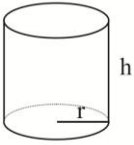
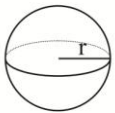
„r” az alapkör sugara, „d” az alapkör átmérője, „h” a henger magassága.

Gömb:

$$A = 4 \cdot r^2 \cdot \pi = d^2 \cdot \pi,$$

$$V = \frac{4}{3} r^3 \cdot \pi = \frac{1}{6} d^3 \cdot \pi,$$

„r” a gömb sugara, „d” a gömb átmérője.

Téglatest		$A = 2 \cdot (ab + bc + ac)$	$V = a \cdot b \cdot c$
Kocka		$A = 6 \cdot a^2$	$V = a^3$
Egyenes körhenger		$A = 2 \cdot r^2 \cdot \pi + 2 \cdot r \cdot \pi \cdot h$	$V = r^2 \cdot \pi \cdot h = \frac{1}{4} d^2 \cdot \pi \cdot h$
Gömb		$A = 4 \cdot r^2 \cdot \pi = d^2 \cdot \pi$	$V = \frac{4}{3} r^3 \cdot \pi = \frac{1}{6} d^3 \cdot \pi$

1.2. Fizikai alapismeretek

1.2.1. SI-alapmennyiségek, mértékegységeik és gyakori jelöléseik

Hosszúság

Jele: l (*longitudo*, hosszúság), s (távolság, út)

Mértékegysége: méter (\Leftarrow *metrum* – latin / *metron* – görög, mérték), rövidítése: m.

Tömeg

Jele: m (*massa*)

Mértékegysége: kilogramm (\Leftarrow *kilo* + *gramma* – görög, kis tömeg), rövidítése: kg.

Idő

Jele: t (*tempus*)

Mértékegysége: másodperc vagy szekundum (\Leftarrow *secunda* – latin, kis rész), rövidítése: s.

Áramerősség

Jele: I (*intensitas*)

Mértékegysége: amper (\Leftarrow *André-Marie Ampère*), rövidítése: A.

Hőmérséklet

Jele: T (*temperare*)

Mértékegysége: kelvin (\Leftarrow *William Thomson Kelvin*), rövidítése: K.

Anyagmennyiség

Jele: n (*numerus*)

Mértékegysége: mól (\Leftarrow *mole*, a német Molekül rövidítése alapján), jele: mol.

Fényerősség

Jele: I_v (*intensitas, visual*)

Mértékegysége: kandela (\Leftarrow *candela* – latin, gyertya), rövidítése: cd.

1.2.2. SI kiegészítő mennyiségek, mértékegységeik és gyakori jelöléseik:

Síkszög

Jele: α

Mértékegysége: radián (\Leftarrow *radius* – latin, sugár), rövidítése: rad.

Térszög

Jele: I_v (*intensitas, visual*)

Mértékegysége: szteradián (\Leftarrow *stereos* – görög + *radius* – latin, tér + sugár), rövidítése: sr.

A kémiai szempontból fontos származtatott mennyiségeket és mértékegységeit a későbbiek során tárgyaljuk.

Prefixumok

A mértékegységek törtrészeit és többszöröseit az egység neve elé illesztett egy-egy szorzót jelentő, az alább felsorolt prefixumok egyikével képezzük.

yotta-	Y	10^{24}	deci-	d	10^{-1}
zetta-	Z	10^{21}	centi-	c	10^{-2}
exa-	E	10^{18}	milli-	m	10^{-3}
peta-	P	10^{15}	mikro-	μ	10^{-6}
tera-	T	10^{12}	nano-	n	10^{-9}
giga-	G	10^9	piko-	p	10^{-12}
mega-	M	10^6	femto-	f	10^{-15}
kilo-	K	10^3	atto-	a	10^{-18}
hekto-	H	10^2	zepto-	z	10^{-21}
deka-	Da	10^1	yocto-	y	10^{-24}

1.2.3. Mechanika

Sűrűség: a tömeg és a térfogat hányadosa.

Jele: ρ vagy d (\Leftarrow *density* – angol)

$$d = \rho = \frac{m}{V}$$

Mértékegysége: kg/m^3 ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$), de használhatjuk még a következő mértékegységeket is: g/cm^3 ($\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$), kg/dm^3 ($\text{kg}\cdot\text{dm}^{-3}$), stb. $1 \text{ g/cm}^3 = 1 \text{ kg/dm}^3 = 1000 \text{ kg/m}^3$. Gázok sűrűsége esetén (mivel ez általában 3 nagyságrenddel kisebb, mint a folyadékoké és szilárd anyagoké) gyakran használjuk a $\text{g/dm}^3 = \text{kg/m}^3$ mértékegységet.

Sebesség: a megtett út és az út megtételéhez szükséges idő hányadosa. Megkülönböztetünk pillanatnyi és átlagos sebességet.

Jele: v (\Leftarrow *velocitas* – latin)

$$v = \frac{\Delta s}{\Delta t}$$

Mértékegysége: $1 \text{ m/s} = 1 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1} = 0,001 \text{ km} / (1/3600 \text{ h}) = 3,6 \text{ km/h} = 3,6 \text{ km}\cdot\text{h}^{-1}$.

Gyorsulás: időegységre eső sebességváltozás, a sebesség változásának gyorsasága.

Jele: a (\Leftarrow *accelerare* – latin)

$$a = \frac{\Delta v}{\Delta t}$$

Mértékegysége: $1 \text{ m/s}^2 = 1 \text{ m}\cdot\text{s}^{-2}$.

Erő: testek közötti kölcsönhatás mértéke. (Azt a fizikai hatást, mely egy test mozgásállapotát vagy alakját megváltoztatja, erőhatásnak nevezzük, ennek a hatásnak a mértéke az erő.) Az erő egyik definíciója szerint a tömeg és a gyorsulás szorzata.

Jele: F (\Leftarrow *force* – angol)

$$F = m \cdot a$$

Mértékegysége: N (newton). $1 \text{ N} = 1 \text{ kg}\cdot\text{m/s}^2 = 1 \text{ kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-2}$.

Nyomás: az erő és a felület hányadosa.

Jele: p (\leftarrow *pressure* – angol)

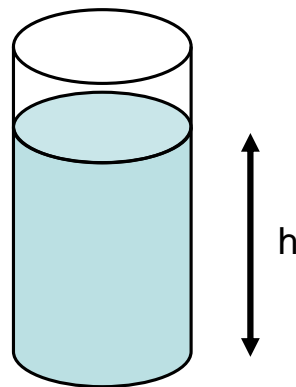
$$p = \frac{F}{A}$$

Mértékegysége: Pa (pascal). $1 \text{ Pa} = 1 \text{ N/m}^2 = 1 (\text{kg} \cdot \text{m/s}^2)/\text{m}^2 = 1 \text{ kg}/(\text{m} \cdot \text{s}^2) = 1 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-2}$.

Folyadékok hidrosztatikai nyomása: egy folyadékoszlop súlyából adódó nyomást a következő kifejezés adja meg:

$$p = d \cdot g \cdot h$$

d : a folyadék sűrűsége, h : a folyadékoszlop magassága, g : a gravitációs gyorsulás (értéke: $9,81 \text{ m/s}^2$).



1.2.3.1. ábra: A folyadékok hidrosztatikai nyomása

A fenti képlet közvetlenül adódik a nyomás definíciójából, azaz a folyadék súlya osztva a folyadék felületével. (Súly: a tömeg és a gravitációs gyorsulás szorzata, az az erő, mely húzza a felfüggesztést vagy nyomja az alátámasztást.)

$$p = \frac{F}{A} = \frac{m \cdot g}{A} = \frac{d \cdot V \cdot g}{A} = \frac{d \cdot h \cdot A \cdot g}{A} = d \cdot g \cdot h$$

Tehát egy folyadék nyomása független attól, hogy a folyadék mekkora felületen gyakorol nyomást az edény aljára, az csak a folyadék sűrűségétől és a folyadékoszlop magasságától függ.

A gázok nyomása a gázmolekuláknak az edény falával történő ütközésekből adódik. A pascal mellett gázok esetén további mértékegységeket is szokás használni:

Bar:

$$1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa}$$

Higanymilliméter vagy torr: 1 mm magasságú higanyoszlop nyomása (a légnyomás mérésére gyakran használunk U-csöves manométert, melyben a higanyoszlopok magasságának különbségét mérjük).

Mivel a higany sűrűsége $13\,578 \text{ kg/m}^3$, 1 mm magas higanyoszlop nyomása:

$$p = d \cdot g \cdot h = 13\,578 \text{ kg/m}^3 \cdot 9,81 \text{ m/s}^2 \cdot 0,001 \text{ m} = 133,2 \text{ Pa}, \text{ azaz } 1 \text{ Hgmm} = 1 \text{ torr} = 133,2 \text{ Pa}.$$

Fizikai atmoszféra: a normál légköri nyomás értéke, azaz

$$1 \text{ atm} = 101\,325 \text{ Pa.}$$

A folyadékok és gázok mechanikájával kapcsolatban érdemes megjegyezni két fontos törvényt is:

Pascal törvénye: egy nyugvó folyadékban a nyomás csökkenés nélkül minden irányban gyengíthetetlenül továbbterjed.

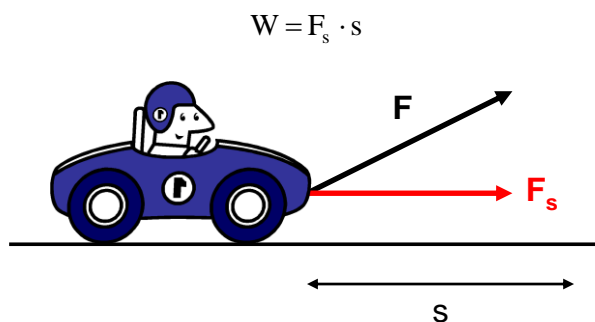
Arkhimédész törvénye: a folyadékba vagy gázba merülő testre ható felhajtóerő megegyezik a test által kiszorított folyadék vagy gáz súlyával. Képletben kifejezve:

$$F = d \cdot g \cdot V,$$

ahol F a felhajtóerő, d a folyadék vagy gáz sűrűsége, g a gravitációs gyorsulás (értéke: $9,81 \text{ m/s}^2$), V a test térfogata.

Munka: az erőnek az elmozdulás irányába eső komponensének és az elmozdulásnak a szorzata.

Jele: W (\Leftarrow *work* – angol)



1.2.3.2. ábra: A munka

F_s az erő elmozdulás irányába eső komponense, s az elmozdulás

Mértékegysége: J (joule), $1 \text{ J} = 1 \text{ N} \cdot \text{m} = 1 \text{ kg} \cdot \text{m/s}^2 \cdot \text{m} = 1 \text{ kg} \cdot \text{m}^2/\text{s}^2 = 1 \text{ kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2}$.

Energia: a munkavégző képesség. Az energia „eltárolt munka”, mely megfelelő körülmények között munkává alakítható. Az energia különféle formákban jelenik meg, például beszélhetünk mechanikai (mozgási, helyzeti,...), termikus, elektromos, stb. Az energia a rendszer egy állapotát írja le, a munka pedig az állapotok közötti változást.

Jele: E (\Leftarrow *energy* – angol)

Mértékegysége: ugyanaz, mint a munkának: J (joule), $1 \text{ J} = 1 \text{ N} \cdot \text{m} = 1 \text{ kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2}$.

Teljesítmény: a munka és az munkavégzés időtartamának hányadosa, egységnyi idő alatt végzett munka, a munkavégzés sebessége.

Jele: P (\Leftarrow *power* – angol)

$$P = \frac{W}{t}$$

Mértékegysége: W (watt), $1 \text{ W} = 1 \text{ J/s} = 1 (\text{kg} \cdot \text{m}^2/\text{s}^2)/\text{s} = 1 \text{ kg} \cdot \text{m}^2/\text{s}^3 = 1 \text{ kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-3}$.

Hatásfok: a hasznos munka és az összes befektetett munka hányadosa, vagy másképpen a hasznos teljesítmény és az összes befektetett teljesítmény hányadosa.

Jele: η

$$\eta = \frac{W_h}{W_\delta} \quad \eta = \frac{P_h}{P_\delta}$$

W_h : hasznos munka, W_δ : befektetett munka, P_h : hasznos teljesítmény, P_δ : befektetett teljesítmény.
Dimenziómentes szám, értéke: $0 \leq \eta \leq 1$.

1.2.4. Elektromosság

Töltés: az elemi töltésnek valahányszorososa.

Jele: Q

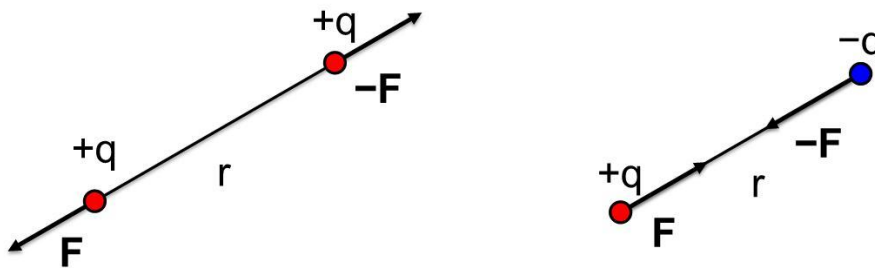
Mértékegysége: C (coulomb). $1 \text{ C} = 1 \text{ A} \cdot \text{s}$

Az elektron töltése $q = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$. Az elektron töltését negatívnak a protonét pedig pozitívnak tekintjük.

Coulomb törvénye: két pontszerű töltés között ható erő egyenesen arányos a töltésekkel, és fordítottan arányos a töltések közötti távolság négyzetével. Két azonos előjelű töltés (+,+ illetve -,-) között taszító, míg két ellentétes előjelű töltés (+,-) között vonzó elektrosztatikus kölcsönhatás jön létre.

$$|F| = k \cdot \frac{|Q_1 \cdot Q_2|}{r^2}$$

F: erő, Q_1 és Q_2 töltés, r: a két töltés közötti távolság, k: arányossági tényező, melynek értéke $8,99 \cdot 10^9 \text{ Nm}^2/\text{C}^2$.



1.2.4.1. ábra: Coulomb törvénye

Áramerősség: az időegység alatt áthaladt töltések mennyisége.

Jele: I (\leftarrow *intensitas* – angol)

$$I = \frac{Q}{t}$$

Q: áthaladt töltés, t: idő.

Mértékegysége: A (amper). $1 \text{ A} = 1 \text{ C/s} = 1 \text{ C} \cdot \text{s}^{-1}$.

Feszültség: a munka és a töltés hányadosa. A feszültség megadja, hogy mennyi munkát végez a mező egységnyi töltésen, míg a töltés az egyik pontból elmozdul a másikba.

Jele: U

$$U = \frac{W}{Q}$$

Q: töltés, W: a Q töltés egyik pontból a másikba juttatásához szükséges munka.

Mértékegysége: V (volt). $1 \text{ V} = 1 \text{ J/C} = 1 \text{ kg} \cdot \text{m}^2/\text{s}^2/(\text{A} \cdot \text{s}) = 1 \text{ kg} \cdot \text{m}^2/(\text{A} \cdot \text{s}^3) = 1 \text{ kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{A}^{-1} \cdot \text{s}^{-3}$.

Ellenállás: egy elektromos körben egy fogyasztón eső feszültség és a rajta átmenő áramerősség hányadosa.

Jele: R (\Leftarrow *resistance* – angol)

$$R = \frac{U}{I}$$

Mértékegysége: Ω (ohm). $1 \Omega = 1 \text{ V/A} = 1 \text{ kg} \cdot \text{m}^2/(\text{A} \cdot \text{s}^3)/\text{s} = 1 \text{ kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{A}^{-2} \cdot \text{s}^{-3}$

Ohm törvénye: egy fogyasztóra kapcsolt feszültség és a rajta áthaladó áramerősség között egyenes arányosság figyelhető meg.

Fajlagos ellenállás: egységnyi hosszú és egységnyi keresztmetszetű tömör anyag ellenállása. Egy adott vezetékdarab ellenállása egyenes arányos a vezeték hosszával, fordítottan annak keresztmetszetével, és az arányossági tényező a fajlagos ellenállás.

Jele: ρ

$$\rho = R \cdot \frac{A}{\ell}$$

R: ellenállás, A: keresztmetszet, ℓ .

Mértékegysége: $\Omega \cdot \text{m}^2/\text{m} = 1 \Omega \cdot \text{m}$, viszont a fajlagos ellenállásnak több más elterjed mértékegysége is ismert, attól függően, hogy milyen mértékegységben mérjük a keresztmetszetet és a hosszt:

$$1 \Omega \cdot \text{m} = 1 \Omega \cdot \text{m}^2/\text{m} = 10^6 \Omega \cdot \text{mm}^2/\text{m}; 1 \Omega \cdot \text{m} = 10^2 \Omega \cdot \text{cm}^2/\text{cm} = 10^2 \Omega \cdot \text{cm}$$

Ez utóbbi mértékegységet általában oldatok fajlagos ellenállása esetén használjuk.

Eredő ellenállás:

– soros kapcsolásnál: az eredő ellenállás az n darab sorba kapcsolt ellenállások értékének összege.

$$R_e = R_1 + R_2 + \dots + R_n = \sum_{i=1}^n R_i$$

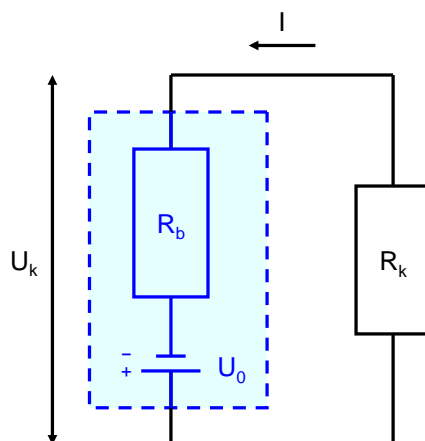
– párhuzamos kapcsolásnál: az eredő ellenállás reciproka az n darab párhuzamosan kapcsolt ellenállások értékének összege.

$$\frac{1}{R_e} = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} + \dots + \frac{1}{R_n} = \sum_{i=1}^n \frac{1}{R_i} \Rightarrow R_e = \frac{1}{\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} + \dots + \frac{1}{R_n}} = \frac{1}{\sum_{i=1}^n \frac{1}{R_i}}$$

Az elektromos áramkör: elektromotoros erő, kapocsfeszültség, belső ellenállás, rövidzárási áram

Ha egy áramforráson nagy belső ellenállású feszültségmérővel megmérjük a feszültséget, az áramforrás **elektromotoros erejét** (más néven forrásfeszültségét, jele U_0) kapjuk eredményül. Ilyenkor az áramforrás terheletlen, azaz a teljes feszültség az áramforráson esik.

Azonban ha egy fogyasztóval terheljük az áramforrást, az áramforráson mért feszültség már nem egyezik meg az elektromotoros erővel, hanem annál kisebb lesz. Ezt a feszültséget **kapocsfeszültségnek** nevezzük (a terhelt áramforrás kapcsain mért feszültség). A jelenség oka, hogy az áramkörben folyó áram az áramforráson is átfolyik. A töltések mozgásával szemben azonban az áramforrásnak is van ellenállása, ezt **belső ellenállásnak** nevezzük.



1.2.4.2. ábra: A belső ellenállás szemléltetése

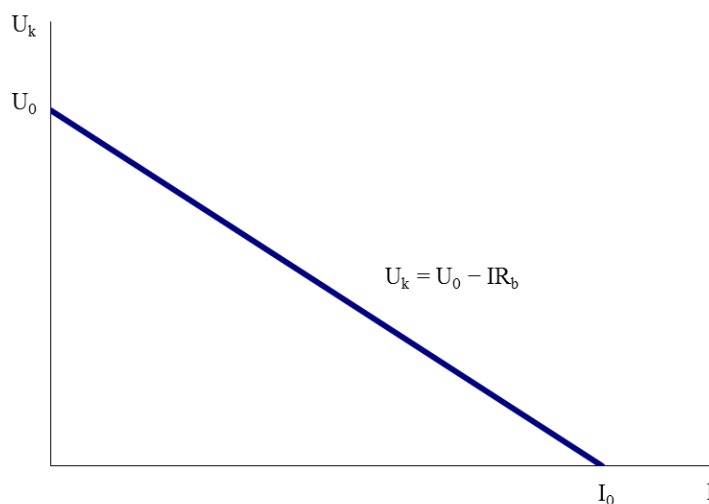
Az áramkörben mérhető áramerősséget (I) a fogyasztó „külső” ellenállása (R_k) és az áramforrás belső ellenállása (R_b) határozza meg:

$$U_0 = I \cdot (R_k + R_b) \Rightarrow I = \frac{U_0}{R_k + R_b}.$$

A kapocsfeszültség az áramforrás kapcsain mérhető feszültség, azaz

$$U_k = I \cdot R_k = U_0 - I \cdot R_b.$$

A kapocsfeszültséget az áramerősség függvényében ábrázolva a következő diagramot kapjuk:



1.2.4.3. ábra: A kapocsfeszültség az áramerősség függvényében

Ha egy elhanyagolható ellenállású vezetődarabbal összekötjük az áramforrás kivezetéseit, a kapocsfeszültség zérus és az ilyenkor mérhető áramerősség a rövidzárási áram:

$$I_0 = \frac{U_0}{R_b}$$

Mint ahogyan a fenti diagramon is látható a rövidzárási áram áramerősség maximumát adja meg.

Egyenáram munkája: az áramerősség, a feszültség és az idő szorzata, ám az ellenállás segítségével több más módon is meghatározható.

$$W = I \cdot U \cdot t$$

I: áramerősség, U: feszültség, t: az elektromos munkavégzés ideje.
Mértékegysége – a többi munkához hasonlóan – joule.

A munka könnyen adódik a feszültség és a töltésmennyiség definíciójából:

$$U = \frac{W}{Q} \Rightarrow W = U \cdot Q = U \cdot I \cdot t$$

Az ellenállás segítségével a következő képletek adódnak:

$$W = I \cdot U \cdot t = \frac{U}{R} \cdot U \cdot t = \frac{U^2}{R} \cdot t, \quad \text{illetve} \quad W = I \cdot U \cdot t = I \cdot (I \cdot R) \cdot t = I^2 \cdot R \cdot t$$

Elektromos teljesítmény: az elektromos teljesítmény az áramerősség és a feszültség szorzataként adódik. Az ellenállás bevezetésével ismét további összefüggéseket kaphatunk.

$$W = I \cdot U = \frac{U^2}{R} = I^2 \cdot R$$

Az elektromos teljesítmény mértékegysége a watt. A fenti összefüggések közvetlenül adódnak az elektromos munka képleteiből (a teljesítmény munka és a munkavégzés idejének hányadosa).

1.2.5. Hőtan

Hőmérsékleti skálák: a hőmérséklet meghatározására több különböző skálát használhatunk. A skálák nagy részét tapasztalati úton alakították ki, méghozzá egy kiválasztott alsó és felső hőmérsékleti érték között, meghatározott számú egyenletes skálaosztást alkalmazva. Itt csak a gyakorlati szempontból legfontosabb két skálát tárgyaljuk:

– Celsius-skála: a víz normál légköri nyomáson mért olvadás- és forráspontja közötti különbség századrészét tekintjük 1 °C-nak (1 Celsius-foknak). Celsius-skálán mérve a víz olvadáspontja 0 °C, míg forráspontja 100 °C normál légköri nyomáson.

– Abszolút hőmérsékleti vagy Kelvin-skála: a léptéke megegyezik a Celsius-skáláéval, azaz 1 °C = 1 K (kelvin), viszont a kiindulópontja –273,15 °C. Az abszolút nulla fokon, azaz 0 K hőmérsékleten a molekulák már nem végeznek rezgést. Kísérletileg az abszolút nulla fok megközelíthető, ám nem érhető el. A kelvin mértékegység után nem írunk fokot, és a °K jelölést is kerüljük!

Áttérés a Celsius-fok és a kelvin között:

$$T[\text{K}] = T[^\circ\text{C}] + 273,15$$

Hőkapacitás: megadja, hogy mennyi hőt kell közölni a rendszerrel, hogy annak hőmérséklete egységnyivel emelkedjen, vagy mennyi hőt kell elvonni a rendszerből, hogy annak hőmérséklete egységnyivel csökkenjen.

Jele: C.

$$C = \frac{Q}{\Delta T}$$

Q: hőmennyiség, ΔT : hőmérséklet-változás.

Mértékegysége: 1 J/K. $1 \text{ J/K} = 1 \text{ J/}^\circ\text{C} = 1 \text{ kg}\cdot\text{m}^2\cdot\text{s}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$, de mivel itt hőmérsékletkülönbségről vagy szó, természetesen a Celsius-fokot is használhatunk kelvin helyett.

Fajlagos hőkapacitás vagy **fajhő:** megadja, hogy mennyi hőt kell közölni egységnyi tömegű anyaggal ahhoz, hogy a hőmérséklete egységnyivel megemelkedjen.

Jele: c.

$$c = \frac{Q}{m \cdot \Delta T}$$

Q: hőmennyiség, m: tömeg, ΔT : hőmérséklet-változás.

Mértékegysége: 1 J/(kg·K). $1 \text{ J}/(\text{kg}\cdot\text{K}) = 10^{-3} \text{ J}/(\text{g}\cdot\text{K}) = 1 \text{ m}^2\cdot\text{s}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$. $1 \text{ kJ}/(\text{kg}\cdot\text{K}) = 1 \text{ J}/(\text{g}\cdot\text{K})$

Moláris hőkapacitás vagy **mólhő:** megadja, hogy mennyi hőt kell közölni egységnyi anyagmennyiségű anyaggal ahhoz, hogy a hőmérséklete egységnyivel megemelkedjen.

Jele: c_m .

$$c_m = \frac{Q}{n \cdot \Delta T}$$

Q: hőmennyiség, n: anyagmennyiség, ΔT : hőmérséklet-változás.

Mértékegysége: 1 J/(mol·K). $1 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1} = 1 \text{ kg}\cdot\text{m}^2\cdot\text{s}^{-2}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$.

Megkülönböztetünk állandó nyomáson és állandó hőmérsékleten értelmezett fajlagos, illetve moláris hőkapacitást. Ennek legnagyobb jelentősége gázok esetén van, mivel ezeknek jelentős a hőtágulása. Megjegyzendő, hogy az állandó nyomáson mért hőkapacitásokat használjuk leginkább, mivel a gyakorlatban a hőkölés is állandó (gyakran légköri) nyomáson történik.

A hőtágulás törvényszerűségei

Lineáris vagy vonalas hőtágulási együttható: egységnyi hőmérsékletemelés hatására bekövetkező relatív hossznövekedés.

Jele: α

$$\alpha = \frac{\Delta l}{l_1 \cdot \Delta T} = \frac{l_2 - l_1}{l_1 \cdot \Delta T}$$

Δl : hossznövekedés, l_1 : kiindulási hossz, l_2 : megnövekedett hossz, ΔT : hőmérséklet-növekedés.

Mértékegysége: K^{-1} vagy $^\circ\text{C}^{-1}$

A tárgy hossza a melegítés után: $l_2 = l_1 \cdot (1 + \alpha \cdot \Delta T)$

Térfogati vagy köbös hőtágulási együttható: egységnyi hőmérsékletemelés hatására bekövetkező relatív térfogat-növekedés ($\Delta V/V_1$).

Jele: β

$$\beta = \frac{\Delta V}{V_1 \cdot \Delta T} = \frac{V_2 - V_1}{V_1 \cdot \Delta T}$$

ΔV : térfogat-növekedés, V_1 : kiindulási térfogat, V_2 : megnövekedett térfogat, ΔT : hőmérséklet-növekedés.

Mértékegysége: K^{-1} vagy $^\circ\text{C}^{-1}$

A gázok térfogati hőtágulási együtthatója gyakorlatilag teljesen független az anyagi minőségtől, és értéke: $\beta = 1/273,15 \text{ K}^{-1}$

A térfogati és lineáris hőtágulási együttható közötti kapcsolat: $\beta \approx 3 \cdot \alpha$.

Ennek igazolása a következőképp történhet egy kocka alakú tárgy esetén:

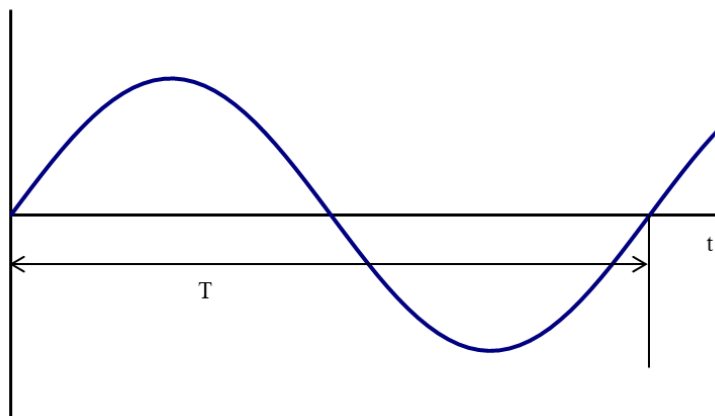
$$V_2 = [\ell_1 \cdot (1 + \alpha \cdot \Delta T)]^3 = \ell_1^3 \cdot (1 + \alpha \cdot \Delta T)^3 = V_1 \cdot (1 + 3 \cdot \alpha \cdot \Delta T + 3 \cdot \alpha^2 \cdot \Delta T^2 + \alpha^3 \cdot \Delta T^3).$$

Mivel α értéke igen kicsi, a négyzetes és köbös tagok sokkal kisebb nagyságrendűek, mint a lineáris tag, így elhanyagolhatóak.

1.2.6. Fénytan

A fény hullámhossza, frekvenciája és sebessége közötti összefüggés, a fény energiája

A fény, mint az elektromágneses hullámok általában, szinusz függvénnyel írható le:



1.2.6.1. ábra: A fény mint hullám

A **periódusidő** (T) egy teljes szinuszhullám megtételéhez szükséges idő (például két egymást követő maximum között eltelt idő).

A **frekvencia** a periódusidő reciproka, és azt mutatja meg, hogy egy időegység alatt hány hullámot tesz meg a fény. Másképp úgy számíthatjuk ki, hogy a periódusok számát elosztjuk az ezen periódusok megtételéhez szükséges idővel.

Jele: ν (egyébként rezgéseknél a frekvenciát szokás f -fel is jelölni.)

$$\nu = \frac{1}{T} = \frac{N}{t}$$

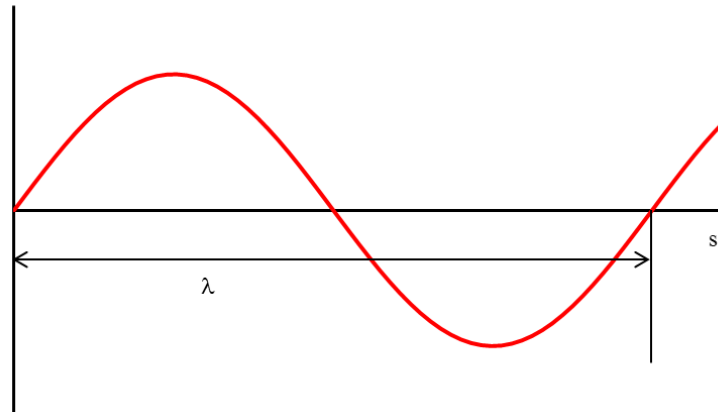
T: periódusidő, N: periódusok száma, t: idő.

Mértékegysége: Hz (herz). $1 \text{ Hz} = 1/\text{s} = 1 \text{ s}^{-1}$.

A **fény sebessége** vákuumban független a fény frekvenciájától, értéke kb. $300\,000 \text{ km/s}$ ($=3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$).

A fény **hullámhossza** egy periódus alatt megtett távolság:

Jele: λ



1.2.6.2. ábra: A fény hullámhossza

A fénysebesség, a frekvencia és hullámhossz közötti összefüggés:

$$c = \lambda \cdot \nu .$$

A **fény energiája** egyenesen arányos a fény frekvenciájával és az arányossági tényező az úgynevezett Planck-állandó. A fény energiája fordítottan arányos a fény hullámhosszával.

$$E = h \cdot \nu = h \cdot \frac{c}{\lambda}$$

h: Planck-állandó. Értéke: $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ J·s.

1.3. A görög ábécé

A	α	alfa	Ι	ι	ióta	Ρ	ρ	ró
B	β	béta	Κ	κ	kappa	Σ	σ	szigma
Γ	γ	gamma	Λ	λ	lambda	Τ	τ	tau
Δ	δ	delta	Μ	μ	mú	Υ	υ	üpszilon
E	ε	epszilon	Ν	ν	nú	Φ	φ	fi
Z	ζ	zéta	Ξ	ξ	kszi	Χ	χ	khí
H	η	éta	Ο	ο	omikron	Ψ	ψ	pszí
Θ	θ	théta	Π	π	pí	Ω	ω	omega

2. AZ ATOMOK SZERKEZETE

2.1. Az atommodellekről dióhéjban

Dalton-féle atommodell: az elemek azonos atomokból épülnek fel, a vegyületek különböző elemek atomjaiból állnak.

Thomson-féle atommodell („mazsolás puding”): az atomban egyenletesen oszlik el a jelentős tömegű, pozitív töltésű része, és ebben mozognak a sokkal kisebb tömegű negatív töltésű részecskék.

Rutherford-féle atommodell: az atommag és az elektronok azonosítása. A kis tömegű elektronok a nagy tömegű atommag körül keringenek.

Borh-féle atommodell: az elektronok adott sugarú körpályákon keringenek.

Sommerfeld-féle atommodell: az elektronok adott sugarú, ellipszis alakú pályákon keringenek.

Schrödinger-féle atommodell: az elektronok csak bizonyos valószínűséggel találhatók meg egy adott térrészben, pontos helyzetüket nem lehet megadni.

2.2. Az atomok felépítése

Atom: atommagból és elektronburokból felépülő semleges részecske.

Az atommagban pozitív töltésű **protonok** és semleges **neutronok** találhatóak (egyetlen kivétel a hidrogénatom, melyben nem található neutron, csak proton). A protonokat és neutronokat mint elemi részecskéket együttesen **nukleonok**knak nevezzük.

Az atomot alkotó elemi részecskék tömege és töltése:

	Részecske neve	Tömeg	Töltés	Relatív tömeg	Relatív töltés
Atommag	Proton (p^+)	$1,672 \cdot 10^{-27}$ kg	$1,6021 \cdot 10^{-19}$ C	1835,5	+1
	Neutron (n^0)	$1,674 \cdot 10^{-27}$ kg	0	1837,7	0
Elektronburok	Elektron (e^-)	$9,109 \cdot 10^{-31}$ kg	$-1,6021 \cdot 10^{-19}$ C	1	-1

Mint látható a fenti táblázatból, a proton és a neutron tömege közelítőleg megegyezik, az elektron tömege pedig ezeknél nagyságrendekkel kisebb (mintegy 1840-ed része a proton vagy a neutron tömegének). A neutron semleges, a proton és az elektron töltése abszolút értékben megegyezik, ám előjelük ellentétes.

Rendszám: az atomban található protonok száma.

Jele: Z

Tömegszám: az atommagban található protonok és neutronok számának az összege.

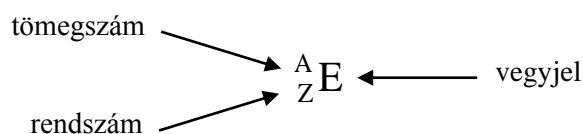
Jele: A

Neutronsám: tömegszámból levonva a protonok számát, azaz a tömegszám és a rendszám különbsége.

Jele: N

$$N = Z - A.$$

(Kémiai) elemeknek nevezzük az azonos rendszámmal rendelkező atomokból felépülő anyagokat. Az elemeket vegyjelükkel szoktuk azonosítani. A vegyjel előtt a tömegszámot és a rendszámot is feltüntethetjük, ilyenkor rendszerint a bal felső indexbe a tömegszámot, a bal alsó indexbe a rendszámot írjuk:



Nuklid: azonos rendszámú és tömegszámú atommagokat tartalmazó atomok összessége.

Izotóp: egy elem izotópjainak nevezzük azonos rendszámmal, ám különböző tömegszámmal rendelkező atomjait. (Egy elem különböző neutronszámú nuklidjai.)

Relatív atomtömeg: megmutatja, hogy az adott atom tömege hányszorosa egy $^{12}_6\text{C}$ -atom tömegének 1/12-ed részénél.

Anyagmennyiség: 1 mól az anyagmennyisége $6,022 \cdot 10^{23}$ darab részecskének.

Avogadro-szám: egy mól részecske darabszáma. Értéke $6,022 \cdot 10^{23}$ / mol.

A relatív atomtömeg megadja 1 mól elem tömegét, az adott elem $6,022 \cdot 10^{23}$ darab atomjának össztömegét.

Egy elemek legnagyobb része többféle izotóp elegye, a természetes gyakoriságukból adódik a relatív atomtömeg. A relatív atomtömeg kiszámításánál az egyes izotópok atomtömegét a természetes gyakoriságukkal súlyozzuk.

Tiszta elem: olyan elem, mely (a természetben) csak egyetlen stabil izotópjával fordul elő. Például: foszfor (P), alumínium (Al), fluor (F), nátrium (Na), mangán (Mn), jód (I) stb.

(Az érdeklődők kedvéért megemlítjük, hogy egy izotóp atomtömege szám szerint nem azonos tökéletesen az izotóp tömegszámával [mely mindig egész szám]. Ennek három oka van: egyrészt a protonok és neutronok tömege nem teljesen azonos – lásd fentebb –, másrészt az atomtömeg tartalmazza az elektronok tömegét is, harmadrészt az atommag keletkezésekor felszabaduló hatalmas energia tömegcsökkenést okoz – lásd relativitáselmélet. Jó közelítéssel azonban egy izotóp tömegszáma és az atomtömege megegyezik. A $^{12}_6\text{C}$ -izotóp esetében azonban a tömegszám és az atomtömeg pontosan megegyezik.)

A stabil izotóppal rendelkező elemek rendszámát (Z), vegyjelét, relatív atomtömegét (A_r), természetben megtalálható stabil izotópjaik tömegszámát (A) és neutronszámát (N) az alábbi táblázat tartalmazza:

Z	Vegyjel	A_r	A	N	A	N	A	N	A	N	A	N
1	H	1,00794(7)	1	0	2	1						
2	He	4,002602(2)	3	1	4	2						
3	Li	6,941(2)	6	3	7	4						
4	Be	9,012182(3)	9	5								
5	B	10,811(7)	10	5	11	6						
6	C	12,0107(8)	12	6	13	7						
7	N	14,0067(2)	14	7	15	8						
8	O	15,9994(3)	16	8	17	9	18	10				

9	F	18,9984032(5)	19	10								
10	Ne	20,1797(6)	20	10	21	11	22	12				
11	Na	22,98976928(2)	23	12								
12	Mg	24,3050(6)	24	12	25	13	26	14				
13	Al	26,9815386(8)	27	14								
14	Si	28,0855(3)	28	14	29	15	30	16				
15	P	30,973762(2)	31	16								
16	S	32,065(5)	32	16	33	17	34	18	36	20		
17	Cl	35,453(2)	35	18	37	20						
18	Ar	39,948(1)	36	18	38	20	40	22				
19	K	39,0983(1)	39	20	41	22						
20	Ca	40,078(4)	40	20	42	22	43	23	44	24		
21	Sc	44,955912(6)	45	24								
22	Ti	47,867(1)	46	24	47	25	48	26	49	27	50	28
23	V	50,9415(1)	51	28								
24	Cr	51,9961(6)	52	28	53	29	54	30				
25	Mn	54,938045(5)	55	30								
26	Fe	55,845(2)	56	30	57	31	58	32				
27	Co	58,933195(5)	59	32								
28	Ni	58,6934(4)	58	30	60	32	61	33	62	34	64	36
29	Cu	63,546(3)	63	34	65	36						
30	Zn	65,38(2)	64	34	66	37	67	38	68	38	70	40
31	Ga	69,723(1)	69	38	71	40						
32	Ge	72,64(1)	70	38	72	40	73	41	74	42		
33	As	74,92160(2)	75	42								
34	Se	78,96(3)	74	40	76	42	77	43	78	44	80	46
35	Br	79,904(1)	79	44	81	46						
36	Kr	83,798(2)	78	42	80	44	82	46	83	47	84	48
			86	50								
37	Rb	85,4678(3)	85	48								
38	Sr	87,62(1)	84	46	86	48	87	49	88	50		
39	Y	88,90585(2)	89	50								
40	Zr	91,224(2)	90	50	91	51	92	52				
41	Nb	92,90638(2)	93	52								
42	Mo	95,96(2)	92	50	94	52	95	53	96	54	97	55
			98	56								
43	Tc	98,9063										
44	Ru	101,07(2)	96	52	98	54	99	55	100	56	101	57
			102	58	104	60						
45	Rh	102,90550(2)	103	58								
46	Pd	106,42(1)	102	56	104	58	105	59	106	60	108	62
			110	64								
47	Ag	107,8682(2)	107	60	109	62						
48	Cd	112,411(8)	110	62	111	63	112	64				
49	In	114,818(3)	113	64								
50	Sn	118,710(7)	112	62	114	64	115	65	116	66	117	67
			118	68	119	69	120	70	122	72	124	74
51	Sb	121,760(1)	121	70	123	72						
52	Te	127,60(3)	122	70	124	72	125	73	126	74		
53	I	126,90447(3)	127	74								
54	Xe	131,293(6)	124	70	126	72	128	74	129	75	130	76
			131	77	132	78	134	80	136	82		

55	Cs	132,9054519(2)	133	78								
56	Ba	137,327(7)	130	74	132	76	134	78	135	79	136	80
			137	81	138	82						
57	La	138,90547(7)	139	82								
58	Ce	140,116(1)	136	78	138	80	140	82				
59	Pr	140,90765(2)	141	82								
60	Nd	144,242(3)	142	82	143	83	145	85	146	86	148	88
61	Pm	146,9151										
62	Sm	150,36(2)	144	82	150	88	152	90	154	92		
63	Eu	151,964(1)	153	90								
64	Gd	157,25(3)	154	90	155	91	156	92	157	93	158	94
65	Tb	158,92535(2)	159	94								
66	Dy	162,500(1)	158	92	160	94	161	95	162	96	163	97
			164	98								
67	Ho	164,93032(2)	165	98								
68	Er	167,259(3)	166	98	167	101	168	100	170	102		
69	Tm	168,93421(2)	169	100								
70	Yb	173,054(5)	170	100	171	101	172	102	173	103	174	104
			176	106								
71	Lu	174,9668(1)	175	104								
72	Hf	178,49(2)	176	104	177	105	178	106	179	107	180	108
73	Ta	180,9479(1)	181	108								
74	W	183,84(1)	182	108	183	109	184	110				
75	Re	186,207(1)	185	110								
76	Os	190,23(3)	187	111	188	112	189	113	190	114		
77	Ir	192,217(3)	191	114	193	116						
78	Pt	195,084(9)	192	114	194	116	195	117	196	118		
79	Au	196,966569(4)	197	118								
80	Hg	200,59(2)	196	116	198	118	199	119	200	120	201	121
			202	122	204	124						
81	Tl	204,3833(2)	203	122	205	124						
82	Pb	207,2(1)	206	124	207	125	208	126				
83	Bi	208,98040(1)	209	126								

A különböző izotópok gyakorlatilag tökéletesen azonos kémiai tulajdonsággal rendelkeznek. A legnagyobb különbség fizikai tulajdonságokban a hidrogén három izotópja között van (itt egyetlen proton mellett egy vagy két neutron viszonylag nagyobb eltérést okoz):

¹H: prócium (99,98%)

²H: deutérium (0,02%), általában a jelölése: D

³H: trícium (radioaktív), általában a jelölése: T.

Radioaktivitás: a nem stabil atommagok spontán bomlása. A radioaktív bomlást nagy energiájú sugárzás kíséri.

A nem stabil magokat szokás radioaktív magoknak is nevezni.

A radioaktivitás kémiai módszerekkel – tehát az elektronszerkezeten keresztül – nem befolyásolható.

2.3. Az atomok elektronszerkezete

Az elemek kémiai tulajdonságait az elektronszerkezetük határozza meg, a kémiai változások az atommagra nincsenek hatással. Az elektronok száma megegyezik a rendszámmal, mely az adott elemre jellemző, így a különböző elemek várhatóan különböző kémiai tulajdonságokkal rendelkeznek.

Az elektronok az atomokban atompályákon helyezkednek el.

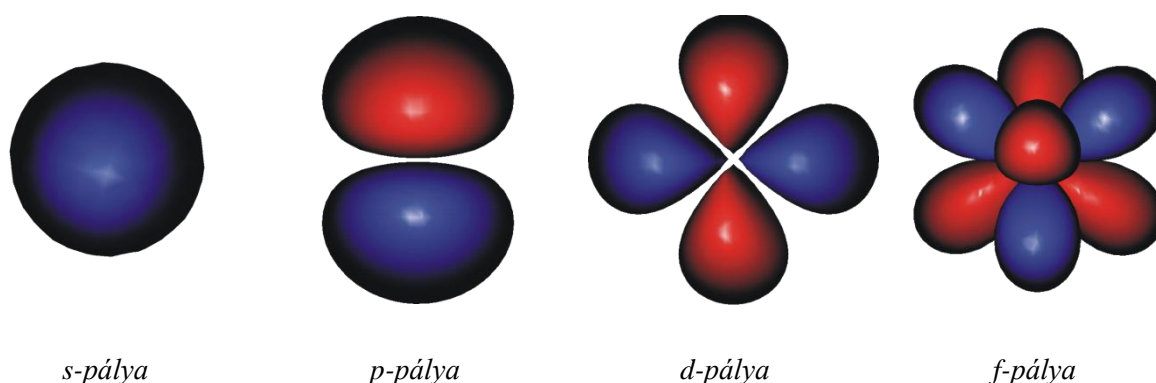
Atompálya: az a térrész, ahol az elektron 90%-os valószínűséggel megtalálható.

Az elektron a tér bármely térrészében megtalálható valamilyen valószínűséggel, az atompálya nem jelent éles határt, inkább valószínűségi jellegű.

Az atompályákat egy szám és egy betű kombinációjával szoktuk jelölni, például $1s$, $2p_x$, $3d_{xy}$ stb...

A pályákat térben ábrázolhatjuk úgy, hogy megjelenítjük azt a felületet, mellyel határolt térrészben az elektron megtalálásának valószínűsége 90%-os.

A különféle pályák alakját megfigyelhetjük az alábbi ábrán:



2.3.1. ábra: Különböző atompályák alakja

A pályák egyik fontos jellemzője a csomósíkok száma. **Csomósíknak** nevezzük azt a síkot, mely keresztül megy az atommagon és benne az elektron megtalálási valószínűsége zérus. Mint látható, az s-pályának nincsen csomósíkja, a p-pályáknak egy csomósíkja van, a d-pályáknak két csomósíkja van és így tovább.

Az elektronburok felépülése

Mint a korábbiakban is említettük, az elemek kémiai tulajdonságait az elektronburok felépítése, az elektronszerkezet határozza meg. Ezért rendkívül fontos az elektronszerkezet felépülését viszonylag részletesen tárgyalnunk. Az általános kémia ezen része viszonylag bonyolult, viszont a fontos alapfogalmak elsajátítása után érdekes törvényszerűségeket ismerünk majd meg!

Vegyünk egy tetszőleges atommagot, és közelítsünk hozzá egy elektront! Az elektron a legalacsonyabb energiájú atompályára kerül, és ezt energiefel szabadulás kíséri. (Megjegyzendő, hogy a felszabaduló energia nem vehet fel bármilyen értéket.) A legalacsonyabb energiájú pályát $1s$ pályának nevezzük. Egy második elektron, közelítve az így keletkezett „egyelektronos” rendszerhez, szintén egy atompályára került, melyet ismét energiefel szabadulás kíséri. A második elektron – az elsőhöz hasonlóan – az $1s$ pályára kerül, és az energiefel szabadulás is megegyezik az első elektron kötődésénél tapasztalttal. Ha ehhez a „kételektronos” rendszerhez egy újabb elektront adunk, az már nem kerülhet a legalacsonyabb energiájú $1s$ pályára, mivel az atompályákon maximálisan két elektron foglalhat helyet! (Most ezt fogadjuk el tényként, – a kiegészítő anyagként tárgyalandó – általánosan megfogalmazott **Pauli-elv** következménye.) A harmadik elektron így a $2s$ pályára kerül. Egy negyedik elektront még mindig el tudunk helyezni a $2s$ pályán, ám az ötödik elektronnak már az egyik $2p$ pályára kell kerülnie (mivel pályánként maximum két elektron foglalhat helyet). Még mielőtt túlzottan belebonyolódnánk a pályák számozásába és sorrendjébe, érdemes összefoglalnunk a fentieket:

- **Energiaminimumra törekvés:** az elektron mindig a legalacsonyabb energiájú pályára kerül.
- Egy pályára **maximálisan két elektront** lehet elhelyezni.

A pályákat az elektronokkal szokás, az alábbi cellás jelöléssel, jelölni:



Pálya elektron nélkül
(üres pálya)



Pálya egy elektronnal
(félleg betöltött pálya)



Pálya két elektronnal
(betöltött pálya)

Alapállapotú atom: minden elektron a lehető legalacsonyabb energiájú atompályán helyezkedik el.

Gerjesztett atom: az atommal energiát közölve, egy vagy több elektron magasabb energiájú pályára kerül. (Még mindig kötődik az atomhoz, nem szakad le róla.)

Az atompályák **alhéjakat**, az alhéjak pedig **elektronhéjakat** alkotnak.

Az alhéjat a pálya megjelölésében található betű jelöli, például lehetséges p-alháj, d-alháj stb. Egy alhéjon belül ugyanolyan típusú és azonos (vagy hasonló) méretű pályák találhatóak, ám ezeknek a térbeli irányultsága különbözhet, például a $2p_x$, $2p_y$ és $2p_z$ három különböző irányban állnak.

Egy adott alhéjon belül az elektronok energiája azonos, tehát a $2p_x$, $2p_y$ és a $2p_z$ pályákon található elektronoknak ugyanakkora (ugyanolyan mély) az energiája.

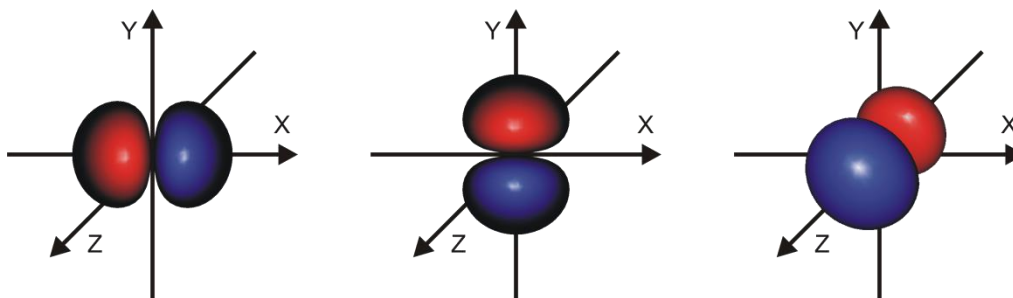
Az elektronhéjat pedig a pálya jelölésében található szám mutatja meg, az elektronháj „méretével” van kapcsolatban: az 1. héj van a legközelebb az atommaghoz, a 2. héj ennél kijebb található, és így tovább. Tehát a héj sorszámja az atommagtól való távolságot jelenti.

A héjakon belül alhéjak találhatóak. Például az 1. héj egyetlen alhéjból ($1s$) áll, mely csupán egy pályát tartalmaz ($1s$), a 2. héj két alhéjból áll: a $2s$ -alháj és a $2p$ -alháj alkotja. A legalacsonyabb energiájú héjat K héjnak, a többit pedig rendre L, M, N, O, ... héjaknak nevezzük.

Megkülönböztetünk különböző „fajta”, különböző alakú pályákat, az egyes típusú atompályák darabszámát pedig a páratlan egész számok adják meg (1, 3, 5, 7, 9, ...).

- s-pálya: héjanként egy s-pálya lehetséges, ez az egy pálya alkotja az s-alhéjat;
- p-pálya: héjanként három p-pálya lehetséges, ezek alkotják a p-alhéjat;
- d-pálya: héjanként öt d-pálya lehetséges, ezek alkotják a d-alhéjat;
- f-pálya: héjanként hét f-pálya lehetséges, ezek alkotják az f-alhéjat;
- g-pálya, és így tovább...

Mint látható, az s-alháj kivételével egy alhéjon belül több pálya is található, a pályáknak többféle irányultsága van: a p_x , p_y és p_z pályák egy derékszögű (Descartes-féle) térbeli koordináta-rendszer három különböző tengelye irányába mutatnak:



2.3.2. ábra: A p-pálya lehetséges irányultságai

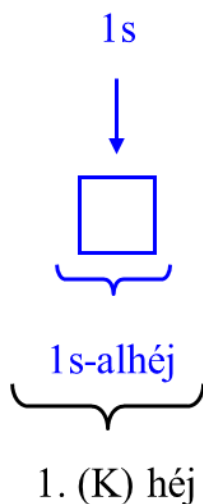
Összefoglalva:

Héj	Alhéj(ak)	Pályák száma az alhéjban	Elektronok maximális száma alhéjanként	Elektronok maximális száma héjanként
1. (K)	1s	1	2	$2 = 2 \cdot 1^2$
2. (L)	2s	1	2	$8 = 2 \cdot 2^2$
	2p	3	6	
3. (M)	3s	1	2	$18 = 2 \cdot 3^2$
	3p	3	6	
	3d	5	10	
4. (N)	4s	1	2	$32 = 2 \cdot 4^2$
	4p	3	6	
	4d	5	10	
	4f	7	14	

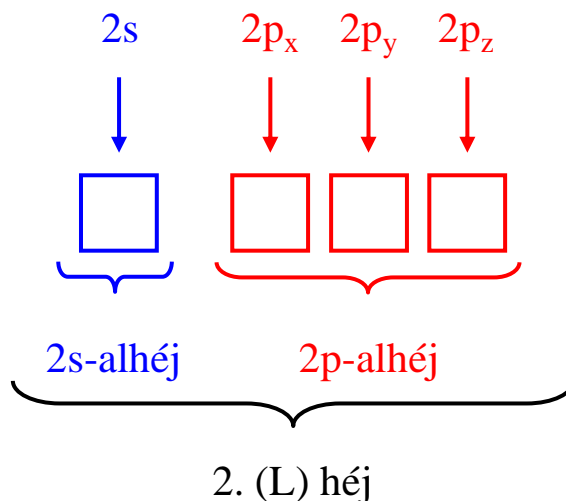
A táblázat alapján az alábbi megállapításokat tehetjük:

- az n. héjon n alhéj lehetséges
- az s alhéj 1, a p-alhéj 3, a d-alhéj 5, az f-alhéj 7 stb. atompályát tartalmaz
- minden atompályán maximálisan 2–2 elektron foglalhat helyet
- az n. héjon maximálisan $2 \cdot n^2$ darab elektron lehetséges.

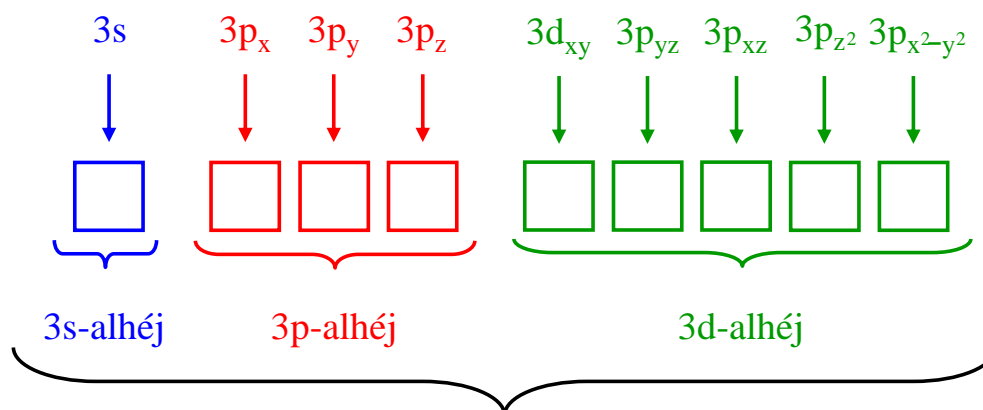
A cellás jelöléssel az 1. (K) héj:



Ehhez hasonlóan a 2. (L) héj:



A fentiekhez hasonló módon ábrázolva a 3. (M) héj:



3. (M) héj

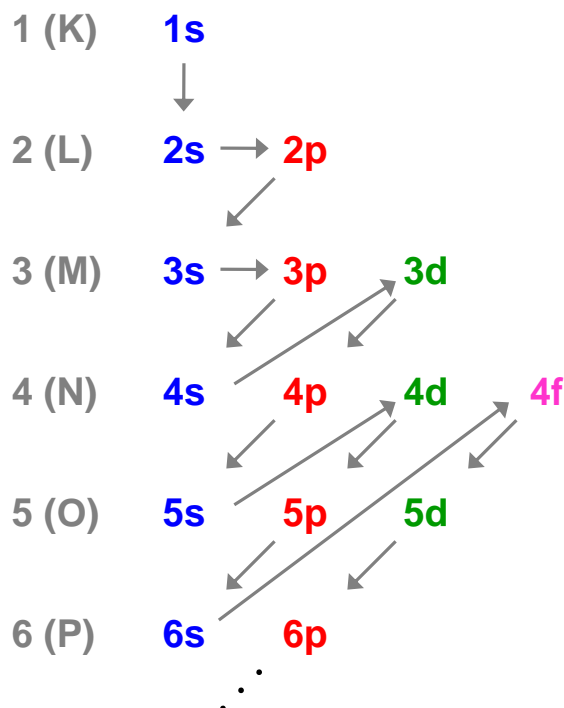
A fentiekben fontos törvényszerűségeket ismertünk meg, ám a valóságban a különböző alhéjak energiaszintje nem felel meg a fenti sorrendnek. Például a 4s alhéjon található elektron energiája mélyebben van, mint a 3d alhéjon található elektronoké.

Most lássuk, hogyan következnek az egyes alhéjak egymás után, energiájuk szerinti sorrendben!



Tehát mindig legelőször az 1s alhéj töltődik be, majd a 2s, ezután a 2p. További elektront a 3s alhéjra tudunk elhelyezni, ezután a 3p alhéj következik. Eddig a sorrend megegyezik azzal, mint amire a fenti táblázat alapján számítanánk. Ám a táblázat szerint következő 3d alhéj energiája magasabb, mint a 4s alhéjé, ezért az elektron inkább arra kerül. Nehéz pontos magyarázatot adni arra, hogy ez miért van, ezért egyszerűen csak fogadjuk el!

Az alhéjak fentebb bemutatott **betöltődési sorrendje** az alábbi ábrán könnyen nyomon követhető:



2.3.3. ábra: Az alhéjak betöltési sorrendje

Természetesen a pályák betöltődése addig tart, amíg rendelkezésre áll elektron. Mindig figyelembe kell vennünk, hogy

- az s-alhéjon 1 pálya,
- a p-alhéjon 3 pálya,
- a d-alhéjon 5 pálya,
- az f-alhéjon 7 pálya

található, és hogy minden pályán maximálisan két elektron helyezkedhet el.

Összefoglalva:

- az s-alhéjakra maximálisan 2 elektront,
- a p-alhéjakra maximálisan 6 elektront,
- a d-alhéjakra maximálisan 10 elektront,
- az f-alhéjakra maximálisan 14 elektront

helyezhetünk.

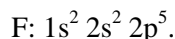
Ezért szokás a betöltődési energiasorrendet az alábbi módon is jelölni:



Például, ha a fluoratom alapállapotú elektronszerkezetére vagyunk kíváncsiak, a fluor (${}^9\text{F}$) rendszámának megfelelő 9 elektront kell megfelelően elhelyezni. Ehhez az 1s pályára helyezünk 2 elektront, majd a 2s pályára szintén 2 elektront. Ez összesen 4 elektront, még további 5 elektront kell elhelyeznünk. Sorrendben a 2p pálya következik, melyre legfeljebb 6 elektront tudunk elhelyezni, így a mind az 5 elektron a 2p pályára kerül.

Az elektronok számát az alhéjakon a *jobb felső indexbe tett számmal* jelöljük.

A fenti fluoratom elektronjainak alhéjak közötti megoszlását a következőképpen írhatjuk le röviden:



Azaz az 1s és 2s alhéjakra (pályákra) 2–2 elektront, míg a 2p pályára 5 elektront kerül (2–2 egy-egy p-pályára, míg a harmadikra csak 1).

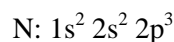
Cellás jelöléssel:



Elektronkonfiguráció: az elektronok pályák szerinti elrendeződése egy atomban.

Most pedig vizsgáljuk meg a nitrogénatom alapállapotú elektronszerkezetét!

A nitrogén rendszáma 7, így 7 elektronja van. Az előzőekhez hasonlóan 2–2 elektront elhelyezünk az 1s és 2s pályákon. A maradék 3 elektront a 2p pályán tudjuk elhelyezni.

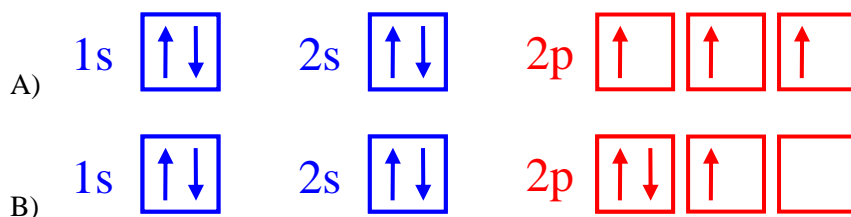


Itt viszont két lehetőségünk van:

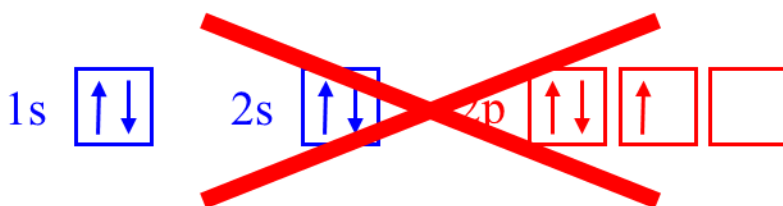
A) a három p-pályára kerül egy–egy–egy elektron

B) a három p-pálya közül egyre két elektron kerül, míg egy másikra csak egy, a harmadik p-pálya pedig betöltetlen marad.

A cellás jelöléssel a két lehetőség:



A fenti két lehetőség közül csak az egyik felel meg a valóságnak, mégpedig az A). Tehát egy alhéjon belül az elektronok lehetőség szerint párosítatlanul helyezkednek el [azaz a B) esetben csak egy párosítatlan elektron van, míg az A) esetben három]. Ezt Hund-szabálynak nevezzük.



Hund-szabály: egy atom alhéján az elektronok úgy helyezkednek el, hogy közülük minél több legyen párosítatlan.

Az alapállapotú elektronszerkezet kialakulásakor az alábbi törvényszerűségeknek kell teljesülniük:

- Energiaminimumra törekvés: az elektron mindig a lehető legalacsonyabb energiájú pályára kerül.
- Egy pályára legfeljebb két elektron kerülhet.
- Alhéjak esetén lehetőség szerint a legtöbb elektron legyen párosítatlan.

2.1. példa:

Állapítsuk meg a germániumatom alapállapotú elektronkonfigurációját.

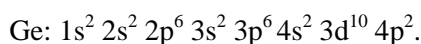
Megoldás:

Vegyük sorra, hogy melyik alhéjon hány elektron lehet. A jobb oldali oszlopban a betöltődési sorrend szerint az összes elektron számát is feltüntettük, melyet az adott alhéj telítődésével lehetséges elérni:

	Alhéjon	Összesen (betöltődés szerint)
1s	2	2
2s	2	2 + 2 = 4
2p	6	4 + 6 = 10
3s	2	10 + 2 = 12
3p	6	12 + 6 = 18
4s	2	18 + 2 = 20
3d	10	20 + 10 = 30
4p	6	30 + 6 = 36

Mivel a germániumnak 32 elektronja van, a 3d alhéj betöltődésével összesen 30 elektront tudunk elhelyezni, ezért a 4p alhéjra is kerül elektron, még hozzá 2.

Tehát az alapállapotú germániumatom elektronszerkezete:



Ellenőrzésképp érdemes összeszámolnunk a felső indexben szereplő számokat, az összegnek meg kell egyeznie a germániumatom elektronjainak számával:

$$2 + 2 + 6 + 2 + 6 + 2 + 10 + 2 = 32.$$

Mivel a p-alhéjon 6 elektront lehet elhelyezni a három p-pályán, a maradék két elektronnak, a Hund-szabály értelmében, párosítatlanul kell elhelyezkednie. Csak a 4s és 4p-alhéjat ábrázolva (az alatta levő 1. (K), 2. (L) és 3. (M) héj elektronokkal betöltött):



Az atomot a kémiai reaktivitás szempontjából két részre („rétegre”) oszthatjuk: a külső vegyértékelektronok vesznek részt a kötések kialakításában, így a kémiai reakciókban, a belsőbb elektronokra (és az atommagra) viszont nincs hatásuk a kémiai változásoknak.

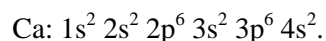
Vegyértékelektronok: vegyértékelektronoknak nevezzük az atom kémiai reakciókban részt vevő külső elektronjait.

Atomtörzs: az atommag és azon elektronok, melyek nem vegyértékelektronok.

A fenti példában a germániumnak összesen négy vegyértékelektronja van, két s és két p elektrona van a vegyértékhéján. Az első (K), a második (L) és a harmadik (M) héjat lezártnak tekintjük, ezek alkotják az atomtörzset.

A nemesgázok elektronszerkezete igen stabilis, kémiai reaktivitásuk igen csekély. Ennek oka, hogy az s- és p-alhéjak a nemesgázok esetén válnak telítetté (kivéve a héliumot, ahol csak az 1s alhéj telítődik), így a lezárt héjak kiemelkedő stabilitást biztosítanak. A vegyértékelektronokat szokták úgy említeni, hogy a legfelső lezárt héjon kívül elhelyezkedő elektronok, a vegyértékhéjat pedig, mint a legkülső, lezáratlan héjat. Ez a megfogalmazás bizonyos esetekben félreértést okozhat.

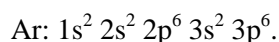
Például a kalcium (rendszáma 20) alapállapotú elektronkonfigurációja:



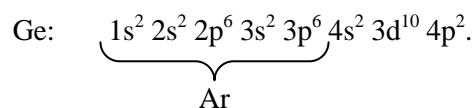
Mint látjuk, a 3. héj még nem telített, mivel a 3d-alhéj elektronjai a 4s alhéj telítődése után népesülnek be, ám csak a 4s alhéj 2 elektronját tekintjük vegyértékelektronnak.

Az elektronkonfiguráció jelölését gyakran lerövidítjük a következő módon: megkeressük azt a legnagyobb rendszámú nemesgázt (${}_1\text{He}$, ${}_{10}\text{Ne}$, ${}_{18}\text{Ar}$, ${}_{36}\text{Kr}$, ${}_{54}\text{Xe}$, ${}_{86}\text{Rn}$), melynek rendszáma kisebb az adott elem rendszámánál, és csak az elem és a nemesgáz elektronkonfigurációja közötti különbséget tüntetjük fel.

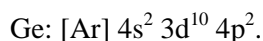
Például a germánium (rendszáma 32) elektronkonfigurációja esetén a legnagyobb, nála kisebb rendszámú nemesgáz a 18-as rendszámú argon (Ar), melynek elektronkonfigurációja:



Így a germánium elektronkonfigurációja és az argon elektronkonfigurációja közötti különbség:



A germánium rövidített elektronkonfigurációja így:



Érdemes az elektronok feltöltődését az alábbi táblázatos formában is összefoglalni:

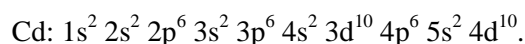
	Alhéjon	Összesen	Nemesgáz
1s	2	2	${}_2\text{He}$
2s	2	$2 + 2 = 4$	
2p	6	$4 + 6 = 10$	${}_{10}\text{Ne}$
3s	2	$10 + 2 = 12$	
3p	6	$12 + 6 = 18$	${}_{18}\text{Ar}$
4s	2	$18 + 2 = 20$	
3d	10	$20 + 10 = 30$	
4p	6	$30 + 6 = 36$	${}_{36}\text{Kr}$
5s	2	$36 + 2 = 38$	
4d	10	$38 + 10 = 48$	
5p	6	$48 + 6 = 54$	${}_{54}\text{Xe}$
6s	2	$54 + 2 = 56$	
4f	14	$56 + 14 = 70$	
5d	10	$70 + 10 = 80$	
6p	6	$80 + 6 = 86$	${}_{86}\text{Rn}$
7s	2	$86 + 2 = 88$	
5f	14	$88 + 14 = 102$	
6d	10	$102 + 10 = 112$	
7p	6	$112 + 6 = 118$	${}_{118}\text{Uuo}$

2.2. példa:

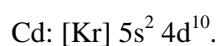
Írjuk fel a 48-es rendszámú kadmium elektronkonfigurációját!

Megoldás:

Tehát 48 elektront kell elhelyeznünk. Így a teljes elektronkonfiguráció:



Most határozzuk meg az elektronkonfigurációt a rövidített leírással! A kriptonban 36 elektron található (a xenonnak több elektronja van, mint a kadmiumnak), így a maradék $48 - 36 = 12$ elektront kell csak feltüntetnünk, ezek az 5s és a 4d alhéjakra kerülnek:



Gyakorlófeladatok:

Írjuk fel az alábbi elemek alapállapotú konfigurációját!

- ${}_{38}\text{Sr}$
- ${}_{13}\text{Al}$
- ${}_{34}\text{Se}$
- ${}_{53}\text{I}$
- ${}_{25}\text{Mn}$
- ${}_{36}\text{Kr}$
- ${}_{67}\text{Ho}$
- ${}_{83}\text{Bi}$
- ${}_{95}\text{Am}$
- ${}_{80}\text{Hg}$

Megoldások:

- $[\text{Kr}] 5s^2$
- $[\text{Ne}] 3s^2 3p^1$

- c) [Ar] 4s² 3d¹⁰ 4p⁴
 d) [Kr] 4d¹⁰ 5s² 5p⁵
 e) [Ar] 4s² 3d⁵
 f) [Ar] 3d¹⁰ 4s² 4p⁶
 g) [Xe] 4f¹¹ 6s²
 h) [Xe] 4f¹⁴ 5d¹⁰ 6s² 6p³
 i) [Rn] 5f⁷ 7s²
 j) [Xe] 4f¹⁴ 5d¹⁰ 6s²

2.4. A kvantumszámok

Az atompályák, illetve az elektronok betöltődésének sorrendje szoros összefüggésben áll a Schrödinger-egyenletekkel, melyek a kvantumkémia legfontosabb alapegyenletei közé tartoznak. Mivel ezen egyenletek megértése felsőbb matematikai ismereteket követel, itt nem ismerkedünk meg velük (későbbi egyetemi tanulmányainkban viszont majd igen), azonban néhány fontosabb következményüket bemutatjuk. A Schrödinger-egyenletek megoldásai **kvantáltak**, ami azt jelenti, hogy nem vehetnek fel bármilyen tetszőleges értéket, hanem csak jól meghatározott értékűek lehetnek. Egy szemléletes példa a molekulák rezgőmozgása: a molekula atomjait képzeljük el tömegpontoknak, melyeket a kémiai kötések rugóként kötnek össze. Egy nagyon egyszerű kétatomos molekula a dihidrogén (H₂). A molekulák – így a dihidrogén is – folyamatos rezgőmozgással rendelkeznek, ám ennek frekvenciája nem vehet fel bármilyen értéket! Ha energiát közlünk a molekulával, növelhetjük a rezgés frekvenciáját, ám nem tetszőleges mértékben: a rezgés frekvenciája *kvantált*.

Egy adott atomban az elektronok energiaszintjei is kvantáltak: nem vehetnek fel bármilyen értéket, az egyes energiaszintek energiája meghatározott. Az elektronok nem tartózkodhatnak energiaszintek között, csak adott energiaszinteken. Ha az elektront az egyik energiaszintről egy másikra szeretnénk juttatni (gerjeszteni), meghatározott energiát kell közölnünk vele. A Schrödinger-egyenlet alapján kiszámíthatjuk az elektronszintek energiáját: ez tartalmaz egy paramétert, melynek értéke 1, 2, 3 stb. értékeket vehet fel. Ezt a paramétert főkvantumszámmal nevezzük. Az elektron mágneses tulajdonságokkal is rendelkezik, melyek szintén kvantáltak. Ezeket a tulajdonságokat a mellékkvantumszám és a mágneses kvantumszám határozza meg, ám ezek értéke sem lehet tetszőleges. Az elektron rendelkezik egy spinnek nevezett mennyiséggel, mely független a többi kvantumszámtól. A spin az elektron egy mágneses jellemzője, az ehhez tartozó kvantumszámot spinkvantumszámmal nevezzük. Mint majd látni fogjuk, a spinkvantumszám két ellentétes előjelű, ám azonos abszolút értékű szám ($-\frac{1}{2}$ vagy $+\frac{1}{2}$) lehet.

Tehát az atom bármely elektronja négy kvantumszámmal jellemezhető.

A **főkvantumszám** (n) értéke 1, 2, 3 stb. pozitív egész szám lehet, és megadja, hogy az elektron hányadik héjon van. Minél nagyobb n értéke, az elektron annál nagyobb sugarú pályán található. Tehát $n = 1$ esetén tudjuk, hogy az elektron az első héjon található, $n = 2$ esetén pedig, hogy a második elektronhéjon. Az elektron energiája is függ a főkvantumszámtól, a legalacsonyabb energia $n = 1$ -hez tartozik.

A **mellékkvantumszám** (ℓ), értéke 0, 1, ..., $n-1$ lehetséges, tehát az adott héjon (adott n esetén) n -féle különböző mellékkvantumszám lehetséges. A mellékkvantumszám megadja, hogy az elektron az elektronhéjon belül melyik alhéjon (s, p, d, f, ...) található.

Az első elektronhéjon ($n = 1$) csak $\ell = 0$ lehetséges, azaz csak s-alhéjon lehet az elektron.

A második elektronhéjon ($n = 2$) ℓ értéke lehet 0 vagy 1. Ha $\ell = 0$, az elektron az s-alhéjon van, ha pedig $\ell = 1$, az elektron a p-alhéjon található.

A harmadik héjon ($n = 3$) ℓ értéke három különböző értéket vehet fel: 0, 1 vagy 2. Az $\ell = 0$ érték mindig s-alhéjat jelöl, $\ell = 1$ esetén az elektron p-alhéjon található, ha pedig ℓ értéke 2, akkor az elektronnál megállapítható, hogy a d-alhéjon van.

A **mágneses kvantumszám** (m) értéke egész szám lehet $-\ell$ -től $+\ell$ -ig terjedőleg (a 0-t is beleértve), így $(2 \cdot \ell + 1)$ különböző értéket vehet fel. A mágneses kvantumszám, adott alhéj esetén, a

pályák irányát adja meg, tehát egy adott alhéj esetén m értéke alapján meg tudjuk állapítani, hogy az elektron melyik pályán található.

Például ha $\ell = 0$, csak egyetlen értéket vehet fel a mágneses kvantumszám: $m = 0$. Az s-alhéjon belül egyetlen s-pálya található, ehhez tartozik az $m = 0$ mágneses kvantumszám.

Ha $\ell = 1$, a p-alhéjon található az elektron. Viszont három különböző irányú p-pályát ismerünk: p_x -, p_y - és p_z -pályákat. A mágneses kvantumszám $\ell = 1$ esetén $m = -1$, $m = 0$ és $m = +1$ lehet, a három érték három különböző irányú (térbeli elhelyezkedésű) p-pályát jelöl.

A d-alhéj, azaz $\ell = 2$ esetén már ötféle értéket vehet fel a mágneses kvantumszám: -2 , -1 , 0 , $+1$ és $+2$. Az öt különböző mágneses kvantumszám az öt különböző d-pályát jelöli a d-alhéjon belül.

Az f-alhéj esetén ($\ell = 3$) hét különböző érték közül vehet fel egyet a mágneses kvantumszám: -3 , -2 , -1 , 0 , $+1$, $+2$, $+3$, így az f-alhéjon belül hét pálya különböztethető meg.

A **spinkvantumszám** (m_s) értéke $+\frac{1}{2}$ vagy $-\frac{1}{2}$ lehet. Egy adott pályára maximálisan két elektron kerülhet, ezek mindig ellentétes spinkvantumszámmal rendelkeznek. Az elektronok cellás jelölésénél a spint nyílal jelöljük, a felfelé és lefelé mutató nyíl két ellentétes spinű elektront jelöl.

Tehát ha ismerjük egy elektron mind a négy kvantumszámát, akkor tudjuk, hogy melyik héjon (n), azon belül melyik alhéjon (ℓ) van, és azt is ismerjük, hogy az alhéjon belül melyik pályán található (m). Az adott pályán található két elektront a spinkvantumszám (m_s) különbözteti meg.

Egy adott atomban azon elektronok, melyek csupán spinkvantumszámukban különböznek, egy **elektronpárt** alkotnak.

Tehát egy atomban minden egyes elektron „beazonosítható” a négy kvantumszám segítségével. Egy nagyon fontos megállapítás, hogy egy pályára maximálisan két elektron kerülhet. Ez a Pauli-elvvel van összefüggésben.

Pauli-elv: egy atomban nem lehet két (vagy több) olyan elektron, melynek mind a négy kvantumszáma azonos.

A kvantumszámok egy összetett fizikai elmélet igen bonyolult matematikai összefüggésekkel megkapott eredményei, melyek segítségével megmagyarázható a héjak–alhéjak–pályák rendszere, így az atom elektronhéjának szerkezete. Mint hamarosan látjuk, az elemek periódusos rendszerének felépítése is szoros összhangban van a kvantumszámok rendszerével.

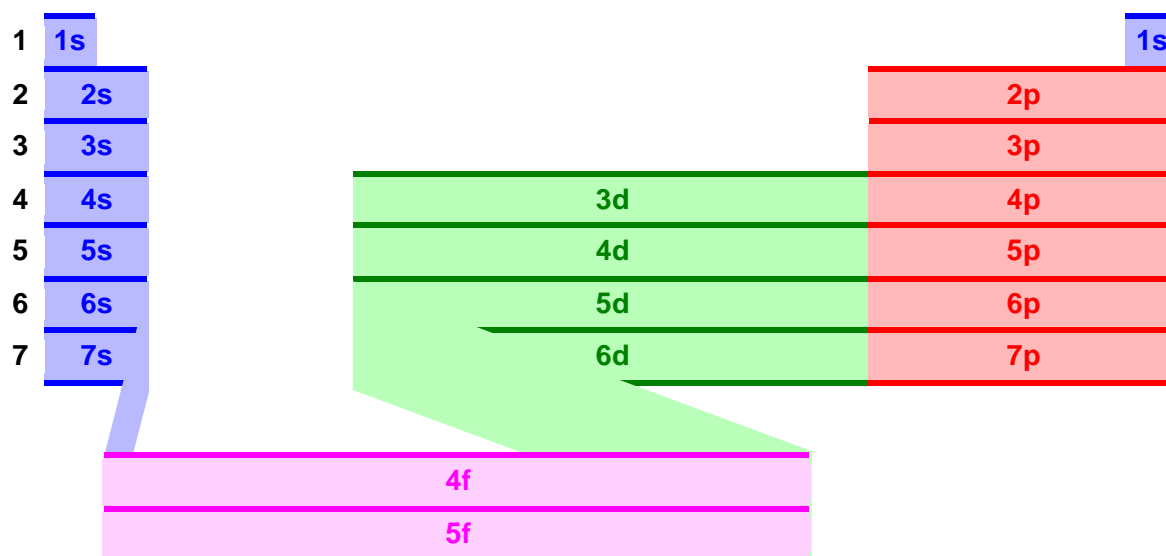
2.5. Az elemek periódusos rendszere

Az elektronok betöltődési sorrendje és a periódusos rendszer

Már régen megfigyelték, hogy bizonyos elemek hasonló kémiai (és/vagy fizikai) tulajdonságokkal rendelkeznek. Mengyelejev a XIX. század végén az addig felfedezett elemeket egy táblázatba gyűjtötte össze. Sőt a felfedezett törvényszerűségeket felhasználva Mengyelejev számos, addig még ismeretlen elem tulajdonságait jósolta meg.

A periódusos rendszer az elemeknek a növekvő rendszám szerint felépített táblázata.

Érdekes módon, ha az egymást követő rendszámú (azaz elektronszámú) elemeket sorba rendezzük, ez az elektronok beépülési sorrendje szerint történik:



2.5.1. ábra: Az elektronok betöltődési sorrendje a periódusos rendszerben

A periódusos rendszer felépülése jól megfigyelhető az alábbi animáción:



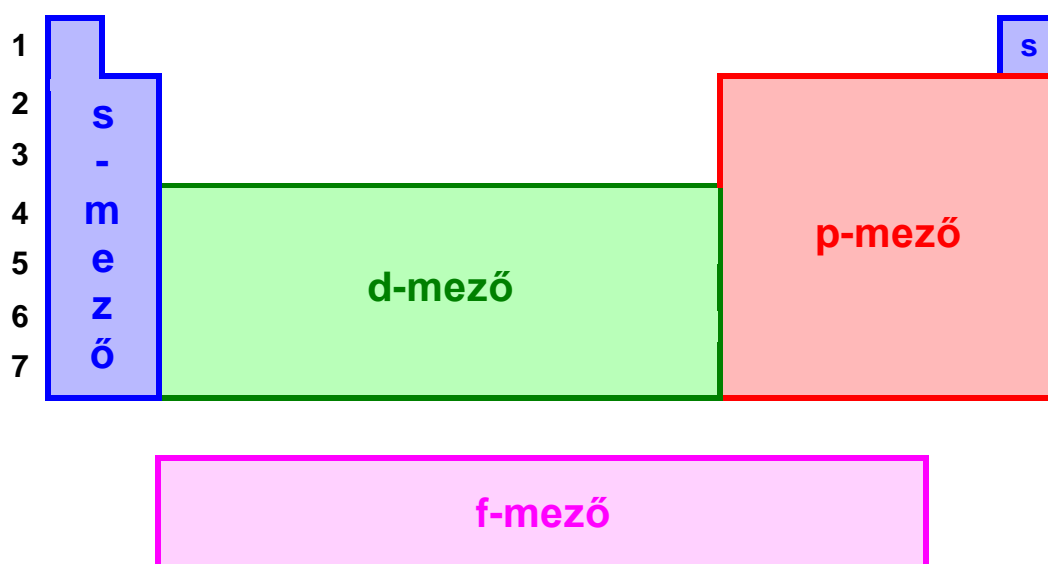
2.5.1. animáció: Az elektronok betöltődési sorrendje és a periódusos rendszer

Periódusok:

A periódusos rendszerben a vízszintes sorokat periódusoknak vagy soroknak nevezzük. Gyakran különbség van a sor és a periódus megjelölés között: az első „sor”-nak általában a 2. periódust szokás tekinteni, például a szén vagy a nitrogén „első sorbeli” elem.

Mezők:

Az egymás alatti sorok az adott elektronszám beépülését mutatják. Az elemeket a fenti táblázatba rendezve különböző, úgynevezett **mezőket** figyelhetünk meg: egy mezőn belül az azonos betöltődő alhéjjal rendelkező elemek találhatók. Így megkülönböztetünk s-, p-, d- és f-mezőt:



2.5.2. ábra: A periódusos rendszer mezői

Az s-mező érdekes módon két helyen található: az egyik a periódusos rendszer bal oldalán, a másik pedig csupán egyetlen elemet tartalmaz: a héliumot. A hélium egyrészt azért került a periódusos rendszer jobb oldalára, mivel tulajdonságaiban sokkal inkább hasonlít az ott található elemekhez. A hélium „áthelyezése” azonban nem önkényes: a periódusos rendszer utolsó oszlopában töltődik be az adott héj, az 1. (K) héj pedig két elektronnal telíthető, azaz már a héliumnál lezárul a héj.

Mint fentebb láthatjuk, az f-mezőt általában ki szokták venni az úgynevezett „hosszú periódusos rendszerből”, mivel egy hosszú keskeny táblázat kezelése viszonylag körülményes.

A feltöltődési sorrendből adódik, hogy az első periódusban csak s-mező található, a második periódustól kezdődik a p-mező feltöltődése. Mivel a 4s alhéj hamarabb kezd feltöltődni, mint a 3d, a 3d héj a 4. periódusban kezd csak feltöltődni. Hasonló a helyzet az f-mezővel: a 4f alhéj csak a 6s alhéj betöltődése után kezd el benépesülni, így a 6. periódusban található. A tudomány pillanatnyi állása szerint nem sikerült még előállítani olyan elemet, mely a 8. periódusban található, sőt a 7. periódus nagyobb rendszámú (úgynevezett késői) elemei is rendkívül instabilak, általában csupán nyomnyi mennyiségben sikerül őket előállítani (gyakran ez csak néhányszor tíz atomot jelent). A nagyfokú instabilitás oka az atommagok radioaktivitása: általában magreakciók segítségével lehet ilyen nagy rendszámú atommagokat előállítani, melyek azonban többnyire nagyon gyorsan radioaktív bomlást szenvednek. Ebből következik, hogy az ilyen rendkívül nagy rendszámú elemek fizikai és kémiai tulajdonságairól nem sokat tudunk. Az érdeklődők kedvéért megjegyezhetjük, hogy a periódusos rendszer alsóbb periódusaiban – a sok külső elektronnak köszönhetően – növekszik a fémesség, és még a fősoportokban is elmosódik az egyes elemek kémiai tulajdonságai között a határ.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
	I.	II.	III.	IV.	V.	VI.	VII.	VIII.	VIII.	VIII.	I.	II.	III.	IV.	V.	VI.	VII.	VIII.
	A	A	B	B	B	B	B	B	B	B	B	B	A	A	A	A	A	A
1	H																	He
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Ta	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	**	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	113	114	115	116	117	118
*	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu			
**	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr			

2.5.3. ábra: A periódusos rendszer

Oszlopok:

A hasonló elektronszerkezetű elemek függőleges elrendeződésben helyezkednek le, egymás alatti helyet foglalnak el a periódusos rendszerben, ezek egy oszlopot alkotnak.

Az s-mező és a p-mező oszlopait összefoglalóan **főcsoportoknak**, míg a d-mező oszlopait **mellékcsoportoknak** szokás nevezni. A későbbiekben megismerkedünk az egyes oszlopok elnevezéseivel is.

Az oszlopok számozását kétféleképpen szokás végezni:

- a régiesebb számozás szerint külön tárgyaljuk a főcsoportokat, illetve a mellékcsoportokat, ám mindkettőt római számokkal jelöljük. Ilyenkor a főcsoportok esetén a megfelelő római szám mellé A betűt írunk, míg a mellékcsoportokat B betűvel jelöljük. A fő- és mellékcsoportok számozása I-től VIII-ig terjed, a VIII.B mellékcsoport 3 oszlopot foglal magában (vascsoport elemei). A periódusos rendszer hagyományos elrendeződése esetén (lásd fent) az I.A után a II.A főcsoport következik, a II.A főcsoport után a III.B mellékcsoport jön, ezután sorrendben következnek a mellékcsoportok, egészen VIII.B-ig. A vascsoporthoz (VIII.B csoport) után az I.B és II.B csoportok jönnek, majd a III.A főcsoporttal folytatjuk a számozást. Ezután a főcsoportok számozása folyamatos VIII.A-ig. Ez a számozási rendszer manapság elavultnak tekinthető.
- a napjainkban elfogadott számozás szerint nincs különbség a főcsoportok és a mellékcsoportok között, a számozás folyamatos. A két s-mezőbeli főcsoport (1 és 2) után következik a d-mező tíz mellékcsoportja, számozásuk: 3 ... 12. A p-mező első oszlopát 13. oszlopnak nevezzük. A p-mező oszlopainak a száma a régi számozás szerinti szám 10-zel megnövelt értéke (például VI.A főcsoport \equiv 16. oszlop, VIII.A főcsoport \equiv 18. oszlop).

Az egyes főcsoportok tradicionális elnevezése:

- 1. oszlop: alkálifémek,
- 2. oszlop: alkáliföldfémek,
- 13. oszlop: bórcsoport (szokás földfémeknek is nevezni),
- 14. oszlop: szénecsoprt,
- 15. oszlop: nitrogéncsoport (szokás pniktogéneknek is nevezni),
- 16. oszlop: oxigéncsoport (szokás kalkogéneknek nevezni),
- 17. oszlop: halogéncsoport,
- 18. oszlop: nemesgázok.

A mellékcsoportok szokásos elnevezése:

- 3. oszlop: szkandiumcsoport,
- 4. oszlop: titánecsoprt,
- 5. oszlop: vanádiumecsoprt,
- 6. oszlop: krómecsoprt,
- 7. oszlop: mangáncsoport,
- 8., 9., 10. csoportok: vascsoprt,
- 11. oszlop: rézecsoprt,
- 12. oszlop: cinkcsoprt.

A fémek–félfémek–nemfémes elemek felosztása:

A bór (B) és az asztáciumot (At) vagy polóniumot (Po) összekötő vonal környékén találhatóak a félfémek, ettől balra fémeket, jobbra pedig nemfémes elemeket találunk.

Félfémek: a bór (B) az asztáciummal (At) vagy polóniummal (Po) összekötő vonal mentén található elemek.

A félfémek közé tartoznak a következő elemek: bór (B), szilícium (Si), germánium (Ge), arzén (As), antimon (Sb), tellúr (Te), polónium (Po) és asztácium (At).

Másodfajú fémek: Az s-mező fémeit (a B–At vagy B–Po vonaltól balra eső elemek) másodfajú fémeknek nevezzük.

A másodfajú fémek közé tartoznak a következő elemek: alumínium (Al), gallium (Ga), indium (In), tallium (Tl), ón (Sn), ólom (Pb) és bizmut (Bi).

Előfordul, hogy a másodfajú fémek közé sorolják a réz- és cinkcsoprt elemeit, a berilliumot és a magnéziumot is.

Átmeneti fémek: a d-mező fémei.

Nemesfémek: az 5. és 6. periódus 8., 9., 10. vagy 11. oszlopában található fémek.

Nemesfémnek tekintjük a következő átmeneti fémeket: ruténium (Ru), ródium (Rh), palládium (Pd), ezüst (Ag), ozmium (Os), irídium (Ir), platina (Pt), és az arany (Au).

Lantanidák és aktinidák:

Az f-mező 6. periódusába tartozó fémeit lantanidáknak (a 7. periódusába tartozókat pedig aktinidáknak szoktuk nevezni).

Ritka földfémek:

A lantanidákat a szkandiummal (Sc) és az ittriummal (Y) együtt ritkafémeknek nevezzük.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	H																	He
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	**	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	113	114	115	116	117	118
*	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu			
**	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr			

	Nemfémek		Alkálifémek
	Félfémek		Alkáliföldfémek
	Másodfajú fémek		Lantanidák
	Átmeneti fémek		Aktinidák
	Nemesfémek		

2.5.4. ábra: A periódusos rendszer felosztása az atomok fémes jellege szerint

2.6. Tulajdonságok változása a periódusos rendszerben

A periódusos rendszerben bizonyos tulajdonságok folytonosan, más tulajdonságok pedig periódusosan változnak.

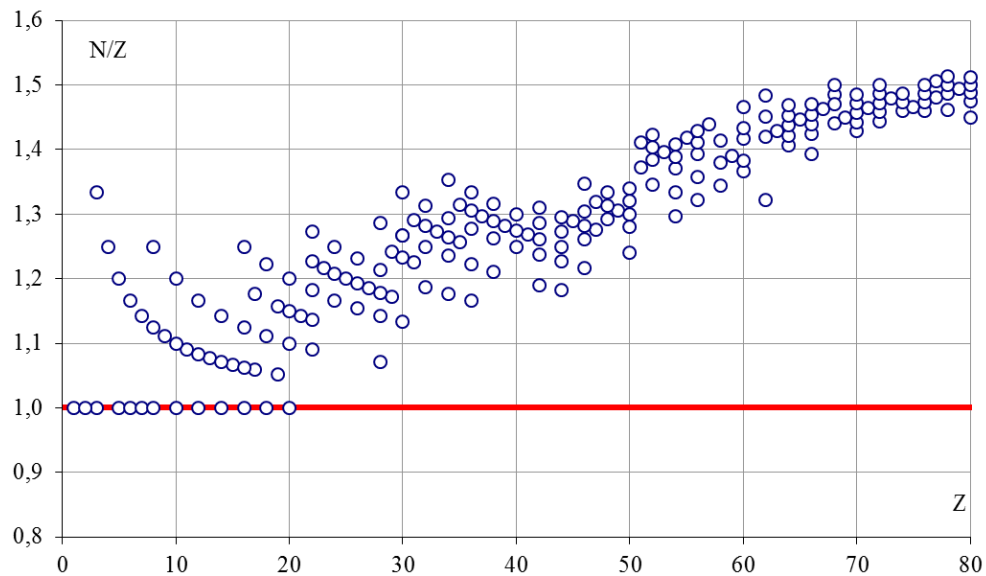
2.6.1. Tömegszám, neutronszám és relatív atomtömeg változása a periódusos rendszerben

A prócium (${}^1_1\text{H}$) kivételével minden izotóp tartalmaz neutronokat, mivel már két proton mellé is szükséges neutron, hogy az atommag stabil legyen.

A kis rendszámú elemek legstabilabb izotópjai esetén (periódusos rendszer eleje) a protonok és a neutronok száma gyakran megegyezik (azaz a neutronszám és protonszám aránya egy körüli – $N/Z \approx 1$), tehát a tömegszám gyakran a rendszám kétszerese. A kalcium 40-es tömegszámú izotópjá (${}^{40}_{20}\text{Ca}$) a legnagyobb rendszámú izotóp, melyben a protonok és neutronok száma megegyezik.

Nagyobb rendszámú elemek izotópjai esetén a neutronok száma meghaladja a protonokét, tehát a tömegszám nagyobb, mint a rendszám kétszerese. Ennek oka, hogy egyre több neutronra van szükség a pozitív töltésű protonok elektrosztatikus taszításának leárnyékolására. A periódusos rendszer utolsó periódusában a neutronok és protonok számának aránya (N/Z) rendszerint nagyobb, mint 1,5.

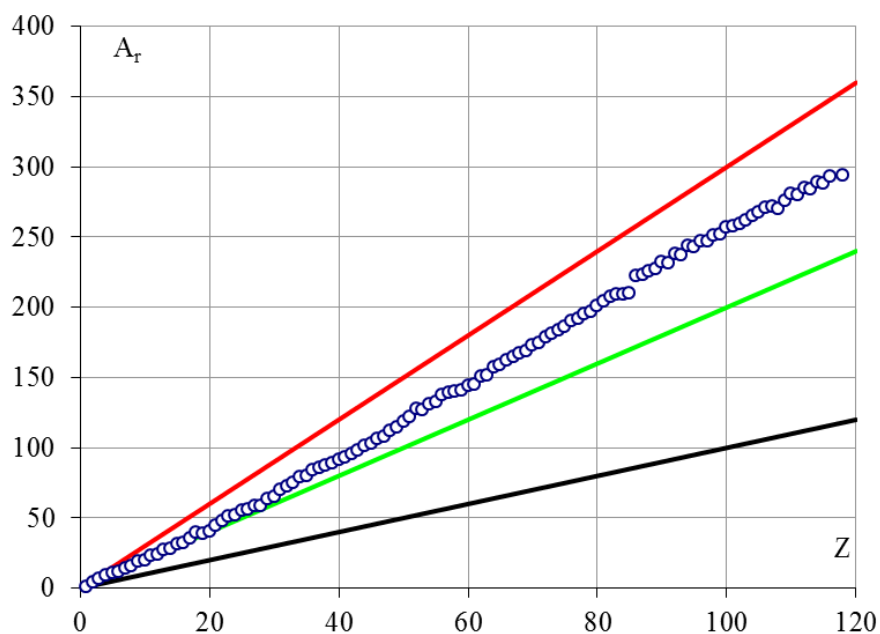
Az alábbi ábrán a létező összes stabil izotóp neutronsám / protonszám aránya (N/Z) van feltüntetve a rendszám (Z , protonszám) függvényében. A piros vonal az $N/Z = 1$ esetet jeleníti meg.



2.6.1.1. ábra: A neutronsám és protonszám aránya a tömegszám függvényében

A relatív atomtömeg a rendszám növekedésével növekszik, ez alól néhány elempár a kivétel csupán (például argon–kálium: ${}_{18}\text{Ar}$: 39,95, ${}_{19}\text{K}$: 39,10; kobalt–nikkel: ${}_{27}\text{Co}$: 58,93, ${}_{28}\text{Ni}$: 58,69; tellúr–jód: ${}_{52}\text{Te}$: 127,60, ${}_{53}\text{I}$: 126,90).

Az alábbi ábrán az elemek relatív atomtömegét (A_r) ábráztuk a rendszám (Z) függvényében (kék körök). A fekete egyenes az $A_r = Z$, a zöld egyenes az $A_r = 2 \cdot Z$, a piros egyenes pedig az $A_r = 3 \cdot Z$ függvényeket jelenti.



2.6.1.2. ábra: A relatív atomtömeg a rendszám függvényében

Mint látható, a relatív atomtömeg a rendszám növekedésével egyre meredekebben növekszik. Míg a kis rendszámok esetén $A_r \approx 2 \cdot Z$ (a neutronok száma nagyjából megegyezik a protonok számával – a rendszámmal), addig a nagy rendszámok esetén az A_r / Z arány 2-nél jóval nagyobb.

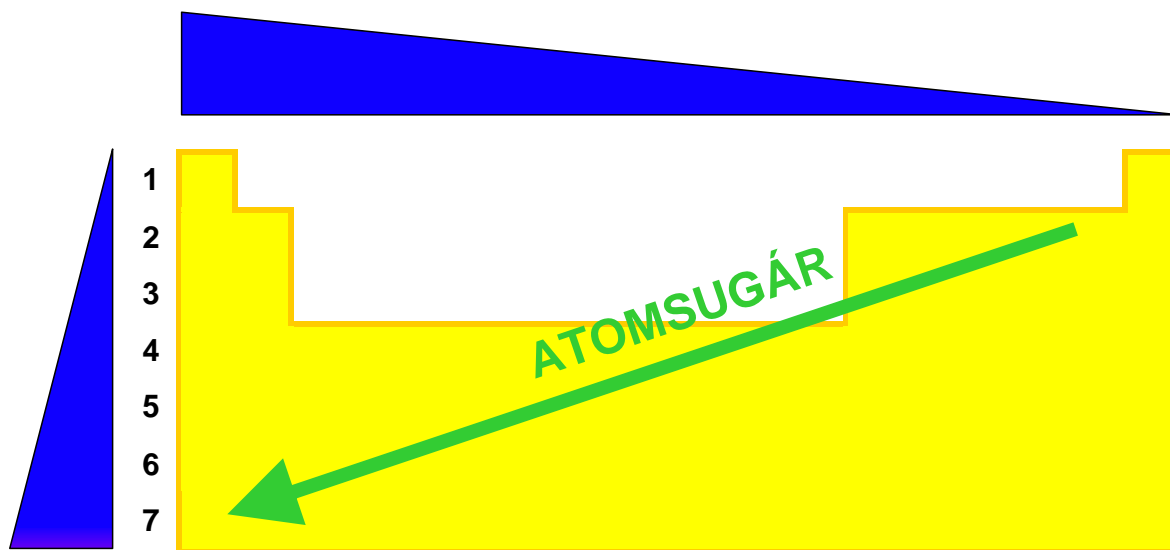
2.6.2. Az atomok méretének változása a periódusos rendszerben

Az atomokat gömbszerűnek feltételezzük, így az atomok méretét az atomsugárral (idegen szóval atomrádiusszal) szoktuk jellemezni. (Csak megemlítjük, hogy az atomsugár függ az atom állapotától, azaz attól is, hogy milyen kötés kialakításában vesz részt. Ezáltal többféle módon definiálhatjuk az atomsugarat, ám ennek részleteivel itt nem foglalkozunk.) Az atomsugár (és így az atomtérfogat) változása számos más tulajdonság változására hatással van (például sűrűség, halmazállapot).

Az atomsugár periodikusan változik a periódusos rendszeren belül.

Egy adott perióduson belül az atomsugár balról jobbra csökken. Ennek a magyarázata a következő: egy perióduson belül balról jobbra haladva növekszik az atommag töltése, mivel egyre több proton található benne. Az atommag töltését az elektronok leárnyékolják. A lezárt belső héjak elektronjainak negatív töltése egy perióduson belül gyakorlatilag azonosnak tekinthető. Balról jobbra haladva egy periódusban az elektronok ugyanarra a külső héjra lépnek be, ezek árnyékoló hatása sokkal kisebb, mint az alatta levő héjak elektronjaié, így az atommag (balról jobbra növekedő) töltése egyre erősebben vonzza a vegyértékelektronokat, ennek következtében az atomsugár csökken.

Az atomsugár egy oszlopon belül felülről lefelé növekszik. Magyarázat: a pályák mérete $1s < 2s < 3s < \dots$ irányban növekszik.



2.6.2.1. ábra: Az atomsugár változása a periódusos rendszerben

Itt érdemes megemlíteni a sűrűség változását is. A sűrűség természetesen nemcsak az atomtérfogattól (atomsugártól) függ, hanem a halmazállapottól, az atomok elrendeződésétől, a kristályszerkezettől is, így igen nehéz általános tendenciákat találni. Viszont azt mindenképpen érdemes megjegyezni, hogy a sűrűség egy oszlopon belül felülről lefelé növekszik.

2.6.3. Az elemek halmazállapota

A halmazállapot a részecskéket összetartó kölcsönhatásoktól függ. A különféle kölcsönhatások és a halmazállapot összefüggéseit majd a későbbiekben részletesen tárgyaljuk, itt – a teljesség kedvéért – azonban megmutatjuk, a periódusos rendszer mely részében milyen halmazállapot jellemző.

Normál légköri nyomáson (101,325 kPa) és 25 °C hőmérsékleten az elemek túlnyomó többsége szilárd, azonban találhatunk közöttük szép számban gázokat is. A legritkább halmazállapot a folyadék, csupán két elem folyékony 25 °C-on: a bróm (Br) és a higany (Hg). További két elemnek igen alacsony az olvadáspontja: a galliumé (Ga, 30 °C) és a céziumé (Cs, 28 °C) is szobahőmérséklet közelében van, enyhe melegítés hatására megolvadnak.

Tizenegy elem gáz halmazállapotú normál légköri nyomáson és 25 °C hőmérsékleten: ide tartoznak a nemesgázok (hélium, neon, argon, kripton, xenon, radon), a halogének egy része (fluor, klór), az oxigén, a nitrogén és a hidrogén.

Az alábbi periódusos rendszerben a különböző halmazállapotú elemeket mutatjuk be:

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	H																	He
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	**	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	113	114	115	116	117	118
*	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu			
**	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr			

	Gázhalmazállapotú
	Folyékony halmazállapotú
	Szilárd halmazállapotú
	Nem ismert

2.6.3.1. ábra: Az elemek halmazállapota

2.6.4. Vegyértékelektronok száma, a vegyérték és a vegyértékhéj elektronkonfigurációja

Egy adott oszlopon belül a vegyértékelektronok száma és a vegyértékhéj elektronkonfigurációja azonos. Tulajdonképpen ez a magyarázata annak, hogy az egy oszlopon belüli elemek kémiai tulajdonsága általában hasonló.

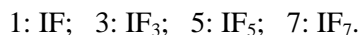
A vegyértékelektronok száma az első 12 oszlopban megegyezik az oszlop számával. A p-mezőben pedig a vegyértékelektronok számát megkapjuk, ha az oszlop számából levonunk 10-et: a

lezárt d-alhéjat (a tíz elektronjával) már nem szokás a p-mező vegyértékelektronjaihoz számítani (itt az n-dik héj telítődik, viszont az (n-1)-dik héj már lezárult a 12. oszlopban). Egyetlen kivétel a hélium (18. oszlop), melynek csupán 2 vegyértékelektronja van.

(A régi számozási mód szerint a főcsoportokban az oszlop száma megegyezik a vegyértékelektronok számával. Ez a mellékcsoportok esetén is igaz, viszont a VIII.B két oszlopára nem igaz – kobalt, nikkel és az alattuk található elemek.)

Vegyérték: az atom által létesíthető kémiai kötések száma. A különböző elemek gyakran többféle vegyértékekkel képezhetnek vegyületeket.

Például a jód esetén ismerünk olyan vegyületeket, melyben a jódatom 1, 3, 5 és 7 vegyértékelektronjával létesít kötést:



A maximális vegyérték megmutatja, hogy hány egy vegyértékű atommal (például a hidrogénnel) képes az adott elem egy atomja kémiai kötés létesítésére. Bizonyos esetekben az atom összes vegyértékelektronjával lehetséges kémiai kötés létrehozni, ám más esetekben a vegyértékelektronoknak csak egy része vihető kémiai kötésbe. Ez alapvetően attól függ, hogy az adott atom mennyire „ragaszkodik” az elektronjaihoz, mennyire könnyű eltávolítani az elektronjait kötés kialakítása céljából. A kémiai kötésekkel a későbbiekben részletesen foglalkozunk.

A maximális vegyérték egy oszlopon belül változhat. A felsőbb periódusokban az elemek rendszerint kevesebb vegyértékelektronnal képesek kötés létesíteni, mint az alsóbb periódusokban található elemek.

Például a fluor maximális vegyértéke 1, a klór és brómé 5, míg a jódé 7.

Az egyes elemek – kísérleti úton tapasztalt – maximális vegyértéke a periódusos rendszerben:

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	1																	0
2	1	2											3	4	3	2	1	0
3	1	2											3	4	5	6	5	0
4	1	2	3	4	5	6	4	3	4	2	2	2	3	4	5	6	5	2
5	1	2	3	4	5	6	6	6	6	4	3	2	3	4	5	6	7	6
6	1	2	*	4	5	6	7	6	6	6	5	2	3	4	5	6	7	6
7	1	2	**															
*	3	4	4	3	3	3	3	3	4	3	3	3	3	3	3	3		
**	3	4	5	6	6	6	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4		

2.6.4.1. ábra: Az elemek maximális vegyértéke a periódusos rendszerben

Az egyes oszlopokban megfigyelhető alapállapotú elektronkonfigurációk szoros összhangban vannak az elektronhéjak betöltődési sorrendjével.

Oszlop	Vegyértékelektronok száma	Alapállapotú elektronkonfiguráció	Maximális vegyérték az oszlopban
1. (I.A) oszlop	1	ns^1	1
2. (II.A) oszlop	2	ns^2	2
3. (III.B) oszlop	3	$ns^2 (n-1)d^1$	3
4. (IV.B) oszlop	4	$ns^2 (n-1)d^2$	4
5. (V.B) oszlop	5	$ns^2 (n-1)d^3$	5
6. (VI.B) oszlop	6	$ns^1 (n-1)d^5$ [$ns^2 (n-1)d^4$]	6
7. (VII.B) oszlop	7	$ns^2 (n-1)d^5$	7
8. (VIII.B) oszlop	8	$ns^2 (n-1)d^6$	2
9. (VIII.B) oszlop	9	$ns^2 (n-1)d^7$	2
10. (VIII.B) oszlop	10	$ns^2 (n-1)d^8$	2
11. (I.B) oszlop	11	$ns^1 (n-1)d^{10}$ [$ns^2 (n-1)d^9$]	2–3
12. (II.B) oszlop	12	$ns^2 (n-1)d^{10}$	2
13. (III.A) oszlop	3	$ns^2 np^1$	3
14. (IV.A) oszlop	4	$ns^2 np^2$	4
15. (V.A) oszlop	5	$ns^2 np^3$	5
16. (VI.A) oszlop	6	$ns^2 np^4$	6
17. (VII.A) oszlop	7	$ns^2 np^5$	7
18. (VIII.A) oszlop	8	$ns^2 np^6$	(6)

Megjegyzés: mivel az ns és $(n-1)d$ alhéjak pályáinak energiája igen közel van egymáshoz, előfordul, hogy csak egy elektron kerül az ns alhéjra és a többi pedig az $(n-1)d$ alhéjra kerül. A d-mező fémek pontos elektronkonfigurációja általában nem olyan szabályos, mint az s- vagy p-mezők esetén.

2.6.5. Az ionok képződését kísérő energia változása a periódusos rendszerben

Ionok képződése atomokból

Egy atom elektromosan semleges, mivel benne a protonok és elektronok száma megegyezik. Ezzel ellentétben az ionok töltéssel rendelkező részecskék.

Ion: egy semleges atomból vagy atomcsoportból elektronok elvételével vagy hozzáadásával keletkező részecske (tulajdonképpen töltéssel rendelkező részecske, mely egy vagy több atommagot tartalmaz).

Oxidáció: elektron leadása
 Redukció: elektron felvétele.

Az **ion töltését** a protonok és az elektronok számának különbsége adja meg. Az ion töltését (elektron mértékegységben) előjelével együtt jobb felső indexben írjuk az ion jele (képlete) mögé. A töltésszám megelőzi az előjelet: Fe^{2+} vagy NO_3^- .

Kation: pozitív töltésű ion (több a protonok száma, mint az elektronoké), az atomból oxidációval keletkezik.

Anion: negatív töltésű ion (több az elektronok száma, mint a protonoké), az atomból redukcióval keletkezik.

Egy iont egyszerű ionnak nevezzük, ha benne csak egy atommag található (egyetlen atomból keletkezik elektron elvételével vagy hozzáadásával, például: Na^+ vagy Γ^-), illetve összetett ionnak, ha benne több atommag található (atomcsoportból, molekulából keletkezik az ion elektron elvételével vagy hozzáadásával, például: NH_4^+ vagy SO_4^{2-})

A legegyszerűbb kation a hidrogénion (H^+), mely megegyezik magával a protonnal (a hidrogénatomnak egy protonja és egy elektronja van, az egyetlen elektront eltávolítva egy hidrogénkationt kapunk: H^+).

Néhány példa kationra: Na^+ , Ca^{2+} , Cr^{3+} , Sn^{4+} , As^{5+} , U^{6+} , NH_4^+ .

Néhány példa anionra: Cl^- , O^{2-} , P^{3-} , NO_3^- , $\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$.

Általánosságban megfogalmazható, hogy a periódusos rendszer **bal oldalán** található fémek esetén (elsősorban az 1., 2., 13. főcsoportok és a mellékcsoportok) kedvezőbb a **kationná alakulás**, míg a periódusos rendszer **jobb oldalán** található nemfémekből (utolsó néhány oszlop, elsősorban 16. és 17. oszlop) inkább **anionok képződnek**.

Ennek magyarázata a következő. Már korábban megismertük, hogy a vegyértékelektronok száma a periódusos rendszer főcsoportjaiban balról jobbra növekszik. A kevés vegyértékelektronnal rendelkező fémek viszonylag könnyen le tudják adni elektronjaikat, így igen stabilis nemesgáz elektronkonfigurációjú ionokká alakulnak, míg a több vegyértékelektronnal rendelkező nemfémek esetén a nemesgáz elektronkonfiguráció elektronfelvétellel könnyebben kialakul. Ellenkező esetben a nemesgáz elektronszerkezet eléréséhez a kevesebb vegyértékelektronnal rendelkező fémeknek viszonylag sok elektront kellene felvenniük, míg a több vegyértékelektronnal rendelkező nemfémeknek igen sok elektront kellene leadniuk, mely energetikailag igen kedvezőtlen.

Így például a káliumatomból egy vegyértékelektronjának eltávolításával egyszeresen pozitív töltésű káliumion, míg a hét vegyértékelektronnal rendelkező fluoratom egy elektront felvéve fluoridanionná tud alakulni. Mind a káliumionnak, mind a fluoridionnak nemesgáz elektronkonfigurációja van.

A nemfémek által maximálisan felvehető elektronok számát nagyon egyszerűen meg tudjuk állapítani: a nemesgázoknak – a hélium kivételével – mindig két s és hat p elektronja van, azaz a vegyértékhéjukon 8 elektronjuk van. Legyen a nemfémnek n vegyértékelektronja, ekkor pontosan $8 - n$ elektron szükséges ahhoz, hogy 8 elektronja legyen a vegyértékhéján.

Mint az előzőekben már tárgyaltuk, a periódusos rendszer oszlopának sorszáma és az adott elem vegyértékelektronjainak száma között szoros összefüggés van. Az oszlopok aktuális számozása szerint tehát az m -edik oszlopban található nemfém $18 - m$ elektront tud felvenni. Például a 15. oszlopban található foszforatom $18 - 15 = 3$ elektront tud maximálisan felvenni, a 16. csoportban található kénatom pedig maximálisan $18 - 16 = 2$ elektron felvételével képes anionná alakulni.

A főcsoportokban a maximálisan eltávolítható elektronok száma megegyezik a vegyértékelektronok számával. Például egy alumíniumatomról (mely három vegyértékelektronnal rendelkezik) három elektront tudunk eltávolítani, míg egy klóratomról (hét vegyértékelektronja van) maximálisan hét elektront tudunk eltávolítani elméletileg.

A későbbiekben tárgyalásra kerülő oxidációfok és a maximálisan eltávolítható, illetve felvehető elektronok száma között nagyon szoros kapcsolat áll fenn. Tehát azon megállapítások, melyeket a

maximálisan eltávolítható, illetve felvehető elektronok számával kapcsolatban teszünk, igazak lesznek a maximális, illetve minimális oxidációfokokra is!

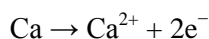
2.3. példa:

Állapítsuk meg, milyen kationok, illetve anionok képződésére számíthatunk az alábbi elemekből!

- kalcium
- gallium
- oxigén
- antimon
- hidrogén.

Megoldás:

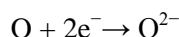
- a) A kalcium a 2. csoportban található, 2 vegyértékelektronja van. Ezért minden bizonnyal kétszeresen pozitív ion keletkezhet belőle. Anion képződésére nem számíthatunk, mivel igen kevés vegyértékelektronja van.



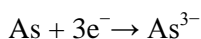
- b) A gallium a 13. csoportban található, és mivel a 3d alhéja már lezárult, 3 vegyértékelektronja van ($4s^2 4p^1$), így várhatóan mindhárom elektronját leadva kationná alakul. Itt sem számítunk anion képződésére, mivel ahhoz 5 elektront kellene felvennie.



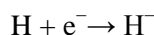
- c) Az oxigén a 16. csoportban van, tehát 6 vegyértékelektronja van ($2s^2 2p^4$). Az oxigén igen erősen vonzza elektronjait, ezért 6 elektront nem tudunk eltávolítani róla, viszont 2 elektron felvételével nemesgáz elektronkonfigurációt képes elérni.



- d) Az arzén (As) a 15. csoportban található, vegyértékelektron-konfigurációja: $4s^2 4p^3$. Az arzén úgy tud nemesgáz elektronkonfigurációjú ionná alakulni, ha lead 5 elektront, vagy pedig ha felvesz 3 elektront.

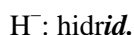
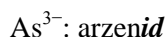
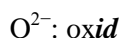


- e) A hidrogén egy kicsit különös eset, mivel a hozzá legközelebbi nemesgáz a hélium, melynek 2 (vegyérték)elektronja van. Így a hidrogénatom egy elektron eladásával hidrogénkationná (tulajdonképpen protonná: ${}^1\text{H}^+ \equiv \text{p}^+$), míg egy elektron felvételével anionná képes alakulni. A hidrogénből képződő aniont hidridionnak nevezzük (az ${}^1\text{H}^-$ esetén egy proton két elektronnal).



Érdeemes megjegyezni, hogy az atomból elektronfelvétellel képződő ion elnevezésének végén mindig **-id végződés** található.

Például:



A mellékcsoportok esetén nem jellemző, hogy az elemek elektronfelvétellel anionná alakuljanak, és a maximálisan eltávolítható elektronok száma is kicsit komplikáltabb. A 3. oszloptól a 8. oszlopig az elemekből bármely vegyértékelektront el lehet távolítani, így az eltávolítható elektronok számának maximuma az oszlop sorszámával azonos. Viszont a 9. oszloptól kezdődően a helyzet hasonlóvá válik ahhoz, mint amit a nemfémeknél tapasztaltunk: nagyszámú elektron eltávolítása már nem lehetséges, tehát nem lehetséges például 9-szeresen pozitív ion képzése. Aniont képezve azonban az aktuális héj lezárásához, a nemesgáz elektronkonfiguráció eléréséhez az összes p-elektront is fel kellene töltenünk, melyhez igen sok energia szükséges. A 9. és 10. oszlopban így nehezen lehet megjósolni a maximálisan eltávolítható elektronszámot. A 11. oszlopban többnyire 1 vagy 2 elektron eltávolítására van lehetőség, míg a 12. oszlopban 2 elektron eltávolításával képezhető kation.

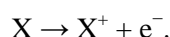
A mellékcsoportokról általánosságban elmondható, hogy itt a főcsoportokhoz képest sokkal több anomália, „rendellenesség” tapasztalható.

Oszlop	Vegyértékelektronok száma	Leadható elektronok számának maximuma	Felvehető elektronok számának maximuma
1. (I.A) oszlop	1	1	—
2. (II.A) oszlop	2	2	—
3. (III.B) oszlop	3	3	—
4. (IV.B) oszlop	4	4	—
5. (V.B) oszlop	5	5	—
6. (VI.B) oszlop	6	6	—
7. (VII.B) oszlop	7	7	—
8. (VIII.B) oszlop	8	8	—
9. (VIII.B) oszlop	9	6	—
10. (VIII.B) oszlop	10	6	—
11. (I.B) oszlop	11	3	—
12. (II.B) oszlop	12	2	—
13. (III.A) oszlop	3	3	—
14. (IV.A) oszlop	4	4	(4)
15. (V.A) oszlop	5	5	3
16. (VI.A) oszlop	6	6	2
17. (VII.A) oszlop	7	7	1
18. (VIII.A) oszlop	8	—	—

A későbbiekben az oxidációfok maximumának fogjuk tekinteni a maximálisan leadható elektronok számát, az oxidációfok minimuma pedig majd megegyezik a maximálisan felvehető elektronok számának (-1) -szeresével.

Első ionizációs energia vagy **első ionizációs potenciál**: első ionizációs energiának nevezzük azt az energiát, melyet be kell fektetnünk, hogy egy atomból egyszeresen pozitív iont (kationt) hozzunk létre.

Az ionizációs energia az alábbi folyamat energiaszükségletét jelenti:



Mindig a leggyengébben kötött elektront tudjuk legkönnyebben eltávolítani, és értelemszerűen minél erősebben kötődik egy elektron az atomhoz, annál nehezebb eltávolítani, azaz annál több energiát kell befektetnünk, hogy el tudjuk távolítani.

A legstabilabb elektronszerkezettel a nemesgázok rendelkeznek (18. oszlop), mivel itt zárul le a betöltődő elektronhéj. A lezárt elektronhéj mindig kiemelkedően stabil, ezért a nemesgázok első ionizációs energiája a legnagyobb egy perióduson belül. Mivel az alkálifémek ionizálásával nemesgáz elektronkonfigurációjú, egyszeresen pozitív ion keletkezik, ez igen nagy stabilitással rendelkezik, és az alkálifématom könnyen leadja az egyetlen s vegyértékelektronját. Tehát egy perióduson belül az alkálifémek első ionizációs energiája a legkisebb.

Az első ionizációs energia változása a periódusos rendszerben:

Egy adott **perióduson belül** balról jobbra növekszik (az alkálifémektől a nemesgázok irányába) az első ionizációs energia értéke.

Minél nagyobb egy atom, a távolság következtében a negatív töltésű külső elektronjaira annál kevésbé hat a pozitív töltésű atommag vonzása, így annál könnyebben távolítható el.

Így egy **oszlopon belül** fentről lefelé csökken az első ionizációs energia.



2.6.5.1. ábra: Az ionizációs energia változása a periódusos rendszerben

Második ionizációs energia vagy potenciál: második ionizációs energiának nevezzük azt az energiát, melyet be kell fektetnünk, hogy egy egyszeresen pozitív ionból kétszeresen pozitív iont hozzunk létre.

A második ionizációs energia mindig nagyobb, mint az első ionizációs energia, mivel egy kationról kell leszakítanunk egy negatív töltésű elektront, mely mélyebb energiájú pályán van, mint az első eltávolított elektron.

Egy perióduson belül az alkálifémek második ionizációs energiája a legnagyobb (igen stabil nemesgáz elektronkonfigurációjú ion elektronszerkezetét bontjuk meg), míg az alkáliföldfémeké a legkisebb (a vegyértékhéjukon már csak egy elektron található, ez viszonylag könnyen eltávolítható).

Azaz egy perióduson belül a 2. oszloptól a 18. oszlopig nő az ionizációs potenciál, ám az 1. oszlopban még ennél is nagyobb.

Egy oszlopon belül a második ionizációs potenciál fentről lefelé csökken.

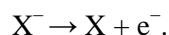
k-dik ionizációs energia vagy potenciál: az energia, mely egy elektronnak egy $(k-1)$ -szeresen pozitív töltésű ionból történő eltávolításához szükséges.

A $(k+1)$ -dik ionizációs energia mindig nagyobb, mint a k -dik ionizációs energia bármely pozitív egész k -ra).

Elektronaffinitás: az az energia, melyet be kell fektetni, hogy egy egyszeresen negatív ionból leszakítsunk egy elektront.

Ha egy atom elektront vesz fel, az legtöbbször energiefelszabadulással jár, ilyenkor az elektronaffinitást – egyezményesen – pozitívnak tekintjük.

Az elektronaffinitás egyezményesen az alábbi folyamat energiáját jelenti (ha stabilabb az anion, mint az egyel kevesebb elektront tartalmazó atom, az elektronaffinitás pozitív):



A periódusos rendszer egy során belül az elektronaffinitás az alkálifémektől a halogénekkig növekszik, azonban a nemesgázoké általában negatív értékű (destabilizációt jelent egy elektron felvétele).

A periódusos rendszer egy oszlopán belül az elektronaffinitás általában fentről lefelé növekszik, ám vannak kivételek: általában a 2. periódusban kisebb az elektronegativitás, mint a 3. periódusban. Legnagyobb elektronaffinitással a klór rendelkezik.

Elektronegativitás: az atom elektronvonzó képessége.

Jele: EN.

Minél nagyobb egy atom elektronegativitása, annál szívesebben vesz fel egy elektront.

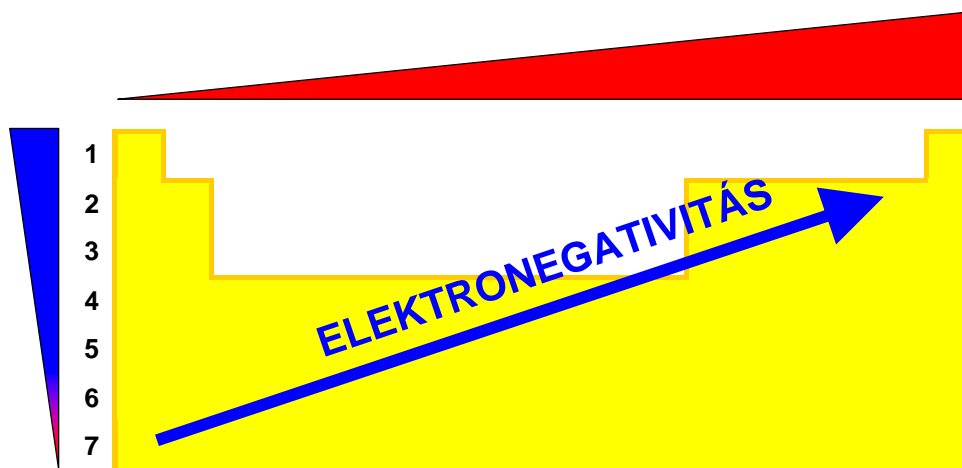
Többféle elektronegativitási skála ismert, mivel többféle úton számítható az elektronegativitás. A skálák tendenciája azonban általában megegyezik.

Az elektronegativitás egyik elterjedt definíciója szerint az elektronegativitás az adott elem ionizációs energiájának és elektronaffinitásának átlaga (számtani közepe).

Az elektronegativitás változása a periódusos rendszerben

A periódusos rendszer egy során belül az elektronegativitás balról jobbra növekszik.

A periódusos rendszer egy oszlopán belül az elektronegativitás fentről lefelé csökken.



2.6.5.2. ábra: Az elektronegativitás változása a periódusos rendszerben

A nemesgázoktól eltekintve (mivel ezek rendszerint igen kevésbé reakcióképesek, így az elektronegativitás kísérleti meghatározása nehéz) a fluor elektronegativitása a legnagyobb, a franciumé a legkisebb (a trendekből adódóan elméletileg létezhet ennél kisebb elektronegativitású elem is, ám még nem sikerült előállítani).

2.7. Gyakorlókérdések, -feladatok

1. Ismertesse az atom felépítését és jellemezze az elemi részecskéket (tömeg, töltés)!
2. Mely részecskék a nukleonok?
3. Mi a rendszám és a tömegszám?
4. Mit jelent a következő jelölés: ${}^4_2\text{He}$?
5. Definiálja a következő fogalmakat: izotóp, nuklid!
6. A klór (rendszáma 17) egyik izotópjának tömegszáma 37. Ezen izotóp egy atomja hány protont, neutronot és elektront tartalmaz?
7. Mi a tömegszám és a relatív atomtömeg?
8. Mi az anyagmennyiség?
9. Mit jelent 1 mól?
10. Mi az Avogadro-szám? Mekkora az értéke?
11. Hány elektrona van 0,125 mól oxigénatomnak (az oxigén rendszáma 8)?
12. A hélium relatív atomtömegét vegyük 4,00-nak. Hány héliumatom található 1,00 gramm héliumban?
13. Mi a radioaktivitás?
14. Definiálja a következő fogalmakat: atompálya, alhéj, elektronhéj!
15. Hogyan állapítjuk meg egy atom alapállapotú elektronkonfigurációját? Milyen fontos törvényszerűségek befolyásolják az elektronhéj benépesedését?
16. Mit nevezünk ionnak, mi a kation és az anion? Hogyan képződnek?
17. Fogalmazza meg, mit nevezünk az oxidációnak, illetve redukciónak!

18. Definiálja a vegyérték fogalmát!
19. Mi a vegyértékhéj?
20. Mi az elektronegativitás?
21. Mi az ionizációs energia és az elektronaffinitás?
22. Hogyan épül fel az elemek periódusos rendszere és milyen mezőket ismerünk?
23. Mi az összefüggés a vegyértékelektronok száma és a periódusos rendszerben elfoglalt hely között?
24. Általánosságban mely elemekből képződnek kationok, és melyekből anionok?
25. Milyen tendencia szerint változnak a következő tulajdonságok a periódusos rendszer periódusaiban, illetve oszlopaiban:
 - a. relatív atomtömeg,
 - b. atomsugár,
 - c. vegyértékelektronok száma,
 - d. vegyérték
 - e. alapállapotú elektronkonfiguráció,
 - f. ionizációs energia,
 - g. elektronaffinitás,
 - h. elektronegativitás.
26. Az elemek periódusos rendszerében hogyan változik az elemek fémes jellege? Fémes, vagy nemfémes elemek vannak többségben a periódusos rendszerben?
27. Miért stabilak a nemesgázok (18. csoport) atomjai?

3. KÉMIAI KÖTÉSEK ÉS A MOLEKULÁK SZERKEZETE

3.1. Kémiai kötések

3.1.1. Elsőrendű kémiai kötések

Az elemek igen ritkán fordulnak elő atomos formában, az egyedüli kivételek a nemesgázok, melyek általában atomos formában találhatók. A nemesgázok lezárt elektronhéjai kiemelkedő stabilitást jelentenek, és az összes többi elem is lezárt héjak elérésére törekszik. Ezt **kémiai kötések** létrehozásával tudják elérni.

Oktettszabály vagy **oktettelv**: kimondja, hogy az elemek rendszerint olyan formában létesítenek kémiai kötést, hogy mindegyikük vegyértékhéján 8 elektron legyen. (*Octo* = nyolc latin szóból)

Az oktettszabály nem teljesül például a hidrogén és a lítium esetében, mivel a hozzájuk legközelebbi lezárt elektronkonfiguráció a héliumé, melynek csak két elektronja van. Így a hidrogén és a lítium a kételektronos lezárt héj elérése törekszik.

Most lássuk, milyen formában teljesülhet az oktettszabály!

I.) Ionos kötés

Mint az előző fejezetben láttuk az ionok kialakulásánál, elektronok felvételével (redukcióval) vagy elektronok leadásával (oxidációval) elérhető nemesgáz elektronkonfiguráció, azaz teljesül az oktettelv.

Lássunk egy példát!

A káliumatomnak egy vegyértékelektronja van, elektronkonfigurációja $[\text{Ar}] 3s^1$. Egyetlen elektron leadásával elérhető a nemesgázszerkezet.

A klóratom elektronkonfigurációja: $[\text{Ne}] 3s^2 3p^5$, egy elektron felvételével az argon elektronkonfigurációja alakítható ki.

Van tehát egy káliumatom, mely elektron leadására törekszik, míg a klóratom elektront szeretne felvenni. Ha egymás közelébe kerülnek, a káliumatom átadja elektronját a klóratomnak, miközben káliumion (K^+) és kloridion (Cl^-) keletkezik. Mindkét ion nemesgáz elektronszerkezettel rendelkezik. A pozitív és negatív ionok között, a Coulomb-törvény szerint, elektrosztatikus vonzóerő jön létre, melyet **ionos kötésnek** nevezünk. Az így keletkezett ionok kristályrácsba rendeződnek, melyet az ellentétes ionok közötti elektrosztatikus vonzó kölcsönhatás tart össze.

Ionos kötés: kationok és anionok között fellépő elektrosztatikus kölcsönhatás.



3.1.1.1. animáció: Az ionos kötés kialakulása

Az ionos kötés létrejöhet egyszerű és összetett ionok között.

Az egyszerű ionok atomokból képződnek elektron(ok) leadásával (kationok), vagy elektron(ok) felvételével (anionok).

Egyszerű kationok: K^+ , Mg^{2+} , Al^{3+} , Fe^{3+} , Ce^{4+} stb.

Egyszerű anionok: Cl^- , O^{2-} , N^{3-} , I^- , H^- stb.

Az összetett ionok több atomból épülnek fel és töltéssel rendelkeznek.

Összetett kationok: legfontosabb az ammóniumion: NH_4^+ .

Összetett anionok: NO_3^- , CO_3^{2-} , PO_4^{3-} , SO_4^{2-} stb.

A tisztán ionos kötésű vegyületek rendszerint igen *eltérő elektronegativitású elemekből* jönnek létre. Többnyire alkálifém vagy alkáliföldfém kationt tartalmaznak és anionjuk általában vagy összetett ion, vagy a periódusos rendszer utolsó oszlopában található elemek egyszerű anionja (elsősorban 16. és 17. oszlop).

II.) Fémes kötés

Fématomok esetén a vegyértékhéj elektronjai viszonylag gyengén kötöttek. A fématomokból pozitív töltésű ionok keletkeznek, a vegyértékelektronok pedig az atomtörzsek közötti térben delokalizálódnak.

Fémes kötés: az egész kristályra kiterjedő közös elektronfelhő által létrehozott kémiai kapcsolatot **fémes kötésnek** nevezzük.

A fémes kötés (nem meglepő módon) *fématomok között* jöhet létre. A fémek elektronegativitása rendszerint nem túl nagy, ezért a tisztán fémes kötés akkor jöhet létre, ha kicsi az elemek elektronegativitása.



3.1.1.2. animáció: A fémes kötés kialakulása

III.) Kovalens kötés

Kémiai kötés úgy is létrejöhet, ha az egymás melletti atomok közös (úgynevezett kötő) elektronpáron (vagy elektronpárokon) keresztül kapcsolódnak össze.

Ezt legegyszerűbben egy példán keresztül érthetjük meg. Vegyünk két klóratomot! Mindkettőnek az elektronkonfigurációja $[Ne] 3s^2 3p^5$, ha fémes kötést szeretnénk kialakítani közöttük, 7–7 elektront kellene leadnia mindkettőnek. Ez energetikailag rendkívül kedvezőtlen. Ezért a lezárt elektronhéjat elektronfelvétel útján lenne célszerű elérni. Természetesen a két klóratom elektronegativitása ugyanakkora, nem jöhet létre közöttük ionos kötés.

A két klóratom között kötő elektronpár létesítésével alakul ki a kémiai kötés: a kötő elektronpár a két klóratom egy–egy elektronjából jön létre, viszont mindkét atomhoz egyaránt tartozik. Így mindkét klóratom körül 8–8 elektron található, tehát mindkét klóratom nemesgáz elektronkonfigurációjává válik, teljesül az oktetszabály. A folyamatot energiafelszabadulás kíséri.

Kovalens kötés: A közös elektronpárral létesített kötést **kovalens kötésnek** nevezzük. (Az angol *covenant* kifejezés alapján: co- = közös, valent = vegyértékű, „közös vegyértéken osztozó”.)



3.1.1.3. animáció: A kovalens kötés kialakulása

A kovalens kötés létrejöttével a két klóratom egy **molekulává** egyesül.

Molekula: legalább két atomból álló, elektromosan semleges részecske, melynek atomjait kovalens kötések tartják össze.

Kovalens kötés általában nemfémek atomjai között létesül. Mint ismeretes, a nemfémek elektronegativitása általában nagy, ezért a kovalens kötés viszonylag nagy elektronegativitású elemek között alakul ki.

Homonukleáris kötésnek nevezzük az azonos elem atomjai közötti kötést, ellenben **heteronukleáris** a kötés, ha két különböző elem atomjai között jön létre.

Példák: kétatomos molekulákban homonukleáris kötés: Cl_2 , H_2 stb., heteronukleáris kötés: HCl , BrF stb.

A heteronukleáris kötés lehet apoláris, vagy poláris.

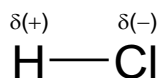
Egy kötés **apolárisnak** tekinthető, ha a két atom elektronegativitása azonos.

Az azonos atomok közötti kötések apolárisak. (Megjegyzés: például a szén–hidrogén-kötést is tekinthetjük közel apolárisnak, mivel a szén és a hidrogén elektronegativitása hasonló [$\text{EN}(\text{C}) = 2,5$, $\text{EN}(\text{H}) = 2,1$]).

A kovalens kötés **poláris**, ha két olyan atomot köt össze, melyek elektronegativitása között különbség van. A poláris kovalens kötés viszonylag jelentős ionos jelleggel rendelkezik.

Például a hidrogén–klór-kötés igen polárisnak tekinthető, a két elem elektronegativitása között jelentős különbség van: $\text{EN}(\text{Cl}) = 3,0$, $\text{EN}(\text{H}) = 2,1$.

A poláris kovalens kötésben a nagyobb elektronegativitású atom részleges negatív töltésű (pontosabban negatívan polarizált), a kisebb elektronegativitású pedig részben pozitív töltésű (pozitívan polarizált). Egy kétatomos molekulában a két atomra jutó úgynevezett **parciális töltés** (részleges töltés) nagysága azonos, de előjele ellentétes. Ezt a következőképp szoktuk érzékeltetni a molekula képletében:



A hidrogén-klorid molekulában a töltések nem egyenletesen oszlanak el. Az ilyen molekulákat dipólusmolekuláknak nevezzük.

A kötés polarizáltsága vektormennyiség, nyíllal szoktuk jelölni. A dipólusvektor a pozitív töltésből mutat a negatív töltés felé. Azt, hogy egy molekula dipólusmolekula-e, a dipólusvektorok eredője határozza meg.

Dipólusmolekula: olyan molekula, melyben vannak poláris kötések és a kötések dipólusvektorainak eredője nem zérus.

Apoláris molekula: csak apoláris kötések tartalmazó molekula, vagy olyan molekula, melyben a poláris kötések úgy helyezkednek el, hogy dipólusvektorainak összege zérus legyen.

A kétatomos molekula akkor dipólusos, hogyha a kötés poláris. Többatomos molekulák esetén a molekula szerkezete is fontos szerepet játszik annak eldöntésében, hogy a molekula dipólusmolekula-e. Ezzel a molekulák szerkezete kapcsán részletesen foglalkozunk majd (ennek a fejezetnek a végén).

Az előzőekben megismerkedtünk a három legfontosabb kötéstípussal. Ezen kötések igen erősek, ezért szokás **elsőrendű kötéseknek** nevezni őket.

Az elsőrendű kötések:

- ionos kötés
- fémes kötés
- kovalens kötés.

Az elektronegativitás és a kötésjelleg közötti összefüggés

A három alaptípus tárgyalásánál megemlítettük, hogy az adott kötéstípus rendszerint milyen elemek között jön létre. Ezeket összefoglalva:

- *tisztán ionos kötés* akkor jön létre, ha az elemek elektronegativitása közötti különbség nagy.
- *tisztán fémes kötés* esetén az elemek elektronegativitása hasonló (kicsi az elektronegativitások különbsége), és mindkét elem elektronegativitása kis értékű.
- *tisztán kovalens kötés* esetén az elemek elektronegativitásai nem túlzottan különbözőek, és mindkét elem elektronegativitása nagy.

A periódusos rendszerből tetszőleges két elemet kiválasztva a közöttük létesülő kötést gyakran nem tudjuk besorolni a fentiek alapján egyik kötéstípusba sem. Fontos hangsúlyozni, hogy **az átmenet gyakorlatilag folytonos bármelyik két elsőrendű kötés között**. Így gyakran előfordul, hogy két atom közötti kötést nem lehet tisztán ionos, fémes vagy kovalens kötésként leírni. A fent tárgyalt poláris kovalens kötés például átmenet a kovalens és az ionos kötés között.

Legyen A és B két tetszőleges elem. A két elem elektronegativitása közötti különbség és a két atom elektronegativitásának összege segíthet annak eldöntésében, hogy milyen típusú elsőrendű kötés jöhet létre a két elem atomjai között.

$$\Delta EN(A,B) = | EN(A) - EN(B) | \quad \text{és} \quad \Sigma EN(A,B) = EN(A) + EN(B)$$

A következő ökölszabályokat alkalmazhatjuk:

- Ha $\Delta EN(A,B)$ nagy érték (jellemzően 2,0 fölött), a kötés ionos jellege nagy.
- Ha $\Delta EN(A,B)$ kicsi érték (jellemzően 1,5 alatt), akkor a kötés lehet kovalens vagy fémes.
 - Ha $\Sigma EN(A,B)$ nagy (jellemzően 4,0 felett), akkor a kötés kovalensnek tekinthető.
 - Ha $\Sigma EN(A,B)$ kicsi (jellemzően 3,0 alatt), akkor a kötés fémes jellegűnek tekinthető.

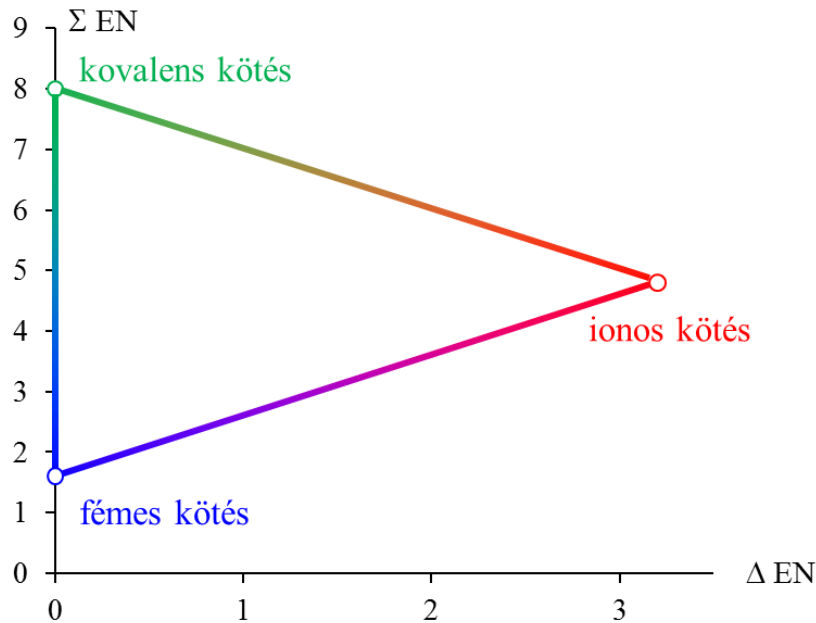
Pauling szerint $\Delta EN(A,B) = 1,5 \dots 2$ esetén az A és B atomok közötti kötés nagyjából fele-fele mértékben ionos és kovalens jellegű.

A stabilan előállítható elemek közül a cézium elektronegativitása a legkisebb, 0,8 (ennél csupán a csak radioaktív izotópokkal rendelkező francium elektronegativitása kisebb: 0,7), a fluor elektronegativitása pedig a legnagyobb (4,0). Ezen elemekből megalkothatjuk a tökéletes ionos, fémes és kovalens kötések.

$\Delta EN(A,B)$	Cs	F
Cs	0,0	3,2
F	3,2	0,0

$\Sigma EN(A,B)$	Cs	F
Cs	1,6	4,8
F	4,8	8,0

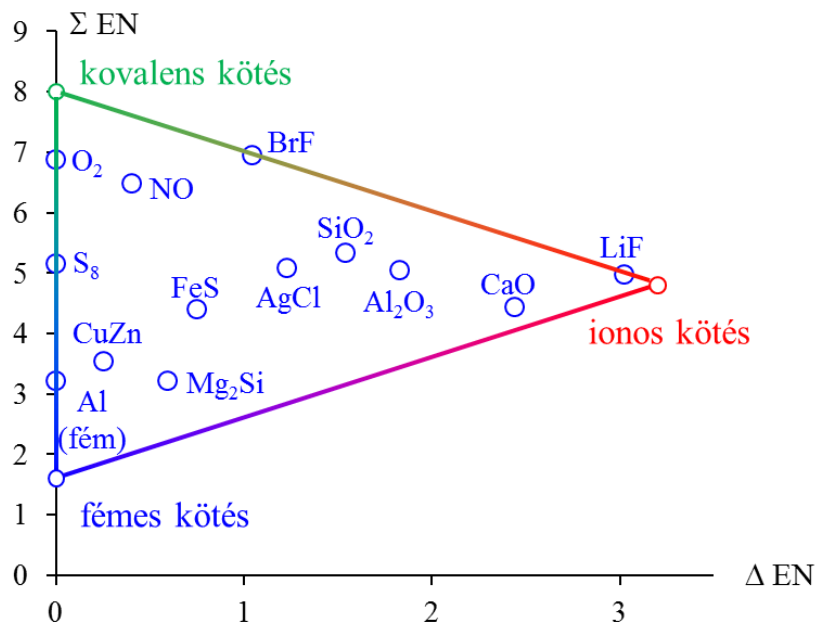
Ha ábrázoljuk a $\Delta EN(A,B)$ függvényében $\Sigma EN(A,B)$ értékeit, egy háromszög három csúcsát kapjuk:



3.1.1. ábra: A kötés jellege és az elektronegativitás

Bármely más elem elektronegativitása a cézium és a fluor közé esik, így a fenti ábrán bármely két elem közötti kötést feltüntethetjük az elektronegativitásaik ismeretében.

Az alábbi ábrán feltüntettük néhány elem és vegyület $\Delta EN(A,B)$ és $\Sigma EN(A,B)$ értékeit.



3.1.1.2. ábra: Példák átmeneti jellegű kötésekre

Mint a fenti ábrán látható, néhány vegyületet igen nehéz a három elsőrendű kötés valamelyikébe besorolni. Ilyen például a vas(II)-szulfid (FeS), szilícium-dioxid (SiO₂) vagy az ezüst-klorid (AgCl). A kémiai kötések ezen vegyületekben nem tekinthetők ionosnak, jelentős a kovalens jellegük.

A fenti ábra alapján a kovalens kötés az elemi oxigénben (O₂) és a kénmolekulában (S₈) apoláris, míg a nitrogén-monoxidban (NO) és a két különböző halogénatomot tartalmazó bróm-fluoridban (BrF) poláris.

A réz-cink ötvözetben (CuZn) és a magnézium-szilicidben (Mg₂Si, egy ötvözésre használt vegyület) a kötés fémesnek tekinthető. Természetesen a fém alumíniumban is fémes a kötés.

A lítium-fluorid (LiF), a kalcium-oxid (CaO) és az alumínium-oxid (Al₂O₃) ionos kötésű vegyületek, az utóbbiban viszonylag jelentős kovalens jelleg is megállapítható.

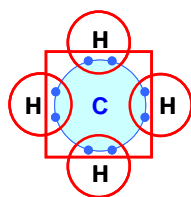
A fentiek alapján belátható, hogy a kémiai kötés ionos, fémes, illetve kovalens jellege elsősorban az kötést létesítő elemek elektronegativitásától függ. Fontos megjegyezni, hogy a kémiai kötés gyakran nem írható le egyféle kötéstípussal, hanem több típus tulajdonságait ötvözi.

Sokatomos molekulák

Az oktett szabályt természetesen a kettőnél több atomos molekulák is követik általában.

Vegyük például a metánmolekulát! A metán képlete CH₄, azaz egy molekulájában négy hidrogénatom és egy szénatom található. A szén elektronkonfigurációja [He] 2s² 2p², tehát négy vegyértékelektronja van, míg a hidrogének egy-egy elektronnal rendelkeznek. A szénatom elektronoktetet (8 elektron a külső héjon) szeretne létrehozni, a hidrogéneknek pedig a héliumhoz hasonló 2 elektronos elektronszerkezet a kedvező.

Ha a szén köré rendeződik a négy hidrogénatom, négy kovalens kötés alakul ki. Minden hidrogén környezetében így 2–2 elektron található (piros körökkel jelölve), míg a négy (közös) elektronpár a szén számára biztosítja a nyolc vegyértékelektront (piros négyzettel jelölve).



3.1.1.3. ábra: Az oktettsszabály

Most pedig vizsgáljuk meg, hogyan néz ki a metánhoz hasonló nitrogénvegyületet elektronszerkezete!

A nitrogén elektronkonfigurációja: [He] 2s² 2p³, azaz 5 vegyértékelektronja van. A nitrogén 8 elektronos vegyértékhéj elérésére törekszik (oktettsszabály), ehhez 3 elektrorra van még szüksége. A három elektront három hidrogén szolgáltatja, így a keletkező molekula képlete: NH₃. Így a nitrogén és a hidrogének is elérték a nemesgáz elektronkonfigurációt. Három **kötő elektronpár** jön létre, azaz a nitrogén összesen 3 elektronját adja a kötésekbe, a maradék 2 elektronja pedig csak a nitrogénhez kapcsolódik. Az ilyen elektronpárt **magános** (vagy nemkötő) **elektronpárnak** nevezzük. A korábban tárgyalt klórmolekula esetében mindkét klóratom 3–3 magános elektronpárral rendelkezik.

Magános elektronpár: olyan vegyérték-elektronpár, mely a kovalens kötést alkotó két atom közül csak az egyikhez tartozik. Egy atomon akár több magános elektronpár is lehetséges.

A kovalens kötés jellemzői

Kötési energia: egy kötés felszakításához szükséges energia, az az energia, melyet be kell fektetni, hogy a kötést létesítő atomokat végtelen távolságba távolítsuk. (Értelemszerűen ugyanekkora energia szabadul fel, mikor a két atom végtelen távolságból kiindulva létrehozza a kötést.) Általában

J/mol (kJ/mol) mértékegységben adjuk meg értékét, ám gyakran használt – nem SI – mértékegység a kcal/mol. $1 \text{ kcal/mol} = 4,18 \text{ kJ/mol}$.

Kötéstávolság vagy **kötéshossz**: a kötést létesítő két atommag közötti távolság.

A kötéstávolságok rendszerint néhányszor 10^{-10} méter nagyságrendűek, természetesen a kötést létesítő atomok rendszámától függően. Gyakran használjuk az angström vagy ångström mértékegységet (rövidítve Å), melynek értéke 10^{-10} méter.

(Megjegyzés: az atomtávolság bármely két atom távolságát jelentheti, ha a kötéstávolság kifejezést használjuk, akkor a két atom között kémiai kötés található.)

A kötéshossz függ az atomok méretétől és az őket összetartó kötés erősségétől. Például a kovalens kötés a fluormolekulában (F–F) rövidebb, mint egy klórmolekulában (Cl–Cl), mivel a klóratomok jóval nagyobbak a fluoratomoknál. Ennek megfelelően a halogénmolekulák között a fluormolekula kötéshossza a legrövidebb, ennél nagyobb a klórmolekuláé, majd sorrendben a brómmolekula (Br–Br) és jód-molekula (I–I) következik, összhangban a halogénatomok méretével.

Adott két atom (például két szénatom), melyek között minél rövidebb a kötéshossz, annál erősebbnek tekinthető a kötés. Tehát a kötés erősségére a kötéshosszból is nyerhetünk információt. Fontos azonban, hogy mindig azonos fajta kötésekkel hasonlítsunk össze, például egy C–C és egy C–H kötés hosszát összehasonlítva, azok erősségét nem lehet pontosan megbecsülni, mivel a kötést alkotó atomok atomsugarának is hatása van a kötéshosszra.

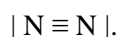
Többszörös kötések

Bizonyos esetekben az elektronoktett kialakításához nem elegendő egyetlen kötő elektronpár. Ezt ismét egy példán keresztül célszerű megvizsgálni.

Az elemi nitrogén molekuláris formában fordul elő a természetben. A nitrogén elektronkonfigurációja $[\text{He}] 2s^2 2p^3$, a vegyértékelektronok száma 5. Két nitrogénatomból egy nitrogénmolekula keletkezik, melynek összesen $2 \cdot 5 = 10$ elektronja van a lezárt héjakon kívül. Mint fentebb láttuk, a klórmolekula esetén 14 elektrontól tudtuk kialakítani a két elektronoktettet. Viszont a nitrogén esetén nem áll rendelkezésre ennyi elektron!

Mi történik, ha a két nitrogénatom nem egy–egy, hanem két–két elektronjával létesít kötést? Ekkor mindkét nitrogénatom körül $5 + 2 = 7$ vegyértékelektron van (eleve volt 5, a másik nitrogéntől pedig 2-t kapott), így nem teljesül az oktetttel.

Most vizsgáljuk meg, hogy mi változik, ha mindkét nitrogén három–három elektront szolgáltat a kötés kialakításához! Ekkorra mindkét nitrogén körül éppen 8 elektron található, azaz megfelel az oktettszabálynak. Ha mindkét nitrogén 3–3 elektronnal létesít kötést, összesen 6 elektron található a két nitrogénatom között. A 6 elektrontól 3 elektronpárt tudunk létrehozni, a nitrogének két–két elektronja pedig egy–egy magános elektronpárt alkot. Mivel az elektronpárt egy vonallal szokás jelölni, a nitrogénmolekula szerkezetét az alábbi formában szoktuk felírni:



Az így keletkezett kötést **hármaskötésnek** nevezzük. Természetesen ennek mintájára létezik kettős kötés is.

Kettős kötés: olyan kovalens kötés, mely két kötő elektronpáron keresztül köti össze a két atomot.

Hármaskötés: olyan kovalens kötés, mely három kötő elektronpáron keresztül létesít kapcsolatot a két atom között.

Az elméleti számítások és kísérletek alapján a kettős kötés jóval erősebb, mint az egyes kötés, ám a kettős kötés kötési energiája általában nem kétszerese az egyes kötésének, hanem kisebb annál.

Hasonlóan a hármas kötés is rendszerint erősebb, mint egy egyes vagy kettős kötés, ám nem háromszor olyan erős, mint egy egyes kötés.

Mivel a kötések erősségét a kötése energiával szoktuk jellemezni, nézzük meg az C–C, C=C és C≡C kötések kötési energiáját!

$$E(\text{C}-\text{C}) = 347 \text{ kJ/mol}$$

$$E(\text{C}=\text{C}) = 610 \text{ kJ/mol}$$

$$E(\text{C}\equiv\text{C}) = 836 \text{ kJ/mol}$$

A kettős kötés „második kötésének” kötési energiája: $610 \text{ kJ/mol} - 347 \text{ kJ/mol} = 263 \text{ kJ/mol}$, míg a szén–szén hármas kötés „harmadik kötésének” kötési energiája a hármas és kettős kötés kötési energiájának a különbségeként adódik: $836 \text{ kJ/mol} - 610 \text{ kJ/mol} = 226 \text{ kJ/mol}$.

Ennek magyarázatához meg kell ismerkednünk a molekulapálya fogalmával.

Molekulapálya: az a térrész, melyen belül 90%-os valószínűséggel megtalálható az elektron. Az atompályához hasonlóan egy molekulapályára is maximálisan két elektron kerülhet. A kötő elektronpárokat tehát molekulapályákkal jeleníthetjük meg.

Térjünk vissza tehát az egyes, kettős és hármas kötések eltérő erőssége különbségének értelmezéséhez. Az egyes kötésnek megfelelő elektronok a két atom között, tengelyirányban helyezkednek el egy hengersizmetrikus molekulapályán. A kettős kötés „második” elektronpárja már nem kerülhet ugyanebbe a térrészbe, hanem „piskóta alakban” az etilénmolekula síkja alatt és fölött helyezkedik el. Mivel ezek az elektronok már nem a két atomot összekötő tengely mentén helyezkednek el, a kötés gyengébb, mint az egyszeres kötés.

A σ -kötés és π -kötés

Az egyszeres kötést σ (szigma) kötésnek hívjuk, a második és harmadik kötések pedig π (pi) kötéseknek nevezzük.

Most vizsgáljuk meg, hogyan alakulhat ki σ -kötés, illetve π -kötés!

A hidrogénatomnak egyetlen elektronja van, mely a gömbszimmetrikus 1s pályán található. Két hidrogénatomot közelítve egymáshoz, a két atompályából két molekulapálya jön létre. Az egyikre két elektron kerül, míg a másik betöltetlen marad (az elsőt szokás kötőpályának, a másikat pedig lazítópályának nevezni). A kétszeresen betöltött pálya hengersizmetrikus, az ilyet nevezzük σ -kötésnek.



3.1.1.4. ábra: A σ -kötés

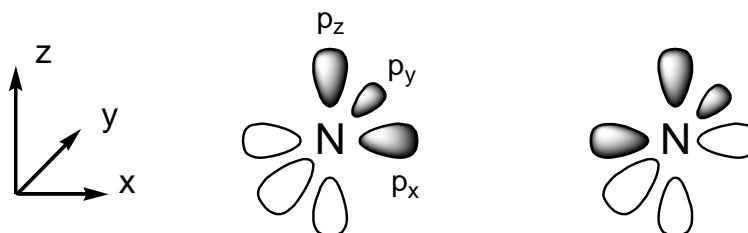
A következőkben vizsgáljuk meg a hidrogén-klorid-molekula kialakulását! A klóratomnak 7 vegyértékelektronja van: $3s^2 3p^5$, azaz a három p-pálya közül kettő kétszeresen betöltött, míg a harmadik csak egyszeresen. Így a hidrogén 1s-pályájából és a klór egyik 3p-pályájából jönnek létre a molekulapályák:

Ismét egy hengersizmetrikus σ -pálya jön létre.

A fent megismert σ -kötések találhatóak például a telített szénhidrogénekben is, melyeknek igen fontos jellemzőjük, hogy a hengerszimmetrikus kötések tengelye mentén a csoportok el tudnak fordulni egymáshoz képest viszonylag kis energiabefektetés hatására, így az ilyen vegyületekben a σ -kötéstengely körüli forgás (rotáció) igen könnyen végbemegy.

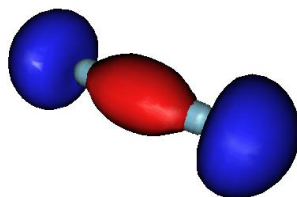
A következőkben vizsgáljuk meg a többszörös kötések kialakulását! Vegyük például a nitrogénmolekula kialakulását:

A nitrogén elektronkonfigurációja: $2s^2 2p^3$. A három p-elektron a három különböző térállású p-pályán található (lásd Hund-szabály). Két nitrogénatomot egymáshoz közelítve az alábbi sematikus ábrát kapjuk:



3.1.1.5. ábra: A nitrogénmolekula kialakulása

A két p_x -pályából létrejön a σ -kötés:



3.1.1.6. ábra: A nitrogénmolekula σ -kötése

Viszont, ha a p_x -pályákból kialakul a σ -kötés, a p_y - és p_z -pályákból már nem jöhet létre σ -kötés. Ezzel ellenben π -kötések jönnek létre:



3.1.1.7. ábra: A nitrogénmolekula π -kötései

A két π -kötésnek van egy-egy csomósíkja (ahol az elektronok megtalálási valószínűsége 0), ez a két csomósík egymásra merőleges. A nitrogén esetében a két π -kötés teljesen egyforma méretű és energiájú.

Kolligációs és datív kötés

A kötő elektronpár kétféleképpen jöhet létre: vagy mindkét atom ad egy-egy (vagy több) elektront, vagy csak az egyik atomtól származik a kötő elektronpár.

Kolligációs kötés: mindkét kötést létesítő atom hozzájárul elektronnal (elektronokkal) a kötéshez.

A fentebb tárgyalt kötések mindegyike kolligációs kötés, akár a klórmolekula, akár a nitrogénmolekula létrejöttéről van szó.

Datív vagy koordinációs kötés: a két kötést létesítő atom közül az egyik atom egy teljes elektronpárral járul hozzá a kötéshez (ez az **elektronpár donor** atom), míg a másik atom nem szolgáltat elektront a kötéshez (ezt **elektronpár-akceptor** atomnak nevezzük).

(datív: a *dativus* latin szóból, melynek jelentése adás)

A datív kötés létrejöttéhez szükséges, hogy az egyik atomnak legyen magános (nemkötő) elektronpárja, a másik atom pedig legyen „elektronhiányos”. Az elektronhiány akkor lép fel, ha nem teljesül az oktettsszabály.

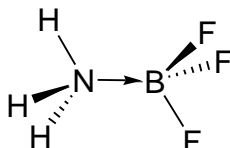
Vegyük például a bór-trifluorid (BF_3) molekulát! A három fluoratom egy-egy elektront ad a kovalens kötésbe, a bór ($[\text{He}] 2s^2 2p^1$) pedig 3 elektronnal tud kötsést létesíteni, így a bór körül három kötő elektronpár helyezkedik el, azaz a bór vegyértékheján csak hat elektron található! A bór-trifluorid molekula sík szerkezetű, mind a négy atom egy síkban van, és a bóratomnak van egy üres p-pályája.

Az üres pályák elektronpár-akceptorként viselkedhetnek.

Most keressünk egy elektronpárdonor molekulát! Például a fentebb megismert ammóniamolekula rendelkezik magános elektronpárral, így elektronpárdonornak tekinthető.

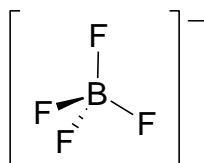
Mi történik, ha közeledik egymáshoz egy ammónia- és egy bór-trifluorid molekula? Az ammóniamolekula nitrogénatomja a magános párját „kölcsonadja” a bórnak, így annak létrejön az elektronoktettje. A nitrogén a magános párját nem adja át teljesen a bórnak, hanem az a két atom között elhelyezkedő elektronpárrá alakul. Így a nitrogénnek is megmarad az elektronoktettje. Az így létrejövő datív kötés olyan, mint egy hagyományos kovalens kötés, a különbség csak abban van, hogy a datív kötés esetén mindkét elektront ugyanaz az atom adja. A kialakuló datív kötés kialakulásának az a hajtóereje, hogy a bóratom elektronhiánya csökkenjen (így teljesül az oktettsszabály).

A datív kötsést általában vonal helyett nyíllal szoktuk jelölni. A nyíl az elektronpárdonor atomtól mutat az elektronpár-akceptor atom felé:



Természetesen nemcsak az ammónia nitrogénje lehet elektronpár-donor, akár ionok is adhatnak elektronpárt a datív kötésbe. Például a fluoridionnak (F^-) is van 4 magános elektronpárja.

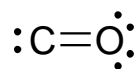
Mi történik, ha egy bór-trifluorid molekulát és egy fluoridiont közelítünk egymáshoz? A fluoridion egyik magános párja datív kötsést létesít a bórtrifluorid bóratomjával. Egy anion keletkezik, melyben a négy fluor egy bóratomot vesz körül:



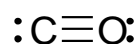
A keletkező igen nagy stabilitású ion neve: tetrafluoroborát-anion. Benne a négy fluor-bór kötés teljesen egyenrangú, nem lehet megkülönböztetni a kolligációs elektronpárt a datív kötésből származótól. Mind a négy fluoratom, mind a bóratom esetén teljesül az oktettsszabály (mindegyik atom körül négy elektronpár található). A negatív töltés megoszlik a négy fluoratomon, egyiknek sincs kitüntetett szerepe.

Datív kötés nemcsak két különálló molekula vagy ion között jöhet létre, erre példa a szén-monoxid molekula.

A szén-monoxidot felírhatjuk úgy, hogy kettős kötést írunk a szén- és oxigénatom közé:



Mint látható, az oxigénatom körül négy elektronpár van, így ez megfelel az oktett szabálynak. Viszont a szénatom körül csak hat elektron (3 elektronpár) található, így elektronhiányos. Az oxigén a két elektronpárja közül az egyikkel datív kötést tud létesíteni, így hármas kötés alakul ki.



Az oxigén az elektronpárdonor, a szén pedig az elektronpár-akceptor. Ha összeszámoljuk az elektronokat a szén és az oxigén körül, azt tapasztaljuk, hogy mindkét elem esetén teljesül az oktettelv.

Érdeemes megjegyezni, hogy a szén-monoxidban a kötés gyakorlatilag apoláris, ami meglepő, ha belegondolunk, hogy a szén és az oxigén elektronegativitása között mintegy egységnyi a különbség [EN(O) = 3,4; EN(C) = 2,5]. Tehát a kötésnek polárisnak kellene lennie az elektronegativitások alapján, az oxigéneken kellene lennie az elektrontöbbletnek. Mivel az oxigén elektront (negatív töltés) ad be a datív kötésbe, a kötés polaritása csökken. Ebből nyilvánvalóvá válik az is, hogy az elektronegativitások alapján nem mindig lehet egyértelműen eldönteni, hogy egy kötés mennyire poláris.

Delokalizált elektronok

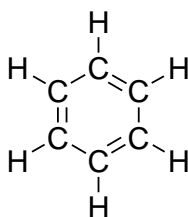
Delokalizáció: ha egy elektron nem rendelhető egyértelműen egy adott atomhoz vagy kémiai kötéshez, az elektront delokalizáltnak tekintjük.

A latin eredetű szó jelentése: nem helyhez kötött. A lokalizált („helyhez kötött”) kötés jól meghatározottan két atom között helyezkedik el.

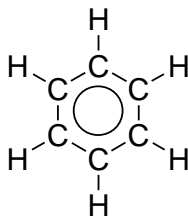
Akkor jön létre delokalizáció, ha egy molekulapálya kettőnél több atomra terjed ki.

Következzen egy példa delokalizált elektronszerkezetre:

A benzol képlete C_6H_6 , sík szerkezetű molekulájában a szénatomok egy szabályos hatszög csúcaiban találhatóak. Az oktettelv teljesülése céljából a szénatomok közé váltakozva egyes és kettős kötések kellene berajzolnunk (összesen hat σ - és három π -kötés):



Mint korábban említettük, a kettős kötés hossza rövidebb az egyes kötésénél, így a benzol esetén is váltakozó hosszúságú kötések kellene kapnunk. A kísérleti vizsgálatok azonban – ezek alapján kissé meglepő módon – a szénatomok között azonos hosszúságú kötések állapítottak meg. Ez azt sejteti, hogy a szénatomok közötti kötés nem tekinthető sem egyes, sem kettős kötésnek, hanem valahol a kettő között van. A benzol $3 \cdot 2 = 6$ π -elektronja *delokalizálódik* a hat szénatom fölött. Ennek megjelenítésére gyakran alkalmazzuk az alábbi képletjelölést (a karika a hat delokalizálódott elektront jeleníti meg):



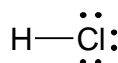
3.1. példa:

Írjuk fel a következő molekulák elektronszerkezetét!

- hidrogén-klorid (HCl)
- víz (H₂O)
- etilén (H₂CCH₂)
- acetilén (HCCH)
- szén-dioxid (CO₂)
- kén-dioxid (SO₂)
- kén-trioxid (SO₃)
- ammóniumion (NH₄⁺).

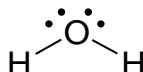
Megoldás:

- A hidrogén-kloridban egy kötő elektronpáron keresztül jön létre a kovalens kötés, a klóratomnak pedig van három magános elektronpárja:



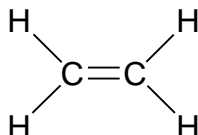
Mivel a hidrogén és a klór elektronegativitása jelentősen eltérő [EN(H) = 2,1; EN(Cl) = 3,1], a kötés poláris kovalens kötésnek tekinthető.

- A vízmolekulában az oxigén hat vegyértékelektronjából kettőt bead a két egyes kötésbe, így a megmaradó négy elektronjából két magános elektronpár jön létre.

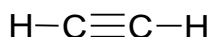


A hidrogén és oxigén között viszonylag nagy az elektronegativitásbeli különbség, ezért a H–O kötés poláris.

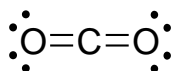
- A négy vegyértékelektronnal rendelkező szénnek még négy elektronra van szüksége az elektronoktett kialakításához, tehát négy kovalens kötés kialakítására képes. Egy szénatom a hozzá kapcsolódó két hidrogénatom felé ad egy-egy elektront, így a két szénatom között kettős kötés van.



- Természetesen a szénatomok elektronoktettjének ismét létre kell jönnie. Egy szénatom a négy vegyértékelektronjából egyet a hidrogén-szén kötésbe ad, így a maradék három elektronból a szénatomok között hármas kötés jön létre:

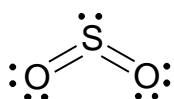


- e) A szén-dioxid-molekulában a központi szénatomhoz két oxigénatom kapcsolódik, így négy vegyértékelektronjából két kettős kötés jön létre a két oxigénnel:



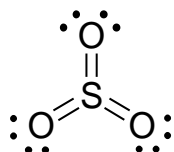
A két oxigénatomnak marad $6 - 2 = 4$ elektronja, melyből két magános pár jön létre.

- f) A kén-dioxidban a központi kénatomhoz két oxigénatom kapcsolódik. A kén a 16. főcsoportban található, így 6 vegyértékelektronja van. Az oxigének (a fentiekhez hasonlóan) kettős kötéssel kapcsolódnak a kénhez, hogy elérjék a nemesgáz elektronkonfigurációt. A kénatomnak így 4 elektronja a két kettős kötésbe adódik, a maradék két elektron pedig egy magános elektrópárt képez. Így a kén-dioxid elektronszerkezete:

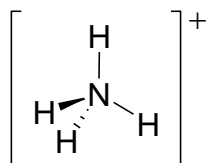


(Az érdeklődők kedvéért megjegyezzük: ha összeszámoljuk a kénatom körüli elektronok számát, eredményül 10-et kapunk. Az olyan atomokat, melyeknek nyolcnál több vegyértékelektronjuk van, *hipervalens* atomoknak nevezzük.)

- g) A kén-trioxidban három darab kettős kötéssel kapcsolódik három oxigénatom a központi kénatomhoz:



- h) Az ammóniumion úgy képződik, hogy az ammóniamolekula nitrogénjének magános elektrópárjára egy protont helyezünk. Az így kialakuló kötés tulajdonképpen datív kötésnek tekinthető (nitrogén: elektrópáradonor, hidrogén: elektrópár-akceptor). Az ammóniumionban található négy σ -kötés teljesen egyforma.



Az ammóniumion szerkezete nagyon hasonló a metánéhoz. Ez nem is meglepő, mivel az ammóniumionban és a metánmolekulában pontosan ugyanannyi elektron található.

3.1.2. Másodrendű kémiai kötések

A fentiekben megismerkedtük az erős elsőrendű kötésekkel. Az ionos és fémes kötés létrejöttével igen nagyszámú részecske tud összekapcsolódni. A molekulán belül a kovalens kötés csak az egymás melletti atomokat tartja össze. A másodrendű kötések szerepe elsősorban a molekulák összetartása.

A **másodrendű** (vagy **másodlagos**) **kötések** az elsőrendű kötéseknel gyengébbek, kötési energiájuk rendszerint egy nagyságrenddel kisebb, mint az elsőrendű kötéseké. A másodrendű kötéseknek szokás összefoglaló néven van der Waals-kölcsönhatásoknak is nevezni.

A másodlagos kötések fajtái

Dipólus-dipólus kötés: dipólusmolekulák között létrejövő kölcsönhatás, melynek alapja az ellentétes előjelű parciális töltések közötti elektrosztatikus vonzás.

dipólus-dipólus kötés akkor jön létre, ha a megfelelő töltések úgy rendeződnek, hogy közöttük a legnagyobb stabilizáció jöhhessen létre. Ezt orientációs hatásnak (effektusnak) nevezzük:



3.1.2.1. ábra: A dipólus-dipólus kötés

A dipólus-dipólus kötés kialakulását megfigyelhetjük a következő animáción:

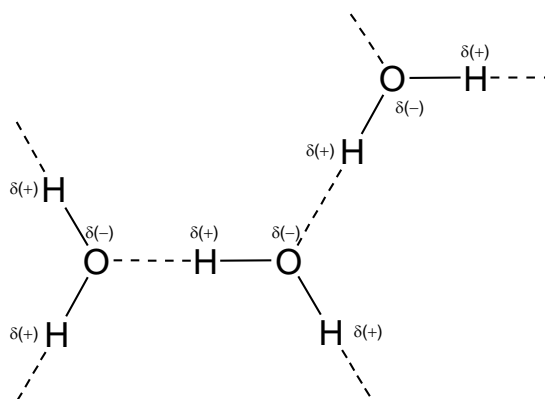


3.1.2.1. animáció: A dipólus-dipólus kötés kialakulása

Hidrogénkötés (vagy hidrogénhídkötés): olyan molekulák között jön létre, melyekben a hidrogénatom egy kiemelkedően nagy elektronegativitású atomjához kapcsolódik.

A hidrogénkötés az átlagos dipólus-dipólus kötésnél erősebb, a legerősebb másodrendű kötés. A hidrogénkötés létrejöttének feltétele, hogy a két atom elektronegativitása között nagy különbség legyen. Általában akkor számíthatunk hidrogénkötés kialakulására, ha a hidrogénatom oxigénhez, nitrogénhez vagy fluorhoz kapcsolódik. A hidrogénkötés rendkívül fontos összetartó erő, megtalálható számos természetes vegyületben.

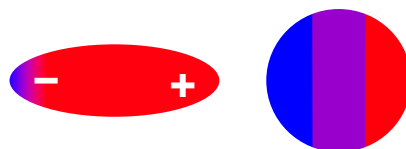
A víz az egyik legfontosabb vegyület, melynek molekulái között hidrogénkötés található:



3.1.2.2. ábra: A hidrogénkötés

Dipólus-indukált dipólus kölcsönhatás: egy dipólusmolekula és egy apoláris molekula között létrejövő összetartó erő.

A dipólusmolekula kismértékű töltésmegoszlást okoz a közelében található apoláris molekulában, ezt indukált polarizációnak nevezzük. A dipólusmolekula és az indukált polaritással rendelkező molekula között így elektrosztatikus vonzás jön létre.



3.1.2.3. ábra: A dipólus-indukáltdipólus kötés

A dipólus-indukáltdipólus kötés gyengébb a dipólus-dipólus kötésnél, mivel az apoláris molekula csak igen kismértékben tud polarizálódni.

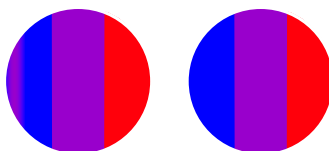


3.1.2.2. animáció: A dipólus-indukáltdipólus kötés kialakulása

Diszperziós kölcsönhatás: az apoláris molekulákat összetartó gyenge kölcsönhatás.

A diszperziós kötést szokták London-kölcsönhatásnak is nevezni.

A diszperziós kölcsönhatás alapja, hogy egy molekula (vagy atom) elektronjai folyamatos véletlenszerű (rezgő) mozgást végeznek, így még az apoláris molekulákban is létrejön kismértékű polarizáció. Az így létrejött pillanatszerű polarizáltság a szomszédos apoláris molekulát polarizálja (hasonlóan a dipólus-indukáltdipólus kötés létrejöttéhez). Tehát önmagában az apoláris molekulák esetén is létrejöhet pillanatszerű aszimmetrikus töltéseloszlás, indukált polarizáció (megjegyzés: az apoláris jelleg viszont időben kiátlagolódik, és így összességében nem tapasztalunk dipólusjelleget). A keletkezett gyengén polarizált molekulák között elektrosztatikus vonzóerő jön létre, melynek eredménye a gyenge diszperziós kölcsönhatás.



3.1.2.4. ábra: A diszperziós kölcsönhatás

A másodrendű kötések növekvő erősség szerinti sorrendje:

Diszperziós (London-) kölcsönhatás	<	Dipólus-indukáltdipólus kölcsönhatás	<	Dipólus-dipólus kölcsönhatás	<	Hidrogén- kötés
--	---	---	---	---------------------------------	---	--------------------

3.1.3. Gyakorlókérdések

1. Mit mond ki az oktettelv (vagy másképp oktettszabály)?
2. Mi az elsőrendű és a másodrendű kémiai kötés?
3. Mi a különbség a homonukleáris és a heteronukleáris kémiai kötés között?
4. Definiálja az ionos kötést! Milyen elemek között jellemző ez a kötésforma?
5. Definiálja a fémes kötést! Milyen elemek között jellemző ez a kötésforma?
6. Definiálja a kovalens kötést! Milyen elemek között jellemző ez a kötésforma?

7. Mit jelent, ha egy kovalens kötés poláris vagy apoláris?
8. Miért nem teljesül az oktettszabály a hidrogén esetén?
9. A bór-trifluoridot (BF_3) elektronhiányos vegyületeként szokták emlegetni. Miért?
10. Mi a különbség a kolligációs és a datív kovalens kötés között?
11. Hogyan jellemezhető a kovalens kötés erőssége?
12. Definiálja a következő fogalmakat: kötéshossz, kötési energia!
13. Két elem elektronegativitása alapján hogyan becsülhető meg, hogy ezen elemek atomja között milyen típusú (elsőrendű) kémiai kötés jöhet létre?
14. Mi a magános elektronpár? Nevezzen meg néhány molekulát, melyben valamely atom rendelkezik magános elektronpárral?
15. Hogyan definiálná a kettős kötetést és a hármas kötetést? Mi a σ - és a π -kötés? Soroljon fel néhány molekulát, melyben kettős, illetve hármas kötés található!
16. Sorolja fel a másodrendű kötés fajtáit, hasonlítsa össze őket a fizikai jelenség, illetve a kötése erősség szempontjából!
17. Mi a különbség a dipólus-dipólus, a dipólus-indukált dipólus és diszperziós kötések között?
18. Milyen kötés jöhet létre a következő vegyületek molekulái között?
 - a. víz (H_2O),
 - b. kloroform (más néven triklórmétán, CHCl_3),
 - c. metán (CH_4),
 - d. jód (I_2),
 - e. hidrogén-fluorid (HF),
 - f. kén-dioxid (SO_2),
 - g. argon (Ar)
 - h. hidrogén-jodid (HI).

3.2. A molekulák alakja

3.2.1. A molekulageometria

A molekulák elektronszerkezete és alakja között szoros összefüggés áll fenn. Tehát mielőtt egy molekula szerkezetét felrajzolnánk, fontos átgondolni, hogy a molekulában milyen kötések találhatóak. Az elektronok negatív töltésük folytán taszítják egymást, így a molekula elektronpárjai egymástól a lehető legtávolabb szeretnének elhelyezkedni.

A molekulák szerkezetét a vegyérték-elektronpárok határozzák meg: a kötő és magános elektronpárok úgy helyezkednek el, hogy távolságuk maximális legyen.

Fontos megállapítások:

- a kettős kötések térigénye nagyobb, mint az egyes kötéseké, a hármas kötéseké pedig nagyobb, mint a kettős kötéseké.
- a magános elektronpárok térigénye általában nagyobb, mint a kötő elektronpároké.

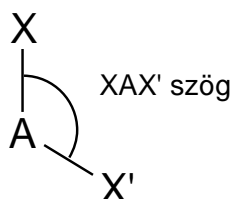
Ha egy molekula szerkezetét (geometriáját) szeretnénk meghatározni, az első lépés megállapítani, hogy hány kötő és magános elektronpárral rendelkeznek az egyes atomok, és hogy a kötő elektronpárok hánszoros kötéssel kapcsolják össze az egyes atomokat.

A központi atomot A-val, a hozzá kapcsolódó atomot X-szel, a központi atom magános elektronpárját pedig E-vel szokás jelölni.

A központi atomhoz kapcsolódó atomot vagy atomcsoportot **ligandumnak** nevezzük.

Kötéstávolság vagy **kötéshossz**: a kötést létesítő két atommag közötti távolság.

Kötésszög: a ligandumok atommagját és a központi atom atommagját összekötő szakaszok által bezárt szög. (A kötésszög 180° -nál nem lehet nagyobb értékű.) XAX' kötésszög az ábra alapján:

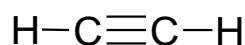


Bármely egyszerű biner (két elemből álló) molekulát felírhatunk AX_nE_m alakban. (Az X jelölhet általános ligandumot is, tehát nem biztos, hogy azonos ligandumokról van szó. A továbbiakban azon molekulákkal foglalkozunk, melyek központi atomja körül azonos ligandumok találhatók).

A **molekula alakján** vagy **geometriáján** a ligandumok atommagjai által meghatározott geometriai alakzatot értjük.

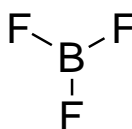
Lineáris molekula: egy három- vagy többatomos molekula lineáris, ha minden atommagja ugyanarra az egyenesre esik. (A kétatomos molekulák esetén az atommagok mindig egy egyenesre esnek, itt nincs értelme linearitásról beszélni.)

Erre egy példa az acetilén- (etin-) molekula:



Sík vagy planáris molekula: minden atomja egy síkba esik.

Például a korábban említett bór-trifluorid síkmolekula, mivel az összes atomja egy síkban található, az FBF kötésszögek 120° -osak, és a három F–B–F kötésszög összege kiadja a teljes szöveget (360°).



3.2.2. A molekulák polaritása

Már a kémiai kötésekkel foglalkozó fejezet elején említettük az apoláris és a dipólusmolekula fogalmánál, hogy a molekula polaritása szempontjából nemcsak a kötések polaritása számít, hanem azok térbeli elrendeződése is.

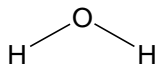
Azon molekula, melyben csak apoláris kötések találhatóak, az mindig apoláris. A poláris kötések tartalmazó molekula lehet apoláris vagy dipólusmolekula: ha a kötések dipólusvektorainak eredője nullvektor, a molekula apoláris, ha a dipólusvektorainak eredője nem zérus vektor, a molekulának van eredő dipólusa, tehát dipólusmolekuláról van szó.

Ezt szemléltessük is egy-két példával:

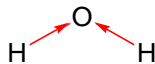
Szénhidrogének: olyan vegyületek, melyek csak szén- és hidrogénatomot tartalmaznak. Néhány példa: metán (CH_4), etán ($\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$), propán ($\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$), etilén ($\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$), acetilén

($\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$), benzol (C_6H_6). A szén és hidrogén elektronegativitása között nincs nagy különbség ($\Delta\text{EN} = 0,4$), ezért a C–H kötések apolárisnak tekinthetők. A kötések elrendeződésétől függetlenül az összes szénhidrogén apoláris molekulájú.

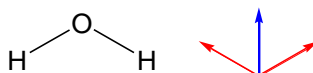
Víz: képlete H_2O . Az oxigén és hidrogén elektronegativitása igen eltérő ($\Delta\text{EN} = 1,4$), ezért a H–O kötések polárisak. Mint a későbbiekben látjuk majd, a víz molekulája V-alakú:



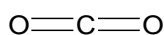
Rajzoljuk be a dipólusvektorokat!



A dipólusvektorok eredője (kék nyíllal jelölve) *nem nullvektor*, ezért a víz *dipólusmolekula*:



Szén-dioxid: képlete CO_2 , egy szénatomhoz két oxigén kapcsolódik. A szén és oxigén elektronegativitása között viszonylag jelentős a különbség ($\Delta\text{EN} = 1,0$), ezért a C–O kötések polárisak. A szénnek nincsen magános elektronpárja, ezért a két ligandum úgy helyezkedik el, hogy az OCO kötésszög 180° legyen:



A dipólusvektorokat berajzolva azt tapasztaljuk, hogy azok *eredője nullvektor*. A szén-dioxid – noha kötései polárisak – *apoláris molekula*.



A molekulák szerkezete alapján a molekula polaritása megbecsülhető. A továbbiakban azt is megvizsgáljuk, hogy egy adott molekulageometria esetén a molekula apoláris, vagy dipólusmolekula.

Megjegyzés: a szimmetria a molekulák szerkezetében igen fontos jellemző. A szimmetria és a molekula polaritása között szoros összefüggés áll fenn. Viszont az helytelen megállapítás, hogy a szimmetrikus molekulák mindig apolárisak. Vegyük például a vízmolekulát! Szerkezete szimmetrikus, ám mégis dipólusmolekula. Egy *bizonyos* szimmetria szükséges ehhez, nem elegendő bármilyen szimmetria. Például, ha egy molekulában van inverziós centrum, akkor az a molekula apoláris. Az inverziós centrum egy olyan pont, melyre középpontosan tükrözve a molekulát, az eredeti molekulával azonos geometriát kapunk. A vízmolekula szerkezete nem rendelkezik inverziós centrummal, a szén-dioxid-molekula viszont igen: a szénatom (atommagja) az inverziós centrum, erre középpontosan tükrözve a molekulát, önmagát kapjuk vissza. Ehhez hasonlóan az etilén is rendelkezik inverziós centrummal: a két szénatomot összekötő egyenes felezőpontjában. Ebből is látható, hogy az inverziós centrum nem szükségszerűen azonos a molekula valamely atomjával.

3.2.3. Egyszerű molekulák szerkezete

Most vizsgáljuk meg, hogy a fenti szabályokat figyelembe véve, adott n és m értékek esetén, milyen szerkezetű lesz az AX_nE_m általános képlettel rendelkező molekula. Az egyszerűség kedvéért a molekula minden liganduma azonos. (Értelemszerűen az n index 1-nél nagyobb egész, m lehet 0, vagy pozitív egész szám. A és X jelölheti akár ugyanazt az elemet is.)

❖ $n = 1, m =$ tetszőleges: AX_1E_m

A molekula két atomból áll összesen, így atommagjaik biztosan egy vonalra esnek. (Természetesen tetszőleges számú magános elektronpár kapcsolódhat bármelyik atomhoz.)

A molekula lehet apoláris, vagy dipólusmolekula, attól függően, hogy az A–X kötés apoláris, vagy poláris.

Példa: HCl, F₂, O₂, N₂, CN⁻.

Magános párral nem rendelkező központi atomú molekulák (AX_n, m = 0)

❖ n = 2, m = 0: AX₂E₀

A molekula központi atomja körül két elektronpár található, melyek közül mindkettő kötő elektronpár. Ezek úgy tudnak legtávolabb kerülni egymástól (taszításuk következtében), ha az XAX' kötésszög 180°.

Ebben az esetben az AX₂ molekula geometriája **lineáris**.

Az ilyen szerkezetű molekula apoláris (amennyiben csak egyféle ligandum kapcsolódik hozzá).

Példa: CO₂, BeF₂.

❖ n = 3, m = 0: AX₃E₀

A molekula központi atomjához három ligandum kapcsolódik, ennek a három elektronpárnak kell egymástól a lehető legtávolabb elrendeződniük. Ez úgy teljesül, ha a központi atom és a három kapcsolódó ligandum ugyanabban a síkban helyezkedik el. (Állandó A–X kötéstávolságok esetén bármely atomot kimozdítva a síkból, az atomok egy része közeledik egymáshoz!) Mindhárom A–X kötés ugyanolyan hosszú.

Az ilyen elrendeződést szabályos **háromszög** vagy **trigonális planáris** geometriájúnak nevezzük (a ligandumok a szabályos háromszög csúcspontjai). A trigonális szó jelentése háromszöges.

A háromszög alakú molekula apoláris (amennyiben csak egyféle ligandum kapcsolódik hozzá).

Példa: BF₃, SO₃, NO₃⁻, CO₃²⁻, BO₃³⁻.

❖ n = 4, m = 0: AX₄E₀

A négy kötő elektronpár térben úgy helyezkedik el egymástól legtávolabb, ha a központi atomot egy tetraéder középsébe helyezzük, a ligandumok pedig a tetraéder négy csúcsában helyezkednek el. A szimmetria következtében minden A–X kötés egyforma hosszú.

A molekula geometriája **tetraéderes**.

Ha egy molekula tetraéderes szerkezetű, akkor apoláris (ha csak egyféle ligandumok kapcsolódnak hozzá, pl. CCl₄ – szén-tetraklorid esetén).

Példa: CH₄, SO₄²⁻, PO₄²⁻.

❖ n = 5, m = 0: AX₅E₀

Az öt elektronpárból három egy síkban rendeződik el háromszög alakban, a másik két elektronpár pedig a sík alatt, illetve fölött helyezkedik el. Az öt A–X kötésből három eltér a másik kettőtől, eltérő környezetben található, így ezen kötések hossza általában eltér a másik két kötés hosszától.

A háromszög síkjában található ligandumok pozícióját **ekvatoriálisnak**, míg az erre merőlegeseket pedig **axiálisnak** (vagy **apikálisnak**) nevezzük.

Két egymás melletti, ekvatoriális helyzetben lévő ligandum közötti kötésszög 120°, míg egy axiális és egy ekvatoriális ligandum között 90°-os a kötésszög.

Az így keletkező szerkezet olyan, mintha két háromszög alapú piramist egy lapjukon összeillesztenénk, ezért az ilyen molekulageometria elnevezése **háromszög alapú bipiramis** vagy **trigonális bipiramis**.

Az ilyen kötéselrendeződés esetén a dipólusvektorok eredője nullvektor, a molekula apoláris.

Példa: PF₅, AsCl₅.

Megjegyzés: öt ligandum nemcsak háromszög alapú piramis alakban rendeződhet el, hanem lehetséges egy másfajta elrendeződés is, melynek neve **négyzet alapú piramis** vagy **tetragonális piramis**. Ekkor a ligandumok egy négyzet alapú egyenes gúla csúcsaiban foglalnak helyet.

Rendszerint a trigonális bipiramisos elrendeződés energetikailag kedvezőbb, mint a tetragonális piramisos.

❖ **$n = 6, m = 0: AX_6E_0$**

A hat elektronpár térben úgy helyezkedik el egymástól legtávolabb, ha a központi atomot egy oktaéder középsébe, a ligandumokat pedig az oktaéder hat csúcsába helyezzük. Az összes A–X kötés hossza azonos. Két egymás melletti X és X' ligandum esetén az XAX' szög 90°-os.

Az ilyen elrendeződést **oktaédes** geometriának nevezzük.

Ha egy molekula alakja oktaéder, akkor nem lehet dipólusmolekula.

Példa: SF₆, PF₆⁻.

❖ **$n = 7, m = 0: AX_7E_0$**

Az alábbiakban csak a legjellegzetesebb geometria kialakulását – elsősorban érdekességként – tárgyaljuk. A hét elektronpárból öt egy síkban, egy szabályos ötszög csúcsainak irányában helyezkedik el. A központi atom az ötszög középpontjában található, a hozzá kapcsolódó öt ligandum pedig az ötszög csúcsaiban. A fennmaradó két ligandum az ötszög síkja felé és alá kerül úgy, hogy ezen két ligandum és a központi atom egy egyenesbe esik. A molekulában kétféle kötéshosszt figyelhetünk meg általában, az ötszög síkjában található kötések és a másik két kötés általában nem egyforma hosszúságú.

A keletkező molekula geometriáját **ötszög alapú bipiramisnak** vagy **pentagonális bipiramisnak** nevezzük.

A szimmetrikus elrendeződés következtében a dipólusvektorok eredője nullvektor, így a molekula apoláris.

Példa: IF₇.

❖ **$n = 8, m = 0: AX_8E_0$**

Csak az érdekesség és teljesség kedvéért említjük meg ezt az elrendeződést, rendkívül ritka. A nyolc kötő elektronpár egy **négyzetes antiprizma** csúcsain helyezkedik el. A négyzetes antiprizma úgy állítható elő, ha egy négyzet alapú egyenes hasáb alapját és fedőlapját egymáshoz képest 45°-ban elforgatjuk.

A molekula apoláris, mivel a dipólusvektorok eredője nullvektor.

Példa: XeF₈²⁻.

Miután megbirkóztunk az egyszerűbb, magános elektronpárt nem tartalmazó molekulák szerkezetével, most vizsgáljunk bonyolultabb eseteket, ahol a kötő elektronpárok mellett magános elektronpárok is találhatóak a központi atom vegyértékhéján!

❖ **$n = 2, m = 1: AX_2E_1$**

A molekula központi atomja körül három elektronpár található, melyek közül kettő kötő elektronpár. A három elektronpár esetén az ideális elrendeződés háromszög alakú, a háromszög két csúcsába kerül egy-egy ligandum.

A magános elektronpárt tartalmazó háromatomos AX₂E molekula geometriáját **hajlottnak** vagy **V-alakúnak** nevezzük.

Amennyiben az A–X kötés poláris, a V-alakú molekula dipólusmolekula.

Példa: SO₂, NO₂⁻.

❖ $n = 2, m = 2: AX_2E_2$

Négy elektronpár (két kötő, két magános) található a molekula központi atomja körül, ezek tetraéderesen rendeződnek. A tetraéder két csúcsába kerül egy-egy ligandum, a másik két csúcs irányába a magános párok mutatnak.

A két magános elektronpárral rendelkező háromatomos molekulák geometriája az előző ponthoz hasonlóan **hajlott** vagy **V-alakú**.

Az ilyen geometriájú molekula poláris, ha az A–X kötés poláris.

Példa: H_2O, H_2S .

❖ $n = 2, m = 3: AX_2E_3$

Összesen öt elektronpár (két kötő, három magános) található a molekula központi atomja körül, így trigonális bipiramisos elrendeződésre számítunk. A magános elektronpárok térigénye általában nagyobb, mint a ligandumoké, így ezek foglalják el a háromszög síkjában található ekvatoriális pozíciókat, a két ligandum pedig a sík alá és fölé kerül. Az XAX' szög így 180° -os, tehát a molekula geometriája **lineáris**.

A molekula apoláris (lásd az AX_2 esetet).

Példa: XeF_2, I_3^- .

Megjegyzés: érdemes átgondolni, miért is kerül a nagyobb térigényű csoport az ekvatoriális pozícióba! Egy trigonális bipiramisos elrendeződésű modell esetén legyen az axiális ligandum X_{ax} , az ekvatoriális ligandum pedig X_{ekv} . Mivel az $X_{ekv}-A-X'_{ekv}$ kötésszög 120° , az $X_{ax}-A-X_{ekv}$ kötésszög pedig csak 90° , két ekvatoriális pozícióban elhelyezkedő ligandum közötti távolság kisebb, mint egy axiális és egy ekvatoriális pozícióban elhelyezkedő ligandum között. Ezért a nagyobb térigényű csoport – hogy a többi ligandumtól a legtávolabb helyezkedjen el, az ekvatoriális pozícióba kerül.

❖ $n = 3, m = 1: AX_3E_1$

Ebben az esetben négy elektronpár (három kötő, egy magános) található a molekula központi atomja körül, így ezek tetraéderesen rendeződnek. A tetraéder három csúcsán található ligandum, így ezek egy síkba esnek. A magános elektronpár nagyobb térigénye folytán az XAX' általában kisebb a tetraéderben lévénél (azaz $109,5^\circ$ -nál).

A molekula geometriája **háromszög alapú piramisos** vagy **trigonális piramisos**.

Poláris A–X kötés esetén a molekula poláris.

Példa: NH_3, PF_3 .

❖ $n = 3, m = 2: AX_3E_2$

Az elektronpárok száma: három kötő, és két magános, összesen öt elektronpár, mely trigonális bipiramis alakzatot vesz fel. A magános elektronpároknak nagyobb a térigényük, ezért ezek az ekvatoriális pozíciókba kerülnek. A három ligandum közül kettő axiális helyzetben van, a harmadik pedig ekvatoriálisban.

A molekula szerkezete **T-alakú**.

Amennyiben az A–X kötések polárisak, a molekula dipólusmolekula.

Példa: ClF_3 .

❖ $n = 4, m = 1: AX_4E_1$

Az öt elektronpárból négy kötő és egy magános, ismét trigonális bipiramis alakzatot vesz fel. A magános elektronpár ebben az esetben is ekvatoriális pozícióba kerül. A négy ligandum közül kettő axiális helyzetben van, a másik kettő pedig ekvatoriálisban.

A molekula geometriáját **mérleghinta alakúnak** nevezzük (ritkábban torzult tetraédernek is nevezik).

Mivel a dipólusvektorok eredője nem nullvektor, a molekula poláris, ha az A–X kötés poláris.

Példa: SF₄.

❖ **n = 4, m = 2: AX₄E₂**

A központi atomhoz összesen hat elektronpár kapcsolódik: négy kötő és két magános, ezek oktaéderesen rendeződnek el. A magános elektronpárok két, egymással ellentétes pozíciót foglalnak el, hogy taszításukat csökkentse. A többi négy ligandum négyzet alakban rendeződik el.

Az ilyen molekula geometriája **négyzetes** vagy **tetragonális planáris**.

A molekula apoláris (még poláris A–X kötések esetén is).

Példa: XeF₄.

❖ **n = 5, m = 1: AX₅E₁**

Összesen hat elektronpár kapcsolódik központi atomhoz, ezek ismét oktaéderesen rendeződnek el. Az oktaéder egyik csúcsába kerül a magános elektronpár.

A molekula **négyzetes piramisos** vagy **tetragonális piramisos** szerkezetű.

Poláris A–X kötés esetén a molekula poláris.

Példa: BrF₅.

❖ **n = 6, m = 1: AX₆E₁**

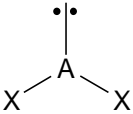
A központi atomon hét elektronpár található, ezek pentagonális bipiramis alakba rendeződnek, ennek az ötszög síkja alatti (vagy feletti) csúcsába kerül a magános elektronpár.


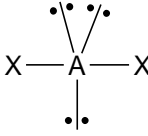
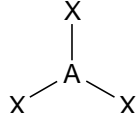
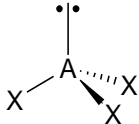
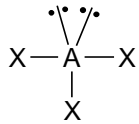
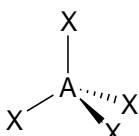
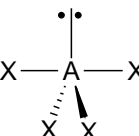
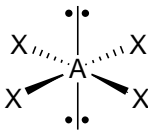
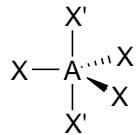
A molekula **ötszög alapú piramisos** vagy **pentagonális piramisos** szerkezetű.

A molekula poláris, ha az A–X kötés poláris.

Példa: XeF₆.

Az alábbi táblázatban a különféle alapmolekulák szerkezetét foglaltuk össze:

n	m	Képlet	Elektronpárok elrendeződése a központi atom körül	Molekula alakja	Kötésszögek	Polaritás (ha A–X kötés poláris)	Példa
1		AX			A—X	poláris	HCl
2	0	AX ₂	lineáris	lineáris	X—A—X XAX: 180°	apoláris	CO ₂
	1	AX ₂ E	trigonális planáris	hajlott vagy V-alakú		poláris	SO ₂

	2	AX_2E_2	tetraéderez	hajlott vagy V-alakú		poláris	H_2O
	3	AX_2E_3	trigonális bipiramis	lineáris	 XAX: 180°	apoláris	XeF_2
3	0	AX_3	trigonális planáris	trigonális planáris	 XAX: 120°	apoláris	BF_3
	1	AX_3E	tetraéderez	trigonális piramis		poláris	NH_3
	2	AX_3E_2	trigonális bipiramis	T-alakú		poláris	BrF_3
4	0	AX_4	szabályos tetraéderez	szabályos tetraéderez	 XAX: $109,5^\circ$	apoláris	CH_4
	1	AX_4E	trigonális bipiramis	mérleghinta		poláris	SF_4
	2	AX_4E_2	oktaéderez	négyzetes	 XAX: 90°	apoláris	XeF_4
5	0	AX_5	trigonális bipiramis	trigonális bipiramis		apoláris	PF_5

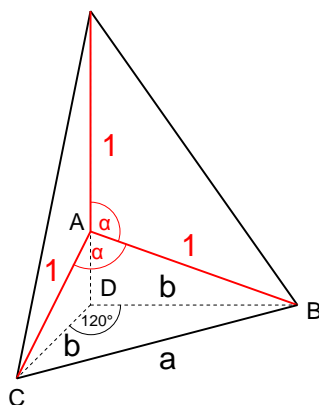
					XAX: 120° XAX': 90°		
	1	AX ₅ E	oktaéderes	tetragonális piramis		poláris	BrF ₅
6	0	AX ₆	oktaéderes	oktaéderes		apoláris	SF ₆
	1	AX ₆ E	pentagonális bipiramis	pentagonális piramis		poláris	XeF ₆
7	0	AX ₇	pentagonális bipiramis	pentagonális bipiramis		apoláris	IF ₇
8	0	AX ₈	tetragonális antiprizma	tetragonális antiprizma		apoláris	XeF ₈ ²⁻

Az alábbi animációban a molekulák térszerkezete jól megfigyelhető:



3.2.2.1. animáció: A molekulák térszerkezete

Megjegyzés: a legtöbb szimmetrikus szerkezetű egyszerű molekula kötésszögeit könnyen kiszámíthatjuk. A szabályos tetraéderes elrendezéshez tartozó kötésszög is kiszámítható trigonometriai összefüggésekkel, mint ahogy az érdeklődő Olvasónak az alábbiakban bemutatjuk. Vegyünk egy olyan szabályos tetraéderes szerkezetű molekulát, melyben a kötéshosszak egységnyiek!



3.2.3.1. ábra: Tetraéderes elrendeződés

A b szakasz hossza (egységnyi kötőszög esetén) az ABD derékszögű háromszögből:

$$b = 1 \cdot \sin(180^\circ - \alpha) = 1 \cdot \sin \alpha = \sin \alpha.$$

Az „ a ” oldal hosszára két koszinusztételt is felírhatunk:

Az ABC háromszögre:

$$a^2 = 1^2 + 1^2 - 2 \cdot 1 \cdot 1 \cdot \cos \alpha = 2 - 2 \cdot \cos \alpha.$$

A BCD háromszögre:

$$a^2 = b^2 + b^2 - 2 \cdot b \cdot b \cdot \cos 120^\circ = 2 \cdot \sin^2 \alpha - 2 \cdot \sin^2 \alpha \cdot \left(-\frac{1}{2}\right) =$$

$$a^2 = 2 \cdot \sin^2 \alpha + \sin^2 \alpha = 3 \cdot \sin^2 \alpha.$$

Ebből következik, hogy

$$2 - 2 \cdot \cos \alpha = 3 \cdot \sin^2 \alpha,$$

$$2 - 2 \cdot \cos \alpha = 3 - 3 \cdot \cos^2 \alpha,$$

$$3 \cdot \cos^2 \alpha - 2 \cdot \cos \alpha - 1 = 0,$$

$$\cos \alpha = 1 \text{ és } \cos \alpha = \left(-\frac{1}{3}\right).$$

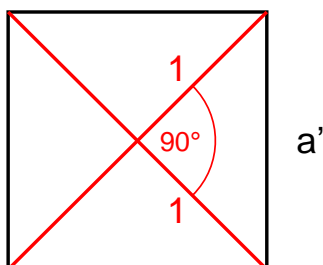
Az első gyökből $\alpha = 0^\circ$, a másodikból pedig $\alpha = 109,471^\circ \approx 109,5^\circ$.

Négy ligandum esetén (AX_4) valószínűleg sokaknak az jut eszébe először, hogy – a háromszöges elrendeződéshez hasonlóan (AX_3) – a négy ligandum egy síkban, egy négyzet csúcsain helyezkedik el egymástól legtávolabb. Érdekes megvizsgálni azt a kérdést is, hogy négy ligandum esetén miért kedvezőbb a szabályos tetraéderes geometria, mint a négyzetes elrendeződés. A központi atom és a ligandum közötti távolságot mindkét esetben egységnyiinek tekintjük.

A fenti esetben a szabályos tetraéder két csúcsának távolsága (azaz két pontszerű ligandum távolsága):

$$a^2 = 3 \cdot \sin^2 \alpha = 3 \cdot (1 - \cos^2 \alpha) = 3 \cdot \left[1 - \left(-\frac{1}{3} \right)^2 \right] = \frac{8}{3} \Rightarrow a = \frac{2 \cdot \sqrt{2}}{\sqrt{3}} \approx 1,633.$$

Négyzetes elrendeződés esetén a következő geometriát kapjuk:



3.2.3.2. ábra: Négyzetes elrendeződés

Ebben az esetben két ligandum közötti távolság: a' , melynek értéke $a' = \sqrt{2} \approx 1,414$.

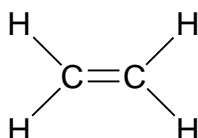
Jól látható, hogy szabályos tetraédes elrendeződés esetén a ligandumok távolabb helyezkednek el egymástól ($a = 1,633$), mint a négyzetes geometria esetén ($a' = 1,414$ egység). Ebből is szépen látszik az összefüggés, hogy minél nagyobb egy kötőszög, a két ligandum annál távolabb helyezkedik el egymástól.

3.2.4. Összetettebb molekulák szerkezete

A következőkben néhány példát mutatunk be összetettebb molekulák szerkezetére. Ezekben nem egyforma ligandumok kapcsolódnak központi atomhoz.

Etilén (etén)

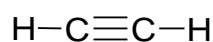
Az etilén képlete C_2H_4 . A két szénatom között kettős kötés van, a szénatomok körül három ligandum helyezkedik el (egy szén és két hidrogén), ezek háromszög alakban rendeződnek. Mivel a kettős kötés térigénye nagyobb, mint az egyes kötésé, a HCH-kötőszög kisebb, mint a HCC-kötőszög:



Az etilénmolekula apoláris, mivel minden kötése apoláris. Megjegyezzük, ha az összes hidrogént lecseréljük négy olyan azonos atomra, hogy a kötés polárisra váljon (például fluor), az így keletkező molekula is apoláris, mivel a dipólusvektorok eredője nullvektor.

Acetilén (etin)

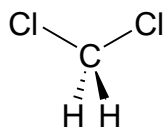
Képlete: C_2H_2 , a szénatomok között hármas kötés helyezkedik el. A szénatom körül két ligandum van (egy szén és egy hidrogén) \Rightarrow lineáris geometria.



Az acetilén – a többi szénhidrogénhez hasonlóan – apoláris molekulájú.

Diklór-metán

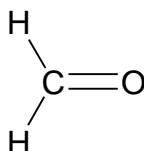
A diklór-metán képlete CH_2Cl_2 . A négy ligandum tetraéderesen rendeződik a szénatom körül. A klóratomoknak nagyobb a térigényük, mint a hidrogéneké, ezért a szerkezet *libikóka alakú* vagy *torzult tetraéder*.



A molekula poláris, mivel a C–Cl kötések polárisak, és a dipólusvektorok eredője nem zérusvektor. (Megjegyzés: a molekula szimmetrikus, ám mégis poláris. Gyakran tévesen azt nevezik dipólusmolekulának, melyben a poláris kötések aszimmetrikusan helyezkednek el. Itt látható, hogy a kötések szimmetrikusan helyezkednek el, viszont a dipólusvektorok nem oltják ki egymást.)

Formaldehid:

A formaldehid összegképlete $\text{H}_2\text{C}=\text{O}$. A központi szénatomhoz három ligandum kapcsolódik, ez háromszög alakban rendeződnek a szén köré. A molekula mind a négy atomja egy síkban helyezkedik el, a szén és oxigén atomok között kettős kötés van.



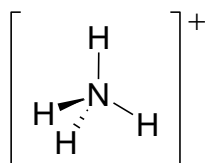
A molekulában a C–H kötés pedig apoláris, a C–O kötés poláris, ezért a formaldehid egy dipólusmolekula.

3.2.5. Összetett ionok szerkezete

Az összetett ionok alakját ugyanazok a hatások befolyásolják, mint a semleges molekulák esetében. Az összetett ionok rendszerint delokalizált elektronrendszerrel rendelkeznek, ezért a ligandumok száma határozza meg az alakjukat.

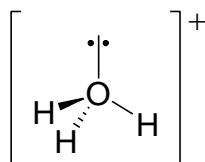
Ammóniumion (NH_4^+)

Mint korábban már említettük, az ammóniumion úgy keletkezik, hogy az ammóniához adunk egy H^+ -iont (protont), mely datív kötést létesít a nitrogénatom magános párjával. A négy hidrogén teljesen egyenértékű (minden N–H kötés egyenlő hosszú), ezért az ammóniumion *szabályos tetraéder* szerkezetű (a metánhoz hasonlóan).



Oxóniumion (H_3O^+)

Az oxóniumion a vízmolekula protonálásával keletkezik, a víz egyik magános párja és a H^+ -ion között létesül datív kötés, a három O–H kötéshossz egyforma. Mivel van egy magános elektronpárja is, a négy elektronpár tetraéderesen rendeződik el, így az oxóniumion szerkezete *trigonális piramis* (háromszög alapú piramis).

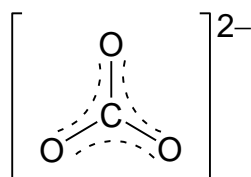


Karbonátion (CO_3^{2-})

A karbonátion a szénsavból vezethető le úgy, hogy két H^+ -ionját (protonját) eltávolítjuk:

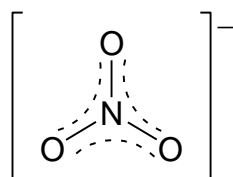


A keletkező karbonátion delokalizált elektronrendszerrel rendelkezik, szerkezete *szabályos háromszög* vagy *trigonális planáris* alakú (így kerülnek a lehető legtávolabb egymástól az oxigének):



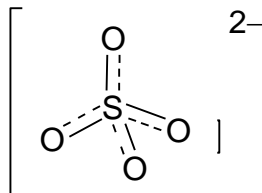
Nitrátion (NO_3^-)

A salétromsavból (HNO_3) egy H^+ -ion eltávolításával keletkező nitrátion a karbonátionhoz hasonlóan szintén *szabályos háromszög* vagy *trigonális planáris* alakú, elektronrendszere delokalizált:



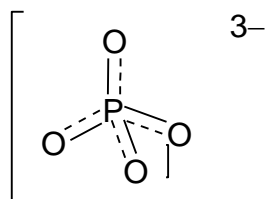
Szulfátion (SO_4^{2-})

A kénsav (H_2SO_4) kétértékű sav, mely azt jelenti, hogy két protont tudunk eltávolítani belőle, ekkor szulfátion keletkezik (SO_4^{2-}). A szulfátionban a négy oxigén úgy tud egymástól a legtávolabb elhelyezkedni, ha szabályos tetraéderesen rendeződnek, így az ion szerkezete *szabályos tetraéder*. A szulfátionban a π -elektronok delokalizálódnak.



Foszfátion (PO_4^{3-})

A foszforsav (H_3PO_4) háromértékű sav, belőle három H^+ -iont (protont) lehet eltávolítani. Így keletkezik a foszfátion (PO_4^{3-}). Négy egyenértékű oxigénatom szabályos tetraéderesen rendeződik a foszforatom körül, a foszfátion szerkezete így *szabályos tetraéder*, elektronszerkezete delokalizált.



3.2.6. Gyakorlókérdések, -feladatok

19. Hogyan állapítja meg egy adott egyszerű molekula felírását AX_nE_m alakban?
20. Mit nevezünk ligandumnak?
21. Definiálja a kötéshosszt és a kötésszöget!
22. Milyen szempontokat kell figyelembe venni, ha egy molekula alakját szeretnénk meghatározni?
23. Milyen esetben apoláris egy molekula?
24. Milyen feltételeknek kell teljesülniük ahhoz, hogy egy molekulát dipólusmolekulának nevezhessünk?
25. A szén-tetrakloridban (CCl_4) a C–Cl kötések polárisak, ám a kísérleti tapasztalatok szerint molekula mégis apoláris. Miért?
26. Mikor mondjuk egy molekulára, hogy az lineáris szerkezetű?
27. Mikor mondjuk egy molekulára, hogy az sík szerkezetű?
28. Milyen esetekben lehet egy molekula szerkezete lineáris? Soroljon fel néhány példát!
29. Milyen esetekben lehet egy molekula sík szerkezetű? Ismertessen néhány példát is!
30. Egy molekula központi atomjához két másik atom kapcsolódik, a központi atomnak lehet(nek) magános elektronpárja(i) is. Milyen lehet ennek a molekula szerkezete? Említsen mindegyik esetre egy-egy példát!
31. Állapítsa meg a következő vegyületek molekuláinak szerkezetét! Apoláris, vagy dipólusmolekulákról van szó?
 - a. nitrogén (N_2),
 - b. metán (CH_4),
 - c. klórmetán (CH_3Cl),
 - d. etilén (C_2H_4),
 - e. acetilén (C_2H_2),
 - f. ammónia (NH_3),
 - g. víz (H_2O),
 - h. kén-hidrogén (H_2S),
 - i. klór (Cl_2),
 - j. szén-dioxid (CO_2),
 - k. kén-dioxid (SO_2),
 - l. kén-trioxid (SO_3),
 - m. foszfor-pentaklorid (PCl_5).
32. Állapítsa meg a következő összetett ionok szerkezetét!
 - a. oxóniumion (H_3O^+),
 - b. ammóniumion (NH_4^+),
 - c. karbonátion (CO_3^{2-}),
 - d. foszfátion (PO_4^{3-}),
 - e. nitrátion (NO_3^-),
 - f. szulfátion (SO_4^{2-}).

4. HALMAZOK, HALMAZÁLLAPOTOK

Ebben a fejezetben az anyagok összetételével, megjelenési formáikkal, a különböző halmazállapotokkal és halmazállapot-változásokkal foglalkozunk.

4.1. Alapfogalmak: elemek, vegyületek, keverékek

Kémiai elemek: azonos rendszámú atomokból felépülő anyagok. Vegyjellel jelöljük őket.

Példák: foszfor (P), réz (Cu), kálium (K), oxigén (O), bróm (Br) stb.

Az elemek az atomokat összetartó kölcsönhatások alapján lehetnek:

- atomos: a nemesgázok – lezárt elektronhéjuk következtében – atomos felépítésűek. A nemesgázatomok között legfeljebb diszperziós kölcsönhatás jöhet létre.
Például: hélium (He), neon (Ne), argon (Ar) stb.
- kovalens kötéssel összekapcsolva:
 - molekuláris: két vagy több azonos atomból felépülő elemmolekulák. Az ilyen molekulákat homonukleáris molekuláknak is nevezzük (homonukleáris: azonos atommagokból felépülő). Az elemmolekulák ezért mindig apolárisak.
Néhány példa elemmolekulára: O_2 , Cl_2 , N_2 , P_4 , S_8 , C_{60} stb.
 - atomok háromdimenziós rendeződése erős kovalens kötéssel összekötve.
Például: gyémánt (C), vörösfoszfor (P), szilícium (Si) stb.
- fémes kötéses elemek:
Például: nátrium (Na), ólom (Pb), réz (Cu) stb.

Vegyületek: elemeket meghatározott arányban tartalmazó anyagok, az egyes elemek arányát egész számokkal fel lehet írni. A vegyületeket képletükkel jellemezzük. A képlet vegyjelek kombinációja, melyben az arányokat kifejező számokat az adott vegyjel jobb alsó indexébe írjuk: $A_aB_bC_c\dots$

Példák: HCl (sósav), CH_3OH (metanol), $MgCl_2$ (magnézium-klorid), $Al_2(SO_4)_3$ (alumínium-szulfát), Na_3PO_4 (trinátrium-foszfát) stb.

A vegyületek atomjait is többféle kötés tarthatja össze:

- kovalens kötés:
 - molekuláris: két vagy több különböző atomból épülnek fel, heteronukleáris molekuláknak nevezzük (heteronukleáris: különböző atommagokból felépülő). Lehetnek polárisak, vagy apolárisak.
Néhány példa: CO_2 (szén-dioxid), HCl (hidrogén-klorid), SO_3 , (kén-trioxid) P_4O_6 , (tetrafoszfor-hexaoxid) stb.
 - atomok háromdimenziós rendeződése erős kovalens kötéssel összekötve.
Például: SiO_2 (szilícium-dioxid) stb.
- ionos kötés:
Például: nátrium-klorid ($NaCl$), kálium-szulfát (K_2SO_4), kalcium-oxid (CaO) stb.
- esetleg fémes kötés: viszonylag ritka, de vannak olyan fémekből felépülő anyagok, melyek pontos összetétellel rendelkeznek.
Például: Ni_3Al stb.
- Gyakran a részecskéket összetartó erő átmenet a különböző fajta kötések között (például átmenet a kovalens és ionos kötés között, erre példa az ezüst-klorid, $AgCl$).

Keverék vagy **elegy:** elemekből és/vagy vegyületekből felépülő halmaz, melyben az egyes alkotóelemeknek nincs megkötött aránya. A keverék komponenseit (alkotóelemeit) fizikai módszerekkel rendszerint szét lehet választani. Fizikai változás: az anyag tulajdonságai úgy változnak meg, hogy közben új anyag nem keletkezik. Például átkristályosítás, szublimálás, desztillálás stb. Az elegy kifejezést általában nem alkalmazzuk szilárd keverékekre.

Az **oldatok** is tulajdonképpen keverékek vagy elegyek, általában folyékony halmazállapotúak, de ritkábban beszélhetünk szilárd oldatokról is. Az oldat fogalmának definiálásakor gyakran azt olvashatjuk, hogy az oldatban van egy kitüntetett komponens, melyet oldószernek nevezünk, ennek a részaránya nagyobb, mint a többi komponensé. Ez többnyire igaz is, ám vannak kivételek: tömény oldatok esetén lehetséges, hogy az oldott anyag mennyisége nagyobb, mint az oldószeré.

Fázis: azon térrész, melynek minden pontjában megegyeznek mind a kémiai, mind a fizikai tulajdonságok.

Például: olajat vízzel összekeverve, azok gyakorlatilag nem elegyednek, két elkülönülő fázist kapunk. A felső (felülúszó) fázis az olaj, az alsó (alulúszó) pedig a víz. Egy „jég–víz” keverékben pedig a szilárd fázis a jég, a folyadék fázis pedig a cseppfolyós víz.

Homogén egy anyagi halmaz, ha nincsenek benne határfelületek, és minden pontjában megegyezik a kémiai összetétel.

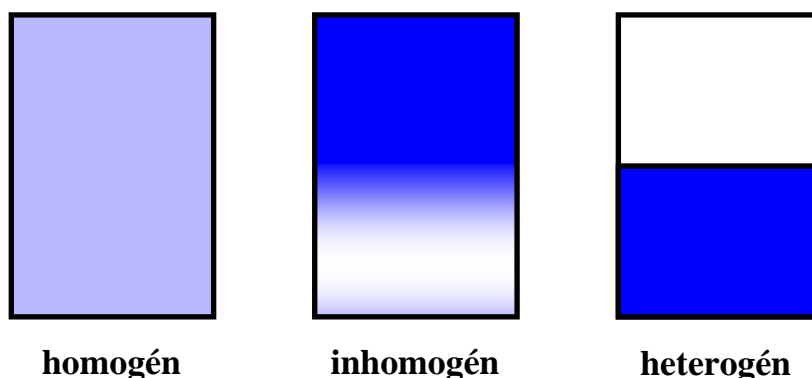
Például egy jól összekevert cukoroldat homogén fázist képez, ha mindenhol egyforma a cukor koncentrációja.

Inhomogénnek nevezünk egy anyagi halmazt, ha pontról pontra változik az összetétele, de nincsenek benne határfelületek.

Például inhomogén fázist kapunk, ha a következőképp készítjük a cukoroldatot: a cukorra ráöntjük a vizet, és keverés nélkül magára hagyjuk a rendszert. A cukor feloldódik, és az oldat alján nagyobb lesz a cukor koncentrációja, mint az oldat tetején, egészen addig, amíg a diffúzió hatására homogénné nem válik az oldat.

A **heterogén** rendszerek több fázist tartalmaznak, bennük határfelületek találhatók.

Például: olaj és víz keveréke.



4.1.1. ábra: Homogén, inhomogén és heterogén rendszerek

A különféle (homogén, inhomogén, heterogén) rendszerek időben változhatnak. A különféle fázisokat alkotó részecskék mozgása (diffúzió) az inhomogén rendszereket – az anyagi minőségtől függően hosszabb vagy rövidebb idő alatt – homogén rendszerré alakíthatják. Például az inhomogén folyadékok idővel homogenizálódhatnak. Ezzel ellentétben az inhomogén szilárd anyagok spontán (külső behatás nélkül) ritkán alakulnak át homogén rendszerré, mivel a szilárd anyagok részecskéit összetartó erők meggátolják a részecskék szabad mozgását.

Természetesen heterogén rendszer is átalakulhat inhomogénné vagy homogénné, és fordítva. Például ha a fentiekhez hasonlóan egy pohár vízhez egy evőkanál cukrot adunk, először egy heterogén (kétfázisú) rendszer jön létre, majd a só feloldódásával megszűnik a fázishatár. Ha az oldatot az oldódás során nem keverjük folyamatosan, akkor az oldat inhomogén lesz, az edény alján nagyobb lesz a cukor koncentrációja, mint az edény felső részében. Az oldatot magára hagyva egy idő után homogenizálódik.

A gáz vagy gőz fázis még gázkeverékek esetén is egy idő után homogénné válik (a gázok hőmozgásuk következtében összekeverednek). Heterogén fázisú rendszerek nem alakulhatnak ki két

légnemű fázisból, ám lehetségesek gáz(gőz)–folyadék, gáz(gőz)–szilárd, folyadék–folyadék, folyadék–szilárd és szilárd–szilárd rendszerek. Az alábbiakban néhány példa:

Gáz–folyadék: például oxigéngáz és víz.

Gáz–szilárd: például platina és hidrogéngáz.

Folyadék–folyadék: egymással nem elegyedő vagy korlátozottan elegyedő folyadékok. Például benzín és víz keveréke.

Folyadék–szilárd: lehet például oldott anyag és oldószer vagy szilárd anyag és olvadéka.

Szilárd–szilárd: például egy elem két módosulata (sárga foszfor és vörös foszfor, grafit és gyémánt).

A magára hagyott rendszer mindig az egyensúly elérésére törekszik.

Standard állapot: a jelenlegi konvenciók szerint a standard állapot egy konkrét nyomásértéket jelöl, még pedig vagy a 10^5 Pa-t, vagy a normál légköri nyomást (101 325 Pa), függetlenül a hőmérséklettől. Régebben elterjedt volt a standard állapot definíciója mint normál légköri nyomás és 25,00 °C (298,15 K) hőmérséklet kombinációja.

4.2. Az anyagi halmazok csoportosítása

A környezetünkben előforduló anyagokat többféleképpen csoportosíthatjuk:

Összetétel alapján:

- **Egyszerű anyagok:** csak azonos rendszámú atomokat tartalmaznak: elemek.
- **Összetett anyagok:** többféle rendszámú anyagból épülnek fel. Ezek lehetnek vegyületek, vagy keverékek.

Komponensek száma szerinti csoportosítás:

- **Tiszta anyagok:** elemek vagy vegyületek, egyetlen komponensből állnak.
- **Keverékek:** többféle komponensből állnak.

Halmazállapot szerinti csoportosítás (az egyetemi tanulmányok során szó lesz még egy negyedik halmazállapotról is):

- szilárd anyag
- folyadék
- légnemű anyagok vagy gázok.

4.3. Halmazállapotok, halmazállapot-változások

Elméletileg minden elem és vegyület három halmazállapotban fordulhat elő, a gyakorlatban azonban nem minden elem és vegyület veszi fel mindhárom halmazállapotot. Például azért, mert az anyag olvadása vagy forrása során elbomlik.

Egy anyag halmazállapota alapvetően a hőmérséklettől, a nyomástól és az anyagi minőségtől függ.

4.3.1. Halmazállapot-változások:

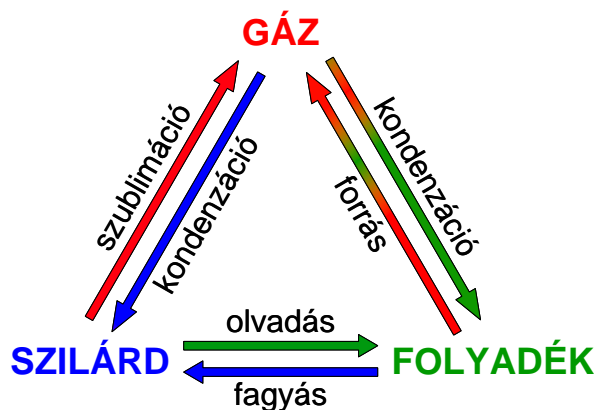
Olvadás: az anyag szilárd halmazállapotból folyadékká válik.

Szublímáció: a szilárd anyag közvetlenül légnemű halmazállapotba kerül anélkül, hogy folyadék halmazállapotot venne fel.

Forrás: folyadékból légnemű anyag keletkezik.

Fagyás: folyadék állapotból légnemű halmazállapotba kerül az anyag.

Kondenzáció vagy **lecsapódás:** légnemű halmazállapotból szilárd vagy folyadék halmazállapotba kerül az anyag.



4.3.1.1. ábra: Fázisátalakulások

Tiszta anyagok (elemek vagy vegyületek) halmazállapot-változásai adott nyomás esetén jól meghatározott hőmérsékleten mennek végbe, az **anyagra jellemző fizikai állandók**. A következőkben ezen kitüntetett hőmérsékleteknek az elnevezésével ismerkedünk meg. Ezek mértékegysége a hőmérséklet szokásos mértékegysége (Celsius-fok: °C, kelvin: K).

Olvadáspont: az a hőmérséklet, melyen az anyag normál légköri nyomáson szilárd halmazállapotból folyadékká alakul.

Fagyáspont vagy **dermedéspont:** azon hőmérséklet, melyen az anyag normál légköri nyomás mellett folyadékból szilárd halmazállapotúvá alakul.

Tiszta anyagok olvadás- és fagyáspontja megegyezik.

Forráspont: az a hőmérséklet, melyen az anyag normál légköri nyomáson folyadékból légnemű halmazállapotúvá válik.

Kondenzációs vagy **lecsapódási pont:** azon a hőmérséklet, melyen az anyag normál légköri nyomáson légneműből folyadék vagy szilárd halmazállapotúvá válik.

Szublimációs pont: az a hőmérséklet, melyen az anyag normál légköri nyomáson szilárdból közvetlenül légnemű halmazállapotúvá válik.

Tiszta anyagok forrása esetén azok forráspontja és kondenzációs pontja megegyezik, hasonlóan a szublimáció esetén a szublimációs pont és a kondenzációs pont azonos.

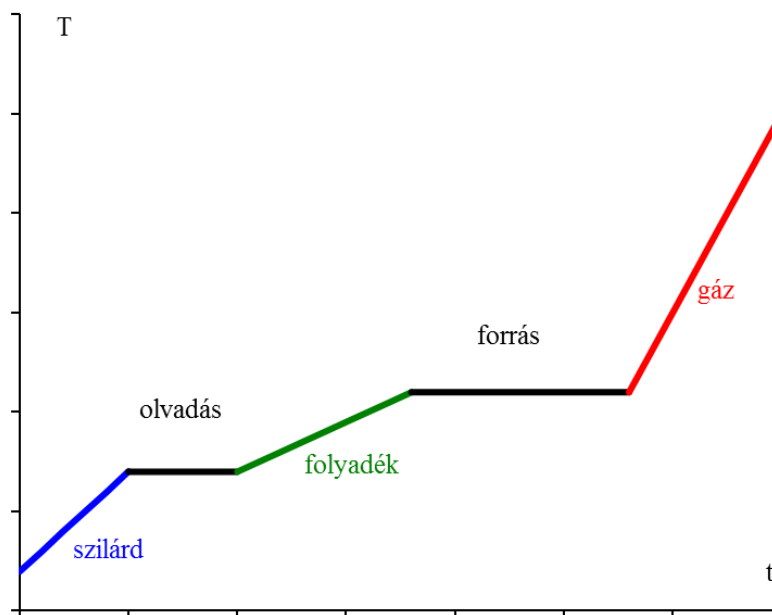
Jogos kérdés, hogy miért hangsúlyozzuk, hogy tiszta anyagok esetén egyezik meg például az olvadáspont és a fagyáspont. Természetesen a keverékeknek (elemek és/vagy vegyületek keveréke) is van olvadáspontja és fagyáspontja, ám ezek esetén azonban az olvadáspont és fagyáspont csak ritkán egyezik meg. Ez természetesen igaz a többi halmazállapot-változásra is. Az elegyek halmazállapot-változásairól részletesebben az egyetemi tanulmányok során esik majd szó.

Megjegyzés: mint fentebb említettük, nemcsak a hőmérséklettől, de a nyomástól is függ, hogy milyen halmazállapotú egy tiszta anyag. A nyomásfüggés igaz azon kitüntetett hőmérsékletekre is, melyeken a halmazállapot-változások végbemennek. A fizikai állandókat mindig normál légköri

nyomásra adjuk meg, melynek értéke $101\,325\text{ Pa}$. Ez természetesen konvenciók kérdése, és bizonyos újabb ajánlások nem a normál légköri nyomást, hanem a hozzá igen közeli 10^5 Pa (100 kPa , 1 bar) nyomást adják meg referenciapontnak. Amennyiben nem normál légköri nyomáson mérjük a halmazállapothoz tartozó hőmérsékletet, a „pont” (olvadáspont, forráspont stb.) helyett „hőmérséklet”-et mondunk. Például, ha egy anyag forrásának hőmérsékletét nem normál légköri nyomáson mérjük, a kapott értéket szabályosan nem mondhatjuk forráspontnak csak forráshőmérsékletnek. Az olvadáshőmérsékletet a külső nyomás nem nagyon befolyásolja, ám a szublimációs és forráshőmérséklet nyomásfüggése viszonylag nagy.

Egy tiszta szilárd anyagot állandó nyomáson melegítünk. Hogyan változik az anyag hőmérséklete eközben?

A hőközlés hatására növekszik a szilárd anyag hőmérséklete, az anyag hőkapacitása adja meg, hogy egy adott hőmennyiség hatására mekkora hőmérséklet-növekedést tapasztalunk. A hőmérséklet egészen addig növekszik, míg az anyag elkezd megolvadni. Az olvadás folyamata közben azonban nem növekszik a hőmérséklet: a hőmérséklet mindaddig állandó marad, amíg az összes szilárd anyag folyadékká nem alakul. A hőmennyiség nem a hőmérséklet növelésére, hanem az olvadásra fordítódik. A hő ahhoz szükséges, hogy a szilárd anyagban lévő kötéseket felbontsuk, így az anyag folyadékká alakuljon. További hőközlés hatására a folyadék hőmérséklete folyamatosan növekszik, míg a forrás meg nem indul. Az olvadáshoz hasonlóan forrás során is állandó a hőmérséklet mindaddig, amíg folyadék is található a gőz mellett. Miután az összes folyadék elforr, a gőz hőmérséklete növekszik. A folyamatot az alábbi ábrán szemléltethetjük.



4.3.1.2. ábra: Hőmérséklet-idejű diagram állandó nyomás mellett

A halmazállapot-változások során a hőmérséklet állandó.

Vegyünk egy másik példát: a jég olvadása 0 °C hőmérsékleten megy végbe (normál légköri nyomáson). Mi történik, ha egy hőszigetelt edényben nagy mennyiségű -10 °C hőmérsékletű jeget és $+5\text{ °C}$ hőmérsékletű folyékony vizet összekeverünk? Mivel a jég olvadáspontja (víz fagyáspontja) 0 °C , a jég ennél alacsonyabb hőmérsékleten nem tud megolvadni. Ahhoz, hogy a jég elkezdjen olvadni, a hőmérsékletének 0 °C -ra kell emelkednie. Mivel hőszigetelt edényben dolgozunk, a felmelegedéshez szükséges hőmennyiség csak a melegebb folyékony víztől származhat. A víznek tehát le kell hűlnie, a jégnek pedig fel kell melegednie 0 °C -ra ahhoz, hogy a halmazállapot-változás végbemehessen! Sejtethető, hogy a folyamat végére a hőmérsékletek kiegyenlítődnek. A rendszer véghőmérséklete függ a jég és a víz mennyiségétől (és további fizikai állandóktól is).

Szélsőséges esetben olyan is előfordulhat, hogy az összes jég felolvad, és a hőmérséklet $0\text{ }^{\circ}\text{C}$ vagy annál magasabb. Ez akkor lehetséges, ha kis mennyiségű jeget sok vízbe helyezünk.

Egy másik eset, hogy csak jég marad az edényben, az összes víz megfagy. Ez akkor lehetséges, ha nagyon sok jéghez adunk kevés vizet.

Tehát a fenti esetben mindenképpen hőmérséklet-kiegyenlítődésnek kell történnie, melynek során beáll a termikus egyensúly. Termikus egyensúly esetén a rendszer minden pontjának azonos a hőmérséklete.

Tiszta anyagok esetén az olvadás, forrás stb., azaz a halmazállapot-változások során a két különböző halmazállapotú fázisoknak egymással egyensúlyban kell lenniük, ezért a halmazállapot-változás – adott nyomás esetén – csak egy konkrét hőmérsékleten mehet végbe.

Fontos megjegyezni, hogy a halmazállapot-változás hőmérsékletét mindig úgy kell kísérletileg meghatározni, hogy közben az anyag mindkét halmazállapotban jelen legyen, tehát egyensúlyi hőmérsékletet mérjünk!

A halmazállapot-változásokat kísérő hőváltozások

Mint fentebb említettük, egy éppen olvadó anyagot melegítve, a hó arra fordítódik, hogy végbemenjen a halmazállapot-változás. A szilárd anyagban lévő kötőerőket fel kell szakítanunk, hogy kialakuljon a folyékony halmazállapot, melyben a részecskék el tudnak mozdulni. Forrás esetén szintén energiát kell befektetnünk ahhoz, hogy a folyadék részecskéit eltávolítsuk egymástól annyira, hogy létrejöjjön a légnemű halmazállapot. A helyzet hasonló a szublimációnál is, energiabefektetés szükséges ahhoz, hogy a szilárd anyagban lévő kötések megszüntessük, és az anyag így légnemű halmazállapotúvá váljék.

Tehát az olvadás, a forrás és a szublimáció esetén energiát kell befektetnünk, így ezek endoterm folyamatok. Az ellentétes irányú folyamatok, azaz a fagyás és kondenzáció során energia szabadul fel, ezek exoterm folyamatok.

Endoterm folyamat: hőelnyeléssel járó folyamat.

Például: olvadás, forrás, szublimáció.

Exoterm folyamat: hőfelszabadulással járó folyamat.

Például: fagyás, kondenzáció.

Nézzünk egy hétköznapi példát a folyadékok párolgására!

Nyári forró napokon nagyobb városokban gyakran locsolják vízzel az utakat. A víz (és a többi folyadék) azonban nemcsak a forráspontján párolog, hanem alacsonyabb hőmérsékleteken is. A párolgás, a forráshoz hasonlóan endoterm folyamat, tehát hőt von el a környezetétől. Az elpárolgó víz így valamelyest lehűti az aszfaltot.

Az elnyelődő, illetve felszabaduló hő arányos az anyag tömegével és így anyagmennyiségével. Az ilyen fajlagos vagy moláris hőmennyiségek már függetlenek az anyag mennyiségétől (tömegétől, illetve anyagmennyiségétől), ezért anyagi jellemzők, megfelelő táblázatokban összegyűjtve megtalálhatóak.

Fajlagos olvadáshő: egységnyi tömegű szilárd anyag megolvasztásához szükséges hő.

$$L_{\text{olv}} = \frac{Q}{m}$$

Moláris olvadáshő: egységnyi anyagmennyiségű szilárd anyag megolvasztásához szükséges hő.

$$L_{\text{olv,m}} = \frac{Q}{n}$$

A két mennyiség között a moláris tömeg ($M = m / n$) teremt kapcsolatot, melynek segítségével könnyen átválthatjuk őket egymásba:

$$L_{\text{olv}} = \frac{L_{\text{olv,m}}}{M}, \text{ illetve } L_{\text{olv,m}} = M \cdot L_{\text{olv}}.$$

Mivel az olvadás endoterm folyamat, a fajlagos, illetve moláris olvadáshő előjele – konvenció szerint – pozitív.

Hasonlóan definiálható fajlagos/moláris fagyáshő, forráshő (vagy párolgáshő), szublimációs hő és kondenzációs hő. Azon hőfajtákat, melyek során nem tapasztalható hőmérséklet-változás, **látens hő**nek nevezzük gyűjtőnéven.

Minden endoterm folyamat esetén a hő előjele pozitív, exoterm folyamatok esetén pedig negatív. Így az egyes fajlagos/moláris hők előjele:

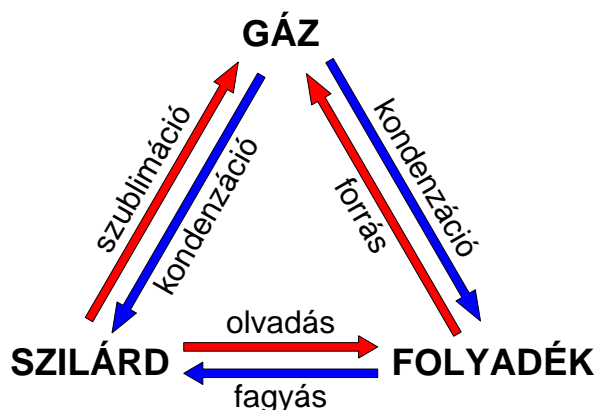
Pozitív előjel:

- olvadáshő,
- forráshő (párolgáshő),
- szublimációs hő.

Negatív előjel:

- fagyáshő,
- kondenzációs hő.

Az alábbi ábrán a piros nyíl az endoterm (hőelnyelő) folyamatot jelöli (a hő előjele pozitív), a kék nyilak pedig az exoterm (hőtermelő) folyamatokat mutatják (a hő előjele negatív).



4.3.1.3. ábra: Fázisátalakulások hőváltozásai

Az olvadás és fagyás ellentétes folyamatok, egy adott mennyiségű anyag megolvasztásához ugyanannyi hőt kell befektetni, mint amennyi hő felszabadul annak megfagyásakor. Ebből adódik, hogy a fajlagos olvadáshő és a fajlagos fagyáshő nagysága ugyanakkora, csak előjele ellentétes.

Tehát a fajlagos, illetve moláris mennyiségekre:

$$L_{\text{fagyás}} = -L_{\text{olvadás}}$$

$$L_{\text{kondenzáció}} = -L_{\text{forrás}}$$

$$L_{\text{kondenzáció}} = -L_{\text{szublimáció}}$$

A szublimációs hő megegyezik az olvadáshő és forráshő összegével:

$$L_{\text{szublimáció}} = L_{\text{olvadás}} + L_{\text{forrás}}$$

4.3.2. A szilárd halmazállapot

Szilárd halmazállapotban a részecskéket összetartó erők igen nagyok, a részecskék csak külső erőhatásra tudnak elmozdulni, akkor csak kis mértékben.

A szilárd anyagok alakja és térfogata is állandó, csak viszonylag nagy erőhatásokra változtatható meg.

A szilárd anyagokat két csoportra oszthatjuk szerkezetük alapján:

Amorf anyagok: nem szabályos (kristály)szerkezetű anyagok.

Példák: üveg, gumi, a legtöbb műanyag, viasz, szurok stb.

Kristályos anyagok: a szilárd anyagot alkotó részecskék a tér minden irányában szabályos elrendezésben helyezkednek el.

Példák: nátrium-klorid, elemi jód, magnézium stb.

A kristályos anyagokra jellemző a kristályrács, melynek legkisebb ismétlődő egysége az **elemi cella**.

(Moláris) rácsenergiának nevezzük azt az energiát, mely felszabadul, mikor egymástól végtelen távolságban lévő részecskékből 1 mól anyag kristályrácsa létrejön. (Másképp megfogalmazva, ugyanennyi energiát kell befektetnünk, hogy 1 mól anyag kristályrácsát megbontsuk, azaz az alkotórészecskéket végtelen távolságba távolítsuk egymástól.)

A kristályos szerkezetű anyag a részecskéket összetartó erők alapján lehet:

- fémrácsos,
- ionrácsos,
- molekularácsos,
- atomrácsos.

Fémrács: az anyagot erős fémes kötés tartja össze. A kristály rácspontjaiban pozitív töltésű fémionok találhatóak, a vegyértékelektronok közöttük delokalizálódva helyezkednek el.

A fémrácsban kristályosodó anyagok változatos olvadásponttal rendelkeznek, például a higany olvadáspontja $-39\text{ }^{\circ}\text{C}$, míg a volfrám olvadáspontja $3695\text{ }^{\circ}\text{C}$.

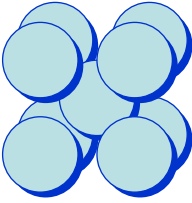
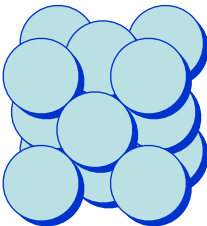
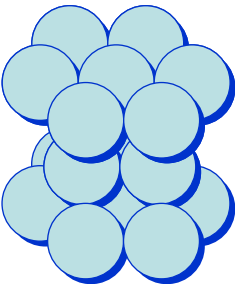
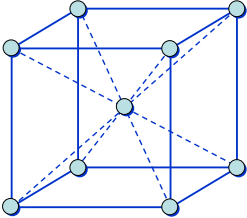
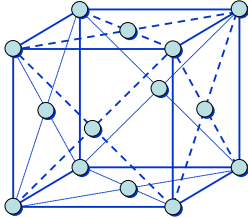
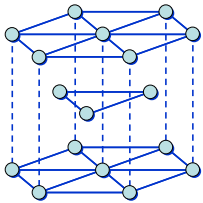
A fémek mechanikai tulajdonsági szintén nagyban függenek az elemtől. Vannak egészen lágy, könnyen megmunkálható és kemény, rideg fémrácsos anyagok is.

A fémrácsos anyagok a hőt és az elektromos áramot általában igen jól vezetik.

Fémeket és fémrácsban kristályosodó vegyületeket többnyire csak kémiai átalakulással lehet oldatba vinni, mely rendszerint a fém oxidációját jelenti. (Ez alól kivétel például az amalgámképzés, mely egy fém higannyal alkotott ötvözetének, oldatának tekinthető.) A fém kémiai tulajdonságaitól függően oldódhat vízben, híg, nem oxidálósavakban, tömény oxidálósavakban, illetve lúgokban.

Példa: vas (Fe), magnézium (Mg), réz (Cu) stb.

A fémek leggyakrabban az alábbi három rács típus valamelyikében kristályosodnak:

			
			
Elnevezés	Térben középpontos kockarács	Lapon középpontos kockarács	Hatszögös (hexagonális) rács
Koordinációs szám	8	12	12
Mechanikai tulajdonságok	Általában nem túl jól megmunkálható fémek (nem elég szoros az illeszkedés, vagy ridegek, vagy túl lágyak)	Puha, könnyen megmunkálható (a síklási síkokon el tudnak csúszni egymáson a rétegek)	Többnyire kemény fémek
Példák:	Na, K, V, Cr, Fe	Au, Ag, Al, Cu, Pb	Mg, Ti, Zn, Cd, Zr

Ionrács: az anyagot erős ionos kötés tartja össze, mely az ellentétes töltésű ionok elektrosztatikus vonzásából adódik. A kristály rácspontjaiban felváltva kationok és anionok helyezkednek el.

Az ionrácsos vegyületek olvadáspontja (és forráspontja) általában magas.

Az ionrácsos vegyületek szigetelők, ám megolvasztva vezetnek az áramot.

Azon vegyületek, melyek ionrácsban kristályosodnak, általában jól oldódnak poláris oldószerekben, például vízben.

Gyakran előfordul, hogy a vegyület a kristályrácsban az oldószer (például víz) molekuláival együtt kristályosodik. (A víz mellett természetesen más oldószer – például alkoholok, ammónia – esetén is lehetséges szolvátburok kialakulása.) Ha egy só vizes oldatból kristályosodik ki, akkor a kristályrácsban található vízmolekulákat kristályvíznek nevezzük. Ezt a képletben a következőképpen jelöljük: például a kristályos nátrium-szulfát esetén $\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 10 \text{H}_2\text{O}$, mely azt jelenti, hogy egy mól nátrium-szulfát mellett 10 mól kristályvíz található. A fenti jelölés azonos a következővel: $\text{Na}_2\text{SO}_4(\text{H}_2\text{O})_{10}$.

Példák ionrácsos vegyületekre: nátrium-klorid (NaCl), kálium-nitrát (KNO_3), kristályos réz(II)-szulfát ($\text{CuSO}_4 \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$), kristályos magnézium-klorid ($\text{MgCl}_2 \cdot 6 \text{H}_2\text{O}$) stb.

Molekularács: a kristály rácspontjaiban molekulák találhatók, ezeket (gyengébb) másodrendű kölcsönhatások tartják össze.

A molekularácsos anyagokra jellemző a viszonylag alacsony olvadáspont (és forráspont is), mivel a molekulákat csak másodrendű kötések tartják össze, emellett ezen anyagok általában illékonyak.

Az apoláros molekulákból felépülő molekularácsos anyagok apoláros oldószerben jól oldódnak, ezzel ellentétben a dipólusmolekulákból felépülő molekularácsos anyagok poláris oldószerben oldódnak jól. Például az elemi jód (a kristályrácsban apoláris I_2 molekulák) kiválóan oldódik az apoláris szén-tetrakloridban és szénhidrogénekben. A szintén molekularácsban kristályosodó, ám dipólusmolekula hidrogén-klorid (HCl) pedig poláris oldószerekben (például víz) oldódik jól.

Általában jó elektromos szigetelők.

A molekulárcsos anyagok közé tartoznak a nemesgázok is, noha atomos szerkezetűek. Éppen ezért a nemesgázokat szokták egyatomos molekuláris szerkezetűnek is nevezni.

Példák: víz (H_2O), ammónia (NH_3), jód (I_2), hélium (He), sárgafoszfór (P_4), rombos kén (S_8) stb.

Atomrács: a kristály rácspontjaiban atomok találhatók, melyeket erős kovalens kötés tart össze.

Az atomrácsos anyagok olvadáspontja rendszerint igen magas, ennek magyarázata a kristályrácsot összetartó kovalens kötés erősségében keresendő.

Az atomrácsos elemek és vegyületek általában kemény, mechanikailag igen ellenálló anyagok (például gyémánt).

Rendszerint nem vezetnek jól a hőt és az elektromos áramot.

A rácsot összetartó kovalens kötések következtében az atomrácsos elemek és vegyületek általánosságban igen oldhatatlanok közönséges oldószerekben (például víz, aceton stb.). Az atomrácsos anyagokat többnyire csak igen erélyes körülmények mellett lehet feloldani (például tömény lúgokban, erős oxidálósavak tömény oldataiban stb.).

A nemesgázok nem atomrácsos, hanem molekulárcsos vegyületek!

Példák: gyémánt (C), bór (B), szilícium-dioxid (SiO_2) stb.

A különböző rács típusok (fémrács, ionrács, molekulárcs, atomrács) összehasonlítása

Tulajdonság	Fémrács	Ionrács	Molekulárcs	Atomrács
Kristályrácsot összetartó kölcsönhatás	fémes kötés	ionos kötés	másodrendű kötőerők	kovalens kötés
Olvadáspont	változó	magas	alacsony	magas
Oldhatóság	csak kémiai reakcióval	poláris oldószerekben	poláris vagy apoláris oldószerekben	csak kémiai reakcióval
Mechanikai szilárdság	általában jó, a fém fajtájától függően	változó	általában törékenyek vagy puhák	általában kifejezetten jó
Elektromos vezetőképesség	általában kifejezetten jó	szigetelők, felolvasztva vezetők	szigetelők	szigetelők
Jellemző anyagok	fémes elemek, ötvözetek	kizárólag vegyületek	nemfémes elemek	nemfémes és félfémes elemek
Példák	nátrium (Na), cink (Zn)	kálium-klorid (KCl), nátrium-szulfát (Na_2SO_4)	argon (Ar), hidrogén-klorid (HCl)	bór (B), szilícium-dioxid (SiO_2)

4.3.3. A folyadék halmazállapot

A folyadék halmazállapotú anyagok részecskéi viszonylag könnyen el tudnak mozdulni egymás mellett, ezért felveszik a tárolóedény alakját (különbség a szilárd anyagoktól). Azonban a folyadékok térfogata külső nyomás hatására csak kismértékben változik (különbség a légnemű anyagoktól). Ennek oka, hogy nemcsak vonzó-, hanem taszítóerő is fellép a folyadékokban. Ez a – kis távolságoknál fellépő – taszítóerő akadályozza meg, hogy a folyadékokat nagymértékben összenyomjuk.

Tehát a folyadékokra jellemező, hogy nincs önálló alakjuk, de van önálló térfogatuk.

Felületi feszültség

Amennyiben a folyadék határfelülete fölött egy másik fázis (például gáz) található, a folyadék felszínén található részecskékre a folyadék belseje felől sokkal erősebbek a kölcsönhatások, mint a

gázfázis felől, a folyadék belseje befelé „húzza” a felszínen lévő részecskéket. A felületi feszültségnek nevezzük a folyadék felületét csökkentő erőhatást. (A felületi feszültséget megadja, hogy mekkora munkával tudjuk a folyadék felületét egységnyivel megnövelni.) A felületi feszültség következménye, hogy a folyadékok a lehető legkisebb felületűre húzódnak össze. Például a szappanbuborék gömb alakú, a nyugvó folyadékok felszíne sík.

Oldódás és elegyedés

A folyadékokra jellemző a diffúzió, melynek nagy szerepe van a különféle anyagok oldódásában. Oldódás során az oldószer-molekulák körülveszik az oldott anyag részecskéit, ezt a folyamatot **szolvatációnak** nevezzük. Az egyik legfontosabb oldószer, a víz esetén **hidratációról** szoktunk beszélni.

A folyadékokat gyakran oldószerként alkalmazzuk, ismerünk poláris és apoláris oldószereket. Az oldódással vagy elegyedéssel kapcsolatban alapvető fontosságú a **„hasonló hasonlót old”-elv**, mely alapján a dipólusmolekulákból felépülő oldószer elsősorban ionokból álló sókat és dipólusmolekulákat oldanak, míg az apoláris oldószerek apoláris anyagokat oldanak jól.

Néhány példa: a poláris molekulákból álló szőlőcukor ($C_6H_{12}O_6$) vagy az ionrácsos nátrium-hidroxidot ($NaOH$) a víz – mint poláris oldószer – igen jól oldja, ám az apoláris molekulákból álló szénhidrogénnel gyakorlatilag nem elegyedik. Az apoláris szén-tetrakloridban (CCl_4) viszont nem oldódnak a sószerű és dipólusmolekulákból álló anyagok, ellenben az apoláris jódot (I_2), brómot (Br_2) és szénhidrogéneket jól oldja.

A folyadékok nemcsak szilárd anyagokat, hanem gázokat is oldhatnak. Például a poláris molekulájú hidrogén-klorid- (HCl), kén-dioxid- (SO_2) vagy az ammóniagáz (NH_3) kiválóan oldódik a dipólusmolekulákból álló vízben. Ezt a következő, úgynevezett szökőkút-kísérlettel is szemléltethetjük:



4.3.3.1. videó: A szökőkút-kísérlet

Ezzel ellentétben a víz rosszul oldja az apoláris molekulájú anyagokat, így például az elemi oxigént (O_2), nitrogént (N_2), a metánt (CH_4) vagy a nemesgázokat. Az apoláris oldószerek pedig jól oldják az apoláris molekulákból álló gázokat, például a metánt.

Beszélhetünk fizikai és kémiai oldódásról: a **fizikai oldódás** során az oldószer-molekulák úgy veszik körül az oldott anyagot, hogy annak összetétele nem változik meg, tehát az oldószer és az oldott anyag molekulái között másodrendű kötéserők lépnek fel.

Kémiai oldódás során viszont az oldott anyag reagál az oldószerrel, így új anyag keletkezik. Például, ha hidrogén-kloridot oldunk vízben, a beoldódott molekulák ionosan disszociálnak

Megjegyzés: a szén-dioxid apoláris molekulájú, ám viszonylag jól oldódik vízben. Ennek oka, hogy az oldódás során kémiai változás történik, a szén-dioxid részlegesen szénsavvá alakul, mely ezután – szintén részlegesen – ionosan disszociál az oldatban.

Az alábbi videón két egymással nem elegyedő folyadékkal mutatunk be egy érdekes kísérletet:



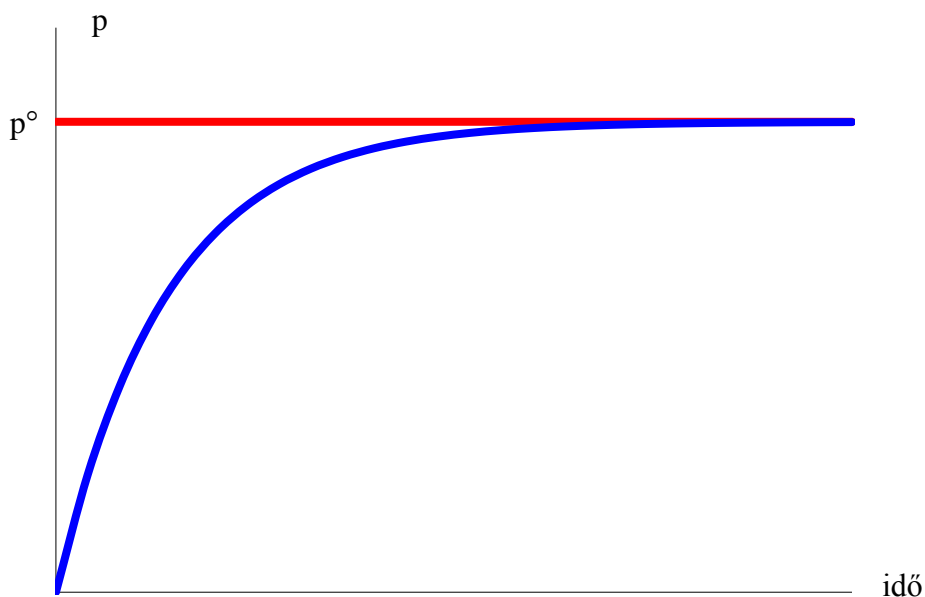
4.3.3.2. videó: Az „ugráló” nátrium

Gőzteniő

A folyadékok párolognak, mely során a felszíni részecskék elszakadnak a folyadékfázistól. (Megjegyzés: elvileg a szilárd anyagok is párolognak, viszont ennek mértéke általában olyan csekély, hogy gyakorlatilag nem is tapasztalható. Viszont bizonyos *illékony* szilárd anyagok jelentős mértékben szublimálhatnak/párologhatnak akár szobahőmérsékleten is. Gondoljuk az „elillan, mint a kámfor” mondásra.)

Vizsgáljuk meg a következő gondolkísérletet!

Egy lezárt, levákuumozott edénybe viszonylag nagy mennyiségű folyékony vizet spriccelünk, majd a hőmérsékletet állandó T_1 értéken tartva mérjük az edényben a nyomást (a gőztér nyomását mérjük). Azt tapasztaljuk, hogy a víz párolog, és a nyomás folyamatosan növekszik. Viszont egy idő után lelassul a nyomás növekedésének sebessége, végül beáll egy telítési értékre. Ekkor a folyadék térfogata sem változik már tovább. A nyomást az időben ábrázolva a következő grafikont kapjuk:



4.3.3.1. ábra: A gőzteniő kialakulása

Az egyensúly beálltakor mérhető p° nyomást a folyadék telített gőznyomásának vagy gőzteniőjének nevezzük.

Gőzteniő: folyadékkal vagy szilárd anyaggal egyensúlyban lévő telített gőz nyomása adott hőmérsékleten.

Mi történik, ha a fenti kísérletet sokkal kisebb mennyiségű vízzel ismétljük meg, azaz csak pár cseppnyi vizet spriccelünk az edénybe?

Ekkor a víz teljes mennyisége elpárolog, és a mérhető parciális nyomás az előző kísérletben tapasztaltnál sokkal kisebb. A jelenség magyarázata a következő: a víz mennyisége kevés volt ahhoz, hogy a telített gőznyomást biztosítsa, tehát a gőztér telítetlen maradt.

Relatív páratartalom: a folyadékból keletkezett gőz nyomásának és az adott anyag azonos hőmérsékletén vett gőztenziójának a hányadosa. Általában százalékban fejezzük ki az értékét.

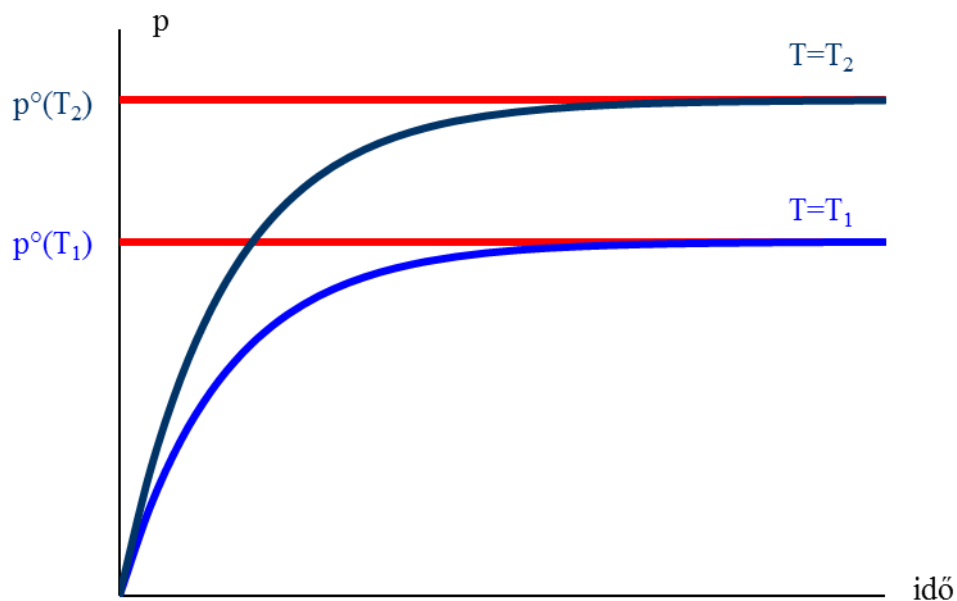
$$\varphi = \frac{p(T)}{p^\circ(T)}$$

Például ha a nyomás $p^\circ / 2$, akkor a relatív páratartalom értéke 50%, ha a nyomás $p^\circ / 4$, akkor a relatív páratartalom 25%-os.

A gőztenzióval kapcsolatban nagyon fontos megjegyezni, hogy csak akkor alakul ki a telített gőznyomás, ha a **gőz és folyadék között egyensúly jön létre**, azaz folyadék is és gőz is van a rendszerben. (Az egyensúly itt azt jelenti, hogy a párolgás sebessége megegyezik a kondenzáció sebességével, a nyomás beáll egy állandó értékre.) Tehát a telített gőznyomás csak úgy jöhet létre, ha megfelelő mennyiségű folyadék áll rendelkezésre!

Most ismételjük meg a kísérletet magasabb állandó hőmérsékleten!

Nagyobb T_2 hőmérsékleten a folyadékok illékonyabbak, ezért a görbe nagyobb nyomásértéknél telítődik. Ez azt jelenti, hogy a folyadék feletti gőztenzió függ a hőmérséklettől, méghozzá magasabb hőmérsékleten nagyobb a gőznyomás értéke [ha $T_2 > T_1$, akkor $p^\circ(T_2) > p^\circ(T_1)$].



4.3.3.2. ábra: A gőztenzió különböző hőmérsékleteken

Most vizsgáljuk meg, mi történik, ha nagy mennyiségű vizet nem levákumozott, hanem levegővel töltött tartályba spriccelünk állandó T_1 hőmérsékleten!

A nyomás már a $t = 0$ időpontban sem nulla, mivel a levegőnek eleve van egy bizonyos nyomása. Ám a nyomás ebben az esetben is növekszik. Egy arra alkalmas berendezéssel mérjük a levegő és a vízgőz nyomását, és azt tapasztaljuk, hogy a vízgőz telítődési nyomására éppen az előző gőztenzióértéket kapjuk! Ebből arra következtethetünk, hogy a gőztenzió nem függ a gőz melletti egyéb komponensektől.

(Megjegyzés: amikor a folyadékot bejuttatjuk a levegővel telt edénybe, a levegő összenyomódik. A víz párolgása során a folyadék mennyisége folyamatosan csökken, így a levegő nyomása is változik valamelyest. Tehát az össznyomás értéke nem pontosan egyezik meg a kiindulási nyomásnak a gőztenzióval megnövelt értékével. Azonban ha a folyadék mennyisége nagy, és a hőmérséklet nem túl magas, akkor ez a térfogatváltozás, és a belőle származó levegő nyomásváltozása gyakorlatilag elhanyagolható.)

A fenti kísérleteket megismételhetjük különféle folyadékokkal is, ekkor azt tapasztalnánk, hogy a folyadék gőztenziója függ a folyadék anyagi minőségétől.

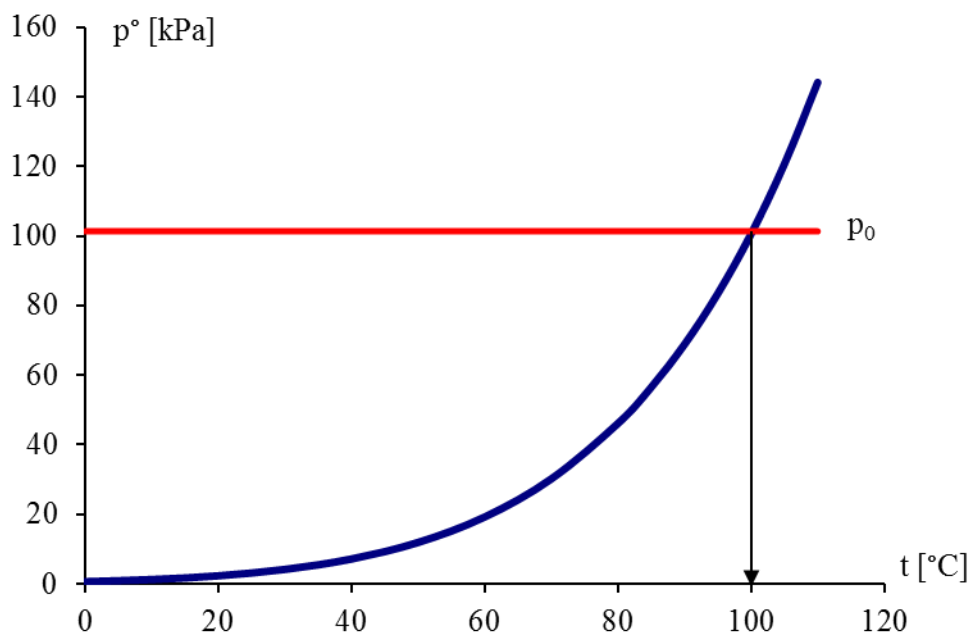
Összefoglalva a fenti kísérletek eredményeit:

Tiszta anyagok gőztenziója:

- **függ** a hőmérséklettől: magasabb hőmérsékleten nagyobb a gőztenzió, mint alacsonyabb hőmérsékleten,
- **függ** az anyagi minőségtől: az illékonyabb anyagok gőztenziója egy adott hőmérsékleten nagyobb, mint a kevésbé illékonyaké,
- **független** a folyadék feletti egyéb anyagok (például levegő) nyomásától és annak összetételétől, értéke a külső nyomással nem befolyásolható.

Megjegyzés: a legutolsó jellemző szigorúan nem igaz, extrém nagy külső nyomás esetén a tiszta anyag gőztenziója csekély mértékben függ a külső nyomástól.

Ahogy növeljük a hőmérsékletet, a gőztenzió növekszik. Azon a hőmérsékleten, melyen a gőztenzió értéke megegyezik a légköri nyomás (külső nyomás) értékével, a folyadék belsejében is megindul a párolgás, a buborékok képződése, és az anyag elkezd forni. Tehát a **forráshőmérséklet az a hőmérséklet, melyen a folyadék gőztenziója éppen megegyezik a külső nyomással.**



4.3.3.3. ábra: A forráspont

A fenti ábrán kék görbével a víz gőztenzióját ábrázoltuk a hőmérséklet függvényében, a piros vízszintes vonal pedig a normál légköri nyomást jelenti ($p_0 = 101,325 \text{ kPa}$). Az ábrát megvizsgálva kiderül, hogy a gőztenziógörbe $100 \text{ }^\circ\text{C}$ hőmérsékleten metszi a vízszintes vonalat, tehát a víz forráspontja a jól ismert $100 \text{ }^\circ\text{C}$.

Megjegyzés: Mi történik, ha a Himalája tetején melegítünk folyékony vizet? A Himalája tetején a nyomás sokkal kisebb, mint a tengerszinten, mintegy 40 kPa. Ha behúzzunk egy vízszintes vonalat ehhez az értékhez, az 77 °C-nál metszi a gőzteniő görbét, azaz a Himalája tetején már 77 °C-on forr a tiszta víz!

Fontos megjegyezni a következőket: a tiszta folyadék gőzteniőja független a külső nyomástól, viszont a folyadék forráspontja a külső nyomás függvénye!

Természetesen nemcsak folyadékoknak, hanem szilárd anyagoknak is van gőzteniőja, mivel a szilárd anyagok felszínéről is elszakadhatnak részecskék, melyek így a gőz fázisba kerülnek. A szilárd anyagok feletti, a szilárd anyaggal egyensúlyban lévő telített gőznyomást is gőzteniőnek nevezzük. A szilárd anyag feletti gőzteniő is függ a hőmérséklettől és az anyagi minőségtől.

A Clausius–Clapeyron-egyenlet

A fent bemutatott ábra alapján sejthető, hogy a gőzteniő és a hőmérséklet között exponenciális összefüggés áll fenn. A tiszta anyag feletti gőzteniő és az abszolút hőmérséklet közötti kapcsolatot a Clausius–Clapeyron-egyenlet jelenti, mely a következő formában írható fel:

$$p^\circ(T) = C \cdot e^{-\frac{L}{R \cdot T}}.$$

A képletben L egy moláris látens hő jelent, mely szilárd anyag szublimációja esetén a szublimációs hő, míg egy folyadék párolgása esetén a moláris párolgáshő, C az adott anyagra jellemző konstans, R az egyetemes gázállandó ($R = 8,314 \text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$), T pedig az abszolút hőmérséklet.

Az egyenletet szokás az alábbi logaritmikus formában is felírni:

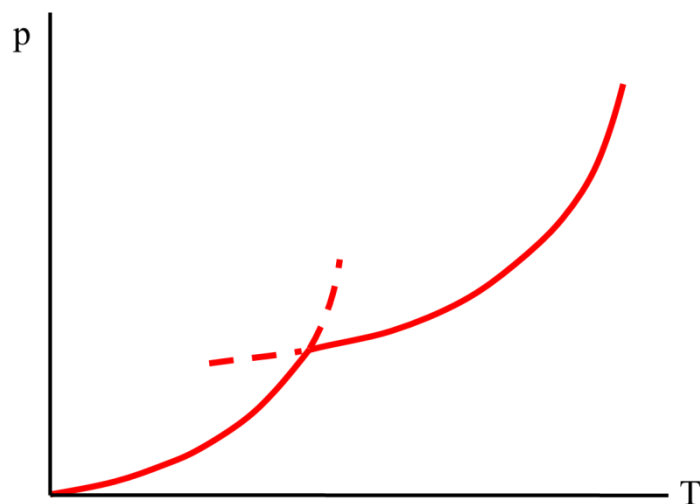
$$\ln p^\circ(T) = \ln C - \frac{L}{R \cdot T}.$$

Fontos megjegyezni, hogy a Clausius–Clapeyron-egyenlet közelítőleg érvényes csak, ám ennek ellenére rendszerint igen jól alkalmazható. A közelítő jelleg abból adódik, hogy az egyenletben szereplő látens hő hőmérsékletfüggését általában elhanyagoljuk, illetve a termodinamikai összefüggésekből történő levezetések során más elhanyagolásokat is teszünk. A Clausius–Clapeyron-egyenlet segítségével egy adott hőmérsékleten megmért gőznyomás és a látens hő ismeretében egy közeli hőmérsékletre át tudjuk számítani a gőznyomást.

A gőzteniővel kapcsolatos számítási feladatokkal a fejezet végén ismerkedünk meg.

4.3.4. Tiszta anyagok fázisdiagramja

A fázisdiagramok a különböző anyagok fázisegyensúlyait szemléltetik. Az alábbiakban a tiszta anyagok fázisdiagramjaival foglalkozunk, mely a nyomás és a hőmérséklet függvényében jeleníti meg az egyes fázisokat. A fázisátmeneteket görbékkel, a fázisokat tartományokkal jellemezhetjük. A fentiek alapján megállapíthatók a tenziőgörbék, azaz a tiszta szilárd anyag vagy folyadék feletti egyensúlyi gőznyomások, melyek exponenciális függvényekkel közelíthetők. Egy tiszta anyag gőznyomása a hőmérséklet függvényében az alábbi görbével jellemezhető.

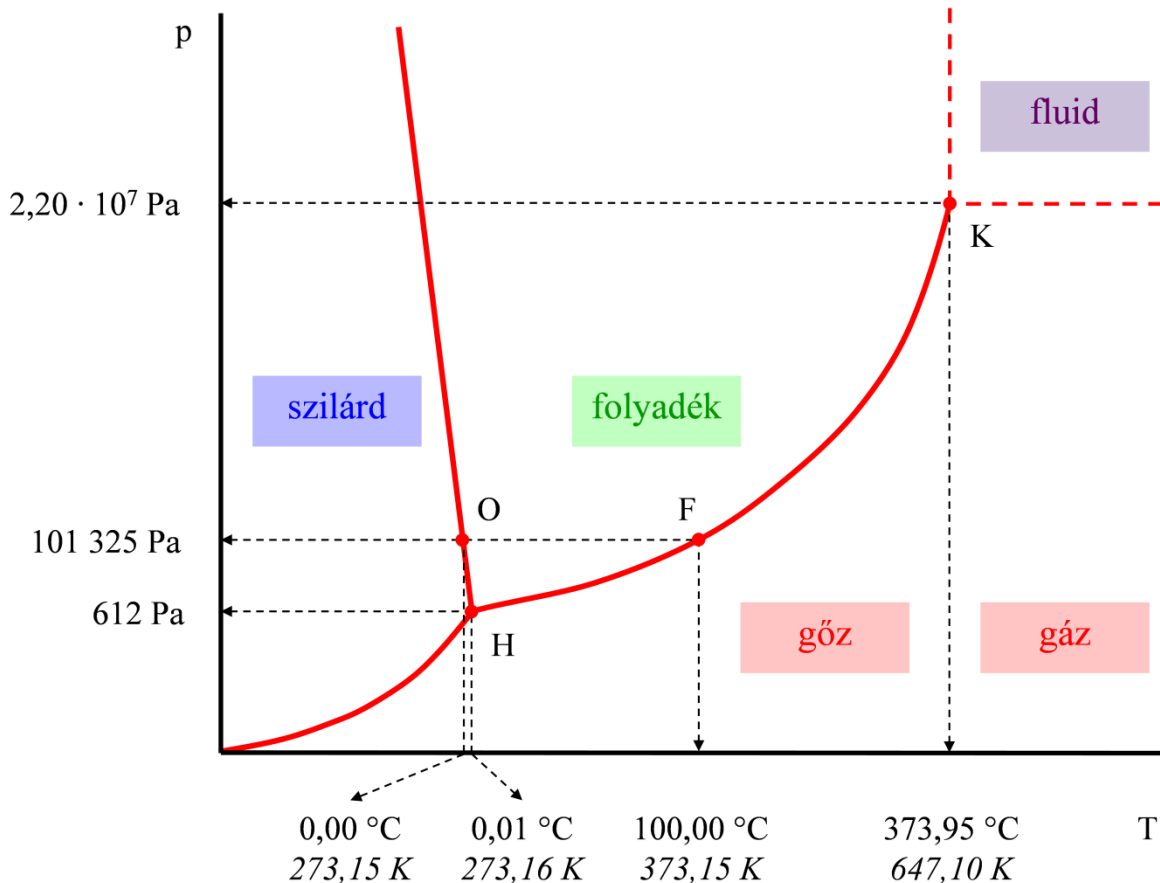


4.3.4.1. ábra: A gőznyomás a hőmérséklet függvényében

Jól megfigyelhető, hogy a függvénynek töréspontja van: két közel exponenciális lefutású görbére bontható a függvény. Ennek oka, hogy alacsonyabb hőmérsékleteken a gőz szilárd fázissal, magasabb hőmérsékleteken pedig cseppfolyós halmazállapotú anyaggal tart egyensúlyt. A Clausius–Clapeyron-egyenlet, mely szilárd–gőz és folyadék–gőz egyensúlyokra is alkalmazható, a két esetben azonban más látens hőt kell behelyettesítenünk. A fentiekben már tárgyaltuk, hogy a szublimációs hő nagyobb, mint a párolgáshő. Ennek következtében egy adott tiszta anyag esetén a szublimációhoz tartozó görbe meredeksége nagyobb, mint a párolgáshoz tartozó görbéé.

Az abszolút nulla fok ($T=0$ K) tetszőlegesen megközelíthető, ám nem érhető el kísérletileg, ezért ezt a pontot nem tudjuk értelmezni ezen a görbén. Azonban a gőzteniő értéke 0-hoz közeledik, ha a hőmérsékletet 0 K-hez közelítjük.

A tenziógörbe egyrészt megadja a szilárd anyaggal vagy folyadékkal egyensúlyban lévő gőz nyomását adott hőmérsékleten, vagy fordítva: az adott nyomáshoz tartozó fázisátalakulás (halmazállapot-változás) hőmérsékletét. Így a görbe azon szakasza, mely a töréspontnál alacsonyabb hőmérsékleteken jellemző, az szublimációs görbe (szilárd–gőz átalakulás), míg a magasabb hőmérsékletekhez tartozó a párolgási görbe. A szublimációs görbéről leolvashatók az adott nyomáshoz tartozó szilárd–gőz fázisátalakulások hőmérsékletei, míg a párolgási görbéről az adott nyomáshoz tartozó forráshőmérsékletek értékei. Felmerülhet a kérdés, hogy a szilárd–folyadék fázisátalakulást milyen görbe jellemzi. A szilárd és a folyadék halmazállapotot (fázist) az úgynevezett olvadáspontgörbe választja szét. Mivel az olvadáspont rendszerint csak csekély mértékben függ a nyomástól, a nyomás–hőmérséklet diagramban az olvadáspontgörbe csaknem függőleges. A három görbe az úgynevezett **háromspontban** találkozik. Ez jól megfigyelhető a tiszta anyagok fázisdiagramján:



4.3.4.2. ábra: Tiszta anyagok fázisdiagramja

(Megjegyzés: az, hogy az olvadáspontgörbe „jobbra” vagy „balra” dől-e, a szilárd anyag és a folyadék moláris térfogatának különbsége adja meg. Tehát a szilárd anyag és a folyadék sűrűsége alapján megállapítható, hogy a görbe növekszik vagy csökken a hőmérséklet növelésével. Abban az esetben, ha a szilárd anyag moláris vagy fajlagos térfogata kisebb, mint a folyadéké – tehát $\rho_{\text{szilárd}} > \rho_{\text{folyadék}}$ – az olvadáspontgörbe „jobbra dől”. Ez igen gyakori a tiszta anyagok között, egy példa a szén-dioxid. Előfordul azonban, hogy a folyadék moláris vagy fajlagos térfogata kisebb a szilárdénál, azaz $\rho_{\text{szilárd}} < \rho_{\text{folyadék}}$, ekkor a görbe balra dől. Erre egy igen fontos példa a víz.)

A hármaspontban a folyadék, a gőz és a szilárd fázisok egyensúlyban vannak egymással, az ekkor mérhető nyomás és a hőmérséklet (hármasponti nyomás és hőmérséklet) az adott tiszta anyagra jellemző mennyiségek, és így függetlenek a mérési körülményektől.

A hármaspont hőmérséklete feletti hőmérsékleten nem lehet a szilárd anyagot elszublimáltatni, ehhez hasonlóan a hármasponti hőmérséklet alatti hőmérsékleten a folyadék nem párologhat.

Megjegyzés: bizonyos anyagoknak lehet több hármaspontjuk is. Ez elsősorban akkor lehetséges, ha szilárd fázisban lehetőség van különböző, egymással egyensúlyban lévő fázisok kialakulására. Ilyen fázisok lehetnek például a szén esetén a grafit és a gyémánt, ezeket allotróp módosulatoknak nevezzük.

A hármaspont mellett a fázisdiagram egy másik fontos pontja a **kritikus pont** (K). A kritikus pont a párolgásgörbe végpontja, jellemző rá a kritikus nyomás és a kritikus hőmérséklet. A kritikus nyomás feletti nyomáson nem lehetséges légnemű halmazállapot, a gáz vagy gőz kondenzálódik. Ezzel ellentétben a kritikus hőmérsékletnél magasabb hőmérsékleten nem lehet folyadék fázis. Ez lehetőséget ad a gőz és a gáz fogalmak definíciójára:

Gőz: olyan légnemű anyag, mely a tiszta anyagra jellemző kritikus hőmérsékletnél alacsonyabb hőmérsékletű. A kritikus hőmérséklet felett nem lehet gőzről beszélni.

Gáz: rendszerint magában foglalja a gőz fogalmát is, tehát a légnemű halmazállapot szinonimájának tekinthető.

Ha a hőmérséklet nagyobb a kritikus hőmérsékletnél, a nyomás pedig a kritikus nyomásnál, egy negyedik fázishoz jutunk: a (szuperkritikus) **fluid** vagy **szuperfluid** fázis. A fluid állapot tulajdonságaiban a folyadék és légnemű halmazállapot között helyezkedik el: jellemző rá a kiváló oldóképesség, a kis viszkozitás. (Szuperkritikus szén-dioxidot alkalmaznak koffeinmentes kávé előállítására ipari méretekben is. Emellett növényi hatóanyagok kinyerésére is használnak szuperkritikus állapotú anyagokat, sőt szennyvizek és talajok károsanyag-tartalmának csökkentésére is alkalmazhatóak.

Ha egy kísérletben egy gőz–folyadék kétfázisú rendszer hőmérsékletét lassan a kritikus hőmérséklet fölé emeljük, a két fázis közötti fázishatár eltűnik, egy homogén fázis keletkezik. A kritikus pont elérésekor rendszerint zavarosodást, opálosodást figyelhetünk meg.

A fázishatár eltűnése azt jelenti, hogy a folyadék feszültsége nullává válik. Ehhez hasonlóan más tulajdonságokban is történik változás:

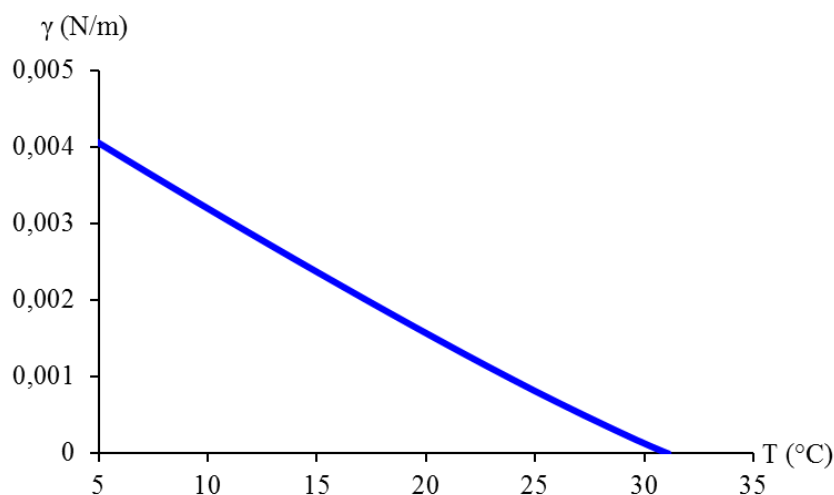
- a moláris párolgáshő nullává válik (eltűnik),
- a felületi feszültség eltűnik,
- a folyadék és gáz sűrűsége azonossá válik,
- a két fázis viszkozitása azonossá válik.

Megjegyzés: a felületi feszültség hőmérsékletfüggését az **Eötvös-törvény** írja le:

$$\gamma = \frac{k \cdot (T_k - T)}{V_m^{2/3}}$$

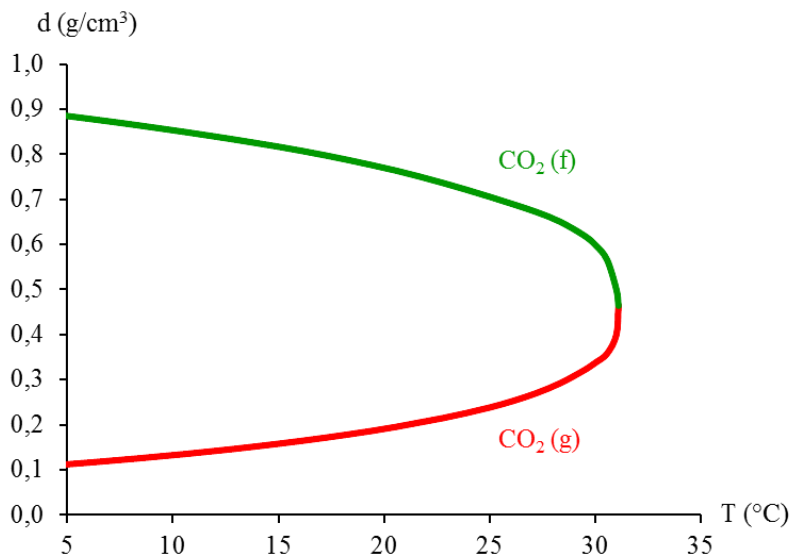
Az egyenletben γ a folyadék felületi feszültsége (N/m), k az Eötvös-állandó, melynek értéke $2,1 \cdot 10^{-7} \text{ J}/(\text{K} \cdot \text{mol}^{2/3})$, T_k a kritikus hőmérséklet (K), T az abszolút hőmérséklet, V_m pedig a folyadék moláris térfogata (m^3/mol).

Az alábbi ábrán a szén-dioxid felületi feszültségének hőmérsékletfüggését figyelhetjük meg:

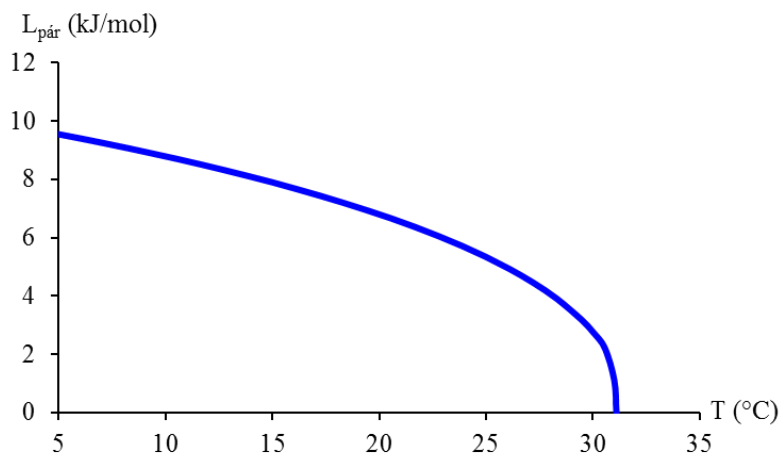


4.3.4.3. ábra: A szén-dioxid felületi feszültségének a hőmérsékletfüggése

A következő diagramokon a cseppfolyós és légnemű szén-dioxid sűrűségét és a szén-dioxid moláris párolgáshőjét ábrázoltuk a hőmérséklet függvényében:



4.3.4.4. ábra: A szén-dioxid sűrűségének a hőmérsékletfüggése



4.3.4.5. ábra: A szén-dioxid moláris párolgáshőjének a hőmérsékletfüggése

4.3.5. A légnemű halmazállapot

A gázok sem önálló alakkal, sem önálló térfogattal nem rendelkeznek. A gázok – a folyadékokhoz hasonlóan – kitöltik a rendelkezésre álló teret, és a térfogatuk függ a nyomástól. A gázokban általában igen gyenge a részecskék közötti kölcsönhatás, gyakorlatilag elhanyagolható.

Ideális gáz: az alkotórészecskék pontszerűek és a közöttük nincsen kölcsönhatás.

Megjegyzendő, hogy az ideális gáz egy modell, mivel a gázokat alkotó részecskék sosem tekinthetők szigorúan pontszerűnek és közöttük kialakulhatnak gyenge kölcsönhatások is. A valóságban a legtöbb gáz reális gázként viselkedik. A reális gázokra nem érvényesek szigorúan az alábbiakban tárgyalt, az ideális gázok viselkedését leíró törvényszerűségek. A problémát elsősorban az alacsony hőmérséklet és nagy nyomás együttes alkalmazása jelentheti, mivel ekkor a gáz (gőz) már közel van a kondenzációhoz, ahol a részecskék között viszonylag jelentős a kölcsönhatás. A reális gázok leírására számos elmélet született, ám ezekkel itt nem foglalkozunk. Az alábbiakban az ideális gázok nyomása, hőmérséklete, térfogata és anyagmennyisége közötti összefüggéseket ismertetünk. Felmerülhet a kérdés, hogy van-e olyan gáz, mely közel ideálisnak tekinthető. Például a hélium igen széles hőmérséklet- és nyomástartományban ideális gázként viselkedik, tehát az ideális gáz törvényei

igen jó közelítéssel érvényesek rá. Emellett számos hétköznapi gáz is nem túl nagy nyomáson és nem túl alacsony hőmérsékleten közel ideálisnak tekinthető, azaz nem követünk el jelentős hibát, ha ideális gázok leírására szolgáló összefüggéseket alkalmazunk számításaink során.

4.3.5.1. *Összefüggések az ideális gáz nyomása (p), térfogata (V) és hőmérséklete (T) között:*

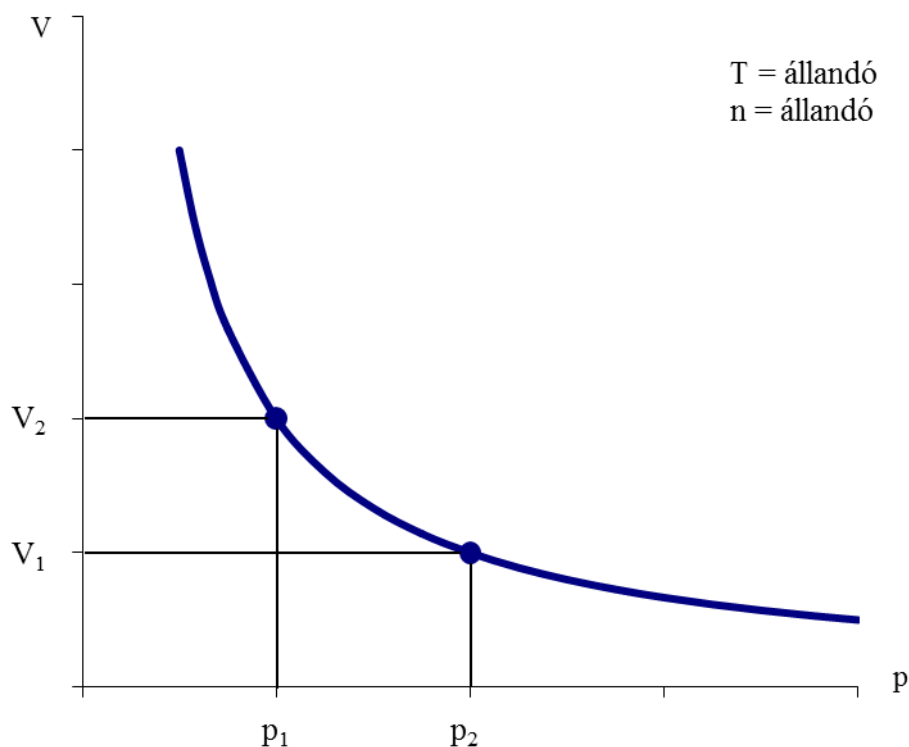
Boyle–Mariotte-törvény: a gáz nyomása (p) és térfogata (V) között fordított arányosság áll fenn, ha a gáz anyagmennyisége és a hőmérséklet állandó. A hőmérsékletet állandó értéken tartva adott anyagmennyiségű gáz térfogatának és nyomásának szorzata állandó:

$$p \cdot V = \text{állandó.}$$

Ha egy adott anyagmennyiségű, nyomású és térfogatú gáz nyomását vagy térfogatát a következő összefüggéssel kiszámíthatjuk:

$$p_1 \cdot V_1 = p_2 \cdot V_2.$$

A gáz térfogatát a nyomásának függvényében ábrázolva jól látható, hogy a mennyiségek közt fordított arányosság áll fenn:



4.3.5.1.1. *ábra: Boyle–Mariotte-törvény*

Charles-törvény (Gay-Lussac I. törvénye): állandó anyagmennyiség és nyomás esetén a gáz térfogata (V) és abszolút hőmérséklete (T) között egyenes arányosság áll fenn:

$$\frac{V}{T} = \text{állandó.}$$

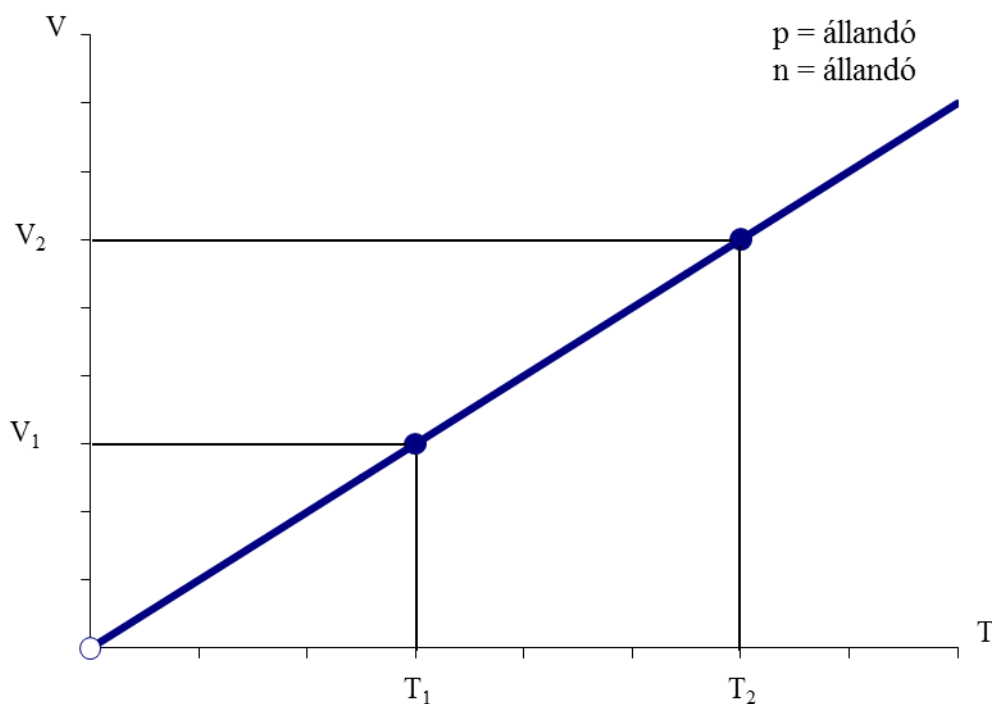
A kelvinben (K) mért abszolút hőmérséklet a Celsius-fokban (°C) mért hőmérsékletnél 273,15 egységgel nagyobb:

$$T[\text{K}] = t[^\circ\text{C}] + 273,15.$$

A törvény megadja az ideális gázok hőtágulását. Például V_1 térfogatú és T_1 hőmérsékletű gázt lezárt edényben, állandó külső nyomás mellett T_2 hőmérsékletre melegítve (vagy hűtve) a gáz V_2 térfogata számítható:

$$\frac{V_1}{T_1} = \frac{V_2}{T_2}.$$

Az egyenes arányosság következtében az ideális gáz térfogatát a hőmérsékletének függvényében ábrázolva egyenest kapunk (a gáz anyagmennyisége nem változik – az edény zárt, illetve a külső nyomás állandó):



4.3.5.1.2. ábra: Charles-törvény (Gay-Lussac I. törvénye)

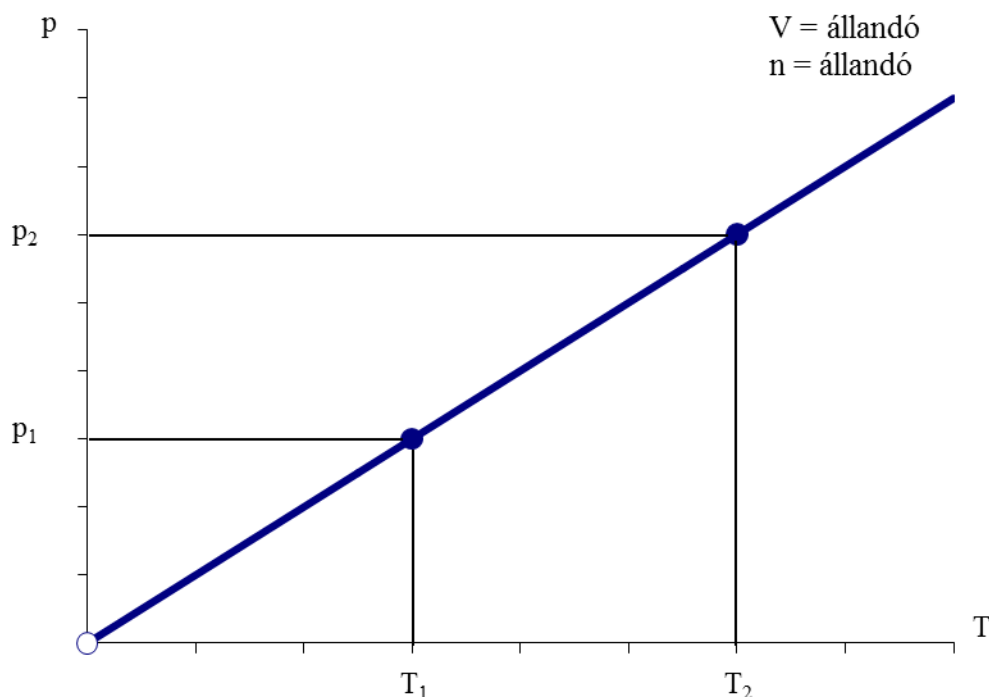
Gay-Lussac-törvény (Gay-Lussac II. törvénye): adott anyagmennyiségű gáz nyomása (p) és abszolút hőmérséklete (T) között egyenes arányosság van, ha a térfogat állandó. Másképp megfogalmazva a nyomás és az abszolút hőmérséklet hányadosa állandó:

$$\frac{p}{T} = \text{állandó}.$$

Ha ismert egy adott anyagmennyiségű gáz nyomása és hőmérséklete, akkor egy ettől eltérő hőmérsékleten számítható a gáz nyomása, ehhez hasonlóan ismert nyomáshoz kiszámítható a hőmérséklete. (Természetesen a gáz anyagmennyisége és térfogata állandó eközben.)

$$\frac{p_1}{T_1} = \frac{p_2}{T_2}$$

Grafikusan ábrázolva:



4.3.5.1.3. ábra: Gay-Lussac-törvény (Gay-Lussac II. törvénye)

A fenti három törvény egyesítésével kapjuk az általános vagy egyesített gáztörvényt:

Egyesített gáztörvény: adott anyagmennyiségű gáz esetén állandó értéket kapunk, ha a gáz nyomásának és térfogatának a szorzatát elosztjuk az abszolút hőmérsékletével:

$$\frac{p \cdot V}{T} = \text{állandó.}$$

Az előzőekhez hasonlóan két állapot között is felírható, ha a gáz anyagmennyisége nem változik:

$$\frac{p_1 \cdot V_1}{T_1} = \frac{p_2 \cdot V_2}{T_2}.$$

Az egyesített gáztörvényből könnyen megkaphatjuk a fenti három gáztörvényt: behelyettesítve például a $T_1 = T_2$ feltételt, adódik a Boyle–Mariotte-törvény.

Avogadro-törvény: különböző anyagi minőségű ideális gázok térfogata és anyagmennyisége megegyezik, ha nyomásuk és térfogatuk azonos. Tehát a gáztörvények függetlenek a gáz anyagi minőségétől, ha a gáz ideálisnak tekinthető.

Az Avogadro-törvény következménye, hogy adott nyomáson és hőmérsékleten az ideális gázok térfogata csak a gáz anyagmennyiségétől függ, az **anyagi minőségétől nem függ**. Így a **moláris térfogat** (1 mól gáz térfogata *adott hőmérsékleten és nyomáson*) is független az anyagi minőségtől:

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

Például 0 °C-on (273,15 K-en) és normál légköri nyomáson (101 325 Pa) az ideális gázok moláris térfogata 22,41 dm³/mol, függetlenül anyagi minőségüktől.

Az ideális gázok állapotegyenlete:

$$p \cdot V = n \cdot R \cdot T,$$

ahol

p: a gáz nyomása Pa-ban,

V: a gáz térfogata m³-ben,

n: a gáz anyagmennyisége molban,

R: egyetemes gázállandó vagy **Regnault-állandó**, melynek értéke: 8,314 J/(mol·K),

T: a gáz hőmérséklet K-ben.

A gáztörvény alkalmazásakor nagyon fontos, hogy a fenti mértékegységekben helyettesítsük be a mennyiségeket, különben félrevezető eredményeket kapunk!

Érdemes megjegyezni, hogyha a nyomást kPa-ban, a térfogatot pedig dm³-ben (literben) írjuk be az ideális gáztörvénybe, az eredményben nem okoz változást:

$$(1 \text{ kPa}) \cdot (1 \text{ dm}^3) = (10^3 \text{ Pa}) \cdot (10^{-3} \text{ m}^3) = (1 \text{ Pa}) \cdot (1 \text{ m}^3).$$

A gáztörvény szigorúan véve ideális gázokra teljesül, ám nem túl alacsony hőmérsékleten a legtöbb reális gáz tulajdonságait is

Honnan származik az egyetemes gázállandó (R)?

A kísérletek alapján 1 mól gáz térfogata normál légköri nyomáson (p = 101 325 Pa) és 0 °C hőmérsékleten (T = 273,15 K) 22,41 dm³ (V = 0,02241 m³), így a Regnault-állandó:

$$R = \frac{p \cdot V}{n \cdot T} = \frac{101325 \text{ Pa} \cdot 0,02241 \text{ m}^3}{1 \text{ mol} \cdot 273,15 \text{ K}} = 8,314 \frac{\frac{\text{N}}{\text{m}^2} \cdot \text{m}^3}{\text{mol} \cdot \text{K}} = 8,314 \frac{\text{N} \cdot \text{m}}{\text{mol} \cdot \text{K}} = 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}.$$

Az ideális gáztörvény segítségével a gázok sűrűségét is ki tudjuk számítani, ha ismerjük a gáz moláris tömegét:

$$d = \frac{m}{V} = \frac{M \cdot n}{n \cdot R \cdot T} = \frac{M}{R \cdot T} = \frac{p \cdot M}{p \cdot R \cdot T}.$$

Tehát az ideális gáz sűrűsége a nyomástól, a moláris tömegtől, és a hőmérséklettől függ.

Gázok relatív sűrűsége: két gáz sűrűségének aránya, dimenziómentes szám.

Ha a két gáz ugyanabban az állapotban van (azonos nyomásuk és hőmérsékletük), akkor a relatív sűrűség megegyezik a moláris tömegek arányával:

$$d_{\text{rel}} = \frac{d_1}{d_2} = \frac{\frac{p \cdot M_1}{R \cdot T}}{\frac{p \cdot M_2}{R \cdot T}} = \frac{M_1}{M_2}.$$

4.3.5.2. Gázelegyek

A gázelegyeket tömegszázalékos, mólszázalékos vagy térfogatszázalékos összetételükkel szoktuk jellemezni.

Tömegtört vagy **tömegszázalék**: az i -dik komponens tömegének (m_i) és a keverék össztömegének ($\sum m_i$) a hányadosa. A tömegszázalék a tömegtört százalékban kifejezett értéke. Az i -dik komponens tömegtörtje:

$$w_i = \frac{m_i}{\sum m_i}$$

A tömegszázaléokra szokták az alábbi jelölést is alkalmazni: (m/m)%.

Móltört vagy **mólszázalék**: az i -dik komponens anyagmennyiségének (n_i) és a keverék összanyagmennyiségének ($\sum n_i$) a hányadosa. A mólszázalék a móltört százalékban kifejezett értéke. Az i -dik komponens móltörtje:

$$x_i = \frac{n_i}{\sum n_i}$$

A mólszázalékra az alábbi jelölés is használatban van: (n/n)%.

Térfogattört vagy **térfogatszázalék**: az i -dik komponens térfogatának (V_i) és a keverék össz-térfogatának ($\sum V_i$) a hányadosa. A térfogatszázalék a térfogattört százalékban kifejezett értéke. Az i -dik komponens móltörtje:

$$\phi_i = \frac{V_i}{\sum V_i}$$

A definíció alapján a térfogatszázalékra a következő jelölés is ismert: (V/V)%.

Az Avogadro-törvény értelmében ideális gázok esetén a **móltört és a térfogattört megegyezik**.

$$\phi_i = x_i$$

Parciális nyomás: az a nyomás, melyet az adott komponens egyedül fejtene ki, ha a rendelkezésre álló térfogatot – azonos hőmérsékleten – egyedül töltené ki. Az i -dik komponens parciális nyomása:

$$p_i = x_i \cdot p_{\text{össz}}$$

Parciális térfogat: az a térfogat, melyet az adott komponens egyedül töltene be a gázkeverék össznyomásán.

$$V_i = x_i \cdot V_{\text{össz}}$$

A parciális mennyiségek közötti összefüggések:

Dalton-törvény: egy adott gázelegyben a komponensek parciális nyomásának összege megadja a gázelegy össznyomását ($p_{\text{összes}}$). N -komponens esetén:

$$p_1 + p_2 + \dots + p_N = \sum_{i=1}^N p_i = p_{\text{össz}}$$

Amagat-szabály vagy **a parciális térfogatok törvénye**: egy adott gázelegyben a komponensek parciális térfogatainak összege megegyezik a gázelegy össztérfogatával ($V_{\text{össz}}$). N-komponens esetén:

$$V_1 + V_2 + \dots + V_N = \sum_{i=1}^N V_i = V_{\text{össz}}.$$

A parciális mennyiségek összefüggései:

Számítsuk ki egy komponens anyagmennyiségének (n_i) ismeretében a komponens parciális nyomását (p_i) és parciális térfogatát (V_i), ha adott az össznyomás ($p_{\text{össz}}$), össztérfogat ($V_{\text{össz}}$) és a hőmérséklet (T)!

Mivel ismert a komponens anyagmennyisége, az összanyagmennyiség:

$$n_{\text{össz}} = \frac{n_i}{x_i}.$$

Ezt behelyettesítve az ideális gáztörvénybe:

$$p_{\text{össz}} \cdot V_{\text{össz}} = n_{\text{össz}} \cdot R \cdot T = \frac{n_i}{x_i} \cdot R \cdot T.$$

Tehát a következő egyenletet kapjuk:

$$x_i \cdot (p_{\text{össz}} \cdot V_{\text{össz}}) = n_i \cdot R \cdot T.$$

A móltörttel (x_i -vel) az össznyomást is és az össztérfogatot is beszorozhatjuk, így két különböző kifejezést kapunk:

$$\text{I) } (x_i \cdot p_{\text{össz}}) \cdot V_{\text{össz}} = n_i \cdot R \cdot T.$$

Mivel $x_i \cdot p_{\text{össz}} = p_i$, a parciális nyomás könnyen számítható:

$$p_i = \frac{n_i \cdot R \cdot T}{V_{\text{össz}}}.$$

$$\text{II) } (x_i \cdot V_{\text{össz}}) \cdot p_{\text{össz}} = n_i \cdot R \cdot T.$$

Ebből pedig a parciális térfogatot ($V_i = x_i \cdot V_{\text{össz}}$) kapjuk meg:

$$V_i = \frac{n_i \cdot R \cdot T}{p_{\text{össz}}}.$$

Tehát a parciális nyomást és a parciális térfogatot könnyen ki tudjuk számolni a fenti egyszerű összefüggések segítségével.

Figyelem! Gyakran elkövetett hiba, hogy a komponens parciális nyomásából és parciális térfogatából az alábbi **helytelen(!)** módon számítják ki a komponens anyagmennyiségét:

$$p_i \cdot V_i \neq n_i \cdot R \cdot T.$$

Ez logikusnak is tűnhet (az indexek miatt), ám nagyon egyszerűen belátható, hogy tökéletesen alkalmatlan a komponens anyagmennyiségének kiszámítására:

$$p_i = x_i \cdot p_{\text{össz}}, \text{ illetve } V_i = x_i \cdot V_{\text{össz}}, \text{ így } p_i \cdot V_i = (x_i \cdot p_{\text{össz}}) \cdot (x_i \cdot V_{\text{össz}}) = x_i^2 \cdot p_{\text{össz}} \cdot V_{\text{össz}}.$$

A fentiek alapján azonban $n_i \cdot R \cdot T = x_i \cdot p_{\text{össz}} \cdot V_{\text{össz}}$, azaz a képlet hibás. Tehát jegyezzük jól meg a következő összefüggést:

$$p_{\text{össz}} \cdot V_i = p_i \cdot V_{\text{össz}} = n_i \cdot R \cdot T.$$

4.4. Gyakorlókérdések:

- Mit nevezünk elemnek és vegyületnek? Mi a különbség a két csoport között?
- Mik a keverékek?
- Hogyan lehet felosztani az anyagokat összetételük alapján?
- Állapítsa meg, hogy a következő anyagok közül melyek elemek, melyek vegyületek és melyek keverékek!

a) levegő,	f) hamu,
b) kálium-szulfát,	g) gyémánt,
c) tengervíz,	h) kénsav-oldat,
d) ólom,	i) ecetsav,
e) ammónia	j) neon.
- Milyen halmazállapotokat ismer?
- Mondjon példát szobahőmérsékleten, normál légköri nyomáson szilárd, folyadék, illetve légnemű halmazállapotú elemekre és vegyületekre!
- Sorolja fel a halmazállapot-változásokat!
- Definiálja a következő fogalmakat: olvasás, fagyás, forrás, szublimáció, kondenzáció!
- Mi a különbség a forráspont és a forráshőmérséklet között?
- Mit nevezünk exoterm, illetve endoterm folyamatnak?
- Mely halmazállapot-változások endotermek, és melyek exotermek?
- Mit nevezünk látens hőnek?
- Definiálja a moláris olvadáshő fogalmát!
- Milyen folyamatok (endoterm, exoterm) hőjét tekintjük pozitív, illetve negatív előjelűnek?
- Jellemezze a szilárd halmazállapotot!
- Milyen rács típusokat ismer!
- Jellemezze a különböző rács típusokat a következő szempontok alapján:

a) részecskéket összetartó erő,
b) olvadáspont,
c) oldhatóság oldószerekben,
d) szilárdság, mechanikai stabilitás,
e) elektromos vezetőképesség.
- Mondjon mind a négy féle kristályrács típusra 3-3 példát!
- Sorolja be a következő – szilárd halmazállapotú – anyagokat a megfelelő kristályrács típusba (fémrács, ionrács, molekularács, atomrács)!

a) hidrogén-klorid,	g) argon,
b) gyémánt,	h) kálium-nitrát,
c) metán,	i) oxigén,
d) nátrium-foszfát,	j) ezüst,
e) kalcium,	k) szilícium-dioxid,
f) sárgafoszfor,	l) kalcium-oxid.

20. A klórmolekulában és a gyémántban is kovalens kötések vannak, ám szobahőmérsékleten, normál légköri nyomáson a klór gáz, míg a gyémánt szilárd halmazállapotú. Magyarozza meg a különbséget!
21. A szilárd nátrium-klorid elektromos szigetelő, ám megolvasztva már vezeti az elektromos áramot. Magyarozza meg, miért!
22. Miért vezetik a fémek általában jól a hőt és az elektromos áramot?
23. Jellemezze a folyadék halmazállapotot!
24. Mi a felületi feszültség?
25. Mi a párolgás?
26. Definiálja a gőztenzió fogalmát!
27. Mitől függ egy tiszta folyadék gőztenziója?
28. Ismerjük egy folyadék gőztenziójának hőmérséklet-függését. Ez alapján hogyan állapítaná meg a folyadék forráspontját egy tetszőleges nyomáson?
29. Jellemezze a légnemű halmazállapotot!
30. Mi a Boyle–Mariotte-törvény?
31. Mit mond ki a Charles-törvény (Gay-Lussac I. törvénye)?
32. Mi Gay-Lussac (II.) törvénye?
33. Írja fel az egyesített gáztörvényt! Mi a jelentése?
34. Hogyan kapható meg az egyesített gáztörvényből a Boyle–Mariotte-törvény?
35. Írja fel az ideális gázok állapotegyenletét és magyarázza el a benne található betűk jelentését!
36. Hogyan számítható ki egy gáz sűrűsége az ideális gáztörvény alapján? Mitől függ egy gáz sűrűsége?
37. Mi a relatív sűrűség?
38. Milyen mennyiségekkel lehetséges egy gáz összetételét megadni? Definiálja ezeket a fogalmakat!
39. Mi a parciális nyomás?
40. Hogyan definiálható a parciális térfogat?
41. Mit mond ki a Dalton-törvény?
42. Mi az Amagat-szabály?

4.5. Számítási feladatok gáztörvényekkel

4.5.1. Ideális gázok

4.1. példa:

Egy zárt tartályban található ideális gáz nyomása 100,0 kPa, hőmérséklete 300,0 K. Mekkora lesz a gáz nyomása, ha a gáz hőmérsékletét 360,0 K-re növeljük? (A tartály térfogata eközben nem változik.)

Megoldás:

Állandó térfogaton megy végbe az adott gázmennyiség melegítése, ezért a Gay-Lussac-törvényt alkalmazhatjuk:

$$\frac{p_1}{T_1} = \frac{p_2}{T_2}$$

(Természetesen ugyanez adódik az egyesített gáztörvényből $V_1 = V_2 =$ állandó behelyettesítésével.)

Az adatokat behelyettesítve az egyenletbe:

$$p_2 = \frac{T_2}{T_1} \cdot p_1 = \frac{360,0 \text{ K}}{300,0 \text{ K}} \cdot 100,0 \text{ kPa} = 120,0 \text{ kPa}.$$

Tehát a gáz nyomása 120,0 kPa-ra növekedett.

4.2. példa:

Egy gáztartály térfogata $10,00 \text{ dm}^3$, nyomása $100,0 \text{ kPa}$, benne a gáz térfogatát hirtelen $2,00 \text{ dm}^3$ -re csökkentjük. Mekkora lett a gáz nyomása, ha a hőmérséklet állandó eközben? (A gáz anyagmennyisége nem változott az összenyomás hatására!)

Megoldás:

Állandó hőmérséklet és anyagmennyiség esetén alkalmazhatjuk a Boyle–Mariotte-törvényt:

$$p_1 \cdot V_1 = p_2 \cdot V_2.$$

Kifejezve p_2 -t, és behelyettesítve:

$$p_2 = \frac{p_1 \cdot V_1}{V_2} = \frac{100,0 \text{ kPa} \cdot 10,00 \text{ dm}^3}{2,00 \text{ dm}^3} = 500 \text{ kPa}.$$

Tehát a gáz végső nyomása 500,0 kPa-ra növekedett.

4.3. példa:

Egy gáz térfogata $10,00 \text{ dm}^3$, nyomása $100,0 \text{ kPa}$, hőmérséklete pedig $290,0 \text{ K}$. A gáz térfogatát hirtelen $2,00 \text{ dm}^3$ -re csökkentjük, eközben a gáz hőmérséklete $304,0 \text{ K}$ -re növekedett. Mekkora lett a gáz nyomása? (A gáz anyagmennyisége nem változott az összenyomás hatására!)

Megoldás:

Az előző példával ellentétben itt nem állandó a hőmérséklet, tehát nem alkalmazhatjuk a Boyle–Mariotte-törvényt, hanem az egyesített gáztörvényt kell használnunk.

$$V_1 = 10,00 \text{ dm}^3$$

$$p_1 = 100,0 \text{ kPa}$$

$$T_1 = 290,0 \text{ K}$$

$$V_2 = 2,00 \text{ dm}^3$$

$$p_2 = ?$$

$$T_2 = 304,0 \text{ K}$$

Az egyesített gáztörvény:

$$\frac{p_1 \cdot V_1}{T_1} = \frac{p_2 \cdot V_2}{T_2}.$$

Kifejezve p_2 értékét:

$$p_2 = p_1 \cdot \frac{T_2}{T_1} \cdot \frac{V_1}{V_2} = 100,0 \text{ kPa} \cdot \frac{304,0 \text{ K}}{290,0 \text{ K}} \cdot \frac{10,00 \text{ dm}^3}{2,00 \text{ dm}^3} = 524,1 \text{ kPa}.$$

A gáz nyomása – a hőmérséklet növekedésének következtében – nagyobb, mint az előző példában, 524,1 kPa.

4.3. példa:

Mekkora 32,00 kg oxigéngáz (O₂) térfogata 101 300 Pa nyomáson és 296,0 K hőmérsékleten?

$$A_r(\text{O}) = 16,00.$$

Megoldás:

A dioxidgáz moláris tömege $M = 32,00 \text{ g/mol}$, így a $32,00 \text{ kg} = 32\,000 \text{ g}$ oxigéngáz anyagmennyisége:

$$n = \frac{m}{M} = \frac{32\,000 \text{ g}}{32,00 \text{ g/mol}} = 1\,000 \text{ mol}.$$

Az ideális gázok állapotegyenletét kell használni: $p \cdot V = n \cdot R \cdot T$, ebből kifejezzük a térfogatot:

$$V = \frac{n \cdot R \cdot T}{p} = \frac{1\,000 \text{ mol} \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 296,0 \text{ K}}{101\,300 \text{ Pa}} = 24,29 \text{ m}^3.$$

Az oxigéngáz térfogata 24,29 m³.

4.4. példa:

Egy $25,00 \text{ dm}^3$ térfogatú gázpalackban a nyomás kezdeti értéke $5,000 \text{ MPa}$, a hőmérséklet pedig $300,0 \text{ K}$. A palackban található ideális gáz $30,0\%$ -át kiengedjük, melynek során az palackban található gáz hőmérséklete $275,0 \text{ K}$ -re csökken. Mekkora lett a palackban a nyomás? Megvárjuk, hogy a gáz visszamelegedjen $300,0 \text{ K}$ -re. Mekkora lesz ekkor a nyomás a gázpalackban?

A gázpalack hőtágulásától tekintsünk el!

Megoldás:

Egy lehetséges megoldást mutatunk itt be.

Számítsuk ki a gáz kiindulási anyagmennyiségét az ideális gáztörvény segítségével:

$$n_1 = \frac{p_1 \cdot V_1}{R \cdot T_1} = \frac{5 \cdot 10^6 \text{ Pa} \cdot 25 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3}{8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 300,0 \text{ K}} = 50,116 \text{ mol}.$$

Ennek $70,0\%$ -a marad a gázpalackban, azaz $n_2 = 0,700 \cdot 50,116 \text{ mol} = 35,08 \text{ mol}$. A palackban a nyomás a gáz kiengedése után (mivel a palack térfogata nem változik, $V_2 = V_1$):

$$p_2 = \frac{n_2 \cdot R \cdot T_2}{V_1} = \frac{35,08 \text{ mol} \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 275,0 \text{ K}}{25 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3} = 3,208 \cdot 10^6 \text{ Pa} = 3,208 \text{ MPa}.$$

Mikor a gáz hőmérséklete visszamelegszik $300,0 \text{ K}$ -re, a gáz nyomása Gay-Lussac törvényével számítható:

$$p_3 = \frac{T_3}{T_2} \cdot p_2 = \frac{300,0 \text{ K}}{275,0 \text{ K}} \cdot 3,208 \text{ MPa} = 3,500 \text{ MPa}.$$

Tehát a lehűlt gáz nyomása 3,208 MPa, a felmelegedetté pedig 3,500 MPa.

4.5. példa:

Oldjuk meg az előző feladatot úgy, hogy nem ismerjük a gázpalack térfogatát!

Megoldás:

A térfogatot hagyjuk paraméterként: V . A kiindulási anyagmennyiség:

$$n_1 = \frac{p_1 \cdot V}{R \cdot T_1}$$

A gáz kiengedése utáni anyagmennyiség: $n_2 = 0,700 \cdot n_1$.

Az új nyomás:

$$\begin{aligned} p_2 &= \frac{n_2 \cdot R \cdot T_2}{V} = \frac{0,700 \cdot n_1 \cdot R \cdot T_2}{V} = \frac{0,700 \cdot \frac{p_1 \cdot V}{R \cdot T_1} \cdot R \cdot T_2}{V} = \frac{0,700 \cdot p_1 \cdot T_2}{T_1} = \\ &= \frac{0,700 \cdot 5,000 \text{ MPa} \cdot 275,0 \text{ K}}{300,0 \text{ K}} = 3,208 \cdot 10^6 \text{ Pa} = 3,208 \text{ MPa}. \end{aligned}$$

A feladat második kérdése Gay-Lussac törvényével számítható:

$$p_3 = \frac{T_3}{T_2} \cdot p_2 = \frac{300,0 \text{ K}}{275,0 \text{ K}} \cdot 3,208 \text{ MPa} = 3,500 \text{ MPa}.$$

Tehát a lehűlt gáz nyomása 3,208 MPa, a felmelegedetté pedig 3,500 MPa.

4.6. példa:

Adott két gáztartály: az 1. tartály térfogata $10,00 \text{ dm}^3$, benne $360,0 \text{ K}$ hőmérsékletű és $270,0 \text{ kPa}$ nyomású nitrogéngáz található, a 2. tartály térfogata $30,00 \text{ dm}^3$, melyben $300,0 \text{ K}$ hőmérsékletű és $150,0 \text{ kPa}$ nyomású nitrogéngáz van. A két tartályt egy elhanyagolható térfogatú csővel összekötjük, ekkor a gázok összekeverednek, a nyomás és a hőmérséklet kiegyenlítődik. A tartályokban kialakuló hőmérséklet $320,0 \text{ K}$. Mekkora nyomás mérhető a gáztartályokban?

A tartályok hőtágulásból eredő esetleges térfogatváltozását hagyjuk figyelmen kívül!

Megoldás:

A két tartályban található gázok anyagmennyiségei:

$$\begin{aligned} n_1 &= \frac{p_1 \cdot V_1}{R \cdot T_1} = \frac{270 \cdot \text{kPa} \cdot 10 \text{ dm}^3}{8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 360,0 \text{ K}} = 0,90209 \text{ mol}. \\ n_2 &= \frac{p_2 \cdot V_2}{R \cdot T_2} = \frac{150 \text{ kPa} \cdot 30 \text{ dm}^3}{8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 300,0 \text{ K}} = 1,80418 \text{ mol}. \end{aligned}$$

(Emlékezzünk csak vissza! Ha a nyomást kPa-ban, a térfogatot pedig dm^3 -ben helyettesítjük be az ideális gáztörvénybe, az R értéke nem változik!)

A két tartályban található gázok anyagmennyisége:

$$n = n_1 + n_2 = 0,90209 \text{ mol} + 1,80418 \text{ mol} = 2,70627 \text{ mol}$$

Az össztérfogat a két tartály térfogatának összege:

$$V = V_1 + V_2 = 10,00 \text{ dm}^3 + 30,00 \text{ dm}^3 = 40,00 \text{ dm}^3.$$

A kialakuló közös hőmérséklet alapján a nyomás:

$$p = \frac{n \cdot R \cdot T}{V} = \frac{2,70627 \text{ mol} \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 320,0 \text{ K}}{40 \text{ dm}^3} = 180,0 \text{ kPa}$$

Tehát a kialakuló közös nyomás 180,0 kPa.

4.7. példa:

Egy gázpalack térfogata 23,00 liter, 310,0 K hőmérsékleten a benne található héliumgáz nyomása 2000,0 kPa. Mekkora a héliumgáz tömege? A gázpalack legfeljebb 5,500 MPa nyomást bír ki. Maximálisan mekkora hőmérsékletre emelhetjük biztonságosan a hőmérsékletet? (Eközben a palack térfogata nem változik.)

$$A_r(\text{He}) = 4,00.$$

Megoldás:

A gáz anyagmennyisége:

$$n = \frac{p \cdot V}{R \cdot T} = \frac{2000 \text{ kPa} \cdot 23 \text{ dm}^3}{8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 310,0 \text{ K}} = 17,848 \text{ mol}$$

A héliumgáz tömege:

$$m = M \cdot n = 4,00 \text{ g/mol} \cdot 17,848 \text{ mol} = 71,39 \text{ g}.$$

Állandó anyagmennyiség és térfogat esetén alkalmazhatjuk a Gay-Lussac-törvényt a maximális hőmérséklet kiszámítására:

$$T_2 = \frac{p_2}{p_1} \cdot T_1 = \frac{5,500 \text{ MPa}}{2,000 \text{ MPa}} \cdot 310,0 \text{ K} = 852,5 \text{ K}.$$

Tehát a gázpalackban 71,39 gramm hélium van, és 852,5 K (579,4 °C) hőmérsékletre melegedhet fel a palack.

4.8. példa:

Mekkora a nitrogéngáz (N₂) sűrűsége 450,0 K hőmérsékleten és 1,010 bar nyomáson? Azonos nyomás mellett mekkora hőmérsékleten lenne a nitrogéngáz sűrűsége 1,000 g/dm³?

$$A_r(\text{N}) = 14,00.$$

Megoldás:

A dinitrogén moláris tömege $M = 28,0 \text{ g/mol} = 0,028 \text{ kg/mol}$.

Az ideális gáz állapotegyenletéből a sűrűség:

$$p \cdot V = n \cdot R \cdot T = \frac{m}{M} \cdot R \cdot T, \quad \text{melyből}$$

$$d = \frac{p \cdot M}{R \cdot T} = \frac{1,010 \cdot 10^5 \text{ Pa} \cdot 0,028 \frac{\text{kg}}{\text{mol}}}{8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 450,0 \text{ K}} = 0,756 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} = 0,756 \frac{\text{g}}{\text{dm}^3}.$$

A második kérdésben azt a hőmérsékletet kell megkeresni, melyen a gáz sűrűsége éppen $1,000 \text{ g/dm}^3 = 1,000 \text{ kg/m}^3$. Ehhez a fenti képletből a hőmérsékletet kell kifejezni:

$$T = \frac{p \cdot M}{R \cdot d} = \frac{1,010 \cdot 10^5 \text{ Pa} \cdot 0,028 \frac{\text{kg}}{\text{mol}}}{8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 1,000 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}} = 340,1 \text{ K}.$$

A nitrogéngáz sűrűsége a fenti nyomáson és hőmérsékleten $0,756 \text{ g/dm}^3$, továbbá $340,1 \text{ K}$ -re kell csökkenteni a hőmérsékletét, hogy sűrűsége $1,000 \text{ g/dm}^3$ legyen.

4.9. példa:

Egy ideális gáz sűrűsége $102,67 \text{ kPa}$ nyomáson és $298,0 \text{ K}$ hőmérsékleten $2,652 \text{ kg/m}^3$. Mi a vegyület képlete, ha $50,0$ tömegszázaléka kénből és $50,0$ tömegszázalék oxigénből áll?

$$A_r(\text{S}) = 32,00$$

$$A_r(\text{O}) = 16,00.$$

Megoldás:

A gáz moláris tömege:

$$M = \frac{d \cdot R \cdot T}{p} = \frac{2,652 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 298,0 \text{ K}}{102\,670 \text{ Pa}} = 0,0640 \frac{\text{kg}}{\text{mol}} = 64,0 \frac{\text{g}}{\text{mol}}.$$

A kén mennyisége: $0,500 \cdot 64,00 \text{ g/mol} = 32,00 \text{ g/mol} \Rightarrow$ molekulánként egy kénatom.

Az oxigén mennyisége: $0,500 \cdot 64,00 \text{ g/mol} = 32,00 \text{ g/mol} \Rightarrow$ molekulánként két oxigénatom.

A vegyület tehát a kén-dioxid, SO_2 .

4.10. példa:

Egy tartályban oxigéngáz (O_2), egy másikban pedig klórgáz (Cl_2) található, mindkét tartályban azonos a nyomás. Mindkét tartály hőmérséklete $300,0 \text{ K}$. Állandó nyomáson mennyivel kell megemelni a klórgázt tartalmazó tartályban a hőmérsékletet, hogy a két gáz sűrűsége azonosra váljon? (A klórgázt tartalmazó tartály hőmérséklete és nyomása állandó.)

$$A_r(\text{O}) = 16,00$$

$$A_r(\text{Cl}) = 35,50.$$

Megoldás:

Az oxigénmolekula moláris tömege $32,00 \text{ g/mol}$, a klórmolekuláé pedig $71,00 \text{ g/mol}$.

Az oxigéngáz sűrűsége (p_1 nyomáson és T_1 hőmérsékleten):

$$d(\text{O}_2) = \frac{p_1 \cdot M(\text{O}_2)}{R \cdot T_1}.$$

A keresett T_2 hőmérsékleten és p_1 nyomáson a klórgáz sűrűsége:

$$d(\text{Cl}_2) = \frac{p_1 \cdot M(\text{Cl}_2)}{R \cdot T_2}.$$

A két gáz sűrűsége megegyezik:

$$d(\text{O}_2) = d(\text{Cl}_2),$$

majd behelyettesítve kapjuk, hogy

$$\frac{p_1 \cdot M(\text{O}_2)}{R \cdot T_1} = \frac{p_1 \cdot M(\text{Cl}_2)}{R \cdot T_2}.$$

Az egyenletet átrendezve kapjuk, hogy

$$T_2 = \frac{M(\text{Cl}_2)}{M(\text{O}_2)} \cdot T_1 = \frac{71,00 \text{ g/mol}}{32,00 \text{ g/mol}} \cdot 300,0 \text{ K} = 665,6 \text{ K}.$$

Tehát a klórgáz hőmérsékletét 365,6 K-nel kell megnövelnünk, hogy a két gáz sűrűsége azonos legyen.

4.11. példa:

Állapítsuk meg a következő gázok sűrűségét 101 325 Pa nyomáson és 273,15 K hőmérsékleten, valamint számítsuk ki ezen gázok azonos állapotú nitrogéngázra vonatkoztatott sűrűségét is:



$$A_r(\text{N}) = 14,00 \quad A_r(\text{O}) = 16,00 \quad A_r(\text{H}) = 1,00 \quad A_r(\text{F}) = 19,00.$$

Megoldás:

A gázok moláris tömegei:

$$\text{NO}_2: \quad M(\text{NO}_2) = 1 \cdot 14,00 + 2 \cdot 16,00 = 46,00 \text{ g/mol} = 0,046 \text{ kg/mol}.$$

$$\text{NH}_3: \quad M(\text{NH}_3) = 1 \cdot 14,00 + 3 \cdot 1,00 = 17,00 \text{ g/mol} = 0,017 \text{ kg/mol}.$$

$$\text{NF}_3: \quad M(\text{NF}_3) = 1 \cdot 14,00 + 3 \cdot 19,00 = 71,00 \text{ g/mol} = 0,071 \text{ kg/mol}.$$

A nyomás: $p = 101\,325 \text{ Pa}$, a hőmérséklet $273,15 \text{ K}$.

$$d(\text{NO}_2) = \frac{p \cdot M(\text{NO}_2)}{R \cdot T} = \frac{101325 \text{ Pa} \cdot 0,046 \frac{\text{kg}}{\text{mol}}}{8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 273,15 \text{ K}} = 2,052 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3},$$

$$d(\text{NH}_3) = \frac{p \cdot M(\text{NH}_3)}{R \cdot T} = \frac{101325 \text{ Pa} \cdot 0,017 \frac{\text{kg}}{\text{mol}}}{8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 273,15 \text{ K}} = 0,758 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3},$$

$$d(\text{NF}_3) = \frac{p \cdot M(\text{NF}_3)}{R \cdot T} = \frac{101325 \text{ Pa} \cdot 0,071 \frac{\text{kg}}{\text{mol}}}{8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 273,15 \text{ K}} = 3,168 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}.$$

A relatív sűrűség kiszámítása igen egyszerű, mivel minden gáz ugyanabban az állapotban van. A nitrogéngáz moláris tömege: $M(\text{N}_2) = 2 \cdot 14,00 = 28,00 \text{ g/mol}$.

$$d_{\text{rel}} = \frac{d(\text{NO}_2)}{d(\text{N}_2)} = \frac{M(\text{NO}_2)}{M(\text{N}_2)} = \frac{46,00 \text{ g/mol}}{28,00 \text{ g/mol}} = 1,643,$$

$$d_{\text{rel}} = \frac{d(\text{NH}_3)}{d(\text{N}_2)} = \frac{M(\text{NH}_3)}{M(\text{N}_2)} = \frac{17,00 \text{ g/mol}}{28,00 \text{ g/mol}} = 0,6071,$$

$$d_{\text{rel}} = \frac{d(\text{NF}_3)}{d(\text{N}_2)} = \frac{M(\text{NF}_3)}{M(\text{N}_2)} = \frac{71,00 \text{ g/mol}}{28,00 \text{ g/mol}} = 2,536.$$

Az adott körülmények között a nitrogén-dioxid sűrűsége 2,052 kg/m³, az ammóniáé 0,758 kg/m³, a nitrogén-trifluoridé pedig 3,168 kg/m³. A három gáz nitrogénre vonatkoztatott sűrűsége rendre 1,643, 0,6071 és 2,536.

4.5.2. Gázelegyekkel kapcsolatos számítások

4.12. példa:

Egy 120,0 kPa össznyomású gázkeverék 60,00 térfogatszázalék metánból és 40,00 térfogatszázalék etánból áll. Mekkora az egyes komponensek parciális nyomása? A gázkeverék egy 29,00 dm³ térfogatú tartályban található. Mekkora a komponensek parciális térfogata?

Megoldás:

Ideális gázok esetén egy adott komponens térfogatszázaléka és mólszázaléka azonos értékű.

A parciális nyomások adódnak a móltört és az össznyomás szorzataként:

$$p_{\text{metán}} = x_{\text{metán}} \cdot p_{\text{össz}} = 0,6000 \cdot 120,0 \text{ kPa} = 72,00 \text{ kPa},$$

$$p_{\text{etán}} = x_{\text{etán}} \cdot p_{\text{össz}} = 0,4000 \cdot 120,0 \text{ kPa} = 48,00 \text{ kPa}.$$

Mivel a térfogattört megegyezik a móltörrel, a parciális térfogatok adódnak az egyes térfogattörtek (móltörtek) és az össztérfogat szorzataként:

$$V_{\text{metán}} = \phi_{\text{metán}} \cdot V_{\text{össz}} = x_{\text{metán}} \cdot V_{\text{össz}} = 0,6000 \cdot 29,00 \text{ dm}^3 = 17,40 \text{ dm}^3,$$

$$V_{\text{etán}} = \phi_{\text{etán}} \cdot V_{\text{össz}} = x_{\text{etán}} \cdot V_{\text{össz}} = 0,4000 \cdot 29,00 \text{ dm}^3 = 11,60 \text{ dm}^3.$$

Tehát a metán parciális nyomás 72,00 kPa, az etané pedig 48,00 kPa; a metán parciális térfogata 17,40 dm³, az etané 11,60 dm³.

(Érdemes megfigyelni, hogy a parciális nyomások összege kiadja az össznyomást, a parciális térfogatok összege megegyezik az össztérfogattal.)

4.13. példa:

Állapítsuk meg a térfogat-százalékos és tömegszázalékos összetételét annak a háromkomponensű gázelegynek, melyben a nitrogén (N₂) parciális nyomása 47 400 Pa, a hidrogéné (H₂) 35 550 Pa, az ammóniáé (NH₃) pedig 11 850 Pa! Mekkora a térfogata 1,00 mól gázelegynek 285,0 K hőmérsékleten? Mekkora az egyes komponensek parciális térfogata?

$$M(\text{N}_2) = 28,0 \text{ g/mol},$$

$$M(\text{H}_2) = 2,00 \text{ g/mol},$$

$$M(\text{NH}_3) = 17,0 \text{ g/mol}.$$

Megoldás:

A gázelegy össznyomása megegyezik a parciális nyomások összegével:

$$p_{\text{össz}} = p_{\text{N}_2} + p_{\text{H}_2} + p_{\text{NH}_3} = 47\,400 \text{ Pa} + 35\,550 \text{ Pa} + 11\,850 \text{ Pa} = 94\,800 \text{ Pa}.$$

A térfogatszázalékos összetétel megegyezik a mólszázalékos összetétellel, mely a parciális nyomásokról számítható:

$$\phi_{N_2} = x_{N_2} = \frac{p_{N_2}}{p_{\text{össz}}} = \frac{47\,400\text{ Pa}}{94\,800\text{ Pa}} = 0,500,$$

$$\phi_{H_2} = x_{H_2} = \frac{p_{H_2}}{p_{\text{össz}}} = \frac{35\,550\text{ Pa}}{94\,800\text{ Pa}} = 0,375,$$

$$\phi_{NH_3} = x_{NH_3} = \frac{p_{NH_3}}{p_{\text{össz}}} = \frac{11\,850\text{ Pa}}{94\,800\text{ Pa}} = 0,125. 0,125.$$

A tömegszázalékos összetétel kiszámításához vegyük 1 mólnyi gázt! Ebben az egyes komponensek tömege:

$$m_{N_2} = M(N_2) \cdot n_{N_2} = 28,0 \text{ g/mol} \cdot 0,500 \text{ mol} = 14,00 \text{ g},$$

$$m_{H_2} = M(H_2) \cdot n_{H_2} = 2,0 \text{ g/mol} \cdot 0,375 \text{ mol} = 0,75 \text{ g},$$

$$m_{NH_3} = M(NH_3) \cdot n_{NH_3} = 17,0 \text{ g/mol} \cdot 0,125 \text{ mol} = 2,125 \text{ g}.$$

Az 1 mól gáz össztömege:

$$m_{\text{össz}} = m_{N_2} + m_{H_2} + m_{NH_3} = 16,875 \text{ g}.$$

A tömegtörtök:

$$w_{N_2} = \frac{m_{N_2}}{m_{\text{össz}}} = \frac{14,00 \text{ g}}{16,875 \text{ g}} = 0,830,$$

$$w_{H_2} = \frac{m_{H_2}}{m_{\text{össz}}} = \frac{0,75 \text{ g}}{16,875 \text{ g}} = 0,044,$$

$$w_{NH_3} = \frac{m_{NH_3}}{m_{\text{össz}}} = \frac{2,125 \text{ g}}{16,875 \text{ g}} = 0,126.$$

1,00 mól gáz össztérfogata:

$$V_{\text{össz}} = \frac{n \cdot R \cdot T}{p} = \frac{1,00 \text{ mol} \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 285,0 \text{ K}}{94\,800 \text{ Pa}} = 0,0250 \text{ m}^3 = 25,0 \text{ dm}^3.$$

A parciális térfogatot megkapjuk az össztérfogat és móltörtök (=téfogattörtök) szorzataként:

$$V_{N_2} = x_{N_2} \cdot V_{\text{össz}} = 0,500 \cdot 25,0 \text{ dm}^3 = 12,5 \text{ dm}^3,$$

$$V_{H_2} = x_{H_2} \cdot V_{\text{össz}} = 0,375 \cdot 25,0 \text{ dm}^3 = 9,375 \text{ dm}^3,$$

$$V_{NH_3} = x_{NH_3} \cdot V_{\text{össz}} = 0,125 \cdot 25,0 \text{ dm}^3 = 3,125 \text{ dm}^3.$$

A gázelegy 50,0 (V/V)% nitrogént, 37,5 (V/V)% hidrogént és 12,5 (V/V)% ammóniát tartalmaz. A tömegszázalékos összetétel: 83,0 (m/m)% nitrogén, 4,4 (m/m)% hidrogén valamint 12,6 (m/m)% ammónia. Továbbá a három komponens (N_2 , H_2 , NH_3) parciális térfogata rendre 12,5 dm³, 9,38 dm³, valamint 3,13 dm³.

4.14. példa:

Egy oxigénből és argonból álló gázelegyben az oxigén anyagmennyisége 0,750 mol. A gázelegy térfogata 3750 cm³, össznyomása pedig 1662,8 kPa 300,0 K hőmérsékleten. Mekkora az oxigén parciális térfogata és parciális nyomása? Állapítsuk meg a keverék átlagos moláris tömegét!

$$M(O_2) = 32,00 \text{ g/mol} \quad M(Ar) = 40,00 \text{ g/mol}.$$

Megoldás:

Az oxigéngáz anyagmennyiségéből az össznyomás segítségével megkapjuk a parciális térfogatát, az össztérfogat alapján pedig meghatározható az oxigén parciális nyomása:

$$p_{\text{össz}} \cdot V_i = p_i \cdot V_{\text{össz}} = n_i \cdot R \cdot T.$$

Az oxigén gáz parciális térfogata:

$$V_{O_2} = \frac{n_{O_2} \cdot R \cdot T}{p_{\text{össz}}} = \frac{0,750 \text{ mol} \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 300,0 \text{ K}}{1662,8 \text{ kPa}} = 1,125 \text{ dm}^3 = 1125 \text{ cm}^3,$$

és parciális nyomása:

$$p_{O_2} = \frac{n_{O_2} \cdot R \cdot T}{V_{\text{össz}}} = \frac{0,750 \text{ mol} \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 300,0 \text{ K}}{3,750 \text{ dm}^3} = 498,8 \text{ kPa}.$$

Az átlagos moláris tömeg kiszámításához célszerű meghatározni a két komponens móltörtjét:

$$x_{O_2} = \frac{p_{O_2}}{p_{\text{össz}}} = \frac{498,8 \text{ kPa}}{1662,8 \text{ kPa}} = 0,300,$$

az argon móltörtje értelemszerűen $x_{Ar} = 1 - 0,300 = 0,700$.

Az átlagos moláris tömeg:

$$\bar{M} = x_{O_2} \cdot M(O_2) + x_{Ar} \cdot M(Ar) = 0,300 \cdot 32,00 \text{ g/mol} + 0,700 \cdot 40,00 \text{ g/mol} = 36,4 \text{ g/mol}.$$

Az oxigén parciális térfogata 1 125 cm³, parciális nyomás 498,8 kPa, az elegy átlagos moláris tömege pedig 36,4 g/mol.

4.15. példa:

Adott két gáztartály, melyeket egy vékony cső köt össze, amelyen keresztül a két gáz összekeveredése gyakorlatilag elhanyagolható, ha a két tartályban a nyomás azonos. Az 1. tartály 1,00 mol héliumot tartalmaz és hőmérséklete 200,0 K, a 2. tartályban pedig 2,00 mol hidrogéngáz van 400,0 K-en. A tartályokban a nyomás 200,0 kPa. A két tartályból álló rendszert 300,0 K hőmérsékletű termosztátba helyezük, és megvárjuk, hogy a tartályok felvegyék ezt a hőmérsékletet. Állapítsuk meg a tartályokban a nyomást és a térfogat-százalékos összetételt!

Megoldás:

Számítsuk ki a két tartály térfogatát! (A héliumot tartalmazó tartályt jelöljük 1-es indexszel.)

$$V_1 = \frac{n_1 \cdot R \cdot T_1}{p_1} = \frac{1,00 \text{ mol} \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 200,0 \text{ K}}{200,0 \text{ kPa}} = 8,314 \text{ dm}^3,$$

$$V_2 = \frac{n_2 \cdot R \cdot T_2}{p_2} = \frac{2,00 \text{ mol} \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 400,0 \text{ K}}{200,0 \text{ kPa}} = 33,256 \text{ dm}^3.$$

Ha a rendszert a termosztátba helyezzük, a két tartályban azonos lesz a nyomás (p_3) és a hőmérséklet ($T_3 = 300,0 \text{ K}$) is. Így $n_3 = n_1 + n_2 = 3,00 \text{ mol}$ gáz tölti ki az összterfogatot, mely $V_3 = V_1 + V_2 = 41,57 \text{ dm}^3$. Így kiszámítható a kialakult új (egyensúlyi) nyomás:

$$p_3 = \frac{n_3 \cdot R \cdot T_3}{V_3} = \frac{3,00 \text{ mol} \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 300,0 \text{ K}}{41,57 \text{ dm}^3} = 180,0 \text{ kPa}$$

Mindkét tartályban azonos lesz a nyomás, méghozzá $180,0 \text{ kPa}$. A hőmérsékletnövekedés hatására az 1. tartályban található héliumgáz kitágul, míg a 2. tartályban található hidrogéngáz nyomása csökken, mivel hőmérséklete csökken. Ennek következtében az 1. tartályból héliumgáz áramlik át a 2. tartályba. Az 1. tartályban maradó héliumgáz anyagmennyisége:

$$n_1^* = \frac{p_3 \cdot V_1}{R \cdot T_3} = \frac{180,0 \text{ kPa} \cdot 8,314 \text{ dm}^3}{8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 300,0 \text{ K}} = 0,600 \text{ mol}$$

Tehát az 1. tartályban $0,600 \text{ mol}$ héliumgáz marad, átáramlik a 2. tartályba $0,400 \text{ mol}$. Így a 2. tartály tartalma: $2,00 \text{ mol}$ hidrogéngáz és $0,400 \text{ mol}$ héliumgáz. Tehát a térfogat-százalékos összetétel:

$$\phi_{\text{H}_2} = \frac{0,400 \text{ mol}}{0,400 \text{ mol} + 2,00 \text{ mol}} = 0,1667.$$

Így a két tartályban $180,0 \text{ kPa}$ lesz a közös nyomás, az 1. tartály csak héliumot tartalmaz, míg a 2. tartály térfogat-százalékos összetétele: $16,67\%$ hélium és $83,33\%$ hidrogén.

4.5.3. A gőzteniő alkalmazása feladatokban

4.16. példa:

A víz gőzteniója $290,0 \text{ K}$ hőmérsékleten $1,933 \text{ kPa}$. $1,000 \text{ m}^3$ levegő $290,0 \text{ K}$ hőmérsékleten mekkora tömegű vizet tartalmaz, ha az vízgőzre telített? Mekkora tömegű a víztartalma, ha a relatív páratartalom csak $73,0\%$?

$$M(\text{H}_2\text{O}) = 18,00 \text{ g/mol}$$

Megoldás:

Ha egy gáz adott hőmérsékleten telített vízgőzre (vagy bármely más folyadék gőzére) nézve, azt jelenti, hogy a gőz parciális nyomása megegyezik a gőzteniójukkal (ekkor a relatív páratartalom 100%).

$$p_{\text{H}_2\text{O}} = p^\circ = 1,933 \text{ kPa}$$

A vízgőz anyagmennyisége az ideális gáztörvény alapján:

$$n_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{p_{\text{H}_2\text{O}} \cdot V_{\text{össz}}}{R \cdot T} = \frac{1933 \text{ Pa} \cdot 1,000 \text{ m}^3}{8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 290,0 \text{ K}} = 0,802 \text{ mol.}$$

Ennek tömege:

$$m_{\text{H}_2\text{O}} = M(\text{H}_2\text{O}) \cdot n_{\text{H}_2\text{O}} = 18,00 \text{ g/mol} \cdot 0,802 \text{ mol} = 14,4 \text{ g.}$$

Ha a relatív páratartalom $\varphi\%$, akkor a vízgőz parciális nyomása az adott hőmérsékleten vett gőztenzió $\varphi\%$ -a:

$$p_{\text{H}_2\text{O}}(\varphi) = \varphi \cdot p^\circ.$$

Mivel a nyomás és az anyagmennyiség egyenesen arányosak (adott hőmérsékleten és térfogatban), a gőzfázisban található vízmennyiség is $\varphi\%$ -a annak, mint amit a vízgőzre telített érték esetén kaptunk.

$$n_{\text{H}_2\text{O}}(\varphi) = \frac{p_{\text{H}_2\text{O}}(\varphi) \cdot V_{\text{össz}}}{R \cdot T} = \frac{\varphi \cdot p^\circ \cdot V_{\text{össz}}}{R \cdot T} = \varphi \cdot \frac{p^\circ \cdot V_{\text{össz}}}{R \cdot T} = \varphi \cdot n_{\text{H}_2\text{O}}(\text{telített}).$$

Természetesen ez nem csak az anyagmennyiségre, hanem a tömegre is igaz:

$$m_{\text{H}_2\text{O}}(73,0\%) = \varphi \cdot m_{\text{H}_2\text{O}}(\text{telített}) = 0,730 \cdot 14,4 \text{ g} = 10,5 \text{ g.}$$

(Aki nem hiszi, számolja ki a fenti képlet alapján úgy, hogy a vízgőz parciális nyomása helyébe a $0,730 \cdot 1933 \text{ Pa} = 1411 \text{ Pa}$ értéket.)

A vízgőzre telített levegő 1 köbmétere 14,4 gramm vízgőzt tartalmaz, a 73,0%-os relatív páratartalmú levegőben pedig 10,5 gramm vízgőz található.

4.17. példa:

Egy 10,00 literes össztérfogatú gázpalackban vízgőzre telített oxigéngáz (O_2) van. Az oxigén tömege 0,1600 kg, a palack aljában 0,500 liter folyékony víz van. Mekkora a gázpalackban az össznyomás 323,0 K hőmérsékleten? Hány térfogatszázalék vízgőz van a gáztérben? A víz gőztenziója 323,0 K hőmérsékleten 12,33 kPa.

$$A_r(\text{O}): 16,00.$$

Megoldás:

A tartály gázterében csak oxigéngáz és vízgőz található, a mólszázalékos összetételhez szükségünk van

Az oxigén anyagmennyisége:

$$n_{\text{O}_2} = \frac{m}{M} = \frac{160,0 \text{ g}}{32,0 \text{ g/mol}} = 5,00 \text{ mol,}$$

A vízzel telített oxigéngáz össztérfogata folyékony víz felüli térfogat:

$$V = 10 \text{ dm}^3 - 0,5 \text{ dm}^3 = 9,5 \text{ dm}^3.$$

A (száraz) oxigéngáz parciális nyomása:

$$p_{\text{O}_2} = \frac{n_{\text{O}_2} \cdot R \cdot T}{V_{\text{össz}}} = \frac{5,00 \text{ mol} \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 323,0 \text{ K}}{9,500 \text{ dm}^3} = 1414,38 \text{ kPa}.$$

A víz parciális nyomása megegyezik a gőztenzióval:

$$p_{\text{H}_2\text{O}} = p^\circ = 12,33 \text{ kPa}.$$

Az össznyomás az oxigéngáz és a vízgőz parciális nyomásának összeg:

$$p_{\text{össz}} = p_{\text{O}_2} + p_{\text{H}_2\text{O}} = 1414,38 \text{ kPa} + 12,33 \text{ kPa} = 1425,7 \text{ kPa}.$$

A víz móltörtje adódik a parciális nyomásából:

$$p_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{p_{\text{H}_2\text{O}}}{p_{\text{össz}}} = \frac{12,33 \text{ kPa}}{1425,7 \text{ kPa}} = 0,0086.$$

A gázpalackban a vízgőztartalom 0,86 mólszázalék.

4.18. példa:

Egy szoba méretei: 4,00 m × 5,30 m × 3,20 m. A szobában 101,31 kPa nyomású, 298,0 K hőmérsékletű száraz levegő (21,0 térfogat% O₂, 79,0 térfogat% N₂) van. Felmosás során legfeljebb mekkora térfogatú víz borulhat ki a padlóra, hogy annak teljes mennyisége el tudjon párologni? Mi lesz a szoba levegőjének mólszázalékos, illetve tömegszázalékos összetétele egyensúlyban, ha feltételezzük, hogy a szobából nem tud eltávozni sem levegő, sem vízpára?

A víz gőztenziója 298 K hőmérsékleten: 3,17 kPa.

$$A_r(\text{N}): 14,00; A_r(\text{O}): 16,00.$$

Megoldás:

A szoba térfogata:

$$V = 4,00 \text{ m} \cdot 5,30 \text{ m} \cdot 3,20 \text{ m} = 67,84 \text{ m}^3.$$

Ha vízgőzzel telített a levegő, akkor a víz parciális nyomása éppen a gőztenzió értéke:

$$p_{\text{H}_2\text{O}} = p^\circ = 3,17 \text{ kPa}.$$

A vízgőz anyagmennyisége:

$$n_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{p^\circ \cdot V}{R \cdot T} = \frac{3170 \text{ Pa} \cdot 67,84 \text{ m}^3}{8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 298 \text{ K}} = 86,80 \text{ mol}.$$

A vízgőz tömege:

$$m_{\text{H}_2\text{O}} = M(\text{H}_2\text{O}) \cdot n_{\text{H}_2\text{O}} = 18,0 \text{ g/mol} \cdot 86,80 \text{ mol} = 1562 \text{ g}.$$

A víz sűrűsége alapján kiszámítható a víz térfogata:

$$V_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{m_{\text{H}_2\text{O}}}{d} = \frac{1562 \text{ g}}{1,000 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}} = 1562 \text{ cm}^3.$$

Legfeljebb 1,56 liter víz borulhatott ki.

A vízgőzzel telített levegő összetételének kiszámításához szükségünk van a levegő alkotóelemeinek mennyiségére.

A levegő anyagmennyisége:

$$n = \frac{p \cdot V}{R \cdot T} = \frac{101310 \text{ Pa} \cdot 67,84 \text{ m}^3}{8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 298 \text{ K}} = 2774,0 \text{ mol}.$$

Ebben az oxigén mennyisége 21,0 mól%, a nitrogéné pedig 79,0 mól%:

$$n_{\text{O}_2} = 0,210 \cdot 2774,0 \text{ mol} = 582,5 \text{ mol},$$

$$n_{\text{N}_2} = 0,790 \cdot 2774,0 \text{ mol} = 2191,5 \text{ mol}.$$

A gázkeverékben van még emellett vízgőz is:

$$n_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{p^\circ \cdot V}{R \cdot T} = \frac{3170 \text{ Pa} \cdot 67,84 \text{ m}^3}{8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 298 \text{ K}} = 86,80 \text{ mol}.$$

A gőzzel telített levegő összanyagmennyisége:

$$n_{\text{össz}} = n_{\text{O}_2} + n_{\text{N}_2} + n_{\text{H}_2\text{O}} = 2774,0 + 86,8 \text{ mol} = 2860,8 \text{ mol}.$$

Az egyes komponensek tömegei:

$$m_{\text{O}_2} = M(\text{O}_2) \cdot n_{\text{O}_2} = 32,00 \text{ g/mol} \cdot 582,5 \text{ mol} = 18\,640 \text{ g},$$

$$m_{\text{N}_2} = M(\text{N}_2) \cdot n_{\text{N}_2} = 28,00 \text{ g/mol} \cdot 2191,5 \text{ mol} = 61\,362 \text{ g},$$

$$m_{\text{H}_2\text{O}} = M(\text{H}_2\text{O}) \cdot n_{\text{H}_2\text{O}} = 18,00 \text{ g/mol} \cdot 86,8 \text{ mol} = 1\,562,4 \text{ g}.$$

A gázelegy össztömege:

$$m_{\text{össz}} = m_{\text{O}_2} + m_{\text{N}_2} + m_{\text{H}_2\text{O}} = 18\,640 \text{ g} + 61\,362 \text{ g} + 1\,562,4 \text{ g} = 81\,564,4 \text{ g}.$$

Így a mol%-os illetve (m/m)%-os összetétel:

	Móltört	Tömegtört
O ₂	(582,5 mol) / (2860,8 mol) = 0,204	(18 640 g) / (81 564,4 g) = 0,229
N ₂	(2191,5 mol) / (2860,8 mol) = 0,766	(61 362 g) / (81 564,4 g) = 0,752
H ₂ O	(86,8 mol) / (2860,8 mol) = 0,030	(1 562,4 g) / (81 564,4 g) = 0,019

Tehát legfeljebb 1,56 liter víz borulhat ki a szobában. Az ekkor keletkező gázelegyben oxigéntartalma 20,4 mól%, nitrogéntartalma 76,6 mól%, víz tartalma pedig 3,0 mól%. Az összetétel tömeg%-ban: 22,9% oxigén, 75,2% nitrogén és 1,9% vízgőz.

4.19. példa:

Egy 2,00 dm³ térfogatú lombikban normál légköri nyomáson levegő van. Lezárjuk a lombikot, és 40,0 °C-on befecskendezünk 1,00 dm³ 40,0 °C hőmérsékletű folyékony diklór-metánt. Mekkora lesz a nyomás? A diklór-metán forráspontja normál légköri nyomáson 40,0 °C.

Megoldás:

A diklór-metánt befecskendezve a lombikban található levegő fele térfogatára összenyomódik, így nyomása kétszeresére növekszik (Boyle–Mariotte-törvény). Így a levegő nyomása:

$$p_{\text{levegő}} = 2 \cdot 101,325 \text{ kPa} = 202,650 \text{ kPa.}$$

A diklór-metán egy része elpárolog, miközben kialakul az adott hőmérsékletnek megfelelő gőztenzió. Ehhez igen kis mennyiségű folyadék elpárolgása elegendő, mivel a gázok és a folyadékok sűrűsége között rendszerint három nagyságrend különbség van. Tehát a párolgás során a folyadék térfogata gyakorlatilag nem változik. A diklór-metán parciális nyomása azonos lesz a normál légköri nyomással, mivel éppen forráspontján van a folyadék.

$$p_{\text{diklór-metán}} = p^{\circ} = 101,325 \text{ kPa.}$$

Így az össznyomás a lombikban:

$$p_{\text{össz}} = p_{\text{levegő}} + p_{\text{diklór-metán}} = 202,650 \text{ kPa} + 101,325 \text{ kPa} = 303,975 \text{ kPa.}$$

Tehát a lombikban a nyomás 304 kPa.

Megjegyzés: Érdemes leellenőrizni, hogy az elpárolgott diklór-metán térfogata tényleg elhanyagolható-e. Számítsuk ki az elpárolgott diklór-metán anyagsűrűségét!

$$n_{\text{diklór-metán}} = \frac{p^{\circ} \cdot V}{R \cdot T} = \frac{101,325 \text{ kPa} \cdot 1,00 \text{ dm}^3}{8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 313,15 \text{ K}} = 0,0389 \text{ mol.}$$

A diklór-metán tömege:

$$m_{\text{diklór-metán}} = M \cdot n_{\text{diklór-metán}} = 85,0 \text{ g/mol} \cdot 0,0389 \text{ mol} = 3,31 \text{ g.}$$

A cseppfolyós diklór-metán sűrűsége 1,33 g/cm³, így a térfogat:

$$V_{\text{diklór-metán}} = \frac{m_{\text{diklór-metán}}}{d} = \frac{3,31 \text{ g}}{1,33 \text{ g/cm}^3} = 2,5 \text{ cm}^3.$$

Mint látható, az elpárolgott diklór-metán térfogata tényleg elhanyagolható az össztérfogathoz képest.

4.20. példa:

Egy 20,0 dm³ úrtartalmú gázpalackban 12,60 kg szén-dioxidnak hány %-a lesz cseppfolyós állapotban 293 K-en, ha ezen a hőmérsékleten a szén-dioxid gőznyomása 5,776 MPa és a folyékony szén-dioxid sűrűsége 0,764 g/cm³?

Megoldás:

(1)

Számítsuk ki a szén-dioxid sűrűségét a gőzfázisban az ideális gáztörvénnyel (a gáztér telített szén-dioxidra tehát $p = p^\circ$)!

$$d_g = \frac{p^\circ \cdot M(\text{CO}_2)}{R \cdot T} = \frac{5,776 \cdot 10^6 \text{ Pa} \cdot 0,044 \frac{\text{kg}}{\text{mol}}}{8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 293 \text{ K}} = 104 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} = 0,104 \frac{\text{kg}}{\text{dm}^3}.$$

Ismerjük tehát a tartályban a cseppfolyós és légnemű szén-dioxid sűrűségét, így meghatározhatjuk a két fázis arányát, mivel ismerjük a szén-dioxid össztömegét és össztérfogatát.

A szén-dioxid össztérfogata: $V_{\text{össz}} = V_g + V_f.$

A szén-dioxid össztömege: $m_{\text{össz}} = d_g \cdot V_g + d_f \cdot V_f.$

Behelyettesítve az egyenletrendszer:

$$V_{\text{össz}} = 20,0 \text{ dm}^3 = V_g + V_f,$$

$$m_{\text{össz}} = 12,60 \text{ kg} = d_g \cdot V_g + d_f \cdot V_f = (0,104 \text{ kg/dm}^3) \cdot V_g + (0,764 \text{ kg/dm}^3) \cdot V_f.$$

Fejezzük ki például a gőz térfogatát az össztérfogatból!

$$V_g = V_{\text{össz}} - V_f = 20,0 - V_f \text{ (dm}^3\text{)}.$$

Helyettesítsük be az össztömeg egyenletébe!

$$12,60 = 0,104 \cdot (20,0 - V_f) + 0,764 \cdot V_f.$$

A megoldás: $V_f = 15,94 \text{ dm}^3$. Ez az össztérfogat 79,7%-a. Számítsuk ki a tömegarányt is!

$$m_f = d_f \cdot V_f = (0,764 \text{ kg/dm}^3) \cdot (15,94 \text{ dm}^3) = 12,178 \text{ kg}.$$

Tehát a szén-dioxid tömegének 96,7%-a van a cseppfolyós fázisban.

(2)

Legyen a szén-dioxid x -ed része cseppfolyós fázisban! Ekkor a cseppfolyós fázis tömege:

$$m_f = x \cdot m_{\text{össz}} = x \cdot 12,60 \text{ kg}.$$

A cseppfolyós fázis térfogata:

$$V_f = \frac{m_f}{d_f} = \frac{x \cdot m_{\text{össz}}}{d_f} = \frac{x \cdot 12,60 \text{ kg}}{0,764 \frac{\text{kg}}{\text{dm}^3}} = x \cdot 16,49 \text{ dm}^3.$$

A gőzfázis térfogata:

$$V_g = V_{\text{össz}} - V_f = 20,0 \text{ dm}^3 - x \cdot 16,49 \text{ dm}^3.$$

A részarányból felírhatunk egy összefüggést a gőz anyagmennyiségére is:

$$m_g = m_{\text{össz}} - m_f = (1 - x) \cdot 12,60 \text{ kg}.$$

$$n_g = \frac{m_g}{M(\text{CO}_2)} = \frac{(1-x) \cdot 12,60 \text{ kg}}{0,044 \frac{\text{kg}}{\text{mol}}} = (1-x) \cdot 286,36 \text{ mol}$$

Adott a gőz anyagmennyisége, térfogata, nyomása (gőztenzió) és a hőmérséklet is, így az ideális gáztörvény segítségével a következő egyenlethez jutunk:

$$p^\circ \cdot V_g = n_g \cdot R \cdot T,$$

$$5,776 \cdot 10^6 \cdot (20,0 - x \cdot 16,49) \cdot 10^{-3} = (1-x) \cdot 286,36 \cdot 8,314 \cdot 293.$$

Az egyenlet megoldása: $x = 0,967$, tehát a szén-dioxid 96,7%-a van cseppfolyós fázisban. Tehát a szén-dioxid tömegének 96,7%-a, térfogatának 79,7%-a van a cseppfolyós fázisban.

4.21. példa:

Egy ipari folyamatban az előállított gyógyszeralapanyag víztartalma 8,50%, a felhasználás során csak 1,20%-os víztartalom a megengedett. Hány m^3 333 K hőmérsékletű és 100,0 kPa nyomású száraz levegő szükséges 100,0 kg anyag szárításához? A szárítás közben a levegő vízgőzre telítetté válik, és az össznyomás állandó. A víz gőztenziója 333 K hőmérsékleten 19,92 kPa.

Megoldás:

Először számítsuk ki az eltávolítandó víz mennyiségét!

A nedves anyag tömege a szárazanyag tömegének és a víz tömegének összege. Számítsuk ki a szárazanyag-tartalmat!

$$m_{\text{sz.a.}} = (1 - w_{\text{víz},1}) \cdot m_0 = (1 - 0,085) \cdot 100,0 \text{ kg} = 91,5 \text{ kg}.$$

A szárított anyagnak már csak 98,8%-a víz, ezért a szárított anyag tömege:

$$m = \frac{m_{\text{sz.a.}}}{1 - w_{\text{víz},2}} = \frac{91,5 \text{ kg}}{1 - 0,012} = \frac{91,5 \text{ kg}}{0,988} = 92,61 \text{ kg}.$$

Az eltávolítandó víz tömege adódik a kiindulási tömeg és a szárított anyag tömegének különbségeként:

$$m_{\text{víz}} = m_0 - m = 100,0 \text{ kg} - 92,61 \text{ kg} = 7,39 \text{ kg} = 7\,390 \text{ g}.$$

A víz anyagmennyisége:

$$n_{\text{víz}} = \frac{m_{\text{víz}}}{M(\text{H}_2\text{O})} = \frac{7\,390 \text{ g}}{18,0 \text{ g/mol}} = 410,5 \text{ mol}$$

A levegő mennyiségének kiszámítására két különböző megoldást is bemutatunk:

(1)

A víz parciális nyomásával (mely a gőztenzióval azonos) számítsuk ki a vízgőzzel telített levegő térfogatát!

$$V_{\text{össz}} = \frac{n_{\text{víz}} \cdot R \cdot T}{p^\circ} = \frac{410,5 \text{ mol} \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 333 \text{ K}}{19920 \text{ Pa}} = 57,05 \text{ m}^3.$$

Ebben a gázelegyenben a vízgőz parciális nyomása 19,92 kPa, a levegőé pedig 80,08 kPa. Így az elegyenben a száraz levegő térfogata:

$$V_{\text{levegő}} = x_{\text{levegő}} \cdot V_{\text{össz}} = \frac{p_{\text{levegő}}}{p_{\text{össz}}} \cdot V_{\text{össz}} = \frac{80,08 \text{ kPa}}{100,0 \text{ kPa}} \cdot 57,05 \text{ m}^3 = 45,7 \text{ m}^3.$$

(2)

A vízgőzre telített levegőben a vízgőz móltörtje:

$$x_{\text{víz}} = \frac{p_{\text{víz}}}{p_{\text{össz}}} = \frac{p^{\circ}}{p_{\text{össz}}} = \frac{19,92 \text{ kPa}}{100,0 \text{ kPa}} = 0,1992$$

A levegő móltörtje értelemszerűen $x_{\text{levegő}} = 1 - x_{\text{víz}} = 1 - 0,1992 = 0,8008$.

A vízgőz anyagmennyiségéből kiszámítható a vízgőzre telített elegyen anyagmennyisége:

$$n_{\text{össz}} = \frac{n_{\text{víz}}}{x_{\text{víz}}} = \frac{410,5 \text{ mol}}{0,1992} = 20607 \text{ mol}$$

Ebben a száraz levegő anyagmennyisége:

$$n_{\text{levegő}} = x_{\text{levegő}} \cdot n_{\text{össz}} = 0,8008 \cdot 20607 \text{ mol} = 16502 \text{ mol}$$

Így a száraz levegő térfogata (mivel a betáplált levegő száraz, ennek nyomása 100,0 kPa):

$$V_{\text{levegő}} = \frac{n_{\text{levegő}} \cdot R \cdot T}{p_{\text{össz}}} = \frac{16502 \text{ mol} \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 333 \text{ K}}{100000 \text{ Pa}} = 45,7 \text{ m}^3.$$

Mindkét megoldással ugyanahhoz az eredményhez jutunk: a szükséges száraz levegő térfogata 45,7 m³.

5. KONCENTRÁCIÓK, OLDHATÓSÁG, ÁTKRISTÁLYOSÍTÁS

Az elegyek, a keverékek, az oldatok több összetevőt vagy más néven komponenst (tisztá anyagot: elemet vagy vegyületet) tartalmaznak. A keverékek összetételét igen sokféleképpen adhatjuk meg, rendszerint egy komponens mennyiségét viszonyítjuk a keverék összmennyiségéhez. Ezen mennyiségeket többféleképpen megadhatjuk: tömeggel, térfogattal, anyagmennyiséggel. A mennyiségek arányát szokás törtben vagy százalékban megadni. Tulajdonképpen ezek ugyanazt jelentik. A százalék századrészt jelent, tehát egy százalék megegyezik 0,01-del. Például $0,27 = \frac{27}{100} = 27\%$.

5.1. Tört-, illetve százalékjellegű mennyiségek

Tört-, illetve százalékjellegű mennyiségek: két ugyanolyan dimenziójú mennyiség arányából adódnak, ezért dimenziómentesek.

Jellemzőjük továbbá, hogy értéküket az összes komponensre összegezve 1-et (100%-ot) kapunk.

Tömegtört vagy **tömegszázalék:** az i -dik komponens tömegének (m_i) és a keverék össztömegének ($\sum m_i$) a hányadosa. A tömegszázalék a tömegtört százalékban kifejezett értéke. Az i -dik komponens tömegtörtje (N komponens esetén):

$$w_i = \frac{m_i}{\sum_{i=1}^N m_i}.$$

A tömegszázalékra szokták az alábbi jelölést is alkalmazni: (m/m)%. Amennyiben nincs külön jelölve egy feladatban, hogy milyen százalékról (törtről) van szó, akkor azt mindig tömegszázaléknak tekintjük.

Móltört vagy **mólszázalék:** az i -dik komponens anyagmennyiségének (n_i) és a keverék összsanyagmennyiségének ($\sum n_i$) a hányadosa. A mólszázalék a móltört százalékban kifejezett értéke. Az i -dik komponens móltörtje (N komponens esetén):

$$x_i = \frac{n_i}{\sum_{i=1}^N n_i}.$$

A mólszázalékra az alábbi jelölés is használatban van: (n/n)%.

Térfogattört vagy **térfogatszázalék:** az i -dik komponens térfogatának (V_i) és a keverék össz-térfogatának ($\sum V_i$) a hányadosa. A térfogatszázalék a térfogattört százalékban kifejezett értéke. Az i -dik komponens móltörtje (N komponens esetén):

$$\phi_i = \frac{V_i}{\sum_{i=1}^N V_i}.$$

A definíció alapján a térfogatszázalékra a következő jelölés is ismert: (V/V)%.

Az oldatok koncentrációját általában nem szoktuk térfogatszázalékban megadni, mivel ennek csak akkor van értelme, ha nincs térfogatváltozás az oldódás vagy elegyedés során. (A töményebb oldatok készítésénél rendszerint fellép térfogatcsökkenés, esetleg térfogat-növekedés.) Érdemes megjegyezni, hogy alkoholos oldatok esetén gyakran alkalmazzák a térfogattörtet az összetevők megadására.

5.2. Koncentráció jellegű mennyiségek

Koncentráció jellegű mennyiségek: két különböző dimenziójú mennyiség arányát jelentik, ezért rendszerint van mértékegységük.

Molaritás, moláris koncentráció vagy röviden **koncentráció:** az adott komponens anyagmennyiségének (n_i) és az oldat térfogatának (V) hányadosa.

$$c = \frac{n_i}{V}$$

Mértékegysége: rendszerint mol/dm³ (M), de lehet mol/m³ (= 10⁻³ mol/dm³), kmol/m³ (=1 mol/dm³), mol/cm³ (= 10³ mol/dm³), mmol/cm³ (= mol/dm³), μmol/cm³ (= 10⁻³ mol/dm³).

A mol/dm³ mértékegységet gyakran M-nek rövidítjük.

A molaritást ritkábban **anyagmennyiség-koncentrációnak** is nevezik.

Tömegkoncentráció: az adott komponens tömegének (m_i) és az oldat térfogatának (V) hányadosa:

$$\rho = \frac{m_i}{V} .$$

Mértékegysége: általában g/dm³, de lehet kg/m³ (= g/dm³), mg/cm³ (= g/dm³), μg/cm³ (=10⁻³ g/dm³).

A tömegkoncentráció hasonló mennyiség, mint a régebben használt **vegyesszázalék**, melynek definíciója: 100 cm³ oldatban oldott anyag tömege grammban kifejezve, így mértékegysége g/100 cm³. A vegyesszázalék helyett a tömegkoncentrációt célszerű használni.

Raoult-koncentráció vagy **molalitás:** az komponens anyagmennyiségének (n_i) és az oldószer tömegének ($m_{\text{oldószer}}$) hányadosa:

$$c_R = \frac{n_i}{m_{\text{oldószer}}} .$$

Mértékegysége: mol/kg vagy mol/1000 gramm oldószer.

Figyelem! A mola**L**itás a Raoult-koncentráció (mol/kg oldószer), a mola**R**itás viszont a moláris koncentráció (mol/dm³), nem szabad őket összekeverni!

Összefoglalva a különböző koncentrációjfajtákat:

Koncentráció	Oldott anyag	Oldószer	Oldat	Képlet	Mértékegység
Tömegtört	m (gramm)		m (gramm)	$w_i = \frac{m_i}{\sum_{i=1}^N m_i}$	—
Móltört	n (mol)		n (mol)	$x_i = \frac{n_i}{\sum_{i=1}^N n_i}$	—
Térfogattört	V (dm ³)		V (dm ³)	$\phi_i = \frac{V_i}{\sum_{i=1}^N V_i}$	—
Moláris koncentráció	n (mol)		V (dm ³)	$c = \frac{n_i}{V}$	$\frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}$
Tömegkoncentráció	m (gramm)		V (dm ³)	$\rho = \frac{m_i}{V}$	$\frac{\text{g}}{\text{dm}^3}$
Raoult-koncentráció	n (mol)	m (kg)		$c_R = \frac{n_i}{m_{\text{oldószer}}}$	$\frac{\text{mol}}{\text{kg}}$

5.3. A ppm- és ppb-koncentrációk:

Ppm (**p**arts **p**er **m**illion): megadja az adott komponens mennyiségét egységben, a rendszer millió (10^6) egységéhez viszonyítva. A mennyiséget kifejezhetjük tömeg- vagy anyagmennyiség-egységében, de lehet részecskeszámban is. Térfogatok arányát gyakran használjuk gázok koncentrációjának meghatározására.

Például 1 ppm a koncentráció a következő esetekben:

$$(1 \text{ gramm}) / (10^6 \text{ gramm}) = (10^{-6} \text{ gramm}) / (1 \text{ gramm}) = 1 \text{ } \mu\text{g/g} = 1 \text{ mg/kg},$$

$$(1 \text{ mol}) / (10^6 \text{ mol}) = (10^{-6} \text{ mol}) / (1 \text{ mol}) = 1 \text{ } \mu\text{mol/mol} = 1 \text{ mmol/kmol},$$

$$(1 \text{ cm}^3) / (10^6 \text{ cm}^3) = (10^{-6} \text{ cm}^3) / (1 \text{ cm}^3) = 1 \text{ } \mu\text{liter/liter} = 1 \text{ cm}^3/\text{m}^3.$$

Ehhez nagyon hasonló a ppb-koncentráció:

Ppb (**p**arts **p**er **b**illion): megadja az adott komponens mennyiségét egységben, a rendszer milliárd (10^9) egységéhez viszonyítva. A mennyiséget ismét kifejezhetjük tömeg-, térfogat- vagy pedig anyagmennyiség-egységében, de lehet részecskeszámban is.

Például 1 ppb a koncentráció a következő esetekben:

$$(1 \text{ gramm}) / (10^9 \text{ gramm}) = (10^{-9} \text{ gramm}) / (1 \text{ gramm}) = 1 \text{ ng/g} = 1 \text{ } \mu\text{g/kg},$$

$$(1 \text{ mol}) / (10^9 \text{ mol}) = (10^{-9} \text{ mol}) / (1 \text{ mol}) = 1 \text{ nmol/mol} = 1 \text{ } \mu\text{mol/kmol},$$

$$(1 \text{ cm}^3) / (10^9 \text{ cm}^3) = (10^{-9} \text{ cm}^3) / (1 \text{ cm}^3) = 1 \text{ } \mu\text{liter}/\text{m}^3.$$

5.4. A koncentrációk átszámítása

A kémiai kísérletek során nagyon gyakran előfordul, hogy pontos összetételű oldatokkal kell dolgoznunk. Természetesen nem mindig találunk a laborban pont megfelelő koncentrációjú oldatot, ilyenkor saját magunknak kell végeznünk az oldat előállítását (például só feloldásával, tömény savoldat hígításával stb.), ezzel a fejezet későbbi részeiben foglalkozunk majd. Viszont az is gyakran előfordul, hogy az oldatok koncentrációját „át kell váltanunk” egymásba. A következőkben a koncentrációk átszámításával ismerkedünk meg részletesebben.

A koncentrációk átszámításával kapcsolatban fontos megjegyezni, hogy a legtöbb feladatot többféleképpen lehet megoldani, itt a sok lehetőség közül egy-egyét ismertetünk. Minden kidolgozott mintapélda után megmutatjuk, hogyan lehet egyszerűsített képletet megállapítani az egyes számításokhoz. Ezeket a képleteket természetesen nem érdemes „bemagolni”, viszont bizonyos esetekben gyors számítást tesznek lehetővé.

Tömegtört → móltört

5.1. példa

Mekkora a móltörtje a 20,00 tömegszázalékos nátrium-nitrát-oldatnak?

$$M(\text{NaNO}_3) = 85,0 \text{ g/mol}, M(\text{H}_2\text{O}) = 18,0 \text{ g/mol}.$$

Megoldás:

Vegyünk egy tetszőleges mennyiségű, például 100 gramm oldatot! A móltört kiszámításához szükségünk van minden komponens, azaz az oldott anyag és oldószer anyagmennyiségére. Ehhez a tömegszázalék alapján ki kell számítanunk a komponensek tömegét az oldatban, majd a moláris tömegek segítségével át kell számolnunk ezeket anyagmennyiségre. Nézzük ezt a gyakorlatban!

100 gramm oldatban a nátrium-nitrát tömege a tömegszázalék (20%) alapján:

$$m(\text{NaNO}_3) = 0,200 \cdot 100 \text{ g} = 20,0 \text{ gramm}.$$

Mivel az oldott anyag és oldószer tömegtörtjének összege 1 (kiadja a 100%-ot), a víz tömegtörtje:

$$w(\text{H}_2\text{O}) = 1 - w(\text{NaNO}_3) = 1 - 0,200 = 0,800,$$

$$m(\text{H}_2\text{O}) = 0,800 \cdot 100 \text{ g} = 80,0 \text{ gramm}.$$

A móltört kiszámításához szükségünk van az anyagmennyiségekre:

$$n(\text{NaNO}_3) = \frac{m}{M} = \frac{20,0 \text{ g}}{85 \text{ g/mol}} = 0,2353 \text{ mol},$$

$$n(\text{H}_2\text{O}) = \frac{m}{M} = \frac{80,0 \text{ g}}{18 \text{ g/mol}} = 4,4444 \text{ mol}.$$

A móltört megadja, hogy az adott komponens mekkora hányada az oldat anyagmennyiségének. Az oldat anyagmennyisége:

$$n = n(\text{NaNO}_3) + n(\text{H}_2\text{O}) = 0,2353 \text{ mol} + 4,4444 \text{ mol} = 4,6797 \text{ mol}.$$

A NaNO_3 móltörtje:

$$x(\text{NaNO}_3) = \frac{0,2353 \text{ mol}}{4,6797 \text{ mol}} = 0,0503.$$

Tehát a 20 tömegszázalékos nátrium-nitrát-oldat móltörtje 0,0503.

Mint fentebb láttuk, a szükséges mennyiségek: w_1 (oldott anyag tömegtörtje), M_1 (oldott anyag moláris tömege), M_2 (oldószer moláris tömege).

Vegyünk m tömegű oldatot! Ebben van $m_1 = w_1 \cdot m$ tömegű oldott anyag és $m_2 = (1 - w_1) \cdot m$ tömegű oldószer. Ezek anyagmennyisége:

$$n_1 = \frac{w_1 \cdot m}{M_1}, \text{ illetve } n_2 = \frac{(1 - w_1) \cdot m}{M_2}.$$

Az összanyagmennyiség:

$$n = n_1 + n_2 = \frac{w_1 \cdot m}{M_1} + \frac{(1 - w_1) \cdot m}{M_2}.$$

Így az oldott anyag móltörtje:

$$x_1 = \frac{n_1}{n_1 + n_2} = \frac{\frac{w_1 \cdot m}{M_1}}{\frac{w_1 \cdot m}{M_1} + \frac{(1 - w_1) \cdot m}{M_2}} = \frac{\frac{w_1}{M_1}}{\frac{w_1}{M_1} + \frac{(1 - w_1)}{M_2}}.$$

Ehhez hasonlóan, ha az 1. komponens tömegtörtje w_1 , a 2. komponensé w_2 , a 3. komponensé w_3 stb., például az 1. komponens móltörtje:

$$x_1 = \frac{\frac{w_1}{M_1}}{\frac{w_1}{M_1} + \frac{w_2}{M_2} + \frac{w_3}{M_3} + \dots} = \frac{\frac{w_1}{M_1}}{\sum_{i=1}^n \frac{w_i}{M_i}}.$$

Figyelem! A képletben minden komponens szerepel, tehát az oldószer tömegtörtje és moláris tömege is!

Móltört \rightarrow tömegtört

5.2. példa:

Állapítsuk meg, hogy mekkora a 10,0 mólszázalékos kalcium-klorid-oldat tömegtörtje!

$$M(\text{CaCl}_2) = 111,0 \text{ g/mol}, M(\text{H}_2\text{O}) = 18,0 \text{ g/mol}.$$

Megoldás:

Induljunk ki egy adott mennyiségű, például 100 mol oldatból! Ennek 10%-a kalcium-klorid, 90%-a pedig víz:

$$n(\text{CaCl}_2) = 0,100 \cdot 100 \text{ mol} = 10,0 \text{ mol},$$

$$n(\text{H}_2\text{O}) = 0,900 \cdot 100 \text{ mol} = 90,0 \text{ mol}.$$

A tömegtört kiszámításához szükség van az egyes komponensek tömegére:

$$m(\text{CaCl}_2) = 111 \text{ g/mol} \cdot 10,0 \text{ mol} = 1110,0 \text{ g},$$

$$m(\text{H}_2\text{O}) = 18 \text{ g/mol} \cdot 90,0 \text{ mol} = 1620,0 \text{ g.}$$

A 100 mólnyi oldat tömege:

$$m = m(\text{CaCl}_2) + m(\text{H}_2\text{O}) = 1110,0 \text{ g} + 1620,0 \text{ g} = 2730 \text{ g.}$$

A CaCl_2 tömeghányada:

$$w(\text{CaCl}_2) = \frac{1110 \text{ g}}{2730 \text{ g}} = 0,407.$$

Tehát a kalcium-klorid tömeghányada 0,407.

Vegyünk n mól oldatot, ebben legyen x_1 az oldott anyag móltörtje, M_1 (oldott anyag moláris tömege), M_2 (oldószer moláris tömege).

Az oldott anyag (n_1) és oldószer (n_2) anyagmennyisége:

$$n_1 = x_1 \cdot n, \text{ illetve } n_2 = (1 - x_1) \cdot n.$$

Az oldott anyag (m_1) és oldószer (m_2) tömege:

$$m_1 = M_1 \cdot n_1 = M_1 \cdot x_1 \cdot n, \text{ illetve } m_2 = M_2 \cdot n_2 = M_2 \cdot (1 - x_1) \cdot n.$$

Így a két komponens tömegéből a tömeghányad már könnyen számítható:

$$w_1 = \frac{m_1}{m_1 + m_2} = \frac{M_1 \cdot x_1 \cdot n}{M_1 \cdot x_1 \cdot n + M_2 \cdot (1 - x_1) \cdot n} = \frac{M_1 \cdot x_1}{M_1 \cdot x_1 + M_2 \cdot (1 - x_1)}.$$

A fentiekhez hasonlóan ez is könnyen általánosítható n komponensre ($n-1$ -fajta oldott anyag és az oldószer):

$$w_1 = \frac{M_1 \cdot x_1}{M_1 \cdot x_1 + M_2 \cdot x_2 + M_3 \cdot x_3 + \dots} = \frac{M_1 \cdot x_1}{\sum_{i=1}^n M_i \cdot x_i}.$$

Tömeghányad \rightarrow molaritás

5.3. példa

A 18,0 tömegszázalékos nátrium-karbonát-oldat sűrűsége $1,186 \text{ g/cm}^3$. Mekkora az oldat koncentrációja mol/dm^3 -ben?

$$M(\text{Na}_2\text{CO}_3) = 106,0 \text{ g/mol}, M(\text{H}_2\text{O}) = 18,0 \text{ g/mol.}$$

Megoldás:

Ismét induljunk ki egy adott tömegű vagy térfogatú oldatból!

Például vegyünk $1 \text{ dm}^3 = 1000 \text{ cm}^3$ oldatot, ennek tömege: $m = 1000 \text{ cm}^3 \cdot 1,186 \text{ g/cm}^3 = 1186 \text{ g}$.

Ebben a nátrium-karbonát tömege:

$$m(\text{Na}_2\text{CO}_3) = 0,180 \cdot 1186 \text{ g} = 213,48 \text{ g.}$$

A nátrium-karbonát anyagmennyisége:

$$n(\text{Na}_2\text{CO}_3) = \frac{m}{M} = \frac{213,48 \text{ g}}{106 \text{ g/mol}} = 2,014 \text{ mol.}$$

Tehát az oldat molaritása: 2,014 mol/dm³.

A fentiekől eltérően is kiszámítható a molaritás a tömegtörtből.

Vegyünk m tömegű oldatot! A fentiek alapján ebben van $w_1 \cdot m$ tömegű oldott anyag, melynek anyagmennyisége:

$$n_1 = \frac{w_1 \cdot m}{M_1}.$$

A molaritáshoz szükségünk van az oldat térfogatára is:

$$V = \frac{m}{d}.$$

Így a moláris koncentráció már könnyen meghatározható:

$$c_1 = \frac{n_1}{V} = \frac{\frac{w_1 \cdot m}{M_1}}{\frac{m}{d}} = \frac{w_1 \cdot m \cdot d}{M_1 \cdot m} = \frac{w_1 \cdot d}{M_1}.$$

Ha több különböző oldott anyag is található az oldatban, ugyanezt a képletet használhatjuk mindegyikre:

$$c_i = \frac{w_i \cdot d}{M_i}.$$

Molaritás → tömegtört

5.4. példa:

Mennyi a 0,520 mol/dm³ koncentrációjú ammónium-nitrát-oldat tömegtörtje, ha a sűrűsége 1,0147 g/cm³?

$$M(\text{NH}_4\text{NO}_3) = 78,0 \text{ g/mol}, M(\text{H}_2\text{O}) = 18,0 \text{ g/mol}.$$

Megoldás:

Induljunk ki 1 dm³ oldatból!

Az oldat tömege:

$$m = 1\,000 \text{ cm}^3 \cdot 1,0147 \text{ g/cm}^3 = 1014,7 \text{ g}.$$

1 dm³ oldatban az ammónium-nitrát anyagmennyisége 0,520 mol, melynek tömege:

$$m(\text{NH}_4\text{NO}_3) = 0,520 \text{ mol} \cdot 78 \text{ g/mol} = 40,56 \text{ g}.$$

Az oldott anyag tömegtörtje:

$$w(\text{NH}_4\text{NO}_3) = \frac{40,56 \text{ g}}{1014,7 \text{ g}} = 0,0400.$$

Tehát a fenti ammónium-nitrát-oldat 4,00 tömegszázalékos.

Vegyünk V térfogatú oldatot, ennek tömege $m = V \cdot d$, a benne található oldott anyag anyagmennyisége:

$$n_1 = c_1 \cdot V,$$

tömege pedig a moláris tömeg segítségével már könnyen számítható:

$$m_1 = M_1 \cdot n_1 = M_1 \cdot c_1 \cdot V.$$

Az oldott anyag tömeghányada:

$$w_1 = \frac{m_1}{m} = \frac{M_1 \cdot c_1 \cdot V}{V \cdot d} = \frac{M_1 \cdot c_1}{d}.$$

Természetes ugyanezt a képletet alkalmazhatjuk bármelyik komponensre.

Móltört \rightarrow molaritás

5.5. példa:

Az $1,145 \text{ g/cm}^3$ sűrűségű kénsavoldat $4,456$ mólszázalékos. Mekkora az oldat koncentrációja mol/dm^3 egységben?

$$M(\text{H}_2\text{SO}_4) = 98,0 \text{ g/mol}, M(\text{H}_2\text{O}) = 18,0 \text{ g/mol}.$$

Megoldás:

100 mól oldatban van $4,456$ mól kénsav és $95,544$ mól víz. Ezek tömege:

$$m(\text{H}_2\text{SO}_4) = 98 \text{ g/mol} \cdot 4,456 \text{ mol} = 436,688 \text{ g},$$

$$m(\text{H}_2\text{O}) = 18 \text{ g/mol} \cdot 95,544 \text{ mol} = 1719,792 \text{ g}.$$

A 100 mól oldat tömege:

$$m = m(\text{H}_2\text{SO}_4) + m(\text{H}_2\text{O}) = 436,688 \text{ g} + 1719,792 \text{ g} = 2156,48 \text{ g}.$$

Az oldat térfogata:

$$V = \frac{m}{d} = \frac{2156,48 \text{ g}}{1,145 \text{ g/cm}^3} = 1883,4 \text{ cm}^3 = 1,8834 \text{ dm}^3.$$

Az oldat moláris koncentrációja:

$$c = \frac{n}{V} = \frac{4,456 \text{ mol}}{1,8834 \text{ dm}^3} = 2,366 \text{ mol/dm}^3.$$

Tehát a kénsavoldat koncentrációja $2,366 \text{ mol/dm}^3$.

Vegyünk n mól oldatot, melyen az oldott anyag anyagmennyisége: $n_1 = x_1 \cdot n$, az oldószeré pedig $n_2 = w_2 \cdot n = (1 - x_1) \cdot n$.

A moláris tömegekkel kiszámítható az oldott anyag és az oldószer tömege:

$$m_1 = M_1 \cdot x_1 \cdot n, \text{ illetve } m_2 = M_2 \cdot (1 - x_1) \cdot n.$$

Az oldat össztömege:

$$m = m_1 + m_2 = M_1 \cdot x_1 \cdot n + M_2 \cdot (1 - x_1) \cdot n.$$

Ebből az oldat térfogata könnyen kiszámítható a sűrűség segítségével:

$$V = \frac{M_1 \cdot x_1 \cdot n + M_2 \cdot x_2 \cdot n}{d}.$$

Mivel ismerjük az oldott anyag anyagmennyiségét és az oldat térfogatát, a moláris koncentráció könnyen meghatározható:

$$c_1 = \frac{n_1}{V} = \frac{x_1 \cdot n}{\frac{M_1 \cdot x_1 \cdot n + M_2 \cdot (1 - x_1) \cdot n}{d}} = \frac{x_1 \cdot d \cdot n}{M_1 \cdot x_1 \cdot n + M_2 \cdot (1 - x_1) \cdot n} = \frac{x_1 \cdot d}{M_1 \cdot x_1 + M_2 \cdot (1 - x_1)}.$$

Hasonlóan n komponens esetén:

$$c_1 = \frac{x_1 \cdot d}{\sum_{i=1}^n M_i \cdot x_i}.$$

Molaritás → móltört

5.6. példa:

Az 1,000 mol/dm³ koncentrációjú kálium-jodid-oldat sűrűsége 1118 kg/m³. Mekkora a kálium-jodid móltörtje az oldatban?

$$M(\text{KI}) = 166,0 \text{ g/mol}, M(\text{H}_2\text{O}) = 18,0 \text{ g/mol}.$$

Megoldás:

1,000 dm³ oldatban van 1,000 mól kálium-jodid, ennek tömege pedig 166 g/mol · 1,000 mol = 166,0 g.

A móltört kiszámításához szükségünk van még az oldószer anyagmennyiségére is!

1,000 dm³ oldat tömege 1118 gramm, ez az oldott kálium-jodid és az oldószer víz tömegének összege. Mivel ismerjük a feloldott kálium-jodid tömegét, az oldószer víz tömege:

$$m(\text{H}_2\text{O}) = 1118 \text{ g} - 166 \text{ g} = 952 \text{ g}.$$

A víz anyagmennyisége:

$$n(\text{KI}) = \frac{m}{M} = \frac{952 \text{ g}}{18 \text{ g/mol}} = 52,889 \text{ mol}.$$

Mivel már ismerjük az oldott anyag és az oldószer anyagmennyiségét is, az oldat móltörtje könnyen számítható:

$$x(\text{KI}) = \frac{1,000 \text{ mol}}{1,000 \text{ mol} + 52,889 \text{ mol}} = 0,0186.$$

A kálium-jodid móltörtje tehát 0,0186.

Vegyünk V térfogatú oldatot, melyben az oldott anyag anyagmennyisége: $n_1 = c_1 \cdot V$, illetve tömege: $m_1 = M_1 \cdot n_1 = M_1 \cdot c_1 \cdot V$.

Az oldat tömege a sűrűség alapján: $m = d \cdot V$.

Mivel az oldat tömege az oldószer és az oldott anyag tömegének összege, az oldószer tömege adódik az oldat és az oldott anyag tömegének különbségeként:

$$m_2 = m - m_1 = d \cdot V - M_1 \cdot c_1 \cdot V.$$

Az oldószer anyagmennyisége a moláris tömeggel:

$$n_2 = \frac{m_2}{M_2} = \frac{d \cdot V - M_1 \cdot c_1 \cdot V}{M_2}.$$

Az oldat összanyagmennyisége:

$$n_1 = c_1 \cdot V + \frac{d \cdot V - M_1 \cdot c_1 \cdot V}{M_2} = \frac{M_2 \cdot c_1 \cdot V + d \cdot V - M_1 \cdot c_1 \cdot V}{M_2}.$$

A móltört pedig:

$$x_1 = \frac{n_1}{n} = \frac{c_1 \cdot V}{\frac{M_2 \cdot c_1 \cdot V + d \cdot V - M_1 \cdot c_1 \cdot V}{M_2}} = \frac{c_1 \cdot M_2}{M_2 \cdot c_1 + d - M_1 \cdot c_1} = \frac{c_1 \cdot M_2}{d + (M_2 - M_1) \cdot c_1}$$

Tömegtört → molalitás

5.7. példa:

Mekkora a 6,00 tömegszázalékos alumínium-szulfát-oldat Raoult-koncentrációja?

$$M(\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3) = 342,0 \text{ g/mol}, M(\text{H}_2\text{O}) = 18,0 \text{ g/mol}.$$

Megoldás:

Vegyünk 100 gramm oldatot! Ebben van 6,00 gramm alumínium-szulfát és $100 \text{ g} - 6 \text{ g} = 94 \text{ g}$ víz. A molalitás (Raoult-koncentráció) az oldott anyag anyagmennyiségének és az oldószer tömegének a hányadosa, ezért ki kell számítanunk az alumínium-szulfát anyagmennyiségét:

$$n(\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3) = \frac{m}{M} = \frac{6,00 \text{ g}}{342 \text{ g/mol}} = 0,01754 \text{ mol}.$$

Így a Raoult-koncentráció (molalitás) számítható. Figyelem! Az oldószer tömegét kg-ban kell behelyettesíteni!

$$c_R = \frac{0,01754 \text{ mol}}{0,094 \text{ kg}} = 0,1866 \text{ mol/kg}$$

Tehát az alumínium-szulfát-oldat molalitása 0,1866 mol/kg víz.

Legyen az oldat tömege m , az oldott anyag tömegtörtje w_1 . Ekkor az oldószer tömege: $(1 - w_1) \cdot m$, az oldott anyagé pedig $w_1 \cdot m$. Az oldott anyag moláris tömege M_1 , így az oldott anyag anyagmennyisége:

$$n_1 = \frac{m_1}{M_1} = \frac{w_1 \cdot m}{M_1}.$$

A molalitás definíciója alapján:

$$c_{R,1} = \frac{n_1}{m_2} = \frac{\frac{w_1 \cdot m}{M_1}}{(1-w_1) \cdot m} = \frac{w_1}{(1-w_1) \cdot M_1} = \frac{w_1}{1-w_1} \cdot \frac{1}{M_1}$$

Vigyázzunk a mértékegységek beírásánál! Úgy kapjuk a molalitást a megfelelő mol/kg mértékegységben, ha a moláris tömeget kg/mol mértékegységben helyettesítjük a képletbe.

Figyelem! Ha többféle oldott anyagot is tartalmaz az oldat, akkor a képlet módosul:

$$c_{R,1} = \frac{w_1}{w_{\text{oldószér}} \cdot M_1},$$

ahol $w_{\text{oldószér}}$ az oldószér tömegtörtjét jelenti (egyből levonva az oldott anyagok tömegtörtjének összegét).

Molalitás → tömegtört

5.8. példa:

Állapítsuk meg a 0,500 mol/kg koncentrációjú benzolos benzoészavoldat tömegszázalékos összetételét!

$$M(\text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}) = 122,0 \text{ g/mol}, M(\text{C}_6\text{H}_6) = 78,0 \text{ g/mol}$$

Megoldás:

Vegyünk 1,000 kg benzolt tartalmazó oldatot, ebben van 0,500 mól benzoészav. A benzoészav tömege: $m(\text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}) = M \cdot n = 122 \text{ g/mol} \cdot 0,500 \text{ mol} = 61,00 \text{ gramm}$. Mivel ismerjük az oldott anyag és az oldószér tömegét is, a tömegszázalékos összetétel egyszerűen számítható:

$$w(\text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}) = \frac{61 \text{ g}}{1000 \text{ g} + 61 \text{ g}} = 0,0575.$$

Tehát az oldat összetétele: 5,75 tömegszázalék benzoészav és 94,25 tömegszázalék benzol.

Vegyünk m_2 tömegű oldószert tartalmazó oldatot, ebben van $n_1 = c_{R,1} \cdot m_2$ mólnyi oldott anyag. Az oldott anyag tömege:

$$m_1 = M_1 \cdot c_{R,1} \cdot m_2,$$

így a tömegtört:

$$w_1 = \frac{m_1}{m} = \frac{m_1}{m_1 + m_2} = \frac{M_1 \cdot c_{R,1} \cdot m_2}{M_1 \cdot c_{R,1} \cdot m_2 + m_2} = \frac{M_1 \cdot c_{R,1}}{M_1 \cdot c_{R,1} + 1}.$$

Móltört → molalitás

5.9. példa:

Mennyi a 4,00 mólszázalékos etanolos jóddoldat molalitása?

$$M(\text{I}_2) = 254,0 \text{ g/mol}, M(\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}) = 46,0 \text{ g/mol}$$

Megoldás:

Induljunk ki 100 mól oldatból, ebben van 4 mól jód és 96 mól etanol. A molalitás kiszámításához az oldószér tömegére is szükség van:

$$m(\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}) = M \cdot n = 46 \text{ g/mol} \cdot 96 \text{ mol} = 4\,416 \text{ g} = 4,416 \text{ kg}.$$

A jód molalitása:

$$c_R = \frac{4 \text{ mol}}{4,416 \text{ kg}} = 0,906 \text{ mol/kg}$$

Tehát az oldatban a jód Raoult-koncentrációja 0,906 mol/kg etanol.

Vegyünk n mól oldatot, ebben van $x_1 \cdot n$ mól oldott anyag és $(1 - x_1) \cdot n$ mól oldószer. Az oldószer tömege:

$$m_2 = M_2 \cdot n_2 = M_2 \cdot (1 - x_1) \cdot n.$$

Az oldat Raoult-koncentrációja:

$$c_{R,1} = \frac{n_1}{m_2} = \frac{x_1 \cdot n}{M_2 \cdot (1 - x_1) \cdot n} = \frac{x_1}{M_2 \cdot (1 - x_1)} = \frac{1}{M_2} \cdot \frac{x_1}{1 - x_1}.$$

Érdemes megfigyelni, hogy az oldott anyag moláris tömege nem szerepel a képletben.

Molalitás → **móltört**

5.10. példa:

Mennyi a glükóz móltörtje abban a vizes oldatban, melynek Raoult-koncentrációja 0,300 mol/kg víz?

$$M(\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6) = 180,0 \text{ g/mol}, M(\text{H}_2\text{O}) = 18,0 \text{ g/mol}$$

Megoldás:

Vegyünk 1,000 kg oldószert tartalmazó oldatot! Ebben a Raoult-koncentráció alapján 0,300 mól glükóz van. Az 1000 gramm oldószer anyagmennyisége:

$$n(\text{H}_2\text{O}) = \frac{m}{M} = \frac{1000 \text{ g}}{18 \text{ g/mol}} = 55,556 \text{ mol}.$$

Az oldott anyag és az oldószer anyagmennyiségének ismeretében kiszámíthatjuk a móltörtet:

$$x(\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6) = \frac{0,300 \text{ mol}}{0,300 \text{ mol} + 55,556 \text{ mol}} = 0,0054.$$

Így az oldatban összetétele 0,54 mólszázalék glükóz és 99,46 mólszázalék víz.

Vegyünk m_2 tömegű oldószert, ebben van $n_1 = c_{R,1} \cdot m_2$ mólnyi oldott anyag. Az oldószer anyagmennyisége

$$n_2 = \frac{m_2}{M_2},$$

így a móltört:

$$x_1 = \frac{n_1}{n} = \frac{n_1}{n_1 + n_2} = \frac{c_{R,1} \cdot m_2}{c_{R,1} \cdot m_2 + \frac{m_2}{M_2}} = \frac{c_{R,1}}{c_{R,1} + \frac{1}{M_2}} = \frac{M_2 \cdot c_{R,1}}{M_2 \cdot c_{R,1} + 1}.$$

Molaritás → molalitás

5.11. példa:

Egy vizes nátrium-hidroxid-oldat koncentrációja 0,700 M, sűrűsége pedig 1,030 g/cm³. Mekkora az oldat Raoult-koncentrációja?

$$M(\text{NaOH}) = 40,0 \text{ g/mol}, M(\text{H}_2\text{O}) = 18,0 \text{ g/mol}.$$

Megoldás:

1 dm³ oldat tömege: 1030 gramm, ebben 0,700 mol nátrium-hidroxid található. Az oldott anyag tömege így:

$$m(\text{NaOH}) = 40 \text{ g/mol} \cdot 0,700 \text{ mol} = 28 \text{ g}.$$

Tehát a víz tömege az oldatban:

$$m(\text{H}_2\text{O}) = 1030 \text{ g} - 28 \text{ g} = 1002 \text{ g} = 1,002 \text{ kg}.$$

Az oldat molalitása:

$$c_R = \frac{0,700 \text{ mol}}{1,002 \text{ kg}} = 0,699 \text{ mol/kg}.$$

Tehát az oldatban a nátrium-hidroxid molalitása: 0,699 mol/kg víz.

Az oldat térfogata V, ebben van c₁ · V mólnyi oldott anyag, melynek tömege M₁ · c₁ · V. Az oldat tömege: m = d · V, így az oldószer tömege:

$$m_2 = m - m_1 = d \cdot V - M_1 \cdot c_1 \cdot V.$$

Az oldat Raoult-koncentrációja:

$$c_{R,1} = \frac{n_1}{m_2} = \frac{c_1 \cdot V}{d \cdot V - M_1 \cdot c_1 \cdot V} = \frac{c_1}{d - M_1 \cdot c_1}.$$

Molalitás → molaritás

5.12. példa:

A 0,500 mol/kg víz Raoult-koncentrációjú foszforsavoldat sűrűsége 1,0233 g/cm³. Mekkora az oldat moláris koncentrációja?

$$M(\text{H}_3\text{PO}_4) = 98,0 \text{ g/mol}, M(\text{H}_2\text{O}) = 18,0 \text{ g/mol}.$$

Megoldás:

Vegyünk 1000 g oldószert tartalmazó oldatmennyiséget. Ez 0,500 mol foszforsavat tartalmaz, ennek tömege:

$$m(\text{H}_3\text{PO}_4) = 98,0 \text{ g/mol} \cdot 0,500 \text{ mol} = 49 \text{ g}.$$

Az oldat tömege: $1000 \text{ g} + 49 \text{ g} = 1049 \text{ g}$. A sűrűség segítségével számíthatjuk az oldat térfogatát:

$$V = \frac{m}{d} = \frac{1049 \text{ g}}{1,0233 \text{ g/cm}^3} = 1025,1 \text{ cm}^3 = 1,0251 \text{ dm}^3.$$

Az oldat molaritása:

$$c = \frac{n}{V} = \frac{0,500 \text{ mol}}{1,0251 \text{ dm}^3} = 0,488 \text{ mol/dm}^3.$$

A foszforsavoldat 0,488 mol/dm³ koncentrációjú.

Egy oldatrészletben, mely m tömegű oldószert tartalmaz, $c_R \cdot m$ mólnyi oldott anyag van. Az oldott anyag moláris tömege M_1 , így az oldott anyag tömege: $M_1 \cdot (c_R \cdot m)$.

Az össztömeg az oldószer és az oldott anyag tömegének összege:

$$m + M_1 \cdot c_R \cdot m = m \cdot (1 + M_1 \cdot c_R).$$

Az oldat térfogata az oldat tömegéből és sűrűségéből számítható:

$$V = \frac{m}{d} = \frac{m \cdot (1 + M_1 \cdot c_R)}{d}.$$

Így a molaritás:

$$c = \frac{n}{V} = \frac{c_R \cdot m}{\frac{m \cdot (1 + M_1 \cdot c_R)}{d}} = \frac{c_R \cdot m \cdot d}{m \cdot (1 + M_1 \cdot c_R)} = \frac{c_R \cdot d}{1 + M_1 \cdot c_R}.$$

5.4.1. Mintafeladatok

5.13. példa:

A 20,00 tömegszázalékos hidrogén-klorid-oldat sűrűsége $1,100 \text{ g/cm}^3$.

Állapítsuk meg az oldat összetételét az alábbi egységekben:

- móltört,
- molaritás,
- molalitás,
- tömegkoncentráció!

$$M(\text{HCl}) = 36,5 \text{ g/mol}, M(\text{H}_2\text{O}) = 18,0 \text{ g/mol}.$$

Megoldás:

Vagy egy tetszőleges térfogatú, vagy egy tetszőleges tömegű oldatból célszerű kiindulnunk, mindkét választás egyformán jó. Induljunk ki egységnyi térfogatból: $V = 1,000 \text{ dm}^3$. Ezen térfogatú oldat tömege $1,100 \text{ kg} = 1100 \text{ g}$.

Az oldatban az oldott anyag tömege: $0,200 \cdot 1100 \text{ g} = 220 \text{ g}$, ennek anyagmennyisége:

$$n(\text{HCl}) = \frac{m}{M} = \frac{220 \text{ g}}{36,5 \text{ g/mol}} = 6,027 \text{ mol}.$$

Az oldatban a víz (oldószer) tömege: $1100 \text{ g} - 220 \text{ g} = 880 \text{ g} = 0,880 \text{ kg}$, ennek anyagmennyisége:

$$n(\text{H}_2\text{O}) = \frac{m}{M} = \frac{880 \text{ g}}{18 \text{ g/mol}} = 48,889 \text{ mol.}$$

a) Móltört: oldott anyag anyagmennyisége osztva az oldat anyagmennyiségével:
 $n(\text{HCl}) = 6,027 \text{ mol}$, $n(\text{H}_2\text{O}) = 48,889 \text{ mol}$, így az oldat anyagmennyisége:

$$n = n(\text{HCl}) + n(\text{H}_2\text{O}) = 6,027 \text{ mol} + 48,889 \text{ mol} = 54,916 \text{ mol.}$$

Az oldott hidrogén-klorid móltörtje:

$$x(\text{HCl}) = \frac{n(\text{HCl})}{n} = \frac{6,027 \text{ mol}}{54,916 \text{ mol}} = 0,1098.$$

Tehát az oldatban a hidrogén-klorid móltörtje 0,1098, a vízé pedig 0,8902.

b) A molaritást úgy kapjuk, hogy a hidrogén-klorid anyagmennyiségét elosztjuk az oldat térfogatával. Ez igen egyszerű, mivel $1,000 \text{ dm}^3$ oldatból indultunk ki:

$$c = \frac{n(\text{HCl})}{V} = \frac{6,027 \text{ mol}}{1,000 \text{ dm}^3} = 6,027 \text{ mol/dm}^3.$$

Az oldat HCl-koncentrációja $6,027 \text{ M}$.

c) A molalitás vagy Raoult-koncentráció az oldott anyag (hidrogén-klorid) anyagmennyiségének és az oldószer tömegének (kg-ban) az aránya:

$$c_R = \frac{6,027 \text{ mol}}{0,880 \text{ kg}} = 6,849 \text{ mol/kg.}$$

Az oldat molalitása $6,849 \text{ mol/kg}$ víz.

d) A tömegkoncentráció az oldott anyag tömege osztva az oldat tömegével (másképp is megkaphatjuk, például a molaritást beszorozva a moláris tömeggel).

$$\rho = \frac{m(\text{HCl})}{V} = \frac{220 \text{ g}}{1,000 \text{ dm}^3} = 220,0 \text{ g/dm}^3 = 0,2200 \text{ kg/dm}^3.$$

Tehát az oldatban a hidrogén-klorid tömegkoncentrációja $220,0 \text{ g/dm}^3$.

5.14. példa:

A $14,00$ tömegszázalékos salétromsavoldat koncentrációja $2,3968 \text{ mol/dm}^3$. Állapítsuk meg az oldat sűrűségét!

$$M(\text{HNO}_3) = 63,0 \text{ g/mol}, M(\text{H}_2\text{O}) = 18,0 \text{ g/mol.}$$

Megoldás:

Induljunk ki $1,000 \text{ dm}^3$ oldatból! Ebben van $2,3968$ mól salétromsav, ennek tömege:

$$m(\text{HNO}_3) = 63,0 \text{ g/mol} \cdot 2,3968 \text{ mól} = 151,0 \text{ g.}$$

Az oldott anyag tömege és a tömegtört (tömegszázalék) alapján ki tudjuk számítani az oldat össztömegét:

$$w(\text{HNO}_3) = \frac{m(\text{HNO}_3)}{m_{\text{oldat}}} \Rightarrow m_{\text{oldat}} = \frac{m(\text{HNO}_3)}{w(\text{HNO}_3)} = \frac{1510 \text{ g}}{0,1400} = 1079 \text{ g}.$$

Mivel $1,000 \text{ dm}^3$ oldatból indultunk ki, az oldat sűrűsége:

$$d = \frac{m_{\text{oldat}}}{V} = \frac{1079 \text{ g}}{1000 \text{ cm}^3} = 1,079 \text{ g/cm}^3.$$

Tehát az oldat sűrűsége $1,079 \text{ g/cm}^3$.

5.15. példa:

Egy szervesetlen anyag $25,00$ grammját feloldjuk $100,00$ gramm desztillált vízben. A keletkező oldat koncentrációja $2,2428 \text{ M}$ és sűrűsége $1,1326 \text{ g/cm}^3$. Mekkora az ismeretlen anyag moláris tömege?

Megoldás:

$100,00$ gramm vízben oldottunk $25,00$ gramm anyagot, így az oldat tömege $125,00$ gramm. Az oldat térfogata a sűrűség alapján:

$$V = \frac{m_{\text{oldat}}}{d} = \frac{125,00 \text{ g}}{1,1326 \text{ g/cm}^3} = 110,366 \text{ cm}^3, 0,110366 \text{ dm}^3.$$

Az oldatban az oldott anyag anyagmennyisége:

$$n = 2,2428 \text{ mol/dm}^3 \cdot 0,110366 \text{ dm}^3 = 0,2475 \text{ mol}.$$

Az oldott anyag moláris tömege:

$$M = \frac{m}{n} = \frac{25,00 \text{ g}}{0,2475 \text{ mol}} = 101,0 \text{ g/mol}.$$

Tehát az ismeretlen vegyület moláris tömege $101,0 \text{ g/mol}$. (Megjegyzés: a vegyület egyébként a kálium-nitrát.)

5.16. példa:

Mekkora tömegű nátrium-hidroxidot kell $500,0 \text{ g}$ vízben feloldanunk, hogy a keletkezett oldat

- $20,0\%$ -os,
- $0,500 \text{ mol/dm}^3$ molaritású (ennek sűrűsége $1,060 \text{ g/cm}^3$ sűrűségű),
- $0,60 \text{ mol/kg}$ víz molalitású legyen?

$$M(\text{NaOH}) = 40,0 \text{ g/mol}.$$

Megoldás:

A hozzáadott nátrium-hidroxid mennyisége legyen x gramm, így az oldat tömege $(500 + x)$ gramm.

a) A tömegtört alapján:

$$w = \frac{m_{\text{oldottanyag}}}{m_{\text{oldat}}} = \frac{x}{500 + x} = 0,200.$$

Megoldás: $x = 125$ gramm.

Egy másik lehetséges megoldási út: a víz tömegtörtje $1 - 0,2 = 0,8$. A víz tömege 500 gramm, ebből az oldat tömege:

$$m_{\text{oldat}} = \frac{m_{\text{oldószér}}}{w_{\text{oldószér}}} = \frac{500 \text{ g}}{0,8} = 625 \text{ g}.$$

Így a hozzáadott nátrium-hidroxid tömege $625 \text{ g} - 500 \text{ g} = 125 \text{ g}$.

b) A hozzáadott nátrium-hidroxid anyagmennyisége:

$$n = \frac{m}{M} = \frac{x \text{ g}}{40 \text{ g/mol}} = \frac{x}{40} \text{ mol}.$$

Az oldat térfogata pedig:

$$V = \frac{m}{d} = \frac{500 + x \text{ g}}{1,060 \text{ g/cm}^3} = \frac{500 + x}{1,060} \text{ cm}^3 = \frac{500 + x}{1060} \text{ dm}^3.$$

A fentiek alapján az oldat molaritására felírhatjuk, hogy:

$$c = \frac{n}{V} = \frac{\frac{x}{40} \text{ mol}}{\frac{500 + x}{1060} \text{ dm}^3} = 0,500 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}.$$

Az egyenlet megoldása: $x = \underline{9,615 \text{ gramm}}$.

c) A Raoult-koncentráció definíciója alapján felírhatjuk a nátrium-hidroxid anyagmennyiségére, hogy

$$n = c_R \cdot m_{\text{oldószér}} = 0,600 \text{ mol/kg} \cdot 0,500 \text{ kg} = 0,3 \text{ mol}.$$

A moláris tömeg segítségével átszámítható tömegre:

$$m = M \cdot n = 40 \text{ g/mol} \cdot 0,3 \text{ mol} = 12 \text{ g}.$$

Tehát 12,0 gramm nátrium-hidroxidot kell feloldanunk.

5.17. példa:

Egy gyógyvíz 2,80 tömegszázalék nátrium-kloridot (NaCl) és 1,70 tömegszázalék magnézium-szulfátot (MgSO₄) tartalmaz, sűrűsége 1,012 g/cm³. Számítsuk ki az egyes ionok molaritását és tömegkoncentrációját!

$$A_r(\text{Na}) = 23,0; A_r(\text{Cl}) = 35,5; A_r(\text{Mg}) = 24,0; A_r(\text{S}) = 32,0; A_r(\text{O}) = 16,0.$$

Megoldás:

1 000 cm³ gyógyvíz tömege 1012 gramm, ebben az oldott sók tömege:

$$m(\text{NaCl}) = 0,028 \cdot 1012 \text{ g} = 28,336 \text{ g}, \quad m(\text{MgSO}_4) = 0,017 \cdot 1012 \text{ g} = 17,204 \text{ g}.$$

Moláris atomtömegek:

$$M(\text{NaCl}) = 23,0 + 35,5 = 58,5 \text{ g/mol}, \quad M(\text{MgSO}_4) = 24,0 + 32,0 + 4 \cdot 16,0 = 120,0 \text{ g/mol}.$$

Most már ki tudjuk számítani az egyes komponensek anyagmennyiségét 1,000 dm³ oldatban:

$$n(\text{NaCl}) = \frac{m}{M} = \frac{28,336 \text{ g}}{58,5 \text{ g/mol}} = 0,482 \text{ mol}.$$

$$n(\text{MgSO}_4) = \frac{m}{M} = \frac{17,204 \text{ g}}{120,0 \text{ g/mol}} = 0,143 \text{ mol.}$$

Így megállapítható az egyes ionok molaritása:

$$c(\text{Na}^+) = c(\text{Cl}^-) = 0,482 \text{ mol/dm}^3,$$

$$c(\text{Mg}^{2+}) = c(\text{SO}_4^{2-}) = 0,143 \text{ mol/dm}^3.$$

A molaritás alapján könnyen számítható a tömegkoncentráció is (a szulfátion moláris tömege $32 + 4 \cdot 16 = 96 \text{ g/mol}$):

$$\rho(\text{Na}^+) = M(\text{Na}^+) \cdot c(\text{Na}^+) = 23,0 \text{ g/mol} \cdot 0,482 \text{ mol/dm}^3 = 11,14 \text{ g/dm}^3,$$

$$\rho(\text{Cl}^-) = M(\text{Cl}^-) \cdot c(\text{Cl}^-) = 35,5 \text{ g/mol} \cdot 0,482 \text{ mol/dm}^3 = 17,20 \text{ g/dm}^3,$$

$$\rho(\text{Mg}^{2+}) = M(\text{Mg}^{2+}) \cdot c(\text{Mg}^{2+}) = 24,0 \text{ g/mol} \cdot 0,143 \text{ mol/dm}^3 = 3,441 \text{ g/dm}^3,$$

$$\rho(\text{SO}_4^{2-}) = M(\text{SO}_4^{2-}) \cdot c(\text{SO}_4^{2-}) = 96,0 \text{ g/mol} \cdot 0,143 \text{ mol/dm}^3 = 13,76 \text{ g/dm}^3,$$

Ion	Molaritás (mol/dm ³)	Tömegkoncentráció (g/dm ³)
Na ⁺	0,482	11,1
Cl ⁻	0,482	17,2
Mg ²⁺	0,143	3,4
SO ₄ ²⁻	0,143	13,8

5.18. példa:

Az úgynevezett Wood-fém egy igen alacsony olvadáspontú (70 °C) ötvözet, összetétele a következő tömegszázalékban: 50,00% bizmut (Bi), 26,70% ólom (Pb), 13,30% ón (Sn) és 10,00% kadmium (Cd). Állapítsuk meg az ötvözet mólszázalékos összetételét!

$$A_r(\text{Bi}) = 209,0; \quad A_r(\text{Pb}) = 207,0; \quad A_r(\text{Sn}) = 118,7; \quad A_r(\text{Cd}) = 112,4.$$

Megoldás:

100 gramm ötvözetből kiindulva, annak fémtartalma:

$$m(\text{Bi}) = 50,0 \text{ g,}$$

$$m(\text{Pb}) = 26,7 \text{ g,}$$

$$m(\text{Sn}) = 13,3 \text{ g,}$$

$$m(\text{Cd}) = 10,0 \text{ g,}$$

A relatív atomtömegek (moláris tömegek) segítségével átszámítva anyagmennyiségre:

$$n(\text{Bi}) = \frac{m}{M} = \frac{50,0 \text{ g}}{209 \text{ g/mol}} = 0,2392 \text{ mol,}$$

$$n(\text{Pb}) = \frac{m}{M} = \frac{26,7 \text{ g}}{207 \text{ g/mol}} = 0,1290 \text{ mol,}$$

$$n(\text{Sn}) = \frac{m}{M} = \frac{13,3 \text{ g}}{118,7 \text{ g/mol}} = 0,1120 \text{ mol,}$$

$$n(\text{Cd}) = \frac{m}{M} = \frac{10,0 \text{ g}}{112,4 \text{ g/mol}} = 0,0890 \text{ mol.}$$

A 100 gramm ötvözet összanyagmennyisége:

$$n = n(\text{Bi}) + n(\text{Pb}) + n(\text{Sn}) + n(\text{Cd}) = 0,2392 \text{ mol} + 0,1290 \text{ mol} + 0,1120 \text{ mol} + 0,0890 \text{ mol} = 0,5692 \text{ mol.}$$

A mólszázalékos összetétel:

$$x(\text{Bi}) = \frac{n(\text{Bi})}{n} = \frac{0,2392 \text{ mol}}{0,5692 \text{ mol}} = 0,4202 = 42,02\%,$$

$$x(\text{Pb}) = \frac{n(\text{Pb})}{n} = \frac{0,1290 \text{ mol}}{0,5692 \text{ mol}} = 0,2266 = 22,66\%,$$

$$x(\text{Sn}) = \frac{n(\text{Sn})}{n} = \frac{0,1120 \text{ mol}}{0,5692 \text{ mol}} = 0,1968 = 19,68\%,$$

$$x(\text{Cd}) = \frac{n(\text{Cd})}{n} = \frac{0,0890 \text{ mol}}{0,5692 \text{ mol}} = 0,1564 = 15,64\%.$$

Tehát az ötvözet 42,02 mól%-a bizmut, 22,66 mól%-a ólom, 19,68 mól%-a ón és 15,64 mól%-a kadmium.

5.5. Az oldhatóság

A különféle anyagok gyakran nem elegyednek egymással bármilyen arányban, hanem csak korlátozott mértékben. Például a legtöbb sóból nem lehetséges tetszőleges mennyiséget feloldani adott mennyiségű vízben. Hasonlóan beszélhetünk bármely anyagnak bármilyen oldószerben való oldhatóságáról is. Ezzel ellentétben ismerünk olyan anyagokat is, melyek tökéletesen elegyednek bármilyen arányban, ilyen például az etanol és a víz, vagy a benzol és a toluol.

Ha összekeverjük az oldandó anyagot az oldószerrel, megkezdődik az oldódás. Ez akkor ér véget, ha az oldat telítetté válik az oldott anyagra, vagy ha elfogy az oldandó anyag, még mielőtt az oldat telítetté válna.

Telített oldat: az adott mennyiségű oldószer több oldott anyagot nem tud már feloldani.

Telítetlen oldat: az oldott anyag koncentrációja kisebb, mint a telített oldaté, azaz tudunk még benne oldott anyagot feloldani.

Túltelített oldat: az oldott anyag koncentrációja nagyobb, mint a telített oldaté.

A későbbiekben még szó lesz arról, hogy túltelített oldatot milyen módon tudunk készíteni.

Oldhatóság: a telített oldat összetételét adja meg, rendszerint vagy tömegszázalékban, vagy pedig 100 gramm oldószerben feloldható anyag tömegeként. Az oldhatóság rendszerint erősen függ a hőmérséklettől, ezért az oldhatóságot adott hőmérsékleten adjuk meg (lásd alább).

Az oldhatóság mértékegysége: gramm oldott anyag/100 g oldószer.

Kristályvizes sók esetén rendszerint a kristályvízmentes anyagra vonatkoztatjuk az oldhatóságot. Például: a kristályvízmentes nátrium-szulfát oldhatósága 30 °C-on 40,8 gramm / 100 gramm víz. Ez azt jelenti, hogy 100 gramm desztillált vízben legfeljebb 40,8 gramm nátrium-szulfátot tudunk feloldani maradéktalanul, és az oldat telítetté válik.

Csapadék: az oldószerben igen rosszul oldódó vegyület.

A csapadékok oldhatósága igen rossz, ám nem lehet pontos határt definiálni a csapék oldhatóságára. Például az ezüst-szulfátot szokták vízben rosszul oldódó sóként is és csapadékként is említeni, oldhatóság nagyjából 1 g / 100 gramm víz.

A csapadék kifejezés abból adódik, hogy a csapadékok rendszerint megfelelő két vízoldható vegyület oldatainak összeöntésekor keletkeznek. Például kalcium-klorid- és nátrium-karbonát-oldatokat összeöntve vízben nagyon rosszul oldódó kalcium-karbonát csapadék válik ki (csapódik ki) az oldatból. A kalcium-klorid és a nátrium-karbonát vízben jól oldódnak, viszont összekeverve a két vegyület oldatát egy rosszul oldódó csapadék keletkezik.

A későbbi tanulmányok során találkozunk majd az oldhatóság egy másik definíciójával is (ott az 1 dm³ oldatban található oldott anyag móljait nevezzük majd oldhatóságnak, mol/dm³ koncentrációban).

Az oldhatóság átszámítása tömegtörtre (tömegszázalékra):

Legyen az oldhatóság y gramm kristályvízmentes anyag / 100 gramm víz. Ha feloldunk 100 gramm vízben y gramm oldott anyagot, az oldat össztömege ($y + 100$) gramm lesz. Ekkor az oldott anyag tömegtörtje:

$$w_{\text{oldottanyag}} = \frac{y \text{ g}}{y \text{ g} + 100 \text{ g}} = \frac{y}{y + 100}.$$

5.19. példa:

A kadmium-jodidból 0 °C-on 79,8 gramm oldódik fel 100 gramm vízben. Mekkora a telített oldat tömegszázalékos összetétele? Mennyi kadmium-jodid és víz szükséges 500 gramm telített kadmium-jodid-oldat előállításához? (A kadmium-jodidnak nincs kristályvíztartalma.)

Megoldás:

100 gramm vízben 79,8 gramm kadmium-jodidot oldunk, az oldat tömege így 179,8 gramm. A kadmium-jodid tömegtörtje:

$$w(\text{CdI}_2) = \frac{79,8 \text{ g}}{179,8 \text{ g}} = 0,444.$$

A telített oldat 44,4 tömegszázalék kadmium-jodidot és 55,6 tömegszázalék vizet tartalmaz. 500 gramm telített oldatban található kadmium-jodid tömege:

$$m(\text{CdI}_2) = 0,444 \cdot 500 \text{ g} = 212 \text{ g}.$$

A víz tömege: 500 g – 212 g = 278 g.

Tehát 212 gramm kadmium-jodidra és 278 gramm vízre van szükség.

Telített oldat tömegtörtjének átszámítása oldhatóságra:

A telített oldat tömegtörtje (az oldott anyagra nézve) legyen w . Ekkor 100 gramm oldatban van $w \cdot 100$ gramm oldott anyag és $(1 - w) \cdot 100$ gramm oldószer. Az oldhatóság tehát gramm / 100 gramm oldószer mértékegységben:

$$y = \frac{w \cdot 100 \text{ g}}{(1 - w) \cdot 100 \text{ g}} = \frac{w}{1 - w} \frac{\text{ gramm oldottanyag}}{\text{ gramm oldószer}} = \frac{w \cdot 100 \text{ gramm oldottanyag}}{1 - w \cdot 100 \text{ gramm oldószer}}.$$

5.20. példa:

Az ammónium-bromid 90 °C-on telített oldata 57,56%-os. Mekkora az ammónium-bromid oldhatósága 90 °C-on?

Megoldás:

Induljunk ki 100 gramm oldatból! Ebben 57,56 gramm oldott anyag és $100 \text{ g} - 57,56 \text{ g} = 42,44 \text{ g}$ víz van. Az oldhatóság átszámítva 100 gramm vízre:

$$y = \frac{57,56 \text{ g}}{42,44 \text{ g}} \cdot 100 \text{ g} = 135,6 \text{ g}.$$

Tehát az ammónium-bromid oldhatósága 90 °C-on 135,6 gramm/100 g víz.

5.6. Műveletek oldatokkal**5.6.1. Oldatok keverése**

Összekeverünk m_1 tömegű oldatot, melyben az oldott anyag tömeghányca w_1 és m_2 tömegű oldatot, melyben az oldott anyag tömeghányca w_2 . Mennyi lesz a keletkezett oldat tömeghányca?

Az összekevert oldat tömege egyszerűen adódik a két oldat tömegéből: $m_1 + m_2$. Az 1. oldatban van $w_1 \cdot m_1$ tömegű oldott anyag, míg a 2. oldatban az oldott anyag tömege $w_2 \cdot m_2$. Az összekevert oldatban az oldott anyag mennyisége megegyezik a két kiindulási oldat összes oldottanyag-tartalmával, mely $w_1 \cdot m_1 + w_2 \cdot m_2$. A keverékben az oldott anyag tömeghányca:

$$w = \frac{m_{\text{oldottanyag}}}{m_{\text{oldat}}} = \frac{w_1 \cdot m_1 + w_2 \cdot m_2}{m_1 + m_2}.$$

Az egyenletet átrendezve egy fontos összefüggést kapunk:

Keverési egyenlet vagy a **tömegmérleg egyenlete**:

$$w_1 \cdot m_1 + w_2 \cdot m_2 = w \cdot (m_1 + m_2).$$

A keverési egyenletet az alábbi animáció szemlélteti:



5.6.1.1. animáció: A keverési egyenlet

Természetesen a keverési egyenletet (mérlegegyenletet) nemcsak a tömeghányca, hanem hasonlóan a móltörtre, molalításra (és híg oldatok esetén a moláris és tömegkoncentrációra, lásd később) is felírható. Például anyagmennyiségek és móltörtek esetén az alábbi egyenletet nevezhetjük anyagmennyiség-mérlegnek:

$$x_1 \cdot n_1 + x_2 \cdot n_2 = w \cdot (m_1 + m_2).$$

Természetesen a mérlegegyenlet nem csak két oldat elegyítésére írható fel, hasonló formában felírható k számú, különböző tömeghányca (w_1, w_2, \dots, w_k) és különböző tömegű (m_1, m_2, \dots, m_k), ám ugyanazt az egyetlen oldott anyagot tartalmazó oldat elegyítésére:

$$w_1 \cdot m_1 + w_2 \cdot m_2 + \dots + w_k \cdot m_k = w \cdot (m_1 + m_2 + \dots + m_k),$$

vagy kicsit rövidebben megfogalmazva:

$$\sum_{i=1}^k w_i \cdot m_i = w \cdot \left(\sum_{i=1}^k m_i \right).$$

A kapott w tömeghány az k oldat összekeverésével keletkezett homogén oldat tömeghányja. Teljesen analóg módon móltörtökre is felírható:

$$x_1 \cdot n_1 + x_2 \cdot n_2 + \dots + x_k \cdot n_k = x \cdot (n_1 + n_2 + \dots + n_k),$$

illetve

$$\sum_{i=1}^k x_i \cdot n_i = x \cdot \left(\sum_{i=1}^k n_i \right).$$

Hasonlóan molalításra ($m_{o,1}, m_{o,2}, \dots, m_{o,k}$ rendre az oldatokban található oldószer tömegét jelenti kg-ban):

$$c_{R,1} \cdot m_{o,1} + c_{R,2} \cdot m_{o,2} + \dots + c_{R,k} \cdot m_{o,k} = c_R \cdot (m_{o,1} + m_{o,2} + \dots + m_{o,k}),$$

illetve

$$\sum_{i=1}^k c_{R,i} \cdot m_{o,i} = c_R \cdot \left(\sum_{i=1}^k m_{o,i} \right).$$

5.21. példa:

Öszekeverünk 300,0 gramm 15,00%-os nátrium-karbonát-oldatot 200,0 gramm 5,00%-os nátrium-karbonát-oldattal. Mi lesz a keverék tömegszázalékos összetétele?

Megoldás:

I.

Az 1. oldatban a nátrium-karbonát tömege: $0,1500 \cdot 300,0 \text{ g} = 45,00 \text{ g}$, míg a 2. oldatban: $0,0500 \cdot 200,0 \text{ g} = 10,00 \text{ g}$.

Az oldatok tömegének összege: $300,0 \text{ g} + 200,0 \text{ g} = 500,0 \text{ g}$, míg az oldott anyag össztömege: $45,00 \text{ g} + 10,00 \text{ g} = 55,00 \text{ g}$.

Csak a szemléletesség kedvéért a mennyiségeket érdemes összefoglalni az alábbi táblázatban:

	Oldott anyag tömege	Oldat tömege
1. oldat (15%)	45 g	300 g
2. oldat (5%)	10 g	200 g
Keverék (w%)	55 g	500 g

Az oldat tömeghányja:

$$w = \frac{m_{\text{oldottanyag}}}{m_{\text{oldat}}} = \frac{55,00 \text{ g}}{500,0 \text{ g}} = 0,110 = 11,0\%.$$

II.

Közvetlenül a keverési egyenletbe történő behelyettesítéssel is megoldhatjuk a feladatot:

$$0,1500 \cdot 300,0 + 0,0500 \cdot 200,0 = w \cdot (300,0 + 200,0).$$

Az egyenlet megoldása: $w = 0,110 = 11,0\%$.

Tehát az oldat 11,0%-a nátrium-karbonát és 89,0%-a víz.

5.22. példa:

Hány gramm 28,0 tömegszázalékos kálium-klorid-oldatot kell 600,0 gramm 12,0 tömegszázalékos kálium-klorid-oldattal összekevernünk, hogy a keverék 16,0 tömegszázalékos legyen?

Megoldás:

I.

Legyen a 2. oldat tömege x ! Az 1. oldatban az oldott anyag tömege: $0,28 \cdot 600,0 \text{ g} = 168 \text{ g}$, míg a 2. oldatban $0,12 \cdot x$. Az oldatok összeöntésével keletkező oldat tömege: $(600,0 + x)$ gramm.

Táblázatos formában összefoglalva:

	Oldott anyag tömege	Oldat tömege
1. oldat (28%)	168 g	600,0 g
2. oldat (12%)	$0,12 \cdot x \text{ g}$	$x \text{ g}$
Keverék (16%)	$168 + 0,12 \cdot x \text{ g}$	$600,0 + x \text{ g}$

Felírhatjuk a tömeghányad kifejezését:

$$w = \frac{m_{\text{oldottanyag}}}{m_{\text{oldat}}} = \frac{168 + 0,12 \cdot x}{600 + x} = 0,16.$$

Ebből a következő megoldást kapjuk: $x = 1800 \text{ g}$.

II.

A keverési egyenletet célszerű használni:

$$0,280 \cdot 600,0 + 0,120 \cdot x = 0,160 \cdot (600,0 + x).$$

Az egyenlet megoldása: $x = 1800,0 \text{ g}$.

Tehát 1800 gramm 12,0 tömegszázalékos oldatot kell hozzáadni.

5.23. példa:

Milyen molarányban kell összekeverünk 0,050 móltörtű és 0,200 móltörtű oldatokat, hogy a keverék móltörtje 0,150 legyen?

Megoldás:

A keverési egyenlet móltörtökre felírva:

$$x_1 \cdot n_1 + x_2 \cdot n_2 = x \cdot (n_1 + n_2).$$

Behelyettesítve:

$$0,050 \cdot n_1 + 0,200 \cdot n_2 = 0,150 \cdot (n_1 + n_2).$$

Ebből azt kapjuk, hogy $0,050 \cdot n_2 = 0,100 \cdot n_1$, azaz $n_1 : n_2 = 1 : 2$.

5.24. példa:

200,0 gramm 0,500 mol/kg víz molalitású sósavoldatot elegyítünk 300,0 gramm 1,000 mol/kg víz molalitású sósavoldattal. Mekkora a keletkezett oldat molalitása?

$$M(\text{HCl}) = 36,5 \text{ g/mol.}$$

Megoldás:**I.**

Számítsuk ki az oldott anyag és az oldószer tömegét az egyes oldatokban! Ehhez először érdemes megállapítanunk az oldatok tömegtörtjét:

$$w_1 = \frac{m_{\text{oldottanyag},1}}{m_{\text{oldat},1}} = \frac{0,500 \cdot 36,5}{0,500 \cdot 36,5 + 1000} = 0,01792,$$

$$w_2 = \frac{m_{\text{oldottanyag},2}}{m_{\text{oldat},2}} = \frac{1,000 \cdot 36,5}{1,000 \cdot 36,5 + 1000} = 0,03521.$$

Ezek alapján az oldott anyag és oldószerek tömege a két oldatban, illetve a keverékükben:

	Oldott anyag (HCl) tömege	Oldószer (H ₂ O) tömege
1. oldat (0,500 mol/kg)	3,5846 g	196,4154 g
2. oldat (1,000 mol/kg)	10,5644 g	289,4356 g
Keverék	14,1490 g	485,8510 g

A HCl anyagmennyisége:

$$n(\text{HCl}) = \frac{m}{M} = \frac{14,149 \text{ g}}{36,5 \text{ g/mol}} = 0,3876 \text{ mol/kg.}$$

Ebből a keverékoldat molalitása:

$$c_R = \frac{n(\text{HCl})}{m_{\text{oldószer}}} = \frac{0,3876 \text{ mol}}{0,485851 \text{ kg}} = 0,798 \text{ mol/kg.}$$

Tehát a keverékoldat molalitása 0,798 mol/kg.

II.

A molalításokra felírt keverési egyenlet felírásával is megoldható a feladat:

A fenti táblázat alapján az oldószer tömege:

	Oldószer (H ₂ O) tömege	Molalitás
1. oldat	0,1964 kg	0,500 mol/kg
2. oldat	0,2894 kg	1,000 mol/kg

A mérlegegyenletet felírva a molalításokra:

$$c_{R,1} \cdot m_{o,1} + c_{R,2} \cdot m_{o,2} = c_R \cdot (m_{o,1} + m_{o,2}),$$

$$0,500 \text{ mol/kg} \cdot 0,1964 \text{ kg} + 1,000 \cdot 0,2894 = c_R \cdot (0,1964 + 0,2894).$$

Az egyenlet megoldása $c_R = \underline{0,798 \text{ mol/kg}}$. Természetesen ugyanazt az eredményt kapjuk, mint az I. megoldásnál.

5.25. példa:

Összekeverünk $100,0 \text{ cm}^3$ 10,0 tömegszázalékos vizes etanololdatot (sűrűsége $0,9819 \text{ g/cm}^3$) és $100,0 \text{ cm}^3$ 90,0 tömegszázalékos vizes etanololdatot (sűrűsége $0,8180 \text{ g/cm}^3$). Állapítsuk meg a keletkező oldat tömegszázalékos összetételét! Mekkora a keletkezett oldat térfogata, hogy sűrűsége $0,9226 \text{ g/cm}^3$?

Megoldás:

A két oldat tömege a sűrűségek alapján:

$$m_1 = 0,9819 \text{ g/cm}^3 \cdot 100,0 \text{ cm}^3 = 98,19 \text{ g}, \quad m_2 = 0,8180 \text{ g/cm}^3 \cdot 100,0 \text{ cm}^3 = 81,80 \text{ g}.$$

A keverési egyenlettel:

$$w_1 \cdot m_1 + w_2 \cdot m_2 = w \cdot (m_1 + m_2),$$

$$0,100 \cdot 98,19 + 0,900 \cdot 81,80 = w \cdot (98,19 + 81,80).$$

Az egyenlet megoldása: $w = 0,4636$, tehát az oldat etanolra nézve 46,36 tömegszázalékos.

A keverék oldat tömege: $98,19 \text{ g} + 81,80 \text{ g} = 179,99 \text{ g}$. A sűrűség segítségével az oldat térfogata:

$$V = \frac{m}{d} = \frac{179,99 \text{ g}}{0,9226 \text{ g/cm}^3} = 195,1 \text{ cm}^3.$$

A keletkezett oldat térfogata $195,1 \text{ cm}^3$, mely $4,9 \text{ cm}^3$ -rel kevesebb, mint a két kiindulási térfogat összege ($200,0 \text{ cm}^3$).

Mint a példából is látható, az oldatok térfogatát többnyire nem szabad egyszerűen összeadni. Ennek oka elsősorban az, hogy a molekulák közötti kölcsönhatás eltérő a víz–víz, a víz–etanol és az etanol–etanol párok esetén. Különböző összetételű oldatok összeöntésekor gyakran lép fel a **térfogatcsökkenés (térfogat-kontrakció)** jelensége. Ha a keverék térfogata nagyobb, mint két összeöntött oldat térfogatának összege, **térfogat-növekedés (dilatáció)** történik.

Híg oldatok esetén azonban ezen effektusok csekélyek, így kis koncentrációjú oldatok esetén gyakran egyszerűen összegezzük a térfogatokat. (A fenti példában egy híg oldatot és egy igen tömény oldatot elegyítettünk, viszonylag nagy volt a térfogat-kontrakció.) Ha nem okoz hibát, a feladatok szövegében gyakran olvashatjuk, hogy az oldatok térfogatát összeadhatjuk a feladat megoldása során.

5.26. példa:

Mekkora a keletkező glükózoldat molaritása, ha $2,000 \text{ dm}^3$ $3,5 \cdot 10^{-3} \text{ M}$ és $0,500 \text{ dm}^3$ $2,8 \cdot 10^{-2} \text{ M}$ koncentrációjú glükózoldatokat elegyítünk? A térfogatok összeadhatóak!

Megoldás:

A keverési egyenlet formája a molaritásra:

$$c_1 \cdot V_1 + c_2 \cdot V_2 \cong c \cdot (V_1 + V_2),$$

$$3,5 \cdot 10^{-3} \cdot 2,000 + 2,8 \cdot 10^{-2} \cdot 0,500 \cong c \cdot (2,000 + 0,500).$$

Az egyenlet megoldása: $c = 8,4 \cdot 10^{-3} \text{ M}$.

5.6.2. Oldatok hígítása

Adott egy oldat, melynek tömege m_1 , benne az oldott anyag tömeghányada w_1 . Az oldatot m_2 tömegű oldószerrel hígítjuk. Állapítsuk meg, hogy mekkora a hígított oldat tömeghányada!

A kiindulási oldatban az oldott anyag mennyisége: $w_1 \cdot m_1$. Az oldat hígítás utáni tömege $m_1 + m_2$. Az új tömeg tört:

$$w = \frac{m_{\text{oldottanyag}}}{m_{\text{oldat}}} = \frac{w_1 \cdot m_1}{m_1 + m_2}.$$

Átrendezve a következő egyenletet kapjuk:

$$w_1 \cdot m_1 = (m_1 + m_2) \cdot w.$$

Ha jobban szemügyre vesszük, az egyenlet hasonlít a fentebb tárgyalt keverési egyenletre, csak a $w_2 \cdot m_2$ tag hiányzik a bal oldalról. Mivel az oldószer felfogható úgy, mint egy oldat, melyben nincs oldott anyag, tehát az oldószerben az oldott anyag tömeg törtje 0. Ezzel a fenti keverési egyenletet az oldatok hígítására is alkalmazhatjuk: az oldószer esetén $w_2 = 0$ -t kell behelyettesíteni.

A keverési egyenlet alkalmazását az alábbi animáció szemlélteti:



5.6.2.1. animáció: Oldatok hígítása

5.27. példa:

Mekkora tömegű vizet kell 600,0 gramm 13,00 tömegszázalékos nátrium-klorid-oldathoz adnunk, hogy koncentrációja 7,50 tömegszázalékra csökkenjen?

Megoldás:

I.

Az oldott anyag tömege a 600,0 gramm oldatban: $0,13 \cdot 600,0 \text{ g} = 78,0 \text{ g}$. Mivel csak oldószer adunk az oldathoz, az oldott anyag tömege nem változik! A tömegszázalék alapján a hígított oldat tömege:

$$m = \frac{m_{\text{oldott}}}{w} = \frac{78 \text{ g}}{0,075} = 1040 \text{ g}.$$

A hígított oldat tömege éppen a hozzáadott víz tömegével növekedett meg, így a hozzáadott víz tömege: $1040 \text{ g} - 600 \text{ g} = 440 \text{ g}$.

II.

Keverési egyenlettel:

$$w_1 \cdot m_1 + w_2 \cdot m_2 = w \cdot (m_1 + m_2).$$

Az oldószerben az oldott anyag tömeg törtje 0, mivel tiszta oldószerrel van szó. Így a következő egyenletet kapjuk:

$$0,13 \cdot 600,0 + 0 \cdot m_2 = 0,075 \cdot (600 + m_2).$$

Az egyenlet megoldása: $m_2 = 440 \text{ g}$. Tehát 440 gramm vízzel kell hígítani az oldatot.

5.6.3. Oldatok töményítése oldott anyag hozzáadásával

A keverési egyenletet tiszta oldott anyag hozzáadására is felírhatjuk. A 100%-os tisztaságú oldott anyag tömeghányada 1, mivel teljes mennyiségével mind az oldott anyag, mind az oldat tömegét növeli. Ha m_1 tömegű oldathoz, melyben az oldott anyag tömeghányada w_1 , m_2 tömegű oldott anyagot adunk ($w_2 = 1$), a keverési egyenlet a következőképp módosul:

$$w_1 \cdot m_1 + 1 \cdot m_2 = w_1 \cdot m_1 + m_2 = (m_1 + m_2) \cdot w.$$

A keverési egyenlet alkalmazását az alábbi animáció szemlélteti:



5.6.3.1. animáció: Oldatok töményítése oldott anyag hozzáadásával

5.28. példa:

Hány gramm cukrot kell feloldani 375,0 gramm 40,0 tömegszázalékos cukoroldathoz, hogy annak töménysége 25,0 tömegszázalékra növekedjen?

Megoldás:

I.

A 375 gramm oldatban található cukor tömege: $0,04 \cdot 375 \text{ g} = 15 \text{ g}$, a víz tömege pedig 360 g. Foglalkozunk össze az adatokat táblázatosan!

	Oldott anyag	Oldószer	Oldat
Kiindulási	15 g	360 g	375 g
Hozzáadott	x g	–	x g
Keverék	15 + x g	360 g	375 + x g

A keletkezett oldat 25 tömegszázalékos, így:

$$w = \frac{m_{\text{oldottanyag}}}{m_{\text{oldat}}} = \frac{15 + x}{375 + x} = 0,25.$$

Az egyenlet megoldása $x = 105$ gramm.

II.

Írjuk fel a keverési egyenletet:

$$w_1 \cdot m_1 + w_2 \cdot m_2 = w \cdot (m_1 + m_2).$$

Ha tiszta, kristályvízmentes oldott anyagot adunk az oldathoz, annak tömeghányadának (w_2) értéke 1. Behelyettesítve a megfelelő mennyiségeket az egyenletbe:

$$0,04 \cdot 375 + 1 \cdot m_2 = 0,25 \cdot (375 + m_2).$$

Az egyenletet megoldva kapjuk: $m_2 = 105$ gramm.

5.6.4. Oldat töményítése oldószer eltávolításával: bepárlás

Az oldószert többféleképpen eltávolíthatjuk egy oldatból, ám a leggyakoribb módszer a desztilláció és a bepárlás. A desztilláció az oldat komponenseinek szétválasztására, míg a bepárlás sóoldatok töményítésére szolgál. Ez utóbbinak lényege, hogy egy vizes sóoldatot melegítve, abból csak az oldószer párolog el, az oldott só teljes egésze az oldatban marad. Mivel az oldószer mennyisége a bepárlás hatására csökken, az oldat töménysége növekszik.

A bepárlásra is felírható a keverési egyenlet, ám ebben az esetben „fordított irányban” kell gondolkoznunk: nem két oldat (vagy egy oldat és oldószer) összeöntéséből keletkezik egy keverék, hanem egy oldat válik szét egy töményebb oldatra és oldószerre.

Legyen a kiindulási oldat tömege m_1 , benne az oldott anyag tömeghányada w_1 , az eltávolított víz mennyisége m . Mivel a bepárlás során nincsen tömegvesztés, a maradék (töményített) oldat tömege: $m_1 - m$, azaz a kiindulási oldattömegből le kell vonnunk az elpárologtatott víz tömegét. Felírva a keverési egyenletet az oldott anyagra:

$$w_1 \cdot m_1 = 0 \cdot m + w_2 \cdot (m_1 - m),$$

$$w_1 \cdot m_1 = w_2 \cdot (m_1 - m).$$

Mivel a keverési egyenletet az oldott anyagra írtuk fel, ebben természetesen az eltávolított oldószer végül nem szerepel tagként (az eredeti egyenletben az oldószer tömeghányada 0).

5.29. példa:

Hány gramm vizet kell elpárologtatni 250 gramm 10,00 tömegszázalékos oldatból, hogy a maradék oldat 25,00 tömegszázalékos legyen?

Megoldás:**I.**

Az oldott anyag tömege: $0,100 \cdot 250 \text{ g} = 25 \text{ g}$, mely a bepárlás során nem változik! Az oldat tömege a tömegszázalék alapján:

$$m_{\text{oldat}} = \frac{m_{\text{oldottanyag}}}{w} = \frac{25 \text{ g}}{0,25} = 100 \text{ g}.$$

Tehát az eltávolított víz tömege: $250 \text{ g} - 100 \text{ g} = 150 \text{ g}$.

II.

Legyen az eltávolított oldószer tömege m , így a keverési egyenlet segítségével:

$$0,10 \cdot 250 = 0 \cdot m + 0,25 \cdot (250 - m).$$

Az egyenletet m -re megoldva kapjuk: $m = \underline{150 \text{ gramm}}$ vizet kell eltávolítanunk.

5.30. példa:

Hány kg 15,0%-os oldatból kell lepárolni 50 kg vizet, hogy így 20,0%-os oldat keletkezzen?

Megoldás:

Legyen a kiindulási oldat tömege $x \text{ kg}$, a bepárlás utáni tömeg pedig $x - 50 \text{ kg}$! Az oldott anyag tömege nem változik, így

$$0,15 \cdot x = 0,20 \cdot (x - 50).$$

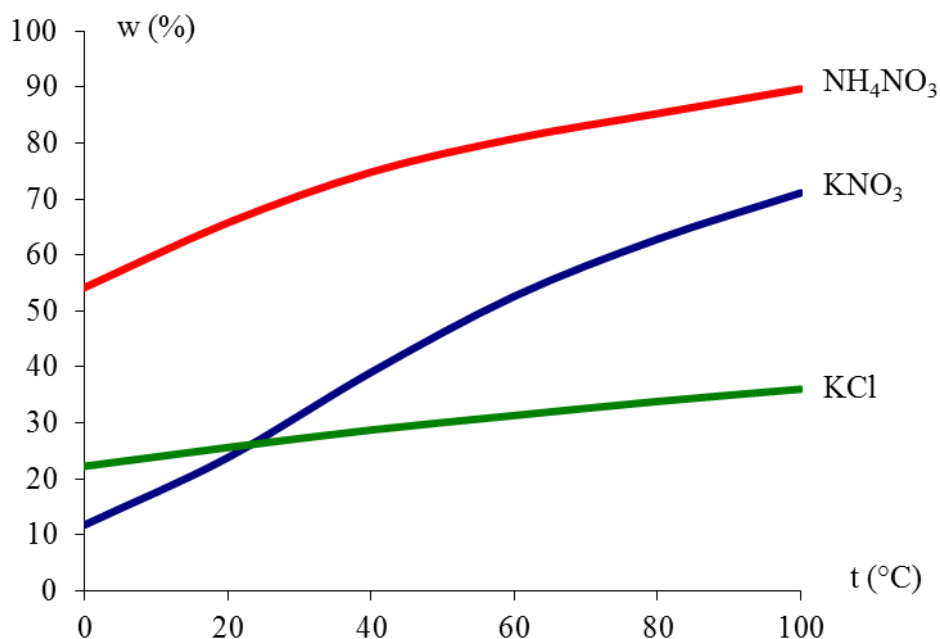
Ebből pedig azt kapjuk, hogy $x = 200 \text{ kg}$, azaz 200 kg oldatot kell bepárolnunk.

5.6.5. Kristályosítás

Az oldatból nem csak az oldószer távolítható el. Mint fentebb már megállapítottuk, igen gyakori, hogy egy feloldandó anyag csak korlátozott mértékben oldódik az oldószerben. Természetesen ez nemcsak vizes oldatokra, hanem bármilyen oldószerre igaz.

Az előzőekben már esett pár szó arról, hogy mit jelent, ha egy oldat túltelített, azaz nagyobb az oldott anyag koncentrációja, mint a telített oldatban. Elsőre furán hangozhat ez a fogalom, mivel telített az az oldat, melyben több oldandó anyagot már nem tudunk feloldani. Most vizsgáljuk meg, hogyan keletkezhet túltelített oldat!

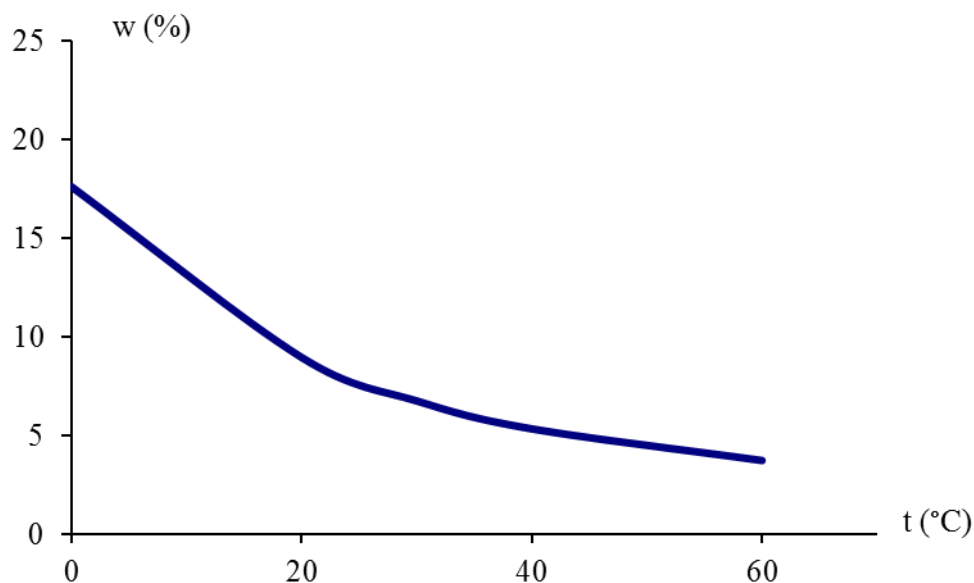
Egy anyag oldhatósága általában függ a hőmérséklettől, és rendszerint az oldhatóság a hőmérséklet növekedésével növekszik (endoterm oldáshőjű anyagok). Ez jól látszik a következő ábrán, melyen a telített oldatban oldott anyag tömegszázalékát ábrázoltuk a hőmérséklet függvényében különböző sók esetén.



5.6.5.1. ábra: Telített oldatban oldott anyag tömegszázaléka a hőmérséklet függvényében

Megemlítjük, hogy csak nagyon kevés példa ismert úgynevezett inverz oldhatóságra, mely azt jelenti, hogy az anyag oldhatósága a hőmérséklet növekedésével csökken (például a cérium(III)-szulfát esetében, mely exoterm oldáshővel rendelkezik). Természetesen ebben az esetben melegítéssel tudjuk eltávolítani a kivált anyagot a hidegen telített oldatból.

Egy fordított vagy inverz oldhatóságú anyag (a cérium(III)-szulfát) telített oldatának tömegtörtje (az oldott anyagra nézve) a hőmérséklet függvényében:



5.6.5.2. ábra: Inverz oldhatóság

Ha készítünk egy magasabb hőmérsékleten telített oldatot, és óvatosan lehűtjük, túltelített oldatot kapunk. A túltelített oldatok általában nem stabilak, belőlük az oldott anyag feleslege többnyire könnyedén kikristályosodik. A kristályképződés beindulásához úgynevezett kristálygócok kialakulása szükséges, ezekből indul meg a kristályképződés, majd a kristálynövekedés. A gócképződés lehet spontán, gyakran mikroszkopikus méretű szennyeződések, vagy az oldat és a levegő felszínén indul meg a kristályképződés (kristályhártya alakul ki).

Az alábbi videón spontán kristálykiválást láthatunk:



5.6.5.1. videó: Kristálykiválás

Bizonyos esetekben azonban csak az anyag egy apró kristályán, úgynevezett oltókristályon tud megindulni a kristályosodás.

Az alábbi videókon olyan túltelített oldatokat mutatunk be, melyből csak igen nehezen, külső beavatkozásra indul meg a kristályosodás:



5.6.5.2. videó: Kristálykiválás elősegítése kaparással



5.6.5.3. videó: Kristálykiválás elősegítése oltókristállyal

Tehát **kristályosodás**nak nevezzük a kristályok kiválását egy anyag túltelített oldatából. A **kristályosítás** pedig az a kémiai művelet, melynek során egy oldatból az oldott anyagot szilárd formában nyerjük ki egy magasabb hőmérsékleten telített oldat lehűtésével, kihasználva, hogy az oldhatóság alacsonyabb hőmérsékleten általában rosszabb, mint magasabb hőmérsékleten.

A kristályosításra is alkalmazhatjuk a keverési egyenletet: legyen a kiindulási oldat tömege m_1 , tömegtörtje pedig w_1 . Ebből a kristályosodás során kiválik m tömegű (kristályvízmentes) kristály (ennek tömegtörtje 1). Tehát mind az oldat, mind az oldott anyag tömege m -mel csökken. A maradék oldat tömege $m_1 - m$, ennek tömegtörtje pedig w_2 . Felírva a keverési egyenletet a kiindulási állapotra (magasabb hőmérsékleten telített oldat) és a végállapotra (kivált szilárd anyag + alacsonyabb hőmérsékleten telített oldat):

$$\underbrace{w_1 \cdot m_1}_{\text{kiindulási oldatban az oldott anyag tömege}} = m + \underbrace{w_2 \cdot (m_1 - m)}_{\text{maradék oldatban az oldott anyag tömege}}$$

Az egyenletből a telített oldatok tömegtörtjeinek (w_1 , w_2) és a kiindulási oldattömeg (m_1) ismeretében a kivált anyag tömege, m számítható.

5.31. példa:

A kálium-nitrát oldhatósága 20 °C-on 31,2 gramm / 100 gramm víz, 60 °C-on pedig 111,0 gramm / 100 gramm víz. 200,0 gramm 60 °C-on telített kálium-nitrát-oldatot lehűtve mekkora tömegű kálium-nitrát válik ki az oldatból?

Megoldás:

I.

Az oldhatóságok alapján a telített oldatok összetétele:

$$20\text{ °C: } \frac{31,2\text{ g}}{100\text{ g} + 31,2\text{ g}} = 0,2378,$$

$$60\text{ °C: } \frac{111\text{ g}}{100\text{ g} + 111\text{ g}} = 0,5261.$$

Az oldott anyag tömege a 60 °C-on telített oldatban: $0,5261 \cdot 200\text{ g} = 105,20\text{ g}$, lehűtve ebből kiválik x gramm.

Az oldat tömege is csökken a kiváló kristályok tömegével, azaz x grammal, így a maradék oldat tömege: $200 - x$ gramm. A tömegtörtek alapján felírhatjuk a kálium-nitrát tömegére a következő egyenletet (a kiindulási KNO_3 tömege megegyezik a kikristályosodott szilárd anyag és a maradék oldatban megtalálható KNO_3 tömegének összegével):

$$105,2 = x + 0,2378 \cdot (200 - x).$$

Az egyenlet megoldása: $x = \underline{75,62\text{ gramm}}$ kálium-nitrát kristályosodik ki.

II.

Abban az esetben, ha a kikristályosuló anyag nem tartalmaz kristályvizet, egy másik úton is megoldhatjuk a példát:

Az oldhatóság alapján 200 gramm 60 °C-on telített oldat 105,2 gramm kálium-nitrátot és 94,8 gramm vizet tartalmaz. Ha lehűtjük az oldatot 20 °C-ra, az oldatból oldott anyag kristályosodik ki, ám az oldószer tömege nem változik. Tehát 20 °C-on is 94,8 gramm víz van az oldatban.

Mivel 20 °C-on 100 gramm víz 31,2 gramm kálium-nitrátot tud feloldani, egyenes arányosságot alkalmazva 94,8 gramm vízben oldott kálium-nitrát tömege:

$$\frac{31,2 \text{ g}}{100 \text{ g}} \cdot 94,8 \text{ g} = 29,58 \text{ g}.$$

A 105,20 gramm kálium-nitrátból tehát oldatban marad 29,58 gramm, azaz kiválik $105,20 \text{ g} - 29,58 \text{ g} = \underline{75,62 \text{ gramm}}$.

5.6.6. Átkristályosítás

Átkristályosításnak nevezzük azt a tisztítási folyamatot, mely során a tisztítandó anyagból oldatot készítünk, majd ezt magasabb hőmérsékleten bepároljuk, és a telített oldatot lehűtve kikristályosítjuk az anyagot.

A fel nem oldódó szennyeződések még a bepárlás előtt kiszűrjük az oldatból. A kristályosodás során pedig az oldott anyag tisztább formában válik ki, még akkor is, ha az adott oldószerben oldódó szennyeződések is tartalmazott a kiindulási anyag. (Ennek oka, hogy a szennyeződés részecskéi nehezebben épülnek be egy másik anyag kristályrácsába.) Tehát egy átkristályosítással csökkenteni tudjuk a számunkra értékes anyag szennyezőit. Az átkristályosítást megismételve, illetve több átkristályosítási lépést alkalmazva, a szennyeződések mennyisége általában tovább csökkenthető.

Az átkristályosítás során kihasználjuk azt a tényt, hogy a legtöbb anyag oldhatósága a hőmérséklet növekedésével jelentősen változik, rendszerint növekszik. Természetesen annál kedvezőbbek a feltételek az átkristályosításhoz (annál több anyagot tudunk kinyerni), minél meredekebb az oldhatóság növekedése a hőmérséklet függvényében. A magasabb hőmérsékleten telített oldatot lehűtve, a kristályok kiválása után maradó oldatot anyalúgnak nevezzük. Az anyalúg általában még tartalmaz jelentős mennyiségű oldott anyagot (az esetleges szennyeződések mellett), ebből adódóan rendszerint nem tudjuk az összes értékes komponenst visszanyerni az átkristályosítás során. Az átkristályosítás elméleti kitermelésének nevezzük a maximálisan visszanyerhető anyag mennyiségének és a kiindulási mennyiségének arányát.

Az átkristályosítás elméleti kitermelését növelni tudjuk általában úgy, hogy a bepárlást minél magasabb hőmérsékleten végezzük (annál töményebb a bepárolt oldat), és minél alacsonyabb hőmérsékletre hűtjük le (annál kisebb az oldhatóság).

5.32. példa:

100,0 gramm ólom-nitrátból 100 °C-on telített oldatot készítünk, majd ezt 20 °C-ra hűtjük. Mennyi ólom-nitrát válik ki eközben az oldatból? Mennyi az átkristályosítás elméleti kitermelése?

Oldatóság:

20 °C: 54,3 gramm $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ 100 gramm vízben,

100 °C: 133,0 gramm $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ 100 gramm vízben.

Megoldás:**I.**

Először is az oldhatóságokat számítsuk át tömegtörtékre!

$$w(20\text{ °C}) = \frac{54,3\text{ g}}{100\text{ g} + 54,3\text{ g}} = 0,3519,$$

$$w(100\text{ °C}) = \frac{133\text{ g}}{100\text{ g} + 133\text{ g}} = 0,5708.$$

100 gramm ólom-nitrátból 100 °C-on telített oldatot készítünk. A keletkező oldat tömege a tömegtört alapján ($w = m_{\text{oldott anyag}} / m_{\text{oldat}}$):

$$m_{\text{oldat}} = \frac{m_{\text{oldottanyag}}}{w} = \frac{100\text{ g}}{0,5708} = 175,2\text{ g}.$$

Az oldatot lehűtve kiválik x gramm ólom-nitrát. Ekkor a fentiek mintájára felírhatjuk a következő egyenletet az ólom-nitrát tömegére:

$$100 = x + (175,2 - x) \cdot 0,3519.$$

Az egyenlet megoldása: $x = 59,17$ gramm.

Az átkristályosítás elméleti kitermelése: $\frac{59,17\text{ g}}{100,0\text{ g}} = 0,5917 = 59,17\%$.

Tehát 59,17 gramm ólom-nitrát válik ki az oldatból, és az átkristályosítás elméleti termelése 59,17% (a fenti feltételek mellett ennél nagyobb arányban nem tudunk anyagot visszanyerni a kiindulási anyagból).

II.

Mivel az ólom-nitrát nem tartalmaz kristályvizet, egyenes arányosságok alkalmazásával is eljutunk a keresett megoldásig.

Ha 100 °C-on 133 gramm ólom-nitrát 100 gramm vízben oldódik, akkor 100 gramm ólom-nitrátot feloldó víz tömege:

$$\frac{100\text{ g}}{133\text{ g}} \cdot 100\text{ g} = 75,2\text{ g}.$$

A 100 °C-on telített oldatot lehűtve ólom-nitrát válik ki, de a víz tömege állandó marad eközben (mivel nincs kristályvíztartalma a kiváló sónak). Tehát 20 °C-on is 75,2 gramm víz van az oldatban. Az oldhatóságra ismét egyenes arányosságot írhatunk fel:

Ha 20 °C-on 100 gramm víz 54,3 gramm ólom-nitrátot képes feloldani, akkor 75,2 gramm víz által feloldható ólom-nitrát tömege:

$$\frac{54,3\text{ g}}{100\text{ g}} \cdot 75,2\text{ g} = 40,83\text{ g}.$$

Tehát az eredetileg feloldott és bepárolt 100 grammnyi ólom-nitrátból 40,83 gramm oldatban maradt, azaz kikristályosodott $100\text{ g} - 40,83\text{ g} = \underline{59,17\text{ gramm}}$ ólom-nitrát. Az elméleti kitermelés 59,17%.

5.33. példa:

Feladatunk nátrium-klorid tisztítása átkristályosítással. Mekkora tömegű 100 °C-on telített oldatot kell lehűtenünk 0 °C-ra ahhoz, hogy 100,0 gramm nátrium-klorid kristályosodjon ki? Mekkora tömegű nátrium-kloridból és vízből kell készítenünk a fenti 100 °C-on telített oldatot? Mekkora az átkristályosítás elméleti kitermelése?

A nátrium-klorid oldhatósága:

0 °C: 35,7 gramm / 100 gramm víz,

100 °C: 39,2 gramm / 100 gramm víz.

Megoldás:

Állapítsuk meg a telített oldatok tömegtörtjeit!

$$w(0\text{ °C}) = \frac{35,7\text{ g}}{100\text{ g} + 35,7\text{ g}} = 0,2631,$$

$$w(100\text{ °C}) = \frac{39,2\text{ g}}{100\text{ g} + 39,2\text{ g}} = 0,2816.$$

Legyen a 100 °C-on telített oldat tömege x ! A 100 °C-on telített oldatot 0 °C-ra lehűtve kiválik belőle 100 g nátrium-klorid, a maradék oldat (anyalúg) tömege így $(x - 100)$ g. Az anyalúg pedig 0 °C-on telített nátrium-kloridra. Az oldott anyagra felírva a keverési egyenletet:

$$0,2816 \cdot x = 100 + 0,2631 \cdot (x - 100).$$

A bal oldalon a 100 °C-on telített oldat oldottanyag-tartalma található, a jobb oldalon az első tag a kivált só mennyisége, a második tag pedig az anyalúg (0 °C-on telített oldat) sótartalma.

Az egyenlet megoldása: $x = 3983$ g, azaz ekkora tömegű 100 °C-on telített oldatot kell lehűtenünk, hogy 100 g nátrium-klorid váljon ki.

A 3983 gramm 100 °C-on telített (azaz 28,16 tömegszázalékos) oldat előállításához szükséges nátrium-klorid tömege:

$$m_{\text{oldott anyag}} = w(100\text{ °C}) \cdot m_{\text{oldat}} = 0,2816 \cdot 3983\text{ g} = 1122\text{ g}.$$

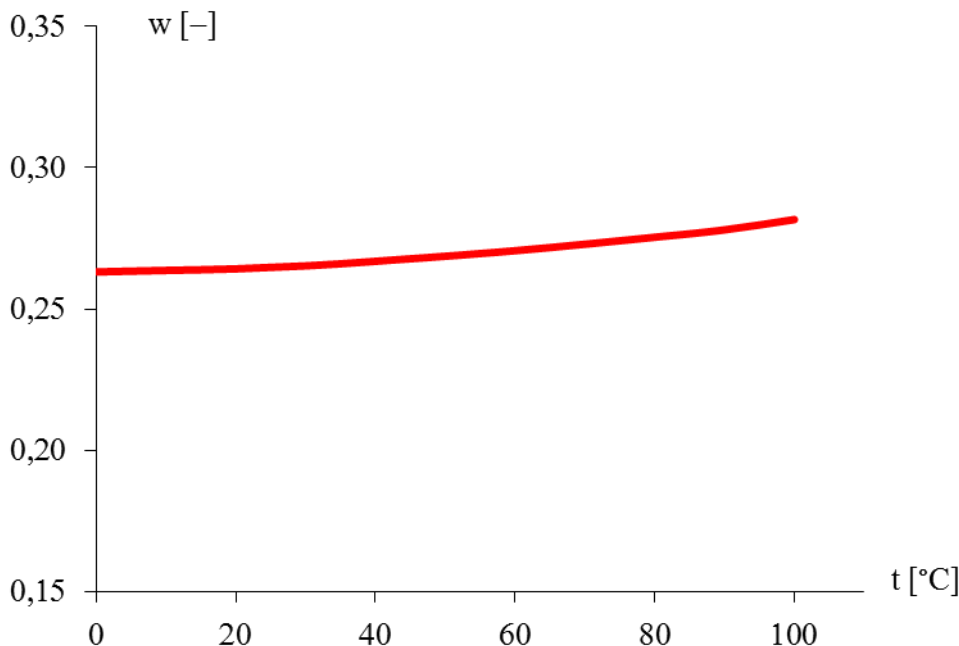
Az oldószer (víz) tömegét megkapjuk, ha az oldat tömegéből levonjuk az oldott anyag tömegét:

$$m_{\text{oldószer}} = m_{\text{oldat}} - m_{\text{oldott anyag}} = 3983\text{ g} - 1122\text{ g} = 2861\text{ g}.$$

Az elméleti kitermelés: $\frac{100\text{ g}}{1122\text{ g}} = 0,0891 = 8,91\%$.

Tehát 3983 gramm 100 °C-on telített oldatból kell kiindulnunk, melynek előállításához 1122 gramm nátrium-kloridra és 2861 gramm vízre van szükség. Az átkristályosítás elméleti termelése 8,91%.

A fentiek alapján a nátrium-klorid átkristályosításának a kitermelése („hatékonysága”) igen csekély. Ennek oka, hogy a nátrium-klorid oldatósága csak kevéssé változik a hőmérséklettel, így az oldott anyag jelentős része benne marad az anyalúgban:



5.6.5.3. ábra: A nátrium-klorid oldhatósága a hőmérséklet függvényében

5.7. Kristályvizes sók

A kristályvizet tartalmazó vegyületeket az alábbi formában szoktuk felírni: $A_aB_b \cdot nH_2O$, például a kristályvizes réz(II)-szulfát képlete: $CuSO_4 \cdot 5H_2O$, vagy a kristályvizes (kristályos) trinátrium-foszfát képlete: $Na_3PO_4 \cdot 12H_2O$.

A kristályvíz nem feltétlenül egész szám: például az égetett gipsz képlete: $CaSO_4 \cdot 0,5H_2O$. Bizonyos kristályvíztartalmú sók idővel elveszíthetik a kristályvizük egy részét, így változatos összetételű sók keletkezhetnek, például $CrK(SO_4)_2 \cdot 9,37H_2O$.

Mint ahogyan a képletekből is látszik, a kristályvíz mennyisége és a só mennyisége között szoros összefüggés áll fenn: a H_2O -molekula előtt álló szám azt mutatja meg, hogy a 1 mól kristályos só hány mól kristályvizet tartalmaz. Tehát a vízmolekula előtti szorzószám megadja a kristályvizes só pontos összetételét.

A kristályvizes sókat felfoghatjuk szilárd oldatokként, melyben az oldószer a kristályvíz, a kristályvízmentes anyag pedig az oldott anyag. A relatív atomtömegek ismeretében kiszámíthatjuk a kristályvíz (mint „szilárd oldat”) tömegszázalékos összetételét.

A kristályos, illetve kristályvizes só kifejezést rendszerint a kristályvíztartalmú só szinonimájaként használjuk.

5.34. példa:

Mekkora a kristályos nátrium-szulfátban ($Na_2SO_4 \cdot 10H_2O$) a nátrium-szulfát és a víz tömegtörtje?

$$A_r(H): 1,00; \quad A_r(O): 16,00; \quad A_r(Na): 23,00; \quad A_r(S): 32,00.$$

Megoldás:

A kristályvízmentes nátrium-szulfát és a víz moláris tömege:

$$M(Na_2SO_4) = 2 \cdot 23,00 + 1 \cdot 32,00 + 4 \cdot 16,00 = 142,00 \text{ g/mol},$$

$$M(H_2O) = 2 \cdot 1,00 + 1 \cdot 16,00 = 18,00 \text{ g/mol}.$$

A kristályvizes nátrium-szulfát moláris tömege:

$$M(\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O}) = 1 \cdot 142,00 \text{ g/mol} + 10 \cdot 18,00 \text{ g/mol} = 322,00 \text{ g/mol},$$

A nátrium-szulfát tömegtörtje:

$$w_{\text{kr}}(\text{Na}_2\text{SO}_4) = \frac{M(\text{Na}_2\text{SO}_4)}{M(\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O})} = \frac{142,00 \text{ g/mol}}{322,00 \text{ g/mol}} = 0,441.$$

Tehát a nátrium-szulfát tömegtörtje 0,441, azaz 44,1 tömegszázalék.

Így a (kristály)víz tömegtörtje: $1 - 0,441 = \underline{0,559}$, azaz 55,9 tömegszázalék.

Általánosságban megfogalmazva egy $A_aB_b \cdot n\text{H}_2\text{O}$ képletű kristályvizes só tömegszázalékos összetétele a következő képlettel számítható:

$$w_{\text{kr}}(A_aB_b) = \frac{M(A_aB_b)}{M(A_aB_b) + n \cdot M(\text{H}_2\text{O})} = \frac{a \cdot A_r(A) + b \cdot A_r(B)}{a \cdot A_r(A) + b \cdot A_r(B) + n \cdot M(\text{H}_2\text{O})}.$$

5.35. példa:

Egy kristályvizét részben elvesztett réz(II)-szulfát ($\text{CuSO}_4 \cdot n\text{H}_2\text{O}$) 27,95 tömegszázaléka réz. Mi a só pontos összetétele (mekkora az n értéke)?

$$A_r(\text{Cu}): 63,50; \quad A_r(\text{S}): 32,00; \quad A_r(\text{O}): 16,00; \quad A_r(\text{H}): 1,00.$$

Megoldás:

Vegyünk 100,0 gramm kristályvizét részben elvesztett sót! Ebben van 27,95 gramm réz, melynek anyagmennyisége:

$$n(\text{Cu}) = \frac{m}{M(\text{Cu})} = \frac{27,95 \text{ g}}{63,5 \text{ g/mol}} = 0,44016 \text{ mol}.$$

Mivel 1 mól sóban 1 mól réz(II)ion található, a fenti anyagmennyiség éppen a 100,0 gramm só anyagmennyiségével egyezik meg. A só átlagos moláris tömege:

$$M(\text{CuSO}_4 \cdot n\text{H}_2\text{O}) = \frac{m_{\text{só}}}{n_{\text{só}}} = \frac{100,0 \text{ g}}{0,44016 \text{ mol}} = 227,2 \text{ g/mol}.$$

Ismerjük a CuSO_4 és a H_2O moláris tömegét:

$$M(\text{CuSO}_4) = 63,50 + 1 \cdot 32,00 + 4 \cdot 16,00 = 159,50 \text{ g/mol},$$

$$M(\text{H}_2\text{O}) = 2 \cdot 1,00 + 1 \cdot 16,00 = 18,00 \text{ g/mol}.$$

Így az átlagos moláris tömegre felírható:

$$M(\text{CuSO}_4 \cdot n\text{H}_2\text{O}) = M(\text{CuSO}_4) + n \cdot M(\text{H}_2\text{O}), \text{ behelyettesítve:}$$

$$227,2 \text{ g/mol} = 159,50 \text{ g/mol} + n \cdot 18,00 \text{ g/mol}.$$

Az egyenletből $n = 3,76$. Tehát a só mólonként 3,76 mól kristályvizet tartalmaz.

5.7.1. Kristályvizes sók oldatainak számítása

A kristályvizes sókra is alkalmazhatjuk a keverési egyenletet, ilyenkor azonban az oldott anyag tömegtörtje a fenti módon kiszámított érték, melynek jelölése a továbbiakban w_{kr} . Tehát a keverési

egyenlettel mindent ugyanúgy számítunk, mint korábban, csak az oldott anyag tömegtörtje $w = w_{kr}$, ha kristályvizes a só, és $w = 1$, ha kristályvízmentes só.

5.7.1.1. Kristályvizes sók oldása

5.36. példa:

250,0 gramm vízben feloldunk 50,0 gramm kristályos vas(II)-szulfátot ($\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$). Állapítsuk meg a keletkezett oldat tömegszázalékos és mólszázalékos összetételét!

$$A_r(\text{Fe}): 55,80; \quad A_r(\text{S}): 32,00; \quad A_r(\text{O}): 16,00; \quad A_r(\text{H}): 1,00.$$

Megoldás:

$$M(\text{FeSO}_4) = 55,80 + 1 \cdot 32,00 + 4 \cdot 16,00 = 151,80 \text{ g/mol},$$

$$M(\text{H}_2\text{O}) = 2 \cdot 1,00 + 1 \cdot 16,00 = 18,00 \text{ g/mol}.$$

$$M(\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}) = 1 \cdot 151,80 \text{ g/mol} + 7 \cdot 18,00 \text{ g/mol} = 277,80 \text{ g/mol},$$

A kristályos vas(II)-szulfát tömegszázalékos összetétele:

$$w_{kr}(\text{FeSO}_4) = \frac{M(\text{FeSO}_4)}{M(\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O})} = \frac{151,80 \text{ g/mol}}{277,80 \text{ g/mol}} = 0,5464.$$

50,0 gramm kristályos vas(II)-szulfátban az „oldott anyag”, illetve kristályvíz tömege:

$$m_{\text{oldott anyag}} = w_{kr} \cdot m = 0,5464 \cdot 50,0 \text{ g} = 27,32 \text{ g},$$

$$m_{\text{kristályvíz}} = m - m_{\text{oldott anyag}} = 50,0 \text{ g} - 27,32 \text{ g} = 22,68 \text{ g}.$$

Tehát az 50,0 gramm kristályvíztartalmú vas(II)-szulfátban a vas(II)-szulfát tömege 27,32 gramm.

Az oldat össztömege a kristályvizes vas(II)-szulfát tömegének (50,0 g) és a víznek (250,0 g) a tömegének az összege:

$$m = 50,0 \text{ g} + 250,0 \text{ g} = 300,0 \text{ g}.$$

Így az oldat tömegtörtje:

$$w_{kr}(\text{FeSO}_4) = \frac{m_{\text{oldottanyag}}}{m} = \frac{27,32 \text{ g/mol}}{300,0 \text{ g/mol}} = 0,0911.$$

A mólszázalékos összetételhez szükségünk van az oldott anyag és az oldószer anyagmennyiségére.

A vas(II)-szulfát tömege alapján annak anyagmennyisége:

$$n(\text{FeSO}_4) = \frac{m_{\text{oldottanyag}}}{M(\text{FeSO}_4)} = \frac{27,32 \text{ g}}{151,80 \text{ g/mol}} = 0,180 \text{ mol}.$$

A víz tömegének számításakor az oldószer víz tömegéhez hozzá kell adnunk a kristályvíz tömegét is:

$$m(\text{H}_2\text{O}) = 250,0 \text{ g} + 22,68 \text{ g} = 272,68 \text{ g}.$$

A víz anyagmennyisége:

$$n(\text{H}_2\text{O}) = \frac{m(\text{H}_2\text{O})}{M(\text{H}_2\text{O})} = \frac{272,68 \text{ g}}{18,0 \text{ g/mol}} = 15,149 \text{ mol.}$$

A FeSO_4 és a H_2O anyagmennyiségéből már számítható a móltört:

$$x(\text{FeSO}_4) = \frac{n_{\text{oldottanyag}}}{n_{\text{oldat}}} = \frac{0,180 \text{ mol}}{0,180 \text{ mol} + 15,149 \text{ mol}} = 0,0117.$$

Tehát a keletkezett vas(II)-szulfát-oldat összetétele: 9,11 tömeg% FeSO_4 és 90,89 tömeg% H_2O , illetve 1,17 mólm% FeSO_4 és 98,83 tömeg% H_2O .

5.37. példa:

Hány gramm kristályos cink(II)-nitrátot $[\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}]$ kell feloldanunk 100,0 gramm vízben, hogy az oldat cink-nitrátra nézve 12,00 tömegszázalékos legyen?

$$A_r(\text{Zn}): 65,40; \quad A_r(\text{N}): 14,00; \quad A_r(\text{O}): 16,00; \quad A_r(\text{H}): 1,00.$$

Megoldás:

Az előző feladathoz hasonlóan meghatározzuk a kristályvizes só tömegszázalékos összetételét:

$$M(\text{Zn}(\text{NO}_3)_2) = 65,40 + 2 \cdot (1 \cdot 14,00 + 3 \cdot 16,00) = 189,40 \text{ g/mol},$$

$$M(\text{H}_2\text{O}) = 2 \cdot 1,00 + 1 \cdot 16,00 = 18,00 \text{ g/mol}.$$

$$M(\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}) = 1 \cdot 189,40 \text{ g/mol} + 6 \cdot 18,00 \text{ g/mol} = 297,40 \text{ g/mol},$$

A kristályos cink(II)-nitrát tömeg%-os összetétele:

$$w_{\text{kr}}(\text{Zn}(\text{NO}_3)_2) = \frac{M(\text{Zn}(\text{NO}_3)_2)}{M(\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6 \text{H}_2\text{O})} = \frac{189,40 \text{ g/mol}}{297,40 \text{ g/mol}} = 0,6368$$

A 100 gramm vízhez hozzáadott kristályvizes cink(II)-nitrát tömege legyen x gramm, így az oldat össztömege $(x + 100)$ gramm! Felírható a következő egyenlet a cink-nitrát tömegére:

$$0,6368 \cdot x = 0,12 \cdot (x + 100).$$

(Bal oldalon az ismeretlen x tömegű $\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ cink(II)-nitrát-tartalma áll; a jobb oldalon pedig a keletkezett 12 tömeg%-os, $(x + 100)$ gramm tömegű oldat cink(II)-nitrát-tartalma található.)

Az egyenlet megoldása: $x = 23,22 \text{ g}$.

Tehát 23,22 gramm kristályos cink(II)-nitrátot kell feloldani.

5.38. példa:

A kristályvízmentes réz(II)-szulfát oldhatósága 60°C -on $40,0 \text{ g} / 100 \text{ g}$ víz. $200,0$ gramm kristályvizes réz(II)-szulfáthoz ($\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$) mekkora tömegű vizet kell adnunk, hogy 60°C -on éppen telített oldatot kapjunk?

$$A_r(\text{Cu}): 63,50; \quad A_r(\text{S}): 32,00; \quad A_r(\text{O}): 16,00; \quad A_r(\text{H}): 1,00.$$

Megoldás:

A feladat megoldásához ki kell számítanunk a 60°C -on telített oldat, illetve a kristályvizes só tömegtörtjét.

$$w(60\text{ }^\circ\text{C}) = \frac{40,0\text{ g}}{100\text{ g} + 40,0\text{ g}} = 0,2857$$

$$M(\text{CuSO}_4) = 65,50 + 1 \cdot 32,00 + 4 \cdot 16,00 = 159,50\text{ g/mol},$$

$$M(\text{H}_2\text{O}) = 2 \cdot 1,00 + 1 \cdot 16,00 = 18,00\text{ g/mol}.$$

$$M(\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}) = 1 \cdot 159,50\text{ g/mol} + 5 \cdot 18,00\text{ g/mol} = 249,50\text{ g/mol},$$

A kristályos réz(II)-szulfát tömegszázalékos összetétele:

$$w_{\text{kr}}(\text{CuSO}_4) = \frac{M(\text{CuSO}_4)}{M(\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O})} = \frac{159,50\text{ g/mol}}{249,50\text{ g/mol}} = 0,6393.$$

A feladat szövegében szereplő 200,0 gramm kristályvizes réz(II)-szulfát oldottanyag-tartalma:

$$m_{\text{oldott anyag}} = 0,6393 \cdot 200,0\text{ g} = 127,86\text{ g}.$$

Mivel a 60 °C-on telített oldat tömegtörtje 0,2857, az oldat tömege:

$$m_{\text{oldat}} = \frac{m_{\text{oldottanyag}}}{w(60\text{ }^\circ\text{C})} = \frac{127,86\text{ g}}{0,2857} = 447,5\text{ g}.$$

A hozzáadott víz mennyisége innen már egyszerűen adódik: $447,5\text{ g} - 200,0\text{ g} = 247,5\text{ g}$.
Tehát 247,5 gramm vízben kell feloldani a kristályos réz(II)-szulfátot.

5.39. példa:

A $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$ oldhatósága 40 °C-on: 106,0 g vízmentes anyag / 100,0 g víz. Mekkora tömegű $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ -ból és mekkora tömegű vízből tudunk előállítani 200,0 g 40 °C-on telített oldatot? Mekkora az így keletkezett oldat mol/dm³ koncentrációja, ha az oldat sűrűsége 1,230 g/cm³.

$$A_r(\text{Ca}): 40,10; \quad A_r(\text{N}): 14,00; \quad A_r(\text{O}): 16,00; \quad A_r(\text{H}): 1,00.$$

Megoldás:

A feladat megoldásához ki kell számítanunk a telített oldat és a kristályvíztartalmú só összetételét az alábbiak alapján:

$$w(40\text{ }^\circ\text{C}) = \frac{106,0\text{ g}}{100\text{ g} + 106,0\text{ g}} = 0,5146.$$

$$M(\text{Ca}(\text{NO}_3)_2) = 40,10 + 2 \cdot (1 \cdot 14,00 + 3 \cdot 16,00) = 164,10\text{ g/mol},$$

$$M(\text{H}_2\text{O}) = 2 \cdot 1,00 + 1 \cdot 16,00 = 18,00\text{ g/mol},$$

$$M(\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}) = 1 \cdot 164,10\text{ g/mol} + 4 \cdot 18,00\text{ g/mol} = 236,10\text{ g/mol}.$$

A kristályos só tömegszázalékos összetétele:

$$w_{\text{kr}}(\text{Ca}(\text{NO}_3)_2) = \frac{M(\text{Ca}(\text{NO}_3)_2)}{M(\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O})} = \frac{164,10\text{ g/mol}}{236,10\text{ g/mol}} = 0,6950.$$

A 200,0 gramm telített (51,46%-os) oldat elkészítéséhez szükséges vízmentes $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$ tömege:

$$m = w(40\text{ }^\circ\text{C}) \cdot m = 0,5146 \cdot 200,0\text{ g} = 102,91\text{ g.}$$

Mivel a kristályvíztartalmú só 69,50%-a vízmentes $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$, így a szükséges kristályos só tömege:

$$m(\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}) = \frac{102,91\text{ g}}{0,6950} = 148,1\text{ g.}$$

A 200,0 gramm oldat előállításához szükséges víz mennyisége: $200,0\text{ g} - 148,1\text{ g} = 51,9\text{ g}$.

Tehát 148,1 gramm $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ -ra és 51,9 gramm vízre van szükségünk az oldat elkészítéséhez.

5.40. példa:

Hány gramm kristályvíztartalmú magnézium-kloridot ($\text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$) kell adnunk 200,0 gramm 5,00 tömegszázalékos magnézium-klorid-oldathoz, hogy az $20\text{ }^\circ\text{C}$ -on telítetté váljék?

A kristályvízmentes magnézium-klorid oldhatósága $20\text{ }^\circ\text{C}$ -on $54,6\text{ g} / 100\text{ g}$ víz.

$$A_r(\text{Mg}): 24,30; \quad A_r(\text{Cl}): 35,50; \quad A_r(\text{O}): 16,00; \quad A_r(\text{H}): 1,00.$$

Megoldás:

A kristályos magnézium-klorid összetétele:

$$M(\text{MgCl}_2) = 24,30 + 2 \cdot 35,50 = 95,30\text{ g/mol,}$$

$$M(\text{H}_2\text{O}) = 2 \cdot 1,00 + 1 \cdot 16,00 = 18,00\text{ g/mol.}$$

$$M(\text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}) = 1 \cdot 95,30\text{ g/mol} + 6 \cdot 18,00\text{ g/mol} = 203,30\text{ g/mol,}$$

A kristályos magnézium-klorid tömegszázalékos összetétele:

$$w_{\text{kr}}(\text{MgCl}_2) = \frac{M(\text{MgCl}_2)}{M(\text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O})} = \frac{95,30\text{ g/mol}}{203,30\text{ g/mol}} = 0,4688.$$

A $20\text{ }^\circ\text{C}$ -on telített oldat összetétele:

$$w(20\text{ }^\circ\text{C}) = \frac{54,6\text{ g}}{100\text{ g} + 54,6\text{ g}} = 0,3532.$$

200 gramm 5,00%-os oldatban van $0,05 \cdot 200\text{ g} = 10\text{ g}$ magnézium-klorid. Adjunk ehhez az oldathoz x gramm kristályvíztartalmú magnézium-kloridot! Ebben van $0,4688 \cdot x$ gramm MgCl_2 , így a keletkezett oldat magnézium-klorid-tartalma: $10\text{ g} + 0,4688 \cdot x\text{ g}$. A keletkezett oldat tömege $200\text{ g} + x\text{ g}$, mely a feladat feltételei alapján telített magnézium-kloridra. A keverési egyenletet felírva a magnézium-klorid-tartalomra:

$$10 + 0,4688 \cdot x = 0,3532 \cdot (200 + x).$$

Megoldva az egyenletet kapjuk, hogy $x = 524,6$ gramm.

Tehát 524,6 gramm kristályvíztartalmú magnézium-kloriddal tudjuk az 5,00%-os oldatot telíteni.

5.41. példa:

Összekeverünk 10,00 gramm kristályvízmentes bárium-kloridot és 10,00 gramm vizet $20\text{ }^\circ\text{C}$ hőmérsékleten. Ekkor a kristályvízmentes só felveszi a kristályvizét, a só feletti oldat pedig telítetté válik bárium-kloridra. Állapítsuk meg az oldat alján maradó kristályvíztartalmú $\text{BaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ tömegét!

A kristályvízmentes bárium-klorid oldhatósága 20 °C-on 35,7 g / 100 g víz.

$$A_r(\text{Ba}): 137,30; \quad A_r(\text{Cl}): 35,50; \quad A_r(\text{O}): 16,00; \quad A_r(\text{H}): 1,00.$$

Megoldás:

Az előzőekhez hasonló módon:

$$M(\text{BaCl}_2) = 137,30 + 2 \cdot 35,50 = 208,30 \text{ g/mol},$$

$$M(\text{H}_2\text{O}) = 2 \cdot 1,00 + 1 \cdot 16,00 = 18,00 \text{ g/mol}.$$

$$M(\text{BaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}) = 1 \cdot 208,30 \text{ g/mol} + 2 \cdot 18,00 \text{ g/mol} = 244,30 \text{ g/mol},$$

A kristályos bárium-klorid tömegszázalékos összetétele:

$$w_{\text{kr}}(\text{BaCl}_2) = \frac{M(\text{BaCl}_2)}{M(\text{BaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O})} = \frac{208,30 \text{ g/mol}}{244,30 \text{ g/mol}} = 0,8526.$$

A 20 °C-on bárium-kloriddal telített oldat összetétele:

$$w(20 \text{ °C}) = \frac{35,7 \text{ g}}{100 \text{ g} + 35,7 \text{ g}} = 0,2631.$$

A kristályvízmentes bárium-klorid és víz tömegének összege 20,0 gramm (ugyanennyi a keletkezett kristályvíztartalmú só és az oldat tömegének összege). A kérdésben szereplő $\text{BaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ tömege legyen x gramm, így a telített oldat tömege $(20,0 - x)$ gramm! A BaCl_2 -mennyiségre felírva a mérlegegyenletet:

$$w_{\text{kr}}(\text{BaCl}_2) \cdot x + w(20 \text{ °C}) \cdot (20,0 - x) = 10,0,$$

$$0,8526 \cdot x + 0,2631 \cdot (20,0 - x) = 10,0.$$

Az egyenlet megoldása: $x = 8,04$ gramm. Tehát 8,04 gramm szilárd anyag marad az edény alján.

5.7.1.2. Kristályvizes sók kristályosítása és átkristályosítása

5.42. példa:

Hány gramm kristályvíztartalmú nátrium-karbonát ($\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$) válik ki 300,0 gramm 80 °C-on telített nátrium-karbonát-oldatból, ha azt 0 °C-ra hűtjük? Az oldat nátrium-karbonát-tartalmának hány %-a kristályosodik ki?

A kristályvízmentes nátrium-karbonát oldhatósága:

$$0 \text{ °C-on } 7,0 \text{ g} / 100 \text{ g víz}.$$

$$80 \text{ °C-on } 43,9 \text{ g} / 100 \text{ g víz}.$$

$$A_r(\text{Na}): 23,00; \quad A_r(\text{C}): 12,00; \quad A_r(\text{O}): 16,00; \quad A_r(\text{H}): 1,00.$$

Megoldás:

Az előző feladatokhoz hasonlóan meg kell állapítanunk a kristályos só összetételét:

$$M(\text{Na}_2\text{CO}_3) = 2 \cdot 23,00 + 1 \cdot 12,00 + 3 \cdot 16,00 = 106,00 \text{ g/mol},$$

$$M(\text{H}_2\text{O}) = 2 \cdot 1,00 + 1 \cdot 16,00 = 18,00 \text{ g/mol}.$$

$$M(\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}) = 1 \cdot 106,00 \text{ g/mol} + 10 \cdot 18,00 \text{ g/mol} = 286,00 \text{ g/mol},$$

A kristályos nátrium-karbonát tömegszázalékos összetétele:

$$w_{\text{kr}}(\text{Na}_2\text{CO}_3) = \frac{M(\text{Na}_2\text{CO}_3)}{M(\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O})} = \frac{106,00 \text{ g/mol}}{286,00 \text{ g/mol}} = 0,3706.$$

Az oldhatóság a két hőmérsékleten:

$$w(0 \text{ }^\circ\text{C}) = \frac{7,0 \text{ g}}{100,0 \text{ g} + 7,0 \text{ g}} = 0,0654,$$

$$w(80 \text{ }^\circ\text{C}) = \frac{43,9 \text{ g}}{100 \text{ g} + 43,9 \text{ g}} = 0,3051.$$

A kivált kristályvíztartalmú nátrium-karbonát ($\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$) tömege legyen x ! A mérlegegyenletet felírva a kristályosodásra:

$$0,3051 \cdot 300 = 0,3706 \cdot x + 0,0654 \cdot (300 - x).$$

(Bal oldalon található a kiindulási, $80 \text{ }^\circ\text{C}$ -on telített oldat sótartalma, a jobb oldalon pedig az első tag a kristályos nátrium-karbonát oldott anyag tartalma, a második a maradék $0 \text{ }^\circ\text{C}$ -on telített oldat sótartalma.)

Az egyenlet megoldása: $x = 235,6 \text{ g}$.

Az oldat eredetileg $0,3051 \cdot 300 \text{ g} = 91,53 \text{ g}$ nátrium-karbonátot tartalmazott $80 \text{ }^\circ\text{C}$ -on.

A kikristályosodott $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ -ban a nátrium-karbonát-tartalom:

$$0,3706 \cdot 235,6 \text{ g} = 87,31 \text{ g}.$$

A két tömeg aránya:

$$\frac{87,31 \text{ g}}{91,53 \text{ g}} = 0,954 = 95,4\%.$$

Tehát a 235,6 gramm $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ vált ki, az oldat nátrium-karbonát-tartalmának 95,4%-át sikerült kinyerni a kristályosítás során.

5.43. példa:

180,0 gramm kristályvíztartalmú kobalt(II)-kloridot ($\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$) kell átkristályosítanunk. A sóhoz 40,0 gramm desztillált vizet öntünk, majd $70 \text{ }^\circ\text{C}$ -ra melegítjük a keveréket. Mekkora a keletkező oldatban a kobalt(II)-klorid tömegszázaléka? Az oldatot $0 \text{ }^\circ\text{C}$ -ra hűtjük. Mekkora tömegű $\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ válik ki az oldatból, ha tudjuk, hogy $0 \text{ }^\circ\text{C}$ -on 45,0 gramm vízmentes CoCl_2 oldható fel 100 gramm desztillált vízben? Hány százalékát tudjuk visszanyerni a kiindulási kristályos kobalt(II)-kloridnak?

$$A_r(\text{Co}): 58,90; \quad A_r(\text{Cl}): 35,50; \quad A_r(\text{O}): 16,00; \quad A_r(\text{H}): 1,00.$$

Megoldás:

Először számítsuk ki a 180,0 gramm kristályvíztartalmú só kobalt(II)-klorid-tartalmát:

$$M(\text{CoCl}_2) = 1 \cdot 58,90 + 2 \cdot 35,50 = 129,90 \text{ g/mol},$$

$$M(\text{H}_2\text{O}) = 2 \cdot 1,00 + 1 \cdot 16,00 = 18,00 \text{ g/mol}.$$

$$M(\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}) = 1 \cdot 129,90 \text{ g/mol} + 6 \cdot 18,00 \text{ g/mol} = 237,90 \text{ g/mol},$$

$$w_{\text{kr}}(\text{CoCl}_2) = \frac{M(\text{CoCl}_2)}{M(\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O})} = \frac{129,90 \text{ g/mol}}{237,90 \text{ g/mol}} = 0,5460.$$

Tehát a 180,0 gramm só CoCl_2 -tartalma: $0,5460 \cdot 180,0 \text{ g} = 98,285 \text{ g}$,
 illetve víztartalma: $180,0 \text{ g} - 98,285 \text{ g} = 81,715 \text{ g}$.

A kristályvizet sóból 40,0 gramm vízzel oldatot készítünk. Az oldat tömege:
 $180,0 \text{ g} + 40,0 \text{ g} = 220,0 \text{ g}$. Így a CoCl_2 tömeghányada az oldatban:

$$w = \frac{m_{\text{oldottanyag}}}{m_{\text{oldat}}} = \frac{98,285 \text{ g}}{220,0 \text{ g}} = 0,447.$$

A 0°C -on telített kobalt(II)-klorid-oldat tömeghányada:

$$w(0^\circ\text{C}) = \frac{45,0 \text{ g}}{100,0 \text{ g} + 45,0 \text{ g}} = 0,3103.$$

Az 70°C -os oldatot 0°C -ra lehűtve kikristályosodik x gramm kristályvíztartalmú kobalt(II)-klorid. A CoCl_2 -tartalomra felírható a következő egyenlet:

$$98,285 = 0,5460 \cdot x + 0,3103 \cdot (220 - x)$$

(Bal oldalon található a kobalt(II)-klorid összmennyisége, a jobb oldalon az első tag a kristályvíztartalmú só CoCl_2 -tartalma, a második a maradék pedig 0°C -on telített oldat CoCl_2 -tartalma.)

Az egyenlet megoldása: $x = 127,4$ gramm, mely a kiindulási mennyiség

$$\frac{127,4 \text{ g}}{180,0 \text{ g}} = 0,708 = 70,8\% \text{-a.}$$

A 70°C -os oldat 44,7 tömegszázalék kobalt(II)-kloridot tartalmaz, ezt lehűtve 127,4 gramm kristályvíztartalmú só válik ki, mely az kiindulási tömeg 70,8%-a.

5.44. példa:

400,0 gramm kristályos nikkell(II)-szulfátot ($\text{NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$) kristályosítunk át az alábbi módon. Az anyagból 100°C hőmérsékleten telített oldatot készítünk, a szennyeződések kiszűrjük, majd lehűtjük az oldatot 20°C -ra. Hány gramm vizet kell a sóhoz adni, hogy 100°C -on telített oldatot tudjunk előállítani? Hány gramm kristályos nikkell(II)-szulfát válik ki az oldatból? Mekkora az elméleti kitermelés maximuma? A szűrési veszteségtől tekintünk el!

A kristályvízmentes nikkell(II)-szulfát oldhatósága:

20°C -on 44,4 g / 100 g víz.

100°C -on 76,7 g / 100 g víz.

$A_r(\text{Mn}): 58,80; A_r(\text{S}): 32,00; A_r(\text{O}): 16,00; A_r(\text{H}): 1,00.$

Megoldás:

Számítsuk ki a kristályvíztartalmú só nikkell(II)-szulfát-tartalmát:

$$M(\text{NiSO}_4) = 1 \cdot 58,80 + 1 \cdot 32,00 + 4 \cdot 16,00 = 154,80 \text{ g/mol},$$

$$M(\text{H}_2\text{O}) = 2 \cdot 1,00 + 1 \cdot 16,00 = 18,00 \text{ g/mol}.$$

$$M(\text{NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}) = 1 \cdot 154,80 \text{ g/mol} + 6 \cdot 18,00 \text{ g/mol} = 262,80 \text{ g/mol},$$

$$w_{\text{kr}}(\text{NiSO}_4) = \frac{M(\text{NiSO}_4)}{M(\text{NiSO}_4 \cdot 6 \text{H}_2\text{O})} = \frac{154,80 \text{ g/mol}}{262,80 \text{ g/mol}} = 0,5890.$$

Az oldhatósági adatokból a telített oldat tömegtörtje különböző hőmérsékleten:

$$w(20 \text{ }^\circ\text{C}) = \frac{44,4 \text{ g}}{100,0 \text{ g} + 44,4 \text{ g}} = 0,3075,$$

$$w(100 \text{ }^\circ\text{C}) = \frac{76,7 \text{ g}}{100,0 \text{ g} + 76,7 \text{ g}} = 0,4301.$$

A továbbiakban meg kell állapítanunk, mennyi 100 °C-on telített oldat készíthető az adott tömegű kristályvíztartalmú sóból: a 400,0 gramm kristályos só NiSO_4 -tartalma: $0,5890 \cdot 400,0 \text{ g} = 235,62 \text{ g}$. A 100 °C-os telített oldat tömegtörtje 0,4301, így az oldat tömege:

$$m_{\text{oldat}} = \frac{235,62 \text{ g}}{0,4301} = 547,82 \text{ g}.$$

A 400,0 gramm sóból 547,82 gramm telített oldat készítéséhez szükséges víz tömege: $547,82 \text{ g} - 400,0 \text{ g} = 247,82 \text{ g} \approx 248 \text{ g}$.

A 100 °C-on telített oldatot lehűtve keletkezik x gramm kristályvíztartalmú só (ebben az oldott anyag tömegtörtje 0,5890), és $(547,82 - x)$ gramm 20 °C-on telített oldat. Így a nikkell(II)-szulfát-tartalomra felírható a következő mérlegegyenlet:

$$235,62 = 0,5890 \cdot x + 0,3075 \cdot (547,82 - x).$$

Az egyenlet megoldása: $x = 238,60 \text{ g} \approx 239 \text{ gramm}$. 400,0 gramm nikkell(II)-szulfátból visszkapunk 238,6 grammot, így az elméleti legjobb kitermelés:

$$\frac{238,6 \text{ g}}{400,0 \text{ g}} = 0,596 = 59,6\%.$$

A feladatban adott tömegű nikkell(II)-szulfátból 248 gramm vízzel tudunk 100 °C-on telített oldatot készíteni, melyet lehűtve – ideális esetben, veszteségek nélkül – 239 gramm kristályvíztartalmú só válik ki, így az elérhető maximális kitermelés 59,6%.

5.8. Gyakorlókérdések

1. Hogyan lehet megadni egy elegy összetételét?
2. Mit nevezünk tömegtörtnek (tömegszázaléknak)?
3. Definiálja a móltört (mólszázalék) fogalmát!
4. Mi a térfogattört (térfogatszázalék)? Milyen esetben célszerű alkalmazni?
5. Definiálja az anyagmennyiség-koncentráció fogalmát!
6. Hogyan számítható ki a tömegkoncentráció?
7. Mi a Raoult-koncentráció?
8. Mi a különbség a molalitás és a molaritás között?

9. Mikor alkalmazható a keverési egyenlet (mérlegegyenlet)? Írja fel a tömegmérleg-egyenletet két oldat összeöntésére (a két oldat ugyanazt az oldott anyagot és oldószert tartalmazza)!
10. Mit nevezünk kristályvíznek?
11. Mit jelent a következő képlet: $\text{Cr}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$?
12. Mi az oldhatóság? Hogyan szokás megadni egy anyag oldhatóságát egy oldószerben?
13. Általában hogyan függ egy szilárd anyag oldhatósága a hőmérséklettől?
14. Mit nevezünk bepárlásnak?
15. Melyek az átkristályosítás lépései?

6. HÍG OLDATOK TÖRVÉNYEI

Az alábbi fejezetben a **híg oldatok törvényeivel** vagy más néven a **kolligatív tulajdonságokkal** foglalkozunk. Ezek jellemzője, hogy az oldatban található részecskék számával arányos a mért mennyiség.

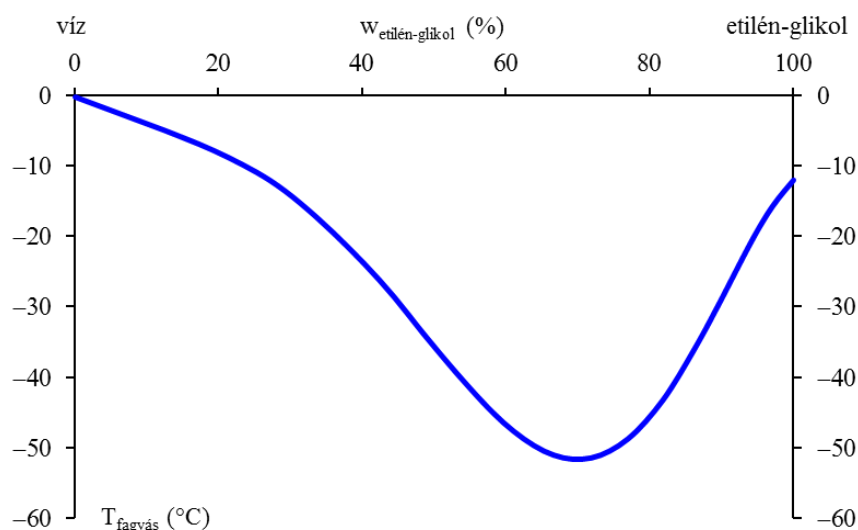
6.1. A forráspont-emelkedés és fagyáspontcsökkenés törvénye

Mint a halmazállapot-változások kapcsán láttuk, adott nyomás esetén a *tiszta anyagok* (elemek és vegyületek) fagyáspontja azonos az olvadásponttal, hasonlóan a forráspontjuk azonos a kondenzációs pontjukkal. *Elegyek* esetén azonban a fagyáspont rendszerint eltér az olvadásponttól. Emellett általában az is megállapítható, hogy az elegy olvadáspontja, illetve fagyáspontja nem azonos az elegyet alkotó bármely tiszta összetevő olvadáspontjával (fagyáspontjával). Vegyünk egy hétköznapi példát! Télen a hóval borított utakat, járdákat nátrium-kloridos sózással szokták kezelni. Az útsózás igen egyszerű elven alapszik: a vizes nátrium-klorid-oldatok fagyáspontja (és olvadáspontja) alacsonyabb a tiszta víz fagyáspontjánál.

(Megjegyzés: az utak sózása nemcsak az élő környezetre van káros hatással, hanem a fémtárgyak korrózióját is elősegíti. Napjainkban ezért lehetőleg kerülni kell a sózásos jégmentesítést, helyette inkább közúzalékot, homokot vagy fűrészport célszerű alkalmazni. Újabban megjelentek olyan fagyáspontcsökkentő anyagok is, melyek már nem tartalmaznak nátrium-kloridot. Például érzékeny növények környezetében lehet használni kalcium-kloridot, ám ez sem tökéletesen környezetbarát. A hómentesítés egyik legkedvezőbb formája a hókotrás, illetve hólapátolás, mely nem alkalmaz vegyi anyagokat.)

A jelenség nem csak a vizes nátrium-klorid-oldatra jellemző: abban az esetben, ha hűtés hatására a viszonylag híg oldatból csak a tiszta oldószer fagy ki, az oldat fagyáspontja alacsonyabb a tiszta oldószer fagyáspontjánál. (Ehhez az szükséges, hogy az oldószer és az oldott anyag eltérő tulajdonságú legyen, azaz ne kristályosodjanak egymás kristályrácsában, ne képezzenek elegykristályt bármely összetételnél. Elegykristályt képeznek azok az anyagok, melyek igen hasonló tulajdonságúak: ezek be tudnak épülni egymás kristályrácsába, így homogén kristály keletkezik. Például elegykristályt képezhetnek a hasonló tulajdonságú fémek, mint a réz és a cink. Ionos vegyületek is képezhetnek elegykristályt, például a nátrium-klorid és a nátrium-bromid.)

Az alábbi ábrán víz és etilén-glikol ($\text{HO-CH}_2\text{-CH}_2\text{-OH}$) elegyének fagyáspontját ábrázoltuk az összetétel függvényében:



6.1.1. ábra: Víz és etilén-glikol elegy fagyáspontja az összetétel függvényében

Jól megfigyelhető, hogy desztillált vízhez etilén-glikolt adagolva az elegy fagyáspontja csökken, ehhez hasonlóan tiszta etilén-glikolhoz desztillált vizet keverve a keletkezett elegy fagyáspontja széles koncentrációtartományban kisebb a tiszta etilén-glikol fagyáspontjánál.

Rendszerint az elegyek forráspontja is eltér az elegyet alkotó tiszta anyagok forráspontjától, ebben az esetben azonban forráspont-emelkedést tapasztalunk. Rendszerint az elegyek forráspontja is eltér az elegyet alkotó tiszta anyagok forráspontjától, Egy oldószerben kis illékonyságú (elhanyagolható gőztenziójú) anyagot oldva, a keletkezett oldat forráspontja magasabb a tiszta oldószer forráspontjánál.

Érdemes megfigyelni, hogy a fenti diagramon a fagyáspont az összetétel függvényében közel lineárisan változik. Híg oldatok esetén mennyiségi törvényeket is megfogalmazhatunk.

6.1.1. Mennyiségi összefüggések

Híg oldatok esetén a fagyáspontcsökkenés egyenesen arányos az oldatban található részecskék (molekulák és ionok) Raoult-koncentrációjának összegével:

$$\Delta T = T_{\text{fagyás},0} - T_{\text{fagyás}} = \Delta T_{M,k} \cdot \sum c_{R,i}$$

ΔT :	fagyáspontcsökkenés értéke ($^{\circ}\text{C}$ vagy K),
$T_{\text{fagyás},0}$:	a tiszta oldószer fagyáspontja ($^{\circ}\text{C}$ vagy K),
$T_{\text{fagyás}}$:	a híg oldat fagyáspontja ($^{\circ}\text{C}$ vagy K),
$\Delta T_{M,k}$:	moláris fagyáspontcsökkenés vagy kriozkópos állandó ($^{\circ}\text{C}\cdot\text{kg/mol}$ vagy $\text{K}\cdot\text{kg/mol}$),
$c_{R,i}$:	az oldatban található i -dik komponens Raoult-koncentrációja (mol/kg),
n :	az oldatban található részecskefajta száma.

Teljesen analóg módon a forráspont-emelkedésre is felírható az alábbi összefüggés:

$$\Delta T = T_{\text{forrás}} - T_{\text{forrás},0} = \Delta T_{M,e} \cdot \sum c_{R,i}$$

A forráspont-emelkedés a híg oldat forráspontja és a tiszta oldószer forráspontja közötti hőmérséklet-különbség. Az arányossági tényező természetesen nem azonos a fenti kriozkópos állandóval: forráspont-emelkedés esetén $\Delta T_{M,e}$ a moláris forráspont-emelkedés vagy ebullioszkópos állandó.

Fontos hangsúlyozni, hogy az oldatban található összes részecske hatását figyelembe kell venni. Például az ionosan disszociáló anyagok esetén az egyes ionok külön részecskeként számítanak. Részlegesen disszociáló anyagok (például gyenge savak és bázisok) oldataiban a disszociációfok 1-nél kisebb, ezt természetesen a számítások során figyelembe kell vennünk! Nemcsak disszociáció, hanem asszociáció is előfordulhat bizonyos oldószerekben: például karbonsavak apoláris oldószerekben dimereket képezhetnek, így csökken az oldatban található részecskék koncentrációja.

6.2. A van 't Hoff-faktor

Amennyiben az oldatban csak egyféle oldott anyag található, a disszociáció hatását a **van 't Hoff-faktor** segítségével könnyen figyelembe vehetjük. A van 't Hoff-faktor (i) az oldatban található, disszociációval keletkezett részecskék összkoncentrációjának és a tiszta anyag ($c_{R,0}$) bemérési koncentrációjának az aránya:

$$i = \frac{\sum c_{R,i}}{c_{R,0}}$$

Természetesen a van 't Hoff-faktort olyan oldatban célszerű alkalmazni, mely csak egyféle oldott anyagot tartalmaz. Ennek segítségével a következő képlettel számítható a fagyáspontcsökkenés, illetve forráspont-emelkedés:

$$\Delta T = \Delta T_M \cdot \sum c_{R,i} = \Delta T_M \cdot i \cdot c_{R,0}$$

Értelemszerűen, ha az oldott anyag nem disszociál, a van 't Hoff-faktor értéke $i = 1$. Ilyen anyagok például: alkoholok, cukrok, karbamid stb.

Amennyiben a feloldott anyag disszociációra képes, célszerű különbséget tennünk az erős és a gyenge elektrolitok között (emlékeztetőül: az erős elektrolitok 100%-ban disszociálnak, míg gyenge elektrolit esetén a disszociáció 100%-nál kisebb, még híg oldatban is).

6.2.1. Tökéletes disszociáció

Vegyünk egy-két példát!

A nátrium-klorid vízben tökéletesen disszociál, melynek során nátriumkationok és kloridanionok keletkeznek. A van 't Hoff-faktor:

$$i = \frac{\sum c_{R,i}}{c_{R,0}} = \frac{c_R(\text{Na}^+) + c_R(\text{Cl}^-)}{c_{R,0}} = \frac{c_{R,0} + c_{R,0}}{c_{R,0}} = \frac{2 \cdot c_{R,0}}{c_{R,0}} = 2.$$

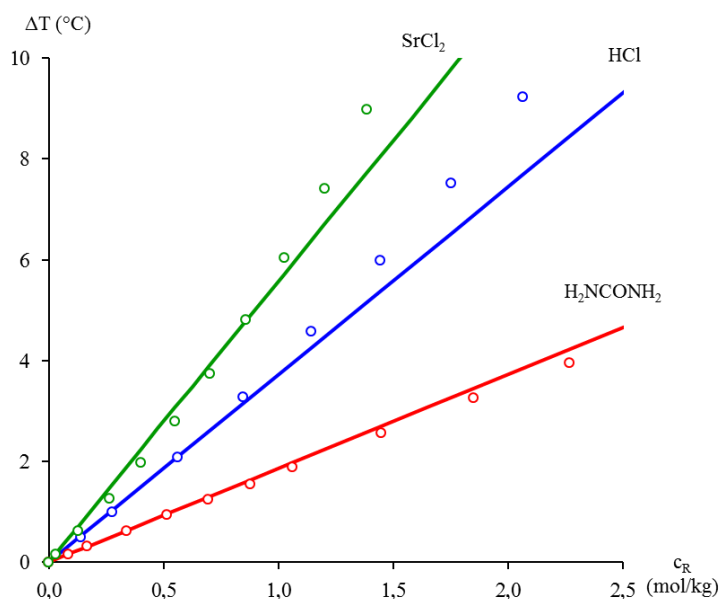
Hasonlóan a stroncium-klorid (SrCl_2) esetén:

$$i = \frac{\sum c_{R,i}}{c_{R,0}} = \frac{c_R(\text{Sr}^{2+}) + c_R(\text{Cl}^-)}{c_{R,0}} = \frac{c_{R,0} + 2 \cdot c_{R,0}}{c_{R,0}} = \frac{3 \cdot c_{R,0}}{c_{R,0}} = 3.$$

Tehát ha az anyag k részre tökéletesen disszociál, a van 't Hoff-faktor a következőképpen alakul:

$$i = \frac{k \cdot c_{R,0}}{c_{R,0}} = k.$$

Az alábbi ábrán három különböző anyag fagyáspontcsökkenését tüntettük fel a Raoult-koncentráció függvényében:

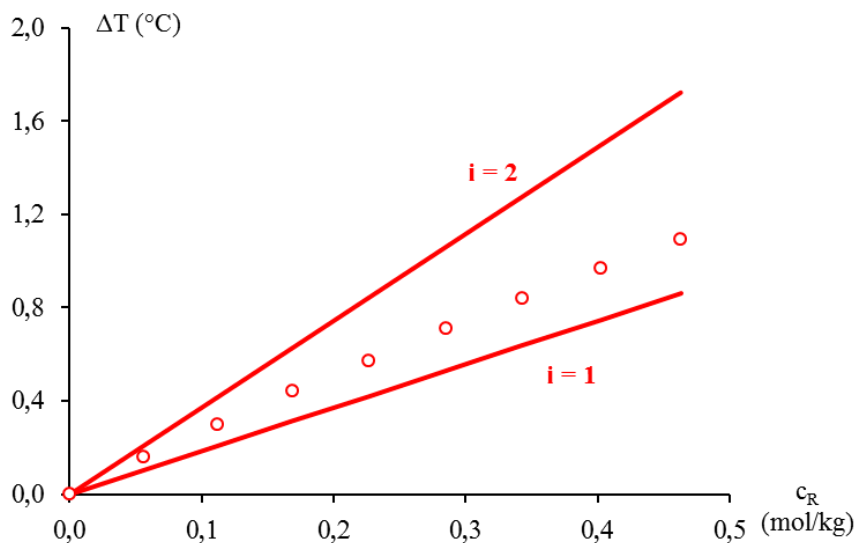


6.2.1.1. ábra: Különböző anyagok fagyáspontcsökkenése a Raoult-koncentráció függvényében

A pontok a mérési eredményeket, a vonalak a fenti összefüggésekkel számított eredményeket jelölik. Jól megfigyelhető, hogy a disszociációval keletkező részecskék számával arányos a tapasztalt fagyáspontcsökkenés. Azt is megfigyelhetjük, hogy nagyobb koncentrációk esetén viszonylag nagy az eltérés a számított és mért értékek között. Éppen ezért szokás híg oldatok törvényeiről beszélni, ám igen nehéz definiálni, hogy mit is nevezünk híg oldatnak. Tulajdonképpen híg oldatnak tekinthetünk egy oldatot, ha tulajdonságait leírhatjuk a híg oldatok törvényeivel.

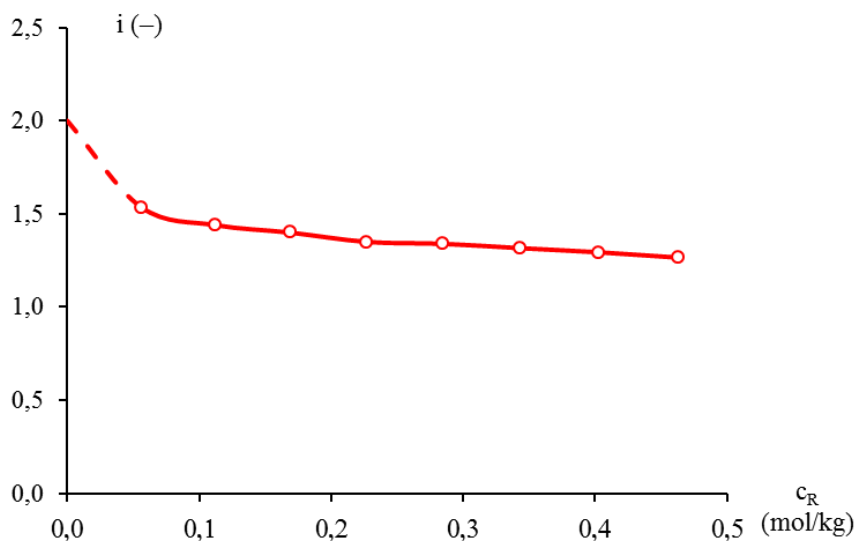
6.2.2. Részleges disszociáció

Vizsgáljuk meg egy gyenge elektrolit, például az oxálsav fagyáspontcsökkenését! Az alábbi ábrán körökkel jelöltük a kísérletileg meghatározott fagyáspontcsökkenést, míg a vonalak az $i = 1$ és $i = 2$ van 't Hoff-féle faktorokkal számított értékeket jelölik.



6.2.2.1. ábra: Az oxálsavoldat fagyáspontcsökkenése a koncentráció függvényében

Jól megfigyelhető, hogy a disszociáció nem 100%-os. Érdekes a van 't Hoff-faktort is ábrázolni a koncentráció (molalitás) függvényében!



6.2.2.2. ábra: Az oxálsav van 't Hoff-faktora a koncentráció függvényében

Mint a pH-számítás kapcsán már volt róla szó, amennyiben egy kétértékű sav disszociációs állandói között jelentős a különbség, elegendő az első disszociációs lépéssel számolni. Az oxálsav esetén ($K_1 = 5,62 \cdot 10^{-2}$, $K_2 = 1,55 \cdot 10^{-4}$) elegendő az első lépést figyelembe venni, legyen a disszociációfok α ! Írjuk fel a disszociációs egyensúlyt táblázatos formában!

	H_2Ox	\rightleftharpoons	H^+	+	HOx^-
Kiindulási:	$c_{\text{R},0}$		0		0
Átalakul:	$-\alpha \cdot c_{\text{R},0}$		$+\alpha \cdot c_{\text{R},0}$		$+\alpha \cdot c_{\text{R},0}$
Egyensúlyban:	$(1-\alpha) \cdot c_{\text{R},0}$		$\alpha \cdot c_{\text{R},0}$		$\alpha \cdot c_{\text{R},0}$

Ebből megállapítható az oldatban található részecskék összkoncentrációja:

$$\sum c_{\text{R},i} = c_{\text{R}}(\text{H}_2\text{Ox}) + c_{\text{R}}(\text{H}^+) + c_{\text{R}}(\text{HOx}^-) = (1-\alpha) \cdot c_{\text{R},0} + \alpha \cdot c_{\text{R},0} + \alpha \cdot c_{\text{R},0} = (1+\alpha) \cdot c_{\text{R},0}.$$

Így a van 't Hoff-faktor:

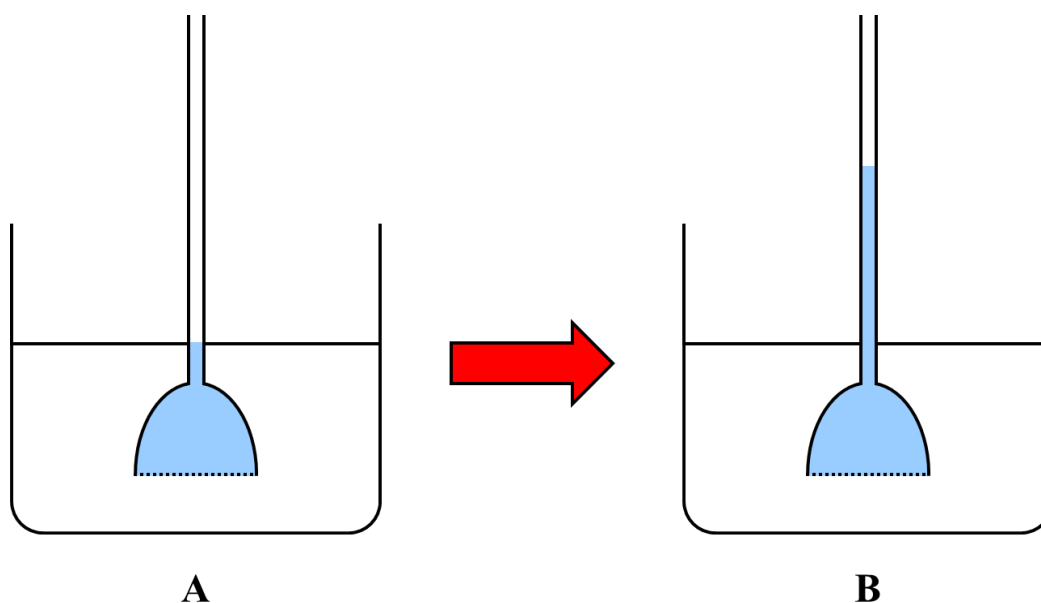
$$i = \frac{\sum c_{\text{R},i}}{c_{\text{R},0}} = \frac{(1+\alpha) \cdot c_{\text{R},0}}{c_{\text{R},0}} = 1 + \alpha.$$

Tehát egy gyenge sav vagy bázis esetében a fagyáspontcsökkenés:

$$\Delta T = \Delta T_{\text{M}} \cdot i \cdot c_{\text{R},0} = \Delta T_{\text{M}} \cdot (1 + \alpha) \cdot c_{\text{R},0}.$$

6.3. Az ozmózisnyomás

Az A ábrán jelölt készülék harangjában híg vizes cukoroldat található, mely desztillált vízbe merül. Az oldatot a desztillált víztől egy féligáteresztő hártya választja el, mely megakadályozza a folyadékok keveredését, a kisméretű oldószer-molekulákat átengedi, ám meggátolja a jóval nagyobb cukormolekulák szabad áramlását. A rendszert magára hagyva, egy idő után, a haranghoz illesztett üvegsőben megemelkedik a folyadékszint. Bizonyos idő elteltével a folyadékszint már nem emelkedik tovább: beáll az egyensúly. A féligáteresztő hártya két oldalán nem azonos a nyomás: a folyadékoszlop hidrosztatikai nyomása többletnyomásként jelentkezik. A jelenséget **ozmózisnak**, a kialakult nyomást **ozmózisnyomásnak** nevezzük.



6.3.1. ábra: Az ozmózis szemléltetése

A jelenséget a következőképp értelmezhetjük: a vízmolekulák a hártya mindkét oldalán át tudnak jutni, ám az átjutás valószínűsége arányos a vízmolekulák koncentrációjával. Értelemszerűen a cukoroldatban a vízmolekulák koncentrációja kisebb, mint a desztillált vízben. Tehát a tiszta vízből nagyobb valószínűséggel juthatnak át oldószerrészecskék a cukoroldat oldalára, mint fordítva. (Tulajdonképpen a hajtóerő a koncentráció-kiegyenlítődé.) Ha a cukoroldatot külső nyomás alá helyezzük, megnöveljük a vízmolekulák átjutásának valószínűségét a cukoroldatból a tiszta vízbe. Ekkor az időegység alatt átjutott vízmolekulák száma azonossá válik a hártya két oldalán, beáll a dinamikus egyensúly. Az egyensúly eléréséhez szükséges ellennyomást nevezzük ozmózisnyomásnak.

Az ozmózisnyomás az alábbi tényezőktől függ:

- az oldat koncentrációja,
- a hőmérséklet,
- a részecskék disszociációja.

Pfeffer-törvény: adott állandó hőmérsékleten az ozmózisnyomás és a moláris koncentráció között egyenes arányosság áll fenn, másképp megfogalmazva az ozmózisnyomás fordítottan arányos az oldat hígításával (a koncentráció reciprokával), feltételezve, hogy az oldott anyag viszonylag híg oldatában vagy tökéletes a disszociáció, vagy eleve nem disszociál az oldott anyag:

$$\frac{\Pi}{c} = \Pi \cdot \varphi = \text{állandó},$$

ahol Π az oldat ozmózisnyomása, c a moláris koncentráció, φ pedig a hígítás.

van 't Hoff-törvény: az ozmózisnyomás megkapható az oldatban található részecskék összkoncentrációjának, az egyetemes gázállandónak és az abszolút hőmérsékletnek a szorzataként:

$$\Pi = \sum c_i \cdot R \cdot T,$$

ahol Π az oldat ozmózisnyomása, c_i az i -dik részecske moláris koncentrációja, R az egyetemes gázállandó, T pedig az abszolút hőmérséklet.

Ha a koncentrációt mol/dm^3 mértékegységben helyettesítjük az egyenletbe, akkor az ozmózisnyomás mértékegysége kPa, ellenben mol/m^3 esetén Pa-ban kapjuk az eredményt.

A fentiekhez hasonlóan az ozmózisnyomás esetén is alkalmazhatjuk a van 't Hoff-faktort:

$$\Pi = \sum c_i \cdot R \cdot T = i \cdot c_0 \cdot R \cdot T.$$

Az ozmózis jelensége rendkívül fontos az élő szervezetekben. Például a fák a számukra szükséges vizet a talajból az ozmózis segítségével juttatják fel koronájukba. Az ember sejteiben az ozmózisnyomás 8 bar körüli, melyet a szervezet igyekszik állandó értéken tartani. Ezért például injekciók, infúziók esetén a szervezetbe juttatott oldat ozmózisnyomásának azonosnak kell lennie a sejtekben található ozmózisnyomással. Az ilyen oldatot izotóniás oldatnak nevezzük, például a 0,9%-os nátrium-klorid-oldat izotóniás oldatnak tekinthető.

Ha egy féligáteresztő hártyával körülhatárolt oldatot egy másik oldatba helyezünk, a két oldat ozmózisnyomásától függően a külső oldatot az alábbi három eset valamelyikébe sorolhatjuk be:

- hipotóniás oldat: a külső oldat ozmózisnyomása a kisebb,
- izotóniás oldat: a két oldat ozmózisnyomása azonos,
- hipertóniás oldat: a külső oldat ozmózisnyomása a nagyobb.

Ha egy rendszert hipotóniás oldatba helyezünk, az megduzzad és akár szét is reped, hipertóniás oldatban viszont összezsugorodik.

Érdekes még pár szót ejteni a **fordított ozmózis** (reverz ozmózis) jelenségéről is: kellően nagy külső nyomás alkalmazásával az oldószer-molekulákat át lehet préselni a diafragmán (félígáteresztő hártyán). Így lehet például híg sóoldatból (tengervízből) töményebb sóoldatot készíteni.

Az alábbi videón egy olyan kísérletet mutatunk be, mely az ozmózis jelenségén alapul:



6.3.1. videó: „A vegyész virágoskertje”

6.1. példa:

Egy polimer 42,5 grammját 100 gramm vízben oldjuk. Mekkora a polimer moláris tömege, ha az oldat $-0,03763\text{ }^{\circ}\text{C}$ -on fagy meg? $\Delta T_M = 1,86\text{ }^{\circ}\text{C}\cdot\text{kg/mol}$

Megoldás:

Az oldatban a polimer Raoult-koncentrációja:

$$c_R = \frac{\Delta T}{\Delta T_M} = \frac{0,03763^{\circ}\text{C}}{1,86^{\circ}\text{C}\cdot\text{kg/mol}} = 0,02023\text{ mol/kg.}$$

Az oldott anyag (polimer) anyagmennyisége:

$$n = c_R \cdot m_{\text{oldószer}} = 0,02023\text{ mol/kg} \cdot 0,1\text{ kg} = 0,002023\text{ mol.}$$

A feloldott polimer moláris tömege:

$$M = \frac{m}{n} = \frac{42,5\text{ g}}{0,002023\text{ mol}} = 21007\text{ g/mol.}$$

A polimer moláris tömege $2,10 \cdot 10^4\text{ g/mol}$.

6.2. példa:

Mekkora a vízbe helyezett szőlőszem falát feszítő ozmózisnyomás $300,0\text{ K}$ -en, ha feltételezzük, hogy a szőlőben $18,0\text{ g/liter}$ koncentrációjú szőlőcukor ($\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$, $M = 180\text{ g/mol}$) oldat van?

Megoldás:

Az oldat molaritása a tömegkoncentrációból:

$$c = \frac{\rho}{M} = \frac{18,0\text{ g/dm}^3}{180\text{ g/mol}} = 0,100\text{ mol/dm}^3.$$

Így az ozmózisnyomás:

$$\Pi = c \cdot R \cdot T = 0,1 \cdot 8,314 \cdot 300,0\text{ kPa} = 249\text{ kPa.}$$

Tehát a szőlőszemben az ozmózisnyomás 249 kPa .

6.3. példa:

Mekkora lesz az alábbi vizes oldatok fagyáspontja, ha 200 g vízben

a. 1,80 g glükózt ($C_6H_{12}O_6$) oldunk?

b. 1,74 g K_2SO_4 -ot oldunk?

Mekkora az a. pontban kapott oldat ozmózisnyomása 298,0 K hőmérsékleten, ha sűrűsége $1,076 \text{ g/cm}^3$?

$$\Delta T_M(H_2O) = 1,86 \text{ }^\circ\text{C}\cdot\text{kg/mol}$$

Megoldás:

a. A glükóz moláris tömege: $M(C_6H_{12}O_6) = 180 \text{ g/mol}$. Az oldott anyag anyagmennyisége:

$$n = \frac{m}{M(C_6H_{12}O_6)} = \frac{1,80 \text{ g}}{180 \text{ g/mol}} = 0,01 \text{ mol.}$$

Az oldat Raoult-koncentrációja:

$$c_R = \frac{n}{m_{\text{oldószer}}} = \frac{0,01 \text{ mol}}{0,2 \text{ kg}} = 0,05 \text{ mol/kg.}$$

Mivel a glükózmolekulák nem disszociálnak:

$$\Delta T = \Delta T_M \cdot c_R = 1,86 \text{ }^\circ\text{C}\cdot\text{kg/mol} \cdot 0,05 \text{ mol/kg} = 0,093 \text{ }^\circ\text{C.}$$

Tehát a fagyáspont $-0,093 \text{ }^\circ\text{C}$.

b. A kálium-szulfát moláris tömege: $M(K_2SO_4) = 174 \text{ g/mol}$. Az oldott anyag anyagmennyisége:

$$n = \frac{m}{M(K_2SO_4)} = \frac{1,74 \text{ g}}{174 \text{ g/mol}} = 0,01 \text{ mol.}$$

Az oldatban a kálium-szulfát Raoult-koncentrációja:

$$c_R = \frac{n}{m_{\text{oldószer}}} = \frac{0,01 \text{ mol}}{0,2 \text{ kg}} = 0,05 \text{ mol/kg.}$$

Mivel a kálium-szulfát (K_2SO_4) 3 részre ($K^+ + K^+ + SO_4^{2-}$) disszociál:

$$\Delta T = \Delta T_M \cdot 3 \cdot c_R = 1,86 \cdot 0,15 \text{ }^\circ\text{C} = 0,279 \text{ }^\circ\text{C.}$$

Így a fagyáspont $-0,279 \text{ }^\circ\text{C}$.

Az ozmózisnyomás számításához meg kell határoznunk az oldat molaritását.

Az oldat tömege és térfogata:

$$m_{\text{oldat}} = 200 \text{ g} + 1,80 \text{ g} = 201,8 \text{ g}, \quad V = \frac{m_{\text{oldat}}}{d} = \frac{201,8 \text{ g}}{1,076 \text{ g/cm}^3} = 187,5 \text{ cm}^3 = 0,1875 \text{ dm}^3$$

Az oldat molaritása:

$$c = \frac{n}{V} = \frac{0,01 \text{ mol}}{0,1875 \text{ dm}^3} = 0,0533 \text{ mol/dm}^3.$$

Mivel a glükóz nem disszociál, az ozmózisnyomás:

$$\Pi = c \cdot R \cdot T = 0,0533 \cdot 8,314 \cdot 298 \text{ kPa} = 132,1 \text{ kPa.}$$

Tehát a glükózoldat fagyáspontja $\underline{-0,093 \text{ }^\circ\text{C}}$, a kálium-szulfát-oldaté pedig $\underline{-0,279 \text{ }^\circ\text{C}}$. A glükózoldat ozmózisnyomása $\underline{132,1 \text{ kPa}}$.

6.4. példa:

0,312 g elemi kén 20,0 gramm toluolban oldunk, az oldat forráspont-emelkedése $0,201 \text{ }^\circ\text{C}$. Hány atomosak a kénmolekulák a toluolos oldatban? $\Delta T_M(\text{toluol}) = 3,22 \text{ }^\circ\text{C} \cdot \text{kg/mol}$

Megoldás:

Számítsuk ki a Raoult-koncentrációt a forráspont-emelkedésből!

$$c_R = \frac{\Delta T}{\Delta T_M} = \frac{0,201 \text{ }^\circ\text{C}}{3,22 \text{ }^\circ\text{C} \cdot \text{kg/mol}} = 0,0624 \text{ mol/kg}$$

Az oldott kén anyagmennyisége:

$$n(\text{S}) = c_R \cdot m_{\text{toluol}} = 0,0624 \text{ mol/kg} \cdot 0,0200 \text{ kg} = 1,248 \cdot 10^{-3} \text{ mol.}$$

A kén moláris tömege:

$$M = \frac{m(\text{S})}{n(\text{S})} = \frac{0,312 \text{ g}}{1,248 \cdot 10^{-3} \text{ mol}} = 249,9 \text{ g/mol.}$$

Mivel a kén relatív atomtömege 32,0, a kénmolekulák átlagosan 7,81 kénatomból állnak, tehát nyolcatomos molekulák találhatóak a toluolos oldatban.

6.5. példa:

A hévízi termásvíz főbb összetevői (mg/liter):

Kationok		Anionok	
Na ⁺	27	Cl ⁻	23,3
Ca ²⁺	81	SO ₄ ²⁻	64
Mg ²⁺	36	HCO ₃ ⁻	378

Mekkora az oldat ozmózisnyomása nyáron, mikor a hőmérséklete $35,0 \text{ }^\circ\text{C}$? Mennyivel kisebb az ozmózisnyomás télen, ha akkor a víz hőmérséklete $24,0 \text{ }^\circ\text{C}$?

Megoldás:

Az ozmózisnyomást az oldatban található részecskék (ionok) összkoncentrációja szabja meg. Éppen ezért célszerű meghatározni az egyes ionok molaritását, majd ezekből az összkoncentrációt.

$$[\text{Na}^+] = \frac{\rho(\text{Na}^+)}{A_r(\text{Na})} = \frac{27 \text{ mg/dm}^3}{23 \text{ g/mol}} = 1,174 \text{ mmol/dm}^3$$

$$[\text{Ca}^{2+}] = \frac{\rho(\text{Ca}^{2+})}{A_r(\text{Ca})} = \frac{81 \text{ mg/dm}^3}{40 \text{ g/mol}} = 2,025 \text{ mmol/dm}^3$$

$$[\text{Mg}^{2+}] = \frac{\rho(\text{Mg}^{2+})}{A_r(\text{Mg})} = \frac{36 \text{ mg/dm}^3}{24,3 \text{ g/mol}} = 1,481 \text{ mmol/dm}^3$$

$$[\text{Cl}^-] = \frac{\rho(\text{Cl}^-)}{A_r(\text{Cl})} = \frac{23,3 \text{ mg/dm}^3}{35,5 \text{ g/mol}} = 0,656 \text{ mmol/dm}^3$$

$$[\text{SO}_4^{2-}] = \frac{\rho(\text{SO}_4^{2-})}{M(\text{SO}_4^{2-})} = \frac{64 \text{ mg/dm}^3}{96 \text{ g/mol}} = 0,667 \text{ mmol/dm}^3$$

$$[\text{HCO}_3^-] = \frac{\rho(\text{HCO}_3^-)}{M(\text{HCO}_3^-)} = \frac{378 \text{ mg/dm}^3}{61 \text{ g/mol}} = 6,197 \text{ mmol/dm}^3$$

Az ionok összkoncentrációja:

$$c_{\text{össz}} = 12,20 \text{ mmol/dm}^3 = 1,220 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3.$$

A nyári termálvíz ozmózisnyomása:

$$\Pi = c_{\text{össz}} \cdot R \cdot T_1 = 1,220 \cdot 10^{-2} \cdot 8,314 \cdot 308,15 \text{ kPa} = 31,3 \text{ kPa}.$$

A téli termálvíz ozmózisnyomása:

$$\Pi = c_{\text{össz}} \cdot R \cdot T_2 = 1,220 \cdot 10^{-2} \cdot 8,314 \cdot 297,15 \text{ kPa} = 30,1 \text{ kPa}.$$

Tehát a termálvíz ozmózisnyomása nyáron 31,3 kPa, míg télen 30,1 kPa.

6.6. példa:

Egy ismeretlen moláris tömegű anyag 1,128 grammját 200 gramm benzolban oldottunk. Az így keletkezett oldat fagyáspontcsökkenése 0,345 °C. Mekkora az anyag moláris tömege, ha $\Delta T_M(\text{C}_6\text{H}_6) = 5,12 \text{ °C} \cdot \text{kg/mol}$?

Megoldás:

Számítsuk ki a Raoult-koncentrációt!

$$c_R = \frac{\Delta T}{\Delta T_M} = \frac{0,345 \text{ °C}}{5,12 \text{ °C} \cdot \text{kg/mol}} = 0,0674 \text{ mol/kg}$$

Az ismeretlen oldott anyag anyagmennyisége az oldatban:

$$n = c_R \cdot m_{\text{benzol}} = 0,0674 \text{ mol/kg} \cdot 0,200 \text{ kg} = 0,01348 \text{ mol}.$$

A keresett moláris tömeg:

$$M = \frac{m}{n} = \frac{1,138 \text{ g}}{0,01348 \text{ mol}} = 83,7 \text{ g/mol}.$$

Az ismeretlen vegyület moláris tömege 83,7 g/mol.

6.7. példa:

A glükóz-fruktóz szörp különféle élelmiszer-ipari termékek (például üdítőitalok) egyik alkotórésze, melyet a répacukor (szacharóz) hidrolízisével lehet előállítani. Jellemzője, hogy igen édes, ezért az alkalmazás céljából a tömény oldatot vízzel szokás hígítani.

10,0 gramm 36,0 tömegszázalék glükóz-, illetve 18,0 tömegszázalék fruktóztartalmú glükóz-fruktóz szörpből 1000 ml oldatot készítettünk. Ennek az oldatnak areométer segítségével meghatároztuk a sűrűségét, mely 1,072 g/cm³-nek adódott. A glükóz és a fruktóz összegképlete is

$C_6H_{12}O_6$. Az adatok ismeretében számítsuk ki a hígított oldat ozmózisnyomását 310,0 K-en, illetve a fagyáspontját! A víz moláris fagyáspontcsökkenése $1,86\text{ °C}\cdot\text{kg/mol}$.

Megoldás:

Mindkét cukorfajta moláris tömege $M(C_6H_{12}O_6)=180\text{ g/mol}$. $1,000\text{ dm}^3$ oldat összesen cukortartalma:

$$m_{\text{cukor}} = (0,36+0,18)\cdot 10,0\text{ g} = 0,54\text{ g},$$

ennek anyagmennyisége:

$$n = \frac{m}{M} = \frac{0,54\text{ g}}{180\text{ g/mol}} = 0,03\text{ mol}.$$

A cukor összkoncentrációja:

$$c = \frac{n}{V} = \frac{0,03\text{ mol}}{1,000\text{ dm}^3} = 0,03\text{ mol/dm}^3 = 30\text{ mol/m}^3,$$

$$\Pi = c \cdot R \cdot T = 30\text{ mol/m}^3 \cdot 8,314\text{ J/(mol}\cdot\text{K)} \cdot 310\text{ K} = 77\,320\text{ Pa} \approx 77,3\text{ kPa}.$$

Oldószer (víz) tömege: $1072\text{ g} - 0,54\text{ g} = 1071,46\text{ g} = 1,07146\text{ kg}$.

$$c_R = \frac{n}{m_{\text{oldószer}}} = \frac{0,03\text{ mol}}{1,07146\text{ kg}} = 0,0280\text{ mol/kg}$$

$$\Delta T = c_R \cdot \Delta T_M = 0,0280\text{ mol/kg} \cdot 1,86\text{ °C}\cdot\text{kg/mol} = 0,052\text{ °C}$$

Így $-0,052\text{ °C}$ a fagyáspont.

6.8. példa:

Állapítsuk meg a következő híg vizes oldatok fagyáspontját! $\Delta T_M = 1,86\text{ °C}\cdot\text{kg/mol}$, $M(H_2O) = 18,0\text{ g/mol}$.

a) 1,00 tömegszázalékos karbamidoldat? $M(H_2NCONH_2) = 60,0\text{ g/mol}$;

b) 0,100 mólszázalékos nátrium-foszfát-oldat? $M(Na_3PO_4) = 164,0\text{ g/mol}$;

A 0,100 mólszázalékos nátrium-foszfát-oldat ozmózisnyomása 320,0 K-en 636,31 kPa. Mekkora az oldat sűrűsége?

Megoldás:

a) 100 g oldatban van 99 gramm víz és 1 gramm karbamid, így a Raoult-koncentráció:

$$c_R = \frac{n}{m_{\text{oldószer}}} = \frac{m(H_2NCONH_2)}{M(H_2NCONH_2) \cdot m_{\text{oldószer}}} = \frac{1,00\text{ g}}{60,0\text{ g/mol} \cdot 0,099\text{ kg}} = 0,1684\text{ mol/kg}.$$

A karbamid nem disszociál vízben, így az oldat fagyáspontcsökkenése:

$$\Delta T = \Delta T \cdot c_R = 1,86 \cdot 0,1684\text{ °C} = 0,313\text{ °C}.$$

Tehát a fagyáspont $-0,313\text{ °C}$.

b) 100 mol oldatban van 0,1 mol Na_3PO_4 és 99,9 mol víz, melynek tömege $18\cdot 99,9\text{ g}=1,7982\text{ kg}$.
Így

$$c_R = \frac{n}{m_{\text{oldószersz}}} = \frac{0,100 \text{ mol}}{1,7982 \text{ kg}} = 0,05561 \text{ mol/kg}$$

Mivel a nátrium-foszfát (Na_3PO_4) négy részre ($\text{Na}^+ + \text{Na}^+ + \text{Na}^+ + \text{PO}_4^{3-}$) disszociál:

$$\Delta T = 4 \cdot \Delta T_M \cdot c_R = 4 \cdot 1,86 \cdot 0,05561 \text{ }^\circ\text{C} = 0,414 \text{ }^\circ\text{C}$$

Így a fagyáspont $-0,414 \text{ }^\circ\text{C}$.

A sűrűség meghatározásához számítsuk ki a molaritást az ozmózisnyomásból!

$$c = \frac{\Pi}{4 \cdot R \cdot T} = \frac{636,31}{4 \cdot 8,314 \cdot 320,0} \text{ mol/dm}^3 = 0,05979 \text{ mol/dm}^3$$

A b) mintájára vegyünk ismét 100 mol oldatot, ennek tömege:

$$m_{\text{oldat}} = m(\text{H}_2\text{O}) + m(\text{Na}_3\text{PO}_4) = 1798,2 \text{ g} + 0,1 \cdot 164 = 1814,6 \text{ g}$$

A 0,1 mol Na_3PO_4 -ot tartalmazó oldat térfogata:

$$V = \frac{n}{c} = \frac{0,1 \text{ mol}}{0,05979 \text{ mol/dm}^3} = 1,672 \text{ dm}^3$$

Így a sűrűség:

$$d = \frac{m_{\text{oldat}}}{V} = \frac{1,8146 \text{ kg}}{1,672 \text{ dm}^3} = 1,085 \text{ kg/dm}^3$$

Tehát az oldat sűrűsége $1,085 \text{ g/cm}^3$.

6.9. példa:

100,0 gramm 0,100 mólszázalékos galaktózoldatot [$M(\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6) = 180 \text{ g/mol}$] mekkora térfogatra kell hígítanunk desztillált vízzel ahhoz, hogy a keletkező oldat ozmózisnyomása 300,0 K-en 100,00 kPa legyen?

Megoldás:

Az adott ozmózisnyomású oldat koncentrációja:

$$c = \frac{\Pi}{R \cdot T} = \frac{100,00}{8,314 \cdot 300,0} \text{ mol/dm}^3 = 0,04009 \text{ mol/dm}^3$$

100,0 gramm galaktózoldat cukortartalma:

$$w = \frac{m_{\text{galaktóz}}}{m_{\text{galaktóz}} + m_{\text{víz}}} = \frac{n_{\text{galaktóz}} \cdot M_{\text{galaktóz}}}{m_{\text{galaktóz}} \cdot M_{\text{galaktóz}} + m_{\text{víz}} \cdot M_{\text{víz}}} = \frac{0,100 \cdot 180}{0,100 \cdot 180 + 99,900 \cdot 18} = 0,00991$$

A 100,0 gramm oldatban a cukor anyagmennyisége:

$$n = \frac{m}{M} = \frac{w \cdot m_{\text{oldat}}}{M} = \frac{0,00991 \cdot 100,0 \text{ g}}{180 \text{ g/mol}} = 0,005506 \text{ mol}$$

Ezt az anyagmennyiségű cukoroldatot V térfogatra kell hígítani, hogy ozmózisnyomása a megadott érték legyen:

$$V = \frac{n}{c} = \frac{0,005506 \text{ mol}}{0,04009 \text{ mol/dm}^3} = 0,1373 \text{ dm}^3 = 137,3 \text{ cm}^3.$$

Azaz 137,3 cm³ térfogatra kell hígítani az oldatot.

6.10. példa:

Állapítsuk meg a 0,100 mol/dm³ koncentrációjú nátrium-szulfát-oldat fagyáspontját!

$$\Delta T_{\text{M}}(\text{H}_2\text{O}) = 1,86 \text{ }^\circ\text{C} \cdot \text{kg/mol}, \quad d = 1,033 \text{ g/cm}^3, \quad M(\text{Na}_2\text{SO}_4) = 142,0 \text{ g/mol}.$$

Megoldás:

1 dm³ oldat tömege a sűrűség alapján 1033 gramm. Ebben van 0,1 mol Na₂SO₄, melynek tömege:

$$m(\text{Na}_2\text{SO}_4) = n \cdot M = 0,100 \cdot 142,0 \text{ g} = 14,2 \text{ g}.$$

Az oldószer víz tömege így:

$$m_{\text{víz}} = 1033 \text{ g} - 14,2 \text{ g} = 1018,8 \text{ g} = 1,0188 \text{ kg}.$$

A molalitás:

$$c_{\text{R}} = \frac{n}{m_{\text{víz}}} = \frac{0,100 \text{ mol}}{1,0188 \text{ kg}} = 0,09815 \text{ mol/kg}.$$

A nátrium-szulfát disszociációjával három ion keletkezik (Na⁺ + Na⁺ + SO₄²⁻), így az oldat fagyáspontcsökkenése:

$$\Delta T = 3 \cdot \Delta T_{\text{M}} \cdot c_{\text{R}} = 3 \cdot 1,86 \cdot 0,09815 \text{ }^\circ\text{C} = 0,548 \text{ }^\circ\text{C}.$$

Az oldat fagyáspontja tehát -0,548 °C.

6.11. példa:

Egy fehérje 1,000 grammjából desztillált vízzel 100,0 cm³ térfogatú oldatot készítünk. A kapott oldat ozmózisnyomása 300,0 K hőmérsékleten 249,42 Pa. Mekkora a fehérje moláris tömege?

Megoldás:

Az adott ozmózisnyomású oldat koncentrációja:

$$c = \frac{\Pi}{R \cdot T} = \frac{249,42}{8,314 \cdot 300,0} \text{ mol/m}^3 = 0,1 \text{ mol/m}^3$$

Az oldott anyag anyagmennyisége:

$$n = c \cdot V = 0,1 \cdot 10^{-4} \text{ mol} = 10^{-5} \text{ mol}$$

A keresett moláris tömeg:

$$M = \frac{m}{n} = \frac{1,000 \text{ g}}{10^{-5} \text{ mol}} = 10^5 \text{ g/mol}$$

A fehérje moláris tömege tehát 1,00 · 10⁵ g/mol.

6.12. példa:

Egy egyértékű gyenge bázis $1,00 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú vizes oldatának pH-ja 10,0. Mekkora az oldat ozmózisnyomása 300 K-en? Mekkora a bázis disszociációs állandója?

Megoldás:

Számítsuk ki a hidroxidionok koncentrációját!

$$\text{pH} = 10,0 \Rightarrow \text{pOH} = 4,0 \Rightarrow [\text{OH}^-] = 1,00 \cdot 10^{-4} \text{ mol/dm}^3$$

Írjuk fel az egyensúlyi táblázatot!

	BOH	\rightleftharpoons	B ⁺	+	OH ⁻
Kiindulási:	10^{-3}		0		0
Átalakul:	-10^{-4}		$+1,00 \cdot 10^{-4}$		$+1,00 \cdot 10^{-4}$
Egyensúlyban:	$9,00 \cdot 10^{-4}$		$1,00 \cdot 10^{-4}$		$1,00 \cdot 10^{-4}$

Az egyensúlyi állandó:

$$K_b = \frac{[\text{B}^+] \cdot [\text{OH}^-]}{[\text{BOH}]} = \frac{(1,00 \cdot 10^{-4}) \cdot (1,00 \cdot 10^{-4})}{9,00 \cdot 10^{-4}} = 1,11 \cdot 10^{-5}$$

Az ozmózisnyomás kétféleképpen is számítható:

(1)

Számítsuk ki az egyes részecskék (molekulák, ionok) összkoncentrációját!

$$c_{\text{össz}} = [\text{BOH}] + [\text{B}^+] + [\text{OH}^-] = 9,00 \cdot 10^{-4} + 1,00 \cdot 10^{-4} + 1,00 \cdot 10^{-4} = 1,10 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3$$

Az ozmózisnyomás:

$$\Pi = c_{\text{össz}} \cdot R \cdot T = 1,10 \cdot 10^{-3} \cdot 8,314 \cdot 300 \text{ kPa} = 2,74 \text{ kPa}$$

(2)

A disszociációfok:

$$\alpha = \frac{[\text{B}^+]}{c_0} = \frac{1,00 \cdot 10^{-4}}{1,00 \cdot 10^{-3}} = 0,100$$

A van 't Hoff-faktort alkalmazva:

$$\begin{aligned} \Pi &= i \cdot c_0 \cdot R \cdot T = (1 + \alpha) \cdot c_0 \cdot R \cdot T = \\ &= (1 + 0,100) \cdot 1,00 \cdot 10^{-3} \cdot 8,314 \cdot 300 \text{ K} = 2,74 \text{ kPa} \end{aligned}$$

Tehát az ozmózisnyomás mindkét módon számítva 2,74 kPa, a bázis disszociációs állandója $1,11 \cdot 10^{-5}$.

6.13. példa:

Mekkora a fagyáspontja a 2,50 pH-jú vizes hangyasavoldatnak? Az oldat sűrűsége $1,00 \text{ g/cm}^3$. $\Delta T_M(\text{H}_2\text{O}) = 1,86 \text{ }^\circ\text{C} \cdot \text{kg/mol}$. A hangyasav savállandója: $1,78 \cdot 10^{-4}$.

Megoldás:

Határozzuk meg a hangyasav bemérési koncentrációját! Először számítsuk ki a hidrogénion-koncentrációt!

$$[\text{H}^+] = 10^{-\text{pH}} = 10^{-2,50} \text{ mol/dm}^3 = 3,162 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3.$$

Az egyensúlyi állandó segítségével:

$$K_s = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{A}^-]}{[\text{HA}]} = \frac{(3,162 \cdot 10^{-3}) \cdot (3,162 \cdot 10^{-3})}{[\text{HA}]} = 1,78 \cdot 10^{-4},$$

melyből $[\text{HA}] = 5,618 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3$. Az oldat bemérési koncentrációja így

$$c_0 = [\text{HA}] + [\text{A}^-] = 5,618 \cdot 10^{-2} + 3,162 \cdot 10^{-3} = 5,934 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3.$$

Ilyen híg oldat esetén feltételezhető, hogy a molalitás és molaritás gyakorlatilag megegyezik. Tehát

$$c_R \approx 5,934 \cdot 10^{-2} \text{ mol/kg}.$$

A hangyasav disszociációfoka:

$$\alpha = \frac{[\text{A}^-]}{c_0} = \frac{3,162 \cdot 10^{-3}}{5,934 \cdot 10^{-2}} = 0,0533.$$

Alkalmazzuk a van 't Hoff-faktort!

$$\begin{aligned} \Delta T &= i \cdot \Delta T_M \cdot c_R = (1 + \alpha) \cdot \Delta T_M \cdot c_R = \\ &= (1 + 0,0533) \cdot 1,86 \cdot 5,934 \cdot 10^{-2} \text{ }^\circ\text{C} = 0,116 \text{ }^\circ\text{C}. \end{aligned}$$

Tehát az oldat fagyáspontja -0,116 °C.

7. KÉMIAI REAKCIÓK

7.1. Bevezetés

Az anyagok (elemek, vegyületek) közötti reakciót a legtöbb esetben le lehet írni kémiai, úgynevezett sztöchiometriai egyenlettel. A sztöchiometriai egyenlet minőségi és mennyiségi összefüggéseket állít fel:

- megmutatja, hogy a kiindulási anyagokból (jobb oldal) milyen termékek keletkeznek (bal oldal),
- az egyes elemek, vegyületek előtt sztöchiometriai együtthatók állnak, ezek mutatják meg az elemek, vegyületek arányát.

Nézzünk egy egyszerű példát:

Keverjük össze kalcium-karbonátot (mészkő, CaCO_3) és sósav- (HCl -) oldatot. Azt tapasztaljuk, hogy a fehér színű por feloldódik, miközben szüntelen gáz buborékol ki az oldatból.



7.1.1. videó: A kalcium-karbonát és sósav reakciója

A folyamat az alábbi sztöchiometriai egyenlettel írható le:



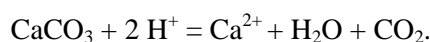
Az egyenletből számtalan megállapítás következhet, ezek közül egy-két példa:

Mint látható, a HCl (sósav) mennyiségének kétszeresének kell lennie a CaCO_3 (kalcium-karbonát) mennyiségének. A CaCO_3 -ban található szén pedig az egyenlet jobb oldalán megtalálható CO_2 formájában, a két sósav hidrogénje pedig „átkerült” a vízmolekulába. Mint látható, az egyes komponensek aránya szigorúan meghatározott, ebből egy igen fontos szabályra következtethetünk:

Anyagmérleg (tömegmérleg) szabálya: adott atomféleségből az egyenlet jobb és bal oldalán szereplő össz mennyiség megegyezik. Az anyagmérlegnek minden egyenletben előforduló minden elemre teljesülnie kell!

Például a fenti egyenletben a klóratomok száma az egyenlet mindkét oldalán 2.

Ezt a vízben lejátszódó folyamatot azonban másképp is fel lehet írni:

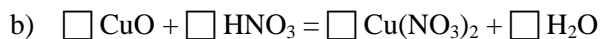


Az ilyen egyenlet az úgynevezett ioneqyenlet, melyben a változatlanul maradó ionokat (jelen esetben kloridionokat) fel sem tüntetjük, helyettük töltéseket írunk. Az ioneqyenletekkel kicsit szemléletesebben ragadjuk meg a folyamat lényegét, csak a legfontosabb reagáló komponenseket írjuk fel. Az anyagmérlegnek természetesen itt is fenn kell állnia minden elemre, azonban még egy fontos szabálynak is teljesülnie kell az ioneqyenletek esetén:

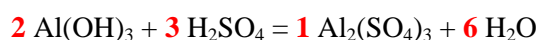
Töltésmérleg szabálya: a töltések előjeles összegének meg kell egyeznie az egyenlet két oldalán.

7.1. példa:

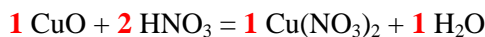
Rendezzük az alábbi egyenleteket!

Megoldás:

A jobb oldalon az $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$ -ban (alumínium-szulfát) két alumínium van, ezért a bal oldalra két Al(OH)_3 -ot (alumínium-hidroxid) kell írni. A H_2SO_4 (kénsav) mennyisége pedig 3-szorosa az $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$ mennyiségének. A jobb oldalon található 6 OH^- -ionból 6 H_2O keletkezik.



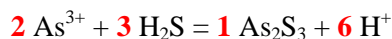
A jobb oldalon egy $\text{Cu(NO}_3)_2$ -ban két NO_3^- -ion (nitrátion) van, melyhez a bal oldalon 2 HNO_3 szükséges, melyből a CuO oxigénjével 1 H_2O keletkezik.



A bal oldalon az $(\text{NH}_4)_2\text{CO}_3$ -ban (ammónium-karbonát) két nitrogénatom van, így a jobb oldalon két NH_3 (ammónia) kell, hogy álljon. Továbbá keletkezik 1 CO_2 (szén-dioxid) és 1 H_2O (víz).



A jobb oldalon két arzén és három kén található az As_2S_3 -ban [arzén(III)-szulfid], így a bal oldalon 2 As^{3+} és 3 H_2S szükséges. Ebből kifolyólag a jobb oldalra 6 H^+ -iont kell írni.



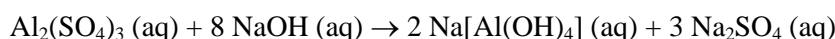
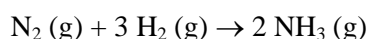
Ellenőrizzük le a töltésmérleg teljesülését! Mindkét oldalon +6 a töltések összege, így helyesen rendeztük az egyenletet.

7.2. A kémiai reakciók fajtái

Mint a fenti példákban is látható, különféle kémiai reakciókat ismerünk, ám igen nehéz egyetlen átfogó csoportosítást létrehozni. Az alábbiakban többfajta lehetséges csoportosítást mutatunk be.

1) Fázisok száma szerint: A fázisok jelölése: g: gáz, f: folyadék, sz: szilárd, aq: hidratált (vizes oldatban lévő).

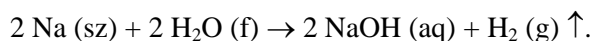
Homogén fázisú reakciók: a kiindulási anyagok és a termékek is azonos fázisban találhatóak.



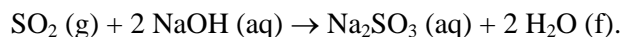
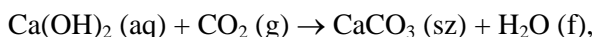
Heterogén fázisú reakciók: a kiindulási anyagok és a termékek különböző fázisban vannak.

– gázfejlődéssel járó reakciók:

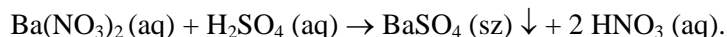
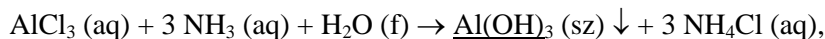




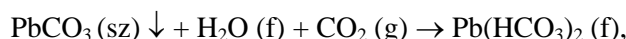
– gáz abszorpciójával járó reakciók:



– csapadékképződéssel járó reakciók:

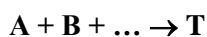


– szilárd anyag feloldódásával járó reakciók:

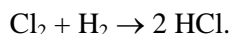


2) A legfontosabb reakciótípusok – a teljesség igénye nélkül – elsősorban a részt vevő anyagok száma szerint csoportosítva:

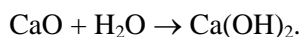
– **Egyesülés:** a reakció során több kiindulási anyagból (egy, de legalábbis kevesebb számú) termék keletkezik.



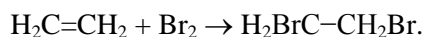
A klór és a hidrogén – megfelelő körülmények között – hidrogén-kloriddá egyesül:



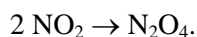
Az égetett mészhöz (CaO) vizet adva oltott mész [Ca(OH)₂] keletkezik:



Addíciónak nevezzük az egyesülést az egyik komponens szempontjából tekintve. Például az etilén addicionálja a brómot:



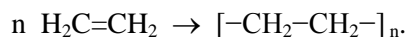
Dimerizáció (dimerképződés): két azonos molekula egyesülése (a keletkezett termék neve dimer). Például:



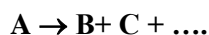
Ehhez hasonlóan beszélhetünk **trimerizációról** (három azonos részecske egyesül). Például:



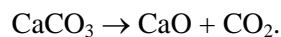
Polimerizáció: sok azonos molekulából keletkezik egy nagy molekula (melynek neve polimer). Például az etilén polimerizációja:



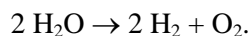
– **Bomlás:** egy kiindulási anyagból több termék keletkezik.



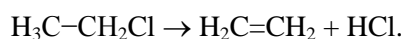
A kalcium-karbonátot hevítve égetett mész és szén-dioxid keletkezik:



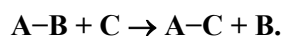
A vízbontás során hidrogén és oxigéngáz keletkezik:



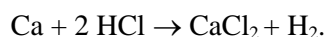
Eliminációnak nevezzük a bomlást, ha az egyik termék szempontjából érdekes a reakció. Például az etil-klorid hidrogénklorid-eliminációja:



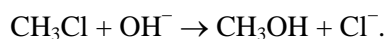
– **Helyettesítés (szubsztitúció):** az egyik reaktáns atomjait vagy atomcsoportjait helyettesítjük:



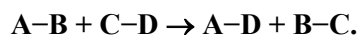
Az alábbi példareakcióban a hidrogén-klorid hidrogénjét helyettesítjük kalciummal:



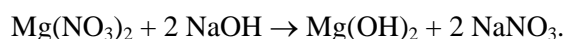
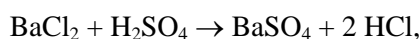
A következő szubsztitúciós reakció a szerves kémiából ismert:



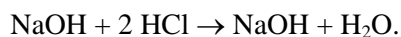
– **Cserebomlás:** két reaktáns kicseréli egymás atomjait (ionjait) vagy atomcsoportjait. A cserebomlást idegen néven **metatézis**nek nevezzük:



A cserebomlás igen gyakori szervesetlen vegyületek között:



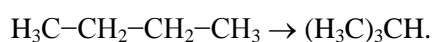
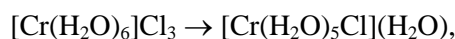
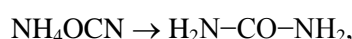
A cserebomlás speciális esete a savak és bázisok közömbösítési reakciója:



– **Izomerizáció:** az anyag elemi összetétele nem változik a reakció során (a moláris tömeg állandó), az anyag szerkezete változik meg.

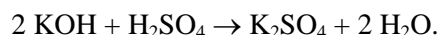


Az alábbi reakciókban a vegyületek izomerizálódnak:



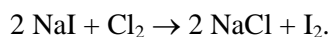
3) Részecskeátmenet szempontjából csoportosítva:

– **Sav-bázis reakciók:** egy sav és egy bázis között végbemenő reakció (protonátmenet). A fejezetben még részletesen foglalkozunk ezzel a reakciótípussal, itt csak egy példát említünk meg:

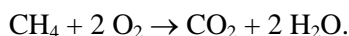


– **Redoxireakció (oxidációs-redukációs reakció):** az egyik reaktáns oxidálódik, a másik pedig redukálódik (elektronátmenet).

A redoxireakciókkal részletesen foglalkozunk a fejezetben, ezért ismét csak egy példát mutatunk meg:



A redoxireakciók egy speciális esete az elemi oxigénnel történő oxidáció, az **égés:**



További fontos reakciótípusokat ismerünk majd meg a szerves kémiával foglalkozó fejezetben.

7.3. Sav-bázis (protolitikus) reakciók, sav-bázis elméletek

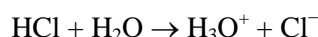
A sav-bázis reakciókban értelemszerűen savak és bázisok reagálnak egymással. Természetesen először nézzük meg, mit is nevezünk savnak és bázisnak! Mint majd látni fogjuk, nem is olyan egyszerű definiálni ezeket a fogalmakat, több különböző sav-bázis elméletet ismerünk.

7.3.1. Arrhenius sav-bázis elmélete

Megjegyzés: ismert még Arrhenius–Ostwald-elmélet néven is.

Savak: azon anyagok, melyek vízben oxóniumiont (H_3O^+) vagy egyszerűbben protont (H^+) és savmaradék aniont eredményeznek. A savak vizes oldatának kémhatása savas.

Például:



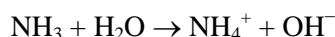
Bázisok: azon anyagok, melyek vízben hidroxidiont és egy kationt szolgáltatnak. A bázisok vizes oldatának kémhatása lúgos.

Például:



A fenti folyamatokat a savak, illetve bázisok **disszociációjának** nevezzük.

A savak így mindenképpen tartalmaznak hidrogént, ám nem minden hidrogéntartalmú anyag eredményez vízzel oxóniumionokat (ilyen például a metán). Az Arrhenius-bázisok viszont nem feltétlenül tartalmaznak hidroxidiont, a hidroxidion keletkezhet az anyag és a víz reakciójából. Erre egy jól ismert példa az ammónia (NH_3):

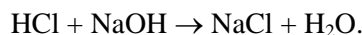


Erős sav és bázis: vízben tökéletesen (sav, illetve bázis maradéka nélkül) ionizálódnak, azaz 100%-os a disszociációjuk.

Például erős sav: salétromsav, hidrogén-klorid, hidrogén-bromid, hidrogén-jodid; erős bázis: nátrium-hidroxid, kálium-hidroxid stb.

Gyenge sav és bázis: vízben csak részlegesen esnek szét ionjaikra, azaz disszociációjuk kisebb, mint 100%-os, mindig marad disszociálatlan sav, illetve bázis az oldatban. Például gyenge sav a foszforsav, az ecetsav és számos szerves sav; gyenge bázis az ammónia vagy a piridin („bűzös bázis”).

Savakat és bázisokat elegyítve, közöttük reakció megy végbe, mely során **sók** keletkeznek:



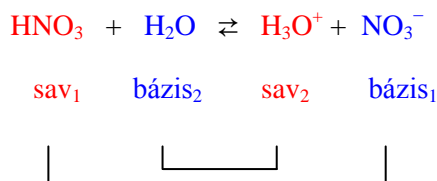
Közömbösítésnek nevezzük azt a folyamatot, melyben a sav és bázis megfelelő mennyiségben történő elegyítéséből só és víz keletkezik.

Az elmélet hiányossága, hogy sav-bázis folyamatok nem csak vizes oldatban mehetnek végbe. Arrhenius sav-bázis elméletének hiányosságát a Brønsted és Lowry által kidolgozott sav-bázis elmélet igyekszik kiküszöbölni.

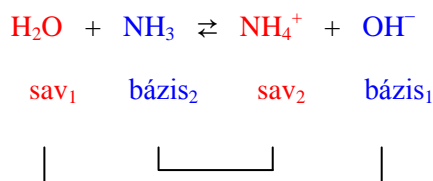
7.3.2. Brønsted–Lowry-elmélet

Savaknak nevezzük azon anyagokat, melyek hidrogénion (proton) leadására, míg **bázisoknak** pedig azokat, melyek hidrogénion (proton) felvételére képesek.

A Brønsted–Lowry-elmélet szerint a hidrogénion átadása megfordítható reakció. A bázis, mely egy savtól hidrogéniont vett át, saját maga rendelkezni fog leadható hidrogénnel, azaz savvá válik. Ezt **konjugált savnak** nevezzük. Hasonlóan, egy savból hidrogéniont eltávolítva, egy olyan anyag keletkezik, mely fel tud venni hidrogéniont, tehát **konjugált bázis**.

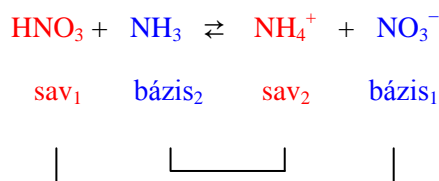


A salétromsav (HNO₃) eltávolítható hidrogént tartalmaz, tehát sav. Átadja protonját a víznek, mely bázisként viselkedik. A keletkező oxóniumion (H₃O⁺) szintén sav (a víz konjugált savja), mivel H⁺-ion leadására képes, a nitrátió pedig bázis (a salétromsav konjugált bázisa).



Az ammónia hidrogéniont vesz át a víztől, tehát ebben a reakcióban a víz nem bázisként, hanem savként viselkedik. Ebből is látható, hogy az, hogy egy anyag savas vagy bázisos karakterű, függ a reakcióban részt vevő másik komponenstől is.

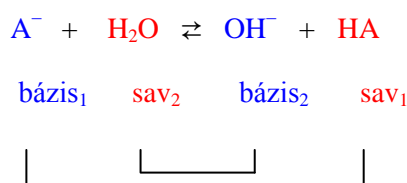
A savak és bázisok reakciója sót eredményez, ám ennek ionjai is sav-bázis karakterűek:



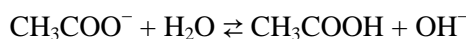
Természetesen ismerünk erősebb és gyengébb savakat, illetve bázisokat. Például az ecetsav sokkal gyengébb sav, mint a salétromsav. Erősebbnek tekintjük azt a savat, mely képes protonálni a gyengébb savat, tehát a különféle savak (illetve bázisok) csoportján belül sorrendet tudunk felállítani. A savak és bázisok erősségével részletesen foglalkozunk a Kémiai egyensúlyok című fejezetben.

A Brønsted–Lowry-elmélet segítségével könnyen értelmezhető a **sók hidrolízise**, azaz mikor egy gyenge savból (bázisból) származó konjugált bázis (sav) reagál a vízzel, és hidroxid- (oxónium-) ionok keletkeznek, melyek következtében semlegestől eltérő az oldat kémhatása.

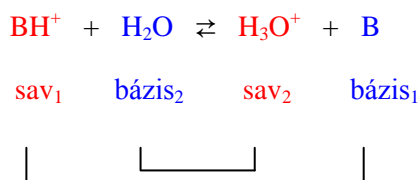
Gyenge savból származó só hidrolízise:



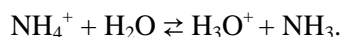
Például az acetátion lúgos hidrolízise:



Gyenge savból származó sók hidrolízise:



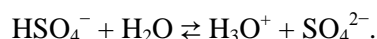
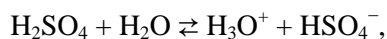
Például az ammóniumion savas hidrolízise:



Amennyiben egy só gyenge sav és gyenge bázis egyesüléséből keletkezik, mindkét ion hidrolizál, és az oldat kémhatását az az ion szabja meg, melynek erősebb a hidrolízise. Például az ammónium-acetát-oldat semleges kémhatású, mivel az ammóniumion és az acetátion hidrolízise gyakorlatilag egyforma mértékű, így nem változtatják meg a tiszta víz semleges kémhatását.

Azon savakat, melyek több hidrogéniont tudnak átadni egy megfelelő bázisnak (például a víznek) **több-bázisú** vagy **(többértékű) savaknak** nevezzük. Ehhez hasonlóan ismerünk **többsavú (többértékű) bázisokat** is (ezek több hidrogéniont tudnak felvenni).

Például a kénsav:



Mint látható, a hidrogén-szulfát-ion az első reakcióban bázisként, a másodikban pedig savként viselkedik. Mivel már eleve negatív töltésű, a hidrogén-szulfát-iont nehezebb deprotonálni, mint a semleges kénsavat. Ezért a többértékű savak a második disszociációs lépcsőben gyengébbek, mint az első lépésben.

A sav-bázis egyensúlyokkal kapcsolatos számítási feladatokkal a kémiai egyensúlyokról szóló fejezetben ismerkedünk meg.

7.3.3. A Lewis-féle sav-bázis elmélet

A Brønsted–Lowry-elmélet kiterjesztése a Lewis-féle sav-bázis elmélet, mely a magános elektronpárokat helyezi a középpontba.

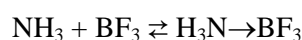
Savak: elektronpár-akceptorok.

Bázisok: elektronpárdonorok. A Lewis-bázisok rendelkeznek olyan lazán kötött elektronpárral, melyek egy Lewis-savval reakcióba vihetők.

Például az ammónia rendelkezik magános elektronpárral, mely például egy protonnal datív kötést tud létrehozni.

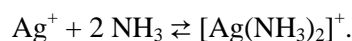
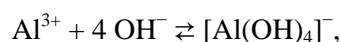


A proton helyett azonban más olyan anyag is állhat, melynek van üres pályája, azaz Lewis-sav. Ilyen vegyület például a bór-trifluorid, az alumínium-klorid stb., melyekkel már megismerkedtünk a datív kötés kapcsán.



Tehát Lewis sav-bázis elméletében már nem csak protonok átadásáról van szó, sőt még oldószerre sincs szükségünk értelmezéséhez!

Ehhez hasonlóan sav-bázis reakcióként értelmezhetők a különböző komplexképződési reakciók:



A fenti reakciókban az Al^{3+} és Ag^+ ionok tekinthetők Lewis-savaknak, míg a OH^- -ionok és ammóniamolekulák Lewis-bázisoknak.

A továbbiakban az igen gyakran előforduló redoxireakciók rendezésével foglalkozunk.

7.4. Oxidációfok, redoxireakciók rendezése

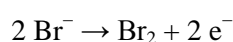
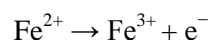
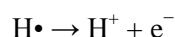
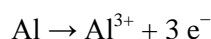
Az oxidáció fogalma eredetileg egy elemnek vagy vegyületnek elemi oxigénnel történő addíciós reakcióját jelentette, míg redukció alatt oxigén eltávolítását értették. Később, ahogy az oxidációs-redukciós folyamatokat egyre jobban megértették, ezen kifejezések jelentése is általánosabb lett.

Oxidáció: elektronleadás, az elektronok számának csökkenése.

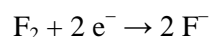
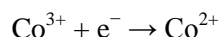
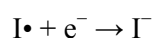
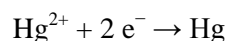
Redukció: elektronfelvétel, az elektronok számának növekedése.

Nézzük néhány példát!

A következő folyamatok mindegyike oxidációt jelent, mivel a folyamatokban elektronok (e^-) keletkeznek, azaz a folyamatot megjelenítő egyenletek jobb oldalán található(k) elektron(ok):



Az oxidációt leíró folyamatokat megfordítva redukcióhoz jutunk. Redukció esetén az adott atom/ion/molekula elektront vesz fel, azaz az elektron az egyenlet bal oldalán van feltüntetve:



A kémiai reakciók során az elektronok leadása és felvétele egyszerre megy végbe. Az ilyen folyamatokat **redoxireakció**knak nevezzük (redukció + oxidáció). Egy redoxifolyamatban általában a részt vevő anyagok egyike elektront ad le, míg a másik elektront vesz fel. Érdeemes megjegyezni, hogy bizonyos esetekben előfordulhat, hogy egynél több anyag oxidálódik, illetve redukálódik. Egy redoxireakció során az adott anyag csak akkor tud leadni elektronokat, ha van a közelében egy másik anyag, amely fel tudja venni a keletkezett elektronokat. Tehát az oxidáció és a redukció mindig egyszerre következik be, azaz mindig lennie kell egy komponensnek, mely oxidálódni tud és egy komponensnek, mely redukcióra képes!

Fontos megismerkednünk az oxidálószer és a redukálószer fogalmával is.

Oxidálószer: olyan anyag, mely oxidál, azaz önmaga redukálódik.

Redukálószer: olyan anyag, mely redukál, azaz önmaga oxidálódik.

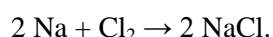
Megjegyzendő, hogy annak az eldöntése, hogy oxidálószernek vagy redukálószernek tekinthető egy adott elem vagy vegyület, mindig az adott konkrét reakciótól függ. Ezzel a problémával a későbbiek során részletesen is foglalkozunk.

Vegyük például az alábbi egyszerű kísérletet! Egy úgynevezett égetőkanálban (kisméretű kanál hosszú szárral) felmelegítünk kevés fém nátriumot, és klórgázzal töltött üveghengerbe merítjük azt. Igen heves reakció megy végbe, melynek során konyhasó, nátrium-klorid keletkezik. A reakció végbemenetelét az alábbi videón lehet megtekinteni:



7.4.1. videó: A nátrium és klór reakciója

A folyamat a következő reakcióegyenlettel írható le:



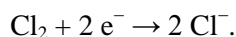
Mit is jelent ez? Az egyenlet megadja, hogy két nátriumatom reagál egy klórmolekulával, melynek során a nátriumatomok mennyiségével megegyező mennyiségű nátrium-klorid keletkezik. Első ránézésre nem biztos, hogy észre vesszük, hogy a fenti reakció redoxireakció. Érdeemes megvizsgálnunk, hogy mi történik az egyes komponensekkel!

A semleges nátriumatomnak egy szabad elektronja van a vegyértékhéján ($3s^1$), melyet eltávolítva nemesgáz elektronkonfigurációjú egyszerűen pozitív nátriumion keletkezik. Tehát az alábbi folyamat megy végbe:



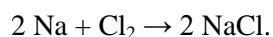
A fenti definíció szerint ez oxidáció (mivel elektronleadás történt). Mivel a nátrium oxidálódott, redukálószerként vett részt a reakcióban.

A klór a VIIA (vagy 17) főcsoportban található, elektronkonfigurációja $3s^23p^5$. Egy elektron felvételével a klóratom egyszeresen negatív kloridionná tud alakulni, és a folyamat igen kedvező, mivel nemesgáz elektronkonfigurációjú a keletkező ion. Tehát a klórmolekulából (Cl_2), mely két klóratomot tartalmaz kovalens kötéssel összekapcsolva, kloridionok keletkeznek a következő egyenlet alapján:



Mivel elektronfelvétel történt, a folyamat redukció. A klórmolekulában található atomok redukálódtak, azaz a klór oxidálta a nátriumot. Ezért a klór a reakció szempontjából oxidálószernek tekinthető (önmaga redukálódik).

Egy redoxireakció során a reaktánsok (vagyis a reagáló anyagok) általában csak bizonyos jól meghatározott arányban reagálhatnak egymással. Ennek oka, hogy **a leadott és felvett elektronok számának meg kell egyeznie!** A klórmolekulában (Cl_2) két klóratom található, így molekulánként két elektron felvétele történik, melynek során két kloridion keletkezik. Mivel két elektron leadásához pontosan két nátriumatom szükséges, a nátriumatomok számának meg kell egyeznie a klórmolekulák számának kétszeresével. Tehát a rendezett egyenletben egy klórmolekulára két nátriumatomot kell vennünk. Mivel az elemi nátriumból és klórból nátrium-klorid keletkezik, a nátrium-klorid mennyisége sem független a kiindulási anyagok mennyiségétől. Mivel az egyenlet jobb oldalán a nátrium, illetve klór csak a nátrium-kloridban található, a keletkezett nátrium-klorid mennyisége kétszerese a klórmolekulák mennyiségének, illetve megegyezik a nátriumatomok mennyiségével:

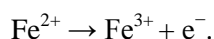


A kémiai egyenletben a vegyjelek, illetve képletek előtt álló számot **szttöchiometriai együtthatónak** nevezzük, az **egyenletrendezés** célja ezen szttöchiometriai együtthatók meghatározása. Az egyenletrendezés során célszerű a lehető legkisebb egész együtthatókat megkeresni, mivel ezekkel írható fel az egyenlet a legegyszerűbb formában!

A fenti példa megismerése során elsajátítottuk a redoxiegyenletek rendezésének legfontosabb szabályait, melyek a következők:

- megállapítjuk, hogy melyik atom hány elektront tud leadni, illetve felvenni az adott reakcióban.
- az oxidáció során leadott elektronok száma megegyezik a redukció során felvett elektronok számával.
- a kémiai reakció során teljesülnie kell az anyagmérlegnek, mely azt jelenti, hogy az adott atomok darabszáma megegyezik az egyenlet két oldalán. Az anyagmérlegnek természetesen minden alkotóelem (például Na, Cl stb.) esetén teljesülnie kell.
- amennyiben nem csak semleges részecskék vannak az egyenletben, a töltések előjeles összegének meg kell egyeznie az egyenlet mindkét oldalán. Ezt más szavakkal úgy mondhatjuk, hogy a töltésmérlegnek teljesülnie kell az egyenletben. Amennyiben minden részt vevő komponens (töltés szempontjából) semleges, a töltésmérleg „automatikusan” teljesül!

Az utolsó megállapításban említett töltésmérlegre következzen egy nagyon egyszerű példa:

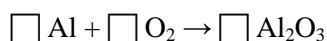


Az egyenlet bal oldalán a töltések összege megegyezik a Fe^{2+} töltésével, azaz +2. A jobb oldalon a töltések összege: $(+3) + (-1) = +2$, mivel az elektron töltése -1 . Tehát tényleg teljesül az úgynevezett töltésmérleg, azaz a töltések összege megegyezik az egyenlet két oldalán.

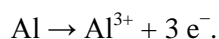
Az anyagmérleg és töltésmérleg fogalmakban a „mérleg” kifejezés arra utal, hogy az egyenlet két oldalának ugyanúgy kiegyensúlyozva kell lennie, mint a mérleg két serpenyőjének. Ha a mérleg egyik serpenyőjébe tett súlyok tömegének összege nem egyezik meg a mérleg másik serpenyőjébe pakolt

súlyok tömegének összegével, a mérleg nincs egyensúlyban. Ehhez hasonlóan, ha az alkotóelemek mennyisége vagy a töltések összege nem azonos a kémiai egyenlet két oldalán, nem tekinthető rendezettnek az egyenlet.

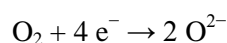
A megismert szabályok segítségével rendezzük az alábbi egyenletet!



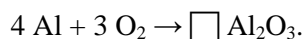
Az alumínium a III.A (másképpen a 13) főcsoportban található, vegyértékelektron-konfigurációja $2s^22p^1$, azaz három vegyértékelektronja van. Három elektron leadásával nemesgáz konfigurációjú alumíniumkation (Al^{3+}) keletkezik, tehát a fém alumínium oxidálódik, saját maga pedig redukálószer:



Az oxigénmolekula két oxigénatomot tartalmaz. Az oxigén mint elem a VI.A (másképp 16) főcsoportban található, így egy oxigénatom hat vegyértékelektronnal rendelkezik. A nemesgáz-elektronkonfigurációt legkönnyebben úgy tudja elérni, ha felvesz két elektront. Egy oxigénmolekula így $2 \cdot 2 = 4$ elektront vesz fel. Az oxigén redukálódik, azaz a reakcióban oxidálószerként viselkedik.

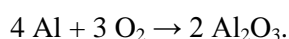


A fentiekben tisztáztuk, hogy egy alumíniumatom három elektront ad le, és egy oxigénmolekula négy elektron felvételére képes. A következő lépés megállapítani, hogy milyen arányban reagálnak az adott elemek. Mint ahogy a fentiekben már leszögeztük, a leadott és felvett elektronok számának meg kell egyeznie. Tehát meg kell keresnünk az „átadott” vagy „átvett” elektronok számát, azt a számot, mely a háromnak és a négynek is többszöröse. Lehetőleg az ilyen számok közül a legkisebbet célszerű kiválasztani, hogy minél egyszerűbb legyen a rendezett egyenlet! A 3 és 4 **legkisebb közös többszöröse** 12, azaz ennyi az átment elektronok száma. 12 elektron leadásához 4 alumíniumatom szükséges, mivel egy alumíniumatom három elektron leadására képes. Hasonlóan, az oxigénmolekulák száma $12 / 4 = 3$. Az egyenlet eddigi formája:



Már csak azt kell megállapítanunk, hogy milyen sztöchiometriai együtthatót kell írunk az alumínium-oxid elé. Egy alumínium-oxidban két alumínium és három oxigén van, viszont ezeknek a mennyiségeknek a kétszerese szerepel az egyenlet bal oldalán. Tehát úgy teljesül az anyagmérleg, ha az alumínium-oxid elé egy 2-es együtthatót írunk (ekkor mind az alumíniumatomok, mint az oxigénatomok száma megegyezik az egyenlet jobb és bal oldalán).

Tehát a rendezett egyenlet a helyes sztöchiometriai együtthatókkal:



Hogyan ellenőrizhetjük le, hogy tényleg ez-e a helyes megoldás? A válasz: ellenőriznünk kell az anyagmérleg és a töltésmérleg teljesülését!

Anyagmérleg vizsgálata: az egyes alkotóelemek mennyiségét összeszámoljuk az egyenlet mindkét oldalán. Ehhez figyelembe kell venni, hogy például az Al_2O_3 képlet azt jelenti, hogy az alumínium-oxid két alumíniumot és három oxigént tartalmaz, azaz megadja az alumínium és oxigén mennyiségének az arányát a vegyületen belül. Precízebben megfogalmazva a képletben szereplő vegyjelek alsó indexe fejezi ki az összetevők legegyszerűbb arányát. Az összegzésnél tehát a sztöchiometriai együtthatót be kell szorozni a kérdéses alkotóelemnek a képletben szereplő indexével! (Amennyiben egy vegyjel jobb oldalán nem találunk alsó indexben számot, ott értelemszerűen egynek tekintjük azt (például a fenti egyenlet bal oldalán szereplő alumínium esetén: $\text{Al} \equiv \text{Al}_1$, ám az 1-nek megfelelő együtthatót sosem írjuk ki).

	Bal oldal	Jobb oldal
Al	$4 \cdot 1 = 4$	$2 \cdot 2 = 4$
O	$3 \cdot 2 = 6$	$2 \cdot 3 = 6$

Mint láthatjuk, az anyagmérleg teljesül mind az alumíniumra, mind az oxigénre.

Töltésmérleg vizsgálata: mivel az egyenletben található összes elem, illetve vegyület semleges, a töltésmérleg teljesül (eleve nincsenek töltések feltüntetve az egyenletben).

7.4.1. Az oxidációfok

A fenti példából az világossá vált, hogy az oxidáció során Al^{3+} ionok, míg a redukció során O^{2-} ionok keletkeznek, tehát az alumínium-oxid leginkább az alábbi képlettel írható le: $(\text{Al}^{3+})_2(\text{O}^{2-})_3$. A redoxiegyenletek kényelmes rendezése céljából ehhez hasonlóan bevezethetjük az úgynevezett oxidációfokot:

Oxidációfok: megadja, hogy a kérdéses atom egy adott vegyületben hány elektront veszített (ekkor előjele pozitív), vagy hány elektront vett fel (ekkor előjele negatív), miközben elemből az adott vegyületté alakult. Ebből következően az elemek oxidációfoka mindig nulla.

Az alumínium-oxidban ezek alapján az alumínium oxidációfoka +3, míg az oxigéné -2. A fém alumíniumban az alumínium oxidációfoka 0, hasonlóan az O_2 gázban is az oxigén oxidációfoka 0, mivel elemekről van szó.

Megjegyzendő, hogy az oxidációfok egy modell, és nem tükrözi az egyes atomok valódi töltését. Ennek oka, hogy a reális töltéeloszlás térbeli, tehát nemcsak az atomon, hanem az atomok közötti térben is van töltés. Ezért egy molekula, összetett ion stb. atomjain rendszerint csak egy kis töltéshányad, nem pedig egy (vagy több) egész töltés van (ez alól kivételek az egyszerű ionok, mint például a kloridion vagy a magnéziumion). Ezzel ellentétben az oxidációfok számítása során mindig teljes elektronátadást feltételezünk egyik atomról a másikra, mely azonban nem okoz problémát az egyenlet sztöchiometriai együtthatóinak kiszámításakor. Tehát az oxidációfokok használata egy modell, mely kiválóan alkalmazható kémiai egyenletek rendezésére.

Az oxidációfok a következőképpen is értelmezhetjük: a vegyületben minden kötő elektrópárt a nagyobb elektronegativitású atomhoz rendeljük, és az így keletkezett formális töltések felelnek meg az oxidációfoknak. Ebből is látszik, hogy az oxidációfokok megállapításánál mindig figyelembe kell vennünk a molekula, ion stb. reális töltéeloszlását, melyet az elemek elektronegativitása befolyásol: a nagyobb elektronegativitású atomja negatívabb, a kisebb elektronegativitású atomja pedig pozitívabb oxidációfokkal rendelkezik.

Az előző példához visszatérve: az alumínium-oxidban az alumínium elektronegativitása (1,61) jóval kisebb, mint az oxigéné (3,44), ezért az alumínium oxidációfoka pozitív előjelű (+3), az oxigéné pedig negatív (-2).

A következőkben általános szabályokat ismertetünk, melyek segítenek az egyes atomok oxidációfokának megállapításában:

- ❖ **Elemek** oxidációfoka mindig zérus. Ez független attól, hogy az adott elem milyen módosulatként van jelen. Például az oxigén oxidációfoka az ózonban (O_3) és az elemi oxigénben (O_2) is zérus. Hasonlóan az alábbi elemek oxidációfoka is nulla: H_2 , N_2 , F_2 (és hasonlóan a többi halogéngáz), P_4 , S_8 , elemi fémek stb.
- ❖ **Azonos atomok összekapcsolódása** nem jelent oxidációfok változást. Így például szerves vegyületekben az egymáshoz kapcsolódó szénatomok oxidációfokának kiszámításakor nem vesszük figyelembe a szén-szén kötések.
- ❖ A **vegyületekben** szereplő atomok oxidációfokainak összege mindig zérus. Például: a vízben (H_2O) a hidrogén oxidációfoka +1, az oxigéné pedig -2, azaz $2 \cdot (+1) + (-2) = 0$.

- ❖ Az **egyszerű ionok** (vagy más néven egyatomos ionok) oxidációfoka megegyezik a töltésükkel.
Például: Cl^- : -1, S^{2-} : -2, P^{3-} : -3, Ca^{2+} : +2, Al^{3+} : +3 stb.
- ❖ **Összetett ionokban** az egyes atomok oxidációfokainak összegének ki kell adnia az ion töltésszámát.
Például: a karbonátióban (CO_3^{2-}) a szén oxidációfoka +4, az oxigéné -2, így igaz, hogy $(+4) + 3 \cdot (-2) = -2$.
- ❖ Általánosságban megfogalmazható, hogy egy elem **maximális oxidációfoka** rendszerint azonos a periódusos rendszer azon oszlopának számával, melyben az adott elem található. Ez alól kivételek a legelektronegatívabb elemek (például fluor, oxigén stb.)
- ❖ Bizonyos molekulákban előfordul, hogy egyfajta atom különböző oxidációfokkal szerepel. Ilyen esetekben célszerű a tényleges oxidációfokok számtani közepét számítanunk, melyet szokás **oxidációsátlagnak** is nevezni. Például a dinitrogén-oxidban (N_2O : $\text{N}=\text{N}=\text{O}$) az egyik nitrogén oxidációfoka nulla, a másiké -2, ám többnyire elegendő az oxidációsátlagot meghatározni, mely $(-2 + 0) / 2 = -1$.
- ❖ A **fluor** oxidációfoka vegyületeiben mindig -1.
- ❖ Az **oxigén** oxidációfoka általában -2, ritkábban -1. A közönséges oxidokban mindig -2 az oxidációfoka, például CaO , P_2O_5 , SO_2 stb. Peroxidokban az oxigén oxidációfoka -1, mivel az azonos elemek közötti kötéseknel nem vesszük figyelembe töltésátadást (lásd fentebb). Példák: hidrogén-peroxid (H_2O_2), nátrium-peroxid (Na_2O_2) stb. Az oxigén fluorral alkotott vegyületében az oxigén oxidációfoka pozitív, például OF_2 : O: +2, F: -1, illetve O_2F_2 : O: +1, F: -1.
- ❖ A **hidrogén** oxidációfoka +1, ha nálánál nagyobb elektronegativitású atomhoz kapcsolódik, például HF, H_2O , H_2S , NH_3 stb. A hidrogén oxidációfoka -1, ha nálánál kisebb elektronegativitású atomhoz kapcsolódik, például NaH, CaH_2 , AlH_3 stb.
- ❖ Az **alkálifémek** (IA vagy 1. főcsoport) oxidációfoka vegyületeikben általában +1. (Ez alól kivételek az alkálifém-ötvözetek, melyekben a nagyobb elektronegativitású fém oxidációfokát -1-nek vesszük.) Példák +1-es oxidációfokra: LiOH, NaCl, K_3PO_4 stb.
- ❖ Az **alkáliföldfémek** (IIA vagy 2. főcsoport) oxidációfoka vegyületeikben általában +2. (Ez alól kivételek az ötvözetek, melyekben a nagyobb elektronegativitású alkáliföldfém oxidációfokát -2-nek vehetjük.) Példák +2-es oxidációfokra: MgSO_4 , CaCl_2 , $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$ stb.

A fontosabb elemek gyakoribb oxidációfokait tartalmazza az alábbi táblázat:

Elem	Vegyjel	Gyakoribb oxidációfok	Ritkább oxidációfok
Alumínium	Al	+3 (AlCl ₃)	
Antimon	Sb	+3 (Sb ₂ O ₃) +5 (Sb ₂ S ₅)	-3 (SbH ₃)
Arany	Au	+3 (AuCl ₃)	+1 (AuCl)
Arzén	As	+3 (As ₂ O ₃) +5 (H ₃ AsO ₄)	-3 (AsH ₃)
Bárium	Ba	+2 (BaCl ₂)	
Berillium	Be	+2 (BeSO ₄)	
Bizmut	Bi	+3 (Bi(NO ₃) ₃)	+5 (BiF ₅)
Bór	B	+3 (H ₃ BO ₃)	
Bróm	Br	-1 (KBr) +5 (NaBrO ₃)	+1 (BrCl) +3 (BrF ₃) +7 (HBrO ₄)
Cézium	Cs	+1 (CsF)	
Cink	Zn	+2 (ZnSO ₄)	
Cirkónium	Zr	+4 (ZrO ₂)	

Ezüst	Ag	+1	(AgCl)	
Fluor	F	-1	(KF)	
Foszfor	P	-3	(PH ₃)	+1 (H ₃ PO ₂)
		+3	(P ₄ O ₆)	
		+5	(H ₃ PO ₄)	
Francium	Fr	+1	(FrCl)	
Gallium	Ga	+3	(GaCl ₃)	
Germánium	Ge	+4	(GeCl ₄)	+2 (GeCl ₂)
				-4 (GeH ₄)
Hidrogén	H	+1	(H ₂ O)	-1 (LiH)
Higany	Hg	+1	(Hg ₂ Cl ₂)	
		+2	(HgI ₂)	
Indium	In	+3	(InCl ₃)	+1 (InBr)
Ittrium	Y	+3	(Y ₂ O ₃)	
Jód	I	-1	(KI)	+1 (HIO)
		+5	(NaIO ₃)	+3 (IF ₃)
		+7	(HIO ₄)	
Kadmium	Cd	+2	(CdCO ₃)	
Kalcium	Ca	+2	(CaF ₂)	
Kálium	K	+1	(KNO ₃)	
Kén	S	-2	(H ₂ S)	-1 (Na ₂ S ₂)
		+4	(SO ₂)	+1 (S ₂ Cl ₂)
		+6	(H ₂ SO ₄)	+2 (Na ₂ S ₂ O ₃)
Klór	Cl	-1	(MgCl ₂)	+1 (NaClO)
				+3 (HClO ₂)
				+5 (KClO ₃)
				+7 (HClO ₄)
Kobalt	Co	+2	(CoCl ₂)	+3 (CoF ₃)
Kripton		—	—	+2 (KrF ₂)
				+4 (KrF ₄)
Króm	Cr	+3	(Cr ₂ O ₃)	+2 (CrCl ₂)
		+6	(K ₂ CrO ₄)	
Lítium	Li	+1	(LiNO ₃)	
Magnézium	Mg	+2	(MgO)	
Mangán	Mn	+2	(MnSO ₄)	+3 (MnF ₃)
		+4	(MnO ₂)	+5 (Na ₃ MnO ₄)
		+7	(KMnO ₄)	+6 (K ₂ MnO ₄)
Molibdén	Mo	+4	(MoS ₂)	
		+6	(MoF ₆)	
Nátrium	Na	+1	(NaCl)	
Nikkel	Ni	+2	(NiSO ₄)	+3 (Ni ₂ O ₃)
Nitrogén	N	-3	(NH ₃)	-2 (N ₂ H ₄)
		+3	(NaNO ₂)	+1 (N ₂ O)
		+5	(HNO ₃)	+2 (NO)
				+4 (NO ₂)
Ólom	Pb	+2	(PbCl ₂)	+4 (PbO ₂)
Ón	Sn	+2	(SnCl ₂)	-4 (SnH ₄)
		+4	(SnCl ₄)	
Oxigén	O	-2	(NaOH)	-1 (H ₂ O ₂)
				+1 (O ₂ F ₂)

			+2	(OF ₂)	
Palládium	Pd	+2	(PdCl ₂)	+4	(PdCl ₄)
Platina	Pt	+2	(PtCl ₂)	+4	(PtCl ₄)
Réz	Cu	+2	(CuSO ₄)	+1	(CuI)
Rubídium	Rb	+1	(RbCl)		
Ruténium	Ru	+4	(RuO ₂)	+8	(RuO ₄)
Scandium	Sc	+3	(ScCl ₃)		
Stroncium	Sr	+2	(SrSO ₄)		
Szelén	Se	+4	(SeO ₂)	-2	(Na ₂ S)
		+6	(H ₂ SeO ₄)	+1	(Se ₂ Cl ₂)
Szén	C	-4	(CH ₄)	-3	(C ₂ H ₆)
		+2	(CO)	-2	(CH ₃ I)
		+4	(CO ₂)	-1	(C ₂ H ₂)
				+3	(C ₂ Cl ₆)
Szilícium	Si	+4	(SiO ₂)	-2	(SiH ₃ Cl)
				-4	(SiH ₄)
Tallium	Tl	+1	(TlI)		
		+3	(TlCl ₃)		
Tellúr	Te	+4	(TeO ₂)	-2	(Na ₂ Te)
		+6	(Na ₂ TeO ₄)		
Titán	Ti	+4	(TiCl ₄)	+3	(Ti ₂ O ₃)
Vanádium	V	+5	(V ₂ O ₅)	+2	(VCl ₂)
				+3	(V ₂ (SO ₄) ₃)
				+4	(VO ₂)
Vas	Fe	+2	(FeSO ₄)		
		+3	(Fe ₂ O ₃)		
Volfrám	W	+6	(WO ₃)	+4	(WS ₂)
				+5	(WBr ₅)
Xenon	Xe	—	—	+2	(XeF ₂)
				+4	(XeF ₄)
				+6	(H ₂ XeO ₄)
				+8	(XeO ₄)

Mint a táblázatból látható, számos kémiai elem többféle oxidációs számmal is alkothat vegyületet. Bizonyos esetekben a különböző oxidációfokú ionok színe is eltér.



7.4.1. ábra: Krómionok színei
(balról jobbra: CrCl_2 -oldat, CrCl_3 -oldat, K_2CrO_4 -oldat, $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ -oldat)



7.4.2. ábra: Vanádiumionok színe
(balról jobbra: VCl_2 -oldat, VCl_3 -oldat, VCl_4 -oldat, NH_4VO_3 -oldat)



7.4.2. videó: A mangántartalmú ionok színei

Gyakran előfordul, hogy meg kell határoznunk az oxidációfokokat sószerű agyagokban. A sók mindig egy vagy több kationból (pozitív töltésű ion) és legalább egy anionból (negatív töltésű ion) állnak. Célszerű ezért áttekintenünk a legfontosabb kationokat és anionokat töltésszámukkal együtt.

Kationok:

A szervesetlen kationok túlnyomó része egyszerű ion, és így oxidációfokára gyakran következtethetünk abból, hogy a periódusos rendszer mely oszlopában található. Erre néhány példa:

nátrium(I): Na^+ ,
 kálium(I): K^+ ,
 magnézium(II): Mg^{2+} ,
 kalcium(II): Ca^{2+} ,
 bizmut(III): Bi^{3+} ,
 titán(IV): Ti^{4+} stb.

A legfontosabb összetett kation az ammóniumion: NH_4^+ .

Anionok:

Az anionok közt sok egyszerű anion található, mint például:

fluorid: F^- ,
 klorid: Cl^- ,
 bromid: Br^- ,
 jodid: I^- ,
 oxid: O^{2-} ,
 szulfid: S^{2-} ,

A fontosabb összetett anionok:

szulfát: SO_4^{2-} ,
 szulfít: SO_3^{2-} ,
 nitrát: NO_3^- ,
 nitrit: NO_2^- ,
 foszfát: PO_4^{3-} ,
 karbonát: CO_3^{2-} ,
 borát: BO_3^{3-} ,
 hidroxid: OH^- .

7.2. példa:

Határozzuk meg a vasatom oxidációfokát a $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$ vegyületben!

Megoldás:

A szulfátion kétszeresen negatív töltésű, a vas oxidációfoka legyen x. Tudjuk, hogy a vegyületekben a töltések összege zérus:

$$2 \cdot x + 3 \cdot (-2) = 0$$

Melyből $x = +3$, azaz a vas háromszor pozitív töltésű: Fe^{3+} .

Az oxidációfok komplex vegyületekben

A komplex vegyületek oxidációfokait szintén a fenti szabályok ismeretében lehet meghatározni. Figyelembe kell azonban vennünk, hogy a központi atomhoz kapcsolódó ligandumok töltéssel rendelkezhetnek. A legfontosabb semleges és anionos ligandumok a következő:

víz:	H_2O ,	például: $[\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_6]\text{Cl}_3$	Cr: +3; (Cl: -1),
ammónia:	NH_3 ,	például: $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]\text{SO}_4$	Cu: +2; (S: +6; O: -2),
foszfin:	PH_3 ,	például: $[\text{Pt}(\text{PH}_3)_2]\text{Cl}_2$	Pt: +2; (Cl: -1),
szén-monoxid:	CO ,	például: $\text{Fe}(\text{CO})_5$	Fe: 0,
hidroxidion:	OH^- ,	például: $\text{Na}[\text{Al}(\text{OH})_4]$	Al: +3; (Na: +1),
fluoridion:	F^- ,	például: $\text{H}[\text{BF}_4]$	B: +3; (H: +1),
kloridion:	Cl^- ,	például: $\text{Na}_2[\text{SnCl}_6]$	Sn: +4; (Na: +1),
bromidion:	Br^- ,	például: $\text{K}_2[\text{CuBr}_4]$	Cu: +2; (K: +1),
jodidion:	I^- ,	például: $\text{Na}_2[\text{HgI}_4]$	Hg: +2; (Ka: +1),
cianidion:	CN^- ,	például: $\text{K}_3[\text{Fe}(\text{CN})_6]$	Fe: +3; (K: +1),
hidridion:	H^- ,	például: $\text{Na}[\text{BH}_4]$	B: +3; (Na: +1).

7.3. példa:

Határozzuk meg az egyes atomok oxidációfokát az alábbi vegyületekben, illetve ionokban!

- H_2SiO_3
- $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$
- ClO_4^-
- $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$
- $\text{K}_3[\text{AlF}_6]$
- $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$
- H_2O_2
- $\text{H}[\text{PF}_6]$
- Mg_3N_2
- $\text{NH}_4\text{H}_2\text{AsO}_4$

Megoldás:

- a) H_2SiO_3

Az oxigén oxidációfoka közönséges vegyületeiben -2, és mivel nem fém-hidridről van szó, a hidrogén oxidációfoka +1. Legyen a szilícium oxidációfoka „a”! Az oxidációfokok összegének 0-nak kell lennie:

$$2 \cdot (+1) + a + 3 \cdot (-2) = 0.$$

A megoldás: $a = +4$. Tehát az oxidációfokok: H: +1; Si: +4; O: -2.

- b) $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$

A képletben felismerhető a nitrát ion: NO_3^- , melynek egyszeres negatív töltése van. Így a réznek kétszeresen pozitívnak kell lennie, hogy a vegyület semleges legyen.

Az oxigén oxidációfoka -2, a nitrogén legyen „b”, melyekből a megfelelő szorzótényezők segítségével meg kell kapnunk a nitrátion egyszeres negatív töltését:

$$b + 3 \cdot (-2) = -1.$$

Ennek megoldása: $b = +5$. Tehát az oxidációfokok: Cu: +2; N: +5; O: -2.



Az oxigén oxidációfoka ismételtelen -2. Legyen a klór oxidációfoka „c”.

$$c + 4 \cdot (-2) = -1$$

A megoldás: $c = +7$, azaz a keresett oxidációfokok: Cl: +7; O: -2.



A kalcium a IIA (2.) főcsoportban található, így oxidációfoka +2. Ez összhangban van természetesen azzal is, hogy a foszfátion (PO_4^{3-}) három negatív töltéssel rendelkezik (egyszerű ellenőrzés: $3 \cdot (+2) + 2 \cdot (-3) = 0$). Az oxigén oxidációfokát a szokásos módon -2-nek tekintjük. A foszfátion töltésére felírva az oxidációfokok összegét megkapjuk a foszfor oxidációfokát, melyet „d”-vel jelöltünk:

$$d + 4 \cdot (-2) = -3.$$

A megoldás így $d = +5$. Az oxidációfokok: Ca: +2; P: +5; O: -2.



Mint a szögletes zárójelből látható, ez egy komplex vegyület, ám az oxidációfokok megfejtése semmiben sem különbözik a fentiektől. Az alkálifémek oxidációfoka mindig +1 (kivételek csak az egymással alkotott ötvözeteik), ez esetben a káliumé is természetesen +1, a jódé pedig -1. A bizmut oxidációfoka legyen „e”:

$$(+1) + e + 4 \cdot (-1) = 0.$$

A megoldás: $e = +3$, azaz a keresett oxidációfokok: K: +1; Bi: +3; I: -1.



Az oxigén oxidációfoka vegyületeiben -2. Így a króm oxidációfoka (f) könnyen adódik:

$$2 \cdot f + 7 \cdot (-2) = -2.$$

Megoldva az egyenletet a következő eredményt kapjuk: $f = (14 - 2) / 2 = +6$. Azaz a bárium-dikromátban az oxidációfokok: Cr: +6; O: -2.



Mivel ez nem fém-hidrid, a hidrogén oxidációfoka +1. Legyen az oxigén oxidációfoka „g”.

$$2 \cdot (+1) + 2 \cdot g = 0$$

Az egyenlet megoldása: $g = -1$. Tehát az oxidációfokok: H: +1; O: -1.

Megjegyzendő, hogy a hidrogén-peroxid szerkezeti képlete a következő: H-O-O-H. Mint látható, az oxigén atomok között kötés található, így ezt nem kell figyelembe venni az oxidációfok számításánál. Tulajdonképpen csak egy „O-H” egységen belül határozzuk meg az oxidációfokokat.

h) $\text{H}[\text{PF}_6]$

A hidrogén oxidációfoka +1, a fluoré pedig minden vegyületében -1 , mivel ez a legelektronegatívabb elem. A foszfor oxidációfokát jelöljük h -val. Ekkor a semleges vegyületre felírva az oxidációfokok összegét:

$$(+1) + h + 6 \cdot (-1) = 0.$$

Könnyen kiszámítható, hogy $h = +5$, így a keresett oxidációfokok: H: +1; P: +5; F: -1 .

i) Mg_3N_2

A magnézium oxidációfokának ismeretében (+2) könnyen kiszámíthatjuk a nitrogén oxidációfokát, melyet „ i ”-vel jelölünk:

$$3 \cdot (+2) + 2 \cdot i = 0.$$

A megoldás: $i = -3$, azaz a kérdésben szereplő oxidációfokok: Mg: +2; N: -3 .

j) $\text{NH}_4\text{H}_2\text{AsO}_4$

A fenti képletet érdemes átírni az alábbi alakra: $(\text{NH}_4)(\text{H}_2\text{AsO}_4)$. Ismert, hogy az ammóniumion töltése +1, tehát az anionnak egyszeresen negatívnak kell lennie: H_2AsO_4^- . Egyrészt meg kell állapítanunk a nitrogén oxidációfokát az ammóniumionban, másrészt az arzén oxidációfokát az anionban. Legyen a nitrogén oxidációfoka j , felírva az oxidációfokok összegét az ammóniumionra:

$$j + 4 \cdot (+1) = +1.$$

A megoldás: $j = -3$. Az előzőekhez hasonlóan meghatározzuk az arzén oxidációfokát is, melyet jelöljünk k -val!

$$2 \cdot (+1) + k + 4 \cdot (-2) = -1$$

Megoldva $k = +5$ -öt kapunk eredményül. Így az oxidációfokok a fenti vegyületben: N: -3 ; H: +1; As: +5; O: -2 .

Megjegyzés: A H_2AsO_4^- anion neve dihidrogén-arzenát ion, a feladatban szereplő úgynevezett savanyú só pedig az ammónium-dihidrogén-arzenát. Az arzénsav a foszforsavnak az arzéntartalmú megfelelője: H_3AsO_4 , melynek egy hidrogénionját helyettesítettük az ammóniumionnal. A savmaradék-ion neve a foszfát mintájára arzenát.

7.4. példa:

Mekkora a következő vegyületekben a szén oxidációfoka és oxidációs száma?

- etán ($\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$),
- etil-alkohol vagy etanol ($\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{OH}$)
- acetaldehid vagy etanal ($\text{H}_3\text{C}-\text{CHO}$),
- ecetsav vagy etánsav ($\text{H}_3\text{C}-\text{COOH}$).

Megoldás:

a) Az etánban ($\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$) a két szénatom közötti kötés következtében csak egy CH_3 fragmensre kell meghatározni az oxidációfokokat: mivel a hidrogéné +1, a széné -1 .

b) Az etil-alkoholban található metilcsoportban az a) ponthoz hasonlóan a szén oxidációfoka -3 . A CH_2OH csoportban az oxigénatom oxidációfoka -2 , a hidrogéneké +1, így a széné -1 .

Az oxidációs szám a két oxidációfok átlaga: $[(-3) + (-1)] / 2 = -2$.

c) Az acetaldehid formil (CHO) csoportjában a szén oxidációs foka +1, a metilcsoportban -3, így a szén oxidációs száma $[(-3) + (+1)] / 2 = -1$.

d) A ecetsavban található metilcsoportban a szén oxidációs foka az előzőekhez hasonlóan -3, a karboxil (COOH) csoportban pedig +3. Az oxidációs szám a két oxidációs fok átlagával egyenlő: $[(-3) + (+3)] / 2 = 0$.

Gyakorlófeladatok

Határozzuk meg az alábbi vegyületekben az egyes elemek oxidációs fokát (oxidációs számát)!

- 1) $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$
- 2) $(\text{NH}_4)_2\text{CO}_3$
- 3) HSO_3^-
- 4) NaH
- 5) NaNH_2
- 6) SO_3
- 7) CrCl_3
- 8) N_2O_3
- 9) $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$
- 10) $\text{Na}_2\text{S}_4\text{O}_6$
- 11) KClO_4
- 12) $\text{S}_2\text{O}_6^{2-}$
- 13) $\text{S}_2\text{O}_7^{2-}$
- 14) SO_2
- 15) $\text{H}_4\text{P}_2\text{O}_6$
- 16) $\text{H}_4\text{P}_2\text{O}_7$
- 17) $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{F}$
- 18) LiBH_4
- 19) Sb_2S_3
- 20) CaC_2
- 21) Mg_2C
- 22) NaH_2PO_2
- 23) $\text{V}_5\text{O}_{14}^{3-}$
- 24) $\text{Ba}(\text{NO}_2)_2$
- 25) HClO_2
- 26) $[\text{FeF}_6]^{3-}$
- 27) PbO_2
- 28) MnO_4^{2-}
- 29) Na_2SO_3
- 30) N_2O_5
- 31) $\text{Mo}_8\text{O}_{26}^{4-}$
- 32) $\text{Sr}(\text{NO}_3)_2$
- 33) Tc_2O_7
- 34) RuO_4
- 35) $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_2(\text{NH}_3)_2]\text{Br}_2$
- 36) Rh_2O_3
- 37) OsOF_5
- 38) H_4TiO_4
- 39) $\text{Ni}(\text{OH})_2$
- 40) Ir_4F_{20}
- 41) KClO_3
- 42) As_2S_3
- 43) HPO_4^{2-}
- 44) NaHSO_3
- 45) $[\text{VO}_2(\text{H}_2\text{O})_4]\text{NO}_3$

- 46) $(\text{NH}_4)_2\text{S}_2\text{O}_8$
- 47) N_2H_5^+
- 48) $[\text{Zn}(\text{OH})_4]^{2-}$
- 49) $[\text{SnCl}_6]^{2-}$
- 50) $\text{Na}_2\text{C}_2\text{O}_4$
- 51) KIO_4
- 52) $\text{V}(\text{OH})_4\text{Cl}$
- 53) $\text{K}_3[\text{AlF}_6]$
- 54) FeS_2
- 55) Fe_2O_3
- 56) HBrO_3
- 57) $\text{Na}_2[\text{SnS}_3]$
- 58) K_2O
- 59) $(\text{NH}_4)_2\text{Mo}_5\text{O}_{16}$
- 60) $\text{K}_3\text{V}_{13}\text{O}_{34}$
- 61) H_5IO_6
- 62) Sc_2S_3
- 63) $\text{Y}_2(\text{CO}_3)_3$
- 64) $\text{K}_2[\text{PtCl}_4]$
- 65) Hg_2I_2
- 66) FeO_4^{2-}
- 67) H_3COH
- 68) H_2CO
- 69) HCOO^-
- 70) ReCl_5
- 71) $\text{Co}(\text{OH})_3$
- 72) $[\text{Cr}(\text{OH})_6]^{3-}$
- 73) CaH_2
- 74) $(\text{BiO})_2\text{SO}_4$
- 75) NH_2OH
- 76) MoO_4^{2-}
- 77) P_4O_{10}
- 78) $\text{B}_4\text{O}_7^{2-}$
- 79) IF_7
- 80) BrF_3
- 81) $\text{Ca}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2$
- 82) Al_2Cl_6
- 83) Ag_2S
- 84) TlOH
- 85) CH_3^+
- 86) XeO_4^{2-}
- 87) OF_2
- 88) ClO^-
- 89) Na_2SiF_6
- 90) SO_3^{2-}
- 91) NF_3
- 92) XeO_3
- 93) OsO_4
- 94) $\text{P}_2\text{O}_7^{4-}$
- 95) TcF_6
- 96) $\text{Li}_2\text{Mn}(\text{CO}_3)_2$
- 97) $\text{Pb}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$
- 98) $(\text{NH}_4)_2\text{Fe}(\text{SO}_4)_2$
- 99) $\text{AlK}(\text{SO}_4)_2$
- 100) $\text{Ca}_3\text{NaAlSi}_3\text{O}_{10}(\text{OH})_2$

Megoldás:

1)	$\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$	Al: +3; S: +6; O: -2,
2)	$(\text{NH}_4)_2\text{CO}_3$	N: -3; H: +1; C: +4; O: -2,
3)	HSO_3^-	H: +1; S: +4; O: -2,
4)	NaH	Na: +1; H: -1,
5)	NaNH_2	Na: +1; N: -3; H: +1,
6)	SO_3	S: +6; O: -2,
7)	CrCl_3	Cr: +3; Cl: -1,
8)	N_2O_3	N: +3; O: -2,
9)	$\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$	Na: +1; S: +2; O: -2,
10)	$\text{Na}_2\text{S}_4\text{O}_6$	Na: +1; S: +2,5; O: -2,
11)	KClO_4	K: +1; Cl: +7; O: -2,
12)	$\text{S}_2\text{O}_6^{2-}$	S: +5; O: -2,
13)	$\text{S}_2\text{O}_7^{2-}$	S: +6; O: -2,
14)	SO_2	S: +4; O: -2,
15)	$\text{H}_4\text{P}_2\text{O}_6$	H: +1; P: +4; O: -2,
16)	$\text{H}_4\text{P}_2\text{O}_7$	H: +1; P: +5; O: -2,
17)	$\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{F}$	Ca: +2; P: +5; O: -2; F: -1,
18)	LiBH_4	Li: +1; B: +3; H: -1,
19)	Sb_2S_3	Sb: +3; S: -2,
20)	CaC_2	Ca: +2; C: -1,
21)	Mg_2C	Mg: +2; C: -4,
22)	NaH_2PO_2	Na: +1; H: +1; P: +1; O: -2,
23)	$\text{V}_5\text{O}_{14}^{3-}$	V: +5; O: -2,
24)	$\text{Ba}(\text{NO}_2)_2$	Ba: +2; N: +3; O: -2,
25)	HClO_2	H: +1; Cl: +3; O: -2,
26)	$[\text{FeF}_6]^{3-}$	Fe: +3; F: -1,
27)	PbO_2	Pb: +4; O: -2,
28)	MnO_4^{2-}	Mn: +6; O: -2,
29)	Na_2SO_3	Na: +1; S: +4; O: -2,
30)	N_2O_5	N: +5; O: -2,
31)	$\text{Mo}_8\text{O}_{26}^{4-}$	Mo: +6; O: -2,
32)	$\text{Sr}(\text{NO}_3)_2$	Sr: +2; N: +5; O: -2,
33)	Tc_2O_7	Tc: +7; O: -2,
34)	RuO_4	Ru: +8; O: -2,
35)	$[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_2(\text{NH}_3)_2]\text{Br}_2$	Ni: +2; H: +1; O: -2; N: -3; Br: -1,
36)	Rh_2O_3	Rh: +3; O: -2,
37)	OsOF_5	Os: +7; O: -2; F: -1,
38)	H_4TiO_4	H: +1; Ti: +4; O: -2,
39)	$\text{Ni}(\text{OH})_2$	Ni: +2; O: -2; H: +1,
40)	Ir_4F_{20}	Ir: +5; F: -1,
41)	KClO_3	K: +1; Cl: +5; O: -2,
42)	As_2S_3	As: +3; S: +2,
43)	HPO_4^{2-}	H: +1; P: +5; O: -2,
44)	NaHSO_3	Na: +1; H: +1; S: +4; O: -2,
45)	$[\text{VO}_2(\text{H}_2\text{O})_4]\text{NO}_3$	V: +5; O: -2; H: +1; N: +5,
46)	$(\text{NH}_4)_2\text{S}_2\text{O}_8$	N: -3; H: +1; S: +7; O: -2,
47)	N_2H_5^+	N: -2; H: +1,
48)	$[\text{Zn}(\text{OH})_4]^{2-}$	Zn: +2; O: -2; H: +1,
49)	$[\text{SnCl}_6]^{2-}$	Sn: +4; Cl: -1,
50)	$\text{Na}_2\text{C}_2\text{O}_4$	Na: +1; C: +3; O: -2,
51)	KIO_4	K: +1; I: +7; O: -2,
52)	$\text{V}(\text{OH})_4\text{Cl}$	V: +5; O: -2; H: +1; Cl: -1,
53)	$\text{K}_3[\text{AlF}_6]$	K: +1; Al: +3; F: -1,

54)	FeS_2	Fe: +2; S: -1,
55)	Fe_2O_3	Fe: +3; O: -2,
56)	HBrO_3	H: +1; Br: +5; O: -2,
57)	$\text{Na}_2[\text{SnS}_3]$	Na: +1; Sn: +4; S: -2,
58)	K_2O	K: +1; O: -2,
59)	$(\text{NH}_4)_2\text{Mo}_5\text{O}_{16}$	N: -3; H: +1; Mo: +6; O: -2,
60)	$\text{K}_3\text{V}_{13}\text{O}_{34}$	K: +1; V: +5; O: -2,
61)	H_5IO_6	H: +1; I: +7; O: -2,
62)	Sc_2S_3	Sc: +3; S: -2,
63)	$\text{Y}_2(\text{CO}_3)_3$	Y: +3; C: +4; O: -2,
64)	$\text{K}_2[\text{PtCl}_4]$	K: +1; Pt: +4; Cl: -1,
65)	Hg_2I_2	Hg: +1; I: -1,
66)	FeO_4^{2-}	Fe: +6; O: -2,
67)	H_3COH	C: -2; O: -2; H: +1,
68)	H_2CO	C: 0; O: -2; H: +1,
69)	HCOO^-	C: +2; O: -2; H: +1,
70)	ReCl_5	Re: +5; Cl: -1,
71)	$\text{Co}(\text{OH})_3$	Co: +3; O: -2; H: +1,
72)	$[\text{Cr}(\text{OH})_6]^{3-}$	Cr: +3; O: -2; H: +1,
73)	CaH_2	Ca: +2; H: -1,
74)	$(\text{BiO})_2\text{SO}_4$	Bi: +3; O: -2; S: +6,
75)	NH_2OH	N: -1; O: -2; H: +1,
76)	MoO_4^{2-}	Mo: +6; O: -2,
77)	P_4O_{10}	P: +5; O: -2,
78)	$\text{B}_4\text{O}_7^{2-}$	B: +3; O: -2,
79)	IF_7	I: +7; F: -1,
80)	BrF_3	Br: +3; F: -1,
81)	$\text{Ca}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2$	Ca: +2; H: +1; P: +5; O: -2,
82)	Al_2Cl_6	Al: +3; Cl: -1,
83)	Ag_2S	Ag: +1; S: -2,
84)	TlOH	Tl: +1; O: -2; H: +1,
85)	CH_3^+	C: -2; H: +1,
86)	XeO_4^{2-}	Xe: +6; O: -2,
87)	OF_2	O: +2; F: -1,
88)	ClO^-	Cl: +1; O: -2,
89)	Na_2SiF_6	Na: +1; Si: +4; F: -1,
90)	SO_3^{2-}	S: +4; O: -2,
91)	NF_3	N: +3; F: -1,
92)	XeO_3	Xe: +6; O: -2,
93)	OsO_4	Os: +8; O: -2,
94)	$\text{P}_2\text{O}_7^{4-}$	P: +5; O: -2,
95)	TcF_6	Tc: +6; F: -1,
96)	$\text{Li}_2\text{Mn}(\text{CO}_3)_2$	Li: +1; Mn: +2; C: +4; O: -2,
97)	$\text{Pb}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$	Pb: +2; P: +5; O: -2; Cl: -1,
98)	$(\text{NH}_4)_2\text{Fe}(\text{SO}_4)_2$	N: -3; H: +1; Fe: +2; S: +6; O: -2,
99)	$\text{AlK}(\text{SO}_4)_2$	Al: +3; K: +1; S: +6; O: -2,
100)	$\text{Ca}_3\text{NaAlSi}_3\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	Ca: +2; Na: +1; Al: +3; Si: +4; O: -2; H: +1.

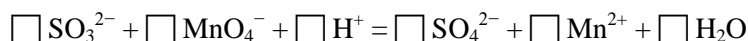
7.4.2. Redoxiegyenletek rendezése oxidációfokok segítségével

Miután megismerkedtük az oxidációfokok kiszámításának szabályaival, ebben a fejezetben oxidációfokok segítségével rendezünk redoxiegyenleteket.

A redoxiegyenletek rendezésének lépéseit egy mintapéldán keresztül ismertetjük:

7.5. példa:

Rendezzük a következő egyenletet az oxidációfokok segítségével!



I. Állapítsuk meg az egyes atomok oxidációfokát, és állapítsuk meg, hogy mely elemek esetén különböznek az oxidációfokok az egyenlet két oldalán!

Bal oldalon:	S: +4;	Mn: +7;	O: -2;	H: +1
Jobb oldalon:	S: +6;	Mn: +2;	O: -2;	H: +1.

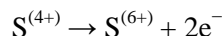
Mint látható, a kén és a mangán oxidációfokában van különbség az egyenlet két oldalán.

Megjegyzés: A későbbiekben, ha már van elegendő tapasztalatunk annak megállapítására, hogy mely atomoknak változik az oxidációfoka, nem mindig lesz szükség minden egyes elem oxidációfokának vizsgálatára, például sejthető, hogy a hidrogén oxidációfoka azonos a H^+ -ionban és a H_2O molekulában, így feltehetően a hidrogén oxidációfoka nem változik a reakció során. Vigyázzunk, bizonyos esetekben kettőnél több elem oxidációfoka is változhat, ezért alaposan meg kell vizsgálni, hogy milyen folyamatok mennek végbe!

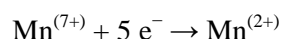
II. Állapítsuk meg a reakció alapfolyamatait, tehát hogy melyik résztvevő oxidálódik (oxidációfok növekszik), illetve melyik résztvevő redukálódik (oxidációfok csökken)!

Az oxidációfok növekedése azt jelenti, hogy az adott komponens elektront veszít, tehát oxidálódik. Ezzel ellentétben redukció során az oxidációfok csökken.

A kén oxidálódik, mivel oxidációfoka *+4-ről +6-ra növekszik*, és az oxidáció során két elektron keletkezik. A folyamat egyszerűsítve így írható fel:



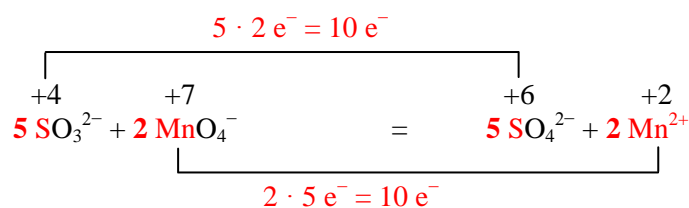
A mangán pedig redukálódik a folyamat során, mivel oxidációfoka *+7-ről +2-re csökken*. A redukcióhoz szükséges elektronok száma: $7 - 2 = 5$. Az egyszerűség kedvéért a folyamatot a következőképp jelöljük:



Tehát megállapítottuk, hogy a szulfition oxidációja során 2 elektront ad le, viszont a permanganácion redukációjához 5 elektron szükséges.

III. Ezután meg kell állapítanunk az oxidálódó és redukálódó komponensek arányát.

A folyamat során nem „tűnhetnek el” elektronok, azaz amennyi elektront az oxidálódó komponens leadott, ugyanannyi elektront fel kell vennie a redukálódó komponensnek. Így a szulfitionok által leadott elektronok számának (mely szulfitiononként 2) meg kell egyeznie a permanganácion által felvett elektronok számával (mely permanganáciononként 5). Ez úgy lehetséges, ha összesen 10 elektront adnak le a szulfitionok, és ugyanannyi, 10 elektront vesznek fel a permanganácionok összességében. Ehhez 5 szulfitionok és 2 permanganácion szükséges, azaz a szulfition mennyisége 5/2-szerese a permanganácionok mennyiségének. Ez a következő ábrával szemléltethető:

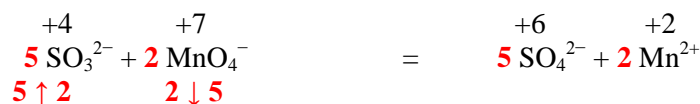


Általánosságban megállapítható, hogy a folyamat során átment elektronok száma a leadott és felvett elektronok számának **legkisebb közös többszöröse!**

Ebben a példában a 2 és 5 legkisebb közös többszöröse 10. Ebből következik, hogy $10 / 2 = 5$ szulfition és $10 / 5 = 2$ permanganátió szükséges.

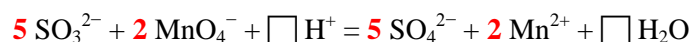
A fenti eljárás leegyszerűsítésére gyakran alkalmazzuk az következő jelölésrendszert:

- az oxidálódó atom alá egy felfele mutató nyilat (\uparrow), a redukálódó atom alá pedig egy lefelé mutató nyilat (\downarrow) rajzolunk. A nyíl iránya így megegyezik az oxidációfok-változás irányával!
- a nyilak mellé jobb oldalra írjuk az oxidációfok-változásokat.
- a nyilak bal oldalára írjuk a megfelelő együtthatókat.



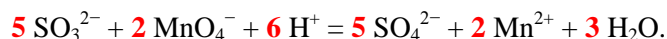
Mindig ellenőriznünk kell, hogy a nyíl két oldalán álló számok szorzata megegyezzen mindkét elemre nézve. (Ezt azért szükséges megtennünk, hogy ellenőrizzük, hogy az oxidálódó komponens által leadott elektronok száma megegyezik-e a redukálódó komponens által felvett elektronok számával.)

IV. Állapítsuk meg az egyenlet többi együtthatóját is!



Meg kell keresnünk a H^{+} -ionok és a víz előtti együtthatókat. Először érdemes összeszámolni az oxigénatomok számát az egyenlet két oldalán. A bal oldalon az oxigénatomok száma: $5 \cdot 3 + 2 \cdot 4 = 23$, a jobb oldalon pedig a szulfátionokban összesen $5 \cdot 4 = 20$ oxigénatom van, tehát $23 - 20 = 3$ oxigénatomot a víznek kell tartalmazni, hogy az anyagmérleg teljesüljön. Tehát a H_2O együtthatója **3**. Hidrogén csak egy-egy komponensben van az egyenlet két oldalán, így a vízben lévő $3 \cdot 2 = 6$ hidrogénnek megfelelően az egyenlet jobb oldalán is **6** H^{+} -ionnak kell lennie.

Tehát az egyenlet a helyes együtthatókkal:



V. Ellenőrizzük a töltésmérleget, illetve az anyagmérleget!

Az egyenlet helyes rendezését kétféleképpen lehet ellenőrizni:

- ha az egyenlet a fentiekhez hasonló úgynevezett **ionegyenlet** (azaz ellenionok nélkül szerepelnek a töltött részecskék), érdemes megállapítani a töltések összegét az egyenlet két oldalán, és helyes rendezés esetén az összegeknek meg kell egyezniük!
- ha az egyenlet csak semleges molekulákat/anyagokat tartalmaz, általában van az egyenletben olyan elem, melynek mennyiségét le tudjuk ellenőrizni az egyenlet két oldalán.

Mivel példánkban ionegyenletet rendeztünk, mindenképpen érdemes összeszámolnunk a töltéseket az egyenlet két oldalán:

Bal oldal: $5 \cdot (-2) + 2 \cdot (-1) + 6 \cdot (+1) = -6$,

Jobb oldal: $5 \cdot (-2) + 2 \cdot (+2) + 3 \cdot 0 = -6$.

Mint látható, a két oldalon megegyezik a töltések összege.

7.6. példa:

Rendezzük az alábbi egyenletet az oxidációfokok alkalmazásával!



Megoldás:

Állapítsuk meg az egyes atomok oxidációfokát!

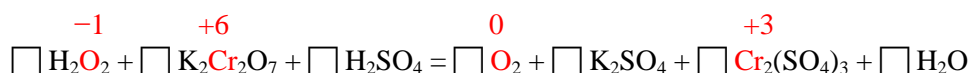
H_2O_2 : H: +1; O: -1,
 $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$: K: +1; Cr: +6; O: -2,
 H_2SO_4 : H: +1; S: +6; O: -2,

O_2 : O: 0,
 K_2SO_4 : K: +1; S: +6; O: -2,
 $\text{Cr}_2(\text{SO}_4)_3$: Cr: +3; S: +6; O: -2,
 H_2O : H: +1; O: -2.

Megvizsgálva az oxidációfokokat, megállapítható, hogy az oxigéneken és krómon kívül más elemnek nem változik az oxidációfoka. A króm oxidációfoka +6-ról +3-ra csökken a reakcióban.

Viszont az oxigén esetén az egyenletben három különböző oxidációfokot találunk: -1; -2 és 0. Itt érdemes egy pillanatra megállni, és átgondolni, melyik komponenseket kell figyelembe vennünk a redoxireakció során.

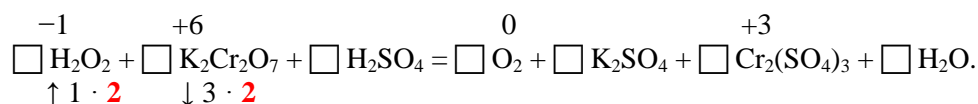
Annyi biztos, hogy a jobb oldalon álló oxigéngázban (O_2) a legmagasabb az oxigén oxidációfoka. A bal oldalon oxigén található a hidrogén-peroxidban (H_2O_2), a kálium-dikromátban ($\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$) és a kénsavban (H_2SO_4) is. Ha jobban megnézzük az egyenlet jobb oldalát, láthatjuk, hogy a kénsav ott is megtalálható, ezért nem ebből származnak az oxigéngáz oxigénatomjai. Kémiai reakciók végrehajtásakor nagyon gyakran előfordul, hogy valamilyen ásványi savat (például kénsav, sósav, salétromsav) kell alkalmazni ahhoz, hogy a reakció végbemenjen. Ebben az esetben a kénsav szerepe egyrészt, hogy növelje a kálium-dikromát oxidálóképességét, másrészt a belőle származó szulfátionok a reakcióban keletkező kationok ellenionjaiként szolgálnak. A kálium-dikromát oxidálószerként szerepel a reakcióegyenletben (mivel az króm oxidációfoka csökken a reakció során), tehát kizárásos alapon a redukálószer a hidrogén-peroxid:



Az oxigén esetén az oxidációfok-változás: $0 - (-1) = 1$, ám mivel a hidrogén-peroxidban eleve 2 oxigén van, ezt az értéket be kell szoroznunk 2-vel. (Megjegyzendő, hogy az oxigéngázban is két oxigén található, ám az alkalmazott kettes szorzóval ezt is figyelembe vesszük, semmi értelme még egyszer alkalmazni.)

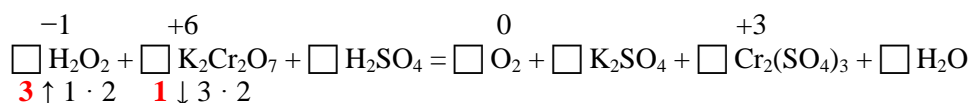
A króm esetén az oxidációfok-változás: $(+3) - (+6) = -3$, azaz redukálódik. Az oxigénhez hasonlóan itt is 2-vel be kell szorozni az értéket, mivel mind a $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ -ben mind a $\text{Cr}_2(\text{SO}_4)_3$ -ban két króm található.

Így a nyilakat és a mellé írandó számokat az alábbi formában célszerű feltüntetni:



A pirossal kiemelt jobb oldali szorzótényezők tehát azért szükségesek, mivel a vegyületek sztöchiometriai összetétele ezt megköveteli.

Ezután a 2 és 6 legkisebb közös többszörösét kell megkeresnünk, mely 6. Így a hidrogén-peroxid sztöchiometriai együtthatója **3**, a kálium-dikromáté ($K_2Cr_2O_7$) pedig **1**.



Ezután meg kell állapítanunk az O_2 és $Cr_2(SO_4)_3$ mennyiségét! Az O_2 mennyisége megegyezik a H_2O_2 mennyiségével (azaz a sztöchiometriai együtthatója **3**), mivel csak hidrogén-peroxidból keletkezhet oxigéngáz. Hasonlóan, a $Cr_2(SO_4)_3$ mennyisége is megegyezik a $K_2Cr_2O_7$ -ével (sztöchiometriai együtthatója **1**).



Már csak a maradék komponensek arányát kell meghatározni. Mivel káliumion csak a $K_2Cr_2O_7$ -ban és a K_2SO_4 -ban van, és mindkettőben azonos mennyiségű, a $K_2Cr_2O_7$ és K_2SO_4 mennyisége megegyezik (sztöchiometriai együtthatójuk **1**). A bal oldalon a szulfátionok mennyisége: $1 \cdot 1 + 1 \cdot 3 = 4$, így 4 kénsavra van szükség. A víz mennyiségét talán legegyszerűbb a hidrogénatomok mennyiségéből kiszámítani: a jobb oldalon $3 \cdot 2 + 4 \cdot 2 = 14$ hidrogénatom található, az anyagmérleg értelmében ugyanennyinek kell lennie a jobb oldalon is, azaz $14 / 2 = 7$ vízmolekula keletkezik. A rendezett egyenlet tehát a következő:



Természetesen ismét fontos leellenőrizni az egyenlet helyességét. Ehhez az oxigénatomok számát célszerű összevetni az egyenlet két oldalán:

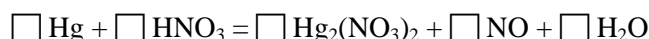
$$\text{Bal oldal: } 3 \cdot 2 + 1 \cdot 7 + 4 \cdot 4 = 29,$$

$$\text{Jobb oldal: } 3 \cdot 2 + 1 \cdot 4 + 1 \cdot (4 \cdot 3) + 7 \cdot 1 = 29.$$

Tehát az egyenletet tényleg helyesen rendeztük.

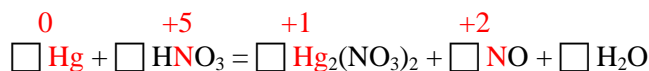
7.7. példa: Fémoldás oxidálásavban

Határozzuk meg az alábbi reakciókban szereplő vegyületek együtthatóit az oxidációfokok alkalmazásával!



Megoldás:

Vizsgáljuk meg, mely elemek oxidációfoka változik és melyeké marad változatlan! A higany és a nitrogén oxidációfoka változik (akinek ez nem megy még ránézésre, írja fel minden elem oxidációfokát az egyenletben!).



Az oxidációfok-változások:

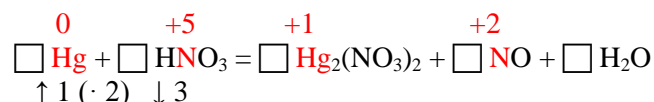
Hg: $0 \rightarrow +1$ változás: $+1$ (oxidálódik)

N: $+5 \rightarrow +2$ változás: -3 (redukálódik)

A feladat „trükkje”, hogy a salétromsav nemcsak mint oxidálószer, hanem mint **sóképző** is részt vesz (a keletkező Hg_2^{2+} -ionok ellenionját képezik a nitrátionok). Tehát első lépésben meg kell

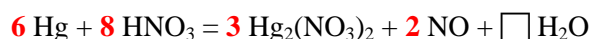
határoznunk, mennyi salétromsav szükséges a higany oxidációjához, másrészt figyelembe kell vennünk az ellenionok mennyiségét is!

Mivel a higany(I)-nitrát képlete $\text{Hg}_2(\text{NO}_3)_2$, a higany mennyiségénél ezt egy 2-es szorzótényezővel figyelembe kell vennünk! (Érdekes a szokatlannak tűnő $\text{Hg}_2(\text{NO}_3)_2$ képlet magyarázata: a szilárd, illetve a vízben oldott higany(I)-nitrát dimer higany-kationt – Hg_2^{2+} -iont – tartalmaz.)

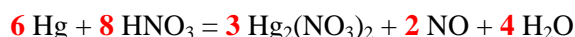


Mivel a fém higany sztöchiometriai együtthatójának 2-vel oszthatónak kell lennie, $2 \cdot 3 = 6$ elektron átmenetele szükséges. Azaz a fém higany sztöchiometriai együtthatója **6**, így a $\text{Hg}_2(\text{NO}_3)_2$ sztöchiometriai együtthatója **3**.

6 Hg oxidálásához 2 salétromsav szükséges (egy nitrogénatom oxidációfok-változása 3), és a salétromsav mennyiségéhez hozzá kell számítanunk a sóképzőként alkalmazott mennyiséget is. Ez a $\text{Hg}_2(\text{NO}_3)_2$ mennyiségének 2-szerese, mivel egy higany(I)-nitrát ($\text{Hg}_2(\text{NO}_3)_2$) két nitrátiont tartalmaz. A salétromsav sztöchiometriai együtthatója tehát: $2 + 3 \cdot 2 = 8$.



Már csupán a víz mennyiségét kell megállapítani, és leellenőrizni az eredményt!
Mivel 8 salétromsav van a bal oldalon, ebből 4 víz keletkezik a jobb oldalon:



Az ellenőrzéshez használjuk fel az oxigénatomok számát!

Bal oldal: $8 \cdot 3 = 24$,

Jobb oldal: $3 \cdot (3 \cdot 2) + 2 \cdot 1 + 4 \cdot 1 = 24$.

7.8. példa: Szinproporción

Határozzuk meg az alábbi reakciókban szereplő vegyületek sztöchiometriai együtthatóit!



Megoldás:

Keressük meg, hogy mely atomoknak változik az oxidációfoka!

I^- : I: -1 ,

IO_3^- : I: $+5$; O: -2 ,

H^+ : H: $+1$,

I_2 : I: 0

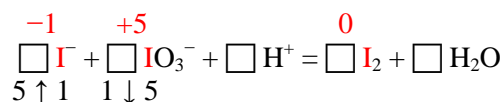
H_2O : H: $+1$; O: -2 .

Meglepő módon a jódon kívül semelyik másik elemnek nem változik az oxidációfoka! Azt is megállapíthatjuk, hogy az egyenlet bal oldalán a jodid (I^-) és jodát (IO_3^-) ionokban különböző a jód oxidációfoka.

Az ilyen reakciókat külön elnevezéssel illetjük: **szinproporción**. A szinproporcións reakciókban két olyan vegyületből, melyek ugyanazt az elemet különböző oxidációfokkal tartalmazzák, egy köztes oxidációfokú termék keletkezik.

Ebben a példában a jodátion (IO_3^- , a jód oxidációfoka $+5$) oxidálja a jodidion (I^- , a jód oxidációfoka -1), a termék pedig elemi jód (I_2 , a jód oxidációfoka 0).

Az együtthatók megállapítása az előzőekhez hasonlóan történik:



A jobb oldalon található IO_3^- ionból 3 H_2O keletkezik, melyhez $2 \cdot 3 = 6 \text{H}^+$ -ion szükséges. Így az egyenlet a rendezett sztöchiometriai együtthatókkal:

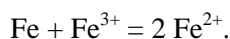


Ellenőrizzük le a töltésmérleget!

Bal oldal: $5 \cdot (-1) + 1 \cdot (-1) + 6 \cdot (+1) = 0$,

Jobb oldal: $3 \cdot 0 + 3 \cdot 0 = 0$.

Megjegyzés: A színproporcióval egy igen egyszerű kísérlet során is találkozhatunk: ha egy vas(III)-só oldatába fém vasat helyezünk, a vas(III)-ionok oxidálják a vas fémét és vas(II)-ionok keletkeznek:



Más, változó vegyértékű fémek esetén is gyakran előfordul színproporció (például: $\text{Hg} + \text{Hg}^{2+} = \text{Hg}_2^{2+}$, $\text{Sn} + \text{Sn}^{4+} = 2 \text{Sn}^{2+}$).

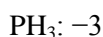
7.9. példa: Diszproporció

Határozzuk meg az alábbi reakciókban szereplő vegyületek sztöchiometriai együtthatóit!



Megoldás:

Vizsgáljuk meg a foszfor oxidációfokát a fenti vegyületekben (a többi elem oxidációfoka nem változik a reakció közben)!

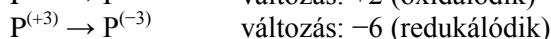
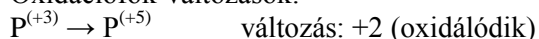


Ez éppen az előző eset megfordítása!

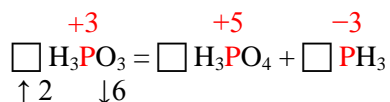
Diszproporció során egy elemet köztes oxidációfokban tartalmazó vegyületből két olyan vegyület keletkezik, mely ugyanazt az elemet különböző oxidációfokkal tartalmazza.

A folyamat során az egyik H_3PO_3 (foszforosav) oxidál egy másik H_3PO_3 molekulát, miközben saját maga redukálódik.

Oxidációfok-változások:



Természetesen a H_3PO_3 sztöchiometriai együtthatóját az oxidálódó és redukálódó molekulák mennyiségének összege adja.



A 2 és 6 legkisebb közös többszöröse 6. Az oxidálódó H_3PO_3 mennyisége: $6/2 = 3$, ebből keletkezik ugyanennyi H_3PO_4 (foszforsav), míg a redukálódó $6/6 = 1$, ugyanennyi PH_3 (foszfin) keletkezik. Összesen $3 + 1 = 4$ foszforossavból indulunk ki.



Ellenőrizzük le az oxigén- és hidrogénatomok mennyiségét!

Bal oldal: O: $4 \cdot 3 = 12$ H: $4 \cdot 3 = 12$,

Jobb oldal: O: $3 \cdot 4 = 12$ H: $3 \cdot 3 + 1 \cdot 3 = 12$.

7.10. példa:

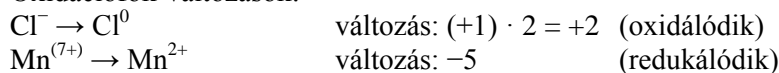
Határozzuk meg az alábbi reakciókban szereplő vegyületek együtthatóit és szükség esetén pótoljuk a hiányzó vizet!



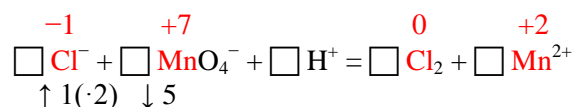
Megoldás:

A feladat megfogalmazásában szerepel, hogy „szükség esetén pótoljuk a hiányzó vizet”. Az egyenletek rendezésénél gyakran előfordul, hogy a **szükséges vizet vagy a víz ionjait** (H^+ - vagy OH^- -ionok) a feladat megoldása során nekünk kell beleírunk az egyenlet valamelyik oldalára.

Oxidációfok-változások:



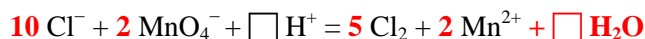
(A klór esetén azért szükséges a 2-es szorzó, mert a Cl_2 molekulában két klóratom van.)



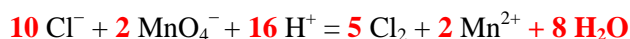
$5 \cdot 2 = 10$ elektron átadása történik: 10 Cl^- -ion lead 10 elektront, miközben 5 Cl_2 keletkezik, míg 2 MnO_4^- -ion (permanganát) ion redukálódik Mn^{2+} -vé:



Azonban az egyenlet rendezésének itt még nincs vége. A hidrogénionok számát is meg kell állapítanunk, valamint a permanganátionokban található oxigének is hiányoznak az egyenlet jobb oldaláról. Mivel a bal oldalon H^+ -ionok találhatóak, a jobb oldalra nem kerülhetnek OH^- -ionok (egy savas oldatban csak nagyon csekély mennyiségben vannak hidroxidionok). Ezért a jobb oldalt ki kell egészíteni vízmolekulákkal:



A permanganátionok összesen 8 oxigénje következtében a jobb oldalon 8 H_2O molekulát kell vennünk, melyhez $8 \cdot 2 = 16 \text{H}^+$ szükséges.



Ellenőrzés: töltésmérleg segítségével:

Bal oldal: $10 \cdot (-1) + 2 \cdot (-1) + 16 \cdot (+1) = +4$,

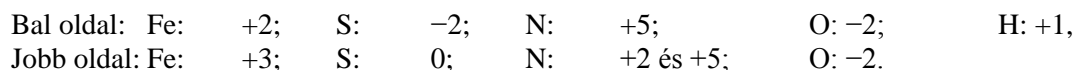
Jobb oldal: $2 \cdot (+2) = +4$.

7.11. példa:

Határozzuk meg az alábbi reakciókban szereplő vegyületek együtthatóit és szükség esetén pótoljuk a hiányzó vizet!

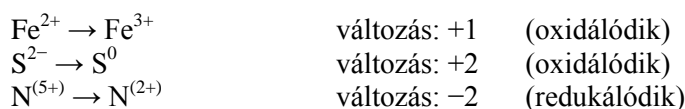
**Megoldás:**

Állapítsuk meg az egyes elemek oxidációs fokát!

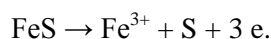


Érdekes módon azt tapasztaljuk, hogy három különböző elemnek is változik az oxidációs foka. A salétromsav nemcsak mint sóképző szerepel az egyenletben, hanem mint oxidálószer is. A vas(II)-szulfidban található vas(II)-ion (Fe^{2+}) és a szulfidion (S^{2-}) is oxidálódik!

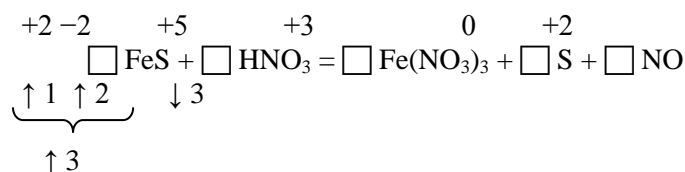
Az oxidációs fok-változások:



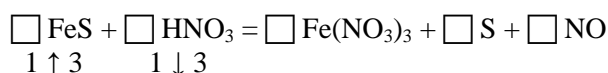
Mivel a két oxidálódó komponens ugyanabban a vegyületben található, érdemes összevonnunk az oxidációs fok-változásokat:



Így felírhatjuk az oxidációs fok-változásokat a szokásos jelölérendszerrel:



Megállapíthatók az oxidálódó és oxidálódó anyagok sztöchiometriai együtthatói:



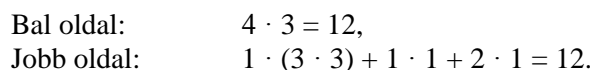
Egy FeS-ből egy $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3$ keletkezik, melyhez 3 HNO_3 szükséges. Tehát a salétromsav összmenyisége: $1 + 3 = 4$.



Az egyenlet bal oldalán a salétromsavakban található 4 hidrogénatom, melynek megfelelően a jobb oldalra kell írunk két vízmolekulát, hogy az anyagmérleg teljesüljön a hidrogénre is:



Ellenőrzésképp állapítsuk meg az oxigénatomok számát az egyenlet két oldalán:



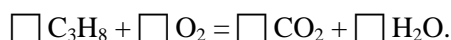
Összefoglalás (redoxiegyenletek rendezése)

- ❖ Megállapítjuk, hogy melyek az oxidálódó, illetve redukálódó komponensek az egyenletben.
- ❖ Kiszámítjuk az oxidációfok-változásokat.
- ❖ Amennyiben szükséges, figyelembe vesszük, ha egy vegyületben az adott elemnek több atomja is megtalálható (például a vas esetén a $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$ -ban, vagy molekuláris gázoknál, mint O_2 , Cl_2 stb.)
- ❖ Megállapítjuk az oxidációfok-változások legkisebb közös többszörösét és ebből kiszámítjuk az oxidálódó és redukálódó komponensek sztöchiometriai együtthatóját.
- ❖ Meghatározzuk a többi komponens sztöchiometriai együtthatóját is.
- ❖ Amennyiben szükséges, pótoljuk a hiányzó vizet és/vagy a víz valamely ionját (H^+ , OH^-).
- ❖ A sztöchiometriai együtthatóknak egész számoknak kell lenniük, méghozzá a lehető legkisebb egész számsorozatot kell megkeresnünk.
- ❖ Ellenőrizzük, hogy helyesen rendeztük-e az egyenletet! Ehhez megvizsgáljuk, hogy valamely, a rendezés során nem vizsgált elem atomjainak a száma vagy a töltések összege megegyezik-e az egyenlet két oldalán.

Szerves vegyületek égése

Az égés is redoxireakciónak tekinthető, ám az égési reakciók egyenletének rendezésénél általában nem használjuk az oxidációfokot, illetve oxidációs számokat. Ennek oka, hogy egy bonyolultabb szerves molekula esetén gyakran tört oxidációs számokat kapunk, melyekkel viszonylag nehézkes az egyenlet rendezése.

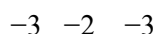
Például a propán égésének egyenlete:



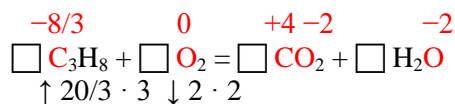
A szén és az oxigén oxidációs száma változik a reakció során. A szén oxidációs száma $-8/3$ a propánban, mely a három szénatom oxidációfokának átlaga:



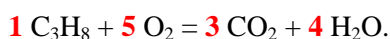
Mivel az azonos elemek atomjai közötti kötést nem vesszük figyelembe az oxidációfok kiszámításakor, az alábbi oxidációfokokat kapjuk:



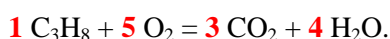
A fenti három oxidációfok átlaga, azaz a szén oxidációs száma $-8/3$.



Az egyenlet rendezve:

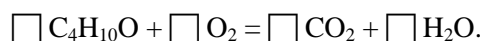


A szerves vegyületek tökéletes égésének reakcióegyenletét általában ennél egyszerűbben szoktuk rendezni: megállapítjuk a keletkező szén-dioxid és víz mennyiségét, majd ezekből az oxigén mennyiségét. A fenti példában 3CO_2 és $8 / 2 = 4 \text{H}_2\text{O}$ keletkezik, a szükséges O_2 mennyisége pedig $(3 \cdot 2 + 4 \cdot 1) / 2 = 5$. Természetesen ugyanazt az egyenletet kell kapnunk:

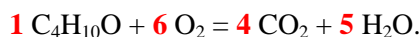


Előfordulhat, hogy a szerves vegyület eleve tartalmaz oxigént. Ebben az esetben le kell vonnunk a vegyületben eleve megtalálható oxigénatomok mennyiségét az égéshez szükséges oxigén mennyiségéből.

Például az *n*-butanol ($\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-OH}$) égése:



4 CO_2 és $10 / 2 = 5 \text{H}_2\text{O}$ keletkezik, az oxigéngáz mennyisége: $(4 \cdot 2 + 5 \cdot 1) / 2 = 6$.



Gyakorlófeladatok

Határozza meg az alábbi reakciókban szereplő vegyületek sztöchiometriai együtthatóit!

- 101) $\square \text{KI} + \square \text{FeCl}_3 = \square \text{I}_2 + \square \text{FeCl}_2 + \square \text{KCl}$
- 102) $\square \text{I}_2 + \square \text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 = \square \text{NaI} + \square \text{Na}_2\text{S}_4\text{O}_6$
- 103) $\square \text{H}_2\text{S} + \square \text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7 + \square \text{H}_2\text{SO}_4 = \square \text{Cr}_2(\text{SO}_4)_3 + \square \text{K}_2\text{SO}_4 + \square \text{S} + \square \text{H}_2\text{O}$
- 104) $\square \text{SnCl}_2 + \square \text{FeCl}_3 = \square \text{SnCl}_4 + \square \text{FeCl}_2$
- 105) $\square \text{P} + \square \text{H}_2\text{SO}_4 = \square \text{H}_3\text{PO}_4 + \square \text{SO}_2 + \square \text{H}_2\text{O}$
- 106) $\square \text{FeSO}_4 + \square \text{H}_2\text{SO}_4 + \square \text{HNO}_3 = \square \text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3 + \square \text{H}_2\text{O} + \square \text{NO}$
- 107) $\square \text{NaHSO}_3 + \square \text{NaIO}_3 + \square \text{Na}_2\text{CO}_3 = \square \text{I}_2 + \square \text{Na}_2\text{SO}_4 + \square \text{H}_2\text{O} + \square \text{CO}_2$
- 108) $\square \text{KMnO}_4 + \square \text{HI} + \square \text{H}_2\text{SO}_4 = \square \text{K}_2\text{SO}_4 + \square \text{MnSO}_4 + \square \text{H}_2\text{O} + \square \text{I}_2$
- 109) $\square \text{Cr}_2\text{O}_3 + \square \text{NaNO}_3 + \square \text{Na}_2\text{CO}_3 = \square \text{Na}_2\text{CrO}_4 + \square \text{NaNO}_2 + \square \text{CO}_2$
- 110) $\square \text{P} + \square \text{HNO}_3 + \square \text{H}_2\text{O} = \square \text{H}_3\text{PO}_4 + \square \text{NO}$
- 111) $\square \text{NaH} + \square \text{TiCl}_4 = \square \text{Ti} + \square \text{NaCl} + \square \text{H}_2$
- 112) $\square \text{KMnO}_4 + \square \text{FeSO}_4 + \square \text{H}_2\text{SO}_4 = \square \text{K}_2\text{SO}_4 + \square \text{MnSO}_4 + \square \text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3 + \square \text{H}_2\text{O}$
- 113) $\square \text{KClO}_3 + \square \text{Zn} + \square \text{NaOH} + \square \text{H}_2\text{O} = \square \text{KCl} + \square \text{Na}_2[\text{Zn}(\text{OH})_4]$
- 114) $\square \text{AsH}_3 + \square \text{AgNO}_3 + \square \text{H}_2\text{O} = \square \text{Ag} + \square \text{H}_3\text{AsO}_4 + \square \text{HNO}_3$
- 115) $\square \text{H}_2\text{O}_2 + \square \text{Na}_3\text{CrO}_3 = \square \text{Na}_2\text{CrO}_4 + \square \text{H}_2\text{O} + \square \text{NaOH}$
- 116) $\square \text{KMnO}_4 + \square \text{HI} = \square \text{I}_2 + \square \text{MnO}_2 + \square \text{KOH} + \square \text{H}_2\text{O}$
- 117) $\square \text{KMnO}_4 + \square \text{HCl} = \square \text{Cl}_2 + \square \text{MnCl}_2 + \square \text{KCl} + \square \text{H}_2\text{O}$
- 118) $\square \text{Cu} + \square \text{H}_2\text{SO}_4 = \square \text{CuSO}_4 + \square \text{SO}_2 + \square \text{H}_2\text{O}$
- 119) $\square \text{Cu} + \square \text{HNO}_3 = \square \text{Cu}(\text{NO}_3)_2 + \square \text{NO}_2 + \square \text{H}_2\text{O}$
- 120) $\square \text{Cu} + \square \text{HNO}_3 = \square \text{Cu}(\text{NO}_3)_2 + \square \text{NO} + \square \text{H}_2\text{O}$

Határozza meg az alábbi ionreakciókban szereplő ionok és molekulák sztöchiometriai együtthatóit!

- 121) $\square \text{Cu}^{2+} + \square \text{I}^- = \square \text{CuI} + \square \text{I}_2$
- 122) $\square \text{IO}_3^- + \square \text{H}_2\text{S} = \square \text{I}^- + \square \text{S} + \square \text{H}_2\text{O}$
- 123) $\square \text{AsO}_3^{3-} + \square \text{Sn}^{2+} + \square \text{Cl}^- + \square \text{H}^+ = \square \text{As} + \square \text{SnCl}_6^{2-} + \square \text{H}_2\text{O}$
- 124) $\square \text{CrO}_4^{2-} + \square \text{SO}_3^{2-} + \square \text{H}^+ = \square \text{Cr}^{3+} + \square \text{SO}_4^{2-} + \square \text{H}_2\text{O}$
- 125) $\square \text{Mn}^{2+} + \square \text{MnO}_4^- + \square \text{OH}^- = \square \text{MnO}_2 + \square \text{H}_2\text{O}$

- 126) $\square \text{Zn} + \square \text{NO}_3^- + \square \text{OH}^- = \square \text{NO}_2^- + \square [\text{Zn}(\text{OH})_4]^{2-}$
- 127) $\square \text{MnO}_4^- + \square \text{H}_2\text{O}_2 + \square \text{H}^+ = \square \text{Mn}^{2+} + \square \text{O}_2 + \square \text{H}_2\text{O}$
- 128) $\square \text{MnO}_4^- + \square \text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4 + \square \text{H}^+ = \square \text{Mn}^{2+} + \square \text{CO}_2 + \square \text{H}_2\text{O}$
- 129) $\square \text{N}_2\text{H}_5^+ + \square \text{Cr}_2\text{O}_7^{2-} + \square \text{H}^+ = \square \text{Cr}^{3+} + \square \text{N}_2 + \square \text{H}_2\text{O}$
- 130) $\square \text{ClO}_3^- + \square \text{Fe}^{2+} + \square \text{H}^+ = \square \text{Cl}^- + \square \text{Fe}^{3+} + \square \text{H}_2\text{O}$
- 131) $\square \text{Fe}^{2+} + \square \text{H}_2\text{O}_2 = \square \text{Fe}^{3+} + \square \text{O}_2 + \square \text{H}_2\text{O}$
- 132) $\square \text{Co} + \square \text{NO}_3^- + \square \text{H}^+ = \square \text{Co}^{2+} + \square \text{NO} + \square \text{H}_2\text{O}$
- 133) $\square \text{Fe} + \square \text{NO}_3^- + \square \text{H}^+ = \square \text{Fe}^{2+} + \square \text{NH}_4^+ + \square \text{H}_2\text{O}$
- 134) $\square \text{MnO}_4^- + \square \text{OH}^- = \square \text{MnO}_4^{2-} + \square \text{O}_2 + \square \text{H}_2\text{O}$
- 135) $\square \text{CrO}_4^{2-} + \square \text{I}^- + \square \text{H}^+ = \square \text{Cr}^{3+} + \square \text{I}_2 + \square \text{H}_2\text{O}$
- 136) $\square \text{MnO}_4^- + \square \text{H}_2\text{S} + \square \text{H}^+ = \square \text{S} + \square \text{Mn}^{2+} + \square \text{H}_2\text{O}$
- 137) $\square [\text{Cr}(\text{OH})_4]^- + \square \text{H}_2\text{O}_2 + \square \text{OH}^- = \square \text{CrO}_4^{2-} + \square \text{H}_2\text{O}$
- 138) $\square \text{Cr} + \square \text{H}^+ + \square \text{SO}_4^{2-} = \square \text{Cr}^{3+} + \square \text{SO}_2 + \square \text{H}_2\text{O}$
- 139) $\square \text{VO}_3^- + \square \text{H}^+ + \square \text{Fe}^{2+} = \square \text{VO}^{2+} + \square \text{Fe}^{3+} + \square \text{H}_2\text{O}$
- 140) $\square \text{Hg}^{2+} + \square \text{Sn}^{2+} + \square \text{Cl}^- = \square \text{Hg}_2\text{Cl}_2 + \square \text{Sn}^{4+}$
- 141) $\square \text{VO}_3^- + \square \text{H}_2\text{S} + \square \text{H}^+ = \square \text{VO}^{2+} + \square \text{S} + \square \text{H}_2\text{O}$
- 142) $\square \text{Hg}_2\text{I}_2 + \square \text{I}^- = \square [\text{HgI}_4]^{2-} + \square \text{Hg}$
- 143) $\square \text{Zn} + \square \text{H}^+ + \square \text{NO}_3^- = \square \text{Zn}^{2+} + \square \text{N}_2\text{O} + \square \text{H}_2\text{O}$
- 144) $\square \text{Sn} + \square \text{H}^+ + \square \text{NO}_3^- = \square \text{Sn}^{2+} + \square \text{NH}_4^+ + \square \text{H}_2\text{O}$
- 145) $\square [\text{Pb}(\text{OH})_4]^{2-} + \square \text{H}_2\text{O}_2 = \square \text{PbO}_2 + \square \text{H}_2\text{O} + \square \text{OH}^-$
- 146) $\square \text{Sn}^{2+} + \square \text{OH}^- + \square \text{Bi}^{3+} = \square \text{Bi} + \square [\text{Sn}(\text{OH})_6]^{2-}$
- 147) $\square \text{As} + \square \text{OCl}^- + \square \text{H}_2\text{O} = \square \text{AsO}_4^{3-} + \square \text{Cl}^- + \square \text{H}^+$
- 148) $\square \text{Sn}^{2+} + \square \text{HgCl}_2 = \square \text{Hg}_2\text{Cl}_2 + \square \text{Sn}^{4+} + 2 \square \text{Cl}^-$
- 149) $\square \text{NH}_3 + \square \text{Mn}^{2+} + \square \text{H}_2\text{O}_2 + \square \text{H}_2\text{O} = \square \text{NH}_4^+ + \square \text{MnO}(\text{OH})_2$
- 150) $\square \text{NO}_2^- + \square \text{I}^- + \square \text{H}^+ = \square \text{I}_2 + \square \text{NO} + \square \text{H}_2\text{O}$

Egészítse ki az alábbi egyenleteket! A megfelelő oldalra, ahol szükséges, írja fel a hiányzó hidrogéniont és vizet, határozza meg az együtthatókat!

- 151) $\square \text{NO}_2^- + \square \text{MnO}_4^- + \square \text{H}^+ = \square \text{NO}_3^- + \square \text{Mn}^{2+}$
- 152) $\square \text{S} + \square \text{HCl} + \square \text{HNO}_3 = \square \text{H}_2\text{SO}_4 + \square \text{HCl}$
- 153) $\square \text{Cu} + \square \text{NH}_3 + \square \text{O}_2 = \square [\text{Cu}(\text{NH}_3)_2]^+$
- 154) $\square \text{ClO}_3^- + \square \text{H}_2\text{SO}_3 = \square \text{Cl}^- + \square \text{SO}_4^{2-}$
- 155) $\square \text{Si} + \square \text{HF} + \square \text{HNO}_3 = \square \text{H}_2\text{SiF}_6 + \square \text{NO}$
- 156) $\square \text{HgS} + \square \text{HCl} + \square \text{HNO}_3 = \square \text{HgCl}_2 + \square \text{S} + \square \text{NO}$
- 157) $\square \text{PbO}_2 + \square \text{HCl} = \square \text{PbCl}_2 + \square \text{Cl}_2$
- 158) $\square \text{Ti} + \square \text{H}_2\text{SO}_4 = \square \text{Ti}^{4+} + \square \text{SO}_4^{2-} + \square \text{SO}_2$
- 159) $\square \text{Br}^- + \square \text{MnO}_2 + \square \text{H}_2\text{SO}_4 = \square \text{Br}_2 + \square \text{Mn}^{2+} + \square \text{SO}_4^{2-}$

- 160) $\square \text{S} + \square \text{HNO}_3 = \square \text{H}_2\text{SO}_4 + \square \text{NO}_2$
- 161) $\square \text{Hg}_2\text{Cl}_2 + \square \text{HNO}_3 + \square \text{HCl} = \square \text{HgCl}_2 + \square \text{NO}$
- 162) $\square \text{V} + \square \text{H}_2\text{SO}_4 = \square (\text{VO})\text{SO}_4 + \square \text{SO}_2$
- 163) $\square \text{CuS} + \square \text{HNO}_3 = \square \text{Cu}(\text{NO}_3)_2 + \square \text{S} + \square \text{NO}_2$
- 164) $\square \text{Hg} + \square \text{HNO}_3 = \square \text{Hg}_2(\text{NO}_3)_2 + \square \text{NO}$
- 165) $\square \text{Br}^- + \square \text{Cr}_2\text{O}_7^{2-} + \square \text{H}_2\text{SO}_4 = \square \text{Br}_2 + \square \text{Cr}^{3+} + \square \text{SO}_4^{2-}$
- 166) $\square \text{Sb} + \square \text{H}_2\text{SO}_4 = \square \text{Sb}_2(\text{SO}_4)_3 + \square \text{SO}_2$
- 167) $\square \text{I}^- + \square \text{NO}_2^- + \square \text{H}^+ = \square \text{I}_2 + \square \text{NO}$
- 168) $\square \text{V} + \square \text{HNO}_3 + \square \text{HCl} = \square \text{VO}^{2+} + \square \text{Cl}^- + \square \text{NO}$
- 169) $\square \text{B} + \square \text{NaOH} + \square \text{H}_2\text{O} = \square \text{Na}^+ + \square [\text{B}(\text{OH})_4]^- + \square \text{H}_2$
- 170) $\square \text{SO}_3^{2-} + \square \text{Cl}_2 + \square \text{H}_2\text{O} = \square \text{SO}_4^{2-} + \square \text{Cl}^-$
- 171) $\square \text{Ag}_2\text{S} + \square \text{HNO}_3 = \square \text{AgNO}_3 + \square \text{S} + \square \text{NO}_2$
- 172) $\square \text{Zn} + \square \text{H}_2\text{SO}_4 = \square \text{ZnSO}_4 + \square \text{SO}_2$
- 173) $\square \text{N}_2\text{O}_4 + \square \text{Br}^- + \square \text{OH}^- = \square \text{NO}_2^- + \square \text{BrO}_3^-$
- 174) $\square \text{NH}_3 + \square \text{Cl}_2 = \square \text{N}_2 + \square \text{NH}_4\text{Cl}$
- 175) $\square \text{B} + \square \text{HNO}_3 = \square \text{H}_3\text{BO}_3 + \square \text{NO}_2$
- 176) $\square \text{Br}^- + \square \text{HNO}_3 = \square \text{Br}_2 + \square \text{NO} + \square \text{NO}_3^-$
- 177) $\square \text{Au} + \square \text{HCl} + \square \text{HNO}_3 = \square \text{H}[\text{AuCl}_4] + \square \text{NO}$
- 178) $\square \text{NO}_2^- + \square \text{H}_2\text{S} + \square \text{H}^+ = \square \text{S} + \square \text{NH}_4^+$
- 179) $\square \text{Al} + \square \text{HNO}_3 = \square \text{Al}(\text{NO}_3)_3 + \square \text{NO}$
- 180) $\square \text{AsO}_3^{3-} + \square \text{I}_2 + \square \text{H}_2\text{O} = \square \text{AsO}_4^{3-} + \square 3 \text{I}^-$
- 181) $\square \text{NO}_3^- + \square \text{H}_2\text{SO}_4 + \square \text{Fe}^{2+} \rightarrow \square \text{Fe}^{3+} + \square \text{NO} + \square \text{SO}_4^{2-}$
- 182) $\square \text{AsO}_4^{3-} + \square \text{H}^+ + \square \text{Sn}^{2+} = \square \text{As} + \square \text{Sn}^{4+}$
- 183) $\square \text{SO}_3^{2-} + \square \text{NO}_2^- + \square \text{H}^+ = \square \text{SO}_4^{2-} + \square \text{NO}$
- 184) $\square \text{H}_2\text{O}_2 + \square \text{H}^+ + \square \text{I}^- = \square \text{I}_2$
- 185) $\square \text{ClO}_3^- + \square \text{H}_2\text{SO}_3 = \square \text{Cl}^- + \square \text{SO}_4^{2-} + \square \text{H}^+$
- 186) $\square \text{Al} + \square \text{NO}_3^- + \square \text{OH}^- = \square \text{NH}_3 + \square [\text{Al}(\text{OH})_4]^-$
- 187) $\square \text{AsO}_4^{3-} + \square \text{H}_2\text{S} = \square \text{AsO}_3^{3-} + \square \text{S}$
- 188) $\square \text{H}_2\text{S} + \square \text{I}_2 = \square \text{HI} + \square \text{S}$
- 189) $\square \text{SO}_3^{2-} + \square \text{Cr}_2\text{O}_7^{2-} + \square \text{H}^+ = \square \text{Cr}^{3+} + \square \text{SO}_4^{2-}$
- 190) $\square \text{I}_2 + \square \text{Cl}_2 + \square \text{H}_2\text{O} = \square \text{IO}_3^- + \square \text{Cl}^-$
- 191) $\square \text{SO}_3^{2-} + \square \text{Zn} + \square \text{H}^+ = \square \text{H}_2\text{S} + \square \text{Zn}^{2+}$
- 192) $\square \text{Ag}_2\text{S}_2\text{O}_3 = \square \text{Ag}_2\text{S} + \square \text{H}_2\text{SO}_4$
- 193) $\square \text{F}_2 + \square \text{H}_2\text{O} = \square \text{H}_2\text{F}_2 + \square \text{O}_2$
- 194) $\square \text{HBrO}_3 + \square \text{HI} = \square \text{I}_2 + \square \text{HBr}$

- 195) $\square \text{Br}^- + \square \text{H}_2\text{SO}_4 = \square \text{Br}_2 + \square \text{SO}_2 + \square \text{SO}_4^{2-}$
- 196) $\square \text{Br}^- + \square \text{Cl}_2 = \square \text{BrCl} + \square \text{Cl}^-$
- 197) $\square \text{KI} + \square \text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7 + \square \text{H}_2\text{SO}_4 = \square \text{I}_2 + \square \text{K}_2\text{SO}_4 + \square \text{Cr}_2(\text{SO}_4)_3$
- 198) $\square \text{ClO}_3^- + \square \text{NO}_2^- = \square \text{Cl}^- + \square \text{NO}_3^-$
- 199) $\square \text{NaCl} + \square \text{H}_2\text{SO}_4 + \square \text{MnO}_2 = \square \text{Cl}_2 + \square \text{MnSO}_4 + \square \text{NaHSO}_4$
- 200) $\square \text{Al} + \square \text{OH}^- = \square [\text{Al}(\text{OH})_4]^- + \square \text{H}_2$
- 201) $\square \text{B} + \square \text{HNO}_3 + \square \text{H}_2\text{F}_2 = \square \text{H}[\text{BF}_4] + \square \text{NO}$
- 202) $\square \text{SnO}_2 + \square \text{S} + \square \text{Na}_2\text{CO}_3 = \square \text{Na}_2\text{SnS}_3 + \square \text{CO}_2 + \square \text{SO}_2$
- 203) $\square \text{K}_2\text{S}_2\text{O}_8 + \square \text{Cr}_2(\text{SO}_4)_3 = \square \text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7 + \square \text{K}_2\text{SO}_4 + \square \text{H}_2\text{SO}_4$
- 204) $\square \text{NaI} + \square \text{Na}_2\text{TeO}_3 + \square \text{HCl} = \square \text{NaCl} + \square \text{Te} + \square \text{I}_2$
- 205) $\square \text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2 + \square \text{C} + \square \text{SiO}_2 = \square \text{CaSiO}_3 + \square \text{P}_4 + \square \text{CO}$
- 206) $\square \text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7 + \square \text{HCl} = \square \text{KCl} + \square \text{CrCl}_3 + \square \text{Cl}_2$
- 207) $\square \text{CdS} + \square \text{I}_2 + \square \text{HCl} = \square \text{CdCl}_2 + \square \text{HI} + \square \text{S}$
- 208) $\square \text{KBrO}_3 + \square \text{Na}_2\text{HAsO}_3 + \square \text{HCl} = \square \text{KBr} + \square \text{H}_3\text{AsO}_4 + \square \text{NaCl}$
- 209) $\square (\text{NH}_4)_2\text{S}_2\text{O}_8 + \square \text{MnSO}_4 + \square \text{H}_2\text{O} = \square \text{MnO}_2 + \square \text{H}_2\text{SO}_4 + \square (\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$
- 210) $\square \text{FeCl}_2 + \square \text{V}(\text{OH})_4\text{Cl} + \square \text{HCl} = \square \text{VOCl}_2 + \square \text{FeCl}_3$
- 211) $\square \text{Sn} + \square \text{HNO}_3 = \square \text{Sn}(\text{NO}_3)_2 + \square \text{NH}_4\text{NO}_3$
- 212) $\square \text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6 + \square \text{KMnO}_4 + \square \text{H}_2\text{SO}_4 = \square \text{CO}_2 + \square \text{K}_2\text{SO}_4 + \square \text{MnSO}_4$
- 213) $\square \text{PbO}_2 + \square \text{MnO} + \square \text{HNO}_3 = \square \text{Pb}(\text{NO}_3)_2 + \square \text{HMnO}_4$
- 214) $\square \text{H}_2\text{O}_2 + \square \text{FeCl}_2 + \square \text{HCl} = \square \text{FeCl}_3$
- 215) $\square \text{KCl} + \square \text{KMnO}_4 + \square \text{H}_2\text{SO}_4 = \square \text{Cl}_2 + \square \text{MnSO}_4 + \square \text{K}_2\text{SO}_4$
- 216) $\square \text{FeSO}_4 + \square \text{KClO}_3 + \square \text{H}_2\text{SO}_4 = \square \text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3 + \square \text{KCl}$
- 217) $\square \text{KClO}_3 + \square \text{H}_2\text{SO}_4 = \square \text{KHSO}_4 + \square \text{ClO}_2 + \square \text{O}_2$
- 218) $\square \text{KNO}_2 + \square \text{CoCl}_2 + \square \text{HCl} = \square \text{K}_3[\text{Co}(\text{NO}_2)_6] + \square \text{NO} + \square \text{KCl}$
- 219) $\square \text{Na}_2\text{C}_2\text{O}_4 + \square \text{KMnO}_4 + \square \text{H}_2\text{SO}_4 = \square \text{CO}_2 + \square \text{MnSO}_4 + \square \text{K}_2\text{SO}_4 + \square \text{Na}_2\text{SO}_4$
- 220) $\square \text{SO}_2 + \square \text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3 + \square \text{H}_2\text{O} = \square \text{FeSO}_4 + \square \text{H}_2\text{SO}_4$
- 221) $\square \text{MnSO}_4 + \square \text{KNO}_3 + \square \text{NaOH} = \square \text{Na}_2\text{MnO}_4 + \square \text{Na}_2\text{SO}_4 + \square \text{KNO}_2$
- 222) $\square \text{H}_2\text{S} + \square \text{HNO}_3 = \square \text{H}_2\text{SO}_4 + \square \text{NO}_2$
- 223) $\square \text{SO}_2 + \square \text{I}_2 = \square \text{HI} + \square \text{H}_2\text{SO}_4$
- 224) $\square \text{HgCl}_2 + \square \text{SiH}_4 + \square \text{H}_2\text{O} = \square \text{Hg}_2\text{Cl}_2 + \square \text{SiO}_2 + \square \text{HCl}$
- 225) $\square \text{Zn} + \square \text{KMnO}_4 + \square \text{H}_2\text{SO}_4 = \square \text{ZnSO}_4 + \square \text{MnSO}_4 + \square \text{K}_2\text{SO}_4$
- 226) $\square \text{MnO}_2 + \square \text{HCl} = \square \text{MnCl}_2 + \square \text{Cl}_2$
- 227) $\square \text{NO}_3^- + \square \text{Zn} + \square \text{OH}^- + \square \text{H}_2\text{O} = \square \text{NH}_3 + \square [\text{Zn}(\text{OH})_4]^{2-}$
- 228) $\square \text{Na}_2\text{SO}_4 + \square \text{C} + \square \text{CaCO}_3 = \square \text{CaS} + \square \text{CO} + \square \text{Na}_2\text{CO}_3$
- 229) $\square \text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 + \square \text{Cl}_2 = \square \text{NaHSO}_4 + \square \text{HCl}$

- 230) $\square \text{H}_3\text{PO}_3 + \square \text{HNO}_3 = \square \text{NO} + \square \text{H}_3\text{PO}_4$
- 231) $\square \text{PbCrO}_4 + \square \text{FeSO}_4 + \square \text{HCl} = \square \text{PbCl}_2 + \square \text{Cr}_2(\text{SO}_4)_3 + \square \text{FeCl}_3 + \square \text{H}_2\text{O} + \square \text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$
- 232) $\square \text{Ag} + \square \text{H}_2\text{S} + \square \text{O}_2 = \square \text{Ag}_2\text{S}$
- 233) $\square \text{Au} + \square \text{NaCN} + \square \text{O}_2 + \square \text{H}_2\text{O} = \square \text{Na}[\text{Au}(\text{CN})_2] + \square \text{NaOH}$
- 234) $\square \text{CuCl} + \square \text{O}_2 + \square \text{H}_2\text{O} = \square \text{CuCl}_2 + \square \text{Cu}(\text{OH})_2$
- 235) $\square \text{PbCrO}_4 + \square \text{HI} = \square \text{PbI}_2 + \square \text{CrI}_3 + \square \text{I}_2$
- 236) $\square \text{NH}_2\text{Cl} + \square \text{NH}_3 + \square \text{NaOH} = \square \text{N}_2\text{H}_4 + \square \text{NaCl}$

Egészítse ki az alábbi egyenleteket! A megfelelő oldalra, ahol szükséges, írja fel a hiányzó hidrogéniont és vizet, határozza meg az együtthatókat!

- 237) $\square \text{NO}_2 + \square \text{H}_2\text{O} = \square \text{HNO}_3 + \square \text{HNO}_2$
- 238) $\square \text{P}_4 + \square \text{NaOH} = \square \text{PH}_3 + \square \text{NaH}_2\text{PO}_2$
- 239) $\square \text{ICl}_3 + \square \text{H}_2\text{O} = \square \text{HIO}_3 + \square \text{HOI} + \square \text{HCl}$
- 240) $\square \text{I}_2 + \square \text{OH}^- = \square \text{I}^- + \square \text{IO}^-$
- 241) $\square \text{P}_2\text{H}_4 = \square \text{PH}_3 + \square \text{P}_4\text{H}_2$
- 242) $\square \text{S} + \square \text{NaOH} = \square \text{Na}_2\text{S} + \square \text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$
- 243) $\square \text{Cl}_2 + \square \text{H}_2\text{O} = \square \text{HCl} + \square \text{HOCl}$
- 244) $\square \text{ClO}^- = \square \text{Cl}^- + \square \text{ClO}_3^-$
- 245) $\square \text{Br}_2 + \square \text{OH}^- = \square \text{Br}^- + \square \text{BrO}_3^-$
- 246) $\square \text{KClO}_3 + \square \text{H}_2\text{SO}_4 = \square \text{ClO}_2 + \square \text{KClO}_4 + \square \text{K}_2\text{SO}_4$
- 247) $\square \text{H}_2\text{S} + \square \text{SO}_2 = \square \text{S} + \square \text{H}_2\text{O}$
- 248) $\square \text{HIO}_3 + \square \text{HI} = \square \text{I}_2$
- 249) $\square \text{KClO}_3 = \square \text{KCl} + \square \text{KClO}_4$
- 250) $\square \text{HNO}_2 = \square \text{HNO}_3 + \square \text{NO}$

Egészítse ki az alábbi egyenleteket! A megfelelő oldalra, ahol szükséges, írja fel a hiányzó hidrogéniont és vizet, határozza meg az együtthatókat!

- 251) $\square \text{As}_2\text{S}_3 + \square \text{NH}_4\text{OH} + \square \text{H}_2\text{O}_2 = \square (\text{NH}_4)_3\text{AsO}_4 + \square (\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$
- 252) $\square \text{FeS}_2 + \square \text{O}_2 = \square \text{Fe}_2\text{O}_3 + \square \text{SO}_2$
- 253) $\square \text{As}_2\text{S}_3 + \square \text{HNO}_3 = \square \text{H}_3\text{AsO}_4 + \square \text{H}_2\text{SO}_4 + \square \text{NO}_2$
- 254) $\square \text{CrI}_3 + \square \text{KOH} + \square \text{Cl}_2 = \square \text{K}_2\text{CrO}_4 + \square \text{KIO}_4 + \square \text{KCl}$
- 255) $\square \text{FeCl}_2 + \square \text{KMnO}_4 + \square \text{H}_2\text{SO}_4 = \square \text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3 + \square \text{K}_2\text{SO}_4 + \square \text{MnSO}_4 + \square \text{Cl}_2$
- 256) $\square \text{FeO} \cdot \text{Cr}_2\text{O}_3 + \square \text{O}_2 + \square \text{Na}_2\text{CO}_3 = \square \text{Fe}_2\text{O}_3 + \square \text{Na}_2\text{CrO}_4 + \square \text{CO}_2$
- 257) $\square \text{CuCrO}_4 + \square \text{KI} + \square \text{H}_2\text{SO}_4 = \square \text{CuI} + \square \text{I}_2 + \square \text{Cr}_2(\text{SO}_4)_3 + \square \text{K}_2\text{SO}_4$
- 258) $\square \text{Cu}_2\text{S} + \square \text{HNO}_3 = \square \text{Cu}(\text{NO}_3)_2 + \square \text{NO} + \square \text{S}$
- 259) $\square \text{Ce}(\text{IO}_3)_4 + \square \text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4 = \square \text{Ce}_2(\text{C}_2\text{O}_4)_3 + \square \text{I}_2 + \square \text{CO}_2 + \square \text{H}_2\text{O}$
- 260) $\square \text{Zn} + \square \text{Ag}_3\text{AsO}_4 + \square \text{H}_2\text{SO}_4 = \square \text{Ag} + \square \text{AsH}_3 + \square \text{ZnSO}_4 + \square \text{H}_2\text{O}$

Rendezze a következő égési egyenleteket!

- 261) $\square \text{C}_2\text{H}_6 + \square \text{O}_2 = \square \text{CO}_2 + \square \text{H}_2\text{O}$
 262) $\square \text{C}_{20}\text{H}_{22} + \square \text{O}_2 = \square \text{CO}_2 + \square \text{H}_2\text{O}$
 263) $\square \text{C}_6\text{H}_6 + \square \text{O}_2 = \square \text{CO}_2 + \square \text{H}_2\text{O}$
 264) $\square \text{C}_7\text{H}_8 + \square \text{O}_2 = \square \text{CO}_2 + \square \text{H}_2\text{O}$
 265) $\square \text{C}_4\text{H}_6\text{O}_2 + \square \text{O}_2 = \square \text{CO}_2 + \square \text{H}_2\text{O}$
 266) $\square \text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{C}_6\text{H}_5 + \square \text{O}_2 = \square \text{CO}_2 + \square \text{H}_2\text{O}$
 267) $\square \text{NH}(\text{C}_2\text{H}_5)_2 + \square \text{O}_2 = \square \text{N}_2 + \square \text{CO}_2 + \square \text{H}_2\text{O}$
 268) $\square \text{CH}_3\text{COOH} + \square \text{O}_2 = \square \text{CO}_2 + \square \text{H}_2\text{O}$
 269) $\square \text{CH}_3\text{COOCH}_3 + \square \text{O}_2 = \square \text{CO}_2 + \square \text{H}_2\text{O}$
 270) $\square \text{C}_2\text{H}_5\text{OCH}_3 + \square \text{O}_2 = \square \text{CO}_2 + \square \text{H}_2\text{O}$
 271) $\square \text{C}_6\text{H}_{13}\text{OH} + \square \text{O}_2 = \square \text{CO}_2 + \square \text{H}_2\text{O}$
 272) $\square \text{CH}_3\text{COCH}_3 + \square \text{O}_2 = \square \text{CO}_2 + \square \text{H}_2\text{O}$
 273) $\square \text{C}_{10}\text{H}_8 + \square \text{O}_2 = \square \text{CO}_2 + \square \text{H}_2\text{O}$
 274) $\square \text{C}_2\text{H}_5\text{SH} + \square \text{O}_2 = \square \text{CO}_2 + \square \text{SO}_2 + \square \text{H}_2\text{O}$
 275) $\square \text{C}_4\text{H}_4\text{O} + \square \text{O}_2 = \square \text{CO}_2 + \square \text{H}_2\text{O}$

Megoldások:

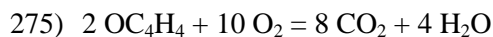
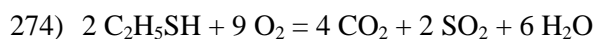
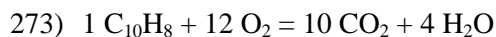
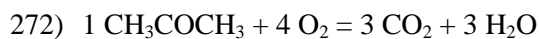
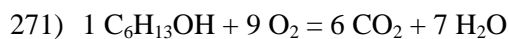
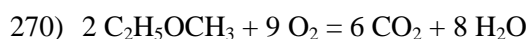
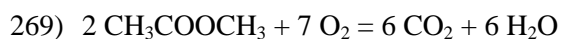
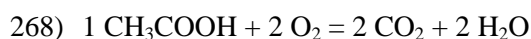
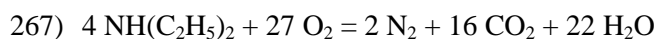
- 101) $2 \text{KI} + 2 \text{FeCl}_3 = \text{I}_2 + 2 \text{FeCl}_2 + 2 \text{KCl}$
 102) $\text{I}_2 + 2 \text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 = 2 \text{NaI} + \text{Na}_2\text{S}_4\text{O}_6$
 103) $3 \text{H}_2\text{S} + \text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7 + 4 \text{H}_2\text{SO}_4 = \text{Cr}_2(\text{SO}_4)_3 + \text{K}_2\text{SO}_4 + 3 \text{S} + 7 \text{H}_2\text{O}$
 104) $\text{SnCl}_2 + 2 \text{FeCl}_3 = \text{SnCl}_4 + 2 \text{FeCl}_2$
 105) $2 \text{P} + 5 \text{H}_2\text{SO}_4 = 2 \text{H}_3\text{PO}_4 + 5 \text{SO}_2 + 2 \text{H}_2\text{O}$
 106) $6 \text{FeSO}_4 + 3 \text{H}_2\text{SO}_4 + 2 \text{HNO}_3 = 3 \text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3 + 4 \text{H}_2\text{O} + 2 \text{NO}$
 107) $10 \text{NaHSO}_3 + 4 \text{NaIO}_3 + 3 \text{Na}_2\text{CO}_3 = 2 \text{I}_2 + 10 \text{Na}_2\text{SO}_4 + 5 \text{H}_2\text{O} + 3 \text{CO}_2$
 108) $2 \text{KMnO}_4 + 10 \text{HI} + 3 \text{H}_2\text{SO}_4 = \text{K}_2\text{SO}_4 + 2 \text{MnSO}_4 + 8 \text{H}_2\text{O} + 5 \text{I}_2$
 109) $\text{Cr}_2\text{O}_3 + 3 \text{NaNO}_3 + 2 \text{Na}_2\text{CO}_3 = 2 \text{Na}_2\text{CrO}_4 + 3 \text{NaNO}_2 + 2 \text{CO}_2$
 110) $3 \text{P} + 5 \text{HNO}_3 + 2 \text{H}_2\text{O} = 3 \text{H}_3\text{PO}_4 + 5 \text{NO}$
 111) $4 \text{NaH} + \text{TiCl}_4 = \text{Ti} + 4 \text{NaCl} + 2 \text{H}_2$
 112) $2 \text{KMnO}_4 + 10 \text{FeSO}_4 + 8 \text{H}_2\text{SO}_4 = \text{K}_2\text{SO}_4 + 2 \text{MnSO}_4 + 5 \text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3 + 8 \text{H}_2\text{O}$
 113) $\text{KClO}_3 + 3 \text{Zn} + 6 \text{NaOH} + 3 \text{H}_2\text{O} = \text{KCl} + 3 \text{Na}_2[\text{Zn}(\text{OH})_4]$
 114) $\text{AsH}_3 + 8 \text{AgNO}_3 + 4 \text{H}_2\text{O} = 8 \text{Ag} + \text{H}_3\text{AsO}_4 + 8 \text{HNO}_3$
 115) $3 \text{H}_2\text{O}_2 + 2 \text{Na}_3\text{CrO}_3 = 2 \text{Na}_2\text{CrO}_4 + 2 \text{H}_2\text{O} + 2 \text{NaOH}$
 116) $2 \text{KMnO}_4 + 6 \text{HI} = 3 \text{I}_2 + 2 \text{MnO}_2 + 2 \text{KOH} + 2 \text{H}_2\text{O}$
 117) $2 \text{KMnO}_4 + 16 \text{HCl} = 5 \text{Cl}_2 + 2 \text{MnCl}_2 + 2 \text{KCl} + 8 \text{H}_2\text{O}$
 118) $\text{Cu} + 2 \text{H}_2\text{SO}_4 = \text{CuSO}_4 + \text{SO}_2 + 2 \text{H}_2\text{O}$

- 119) $\text{Cu} + 4 \text{HNO}_3 = \text{Cu}(\text{NO}_3)_2 + 2 \text{NO}_2 + 2 \text{H}_2\text{O}$
- 120) $3 \text{Cu} + 8 \text{HNO}_3 = 3 \text{Cu}(\text{NO}_3)_2 + 2 \text{NO} + 4 \text{H}_2\text{O}$
- 121) $2 \text{Cu}^{2+} + 4 \text{I}^- = 2 \text{CuI} + \text{I}_2$
- 122) $\text{IO}_3^- + 3 \text{H}_2\text{S} = \text{I}^- + 3 \text{S} + 3 \text{H}_2\text{O}$
- 123) $2 \text{AsO}_3^{3-} + 3 \text{Sn}^{2+} + 18 \text{Cl}^- + 12 \text{H}^+ = 2 \text{As} + 3 \text{SnCl}_6^{2-} + 6 \text{H}_2\text{O}$
- 124) $2 \text{CrO}_4^{2-} + 3 \text{SO}_3^{2-} + 10 \text{H}^+ = 3 \text{Cr}^{3+} + 3 \text{SO}_4^{2-} + 5 \text{H}_2\text{O}$
- 125) $3 \text{Mn}^{2+} + 2 \text{MnO}_4^- + 4 \text{OH}^- = 5 \text{MnO}_2 + 2 \text{H}_2\text{O}$
- 126) $\text{Zn} + \text{NO}_3^- + 2 \text{OH}^- + \text{H}_2\text{O} = \text{NO}_2^- + [\text{Zn}(\text{OH})_4]^{2-}$
- 127) $2 \text{MnO}_4^- + 5 \text{H}_2\text{O}_2 + 6 \text{H}^+ = 2 \text{Mn}^{2+} + 5 \text{O}_2 + 8 \text{H}_2\text{O}$
- 128) $2 \text{MnO}_4^- + 5 \text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4 + 6 \text{H}^+ = 2 \text{Mn}^{2+} + 10 \text{CO}_2 + 8 \text{H}_2\text{O}$
- 129) $\text{N}_2\text{H}_5^+ + \text{Cr}_2\text{O}_7^{2-} + 13 \text{H}^+ = 4 \text{Cr}^{3+} + 3 \text{N}_2 + 14 \text{H}_2\text{O}$
- 130) $\text{ClO}_3^- + 6 \text{Fe}^{2+} + 6 \text{H}^+ = \text{Cl}^- + 6 \text{Fe}^{3+} + 3 \text{H}_2\text{O}$
- 131) $4 \text{Fe}^{2+} + 2 \text{H}_2\text{O}_2 = 4 \text{Fe}^{3+} + 2 \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$
- 132) $3 \text{Co} + 2 \text{HNO}_3 + 6 \text{H}^+ = 3 \text{Co}^{2+} + 2 \text{NO} + 4 \text{H}_2\text{O}$
- 133) $4 \text{Fe} + 10 \text{H}^+ + \text{NO}_3^- = 4 \text{Fe}^{2+} + \text{NH}_4^+ + 3 \text{H}_2\text{O}$
- 134) $4 \text{MnO}_4^- + 4 \text{OH}^- = 4 \text{MnO}_4^{2-} + \text{O}_2 + 2 \text{H}_2\text{O}$
- 135) $2 \text{CrO}_4^{2-} + 6 \text{I}^- + 16 \text{H}^+ = 2 \text{Cr}^{3+} + 3 \text{I}_2 + 8 \text{H}_2\text{O}$
- 136) $2 \text{MnO}_4^- + 5 \text{H}_2\text{S} + 6 \text{H}^+ = 5 \text{S} + 2 \text{Mn}^{2+} + 8 \text{H}_2\text{O}$
- 137) $2 [\text{Cr}(\text{OH})_4]^- + 3 \text{H}_2\text{O}_2 + 2 \text{OH}^- = 2 \text{CrO}_4^{2-} + 8 \text{H}_2\text{O}$
- 138) $2 \text{Cr} + 6 \text{H}_2\text{SO}_4 = 2 \text{Cr}^{3+} + 3 \text{SO}_4^{2-} + 3 \text{SO}_2 + 6 \text{H}_2\text{O}$
- 139) $\text{VO}_3^- + 4 \text{H}^+ + \text{Fe}^{2+} = \text{VO}^{2+} + \text{Fe}^{3+} + 2 \text{H}_2\text{O}$
- 140) $2 \text{Hg}^{2+} + \text{Sn}^{2+} + 2 \text{Cl}^- = \text{Hg}_2\text{Cl}_2 + \text{Sn}^{4+}$
- 141) $2 \text{VO}_3^- + \text{H}_2\text{S} + 6 \text{H}^+ = 2 \text{VO}^{2+} + \text{S} + 8 \text{H}_2\text{O}$
- 142) $\text{Hg}_2\text{I}_2 + 2 \text{I}^- = [\text{HgI}_4]^{2-} + \text{Hg}$
- 143) $4 \text{Zn} + 10 \text{H}^+ + 2 \text{NO}_3^- = 4 \text{Zn}^{2+} + \text{N}_2\text{O} + 5 \text{H}_2\text{O}$
- 144) $4 \text{Sn} + 10 \text{H}^+ + \text{NO}_3^- = 4 \text{Sn}^{2+} + \text{NH}_4^+ + 3 \text{H}_2\text{O}$
- 145) $[\text{Pb}(\text{OH})_4]^{2-} + \text{H}_2\text{O}_2 = \text{PbO}_2 + 2 \text{H}_2\text{O} + 2 \text{OH}^-$
- 146) $3 \text{Sn}^{2+} + 18 \text{OH}^- + 2 \text{Bi}^{3+} = 2 \text{Bi} + 3 [\text{Sn}(\text{OH})_6]^{2-}$
- 147) $2 \text{As} + 5 \text{OCl}^- + 3 \text{H}_2\text{O} = 2 \text{AsO}_4^{3-} + 5 \text{Cl}^- + 6 \text{H}^+$
- 148) $\text{Sn}^{2+} + 2 \text{HgCl}_2 = \text{Hg}_2\text{Cl}_2 + \text{Sn}^{4+} + 2 \text{Cl}^-$
- 149) $2 \text{NH}_3 + \text{Mn}^{2+} + \text{H}_2\text{O}_2 + \text{H}_2\text{O} = \text{MnO}(\text{OH})_2 + 2 \text{NH}_4^+$
- 150) $2 \text{NO}_2^- + 2 \text{I}^- + 4 \text{H}^+ = \text{I}_2 + 2 \text{NO} + 2 \text{H}_2\text{O}$
- 151) $5 \text{NO}_2^- + 2 \text{MnO}_4^- + 6 \text{H}^+ = 5 \text{NO}_3^- + 2 \text{Mn}^{2+} + 3 \text{H}_2\text{O}$
- 152) $\text{S} + 6 \text{HCl} + 2 \text{HNO}_3 = \text{H}_2\text{SO}_4 + 6 \text{HCl} + 2 \text{NO}$
- 153) $4 \text{Cu} + 8 \text{NH}_3 + 2 \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2 = 4 [\text{Cu}(\text{NH}_3)_2]^+ + 4 \text{OH}^-$
- 154) $\text{ClO}_3^- + 3 \text{H}_2\text{SO}_3 = \text{Cl}^- + 3 \text{SO}_4^{2-} + 6 \text{H}^+$
- 155) $3 \text{Si} + 18 \text{HF} + 4 \text{HNO}_3 = 3 \text{H}_2\text{SiF}_6 + 4 \text{NO} + 8 \text{H}_2\text{O}$

- 156) $3 \text{HgS} + 6 \text{HCl} + 2 \text{HNO}_3 = 3 \text{HgCl}_2 + 3 \text{S} + 2 \text{NO} + 4 \text{H}_2\text{O}$
- 157) $\text{PbO}_2 + 4 \text{HCl} = \text{PbCl}_2 + 2 \text{H}_2\text{O} + \text{Cl}_2$
- 158) $\text{Ti} + 4 \text{H}_2\text{SO}_4 = \text{Ti}^{4+} + 2 \text{SO}_4^{2-} + 2 \text{SO}_2 + 4 \text{H}_2\text{O}$
- 159) $2 \text{Br}^- + \text{MnO}_2 + 2 \text{H}_2\text{SO}_4 = \text{Br}_2 + \text{Mn}^{2+} + 2 \text{SO}_4^{2-} + 2 \text{H}_2\text{O}$
- 160) $\text{S} + 6 \text{HNO}_3 = 2 \text{H}^+ + \text{SO}_4^{2-} + 6 \text{NO}_2 + 2 \text{H}_2\text{O}$
- 161) $3 \text{Hg}_2\text{Cl}_2 + 2 \text{HNO}_3 + 6 \text{HCl} = 6 \text{HgCl}_2 + 2 \text{NO} + 4 \text{H}_2\text{O}$
- 162) $\text{V} + 3 \text{H}_2\text{SO}_4 = (\text{VO})\text{SO}_4 + 2 \text{SO}_2 + 3 \text{H}_2\text{O}$
- 163) $\text{CuS} + 4 \text{HNO}_3 = \text{Cu}^{2+} + 2 \text{NO}_3^- + \text{S} + 2 \text{NO}_2 + 2 \text{H}_2\text{O}$
- 164) $6 \text{Hg} + 8 \text{HNO}_3 = 3 \text{Hg}_2^{2+} + 2 \text{NO} + 6 \text{NO}_3^- + 4 \text{H}_2\text{O}$
- 165) $6 \text{Br}^- + \text{Cr}_2\text{O}_7^{2-} + 7 \text{H}_2\text{SO}_4 = 3 \text{Br}_2 + 2 \text{Cr}^{3+} + 7 \text{SO}_4^{2-} + 7 \text{H}_2\text{O}$
- 166) $2 \text{Sb} + 3 \text{H}_2\text{SO}_4 + 6 \text{H}^+ = 2 \text{Sb}^{3+} + 3 \text{SO}_2 + 6 \text{H}_2\text{O}$
- 167) $2 \text{I}^- + 2 \text{NO}_2^- + 4 \text{H}^+ = \text{I}_2 + 2 \text{NO} + 2 \text{H}_2\text{O}$
- 168) $3 \text{V} + 4 \text{HNO}_3 + 6 \text{HCl} = 3 \text{VO}^{2+} + 6 \text{Cl}^- + 4 \text{NO} + 5 \text{H}_2\text{O}$
- 169) $2 \text{B} + 2 \text{NaOH} + 6 \text{H}_2\text{O} = 2 \text{Na}^+ + 2 [\text{B}(\text{OH})_4]^- + 3 \text{H}_2$
- 170) $\text{SO}_3^{2-} + \text{Cl}_2 + \text{H}_2\text{O} = \text{SO}_4^{2-} + 2 \text{H}^+ + 2 \text{Cl}^-$
- 171) $\text{Ag}_2\text{S} + 4 \text{HNO}_3 = 2 \text{Ag}^+ + 2 \text{NO}_3^- + \text{S} + 2 \text{NO}_2 + 2 \text{H}_2\text{O}$
- 172) $\text{Zn} + 2 \text{H}_2\text{SO}_4 = \text{Zn}^{2+} + \text{SO}_4^{2-} + \text{SO}_2 + 2 \text{H}_2\text{O}$
- 173) $3 \text{N}_2\text{O}_4 + \text{Br}^- + 6 \text{OH}^- = 6 \text{NO}_2^- + \text{BrO}_3^- + 3 \text{H}_2\text{O}$
- 174) $8 \text{NH}_3 + 3 \text{Cl}_2 = \text{N}_2 + 6 \text{NH}_4\text{Cl}$
- 175) $\text{B} + 3 \text{HNO}_3 = \text{H}_3\text{BO}_3 + 3 \text{NO}_2$
- 176) $6 \text{Br}^- + 8 \text{HNO}_3 = 3 \text{Br}_2 + 2 \text{NO} + 6 \text{NO}_3^- + 4 \text{H}_2\text{O}$
- 177) $\text{Au} + 4 \text{HCl} + \text{HNO}_3 = \text{H}[\text{AuCl}_4] + \text{NO} + 2 \text{H}_2\text{O}$
- 178) $\text{NO}_2^- + 3 \text{H}_2\text{S} + 2 \text{H}^+ = 3 \text{S} + \text{NH}_4^+ + 2 \text{H}_2\text{O}$
- 179) $\text{Al} + 4 \text{HNO}_3 = \text{Al}^{3+} + 3 \text{NO}_3^- + \text{NO} + 2 \text{H}_2\text{O}$
- 180) $\text{AsO}_3^{3-} + \text{I}_2 + \text{H}_2\text{O} = \text{AsO}_4^{3-} + 2 \text{I}^- + 2 \text{H}^+$
- 181) $2 \text{NO}_3^- + 4 \text{H}_2\text{SO}_4 + 6 \text{Fe}^{2+} = 6 \text{Fe}^{3+} + 2 \text{NO} + 4 \text{SO}_4^{2-} + 4 \text{H}_2\text{O}$
- 182) $2 \text{AsO}_4^{3-} + 16 \text{H}^+ + 5 \text{Sn}^{2+} = 2 \text{As} + 5 \text{Sn}^{4+} + 8 \text{H}_2\text{O}$
- 183) $\text{SO}_3^{2-} + 2 \text{NO}_2^- + 2 \text{H}^+ = \text{SO}_4^{2-} + 2 \text{NO} + \text{H}_2\text{O}$
- 184) $\text{H}_2\text{O}_2 + 2 \text{H}^+ + 2 \text{I}^- = \text{I}_2 + 2 \text{H}_2\text{O}$
- 185) $\text{ClO}_3^- + 3 \text{H}_2\text{SO}_3 = \text{Cl}^- + 3 \text{SO}_4^{2-} + 6 \text{H}^+$
- 186) $8 \text{Al} + 3 \text{NO}_3^- + 5 \text{OH}^- + 18 \text{H}_2\text{O} = \text{NH}_3 + 8 [\text{Al}(\text{OH})_4]^-$
- 187) $\text{H}_2\text{O}_2 + 2 \text{H}^+ + 2 \text{I}^- = \text{I}_2 + 2 \text{H}_2\text{O}$
- 188) $\text{H}_2\text{S} + \text{I}_2 = 2 \text{HI} + \text{S}$
- 189) $3 \text{SO}_3^{2-} + \text{Cr}_2\text{O}_7^{2-} + 8 \text{H}^+ = 2 \text{Cr}^{3+} + 3 \text{SO}_4^{2-} + 4 \text{H}_2\text{O}$
- 190) $\text{I}_2 + 5 \text{Cl}_2 + 6 \text{H}_2\text{O} = 2 \text{IO}_3^- + 10 \text{Cl}^- + 12 \text{H}^+$
- 191) $\text{SO}_3^{2-} + 3 \text{Zn} + 8 \text{H}^+ = \text{H}_2\text{S} + 3 \text{Zn}^{2+} + 3 \text{H}_2\text{O}$
- 192) $\text{Ag}_2\text{S}_2\text{O}_3 + \text{H}_2\text{O} = \text{Ag}_2\text{S} + \text{H}_2\text{SO}_4$

- 193) $2 \text{F}_2 + 2 \text{H}_2\text{O} = 2 \text{H}_2\text{F}_2 + \text{O}_2$
- 194) $2 \text{HBrO}_3 + 10 \text{HI} = 5 \text{I}_2 + 2 \text{HBr} + 6 \text{H}_2\text{O}$
- 195) $2 \text{Br}^- + 2 \text{H}_2\text{SO}_4 = \text{Br}_2 + \text{SO}_2 + \text{SO}_4^{2-} + 2 \text{H}_2\text{O}$
- 196) $2 \text{Br}^- + 2 \text{Cl}_2 = 2 \text{BrCl} + 2 \text{Cl}^-$
- 197) $6 \text{KI} + 1 \text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7 + 7 \text{H}_2\text{SO}_4 = 3 \text{I}_2 + 4 \text{K}_2\text{SO}_4 + 1 \text{Cr}_2(\text{SO}_4)_3 + 14 \text{H}_2\text{O}$
- 198) $\text{ClO}_3^- + 3 \text{NO}_2^- = \text{Cl}^- + 3 \text{NO}_3^-$
- 199) $2 \text{NaCl} + 3 \text{H}_2\text{SO}_4 + \text{MnO}_2 = \text{Cl}_2 + \text{MnSO}_4 + 2 \text{NaHSO}_4 + 2 \text{H}_2\text{O}$
- 200) $2 \text{Al} + 2 \text{OH}^- + 6 \text{H}_2\text{O} = 2 [\text{Al}(\text{OH})_4]^- + 3 \text{H}_2$
- 201) $2 \text{B} + 2 \text{HNO}_3 + 4 \text{H}_2\text{F}_2 = 2 \text{H}[\text{BF}_4] + 2 \text{NO} + 4 \text{H}_2\text{O}$
- 202) $2 \text{SnO}_2 + 9 \text{S} + 2 \text{Na}_2\text{CO}_3 = 2 \text{Na}_2\text{SnS}_3 + 2 \text{CO}_2 + 3 \text{SO}_2$
- 203) $3 \text{K}_2\text{S}_2\text{O}_8 + \text{Cr}_2(\text{SO}_4)_3 + 7 \text{H}_2\text{O} = \text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7 + 2 \text{K}_2\text{SO}_4 + 7 \text{H}_2\text{SO}_4$
- 204) $4 \text{NaI} + \text{Na}_2\text{TeO}_3 + 6 \text{HCl} = 6 \text{NaCl} + \text{Te} + 3 \text{H}_2\text{O} + 2 \text{I}_2$
- 205) $2 \text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2 + 10 \text{C} + 6 \text{SiO}_2 = 6 \text{CaSiO}_3 + \text{P}_4 + 10 \text{CO}$
- 206) $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7 + 14 \text{HCl} = 2 \text{KCl} + 2 \text{CrCl}_3 + 7 \text{H}_2\text{O} + 3 \text{Cl}_2$
- 207) $\text{CdS} + \text{I}_2 + 2 \text{HCl} = \text{CdCl}_2 + 2 \text{HI} + \text{S}$
- 208) $3 \text{Na}_2\text{HAsO}_3 + \text{KBrO}_3 + 6 \text{HCl} = \text{KBr} + 3 \text{H}_3\text{AsO}_4 + 6 \text{NaCl}$
- 209) $(\text{NH}_4)_2\text{S}_2\text{O}_8 + \text{MnSO}_4 + 2 \text{H}_2\text{O} = \text{MnO}_2 + 2 \text{H}_2\text{SO}_4 + (\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$
- 210) $\text{FeCl}_2 + \text{V}(\text{OH})_4\text{Cl} + 2 \text{HCl} = \text{VOCl}_2 + \text{FeCl}_3 + 3 \text{H}_2\text{O}$
- 211) $4 \text{Sn} + 10 \text{HNO}_3 = 4 \text{Sn}(\text{NO}_3)_2 + \text{NH}_4\text{NO}_3 + 3 \text{H}_2\text{O}$
- 212) $5 \text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6 + 24 \text{KMnO}_4 + 36 \text{H}_2\text{SO}_4 = 30 \text{CO}_2 + 12 \text{K}_2\text{SO}_4 + 24 \text{MnSO}_4 + 66 \text{H}_2\text{O}$
- 213) $5 \text{PbO}_2 + 2 \text{MnO} + 10 \text{HNO}_3 = 5 \text{Pb}(\text{NO}_3)_2 + 2 \text{HMnO}_4 + 4 \text{H}_2\text{O}$
- 214) $\text{H}_2\text{O}_2 + 2 \text{FeCl}_2 + 2 \text{HCl} = 2 \text{FeCl}_3 + 2 \text{H}_2\text{O}$
- 215) $10 \text{KCl} + 2 \text{KMnO}_4 + 8 \text{H}_2\text{SO}_4 = 5 \text{Cl}_2 + 2 \text{MnSO}_4 + 6 \text{K}_2\text{SO}_4 + 8 \text{H}_2\text{O}$
- 216) $6 \text{FeSO}_4 + \text{KClO}_3 + 3 \text{H}_2\text{SO}_4 = 3 \text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3 + \text{KCl} + 3 \text{H}_2\text{O}$
- 217) $4 \text{KClO}_3 + 4 \text{H}_2\text{SO}_4 = 4 \text{KHSO}_4 + 4 \text{ClO}_2 + 1 \text{O}_2 + 2 \text{H}_2\text{O}$
- 218) $7 \text{KNO}_2 + \text{CoCl}_2 + 2 \text{HCl} = \text{K}_3[\text{Co}(\text{NO}_2)_6] + \text{NO} + 4 \text{KCl} + \text{H}_2\text{O}$
- 219) $5 \text{Na}_2\text{C}_2\text{O}_4 + 2 \text{KMnO}_4 + 8 \text{H}_2\text{SO}_4 = 10 \text{CO}_2 + 2 \text{MnSO}_4 + \text{K}_2\text{SO}_4 + 5 \text{Na}_2\text{SO}_4 + 8 \text{H}_2\text{O}$
- 220) $\text{SO}_2 + \text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3 + 2 \text{H}_2\text{O} = 2 \text{FeSO}_4 + 2 \text{H}_2\text{SO}_4$
- 221) $\text{MnSO}_4 + 2 \text{KNO}_3 + 4 \text{NaOH} = \text{Na}_2\text{MnO}_4 + \text{Na}_2\text{SO}_4 + 2 \text{KNO}_2 + 2 \text{H}_2\text{O}$
- 222) $\text{H}_2\text{S} + 8 \text{HNO}_3 = \text{H}_2\text{SO}_4 + 8 \text{NO}_2 + 4 \text{H}_2\text{O}$
- 223) $\text{SO}_2 + \text{I}_2 + \text{H}_2\text{O} = 2 \text{HI} + \text{H}_2\text{SO}_4$
- 224) $8 \text{HgCl}_2 + \text{SiH}_4 + 2 \text{H}_2\text{O} = 4 \text{Hg}_2\text{Cl}_2 + \text{SiO}_2 + 8 \text{HCl}$
- 225) $5 \text{Zn} + 2 \text{KMnO}_4 + 8 \text{H}_2\text{SO}_4 = 5 \text{ZnSO}_4 + 2 \text{MnSO}_4 + \text{K}_2\text{SO}_4 + 8 \text{H}_2\text{O}$
- 226) $\text{MnO}_2 + 4 \text{HCl} = \text{MnCl}_2 + \text{Cl}_2 + 2 \text{H}_2\text{O}$
- 227) $1 \text{NO}_3^- + 4 \text{Zn} + 7 \text{OH}^- + 6 \text{H}_2\text{O} = 1 \text{NH}_3 + 4 [\text{Zn}(\text{OH})_4]^{2-}$
- 228) $1 \text{Na}_2\text{SO}_4 + 4 \text{C} + 1 \text{CaCO}_3 = 1 \text{CaS} + 4 \text{CO} + 1 \text{Na}_2\text{CO}_3$
- 229) $1 \text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 + 4 \text{Cl}_2 + 5 \text{H}_2\text{O} = 2 \text{NaHSO}_4 + 8 \text{HCl}$

- 230) $3 \text{H}_3\text{PO}_3 + 2 \text{HNO}_3 = 2 \text{NO} + 3 \text{H}_3\text{PO}_4 + \text{H}_2\text{O}$
- 231) $2 \text{PbCrO}_4 + 6 \text{FeSO}_4 + 16 \text{HCl} = 2 \text{PbCl}_2 + \text{Cr}_2(\text{SO}_4)_3 + 4 \text{FeCl}_3 + 8 \text{H}_2\text{O} + 1 \text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$
- 232) $4 \text{Ag} + 2 \text{H}_2\text{S} + 1 \text{O}_2 = 2 \text{Ag}_2\text{S} + 2 \text{H}_2\text{O}$
- 233) $4 \text{Au} + 8 \text{NaCN} + 1 \text{O}_2 + 2 \text{H}_2\text{O} = 4 \text{Na}[\text{Au}(\text{CN})_2] + 4 \text{NaOH}$
- 234) $4 \text{CuCl} + 1 \text{O}_2 + 2 \text{H}_2\text{O} = 2 \text{CuCl}_2 + 2 \text{Cu}(\text{OH})_2$
- 235) $2 \text{PbCrO}_4 + 16 \text{HI} = 2 \text{PbI}_2 + 2 \text{CrI}_3 + 3 \text{I}_2$
- 236) $1 \text{NH}_2\text{Cl} + 1 \text{NH}_3 + 1 \text{NaOH} = 1 \text{N}_2\text{H}_4 + 1 \text{NaCl} + 1 \text{H}_2\text{O}$
- 237) $2 \text{NO}_2 + \text{H}_2\text{O} = \text{HNO}_3 + \text{HNO}_2$
- 238) $4 \text{P} + 3 \text{KOH} + 3 \text{H}_2\text{O} = 3 \text{KH}_2\text{PO}_2 + \text{PH}_3$
- 239) $2 \text{ICl}_3 + 4 \text{H}_2\text{O} = \text{HIO}_3 + \text{HOI} + 6 \text{HCl}$
- 240) $2 \text{I}_2 + \text{OH}^- = \text{I}^- + \text{IO}^- + \text{H}_2\text{O}$
- 241) $5 \text{P}_2\text{H}_4 = 6 \text{PH}_3 + \text{P}_4\text{H}_2$
- 242) $4 \text{S} + 6 \text{NaOH} = 2 \text{Na}_2\text{S} + \text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 + 3 \text{H}_2\text{O}$
- 243) $\text{Cl}_2 + \text{H}_2\text{O} = \text{HCl} + \text{HOCl}$
- 244) $3 \text{ClO}^- = 2 \text{Cl}^- + \text{ClO}_3^-$
- 245) $3 \text{Br}_2 + 6 \text{OH}^- = 5 \text{Br}^- + \text{BrO}_3^- + 3 \text{H}_2\text{O}$
- 246) $3 \text{KClO}_3 + \text{H}_2\text{SO}_4 = 2 \text{ClO}_2 + \text{KClO}_4 + \text{K}_2\text{SO}_4 + \text{H}_2\text{O}$
- 247) $2 \text{H}_2\text{S} + \text{SO}_2 = 3 \text{S} + 2 \text{H}_2\text{O}$
- 248) $\text{HIO}_3 + 5 \text{HI} = 3 \text{I}_2 + 3 \text{H}_2\text{O}$
- 249) $4 \text{KClO}_3 = \text{KCl} + 3 \text{KClO}_4$
- 250) $3 \text{HNO}_2 = \text{HNO}_3 + \text{H}_2\text{O} + 2 \text{NO}$
- 251) $\text{As}_2\text{S}_3 + 12 \text{NH}_4\text{OH} + 14 \text{H}_2\text{O}_2 = 2 (\text{NH}_4)_3\text{AsO}_4 + 3 (\text{NH}_4)_2\text{SO}_4 + 20 \text{H}_2\text{O}$
- 252) $4 \text{FeS}_2 + 11 \text{O}_2 = 2 \text{Fe}_2\text{O}_3 + 8 \text{SO}_2$
- 253) $\text{As}_2\text{S}_3 + 28 \text{HNO}_3 = 2\text{H}_3\text{AsO}_4 + 3 \text{H}_2\text{SO}_4 + 8 \text{H}_2\text{O} + 28 \text{NO}_2$
- 254) $2 \text{CrI}_3 + 64 \text{KOH} + 27 \text{Cl}_2 = 2 \text{K}_2\text{CrO}_4 + 6 \text{KIO}_4 + 54 \text{KCl} + 32 \text{H}_2\text{O}$
- 255) $10 \text{FeCl}_2 + 6 \text{KMnO}_4 + 24 \text{H}_2\text{SO}_4 = 5 \text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3 + 3 \text{K}_2\text{SO}_4 + 6 \text{MnSO}_4 + 10 \text{Cl}_2 + 24 \text{H}_2\text{O}$
- 256) $4 \text{FeO} \cdot \text{Cr}_2\text{O}_3 + 7 \text{O}_2 + 8 \text{Na}_2\text{CO}_3 = 2 \text{Fe}_2\text{O}_3 + 8 \text{Na}_2\text{CrO}_4 + 8 \text{CO}_2$
- 257) $2 \text{CuCrO}_4 + 10 \text{KI} + 8 \text{H}_2\text{SO}_4 = 2 \text{CuI} + 4 \text{I}_2 + \text{Cr}_2(\text{SO}_4)_3 + 8 \text{H}_2\text{O} + 5 \text{K}_2\text{SO}_4$
- 258) $3 \text{Cu}_2\text{S} + 16 \text{HNO}_3 = 6 \text{Cu}(\text{NO}_3)_2 + 4 \text{O} + 3 \text{S} + 8 \text{H}_2\text{O}$
- 259) $2 \text{Ce}(\text{IO}_3)_4 + 24 \text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4 = 1 \text{Ce}_2(\text{C}_2\text{O}_4)_3 + 4 \text{I}_2 + 42 \text{CO}_2 + 24 \text{H}_2\text{O}$
- 260) $11 \text{Zn} + 2 \text{Ag}_3\text{AsO}_4 + 11 \text{H}_2\text{SO}_4 = 6 \text{Ag} + 2 \text{AsH}_3 + 11 \text{ZnSO}_4 + 8 \text{H}_2\text{O}$
- 261) $2 \text{C}_2\text{H}_6 + 7 \text{O}_2 = 4 \text{CO}_2 + 6 \text{H}_2\text{O}$
- 262) $2 \text{C}_{20}\text{H}_{22} + 31 \text{O}_2 = 20 \text{CO}_2 + 22 \text{H}_2\text{O}$
- 263) $2 \text{C}_6\text{H}_6 + 15 \text{O}_2 = 12 \text{CO}_2 + 6 \text{H}_2\text{O}$
- 264) $1 \text{C}_7\text{H}_8 + 9 \text{O}_2 = 7 \text{CO}_2 + 4 \text{H}_2\text{O}$
- 265) $2 \text{C}_4\text{H}_6\text{O}_2 + 11 \text{O}_2 = 8 \text{CO}_2 + 6 \text{H}_2\text{O}$
- 266) $2 \text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{C}_6\text{H}_5 + 23 \text{O}_2 = 18 \text{CO}_2 + 10 \text{H}_2\text{O}$



7.5. Sztöchiometria

A **sztöchiometria** a kémia azon ága, mely az anyagok összetételével és a kémiai folyamatok mennyiségi viszonyaival foglalkozik.

Anyagmennyiség: a részecskék darabszámával arányos mennyiség.

Jele: n.

Mértékegysége: mol (írásban mól).

$6,022 \cdot 10^{23}$ darab (Avogadro-szám: N_A) részecske felel meg 1 mól az anyagmennyiségnek.

Relatív atomtömeg: megadja, hogy egy atom tömege hányszor nagyobb egy 12-es tömegszámú szénatom tömegének egytizenketted részénél.

Jele: A_r

Dimenziómentes mennyiség.

Relatív molekulatömeg: megadja, hogy egy molekula tömege hányszor nagyobb egy 12-es tömegszámú szénatom tömegének egytizenketted részénél.

Jele: M_r

Dimenziómentes mennyiség.

A relatív molekulatömeg megegyezik a molekulában található atomok atomtömegeinek összegével:

$$M_r(\text{A}_a\text{B}_b\text{C}_c) = a \cdot A_r(\text{A}) + b \cdot A_r(\text{B}) + c \cdot A_r(\text{C}).$$

Például:

$$\text{C}_7\text{H}_8 \text{ esetén } M_r(\text{C}_7\text{H}_8) = 7 \cdot A_r(\text{C}) + 8 \cdot A_r(\text{H}).$$

A relatív atomtömeg és a relatív molekulatömeg általában nem egész számok, mivel az elemek általában több különböző tömegszámú izotópból épülnek fel (lásd korábban).

Moláris tömeg: 1 mól anyagmennyiségű elem vagy vegyület tömege.

Jele: M

A moláris tömeg az adott anyag tömegének és anyagmennyiségének aránya:

$$M = \frac{m}{n}.$$

Mértékegysége: kg/mol vagy g/mol.

Egy molekuláris anyag moláris tömege számértékében megegyezik a relatív molekulatömegével.

Egy adott tömegű elem vagy vegyület anyagmennyiségét kiszámíthatjuk a tömeg és a moláris tömeg hányadosaként:

$$n = \frac{m}{M}$$

7.5.1. Képletek megadása

Tapasztalati képlet: az adott vegyület úgynevezett sztöchiometriai összetételét fejezi ki. Az elemek egymás mellé írt vegyjelét tartalmazza rendszerint ábécé sorrendben, és a vegyjelek alsó indexe fejezi ki az összetevők **legegyszerűbb arányát**.

Egy vegyület tömegszázalékos elemösszetétele alapján könnyen meghatározhatjuk a vegyület tapasztalati képletét.

Molekulaképlet: a vegyület egy molekulájának tényleges összetételét fejezi ki. Nem feltétlenül egyezik meg a tapasztalati képlettel, mivel a tapasztalati képlet a legegyszerűbb arányt fejezi ki, ennek többszöröse is lehet a molekulaképlet. Gyakran viszont megegyezik a tapasztalati és a molekulaképlet. Néhány példa a tapasztalati és a molekulaképlet különbözőségére.

Név	Molekulaképlet	Tapasztalati képlet
Ciklohexán	C ₆ H ₁₂	CH ₂
Propén	C ₃ H ₆	CH ₂
Glükóz	C ₆ H ₁₂ O ₆	CH ₂ O
Ecetsav	C ₂ H ₄ O ₂	CH ₂ O
Formaldehid	CH ₂ O	CH ₂ O
Nitrogén-dioxid	NO ₂	NO ₂
Dinitrogén-tetroxid	N ₂ O ₄	NO ₂

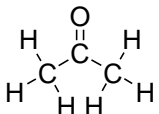
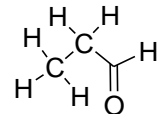
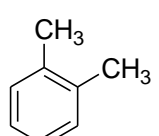
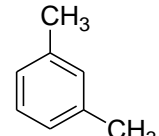
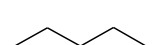
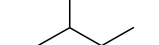
Szerkezeti vagy konstitúciós képlet: az atomok kapcsolódási sorrendjét is megmutatja.

Például:

Név	Molekulaképlet	Szerkezeti képlet
Ecetsav	C ₂ H ₄ O ₂	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{O} \\ \quad // \\ \text{H}-\text{C}-\text{C} \\ \quad \backslash \\ \text{H} \quad \text{O}-\text{H} \end{array}$
Foszforsav	H ₃ PO ₄	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{H}-\text{O}-\text{P} \\ \quad \backslash \\ \text{O} \quad \text{O}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$
Ammónia	NH ₃	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{N}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$
Propén	C ₃ H ₆	H ₂ C=CH-CH ₃
1,2-Diklóretán	C ₂ Cl ₂ H ₄	$\begin{array}{c} \text{Cl} \quad \text{H} \\ \quad \\ \text{Cl}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$

Izomerek: azon szerkezetek, melyek ugyanazon molekulaképlettel írhatóak le.

Példák:

Molekulaképlet	Szerkezeti képlet	
C_2H_4O	 Aceton	 Acetaldehid
C_8H_{10}	 o-Xilol	 m-Xilol
C_5H_{12}	 n-Pentán	 2-Metil-bután

7.5.2. Számításos feladatok: képletek meghatározására tömegszázalékos összetétel alapján

7.12. példa:

Állapítsuk meg az $(NH_4)_2Cr_2O_7$ (ammónium-dikromát) tömegszázalékos összetételét!

Relatív atomtömegek:

$$A_r(N) = 14,0,$$

$$A_r(H) = 1,0,$$

$$A_r(Cr) = 52,0,$$

$$A_r(O) = 16,0.$$

Megoldás:

Az ammónium-dikromát moláris tömege adódik az egyes elemek relatív atomtömegeinek súlyozott összegeként.

1 mól ammónium-dikromátban van 2 mól N, $2 \cdot 4 = 8$ mól H, 2 mól Cr és 7 mól O.

Az egyes elemek tömege 1 mól ammónium-kloridban:

$$N: \quad m(N) = 2 \cdot 14,0 \text{ g} = 28,0 \text{ g},$$

$$H: \quad m(H) = 8 \cdot 1,0 \text{ g} = 8,0 \text{ g},$$

$$Cr: \quad m(Cr) = 2 \cdot 52,0 \text{ g} = 104,0 \text{ g},$$

$$O: \quad m(O) = 7 \cdot 16,0 \text{ g} = 112,0 \text{ g}.$$

1 mól ammónium-dikromát tömege így (azaz a moláris tömeg számértéke):

$$m = 28,0 \text{ g} + 8,0 \text{ g} + 104,0 \text{ g} + 112,0 \text{ g} = 252,0 \text{ g}.$$

Az egyes elemek tömegszázaléka így már könnyen számítható:

$$N: \quad w(N) = m(N) / m = (28,0 \text{ g}) / (252,0 \text{ g}) = 0,1111 = 11,11\%,$$

$$H: \quad w(H) = m(H) / m = (8,0 \text{ g}) / (252,0 \text{ g}) = 0,0318 = 3,18\%,$$

$$\text{Cr:} \quad w(\text{Cr}) = m(\text{Cr}) / m = (104,0 \text{ g}) / (252,0 \text{ g}) = 0,4127 = 41,27\%,$$

$$\text{O:} \quad w(\text{O}) = m(\text{O}) / m = (112,0 \text{ g}) / (252,0 \text{ g}) = 0,4444 = 44,44\%,$$

Tehát az ammónium-dikromát 11,11 tömeg%-a nitrogén, 3,18 tömeg%-a hidrogén, 41,27 tömeg%-a króm és 44,44 tömeg%-a oxigén.

7.13. példa:

Egy vasérc moláris tömege 120,0 g/mol, vastartalma 46,67 tömeg%, kéntartalma 53,33 tömeg%, ezen a két elemen kívül más nem tartalmaz. Mi a vegyület tapasztalati képlete?

Relatív atomtömegek:

$$A_r(\text{Fe}) = 56,0,$$

$$A_r(\text{S}) = 32,0.$$

Megoldás:

1 mól azaz 120,0 gramm vegyület vastartalma:

$$0,4667 \cdot 120,0 \text{ g} = 56,0 \text{ gramm.}$$

1 mól azaz 120,0 gramm vegyület kéntartalma:

$$0,5333 \cdot 120,0 \text{ g} = 64,0 \text{ gramm.}$$

1 mól vas tömege 56,0 gramm, míg 1 mól kén tömege 64,0 g, így 1 mól vasércben van 1 mól vas és 2 mól kén, tehát az érc tapasztalati képlete: FeS₂.

7.14. példa:

Egy vegyület moláris tömege 60,0 g/mol, elemi összetétele: 20,00 tömeg% szén, 46,67 tömeg% nitrogén, 26,67 tömeg% oxigén, a többi pedig hidrogén. Határozzuk meg a tapasztalati képletét, molekulaképletét, és javasoljunk egy szerkezeti képletet is a vegyületre!

Relatív atomtömegek:

$$A_r(\text{C}) = 12,0,$$

$$A_r(\text{N}) = 14,0,$$

$$A_r(\text{O}) = 16,0,$$

$$A_r(\text{H}) = 1,0.$$

Megoldás:

A vegyület tapasztalati képlete: C_xH_yN_zO_w tömeg%-os összetételek alapján az egyes elemek mennyisége 60 gramm vegyületben:

A hidrogén tömeg%-a adódik a többi elem tömeg%-os arányából:

$$100 - (20,00 + 46,67 + 26,67) = 6,66.$$

$$\text{Szén:} \quad 0,2000 \cdot 60,0 \text{ g} = 12,0 \text{ g} \Rightarrow x = 12 / 12 = 1$$

$$\text{Hidrogén:} \quad 0,0666 \cdot 60,0 \text{ g} = 4,0 \text{ g} \Rightarrow y = 4 / 1 = 4$$

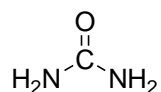
$$\text{Nitrogén:} \quad 0,4667 \cdot 60,0 \text{ g} = 28,0 \text{ g} \Rightarrow z = 28 / 14 = 2$$

$$\text{Oxigén:} \quad 0,2667 \cdot 60,0 \text{ g} = 16,0 \text{ g} \Rightarrow w = 16 / 16 = 1.$$

Tehát a vegyület molekulaképlete, mely megegyezik tapasztalati képlettel is:



Egy lehetséges szerkezeti képlet:



Tehát a keresett vegyület a karbamid, a tapasztalati és molekulaképlete $\text{CH}_4\text{N}_2\text{O}$, a szerkezeti képlete pedig $(\text{H}_2\text{N})_2\text{C}=\text{O}$.

7.15. példa:

Egy szénhidrogénben a széntartalom 91,304 tömeg%. Mi a vegyület tapasztalati képlete?

Relatív atomtömegek:

$$A_r(\text{C}) = 12,0,$$

$$A_r(\text{H}) = 1,0.$$

Megoldás:

A szénhidrogén tapasztalati képlete C_xH_y , feladatunk megkeresni a legkisebb x és y számokat. Vegyünk 100 gramm vegyületet! Ebben van 91,304 gramm szén és $100 \text{ g} - 91,304 \text{ g} = 8,696$ gramm hidrogén. A szén és hidrogén anyagmennyiségének aránya megadja a sztöchiometriai összetételt, tehát a tapasztalati képletet:

$$n(\text{C}) = (91,304 \text{ g}) / (12,0 \text{ g/mol}) = 7,60867 \text{ mol},$$

$$n(\text{H}) = (8,696 \text{ g}) / (1,0 \text{ g/mol}) = 8,696 \text{ mol}.$$

A x / y arány meg kell, hogy egyezzen a szén és hidrogén anyagmennyiségének arányával:

$$x / y = n(\text{C}) / n(\text{H}) = (7,60867 \text{ mol}) / (8,696 \text{ mol}) \approx 0,875 = 7 / 8.$$

Tehát a szénhidrogén tapasztalati képlete: C_7H_8 . (Megjegyezzük, hogy a toluol vagy más néven metil-benzol – $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3$ – éppen megfelel ennek a tapasztalati képletnek.)

7.16. példa:

Egy ismeretlen *nyílt láncú telítetlen szénhidrogén* 85,714 tömeg%-a szén, a többi értelemszerűen hidrogén. Mi a vegyület tapasztalati képlete? Mi a molekulaképlete, ha moláris tömege 70 g/mol? Rajzoljuk fel a vegyület nyílt láncú izomerjeit!

Relatív atomtömegek:

$$A_r(\text{C}) = 12,0,$$

$$A_r(\text{H}) = 1,0.$$

Megoldás:

Az előző példához hasonlóan 100 gramm C_xH_y vegyületben lévő elemek anyagmennyisége:

$$n(\text{C}) = (85,714 \text{ g}) / (12,0 \text{ g/mol}) = 7,143 \text{ mol},$$

$$n(\text{H}) = (100 \text{ g} - 85,714 \text{ g}) / (1,0 \text{ g/mol}) = 14,286 \text{ mol},$$

$$x / y = n(\text{C}) / n(\text{H}) = (7,143 \text{ mol}) / (14,286 \text{ mol}) = 0,5 = 1 / 2.$$

Tehát a vegyület tapasztalati képlete: $\underline{\text{CH}_2}$.

A vegyület tehát az alábbi általános képlettel írható le: C_nH_{2n} , melynek moláris tömege:

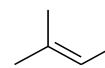
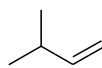
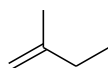
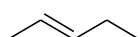
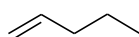
$$M(\text{C}_n\text{H}_{2n}) = 12 \cdot n + 1 \cdot (2n) = 14 \cdot n.$$

A feladat szövegéből ismert, hogy a vegyület moláris tömege 70 g/mol, így n értékét kiszámíthatjuk:

$$n = 70 / 14 = 5.$$

Azaz a szénhidrogén molekulaképlete: $\underline{\text{C}_5\text{H}_{10}}$.

A lehetséges nyílt láncú izomerek:



7.17. példa:

A kristályvizes trinátrium-foszfát ($\text{Na}_3\text{PO}_4 \cdot x \text{H}_2\text{O}$) tömegének 18,158%-a nátrium. Hány kristályvizet tartalmaz a kristályos trinátrium-foszfát?

Relatív atomtömegek:

$$A_r(\text{Na}) = 23,0,$$

$$A_r(\text{P}) = 31,0,$$

$$A_r(\text{O}) = 16,0,$$

$$A_r(\text{H}) = 1,0.$$

Megoldás:

A kérdés tehát x értéke a képletben. Egy lehetséges út, hogy megállapítjuk a kristályvizes és kristályvíz nélküli trinátrium-foszfát moláris tömegét, és a kristályvizes és kristályvízmentes trinátrium-foszfát moláris tömegének a különbsége éppen a kristályvíz mennyisége. Vegyünk például 100 gramm kristályvizes sót! Meg kell állapítanunk ennek anyagmennyiségét, így ki tudjuk számítani a kristályvizes só moláris tömegét!

100 gramm trinátrium-foszfátban van $0,18158 \cdot 100 \text{ g} = 18,158$ gramm nátrium. Ennek anyagmennyisége:

$$n(\text{Na}) = 18,158 / 23 \text{ mol} = 0,7895 \text{ mol}.$$

1 mólnyi kristályos trinátrium-foszfátban 3 mólnyi nátrium található, így a só anyagmennyisége a nátrium anyagmennyiségének 1/3-a. Így a só anyagmennyisége:

$$n = 0,7895 / 3 \text{ mol} = 0,2632 \text{ mol}.$$

Tehát a 100 gramm vegyület 0,2632 mol anyagmennyiségű, így a vegyület moláris tömege:

$$M(\text{Na}_3\text{PO}_4 \cdot x \text{H}_2\text{O}) = (100 \text{ g}) / (0,2632 \text{ mol}) = 380,0 \text{ g/mol}.$$

A trinátrium-foszfát moláris tömege:

$$M(\text{Na}_3\text{PO}_4) = 3 \cdot 23,0 + 1 \cdot 31,0 + 4 \cdot 16,0 = 164,0 \text{ g/mol},$$

mely a kristályvizes trinátrium-foszfát moláris tömegénél éppen a kristályvíz mennyiségével kevesebb.

A víz moláris tömege $M(\text{H}_2\text{O}) = 2 \cdot 1 + 1 \cdot 16 = 18,0 \text{ g/mol}$, így x értéke a moláris tömegekből kiszámítható.

$$M(\text{Na}_3\text{PO}_4 \cdot x \text{H}_2\text{O}) = 380,0 \text{ g/mol} = M(\text{Na}_3\text{PO}_4) + x \cdot M(\text{H}_2\text{O}) = 164,0 \text{ g/mol} + x \cdot 18,0 \text{ g/mol}$$

$$x = (380 \text{ g/mol} - 164 \text{ g/mol}) / (18 \text{ g/mol}) = 12$$

Tehát a trinátrium-foszfát 12 kristályvízzel kristályosodik.

Megjegyzés:

Egy másik lehetséges megoldás a kristályvizes só moláris tömegének kiszámítására, hogy vegyünk 3 mólnyi nátriumot, ennek tömege $3 \cdot 23 \text{ g} = 69 \text{ gramm}$, mely 18,158 tömeg%-a 1 mól kristályos trinátrium-foszfátnak. Ebből 1 mól kristályos só tömege:

$$M(\text{Na}_3\text{PO}_4 \cdot x \text{H}_2\text{O}) = (69 \text{ g/mol}) / 0,18158 = 380,0 \text{ g/mol}.$$

Innen a feladat folytatása azonos az előzőekben bemutatottal.

7.18. példa:

Egy kétértékű szerves oxosav (H_2AO_n) savanyú nátriumsójának moláris tömege a szabályos nátriumsó 84,51%-a. A szabályos só 45,07 tömeg%-a oxigén. Mi a két só moláris tömege és képlete? Melyik savról van szó?

Megoldás:

A savanyú só képlete legyen NaHAO_n , a szabályos sóé Na_2AO_n , moláris tömegük pedig

$$M(\text{NaHAO}_n) = 23,00 + 1,00 + M(\text{AO}_n) = 24,00 + M(\text{AO}_n),$$

$$M(\text{Na}_2\text{AO}_n) = 2 \cdot 23,00 + M(\text{AO}_n) = 46,00 + M(\text{AO}_n),$$

A két moláris tömeg arányára felírható, hogy

$$\frac{M(\text{NaHAO}_n)}{M(\text{Na}_2\text{AO}_n)} = \frac{24,00 + M(\text{AO}_n)}{46,00 + M(\text{AO}_n)} = 0,8451.$$

Ennek megoldása: $M(\text{AO}_n) = 96,00 \text{ g/mol}$.

A szabályos só moláris tömege: $M(\text{Na}_2\text{AO}_n) = 46,00 + M(\text{AO}_n) = 46,00 + 96,00 = 142,00 \text{ g/mol}$. Ennek 45,07%-a oxigén: $0,4507 \cdot 142,00 \text{ g/mol} = 64,00 \text{ g/mol}$. Az oxigén relatív atomtömege 16,00, így $n = 64,00 / 16,00 = 4$ oxigénatom található a savban.

Már csak a sav ismeretlen központi atomját (A) kell meghatároznunk! Mivel az Na_2AO_4 moláris tömege 142,00 g/mol, ebből a két nátrium tömege $2 \cdot 23,00 = 46,00 \text{ g/mol}$, a négy oxigénnek pedig 64,00 g/mol, így az A elem relatív atomtömege $142,00 - 46,00 - 64,00 = 32,00$, tehát a kénről van szó. A keresett sav a kénsav (H_2SO_4), a két só pedig a nátrium-hidrogénszulfát (NaHSO_4) és nátrium-szulfát (Na_2SO_4).

7.5.3. Sztöchiometriai számítások

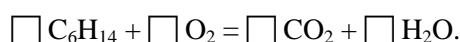
Az előzőekben megismert kémiai egyenletek megjelenítik a reakciók során lejátszódó változásokat, továbbá belőlük pontos mennyiségi változások is kiolvashatók. Az egyenletek együtthatói nemcsak a kiindulási anyagok, illetve termékek molekuláinak a számát fejezik ki, hanem a megfelelő anyagmennyiségek arányát is.

A sztöchiometria alapszabálya, hogy a kémiai változást leíró egyenletben szereplő sztöchiometriai együtthatók (az elem, vegyület vagy ion előtt álló számok) és az anyagmennyiségek között **egyenes arányosság** van.

Ezt legegyszerűbben példákon keresztül lehet szemléltetni:

7.19. példa:

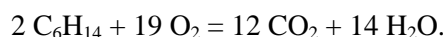
6,880 gramm hexánt elégetve mekkora térfogatú 101 325 Pa nyomású és 300,0 K hőmérsékletű CO₂ gáz keletkezik? Feltételezzük, hogy a keletkező vízpára teljesen kicsapódik. Hány gramm vízpára csapódik ki? Az égés rendezendő egyenlete:



$$A_r: \text{H}: 1,0; \text{C}: 12,0; \text{O}: 16,0.$$

Megoldás

A rendezett egyenlet:



Először meg kell határoznunk a hexán anyagmennyiségét, melyhez szükségünk van a hexán moláris tömegére. 1 mól hexán tömege:

$$M(\text{C}_6\text{H}_{14}) = 6 \cdot 12,0 + 14 \cdot 1,0 = 86,0 \text{ g/mol}.$$

Tehát a hexán anyagmennyisége:

$$n = \frac{m}{M(\text{C}_6\text{H}_{14})} = \frac{6,88 \text{ g}}{86 \text{ g/mol}} = 0,08 \text{ mol}.$$

2 mól hexánból 12 mól CO₂ és 14 mól H₂O keletkezik, tehát a CO₂ mennyisége 6-szorosa, a H₂O mennyisége pedig 7-szerese a hexán mennyiségének.

$$n(\text{CO}_2) = 6 \cdot n = 6 \cdot 0,08 \text{ mol} = 0,48 \text{ mol}$$

$$n(\text{H}_2\text{O}) = 7 \cdot n = 7 \cdot 0,08 \text{ mol} = 0,56 \text{ mol}$$

A szén-dioxid gáz térfogata, az ideális gáztörvényt felhasználva:

$$p = 101\,325 \text{ Pa} \quad T = 300 \text{ K} \quad n = 0,48 \text{ mol}$$

$$p \cdot V = n \cdot R \cdot T$$

$$V = \frac{n \cdot R \cdot T}{p} = \frac{(0,48 \text{ mol}) \cdot \left(8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}\right) \cdot (300 \text{ K})}{101325 \text{ Pa}} = 0,011816 \text{ m}^3 = 11,816 \text{ dm}^3$$

A víz tömegének kiszámításához szükségünk van 1 mól víz tömegére, azaz a moláris tömegre:

$$M(\text{H}_2\text{O}) = 2 \cdot 1 + 1 \cdot 16 = 18 \text{ g/mol}.$$

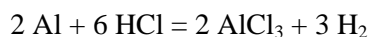
A keletkezett 0,56 mól víz tömege:

$$m(\text{H}_2\text{O}) = n(\text{H}_2\text{O}) \cdot M(\text{H}_2\text{O}) = (0,56 \text{ mol}) \cdot (18 \text{ g/mol}) = 10,08 \text{ g}$$

Tehát 11,82 dm³ szén-dioxid gáz és 10,08 gramm víz keletkezett az égés során.

7.20. példa:

94,500 gramm alumíniumot sósavban oldva hány gramm alumínium-klorid állítható elő az alábbi egyenlet alapján? Mekkora térfogatú 10,00 tömeg%-os, 1,105 g/cm³ sűrűségű sósavoldat szükséges a reakcióhoz, ha azt 10,00% feleslegben alkalmazzuk?



Relatív atomtömegek: Al: 27,0; H: 1,0; Cl: 35,5.

1. megoldás: egyenes arányok segítségével

1 mól alumínium-klorid tömege:

$$M(\text{AlCl}_3) = 1 \cdot A_r(\text{Al}) + 3 \cdot A_r(\text{Cl}) = 1 \cdot 27,0 + 3 \cdot 35,5 = 133,5 \text{ g/mol}$$

Egyenes arányosságot alkalmazva:

Az egyenlet szerint 2 mól alumíniumból 2 mól alumínium-klorid keletkezik, másképp fogalmazva 1 mól alumíniumból 1 mól alumínium-klorid keletkezik

Tudjuk továbbá, hogy 1 mól alumínium tömege 27 gramm, míg 1 mól alumínium-klorid tömeg 133,5 gramm. Felírhatjuk a következő egyenes arányosságot:

Ha	27 gramm alumíniumból	133,5 gramm alumínium-klorid keletkezik,
akkor	94,500 gramm alumíniumból	x gramm alumínium-klorid keletkezik.

Megoldva: $x = 467,25 \text{ gramm}$

A reakcióegyenlet alapján 2 mól alumíniumhoz 6 mól (tehát 3-szor annyi) HCl szükséges. A HCl 1 móljának tömegére:

$$M(\text{HCl}) = 1 \cdot A_r(\text{H}) + 1 \cdot A_r(\text{Cl}) = 1 \cdot 1,0 + 1 \cdot 35,5 = 36,5 \text{ g/mol.}$$

Ismét egyenes arányosságot írhatunk fel:

Ha	27 gramm alumíniumhoz	$3 \cdot 36,5 = 109,5$ gramm HCl szükséges,
akkor	94,500 gramm alumíniumból	y gramm HCl szükséges.

A megoldás: $y = 383,25 \text{ gramm}$

A továbbiakban egyenes arányossággal ki kell számítanunk, hogy mekkora tömegű sósavoldatban a fenti mennyiségű HCl:

Ha	100 gramm oldatban van	10,0 gramm HCl,
akkor	z gramm oldatban van	383,25 gramm HCl.

Megoldva: $z = 3832,5 \text{ gramm}$

Ezután meg kell határozni, hogy mekkora térfogatú az oldat. Ehhez ismét használhatunk egyenes arányosságot.

Ha $1,0 \text{ cm}^3$ oldatban tömege $1,105 \text{ gramm}$,
akkor $w \text{ cm}^3$ oldat tömege $3832,5 \text{ gramm HCl}$.

Megoldva: $w = 3468,3 \text{ gramm}$

Az utolsó lépésben még figyelembe kell vennünk a 10% felesleget, azaz 10%-kal meg kell növelnünk a sósavoldat térfogatát:

$$3468,3 \text{ cm}^3 \cdot 1,10 = 3815,16 \text{ cm}^3.$$

A végeredmény tehát négy értékes jegy pontossággal: 467,3 gramm alumínium-klorid keletkezik és 3815 cm³ sósavoldatra van szükségünk.

2. megoldás: képletekkel

Az alumínium anyagmennyisége:

$$n(\text{Al}) = \frac{m}{M} = \frac{94,500 \text{ g}}{27,0 \text{ g/mol}} = 3,5 \text{ mol}.$$

Az egyenlet alapján 2 mól alumíniumból 2 mól alumínium-klorid keletkezik, azaz megegyezik az alumínium és az alumínium-klorid anyagmennyisége:

$$n(\text{AlCl}_3) = n(\text{Al}) = 3,5 \text{ mol}.$$

A keletkezett alumínium-klorid tömegének kiszámítása előtt meg kell határoznunk az alumínium-klorid moláris tömegét:

$$M(\text{AlCl}_3) = 1 \cdot A_r(\text{Al}) + 3 \cdot A_r(\text{Cl}) = 1 \cdot 27,0 + 3 \cdot 35,5 = 133,5 \text{ g/mol}.$$

Az alumínium-klorid tömege:

$$m(\text{AlCl}_3) = n(\text{AlCl}_3) \cdot M(\text{AlCl}_3) = 3,5 \text{ mol} \cdot 133,5 \text{ g/mol} = \underline{467,25 \text{ g}}.$$

A reakcióegyenlet alapján 2 mól alumíniumhoz 6 mól (tehát 3-szor annyi) HCl szükséges, így a HCl anyagmennyisége:

$$n(\text{HCl}) = 3 \cdot n(\text{Al}) = 3 \cdot 3,5 \text{ mol} = 10,5 \text{ mol}.$$

A HCl tömegének kiszámításához szükségünk van annak moláris tömegére is:

$$M(\text{HCl}) = 1 \cdot A_r(\text{H}) + 1 \cdot A_r(\text{Cl}) = 1 \cdot 1,0 + 1 \cdot 35,5 = 36,5 \text{ g/mol}.$$

A HCl tömege:

$$m(\text{HCl}) = n(\text{HCl}) \cdot M(\text{HCl}) = 10,5 \text{ mol} \cdot 36,5 \text{ g/mol} = 383,25 \text{ g}.$$

Ez a mennyiség azonban az oldatban lévő HCl mennyiség, a kérdés pedig az oldat tömegére vonatkozott. A sósavoldat 10,0 tömeg%-os, így az oldat tömege:

$$m_{\text{oldat}} = \frac{m(\text{HCl})}{w} = \frac{383,25 \text{ g}}{0,100} = 3832,5 \text{ g}.$$

A sósavoldat sűrűségének segítségével kiszámítható az oldat térfogata:

$$V_0 = \frac{m_{\text{oldat}}}{d} = \frac{38325 \text{ g}}{1,105 \text{ g/cm}^3} = 3468,3 \text{ cm}^3.$$

Az utolsó lépésben még figyelembe kell vennünk a felesleget, azaz 10%-kal meg kell növelnünk a sósavoldat térfogatát:

$$V = V_0 \cdot 1,10 = 3468,3 \text{ cm}^3 \cdot 1,10 = \underline{3815,16 \text{ cm}^3}.$$

A végeredmény tehát négy értékes jegy pontossággal: 467,3 gramm alumínium-klorid keletkezik és 3815 cm³ sósavoldatra van szükségünk.

7.5.4. A kitermelés

A kémiai és technológiai számításokon belül egy igen fontos fogalom a kitermelés.

Kitermelés vagy **termelés**: megmutatja, hogy az elméletileg kapható terméknek mekkora hányadát sikerült előállítanunk egy folyamatban. Általában ezt a részarányt százalékban fejezzük ki.

$$\text{Kitermelés} = \frac{\text{a termékténylegesanyagmennyisége}}{\text{a termékelméletileg kaphatóanyagmennyisége}}$$

A kitermelés általában kisebb, mint 100 százalék, mivel szinte mindig vannak veszteségek (például nem tudjuk a termék teljes mennyiségét visszanyerni a reakcióelegyből), de az is gyakran előfordul, hogy a kiindulási anyagból többféle termék keletkezhet, azaz a számunkra fontos termék mellett melléktermékek is keletkeznek.

A **hozam** kifejezést általában a termék tömegére vagy anyagmennyiségére alkalmazzuk (például a reakció hozama 5,40 gramm vagy 0,040 mól termék), de néha a kitermelés szinonimája.

Gyakran alkalmazott fogalom a **konverzió**, mely azt mutatja meg, hogy a kiindulási anyag mekkora hányada (hány százaléka) alakult át bármilyen más anyaggá. Abban az esetben, ha nincsenek melléktermékek a reakcióban, a kitermelés és a konverzió megegyezik, ha vannak melléktermékek a főtermék mellett, akkor a konverzió nagyobb, mint a kitermelés.

A kitermelés számításával kapcsolatban fontos megjegyezni a következőket:

– abban az esetben, ha a kiindulási anyag és a termék azonos kémiai összetételű (azaz ugyanaz az elem vagy vegyület), tehát a folyamat csupán egy tisztítási lépés (például átkristályosítás), a kitermelés megegyezik a termék és a kiindulási anyag tömegének arányával.

–ha a kiindulási anyag és a termék nem azonos összetételű anyag, tehát kémiai reakció is történik, nem számíthatjuk egyszerű tömegarányként a kitermelést, ilyenkor mindig át kell számítani anyagmennyiségekre a tömegeket. Tehát a kitermelést az anyagmennyiségek arányából kell kiszámítanunk!

– több kiindulási anyag esetén a kitermelés megadásánál fel szoktuk tüntetni, hogy melyik kiindulási anyagra vonatkoztatjuk a kitermelést. Ez alól kivétel, ha valamelyik kiindulási anyagból felesleget alkalmazunk, ilyenkor az értékes komponens(ek)re szoktuk csak megadni a kitermelést.

– bizonyos esetekben beszélhetünk elméleti kitermelésről: abban az esetben, ha például átkristályosítást végzünk, az oldott anyag oldhatósága következtében sosem tudjuk visszanyerni a kiindulási anyag teljes mennyiségét. Ilyenkor a folyamat elméleti kitermelését is meg tudjuk adni, azaz, hogy elméletileg a kiindulási anyag mekkora hányadát tudjuk visszanyerni terméként.

7.21. példa:

10,00 gramm szennyezett kámfort szublimációval tisztítunk. A szublimálóberendezésből 8,34 gramm kámfort sikerült kinyernünk. Mekkora a kitermelés?

Megoldás:

Ez egy tisztítási folyamat, melyben a kiindulási anyag és a termék megegyezik (mindkettő kámfor), azaz a moláris tömegük megegyezik. *Ebben az esetben* az alábbi egyszerű formában írhatjuk fel a kitermelést:

$$\text{Kitermelés} = \frac{n(\text{termék})}{n(\text{kiindulási anyag})} = \frac{\frac{m(\text{termék})}{M}}{\frac{m(\text{kiindulási anyag})}{M}} = \frac{m(\text{termék})}{m(\text{kiindulási anyag})},$$

$$\text{Kitermelés} = \frac{m(\text{termék})}{m(\text{kiindulási anyag})} = \frac{8,34 \text{ g}}{10,00 \text{ g}} = 0,834 = 83,4\% .$$

Tehát a kitermelés 83,4%.

7.22. példa:

Mésző (kalcium-karbonát, CaCO_3) hevítésével égetett meszet (kalcium-oxid, CaO) állítunk elő. 1,500 kilogramm mészkőből 646,8 gramm égetett mész keletkezett. Mekkora a folyamat kitermelése? A reakcióegyenlet:



Relatív atomtömegek:

$$A_r(\text{Ca}) = 40,0,$$

$$A_r(\text{C}) = 12,0,$$

$$A_r(\text{O}) = 16,0.$$

Megoldás:

Mint láthatjuk a reakcióegyenlet alapján, 1 mól CaCO_3 -ból elméletileg 1 mólnyi CaO keletkezhet. A kitermelés megállapításához ki kell számítanunk a kiindulási anyag és a termék anyagmennyiségét, melyhez ismernünk kell a moláris tömegeket:

$$M(\text{CaCO}_3) = 1 \cdot 40,0 + 1 \cdot 12,0 + 3 \cdot 16,0 = 100,0 \text{ g/mol},$$

$$M(\text{CaO}) = 1 \cdot 40,0 + 1 \cdot 16,0 = 56,0 \text{ g/mol}.$$

Az anyagmennyiségek könnyen kiszámíthatóak a tömegek és moláris tömegek segítségével:

$$n(\text{CaCO}_3) = m(\text{CaCO}_3) / M(\text{CaCO}_3) = (1500 \text{ g}) / (100 \text{ g/mol}) = 15,00 \text{ mol},$$

$$n(\text{CaO}) = m(\text{CaO}) / M(\text{CaO}) = (646,8 \text{ g}) / (56 \text{ g/mol}) = 11,55 \text{ mol}.$$

A 15 mól kalcium-karbonátból elméletileg (ha nincs veszteség és teljes átalakulást feltételezünk) 15 mól kalcium-oxid keletkezhet, ám a valóságban csak 11,55 mól keletkezett.

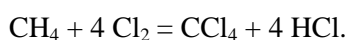
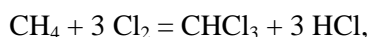
$$\text{Kitermelés} = \frac{n_{\text{tényleges}}}{n_{\text{elméleti}}} = \frac{11,55 \text{ mol}}{15,00 \text{ mol}} = 0,77 = 77\%$$

Tehát a CaO előállításának kitermelése 77%.

7.23. példa:

16,000 tonna metánból (CH₄) klórgázzal szén-tetrakloridot (CCl₄) állítunk elő az alábbi reakcióegyenlet alapján. A termékegyes tartalma: 127,82 tonna szén-tetraklorid (CCl₄) és 19,120 tonna kloroform (CHCl₃) és 850,00 kilogramm diklórmétán (CH₂Cl₂). Mekkora a szén-tetraklorid kitermelése és a metán konverziója?

A reakcióegyenletek:



Relatív atomtömegek:

$$A_r(\text{C}) = 12,0,$$

$$A_r(\text{Cl}) = 35,5,$$

$$A_r(\text{H}) = 1,0.$$

Megoldás:

Az egyes vegyületek moláris tömege:

$$M(\text{CH}_4) = 1 \cdot 12,0 + 4 \cdot 1,0 = 16,0 \text{ g/mol},$$

$$M(\text{CCl}_4) = 1 \cdot 12,0 + 4 \cdot 35,5 = 154,0 \text{ g/mol},$$

$$M(\text{CHCl}_3) = 1 \cdot 12,0 + 1 \cdot 1,0 + 3 \cdot 35,5 = 119,5 \text{ g/mol},$$

$$M(\text{CH}_2\text{Cl}_2) = 1 \cdot 12,0 + 2 \cdot 1,0 + 2 \cdot 35,5 = 85,0 \text{ g/mol}.$$

A metán anyagmennyisége:

$$n(\text{CH}_4) = m(\text{CH}_4) / M(\text{CH}_4) = (1,6 \cdot 10^7 \text{ g}) / (16 \text{ g/mol}) = 10^6 \text{ mol}.$$

A termékek anyagmennyiségei:

$$n(\text{CCl}_4) = m(\text{CCl}_4) / M(\text{CCl}_4) = (1,2782 \cdot 10^8 \text{ g}) / (154 \text{ g/mol}) = 8,30 \cdot 10^5 \text{ mol},$$

$$n(\text{CHCl}_3) = m(\text{CHCl}_3) / M(\text{CHCl}_3) = (1,912 \cdot 10^7 \text{ g}) / (119,5 \text{ g/mol}) = 1,60 \cdot 10^5 \text{ mol},$$

$$n(\text{CH}_2\text{Cl}_2) = m(\text{CH}_2\text{Cl}_2) / M(\text{CH}_2\text{Cl}_2) = (8,500 \cdot 10^5 \text{ g}) / (85,0 \text{ g/mol}) = 1,00 \cdot 10^4 \text{ mol}.$$

A 10⁶ mól metánból elméletileg 10⁶ mól szén-tetrakloridnak kellett volna keletkeznie. Így a szén-tetraklorid kitermelése:

$$\text{CCl}_4: \quad n(\text{CCl}_4) / n(\text{CH}_4) = (8,30 \cdot 10^5 \text{ mol}) / (10^6 \text{ mol}) = 0,83 = 83\%.$$

A metán klórozásakor a szén-tetraklorid kitermelése 83,00%.

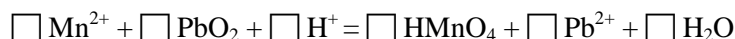
A metán konverziójának kiszámításához összeadjuk a keletkezett termékek mennyiségét:

$$n = n(\text{CCl}_4) + n(\text{CHCl}_3) + n(\text{CH}_2\text{Cl}_2) = 8,30 \cdot 10^5 \text{ mol} + 1,60 \cdot 10^5 \text{ mol} + 1,00 \cdot 10^4 \text{ mol} = 1,00 \cdot 10^6 \text{ mol}.$$

Tehát a metán teljes mennyisége átalakult, a konverzió 100,00%.

7.24. példa:

138,50 kg kristályvizes mangán(II)-szulfátból ($\text{MnSO}_4 \cdot 7 \text{H}_2\text{O}$) permangánsavat állítunk elő az alábbi rendezendő reakcióegyenlet szerint.



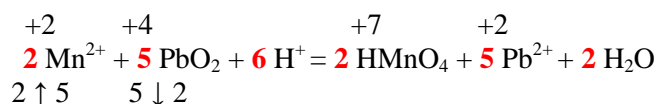
- Hány kg ólom(IV)-oxidot kell ehhez felhasználnunk?
- A keletkezett permangánsavat kálium-hidroxid segítségével kálium-permanganáttá (KMnO_4) alakítjuk, és a folyamat végén így 56,88 kg KMnO_4 -ot sikerült előállítani. Mekkora a folyamat kitermelése?

Relatív atomtömegek:

$$\begin{array}{lll} A_r(\text{H}) = 1,0; & A_r(\text{O}) = 16,0; & A_r(\text{S}) = 32,0; \\ A_r(\text{K}) = 39,0; & A_r(\text{Mn}) = 55,0; & A_r(\text{Pb}) = 207,0. \end{array}$$

Megoldás:

A rendezett reakcióegyenlet:



Moláris tömegek:

$$M(\text{MnSO}_4) = 151,0 \text{ g/mol}; M(\text{MnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}) = 277,0 \text{ g/mol}; M(\text{PbO}_2) = 239,0 \text{ g/mol}.$$

A kiindulási kristályos mangán-szulfát anyagmennyisége:

$$n(\text{MnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}) = (138\,500 \text{ g}) / (277,0 \text{ g/mol}) = 500 \text{ mol}.$$

Az ólom(IV)-oxid anyagmennyiségét a következőképp számíthatjuk ki. 2 mól mangán-szulfáthoz 5 mól PbO_2 szükséges (az PbO_2 anyagmennyisége 5/2-szerese a mangán-szulfát anyagmennyiségének):

$$n(\text{PbO}_2) = 5 / 2 \cdot (500 \text{ mol}) = 1\,250 \text{ mol}.$$

Így a szükséges PbO_2 tömege:

$$m(\text{PbO}_2) = (1\,250 \text{ mol}) \cdot (239 \text{ g/mol}) = 298\,750 \text{ g} = 298,75 \text{ kg}.$$

b. A kálium-permanganát moláris tömege:

$$M(\text{KMO}_4) = 158 \text{ g/mol}.$$

A kálium-permanganát moláris tömege:

$$n(\text{KMnO}_4) = (56\,880 \text{ g}) / (158 \text{ g/mol}) = 360 \text{ mol.}$$

1 mól $\text{MnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ -ból 1 mól KMnO_4 keletkezik elméletileg, így a kitermelés:

$$\text{Kitermelés} = (360 \text{ mol}) / (500 \text{ mol}) = 0,72 = 72\%.$$

Tehát 298,75 kilogramm PbO_2 -ra van szükség, és a kitermelés 72,00%-os.

7.25. példa:

200,0 gramm bóraxból ($\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7 \cdot 10 \text{H}_2\text{O}$) sósavas oldással bórsavat (H_3BO_3) állítunk elő. A kikristályosított bórsav tömege 90,00 gramm. Mekkora a folyamat kitermelése?



Relatív atomtömegek:

$$A_r(\text{Na}) = 23,0,$$

$$A_r(\text{B}) = 10,8,$$

$$A_r(\text{O}) = 16,0,$$

$$A_r(\text{H}) = 1,0.$$

Megoldás:

A rendezett reakcióegyenlet:



A bórax és a bórsav moláris tömege:

$$M(\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7 \cdot 10 \text{H}_2\text{O}) = 2 \cdot 23,0 + 4 \cdot 10,8 + 7 \cdot 16,0 + 10 \cdot 18,0 = 381,2 \text{ g/mol,}$$

$$M(\text{H}_3\text{BO}_3) = 3 \cdot 1,0 + 1 \cdot 10,8 + 3 \cdot 16,0 = 61,8 \text{ g/mol.}$$

A fenti moláris tömegekkel kiszámíthatóak az anyagmennyiségek is:

$$n(\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7 \cdot 10 \text{H}_2\text{O}) = m / M = (200,0 \text{ g}) / (381,2 \text{ g/mol}) = 0,52466 \text{ mol.}$$

$$n(\text{H}_3\text{BO}_3) = m / M = (90 \text{ g}) / (61,8 \text{ g/mol}) = 1,4563 \text{ mol}$$

A reakcióegyenlet alapján 1 mól bóraxból 4 mól bórsav keletkezik, így elméletileg 0,52466 mól bóraxból $4 \cdot 0,52466 \text{ mol} = 2,0986 \text{ mol}$ bórsav keletkezhet.

A kitermelés ez alapján:

$$\text{Kitermelés} = \frac{n_{\text{tényleges}}}{n_{\text{elméleti}}} = \frac{1,4563 \text{ mol}}{2,0986 \text{ mol}} = 0,6939 = 69,39\% .$$

A bóraxból 69,39%-os kitermeléssel sikerült előállítani a bórsavat.

7.5.5. Összetettebb sztöchiometriai feladatok

7.26. példa:

A pirokénsav ($\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_7$) olyan kénsav, mely kén-trioxidot tartalmaz (az ilyen oldatot szokták óleumnak, illetve vitriolnak is nevezni). A kén-trioxidot gyakran vas(III)-szulfát hevítésével állítják elő, majd ezt elnyeletik tömény kénsavban, az alábbi reakcióegyenletek alapján:





100,0 kilogramm, 4,00 tömeg% szennyeződést tartalmazó vas(III)-szulfátot elbontva, mekkora térfogatú 100%-os kénsavba kell bevezetni a keletkező kén-trioxidot, ha a kénsav sűrűsége $1,840 \text{ g/cm}^3$? Hány kilogramm pirokénsvat lehet előállítani a fenti mennyiségű $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$ -ből? A veszteségektől eltekintünk!

Relatív atomtömegek:

$$A_r(\text{Fe}) = 56,0,$$

$$A_r(\text{S}) = 32,0,$$

$$A_r(\text{O}) = 16,0,$$

$$A_r(\text{H}) = 1,0.$$

Megoldás:

A vas(III)-szulfát, a pirokénsvat és a kénsav moláris tömege:

$$M(\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3) = 2 \cdot 56,0 + 3 \cdot (1 \cdot 32,0 + 4 \cdot 16,0) = 400,0 \text{ g/mol},$$

$$M(\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_7) = 2 \cdot 1,0 + 2 \cdot 32,0 + 7 \cdot 16,0 = 178,0 \text{ g/mol},$$

$$M(\text{H}_2\text{SO}_4) = 2 \cdot 1,0 + 1 \cdot 32,0 + 4 \cdot 16,0 = 98,0 \text{ g/mol}.$$

A szennyezett vas(III)-szulfát $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$ -tartalma: $0,96 \cdot 100,0 \text{ kg} = 96,0 \text{ kg}$.

A $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$ anyagmennyisége:

$$n(\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3) = m(\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3) / M(\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3) = (96\,000 \text{ g}) / (400,0 \text{ g/mol}) = 240,0 \text{ mol}.$$

Az első egyenlet alapján 1 mól $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$ -ból 3 mól SO_3 keletkezik. A második egyenlet szerint 1 mól SO_3 1 mól H_2SO_4 -val reagál, miközben 1 mól $\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_7$ keletkezik.

Célszerű az alábbi módon gondolkozni: összességében 1 mól $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$ -ből 3 mól pirokénsvat ($\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_7$) tudunk előállítani, és ehhez 3 mól tömény kénsav is szükséges. Egyenes arányosságot kell alkalmazunk:

240 mól vas(III)-szulfátból $3 \cdot 240 \text{ mól} = 720 \text{ mól}$ pirokénsvat keletkezik, és ehhez $3 \cdot 240 \text{ mól} = 720 \text{ mól}$ tömény kénsav szükséges.

Így a pirokénsvat tömege:

$$m(\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_7) = (720 \text{ mol}) \cdot (178,0 \text{ g/mol}) = 128\,160 \text{ g} = 128,16 \text{ kg}.$$

A kénsav tömege:

$$m(\text{H}_2\text{SO}_4) = (720 \text{ mol}) \cdot (98,0 \text{ g/mol}) = 70\,560 \text{ g} = 70,56 \text{ kg},$$

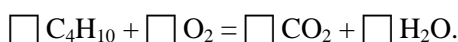
melyből a sűrűség segítségével számítható a térfogat is:

$$V(\text{H}_2\text{SO}_4) = m(\text{H}_2\text{SO}_4) / d(\text{H}_2\text{SO}_4) = (70,56 \text{ kg}) / (1,840 \text{ kg/dm}^3) = 38,35 \text{ dm}^3.$$

Tehát 70,56 kilogramm pirokénsvat lehet előállítani, melyhez 38,35 dm³ tömény kénsav szükséges.

7.27. példa:

Hány kilogramm bután (C_4H_{10}) égetésével tudunk 1,100 kg szén-dioxidot előállítani? Hány m^3 101,00 kPa nyomású és 300,0 K hőmérsékletű levegő (21 térfogat% O_2 , 79 térfogat% N_2) szükséges, ha azt 20,00%-os feleslegben alkalmazzuk? A rendezendő egyenlet:

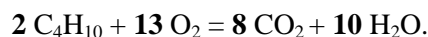


Relatív atomtömegek:

$$A_r(\text{C}) = 12,0, \quad A_r(\text{H}) = 1,0.$$

Megoldás:

A rendezett reakcióegyenlet:



A szükséges moláris tömegek:

$$M(\text{CO}_2) = 1 \cdot 12,0 + 2 \cdot 16,0 = 44,0 \text{ g/mol},$$

$$M(\text{C}_4\text{H}_{10}) = 4 \cdot 12,0 + 10 \cdot 1,0 = 58,0 \text{ g/mol}.$$

A CO_2 anyagmennyisége:

$$n(\text{CO}_2) = m / M = (1 \text{ 100 g}) / (44 \text{ g/mol}) = 25,00 \text{ mol}.$$

2 mól butánból 8 mól CO_2 keletkezik, így a bután mennyisége a szén-dioxid mennyiségének 1 / 4-e:

$$n(\text{C}_4\text{H}_{10}) = 1 / 4 \cdot n(\text{CO}_2) = 1 / 4 \cdot (25,00 \text{ mol}) = 6,250 \text{ mol}.$$

A bután tömege:

$$m(\text{C}_4\text{H}_{10}) = n(\text{C}_4\text{H}_{10}) \cdot M(\text{C}_4\text{H}_{10}) = (6,25 \text{ mol}) \cdot (58,0 \text{ g/mol}) = 362,5 \text{ g} = 0,3625 \text{ kg}.$$

1 mól bután égéséhez 13 / 2 mól = 6,5 mól O_2 szükséges, így az oxigén mennyisége:

$$n(\text{O}_2) = 6,5 \cdot 6,25 \text{ mol} = 40,625 \text{ mol}.$$

Mivel a levegőnek csak 21 mól%-a az oxigén, a levegő anyagmennyisége:

$$n(\text{levegő}) = n(\text{O}_2) / 0,21 = 40,625 / 0,21 = 193,45 \text{ mol}.$$

Az ideális gáztörvény segítségével a levegőtérfogat:

$$V = n \cdot R \cdot T / p = (193,45 \text{ mol}) \cdot (8,314 \text{ J/mol/K}) \cdot (300 \text{ K}) / (101 \text{ 000 Pa}) = 4,777 \text{ m}^3.$$

A feladat szövege alapján 20% feleslegben kell alkalmazni az oxigént:

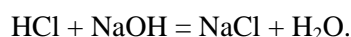
$$V' = 1,20 \cdot 4,777 \text{ m}^3 = 5,733 \text{ m}^3.$$

Tehát 0,3625 kilogramm butánt kell elégetnünk és ehhez 5,733 m³ levegő szükséges.

7.5.6. Titrálással kapcsolatos feladatok

Gyakran előfordul, hogy egy anyag mennyiségét vagy egy oldat koncentrációját szeretnénk meghatározni. Bizonyos esetekben erre úgynevezett titrálást alkalmazunk, mely alapvetően térfogatmérésen alapul. A titrálás folyamatát legegyszerűbb egy példán keresztül bemutatni.

Adott egy híg sósavoldat, viszont nem ismerjük, hogy mekkora benne a hidrogén-klorid anyagmennyisége. Ezért az oldathoz ismert koncentrációjú nátrium-hidroxid-oldatot adagolunk mindaddig, míg az összes hidrogén-klorid el nem reagál az alábbi reakcióegyenlet alapján:



Ez azt jelenti, hogy az adagolás során a hidrogén-klorid mennyisége folyamatosan csökken az oldatban (természetesen a nátrium-klorid mennyisége pedig növekszik), majd elérkezünk egy ponthoz, mikor a hidrogén-klorid éppen elfogy az oldatból. Azt a pontot, mikor az eredetileg az oldatban lévő hidrogén-klorid és a hozzáadagolt nátrium-hidroxid mennyisége éppen közömbösíti egymást, a titrálás **ekvivalenciapontjának** vagy **végpontjának** nevezzük (ez azt jelenti, hogy ekkor a hidrogén-klorid és nátrium-hidroxid mennyisége ekvivalens, azaz maradék nélkül elreagálnak). Ha tovább folytatjuk a nátrium-hidroxid-oldat adagolását, az oldat már lúgos kémhatású lesz (az oldatból az ekvivalenciapontban elfogyott a sósav).

Általánosságban egy titrálás: az ismeretlen mennyiségű anyagot egy alkalmasan megválasztott reakciópartnerrel reagáltatjuk, és ennek a reakciópartnernek a mennyiségét mérjük. Általában ennek az úgynevezett titrálószernek egy ismert koncentrációjú oldatát – melyet szokás **mérőoldatnak** nevezni – adagoljuk az ismeretlen mennyiségű (titrálendő) anyaghoz, miközben mérjük a titrálószer térfogatát. Mikor elérkezünk az ekvivalenciaponthoz, megállapítjuk, hogy mekkora térfogatú titrálószer adagoltunk a titrálendő anyaghoz, és ebből ki tudjuk számítani az ismeretlen mennyiséget a sztöchiometriai egyenlet alapján. (Ebből következik, hogy olyan titrálószerrel kell választani, mellyel a titrálendő anyag maradéktalanul elreagál, és a sztöchiometriai egyenletben feltüntetett arányok pontosan teljesülnek.)

A számítások során elsősorban sav-bázis, redoxi-, esetleg csapadékképződési vagy komplexképződési reakciót alkalmazunk, így az **alábbi fontosabb titrálásokat különböztethetjük meg:**

- Sav-bázis titrálás során egy sav (vagy bázis) mennyiségét, vagy egy savoldat (vagy lúgoldat) koncentrációját határozzuk meg ismert koncentrációjú mérőoldat segítségével.
- Redoxititrálás esetén egy oxialószer (vagy redukálószer) mennyisége vagy oldatának koncentrációja a kérdés. Természetesen az oxidálószerhez redukálószerrel kell adagolnunk, redukálószerhez pedig oxidálószerrel.
- Csapadékos titrálásnál az adott iont egy rosszul oldódó csapadéka formájában választjuk le a megfelelő ellenion oldata segítségével.
- Komplexometriás titrálásnál általában a komplexképző ligandum ismert koncentrációjú oldatával titráljuk az ismeretlen mennyiségű fémiont.

Későbbi tanulmányaink során részletesen tárgyalásra kerülnek majd a titrálások különféle fajtái, illetve az ekvivalenciapont jelzésének módszerei, itt elsősorban a titrálással kapcsolatos számításokkal foglalkozunk.

Bizonyos esetekben nem áll módunkban egyszerű titrálást végezni, például azért, mert a titrálási reakció túl lassú. Ilyen esetekben gyakran alkalmazhatunk visszatitrálást.

Visszatitrálás: a meghatározandó oldathoz feleslegben adunk ismert mennyiségű segédmérőoldatot, majd a segédmérőoldat feleslegét titráljuk egy mérőoldattal.

A visszatitrálás számítása során tehát adott az ismeretlen x mennyiség, melyhez hozzáadunk a y mennyiségű segédmérőoldatot. Az y mennyiségnek x -szel elreagál – a sztöchiometriai egyenlet szerint – megfelelő része, majd a maradékát egy másik mérőoldattal titráljuk meg.

A gyakorlati munka során a mérőoldatok koncentrációját gyakran faktor segítségével adják meg:

Faktor: a tényleges és a névleges koncentráció aránya.

Például a nátrium-hidroxid mérőoldat koncentrációja a levegő szén-dioxid-tartalmának következtében időben változik, de gyakran eleve nem tudunk kellő pontosságú oldatot készíteni. A gyors és könnyű számítások céljából általában a koncentrációkat szeretjük egyszerű formában megadni (például $0,100 \text{ mol/dm}^3$ HCl-oldat, $0,0200 \text{ mol/dm}^3$ KMnO_4 -oldat, $0,500 \text{ mol/dm}^3$ AgNO_3 -oldat, $0,0250 \text{ mol/dm}^3$ $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ -oldat), ám ez nem mindig sikerül. Például egy $0,0100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú nátrium-hidroxid-oldatot szeretnénk volna készíteni, ám a koncentrációt ellenőrizve

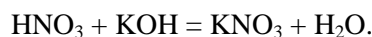
kiderült, hogy az $0,00987 \text{ mol/dm}^3$. Ilyenkor gyakran azt mondjuk, hogy az oldat névleges koncentrációja $0,0100 \text{ mol/dm}^3$, a faktora pedig $f = 0,987$. Tehát a faktor egy korrekciót jelent, mellyel a valódi koncentrációra korrigáljuk a névleges koncentráció értékét.

A mérőoldat tényleges koncentrációját megkapjuk, ha a faktoriall beszorozzuk a névleges koncentrációt:

$$c_{\text{tényleges}} = f \cdot c_{\text{névleges}}$$

7.28. példa

$10,0 \text{ cm}^3$ ismeretlen koncentrációjú salétromsav-oldatot $20,0 \text{ cm}^3$ térfogatú $0,0300 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú kálium-hidroxid-oldattal tudunk semlegesíteni az alábbi reakcióegyenlet szerint:



Mekkora a salétromsav-oldat koncentrációja?

Megoldás:

A kálium-hidroxid anyagmennyisége:

$$n(\text{KOH}) = c(\text{KOH}) \cdot V(\text{KOH}) = (0,0300 \text{ mol/dm}^3) \cdot (0,0200 \text{ dm}^3) = 6,000 \cdot 10^{-4} \text{ mol}.$$

A salétromsav és a kálium-hidroxid anyagmennyiségének meg kell egyeznie:

$$n(\text{HNO}_3) = n(\text{KOH}) = 6,000 \cdot 10^{-4} \text{ mol}.$$

Így a salétromsav-oldat koncentrációja:

$$c(\text{HNO}_3) = n(\text{HNO}_3) / V(\text{HNO}_3) = (6,000 \cdot 10^{-4} \text{ mol}) / (0,0100 \text{ dm}^3) = 0,0600 \text{ mol/dm}^3.$$

A salétromsav-oldat pontos koncentrációja $0,0600 \text{ mol/dm}^3$.

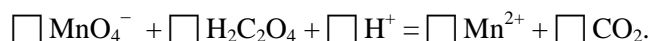
Megjegyzés: amennyiben a koncentráció és térfogat szorzatából anyagmennyiséget számolunk, érdemes tudni, hogy a cm^3 és mol/dm^3 szorzata éppen millimólt (mmol) ad:

$$(1 \text{ cm}^3) \cdot (1 \text{ mol/dm}^3) = (10^{-3} \text{ dm}^3) \cdot (1 \text{ mol/dm}^3) = 10^{-3} \text{ mol} = 1 \text{ mmol}.$$

Hasonlóan: $1 \text{ mol/dm}^3 = 1 \text{ mmol/cm}^3$.

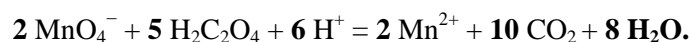
7.29. példa:

Mekkora annak az oxálsav- ($\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4$) oldatnak a koncentrációja, melynek $20,0 \text{ cm}^3$ -e savas közegben $16,8 \text{ cm}^3$ $0,0200 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú és $f = 0,995$ faktorú kálium-permanganát (KMnO_4) oldattal reagál az alábbi kiegészítendő reakcióegyenlet szerint:



Megoldás:

A kiegészített és rendezett reakcióegyenlet:



A kálium-permanganát oldat valódi koncentrációja:

$$c(\text{KMnO}_4) = f \cdot c_{\text{névleges}} = 0,995 \cdot 0,020 \text{ mol/dm}^3 = 0,0199 \text{ mol/dm}^3.$$

A kálium-permanganát anyagmennyisége:

$$n(\text{KMnO}_4) = c(\text{KMnO}_4) \cdot V(\text{KMnO}_4) = (0,0199 \text{ mol/dm}^3) \cdot (16,8 \text{ cm}^3) = 0,33432 \text{ mmol.}$$

Mivel 2 mól MnO_4^- az egyenlet alapján 5 mól oxálsavval reagál, az oxálsav anyagmennyisége:

$$n(\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4) = 5 / 2 \cdot n(\text{KMnO}_4) = 0,8358 \text{ mmol.}$$

Az oxálsav-oldat koncentrációja:

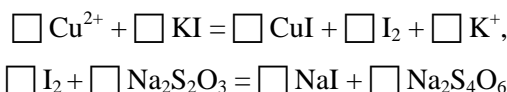
$$c(\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4) = n(\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4) / V(\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4) = (0,8358 \text{ mmol}) / (20,0 \text{ cm}^3) = 0,04179 \text{ mol/dm}^3.$$

Tehát az oxálsav-oldat koncentrációja (3 értékes jegy pontossággal) 0,0418 mol/dm³.

7.30. példa:

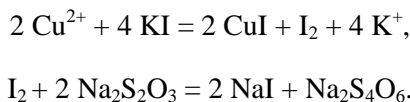
Egy réz-cink ötvözet réztartalmát határozzuk meg a következő módon: az ötvözet 0,1000 gramm tömegű mintáját maradék nélkül feloldjuk salétromsavban (Cu^{2+} - és Zn^{2+} -ionok keletkeznek), majd az oldat savtartalmát bepárlással eltávolítjuk, és a maradékot desztillált vízzel felhígítjuk. Az így kapott oldathoz feleslegben kálium-jodidot (KI) adunk, és az első egyenlet szerint kivált elemi jódot (I_2) a második egyenlet szerint titráljuk 0,0500 mol/dm³ koncentrációjú nátrium-tioszulfáttal ($\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$), a fogyás 22,9 cm³. Az ötvözet hány tömegszázaléka réz, ha a réz relatív atomtömege 65,5?

A rendezendő egyenletek:



Megoldás:

A rendezett egyenletek:



Az egyenletekből látható, hogy 2 mól Cu^{2+} -ion 1 mól elemi jódot generál, mely 2 mól $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ -tal reagál, tehát összességében 2 mól Cu^{2+} -ion 2 mól $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ -ot fogyaszt.

A nátrium-tioszulfát anyagmennyisége:

$$n(\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3) = c(\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3) \cdot V(\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3) = (0,0500 \text{ mol/dm}^3) \cdot (22,9 \text{ cm}^3) = 1,145 \text{ mmol.}$$

Ez a fentiek alapján megegyezik a Cu^{2+} -ionok anyagmennyiségével, azaz az ötvözetben található réz anyagmennyiségével:

$$n(\text{Cu}^{2+}) = n(\text{Cu}) = n(\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3) = 1,145 \text{ mmol.}$$

A réz tömege:

$$m(\text{Cu}) = n(\text{Cu}) \cdot A_r(\text{Cu}) = (0,001145 \text{ mol}) \cdot (65,5 \text{ g/mol}) = 0,0750 \text{ g.}$$

Az ötvözet réztartalma tömegszázalékban:

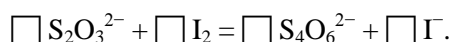
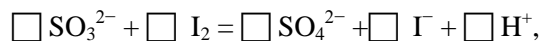
$$w(\text{Cu}) = (0,0750 \text{ g}) / (0,1000 \text{ g}) = 0,750 = 75,0\%.$$

Tehát az ötvözet 75,0 tömeg% rezet tartalmaz.

7.31. példa:

Egy $\text{Na}_2\text{SO}_3 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ és $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ keverék 1,5000 grammját desztillált vízben oldjuk, majd $100,0 \text{ cm}^3$ $0,0500 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú I_2 -oldatot adunk hozzá. A jód a szulfittal és a tioszulfáttal is reagál az alábbi egyenletek szerint. A I_2 feleslegének a meghatározásához $27,8 \text{ cm}^3$ $0,1000 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ -oldat szükséges (ehhez szintén a második egyenletet használjuk!) Mi a keverék tömeg%-os összetétele?

A kiegészítendő egyenletek:



Relatív atomtömegek:

$$A_r(\text{Na}) = 23,0$$

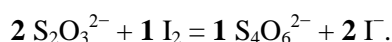
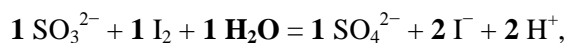
$$A_r(\text{S}) = 32,0$$

$$A_r(\text{H}) = 1,0$$

$$A_r(\text{O}) = 16,0.$$

Megoldás:

A rendezett és kiegészített egyenletek:



Moláris tömegek:

$$M(\text{Na}_2\text{SO}_3 \cdot 7\text{H}_2\text{O}) = 2 \cdot 23,0 + 1 \cdot 32,0 + 3 \cdot 16,0 + 7 \cdot 18,0 = 252 \text{ g/mol},$$

$$M(\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}) = 2 \cdot 23,0 + 2 \cdot 32,0 + 3 \cdot 16,0 + 5 \cdot 18,0 = 248 \text{ g/mol}.$$

A bemért jód (I_2) egy része a nátrium-szulfit, illetve a nátrium-tioszulfát oxidációjára fordítódott, a maradékát pedig megtitráltuk ismert koncentrációjú nátrium-tioszulfát-oldattal.

A bemért elemi jód (I_2) anyagmennyisége:

$$(100,0 \text{ cm}^3) \cdot (0,0500 \text{ mol/dm}^3) = 5,00 \text{ mmol}.$$

A titráláshoz felhasznált nátrium-tioszulfát mennyisége:

$$n(\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3) = (27,8 \text{ cm}^3) \cdot (0,1000 \text{ mol/dm}^3) = 2,78 \text{ mmol}.$$

Az egyenlet alapján a megtitrált maradék I_2 mennyisége a tioszulfát mennyiségének a fele:

$$n(\text{I}_2) = 1 / 2 \cdot 2,78 \text{ mmol} = 1,39 \text{ mmol}.$$

Reakciókban fogyott elemi jód anyagmennyisége:

$$n(\text{I}_2)_0 - n(\text{I}_2) = 5,00 \text{ mmol} - 1,39 \text{ mmol} = 3,61 \text{ mmol}.$$

Legyen a nátrium-szulfit anyagmennyisége x , a nátrium-tioszulfáté pedig y . A reakcióegyenletek alapján felírhatjuk a következő egyenletet (a jód a szulfittal 1 : 1, a tioszulfáttal 2 : 1 arányban reagál):

$$1 \cdot x + 0,5 \cdot y = 3,61 \text{ (mmol)}.$$

A moláris tömegek alapján felírhatjuk a minta össztömegét ($m = M \cdot n$):

$$252 \cdot x + 248 \cdot y = 1500 \text{ (mg)}.$$

Az egyenletrendszer megoldása: $x = 1,191$ mmol és $y = 4,838$ mmol.

A tömegszázalékos összetételhez ki kell számítanunk az egyes komponensek tömegét:

$$m(\text{Na}_2\text{SO}_3 \cdot 7\text{H}_2\text{O}) = (252 \text{ g/mol}) \cdot (0,001191 \text{ mol}) = 0,300 \text{ g.}$$

A kristályos nátrium-szulfid ($\text{Na}_2\text{SO}_3 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$) tömeg%-a:

$$w(\text{Na}_2\text{SO}_3 \cdot 7\text{H}_2\text{O}) = (0,300 \text{ g}) / (1,500 \text{ g}) = 0,200 = 20\%.$$

Tehát a minta összetétele: 20 tömegszázalék $\text{Na}_2\text{SO}_3 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ és 80 tömegszázalék $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$.

7.6. A kémiai reakciókat kísérő hőváltozások – Termokémia

A termokémia a kémiai tudomány azon ága, mely a kémiai reakciók energiváltozásával, hőváltozásaival foglalkozik.

A termokémiai folyamatok vizsgálatánál elkülönítjük a vizsgált rendszert és a környezetét. A rendszer lehet nyitott, zárt és elszigetelt.

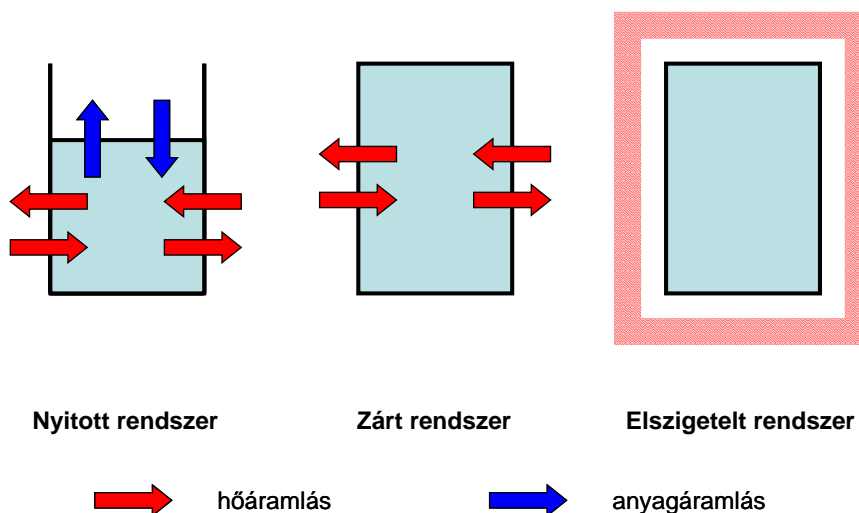
Nyitott rendszer: a rendszer és a környezet között hőcsere és anyagáramlás is lehetséges.

Erre példa a következő kísérlet: kalcium-karbonátra sósavat öntünk egy nyitott lombikban. A keletkező szén-dioxid gáz eltávozik a lombikból, tehát anyagáramlás van a rendszer és környezete között. Abban az esetben, ha anyag távozik el egy rendszerből, az természetesen hőváltozással is jár, mivel a távozó anyagnak van valamekkora hőkapacitása.

Zárt rendszer: nincs anyagáramlás a rendszer és környezete között, viszont hőáramlás lehetséges.

Például a fenti kísérletet légmentesen ledugózott lombikban elvégezve, a szén-dioxid nem tud eltávozni, így nincs anyagáramlás.

Elszigetelt (vagy izolált) rendszer: a rendszer a környezetével sem anyagot, sem hőt nem cserél (zárt rendszer, melyet hőszigetelés választ el a környezetétől).



7.6.1. ábra: A vizsgált rendszer és környezete

Attól függően, hogy egy folyamat során energia szabadul fel, vagy nyelődik el, ismerünk exoterm és endoterm változásokat.

Exoterm változás: a folyamat során hő szabadul fel, a vizsgált rendszer lead hőt a környezet felé. A konvenció szerint a rendszer szempontjából nézve az exoterm változáshoz negatív előjelű hőváltozást rendelünk („leadja a hőt”, exo- = külső, kifelé irányuló).

Endoterm változás: a folyamat során a környezet ad át hőt a rendszernek. Ha a rendszer szempontjából vizsgáljuk a hőváltozást, akkor pozitív előjelű a hő (a rendszer hőt kap a környezetétől, endo- = belső, befelé irányuló).

Amennyiben nem történik munkavégzés, a rendszer által leadott hőnek és a környezet által felvett hőnek abszolút értékükben meg kell egyezniük. Ha a rendszer lead Q hőmennyiséget, a rendszer energiája Q -val csökken, viszont ezzel egy időben a környezet energiája Q -val növekszik. Tehát az energiaváltozás mértéke azonos, akár a rendszer, akár a környezet szempontjából vizsgáljuk a hőátadást, csak a változás előjele ellentétes.

Milyen termikus folyamat megy végbe, ha a teafőzéshez vizet melegítünk? És ha beteszünk a hűtőszekrénybe egy darabka szobahőmérsékletű sajtot? A melegítés során hőt közlünk a vízzel („rendszerrel”), tehát a folyamat endoterm: növekszik a víz energiája, növekszik a hőmérséklete. A hűtőgépbe tett szobahőmérsékletű sajtból hőt vonunk el (azaz a sajt hőt ad le a környezetének), így, mivel csökken az energiája, csökken a hőmérséklete. A hűtés így exoterm folyamat, a rendszer oldaláról nézve.

7.6.1. Hőmérséklet-kiegyenlítődés: termikus egyensúly

Most vizsgáljuk meg, mi történik, ha két különböző hőmérsékletű tárgy vagy anyag között jön létre termikus kölcsönhatás! Vegyünk egy pohár jégbe hűtött pezsgőt és egy pohár szobahőmérsékletű frissen facsart narancslevelet! A két pohár tartalmát összeöntve a koktél hőmérséklete a két kiindulási anyag hőmérséklete között van, hőmérséklet-kiegyenlítődés történik, beáll a **termikus egyensúly**. Ám nem csak keveredéskor alakul ki termikus egyensúly. Régen például az ágyakat úgy fűtötték be, hogy a sparheltlen felmelegített téglát betették a paplan alá. A téglát ilyenkor hőt ad le, hőmérséklete csökken, az eredetileg hideg ágyban pedig növekszik a hőmérséklet. Mindez addig megy végbe, míg a hőmérsékletek ki nem egyenlítődnek, azaz be nem áll a termikus egyensúly.

Bizonyos esetben a termikus kölcsönhatásban részt vevő egyik tárgy hőmérsékletében csak csekély változás történik. Például mikor a kovács az izzó vasat a hideg vízbe mártja, a vas igen gyorsan lehül, miközben a víz hőmérséklete nem változik jelentősen. Ennek oka, hogy a vas és a víz hőkapacitása között nagy a különbség. A víznek sokkal nagyobb a hőkapacitása, mint a vasnak, ezért a vas hőmérséklete nagyobb mértékben változik.

Hőkapacitás: megadja, hogy mennyi hőt kell közölni a rendszerrel, hogy annak hőmérséklete egységnyivel emelkedjen, vagy mennyi hőt kell elvonni a rendszerből, hogy annak hőmérséklete egységnyivel csökkenjen.

Egy C hőkapacitású tárgy hőmérsékletének T_1 -ről T_2 -re növeléséhez szükséges hőmennyiség:

$$Q = C \cdot (T_2 - T_1).$$

Figyelem! Mindig a végállapot hőmérsékletéből (itt T_2) vonjuk ki a kiindulási állapot hőmérsékletét (T_1)!

Legyen a víz hőkapacitása C_1 , hőmérséklete T_1 , a vasé C_2 , illetve T_2 , a kialakuló közös hőmérséklet T . A víz hőmérséklete T_1 -ről T -re növekszik, az eközben felvett hő (előjele pozitív!): $Q_{\text{felvett}} = C_1 \cdot \Delta T_1 = C_1 \cdot (T - T_1)$.

A vas viszont lehül, hőmérséklete T_2 -ről T -re csökken. A vas által leadott hő: $Q_{\text{leadott}} = C_2 \cdot \Delta T_2 = C_2 \cdot (T - T_2)$, és mivel $T < T_2$, előjele negatív (exoterm változás). Feltételezhetjük, hogy a vas által leadott összes hőt felveszi a víz, azaz:

$$Q_{\text{felvett}} + Q_{\text{leadott}} = 0.$$

Behelyettesítve a mennyiségeket:

$$C_1 \cdot (T - T_1) + C_2 \cdot (T - T_2) = 0.$$

Az egyenletet megoldva T-re a következő kifejezést kapjuk:

$$T = \frac{C_1 \cdot T_1 + C_2 \cdot T_2}{C_1 + C_2}.$$

Mint a képletből látható, a kialakuló közös hőmérséklet függ a kiindulási hőmérsékletektől és a hőkapacitásoktól is! A példa szerint a víz hőkapacitása sokkal nagyobb, mint a vasé, tehát $C_1 \gg C_2$, a kialakuló közös hőmérséklet T_1 -hez igen közel van.

(Megjegyzés: a $Q_{\text{felvett}} + Q_{\text{leadott}} = 0$ egyenletet más formában is felírhatjuk: $|Q_{\text{felvett}}| = |Q_{\text{leadott}}|$, azaz a felvett és leadott hő – abszolút értékben – megegyezik. Ezt azért fontos hangsúlyozni, mert a hőmérsékletváltozást mindig a végállapot és a kiindulási állapot különbségeként értelmezzük. Mivel $T < T_2$, a hőmérsékletkülönbség negatív, ezért szükséges az abszolútérték-jel.)

Természetesen egy anyag hőkapacitása függ annak mennyiségétől is: például ha két kilogramm víz hőmérsékletét szeretnénk egységnyivel megemelni, ahhoz kétszer akkora hőmennyiség szükséges, mint mikor egy kilogramm víz hőmérsékletét emeljük egységnyivel. Érdekes ezért a fajlagos és moláris hőkapacitás fogalmával is megismerkednünk:

Fajlagos hőkapacitás: megadja, hogy mennyi hőt kell közölni 1 kilogramm tömegű anyaggal ahhoz, hogy a hőmérséklete 1 K-nel (1 °C-kal) megemelkedjen.

Moláris hőkapacitás: megadja, hogy 1 mól anyagmennyiségű anyaggal mennyi hőt kell közölni, hogy a hőmérséklete 1 K-nel (1 °C-kal) megemelkedjen.

A homogén anyag hőkapacitása kifejezhető a fajlagos hőkapacitás (c), illetve a moláris hőkapacitás (c_m) segítségével:

$$C = c \cdot m \cdot \Delta T = c_m \cdot n \cdot \Delta T.$$

A fajlagos és moláris hőkapacitások között az átváltás könnyen elvégezhető a moláris tömeg ismeretében:

$$c = \frac{Q}{m \cdot \Delta T} = \frac{Q}{(n \cdot M) \cdot \Delta T} = \frac{1}{M} \cdot \frac{Q}{n \cdot \Delta T} = \frac{c_m}{M}.$$

Tehát a moláris hőkapacitás: $c_m = M \cdot c$.

7.32. példa:

Egy hőszigetelt edénybe 1,000 kilogramm tömegű, 20,0 °C hőmérsékletű vizet öntünk, majd behelyezünk egy 100,0 °C hőmérsékletű, 3,000 kilogramm tömegű rézkockát. Mekkora a kialakuló közös hőmérséklet?

A víz és a réz hőkapacitása: $c(\text{víz}) = 4,182 \text{ kJ}/(\text{kg} \cdot ^\circ\text{C})$, $c(\text{réz}) = 0,385 \text{ kJ}/(\text{kg} \cdot ^\circ\text{C})$.

Megoldás:

Írjuk fel a víz és a réz hőváltozását!

$$Q_{\text{felvett}}(\text{víz}) + Q_{\text{leadott}}(\text{réz}) = 0$$

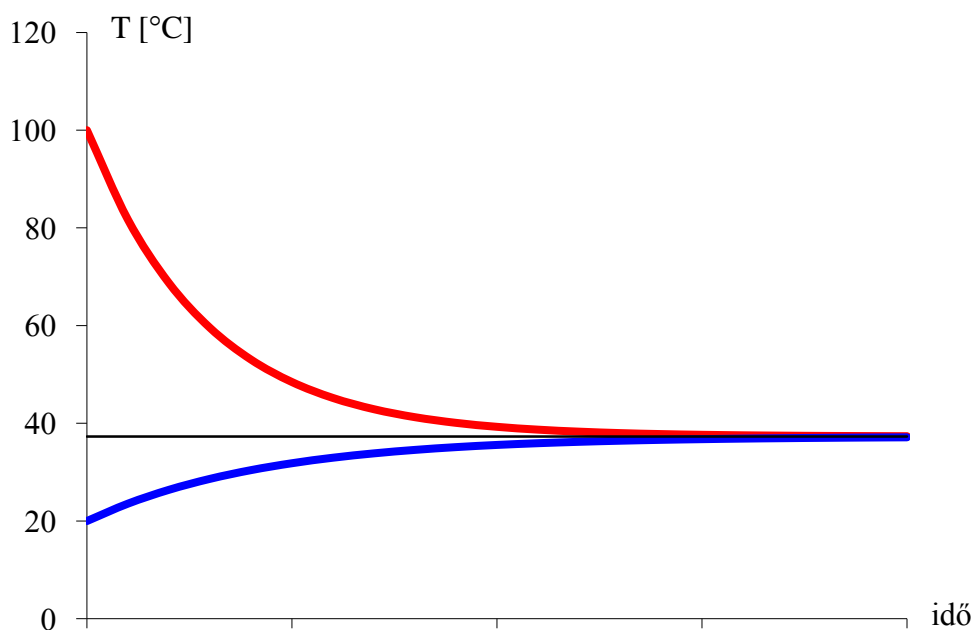
$$c_{\text{víz}} \cdot m_{\text{víz}} (T - T_{\text{víz}}) + c_{\text{réz}} \cdot m_{\text{réz}} \cdot (T - T_{\text{réz}}) = 0$$

$$T = \frac{c_{\text{víz}} \cdot m_{\text{víz}} \cdot T_{\text{víz}} + c_{\text{réz}} \cdot m_{\text{réz}} \cdot T_{\text{réz}}}{c_{\text{víz}} \cdot m_{\text{víz}} + c_{\text{réz}} \cdot m_{\text{réz}}}$$

Az adatokat behelyettesítve megkapjuk a közös hőmérsékletet:

$$T = \frac{4,182 \cdot 1,000 \cdot 20,0 + 0,385 \cdot 3,000 \cdot 100,0}{4,182 \cdot 1,000 + 0,385 \cdot 3,000} \text{ K} = 37,3 \text{ } ^\circ\text{C}.$$

A víz (kék görbe) és a réz (piros görbe) hőmérsékletének kiegyenlítődését az alábbi ábrán követhetjük:



7.6.1.1. ábra: Réz (piros) és víz (kék) hőmérséklete az idő függvényében

Térjünk vissza a termikus kölcsönhatáshoz! Bonyolultabb a helyzet, ha halmazállapot-változás is végbemegy a hőmérséklet-kiegyenlítődés mellett. Már láttuk a halmazokkal foglalkozó fejezetben, hogy a halmazállapot-változások során a hőmérséklet állandó, mégis történik hőcsere. **Látens hőnek** nevezzük azt a formáját, melynek felszabadulása vagy elnyelődése során nincs hőmérséklet-változás.

A halmazállapot-változások során fejlődő vagy elnyelődő hő függ az átalakuló anyag tömegétől, illetve anyagmennyiségétől. Például **fajlagos olvadáshő** (L_{olv}) 1 kilogramm szilárd anyag állandó hőmérsékleten történő felolvasztásához szükséges hőmennyisége, míg a **moláris olvadáshő** ($L_{olv,m}$) 1 mól szilárd anyag azonos hőmérsékletű folyadékká alakításához szükséges hőmennyiség. (A többi halmazállapot-változáshoz tartozó látens hőt a megfelelő fejezetben már tárgyaltuk.)

$$L_{olv} = \frac{Q_{olv}}{m} \quad L_{olv,m} = \frac{Q_{olv}}{n}$$

A fajlagos és moláris hőkapacitásokhoz hasonlóan a fajlagos és moláris látens hők is átszámíthatóak egymásba: $L_{olv,m} = M \cdot L_{olv}$.

7.33. példa:

Mennyi hő szükséges ahhoz, hogy 2,500 kg $-25,0 \text{ } ^\circ\text{C}$ hőmérsékletű jeget $50,0 \text{ } ^\circ\text{C}$ hőmérsékletű cseppfolyós vízzé alakítsunk?

$$L_{olv} = 335 \text{ kJ/kg}, c(\text{jég}) = 2,090 \text{ kJ/(kg}\cdot^\circ\text{C)}, c(\text{cseppfolyós víz}) = 4,182 \text{ kJ/(kg}\cdot^\circ\text{C)}.$$

Megoldás:

A feladatban felvázolt folyamat három részlépből áll:

- a $T_1 = -25\text{ °C}$ -os jég felmelegítése olvadáspontjára ($T_{\text{op}} = 0\text{ °C}$): Q_1 ,
- a jég megolvasztása (állandó 0 °C hőmérsékleten): Q_2 ,
- a 0 °C -os víz felmelegítése 50 °C -ra: Q_3 .

A folyamathoz szükséges hő:

$$Q = Q_1 + Q_2 + Q_3 = c(\text{jég}) \cdot m \cdot (T_{\text{op}} - T_1) + L_{\text{olv}} \cdot m + c(\text{víz}) \cdot m \cdot (T_2 - T_{\text{op}}) =$$

$$Q = [c(\text{jég}) \cdot (T_{\text{op}} - T_1) + L_{\text{olv}} + c(\text{víz}) \cdot (T_2 - T_{\text{op}})] \cdot m.$$

Behelyettesítve az adatokat (kJ/kg, kg, °C mértékegységekben):

$$Q = [2,090 \cdot (0 - (-25)) + 335 + 4,182 \cdot (50 - 0)] \cdot 2,500 = 1490,875 \text{ kJ}.$$

Tehát a fenti jégmennyiség cseppfolyós vízzé alakításához 1491 kJ hőre van szükség.

7.34. példa:

Mekkora tömegű $160,0\text{ °C}$ hőmérsékletű vízgőzt kell egy hőszigetelt edényben lévő $2,500$ kilogramm tömegű és $-25,0\text{ °C}$ hőmérsékletű jégtömbre fűtatni, hogy a keletkező víz hőmérséklete $50,0\text{ °C}$ legyen? Mekkora lesz az edényben található víz tömege, ha feltételezzük, hogy az összes gőz $50,0\text{ °C}$ -os vízzé alakul?

$$c(\text{jég}) = 2,090 \text{ kJ}/(\text{kg} \cdot \text{°C}), \quad c(\text{cseppfolyós víz}) = 4,182 \text{ kJ}/(\text{kg} \cdot \text{°C}),$$

$$c(\text{vízgőz}) = 2,008 \text{ kJ}/(\text{kg} \cdot \text{°C}), \quad L_{\text{olv}} = 335 \text{ kJ}/\text{kg}, \quad L_{\text{forr}} = 2260 \text{ kJ}/\text{kg}.$$

Megoldás:

A $-25,0\text{ °C}$ hőmérsékletű víz $50,0\text{ °C}$ -ra melegítéséhez szükséges hőt már az előző feladatban kiszámítottuk, ez $Q(\text{jég}) = 1490,875 \text{ kJ}$.

Most vizsgáljuk meg a gőz kondenzációját!

– A $T_1 = 160,0\text{ °C}$ -os gőznek a víz forráspontjára, $T_{\text{fp}} = 100,0\text{ °C}$ -ra kell hűlnie ahhoz, hogy kondenzálódjon (Q_1 : T_1 hőmérsékletű gőz \rightarrow T_{fp} hőmérsékletű gőz).

– A $100,0\text{ °C}$ -os gőz $100,0\text{ °C}$ -os cseppfolyós vízzé alakul a lecsapódás (kondenzáció) során (Q_2 : gőz \rightarrow cseppfolyós víz).

– Ezután a víz hőmérséklete $100,0\text{ °C}$ -ról $T_2 = 50,0\text{ °C}$ -ra csökken (Q_3 : T_{fp} hőmérsékletű víz \rightarrow T_2 hőmérsékletű víz). A gőz tömege legyen m , így a folyamat lépései alapján a hőmennyiség:

$$Q(\text{gőz}) = Q_1 + Q_2 + Q_3 = c(\text{gőz}) \cdot m \cdot (T_{\text{fp}} - T_1) + L_{\text{kond}} \cdot m + c(\text{víz}) \cdot m \cdot (T_2 - T_{\text{fp}}) =$$

$$Q(\text{gőz}) = [c(\text{gőz}) \cdot (T_{\text{fp}} - T_1) + (-L_{\text{forr}}) + c(\text{víz}) \cdot (T_2 - T_{\text{fp}})] \cdot m.$$

Behelyettesítve az értékeket:

$$Q(\text{gőz}) = [2,008 \cdot (100 - 160) + (-2260) + 4,182 \cdot (50 - 100)] \cdot m = (-2\,589,58 \text{ kJ}/\text{kg}) \cdot m.$$

A jég által felvett és a gőz által leadott hőnek ki kell egyenlíteni egymást:

$$Q(\text{jég}) + Q(\text{gőz}) = 0,$$

$$1490,875 + (-2\,589,58 \text{ kJ}/\text{kg}) \cdot m = 0.$$

Az egyenlet megoldása: $m = 0,576 \text{ kg}$, ennyi gőz szükséges a folyamathoz. A hőmérséklet-egyenlítődés végén $2,500 \text{ kg} + 0,576 \text{ kg} = 3,076 \text{ kg}$ tömegű, 50 °C hőmérsékletű cseppfolyós víz található az edényben.

7.35. példa:

Egy 2,000 kilogramm tömegű és $-20,0\text{ }^{\circ}\text{C}$ hőmérsékletű jégtömböt egy hőszigetelt edényben lévő 0,500 kilogramm tömegű, $15,0\text{ }^{\circ}\text{C}$ hőmérsékletű vízbe helyezünk. Mekkora a hőmérséklet-kiegyenlítés után a rendszer hőmérséklete?

$$L_{olv} = -L_{fagyás} = 335\text{ kJ/kg}, c(\text{jég}) = 2,090\text{ kJ/(kg}\cdot^{\circ}\text{C}), c(\text{cseppfolyós víz}) = 4,182\text{ kJ/(kg}\cdot^{\circ}\text{C}).$$

Megoldás:

Előre nem tudjuk eldönteni, hogy az alábbi három lehetőség közül melyik teljesül:

- 1.) A kialakuló közös hőmérséklet $0\text{ }^{\circ}\text{C}$ alatti, tehát az összes víz lehül és megfagy, majd hőmérséklete $0\text{ }^{\circ}\text{C}$ alá hűl. Azaz nem marad folyadék halmazállapotú víz, csak szilárd jég található az edényben. (Ez például abban az esetben történhet meg, ha a jég mennyisége nagyon nagy – így a felmelegedéséhez szükséges hő fedezni tudja a víz hőmérséklet-csökkenését, megfagyását és hőmérsékletének $0\text{ }^{\circ}\text{C}$ alá csökkenését. Mivel itt a jég és a folyékony víz tömege összemérhető, várhatóan a kialakuló közös hőmérséklet nem lesz $0\text{ }^{\circ}\text{C}$ alatt, ám számítás nélkül ezt nem jelenthetjük ki egyértelműen!)
- 2.) A közös hőmérséklet $0\text{ }^{\circ}\text{C}$ felett van: az összes jég felmelegszik $0\text{ }^{\circ}\text{C}$ -ra és felolvad, majd tovább melegszik. Az edényben csak folyadék halmazállapotú vizet találunk. Ez történik például, ha egy nagy vödör vízbe egy kis jégkockát dobunk, a jég felolvad anélkül, hogy a víz hőmérséklete számottevően változna.)
- 3.) A közös hőmérséklet $0\text{ }^{\circ}\text{C}$. Ebben az esetben a jég felmelegszik $0\text{ }^{\circ}\text{C}$ -ra, a víz pedig lehül $0\text{ }^{\circ}\text{C}$ -ra (kétfázisú a rendszer). Az egyensúlyban lévő jég és víz tömegének aránya a két anyag mennyiségének és kiindulási hőmérsékletének függvénye.

A kialakuló közös hőmérséklet legyen T , a jég kezdeti hőmérséklete T_1 , tömege m_1 , a víz kiindulási hőmérséklete T_2 , tömege m_2 .

Most vizsgáljuk meg a három esetet külön-külön!

- 1.) A hőmérlegegyenlet:

$$Q(\text{jég}) + Q(\text{víz}) = 0.$$

A jég hőmérséklete T_1 -ről T -re emelkedik, a víz hőmérséklete T_2 -ről $0\text{ }^{\circ}\text{C}$ -ra csökken, majd megfagy, és hőmérséklete – már jég formában – T -re csökken. Természetesen a megoldásnak teljesítenie kell a $T < 0\text{ }^{\circ}\text{C}$ feltételt.

A jég hőváltozása: $Q(\text{jég}) = c(\text{jég}) \cdot m_1 \cdot (T - T_1)$.

A víz hőváltozása: $Q(\text{víz}) = c(\text{víz}) \cdot m_2 \cdot (0\text{ }^{\circ}\text{C} - T_2) + L_{fagyás} \cdot m_2 + c(\text{jég}) \cdot m_2 \cdot (T - 0\text{ }^{\circ}\text{C})$.

$$c(\text{jég}) \cdot m_1 \cdot (T - T_1) + c(\text{víz}) \cdot m_2 \cdot (0\text{ }^{\circ}\text{C} - T_2) + L_{fagyás} \cdot m_2 + c(\text{jég}) \cdot m_2 \cdot (T - 0\text{ }^{\circ}\text{C}) = 0.$$

A mennyiségeket behelyettesítve (kJ, illetve kg mértékegységekkel):

$$2,090 \cdot 2,000 \cdot [T - (-20)] + 4,182 \cdot 0,500 \cdot (0 - 15) + (-335) \cdot 0,500 + 2,090 \cdot 0,500 \cdot (T - 0) = 0,$$

$$T = +22,1\text{ }^{\circ}\text{C}.$$

A kapott eredmény szerint a közös hőmérséklet $0\text{ }^{\circ}\text{C}$ feletti, ezért ellentmondáshoz jutottunk. Tehát megállapítható, hogy a hőmérséklet legalább $0\text{ }^{\circ}\text{C}$.

- 2.) Az előző ponthoz hasonlóan felírjuk a hőváltozásokat. Természetesen a közös hőmérsékletnek $0\text{ }^{\circ}\text{C}$ -nál nagyobbobbnak kell lennie (a feltételezés alapján jég nem maradhat a víz mellett).

A jég hőváltozása: $Q(\text{jég}) = c(\text{jég}) \cdot m_1 \cdot (0\text{ }^{\circ}\text{C} - T_1) + L_{olv} \cdot m_1 + c(\text{víz}) \cdot m_1 \cdot (T - 0\text{ }^{\circ}\text{C})$

A víz hőváltozása: $Q(\text{víz}) = c(\text{víz}) \cdot m_2 \cdot (T - T_1)$,

$$Q(\text{jég}) + Q(\text{víz}) = 0,$$

$$c(\text{jég}) \cdot m_1 \cdot (0 \text{ }^\circ\text{C} - T_1) + L_{\text{olv}} \cdot m_1 + c(\text{víz}) \cdot m_1 \cdot (T - 0 \text{ }^\circ\text{C}) + c(\text{víz}) \cdot m_2 \cdot (T - T_1) = 0,$$

$$2,090 \cdot 2,000 \cdot [0 - (-20)] + 335 \cdot 0,500 + 4,182 \cdot 0,500 \cdot (T - 0) + 4,182 \cdot 0,500 \cdot (T - 15) = 0,$$

$$T = -52,5 \text{ }^\circ\text{C}.$$

Ismét ellentmondásba ütköztünk, nem teljesül a kezdeti feltétel, azaz, hogy a közös hőmérséklet a jég olvadáspontjánál nagyobb.

- 3.) Az 1.) és 2.) pont alapján kizárásos alapon következik, hogy a közös hőmérséklet $0 \text{ }^\circ\text{C}$, azaz sem a jég teljes mennyisége, sem a víz teljes mennyisége nem tud felolvadni. A jég és a folyékony víz – normál légköri nyomáson – csak $0 \text{ }^\circ\text{C}$ hőmérsékleten lehet egyensúlyban egymással!

Számítsuk ki az egymással egyensúlyban lévő jég és a víz tömegét!

Először el kell döntenünk, hogy a fagyáspontjára lehűlt víz egy része fog megfagyni, vagy pedig az olvadáspontjára melegedett jég egy része fog megolvadni. Ehhez az alábbi hőváltozások nagyságát (azaz abszolút értékét) kell összehasonlítani:

A jég hőmérsékletének $0 \text{ }^\circ\text{C}$ -ra növekedéséhez szükséges hő:

$$Q_1 = c(\text{jég}) \cdot m_1 \cdot (0 \text{ }^\circ\text{C} - T_1) = 2,090 \cdot 2,000 \cdot [0 - (-20)] \text{ kJ} = 82,6 \text{ kJ}.$$

A víz hőmérsékletének $0 \text{ }^\circ\text{C}$ -ra csökkenése során felszabaduló hő:

$$Q_2 = c(\text{víz}) \cdot m_1 \cdot (T - 0 \text{ }^\circ\text{C}) = 4,182 \cdot 0,500 \cdot (0 - 15) = -31,365 \text{ kJ}.$$

A két hőmennyiséget összehasonlítva azt tapasztaljuk, hogy a jég felmelegedéséhez szükséges hőt a víz lehűlése nem tudja fedezni, $|Q(\text{víz})| < |Q(\text{jég})|$. Viszont a jégnek $0 \text{ }^\circ\text{C}$ -ra kell melegednie, különben nem tud felolvadni! A szükséges hőt a víz egy részének kifagyása fedezi. A kifagyott víz tömege legyen m !

$$Q_1 + L_{\text{fagyás}} \cdot m + Q_2 = 0$$

$$82,6 + (-335) \cdot m + (-31,365) = 0$$

$$m = 0,153 \text{ kg}.$$

Tehát a $0,153 \text{ kg}$ tömegű víz kifagy, így az egyensúlyban lévő rendszerben $2,153 \text{ kilogramm}$ $0 \text{ }^\circ\text{C}$ hőmérsékletű jég és $0,347 \text{ kilogramm}$ tömegű $0 \text{ }^\circ\text{C}$ hőmérsékletű cseppfolyós víz található.

7.36. példa:

Egy fagyasztószekrényből kivesszünk $1,000 \text{ kg}$ $-15,0 \text{ }^\circ\text{C}$ hőmérsékletű jégtömböt, és egy hőszigetelt edénybe helyezzük. Mekkora tömegű $100,0 \text{ }^\circ\text{C}$ hőmérsékletű vízgőzt kell a jégtömbre fűválnunk, ha azt szeretnénk, hogy a keletkező kétfázisú elegy $\frac{1}{4}$ -e jég legyen? A folyamat során nincs sem anyagvesztés, sem hővesztés!

$$c(\text{jég}) = 2,090 \text{ kJ}/(\text{kg} \cdot \text{ }^\circ\text{C}), c(\text{cseppfolyós víz}) = 4,182 \text{ kJ}/(\text{kg} \cdot \text{ }^\circ\text{C}), L_{\text{olv}} = 335 \text{ kJ}/\text{kg}, L_{\text{forr}} = 2260 \text{ kJ}/\text{kg}.$$

Megoldás:

A jégnek fel kell melegednie $0 \text{ }^\circ\text{C}$ -ra, majd egy részének meg kell olvadnia. A vízgőznek $100 \text{ }^\circ\text{C}$ -on kondenzálnia kell, majd a keletkezett $100 \text{ }^\circ\text{C}$ -os cseppfolyós víznek $0 \text{ }^\circ\text{C}$ -ra kell hűlnie.

Legyen a szükséges gőz mennyisége m_2 , a jég kiindulási tömege m_1 ! Ekkor az elegy össztömege: $m_1 + m_2$. A folyamat végén a jég tömege $(m_1 + m_2) / 4$, a többi jégnek fel kell olvadnia! A felolvadt jég tömege: $m_1 - (m_1 + m_2) / 4 = (m_1 - m_1 / 4) - m_2 / 4 = (3 \cdot m_1 - m_2) / 4$.

Írjuk fel az egyes folyamatokhoz tartozó hőváltozásokat!

Jég hőmérsékletének növekedéséhez ($T_1 \rightarrow T_{op}$) szükséges hő: $c(\text{jég}) \cdot m_1 \cdot (T_{op} - T_1)$.

A jég olvadásához szükséges hő mennyisége: $L_{olv} \cdot (3 \cdot m_1 - m_2) / 4$.

Így a jég által felvett hő:

$$Q(\text{jég}) = c(\text{jég}) \cdot m_1 \cdot (T_{op} - T_1) + L_{olv} \cdot (3 \cdot m_1 - m_2) / 4.$$

A gőz kondenzációja és a keletkező víz hőmérsékletének csökkenése ($T_{forr} = 100 \text{ °C} \rightarrow T_{op} = 0 \text{ °C}$) során felszabaduló hőmennyiség:

$$Q(\text{gőz}) = L_{kond} \cdot m_2 + c(\text{víz}) \cdot m_2 \cdot (T_{op} - T_{fp}).$$

Így felírhatjuk a hőmérleget:

$$Q(\text{jég}) + Q(\text{víz}) = 0,$$

$$c(\text{jég}) \cdot m_1 \cdot (T_{op} - T_1) + L_{olv} \cdot (3 \cdot m_1 - m_2) / 4 + L_{kond} \cdot m_2 + c(\text{víz}) \cdot m_2 \cdot (T_{op} - T_{fp}) = 0.$$

Behelyettesítve a mennyiségeket:

$$2,090 \cdot 1,000 \cdot [0 - (-15)] + 335 \cdot (3 \cdot 1,000 - m_2) / 4 + [(-2260 + 4,182 \cdot (0 - 100))] \cdot m_2 = 0.$$

Az egyenlet megoldása: $m_2 = 0,102 \text{ kg}$. Tehát 0,102 kilogrammnyi 100 °C-os gőzre van szükségünk.

7.6.2. Oldódás során tapasztalható hőváltozások

Vizsgáljuk meg, mi történik, ha nátrium-hidroxidot oldunk vízben. Ekkor azt tapasztaljuk, hogy az oldat erőteljesen melegszik. A nátrium-hidroxid oldódása során felszabaduló hő az oldat felmelegítésére fordítódik. Hogyan tudnánk állandó hőmérsékleten tartani az oldat hőmérsékletét? Hűteni kellene az oldatot, a felszabaduló hőt el kell vonnunk valamilyen külső segítséggel (például vízzel vagy jéggel kell hűtenünk a lombikot). Ismerünk olyan anyagokat is, melyeknek endoterm az oldódása. Ilyen például a kálium-nitrát vagy ammónium-nitrát oldódása vízben: az oldódáshoz hő szükséges, melyet a környezetéből (gyakorlatilag magából az oldatból) von el. Ennek következtében az oldat lehül. Az alábbi videón különböző anyagok oldódásának hőeffektusait szemléltetjük:



7.6.2.1. videó: Oldódás során tapasztalható hőváltozások

Moláris oldáshőnek nevezzük azt a hőmennyiséget, mely egymólnyi anyag (végtelen) nagy mennyiségű oldószerben történő oldódása során felszabadul vagy elnyelődik. (Azért szükséges a „végtelen” mennyiségű oldószer, hogy nagyon híg oldat keletkezzen. Így a feloldódott részecskék egymással már nem tudnak kölcsönhatásba lépni – a kölcsönhatás energiája befolyásolná az oldáshőt.)

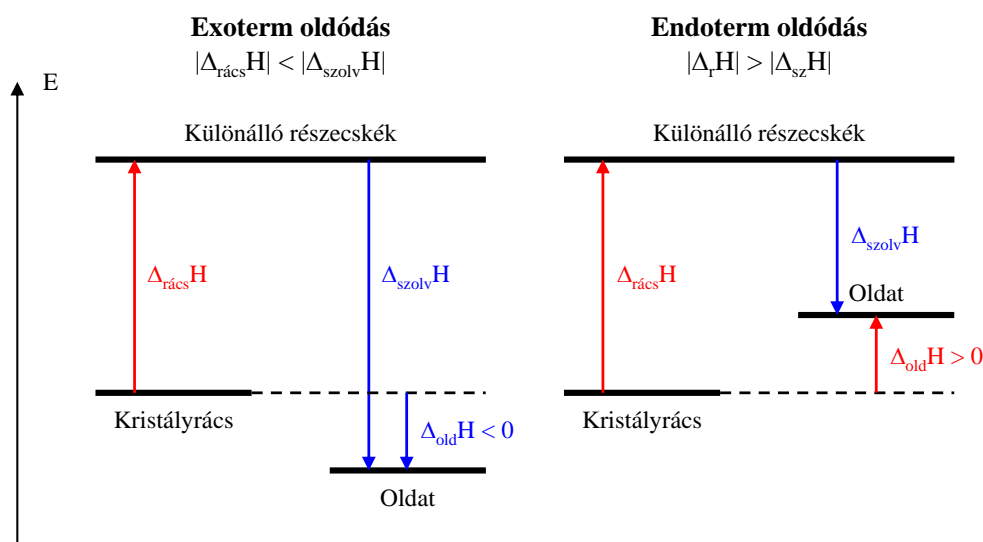
A negatív oldáshőjű anyagok oldódása exoterm, a pozitív oldáshővel rendelkezőkét endoterm.

Az oldáshő alapvetően az oldandó anyagtól és az oldószertől függ. Egyrészt fel kell szakítanunk az oldandó anyag kristályrácsát (lásd **rácsenergia**), másrészt a részecskéknak szolvatálódniuk kell az oldószerben. A szolvatáció (víz esetén speciálisan hidratáció) során az oldószer-molekulák körülveszik az oldott anyag részecskéit, ez hőfelszabadulással jár. A **szolvatációs hő** a különálló (egymástól végtelen távolban található, azaz egymással kölcsönhatásban nem lévő) oldandóanyag-részecskék szolvatációját kísérő energiafelszabadulás, általában 1 mólnyi oldott anyagra vonatkoztatjuk.

Az oldáshő ($\Delta_{\text{old}}H$) előjele és értéke a rácsenergia ($\Delta_{\text{rác}}H$) és a szolvatációs hő ($\Delta_{\text{szolv}}H$) viszonyától függ:

$$\Delta_{\text{old}}H = \Delta_{\text{rác}}H + \Delta_{\text{szolv}}H.$$

Az alábbi ábra szemlélteti:



7.6.2.1. ábra: Az endoterm és exoterm oldódás

7.6.3. Kémiai reakciókat kísérő hőváltozások

A kémiai változások rendszerint hőváltozással is járnak. Ez lehet exoterm vagy endoterm, annak függvényében, hogy a reakció során hő fejlődik vagy elnyelődik.

Az alábbi videókon exoterm reakciókat láthatunk:



7.6.3.1. videó: Alumínium és jód reakciója

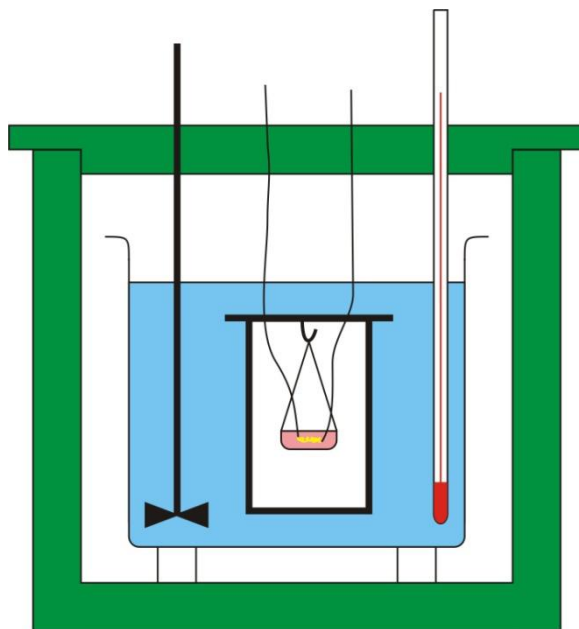


7.6.3.2. videó: Cink és jód reakciója



7.6.3.3. videó: Az ammónium-dikromát bomlása

A felszabaduló vagy elnyelt hő mérésére alkalmas egy igen egyszerű berendezés, a bombakaloriméter. Ez két fő egységből áll: egy hőszigetelt külső edényből (melyet köpenynek is neveznek), melyben általában egy nagy hőkapacitású folyadék található, ebbe merül az úgynevezett „bomba” (egy zárt reaktor), melyben a kémiai reakció végbemegy. A bombában megindítjuk a kémiai reakciót, mely hőt ad le a környezetének vagy hőt von el a környezetéből. A környezet ez esetben a kaloriméter köpenyrészében található folyadék. A leadott vagy felvett hő következtében a folyadék hőmérséklete megváltozik: ha a bombában exoterm folyamat megy végbe, akkor hőmérséklete növekszik, ha endoterm, akkor csökken, a hőmérséklet-változást hőmérővel mérjük. Mivel a folyadék hőszigetelt edényben van, az összes felszabaduló (elnyelődő) hő a folyadék fűtésére (hűtésére) fordítódik. A folyadék hőkapacitása és a hőmérséklet-változás ismeretében a leadott (felvett) hő számítható.



7.6.3.1. ábra: Bombakaloriméter sematikus rajza

(Megjegyzés: mivel hőmérséklet-kiegyenlítődés történik, az így elvégzett mérés szigorúan nem tekinthető állandó hőmérsékletűnek – idegen szóval izotermnek. A különféle hőváltozások általában függenek a hőmérséklettől – például forráshő stb. –, ezért ennek hibáját úgy igyekszünk kiküszöbölni, hogy nagy hőkapacitású folyadékot alkalmazunk. Ekkor várhatóan a hőmérséklet-változás nem túl

nagy, így közel izoterm körülmények között tudunk mérni. Természetesen az sem előnyös, ha rendkívül nagy a folyadék hőkapacitása, mert akkor nagyon kicsi a hőmérséklet-változás, melyet nehezen tudunk mérni. A folyadék hőmérsékletének minden pontban azonosnak kell lenni, ezért gondoskodnunk kell a folyamatos kevertetésről is!

A reakció során keletkezett vagy elnyelődött hő függ a *hőmérséklettől* és *nyomástól*, és *arányos a reagáló anyagok anyagmennyiségével*, ezért általában anyagmennyiségre vonatkoztatott reakcióhőről beszélünk. Standard nyomáson (ez általában a légköri nyomás: 101 325 Pa, de más konvenciók szerint lehet 1 bar = 10⁵ Pa is), 298,15 K hőmérsékleten és tiszta anyagok esetén beszélhetünk standard reakcióhőről.

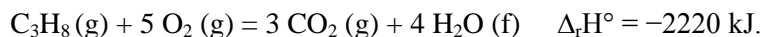
Standard reakcióhő: a tiszta kiindulási anyagoknak a termokémiai reakcióegyenlet által megadott anyagmennyiségű (mólokban értve) és állapotú mennyiségeinek reakciója során felszabaduló vagy elnyelődő hőmennyiség standard nyomáson és 25 °C (298,15 K) hőmérsékleten. Az exoterm reakciók reakcióhője negatív, az endoterm reakcióké pozitív.

A standard reakcióhő jelölése: $\Delta_r H^\circ$.

Az állapotok jelölése a korábbiakkal azonosan: sz (vagy s = solid): szilárd, f (vagy l = liquid): folyadék, g: gáz, aq (aqua): vizes oldat.

Termokémiai reakcióegyenlet: nemcsak a kiindulási anyagok és termékek minőségét és mennyiségét, de azok halmazállapotát is megadjuk. (Ez azért fontos, mert a halmazállapot-változások hője megváltoztatja a reakcióhő értékét.)

Például a propán égésének termokémiai reakcióegyenlete, ha folyadék halmazállapotú víz képződik:



Tehát ha egymólnyi propángázt ötmólnyi oxigéngázban elégetünk, és a termékek szén-dioxid gáz és cseppfolyós víz, akkor éppen 2220 kJ hő fejlődik.

Egy vegyület **képződéshőjének** nevezzük azt a reakcióhőt, mely a vegyületet felépítő kémiai elemek legstabilabb módosulatából, a termokémiai reakcióegyenletnek megfelelően történő képződését kíséri.

Standard moláris képződéshő: egy mól vegyület elemeiből történő képződésének standard reakcióhője, feltételezve, hogy minden elem a standard nyomáson és 25 °C hőmérsékleten legstabilabb formájában van jelen.

A standard moláris képződéshő jelölése: $\Delta_f H^\circ$ (angol nyelvű irodalomban $\Delta_f H^\circ$, f = formation).

Az **elemek** legstabilabb módosulatának standard képződéshőjét zérusnak tekintjük.

Standard moláris égéshő: egy mól vegyület oxigénfeleslegben történő (tökéletes) elégetésének standard reakcióhője.

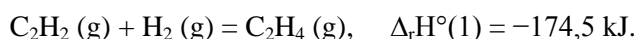
A standard moláris égéshő jelölése: $\Delta_c H^\circ$ (angol nyelvű irodalomban $\Delta_c H^\circ$, c = combustion).

A termokémia alaptétele, legfontosabb összefüggése Hess tétele:

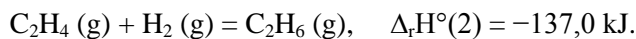
Hess-tétel: a kémiai reakciók standard reakcióhője csak a kiindulási anyagoktól, a végtermékektől és azok állapotától függ. Ez más szavakkal azt jelenti, hogy egy reakció standard reakcióhője független attól, hogy reakciót egy vagy több lépésben tettük meg.

Nézzünk is erre egy példát!

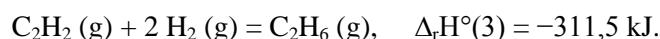
Az acetilént (C_2H_2) – a megfelelő katalizátor alkalmazásával – hidrogénezve etilént (C_2H_4) kapunk:



Az etilén katalizátor jelenlétében tovább hidrogénezhető, ekkor etán (C_2H_6) keletkezik:



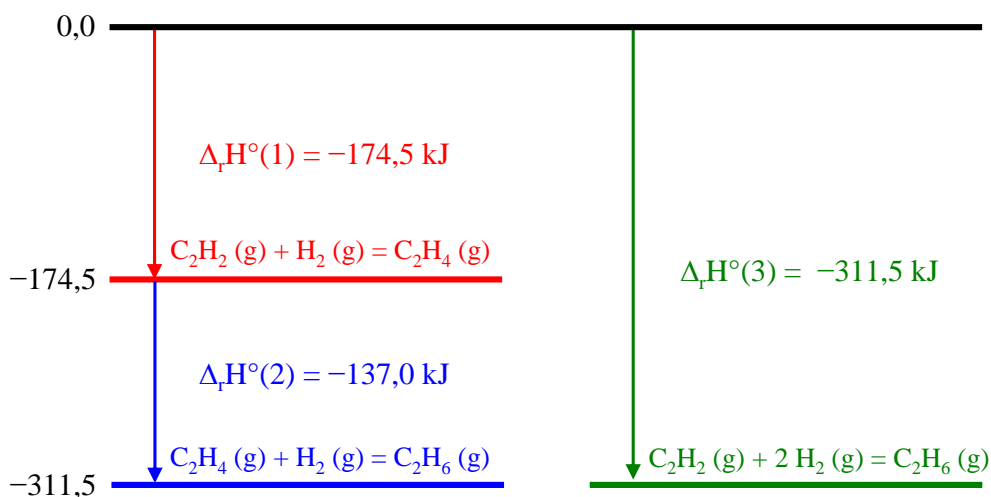
Megfelelő körülmények között azonban az acetilént közvetlenül etánná tudjuk hidrogénezni az alábbi egyenlet alapján:



Hess tétele azt mondja ki, hogy egy reakció reakcióhője független az úttól, melyen keresztül a kiindulási anyagokból a termékekig eljutunk. Tehát az acetilén etánig történő hidrogénezésének standard reakcióhője megegyezik a kétlépéses hidrogénezés (az acetilént először etilénné, majd az etilént acetilénné hidrogénezzük) lépéseiben kapott standard reakcióhők összegével. Ellenőrizzük is ezt le a reakcióhők alapján!

$$\Delta_r H^\circ(1) + \Delta_r H^\circ(2) = (-174,5 \text{ kJ}) + (-137,0 \text{ kJ}) = -311,5 \text{ kJ}$$

Ez tényleg megegyezik a harmadik reakció standard reakcióhőjével!

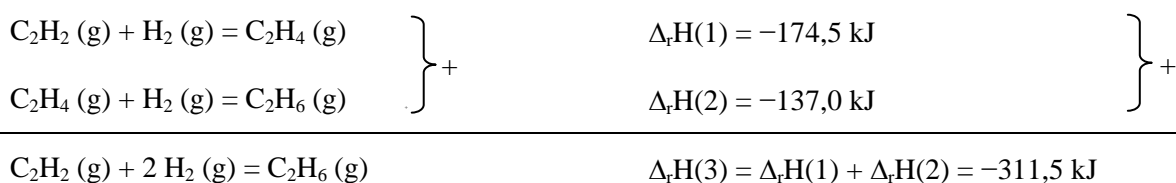


7.6.3.2. ábra: A Hess-tétel szemléltetése

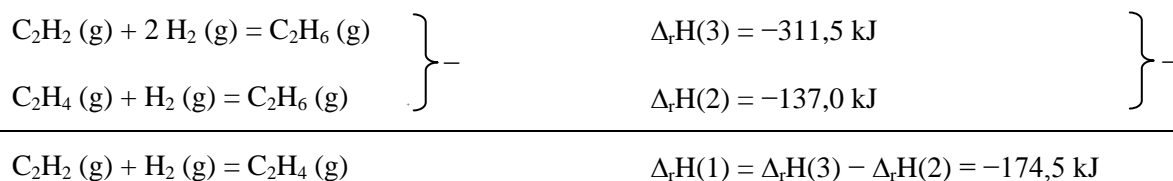
Általánosságban is igaz, hogy ha összeadunk két termokémiai egyenletet, akkor a reakcióhőjük is összegződik, ha kivonunk egymásból két termokémiai egyenletet, akkor az így keletkező reakció reakcióhője az eredeti két reakcióhő különbségeként adódik. Hasonlóan, ha egy adott n számmal beszorozzuk egy termokémiai egyenlet minden együtthatóját, a reakcióhő is az eredeti reakcióhő n -szeresére változik.

Például:

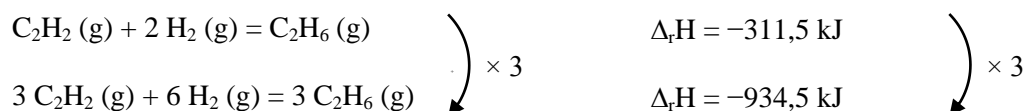
1.) Egyenletek összeadása:



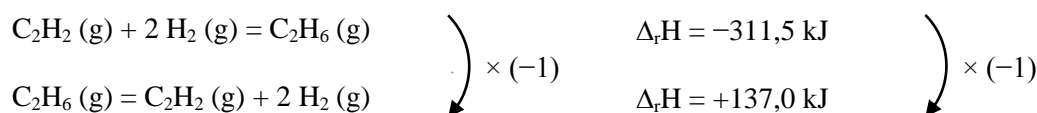
2.) Egyenletek kivonása egymásból:



3.) Egyenletek szorzása számmal:



4.) Ha az egyenletet (-1)-gyel szorozzuk meg, akkor az ellentétes folyamatot kapjuk és ennek reakcióhője az eredeti reakcióhő ellentettje:

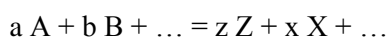


Ez utóbbi megállapítást külön névvel is szokták illetni:

Lavoisier–Laplace-törvény: egy adott irányú folyamat hőváltozása azonos az ellentétes irányú folyamat hőváltozásának ellentettjével.

Hess tételének egy nagyon fontos következménye, hogy a standard reakcióhő kiszámítható a reakcióban részt vevő anyagok standard képződéshőiből: a termékek sztöchiometriai együtthatóval beszorzott képződéshőinek összegéből levonjuk a kiindulási anyagok sztöchiometriai együtthatóval beszorzott képződéshőinek összegét.

Az alábbi általános reakcióra:



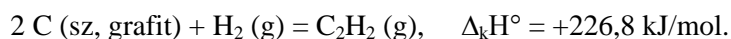
$$\Delta_r\text{H}^\circ = \underbrace{[z \cdot \Delta_f\text{H}^\circ(\text{Z}) + x \cdot \Delta_f\text{H}^\circ(\text{X}) + \dots]}_{\text{termékek}} - \underbrace{[a \cdot \Delta_f\text{H}^\circ(\text{A}) + b \cdot \Delta_f\text{H}^\circ(\text{B}) + \dots]}_{\text{kiindulási anyagok}}$$

Most pedig térjünk vissza az acetilénhez, etilénhez és etánhoz!

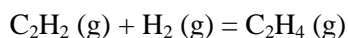
Az egyes vegyületek standard moláris képződéshőit az alábbi táblázat tartalmazza:

Vegyület	$\Delta_f\text{H}^\circ$ (kJ/mol)
Acetilén: $\text{C}_2\text{H}_2(\text{g})$	+226,8
Etilén: $\text{C}_2\text{H}_4(\text{g})$	+52,3
Etán: $\text{C}_2\text{H}_6(\text{g})$	-84,7

A vegyületek standard képződéshője a standard állapotban, 25 °C-on legstabilabb elem módosulatból történő képződésekor felszabaduló vagy elnyelődő hőmennyiség. Mindhárom vegyület szénből és hidrogénből áll. A szén legstabilabb (legalacsonyabb energiájú) módosulata 25 °C-on és normál légköri nyomáson a grafit, a hidrogéné a dihidrogéngáz (H_2). Tehát például az acetilén standard képződéshőjéhez tartozó termokémiai egyenlet:



Hasonló képződési reakcióegyenletek írhatók fel a másik két anyagra is. Most vizsgáljuk meg az acetilén etilénné történő hidrogénezésének standard reakcióhőjét!

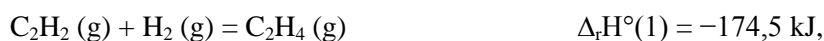
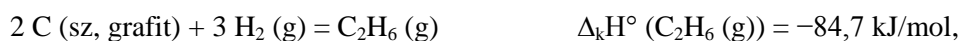


$$\Delta_{\text{r}}H^\circ(1) = \sum \Delta_{\text{k}}H^\circ(\text{termékek}) - \sum \Delta_{\text{r}}H^\circ(\text{kiindulási anyagok}) =$$

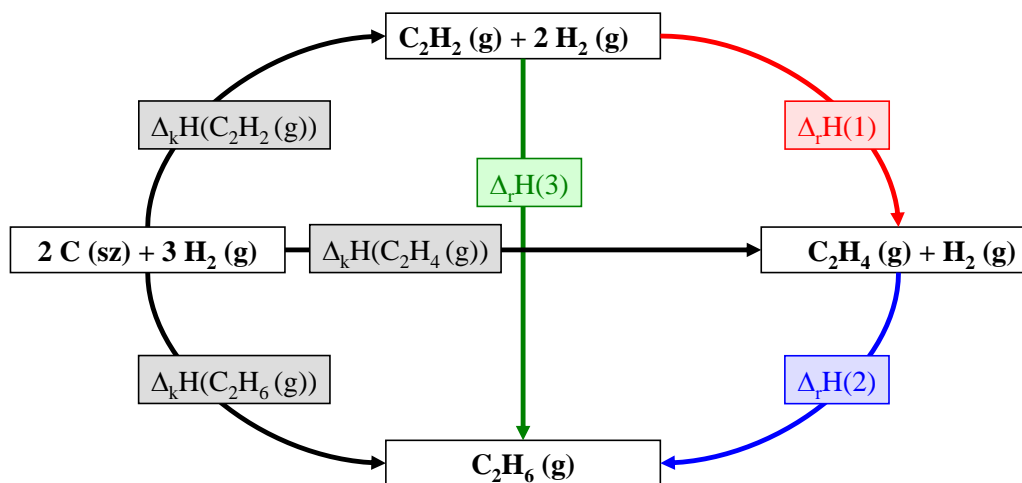
$$\Delta_{\text{r}}H^\circ(1) = 1 \cdot \Delta_{\text{k}}H^\circ(\text{C}_2\text{H}_4 \text{ (g)}) - [1 \cdot \Delta_{\text{k}}H^\circ(\text{C}_2\text{H}_2 \text{ (g)}) + 1 \cdot \Delta_{\text{k}}H^\circ(\text{C}_2\text{H}_4 \text{ (g)})] =$$

$$\Delta_{\text{r}}H^\circ(1) = (+52,3 \text{ kJ/mol}) - [(+226,8 \text{ kJ/mol}) + (0,0 \text{ kJ/mol})] = -174,5 \text{ kJ}$$

Ehhez hasonlóan a többi reakció standard reakcióhője is kiszámítható:



Az egyes elemek és vegyületek között különféle reakciók mehetnek végbe, ezen hat reakcióegyenlet kapcsolatát szemlélteti az alábbi folyamatábra.



7.6.3.3. ábra: A Hess-tétel szemléltetése

A fenti ábrán látható folyamatokhoz tartozó hőváltozások, tehát az egyes vegyületek képződéshője és a reakcióhők között összefüggések állnak fenn a Hess-tétel alapján. Az alábbi ábrán a fekete nyilak az egyes vegyületek (acetilén, etilén és etán) képződéshőit jelölik, míg a színes nyilak az egyes hidrogénezési reakciókat.

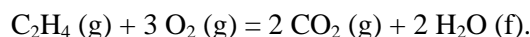
7.37. példa:

Mekkora az etilén standard égéshője?

$$\Delta_{\text{k}}H^{\circ}(\text{C}_2\text{H}_4(\text{g})) = +52,3 \text{ kJ/mol}, \Delta_{\text{k}}H^{\circ}(\text{CO}_2(\text{g})) = -393,5 \text{ kJ/mol}, \Delta_{\text{k}}H^{\circ}(\text{H}_2\text{O}(\text{g})) = -285,8 \text{ kJ/mol}.$$

Megoldás:

Az etilén égésének termokémiai egyenlete:



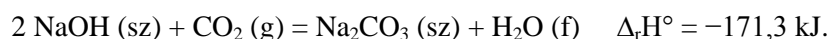
A szén-dioxid gáz standard képződéshője: $\Delta_{\text{k}}H^{\circ}(\text{CO}_2(\text{g})) = -393,5 \text{ kJ/mol}$, a folyékony vízé pedig $\Delta_{\text{k}}H^{\circ}(\text{H}_2\text{O}(\text{g})) = -285,8 \text{ kJ/mol}$, az etiléngázé $\Delta_{\text{k}}H^{\circ}(\text{C}_2\text{H}_4(\text{g})) = +52,3 \text{ kJ/mol}$, az oxigéngázé pedig természetesen 0.

$$\begin{aligned} \Delta_{\text{k}}H^{\circ}(\text{C}_2\text{H}_4(\text{g})) &= [2 \cdot \Delta_{\text{k}}H^{\circ}(\text{CO}_2(\text{g})) + 2 \cdot \Delta_{\text{k}}H^{\circ}(\text{H}_2\text{O}(\text{g}))] - [\Delta_{\text{k}}H^{\circ}(\text{C}_2\text{H}_4(\text{g})) + 3 \cdot \Delta_{\text{k}}H^{\circ}(\text{O}_2(\text{g}))] = \\ &= [2 \cdot (-393,5) + 2 \cdot (-285,8)] - [(+52,3) + 3 \cdot 0,0] \text{ kJ} = -1410,9 \text{ kJ} \end{aligned}$$

Tehát az etilén standard moláris égéshője -1410,9 kJ/mol.

7.38. példa:

Mekkora a szilárd nátrium-hidroxid standard moláris képződéshője, ha adott a következő folyamat standard reakcióhője?



Adottak továbbá a következő standard képződéshők: $\Delta_{\text{k}}H^{\circ}(\text{Na}_2\text{CO}_3(\text{sz})) = -1130,8 \text{ kJ/mol}$, $\Delta_{\text{k}}H^{\circ}(\text{CO}_2(\text{g})) = -393,5 \text{ kJ/mol}$, $\Delta_{\text{k}}H^{\circ}(\text{H}_2\text{O}(\text{f})) = -285,8 \text{ kJ/mol}$.

Megoldás:

Írjuk fel a reakcióhőt a megfelelő képződéshők különbségeként!

$$\Delta_{\text{r}}H^{\circ} = \sum \Delta_{\text{k}}H^{\circ}(\text{termékek}) - \sum \Delta_{\text{k}}H^{\circ}(\text{kiindulási anyagok}) =$$

$$\Delta_{\text{r}}H^{\circ} = [1 \cdot \Delta_{\text{k}}H^{\circ}(\text{Na}_2\text{CO}_3(\text{sz})) + 1 \cdot \Delta_{\text{k}}H^{\circ}(\text{H}_2\text{O}(\text{f}))] - [2 \cdot \Delta_{\text{k}}H^{\circ}(\text{NaOH}(\text{sz})) + 1 \cdot \Delta_{\text{k}}H^{\circ}(\text{CO}_2(\text{g}))]$$

Ebből kifejezzük a nátrium-hidroxid képződéshőjét:

$$\Delta_{\text{k}}H^{\circ}(\text{NaOH}(\text{sz})) = \frac{1}{2} \cdot [\Delta_{\text{k}}H^{\circ}(\text{Na}_2\text{CO}_3(\text{sz})) + \Delta_{\text{k}}H^{\circ}(\text{H}_2\text{O}(\text{f})) - \Delta_{\text{r}}H^{\circ} - \Delta_{\text{k}}H^{\circ}(\text{CO}_2(\text{g}))].$$

Behelyettesítve az adatokat:

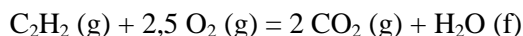
$$\Delta_{\text{k}}H^{\circ}(\text{NaOH}(\text{sz})) = \frac{1}{2} \cdot [(-1130,8) + (-285,8) - (-171,3) - (-393,5)] \text{ kJ/mol} = -425,9 \text{ kJ/mol}.$$

Tehát a szilárd nátrium-hidroxid standard moláris képződéshője -425,9 kJ/mol.

7.39. példa:

Egy kaloriméterben nagy oxigénfeleslegben tökéletesen elégetünk 250,0 ml 101,30 kPa nyomású és 298,0 K hőmérsékletű acetilén (C_2H_2) gázt, eközben cseppfolyós víz keletkezik. Az égés során felszabaduló hő teljes mértékben átadódik a kalorimétert körülvevő 1,250 kg tömegű 25,00 °C hőmérsékletű víznek, mely ennek következtében 27,54 °C-ra melegszik. Mekkora az acetiléngáz

standard moláris égéshője és képződéshője? A kaloriméterben lévő anyagok és a kaloriméter hőkapacitása elhanyagolható! A víz fajhője $4,18 \text{ kJ}/(\text{kg}^\circ\text{C})$. $\Delta_{\text{k}}H^\circ(\text{CO}_2(\text{g})) = -393,5 \text{ kJ/mol}$, $\Delta_{\text{k}}H^\circ(\text{H}_2\text{O}(\text{g})) = -285,8 \text{ kJ/mol}$.



Megoldás:

Először számítsuk ki az ideális gáztörvénnyel az acetiléngáz anyagmennyiségét!

$$n = \frac{p \cdot V}{R \cdot T} = \frac{101,30 \cdot 0,2500}{8,314 \cdot 298} \text{ mol} = 0,01022 \text{ mol}$$

A víz által felvett hő:

$$Q_{\text{víz}} = c \cdot m \cdot \Delta T = 4,18 \cdot 1,250 \cdot (27,54 - 25,00) \text{ kJ} = 13,2715 \text{ kJ}.$$

Ez megegyezik az acetilén által leadott hő ellentettjével ($Q_{\text{égés}} + Q_{\text{víz}} = 0$):

$$Q_{\text{égés}} = -Q_{\text{víz}} = -13,2715 \text{ kJ}.$$

Ebből könnyen megkapjuk a standard moláris égéshőt:

$$\Delta_{\text{é}}H^\circ(\text{C}_2\text{H}_2) = \frac{Q_{\text{égés}}}{n(\text{C}_2\text{H}_2)} = \frac{(-13,2715)}{0,01022} \text{ kJ/mol} = -1298,6 \text{ kJ/mol}.$$

Az acetilén képződéshőjét megkaphatjuk az égéshő és a szén-dioxid és a víz képződéshőjének segítségével (az oxigéngáz képződéshője 0).

$$\Delta_{\text{r}}H^\circ = [2 \cdot \Delta_{\text{k}}H^\circ(\text{CO}_2(\text{g})) + 1 \cdot \Delta_{\text{k}}H^\circ(\text{H}_2\text{O}(\text{f}))] - [1 \cdot \Delta_{\text{k}}H^\circ(\text{C}_2\text{H}_2(\text{g})) + 2,5 \cdot \Delta_{\text{k}}H^\circ(\text{O}_2(\text{g}))]$$

$$\Delta_{\text{k}}H^\circ(\text{C}_2\text{H}_2(\text{g})) = 2 \cdot \Delta_{\text{k}}H^\circ(\text{CO}_2(\text{g})) + \Delta_{\text{k}}H^\circ(\text{H}_2\text{O}(\text{f})) - 2,5 \cdot \Delta_{\text{k}}H^\circ(\text{O}_2(\text{g})) - \Delta_{\text{r}}H^\circ =$$

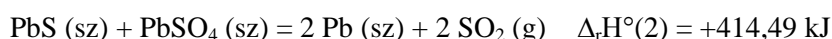
$$2 \cdot (-393,5) + (-285,8) - 2,5 \cdot 0 - (-1298,6) \text{ kJ/mol} = +225,8 \text{ kJ/mol}$$

Tehát az acetilén standard moláris égéshője $-1298,6 \text{ kJ/mol}$, képződéshője pedig $+225,8 \text{ kJ/mol}$.

7.40. példa:

Számítsa ki a szilárd PbS és PbSO₄ moláris képződéshőjét, ha ismerjük a következő reakciók standard entalpiáit (azaz standard reakcióhőit), illetve a SO₂ gáz képződéshőjét:

$$\Delta_{\text{k}}H^\circ(\text{SO}_2(\text{g})) = -296,80 \text{ kJ/mol!}$$



1. megoldás:

Legyen $\Delta_{\text{k}}H^\circ(\text{PbS}(\text{sz})) = x$ és $\Delta_{\text{k}}H^\circ(\text{PbSO}_4(\text{sz})) = y$. Ekkor a reakcióhőket kifejezve egy egyenletrendszerrel kapunk:

Az első egyenlet alapján:

$$\Delta_{\text{r}}H^\circ(1) = 1 \cdot \Delta_{\text{k}}H^\circ(\text{PbSO}_4(\text{sz})) - [1 \cdot \Delta_{\text{k}}H^\circ(\text{PbS}(\text{sz})) + 2 \cdot \Delta_{\text{k}}H^\circ(\text{O}_2(\text{g}))].$$

$$\text{Behelyettesítve: } -817,26 = y - (x + 2 \cdot 0) = y - x.$$

A második egyenlet alapján:

$$\Delta_r H^\circ(1) = [2 \cdot \Delta_k H^\circ(\text{Pb (sz)}) + 2 \cdot \Delta_k H^\circ(\text{SO}_2 \text{ (g)})] - [1 \cdot \Delta_k H^\circ(\text{PbS (sz)}) + 1 \cdot \Delta_k H^\circ(\text{PbSO}_4 \text{ (g)})].$$

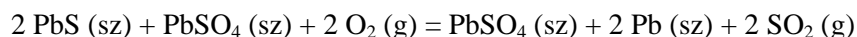
Behelyettesítve: $+414,49 = 2 \cdot 0 + 2 \cdot (-296,80) - (x + y)$.

Az egyenletrendszer megoldása: $x = -95,42 \text{ kJ/mol}$, $y = -912,68 \text{ kJ/mol}$.

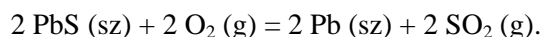
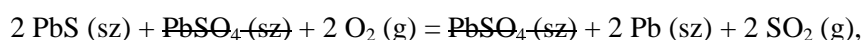
Tehát a szilárd PbS standard képződéshője $-95,42 \text{ kJ/mol}$, az PbSO₄-é pedig $-912,68 \text{ kJ/mol}$.

2. megoldás:

Adjuk össze a két egyenletet!



A szilárd PbSO₄ mindkét oldalon megtalálható, ezért egyszerűsíthetünk vele:



Az így keletkezett termokémiai egyenlethez tartozó reakcióhő:

$$\Delta_r H^\circ(1+2) = \Delta_r H^\circ(1) + \Delta_r H^\circ(2) = -817,26 \text{ kJ} + 414,49 \text{ kJ} = -402,77 \text{ kJ}.$$

Az ólom-szulfid képződéshőjét kifejezhetjük ennek a reakciónak a hőjéből:

$$\begin{aligned} \Delta_k H^\circ(\text{PbS (sz)}) &= \frac{1}{2} \cdot [2 \cdot \Delta_k H^\circ(\text{Pb (sz)}) + 2 \cdot \Delta_k H^\circ(\text{SO}_2 \text{ (g)}) - 2 \cdot \Delta_k H^\circ(\text{O}_2 \text{ (g)}) - \Delta_r H^\circ(1+2)] = \\ &= \frac{1}{2} \cdot [2 \cdot 0 + 2 \cdot (-296,80) - 2 \cdot 0 - (-402,77)] \text{ kJ/mol} = \underline{\underline{-95,42 \text{ kJ/mol}}}. \end{aligned}$$

Ennek ismeretében az ólom-szulfát képződéshője az első egyenletből kiszámítható:

$$\begin{aligned} \Delta_k H^\circ(\text{PbSO}_4 \text{ (sz)}) &= \Delta_r H^\circ(1) + \Delta_k H^\circ(\text{PbS (sz)}) + 2 \cdot \Delta_k H^\circ(\text{O}_2 \text{ (g)}) = \\ &= (-817,26) + (-95,42) + 2 \cdot 0 \text{ kJ/mol} = \underline{\underline{-912,68 \text{ kJ/mol}}}. \end{aligned}$$

7.41. példa:

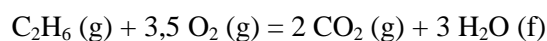
Számítsuk ki az etán és a bután standard égéshőjét a megadott adatok felhasználásával (az égés tökéletes, folyékony víz keletkezik)! Egy etán-bután gázelegy 49,60 g-ját levegőfeleslegben elégetve 2481,74 kJ hő fejlődik, a termék pedig szén-dioxid gáz és folyékony víz. Mi a szénhidrogén-elegy mol%-os összetétele?

Standard moláris képződéshők: $\Delta_k H^\circ(\text{C}_2\text{H}_6 \text{ (g)})$: $-84,7 \text{ kJ/mol}$; $\Delta_k H^\circ(\text{C}_4\text{H}_{10} \text{ (g)})$: $-126,1 \text{ kJ/mol}$;

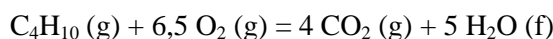
$$\Delta_k H^\circ(\text{CO}_2 \text{ (g)})$$
: $-393,5 \text{ kJ/mol}$; $\Delta_k H^\circ(\text{H}_2\text{O (f)})$: $-285,8 \text{ kJ/mol}$

Megoldás:

Állapítsuk meg a moláris égéshőket!



$$\begin{aligned} \Delta_k H^\circ(\text{C}_2\text{H}_6 \text{ (g)}) &= [2 \cdot \Delta_k H^\circ(\text{CO}_2 \text{ (g)}) + 3 \cdot \Delta_k H^\circ(\text{H}_2\text{O (f)})] - [1 \cdot \Delta_k H^\circ(\text{C}_2\text{H}_6 \text{ (g)}) + \\ &+ 3,5 \cdot \Delta_k H^\circ(\text{O}_2 \text{ (g)})] = [2 \cdot (-393,5) + 3 \cdot (-285,8)] + [(-84,7) + 3,5 \cdot 0] \text{ kJ} = -1559,7 \text{ kJ} \end{aligned}$$



$$\Delta_{\text{r}}\text{H}^\circ(\text{C}_4\text{H}_{10}(\text{g})) = [10 \cdot \Delta_{\text{k}}\text{H}^\circ(\text{CO}_2(\text{g})) + 5 \cdot \Delta_{\text{k}}\text{H}^\circ(\text{H}_2\text{O}(\text{f}))] - [1 \cdot \Delta_{\text{k}}\text{H}^\circ(\text{C}_4\text{H}_{10}(\text{g})) + 6,5 \cdot \Delta_{\text{k}}\text{H}^\circ(\text{O}_2(\text{g}))] = [4 \cdot (-393,5) + 5 \cdot (-285,8)] - [(-126,1) + 6,5 \cdot 0] = -2876,9 \text{ kJ}$$

Az etán anyagmennyisége legyen x , a butáné y , a moláris tömegeik: 30,0 g/mol, illetve 58 g/mol.

Felírhatunk egy egyenletet az elegy össztömegére (1), illetve az elégetése során fejlődött hőmennyiségre (2):

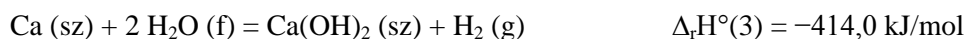
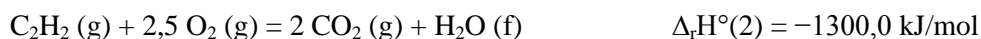
$$(1) \quad 30 \cdot x + 58 \cdot y = 49,6 \text{ (g)}$$

$$(2) \quad (-1559,7) \cdot x + (-2876,9) \cdot y = -2481,74 \text{ (kJ)}$$

Az egyenletrendszer megoldása: $x = 0,300$ mol és $y = 0,700$ mol, a keverék összanyagmennyisége 1,000 mol. Így a mólszázalékos összetétel: 30,0 mol% etán, 70,0 mol% bután.

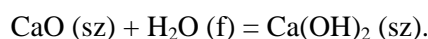
7.42. példa:

Számítsuk ki a szilárd kalcium-karbid (CaC_2) képződéshőjét az alábbiak ismeretében!



Ismerjük továbbá, hogy a CO_2 képződéshője $\Delta_{\text{k}}\text{H}^\circ(\text{CO}_2(\text{g})) = -393,5$ kJ/mol, a folyékony vízé pedig $\Delta_{\text{k}}\text{H}^\circ(\text{H}_2\text{O}(\text{f})) = -285,8$ kJ/mol.

Mekkora a mészsoltás reakcióhője, ha a szilárd CaO képződéshője $\Delta_{\text{k}}\text{H}^\circ(\text{CaO}(\text{sz})) = -149,0$ kJ/mol. A mészsoltás egyenlete:



Megoldás:

Számítsuk ki az acetilén képződéshőjét a 2. egyenletből!

$$\Delta_{\text{r}}\text{H}^\circ(2) = [2 \cdot \Delta_{\text{k}}\text{H}^\circ(\text{CO}_2(\text{g})) + 1 \cdot \Delta_{\text{k}}\text{H}^\circ(\text{H}_2\text{O}(\text{f}))] - [1 \cdot \Delta_{\text{k}}\text{H}^\circ(\text{C}_2\text{H}_2(\text{g})) + 2,5 \cdot \Delta_{\text{k}}\text{H}^\circ(\text{O}_2(\text{g}))]$$

Kifejezve az acetilén képződéshőjét:

$$\Delta_{\text{k}}\text{H}^\circ(\text{C}_2\text{H}_2(\text{g})) = 2 \cdot \Delta_{\text{k}}\text{H}^\circ(\text{CO}_2(\text{g})) + \Delta_{\text{k}}\text{H}^\circ(\text{H}_2\text{O}(\text{f})) - 2,5 \cdot \Delta_{\text{k}}\text{H}^\circ(\text{O}_2(\text{g})) - \Delta_{\text{r}}\text{H}^\circ = 2 \cdot (-393,5) + (-285,8) - 2,5 \cdot 0 - (-1300,0) \text{ kJ/mol} = +227,2 \text{ kJ/mol}.$$

A 3. egyenletből kiszámítható a kalcium-hidroxid képződéshője:

$$\Delta_{\text{r}}\text{H}^\circ(3) = [1 \cdot \Delta_{\text{k}}\text{H}^\circ(\text{Ca}(\text{OH})_2(\text{sz})) + 1 \cdot \Delta_{\text{k}}\text{H}^\circ(\text{H}_2(\text{g}))] - [1 \cdot \Delta_{\text{k}}\text{H}^\circ(\text{Ca}(\text{sz})) + 2 \cdot \Delta_{\text{k}}\text{H}^\circ(\text{H}_2\text{O}(\text{g}))].$$

A $\text{Ca}(\text{OH})_2$ képződéshője:

$$\Delta_{\text{k}}\text{H}^\circ(\text{Ca}(\text{OH})_2(\text{sz})) = \Delta_{\text{r}}\text{H}^\circ(3) + \Delta_{\text{k}}\text{H}^\circ(\text{Ca}(\text{sz})) + 2 \cdot \Delta_{\text{k}}\text{H}^\circ(\text{H}_2\text{O}(\text{g})) - \Delta_{\text{k}}\text{H}^\circ(\text{H}_2(\text{g})) = (-414,0) + 0 + 2 \cdot (-285,8) - 0 \text{ kJ/mol} = -985,6 \text{ kJ/mol}.$$

Az 1. egyenlet alapján a kalcium-karbid képződéshője:

$$\Delta_r H^\circ(1) = [1 \cdot \Delta_k H^\circ(\text{Ca}(\text{OH})_2(\text{sz})) + 1 \cdot \Delta_k H^\circ(\text{C}_2\text{H}_2(\text{g}))] - [1 \cdot \Delta_k H^\circ(\text{CaC}_2(\text{sz})) + 2 \cdot \Delta_k H^\circ(\text{H}_2\text{O}(\text{g}))].$$

A kérdéses képződéshő:

$$\begin{aligned} \Delta_k H^\circ(\text{CaC}_2(\text{sz})) &= \Delta_k H^\circ(\text{Ca}(\text{OH})_2) + \Delta_k H^\circ(\text{C}_2\text{H}_2) - 2 \cdot \Delta_k H^\circ(\text{H}_2\text{O}) - \Delta_r H^\circ(1) = \\ &= (-985,6) + 227,2 - 2 \cdot (-285,8) - (-127,0) \text{ kJ/mol} = -59,8 \text{ kJ/mol}. \end{aligned}$$

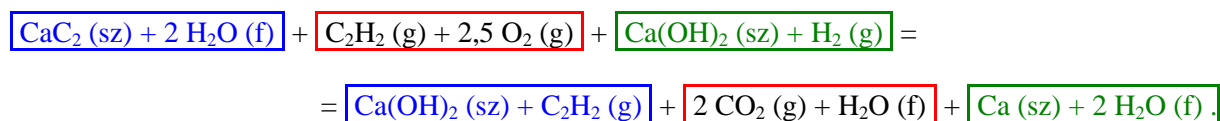
A mészoltás reakcióhőjét a megfelelő képződéshők segítségével egyszerűen ki lehet számítani:

$$\begin{aligned} \text{CaO}(\text{sz}) + \text{H}_2\text{O}(\text{f}) &= \text{Ca}(\text{OH})_2(\text{sz}), \\ \Delta_r H^\circ &= 1 \cdot \Delta_k H^\circ(\text{Ca}(\text{OH})_2) - [1 \cdot \Delta_k H^\circ(\text{CaO}) + 1 \cdot \Delta_k H^\circ(\text{H}_2\text{O})] = \\ &= (-985,6) - [(-149,0) + (-285,8)] \text{ kJ} = -550,8 \text{ kJ}. \end{aligned}$$

Tehát a kalcium-karbid standard moláris képződéshője -59,8 kJ/mol, a mészoltás reakcióhője -550,8 kJ.

Egy másik megoldási út a kalcium-karbid képződéshőjének kiszámításához:

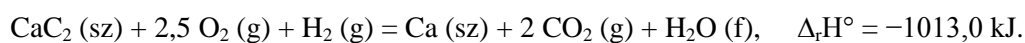
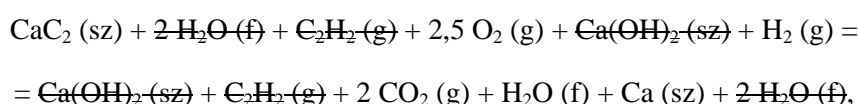
Adjuk össze az **1** és a **2** egyenletet, ehhez hozzáadjuk a **3** egyenlet ellentettjét! Ekkor a következő termokémiai egyenletet kapjuk:



Az ehhez tartozó reakcióhő pedig:

$$\Delta_r H^\circ(1+2-3) = \Delta_r H^\circ(1) + \Delta_r H^\circ(2) - \Delta_r H^\circ(3) = (-127,0) + (-1300,0) - (-414,0) \text{ kJ} = -1013,0 \text{ kJ}.$$

Az egyenlet mindkét oldalán megtalálható anyagokkal egyszerűsítve az egyenletet kapjuk:



A reakcióhő:

$$\begin{aligned} \Delta_r H^\circ &= [1 \cdot \Delta_k H^\circ(\text{Ca}(\text{sz})) + 2 \cdot \Delta_k H^\circ(\text{CO}_2(\text{g})) + 1 \cdot \Delta_k H^\circ(\text{H}_2\text{O}(\text{f}))] - \\ &= [1 \cdot \Delta_k H^\circ(\text{CaC}_2(\text{sz})) + 2,5 \cdot \Delta_k H^\circ(\text{O}_2(\text{g})) + 1 \cdot \Delta_k H^\circ(\text{H}_2(\text{g}))]. \end{aligned}$$

Mivel az elemi kalcium, hidrogén és oxigén standard képződéshője zérus:

$$\Delta_r H^\circ = 2 \cdot \Delta_k H^\circ(\text{CO}_2(\text{g})) + \Delta_k H^\circ(\text{H}_2\text{O}(\text{f})) - \Delta_k H^\circ(\text{CaC}_2(\text{sz})).$$

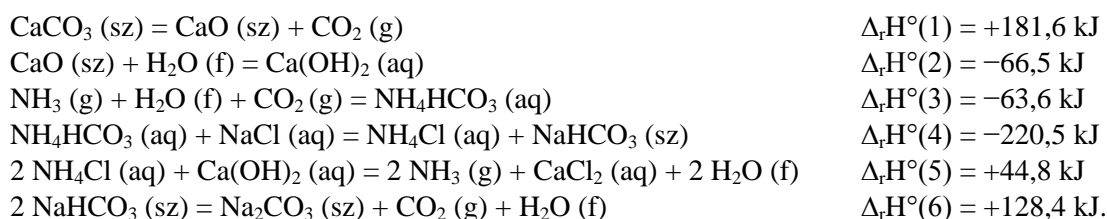
A kalcium-karbid képződéshője:

$$\begin{aligned} \Delta_k H^\circ(\text{CaC}_2(\text{sz})) &= 2 \cdot \Delta_k H^\circ(\text{CO}_2(\text{g})) + \Delta_k H^\circ(\text{H}_2\text{O}(\text{f})) - \Delta_r H^\circ = \\ &= 2 \cdot (-393,5) + (-285,8) - (-1013,0) \text{ kJ/mol} = -59,8 \text{ kJ/mol}. \end{aligned}$$

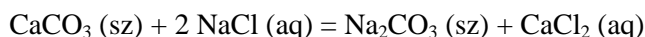
7.43. példa:

A szóda (nátrium-karbonát: Na_2CO_3) az egyik igen fontos vegyipari nyersanyagunk. Előállítására gyakran az úgynevezett Solvay-féle többlépcsős eljárással történik. Ennek lényege, hogy a mészkő (kalcium-karbonát: CaCO_3) hőbontásával égetett meszet (kalcium-oxid: CaO) szén-dioxidot állítanak elő. Az égetett mészből vízzel oltott meszet [kalcium-hidroxid: $\text{Ca}(\text{OH})_2$] állítanak elő. A szén-dioxidot elnyeletik nátrium-kloridot tartalmazó ammóniaoldatban, melyből a nátrium-hidrogén-karbonát (NaHCO_3) – rossz oldhatóságának köszönhetően – kikristályosodik. Az eközben keletkező ammónium-klorid (NH_4Cl) oldatból oltott mésszel nyerik vissza az ammóniát. A folyamat utolsó lépése a nátrium-hidrogén-karbonát hőbontása, melyben nátrium-karbonát és szén-dioxid keletkezik, ez utóbbit visszavezetik a folyamat elejére.

A folyamat termokémiai egyenletei a következők:



A részfolyamatokból hogyan lehet a Solvay-féle szódagyártás bruttó egyenletét megkapni?



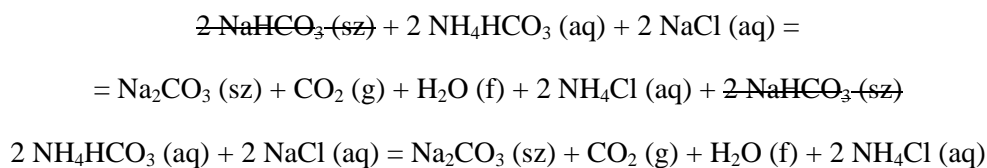
Számítsuk ki ezen egyenlet standard reakcióhőjét!

Megoldás:

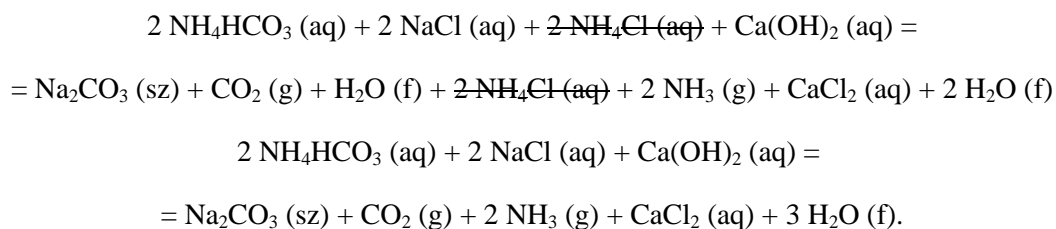
Az egyenletek összeadásának (kivonásának) az alapelve, hogy eltüntessük a bruttó egyenletben nem található komponenseket! Ha két egyenletet összeadva a kapott egyenlet két oldalán megtalálható valamely komponens, akkor azzal egyszerűsítjük az egyenletet.

Induljunk el a 6 egyenletből! A 2 mólnyi NaHCO_3 -hoz a 4 egyenletnek a kétszerese szükséges (hogy kiküszöbölhessük a nátrium-hidrogén-karbonátot mint köztterméket).

Adjuk hozzá a 6 egyenlethez a 4 egyenlet kétszeresét!

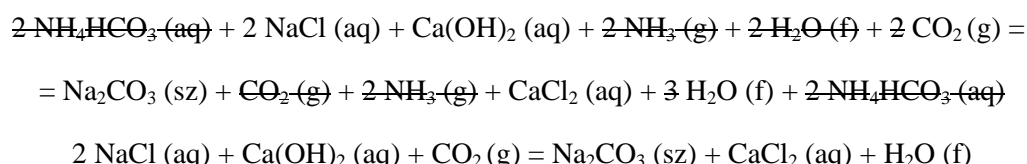


Az így keletkezett egyenletben két NH_4Cl található, ezért ennek kiküszöbölésére adjuk hozzá az 5 egyenletet:



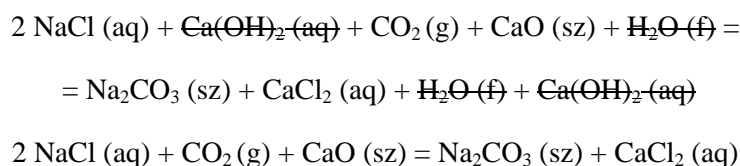
Tehát a fenti egyenlet az alábbi formában írható fel: 6 + 2 · 4 + 5.

Az NH_4HCO_3 eliminálására adjuk ehhez az egyenlethez a 3 egyenlet kétszeresét!

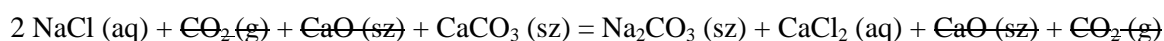


Az így keletkezett egyenlet tehát: $\boxed{6} + 2 \cdot \boxed{4} + \boxed{5} + 2 \cdot \boxed{3}$.

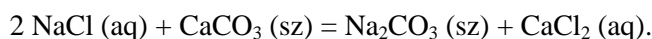
A $\text{Ca}(\text{OH})_2$ -ot a $\boxed{2}$ egyenlet segítségével tudjuk kikerülni. A legutolsó egyenlethez adjuk hozzá a $\boxed{2}$ egyenletet!



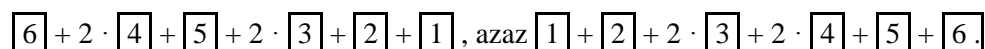
Az így keletkezett egyenlet $(\boxed{6} + 2 \cdot \boxed{4} + \boxed{5} + 2 \cdot \boxed{3} + \boxed{2})$ már csak igen kicsit különbözik a Solvay-féle szódagyártás bruttó egyenletétől. A fenti egyenletben található CO_2 és CaO az $\boxed{1}$ egyenlet hozzáadásával eliminálható:



Tehát tényleg megkapjuk a Solvay-eljárás egyenletét:



A bruttó folyamat a hat részlépés alábbi kombinációjával állítható elő:



Ennek megfelelően a bruttó folyamat reakcióhője:

$$\begin{aligned}
 \Delta_r H^\circ &= \Delta_r H^\circ(1) + \Delta_r H^\circ(2) + 2 \cdot \Delta_r H^\circ(3) + 2 \cdot \Delta_r H^\circ(4) + \Delta_r H^\circ(5) + \Delta_r H^\circ(6) = \\
 &= (+181,6) + (-66,5) + 2 \cdot (-63,6) + 2 \cdot (-220,5) + (+44,8) + (+128,4) \text{ kJ} = -279,9 \text{ kJ}.
 \end{aligned}$$

7.7. A kémiai reakciók sebessége

A különböző kémiai változások rendszerint nem egyforma sebességgel mennek végbe. Vannak nagyon gyors reakciók, ezeket általában pillanatszerű reakcióknak nevezzük. Erre példa a semlegesítés és a legtöbb csapadékképződési reakció. Az alábbi videón a kénsav és bárium-klorid közötti reakciót figyelhetjük meg. A két oldatot összeöntve azonnal fehér bárium-szulfát-csapadék válik le.



7.7.1. videó: A bárium-szulfát leválása

Más kémiai reakciók viszont sokkal lassabbak, ezeket szokták időreakcióknak is nevezni. Egy igen szép példa az időreakcióra az úgynevezett aranyóra-reakció. A nátrium-tioszulfát-oldathoz savat adva az alábbi reakció megy végbe:



A folyamat több részlépből áll, és egy kis időbe telik, hogy az elemi kén kicsapódjon az oldatból.



7.7.2. videó: Elemi kén leválása

Bizonyos folyamatok rendkívül lassúak lehetnek. Erre példa a kőolaj és földgáz kialakulása a természetes eredetű, lebomló élő szervezetekből, mely akár több millió évet is igénybe vehet. Nem ennyire lassú, de általában hónapokban, években mérhető például a rozsdaképződéshez szükséges idő. Ismerünk olyan reakciókat is, melyek nem mennek maguktól végbe.

Az alábbi videókon további gyors és lassú reakciók láthatóak:



7.7.3. videó: Landolt reakciók

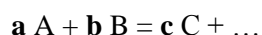


7.7.4. videó: Vas(III)-komplexek képződése

7.7.1. A reakciósebesség

A reakciósebesség azt fejezi ki, hogy időegység alatt egységnyi térfogatban mekkora anyagmennyiségű részecske alakul át.

Az alábbi reakcióra nézve a reakciósebesség:



$$v = -\frac{1}{a} \frac{\Delta n_{\text{A}}}{V \cdot \Delta t} = -\frac{1}{b} \frac{\Delta n_{\text{B}}}{V \cdot \Delta t} = \frac{1}{c} \frac{\Delta n_{\text{C}}}{V \cdot \Delta t},$$

illetve koncentrációkkal kifejezve:

$$v = -\frac{1}{a} \frac{\Delta c_A}{\Delta t} = -\frac{1}{b} \frac{\Delta c_B}{\Delta t} = \frac{1}{c} \frac{\Delta c_C}{\Delta t},$$

ahol V a térfogatot, t az idő jelöli, n_A , n_B , n_C stb. az adott részecskék anyagmennyiségeit, a , b , c stb. a rendezett sztöchiometriai egyenlet szerinti sztöchiometriai együtthatókat jelölik, c_A , c_B , c_C stb. az adott részecskék koncentrációja. A Δt időkülönbség rendszerint egy igen rövid időtartamot jelöl (a reakciósebesség egy végtelenül rövid időtartam alatti koncentrációváltozás).

Természetesen egy egyenletben a különböző sztöchiometriai együtthatójú anyagok anyagmennyisége (koncentrációja) a sztöchiometriai együtthatóik arányában változik: a reakciósebesség független a sztöchiometriai együtthatóktól, belőle az egyes reagáló anyagok vagy termékek koncentrációváltozásának sebessége a sztöchiometriai együtthatóval történő szorzással megkapható:

$$\frac{\Delta c_A}{\Delta t} = -a \cdot v, \quad \frac{\Delta c_B}{\Delta t} = -b \cdot v, \quad \frac{\Delta c_C}{\Delta t} = c \cdot v.$$

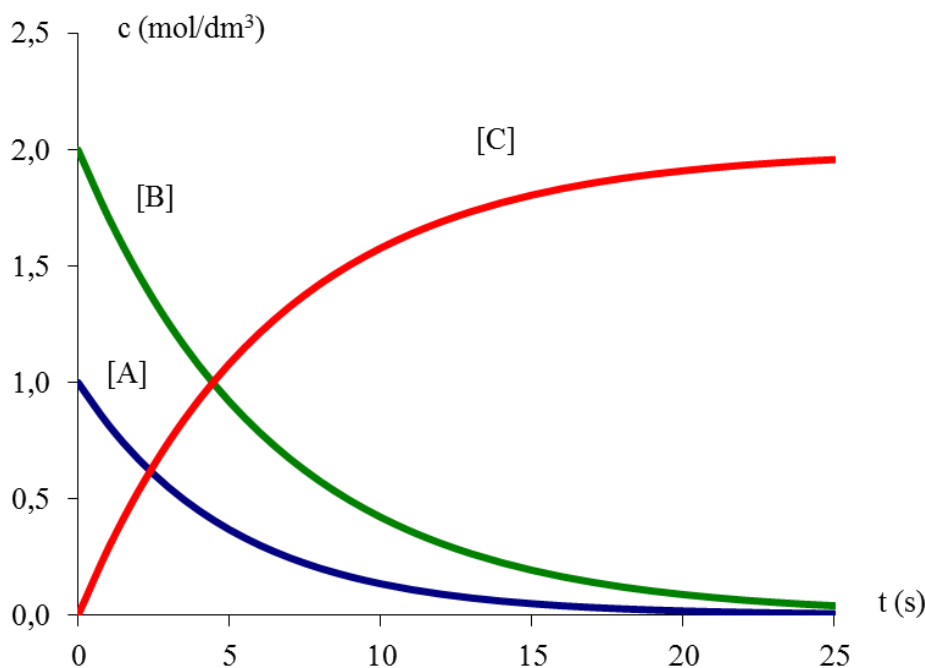
Mint látható az egyenletekből, a kiindulási anyag koncentrációja a reakció előrehaladtával csökken, míg a termékeké növekszik (a reakciósebesség pozitív). Ha a rendezett reakcióban az A kiindulási anyag sztöchiometriai együtthatója kétszerese a B kiindulási anyagénak, akkor az A anyag koncentrációváltozásának (átalakulásának) sebessége a B anyagénak a kétszerese. Ez következménye annak a ténynek, hogy a reakcióegyenlet szigorú mennyiségi, sztöchiometriai arányokat szab meg.

Nézzünk egy példát is!

Egy A anyag és B anyag reakciójában keletkezik a C anyag az alábbi reakcióegyenlet alapján:



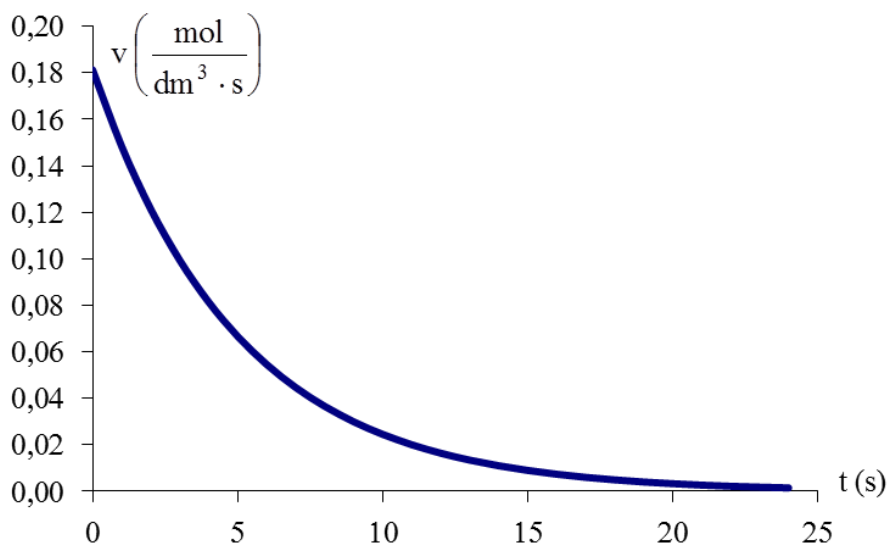
A következő ábra az egyes reaktánsok koncentrációját mutatja az idő függvényében. A B anyag kiindulási koncentrációja kétszerese az A anyagénak: $[B]_0 = 2 \cdot [A]_0$.



7.7.1.1. ábra: Az egyes anyagok koncentrációja az idő függvényében

Mint látható, a kiindulási anyagok koncentrációja az időben csökken és 0-hoz közeledik. Ezzel ellentétben a termék (C) koncentrációja növekszik, és közelíti a teljes átalakulást jelentő 2 mol/dm^3 -es koncentrációt.

A reakciósebesség kiszámítható az egységnyi idő alatti koncentrációváltozásból. A reakciósebességet az idő függvényében ábrázolva a következő ábrát kapjuk.



7.7.1.2. ábra: A reakciósebesség az idő függvényében

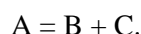
Szépen megfigyelhető, hogy a reakciósebesség nem állandó az idő függvényében, hanem a reakció előrehaladtával csökken. A reakciósebesség a $t = 0$ időpontban a legnagyobb, majd meredeken csökkenni kezd. Fontos azonban megjegyezni, hogy a reakciósebesség nem minden esetben csökken az idő előrehaladtával, bizonyos esetekben állandó lehet, sőt ismerünk olyan reakciókat is, melyek esetén a reakciósebesség időben növekszik (lásd lentebb).

A reakciósebesség általában függ:

- a kiindulási anyagok minőségétől és mennyiségétől (koncentrációjától),
- a hőmérséklettől,
- a katalizátortól
- (bizonyos esetekben) a nyomástól,
- egyéb folyamatoktól (például heterogén fázisú reakcióknál a fázishatáron történő transzport sebességétől).

7.7.2. A reakciósebesség koncentrációfüggése

A kémiai reakciók rendszerint a részecskék ütközése során mennek végbe. Minél gyakrabban találkoznak a molekulák egymással, annál nagyobb a reakció sebessége. Az ütközés gyakorisága függ az anyagok koncentrációjától: minél nagyobb a reaktánsok koncentrációja, rendszerint annál nagyobb az ütközések száma. Tehát a reakciósebesség az esetek többségében függ a reaktánsok koncentrációjától. Az A anyag az alábbi reakcióegyenlet alapján bomlik:



A bomlás reakciósebességét az alábbi **sebességi egyenlettel** jellemezhetjük:

$$v = - \frac{\Delta c_A}{\Delta t} = k \cdot c_A^n.$$

Az n számot a **reakció rendjének**, a k állandót pedig **reakciósebességi állandónak** nevezzük (mértékegysége függ a reakció rendjétől).

A rendűség jellemző a reakcióra adott kísérleti körülmények között. A továbbiakban a különböző rendű reakciókat vizsgáljuk meg alaposabban, minden esetben a legegyszerűbb fenti reakciót, az A anyag bomlását alapul véve. A leggyakoribbak a nullad- ($n = 0$), első- ($n = 1$) és másodrendű ($n = 2$) reakciók, a harmad- és magasabb rendű reakciók igen ritkák, és ezért nem foglalkozunk velük. A bomlásokkal kapcsolatban még egy fogalmat kell tisztáznunk: a felezési időt.

Felezési idő: azon idő, mely alatt a kiindulási anyag koncentrációja az kiindulási ($t = 0$) érték felére csökken. Jele: $t_{1/2}$. A felezési idő függ a reakció rendjétől.

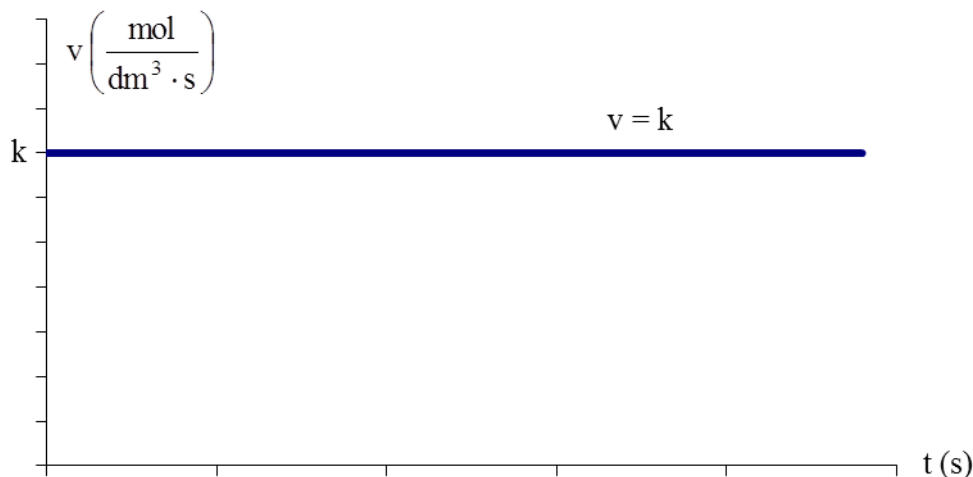
Elemi reakciók

Nulladrendű reakciók

A nulladrendű reakciók sebessége független a koncentrációtól:

$$v = -\frac{\Delta c_A}{\Delta t} = k \cdot c_A^0 = k.$$

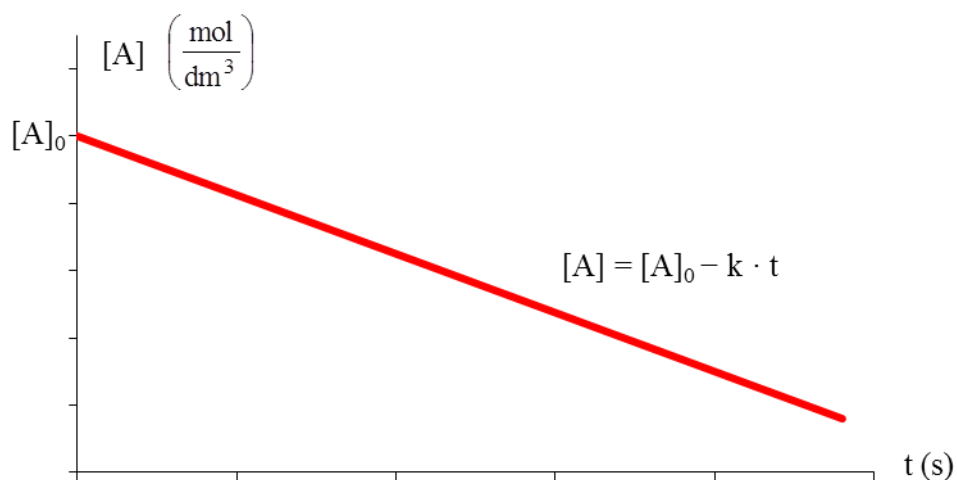
A sebességi állandó mértékegysége megegyezik a reakciósebességével, azaz $\text{mol}/(\text{dm}^3 \cdot \text{s})$. A reakciósebesség időben állandó, értéke pedig éppen a reakciósebességi állandó (k):



7.7.2.1. ábra: Nulladrendű reakció sebessége az idő függvényében

A nulladrendű esetben a koncentráció az idő függvényében lineárisan változik az alábbi egyenlet alapján:

$$[A] = [A]_0 - k \cdot t$$



7.7.2.2. ábra: Az A anyag koncentrációja az idő függvényében nulladrendű reakció esetén

A felezési idő azon időtartam, mely alatt az A anyag koncentrációja a kiindulási koncentráció felére csökken:

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

Így a felezési időre a következő kifejezést kapjuk:

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

A kifejezés alapján megállapítható, hogy a felezési idő függ a koncentrációtól, és ahogy telik az idő, a felezési idő csökken.

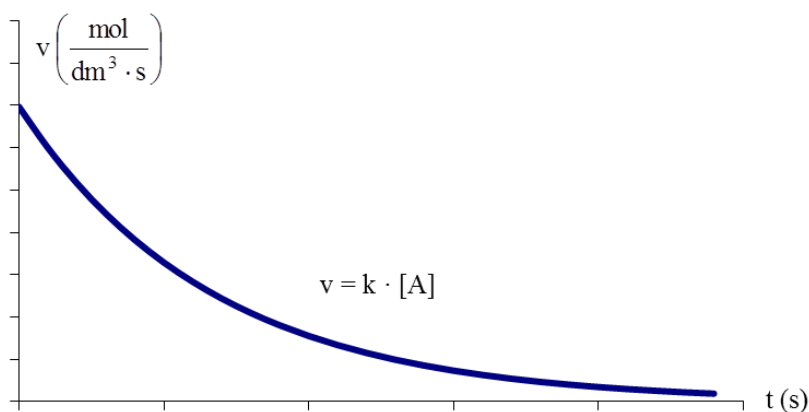
Elsőrendű reakciók

A reakciósebesség az A anyag koncentrációjának első hatványától függ:

$$v = -\frac{\Delta c_A}{\Delta t} = k \cdot c_A^1 = k \cdot c_A.$$

A reakciósebességi állandó mértékegysége 1/s (az időegység reciproka).

Az első rendű reakció esetén a reakciósebesség időben csökken, méghozzá exponenciális függvény szerint:

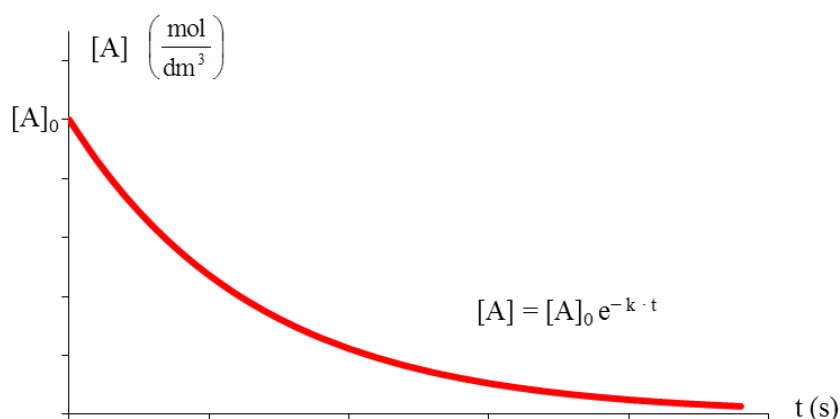


7.7.2.3. ábra: Elsőrendű reakció sebessége az idő függvényében

A kiindulási anyag mennyisége is exponenciálisan csökken az alábbi függvény szerint:

$$[A] = [A]_0 \cdot e^{-k \cdot t}.$$

Az e szám az úgynevezett Euler-féle szám, értéke 2,718. Az e szám igen gyakori a természettudományokban, sokféle jelenség leírása során találkozhatunk vele. Az e alapú logaritmust természetes logaritmusnak nevezzük, jele \ln (*logarimus naturalis*).



7.7.2.4. ábra: Az A anyag koncentrációja az idő függvényében elsőrendű reakció esetén

A felezési idő a következő egyenletből számítható:

$$[A] = \frac{[A]_0}{2} = [A]_0 e^{-k \cdot t_{1/2}}.$$

Ebből a következő kifejezést kapjuk:

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k} = \frac{0,683}{k}.$$

Érdeemes megfigyelni, hogy elsőrendű reakció esetén a felezési idő független a koncentrációtól, így a reakció végbemenete alatt állandó.

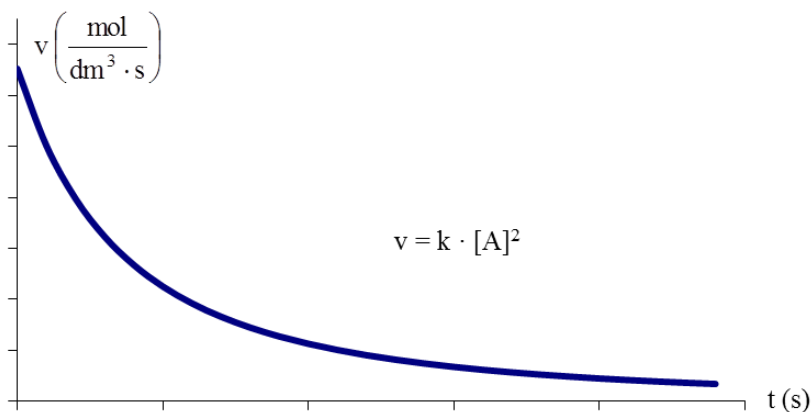
Másodrendű reakciók

A reakciósebesség az A anyag koncentrációjának második hatványától függ:

$$v = -\frac{\Delta c_A}{\Delta t} = k \cdot c_A^2.$$

A reakciósebességi állandó mértékegysége $\text{dm}^3/(\text{mol} \cdot \text{s})$.

Az első rendű reakció esetén a reakciósebesség időben csökken:

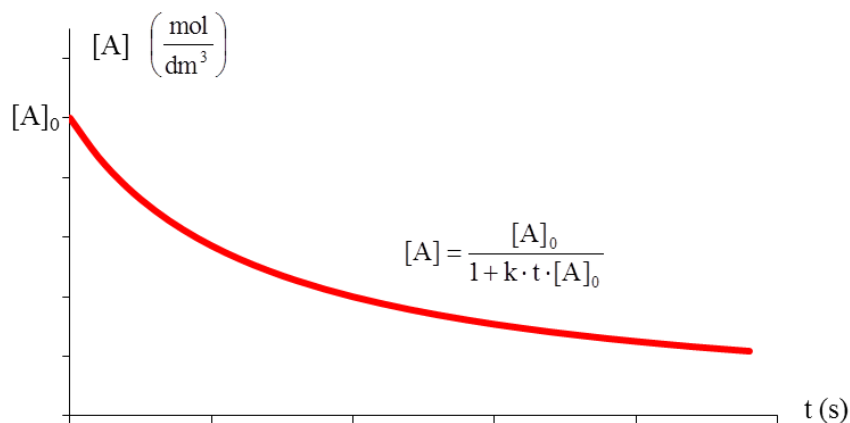


7.7.2.5. ábra: Másodrendű reakció sebessége az idő függvényében

Az A kiindulási anyag koncentrációja az idő törtfüggvénye (hiperbolával írható le):

$$[A] = \frac{[A]_0}{1 + k \cdot t \cdot [A]_0}.$$

Ezt grafikusán ábrázolva a következő diagramot kapjuk:



7.7.2.6. ábra: Az A anyag koncentrációja az idő függvényében másodrendű reakció esetén

A felezési időt – az előzőekhez hasonlóan – kifejezhetjük az alábbi egyenletből:

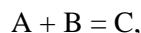
$$[A] = \frac{[A]_0}{2} = \frac{[A]_0}{1 + k \cdot t_{1/2} \cdot [A]_0}.$$

Így a másodrendű folyamat felezési ideje:

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

Mint látható, a felezési idő függ a koncentrációtól, és így folyamatosan változik a reakció lefutása közben.

Másodrendű reakcióról beszélünk akkor is, ha a reakció nem egy adott anyag koncentrációjának második hatványával, hanem két anyag koncentrációjának szorzatával arányos. Például a következő reakció esetén:



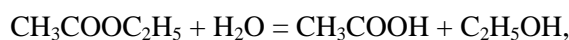
$$v = -\frac{\Delta c_A}{\Delta t} = -\frac{\Delta c_B}{\Delta t} = k \cdot c_A \cdot c_B.$$

Ilyenkor a reakció **részrendje** A-ra illetve B-re nézve 1, míg a reakció összességében **bruttó** másodrendű.

Foglaljuk össze táblázatos formában a rendűséggel kapcsolatos képleteket!

	Nulladrendű	Elsőrendű	Másodrendű
Reakciósebesség	$v = k$	$v = k \cdot [A]$	$v = k \cdot [A]^2$
Koncentráció	$[A] = [A]_0 - k \cdot t$	$[A] = [A]_0 \cdot e^{-k \cdot t}$	$[A] = \frac{[A]_0}{1 + k \cdot t \cdot [A]_0}$
Függvény alakja	lineáris	exponenciális	hiperbola
Felezési idő	$t_{1/2} = \frac{[A]_0}{2 \cdot k}$	$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k} = \frac{0,683}{k}$	$t_{1/2} = \frac{1}{k \cdot [A]_0}$

Fontos megállapítani, hogy kísérletek nélkül általában nem lehet eldönteni, hogy egy reakció hányadrendű. Sőt, a kísérleti körülmények meg is változtathatják egy reakció rendűségét! Például az etil-acetát hidrolízisét egy kísérlet során bruttó másodrendűnek találjuk:



$$v = k \cdot [\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5] \cdot [\text{H}_2\text{O}].$$

A kísérletet megismételjük nagy vízfeszlegben, a víz kiindulási koncentrációja legyen az etil-acetát koncentrációjának 100-szorosa. Ekkor a víz koncentrációja a reakció folyamán gyakorlatilag állandó marad, így „beolvasztható” a sebességi állandóba:

$$v = k \cdot [\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5] \cdot [\text{H}_2\text{O}]_0 = k \cdot [\text{H}_2\text{O}]_0 \cdot [\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5] = k' \cdot [\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5].$$

Ekkor az etil-acetát hidrolízise már nem másodrendű reakció, hanem **pszeudo-elsőrend** szerint megy végbe.

Összetett reakciók

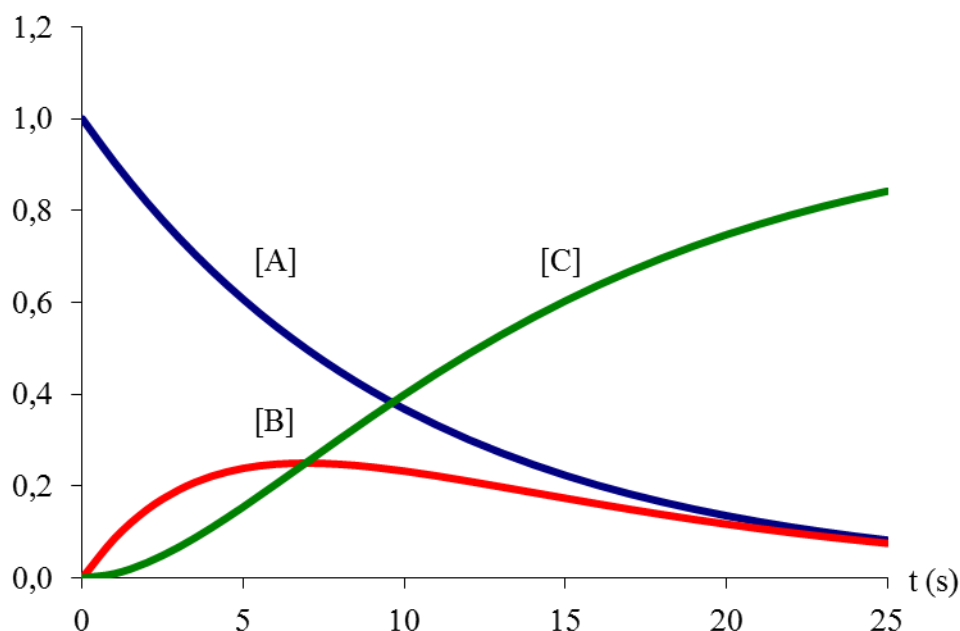
A kémiai reakciók gyakran nem írhatók le a fent tárgyalt egyszerű egyenletekkel. Sokszor előfordul, hogy a reakcióban keletkezett termék egy másik reakció kiindulópontja, azaz egymást követi két reakció. Az is igen gyakori, hogy egy reakció mellett egy másik, konkurens reakció is végbemehet. A továbbiakban ezen reakciótípusokat ismertetjük röviden.

Egymást követő (sorozatos, konsekutív) reakciók

Sorozatos reakcióknak nevezzük azt a két reakciót, melyek közül az első reakció terméke a második reakció kiindulási anyaga. Ezt az anyagot köztiterméknek nevezzük. Például a következő reakciólánc konsekutív reakció:



Az alábbi ábra egy kétlépéses reakciólánc koncentrációviszonyait mutatja.



7.7.2.7. ábra: Sorozatos reakció komponenseinek koncentrációja az idő függvényében

Mint látható, a B jelű köztitermék koncentrációja maximumot ér el, majd csökkenve a nulla felé tart. A köztitermék mennyiségét a két lépés egymáshoz viszonyított sebessége határozza meg. Ha az első reakció sokkal gyorsabb, mint az azt követő második, akkor a köztitermék felhalmozódik, és csak lassan alakul át a C végtermékig. Ha a második reakció sokkal gyorsabb, mint az első, akkor ez azt jelenti, hogy a B köztitermék igen gyorsan továbbalakul C-vé, azaz a köztitermék mennyisége csekély lesz.

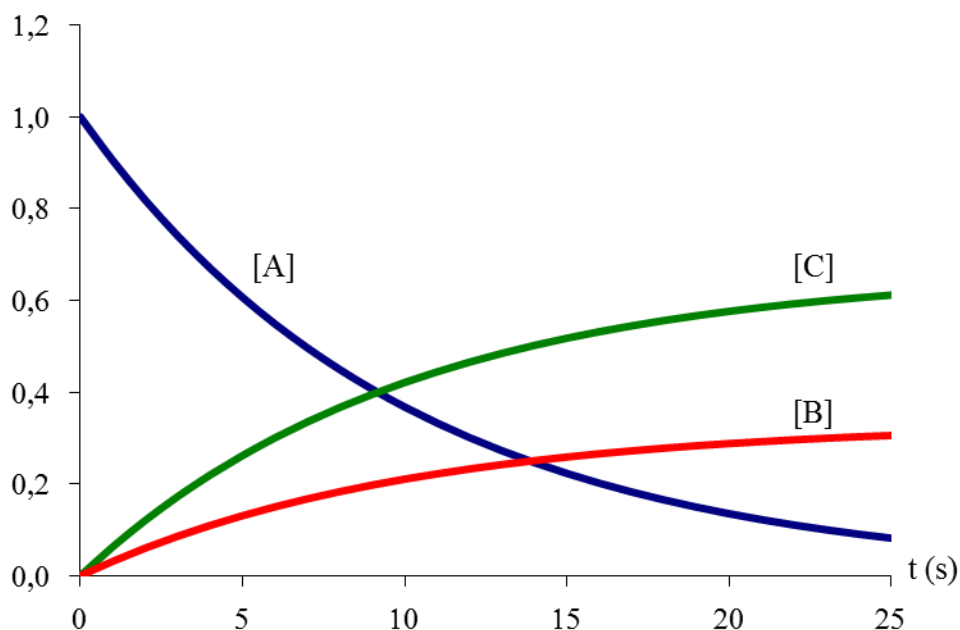
Párhuzamos (paralel) reakciók

Párhuzamos reakcióknak nevezzük azon reakciókat, melyek ugyanabból az anyagból indulnak ki. Például:





A párhuzamos reakciók jellegzetes koncentrációviszonyait az alábbi ábra szemlélteti.



7.7.2.7. ábra: Párhuzamos reakciók komponenseinek koncentrációja az idő függvényében

A B és C termékek relatív mennyiségét a hozzájuk vezető reakciók sebessége határozza meg. Ha a két reakció sebessége között jelentős különbség áll fenn, akkor a gyorsabb reakció gátolja a kevésbé gyors reakcióban keletkező termék keletkezését. A fenti példában a C termék képződése gátolja a B termék képződését.

Egyensúlyra vezető (egyensúlyi) reakciók

Egyensúlyi reakció esetén a reakcióval ellentétes folyamat is mérhető sebességgel végbemegy.

Az egyensúlyra vezető reakciók rendkívül gyakoriak. (Elméletileg minden reakció megfordítható, ám a gyakorlatban bizonyos reakcióknak a sebessége annyira kicsi, hogy nem tapasztalunk visszaalakulást, csak egyirányú folyamatot.)

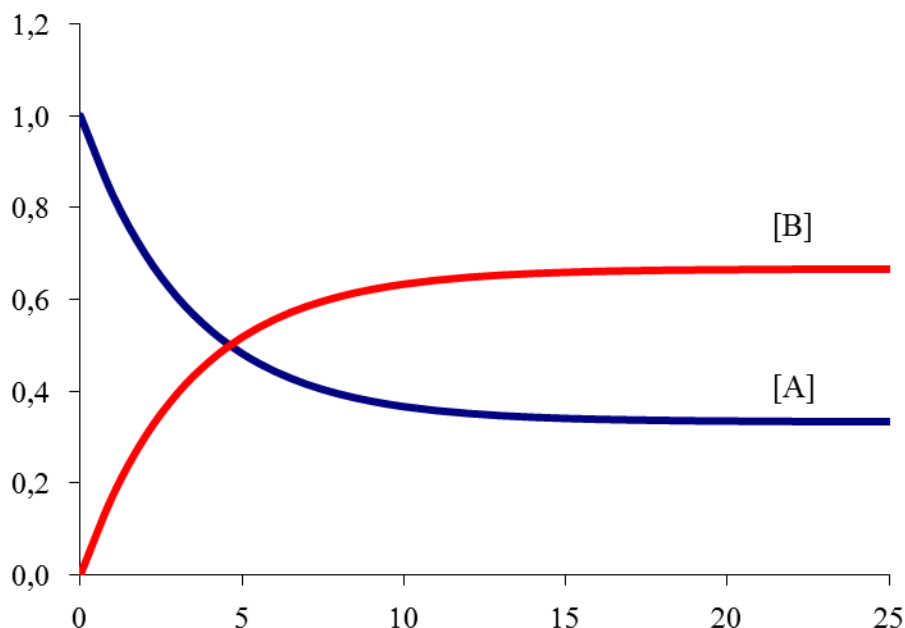
Az egyensúlyi reakciókat az alábbi sémával szemléltethetjük:



Gyakori továbbá az „oda-vissza-nyilat” tartalmazó jelölés is:



Az egyensúlyi reakciók jellemző koncentrációprofilját az alábbi ábrán láthatjuk:



7.7.2.7. ábra: Egyensúlyi reakció komponenseinek koncentrációja az idő függvényében

Az ábra alapján egyértelműen megállapítható, hogy az A anyag sosem alakul át teljesen B-vé. Egy bizonyos idő után az A és B anyagok koncentrációja gyakorlatilag már nem változik (legalábbis számottevő mértékben), ekkor beáll a dinamikus egyensúly. A dinamikus egyensúlyban időegység alatt ugyanannyi A alakul át B anyaggá, mint amennyi B alakul vissza A anyaggá, tehát az egyensúlyban lévő anyagok koncentrációja állandó. Az egyensúlyi koncentrációk ($[A]_e$, $[B]_e$) aránya így egy állandó érték (az ábra alapján 1 : 2), melyet egyensúlyi állandónak nevezünk:

$$K = \frac{[B]_e}{[A]_e}.$$

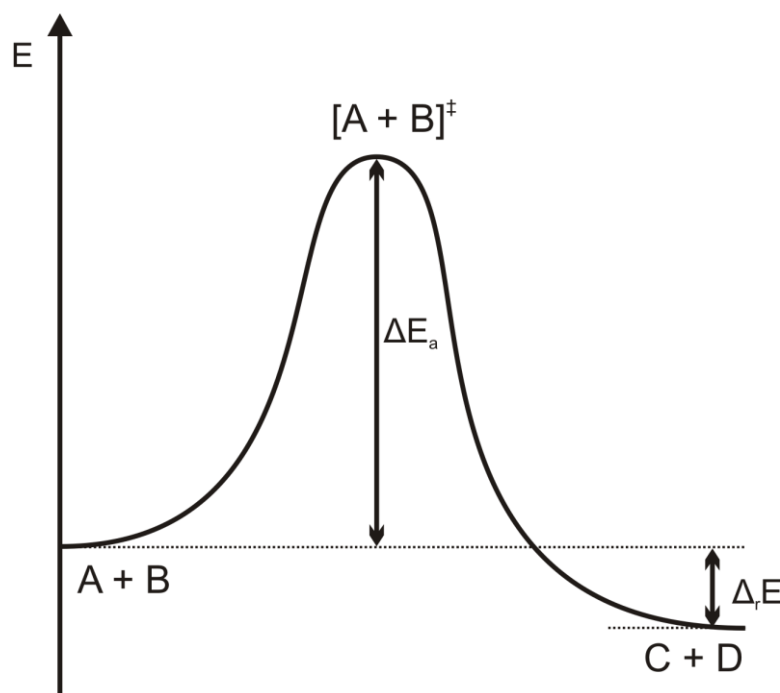
Az egyensúlyi reakciókkal részletesen a következő fejezetben foglalkozunk.

7.7.3. A reakciósebesség hőmérsékletfüggése

Mint korábban már említettük, a kémiai reakciók általában a részecskék ütközése során mennek végbe. A hőmérséklet növelésével egyrészt növekszik az ütközések gyakorisága, másrészt növekszik a részecskék energiája is. Ennek következtében a hőmérséklet növelése gyorsítja a kémiai reakciókat.

Ökölszabályként érdemes megjegyezni, hogy 10 °C hőmérsékletnövekedés hatására általában 2-3-szorosára növekszik az elemi reakciók sebessége (a legtöbb reakcióra szobahőmérséklet körül igaz).

Az ütközések nem mindig eredményeznek kémiai változást. Ha ez így lenne, akkor szinte minden reakció gyakorlatilag pillanatszerűen végbemenne. Azon molekulák ütközése hatásos, melyek energiájának összege meghaladja az úgynevezett **aktiválási energiát** (jele: E_a vagy ΔE^\ddagger). (Amennyiben a molekulák nem rendelkeznek a reakcióhoz szükséges aktiválási energiával, az ütközés során nem történik kémiai átalakulás). A kiindulási anyagokból **aktivált komplex** keletkezik, mely ezután termékekre disszociál.



7.7.3.1. ábra: Az aktiválási energia és az aktivált komplex

Minél kisebb az aktiválási energia, annál könnyebben megy végbe az átalakulás, tehát adott hőmérsékleten a kis aktiválási energiájú folyamatok általában gyorsabbak, mint a nagyobb aktiválási energiájúak. Megjegyzés: az ütközés hatékonysága szempontjából fontos, hogy a részecskék megfelelő irányból találkozzanak, tehát egy meghatározott valószínűséggel jöhet létre kémiai átalakulás.

A reakciósebességi állandó hőmérsékletfüggését az empirikus Arrhenius-egyenlet írja le:

$$k = A \cdot e^{-\frac{E_a}{R \cdot T}},$$

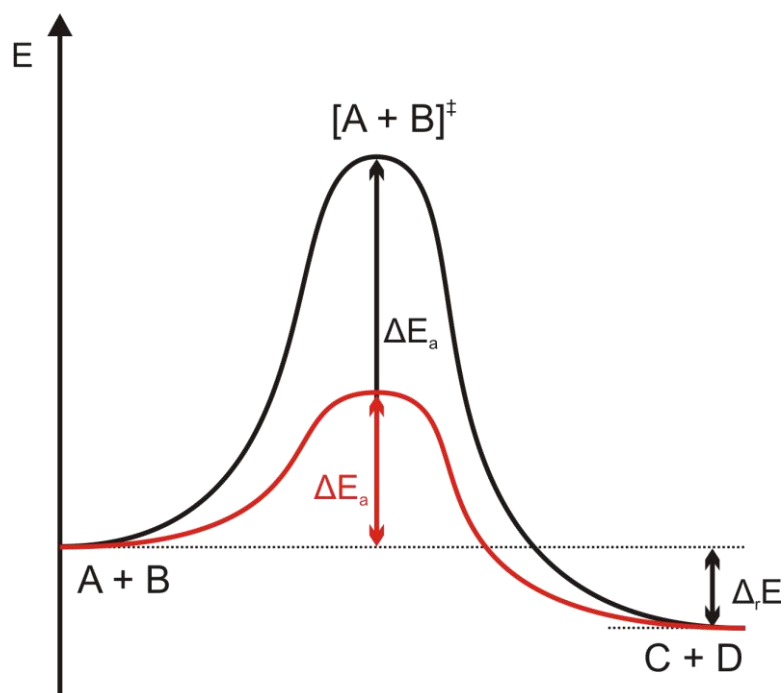
ahol A-val jelöljük a pre-exponenciális tényezőt, E_a az aktiválási energia (J/mol-ban), R az egyetemes gázállandó ($8,314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$), és T az abszolút hőmérséklet (K-ben mérve).

Az Arrhenius-egyenlet viszonylag egyszerű matematikai összefüggést teremt az aktiválási energia, a hőmérséklet és a reakciósebesség között. Minél kisebb az aktiválási energia értéke, annál nagyobb a k értéke, azaz annál gyorsabban megy végbe a reakció. A hőmérsékletet növelve szintén növekszik a reakciósebességi állandó értéke, tehát azonos körülmények között vizsgálva növekszik a reakciósebesség.

A **katalizátorok** a folyamat aktiválási energiáját lecsökkentve gyorsítják a kémiai reakciót. Ez jól megfigyelhető a következő ábrán feltüntetett reakció-energiaprofilon, melyen feketével jelöltük, ha katalizátor nélküli, míg pirossal, ha katalizátor jelenlétében megy végbe a folyamat. Fontos megjegyezni, hogy a katalizátor a reakcióhőt nem változtatja meg.

Gyakran előfordul, hogy katalizátor jelenlétében a reakció egy egészen eltérő reakcióúton megy végbe, például az egy lépéses reakcióút helyett, katalizátort alkalmazva, több lépésben megy végbe a reakció.

A katalizátorok egy fontos jellemzője, hogy a reakció végén eredeti formájukban rendszerint visszanyerhetők (ez nem mindig igaz, és gyakran számolnunk kell veszteséggel is).



7.7.3.2. ábra: Katalizátor hatása az aktiválási energiára

Az élő szervezetekben található enzimek általában valamilyen biokémiai folyamatot katalizálnak.

Bizonyos esetekben a reakcióban keletkező terméknek is lehet katalitikus hatása, ilyenkor **autokatalízis**ről beszélünk. Ekkor a termék keletkezése gyorsítja a reakciót, növeli a reakciósebességet.

A **promotorok** olyan anyagok, melyek növelik az adott reakció sebességét, ám nem kaphatók vissza a reakció végén.

Az **inhibitorok** a kémiai reakciók sebességét lecsökkentve gátolják a folyamatot.

Az inhibícióval leggyakrabban az enzimreakciókkal kapcsolatban találkozunk. A **katalizátormérgek** olyan anyagok, melyek a katalizátorhoz kapcsolódva meggátolják annak működését, tehát inhibíciót okoznak.

7.8. Gyakorlókérdések

1. Mit nevezünk reakciósebességnek?
2. Mitől függ a reakciósebesség?
3. Mi a rendűség?
4. Hogyan definiálható a sebességi együttható?
5. Definiálja a sorozatos reakciók fogalmát!
6. Az A anyagból keletkező B anyag tovább tud alakulni a C jelű anyaggá. Milyen esetben tudjuk B-t viszonylag tisztán előállítani?
7. Milyen reakciókat nevezünk párhuzamos reakcióknak?
8. Milyen hatással van a hőmérséklet-növelés a reakciósebességre?
9. Mik a katalizátorok?
10. Mi az autokatalízis?
11. Mit nevezünk inhibitoroknak?
12. Egy elemi reakció sebességét milyen hatásokkal tudjuk megnövelni?
13. Hogyan dönthető el egy elemi reakcióról, hogy milyen rendű?

7.44. példa:

Egy **A** anyag elsőrendű kinetika szerint bomlik. Adott hőmérsékleten az **A** anyag kiindulási koncentrációja $1,000 \text{ mol/dm}^3$, ám 25,0 perc múltán már csak $0,650 \text{ mol/dm}^3$ a koncentráció. Mekkora a reakciósebességi állandó? Mennyi idő múlva csökken az **A** anyag koncentrációja $0,650 \text{ mol/dm}^3$ -ről $0,500 \text{ mol/dm}^3$ -re?

Megoldás:

Az **A** anyag koncentrációjának időbeli változása elsőrendű kinetika esetén:

$$[\mathbf{A}] = [\mathbf{A}]_0 \cdot e^{-k \cdot t}.$$

Behelyettesítve a mennyiségeket:

$$0,650 = 1,000 \cdot e^{-k \cdot 25 \text{ min}}.$$

Ebből a reakciósebességi állandó értéke: $k = 0,0172 \text{ 1/min}$.

Ezután kiszámítható, hogy mennyi időn belül csökken a koncentráció $0,500 \text{ mol/dm}^3$ -re:

$$0,500 = 0,650 \cdot e^{-0,0172 \cdot t}.$$

Ebből $t = 15,3 \text{ min}$.

Tehát a reakciósebességi állandó értéke 0,0172 1/min, és 15,3 perc múlva csökken a koncentráció $0,650 \text{ mol/dm}^3$ -ről $0,500 \text{ mol/dm}^3$ -re.

7.45. példa:

Az **A** anyag bomlási reakciójában **B** anyag keletkezik: $\mathbf{A} \rightarrow 2 \mathbf{B}$. Egy kísérletsorozatban vizsgáltuk az **A** anyag koncentrációjának időbeli változását. A kapott eredményeket a következő táblázat tartalmazza:

t (min)	[A] (mol/dm³)
0	0,7000
1	0,6000
2	0,5186
3	0,4510
4	0,4015
5	0,3307
6	0,2846
7	0,2340
8	0,2109
9	0,1815
10	0,1610
11	0,1345
12	0,1157
13	0,1010
14	0,0857
15	0,0738

Az eredmények alapján döntsük el, hogy nullad-, első- vagy másodrend szerint megy végbe az **A** anyag bomlása!

Megoldás:

Az A anyag koncentrációjának változása nulladrend esetén:

$$[A] = [A]_0 - k \cdot t.$$

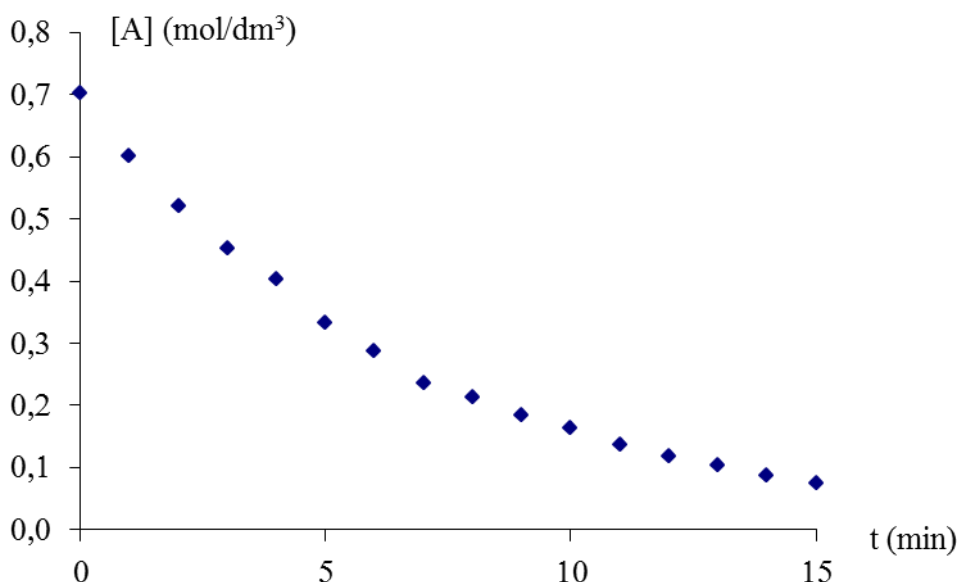
Elsőrendű reakció esetén:

$$[A] = [A]_0 \cdot e^{-k \cdot t}.$$

Másodrendű reakció esetén pedig:

$$[A] = \frac{[A]_0}{1 + k \cdot t \cdot [A]_0}.$$

Ábrázoljuk az A anyag koncentrációját az idő függvényében!



7.8.1. ábra: Az A anyag koncentrációja az idő függvényében

Az ábrából látható, hogy biztosan nem nulladrend szerint megy végbe a bomlás, mivel ez esetben lineáris lenne a koncentráció–idő függvény. Tehát vagy első, vagy másodrend szerint történik a bomlás. Az elsőrendű reakció exponenciális lefutását a diagram alapján nem könnyű megkülönböztetni a másodrendű reakció hiperbola függvényétől, mivel a két görbe alakja hasonló. Ilyenkor célszerű a görbét olyan alakúra transzformálni, hogy a rendűséget könnyebben meg tudjuk állapítani. Megfelelő matematikai műveletekkel az elsőrendű és a másodrendű reakció egyenlete is lineáris formára hozható. Ha elvégezzük a koncentrációk transzformációját, és ezt ábrázoljuk az idő függvényében, a két eset valamelyikében lineáris függvényt kapunk (feltéve, hogy első- vagy másodrend szerint megy végbe a reakció).

Hozzuk lineáris formára az elsőrendű reakció egyenletét!

$$[A] = [A]_0 \cdot e^{-k \cdot t}$$

$$\frac{[A]}{[A]_0} = e^{-k \cdot t}$$

$$\ln \frac{[A]}{[A]_0} = -k \cdot t$$

Mint látható, az $\ln \frac{[A]}{[A]_0}$ kifejezést az idő függvényében ábrázolva egy origóra illeszkedő lineáris függvényt kell kapnunk, melynek meredeksége a reakciósebességi állandó ellentettje ($-k$).

Most linearizáljuk a másodrendű reakció függvényét is!

$$[A] = \frac{[A]_0}{1 + k \cdot t \cdot [A]_0}$$

$$[A] = \frac{1}{\frac{1}{[A]_0} + k \cdot t}$$

$$\frac{1}{[A]_0} + k \cdot t = \frac{1}{[A]}$$

$$\frac{1}{[A]} - \frac{1}{[A]_0} = k \cdot t$$

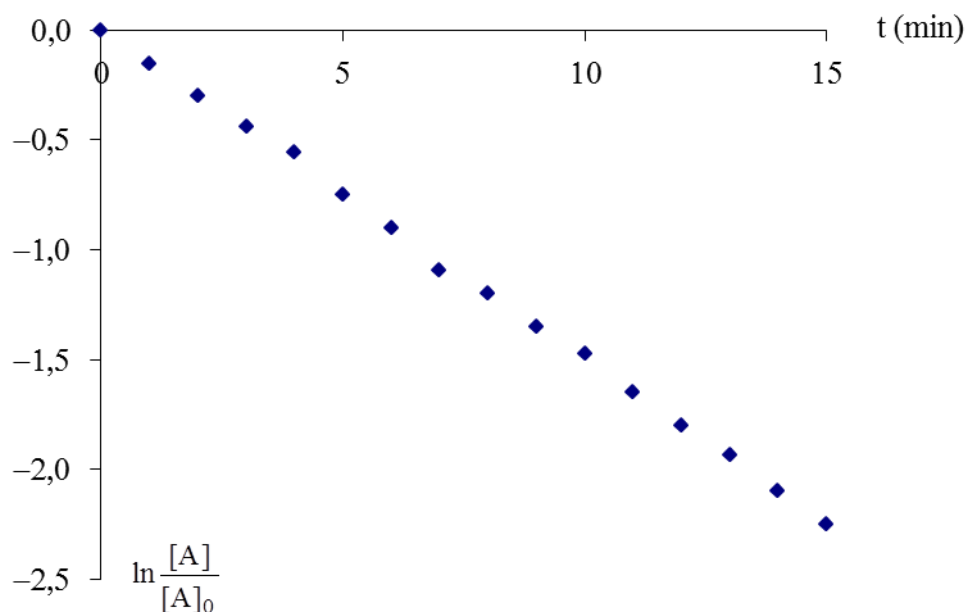
Tehát ha az $\frac{1}{[A]} - \frac{1}{[A]_0}$ kifejezést ábrázoljuk az idő függvényében, egyenest kell kapnunk, melynek a meredeksége éppen a reakciósebességi állandó (k).

Most végezzük el mindkét transzformációt a koncentrációkon!

t (min)	A (mol/dm ³)	$\ln \frac{[A]}{[A]_0}$ (-)	$\frac{1}{[A]} - \frac{1}{[A]_0}$ (dm ³ /mol)
0	0,7000	0,0000	0,0000
1	0,6000	-0,1542	0,2381
2	0,5186	-0,3000	0,4997
3	0,4510	-0,4397	0,7887
4	0,4015	-0,5559	1,0621
5	0,3307	-0,7500	1,5955
6	0,2846	-0,9000	2,0848
7	0,2340	-1,0959	2,8449
8	0,2109	-1,2000	3,3139
9	0,1815	-1,3500	4,0813
10	0,1610	-1,4698	4,7826
11	0,1345	-1,6500	6,0087
12	0,1157	-1,8000	7,2122
13	0,1010	-1,9362	8,4724
14	0,0857	-2,1000	10,2348
15	0,0738	-2,2500	12,1222

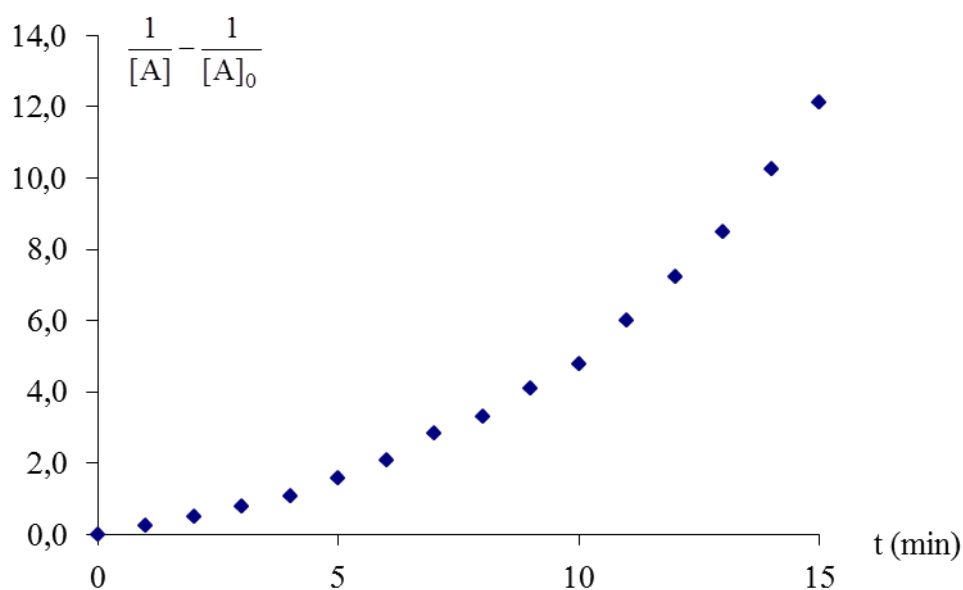
Ezután ábrázoljuk a két transzformált adatsort az idő függvényében!

Elsőrendű reakciót feltételezve az alábbi diagramot kapjuk:



7.8.2. ábra: Az eredmények ábrázolása elsőrendű reakciót feltételezve

Másodrendű reakciót feltételezve pedig a következő ábrához jutunk:



7.8.3. ábra: Az eredmények ábrázolása másodrendű reakciót feltételezve

Mint a két diagramból látható, elsőrendű reakciót feltételezve egy origóból kiinduló egyenest kapunk, míg másodrendű reakciót feltételezve egy görbét. Tehát az A anyag bomlása elsőrendű reakció szerint megy végbe. Az egyenes meredekségét a diagramról leolvastva megállapítható, hogy a reakció sebességi állandója: $k \approx 0,15$ 1/min.

8. KÉMIAI EGYENSÚLYOK

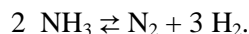
8.1. A tömeghatás törvénye és az egyensúlyi állandó

A kémiai reakciók esetén gyakran tapasztaljuk, hogy nem mennek tökéletesen végbe, azaz a kiindulási anyagok egy része reagálatlanul megmarad, és így természetesen kevesebb terméket kapunk, mint amennyi a reakció sztöchiometriai egyenlete alapján várható lenne. Azaz (elméletileg) akár végtelen ideig folytatva a reakciót az elegyben, nemcsak a termékek, hanem a kiindulási anyagok is jelen lesznek, továbbá – mint ahogy a későbbiekben látni is fogjuk – az egyes komponensek mennyiségét is egy nem túl bonyolult összefüggés írja le. Az ilyen típusú reakciókat **egyensúlyi folyamatoknak** nevezzük.

Az **egyensúlyi reakciók** nemcsak a kiindulási anyagokból a termékek irányába mehetnek végbe, hanem az egyenletben a termékek szerepét betöltő anyagokat egymással reagáltatva visszakaphatjuk a kiindulási anyagokat, azaz ezek a reakciók **megfordíthatók** (idegen kifejezéssel **reverzibilisek**, míg a vissza nem fordítható reakciók **irreverzibilisek**).

Tehát egy egyensúlyi reakció egyenletének megfelelően reagáltatva az anyagokat, azt tapasztaljuk, hogy az egyes komponensek koncentrációja egy bizonyos idő múltán már gyakorlatilag nem változik, beáll az úgynevezett dinamikus egyensúly. Ez azonban nem azt jelenti, hogy ekkor már nem megy végbe semmilyen folyamat, csupán az egyes anyagok oda-, illetve visszaalakulásának a sebessége megegyezik, így a teljes reakcióelegyben – összességében – nincs változás: beáll a **dinamikus egyensúly**.

Például egy egyszerű reakció, az ammónia disszociációja egyensúlyi folyamat:



Egy kísérletsorozatot elvégezve, egy adott térfogatú gáztartályba különböző mennyiségű ammóniagázt juttatunk, majd – minden esetben azonos hőmérsékleten – megvárjuk, hogy beálljon az egyensúly, azaz ne változzék az ammónia-, hidrogén- és nitrogénmolekulák koncentrációja. Ekkor a következő mérési eredményeket kaptuk:

Mérés	$[\text{NH}_3]_0$ (mol/dm ³)	$[\text{NH}_3]$ (mol/dm ³)	$[\text{N}_2]$ (mol/dm ³)	$[\text{H}_2]$ (mol/dm ³)
1	0,1000	0,00103	0,04949	0,14846
2	0,2000	0,00404	0,09798	0,29394
3	0,3000	0,00892	0,14554	0,43662
4	0,4000	0,01560	0,19220	0,57660
5	0,5000	0,02380	0,23810	0,71430

$[\text{NH}_3]_0$: az ammóniagáz kiindulási koncentrációja, $[\text{NH}_3]$ az ammóniagáz egyensúlyi koncentrációja, $[\text{N}_2]$: a nitrogéngáz egyensúlyi koncentrációja, $[\text{H}_2]$ pedig a hidrogéngáz egyensúlyi koncentrációja.

Ezután számítsuk ki a következő kifejezés értékét minden mérési pontra:

$$\frac{[\text{N}_2] \cdot [\text{H}_2]^3}{[\text{NH}_3]^2}.$$

Az eredményeket a következő táblázat tartalmazza:

Mérés	$\frac{[\text{N}_2] \cdot [\text{H}_2]^3}{[\text{NH}_3]^2}$
1	152,6
2	152,5
3	152,3
4	151,4
5	153,2

Érdekes módon azt tapasztaljuk, hogy az ammónia, a nitrogén és a hidrogén koncentrációi között minden esetben a következő összefüggés áll fenn:

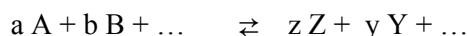
$$\frac{c_{\text{N}_2} \cdot c_{\text{H}_2}^3}{c_{\text{NH}_3}^2} = \frac{[\text{N}_2] \cdot [\text{H}_2]^3}{[\text{NH}_3]^2} = \text{állandó}.$$

A képletben a c betű illetve a [szögletes zárójel] az *egyensúlyi* koncentrációkat jelenti mol/dm³-ben, és az egyes hatványkitevők a reakcióegyenletben szereplő sztöchiometriai együtthatók.

(Megjegyzések: az egyes komponensek egyensúlyi koncentrációja közötti összefüggés nemcsak tapasztalati úton igazolható, hanem fizikai-kémiai megfontolások alapján is levezethető. Továbbá a kísérleti hibák következtében a fenti esetben ez csak közelítőleg igaz.)

Fontos megjegyezni, hogy az ammónia kiindulási koncentrációja minden kísérletben különböző, viszont az egyensúlyi koncentrációkra minden esetben azonos a fenti kifejezés értéke.

A fenti összefüggést, a **tömeghatás törvényét** (Guldberg és Waage alapján) egy általános formában felírt reakcióegyenlet esetén az alábbi módon definiálhatjuk.



kiindulási anyagok \rightleftharpoons termékek

$$K_c = \frac{[\text{Z}]_e^z \cdot [\text{Y}]_e^y \cdot \dots}{[\text{A}]_e^a \cdot [\text{B}]_e^b \cdot \dots}$$

Az állandó értékét kémiai **egyensúlyi állandónak** vagy **tömeghatástörtnek** nevezzük, és K betűvel jelöljük. Általában a koncentrációkkal kifejezett egyensúlyi állandó esetén a K_c jelölést alkalmazzuk, mivel – mint majd később látjuk – különböző egyensúlyi állandókat is használhatunk.

Azaz a számlálóban a termékek *egyensúlyi* koncentrációit megfelelő hatványkitevőre emelve összeszorozzuk, míg a nevezőben hasonlóan járunk el, csak a kiindulási anyagok *egyensúlyi* koncentrációit helyettesítjük be.

Az egyensúlyi állandót általában dimenziómentesnek tekintjük, ám bizonyos szakkönyvek a mol/dm³ megfelelő hatványát tüntetik fel az egyensúlyi állandó mértékegységeként. A továbbiakban az egyensúlyi állandót dimenziómentesnek fogjuk tekinteni. Ezt precízen úgy kapjuk meg, hogy az egyes komponensek mol/dm³-ben mért koncentrációját elosztjuk a c_0 egységkoncentrációval, azaz 1 mol/dm³-rel, és ezt helyettesítjük be a képletbe. Így K_c dimenziómentes lesz:

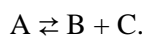
$$K_c = \frac{\left(\frac{[\text{Z}]_e}{c_0}\right)^z \cdot \left(\frac{[\text{Y}]_e}{c_0}\right)^y \cdot \dots}{\left(\frac{[\text{A}]_e}{c_0}\right)^a \cdot \left(\frac{[\text{B}]_e}{c_0}\right)^b \cdot \dots}$$

A c_0 egységkoncentrációval történő osztást a továbbiakban nem fogjuk feltüntetni, viszont az egyensúlyi állandót dimenzió nélkülinek fogjuk tekinteni.

A bomlási (idegen kifejezéssel disszociációs) reakciók egy fontos jellemzője a disszociációfok.

Disszociációfok: a disszociáció során elbomlott részecskék mennyiségének és az adott részecske kiindulási (össz)mennyiségének aránya. Rendszerint α -val jelöljük.

Például ha a következő reakcióra a disszociációfok 0,7 (vagy másképpen 70%-os), az azt jelenti, hogy az A molekulák számának 70%-a disszociált, 30%-a viszont nem:



A disszociációfok természetesen koncentrációkkal is kifejezhető. Legyen a disszociáló A anyag kiindulási koncentrációja $[A]_0$, az egyensúlyban pedig $[A]_e$ (ez tehát a disszociálatlan anyag koncentrációja). Így a disszociált (elbomlott) anyag koncentrációja $[A]_0 - [A]_e$. Ekkor a disszociációfok:

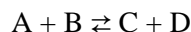
$$\alpha = \frac{[A]_0 - [A]_e}{[A]_0} = 1 - \frac{[A]_e}{[A]_0}.$$

Tökéletes disszociáció esetén $\alpha = 1$, azaz nem marad a kiindulási anyagból, ha viszont $\alpha = 0$, akkor az azt jelenti, hogy az anyag egyáltalán nem disszociál. Amennyiben a disszociáció egyensúlyi folyamat,

Megjegyezzük, hogy egyesülési reakciók esetén ezzel analóg módon szoktak asszociációfokot is definiálni.

Az egyensúlyi állandó (K) értékéből sok fontos ismeret megtudhatunk: amennyiben értéke nagyon kicsi, akkor sejthető, hogy a kiindulási anyagok csak csekély mértékben alakulnak át, a termékek mennyisége is kicsi az egyensúly beálltakor. A nagy egyensúlyi állandó ezzel szemben azt mutatja, hogy sok termék keletkezik, és így a kiindulási anyag jelentős része átalakul.

Az egyensúlyi állandóhoz hasonló összefüggés természetesen nem csak egyensúlyi rendszer esetén írható fel. Vegyünk egy igen egyszerű egyensúlyi reakciót, mely a következő egyenlettel írható le!



A tiszta A és tiszta B anyagból azonos anyagmennyiséget összekeverünk egy edényben. Az összekeverés pillanatában az elegy még nem tartalmaz C és D anyagokat, viszont ahogy telik az idő, az A és B anyagok mennyisége (koncentrációja) csökken, a C és D anyagok mennyisége (koncentrációja) pedig növekszik. A tömeghatástörtnek megfelelő kifejezést bármely pillanatra felírhatjuk:

$$Q = \frac{[C] \cdot [D]}{[A] \cdot [B]}.$$

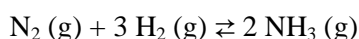
A Q-val jelölt mennyiség a reakcióhányados (vagy reakciókvóciens), melynek értéke a reakció kezdeti pillanatában nulla, viszont a reakció előrehaladtával növekszik, míg el nem éri az egyensúlyi állandó (tömeghatástört) értékét. Tehát az egyensúlyi állandó az egyensúlyban mért reakcióhányados. Egy adott összetételű – nem egyensúlyban lévő – reakcióelegyben a reakcióhányados segítségével megbecsülhetjük, hogy milyen irányú folyamat megy végbe nagyobb sebességgel: ha a reakcióhányados kisebb, mint az egyensúlyi állandó ($Q < K$), akkor a kiindulási anyagokból a termékek keletkezése (azaz $A + B \rightarrow C + D$) a gyorsabb folyamat, mely közelíti a rendszert az egyensúlyhoz. Amennyiben a reakcióhányados értéke nagyobb, mint az egyensúlyi állandó, akkor a $C + D \rightarrow A + B$ reakció a gyorsabb, tehát az egyensúly eléréséhez a termékekből még kiindulási anyagoknak kell keletkezniük.

8.1. példa:

Az ammónia egy igen fontos vegyipari alapanyagunk, elemi hidrogénből és nitrogénből állítják elő, mely egyensúlyi folyamat. 400 °C hőmérsékleten az egyensúlyi elegyben az egyes komponensek koncentrációja a következő:

Komponens	Koncentráció
N ₂ (g)	0,150 mol/dm ³
H ₂ (g)	0,450 mol/dm ³
NH ₃ (g)	0,012 mol/dm ³

Mekkora az alábbi folyamat egyensúlyi állandója?

**Megoldás:**

A reakcióegyenlet alapján az egyensúlyi állandó kifejezése:

$$K_c = \frac{[\text{NH}_3]^2}{[\text{N}_2] \cdot [\text{H}_2]^3}.$$

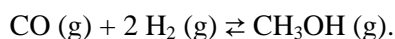
Behelyettesítve az egyensúlyi koncentrációkat:

$$K_c = \frac{[\text{NH}_3]^2}{[\text{N}_2] \cdot [\text{H}_2]^3} = \frac{0,012^2}{0,150 \cdot 0,450^3} = 1,05 \cdot 10^{-2}.$$

Tehát az ammóniaszintézis egyensúlyi állandója 1,05 · 10⁻².

8.2. példa:

Megfelelően magas hőmérsékleten szén-monoxidból és hidrogénből egyensúlyi folyamatban metanolgáz keletkezik a következő egyenlet alapján:



Egy 1,000 dm³ térfogatú tartályban összekeverünk 28,00 gramm szén-monoxidot és 6,00 gramm hidrogéngázt. Megvárjuk, hogy beálljon az egyensúly, ekkor azt tapasztaljuk, hogy a szén-monoxidnak már csak 16,00%-a található meg a reakcióelegyben. Mekkora a metanol koncentrációja? Mekkora a folyamat egyensúlyi állandója?

$$A_r(\text{H}) = 1,0; A_r(\text{C}) = 12,0; A_r(\text{O}) = 16,0.$$

Megoldás:

Számítsuk ki a szén-monoxid és a hidrogén kiindulási anyagmennyiségeit!

$$M(\text{CO}) = 28,0 \text{ g/mol}, M(\text{H}_2) = 2,0 \text{ g/mol},$$

így:

$$n(\text{CO}) = 1 \text{ mol}, n(\text{H}_2) = 3 \text{ mol}.$$

A szén-monoxid 16,0%-a marad meg, azaz 0,16 mol, a többi pedig metanollá alakult. Így a metanol anyagmennyisége: $n(\text{CH}_3\text{OH}) = 0,84 \text{ mol}$.

Mivel az elegy térfogata 1,000 dm³, a metanol koncentrációja 0,84 mol/dm³.

Most számítsuk ki a maradék hidrogéngáz anyagmennyiségét! Mivel az egyenlet alapján 1 mól szén-monoxid 2 mól hidrogénnel reagál, 0,84 mol szén-monoxiddal $2 \cdot 0,84 \text{ mol} = 1,68 \text{ mol}$ hidrogén

reagál (a sztöchiometriából jól ismert egyenes arányosság továbbra is fennáll!). Így a 3 mol H_2 -ből csak 3 mol – 1,68 mol = 1,32 mol marad.

Az egyes komponensek egyensúlyi koncentrációi (mivel a térfogat 1,000 dm³, ezek éppen megegyeznek az anyagmennyiségek számértékével):

Komponens	Koncentráció
CO (g)	0,16 mol/dm ³
H ₂ (g)	1,32 mol/dm ³
CH ₃ OH (g)	0,84 mol/dm ³

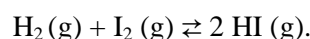
Így a folyamat egyensúlyi állandója:

$$K_c = \frac{[CH_3OH]}{[CO] \cdot [H_2]^2} = \frac{0,84}{0,16 \cdot 1,32^2} = 3,013.$$

Tehát a metanol előállításának egyensúlyi állandója 3,013.

8.3. példa:

Hidrogéngázt jódgőzzel összekeverve egyensúlyi reakcióban hidrogén-jodid keletkezik. A folyamat egyensúlyi állandója 445 °C hőmérsékleten $K_c = 50,2$:



Egy 2,000 dm³ térfogatú eredetileg üres tartályban összekeverünk 2,000 mol hidrogéngázt és 2,000 mol jódgőzt, és megvárjuk, hogy beálljon az egyensúly. Állapítsuk meg az egyes komponensek egyensúlyi koncentrációját!

Megoldás:

Először számítsuk ki a kiindulási koncentrációkat!

$$[H_2]_0 = 1,000 \text{ mol/dm}^3, [I_2]_0 = 1,000 \text{ mol/dm}^3.$$

A következőkben egy, az egyensúlyi feladatok megoldásához általában igen jól alkalmazható módszert mutatunk be. Készítünk egy táblázatot, melyben összefoglaljuk az átalakulás során végbemenő anyagmennyiség (koncentráció) változásokat! A táblázat első sorában szerepeljenek a kiindulási koncentrációk (a HI kiindulási koncentrációja – mivel kiinduláskor még nem keletkezett – zérus). A második sorban feltüntetjük az átalakult mennyiségeket: a növekvő anyagmennyiségű (koncentrációjú) mennyiségeket pozitív, a csökkenőket pedig negatív előjellel (pirossal jelölve az alábbi táblázatban). Itt nagyon fontos figyelni a sztöchiometriai arányokra! A változó mennyiségekre továbbra is érvényben marad a sztöchiometriában megismert arányosság. Tehát ha adott mennyiségű hidrogén átalakul, akkor az átalakult mennyiség kétszeresének megfelelő mennyiségű hidrogén-jodid keletkezik (kékkel jelölve a táblázatban)! Mivel nem ismerjük, hogy mennyi hidrogén és jód alakult át, ezt a mennyiséget jelöljük például x-szel! A táblázat utolsó sora az első két sor összege, azaz azon anyagmennyiségek vagy koncentrációk, melyeket egyensúlyban tapasztalunk (a kiindulási mennyiség + az átalakult mennyiség). Most nézzük mindezt gyakorlatban!

	H ₂ (g)	+	I ₂ (g)	⇌	2 HI (g)
Kiindulási:	1,000		1,000		0
Átalakul:	- x		- x		+ 2 · x
Egyensúlyban:	1,000 - x		1,000 - x		2 · x

Tehát az egyensúlyi koncentrációk:

$$[H_2]_e = 1,000 - x$$

$$[I_2]_e = 1,000 - x$$

$$[HI]_e = 2 \cdot x.$$

Behelyettesítve az egyensúlyi koncentrációkat az egyensúlyi állandó megfelelő kifejezésébe:

$$K_c = \frac{[\text{HI}]^2}{[\text{H}_2] \cdot [\text{I}_2]} = \frac{(2 \cdot x)^2}{(1,000 - x) \cdot (1,000 - x)}$$

Mivel ismerjük az egyensúlyi állandó értékét, a létrejött egyenletet meg tudjuk oldani x -re:

$$K_c = \frac{(2 \cdot x)^2}{(1,000 - x) \cdot (1,000 - x)} = 50,2,$$

$$\frac{(2 \cdot x)^2}{(1,000 - x)^2} = 50,2,$$

$$\left(\frac{2 \cdot x}{1,000 - x} \right)^2 = 50,2.$$

Ebből az alábbi két egyenletet kapjuk:

$$\frac{2 \cdot x}{1,000 - x} = \sqrt{50,2} = 7,085, \quad \frac{2 \cdot x}{1,000 - x} = -\sqrt{50,2} = -7,085.$$

A bal oldali egyenlet megoldása $x_1 = 0,7798 \text{ mol/dm}^3$, a jobb oldalié pedig $x_2 = 1,3933 \text{ mol/dm}^3$.

A x ismeretlen értéke azonban nem lehet nagyobb, mint $1,000 \text{ mol/dm}^3$, mivel annál több hidrogén, illetve jód nem tud átalakulni, mint amennyi kiinduláskor volt. Így csak az x_1 értéket fogadhatjuk el, x_2 kémiaileg értelmetlen megoldáshoz vezetne.

Tehát az egyensúlyi koncentrációk a táblázat utolsó sora alapján:

$$[\text{H}_2]_e = 1,000 - 0,7798 = 0,2202 \text{ mol/dm}^3,$$

$$[\text{I}_2]_e = 1,000 - 0,7798 = 0,2202 \text{ mol/dm}^3,$$

$$[\text{HI}]_e = 2 \cdot 0,7798 = 1,5596 \text{ mol/dm}^3.$$

Így a feladat megoldása: a hidrogén egyensúlyi koncentrációja $0,220 \text{ mol/dm}^3$, a jódé szintén $0,220 \text{ mol/dm}^3$, a hidrogén-jodid pedig $1,560 \text{ mol/dm}^3$.

8.4. példa:

A nitrozil-klorid (NOCl) egy sárgás színű gáz, mely egyensúlyi reakcióban nitrogén-monoxidra és klórgázra disszociál:



Írjuk fel az egyensúlyi állandót a nitrozil-klorid egyensúlyi disszociációfoka (α) és kezdeti koncentrációja (c_0) segítségével!

Megoldás:

Fejezzük ki a koncentrációkat – a sztöchiometriai együtthatókra is ügyelve – a kiindulási koncentráció és a disszociációfok segítségével:

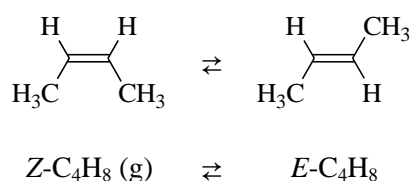
	2 NOCl (g)	⇌	2 NO (g)	+	Cl ₂ (g)
Kiindulási:	c ₀		0		0
Átalakul:	- α · c ₀		+ α · c ₀		+ 0,5 · α · c ₀
Egyensúlyban:	(1 - α) · c ₀		α · c ₀		0,5 · α · c ₀

Behelyettesítve az egyensúlyi állandóba:

$$K_c = \frac{[\text{NO}]^2 \cdot [\text{Cl}_2]}{[\text{NOCl}]^2} = \frac{(\alpha \cdot c_0)^2 \cdot \left(\frac{\alpha \cdot c_0}{2}\right)}{[(1 - \alpha) \cdot c_0]^2} = \frac{\alpha^2 \cdot c_0^2 \cdot \alpha \cdot c_0}{2 \cdot (1 - \alpha)^2 \cdot c_0^2} = \frac{\alpha^3 c_0}{2 \cdot (1 - \alpha)^2}.$$

8.5. példa:

A but-2-én *E*- és *Z*- (régie elnevezéssel *transz*- és *cisz*-) izomerje között 800 K hőmérsékleten az alábbi egyensúly figyelhető meg:



A reakció egyensúlyi állandója a fenti hőmérsékleten $K_c = 1,664$. Állapítsuk meg, hogy a but-2-én hány százaléka van a stabilabb *E* (*transz*) formában 800 K hőmérsékleten!

Megoldás:

Vegyük a *Z*-but-2-én kiindulási koncentrációját c_0 -nak! Az előző feladathoz hasonlóan készítsük el a táblázatot!

	Z-C ₄ H ₈	⇌	E-C ₄ H ₈
Kiindulási:	c ₀		0
Átalakul:	- x		+ x
Egyensúlyban:	c ₀ - x		x

Írjuk be a megfelelő koncentrációkat az egyensúlyi állandóba:

$$K_c = \frac{[\text{E-C}_4\text{H}_8]}{[\text{Z-C}_4\text{H}_8]} = \frac{x}{c_0 - x},$$

$$K_c = \frac{1}{\frac{c_0}{x} - 1},$$

$$\frac{c_0}{x} = \frac{1}{K_c} + 1 = \frac{K_c + 1}{K_c}.$$

Ebből azt kapjuk, hogy $\frac{x}{c_0} = \frac{K_c}{K_c + 1}$. A feladat kérdése az volt, hogy az egyensúlyi rendszerben a

but-2-én hány százaléka van *E*-formában, ez éppen az $\frac{x}{c_0}$ arány! Behelyettesítve a képletbe az arány:

$$\frac{x}{c_0} = \frac{K_c}{K_c + 1} = \frac{1,664}{1,664 + 1} = 0,625.$$

Tehát miután beáll az egyensúly, a but-2-én 62,5%-ban a stabilabb E-, míg 37,5%-ban a kevésbé stabil Z-formában van jelen 800 K-en.

8.6. példa:

Ha az ammónium-kloridot (NH_4Cl) 0,1010 MPa nyomáson 573 K hőmérsékletre hevítjük, az egyensúlyi gázelegy sűrűsége $0,619 \text{ g/dm}^3$ lesz. Hány százalék ammónium-klorid bomlott el? A bomlás egyensúlyi reakció egyenlete:



Megoldás:

Számítsuk ki a gázelegy átlagos moláris tömegét a sűrűség alapján!

$$\bar{M} = \frac{d \cdot R \cdot T}{p} = \frac{0,619 \cdot 8,314 \cdot 573}{101000} \frac{\text{kg}}{\text{mol}} = 0,02920 \frac{\text{kg}}{\text{mol}} = 29,20 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

Az egyes komponensek moláris tömege:

$$M(\text{NH}_4\text{Cl}) = 53,5 \text{ g/mol},$$

$$M(\text{NH}_3) = 17,0 \text{ g/mol},$$

$$M(\text{HCl}) = 36,5 \text{ g/mol}.$$

Az átlagos moláris tömeg adódik az egyensúlyi elegy móltörtjeiből. Ehhez azonban fel kell írunk az egyensúlyi táblázatot. Induljunk ki egy mól ammónium-kloridból!

	$\text{NH}_4\text{Cl} (\text{g})$	\rightleftharpoons	$\text{NH}_3 (\text{g})$	+	$\text{HCl} (\text{g})$
Kiindulási:	1		0		0
Átalakul:	- x		+ x		+ x
Egyensúlyban:	1 - x		x		x

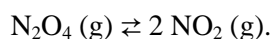
Az elegy átlagos moláris tömege:

$$\bar{M} = 29,20 = \frac{\sum n_i \cdot M_i}{\sum n_i} = \frac{(1-x) \cdot 53,5 + x \cdot 17,0 + x \cdot 36,5}{(1-x) + x + x} = \frac{53,5}{1+x}.$$

Ebből a disszociált ammónium-klorid anyagmennyisége: $x = 0,832$. Tehát a disszociációfok 83,2%.

8.7. példa:

A dinitrogén-tetraoxid-gáz már szobahőmérsékleten is bomlik az alábbi reakcióegyenlet szerint:



A reakció egyensúlyi állandója $25 \text{ }^\circ\text{C}$ hőmérsékleten $K_c = 4,61 \cdot 10^{-3}$. Egy $5,00 \text{ dm}^3$ térfogatú üres tartályba $0,200 \text{ mol}$ tiszta dinitrogén-tetraoxid-gázt juttatunk. Az egyensúly beálltával mekkora lesz a vegyület disszociációfoka? Állapítsuk meg az egyes komponensek koncentrációját és móltörtjét is!

Megoldás:

A dinitrogén-tetraoxid kiindulási koncentrációja: $c_0 = 0,04 \text{ mol/dm}^3$. Az előzőekhez hasonlóan írjuk fel táblázatos formában a mennyiségeket!

	N_2O_4	\rightleftharpoons	2NO_2
Kiindulási:	0,04		0
Átalakul:	- x		+ 2 · x
Egyensúlyban:	0,04 - x		2 · x

Behelyettesítve az egyensúlyi állandóba:

$$K_c = \frac{[\text{NO}_2]^2}{[\text{N}_2\text{O}_4]},$$

$$4,61 \cdot 10^{-3} = \frac{(2 \cdot x)^2}{0,04 - x} = \frac{4 \cdot x^2}{0,04 - x},$$

$$0 = 4 \cdot x^2 + 4,61 \cdot 10^{-3} \cdot x - 1,844 \cdot 10^{-4}.$$

A másodfokú egyenlet megoldóképletét alkalmazva:

$$x_{1,2} = \frac{-4,61 \cdot 10^{-3} \pm \sqrt{(4,61 \cdot 10^{-3})^2 - 4 \cdot 4 \cdot (-1,844 \cdot 10^{-4})}}{2 \cdot 4} = \frac{-4,61 \cdot 10^{-3} \pm 5,451 \cdot 10^{-2}}{8}.$$

Az egyenlet két megoldása: $x_1 = 6,24 \cdot 10^{-3}$, $x_2 = -7,39 \cdot 10^{-3}$. Természetesen a negatív előjelű megoldás kémiai szempontból értelmetlen, így a megoldás: $6,24 \cdot 10^{-3}$.

Az egyes komponensek koncentrációi:

$$[\text{N}_2\text{O}_4] = 0,04 - 6,24 \cdot 10^{-3} = 0,03376 \text{ mol/dm}^3,$$

$$[\text{NO}_2] = 2 \cdot 6,24 \cdot 10^{-3} = 0,01248 \text{ mol/dm}^3.$$

Az anyagmennyiségek:

$$n(\text{N}_2\text{O}_4) = 0,1688 \text{ mol},$$

$$n(\text{NO}_2) = 0,0624 \text{ mol}.$$

Az összanyagmennyiség így: $n_{\text{össz}} = 0,2312 \text{ mol}$, így a mólszázalékos összetétel:

$$x(\text{N}_2\text{O}_4) = 0,730 = 73,0\%,$$

$$x(\text{NO}_2) = 0,270 = 27,0\%.$$

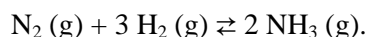
A $0,200 \text{ mol N}_2\text{O}_4$ -ból elbomlott $6,24 \cdot 10^{-3} \cdot 5 \text{ mol} = 0,0312 \text{ mol}$, így a disszociációfok:

$$\alpha = \frac{0,0312 \text{ mol}}{0,200 \text{ mol}} = 0,156.$$

Tehát a dinitrogén-tetraoxid egyensúlyi koncentrációja $0,03376 \text{ mol/dm}^3$, a nitrogén-dioxidé $0,01248 \text{ mol/dm}^3$, a mólszázalékos összetétel: $73,0\% \text{ N}_2\text{O}_4$ és $27,0\% \text{ NO}_2$, a disszociációfok pedig $0,156$.

8.8. példa:

Az ammónia szintézisének egyensúlyi állandója 823 K-en $K_c = 5,38 \cdot 10^{-6}$ a következő egyenletre:



Mekkora az ammóniagáz koncentrációja egyensúlyban, ha a nitrogéngáz kiindulási koncentrációja $1,000 \text{ mol/dm}^3$, a hidrogéné pedig $3,000 \text{ mol/dm}^3$? A nitrogéngáz hány százaléka alakul át?

Megoldás:

Írjuk fel az egyensúlyt táblázatos formában (mindenhol koncentrációk vannak feltüntetve)!

	$\text{N}_2 (\text{g})$	+	$3 \text{H}_2 (\text{g})$	\rightleftharpoons	$2 \text{NH}_3 (\text{g})$
Kiindulási:	1,000		3,000		0
Átalakul:	- x		- 3 · x		+ 2 · x
Egyensúlyban:	$1,000 - x$		$3,000 - 3 \cdot x$		$2 \cdot x$

Behelyettesítve a koncentrációkat az egyensúlyi állandóba, a következő egyenletet kapjuk:

$$K_c = \frac{[\text{NH}_3]^2}{[\text{N}_2] \cdot [\text{H}_2]^3} = \frac{(2 \cdot x)^2}{(1 - x) \cdot (3 - 3 \cdot x)^3},$$

$$\frac{(2 \cdot x)^2}{(1 - x) \cdot (3 - 3 \cdot x)^3} = 5,38 \cdot 10^{-6}.$$

Az elsőre igen bonyolultnak tűnő egyenletet átalakítva kapjuk, hogy:

$$\frac{4 \cdot x^2}{(1 - x) \cdot [3 \cdot (1 - x)]^3} = 5,38 \cdot 10^{-6},$$

$$\frac{x^2}{(1 - x)^4} = 3,6315 \cdot 10^{-5},$$

$$\left[\frac{x}{(1 - x)^2} \right]^2 = 3,6315 \cdot 10^{-5}.$$

Ebből az alábbi kémiai tartalommal bíró egyenletet kapjuk (x-nek pozitívnak kell lennie!):

$$\frac{x}{(1 - x)^2} = 6,0262 \cdot 10^{-3}.$$

A másodfokúra vezető egyenlet megoldásai: $x_1 = 5,95 \cdot 10^{-3}$, $x_2 = 167,9$. 1 mól nitrogénből x_2 -nek megfelelő mennyiségű nem tud átalakulni, ezért x_1 a kémiailag helyes megoldás.

Az ammónia egyensúlyi koncentrációja:

$$[\text{NH}_3]_e = 2 \cdot x = 2 \cdot 5,955 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3 \approx 0,0120 \text{ mol/dm}^3.$$

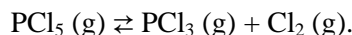
Az átalakult nitrogén mennyisége:

$$\eta = \frac{5,95 \cdot 10^{-3}}{1} = 5,95 \cdot 10^{-3} = 0,595\%.$$

Tehát az ammónia egyensúlyi koncentrációja $0,0120 \text{ mol/dm}^3$, a nitrogén $0,595\%$ -a alakult csupán át.

8.9. példa:

A foszfor-pentaklorid (PCl_5) 250°C -on részlegesen disszociál a következő egyenlet alapján:



Az egyensúlyi állandó értéke 250°C -on: $3,80 \cdot 10^{-2}$.

Egy $2,000 \text{ dm}^3$ térfogatú, levákuumozott edénybe helyezünk $20,85$ gramm foszfor-pentakloridot és $5,50$ gramm foszfor-trikloridot. Az tartályt 250°C -ra melegítjük, és megvárjuk, hogy beálljon az egyensúly (ezen a körülmények között a PCl_5 és PCl_3 is gáz halmazállapotú). Mekkora tömegű elemi klór található ekkor az edényben?

Megoldás:

Az előző feladatoktól eltérően itt az egyik terméket eleve tartalmazza a kiindulási elegy. Természetesen ennek koncentrációját is fel kell tüntetni táblázatunkban!

A kiindulási koncentrációk (az elemi klór kiindulási koncentrációja 0):

$$c_0(\text{PCl}_5) = \frac{n(\text{PCl}_5)}{V} = \frac{m(\text{PCl}_5)}{M(\text{PCl}_5) \cdot V} = \frac{20,85}{208,5 \cdot 2,000} \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3} = 0,05 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3},$$

$$c_0(\text{PCl}_3) = \frac{n(\text{PCl}_3)}{V} = \frac{m(\text{PCl}_3)}{M(\text{PCl}_3) \cdot V} = \frac{5,50}{137,5 \cdot 2,000} \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3} = 0,02 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}.$$

A „szokásos” táblázatot felírva kapjuk:

	$\text{PCl}_5(\text{g})$	\rightleftharpoons	$\text{PCl}_3(\text{g})$	+	$\text{Cl}_2(\text{g})$
Kiindulási:	0,05		0,02		0
Átalakul:	- x		+ x		+ x
Egyensúlyban:	$0,05 - x$		$0,02 + x$		x

Az egyensúlyi állandóba kifejezése:

$$K_c = \frac{[\text{PCl}_3] \cdot [\text{Cl}_2]}{[\text{PCl}_5]}.$$

A megfelelő koncentrációk behelyettesítésével a következő egyenletet kapjuk:

$$3,80 \cdot 10^{-2} = \frac{(0,02 + x) \cdot x}{0,05 - x}.$$

Átszorzás és rendezés után a következő másodfokú egyenletet kapjuk:

$$0 = x^2 + 0,058 \cdot x + 0,0019.$$

Az egyenlet két megoldása: $x_1 = 0,02335$, $x_2 = -0,08135$. A második megoldásnak nincs kémiai tartalma, így az elemi klór koncentrációja: $0,02335 \text{ mol/dm}^3$.

A klór anyagmennyisége:

$$n(\text{Cl}_2) = [\text{Cl}_2] \cdot V = 0,02335 \cdot 2,000 \text{ mol} = 0,0467 \text{ mol}.$$

A klórgáz tömege:

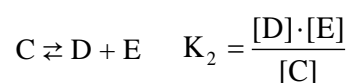
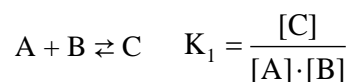
$$m(\text{Cl}_2) = n(\text{Cl}_2) \cdot M(\text{Cl}_2) = 0,0467 \cdot 71 \text{ g} = 3,316 \text{ g}.$$

Tehát egyensúlyban 3,316 gramm elemi klór található az edényben.

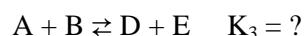
8.2. A reakcióegyenlet és az egyensúlyi állandó kapcsolata

Először vizsgáljuk meg, hogyan állapítható meg az egyensúlyi állandó, ha két egyensúlyra vezető folyamat egyenletét összeadjuk!

Az A és B anyagokból egyensúlyban keletkezik C, mely szintén egyensúlyi reakcióban elbomlik D és E anyagokra:



Adjuk össze a két egyenletet!



Írjuk fel az egyenletek összeadásával kapott reakció egyensúlyi állandóját!

$$K_3 = \frac{[\text{D}] \cdot [\text{E}]}{[\text{A}] \cdot [\text{B}]}$$

Bővítsük a számlálót és a nevezőt is [C]-vel (így a tört értéke nem változik) és csoportosítsuk az egyes koncentrációkat!

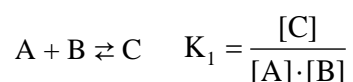
$$K_3 = \frac{[\text{D}] \cdot [\text{E}]}{[\text{A}] \cdot [\text{B}]} = \frac{[\text{D}] \cdot [\text{E}] \cdot [\text{C}]}{[\text{A}] \cdot [\text{B}] \cdot [\text{C}]} = \frac{[\text{C}]}{[\text{A}] \cdot [\text{B}]} \cdot \frac{[\text{D}] \cdot [\text{E}]}{[\text{C}]}$$

Érdekes módon a 3. egyenlethez tartozó egyensúlyi állandó megkapható az 1. és 2. egyenlethez tartozó egyensúlyi állandó szorzataként (természetesen a három egyensúlyi állandót azonos hőmérsékleten kell érteni!):

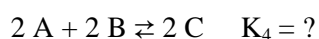
$$K_3 = \frac{[\text{C}]}{[\text{A}] \cdot [\text{B}]} \cdot \frac{[\text{D}] \cdot [\text{E}]}{[\text{C}]} = K_1 \cdot K_2.$$

A megállapításunkat általánosíthatjuk: ha összeadjuk két egyensúlyi reakcióhoz tartozó sztöchiometriai egyenletet, az így kapott egyenlethez tartozó egyensúlyi állandó az eredeti egyenletekhez tartozó egyensúlyi állandók szorzata.

Most vizsgáljuk meg, hogy mi történik, ha egy egyenletet együtthatóit végigszorozzuk egy számmal. Vegyük az előző példa első egyenletét!



Szorozzuk végig 2-vel az egész egyenletet (pontosabban az egyes anyagok sztöchiometriai együtthatóit), ekkor a következő egyenletet kapjuk:

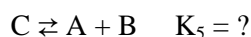


Mi az így keletkezett folyamat egyensúlyi állandója?

$$K_4 = \frac{[C]^2}{[A]^2 \cdot [B]^2} = \left(\frac{[C]}{[A] \cdot [B]} \right)^2 = K_1^2$$

Az eredményt általánosíthatjuk: egy n számmal végigszorozva a reakcióegyenlet sztöchiometriai együtthatóit, az így kapott egyenlethez tartozó egyensúlyi állandó megegyezik az eredeti egyenlethez tartozó egyensúlyi állandó n -edik hatványával.

Mi történik, ha (-1) -gyel szorozzuk végig a sztöchiometriai együtthatókat? A termokémia fejezetben már tárgyaltuk, hogy ilyenkor a reakcióegyenlet megfordul (az ellentétes irányú folyamatra írjuk fel az egyenletet). A fenti példánál maradva:



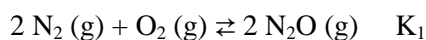
Mekkora a folyamat egyensúlyi állandója (K_3)?

$$K_5 = \frac{[A] \cdot [B]}{[C]} = \left(\frac{[C]}{[A] \cdot [B]} \right)^{-1} = K_1^{-1} = \frac{1}{K_1}$$

Tehát az egyenlet két oldalának megcserélésével kapott egyenlethez tartozó egyensúlyi állandó megegyezik az eredeti egyenlethez tartozó egyensúlyi állandó reciprokéval.

8.10. példa:

Ismerjük az alábbi folyamat egyensúlyi állandóját: $K_1 = 5,76 \cdot 10^{-36}$.



Mekkora az alábbi reakcióegyenletekhez tartozó egyensúlyi állandó?

- | | | |
|----|--|-------|
| a) | $\text{N}_2 (\text{g}) + \frac{1}{2} \text{O}_2 (\text{g}) \rightleftharpoons \text{N}_2\text{O} (\text{g})$ | K_2 |
| b) | $2 \text{N}_2\text{O} (\text{g}) \rightleftharpoons 2 \text{N}_2 (\text{g}) + \text{O}_2 (\text{g})$ | K_3 |
| c) | $\text{N}_2\text{O} (\text{g}) \rightleftharpoons \text{N}_2 (\text{g}) + \frac{1}{2} \text{O}_2 (\text{g})$ | K_4 |

Megoldás:

Az a) pontban kapott egyenlet úgy keletkezett, hogy az eredeti egyenlet együtthatóit elosztottuk kettővel, vagyis $\frac{1}{2}$ -del végigszoroztuk az egyenlet együtthatóit. Így az egyensúlyi állandó:

$$K_2 = K_1^{\frac{1}{2}} = \sqrt{K_1} = \sqrt{5,76 \cdot 10^{-36}} = \underline{\underline{2,40 \cdot 10^{-18}}}$$

A b) pontban felírt egyenletet úgy kapjuk, hogy az eredeti egyenlet két oldalát felcseréljük. Ekkor az egyensúlyi állandó az eredeti egyensúlyi állandó reciproka:

$$K_3 = K_1^{-1} = \frac{1}{K_1} = \frac{1}{5,76 \cdot 10^{-36}} = \underline{\underline{1,74 \cdot 10^{35}}}$$

A c) pont reakcióegyenletét megkaphatjuk, ha az a) pontban kapott reakcióegyenlet két oldalát felcseréljük, vagy pedig a b) pont egyenletét végigszorozzuk $\frac{1}{2}$ -del:

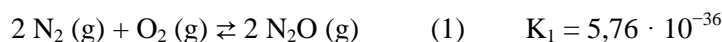
$$K_4 = K_2^{-1} = \frac{1}{K_2} = \frac{1}{2,40 \cdot 10^{-18}} = \underline{\underline{4,17 \cdot 10^{17}}}$$

illetve

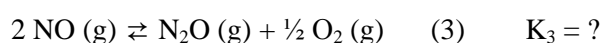
$$K_4 = K_3^{\frac{1}{2}} = \sqrt{K_3} = \sqrt{1,74 \cdot 10^{35}} = \underline{\underline{4,17 \cdot 10^{17}}}.$$

8.11. példa:

Ismerjük az alábbi reakciók egyensúlyi állandóit azonos hőmérsékleten:



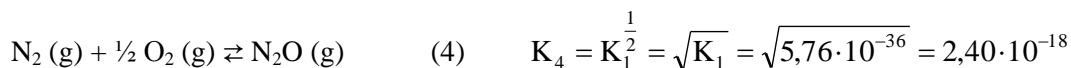
a következő folyamat egyensúlyi állandója az adott hőmérsékleten?



Megoldás:

Próbáljuk „felépíteni” a 3. egyenletet az 1. és 2. egyenletből! Ehhez érdemes megkeresni azokat az anyagokat, melyek közösek az egyenletekben.

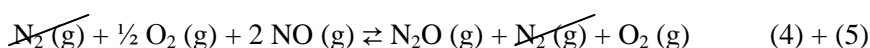
A harmadik egyenletben egy N_2O található, az elsőben azonban kettő. Szorozzuk be az első egyenletet $\frac{1}{2}$ -del!



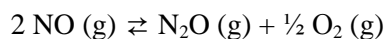
A második egyenletben a NO a jobb oldalon található, a harmadikban viszont a bal oldalon, ezért cseréljük meg a második egyenlet két oldalát!



Adjuk össze a 4. és 5. egyenleteket!



Így a kívánt egyenletet kapjuk (az $\frac{1}{2} \text{O}_2$ -t át kell vinnünk a bal oldalról a jobb oldalra):



Ennek egyensúlyi állandója adódik a 4. és az 5. egyenlethez tartozó egyensúlyi állandók szorzataként:

$$K_3 = K_4 \cdot K_5 = 2,40 \cdot 10^{-18} \cdot 2,45 \cdot 10^{30} = 5,88 \cdot 10^{12}.$$

Tehát a kérdésben szereplő reakció egyensúlyi állandója $5,88 \cdot 10^{12}$.

8.3. Az egyensúly eltolása: a legkisebb kényszer elve

A tömeghatás törvénye értelmében tehát szigorúan meghatározott az összefüggésben szereplő anyagok koncentrációjának aránya. Vizsgáljuk meg, hogyan reagál a rendszer a **koncentrációváltásra** mint külső hatásra! Ha egy egyensúlyban lévő rendszerben az egyik kiindulási anyag koncentrációját megnöveljük, a tört nevezője megnövekszik. Ahhoz, hogy a tömeghatástört értéke állandó maradjon, a számlálónak is növekednie kell, azaz a termékek koncentrációjának is növekednie kell. A termékek mennyisége azonban csak úgy növekedhet, ha a kiindulási anyagok egy része terméké alakul. Így egy új egyensúlyba jutunk, melyben az egyensúlyi koncentrációk már eltérnek az eredetitől, ám a tömeghatás törvénye továbbra is fennáll az egyensúlyi koncentrációk között. Összességében megállapítható, hogy a kiindulási anyag mennyiségének növelése a megnövekedett érték csökkenését eredményezi, tehát a folyamat gátlólag hat a kiindulási anyag koncentrációjának növekedésére, mint külső hatásra.

Le Chatelier–Braun-elv vagy más néven a **legkisebb kényszer elve**: Bármely egyensúlyi rendszer a külső behatásra úgy reagál, hogy a rá gyakorolt hatást csökkentse.

A reakciósebesség kapcsán már említettük, hogy kémiai egyensúlyban az odaalakulás és visszaalakulás sebessége megegyezik. A Le Chatelier–Braun-elv egy másik megfogalmazása a következő: az egyensúly megzavarásakor megnövekszik annak a reakciónak a sebessége, mely a zavarást csökkenteni tudja.

8.3.1. Az egyensúly eltolása a koncentrációváltással

Amennyiben megnöveljük a kiindulási anyagok mennyiségét, a rendszer ezt csökkenteni szeretné, és ezt úgy tudja elérni, hogy a reakciót a termékeké alakulás irányába tolja el, és így még több termék keletkezik, és ezáltal a kiindulási anyagok mennyiségének a növekedése (azaz a zavarás) csökken. Úgy is megfogalmazhatjuk ezt a tapasztalatot, hogy a kiindulási anyag mennyiségének növelése a felső nyíl (termékképződés) irányába tolja el az egyensúlyt.

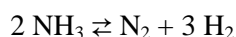
A Le Chatelier–Braun-elv segítségével megválaszolhatjuk a következő kérdést is: Mi történik, ha az egyik terméket (valamilyen fizikai vagy kémiai) módszerrel elvonjuk az egyensúlyban lévő rendszerből?

A tömeghatástört nevezőjében található termékkoncentráció csökken, ezért a kiindulási anyag koncentrációjának is csökkennie kell, hogy a tört értéke változatlan maradjon. Ez úgy lehetséges, hogy a kiindulási anyagok termékeké alakulnak. A zavarás a termékek koncentrációjának csökkentése, a legkisebb kényszer elve szerint a rendszer ezt gátolni igyekszik, azaz növeli a termékek mennyiségét a kiindulási anyagok átalakulása révén.

Összefoglalva: amennyiben a kiindulási anyagok mennyiségét növeljük, vagy a termékek mennyiségét csökkentjük, az egyensúlyt a termékképződés (felső nyíl) irányába toljuk el. Ezzel ellentétben, ha a kiindulási anyagok mennyiségét csökkentjük, vagy a termékek mennyiségét növeljük, akkor az egyensúly a kiindulási anyagok (alsó nyíl) irányába tolódik el.

8.3.2. Az egyensúly eltolása nyomásváltoztatással

A továbbiakban vizsgáljuk meg a nyomásváltozás hatását egy gázreakcióra! Vegyük például a már jól ismert ammónia disszociációs egyenletét!



Az ideális gázok nyomása adott hőmérsékleten és térfogatban arányos a gáz anyagmennyiségével. A reakcióegyenlet alapján 2 molekulából 1 + 3 = 4 molekula keletkezik, tehát a reakció végbemenetele állandó nyomáson térfogatnövekedéssel jár. Mi történik, ha megnöveljük a külső nyomást? A

Le Chatelier–Braun-elv szerint a nyomás növekedése olyan folyamatot indít el, mely csökkenti igyekszik ezt. A nyomás úgy tud csökkenni (állandó térfogat és hőmérséklet mellett), hogy a részecskék száma (a gáz összanyagmennyisége) csökken. Az egyenlet bal oldalán két molekula, a jobb oldalán pedig négy molekula található, ezért az egyensúly tehát abba az irányba tolódik el, amelyikben kevesebb számú részecske van feltüntetve: a nitrogénből és a hidrogénből ammónia keletkezik, az alsó nyíl irányába tolódik el az egyensúly. Ezzel ellentétben, a külső nyomást állandó térfogaton és hőmérsékleten lecsökkentve, az egyensúly a részecskeszám-növekedés irányába tolódik el. A fenti példában tehát a felső nyíl, a disszociáció irányába.

Fontos megjegyezni, hogy a kondenzált fázisú reakciókra (tehát például oldatreakciókra) a külső nyomásnak nincsen jelentős hatása.

8.3.3. Az egyensúly eltolása hőmérsékletváltozással

Most vizsgáljuk meg a Le Chatelier–Braun-elvet **hőmérséklet-változtatásra** mint külső hatásra!

Növeljük meg egy adott egyensúlyi elegy hőmérsékletét! A hőmérséklet növekedése a legkisebb kényszer elve szerint olyan folyamatot generál, mely csökkenti a zavaró hatást. Az endoterm reakciók hőt vesznek fel környezetüktől, ezért a hőmérséklet növelése az endoterm reakcióknak kedvez.

Ha egy egyensúlyi reakció az egyik irányban exoterm, akkor a termokémia szabályai értelmében az ellentétes irányú folyamat endoterm (és természetesen a két reakcióhő abszolút értékükben megegyezik). Ennek következtében a megállapítások endoterm és exoterm reakciókra ellentétesek: az exoterm reakciónak a hőmérséklet csökkentése kedvez.

Összefoglalva: egy egyensúlyt az endoterm reakció irányába a hőmérséklet növelésével, az exoterm reakció irányába pedig hőmérséklet-csökkentéssel tudjuk eltolni.

Érdekességként megemlítjük, hogy az egyensúlyi állandó az abszolút hőmérséklet reciprokának exponenciális függvénye. A **van 't Hoff-egyenlet** írja le az egyensúlyi állandó hőmérsékletfüggését:

$$K = A \cdot e^{-\frac{\Delta_r H}{R \cdot T}},$$

ahol $\Delta_r H$ a 1 mólnyi anyag átalakulásának reakcióhője (J/mol-ban), R az egyetemes gázállandó (8,314 J/mol/K), T az abszolút hőmérséklet (K-ben), A pedig egy pre-exponenciális tényező.

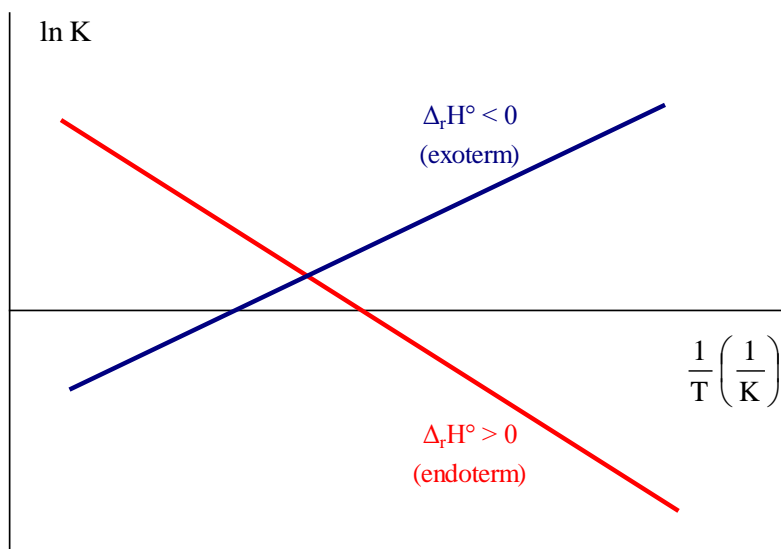
A képletből jól látszik, hogyan függ az egyes reakciók egyensúlyi állandója a hőmérséklettől: a hőmérsékletet növelve $1/T$ értéke csökken. (Az A pre-exponenciális tényezőt függetlennek tekintjük a hőmérséklettől.)

Exoterm reakcióknál, ahol $\Delta_r H < 0$, a kitevőben szereplő kifejezés pozitív lesz, ám nagyobb hőmérsékleten kisebb értékű, mint kisebb hőmérsékleten ($1/T$ miatt), így összességében K értéke is kisebb lesz magasabb hőmérsékleten, viszont a hőmérsékletet csökkentve K értéke nő. Például legyen egy egyensúlyi reakció a felső nyíl irányában exoterm. A kiindulási anyagokat összekeverve megvárjuk, hogy beálljon az egyensúly. Ezután hirtelen lecsökkentjük a hőmérsékletet, a van 't Hoff-egyenlettel összhangban megnövekszik az egyensúlyi állandó értéke. Ennek az a következménye, hogy a termékek koncentrációjának növekednie, a kiindulási anyagok koncentrációjának csökkennie kell, hogy a reakcióhányados beálljon a megfelelő – megnövekedett – egyensúlyi értékre.

Hasonló megfontolásokkal igazolható, hogy endoterm reakcióknál a hőmérsékletet növelve K értéke is növekszik, viszont a hőmérsékletet csökkentve csökken az egyensúlyi állandó értéke.

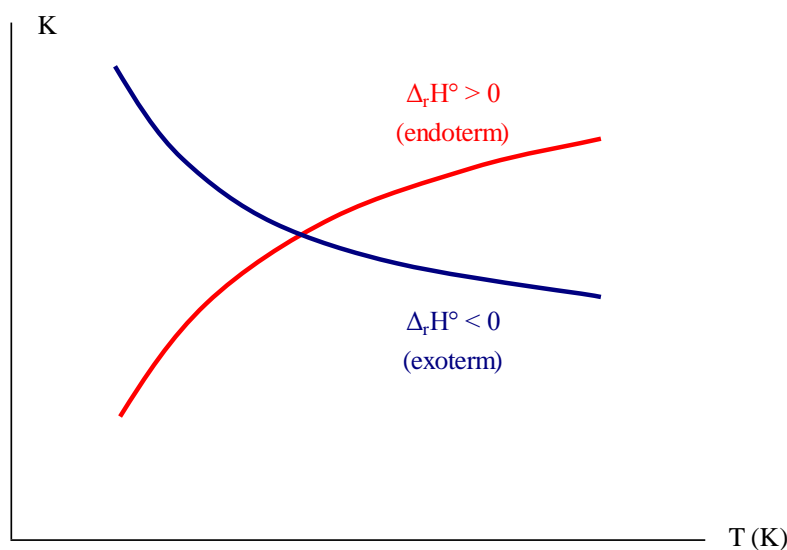
A következő ábrán megfigyelhető a van 't Hoff-egyenlet linearizált formája:

$$\ln K = \ln A - \frac{\Delta_r H}{R \cdot T} = \ln A - \frac{\Delta_r H}{R} \cdot \left(\frac{1}{T} \right).$$



8.3.3.1. ábra: A van 't Hoff-egyenlet linearizált formája

A fenti diagram alapján az egyensúlyi állandót ábrázolva a hőmérséklet függvényében, a következő ábrát kapjuk:



8.3.3.2. ábra: Az egyensúlyi állandót ábrázolva a hőmérséklet függvényében

Amennyiben tudjuk, hogy exoterm, vagy pedig endoterm a reakció, el tudjuk dönteni, hogy az átalakulás érdekében magasabb, vagy alacsonyabb hőmérsékleten célszerű dolgozni. Exoterm reakciók esetén a hőmérséklet csökkentése, míg az endoterm reakcióknál a hőmérséklet növelése a célszerű a termék mennyiségének növelése érdekében.

8.3.4. Katalizátor hatása az egyensúlyra

A katalizátorok csak a folyamatok sebességét változtatják meg, ám nincs hatásuk a reakció egyensúlyára. Katalizátorokkal nem tolható el az egyensúly.

Érdeemes belegondolni, hogy egy lépéses reakció esetén a katalizátor mindkét irányú folyamat aktiválási energiáját lecsökkenti, még hozzá ugyanolyan mértékben, viszont a reakcióhőre nincsen hatással. A van 't Hoff-egyenlet alapján az egyensúlyi állandó a reakcióhővel áll összefüggésben, ez viszont nem változik meg katalizátor hatására. Viszont az egyensúly gyorsabban beáll, ha katalizátort alkalmazunk.

Foglaljuk össze, hogy milyen módon tudunk egy egyensúlyt a termékek képződésének irányába eltolni! A termékek koncentrációja (mennyisége) növekszik, és a kiindulási anyagok koncentrációja (mennyisége) csökken, ha:

- növeljük a kiindulási anyag(ok) koncentrációját,
- csökkentjük a termékek koncentrációját,
- exoterm reakciók esetén csökkentjük a hőmérsékletet,
- endoterm reakciók esetén csökkentjük a hőmérsékletet,
- térfogat növekedésével járó gázreakciók esetén növeljük az össznyomást,
- térfogat csökkenésével járó reakciók esetén csökkentjük az össznyomást.

Néhány videó a Le Chatelier–Braun-elv szemléltetésére:



8.3.1. videó: Kromát-dikromát egyensúly



8.3.2. videó: Réz(II)ionok komplexképzési egyensúlya



8.3.3. videó: Kobalt(II)ionok komplexálódása



8.3.4. videó: Réz(I)-jodid képződése



8.3.5. videó: Nitrogén-oxidok egyesülése és bomlása

8.12. példa:

A foszgén (COCl_2 , melyet az I. világháborúban harci gázként is használtak) szén-monoxid gázra és klórgázra disszociál:



1,000 dm³-es üres tartályba 0,020 mol tiszta foszgént teszünk, mely ott 0,004 mólnyi Cl_2 -ra és 0,004 mólnyi CO-ra disszociál.

- Mekkora az egyensúlyi állandó (K_c) értéke?
- Mekkora lesz az egyes komponensek koncentrációja, hogyha 0,040 mol tiszta foszgént egy 1,000 dm³ térfogatú tartályba helyezünk és megvárjuk, hogy beálljon az egyensúly?
- Mi történik, ha ezután 0,030 mólnyi Cl_2 gázt juttatunk az edénybe?

Megoldás:

a) Kiindulási foszgénkoncentráció: $c_0(\text{COCl}_2)=0,02 \text{ mol/dm}^3$, a másik két anyag esetén: $c_0(\text{CO}) = c_0(\text{Cl}_2) = 0 \text{ mol/dm}^3$.

Mivel a 0,02 mol foszgéből 0,004 mol klór és CO keletkezett, az egyenlet szerint ez úgy lehetséges, hogy 0,004 mol foszgén alakul át!

Írjuk fel az egyensúlyt a következő táblázatos formában:

	$\text{COCl}_2(\text{g})$	\rightleftharpoons	$\text{CO}(\text{g})$	+	$\text{Cl}_2(\text{g})$
Kiindulási:	0,02		0		0
Átalakul:	- 0,004		+ 0,004		+ 0,004
Egyensúlyban:	0,02 - 0,004		0,004		0,004

A legelső sorból meghatározható az egyensúlyi állandó értéke:

$$K_c = \frac{0,004 \cdot 0,004}{0,02 - 0,004} = 10^{-3}.$$

Tehát a foszgén disszociációjának egyensúlyi állandója $1,00 \cdot 10^{-3}$.

b) A második esetben tulajdonképpen kétszeresére növeljük a kiindulási foszgénkoncentrációt. $c_0(\text{COCl}_2)=0,04 \text{ mol/dm}^3$.

Hasonlóan felírva az egyensúlyt:

	$\text{COCl}_2(\text{g})$	\rightleftharpoons	$\text{CO}(\text{g})$	+	$\text{Cl}_2(\text{g})$
Kiindulási:	0,04		0		0
Átalakul:	- x		+ x		+ x
Egyensúlyban:	0,04 - x		x		x

Ezt behelyettesítve az előző részben kiszámolt egyensúlyi állandóba:

$$K_c = 10^{-3} = \frac{x \cdot x}{0,04 - x}$$

A nem túl bonyolult másodfokú egyenlet rendezett formája:

$$0 = x^2 + 10^{-3} \cdot x - 4 \cdot 10^{-5}$$

Majd a másodfokú egyenlet megoldóképletével:

Így a két megoldás: $x_1 = 5,84 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3$ illetve $x_2 = -6,84 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3$. Természetesen x_2 -nek nincs kémiai tartalma.

Az egyensúlyi koncentrációk tehát:

$$[\text{COCl}_2]_e = 3,42 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3, \quad [\text{CO}]_e = [\text{Cl}_2]_e = 5,84 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3$$

Érdeemes megfigyelni, hogy amennyiben megnöveljük a kiindulási anyag koncentrációját, akkor nagyobb mértékű lesz az átalakulás, és így a termékek koncentrációja is nagyobb lesz (Le Chatelier–Braun-elv)!

c) A feladat harmadik részében az egyik termék koncentrációját növeljük meg, így sejtethetjük, hogy az alsó nyíl irányába fog eltolódní az egyensúly.

Alapvetően két lehetőségünk van a részfeladat megoldására:

I. megoldás:

Hasonló „táblázatos” módszerrel az előző egyensúlyból lépünk tovább, ám a Cl_2 kiindulási koncentrációját megnöveljük $0,03 \text{ mol/dm}^3$ értékkel. Mivel várhatóan az alsó nyíl irányába fog eltolódní az egyensúly, a COCl_2 koncentrációja növekszik, a CO és Cl_2 koncentrációja pedig ugyanennyivel csökken.

	$\text{COCl}_2 \text{ (g)}$	\rightleftharpoons	CO (g)	+	$\text{Cl}_2 \text{ (g)}$
Előző egyensúly:	0,0342		0,00584		0,00584
Új kiindulási:	0,0342		0,00584		0,00584 + 0,03
Átalakul:	+ y		- y		- y
Egyensúlyban:	0,0342 + y		0,00584 - y		0,03584 - y

Ismét az egyensúlyi állandó kifejezését használjuk:

$$K_c = 10^{-3} = \frac{(0,00584 - y) \cdot (0,03584 - y)}{0,0342 + y}$$

A másodfokúra vezető egyenlet két megoldása: $y_1 = 4,60 \cdot 10^{-3}$, $y_2 = 3,81 \cdot 10^{-2}$. Ebben az esetben mindkét megoldás pozitív, ám y_2 nagyobb, mint a CO és Cl_2 koncentrációja, tehát ennyi nem tud átalakulni (így a CO és Cl_2 koncentrációja negatív lenne az egyensúlyban). Az y_2 megoldás kizárható, így y_1 esetén az egyensúlyi koncentrációk:

$$[\text{COCl}_2]_e = 3,88 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3,$$

$$[\text{CO}]_e = 1,24 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3,$$

$$[\text{Cl}_2]_e = 3,12 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3.$$

Megjegyzés: ha nem tudjuk előre, hogy a COCl_2 koncentrációja növekedni fog, a következő egyenletet kapjuk:

$$K_c = 10^{-3} = \frac{(0,00584 + y) \cdot (0,03584 + y)}{0,0342 - y}$$

Az egyenlet két megoldása értelemszerűen: $y_1 = -4,60 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3$ és $y_2 = -3,88 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3$ (éppen az előző megoldások ellentettjei). Az előzőekhez hasonlóan y_2 kizárható, és y_1 negatív előjeléből rögtön rájöhettünk, hogy a COCl_2 koncentrációja növekszik, a CO és Cl_2 koncentrációja csökken.

Tehát azt figyelhetjük meg mindkét megoldásban, hogy ha az egyik termék koncentrációját növeljük meg, akkor az alsó nyíl, azaz az odaalakulás irányába toljuk el az egyensúlyt, a kiindulási anyag mennyisége növekszik az előző egyensúlyhoz képest. Ez szintén összhangban van a legkisebb kényszer elvével.

II. megoldás:

Igazából teljesen mindegy, hogy a b) pontban kapott egyensúlyi rendszert zavarjuk meg a hozzáadott klórmennyiséggel, vagy már a kiindulási anyagok között feltüntetjük a hozzáadott klór mennyiségét. Ezt meg is mutatjuk ebben a megoldásban!

Tehát a Cl_2 kiindulási koncentrációjának helyére $0,03 \text{ mol/dm}^3$ -t írva a következő táblázathoz jutunk (mivel szén-monoxid nincs a kiindulási anyagok között, biztosan a COCl_2 mennyisége csökken, és a Cl_2 -é növekszik):

	COCl_2 (g)	\rightleftharpoons	CO (g)	+	Cl_2 (g)
Kiindulási:	0,04		0		0,03
Átalakul:	- z		+ z		+ z
Egyensúlyban:	$0,04 - z$		z		$0,03 + z$

Az egyensúlyi állandóba beírva a koncentrációkat:

$$K_c = 10^{-3} = \frac{z \cdot (0,03 + z)}{0,04 - z}$$

Az egyenlet megoldásai: $z_1 = 1,24 \cdot 10^{-3}$, $z_2 = -3,22 \cdot 10^{-2}$. A második megoldás (z_2) esetén a szén-monoxid koncentrációja negatív lenne, így ezt ki kell zárunk. A z_1 megoldással pedig ugyanazokat az egyensúlyi koncentrációkat kapjuk, mint az I. megoldás esetén:

$$[\text{COCl}_2]_e = 3,88 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3,$$

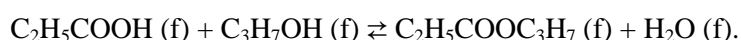
$$[\text{CO}]_e = 1,24 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3,$$

$$[\text{Cl}_2]_e = 3,12 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3.$$

Ez utóbbi megoldás előnye, hogy viszonylag egyszerűbb egyenlethez jutunk vele, így kevesebb számítással megoldható a feladat.

8.13. példa:

Az alábbi folyamat egyensúlyi állandóját szeretnénk meghatározni $20 \text{ }^\circ\text{C}$ -on:



148,0 gramm vízmentes propionsavat ($\text{C}_2\text{H}_5\text{COOH}$) és 180,0 gramm vízmentes propanolt ($\text{C}_3\text{H}_7\text{OH}$) összekeverünk és megvárjuk az egyensúly beálltát. Ekkor az oldat 150,8 gramm propilpropionátot ($\text{C}_2\text{H}_5\text{COOC}_3\text{H}_7$) tartalmaz. Mekkora a folyamat egyensúlyi állandója (K_c) ezen a

hőmérsékleten? A fenti rendszerhez 90,0 gramm vízmentes propanolt adunk. Mekkora lesz az elegy propil-propionát-tartalma (g-ban kifejezve) az új egyensúly beálltakor? A keverékhez kihevített magnézium-szulfátot adunk, mely egy vízmegkötő szer. A keverékben a víz anyagmennyisége 0,050 móltra csökken. Mekkora az elegy propil-propionát-tartalma?

$$A_r(\text{C}) = 12,0; A_r(\text{H}) = 1,0; A_r(\text{O}) = 16,0.$$

Megoldás:

Először számítsuk ki az egyes komponensek moláris tömegét:

$$\begin{aligned} M(\text{C}_2\text{H}_5\text{COOH}) &= 74,0 \text{ g/mol}; & M(\text{C}_3\text{H}_7\text{OH}) &= 60,0 \text{ g/mol}; \\ M(\text{C}_2\text{H}_5\text{COOC}_3\text{H}_7) &= 116,0 \text{ g/mol}; & M(\text{H}_2\text{O}) &= 18,0 \text{ g/mol}. \end{aligned}$$

A moláris tömegek alapján az anyagmennyiségek:

$$n(\text{C}_2\text{H}_5\text{COOH}) = 2,000 \text{ mol}; \quad n(\text{C}_3\text{H}_7\text{OH}) = 3,000 \text{ mol};$$

$$n(\text{C}_2\text{H}_5\text{COOC}_3\text{H}_7) = 1,300 \text{ mol};$$

Mivel nem ismerjük az elegy térfogatát, írjuk fel a táblázatot az anyagmennyiségekre!

	$\text{C}_2\text{H}_5\text{COOH}$	+	$\text{C}_3\text{H}_7\text{OH}$	\rightleftharpoons	$\text{C}_2\text{H}_5\text{COOC}_3\text{H}_7$	+	H_2O
Kiindulási:	2,000		3,000		0		0
Átalakul:	- x		- x		+ x		+ x
Egyensúlyban:	2,000 - x		3,000 - x		x		x

A feladat szövege alapján $x = 1,300 \text{ mol}$.

Mivel minden anyag ugyanabban a térfogatban van feloldva, az egyensúlyi állandó értékét ki tudjuk számítani a térfogat ismeretének hiányában is:

$$K_c = \frac{[\text{C}_2\text{H}_5\text{COOC}_3\text{H}_7] \cdot [\text{H}_2\text{O}]}{[\text{C}_2\text{H}_5\text{COOH}] \cdot [\text{C}_3\text{H}_7\text{OH}]} = \frac{\frac{n(\text{C}_2\text{H}_5\text{COOC}_3\text{H}_7)}{V} \cdot \frac{n(\text{H}_2\text{O})}{V}}{\frac{n(\text{C}_2\text{H}_5\text{COOH})}{V} \cdot \frac{n(\text{C}_3\text{H}_7\text{OH})}{V}}$$

Egyszerűsítve a térfogatokkal:

$$K_c = \frac{n(\text{C}_2\text{H}_5\text{COOC}_3\text{H}_7) \cdot n(\text{H}_2\text{O})}{n(\text{C}_2\text{H}_5\text{COOH}) \cdot n(\text{C}_3\text{H}_7\text{OH})} = \frac{x \cdot x}{(2-x) \cdot (3-x)} = \frac{1,300 \cdot 1,300}{0,700 \cdot 1,700} = 1,420.$$

Figyelem! A térfogattal történő egyszerűsítés csak abban az esetben tehető meg, ha az egyenlet két oldalán azonos számú molekula (részecske) legyen. Például disszociációs vagy asszociációs folyamatok esetén (melyek a részecskeszám változásával járnak) ezt biztosan nem tudjuk megtenni!

Az előző feladathoz hasonlóan a második és harmadik részfeladatot is kétféle úton lehet megoldani. A következőkben a beállt egyensúlyból indulunk ki (az előző feladat I. megoldásához hasonlóan).

A hozzáadott propanol anyagmennyisége:

$$n(\text{C}_3\text{H}_7\text{OH}) = 1,5 \text{ mol}.$$

	C_2H_5COOH	+	C_3H_7OH	\rightleftharpoons	$C_2H_5COOC_3H_7$	+	H_2O
Előző egyensúly:	0,7		1,7		1,3		1,3
Új kiindulási:	0,7		1,7 + 1,5		1,3		1,3
Átalakul:	- y		- y		+ y		+ y
Egyensúlyban:	0,7 - y		3,2 - y		1,3 + y		1,3 + y

Az előző részfeladathoz hasonlóan, a koncentrációk helyett elegendő az anyagmennyiségekkel számolni:

$$K_c = 1,420 = \frac{(1,3 + y) \cdot (1,3 + y)}{(0,7 - y) \cdot (3,2 - y)}$$

Az egyenlet megoldásai: $y_1 = 0,185$ és $y_2 = 19,191$. Az utóbbi megoldásnak nincs kémiai tartalma. Így a propil-propionát anyagmennyisége az új egyensúlyban:

$$n(C_2H_5COOC_3H_7) = 1,3 \text{ mol} + 0,185 \text{ mol} = 1,485 \text{ mol},$$

melynek tömege így:

$$m(C_2H_5COOC_3H_7) = 1,485 \cdot 116 \text{ g} = 172,3 \text{ g}.$$

A Le Chatelier–Braun-elvvel összhangban a propil-propionát és a víz mennyisége megnövekedett az egyik kiindulási anyag mennyiségének növelésére.

A harmadik lépésben (vízelvonó szer hozzáadása) az előző egyensúlyból célszerű továbbhaladnunk. Mivel a víz mennyiségét vízmegkötő anyaggal távolítottuk el, a víz anyagmennyiségének változását nem tüntetjük fel a táblázatban, csak az egyensúlyban lévő anyag mennyiségét (0,05 mól):

	C_2H_5COOH	+	C_3H_7OH	\rightleftharpoons	$C_2H_5COOC_3H_7$	+	H_2O
Előző egyensúly:	0,515		3,015		1,485		1,485
Kiindulási:	0,515		3,015		1,485		- 1,435
Átalakul:	- z		- z		+ z		- 1,435
Egyensúlyban:	0,515 - z		3,015 - z		1,485 + z		0,05

Az egyensúlyi koncentrációkat behelyettesítve a következő egyenletet kapjuk:

$$K_c = 1,420 = \frac{\frac{1,485 + z}{V} \cdot \frac{0,05}{V}}{\frac{0,515 - z}{V} \cdot \frac{3,2 - z}{V}} = \frac{(1,485 + z) \cdot 0,05}{(0,515 - z) \cdot (3,2 - z)}$$

Az egyenlet megoldásai: $z_1 = 0,487$ és $z_2 = 3,078$, melyből csak az első eredménynek van kémiai tartalma. A propil-propionát anyagmennyisége és tömege így egyensúlyban:

$$n(C_2H_5COOC_3H_7) = 1,485 \text{ mol} + 0,487 \text{ mol} = 1,972 \text{ mol},$$

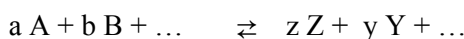
$$m(C_2H_5COOC_3H_7) = 1,972 \cdot 116 \text{ g} = 228,8 \text{ g}.$$

Érdemes megfigyelni, hogy az egyik termék mennyiségét lecsökkentve, a felső nyíl irányába toljuk el az egyensúlyt, így a másik termék mennyisége növekszik. A propanol hozzáadásával a propionsavat 74,3%-ra növeltük, majd a víz elvonásával sikerült elérni, hogy a kiindulási propionsav 98,6%-a átalakuljon észterré!

8.4. Homogén gázfázisú reakciók

Kicsit komplikáltabb a helyzet a gázreakcióknál, ahol többféleképpen felírhatjuk az egyensúlyi állandót: a koncentrációkkal kifejezett egyensúlyi állandó mintájára definiálhatunk anyagmennyiségekkel, móltörttekkel, illetve parciális nyomásokkal kifejezett egyensúlyi állandókat.

Az **anyagmennyiségekkel kifejezett egyensúlyi állandót** (K_n) úgy kapjuk, hogy a koncentrációk helyett a megfelelő *egyensúlyi* anyagmennyiségeket helyettesítjük az egyensúlyi állandó képletébe. Természetesen a megfelelő hatványra emelést itt sem szabad elfelejteni!



kiindulási anyagok \rightleftharpoons termékek

$$K_n = \frac{n_e^z \cdot n_e^y \cdot \dots}{n_e^a \cdot n_e^b \cdot \dots}$$

A képletben $n_{A,e}$, $n_{B,e}$, $n_{Z,e}$, stb. az A, B, Z stb. anyagok egyensúlyi anyagmennyiségét jelöli (mólban).

(Megjegyzés: a koncentrációkkal kifejezett egyensúlyi állandókhöz hasonlóan itt is elosztjuk az összes anyagmennyiséget az „egység-anyagmennyiséggel”, azaz 1 móllal, melynek következtében a K_n is dimenziómentes.)

A **móltörttekkel kifejezett egyensúlyi állandó** (K_x) az előzőekhez nagyon hasonlóan adódik, csak a koncentrációk, illetve anyagmennyiségek helyett a komponensek egyensúlyi móltörtjeit kell behelyettesíteni az egyensúlyi állandó kifejezésébe:

$$K_x = \frac{x_{Z,e}^z \cdot x_{Y,e}^y \cdot \dots}{x_{A,e}^a \cdot x_{B,e}^b \cdot \dots}$$

A képletben szereplő $x_{A,e}$, $x_{B,e}$, $x_{Z,e}$ stb. az A, B, Z stb. anyagok egyensúlyi móltörtjét jelöli. A móltörttekkel kifejezett egyensúlyi állandó a többi egyensúlyi állandóhoz hasonlóan dimenziómentes.

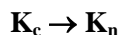
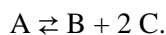
A **parciális nyomásokkal kifejezett egyensúlyi állandó** (K_p) esetén is hasonlóan járunk el, ám ebben az esetben a parciális nyomásoknak a standard nyomásra vonatkoztatott értékét kell az egyensúlyi állandó kifejezésébe behelyettesíteni:

$$K_p = \frac{\left(\frac{p_{Z,e}}{p^\circ}\right)^z \cdot \left(\frac{p_{Y,e}}{p^\circ}\right)^y \cdot \dots}{\left(\frac{p_{A,e}}{p^\circ}\right)^a \cdot \left(\frac{p_{B,e}}{p^\circ}\right)^b \cdot \dots}$$

A kifejezésben $p_{A,e}$, $p_{B,e}$, $p_{Z,e}$ stb. az egyes komponensek egyensúlyi parciális nyomásait jelentik, p° pedig rendszerint a légköri nyomást jelenti (101 325 Pa). Ettől eltérő konvenciók is léteznek, bizonyos könyvek például az 1 bar = 10^5 Pa értéket veszik alapul. A továbbiakban minden esetben a normál légköri nyomást alkalmazzuk a parciális nyomásokkal kifejezett egyensúlyi állandó számításakor. (A félreértések elkerülése végett, amennyiben irodalomból, egyéb táblázatokból veszünk K_p értékeket, mindig érdemes alaposan utánajárni, hogy az milyen standard nyomásra vonatkozik. Választhatnánk például az 1 Pa-t is a normál légköri nyomás helyett, ám az így számított egyensúlyi állandók – nagyságrendjük következtében – nem túl praktikusak.) Mivel minden nyomást ezzel elosztunk, a kifejezés dimenzió nélküli. A nyomásokat nem szükséges pascal mértékegységben

beírni a képletbe, viszont ha nem így teszünk, a légköri nyomás értékét is ugyanolyan mértékegységre kell átváltani, mint a parciális nyomásokét!

A K_c , K_n , K_x és K_p egyensúlyi állandók közt összefüggéseket lehet levezetni, melyek segítségével át lehet térni az egyik egyensúlyi állandóról a másikra. Mikor lehet erre szükség? Például, ha a probléma megoldásánál K_p -t lenne célszerű használni, viszont csak K_c -re találunk értéket valamely szakkönyvben vagy adatbázisban. Ezért a következőkben bemutatjuk az egyes egyensúlyi állandók egymás közötti átszámítását. Minden esetben a következő homogén fázisú reakciót leíró, egyszerű egyenletet vizsgáljuk, majd ennek eredményeiből általánosítunk:



A koncentráció és az anyagmennyiség között az alábbi kapcsolat áll fenn: $n_i = c_i \cdot V$, ahol V az elegy térfogata.

$$K_n = \frac{n_B \cdot n_C^2}{n_A} = \frac{(c_B \cdot V) \cdot (c_C \cdot V)^2}{c_A \cdot V} = \frac{c_B \cdot c_C^2 \cdot V^{1+2}}{c_A \cdot V} = \frac{c_B \cdot c_C^2}{c_A} \cdot V^{1+2-1} = K_c \cdot V^2$$

A képletben szándékosan tüntettük fel a 1+2-1 számokat: ezek szoros rokonságban állnak a sztöchiometriai egyenlet együtthatóival: a kifejezést a reakció mólszámváltozásának nevezzük, és Δv -vel jelöljük. A fenti reakcióban tehát a mólszámváltozás: $\Delta v = 2$.

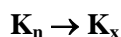
Egy **reakció mólszámváltozását** megkapjuk, ha a termékek sztöchiometriai együtthatóiból levonjuk a kiindulási anyagok sztöchiometriai együtthatóját. Például a következő általános reakcióra:



A reakció mólszámnövekedéssel jár, ha $\Delta v > 0$, illetve mólszámcsökkenéssel jár, ha $\Delta v < 0$. Ha $\Delta v = 0$, akkor a reakciót mólszámváltozás nélkülinek mondjuk.

Egy általános reakcióra a K_c és K_n közötti összefüggés:

$$K_n = K_c \cdot V^{\Delta v}.$$



Egy adott komponens móltörtje a komponens anyagmennyiségének és az összanyagmennyiségnek a hányadosa:

$$x_i = \frac{n_i}{\sum_i n_i} = \frac{n_i}{n_{\text{össz}}}.$$

Az $A \rightleftharpoons B + 2 C$ reakcióra K_x képlete:

$$K_x = \frac{x_B \cdot x_C^2}{x_A} = \frac{\left(\frac{n_B}{n_{\text{össz}}}\right) \cdot \left(\frac{n_C}{n_{\text{össz}}}\right)^2}{\left(\frac{n_A}{n_{\text{össz}}}\right)} = \frac{n_B \cdot n_C^2}{n_A} \left(\frac{1}{n_{\text{össz}}}\right)^{1+2-1} = K_n \cdot \left(\frac{1}{n_{\text{össz}}}\right)^{1+2-1} = K_n \cdot n_{\text{össz}}^{-2}.$$

Általános esetben pedig a következő formulát kapjuk (Vigyázzunk! A kivetőben a mólszámváltozás ellentettje található.):

$$K_x = K_n \cdot n_{\text{össz}}^{-\Delta v}$$

$K_c \rightarrow K_x$

Mivel ismerjük a $K_c \rightarrow K_n$ és $K_n \rightarrow K_x$ átváltásokat, a $K_c \rightarrow K_x$ könnyen megkapható:

$$K_x = K_n \cdot n_{\text{össz}}^{-\Delta v} = K_c \cdot V^{\Delta v} \cdot n_{\text{össz}}^{-\Delta v} = K_c \cdot \left(\frac{V}{n_{\text{össz}}} \right)^{\Delta v}$$

A gáztörvény segítségével kifejezhetjük a térfogatot és az összanyagmennyiséget:

$$\frac{V}{n_{\text{össz}}} = \frac{R \cdot T}{p_{\text{össz}}}$$

Ezt behelyettesítve a képletbe:

$$K_x = K_c \cdot \left(\frac{R \cdot T}{p_{\text{össz}}} \right)^{\Delta v}$$

$K_c \rightarrow K_p$

A parciális nyomásokkal kifejezett egyensúlyi állandó (K_p) csak gázreakciókra értelmezhető. Az ideális gázok állapotegyenlete összefüggést szolgáltat a parciális nyomások (p_i) és a koncentrációk között:

$$p_i \cdot V = n_i \cdot R \cdot T,$$

melyből a parciális nyomásra kapjuk:

$$p_i = \frac{n_i \cdot R \cdot T}{V} = \frac{n_i}{V} \cdot R \cdot T = c_i \cdot R \cdot T.$$

K_p képletébe behelyettesítve kapjuk:

$$K_p = \frac{\left(\frac{p_B}{p^\circ} \right) \cdot \left(\frac{p_C}{p^\circ} \right)^2}{\left(\frac{p_A}{p^\circ} \right)} = \frac{\left(\frac{c_B \cdot R \cdot T}{p^\circ} \right) \cdot \left(\frac{c_C \cdot R \cdot T}{p^\circ} \right)^2}{\left(\frac{c_A \cdot R \cdot T}{p^\circ} \right)} = \frac{c_B \cdot c_C^2}{c_A} \cdot \left(\frac{R \cdot T}{p^\circ} \right)^{1+2-1} = K_c \cdot \left(\frac{R \cdot T}{p^\circ} \right)^2.$$

Általános esetben pedig a következő kifejezést kapjuk:

$$K_p = K_c \cdot \left(\frac{R \cdot T}{p^\circ} \right)^{\Delta v}$$

Az eddig megismert átszámításokból már bármely két egyensúlyi állandó közötti kapcsolatot fel tudjuk írni:

$K_p \rightarrow K_n$ A $K_p \rightarrow K_c$ illetve a $K_c \rightarrow K_x$ összefüggések alapján:

$$K_p = K_c \cdot \left(\frac{R \cdot T}{p^\circ} \right)^{\Delta v} = K_x \left(\frac{p_{\text{össz}}}{R \cdot T} \right)^{\Delta v} \cdot \left(\frac{R \cdot T}{p^\circ} \right)^{\Delta v} = K_x \left(\frac{p_{\text{össz}}}{R \cdot T} \cdot \frac{R \cdot T}{p^\circ} \right)^{\Delta v} = K_x \left(\frac{p_{\text{össz}}}{p^\circ} \right)^{\Delta v}.$$

Az K_p és K_x közötti összefüggés:

$$K_p = K_x \left(\frac{p_{\text{össz}}}{p^\circ} \right)^{\Delta v}.$$

 $K_p \rightarrow K_n$ A $K_p \rightarrow K_c$ illetve a $K_c \rightarrow K_n$ összefüggések alapján:

$$K_n = K_c \cdot V^{\Delta v} = K_p \cdot \left(\frac{p^\circ}{R \cdot T} \right)^{\Delta v} \cdot V^{\Delta v} = K_p \cdot \left(\frac{p^\circ \cdot V}{R \cdot T} \right)^{\Delta v}.$$

A képletet egyszerűsíthetjük még az ideális gáztörvény segítségével:

$$\frac{V}{R \cdot T} = \frac{n_{\text{össz}}}{p_{\text{össz}}}.$$

Így a következő összefüggést kapjuk:

$$K_n = K_p \cdot \left(\frac{p^\circ \cdot n_{\text{össz}}}{p_{\text{össz}}} \right)^{\Delta v}.$$

Foglaljuk is össze a képleteket!

	K_c	K_n	K_x	K_p
K_c	—	$K_c = K_n \cdot \left(\frac{1}{V} \right)^{\Delta v}$	$K_c = K_x \cdot \left(\frac{p_{\text{össz}}}{R \cdot T} \right)^{\Delta v}$	$K_c = K_p \cdot \left(\frac{p^\circ}{R \cdot T} \right)^{\Delta v}$
K_n	$K_n = K_c \cdot V^{\Delta v}$	—	$K_n = K_x \cdot n_{\text{össz}}^{\Delta v}$	$K_n = K_p \cdot \left(\frac{p^\circ \cdot n_{\text{össz}}}{p_{\text{össz}}} \right)^{\Delta v}$
K_x	$K_x = K_n \cdot \left(\frac{1}{n_{\text{össz}}} \right)^{\Delta n}$	$K_x = K_c \cdot \left(\frac{R \cdot T}{p_{\text{össz}}} \right)^{\Delta v}$	—	$K_x = K_p \cdot \left(\frac{p^\circ}{p_{\text{össz}}} \right)^{\Delta v}$
K_p	$K_p = K_c \cdot \left(\frac{R \cdot T}{p^\circ} \right)^{\Delta v}$	$K_p = K_n \cdot \left(\frac{p_{\text{össz}}}{p^\circ \cdot n_{\text{össz}}} \right)^{\Delta v}$	$K_p = K_x \cdot \left(\frac{p_{\text{össz}}}{p^\circ} \right)^{\Delta v}$	—

Fontos megjegyezni, hogy abban az esetben, ha a reakcióegyenlet oldalán ugyanannyi számú részecske (molekula) található, azaz $\Delta v = 0$, mindegyik egyensúlyi állandó azonos értékű!

$$\Delta v = 0 \quad \Rightarrow \quad K_c = K_n = K_x = K_p$$

8.14. példa:

107,0 g tiszta ammónium-kloridot egy 5,000 dm³-es levákuumozott edényben 573,0 K hőmérsékletre hevítünk, mely során teljesen elszublimál és részben disszociál az alábbi egyenlet szerint:



Az edényben a nyomás ekkor 3048,9 kPa lett. Mekkora a disszociációfok? Mekkora a folyamat alábbi egyensúlyi állandói: K_n , K_c , K_x , K_p ezen a hőmérsékleten?

Megoldás:

Az ammónium-klorid moláris tömege: $M = 14,0 + 4 \cdot 1,0 + 35,5 = 53,5$ g/mol.

Így az ammónium-klorid anyagmennyisége: $n_0 = 2$ mol.

	NH ₄ Cl (g)	⇌	NH ₃ (g)	+	HCl (g)
Kiindulási:	2		0		0
Átalakul:	- x		+ x		+ x
Egyensúlyban:	2,000 - x		x		x

A tartályban lévő anyag összanyagmennyisége az egyensúlyban:

$$n_{\text{ö}} = (2 - x) + x + x = 2 + x.$$

Az összanyagmennyiséget megkaphatjuk a tartályban mért össznyomásból:

$$n_{\text{ö}} = \frac{p_{\text{ö}} \cdot V_{\text{ö}}}{RT} = \frac{30489 \cdot 5}{8,314 \cdot 573} \text{ mol} = 3,200 \text{ mol}.$$

Így a következő egyenlethez jutunk: $n_{\text{ö}} = 2 + x = 3,2$.

Ebből $x = 1,200$ mol.

A disszociációfok:

$$\alpha = \frac{n(\text{disszociált})}{n_{\text{ö}}} = \frac{1,200}{2,000} = 0,600 = 60,0\%.$$

K_n értéke igen könnyen kiszámítható:

$$K_n = \frac{n(\text{NH}_3) \cdot n(\text{HCl})}{n(\text{NH}_4\text{Cl})} = \frac{1,2 \cdot 1,2}{2 - 1,2} = 1,800.$$

A koncentrációkkal kifejezett egyensúlyi állandó:

$$[\text{NH}_3] = \frac{n(\text{NH}_3)}{V} = \frac{1,2 \text{ mol}}{5 \text{ dm}^3} = 0,24 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3},$$

$$[\text{HCl}] = \frac{n(\text{HCl})}{V} = \frac{1,2 \text{ mol}}{5 \text{ dm}^3} = 0,24 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3},$$

$$[\text{NH}_4\text{Cl}] = \frac{n(\text{NH}_4\text{Cl})}{V} = \frac{0,8 \text{ mol}}{5 \text{ dm}^3} = 0,16 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}.$$

Az adatokat behelyettesítve kapjuk:

$$K_c = \frac{[\text{NH}_3] \cdot [\text{HCl}]}{[\text{NH}_4\text{Cl}]} = \frac{0,24 \cdot 0,24}{0,16} = 0,3600.$$

A móltörttekkel kifejezett egyensúlyi állandó kiszámításához ismernünk kell a móltörtteket:

$$x(\text{NH}_3) = \frac{n(\text{NH}_3)}{n_{\text{ö}}} = \frac{1,2}{3,2} = 0,375,$$

$$x(\text{HCl}) = \frac{n(\text{HCl})}{n_{\text{ö}}} = \frac{1,2}{3,2} = 0,375,$$

$$x(\text{NH}_4\text{Cl}) = \frac{n(\text{NH}_4\text{Cl})}{n_{\text{ö}}} = \frac{0,8}{3,2} = 0,250.$$

$$K_x = \frac{x(\text{NH}_3) \cdot x(\text{HCl})}{x(\text{NH}_4\text{Cl})} = \frac{0,375 \cdot 0,375}{0,250} = 0,5625.$$

Már csak K_p kiszámítása van hátra. Ehhez viszont ismernünk kell az egyes komponensek parciális nyomását, melyet megkapunk, ha az adott móltörttel beszorozzuk az össznyomást.

$$p(\text{NH}_3) = 0,375 \cdot 30489 \text{ kPa} = 11433 \text{ kPa},$$

$$p(\text{HCl}) = 0,375 \cdot 30489 \text{ kPa} = 11433 \text{ kPa},$$

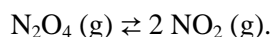
$$p(\text{NH}_4\text{Cl}) = 0,25 \cdot 30489 \text{ kPa} = 7622 \text{ kPa}$$

$$K_p = \frac{\left(\frac{p(\text{NH}_3)}{p^\circ}\right) \cdot \left(\frac{p(\text{HCl})}{p^\circ}\right)}{\left(\frac{p(\text{NH}_4\text{Cl})}{p^\circ}\right)} = \frac{\left(\frac{11433}{101325}\right) \cdot \left(\frac{11433}{101325}\right)}{\left(\frac{7622}{101325}\right)} = 16,93.$$

Tehát a disszociációfok 0,6000, K_n , K_c , K_n , K_p értéke rendre: 1,800, 0,3000, 0,5625 és 16,93.

8.15. példa:

A dinitrogén-tetraoxid (N_2O_4) egy szintelen folyadék, melynek forráspontja 21°C , moláris tömege $92,0 \text{ g/mol}$. Egy 1000 cm^3 térfogatú levákuozott tartályba $9,20 \text{ gramm}$ tiszta N_2O_4 -ot helyezünk, majd az edényt 343 K -re melegítjük. (A tartály térfogata nem változik a melegítés hatására.) Ekkor amellet, hogy a N_2O_4 gáz fázisba kerül, még részlegesen disszociál is az alábbi reakcióegyenlet szerint:



Az egyensúly beálltakor az edényben az össznyomás $399,24 \text{ kPa}$ (343 K -en).

Adjuk meg a disszociációfokot, a gázelegy összetételét térfogat%-ban, és a gázelegy átlagos moláris tömegét! Állapítsuk meg a disszociáció

- a) koncentrációkkal, b) anyagmennyiségekkel,
c) nyomásokkal, d) móltörttekkel kifejezett egyensúlyi állandóját!

Mekkora tömegű N_2O_4 -ot kell még a rendszerbe juttatni, ha azt szeretnénk, hogy az össznyomás 600 kPa legyen?

Megoldás:

A dinitrogén-tetraoxid kiindulási anyagmennyisége: $n_0(\text{N}_2\text{O}_4)=0,100$ mol.

Írjuk fel a disszociációs folyamatra a jól ismert táblázatot!

	N_2O_4 (g)	\rightleftharpoons	2NO_2 (g)
Kiindulási:	0,1		0
Átalakul:	- x		+ 2 · x
Egyensúlyban:	0,1 - x		2 · x

Az egyensúlyi rendszer összanyagmennyisége az ideális gáztörvény alapján:

$$n_{\text{össz}} = \frac{p_{\text{ö}} \cdot V}{R \cdot T} = \frac{399,24 \cdot 1,000}{8,314 \cdot 343} \text{ mol} = 0,140 \text{ mol}$$

Mivel a két gáz anyagmennyiségének összege a gáztörvény alapján 0,14 mol:

$$n_{\text{össz}} = 0,14 \text{ mol} = 0,1 \text{ mol} - x + 2 \cdot x.$$

Az igen egyszerű egyenlet megoldása: $x = 0,040$ mol.

Mivel 0,04 mol disszociált a 0,1 mólból, a disszociációfokot nagyon könnyen kiszámíthatjuk:

$$\alpha = \frac{0,04 \text{ mol}}{0,10 \text{ mol}} = 0,4 = 40\% .$$

A táblázat alapján tehát 0,06 mol N_2O_4 és 0,08 mol NO_2 van egyensúlyban, ebből a térfogat%-os összetétel (mely megegyezik a mol%-os összetétellel):

$$x(\text{N}_2\text{O}_4) = \frac{0,06 \text{ mol}}{0,14 \text{ mol}} = 0,429 = 42,9\% .$$

Tehát az egyensúlyi gázelegy 42,9 térfogat%-a N_2O_4 és 57,1 térfogat%-a NO_2 .

A móltörtekből egyszerűen számítható az átlagos moláris tömeg:

$$M(\text{átlag}) = 0,429 \cdot 92,0 \text{ g/mol} + 0,571 \cdot 46,0 \text{ g/mol} = 65,73 \text{ g/mol}.$$

A feladat kérdései között szerepelnek az egyensúlyi állandók is:

Az anyagmennyiségekből K_n közvetlenül adódik. Mivel *ebben a speciális esetben* a térfogat 1 dm^3 , K_c számértéke megegyezik K_n -nel:

$$K_n = \frac{(n(\text{NO}_2))^2}{n(\text{N}_2\text{O}_4)} = \frac{0,08^2}{0,06} = 0,1067.$$

A móltörtekekkel kifejezett egyensúlyi állandó:

$$K_x = \frac{(x(\text{NO}_2))^2}{x(\text{N}_2\text{O}_4)} = \frac{0,571^2}{0,429} = 0,7600$$

A móltörtekből számíthatók a parciális nyomások, majd azokat a normál légköri nyomással (101,325 kPa) osztva beírjuk a K_p kifejezésébe megfelelő formában.

$$p(\text{NO}_2) = x(\text{NO}_2) \cdot p_{\text{ö}} = 0,571 \cdot 399,24 \text{ kPa} = 228,1 \text{ kPa}$$

$$p(\text{N}_2\text{O}_4) = x(\text{N}_2\text{O}_4) \cdot p_{\text{ö}} = 0,429 \cdot 399,24 \text{ kPa} = 171,1 \text{ kPa}$$

$$K_p = \frac{\left(\frac{p(\text{NO}_2)}{p^\circ}\right)^2}{\left(\frac{p(\text{N}_2\text{O}_4)}{p^\circ}\right)} = \frac{\left(\frac{228,1}{101,325}\right)^2}{\left(\frac{171,1}{101,325}\right)} = 3,000.$$

Már csak egy kérdésre kell választ keresnünk: Mekkora tömegű N_2O_4 -ot kell még a rendszerbe juttatni, ha azt szeretnénk, hogy az össznyomás 600 kPa legyen?

I. megoldás:

Induljunk ki az előző részfeladatban kapott egyensúlyból:

Adjunk a mólnyi dinitrogén-tetraoxidot a rendszerhez!

	N_2O_4 (g)	\rightleftharpoons	2NO_2 (g)
Előző egyensúly	0,06		0,08
Új kiindulási:	$0,06 + a$		0,08
Átalakul:	$- b$		$+ 2 \cdot b$
Egyensúlyban:	$0,06 + a - b$		$0,08 + 2 \cdot b$

Ne feledkezzünk meg az egyensúlyi össznyomás értékéről a N_2O_4 hozzáadása után:
 $p_{\text{ö},2} = 600 \text{ kPa}$!

Ebből kiszámítható az egyensúlyi elegy összanyagmennyisége:

$$n_{\text{ö},2} = \frac{p_{\text{ö},2} \cdot V}{R \cdot T} = \frac{600,0 \cdot 1,000}{8,314 \cdot 343} \text{ mol} = 0,2104 \text{ mol}$$

A táblázat utolsó sora alapján felírhatjuk, hogy:

$$n_{\text{ö},2} = n(\text{N}_2\text{O}_4) + n(\text{NO}_2) = (0,06 + a - b) + (0,08 + 2 \cdot b) = 0,14 + a + b = 0,2104$$

melyből $a + b = 0,0704$.

Az anyagmennyiségekkel kifejezett egyensúlyi állandó alapján:

$$K_n = \frac{(0,08 + 2 \cdot b)^2}{0,06 + a - b} = 0,1067.$$

Behelyettesítve $a = 0,0704 - b$ értéket:

$$K_n = \frac{(0,08 + 2 \cdot b)^2}{0,06 + (0,0704 - b) - b} = \frac{(0,08 + 2 \cdot b)^2}{0,1304 - 2 \cdot b} = 0,1067.$$

A másodfokúra vezető egyenlet megoldásai: $b_1 = 0,0128$ és $b_2 = -0,1924$. A második megoldás kémiai szempontból nem értelmezhető, így $b = 0,0128 \text{ mol}$, $a = 0,0567 \text{ mol}$.

A hozzáadott N_2O_4 tömege:

$$m(\text{N}_2\text{O}_4) = M \cdot n = 92,0 \cdot 0,0567 \text{ g} = 3,300 \text{ g}.$$

II. megoldás:

Elméletileg ugyanazt a megoldást kapjuk, ha egy ismeretlen n mólnyi dinitrogén-tetroxidból indulunk ki:

	N_2O_4 (g)	\rightleftharpoons	$2 NO_2$ (g)
Kiindulási:	n		0
Átalakul:	$-y$		$+2 \cdot y$
Egyensúlyban:	$n - y$		$2 \cdot y$

Az összanyagmennyiség:

$$n_{\text{össz}} = n - y + 2 \cdot y = n + y = 0,2104(\text{mol}),$$

melyből $n = 0,2104 - y$,

Az egyensúlyi állandó (K_n) alapján:

$$K_n = \frac{(2 \cdot y)^2}{n - y} = \frac{(2 \cdot y)^2}{0,2104 - 2 \cdot y} = 0,1067.$$

A másodfokú egyenlet gyökei: $y_1 = 0,0528$, $y_2 = -0,1062$, ám ez utóbbinak nincsen kémiai tartalma. Így $y = 0,0528$ mol, $n = 0,2104$ mol $- 0,0528$ mol = $0,1576$ mol. Eredetileg a tartályban $0,100$ mól dinitrogén-tetraoxid volt, azaz $0,0576$ mol N_2O_4 -ot kell a tartályba juttatni, melynek tömege 5,300 gramm.

8.16. példa:

A foszgén magasabb hőmérsékleten az alábbi reakció szerint (homogén gázfázisú reakcióban) disszociál:



Egy levákuumozott edénybe 773 K hőmérsékleten tiszta foszgégázt teszünk. Az egyensúly beálltakor a foszgén disszociációfoka 67% , az össznyomás $101,0$ kPa.

Számítsa ki a gázelegy térfogat%-os összetételét és az átlagos moláris tömegét!

Mekkora a móltörttekkel, illetve a parciális nyomásokkal kifejezett egyensúlyi állandó ezen a hőmérsékleten?

Az edény hőmérsékletét 100 K-nel megemeljük, s egy dugattyú segítségével a nyomást $101,0$ kPa értéken tartjuk (eközben az edény térfogata növekszik). Az így keletkező gázelegyben a foszgén disszociációfoka 91% . Hány %-kal nőtt meg az edény térfogata? Mekkora 873 K-en a móltörttekkel kifejezett egyensúlyi állandó?

$$A_r(C): 12,0; A_r(O): 16,0; A_r(Cl): 35,5.$$

Megoldás:

Nem ismerjük a foszgén kiindulási mennyiségét, ezt jelöljük n -nel!

Az egyensúlyi táblázatos felírása (a disszociációfok a feladat szövege alapján $0,67$):

	$COCl_2$ (g)	\rightleftharpoons	CO (g)	+	Cl_2 (g)
Kiindulási:	n		0		0
Átalakul:	$-0,67 \cdot n$		$+0,67 \cdot n$		$+0,67 \cdot n$
Egyensúlyban:	$0,33 \cdot n$		$0,67 \cdot n$		$0,67 \cdot n$

A móltörtöket (melyek megegyeznek a térfogattörtökkel) ezek alapján ki tudjuk számítani:

$$n_{\text{össz},1} = 0,33 \cdot n + 0,67 \cdot n + 0,67 \cdot n = 1,67 \cdot n,$$

ebből a mól%-os (illetve térfogat%) összetételek:

$$x(\text{COCl}_2) = \frac{0,33 \cdot n}{1,67 \cdot n} = 0,1976 = 19,76\% ,$$

$$x(\text{CO}) = \frac{0,67 \cdot n}{1,67 \cdot n} = 0,4012 = 40,12\% ,$$

$$x(\text{Cl}_2) = \frac{0,67 \cdot n}{1,67 \cdot n} = 0,4012 = 40,12\% .$$

Az átlagos moláris tömeg:

$$M(\text{átlag}) = 0,1976 \cdot 99,0 + 0,4012 \cdot 28,0 + 0,4012 \cdot 71,0 = 59,3 \text{ g/mol}$$

Tehát az egyensúlyi összetétel: COCl_2 : 19,76 térfogat%, CO és Cl_2 : 40,12 térfogat%, az átlagos moláris tömeg pedig 59,3 g/mol.

A móltörtökkel kifejezett egyensúlyi állandó:

$$K_x = \frac{x(\text{CO}) \cdot x(\text{Cl}_2)}{x(\text{COCl}_2)} = \frac{0,4012 \cdot 0,4012}{0,1976} = 0,815.$$

A parciális nyomások segítségével kiszámítható a nyomásokkal kifejezett egyensúlyi állandó:

$$p(\text{COCl}_2) = 0,1976 \cdot 101,0 \text{ kPa} = 19,96 \text{ kPa}$$

$$p(\text{CO}) = 0,4012 \cdot 101,0 \text{ kPa} = 40,52 \text{ kPa}$$

$$p(\text{Cl}_2) = 0,4012 \cdot 101,0 \text{ kPa} = 40,52 \text{ kPa}$$

$$K_p = \frac{\left(\frac{p(\text{CO})}{p^\circ}\right) \cdot \left(\frac{p(\text{Cl}_2)}{p^\circ}\right)}{\left(\frac{p(\text{COCl}_2)}{p^\circ}\right)} = \frac{\frac{40,52}{101,325} \cdot \frac{40,52}{101,325}}{\frac{19,96}{101,325}} = 0,812.$$

A kérdéses egyensúlyi állandók: $K_x = \underline{0,815}$, $K_p = \underline{0,812}$.

Ezután az edényt melegítve, a térfogat megnövekedett. A kiindulási foszgén mennyisége (tehát n) nem változik (nem adtunk semmilyen anyagot az egyensúlyi rendszerhez), így az előzőekhez hasonlóan a disszociációfok segítségével:

$$n_{\text{össz},2} = n - 0,91 \cdot n + 0,91 \cdot n + 0,91 \cdot n = 1,91 \cdot n.$$

Írjuk fel az ideális gáztörvényt mindkét hőmérsékletre. Vigyázzunk, az anyagmennyiség nem állandó, mivel növekszik a disszociációfok!

$$773 \text{ K-re: } p \cdot V_1 = n_{\text{össz},1} \cdot R \cdot T_1, \quad 873 \text{ K-re: } p \cdot V_2 = n_{\text{össz},2} \cdot R \cdot T_2.$$

A két egyenletből kifejezhető a két térfogat aránya:

$$\frac{V_2}{V_1} = \frac{\frac{n_{\text{össz},2} \cdot R \cdot T_2}{p_{\text{össz}}}}{\frac{n_{\text{össz},1} \cdot R \cdot T_1}{p_{\text{össz}}}} = \frac{n_{\text{össz},2} \cdot T_2}{n_{\text{össz},1} \cdot T_1}$$

A két hőmérsékleten ismerjük a disszociációfokkal kifejezett összanyagmennyiséget:

$$\frac{V_2}{V_1} = \frac{n_{\text{össz},2} \cdot T_2}{n_{\text{össz},1} \cdot T_1} = \frac{1,91 \cdot n \cdot T_2}{1,67 \cdot n \cdot T_1} = \frac{1,91 \cdot T_2}{1,67 \cdot T_1} = \frac{1,91 \cdot 873,0 \text{ K}}{1,67 \cdot 773,0 \text{ K}} = 1,292.$$

Azaz a térfogat-növekedés 29,2%-os volt.

873,0 K-en az összetétel az előző részfeladat mintájára:

$$x_2(\text{COCl}_2) = \frac{0,09 \cdot n}{1,91 \cdot n} = 0,0471 = 4,71\%,$$

$$x_2(\text{CO}) = \frac{0,91 \cdot n}{1,91 \cdot n} = 0,4764 = 47,64\%,$$

$$x_2(\text{Cl}_2) = \frac{0,91 \cdot n}{1,91 \cdot n} = 0,4764 = 47,64\%.$$

A móltörttekkel kifejezett egyensúlyi állandó:

$$K_{x,873\text{K}} = \frac{x_2(\text{CO}) \cdot x_2(\text{Cl}_2)}{x_2(\text{COCl}_2)} = \frac{0,4764 \cdot 0,4764}{0,0471} = 4,819.$$

873 K hőmérsékleten a móltörttekkel kifejezett egyensúlyi állandó 4,819.

Érdemes megfigyelni, hogy a hőmérséklet növekedésével növekedett az egyensúlyi állandó. A disszociációs reakciókat általában endoterm hőváltozás kíséri (bizonyos kötések megszüntetéséhez energiát kell befektetni), a Le Chatelier–Braun-elv értelmében a hőmérséklet-növekedés a felső nyíl (odaalakulás) irányába tolja el az egyensúlyt, azaz fokozódik a disszociáció. Ez kiváló összhangban van a feladat eredményeivel.

Érdekességképp megmutatjuk, hogy a feladat eredményeiből megbecsülhető a reakcióhő is. A van 't Hoff-egyenlet átalakításával a következő egyenletet kapjuk:

$$\ln K = \ln A - \frac{\Delta_r H}{R \cdot T}$$

Két különböző hőmérsékleten:

$$\ln K_1 = \ln A - \frac{\Delta_r H}{R \cdot T_1},$$

$$\ln K_2 = \ln A - \frac{\Delta_r H}{R \cdot T_2}.$$

A két egyenletet kivonva egymásból:

$$\ln K_1 - \ln K_2 = \ln \frac{K_1}{K_2} = \left(\ln A - \frac{\Delta_r H}{R \cdot T_1} \right) - \left(\ln A - \frac{\Delta_r H}{R \cdot T_2} \right) = \frac{\Delta_r H}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right).$$

A két egyensúlyi állandót és a két hőmérsékletet behelyettesítve:

$$\ln \frac{0,815}{4,819} = \frac{\Delta_r H}{8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}} \cdot \left(\frac{1}{873 \text{K}} - \frac{1}{773 \text{K}} \right).$$

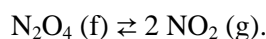
Az endoterm reakció moláris reakcióhőjének értéke: $\Delta_r H = +99\,707 \text{ J/mol} \approx \underline{+99,71 \text{ kJ/mol}}$.

8.5. Heterogén fázisú egyensúlyok

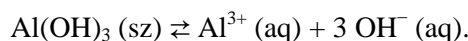
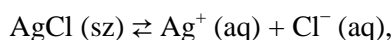
Az egyensúlyi reakciók egy érdekes csoportját alkotják a heterogén fázisú reakciók, melyeknek jellemzője, hogy a kiindulási anyagok vagy a termékek valamelyike más fázisban található, mint a többi anyag. Ilyen reakciókra számos példát találhatunk: szilárd magnézium-karbonát MgCO_3 bomlása szilárd magnézium-oxidra (MgO) és gáz halmazállapotú szén-dioxidra (CO_2):



Heterogén fázisú reakció a folyadék halmazállapotú dinitrogén-tetroxid (N_2O_4) disszociációja nitrogén-dioxid (NO_2) gázra:



A különböző csapadékok (pl. ezüst-klorid: AgCl , alumínium-hidroxid: $\text{Al}(\text{OH})_3$ stb.) oldódása vízben is heterogén folyamat:



Mivel ezekben az esetekben a kondenzált (szilárd vagy folyadék) fázis koncentrációját állandónak vehetjük, ezek értékét bele sem írjuk az egyensúlyi állandóba. Úgy is értelmezhetjük, hogy az egyensúlyi állandóba egy állandó értéket beleírva, azzal átszorozva/átosztva értékét, az egyensúlyi állandóba beleolvastjuk, és csak azon komponensek maradnak az egyensúlyi állandóban, melyeknek változik a koncentrációja.

Így a fenti példánál maradva:

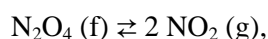
Szilárd anyag \leftrightarrow gáz reakció:



$$K_p = \frac{p_{\text{CO}_2}}{p^\circ}.$$

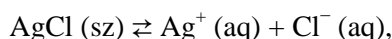
A magnézium-karbonát és a magnézium-oxid is szilárd, az egyetlen anyag, melynek koncentrációja vagy parciális nyomása változik, az a szén-dioxid. Mi történik, ha egy zárt tartályban magnézium-karbonátot hevítünk? A nyomás kezdetben növekszik, ám elér egy egyensúlyi értéket. Akkor beszélhetünk egyensúlyról, ha szén-dioxid, magnézium-oxid és magnézium-karbonát is található egyszerre az edényben, és ezeknek a mennyisége időben állandóvá válik. A szén-dioxid parciális nyomása független a szilárd magnézium-karbonát és magnézium-oxid mennyiségétől (feltéve, hogy van elegendő mennyiségű magnézium-karbonát a megfelelő mennyiségű szén-dioxid parciális nyomás létrehozásához).

Folyadék ↔ gáz reakció:

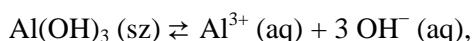


$$K_p = \left(\frac{P_{\text{NO}_2}}{p^\circ} \right)^2.$$

Szilárd anyag ↔ oldat reakció:



$$K_c = c_{\text{Ag}^+} \cdot c_{\text{Cl}^-} = [\text{Ag}^+] \cdot [\text{Cl}^-],$$



$$K_c = c_{\text{Al}^{3+}} \cdot c_{\text{OH}^-}^3 = [\text{Al}^{3+}] \cdot [\text{OH}^-]^3.$$

A csapadékok oldhatósága esetén az egyensúlyi állandót oldhatósági szorzatnak hívják és általában L-lel (a német Löslichkeitsprodukt) vagy az angol nyelvű irodalomban K_{sp} -vel (solubility product) jelölik. Természetesen a szilárd anyag koncentrációja – mivel ez állandó – nincs benne az egyensúlyi állandóban! Ezek után igazán könnyen választ tudunk adni az oldhatósági egyensúlyokkal kapcsolatos kérdésekre. Például megállapíthatjuk, hogy ha megnöveljük valamely oldatbeli ion koncentrációját (azaz a termék koncentrációját), a kiindulási anyag, azaz a csapadék irányába toljuk el az egyensúlyt. Tehát bármelyik ion koncentrációját növelve nő a csapadék mennyisége. Viszont pont ellentétes a hatás, hogyha valamelyik ion koncentrációja – például komplex képződése következtében – lecsökken, az egyensúlyt a felső nyíl irányába, azaz az oldódás irányába toljuk el! Összefoglalva, a saját ionok mennyiségének növelése csökkenti az oldhatóságot, azonban ha valamilyen módszerrel lecsökkentjük a (termék) ionok koncentrációját, az oldhatóság növekedni fog (az oldódás irányába toljuk el a reakciót). Az oldhatósági egyensúlyokkal az elektrolitegyensúlyok során részletesen is foglalkozunk.

8.17. példa:

Egy edénybe 100,0 gramm kalcium-karbonátot (mész) helyezünk, a benne lévő levegőt eltávolítjuk, ekkor a szilárd anyag feletti hasznos térfogat $2,400 \text{ dm}^3$. A hőmérsékletet $900,0 \text{ K}$ -re emeljük, ekkor a kalcium-karbonát a következő egyenlet szerint részlegesen elbomlik kalcium-oxidra (égetett mész) és szén-dioxid-gázra:



A folyamat parciális nyomással kifejezett egyensúlyi állandója $900,0 \text{ K}$ -en: $K_p = 0,631$.

Miután beállt az egyensúly, mekkora nyomást mérünk az edényben?

A kiindulási kalcium-karbonát hány százaléka bomlott el?

Mi lett a szilárd anyag tömegszázalékos összetétele?

Megoldás:

Mivel a kalcium-karbonát moláris tömege 100,0 g/mol, kereken 1 mólnyi juttattunk belőle az edénybe.

Írjuk fel az átalakulást!

	CaCO ₃ (sz)	⇌	CaO (sz)	+	CO ₂ (g)
Kiindulási:	1		0		0
Átalakul:	- x		+ x		+ x
Egyensúlyban:	1 - x		x		x

Számítsuk ki a szén-dioxid egyensúlyi nyomását K_p -ből:

$$K_p = \frac{p(\text{CO}_2)}{p^\circ} \quad \Rightarrow \quad p(\text{CO}_2) = K_p \cdot p^\circ = 0,631 \cdot 101,325 \text{ kPa} = 63,936 \text{ kPa}.$$

Az ideális gáztörvény segítségével a szén-dioxid anyagmennyisége (mely a fenti táblázatban az x ismeretlen):

$$x = \frac{p \cdot V}{R \cdot T} = \frac{63,936 \cdot 2,400}{8,314 \cdot 900} \text{ mol} = 0,0205 \text{ mol}.$$

Így az elbomlott CaCO₃ és a keletkezett kalcium-oxid anyagmennyisége: $x = 0,0205$ mol.

A szilárd anyagok tömege:

$$m(\text{CaCO}_3) = M(\text{CaCO}_3) \cdot n(\text{CaCO}_3) = 100,0 \cdot (1 - 0,0205) \text{ g} = 97,95 \text{ g},$$

$$m(\text{CaO}) = M(\text{CaO}) \cdot n(\text{CaO}) = 56 \cdot 0,0205 \text{ g} = 1,148 \text{ g}.$$

Tehát a tömegszázalékos összetétel: 98,84 tömeg% CaCO₃ és 1,16 tömeg% CaO.

8.18. példa:

Az arzin (AsH₃ vagy arzén-hidrogén, az ammóniával analóg arzénvegyület) egyensúlyi reakcióban elemi arzénre és hidrogéngázra disszociál az alábbi egyenlet szerint:



Egy levákuozott edénybe tiszta arzingázt juttatunk. Az edényben a kiindulási nyomás 51,58 kPa. Megvárjuk, hogy beálljon az egyensúly, ekkor 64,21 kPa a gázelegy össznyomása. Mekkora az arzin- és a hidrogéngáz parciális nyomása? Mekkora a parciális nyomással kifejezett egyensúlyi állandó?

Megoldás:

A szilárd arzin nem szerepel az egyensúlyi állandóban. A táblázatot most a parciális nyomásokra (az értékek kPa-ban) célszerű felírni:

	2 AsH ₃ (g)	⇌	2 As (sz)	+	3 H ₂ (g)
Kiindulási:	51,58		—		0
Átalakul:	- 2 · p		—		+ 3 · p
Egyensúlyban:	51,58 - 2 · p		—		3 · p

A gázelegy össznyomása adódik az utolsó sorban szereplő parciális nyomások (kPa-ban) összegeként:

$$p_{\text{össz}} = p(\text{AsH}_3) + p(\text{H}_2) = (51,58 - 2 \cdot p) + (3 \cdot p) = 51,58 + p = 64,21,$$

melyből $p = 12,63 \text{ kPa}$.

Így a parciális nyomások (kPa-ban):

$$p(\text{AsH}_3) = 51,58 \text{ kPa} - 2 \cdot p = 51,58 \text{ kPa} - 2 \cdot 12,63 \text{ kPa} = 26,32 \text{ kPa},$$

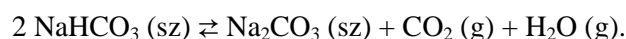
$$p(\text{H}_2) = 3 \cdot p = 3 \cdot 12,63 \text{ kPa} = 37,89 \text{ kPa}.$$

A parciális nyomásokkal kifejezett egyensúlyi állandó:

$$K_p = \frac{\left(\frac{p(\text{H}_2)}{p^\circ}\right)^3}{\left(\frac{p(\text{AsH}_3)}{p^\circ}\right)^2} = \frac{\left(\frac{37,89 \text{ kPa}}{101,325 \text{ kPa}}\right)^3}{\left(\frac{26,32 \text{ kPa}}{101,325 \text{ kPa}}\right)^2} = 0,775.$$

8.19. példa:

A nátrium-hidrogén-karbonát disszociációjának reakcióegyenlete:



A reakció egyensúlyi állandója 400,0 K hőmérsékleten: $K_p = 0,250$.

Egy 1,000 dm³ térfogatú edénybe szobahőmérsékleten 10,00 gramm tömegű nátrium-hidrogén-karbonátot mérünk, majd levákuumozzuk az edényt (a NaHCO₃ térfogata és a bomlása szobahőmérsékleten elhanyagolható). A levákuumozott edényt 400,0 K hőmérsékletre hevítjük. Mekkora a szén-dioxid-gáz és a vízgőz parciális nyomása?

Állapítsuk meg, mennyi a szilárd komponensek tömege?

Mekkora kellene növelni az edény térfogatát, hogy azonos körülmények között teljesen elbonthassuk a 10,00 gramm tömegű nátrium-hidrogén-karbonátot!

Megoldás:

Mivel K_p van megadva, írjuk fel az egyensúlyi táblázatot a parciális nyomásokkal:

	2 NaHCO ₃ (sz)	⇌	Na ₂ CO ₃ (sz)	+	CO ₂ (g)	+	H ₂ O (g)
Kiindulási:	—		—		0		0
Átalakul:	—		—		+ p		+ p
Egyensúlyban:	—		—		p		p

Az egyensúlyi állandóba behelyettesítve a parciális nyomásokat:

$$K_p = \left(\frac{p(\text{CO}_2)}{p^\circ}\right) \cdot \left(\frac{p(\text{H}_2\text{O})}{p^\circ}\right) = \left(\frac{p}{p^\circ}\right) \cdot \left(\frac{p}{p^\circ}\right) = \frac{p^2}{(p^\circ)^2},$$

melyből

$$p = \sqrt{K_p \cdot (p^\circ)^2} = p^\circ \cdot \sqrt{K_p} = (101,325 \text{ kPa}) \cdot \sqrt{0,250} = 50,66 \text{ kPa}.$$

Tehát a szén-dioxid és a vízgőz parciális nyomása 50,66 kPa.

A keletkezett szén-dioxid anyagmennyisége az ideális gáztörvényből:

$$n(\text{CO}_2) = \frac{p(\text{CO}_2) \cdot V}{R \cdot T} = \frac{50,66 \cdot 1,000}{8,314 \cdot 400} \text{ mol} = 0,01523 \text{ mol}.$$

2 mól NaHCO_3 elbomlásakor 1 mól CO_2 keletkezik, így az elbomlott NaHCO_3 anyagmennyisége:

$$n_{\text{elbomlott}} = 2 \cdot 0,01523 \text{ mol} = 0,03046 \text{ mol}.$$

A nátrium-hidrogén-karbonát kiindulási anyagmennyisége:

$$n_0(\text{NaHCO}_3) = \frac{m}{M} = \frac{10,00}{84,0} \text{ mol} = 0,11904 \text{ mol}.$$

A keletkezett nátrium-karbonát anyagmennyisége megegyezik a szén-dioxid anyagmennyiségével (0,01523 mol). A maradék NaHCO_3 anyagmennyisége:

$$n(\text{NaHCO}_3) = 0,11904 \text{ mol} - 0,03046 \text{ mol} = 0,08858 \text{ mol}.$$

Így a szilárd komponensek tömege:

$$m(\text{NaHCO}_3) = 84,0 \cdot 0,08858 \text{ g} = 7,441 \text{ gramm},$$

$$m(\text{Na}_2\text{CO}_3) = 106,0 \cdot 0,01523 \text{ g} = 1,614 \text{ gramm}.$$

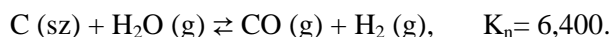
A feladat utolsó kérdésére a választ igen könnyen megállapíthatjuk. Az összes NaHCO_3 elbontásával 0,05952 mól CO_2 keletkezik. Az ideális gáztörvénnyel a szükséges edény térfogata:

$$V = \frac{n'(\text{CO}_2) \cdot R \cdot T}{p(\text{CO}_2)_e} = \frac{0,05952 \cdot 8,314 \cdot 400,0}{50,66} \text{ dm}^3 = 3,91 \text{ dm}^3.$$

Tehát a CO_2 és H_2O parciális nyomása 50,66 kPa, a bomlás során keletkezett 1,614 g Na_2CO_3 és megmaradt 7,441 g NaHCO_3 , és 3,91 dm³ térfogatú edényben lehetne a teljes mennyiségű nátrium-hidrogén-karbonátot elbontani.

8.20. példa:

Egy levákuumozott tartályba 12,000 kg szilárd szénét helyezünk, ekkor az edény maradék térfogata 1,000 m³, majd tiszta vízgőzt fúvatunk rá. Ekkor az alábbi egyensúlyi reakció (az úgynevezett vízgázreakció) megy végbe:



A hidrogén parciális nyomása 99,77 kPa egyensúlyban, a hőmérséklet pedig 1500 K. Eredetileg hány gramm vízgőzt juttattunk a tartályba? Mekkora lesz a H_2 és a CO egyensúlyi parciális nyomása, ha még 16 gramm hidrogént juttatunk a rendszerbe? Mennyivel nő ekkor a szén tömege az előző egyensúlyi helyzethez képest? $A_r(\text{C}): 12$.

Megoldás:

Számítsuk ki az ideális gáztörvény segítségével a hidrogén anyagmennyiségét!

$$n(\text{H}_2) = \frac{p(\text{H}_2) \cdot V}{R \cdot T} = \frac{99,77 \cdot 10^3 \cdot 1,000}{8,314 \cdot 1500} \text{ mol} = 8,000 \text{ mol}$$

Írjuk fel az anyagmennyiségek segítségével az egyensúlyi táblázatot!

	C (sz)	+	H ₂ O (g)	⇌	CO (g)	+	H ₂ (g)
Kiindulási:	1000		n		0		0
Átalakul:	- 8		- 8		+ 8		+ 8
Egyensúlyban:	992		n - 8		8		8

Az egyensúlyi állapotban a szén anyagmennyisége – mivel szilárd fázisban van – nem szerepel:

$$K_n = \frac{n(\text{CO}) \cdot n(\text{H}_2)}{n(\text{H}_2\text{O})} = \frac{8 \cdot 8}{n - 8} = 6,4.$$

Az egyenlet megoldása: $n = 18$ mol. A víz tömege:

$$m(\text{H}_2\text{O}) = M \cdot n = 18 \cdot 18 \text{ g} = 324,0 \text{ g}.$$

A beállt egyensúlyi rendszerbe bejuttatott hidrogéngáz anyagmennyisége:

$$n_2(\text{H}_2) = \frac{m}{M} = \frac{16,0}{2,0} \text{ mol} = 8 \text{ mol}.$$

Az új egyensúlyra felírható a következő táblázat:

	C (sz)	+	H ₂ O (g)	⇌	CO (g)	+	H ₂ (g)
Előző egyensúly	992		10		8		8
Új kiindulási:	992		10		8		16
Átalakul:	+ x		+ x		- x		- x
Egyensúlyban:	992 + x		10 + x		8 - x		16 - x

$$K_n = \frac{n(\text{CO}) \cdot n(\text{H}_2)}{n(\text{H}_2\text{O})} = \frac{(8 - x) \cdot (16 - x)}{10 + x} = 6,4.$$

A másodfokúra vezető egyenlet megoldásai: $x_1 = 2,276$, $x_2 = 28,124$. A második eredmény kémiai szempontból kizárható. Így 2,276 mól hidrogén alakult át, ugyanennyivel nőtt a szilárd szén anyagmennyisége.

A szén tömegnövekedése:

$$m(\text{C}) = A_r(\text{C}) \cdot \Delta n(\text{C}) = 12,00 \cdot 2,276 \text{ mol} = 40,97 \text{ g}.$$

A parciális nyomások kiszámítása:

$$p(\text{H}_2) = \frac{n(\text{H}_2) \cdot R \cdot T}{V} = \frac{13,724 \cdot 8,314 \cdot 1500}{10^3} \text{ kPa} = 171,2 \text{ kPa},$$

$$p(\text{CO}) = \frac{n(\text{CO}) \cdot R \cdot T}{V} = \frac{5,724 \cdot 8,314 \cdot 1500}{10^3} \text{ kPa} = 71,4 \text{ kPa}.$$

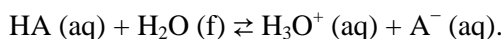
8.6. Elektrolitegyensúlyok

Az oldatokban végbemenő egyensúlyi folyamatok igen fontos terület, ezért részletesen foglalkozunk vele. Ide tartozik minden olyan folyamat, ami oldatokban (gyakran vizes oldatokban) ionizációval jár, például a sav-bázis egyensúlyok, a komplexképződési reakciók és a csapadékok oldódása is.

8.6.1. Sav-bázis egyensúlyok. Az oldatok kémhatása

Az Brønsted–Lowry-féle sav-bázis elmélet alapján az oldatok kémhatása attól függ, hogy savat vagy bázist adunk a vízhez. Savaknak tekintjük azon anyagokat, melyek proton leadására képesek, míg a bázisok protont tudnak felvenni. Vizes oldatban ez az alábbiak szerint történik:

Savak disszociációja (HA: egy tetszőleges egyértékű sav):



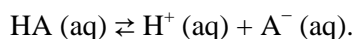
Az egyenlethez tartozó egyensúlyi állandónak a következő alakot kellene felvennie:

$$K_c = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+] \cdot [\text{A}^-]}{[\text{HA}] \cdot [\text{H}_2\text{O}]}.$$

Azonban a víz maga az oldószer, így koncentrációja igen nagy (könnyen kiszámítható, hogy mintegy $55,56 \text{ mol/dm}^3$), így az egyensúlyban csak igen kevéssé változik meg értéke, ezért „beleolvashatjuk” K_c értékébe. Az így kapott egyensúlyi állandó savi disszociációs állandónak (K_s) nevezzük és a következő képlet szerint számítjuk:

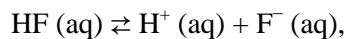
$$K_s = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{A}^-]}{[\text{HA}]},$$

mely tulajdonképpen a következő egyenletre vonatkozik:



Érdemes megjegyezni, hogy oldatok esetén általában mol/dm^3 koncentrációkkal kell számolnunk, így az elektrolitegyensúlyok esetén rendszerint koncentrációkkal kifejezett egyensúlyi állandókat használunk, és a továbbiakban ezt nem jelöljük a K jobb alsó indexében.

Példaként szerepeljen a hidrogén-fluorid:



$$K_s(\text{HF}) = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{F}^-]}{[\text{HF}]}.$$

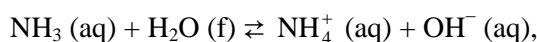
Ezzel analóg módon a bázisok disszociációját is felírhatjuk. B egy tetszőleges egyértékű (egysavú) bázist jelent:



Az előzőekhez hasonlóan definiálhatjuk a bázisdisszociációs állandót (K_b), melyben szintén nem tüntetjük fel az oldószer víz koncentrációját:

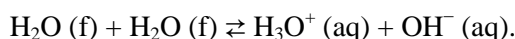
$$K_b = \frac{[\text{BH}^+] \cdot [\text{OH}^-]}{[\text{B}]}.$$

Egy példa erre az ammónia:



$$K_b(\text{NH}_3) = \frac{[\text{NH}_4^+] \cdot [\text{OH}^-]}{[\text{NH}_3]}.$$

Mint korábban már láttuk, a víz is rendelkezik sav-bázis tulajdonságokkal, amfoter vegyület. A víz disszociációját autoprotolízisnek is nevezik, és az alábbi reakcióegyenlettel írható le:



A folyamat egyensúlyi állandója elvileg az alábbi formát veszi fel:

$$K_c = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+] \cdot [\text{OH}^-]}{[\text{H}_2\text{O}]^2}.$$

A fentiekhez hasonlóan azonban a víz koncentrációját állandónak vehetjük, így a következő szorzathoz jutunk (az oxóniumiont a továbbiakban csak H^+ -nak írjuk):

$$K_v = [\text{H}^+] \cdot [\text{OH}^-].$$

A fenti kifejezést **vízionszorzat**nak nevezzük, és megállapítható belőle, hogy egy vizes oldatban a hidrogénionok és hidroxidionok koncentrációja fordítottan arányos egymással.

A vízionszorzat – a többi egyensúlyi állandóhoz hasonlóan – függ a hőmérséklettől, növelve a endotermek, így a hőmérséklet növelésével növekszik az egyensúlyi állandó). hőmérsékletet, értéke növekszik (ez összefügg azzal, hogy a disszociációs folyamatok rendszerint

A vízionszorzat értéke 25 °C hőmérsékleten $1,00 \cdot 10^{-14}$. A semleges vízben megegyezik a hidrogénionok és hidroxidionok mennyisége (koncentrációja), így a vízionszorzathoz kiszámítható koncentrációjuk:

$$[\text{H}^+] = [\text{OH}^-] = \sqrt{K_v} = \sqrt{1,00 \cdot 10^{-14}} = 1,00 \cdot 10^{-7} \text{ mol/dm}^3.$$

A semleges vízben tehát 10^{-7} mol/dm^3 koncentrációban találhatók H^+ - és OH^- -ionok.

Az oldatok pH-ja

Mivel a H^+ - és OH^- -ionok koncentrációja vizes oldatokban nem túl nagy érték, a könnyebb kezelhetőség céljából egy új fogalmat vezettek be: a **pH**-t. A pH (*pondus Hydrogenii* = hidrogén tömeg) és az oldat H^+ -ion koncentrációja (mol/dm^3 -ben mérve) között egyértelmű kapcsolat van:

$$\text{pH} = -\lg[\text{H}^+].$$

(Az lg jelölés 10-es alapú logaritmust jelöl. Az egyensúlyi állandóhoz hasonlóan a koncentrációt mértékegység nélkül írjuk be a képletbe, formálisan elosztva 1 mol/dm^3 egységkoncentrációval.)

Ebből látszik, hogy növelve a H^+ -ionok koncentrációját, a pH csökken, csökkentve azt a pH növekszik.

A pH-hoz hasonlóan definiálható a **pOH** is, mely az oldat OH^- -ion koncentrációjának egyértelmű megfeleltetése:

$$\text{pOH} = -\lg[\text{OH}^-].$$

Mint azt majd később látni fogjuk, általánosságban is felírhatjuk, hogy $pX = -\lg X$ ($p\dots = -\lg\dots$).

A víziószorzat segítségével a pH és a pOH között összefüggést írhatunk fel. A hidroxidionok koncentrációja adódik a víziószorzat és a hidrogénion-koncentráció hányadosaként:

$$[\text{OH}^-] = \frac{K_v}{[\text{H}^+]},$$

melyből a pOH:

$$\text{pOH} = -\lg[\text{OH}^-] = -\lg \frac{K_v}{[\text{H}^+]} = -\lg K_v - (-\lg[\text{H}^+]) = -\lg K_v - \text{pH}.$$

A pH-hoz hasonlóan a $(-\lg K_v)$ értéket szoktuk $\text{p}K_v$ -nek rövidíteni, így a következő egyenletet kapjuk:

$$\text{pH} + \text{pOH} = \text{p}K_v.$$

Mivel 25 °C-on $\text{p}K_v$ értéke 14, ezért ezen a hőmérsékleten $\text{pH} + \text{pOH} = 14$. Így a pH-ból egyszerűen kiszámíthatjuk a pOH-t, illetve fordítva. A továbbiakban a hőmérséklet mindig 25 °C, kivéve ahol ezt külön jelöljük.

Elsőre meglepőnek tűnhet, hogy létezik negatív és 14-nél nagyobb pH-érték is, mivel gyakran a pH-skálát 0 ... 14 tartományban szokták megadni. A hidrogénion-koncentráció azonban lehet 1-nél nagyobb, így a pH lehet negatív érték is. Tömény lúgoldatokban pedig nem ritka, hogy 14-nél nagyobb pH-t mérünk.

A pH-skáláról annyit tudunk biztosan, hogy a semleges pH, azaz mikor az oldatban $[\text{H}^+] = [\text{OH}^-]$, a következő képlet szerint adódik:

$$[\text{H}^+] \cdot [\text{OH}^-] = [\text{H}^+] \cdot [\text{H}^+] = K_v,$$

$$[\text{H}^+] = \sqrt{K_v},$$

$$\text{pH} = -\lg[\text{H}^+] = -\lg \sqrt{K_v} = \frac{1}{2} \cdot (-\lg K_v) = \frac{\text{p}K_v}{2}.$$

Tehát a semleges pH éppen a $\text{p}K_v$ -nek a fele, így 25 °C-on a semleges vizes oldat pH-ja 7. Így a pH-skála „közepontja” a semleges pH-nál van, és a skála elvileg mindkét irányban végtelen. Természetesen bármilyen nagy H^+ - vagy OH^- -ion-koncentrációt nem lehet létrehozni, ezért a pH a gyakorlatban nem vehet fel bármilyen kicsi vagy nagy értéket. Azonban elvi határa nincsen a pH-skálának.

8.6.1.1. Erős és gyenge savak és bázisok

Az **erős savak**, illetve **erős bázisok** nem túl tömény oldatukban 100%-ban (tökéletesen) disszociálnak.

A „nem túl tömény oldat” kifejezést azért fontos hangsúlyozni, mert például a tömény savak (tömény salétromsav, tömény kénsav) oldatában már olyan nagy a sav/víz arány, hogy a tökéletes disszociáció még elvileg sem lehetséges. Tehát az ideális és a reális oldatok között különbség van, ám ez hígabb oldatok esetén rendszerint nem jelentős, ám töményebb oldatokban igen nagy eltéréseket tapasztalhatunk az ideális viselkedéstől. Ezért öményebb oldatokban az összefüggésekben a koncentráció helyett az úgynevezett **aktivitást** kell alkalmazni, mely egy koncentráció dimenziójú mennyiség. Az aktivitás egy olyan mennyiség, melyet az ideális oldatokat leíró összefüggésekbe behelyettesítve leírják a valódi viselkedést.

Gyakran erős savnak (bázisoknak) tekintjük azokat a savakat (bázisokat), melyek 1 mol/dm³ koncentrációnál hígabb oldatokban tökéletesen disszociálnak.

Vizes oldatban erős savnak tekintjük például a salétromsavat (HNO₃), a sósavat (HCl), a hidrogén-bromidot (HBr), hidrogén-jodidot (HI), és első disszociációs lépésében a kénsavat (H₂SO₄) is (a második lépésben már nem).

Erősnek tekintjük vizes oldatban az alkálifém-hidroxidokat, például a nátrium-hidroxidot (NaOH), kálium-hidroxidot (KOH). Az alkáliföldfém hidroxidok (például kalcium-hidroxid) vízben rosszul oldódnak, viszont disszociációjuk teljes.

Szupersavaknak nevezzük azokat a savakat, melyeknek savassága nagyobb, mint a tiszta, 100%-os kénsavnak. Ide tartozik például a fluor-szulfonsav (HSO₃F), a trifluor-metil-szulfonsav (HSO₃CF₃), a hexafluoroantimonsav (H[SbF₆]), vagy az Oláh György-féle mágikus sav (fluorszulfonsav és antimon-pentafluorid keveréke).

Ehhez hasonlóan ismerünk szuperbázisokat is. Ezek vízzel rendszerint igen hevesen reagálnak, gyakran szerves fémvegyületek, de ismerünk más típusú szuperbázisokat is. Például ilyen a nátrium-amid (NaNH₂, az ammónia deprotonálásával keletkezik) vagy a kálium-*terc*-butoxid (KOC(CH₃)₃, ez a *terc*-butanol kálium-sója).

A **gyenge savak**, illetve **gyenge bázisok** még híg oldatban sem képesek tökéletesen disszociálni (disszociációfokuk kisebb, mint 1), disszociációjuk egyensúlyra vezető folyamat.

A sav vagy bázis disszociációs állandójából következtethetünk a sav, illetve bázis erősségére. Egy adott oldószer esetén vizsgálva, annál erősebb egy sav vagy bázis, minél nagyobb a disszociációs egyensúlyi állandója.

Mivel a disszociációs állandó rendszerint több nagyságrendnyi tartományt ölthet fel, a pH vagy pK_v mintájára a disszociációs állandókat is szokás negatív logaritmusukkal kifejezni (ennek a felírásnak például előnye lehet bizonyos számításoknál is):

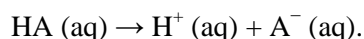
$$pK_s = -\lg K_s, \quad pK_b = -\lg K_b.$$

Ennek értelmében, minél kisebb, azaz negatívabb egy sav esetén a pK_s (bázis esetén pK_b), annál erősebbnek tekintjük a savat (bázist). Gyenge savak (bázisok) esetén a disszociációs állandó értéke kicsi, ezért a pK_s (pK_b) rendszerint nagy pozitív szám. Tehát két sav közül az tekinthető erősebbnek, melynek nagyobb a K_s disszociációs állandója, vagy ezzel ekvivalens, hogy negatívabb a pK_s értéke.

Nem véletlenül hangsúlyoztuk fentebb, hogy egy adott oldószer esetén van értelme erős és gyenge savokról (bázisokról) beszélni. Az oldatok kémhatása nemcsak vizes oldatban értelmezhető, hanem sok más oldószerben lehet pH-ról beszélni. Bizonyos oldószerekben jelentősen megváltozhatnak a sav-bázis viszonyok. Például jégecetben (vízmentes ecetsav) még az ammónia is erős bázisnak számít, ám különbséget tudunk tenni a vízben egyformán 100%-ban disszociáló salétromsav és sósav erőssége között. Ezzel ellentétben, folyékony ammóniában a bázisok erősségének sorrendjét tudjuk megállapítani.

8.6.1.2. Egyértékű erős savak pH-ja

Mivel az erős savak disszociációs állandója igen nagy (rendszerint tízes nagyságrendű), nem túl tömény vizes oldatban tökéletesen disszociálnak. Így a disszociáció során keletkezett H⁺-ionok mennyisége megegyezik a kiindulási sav mennyiségével:



Az úgynevezett bemérési koncentrációt (kiindulási sav/bázis koncentráció) c_0 -al jelöljük a továbbiakban.

Erős savak esetén fennáll, hogy $[H^+] = c_0$ (vannak kivételek, ám ezekről majd később lesz még szó részletesen).

Így a pH igen egyszerűen adódik:

$$pH = -\lg[H^+] = -\lg c_0.$$

A pH ismeretében kiszámítható a sav bemérési koncentrációja:

$$c_0 = 10^{-pH}.$$

Az így kapott koncentráció mértékegysége: mol/dm³!

8.6.1.3. Egyértékű erős bázisok pH-ja

Az erős bázisok tökéletesen disszociálódnak (ionizálódnak) vízben, így a keletkező OH⁻-ionok koncentrációja (általában) azonos lesz a bázis bemérési koncentrációjával: $[OH^-] = c_0$.

A pOH-t így könnyen kiszámíthatjuk, melyből a pH is adódik:

$$pOH = -\lg[OH^-] = -\lg c_0,$$

$$pH = pK_v - pOH = pK_v + \lg c_0.$$

Az erős savakhoz hasonlóan a pH ismeretében az erős bázisok bemérési koncentrációja is számítható:

$$c_0 = 10^{-pOH} = 10^{-(pK_v - pH)} = 10^{pH - pK_v}.$$

Az így kapott koncentráció mértékegysége ismét: mol/dm³.

8.21. példa:

Mekkora a 0,0100 mol/dm³ és az $5,20 \cdot 10^{-3}$ mol/dm³ koncentrációjú salétromsavoldat pH-ja?

Megoldás:

A disszociáció 100%-os, így $[H^+] = c_0 = 1,00 \cdot 10^{-2}$ mol/dm³. Így a pH:

$$pH = -\lg[H^+] = -\lg(1,00 \cdot 10^{-2}) = 2,00.$$

A második esetben is hasonlóan járunk el:

$$pH = -\lg[H^+] = -\lg(5,20 \cdot 10^{-3}) = 2,28.$$

Mint látható, a hígabb salétromsavoldat pH-ja, mely 2,28 nagyobb, mint a töményebbé, amely 2,00.

8.22. példa:

A 2,00 tömegszázalékos NaOH-oldat sűrűsége 1,0219 g/cm³. Mekkora az oldat pH-ja?

$M(\text{NaOH}) = 40,0$ g/mol.

Megoldás:

Ki kell számítanunk az oldat koncentrációját mol/dm³-ben. Vegyünk 1 dm³ oldatot! Ennek tömege 1021,9 gramm, benne a NaOH anyagmennyisége:

$$n(\text{NaOH}) = \frac{m(\text{NaOH})}{M} = \frac{w \cdot m_{\text{oldat}}}{M} = \frac{0,0200 \cdot 1021,9}{40,0} \text{ mol} = 0,51095 \text{ mol}.$$

Így az oldat bemérési koncentrációja:

$$c_0 = \frac{n(\text{NaOH})}{V} = \frac{0,51095 \text{ mol}}{1,000 \text{ dm}^3} = 0,51095 \text{ mol/dm}^3.$$

Mivel a nátrium-hidroxid erős bázis, a hidroxidion-koncentráció megegyezik a bemérési koncentrációval:

$$[\text{OH}^-] = c_0 = 0,51095 \text{ mol/dm}^3.$$

Így az oldat pOH-ja:

$$\text{pOH} = -\lg [\text{OH}^-] = -\lg 0,51095 = 0,292.$$

A pH pedig:

$$\text{pH} = \text{pK}_v - \text{pOH} = 14,000 - 0,292 = 13,708.$$

Tehát az oldat pH-ja 13,708.

8.23. példa:

Egy oldat 3,00 tömegszázalék hidrogén-kloridot és 3,00 tömegszázalék hidrogén-bromidot tartalmaz. Számítsuk ki az oldat pH-ját, ha sűrűsége 1,042 g/cm³! (Feltételezzük, hogy az ilyen töménységű oldatban mindkét sav teljesen disszociál!)

$$M(\text{HCl}) = 36,5 \text{ g/mol}, M(\text{HBr}) = 81,0 \text{ g/mol}$$

Megoldás:

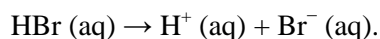
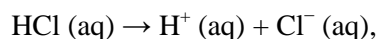
Számítsuk ki az 1 dm³ oldatban található savak anyagmennyiségét!

A hidrogén-klorid anyagmennyisége:

$$n(\text{HCl}) = \frac{m(\text{HCl})}{M(\text{HCl})} = \frac{w \cdot m_{\text{oldat}}}{M} = \frac{0,0300 \cdot 1042}{36,5} \text{ mol} = 0,8564 \text{ mol},$$

$$n(\text{HBr}) = \frac{m(\text{HBr})}{M(\text{HBr})} = \frac{w \cdot m_{\text{oldat}}}{M} = \frac{0,0300 \cdot 1042}{81,0} \text{ mol} = 0,3859 \text{ mol}$$

Mindkét sav erős savnak számít, teljesen disszociálnak, ezért az oldat hidrogénion-koncentrációja adódik a két sav molaritásának összegeként:



$$[\text{H}^+] = c_0(\text{HCl}) + c_0(\text{HBr}) = 0,8564 \text{ mol/dm}^3 + 0,3859 \text{ mol/dm}^3 = 1,2423 \text{ mol/dm}^3.$$

Így a pH a szokásos módon számítható:

$$\text{pH} = -\lg [\text{H}^+] = -\lg 1,2423 = -0,094.$$

Tehát a savkeverék pH-ja -0,094.

8.24. példa:

Mekkora a 14,00 pH-jú kálium-hidroxid-oldat koncentrációja?

Megoldás:

A pH-ból kiszámítható a pOH, majd ebből az oldat bemérési koncentrációja:

$$\text{pOH} = \text{pK}_v - \text{pH} = 14,00 - 14,00 = 0,00,$$

$$c_0 = 10^{-\text{pOH}} = 10^0 = 1 \text{ mol/dm}^3.$$

Tehát az oldat koncentrációja 1,000 mol/dm³.

8.25. példa:

Hány mólszázalékos a 0,750 pH-jú salétromsavoldat? Az oldat sűrűsége 1,003 g/cm³.

$$M(\text{HNO}_3) = 63,0 \text{ g/mol.}$$

Megoldás:

Először a pH-ból kiszámítjuk a bemérési koncentrációt, majd ebből meghatározzuk az oldat móltörtjét.

$$c_0 = 10^{-\text{pH}} = 10^{0,750} = 0,1778 \text{ mol/dm}^3$$

Vegyünk 1 dm³ oldatot! Ebben van 0,1778 mólnyi salétromsav. Ennek tömege:

$$m(\text{HNO}_3) = M(\text{HNO}_3) \cdot n(\text{HNO}_3) = 63,0 \cdot 0,1778 \text{ g} = 11,203 \text{ g.}$$

A víz tömegét megkapjuk, ha az oldat össztömegéből levonjuk a salétromsav tömegét:

$$m(\text{H}_2\text{O}) = m_{\text{oldat}} - m(\text{HNO}_3) = 1003 \text{ g} - 11,203 \text{ g} = 991,797 \text{ g.}$$

A víz anyagmennyisége:

$$n(\text{H}_2\text{O}) = \frac{m(\text{H}_2\text{O})}{M(\text{H}_2\text{O})} = \frac{991,797}{18,0} \text{ mol} = 55,0998 \text{ mol.}$$

Így a mólszázalékos összetétel: 0,322% salétromsav és 99,678% víz.

8.26. példa:

Egy vegyszeresüvegen elmosódott a felirat, csak annyi látszik, hogy az üveg nátrium-hidroxid-oldatot tartalmaz. Az oldatból kimérünk 1,00 grammot és desztillált vízzel 100,0 cm³-re egészítjük ki, az így keletkezett oldat pH-ja 12,86. Állapítsuk meg a vegyszeresüvegben található oldat tömegtörtjét!

$$M(\text{NaOH}) = 40,0 \text{ g/mol.}$$

Megoldás:

Először ki kell számítanunk a hígított oldat koncentrációját:

$$\text{pOH} = \text{pK}_v - \text{pH} = 14,00 - 12,86 = 1,14,$$

$$[\text{OH}^-] = 10^{-\text{pOH}} = 10^{-1,14} = 0,07244 \text{ mol/dm}^3.$$

A 100,0 cm³ oldatban a NaOH anyagmennyisége:

$$n(\text{NaOH}) = V \cdot [\text{OH}^-] = 0,1000 \cdot 0,07244 \text{ mol} = 7,244 \cdot 10^{-3} \text{ mol.}$$

A NaOH tömege a moláris tömeg segítségével:

$$m(\text{NaOH}) = M(\text{NaOH}) \cdot n(\text{NaOH}) = 40,0 \cdot 7,244 \cdot 10^{-3} \text{ g} = 0,290 \text{ g.}$$

Tehát a nátrium-hidroxid-oldat 29,0 tömegszázalékos.

8.6.1.4. Erős savak és bázisok extrém híg oldatainak pH-ja

Mekkora a 10⁻⁷ mol/dm³ koncentrációjú sósavoldat pH-ja? Mint tudjuk, az erős savak, így a sósav is, híg oldatban teljesen disszociálnak, így keletkezik 10⁻⁷ mol/dm³ koncentrációban H⁺-ion. Ekkor – meggondolatlanul – az válaszolhatnánk a feltett kérdésre, hogy az oldat pH-ja 7. Gondoljunk el egy kicsit az eredményen! 25 °C-on, ha pH = 7, akkor az azt jelenti, hogy az oldat semleges. Viszont egy sósavoldat, akármennyire is híg, nem lehet semleges! Tehát sejthető, hogy valamit nem vettünk figyelembe. Ez pedig a víz autoprotolízise. A helyes pH-t két különböző úton is megkaphatjuk:

I. Induljunk ki a semleges desztillált vízből, melyben 10⁻⁷ mol/dm³ koncentrációban van H⁺-ion és OH⁻-ion. A H⁺-ionok koncentrációját meg növeljük 10⁻⁷ mol/dm³-rel, ám ekkor a vízionszorzat következtében az OH⁻-ionok koncentrációjának le kell csökkennie. Írjuk fel a megváltozott koncentrációkat táblázatos formában:

	H ₂ O	⇌	H ⁺	+	OH ⁻
Kiindulási:	—		2 · 10 ⁻⁷		10 ⁻⁷
Átalakul:	—		-x		-x
Egyensúlyban:	—		2 · 10 ⁻⁷ - x		10 ⁻⁷ - x

A H⁺- és OH⁻-ionok koncentrációjának a szorzata továbbra is egyenlő a vízionszorzattal:

$$[\text{H}^+] \cdot [\text{OH}^-] = K_v = 10^{-14},$$

$$(2 \cdot 10^{-7} - x) \cdot (10^{-7} - x) = 10^{-14},$$

$$0 = x^2 - 3 \cdot 10^{-7} + 10^{-14}.$$

Az egyenlet két megoldása: $x_1 = 3,820 \cdot 10^{-8}$ és $x_2 = 2,618 \cdot 10^{-7}$. Mivel ez utóbbi eredmény esetén mind a H⁺-, mind az OH⁻-ionok koncentrációja negatív lenne, ezért ez kémiai szempontból értelmetlen. Az első megoldással viszont az oldat H⁺-ion koncentrációja:

$$[\text{H}^+] = 2 \cdot 10^{-7} \text{ mol/dm}^3 - 3,820 \cdot 10^{-8} \text{ mol/dm}^3 = 1,618 \cdot 10^{-7} \text{ mol/dm}^3.$$

Így a pH:

$$\text{pH} = -\lg [\text{H}^+] = -\lg (1,618 \cdot 10^{-7}) = 6,791.$$

II. Kiindulhatunk abból a tényből is, hogy az oldatban a kationok és anionok összmennyiségének meg kell egyeznie. Tehát a H⁺-ionok koncentrációja megegyezik a Cl⁻-ionok és az OH⁻-ionok koncentrációjának összegével (ezt nevezzük töltésmérlegnek):

$$[\text{H}^+] = [\text{Cl}^-] + [\text{OH}^-].$$

A kloridionok koncentrációját ismerjük, ez a hidrogén-klorid bemérési koncentrációja, azaz $c_0 = 10^{-7} \text{ mol/dm}^3$. Így kifejezhetjük például az OH⁻-ionok koncentrációját:

$$[\text{OH}^-] = [\text{H}^+] - [\text{Cl}^-] = [\text{H}^+] - c_0.$$

Írjuk bele a kifejezést a víziionszorzatba!

$$K_v = [\text{H}^+] \cdot [\text{OH}^-] = [\text{H}^+] \cdot ([\text{H}^+] - c_0)$$

$$0 = [\text{H}^+] - c_0 \cdot [\text{H}^+] - K_v$$

$$[\text{H}^+]_{1,2} = \frac{c_0 \pm \sqrt{c_0^2 + 4 \cdot K_v}}{2}$$

Ebből csak a pozitív megoldás rendelkezik kémiai tartalommal:

$$[\text{H}^+] = \frac{c_0 + \sqrt{c_0^2 + 4 \cdot K_v}}{2}.$$

Behelyettesítve a koncentrációt és a víziionszorzat értékét:

$$[\text{H}^+] = \frac{10^{-7} + \sqrt{(10^{-7})^2 + 4 \cdot 10^{-14}}}{2} = 1,618 \cdot 10^{-7} \text{ mol/dm}^3.$$

Természetesen a hidrogénion-koncentráció megegyezik az I. megoldásnál kapottal.

A 10^{-7} mol/dm^3 koncentrációjú sósavoldat pH-ja tehát 6,791. Mivel nagyon híg oldatról van szó, a kémhatás közel semleges, ám természetesen a savas tartományban van.

Érdeemes megfigyelni a H^+ -ion koncentrációra kapott kifejezést. Bármilyen erős sav pH-jának kiszámításakor úgy járunk el helyesen, ha ezt a képletet használjuk. Mi van akkor azonban, ha c_0 viszonylag nagy? Ekkor egyszerűsíthetünk a képletben, méghozzá úgy, hogy a c_0 melletti $4 \cdot K_v$ mennyiséget elhanyagoljuk: ez akkor tehető meg, ha

$$4 \cdot K_v \ll c_0^2,$$

$$[\text{H}^+] = \frac{c_0 + \sqrt{c_0^2 + 4 \cdot K_v}}{2} \approx \frac{c_0 + \sqrt{c_0^2}}{2} = \frac{c_0 + c_0}{2} = c_0.$$

Tehát ha c_0 viszonylag nagy (nem extrém kicsi), akkor továbbra is alkalmazhatjuk a fentebb ismertetett módszert az erős sav (bázis) pH-jának kiszámítására, tehát erős savak esetén $[\text{H}^+] = c_0$, vagy bázisok esetén $[\text{OH}^-] = c_0$, azaz a bemérési koncentráció.

Nézzük is meg, hogy mekkora hibát okoz, ha nem vesszük figyelembe a víz autoprotolízisét! Különböző koncentrációk (c_0) esetén számítjuk ki egy erős sav oldatában a pontos H^+ -koncentrációt és a pH-t a víz öndisszociációjának elhanyagolásával (pH_1) és annak figyelembevételével (pH_2):

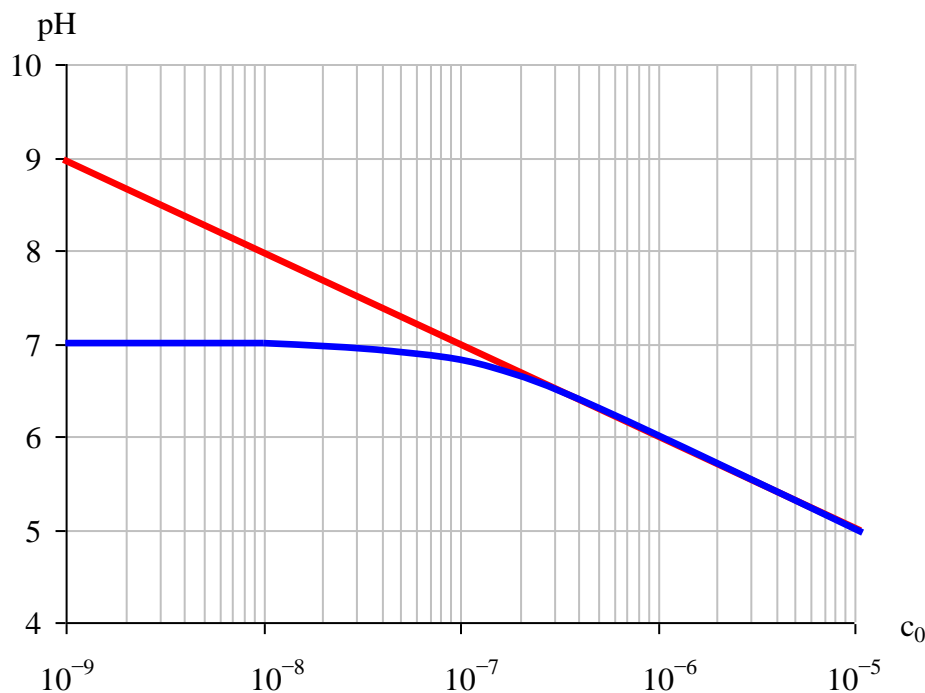
c_0 (mol/dm ³)	[H ⁺] (mol/dm ³)	pH ₁ (—)	pH ₂ (—)	pH ₁ - pH ₂ (—)
10 ⁰	1,000 · 10 ⁰	0,000	0,000	0
10 ⁻¹	1,000 · 10 ⁻¹	1,000	1,000	4,34 · 10 ⁻¹³
10 ⁻²	1,000 · 10 ⁻²	2,000	2,000	4,34 · 10 ⁻¹¹
10 ⁻³	1,000 · 10 ⁻³	3,000	3,000	4,34 · 10 ⁻⁹
10 ⁻⁴	1,000 · 10 ⁻⁴	4,000	4,000	4,34 · 10 ⁻⁷
10 ⁻⁵	1,000 · 10 ⁻⁵	5,000	5,000	4,34 · 10 ⁻⁵
10 ⁻⁶	1,010 · 10 ⁻⁶	6,000	5,996	4,28 · 10 ⁻³
10 ⁻⁷	1,618 · 10 ⁻⁷	7,000	6,791	0,209
10 ⁻⁸	1,051 · 10 ⁻⁷	(8,000)	6,978	1,022
10 ⁻⁹	1,005 · 10 ⁻⁷	(9,000)	6,998	2,002
10 ⁻¹⁰	1,001 · 10 ⁻⁷	(10,000)	7,000	3,000
10 ⁻¹¹	1,000 · 10 ⁻⁷	(11,000)	7,000	4,000
10 ⁻¹²	1,000 · 10 ⁻⁷	(12,000)	7,000	5,000

A pH-t általában 3 tizedesjegynél pontosabban nem szoktuk megadni, ezért 10⁻⁵ mol/dm³ bemérési koncentrációig biztosan nem követünk el hibát. Ennél kisebb koncentrációk esetén azonban már figyelembe kell vennünk a víz autoprotolízisét is. A táblázatból az is látható, hogy 10⁻¹⁰ mol/dm³ bemérési koncentráció alatt a pH gyakorlatilag semleges, mivel ilyenkor a vízből származó H⁺-ionok határozzák meg a pH-t:

$$c_0^2 \ll 4 \cdot K_v$$

$$[H^+] = \frac{c_0 + \sqrt{c_0^2 + 4 \cdot K_v}}{2} \approx \frac{\sqrt{4 \cdot K_v}}{2} = \frac{2 \cdot \sqrt{K_v}}{2} = \sqrt{K_v} = 10^{-7} \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}.$$

Az alábbi ábrán késsel jelöltük egy erős sav oldatának pH-ját a koncentráció függvényében, pirossal pedig a víz autoprotolízisét figyelmen kívül hagyó eredményt. A koncentrációt logaritmikus skálán ábráztuk, hogy jobban megfigyelhető legyen a változás. Mint az ábrából látható, a nagyobb koncentrációtartományban (10⁻⁶ mol/dm³ felett) helytálló a pH = -lg c₀ számítási mód. Amennyiben a koncentráció kisebb, mint 10⁻⁸ mol/dm³, az oldat pH-ja gyakorlatilag semlegesnek tekinthető.



8.6.1.4.1. ábra: Erős sav extrém híg oldatának pH-ja

8.27. példa:

Egy tartályban található, $100,0 \text{ m}^3$ térfogatú vízbe véletlen belekerült $1,00$ gramm szilárd nátrium-hidroxid. Az oldat tökéletes összekeverése után mekkora pH-t mérünk?

$$M(\text{NaOH}) = 40,0 \text{ g/mol.}$$

Megoldás:

Az oldat bemérési koncentrációja:

$$c_0 = \frac{n}{V} = \frac{m}{M \cdot V} = \frac{1,00}{40,0 \cdot 100,0 \cdot 10^3} \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3} = 2,50 \cdot 10^{-7} \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}.$$

Az oldat hidroxidion-koncentrációjára felírható, hogy:

$$[\text{OH}^-] = [\text{Na}^+] + [\text{H}^+],$$

melyből

$$[\text{H}^+] = [\text{OH}^-] - c_0 = [\text{OH}^-] - 2,5 \cdot 10^{-7}.$$

Így a következő egyenlethez jutunk:

$$10^{-14} = [\text{OH}^-] \cdot ([\text{OH}^-] - 2,5 \cdot 10^{-7})$$

Az egyenlet – kémiai szempontból releváns – megoldása: $[\text{OH}^-] = 2,851 \cdot 10^{-7}$. Így az oldat pH-ja:

$$\text{pH} = 14 - \text{pOH} = 14 - (-\lg 2,851 \cdot 10^{-7}) = 7,455.$$

Tehát az oldat pH-ja 7,455.

8.28. példa:

Becsüljük meg, hogy mekkora térfogatú desztillált vízben kell tökéletesen elkeverni 1 cseppnyi tömény sósavat ahhoz, hogy a keletkezett oldat pH-ja 6,500 legyen! Egy csepp térfogatát vegyük $0,05 \text{ cm}^3$ -nek, a tömény sósav 38,0 tömegszázalékos, és sűrűsége $1,1885 \text{ g/cm}^3$!

Megoldás:

Számítsuk ki az tömény sósavoldatban a hidrogén-klorid anyagmennyiségét!

$$n(\text{HCl}) = \frac{m}{M} = \frac{w \cdot m_{\text{oldat}}}{M} = \frac{w \cdot d \cdot V_{\text{oldat}}}{M} = \frac{0,38 \cdot 1,1885 \cdot 0,05}{36,5} \text{ mol} = 6,1867 \cdot 10^{-4} \text{ mol}$$

Most számítsuk ki a hígított oldat bemérési koncentrációját! Az oldat pH-jából a H^+ és OH^- ionok koncentrációja:

$$[\text{H}^+] = 10^{-\text{pH}} = 10^{-6,5} = 3,1623 \cdot 10^{-7} \text{ mol/dm}^3,$$

$$[\text{OH}^-] = 10^{-\text{pOH}} = 10^{-7,5} = 3,1623 \cdot 10^{-8} \text{ mol/dm}^3.$$

A sósav bemérési koncentrációja a töltésmérleghől:

$$c_0 = [\text{Cl}^-] = [\text{H}^+] - [\text{OH}^-] = 3,1623 \cdot 10^{-7} \text{ mol/dm}^3 - 3,1623 \cdot 10^{-8} \text{ mol/dm}^3 = \\ c_0 = 2,846 \cdot 10^{-7} \text{ mol/dm}^3.$$

Az oldat térfogata:

$$V = \frac{n(\text{HCl})}{c_0} = \frac{6,1867 \cdot 10^{-4} \text{ mol}}{2,846 \cdot 10^{-7} \text{ mol/dm}^3} = 2173 \text{ dm}^3.$$

Tehát a szükséges víz térfogata 2 173 dm³.

8.6.1.5. Gyenge savak pH-ja

Gyenge savak esetén a disszociáció még híg oldatban sem tekinthető 100%-osnak, a disszociációt követően mindig marad disszociálatlan sav (HA) az oldatban. Ekkor mindenképp figyelembe kell venni az egyensúlyi állandót. Az alábbiakban a víz autoprotolízisét – első körben – elhanyagoljuk. A szokásos táblázatos felírasmódot alkalmazva:

	HA	\rightleftharpoons	H^+	+	A^-
Kiindulási:	c_0		0		0
Átalakul:	- x		+ x		+ x
Egyensúlyban:	$c_0 - x$		x		x

Behelyettesítve az egyensúlyi állandóba:

$$K_s = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{A}^-]}{[\text{HA}]} = \frac{x \cdot x}{c_0 - x}.$$

Az egyenletet felírhatjuk közvetlenül a hidrogénion-koncentrációval is:

$$K_s = \frac{[\text{H}^+]^2}{c_0 - [\text{H}^]}.$$

Az egyenletet $[H^+]$ -ra megoldva a következő kifejezést kapjuk (csak a kémiaileg releváns eredményt tüntetjük fel):

$$[H^+] = \frac{-K_s + \sqrt{K_s^2 + 4 \cdot K_s \cdot c_0}}{2}.$$

Az eredményeket kifejezhetjük a disszociációk segítségével is:

	HA	\rightleftharpoons	H^+	+	A^-
Kiindulási:	c_0		0		0
Átalakul:	$-\alpha \cdot c_0$		$+\alpha \cdot c_0$		$+\alpha \cdot c_0$
Egyensúlyban:	$c_0(1-\alpha)$		$\alpha \cdot c_0$		$\alpha \cdot c_0$

Így az egyensúlyi állandó képlete:

$$K_s = \frac{(\alpha \cdot c_0)^2}{c_0 - \alpha \cdot c_0} = \frac{\alpha^2 \cdot c_0^2}{(1-\alpha) \cdot c_0} = \frac{\alpha^2}{1-\alpha} c_0.$$

Bizonyos esetekben elhanyagolásokat is tehetünk (amellett, hogy a víz autoprotolízisét elhanyagoljuk). Amennyiben a disszociációfok kicsi, a nevezőben elhanyagolható α értéke, így az alábbi egyszerűsített képlethez jutunk:

$$K_s = \frac{\alpha^2}{1-\alpha} c_0 \approx \alpha^2 \cdot c_0 \quad \Rightarrow \quad \alpha \approx \sqrt{\frac{K_s}{c_0}}$$

Általában élhetünk az elhanyagolással, ha $\alpha < 0,05$.

Ehhez teljesen hasonló módon az alábbi elhanyagolást is megtehetjük, ha $[H^+] \ll c_0$:

$$K_s = \frac{[H^+]^2}{c_0 - [H^+]} \approx \frac{[H^+]^2}{c_0} \quad \Rightarrow \quad [H^+] \approx \sqrt{K_s \cdot c_0}$$

Ez utóbbi egyszerűsített képletek alkalmazásánál azonban mindig ellenőriznünk kell, hogy jogos volt-e az elhanyagolás. A két képlet közül bármelyiket alkalmazva, ellenőrizzük a disszociációfokot, és ha az 0,05-nél nagyobbak adódnak, az elhanyagolás nem volt jogos, az eredeti másodfokú egyenletet kell megoldanunk.

Amennyiben a kapott pH-érték közel van a semlegeshez, a víz autoprotolízisét is figyelembe kell vennünk. Ez például akkor fordul elő, ha az oldat igen híg és/vagy a disszociációs állandó kicsi, azaz igen gyenge sav pH-ját számítjuk. Ha a savoldat pH-ja 6 vagy annál nagyobb, akkor a víz autoprotolízisét mindenképpen figyelembe kell vennünk! Az ilyen esetekkel a későbbiekben még részletesen foglalkozunk.

Térjünk vissza az „egyszerűsített” képletekhez!

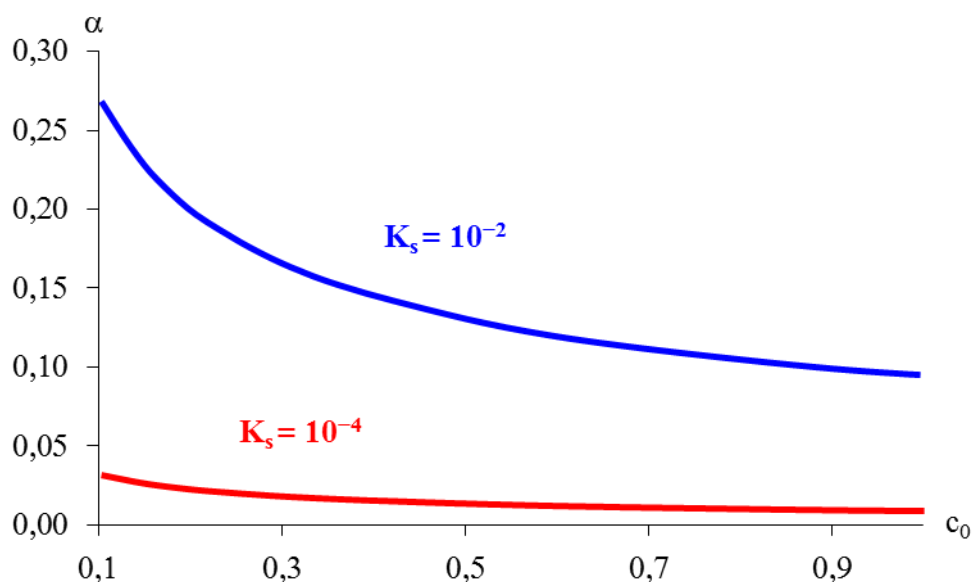
Az alábbi képletből a látható, hogy a disszociációfok alapvetően két dologtól függ: a savi disszociációs állandótól és a bemérési koncentrációtól:

$$\alpha \approx \sqrt{\frac{K_s}{c_0}}.$$

A disszociációfok növekszik, ha a bemérési koncentrációt csökkentjük, azaz hígítva az oldatot, a gyenge savak disszociációfoka növekszik. Ezt úgy értelmezhetjük, hogy a gyenge sav molekulái egymást gátolják, ezért nem tudnak teljesen disszociálódni. Az oldatot hígítva a molekulák egymástól távolabb kerülnek, ezért a disszociáció viszonylag könnyebben végbemegy.

Azonos bemérési koncentrációjú gyenge savakat összehasonlítva, a nagyobb savi disszociációs állandójú, azaz erősebb sav oldatában nagyobb a disszociációfok.

Az alábbi ábrán jól megfigyelhető a disszociációfok koncentrációfüggése két különböző savi disszociációs állandójú, gyenge sav esetén ($K_s = 10^{-2}$ és $K_s = 10^{-4}$ esetén, egy adott koncentrációtartományban). Mint látható, a koncentráció növelésével csökken a disszociációfok mindkét esetben. Az erősebb sav (nagyobb K_s) disszociációfoka ugyanakkora koncentrációnál nagyobb, mint a gyengébb savé.



8.6.1.5.1. ábra: A disszociációfok koncentrációfüggése két különböző savi disszociációs állandójú gyenge sav esetén

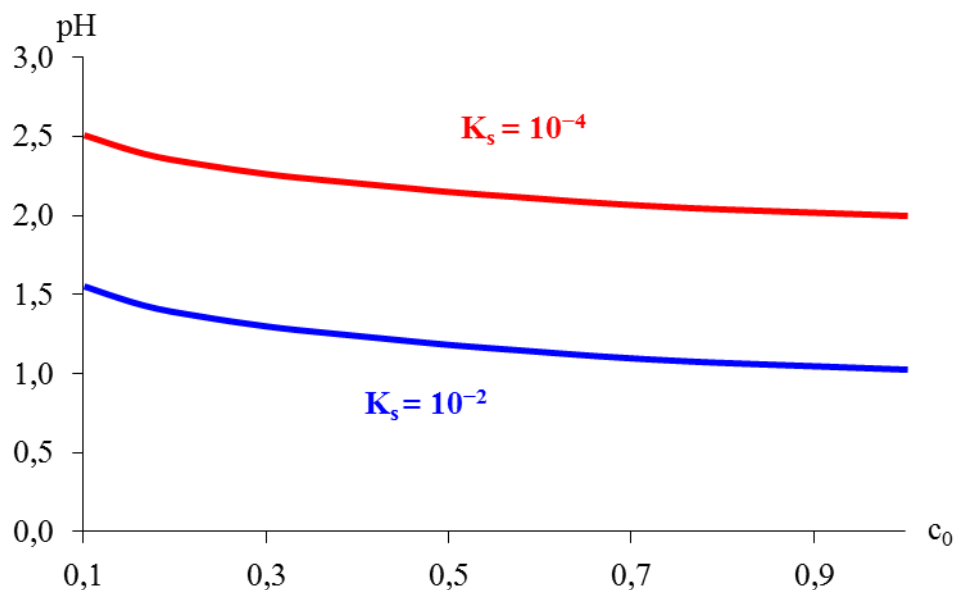
A gyenge sav oldatának pH-ja is alapvetően a savi disszociációs állandótól és a koncentrációtól függ – feltéve, hogy az oldat pH-ja nem 7 körüli:

$$[\text{H}^+] \approx \sqrt{K_s \cdot c_0},$$

$$\text{pH} = -\lg[\text{H}^+] \approx -\lg \sqrt{K_s \cdot c_0} = -\frac{1}{2}(\lg K_s + \lg c_0) = \frac{\text{p}K_s - \lg c_0}{2}.$$

Az oldatot hígítva (c_0 -t csökkentve) a hidrogénion-koncentráció csökken, a pH pedig nő. Két különböző sav azonos bemérési koncentrációjú oldatai közül a nagyobb disszociációs állandójú, azaz kisebb $\text{p}K_s$ értékű, erősebb sav hidrogénion-koncentrációja a nagyobb, illetve pH-ja kisebb.

Az alábbi ábrán a fenti két gyenge sav ($K_s = 10^{-2}$ és $K_s = 10^{-4}$) pH-jának koncentrációfüggését figyelhetjük meg (egy adott koncentrációtartományban). A gyengébb sav pH-ja mindig nagyobb, mint az erősebb savé. Másrészt a koncentráció növelésével csökken a pH (növekszik a hidrogénion-koncentráció).



8.6.1.5.2. ábra: Két gyenge sav pH-jának koncentrációfüggése

Összefoglalva:

Egy gyenge sav koncentrációját csökkentve, azaz az oldat desztillált vízzel hígítva:

- a sav disszociációfoka növekszik,
- az oldat hidrogénion-koncentrációja csökken,
- az oldat pH-ja növekszik.

Két eltérő disszociációs állandójú sav azonos bemérési koncentrációjú oldataiban az erősebb sav oldatában:

- nagyobb a disszociációfok,
- nagyobb a hidrogénion-koncentráció,
- kisebb a pH.

Felmerül a kérdés, hogy a fenti görbék hogyan folytatódnak kisebb koncentrációtartományban. A kérdésre a választ hamarosan megkapjuk a fejezet későbbi részében.

8.6.1.6. Gyenge bázisok pH-ja

A gyenge bázisok pH-számítása teljesen analóg a gyenge savaknál ismertetettel, a különbség annyi, hogy először a pOH-t kapjuk meg közvetlenül, melyből ki kell számítanunk a pH-t. Egy általános bázisra (B) a következő táblázatot írhatjuk fel:

	B	+	H ₂ O	⇌	BH ⁺	+	OH ⁻
Kiindulási:	c ₀		—		0		0
Átalakul:	- x		—		+ x		+ x
Egyensúlyban:	c ₀ - x		—		x		x

A víz mint oldószer nem szerepel az egyensúlyi állandóban:

$$K_b = \frac{[\text{BH}^+] \cdot [\text{OH}^-]}{[\text{B}]} = \frac{x \cdot x}{c_0 - x} = \frac{[\text{OH}^-]^2}{c_0 - [\text{OH}^-]} = \frac{\alpha^2}{1 - \alpha} c_0.$$

A másodfokú egyenletet megoldva:

$$[\text{OH}^-] = \frac{-K_b + \sqrt{K_b^2 + 4 \cdot K_b \cdot c_0}}{2}$$

Elővigyázatossággal a közelítő képletek is alkalmazhatóak:

$$\alpha \approx \sqrt{\frac{K_b}{c_0}}, \text{ illetve } [\text{OH}^-] \approx \sqrt{K_b \cdot c_0}.$$

Ezen képletek használatakor minden esetben ellenőriznünk kell, hogy a disszociációfok tényleg elhanyagolható-e (azaz kisebb, mint 0,05), és az oldat pH-ja nincs a semleges tartományban, tehát nem 8 vagy annál kisebb.

A gyenge savakhoz hasonlóan a gyenge bázisok disszociációfoka is növekszik hígítás hatására. A bemérési koncentrációt csökkentve, az oldat hidroxidion-koncentrációja és pH-ja is csökken (mivel a pOH növekszik).

8.29. példa:

Mekkora a $0,0100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú ecetsavoldat pH-ja és disszociációfoka? $K_s(\text{CH}_3\text{COOH}) = 1,79 \cdot 10^{-5}$

Megoldás:

Írjuk fel a megfelelő táblázatos formában az egyensúlyt!

	CH_3COOH	\rightleftharpoons	H^+	+	CH_3COO^-
Kiindulási:	0,0100		0		0
Átalakul:	- x		+ x		+ x
Egyensúlyban:	$0,0100 - x$		x		x

Behelyettesítve az egyensúlyi állandóba:

$$K_s = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{CH}_3\text{COO}^-]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]},$$

$$1,79 \cdot 10^{-5} = \frac{x \cdot x}{0,0100 - x}.$$

Az egyenlet kémiailag releváns megoldása: $x = 4,142 \cdot 10^{-4}$. Így az oldat pH-ja:

$$\text{pH} = -\lg [\text{H}^+] = -\lg (4,142 \cdot 10^{-4}) = 3,383.$$

(Megjegyzés: mivel a pH viszonylag savas, teljesen jogosan tekinthetünk el a víz autoprotolízisétől.)

Most számítsuk ki a disszociációfokot! A disszociációfokot megkapjuk, ha elosztjuk a disszociált molekulák mennyiségét (koncentrációját) a sav kiindulási mennyiségével (koncentrációjával). A disszociáció során az ecetsav-molekulákból acetátionok (CH_3COO^-) keletkeznek, így a disszociációfok:

$$\alpha = \frac{[\text{disszociált}]}{[\text{összes}]} = \frac{[\text{CH}_3\text{COO}^-]}{c_0} = \frac{4,142 \cdot 10^{-4}}{0,0100} = 0,04014$$

Most nézzük meg azt is, hogy az egyszerűsített képletekkel milyen eredményt kapunk!

$$1,79 \cdot 10^{-5} = \frac{x \cdot x}{0,0100 - x} \approx \frac{x^2}{0,0100} \quad \Rightarrow \quad x \approx \sqrt{1,79 \cdot 10^{-5} \cdot 0,0100} = 4,230 \cdot 10^{-4}$$

Az eltérés a pontosan számított eredménytől 2,1%-os.

A közelítő eredménnyel a pH:

$$\text{pH} = -\lg [\text{H}^+] = -\lg (4,230 \cdot 10^{-4}) = 3,374.$$

Tehát a közelítés a pH-ban 0,009 egységnyi változást jelent.
Ellenőrizzük le a disszociációfokot is!

$$\alpha = \frac{[\text{disszociált}]}{[\text{összes}]} = \frac{[\text{CH}_3\text{COO}^-]}{c_0} = \frac{4,230 \cdot 10^{-4}}{0,0100} = 0,0423.$$

Mint látható, a disszociációfok 0,05-nél kisebb, a közelítés nem okoz jelentős hibát. Amennyiben pontos eredményre van szükségünk, mindenképpen oldjuk meg a másodfokú egyenletet!

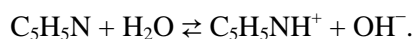
8.30. példa:

Mekkora a 0,500 mol/dm³ koncentrációjú piridinoldat pH-ja? $K_b(\text{piridin}) = 1,80 \cdot 10^{-9}$

(A piridin, az úgynevezett „bűzös bázis” egy gyenge bázis, összegképlete C₅H₅N. Formálisan úgy kapjuk meg, hogy a benzolgyűrű egy CH egységét N-re cseréljük.)

Megoldás:

A piridin disszociációjának egyenlete:



Az egyensúly táblázatos formában:

	C ₅ H ₅ N	+	H ₂ O	⇌	C ₅ H ₅ NH ⁺	+	OH ⁻
Kiindulási:	0,500		—		0		0
Átalakul:	-x		—		+x		+x
Egyensúlyban:	0,500 - x		—		x		x

A víz mint oldószer nem szerepel az egyensúlyi állandóban:

$$K_b = \frac{[\text{C}_5\text{H}_5\text{NH}^+] \cdot [\text{OH}^-]}{[\text{C}_5\text{H}_5\text{N}]} = \frac{x \cdot x}{0,500 - x} = 1,80 \cdot 10^{-9}.$$

Az egyenlet kémiailag helytálló megoldása: $x = 2,99991 \cdot 10^{-5}$. Az oldat pH-ja a pOH alapján:

$$\text{pH} = 14 - \text{pOH} = 14 + \lg [\text{OH}^-] = 14 + \lg (2,99991 \cdot 10^{-5}) = 9,477.$$

Most vizsgáljuk meg az egyszerűsített képlet alkalmazhatóságát is!

$$[\text{OH}^-] = x = \sqrt{K_b \cdot c_0} = \sqrt{1,80 \cdot 10^{-9} \cdot 0,500} = 3 \cdot 10^{-5}$$

Az oldat pH-ja a fentiekkel azonos módon számítva: 9,477.

Mint látható, a pontosan számított és becsült eredmény között gyakorlatilag nincsen különbség (a két pH három tizedesjegy pontosságra megegyezik), tehát ebben az esetben az egyszerűsített képlet kiválóan alkalmazható. Ennek oka, hogy a bázis igen gyenge, és az oldat koncentrációja viszonylag nagy (a disszociációfok olyan csekély, hogy elhanyagolása nem okoz problémát).

Tehát az oldat pH-ja 9,477.

8.31. példa:

Mekkora a 2,000 pH-jú diklórecetsav-oldat koncentrációja? $K_s(\text{CHCl}_2\text{COOH}) = 3,30 \cdot 10^{-2}$

Megoldás:

Az oldat hidrogénion-koncentrációja: $[\text{H}^+] = 10^{-\text{pH}} = 10^{-2} = 0,01 \text{ mol/dm}^3$.

A jól ismert egyensúlyi táblázatot felírva:

	CHCl_2COOH	\rightleftharpoons	H^+	+	$\text{CHCl}_2\text{COO}^-$
Kiindulási:	c_0		0		0
Átalakul:	-0,01		+0,01		+0,01
Egyensúlyban:	$c_0 - 0,01$		0,01		0,01

$$K_s = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{CHCl}_2\text{COO}^-]}{[\text{CHCl}_2\text{COOH}]} = \frac{0,01 \cdot 0,01}{c_0 - 0,01} = 3,30 \cdot 10^{-2}.$$

Az egyenlet megoldása: $c_0 = 0,01303$. Érdemes megfigyelni, hogy ebben az esetben nem szabad elhanyagolni a $[\text{H}^+]$ -t c_0 mellett. Ennek oka, hogy a diklórecetsav középérs sav ($\text{p}K_s = 1,48$), ezért viszonylag jelentős a disszociációja.

Tehát a diklórecetsav koncentrációja $1,30 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3$.

8.32. példa:

Mekkora annak a hangyasavnak a bemérési koncentrációja, melyben a disszociációfok 50%? $K_s = 1,80 \cdot 10^{-4}$.

Megoldás:

	HA	\rightleftharpoons	H^+	+	A^-
Kiindulási:	c_0		0		0
Átalakul:	$-0,5 \cdot c_0$		$+0,5 \cdot c_0$		$+0,5 \cdot c_0$
Egyensúlyban:	$0,5 \cdot c_0$		$0,5 \cdot c_0$		$0,5 \cdot c_0$

Így az egyensúlyi állandó képlete:

$$K_s = \frac{(0,5 \cdot c_0)^2}{0,5 \cdot c_0} = \frac{0,5^2 \cdot c_0^2}{0,5 \cdot c_0} = 0,5 \cdot c_0.$$

Tehát az 50%-os disszociációfok esetén a koncentráció éppen az egyensúlyi állandó kétszerese:

$$c_0 = 2 \cdot K_s = 2 \cdot 1,80 \cdot 10^{-4} \text{ mol/dm}^3 = 3,60 \cdot 10^{-4} \text{ mol/dm}^3.$$

Az oldat hidrogénion-koncentrációja:

$$[\text{H}^+] = \alpha \cdot c_0 = 0,500 \cdot 3,60 \cdot 10^{-4} \text{ mol/dm}^3 = 1,80 \cdot 10^{-4} \text{ mol/dm}^3.$$

$$\text{pH} = -\lg [\text{H}^+] = -\lg (1,80 \cdot 10^{-4}) = 3,745.$$

Tehát $\text{pH} = \text{pK}_s = 3,745$ esetén az oldatban a disszociációfok 50%-os, ekkor az oldat koncentrációja ekkor $3,60 \cdot 10^{-4} \text{ mol/dm}^3$.

8.6.1.7. Gyenge savak (és bázisok) nagyon híg oldatainak pH-ja

Ebben a kiegészítő részben foglalkozunk a gyenge savak számításának azon eseteivel, melyeknél nem tekinthetünk el a víz autoprotolízisétől. A bázisokra minden összefüggés analóg módon levezethető, ám részletes ismertetésüktől itt eltekintünk.

Vegyük sorra, milyen anyagok és ionok találhatóak az oldatban:

- disszociálatlan gyenge sav (HA),
- disszociált gyenge sav: savmaradékion (A^-),
- hidrogénion (H^+),
- hidroxidion (OH^-).

Az egyensúly felírásához az alábbi összefüggéseket ismerjük az egyes anyagok/ionok között:

- savi disszociációs állandó:

$$K_s = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{A}^-]}{[\text{HA}]},$$

- vízionszorzat:

$$K_v = [\text{H}^+] \cdot [\text{OH}^-],$$

- anyagmérleg:

$$c_0 = [\text{HA}] + [\text{A}^-],$$

- töltésmérleg:

$$[\text{H}^+] = [\text{A}^-] + [\text{OH}^-].$$

Van négy egyenletünk négy ismeretlennel, és feltehetően megoldható az egyenletrendszer. Lássunk is hozzá! A cél a $[\text{H}^+]$ meghatározása. Fejezzük ki $[\text{HA}]$ -t a disszociációs állandóból:

$$[\text{HA}] = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{A}^-]}{K_s}.$$

A kapott kifejezést helyettesítsük be a bemérési koncentráció egyenletébe:

$$c_0 = [\text{HA}] + [\text{A}^-] = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{A}^-]}{K_s} + [\text{A}^-] = \left(\frac{[\text{H}^+]}{K_s} + 1 \right) \cdot [\text{A}^-] = \frac{[\text{H}^+] + K_s}{K_s} [\text{A}^-].$$

Az így kapott összefüggésből kifejezhető $[\text{A}^-]$:

$$[\text{A}^-] = \frac{K_s \cdot c_0}{[\text{H}^+] + K_s}.$$

Ezt helyettesítsük be a töltésmérlegbe:

$$[\text{H}^+] = [\text{A}^-] + [\text{OH}^-] = \frac{K_s \cdot c_0}{[\text{H}^+] + K_s} + [\text{OH}^-].$$

A hidroxidion-koncentrációra is ismerünk összefüggést, méghozzá a víziionszorzatot:

$$[\text{OH}^-] = \frac{K_v}{[\text{H}^]}.$$

Ez is behelyettesítve a fenti egyenletbe:

$$[\text{H}^+] = [\text{A}^-] + [\text{OH}^-] = \frac{K_s \cdot c_0}{[\text{H}^+] + K_s} + \frac{K_v}{[\text{H}^]}.$$

Tehát a megoldandó egyenlet:

$$[\text{H}^+] = \frac{K_s \cdot c_0}{[\text{H}^+] + K_s} + \frac{K_v}{[\text{H}^]}.$$

Az egyenletet átrendezve, sajnálatos módon, harmadfokú egyenlethez jutunk, melyet nem túl egyszerű megoldani. Noha létezik rá zárt formában megoldás, ám ez rendkívül bonyolult: a K_s , K_v és c_0 paraméterekkel kifejezett alakja több sort is kitenne, ezért nem itt nem ismertetjük.

Az egyenlet közelítő megoldását – tetszőleges pontossággal – viszont könnyűszerrel megkaphatjuk! Ehhez iterációra lesz szükségünk, melyre az egyenlet fenti alakja további átalakítások nélkül is alkalmas.

8.33. példa:

Mekkora az $1,00 \cdot 10^{-7} \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú ecetsavoldat pH-ja? $K_s = 1,79 \cdot 10^{-5}$

Megoldás:

Alkalmazzuk a következő összefüggést:

$$[\text{H}^+] = \frac{K_s \cdot c_0}{[\text{H}^+] + K_s} + \frac{K_v}{[\text{H}^]} = \frac{1,79 \cdot 10^{-5} \cdot 1,00 \cdot 10^{-7}}{[\text{H}^+] + 1,79 \cdot 10^{-5}} + \frac{10^{-14}}{[\text{H}^]}.$$

Sejthető, hogy a pH 7 körül lesz (valamennyivel kisebb, mint 7), ezért legyen $[\text{H}^+]$ kiindulási értékének például $[\text{H}^+]_0 = 5 \cdot 10^{-7}$. Helyettesítsük be $[\text{H}^+]$ értékét a képlet jobb oldalába, ez egy új $[\text{H}^+]$ -t eredményez, ezt $[\text{H}^+]_1$ -nek jelöljük. Ezután $[\text{H}^+]_1$ -et is behelyettesítjük a képletbe, ez $[\text{H}^+]_2$ -t adja eredményül. Ezt így folytatjuk addig, amíg a kívánt pontosságot el nem érjük. A $[\text{H}^+]_0$, $[\text{H}^+]_1$, $[\text{H}^+]_2 \dots$ sorozat:

	$[\text{H}^+]$	pH
$[\text{H}^+]_0$	$5,000 \cdot 10^{-7}$	6,301
$[\text{H}^+]_1$	$1,173 \cdot 10^{-7}$	6,931
$[\text{H}^+]_2$	$1,846 \cdot 10^{-7}$	6,734
$[\text{H}^+]_3$	$1,531 \cdot 10^{-7}$	6,815
$[\text{H}^+]_4$	$1,644 \cdot 10^{-7}$	6,784
$[\text{H}^+]_5$	$1,599 \cdot 10^{-7}$	6,796
$[\text{H}^+]_6$	$1,617 \cdot 10^{-7}$	6,791
$[\text{H}^+]_7$	$1,610 \cdot 10^{-7}$	6,793
$[\text{H}^+]_8$	$1,612 \cdot 10^{-7}$	6,793
$[\text{H}^+]_9$	$1,611 \cdot 10^{-7}$	6,793

$[\text{H}^+]_{10}$	$1,612 \cdot 10^{-7}$	6,793
$[\text{H}^+]_{11}$	$1,612 \cdot 10^{-7}$	6,793

Tehát a 10^{-7} mol/dm³ koncentrációjú ecetsavoldat pH-ja 6,793. Érdemes összehasonlítani az eredményt a 10^{-7} mol/dm³ koncentrációjú sósavoldat pH-jával (lásd fentebb), mely 6,791. Igen érdekes, hogy az ilyen rendkívül híg ecetsavoldat és az azonos koncentrációjú sósavoldat pH-ja között gyakorlatilag nincsen különbség. Ezt úgy is megfogalmazhatjuk, hogy az ecetsav nagyon híg oldatában a disszociációfok olyan nagy, hogy ez a közepérső sav szinte erős savként viselkedik!

Az előző példa alapján érdemes megvizsgálunk az alábbi egyenletet különböző egyensúlyi állandók és koncentrációk esetén:

$$[\text{H}^+] = \frac{K_s \cdot c_0}{[\text{H}^+] + K_s} + \frac{K_v}{[\text{H}^+]}$$

Mivel a koncentrációtartományok, melyekben az egyszerűsítések érvényesek, függenek a disszociációs állandótól, az alábbiakban nem adunk meg pontos határokat.

A nagyon híg oldat koncentrációja rendszerint 10^{-6} mol/dm³-nél kisebb.

A közepes töménység rendszerint $10^{-6} \dots 10^{-3}$ mol/dm³ tartományban értendő.

A „töményebb” oldat nem tömény oldatot jelent, csak a közepes töménységűnél töményebbet, tehát 10^{-2} mol/dm³ bemérési koncentrációnál töményebb oldatot.

Nagyon gyenge savnak tekintjük az alábbiakban azon savakat, melyek disszociációs állandója igen csekély, $10^{-8} - 10^{-10}$ nagyságrendű, vagy még ennél is kisebb.

A gyenge, illetve közepesen erős savak között sem húzható éles határvonal, ezek disszociációs állandója nagyjából 10^{-7} -nél nagyobb.

Az erős savak tökéletesen disszociálnak, disszociációs állandójukat végtelen nagyra tekintjük. (Megjegyzés: megfelelő módszerekkel még az erős savaknak tekintett sósav, salétromsav stb. esetén is kimérhető a disszociációs állandó, mely rendszerint igen nagy. Tehát még az erős savak sem tekinthetők szigorúan véve erősnek, mivel nem végtelen nagy a disszociációs állandójuk. Azonban 1 mol/dm^3 koncentrációnál hígabb oldatban ezen savak gyakorlatilag tökéletesen disszociálnak, ezért erős savaknak tekintjük őket.)

8.6.1.8. Összefoglalás: Egyértékű savak és bázisok

Erős savak

Nagyon híg oldat esetén feltételezhetjük, hogy $K_s \gg [\text{H}^+]$, ekkor az egyenletben az alábbi közelítést alkalmazhatjuk (a $[\text{H}^+]$ elhanyagolható K_s mellett):

$$[\text{H}^+] = \frac{K_s \cdot c_0}{[\text{H}^+] + K_s} + \frac{K_v}{[\text{H}^+]} \approx \frac{K_s \cdot c_0}{K_s} + \frac{K_v}{[\text{H}^+]} = c_0 + \frac{K_v}{[\text{H}^+]}$$

Tehát az alkalmazandó képlet:

$$[\text{H}^+] \approx c_0 + \frac{K_v}{[\text{H}^+]}$$

(Ez megegyezik azzal, amit már korábban is megismertünk.)

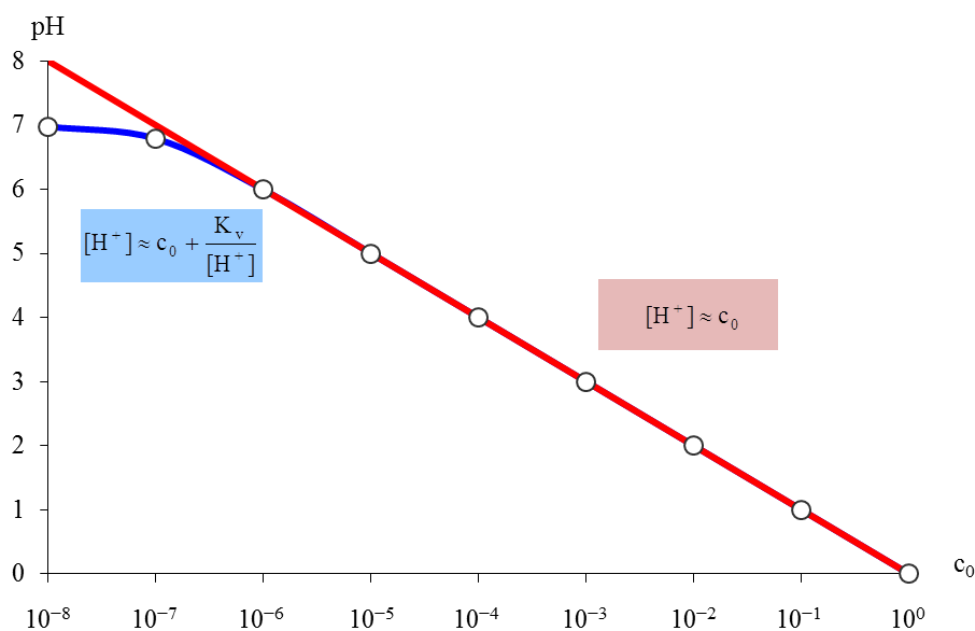
Közepes töménységű és töményebb oldatok esetén a képlet tovább egyszerűsödik, mivel a víz autoprotolízisét elhanyagolhatjuk:

$$[\text{H}^+] \approx c_0 + \frac{K_v}{[\text{H}^+]} \approx c_0.$$

A képlet az alábbi formára egyszerűsödik:

$$[\text{H}^+] \approx c_0.$$

Az egyenletek alkalmazhatósága jól megfigyelhető az alábbi ábrán, melyen egy erős sav pH-ját ábrázoltuk a koncentráció függvényében:



8.6.1.8.1. ábra: Egy erős sav pH-ja a koncentráció függvényében

Gyenge és közepesen erős savak

Nagyon híg oldatok esetén feltételezhetjük, hogy $K_s \gg [\text{H}^+]$, ekkor az alábbi közelítő egyenletet alkalmazhatjuk ($[\text{H}^+]$ elhanyagolható K_s mellett):

$$[\text{H}^+] = \frac{K_s \cdot c_0}{[\text{H}^+] + K_s} + \frac{K_v}{[\text{H}^+]} \approx \frac{K_s \cdot c_0}{K_s} + \frac{K_v}{[\text{H}^+]} = c_0 + \frac{K_v}{[\text{H}^+]}$$

Tehát az alkalmazandó képlet:

$$[\text{H}^+] \approx c_0 + \frac{K_v}{[\text{H}^+]}$$

Ekkor azt a képletet kapjuk eredményül, amit az erős savak nagyon híg oldatainál már megismertünk. Tehát a nem túl gyenge savak nagyon híg oldatban erős savként viselkednek.

Közepes töménységű oldatok esetén a pH savas (nem 7 körüli), ezért a második tagot elhanyagolhatjuk. Ekkor ahhoz a képlethez jutunk, melyet már megismertünk a gyenge savak számításánál:

$$[\text{H}^+] = \frac{K_s \cdot c_0}{[\text{H}^+] + K_s} + \frac{K_v}{[\text{H}^+]} \approx \frac{K_s \cdot c_0}{[\text{H}^+] + K_s}.$$

A $[\text{H}^+]$ -t kifejezve:

$$[\text{H}^+] = \frac{-K_s + \sqrt{K_s^2 + 4 \cdot K_s \cdot c_0}}{2}.$$

Gyenge és közép erős savak töményebb oldata esetén, azaz, ha $[\text{H}^+] \gg K_s$, az előző közelítésben a $[\text{H}^+] + K_s \approx [\text{H}^+]$, így a következő egyenlethez jutunk:

$$[\text{H}^+] \approx \frac{K_s \cdot c_0}{[\text{H}^+] + K_s} \approx \frac{K_s \cdot c_0}{[\text{H}^+]}$$

Így a már jól ismert képletet kapjuk:

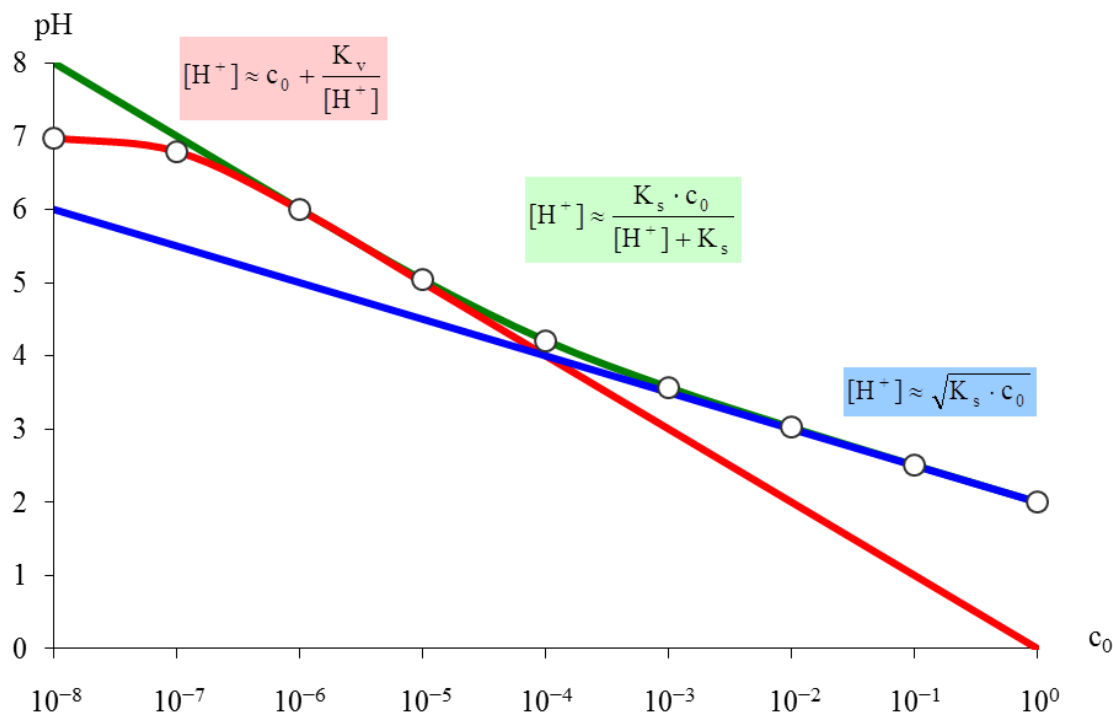
$$[\text{H}^+] \approx \sqrt{K_s \cdot c_0}.$$

A következő ábrán a fenti három egyenlet alkalmazhatóságát jelenítjük meg szemléletesen. A fekete körök a pontosan számított értékeket jelölik, a színes görbék pedig a megfelelő egyszerűsített képletekkel számított pH-értékeket. A koncentrációk logaritmikus skálán vannak jelölve, mivel így jobban látszódnak az eltérések.

A legutóbbi képlet a logaritmikus beosztás következtében egyenesnek adódik:

$$[\text{H}^+] \approx \sqrt{K_s \cdot c_0} \quad \Rightarrow \quad \text{pH} = -\lg [\text{H}^+] \approx -\lg \sqrt{K_s \cdot c_0} = -\frac{\lg K_s + \lg c_0}{2} = -\frac{1}{2} \text{p}K_s - \frac{1}{2} \lg c_0.$$

Mint látható, kis koncentrációk esetén a piros görbe, nagy koncentrációk esetén a kék görbe írja le a pH koncentrációfüggését megfelelően. Közepes koncentrációk esetén a zöld görbét célszerű használni, ám ez nagyobb koncentrációk esetén „beleolvad” a kék görbébe (azaz mindkét közelítés ugyanazt az eredményt adja).



8.6.1.8.2. ábra: Egy gyenge sav pH-ja a koncentráció függvényében

Nagyon gyenge savak

Híg oldatok esetén feltételezhető, hogy $[H^+] \gg K_s$, ezért az első tag nevezőjében az egyensúlyi állandó elhanyagolható:

$$[H^+] = \frac{K_s \cdot c_0}{[H^+] + K_s} + \frac{K_v}{[H^+]} \approx \frac{K_s \cdot c_0}{[H^+]} + \frac{K_v}{[H^+]} = \frac{K_s \cdot c_0 + K_v}{[H^+]}$$

Így a következő képletet kapjuk:

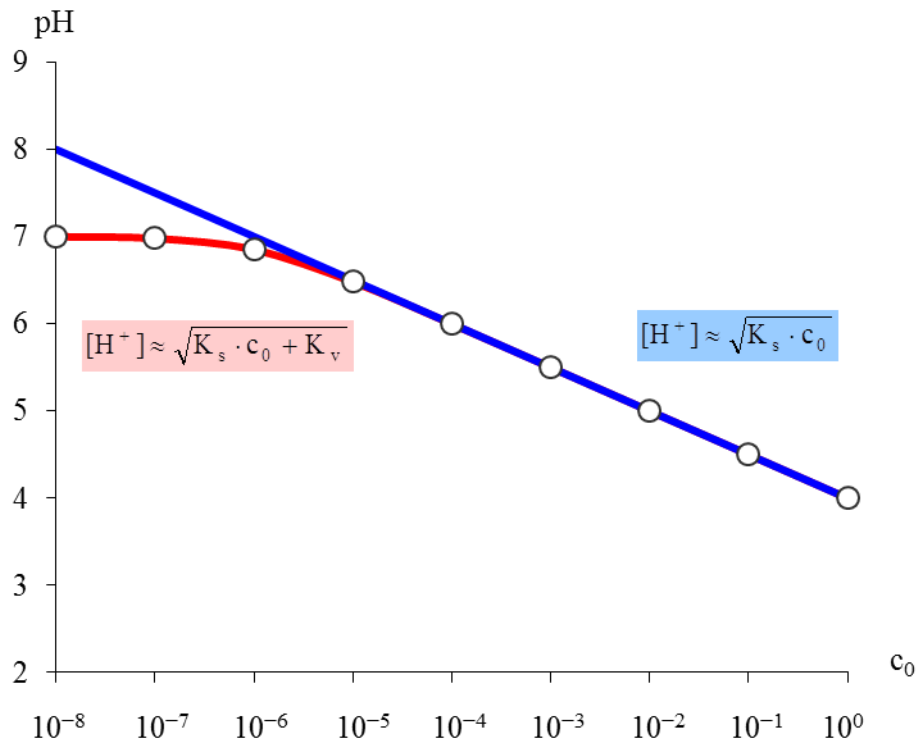
$$[H^+] \approx \sqrt{K_s \cdot c_0 + K_v}$$

Töményebb oldatok esetén a pH viszonylag savas (nem semleges közeli), a fenti képletben elhanyagolható K_v a másik tag mellett:

$$[H^+] \approx \sqrt{K_s \cdot c_0 + K_v} \approx \sqrt{K_s \cdot c_0}$$

Így a következő képletet kapjuk:

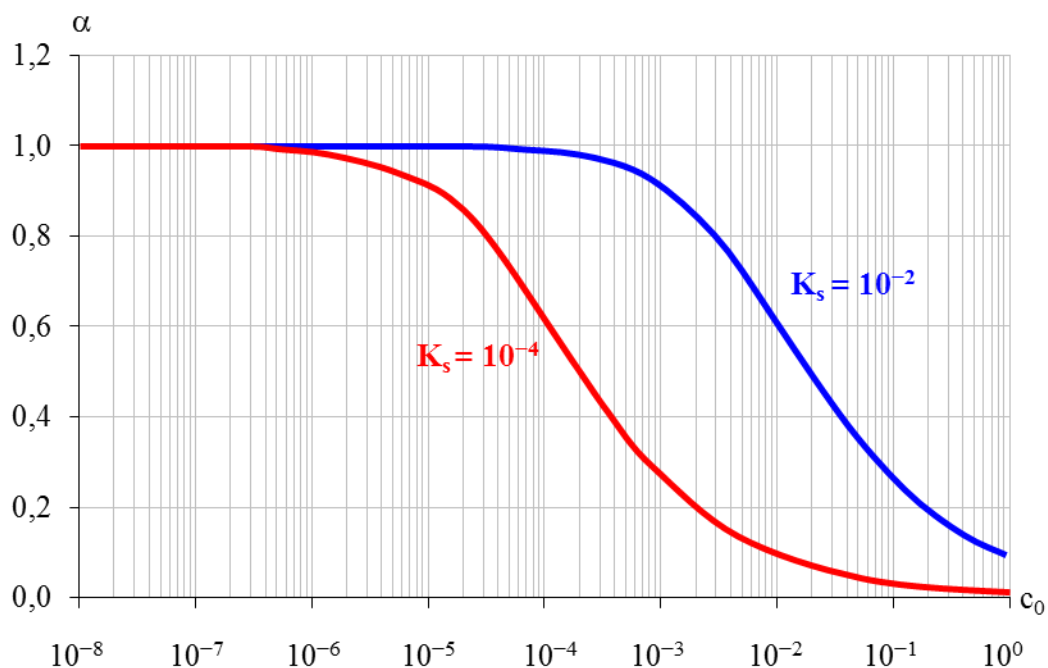
$$[H^+] \approx \sqrt{K_s \cdot c_0}$$



8.6.1.8.3. ábra: Nagyon gyenge sav pH-ja a koncentráció függvényében

Különböző erősségű savak tulajdonságainak összehasonlítása

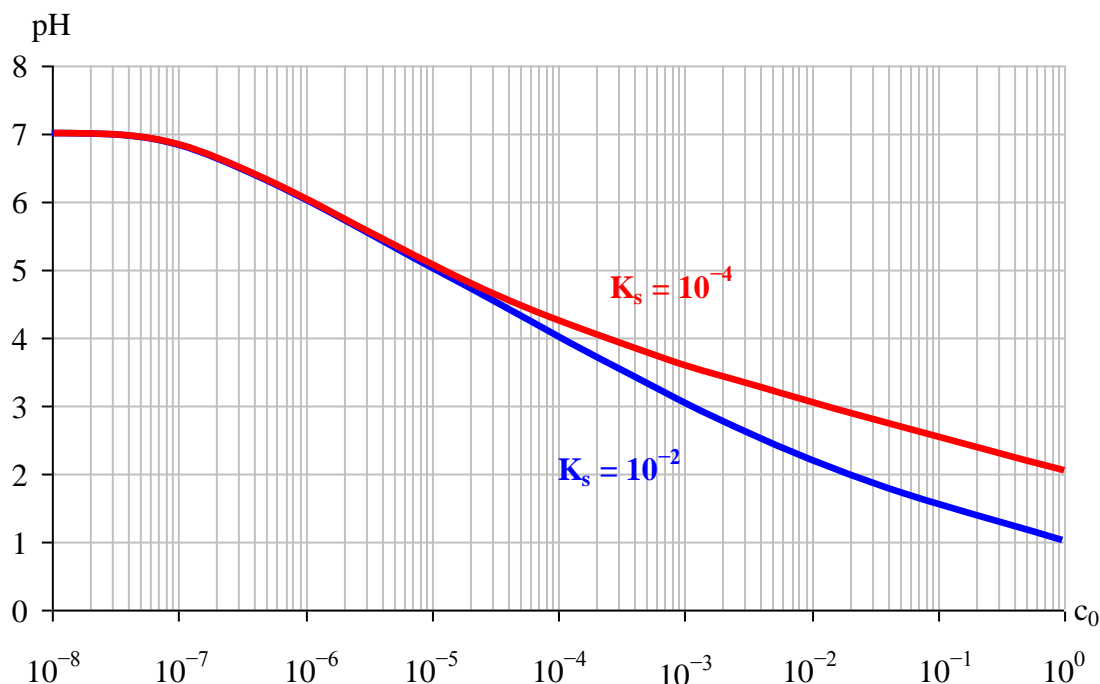
Vizsgáljuk meg két különböző disszociációs állandójú sav esetén a disszociációfok és a pH koncentrációfüggését! Legyen a két sav disszociációs állandója $1,00 \cdot 10^{-2}$ és $1,00 \cdot 10^{-4}$. Ekkor a pontos H^+ -ion-koncentrációt megadó egyenletet megoldva az alábbi görbéket kapjuk a disszociációfokra:



8.6.1.8.4. ábra: A disszociációfok a koncentráció függvényében

Az ábrán jól megfigyelhető, hogy kis koncentrációknál (függetlenül a sav disszociációs állandójától) a **disszociációfok közel 100%-os**. A két görbe rendkívül hasonló, egymásba eltolással átvihetők (azonos a disszociációfok, ha a gyengébb és az erősebb sav koncentrációjának aránya 1 : 100). A gyengébb sav (kisebb K_s) disszociációfoka minden bemérési koncentráció esetén kisebb az azonos koncentrációjú erősebb savénál.

Most nézzük meg, hogy néz ki ugyanennek a két savnak a pH-koncentráció-összefüggése! Az egyszerűsítés nélküli képletet alkalmazva adott c_0 esetén meghatározható a pH. Ezt a bemérési koncentráció függvényében ábrázolva, a következő diagramot kapjuk (a koncentrációt logaritmikus skálán ábrázoltuk, hogy jobban megfigyelhető legyen a változás):



8.6.1.8.5. ábra: A pH a koncentráció függvényében

Az ábrán jól megfigyelhető, hogy a két sav közötti különbség a nagyobb koncentrációtartományban jelentősebb, a kisebb koncentrációknál a két görbe gyakorlatilag összeolvad. Érdekes ezt az eredményt összehasonlítani az erős (tökéletesen disszociáló) és gyengébb savakkal is. A következő ábrán négy gyenge sav (K_s : 10^{-2} , 10^{-4} , 10^{-6} , 10^{-8}) és az erős sav pH-koncentráció összefüggését ábrázoltuk.

Jól megfigyelhető, hogy egy adott koncentráció esetén minél gyengébb a sav, annál nagyobb a pH-ja. Egy adott koncentrációnál vizsgálva, az összes görbe közül természetesen az erős sav pH-ja a legkisebb.

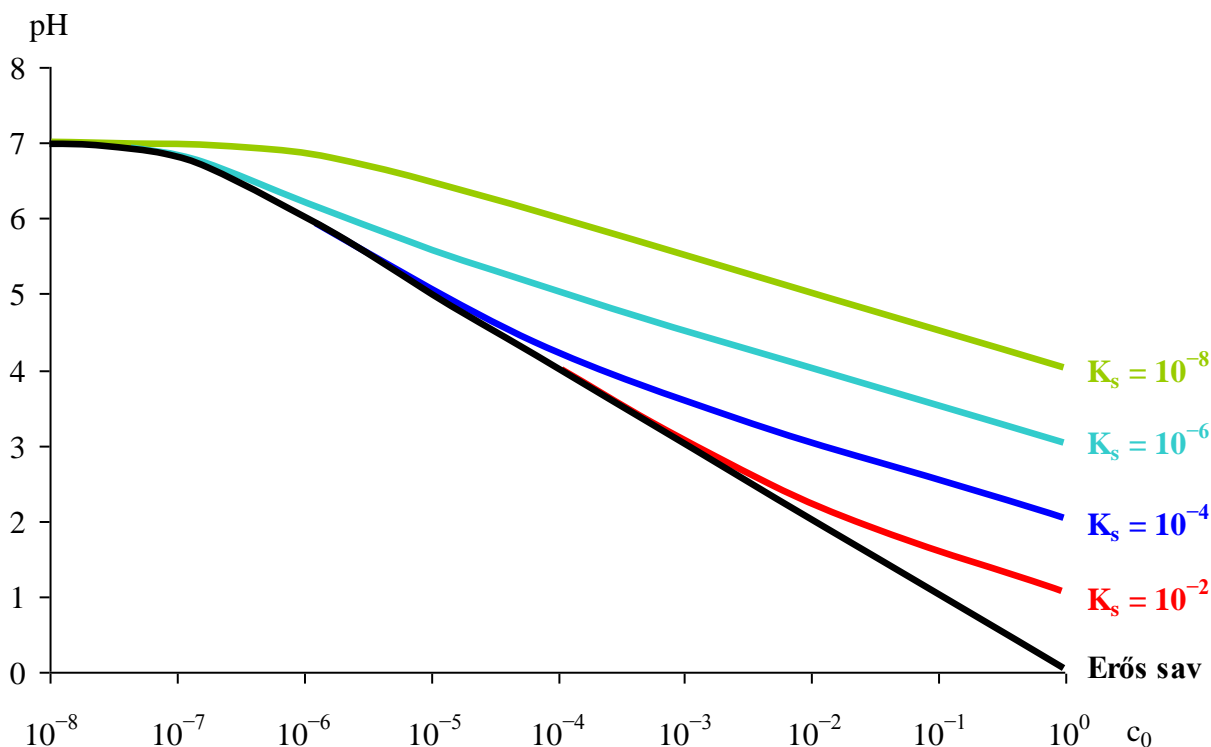
A gyenge savak pH-görbéi a nagyobb koncentrációtartományban egymással párhuzamosak, ez könnyen megérthető, ha az alábbi közelítő képlettel számítjuk a pH-t:

$$[\text{H}^+] \approx \sqrt{K_s \cdot c_0} \quad \Rightarrow \quad \text{pH} \approx -\lg \sqrt{K_s \cdot c_0} = \frac{1}{2} \text{p}K_s - \frac{1}{2} \lg c_0.$$

Mivel ebben a tartományban igen jól használható ez a „gyökös” képlet, a koncentráció logaritmusának függvényében ábrázolva a pH-t, egy negatív meredekségű egyenest kapunk, melynek tengelymetszete éppen a $\text{p}K_s$ fele (a logaritmikus skála miatt a tengelymetszet itt $c_0 = 10^0$ esetén van).

Az is megfigyelhető, hogy egy bizonyos koncentrációnál kisebb koncentrációk esetén a gyenge savak gyakorlatilag úgy viselkednek, mint egy erős sav. Ez az ábrán úgy látszik, hogy a gyenge sav

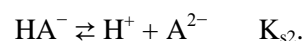
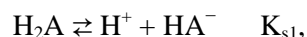
görbéje „beleolvad” az erős sav (fekete) görbéjébe. Minél gyengébb egy sav, annál kisebb az a koncentráció, melynél hígabb oldatban erős savval közelíthető a gyenge sav.



8.6.1.8.6. ábra: Savoldatok pH-ja a koncentráció függvényében

8.6.1.9. Többértékű savak és bázisok pH-ja

A többértékű (több-bázisú) savak pH-ja több, egymást követő egyensúlyi lépésből számítható. Az egymást követő lépések egyensúlyi állandója csökkenő sorozatot követ (a pK_s értékek növekednek):



esetén $K_{s1} > K_{s2}$, avagy $pK_{s1} < pK_{s2}$, hasonlóan kettőnél több bázisú savakra is. A továbbiakban elsősorban kétértékű savakkal foglalkozunk, ám az összefüggések általánosíthatóak többértékű savakra is és többértékű bázisokra is.

Első lépésben erős, második lépésben gyenge savak

A legismertebb példa erre a kénsav. Az első disszociációs lépés tökéletesen végbemegy, ám a hidrogén-szulfát-ion már csak közép-erős savnak tekinthető:



Természetesen az első lépésben keletkezett H^+ -ionok hatással vannak a második disszociációs lépésre is! Egy c_0 bemérési koncentrációjú kénsavoldat esetén az első lépésben keletkezik c_0 koncentrációjú H^+ -ion. A második lépés egyensúlya így a következő lesz:

	HSO_4^-	\rightleftharpoons	H^+	+	SO_4^{2-}
Kiindulási:	c_0		c_0		0
Átalakul:	$-x$		$+x$		$+x$
Egyensúlyban:	$c_0 - x$		$c_0 + x$		x

Így az egyensúlyi állandó felírható:

$$K_{s2} = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{SO}_4^{2-}]}{[\text{HSO}_4^-]} = \frac{(c_0 + x) \cdot x}{c_0 - x}.$$

Az egyenletet megoldva x -re, megkapjuk a disszociált hidrogén-szulfát-ionok koncentrációját, és így a hidrogénion-koncentráció: $[\text{H}^+] = c_0 + x$.

8.34. példa:

Mekkora a $0,0500 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú kénsavoldat pH-ja és a második lépés disszociációfoka? $K_{s2} = 1,20 \cdot 10^{-2}$

Megoldás:

Az előző megfontolások alapján az egyensúlyi állandóba beírva a $c_0 = 0,0500 \text{ mol/dm}^3$ értéket:

$$\frac{(c_0 + x) \cdot x}{c_0 - x} = \frac{(0,0500 + x) \cdot x}{0,0500 - x} = 1,20 \cdot 10^{-2} = K_{s2}.$$

Az egyenlet megoldásai: $x_1 = 8,509 \cdot 10^{-3}$ és $x_2 = -7,051 \cdot 10^{-2}$. Értelemszerűen csak x_1 -nek van kémiai tartalma, így az oldat hidrogénion-koncentrációja:

$$[\text{H}^+] = c_0 + x = 0,0500 \text{ mol/dm}^3 + 8,509 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3 = 0,058509 \text{ mol/dm}^3,$$

így a pH:

$$\text{pH} = -\lg 0,058509 = 1,233.$$

A kénsav disszociációfoka az első lépésben 100%-os, a második lépésben pedig:

$$\alpha = \frac{[\text{disszociált}]}{[\text{összes}]} = \frac{[\text{SO}_4^{2-}]}{c_0(\text{HSO}_4^-)} = \frac{8,509 \cdot 10^{-3}}{0,0500} = 0,170.$$

Érdeemes megvizsgálni, hogy mennyiben tér el az eredmény, ha feltételezzük, hogy mindkét disszociációs lépés tökéletesen végbemegy (azaz a kénsavat második lépésében is erős savnak tekintjük)! Ekkor a pH:

$$\text{pH} = -\lg(2 \cdot c_0) = -\lg(2 \cdot 0,0500) = 1,000.$$

Mint látható, igen jelentős az eltérés (0,233 egység), ezért fontos figyelembe venni, hogy a kénsav második deprotonálódása egyensúlyi folyamat.

A $0,0500 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú kénsavoldat pH-ja tehát 1,233, az első lépés disszociációfoka 100%, a másodiké pedig 17,0%.

Kétértékű gyenge savak

A konszekutív (egymást követő) disszociációs reakciók egyenletei egy kétbázisú sav esetén:



Ezt a csoportot két részre lehet bontani. Az egyik csoportba tartoznak azon savak, melyek egyensúlyi állandói között nagy a különbség ($K_{s1} \gg K_{s2}$, $\text{p}K_{s1} \ll \text{p}K_{s2}$), a másikba azok, melyeknek egyensúlyi állandói hasonlóak ($K_{s1} \approx K_{s2}$, $\text{p}K_{s1} \approx \text{p}K_{s2}$). Az összefüggések kettőnél többértékű savakra is általánosíthatóak, itt azonban csak a kétértékű savakkal foglalkozunk részletesen.

a) $\text{p}K_{s1} \ll \text{p}K_{s2}$

Először nézzük azon savakat, melyek egyensúlyi állandói jelentősen eltérnek egymástól! Ebben az esetben a tiszta sav nem nagyon híg oldatában csak az első lépés a meghatározó, a további lépések olyan csekély mértékben mennek végbe, hogy elhanyagolhatóak. (Gondoljunk csak bele, az első lépésben keletkezett H^+ -ionok, a legkisebb kényszer elvének értelmében, visszaszorítják a második lépést, melynek disszociációs állandója sokkal kisebb az első lépésénél.)

Tehát a pH az első disszociációs lépésből számítható a gyenge savak pH-jánál megismert módon.

8.35. példa:

Mekkora a $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú oxálsavoldat pH-ja? $K_{s1} = 5,90 \cdot 10^{-2}$, $K_{s2} = 6,40 \cdot 10^{-5}$.

Megoldás:

Induljunk ki az első disszociációs lépésből! Ha szigorúan vesszük, a két lépést nem szabadna különválasztani, ám mivel az egyensúlyi állandók között három nagyságrendnyi a különbség, ez várhatóan nem okoz nagy hibát. Természetesen a végén le kell ellenőriznünk, hogy a második disszociációs lépés elhanyagolása tényleg nem befolyásolja-e a pH-t!

	$\text{H}_2(\text{COO})_2$	\rightleftharpoons	H^+	+	$\text{H}(\text{COO})_2^-$
Kiindulási:	0,100		0		0
Átalakul:	- x		+ x		+ x
Egyensúlyban:	$0,100 - x$		x		x

Behelyettesítve az egyensúlyi állandóba:

$$K_{s1} = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{H}(\text{COO})_2^-]}{[\text{H}_2(\text{COO})_2]} = \frac{x \cdot x}{0,100 - x} = 5,90 \cdot 10^{-2}.$$

Az egyenlet kémiailag helytálló megoldása: $x = 0,05287$.

Tehát az oldat pH-ja (csak az első disszociációs lépést figyelembe véve) 1,277.

Most ellenőrizzük le, hogy mekkora a második lépés disszociációja!

	$\text{H}(\text{COO})_2^-$	\rightleftharpoons	H^+	+	$(\text{COO})_2^{2-}$
Kiindulási:	0,05287		0,05287		0
Átalakul:	- y		+ y		+ y
Egyensúlyban:	$0,05287 - y$		$0,05287 + y$		y

Behelyettesítve az egyensúlyi állandóba, a következő eredményt kapjuk:

$$K_{s1} = \frac{[H^+] \cdot [(COO)_2^{2-}]}{[H(COO)_2^-]} = \frac{(0,05287 + y) \cdot y}{0,05287 - y} = 6,40 \cdot 10^{-5}.$$

Mivel várhatóan $y \ll 0,05287$, ezért az alábbi becsléssel élhetünk:

$$6,40 \cdot 10^{-5} = \frac{(0,05287 + y) \cdot y}{0,05287 - y} \approx \frac{0,05287 \cdot y}{0,05287} = y.$$

Tehát y értéke 10^{-5} nagyságrendű (az egyenlet pontos megoldás: $y = 6,384 \cdot 10^{-5}$), mely tényleg elhanyagolható a $0,05287$ mellett.

Így az oldat pH-ja:

$$\text{pH} = -\lg [H^+] = -\lg 0,05287 = 1,277.$$

Megjegyzés: ennél bonyolultabb módon megkapható a pontos eredmény is (lásd később), mely három tizedesjegy pontossággal megegyezik a fenti eredménnyel, eltérés csupán a negyedik tizedesjegyben van!

8.36. példa:

Mekkora a $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú foszforsavoldat pH-ja? $K_{s1} = 7,50 \cdot 10^{-3}$, $K_{s2} = 6,20 \cdot 10^{-8}$, $K_{s3} = 2,20 \cdot 10^{-13}$.

Megoldás:

A foszforsav disszociációs állandói között 5 nagyságrend különbség van, azaz a második disszociációs lépés az elsőhöz képest gyakorlatilag alig megy végbe. Az előző példához hasonlóan elegendő megoldani az első disszociációs lépéssel a feladatot.

	H_3PO_4	\rightleftharpoons	H^+	+	$H_2PO_4^-$
Kiindulási:	0,100		0		0
Átalakul:	- x		+ x		+ x
Egyensúlyban:	$0,100 - x$		x		x

Az egyensúlyi állandóba behelyettesítve:

$$K_{s1} = \frac{[H^+] \cdot [H_2PO_4^-]}{[H_3PO_4]} = \frac{x \cdot x}{0,100 - x} = 7,50 \cdot 10^{-3}.$$

Az egyenlet kémiailag releváns megoldása: $x = 0,02389$. Ebből a pH:

$$\text{pH} = -\lg [H^+] = -\lg 0,02389 = 1,622.$$

b) $\text{p}K_{s1} \approx \text{p}K_{s2}$

Kicsit bonyolultabb a helyzet, ha a két egyensúlyi állandó közel esik egymáshoz. Ekkor a két disszociációs lépés kölcsönösen hat egymásra, ezért van úgy, hogy nem lehet elhanyagolni a második disszociációs lépést sem.

Adott egy H_2A kétbázisú sav, ismerjük az egyensúlyi állandókat: K_{s1} , K_{s2} .

Írjuk fel az oldatban található anyagokat és ionokat:

- disszociálatlan H_2A ,
- egyszeresen deprotonált sav: HA^- ,
- kétszeresen deprotonált sav: A^{2-} ,
- hidrogénion: H^+ .

Most vegyük sorra, milyen összefüggéseket ismerünk:

– az első disszociációs állandó:

$$K_{s1} = \frac{[H^+] \cdot [HA^-]}{[H_2A]},$$

– a második disszociációs állandó:

$$K_{s2} = \frac{[H^+] \cdot [A^{2-}]}{[HA^-]},$$

– anyagmérleg:

$$c_0 = [H_2A] + [HA^-] + [A^{2-}],$$

– töltésmérleg (mivel a kétszeresen deprotonált sav kétszeresen negatív töltésű, be kell szorozni a koncentrációját 2-vel):

$$[H^+] = [HA^-] + 2 \cdot [A^{2-}].$$

Ezek után meg kell oldanunk a négy egyenletből álló, négyismeretlenes egyenletrendszert. Szorozzuk össze a két egyensúlyi állandót!

$$K_{s1} \cdot K_{s2} = \frac{[H^+] \cdot [HA^-]}{[H_2A]} \cdot \frac{[H^+] \cdot [A^{2-}]}{[HA^-]} = \frac{[H^+]^2 \cdot [A^{2-}]}{[H_2A]}$$

Fejezzük ki $[A^{2-}]$ -t és $[HA^-]$ -t is $[H_2A]$ segítségével (a fenti egyenletből, illetve K_{s1} -ből):

$$[A^{2-}] = \frac{K_{s1} \cdot K_{s2} \cdot [H_2A]}{[H^+]^2},$$

$$[HA^-] = \frac{K_{s1} \cdot [H_2A]}{[H^+]}$$

Behelyettesítve a kapott koncentrációkat az anyagmérleg-egyenletbe:

$$c_0 = [H_2A] + [HA^-] + [A^{2-}] = [H_2A] + \frac{K_{s1} \cdot [H_2A]}{[H^+]} + \frac{K_{s1} \cdot K_{s2} \cdot [H_2A]}{[H^+]^2},$$

$$c_0 = [H_2A] \cdot \left(1 + \frac{K_{s1}}{[H^+]} + \frac{K_{s1} \cdot K_{s2}}{[H^+]^2} \right) = [H_2A] \cdot \frac{[H^+]^2 + K_{s1} \cdot [H^+] + K_{s1} \cdot K_{s2}}{[H^+]^2}.$$

Ebből kifejezhető $[H_2A]$ a $[H^+]$ függvényében:

$$[H_2A] = \frac{c_0 \cdot [H^+]^2}{[H^+]^2 + K_{s1} \cdot [H^+] + K_{s1} \cdot K_{s2}}.$$

Ezzel kifejezhetők a $[HA^-]$ és $[A^{2-}]$ koncentrációk is:

$$[HA^-] = \frac{K_{s1} \cdot [H_2A]}{[H^+]} = \frac{K_{s1}}{[H^+]} \cdot \frac{c_0 \cdot [H^+]^2}{[H^+]^2 + K_{s1} \cdot [H^+] + K_{s1} \cdot K_{s2}} = \frac{K_{s1} \cdot c_0 \cdot [H^+]}{[H^+]^2 + K_{s1} \cdot [H^+] + K_{s1} \cdot K_{s2}},$$

$$[A^{2-}] = \frac{K_{s1} \cdot K_{s2} \cdot [H_2A]}{[H^+]^2} = \frac{K_{s1} \cdot K_{s2}}{[H^+]^2} \cdot \frac{c_0 \cdot [H^+]^2}{[H^+]^2 + K_{s1} \cdot [H^+] + K_{s1} \cdot K_{s2}} = \frac{K_{s1} \cdot K_{s2} \cdot c_0}{[H^+]^2 + K_{s1} \cdot [H^+] + K_{s1} \cdot K_{s2}}$$

A kapott eredményeket helyettesítsük bele a töltésmérlegbe:

$$[H^+] = [HA^-] + 2 \cdot [A^{2-}] = \frac{K_{s1} \cdot c_0 \cdot [H^+]}{[H^+]^2 + K_{s1} \cdot [H^+] + K_{s1} \cdot K_{s2}} + 2 \cdot \frac{K_{s1} \cdot K_{s2} \cdot c_0}{[H^+]^2 + K_{s1} \cdot [H^+] + K_{s1} \cdot K_{s2}},$$

$$[H^+] = \frac{K_{s1} \cdot c_0 \cdot [H^+] + 2 \cdot K_{s1} \cdot K_{s2} \cdot c_0}{[H^+]^2 + K_{s1} \cdot [H^+] + K_{s1} \cdot K_{s2}}.$$

A hosszadalmas és komplikált levezetés eredménye egy viszonylag bonyolult egyenlet, mely sajnálatos módon harmadfokú egyenlethez vezet. Viszont a képlet jól használható iterációra, és így könnyen, tetszőleges pontossággal meghatározhatjuk a hidrogénion-koncentrációt.

Megjegyzés: nagyon híg oldatok esetén annyival bonyolódik a helyzet, hogy még az OH^- -ionok koncentrációját is figyelembe kell venni. Ekkor a töltésmérleg így alakul:

$$[H^+] = [HA^-] + 2 \cdot [A^{2-}] + [OH^-] = [HA^-] + 2 \cdot [A^{2-}] + \frac{K_v}{[H^+]}$$

Az iterációval megoldandó egyenlet pedig egy taggal bővül:

$$[H^+] = \frac{K_{s1} \cdot c_0 \cdot [H^+] + 2 \cdot K_{s1} \cdot K_{s2} \cdot c_0}{[H^+]^2 + K_{s1} \cdot [H^+] + K_{s1} \cdot K_{s2}} + \frac{K_v}{[H^+]}$$

8.37. példa:

Határozzuk meg a $0,050 \text{ mol/dm}^3$, illetve $0,00050 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú borkősavoldat pH-ját!
 $K_{s1} = 6,00 \cdot 10^{-4}$, $K_{s2} = 1,50 \cdot 10^{-5}$.

Megoldás:

Mivel a két savi disszociációs állandó között csak egy nagyságrendnyi a különbség, ezért alkalmazzuk a fenti iterációs képletet:

$$[H^+] = \frac{K_{s1} \cdot c_0 \cdot [H^+] + 2 \cdot K_{s1} \cdot K_{s2} \cdot c_0}{[H^+]^2 + K_{s1} \cdot [H^+] + K_{s1} \cdot K_{s2}} = \frac{6,00 \cdot 10^{-4} \cdot 0,05 \cdot [H^+] + 2 \cdot 6,00 \cdot 10^{-4} \cdot 1,5 \cdot 10^{-5} \cdot 0,05}{[H^+]^2 + 6,00 \cdot 10^{-4} \cdot [H^+] + 6,00 \cdot 10^{-4} \cdot 1,50 \cdot 10^{-5}}$$

Vegyük kiindulási értéknek: $[H^+]_0 = 5,000 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3$.

Lépés	[H ⁺]	pH
[H ⁺] ₀	5,000 · 10 ⁻³	2,301
[H ⁺] ₁	5,387 · 10 ⁻³	2,269
[H ⁺] ₂	5,037 · 10 ⁻³	2,299
[H ⁺] ₃	5,352 · 10 ⁻³	2,271
[H ⁺] ₄	5,067 · 10 ⁻³	2,295
[H ⁺] ₅	5,323 · 10 ⁻³	2,274
[H ⁺] ₆	5,092 · 10 ⁻³	2,293
[H ⁺] ₇	5,300 · 10 ⁻³	2,276
[H ⁺] ₈	5,112 · 10 ⁻³	2,291
[H ⁺] ₉	5,281 · 10 ⁻³	2,277
[H ⁺] ₁₀	5,128 · 10 ⁻³	2,290
[H ⁺] ₁₁	5,266 · 10 ⁻³	2,279

Lépés	[H ⁺]	pH
[H ⁺] ₁₂	5,142 · 10 ⁻³	2,289
[H ⁺] ₁₃	5,253 · 10 ⁻³	2,280
[H ⁺] ₁₄	5,153 · 10 ⁻³	2,288
[H ⁺] ₁₅	5,244 · 10 ⁻³	2,280
[H ⁺] ₁₆	5,162 · 10 ⁻³	2,287
[H ⁺] ₁₇	5,236 · 10 ⁻³	2,281
[H ⁺] ₁₈	5,169 · 10 ⁻³	2,287
[H ⁺] ₁₉	5,229 · 10 ⁻³	2,282
[H ⁺] ₂₀	5,175 · 10 ⁻³	2,286
[H ⁺] ₂₁	5,223 · 10 ⁻³	2,282
[H ⁺] ₂₂	5,179 · 10 ⁻³	2,284
[H ⁺] ₂₃	5,219 · 10 ⁻³	2,282

Lépés	[H ⁺]	pH
[H ⁺] ₂₄	5,183 · 10 ⁻³	2,285
[H ⁺] ₂₅	5,216 · 10 ⁻³	2,283
[H ⁺] ₂₆	5,186 · 10 ⁻³	2,285
[H ⁺] ₂₇	5,213 · 10 ⁻³	2,283
[H ⁺] ₂₈	5,189 · 10 ⁻³	2,285
[H ⁺] ₂₉	5,211 · 10 ⁻³	2,283
[H ⁺] ₃₀	5,191 · 10 ⁻³	2,285
[H ⁺] ₃₁	5,209 · 10 ⁻³	2,283
[H ⁺] ₃₂	5,193 · 10 ⁻³	2,285
[H ⁺] ₃₃	5,207 · 10 ⁻³	2,283
[H ⁺] ₃₄	5,194 · 10 ⁻³	2,284
[H ⁺] ₃₅	5,206 · 10 ⁻³	2,284

Tehát 0,05 mol/dm³ bemérési koncentráció esetén a borkősavoldat pH-ja 2,284.

Számítsuk ki a pH-t úgy is, hogy csak az első lépést vesszük figyelembe!

$$K_{s1} = 6,00 \cdot 10^{-4} = \frac{[H^+]^2}{0,05 - [H^+]}$$

Az egyenlet kémiai releváns megoldása: $[H^+] = 5,185 \cdot 10^{-3}$, melyből pH = 2,285. Mint látható, ebben az esetben nem volt szükség az iterációra sem, a borkősavat egyértékű savként kezelve, a pH gyakorlatilag ugyanannyinak adódik, mint a pontos összefüggés alkalmazásával.

Most vizsgáljuk meg a hígabb oldatot is! Az oldat bemérési koncentrációja $5,0 \cdot 10^{-4}$ mol/dm³. Az iterációval megoldandó egyenlet a következő:

$$[H^+] = \frac{6,00 \cdot 10^{-4} \cdot 5 \cdot 10^{-4} \cdot [H^+] + 2 \cdot 6,00 \cdot 10^{-4} \cdot 1,5 \cdot 10^{-5} \cdot 5 \cdot 10^{-4}}{[H^+]^2 + 6,00 \cdot 10^{-4} \cdot [H^+] + 6,00 \cdot 10^{-4} \cdot 1,50 \cdot 10^{-5}}$$

Az iteráció lépése:

	[H ⁺]	pH
[H ⁺] ₀	5,000 · 10 ⁻³	2,301
[H ⁺] ₁	5,388 · 10 ⁻³	2,269
[H ⁺] ₂	5,689 · 10 ⁻³	3,245
[H ⁺] ₃	2,666 · 10 ⁻³	3,574
[H ⁺] ₄	3,707 · 10 ⁻³	3,431
[H ⁺] ₅	3,259 · 10 ⁻³	3,487
[H ⁺] ₆	3,436 · 10 ⁻³	3,464
[H ⁺] ₇	3,364 · 10 ⁻³	3,473
[H ⁺] ₈	3,393 · 10 ⁻³	3,469
[H ⁺] ₉	3,381 · 10 ⁻³	3,471
[H ⁺] ₁₀	3,386 · 10 ⁻³	3,470
[H ⁺] ₁₁	3,384 · 10 ⁻³	3,471
[H ⁺] ₁₂	3,385 · 10 ⁻³	3,471
[H ⁺] ₁₃	3,384 · 10 ⁻³	3,471

Ebben az esetben az iteráció sokkal gyorsabb, annak ellenére, hogy a kiindulási $[H^+]_0$ koncentráció távolabb van a végeredménytől, mint az előző esetben.

Tehát az $5 \cdot 10^{-4}$ mol/dm³ koncentrációjú borkősavoldat pH-ja a pontos számítás szerint 3,471.

Most vizsgáljuk meg, hogy milyen eredményt kapunk, ha egybázisú savként kezeljük a borkósavat!

$$K_{s1} = 6,00 \cdot 10^{-4} = \frac{[\text{H}^+]^2}{5 \cdot 10^{-4} - [\text{H}^+]}$$

Az egyenlet kémiailag helytálló megoldása: $[\text{H}^+] = 3,245 \cdot 10^{-4}$, így pedig a pH 3,489-nek adódik.

A kisebb koncentráció esetén az egyértékű savval történő közelítés már nem működik igazán jól, viszont a töményebb oldatok esetén a második disszociációs lépést elhanyagolhatjuk a bórsav esetében. Ennek magyarázata igen egyszerű: töményebb oldatban savasabb a pH, a nagyobb hidrogénion-koncentráció visszaszorítja a második disszociációs lépést. Az oldatot hígítva csökken a hidrogénionok koncentrációja, kevésbé szorítják vissza a második deprotonálódási folyamatot.

8.6.1.10. Sóoldatok pH-ja

Gyenge savak (bázisok) erős bázisokkal (savakkal) alkotott sóinak pH-ja

Idézzük fel a Brønsted–Lowry sav-bázis elméletet egy egyértékű gyenge sav sójának hidrolízisére:



Írjuk fel a folyamat egyensúlyi állandóját, melyet hidrolízisállandónak (K_h) is szoktunk nevezni:

$$K_h = \frac{[\text{HA}] \cdot [\text{OH}^-]}{[\text{A}^-]}$$

Nézzük meg, mi az összefüggés a HA sav disszociációs állandója és az A^- bázis hidrolízis állandója között!

$$K_s = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{A}^-]}{[\text{HA}]}$$

Szorozzuk össze K_s -t és K_h -t!

$$K_s \cdot K_h = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{A}^-]}{[\text{HA}]} \cdot \frac{[\text{HA}] \cdot [\text{OH}^-]}{[\text{A}^-]} = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{A}^-] \cdot [\text{HA}] \cdot [\text{OH}^-]}{[\text{A}^-] \cdot [\text{HA}]} = [\text{H}^+] \cdot [\text{OH}^-] = K_v$$

Tehát a hidrolízisállandó kiszámítható a víziószorzat és a savi disszociációs állandó hányadosaként. Az A^- aniont a HA sav konjugált bázisának nevezik, és a kapott hidrolízisállandó tulajdonképpen egy bázis disszociációs állandó, tehát a pH-t a gyenge bázis esetén megismert módon számíthatjuk!

$$K_h = \frac{K_v}{K_s}$$

Hasonló megfontolásokkal egy gyenge bázis sójának a pH-ját is ki tudjuk számítani:



A gyenge bázis sójának hidrolízisállandója (K_h):

$$K_h = \frac{[\text{B}] \cdot [\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{BH}^+]} = \frac{[\text{B}] \cdot [\text{H}^+]}{[\text{BH}^+]} \cdot \frac{[\text{OH}^-]}{[\text{OH}^-]} = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{OH}^-]}{\frac{[\text{BH}^+]}{[\text{B}]} \cdot [\text{OH}^-]} = \frac{K_v}{K_b}$$

Tehát a hidrolízisállandó a vízionszorzat és a disszociációs állandó hányadosa.

8.38. példa:

Mekkora a $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú nátrium-acetát-oldat pH-ja? $K_s(\text{CH}_3\text{COOH}) = 1,79 \cdot 10^{-5}$

Megoldás:

Írjuk fel az egyensúlyt táblázatos formában:

	CH_3COO^-	+	H_2O	\rightleftharpoons	CH_3COOH	+	OH^-
Kiindulási:	0,100				0		0
Átalakul:	- x				+ x		+ x
Egyensúlyban:	$0,100 - x$				x		x

A hidrolízis állandó értéke:

$$K_h = \frac{K_v}{K_s} = \frac{1,00 \cdot 10^{-14}}{1,79 \cdot 10^{-5}} = 5,587 \cdot 10^{-10}$$

Behelyettesítve a hidrolízisállandóba:

$$K_h = 5,587 \cdot 10^{-10} = \frac{[\text{CH}_3\text{COOH}] \cdot [\text{OH}^-]}{[\text{CH}_3\text{COO}^-]} = \frac{x \cdot x}{0,100 - x}$$

Az egyenlet kémiai tartalommal bíró megoldása: $x = 7,474 \cdot 10^{-6}$, mely tehát az oldat egyensúlyi hidroxidion-koncentrációja. A pOH könnyen számítható:

$$\text{pOH} = -\lg(7,474 \cdot 10^{-6}) = 5,264$$

Így az oldat pH-ja:

$$\text{pH} = 14,000 - 5,264 = 8,736$$

Érdeemes megvizsgálni, hogy a közelítő képlet milyen eredményt ad!

$$[\text{OH}^-] = \sqrt{K_h \cdot c_0} = \sqrt{\frac{K_v}{K_s} \cdot c_0} = \sqrt{\frac{1,00 \cdot 10^{-14}}{1,79 \cdot 10^{-5}} \cdot 0,100} = 7,474 \cdot 10^{-6}$$

Mint látható, a közelítő képlet kiválóan alkalmazható. Ennek oka, hogy az ecetsav konjugált bázisának (azaz az acetátióznak) nagyon kicsi a disszociációs állandója (lásd fentebb, a nagyon gyenge savak pH-jánál).

8.39. példa:

Mekkora a $0,0500 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú ammónium-klorid-oldat pH-ja? $K_b(\text{NH}_3) = 1,78 \cdot 10^{-5}$

Megoldás:

Az egyensúly táblázatos formában:

	NH_4^+	\rightleftharpoons	NH_3	+	H^+
Kiindulási:	0,0500		0		0
Átalakul:	- x		+ x		+ x
Egyensúlyban:	$0,100 - x$		x		x

A hidrolízisállandó értéke:

$$K_h = \frac{K_v}{K_b} = \frac{1,00 \cdot 10^{-14}}{1,78 \cdot 10^{-5}} = 5,618 \cdot 10^{-10},$$

$$K_h = 5,618 \cdot 10^{-10} = \frac{[\text{NH}_3] \cdot [\text{H}^+]}{[\text{NH}_4^+]} = \frac{x \cdot x}{0,0500 - x},$$

$$x = [\text{H}^+] = \sqrt{K_h \cdot c_0} = \sqrt{5,618 \cdot 10^{-10} \cdot 0,0500} = 5,300 \cdot 10^{-6}.$$

Ellenőrizzük le a disszociációfokot (szokás hidrolízisfoknak is nevezni, melyet δ -val jelölünk):

$$\delta = \frac{[\text{NH}_3]}{c_0} = \frac{5,300 \cdot 10^{-6}}{0,0500} = 1,060 \cdot 10^{-4}.$$

Mivel a hidrolízisfok igen kicsi, jogosan élhetünk az elhanyagolással. Az oldat pH-ja a hidrogénion-koncentrációból:

$$\text{pH} = -\lg(5,300 \cdot 10^{-6}) = 5,276.$$

Tehát a $0,0500 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú ammónium-klorid-oldat pH-ja 5,276.

8.40. példa:

$100,0 \text{ cm}^3$ $0,0100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú nátrium-hidroxid-oldatban feloldottunk $2,450$ gramm nátrium-cianidot.

a) Mennyivel változik meg az oldat pH-ja?

b) Mekkora lenne a pH, ha ugyanakkora térfogatú desztillált vízben oldottuk volna fel a nátrium-cianid-mintát? (Az oldat térfogatváltozásától eltekinthetünk!) $K_s(\text{HCN}) = 4,90 \cdot 10^{-10}$, $M(\text{NaCN}) = 49,0 \text{ g/mol}$.

Megoldás:

A $0,0100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú nátrium-hidroxid-oldat pH-ja:

$$\text{pH} = 14,000 - \text{pOH} = 14,000 + \lg(0,0100) = 12,000.$$

Számítsuk ki a nátrium-cianid bemérési koncentrációját!

$$c_0(\text{NaCN}) = \frac{n}{V} = \frac{m}{M \cdot V} = \frac{2,450}{49,0 \cdot 0,1000} \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3} = 0,500 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}$$

A nátrium-hidroxid visszaszorítja a nátrium-cianid hidrolízisét. Az egyensúlyi táblázat első sorában fel kell tüntetnünk a nátrium-hidroxid-koncentrációt is ($[\text{OH}^-]_0 = 0,0100 \text{ mol/dm}^3$):

	CN^-	+	H_2O	\rightleftharpoons	HCN	+	OH^-
Kiindulási:	0,500				0		0,0100
Átalakul:	- x				+ x		+ x
Egyensúlyban:	0,500 - x				x		0,0100 + x

A cianidion hidrolízisállandója:

$$K_h = \frac{K_v}{K_b} = \frac{1,00 \cdot 10^{-14}}{4,90 \cdot 10^{-10}} = 2,041 \cdot 10^{-5}.$$

Behelyettesítve a táblázat adatait az egyensúlyi állandóba:

$$K_h = 2,041 \cdot 10^{-5} = \frac{[\text{HCN}] \cdot [\text{OH}^-]}{[\text{CN}^-]} = \frac{x \cdot (0,0100 + x)}{0,500 - x}.$$

Az egyenlet kémiailag is helyes megoldása: $x = 9,317 \cdot 10^{-4}$. Így az oldat hidroxidion-koncentrációja:

$$[\text{OH}^-] = 0,0100 + x = 0,0100 + 9,317 \cdot 10^{-4} = 0,0109317 \text{ mol/dm}^3.$$

Így az oldat pH-ja:

$$\text{pH} = 14,000 - \text{pOH} = 14,000 + \lg(0,0109317) = 12,039.$$

Tehát 0,039 egységgel növekszik az oldat pH-ja.

Amennyiben desztillált vízben oldjuk fel a mintát, a következőképpen írhatjuk fel az egyensúlyt:

	CN^-	+	H_2O	\rightleftharpoons	HCN	+	OH^-
Kiindulási:	0,500				0		0
Átalakul:	- y				+ y		+ y
Egyensúlyban:	0,500 - y				y		y

Behelyettesítve a táblázat adatait az egyensúlyi állandóba:

$$K_h = 2,041 \cdot 10^{-5} = \frac{[\text{HCN}] \cdot [\text{OH}^-]}{[\text{CN}^-]} = \frac{y \cdot y}{0,500 - y}.$$

Az egyenlet kémiailag is helyes megoldása: $x = 3,184 \cdot 10^{-3}$. Így az oldat hidroxidion-koncentrációja:

$$[\text{OH}^-] = y = 3,184 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3.$$

Így az oldat pH-ja:

$$\text{pH} = 14,000 - \text{pOH} = 14,000 + \lg(3,184 \cdot 10^{-3}) = 11,503.$$

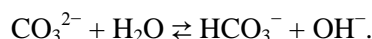
Tehát a 12,000 pH-jú nátrium-hidroxid-oldat pH-ja 0,039 egységgel növekszik. Ha az adott mennyiségű nátrium-cianidot desztillált vízben oldjuk, akkor a pH 11,503 lesz.

8.41. példa:

Mekkora a $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú nátrium-karbonát-oldat pH-ja? $K_{s1} = 4,30 \cdot 10^{-7}$, $K_{s2} = 5,60 \cdot 10^{-11}$.

Megoldás:

A nátrium-karbonát hidrolízisének (meghatározó) egyenlete:



Mivel a disszociációs állandók között nagy a különbség, elegendő csak a fenti egyensúlyt számítani:

	CO_3^{2-}	+	H_2O	\rightleftharpoons	HCO_3^-	+	OH^-
Kiindulási:	0,100				0		0
Átalakul:	- x				+ x		+ x
Egyensúlyban:	$0,100 - x$				x		x

A folyamat egyensúlyi állandója:

$$K_{h2} = \frac{K_v}{K_{s2}} = \frac{1,00 \cdot 10^{-14}}{5,60 \cdot 10^{-11}} = 1,786 \cdot 10^{-4}.$$

Felírható így az alábbi egyenlet:

$$K_{h2} = 1,786 \cdot 10^{-4} = \frac{[\text{HCO}_3^-] \cdot [\text{OH}^-]}{[\text{CO}_3^{2-}]} = \frac{x \cdot x}{0,100 - x}.$$

Az egyenlet megoldása: $x = 4,137 \cdot 10^{-4}$. Az oldat pH-ja:

$$\text{pH} = 14,000 - \text{pOH} = 14,000 + \lg(4,137 \cdot 10^{-4}) = 11,617.$$

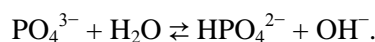
Tehát a $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú nátrium-foszfát-oldat pH-ja 11,617.

8.42. példa:

Mekkora a $0,1000 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú kálium-foszfát-oldat pH-ja? $K_{s1} = 7,50 \cdot 10^{-3}$, $K_{s2} = 6,20 \cdot 10^{-8}$, $K_{s3} = 2,20 \cdot 10^{-13}$.

Megoldás:

A nátrium-foszfát hidrolízisének (meghatározó) egyenlete:



Mivel a disszociációs állandók között nagy a különbség, elegendő csak a fenti egyensúlyt számítani:

	PO_4^{3-}	+	H_2O	\rightleftharpoons	HPO_4^{2-}	+	OH^-
Kiindulási:	0,100				0		0
Átalakul:	- x				+ x		+ x
Egyensúlyban:	$0,100 - x$				x		x

A folyamat egyensúlyi állandója:

$$K_{h3} = \frac{K_v}{K_{s3}} = \frac{1,00 \cdot 10^{-14}}{2,20 \cdot 10^{-13}} = 4,545 \cdot 10^{-2}.$$

Mivel az egyensúlyi állandó igen nagy, feltételezhetően nem alkalmazhatjuk a közelítő képletet, hanem az alábbi másodfokú egyenletet kell megoldanunk:

$$K_{h3} = 4,545 \cdot 10^{-2} = \frac{[\text{HPO}_4^{2-}] \cdot [\text{OH}^-]}{[\text{PO}_4^{3-}]} = \frac{x \cdot x}{0,100 - x}.$$

Az egyenlet megoldása: $x = 4,842 \cdot 10^{-2}$. Az oldat pH-ja:

$$\text{pH} = 14,000 - \text{pOH} = 14,000 + \lg(4,842 \cdot 10^{-2}) = 12,685.$$

Így a 0,100 mol/dm³ koncentrációjú trikálium-foszfát-oldat pH-ja 12,685.

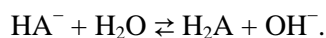
Savanyú sók pH-ja

A savanyú sók pH-ját kicsit bonyolultabban lehet meghatározni, mint az egyszerű sók pH-ját. Kezdjük először egy kétértékű sav savanyú sójával, melynek általános képlete legyen NaHA.

A HA⁻ egyrészt disszociál:



Másrészt hidrolizál:



Vegyük sorra, milyen ionok és molekulák találhatók az oldatban!

- Na⁺-ion,
- HA⁻-ion,
- H₂A (disszociálatlan sav, a HA⁻-ion protonálódásával keletkezik),
- A²⁻ (a HA⁻-ion disszociációjával keletkezik),
- H⁺-ion,
- OH⁻-ion.

Most pedig vizsgáljuk meg, milyen összefüggések állnak fenn az egyes részecskék között!

– Első disszociációs állandó:

$$K_{s1} = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{HA}^-]}{[\text{H}_2\text{A}]}.$$

– Második disszociációs állandó:

$$K_{s2} = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{A}^{2-}]}{[\text{HA}^-]}.$$

– Anyagmérleg:

$$c_0 = [\text{Na}^+] = [\text{H}_2\text{A}] + [\text{HA}^-] + [\text{A}^{2-}].$$

– Töltésmérleg:

$$[\text{Na}^+] + [\text{H}^+] = [\text{HA}^-] + 2 \cdot [\text{A}^{2-}] + [\text{OH}^-].$$

– Víziionszorzat:

$$K_v = [\text{H}^+] \cdot [\text{OH}^-].$$

Fejezzük ki K_{s1} és K_{s2} állandókkal H_2A és A^{2-} koncentrációját HA^- koncentrációjának segítségével (mivel az oldat túlnyomórészt HA^- -t tartalmaz, a másik két anyag koncentrációját célszerű ezzel kifejezni)!

$$[\text{H}_2\text{A}] = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{HA}^-]}{K_{s1}}$$

$$[\text{A}^{2-}] = \frac{K_{s2} \cdot [\text{HA}^-]}{[\text{H}^+]}$$

A hidroxidionok koncentrációját kifejezhetjük a víziionszorzatból:

$$[\text{OH}^-] = \frac{K_v}{[\text{H}^+]}$$

Írjuk be a Na^+ -ionok koncentrációját az anyagmérlegből a töltésmérlegbe!

$$[\text{Na}^+] + [\text{H}^+] = [\text{HA}^-] + 2 \cdot [\text{A}^{2-}] + [\text{OH}^-], \quad [\text{Na}^+] = [\text{H}_2\text{A}] + [\text{HA}^-] + [\text{A}^{2-}]$$

Ekkor a következő egyenletet kapjuk:

$$[\text{H}_2\text{A}] + [\text{HA}^-] + [\text{A}^{2-}] + [\text{H}^+] = [\text{HA}^-] + 2 \cdot [\text{A}^{2-}] + [\text{OH}^-].$$

Rendezve az egyenletet:

$$[\text{H}_2\text{A}] + [\text{H}^+] = [\text{A}^{2-}] + [\text{OH}^-].$$

Helyettesítsük be H_2A , A^{2-} és OH^- koncentrációját!

$$\frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{HA}^-]}{K_{s1}} + [\text{H}^+] = \frac{K_{s2} \cdot [\text{HA}^-]}{[\text{H}^+]} + \frac{K_v}{[\text{H}^+]}$$

Szorozzuk végig az egyenletet $K_{s1} \cdot [\text{H}^+]$ -val:

$$[\text{H}^+]^2 \cdot [\text{HA}^-] + [\text{H}^+]^2 \cdot K_{s1} = K_{s1} K_{s2} \cdot [\text{HA}^-] + K_{s1} \cdot K_v.$$

Fejezzük ki $[\text{H}^+]$ -t!

$$[\text{H}^+]^2 \cdot ([\text{HA}^-] + K_{s1}) = K_{s1} K_{s2} \cdot [\text{HA}^-] + K_{s1} \cdot K_v$$

Így a hidrogénion-koncentrációra a következő képletet kapjuk:

$$[\text{H}^+] = \sqrt{\frac{K_{s1} K_{s2} \cdot [\text{HA}^-] + K_{s1} \cdot K_v}{[\text{HA}^-] + K_{s1}}}$$

Mivel az oldatban HA^- protonálódása, illetve deprotonálódása rendszerint nem túl jelentős, HA^- koncentrációja jól közelíthető a só bemérési koncentrációjával:

$$[\text{HA}^-] \approx c_0,$$

$$[\text{H}^+] \approx \sqrt{\frac{K_{s1} \cdot (K_{s2} \cdot c_0 + K_v)}{c_0 + K_{s1}}}$$

A fenti képlet elnevezése: savanyúsó-képlet.

Vizsgáljuk meg az egyenletet alaposabban! Ha a só koncentrációja jóval nagyobb, mint az első disszociációs állandó ($c_0 \gg K_{s1}$), akkor ez utóbbi elhanyagolható a nevezőben. Hasonlóan, ha $K_{s2} \cdot c_0 \gg K_v$, a számlálóban is elhanyagolható $K_{s1} \cdot K_v$. Ezek a feltételezések igen gyakran helytállóak, így a következő képletet gyakran alkalmazhatjuk savanyú sók hidrogénion-koncentrációjának kiszámítására:

$$[\text{H}^+] \approx \sqrt{\frac{K_{s1} \cdot (K_{s2} \cdot c_0 + K_v)}{c_0 + K_{s1}}} \approx \sqrt{\frac{K_{s1} \cdot K_{s2} \cdot c_0}{c_0}} = \sqrt{K_{s1} \cdot K_{s2}}$$

Tehát egy kétértékű gyenge savból származó savanyú só pH-ja közelítőleg:

$$\text{pH} = -\lg[\text{H}^+] \approx -\lg \sqrt{K_{s1} \cdot K_{s2}} = -\frac{\lg(K_{s1} \cdot K_{s2})}{2} = -\frac{\lg K_{s1} + \lg K_{s2}}{2} = \frac{\text{p}K_{s1} + \text{p}K_{s2}}{2}$$

Egy kétértékű sav savanyú sóján pH-ja megbecsülhető a két $\text{p}K_s$ érték átlagaként:

$$\text{pH} \approx \frac{\text{p}K_{s1} + \text{p}K_{s2}}{2}$$

Természetesen nemcsak kétbázisú savaknak léteznek savanyú sói, hanem három- vagy többértékű savaknak is. Például egy háromértékű sav esetén kétféle savanyú nátriumsó is feltételezhető: NaH_2A és Na_2HA (az elsőt primer sónak, a másodikat szekunder sónak nevezzük, a tercier só pedig Na_3A). A savanyúsó-képlet segítségével a primer és szekunder sók pH-ját is számíthatjuk:

Primer sók esetén:

$$[\text{H}^+] \approx \sqrt{\frac{K_{s1} \cdot (K_{s2} \cdot c_0 + K_v)}{c_0 + K_{s1}}} \approx \sqrt{K_{s1} \cdot K_{s2}} \Rightarrow \text{pH} \approx \frac{\text{p}K_{s1} + \text{p}K_{s2}}{2}$$

Szekunder sók esetén:

$$[\text{H}^+] \approx \sqrt{\frac{K_{s2} \cdot (K_{s3} \cdot c_0 + K_v)}{c_0 + K_{s2}}} \approx \sqrt{K_{s2} \cdot K_{s3}} \Rightarrow \text{pH} \approx \frac{\text{p}K_{s2} + \text{p}K_{s3}}{2}$$

8.43. példa:

Mekkora a $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú nátrium-hidrogén-karbonát-oldat pH-ja? $K_{s1} = 4,30 \cdot 10^{-7}$, $K_{s2} = 5,60 \cdot 10^{-11}$.

Megoldás:

Alkalmazzuk a savanyúsó-képletet!

$$[\text{H}^+] = \sqrt{\frac{K_{s1} \cdot (K_{s2} \cdot c_0 + K_v)}{c_0 + K_{s1}}} = \sqrt{\frac{4,30 \cdot 10^{-7} \cdot 5,60 \cdot 10^{-11} \cdot 0,100 + 4,30 \cdot 10^{-7} \cdot 10^{-14}}{0,100 + 4,30 \cdot 10^{-7}}} = 4,912 \cdot 10^{-9}$$

Így a pH:

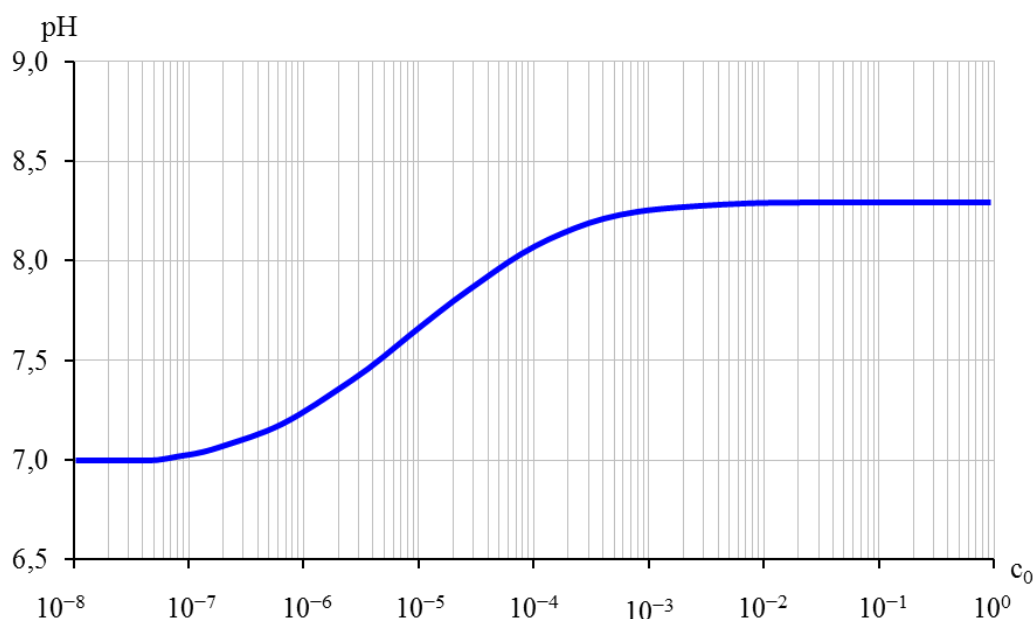
$$\text{pH} = -\lg[\text{H}^+] = -\lg(4,912 \cdot 10^{-9}) = 8,309.$$

Most becsüljük meg a pH-t a közelítő képlet segítségével is:

$$\text{pH} \approx \frac{\text{p}K_{s1} + \text{p}K_{s2}}{2} = -\frac{\lg K_{s1} + \lg K_{s2}}{2} = -\frac{\lg(4,30 \cdot 10^{-7}) + \lg(5,60 \cdot 10^{-11})}{2} = 8,309.$$

Tehát a képlet kiválóan alkalmazható! A $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú nátrium-hidrogén-karbonát-oldat pH-ja 8,309. Érdekes megjegyezni, hogy a nátrium-hidrogén-karbonát neve alapján savanyú só ugyan, de vizes oldatának kémhatása lúgos! Ennek oka, hogy a szénsav második disszociációs lépésének egyensúlyi állandója ($K_{s2} = 5,60 \cdot 10^{-11}$) sokkal kisebb, mint a hidrogén-karbonát-ion hidrolízisállandója ($2,326 \cdot 10^{-8}$).

A következő diagramon a különböző koncentrációjú nátrium-hidrogén-karbonát-oldatok pH-ját ábrázoltuk (mindenhol az elhanyagolások nélküli képletet használtuk):



8.6.1.10.1. ábra: Nátrium-hidroxid-oldat pH-ja a koncentráció függvényében

Mint látható, egészen $c_0 = 10^{-3} \text{ mol/dm}^3$ koncentrációig a pH gyakorlatilag független a koncentrációtól, ebben a tartományban $\text{pH} = 8,309$. Az igen híg oldatok pH-ja értelemszerűen 7 körüli.

8.44. példa:

Állapítsuk meg a $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú KH_2PO_4 - és K_2HPO_4 -oldatok pH-ját! $K_{s1} = 7,50 \cdot 10^{-3}$, $K_{s2} = 6,20 \cdot 10^{-8}$, $K_{s3} = 2,20 \cdot 10^{-13}$.

Megoldás:

Ismét a savanyúsó-képletet kell alkalmazni:

A primer foszfát pH-ja:

$$[\text{H}^+] = \sqrt{\frac{K_{s1} \cdot (K_{s2} \cdot c_0 + K_v)}{c_0 + K_{s1}}} = \sqrt{\frac{7,50 \cdot 10^{-3} \cdot (6,20 \cdot 10^{-8} \cdot 0,1 + 10^{-14})}{0,1 + 7,50 \cdot 10^{-3}}} = 2,080 \cdot 10^{-5},$$

$$\text{pH} = -\lg[\text{H}^+] = -\lg(2,080 \cdot 10^{-5}) = 4,682$$

Nézzük meg, mennyiben tér el a pH, ha a közelítő képletet alkalmazzuk!

$$\text{pH} \approx \frac{\text{p}K_{s1} + \text{p}K_{s2}}{2} = -\frac{\lg K_{s1} + \lg K_{s2}}{2} = -\frac{\lg(7,50 \cdot 10^{-3}) + \lg(6,20 \cdot 10^{-8})}{2} = 4,666.$$

A szekunder foszfát pH-ja:

$$[\text{H}^+]_2 = \sqrt{\frac{K_{s2} \cdot (K_{s3} \cdot c_0 + K_v)}{c_0 + K_{s2}}} = \sqrt{\frac{6,20 \cdot 10^{-8} \cdot (2,20 \cdot 10^{-13} \cdot 0,1 + 10^{-14})}{0,1 + 6,20 \cdot 10^{-8}}} = 1,409 \cdot 10^{-10},$$

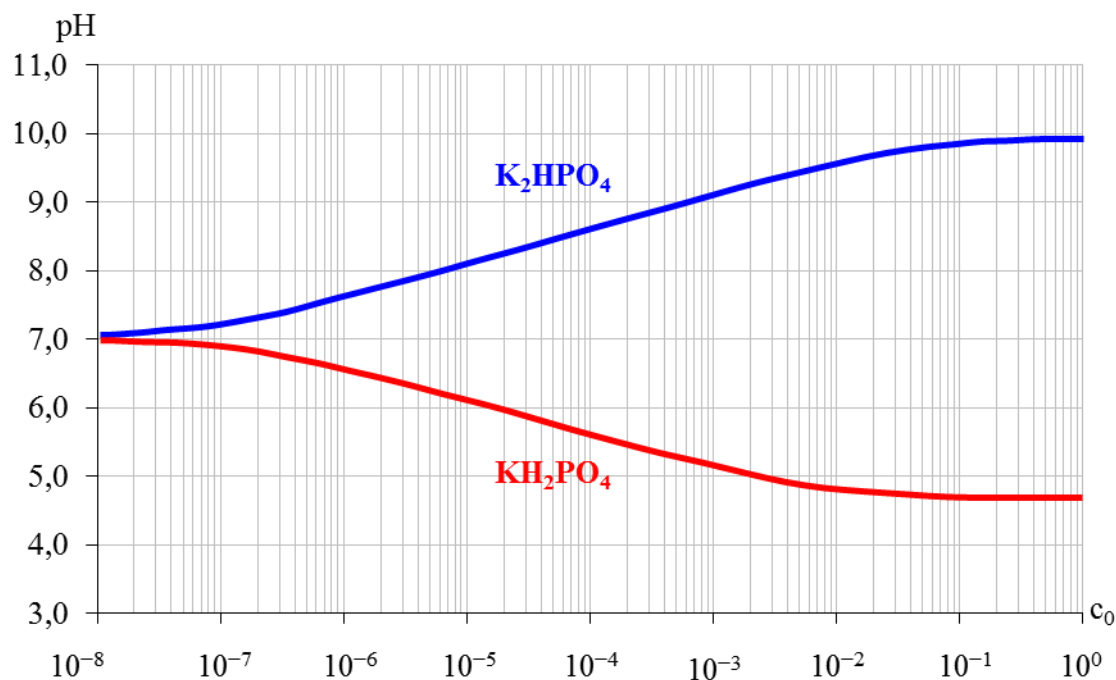
$$\text{pH} = -\lg[\text{H}^+] = -\lg(1,409 \cdot 10^{-10}) = 9,851.$$

Közelítő képlettel:

$$\text{pH} \approx \frac{\text{p}K_{s2} + \text{p}K_{s3}}{2} = -\frac{\lg K_{s2} + \lg K_{s3}}{2} = -\frac{\lg(6,20 \cdot 10^{-8}) + \lg(2,20 \cdot 10^{-13})}{2} = 9,933.$$

Tehát a 0,100 mol/dm³ koncentrációjú KH₂PO₄-oldat pH-ja 4,682, a K₂HPO₄-oldaté pedig 9,851. A közelítő képletek igen hasonló eredményt adnak: 4,666, és 9,933.

A következő ábrán megfigyelhető a KH₂PO₄-, illetve K₂HPO₄-oldatok pH-jának koncentrációfüggése.



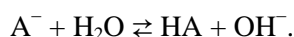
8.6.1.10.2. ábra: KH_2PO_4 , illetve K_2HPO_4 -oldatok pH-ja a koncentráció függvényében

Gyenge sav és gyenge bázis sójának pH-ja

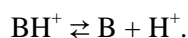
Az előzőekben megvizsgáltuk a gyenge sav erős bázissal és a gyenge bázis erős savval alkotott sójának, valamint a savanyú sóknak a pH-ját. Most pedig nézzük meg, mi történik, ha a kation és az anion is hidrolizál!

Legyen a só képlete $(BH^+)(A^-)$, ahol BH^+ egy gyenge bázis kationja, A^- pedig egy gyenge sav savmaradék anionja. Az alábbi hidrolízisfolyamatok mehetnek végbe:

Az anion hidrolízise:



A kation hidrolízise:



Ismét érdemes összegyűjteni az oldatban fellelhető molekulákat és ionokat, valamint az összefüggéseket:

Oldott részecskék	Összefüggések:
– A^- -ion: $[A^-]$,	– Savi disszociációs állandó:
– BH^+ -ion: $[BH^+]$,	$K_s = \frac{[H^+] \cdot [A^-]}{[HA]}$
– HA sav: $[HA]$,	– Bázis disszociációs állandó:
– B bázis: $[B]$,	$K_b = \frac{[BH^+] \cdot [OH^-]}{[B]}$

<p>– H⁺-ion: [H⁺],</p> <p>– OH⁻-ion: [OH⁻].</p>	<p>– Víziionszorzat: K_v = [H⁺] · [OH⁻]</p> <p>– Anyagmérlegek: c₀ = [BH⁺] + [B], c₀ = [HA] + [A⁻]</p> <p>– Töltésmérleg: [H⁺] + [BH⁺] = [A⁻] + [OH⁻]</p>
---	--

Induljunk ki a töltésmérlegből!

$$[\text{H}^+] = [\text{A}^-] + [\text{OH}^-] - [\text{BH}^+]$$

Fejezzük ki az anyagmérlegből [BH⁺] koncentrációt és írjuk bele a fenti egyenletbe:

$$[\text{BH}^+] = [\text{HA}] + [\text{A}^-] - [\text{B}].$$

Behelyettesítve:

$$[\text{H}^+] = [\text{A}^-] + [\text{OH}^-] - [\text{BH}^+] = [\text{A}^-] + [\text{OH}^-] - ([\text{HA}] + [\text{A}^-] - [\text{B}]) = [\text{A}^-] + [\text{OH}^-] - [\text{HA}] - [\text{A}^-] + [\text{B}]$$

Egyszerűsítve:

$$[\text{H}^+] = [\text{OH}^-] - [\text{HA}] + [\text{B}].$$

Most fejezzük ki [HA] és [B] koncentrációkat (szabad sav, illetve bázis koncentrációja) az egyensúlyi állandók segítségével!

$$[\text{HA}] = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{A}^-]}{K_s}$$

Hasonlóan:

$$[\text{B}] = \frac{[\text{BH}^+] \cdot [\text{OH}^-]}{K_b}$$

Ezeket az összefüggéseket helyettesítsük be a fenti egyenletbe:

$$[\text{H}^+] = [\text{OH}^-] - [\text{HA}] + [\text{B}] = [\text{OH}^-] - \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{A}^-]}{K_s} + \frac{[\text{BH}^+] \cdot [\text{OH}^-]}{K_b}$$

Küszöböljük ki a hidroxidion-koncentrációt a víziionszorzat segítségével!

$$[\text{OH}^-] = \frac{K_v}{[\text{H}^+]}$$

Behelyettesítve:

$$[\text{H}^+] = [\text{OH}^-] - \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{A}^-]}{K_s} + \frac{[\text{BH}^+] \cdot [\text{OH}^-]}{K_b} = \frac{K_v}{[\text{H}^+]} - \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{A}^-]}{K_s} + \frac{[\text{BH}^+]}{K_b} \cdot \frac{K_v}{[\text{H}^+]}$$

Rendezve az egyenletet:

$$[\text{H}^+] = \frac{K_v}{[\text{H}^+]} - \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{A}^-]}{K_s} + \frac{[\text{BH}^+] \cdot \frac{K_v}{K_b}}{[\text{H}^+]}$$

Szorozzuk végig az egyenletet a $K_s \cdot [\text{H}^+]$ kifejezéssel:

$$[\text{H}^+]^2 \cdot K_s = K_s \cdot K_v - [\text{H}^+]^2 \cdot [\text{A}^-] + K_s \cdot \frac{K_v}{K_b} \cdot [\text{BH}^+]$$

Átrendezve az egyenletet, a következő összefüggést kapjuk:

$$[\text{H}^+]^2 \cdot ([\text{A}^-] + K_s) = K_s \cdot \frac{K_v}{K_b} \cdot [\text{BH}^+] + K_s \cdot K_v$$

Fejezzük ki $[\text{H}^+]$ -t:

$$[\text{H}^+] = \sqrt{\frac{K_s \cdot \frac{K_v}{K_b} \cdot [\text{BH}^+] + K_s \cdot K_v}{[\text{A}^-] + K_s}}$$

Feltételezhetjük, hogy egyik ion (BH^+ , A^-) hidrolízise sem olyan jelentős, hogy a kiindulási ionkoncentrációt megváltoztassa, így a következő közelítéssel élhetünk:

$$[\text{BH}^+] \approx c_0 \text{ és } [\text{A}^-] \approx c_0$$

Így a következő képletet nyerjük:

$$[\text{H}^+] = \sqrt{\frac{K_s \cdot \frac{K_v}{K_b} \cdot c_0 + K_s \cdot K_v}{c_0 + K_s}}$$

Az így kapott kifejezéssel bármely egyszerű só pH-ját számítani tudjuk. Érdeemes megfigyelni, hogy a fenti egyenlet rendkívül hasonlít a savanyúsó-képletéhez! Közvetlenül megkaphatjuk a savanyúsó-képletből, ha K_{s1} helyére a sav disszociációs állandóját, K_{s2} helyére pedig a bázis konjugált savának disszociációs állandóját, azaz a bázis hidrolízisállandóját helyettesítjük.

A savanyúsó-képlethez hasonlóan itt is egyszerűsítéseket vezethetünk be. Amennyiben $c_0 \gg K_s$, és $K_s \cdot K_v$ elhanyagolható a számlálóban, a következő képletet kapjuk eredményül:

$$[\text{H}^+] = \sqrt{\frac{K_s \cdot \frac{K_v}{K_b} \cdot c_0 + K_s \cdot K_v}{c_0 + K_s}} \approx \sqrt{\frac{K_s \cdot \frac{K_v}{K_b} \cdot c_0}{c_0}} = \sqrt{K_s \cdot \frac{K_v}{K_b}}$$

Így a pH közelítő képlete:

$$\text{pH} = -\lg[\text{H}^+] \approx -\lg \sqrt{K_s \cdot \frac{K_v}{K_b}} = \frac{(-\lg K_s) + (-\lg K_v) - (-\lg K_b)}{2} = \frac{\text{p}K_s + \text{p}K_v - \text{p}K_b}{2}.$$

8.45. példa:

Mekkora a 0,100 mol/dm³ koncentrációjú ammónium-formiát- és ammónium-acetát-oldat pH-ja?

$$K_s(\text{HCOOH}) = 1,78 \cdot 10^{-4}, K_s(\text{CH}_3\text{COOH}) = 1,79 \cdot 10^{-5}, K_b(\text{NH}_3) = 1,78 \cdot 10^{-5}.$$

Megoldás:

Az ammónium-formiát esetén a fenti képletet alkalmazva:

$$[\text{H}^+] = \sqrt{\frac{K_s \cdot \frac{K_v}{K_b} \cdot c_0 + K_s \cdot K_v}{c_0 + K_s}} = \sqrt{\frac{1,78 \cdot 10^{-4} \cdot \frac{10^{-14}}{1,78 \cdot 10^{-5}} \cdot 0,100 + 1,78 \cdot 10^{-4} \cdot 10^{-14}}{0,100 + 1,78 \cdot 10^{-4}}} = 3,160 \cdot 10^{-7}.$$

Az oldat pH-ja:

$$\text{pH} = -\lg[\text{H}^+] = -\lg(3,160 \cdot 10^{-7}) = 6,500.$$

A közelítő képlet alkalmazásával:

$$\text{pH} \approx \frac{\text{p}K_s + \text{p}K_v - \text{p}K_b}{2} = \frac{(-\lg K_s) + (-\lg K_v) - (-\lg K_b)}{2} = \frac{3,750 + 14,000 - 4,750}{2} = 6,500.$$

A 0,100 mol/dm³ koncentrációjú ammónium-acetát pH-ja:

$$[\text{H}^+] = \sqrt{\frac{K_s \cdot \frac{K_v}{K_b} \cdot c_0 + K_s \cdot K_v}{c_0 + K_s}} = \sqrt{\frac{1,79 \cdot 10^{-5} \cdot \frac{10^{-14}}{1,78 \cdot 10^{-5}} \cdot 0,100 + 1,79 \cdot 10^{-5} \cdot 10^{-14}}{0,100 + 1,79 \cdot 10^{-5}}} = 1,003 \cdot 10^{-7}.$$

Ebből adódóan az ammónium-acetát pH-ja:

$$\text{pH} = -\lg[\text{H}^+] = -\lg(1,003 \cdot 10^{-7}) = 6,999.$$

A közelítő képlet segítségével:

$$\text{pH} \approx \frac{\text{p}K_s + \text{p}K_v - \text{p}K_b}{2} = \frac{(-\lg K_s) + (-\lg K_v) - (-\lg K_b)}{2} = \frac{3,747 + 14,000 - 4,750}{2} = 6,999.$$

A 0,100 mol/dm³ koncentrációjú ammónium-formiát-oldat pH-ja 6,500, az azonos koncentrációjú ammónium-acetát-oldaté pedig 6,999. Mindkét oldat gyakorlatilag semlegesnek tekinthető, ennek oka, hogy mindkét szerves sav és az ammónia disszociációs állandója is hasonló nagyságrendű. A hangyasav valamelyest erősebb sav, mint amennyire az ammónia erős bázis, ezért az ammóniumion hidrolízise kicsit nagyobb mértékű, mint a formiátioné, ezért az ammónium-formiát pH-ja a savas tartományban van.

8.46. példa:

Mekkora a következő oldatok pH-ja?

- 0,100 mol/dm³ koncentrációjú (NH₄)₂PO₄,
- 0,100 mol/dm³ koncentrációjú (NH₄)₂HPO₄,
- 0,100 mol/dm³ koncentrációjú K(NH₄)HPO₄,

- d) $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú $(\text{NH}_4)_3\text{PO}_4$,
e) $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú $\text{K}(\text{NH}_4)_2\text{PO}_4$,
f) $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú $\text{K}_2(\text{NH}_4)\text{PO}_4$?

Az ammónia és a foszforsav disszociációs állandói: $K_b(\text{NH}_3) = 1,78 \cdot 10^{-5}$, $K_{s1} = 7,50 \cdot 10^{-3}$,
 $K_{s2} = 6,20 \cdot 10^{-8}$, $K_{s3} = 2,20 \cdot 10^{-13}$.

Megoldás:

A fentiekhez hasonlóan írjuk fel az összefüggéseket az egyensúlyi állandók, az anyagmérleg és a töltésmérleg segítségével! Ezután oldjuk meg az egyenletet a fentiekkel analóg módon, ekkor a következő szempontokat érdemes követni:

– bizonyos, feltételezhetően kis koncentrációjú anyagok koncentrációit elhanyagolhatjuk. Például az $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$ esetén a PO_4^{3-} -ionok koncentrációja várhatóan igen csekély (az oldat pH-ja várhatóan 7 alatti).

– az oldatban található ionok és molekulák közül érdemes megállapítani, hogy várhatóan melyek lesznek jelen nagyobb és melyek kisebb koncentrációban. Támponként érdemes megjegyezni, hogy a vegyületet alkotó ionok várhatóan igen nagy koncentrációban lesznek jelen. Például az $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$ esetén az NH_4^+ - és H_2PO_4^- -ionok koncentrációját tekinthetjük a bemérési koncentrációnak, és a disszociációval, illetve hidrolízissel keletkező NH_3 , H_3PO_4 , HPO_4^- részecskék koncentrációja sokkal kisebb ennél.

– fejezzük ki a kisebb koncentrációjú részecskék koncentrációját az egyensúlyi állandókból úgy, hogy a végén a só alkotó főbb ionok bemérési koncentrációjával kifejezhessük ezeket.

– a kisebb koncentrációjú részecskék fenti módon kifejezett koncentrációját helyettesítsük be a töltésmérleg és anyagmérleg egyenleteibe, és fejezzük ki a H^+ -ionok koncentrációját!

a) $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$ -oldat:

Oldott részecskék	Összefüggések:
– NH_4^+ -ion: $[\text{NH}_4^+] \approx c_0$,	– Bázis disszociációs állandó:
– H_2PO_4^- -ion: $[\text{H}_2\text{PO}_4^-] \approx c_0$,	$K_b = \frac{[\text{NH}_4^+] \cdot [\text{OH}^-]}{[\text{NH}_3]} \approx \frac{c_0 \cdot [\text{OH}^-]}{[\text{NH}_3]} \Rightarrow [\text{NH}_3] \approx \frac{c_0 \cdot [\text{OH}^-]}{K_b},$
– ammónia: $[\text{NH}_3]$,	– Savi disszociációs állandók:
– foszforsav: $[\text{H}_3\text{PO}_4]$,	$K_{s1} = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{H}_2\text{PO}_4^-]}{[\text{H}_3\text{PO}_4]} \approx \frac{[\text{H}^+] \cdot c_0}{[\text{H}_3\text{PO}_4]} \Rightarrow [\text{H}_3\text{PO}_4] \approx \frac{[\text{H}^+] \cdot c_0}{K_{s1}},$
– HPO_4^{2-} -ion: $[\text{HPO}_4^{2-}]$,	$K_{s2} = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{HPO}_4^{2-}]}{[\text{H}_2\text{PO}_4^-]} \approx \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{HPO}_4^{2-}]}{c_0}$
– PO_4^{3-} -ion: $[\text{PO}_4^{3-}] \approx 0$,	$\Rightarrow [\text{HPO}_4^{2-}] \approx \frac{K_{s2} \cdot c_0}{[\text{H}^+]},$
– H^+ -ion: $[\text{H}^+]$,	– Víziionszorzat:
– OH^- -ion: $[\text{OH}^-]$.	$K_v = [\text{H}^+] \cdot [\text{OH}^-] \Rightarrow [\text{OH}^-] = \frac{K_v}{[\text{H}^+]},$
	– Anyagmérlegek:
	$c_0 = [\text{NH}_4^+] + [\text{NH}_3],$
	$c_0 = [\text{H}_3\text{PO}_4] + [\text{H}_2\text{PO}_4^-] + [\text{HPO}_4^{2-}] + [\text{PO}_4^{3-}] \approx$
	$\approx [\text{H}_3\text{PO}_4] + [\text{H}_2\text{PO}_4^-] + [\text{HPO}_4^{2-}],$
	– Töltésmérleg:
	$[\text{H}^+] + [\text{NH}_4^+] = [\text{H}_2\text{PO}_4^-] + 2 \cdot [\text{HPO}_4^{2-}] + 3 \cdot [\text{PO}_4^{3-}] + [\text{OH}^-] \approx$
	$\approx [\text{H}_2\text{PO}_4^-] + 2 \cdot [\text{HPO}_4^{2-}] + [\text{OH}^-].$

A töltésmérlegből és az anyagmérleg-egyenletekből:

$$[\text{H}^+] + c_0 - [\text{NH}_3] = c_0 - [\text{H}_3\text{PO}_4] + [\text{HPO}_4^{2-}] + [\text{OH}^-]$$

A megfelelő koncentrációkat behelyettesítve, az egyensúlyi állandókból a következő egyenletet kapjuk:

$$[\text{H}^+] - \frac{c_0 \cdot K_v}{K_b \cdot [\text{H}^+]} = -\frac{[\text{H}^+] \cdot c_0}{K_{s1}} + \frac{K_{s2} \cdot c_0}{[\text{H}^+]} + \frac{K_v}{[\text{H}^+]}$$

Az egyenletet rendezve a következő összefüggést kapjuk:

$$[\text{H}^+] = \sqrt{\frac{K_{s1} \cdot \left(\frac{K_v}{K_b} \cdot c_0 + K_{s2} \cdot c_0 + K_v \right)}{c_0 + K_{s1}}}$$

Az állandók értékét behelyettesítve:

$$[\text{H}^+] = \sqrt{\frac{7,5 \cdot 10^{-3} \cdot \left(\frac{10^{-14}}{1,78 \cdot 10^{-5}} \cdot 0,1 + 6,2 \cdot 10^{-8} \cdot 0,1 + 10^{-14} \right)}{0,1 + 7,5 \cdot 10^{-3}}} = 2,089 \cdot 10^{-5}.$$

Így az oldat pH-ja:

$$\text{pH} = -\lg[\text{H}^+] = -\lg(2,089 \cdot 10^{-5}) = 4,680.$$

b) $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$ -oldat:

A fentiekhez hasonlóan levezethető az alábbi képlet (figyelem! $[\text{NH}_4^+] \approx 2 \cdot c_0$, innen származik a 2-es szorzó a képletben):

$$[\text{H}^+] = \sqrt{\frac{K_{s2} \cdot \left(2 \cdot \frac{K_v}{K_b} \cdot c_0 + K_{s3} \cdot c_0 + K_v \right)}{c_0 + K_{s2}}}.$$

Behelyettesítve:

$$[\text{H}^+] = \sqrt{\frac{6,2 \cdot 10^{-8} \cdot \left(2 \cdot \frac{10^{-14}}{1,78 \cdot 10^{-5}} \cdot 0,1 + 2,2 \cdot 10^{-13} \cdot 0,1 + 10^{-14} \right)}{0,1 + 6,2 \cdot 10^{-8}}} = 8,348 \cdot 10^{-9}.$$

Így az oldat pH-ja:

$$\text{pH} = -\lg[\text{H}^+] = -\lg(8,348 \cdot 10^{-9}) = 8,078.$$

c) $\text{K}(\text{NH}_4)\text{HPO}_4$ -oldat:

A fentiekhez hasonlóan levezethető képlet ($[\text{NH}_4^+] \approx c_0$, $[\text{K}^+] = c_0$):

$$[\text{H}^+] = \sqrt{\frac{K_{s2} \cdot \left(\frac{K_v}{K_b} \cdot c_0 + K_{s3} \cdot c_0 + K_v \right)}{c_0 + K_{s2}}}.$$

Behelyettesítve az állandókat és a bemérési koncentrációt:

$$[\text{H}^+] = \sqrt{\frac{6,2 \cdot 10^{-8} \cdot \left(\frac{10^{-14}}{1,78 \cdot 10^{-5}} \cdot 0,1 + 2,2 \cdot 10^{-13} \cdot 0,1 + 10^{-14} \right)}{0,1 + 6,2 \cdot 10^{-8}}} = 5,903 \cdot 10^{-9}.$$

Így az oldat pH-ja:

$$\text{pH} = -\lg[\text{H}^+] = -\lg(5,903 \cdot 10^{-9}) = 8,229.$$

d) $(\text{NH}_4)_3\text{PO}_4$ -oldat:

A fentiekhez hasonlóan levezethető képlet: (Megjegyzések: mivel várhatóan lúgos kémhatású az oldat, a H_3PO_4 és H_2PO_4^- részecskék koncentrációját hanyagoljuk el! Ne feledkezzünk meg arról sem, hogy $[\text{NH}_4^+] \approx 3 \cdot c_0$, innen jön a 3-as szorzó):

$$[\text{H}^+] = \sqrt{\frac{K_{s3} \cdot \left(3 \cdot \frac{K_v}{K_b} \cdot c_0 + K_v \right)}{c_0 + K_{s3}}}$$

Behelyettesítve az állandókat és a bemérési koncentrációt:

$$[\text{H}^+] = \sqrt{\frac{2,2 \cdot 10^{-13} \cdot \left(3 \cdot \frac{10^{-14}}{1,78 \cdot 10^{-5}} \cdot 0,1 + 10^{-14} \right)}{0,1 + 2,20 \cdot 10^{-13}}} = 1,926 \cdot 10^{-11}$$

Tehát az oldat pH-ja:

$$\text{pH} = -\lg[\text{H}^+] = -\lg(1,926 \cdot 10^{-11}) = 10,715$$

e) $\text{K}(\text{NH}_4)_2\text{PO}_4$ -oldat:

A levezethető képlet:

$$[\text{H}^+] = \sqrt{\frac{K_{s3} \cdot \left(2 \cdot \frac{K_v}{K_b} \cdot c_0 + K_v \right)}{c_0 + K_{s3}}}$$

(Megjegyzések: a H_3PO_4 és H_2PO_4^- részecskék koncentrációját ismét elhanyagoltuk. Mivel $[\text{NH}_4^+] \approx 2 \cdot c_0$, a képletben egy 2-es szorzótényező is szerepel).

Behelyettesítve az állandókat és a bemérési koncentrációt:

$$[\text{H}^+] = \sqrt{\frac{2,2 \cdot 10^{-13} \cdot \left(2 \cdot \frac{10^{-14}}{1,78 \cdot 10^{-5}} \cdot 0,1 + 10^{-14} \right)}{0,1 + 2,20 \cdot 10^{-13}}} = 1,572 \cdot 10^{-11}$$

Az oldat pH-ja:

$$\text{pH} = -\lg[\text{H}^+] = -\lg(1,572 \cdot 10^{-11}) = 10,803$$

f) $\text{K}_2(\text{NH}_4)\text{PO}_4$ -oldat:

A levezethető képlet:

$$[\text{H}^+] = \sqrt{\frac{K_{s3} \cdot \left(\frac{K_v}{K_b} \cdot c_0 + K_v \right)}{c_0 + K_{s3}}}$$

(Megjegyzés: a H_3PO_4 és H_2PO_4^- részecskék koncentrációját ismét elhanyagoltuk.)

Behelyettesítve az állandókat és a bemérési koncentrációt:

$$[\text{H}^+] = \sqrt{\frac{2,2 \cdot 10^{-13} \cdot \left(\frac{10^{-14}}{1,78 \cdot 10^{-5}} \cdot 0,1 + 10^{-14} \right)}{0,1 + 2,20 \cdot 10^{-13}}} = 1,112 \cdot 10^{-11}.$$

Az oldat pH-ja:

$$\text{pH} = -\lg[\text{H}^+] = -\lg(1,112 \cdot 10^{-11}) = 10,954.$$

Érdemes összefoglalni a feladatban szereplő és a korábban megismert képleteket!

$(\text{NH}_4)\text{H}_2\text{PO}_4$	$\sqrt{\frac{\text{K}_{s1} \cdot \left(\frac{\text{K}_v}{\text{K}_b} \cdot c_0 + \text{K}_{s2} \cdot c_0 + \text{K}_v \right)}{c_0 + \text{K}_{s1}}}$
KH_2PO_4	$\sqrt{\frac{\text{K}_{s1} \cdot (\text{K}_{s2} \cdot c_0 + \text{K}_v)}{c_0 + \text{K}_{s1}}}$
$(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$	$\sqrt{\frac{\text{K}_{s2} \cdot \left(2 \cdot \frac{\text{K}_v}{\text{K}_b} \cdot c_0 + \text{K}_{s3} \cdot c_0 + \text{K}_v \right)}{c_0 + \text{K}_{s2}}}$
$\text{K}(\text{NH}_4)\text{HPO}_4$	$\sqrt{\frac{\text{K}_{s2} \cdot \left(\frac{\text{K}_v}{\text{K}_b} \cdot c_0 + \text{K}_{s3} \cdot c_0 + \text{K}_v \right)}{c_0 + \text{K}_{s2}}}$
K_2HPO_4	$\sqrt{\frac{\text{K}_{s2} \cdot (\text{K}_{s3} \cdot c_0 + \text{K}_v)}{c_0 + \text{K}_{s2}}}$
$(\text{NH}_4)_3\text{PO}_4$	$\sqrt{\frac{\text{K}_{s3} \cdot \left(3 \cdot \frac{\text{K}_v}{\text{K}_b} \cdot c_0 + \text{K}_v \right)}{c_0 + \text{K}_{s3}}}$
$\text{K}(\text{NH}_4)_2\text{PO}_4$	$\sqrt{\frac{\text{K}_{s3} \cdot \left(2 \cdot \frac{\text{K}_v}{\text{K}_b} \cdot c_0 + \text{K}_v \right)}{c_0 + \text{K}_{s3}}}$
$\text{K}_2(\text{NH}_4)\text{PO}_4$	$\sqrt{\frac{\text{K}_{s3} \cdot \left(\frac{\text{K}_v}{\text{K}_b} \cdot c_0 + \text{K}_v \right)}{c_0 + \text{K}_{s3}}}$
K_3PO_4	$\sqrt{\frac{\text{K}_{s3} \cdot \text{K}_v}{c_0 + \text{K}_{s3}}} \approx \sqrt{\frac{\text{K}_{s3} \cdot \text{K}_v}{c_0}}$

Jól megfigyelhető, hogy minden ammónium-foszfát esetén a „hagyományos” savanyúsó-képlet számlálójában található zárójel bővül a következő taggal, mely tulajdonképpen az ammóniumion (az ammónia konjugált savának) savi disszociációs állandóját tartalmazza:

$$n \cdot \frac{K_v}{K_b} \cdot c_0 = n \cdot K_s(\text{NH}_4^+) \cdot c_0,$$

ahol n az ammóniumionok száma a só képletében [például az $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$ esetén $n = 2$].

Mivel a számláló értéke ezzel a taggal növekszik (az eredeti savanyúsó-képlethez képest), a hidrogénionkoncentráció-érték is növekszik. Ez más szavakkal azt jelenti, hogy egy adott ammónium-foszfát-oldatban a hidrogénion-koncentráció nagyobb (ezért a pH kisebb, az oldat kémhatása savasabb), mint a megfelelő kálium-foszfát oldatában.

A képletek általános alakja:

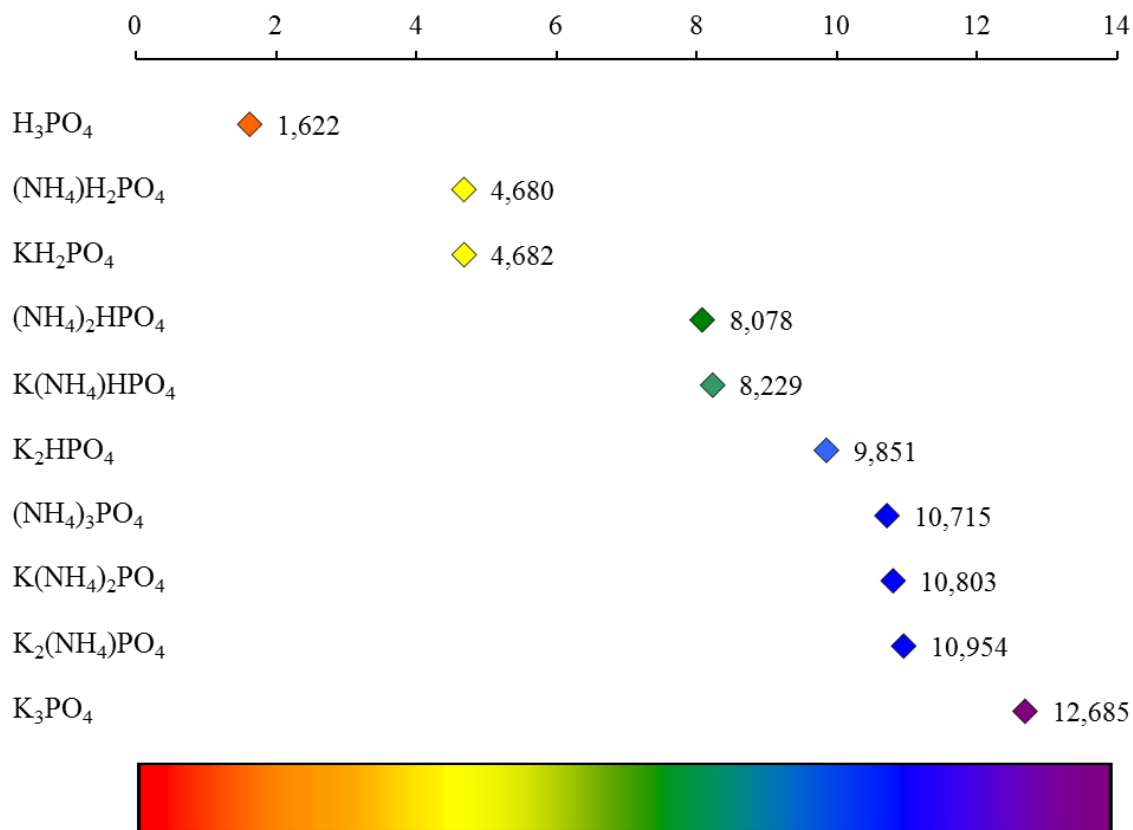
$$[\text{H}^+] \approx \sqrt{\frac{K_{s,m} \cdot \left(n \cdot \frac{K_v}{K_b} \cdot c_0 + K_{s,m+1} \cdot c_0 + K_v \right)}{c_0 + K_{s,m}}}.$$

Ebben az összefüggésben m a savanyú só rendűségét adja meg, így $m = 1$ primer, $m = 2$ szekunder, és $m = 3$ tercier sók esetén. Mivel tercier sók esetén $K_{s,m+1}$ egyensúlyi állandó már nincsen, ez a tag hiányzik az összes, tercier foszfátokra vonatkozó képletből.

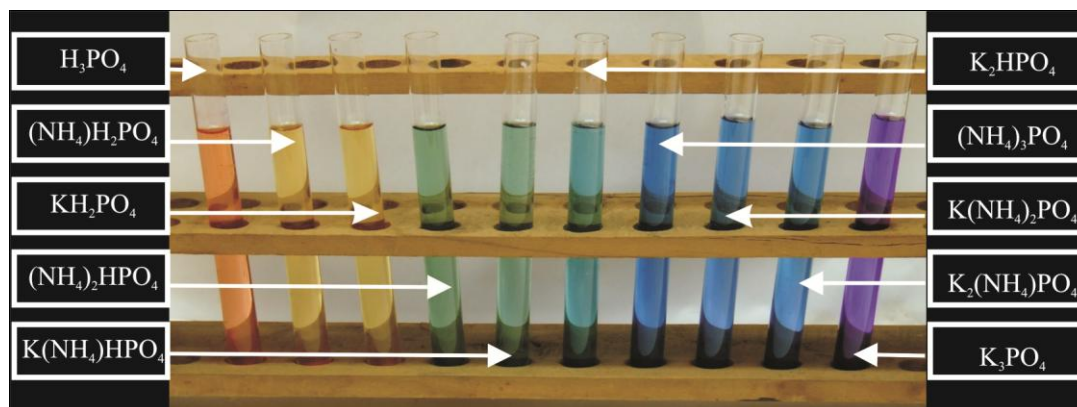
Mi történik, ha valamely ammónium-foszfátban egy ammóniumiont kicserélünk egy káliumionnal? A képlet csupán annyiban változik meg, hogy az ammóniumionok számát mutató n értéke 1-gyel csökken. Ez szépen megfigyelhető a fenti táblázatban az $(\text{NH}_4)_3\text{PO}_4$, $\text{K}(\text{NH}_4)_2\text{PO}_4$, $\text{K}_2(\text{NH}_4)\text{PO}_4$ és K_3PO_4 esetén, a képletekben n értéke rendre 3, 2, 1, 0 (értelemszerűen a K_3PO_4 oldatában az ammóniumionoknak vagy a képletben az ammónia disszociációs állandójának semmi keresnivalója). Mit jelent ez a gyakorlatban? Ha n értéke csökken, a $[\text{H}^+]$ is csökken, azaz a pH növekszik. Tehát ha egy ammónium-foszfát vegyületképletében egy ammóniumiont káliumionra cserélünk, a pH növekszik. Mivel a képletben n -en kívül semmilyen más mennyiség nem változik, az ammóniumsó és a megfelelő káliumsó pH-ja viszonylag csak kevésbé tér el egymástól, a különbség rendszerint néhány tized pH-egység. A legjelentősebb eltérés az azonos koncentrációjú $(\text{NH}_4)_3\text{PO}_4$ és K_3PO_4 oldatok között van, ez $10,715 - 12,685 = -1,97$ egység.

Az is megfigyelhető, hogy amennyiben a só tartalmaz ammóniumiont, az oldat pH-ja savasabb, mint a megfelelő káliumsó oldata, a pH-különbség rendszerint 1-2 egység körüli. Viszont ha egy adott rendű (primer, szekunder vagy tercier) són belül az ammónium- és káliumionok arányát változtatjuk, a pH-ban nem tapasztalunk jelentős változást.

A különböző foszfátsók pH-jának ismerete igen fontos a szerves kémiai tanulmányokban (például kvalitatív analízis esetén).



8.6.1.10.3. ábra: Különböző foszfátoldatok pH-ja



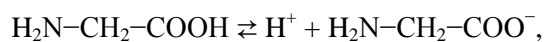
8.6.1.10.4. ábra: Különböző foszfátoldatok pH-ja univerzális indikátorral jelezve

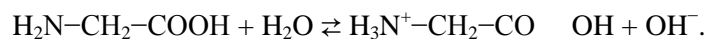
8.47. példa:

Mekkora a glicin (aminoecetsav) $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú oldatának pH-ja? $K_s = 4,47 \cdot 10^{-3}$, $K_b = 5,01 \cdot 10^{-5}$

Megoldás:

Az glicin ($\text{H}_2\text{N}-\text{CH}_2-\text{COOH}$) egy aminosav, mely amfoter:





Az alábbi folyamatok egyensúlyi állandója (a továbbiakban a glicint HA-val rövidítjük, A^- a deprotonált sav, H_2A^+ pedig az aminocsoporton is protonált forma):

$$K_s = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{A}^-]}{[\text{HA}]} \Rightarrow [\text{A}^-] = \frac{K_s}{[\text{H}^+]} \cdot [\text{HA}],$$

$$K_b = \frac{[\text{H}_2\text{A}^+] \cdot [\text{OH}^-]}{[\text{HA}]} \Rightarrow [\text{H}_2\text{A}^+] = \frac{K_b}{[\text{OH}^-]} \cdot [\text{HA}] = \frac{K_b}{\frac{K_v}{[\text{H}^+]}} \cdot [\text{HA}] = \frac{K_b}{K_v} \cdot [\text{H}^+] \cdot [\text{HA}].$$

Az oldatban a töltésmérleg:

$$[\text{H}^+] + [\text{H}_2\text{A}^+] = [\text{OH}^-] + [\text{A}^-].$$

Helyettesítsük be a H_2A^+ - és A^- -ionok koncentrációját, valamint a hidroxidionok koncentrációját a víziionszorzatból!

$$[\text{H}^+] + \frac{K_b}{K_v} \cdot [\text{H}^+] \cdot [\text{HA}] = \frac{K_v}{[\text{H}^+]} + \frac{K_s}{[\text{H}^+]} \cdot [\text{HA}]$$

Az egyenletből a hidrogénion-koncentrációt kiemelve:

$$[\text{H}^+] \cdot \left(1 + \frac{K_b}{K_v} \cdot [\text{HA}] \right) = \frac{1}{[\text{H}^+]} \cdot (K_v + K_s \cdot [\text{HA}]).$$

A glicin összkoncentrációjára a három különböző mértékben protonált forma koncentrációjának összege, ám feltételezhetően az A^- és H_2A^+ ionok koncentrációja elhanyagolható a semleges glicin koncentrációja mellett: $[\text{HA}] \approx c_0$. Ezt behelyettesítve:

$$[\text{H}^+] = \sqrt{\frac{K_v + K_s \cdot c_0}{1 + \frac{K_b}{K_v} \cdot c_0}} = \sqrt{\frac{10^{-14} + 4,47 \cdot 10^{-3} \cdot 0,1}{1 + \frac{5,01 \cdot 10^{-5}}{10^{-14}} \cdot 0,1}} = 9,446 \cdot 10^{-7} \text{ mol/dm}^3,$$

$$\text{pH} = -\lg[\text{H}^+] = -\lg(9,446 \cdot 10^{-7}) = 6,025.$$

Tehát a glicin $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú oldatának pH-ja 6,025.

Mivel a glicin esetén $K_v \ll K_s \cdot c_0$, és a nevezőben található összegben is elhanyagolható 1 a 10^8 nagyságrendű tag mellett, a következő egyszerűsítést alkalmazhatjuk:

$$[\text{H}^+] = \sqrt{\frac{K_v + K_s \cdot c_0}{1 + \frac{K_b}{K_v} \cdot c_0}} \approx \sqrt{\frac{K_s \cdot c_0}{\frac{K_b}{K_v} \cdot c_0}} = \sqrt{\frac{K_s}{\frac{K_b}{K_v}}} = \sqrt{K_s \cdot \frac{K_v}{K_b}}.$$

A képlet alapján a glicinoldat pH-ja – nem túl kis koncentrációk esetén – független az oldat koncentrációjától!

A szorzat második tényezője tulajdonképpen a H_2A^+ (konjugált) sav disszociációs állandója. Az aminosavak esetén igen gyakori, hogy csak savállandókat adnak meg, vagy pedig ezek logaritmusának ellentettjét. Esetünkben $\text{p}K_{s1}$ és $\text{p}K_{s2}$:

$$pK_{s1} = -\lg K_s \quad pK_{s2} = -\lg \frac{K_v}{K_b}$$

Így a glicinoldat pH-ja:

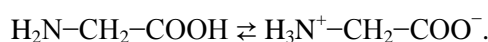
$$pH = -\lg \sqrt{K_s \cdot \frac{K_v}{K_b}} = -\frac{1}{2} \cdot \lg K_s + \frac{1}{2} \cdot \left(-\lg \frac{K_v}{K_b} \right) = \frac{pK_{s1} + pK_{s2}}{2} = \frac{2,35 + 9,70}{2} = 6,025.$$

Érdemes megjegyezni, hogy a két pK_s átlaga egy igen fontos mennyiség az aminosavak (és a belőlük felépülő polipeptidek) esetén: izoelektromos pontnak nevezzük, és rendszerint pI-nek rövidítjük:

$$pI = \frac{pK_{s1} + pK_{s2}}{2}.$$

Az izoelektromos pont az a pH, melyen az aminosav különböző mértékben protonált (deprotonált) formái közül a semleges formának (HA) van a legnagyobb részaránya. Ha az izoelektromos pontból kiindulva a pH-t csökkentjük, akkor a karboxilcsoport deprotonálódik, míg a pH-t növelve az aminocsoport protonálódik. Tehát adott bemérési koncentrációjú oldatban az izoelektromos pontban maximális a semleges aminosavforma koncentrációja.

(Megjegyzés: az aminosavak vizes közegben rendszerint ikerionos formában vannak jelen, szerkezeti képletük nem a fent bemutatott:



Az ikerionos szerkezetben az aminocsoport protonált formában, a karboxilcsoport pedig deprotonált formában található.)

8.6.1.11. Pufferoldatok pH-ja

Savak, bázisok és sók oldatai tetszőlegesen összekeverhetőek. Arra már láttunk korábban példát, hogy miként számítható a pH, ha például egy erős savat és egy erős bázist keverünk össze, vagy pedig egy oldat egyszerre tartalmaz egy erős és egy gyenge savat (vagy bázist).

Gyakorlati felhasználás szempontjából fontosak a sav-bázis pufferek. Ezek olyan oldatok, melyek egyszerre tartalmaznak egy gyenge savat és ugyanazon sav erős bázissal alkotott sóját. Egy másik fajtájuk pedig egy gyenge bázist és ugyanennek a bázisnak egy erős savval alkotott sóját tartalmazza. Ismerünk olyan pufferelegyeket is, melyek többértékű savak savanyú sóinak oldatai.

Savas pufferek

Egy gyakran alkalmazott puffer az ecetsav – nátrium-acetát-puffer. Ez úgy készül, hogy a fenti két anyagot mérjük össze egy oldatban.

Legyen a nátrium-acetát bemérési koncentrációja $c_{s\acute{o}}$ és az ecetsavé c_{sav} . Amennyiben mindkét koncentráció viszonylag nagy és a vizes oldatuk pH-ja 7-től távoli, feltételezhetjük, hogy az egyensúlyi acetátkoncentráció megegyezik a nátrium-acetát bemérési koncentrációjával, az egyensúlyi ecetsav-koncentráció pedig megegyezik a beérési savkoncentrációval:

$$[CH_3COOH] \approx c_{sav}, \text{ illetve } [CH_3COO^-] \approx c_{s\acute{o}}.$$

Ezeket behelyettesítve a savi disszociációs állandóba:

$$K_s = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{CH}_3\text{COO}^-]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]} \approx \frac{[\text{H}^+] \cdot c_{\text{só}}}{c_{\text{sav}}}$$

Ennek az átrendezésével kaphatjuk a **Henderson–Hasselbach-egyenletet** (szokták csak Henderson-egyenletnek is hívni):

$$[\text{H}^+] = K_s \cdot \frac{c_{\text{sav}}}{c_{\text{só}}}$$

Tehát a hidrogénion-koncentráció egyenesen arányos a sav koncentrációjával és fordítottan arányos a só koncentrációjával (gondoljunk csak bele, ha növeljük a sav koncentrációját, akkor savasodik a kémhatás, azaz növekszik a hidrogénion-koncentráció!).

Mivel a sav és a só anyagmennyisége ugyanabba a térfogatba van bemérve, a következő egyszerűsítést tehetjük:

$$[\text{H}^+] = K_s \cdot \frac{c_{\text{sav}}}{c_{\text{só}}} = K_s \cdot \frac{\left(\frac{c_{\text{sav}}}{V}\right)}{\left(\frac{c_{\text{só}}}{V}\right)} = K_s \cdot \frac{n_{\text{sav}}}{n_{\text{só}}}$$

Ebből a pH-t is kifejezhetjük:

$$\text{pH} = -\lg[\text{H}^+] = -\lg\left(K_s \cdot \frac{c_{\text{sav}}}{c_{\text{só}}}\right) = \text{p}K_s - \lg c_{\text{sav}} + \lg c_{\text{só}} = \text{p}K_s - \lg n_{\text{sav}} + \lg n_{\text{só}}$$

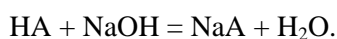
Tehát a pH az egyenlet alapján elsősorban sav disszociációs állandójától, valamint a bemért sav és só anyagmennyiségének arányától függ. Ebből adódik a pufferek egyik legfontosabb tulajdonsága, miszerint egy puffer pH-ja nem nagyon függ a koncentrációjától, azaz desztillált vízzel hígítva tartja a pH-ját. Ez azonban nem igaz bármekkora hígításra, mivel bármely vizes oldat pH-ja hígítás hatására a semleges (pH = 7) értékhez közeledik. (Például gondoljunk arra, hogy egy adott pufferelegyet beleöntünk a Dunába! Az összekeveredés után a pH gyakorlatilag semleges lesz, mivel annyira csekély a sav és a só koncentrációja, hogy a pH-ban nem okoz változást. Az ehhez hasonló, extrém híg pufferoldatokkal majd a későbbiekben még foglalkozunk.) Mint majd később látni fogjuk, a pufferek nemcsak a hígítással, hanem savakkal és lúgokkal szemben is stabilizálják az oldat pH-ját.

Mint a képletből látható, a gyenge savból és annak erős bázissal alkotott sójából képzett pufferoldat pH-ja (a koncentrációktól függően) savas kémhatású (mivel rendszerint a sav- és a sómennyiség nem különbözik nagyon egymástól, legalábbis nem szélsőségesen nagy vagy kicsi az $n_{\text{sav}}/n_{\text{só}}$ arány).

Savas puffereket nem csak sav és a megfelelő só összekeverésével lehet előállítani. A lényeg, hogy az oldatban legyen megtalálható a sav és sója is, így például pufferhez jutunk akkor is, ha a savat részlegesen semlegesítjük egy erős bázissal (azaz a sav egy részéből kémiai reakcióval előállítjuk a sót), vagy ha a sóból – a közömbösítéshez szükségesnél kevesebb – erős savval felszabadítjuk a gyenge savat.

Puffer előállítása gyenge sav részleges semlegesítésével:

Legyen a sav kiindulási anyagmennyisége $n_{\text{sav},0}$, adjunk az oldathoz x anyagmennyiségű ($x < n_{\text{sav},0}$) erős bázist (például nátrium-hidroxidot)! Ekkor keletkezik $n_{\text{só}} = x$ anyagmennyiségű só, és marad az oldatban $n_{\text{sav},0} - x$ anyagmennyiségű sav:

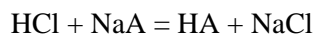


Behelyettesítve az egyensúlyi állandóba az anyagmennyiségeket:

$$[\text{H}^+] = K_s \cdot \frac{n_{\text{sav}}}{n_{\text{só}}} = K_s \cdot \frac{n_{\text{sav},0} - x}{x} = K_s \cdot \left(\frac{n_{\text{sav},0}}{x} - 1 \right).$$

Puffer előállítás a gyenge sav sójából történő felszabadításával:

Egy gyenge sav erős bázissal alkotott sójának kiindulási $n_{\text{só},0}$ anyagmennyiségéhez adjunk y anyagmennyiségű ($y < n_{\text{só},0}$) erős savat (például sósavat). Ekkor a só mennyisége lecsökken y -al, miközben y anyagmennyiségű gyenge sav keletkezik:



Az oldat hidrogénion-koncentrációja:

$$[\text{H}^+] = K_s \cdot \frac{n_{\text{sav}}}{n_{\text{só}}} = K_s \cdot \frac{y}{n_{\text{só},0} - y} = K_s \cdot \frac{1}{\frac{n_{\text{só},0}}{y} - 1}.$$

Bázisos pufferek

A fentiekhez hasonlóan egy gyenge bázisból és annak egy erős savval alkotott sójából is pufferelegyet tudunk készíteni. Például az ammóniából és ammónium-kloridból álló puffert gyakorlatban is sokszor alkalmazzuk, elsősorban lúgos kémhatású oldatok előállítására.

Ismét feltételezhetjük, hogy az egyensúlyi koncentrációk megegyeznek a bemérési koncentrációkkal:

$$[\text{NH}_3] \approx c_{\text{bázis}}, \text{ illetve } [\text{NH}_4^+] \approx c_{\text{só}}.$$

Ezeket behelyettesítve az ammónia disszociációs állandójába:

$$K_b = \frac{[\text{OH}^-] \cdot [\text{NH}_4^+]}{[\text{NH}_3]} \approx \frac{[\text{OH}^-] \cdot c_{\text{só}}}{c_{\text{bázis}}}.$$

Ennek az átrendezésével megkapjuk a bázisos pufferekre vonatkozó **Henderson–Hasselbach-egyenletet**:

$$[\text{OH}^-] = K_b \cdot \frac{c_{\text{bázis}}}{c_{\text{só}}}.$$

A hidroxidion-koncentráció egyenesen arányos a gyenge bázis koncentrációjával és fordítottan arányos a só koncentrációjával. Az előzőekhez hasonlóan – nem túl híg oldatok esetén – az anyagmennyiségekkel is kifejezhetjük a hidroxidion-koncentrációt:

$$[\text{OH}^-] = K_b \cdot \frac{n_{\text{bázis}}}{n_{\text{só}}}.$$

A savaknál megismert módszerekhez hasonlóan bázisos puffereket is többféleképpen előállíthatunk. Puffer keletkezik, ha részben semlegesítjük egy gyenge bázis oldatát, vagy ha egy erős bázis (ekvivalensnél kisebb mennyiségével) felszabadítjuk sójából a gyenge bázist.

Puffer előállítás részleges semlegesítéssel:

Az $n_{\text{bázis},0}$ anyagmennyiségű bázishoz adjunk x anyagmennyiségű erős savat ($x < n_{\text{bázis},0}$), ekkor a hidroxidion-koncentráció:

$$[\text{OH}^-] = K_b \cdot \frac{n_{\text{bázis}}}{n_{\text{só}}} = K_b \cdot \frac{n_{\text{bázis},0} - x}{x} = K_b \cdot \left(\frac{n_{\text{bázis},0}}{x} - 1 \right).$$

Puffer előállítás gyenge sav sójából:

Legyen a gyenge bázis erős savval alkotott sójának anyagmennyisége $n_{\text{só},0}$, ehhez adjunk y anyagmennyiségű ($y < n_{\text{só},0}$) erős bázist (például nátrium-hidroxidot). Ekkor a hidroxidion-koncentráció:

$$[\text{OH}^-] = K_b \cdot \frac{n_{\text{bázis}}}{n_{\text{só}}} = K_b \cdot \frac{y}{n_{\text{só},0} - y} = K_b \cdot \frac{1}{\frac{n_{\text{só},0}}{y} - 1}.$$

Pufferek savanyú sókból

A pufferoldat előállítására alkalmazhatunk savanyú sókat is, ezeknek előnyük, hogy tömegüket rendszerint igen pontosan tudjuk mérni, így a pH-t igen pontosan be tudjuk állítani.

Például egy gyakorlatban sokat alkalmazott puffer kálium-dihidrogén-foszfátot (KH_2PO_4) és dikálium-hidrogén-foszfátot (K_2HPO_4) tartalmaz. Legyen a kálium-dihidrogén-foszfát bemérési koncentrációja $c(\text{KH}_2\text{PO}_4)$, a dikálium-hidrogén-foszfáté pedig $c(\text{K}_2\text{HPO}_4)$. Feltételezhető, hogy az oldatban található anionkoncentrációk nem nagyon különböznek a bemérési koncentrációktól:

$$[\text{H}_2\text{PO}_4^-] \approx c(\text{KH}_2\text{PO}_4), \text{ illetve } [\text{HPO}_4^{2-}] \approx c(\text{K}_2\text{HPO}_4).$$

Így az oldat hidrogénion-koncentrációja (és pH-ja) a foszforsav második disszociációs állandójából számítható:

$$K_{s2} = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{HPO}_4^{2-}]}{[\text{H}_2\text{PO}_4^-]} \approx \frac{[\text{H}^+] \cdot c(\text{K}_2\text{HPO}_4)}{c(\text{KH}_2\text{PO}_4)},$$

$$[\text{H}^+] = K_{s2} \cdot \frac{c(\text{KH}_2\text{PO}_4)}{c(\text{K}_2\text{HPO}_4)} = K_{s2} \cdot \frac{n(\text{KH}_2\text{PO}_4)}{n(\text{K}_2\text{HPO}_4)}.$$

Gyenge savakból rendszerint savas, gyenge bázisokból pedig lúgos kémhatású pufferoldatokat szokás készíteni. Viszont gyakran szükség van semleges pH-jú pufferekre (például biológiai rendszerek esetén, ahol gyakran 7 körüli pH-t kell biztosítani). Például a fenti dihidrogén-foszfát – hidrogén-foszfát-puffer kiválóan alkalmazható semleges oldatok pufferelésére. További igen fontos előnyük még a savanyú sóknak, hogy összetételük általában jól meghatározott és egyszerűen készíthető belőlük pontos koncentrációjú oldat (például az ecetsav- vagy az ammóniaoldat koncentrációja gyakran ingadozik).

Savanyú sókat tartalmazó puffereket – a fentiekhez hasonlóan – előállíthatunk a savból (bázisból) a megfelelő erős bázis (sav) segítségével, vagy pedig szabályos sójúból is protonálás (deprotonálás) segítségével.

Összefoglalva a pufferek előállítási lehetőségeit:

- egy gyenge sav és a gyenge sav erős bázissal alkotott sója,
- egy gyenge bázis és a gyenge bázis erős savval alkotott sója,
- gyenge sav részleges semlegesítése,
- gyenge bázis részleges semlegesítése,
- savasan hidrolizáló só megsavanyítva, de még nem semlegesítve,
- lúgosan hidrolizáló só meglúgosítva, de még nem semlegesítve,
- savanyú sók keverékei (akár a savból – bázisból – vagy a sóból előállítva).

8.48. példa:

Mekkora a pH-ja annak az oldatnak, mely $0,500 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációban tartalmaz ecetsavat és $0,250 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációban nátrium-acetátot? $K_s = 1,79 \cdot 10^{-5}$

Megoldás:

A Henderson–Hasselbach-egyenlet alapján:

$$[\text{H}^+] = K_s \cdot \frac{c_{\text{sav}}}{c_{\text{só}}} = 1,79 \cdot 10^{-5} \cdot \frac{0,500}{0,250} = 3,58 \cdot 10^{-5} \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}.$$

Az oldat pH-ja:

$$\text{pH} = -\lg[\text{H}^+] = -\lg 3,58 \cdot 10^{-5} = 4,446.$$

Tehát a pufferoldat pH-ja 4,446.

8.49. példa:

Mekkora a pH-ja a következő pufferoldatnak: az ammónia koncentrációja $1,500 \text{ mol/dm}^3$, az ammónium-nitráté pedig $0,450 \text{ mol/dm}^3$? $K_b = 1,78 \cdot 10^{-5}$

Megoldás:

A Henderson–Hasselbach-egyenletet felírva:

$$[\text{OH}^-] = K_b \cdot \frac{c_{\text{bázis}}}{c_{\text{só}}} = 1,78 \cdot 10^{-5} \cdot \frac{1,500}{0,450} = 5,933 \cdot 10^{-5} \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}.$$

Az oldat pH-ja:

$$\text{pH} = 14 - \text{pOH} = 14 + \lg[\text{OH}^-] = 14 + \lg 5,933 \cdot 10^{-5} = 9,773.$$

Így a pufferoldat pH-ja 9,773.

8.50. példa:

Kevés desztillált vízben feloldunk 1,380 gramm kristályvíztartalmú nátrium-dihidrogén-foszfátot és 2,610 gramm dikálium-hidrogén-foszfátot, majd az oldatot $100,0 \text{ cm}^3$ -re egészítjük ki. Mekkora az oldat pH-ja? $M(\text{NaH}_2\text{PO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}) = 138,0 \text{ g/mol}$, $M(\text{K}_2\text{HPO}_4) = 174,0 \text{ g/mol}$, $K_{s2} = 6,20 \cdot 10^{-8}$.

Megoldás:

A sók anyagmennyiségei:

$$n(\text{NaH}_2\text{PO}_4) = 0,01 \text{ mol}, n(\text{K}_2\text{HPO}_4) = 0,015 \text{ mol}.$$

A pufferoldat hidrogénion-koncentrációja:

$$[\text{H}^+] = K_{s2} \cdot \frac{n(\text{NaH}_2\text{PO}_4)}{n(\text{K}_2\text{HPO}_4)} = 6,20 \cdot 10^{-8} \cdot \frac{0,01}{0,015} = 4,133 \cdot 10^{-8} \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}.$$

Így az oldat pH-ja:

$$\text{pH} = -\lg[\text{H}^+] = -\lg 4,133 \cdot 10^{-8} = 7,384.$$

Tehát az oldat pH-ja 7,384.

8.51. példa:

Mekkora tömegű nátrium-formiátot kell feloldani $100,0 \text{ cm}^3$ 4,555 tömegszázalékos hangyasavoldatban ($d = 1,010 \text{ g/cm}^3$), hogy a keletkező oldat pH-ja 4,500 legyen? (Az oldás során esetleg bekövetkező térfogatváltozást hanyagoljuk el!) $M(\text{HCOOH}) = 46,0 \text{ g/mol}$, $M(\text{HCOONa}) = 68,0 \text{ g/mol}$, $K_s = 1,80 \cdot 10^{-4}$.

Megoldás:

Számítsuk ki az hangyasavoldat molaritását!

$$c(\text{HCOOH}) = \frac{n}{V} = \frac{m}{M \cdot V} = \frac{w \cdot m_{\text{oldat}}}{M \cdot V} = \frac{w \cdot d \cdot V}{M \cdot V} = \frac{w \cdot d}{M} = \frac{0,04555 \cdot 1010}{46,0} \text{ mol/dm}^3 = 1,000 \text{ mol/dm}^3$$

$100,0 \text{ cm}^3$ oldat hangyasav-tartalma:

$$n_{\text{sav}} = c(\text{HCOOH}) \cdot V = 1,000 \cdot 0,100 \text{ mol} = 0,100 \text{ mol}.$$

Számítsuk ki a keletkező oldat hidrogénion-koncentrációját!

$$[\text{H}^+] = 10^{-\text{pH}} = 10^{-4,500} = 3,1623 \cdot 10^{-5} \text{ mol/dm}^3$$

Írjuk fel a pufferek számítására alkalmazandó képletet, és fejezzük ki belőle a só anyagmennyiségét!

$$[\text{H}^+] = K_s \cdot \frac{n_{\text{sav}}}{n_{\text{só}}} \Rightarrow n_{\text{só}} = K_s \cdot \frac{n_{\text{sav}}}{[\text{H}^+]} = 1,80 \cdot 10^{-4} \cdot \frac{0,100}{3,1623 \cdot 10^{-5}} = 0,5692 \text{ mol}$$

Már csak át kell számítanunk az anyagmennyiséget tömegre:

$$m = M \cdot n = 68,0 \cdot 0,5692 \text{ g} = 38,7 \text{ g}.$$

Tehát 38,7 gramm nátrium-formiátot kell feloldani a hangyasavoldatban.

8.52. példa:

$500,0 \text{ cm}^3$ 9,000 pH-jú pufferoldatot kell előállítanunk. A laborban rendelkezésre áll $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú ammónia- és $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú ammónium-klorid-oldat. Milyen térfogatokat kell összemérnünk a kívánt pufferoldat előállításához? (A térfogatokat tekintsük összeadhatónak!) $K_b = 1,78 \cdot 10^{-5}$

Megoldás:

A pH-ból számítsuk ki a hidroxidion-koncentrációt!

$$[\text{OH}^-] = 10^{-\text{pOH}} = 10^{-(14-\text{pH})} = 10^{-(14-9)} = 10^{-5} \text{ mol/dm}^3$$

Legyen az ammóniaoldat térfogata $V \text{ (dm}^3\text{)}$, az ammónium-klorid-oldaté így $0,500 - V \text{ (dm}^3\text{)}$. Írjuk fel a Henderson–Hasselbach-egyenletet!

$$[\text{OH}^-] = 10^{-5} = K_b \cdot \frac{n_{\text{bázis}}}{n_{\text{só}}} = K_b \cdot \frac{c_{\text{bázis}} \cdot V}{c_{\text{só}} \cdot (0,500 - V)} = 1,78 \cdot 10^{-5} \cdot \frac{0,1 \cdot V}{0,1 \cdot (0,500 - V)} = 10^{-5}$$

Az egyenletet megoldva: $V = 0,180 \text{ dm}^3$.

Tehát 180 cm³ ammóniaoldatot és 320 cm³ ammónium-klorid-oldatot kell elegyítenünk.

8.53. példa:

Egy gyenge sav oldatában a sav 50%-át közömbösítjük nátrium-hidroxid segítségével. Mekkora az oldat pH-ja? $K_s = 2,71 \cdot 10^{-4}$.

Megoldás:

Legyen a sav anyagmennyisége n_{sav} , ennek 50%-át közömbösítjük, így megmarad a sav 50%-a:

$$[H^+] = K_s \cdot \frac{n_{sav}}{n_{só}} = K_s \cdot \frac{0,5 \cdot n_{sav,0}}{0,5 \cdot n_{sav,0}} = K_s.$$

Így az oldat pH-ja:

$$pH = -\lg[H^+] = -\lg K_s = pK_s = 3,567.$$

Tehát a keletkezett pufferoldat pH-ja 3,567.

8.54. példa:

Egy ipari folyamat során 1,000 m³ 4,200 pH-jú pufferoldatra van szükségünk. Rendelkezésre áll ecetsavoldat, nátrium-acetát-oldat, sósavoldat és nátrium-hidroxid-oldat, mindegyik oldat koncentrációja 0,1000 mol/liter. $K_s = 1,79 \cdot 10^{-5}$.

Milyen térfogatokat kell kimérni az egyes oldatokból, ha

- ecetsavoldatból és nátrium-acetát-oldatból,
- ecetsavoldatból és nátrium-hidroxid-oldatból,
- sósavoldatból és nátrium-acetát-oldatból

készítjük a puffert? A térfogatokat vegyük összeadhatónak!

Melyik a leggazdaságosabb megoldás, ha az egyes oldatok ára literenként a következő:

Ecetsavoldat:	582 Ft/liter,	nátrium-acetát-oldat:	1039 Ft/liter,
sósavoldat:	420 Ft/liter,	nátrium-hidroxid-oldat:	322 Ft/liter.

Megoldás:

Az oldat H⁺-koncentrációja:

$$[H^+] = 10^{-pH} = 10^{-4,200} = 6,3096 \cdot 10^{-5} \text{ mol/dm}^3.$$

a)

Az ecetsavoldat térfogata legyen V m³, és mivel az össztérfogat 1,000 m³, a nátrium-acetát-oldat koncentrációja $(1 - V)$ m³. Felírva a Henderson–Hasselbach-egyenletet:

$$[H^+] = K_s \cdot \frac{n_{sav}}{n_{só}} = 1,79 \cdot 10^{-5} \cdot \frac{0,1 \cdot V}{0,1 \cdot (1 - V)} = 6,3096 \cdot 10^{-5}.$$

Az egyenlet megoldása: $V = 0,779$. Tehát 0,779 m³ ecetsavoldatot és 0,221 m³ nátrium-acetát-oldatot kell összekevernünk.

b)

Jelöljük V' -vel az ecetsavoldat térfogatát, így a nátrium-hidroxid-oldat térfogata $(1 - V')$ m³.

Az ecetsav anyagmennyisége: $0,1 \cdot V'$ kmol, a nátrium-hidroxidé pedig $0,1 \cdot (1 - V')$ kmol. Tehát keletkezik $0,1 \cdot (1 - V')$ kmol nátrium-acetát és marad $[0,1 \cdot V' - 0,1 \cdot (1 - V')]$ kmol ecetsav.

$$[\text{H}^+] = K_s \cdot \frac{n_{\text{sav}}}{n_{\text{só}}} = 1,79 \cdot 10^{-5} \cdot \frac{0,1 \cdot [V' - (1 - V')]}{0,1 \cdot (1 - V')} = 1,79 \cdot 10^{-5} \cdot \frac{2 \cdot V' - 1}{1 - V'}$$

Tehát a következő egyenletet kell megoldanunk:

$$1,79 \cdot 10^{-5} \cdot \frac{2 \cdot V' - 1}{1 - V'} = 6,3096 \cdot 10^{-5}.$$

Az egyenlet megoldása: $V' = 0,819$. Tehát 0,819 m³ ecetsavoldatot és 0,181 m³ nátrium-hidroxid-oldatot kell összekevernünk.

c)

A sósavoldat térfogata legyen V'' , így a nátrium-acetát-oldat térfogata $(1 - V'')$ m³. A hidrogén-klorid anyagmennyisége $0,1 \cdot V''$ kmol, a nátrium-acetáté pedig $0,1 \cdot (1 - V'')$ kmol.

A sósav és a nátrium-acetát reakciójából keletkező ecetsav anyagmennyisége $0,1 \cdot V''$ kmol, valamint a maradék nátrium-acetát anyagmennyisége: $[0,1 \cdot (1 - V'') - 0,1 \cdot V'']$ kmol.

$$[\text{H}^+] = K_s \cdot \frac{n_{\text{sav}}}{n_{\text{só}}} = 1,79 \cdot 10^{-5} \cdot \frac{0,1 \cdot V''}{0,1 \cdot [(1 - V'') - V'']} = 1,79 \cdot 10^{-5} \cdot \frac{V''}{1 - 2 \cdot V''}$$

A megoldandó egyenlet:

$$1,79 \cdot 10^{-5} \cdot \frac{V''}{1 - 2 \cdot V''} = 6,3096 \cdot 10^{-5}.$$

Az egyenletet megoldva kapjuk: $V'' = 0,438$. Így 0,438 m³ sósavoldatot és 0,562 m³ nátrium-acetát-oldatot kell összeöntönnünk.

A leggazdaságosabb eljárás kiválasztásához ki kell számítanunk minden keverék előállításának költségeit, mely adódik az oldatok térfogatának és literenkénti árának szorzataként:

a)

	Térfogat (liter)	Egységár (Ft/liter):	Ár (Ft):
Ecetsavoldat:	$0,779 \cdot 10^3$	582	453 378
Nátrium-acetát-oldat:	$0,221 \cdot 10^3$	1 039	229 619
Összesen			682 997

b)

	Térfogat (liter)	Egységár (Ft/liter):	Ár (Ft):
Ecetsavoldat:	$0,819 \cdot 10^3$	582	476 658
Nátrium-hidroxid-oldat:	$0,181 \cdot 10^3$	322	58 282
Összesen			534 940

c)

	Térfogat (liter)	Egységár (Ft/liter):	Ár (Ft):
Sósavoldat:	$0,438 \cdot 10^3$	420	183 960
Nátrium-acetát-oldat:	$0,562 \cdot 10^3$	1039	583 918
Összesen			767 878

Az eredményeket összehasonlítva kiderül, hogy a b) pontban leírt eljárás a legolcsóbb.

8.55. példa:

10,00 pH-jú puffert szeretnénk előállítani. Mekkora tömegű nátrium-hidroxidot kell feloldanunk 250,0 cm³ 0,500 mol/dm³ koncentrációjú trietil-ammónium-klorid- ([Et₃NH⁺][Cl⁻]-) oldatban, hogy a kívánt pH-jú oldatot előállítsuk? $K_b = 5,62 \cdot 10^{-4}$.

Megoldás:

A pH alapján a hidroxidion-koncentráció:

$$[\text{OH}^-] = 10^{-\text{pOH}} = 10^{-(14-\text{pH})} = 10^{-(14-10)} = 10^{-4} \text{ mol/dm}^3.$$

Az oldathoz hozzáadott nátrium-hidroxid anyagmennyisége legyen y , a trietil-ammónium-só kiindulási anyagmennyisége pedig:

$$n_{\text{só},0} = 0,500 \cdot 0,2500 \text{ mol} = 0,125 \text{ mol}.$$

A reakció lejátszódása után behelyettesítve az egyensúlyi állandóba, a következő egyenletet kapjuk:

$$[\text{OH}^-] = K_b \cdot \frac{n_{\text{bázis}}}{n_{\text{só}}} \Rightarrow K_b \cdot \frac{y}{n_{\text{só},0} - y} = 5,62 \cdot 10^{-4} \cdot \frac{y}{0,125 - y} = 10^{-4}.$$

Az egyenlet megoldása: $y = 0,0189$. Tehát a hozzáadott nátrium-hidroxid tömege:

$$m(\text{NaOH}) = M(\text{NaOH}) \cdot y = 40,0 \text{ g/mol} \cdot 0,0189 \text{ mol} = 0,755 \text{ g}.$$

Tehát 0,755 gramm nátrium-hidroxidot kell feloldanunk az oldatban.

8.56. példa:

Mekkora tömegű dinátrium-hidrogén-foszfátot kell feloldani 100,0 cm³ 0,100 mol/dm³ koncentrációjú sósavoldatban, hogy 7,000 pH-jú puffert kapjunk? Az oldat térfogatváltozásától tekintünk el! $M(\text{Na}_2\text{HPO}_4) = 142,0 \text{ g/mol}$, $K_{s2} = 6,20 \cdot 10^{-8}$.

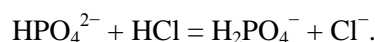
Megoldás:

A sósav anyagmennyisége: $n(\text{HCl}) = 0,1 \cdot 0,1 \text{ mol} = 0,01 \text{ mol}$.

Írjuk fel a megfelelő egyensúlyi állandót:

$$K_{s2} = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{HPO}_4^{2-}]}{[\text{H}_2\text{PO}_4^-]} = \frac{[\text{H}^+] \cdot n(\text{HPO}_4^{2-})}{n(\text{H}_2\text{PO}_4^-)}.$$

Legyen a hozzáadott Na₂HPO₄ anyagmennyisége x ! A 0,01 mól HCl létrehoz 0,01 mól H₂PO₄⁻-iont:



Tehát marad $(x - 0,01)$ mólnyi monohidrogén-foszfát (HPO₄²⁻):

$$K_{s2} = \frac{[\text{H}^+] \cdot n(\text{HPO}_4^{2-})}{n(\text{H}_2\text{PO}_4^-)} = \frac{10^{-7} \cdot (x - 0,01)}{0,01} = 6,2 \cdot 10^{-8}.$$

Az egyenlet megoldása: $x = 0,0162 \text{ mol}$. Átszámítva tömegre:
 $m(\text{Na}_2\text{HPO}_4) = 142 \cdot 0,0162 \text{ g} = 2,30 \text{ g}$.

Tehát 2,30 gramm dinátrium-hidrogén-foszfátot kell feloldanunk.

Erős savak és bázisok hatása a pufferoldatok pH-jára

Vizsgáljuk meg, mi történik, ha erős savat adunk egy ecetsav–nátrium-acetát pufferoldathoz!



Legyen a sav kiindulási anyagmennyisége n_{sav} , a sóé $n_{\text{só}}$. Ekkor az oldat hidrogénion-koncentrációja:

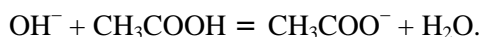
$$[\text{H}^+] = \frac{n_{\text{sav}}}{n_{\text{só}}} \cdot K_s.$$

Ha x mennyiségű ($x < n_{\text{só}}$) erős savat adunk a pufferoldathoz, a só mennyisége x -szel csökken, a sav mennyisége pedig x -szel növekszik a fenti egyenlet értelmében, így az új hidrogénion-koncentráció:

$$[\text{H}^+]' = \frac{n_{\text{sav}} + x}{n_{\text{só}} - x} \cdot K_s.$$

Abban az esetben, ha x igen kicsi ($x \ll n_{\text{sav}}$, $x \ll n_{\text{só}}$), értéke a számlálót és a nevezőt is csak kicsit változtatja meg, így a pH-változás nem jelentős. Az is megfigyelhető a képletben, hogy sav hozzáadására (mivel x pozitív) a hányados értéke növekszik, azaz az oldat hidrogénion-koncentrációja növekszik, a pH pedig csökken. (Az eredmény nem túl meglepő, ha belegondolunk, hogy egy oldathoz savat adva a pH-nak csökkennie kell.)

Ezzel ellentétben, ha lúgot adunk a pufferrendszerhez, a következő egyenlet szerinti átalakulás megy végbe:



Adott kiindulási n_{sav} és $n_{\text{só}}$ anyagmennyiségek esetén y anyagmennyiségű erős bázist ($y < n_{\text{sav}}$) adunk a pufferoldathoz, az új hidrogénion-koncentráció:

$$[\text{H}^+]' = \frac{n_{\text{sav}} - y}{n_{\text{só}} + y} \cdot K_s.$$

A fenti reakcióegyenlet értelmében, ha erős lúgot adunk az oldathoz, a lúg teljes mennyisége elreagál a savval, így a sav anyagmennyisége csökken, a só anyagmennyisége pedig ugyanennyivel növekszik. Ha y értéke kicsi, a hidrogénion-koncentráció változása nem jelentős, a puffer „tartja” a pH-értékét ($[\text{H}^+]' \approx [\text{H}^+]$).

Itt érdemes megismerkedünk a pufferkapacitás fogalmával!

Erős savra vonatkozó pufferkapacitás: egy erős sav anyagmennyisége, melyet 1 dm^3 pufferelegyhez – térfogatváltozás nélkül – hozzáadva, annak pH-ja 1 egységgel csökken.

Erős bázisra vonatkozó pufferkapacitás: egy erős bázis anyagmennyisége, melyet 1 dm^3 pufferelegyhez – térfogatváltozás nélkül – hozzáadva, annak pH-ja 1 egységgel növekszik.

Fentebb említettük, hogy a pufferoldat pH-ja – eltekintve az extrém híg oldatoktól – gyakorlatilag független a sav és a só anyagmennyiségétől, csupán ezek arányától függ. Mint látható, a pufferkapacitás azonban nagyon is függ a konkrét koncentrációktól (anyagmennyiségektől), ezért a pufferek alkalmazhatósága szempontjából igen fontos az anyagok oldatbeli koncentrációja is (nemcsak ezek aránya).

Most nézzük meg, hogyan számítható a pufferkapacitás egy savas pufferre!

Legyen a kiindulási sav és só koncentrációja: c_{sav} és $c_{\text{só}}$! Ekkor az oldat (kiindulási) hidrogénion-koncentrációja:

$$[\text{H}^+]_0 = \frac{c_{\text{sav}}}{c_{\text{só}}} \cdot K_s.$$

Adjunk dm^3 -enként β_{sav} mólnyi erős savat az oldathoz (x az erős savra vonatkoztatott pufferkapacitás), ekkor az új hidrogénion-koncentráció:

$$[\text{H}^+]' = \frac{c_{\text{sav}} + \beta_{\text{sav}}}{c_{\text{só}} - \beta_{\text{sav}}} \cdot K_s.$$

A pH eközben – a pufferkapacitás definíciója szerint – egy egységnyit csökken, mely a hidrogénion-koncentrációban 10-szeres növekedést jelent:

$$[\text{H}^+]' = 10 \cdot [\text{H}^+]_0.$$

(Megjegyzés: ez könnyen belátható, ha a fenti egyenletből meghatározzuk a pH-t:

$$\text{pH}' = -\lg[\text{H}^+]' = -\lg(10 \cdot [\text{H}^+]_0) = -(\lg 10 + \lg[\text{H}^+]_0) = -(1 - \text{pH}) = \text{pH} - 1).$$

Így az $[\text{H}^+]'$ értékét behelyettesítve a pufferképletbe:

$$[\text{H}^+]' = \frac{c_{\text{sav}} + \beta_{\text{sav}}}{c_{\text{só}} - \beta_{\text{sav}}} \cdot K_s = 10 \cdot [\text{H}^+]_0.$$

Mivel a kiindulási c_{sav} és $c_{\text{só}}$ koncentrációk meghatározzák a kiindulási $[\text{H}^+]_0$ -t:

$$[\text{H}^+]' = \frac{c_{\text{sav}} + \beta_{\text{sav}}}{c_{\text{só}} - \beta_{\text{sav}}} \cdot K_s = 10 \cdot [\text{H}^+]_0 = 10 \cdot \frac{c_{\text{sav}}}{c_{\text{só}}} \cdot K_s.$$

Az egyenletet megoldva x-re:

$$\beta_{\text{sav}} = \frac{9 \cdot c_{\text{sav}} \cdot c_{\text{só}}}{10 \cdot c_{\text{sav}} + c_{\text{só}}}.$$

Mint látható, a pufferkapacitás független a sav disszociációs állandójától, csak a sav és a só bemérési koncentrációjától függ!

Teljesen hasonló módon levezethető a bázisra vonatkozó pufferkapacitás is. Ekkor, a fentihez képest, két különbséget kell figyelembe venni: a $[\text{H}^+]$ nem 10-szeresére növekszik, hanem 10-edére csökken ($[\text{H}^+]'' = 0,1 \cdot [\text{H}^+]_0$), a savkoncentráció csökken, és nem növekszik, valamint a sókoncentráció növekszik, és nem csökken:

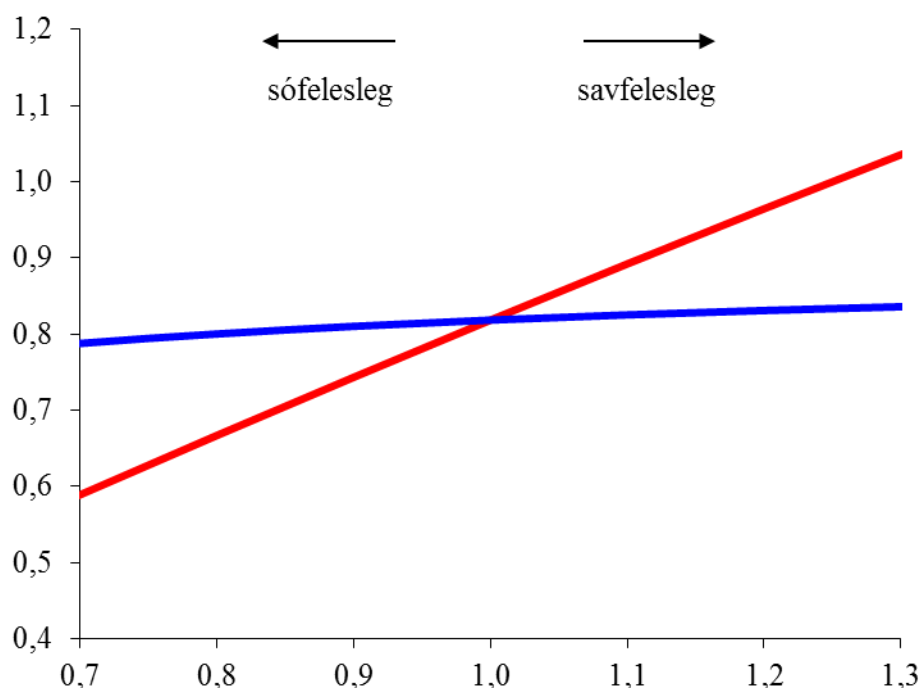
$$[\text{H}^+]'' = \frac{c_{\text{sav}} - \beta_{\text{bázis}}}{c_{\text{só}} + \beta_{\text{bázis}}} \cdot K_s = \frac{1}{10} \cdot [\text{H}^+]_0 = \frac{1}{10} \cdot \frac{c_{\text{sav}}}{c_{\text{só}}} \cdot K_s.$$

Az egyenletet megoldva:

$$\beta_{\text{bázis}} = \frac{9 \cdot c_{\text{só}} \cdot c_{\text{sav}}}{10 \cdot c_{\text{só}} + c_{\text{sav}}}.$$

A képlet nagyon hasonlít a savra vonatkozó pufferkapacításra, a különbség a nevezőben van.

Egy adott savkoncentráció ($c_{\text{sav}} = 1 \text{ mol/dm}^3$) esetén ábrázolva az erős savra és az erős bázisra vonatkozó pufferkapacitást a sókoncentráció függvényében a következő diagramot kapjuk:



8.6.1.11.1. ábra: A pufferkapacitás

Az ábrán jól megfigyelhető, hogy ha a gyenge sav van feleslegben, akkor a bázisra vonatkozó pufferkapacitás nagyobb, mint a savra vonatkoztatott ($\beta_{\text{bázis}} > \beta_{\text{sav}}$), míg a sókomponens feleslege esetén $\beta_{\text{sav}} > \beta_{\text{bázis}}$. Különösen fontos a $c_{\text{sav}} = c_{\text{só}}$ eset, mivel ekkor a savra és a bázisra vonatkozó pufferkapacitás azonos, tehát akár sav, akár bázis kerül az oldatba, mindkét esetben azonosan hatékony a pufferoldat.

A bázisokat és savanyú sókat tartalmazó pufferekre is hasonló összefüggések vezethetők le, ezeket itt nem ismertetjük részletesen, azonban az alábbi kidolgozott mintafeladatokban bemutatjuk őket.

8.57. példa:

Összekeverünk $250,0 \text{ cm}^3$ $1,000 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú ammónia- és $250,0 \text{ cm}^3$ $1,000 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú ammónium-nitrát-oldatot, majd a térfogatot $1000,0 \text{ cm}^3$ -re egészítjük ki desztillált vízzel. Mekkora az oldat pH-ja? Mekkora az oldat erős savra, illetve erős bázisra vonatkozó pufferkapacitása? $K_b = 1,78 \cdot 10^{-5}$

Megoldás:

A bázis és a só koncentrációja az oldatban:

$$c_{\text{bázis}} = \frac{0,250 \cdot 1,000 \text{ mol}}{1,000 \text{ dm}^3} = 0,250 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}, \quad c_{\text{só}} = \frac{0,250 \cdot 1,000 \text{ mol}}{1,000 \text{ dm}^3} = 0,250 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}.$$

Így az oldat hidroxidion-koncentrációja:

$$[\text{OH}^-] = K_b \cdot \frac{c_{\text{bázis}}}{c_{\text{só}}} = 1,78 \cdot 10^{-5} \cdot \frac{0,250}{0,250} = 1,78 \cdot 10^{-5}.$$

Ebből a pH:

$$\text{pH} = 14 - \text{pOH} = 14 + \lg[\text{OH}^-] = 14 + \lg 1,78 \cdot 10^{-5} = 9,250.$$

Savra vonatkozó pufferkapacitás számítása:

I. megoldás:

Adjunk x mólnyi erős savat 1 dm^3 pufferhez. Ekkor keletkezik x mólnyi ammóniumsó a kiindulási $0,250 \text{ mol}$ mellett, az ammónia anyagmennyisége pedig csökken x móllal, tehát új koncentrációja $(0,250 - x) \text{ mol/dm}^3$.

Az új pH 1 egységgel kisebb kell, hogy legyen, azaz a hidroxidion-koncentrációnak 10-edére kell csökkennie:

$$[\text{OH}^-]' = \frac{[\text{OH}^-]}{10} = \frac{1,78 \cdot 10^{-5}}{10} = 1,78 \cdot 10^{-6}.$$

Behelyettesítve a pufferképletbe:

$$[\text{OH}^-]' = 1,78 \cdot 10^{-6} = 1,78 \cdot 10^{-5} \cdot \frac{c_{\text{bázis}} - x}{c_{\text{só}} + x} = 1,78 \cdot 10^{-5} \cdot \frac{0,250 - x}{0,250 + x}.$$

Az egyenlet megoldása: $x = 0,2045$.

II. megoldás:

A feladatot – a fentiekhez hasonlóan – természetesen képlet levezetésével is megoldhatjuk.

A hidroxidion-koncentráció az erős sav hozzáadása után a pufferkapacitás definíciója alapján:

$$[\text{OH}^-]' = \frac{[\text{OH}^-]}{10}.$$

Behelyettesítve a pufferképletbe:

$$[\text{OH}^-]' = \frac{[\text{OH}^-]}{10} = \frac{1}{10} \cdot K_b \cdot \frac{c_{\text{bázis}}}{c_{\text{só}}} = K_b \cdot \frac{c_{\text{bázis}} - x}{c_{\text{só}} + x}.$$

Az egyenlet rendezésével kapjuk:

$$x = \frac{9 \cdot c_{\text{só}} \cdot c_{\text{bázis}}}{10 \cdot c_{\text{só}} + c_{\text{bázis}}} = \beta_{\text{sav}}.$$

Érdeemes a képletet összehasonlítani a savas pufferek lúg hozzáadására vonatkozó pufferkapacitásával!

Behelyettesítve a képletbe:

$$x = \frac{9 \cdot c_{\text{só}} \cdot c_{\text{bázis}}}{10 \cdot c_{\text{só}} + c_{\text{bázis}}} = \frac{9 \cdot 0,250 \cdot 0,250}{10 \cdot 0,250 + 0,250} = 0,2045.$$

Bázisra vonatkozó pufferkapacitás számítása:

A fentiekhez hasonlóan kétféle megoldást ismertetünk.

I. megoldás:

Ha y mólnyi erős bázist adunk 1 dm^3 pufferhez, keletkezik y mólnyi ammónia (a már meglévő $0,250 \text{ mol}$ mellé), az ammóniumsó anyagmennyisége pedig csökken y móllal, tehát új koncentrációja $(0,250 - y) \text{ mol/dm}^3$. A hidroxidion-koncentráció 10-szeresére növekszik az y mólnyi erős lúg hozzáadására:

$$[\text{OH}^-]' = 10 \cdot [\text{OH}^-] = 10 \cdot 1,78 \cdot 10^{-5} = 1,78 \cdot 10^{-4}.$$

Az adatokat beírva a pufferképletbe:

$$[\text{OH}^-]' = 1,78 \cdot 10^{-4} = K_b \cdot \frac{c_{\text{bázis}}}{c_{\text{só}}} = 1,78 \cdot 10^{-5} \cdot \frac{0,250 + y}{0,250 - y}.$$

Az egyenletet megoldva a következő eredményt kapjuk: $y = 0,2045$.

Mivel a pufferben található bázis és só koncentrációja azonos, az erős savra és erős bázisra vonatkoztatott pufferkapacitás is azonos.

II. megoldás:

Teljesen analóg módon levezethető az alábbi képlet:

$$\beta_{\text{bázis}} = \frac{9 \cdot c_{\text{bázis}} \cdot c_{\text{só}}}{10 \cdot c_{\text{bázis}} + c_{\text{só}}}.$$

(Ismét érdemes összehasonlítani a képletet a savas puffereknél megismertekkel: a savas puffer savra vonatkozó pufferkapacitásának képlete azonos a bázisos puffer erős bázisra vonatkozó pufferkapacitásával, a különbség csupán annyi, hogy a képletben $c_{\text{bázis}}$ -t kell írni c_{sav} helyére!)

Behelyettesítve a képletbe:

$$\beta_{\text{bázis}} = \frac{9 \cdot c_{\text{bázis}} \cdot c_{\text{só}}}{10 \cdot c_{\text{bázis}} + c_{\text{só}}} = \frac{9 \cdot 0,250 \cdot 0,250}{10 \cdot 0,250 + 0,250} = 0,2045.$$

Tehát a keletkezett puffer pH-ja 9,25, a savra és a bázisra vonatkoztatott pufferkapacitás is $0,2045 \text{ mol/dm}^3$.

8.58. példa:

$500,0 \text{ cm}^3$ $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú ammónium-klorid-oldatban feloldottunk $1,200 \text{ gramm}$ szilárd nátrium-hidroxidot. Mekkora változott az oldat pH-ja? Mekkora anyagmennyiségű sósavat vagy nátrium-hidroxidot kell az oldathoz adni, hogy a pH 10,000 legyen? $M(\text{NaOH}) = 40,0 \text{ g/mol}$, $K_b = 1,78 \cdot 10^{-5}$

Megoldás:

Az ammónium-klorid-oldat pH-ja savas, mivel a só hidrolizál. A hidrolízisállandó:

$$K_h = \frac{K_v}{K_b} = \frac{10^{-14}}{1,78 \cdot 10^{-5}} = 5,618 \cdot 10^{-10}.$$

Az oldat hidrogénion-koncentrációja a közelítő képlettel:

$$[\text{H}^+] \approx \sqrt{K_h \cdot c_0} = \sqrt{5,628 \cdot 10^{-10} \cdot 0,1} = 7,495 \cdot 10^{-6}.$$

Leellenőrizve a hidrolízisfokot:

$$\delta = \frac{[\text{NH}_3]}{c_0} = \frac{[\text{H}^+]}{c_0} = \frac{7,495 \cdot 10^{-6}}{0,100} = 7,495 \cdot 10^{-5} \ll 0,05.$$

A kiindulási oldat pH-ja:

$$\text{pH} = -\lg[\text{H}^+] = -\lg 7,495 \cdot 10^{-6} = 5,125.$$

Az oldat eredetileg tartalmazott 0,05 mól ammónium-kloridot, majd feloldunk benne 0,03 mól nátrium-hidroxidot, így keletkezik 0,03 mól ammónia és maradt $0,05 - 0,03 = 0,02$ mól ammónium-klorid. Az oldat pH-ja a pufferképlet segítségével:

$$[\text{OH}^-] = K_b \cdot \frac{n_{\text{bázis}}}{n_{\text{só}}} = 1,78 \cdot 10^{-5} \cdot \frac{0,03}{0,02} = 2,67 \cdot 10^{-5}.$$

Az oldat pH-ja:

$$\text{pH} = 14 - \text{pOH} = 14 + \lg[\text{OH}^-] = 14 + \lg 2,67 \cdot 10^{-5} = 9,427.$$

Tehát az oldat pH-ja 4,302 egységnyivel nőtt a nátrium-hidroxid hozzáadására.

Ahhoz, hogy a pH-t 9,427-ről 10,000-re növeljük, nátrium-hidroxidot kell adni az oldathoz. Ha n mólnyi nátrium-hidroxidot adunk az oldathoz, abból keletkezik n mólnyi ammónia, az ammónium-klorid anyagmennyisége pedig n -nel csökken. A következő egyenletet kapjuk:

$$1,78 \cdot 10^{-5} \cdot \frac{0,03 + n}{0,02 - n} = 10^{-4}.$$

Az egyenlet megoldása: $n = 0,01245$. Tehát még 0,01245 mól nátrium-hidroxidot kell feloldani az oldatban.

8.59. példa:

100,0 cm³ térfogatú savas pH-jú puffert szeretnénk készíteni, melynek pH-ja 3,000 és 4,000 közötti tartományba esik. A laborban találtunk egy üveg 1,000 mol/dm³ koncentrációjú ecetsavoldatot. Készíthető-e olyan puffer, mely a fenti pH-tartományba esik, és a bázisra vonatkozó pufferkapacitása 0,500 mol/dm³? Ha igen, akkor mekkora tömegű nátrium-acetátot kell feloldanunk 100,0 cm³ ecetsavban? Előállítható megfelelő pH-jú és pufferkapacitású puffer úgy, ha az ecetsavban nátrium-hidroxidot oldunk fel? $M(\text{CH}_3\text{COONa}) = 82,0$ g/mol, $K_s = 1,79 \cdot 10^{-5}$

Megoldás:

Az oldat hidrogénion-koncentrációjára felírható:

$$[\text{H}^+] = \frac{c_{\text{sav}}}{c_{\text{só}}} \cdot K_s.$$

Induljunk ki abból a feltételből, hogy a bázisra vonatkoztatott pufferkapacitásnak 0,500 mol/dm³-nek kell lennie!

Legyen a nátrium-acetát koncentrációja $c_{\text{só}}$! Ekkor literenként 0,5 mól erős bázist adva az oldathoz, a sókoncentráció megnövekszik 0,5 mol/dm³-rel, a savkoncentráció pedig lecsökken 0,5 mol/dm³-rel:

$$[\text{H}^+] = \frac{c_{\text{sav}} - \beta_{\text{bázis}}}{c_{\text{só}} + \beta_{\text{bázis}}} \cdot K_s = \frac{1 - 0,5}{c_{\text{só}} + 0,5} \cdot 1,79 \cdot 10^{-5}.$$

A hidrogénion-koncentráció ekkor az eredeti 10-edére csökken:

$$[\text{H}^+] = \frac{[\text{H}^+]}{10} = \frac{c_{\text{sav}}}{c_{\text{só}}} \cdot \frac{K_s}{10} = \frac{1}{c_{\text{só}}} \cdot \frac{1,79 \cdot 10^{-5}}{10}.$$

A fenti két egyenletből:

$$\frac{1 - 0,5}{c_{\text{só}} + 0,5} \cdot 1,79 \cdot 10^{-5} = \frac{1}{c_{\text{só}}} \cdot \frac{1,79 \cdot 10^{-5}}{10}.$$

Megoldásként kapjuk: $c_{\text{só}} = 0,125$. Le kell ellenőriznünk, hogy az oldat pH-ja beleesik-e a megadott pH-tartományba!

$$[\text{H}^+] = \frac{c_{\text{sav}}}{c_{\text{só}}} \cdot K_s = \frac{1,000}{0,125} \cdot 1,79 \cdot 10^{-5} = 1,432 \cdot 10^{-4}.$$

Így a pH:

$$\text{pH} = -\lg[\text{H}^+] = -\lg 1,432 \cdot 10^{-4} = 3,844.$$

Mint látható, az oldat pH-ja 3,000 és 4,000 közé esik, tehát készíthető a megadott feltételeknek megfelelő pufferoldat. Ehhez a $100,0 \text{ cm}^3$ $1,000 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú ecetsavban feloldandó nátrium-acetát tömege:

$$m_{\text{só}} = M \cdot n_{\text{só}} = M \cdot c_{\text{só}} \cdot V = 82 \cdot 0,125 \cdot 0,1 \text{ g} = 1,025 \text{ g}.$$

Tehát 1,025 gramm nátrium-acetátot kell feloldanunk az ecetsavoldatban.

Most vizsgáljuk meg, lehetséges-e a megfelelő oldat előállítása nátrium-hidroxid feloldásával! Induljunk ki $1,000 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú ecetsavoldatból, oldjunk fel benne NaOH-ot $c \text{ (mol/dm}^3\text{)}$ koncentrációban! Ekkor a maradék savkoncentráció: $(1 - c) \text{ mol/dm}^3$, a keletkezett só koncentrációja $c \text{ mol/dm}^3$. Az oldat hidrogénion-koncentrációja:

$$[\text{H}^+] = \frac{c_{\text{sav}}}{c_{\text{só}}} \cdot K_s = \frac{1 - c}{c} \cdot 1,79 \cdot 10^{-5}.$$

Felírva a bázisra vonatkozó pufferkapacitást (a hidrogénion-koncentráció a kiindulási tizedére csökken):

$$[\text{H}^+] = \frac{c_{\text{sav}}}{c_{\text{só}}} \cdot K_s = \frac{(1 - c) - 0,5}{c + 0,5} \cdot 1,79 \cdot 10^{-5} = \frac{1 - c}{c} \cdot \frac{1,79 \cdot 10^{-5}}{10}.$$

Ebből a következő, másodfokúra vezető egyenletet kapjuk:

$$\frac{0,5 - c}{c + 0,5} = \frac{1 - c}{10 \cdot c}.$$

Az egyenlet két megoldása:

$$c_1 = \frac{1}{3}; \quad c_2 = \frac{1}{6}.$$

Nézzük meg, hogy mekkora ezen pufferoldatok pH-ja! A fenti módon kiszámítva c1 esetén a pH 4,446, a második megoldás esetén pedig 4,048. Tehát nátrium-hidroxid feloldásával nem állítható elő a kívánt pufferoldat!

8.60. példa:

Ecetsavból és nátrium-acetátból szeretnénk 4,000 pH-jú pufferoldatot készíteni. Milyen koncentrációban kell tartalmaznia a két anyagot a puffernek, ha azt szeretnénk, hogy savra is és lúgra is legalább 0,01 mol/dm³ legyen a pufferkapacitás? $K_s = 1,79 \cdot 10^{-5}$

Megoldás:

Az adott pH miatt a koncentrációk aránya meghatározott:

$$[\text{H}^+] = \frac{c_{\text{sav}}}{c_{\text{só}}} \cdot K_s \quad \Rightarrow \quad \frac{c_{\text{sav}}}{c_{\text{só}}} = \frac{[\text{H}^+]}{K_s} = \frac{10^{-4}}{1,79 \cdot 10^{-5}} = 5,5866.$$

Nézzük először a savra vonatkoztatott pufferkapacitást! Köbdeciméterenként egy erős sav 0,05 mólnyi mennyiségét hozzáadva, a pH nem lehet 3,000-nál kisebb:

$$[\text{H}^+] = \frac{c_{\text{sav}} + 0,01}{c_{\text{só}} - 0,01} \cdot 1,79^{-5} \leq 10^{-3}.$$

Ismerjük továbbá a sav és só koncentrációjának arányát is: $c_{\text{sav}} = 5,5866 \cdot c_{\text{só}}$. Így az egyenlőség pozitív előjelű megoldása: $c_{\text{só}} \geq 0,0566$, $c_{\text{sav}} \geq 0,3159$, de a $c_{\text{sav}}/c_{\text{só}}$ aránynak a megadott értéknek kell lennie, különben nem 4,000 a puffer pH-ja!

Most számítsuk ki az összetételt a bázisra vonatkozó pufferkapacitásra is! 0,05 mól erős bázis hozzáadására nem lehet a pH 5,000-nál nagyobb:

$$[\text{H}^+] = \frac{c_{\text{sav}} - 0,01}{c_{\text{só}} + 0,01} \cdot 1,79^{-5} \geq 10^{-5}.$$

Természetesen továbbra is fennáll, hogy $c_{\text{sav}} = 5,5866 \cdot c_{\text{só}}$! Így az egyenlőség megoldása: $c_{\text{só}} \geq 0,0155$, $c_{\text{sav}} \geq 0,0866$. Mivel ezek az értékek kisebbek, mint amelyeket a savra vonatkozó pufferkapacitásnál kaptunk, mindenképpen a nagyobb értékeket kell figyelembe vennünk! (Ha nem így tennénk, a savra vonatkozó pufferkapacitás nem lenne megfelelően nagy.)

Tehát a leghígabb oldat összetétele, mely megfelel a pufferrel szemben támasztott követelményeknek: $c_{\text{sav}} = 0,316 \text{ mol/dm}^3$, $c_{\text{só}} = 0,0566 \text{ mol/dm}^3$.

Megjegyzés:

A pufferoldatban jelentősen nagyobb a savkoncentráció, mint a sókoncentráció, ezért a bázisra vonatkozó pufferkapacitás nagyobb, mint a savra vonatkozó. Tehát ha a savra teljesül a feltétel, a bázisra is minden bizonnyal teljesülnie kell! Ezt könnyen le is ellenőrizhetjük:

Számítsuk ki a bázisra vonatkozó pufferkapacitást, ha $c_{\text{sav}} = 0,316 \text{ mol/dm}^3$, $c_{\text{só}} = 0,0566 \text{ mol/dm}^3$! A sav koncentrációja $\beta_{\text{bázis}}$ -sal csökken, a sóé pedig ugyanennyivel nő:

$$\frac{0,316 - \beta_{\text{bázis}}}{0,0566 + \beta_{\text{bázis}}} \cdot 1,79^{-5} = 10^{-5}.$$

Az egyenlet megoldása: $\beta_{\text{bázis}} = 0,182$. Tehát a fenti puffer esetén tényleg teljesül, hogy a bázisra vonatkozó pufferkapacitás nagyobb, mint a savra vonatkozó!

8.61. példa:

Gyakran előfordul, hogy megadott feltételek mellett pufferelegyet kell terveznünk, ebben a viszonylag nehéz feladatban ez lesz a dolgunk.

Egy kémiai reakció legnagyobb kitermeléssel $\text{pH} = 3$ esetén hajtható végre. A keletkező termék lúgra igen érzékeny, ezért az oldat lúgra vonatkozó pufferkapacitását $1,000 \text{ mol/dm}^3$ értékre szeretnénk beállítani, a savra vonatkozó pufferkapacitás pedig legyen $0,500 \text{ mol/dm}^3$! Mekkora savi disszociációs állandójú savat válasszunk, és milyen bemérési koncentrációkat kell alkalmaznunk, hogy megfelelő pufferkapacitású és $3,000 \text{ pH}$ -jú oldatot kapjunk?

Megoldás:

A pH -ból az alábbi összefüggést kapjuk:

$$K_s = [\text{H}^+] \cdot \frac{c_{\text{só}}}{c_{\text{sav}}} = 10^{-3} \cdot \frac{c_{\text{só}}}{c_{\text{sav}}}$$

A feladat bázisra vonatkozó pufferkapacitása azt jelenti, hogy literenként $1,000 \text{ mol}$ erős bázis nem okoz 1 egységnél nagyobb pH -növekedést (azaz a pH ne legyen nagyobb $4,000$ -nél).

$$\frac{c_{\text{sav}} - 1}{c_{\text{só}} + 1} \cdot K_s = 10^{-4}$$

Behelyettesítve K_s kifejezését:

$$\frac{c_{\text{sav}} - 1}{c_{\text{só}} + 1} \cdot 10^{-3} \cdot \frac{c_{\text{só}}}{c_{\text{sav}}} = 10^{-4}$$

Hasonlóan a savra vonatkozó pufferkapacitás esetén:

$$\frac{c_{\text{sav}} + 0,5}{c_{\text{só}} - 0,5} \cdot K_s = 10^{-2}$$

Ismét behelyettesítve K_s -t:

$$\frac{c_{\text{sav}} + 0,5}{c_{\text{só}} - 0,5} \cdot 10^{-3} \cdot \frac{c_{\text{só}}}{c_{\text{sav}}} = 10^{-2}$$

Az alábbi egyenletrendszert kapjuk:

$$\frac{c_{\text{sav}} - 1}{c_{\text{só}} + 1} \cdot \frac{c_{\text{só}}}{c_{\text{sav}}} = \frac{1}{10}; \quad \frac{c_{\text{sav}} + 0,5}{c_{\text{só}} - 0,5} \cdot \frac{c_{\text{só}}}{c_{\text{sav}}} = 10.$$

Az egyenletrendszer megoldása: $c_{\text{só}} = 0,5879$, $c_{\text{sav}} = 1,375$. Így a disszociációs állandót is meghatározhatjuk:

$$K_s = [\text{H}^+] \cdot \frac{c_{\text{só}}}{c_{\text{sav}}} = 10^{-3} \cdot \frac{0,5879}{1,375} = 4,28 \cdot 10^{-4}$$

Tehát a feladatban keresett sav disszociációs állandója $4,28 \cdot 10^{-4}$, a sav bemérési koncentrációja legyen $1,375 \text{ mol/dm}^3$, a sóé pedig $0,5879 \text{ mol/dm}^3$.

8.62. példa:

Milyen c_{sav} és $c_{\text{só}}$ koncentrációkat kell alkalmazni egy savas puffer esetén, hogy a pufferkapacitás β_{sav} és $\beta_{\text{bázis}}$ legyen?

Megoldás:

A két pufferkapacitás:

$$\beta_{\text{sav}} = \frac{9 \cdot c_{\text{sav}} \cdot c_{\text{só}}}{10 \cdot c_{\text{sav}} + c_{\text{só}}} \quad \text{és} \quad \beta_{\text{bázis}} = \frac{9 \cdot c_{\text{só}} \cdot c_{\text{sav}}}{10 \cdot c_{\text{só}} + c_{\text{sav}}}.$$

Az egyenletekből kifejezhető c_{sav} és $c_{\text{só}}$:

$$c_{\text{sav}} = \frac{11 \cdot \beta_{\text{sav}} \cdot \beta_{\text{bázis}}}{10 \cdot \beta_{\text{sav}} - \beta_{\text{bázis}}} \quad \text{és} \quad c_{\text{só}} = \frac{11 \cdot \beta_{\text{sav}} \cdot \beta_{\text{bázis}}}{10 \cdot \beta_{\text{bázis}} - \beta_{\text{sav}}}.$$

Az oldat hidrogénion-koncentrációja pedig:

$$[\text{H}^+] = \frac{c_{\text{sav}}}{c_{\text{só}}} \cdot K_s = \frac{\frac{11 \cdot \beta_{\text{sav}} \cdot \beta_{\text{bázis}}}{10 \cdot \beta_{\text{sav}} - \beta_{\text{bázis}}}}{\frac{11 \cdot \beta_{\text{sav}} \cdot \beta_{\text{bázis}}}{10 \cdot \beta_{\text{bázis}} - \beta_{\text{sav}}}} \cdot K_s = \frac{10 \cdot \beta_{\text{bázis}} - \beta_{\text{sav}}}{10 \cdot \beta_{\text{sav}} - \beta_{\text{bázis}}} \cdot K_s.$$

Természetesen c_{sav} -nak és $c_{\text{só}}$ -nak is pozitívnak kell lennie, ezért csak akkor van értelme a képletet alkalmazni, ha teljesülnek a következő egyenlőtlenségek:

$$0 < 10 \cdot \beta_{\text{sav}} - \beta_{\text{bázis}} \quad \Rightarrow \quad \beta_{\text{bázis}} < 10 \cdot \beta_{\text{sav}}.$$

Illetve:

$$0 < 10 \cdot \beta_{\text{bázis}} - \beta_{\text{sav}} \quad \Rightarrow \quad \beta_{\text{bázis}} > \frac{\beta_{\text{sav}}}{10}.$$

Tehát nem készíthetünk bármilyen tetszőleges pufferkapacítású oldatot, teljesülnie kell a következő egyenlőtlenségeknek:

$$\frac{\beta_{\text{sav}}}{10} < \beta_{\text{bázis}} < 10 \cdot \beta_{\text{sav}} \quad \text{és} \quad \frac{\beta_{\text{bázis}}}{10} < \beta_{\text{sav}} < 10 \cdot \beta_{\text{bázis}}.$$

A megvalósíthatóság szempontjából érdemes a kétféle pufferkapacitást viszonylag hasonló értéknek választani, legalábbis ne legyen közöttük jelentős különbség. Természetesen azonban nem lehet bármilyen tetszőleges sav- és sókoncentrációt létrehozni, ezért a gyakorlatban nem lehet tetszőlegesen nagy pufferkapacítású oldatot előállítani, az oldhatóság határt szab a pufferkapacitás nagyságának.

Savak (bázisok) és sók elegyei a kis koncentrációban

Mint már fentebb is említettük, ha egy pufferoldatot (illetve bármilyen más vizes oldatot) vízzel hígítunk, annak pH-ja a semleges pH felé közelít. Ha a puffer bármely alkotóelemének a koncentrációja kicsi, már nem élhetünk azzal az elhanyagolással, melyet a Henderson–Hasselbach-egyenletnél alkalmaztunk.

Például egy savas pufferoldat esetén, ha a sav koncentrációja jóval nagyobb, mint a só koncentrációja, a sav valamennyire disszociálni képes, így a tényleges savkoncentráció nem lesz egyenlő a bemérési savkoncentrációval.

Tehát ha $c_{\text{sav}} \gg c_{\text{só}}$, akkor a következő egyensúlyi táblázatot kell alkalmaznunk:

	HA	\rightleftharpoons	H ⁺	+	A ⁻
Kiindulási:	c_{sav}		0		$c_{\text{só}}$
Átalakul:	- x		+ x		+ x
Egyensúlyban:	$c_{\text{sav}} - x$		x		$c_{\text{só}} + x$

Így a következő egyenlethez jutunk (bevezetjük, hogy $x = [\text{H}^+]$):

$$K_s = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{A}^-]}{[\text{HA}]} = \frac{x \cdot (c_{\text{só}} + x)}{c_{\text{sav}} - x} = \frac{[\text{H}^+] \cdot (c_{\text{só}} + [\text{H}^+])}{c_{\text{sav}} - [\text{H}^+]}$$

Átrendezve a következő egyenletet kapjuk:

$$[\text{H}^+] = K_s \cdot \frac{c_{\text{sav}} - [\text{H}^+]}{c_{\text{só}} + [\text{H}^+]}$$

Mint látható, ha $c_{\text{sav}} \gg [\text{H}^+]$ és $c_{\text{só}} \gg [\text{H}^+]$, az egyenletben a $[\text{H}^+]$ elhanyagolásával visszakapjuk a Henderson–Hasselbach-egyenletet:

$$[\text{H}^+] = K_s \cdot \frac{c_{\text{sav}} - [\text{H}^+]}{c_{\text{só}} + [\text{H}^+]} \approx K_s \cdot \frac{c_{\text{sav}}}{c_{\text{só}}}$$

Azonban ha $c_{\text{só}}$ értéke kicsi, és ehhez képes c_{sav} nagy, mindenképpen a fenti egyenletet kell alkalmaznunk!

8.63. példa:

Mekkora annak az oldatnak a pH-ja, mely hangyasavat $0,100 \text{ mol/dm}^3$, míg nátrium-formiátot $0,00100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációban tartalmaz? $K_s = 1,80 \cdot 10^{-4}$.

Megoldás:

Alkalmazzuk a fenti egyenletet!

$$K_s = \frac{[\text{H}^+] \cdot (c_{\text{só}} + [\text{H}^+])}{c_{\text{sav}} - [\text{H}^+]}$$

Behelyettesítve K_s -t és c_{sav} és $c_{\text{só}}$ koncentrációkat, a következő egyenletet kapjuk:

$$1,80 \cdot 10^{-4} = \frac{[\text{H}^+] \cdot (0,001 + [\text{H}^+])}{0,1 - [\text{H}^+]}$$

Ennek pozitív előjelű megoldása: $[\text{H}^+] = 3,693 \cdot 10^{-3}$, melyből következik, hogy az oldat pH-ja 2,433. Könnyen kiszámítható, hogy a Henderson–Hasselbach-egyenletet alkalmazva, eredményül a hibás $\text{pH} = 1,745$ értéket kapnánk. Érdemes itt azt is megjegyezni, hogy a $0,1 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú tiszta hangyasavoldat pH-ja 2,382, így a Henderson–Hasselbach-egyenlet ebben az esetben még a tiszta pH-jánál is kisebb értéket eredményez!

Ettől eltérő a helyzet, ha a „pufferoldatban” a só koncentrációja sokkal nagyobb, mint a sav koncentrációja ($c_{\text{só}} \gg c_{\text{sav}}$). Ekkor a só hidrolízise a meghatározó, így a következő táblázatot írhatjuk fel:

	A^-	+	H_2O	\rightleftharpoons	HA	+	OH^-
Kiindulási:	$c_{\text{só}}$				c_{sav}		0
Átalakul:	$-y$				$+y$		$+y$
Egyensúlyban:	$c_{\text{só}} - y$				$c_{\text{sav}} + y$		y

Behelyettesítve a hidrolízisállandóba (és bevezetve, hogy $y = [OH^-]$):

$$\frac{K_v}{K_s} = \frac{[OH^-] \cdot [HA]}{[A^-]} = \frac{y \cdot (c_{\text{sav}} + y)}{c_{\text{só}} - y} = \frac{[OH^-] \cdot (c_{\text{sav}} + [OH^-])}{c_{\text{só}} - [OH^-]} = \frac{K_v}{[H^+]} \frac{c_{\text{sav}} + [OH^-]}{c_{\text{só}} - [OH^-]}$$

Ebből kifejezhető a $[H^+]$:

$$[H^+] = K_s \cdot \frac{c_{\text{sav}} + [OH^-]}{c_{\text{só}} - [OH^-]}$$

Szépen megfigyelhető, hogy ha c_{sav} és $c_{\text{só}}$ sokkal nagyobb, mint $[OH^-]$, ez utóbbit az egyenletből elhanyagolva visszkapjuk a Henderson–Hasselbach-egyenletet!

$$[H^+] = K_s \cdot \frac{c_{\text{sav}} + [OH^-]}{c_{\text{só}} - [OH^-]} \approx K_s \cdot \frac{c_{\text{sav}}}{c_{\text{só}}}$$

8.64. példa:

Mekkora annak az oldatnak a pH-ja, mely $0,001 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációban tartalmaz hidrogén-cianidot és $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációban nátrium-cianidot? $K_s = 4,90 \cdot 10^{-10}$.

Megoldás:

Alkalmazzuk a fenti egyenletet!

$$[H^+] = K_s \cdot \frac{c_{\text{sav}} + [OH^-]}{c_{\text{só}} - [OH^-]} = K_s \cdot \frac{c_{\text{sav}} + \frac{K_v}{[H^+]}}{c_{\text{só}} - \frac{K_v}{[H^+]}} = K_s \cdot \frac{[H^+] \cdot c_{\text{sav}} + K_v}{[H^+] \cdot c_{\text{só}} - K_v}$$

Behelyettesítve a következő egyenletet kapjuk:

$$[H^+] = 4,90 \cdot 10^{-10} \cdot \frac{[H^+] \cdot 0,001 + 10^{-14}}{[H^+] \cdot 0,100 - 10^{-14}}$$

A másodfokúra vezető egyenlet pozitív megoldása: $[H^+] = 9,933 \cdot 10^{-12}$, így az oldat pH-ja 11,003. A Henderson–Hasselbach-egyenlet alkalmazásával a pH 11,310-nak adódna, így viszonylag jelentős az eltérés (összehasonlításként: a $0,1 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú nátrium-cianid-oldat pH-ja 11,152).

A Brønsted–Charlot-egyenlet

A fentiekben megismertünk két olyan összefüggést, melyek akkor érvényesek, ha egy oldatban a savnak vagy sójának a koncentrációja kicsi:

$$\text{Ha } c_{\text{sav}} \gg c_{\text{só}}: \quad [\text{H}^+] = K_s \cdot \frac{c_{\text{sav}} - [\text{H}^+]}{c_{\text{só}} + [\text{H}^+]},$$

$$\text{Ha } c_{\text{só}} \gg c_{\text{sav}}: \quad [\text{H}^+] = K_s \cdot \frac{c_{\text{sav}} + [\text{OH}^-]}{c_{\text{só}} - [\text{OH}^-]}.$$

Abban az esetben, ha a savnak és sójának koncentrációja is kicsi, és ez összemérhető a víz autoprotolíziséből származó ionok koncentrációjával, egyik fenti egyenletet sem tudjuk alkalmazni. Ám a két egyenletet egyesíthetjük, így kapjuk a **Brønsted–Charlot-egyenletet**:

$$[\text{H}^+] = K_s \cdot \frac{c_{\text{sav}} - [\text{H}^+] + [\text{OH}^-]}{c_{\text{só}} + [\text{H}^+] - [\text{OH}^-]}.$$

Az egyenlet bármilyen sav- és sókoncentráció esetén alkalmazható, egyetlen szépséghibája, hogy harmadfokú egyenletre vezet, ha $[\text{OH}^-]$ -t behelyettesítjük a vízionszorzból. Tehát abban az esetben, ha a sav és a só koncentrációja igen kicsi (vagy bázisos pufferek esetén a bázis és sójának koncentrációja igen kicsi), a Brønsted–Charlot-egyenletet kell megoldanunk – iterációs úton vagy közelítést alkalmazva.

Értelemszerűen a Brønsted–Charlot-egyenletből megkapható a fentebb bemutatott két egyszerűsített egyenlet (ha $c_{\text{sav}} \gg c_{\text{só}}$, $[\text{OH}^-]$ elhanyagolható, illetve ha $c_{\text{só}} \gg c_{\text{sav}}$, $[\text{H}^+]$ elhanyagolható) és a Henderson–Hasselbach-képlet is (ha $c_{\text{sav}}, c_{\text{só}} \gg [\text{H}^+], [\text{OH}^-]$, $[\text{H}^+]$ és $[\text{OH}^-]$ is elhanyagolható).

8.65. példa:

Mekkora azon oldatnak a pH-ja, mely $1,00 \cdot 10^{-7} \text{ mol/dm}^3$ koncentrációban tartalmaz ecetsavat és $2,00 \cdot 10^{-7} \text{ mol/dm}^3$ koncentrációban nátrium-acetátot? $K_s = 1,79 \cdot 10^{-5}$.

Megoldás:

Az alábbi egyenletet kell megoldanunk:

$$[\text{H}^+] = K_s \cdot \frac{c_{\text{sav}} - [\text{H}^+] + [\text{OH}^-]}{c_{\text{só}} + [\text{H}^+] - [\text{OH}^-]} = K_s \cdot \frac{c_{\text{sav}} - [\text{H}^+] + \frac{K_v}{[\text{H}^+]}}{c_{\text{só}} + [\text{H}^+] - \frac{K_v}{[\text{H}^+]}} = K_s \cdot \frac{[\text{H}^+] \cdot c_{\text{sav}} - [\text{H}^+]^2 + K_v}{[\text{H}^+] \cdot c_{\text{só}} + [\text{H}^+]^2 - K_v}.$$

Az egyenletet átrendezve kapjuk:

$$[\text{H}^+]^3 + (K_s + c_{\text{só}}) \cdot [\text{H}^+]^2 - (K_v + K_s \cdot c_{\text{sav}}) \cdot [\text{H}^+] - K_s \cdot K_v = 0.$$

Helyettesítsük be a megfelelő mennyiségeket!

$$[\text{H}^+]^3 + (1,79 \cdot 10^{-5} + 2 \cdot 10^{-7}) \cdot [\text{H}^+]^2 - (10^{-14} + 1,79 \cdot 10^{-5} \cdot 10^{-7}) \cdot [\text{H}^+] - 1,79 \cdot 10^{-5} \cdot 10^{-14} = 0$$

$$[\text{H}^+]^3 + 1,81 \cdot 10^{-5} \cdot [\text{H}^+]^2 - 1,80 \cdot 10^{-12} \cdot [\text{H}^+] - 1,79 \cdot 10^{-19} = 0$$

Az oldat pH-ja a kis koncentrációk következtében 7 körülire tehető, azaz $[\text{H}^+] \approx 10^{-7}$. Most érdemes megbecsülni az egyenlet tagjainak nagyságrendjét:

$$[\text{H}^+]^3 \approx (10^{-7})^3 \approx 10^{-21},$$

$$1,81 \cdot 10^{-5} \cdot [\text{H}^+]^2 \approx 1,81 \cdot 10^{-5} \cdot (10^{-7})^2 \approx 10^{-19},$$

$$1,80 \cdot 10^{-12} \cdot [\text{H}^+] \approx 1,80 \cdot 10^{-12} \cdot 10^{-7} \approx 10^{-19},$$

$$1,79 \cdot 10^{-19} \approx 10^{-19}.$$

Mint látható, az első, $[\text{H}^+]^3$ tagnak két nagyságrenddel kisebb, mint a többi tag, ezért hanyagoljuk el! Az, hogy milyen elhanyagolásokat tehetünk, nagymértékben függ a feladat kiindulási adataitól, minden konkrét feladatban alaposan meg kell vizsgálni az esetleges egyszerűsítések lehetőségét!

A következő másodfokú egyenletet kapjuk:

$$1,81 \cdot 10^{-5} \cdot [\text{H}^+]^2 - 1,80 \cdot 10^{-12} \cdot [\text{H}^+] - 1,79 \cdot 10^{-19} = 0.$$

Ennek megoldása: $[\text{H}^+] = 1,609 \cdot 10^{-7}$, azaz a pH: 6,793. A harmadfokú egyenlet pontos megoldása egyébként csupán 0,6%-kal tér el ettől: $[\text{H}^+] = 1,599 \cdot 10^{-7}$, tehát a pontos pH: 6,796, az elhanyagolás csupán 0,003 egységnyi eltérést okozott.

Érdekesképp vizsgáljuk meg, milyen eredményt ad a Henderson–Hasselbach-képlet!

$$[\text{H}^+] = K_s \cdot \frac{c_{\text{sav}}}{c_{\text{só}}} = 1,79 \cdot 10^{-5} \cdot \frac{1,00 \cdot 10^{-7}}{2,00 \cdot 10^{-7}} = 8,95 \cdot 10^{-6} \Rightarrow \text{pH} = 5,048.$$

Mint látható, rendkívül nagy az eltérés, majdnem 2 pH-egység. Itt érdemes visszaemlékezni arra a gondolatra, melyet a puffer hígításával kapcsolatban megjegyeztünk. Ha a sav és a só koncentrációja viszonylag nagy, a hidrogénion-koncentráció és így a pH független a tényleges koncentrációktól, csak a sav és a só anyagmennyiségének arányától függ. Ám ha nagyon sok vízzel hígítjuk a pufferelegyet, az már nem tudja biztosítani az állandó pH-értéket! Gondoljunk a következőre: egy vödörnyi 5,00 pH-jú pufferelegyet a Dunába öntve, nem fog a folyó pH-ja is 5,00-re változni. Az ehhez hasonló esetekben a Henderson–Hasselbach-egyenlet felmondja a szolgálatot és a belőle származó tulajdonságok sem helytállóak (például hogy az oldat tartja a pH-t hígítással szemben.)

8.6.1.12. Savak, bázisok és sók keverékének pH-ja

Gyakorlasképp bemutatunk néhány kidolgozott mintafeladatot.

8.66. példa:

Állapítsuk meg az alábbi oldatok pH-ját két tizedegység pontosságra! $K_s(\text{CH}_3\text{COOH}) = 1,79 \cdot 10^{-5}$.

- A oldat** 0,100 mol/dm³ hidrogén-klorid-oldat
- B oldat** 0,200 mol/dm³ nátrium-hidroxid-oldat
- C oldat** 0,100 mol/dm³ ecetsavoldat
- D oldat** 0,300 mol/dm³ nátrium-acetát-oldat

Állapítsa meg a fenti oldatok megadott mennyiségeinek összekeverésekor kapott oldatok pH-ját. Feltételezzük, hogy az oldatok térfogatai összeadhatóak!

- 1,000 dm³ **A oldat** és 1,000 dm³ **B oldat**
- 1,000 dm³ **C oldat** és 1,000 dm³ **D oldat**
- 1,000 dm³ **A oldat** és 1,000 dm³ **C oldat**
- 1,000 dm³ **B oldat** és 1,000 dm³ **D oldat**

- i) 1,000 dm³ **A oldat** és 1,000 dm³ **D oldat**
 j) 1,000 dm³ **B oldat** és 1,000 dm³ **C oldat**
 k) 1,000 dm³ **A oldat** és 1,000 dm³ **B oldat** és 1,000 dm³ **C oldat**
 l) 3,000 dm³ **A oldat** és 1,000 dm³ **B oldat** és 1,000 dm³ **C oldat** és 1,000 dm³ **D oldat**

Megoldás:

a) A hidrogén-klorid **erős sav**, az oldata viszonylag tömény, ezért a pH-ja közvetlenül adódik a bemérési koncentrációból:

$$\text{pH} = -\lg[\text{H}^+] = -\lg c_0 = -\lg 0,1 = \underline{\underline{1,00}}$$

b) A nátrium-hidroxid **erős bázis**, ezért a pH-ja:

$$\text{pH} = 14 - \text{pOH} = 14 + \lg[\text{OH}^-] = 14 + \lg 0,2 = \underline{\underline{13,30}}$$

c) Az ecetsav egy **gyenge sav**, ezért pH-ját

	CH ₃ COOH	⇌	H ⁺	+	CH ₃ COO ⁻
Kiindulási:	0,100		0		0
Átalakul:	- x		+ x		+ x
Egyensúlyban:	0,100 - x		x		x

A disszociációs állandót felírva:

$$K_s = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{CH}_3\text{COO}^-]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]} = \frac{x \cdot x}{0,100 - x} = 1,79 \cdot 10^{-5}$$

Az egyenlet pozitív gyöke: $x = 1,329 \cdot 10^{-3}$. Így az oldat pH-ja:

$$\text{pH} = -\lg[\text{H}^+] = -\lg(1,329 \cdot 10^{-3}) = 2,87$$

Megjegyzés: a hidrogénion-koncentráció számítható a közelítő képlettel is:

$$x \approx \sqrt{K_s \cdot c_0} = \sqrt{1,79 \cdot 10^{-5} \cdot 0,1} = 1,3379 \cdot 10^{-3}$$

Ellenőrizzük le a disszociációfokot!

$$\alpha = \frac{[\text{CH}_3\text{COO}^-]}{c_0} = \frac{x}{c_0} = \frac{1,3379 \cdot 10^{-3}}{0,1} = 0,0133 < 0,05$$

Így a pH:

$$\text{pH} = -\lg[\text{H}^+] = -\lg(1,3379 \cdot 10^{-3}) = \underline{\underline{2,87}}$$

d) A nátrium-acetát egy lúgosan **hidrolizáló só**:

	CH ₃ COO ⁻	+	H ₂ O	⇌	CH ₃ COOH	+	OH ⁻
Kiindulási:	0,300		—		0		0
Átalakul:	- y		—		+ y		+ y
Egyensúlyban:	0,300 - y		—		y		y

$$K_h = \frac{K_v}{K_s} = \frac{[\text{OH}^-] \cdot [\text{CH}_3\text{COOH}]}{[\text{CH}_3\text{COO}^-]} = \frac{y \cdot y}{0,300 - x} = \frac{10^{-14}}{1,79 \cdot 10^{-5}} = 5,586 \cdot 10^{-10}$$

Az egyenlet pozitív gyöke: $x = 1,394 \cdot 10^{-5}$. Így az oldat pH-ja:

$$\text{pH} = 14 - \text{pOH} = 14 + \lg[\text{OH}^-] = 14 + \lg(1,394 \cdot 10^{-5}) = 9,11.$$

Megjegyzés: a hidroxidion-koncentráció számítható a közelítő képlettel is:

$$y \approx \sqrt{K_h \cdot c_0} = \sqrt{\frac{K_v}{K_s} \cdot c_0} = \sqrt{\frac{10^{-14}}{1,79 \cdot 10^{-5}} \cdot 0,3} = 1,295 \cdot 10^{-5}.$$

Ellenőrizzük le a hidrolízisfokot!

$$\delta = \frac{[\text{CH}_3\text{COOH}]}{c_0} = \frac{y}{c_0} = \frac{1,295 \cdot 10^{-5}}{0,3} = 4,31 \cdot 10^{-5} < 0,05$$

Így a pH:

$$\text{pH} = 14 - \text{pOH} = 14 + \lg[\text{OH}^-] = 14 + \lg(1,295 \cdot 10^{-5}) = \underline{\underline{9,11}}$$

e) $1,000 \text{ dm}^3$ $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú sósavat és $1,000 \text{ dm}^3$ $0,200 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú nátrium-hidroxid-oldatot összekeverve semlegesítési reakció megy végbe. Ki kell számolnunk, melyik komponensből marad feleslegben!

A HCl anyagmennyisége: $n(\text{HCl}) = c(\text{HCl}) \cdot V(\text{HCl}) = 0,100 \cdot 1,000 \text{ mol} = 0,100 \text{ mol}$

A NaOH anyagmennyisége: $n(\text{NaOH}) = c(\text{NaOH}) \cdot V(\text{NaOH}) = 0,200 \cdot 1,000 \text{ mol} = 0,200 \text{ mol}$

Mint látható, több a nátrium-hidroxid, mint a sósav, így az oldat pH-ja lúgos lesz. A reakcióban keletkezik $0,100 \text{ mol}$ NaCl (mely nem hidrolizál), és marad $0,100 \text{ mol}$ nátrium-hidroxid. Az oldat térfogata 2 dm^3 , így az oldat pH-ja:

$$\text{pH} = 14 - \text{pOH} = 14 + \lg[\text{OH}^-] = 14 + \lg \frac{0,1}{2} = \underline{\underline{12,70}}$$

f) Az ecetsavoldat és a nátrium-acetát-oldat összeöntésével **pufferelegy** keletkezik:

$$[\text{H}^+] = K_s \cdot \frac{c_{\text{sav}}}{c_{\text{só}}} = K_s \cdot \frac{n_{\text{sav}}}{n_{\text{só}}} = 1,79 \cdot 10^{-5} \cdot \frac{0,100}{0,300} = 5,967 \cdot 10^{-6},$$

$$\text{pH} = -\lg[\text{H}^+] = -\lg(5,967 \cdot 10^{-6}) = \underline{\underline{5,22}}$$

g) A keletkező oldat **egy erős és egy gyenge sav keveréke**. Az erős savból (HCl) keletkezik – az oldat hígulását figyelembe véve $0,05 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációban hidrogénion, mely visszaszorítja az ecetsav disszociációját:

	CH_3COOH	\rightleftharpoons	H^+	+	CH_3COO^-
Kiindulási:	0,05		0,05		0
Átalakul:	- z		+ z		+ z
Egyensúlyban:	$0,05 - z$		$0,05 + z$		z

Helyettesítsük be az egyes alkotóelemek koncentrációját az egyensúlyi állandóba!

$$K_s = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{CH}_3\text{COO}^-]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]} = \frac{(0,05 + z) \cdot z}{0,05 - z} = 1,79 \cdot 10^{-5}$$

Az egyenlet kémiailag helytálló (azaz pozitív) megoldása: $z = 1,789 \cdot 10^{-5}$, így az oldat pH-ja:

$$\text{pH} = -\lg[\text{H}^+] = -\lg(0,05 + 1,789 \cdot 10^{-5}) = \underline{\underline{1,30}}$$

(Mint látható, az ecetsav disszociációja nagyon visszaszorul, mivel az oldat eleve viszonylag nagy koncentrációban tartalmaz H^+ -t. A pH-t gyakorlatilag az erős savból származó hidrogénionok szabják meg.)

h) Egy erős bázis és egy lúgosan hidrolizáló só oldata keletkezik a két oldat összeöntésével, az erős lúg visszaszorítja a só hidrolízisét. A hígulást figyelembe véve (mivel tulajdonképpen mindkét oldat térfogata kétszeresére növekszik) az egyensúlyi táblázat:

	CH_3COO^-	+	H_2O	\rightleftharpoons	CH_3COOH	+	OH^-
Kiindulási:	0,15		—		0		0,1
Átalakul:	-v		—		+v		+v
Egyensúlyban:	$0,15 - v$		—		v		$0,1 + v$

$$K_h = \frac{K_v}{K_s} = \frac{[\text{OH}^-] \cdot [\text{CH}_3\text{COOH}]}{[\text{CH}_3\text{COO}^-]} = \frac{(0,1 + v) \cdot v}{0,15 - v} = \frac{10^{-14}}{1,79 \cdot 10^{-5}} = 5,586 \cdot 10^{-10}$$

Mivel az egyensúlyi állandó igen kicsi, a következő egyszerűsítést alkalmazhatjuk:

$$5,586 \cdot 10^{-10} = \frac{(0,1 + v) \cdot v}{0,15 - v} \approx \frac{0,1 \cdot v}{0,15} = \frac{2}{3} \cdot v.$$

Így $v \approx 8,38 \cdot 10^{-10}$, tehát az oldat pH-ját a nátrium-hidroxid határozza meg, emellett a nátrium-acetát hidrolízise elhanyagolható:

$$\text{pH} = 14 - \text{pOH} = 14 + \lg[\text{OH}^-] = 14 + \lg(0,1) = \underline{\underline{13,00}}$$

i) 0,1 mól sósavat és 0,3 mól nátrium-acetátot kevertünk össze (2 dm³ oldattérfogatban). A nátrium-acetát van feleslegben, a sósavból és a nátrium-acetát egy részéből ecetsav keletkezik, így egy puffereleggyel van dolgunk. A keletkező ecetsav anyagmennyisége 0,1 mól, a maradék nátrium-acetáté pedig 0,2 mól.

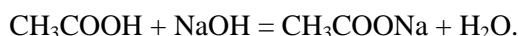
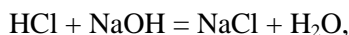
$$[\text{H}^+] = K_s \cdot \frac{c_{\text{sav}}}{c_{\text{só}}} = K_s \cdot \frac{n_{\text{sav}}}{n_{\text{só}}} = 1,79 \cdot 10^{-5} \cdot \frac{0,100}{0,200} = 8,95 \cdot 10^{-6}$$

$$\text{pH} = -\lg[\text{H}^+] = -\lg(8,95 \cdot 10^{-6}) = \underline{\underline{5,05}}$$

j) 0,2 mól nátrium-hidroxid és 0,1 mól ecetsav került az oldatba (melynek térfogat 2 dm³). Mivel a nátrium-hidroxid van feleslegben, ennek egy része az ecetsavból nátrium-acetátot képez. Az oldat pH-ját – a fentiekhez hasonlóan – a maradék 0,1 mólnyi nátrium-hidroxid határozza meg (a nátrium-acetát hidrolízise a lúgos oldatban elhanyagolható):

$$\text{pH} = 14 - \text{pOH} = 14 + \lg[\text{OH}^-] = 14 + \lg \frac{0,2 - 0,1}{2} = \underline{\underline{12,70}}$$

k) Összekeverünk 0,1 mól hidrogén-kloridot, 0,2 mól nátrium-hidroxidot és 0,1 mól ecetsavat, az oldat térfogata pedig 3 dm³ lesz. A következő folyamatok mennek végbe:



Az anyagmennyiségekből következik, hogy az oldat 0,1 mól nátrium-kloridot és 0,1 mól nátrium-acetátot tartalmaz, ez utóbbi szabja meg az oldat pH-ját. A fenti hidrolízishez hasonlóan számítható az oldat pH-ja:

$$[\text{OH}^-] \approx \sqrt{K_h \cdot c_0} = \sqrt{\frac{K_v}{K_s} \cdot c_0} = \sqrt{\frac{10^{-14}}{1,79 \cdot 10^{-5}} \cdot \frac{0,1}{3}} = 4,315 \cdot 10^{-6}.$$

Ellenőrizzük le a hidrolízisfokot!

$$\delta = \frac{[\text{CH}_3\text{COOH}]}{c_0} = \frac{[\text{OH}^-]}{c_0} = \frac{4,315 \cdot 10^{-6}}{0,033333} = 1,29 \cdot 10^{-4} < 0,05$$

Így a pH:

$$\text{pH} = 14 - \text{pOH} = 14 + \lg[\text{OH}^-] = 14 + \lg(4,315 \cdot 10^{-6}) = \underline{\underline{8,64}}$$

l) A 6 dm³ térfogatú oldatban összekeverésének pillanatában a következő anyagok találhatóak:

0,3 mól HCl, 0,2 mól NaOH, 0,1 mól CH₃COOH és 0,3 mól CH₃COONa. A NaOH teljes mennyiségéből NaCl keletkezik, és még marad 0,1 mól HCl, mely reagál a nátrium-acetáttal. Így marad 0,2 mól nátrium-acetát, és a reakcióban keletkezik 0,1 mól ecetsav. Tehát végeredményben 0,2 mól NaCl-ot, 0,2 mól CH₃COOH-at és 0,2 mól CH₃COONa-ot tartalmaz az oldat, tehát egy pufferelegről van szó:

$$[\text{H}^+] = K_s \cdot \frac{c_{\text{sav}}}{c_{\text{só}}} = K_s \cdot \frac{n_{\text{sav}}}{n_{\text{só}}} = 1,79 \cdot 10^{-5} \cdot \frac{0,200}{0,200} = 1,79 \cdot 10^{-5},$$

$$\text{pH} = -\lg[\text{H}^+] = -\lg(1,79 \cdot 10^{-5}) = \underline{\underline{4,75}}$$

8.67. példa:

Milyen térfogatarányban kell összekeverni 11,000 pH-jú ammóniaoldatot és 9,000 pH-jú nátrium-hidroxid-oldatot, hogy a keverék pH-ja 10,000 legyen? (A térfogatok összeadhatóak.) $K_s(\text{NH}_3) = 1,78 \cdot 10^{-5}$.

Megoldás:

Számítsuk ki az egyes oldatok koncentrációját!

$$c_0(\text{NaOH}) = 10^{-\text{pOH}} = 10^{-5} \frac{\text{mold}}{\text{dm}^3}$$

$$c_0(\text{NH}_3) = \frac{[\text{OH}^-]^2}{K_b} + [\text{OH}^-] = \frac{(10^{-3})^2}{1,78 \cdot 10^{-5}} + 10^{-3} = 0,05718 \frac{\text{mold}}{\text{dm}^3}$$

Vegyünk egy dm^3 elegyet, mely $V \text{ dm}^3$ ammónium-hidroxid-oldat és $(1 - V) \text{ dm}^3$ nátrium-hidroxid-oldat összeöntésével keletkezik. Ekkor az új koncentrációk:

$$c(\text{NH}_3) = 0,05718 \cdot V \frac{\text{mold}}{\text{dm}^3},$$

$$c(\text{NaOH}) = 10^{-5} \cdot (1 - V) \frac{\text{mold}}{\text{dm}^3}.$$

	NH_3	+	H_2O	\rightleftharpoons	NH_4^+	+	OH^-
Kiindulási:	$0,05718 \cdot V$		—		0		$10^{-5} \cdot (1 - V)$
Átalakul:	- x		—		+ x		+ x
Egyensúlyban:	$0,05718 \cdot V - x$		—		x		$10^{-5} \cdot (1 - V) + x$

Az alábbi egyenletrendszerhez jutunk:

$$K_b = 1,78 \cdot 10^{-5} = \frac{x \cdot [10^{-5} \cdot (1 - V) + x]}{0,05718 \cdot V - x}, \quad 10^{-5} \cdot (1 - V) + x = 10^{-4}.$$

Az egyenletrendszer megoldása: $x = 9,011 \cdot 10^{-5}$, $V = 0,0104$. Tehát 10,4 cm^3 ammóniaoldatot és 989,6 cm^3 nátrium-hidroxid-oldatot kell összekevernünk.

8.6.1.13. Sav-bázis titrálási görbék

Erős sav titrálása erős bázissal

Mint korábban már említettük, egy erős sav koncentrációja megállapítható egy ismert koncentrációjú erős bázis oldatának segítségével. Nézzük meg, hogyan változik az oldat pH-ja a titrálás során!

Legyen az erős sav (például sósav) koncentrációja $c_0 = 0,100 \text{ mol/dm}^3$. Az oldatból kimérünk $10,0 \text{ cm}^3$ -t és $c = 0,0500 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú nátrium-hidroxid-oldattal titráljuk. Könnyen kiszámítható a teljes sósavmennyiség közömbösítéséhez szükséges (azaz *ekvivalens*) nátrium-hidroxid-oldat térfogata, melynek jelölése V_{ekv} :

$$V_{\text{ekv}} = \frac{n(\text{NaOH})}{c} = \frac{n(\text{HCl})}{c} = \frac{c_0 \cdot V_0}{c} = \frac{0,100 \cdot 10,0}{0,0500} \text{ cm}^3 = 20,0 \text{ cm}^3.$$

A titrálás során hozzáadott nátrium-hidroxid-oldat térfogatát jelöljük V -vel, és az úgynevezett **titráltsági fokot** (ξ) is definiálhatjuk (melyet gyakran százalékban fejezünk ki): a hozzáadott reagens mennyisége (mérőoldat térfogata) osztva a mérendő anyaggal egyenértékű reagens mennyiségével (mérőoldat térfogatával).

$$\xi = \frac{V}{V_{\text{ekv}}}$$

Tehát ha $\xi = 1$, éppen az ekvivalens térfogatot adtuk a mérőoldatból a titrálendő oldathoz. Ha $\xi < 1$, azt mondjuk, hogy az oldat alultitrált, ha $\xi > 1$, akkor az oldat túltitrált.

A kiindulási pont ($\xi = 0$) a tiszta sósavoldat pH-ja:

$$\text{pH} = -\lg[\text{H}^+] = -\lg 0,100 = 1,000.$$

A titrálás folyamán – az ekvivalenciapontig – a sósav mennyisége csökken, de az oldat kémhatása savas. Ha a $c_0 \cdot V_0$ anyagmennyiségű HCl-hoz V térfogatú NaOH-oldatot adunk, az oldat maradék savtartalma:

$$n(\text{HCl}) = n_0(\text{HCl}) - n(\text{NaOH}) = c_0 \cdot V_0 - c \cdot V.$$

Mivel az össztérfogat a két oldat térfogatának összegével azonosnak vehető ($V_0 + V$), az oldat hidrogénion-koncentrációja a nem extrém híg tartományban (azaz a 100%-os titráltságtól távol):

$$[\text{H}^+] = \frac{n(\text{HCl})}{V_0 + V} = \frac{c_0 \cdot V_0 - c \cdot V}{V_0 + V}.$$

A 100%-os titráltság környékén az oldat pH-ját a víz autoprotolízisének figyelembevételével kell számítani!

100%-os titráltság esetén ($V = V_{\text{ekv}}$) az oldat tulajdonképpen nátrium-klorid vizes oldata, azaz $\text{pH} = 7$.

A túltitráltság esetén az oldatban nátrium-klorid mellett nátrium-hidroxid is van. Ennek az anyagmennyisége:

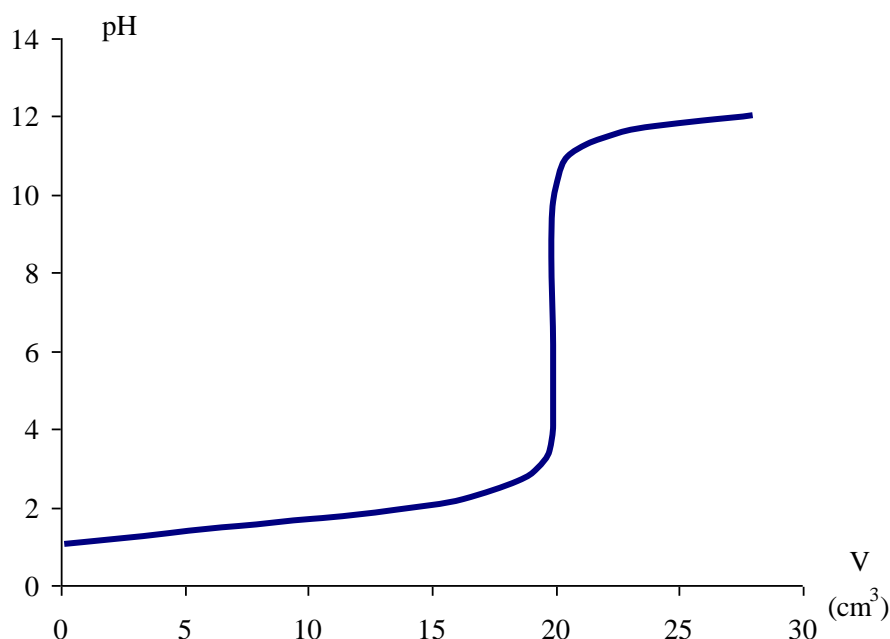
$$n = n(\text{NaOH}) - n_0(\text{HCl}) = c \cdot V - c_0 \cdot V_0.$$

Így az oldat hidroxidion-koncentrációja:

$$[\text{OH}^-] = \frac{n}{V_0 + V} = \frac{c \cdot V - c_0 \cdot V_0}{V_0 + V}.$$

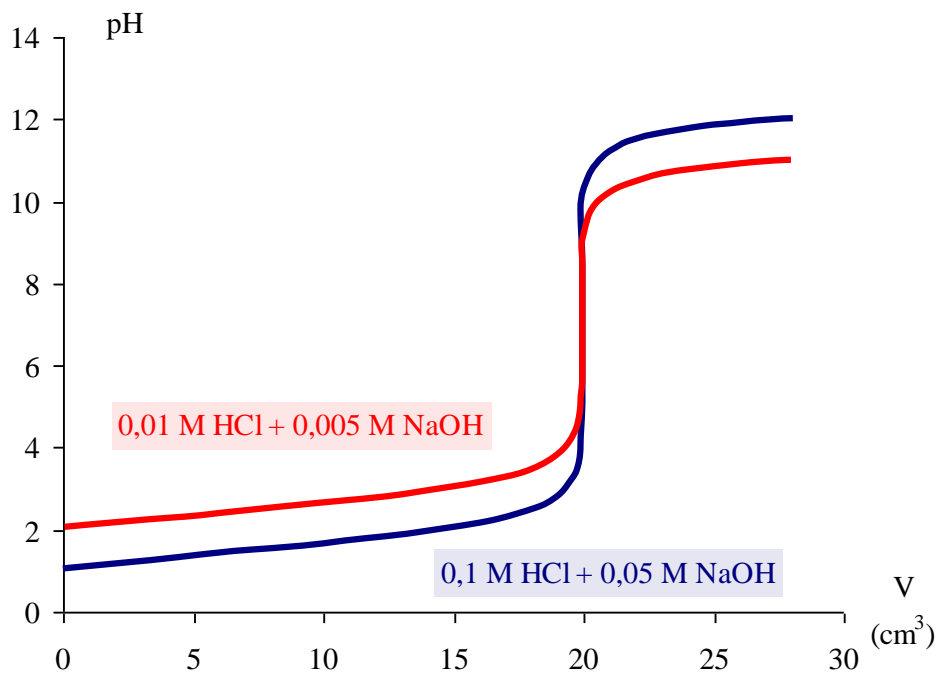
(Természetesen a semleges pH környékén ebben az esetben is figyelembe kell vennünk a víz öndisszociációját!)

A pH-t a hozzáadott nátrium-hidroxid-oldat térfogatának függvényében ábrázolva, a következő diagramot kapjuk:



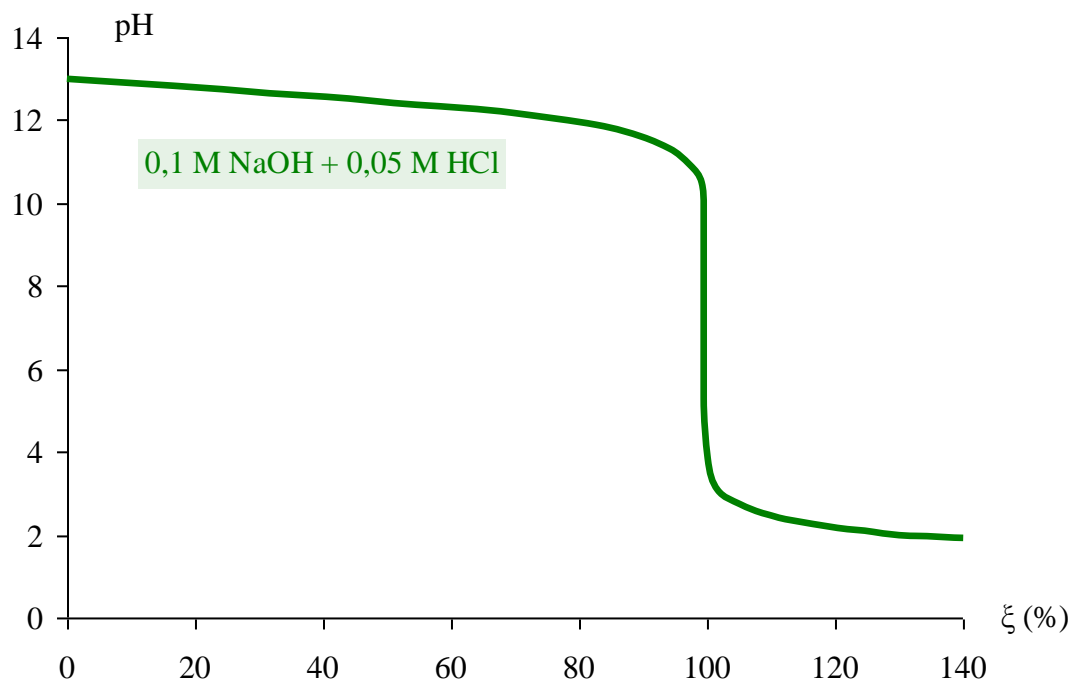
8.6.1.13.1. ábra: HCl-oldat titrálási görbéje

Mint látható, a titrálás kezdetén az oldat pH-ja igen savas, az ekvivalenciapont környékén egy igen meredek ugrást tapasztalunk, majd utána lassan tovább növekszik a pH. Az ekvivalenciapont közelében kevesebb, mint $0,05\text{--}0,1\text{ cm}^3$ térfogatváltozás hatására a pH többszöröseit változik. Hasonló titrálási görbéket fel lehet rajzolni más koncentrációknál, az alábbi ábrán bemutatjuk, hogy mi történik, ha a sósav- és a nátrium-hidroxid-oldat koncentrációját is a tizedére csökkentjük. A görbe alakja alapvetően nem változik, ugyanúgy megtalálható a pH-ugrás is. Azonban ebben az esetben kisebb a pH-változás az ekvivalenciapont környékén, mint az egy nagyságrenddel nagyobb koncentrációjú oldatok esetén.



8.6.1.13.2. ábra: Különböző koncentrációjú oldatok titrálási görbéje

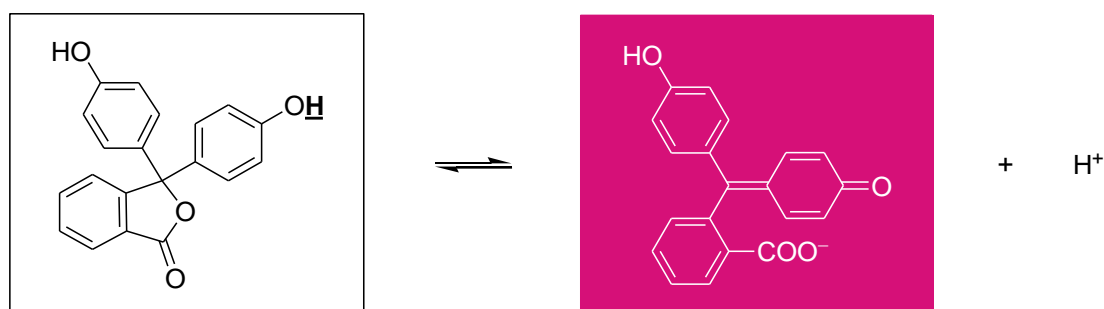
Az erős bázis erős savval történő titrálására is hasonló titrálási görbét lehet felrajzolni. Az alábbiakban a $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú nátrium-hidroxid-oldat $0,05 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú sósavoldattal történő titrálásának görbéjét mutatjuk be, az előzőektől eltérően itt a titráltsági fokot tüntetjük fel független változónak:



8.6.1.13.3. ábra: NaOH-oldat titrálási görbéje

A **sav-bázis indikátorok** színükkel képesek jelezni a pH változását még igen kis koncentrációban is. A sav-bázis indikátorok gyenge savak vagy gyenge bázisok (vagy ezek sói), jellemzőjük a disszociációs állandójuk. Működésük alapelve, hogy a disszociált és a disszociálatlan forma színe eltérő.

Például a fenolftalein egy szintelen gyenge sav, melynek disszociációjával keletkező fenolftaleinátion élénkvörös színű:



8.6.1.13.4. ábra: A fenolftalein indikátor

A fenti reakciót az alábbi, egyszerűsített formában is írhatjuk:



A folyamat egyensúlyi állandója egy savi disszociációs állandó, melynek negatív logaritmusát **indikátorexponensnek** nevezik.

Mint látható a színes és a színtelen forma koncentrációjának aránya a disszociációs állandótól és az oldat hidrogénion-koncentrációjától (pH-jától) függ:

$$\frac{[\text{Ind}^-]}{[\text{HInd}]} = \frac{K_s}{[\text{H}^+]}$$

Ahogy növeljük a pH-t (csökkentjük a hidrogénion-koncentrációt, azaz a jobb oldal számlálóját), úgy növekszik a színes disszociált forma részaránya a színtelen, disszociálatlan formához képest. Abban az esetben, ha $[\text{Ind}^-] = [\text{HInd}]$, a két forma keverékszínét látjuk, melyet átcsapási színnek nevezünk. Ez a fenolftalein esetén halvány rózsaszín. Ekkor az oldat hidrogénion-koncentrációja éppen megegyezik az indikátor savi disszociációs állandójával: $[\text{H}^+] = K_s$. Tehát az indikátor átcsapásakor (mikor épp megegyezik a disszociált és disszociálatlan forma koncentrációja), az **átcsapási pH** éppen megegyezik az indikátorexponenssel. Az úgynevezett **átcsapási tartomány** az a pH-tartomány, ahol a két forma keverékszínét látjuk. Ezen a tartományon kívül az indikátor színe a pH-túl függetlenül gyakorlatilag állandó: a fenolftalein savas oldatban színtelen, lúgos oldatban vörös színű. Az átcsapási tartomány rendszerint mintegy 2 pH-egységi tartomány, melynek középpontja az indikátorexponens (ennek oka, hogy az emberi szem két különböző színű részecskét akkor tud megkülönböztetni, ha azok aránya 10 : 1 és 1 : 10 közé esik).

A fenolftalein disszociációs állandója $7,94 \cdot 10^{-10}$, így $\text{p}K_s = 9,10$. Tehát a fenolftalin átcsapási tartománya: 8,10–10,10. Azaz ha $\text{pH} < 8$, az oldat színtelen, ha pedig $\text{pH} > 10$, az oldat intenzív vörös színű.

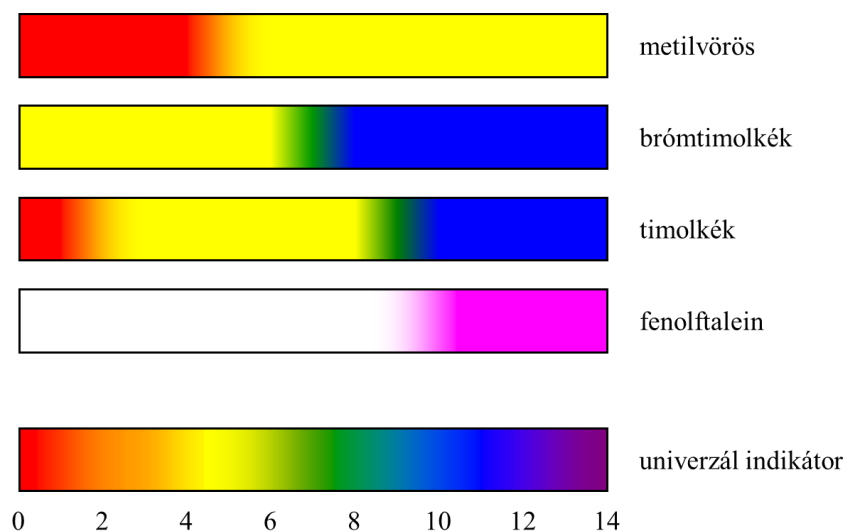
(Felmerülhet a kérdés, hogy ha az indikátorok sav-bázis karakterrel rendelkeznek, nem befolyásolják-e az oldat pH-ját és így nem okoznak-e hibát a titrálásban. Erre a válasz, hogy a jól használható indikátoroknak rendszerint olyan intenzív a színük, hogy már igen kis koncentrációban is jól látható az eltérés. Másrészt ezen vegyületek általában igen gyenge savak, így híg oldatban a pH-t disszociációjuk nem befolyásolja számottevően.)



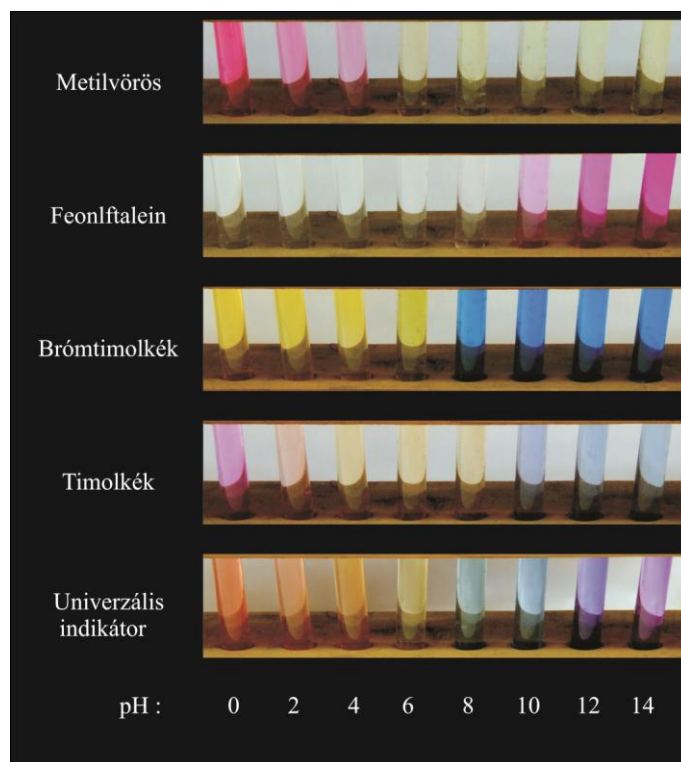
8.6.1.13.5. ábra: Indikátorok átcsapása: az egymás mellett található oldatok pH-ja között 0,1 egység a különbség

Az univerzális indikátor többféle indikátor keverékeként állítható elő. Az egyes indikátorokat úgy választják meg, hogy a keverékindikátor egy széles pH-tartományban mutasson színváltozást.

Például metilvörös (4,6–6,0), brómtimolkék (6,0–7,6), timolkék (1,2–2,8 és 8,0–9,6) és fenolftalein (8,2–10,0) felhasználásával az alábbi univerzális indikátort kapjuk:



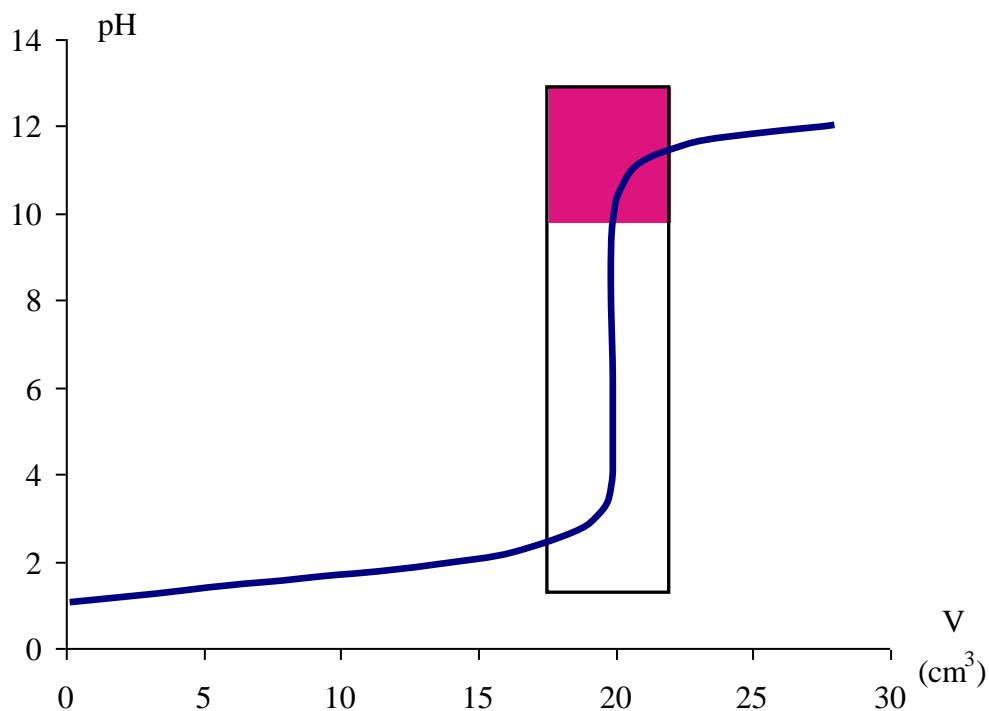
8.6.1.13.6. ábra: Az univerzális indikátor összetevői



8.6.1.13.7. ábra: Univerzális indikátor

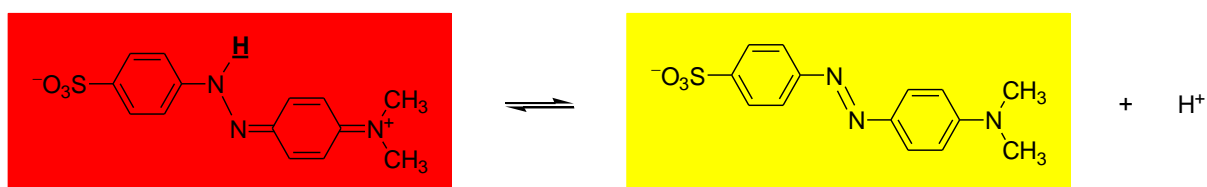
Az indikátorok alkalmazásával kapcsolatban érdemes megjegyezni, hogy úgy érdemes megválasztani a titráláshoz az indikátort, hogy annak átcsapási tartománya a titrálási görbe ekvivalenciapontja környékén található meredek szakaszra essen.

Nézzük meg, hogy a fenti titrálási görbén hova esik az indikátor átcsapási tartománya!



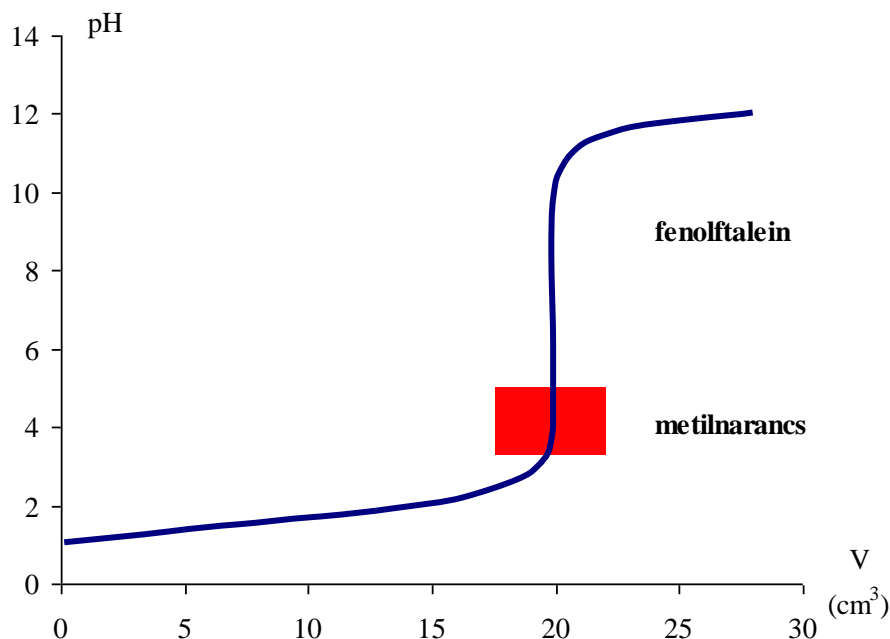
8.6.1.13.8. ábra: A fenolftalein átcsapási tartománya

Mint látható, az indikátor átcsapási tartománya a titrálási görbe meredek részére esik. Tehát a sósav titrálására alkalmazható indikátornak a fenolftalein. Mivel az ekvivalenciapontban $\text{pH} = 7$, legideálisabb egy olyan indikátor lenne, melynek átcsapási tartománya 7 körül van. Viszont a pH ugrás olyan meredek, hogy a fenolftalein alkalmazása során adódó hiba elhanyagolható. Természetesen más sav-bázis indikátorokat is ismerünk. Például egy másik igen gyakran használt pH-indikátor a metilnarancs:



8.6.1.13.9. ábra: A metilnarancs indikátor

A metilnarancs disszociációs állandója $3,47 \cdot 10^{-4}$, színe $\text{pH} = 2,5$ alatt vörös, $\text{pH} = 4,5$ felett pedig citromsárga, átmeneti színe rózsaszínes („hagymahéjszínű”). Ábrázoljuk a metilnarancs átmeneti tartományát is a titrálási görbén!



8.6.1.13.10. ábra: A fenolftalein és a metilnarancs átcsapási tartománya

Az ábrán megfigyelhető, hogy a metilnarancs is a meredek tartományba esik, így alkalmazható a sósav nátrium-hidroxiddal történő titrálására.

Gyenge sav titrálása erős bázissal

Most nézzük meg egy gyenge sav titrálását erős bázissal! Például $V_0 = 10,0 \text{ cm}^3$ térfogatú, $c_0 = 0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú ecetsavoldatot titrálunk $c = 0,05 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú nátrium-hidroxid-oldattal. A közömbösítéshez szükséges nátrium-hidroxid-oldat térfogata:

$$V_{\text{ekv}} = \frac{n(\text{NaOH})}{c} = \frac{n(\text{HCl})}{c} = \frac{c_0 \cdot V_0}{c} = \frac{0,100 \cdot 10,0}{0,0500} \text{ cm}^3 = 20,0 \text{ cm}^3.$$

$V = 0,0 \text{ cm}^3$ ($\xi = 0$) esetén, azaz a kiindulási pontban tiszta ecetsav található csak a lombikban, így az oldat pH-ját a gyenge savaknál megismert módon számíthatjuk.

$V = 0,0\text{--}20,0 \text{ cm}^3$ ($0 < \xi < 1$) esetén puffereleggyel van dolgunk. (Mivel az oldat nem túl híg, a semleges pH környékén a víz autoprotolízise elhanyagolható). Ekkor az oldat pH-ját az alábbi módon számíthatjuk:

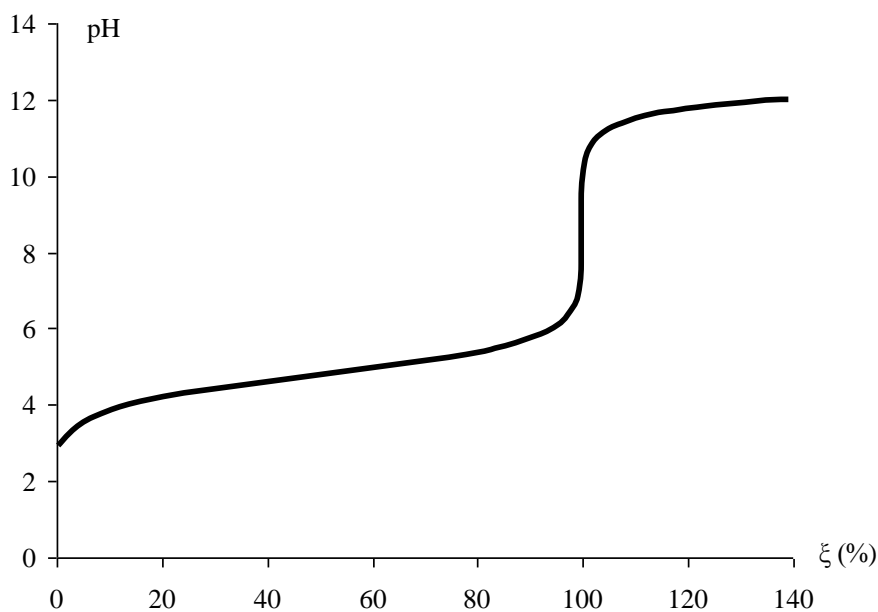
$$[\text{H}^+] = K_s \cdot \frac{n_{\text{sav}}}{n_{\text{só}}} = K_s \cdot \frac{c_0 \cdot V_0 - c \cdot V}{c \cdot V} = K_s \cdot \left(\frac{c_0 \cdot V_0}{c \cdot V} - 1 \right).$$

50%-os titráltság esetén ($V = 10,0 \text{ cm}^3$, $\xi = 0,5$), az oldat hidrogénion-koncentrációja éppen a disszociációs állandóval azonos, azaz $\text{pH} = \text{p}K_s$.

Az ekvivalenciapontban ($V = 20,0 \text{ cm}^3$, $\xi = 1$) az oldatban nátrium-acetát található, így a megfelelő koncentrációjú (jelen esetben $0,0333 \text{ mol/dm}^3$) nátrium-acetát-oldat pH-ját kell kiszámítanunk a hidrolizáló sók esetén megismert módon.

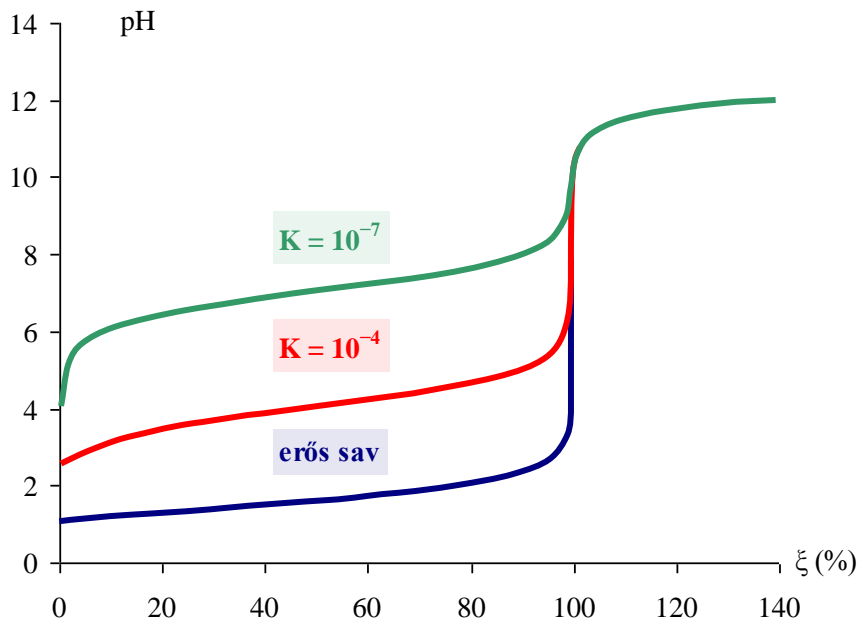
A titrálás további részében ($V > 20,0 \text{ cm}^3$, $\xi > 1$) az oldatban a hidrolizáló nátrium-acetát mellett egy erős bázis található, mely gyakorlatilag teljesen visszaszorítja a só hidrolízisét (így gyakorlatilag elhanyagolható a hidrolízis, és csak a nátrium-hidroxid-oldat feleslegével érdemes számolni).

Ezek alapján az ecetsav titrálásának pH-görbéje:



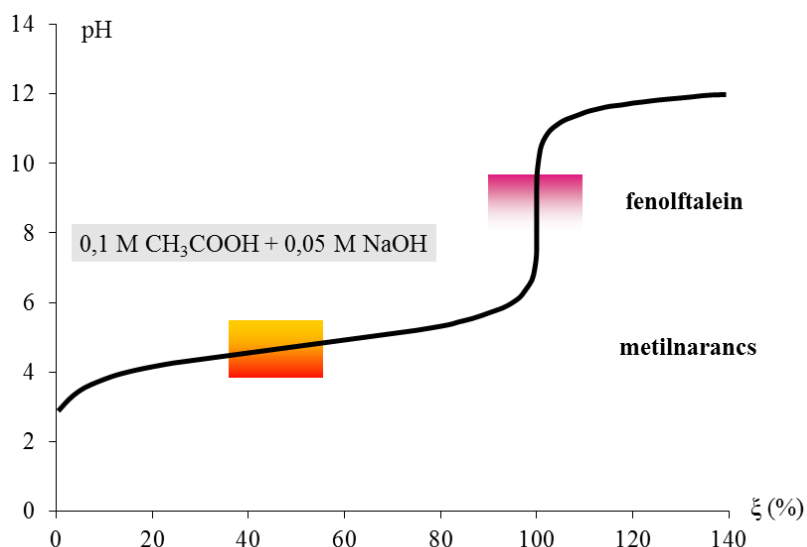
8.6.1.13.11. ábra: Az ecetsav titrálási görbéje

Vizsgáljuk meg, hogyan függ a titrálási görbe alakja a sav disszociációs állandójától! Az alábbi görbén három különböző sav *azonos koncentrációjú* oldatának titrálási görbéjét látjuk:



8.6.1.13.12. ábra: Három különböző sav azonos koncentrációjú oldatának titrálási görbéje

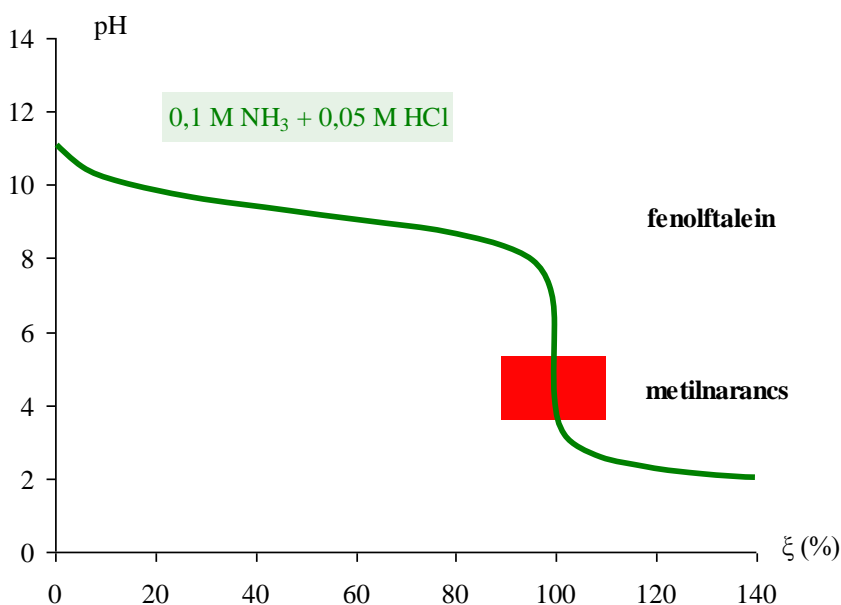
Ismét érdemes megvizsgálni, hogy a fent említett két indikátor (fenolftalein és metilnarancs) mennyire alkalmas az ecetsav titrálásának végpontjelzésére!



8.6.1.13.13. ábra: A fenolftalein és a metilnarancs átcsapási tartománya gyenge sav esetén

Az ábrán jól megfigyelhető, hogy a metilnarancs színváltozása mintegy 40%-os titráltsági foknál található, tehát mikor az indikátor elvileg a titrálás végpontját jelezné, még az ecetsav 60%-a nincs megtitrálva, mely rendkívül nagy hibát jelent. Ezért gyenge savak titrálására nem alkalmazható a metilnarancs indikátor. Viszont a fenolftalein éppen a legmeredekebb szakaszra esik, így ezt célszerű alkalmazni.

Ezzel ellentétben egy gyenge bázis (például az ammónia) titrálásához savas pH-n átcsapó indikátort (például metilnarancs) célszerű alkalmazni, a lúgos pH-n átcsapó indikátorok (például fenolftalein) alkalmatlanok végpontjelzésre ebben az esetben.



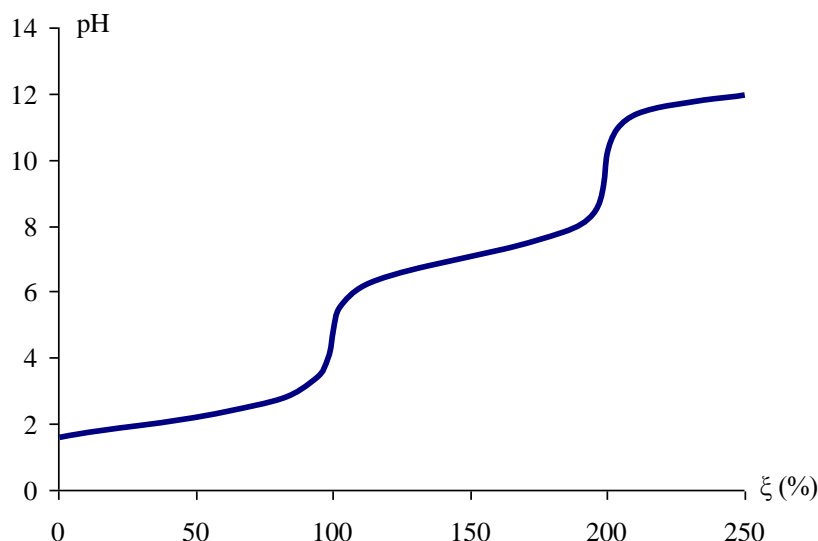
8.6.1.13.14. ábra: A fenolftalein és a metilnarancs átcsapási tartománya gyenge bázis esetén

Összegzésként érdemes megjegyezni, hogy egy gyenge savat erős bázissal titrálva, lúgos pH-nál átcsapó indikátort kell választani, míg ha egy gyenge bázist erős savval titrálunk, savas tartományban jelző indikátort célszerű alkalmazni. Ez könnyen megjegyezhető, ha belegondolunk, hogy az ekvivalenciapontban a pH-t a titrálás során keletkezett só szabja meg, mely gyenge sav esetén lúgos,

míg gyenge bázis esetén savas kémhatású. Tehát olyan indikátort kell választani, mely a keletkező só pH-ja környékén mutat színváltozást (átcsapást).

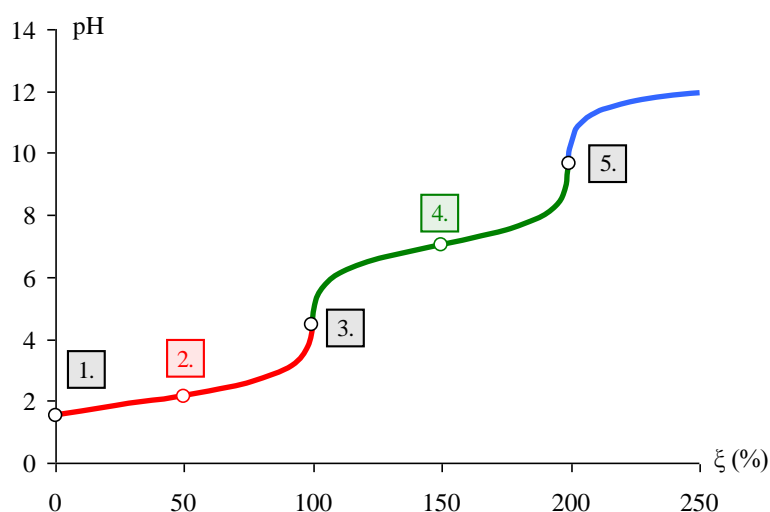
Többértékű savak titrálási görbéje

A fentiekhez hasonlóan ki lehet számítani a többértékű savak titrálási görbéjét is. Az alábbi ábrán a kénessav (H_2SO_3 , $K_{s1} = 1,20 \cdot 10^{-2}$, $K_{s2} = 1,00 \cdot 10^{-7}$) titrálási görbéje látható, a sav bemérési koncentrációja $0,100 \text{ mol/dm}^3$, a nátrium-hidroxid-mérőoldaté koncentrációja pedig $0,050 \text{ mol/dm}^3$:



8.6.1.13.14. ábra: A kénessav titrálási görbéje

Mint jól látható, a kétértékű kénessav titrálási görbéje két lépcsőből áll, mindkét ekvivalenciapont környékén meredek pH-ugrást tapasztalunk. Az ábrán az első egyenértékpontra tartó szakaszt pirossal, a másodikig tartót zölddel jelöltük. A kék szakasz a túltitrálási oldat pH-ját mutatja.



8.6.1.13.15. ábra: Többértékű sav titrálási görbéje

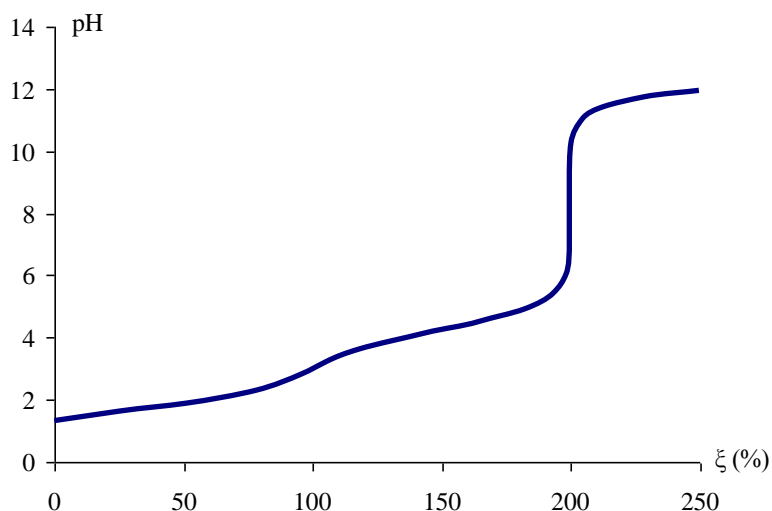
Érdeemes megfigyelni néhány jellegzetes pontot az ábrán. Az 1. pont a $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú kénessavoldat pH-ja. A 2. pontban – 50%-os titráltságnál – a hidrogénion-koncentráció éppen megegyezik az első disszociációs állandóval, azaz $\text{pH} \cong \text{p}K_{s1}$. A 3. pontban az oldat nátrium-

hidrogén-szulfidot tartalmaz, így ennek a savanyúsónak a pH-ját mérhetjük meg [$\text{pH} \cong 0,5 \cdot (\text{p}K_{s1} + \text{p}K_{s2})$]. A 4. pontban $\text{pH} \cong \text{p}K_{s2}$. (a HSO_3^- és SO_3^{2-} koncentrációk megegyeznek). A 5. ponttal jelöltük a második egyenértékpontot, ekkor az oldat pH-ja a megfelelő koncentrációjú nátrium-szulfit-oldat pH-jával egyenlő.

A kénsav két disszociációs lépcsője a titrálási görbe alapján jól elkülöníthető, ezért a kénsavat – megfelelő indikátor alkalmazásával – egyértékű és kétértékű savként is titrálhatjuk. (Például az első lépcsőt metilnarancs, a másodikat pedig fenoltaleinnel jelezve.)

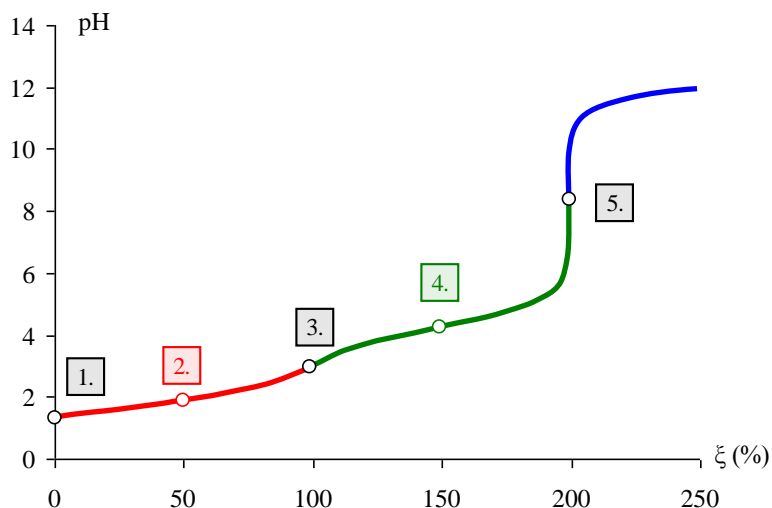
A helyzet bizonyos két- vagy több-bázisú savak esetén ennél bonyolultabb lehet.

Vegyük például az oxálsavat (HOOC-COOH)! Az oxálsav két disszociációs állandója: $K_{s1} = 5,90 \cdot 10^{-2}$, $K_{s2} = 6,40 \cdot 10^{-5}$. $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú oldatának titrálási görbéje a következő (a mérőoldat $0,050 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú nátrium-hidroxid-oldat):



8.6.1.13.16. ábra: Az oxálsav titrálási görbéje

Jóllehet a görbe alakja különbözik attól, amit fentebb láttunk, azonban ha jól megfigyeljük, a kénsav esetén megismert pontokat itt is felfedezhetjük.

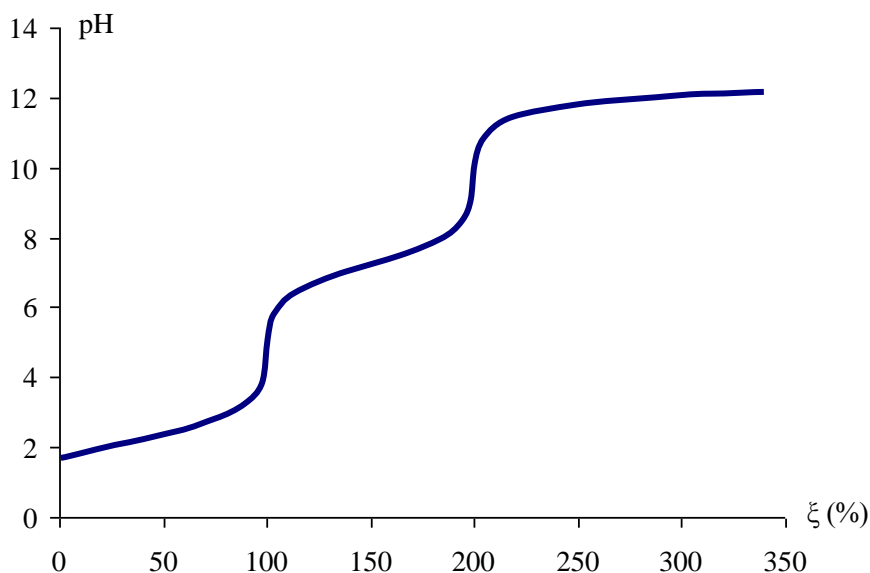


8.6.1.13.17. ábra: Az oxálsav titrálási görbéje

A két sav között alapvető különbség van az egyensúlyi állandókban. A kénsav esetén a két disszociációs állandó között öt nagyságrendnyi a különbség, az oxálsav esetén ez csupán három

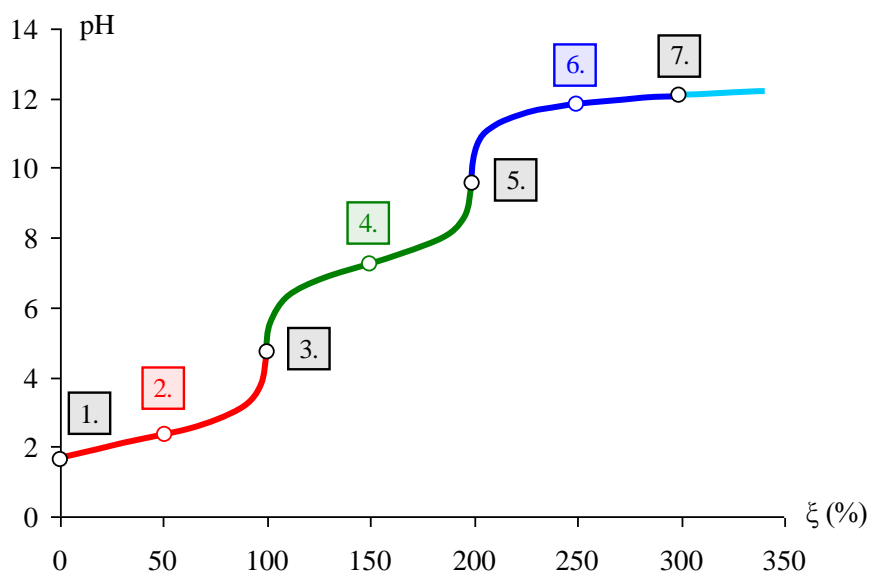
nagyságrend. Mivel az oxálsav esetén az első disszociációs lépcsőnél nincsen pH-ugrás, igen nagy hibát követünk el, ha az oxálsavat egyértékű savként (tehát hidrogén-oxalátig) titráljuk. Az oxálsavat kétértékű savként tudjuk megtitrálni.

A foszforsav – mint már korábban említettük – egy háromértékű sav, az alábbi titrálási görbével jellemezhető (a foszforsavoldat koncentrációja $0,100 \text{ mol/dm}^3$, a nátrium-hidroxid-mérőoldaté pedig $0,050 \text{ mol/dm}^3$).



8.6.1.13.18. ábra: A foszforsav titrálási görbéje

Egy háromértékű savnál három pH-ugrást várnánk, azonban – mint az ábrán is látható – a foszforsav esetén csak kettőt figyelhetünk meg, a görbe igen hasonló a kénessavnál megismerthez. Érdekes jellegzetes pontokat keresünk a görbén!



8.6.1.13.19. ábra: A foszforsav titrálási görbéje

A 200%-os titráltsági fokig nem veszünk észre semmi különlegességet, viszont, érdekes módon, a harmadik deprotonáláshoz nem tartozik pH-ugrás (7. pont). Ennek oka, hogy a foszfátion (PO_4^{3-}) annyira erős bázis (mivel K_{s3} rendkívül kicsi, $2,20 \cdot 10^{-13}$), hogy az oldat pH-ja a nátrium-hidroxid-oldat pH-jával összemérhető. Ennek következtében a foszforsavat mérhetjük egyértékű és kétértékű savként is, ám a harmadik protonjának eltávolítását nem tudjuk indikátorral jelezni. Még azt is megfigyelhetjük, hogy az első két lépcső esetén sem túl meredek a pH-ugrás, ezért az indikátor alkalmazása kicsit nehézkes [gyakran a megfelelő só (dihidrogén-foszfát vagy hidrogén-foszfát) oldatához adnak indikátort, és a titrálás során ehhez hasonlítják a titrált oldat színét].

8.6.1.14. Savak és bázisok specieszeloszlása a pH függvényében

Mint a titrálások során láthattuk, a savakból és bázisokból keletkező ionok mennyisége és relatív mennyisége a pH függvényében rendszerint jelentősen változik. Az alábbiakban különböző savak és bázisok oldataiban található **specieszek** (azaz disszociálatlan molekulák és ionok) mennyiségi arányát vizsgáljuk a pH függvényében.

Egyértékű gyenge savak és bázisok

Legyen egy HA gyenge sav disszociációs állandója K_s . Egy adott c_0 koncentrációjú oldatához – térfogatváltozás nélkül – nátrium-hidroxidot adagolunk, és közben vizsgáljuk az oldat pH-ját. (Ez a titrálástól annyiban különbözik, hogy itt az oldat térfogata állandó, tehát a sav összkoncentrációja állandó.) A kiindulási savoldatban található disszociálatlan HA sav, A^- -anion, H^+ -ion és kis mennyiségben OH^- -ion, valamint a nátrium-hidroxid adagolása során az oldatba Na^+ -ion is kerül.

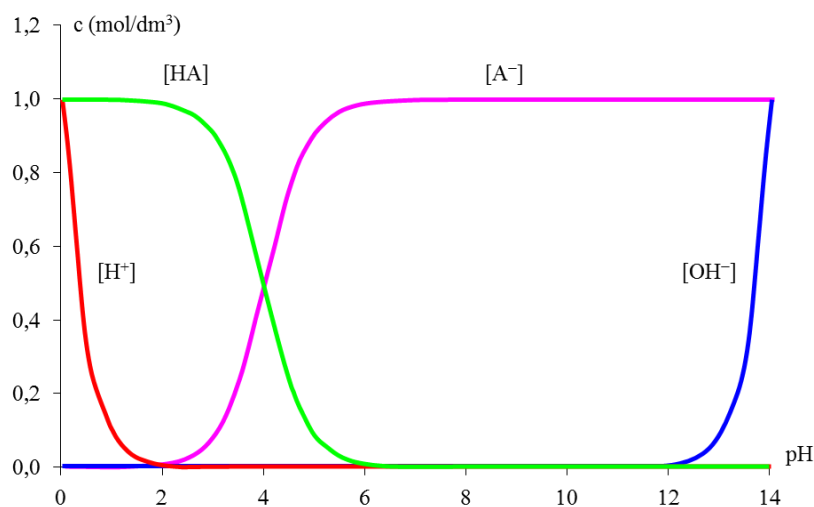
A disszociálatlan és disszociált sav koncentrációja: $c_0 = [\text{HA}] + [\text{A}^-]$.

Az egyensúlyi állandó alapján: $K_s = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{A}^-]}{[\text{HA}]} \Rightarrow [\text{A}^-] = \frac{K_s}{[\text{H}^+]} \cdot [\text{HA}]$.

Így a HA és A^- koncentrációk a H^+ -ionok koncentrációjának függvényében:

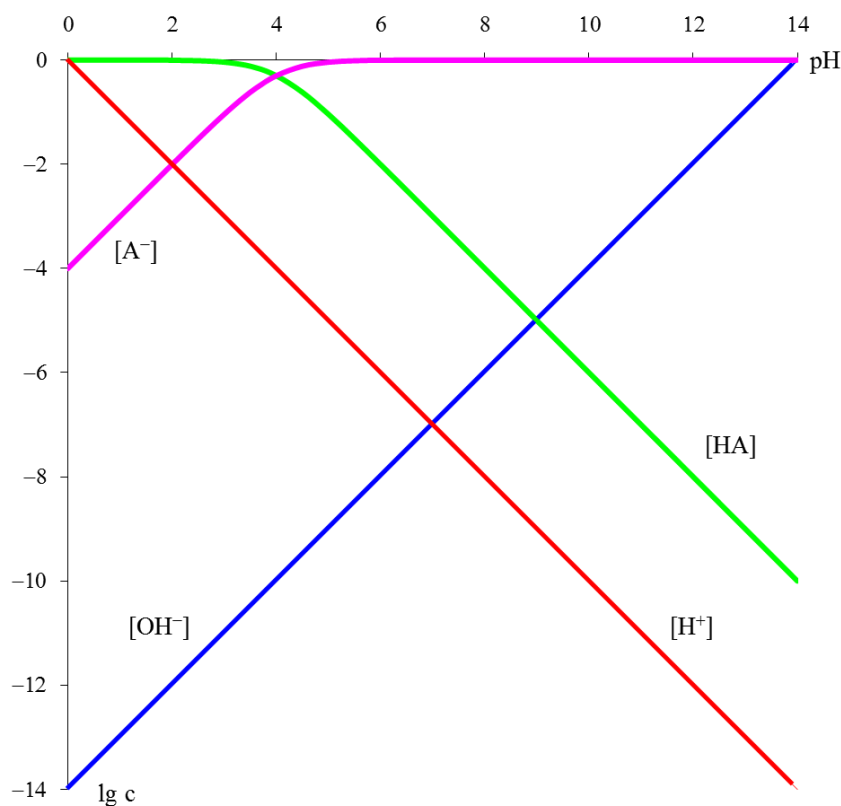
$$[\text{HA}] = \frac{[\text{H}^+]}{[\text{H}^+] + K_s} \cdot c_0 \quad [\text{A}^-] = \frac{K_s}{[\text{H}^+] + K_s} \cdot c_0$$

A fenti egyenletek segítségével bármilyen pH esetén kiszámíthatjuk az egyes ionok koncentrációját. A pH függvényében ábrázolva a $[\text{H}^+]$, $[\text{OH}^-]$, $[\text{HA}]$ és $[\text{A}^-]$ koncentrációkat egy $1,000 \text{ mol/dm}^3$ bemérési koncentrációjú és $K_s = 10^{-4}$ disszociációs állandójú sav esetén a következő diagramot kapjuk:



8.6.1.14.1. ábra: Egyensúlyi koncentrációk a pH függvényében egyértékű gyenge sav esetén

Mint látható, a pH növelésével a disszociálatlan sav koncentrációja csökken, míg a savmaradék anionkoncentrációja növekszik. Még szemléletesebben is bemutatathatjuk ezeket a koncentrációkat. Az alábbi ábrán az egyes koncentrációk logaritmusai vannak feltüntetve a pH függvényében:



8.6.1.14.2. ábra: Egyensúlyi koncentrációk logaritmusai a pH függvényében, egyértékű gyenge sav esetén

Értelemszerűen $\lg [H^+]$ -t ábrázolva a pH függvényében egy (-1) meredekségű egyenest kapunk, a vízionszorzat alapján $\lg [OH^-]$ szintén egyenest ad (meredeksége 1). Ez a két egyenes 7-es pH-nál metszi egymást, mivel ekkor azonos a két ion koncentrációja (25 °C-on).

A $[H^+]$ egyenes és az $[A^-]$ görbe metszéspontja a tiszta savoldatot jelenti, ekkor a $pH \approx 2$.

Abban a pontban, ahol a $[HA]$ és az $[A^-]$ görbék metszik egymást ($[HA] = [A^-]$), $pH = pK_s = 4,00$:

$$K_s = \frac{[H^+] \cdot [A^-]}{[HA]} = \frac{[H^+] \cdot [HA]}{[HA]} = [H^+] \Rightarrow pH = pK_s.$$

A diagramból megállapítható az adott koncentrációjú ($c = 1 \text{ mol/dm}^3$) hidrolizáló só pH-ja is. Ekkor $[HA] = [OH^-]$:

$$\frac{K_v}{K_s} = \frac{[HA] \cdot [OH^-]}{[A^-]} \Rightarrow [HA] = [OH^-] \approx \sqrt{\frac{K_v}{K_s} \cdot c_0} \Rightarrow [H^+] = \frac{K_v}{[OH^-]} \approx \frac{K_v}{\sqrt{\frac{K_v}{K_s} \cdot c_0}} = \sqrt{\frac{K_s \cdot K_v}{c_0}}.$$

Ez $K_s = 10^{-4}$ és $c_0 = 1$ esetén $pH = 9$ esetén teljesül.

Tehát az egyensúlyimegoszlás-diagramról nemcsak az egyes komponensek arányát lehet leolvasni, hanem segítségével megbecsülhető a tiszta sav és só oldatának pH-ja, valamint a sav egyensúlyi állandója is.

Kétértékű gyenge savak megoszlási diagramjai

Kétértékű savak esetén az alábbi specieszek találhatók az oldatban (csak a savból származókat tüntettük fel): H_2A , HA^- , és A^{2-} . $K_{s1} = 10^{-4}$, $K_{s2} = 10^{-8}$.

Az anyagmérleg: $c_0 = [\text{H}_2\text{A}] + [\text{HA}^-] + [\text{A}^{2-}]$.

Az egyensúlyi állandók alapján:

$$K_{s1} = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{A}^-]}{[\text{HA}]} \Rightarrow [\text{HA}^-] = \frac{K_{s1}}{[\text{H}^+]} \cdot [\text{HA}],$$

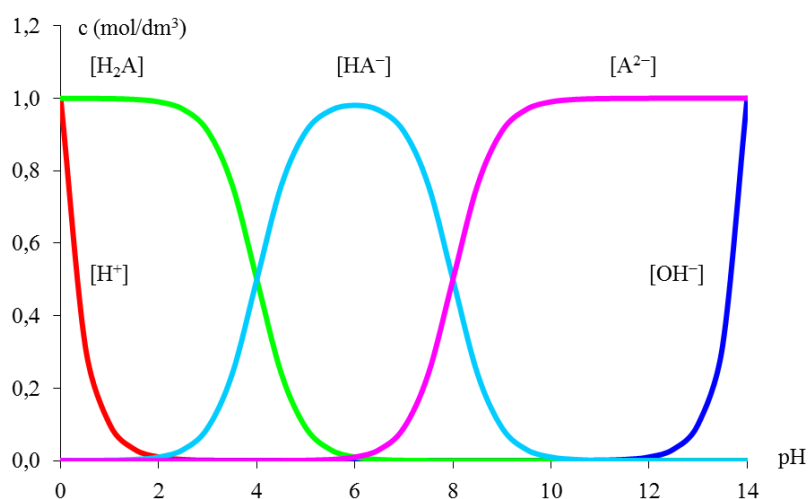
$$K_{s1} \cdot K_{s2} = \frac{[\text{H}^+]^2 \cdot [\text{A}^{2-}]}{[\text{H}_2\text{A}]} \Rightarrow [\text{A}^{2-}] = \frac{K_{s1} \cdot K_{s2}}{[\text{H}^+]^2} \cdot [\text{H}_2\text{A}],$$

$$c_0 = [\text{H}_2\text{A}] + [\text{HA}^-] + [\text{A}^{2-}] = [\text{H}_2\text{A}] + \frac{K_{s1}}{[\text{H}^+]} \cdot [\text{HA}] + \frac{K_{s1} \cdot K_{s2}}{[\text{H}^+]^2} \cdot [\text{H}_2\text{A}] = [\text{H}_2\text{A}] \cdot \left(1 + \frac{K_{s1}}{[\text{H}^+]} + \frac{K_{s1} \cdot K_{s2}}{[\text{H}^+]^2} \right).$$

Így bármely komponens koncentrációja számítható a $[\text{H}^+]$ függvényében:

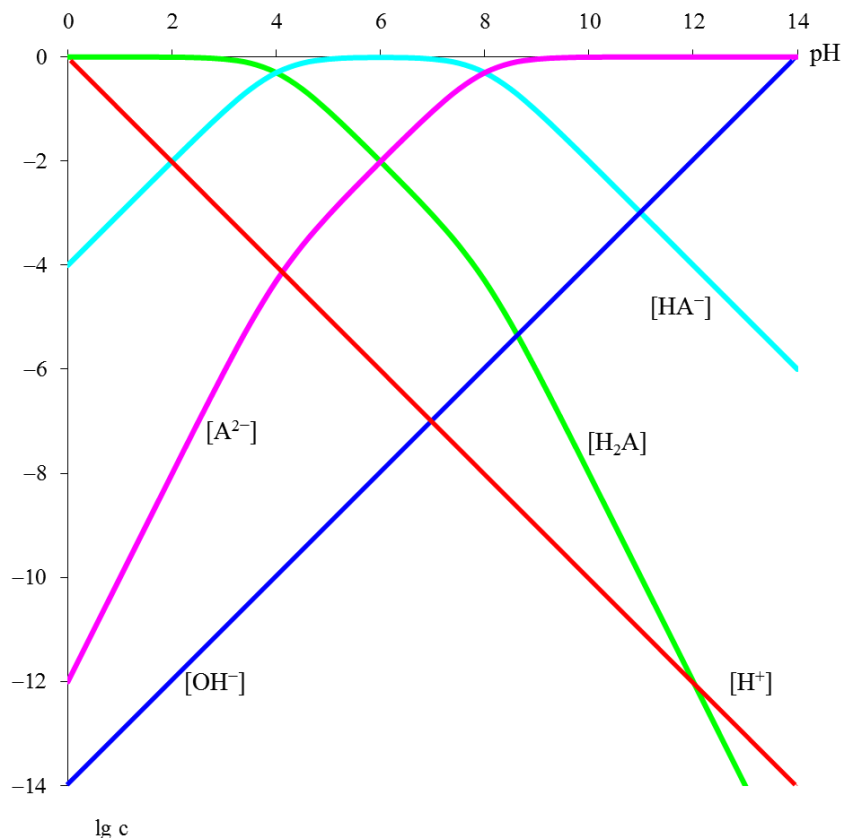
$$[\text{H}_2\text{A}] = \frac{1}{1 + \frac{K_{s1}}{[\text{H}^+]} + \frac{K_{s1} \cdot K_{s2}}{[\text{H}^+]^2}} \cdot c_0, \quad [\text{HA}^-] = \frac{\frac{K_{s1}}{[\text{H}^+]}}{1 + \frac{K_{s1}}{[\text{H}^+]} + \frac{K_{s1} \cdot K_{s2}}{[\text{H}^+]^2}} \cdot c_0,$$

$$[\text{A}^{2-}] = \frac{\frac{K_{s1} \cdot K_{s2}}{[\text{H}^+]^2}}{1 + \frac{K_{s1}}{[\text{H}^+]} + \frac{K_{s1} \cdot K_{s2}}{[\text{H}^+]^2}} \cdot c_0.$$



8.6.1.14.3. ábra: Egyensúlyi koncentrációk a pH függvényében, kétértékű gyenge sav esetén

A logaritmikusan egyensúlyi diagram pedig a következőképpen néz ki:



8.6.1.14.4. ábra: Egyensúlyi koncentrációk logaritmusai a pH függvényében, kétértékű gyenge sav esetén

A fentiekhez hasonlóan itt is megtalálhatók a tiszta sav ($[H^+] = [HA^-]$, $pH = 4$) és a hidrolizálósó ($[OH^-] = [HA^-]$, $pH = 11$) pontjai.

Könnyen leolvasható a két disszociációs állandó is: $[H_2A] = [HA^-]$ esetén $pH = pK_{s1}$, $[HA^-] = [A^{2-}]$ esetén $pH = pK_{s2}$.

2-nél kisebb pH-n gyakorlatilag az összes sav H_2A formában található az oldatban, míg $pH = 12$ felett gyakorlatilag A^{2-} anionok találhatóak. A HA^- anion koncentrációjának maximuma van, ekkor az alábbi egyenlet teljesül ($[H_2A] = [A^{2-}]$):

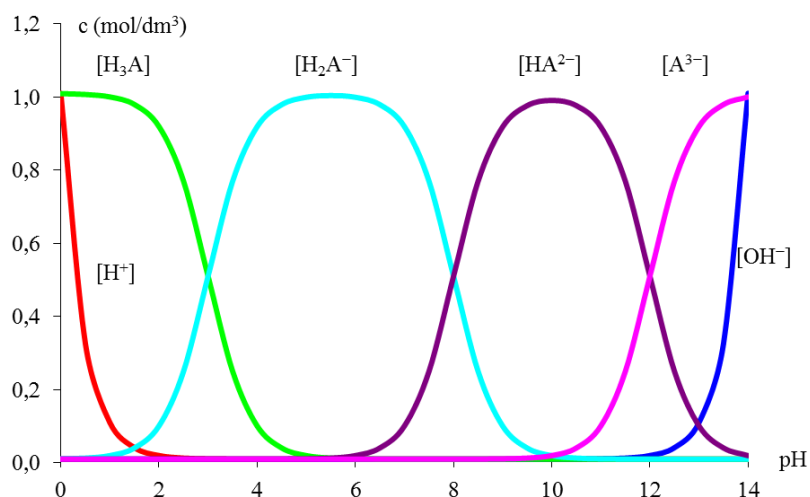
$$K_{s1} \cdot K_{s2} = \frac{[H^+]^2 \cdot [A^{2-}]}{[H_2A]} \approx [H^+]^2 \Rightarrow [H^+] \approx \sqrt{K_{s1} \cdot K_{s2}} \quad pH \approx \frac{pK_{s1} + pK_{s2}}{2}.$$

Ez a fenti sav esetén $pH = 6$ esetén teljesül (ez gyakorlatilag a savanyú só oldatának pH-ja).

Hárombázisú savak

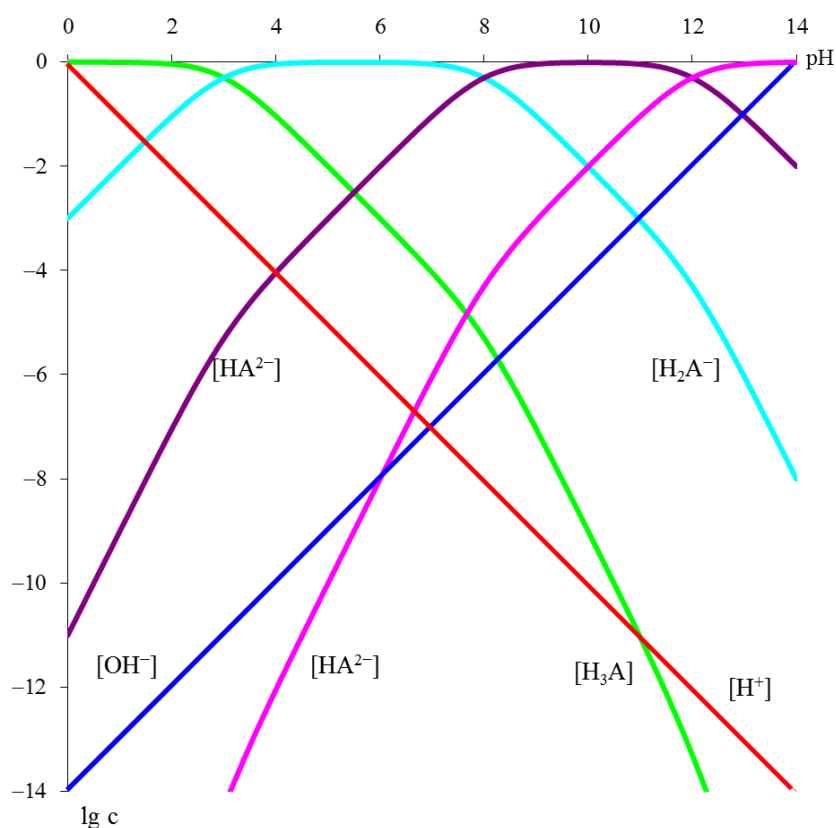
Természetesen kettőnél több értékű savakra is elkészíthetjük a fenti diagramokat. Az egyenletek ismertetése nélkül bemutatjuk az alábbi disszociációs állandókkal jellemezhető sav megoszlását:

$$K_{s1} = 10^{-3}, K_{s2} = 10^{-8}, K_{s3} = 10^{-12}.$$



8.6.1.14.5. ábra: Egyensúlyi koncentrációk a pH függvényében, háromértékű sav esetén

A kétértékű savval ellentétben, itt nem egy, hanem két maximumgörbét látunk (H_2A^- , HA^{2-}). Általánosságban is megállapítható, hogy egy n -bázisú sav esetén $(n-1)$ speciesznél maximumgörbét látunk, a disszociálatlan sav (H_nA) görbéje kisebb pH-nál, a teljesen deprotonált sav (A^{n-}) görbéje pedig nagyobb pH-nál telítődik. A logaritmikus diagram is hasonló az előzőekhez:



8.6.1.14.6. ábra: Egyensúlyi koncentrációk logaritmusai a pH függvényében, háromértékű sav esetén

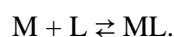
Bizonyos görbék metszéspontjai a fentiekhez hasonlóan értelmezhetőek. A disszociációs állandó meghatározható két olyan speciesz görbéjének metszéspontjából, melyek egyetlen H^+ -ionnal

egymásba alakíthatók. A disszociálatlan sav (H_3A) és a $[H^+]$ -görbe metszéspontja megadja a tiszta sav pH-ját, a teljesen deprotonált sav (A^{3-}) és az $[OH^-]$ -görbe metszéspontja megadja a hidrolizáló só pH-ját. A köztes specieszek (H_2A^- , HA^{2-}) maximumából pedig kiszámítható (megbecsülhető) a savanyú sók pH-ja.

8.6.2. Komplexképződési egyensúlyok

Mint korábban már szó volt róla, a komplex vegyületek egy Lewis-savból és egy Lewis-bázisból keletkeznek. Az alábbiakban egy általános fém (M, a töltésén nem jelöljük) és ligandum (L) segítségével mutatjuk be a komplexképződési egyensúlyokat. Egy fém egy adott ligandummal rendszerint többféle koordinációs számú komplexet képezhet. Fontos megjegyezni, hogy a fémionok vizes oldatban rendszerint vízmolekulákkal körülvéve, úgynevezett akvakomplekként vannak jelen. A komplexképződés során tulajdonképpen ezen vízmolekulák cserélődnek le az egyéb ligandumokra, tehát komplexképződés helyett vizes oldatban általában célszerűbb ligandumkicserélődésről beszélnünk. A továbbiakban – vizes oldatok esetén – azonban eltekintünk az akvakomplekx disszociációjától, és csak a komplexképződési reakciókkal foglalkozunk alapvetően.

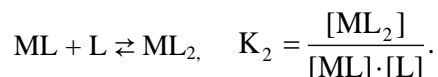
Ha a komplexben a koordinációs szám 1, akkor az alábbi egyenlet írható fel:



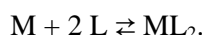
A folyamat egyensúlyi állandója:

$$K_1 = \frac{[ML]}{[M] \cdot [L]}.$$

Egy második ligandum beépülésének egyenlete és egyensúlyi állandója:



Ezzel ellentétben a folyamatot úgy is felírhatjuk, hogy a fémből két ligandummal közvetlenül keletkezik az ML_2 komplex:



Ezen folyamat egyensúlyi állandója:

$$K = \frac{[ML_2]}{[M] \cdot [L]^2}.$$

A folyamat egyensúlyi állandója kifejezhető a fenti két egyensúlyi állandó (K_1 , K_2) segítségével. Az így kapott egyensúlyi állandót **kumulált komplexstabilitási állandónak** nevezzük, és β -val szoktuk jelölni:

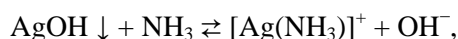
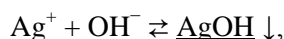
$$\frac{[ML_2]}{[M] \cdot [L]^2} = \frac{[ML_2]}{[M] \cdot [L]^2} \cdot \frac{[ML]}{[ML]} = \frac{[ML]}{[M] \cdot [L]} \cdot \frac{[ML_2]}{[ML] \cdot [L]} = K_1 \cdot K_2 = \beta_2.$$

Értelemszerűen $\beta_1 = K_1$. Általánosságban is felírható, hogy az n-dik kumulált stabilitási állandó az n lépés egyensúlyi állandójának szorzata:

$$M + n L \rightleftharpoons ML_n, \quad \beta_n = \frac{[ML_n]}{[M] \cdot [L]^n} = K_1 \cdot K_2 \cdots K_n = \prod_{i=1}^n K_i.$$

Mivel értékük rendszerint igen nagy, gyakran a kumulált stabilitási állandó logaritmusát szoktuk megadni. Például az ezüst amminkomplexei ($[\text{Ag}(\text{NH}_3)_n]$) esetén $\lg \beta_1 = 3,35$, $\lg \beta_2 = 7,23$.

A kumulált stabilitási állandók segítségével kiszámítható egy adott szabad ligandumkoncentráció esetén a szabad fém és az egyes komplexek koncentrációja és relatív mennyisége. Vegyük például az ezüst-ammin-komplexeiket! Ha ezüst-nitrát-oldathoz ammóniát adunk, a lúgos kémhatás következtében először ezüst-hidroxid (AgOH) csapadék válik le, majd ez feloldódik amminkomplekek formájában:



A keletkezett oldatban a szabad ammóniakoncentráció $[\text{NH}_3]$, a szabad ezüstion-koncentráció $[\text{Ag}^+]$, az ezüsttartalmú ionok összkoncentrációja $c_0(\text{Ag}^+)$:

$$c_0(\text{Ag}^+) = [\text{Ag}^+] + [\text{Ag}(\text{NH}_3)]^+ + [\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+.$$

A kumulált stabilitási állandók segítségével az oldatban található ezüst-ammin-komplex koncentrációja:

$$\beta_1 = \frac{[\text{Ag}(\text{NH}_3)]^+}{[\text{Ag}^+] \cdot [\text{NH}_3]} \Rightarrow [\text{Ag}(\text{NH}_3)]^+ = \beta_1 \cdot [\text{Ag}^+] \cdot [\text{NH}_3].$$

A diammin-komplexé pedig:

$$\beta_2 = \frac{[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+}{[\text{Ag}^+] \cdot [\text{NH}_3]^2} \Rightarrow [\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+ = \beta_2 \cdot [\text{Ag}^+] \cdot [\text{NH}_3]^2.$$

Helyettesítsük be a kapott koncentrációkat az ezüstionok összkoncentrációjába!

$$c_0(\text{Ag}^+) = [\text{Ag}^+] + [\text{Ag}(\text{NH}_3)]^+ + [\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+ = [\text{Ag}^+] + \beta_1 \cdot [\text{Ag}^+] \cdot [\text{NH}_3] + \beta_2 \cdot [\text{Ag}^+] \cdot [\text{NH}_3]^2$$

$[\text{Ag}^+]$ -t kiemelve az egyenletet egyszerűbb formára hozhatjuk:

$$c_0(\text{Ag}^+) = [\text{Ag}^+] (1 + \beta_1 \cdot [\text{NH}_3] + \beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2).$$

Így megkapjuk a szabad fémion-koncentrációt:

$$[\text{Ag}^+] = \frac{c_0(\text{Ag}^+)}{1 + \beta_1 \cdot [\text{NH}_3] + \beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2}.$$

Ennek segítségével a komplexek koncentrációját is megkapjuk:

$$[\text{Ag}(\text{NH}_3)]^+ = \beta_1 \cdot [\text{Ag}^+] \cdot [\text{NH}_3] = \beta_1 \cdot \frac{c_0(\text{Ag}^+)}{1 + \beta_1 \cdot [\text{NH}_3] + \beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2} \cdot [\text{NH}_3],$$

$$[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+ = \frac{\beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2}{1 + \beta_1 \cdot [\text{NH}_3] + \beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2} \cdot c_0(\text{Ag}^+).$$

Hasonlóan a diammin-komplex koncentrációja:

$$[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2^+] = \beta_2 \cdot [\text{Ag}^+] \cdot [\text{NH}_3]^2 = \beta_2 \cdot \frac{c_0(\text{Ag}^+)}{1 + \beta_1 \cdot [\text{NH}_3] + \beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2} \cdot [\text{NH}_3]^2,$$

$$[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2^+] = \frac{\beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2}{1 + \beta_1 \cdot [\text{NH}_3] + \beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2} \cdot c_0(\text{Ag}^+).$$

Tehát a szabad és komplexált ezüstionok koncentrációja:

$$[\text{Ag}^+] = \frac{1}{1 + \beta_1 \cdot [\text{NH}_3] + \beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2} \cdot c_0(\text{Ag}^+),$$

$$[\text{Ag}(\text{NH}_3)^+] = \frac{\beta_1 \cdot [\text{NH}_3]}{1 + \beta_1 \cdot [\text{NH}_3] + \beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2} \cdot c_0(\text{Ag}^+),$$

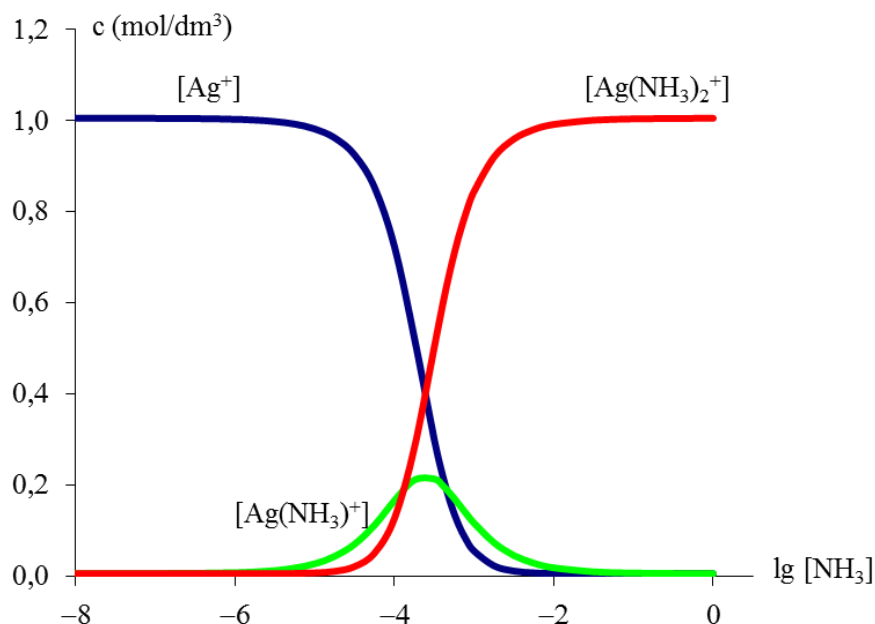
$$[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2^+] = \frac{\beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2}{1 + \beta_1 \cdot [\text{NH}_3] + \beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2} \cdot c_0(\text{Ag}^+).$$

Az egyenletekből (egymással elosztva őket) adódik az egyes koncentrációk relatív mennyisége is:

$$[\text{Ag}^+] : [\text{Ag}(\text{NH}_3)^+] : [\text{Ag}(\text{NH}_3)_2^+] = 1 : \beta_1 \cdot [\text{NH}_3] : \beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2.$$

Jól megfigyelhető, hogy az egyes komplexek relatív mennyisége független az ezüstionok összkoncentrációjától, csak a stabilitási állandóktól és a ligandum koncentrációjától függ.

Az egyes ionok koncentrációját ábrázolhatjuk az egyensúlyi szabad ammóniakoncentráció logaritmusának ($\lg[\text{NH}_3]$) függvényében. Ekkor az alábbi diagramot kapjuk – az ezüstionok összkoncentrációja $c_0(\text{Ag}^+) = 1 \text{ mol/dm}^3$:

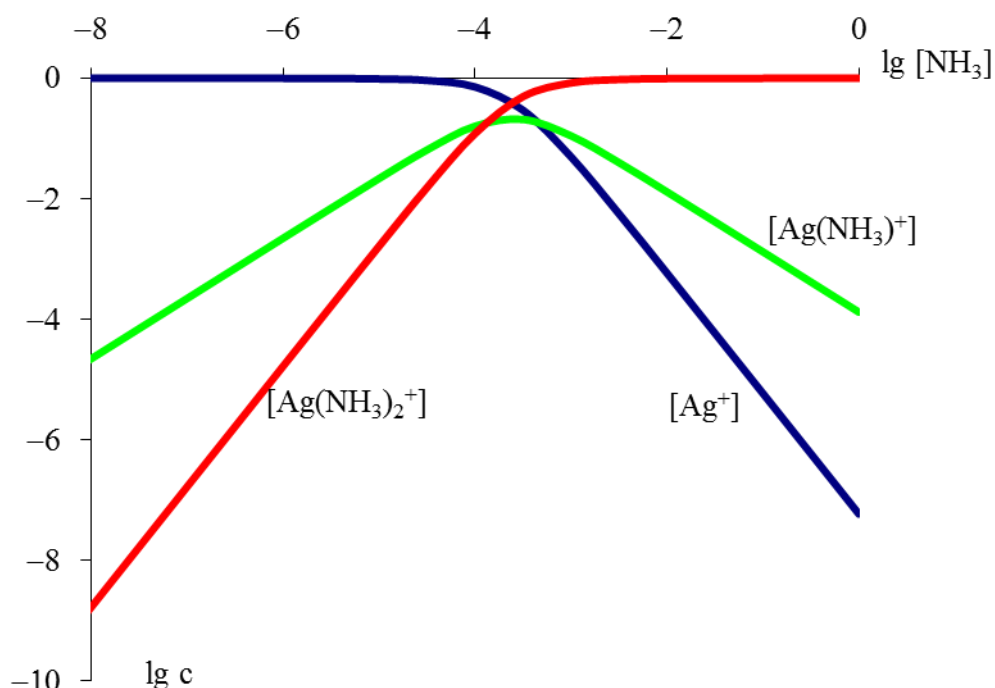


8.6.2.1. ábra: Az egyes ionok koncentrációja az egyensúlyi szabad ammóniakoncentráció logaritmusának függvényében

Kis ligandumkoncentrációk ($[\text{NH}_3] < 10^{-6}$) esetén gyakorlatilag az összes ezüstion komplexátlan formában van. Ha ammóniát adunk az oldathoz, növekszik a két komplex koncentrációja (természetesen a szabad ammóniakoncentráció is növekszik). Kezdetben az $[\text{Ag}(\text{NH}_3)]^+$ komplex koncentrációja meredekebben növekszik, mint az $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$ komplexé. Egy bizonyos ammóniakoncentrációnál az $[\text{Ag}(\text{NH}_3)]^+$ komplex koncentrációjának maximuma van, ekkor a szabad ezüstionok (Ag^+) és az $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$ komplex koncentrációja megegyezik. Könnyen kiszámítható, hogy ez az alábbi ammóniakoncentráció esetén jön létre:

$$[\text{Ag}^+] = \beta_2 \cdot [\text{Ag}^+] \cdot [\text{NH}_3]^2 \quad \Rightarrow \quad [\text{NH}_3] = \frac{1}{\sqrt{\beta_2}}$$

A protolitikus egyensúlyokhoz hasonlóan itt is készíthetünk logaritmikus egyensúlyi diagramot:



8.6.2.2. ábra: Az egyes ionok koncentrációjának logaritmusának az egyensúlyi szabad ammóniakoncentráció logaritmusának függvényében

Jól megfigyelhető, hogy kis ammóniakoncentrációk esetén az alábbi közelítések érvényesek. Mivel $[\text{NH}_3]$ igen kicsi, a törtek nevezőjében elhanyagolható a második ($\beta_1 \cdot [\text{NH}_3]$, és harmadik ($\beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2$) tag:

$$[\text{Ag}^+] = \frac{c_0(\text{Ag}^+)}{1 + \beta_1 \cdot [\text{NH}_3] + \beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2} \approx c_0(\text{Ag}^+),$$

$$[\text{Ag}(\text{NH}_3)^+] = \frac{\beta_1 \cdot [\text{NH}_3] \cdot c_0(\text{Ag}^+)}{1 + \beta_1 \cdot [\text{NH}_3] + \beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2} \approx \beta_1 \cdot c_0(\text{Ag}^+) \cdot [\text{NH}_3],$$

$$[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2^+] = \frac{\beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2 \cdot c_0(\text{Ag}^+)}{1 + \beta_1 \cdot [\text{NH}_3] + \beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2} \approx \beta_2 \cdot c_0(\text{Ag}^+) \cdot [\text{NH}_3]^2.$$

Ha a koncentrációk logaritmusát vesszük:

$$\lg[\text{Ag}^+] \approx \lg c_0(\text{Ag}^+),$$

$$\lg[\text{Ag}(\text{NH}_3)^+] \approx \lg(\beta_1 \cdot c_0(\text{Ag}^+) \cdot [\text{NH}_3]) = \lg(\beta_1 \cdot c_0(\text{Ag}^+)) + \lg[\text{NH}_3],$$

$$\lg[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2^+] \approx \lg(\beta_2 \cdot c_0(\text{Ag}^+) \cdot [\text{NH}_3]^2) = \lg(\beta_2 \cdot c_0(\text{Ag}^+)) + 2 \cdot \lg[\text{NH}_3].$$

Tehát a koncentrációk rendre az ammóniakoncentráció nulladik, első és második hatványával arányosak, ez a logaritmikus diagramon is szépen látszik a meredekségeken.

Ezzel ellentétben nagy ammóniakoncentrációk esetén a tört nevezőjében az első két tag hanyagolható el:

$$[\text{Ag}^+] = \frac{c_0(\text{Ag}^+)}{1 + \beta_1 \cdot [\text{NH}_3] + \beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2} \approx \frac{c_0(\text{Ag}^+)}{\beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2} = \frac{c_0(\text{Ag}^+)}{\beta_2} \cdot \frac{1}{[\text{NH}_3]^2},$$

$$[\text{Ag}(\text{NH}_3)^+] = \frac{\beta_1 \cdot [\text{NH}_3] \cdot c_0(\text{Ag}^+)}{1 + \beta_1 \cdot [\text{NH}_3] + \beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2} \approx \frac{\beta_1 \cdot [\text{NH}_3] \cdot c_0(\text{Ag}^+)}{\beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2} = \frac{\beta_1 \cdot c_0(\text{Ag}^+)}{\beta_2} \cdot \frac{1}{[\text{NH}_3]},$$

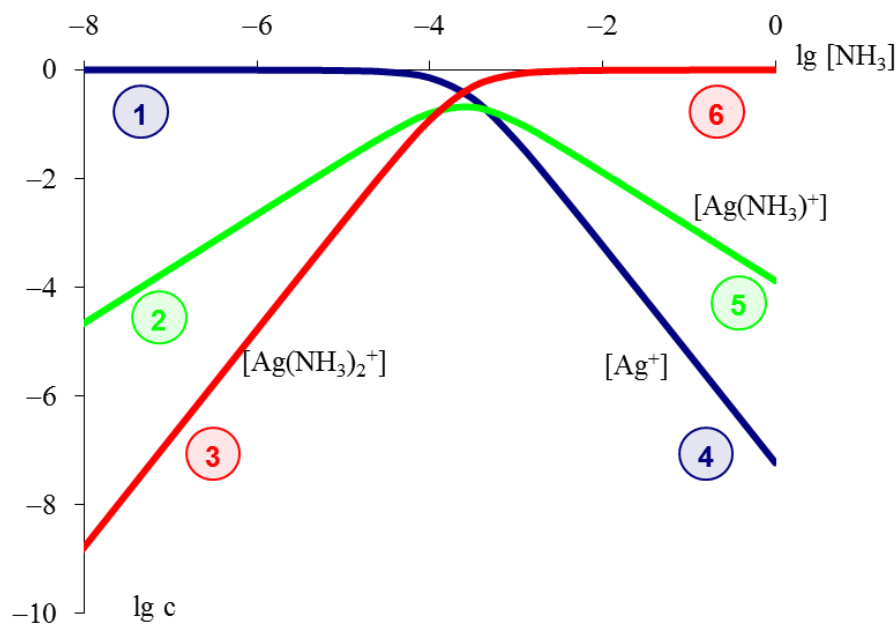
$$[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2^+] = \frac{\beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2 \cdot c_0(\text{Ag}^+)}{1 + \beta_1 \cdot [\text{NH}_3] + \beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2} \approx \frac{\beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2 \cdot c_0(\text{Ag}^+)}{\beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2} = c_0(\text{Ag}^+).$$

Az egyenletek logaritmusát ábrázolva, $\lg[\text{NH}_3]$ függvényében rendre (-2), (-1) és 0 meredekségű egyeneseket kapunk (lásd a fenti diagram jobb oldala):

$$\lg[\text{Ag}^+] \approx \lg \frac{c_0(\text{Ag}^+)}{\beta_2} \cdot \frac{1}{[\text{NH}_3]^2} = \lg \frac{c_0(\text{Ag}^+)}{\beta_2} - 2 \cdot \lg[\text{NH}_3],$$

$$\lg[\text{Ag}(\text{NH}_3)^+] \approx \lg \frac{\beta_1 \cdot c_0(\text{Ag}^+)}{\beta_2} \cdot \frac{1}{[\text{NH}_3]} = \lg \frac{\beta_1 \cdot c_0(\text{Ag}^+)}{\beta_2} - 1 \cdot \lg[\text{NH}_3],$$

$$\lg[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2^+] \approx \lg c_0(\text{Ag}^+).$$



$\lg[\text{Ag}^+]$	①	$\lg c_0(\text{Ag}^+)$	④	$\lg \frac{c_0(\text{Ag}^+)}{\beta_2} - 2 \cdot \lg[\text{NH}_3]$
$\lg[\text{Ag}(\text{NH}_3)^+]$	②	$\lg(\beta_1 \cdot c_0(\text{Ag}^+)) + \lg[\text{NH}_3]$	⑤	$\lg \frac{\beta_1 \cdot c_0(\text{Ag}^+)}{\beta_2} - \lg[\text{NH}_3]$
$\lg[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2^+]$	③	$\lg(\beta_2 \cdot c_0(\text{Ag}^+)) + 2 \cdot \lg[\text{NH}_3]$	⑥	$\lg c_0(\text{Ag}^+)$

8.6.2.3. ábra: Az egyes ionok koncentrációjának logaritmusai az egyensúlyi szabad ammóniakoncentráció logaritmusának függvényében

Összességében megállapítható, hogy – a tényleges egyensúlyi állandóktól függő – kis ligandumkoncentrációk esetén a szabad (komplexálatlan) fémion koncentrációja a legnagyobb, azonban, ha nagy a szabad ligandum koncentrációja, akkor gyakorlatilag az összes ezüstion diammin-komplex formájában van az oldatban.

A következőkben bemutatjuk néhány komplex megoszlási diagramját.

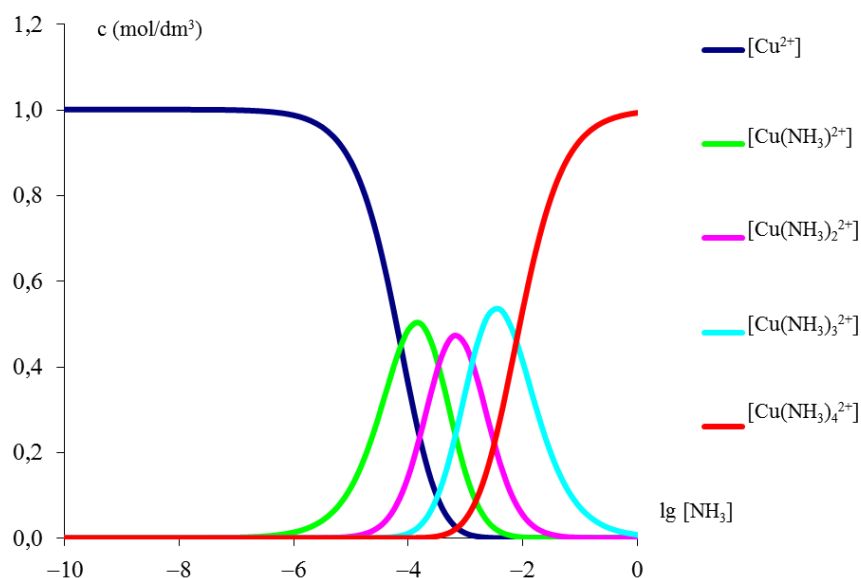
Réz(II)-amin komplexek

A réz(II)ionok fontos kimutatási reakciója az ammóniával történő komplexképzés. Réz(II)ionokat tartalmazó oldathoz ammónia oldatának kis részletét adva, először világoskék réz(II)-hidroxid ($\text{Cu}(\text{OH})_2$) csapadék válik le, majd az ammóniaoldat nagyobb mennyisége hatására komplex vegyületek keletkeznek, így az oldat színe jellegzetesen mélykékre változik.

Az egyes koordinációs számú komplexek stabilitási állandója:

$$\beta_1 = 1,35 \cdot 10^4; \beta_2 = 3,98 \cdot 10^7; \beta_3 = 3,02 \cdot 10^{10}; \beta_4 = 3,89 \cdot 10^{12}.$$

A réz(II)ionok összkoncentrációja 1 mol/dm^3 .



8.6.2.4. ábra: Réz(II)-amin komplexek megoszlási diagramja

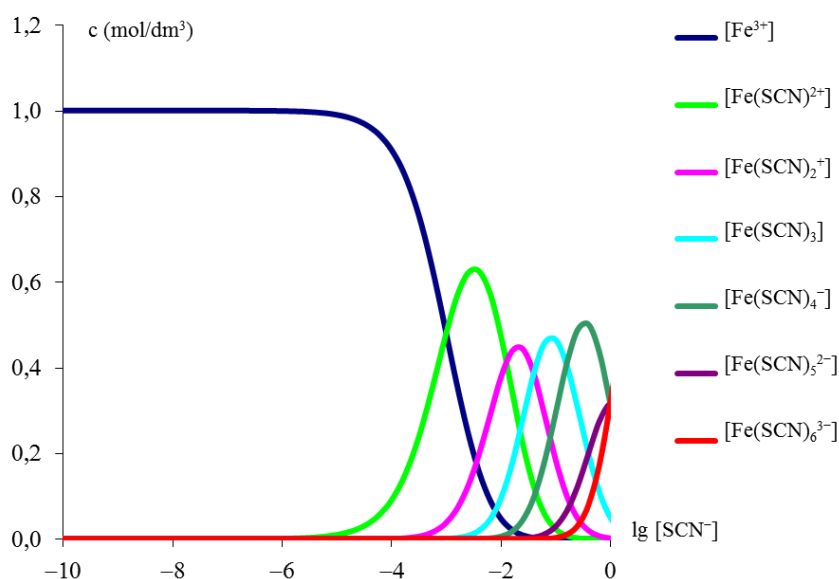
A réz-ammin-komplexek stabilitási állandói viszonylag nagyok, ám igen nagy ($\sim 1 \text{ mol/dm}^3$) szabad ammóniakoncentráció szükséges ahhoz, hogy a Cu^{2+} -ionokat a maximális, 4-es koordinációjú komplexbe vigyük. Mivel az egyes stabilitási állandók között nincs sok nagyságrendnyi eltérés (kb. 3 nagyságrend a különbség), kisebb ammóniakoncentrációk esetén viszonylag jelentős a kisebb koordinációs számú komplexek relatív mennyisége is.

Vas(III)-tiocianát és vas(III)-fluoro komplexek

A szeretlen kémiai analízisben a vas(III)ionok kimutatásának egyik fontos reakciója a tiocianát- (SCN^-)-ionnal történő komplexképzés: jellegzetes, intenzív vérvörös színű komplexek jönnek létre, ha valamilyen Fe^{3+} -tartalmú oldathoz SCN^- -ionokat adunk.

Az $[\text{Fe}(\text{SCN})_n]^{3-n}$ komplexek kumulált stabilitási állandói:

$$\beta_1 = 1,00 \cdot 10^3; \beta_2 = 7,94 \cdot 10^4; \beta_3 = 2,00 \cdot 10^6; \beta_4 = 1,26 \cdot 10^7; \beta_5 = 1,26 \cdot 10^7; \beta_6 = 1,00 \cdot 10^6.$$

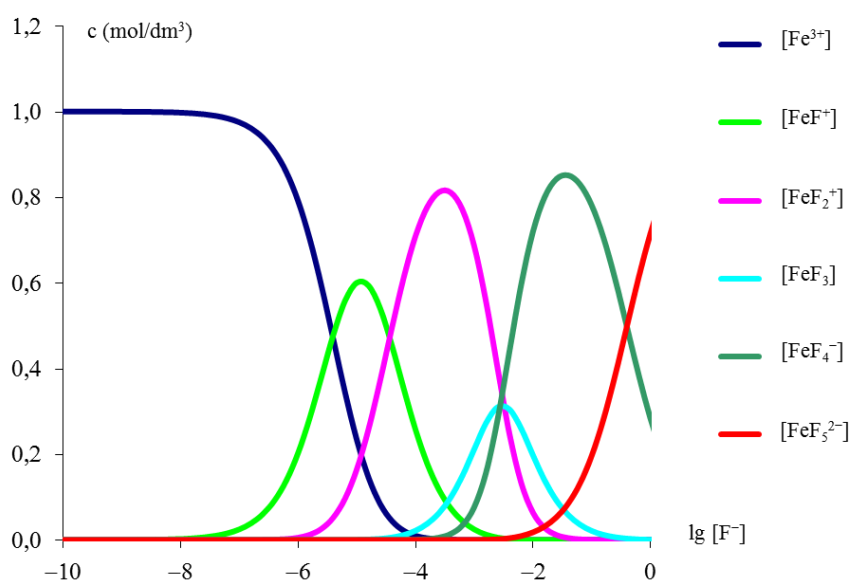


8.6.2.5. ábra: Vas(III)-tiocianát komplexek megoszlási diagramja

A komplexstabilitási állandók tekinthetők kiemelkedően nagyoknak (összehasonlítva más komplexekkel), és az egyes állandók között sincsen jelentős különbség ($\beta_3 \approx \beta_4 \approx \beta_5 \approx \beta_6$), ezért a legtöbb tiocianát-koncentráció esetén többféle koordinációs számú komplex van egymással egyensúlyban. Még nagy szabad SCN^- -koncentráció (1 mol/dm^3) esetén is a három legstabilabb komplex ($[\text{Fe}(\text{SCN})_4]^-$, $[\text{Fe}(\text{SCN})_5]^{2-}$ és $[\text{Fe}(\text{SCN})_6]^{3-}$) kb. 1 : 1 : 1 arányú keverékét kapjuk, de még a semleges $[\text{Fe}(\text{SCN})_3]$ komplex relatív mennyisége is viszonylag nagy.

A vas(III)ionok stabil komplexeket képeznek fluoridionokkal is. A stabilitási állandók:

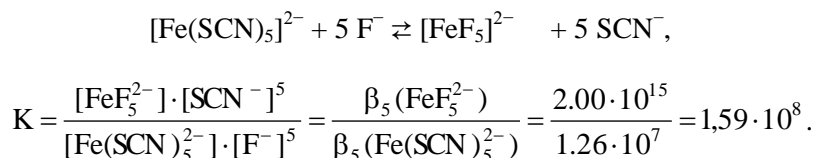
$$\beta_1 = 2,57 \cdot 10^5; \beta_2 = 7,08 \cdot 10^9; \beta_3 = 2,19 \cdot 10^{12}; \beta_4 = 7,94 \cdot 10^{14}; \beta_5 = 2,00 \cdot 10^{15}.$$



8.6.2.6. ábra: Vas(III)-fluorid komplexek megoszlási diagramja

Egyrészt a stabilitási állandókból, másrészt a diagramokat összehasonlítva is látható, hogy a fluoridionok sokkal stabilabb komplexeket képeznek a Fe^{3+} -ionokkal, mint a tiocianátionok (a diagramban már sokkal kisebb fluoridkoncentráció esetén megjelennek a komplexek, mint a tiocianát anion esetén).

Kísérleti tapasztalatok alapján a vas(III)-tiocianát komplexekből kiszorítható a tiocianátion fluoridionok segítségével, azaz a vörösvörös vas(III)-tiocianát komplexek oldatához például nátrium-fluoridot adva az oldat elszíntelenedik, mivel a vas(III)-fluoro komplexek színtelenek. Ezt az alábbi reakció egyensúlyi állandójával szemléltethetjük:



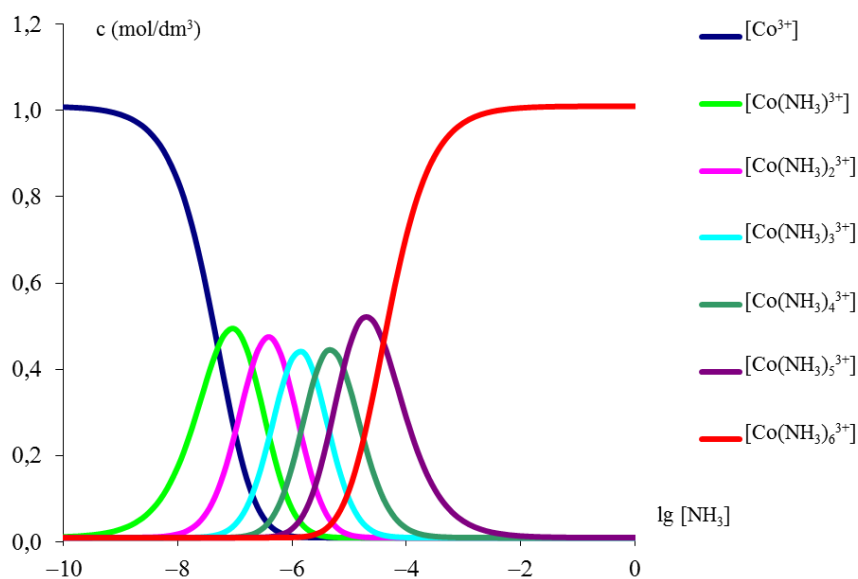
A rendkívül nagy egyensúlyi állandó következtében az egyensúly a jobb oldal irányába van eltolódva, így az oldatban gyakorlatilag az összes vas(III)ion fluorokomplex formájában van jelen, a vas(III)-tiocianát komplexek mennyisége igen kicsi.

Kobalt(III)-amin komplexek

A stabilitási állandók:

$$\beta_1 = 2,00 \cdot 10^7; \beta_2 = 1,00 \cdot 10^{14}; \beta_3 = 1,26 \cdot 10^{20}; \beta_4 = 5,01 \cdot 10^{25}; \beta_5 = 6,31 \cdot 10^{30}; \beta_6 = 1,58 \cdot 10^{35}.$$

A kobalt(III)ionok összkoncentrációja 1 mol/dm^3 .



8.6.2.7. ábra: Kobalt(III)-amin komplexek megoszlási diagramja

A rendkívül nagy β_6 egyensúlyi állandónak köszönhetően, már igen kicsi ammóniakoncentráció esetén ($[\text{NH}_3] > 10^{-2} \text{ mol/dm}^3$), gyakorlatilag csak hatos koordinációs számú komplex található az oldatban. Annak ellenére, hogy β_3 , β_4 és β_5 is igen nagy, ezek relatív mennyisége csak kisebb ammóniakoncentrációk esetén meghatározó ($10^{-9} \text{ mol/dm}^3 < [\text{NH}_3] < 10^{-3} \text{ mol/dm}^3$).

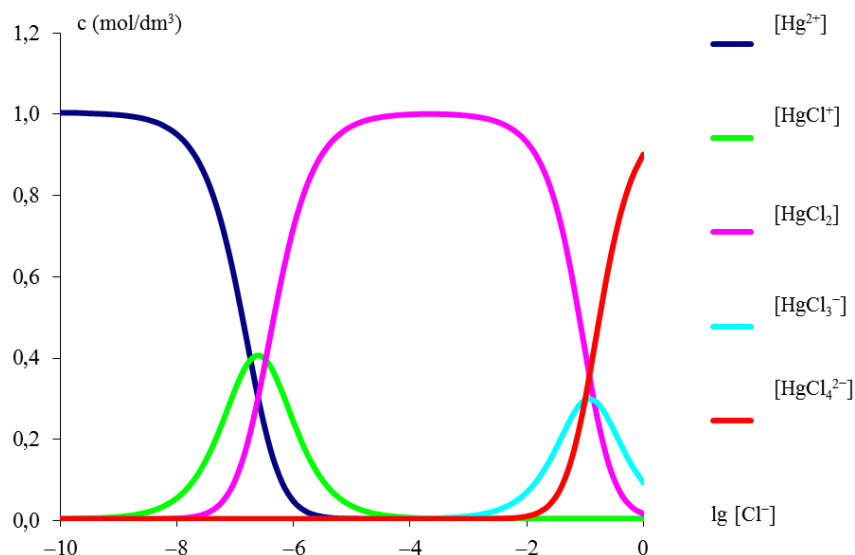
Higany(II)-kloro komplexek

A higany(II)ionnak többféle koordinációs számú komplexe ismert.

A különböző n koordinációs számú $[\text{HgCl}_n]^{2-n}$ komplexek ($n: 1-4$) stabilitási állandói:

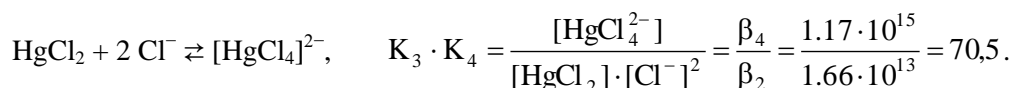
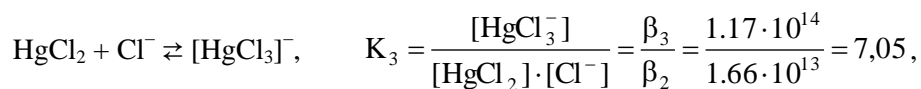
$$\beta_1 = 5,50 \cdot 10^6; \beta_2 = 1,66 \cdot 10^{13}; \beta_3 = 1,17 \cdot 10^{14}; \beta_4 = 1,17 \cdot 10^{15}.$$

A szabad Hg^{2+} -ion és az egyes komplexek koncentrációja ($c_0(\text{Hg}^{2+}) = 1 \text{ mol/dm}^3$) a szabad kloridion-koncentráció függvényében:



8.6.2.8. ábra: Higany(II)-klorid komplexek megoszlási diagramja

A kapott diagram az előzőektől igen eltér: igen széles Cl^- -ion tartományban a semleges HgCl_2 komplex van túlsúlyban. Igen nagy kloridion-koncentráció szükséges ahhoz, hogy anionos komplexet hozzunk létre. Ennek oka, hogy β_3 , β_4 és β_5 közel egyforma értékű, azaz a hármas és négyes koordinációs számú komplex keletkezése nem túl kedvező, csak ha nagy a szabad kloridion koncentrációja. A kumulatív stabilitási állandókból megállapítható az alábbi folyamatok egyensúlyi állandója:



Az egyensúlyi állandókból látható, hogy a tetrakloro-komplex képződése sokkal kedvezőbb, mint a triklorokomplexé, ezért ez utóbbi mennyisége igen csekély gyakorlatilag bármilyen kloridion-koncentrációnál.

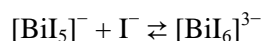
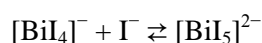
A kísérleti tapasztalatok szerint a higany(II)-klorid vizes oldatában igen gyengén disszociál ionjaira, főleg semleges HgCl_2 -ként található meg. Az egyensúlyi állandók alapján kiszámítható, hogyha tiszta higany(II)-kloridból 1 mol/dm^3 koncentrációjú oldatot készítünk, akkor abban a különböző higanytartamú részecskék százalékos megoszlása az alábbi táblázatban található (ekkor az oldatban a szabad Cl^- -koncentráció $2 \cdot 10^{-4}$). A táblázat tartalmazza abban az oldatban a higany-speciesszek megoszlását, melyet 1 mol higany(II)-kloridot 1 dm^3 térfogatú 1 mol/dm^3 koncentrációjú sósavoldatban történő feloldásával állítottunk elő.

Speciesz	Mólszázalék (%)	
	1 mol/dm ³ HgCl ₂ desztillált vízben	1 mol/dm ³ HgCl ₂ 1 mol/dm ³ HCl-oldatban
Hg ²⁺	0,0001	2 · 10 ⁻⁸
[HgCl] ⁺	0,1632	0,0001
[HgCl ₂]	99,6936	40,5556
[HgCl ₃] ⁻	0,1427	29,3800
[HgCl ₄] ²⁻	0,0003	30,0643

A „tisztá” higany(II)-klorid-oldatban gyakorlatilag csak HgCl₂ molekulák találhatók, és még a sósavas oldatban is mintegy 40%-nyi a HgCl₂ molekulák részaránya. (A higany(II)-klorid nem sószerű anyag, hanem molekulárcsos, melyet más tulajdonságai is alátámasztanak. Például melegítés hatására könnyen szublimál, mely egy kiváló módszer tisztítására is.)

8.68. példa:

Mekkora a következő folyamatok egyensúlyi állandója? $\beta_4 = 1,00 \cdot 10^{15}$; $\beta_5 = 6,31 \cdot 10^{16}$; $\beta_6 = 6,32 \cdot 10^{18}$.



Megoldás:

A kumulált stabilitási állandók alapján:

$$K_5 = \frac{[\text{BiI}_5^{2-}]}{[\text{BiI}_4^-] \cdot [\text{I}^-]} = \frac{[\text{BiI}_5^{2-}]}{[\text{BiI}_4^-] \cdot [\text{I}^-]} \cdot \frac{[\text{Bi}^{3+}] \cdot [\text{I}^-]^4}{[\text{Bi}^{3+}] \cdot [\text{I}^-]^4} = \frac{[\text{BiI}_5^{2-}]}{[\text{Bi}^{3+}] \cdot [\text{I}^-]^5} \cdot \frac{[\text{Bi}^{3+}] \cdot [\text{I}^-]^4}{[\text{BiI}_4^-]} = \frac{[\text{BiI}_5^{2-}]}{[\text{Bi}^{3+}] \cdot [\text{I}^-]^4} = \frac{\beta_5}{\beta_4},$$

$$K_5 = \frac{\beta_5}{\beta_4} = \frac{6,31 \cdot 10^{16}}{1,00 \cdot 10^{15}} = 63,1,$$

$$K_6 = \frac{[\text{BiI}_6^{3-}]}{[\text{BiI}_5^{2-}] \cdot [\text{I}^-]} = \frac{[\text{BiI}_6^{3-}]}{[\text{BiI}_5^{2-}] \cdot [\text{I}^-]} \cdot \frac{[\text{Bi}^{3+}] \cdot [\text{I}^-]^5}{[\text{Bi}^{3+}] \cdot [\text{I}^-]^5} = \frac{[\text{BiI}_6^{3-}]}{[\text{Bi}^{3+}] \cdot [\text{I}^-]^6} \cdot \frac{[\text{Bi}^{3+}] \cdot [\text{I}^-]^5}{[\text{BiI}_5^{2-}]} = \frac{[\text{BiI}_6^{3-}]}{[\text{BiI}_5^{2-}] \cdot [\text{Bi}^{3+}] \cdot [\text{I}^-]^5} = \frac{\beta_6}{\beta_5},$$

$$K_6 = \frac{\beta_6}{\beta_5} = \frac{6,32 \cdot 10^{18}}{6,31 \cdot 10^{16}} = 100,2.$$

Tehát a két folyamat egyensúlyi állandója: $K_5 = 63,1$; $K_6 = 100,2$.

8.69. példa:

A [Cr(OH)₄]⁻ komplex stabilitási állandója: $\beta_4 = 1,60 \cdot 10^{28}$ (a többi egyensúlyi állandó sokkal kisebb, ezért más komplexek képződésétől eltekintünk). Mekkora kell beállítani a 0,100 mol/dm³ koncentrációjú CrCl₃-oldat pH-ját, hogy a szabad Cr³⁺-koncentráció 1,00 · 10⁻¹⁰-re csökkenjen?

Megoldás:

Csak a 4-es koordinációs számú komplexet kell figyelembe vennünk (és a szabad Cr^{3+} -ionokat, melyek mennyisége egyébként rendkívül kicsi):

$$\beta_4 = \frac{[\text{Cr}(\text{OH})_4^-]}{[\text{Cr}^{3+}] \cdot [\text{OH}^-]^4} \Rightarrow [\text{Cr}(\text{OH})_4^-] = \beta_4 \cdot [\text{Cr}^{3+}] \cdot [\text{OH}^-]^4,$$

$$c_0(\text{Cr}^{3+}) = [\text{Cr}^{3+}] + [\text{Cr}(\text{OH})_4^-] = [\text{Cr}^{3+}] + \beta_4 \cdot [\text{Cr}^{3+}] \cdot [\text{OH}^-]^4 = [\text{Cr}^{3+}] (1 + \beta_4 \cdot [\text{OH}^-]^4).$$

Melyből:

$$[\text{OH}^-] = \sqrt[4]{\frac{\frac{c_0(\text{Cr}^{3+})}{[\text{Cr}^{3+}]} - 1}{\beta_4}} = \sqrt[4]{\frac{0,100}{1,00 \cdot 10^{-10}} - 1} = 1,58 \cdot 10^{-5} \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}.$$

Így az oldat pH-ja:

$$\text{pH} = 14 + \lg[\text{OH}^-] = 14 + \lg(1,58 \cdot 10^{-5}) = 9,20.$$

Tehát az oldat pH-ját 9,20-ra kell beállítani.

8.70. példa:

Ezüsttükör- (Tollens-) próbát szeretnénk elvégezni, ehhez ezüst-diammin-komplexet kell készítenünk. 100,0 cm³ térfogatú, 1,00 mol/dm³ koncentrációjú ezüst-nitrát-oldatba mekkora anyagmennyiségű ammóniagázt kell vezetnünk, hogy az ezüstionok 99,0%-a diammin-komplekként legyenek az oldatban? A gázbevezetés nem változtatja meg az oldat térfogatát. $\beta_1 = 2,24 \cdot 10^3$, $\beta_2 = 1,70 \cdot 10^7$.

Megoldás:

Ki kell számítanunk a szabad ammóniakoncentrációt!

A fentiek alapján az diammin-komplex mennyisége:

$$[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2^+] = \frac{\beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2}{1 + \beta_1 \cdot [\text{NH}_3] + \beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2} \cdot c_0(\text{Ag}^+).$$

Ebből a részarány:

$$\frac{[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2^+]}{c_0(\text{Ag}^+)} = \frac{\beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2}{1 + \beta_1 \cdot [\text{NH}_3] + \beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2}.$$

A diamminkomplexnek 99%-os mennyiségben kell jelen lennie, így a következő egyenletet kapjuk:

$$0,99 = \frac{[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2^+]}{c_0(\text{Ag}^+)} = \frac{\beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2}{1 + \beta_1 \cdot [\text{NH}_3] + \beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2} = \frac{1,70 \cdot 10^7 \cdot [\text{NH}_3]^2}{1 + 2,24 \cdot 10^3 \cdot [\text{NH}_3] + 1,70 \cdot 10^7 \cdot [\text{NH}_3]^2}.$$

A másodfokú egyenletet megoldva, az egyenlet kémiaileg releváns (pozitív) gyöke: $[\text{NH}_3] = 0,0135 \text{ mol/dm}^3$. Tehát már ismerjük a szabad ammóniakoncentrációt. A továbbiakban ki kell számítani a monoammin-komplex koncentrációját is:

$$[\text{Ag}(\text{NH}_3)^+] = \frac{\beta_1 \cdot [\text{NH}_3]}{1 + \beta_1 \cdot [\text{NH}_3] + \beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2} \cdot c_0(\text{Ag}^+) = \frac{2,24 \cdot 10^3 \cdot [\text{NH}_3]}{1 + 2,24 \cdot 10^3 \cdot [\text{NH}_3] + 1,70 \cdot 10^7 \cdot [\text{NH}_3]^2} \cdot 1,$$

$$[\text{Ag}(\text{NH}_3)^+] = \frac{2,24 \cdot 10^3 \cdot 0,0135}{1 + 2,24 \cdot 10^3 \cdot 0,0135 + 1,70 \cdot 10^7 \cdot 0,0135^2} \cdot 1 = 9,663 \cdot 10^{-3}.$$

Végül össze kell számolnunk, hogy mennyi ammónia került az oldatba. A diammin-komplexben (ennek koncentrációja a feltétel alapján $0,99 \text{ mol/dm}^3$) mólonként 2 mól ammónia van, a monoamin-komplexben 1, és még hozzá kell számítanunk a szabad ammónia koncentrációját is:

$$c(\text{NH}_3) = 2 \cdot [\text{Ag}(\text{NH}_3)_2^+] + [\text{Ag}(\text{NH}_3)^+] + [\text{NH}_3] = 2 \cdot 0,99 + 9,663 \cdot 10^{-3} + 0,0135 = 2,003 \text{ mol/dm}^3.$$

Tehát $100,0 \text{ cm}^3$ oldatba 0,2003 mol ammóniagázt kell bevezetnünk.

8.71. példa

Az ólom(II)ionok hidroxokomplexeiket képeznek lúgos pH-n. Az egyes komplexek stabilitási állandói

$$\beta_1 = 1,58 \cdot 10^6, \beta_2 = 2,00 \cdot 10^{10}, \beta_3 = 2,00 \cdot 10^{13}.$$

Egy oldat $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációban tartalmaz ólom(II)ionokat, a pH pedig 10,00. Mekkora az alábbi ionok koncentrációja: Pb^{2+} , $[\text{Pb}(\text{OH})^+]$, $[\text{Pb}(\text{OH})_2]$, $[\text{Pb}(\text{OH})_3^-]$?

Megoldás:

A pH-ból kiszámítható a szabad OH^- -koncentráció:

$$[\text{OH}^-] = 10^{-\text{pOH}} = 10^{-4} \text{ mol/dm}^3.$$

Az előzőekhez hasonlóan az egyes ionok koncentrációja:

$$[\text{Pb}^{2+}] = \frac{c_0(\text{Ag}^+)}{1 + \beta_1 \cdot [\text{OH}^-] + \beta_2 \cdot [\text{OH}^-]^2 + \beta_3 \cdot [\text{OH}^-]^3},$$

$$[\text{Pb}(\text{OH})^+] = \frac{\beta_1 \cdot [\text{OH}^-] \cdot c_0(\text{Ag}^+)}{1 + \beta_1 \cdot [\text{OH}^-] + \beta_2 \cdot [\text{OH}^-]^2 + \beta_3 \cdot [\text{OH}^-]^3},$$

$$[\text{Pb}(\text{OH})_2] = \frac{\beta_2 \cdot [\text{OH}^-]^2 \cdot c_0(\text{Ag}^+)}{1 + \beta_1 \cdot [\text{OH}^-] + \beta_2 \cdot [\text{OH}^-]^2 + \beta_3 \cdot [\text{OH}^-]^3},$$

$$[\text{Pb}(\text{OH})_3^-] = \frac{\beta_3 \cdot [\text{OH}^-]^3 \cdot c_0(\text{Ag}^+)}{1 + \beta_1 \cdot [\text{OH}^-] + \beta_2 \cdot [\text{OH}^-]^2 + \beta_3 \cdot [\text{OH}^-]^3}.$$

A nevező értéke:

$$\alpha = 1 + \beta_1 \cdot [\text{OH}^-] + \beta_2 \cdot [\text{OH}^-]^2 + \beta_3 \cdot [\text{OH}^-]^3 = \\ 1 + 1,58 \cdot 10^6 \cdot 10^{-4} + 2,00 \cdot 10^{10} \cdot (10^{-4})^2 + 2,00 \cdot 10^{13} \cdot (10^{-4})^3 = 379.$$

Így az egyes ionok koncentrációja:

$$[\text{Pb}^{2+}] = \frac{0,100 \text{ mol}}{379 \text{ dm}^3} = 2,64 \cdot 10^{-4} \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3},$$

$$[\text{Pb}(\text{OH})^+] = \frac{1,58 \cdot 10^6 \cdot 10^{-4} \cdot 0,100 \text{ mol}}{379 \text{ dm}^3} = 4,17 \cdot 10^{-2} \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3},$$

$$[\text{Pb}(\text{OH})_2] = \frac{2,00 \cdot 10^{10} \cdot (10^{-4})^2 \cdot 0,100 \text{ mol}}{379 \text{ dm}^3} = 5,28 \cdot 10^{-2} \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3},$$

$$[\text{Pb}(\text{OH})_3^-] = \frac{2,00 \cdot 10^{13} \cdot (10^{-4})^3 \cdot 0,100 \text{ mol}}{379 \text{ dm}^3} = 5,28 \cdot 10^{-3} \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}.$$

Tehát az egyes specieszek koncentrációja:

$$[\text{Pb}^{2+}] = \underline{2,64 \cdot 10^{-4} \text{ mol/dm}^3}, \quad [\text{Pb}(\text{OH})^+] = \underline{4,17 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3}, \quad [\text{Pb}(\text{OH})_2] = \underline{5,28 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3} \text{ és}$$

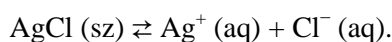
$$[\text{Pb}(\text{OH})_3^-] = \underline{5,28 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3}.$$

8.6.3. Oldhatósági egyensúlyok

8.6.3.1. Az oldhatósági szorzat

Már korábban is volt szó a heterogén fázisú egyensúlyokról. A szilárd anyagok oldódása tipikusan heterogén fázisú egyensúlynak tekinthető. A csapadékok igen korlátozott oldékonysággal rendelkeznek, a hagyományos sók oldhatóságánál nagyságrendekkel kisebb az oldhatóságuk.

Vegyünk egy egyszerű példát! Ezüst-kloridot desztillált vízbe szórva, a következő egyenlet szerinti oldódás megy végbe:

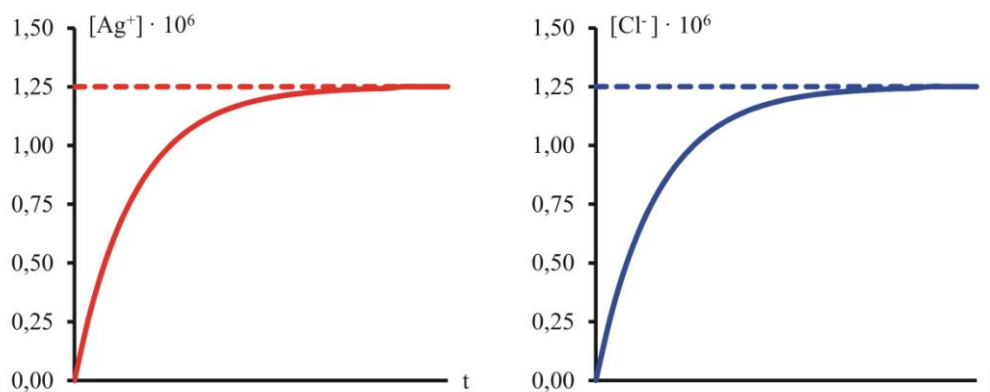


A folyamat egyensúlyi állandójában nem szerepel a szilárd AgCl koncentrációja, mivel az nem az oldat fázisban található. Tehát a folyamat egyensúlyi állandója:

$$K_{\text{sp}} = L = [\text{Ag}^+ (\text{aq})] \cdot [\text{Cl}^- (\text{aq})].$$

K_{sp} állandóban „sp” az angol *solubility product*, az L pedig a német *Löslichkeitsprodukt* szóból származik, magyarul pedig **oldhatósági szorzat**nak nevezzük a kifejezést (a továbbiakban L-lel jelöljük, és a jelölésben az (aq) fázisjelet is elhagyjuk, mivel minden koncentráció hidratált iont fog jelenteni).

Mi történik, ha egy adott (nagy) mennyiségű szilárd ezüst-kloridra desztillált vizet öntünk? A rosszul oldódó csapadék elkezd oldódni, az oldatban növekszik az Ag^+ és Cl^- ionok koncentrációja, ám a növekedés lelassul: az oldat telítődik. Ekkor több csapadék már nem tud feloldódni az adott térfogatban adott körülmények között: beáll a dinamikus egyensúly (az oldódás és a kicsapódás sebessége azonos, az ionok koncentrációja időben állandó). Az egyes ionok oldatban mérhető koncentrációja az idő függvényében:



8.6.3.1.1. ábra: Az Ag^+ - és Cl^- -ionok koncentrációja az idő függvényében

Mivel az ionok arányának (1 : 1) következtében minden egyes kationnal (Ag^+) együtt egy anion (Cl^-) is beoldódik, mindkét ion koncentrációja ugyanahhoz az értékhez tart. Az egyensúlyi koncentrációk:

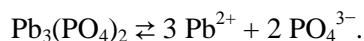
$$[\text{Ag}^+] = [\text{Cl}^-] = 1,25 \cdot 10^{-5} \text{ mol/dm}^3.$$

Az egyensúlyi koncentrációk segítségével kiszámítható az oldhatósági szorzat:

$$L = [\text{Ag}^+] \cdot [\text{Cl}^-] = (1,25 \cdot 10^{-5}) \cdot (1,25 \cdot 10^{-5}) = 1,5625 \cdot 10^{-10}.$$

Amennyiben nem 1 : 1 arányú az anion és kation aránya a vegyületben, az oldhatósági szorzatban – a többi egyensúlyi állandóhoz hasonlóan – a megfelelő hatványra kell emelni az egyes ionok koncentrációját (melyeket a szokásos módon mol/dm^3 -ben kell behelyettesítenünk).

Például az ólom(II)-foszfát csapadék esetén:



Az oldhatósági szorzat kifejezése a fenti reakcióegyenlet alapján:

$$L = [\text{Pb}^{2+}]^3 \cdot [\text{PO}_4^{3-}]^2.$$

Az egyenletben $[\text{Pb}^{2+}]$ és $[\text{PO}_4^{3-}]$ az ólom-, illetve foszfátionok egyensúlyi koncentrációját jelenti a telített oldatban.

Hasonlóan egy A_mB_n általános összetételű csapadék esetén az oldódás egyenlete:



Az oldhatósági szorzat alakja:

$$L(\text{A}_m\text{B}_n) = [\text{A}^{n+}]^m \cdot [\text{B}^{m-}]^n.$$

8.6.3.2. Az oldhatósági egyensúly

Az oldhatósági egyensúly feltétele, hogy beálljon a dinamikus egyensúly az oldat és a szilárd anyag között. Ha egy adott térfogatú desztillált vízbe valamilyen csapadékot szórunk, három eset lehetséges:

- a szilárd anyag kiindulási mennyisége nagyobb annál, mint amennyi az adott térfogatban fel tud oldódni: a szilárd anyag egy része feloldódik, az oldat telítetté válik az oldott anyagra

nézve. Az oldatban lévő ionok megfelelő hatványon vett szorzata azonos az oldhatósági szorzattal:

$$[A^{n+}]^m \cdot [B^{m-}]^n = L(A_m B_n).$$

- a szilárd anyag kiindulási mennyisége éppen fel tud oldódni az oldószerben. Az oldat telített az oldott anyagra nézve, de nem marad szilárd anyag. Ekkor szintén teljesül az oldhatósági szorzat:

$$[A^{n+}]^m \cdot [B^{m-}]^n = L(A_m B_n).$$

- a szilárd anyag mennyisége kevesebb, mint amennyi fel tud oldódni az oldószerben. Ekkor az oldat telítetlen, és az ionok megfelelő hatványon vett szorzata kisebb, mint az oldhatósági szorzat:

$$[A^{n+}]^m \cdot [B^{m-}]^n < L(A_m B_n).$$

Ha összeöntünk két tetszőleges koncentrációjú oldatot, melyek közül egyik az A^{n+} -iont, a másik pedig a B^{m-} -iont tartalmazza, a keverékben az oldatok hígulását figyelembe véve az új kiindulási koncentrációk: $c(A^{n+})$ és $c(B^{m-})$. Három eset fordulhat elő:

- a kiindulási koncentrációk megfelelő hatványon vett szorzat nagyobb, mint az oldhatósági szorzat:

$$c(A^{n+})^m \cdot c(B^{m-})^n < L(A_m B_n).$$

Ekkor az oldat túltelített az $A_m B_n$ vegyületre nézve, csapadék keletkezik. Annyi csapadék fog kiválni, hogy az egyensúlyi koncentrációk megfelelő hatványon vett szorzata éppen egyenlő legyen az oldhatósági szorzattal.

- a kiindulási koncentrációk megfelelő hatványon vett szorzata éppen egyenlő az oldhatósági szorzattal:

$$c(A^{n+})^m \cdot c(B^{m-})^n = L(A_m B_n).$$

Ekkor nem keletkezik csapadék, az oldat éppen telített az anyagra nézve.

A kiindulási koncentrációk megfelelő hatványon vett szorzata kisebb, mint az oldhatósági szorzat:

$$c(A^{n+})^m \cdot c(B^{m-})^n < L(A_m B_n).$$

Nem keletkezik csapadék, az oldat telítetlen az anyagra nézve, még további szilárd anyagot lehetne feloldani az oldatban ahhoz, hogy telített legyen.

A fentiek alapján el tudjuk dönteni, hogy két oldatot összeöntve válik-e le csapadék, vagy sem. Az alábbi videón ezüst-klorid és ezüst-kromát csapadékok leválása látható:



8.6.3.2.1. videó: Ezüst-klorid és ezüst-kromát csapadékok leválása

8.72. példa:

Desztillált vízbe kalcium-szulfátot (CaSO_4) szórunk, az oldat telítetté válik bárium-szulfátra. Az oldatban a kalciumion-koncentráció $7,02 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3$. Mekkora a kalcium-szulfát oldhatósági szorzata?

Megoldás:

	CaSO_4	\rightleftharpoons	Ca^{2+}	+	SO_4^{2-}
Kiindulási:	—		0		0
Átalakul:	—		+ x		+ x
Egyensúlyban:	—		x		x

A kalcium- és szulfácionok koncentrációja azonos:

$$x = [\text{Ca}^{2+}] = [\text{SO}_4^{2-}] = 7,02 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3.$$

Így az oldhatósági szorzat:

$$L = [\text{Ca}^{2+}] \cdot [\text{SO}_4^{2-}] = x \cdot x = (7,02 \cdot 10^{-3}) \cdot (7,02 \cdot 10^{-3}) = 4,93 \cdot 10^{-5}.$$

Tehát a kalcium-szulfát oldhatósági szorzata $4,93 \cdot 10^{-5}$.

8.73. példa:

A kálium-perklorát (KClO_4) vízben igen rosszul oldódik. 100,0 gramm desztillált vízben 1,425 gramm kálium-perklorátot tudunk feloldani, a keletkezett oldat sűrűsége $1,010 \text{ g/cm}^3$. Mekkora a kálium-perklorát oldhatósági szorzata? $M(\text{KClO}_4) = 138,5 \text{ g/mol}$.

Megoldás:

1,425 gramm kálium-perklorát anyagmennyisége:

$$n = \frac{m}{M} = \frac{1,425 \text{ g}}{138,5 \text{ g/mol}} = 0,01029 \text{ mol}.$$

A keletkezett 101,425 gramm oldat térfogata:

$$V = \frac{m}{d} = \frac{101,425 \text{ g}}{1,010 \text{ g/cm}^3} = 101,42 \text{ cm}^3 = 0,10142 \text{ dm}^3.$$

A kálium- és perklorácionok koncentrációja:

$$[\text{K}^+] = [\text{ClO}_4^-] = \frac{n}{V} = \frac{0,01029 \text{ mol}}{0,10142 \text{ dm}^3} = 0,10146 \text{ mol/dm}^3.$$

Így az oldhatósági szorzat:

$$L = [\text{K}^+] \cdot [\text{ClO}_4^-] = 0,10146 \cdot 0,10146 = 1,03 \cdot 10^{-2}$$

Tehát a kálium-perklorát oldhatósági szorzata $1,03 \cdot 10^{-2}$.

8.74. példa:

Az ezüst-arzenát (Ag_3AsO_4) egy jellegzetes csokoládébarna színű csapadék. Desztillált vízbe ezüst-arzenátot szórunk, és megvárjuk, hogy az oldat telítetté váljon ezüst-arzenátra. Ekkor $100,0 \text{ cm}^3$ oldat ezüsttartalma $45,24 \text{ }\mu\text{g}$. Mekkora az ezüst-arzenát oldhatósági szorzata? $A_r(\text{Ag}) = 107,9$.

Megoldás:

Az oldat Ag^+ -ion-koncentrációja:

$$[\text{Ag}^+] = \frac{n}{V} = \frac{m}{M \cdot V} = \frac{45,24 \cdot 10^{-6} \text{ g}}{(107,9 \text{ g/mol}) \cdot 0,1000 \text{ dm}^3} = 4,193 \cdot 10^{-6} \text{ mol/dm}^3.$$

	Ag_3PO_4	\rightleftharpoons	3 Ag^+	+	PO_4^{3-}
Kiindulási:	—		0		0
Átalakul:	—		$+ 3 \cdot x$		$+ x$
Egyensúlyban:	—		$3 \cdot x$		x

Mivel egy mól Ag_3AsO_4 feloldódásával 3 mól Ag^+ és 1 mól AsO_4^{3-} -ion keletkezik, az arzenátionok koncentrációja:

$$x = [\text{AsO}_4^{3-}] = \frac{[\text{Ag}^+]}{3} = \frac{4,193 \cdot 10^{-6} \text{ mol/dm}^3}{3} = 1,398 \cdot 10^{-6} \text{ mol/dm}^3.$$

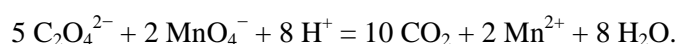
Így az oldhatósági szorzat:

$$L = [\text{Ag}^+]^3 \cdot [\text{AsO}_4^{3-}] = (4,193 \cdot 10^{-6})^3 \cdot (1,398 \cdot 10^{-6}) = 1,03 \cdot 10^{-22}.$$

Tehát az ezüst-arzenát oldhatósági szorzata $1,03 \cdot 10^{-22}$.

8.75. példa:

A magnézium-oxalát (MgC_2O_4) desztillált vízben igen rosszul oldódik. $100,0 \text{ cm}^3$ telített magnézium-oxalát-oldathoz kénsavat adunk és kálium-permanganáttal titráljuk. Ekkor az alábbi egyenlet szerinti reakció megy végbe:



Az oldat oxaláttartalmára $8,79 \text{ cm}^3$ $0,0100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú kálium-permanganát-oldat fogy. Mekkora a magnézium-oxalát oldhatósági szorzata?

Megoldás:

A titrálás során fogyott KMnO_4 anyagmennyisége:

$$n(\text{KMnO}_4) = c \cdot V = 0,0100 \cdot 8,79 \cdot 10^{-3} \text{ mol} = 8,79 \cdot 10^{-5} \text{ mol}.$$

Az oxalát anyagmennyisége:

$$n(\text{C}_2\text{O}_4^{2-}) = \frac{5}{2} \cdot n(\text{KMnO}_4) = \frac{5}{2} \cdot 8,79 \cdot 10^{-5} \text{ mol} = 2,1975 \cdot 10^{-4} \text{ mol}.$$

A telített oldat oxalát- (illetve magnézium-) koncentrációja:

$$[\text{C}_2\text{O}_4^{2-}] = \frac{n(\text{C}_2\text{O}_4^{2-})}{V_0} = \frac{2,198 \cdot 10^{-4} \text{ mol}}{0,1000 \text{ dm}^3} = 2,1975 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3 = [\text{Mg}^{2+}].$$

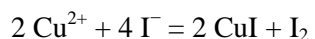
A magnézium-oxalát oldhatósági szorzata:

$$L = [\text{Mg}^{2+}] \cdot [\text{C}_2\text{O}_4^{2-}] = (2,1975 \cdot 10^{-3}) \cdot (2,1975 \cdot 10^{-3}) = 4,83 \cdot 10^{-6}.$$

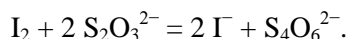
Tehát a keresett oldhatósági szorzat: $4,83 \cdot 10^{-6}$.

8.76. példa:

Az alábbi kísérletben a réz(II)-jodát ($\text{Cu}(\text{IO}_3)_2$) oldhatósági szorzatát határozzuk meg. $50,0 \text{ cm}^3$ telített réz(II)-jodát-oldathoz nagy mennyiségű szilárd kálium-jodidot és híg kénsavat adunk, ekkor az alábbi reakciók mennek végbe:



A keletkezett elemi jódot $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú nátrium-tioszulfáttal titráljuk az alábbi egyenlet szerint:



A fogyás $16,8 \text{ cm}^3$. Mekkora a réz(II)-jodát oldhatósági szorzata?

Megoldás:

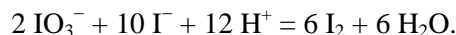
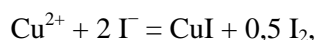
A fogyott nátrium-tioszulfát anyagmennyisége:

$$n(\text{S}_2\text{O}_3^{2-}) = c \cdot V = 0,100 \cdot 16,8 \cdot 10^{-3} \text{ mol} = 1,68 \cdot 10^{-3} \text{ mol}.$$

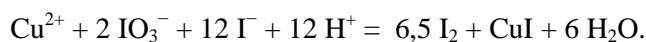
Az ezzel egyenértékű jód anyagmennyisége:

$$n(\text{I}_2) = \frac{n(\text{S}_2\text{O}_3^{2-})}{2} = \frac{1,68 \cdot 10^{-3} \text{ mol}}{2} = 8,40 \cdot 10^{-4} \text{ mol}.$$

A reakcióegyenletek alapján:



A két egyenletet összeadva:



1 mól $\text{Cu}(\text{IO}_3)_2$ -ból 6,5 mólnyi elemi jód keletkezik, azaz a $\text{Cu}(\text{IO}_3)_2$ anyagmennyisége:

$$n(\text{Cu}(\text{IO}_3)_2) = \frac{n(\text{I}_2)}{6,5} = \frac{8,40 \cdot 10^{-4} \text{ mol}}{6,5} = 1,292 \cdot 10^{-4} \text{ mol}.$$

A Cu^{2+} - és IO_3^- -ionok koncentrációja:

$$[\text{Cu}^{2+}] = \frac{n(\text{Cu}(\text{IO}_3)_2)}{V_0} = \frac{1,292 \cdot 10^{-4} \text{ mol}}{0,0500 \text{ dm}^3} = 2,584 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3,$$

$$[\text{IO}_3^-] = \frac{2 \cdot n(\text{Cu}(\text{IO}_3)_2)}{V_0} = 5,168 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3.$$

Így a keresett oldhatósági szorzat:

$$L = [\text{Cu}^{2+}][\text{IO}_3^-]^2 = (2,584 \cdot 10^{-3}) \cdot (5,168 \cdot 10^{-3})^2 = 6,90 \cdot 10^{-8}.$$

Tehát a réz(II)-jodát oldhatósági szorzata $6,90 \cdot 10^{-8}$.

8.77. példa:

Keletkezik-e kalcium-fluorid (CaF_2) csapadék, ha összeöntünk $10,0 \text{ cm}^3$ $0,050 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú kalcium-klorid-oldatot és $40,0 \text{ cm}^3$ $0,050 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú nátrium-fluorid-oldatot? $L(\text{CaF}_2) = 3,45 \cdot 10^{-11}$.

Megoldás:

Az oldat összterfoga $50,0 \text{ cm}^3$, így a hígulást figyelembevéve az egyes ionok elméleti kiindulási koncentrációi:

$$c(\text{Ca}^{2+}) = \frac{c_1 \cdot V_1}{V_1 + V_2} = \frac{0,050 \cdot 0,0100}{0,0100 + 0,0400} \text{ mol/dm}^3 = 0,01 \text{ mol/dm}^3,$$

$$c(\text{F}^-) = \frac{c_2 \cdot V_2}{V_1 + V_2} = \frac{0,050 \cdot 0,0400}{0,0100 + 0,0400} \text{ mol/dm}^3 = 0,04 \text{ mol/dm}^3.$$

Számítsuk ki az oldhatósági szorzat mintájára a koncentrációk megfelelő hatványon vett szorzatát!

$$c(\text{Ca}^{2+}) \cdot c(\text{F}^-)^2 = 0,01 \cdot 0,04^2 = 1,6 \cdot 10^{-5}$$

Mivel az így kapott szorzat nagyobb, mint az oldhatósági szorzat értéke ($L = 3,45 \cdot 10^{-11}$), az oldatból CaF_2 csapadék fog kiválni.

8.78. példa:

Egy $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú bárium-klorid-oldat pH-ját szilárd erős bázissal 11,00-ra állítjuk be. Számíthatunk-e $\text{Ba}(\text{OH})_2$ csapadék leválására? $L(\text{Ba}(\text{OH})_2) = 2,55 \cdot 10^{-4}$.

Megoldás:

Az oldatban az OH^- -ion-koncentráció:

$$[\text{OH}^-] = 10^{-\text{pOH}} = 10^{-(14-11)} \text{ mol/dm}^3 = 10^{-3} \text{ mol/dm}^3.$$

A bárium-ionok kiindulási koncentrációja $0,100 \text{ mol/dm}^3$, így a kiindulási állapotra felírva a szorzatot:

$$c(\text{Ba}^{2+}) \cdot c(\text{OH}^-)^2 = 0,1 \cdot (10^{-3})^2 = 10^{-7}.$$

Mivel ez a szorzat jelentősen kisebb, mint a bárium-hidroxid oldhatósági szorzata, nem válik ki csapadék az oldatból.

8.79. példa:

Mekkora tömegű nátrium-kloridot kell feloldani $100,0 \text{ cm}^3$ $0,0100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú ólom-nitrát-oldatban, hogy az éppen telítetté váljon ólom-kloridra? $M(\text{NaCl}) = 58,5 \text{ g/mol}$, $L(\text{PbCl}_2) = 1,70 \cdot 10^{-5}$.

Megoldás:

Akkor válik telítetté az oldat PbCl_2 -ra, ha a következő egyenlőség teljesül:

$$[\text{Pb}^{2+}] \cdot [\text{Cl}^-]^2 = L = 1,70 \cdot 10^{-5}.$$

Mivel az Pb^{2+} -ionok koncentrációja $0,01 \text{ mol/dm}^3$, a Cl^- -koncentrációt számítani tudjuk:

$$[\text{Cl}^-] = \sqrt{\frac{L}{[\text{Pb}^{2+}]}} = \sqrt{\frac{1,70 \cdot 10^{-5}}{0,0100}} = 0,04123 \text{ mol/dm}^3.$$

A $100,0 \text{ cm}^3$ oldathoz hozzáadott nátrium-klorid tömege:

$$m = M \cdot n = M \cdot [\text{Cl}^-] \cdot V = 58,5 \cdot 0,04123 \cdot 0,1000 \text{ g} = 0,241 \text{ g}.$$

Tehát 0,241 gramm nátrium-kloridot kell feloldani az oldatban.

8.80. példa:

Maximum mekkorára növelhetjük egy $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú magnézium-nitrát-oldat pH-ját, hogy még ne váljon le magnézium-hidroxid csapadék? $L(\text{Mg}(\text{OH})_2) = 5,61 \cdot 10^{-12}$.

Megoldás:

Telített oldat esetén:

$$[\text{Mg}^{2+}] \cdot [\text{OH}^-]^2 = L = 5,61 \cdot 10^{-12}.$$

Mivel az Mg^{2+} -ionok koncentrációja $0,100 \text{ mol/dm}^3$, a maximális OH^- -koncentrációt számítani tudjuk:

$$[\text{OH}^-] = \sqrt{\frac{L}{[\text{Mg}^{2+}]}} = \sqrt{\frac{5,61 \cdot 10^{-12}}{0,100}} = 7,49 \cdot 10^{-6} \text{ mol/dm}^3.$$

Így az oldat pH-ja:

$$\text{pH} = 14 + \lg[\text{OH}^-] = 14 + \lg(7,49 \cdot 10^{-6}) = 8,87.$$

Tehát az oldat pH-ját maximum 8,66-re növelhetjük anélkül, hogy magnézium-hidroxid csapadék válna le.

8.81. példa:

A vas(III)-sók oldata – hasonlóan a legtöbb átmenetifém és másodfajú fém sóihoz – erősen hidrolizál vizes oldatban, gyakran valamilyen ásványi savval szoktak belőlük oldatot készíteni. Megmérjük a kémialabor polcáról levett $0,050 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú FeCl_3 -oldat pH-ját, 1,15-nek adódik.

Maximum mekkorára növelhetjük az oldat pH-ját, hogy még ne váljon le $\text{Fe}(\text{OH})_3$ csapadék?
 $L(\text{Fe}(\text{OH})_3) = 2,79 \cdot 10^{-39}$.

Megoldás:

Az oldatban a Fe^{3+} -koncentráció $0,050 \text{ mol/dm}^3$. Telített oldat esetén:

$$[\text{Fe}^{3+}] \cdot [\text{OH}^-]^3 = L = 2,79 \cdot 10^{-39}.$$

Ebből a maximális OH^- -koncentráció:

$$[\text{OH}^-] = \sqrt[3]{\frac{L}{[\text{Fe}^{3+}]}} = \sqrt[3]{\frac{2,79 \cdot 10^{-39}}{0,050}} = 3,821 \cdot 10^{-13} \text{ mol/dm}^3,$$

$$\text{pH} = 14 + \lg[\text{OH}^-] = 14 + \lg(3,8321 \cdot 10^{-13}) = 1,58.$$

Tehát vas(III)-hidroxid csapadék leválására kell számítanunk, ha a pH nagyobb 1,58-nál.

8.82. példa:

A kálium-perklorát oldhatósági szorzatát vegyük $1,0 \cdot 10^{-2}$ -nek! Egy edénybe $10,0 \text{ cm}^3$ $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú kálium-nitrát-oldatot öntünk, majd az oldathoz $0,500 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú nátrium-perklorát-oldatot csepegtetünk. A térfogatokat tekintjük összeadhatónak!

- Mekkora térfogatú nátrium-perklorát-oldatot kell adnunk az oldathoz, hogy kálium-perklorát csapadék kezdjen leválni?
- Ábrázoljuk a levált kálium-perklorát csapadék anyagmennyiségét a nátrium-perklorát-oldat térfogatának függvényében a $0,0 \dots 50,0 \text{ cm}^3$ térfogattartományban!
- Mekkora lehet maximálisan annak a nátrium-perklorát-oldatnak a koncentrációja, hogy azt $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú kálium-nitrát-oldattal bármilyen térfogatarányban összeöntve ne váljon le kálium-perklorát csapadék?

Megoldás:

Az alábbi példában azt vizsgáljuk meg, hogy milyen hatása van az oldat hígulásának az oldhatósági egyensúlyra.

a) Meg kell állapítanunk, hogy mekkora térfogatú nátrium-perklorát-oldat hozzáadásával válik telítetté az oldat kálium-perklorátra nézve.

Mivel az oldatok térfogatai összeadhatóak, a hígulást figyelembe véve az alábbi koncentrációkat kapjuk (c_1, V_1 : a kálium-nitrát-oldat kiindulási koncentrációja, illetve térfogata, c_2, V_2 : a nátrium-perklorát-oldat kiindulási koncentrációja, illetve térfogata):

$$[\text{K}^+] = \frac{c_1 \cdot V_1}{V_1 + V_2} \quad [\text{ClO}_4^-] = \frac{c_2 \cdot V_2}{V_1 + V_2}.$$

Amikor éppen telített az oldat kálium-perklorátra, teljesül az alábbi egyenlőség:
 $[\text{K}^+] \cdot [\text{ClO}_4^-] = L$. Behelyettesítve a fent kapott koncentrációkat:

$$[\text{K}^+] \cdot [\text{ClO}_4^-] = \frac{c_1 \cdot V_1}{V_1 + V_2} \cdot \frac{c_2 \cdot V_2}{V_1 + V_2} = \frac{c_1 \cdot c_2 \cdot V_1 \cdot V_2}{(V_1 + V_2)^2} = L.$$

Ismert $c_1=0,100 \text{ M}$, $c_2=0,500 \text{ M}$, $V_1=0,0100 \text{ dm}^3$. Ezeket az értékeket behelyettesítve a következő egyenlethez jutunk:

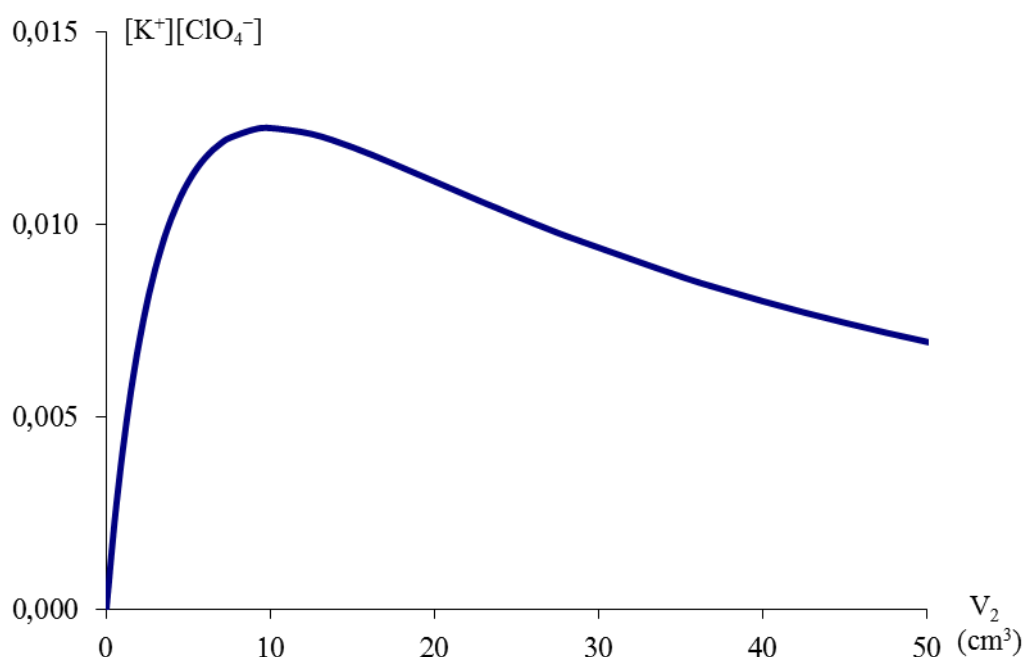
$$[\text{K}^+] \cdot [\text{ClO}_4^-] = \frac{0,100 \cdot 0,500 \cdot 0,0100 \cdot V_2}{(0,0100 + V_2)^2} = 1,00 \cdot 10^{-2}.$$

Az így kapott egyenletet V_2 -re megoldva két gyököt kapunk, és mindkettőnek van reális kémiai tartalma:

$$V_2(1) = 3,8 \cdot 10^{-3} \text{ dm}^3 = 3,8 \text{ cm}^3, \text{ illetve } V_2(2) = 26,2 \cdot 10^{-2} \text{ dm}^3 = 26,2 \text{ cm}^3.$$

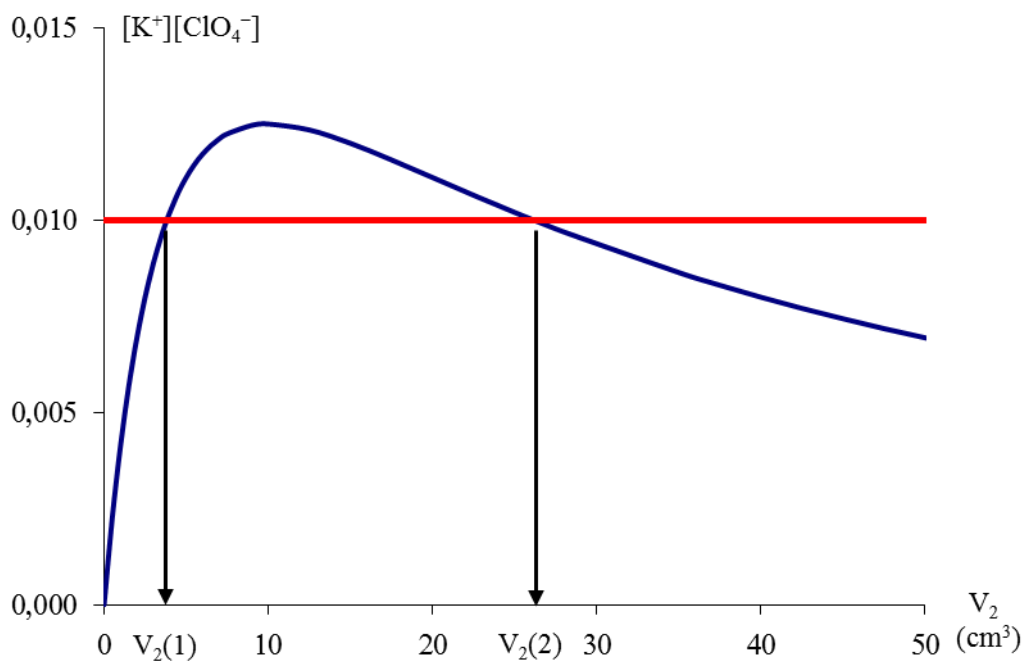
A kapott eredményeket a következőképp értelmezhetjük: a kisebb térfogatú nátrium-perklorát-oldat hozzáöntésekor kezdődik el a csapadék leválása, tehát $V_2 < V_2(1) = 3,8 \text{ cm}^3$ esetén nincs csapadék-leválás. Ha ennél nagyobb térfogatú nátrium-perklorát-oldatot adunk az eredeti kálium-nitrát-oldathoz, csapadék válik le. Nem szabad azonban elfelejtkeznünk arról sem, hogy az oldat össztérfogata folyamatosan növekszik, így az adott mennyiségű K^+ -ion egyre nagyobb térfogatban lesz feloldva. A nagyobbik eredményül kapott térfogatot elérve ismét telítetté válik az oldat kálium-perklorátra nézve, majd a $V_2 > V_2(2) = 26,2 \text{ cm}^3$ nátrium-perklorát-oldattérfogat esetén szintén nem tapasztalunk csapadékleválást, a kálium-perklorát teljes mennyisége oldatban tud maradni, mivel már elegendően nagy az oldat térfogata ehhez.

Az eredményeket grafikusán is szemléltethetjük. A hígítást figyelembe véve egy adott V_2 térfogatnál kiszámítható a káliumionok és a perklorátionok koncentrációjának szorzata. Ezt a **számított** értéket ábrázolva a V_2 térfogat függvényében, a következő diagramot kapjuk:



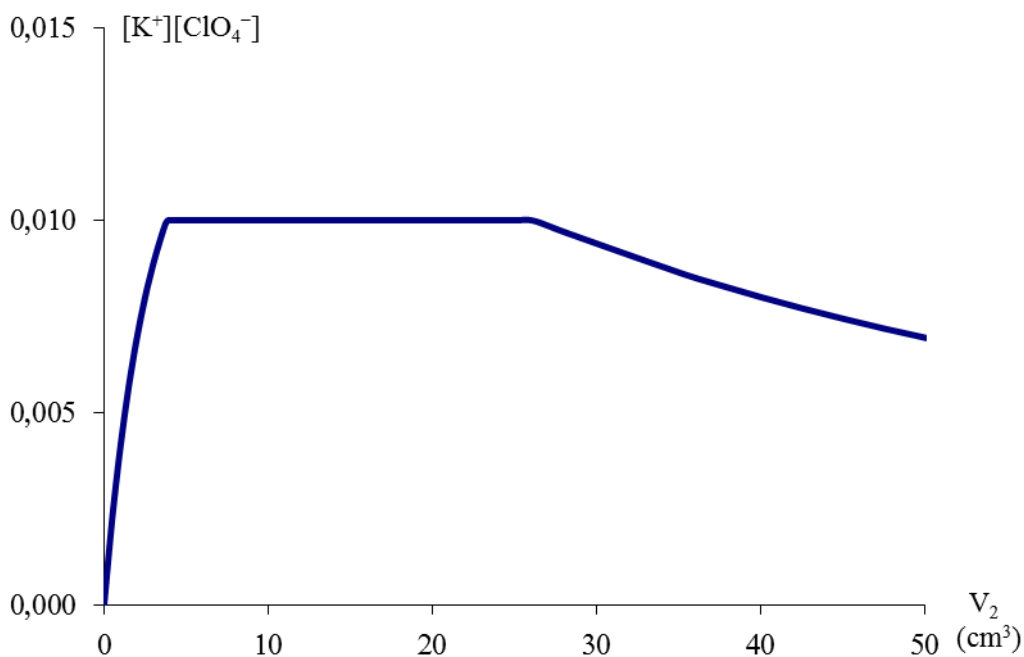
8.6.3.2.1. ábra: A számított $[\text{K}^+] \cdot [\text{ClO}_4^-]$ szorzat

Ábrázoljuk a $[K^+] \cdot [ClO_4^-] = L$ értéket is a diagramon, ez értelemszerűen egy vízszintes egyenes. Ahol a görbe és az egyenes metszi egymást, ott kell leolvasni a V_2 térfogatokat.



8.6.3.2.2. ábra: A telítéshez szükséges térfogatok

Természetesen a valóságban nem lehet a $[K^+] \cdot [ClO_4^-]$ értéke L -nél nagyobb. Ha ugyanis a szorzat értéke L -nél nagyobb lenne, az oldatból a „felesleges” kálium- és perklorátionok csapadékot képezve kicsapódnak az oldatból (az oldat túltelített). Tehát az oldatban **mérhető, tényleges** $[K^+] \cdot [ClO_4^-]$ szorzat az alábbi ábrával szemléltethető:



8.6.3.2.3. ábra: A mérhető $[K^+] \cdot [ClO_4^-]$ szorzat

b) Most pedig foglalkozunk a $V_2(1) < V_2 < V_2(2)$ tartománnyal! Az oldat térfogata $V_1 + V_2$, a káliumionok összanyagmennyisége $c_1 \cdot V_1$, a perklorátionoké pedig $c_2 \cdot V_2$. Amennyiben n anyagmennyiségű csapadék válik ki V_2 térfogatú nátrium-perklorát-oldat hozzáöntése után, az egyes ionok koncentrációja az oldatban a következőképpen írható fel:

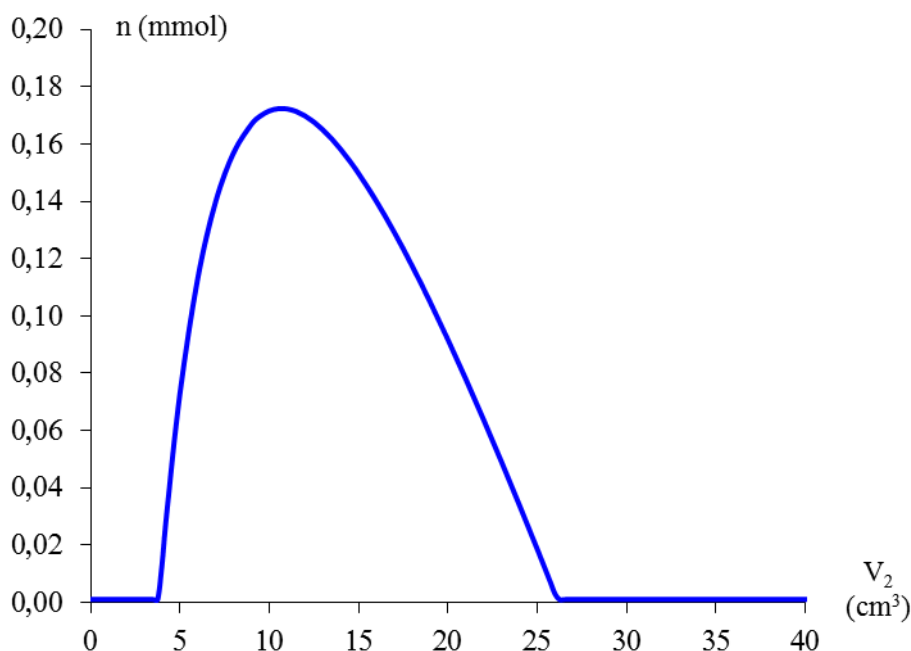
Mivel telített az oldat, teljesülnie kell az alábbi egyenlőségnek: $[K^+] \cdot [ClO_4^-] = L$. Helyettesítsük be a koncentrációkat!

$$[K^+][ClO_4^-] = \frac{c_1 \cdot V_1 - n}{V_1 + V_2} \cdot \frac{c_2 \cdot V_2 - n}{V_1 + V_2} = L$$

Ezt rendezve az alábbi másodfokú egyenlethez jutunk:

$$0 = n^2 - (c_1 \cdot V_1 + c_2 \cdot V_2) \cdot n + c_1 \cdot c_2 \cdot V_1 \cdot V_2 - L \cdot (V_1 + V_2)^2.$$

Adott V_2 esetén megoldva az egyenletet, kapunk két értéket n -re, melyek közül csak az egyiknek (kisebbiknek) van reális kémiai tartalma. A megfelelő $V_2 - n$ értékpárokat ábrázolva az alábbi diagramot kapjuk:



8.6.3.2.4. ábra: A kivált kálium-perklorát a anyagmennyisége

Megfigyelhető, hogy a nátrium-nitrát-oldat hozzáadásakor kezdetben nem válik le csapadék, majd $3,8 \text{ cm}^3$ -nél megindul a kálium-perklorát csapadék leválása. A csapadék mennyisége kb. $10\text{--}11 \text{ cm}^3$ -nél eléri a maximumot, majd ennél nagyobb térfogatú nátrium-perklorát-oldat hozzáadása már a csapadék mennyiségének csökkenésével jár. Amennyiben $V_2 > 26,2 \text{ cm}^3$, a keletkező oldat telítetlen kálium-perklorátra nézve.

c) Ahhoz, hogy ne legyen túltelített az oldat kálium-perklorátra nézve, a $[K^+] \cdot [ClO_4^-] < L$ egyenlőtlenségnek kell teljesülnie. Az előzőekhez hasonlóan felírható, hogy:

$$[K^+][ClO_4^-] = \frac{c_1 \cdot V_1}{V_1 + V_2} \cdot \frac{c_2 \cdot V_2}{V_1 + V_2} = \frac{c_1 \cdot c_2 \cdot V_1 \cdot V_2}{(V_1 + V_2)^2} < L.$$

Melyből az alábbi V_2 -ben másodfokú egyenlőtlenséget kapjuk:

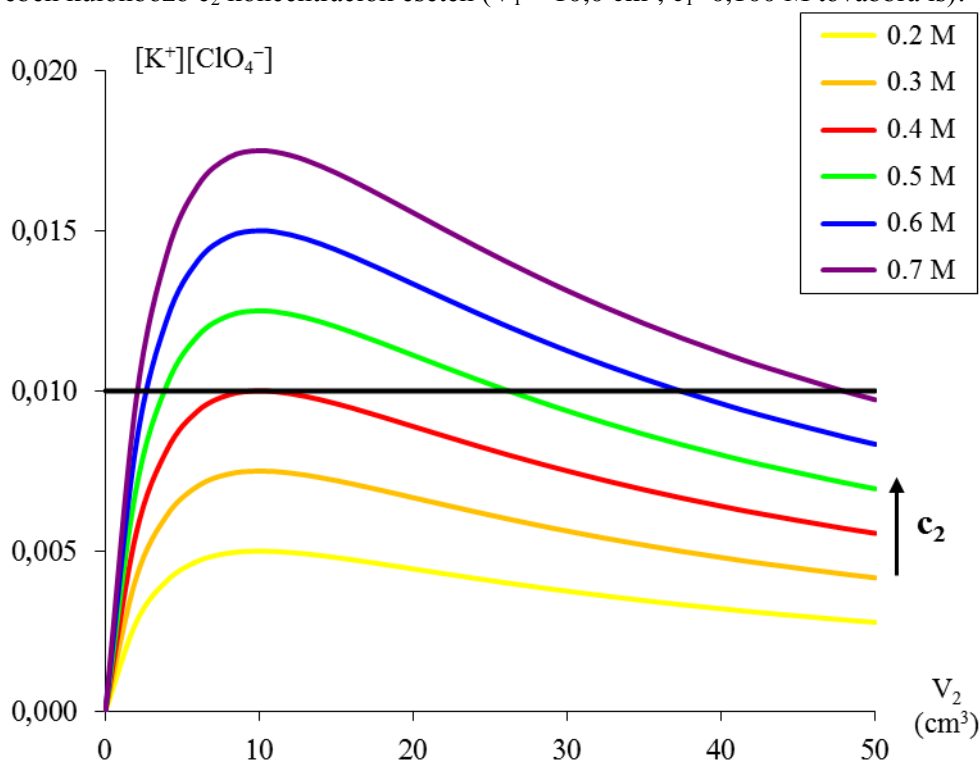
$$0 < L \cdot V_2^2 + (2 \cdot L \cdot V_1 - c_1 \cdot c_2 \cdot V_1) \cdot V_2 + L \cdot V_1^2.$$

Tehát adott egy másodfokú egyenlőtlenség. Ahhoz, hogy egy másodfokú függvény bármely változó esetén pozitív legyen, két feltételnek kell teljesülnie: egyrészt a másodfokú tagban szereplő konstans legyen pozitív, ez esetünkben teljesül, mivel $L > 0$. Másrészt, az másodfokú függvény nem metszheti a vízszintes tengelyt, azaz a függvénynek nincsen zérushelye. Ez akkor lehetséges, ha a másodfokú függvényből kapható diszkrimináns negatív. Tehát ahhoz, hogy bármilyen térfogatarányban, azaz egy adott V_1 ismeretében bármely V_2 esetén teljesüljön az egyenlőtlenség, a diszkriminánsnak negatívnak kell lennie:

$$\begin{aligned} 0 > (2 \cdot L \cdot V_1 - c_1 \cdot c_2 \cdot V_1)^2 - 4 \cdot L \cdot L \cdot V_1^2 &= V_1^2 \cdot [(2 \cdot L - c_1 \cdot c_2)^2 - (2 \cdot L)^2] = \\ &= V_1^2 \cdot (-c_1 \cdot c_2) \cdot (4 \cdot L - c_1 \cdot c_2). \end{aligned}$$

Ebből pedig következik, hogy a $4 \cdot L > c_1 \cdot c_2$ feltételnek kell teljesülnie. Azaz maximálisan $c_2 = 4 \cdot 1,00 \cdot 10^{-2} / 0,100 \text{ mol/dm}^3 = 0,40 \text{ mol/dm}^3$ lehet a nátrium-perklorát-oldat koncentrációja.

Megjegyzés: Ábrázoljuk a hígítás alapján **elméletileg** kiszámítható $[K^+] \cdot [ClO_4^-]$ szorzatot V_2 függvényében különböző c_2 koncentrációk esetén ($V_1 = 10,0 \text{ cm}^3$, $c_1 = 0,100 \text{ M}$ továbbra is)!



8.6.3.2.5. ábra: A számított $[K^+] \cdot [ClO_4^-]$ szorzat különböző kiindulási koncentrációk esetén

Mint látható, $c_2 < 0,4 \text{ M}$ esetén a görbék nem metszik az L értékének megfelelő egyenest, azaz semmilyen térfogatarányban sem válik le csapadék. Amennyiben $c_2 = 0,4 \text{ M}$, 1 : 1 térfogatarány ($V_2 = 10,0 \text{ cm}^3$) esetén éppen telítette válik az oldat, bármely más térfogataránynál telítetlen az oldat kálium-perklorátra nézve. Ha $c_2 > 0,4 \text{ M}$, a görbe két helyen is metszi az $L = 0,01$ vízszintes egyenest, a két metszéspont közötti tartományban van csapadék, a metszéspontokban éppen telített az oldat, azokon kívül pedig nincs csapadékleválás. Azt is megfigyelhetjük, hogy minél töményebb a nátrium-perklorát-oldat (azaz minél nagyobb c_2), annál szélesebb térfogattartományban történik csapadékleválás. A szerves kémiai analízisben igen fontos a káliumionok és a perklorátionok közötti reakció,

mivel ez a káliumionok csapadékos azonosításának egyik legegyszerűbb módja. Fontos azonban megjegyeznünk, hogy káliumionokat csak viszonylag töményebb oldatból lehet kimutatni, hígabb oldatokból nehezen választható le csapadék. Azért, hogy kémcsőreakciók esetén minél kisebb térfogatú (néhány csepp) reagens segítségével ki tudjuk mutatni a káliumionokat, rendszerint tömény (70 tömegszázalékos) perklórsavoldatot szoktunk alkalmazni.

8.6.3.3. Az oldhatóság

Sókkal kapcsolatban korábban már megismertedtünk az oldhatóság fogalmával, mely 100 g oldószerben maximálisan feloldható (kristályvízmentes) anyag tömege. Ezzel ellentétben a rosszul oldódó vegyületek, csapadékok esetén ettől eltérő definíciót használunk:

Oldhatóság: 1 dm³ telített oldatban található oldott anyag anyagmennyisége.
Mértékegysége: mol/dm³, jele: S.

Most nézzük meg a fenti példánál, hogyan számítható ki az oldhatóság az oldhatósági szorzatból!

Az ezüst-klorid (AgCl) desztillált vízben történő oldása esetén az oldhatóság a feloldódott AgCl anyagmennyisége dm³-enként. Azaz az ezüstionok koncentrációja és a kloridionok koncentrációja is megegyezik az oldhatósággal:

$$S = [\text{Ag}^+] = [\text{Cl}^-].$$

Az oldhatóság desztillált vízben az oldhatósági szorzat alapján:

$$L = [\text{Ag}^+] \cdot [\text{Cl}^-] = S \cdot S,$$

$$S = \sqrt{L}.$$

Az ólom(II)-foszfát desztillált vízben történő oldása esetén az oldhatóság a dm³-enként feloldódott Pb₃(PO₄)₂ anyagmennyisége. Mivel 1 mól Pb₃(PO₄)₂ feloldódásával 3 mól Pb²⁺- és 2 mól PO₄³⁻-ion kerül az oldatba, az oldhatóság a két ion telített oldatban mérhető koncentrációjából a következőképp adódik:

$$S = \frac{[\text{Pb}^{2+}]}{3} = \frac{[\text{PO}_4^{3-}]}{2}.$$

Az egyes ionok koncentrációja az oldhatóság segítségével kifejezve:

$$[\text{Pb}^{2+}] = 3 \cdot S, \quad [\text{PO}_4^{3-}] = 2 \cdot S.$$

Az oldhatóság desztillált vízben:

$$L = [\text{Pb}^{2+}]^3 \cdot [\text{PO}_4^{3-}]^2 = (3 \cdot S)^3 \cdot (2 \cdot S)^2 = (3^3 \cdot S^3) \cdot (2^2 \cdot S^2) = 3^3 \cdot 2^2 \cdot S^5,$$

$$S = \sqrt[5]{\frac{L}{3^3 \cdot 2^2}} = \sqrt[5]{\frac{L}{108}}.$$

Egy A_mB_n általános képlettel jellemezhető vegyület desztillált vízben történő oldódása esetén az oldhatóság:

$$S = \frac{[\text{A}^{n+}]}{m} = \frac{[\text{B}^{m-}]}{n}.$$

Az oldhatóság könnyen számítható az egyes ionok koncentrációja alapján (dm^3 -enként S mólnyi A_mB_n oldódik fel):



$$[A^{n+}] = m \cdot S, \quad [B^{m-}] = n \cdot S.$$

Behelyettesítve a koncentrációkat az oldhatósági szorzatba:

$$L = [A^{n+}]^m \cdot [B^{m-}]^n = (m \cdot S)^m \cdot (n \cdot S)^n = (m^m \cdot S^m) \cdot (n^n \cdot S^n) = m^m \cdot n^n \cdot S^{m+n}.$$

Így az oldhatóság desztillált vízben (mol/dm^3 -ben):

$$S = \sqrt[m+n]{\frac{L}{m^m \cdot n^n}}.$$

8.83. példa:

Számítsuk ki a kalcium-karbonát oldhatóságát desztillált vízben! $L(\text{CaSO}_4) = 4,93 \cdot 10^{-5}$.

Megoldás:

A CaSO_4 az alábbi egyenlet szerint oldódik desztillált vízben:



Az oldhatóság azonos a beoldódott kalcium-, illetve szulfátionok koncentrációjával:

$$[\text{Ca}^{2+}] = [\text{SO}_4^{2-}] = S.$$

Behelyettesítve az oldhatósági szorzatba:

$$L = [\text{Ca}^{2+}] \cdot [\text{SO}_4^{2-}] = S \cdot S.$$

Így az oldhatóság:

$$S = \sqrt{L} = \sqrt{4,93 \cdot 10^{-5}} = 7,02 \cdot 10^{-3} \text{ mol}/\text{dm}^3.$$

Tehát a kalcium-szulfát oldhatósága desztillált vízben $7,02 \cdot 10^{-3} \text{ mol}/\text{dm}^3$.

8.84. példa:

Számítsuk ki az ólom(II)-klorid oldhatóságát desztillált vízben! Mekkora az egyes ionok koncentrációja? $L(\text{PbCl}_2) = 1,70 \cdot 10^{-5}$.

Megoldás:

A fentiekhez hasonlóan, dm^3 -enként S mólnyi PbCl_2 feloldódása során az alább egyensúlyi koncentrációkat kapjuk a telített oldatban:

$$[\text{Pb}^{2+}] = S, \text{ illetve } [\text{Cl}^-] = 2 \cdot S.$$

Az oldhatósági szorzatba beírva:

$$L = [\text{Pb}^{2+}] \cdot [\text{Cl}^-]^2 = S \cdot (2 \cdot S)^2 = 4 \cdot S^3 \quad \Rightarrow \quad S = \sqrt[3]{\frac{L}{4}} = \sqrt[3]{\frac{1,70 \cdot 10^{-5}}{4}} = 1,62 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3.$$

Az egyes ionok koncentrációja (a kloridionok kétszeres mennyiségben keletkeznek):

$$[\text{Pb}^{2+}] = S = 1,62 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3,$$

$$[\text{Cl}^-] = 2 \cdot S = 2 \cdot 1,62 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3 = 3,24 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3.$$

Az ólom(II)-klorid oldhatósága desztillált vízben $\underline{1,62 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3}$, a Pb^{2+} -ion koncentrációja szintén $\underline{1,62 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3}$, a Cl^- -ioné pedig $\underline{3,24 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3}$.

8.85. példa:

Mekkora a higany(I)-klorid (Hg_2Cl_2) oldhatósága desztillált vízben? $L(\text{Hg}_2\text{Cl}_2) = 1,43 \cdot 10^{-18}$.

Megoldás:

A higany(I)-vegyületek vizes oldatban nem Hg^+ -, hanem dimer Hg_2^{2+} -ionokat tartalmaznak, a higany(I)-klorid tulajdonképpen $[\text{Hg}_2]\text{Cl}_2$. Az oldhatósági szorzat így a következő:

$$L = [\text{Hg}_2^{2+}] \cdot [\text{Cl}^-]^2 = S \cdot (2 \cdot S)^2 = 4 \cdot S^3.$$

Így

$$S = \sqrt[3]{\frac{1,43 \cdot 10^{-18}}{4}} = 7,10 \cdot 10^{-7} \text{ mol/dm}^3.$$

Tehát a higany(I)-klorid oldhatósága desztillált vízben $\underline{7,10 \cdot 10^{-7} \text{ mol/dm}^3}$.

8.86. példa:

Mekkora az ezüst-szulfát oldhatósága desztillált vízben? $L(\text{Ag}_2\text{SO}_4) = 1,20 \cdot 10^{-5}$.

Megoldás:

Az oldhatósági szorzatba behelyettesítve:

$$L = [\text{Ag}^+]^2 \cdot [\text{SO}_4^{2-}] = (2 \cdot S)^2 \cdot S = 4 \cdot S^3.$$

Így

$$S = \sqrt[3]{\frac{1,20 \cdot 10^{-5}}{4}} = 1,44 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3.$$

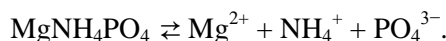
Tehát az ezüst-szulfát oldhatósága desztillált vízben $\underline{1,44 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3}$.

8.87. példa:

A magnéziumion egyik kimutatási reakciója, hogy ammónia és ammóniumionok jelenlétében foszfáttal fehér színű magnézium-ammónium-foszfát (MgNH_4PO_4) csapadékot ad. Mekkora a magnézium-ammónium-foszfát oldhatósága desztillált vízben? Mekkora tömegű MgNH_4PO_4 oldható fel $30,0 \text{ cm}^3$ desztillált vízben? $M(\text{MgNH}_4\text{PO}_4) = 137,3 \text{ g/mol}$, $L(\text{MgNH}_4\text{PO}_4) = 2,50 \cdot 10^{-13}$.

Megoldás:

A feladat érdekessége, hogy a vegyület oldódásával három különböző ion keletkezik (két kation és egy anion):



Az egyes ionok koncentrációja megegyezik az oldhatósággal (1 mól anyag feloldódásakor minden ionból 1–1 mólnyi keletkezik):

$$[\text{Mg}^{2+}] = [\text{NH}_4^+] = [\text{PO}_4^{3-}] = S.$$

Behelyettesítve az oldhatósági szorzatba:

$$L = [\text{Mg}^{2+}] \cdot [\text{NH}_4^+] \cdot [\text{PO}_4^{3-}] = S \cdot S \cdot S \Rightarrow S = \sqrt[3]{L} = \sqrt[3]{2,50 \cdot 10^{-13}} = 6,30 \cdot 10^{-5} \text{ mol/dm}^3.$$

30,0 cm³ térfogatú vízben feloldható MgNH₄PO₄ tömege:

$$m = M \cdot n = M \cdot S \cdot V = 137,3 \cdot 6,30 \cdot 10^{-5} \cdot 30 \cdot 10^{-3} \text{ g} = 2,59 \cdot 10^{-4} \text{ g} = 0,259 \text{ mg}.$$

Tehát a magnézium-ammónium-foszfát oldhatósága desztillált vízben 6,30 · 10⁻⁵ mol/dm³, 30,0 cm³ desztillált vízben 0,259 mg oldható fel belőle.

8.88. példa:

Vas(II)-hidroxid port szórunk desztillált vízbe, és megvárjuk, hogy beálljon a telítési egyensúly (az edény alján még van fel nem oldódott vegyület). Mekkora az oldat pH-ja? $L(\text{Fe}(\text{OH})_2) = 4,87 \cdot 10^{-17}$.

Megoldás:

Számítsuk ki a Fe(OH)₂ oldhatóságát!

$$L = [\text{Fe}^{2+}] \cdot [\text{OH}^-]^2 = S \cdot (2 \cdot S)^2 = 4 \cdot S^3 \Rightarrow S = \sqrt[3]{\frac{L}{4}} = \sqrt[3]{\frac{4,87 \cdot 10^{-17}}{4}} = 2,30 \cdot 10^{-6} \text{ mol/dm}^3$$

Az oldatban az OH⁻-koncentráció (a Fe²⁺-koncentráció kétszeres):

$$[\text{OH}^-] = 2 \cdot S = 2 \cdot 2,30 \cdot 10^{-6} \text{ mol/dm}^3 = 4,60 \cdot 10^{-6} \text{ mol/dm}^3.$$

Így az oldat pH-ja:

$$\text{pH} = 14 + \lg[\text{OH}^-] = 14 + \lg(4,60 \cdot 10^{-6}) = 8,66.$$

Tehát a telített vas(II)-hidroxid-oldat pH-ja 8,66.

(Felmerülhet a kérdés, hogy a desztillált vízben eleve megtalálható OH⁻-ionok nem okoznak-e gondot a számításnál. A 10⁻⁵ mol/dm³ nagyságrendű OH⁻-koncentráció esetén a vízből származó OH⁻-ionok mennyisége elhanyagolható – ez kb. 10⁻⁹ mol/dm³ nagyságrendű a pH alapján.)

8.6.3.4. Az oldhatóságot befolyásoló tényezők

Az oldhatósági egyensúly – a többi egyensúlyhoz hasonlóan – több tényező is befolyásolja, ezeknek egy része specifikusan a kationra vagy az anionra van hatással:

- **hőmérséklet:** az oldhatóság rendszerint növekszik a hőmérséklettel csapadékok esetén is.
- **„sajátionok” hatása,** az oldott (oldandó) anyag kationjai vagy anionjai az oldatban: az oldódás során anionok és kationok mennek az oldatba, ha ezek közül bármelyik eleve megtalálható az oldatban, az oldhatóság kisebb, mint a tiszta oldószerben.



Ha az oldat eleve tartalmaz például A^{n+} -iont, az – mint a termékek egy általános egyensúly esetén – visszaszorítja az $A_m B_n$ vegyület oldódását.

- az **oldatban** jelen lévő egyéb ionok (úgynevezett „idegen” ionok), ezeket hatását **idegenion-hatásnak** nevezzük. Az oldatban található egyéb ionok rendszerint növelik az oldhatóságot. Az idegenionok hatását igen nehéz általánosítani, széleskörűen elfogadott egyszerű elmélettel nem lehet leírni a hatást.
- **komplexbépzés**: a **fémionok** jelentős része bizonyos ligandumokkal stabil komplexet képez. Például az ezüst-klorid csapadék jól oldódik ammóniaoldatban, vagy
- **pH**: az oldat pH-ja **többféleképpen** befolyásolhatja az oldhatóságot:
 - sajátion-hatásként fém-hidroxidok esetén: a fém-hidroxidok oldhatósága a pH növelésével csökken. Például a magnézium-hidroxid savas pH-jú oldatban sokkal jobban oldódik, mint lúgos pH-n (ekkor kémiai reakció is végbemehet).
 - amennyiben az anion gyenge savból származik, a protonálódás befolyásolja az oldhatóságot. Az ilyen anyagok (például karbonátok, foszfátok, stb.) ezért jobban oldódnak kisebb pH-n.
 - hidroxo-komplex képzésével: sok fémion stabil hidroxokomplexet képez nagyobb pH-n (nagyobb OH^- -koncentráció mellett). Ezen fémek gyakran a p-mezőben (illetve a d-mezőben) találhatóak (például Al^{3+} , Sn^{2+} , Sn^{4+} , Pb^{2+} stb.)

A továbbiakban részletesebben megvizsgáljuk a legfontosabb hatásokat.

A hőmérséklet hatása

8.89. példa:

Az ólom(II)ion egy igen fontos kimutatási reakciója, hogy jodidionokkal sárga csapadékot ad, mely forralás hatására feloldódik. A forró telített oldatot lehűtve az ólom(II)-jodid csillogó aransárga kristályok formájában kiválik az oldatból, ezért ezt a kimutatást aranyeső próbának is nevezik. Az PbI_2 oldhatósági szorzata 25 °C -on $1,02 \cdot 10^{-8}$, míg 100 °C -on $2,78 \cdot 10^{-6}$. Mekkora az ólom(II)-jodid oldhatósága a két hőmérsékleten? $10,0\text{ cm}^3$ (mintegy fél kémcsőnyi) 100 °C -on telített ólom(II)-jodid-oldatot 25 °C -ra hűtve mekkora tömegű anyag válik ki? $M(PbI_2) = 461\text{ g/mol}$.

Megoldás:

Az oldhatóság az előzőekhez hasonlóan:

$$L = [Pb^{2+}] \cdot [I^-]^2 = S \cdot (2 \cdot S)^2 = 4 \cdot S^3 \quad \Rightarrow \quad S = \sqrt[3]{\frac{L}{4}}$$

$$25\text{ °C-on: } S(25\text{ °C}) = \sqrt[3]{\frac{L}{4}} = \sqrt[3]{\frac{1,02 \cdot 10^{-8}}{4}} = 1,367 \cdot 10^{-3}\text{ mol/dm}^3,$$

$$100\text{ °C-on: } S(100\text{ °C}) = \sqrt[3]{\frac{L}{4}} = \sqrt[3]{\frac{2,78 \cdot 10^{-6}}{4}} = 8,858 \cdot 10^{-3}\text{ mol/dm}^3.$$

$10,0\text{ cm}^3$ oldatban lévő anyagmennyiségek:

$$25\text{ °C-on: } n(25\text{ °C}) = V \cdot S(25\text{ °C}) = 10 \cdot 10^{-3} \cdot 1,367 \cdot 10^{-3}\text{ mol} = 1,367 \cdot 10^{-5}\text{ mol},$$

$$100\text{ °C-on: } n(100\text{ °C}) = V \cdot S(100\text{ °C}) = 10 \cdot 10^{-3} \cdot 8,858 \cdot 10^{-3}\text{ mol} = 8,858 \cdot 10^{-5}\text{ mol}.$$

Az oldatból kivált anyag mennyisége:

$$\Delta n = n(100^\circ\text{C}) - n(25^\circ\text{C}) = 8,858 \cdot 10^{-5} \text{ mol} - 1,367 \cdot 10^{-5} \text{ mol} = 7,491 \cdot 10^{-5} \text{ mol}.$$

Ennek tömege:

$$\Delta m = M \cdot \Delta n = 461 \cdot 7,491 \cdot 10^{-5} \text{ g} = 0,0345 \text{ g} = 34,5 \text{ mg}.$$

Tehát az oldhatóság 25°C -on $1,37 \text{ mol/dm}^3$, 100°C -on pedig $8,86 \text{ mol/dm}^3$. $10,0 \text{ cm}^3$ oldatot lehűtve 34,5 mg ólom(II)-jodid válik ki.



8.6.3.3.1. ábra: Csillogó ólom(II)-jodid

Sajátion-hatás

Az $A_m B_n$ általános képlettel leírható vegyület oldhatósági szorzata $L(A_m B_n)$:

$$L = [A^{n+}]^m \cdot [B^{m-}]^n.$$

Az oldhatóság desztillált vízben:

$$L = (m \cdot S)^m \cdot (n \cdot S)^n = m^m \cdot n^n \cdot S^{m+n} \Rightarrow S = \sqrt[m+n]{\frac{L}{m^m \cdot n^n}}.$$

Mekkora a vegyület oldhatósága abban az oldatban, mely eredetileg c_0 koncentrációban tartalmaz A^{n+} -iont?

Írjuk fel az egyensúlyi táblázatot! Az oldatban dm^3 -enként S mólnyi vegyület oldódik fel:

	$A_m B_n$	\rightleftharpoons	$m A^{n+}$	+	$n B^{m-}$
Kiindulási:	—		c_0		0
Átalakul:	—		$+ m \cdot S$		$+ n \cdot S$
Egyensúlyban:	—		$c_0 + m \cdot S$		$n \cdot S$

Az alábbi egyenlethez jutunk, ha behelyettesítjük a koncentrációkat az egyensúlyi állandóba:

$$L = [A^{n+}]^m \cdot [B^{m-}]^n = (c_0 + m \cdot S)^m \cdot (n \cdot S)^n.$$

Az egyenlet már $m = n = 1$ esetén is másodfokú, ha pedig a csapadék nem 1 : 1 arányban tartalmazza a két iont, matematikailag igen bonyolulttá válhat a probléma. Ezért az alábbi két esetet különböztethetjük meg:

Ha $c_0 \gg m \cdot S$ (tehát eleve viszonylag tömény az oldat az ionra nézve), akkor $m \cdot S$ értékét elhanyagolhatjuk c_0 mellett:

$$L = (c_0 + m \cdot S)^m \cdot (n \cdot S)^n \approx c_0^m \cdot (n \cdot S)^n.$$

Az egyenletet így már könnyen megoldhatjuk:

$$S = \frac{1}{n} \sqrt[n]{\frac{L}{c_0^m}}.$$

Amennyiben $c_0 \approx m \cdot S$ (a két mennyiség nagysága összemérhető), már nem hanyagolhatjuk el az utóbbit, ezért az $(m + n)$ -ed fokú egyenletet kell megoldanunk – általában közelítő módszerrel.

Általánosságban megállapítható, hogy ha egy összegben két tag között 3 vagy több nagyságrendnyi különbség van, akkor a kisebbik elhanyagolható a nagyobbik mellett (a közelítés nem okoz jelentős hibát, legalábbis kémiai szempontból). Tehát gyakran egy magasabb fokú egyenletet is viszonylag könnyen meg tudunk oldani, ha ésszerű elhanyagolásokkal élünk.

Teljesen hasonló módon kiszámítható az oldhatóság egy olyan oldatban, mely eredetileg c_0 koncentrációban tartalmaz B^{m-} -iont:

$$L = [A^{n+}]^m \cdot [B^{m-}]^n = (m \cdot S)^m \cdot (c_0 + n \cdot S)^n.$$

A közelítő képlet pedig:

$$S = \frac{1}{m} \sqrt[m]{\frac{L}{c_0^n}}.$$

8.90. példa:

Mekkora a bárium-szulfát oldhatósága $0,500 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú bárium-klorid-oldatban? $L(\text{BaSO}_4) = 1,08 \cdot 10^{-11}$.

Megoldás:

Írjuk fel az egyensúlyi táblázatot!

	BaSO ₄	⇌	Ba ²⁺	+	SO ₄ ²⁻
Kiindulási:	—		0,500		0
Átalakul:	—		+ S		+ S
Egyensúlyban:	—		0,500 + S		S

Az oldhatósági szorzat alapján:

$$L = [\text{Ba}^{2+}] \cdot [\text{SO}_4^{2-}] = (0,500 + S) \cdot S = 1,08 \cdot 10^{-11}.$$

Két lehetőségünk van az egyenlet megoldására:

I. Ha elhanyagoljuk S értékét az első tényezőben, a következő eredményt kapjuk:

$$S \approx \frac{1,08 \cdot 10^{-11}}{0,500} = 2,16 \cdot 10^{-11} \text{ mol/dm}^3.$$

Az eredményből látható, hogy $S = 2,16 \cdot 10^{-11} \ll 0,5$, tehát jogos volt az elhanyagolás.

II.

Elhanyagolás nélkül a következő másodfokú egyenletet kapjuk:

$$S^2 + 0,500 \cdot S - 1,08 \cdot 10^{-11} = 0.$$

Ennek két megoldása: $S_1 = 2,16 \cdot 10^{-11}$, $S_2 = -0,5$, ez utóbbinak természetesen nincsen kémiai tartalma. Mint látható, a másodfokú egyenlet precíz megoldása ugyanazt az eredményt adja, mint az elhanyagolással történő megoldásmód. Természetesen nem általánosítható, hogy minden esetben élhetünk az elhanyagolással, ám ha ellenőrizzük, hogy tényleg jogos-e az elhanyagolás, észrevesszük, ha esetleg mégsem volt helytálló a feltételezésünk.

Tehát a bárium-szulfát oldhatósága $0,500 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú bárium-klorid-oldatban $2,16 \cdot 10^{-11} \text{ mol/dm}^3$.

8.91. példa:

Mekkora a kálium-perklorát (KClO_4) oldhatósága $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú perklorásvoldatban? $L(\text{KClO}_4) = 1,03 \cdot 10^{-2}$.

Megoldás:

Az oldatban a kiindulási ClO_4^- -koncentráció $0,100 \text{ mol/dm}^3$, mivel az oldat írjuk fel az egyensúlyi táblázatot az oldatbeli koncentrációkra!

	KClO_4	\rightleftharpoons	K^+	+	ClO_4^-
Kiindulási:	—		0		0,100
Átalakul:	—		+ S		+ S
Egyensúlyban:	—		S		0,100 + S

Behelyettesítve Az oldhatósági szorzat alapján:

$$L = [\text{K}^+] \cdot [\text{ClO}_4^-] = (0,100 + S) \cdot S = 1,03 \cdot 10^{-2}.$$

Nézzük meg, mi történik, ha elhanyagoljuk S értékét az első tényezőben!

$$S \approx \frac{1,03 \cdot 10^{-2}}{0,100} = 0,103 \text{ mol/dm}^3$$

Az eredményből látható, hogy S értéke nagyságrendileg azonos a kiindulási perklorát-koncentrációval, így bebizonyosodott, hogy nem alkalmazható az elhanyagolás, az alábbi másodfokú egyenletet kell megoldanunk!

$$S^2 + 0,100 \cdot S - 1,03 \cdot 10^{-2} = 0$$

Ennek két kémiailag releváns (pozitív) megoldása: $S = 6,313 \cdot 10^{-2}$.

Tehát a kálium-perklorát oldhatósága $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú perklorásvoldatban $6,313 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3$.

8.92. példa:

Mekkora az nikkell(II)-hidroxid oldhatósága 10,00 pH-n? $L(\text{Ni(OH)}_2) = 5,48 \cdot 10^{-16}$.

Megoldás:

A pH alapján az oldat OH^- -koncentrációja:

$$[\text{OH}^-] = 10^{-\text{pOH}} = 10^{-\text{pOH}} = 10^{-4} \text{ mol/dm}^3,$$

	Ni(OH)_2	\rightleftharpoons	Ni^{2+}	+	2OH^-
Kiindulási:	—		0		10^{-4}
Átalakul:	—		+ S		+ 2 · S
Egyensúlyban:	—		S		$10^{-4} + 2 \cdot S$

$$L = [\text{Ni}^{2+}] \cdot [\text{OH}^-]^2 = S \cdot (10^{-4} + 2 \cdot S)^2.$$

Hanyagoljuk el $2 \cdot S$ értékét 10^{-4} mellett, így

$$S = \frac{5,48 \cdot 10^{-16}}{(10^{-4})^2} = 5,48 \cdot 10^{-8} \text{ mol/dm}^3.$$

Mivel $5,48 \cdot 10^{-8} \ll 10^{-4}$, így jogos volt az elhanyagolás.

Tehát a nikkell(II)-hidroxid oldhatósága pH = 10,00 esetén $5,48 \cdot 10^{-8} \text{ mol/dm}^3$.

8.93. példa:

Mekkora az magnézium-fluorid oldhatósága $0,0100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú kálium-fluorid-oldatban?
 $L(\text{MgF}_2) = 5,16 \cdot 10^{-11}$.

Megoldás:

Írjuk fel az egyensúlyi táblázatot!

	MgF_2	\rightleftharpoons	Mg^{2+}	+	2F^-
Kiindulási:	—		0		0,0100
Átalakul:	—		+ S		+ 2 · S
Egyensúlyban:	—		S		$0,0100 + 2 \cdot S$

Beírva az oldhatósági szorzatba:

$$L = [\text{Mg}^{2+}] \cdot [\text{F}^-]^2 = S \cdot (0,0100 + 2 \cdot S)^2.$$

Hanyagoljuk el $2 \cdot S$ értékét 0,0100 mellett, így

$$S = \frac{5,16 \cdot 10^{-11}}{0,0100^2} = 5,16 \cdot 10^{-7} \text{ mol/dm}^3.$$

Mivel $5,16 \cdot 10^{-7} \ll 0,0100$, így jogos volt az elhanyagolás.

Tehát az magnézium-fluorid oldhatósága $0,0100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú kálium-fluorid-oldatban $5,16 \cdot 10^{-7} \text{ mol/dm}^3$.

8.94. példa:

Mekkora az ezüst-szulfát oldhatósága $0,500 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú nátrium-szulfát-oldatban?
 $L(\text{Ag}_2\text{SO}_4) = 1,20 \cdot 10^{-5}$.

Megoldás:

Írjuk fel az egyensúlyi táblázatot!

	Ag_2SO_4	\rightleftharpoons	2Ag^+	+	SO_4^{2-}
Kiindulási:	—		0		0,500
Átalakul:	—		+ 2 · S		+ S
Egyensúlyban:	—		2 · S		0,500 + S

Az oldhatósági szorzatba behelyettesítve:

$$L = [\text{Ag}^+]^2 \cdot [\text{SO}_4^{2-}] = (2 \cdot S)^2 \cdot (0,500 + S).$$

Hanyagoljuk el S értékét 0,500 mellett, így

$$S = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1,20 \cdot 10^{-5}}{0,500}} = 2,45 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3.$$

Mivel $2,45 \cdot 10^{-3} \ll 0,500$, így jogos volt az elhanyagolás.

Tehát az ezüst-szulfát oldhatósága $0,500 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú nátrium-szulfát-oldatban $2,45 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3$. (A korábbi feladat alapján az ezüst-szulfát oldhatósága desztillált vízben $1,44 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3$, tehát a nátrium-foszfát-oldatban tényleg egy nagyságrenddel rosszabb az oldhatóság.)

8.95. példa:

Mekkora az ezüst-szulfát oldhatósága $1,00 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú nátrium-szulfát-oldatban?
 $L(\text{Ag}_2\text{SO}_4) = 1,20 \cdot 10^{-5}$.

Megoldás:

Az előző feladathoz hasonlóan írjuk fel az egyensúlyi táblázatot!

	Ag_2SO_4	\rightleftharpoons	2Ag^+	+	SO_4^{2-}
Kiindulási:	—		0		$1,00 \cdot 10^{-2}$
Átalakul:	—		+ 2 · S		+ S
Egyensúlyban:	—		2 · S		$1,00 \cdot 10^{-2} + S$

$$L = [\text{Ag}^+]^2 \cdot [\text{SO}_4^{2-}] = (2 \cdot S)^2 \cdot (1,00 \cdot 10^{-2} + S) = 1,20 \cdot 10^{-5}.$$

Mivel S értéke nem hanyagolható el az $1,00 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3$ mellett, tehát az egyenletet iterációs úton célszerű megoldani:

Fejezzük ki S-t az egyenletből az alábbi formában!

$$S = \frac{1}{2} \cdot \sqrt{\frac{1,20 \cdot 10^{-5}}{1,00 \cdot 10^{-2} + S}}$$

Vegyünk S kiindulási értékének $S_0 = 10^{-2}$ -t! Helyettesítsük be S_0 -t az egyenletbe, így kapjuk S_1 -t. Ezt visszahelyettesítve S_2 -t, és így tovább. A kapott eredmények:

S_0	$1,00 \cdot 10^{-2}$
S_1	$1,22 \cdot 10^{-2}$
S_2	$1,16 \cdot 10^{-2}$
S_3	$1,18 \cdot 10^{-2}$
S_4	$1,17 \cdot 10^{-2}$
S_5	$1,17 \cdot 10^{-2}$

Tehát az ezüst-szulfát oldhatósága $1,00 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú nátrium-szulfát-oldatban $1,17 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3$.

Az oldat pH-jának hatása az oldhatóságra

Az alábbiakban először azt vizsgáljuk meg, hogyan befolyásolja a pH-t, ha a csapadék anionja egy gyenge savból származik.

8.96. példa:

Mekkora a bárium-fluorid oldhatósága 2,00 pH-jú pufferoldatban? $L(\text{BaF}_2) = 1,84 \cdot 10^{-7}$, $K_s(\text{HF}) = 6,31 \cdot 10^{-4}$.

Megoldás:

A feloldó sóból a fluoridion savas közegben részben protonálódik, ám az oldat pH-ját állandónak vehetjük, mivel a puffer ezt biztosítja. A pH megszabja, hogy a fluoridionok mekkora hányada tud protonálódni:

$$K_s = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{F}^-]}{[\text{HF}]} \Rightarrow \frac{[\text{HF}]}{[\text{F}^-]} = \frac{[\text{H}^+]}{K_s}.$$

Tehát az oldatban a $[\text{HF}]/[\text{F}^-]$ koncentrációarány állandó, a hidrogén-fluorid koncentrációja kifejezhető a F^- -ion koncentrációjának függvényében:

$$[\text{HF}] = \frac{[\text{H}^+]}{K_s} \cdot [\text{F}^-].$$

Ha feloldódik dm^3 -enként S mólnyi BaF_2 , akkor az oldatban a Ba^{2+} -koncentráció $S \text{ mol/dm}^3$ lesz. Minden egyes Ba^{2+} -ionnal együtt 2 F^- -ion is oldatba megy, ám ezeknek egy része protonálódik. Így a fluoridionok és a hidrogén-fluorid koncentrációjának összege:

$$c_{\text{össz}}(\text{F}^-) = 2 \cdot S = [\text{HF}] + [\text{F}^-].$$

Behelyettesítve a $[\text{HF}]$ koncentrációt:

$$2 \cdot S = [\text{HF}] + [\text{F}^-] = \frac{[\text{H}^+]}{K_s} \cdot [\text{F}^-] + [\text{F}^-] = \left(\frac{[\text{H}^+]}{K_s} + 1 \right) \cdot [\text{F}^-].$$

Így egy összefüggést kaptunk az oldhatóság (S) és a fluoridion-koncentráció között ($[\text{F}^-]$):

$$[\text{F}^-] = \frac{2 \cdot S}{\frac{[\text{H}^+]}{K_s} + 1} = 2 \cdot S \cdot \frac{K_s}{[\text{H}^+] + K_s}.$$

Mint tudjuk az oldatban $[\text{Ba}^{2+}] = S$, így felírható az oldhatósági szorzat:

$$L = [\text{Ba}^{2+}] \cdot [\text{F}^-]^2 = S \cdot \left(2 \cdot S \cdot \frac{K_s}{[\text{H}^+] + K_s} \right)^2 = 4 \cdot S^3 \cdot \left(\frac{K_s}{[\text{H}^+] + K_s} \right)^2.$$

Így az oldhatóságot már könnyen számíthatjuk az egyenletből:

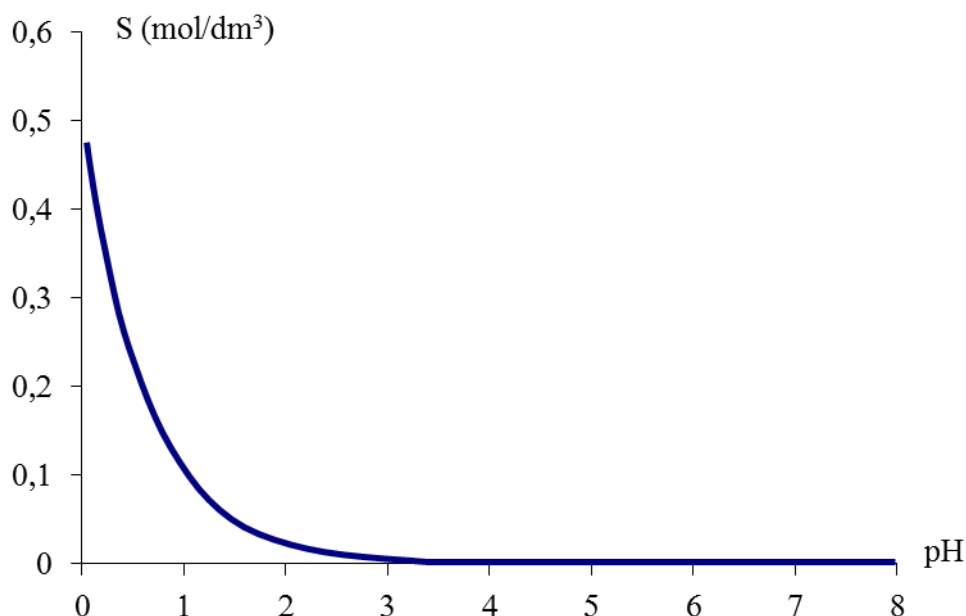
$$S = \sqrt[3]{\frac{L}{4 \cdot \left(\frac{K_s}{[H^+] + K_s}\right)^2}} = \sqrt[3]{\frac{1,84 \cdot 10^{-7}}{4 \cdot \left(\frac{6,31 \cdot 10^{-4}}{10^{-2} + 6,31 \cdot 10^{-4}}\right)^2}} = 2,35 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3.$$

Tehát a bárium-fluorid oldhatósága pH = 2,00 esetén $\underline{2,35 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3}$.

Érdeemes megvizsgálni, hogyan változik a bárium-fluorid oldhatósága a pH függvényében! Adott pH esetén ki tudjuk számítani az oldhatóságok az alábbi képlet alapján:

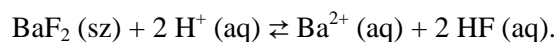
$$S = \sqrt[3]{\frac{L}{4 \cdot \left(\frac{K_s}{[H^+] + K_s}\right)^2}}.$$

A pH függvényében az oldhatóságot ábrázolva a következő diagramot kapjuk:



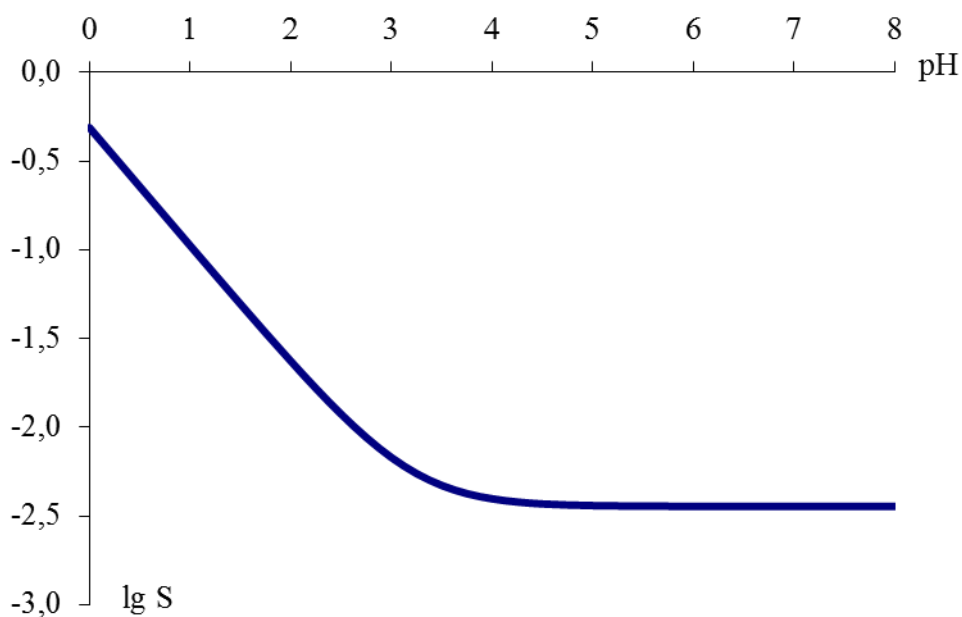
8.6.3.4.1. ábra: Az oldhatóság pH-függése

Mint látható, a bárium-fluorid oldhatósága a pH csökkenésével növekszik. Ennek oka, hogy a beoldódó fluoridion az adott pH-nak megfelelő arányban protonálódik. Tulajdonképpen az alábbi egyenlet szerinti reakció megy végbe:



Mivel a hidrogén-fluorid gyenge sav, az oldhatóság savas pH-n sokkal jobb, mint semleges vagy lúgos pH-n.

Még szemléletesebb képet kapunk, ha a pH függvényében nem az oldhatóságot, hanem annak logaritmusát ábrázoljuk!



8.6.3.4.2. ábra: Az oldhatóság logaritmusának a pH függvényében

A logaritmusos ábrázolás alapján az oldhatóság pH-függése két fő szakaszra (és egy átmeneti szakaszra) bontható: kisebb pH-n ($\text{pH} < 2$) az oldhatóság logaritmusának egyenesen arányos az oldat pH-jával.

Ez adódik az alábbi képletből:

$$S = \sqrt[3]{\frac{L}{4 \cdot \left(\frac{K_s}{[\text{H}^+] + K_s}\right)^2}}$$

Ha a pH kicsi, $[\text{H}^+]$ értéke nagy, $[\text{H}^+] \gg K_s$, ezért $[\text{H}^+] + K_s \approx [\text{H}^+]$ (azaz K_s elhanyagolható). Ekkor a következő összefüggést kapjuk:

$$S = \sqrt[3]{\frac{L}{4 \cdot \left(\frac{K_s}{[\text{H}^+] + K_s}\right)^2}} \approx \sqrt[3]{\frac{L}{4 \cdot \left(\frac{K_s}{[\text{H}^+]}\right)^2}} = \sqrt[3]{\frac{L \cdot [\text{H}^+]^2}{4 \cdot K_s^2}} = \sqrt[3]{\frac{L}{4 \cdot K_s^2}} \cdot [\text{H}^+]^{\frac{2}{3}}$$

Ha az oldhatóság logaritmusát számítjuk, akkor a következő egyenlet adódik:

$$\lg S \approx \lg \left(\sqrt[3]{\frac{L}{4 \cdot K_s^2}} \cdot [\text{H}^+]^{\frac{2}{3}} \right) = \lg \sqrt[3]{\frac{L}{4 \cdot K_s^2}} + \frac{2}{3} \lg [\text{H}^+] = \lg \sqrt[3]{\frac{L}{4 \cdot K_s^2}} - \frac{2}{3} \text{pH}$$

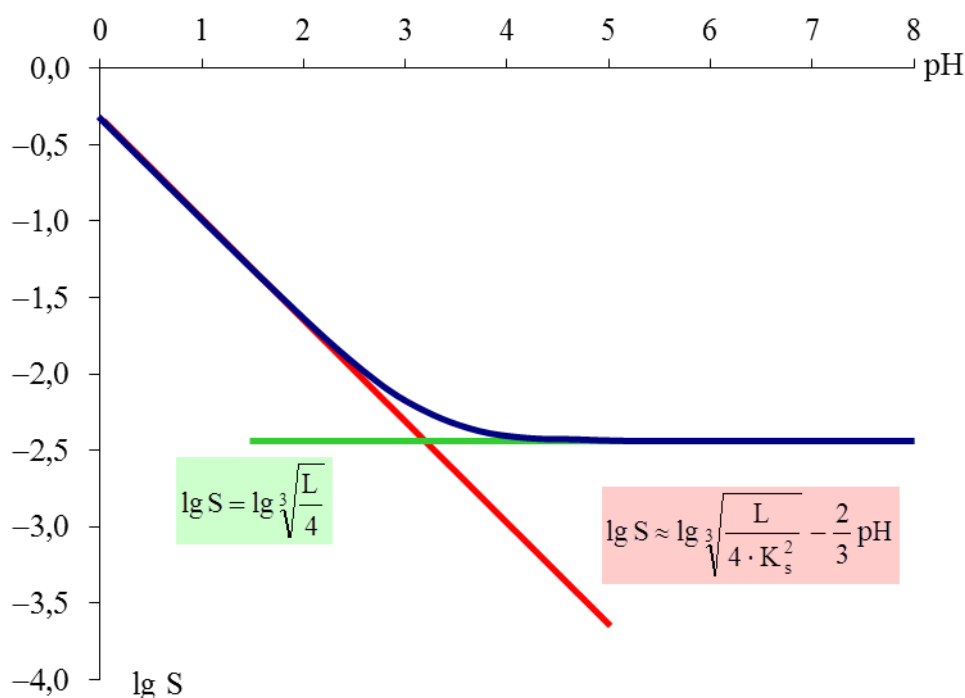
Tehát nagy $[\text{H}^+]$ esetén $\lg S$ lineáris a pH függvényében.

Ha a pH viszonylag nagy ($\text{pH} > 5$) az oldhatóság gyakorlatilag függetlennek tekinthető a pH-tól. Ekkor a $[\text{H}^+] \ll K_s$, így a következő egyszerűsítést tehetjük:

$$S = \sqrt[3]{\frac{L}{4 \cdot \left(\frac{K_s}{[H^+] + K_s}\right)^2}} \approx \sqrt[3]{\frac{L}{4 \cdot \left(\frac{K_s}{K_s}\right)^2}} = \sqrt[3]{\frac{L}{4}} = 3,583 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3.$$

Így például desztillált vízben vagy lúgos oldatban a bárium-fluorid oldhatóságát számíthatjuk a protonálódást figyelmen kívül hagyva is, az eltérés igen csekély a pontosan és az elhanyagolással számolt értékek között.

A két közelítő egyenletet ábrázolva (piros és zöld színnel) az eredeti oldhatósággörbe (kék színnel) mellett a következő ábrát kapjuk:



8.6.3.4.3. ábra: Az oldhatóság logaritmus a pH függvényében

Érdeemes megfigyelni, hogy mely pH-értéknél metszi egymást a két görbe:

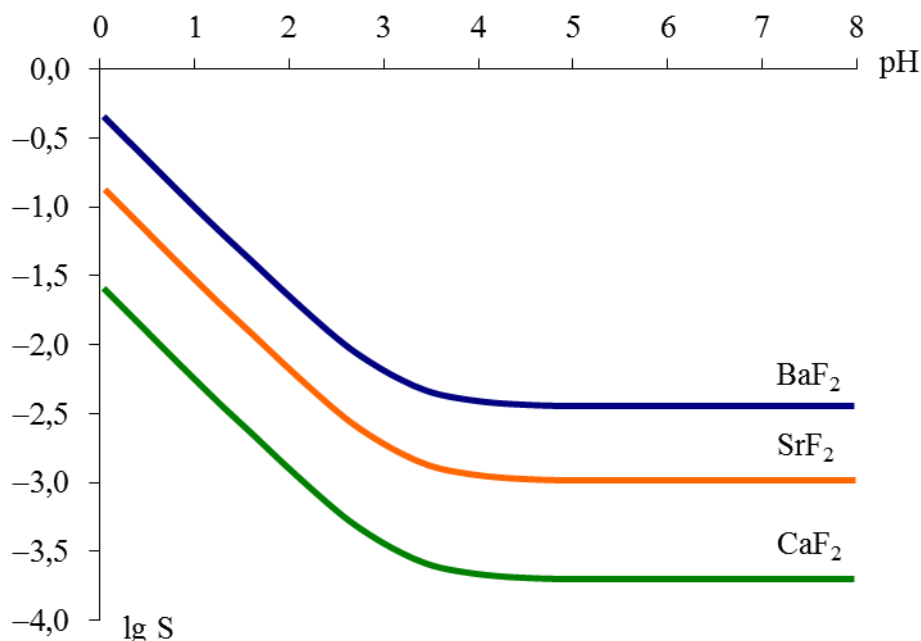
$$\lg \sqrt[3]{\frac{L}{4 \cdot K_s^2}} - \frac{2}{3} \text{pH} = \lg \sqrt[3]{\frac{L}{4}}.$$

Ebből azt kapjuk, hogy $\text{pH} = -\lg K_s = \text{p}K_s = -\lg(6,31 \cdot 10^{-4}) = 3,20$.

Tehát az oldhatósági szorzattól függetlenül a két görbe éppen $\text{pH} = \text{p}K_s$ értéknél metszi egymást. Ebből a következő általánosítások következnek:

- ha csapadék anionja erős savból származik (pl. Cl^- , Br^- , I^- , stb.), akkor az oldhatóság független a pH-tól.
- Ha a csapadék anionja gyenge savból származik, akkor $\text{pH} > \text{p}K_s + 2$ esetén az anion protonálódásától eltekinthetünk, ilyenkor nem követünk el túl nagy hibát, ha figyelmen kívül hagyjuk, hogy az anion gyenge savból származik.
- $\text{pH} < \text{p}K_s + 2$ esetén nem célszerű elhanyagolni az anion protonálódásakor keletkező sav mennyiségét.

A következő diagramon a BaF_2 , ($L = 1,84 \cdot 10^{-7}$) SrF_2 ($L = 4,33 \cdot 10^{-9}$) és CaF_2 ($L = 3,45 \cdot 10^{-11}$) oldhatósági görbéjét ábráztuk a pH függvényében:



8.6.3.4.4. ábra: A BaF_2 , SrF_2 és CaF_2 oldhatósági görbéje a pH függvényében

A három görbe igen hasonlít egymáshoz, egymásba függőleges eltolással átvihetők. Mivel a CaF_2 oldhatósági szorzata a legkisebb, ennek a vegyületnek az oldhatósága a legrosszabb adott pH-n, és a BaF_2 oldhatósága a legjobb adott pH-n. A görbék „törése” mindig ugyanazon a pH-n történik ($\text{pH} = \text{pK}_s$).

8.97. példa:

Mekkora a vas(II)-szulfid oldhatósága $\text{pH} = 3,00$ és $\text{pH} = 7,00$ esetén? $L = 1,59 \cdot 10^{-19}$, $K_{s1} = 8,91 \cdot 10^{-8}$, $K_{s2} = 1,00 \cdot 10^{-19}$.

Megoldás:

A szulfidion (S^{2-}) az oldat pH-jától függően protonálódik: hidrogén-szulfid-anion (HS^-) és kénhidrogén (H_2S) keletkezhet belőle. Az összes beoldódott vas(II)-szulfid mennyisége dm^3 -enként S , így a háromféle szulfidtartalmú részecske összkoncentrációjára felírható:

$$S = [\text{H}_2\text{S}] + [\text{HS}^-] + [\text{S}^{2-}].$$

Az oldhatósági szorzatban csak a S^{2-} -ionok koncentrációja szerepel, ezért érdemes kifejezni a H_2S - és HS^- -koncentrációkat is $[\text{S}^{2-}]$ segítségével:

$$K_{s1} \cdot K_{s2} = \frac{[\text{H}^+]^2 \cdot [\text{S}^{2-}]}{[\text{H}_2\text{S}]} \Rightarrow [\text{H}_2\text{S}] = \frac{[\text{H}^+]^2 \cdot [\text{S}^{2-}]}{K_{s1} \cdot K_{s2}},$$

$$K_{s2} = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{S}^{2-}]}{[\text{HS}^-]} \Rightarrow [\text{HS}^-] = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{S}^{2-}]}{K_{s2}}.$$

Helyettesítsük be a kapott koncentrációkat az oldhatóság (S) kifejezésébe!

$$S = [\text{H}_2\text{S}] + [\text{HS}^-] + [\text{S}^{2-}] = \frac{[\text{H}^+]^2 \cdot [\text{S}^{2-}]}{K_{s1} \cdot K_{s2}} + \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{S}^{2-}]}{K_{s2}} + [\text{S}^{2-}] = \left(\frac{[\text{H}^+]^2}{K_{s1} \cdot K_{s2}} + \frac{[\text{H}^+]}{K_{s2}} + 1 \right) \cdot [\text{S}^{2-}]$$

Így az oldat S^{2-} -koncentrációja adott pH esetén:

$$[\text{S}^{2-}] = \frac{S}{\frac{[\text{H}^+]^2}{K_{s1} \cdot K_{s2}} + \frac{[\text{H}^+]}{K_{s2}} + 1}$$

Mivel az oldatban a Fe^{2+} -ionok koncentrációja S , az oldhatósági szorzat a következőképpen alakul:

$$L = [\text{Fe}^{2+}] \cdot [\text{S}^{2-}] = S \cdot \frac{S}{\frac{[\text{H}^+]^2}{K_{s1} \cdot K_{s2}} + \frac{[\text{H}^+]}{K_{s2}} + 1} = \frac{S^2}{\frac{[\text{H}^+]^2}{K_{s1} \cdot K_{s2}} + \frac{[\text{H}^+]}{K_{s2}} + 1}$$

Ebből az oldhatóság:

$$S = \sqrt{L \cdot \left(\frac{[\text{H}^+]^2}{K_{s1} \cdot K_{s2}} + \frac{[\text{H}^+]}{K_{s2}} + 1 \right)}$$

Behelyettesítve az adatokat a két különböző pH-n:

$$\text{pH} = 3,00$$

$$S = \sqrt{L \cdot \left(\frac{[\text{H}^+]^2}{K_{s1} \cdot K_{s2}} + \frac{[\text{H}^+]}{K_{s2}} + 1 \right)} = \sqrt{1,59 \cdot 10^{-19} \cdot \left(\frac{(10^{-3})^2}{8,91 \cdot 10^{-8} \cdot 1,00 \cdot 10^{-14}} + \frac{10^{-3}}{1,00 \cdot 10^{-14}} + 1 \right)} = 0,0134 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}$$

$$\text{pH} = 7,00$$

$$S = \sqrt{L \cdot \left(\frac{[\text{H}^+]^2}{K_{s1} \cdot K_{s2}} + \frac{[\text{H}^+]}{K_{s2}} + 1 \right)} = \sqrt{1,59 \cdot 10^{-19} \cdot \left(\frac{(10^{-7})^2}{8,91 \cdot 10^{-8} \cdot 1,00 \cdot 10^{-14}} + \frac{10^{-7}}{1,00 \cdot 10^{-14}} + 1 \right)} = 1,84 \cdot 10^{-6} \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}$$

Tehát a vas(II)-szulfid oldhatósága 3,00 pH-n 0,0134 mol/dm³, pH = 7,00 esetén pedig 1,84 · 10⁻⁶ mol/dm³.

Szulfidcsapadékok oldhatósága

Mint az előző példa alapján is láhattuk, a fém-szulfidok oldhatósága nagy mértékben függ a pH-tól. Az oldhatóságra kapott összefüggésben megfigyelhető, hogy a négyzetgyök alatt álló kifejezés minden pH-n nagyobb, mint az oldhatósági szorzat:

$$S = \sqrt{L \cdot \left(\frac{[\text{H}^+]^2}{K_{s1} \cdot K_{s2}} + \frac{[\text{H}^+]}{K_{s2}} + 1 \right)}$$

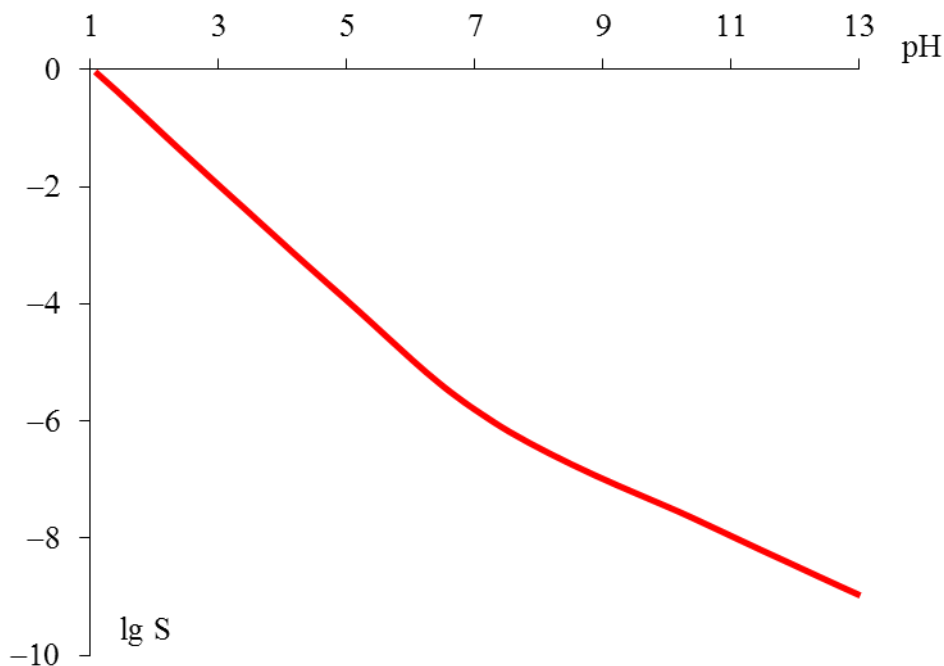
Ennek oka, hogy a $[\text{H}^+]$ és az egyensúlyi állandók mindig pozitívak, ezért a zárójelben található kifejezés értéke mindig nagyobb 1-nél. Gyakran ez a zárójelben szereplő összeget α_{H} -val jelölik (a H betű a hidrogénionokra utal). Konkrétan a hidrogén-szulfidra (természetesen bármely más savra is felírható):

$$\alpha_H = \frac{[H^+]^2}{K_{s1} \cdot K_{s2}} + \frac{[H^+]}{K_{s2}} + 1.$$

Így az oldhatóság:

$$S = \sqrt{L \cdot \alpha_H}.$$

Ismét érdemes az oldhatóság logaritmusát ábrázolni a pH függvényében:



8.6.3.4.5. ábra: A vas(II)-szulfid oldhatóságának logaritmusának a pH függvényében

Az ábrán megfigyelhető, hogy a vas(II)-szulfid oldhatósága rendkívül érzékeny a pH-ra, és mivel a hidrogén-szulfid (H_2S) disszociációs állandói igen kicsik (főleg $K_{s2} = 1,00 \cdot 10^{-14}$), az oldat pH-ját mindig célszerű figyelembe venni az oldhatóság számításánál.

Ismét két eltérő meredekségű szakaszt figyelhetünk meg. Savas pH-n egy (-1) meredekségű egyenessel közelíthető a görbe:

$$S = \sqrt{L \cdot \left(\frac{[H^+]^2}{K_{s1} \cdot K_{s2}} + \frac{[H^+]}{K_{s2}} + 1 \right)} \approx \sqrt{L \cdot \frac{[H^+]^2}{K_{s1} \cdot K_{s2}}} = \sqrt{\frac{L}{K_{s1} \cdot K_{s2}}} \cdot [H^+],$$

$$\lg S \approx \lg \sqrt{\frac{L}{K_{s1} \cdot K_{s2}}} + \lg [H^+] = \lg \sqrt{\frac{L}{K_{s1} \cdot K_{s2}}} - \text{pH}.$$

Lúgos pH-n viszont a görbét egy (-0,5) meredekségű egyenessel közelíthetjük:

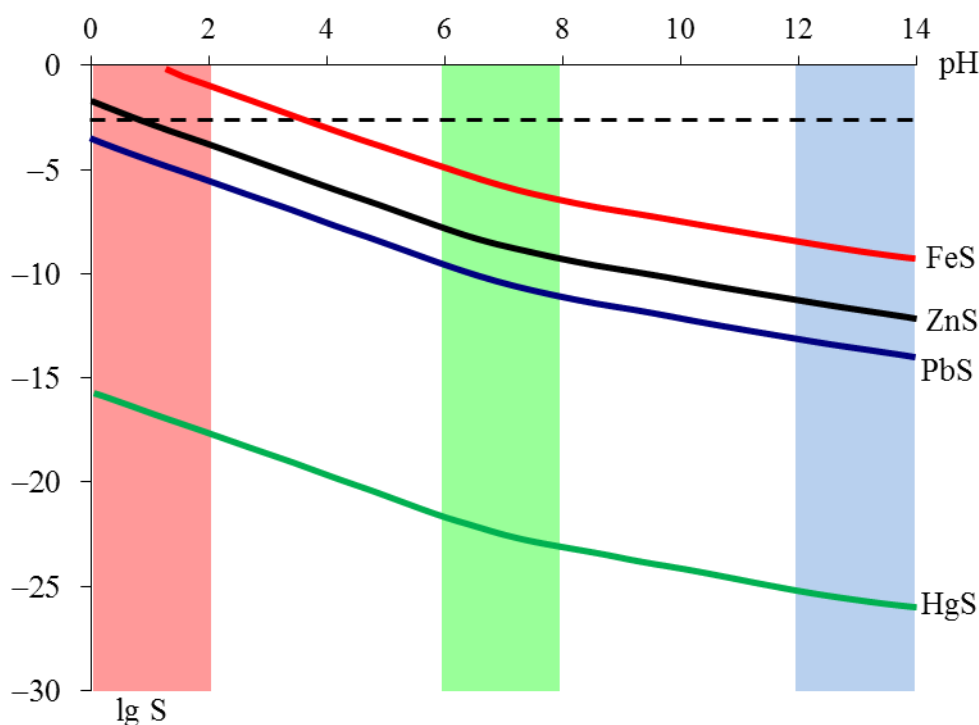
$$S = \sqrt{L \cdot \left(\frac{[H^+]^2}{K_{s1} \cdot K_{s2}} + \frac{[H^+]}{K_{s2}} + 1 \right)} \approx \sqrt{L \cdot \frac{[H^+]}{K_{s2}}} = \sqrt{\frac{L}{K_{s2}}} \cdot \sqrt{[H^+]},$$

$$\lg S \approx \lg \sqrt{\frac{L}{K_{s2}}} + \lg \sqrt{[H^+]} = \lg \sqrt{\frac{L}{K_{s2}}} - \frac{1}{2} \text{pH}.$$

A két „közelítő” egyenes $\text{pH} = \text{p}K_{s1}$ -nél metszi egymást.

Felmerülhet az Olvasóban, hogy – az alkáliföldfém-fluoridokhoz hasonlóan – miért nincsen 0 meredekségű (vízszintes) szakasza az oldhatósági görbének. Az elvárás jogos, mivel bizonyos pH-tartományban az oldhatóságnak függetlennek kellene lennie az oldat pH-jától (azaz a csapadék anionja itt már nem protonálódna). A szulfidion igen erős bázis (a HS^- igen gyenge sav), így igen nagy pH kellene ahhoz, hogy az oldhatóság független legyen az oldat pH-jától. Ez $\text{pH} > 14$ esetén lenne lehetséges ($\text{p}K_{s2} = 14,00$), ám vizes oldatok esetén nem lehet olyan nagy pH-t előállítani, ahol ez bekövetkezne.

Érdeemes megvizsgálni más szulfidcsapadékok viselkedését is. Vegyük például a cink-szulfid (ZnS , $L = 2,93 \cdot 10^{-25}$), az ólom(II)-szulfid (PbS , $L = 9,04 \cdot 10^{-29}$) és higany(II)-szulfid (HgS , $L = 6,54 \cdot 10^{-53}$) csapadékokat!



8.6.3.4.6. ábra: Szulfidcsapadékok oldhatósága

A görbék alapján fontos megállapításokat tehetünk, melyek rendkívül hasznosak a szerves kémiai minőségi analízisben. Az ábra alapján megérthető, hogy melyik csapadékok milyen kémhatású oldatból választhatók le szulfidcsapadék formájában. Amennyiben az oldhatóság kb. 10^{-2} mol/dm³-nél kisebb, a csapadékot igen rosszul oldódónak tekinthetjük az adott pH-n (ezt egy vízszintes szaggatott vonallal jelöltük az ábrán). A csapadékok oldhatósága semleges (zöld sáv) és lúgos (kék sáv) pH-n is igen rossznak tekinthető. Ebből arra következtethetünk, hogy semleges vagy lúgos közegben a Fe^{2+} -, Zn^{2+} -, Pb^{2+} - és Hg^{2+} -ionok is leválaszthatóak szulfidcsapadék formájában.

Savas közegben azonban a vas(II)-szulfid már igen jól oldódik, ezért savas pH-n Fe^{2+} -sók oldatából S^{2-} -ionok (H_2S) hatására nem válik le FeS csapadék.

A cink-szulfid oldhatósága valamelyest rosszabb, mint a vas(II)-szulfidé, ezért az ecetsav pH-ján a Zn^{2+} -oldatokból leválasztható ZnS csapadék. Azonban ha az oldat pH-ja savasabb (például 1 mol/dm³ koncentrációjú sósavoldat, $\text{pH} = 0$), a cink-szulfid már nem választható le.

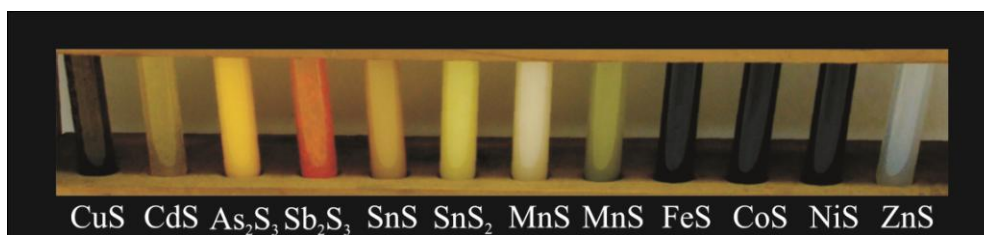
Az ólom(II)-szulfid és higany(II)-szulfid oldhatósági szorzata olyan kicsi, hogy még savas oldatban ($\text{pH} = 0$) is leválaszthatóak.

A különféle szulfidcsapadékok oldhatósága lehetőséget nyújt a különböző fémionok csoportosítására, mely a **Fresenius-féle elemzési rendszer** alapját képezi. A szulfidcsapadékok oldhatósága alapján az alábbi csoportokat különböztetjük meg:

a) Igen savas pH-n hidrogén-szulfid hatására szulfidcsapadékot képeznek: Ag^+ , Hg_2^{2+} , Pb^{2+} , Hg^{2+} , Cd^{2+} , Cu^{2+} , stb. (A Fresenius-rendszer I. és II. csoportját alkotják.)

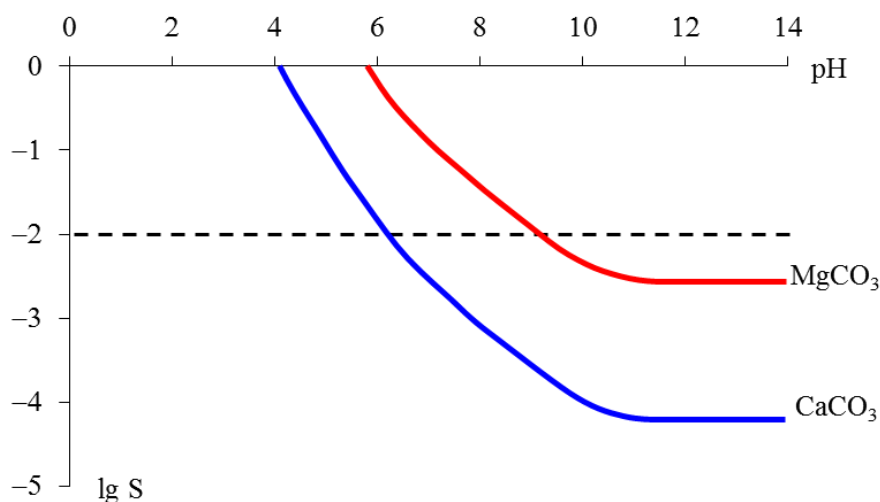
b) Semleges vagy enyhén lúgos közegben ammónium-szulfid ($(\text{NH}_4)_2\text{S}$) hatására szulfidcsapadékot képeznek, de erősen savas pH-n nem választható le belőlük szulfidcsapadék: Fe^{2+} , Ni^{2+} , Mn^{2+} , Zn^{2+} , stb. A ZnS leválasztható ecetsavas közegben (enyhén savas pH-n). (Ezen ionok a Fresenius-rendszer III. csoportjába tartoznak.)

c) Semleges közegben sem választható le szulfidcsapadékuk: Ca^{2+} , Mg^{2+} , Na^+ , K^+ , NH_4^+ stb. (Ezen ionok a Fresenius-rendszer IV. és V. csoportjába tartoznak.)



8.6.3.4.7. ábra: Szulfidcsapadékok

A Fresenius-rendszer kapcsán érdemes megvizsgálni a karbonátcsapadékok oldhatóságát is. Az alábbi ábrán két különböző karbonátcsapadék oldhatóságát tüntettük fel a pH függvényében: MgCO_3 ($L = 6,84 \cdot 10^{-6}$) és CaCO_3 ($L = 3,39 \cdot 10^{-9}$).



8.6.3.4.8. ábra: Karbonátcsapadékok oldhatósága

A görbék alapján látható, hogy az kalcium-karbonát már semleges pH-n is leválasztható, a magnéziumionok kicsapásához azonban $\text{pH} \approx 9-10$ szükséges. A híg ammónium-karbonát oldat pH-ja 9,5 körüli, így ha a Ca^{2+} -ionok ammónium-karbonáttal leválaszthatóak (ehhez hasonlóan a Ba^{2+} - és Sr^{2+} -ionok is, mivel ezek karbonátjának oldhatósági szorzata a CaCO_3 -éhoz hasonló értékű). A Mg^{2+} -ionok azonban csak részlegesen csaphatók ki ammónium-karbonát-oldattal. Ha egy oldat egyszerre tartalmaz Ca^{2+} - és Mg^{2+} -ionokat, és külön-külön szeretnénk kimutatni őket ammónium-karbonáttal, akkor célszerű ammónium-kloridot adni az oldathoz, ezzel a pH-t annyira lecsökkentjük, hogy a magnézium-karbonát nem csapódik ki, ám a kalcium-karbonát leválasztható csapadék formájában ($\text{pH} \approx 8$).

A fenti diagramon az is megfigyelhető, hogy a pH-t csökkentve mindkét karbonát oldhatósága megnövekszik, ekkor a karbonátionokból hidrogén-karbonát-ionok keletkeznek jelentős mennyiségben. Szénsavas vízben (H_2CO_3 , $\text{pH} \approx 5$) a kalcium-karbonát és a magnézium-karbonát is jól oldódik (változó vízkeménység: $\text{Ca}(\text{HCO}_3)_2$, $\text{Mg}(\text{HCO}_3)_2$).

A komplexképződés hatása az oldhatóságra

Ha egy fémion stabil komplexet képez valamely ligandummal, akkor a komplexképződés során lecsökken a szabad fémion koncentrációja. Ennek következtében a komplexképződés növeli az oldhatóságot (a desztillált vízben történő oldhatósághoz viszonyítva). Például a Cu^{2+} -sók oldatából lúg hatására leváló réz(II)-hidroxid csapadék igen jól oldódik ammóniaoldat feleslegében.

8.98. példa:

Ezüst-kloridot ammóniaoldatba szórunk, miután beállt az egyensúly, az oldat szabad NH_3 -koncentráció $0,500 \text{ mol/dm}^3$. Hány mól ezüst-klorid oldódott fel dm^3 -enként? $L(\text{AgCl}) = 1,77 \cdot 10^{-10}$, $\beta_1 = 2,24 \cdot 10^3$, $\beta_2 = 1,70 \cdot 10^7$.

Megoldás:

Az oldhatóság, azaz a feloldódott ezüst-klorid anyagmennyisége dm^3 -enként legyen S ! Az oldatban a Cl^- -koncentrációt S , ugyanennyi az ezüstionok koncentrációjának összege, ám ezek három különböző formában vannak jelen:

$$S = [\text{Ag}^+]_{\text{össz}} = [\text{Ag}^+] + [\text{Ag}(\text{NH}_3)^+] + [\text{Ag}(\text{NH}_3)_2^+].$$

A kumulált komplexstabilitási állandók segítségével kifejezhetőek a komplexált fémionok koncentrációi:

$$[\text{Ag}(\text{NH}_3)^+] = \beta_1 \cdot [\text{Ag}^+] \cdot [\text{NH}_3],$$

$$[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2^+] = \beta_2 \cdot [\text{Ag}^+] \cdot [\text{NH}_3]^2.$$

A koncentrációkat behelyettesítve a fenti egyenletbe:

$$S = [\text{Ag}^+] + [\text{Ag}(\text{NH}_3)^+] + [\text{Ag}(\text{NH}_3)_2^+] = [\text{Ag}^+] + \beta_1 \cdot [\text{Ag}^+] \cdot [\text{NH}_3] + \beta_2 \cdot [\text{Ag}^+] \cdot [\text{NH}_3]^2.$$

A szabad Ag^+ -ionok koncentrációja kiemelhető:

$$S = [\text{Ag}^+] \cdot (1 + \beta_1 \cdot [\text{NH}_3] + \beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2).$$

Ebből kifejezhető a szabad fémion-koncentráció:

$$[\text{Ag}^+] = \frac{S}{1 + \beta_1 \cdot [\text{NH}_3] + \beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2}.$$

Mivel a Cl^- -ionok koncentrációja S , az oldhatósági szorzat a következőképp alakul:

$$L = [\text{Ag}^+] \cdot [\text{Cl}^-] = \frac{S}{1 + \beta_1 \cdot [\text{NH}_3] + \beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2} \cdot S.$$

Az oldhatóság:

$$S = \sqrt{L \cdot (1 + \beta_1 \cdot [\text{NH}_3] + \beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2)}.$$

Behelyettesítve a mennyiségeket:

$$S = \sqrt{1,77 \cdot 10^{-10} \cdot (1 + 2,24 \cdot 10^3 \cdot 0,5 + 1,70 \cdot 10^7 \cdot 0,5^2)} = 2,74 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3.$$

Tehát az ezüst-klorid oldhatósága az adott ammóniaoldatban $2,74 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3$.

Az előző feladatban kapott összefüggést érdemes kicsit tovább elemezni. Tehát az ezüst-klorid oldhatósága $[\text{NH}_3]$ szabad ammóniakoncentráció mellett:

$$S = \sqrt{L \cdot (1 + \beta_1 \cdot [\text{NH}_3] + \beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2)}.$$

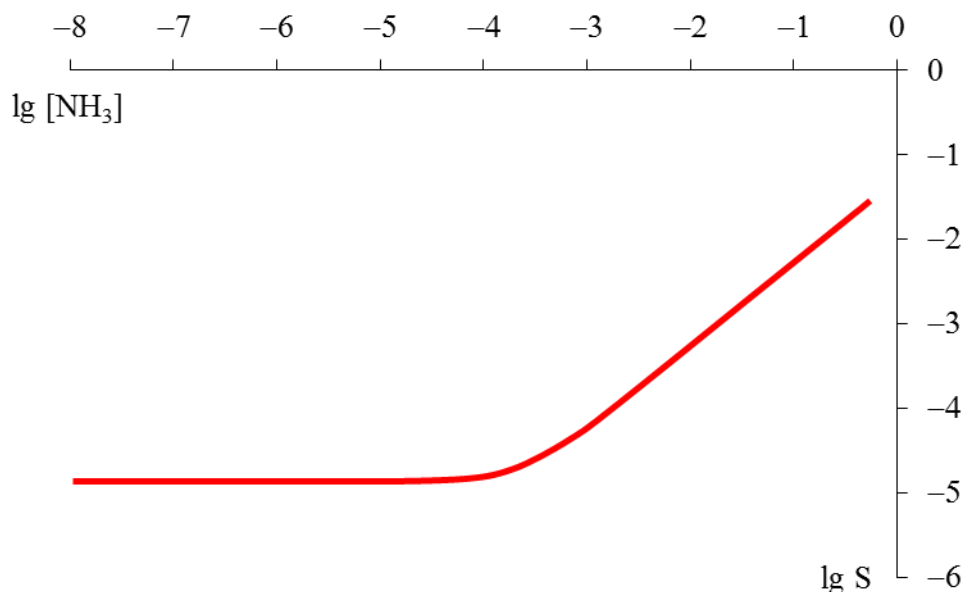
Mint látható, ha az oldatban van ammónia, akkor az oldhatóság nagyobb, mint az oldhatósági szorzat négyzetgyöke, mivel a zárójelben lévő kifejezés értéke legalább 1. A gyenge savból származó anion protonálódásánál megismert α_H mintájára ezt a kifejezést α_L -lel szokták jelölni:

$$\alpha_L = 1 + \beta_1 \cdot [\text{NH}_3] + \beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2.$$

Így az oldhatóság:

$$S = \sqrt{L \cdot \alpha_L}.$$

Ismét érdemes ábrák segítségével megvizsgálni, hogyan függ az ezüst-klorid oldhatósága a szabad ammóniakoncentráció függvényében! Az oldhatóság logaritmusát az ammóniakoncentráció logaritmusának függvényében ábrázolva a következő diagramot kapjuk:



8.6.3.4.9. ábra: Az ezüst-klorid oldhatóságának logaritmusa a szabad ammóniakoncentráció függvényében

A görbe nagyon hasonlít ahhoz, melyet a bárium-fluorid oldhatóságának pH-függésére kaptunk. Igen kis ammóniakoncentrációk esetén az oldhatóság gyakorlatilag megegyezik a desztillált vízben való oldhatósággal:

$$S = \sqrt{L \cdot (1 + \beta_1 \cdot [\text{NH}_3] + \beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2)} \approx \sqrt{L}.$$

Nagy ammóniakoncentrációk esetén – mivel αL -ben az első két tag elhanyagolhatóvá válik $\beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2$ mellett – az alábbi összefüggéssel közelíthető a görbe:

$$S = \sqrt{L \cdot (1 + \beta_1 \cdot [\text{NH}_3] + \beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2)} \approx \sqrt{L \cdot \beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2} = \sqrt{L \cdot \beta_2} \cdot [\text{NH}_3].$$

Ebből következik, hogy az oldhatóság logaritmusát ($\lg S$) a szabad ammóniakoncentráció logaritmusának ($\lg[\text{NH}_3]$) függvényében ábrázolva, egyenest kapunk. (Megjegyzés: β_1 jóval kisebb, mint β_2 , ezért nagyobb ammóniakoncentrációk esetén legtöbbször elhanyagolható az előző.)

8.99. példa:

Mekkora az ezüst-bromid és ezüst-jodid oldhatósága $0,050 \text{ mol/dm}^3$ szabad ammóniakoncentráció mellett? $L(\text{AgBr}) = 5,35 \cdot 10^{-13}$, $L(\text{AgI}) = 8,52 \cdot 10^{-17}$, $\beta_1 = 2,24 \cdot 10^3$, $\beta_2 = 1,70 \cdot 10^7$.

Megoldás:

Az előző feladattal teljesen analóg módon:

$$S = \sqrt{L \cdot (1 + \beta_1 \cdot [\text{NH}_3] + \beta_2 \cdot [\text{NH}_3]^2)}.$$

Behelyettesítve a mennyiségeket az ezüst-bromid esetén:

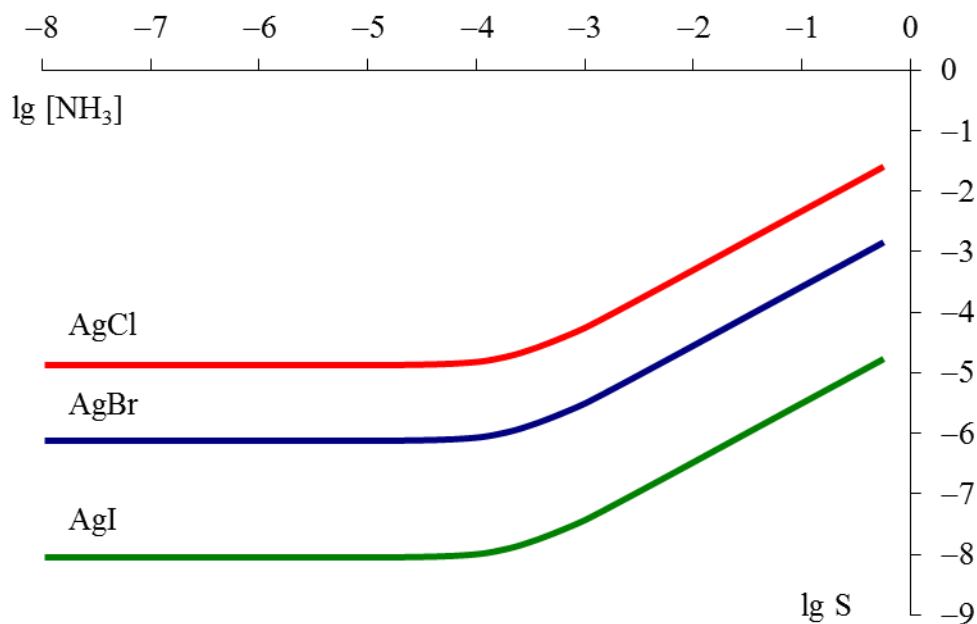
$$S = \sqrt{5,35 \cdot 10^{-13} \cdot (1 + 2,24 \cdot 10^3 \cdot 0,05 + 1,70 \cdot 10^7 \cdot 0,05^2)} = 1,51 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3.$$

Az ezüst-jodid esetén:

$$S = \sqrt{8,52 \cdot 10^{-17} \cdot (1 + 2,24 \cdot 10^3 \cdot 0,05 + 1,70 \cdot 10^7 \cdot 0,05^2)} = 1,90 \cdot 10^{-5} \text{ mol/dm}^3.$$

Tehát $0,500 \text{ mol/dm}^3$ szabad ammóniakoncentráció mellett az ezüst-bromid oldhatósága $1,51 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3$, az ezüst-jodidé pedig $1,90 \cdot 10^{-5} \text{ mol/dm}^3$.

Az eredményeket összehasonlítva az ezüst-klorid oldhatóságával (azonos körülmények között), megállapítható, hogy az oldhatósági sorrend: $\text{AgCl} > \text{AgBr} > \text{AgI}$. Ez szoros összefüggésben áll a kísérleti tapasztalattal, hogy az ezüst-klorid oldhatósága 1 mol/dm^3 koncentrációjú ammónium-karbonát- vagy ammónium-klorid-oldatban is viszonylag nagy (ezekben viszonylag kicsi a szabad ammóniakoncentráció), ezzel ellentétben az ezüst-bromid feloldásához viszonylag töményebb ammóniaoldat szükséges (ammónium-karbonát- és ammónium-klorid-oldatban nem oldódik), az ezüst-jodid pedig még ammóniaoldatban sem oldódik jelentős mértékben.



8.6.3.4.10. ábra: Az AgCl, AgBr és AgI oldhatóságának logaritmusának függvényében a szabad ammóniakoncentráció

8.100. példa:

Mekkora a $\text{Zn}(\text{OH})_2$ oldhatósága 12,00-es pH-jú puffer esetén? $L(\text{Zn}(\text{OH})_2) = 3,00 \cdot 10^{-17}$, $\beta_1 = 2,51 \cdot 10^4$, $\beta_2 = 2,00 \cdot 10^{11}$, $\beta_3 = 1,26 \cdot 10^{13}$, $\beta_4 = 5,01 \cdot 10^{14}$.

Megoldás:

A pH alapján a OH^- -koncentráció:

$$[\text{OH}^-] = 10^{-\text{pOH}} = 10^{-2} \text{ mol/dm}^3.$$

A pH alapján kiszámítható a szabad Zn^{2+} -ionok koncentrációja:

$$[\text{Zn}^{2+}] = \frac{L}{[\text{OH}^-]^2} = \frac{3,00 \cdot 10^{-17}}{(10^{-2})^2} = 3 \cdot 10^{-13} \text{ mol/dm}^3.$$

Ki kell számítanunk a további (komplexált) ionok koncentrációját is $[\text{Zn}^{2+}]$ és $[\text{OH}^-]$ ismeretében:

$$[\text{Zn}(\text{OH})^+] = \beta_1 \cdot [\text{Zn}^{2+}] \cdot [\text{OH}^-] = 2,51 \cdot 10^4 \cdot 3 \cdot 10^{-13} \cdot 10^{-2} = 7,53 \cdot 10^{-11} \text{ mol/dm}^3,$$

$$[\text{Zn}(\text{OH})_2] = \beta_2 \cdot [\text{Zn}^{2+}] \cdot [\text{OH}^-]^2 = 2,00 \cdot 10^{11} \cdot 3 \cdot 10^{-13} \cdot (10^{-2})^2 = 6,00 \cdot 10^{-6} \text{ mol/dm}^3,$$

$$[\text{Zn}(\text{OH})_3^-] = \beta_3 \cdot [\text{Zn}^{2+}] \cdot [\text{OH}^-]^3 = 1,26 \cdot 10^{13} \cdot 3 \cdot 10^{-13} \cdot (10^{-2})^3 = 3,78 \cdot 10^{-6} \text{ mol/dm}^3,$$

$$[\text{Zn}(\text{OH})_4^{2-}] = \beta_4 \cdot [\text{Zn}^{2+}] \cdot [\text{OH}^-]^4 = 5,01 \cdot 10^{14} \cdot 3 \cdot 10^{-13} \cdot (10^{-2})^4 = 1,53 \cdot 10^{-6} \text{ mol/dm}^3.$$

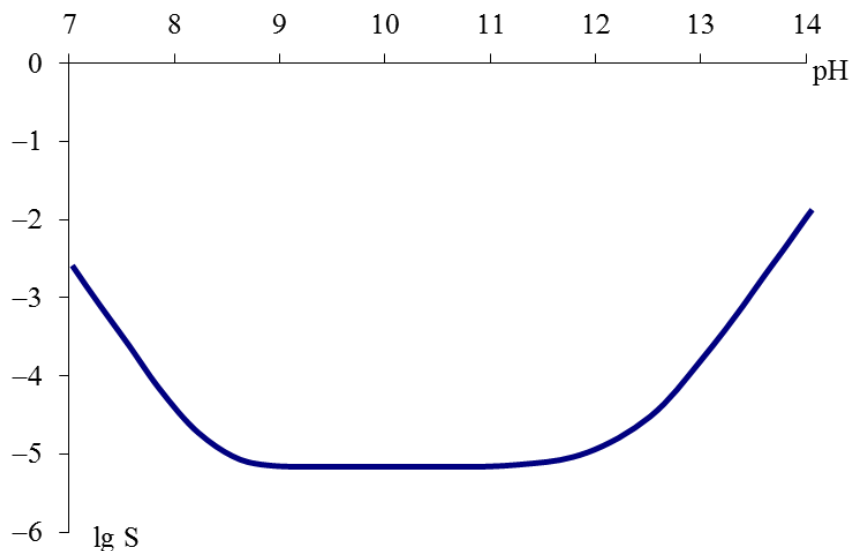
Az oldhatóság az összes Zn^{2+} -tartalmú részecske koncentrációjának összege:

$$S = [\text{Zn}^{2+}] + [\text{Zn}(\text{OH})^+] + [\text{Zn}(\text{OH})_2] + [\text{Zn}(\text{OH})_3^-] + [\text{Zn}(\text{OH})_4^{2-}] =$$

$$S = 3 \cdot 10^{-13} + 7,53 \cdot 10^{-11} + 6,00 \cdot 10^{-6} + 3,78 \cdot 10^{-6} + 1,53 \cdot 10^{-6} = 1,131 \cdot 10^{-5} \text{ mol/dm}^3.$$

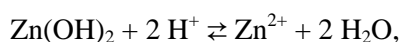
Tehát a Zn(OH)_2 oldhatósága 12-es pH-n $\underline{1,131 \cdot 10^{-5} \text{ mol/dm}^3}$.

Érdeemes megvizsgálni a Zn(OH)_2 oldhatóságát különböző pH-nál. Ehhez a fenti összefüggésekkel kiszámíthatjuk az oldhatóságot az adott OH^- -koncentrációnál, és ezt ábrázoljuk a pH függvényében, ekkor a következő diagramot kapjuk:



8.6.3.4.11. ábra: A Zn(OH)_2 oldhatóságának logaritmus a pH függvényében

Az ábrán jól megfigyelhető, hogy a Zn(OH)_2 oldhatóságának a 9–11 pH-tartományban minimuma van, és az oldhatóság növekszik akár növeljük, akár csökkentjük a pH-t. Tehát a Zn(OH)_2 egy amfoter karakterű anyag, savval és bázissal is reagál:



Savas pH-n nem kell tartanunk Zn(OH)_2 kicsapódásától, igen lúgos pH-n pedig a keletkező hidroxokomplex oldhatósága következtében oldódik fel a Zn(OH)_2 . Ez a kísérletileg is megfigyelhető: Zn^{2+} -ionokat tartalmazó oldathoz nátrium-hidroxid-oldatot öntve fehér csapadék válik le, mely feloldható nátrium-hidroxid-oldat feleslegében és sav hozzáadásával is.

Kis OH^- -koncentrációk (azaz kis pH esetén) a hidroxokomplexek keletkezése nem jelentős, ekkor a következő összefüggés írható fel:

$$S \approx [\text{Zn}^{2+}] = \frac{L}{[\text{OH}^-]^2} \Rightarrow \lg S \approx \lg \frac{L}{[\text{OH}^-]^2} = \lg L - \lg[\text{OH}^-]^2 = \lg L + 2 \cdot \text{pOH} = \lg L + 2 \cdot (\text{pK}_v - \text{pH}),$$

$$\lg S \approx -2 \cdot \text{pH} + \lg L + 2 \cdot \text{pK}_v.$$

Természetesen igen kis pH-nál az oldhatóságot már nemcsak a hidroxidionok koncentrációja, hanem az oldatban található egyéb ionok (pl. az oldat savanyításához alkalmazott kénsavból, sósavból stb. származó anionok) is befolyásolják.

Nagy OH^- -koncentráció (nagy pH) esetén az oldatban a négyes koordinációjú komplex koncentrációja a legjelentősebb:

$$S \approx [\text{Zn}(\text{OH})_4^{2-}] = \beta_4 \cdot [\text{Zn}^{2+}] \cdot [\text{OH}^-]^4 = \beta_4 \cdot \frac{L}{[\text{OH}^-]^2} \cdot [\text{OH}^-]^4 = \beta_4 \cdot L \cdot [\text{OH}^-]^2,$$

$$\lg S \approx \lg(\beta_4 \cdot L \cdot [\text{OH}^-]^2) = \lg(\beta_4 \cdot L) + \lg[\text{OH}^-]^2 = \lg(\beta_4 \cdot L) - 2 \cdot \text{pOH} = \lg(\beta_4 \cdot L) - 2 \cdot (\text{pK}_v - \text{pH}),$$

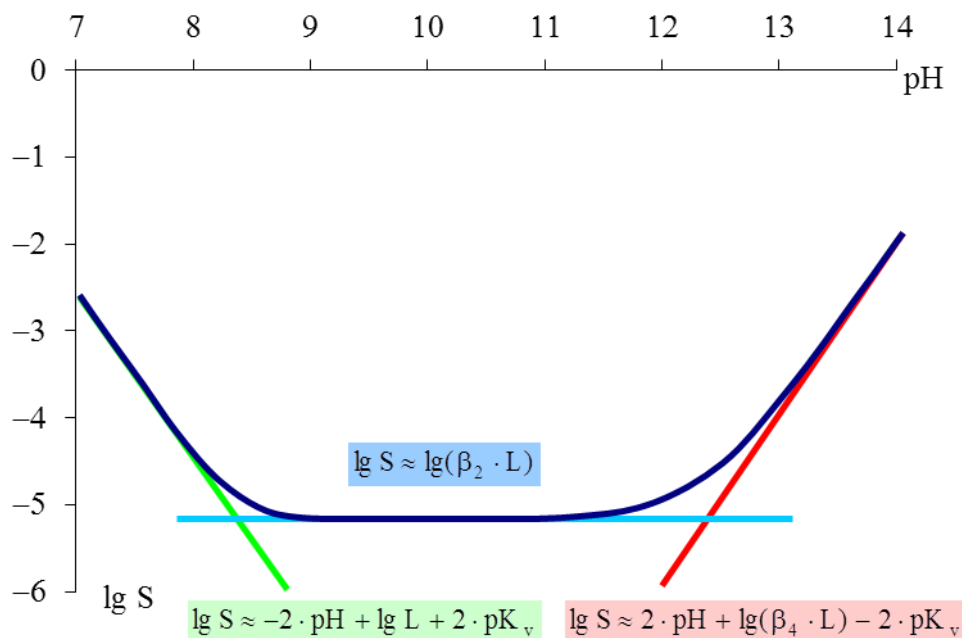
$$\lg S \approx 2 \cdot \text{pH} + \lg(\beta_4 \cdot L) - 2 \cdot \text{pK}_v.$$

Az oldhatóság a minimum környékén gyakorlatilag állandó, mely abból adódik, hogy az oldatban a hidratált $\text{Zn}(\text{OH})_2$ koncentrációja nem változik:

$$S \approx [\text{Zn}(\text{OH})_2] = \beta_2 \cdot [\text{Zn}^{2+}] \cdot [\text{OH}^-]^2 = \beta_2 \cdot \frac{L}{[\text{OH}^-]^2} \cdot [\text{OH}^-]^2 = \beta_2 \cdot L,$$

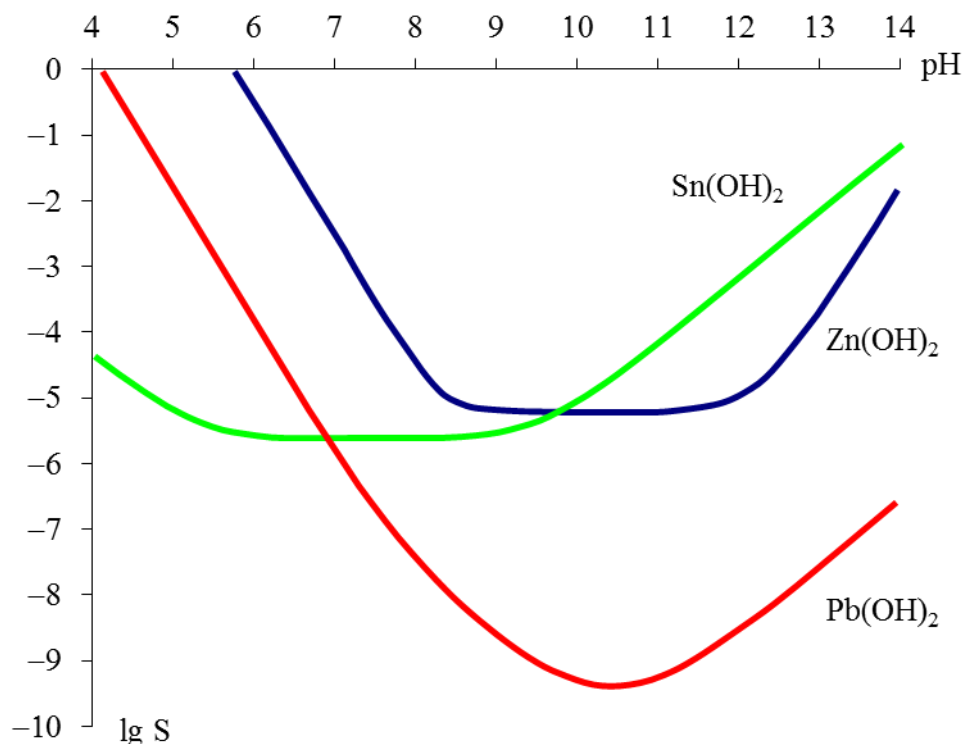
$$\lg S \approx \lg[\text{Zn}(\text{OH})_2] = \lg(\beta_2 \cdot L).$$

A különböző pH-knál megfigyelhető összefüggéseket szemléletli a következő ábra:



8.6.3.4.12. ábra: A $\text{Zn}(\text{OH})_2$ oldhatóságának logaritmusának pH függvényében

Ehhez hasonlóan más hidroxokomplekxképző fémionok hidroxidcsapadékainak oldhatósága is minimumgörbe. Az alábbi ábrán a $\text{Zn}(\text{OH})_2$, a $\text{Pb}(\text{OH})_2$ és a $\text{Sn}(\text{OH})_2$ csapadékok oldhatóságát tüntettük fel a pH függvényében:



8.6.3.4.13. ábra: A $Zn(OH)_2$, a $Pb(OH)_2$ és a $Sn(OH)_2$ csapadékok oldhatóságának logaritmusának a pH függvényében

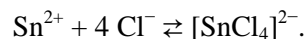
A diagram alapján megállapítható, hogy az ólom-hidroxid csapadék már nem túl savas pH-n is feloldható, ám a hidroxokomplexek kialakulásához igen nagy OH^- -koncentráció (és így nagy pH) szükséges.

Az $Sn(OH)_2$ feloldásához igen savas pH szükséges (még 4-es pH-n sem túl jó az oldhatóság), viszont lúgfelesleg hatására viszonylag könnyen feloldható.

Az ónsók (például $SnCl_2$, $SnCl_4$ stb.) rendszerint igen erősen hidrolizálnak vizes oldatukban, így feloldásukhoz valamilyen ásványi savat szokás alkalmazni. Ha az ón(II)-klorid-oldatot (melyet rendszerint $SnCl_2$ híg sósavban történő feloldásával készítenek, így pH-ja igen savas) nagy mennyiségű desztillált vízzel hígítjuk, akkor fehér zavarosodást vagy csapadékleválást figyelhetünk meg. A hígítás során a pH jelentősen növekszik, és mivel az $Sn(OH)_2$ oldhatósága igen rossz semleges pH környékén (lásd fenti diagramot), a hígítás következtében fehér színű $Sn(OH)_2$ csapadék válik ki az oldatból:



(Megjegyzés: a sósavnak két különböző hatása is van az ónsók oldhatóságára. Az egyik a hidrolízis visszaszorítása, a másik pedig, hogy az Sn^{2+} -ionok – és hasonlóan a Sn^{4+} -ionok – is klorokomplexet képeznek a sósavoldatban található kloridionokkal. Például egy lehetséges komplex:



A komplex koncentrációja, a komplexképződés mértéke természetesen függ az oldat szabad kloridion-koncentrációjától is. Ha az oldatot nagy mennyiségű desztillált vízzel hígítjuk, az oldatban jelentősen csökken a kloridion-koncentráció, mely a fenti egyensúlyt az alsó nyíl irányába tolja el, azaz a komplex disszociációjával Sn^{2+} -ionok keletkeznek. A viszonylag nagy OH^- -koncentráció következtében azonban az Sn^{2+} -ionok $Sn(OH)_2$ csapadékot hoznak létre. Az ón(II)-hidroxid és ón(IV)-hidroxid oldhatósági szorzata olyan kicsi, hogy már semleges, sőt enyhén savas is leválhat az megfelelő csapadék! Az ónionokhoz igen hasonlóan viselkednek az antimon és bizmut ionjai is: Sb^{3+} ,

Sb^{5+} és Bi^{3+} ezen ionokat tartalmazó oldatok semlegesítése–hígítása is hidrolízist és zavarosodást/ /csapadékkiválást eredményez.)

8.7. Megoszlási egyensúlyok

Vizsgáljuk meg a következő kísérletet! Az elemi jód vizes oldatához adjunk szén-tetrakloridot (CCl_4), rázzuk össze a két folyadékot, és várjuk meg, hogy a két folyadékfázis szétváljon! A szén-tetraklorid és a víz egymásban igen rosszul oldódik, gyakorlatilag nem elegyíthetőek. Ennek oka, hogy a szén-tetraklorid molekulája apoláris, a víz pedig poláris, így a „hasonló hasonlót old”-elv értelmében nem elegyednek. A jód vízben nem oldódik túl jól, ám a telített oldat világossárga színű. Szén-tetrakloridban az apoláris jód kiválóan oldódik, és az oldat ibolyaszínű. Ha a vizes jóddalhoz szén-tetrakloridot adunk, a jód jelentős része átmegy a szén-tetrakloridba, így a víz gyakorlatilag elszíntelenedik, a szén-tetraklorid pedig az oldott jódtól ibolyaszínűvé válik. Mivel a két folyadékfázis nem elegyedik egymással, ezek például egy választótölcsér segítségével szétválaszthatóak. Az előzőekben leírt folyamatot **folyadék–folyadék extrakciónak** vagy **kirázásnak** nevezzük.

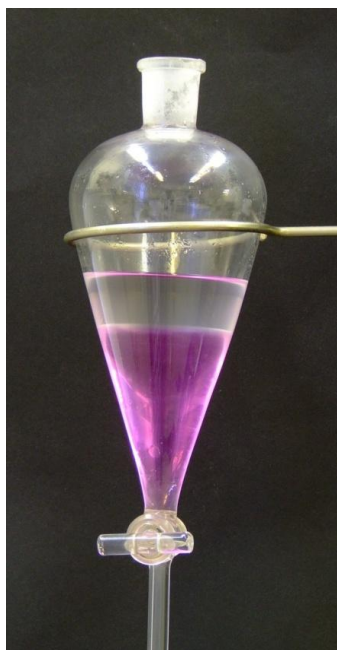


Extrakció előtt



Extrakció után

8.7.1. ábra: Vizes jóddal extrakciója szén-tetrakloriddal



8.7.2. ábra: A választótölcsér

Az extrakciós eljárás lehetőséget nyújt tisztításra és elválasztásra. Például ha egy szerves reakciót – a reagáló kiindulási anyagok miatt – vizes közegben kell végrehajtani, és a termék viszonylag apoláris, gyakran alkalmazhatunk extrakciót a termék kinyerésére. Ekkor keresnünk kell egy alkalmas extraháló oldószert, mely nem elegyedik a reakcióeleggyel (esetünkben vízzel), és a kinyerni kívánt terméket jól, míg az esetleges szennyező anyagokat rosszul oldja. A megfelelően kiválasztott oldószerral elvégezhető az extrakció, ekkor a termékünknek – a körülményektől függően – tiszta oldata keletkezik. Az oldatból már kinyerhető a kívánt termék tisztán például desztilláció vagy kristályosítás útján. Gyakran alkalmaznak extrakciót a kémiai reakcióban keletkező termék tisztítására a következőképpen is: ha egy apoláris oldószerben a számunkra értékes, apoláris molekulájú termék mellett keletkeznek polárisabb melléktermékek, szennyezők, ezeket eltávolíthatjuk valamilyen alkalmasan megválasztott poláris extrahálószer segítségével. Ekkor a polárisabb oldószerral (gyakran például víz) eltávolíthatjuk a szennyeződések, így szerencsés esetben, az apoláris oldószerben gyakorlatilag már csak a számunkra értékes apoláris termék marad, melyet ezután tisztán kinyerhetünk az oldatból.

Extrakciót nemcsak két folyadék közötti megoszlással tudunk végrehajtani, hanem ismerünk **szilárd–folyadék extrakciót** is. Ebben az esetben egy szilárd anyagból távolítunk el valamilyen anyagot egy oldószer segítségével (tulajdonképpen kioldásról van szó). Például a növények illóanyagait az egyes növényi részekből (például virág, gyökér, levél) gyakran extrakcióval nyerik ki.

A továbbiakban az oldott anyag két egymással nem elegyedő oldószer közötti megoszlásával foglalkozunk részletesebben.

Térjünk vissza a vizes jódoldat szén-tetrakloriddal történő extrakciójához. Különböző koncentrációjú vizes oldatokat extrahálunk, ám a két oldat térfogata minden esetben azonos. Elvégezzük a kirázást, majd meghatározzuk a vizes és a szén-tetrakloridos fázis jódtartalmát. A kapott mérési eredményeket az alábbi táblázat tartalmazza, melyben feltüntettük a két koncentráció hányadosát is:

$[I_2 \text{ (szén-tetraklorid)}]$ (mol/dm ³)	$[I_2 \text{ (víz)}]$ (mol/dm ³)	$\frac{[I_2 \text{ (szén - tetraklorid)}]}{[I_2 \text{ (víz)}]}$
$1,15 \cdot 10^{-2}$	$1,39 \cdot 10^{-4}$	82,7
$2,34 \cdot 10^{-2}$	$2,85 \cdot 10^{-4}$	82,1
$3,87 \cdot 10^{-2}$	$4,70 \cdot 10^{-4}$	82,3

A két koncentráció hányadosa állandónak tekinthető minden esetben:

$$\frac{[I_2 \text{ (szén - tetraklorid)}]}{[I_2 \text{ (víz)}]} = \text{állandó.}$$

Ezt az állandót megoszlási hányadosnak nevezzük, és D-vel (angol elnevetés: *distribution ratio*) vagy K-val jelöljük, mi a továbbiakban D-vel jelöljük. Tulajdonképpen felfogható úgy is, mint az alábbi **heterogén** folyamat egyensúlyi állandója:

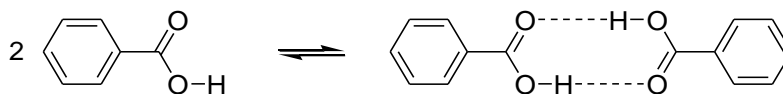


A megoszlási hányados függ – többek között – az oldott anyag és a két oldószer anyagi minőségétől és a hőmérséklettől is. A megoszlási folyamat a két folyadékot elválasztó határfelületen keresztül megy végbe, ezért heterogénnek tekinthető, és a folyamat egyensúlyra vezet (azaz a határfelületen időegység alatt átlépő részecskék száma a két irányban azonosra válik).

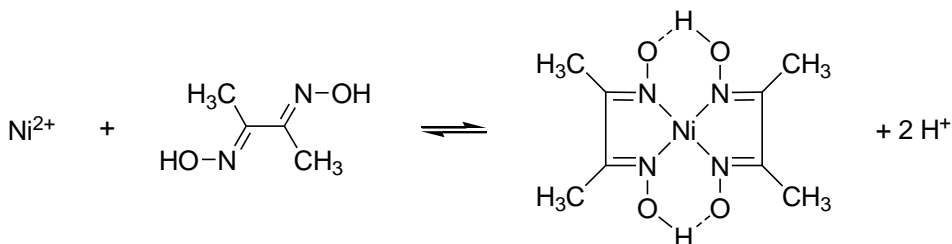
Az oldott anyag megoszlását a két fázis között – az anyagi minőségen túl – befolyásolja minden olyan folyamat, mely megváltoztatja bármely oldószerben az oldott anyag koncentrációját, így például:

- asszociációs folyamatok, például komplexképződés, dimerizáció stb.
- disszociációs folyamatok, különösen sav-bázis karakterű anyagok megoszlása esetén a pH, valamint a két oldat térfogata és a hőmérséklet.

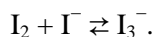
Asszociációs folyamatok felléphetnek például szerves savak esetén, például a benzoosav (és más gyenge savak) apoláris oldószerben (például benzolban) dimereket képeznek:



A szerves komplexképző ligandumok bizonyos átmentifémekkel komplexeket képezhetnek, melyek stabilitása hatással van a ligandum vagy a komplex extrakciós tulajdonságaira. Például a nikkeldimetil-glioxim csapadék vízben rosszul oldódik, apoláris oldószerrel extrahálható:



A jóddal vízes kálium-jodid-oldatban viszonylag jól oldódik, ezért a vízes oldat oldaláról alábbi reakció befolyásolja a megoszlási egyensúlyt:



A disszociációs folyamatok leggyakrabban sav-bázis egyensúlyhoz kapcsolódnak. Például ha egy gyenge savat szeretnénk átvinni a szerves fázisból a vízes fázisba, akkor érdemes lúgos pH-jú oldattal végezni az extrakciót (a gyenge bázisokat pedig savas oldattal célszerű extrahálni). A megoszlási hányadosban (egyensúlyi állandóban) csak a disszociálatlan forma van feltüntetve (mind a szerves fázis, mind a vízes fázis esetén). A lúgos pH hatására a sav jelentős része deprotonálódik, azaz a savmaradék anionná alakul (ennek mértéke az alkalmazott pH-tól és a sav disszociációs állandójától függ). Tehát a vízes fázisban a savnak minél nagyobb hányada van deprotonált formában, annál több tud átoldódni a szerves fázisból a vízes fázisba. Ezt a későbbiekben számításokkal is megvizsgáljuk majd.

8.101 példa:

A brómmal telített vízben az elemi bróm koncentrációja $0,211 \text{ mol/dm}^3$. A telített brómos vizet kloroformmal extraháljuk, a megoszlási hányados:

$$\frac{[\text{Br}_2(\text{kloroform})]}{[\text{Br}_2(\text{víz})]} = 38,9.$$

$100,0 \text{ cm}^3$ telített brómos vízhez $100,0 \text{ cm}^3$ tiszta kloroformot adunk, összerázzuk a két folyadékot és megvárjuk, hogy beálljon a megoszlási egyensúly. A kiindulási bróm hány százaléka marad a vízes oldatban? Hány %-ra csökken le az eredetihez képest a vízes oldat brómkoncentrációja, ha két külön lépésben $50,0$ – $50,0 \text{ cm}^3$ -nyi kloroformmal végezzük az extrakciót? És ha négyszer $25,0 \text{ cm}^3$ -rel?

Megoldás:

A bróm összanyagmennyisége: $n_0 = 0,1 \cdot 0,211 \text{ mol} = 0,0211 \text{ mol}$.

Az extrakció során a bróm egy része átmegy a kloroformba, a maradék viszont a vízben marad. Legyen a vízben maradó anyagmennyiség n . Ekkor felírható:

$$D = \frac{[\text{Br}_2(\text{kloroform})]}{[\text{Br}_2(\text{víz})]} = \frac{\frac{n_0 - n}{V_{\text{kloroform}}}}{\frac{n}{V_{\text{víz}}}} = \frac{n_0 - n}{n} \cdot \frac{V_{\text{víz}}}{V_{\text{kloroform}}} = \left(\frac{n_0}{n} - 1 \right) \cdot \frac{V_{\text{víz}}}{V_{\text{kloroform}}}$$

Ebből kifejezhető a vízben maradó bróm és a kiindulási bróm anyagmennyiségének aránya:

$$\frac{n}{n_0} = \frac{1}{D \cdot \frac{V_{\text{kloroform}}}{V_{\text{víz}}} + 1}$$

Behelyettesítve az értékeket:

$$\frac{n}{n_0} = \frac{1}{D \cdot \frac{V_{\text{kloroform}}}{V_{\text{víz}}} + 1} = \frac{1}{38,9 \cdot \frac{0,1 \text{ dm}^3}{0,1 \text{ dm}^3} + 1} = 0,02506$$

Tehát 1 : 1 arányú extrakció után a kiindulási brómmennyiség 2,51%-a marad a vízben.

Most vizsgáljuk meg, mi történik, ha két részletben extraháljuk a brómot! Ekkor azonban csak 50,00 cm³ kloroformot alkalmazunk mindkét lépésben. Az első lépésben a vízben maradó bróm anyagmennyisége legyen n₁:

$$\frac{n_1}{n_0} = \frac{1}{D \cdot \frac{V'_{\text{kloroform}}}{V_{\text{víz}}} + 1} = \frac{1}{38,9 \cdot \frac{0,05 \text{ dm}^3}{0,1 \text{ dm}^3} + 1} = 0,04890$$

Így a vízben maradó bróm anyagmennyisége: n₁ = 0,04890 · 0,0211 mol = 1,0318 · 10⁻³ mol.

A második lépésben a maradék brómot extraháljuk 50,00 cm³ kloroformmal, ekkor a maradék bróm anyagmennyisége: n₂.

$$\frac{n_2}{n_1} = \frac{1}{D \cdot \frac{V'_{\text{kloroform}}}{V_{\text{víz}}} + 1} = \frac{1}{38,9 \cdot \frac{0,05 \text{ dm}^3}{0,1 \text{ dm}^3} + 1} = 0,04890$$

Mivel n₁ = 1,0318 · 10⁻³ mol, n₂ = 0,04890 · 1,0318 · 10⁻³ mol = 5,045 · 10⁻⁵ mol. Ez azt jelenti, hogy a második extrakció után maradt és a kiindulási bróm-anyagmennyiség aránya:

$$\frac{5,045 \cdot 10^{-5} \text{ mol}}{0,0211 \text{ mol}} = 2,39 \cdot 10^{-3}$$

Tehát kétszeri – ám feleakkora térfogatú extrahálószerrel történő – extrakció esetén a brómnak csupán 0,239%-a marad a vizes fázisban.

Érdeemes megvizsgálni a fenti összefüggéseket!

$$\frac{n_1}{n_0} = \frac{1}{D \cdot \frac{V'_{\text{kloroform}}}{V_{\text{víz}}} + 1} = 0,04890 \quad \frac{n_2}{n_1} = \frac{1}{D \cdot \frac{V'_{\text{kloroform}}}{V_{\text{víz}}} + 1} = 0,04890$$

A két egyenletből:

$$\frac{n_2}{n_0} = \frac{n_2}{n_1} \cdot \frac{n_1}{n_0} = \frac{1}{D \cdot \frac{V'_{\text{kloroform}}}{V_{\text{víz}}} + 1} \cdot \frac{1}{D \cdot \frac{V'_{\text{kloroform}}}{V_{\text{víz}}} + 1} = \frac{1}{\left(D \cdot \frac{V'_{\text{kloroform}}}{V_{\text{víz}}} + 1 \right)^2}.$$

Érdeemes a két térfogat hányadosát egyetlen betűvel (k) jelölni:

$$k = D \cdot \frac{V'_{\text{kloroform}}}{V_{\text{víz}}}.$$

A fenti összefüggésből jól látszik, hogy a víz brómtartalma minden egyes kirázás esetén $(D \cdot k + 1)$ -ed részére csökken – természetesen, ha a térfogatarány állandó. Így ha n -szer végezzük az extrakciót, a víz brómtartalma:

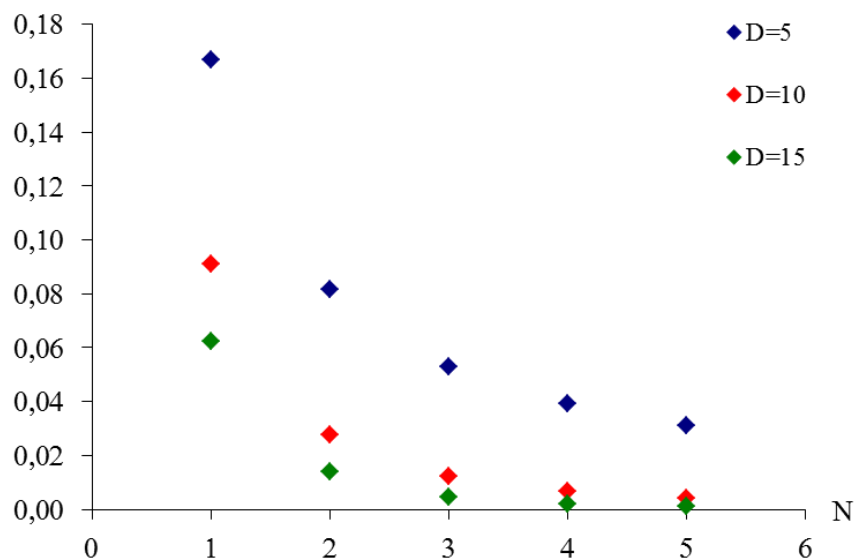
$$\frac{n_N}{n_0} = \frac{1}{(D \cdot k + 1)^N} = \frac{1}{\left(D \cdot \frac{V'_{\text{kloroform}}}{V_{\text{víz}}} + 1 \right)^N}.$$

Így ha egymás után $N = 4$ -szer extraháljuk a vizes fázist kloroformmal ($V''_{\text{kloroform}} = 25,0 \text{ cm}^3$), az oldat maradék brómtartalma (n_N):

$$\frac{n_N}{n_0} = \frac{1}{\left(D \cdot \frac{V''_{\text{kloroform}}}{V_{\text{víz}}} + 1 \right)^N} = \frac{1}{\left(38,9 \cdot \frac{0,025 \text{ dm}^3}{0,1 \text{ dm}^3} + 1 \right)^4} = 7,56 \cdot 10^{-5}.$$

Tehát egyszer $100,0 \text{ cm}^3$ kloroformmal extrahálva a bróm 2,51%-a marad a vizes fázisban, ha kétszer $50,0 \text{ cm}^3$ -rel extrahálunk, akkor csak 0,239%-a. Ha viszont 4-szer $25,0 \text{ cm}^3$ -nyi kloroformmal extrahálunk, a vizes oldat maradék brómtartalma a kiindulásinak csupán $7,56 \cdot 10^{-3}\%$ -a.

Az alábbi ábrán három különböző extrahálószerrel végzett N -szeres extrakció eredményeit láthatjuk. Minden esetben adott V_0 térfogatú extrahálandó oldatra V_0 térfogatú extrahálószer számítottunk, ám ez utóbbit N azonos térfogatú részletre osztjuk fel, és az N -szeres extrakciót V_0/N térfogatokkal végezzük. (Tehát $N = 1$ esetén egyszer extrahálunk V_0 térfogatú oldattal, $N = 2$ esetén kétszer extraháljuk az oldatot, mindkétyszer $V_0/2$ térfogatokkal.) A három különböző extrahálószer esetén a megoszlási hányadosok értéke 5, 10 és 15. A diagramon az extrahált oldat maradék oldottanyag-tartalmának (n) és a kiindulási oldottanyag-tartalomnak (n_0) az arányát mutatjuk be az extrakció ismétlésszámának függvényében.



8.7.3. ábra: A kiindulási oldottanyag-tartalom aránya az extrakció ismétlésszámának függvényében

Jól megfigyelhető, hogy egy adott térfogatú extrahálószerrel érdemes több egyenlő térfogatra felosztani, és ezekkel a térfogategységekkel több lépésben kinyerni az oldott anyagot, mivel a többszörös extrakció hatékonyabb (több anyagot tudunk vele kinyerni), mint az egyszeri extrakció. Érdemes megjegyezni, hogy minél nagyobb az oldott anyag megoszlási hányadosa az extrahálószer és a kiindulási oldószer között, annál több anyagot tudunk kinyerni egy adott lépésben. Tehát – amennyiben erre lehetőség van – olyan extrahálószerrel célszerű választani, mely esetén az anyag megoszlási hányadosa minél nagyobb.

8.102. példa:

Az aceton vízben és kloroformban is jól oldódik. $50,0 \text{ cm}^3$ vizes oldatban az aceton koncentrációja $5,000 \text{ mol/dm}^3$. Ehhez adunk $50,0 \text{ cm}^3$ kloroformot, és megvárjuk, hogy beálljon a megoszlási egyensúly. A fázisokat szétválasztjuk egymástól, és jodimetriásan meghatározzuk a vizes oldat acetontartalmát, mely $1,840 \text{ mol/dm}^3$ -nek adódik. Mekkora az aceton megoszlási hányadosa a két folyadék között? Egy ipari eljárásban $1,500 \text{ m}^3$ $5,000 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú acetonoldatot extrahálnak. Mekkora térfogatú kloroformmal távolítható el a víz acetontartalmának 90,0%-a? Mekkora azonos kloroform-térfogatokat kell alkalmazni ahhoz, hogy az extrakciót két, illetve tíz alkalommal elvégezve az aceton 90,0%-át el tudjuk távolítani a vízből? Melyik esetben kell a legkevesebb oldószerrel alkalmazni összességében?

Megoldás:

Először meg kell határoznunk az aceton megoszlási hányadosát! Az aceton összmenyisége $0,05 \cdot 5 \text{ mol} = 0,25 \text{ mol}$, melyből a vízben marad $0,05 \cdot 1,84 = 0,092 \text{ mol}$. Így a kloroformba átment aceton anyagmennyisége: $0,250 \text{ mol} - 0,092 \text{ mol} = 0,158 \text{ mol}$. A koncentráció a kloroformos fázisban:

$$c(\text{kloroform}) = \frac{0,158 \text{ mol}}{0,05 \text{ dm}^3} = 3,16 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}.$$

A megoszlási hányados:

$$D = \frac{c(\text{kloroform})}{c(\text{víz})} = \frac{3,16 \text{ mol/dm}^3}{1,84 \text{ mol/dm}^3} = 1,717.$$

Az ipari eljárásban az aceton összanyagmennyisége: $1500 \cdot 5 \text{ mol} = 7500 \text{ mol}$. Azt a kloroform térfogatot keressük, mely esetén az aceton 90%-a a kloroformba kerül (6750 mol), és csak 750 mol marad a vízben. Írjuk fel a megoszlási hányadost!

$$D = \frac{c(\text{kloroform})}{c(\text{víz})} = \frac{\frac{n(\text{kloroform})}{V_{\text{kloroform}}}}{\frac{n(\text{víz})}{V_{\text{víz}}}} = \frac{\frac{6750 \text{ mol}}{V_{\text{kloroform}}}}{\frac{750 \text{ mol}}{1500 \text{ dm}^3}} = 1,717$$

Az egyenletből $V_{\text{kloroform}} = 7863 \text{ dm}^3 = 7,863 \text{ m}^3$.

A kétszeres extrakció kiszámításához írjuk fel az első lépést:

$$D = \frac{c(\text{kloroform})}{c(\text{víz})} = \frac{\frac{n(\text{kloroform})}{V_{\text{kloroform}}}}{\frac{n(\text{víz})}{V_{\text{víz}}}} = \frac{\frac{n_0 - n}{V_{\text{kloroform}}}}{\frac{n}{V_{\text{víz}}}}$$

Érdemes kifejezni az összefüggésből a maradék aceton anyagmennyiségét a vizes fázisban:

$$n = \frac{n_0}{D \cdot \frac{V_{\text{kloroform}}}{V_{\text{víz}}} + 1}$$

Kétszeres extrakció után az eredeti acetonneménység 10%-a marad a vízben:

$$n = \frac{n_0}{\left(D \cdot \frac{V'_{\text{kloroform}}}{V_{\text{víz}}} + 1 \right)^2} = \frac{7500 \text{ mol}}{\left(1,717 \cdot \frac{V'_{\text{kloroform}}}{1500 \text{ dm}^3} + 1 \right)^2} = 750 \text{ mol.}$$

Az egyenlet megoldás: $V'_{\text{kloroform}} = 1889 \text{ dm}^3 = 1,889 \text{ m}^3$. Az alkalmazott kloroform össztérfogata a kétszeres extrakció esetén: $2 \cdot 1,889 \text{ m}^3 = 3,778 \text{ m}^3$.

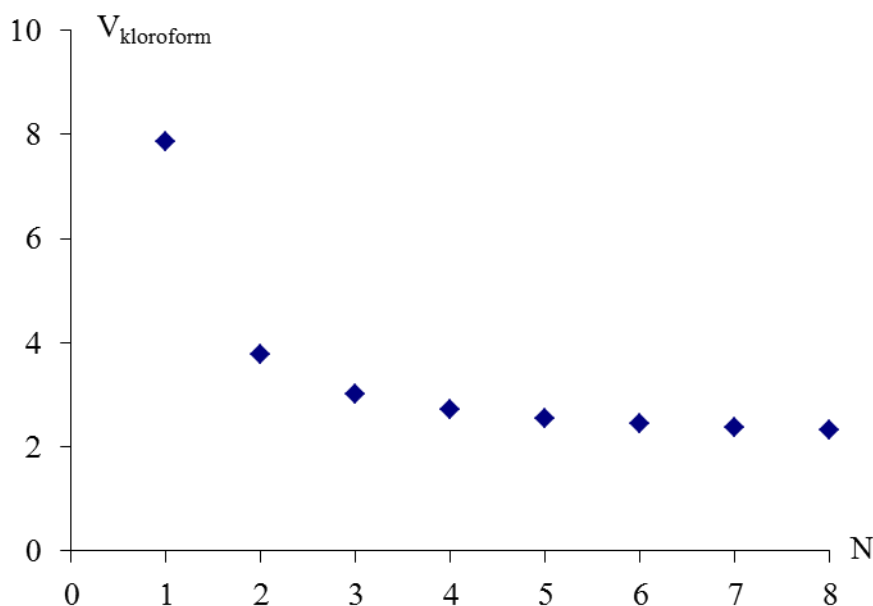
Hasonlóan tíz alkalommal történő extrakció esetén:

$$n = \frac{n_0}{\left(D \cdot \frac{V''_{\text{kloroform}}}{V_{\text{víz}}} + 1 \right)^{10}} = \frac{7500 \text{ mol}}{\left(1,717 \cdot \frac{V''_{\text{kloroform}}}{1500 \text{ dm}^3} + 1 \right)^{10}} = 750 \text{ mol.}$$

Megoldva az egyenletet: $V''_{\text{kloroform}} = 226 \text{ dm}^3 = 0,226 \text{ m}^3$. A szükséges kloroform össztérfogata a tízszeres extrakció esetén: $10 \cdot 0,226 \text{ m}^3 = 2,26 \text{ m}^3$.

Összefoglalva megállapítható, hogy ugyanazt az extraháló oldószermennyiséget több (egyenlő) részletben alkalmazva hatékonyabban nyerhető ki az értékes anyag az adott mennyiségű oldatból, illetve többszörös extrakciót alkalmazva a szükséges extraháló oldószer mennyisége az extrakció lépésszámával csökken.

A következő ábrán a szükséges extrahálószer össztérfogata van feltüntetve, ha $1,500 \text{ m}^3$ $5,000 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú vizes acetondatot extrahálunk kloroformmal. N az extrakció lépésszáma.



8.7.4. ábra: A szükséges extrahálószer össztérfogata az extrakció lépésszámának a függvényében

Érdeemes megfigyelni, hogy a szükséges össztérfogat az extrakció lépésszámával csökken, ám nem 0-hoz tart. Ha N nagyon nagy, azt jelenti, hogy nagyon kis térfogatú kloroform térfogatokkal végezzük az extrakciót. Ezt a folyamatot perforálásnak nevezzük, melynek során az extrahálószer (kloroform) apró cseppekben visszük az extrahálendő oldatba, míg a csepp keresztülhalad az extrahálendő oldaton, beáll a megoszlási egyensúly. A cseppeket ezután összegyűjtjük, és egyesítjük. A perforáláshoz szükséges a legkevesebb extrahálószer, ezért drága extrahálószeresek esetén célszerű alkalmazni. Bonyolultabb matematikai csatározás útján levezethető, hogy a perforációhoz szükséges (így minimális) térfogatmennyiség:

$$V_{\text{kloroform}} = \frac{V_{\text{víz}}}{D} \ln \frac{n_0}{n} = \frac{1,5 \text{ m}^3}{1,717} \ln \frac{7500 \text{ mol}}{750 \text{ mol}} = 2,01 \text{ m}^3.$$

Tehát $2,01 \text{ m}^3$ -nél kevesebb kloroformmal nem lehetséges eltávolítani az acetont 90%-át.

8.103. példa:

A fenol (rövidítve PhOH) egy gyenge sav, disszociációs állandója $1,00 \cdot 10^{-10}$. Az alábbiakban $500,0 \text{ cm}^3$ vizes pufferoldattal extrahálunk $500,0 \text{ cm}^3$ butil-acetátot, mely $0,400 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációban tartalmaz fenolt. A fenol hány százaléka nyerhető ki, ha 2,000-es, illetve 12,000-es pH-jú pufferrel extraháljuk a fenolt? A megoszlási hányados:

$$\frac{[\text{PhOH}]_{\text{butil-acetát}}}{[\text{PhOH}]_{\text{víz}}} = 50,0.$$

Megoldás:

A vizes fázisban a fenol két formában van jelen: disszociálatlan savként és disszociált formában, fenolát anionként. A kinyert fenolmennyiség a két forma összege (az alsó index azt jelöli, hogy a vizes fázisra vonatkozik az adott mennyiség):

$$n_{\text{víz}} = V_{\text{víz}} \cdot ([\text{PhOH}]_{\text{víz}} + [\text{PhO}^-]_{\text{víz}}).$$

A vizes fázisban a disszociált és disszociálatlan fenol koncentrációja között a savi disszociációs állandó teremt összefüggést (butil-acetátban nem disszociál a fenol):

$$K_s = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{PhO}^-]_{\text{víz}}}{[\text{PhOH}]_{\text{víz}}}$$

Mivel vizes pufferrel végezzük az extrakciót, a H^+ -ionok koncentrációja állandó, így disszociált és disszociálatlan forma koncentrációjának aránya állandó. Mivel az extrakció során az megoszlási hányados a disszociálatlan formákat tartalmazza, érdemes a fenolátion koncentrációját kifejezni:

$$[\text{PhO}^-]_{\text{víz}} = \frac{K_s}{[\text{H}^+]} \cdot [\text{PhOH}]_{\text{víz}}$$

Így kifejezhető a vízbe átoldódott fenol összmenyisége is ($[\text{PhO}^-]_{\text{víz}}$ helyére beírjuk a fenti kifejezést):

$$n_{\text{víz}} = V_{\text{víz}} \cdot ([\text{PhOH}]_{\text{víz}} + [\text{PhO}^-]_{\text{víz}}) = V_{\text{víz}} \cdot \left([\text{PhOH}]_{\text{víz}} + \frac{K_s}{[\text{H}^+]} \cdot [\text{PhOH}]_{\text{víz}} \right)$$

Kiemelve a vizes oldat fenolkoncentrációját ($[\text{PhOH}]_{\text{víz}}$):

$$n_{\text{víz}} = V_{\text{víz}} \cdot ([\text{PhOH}]_{\text{víz}} + \frac{K_s}{[\text{H}^+]} \cdot [\text{PhOH}]_{\text{víz}}) = V_{\text{víz}} \cdot [\text{PhOH}]_{\text{víz}} \cdot \left(1 + \frac{K_s}{[\text{H}^+]} \right)$$

$$[\text{PhOH}]_{\text{víz}} = \frac{n_{\text{víz}}}{V_{\text{víz}} \cdot \left(1 + \frac{K_s}{[\text{H}^+]} \right)}$$

A butil-acetátban a fenol kiindulási mennyisége: $n_0 = 0,5 \cdot 0,4 \text{ mol} = 0,2 \text{ mol}$. A butil-acetátban maradó fenol anyagmennyisége: $n_0 - n_{\text{víz}}$.

Behelyettesítve a megoszlási hányadosba:

$$D = \frac{[\text{PhOH}]_{\text{butil-acetát}}}{[\text{PhOH}]_{\text{víz}}} = \frac{\frac{n_0 - n_{\text{víz}}}{V_{\text{butil-acetát}}}}{\frac{n_{\text{víz}}}{V_{\text{víz}} \cdot \left(1 + \frac{K_s}{[\text{H}^+]} \right)}} = \frac{V_{\text{víz}}}{V_{\text{butil-acetát}}} \cdot \left(\frac{n_0}{n_{\text{víz}}} - 1 \right) \cdot \left(1 + \frac{K_s}{[\text{H}^+]} \right)$$

Fejezzük ki $n_{\text{víz}}$ értékét:

$$n_{\text{víz}} = \frac{n_0}{\frac{V_{\text{butil-acetát}}}{V_{\text{víz}}} \cdot \frac{D}{1 + \frac{K_s}{[\text{H}^+]}} + 1}$$

Helyettesítsük be a két különböző pH esetén a H^+ -ion-koncentrációt:

$$\text{pH} = 2,000 \Rightarrow [\text{H}^+] = 10^{-\text{pH}} = 10^{-2} \text{ mol/dm}^3,$$

$$n_{\text{víz}} = \frac{n_0}{\frac{V_{\text{butil-acetát}}}{V_{\text{víz}}} \cdot \frac{D}{1 + \frac{K_s}{[\text{H}^+]}} + 1} = \frac{0,2 \text{ mol}}{\frac{0,5 \text{ dm}^3}{0,5 \text{ dm}^3} \cdot \frac{50}{1 + \frac{10^{-10}}{10^{-2}}} + 1} = 3,92 \cdot 10^{-3} \text{ mol}$$

$$\text{pH} = 12,000 \Rightarrow [\text{H}^+] = 10^{-\text{pH}} = 10^{-12} \text{ mol/dm}^3$$

$$n_{\text{víz}} = \frac{n_0}{\frac{V_{\text{butil-acetát}}}{V_{\text{víz}}} \cdot \frac{D}{1 + \frac{K_s}{[\text{H}^+]}} + 1} = \frac{0,2 \text{ mol}}{\frac{0,5 \text{ dm}^3}{0,5 \text{ dm}^3} \cdot \frac{50}{1 + \frac{10^{-10}}{10^{-12}}} + 1} = 0,134 \text{ mol}$$

Tehát pH = 2,000 esetén $3,92 \cdot 10^{-3}$ mól (az összmennyiség 1,96%-a), míg pH = 12,000 esetén 0,134 mól (az összmennyiség 67,0%-a) fenol távolítható el a 0,2 mólnyi butil-acetátból.

8.104. példa:

Az előző példa alapján állapítsuk meg, hogy hányas pH-jú, 500,0 cm³ térfogatú puffert kell alkalmazni, hogy 500,0 cm³ 0,400 mol/dm³ koncentrációjú butil-acetátos fenololdatból a fenol 90,0%-át ki tudjuk nyerni egy lépésben? Mekkora térfogatú 2,000-es pH-jú pufferoldatra lenne szükség ugyanehhez?

Megoldás:

Alkalmazzuk a fentebb megismert képletet!

$$n_{\text{víz}} = \frac{n_0}{\frac{V_{\text{butil-acetát}}}{V_{\text{víz}}} \cdot \frac{D}{1 + \frac{K_s}{[\text{H}^+]}} + 1} = \frac{0,2 \text{ mol}}{\frac{0,5 \text{ dm}^3}{0,5 \text{ dm}^3} \cdot \frac{50}{1 + \frac{10^{-10}}{[\text{H}^+]}} + 1} = 0,02 \text{ mol}$$

Az egyenlet megoldása: $[\text{H}^+] = 8,696 \cdot 10^{-12} \text{ mol/dm}^3$, így pH = 11,06.

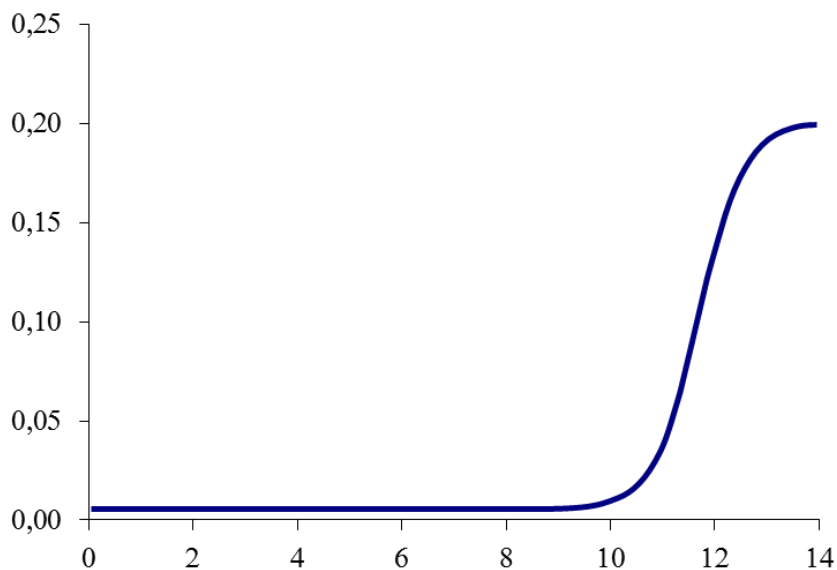
Legyen a 2,000-es pH-jú pufferoldat térfogata $V'_{\text{víz}}$! Helyettesítsük be az egyenletbe $[\text{H}^+] = 10^{-2} \text{ mol/dm}^3$ értékét!

$$n_{\text{víz}} = \frac{n_0}{\frac{V_{\text{butil-acetát}}}{V_{\text{víz}}} \cdot \frac{D}{1 + \frac{K_s}{[\text{H}^+]}} + 1} = \frac{0,2 \text{ mol}}{\frac{0,5 \text{ dm}^3}{V'_{\text{víz}}} \cdot \frac{50}{1 + \frac{10^{-10}}{10^{-2}}} + 1} = 0,02 \text{ mol}$$

Az egyenlet megoldása: $V'_{\text{víz}} = 2,778 \text{ dm}^3$.

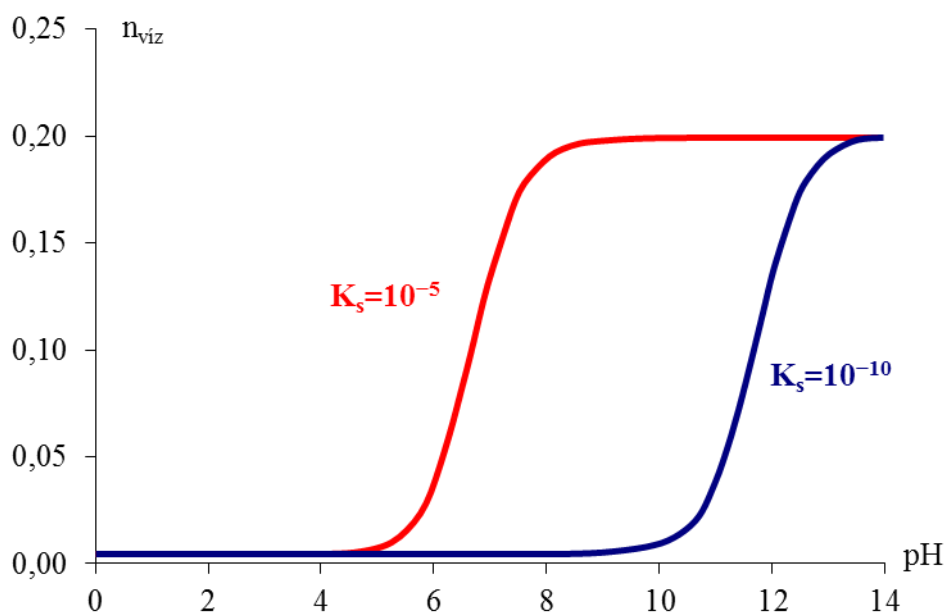
Tehát 0,500 dm³ 11,06-es pH-jú pufferoldattal kell végezni az extrakciót. Ha 2,000-es pH-jú pufferrel végezzük az extrakciót, akkor 2,778 dm³ pufferoldatra van szükség.

A fentiek alapján megállapítható, hogy a fenol extrakciója egy apoláris szerves oldószerből lúgos pH-n sokkal hatékonyabb, mint savas (vagy semleges) pH-n. Ezt a következő diagramon is jól megfigyelhetjük, melyen a vízbe átvitt fenol anyagmennyisége van feltüntetve különböző pH-n (minden esetben a vizes és a butil-acetátos oldat térfogatának aránya 1 : 1):



8.7.5. ábra: A vízbe átvitt fenol anyagmennyisége a pH függvényében

Lúgos pH-n a vizes fázisba átkerülő fenol deprotonálódik, így lecsökken az oldatban a disszociálatlan fenol koncentrációja, mely egyensúlyt tart a szerves fázisban található fenollal. Savas pH-jú puffer esetén a fenol gyakorlatilag nem disszociál, az extrakció során a szerves fázisból a vizes fázisba átkerülő fenolmennyiség gyakorlatilag független a pH-tól. Természetesen a sav disszociációs állandójától is függ, hogy milyen pH-n válik igazán hatékonyá az extrakció. A fenol igen gyenge sav, ezért igen lúgos pH-n extrahálható hatékonyan. Adott mennyiségű anyag átviteléhez egy erősebb sav esetén kisebb pH is elegendő.



8.7.6. ábra: Két különböző gyenge sav vízbe átvitt anyagmennyisége a pH függvényében

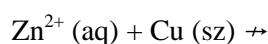
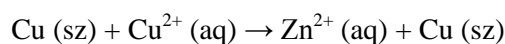
9. ELEKTROKÉMIA

9.1. Bevezetés

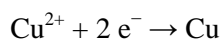
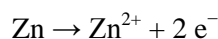
Az alábbi fejezetben azon jelenségeket tárgyaljuk, melyek az elektromos árammal, az elektromos munkavégzéssel kapcsolatosak. A fejezet egyes témakörei szorosan kapcsolódnak a redoxiegyenleteknél tanultakhoz, más részek pedig a kémiai egyensúlyok alapos ismeretére építenek.

A redoxifolyamatok elektrokémiai tárgyalása

Végezzük el a következő kísérleteket! Helyezzünk híg réz-szulfát-oldatba fém cinket, illetve cink-szulfát-oldatba fém rézet, és várjunk pár percet. A két kísérlet közül az egyikben változást tapasztalunk: a réz-szulfát-oldat kék színe elhalványodott, és a cink felületén vörös színű bevonat keletkezett, mely elemi réz, az oldat pedig cinkionokat tartalmaz (szulfát- és kis mennyiségű réz(II)ionok mellett). A másik kísérletben (mikor fém rézet helyezünk cink-szulfát-oldatba) viszont semmilyen szemmel látható változást nem tapasztalunk: sem az oldat színe, sem a fém kinézete nem változott. A fém réz változatlan maradt, és az oldat is csak cink-szulfátot tartalmaz. Ebből arra következtethetünk, hogy a cink és a rézionok között végbemegy kémiai reakció, míg elemi réz és cinkionok között nem:



A redoxireakció két alapfolyamatra bontható: az elemi cink oxidálódik cinkionná, míg a rézionok redukálódnak fém rézzé:

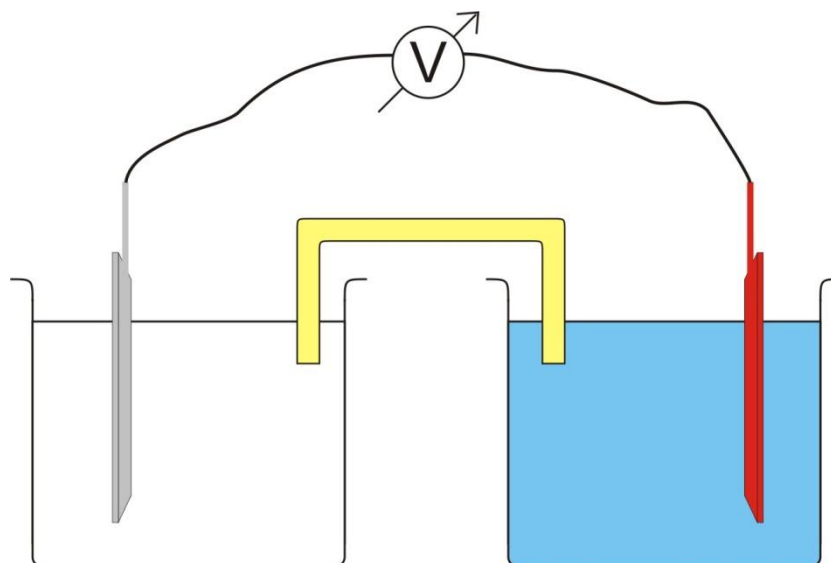


A folyamatban a cink elektronokat ad át a rézionoknak. Felmerülhet a kérdés, hogy térben elválasztható-e a két folyamat. Állítsuk össze a következő kísérleti berendezést! Két edénybe helyezzünk réz-szulfát-, illetve cink-szulfát-oldatot! Helyezzünk egy rézlemezt a réz-szulfát-oldatba, és egy cinklemezt a cink-szulfát-oldatba! A két fémeket kössük össze vezetékkel, melybe egy izzót is beleépítettünk. Az áramkör zárásához sóhidat is kell alkalmaznunk (lásd lentebb). Az áramkört zárva az izzó világítani kezd.

A cinkatomokból cinkionok keletkeznek, melyek az oldatba mennek, az elektronok pedig a vezetéken keresztül a rézhez „vándorolnak”, ahol az oldatban található rézionokat redukálják elemi rézzé. A cink fémlemez tömege csökken, a cink-szulfát-oldat cinktartalma (Zn^{2+}) pedig növekszik. A fém réz tömege növekszik, míg az réz-szulfát-oldat réztartalma pedig csökken. (Jó közelítéssel tulajdonképpen ugyanaz a folyamat vége, mint abban az esetben, ha egy cinkdarabot dobunk réz-szulfát-oldatba.)

Az így összeállított rendszert **galvánelemnek** nevezzük. A galvánelem két **elektród**ból áll: az elektród jelen esetben egy fém, mely saját sójának az oldatába merül. A sóoldatot **elektrolitnak** is nevezhetjük. Mint fentebb már szó volt róla, a két oldatot **sóhíddal** (vagy áramkulccsal) kell összekötni. Ennek magyarázata a következő: a fém cinkből pozitív töltésű ionok mennek a cink-szulfát-oldatba, a réz-szulfát-oldatból pedig eltávoznak kationok. Ha nem lenne kapcsolat a két oldat között, a cinkelektrod körüli oldat pozitív töltésűvé válna, míg a rézelektrod körüli oldat a megmaradó szulfátanionok következtében negatív töltésű lenne. A töltésegyensúlyt biztosítja a sóhíd, mely egy kiváló elektromos vezetőképeségű sóoldat (például KNO_3 - vagy KCl -oldat) egy megfelelő kialakítású edényben. A sóhídból anionok kerülnek a cinkelektrod körüli oldatba, kationok pedig a rézelektrod körüli oldatba. A sóhíd (áramkulcs) gyakran egy U-alakú cső, melynek két szarát porózus üveg

választja el a két elektrolittól (ennek szerepe, hogy ne keveredjen össze az elektrolit és az áramkulcs oldata).

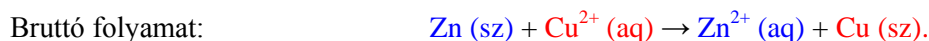


9.1.1. ábra: A galvánelem

Azt az elektródot, melyen **oxidáció** megy végbe, **anódnak** nevezzük, a **redukció** pedig a **katódon** megy végbe. Az egyes elektródokon végbemenő folyamatokat **félcella-reakcióknak** is szokás nevezni:



A **bruttó folyamat** a katód- és anódfolyamatból adódik:



A bruttó folyamat reakcióegyenletét megkapjuk, ha az anód- és katódfolyamatok egyenleteit olyan alakra hozzuk, hogy az átadott elektronok száma azonos legyen mindkettőben, és összeadjuk őket. (A fenti esetben nem kellett beszoroznunk az egyenleteket, mivel eleve azonos volt az átadott elektronok száma.)

A fenti galvánelem szokásos rövid jelölése:



Természetesen jelölhetjük az alábbi formában is:



A jelölés szerint az oldatokat két függőleges vonallal választjuk el, az elektródfém és az elektrolit közé pedig egy függőleges vonalat húzunk.

A konvenció szerint a bal oldalra írjuk az anódot, jobbra pedig a katódot.

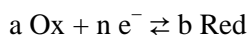
Az **elektromotoros erő** (rövidítve EME) a galvánelem igen fontos jellemzője: ez az árammentes állapotban mérhető feszültség a két elektród között. (Ha áram megy az elektródokon keresztül, a mért feszültség kisebb, mint az elektromotoros erő – lásd Matematikai és fizikai alapok fejezet. Az elektromotoros erő méréséhez ezért nagy külső ellenállást kell alkalmaznunk.)

Az elektromotoros erő felírható a két elektród **elektródpotenciáljának** (jele ε) különbségeként. Az elektromotoros erő mindig nemnegatív, azaz a pozitívabb elektródpotenciálból vonjuk ki a negatívabb elektródpotenciált.

Az elektródpotenciál önmagában nem mérhető, csak két elektródpotenciál különbségét, az elektromotoros erőt tudjuk mérni. Ebből következik, hogy célszerű választani egy „nullapontot”, azaz egy elektródot, melyhez az összes többi elektród potenciálját viszonyítjuk. Ezt az elektródot **standard buborékoló hidrogénelektroddnak** vagy **standard hidrogénelektroddnak** (rövidítve SHE) nevezzük, és elektródpotenciálját 0 V-nak tekintjük. A standard hidrogénelektrod egy platinaelektrod, melyre normál légköri nyomású (101 325 Pa) tiszta hidrogéngázt vezetünk és 0 pH-jú (egységnyi hidrogénion-koncentrációjú) oldatba merül, a hőmérséklet pedig 298,15 K (25 °C).

Ha szeretnénk meghatározni egy elektród potenciálját, akkor ebből az elektródból és a standard hidrogénelektrodból összeállítható egy galvánelem, melynek az elektromotoros erejéből megkapjuk a kérdéses elektródpotenciált. Természetesen azt is tisztázni kell, hogy melyik elektród az anód és melyik a katód, mivel a vizsgált elektród potenciálja lehet negatívabb vagy pozitívabb a standard hidrogénelektrodéhoz képest. Amennyiben a vizsgált elektródon oxidáció megy végbe, és a standard hidrogénelektrodon történik a redukció, a kérdéses elektród potenciálja negatív előjelű, míg ellenkező esetben (ha a SHE-on oxidáció történik) pedig pozitív. Tehát eljutottunk az elektródpotenciál (ε) definíciójához: a standard hidrogénelektroddhoz ($\varepsilon = 0$ V) viszonyított potenciál. (Megjegyzés: a gyakorlatban nem szükséges standard hidrogénelektrodot alkalmazni referenciaelektroddnak, hanem helyette használható bármilyen elektród, melynek ismerjük a potenciálját. Erről a későbbiek során lesz még szó.)

Az elektródpotenciálhoz tartozó elektródreakciót a konvenció szerint a **redukció irányában írjuk fel**, azaz redukciós potenciálról beszélünk. Ez elektródreakció egy általános esetben (Ox: az oxidált[abb] forma, Red: a redukált[abb] forma, n: az átadott elektronok száma):



Megjegyzés: az oxidált és a redukált forma közül rendszerint legalább az egyik töltéssel rendelkezik, sőt gyakran vizes oldatokban a vízből származó ionok (hidrogénionok és hidroxidionok) valamelyike is szerepel az egyenletben. Itt az egyszerűség kedvéért nem jelöltük a részecskék töltését.

Ha két tetszőleges elektródból egy galvánelemet állítunk össze, akkor a nagyobb elektródpotenciállal rendelkező elektródon redukció, a kisebb elektródpotenciállal rendelkező elektródon pedig oxidáció megy végbe.

	Kisebb elektród-potenciálú elektród	Nagyobb elektród-potenciálú elektród
Az elektródon végbemenő folyamat	Oxidáció	Redukció
Az elektród megnevezése	Anód	Katód

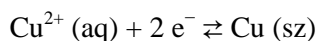
Az elektródpotenciál függ:

- az elektród és az elektrolit anyagi minőségétől,
- az elektrolitoldat összetételétől (moláris koncentrációktól),
- gázelektrodok esetén a gáz parciális nyomásától,
- a hőmérséklettől.

Standard elektródpotenciálról (ε°) beszélünk, ha az alábbi feltételek mindegyik teljesül:

- az elektrolitban minden, az elektródreakcióban szereplő komponens koncentrációja egységnyi (1 mol/dm³),
- a szilárd komponensek tiszták,
- ha gáz halmazállapotú anyagok is részt vesznek az elektródreakcióban, akkor ezek parciális nyomása megegyezik a normál légköri nyomással (101 325 Pa),
- a hőmérséklet 298,15 K (25 °C).

Például az alábbi elektród esetén:

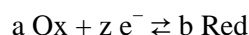


a standard elektródpotenciált mérjük, ha tiszta rezet egy réz(II)-só oldatába merítjük, melyben a Cu^{2+} -ionok koncentrációja 1 mol/dm^3 .

Tehát egységnyi koncentrációkat, illetve gázok esetén normál légköri nyomást alkalmazva meghatározható az egyes redoxirendszerek standard potenciálja.

9.2. Az elektródpotenciál függése a hőmérséklettől, koncentrációtól és nyomástól

Mint fentebb láttuk, az elektródpotenciál függ az oldatban található ionok koncentrációjától, gázelektrodok esetén a gáz(ok) parciális nyomásától. Az alábbi általános reakcióegyenlettel jellemezhető folyamat esetén az elektródpotenciál koncentrációfüggését és hőmérsékletfüggését a **Nernst-egyenlet** (szokás Nernst–Peters-egyenletnek is nevezni) írja le:



$$\varepsilon = \varepsilon^{\circ} + \frac{R \cdot T}{z \cdot F} \ln \frac{[\text{Ox}]^a}{[\text{Red}]^b}$$

Ahol

ε° a standard elektródpotenciál,

R az egyetemes gázállandó [$8,314 \text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$],

T az abszolút hőmérséklet (K),

z a redoxireakcióban átadott elektronok száma (az oxidált és redukált forma közötti elektronszám-különbség),

F a Faraday-állandó, melynek értéke $96\,485 \text{ C/mol}$ (lásd később).

[Ox] az oxidált forma koncentrációja (mol/dm^3),

[Red] pedig a redukált forma koncentrációja (mol/dm^3).

A Nernst-egyenletből megállapítható, hogyha a hőmérséklet nem tér el jelentősen $25 \text{ }^{\circ}\text{C}$ -tól, az elektródpotenciál hőmérsékletfüggése nem túl jelentős. Ezzel ellentétben a koncentrációfüggés rendszerint sokkal jelentősebb. $25 \text{ }^{\circ}\text{C}$ hőmérsékleten a Nernst-egyenletet érdemes az alábbi formára hozni:

$$\varepsilon = \varepsilon^{\circ} + \frac{R \cdot T}{z \cdot F} \ln \frac{[\text{Ox}]^a}{[\text{Red}]^b} = \varepsilon^{\circ} + \frac{8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 298,15 \text{ K}}{z \cdot 96\,485 \frac{\text{C}}{\text{mol}}} \cdot \frac{\lg \frac{[\text{Ox}]^a}{[\text{Red}]^b}}{\lg e} = \varepsilon^{\circ} + \frac{0,0591 \text{ V}}{z} \lg \frac{[\text{Ox}]^a}{[\text{Red}]^b} .$$

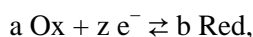
Figyelem! Az így kapott egyenletben már nem természetes alapú, hanem 10-es alapú logaritmus szerepel!

Jól megfigyelhető, hogy az oxidált forma koncentrációját növelve (és a redukált forma koncentrációját állandó értéken tartva) növekszik az elektródpotenciál, ezzel ellentétben a redukált forma koncentrációját növelve (és az oxidált forma koncentrációját állandó értéken tartva) az elektródpotenciál csökken.

Megjegyzés: a Nernst-egyenletben tulajdonképpen a fenti egyensúlyi reakció egyensúlyi állandója szerepel:

$$\varepsilon = \varepsilon^\circ + \frac{R \cdot T}{z \cdot F} \ln \frac{[\text{Ox}]^a}{[\text{Red}]^b} = \varepsilon^\circ - \frac{R \cdot T}{z \cdot F} \ln \frac{[\text{Red}]^b}{[\text{Ox}]^a} = \varepsilon^\circ - \frac{R \cdot T}{z \cdot F} \ln K.$$

Az egyenletben szereplő K az alábbi folyamathoz tartozó egyensúlyi állandó:



$$K = \frac{[\text{Red}]^b}{[\text{Ox}]^a}.$$

Érdemes azt is megemlíteni, hogy a Nernst-egyenlet – noha elméleti úton is igazolható – a gyakorlatban nem alkalmazható bármilyen koncentrációjú oldat esetén. Ha az oldat koncentrációja igen kicsi (például adott elektródok esetén 10^{-10} mol/dm³-nél kisebb koncentrációk esetén), az egyenlet segítségével számított eredmények jelentősen eltérhetnek a mért értékektől. Nagyobb koncentrációk (például 0,1–1 mol/dm³ vagy nagyobb koncentrációk) esetén koncentrációk helyett aktivitásokat kell az egyenletbe behelyettesíteni. Az aktivitás olyan koncentráció jellegű (koncentráció dimenziójú) mennyiség, mellyel az ideális oldatokat leíró törvényszerűségek az ideálistól eltérő viselkedésű oldatokban is érvényben maradnak. Az aktivitás és a moláris koncentráció (molaritás) között az aktivitási koefficiens (γ) teremt kapcsolatot:

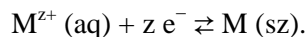
$$a = \gamma \cdot c.$$

Tulajdonképpen a koncentrációk helyett mindig aktivitásokat kellene alkalmaznunk, ám nem túl tömény oldatok esetén az aktivitás rendszerint igen jól egyezik a moláris koncentrációval, azaz az aktivitási koefficiens értéke 1 körüli, tehát nem követünk el nagy hibát, ha az aktivitások helyett molaritásokat alkalmazunk. Töményebb oldatok esetén azonban aktivitásokat kell használni. Az aktivitás vagy aktivitási koefficiens kísérleti úton meghatározható, ám számítása meglehetősen bonyolult és nem is túl pontos. Ezért a továbbiakban töményebb oldatok leírásával nem foglalkozunk, a feladatokban a molaritást alkalmazzuk aktivitás helyett.

A továbbiakban a különböző típusú elektródok potenciáljának koncentrációfüggését mutatjuk be:

1.) Elsőfajú fémelektródok

A fémelektródok egyik példája a fent említett réz- és cinkelektródok: egy fém merül saját sójának oldatába. A fémelektródok reakciójának általános formája (M^{z+} az oldatban található fémiont, M pedig a fémet jelöli, z a fémion töltése):



Mint látható, az elektródreakcióban a fém is szerepel, ám ez kondenzált fázisban (azaz nem az oldatban található), mely tiszta fémek esetén természetesen állandó érték, ezért nem szerepel az elektródpotenciál képletében.

$$\varepsilon = \varepsilon^\circ + \frac{R \cdot T}{z \cdot F} \ln [M^{z+}]$$

Vagy 25 °C hőmérsékleten:

$$\varepsilon = \varepsilon^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{z} \lg [M^{z+}].$$

Tehát az elsőfajú fémelektrod potenciálja alapvetően a fém anyagi minőségétől (beleértve az oxidációs számát) és a fémion oldatbeli koncentrációjától függ (és természetesen a hőmérséklettől).

9.1. példa:

Számítsuk ki a $0,0500 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú réz(II)-szulfát-oldatba merülő fém réz elektrodpotenciálját 25°C -on!

$$\varepsilon^\circ(\text{Cu}^{2+}/\text{Cu}) = +0,342 \text{ V.}$$

Megoldás:

Közvetlenül behelyettesíthetünk a Nernst-egyenletbe:

$$\varepsilon = \varepsilon^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{2} \lg[\text{Cu}^{2+}] = +0,342 \text{ V} + \frac{0,0591\text{V}}{2} \lg 0,0500 = +0,304 \text{ V.}$$

Tehát az elektrod potenciálja $+0,304 \text{ V}$.

9.2. példa:

Állapítsuk meg azon krómelektrod elektrodpotenciálját 25°C -on, mely $3,00$ tömeg%-os és $1,004 \text{ g/cm}^3$ sűrűségű $\text{Cr}_2(\text{SO}_4)_3$ -oldatba merül!

$$\varepsilon^\circ(\text{Cr}^{3+}/\text{Cr}) = -0,744 \text{ V, } M(\text{Cr}_2(\text{SO}_4)_3) = 392 \text{ g/mol.}$$

Megoldás:

$1,000 \text{ dm}^3$ (azaz 1004 g) oldatban van $0,0300 \cdot 1004 \text{ g} = 30,12 \text{ g}$ $\text{Cr}_2(\text{SO}_4)_3$, melynek anyagmennyisége:

$$n = \frac{m}{M} = \frac{30,12 \text{ g}}{392 \text{ g/mol}} = 0,0768 \text{ mol,}$$

így az oldatban a Cr^{3+} -ionok moláris koncentrációja:

$$[\text{Cr}^{3+}] = \frac{2 \cdot n}{V} = \frac{2 \cdot 0,0768 \text{ mol}}{1,000 \text{ dm}^3} = 0,1536 \text{ mol/dm}^3.$$

(Ne feledkezzünk meg arról, hogy a króm(III)-szulfát 1 mólja két mól króm(III)iont tartalmaz!)

$$\varepsilon = \varepsilon^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{3} \lg[\text{Cr}^{3+}] = -0,710 \text{ V} + \frac{0,0591\text{V}}{3} \lg 0,1536 = -0,726 \text{ V.}$$

Tehát a krómelektrod potenciálja $-0,726 \text{ V}$.

9.3. példa:

Állapítsa meg azon ólom elektrod elektrodpotenciálját 25°C -on, mely $\text{Pb}_3(\text{PO}_4)_2$ -ra telített vizes oldatba merül. $L[(\text{Pb}_3(\text{PO}_4)_2)] = 6,80 \cdot 10^{-13}$, $\varepsilon^\circ(\text{Pb}^{2+}/\text{Pb}) = -0,126 \text{ V}$.

Megoldás:

Számítsuk ki az oldhatóságot az oldhatósági szorzatból!

$$L = (3 \cdot S)^2 \cdot (2S)^2 = 108 \cdot S^5 \Rightarrow S = \sqrt[5]{\frac{L}{108}} = 1,445 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3$$

Az oldhatóságból kiszámítható az Pb^{2+} -ionok koncentrációja:

$$[\text{Pb}^{2+}] = 3 \cdot S = 3 \cdot 1,445 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3 = 4,335 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3$$

Az Pb^{2+} -koncentráció segítségével az elektródpotenciál:

$$\varepsilon = \varepsilon^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{2} \lg[\text{Pb}^{2+}] = -0,126\text{V} + \frac{0,0591\text{V}}{2} \lg(4,335 \cdot 10^{-3}) = -0,196\text{V}.$$

Tehát az ólomelektrod potenciálja -0,196 V.

9.4. példa:

Mekkora a $\text{Ni}(\text{OH})_2$ -ra nézve telített, 9,00 pH-jú pufferoldatba merülő fém nikkelelektrod potenciálja? $L[\text{Ni}(\text{OH})_2] = 5,48 \cdot 10^{-16}$, $\varepsilon^\circ(\text{Ni}^{2+}/\text{Ni}) = -0,257\text{V}$.

Megoldás:

Számítsuk ki az oldat OH^- -ion-koncentrációját!

$$[\text{OH}^-] = 10^{-\text{pOH}} = 10^{-(\text{pK}_v - \text{pH})} = 10^{-(14-5)} = 1,00 \cdot 10^{-5} \text{ mol/dm}^3$$

A nikkelionok koncentrációja:

$$[\text{Ni}^{2+}] = \frac{L}{[\text{OH}^-]^2} = \frac{5,48 \cdot 10^{-16}}{(1,00 \cdot 10^{-5})^2} = 5,48 \cdot 10^{-6} \text{ mol/dm}^3$$

A Nernst-egyenlet segítségével az elektródpotenciál:

$$\varepsilon = \varepsilon^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{2} \lg[\text{Ni}^{2+}] = -0,257\text{V} + \frac{0,0591\text{V}}{2} \lg(5,48 \cdot 10^{-6}) = -0,412\text{V}.$$

Tehát a nikkelelektrod potenciálja -0,412 V.

2.) Másodfajú fémelektrodok

Másodfajú fémelektrodról beszélünk, ha a fémet egy rosszul oldódó sója és ennek telített oldata veszi körül. Például a fém ezüst elektródot ezüst-kloriddal vonjuk be, és ezt egy adott koncentrációjú kloridoldatba merítjük, akkor a kloridion-koncentráció függvényében az oldatba kerülnek ezüstionok is. A kloridionok és az ezüstionok koncentrációja között az oldhatósági szorzat teremt összefüggést:

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

melyből az ezüstionok koncentrációja:

$$[\text{Ag}^+] = \frac{L}{[\text{Cl}^-]}.$$

Helyettesítsük be a kapott összefüggést az ezüstelektrod potenciáljának Nernst-egyenletébe!

$$\varepsilon = \varepsilon^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{z} \lg[\text{Ag}^+] = \varepsilon^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{z} \lg \frac{L}{[\text{Cl}^-]} = \varepsilon^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{z} (\lg L - \lg[\text{Cl}^-])$$

Továbbalakítva:

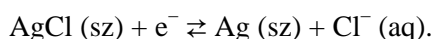
$$\varepsilon = \varepsilon^\circ(\text{Ag}^+ / \text{Ag}) + \frac{0,0591\text{V}}{z} (\lg L - \lg[\text{Cl}^-]) = \varepsilon^\circ(\text{Ag}^+ / \text{Ag}) + \frac{0,0591\text{V}}{z} \lg L - \frac{0,0591\text{V}}{z} \lg[\text{Cl}^-].$$

Mint látható, az elektródpotenciál alapvetően a kloridion-koncentráció függvénye. Tehát a másodfajú elektród nem a fémionra, hanem – közvetett módon – az anionkoncentráció függvénye. A másodfajú fémelektrodok egy igen fontos alkalmazási területe, hogy referenciaelektrodként alkalmazhatóak, ha az anion koncentrációja kellően nagy. (A jó referenciaelektrod feltétele, hogy potenciálja legyen állandó. Ha az anion koncentrációja elég nagy, a végbemenő elektródfolyamatok nem okoznak jelentős változást a koncentrációban, így az elektród potenciálja állandónak tekinthető.) Gyakorlati szempontból fontos az ezüst-kloriddal bevont ezüstelektrod (Ag/AgCl-elektrod) és a kalomel-elektrod, mely elemi higanyt és higany(I)-kloridot (Hg_2Cl_2) tartalmaz. Az elektrolitok rendszerint adott, viszonylag nagy kloridion-koncentrációjú oldatok (például 3 mol/dm^3 koncentrációjú NaCl-oldat vagy telített KCl-oldat), így az elektród potenciálja időben állandónak tekinthető.

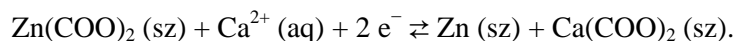
A fenti kifejezésben az $\lg L$ -t tartalmazó tagot – mivel adott hőmérsékleten állandónak tekinthető – gyakran „beleolvasztják” az elektródpotenciál értékébe, így a körülményekre jellemző **formálpotenciál**hoz juthatunk:

$$\varepsilon = \varepsilon^\circ(\text{Ag}^+ / \text{Ag}) + \frac{0,0591\text{V}}{z} \lg L - \frac{0,0591\text{V}}{z} \lg[\text{Cl}^-] = \varepsilon(\text{AgCl} / \text{Ag}) - \frac{0,0591\text{V}}{z} \lg[\text{Cl}^-].$$

A formálpotenciál tulajdonképpen a következő elektródreakcióhoz tartozik:



Megjegyzés: másodfajú elektródokhoz hasonlóan ismerünk harmadfajú elektródokat is, ezek kétféle vízben rosszul oldódó csapadékot tartalmaznak. Például ha fém cinket cink-oxalát és kalcium-oxalát keverékével vonjuk be, harmadfajú elektródot kapunk. Az elektrolit telített mindkét rosszul oldódó sóra, és az oxalationokon keresztül az elektród potenciálját a kalciumionok koncentrációja határozza meg. Az elektródreakció egyenlete:



9.5. példa:

Az $1,00 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú NaF-oldatba merített, ólom-fluoriddal bevont ólomelektrod potenciálja $-0,347 \text{ V}$. Mekkora az ólom-fluorid oldhatósági szorzata? $\varepsilon^\circ(\text{Pb}^{2+}/\text{Pb}) = -0,126 \text{ V}$.

Megoldás:

Az oldat feltehetően telített ólom-fluoridra. Írjuk fel a Nernst-egyenletet, melyből meghatározható az oldat Pb^{2+} -ion-koncentrációja:

$$\varepsilon = \varepsilon^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{2} \lg[\text{Pb}^{2+}] = -0,126 \text{ V} + \frac{0,0591\text{V}}{2} \lg[\text{Pb}^{2+}] = -0,347 \text{ V}.$$

Az egyenletet megoldva az ólom(II)ionok koncentrációja:

$$[\text{Pb}^{2+}] = 3,32 \cdot 10^{-8} \text{ mol/dm}^3.$$

Az oldatban a fluoridionok koncentrációja $1,00 \text{ mol/dm}^3$ (az ólom-fluoriddal beoldódott fluoridionok koncentrációja – mely 10^{-8} mol/dm^3 nagyságrendű – emellett elhanyagolható) így az ólom-fluorid oldhatósági szorzata:

$$L(\text{PbF}_2) = [\text{Pb}^{2+}] \cdot [\text{F}^-]^2 = (3,32 \cdot 10^{-8}) \cdot (1,00)^2 = 3,32 \cdot 10^{-8}.$$

Az ólom-fluorid oldhatósági szorzata $3,32 \cdot 10^{-8}$.

3.) Redoxielektrodok

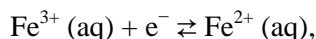
Egyszerűbb redoxielektrodok

A redoxielektrodok rendszerint valamilyen *inert fém*ből (például platina) és az azt körülvevő oldatból állnak, az oxidált és a redukált forma is az oldatban található.

A különbségek egy „klasszikus” redoxielektrod és egy „klasszikus” elsőfajú fémelektrod között:

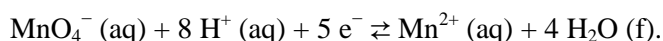
- a redoxielektrodnál egy inert fém merül az oldatba, mely nem vesz részt a félcellareakcióban.
- a redoxielektrodnál mind az oxidált forma, mind a redukált forma az oldatban található.

Például ha Fe^{2+} - és Fe^{3+} -ionokat tartalmazó oldatba fém platinát helyezünk, az alábbi félcellareakcióhoz tartozó elektródot kapunk:



$$\varepsilon = \varepsilon^{\circ}(\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}) + \frac{0,0591\text{V}}{1} \cdot \lg \frac{[\text{Fe}^{3+}]}{[\text{Fe}^{2+}]} = \varepsilon^{\circ}(\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}) + (0,0591\text{V}) \cdot \lg \frac{[\text{Fe}^{3+}]}{[\text{Fe}^{2+}]}.$$

A redoxielektrodok egy speciális csoportját alkotják a **pH-függő elektródok**. Ezen elektródok esetén hidrogén- vagy hidroxidionok is szerepelnek a félcellaeqyenletben. A Nernst-egyenletbe természetesen ezen ionokat is bele kell írunk. Például permanganátionok redukációjával savas közegben mangán(II)ionok keletkeznek:



Ekkor az elektródreakcióhoz tartozó Nernst-egyenlet:

$$\varepsilon = \varepsilon^{\circ}(\text{MnO}_4^{-}/\text{Mn}^{2+}) + \frac{0,0591\text{V}}{5} \cdot \lg \frac{[\text{MnO}_4^{-}] \cdot [\text{H}^{+}]^8}{[\text{Mn}^{2+}]}.$$

Figyelem! A permanganátionok melletti hidrogénionokat is be kell írni a Nernst-egyenletbe, méghozzá a 8-adik hatványon a tört számlálójába! Mivel a víz mint oldószer is jelen van, koncentrációja igen nagy, és gyakorlatilag nem befolyásolja az egyensúlyt, ezért nem írjuk bele a Nernst-egyenletbe (hasonlóan a korábbi egyensúlyokhoz, például mint a vízionoszorozatnál).

Az alábbi átalakítással megmutatható a pH-függés (lásd logaritmusazonosságok):

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \varepsilon^{\circ}(\text{MnO}_4^{-}/\text{Mn}^{2+}) + \frac{0,0591\text{V}}{5} \cdot \lg \frac{[\text{MnO}_4^{-}] \cdot [\text{H}^{+}]^8}{[\text{Mn}^{2+}]} = \\ &= \varepsilon^{\circ}(\text{MnO}_4^{-}/\text{Mn}^{2+}) + \frac{0,0591\text{V}}{5} \cdot \lg \frac{[\text{MnO}_4^{-}]}{[\text{Mn}^{2+}]} + \frac{0,0591\text{V}}{5} \cdot \lg [\text{H}^{+}]^8 = \\ &= \varepsilon^{\circ}(\text{MnO}_4^{-}/\text{Mn}^{2+}) + \frac{0,0591\text{V}}{5} \cdot \lg \frac{[\text{MnO}_4^{-}]}{[\text{Mn}^{2+}]} + \frac{8 \cdot 0,0591\text{V}}{5} \cdot \lg [\text{H}^{+}] = \\ &= \varepsilon^{\circ}(\text{MnO}_4^{-}/\text{Mn}^{2+}) + \frac{0,0591\text{V}}{5} \cdot \lg \frac{[\text{MnO}_4^{-}]}{[\text{Mn}^{2+}]} + \frac{8 \cdot 0,0591\text{V}}{5} \cdot (-\text{pH}) \end{aligned}$$

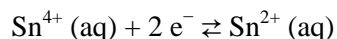
Hogyan változik a fenti elektród potenciálja, ha adott permanganátion- és mangán(II)ion koncentráció mellett csökkentjük az oldat pH-ját, azaz növeljük a H^{+} -ionok koncentrációját? Az egyenletből jól látható, hogy az elektródpotenciál növekszik: az oldat pH-ját csökkentve („savanyítva az oldatot”) a permanganátionok „oxidálóképessége” növekszik. Ebből következik, hogy ha permanganátionokat mangán(II)ionokká szeretnénk redukálni, azt savas közegben célszerű végezni.

9.6. példa:

Mekkora a platinaelektrod potenciálja abban az oldatban, melyben $[\text{Sn}^{2+}] = 0,050 \text{ M}$ és $[\text{Sn}^{4+}] = 0,250 \text{ M}$? $\varepsilon^\circ(\text{Sn}^{4+}/\text{Sn}^{2+}) = +0,151 \text{ V}$.

Megoldás:

Írjuk fel az elektrod folyamatot!



Helyettesítsük be a koncentrációkat a Nernst-egyenletbe!

$$\varepsilon = \varepsilon^\circ + \frac{0,0591 \text{ V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{Sn}^{4+}]}{[\text{Sn}^{2+}]} = +0,151 \text{ V} + \frac{0,0591 \text{ V}}{2} \cdot \lg \frac{0,250}{0,050} = 0,192 \text{ V}$$

Így az elektrod potenciálja 0,192 V.

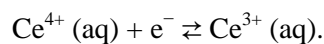
9.7. példa:

Állapítsuk meg azon platinaelektrod elektrodpotenciálját 25 °C-on, mely a következő összetételű elektrolitba merül: $c(\text{Ce}(\text{NO}_3)_3) = 0,200 \text{ M}$ és $c(\text{Ce}(\text{SO}_4)_2) = 0,500 \text{ M}$.

$$\varepsilon^\circ(\text{Ce}^{4+}/\text{Ce}^{3+}) = +1,720 \text{ V}.$$

Megoldás:

Az elektrod folyamat:



Helyettesítsük be a koncentrációkat a Nernst-egyenletbe!

$$\varepsilon = \varepsilon^\circ + \frac{0,0591 \text{ V}}{1} \cdot \lg \frac{[\text{Ce}^{4+}]}{[\text{Ce}^{3+}]} = +1,720 \text{ V} + (0,0591 \text{ V}) \cdot \lg \frac{0,500}{0,200} = 1,744 \text{ V}$$

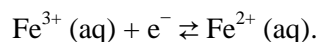
Tehát az elektrod potenciálja 1,744 V.

9.8. példa:

Határozzuk meg azon platinaelektrod potenciálját, mely a következő elektrolitba merül: 100 cm³ elektrolitban pedig 2,280 gramm FeSO₄ és 0,800 gramm Fe₂(SO₄)₃ van feloldva. $M(\text{FeSO}_4) = 152,0 \text{ g/mol}$, $M[\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3] = 400,0 \text{ g/mol}$, $\varepsilon^\circ(\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}) = +0,781 \text{ V}$.

Megoldás:

Az elektrodon végbemenő folyamat:



Számítsuk ki az egyes ionok (Fe²⁺, Fe³⁺) koncentrációját!

$$[\text{Fe}^{2+}] = \frac{n(\text{FeSO}_4)}{V} = \frac{m(\text{FeSO}_4)}{M(\text{FeSO}_4) \cdot V} = \frac{2,280 \text{ g}}{152,0 \text{ g/mol} \cdot 0,100 \text{ dm}^3} = 0,15 \text{ mol/dm}^3$$

$$[\text{Fe}^{3+}] = \frac{2 \cdot n[(\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3)]}{V} = \frac{m[(\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3)]}{M[(\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3)] \cdot V} = \frac{0,800 \text{ g}}{400,0 \text{ g/mol} \cdot 0,100 \text{ dm}^3} = 0,04 \text{ mol/dm}^3$$

Behelyettesítve a Nernst-egyenletbe:

$$\varepsilon = \varepsilon^\circ + \frac{0,0591 \text{ V}}{1} \cdot \lg \frac{[\text{Fe}^{3+}]}{[\text{Fe}^{2+}]} = +0,771 \text{ V} + (0,0591 \text{ V}) \cdot \lg \frac{0,04}{0,15} = 0,737 \text{ V}.$$

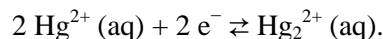
Tehát az elektród potenciálja 0,737 V.

9.9. példa:

Összeöntünk 100 cm^3 $0,200 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú $\text{Hg}_2(\text{NO}_3)_2$ -oldatot és 150 cm^3 $0,500 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2$ -oldatot. Határozzuk meg az oldatba merülő platinaelektród potenciálját! Az oldatok térfogatát vegyük összeadhatónak. $\varepsilon^\circ(2\text{Hg}^{2+}/\text{Hg}_2^{2+}) = +0,920 \text{ V}$.

Megoldás:

Az elektródon végbemenő folyamat:



Az oldatok hígulása következtében a Hg_2^{2+} - és Hg^{2+} -ionok koncentrációja:

$$[\text{Hg}_2^{2+}] = \frac{n}{V} = \frac{c_1 \cdot V_1}{V_1 + V_2} = \frac{0,200 \cdot 100}{100 + 150} \text{ mol/dm}^3 = 0,080 \text{ mol/dm}^3,$$

$$[\text{Hg}^{2+}] = \frac{n}{V} = \frac{c_2 \cdot V_2}{V_1 + V_2} = \frac{0,500 \cdot 150}{100 + 150} \text{ mol/dm}^3 = 0,300 \text{ mol/dm}^3.$$

Behelyettesítve a Nernst-egyenletbe (ne feledjük, két higany(II)ionból keletkezik egy higany(I)ion, pontosabban dihigany(I)dikation!):

$$\varepsilon = \varepsilon^\circ + \frac{0,0591 \text{ V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{Hg}^{2+}]^2}{[\text{Hg}_2^{2+}]} = +0,920 \text{ V} + \frac{0,0591 \text{ V}}{2} \cdot \lg \frac{0,300^2}{0,080} = 0,922 \text{ V}.$$

Tehát az elektród potenciálja 0,922 V.

9.10. példa:

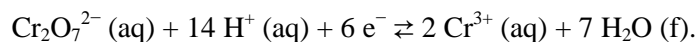
Mekkora a fém platinaelektród potenciálja, mely a következő összetételű oldatba merül: $[\text{Cr}^{3+}] = 0,100 \text{ mol/dm}^3$, $[\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}] = 0,0500 \text{ mol/dm}^3$, és az oldatban

- pH = 1,00,
- pH = 4,00.

$$\varepsilon^\circ(\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-} + 14\text{H}^+ / 2\text{Cr}^{3+}) = +1,360 \text{ V}$$

Megoldás:

Az elektródon végbemenő folyamat:



Jól látható, hogy az elektródfolyamatban hidrogénionok is szerepelnek, így a Nernst-egyenlet:

$$\varepsilon = \varepsilon^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{6} \cdot \lg \frac{[\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}] \cdot [\text{H}^+]^{14}}{[\text{Cr}^{3+}]^2}.$$

Behelyettesítve a két különböző pH esetén:

$$[\text{H}^+] = 10^{-\text{pH}} = 1,00 \cdot 10^{-1} \text{ mol/dm}^3,$$

$$\varepsilon = \varepsilon^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{6} \cdot \lg \frac{[\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}] \cdot [\text{H}^+]^{14}}{[\text{Cr}^{3+}]^2} = 1,360\text{V} + \frac{0,0591\text{V}}{6} \cdot \lg \frac{0,0500 \cdot (1,00 \cdot 10^{-1})^{14}}{(0,100)^2} = 1,229\text{V}.$$

$$[\text{H}^+] = 10^{-\text{pH}} = 1,00 \cdot 10^{-4} \text{ mol/dm}^3,$$

$$\varepsilon = \varepsilon^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{6} \cdot \lg \frac{[\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}] \cdot [\text{H}^+]^{14}}{[\text{Cr}^{3+}]^2} = 1,360\text{V} + \frac{0,0591\text{V}}{6} \cdot \lg \frac{0,0500 \cdot (1,00 \cdot 10^{-4})^{14}}{(0,100)^2} = 0,815\text{V}.$$

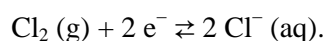
Az elektródpotenciál 1,00-es pH-n 1,229 V, míg 4,00-es pH-n 0,815 V. Mint látható, a dikromát/króm(III)-rendszer elektródpotenciálja a pH növekedésével jelentősen csökken. Ez az oka annak, hogy a dikromátokat igen savas közegben szokás oxidálószerként alkalmazni.

4.) Gázelektrodok

A redoxielektrodok egy másik speciális csoportját képviselik a gázelektrodok, melyekkel fontosságuk miatt külön is foglalkozunk. A heterogén fázisú egyensúlyokhoz hasonlóan ilyenkor a gáz parciális nyomását kell beírni az elektródpotenciál kifejezésébe, ám nem szabad elfelejtenni arról, hogy a parciális nyomást el kell osztani a normál légköri nyomással.

Klörgázelektrod

A klörgázelektrod egy platinalemezről áll, melyre klörgázt vezetnek egy olyan elektrolitban, mely kloridionokat tartalmaz. A félcella-reakció egyenlete:



Az elektródpotenciál kifejezésébe helyettesítsük be a redukált forma koncentrációját ($[\text{Cl}^-]$) a második hatványra emelve, az elektronszám-változást ($z = 2$), valamint az oxidált komponens „koncentrációját”, azaz a klörgáz parciális nyomását ($p(\text{Cl}_2)$), melyet el kell osztanunk a normál légköri nyomással ($p^\circ = 101\,325 \text{ Pa}$).

$$\varepsilon = \varepsilon^\circ(\text{Cl}_2 / 2\text{Cl}^-) + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{p(\text{Cl}_2) / p^\circ}{[\text{Cl}^-]^2}$$

Egyszerű átalakítással az elektródpotenciál a következő formára hozható ($\frac{1}{2} \lg x = \lg(\sqrt{x})$):

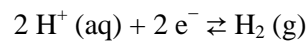
$$\varepsilon = \varepsilon^\circ(\text{Cl}_2 / 2\text{Cl}^-) + \frac{0,0591\text{V}}{1} \cdot \lg \sqrt{\frac{p(\text{Cl}_2) / p^\circ}{[\text{Cl}^-]^2}} = \varepsilon^\circ(\text{Cl}_2 / 2\text{Cl}^-) + (0,0591\text{V}) \cdot \lg \frac{\sqrt{p(\text{Cl}_2) / p^\circ}}{[\text{Cl}^-]}.$$

Amennyiben a klörgáz parciális nyomása éppen normál légköri nyomású, a következő összefüggést kapjuk:

$$\varepsilon = \varepsilon^\circ(\text{Cl}_2 / 2\text{Cl}^-) + (0,0591\text{V}) \cdot \lg \frac{1}{[\text{Cl}^-]} = \varepsilon^\circ(\text{Cl}_2 / 2\text{Cl}^-) - (0,0591\text{V}) \cdot \lg[\text{Cl}^-].$$

Buborékoló hidrogén-gáz-elektrod

A hidrogén-gáz-elektrod potenciálja – a többi gázelektroddhoz hasonlóan – nyomásfüggő. A félcella-reakció egyenlete:



A klórgázelektroddal analóg módon az elektrodpotenciál:

$$\varepsilon = \varepsilon^\circ(2\text{H}^+ / \text{H}_2) + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{H}^+]^2}{p(\text{H}_2)/p^\circ}$$

Ismét átalakíthatjuk a kifejezést:

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \varepsilon^\circ(2\text{H}^+ / \text{H}_2) + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{H}^+]^2}{p(\text{H}_2)/p^\circ} = \\ &= \varepsilon^\circ(2\text{H}^+ / \text{H}_2) + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{1}{p(\text{H}_2)/p^\circ} + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg[\text{H}^+]^2 = \\ &= \varepsilon^\circ(2\text{H}^+ / \text{H}_2) + (0,0591\text{V}) \cdot \lg \frac{1}{\sqrt{p(\text{H}_2)/p^\circ}} + (0,0591\text{V}) \cdot \lg[\text{H}^+] \\ &= \varepsilon^\circ(2\text{H}^+ / \text{H}_2) + (0,0591\text{V}) \cdot \lg \frac{1}{\sqrt{p(\text{H}_2)/p^\circ}} + (0,0591\text{V}) \cdot (-\text{pH}) \end{aligned}$$

Mint jól látható, a buborékoló hidrogénelektrod potenciálja függ az oldat pH-jától, ezért pH-mérésre alkalmazható. Viszonylag bonyolult felépítésének következtében gyakorlatban nem szokták rutinszerű pH-meghatározásra használni.

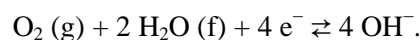
A $2\text{H}^+/\text{H}_2$ -rendszer standardpotenciálja egyezményesen 0 V, így ha a hidrogén-gáz parciális nyomása 101 325 Pa, a következő kifejezést kapjuk:

$$\varepsilon = 0 \text{ V} + (0,0591\text{V}) \cdot \lg \frac{1}{\sqrt{1}} + (0,0591\text{V}) \cdot (-\text{pH}) = -(0,0591\text{V}) \cdot \text{pH} .$$

Megjegyzendő, hogy a pH mérésére általában úgynevezett üvegelektrodot szoktak alkalmazni (ennek működésével későbbi tanulmányok során ismerkedünk meg).

Oxigén-gáz-elektrod

Az oxigén-gáz-elektrod félcella-reakciója:



Az egyenlethez tartozó potenciál:

$$\varepsilon = \varepsilon^\circ(\text{O}_2 / 4\text{OH}^-) + \frac{0,0591\text{V}}{4} \cdot \lg \frac{p(\text{O}_2)/p^\circ}{[\text{OH}^-]^4}$$

A kifejezés szintén továbbalakítható:

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \varepsilon^\circ(\text{O}_2 / 4\text{OH}^-) + (0,0591\text{V}) \cdot \lg \frac{\sqrt[4]{p(\text{O}_2)/p^\circ}}{[\text{OH}^-]} = \\ &= \varepsilon^\circ(\text{O}_2 / 4\text{OH}^-) + (0,0591\text{V}) \cdot \lg \sqrt[4]{p(\text{O}_2)/p^\circ} + (0,0591\text{V}) \cdot \lg[\text{OH}^-] . \end{aligned}$$

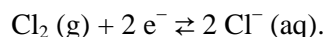
Mint látható, az oxigéngáz-elektrod potenciálja is függ az oldat pH-jától ($-\lg[\text{OH}^-] = \text{pOH} = \text{pK}_w - \text{pH}$).

9.11. példa:

Mekkora az alábbi buborékoló klórgázelektrod potenciálja? A klórgáz parciális nyomása azonos a normál légköri nyomással, az oldatban a kloridionok koncentrációja $0,0340 \text{ mol/dm}^3$. $\varepsilon^\circ = +1,358 \text{ V}$.

Megoldás:

Az elektrodreakció egyenlete:



A Nernst-egyenletbe behelyettesítve:

$$\varepsilon = \varepsilon^\circ + \frac{0,0591 \text{ V}}{2} \cdot \lg \frac{p(\text{Cl}_2)/p^\circ}{[\text{Cl}^-]^2} = 1,358 \text{ V} + \frac{0,0591 \text{ V}}{2} \cdot \lg \frac{p^\circ/p^\circ}{0,0340^2} = 1,445 \text{ V}.$$

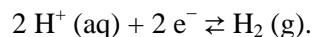
Tehát az elektrod potenciálja 1,445 V.

9.12. példa:

Mekkora a $0,0325 \text{ mol/dm}^3 \text{ H}^+$ -ion-koncentrációjú oldatba merülő buborékoló H_2 -elektrod potenciálja, ha a hidrogéngáz normál légköri nyomású?

Megoldás:

A félcella-reakció egyenlete:



A Nernst-egyenletbe behelyettesítve:

$$\varepsilon = \varepsilon^\circ + \frac{0,0591 \text{ V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{H}^+]^2}{p(\text{H}_2)/p^\circ} = 0 \text{ V} + \frac{0,0591 \text{ V}}{2} \cdot \lg \frac{0,0325^2}{p^\circ/p^\circ} = -0,088 \text{ V}.$$

Tehát az elektrod potenciálja -0,088 V.

9.13. példa:

Mekkora a $12,00 \text{ pH}$ -jú NaOH -oldatba merülő buborékoló H_2 -elektrod potenciálja, ha a hidrogéngáz normál légköri nyomású.

Megoldás:

(1) Számítsuk ki az oldat hidrogénion-koncentrációját!

$$[\text{H}^+] = 10^{-\text{pH}} = 1,00 \cdot 10^{-12} \text{ mol/dm}^3.$$

Így a potenciál:

$$\varepsilon = \varepsilon^\circ + \frac{0,0591 \text{ V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{H}^+]^2}{p(\text{H}_2)/p^\circ} = 0 \text{ V} + \frac{0,0591 \text{ V}}{2} \cdot \lg \frac{(1,00 \cdot 10^{-12})^2}{p^\circ/p^\circ} = -0,709 \text{ V}.$$

(2) Használhatjuk a fent levezetett pH-t tartalmazó képletet is:

$$\begin{aligned}\varepsilon &= \varepsilon^\circ + (0,0591\text{V}) \cdot \lg \frac{1}{\sqrt{p(\text{H}_2)/p^\circ}} + (0,0591\text{V}) \cdot (-\text{pH}) = \\ &= 0\text{V} + (0,0591\text{V}) \cdot \lg \frac{1}{\sqrt{p^\circ/p^\circ}} + (0,0591\text{V}) \cdot (-\text{pH}) = -0,709\text{V}.\end{aligned}$$

Mindkét módszerrel a buborékoló hidrogénelektrod potenciálja -0,709 V.

9.14. példa:

Mennyivel változik meg a 4,00 pH-jú pufferoldatba merülő buborékoló H₂-elektrod potenciálja, ha a hidrogéngáz parciális nyomása 1,00 · 10⁵ Pa-ról 2,50 · 10³ Pa-ra csökken?

Megoldás:

Az oldat hidrogénion-koncentrációja:

$$[\text{H}^+] = 10^{-\text{pH}} = 1,00 \cdot 10^{-4} \text{ mol/dm}^3.$$

Számítsuk ki az elektródpotenciált mindkét nyomás esetén!

$$p_1(\text{H}_2) = 1,00 \cdot 10^5 \text{ Pa}$$

$$\varepsilon_1 = \varepsilon^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{H}^+]^2}{\frac{p_1(\text{H}_2)}{p^\circ}} = 0\text{V} + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{(1,00 \cdot 10^{-4})^2}{\frac{1,00 \cdot 10^5 \text{ Pa}}{101325 \text{ Pa}}} = -0,236\text{V}.$$

$$p_2(\text{H}_2) = 2,50 \cdot 10^3 \text{ Pa}$$

$$\varepsilon_2 = \varepsilon^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{H}^+]^2}{\frac{p_2(\text{H}_2)}{p^\circ}} = 0\text{V} + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{(1,00 \cdot 10^{-4})^2}{\frac{2,50 \cdot 10^3 \text{ Pa}}{101325 \text{ Pa}}} = -0,189\text{V}.$$

Az elektródpotenciál megváltozása tehát:

$$\Delta\varepsilon = \varepsilon_2 - \varepsilon_1 = -0,189\text{V} - (-0,236\text{V}) = 0,047\text{V}.$$

Tehát ha a hidrogéngáz parciális nyomása 40-ed részére (azaz 97,5%-kal) csökken, az elektródpotenciál 0,047 V-tal növekszik.

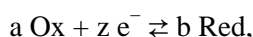
Megjegyzés: A feladat másképp is megoldható. Írjuk fel a két elektródpotenciál különbségét!

$$\begin{aligned}\Delta\varepsilon &= \varepsilon_2 - \varepsilon_1 = \left(\varepsilon^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{H}^+]^2}{p_2(\text{H}_2)/p^\circ} \right) - \left(\varepsilon^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{H}^+]^2}{p_1(\text{H}_2)/p^\circ} \right) = \\ &= \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{H}^+]^2}{p_2(\text{H}_2)/p^\circ} - \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{H}^+]^2}{p_1(\text{H}_2)/p^\circ} = \\ &= \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \left(\lg \frac{[\text{H}^+]^2}{p_2(\text{H}_2)/p^\circ} - \lg \frac{[\text{H}^+]^2}{p_1(\text{H}_2)/p^\circ} \right) = \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \left(\frac{[\text{H}^+]^2}{p_2(\text{H}_2)/p^\circ} : \frac{[\text{H}^+]^2}{p_1(\text{H}_2)/p^\circ} \right) = \\ &= \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \left(\frac{[\text{H}^+]^2}{p_2(\text{H}_2)/p^\circ} \cdot \frac{p_1(\text{H}_2)/p^\circ}{[\text{H}^+]^2} \right)\end{aligned}$$

Mivel az oldat pH-ja nem változik, $[H^+]$ -val egyszerűsíthetünk, ehhez hasonlóan p° is kiesik:

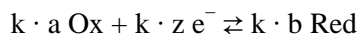
$$\begin{aligned}\Delta\varepsilon &= \frac{0,0591V}{2} \cdot \lg\left(\frac{[H^+]^2 \cdot p_1(H_2)/p^\circ}{p_2(H_2)/p^\circ \cdot [H^+]^2}\right) = \frac{0,0591V}{2} \cdot \lg\frac{p_1(H_2)}{p_2(H_2)} = \\ &= \frac{0,0591V}{2} \cdot \lg\frac{1,00 \cdot 10^5 \text{ Pa}}{2,50 \cdot 10^3 \text{ Pa}} = 0,047 \text{ V}.\end{aligned}$$

Az elektródpotenciál értéke mindig egy adott reakcióegyenlethez tartozik. Ha az egyenletet konstanssal szorozzuk, az elektródpotenciál értéke nem változik:



$$\varepsilon = \varepsilon^\circ + \frac{R \cdot T}{z \cdot F} \ln \frac{[\text{Ox}]^a}{[\text{Red}]^b}.$$

A reakcióegyenletet beszorozva egy k konstanssal:

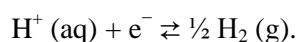


$$\varepsilon = \varepsilon^\circ + \frac{R \cdot T}{k \cdot z \cdot F} \ln \frac{[\text{Ox}]^{k \cdot a}}{[\text{Red}]^{k \cdot b}} = \varepsilon^\circ + \frac{R \cdot T}{k \cdot z \cdot F} \ln \left(\frac{[\text{Ox}]^a}{[\text{Red}]^b} \right)^k = \varepsilon^\circ + \frac{R \cdot T}{k \cdot z \cdot F} \cdot k \cdot \ln \frac{[\text{Ox}]^a}{[\text{Red}]^b} = \varepsilon^\circ + \frac{R \cdot T}{z \cdot F} \cdot \ln \frac{[\text{Ox}]^a}{[\text{Red}]^b}$$

Vegyük például a hidrogéngáz-elektrodot!

$$2 H^+ (\text{aq}) + 2 e^- \rightleftharpoons H_2 (\text{g}) \quad \varepsilon = \varepsilon^\circ + \frac{R \cdot T}{2 \cdot F} \cdot \ln \frac{[H^+]^2}{p(H_2)/p^\circ}$$

Az elektródreakció egyenletét az alábbi formában is felírhatjuk például:

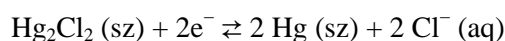


Az elektródpotenciál:

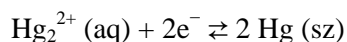
$$\varepsilon = \varepsilon^\circ + \frac{R \cdot T}{F} \cdot \ln \frac{[H^+]}{\sqrt{p(H_2)/p^\circ}} = \varepsilon^\circ + \frac{R \cdot T}{F} \cdot \ln \left(\frac{[H^+]^2}{p(H_2)/p^\circ} \right)^{1/2} = \varepsilon^\circ + \frac{R \cdot T}{2 \cdot F} \cdot \ln \frac{[H^+]^2}{p(H_2)/p^\circ}.$$

Mint fentebb az ezüst-klorid/ezüst elektródnál láttuk, kémiai egyensúlyi állandók segítségével „áttérhetünk” különböző elektródreakciókhoz tartozó elektródpotenciálok között.

Például a $Hg_2^{2+}/2Hg$ elektródpotenciálja segítségével írjuk fel a következő folyamat elektródpotenciálját!



Írjuk fel a $Hg_2^{2+}/2Hg$ reakciót és elektródpotenciálját!



$$\varepsilon = \varepsilon^\circ(Hg_2^{2+}/2Hg)^\circ + \frac{0,0591V}{2} \cdot \lg[Hg_2^{2+}]$$

Fejezzük ki a Hg_2^{2+} -ionok koncentrációját a Hg_2Cl_2 oldhatósági szorzatából!

$$[\text{Hg}_2^{2+}] = \frac{L}{[\text{Cl}^-]^2}$$

Behelyettesítve a fenti Nernst-egyenletbe:

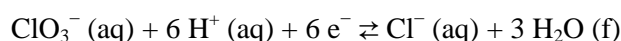
$$\varepsilon = \varepsilon^\circ(\text{Hg}_2^{2+}/2\text{Hg})^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{L}{[\text{Cl}^-]^2} = \varepsilon^\circ(\text{Hg}_2^{2+}/2\text{Hg})^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg L + (0,0591\text{V}) \cdot \lg \frac{1}{[\text{Cl}^-]}.$$

Így a keresett elektródpotenciál:

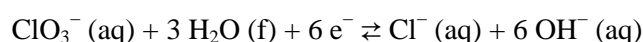
$$\varepsilon^\circ(\text{Hg}_2\text{Cl}_2/2\text{Hg}) = \varepsilon^\circ(\text{Hg}_2^{2+}/2\text{Hg}) + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg L.$$

9.15. példa:

Az alábbi folyamathoz tartozó standard potenciál $\varepsilon_1^\circ = +1,451\text{V}$:



Mekkora az alábbi reakcióegyenlettel leírható folyamat standard elektródpotenciálja (ε_2°)?



Megoldás:

Írjuk fel a Nernst-egyenletet az első folyamatra!

$$\varepsilon = \varepsilon_1^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{6} \cdot \lg \frac{[\text{ClO}_3^-] \cdot [\text{H}^+]^6}{[\text{Cl}^-]}.$$

Természetesen a potenciál nem változik attól, hogy a reakcióegyenletet másképp írjuk fel. Mivel az első folyamatban H^+ -ionok, a másodikban pedig OH^- -ionok találhatóak, ezek között a vízionszorzat teremt kapcsolatot:

$$[\text{H}^+] = \frac{K_v}{[\text{OH}^-]}.$$

Helyettesítsük be a H^+ -ionok koncentrációját mint a OH^- -ionok koncentrációjának függvényét!

$$\varepsilon = \varepsilon_1^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{6} \cdot \lg \frac{[\text{ClO}_3^-] \cdot [\text{H}^+]^6}{[\text{Cl}^-]} = \varepsilon_1^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{6} \cdot \lg \frac{[\text{ClO}_3^-] \cdot \left(\frac{K_v}{[\text{OH}^-]} \right)^6}{[\text{Cl}^-]}$$

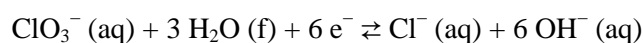
Alakítsuk tovább az egyenletet (bontsuk fel a zárójelet és alkalmazzuk a logaritmusazonosságokat)!

$$\begin{aligned}\varepsilon &= \varepsilon_1^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{6} \cdot \lg \frac{[\text{ClO}_3^-] \cdot \left(\frac{K_v}{[\text{OH}^-]}\right)^6}{[\text{Cl}^-]} = \varepsilon^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{6} \cdot \lg \frac{[\text{ClO}_3^-] \cdot K_v^6}{[\text{Cl}^-] \cdot [\text{OH}^-]^6} = \\ &= \varepsilon_1^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{6} \cdot \left(\lg \frac{[\text{ClO}_3^-]}{[\text{Cl}^-] \cdot [\text{OH}^-]^6} + \lg K_v^6 \right) = \varepsilon_1^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{6} \cdot \left(\lg \frac{[\text{ClO}_3^-]}{[\text{Cl}^-] \cdot [\text{OH}^-]^6} + 6 \cdot \lg K_v \right)\end{aligned}$$

Bontsuk fel a zárójelet!

$$\begin{aligned}\varepsilon &= \varepsilon_1^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{6} \cdot \left(\lg \frac{[\text{ClO}_3^-]}{[\text{Cl}^-] \cdot [\text{OH}^-]^6} + 6 \cdot \lg K_v \right) = \\ &= \varepsilon_1^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{6} \cdot \lg \frac{[\text{ClO}_3^-]}{[\text{Cl}^-] \cdot [\text{OH}^-]^6} + \frac{0,0591\text{V}}{6} \cdot 6 \cdot \lg K_v = \\ &= \varepsilon_1^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{6} \cdot \lg \frac{[\text{ClO}_3^-]}{[\text{Cl}^-] \cdot [\text{OH}^-]^6} + (0,0591\text{V}) \cdot \lg K_v\end{aligned}$$

Írjuk fel a második folyamatra is az elektródpotenciál kifejezését!



$$\varepsilon = \varepsilon_2^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{6} \cdot \lg \frac{[\text{ClO}_3^-]}{[\text{Cl}^-] \cdot [\text{OH}^-]^6}$$

A két elektródpotenciált összevetve:

$$\varepsilon = \varepsilon_1^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{6} \cdot \lg \frac{[\text{ClO}_3^-]}{[\text{Cl}^-] \cdot [\text{OH}^-]^6} + (0,0591\text{V}) \cdot \lg K_v = \varepsilon_2^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{6} \cdot \lg \frac{[\text{ClO}_3^-]}{[\text{Cl}^-] \cdot [\text{OH}^-]^6},$$

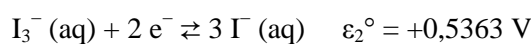
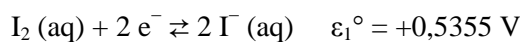
melyből következik:

$$\varepsilon_2^\circ = \varepsilon_1^\circ + (0,0591\text{V}) \cdot \lg K_v = 1,451\text{V} + (0,0591\text{V}) \cdot \lg(1,00 \cdot 10^{-14}) = +0,624\text{V}.$$

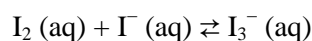
Tehát a második folyamat standard elektródpotenciálja 0,624 V.

9.16. példa:

Ismerjük a standard elektródpotenciált az alábbi folyamatok esetén:



Mekkora az alábbi folyamat egyensúlyi állandója?



Megoldás:

A kérdéses folyamat egyensúlyi állandója:

$$K = \frac{[\text{I}_3^-]}{[\text{I}_2] \cdot [\text{I}^-]}.$$

Egy redoxirendszer elektródpotenciálja független attól, hogyan írjuk fel a Nernst-egyenletet. Írjuk fel a Nernst-egyenletet mindkét folyamatra!

$$\varepsilon = \varepsilon_1^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{I}_2]}{[\text{I}^-]^2} = \varepsilon_2^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{I}_3^-]}{[\text{I}^-]^3}$$

Rendezzük át az egyenletet!

$$\begin{aligned} \varepsilon_1^\circ - \varepsilon_2^\circ &= \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{I}_3^-]}{[\text{I}^-]^3} - \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{I}_2]}{[\text{I}^-]^2} \\ \varepsilon_1^\circ - \varepsilon_2^\circ &= \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \left(\lg \frac{[\text{I}_3^-]}{[\text{I}^-]^3} - \lg \frac{[\text{I}_2]}{[\text{I}^-]^2} \right) = \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \left(\frac{[\text{I}_3^-]}{[\text{I}^-]^3} \cdot \frac{[\text{I}^-]^2}{[\text{I}_2]} \right) = \\ &= \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \left(\frac{[\text{I}_3^-]}{[\text{I}^-]} \cdot \frac{[\text{I}^-]^2}{[\text{I}_2]} \right) = \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \left(\frac{[\text{I}_3^-]}{[\text{I}_2] \cdot [\text{I}^-]} \right) = \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg K \end{aligned}$$

Az egyenlet megoldása:

$$K = \frac{[\text{I}_3^-]}{[\text{I}_2] \cdot [\text{I}^-]} = 10^{\frac{2 \cdot (\varepsilon_1^\circ - \varepsilon_2^\circ)}{0,0591\text{V}}} = 10^{\frac{2 \cdot (0,5355\text{V} - 0,5363\text{V})}{0,0591\text{V}}} = 0,940.$$

Így a folyamat egyensúlyi állandója 0,940.

9.3. Galvánelemek

9.17. példa:

Számítsuk ki az alábbi galvánelemek elektromotoros erejét! Írjuk fel a megfelelő cellareakciókat és a végbemenő bruttó folyamatok rendezett egyenleteit is!



Mennyivel változik az elektromotoros erő, ha a fenti galvánelem mindkét elektrolitját 100-szoros térfogatra hígítjuk?

$$\varepsilon^\circ(\text{Zn}^{2+}/\text{Zn}) = -0,762 \text{ V}, \quad \varepsilon^\circ(\text{Cd}^{2+}/\text{Cd}) = -0,352 \text{ V}$$

Megoldás:

Helyettesítsünk be a Nernst-egyenletbe!

$$\varepsilon(\text{Zn}^{2+}/\text{Zn}) = \varepsilon^\circ(\text{Zn}^{2+}/\text{Zn}) + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg [\text{Zn}^{2+}] = -0,762 \text{ V} + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg 0,010 = -0,821 \text{ V}$$

$$\varepsilon(\text{Cd}^{2+}/\text{Cd}) = \varepsilon^\circ(\text{Cd}^{2+}/\text{Cd}) + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg [\text{Cd}^{2+}] = -0,352 \text{ V} + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg 0,100 = -0,382 \text{ V}$$

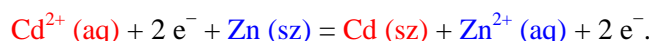
Az elektromotoros erő:

$$\text{EME} = \varepsilon(\text{Cd}^{2+}/\text{Cd}) - \varepsilon(\text{Zn}^{2+}/\text{Zn}) = (-0,382 \text{ V}) - (-0,821 \text{ V}) = 0,439 \text{ V}.$$

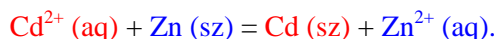
A kadmiumelektrod potenciálja ($-0,382\text{ V}$) nagyobb, mint a cinkelektrodé ($-0,821\text{ V}$), így a redukció a kadmiumelektrodon történik, ez a katód, az anód pedig a cinkelektrod. Tehát a katódon a kadmiumionok elemi kadmiummá redukálódnak, míg a cink oxidálódik. Az elektrodokon végbemenő folyamatok tehát:



A katód- és anódfolyamatokból könnyen megkaphatjuk a bruttó folyamatot. Ehhez a két egyenletet úgy kell összeadnunk, hogy az elektronszám-változás azonos legyen. Mivel itt mindkét folyamat esetén a leadott/felvett elektronok száma 2, egyszerűen összeadhatjuk a két egyenletet:



Természetesen az elektronokat nem szükséges feltüntetni, így a bruttó folyamat a következő egyenlettel írható le:



Mi történik, ha az elektrolitokat desztillált vízzel 100-szoros térfogatra hígítjuk, azaz a kationok koncentrációját 100-adára csökkentjük? Írjuk fel a Nernst-egyenleteket ismét!

$$\varepsilon(\text{Zn}^{2+}/\text{Zn}) = \varepsilon^{\circ}(\text{Zn}^{2+}/\text{Zn}) + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg[\text{Zn}^{2+}] = -0,762\text{V} + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg(1,0 \cdot 10^{-4}) = -0,880\text{V}$$

$$\varepsilon(\text{Cd}^{2+}/\text{Cd}) = \varepsilon^{\circ}(\text{Cd}^{2+}/\text{Cd}) + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg[\text{Cd}^{2+}] = -0,352\text{V} + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg(1,0 \cdot 10^{-3}) = -0,441\text{V}$$

Az elektromotoros erő:

$$\text{EME} = \varepsilon(\text{Cd}^{2+}/\text{Cd}) - \varepsilon(\text{Zn}^{2+}/\text{Zn}) = (-0,441\text{V}) - (-0,880\text{V}) = 0,439\text{V}.$$

Vessük össze az eredményt a fenti – eredeti oldatokkal számított – elektromotoros erővel! A hígítás hatására nem változott az elektromotoros erő! Vajon ez a véletlen műve, vagy van rá ésszerű magyarázat? Írjuk fel az elektromotoros erőt a két potenciál különbségként!

$$\begin{aligned} \text{EME} &= \varepsilon(\text{Cd}^{2+}/\text{Cd}) - \varepsilon(\text{Zn}^{2+}/\text{Zn}) = \\ &= \left(\varepsilon^{\circ}(\text{Cd}^{2+}/\text{Cd}) + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg[\text{Cd}^{2+}] \right) - \left(\varepsilon^{\circ}(\text{Zn}^{2+}/\text{Zn}) + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg[\text{Zn}^{2+}] \right) \end{aligned}$$

Bontsuk fel a zárójeleket és rendezzük át a kifejezéseket!

$$\text{EME} = \varepsilon^{\circ}(\text{Cd}^{2+}/\text{Cd}) - \varepsilon^{\circ}(\text{Zn}^{2+}/\text{Zn}) + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg[\text{Cd}^{2+}] - \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg[\text{Zn}^{2+}]$$

A logaritmus előtti szorzó kiemelhető:

$$\begin{aligned} \text{EME} &= \varepsilon^{\circ}(\text{Cd}^{2+}/\text{Cd}) - \varepsilon^{\circ}(\text{Zn}^{2+}/\text{Zn}) + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot (\lg[\text{Cd}^{2+}] - \lg[\text{Zn}^{2+}]) = \\ &= \varepsilon^{\circ}(\text{Cd}^{2+}/\text{Cd}) - \varepsilon^{\circ}(\text{Zn}^{2+}/\text{Zn}) + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{Cd}^{2+}]}{[\text{Zn}^{2+}]} \end{aligned}$$

A kapott összefüggésből jól látható, hogy az elektromotoros erő a két standard elektródpotenciálon kívül a kadmium- és cinkionok koncentrációjának arányától függ (és emellett az elektronszám-változás is szerepel a képletben). Ha a fémionok koncentrációját 100-adára csökkentjük, azok aránya változatlan marad, így az elektromotoros erő sem változik!

$$\begin{aligned} \text{EME} &= \varepsilon^\circ(\text{Cd}^{2+} / \text{Cd}) - \varepsilon^\circ(\text{Zn}^{2+} / \text{Zn}) + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{Cd}^{2+}]_0}{\frac{100}{[\text{Zn}^{2+}]_0}} = \\ &= \varepsilon^\circ(\text{Cd}^{2+} / \text{Cd}) - \varepsilon^\circ(\text{Zn}^{2+} / \text{Zn}) + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{Cd}^{2+}]_0}{[\text{Zn}^{2+}]_0} = \\ &= (-0,352\text{V}) - (-0,762\text{V}) + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{0,100}{0,010} = 0,439\text{V}. \end{aligned}$$

9.18. példa:

Határozzuk meg 25 °C-on a következő galvánelemek esetén az egyes elektródok potenciáját, illetve az elektromotoros erőket! Írjuk fel a galvánelemben lejátszódó bruttó folyamatok rendezett reakcióegyenletét is!

- Ni | 0,100 M Ni(NO₃)₂ || 0,0500 M AgNO₃ | Ag
- Ni | telített Ni(IO₃)₂-oldat || telített AgIO₃-oldat | Ag

A telített oldat minden esetben a csapadék desztillált vizes oldatát jelenti. $\varepsilon^\circ(\text{Ni}^{2+}/\text{Ni}) = -0,257\text{V}$, $\varepsilon^\circ(\text{Ag}^+/\text{Ag}) = +0,800\text{V}$, $L[\text{Ni}(\text{IO}_3)_2] = 4,71 \cdot 10^{-5}$, $L(\text{AgIO}_3) = 3,17 \cdot 10^{-8}$.

Megoldás:

- Számítsuk ki a két elektród potenciálját!

$$\varepsilon(\text{Ni}^{2+} / \text{Ni}) = \varepsilon^\circ(\text{Ni}^{2+} / \text{Ni}) + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg[\text{Fe}^{2+}] = -0,257\text{V} + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg 0,100 = -0,287\text{V}$$

$$\varepsilon(\text{Ag}^+ / \text{Ag}) = \varepsilon^\circ(\text{Ag}^+ / \text{Ag}) + \frac{0,0591\text{V}}{1} \cdot \lg[\text{Ag}^+] = +0,800\text{V} + \frac{0,0591\text{V}}{1} \cdot \lg 0,0500 = +0,723\text{V}$$

Az elektromotoros erő:

$$\text{EME} = \varepsilon(\text{Ag}^+ / \text{Ag}) - \varepsilon(\text{Ni}^{2+} / \text{Ni}) = (+0,723\text{V}) - (-0,287\text{V}) = 1,010\text{V}.$$

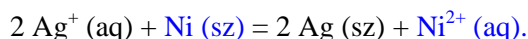
Az ezüstelektrodon történik redukció, mivel ennek a potenciálja a nagyobb, az oldatban található ezüstionok fém ezüssté redukálódnak:



A katód tehát az ezüstelektrod, az anód pedig a nikkelelektrod: a fém nikkelt nikkellionokká oxidálódik:



A bruttó folyamat reakcióegyenletét megkapjuk, ha a katód folyamat egyenletének kétszereséhez hozzáadjuk az anód folyamat reakcióegyenletét (az elektronokkal egyszerűsítve):



- b. A fentiekhez hasonlóan végezzük el a számításokat! Természetesen az oldhatósági szorzatokból először ki kell számítanunk a megfelelő ionok koncentrációját.

Nikkelelektrod:

$$L[\text{Ni}(\text{IO}_3)_2] = [\text{Ni}^{2+}] \cdot [\text{IO}_3^-]^2 = S \cdot (2 \cdot S)^2 = 4 \cdot S^3,$$

$$[\text{Ni}^{2+}] = S = \sqrt[3]{\frac{L}{4}} = \sqrt[3]{\frac{4,71 \cdot 10^{-5}}{4}} = 2,28 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3,$$

$$\varepsilon(\text{Ni}^{2+} / \text{Ni}) = \varepsilon^\circ(\text{Ni}^{2+} / \text{Ni}) + \frac{0,0591 \text{V}}{2} \cdot \lg[\text{Fe}^{2+}] = -0,257 \text{V} + \frac{0,0591 \text{V}}{2} \cdot \lg(2,28 \cdot 10^{-2}) = -0,306 \text{V}.$$

Ezüstelektrod:

$$L(\text{AgIO}_3) = [\text{Ag}^+] \cdot [\text{IO}_3^-] = S \cdot S,$$

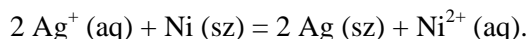
$$[\text{Ag}^+] = S = \sqrt{L} = \sqrt{3,17 \cdot 10^{-8}} = 1,78 \cdot 10^{-4} \text{ mol/dm}^3,$$

$$\varepsilon(\text{Ag}^+ / \text{Ag}) = \varepsilon^\circ(\text{Ag}^+ / \text{Ag}) + \frac{0,0591 \text{V}}{1} \cdot \lg[\text{Ag}^+] = +0,800 \text{V} + \frac{0,0591 \text{V}}{1} \cdot \lg 1,78 \cdot 10^{-4} = +0,578 \text{V}.$$

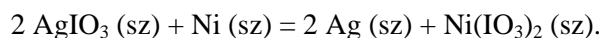
Az elektromotoros erő:

$$\text{EME} = \varepsilon(\text{Ag}^+ / \text{Ag}) - \varepsilon^\circ(\text{Ni}^{2+} / \text{Ni}) = (+0,578 \text{V}) - (-0,306 \text{V}) = 0,884 \text{V}.$$

Az elektródokon végbemenő folyamatok azonosak a fentiekkel, így a bruttó folyamat:



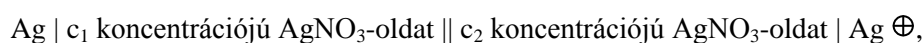
Ha a teljes rendszer vizsgáljuk, akkor az alábbi egyenlet helyesebben írja le a változást:



(Ekkor feltételezzük, hogy a sóhídon keresztül jodátionok jutnak a katód elektrolitjából az anódtér elektrolitjába.)

9.4. Koncentrációs elemek

Koncentrációs elemeknek nevezzük azokat a galvánelemeket, melyek elektródja azonos minőségű, és az elektrolitok között is csak a koncentrációban van különbség. Például egy **kationra érzékeny koncentrációs** elem:



ahol a c_2 koncentráció nagyobb, mint a c_1 koncentráció.

A kationra érzékeny koncentrációs elemek esetén a nagyobb koncentrációjú (töményebb) oldatból fémionok válnak ki, a kisebb koncentrációjú (hígabb) oldatba pedig ezüstionok oldódnak be. Ennek következtében a töményebb oldatba merülő elektród a pozitív pólus, míg a hígabbba merülő a negatív. A koncentrációs elem áramtermelése közben a hígabb oldat koncentrációja növekszik, a töményebb oldat koncentrációja csökken, így az elem lemerülésekor a két oldat koncentrációja azonossá válik.

A koncentrációs elem elektromotoros ereje:

$$\begin{aligned} \text{EME} &= \left(\varepsilon^\circ(\text{Ag}^+ / \text{Ag}) + \frac{0,0591\text{V}}{1} \cdot \lg c_2 \right) - \left(\varepsilon^\circ(\text{Ag}^+ / \text{Ag}) + \frac{0,0591\text{V}}{1} \cdot \lg c_1 \right) = \\ &= \varepsilon^\circ(\text{Ag}^+ / \text{Ag}) - \varepsilon^\circ(\text{Ag}^+ / \text{Ag}) + \frac{0,0591\text{V}}{1} \cdot \lg \frac{c_2}{c_1} = \frac{0,0591\text{V}}{1} \cdot \lg \frac{c_2}{c_1} \end{aligned}$$

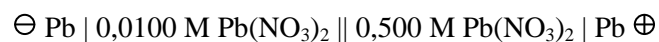
Tehát az elektromotoros erő számításakor nincs szükségünk a standard elektródpotenciálra, az elektromotoros erő csak a két oldat koncentrációjától és az elektronszám-változástól (z) függ:

$$\text{EME} = \frac{0,0591\text{V}}{z} \cdot \lg \frac{c_2}{c_1} \quad \text{ahol } c_2 > c_1.$$

Koncentrációs elemeket ritkán használnak áramforrásként, ezzel ellentétben fontos a gyakorlati alkalmazásuk, hogy segítségükkel egy oldat ismeretlen koncentrációját lehet meghatározni. Ehhez szükségünk van egy ismert koncentrációjú oldatra, és megmérve az elektromotoros erőt, az ismeretlen koncentráció számítható.

9.19. példa:

Számítsuk ki az alábbi koncentrációs elem elektromotoros erejét!



A fenti galvánelem mindkét elektrolitját 100-szoros térfogatúra hígítva mekkora lesz az elektromotoros erő?

Megoldás:

Alkalmazzuk a fenti összefüggést!

$$\text{EME} = \frac{0,0591\text{V}}{z} \cdot \lg \frac{c_2}{c_1} = \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{0,500}{0,0100} = 0,0502\text{V}$$

Mi történik, ha 100-szoros térfogatra hígítjuk mindkét elektrolitoldatot?

$$\text{EME} = \frac{0,0591\text{V}}{z} \cdot \lg \frac{c_2^*}{c_1^*} = \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{\frac{c_2}{100}}{\frac{c_1}{100}} = \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{0,500}{0,0100} = 0,0502\text{V}$$

Tehát az elektromotoros erő nem változik.

Az elektromotoros erő mindkét esetben 50,2 mV.

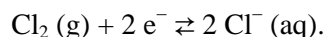
9.20. példa:

Számítsuk ki az alábbi koncentrációs elem elektromotoros erejét! A klórgáz parciális nyomása mindkét elektródon megegyezik a normál légköri nyomással.



Megoldás:

Az elektródreakció egyenlete:



A Nernst-egyenletbe behelyettesítve:

$$\varepsilon = \varepsilon^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{p(\text{Cl}_2)/p^\circ}{[\text{Cl}^-]^2} = \varepsilon^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{1} \cdot \lg \frac{1}{[\text{Cl}^-]} = \varepsilon^\circ - (0,0591\text{V}) \cdot \lg[\text{Cl}^-].$$

Írjuk fel az elektromotoros erőt!

$$\text{EME} = \{\varepsilon^\circ - (0,0591\text{V}) \cdot \lg[\text{Cl}^-]_2\} - \{\varepsilon^\circ - (0,0591\text{V}) \cdot \lg[\text{Cl}^-]_1\} = -(0,0591\text{V}) \cdot \lg \frac{[\text{Cl}^-]_2}{[\text{Cl}^-]_1}$$

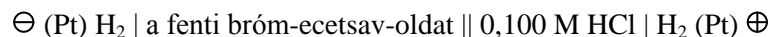
Figyelem! Mivel a kloridion-koncentráció logaritmusának (-1) -szeresével arányos az elektródpotenciál, ebben az esetben a hígabb oldatba merülő elektród a pozitív pólus, ellentétben a saját fémionjaiba merülő fém elektróddal. Így az elektromotoros erő:

$$\text{EME} = -(0,0591\text{V}) \cdot \lg \frac{[\text{Cl}^-]_2}{[\text{Cl}^-]_1} = -(0,0591\text{V}) \cdot \lg \frac{0,0500}{0,100} = 0,0178\text{V}.$$

Az elektromotoros erő 17,8 mV.

9.21. példa:

Egy koncentrációs elem segítségével szeretnénk meghatározni a bróm-ecetsav (BrCH_2COOH , $M = 139,0 \text{ g/mol}$) disszociációs állandóját. Kimérünk 1,390 gramm bróm-ecetsavat, kevés desztillált vízben feloldjuk, és desztillált vízzel $100,0 \text{ cm}^3$ térfogatra hígítjuk. Az alábbi koncentrációs elem elektromotoros ereje 57,58 mV.



Mekkora a bróm-ecetsav savi disszociációs állandója, ha a hidrogéngáz normál légköri nyomású?

Megoldás:

A buborékoló hidrogéngáz-elektrod Nernst-egyenlete, ha a hidrogéngáz normál légköri nyomású:

$$\varepsilon = \varepsilon^\circ + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{H}^+]^2}{p(\text{H}_2)/p^\circ} = \varepsilon^\circ + (0,0591\text{V}) \cdot \lg[\text{H}^+].$$

Így az elektromotoros erő:

$$\text{EME} = (0,0591\text{V}) \cdot \lg \frac{[\text{H}^+]_2}{[\text{H}^+]_1}.$$

Behelyettesítve:

$$\text{EME} = 0,05758\text{V} = (0,0591\text{V}) \cdot \lg \frac{0,100}{[\text{H}^+]_1}.$$

Ebből az ismeretlen H^+ -ion-koncentráció: $[\text{H}^+]_1 = 1,061 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3$.

Számítsuk ki a bróm-ecetsav-oldat bemérési koncentrációját!

$$c_0 = \frac{n}{V} = \frac{m}{M \cdot V} = \frac{1,390 \text{ g}}{\frac{139,0 \text{ g/mol}}{0,1000 \text{ dm}^3}} = 0,100 \text{ mol/dm}^3.$$

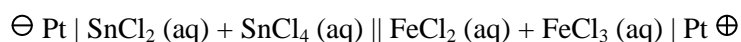
A bróm-ecetsav savi disszociációs állandója:

$$K_s = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{BrCH}_2\text{COO}^-]}{[\text{BrCH}_2\text{COOH}]} = \frac{[\text{H}^+]^2}{c_0 - [\text{H}^+]} = \frac{(1,061 \cdot 10^{-2})^2}{0,100 - 1,061 \cdot 10^{-2}} = 1,26 \cdot 10^{-3}.$$

Tehát a bróm-ecetsav savi disszociációs állandója $1,26 \cdot 10^{-3}$.

9.5. Az elektródpotenciálok és a redoxireakciók iránya

Gondolatban állítsuk össze az alábbi galvánelemet és minden oldott anyag koncentrációját vegyük egységnyinek!



Az egyes elektródok potenciálja az egységnyi koncentrációk következtében megegyezik a standard elektródpotenciáljukkal, azaz:

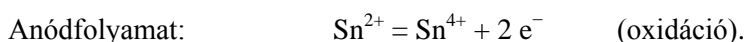
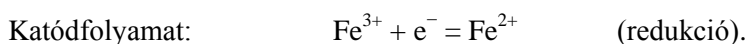
$$\varepsilon(\text{Sn}^{4+}/\text{Sn}^{2+}) = \varepsilon^\circ(\text{Sn}^{4+}/\text{Sn}^{2+}) = +0,151 \text{ V}, \text{ illetve } \varepsilon(\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}) = \varepsilon^\circ(\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}) = +0,771 \text{ V}.$$

Az elektródpotenciálokból megállapítható, hogy az elektród negatív pólusa az a platinaelektród, mely az SnCl_2 -ot és SnCl_4 -ot tartalmazó oldatba merül, a pozitív pólus pedig az a platinaelektród, mely a FeCl_2 -ot és FeCl_3 -ot tartalmazó oldatba merül.

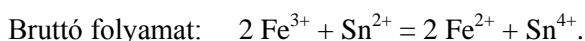
A két elektródpotenciálból kiszámítható a galvánelem elektromotoros ereje:

$$\text{EME} = \varepsilon(\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}) - \varepsilon(\text{Sn}^{4+}/\text{Sn}^{2+}) = 0,771 \text{ V} - 0,151 \text{ V} = 0,620 \text{ V}.$$

Mint fentebb láttuk, a nagyobb (pozitívabb) elektródpotenciálú elektródon redukció történik, a kisebb (negatívabb) elektródpotenciálú elektródon pedig oxidáció történik. Tehát az alábbi folyamatok mennek végbe:



A két elektródfolyamatból megállapítható a bruttó folyamat:



A bruttó folyamatban tehát a Fe^{3+} -ionok oxidálják az Sn^{2+} -ionokat, miközben Fe^{2+} - és Sn^{4+} -ionok keletkeznek.

Mint fentebb láttuk, a galvánelemek működésének „hajtóereje” az a kémiai változás, mely az elektródokon végbemegy. Ezért most vizsgáljuk meg a következő kísérletet! Egy kémcsőben összekeverünk megfelelő koncentrációjú és térfogatú SnCl_2 -, SnCl_4 -, FeCl_2 - és FeCl_3 -oldatokat úgy, hogy a keverékben mind a négy anyag koncentrációja egységnyi legyen. Az elektródpotenciálok alapján el lehet dönteni, hogy milyen folyamat mehet végbe a fenti anyagok között: mivel a fenti galvánelem ugyanezt a két redoxirendszert tartalmazza térben szeparálva, ugyanaz a bruttó folyamat megy végbe a galvánelemben, mint abban a kémcsőben, mely mind a négy anyagot egyszerre tartalmazza. Tehát a redoxipotenciálok segítségével megállapítható a redoxifolyamatok iránya!

Ha kiválasztunk két tetszőleges redoxirendszert, akkor a nagyobb (pozitívabb) elektródpotenciálú rendszer oxidált formája redukálódik, eközben oxidálja a kisebb (negatívabb) elektródpotenciálú rendszer redukált formáját, mely így oxidálódik.

Megjegyzés: Az elektródpotenciálok segítségével azt lehet megállapítani, hogy a reakció termodinamikailag lehetséges-e. Bizonyos esetekben azonban a termodinamikailag lehetséges reakciók kinetikailag gátoltak, így a valóságban mégsem tapasztalunk kémiai változást.

Nézzünk néhány további példát!

9.22. példa:

Melyik esetben tapasztalunk fémkiválást az oldatból:

- ha ezüstlemez merítünk 1 mol/dm^3 koncentrációjú $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ -oldatba.
- ha ólomlemez merítünk 1 mol/dm^3 koncentrációjú AgNO_3 -oldatba.

$$\varepsilon^\circ(\text{Ag}^+/\text{Ag}) = +0,800 \text{ V}, \varepsilon^\circ(\text{Pb}^{2+}/\text{Pb}) = -0,126 \text{ V}.$$

Megoldás:

Mivel 1 mol/dm^3 koncentrációjú oldatokba merülő fémekről van szó, a potenciálok megegyeznek a standard potenciálokkal. Az Ag/Ag^+ rendszer elektródpotenciálja (+0,800 V) pozitívabb az Pb/Pb^{2+} rendszerénél (-0,126 V). A nagyobb potenciálú rendszer oxidált formája az ezüstion, redukált formája pedig az elemi ezüst. Hasonlóan a másik rendszer esetén az oxidált forma az ólomion, a redukált forma pedig a fém ólom. Tehát csak az a reakció lehetséges, melyben az ezüstionok oxidálják a fém ólomot. Másképp megfogalmazva: az ólomionok nem képesek oxidálni a fém ezüstöt. Tehát csak akkor tapasztalunk fémkiválást az oldatból, ha ólomlemez merítünk ezüst-nitrát-oldatba.



9.5.1. ábra: Ólomra kivált ezüst („Szaturnusz fája”)



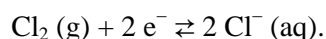
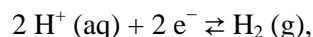
9.5.2. ábra: Higanyra kivált ezüst („Diána fája”)

9.23. példa:

Standard elektródpotenciálok alapján becsüljük meg, hogy 1,00 mol/dm³ koncentrációjú sósavoldattal reagál-e a fém cink, illetve a fém réz! $\varepsilon^\circ(\text{Zn}^{2+}/\text{Zn}) = -0,762 \text{ V}$, $\varepsilon^\circ(\text{Cu}^{2+}/\text{Cu}) = +0,342 \text{ V}$, $\varepsilon^\circ(\text{Cl}_2/2\text{Cl}^-) = +1,358 \text{ V}$.

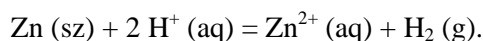
Megoldás:

Vegyük először a cink reakcióját sósavval! A fém cink a Zn^{2+}/Zn rendszer redukált komponense, mely egy másik redoxirendszer oxidált formájával tud redoxireakcióba lépni. Vegyük sorra, milyen fontosabb redoxirendszerek összetevői lehetnek az oldatban! Kézenfekvően adódik az alábbi két redoxirendszer:

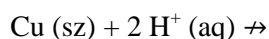


Az első egyenletben feltüntetett redoxipár oxidált formája a H^+ -ion, a redukált formája pedig az elemi H_2 -gáz, a második egyenletben az oxidált forma a Cl_2 -gáz, a redukált forma pedig a Cl^- -ion.

Mivel az elemi cink eleve redukált állapotban van, csak oxidált formában jelen lévő anyaggal tud redoxireakcióban reagálni. Ez a fentiek alapján vagy a H^+ -ion, vagy a Cl_2 -gáz lehet. Mivel a cink és a sósav közötti reakciót vizsgáljuk, klórgáz nem található a reagáló anyagok között, így ezt a lehetőséget el kell vetnünk. Ezzel ellentétben a sósavoldatban H^+ -ionok találhatóak igen nagy koncentrációban, tehát adott egy oxidált forma, mellyel elvileg lehetséges redoxireakció. Most az elektródpotenciálok kell megvizsgáljunk, azaz meg kell állapítanunk, hogy melyik a nagyobb elektródpotenciálú rendszer. A nagyobb standard elektródpotenciálú rendszer a $2\text{H}^+/\text{H}_2$ -rendszer, mivel $0,000 \text{ V} = \varepsilon^\circ(2\text{H}^+/\text{H}_2) > \varepsilon^\circ(\text{Zn}^{2+}/\text{Zn}) = -0,762 \text{ V}$. Tehát adott két redoxirendszer, és a nagyobb elektródpotenciálú rendszer oxidált formája (H^+ -ionok) és a kisebb elektródpotenciálú rendszer redukált formája (Zn) is megtalálható a vizsgált rendszerben (Zn + HCl-oldat). Így a H^+ -ionok oxidálják az elemi cinket, melyből Zn^{2+} -ionok keletkeznek, a H^+ -ionok pedig H_2 -gázzá redukálódnak. Tehát a végbemenő folyamat:



Most vizsgáljuk meg, hogy mi történik, ha cink helyett rézet teszünk sósavoldatba! A Cu^{2+}/Cu rendszer standard elektródpotenciálja (+0,342 V) pozitívabb, mint a $2\text{H}^+/\text{H}_2$ rendszeré (0,000 V), így a fém réz nem reagál a sósavoldatban jelen lévő H^+ -ionokkal.



Megjegyzés: Érdekes megfontolni, hogy a standard potenciálok alapján a fém cink, illetve réz és elemi klórgáz között létrejöhet-e redoxireakció. Mivel a $\text{Cl}_2/2\text{Cl}^-$ rendszer oxidált formája a klórgáz, és standard potenciálja (+1,358 V) nagyobb, mint a Zn^{2+}/Zn , illetve Cu^{2+}/Cu rendszeréé, a fém cink és a fém réz is oxidálható klórral, melynek során a megfelelő átmenetifém-kloridok (ZnCl_2 , CuCl_2) keletkeznek.

Általánosságban is megállapítható, hogy a negatív redukációs potenciállal rendelkező fémion/fém rendszerek ($\varepsilon^\circ(\text{M}^{z+}/\text{M}) < 0$) nem oxidáló savakban hidrogéngáz fejlődése közben oldódnak, ellenben ha $\varepsilon^\circ(\text{M}^{z+}/\text{M}) > 0$, a fém nem oldható fel nem oxidáló savakban (például sósavban, ecetsavban).

Érdekes megjegyezni, hogy oxidáló savak (például salétromsav, kénsav) oldataiból (különösen töményebb oldatokból) ezen fémek csak ritkán fejlesztenek hidrogéngázt. Oxidáló savak tömény oldataiban gyakran megfigyelhető az úgynevezett **passzíválódás** jelensége. Például a fém vas nem oldódik hideg tömény salétromsavban és kénsavban. A passzíválódás oka rendszerint egy összefüggő, a közegben nem oldódó védőréteg kialakulása, mely meggátolja a további oxidációt. A passzíválódás kinetikai gátlásnak tekinthető, és gyakran a hőmérséklet növelésével csökkenthető a passzíválódás

mértéke. Például forró tömény salétromsavban a vas feloldható, eközben túlnyomórészt nitrogén-monoxid fejlődik.

9.24. példa:

Összeöntünk 5,0–5,0 cm³ térfogatokat az alábbi oldatokból:

0,100 mol/dm³ koncentrációjú FeSO₄-oldat,

0,100 mol/dm³ koncentrációjú Fe(NO₃)₃-oldat,

0,100 mol/dm³ koncentrációjú MnSO₄-oldat,

0,100 mol/dm³ koncentrációjú KMnO₄-oldat.

A keverék térfogatát 25,0 cm³-re egészítjük ki híg kénsavoldattal, így az elegy pH-ja 3,00 lett. Állapítsuk meg, milyen folyamat megy végbe az edényben!

$$\varepsilon^\circ(\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}) = +0,771 \text{ V}, \quad \varepsilon^\circ(\text{MnO}_4^- + 8\text{H}^+/\text{Mn}^{2+}) = +1,507 \text{ V}.$$

Megoldás:

Az összeöntés pillanatában mind a négy vegyület kiindulási koncentrációja azonos lesz, a hígulást figyelembe véve:

$$[\text{Fe}^{2+}] = 0,0200 \text{ mol/dm}^3, \quad [\text{Fe}^{3+}] = 0,0200 \text{ mol/dm}^3,$$

$$[\text{Mn}^{2+}] = 0,0200 \text{ mol/dm}^3, \quad [\text{MnO}_4^-] = 0,0200 \text{ mol/dm}^3,$$

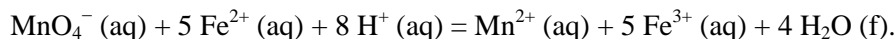
$$\text{a pH-ből pedig } [\text{H}^+] = 1,00 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3.$$

Számítsuk ki a két redoxirendszer elektródpotenciálját!

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_1^\circ + \frac{0,0591 \text{ V}}{1} \cdot \lg \frac{[\text{Fe}^{3+}]}{[\text{Fe}^{2+}]} = +0,771 \text{ V} + (0,0591 \text{ V}) \cdot \lg \frac{0,0200}{0,0200} = 0,771 \text{ V},$$

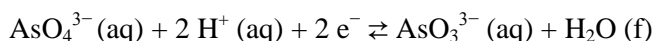
$$\varepsilon_2 = \varepsilon_2^\circ + \frac{0,0591 \text{ V}}{5} \cdot \lg \frac{[\text{MnO}_4^-] \cdot [\text{H}^+]^8}{[\text{Mn}^{2+}]} = +1,507 \text{ V} + \frac{0,0591 \text{ V}}{5} \cdot \lg \frac{0,0200 \cdot (1,00 \cdot 10^{-3})^8}{0,0200} = 1,223 \text{ V}.$$

Mint látható az eredményekből, $\varepsilon_2 > \varepsilon_1$, azaz a MnO₄⁻-ionok oxidálják a Fe²⁺-ionokat, miközben maguk Mn²⁺-ionokká redukálódnak, a Fe²⁺-ionok pedig Fe³⁺-ionokká oxidálódnak. Tehát a végbemenő folyamat rendezett reakcióegyenlete:



9.25. példa:

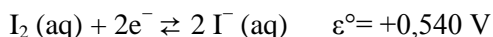
Az AsO₃³⁻/AsO₄³⁻ rendszer elektródpotenciálja függ a közeg pH-jától:



A folyamat standard elektródpotenciálja: $\varepsilon^\circ = +0,574 \text{ V}$.

- Mekkora a fém platinaelektród potenciája 25 °C-on abban az oldatban, melynek pH-ja 0,00, továbbá tudjuk, hogy [AsO₃³⁻]=0,500 M és [AsO₄³⁻]=0,100 M?
- Mekkora a fém platinaelektród potenciája 25 °C-on abban az oldatban, melynek pH-ja 7,00, továbbá tudjuk, hogy [AsO₃³⁻]=0,500 M és [AsO₄³⁻]=0,100 M?

A szerves kémiaiában az arzenit- (AsO_3^{3-}), illetve arzenát- (AsO_4^{3-}) ionok megkülönböztetése szempontjából fontos az arzéntartalmú ionok reakciója jodidionnal, illetve elemi jóddal. Ismerjük az alábbi folyamat standard redoxipotenciálját (fém platinaelektroddal mérve):



- c. Mekkora a $2\text{I}^-/\text{I}_2$ rendszer potenciálja 25 °C-on abban az esetben, ha $[\text{I}^-]=0,100 \text{ M}$, illetve $[\text{I}_2] = 0,00100 \text{ M}$?

Az alábbi kísérletet végezzük el 25 °C-on: Egy edényben összekeverünk $\text{Na}_3\text{AsO}_3^-$, $\text{Na}_3\text{AsO}_4^-$, NaI - és I_2 -oldatokat úgy, hogy az alábbi kiindulási koncentrációkat kapjuk:



- d. Írjuk fel a fenti kiindulási koncentrációk esetén végbemenő folyamat rendezett redoxiegyenletét, ha az oldat pH-ja 0,00, illetve 7,00!

Megoldás:

- a) A pH alapján: $[\text{H}^+] = 1,00 \text{ M}$, így a kérdéses elektródpotenciál:

$$\varepsilon_1(\text{pH} = 0) = \varepsilon^\circ + \frac{0,0591 \text{ V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{AsO}_4^{3-}] \cdot [\text{H}^+]^2}{[\text{AsO}_3^{3-}]} = +0,574 \text{ V} + \frac{0,0591 \text{ V}}{2} \cdot \lg \frac{0,100 \cdot 1^2}{0,500} = +0,553 \text{ V}.$$

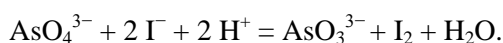
- b) Semleges pH esetén az oldat hidrogénion-koncentrációja: $[\text{H}^+] = 10^{-7} \text{ M}$

$$\varepsilon_1(\text{pH} = 7) = \varepsilon^\circ + \frac{0,0591 \text{ V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{AsO}_4^{3-}] \cdot [\text{H}^+]^2}{[\text{AsO}_3^{3-}]} = +0,574 \text{ V} + \frac{0,0591 \text{ V}}{2} \cdot \lg \frac{0,100 \cdot (1,00 \cdot 10^{-7})^2}{0,500} = +0,140 \text{ V}$$

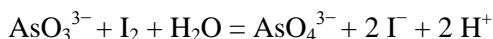
- c) Behelyettesítve a megfelelő koncentrációkat:

$$\varepsilon_2 = \varepsilon_2^\circ + \frac{0,0591 \text{ V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{I}_2]}{[\text{I}^-]^2} = +0,540 \text{ V} + \frac{0,0591 \text{ V}}{2} \cdot \lg \frac{0,001}{0,100^2} = +0,511 \text{ V}.$$

d) Az első esetben, tehát pH=0,00 esetén az $\text{AsO}_3^{3-}/\text{AsO}_4^{3-}$ rendszer elektródpotenciálja (+0,553 V) nagyobb, mint a $2\text{I}^-/\text{I}_2$ rendszeré (+0,511 V), így az arzenát redukálódik, miközben a jodidot oxidálja:

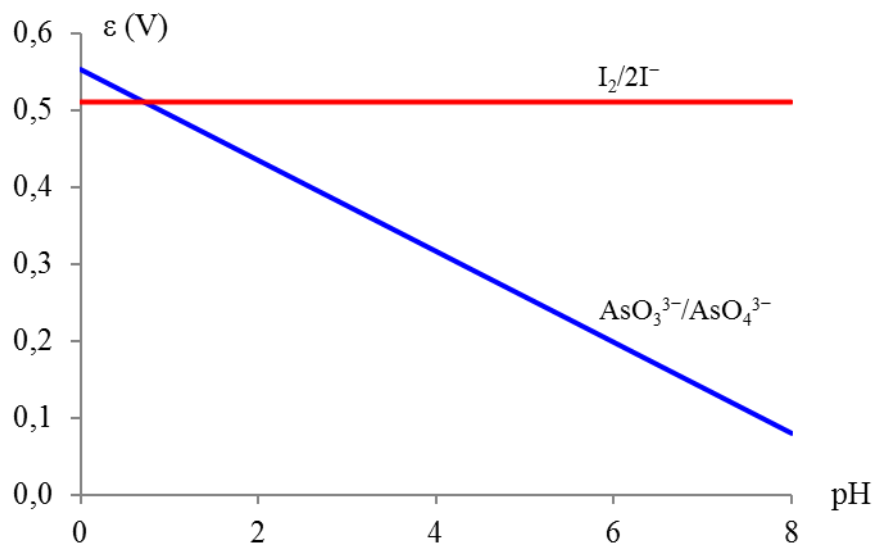


pH=7,00 esetén a fordított irányú folyamat megy végbe, azaz a jód oxidálja az arzenitionokat, miközben arzenationok és jodidionok keletkeznek.



Ezek alapján megállapítható az arzenationok és arzenitionok megkülönböztetésének egyszerű kísérleti módszere: ha az oldat arzenationokat tartalmaz, savas pH-n jodidionok hatására elemi jód keletkezik (az oldat bebarnul, keményítővel kék színreakciót tapasztalunk). Ezzel ellentétben, ha az oldat arzenitionokat tartalmaz, akkor semleges (vagy enyhén lúgos) pH-n az oldat elszínteleníti a jódoldatot (általában kálium-jodidos jódoldatot alkalmazunk).

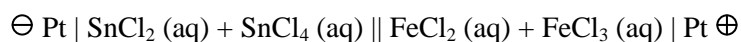
Az alábbi ábrán jól megfigyelhető az egyes redoxirendszerek potenciáljának pH-függése:



9.5.3. ábra: Egyes redoxirendszerek pH-függése

9.6. Az elektródpotenciálok és a kémiai egyensúlyi állandó kapcsolata

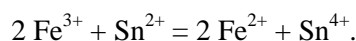
Térjünk vissza a korábban tárgyalt galvánelemhez, és minden oldott anyag koncentrációját vegyük ismét egységnyinek!



A galvánelem elektromotoros ereje (lásd fentebb):

$$\text{EME} = \varepsilon(\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}) - \varepsilon(\text{Sn}^{4+}/\text{Sn}^{2+}) = 0,771 \text{ V} - 0,151 \text{ V} = 0,620 \text{ V}.$$

Azt is tisztáztuk, hogy a galvánelemben végbemenő bruttó folyamat egyenlete a következő:



Mi történik, ha magára hagyjuk a galvánelemet? Az elektródokon végbemennek a fentebb tárgyalt folyamatok, változik az egyes ionok mennyisége és ennek következtében koncentrációja. A Fe^{3+} - és Sn^{2+} -ionok koncentrációja csökken (lásd bruttó folyamat bal oldala), míg a Fe^{2+} - és Sn^{4+} -ionok koncentrációja növekszik.

A $\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}$ -elektród esetén az $[\text{Fe}^{3+}] / [\text{Fe}^{2+}]$ koncentrációarány csökken, melynek következtében az elektród potenciálja csökken. Ezzel ellentétben az $\text{Sn}^{4+}/\text{Sn}^{2+}$ -elektród esetén az $[\text{Sn}^{4+}] / [\text{Sn}^{2+}]$ hányados növekszik, így ezen elektród potenciálja növekszik.

Mi történik eközben az elektromotoros erővel? Mivel $\varepsilon(\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+})$ csökken, és $\varepsilon(\text{Sn}^{4+}/\text{Sn}^{2+})$ növekszik, a két potenciál közötti különbség $[\varepsilon(\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}) - \varepsilon(\text{Sn}^{4+}/\text{Sn}^{2+})]$ csökken. Tehát egy galvánelem esetén az elektromotoros erő időben csökken a végbemenő folyamatok következtében. Ha kellően sokáig várunk, az elektromotoros erő 0-ra csökken, az elem „kisül”, azaz egyenlővé válik a $\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}$ és $\text{Sn}^{4+}/\text{Sn}^{2+}$ rendszerek potenciálja. (Megjegyzés: elméletileg csak végtelen sokára csökken 0-ra az elektromotoros erő.) Ha az elektromotoros erő zérus, egyensúly áll be.

Írjuk fel a két elektród potenciáljának azonosságát a Nernst-egyenleteik segítségével!

$$0 \text{ EME} = 0 \Leftrightarrow \varepsilon(\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}) = \varepsilon(\text{Sn}^{4+}/\text{Sn}^{2+})$$

$$\varepsilon^\circ(\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}) + \frac{0,0591 \text{ V}}{1} \cdot \lg \frac{[\text{Fe}^{3+}]}{[\text{Fe}^{2+}]} = \varepsilon^\circ(\text{Sn}^{4+}/\text{Sn}^{2+}) + \frac{0,0591 \text{ V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{Sn}^{4+}]}{[\text{Sn}^{2+}]}$$

Vigyük át a logaritmikus tagokat egy oldalra!

$$\varepsilon^\circ(\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}) - \varepsilon^\circ(\text{Sn}^{4+}/\text{Sn}^{2+}) = \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{Sn}^{4+}]}{[\text{Sn}^{2+}]} - \frac{0,0591\text{V}}{1} \cdot \lg \frac{[\text{Fe}^{3+}]}{[\text{Fe}^{2+}]}$$

Alakítsuk tovább az egyenletet!

$$\varepsilon^\circ(\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}) - \varepsilon^\circ(\text{Sn}^{4+}/\text{Sn}^{2+}) = \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{Sn}^{4+}]}{[\text{Sn}^{2+}]} - \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{Fe}^{3+}]^2}{[\text{Fe}^{2+}]^2}$$

Összevonhatjuk a logaritmust tartalmazó tagokat:

$$\varepsilon^\circ(\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}) - \varepsilon^\circ(\text{Sn}^{4+}/\text{Sn}^{2+}) = \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \left(\lg \frac{[\text{Sn}^{4+}]}{[\text{Sn}^{2+}]} - \lg \frac{[\text{Fe}^{3+}]^2}{[\text{Fe}^{2+}]^2} \right)$$

$$\varepsilon^\circ(\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}) - \varepsilon^\circ(\text{Sn}^{4+}/\text{Sn}^{2+}) = \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \left(\lg \frac{[\text{Sn}^{4+}]}{[\text{Sn}^{2+}]} \cdot \frac{[\text{Fe}^{2+}]^2}{[\text{Fe}^{3+}]^2} \right)$$

(Figyelem! A logaritmusazonosságok alapján $\lg a - \lg b = \lg(a/b)$, ezért az összevonás után $[\text{Fe}^{3+}]^2 / [\text{Fe}^{2+}]^2$ helyett annak reciproka, $[\text{Fe}^{2+}]^2 / [\text{Fe}^{3+}]^2$ szerepel.)

Vizsgáljuk meg alaposabban a logaritmus mögötti kifejezést! A koncentrációk hányadosa tulajdonképpen a következő egyenlettel leírható folyamat egyensúlyi állandója:

$$2 \text{Fe}^{3+} + \text{Sn}^{2+} = 2 \text{Fe}^{2+} + \text{Sn}^{4+} \quad K = \frac{[\text{Fe}^{2+}]^2 \cdot [\text{Sn}^{4+}]}{[\text{Fe}^{3+}]^2 \cdot [\text{Sn}^{2+}]}$$

Így egy rendkívül fontos összefüggéshez jutottunk: az elektródpotenciálok segítségével meghatározhatjuk bizonyos kémiai reakciók egyensúlyi állandóját! Helyettesítsük be az egyensúlyi állandót a fenti egyenletbe!

$$\varepsilon^\circ(\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}) - \varepsilon^\circ(\text{Sn}^{4+}/\text{Sn}^{2+}) = \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg K$$

Az egyenletből a folyamat egyensúlyi állandója:

$$\lg K = \frac{2 \cdot [\varepsilon^\circ(\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}) - \varepsilon^\circ(\text{Sn}^{4+}/\text{Sn}^{2+})]}{0,0591\text{V}}$$

$$K = 10^{\frac{2[\varepsilon^\circ(\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}) - \varepsilon^\circ(\text{Sn}^{4+}/\text{Sn}^{2+})]}{0,0591\text{V}}}$$

Helyettesítsünk be a képletbe!

$$K = 10^{\frac{2[\varepsilon^\circ(\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}) - \varepsilon^\circ(\text{Sn}^{4+}/\text{Sn}^{2+})]}{0,0591\text{V}}} = 10^{\frac{2(0,771\text{V} - 0,151\text{V})}{0,0591\text{V}}} = 9,58 \cdot 10^{20}$$

Mint láthatjuk a rendkívül nagy egyensúlyi állandóból, az egyensúly gyakorlatilag teljesen a termékek irányába van eltolódva. Tehát a galvánelem kisülésekor a vasionok nagyrészt Fe^{2+} , az ónionok pedig nagyrészt Sn^{4+} -ionok formájában találhatóak az elektrolitokban. Természetesen ez az egyensúly nemcsak galvánelemek esetén jöhet létre, hanem ha a megfelelő oldatokat összeöntjük, ugyanakkora egyensúlyi állandóval jellemezhető a beálló egyensúly.

A fenti levezetésben a hőmérsékletet 25 °C-nak vettük, ám bármely más hőmérsékletre is kiszámítható az egyensúlyi állandó értéke. Ehhez az alábbi formára kell hoznunk az egyenletet:

$$\ln K = \frac{2 \cdot F \cdot [\varepsilon^\circ(\text{Fe}^{3+} / \text{Fe}^{2+}) - \varepsilon^\circ(\text{Sn}^{4+} / \text{Sn}^{2+})]}{R \cdot T},$$

$$K = e^{\frac{2 \cdot F \cdot [\varepsilon^\circ(\text{Fe}^{3+} / \text{Fe}^{2+}) - \varepsilon^\circ(\text{Sn}^{4+} / \text{Sn}^{2+})]}{R \cdot T}}.$$

Általánosságban pedig a következő formában is felírhatjuk az egyensúlyi állandó és a standard elektródpotenciálok közötti kapcsolatot:

$$R \cdot T \cdot \ln K = z \cdot F \cdot \Delta \varepsilon^\circ.$$

Ezen képlet használata azonban fokozott körültekintést igényel. Nem mindegy ugyanis, hogy a nagyobb elektródpotenciálból vonjuk ki a kisebbet, vagy fordítva, mivel ekkor a két egyensúlyi állandó egymás reciproka lesz, azaz éppen az ellentétes folyamatokhoz tartozó egyensúlyi állandókat kapjuk meg. A hibák elkerülése érdekében célszerű felírni a folyamatot és annak egyensúlyi állandóját, és annak megfelelően levezetni az összefüggést.

A képlet értelmezésénél érdemes megemlíteni, hogy az egyensúlyi állandó annál nagyobb, minél nagyobb a különbség a két redoxirendszer standard elektródpotenciálja között. Tehát ha nagy a különbség a két ε° érték között, a reakció a bruttó folyamat irányába gyakorlatilag teljesen el van tolódva. Ezzel ellentétben, ha $\Delta \varepsilon^\circ$ zérus körüli, a kiindulási anyagoknak csak egy része alakul át terméké.

Megjegyzés: A galvánelem „kisülését”, „lemerülését” másképp is értelmezhetjük. Írjuk fel az elektromotoros erőt mint a két aktuális potenciál különbségét!

$$\begin{aligned} \text{EME} &= \varepsilon(\text{Fe}^{3+} / \text{Fe}^{2+}) - \varepsilon(\text{Sn}^{4+} / \text{Sn}^{2+}) = \\ &= \left(\varepsilon^\circ(\text{Fe}^{3+} / \text{Fe}^{2+}) + \frac{0,0591\text{V}}{1} \cdot \lg \frac{[\text{Fe}^{3+}]}{[\text{Fe}^{2+}]} \right) - \left(\varepsilon^\circ(\text{Sn}^{4+} / \text{Sn}^{2+}) + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{Sn}^{4+}]}{[\text{Sn}^{2+}]} \right) \end{aligned}$$

A fentiekhez hasonlóan alakítsuk át a kifejezést:

$$\begin{aligned} \text{EME} &= \left(\varepsilon^\circ(\text{Fe}^{3+} / \text{Fe}^{2+}) + \frac{0,0591\text{V}}{1} \cdot \lg \frac{[\text{Fe}^{3+}]}{[\text{Fe}^{2+}]} \right) - \left(\varepsilon^\circ(\text{Sn}^{4+} / \text{Sn}^{2+}) + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{Sn}^{4+}]}{[\text{Sn}^{2+}]} \right) = \\ &= \varepsilon^\circ(\text{Fe}^{3+} / \text{Fe}^{2+}) - \varepsilon^\circ(\text{Sn}^{4+} / \text{Sn}^{2+}) - \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{Fe}^{2+}]^2 \cdot [\text{Sn}^{4+}]}{[\text{Fe}^{3+}]^2 \cdot [\text{Sn}^{2+}]} \end{aligned}$$

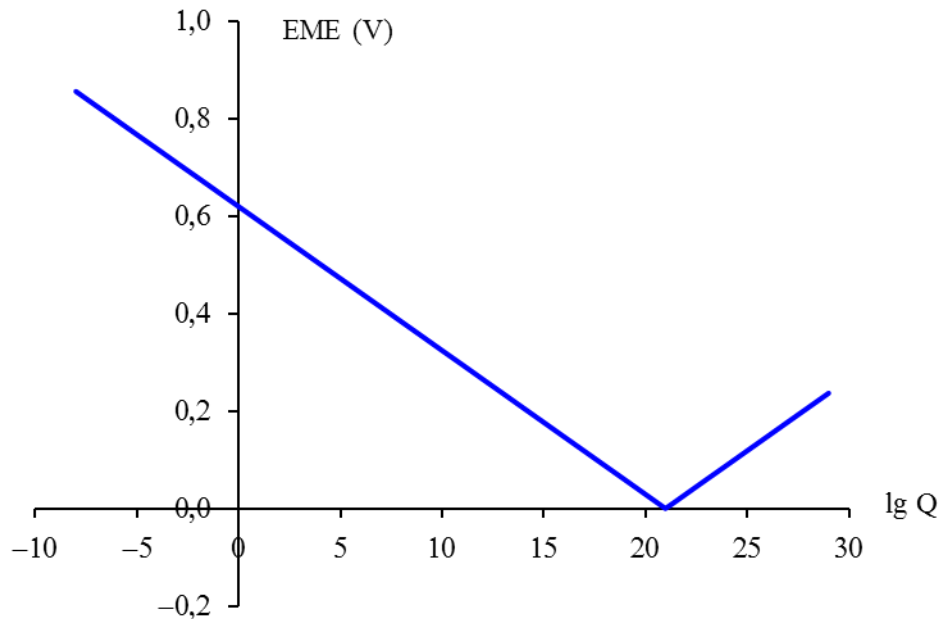
A nemegyensúlyi rendszerre – az egyensúlyi állandóhoz hasonlóan – a pillanatnyi koncentrációkkal definiálhatjuk a reakcióhányadost:

$$Q = \frac{[\text{Fe}^{2+}]^2 \cdot [\text{Sn}^{4+}]}{[\text{Fe}^{3+}]^2 \cdot [\text{Sn}^{2+}]}.$$

Az elektromotoros erő és a reakcióhányados között így az alábbi összefüggés áll fenn:

$$\text{EME} = [\varepsilon^\circ(\text{Fe}^{3+} / \text{Fe}^{2+}) - \varepsilon^\circ(\text{Sn}^{4+} / \text{Sn}^{2+})] - \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg Q = \Delta \varepsilon^\circ - \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg Q.$$

Egységnyi koncentrációk esetén $Q = 1$, így $EME = \Delta \varepsilon^\circ$. A reakció előrehaladásával Q növekszik, egészen addig, amíg be nem áll az egyensúly, azaz $Q = K$ nem teljesül. Ha $Q = K$, akkor az elektromotoros erő zérus, az elem „lemerült”:



9.6.1. ábra: Az elektromotoros erő a reakcióhányados logaritmusának függvényében

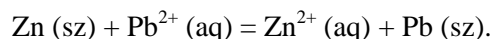
Mi történik, ha egy oldatban úgy mérjük össze az anyagok koncentrációit, hogy a $Q > K$ egyenlőtlenség teljesül? Ekkor természetesen nem mérhetünk negatív elektromotoros erőt (a fenti képlet alkalmazásakor az jönne ki). Ilyenkor az előzővel ellentétes irányú folyamat indul meg, míg el nem érjük az egyensúlyt, azaz míg az elektromotoros erő 0-ra nem csökken.

9.26. példa:

100 cm³ 0,500 mol/dm³ koncentrációjú Pb(NO₃)₂-oldatba 13,00 g fém cinket helyezünk. Mi történik? Mekkora lesz a cink- és az ólomionok koncentrációja az egyensúly beállása után? (Az oldat térfogata nem változik eközben.) Mekkora lesz a fém tömege? $\varepsilon^\circ(\text{Pb}^{2+}/\text{Pb}) = -0,126 \text{ V}$; $\varepsilon^\circ(\text{Zn}^{2+}/\text{Zn}) = -0,762 \text{ V}$.

Megoldás:

A Zn²⁺/Zn rendszer standard potenciálja negatívabb, ezért a fém Zn oldatba megy Zn²⁺-ionok formájában, az Pb²⁺-ionok pedig kiválik az oldatból:



Számítsuk ki a fenti folyamat egyensúlyi állandóját! A fentiekhez hasonlóan egyensúlyban megegyezik a Zn²⁺/Zn és Pb²⁺/Pb rendszer elektródpotenciálja:

$$\varepsilon^\circ(\text{Zn}^{2+}/\text{Zn}) + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg[\text{Zn}^{2+}] = \varepsilon^\circ(\text{Pb}^{2+}/\text{Pb}) + \frac{0,0591\text{V}}{2} \cdot \lg[\text{Pb}^{2+}].$$

Ebből a folyamat egyensúlyi állandójának logaritmusa:

$$\lg K = \lg \frac{[\text{Zn}^{2+}]}{[\text{Pb}^{2+}]} = \frac{2 \cdot [\varepsilon^\circ(\text{Pb}^{2+}/\text{Pb}) - \varepsilon^\circ(\text{Zn}^{2+}/\text{Zn})]}{0,0591\text{V}} = \frac{2 \cdot [(-0,126 \text{ V}) - (-0,762 \text{ V})]}{0,0591\text{V}} = 22,52.$$

Így a folyamat egyensúlyi állandója:

$$K = \frac{[\text{Zn}^{2+}]}{[\text{Pb}^{2+}]} = 10^{22,52} = 3,33 \cdot 10^{21}.$$

A folyamat tehát gyakorlatilag teljesen el van tolódva az ólom kiválásának irányába. Ezután meg kell állapítanunk, hogy az oldatban lévő ólomionok vagy a fém cink van-e feleslegben.

$$n(\text{Zn}) = \frac{m}{A_r} = \frac{13,00}{65,0} \text{ mol} = 0,200 \text{ mol} \quad n(\text{Pb}^{2+}) = 0,1 \cdot 0,5 \text{ mol} = 0,050 \text{ mol}$$

Tehát a fém cink van feleslegben, és az egyensúlyi állandó alapján gyakorlatilag az összes ólom kiválik. Így a cinkionok koncentrációja gyakorlatilag $0,500 \text{ mol/dm}^3$ -nek tekinthető. Így az ólomionok koncentrációja:

$$[\text{Pb}^{2+}] = \frac{[\text{Zn}^{2+}]}{K} = \frac{0,500}{3,33 \cdot 10^{21}} \text{ mol/dm}^3 = 1,50 \cdot 10^{-22} \text{ mol/dm}^3.$$

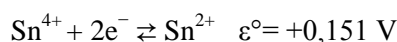
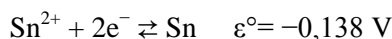
A kivált ólom tömege így: $m(\text{Pb}) = 207,0 \cdot 0,050 = 10,35 \text{ g}$.

A maradék cink tömege: $m(\text{Zn}) = 65,0 \cdot (0,200 - 0,050) = 9,75 \text{ g}$.

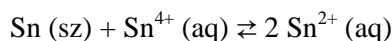
A fém tömege összesen: $m = m(\text{Pb}) + m(\text{Zn}) = 20,1 \text{ g}$.

9.27. példa:

Ismertek a következő folyamatok standard elektródpotenciáljai:



a) Határozzuk meg a következő szinproporciós folyamat egyensúlyi állandóját 25°C -on!



100,0 ml $0,500 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú SnCl_4 -oldatba 25°C -on 10,00 gramm fém ónt helyezünk, és megvárjuk, hogy beálljon az egyensúly. (Eközben az oldat térfogatváltozása elhanyagolható.)

b) Állapítsuk meg az Sn^{2+} - és Sn^{4+} -ionok koncentrációit az oldatban!

c) Mekkora a maradék szilárd ón tömege?

Megoldás:

Egyensúlyban: $\varepsilon(\text{Sn}^{2+}/\text{Sn}) = \varepsilon(\text{Sn}^{4+}/\text{Sn}^{2+})$, azaz

$$\varepsilon^\circ(\text{Sn}^{2+}/\text{Sn}) + \frac{0,0591 \text{ V}}{2} \cdot \lg[\text{Sn}^{2+}] = \varepsilon^\circ(\text{Sn}^{4+}/\text{Sn}^{2+}) + \frac{0,0591 \text{ V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{Sn}^{4+}]}{[\text{Sn}^{2+}]}$$

Így az előző feladatokhoz hasonlóan:

$$\lg K = \lg \frac{[\text{Sn}^{2+}]^2}{[\text{Sn}^{4+}]} = \frac{2 \cdot [\varepsilon^\circ(\text{Sn}^{4+}/\text{Sn}^{2+}) - \varepsilon^\circ(\text{Sn}^{2+}/\text{Sn})]}{0,0591 \text{ V}} = \frac{2 \cdot [(+0,151 \text{ V}) - (-0,138 \text{ V})]}{0,0591 \text{ V}} = 9,78.$$

Tehát $K = 6,03 \cdot 10^9$. Mivel K értéke nagyon nagy, feltételezhető, hogy gyakorlatilag az összes Sn^{4+} redukálódik Sn^{2+} -ionná, azaz $[\text{Sn}^{2+}]_e = 2 \cdot 0,500 \text{ mol/dm}^3 = 1,000 \text{ mol/dm}^3$. Az egyensúlyi állandó segítségével:

$$[\text{Sn}^{4+}]_e = \frac{[\text{Sn}^{2+}]_e^2}{K} = \frac{1,000^2}{6,03 \cdot 10^9} = 1,66 \cdot 10^{-10} \text{ mol/dm}^3.$$

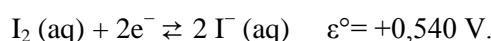
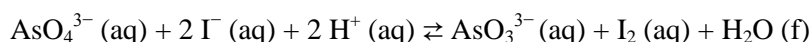
Eredetileg az oldatban volt $n_0 = c_0 \cdot V = 0,500 \cdot 0,100 \text{ mol} = 0,050 \text{ mol}$ ónion, az egyensúly beálltakor pedig $n_e = [\text{Sn}^{2+}]_e \cdot V = 1,000 \cdot 0,100 \text{ mol} = 0,100 \text{ mol}$.

A feloldódott ón anyagmennyisége: $\Delta n = 0,100 \text{ mol} - 0,050 \text{ mol} = 0,050 \text{ mol}$, melynek tömege: $m = A_r \cdot \Delta n = 119 \cdot 0,050 \text{ g} = 5,95 \text{ g}$, így $10,00 \text{ g} - 5,95 \text{ g} = 4,05 \text{ g}$ fém ón maradt.

Tehát a folyamat egyensúlyi állandója $\underline{6,03 \cdot 10^9}$, az egyensúlyi koncentrációk: $[\text{Sn}^{2+}]_e = \underline{1,000 \text{ mol/dm}^3}$, $[\text{Sn}^{4+}]_e = \underline{1,66 \cdot 10^{-10} \text{ mol/dm}^3}$, a maradék fém ón tömege $\underline{4,05 \text{ gramm}}$.

9.28. példa:

Mekkora a következő folyamat egyensúlyi állandója 25 °C-on?



Megoldás:

A keresett egyensúlyi állandó:

$$K = \frac{[\text{AsO}_3^{3-}] \cdot [\text{I}_2]}{[\text{AsO}_4^{3-}] \cdot [\text{I}^-]^2 \cdot [\text{H}^+]^2}.$$

Egyensúlyban: $\varepsilon(\text{AsO}_4^{3-} + 2\text{H}^+ / \text{AsO}_3^{3-}) = \varepsilon(\text{I}_2 / 2\text{I}^-)$, tehát

$$\varepsilon^\circ(\text{AsO}_4^{3-} + 2\text{H}^+ / \text{AsO}_3^{3-}) + \frac{0,0591 \text{ V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{AsO}_4^{3-}] \cdot [\text{H}^+]^2}{[\text{AsO}_3^{3-}]} = \varepsilon^\circ(\text{I}_2 / 2\text{I}^-) + \frac{0,0591 \text{ V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{I}_2]}{[\text{I}^-]^2}.$$

Megfelelő formára hozva az egyenlet:

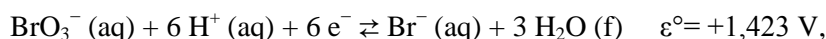
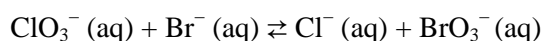
$$\varepsilon^\circ(\text{AsO}_4^{3-} + 2\text{H}^+ / \text{AsO}_3^{3-}) - \varepsilon^\circ(\text{I}_2 / 2\text{I}^-) = \frac{0,0591 \text{ V}}{2} \cdot \lg \frac{[\text{AsO}_3^{3-}] \cdot [\text{I}_2]}{[\text{AsO}_4^{3-}] \cdot [\text{I}^-]^2 \cdot [\text{H}^+]^2} = \frac{0,0591 \text{ V}}{2} \cdot \lg K,$$

$$\lg K = \frac{2 \cdot [\varepsilon^\circ(\text{AsO}_4^{3-} + 2\text{H}^+ / \text{AsO}_3^{3-}) - \varepsilon^\circ(\text{I}_2 / 2\text{I}^-)]}{0,0591 \text{ V}} = \frac{2 \cdot [(+0,574 \text{ V}) - (+0,540 \text{ V})]}{0,0591 \text{ V}} = 1,151.$$

Így a keresett egyensúlyi állandó: $K = \underline{14,14}$.

9.29. példa:

Mekkora a következő folyamat egyensúlyi állandója 25 °C-on?



Megoldás:

A keresett egyensúlyi állandó:

$$K = \frac{[\text{BrO}_3^-] \cdot [\text{Cl}^-]}{[\text{ClO}_3^-] \cdot [\text{Br}^-]}$$

Egyensúlyban: $\varepsilon(\text{BrO}_3^- + 6\text{H}^+ / \text{Br}^-) = \varepsilon(\text{ClO}_3^- + 6\text{H}^+ / \text{Cl}^-)$, tehát

$$\varepsilon^\circ(\text{BrO}_3^- + 6\text{H}^+ / \text{Br}^-) + \frac{0,0591\text{V}}{6} \cdot \lg \frac{[\text{BrO}_3^-] \cdot [\text{H}^+]^6}{[\text{Br}^-]} = \varepsilon^\circ(\text{ClO}_3^- + 6\text{H}^+ / \text{Cl}^-) + \frac{0,0591\text{V}}{6} \cdot \lg \frac{[\text{ClO}_3^-] \cdot [\text{H}^+]^6}{[\text{Cl}^-]}$$

Megfelelő formára hozva az egyenletet:

$$\frac{0,0591\text{V}}{6} \cdot \lg \left(\frac{[\text{BrO}_3^-] \cdot [\text{H}^+]^6}{[\text{Br}^-]} \cdot \frac{[\text{Cl}^-]}{[\text{ClO}_3^-] \cdot [\text{H}^+]^6} \right) = \varepsilon^\circ(\text{ClO}_3^- + 6\text{H}^+ / \text{Cl}^-) - \varepsilon^\circ(\text{BrO}_3^- + 6\text{H}^+ / \text{Br}^-),$$

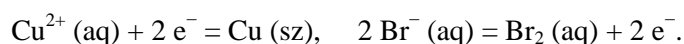
$$\lg K = \frac{6 \cdot [\varepsilon^\circ(\text{ClO}_3^- + 6\text{H}^+ / \text{Cl}^-) - \varepsilon^\circ(\text{BrO}_3^- + 6\text{H}^+ / \text{Br}^-)]}{0,0591\text{V}} = \frac{6 \cdot [(+1,451\text{V}) - (+1,423\text{V})]}{0,0591\text{V}} = 2,843.$$

Tehát a keresett egyensúlyi állandó: $K = \underline{696}$.

9.7. Az elektrolízis

Az alábbi kísérletben réz(II)-bromid (CuBr_2) vizes oldatát töltöttük egy U alakú csőbe. Az U alakú cső mindkét szárába egy-egy grafit-elektrodát helyezünk, és a grafit-elektrodokra egyenfeszültséget kapcsolunk. Ekkor az egyenáram hatására az egyik elektródon, a katódon Cu^{2+} -ionok redukálódnak fém rézzé, a másik elektródon, az anódon pedig Br^- -ionok oxidálódnak, melynek során elemi bróm keletkezik. Az **elektrolízis** esetén a negatív póluson történik a redukció, míg a pozitív póluson az oxidáció. Tehát a katód a negatív pólus és az anód a pozitív.

A folyamatok reakcióegyenletei:

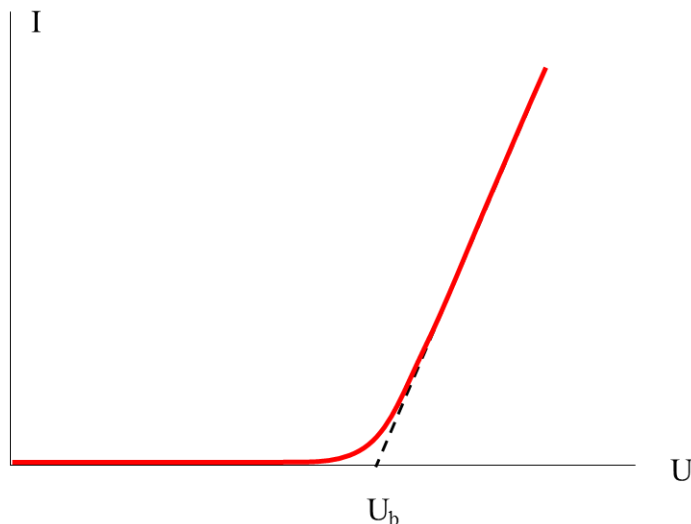


A fenti folyamatok azonban csak az első pillanatban mennek végbe. Ennek oka, hogy az első áramlökés hatására a grafitkatód Cu^{2+}/Cu elektróddá alakul, míg a másik elektród $\text{Br}_2/2\text{Br}^-$ elektróddá válik. Így az eredetileg indifferent elektródok különbözővé válnak, így egy galvánelem jön létre. Ezt a folyamatot **kémiai polarizációnak** nevezzük. Általánosságban **polarizációnak** nevezzük azt a jelenséget, melynek során az áthaladó áram hatására megváltozik egy elektród potenciálja. A kémiai polarizáció esetén megváltozik az elektród anyagi minősége, így potenciálja is változik. (Megjegyzés: a polarizációt okozhatja koncentrációváltozás is, ilyenkor **koncentrációs polarizációról** beszélünk. Például koncentrációs polarizációt okoz, ha az elektródreakció hatására az oldatban csökken vagy növekszik az oxidált vagy redukált forma koncentrációja.)

Tehát a polarizáció következtében a grafit-elektrodokból Cu^{2+}/Cu , illetve $\text{Br}_2/2\text{Br}^-$ elektródok keletkeznek, melyek így egy galvánelemet alkotnak. A galvánelem pozitív pólusa $\text{Br}_2/2\text{Br}^-$ elektród, negatív pólusa pedig a Cu^{2+}/Cu elektród. Az így létrejött galvánelemben a réz oxidálódik Cu^{2+} -ionokká (anód), míg az elemi bróm Br^- -ionokká redukálódik (katód). (Megjegyzés: ha megszüntetjük a feszültséget, a létrejött galvánelemben ténylegesen végbemennek ezek a folyamatok!) A galvánelemben a korábbiakhoz hasonlóan a pozitívabb elektród a katód, a negatívabb pedig az anód. Így a polarizáció következtében létrejött elektromotoros erő (polarizált feszültség) ellentétes irányú az elektrolizáló feszültséggel. (A polarizált feszültség mindig olyan irányú, hogy a polarizáló áram erősségét csökkenteni igyekszik.) Ebből következik, hogy az elektrolízis nem mehet végbe

tetszőlegesen kis feszültségek esetén: az elektrolizáló feszültségnek „le kell győznie” a létrejött galvánelem elektromotoros erejét, azaz egy meghatározott feszültségnél nagyobb feszültséget kell alkalmaznunk. Ezt a minimális feszültséget **bontási feszültségnek** vagy **bomlásfeszültségnek** (U_b) nevezzük.

Mi történik, ha a CuBr_2 -oldatba merülő grafitelektródokra növekvő egyenfeszültséget kapcsolunk, és közben mérjük az áramerősséget? Az áramerősséget a feszültség függvényében ábrázolva a következő görbét kapjuk:



9.7.1. ábra: Az áramerősség a feszültség függvényében

Kezdetben, tehát ha a feszültség kisebb, mint a bontási feszültség, gyakorlatilag nem mérhető áram. Ha elérjük a bontási feszültséget, ennél nagyobb feszültség alkalmazásakor tartós áramot tapasztalunk. Ekkor már érvényes az oldatra az Ohm-törvény: a feszültség és az áramerősség között lineáris kapcsolat van:

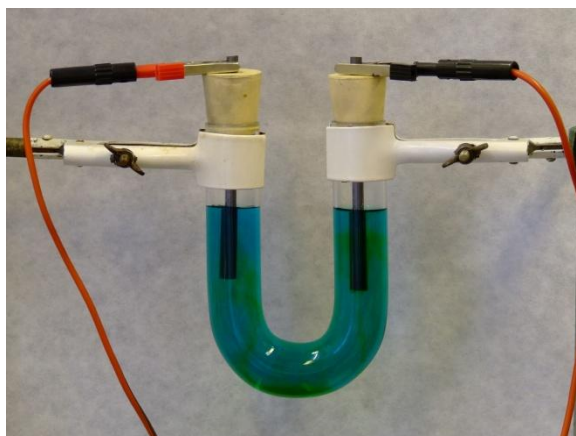
$$R = \frac{U - U_b}{I}.$$

Mint látható, az oldat elektromos ellenállással (R) rendelkezik. (Megjegyzés: a feszültséget növelve az áramerősség növekedése nem marad lineáris: mivel az elektródreakcióban átalakulnak az oldatban található ionok, az oldatban lecsökken a vezető ionok koncentrációja, azaz fellép a koncentrációs polarizáció jelensége. Az elektrolitoldatok koncentrációja – mint később látni fogjuk – függ az oldott anyag koncentrációjától, az oldat hígulásával növekszik az oldat ellenállása. A növekvő ellenállás következtében csökken az áramerősség.)

Ha tehát a bontási feszültségnél nagyobb feszültséggel végezzük az elektrolízist, a negatív elektródon a Cu^{2+} -ionok fém rézzé redukálódnak, a másik elektródon pedig a Br^- -ionok elemi brómmá oxidálódnak. Elektrolízis esetén tehát elektromos áram segítségével kémiai reakciót, kémiai átalakulást hajtunk végre. Ez a folyamat „ellentétes irányú” a galvánelemekkel összehasonlítva: galvánelemek esetén kémiai átalakulással elektromos áramot lehet előállítani.

Érdeemes összefoglalni, hogy melyik elektród a katód, illetve anód az elektrolízis, illetve galvánelemek esetén!

	Katód	Anód
Végbemenő folyamat	Redukció	Oxidáció
Elektrolízis	Negatív \ominus	Pozitív \oplus
Galvánelem	Pozitív \oplus	Negatív \ominus



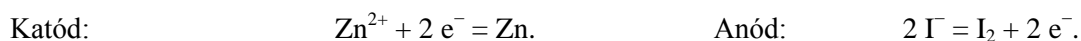
9.7.2. ábra: CuBr_2 -oldat elektrolízise (a jobb oldali elektród az anód)

9.7.1. Az elektrolízis különböző oldatokban

Az alábbiakban néhány példán keresztül bemutatjuk a különböző összetételű oldatok elektrolízisekor lejátszódó kémiai folyamatokat.

ZnI_2 -oldat

Ha cink-jodid-oldatot elektrolizálunk grafit-elektrodok között, a katódon fém cink redukálódik, az anódon pedig elemi jód válik le. A folyamatok egyenletei:



9.7.1.1. ábra: Cink-jodid-oldat elektrolízise grafit-elektrodok között (a jobb oldali elektród az anód)



Az egyenlet alapján jól megfigyelhető, hogy az oldatban a cink-jodid-koncentráció az elektrolízis folyamán csökken.

Ehhez hasonlóan más kationok is redukálhatóak, illetve más anionok is oxidálhatóak. Például elektrolitikus úton leválasztható a réz, a kadmium, az ólom, a króm, a nikkelt stb. A bromidionok elemi brómmá, a kloridionok pedig klórgázzá oxidálhatóak.

Na₂SO₄-oldat

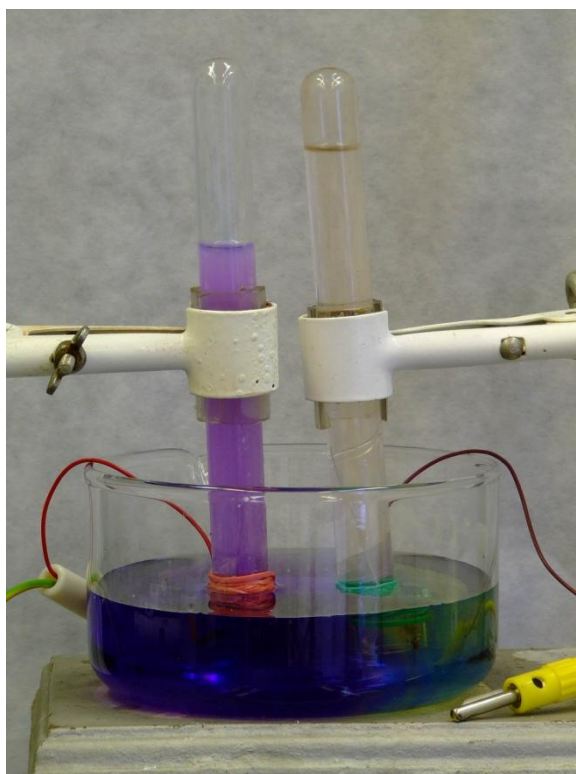
Nátrium-szulfát-oldat platinaelektrodok között történő elektrolízisekor vízbontás történik, azaz a katódon hidrogéngáz fejlődik, az anódon pedig oxigéngáz keletkezik. A folyamatok egyenleteit többféle formában is fel lehet írni. Az egyik lehetőség, hogy a víz ionjaiból keletkezik a kétféle gáz: a hidrogénionok hidrogéngázzá redukálódnak, a hidroxidionok pedig oxigénné oxidálódnak.



Egy másik lehetőség, hogy a víz redukciójának vagy oxidációjának bruttó folyamatát írjuk fel:



A fenti egyenletpárok összességében ugyanazt jelentik: a katódtérben az oldat lúgosodik, az anód környezetében pedig savasodik a kémhatás. (Újabb kísérletek kimutatták, hogy a hidrogénionok redukciója még semleges vagy gyengén lúgos oldatban is végbemegy, viszont savas oldatokban nem jelentős a víz redukciója hidroxidionokká. Éppen ezért elfogadható mindkét felírásmód az esetek többségében.)



9.7.1.2. ábra: Nátrium-szulfát-oldat elektrolízise platinaelektrodok között
(a jobb oldali elektród az anód)



Fontos hangsúlyozni, hogy platinaelektrodokat alkalmazva nem választható le a fém nátrium. Ez könnyen megérthető, ha belegondolunk, hogy fém nátriumot vízbe helyezve az hidrogéngáz fejlődése közben oldódik. Általánosságban is megfogalmazható, hogy az alkáli- és alkáliföldfémek, illetve más igen negatív redukciós potenciálú fémek ionjai vizes oldatból csak speciális körülmények között redukálhatóak ki.

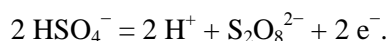
Ilyen speciális eljárás a *higanykatódos redukció*: katódként fém higanyt alkalmazva a nátriumionok redukciójával keletkező fém nátriumból amalgám (ötvetet) képződik. A módszert régebben az iparban is használták: nátrium-klorid-oldat elektrolízisével klórgázt és nátrium-amalgámot állítottak elő, az amalgámot vízzel reagáltatva nátrium-hidroxid és hidrogéngáz keletkezik. A higanykatódos elektrolízist ma már csak elenyésző mértékben használják, helyette korszerűbb és környezetkímélőbb módszereket alkalmaznak.

Felmerülhet a kérdés, hogy milyen elektrolitikus eljárással lehet előállítani alkáli- és alkáliföldfémeket. A vizes közeget célszerű elkerülni, oldat helyett *olvadékot* kell elektrolizálni. Például a fém nátriumot iparilag nátrium-klorid-olvadék elektrolízisével állítják elő (az olvadék az olvadáspont csökkentése céljából kalcium-kloridot is tartalmaz – Downs-eljárás). Hasonló módon állítanak elő kalciumot (CaCl₂-olvadékból), illetve magnéziumot (MgCl₂-olvadékból). A fém alumínium előállítása kriolitban (Na₃AlF₆) oldott Al₂O₃ olvadékelektrolízisével történik.

A szulfátionok oxidációja helyett az anódon a hidroxidionok oxidálódnak. Ennek oka, hogy az összetett ionok (mint a szulfátion, nitrátion, foszfátion stb.) igen stabilak, nehezen oxidálhatóak. Híg oldatban az összetett ionok helyett ezért a hidroxidionok vagy a víz oxidációja megy végbe. Kivétel ez alól, ha az összetett ion könnyen oxidálható (ez természetesen a redoxipotenciáltól függ).

Kénsavoldat

kénsavoldatot platinaelektrodok között elektrolizálva a fentiekhez hasonlóan vízbontás történik. Töményebb oldatban azonban a kénsavból keletkező hidrogén-szulfát-ionok oxidálódnak, mely során peroxo-diszulfát-ionok keletkeznek az alábbi egyenlet alapján:

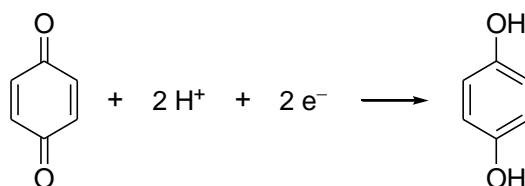


A peroxo-dikénsavat régebben hidrogén-peroxid előállítására használták, ám az elektrolízis költségcsökkentése következtében ma már nem alkalmazzák ezt a módszert.

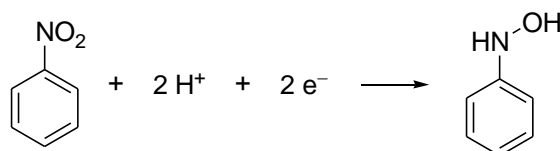
Szerves anyagok elektrolízise

Természetesen nemcsak ionok, hanem semleges molekulák is részt vehetnek elektródreakcióban. Mint fentebb láttuk, a víz is oxidálható, illetve redukálható. Ehhez hasonlóan szerves anyagok is elektrolizálhatóak. Néhány példa:

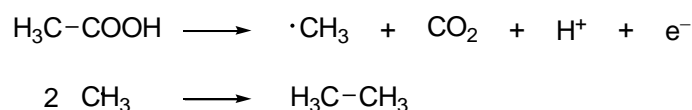
p-benzokinin redukciója hidrokinonná:



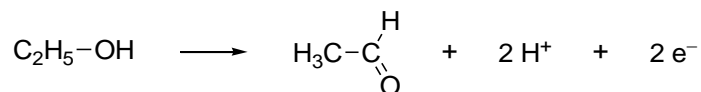
Nitrobenzol redukciója fenil-hidroxil-aminná:



Ecetsav anódos oxidációja:



Etanol oxidációja acetaldehiddé:



9.7.2. Az elektrolízis mennyiségi törvényei

Az elektrolízis mennyiségi összefüggéseit Faraday már 1832-ben felfedezte. A különböző szakkönyvek az elektrolízis törvényeit többféleképpen is megfogalmazzák, és általában két Faraday-törvényt is megkülönböztetnek.

Faraday I. törvénye: az elektrolízis során átalakult anyag anyagmennyisége (illetve tömege) egyenesen arányos a rendszeren áthaladt elektromos töltésmennyiséggel:

$$n = k \cdot Q.$$

Az **elektromos töltés** (vagy töltésmennyiség) állandó egyenáram esetén egyenlő az áramerősség és az idő szorzatával. Másképp megfogalmazva: állandó egyenárammal elektrolizálva az áthaladt töltésmennyiség egyenesen arányos az idővel, és az arányossági tényező az áramerősség.

$$Q = I \cdot t$$

Faraday I. törvényét úgy is megfogalmazhatjuk, hogy az állandó egyenárammal leválasztott (átalakított) anyag anyagmennyisége egyenesen arányos az áramerősséggel és az idővel is.

Faraday II. törvénye: 1 mólnyi anyag leválasztásához $z \cdot F$ coulomb-nyi töltés szükséges, ahol z a folyamat elektronszám-változása.

Az F -fel jelölt Faraday-állandó 1 mól elektron töltését adja meg, értéke 96 485 C/mol.

Tehát Faraday II. törvénye azt mondja ki, hogy ha az elektródreakcióban az elektronszám-változás z , akkor 1 mól anyag átalakításához z mólnyi elektron szükséges. Ez egyszerűen következik a redoxireakciók sztöchiometriájából.

Másképp megfogalmazva: n mólnyi anyag átalakításához szükséges töltésmennyiség megkapható az alábbi képlet segítségével: $Q = n \cdot z \cdot F$.

(A Faraday-állandót könnyen megkaphatjuk, ha tudjuk, hogy egy elektron töltése $1,602 \cdot 10^{-19}$ C, így F értéke:

$$F = e \cdot N_A = (1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}) \cdot (6,022 \cdot 10^{23} \text{ 1/mol}) = 96 485 \text{ C/mol.}$$

A 96 485 C töltésmennyiséget szokás 1 faraday-nek is mondani.)

Érdeemes még megemlíteni a töltésmennyiség egy gyakori mértékegységét is: 1 amperóra (rövidítve 1 Ah) az a töltés, melyet 1 amperes áram 1 óra alatt hoz létre.

$$1 \text{ Ah} = 1 \text{ A} \cdot 3 600 \text{ s} = 3 600 \text{ C} = 0,0373 \text{ F}$$

$$1 \text{ C} = 2,778 \cdot 10^{-4} \text{ Ah} \quad 1 \text{ F} = 26,80 \text{ Ah}$$

Az elektromos munka és mértékegysége:

$$W = Q \cdot U = I \cdot t \cdot U, \quad 1 \text{ C} \cdot 1 \text{ V} = 1 \text{ A} \cdot 1 \text{ s} \cdot 1 \text{ V} = 1 \text{ J.}$$

Az elektromos teljesítmény és mértékegysége:

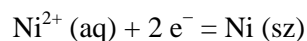
$$P = \frac{W}{t} = \frac{I \cdot t \cdot U}{t} = I \cdot U, \quad 1 \text{ A} \cdot 1 \text{ V} = 1 \text{ W.}$$

9.30. példa:

Nikkel(II)-nitrát-oldat elektrolízisével nikkelbevonatot készítünk. Mekkora töltés szükséges 2,000 gramm nikkel leválasztásához? Mennyi ideig kell elektrolizálni, ha az áramerősség 0,750 A?

Megoldás:

A Ni^{2+} -ionokból fém nikkel válik le az elektródfolyamatban:



Tehát $z = 2$. Számítsuk ki a kiredukált nikkel anyagmennyiségét!

$$n = \frac{m}{A_r} = \frac{2,000 \text{ g}}{58,7 \text{ g/mol}} = 0,0341 \text{ mol}$$

A redukcióhoz szükséges töltésmennyiség (mivel 1 nikkelion 2 elektront vesz fel):

$$Q = n \cdot z \cdot F = 0,0341 \cdot 2 \cdot 96\,485 \text{ C} = 6\,475 \text{ C.}$$

A szükséges idő:

$$t = \frac{Q}{I} = \frac{6475 \text{ C}}{0,750 \text{ A}} = 8766 \text{ s} = 146 \text{ min} = 2 \text{ h } 26 \text{ min.}$$

Tehát a szükséges töltésmennyiség 6475 C, az elektrolízis időtartama 2 óra 36 perc.

9.31. példa:

Egy szennyezett rézlemez 0,0500 grammos darabját kénsavban oldjuk, melynek során a szennyezők nem oldódnak fel. Az oldat Cu^{2+} -tartalmát 0,100 A-es árammal 20,00 perc alatt tudjuk kiredukálni. Állapítsa meg, hogy hány tömegszázalék volt a lemez réztartalma, hogyha az elektrolízis hatásfoka 91%!

Megoldás:

Az elektrolízis során átment töltésmennyiség:

$$Q = I \cdot t = 0,100 \cdot 20,00 \cdot 60 \text{ C} = 120 \text{ C.}$$

Az elektródreakcióra fordítódott (hasznos) töltésmennyiség:

$$Q_h = \eta \cdot Q = 0,91 \cdot 120 \text{ C} = 109,2 \text{ C.}$$

Ez a töltésmennyiség a Cu^{2+} -ionok redukációjára fordítódott. Így a Cu^{2+} -ionok anyagmennyisége:

$$n = \frac{Q_h}{z \cdot F} = \frac{109,2 \text{ C}}{2 \cdot 96485 \text{ C/mol}} = 5,66 \cdot 10^{-4} \text{ mol}$$

A kiredukált réz tömege megegyezik a feloldott rézlemez réztartalmával:

$$m(\text{Cu}) = A_r \cdot n = 63,5 \cdot 5,66 \cdot 10^{-4} \text{ g} = 0,0359 \text{ g.}$$

A rézlemez százalékos réztartalma:

$$w = \frac{m(\text{Cu})}{m_0} = \frac{0,0359 \text{ g}}{0,0500 \text{ g}} = 0,719 = 71,9\%.$$

Tehát a lemez 71,9% rezet tartalmazott.

9.32. példa:

Egy $90,0 \text{ cm}^2$ összfelületű tárgyat szeretnénk $0,500 \text{ mm}$ vastag krómréteggel bevonni. Mennyi ideig kell elektrolizálni a CrCl_3 -oldatot, ha az alkalmazott áramerősség $0,500 \text{ A}$ és az elektrolízis hatásfoka 87% ? $d(\text{Cr})=7,15 \text{ g/cm}^3$.

Megoldás:

A bevonat térfogatát megkapjuk a felület és a rétegvastagság szorzataként:

$$V = A \cdot h = 90,0 \cdot 0,0500 \text{ cm}^3 = 4,50 \text{ cm}^3.$$

A kivált króm tömege és anyagmennyisége:

$$m = d \cdot V = 7,15 \cdot 4,50 \text{ g} = 32,175 \text{ g}, \quad n = \frac{m}{A_r} = \frac{32,175 \text{ g}}{52 \text{ g/mol}} = 0,61875 \text{ mol}$$

Az áthaladt hasznos töltésmennyiség:

$$Q_h = 0,61875 \cdot 3 \cdot 96485 \text{ C} = 179100 \text{ C.}$$

Az összes töltésmennyiség:

$$Q = \frac{Q_h}{\eta} = \frac{179100 \text{ C}}{0,87} = 205862 \text{ C.}$$

Az elektrolízishez szükséges idő:

$$t = \frac{Q}{I} = \frac{205862 \text{ C}}{0,500 \text{ A}} = 411789 \text{ s} = 114,4 \text{ h.}$$

Tehát az elektrolízis időtartama 114,4 óra.

9.33. példa:

Nikkel-szulfát-oldat elektrolízisekor a katódon fém nikkel válik le, az anódon oxigén fejlődik, az oldat pedig a felszabaduló kénsavtól megsavanyodik. Számítsuk ki, mekkora tömegű nikkel-karbonát szükséges óránként a sav közömbösítésére az alábbi egyenlet alapján, ha az oldaton $1,00 \text{ amper}$ erősségű áram halad át! Az elektrolízis hatásfoka 100% .

Megoldás:

Az áthaladt töltésmennyiség egy óra alatt:

$$Q = I \cdot t = 1,00 \text{ A} \cdot 3\,600 \text{ s} = 3\,600 \text{ C}.$$

A kiredukálódott nikkell anyagmennyisége:

$$n(\text{Ni}) = \frac{Q}{z \cdot F} = \frac{3\,600 \text{ C}}{2 \cdot 96\,485 \text{ C/mol}} = 0,0187 \text{ mol}$$

A kivált nikkellel azonos anyagmennyiségű kénsav szabadul fel, melyet szintén azonos anyagmennyiségű (0,0187 mol) nikkell-karbonáttal közömbösíthetünk az alábbi egyenlet szerint:



A szükséges nikkell-karbonát tömege:

$$m = M \cdot n = 119 \text{ g/mol} \cdot 0,0187 \text{ mol} = 2,22 \text{ g}.$$

Tehát 2,22 gramm nikkell-karbonátra van szükség.

9.34. példa:

Egy ezüst-nitrát–ezüst-szulfát keverék 1,00 g-ját vízben oldva az oldatban levő teljes ezüstmennyiség 2,00 amperes árammal 5,00 perc alatt elektrolizálható ki. Számítsuk ki a keverék összetételét tömegszázalékban! (Az elektrolízis hatásfoka 100%!)

Megoldás:

A keverék ezüsttartalmának redukciójához szükséges töltésmennyiség:

$$Q = I \cdot t = 2,00 \cdot 5,00 \cdot 60 \text{ C} = 600 \text{ C}.$$

A kiredukált Ag^+ -ionok anyagmennyisége:

$$n = \frac{Q_h}{z \cdot F} = \frac{600 \text{ C}}{1 \cdot 96\,485 \text{ C/mol}} = 6,219 \cdot 10^{-3} \text{ mol}$$

A mintában legyen x mól AgNO_3 és y mól Ag_2SO_4 ! Ekkor az ezüsttartalomra felírható a következő egyenlet:

$$x + 2 \cdot y = 6,219 \cdot 10^{-3} \text{ (mol)}.$$

A moláris tömegek alapján a minta tömege:

$$170,0 \cdot x + 312 \cdot y = 1,00 \text{ (g)}.$$

Az egyenletrendszer megoldása: $x = 2,131 \cdot 10^{-3} \text{ mol}$, $y = 2,044 \cdot 10^{-3} \text{ mol}$.

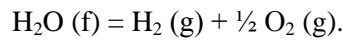
Így a tömegszázalékos összetétel: 36,2% AgNO_3 és 63,8% Ag_2SO_4 .

9.35. példa:

50,0 gramm 10,0 tömegszázalékos H_2SO_4 -oldatot 12,5 órán keresztül elektrolizálunk 4,00 A-es árammal. Hány tömegszázalékos lesz az oldat az elektrolízis végén? Mekkora térfogatú 310,0 K hőmérsékletű és 100,0 kPa nyomású H_2 -, illetve O_2 -gáz fejlődik eközben?

Megoldás:

A vízbontás bruttó egyenlete:



Eközben 2 F töltés halad át, így 2 F töltés hatására 1 mól víz bomlik elemeire. Az áthaladt töltés:

$$Q = I \cdot t = 4,00 \cdot 12,5 \cdot 3600 \text{ s} = 180\,000 \text{ C}.$$

Az elbontott víz anyagmennyisége és tömege:

$$n = \frac{Q}{z \cdot F} = \frac{180\,000 \text{ C}}{2 \cdot 96\,485 \text{ C/mol}} = 0,933 \text{ mol} \Rightarrow m = M \cdot n = 18,0 \cdot 0,933 \text{ g} = 16,8 \text{ g}.$$

Tehát 16,8 g víz elbomlott, a kénsav tömege nem változott. Így az új tömegszázalékos összetétel:

$$w = \frac{m(\text{H}_2\text{SO}_4)}{m_{\text{oldat}}} = \frac{5,00 \text{ g}}{50,0 \text{ g} - 16,8 \text{ g}} = 0,150 = 15,0\%.$$

0,933 mól vízből keletkezett 0,933 mól hidrogén-, és 0,4665 mól oxigéngáz. A gázok térfogata:

$$V(\text{H}_2) = \frac{n(\text{H}_2) \cdot R \cdot T}{p} = \frac{0,933 \cdot 8,314 \cdot 310,0}{100,0} \text{ dm}^3 = 24,0 \text{ dm}^3,$$

$$V(\text{O}_2) = \frac{n(\text{O}_2) \cdot R \cdot T}{p} = \frac{0,4665 \cdot 8,314 \cdot 310,0}{100,0} \text{ dm}^3 = 12,0 \text{ dm}^3.$$

Tehát a kénsavoldat 15,0%-os lett, és 24,0 dm³ hidrogén-, illetve 12,0 dm³ oxigéngáz fejlődött az elektrolízis közben.

9.36. példa:

Egy durranógáz-coulombmérőn egyenáram halad át, 25,7 cm³ 287 K hőmérsékletű és 101,64 kPa nyomású durranógáz fejlődik eközben. Mekkora töltésmennyiség haladt át eközben az oldaton? (Az elektrolit tenziójától eltekinthetünk, az elektrolízis hatásfoka 100%!)

Megoldás:

A vízbontás egyenlete 2 F töltés hatására: $\text{H}_2\text{O} = \text{H}_2 + \frac{1}{2} \text{O}_2$. 1 mól víz bomlása során 1,5 mól gáz fejlődik. A durranógáz anyagmennyisége:

$$n = \frac{p \cdot V}{R \cdot T} = \frac{101,64 \cdot 0,0257}{8,314 \cdot 287} \text{ mol} = 1,095 \cdot 10^{-3} \text{ mol}$$

Ez az elbontott víz anyagmennyiségének 1,5-szerese. Az elektrolízis során elbontott víz anyagmennyisége: $7,298 \cdot 10^{-4}$ mol. A vízbontáshoz szükséges töltés:

$$Q = n \cdot z \cdot F = 7,298 \cdot 10^{-4} \cdot 2 \cdot 96\,485 \text{ C} = 140,8 \text{ C}.$$

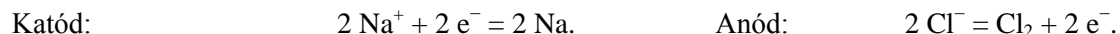
Az áthaladt töltésmennyiség 140,8 C.

9.37. példa:

Iparilag a fém nátriumot olyan nátrium-klorid-olvadék elektrolízisével állítják elő, mely az olvadáspont csökkentése céljából kalcium-kloridot is tartalmaz (Downs-eljárás). Mekkora töltés és elektromos energia szükséges 1,00 tonna fém nátrium előállításához, ha az alkalmazott feszültség 8,00 V és az elektrolízis hatásfoka 87,5%? Mekkora térfogatú 885 K hőmérsékletű és normál légköri nyomású klórgáz fejlődik eközben? Mekkora az áramköltség, ha 1 kWh elektromos energia ára 42 Ft?

Megoldás:

Az elektród folyamatok:



A fém nátrium anyagmennyisége:

$$n(\text{Na}) = \frac{m}{A_r} = \frac{1,00 \cdot 10^6 \text{ g}}{23,0 \text{ g/mol}} = 4,348 \cdot 10^4 \text{ mol}$$

$4,348 \cdot 10^4$ mol nátriumion redukációjához szükséges töltésmennyiség:

$$Q_h = n \cdot z \cdot F = 4,348 \cdot 10^4 \cdot 1 \cdot 96\,485 \text{ C} = 4,195 \cdot 10^9 \text{ C.}$$

Az elektrolízis hatásfokának figyelembevételével:

$$Q = \frac{Q_h}{\eta} = \frac{4,195 \cdot 10^9 \text{ C}}{0,875} = 4,794 \cdot 10^9 \text{ C.}$$

Az elektromos munka:

$$W = Q \cdot U = 4,794 \cdot 10^9 \text{ C} \cdot 8,00 \text{ V} = 3,835 \cdot 10^{10} \text{ J} = 1,065 \cdot 10^4 \text{ kWh.}$$

Ennek az elektromos energiának az ára:

$$K = W \cdot a = 1,065 \cdot 10^4 \text{ kWh} \cdot 42 \text{ Ft/kWh} = 447\,500 \text{ Ft.}$$

A keletkezett klórgáz anyagmennyisége $2,174 \cdot 10^4$ mol, melynek térfogata:

$$V(\text{Cl}_2) = \frac{n(\text{Cl}_2) \cdot R \cdot T}{p} = \frac{2,174 \cdot 10^4 \cdot 8,314 \cdot 885}{101325} \text{ m}^3 = 1\,579 \text{ m}^3.$$

A szükséges töltésmennyiség $4,195 \cdot 10^9 \text{ C}$, az elektromos energia $1,065 \cdot 10^4 \text{ kWh}$, melynek ára 447 500 Ft. A folyamat során 1 579 m³ klórgáz fejlődik.

9.38. példa:

Egy alumíniumgyárban hetente 51,0 tonna timföldet (alumínium-oxid, Al_2O_3) elektrolizálnak fém alumíniummá a Hall–Héroult-eljárással. 1 kg alumínium piaci ára 260 Ft.

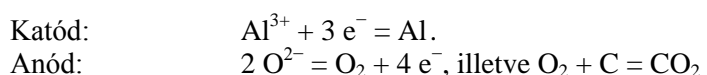
- 51,0 tonna timföld elektrolíziséből összesen mekkora bevételhez jut a gyár, ha a nyers alumíniumból a tisztítási eljárás során 6,50% a veszteség?
- Hány órán át kell 51,0 tonna timföldet elektrolizálni 500 kA-es árammal, ha az elektrolízis során 100%-os az áramkihasználás?

Az elektrolízis során grafitanódot alkalmaznak, mellyel a keletkező oxigén gáz reagál, miközben szén-dioxid keletkezik.

- Feltételezve, hogy a keletkező oxigén teljes mennyisége átalakul szén-dioxiddá, hetente hány tonna grafitra van szükség?
- Eközben hány m³ 1200 K hőmérsékletű, 101,300 kPa nyomású szén-dioxid-gáz fejlődik?

Megoldás:

Az olvadt kriolitban (Na_3AlF_6) a következő folyamatok mennek végbe:



A bruttó folyamat: $2 \text{ Al}_2\text{O}_3 = 4 \text{ Al} + 3 \text{ O}_2$

a) A timföld anyagmennyisége:

$$n(\text{Al}_2\text{O}_3) = \frac{m}{M} = \frac{5,10 \cdot 10^7 \text{ g}}{102 \text{ g/mol}} = 5,00 \cdot 10^5 \text{ mol}$$

Így az elméletileg előállítható alumíniummennyiség $1,00 \cdot 10^6 \text{ mol}$. A tiszta alumínium tömege:

$$m(\text{Al}) = (1-v) \cdot n \cdot A_r = (1-0,0650) \cdot 1,00 \cdot 10^7 \cdot 27,0 \text{ g} = 2,5245 \cdot 10^7 \text{ g} = 25\,245 \text{ kg.}$$

A gyár bevétele: $25\,245 \text{ kg} \cdot 260 \text{ Ft/kg} = 6\,563\,700 \text{ Ft.}$

b) $1,00 \cdot 10^6 \text{ mol}$ alumíniumion redukciójához szükséges töltésmennyiség:

$$Q = 1,00 \cdot 10^6 \cdot 3 \cdot 96\,485 \text{ C} = 2,895 \cdot 10^{11} \text{ C.}$$

Az elektrolízishez szükséges idő:

$$t = \frac{Q}{I} = \frac{2,895 \cdot 10^{11} \text{ C}}{500\,000 \text{ A}} = 5,79 \cdot 10^5 \text{ s} = 160,8 \text{ h} \approx 6,70 \text{ nap.}$$

c) $5,00 \cdot 10^5 \text{ mol}$ Al_2O_3 -ból keletkezik $7,50 \cdot 10^5 \text{ mol}$ O_2 , mely ugyanekkora anyagmennyiségű grafitral reagál. Tehát a grafit tömege:

$$m(\text{C}) = n \cdot A_r = 7,50 \cdot 10^5 \cdot 12,0 \text{ g} = 9,00 \cdot 10^6 \text{ g} = 9\,000 \text{ kg} = 9,00 \text{ tonna.}$$

d) A CO_2 -gáz térfogata:

$$V(\text{CO}_2) = \frac{n(\text{CO}_2) \cdot R \cdot T}{p} = \frac{7,50 \cdot 10^5 \cdot 8,314 \cdot 1200}{101300} \text{ m}^3 = 7,39 \cdot 10^4 \text{ m}^3.$$

A gyár bevétele 6,56 millió forint, az elektrolízist 6,70 napig kell végezni, eközben 9,00 tonna grafitra van szükség és $7,39 \cdot 10^4 \text{ m}^3$ szén-dioxid-gáz fejlődik.

9.39. példa:

Mekkora lesz 200,0 gramm, 10,00 tömeg%-os Na_2SO_4 -oldat tömeg%-os összetétele 200 órán át tartó elektrolízis után, ha az áramerősség 0,500 A, és az elektrolízis hatásfoka 100%? Az elektrolízist platinaelektrodok között végezzük. Válik-e ki az oldatból $\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$, ha tudjuk, hogy a kristályvízmentes Na_2SO_4 oldhatósága az elektrolízis hőmérsékletén 25 g/100 g víz.

Megoldás:

Az áthaladt töltésmennyiség:

$$Q = I \cdot t = 0,500 \text{ A} \cdot 200 \cdot 3600 \text{ s} = 360\,000 \text{ C.}$$

2 F hatására bomlik 1 mól víz, így az elbomlott víz anyagmennyisége és tömege:

$$n = \frac{Q}{z \cdot F} = \frac{360\,000 \text{ C}}{2 \cdot 96\,485 \text{ C/mol}} = 1,866 \text{ mol} \Rightarrow m = M \cdot n = 18,0 \cdot 1,866 \text{ g} = 33,6 \text{ g.}$$

Az oldatban a nátrium-szulfát tömegtörtje:

$$w = \frac{m(\text{Na}_2\text{SO}_4)}{m_{\text{oldat}}} = \frac{0,100 \cdot 200,0 \text{ g}}{200,0 \text{ g} - 33,6 \text{ g}} = 0,120 = 12,0\%.$$

A telített oldat összetétele:

$$w = \frac{m(\text{Na}_2\text{SO}_4)}{m_{\text{oldat}}} = \frac{25,0 \text{ g}}{125,0 \text{ g}} = 0,200 = 20,0\%.$$

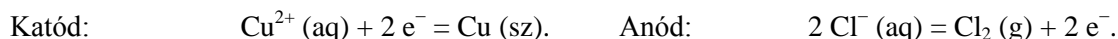
Az oldat 12,0% Na_2SO_4 -ot tartalmaz az elektrolízis végén, tehát az oldat még mindig telítetlen Na_2SO_4 -ra, azaz nem fog kiválni szilárd anyag.

9.40. példa:

680 g telített CuCl_2 -oldatot 2,00 órán keresztül 15,0 A-es áramerősséggel elektrolizálunk, így CuCl_2 -ra nézve 33,86 tömegszázalékos lett. Mekkora a CuCl_2 oldhatósága g vízmentes anyag/100 g víz mértékegységben kifejezve?

Megoldás:

Az elektródfolyamatok:



Tehát 2 F töltés áthaladása 1 mólnyi CuCl_2 távozásával jár. A töltésmennyiség:

$$Q = I \cdot t = 15,0 \text{ A} \cdot 7200 \text{ s} = 108\,000 \text{ C}.$$

Az elbontott CuCl_2 anyagmennyisége:

$$n = \frac{Q}{z \cdot F} = \frac{108\,000 \text{ C}}{2 \cdot 96\,485 \text{ C/mol}} = 0,5597 \text{ mol}$$

Ennek a CuCl_2 -mennyiségnek a tömege:

$$m = M \cdot n = 134,5 \cdot 0,5597 \text{ g} = 75,3 \text{ g}.$$

A maradék oldat tömege: $680 \text{ g} - 75,3 \text{ g} = 604,7 \text{ g}$, az ebben lévő CuCl_2 tömege:

$$m_{\text{maradék}} = w \cdot m_{\text{oldat}} = 0,3386 \cdot 604,7 \text{ g} = 204,7 \text{ g}.$$

680 g telített oldatban eredetileg volt összesen:

$$m(\text{CuCl}_2) = 204,7 \text{ g} + 75,3 \text{ g} = 280,0 \text{ g CuCl}_2.$$

Az elektrolízis kezdetén az oldatban a víz tömege:

$$m(\text{H}_2\text{O}) = 680,0 \text{ g} - 280,0 \text{ g} = 400,0 \text{ g}.$$

Így az oldhatóság:

$$\frac{m(\text{CuCl}_2)}{m(\text{H}_2\text{O})} = \frac{280,0 \text{ g}}{400,0 \text{ g}} = 70,0 \text{ g/100 g víz}.$$

Tehát a réz(II)-klorid oldhatósága 70,0 g/100 g víz.

9.41. példa:

270,0 gramm 17,5 tömegszázalékos $\text{Zn}(\text{NO}_3)_2$ -oldatot elektrolizálunk 6,00 A-es áramerősséggel. Állapítsuk meg a maradék homogenizált oldat tömegszázalékos összetételét

- 1,50 óra elteltével, illetve
- 3,00 óra elteltével!

Megoldás:

A cink-nitrát-oldat elektrolízisekor először a cinkionok redukálódnak, majd ha ezek elfogytak, az oldatból hidrogéngáz fejlődik. A nitrátionok az oldatban maradnak, az anódon oxigéngáz fejlődik. Tehát az oldat cink-nitrát-tartalma az elektrolízis előrehaladtával csökken, míg a salétromsavtartalma növekszik.

A cink-nitrát tömege a kiindulási oldatban: $0,175 \cdot 270,0 \text{ g} = 47,25 \text{ g}$. Ennek anyagmennyisége:

$$n = \frac{m}{M} = \frac{47,25 \text{ g}}{189 \text{ g/mol}} = 0,250 \text{ mol}$$

A teljes cinkmennyiség redukációjához szükséges idő:

$$t = \frac{Q}{I} = \frac{n \cdot z \cdot F}{I} = \frac{0,250 \cdot 2 \cdot 96485 \text{ C}}{6,00 \text{ A}} = \frac{48242,5 \text{ C}}{6,00 \text{ A}} = 8040 \text{ s} = 134 \text{ min} = 2,23 \text{ h.}$$

Ezek alapján az a. esetben az oldatban még marad cink-nitrát is a salétromsav mellett, míg a b. esetben a maradék oldat tiszta salétromsav.

a) A 1,50 óra alatt áthaladt töltésmennyiség:

$$Q = I \cdot t = 6,00 \text{ A} \cdot 1,50 \cdot 3600 \text{ s} = 32400 \text{ C.}$$

A kiredukálódott cink anyagmennyisége és tömege:

$$n(\text{Zn}) = \frac{Q}{z \cdot F} = \frac{32400 \text{ C}}{2 \cdot 96485 \text{ C/mol}} = 0,1679 \text{ mol} \Rightarrow m(\text{Zn}) = A_r \cdot n = 65,0 \cdot 0,1679 \text{ g} = 10,91 \text{ g.}$$

Eközben a $2 \text{ H}_2\text{O} = 4 \text{ H}^+ + \text{O}_2 + 4 \text{ e}^-$ egyenlet alapján oxigéngáz fejlődik. A keletkezett oxigén anyagmennyisége és tömege:

$$n(\text{O}_2) = \frac{Q}{z \cdot F} = \frac{32400 \text{ C}}{4 \cdot 96485 \text{ C/mol}} = 0,0840 \text{ mol} \Rightarrow m(\text{O}_2) = M \cdot n = 32,0 \cdot 0,0840 \text{ g} = 2,69 \text{ g.}$$

A maradék oldat tömegét megkapjuk, ha a kiindulási oldattömegből levonjuk a leválasztott cink és oxigéngáz tömegét: $270,0 \text{ g} - (10,91 \text{ g} + 2,69 \text{ g}) = 256,4 \text{ gramm}$.

A maradék cink-nitrát anyagmennyisége: $0,250 \text{ mol} - 0,1679 \text{ mol} = 0,0821 \text{ mol}$, melynek tömege 15,52 gramm. Keletkezett $2 \cdot 0,1679 \text{ mol} = 0,3358 \text{ mol}$ salétromsav, melynek tömege 21,16 gramm.

Az oldat összetétele:

$$w[\text{Zn}(\text{NO}_3)_2] = \frac{15,52 \text{ g}}{256,4 \text{ g}} = 0,0605 = 6,05\%, \quad w(\text{HNO}_3) = \frac{21,16 \text{ g}}{256,4 \text{ g}} = 0,0825 = 8,25\%.$$

b) 3,00 óra alatt az összes cinkion (0,250 mol) kiredukálódott az oldatból, miközben az anódon oxigéngáz fejlődött. Az oldatból eltávozott cink tömege: $0,250 \cdot 65,0 \text{ g} = 16,25 \text{ g}$. Eközben fejlődött 0,125 mól oxigéngáz, ennek tömege: $0,125 \cdot 32,0 \text{ g} = 4,00 \text{ g}$.

Számítsuk ki a vízbontásra fordítódott töltésmennyiséget! 3,00 óra alatt átment töltés:

$$Q = I \cdot t = 6,00 \text{ A} \cdot 3,00 \cdot 3600 \text{ s} = 64\,800 \text{ C.}$$

A cink és oxigén leválasztásához szükséges töltés: 48 242,5 C. Tehát a vízbontásra fordítódott:

$$Q_{\text{vízbontás}} = 64\,800 \text{ C} - 48\,242,5 = 16\,557,5 \text{ C.}$$

Mivel 1 mól víz bontásához $2 \cdot 96\,485 \text{ C}$ töltés szükséges, az elbontott víz anyagmennyisége és tömege:

$$n = \frac{Q}{z \cdot F} = \frac{16\,557,5 \text{ C}}{2 \cdot 96\,485 \text{ C/mol}} = 0,0858 \text{ mol} \Rightarrow m = M \cdot n = 18,0 \cdot 0,0858 \text{ g} = 1,54 \text{ g.}$$

Az oldat tömege az elektrolízis végén:

$$m_{\text{oldat}} = 270,0 \text{ g} - (16,25 \text{ g} + 4,00 \text{ g} + 1,54 \text{ g}) = 248,21 \text{ g.}$$

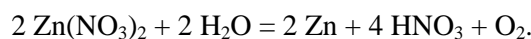
Ekkor az oldatban van $2 \cdot 0,250 \text{ mól} = 0,500 \text{ mól}$ salétromsav, ennek tömege $0,500 \cdot 63,0 \text{ g} = 31,5 \text{ gramm}$.

A tömegszázalékos salétromsav-tartalom:

$$w(\text{HNO}_3) = \frac{31,5 \text{ g}}{248,21 \text{ g}} = 0,127 = 12,7\%.$$

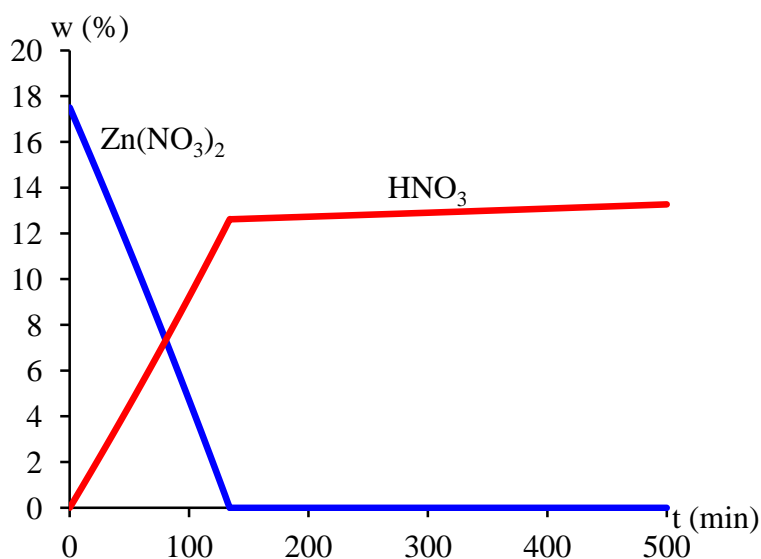
Tehát 1,50 óra elteltével az oldat összetétele: 6,05% cink-nitrát és 8,25% salétromsav, 3,00 óra elteltével pedig 12,7% salétromsav.

Megjegyzés: az elektrolízis kezdeti szakaszában a salétromsav képződését jól szemlélteti az alábbi egyenlet:



A fenti bruttó folyamat során 4 F töltésátadás történik.

A cink-nitrát és salétromsav tömegszázalékát ábrázolva a következő diagramot kapjuk:



9.7.2.1. ábra: Cink-nitrát és salétromsav koncentrációjának változása az idő függvényében

Jól megfigyelhető, hogy $t = 134$ percig a $\text{Zn}(\text{NO}_3)_2$ tömegtörtje csökken, ugyanaddig az időpontig a HNO_3 tömegtörtje pedig meredeken emelkedik. Miután az oldatból elfogyott a cink-nitrát, a salétromsav tömegtörtjének növekedése kisebb meredekségű, mivel ekkor már csak vízbontás történik, és az oldat tömege viszonylag kevésbé változik időben. (A salétromsav mennyisége nem változik, viszont az oldat tömege csökken.)

9.42. példa:

Az alábbi galvánelemet állítjuk össze: a két elektród fém platina, az **A** elektrolit 3,00 mmol $\text{Ce}(\text{NO}_3)_3$ és 3,00 mmol $\text{Ce}(\text{NO}_3)_4$ 50,0 cm^3 híg salétromsavban oldva. A vele áramkulccsal összekötött **B** elektrolit 3,00 mmol $\text{Fe}(\text{NO}_3)_2$ és 3,00 mmol $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3$ szintén 50,0 cm^3 híg salétromsavban feloldva. Mekkora elektromotoros erőt mérünk 25°C-on? Milyen folyamatok mennek végbe az egyes elektródokon és mi a nettó folyamat? A galvánelemre egy izzót kapcsolunk. Mekkora töltésmennyiség haladt át az izzón összesen, ha a működtetés során a galvánelem elektromotoros ereje 0,900 V-ra, illetve 0,500 V-ra csökkent? Mekkora lesz az egyes ionok koncentrációja ekkor? $\varepsilon^\circ(\text{Ce}^{4+}/\text{Ce}^{3+}) = +1,720 \text{ V}$ $\varepsilon^\circ(\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}) = +0,771 \text{ V}$

Megoldás:

A különböző cérium- és vasionok kiindulási koncentrációja azonos:

$$[\text{Ce}^{3+}]_0 = [\text{Ce}^{4+}]_0 = [\text{Fe}^{2+}]_0 = [\text{Fe}^{3+}]_0 = \frac{n}{V} = \frac{3,00 \text{ mmol}}{50,0 \text{ cm}^3} = 0,0600 \text{ mol/dm}^3.$$

Az elektródpotenciálok:

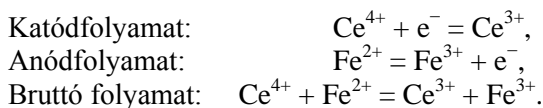
$$\varepsilon(\text{Ce}^{4+}/\text{Ce}^{3+}) = \varepsilon^\circ + \frac{0,0591 \text{ V}}{1} \cdot \lg \frac{[\text{Ce}^{4+}]_0}{[\text{Ce}^{3+}]_0} = +1,720 \text{ V} + (0,0591 \text{ V}) \cdot \lg \frac{0,0600}{0,0600} = 1,720 \text{ V},$$

$$\varepsilon(\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}) = \varepsilon^\circ + \frac{0,0591 \text{ V}}{1} \cdot \lg \frac{[\text{Fe}^{3+}]_0}{[\text{Fe}^{2+}]_0} = +0,771 \text{ V} + (0,0591 \text{ V}) \cdot \lg \frac{0,0600}{0,0600} = 0,771 \text{ V}.$$

Az elektromotoros erő:

$$\text{EME} = 1,720 \text{ V} - 0,771 \text{ V} = 0,949 \text{ V}.$$

Mivel a $\text{Ce}^{4+}/\text{Ce}^{3+}$ rendszer potenciálja nagyobb, mint a $\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}$ rendszeré, a Ce^{4+} oxidálja a Fe^{2+} -t:



Mikor az elektromotoros erő 0,900 V, felírható, hogy:

$$\begin{aligned} \text{EME} &= \varepsilon(\text{Ce}^{4+}/\text{Ce}^{3+}) - \varepsilon(\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}) = \Delta\varepsilon^\circ + \frac{0,0591 \text{ V}}{1} \cdot \lg \frac{[\text{Ce}^{4+}]}{[\text{Ce}^{3+}]} - \frac{0,0591 \text{ V}}{1} \cdot \lg \frac{[\text{Fe}^{3+}]}{[\text{Fe}^{2+}]} = \\ &= \Delta\varepsilon^\circ + (0,0591 \text{ V}) \cdot \left(\lg \frac{[\text{Ce}^{4+}]}{[\text{Ce}^{3+}]} - \lg \frac{[\text{Fe}^{3+}]}{[\text{Fe}^{2+}]} \right) = \Delta\varepsilon^\circ + (0,0591 \text{ V}) \cdot \lg \left(\frac{[\text{Ce}^{4+}]}{[\text{Ce}^{3+}]} \cdot \frac{[\text{Fe}^{2+}]}{[\text{Fe}^{3+}]} \right). \end{aligned}$$

A Ce^{4+} illetve a Fe^{2+} koncentrációja $x \text{ mol/dm}^3$ -rel csökken, míg a Ce^{3+} illetve a Fe^{3+} koncentrációja $x \text{ mol/dm}^3$ -rel növekszik, így behelyettesítve:

$$\begin{aligned} \text{EME} &= \Delta\varepsilon^\circ + (0,0591 \text{ V}) \cdot \lg \left(\frac{[\text{Ce}^{4+}] \cdot [\text{Fe}^{2+}]}{[\text{Ce}^{3+}] \cdot [\text{Fe}^{3+}]} \right) = \\ &= 0,949 \text{ V} + (0,0591 \text{ V}) \cdot \lg \left(\frac{0,0600 - x}{0,0600 + x} \cdot \frac{0,0600 - x}{0,0600 + x} \right) = 0,900 \text{ V}. \end{aligned}$$

Az egyenlet megoldásai: $x_1 = 0,0266 \text{ mol/dm}^3$, $x_2 = 0,135 \text{ mol/dm}^3$, ez utóbbi fizikailag nem lehetséges. Tehát az átalakult anyagok mennyisége:

$$\Delta n = x \cdot V = 0,0266 \cdot 0,0500 \text{ mol} = 1,33 \cdot 10^{-3} \text{ mol}.$$

Ebből kifejezve az áthaladt töltést:

$$Q = \Delta n \cdot z \cdot F = 1,33 \cdot 10^{-3} \text{ mol} \cdot 1 \cdot 96\,485 \text{ C/mol} = 128,3 \text{ C}.$$

Hasonlóan $0,500 \text{ V}$ esetén:

$$\text{EME} = 0,949 \text{ V} + (0,0591 \text{ V}) \cdot \lg \left(\frac{0,0600 - y}{0,0600 + y} \cdot \frac{0,0600 - y}{0,0600 + y} \right) = 0,500 \text{ V}.$$

Az egyenlet megoldásai: $y_1 = 0,05998 \text{ mol/dm}^3$, $y_2 = 0,06001 \text{ mol/dm}^3$ (ez utóbbi fizikailag nem lehetséges ebben az esetben sem). Az átalakult anyagok mennyisége:

$$\Delta n = y \cdot V = 0,05998 \cdot 0,0500 \text{ mol} = 2,999 \cdot 10^{-3} \text{ mol}.$$

Ebből kifejezve az áthaladt töltést:

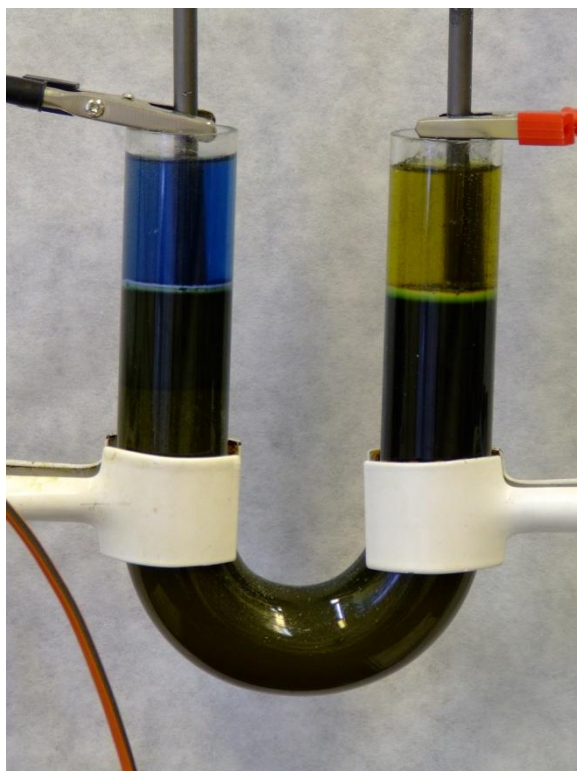
$$Q = \Delta n \cdot z \cdot F = 2,999 \cdot 10^{-3} \text{ mol} \cdot 1 \cdot 96\,485 \text{ C/mol} = 289,4 \text{ C}.$$

Az elektromotoros erő kezdetben 0,949 V, 128,3 C töltésnek kell áthaladnia, hogy az elektromotoros erő $0,900 \text{ V}$ -ra csökkenjen, míg 289,4 C töltésnek kell áthaladnia, hogy az EME $0,500 \text{ V}$ -ra csökkenjen.

9.8. Elektrolitok vezetése

Az elektromos áramot azok az anyagok vezetik jól, melyek tartalmazznak elektromos erőtér hatására elmozdulni képes részecskéket. A fémek rendszerint igen jól vezetnek az elektromosságot, mivel a delokalizált elektronfelhő erőtér hatására könnyen el tud mozogni. A fémeken kívül más vezetőket is ismerünk. Jól vezetnek az áramot az ionkristályos anyagok olvadási és oldatai is, illetve azon anyagok is, melyek megfelelő oldószerben (legalább részlegesen) ionosan disszociálni tudnak. Itt elsősorban a vizes oldatok vezetésével foglalkozunk.

Az alábbi ábrán $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]\text{Cr}_2\text{O}_7$ -oldat elektrolízisével szemléltetjük az ionvándorlást. A kékszínű $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$ -ionok a negatív pólus felé, míg a sárgás színű $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ -ionok a pozitív pólus felé vándorolnak. (Az oldat fölé szintelen ammónium-szulfát-oldatot rétegeztünk.)



9.8.1. ábra: $[Cu(NH_3)_4]Cr_2O_7$ -oldat elektrolízise

Ohm törvénye: az áramerősség (I) és a fogyasztó sarkai között mérhető feszültség között egyenes arányosság áll fenn. A feszültség és az áramerősség hányadosa állandó, melyet **elektromos ellenállásnak** (R) nevezzük.

$$\frac{U}{I} = \text{állandó} = R$$

Elektromos vezetés: az áramerősség és a feszültség hányadosa, az elektromos ellenállás reciproka.

$$G = \frac{I}{U} = \frac{1}{R}$$

Az elektromos vezetés mértékegysége a siemens:

$$1\text{ S} = \frac{1\text{ A}}{1\text{ V}} = 1 \frac{1}{\Omega}$$

1 siemens a vezetése annak a fogyasztónak, melyen 1 volt feszültségkülönbség hatására 1 amper erősségű áram halad át.

Homogén anyagok esetén célszerű fajlagos ellenállásról, illetve vezetésről is beszélni.

Fajlagos ellenállás: egységnyi hosszúságú (ℓ) és egységnyi keresztmetszetű (A) homogén anyag ellenállása:

$$\rho = R \cdot \frac{A}{\ell}$$

A fajlagos ellenállást rendszerint szobahőmérsékleten adjuk meg.

Egy anyag (például vezeték, oldat) ellenállása egyenesen arányos a hosszal és fordítottan arányos a keresztmetszettel:

$$R = \rho \cdot \frac{\ell}{A}$$

A fajlagos ellenállásnak többféle mértékegysége is elterjedt: $\Omega \cdot \text{mm}^2/\text{m}$ (elsősorban vezetékekre), $\Omega \cdot \text{m}$, illetve $\Omega \cdot \text{cm}$. Ez utóbbi mértékegységet rendszerint elektrolitoldatok fajlagos ellenállására alkalmazzuk. Az egyes mértékegységek átváltása:

$$1 \Omega \cdot \text{m} = 10^6 \frac{\Omega \cdot \text{mm}^2}{\text{m}} = 10^2 \Omega \cdot \text{cm}.$$

Fajlagos vezetés: a fajlagos ellenállás reciproka.

$$\kappa = \frac{1}{\rho}$$

A fajlagos vezetés szokásos mértékegységei: S/m, S/cm. Elektrolitoldatok esetén a S/cm mértékegységet szokás használni, a továbbiakban mi is ezt követjük.

$$1 \frac{\text{S}}{\text{m}} = 10^{-2} \frac{\text{S}}{\text{cm}}$$

Az elektrolitoldatok fajlagos vezetését vezetőképesség-mérő cellával szokták megállapítani. Ez két (vagy négy) inert elektródból áll (például platina, grafit, rozsdamentes acél), melyek gyakran az alábbi elrendezésben helyezkednek el:

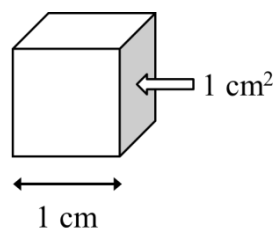
A két elektród közötti távolság ℓ , az elektródok fajlagos felülete A. Így a fajlagos vezetés:

$$\kappa = \frac{1}{\rho} = \frac{1}{R \cdot \frac{A}{\ell}} = \frac{1}{R} \cdot \frac{\ell}{A} = G \cdot \frac{\ell}{A}$$

Az elektródok közötti távolság és az elektródfelület hányadosát **cellaállandónak** (K) szokás nevezni. A cellaállandó mértékegysége elektrolitoldatok esetén rendszerint 1/cm. A pontosság érdekében általában kalibrációval határozzuk meg a vezetőképesség-mérő cella cellaállandóját.

$$K = \frac{\ell}{A} \Rightarrow \kappa = \frac{K}{R} = G \cdot K$$

Érdeemes megjegyezni, hogy egy oldat fajlagos vezetése megegyezik annak az oldattérfogatnak a vezetésével, mely egy egységnyi élű kockában található: a kocka két átlellenes lapja 1 cm^2 felületű, és a lapok között 1 cm a távolság.



Egy oldat (fajlagos) vezetése függ:

- az oldott anyag(ok) anyagi minőségétől,
- az oldott anyag(ok) koncentrációjától,
- a hőmérséklettől.

Vezetés (ellenállás) szempontjából az elektrolitokat két nagy csoportra lehet osztani:

- erős elektrolitok: disszociációjuk még viszonylag töményebb oldatban is gyakorlatilag 100%-os. A legtöbb sóoldat erős elektrolitot képez (például NaCl-oldat, KNO₃-oldat), illetve erős savakat vagy bázisokat vízben oldva is erős elektrolitot kapunk (például HNO₃-oldat, NaOH-oldat).
- gyenge elektrolitok: disszociációfokuk még hígabb oldatban is 1-nél (100%-nál) kisebb. A gyenge savak és bázisok vizes oldatai gyenge elektrolitok (például ecetsavoldat, ammóniaoldat).

Híg oldatok esetén feltételezhetjük, hogy az egyes ionfajták nem gátolják egymást az elektromosság vezetésében. Természetesen az anionok és a kationok is részt vesznek az elektromos vezetésben, ám rendszerint nem egyforma mértékben.

A független ionvándorlás törvénye

A legegyszerűbb közelítés szerint az egyes ionfajták járuléka a fajlagos vezetéséhez egyenesen arányos az adott ion koncentrációjával és töltésével. A fajlagos vezetés megkapható az egyes ionok járulékaiknak összegeként.

$$\kappa = \sum_i |v_i| \cdot u_i \cdot c_i$$

A fenti képletben v_i az adott ion töltése, u_i az adott ion **relatív ionmozgékonytsága**, c_i pedig az ion tényleges koncentrációja az oldatban.

A relatív ionmozgékonytság mértékegysége általában $\text{S} \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{mol}^{-1}$, a koncentrációé pedig ennek megfelelően $\text{mol} \cdot \text{cm}^{-3}$.

(Megjegyzés: bizonyos szakkönyvek relatív ionmozgékonytságnak nevezik a fenti mennyiségnek és a Faraday-állandónak a hányadosát.)

A képletben szerepel az ion töltése is, ami például Ba²⁺ esetén $v_i = 2$, Al³⁺ esetén pedig $v_i = 3$. A relatív ionmozgékonytság az egyes ionok egymáshoz viszonyított vándorlási sebességét adja meg, ám egy Ba²⁺-ion kétszer, egy Al³⁺-ion pedig háromszor annyi töltést „szállít”, mint egy K⁺-ion. Ezért szükséges a fajlagos vezetés számításánál ezt is figyelembe venni. A relatív ionmozgékonytság jelölésénél erre külön is felhívjuk a figyelmet: a Ba²⁺ esetén $u(1/2\text{Ba}^{2+})$, míg Al³⁺ esetén $u(1/3\text{Al}^{3+})$ jelölést alkalmazunk.

Lássunk néhány példát!

Kálium-klorid-oldat

A kálium-klorid (KCl) disszociációjával K⁺- és Cl⁻-ionok keletkeznek azonos koncentrációban. Mivel a disszociáció teljes, az oldat erős elektrolit, így a kálium- és kloridionok koncentrációja azonos a bemérési koncentrációval (c_0). A fajlagos vezetés:

$$\kappa = | +1 | \cdot u(\text{K}^+) \cdot c(\text{K}^+) + | -1 | \cdot u(\text{Cl}^-) \cdot c(\text{Cl}^-) = [u(\text{K}^+) + u(\text{Cl}^-)] \cdot c_0.$$

Kálium-szulfát-oldat

A kálium-szulfát (K₂SO₄) disszociációjával erős elektrolit keletkezik, ám a káliumionok koncentrációja a bemérési koncentráció (c_0) kétszerese:

$$c(\text{K}^+) = 2 \cdot c_0 \qquad c(\text{SO}_4^{2-}) = c_0.$$

Az oldat fajlagos vezetése:

$$\kappa = | +1 | \cdot u(\text{K}^+) \cdot c(\text{K}^+) + | -2 | \cdot u(1/2\text{SO}_4^{2-}) \cdot c(\text{SO}_4^{2-}) = u(\text{K}^+) \cdot 2 \cdot c_0 + 2 \cdot u(1/2\text{SO}_4^{2-}) \cdot c_0.$$

A kifejezést egyszerűbb formára is hozhatjuk:

$$\kappa = 2 \cdot [u(\text{K}^+) + u(1/2\text{SO}_4^{2-})] \cdot c_0.$$

Alumínium-szulfát-oldat

Az alumínium-szulfát $[\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3]$ disszociációjával erős elektrolit keletkezik. Az egyes ionok koncentrációja:

$$c(\text{Al}^{3+}) = 2 \cdot c_0 \quad c(\text{SO}_4^{2-}) = 3 \cdot c_0.$$

Az oldat fajlagos vezetése:

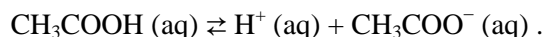
$$\kappa = | +3 | \cdot u(1/3\text{Al}^{3+}) \cdot c(\text{Al}^{3+}) + | -2 | \cdot u(1/2\text{SO}_4^{2-}) \cdot c(\text{SO}_4^{2-}) = 3 \cdot u(1/3\text{Al}^{3+}) \cdot 2 \cdot c_0 + 2 \cdot u(1/2\text{SO}_4^{2-}) \cdot 3 \cdot c_0.$$

Ismét érdemes egyszerűbb alakra hozni a képletet!

$$\kappa = 6 \cdot [u(1/3\text{Al}^{3+}) + u(1/2\text{SO}_4^{2-})] \cdot c_0$$

Ecetsavoldat

Az ecetsav egy gyenge sav, vízben csak részlegesen disszociál (a folyamat egyensúlyra vezet). A disszociáció során H^+ - és CH_3COO^- -ionok keletkeznek azonos koncentrációban az alábbi egyenlet szerint:



A fajlagos vezetés azonban csak az oldatban jelen levő ionok vezetéséből jön létre:

$$\kappa = | +1 | \cdot u(\text{H}^+) \cdot c(\text{H}^+) + | -1 | \cdot u(\text{CH}_3\text{COO}^-) \cdot c(\text{CH}_3\text{COO}^-).$$

A H^+ - és CH_3COO^- -ionok koncentrációja azonos, továbbá a bemérési koncentráció és az egyes ionok koncentrációja között a disszociációfok teremt kapcsolatot:

$$\alpha = \frac{c(\text{CH}_3\text{COO}^-)}{c_0} = \frac{c(\text{H}^+)}{c_0}.$$

Így kifejezhetjük a H^+ - és CH_3COO^- -ionok koncentrációját a disszociációfok segítségével:

$$c(\text{H}^+) = \alpha \cdot c_0 \quad c(\text{CH}_3\text{COO}^-) = \alpha \cdot c_0.$$

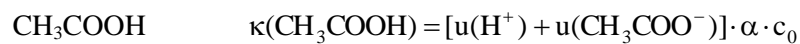
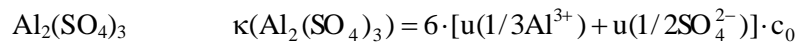
Helyettesítsük be a koncentrációkat!

$$\kappa = u(\text{H}^+) \cdot \alpha \cdot c_0 + u(\text{CH}_3\text{COO}^-) \cdot \alpha \cdot c_0 = [u(\text{H}^+) + u(\text{CH}_3\text{COO}^-)] \cdot \alpha \cdot c_0$$

Ha jól megfigyeljük a fajlagos vezetés összefüggéseit, minden esetben az derült ki, hogy a fajlagos vezetés (κ) és a bemérési koncentráció (c_0) között egyenes arányosság áll fenn:

$$\text{KCl} \quad \kappa(\text{KCl}) = [u(\text{K}^+) + u(\text{Cl}^-)] \cdot c_0.$$

$$\text{K}_2\text{SO}_4 \quad \kappa(\text{K}_2\text{SO}_4) = 2 \cdot [u(\text{K}^+) + u(1/2\text{SO}_4^{2-})] \cdot c_0.$$



Jól látható, hogy gyenge elektrolitok esetén a fajlagos vezetés egyenesen arányos a disszociációfokkal is, mely természetesen függ a bemérési koncentrációtól! Tehát gyenge elektrolitok esetén a fajlagos vezetés és a bemérési koncentráció között nem lesz lineáris kapcsolat, az összefüggés jóval bonyolultabb. Viszont a független ionvándorlás törvénye alapján az oldatban ténylegesen megtalálható ionok koncentrációjával arányos a fajlagos vezetés.

Erős elektrolitok esetén a fajlagos vezetés és a bemérési koncentráció hányadosa a *független ionvándorlás törvénye alapján* egy állandó érték, melynek külön nevet is adtak: moláris fajlagos vezetés.

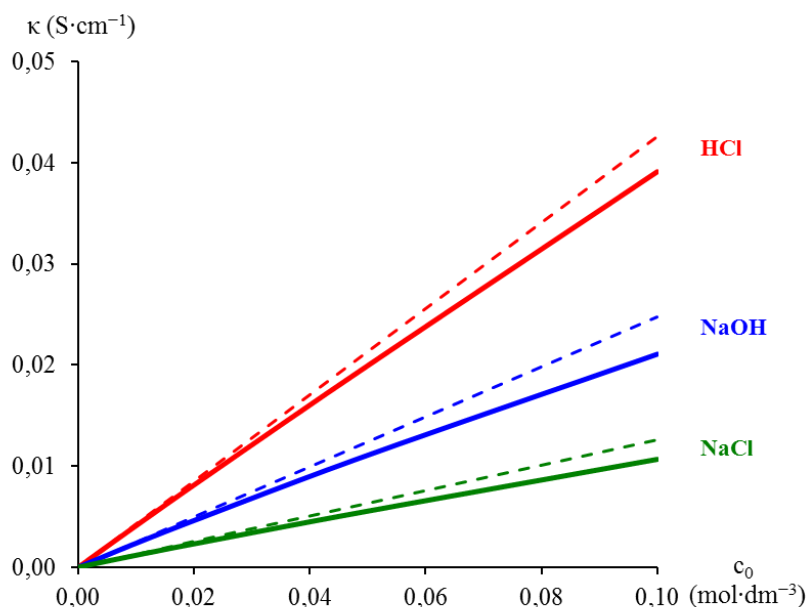
Moláris fajlagos vezetés: fajlagos vezetés és a bemérési koncentráció hányadosa:

$$\Lambda = \frac{\kappa}{c_0}$$

A rendszerint Λ -val vagy esetleg λ -val jelölt moláris fajlagos vezetés mértékegysége azonos a relatív ionmozgékonyosság mértékegységével, azaz $\text{S} \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{mol}^{-1}$.

A moláris fajlagos vezetés gyenge elektrolitokra is ugyanígy definiálható, ám ebben az esetben biztosak lehetünk abban, hogy Λ értéke jelentősen függ a bemérési koncentrációtól.

Most vizsgáljuk meg a fajlagos vezetés és koncentráció közötti egyenes arányosságot erős elektrolitok esetén! Az alábbi ábrán különböző anyagok vizes oldatának fajlagos vezetését ábrázoltuk a bemérési koncentráció függvényében:

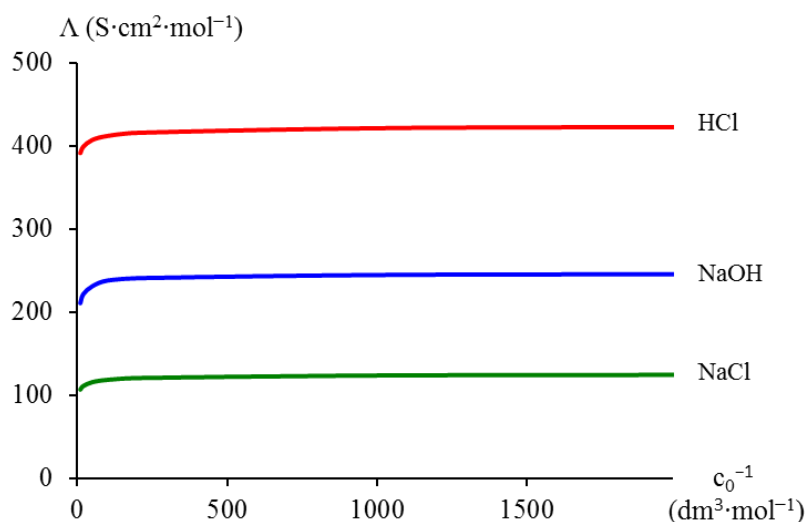


9.8.1. ábra: Különböző anyagok vizes oldatának fajlagos vezetése a koncentráció függvényében

Az ábrán szaggatott vonallal jelöltük a független ionvándorlás törvénye alapján számított értékeket, míg a folytonos vonalak a tényleges, kísérletileg meghatározott értékeket jelölik. Jól megfigyelhető, hogy a kísérleti és az elméletileg számított görbe kis koncentrációknál jól egyezik, ám

nagyobb koncentrációknál jelentős az eltérés. Ennek az oka, hogy töményebb oldatokban az egyes ionok között kölcsönhatás jön létre, akadályozzák egymást, így a vezetés kisebb az elméletileg vártnál. Ez azt jelenti, hogy a független ionvándorlás törvénye töményebb oldatokra nem ad jó becslést, más szavakkal a moláris fajlagos vezetés nem független a koncentrációtól.

Erős elektrolitok esetén ábrázoljuk a moláris fajlagos vezetést a koncentráció reciprokának a függvényében! (A koncentráció reciprokát szokás **hígításnak** nevezni, ez megadja, hogy 1 mól oldott anyag hány dm³ oldatban található meg.) A fenti ábra kísérletileg mért adatait ábrázolva a következő diagramot kapjuk:



9.8.2. ábra: Különböző anyagok vizes oldatának moláris fajlagos vezetése a koncentráció reciprokának a függvényében

Az ábrán az egyes görbék nagy hígítások (kis koncentrációk) esetén gyakorlatilag vízszintessé válnak, azaz híg oldatban a moláris fajlagos vezetés függetlenné válik a koncentrációtól. Végtelen híg oldatok (az oldott anyag végtelen sok oldószerben van oldva) esetén a moláris fajlagos vezetésnek kitüntetett elnevezést is adtak: ez a **végtelen híg oldatra extrapolált moláris fajlagos vezetés**, melyet Λ_{∞} -nel (vagy λ_{∞} -nel) szokták jelölni.

A végtelen híg oldatra extrapolált moláris fajlagos vezetés már megkapható az egyes ionfajták relatív mozgékonyaságából:

KCl	$\Lambda_{\infty}(\text{KCl}) = u(\text{K}^+) + u(\text{Cl}^-)$
K ₂ SO ₄	$\Lambda_{\infty}(\text{K}_2\text{SO}_4) = 2 \cdot [u(\text{K}^+) + u(1/2\text{SO}_4^{2-})]$
Al ₂ (SO ₄) ₃	$\Lambda_{\infty}(\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3) = 6 \cdot [u(1/3\text{Al}^{3+}) + u(1/2\text{SO}_4^{2-})]$
CH ₃ COOH	$\Lambda_{\infty}(\text{CH}_3\text{COOH}) = u(\text{H}^+) + u(\text{CH}_3\text{COO}^-)$

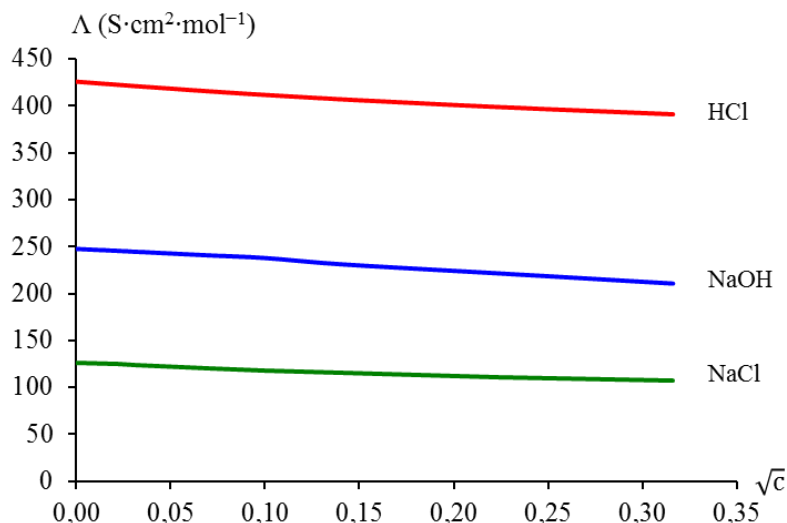
Mivel végtelen híg oldatban a gyenge elektrolitok disszociációja 100%-osnak tekinthető, a végtelen híg oldatra extrapolált moláris fajlagos vezetés itt is adódik az egyes ionfajták relatív mozgékonyaságából. Ennek segítségével a gyenge elektrolit disszociációfoka könnyen számítható Λ és Λ_{∞} ismeretében:

$$\alpha = \frac{\Lambda}{\Lambda_{\infty}}$$

Érdeemes még azt is megemlíteni, hogy erős elektrolitok esetén a moláris fajlagos vezetési jó közelítéssel a koncentráció négyzetgyökének lineáris függvénye. Ezt az összefüggést **Kohlrausch szabályának** nevezik:

$$\Lambda = \Lambda_{\infty} - a \cdot \sqrt{c_0}.$$

Tehát a moláris fajlagos vezetést a bemérési koncentráció gyökének függvényében ábrázolva erős elektrolitok esetén jó közelítéssel egy egyenest kapunk, ám gyenge elektrolitok esetén nem.



9.8.3. ábra: Különböző anyagok vizes oldatának moláris fajlagos vezetése a koncentráció gyökének függvényében

Jól megfigyelhető az ábrán, hogy a savak és bázisok fajlagos vezetése általában sokkal nagyobb, mint a sók vezetése. Ennek oka, hogy a H^+ -ionok és OH^- -ionok a többi kationtól és aniontól eltérő mechanizmussal vezetik az áramot: a vízmolekulák hidrogénhidas láncában a H^+ -ionok rendkívül könnyen át tudnak adódni egyik vízmolekuláról a másikra. Ezzel ellentétben a többi ion hidrátburkával együtt „vándorol” a megfelelő elektród felé, mely egy sokkal lassabb folyamat.

Itt érdemes még megjegyezni, hogy az adott ion relatív mozgékonyasága a hidratált ion méretével van összefüggésben. Például a lítiumion ($r = 76$ pm) sokkal kisebb, mint a nátriumion ($r = 102$ pm), ám a relatív mozgékonyaságuk vizes oldatban: $u(Li^+) = 38,7$ S·cm²·mol⁻¹, $u(Na^+) = 50,2$ S·cm²·mol⁻¹. A kisebb méretű lítiumion felületén nagyobb a töltéssűrűség, mint a nátriumion felületén, ezért az előbbi hidrátburkában több vízmolekula található, mint az utóbbiában.

9.43. példa:

Egy edénybe híg kénsavoldatot töltünk, és az oldatba egymástól 2,50 cm távolságban két rozsdamentes acélelektrodot helyezünk, melynek mérete 15,0 mm × 20,0 mm. Az oldat ellenállása 125 Ω. Mekkora az oldat vezetése, fajlagos ellenállása és fajlagos vezetése?

Megoldás:

A vezetési az ellenállás reciproka:

$$G = \frac{1}{R} = \frac{1}{125\Omega} = 8,00 \cdot 10^{-3} \text{ S.}$$

A rozsdamentes acélelektrodok keresztmetszete:

$$A = a \cdot b = 1,50 \text{ cm} \cdot 2,00 \text{ cm} = 3,00 \text{ cm}^2.$$

A fajlagos ellenállás:

$$\rho = R \cdot \frac{A}{\ell} = 125 \Omega \cdot \frac{3,00 \text{ cm}^2}{2,50 \text{ cm}} = 150 \Omega \cdot \text{cm}.$$

A fajlagos vezetés:

$$\kappa = \frac{1}{\rho} = \frac{1}{150 \Omega \cdot \text{cm}} = 6,67 \cdot 10^{-3} \text{ S/cm}.$$

Tehát az oldat vezetése $8,00 \cdot 10^{-3} \text{ S}$, fajlagos ellenállása $150 \Omega \cdot \text{cm}$, fajlagos vezetése $6,67 \cdot 10^{-3} \text{ S/cm}$.

9.44. példa:

Mekkora a 3,00 pH-jú HCl-oldat fajlagos vezetése?

$$u(\text{H}^+) = 349,7 \text{ S} \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{mol}^{-1}, \quad u(\text{Cl}^-) = 76,32 \text{ S} \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{mol}^{-1}.$$

Megoldás:

Először számítsuk ki a sósavoldat koncentrációját!

$$c_0 = 10^{-\text{pH}} = 10^{-3,00} \text{ mol/dm}^3 = 1,00 \cdot 10^{-6} \text{ mol/cm}^3$$

A fajlagos vezetés:

$$\kappa = u(\text{H}^+) \cdot c_0 + u(\text{Cl}^-) \cdot c_0 = [u(\text{H}^+) + u(\text{Cl}^-)] \cdot c_0 = (349,7 + 76,32) \cdot 1,00 \cdot 10^{-6} \text{ S/cm} = 4,26 \cdot 10^{-4} \text{ S/cm}.$$

Tehát a 3,00 pH-jú sósavoldat fajlagos vezetése $4,26 \cdot 10^{-4} \text{ S/cm}$.

9.45. példa:

Határozzuk meg a 12,00 pH-jú KOH-oldat fajlagos ellenállását! (Az oldat K^+ - és OH^- -ionok mellett más iont gyakorlatilag nem tartalmaz.)

$$u(\text{K}^+) = 68,0 \text{ S} \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{mol}^{-1}, \quad u(\text{OH}^-) = 200,0 \text{ S} \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{mol}^{-1}.$$

Megoldás:

Számítsuk ki az oldat bemérési koncentrációját!

$$c_0 = 10^{-\text{pOH}} = 10^{\text{pH}-14} = 10^{-2,00} \text{ mol/dm}^3 = 1,00 \cdot 10^{-5} \text{ mol/cm}^3$$

A fajlagos vezetés:

$$\kappa = u(\text{K}^+) \cdot c_0 + u(\text{OH}^-) \cdot c_0 = [u(\text{K}^+) + u(\text{OH}^-)] \cdot c_0 = (68,0 + 200,0) \cdot 1,00 \cdot 10^{-5} \text{ S/cm} = 2,68 \cdot 10^{-3} \text{ S/cm}.$$

A fajlagos ellenállás:

$$\rho = \frac{1}{\kappa} = \frac{1}{2,68 \cdot 10^{-3} \text{ S/cm}} = 373,1 \Omega \cdot \text{cm}.$$

Tehát a 12,00 pH-jú kálium-hidroxid-oldat fajlagos ellenállása $373,1 \Omega \cdot \text{cm}$.

9.46. példa:

Számítsuk ki a desztillált víz fajlagos ellenállását, ha a víziionszorzat értéke 10^{-14} !

$$u(\text{H}^+) = 349,7 \text{ S}\cdot\text{cm}^2\cdot\text{mol}^{-1}, u(\text{OH}^-) = 200,0 \text{ S}\cdot\text{cm}^2\cdot\text{mol}^{-1}.$$

Megoldás:

Először érdemes kiszámolni a hidrogén- és hidroxidionok koncentrációját:

$$K_v = [\text{H}^+] \cdot [\text{OH}^-] = 10^{-14} \Rightarrow [\text{H}^+] = [\text{OH}^-] = \sqrt{K_v} = \sqrt{10^{-14}} = 10^{-7} \text{ mol/dm}^3 = 10^{-10} \text{ mol/cm}^3$$

A desztillált víz fajlagos vezetése:

$$\kappa = u(\text{H}^+) \cdot [\text{H}^+] + u(\text{OH}^-) \cdot [\text{OH}^-] = (349,7 + 200,0) \cdot 1,00 \cdot 10^{-10} \text{ S/cm} = 5,497 \cdot 10^{-8} \text{ S/cm}.$$

Ebből pedig a fajlagos ellenállás:

$$\rho = \frac{1}{\kappa} = \frac{1}{5,50 \cdot 10^{-8} \text{ S/cm}} = 1,82 \cdot 10^7 \text{ }\Omega \cdot \text{cm}.$$

Tehát a desztillált víz fajlagos ellenállása $1,82 \cdot 10^7 \text{ }\Omega \cdot \text{cm}$.

9.47. példa:

Mekkora a $0,0500 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú ecetsavoldat fajlagos ellenállása?

$$K_s(\text{CH}_3\text{COOH}) = 1,79 \cdot 10^{-5}, u(\text{H}^+) = 349,7 \text{ S}\cdot\text{cm}^2\cdot\text{mol}^{-1}, u(\text{CH}_3\text{COO}^-) = 41,0 \text{ S}\cdot\text{cm}^2\cdot\text{mol}^{-1}.$$

Megoldás:

Az alábbiakban két különböző megoldást mutatunk be:

(1)

Számítsuk ki a hidrogén- és acetátionok koncentrációját az egyensúlyi állandó segítségével!

$$K_s = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{CH}_3\text{COO}^-]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]} = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{H}^+]}{c_0 - [\text{H}^+]} \Rightarrow 1,79 \cdot 10^{-5} = \frac{[\text{H}^+]^2}{0,0500 - [\text{H}^+]}$$

Az egyenlet kémiailag releváns megoldása: $[\text{H}^+] = 9,37 \cdot 10^{-4} \text{ mol/dm}^3 = 9,37 \cdot 10^{-7} \text{ mol/cm}^3$.

A fajlagos vezetés könnyen kiszámítható a hidrogén- és acetátionok koncentrációjából:

$$\kappa = u(\text{H}^+) \cdot [\text{H}^+] + u(\text{CH}_3\text{COO}^-) \cdot [\text{CH}_3\text{COO}^-] = (349,7 + 41,0) \cdot 9,37 \cdot 10^{-7} \text{ S/cm} = 3,66 \cdot 10^{-4} \text{ S/cm}.$$

A fajlagos ellenállás:

$$\rho = \frac{1}{\kappa} = \frac{1}{3,66 \cdot 10^{-4} \text{ S/cm}} = 2732 \text{ }\Omega \cdot \text{cm}.$$

(2)

Számítsuk ki a bemérési koncentráció és az egyensúlyi állandó segítségével a disszociációfokot! Ehhez használjuk fel az (1) pontban kiszámolt hidrogénion-koncentrációt!

$$\alpha = \frac{[\text{H}^+]}{c_0} = \frac{9,37 \cdot 10^{-4}}{0,0500} = 0,0187$$

Alkalmazzuk a fent levezetett képletet!

$$\kappa = [u(\text{H}^+) + u(\text{CH}_3\text{COO}^-)] \cdot \alpha \cdot c_0 = (349,7 + 41,0) \cdot 0,0187 \cdot 5,00 \cdot 10^{-5} \text{ S/cm} = 3,66 \cdot 10^{-4} \text{ S/cm}$$

A fajlagos ellenállás:

$$\rho = \frac{1}{\kappa} = \frac{1}{3,66 \cdot 10^{-4} \text{ S/cm}} = 2732 \Omega \cdot \text{cm}.$$

Így az ecetsavoldat fajlagos ellenállása 2732 $\Omega \cdot \text{cm}$.

9.48. példa:

A 0,100 mol/dm³ koncentrációjú ammóniaoldat fajlagos ellenállása 2327 $\Omega \cdot \text{cm}$? Mekkora az ammónia disszociációs állandója és az oldat pH-ja?

$$u(\text{NH}_4^+) = 73,7 \text{ Scm}^2 \cdot \text{mol}^{-1}, u(\text{OH}^-) = 200,0 \text{ S} \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{mol}^{-1}.$$

Megoldás:

Az oldatban az ammónium- és hidroxidionok koncentrációja azonos (a hidrogénionok koncentrációját a lúgos kémhatású oldatban elhanyagolhatjuk). Először számítsuk ki a fajlagos vezetést!

$$\kappa = \frac{1}{\rho} = \frac{1}{2327 \Omega \cdot \text{cm}} = 4,297 \cdot 10^{-4} \text{ S/cm}$$

Írjuk fel a fajlagos ellenállást mint a koncentráció függvénye ($[\text{OH}^-] = [\text{NH}_4^+]$)!

$$\kappa = u(\text{NH}_4^+) \cdot [\text{NH}_4^+] + u(\text{OH}^-) \cdot [\text{OH}^-] = (73,7 + 200,0) \cdot [\text{OH}^-] = 4,297 \cdot 10^{-4} \text{ S/cm}$$

Ebből az egyenletből megkapjuk a hidroxidionok koncentrációját:

$$[\text{OH}^-] = 1,57 \cdot 10^{-6} \text{ mol/cm}^3 = 1,57 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3.$$

Így könnyen kiszámítható az oldat pH-ja:

$$\text{pH} = 14 - \text{pOH} = 14 - (-\lg[\text{OH}^-]) = 14 - [-\lg(1,57 \cdot 10^{-3})] = 11,20.$$

A disszociációs egyensúlyi állandó:

$$K_b = \frac{[\text{NH}_4^+] \cdot [\text{OH}^-]}{[\text{NH}_3]} = \frac{[\text{OH}^-] \cdot [\text{OH}^-]}{c_0 - [\text{OH}^-]} = \frac{(1,57 \cdot 10^{-3})^2}{0,100 - 1,57 \cdot 10^{-3}} = 2,50 \cdot 10^{-5}.$$

Tehát az ammóniaoldat pH-ja 11,20, az ammónia disszociációs állandója pedig $2,50 \cdot 10^{-5}$.

9.49. példa:

Mekkora az AgCl telített oldatának fajlagos ellenállása, ha $L(\text{AgCl}) = 1,77 \cdot 10^{-10}$?

$$u(\text{Ag}^+) = 61,9 \text{ S} \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{mol}^{-1}, u(\text{Cl}^-) = 76,3 \text{ S} \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{mol}^{-1}.$$

Megoldás:

Az oldhatósági szorzat alapján:

$$L = [\text{Ag}^+] \cdot [\text{Cl}^-] \Rightarrow [\text{Ag}^+] = [\text{Cl}^-] = \sqrt{L} = \sqrt{1,77 \cdot 10^{-10}} = 1,33 \cdot 10^{-5} \text{ mol/dm}^3 = 1,33 \cdot 10^{-8} \text{ mol/cm}^3$$

Az oldat fajlagos vezetése:

$$\kappa = u(\text{Ag}^+) \cdot [\text{Ag}^+] + u(\text{Cl}^-) \cdot [\text{Cl}^-] = (61,9 + 76,3) \cdot 1,33 \cdot 10^{-8} \text{ S/cm} = 1,839 \cdot 10^{-6} \text{ S/cm}.$$

A fajlagos ellenállás:

$$\rho = \frac{1}{\kappa} = \frac{1}{1,839 \cdot 10^{-6} \text{ S/cm}} = 5,44 \cdot 10^5 \text{ } \Omega \cdot \text{cm.}$$

Így a telített ezüst-klorid-oldat fajlagos ellenállása $5,44 \cdot 10^5 \text{ } \Omega \cdot \text{cm}$.

Megjegyzés: Érdeemes megvizsgálni, hogy mennyit változtat a fajlagos ellenálláson, ha a desztillált víz vezetését is figyelembe vesszük a számításnál. Mint a 9.46. feladatban kiszámítottuk, a desztillált víz fajlagos vezetése $5,497 \cdot 10^{-8} \text{ S/cm}$.

A telített AgCl-oldat fajlagos vezetése és ellenállása a desztillált víz járulékaival:

$$\kappa = \kappa(\text{AgCl}) + \kappa(\text{H}_2\text{O}) = 1,839 \cdot 10^{-6} \text{ S/cm} + 5,497 \cdot 10^{-8} \text{ S/cm} = 1,894 \cdot 10^{-6} \text{ S/cm.}$$

$$\rho = \frac{1}{\kappa} = \frac{1}{1,894 \cdot 10^{-6} \text{ S/cm}} = 5,28 \cdot 10^5 \text{ } \Omega \cdot \text{cm.}$$

Tehát a vízből származó hidrogén- és hidroxidionok vezetésének figyelembevétele 2,95%-kal csökkenti az oldat fajlagos ellenállását.

9.50. példa:

Mekkora az alábbi oldatok fajlagos ellenállása?

0,0100 mol/dm³ koncentrációjú Ba(OH)₂-oldat,

0,0100 mol/dm³ koncentrációjú H₂SO₄-oldat,

a fenti két oldat 1 : 1 arányú elegye.

A c. pontban a térfogatokat vegyük összeadhatónak! $L(\text{BaSO}_4) = 1,08 \cdot 10^{-10}$

$$u(1/2\text{Ba}^{2+}) = 63,7 \text{ S} \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{mol}^{-1}, \quad u(\text{OH}^-) = 200,0 \text{ S} \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{mol}^{-1},$$

$$u(\text{H}^+) = 349,7 \text{ S} \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{mol}^{-1}, \quad u(1/2\text{SO}_4^{2-}) = 79,8 \text{ S} \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{mol}^{-1}.$$

Megoldás:

a.

Írjuk fel a fajlagos vezetést! Mivel a bárium-hidroxid képlete Ba(OH)₂, a koncentrációkra felírható, hogy $[\text{Ba}^{2+}] = 1,00 \cdot 10^{-5} \text{ mol/cm}^3$, $[\text{OH}^-] = 2,00 \cdot 10^{-5} \text{ mol/cm}^3$.

$$\kappa(\text{Ba(OH)}_2) = | +2 | \cdot u(1/2\text{Ba}^{2+}) \cdot [\text{Ba}^{2+}] + | -1 | \cdot u(\text{OH}^-) \cdot [\text{OH}^-] =$$

$$\kappa(\text{Ba(OH)}_2) = 2 \cdot 63,7 \cdot 1,00 \cdot 10^{-5} + 1 \cdot 200,0 \cdot 2,00 \cdot 10^{-5} = 5,274 \cdot 10^{-3} \text{ S/cm.}$$

A Ba(OH)₂-oldat fajlagos ellenállása:

$$\rho(\text{Ba(OH)}_2) = \frac{1}{\kappa} = \frac{1}{5,274 \cdot 10^{-3} \text{ S/cm}} = 189,6 \text{ } \Omega \cdot \text{cm.}$$

b.

Az ionok koncentrációja az oldatban: $[\text{H}^+] = 2,00 \cdot 10^{-5} \text{ mol/cm}^3$, $[\text{SO}_4^{2-}] = 1,00 \cdot 10^{-5} \text{ mol/cm}^3$.

$$\kappa(\text{H}_2\text{SO}_4) = | +1 | \cdot u(\text{H}^+) \cdot [\text{H}^+] + | -2 | \cdot u(1/2\text{SO}_4^{2-}) \cdot [\text{SO}_4^{2-}] =$$

$$\kappa(\text{H}_2\text{SO}_4) = 1 \cdot 349,7 \cdot 2,00 \cdot 10^{-5} + 2 \cdot 79,8 \cdot 1,00 \cdot 10^{-5} = 8,590 \cdot 10^{-3} \text{ S/cm.}$$

A H₂SO₄-oldat fajlagos ellenállása:

$$\rho(\text{H}_2\text{SO}_4) = \frac{1}{\kappa} = \frac{1}{8,590 \cdot 10^{-3} \text{ S/cm}} = 116,4 \text{ } \Omega \cdot \text{cm.}$$

c.

Azonos térfogatú $0,0100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú Ba(OH)_2 - és H_2SO_4 -oldatokat összeöntve BaSO_4 -csapadék válik ki az oldatból. Mivel egyik reaktáns sincs feleslegben, a keletkezett oldat telített lesz BaSO_4 -ra nézve, és Ba^{2+} -, illetve SO_4^{2-} -ionokon kívül gyakorlatilag más iont nem tartalmaz (pontosabban csak a víz autoprotolíziséből származó hidrogén- és hidroxidionok mennyiségétől eltekinthetünk).

$$L = [\text{Ba}^{2+}] \cdot [\text{SO}_4^{2-}] \Rightarrow [\text{Ba}^{2+}] = [\text{SO}_4^{2-}] = \sqrt{L} = \sqrt{1,08 \cdot 10^{-10}} = 1,039 \cdot 10^{-5} \text{ mol/dm}^3 = 1,039 \cdot 10^{-8} \text{ mol/cm}^3$$

A fajlagos vezetés:

$$\begin{aligned} \kappa(\text{BaSO}_4) &= | +2 | \cdot u(1/2\text{Ba}^{2+}) \cdot [\text{Ba}^{2+}] + | -2 | \cdot u(1/2\text{SO}_4^{2-}) \cdot [\text{SO}_4^{2-}] = \\ \kappa(\text{H}_2\text{SO}_4) &= 2 \cdot 63,7 \cdot 1,039 \cdot 10^{-8} + 2 \cdot 79,8 \cdot 1,039 \cdot 10^{-8} = 2,982 \cdot 10^{-6} \text{ S/cm}. \end{aligned}$$

A BaSO_4 -oldat fajlagos ellenállása:

$$\rho(\text{BaSO}_4) = \frac{1}{\kappa} = \frac{1}{2,982 \cdot 10^{-6} \text{ S/cm}} = 3,353 \cdot 10^5 \Omega \cdot \text{cm}.$$

Ismét érdemes leellenőrizni, hogy valóban elhanyagolható-e a vízből származó ionok vezetése az oldatban.

A telített BaSO_4 -oldat fajlagos vezetése és ellenállása a H^+ - és OH^- -ionok járulékával:

$$\kappa = \kappa(\text{BaSO}_4) + \kappa(\text{H}_2\text{O}) = 2,982 \cdot 10^{-6} \text{ S/cm} + 5,497 \cdot 10^{-8} \text{ S/cm} = 3,037 \cdot 10^{-6} \text{ S/cm}.$$

$$\rho = \frac{1}{\kappa} = \frac{1}{3,037 \cdot 10^{-6} \text{ S/cm}} = 3,293 \cdot 10^5 \Omega \cdot \text{cm}.$$

A vízből származó ionok vezetésének elhanyagolása 1,8%-os hibát okoz, mely nem jelentős.

Tehát a $0,0100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú Ba(OH)_2 -oldat fajlagos ellenállása $\underline{1,90 \cdot 10^2 \Omega \cdot \text{cm}}$, a $0,0100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú H_2SO_4 -oldaté pedig $\underline{1,16 \cdot 10^2 \Omega \cdot \text{cm}}$. A két oldat azonos térfogatait összeöntve a keletkező oldat fajlagos ellenállása $\underline{3,29 \cdot 10^5 \Omega \cdot \text{cm}}$.

9.51. példa:

$10,0 \text{ cm}^3$ $0,0100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú HCl -oldathoz $90,0 \text{ cm}^3$ desztillált vizet adunk. Ehhez az oldathoz $0,0100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú NaOH -oldatot csepegtetünk. Mekkora az oldat fajlagos vezetése a következő NaOH -térfogatok esetén?

- $0,0 \text{ cm}^3$,
- $5,0 \text{ cm}^3$,
- $10,0 \text{ cm}^3$,
- $15,0 \text{ cm}^3$.

A térfogatok összeadhatóak!

$$\begin{aligned} u(\text{H}^+) &= 349,7 \text{ S} \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{mol}^{-1}, \quad u(\text{Cl}^-) = 76,3 \text{ S} \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{mol}^{-1}, \\ u(\text{Na}^+) &= 50,2 \text{ S} \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{mol}^{-1}, \quad u(\text{OH}^-) = 200,0 \text{ S} \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{mol}^{-1}. \end{aligned}$$

Megoldás:

Az a) pont kivételével a többi oldatban a H^+ - és Cl^- -ionok mellett Na^+ - és OH^- -ionok is vannak. Az oldat $10,0 \text{ cm}^3$ NaOH -oldat hozzáadásakor éppen semleges, ennél kisebb hozzáadott oldattérfogat esetén az oldat savas, nagyobb hozzáadott oldattérfogat esetén pedig lúgos kémhatású. A savas pH-jú oldatban a hidroxidionok mennyisége elhanyagolható, lúgos kémhatású oldatban pedig nem szükséges a hidrogénionok mennyiségével számolnunk.

a)

A kiindulási oldatban eredetileg 0,100 mmol HCl található.

A H^+ - és Cl^- -ionok koncentrációja az oldatban a hígulást figyelembe véve:

$$[H^+] = [Cl^-] = 0,00100 \text{ mol/dm}^3 = 1,00 \cdot 10^{-6} \text{ mol/cm}^3.$$

Az oldat fajlagos vezetése:

$$\kappa = u(H^+) \cdot [H^+] + u(Cl^-) \cdot [Cl^-] = (349,7 + 76,3) \cdot 1,00 \cdot 10^{-6} \text{ S/cm} = 4,26 \cdot 10^{-4} \text{ S/cm}.$$

b)

5,0 cm³ NaOH-oldat hozzáadásával 0,0500 mmol erős bázist juttatunk, mely a kiindulási sósv mennyiség éppen felével reagál. Tehát az oldat tartalmaz 0,100 mmol kloridiont és 0,0500 mmol nátrium-, illetve hidrogéniont. Az egyes ionok koncentrációja:

$$[Cl^-] = \frac{0,100 \text{ mmol}}{105,0 \text{ cm}^3} = 0,000952 \text{ mol/dm}^3 = 9,52 \cdot 10^{-7} \text{ mol/cm}^3,$$

$$[H^+] = \frac{0,0500 \text{ mmol}}{105,0 \text{ cm}^3} = 0,000476 \text{ mol/dm}^3 = 4,76 \cdot 10^{-7} \text{ mol/cm}^3,$$

$$[Na^+] = \frac{0,0500 \text{ mmol}}{105,0 \text{ cm}^3} = 0,000476 \text{ mol/dm}^3 = 4,76 \cdot 10^{-7} \text{ mol/cm}^3.$$

Az oldat fajlagos vezetése:

$$\begin{aligned} \kappa &= u(H^+) \cdot [H^+] + u(Na^+) \cdot [Na^+] + u(Cl^-) \cdot [Cl^-] = \\ &= 349,7 \cdot 4,76 \cdot 10^{-7} + 50,2 \cdot 4,76 \cdot 10^{-7} + 76,3 \cdot 9,52 \cdot 10^{-7} \text{ S/cm} = 2,63 \cdot 10^{-4} \text{ S/cm}. \end{aligned}$$

c)

A nátrium-hidroxid éppen elreagál az összes hidrogén-kloriddal, és az oldat így gyakorlatilag csak nátrium- és kloridionokat tartalmaz (a hidrogén- és hidroxidionok koncentrációja elhanyagolhatóan csekély). A keletkezett nátrium-klorid anyagmennyisége 0,100 mmol. Az egyes ionok koncentrációja:

$$[Na^+] = [Cl^-] = \frac{0,100 \text{ mmol}}{110,0 \text{ cm}^3} = 0,000909 \text{ mol/dm}^3 = 9,09 \cdot 10^{-7} \text{ mol/dm}^3.$$

Az oldat fajlagos vezetése:

$$\kappa = u(Na^+) \cdot [Na^+] + u(Cl^-) \cdot [Cl^-] = (50,2 + 76,3) \cdot 9,09 \cdot 10^{-7} \text{ S/cm} = 1,15 \cdot 10^{-4} \text{ S/cm}.$$

d)

Az oldat tartalmaz 0,100 mmol nátrium-kloridot és 0,0500 mmol nátrium-hidroxidot. Az egyes ionok koncentrációja:

$$[Cl^-] = \frac{0,100 \text{ mmol}}{115,0 \text{ cm}^3} = 0,000870 \text{ mol/dm}^3 = 8,70 \cdot 10^{-7} \text{ mol/cm}^3,$$

$$[OH^-] = \frac{0,0500 \text{ mmol}}{115,0 \text{ cm}^3} = 0,000435 \text{ mol/dm}^3 = 4,35 \cdot 10^{-7} \text{ mol/cm}^3,$$

$$[\text{Na}^+] = \frac{0,1500 \text{ mmol}}{115,0 \text{ cm}^3} = 0,00130 \text{ mol/dm}^3 = 1,30 \cdot 10^{-6} \text{ mol/cm}^3.$$

Az oldat fajlagos vezetése:

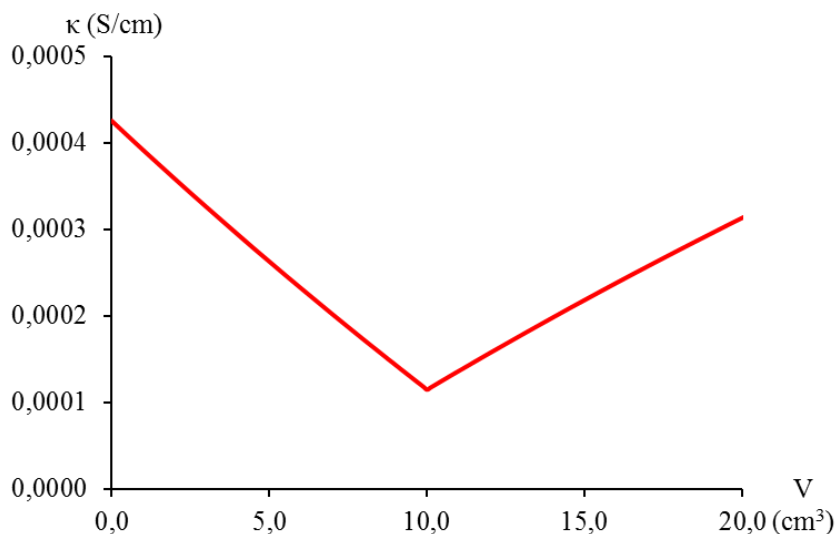
$$\begin{aligned} \kappa &= u(\text{Cl}^-) \cdot [\text{Cl}^-] + u(\text{OH}^-) \cdot [\text{OH}^-] + u(\text{Na}^+) \cdot [\text{Na}^+] = \\ &= 76,3 \cdot 8,70 \cdot 10^{-7} + 200,0 \cdot 4,35 \cdot 10^{-7} + 50,2 \cdot 1,30 \cdot 10^{-6} \text{ S/cm} = 2,19 \cdot 10^{-4} \text{ S/cm}. \end{aligned}$$

Foglaljuk össze az eredményeket!

NaOH-oldat térfogata (V_{NaOH})	Fajlagos vezetés (κ)
0,0 cm ³	$4,26 \cdot 10^{-4} \text{ S/cm}$
5,0 cm ³	$2,63 \cdot 10^{-4} \text{ S/cm}$
10,0 cm ³	$1,15 \cdot 10^{-4} \text{ S/cm}$
15,0 cm ³	$2,19 \cdot 10^{-4} \text{ S/cm}$

Jól megfigyelhető, hogy a nátrium-hidroxid-oldat hozzáadásával változik az oldat vezetése, a fajlagos vezetés éppen az ekvivalenciapontban minimális (ennek oka, hogy a hidrogén-, illetve hidroxidionoknak jóval nagyobb a mozgékonyága, mint a többi ionnak). Ezt a módszert felhasználhatjuk titrálás végpontjelzésére is: a mérőoldat hozzáadása közben az oldat vezetését folyamatosan regisztráljuk, és a kapott titrálási görbéből állapítjuk meg a fogyást. Az ilyen térfogatos elemzést **konduktometriás titrálásnak** nevezzük.

Az alábbi ábrán a fenti titrálás görbét láthatjuk:

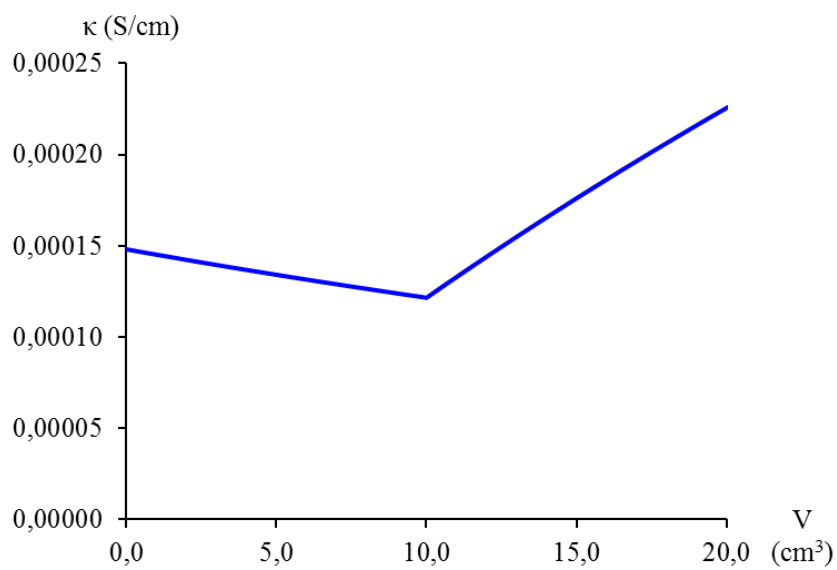


9.8.4. ábra: Konduktometriás titrálási görbe

Mint látható, a titrálási görbe törése éppen a mérőoldat fogyásánál található. A titráló- és titrált oldatok koncentrációja között viszonylag jelentős a különbség, a titrált oldat koncentrációja jóval kisebb a titrálószerénél. (Ez azért célszerű, mert így az oldat hígulása nem túl jelentős. Ha az oldat térfogata közel állandónak tekinthető, a görbe két szakasza jó közelítéssel egyenes. Ellenben, ha jelentős a hígulás, ez már nem igaz. A mérési pontokra illesztett egyenesek metszéspontja megadja a keresett fogyást.)

A módszer nem csak sav-bázis titrálásokra alkalmazható, a konduktometriás titrálás feltétele, hogy az oldat vezetőképessége jelentősen változzon a mérőoldat hozzáadásával. Például ha ezüst-nitrát-oldathoz nátrium-klorid-oldatot csepegtetünk, az oldat vezetése a vízben rosszul oldódó ezüst-klorid kiválásának hatására jelentősen csökken. Egy ilyen titrálási görbe látható az alábbi ábrán:

100,0 cm³ 0,00100 mol/dm³ koncentrációjú AgNO₃-oldathoz 0,0100 mol/dm³ koncentrációjú NaCl-oldatot adagolunk.



9.8.5. ábra: Konduktometriás titrálási görbe

10. A SZERVETLEN KÉMIA ALAPJAI

A fejezetben a legfontosabb szervesetlen vegyületekkel ismerkedünk meg.

10.1. A szervesetlen vegyületek csoportosítása

A szervesetlen vegyületeket többféleképpen csoportosíthatjuk. Egy kézenfekvő csoportosítás a periódusos rendszerben elfoglalt helyük alapján történhet. Egy másik lehetőség, ha az elemi összetétel alapján végezzük a csoportosítást. Bizonyos tulajdonságok, például sav-bázis jellemzők alapján is kategorizálhatjuk a különféle vegyületeket.

Csoportosítás a periódusos rendszer alapján:

- s-mező elemeinek vegyületei:
 - » alkálifémek vegyületei
 - » alkáliföldfém vegyületek
- p-mező elemeinek vegyületei:
 - » bórvegyületek, földfémvegyületek stb.
 - » szénvegyületek, szilíciumvegyületek stb.
 - » nitrogénvegyületek, foszforvegyületek stb. (pniktogén-vegyületek)
 - » oxigénvegyületek, kénvegyületek stb. (kalkogén-vegyületek)
 - » halogénvegyületek
 - » nemesgázok vegyületei
- d-mező elemeinek (átmenetifémek) vegyületei
- f-mező elemeinek (lantanidák és aktinidák) vegyületei.

Az alkotóelemek, elemi összetételük szerinti csoportosítás. A legfontosabb vegyületcsoportok a bennük található anion alapján:

– **Hidridek:** hidrogént tartalmazó vegyületek.

Vannak **kovalens** hidridek [például hidrogén-klorid (HCl), víz (H₂O), kén-hidrogén (H₂S), ammónia (NH₃), metán (CH₄)] és **sószerű** hidridek [például nátrium-hidrid (NaH), alumínium-hidrid (AlH₃)]. (Léteznek még a d-mező egyes elemeivel fémes – más néven intersticiális – hidridek is.) Vigyázzunk! A hidrid jelentést kétféle értelemben használjuk: egyrészt mint vegyületcsoportot (hidrogénnel alkotott vegyület), másrészt mint a hidridiont tartalmazó vegyületek, ide csak a hidrogént anionként tartalmazó sók tartoznak.

– **Halogenidek:** olyan halogéntartalmú (F, Cl, Br, I) vegyületek, melyben a halogenidion (egyszeresen negatív töltésű ion: F⁻, Cl⁻, Br⁻, I⁻) található.

Az atomok közötti kötés szerint lehetnek **ionosak** [sószerű halogenidek, például nátrium-fluorid (NaF), kalcium-klorid (CaCl₂), kálium-bromid (KBr)], felépülhetnek **kovalens** molekulákból [kovalens halogenidek, például hidrogén-jodid (HI), foszfor-triklorid (PCl₃), kén-hexafluorid (SF₆)] és **átmeneti** kovalens-ionos jellegűek [például ezüst(I)-klorid (AgCl), vas(III)-fluorid (FeF₃)].

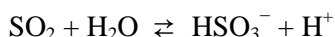
- **fluoridok:**
például: kalcium-fluorid (CaF₂), hidrogén-fluorid (HF), bór-trifluorid (BF₃), jód(VII)-heptafluorid (IF₇)
- **kloridok:**
például: kálium-klorid (KCl), magnézium-klorid (MgCl₂), ón(IV)-klorid (SnCl₄), kéndiklorid (SCl₂), foszfor-triklorid (PCl₃)
- **bromidok:**
például: nátrium-bromid (NaBr), nikkell(II)-bromid (NiBr₂), hidrogén-bromid (HBr), ezüst(I)-bromid (AgBr)
- **jodidok:**

például: kálium-jodid (KI), hidrogén-jodid (HI), higany(II)-jodid (HgI₂), ólom(II)-jodid (PbI₂)

– **Oxidok:** (formálisan) oxidiont (O²⁻) tartalmazó vegyületek.

Ismerünk savas, bázisos és amfoter oxidokat, ám van olyan oxid, melyet nem lehet egyik kategóriába sem besorolni (ezeknek a semleges oxidoknak is nevezett vegyületeknek nincs sem savas, sem bázisos karakterük, például a szén-monoxid).

- savas oxidok: ezek vízzel reagálva savakat képeznek. Általában a nemfémek (elektronegatív) elemek kovalens kötésű oxidjai tartoznak ide.



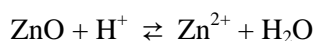
például: szén-dioxid (CO₂), kén-dioxid (SO₂), foszfor-pentoxid (P₂O₅, valójában P₄O₁₀ molekulákból áll), dinitrogén-pentoxid (N₂O₅).

- bázisos oxidok: vízzel reagálva bázisokat (lúgokat) képeznek. Rendszerint a fémek oxidjai (elektropozitív elemek oxidjai) tartoznak ide, ezekben a kötés rendszerint ionos.



például: nátrium-oxid (Na₂O), kalcium-oxid (CaO), lítium-oxid (Li₂O).

- amfoter oxidok: erős savakkal bázisként, erős bázisokkal savként viselkednek. Gyakran az átmeneti és másodfajú fémek oxidjai amfoterek.



például: cink-oxid (ZnO), víz (H₂O), alumínium-oxid (Al₂O₃).

– **Hidroxidok:** hidroxidion-tartalmú (OH⁻) vegyületek.

például: nátrium-hidroxid (NaOH), réz(II)-hidroxid [Cu(OH)₂], vas(III)-hidroxid [Fe(OH)₃].

– **Karbonátok:** karbonátiont (CO₃²⁻) tartalmazó vegyületek. Ezekkel rokon vegyületek a hidrogén-karbonátok (HCO₃⁻)

például: nátrium-karbonát (Na₂CO₃), kálium-hidrogén-karbonát (KHCO₃)

– **Szulfátok:** szulfátiont (SO₄²⁻) tartalmazó vegyületek. (Ismertek hidrogén-szulfátok is: ezek HSO₄⁻ - iont tartalmaznak)

például: alumínium-szulfát [Al₂(SO₄)₃], ammónium-hidrogén-szulfát (NH₄HSO₄), vas(II)-szulfát (FeSO₄).

– **Nitrátok:** nitrátiont (NO₃⁻) tartalmazó vegyületek

például: magnézium-nitrát [Mg(NO₃)₂], króm(III)-nitrát [Cr(NO₃)₃], ezüst(I)-nitrát (AgNO₃).

– **Foszfátok:** foszfátiont (PO₄³⁻) tartalmazó vegyületek. Ismerünk hidrogén-foszfátokat és dihidrogén-foszfátokat is

például: nátrium-foszfát (Na₃PO₄), kalcium-dihidrogén-foszfát [Ca(H₂PO₄)₂], diammónium-hidrogén-foszfát [(NH₄)₂HPO₄].

– **Szulfidok:** szulfidiont (S²⁻) tartalmazó vegyületek

például: nátrium-szulfid (Na₂S), alumínium-szulfid (Al₂S₃), vas(II)-szulfid (FeS), arzén(v)-szulfid (As₂S₃).

– **Szulfitok:** szulfitiont (SO₃²⁻) tartalmazó vegyületek. A hidrogén-szulfitok HSO₃⁻-iont tartalmaznak. Például: nátrium-szulfit (Na₂SO₃), kálium-hidrogén-szulfit (KHSO₃).

– **Számos egyéb vegyületcsoport** ismert: borátok (például nátrium-tetraborát: Na₂B₄O₇, nitridek (például lítium-nitrid: Li₃N), karbidok (például kalcium-karbid: CaC₂, szilícium-karbid: SiC), nitritrek (például nátrium-nitrit: NaNO₂), cianidok (például kálium-cianid: KCN), ezekkel részlegesen majd a későbbi szervetlen kémiai tanulmányok során foglalkozunk.

A legfontosabb szervesetlen vegyületekkel az alábbi csoportosítás szerint ismerkedünk meg:

- savak,
- bázisok,
- sók,
- komplex vegyületek.

10.2. Savak

Savak: a Brønsted–Lowry sav-bázis elmélet szerint savaknak nevezzük azon anyagokat, melyek H^+ -iont (hidrogéniont vagy protont) iont tudnak leadni (*protondonorok*).

[Emlékeztetőül: Arrhenius definíciója szerint savnak tekintjük azon vegyületeket, melyekből vízben H_3O^+ -ionok (oxóniumionok) és savmaradék anionok keletkeznek.]

Savanhidridnek nevezzük az a vegyületet, melyet vízzel reagáltatva savat (oxosavat) kapunk. Az oxodavak anhidridjei rendszerint elektronegatív (nagy elektronegativitású) elemek – kovalens – oxidjai.

Például a kén-trioxid a kénsav anhidridje: $SO_3 + H_2O = H_2SO_4$.

Ismerünk pszeudo-savanhidrideket (nem valódi savanhidridek) is, ilyen például a szén-monoxid (CO), mely a hangyasav (HCOOH) anhidridjének tekinthető.

A sav **disszociációjának** vagy **deprotonálódásnak** nevezzük azt a folyamatot, mely során a savból H^+ -ion és savmaradék anion keletkezik:



A savak lehetnek egybázisúak és többbázisúak:

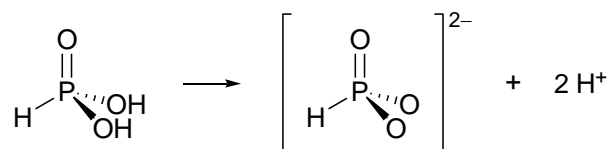
Egybázisú vagy **egyértékű sav:** egyszeresen deprotonálható, egyetlen hidrogénjét lehet eltávolítani, fémmel helyettesíteni.

Erre példa a sósav (HCl), a hidrogén-cianid (HCN).

Többbázisú vagy **többértékű sav:** egynél több hidrogénjét lehet fémmre cserélni.

Például: kénsav (H_2SO_4), foszforsav (H_3PO_4).

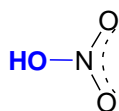
Bizonyos esetekben a sav tartalmazhat olyan hidrogéneket is, melyeket nem lehet vizes közegben eltávolítani. Erre egy érdekes példa a foszforosav, melynek képlete H_3PO_3 . A hidrogénatomok számából arra következtethetünk, hogy a sav háromértékű, ám a kísérletek alapján csak kétértékű: $H_2[HPO_3]$. A sav szerkezetén jól megfigyelhető, hogy az egyik hidrogén (proton) közvetlenül a foszforatomhoz kapcsolódik, így nem távolítható el:



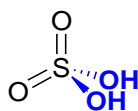
A savakat csoportosíthatjuk **erősségük alapján** is: vannak **erős, közép-erős, gyenge és igen gyenge** savak (lásd a Kémiai egyensúlyok fejezetet).

Oxosavak: hidrogéneken és egy másik (gyakran nemfémes) elemen kívül is oxigént is tartalmaz. A hidrogén atom (vagy atomok) rendszerint nem közvetlenül kapcsolódik (kapcsolódnak) a nemfémes elemhez, hanem oxigénatomhoz kapcsolódnak. Az így létrejövő OH-csoportot **hidroxil**csoportnak nevezzük (a lenti ábrán vastagon szedve látható). Az oxosavaknak rendszerint van savanhidridjük.

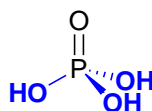
Például: salétromsav (HNO_3), kénsav (H_2SO_4), foszforsav (H_3PO_4), vannak azonban átmeneti fémeknek is oxosavai is: permangánsav ($HMnO_4$).



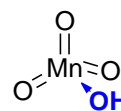
salétromsav



kénsav



foszforsav



permangánsav

Savgyök: egy (vagy több) hidroxilcsoport eltávolításával keletkező gyök. Például az ecetsavból az OH-gyököt eltávolítva acetylgyököt (CH_3CO) kapunk.

További példák:

Tionilgyök: a kénsav két OH-csoportjának eltávolításával keletkezik (SO). Szokás szulfonilgyöknek is nevezni.

Szulfurilgyök: a kénsav két OH-csoportjának eltávolításával keletkezik (SO_2). Újabb elnevezési szabályok szerint szulfonilgyöknek is nevezik.

Hidrogén-halogenidek és rokon vegyületek: hidrogént (hidrogéneket) és egy (vagy több) nemfém elemet tartalmazó, kovalens kötésű vegyületek. A bennük lévő nemfémnek általában nagy az elektronegativitása (pl. F, Cl, stb.). Ezen savaknak nincs savanhidridjük, nem oxosavak.

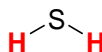
Például: hidrogén-klorid (HCl, vizes oldata a sósavoldat), hidrogén-fluorid vagy folyosav (HF), kénhidrogén vagy hidrogén-szulfid (H_2S), hidrogén-cianid (HCN).



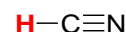
hidrogén-klorid



hidrogén-fluorid

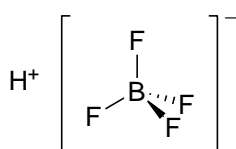


hidrogén-szulfid

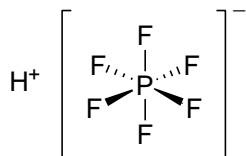


hidrogén-cianid

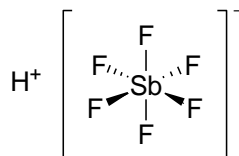
Továbbá ismerünk **egyéb** savfajtákat is, ilyenek a komplex savak (például tetrafluoro-bórsav $\text{H}[\text{BF}_4]$, hexafluoro-foszforsav $\text{H}[\text{PF}_6]$, hexafluoroantimonsav $\text{H}[\text{SbF}_6]$, ez utóbbi egy rendkívül erős szupersav), tiosavak (egy oxosav egy vagy több oxigénjét kénnel helyettesítjük, például tiokénsav: $\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_3$), stb.



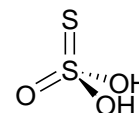
tetrafluoro-bórsav



hexafluoro-foszforsav



hexafluoro-antimonsav



tiokénsav

A legfontosabb szervetlen savak:

Hidrogén-klorid (HCl)

- Egyértékű (hidrid típusú) erős sav.
- Színtelen, szúrós szagú gáz, vízben kiválóan oldódik (lásd szökőkút kísérlet).
- Vizes oldatát sósavnak nevezzük.
- A tömény sósavoldat kb. 36 tömeg%-os, levegőn füstölög.
- Előállítás: többnyire szerves anyagok klórozásának mellékterméke.
- Sói a **kloridok** (például kalcium-klorid: CaCl_2).
- Nincs savanhidridje (nem oxosav).

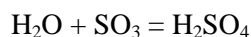
- A hidrogén-klorid szerkezeti képlete:



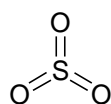
hidrogén-klorid

Kénsav (H₂SO₄)

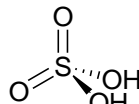
- Kétértékű oxosav, első disszociációs lépcsőjében erős, a másodikban pedig középérs savnak tekinthető.
- Tömény vizes oldata (kb. 96–98 tömeg%-os) nagy sűrűségű, viszkózus, színtelen folyadék.
- Előállítható 100%-os kénsav is, melynek elnevezése *füstölgő kénsav*.
- *Óleumnak* nevezzük a fölös kén-trioxidot tartalmazó kénsavat (ez 100%-osnál töményebbnek tekinthető).
- A kénsav vízzel korlátlanul elegyedik.
- Vízelvonó hatású (higroszkópos)
- A kénsavban a kén oxidációfoka +6.
- Töményen erős oxidálószer.
- Előállítás: a kén-dioxid katalitikus (V₂O₅ katalizátor) oxidációjával keletkező kén-trioxidot tömény kénsavban oldják, majd ezt hígítják.
- Szabályos sói a **szulfátok** (például kálium-szulfát: K₂SO₄), savanyú sói a **hidrogén-szulfátok** (például nátrium-hidrogén-szulfát: NaHSO₄).
- A kénsav anhidridje a kén-trioxid: SO₃.



- a kén-trioxid és a salétromsav szerkezeti képlete:



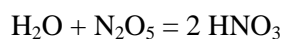
kén-trioxid



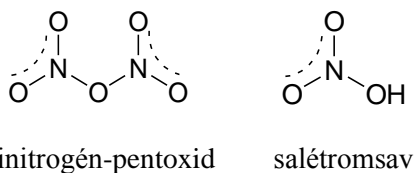
kénsav

Salétromsav (HNO₃)

- Egybázisú erős oxosav.
- Tiszta állapotban (szobahőmérsékleten és normál légköri nyomáson) színtelen, szúrós szagú folyadék, ám állás hatására barnás színűvé válik (ennek oka a bomlás közben keletkező nitrogén-dioxid).
- A kereskedelemben kapható salétromsav 68 tömeg%-os.
- A tömény (86 tömeg%-nál töményebb) salétromsavat *füstölgő salétromsav*nak nevezzük.
- *Választóvíz*: 50 tömeg%-nál töményebb salétromsav, mely még az ezüstöt is oldja (de az aranyat nem).
- A salétromsavban a nitrogén oxidációfoka +5.
- Elsősorban tömény vizes oldatban erős oxidáló sav.
- Előállítás: ammóniagáz katalitikus (platina katalizátor) oxidációjával nitrogén-dioxidot állítanak elő, majd ezt permetezőtoronyokban levegővel és vízzel reagáltatva keletkezik a salétromsav (Ostwald-eljárás).
- Sói a **nitrátok** [például alumínium-nitrát: Al(NO₃)₃].
- Savanhidridje a dinitrogén-pentoxid (N₂O₅).



- a savanhidrid és a sav szerkezeti képlete:

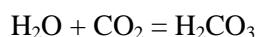


Szénsav (H₂CO₃)

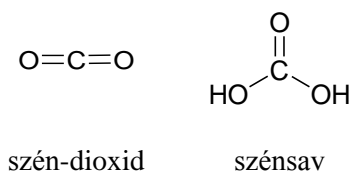
- Kétfázisú gyenge oxosav.
- A szénsavoldat tulajdonképpen a szén-dioxid gáz vizes oldatának tekinthető (a beoldódott szén-dioxid túlnyomó része hidratált szén-dioxid formában van jelen az oldatban, emellett főleg hidrogén-karbonátionokat tartalmaz, disszociálatlan szénsavat rendkívül kis koncentrációban található az oldatban).



- A szénsav szabályos sói a **karbonátok** (például kalcium-karbonát: CaCO₃), savanyú sói a **hidrogén-karbonátok** (például nátrium-hidrogén-karbonát: NaHCO₃).
- Savanhidridje a szén-dioxid (CO₂).

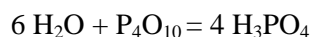


A szén-dioxid (savanhidrid) és a szénsav szerkezeti képlete:

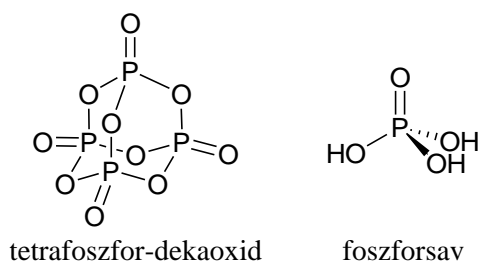


Foszforsav (H₃PO₄)

- Hárombázisú oxosav, az első disszociációs lépésben középérső, a második két lépésében gyenge, illetve igen gyenge savnak tekinthető.
- Régi magyar elnevezése: vilsav, szokás ortofoszforsavnak is hívni.
- A tiszta foszforsav szobahőmérsékleten színtelen, víztiszta, kristályos, viszonylag kemény anyag, olvadáspontja 42 °C, megolvadva színtelen viszkózus folyadék.
- A foszforsav vízben kiválóan oldódik.
- Előállítás: a fehérfoszfor oxidációjával keletkező foszfor-pentoxidot elnyeletik foszforsavban, majd a keletkezett tömény savat vízzel hígítják.
- Szabályos sói a **foszfátok** vagy **tercier foszfátok** (például nátrium-foszfát: Na₃PO₄), kétféle savanyú sója is ismert: **hidrogén-foszfátok** vagy **szekunder foszfátok** (például dikálium-hidrogén-foszfát: K₂HPO₄) és a **dihidrogén-foszfátok** vagy **primer foszfátok** [például kalcium-dihidrogén-foszfát: Ca(H₂PO₄)₂].
- Savanhidridje a foszfor(V)-oxid (P₂O₅) vagy molekuláris formájában tetrafoszfor-dekaoxid (P₄O₁₀).



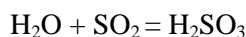
- a tetrafoszfor-dekaoxid és a foszforsav szerkezeti képlete:



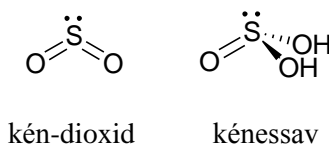
Egyéb fontosabb savak:

Kénessav (H₂SO₃)

- A kén-dioxid (mely szobahőmérsékleten, normál nyomáson színtelen, fojtó szagú gáz) vízben történő oldásával keletkezik, kétértékű viszonylag gyenge sav.
- A kénessavban a kén oxidációs foka +4.
- A kéndioxidhoz hasonlóan redukáló hatású, levegőn lassan kénsavvá oxidálódik.
- Szabályos sói a **szulfitok** (például bárium-szulfit: BaSO₃), savanyú sói a **hidrogén-szulfitok**, melyeket régebben biszulfitoknak is neveztek (például nátrium-hidrogén-szulfit: NaHSO₃).
- A kénessav anhidridje a kén-dioxid: SO₂.

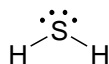


- a kén-dioxid és a kénessav szerkezeti képlete:



Dihidrogén-szulfid (H₂S)

- A kén-hidrogén vagy hidrogén-szulfid egy kétértékű gyenge sav.
- A H₂S szobahőmérsékleten, normál légköri nyomáson gáz halmazállapotú, jellegzetes záptojásszagú, rendkívül mérgező vegyület, mely vízben jól oldódik. Oldatának neve kénhidrogénes víz.
- A H₂S-ben a kén oxidációs foka -2.
- Redukáló hatású sav, könnyen oxidálható például elemi kénné (erélyesebb oxidálószerrek akár kénsavvá is oxidálhatják).
- Szabályos sói a **szulfidok** [például ammónium-szulfid: (NH₄)₂S], savanyú sói a **hidrogén-szulfidok** (például nátrium-hidrogén-szulfid: NaHS).
- Nincs savanhidridje.
- A hidrogén-klorid szerkezeti képlete:

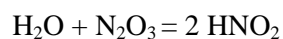


dihidrogén-szulfid

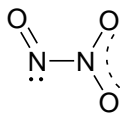
Salétromossav (HNO₂)

- Egyértékű gyenge sav.
- Csak híg vizes oldatban stabil, melegítve salétromsavra és nitrogén-oxidokra bomlik.
- Sói a **nitritek** (például ammónium-nitrit: NH₄NO₂).

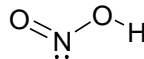
- A salétromossav anhidridje a dinitrogén-trioxid: N_2O_3 .



- A dinitrogén-trioxid molekula és a salétromossav szerkezeti képlete:



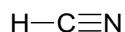
dinitrogén-trioxid



salétromossav

Hidrogén-cianid (HCN)

- Egyértékű gyenge sav.
- A hidrogén-cianid szobahőmérsékleten és normál nyomáson egy rendkívül mérgező, keserűmandula szagú gáz, vizes oldatát triviális nevén kéksavnak nevezik.
- A hidrogén-cianid sói a **cianidok** (például kálium-cianid: KCN, ezüst-cianid: AgCN).
- Nincs savanhidridje.



hidrogén-cianid

Hidrogén-fluorid (HF)

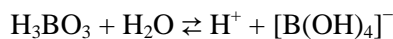
- Egyértékű középérső sav (ellentétben a többi hidrogén-halogeniddel, mivel azok erős savak tekinthetők).
- Normál légköri nyomáson a tiszta hidrogén-fluorid 20 °C-on forró folyadék, mely vízelvonó hatású (higroszkópos).
- Triviális elnevezése: folyosav.
- Sói a **fluoridok** (például alumínium-fluorid: AlF_3).
- Nincs anhidridje.



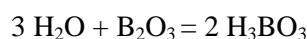
hidrogén-fluorid

Bórsav (H_3BO_3)

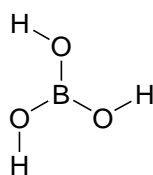
- Rendkívül gyenge, vízben gyakorlatilag egyértékűnek tekinthető sav.
- Érdekes módon, a többi oxosavtól eltérően nem deprotonálódással szolgáltat hirogénionokat:



- Normál légköri nyomáson és szobahőmérsékleten fehér kristályos anyag, vízben jól oldódik.
- Sói a **borátok** (például nátrium-tetraborát: $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7$).
- A bórsav anhidridje a dibór-trioxid: B_2O_3 .



- a bórsav szerkezeti képlete:



bórsav

A halogének oxosavai, ezek ionjai és elnevezésük

0A fluor kivételével a halogéneknek többféle oxosavuk is ismert (a hidrogén-halogenidek mellett), ezen savakban a halogénatomok különböző oxidációfokkal rendelkeznek. Az ismert halogén-oxosavakat és hagyományos elnevezésüket az alábbi táblázatban gyűjtöttük össze:

Halogénelem oxidációfoka:	+1	+3	+5	+7
Klór	HClO hipoklórossav	HClO ₂ klórossav	HClO ₃ klórsav	HClO ₄ Perklórsav
Bróm	HBrO hipobrómosav	HBrO ₂ brómosav	HBrO ₃ brómsav	HBrO ₄ Perbrómsav
Jód	HIO hipojódosav	HIO ₂ jódosav	HIO ₃ jódosav	HIO ₄ Perjódosav

A halogének oxosavainak sóinak hagyományos elnevezését a következő táblázat tartalmazza:

Halogénelem oxidációfoka:	+1	+3	+5	+7
Klór	ClO ⁻ hipoklorit	ClO ₂ ⁻ klorit	ClO ₃ ⁻ klorát	ClO ₄ ⁻ Perklorát
Bróm	BrO ⁻ hipobromit	BrO ₂ ⁻ bromit	BrO ₃ ⁻ bromát	BrO ₄ ⁻ Perbromát
Jód	HIO ⁻ hipojodit	IO ₂ ⁻ jodit	IO ₃ ⁻ jodát	IO ₄ ⁻ Perjodát

10.3. Bázisok

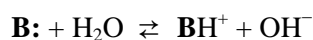
Bázisok: a Brønsted–Lowry-elmélet szerint bázisok azok a vegyületek, melyek proton felvételére képesek (*protonakceptorok*).

[Emlékeztetőül: Arrhenius sav-bázis elmélete szerint a bázisok vízben OH⁻ (hidroxid) ionra és kationra disszociálnak.]

Bázisanhidrid: olyan anyag, mely vízzel reagálva bázist (oxobázist) eredményez. Rendszerint a bázisanhidridek elektropozitív (kis elektronegativitású) elemek – ionos – oxidjai.

Például a nátrium-oxid egy bázisanhidrid: Na₂O + H₂O = 2 NaOH.

A bázisok disszociációjuk vagy vízzel történő reakciójuk során hidroxid-ionok keletkeznek:



A savak csoportosításához hasonlóan a bázisokat is kategorizálhatjuk:

Értékűség szerint ismerünk **egysavú (egyértékű)** és **többsavú (többértékű)** bázisokat: az értékűség megadja, hogy a bázis hány hidroxid ionját lehet lecserélni más anionra. Egysavú bázisra példa a nátrium-hidroxid (NaOH), kétsavú bázisra a kalcium-hidroxid [Ca(OH)₂], háromsavúra pedig az alumínium-hidroxid [Al(OH)₃].

Erősség szerint a bázisokat lehetnek erős, közép-erős és gyenge bázisok.

Szerkezetük alapján ismerünk ionos és molekuláris bázisokat:

Ionos bázisok: ionrácsos vegyületek, melyek kristályrácsában hidroxid (vagy más protonakceptor) ionok találhatóak a kationok mellett.
Például: kálium-hidroxid (KOH)

Molekuláris bázisok: olyan molekulák, melyben proton felvételére alkalmas magános elektrópár található.

Például: ammónia (:NH₃), piridin (:NC₅H₅).

A legfontosabb bázisok:

Alkálifém-hidroxidok

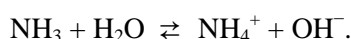
- Közülük a két legfontosabb hidroxid a nátrium-hidroxid, triviális nevén nátronlúg vagy marónátron (NaOH) és a kálium-hidroxid, triviális nevén kálilúg (KOH).
- Egyértékű erős bázisok.
- Szobahőmérsékleten és normál nyomáson szilárd halmazállapotúak, levegőn elmálló, átlátszatlan fehér kristályokat képeznek, vízben jól oldódnak.
- Szilárd halmazállapotban higroszkóposak, megkötik a levegő szén-dioxid tartalmát (még oldatban is). Például: $2 \text{NaOH} + \text{CO}_2 = \text{Na}_2\text{CO}_3 + \text{H}_2\text{O}$
- Anhidridjeik a megfelelő oxidjai (például a kálium-hidroxid anhidridje a kálium-oxid: K₂O).

Alkáliföldfém-hidroxidok

- A magnézium-hidroxid igen gyenge bázis, a kalcium-, stroncium- és bárium-hidroxid közép-erős bázisok (ez utóbbi vizes oldatának közismert neve baritvíz).
- Vízben csak korlátozottan oldódnak.
- Megkötik a levegő szén-dioxid-tartalmát. Például: $\text{Ba}(\text{OH})_2 + \text{CO}_2 = \text{BaCO}_3 + \text{H}_2\text{O}$.
- Gyakorlati szempontból fontos vegyület: kalcium-hidroxid, triviális nevén oldott mész, mely kalcium-oxid (égetett mész) vízben való oldásával keletkezik. A kalcium-hidroxid lassan megkötöi a levegő szén-dioxid-tartalmát, miközben kalcium-karbonáttá (triviális néven mészkö) alakul.
- Anhidridjeik az alkáliföldfém-oxidok (például a kalcium-hidroxid anhidridje a kalcium-oxid: CaO).

Ammónia (NH₃)

- Egyértékű gyenge bázis.
- Az ammónia szobahőmérsékleten és normál nyomáson szúrós szagú, színtelen gáz. Vizes oldatát szokták ammóniaoldatnak vagy szalmiákszesznek hívni.
- A ammónium-hidroxid téves kifejezés, valójában az ammóniagáz vizes oldatáról van szó, melyben részlegesen lejátszódik az alábbi folyamat:

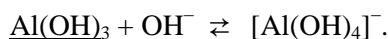
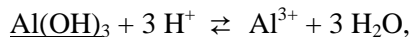


Tehát az oldatban nem NH₄OH molekulák vannak, hanem hidratált ammónia molekulák (NH₃), ammóniumionok (NH₄⁺) és hidroxidionok (OH⁻) találhatóak.

- Az ammónia sóit **ammónium**-vegyületeknek nevezzük.
- Nincs bázisanhidridje.

Másodfajú fémek hidroxidjai

- Ide sorolható például az alumínium-hidroxid, az ón(II) és ón(IV)-hidroxidok, az ólom-hidroxid.
- Vízben rosszul oldódó csapadékok, ezért oldatuk kémhatása sem lúgos.
- Rendszerint amfoter karakterűek, mind ásványi savakban, mind erős bázisok (például nátrium-hidroxid) oldatában oldódnak (ez utóbbi esetben a megfelelő hidroxokomplex keletkezik). Például az alumínium-hidroxid esetén:

**10.4. Sók**

Sóknak nevezzük a kationokból és anionokból felépülő vegyületeket. A savak és bázisok közömbösítési reakciójából keletkező vegyületek sóknak tekinthetők.

Savanyú só: a többértékű sav nem minden savas protonját helyettesítjük kationnal.

Például: kálium-hidrogén-szulfát (KHSO_4), diammonium-hidrogén-foszfát $[(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4]$. Többértékű szerves savaknak is ismertek savanyú sói. Például: kálium-hidrogén-tartarát $[\text{HOOC-CH(OH)-CH(OH)-COOK}]$, kálium-hidrogén-ftalát ($\text{HOOC-C}_6\text{H}_4\text{-COOK}$).

Bázisos só: a többértékű bázisnak nem minden OH^- -ionját helyettesítjük anionnal.

Például: kalcium-klorid-hidroxid $[\text{CaCl(OH)}]$, réz(II)-karbonát-dihidroxid $[\text{Cu}_2(\text{CO}_3)(\text{OH})_2]$, cink-jodid-hidroxid $[\text{ZnI(OH)}]$.

Szabályos sók: a sav összes protonját más kationnal helyettesítjük, valamint a bázisnak az összes hidroxid ionját anionnal helyettesítjük.

Például: kálium-szulfát (K_2SO_4), ólom(II)-karbonát (PbCO_3), alumínium-szulfát $[\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3]$, bárium-jodát $[\text{Ba(IO}_3)_2]$.

Kettős sóknak nevezzük azokat a sókat, melyek kétfajta kationt és egyfajta aniont, vagy egyfajta kationt és kétfajta aniont tartalmaznak. A hármassók ennek a megfelelő kibővítését jelentik.

Például: alumínium-kálium-szulfát $[\text{AlK}(\text{SO}_4)_2]$, pentakalcium-fluorid-trifoszfát $[\text{Ca}_5\text{F}(\text{PO}_4)_3]$, magnézium-ammónium-foszfát (MgNH_4PO_4), nátrium-ammónium-hidrogén-foszfát ($\text{NaNH}_4\text{HPO}_4$), kálium-magnézium-fluorid (KMgF_3).

Speciális elnevezések:

Gálicok (esetleg **vitriolok**): a kétértékű fémek szulfátjai, melyek rendszerint 7 kristályvízzel kristályosodnak. Elsősorban a magnézium-, kalcium-, mangán-, vas-, cink- és réz-szulfát tartozik ide.

Például: cink(II)-szulfát ($\text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$), magnézium-szulfát ($\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$), réz(II)-szulfát ($\text{CuSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$), kalcium-szulfát ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$)

Timsók: egy egyértékű és egy háromértékű fém szulfátjából álló kettős sók. Az egyértékű kation gyakran kálium (K^+), ammónium (NH_4^+), tallium (Tl^+), esetleg más alkálifémion, a háromértékű pedig alumínium(III) (Al^{3+}), króm(III) (Cr^{3+}), vas(III) (Fe^{3+}), mangán(III) (Mn^{3+}) stb.

Általános képletük rendszerint $\text{M(I)M(III)(SO}_4)_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$.

Például: króm(III)-kálium-szulfát-víz (1/12) $[\text{CrK}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}]$, alumínium-ammónium-szulfát-víz (1/12) $[\text{AlNH}_4(\text{SO}_4)_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}]$.

10.5. Komplex vegyületek

A komplex vagy koordinációs vegyületek központi atom(ok)ból vagy ion(ok)ból és ligandum(ok)ból állnak.

Az atom, melyből a komplex vegyület központi atomja lesz, üres pályákkal rendelkezik (elektronpár-akceptor), a központi atom és a ligandumok között datív (koordinációs) kötés található (ezért a ligandumnak rendelkeznie kell magános elektronpárral, tehát *elektronpárdonor*).

A komplex vegyületek képletében a központi atomot a ligandumokkal szögletes zárójelbe tesszük.

Koordinációs szám: a központi atom körül elhelyezkedő ligandumok száma.

Például: $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-}$ koordinációs száma 6 (hexakoordinált Fe^{3+}), $[\text{Al}(\text{OH})(\text{H}_2\text{O})_5]^{2+}$ koordinációs száma 6 (hexakoordinált), $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$ koordinációs száma 4 (tetrakoordinált).

Alapvetően a koordinációs vegyületeket a ligandumok szerint szoktuk csoportosítani.

A ligandumok lehetnek semlegesek, de rendelkezhetnek töltéssel is (ez általában negatív töltés).

Néhány fontosabb ligandum:

Töltéssel rendelkező: a ligandum neve -o végződést kap.

- halogenidionok (F^- , Cl^- , Br^- , I^-) \Rightarrow halogeno- (*fluoro-*, *kloro-*, *bromo-*, *jodo-*),
- hidridion (H^-) \Rightarrow *hidro-*,
- oxidion (O^{2-}) \Rightarrow *oxo-*,
- hidroxidion (OH^-) \Rightarrow *hidroxo-*,
- szulfidion (S^{2-}) \Rightarrow *szulfido-*,
- cianidion (CN^-) \Rightarrow *ciano-*,
- tiocianátion (SCN^-) \Rightarrow *tiocianáto-*,
- tioszulfátion ($\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$) \Rightarrow *tioszulfáto-* stb.

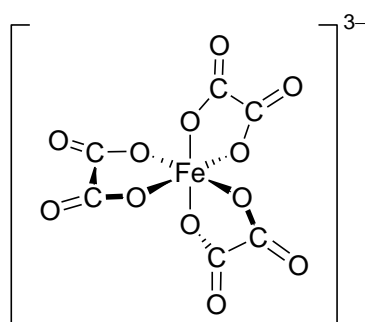
Semleges, magános párral rendelkező molekulák:

- víz (H_2O) \Rightarrow akva-,
- ammónia (NH_3) \Rightarrow ammin-,
- szén-monoxid (CO) \Rightarrow karbonil- stb.

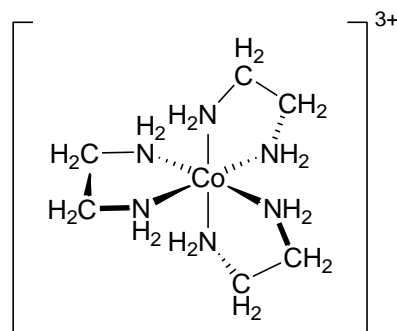
Egy ligandumon belül nem csak egy elektronpárdonor atom lehetséges, ismerünk többfogú ligandumokat is.

Kelát ligandum: többfogú ligandum, mely gyűrűs vagy kalitka szerkezeteket hoz létre a központi atommal.

Például: oxalátion $[(\text{COO})_2]^{2-}$, etilén-diamin ($\text{H}_2\text{N}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{NH}_2$, rövidítve en).



[trioxaláto-ferrát(III)](3-)



[tris(etiléndiammin)-kobalt(III)](3+)

Érdekesség: A kelátkomplexek általában igen stabilak, rendszerint stabilabbak azon komplexeknél, melyek két (vagy több) különálló, de megfelelő donoratommal rendelkező ligandumot tartalmaznak (ezt **keláthatásnak** nevezzük). A fenti példában szereplő etilén-diamin komplexei stabilabbak, mint azon komplexek, melyekben két ammónialigandum az elektrondonor.

10.6. Elemek és vegyületek szisztematikus elnevezése

10.6.1. Elemek elnevezése

Molekulaképlettel megadott elemek esetén görög számnévvel jelöljük azt, hogy hány (azonos) atomból épül fel a molekula, végtelen szerkezettel leírható elemek esetén az elem neve ugyanaz, mint az atomé.

Például: N₂: dinitrogén, O₃: trioxigén (ózon), Cl₂: diklór, P₄: tetrafoszfor, S₈: oktakén.

Izotópok jelölése:

– vegyjelben a bal felső indexben

például: ¹⁸O, ³H = T, ³¹P, ¹⁴C.

– elemekben a név előtt

például: 18-oxigén, 2-hidrogén (deutérium), 3-hidrogén (trícium), 31-foszfor, 14-szén.

10.6.2. Vegyületek képlete

A képletben először az elektropozitívabb elemeket, ezt követően az elektronegatívabb elemeket soroljuk fel. (Azt, hogy elektropozitívnak vagy elektronegatívnak tekintjük az elemet, az elektronegativitási sorrend alapján állapítjuk meg. Az alumíniumnál kisebb elektronegativitású elemeket elektropozitívnak, a bórnál nagyobb elektronegativitásúakat elektronegatívnak nevezzük.) Ha egynél több elektropozitív és/vagy elektronegatív elem alkotja a vegyületet, ezeken a csoportokon belül ábécé sorrendben soroljuk fel az elemeket. Az ammóniumion képletét (NH₄⁺) egy vegyjelnek tekintjük (így a nátrium – Na – után következnek: NaNH₄SO₄). A savanyú sók hidrogénjét mindig közvetlenül az anion elé helyezzük [LiHCO₃]. A kevesebb atomból felépülő ionok megelőzik a több atomból álló ionokat [például az O²⁻ az OH⁻-t: MnO(OH)₂]. Az egyes elemek arányát arab számokkal jelöljük a vegyjel jobb alsó indexében. Ha egy vegyület képletében ugyanabból az összetett ionból vagy molekulából több is található, azok képletét kerek zárójelbe tesszük, és ezeknek a jobb alsó indexében jelöljük a mennyiségüket.

Például: CaMg(CO₃)₂, Fe(NH₄)₂(SO₄)₂, Ca₅(PO₄)₃F, Pb₅(VO₄)₃Cl, KNaNH₄PO₄, NaNH₄HPO₄, NaH₂AsO₃, Ba(HCO₃)₂, MnO(OH)₂, FeO(OH).

Addíciós vegyületek (több molekula vagy ion lazán kötött vegyülete) esetén az összetevők közé pontot teszünk és jelöljük a mennyiségi arányokat (ha egy addíciós vegyület kettőnél több összetevőből áll, akkor ezeket növekvő számuk szerint soroljuk fel). A gyakorlati életben legfontosabbak a kristályvizes sók (úgynevezett hidrátok), melyek esetén a kristályvizet a képlet végére írjuk.

Például: CaSO₄ · 2H₂O, 2CaSO₄ · H₂O = CaSO₄ · 0,5H₂O, 3CdSO₄ · 8H₂O, Fe(NH₄)₂SO₄ · 6H₂O, K₄Fe(CN)₆ · 10H₂O, H₃PO₄ · H₂O, CoCl₂ · 6H₂O, AlCl₃ · 4C₂H₅OH, CaO · SiO₂ (= CaSiO₃).

10.6.3. Vegyületek elnevezése

A vegyületek elnevezésénél először megnevezzük az elektropozitív csoportokat, majd az elektronegatív csoportokat, és ezek arányát. Az arányok kifejezésére görög, illetve latin számneveket használunk:

1	mono-	6	hexa-
2	di-	7	hepta-
3	tri-	8	okta-
4	tetra-	9	nona-
5	penta-	10	deka-

Például:

S_2Cl_2 : dikén-diklorid, Fe_3O_4 : trivas-tetraoxid, $KMgF_3$: kálium-magnézium-trifluorid, P_4O_{10} : tetrafoszfor-dekaoxid, $Ni(OH)_3$: nikkelt-trihidroxid.

Abban az esetben, ha két vagy több számnevet kell alkalmaznunk a képletben, a második számnév helyett az alábbiakat kell alkalmazni:

1	—	6	hexakis-
2	bisz-	7	heptakis-
3	trisz-	8	oktakisz-
4	tetrakis-	9	nonakis-
5	pentakis-	10	dekakis-

Például: $Ca[PF_6]_2$: kalcium-bisz[hexafluoro-foszfát], $Fe_2(Cr_2O_7)_3$: divas-triszdikromát (mivel a $Cr_2O_7^{2-}$ ion neve dikromátion).

Kationok elnevezése

Egyszerű (egyatomos) kationok elnevezése

Ha egy atomból kationt képzünk, a neve nem változik meg, csak a töltését kell jelölnünk. Erre két lehetőség van: vagy római számmal (+ jel nélkül) vagy arab számmal és + jellel jelöljük az oxidációfokot, illetve a töltést.

Például:	Fe^{II} -kation	vas(II)kation	Fe^{2+} -ion	vas(2+)ion
	Ti^{IV} -kation	titán(IV)kation	Ti^{4+} -ion	titán(4+)ion
	Tl^I -kation	tallium(I)kation	Tl^+ -ion	tallium(1+)ion
	U^{VI} -kation	urán(VI)kation	U^{6+} -ion	urán(6+)ion
	Br^I -kation	bróm(I)kation	Br^+ -ion	bróm(1+)ion

Összetett (többatomos) kationok elnevezése

Azonos atomokból álló ionok nevét az egyatomos ionokhoz hasonlóan nevezzük el, csak jelöljük az atomok számát.

Például: Hg_2^{2+} dihigany(i)kation dihigany(2+)kation.

Az egyéb többatomos kationokat **-ium** végződéssel szoktuk ellátni.

Például:	H_3O^+	oxóniumion
	NH_4^+	ammóniumion
	$N(CH_3)_3^+$	tetrametil-ammónium-ion
	PCl_4^+	tetrakloro-foszfónium-ion.

Triviális elnevezésű kationok:

Például:	NO^+	nitrozilkation
	NO_2^+	nitrilkation
	SbO^+	antimonil(1+)kation
	BiO^+	bizmutil(1+)kation
	UO_2^{2+}	uranil(2+)kation.

Komplex kationok elnevezése

A ligandumokat összeszámoljuk, majd számnévvel kiegészítjük, és a központi atom neve elé írjuk. Megállapítjuk a központi atom oxidációfokát vagy a komplex ion töltését, és ezt is jelöljük az

elnevezésben. Az oxidációfok vagy töltés elhagyható, ha a központi atom jellemzően csak egyféle oxidációfokkal rendelkezik. A szögletes zárójelet az elnevezésben is alkalmazzuk.

Például:	$[\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$	[hexaakva-vas(II)]	[hexaakva-vas](3+)
	$[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$	[tetraammin-réz(II)]	[tetraammin-réz](2+)
	$[\text{Al}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$	[hexaakva-alumínium]	[hexaakva-alumínium].

Anionok elnevezése

Egyszerű (egyatomos) anionok elnevezése

A egyetlen atomból redukcióval képződő (egy vagy többszörös negatív töltésű) anionok **-id** végződést kapnak.

Például:	F^-	fluorid	O^{2-}	oxid
	Cl^-	klorid	S^{2-}	szulfid
	Br^-	bromid	N^{3-}	nitrid
	I^-	jodid	P^{3-}	foszfid
	H^-	hidrid	C^{4-}	karbid.

Összetett (többatomos) anionok elnevezése

Azonos atomokból felépülő ionok esetén szintén **-id** végződést kell alkalmaznunk, és megfelelően jelöljük az összekapcsolódott atomok számát.

Például:	S_2^{2-}	diszulfid(2-)ion
	I_3^-	trijodid(1-)ion.

Összetett anionok elnevezése

Oxosavak és komplex savak anionjainak triviális és szisztematikus elnevezése

A későbbi tanulmányok során és a kémiai tankönyvekben, szakirodalomban gyakran találkozhatunk szisztematikus elnevezésekkel is (a triviális nevek mellett). A szisztematikus elnevezésben az oxosavak és komplex anionok neve mindig **-át** végződést kap. Az elnevezésnél meg kell állapítanunk a központi atom oxidációfokát és az azt körülvevő ligandumok számát. A központi atom oxidációfokát római számmal (kerek zárójelben) az elnevezés végére írjuk.

Fontos megjegyezni, hogy az alábbi táblázatban szereplő anionok triviális neveit korlátozás nélkül használhatjuk, tehát nem kötelező a (hosszabb és nehezebben felismerhető) szisztematikus elnevezéseket alkalmaznunk. Viszont abban az esetben, ahol ez félreértéseket okozhat, mindenképpen célszerű a szisztematikus elnevezést használni. Természetesen nincs minden anionnak triviális neve, ezért ilyenkor mindenképp rákényszerülünk a szisztematikus név használatára!

Képlet	Szisztematikus nevek		Triviális név
CO_3^{2-}	[trioxo-karbonát(IV)]	[trioxo-karbonát](2-)	karbonát
NO_3^-	[trioxo-nitrát(V)]	[trioxo-nitrát](1-)	nitrát
PO_4^{3-}	[tetraoxo-foszfát(V)]	[tetraoxo-foszfát](3-)	foszfát
SO_4^{2-}	[trioxo-szulfát(VI)]	[trioxo-szulfát](2-)	szulfát
BO_3^{3-}	[trioxo-borát(III)]	[trioxo-borát](3-)	borát
SiO_3^{2-}	[trioxo-szilikát(IV)]	[trioxo-szilikát](2-)	szilikát
NO_2^-	[dioxo-nitrát(III)]	[dioxo-nitrát](1-)	nitrit
AsO_4^{3-}	[tetraoxo-arzenát(V)]	[tetraoxo-arzenát](3-)	arzenát
AsO_3^{2-}	[trioxo-arzenát(III)]	[trioxo-arzenát](3-)	arzenit
SO_3^{2-}	[tetraoxo-szulfát(IV)]	[tetraoxo-szulfát](2-)	szulfít
$\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$	[trioxo-tio-szulfát(VI)]	[trioxo-tio-szulfát](2-)	tioszulfát
ClO_4^-	[tetraoxo-klorát(VII)]	[tetraoxo-klorát](1-)	perklorát
ClO_3^-	[trioxo-klorát(V)]	[trioxo-klorát](1-)	klorát
ClO_2^-	[dioxo-klorát(III)]	[dioxo-klorát](1-)	klorit
ClO^-	[oxo-klorát(I)]	[oxo-klorát](1-)	hipoklorit
VO_3^-	[trioxo-vanadát(V)]	[trioxo-vanadát](1-)	vanadát
CrO_4^{2-}	[tetraoxo-kromát(VI)]	[tetraoxo-kromát](2-)	kromát
$\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$	[heptaoxo-dikromát(VI)]	[heptaoxo-dikromát](2-)	dikromát
MnO_4^{2-}	[tetraoxo-manganát(VI)]	[tetraoxo-magnanát](2-)	manganát
MnO_4^-	[tetraoxo-manganát(VII)]	[tetraoxo-magnanát](1-)	permanganát

Triviális elnevezésű anionok:

OH^-	hidroxid
CN^-	cianid
SCN^-	tiocianát
NH_2^-	amid.

Komplex anionok

A komplex anionok szisztematikus elnevezésének szabályai az oxosavak anionjai esetén megismerttel.

Példák:	$[\text{BF}_4]^-$	[tetrafluoro-borát(III)]	[tetrafluoro-borát](1-)
	$[\text{Al}(\text{OH})_4]^-$	[tetrahidroxo-aluminát(III)]	[tetrahidroxo-aluminát](1-)
	$[\text{PtCl}_6]^{2-}$	[hexakloro-platinát(VI)]	[hexakloro-platinát](2-)
	$[\text{Ag}(\text{S}_2\text{O}_3)_2]^{3-}$	[ditioszulfáto-argentát(I)]	[ditioszulfáto-argentát](3-)
	$[\text{Pb}(\text{OH})_4]^{2-}$	[tetrahidroxo-plumbát(II)]	[tetrahidroxo-plumbát](2-)
	$[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$	[hexaciano-ferrát(II)]	[hexaciano-ferrát](4-)
	$[\text{BiI}_4]^-$	[tetrajodo-bizmutát(III)]	[tetrajodo-bizmutát](1-).

Addíciós vegyületek elnevezése

Amennyiben addíciós vegyületeket nevezünk el, jelölnünk kell a molekulák (vegyületek) mennyiségének arányát is:

Például:	$\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	kalcium-szulfát-víz (1/2)
	$2\text{CaSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$	kalcium-szulfát-víz (2/1)

$\text{CaSO}_4 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$	kalcium-szulfát–víz (1/0,5)
$3\text{CdSO}_4 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$	kadmium-szulfát–víz (1/8)
$\text{Fe}(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	vas(II)-ammónium-szulfát–víz (1/6)
$\text{K}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6] \cdot 10\text{H}_2\text{O}$	kálium-[hexaciano-ferrát(III)]–víz (1/10)
$\text{H}_3\text{PO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$	foszforsav–víz (1/1)
$\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	kobalt(II)-klorid–víz (1/6)
$\text{AlCl}_3 \cdot 4\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$	alumínium-klorid–etanol (1/4)
$\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$	kalcium-oxid–szilícium-dioxid (1/1).

10.7. Gyakorlókérdések

- Hogyan csoportosíthatjuk a szervetlen vegyületeket?
- Mit nevezünk hidridnek?
- Csoportosítsa az oxidokat sav-bázis karakterük alapján?
- Mondjon példát savas, bázisos és amfoter oxidokra?
- Milyen halogenidionokat ismer?
- Mit nevezünk savnak az Arrhenius- és a Brønsted–Lowry-elmélet alapján?
- Mit jelent az, hogy többértékű egy sav? Mondjon erre példákat is!
- Definiálja a savanhidrid fogalmát! Nevezzen meg néhány savanhidridet!
- Nevezzen meg néhány savat, melyeknek nincs savanhidridjük!
- Írjon fel komplex savakra példákat!
- Írja fel az alábbi ionok képletét! Ezek közül melyek anionok és kationok? Melyek származnak oxosavból?

a) klorid,	h) oxónium,
b) nitrát,	i) hidrogén-karbonát,
c) szulfát,	j) ammónium,
d) jodid,	k) hidrid,
e) karbonát,	l) nitrit,
f) foszfát,	m) bromid,
g) hidroxid,	n) dihidrogén-foszfát.
- Ismertesse a következő ásványi savak fizikai és kémiai tulajdonságait!

a) sósav,
b) kénsav,
c) salétromsav,
d) foszforsav,
e) szénsav.
- Definiálja a bázis fogalmát az Arrhenius- és a Brønsted–Lowry sav-bázis elmélet alapján!
- Mi értünk egy bázis többértékűségén? Ismertessen példákat is!
- Mi a bázisanhidrid? Soroljon fel néhány bázisanhidridet!
- Mi a különbség a savanhidrid és a bázisanhidrid között?
- Mi jellemző az alkálifém-hidroxidokra?
- Ismertesse az alkáliföldfém-hidroxidok kémiai tulajdonságait!
- Mi az ammóniaoldat? Milyen ionokat tartalmaz?
- Mi a különbség az ionos és a molekuláris bázisok között?

21. Definiálja a sók fogalmát!
22. Mik a szabályos sók? Nevezzen meg példákat is!
23. Definiálja a savanyú só és a bázisos só fogalmát!
24. Mik a kettős sók? Mondjon néhány példát is kettős sóra!
25. Definiálja a komplex (koordinációs) vegyület fogalmát!
26. Mi a ligandum és a központi atom?
27. Mit nevezünk koordinációs számnak?
28. Rendszerint milyen kötés található a ligandum és a központi atom között?
29. Hogyan csoportosíthatók a ligandumok?
30. Nevezzen meg néhány ligandumot!
31. Mit nevezünk kelát ligandumnak? Mondjon rá példát is!
32. Írja fel az alábbi vegyületek képletét!
- | | |
|---------------------------------|-------------------------------|
| a) nátrium-klorid, | n) molibdén-tetraklorid, |
| b) kálium-szulfát, | o) mangán(II)-foszfát, |
| c) ólom(IV)-oxid, | p) kobalt(III)-hidroxid, |
| d) vas(II)-nitrát, | q) tetrakén-tetranitrid, |
| e) króm(III)-szulfát, | r) jód-triklorid, |
| f) difoszfor-pentaoxid, | s) bór(III)-oxid, |
| g) arzén(III)-oxid, | t) germánium(IV)-tetraklorid, |
| h) kén-hexafluorid, | u) szilícium-dioxid, |
| i) ón(IV)-klorid, | v) ammónium-foszfát, |
| j) ammónium-nitrát, | w) alumínium-szulfát, |
| k) magnézium-hidrogén-karbonát, | x) lítium-oxid, |
| l) kálium-hidrogén-szulfát, | y) kalcium-karbonát, |
| m) bárium-dihidrogén-foszfát, | z) bróm-pentafluorid. |
33. Nevezze el a következő vegyületeket!
- | | |
|---------------------------------|--|
| a) Cr_2O_3 , | n) K_2HPO_4 , |
| b) MgSO_4 , | o) SnCl_2 , |
| c) BCl_3 , | p) Sb_2O_3 , |
| d) NaNO_3 , | q) $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$, |
| e) PbCO_3 , | r) $(\text{NH}_4)_2\text{CrO}_4$, |
| f) NiO , | s) SrCO_3 , |
| g) SO_3 , | t) $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$, |
| h) $\text{Al}(\text{OH})_3$, | u) I_2O_5 , |
| i) CCl_4 , | v) MnBr_2 , |
| j) CuSO_4 , | w) Li_2CO_3 , |
| k) NH_4HCO_3 , | x) $\text{Ca}(\text{NO}_2)_2$, |
| l) $\text{Bi}(\text{NO}_3)_3$, | y) $\text{FeO}(\text{OH})$, |
| m) IF_7 , | z) Na_2SO_3 . |
34. Mi az alábbi vegyületek képlete?
- | |
|--|
| a) [hexaakva-alumínium(III)]-klorid, |
| b) [tetraammin-réz(II)]-szulfát, |
| c) nátrium-[tetrahidroxó-kromát(III)], |
| d) kálium-[hexakloro-sztannát(IV)], |
| e) ammónium-[tetrafluoro-borát(III)], |
| f) [hexaakva-króm(III)]-szulfát, |
| g) nátrium-[hexacianoferrát(II)]. |

35. Írja fel az alábbi szisztematikus elnevezésű vegyületek képletét!

- trinátrium-[tetraoxofoszfát(V)],
- kálium-[tetraoxo-manganát(VII)],
- nátrium-[trioxo-bromát(III)],
- kalcium-[trioxokarbonát(IV)],
- kálium-[diciano-argentát(I)],
- magnézium-[trioxo-borát(III)],
- ammónium-[tetraoxo-szulfát(VI)].

36. Írja fel az alábbi kristályvizes sók sztöchiometriai képletét!

- cink(II)-klorid-víz (1/4),
- króm(III)-szulfát-víz (1/12),
- réz(II)-nitrát-víz (1/3),
- mangán(II)-klorid-víz (1/4),
- alumínium-trifluorid-víz (1/1),
- ón(II)-bromid-víz (6/5),
- alumínium(III)-kálium-szulfát-víz (1/12),
- kobalt(II)-szulfát-víz (1/7),
- nikkel(II)-nitrát-víz (1/6),
- vas(III)-ammónium-szulfát-víz (1/12),
- króm(III)-klorid-víz (1/6),
- kadmium(II)-bromid-víz (1/4).

A 32–36. feladatok megoldásai:

32.

- | | |
|---|--|
| a) NaCl, | n) MoCl ₄ , |
| b) K ₂ SO ₄ , | o) Mn ₃ (PO ₄) ₂ , |
| c) PbO ₂ , | p) Co(OH) ₃ , |
| d) Fe(NO ₃) ₂ , | q) S ₄ N ₄ , |
| e) Cr ₂ (SO ₄) ₃ , | r) ICl ₃ , |
| f) P ₂ O ₅ , | s) B ₂ O ₃ , |
| g) As ₂ O ₃ , | t) GeCl ₄ , |
| h) SF ₆ , | u) SiO ₂ , |
| i) SnCl ₄ , | v) (NH ₄) ₃ PO ₄ , |
| j) NH ₄ NO ₃ , | w) Al ₂ (SO ₄) ₃ , |
| k) Mg(HCO ₃) ₂ , | x) Li ₂ O, |
| l) KHSO ₄ , | y) CaCO ₃ , |
| m) Ba(H ₂ PO ₄) ₂ , | z) BF ₅ . |

33.

- króm(III)-oxid, dikróm-trioxid,
- magnézium-szulfát (vagy magnézium-[tetraoxo-szulfát(VI)]),
- bór(III)-klorid, bór-triklorid,
- nátrium-nitrát (vagy nátrium-[trioxo-nitrát(V)]),
- ólom(II)-karbonát (vagy ólom-[trioxo-karbonát(IV)]),
- nikkel(II)-oxid,
- kén-trioxid (vagy kén(VI)-oxid),
- alumínium(III)-hidroxid (vagy alumínium-trihidroxid),
- szén-tetraklorid,
- réz(II)-szulfát (vagy réz(II)-[tetraoxo-szulfát(vi)]),
- ammónium-hidrogén-karbonát (vagy ammónium-{hidrogén-[trioxo-karbonát(IV)]}),
- bizmut(III)-nitrát (vagy bizmut(III)-tris[trioxo-nitrát(V)]),
- jód-heptafluorid, jód(vii)-fluorid,

- n) dikálium-hidrogén-foszfát (vagy dikálium-bisz{hidrogén-[tetraoxo-foszfát(V)]}),
- o) ón(II)-klorid, ón-diklorid,
- p) antimon(III)-oxid, diantimon-trioxid,
- q) vas(III)-szulfát (vagy divas(III)-trisz[tetraoxo-szulfát(VI)]),
- r) ammónium-kromát (vagy diammónium-[tetraoxo-kromát(VI)]),
- s) stroncium-karbonát (vagy stroncium-[trioxo-karbonát(IV)]),
- t) nátrium-tioszulfát (vagy dinátrium-[trioxo-tio-szulfát(VI)]),
- u) dijód-pentaoxid, jód(V)-oxid,
- v) mangán(II)-bromid,
- w) lítium-karbonát (vagy dilítium-[trioxo-karbonát(IV)]),
- x) kalcium-nitrit (vagy kalcium-bisz[dioxo-nitrát(III)]),
- y) vas(III)-oxid-hidroxid,
- z) nátrium-szulfit (vagy dinátrium-[trioxo-szulfát(IV)]).

34.

- a) $[\text{Al}(\text{H}_2\text{O})_6]\text{Cl}_3$,
- b) $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]\text{SO}_4$,
- c) $\text{Na}[\text{Cr}(\text{OH})_4]$,
- d) $\text{K}_2[\text{SnCl}_6]$,
- e) $\text{NH}_4[\text{BF}_4]$,
- f) $[\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_6]_2(\text{SO}_4)_3$,
- g) $\text{Na}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]$.

35.

- a) Na_3PO_4 ,
- b) KMnO_4 ,
- c) NaBrO_2 ,
- d) CaCO_3 ,
- e) $\text{K}[\text{Ag}(\text{CN})_2]$,
- f) $\text{Mg}_3(\text{BO}_3)_2$,
- g) $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$.

36.

- a) $\text{ZnCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$,
- b) $\text{Cr}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$,
- c) $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$,
- d) $\text{MnCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$,
- e) $\text{AlF}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$,
- f) $6\text{SnBr}_2 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$,
- g) $\text{AlK}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$,
- h) $\text{CoSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$,
- i) $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$,
- j) $\text{FeNH}_4(\text{SO}_4)_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$,
- k) $\text{CrCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$,
- l) $\text{CdBr}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$.

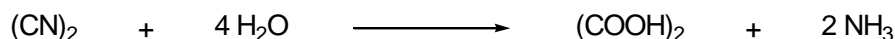
11. SZERVES KÉMIA

11.1. Bevezetés

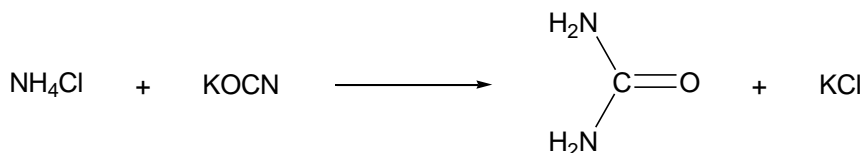
11.1.1. A szerves kémia története dióhéjban

Berzelius az élő anyagból elkülönített anyagot szerves anyagnak nevezte el.

- ♦ Lavoisier kimondta, hogy a szerves vegyületek organogén elemeket tartalmaznak: szenet, hidrogént, oxigént, illetve nitrogént.
- ♦ Wöhler megdöntötte a *vis vitalis elvet* (csak az élő szervezet tud szerves anyagot előállítani): szerves vegyületek reakciójából szerves vegyületeket sikerült előállítani:
 - dician hidrolízisével oxálsav (sósavas) keletkezett (1824):



- ammónium-klorid és kálium-cianát reakciójából (a korábban csak vizeletből kinyerhető) karbamidot állított elő (1828):



- ♦ Butlerov megállapította, hogy a szén négy vegyértékű és egy vagy több kötéssel egymáshoz is tud kapcsolódni.
- ♦ Kekulé nevéhez fűződik annak a megállapítása, hogy a szerves vegyületek lehetnek gyűrűs szerkezetűek is.

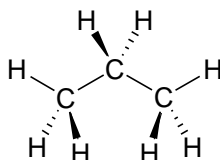
11.1.2. A szerves vegyületek összetételének leírása, képlete

Összeg- vagy molekulaképlet: egy molekulában az alkotóelemek atomjainak számát (arányát) adja meg. Például a propán: C_3H_8 .

Szerkezeti képlet: megadja az atomok kapcsolódását vagy a térszerkezetét.

Például a propán esetén:

Cikkcakkábrázolás:



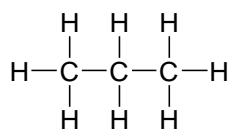
Vonalképlet:



Egyszerűsített konstitúciós képlet (vagy félszerkezeti képlet):

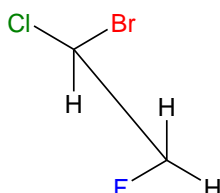


Síkképlet:

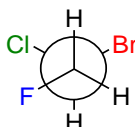


Ábrázolásmódok:

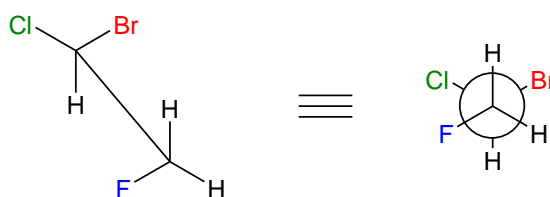
Fűrészbak-projekció: perspektivikus ábrázolásmód:



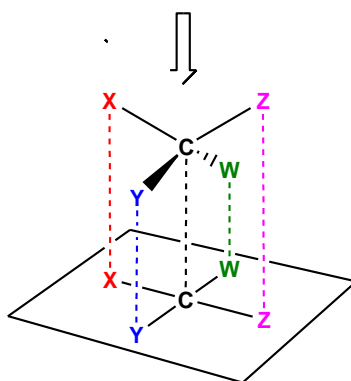
Newman-projekció: háromdimenziós szerkezetet úgy ábrázol, hogy két egymáshoz kapcsolódó atomot egymás mögé helyez:



A fűrészbak- és Newman-projekciók kölcsönösen megfelelnek egymásnak:



Fischer-projekció: a háromdimenziós szerkezetből vonalképletet hoz létre. Egy vagy több atom körüli kötéselrendeződéseket lehet szemléltetni vele.



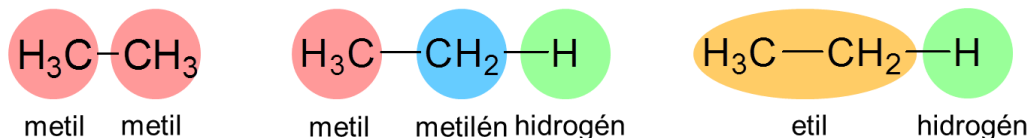
11.1.3. A szerves vegyületek felépítése

A szerves vegyületek általában egy szénláncból (vagy szénláncokból) és funkciós csoportokból épülnek fel.

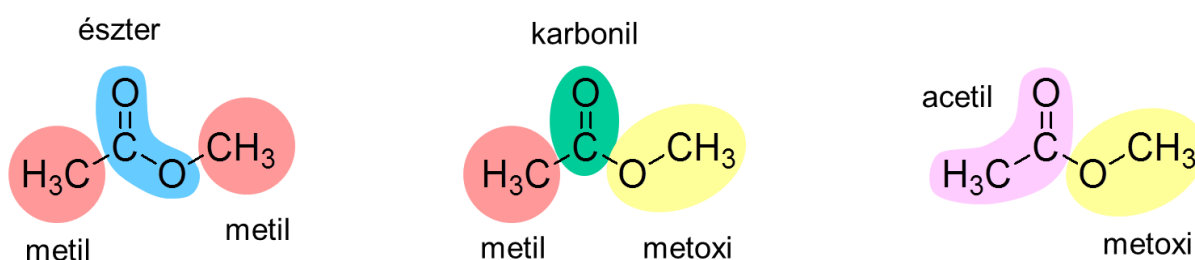
Funkciós csoport: a szerves vegyület molekulájának az a része (atom vagy atomcsoport), amely jelentősen befolyásolja a vegyület fizikai és kémiai tulajdonságait. Például alkoholnál a hidroxilcsoport (–OH), a karbonsavaknál a karboxilcsoport (–COOH).

A szerves vegyületek építőkövekből, különféle csoportokból épülnek fel. Gyakran a molekulát többféleképpen is feloszthatjuk funkciós csoportokra. Erre néhány példát szeretnénk bemutatni:

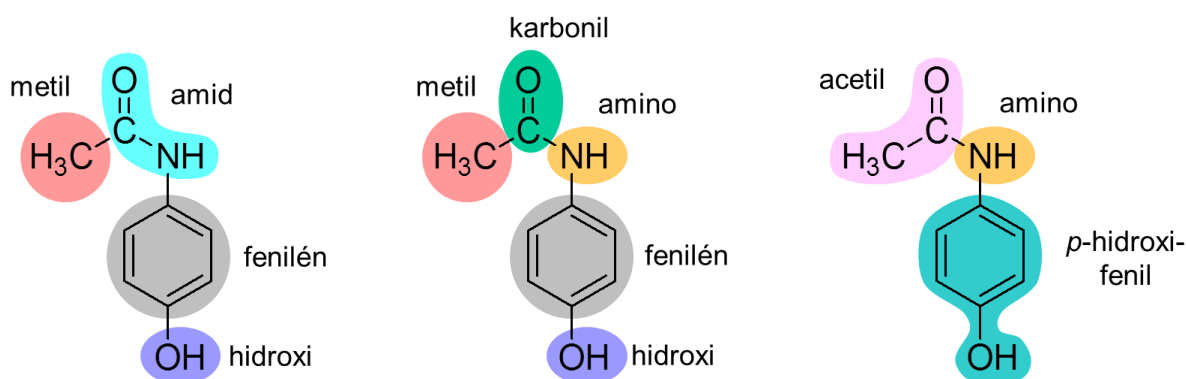
Etán:



Metil-acetát:



Paracetamol: *N*-(*p*-hidroxifenil)acetamid



Néhány fontos alaphfogalom

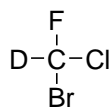
Konstitúció: a molekulában az atomok kapcsolódási sorrendje.

Konfiguráció: egy szénatom körül az egymással közvetlenül nem kapcsolódó atomok, atomcsoportok viszonylagos térbeli elrendeződését.

Konformációk: a molekula azon lehetséges térszerkezetei, amelyek egy-egy kötéstengely körüli átfordulással átmehetnek egymásba.

Szubsztituens vagy **helyettesítő:** az adott szénatomhoz kapcsolódó (hidrogéntől eltérő) atom vagy csoport.

Például:

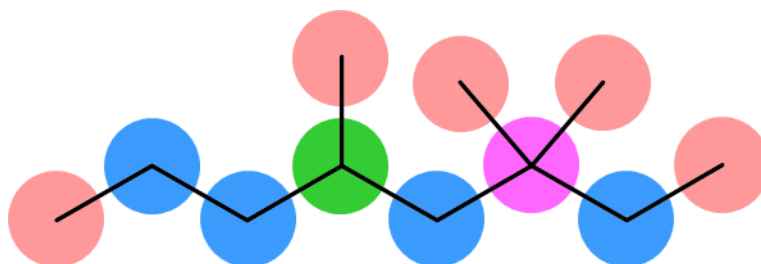


A központi szénatomhoz kapcsolódik egy fluor-, egy klór-, egy bróm- és egy deutérium-szubsztituens. Ezért ezt a szénatomot négyszeresen szubsztituáltként nevezzük.

A szénatomok rendűsége: megadja, hogy az adott szénatomhoz hány szénatom kapcsolódik a szénláncban.

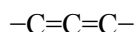
Ez alapján megkülönböztetünk:

- ♦ **primer:** elsőrendű,
- ♦ **szekunder:** másodrendű,
- ♦ **tercier:** harmadrendű,
- ♦ **kvaterner:** negyedrendű szénatomokat.

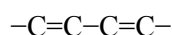


A telítetlenségek elhelyezkedése a láncban:

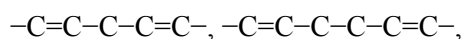
- ♦ **Kumulált:** a két kettős kötés ugyanahhoz a szénatomhoz kapcsolódik:



- ♦ **Konjugált:** a két kettős kötés között pontosan egy egyszeres kötés van:



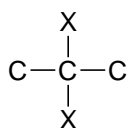
- ♦ **Izolált:** a két kettős kötés között legalább két egyszeres kötés van:



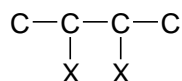
stb.

A lánchoz kapcsolódó csoportok elhelyezkedése alapján:

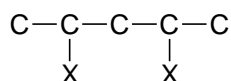
- ♦ **Geminális:** a két csoport ugyanahhoz a szénatomhoz kapcsolódik:



- ♦ **Vicinális:** a két csoport egymás melletti szénatomokon található:

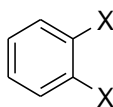


- ♦ **Diszjunkt:** a két csoport olyan szénatomokhoz kapcsolódnak, melyek között legalább még egy szénatom található:

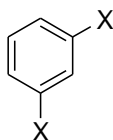


Aromás gyűrűhöz kapcsolódó csoportok elhelyezkedése alapján:

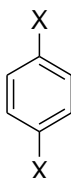
- ♦ **Orto:** a két csoport egymás melletti szénatomokhoz kapcsolódik:



- ♦ **Meta:** a két csoport olyan szénatomokhoz kapcsolódik, melyek között a gyűrűben egy szénatom található:



- ♦ **Para:** a két csoport a gyűrű áttellenes szénatomjain található:

**11.1.4. A szerves vegyületek nagy számának okai**

Felmerül a kérdés, hogy miért ismerünk nagyságrendekkel több szerves vegyületet, mint szervesetlent (mintegy 10 millióra tehető az ismert szerves vegyületek száma, míg a szervesetlenté nagyjából százezres nagyságrendű). A válasz egyrészt a szénatom speciális tulajdonságaiban keresendő, mivel szénatomok egymással gyakorlatilag végtelen számban össze tudnak kapcsolódni igen változatos szerkezeteket és kötésformákat létrehozva. Másrészt igen gyakori, hogy egy adott összegképlethez többféle különböző szerkezetű molekulát is fel tudunk rajzolni. Most ismerkedjünk meg ezekkel részletesebben is!

A szénatom jellemzői:

- ♦ kisméretű,
- ♦ viszonylag nagy az elektronegativitása (EN=2,5),
- ♦ négy kovalens kötés kialakítására képes számos kémiai elemmel (H, O, N, S, P, halogének),
- ♦ igen erős C–C kötés kialakítására képes,
- ♦ számos oxidációs fokkal rendelkezik vegyületeiben (–4-től +4-ig),
- ♦ változatos kötési szerkezeteket tud kialakítani (például többszörös kötések, aromás gyűrűk stb.),
- ♦ gyűrűk, láncok létrehozására alkalmas.

11.1.5. Az izoméria

Izomerek: olyan vegyületek, amelyeknek azonos az összegképletük (tapasztalati képletük), de az alkotó atomoknak eltérő a kapcsolódási sorrendje vagy a térbeli helyzete, és emiatt fizikai, illetve kémiai tulajdonságaik eltérőek.

Az izoméria fajtái:

- konstitúciós (szerkezeti) izoméria,
- sztereoizoméria (térisoméria).

Konstitúciós (szerkezeti) izoméria: az izomer molekulákban az atomok kapcsolódási sorrendje (*konstitúciója*) tér el.

Például az etil-alkohol ($\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{OH}$) és a dimetil-éter ($\text{H}_3\text{C}-\text{O}-\text{CH}_3$) konstitúciós izomerek.

Sztereoizoméria (térizoméria): az izomer molekulákban a ligandumok (atomok, atomcsoportok) viszonylagos helyzete tér el, tehát más a *konfigurációjuk*.

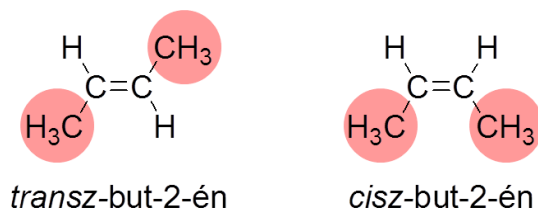
Sztereoizomerek: azonos konstitúciójú, de eltérő szerkezetű, egymásba nem forgatható molekulák. Csak a csoportok térbeli elrendeződésében különböznek egymástól.

A sztereoizomeria fajtái:

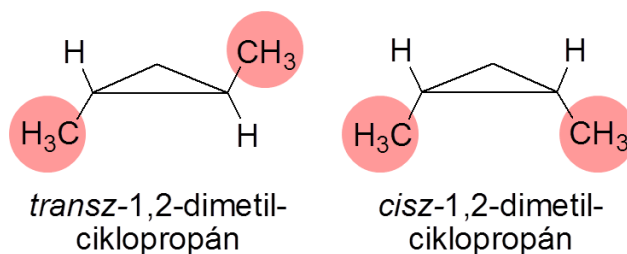
- geometriai vagy cisz-transz izoméria,
- optikai izoméria.

Geometriai vagy cisz-transz izoméria: a geometriai izoméria a kötés gátolt rotációja miatt alakul ki.

Feltétele, hogy a kettős kötéssel kapcsolódó szénatom pár mindegyikén két különböző csoport legyen. Például a but-2-én esetén a két izomer:



A gátolt rotációt nemcsak kettős kötés okozhatja, hanem például kötött geometriájú gyűrű is. Itt csak a legegyszerűbb háromtagú gyűrűt mutatjuk be, ám nagyobb tagszámú gyűrűk esetén is felléphet cisz-transz izoméria.



Optikai izoméria

Királis molekula: a molekula a tükörképével nem hozható fedésbe. A királis molekulákra jellemző az optikai aktivitás. Az optikai aktivitás azt jelenti, hogy a síkban polarizált fény síkját az egyik molekula jobbra, a másik molekula balra forgatja el azonos szöggel.

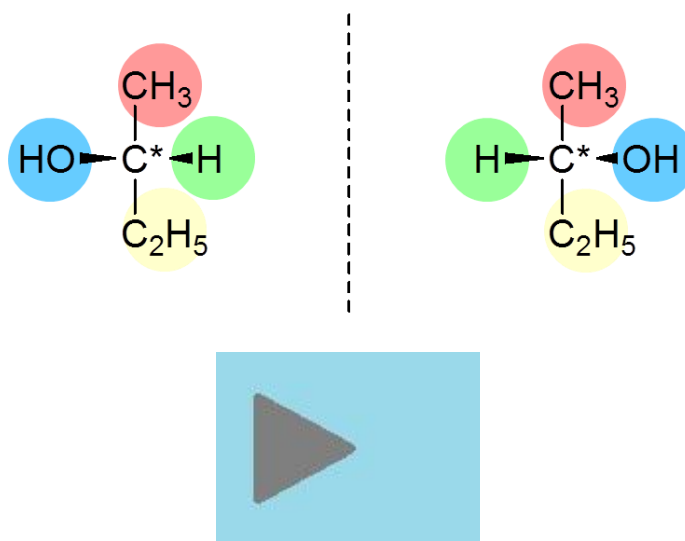
Megjegyzés: nem csak molekulák lehetnek királisak. Például a kezünk és a lábunk is királis, mivel nem hozható fedésbe a tükörképével.

A nem királis molekulákat (objektumokat) **akirálisnak** nevezzük. Az akirális molekulák fedésbe hozhatók tükörképükkel.

Királis szénatom: négy különböző csoport (ideértendő az atom is) kapcsolódik hozzá. A királis szénatomot tartalmazó vegyületeket két csoportra oszthatjuk: az egy királis szénatomot tartalmazó molekulák mindig királisak, ám abban az esetben, ha több királis szénatom (aszimmetriacentrum) is található a molekulában, nem szükséges, hogy a molekula királis legyen (lásd később).

Az optikai izoméria nem csak királis szénatomot tartalmazó molekulák esetén léphet fel, ám ezen vegyületekre is jellemző az optikai aktivitás.

Például a bután-2-olnak két sztereoizomerje létezik, amelyek egymásnak tükörképi párjai:

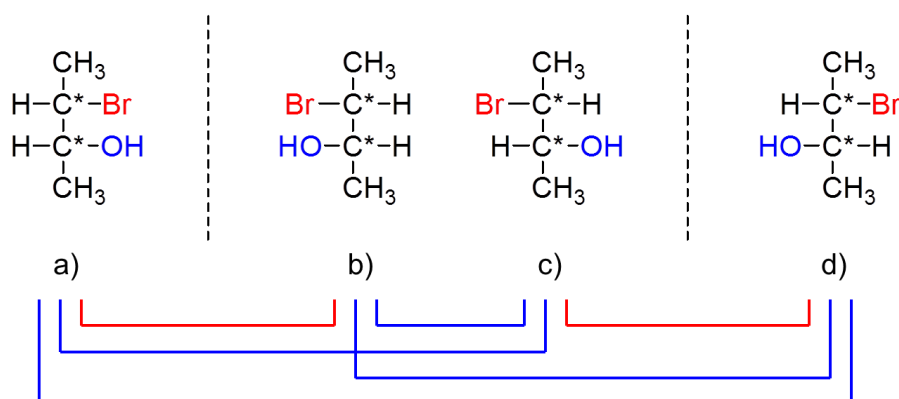


11.1.5.1. animáció: Tükörképi párok

A két molekula **enantiomerpárt**, vagyis egymással nem azonos tükörképi párt alkot. A királis molekula tükörképe nem azonos önmagával és mindkét molekula optikailag aktív. A négy különböző helyettesítővel rendelkező királis szénatomnak az enantiomerpároknál más a térbeli elrendeződése, más a két molekulában a konfiguráció.

Az optikai sztereoizomerek száma 2^n képlettel számolható, ahol n a királis szénatomok száma, amennyiben nincs belső szimmetriasíkja a molekulának (lásd később).

Ha a szerves vegyületben több királis szénatom is található, **diasztereomernek** nevezzük azt a sztereoizomert, amely nem tükörképi párja a vizsgált molekulának. Például a 3-bróm-butan-2-ol négy optikai izomerje:



Az a) és b) enantiomerpárok (tükörképi párok), a)-val c), illetve d) nem enantiomer-, hanem diasztereomerviszonyban áll.

Az élő szervezetben a legtöbb molekula királis, de a természetben *sokszor* csak az egyik enantiomer fordul elő. A két izomer azonos fizikai tulajdonságokkal rendelkezik (ám a forgatásuk ellentétes irányú), de a biológiai tulajdonságuk eltér. Akirális molekulákkal reagálva a két enantiomer hasonló reakciót eredményez, ám a termék térszerkezetét csak a reakció alapos megismerésével lehet előre jelezni. (Ha a termék konfigurációja azonos a kiindulási anyaggal, retenció történik, ha ellentétes, akkor inverzióról beszélünk.)

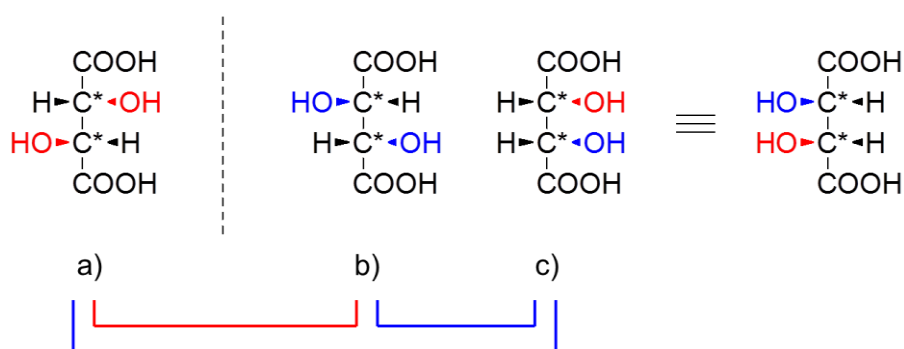
Fontos hangsúlyozni, hogy a diasztereomer kifejezés nem csak a kiralitással áll összefüggésben: például a cisz-transz izomerek is diasztereomerviszonyban vannak egymással, mivel nem azonosak és

nem is tükörképei egymásnak. (A diasztereomerek olyan sztereoizomerek, melyek nem tükörképei egymásnak.)

Racemát: a két enantiomer 1 : 1 arányú elegye vagy keveréke. A racém elegy optikailag inaktív, mert a két enantiomer forgatása kiegyenlíti egymást.

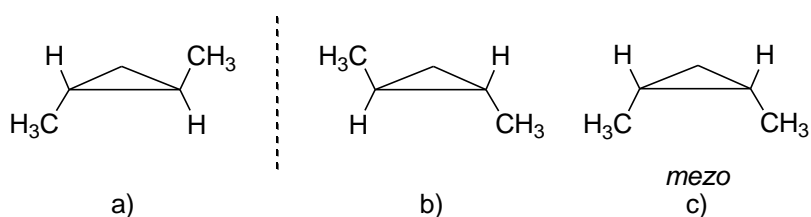
Reszolválás: a racém elegy szétválasztása. Ennek gyakori módja, hogy a két enantiomert királis molekulával reagáltatják, melynek során diasztereomerek keletkeznek, melyeknek már eltérőek a fizikai tulajdonságai. Például racém tejsavat ($\text{H}_3\text{C}-\text{CH}(\text{OH})-\text{COOH}$) királis bázis egyik tiszta enantiomerjével reagáltatva két só keletkezik, melyek már diasztereomer viszonyban állnak egymással, így például eltér az oldhatóságuk. Kedvező esetben frakcionált kristályosítással elválaszthatóak a diasztereomer sópárok, és ezekből kinyerhetők a tiszta enantiomerek. Napjainkban igen gyakori a királis vegyületek – gyakran biológiai úton történő – enantiomertiszta előállítás.

Mezo-vegyület: ha molekulának van belső tükörsíkjá, akirális (optikailag inaktív) vegyületet kapunk. Például a *mezo*-borkősav.

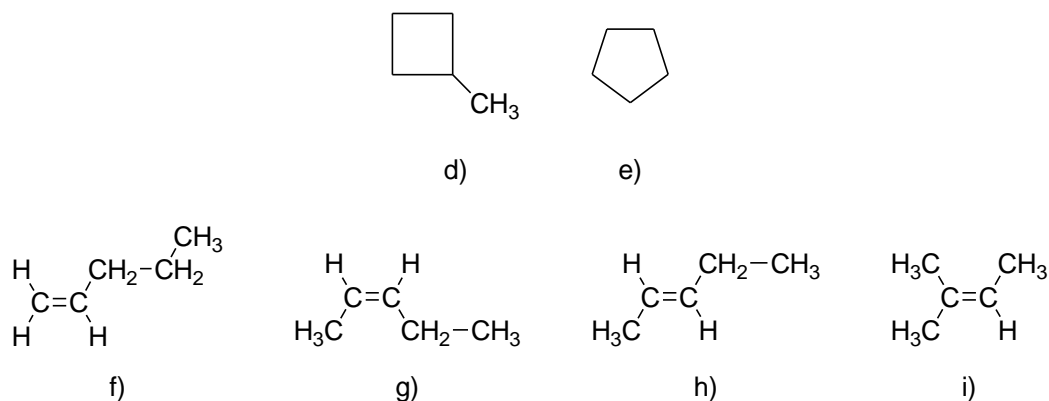


Jól megfigyelhető, hogy a belső szimmetriasík csökkenti az izomerek számát, mivel a belső szimmetriasíkkal rendelkező molekula azonos a tükörképi párjával, így akirális.

Érdekességként megemlíthető, hogy az 1,2-dimetil-ciklopropán *transz* izomerje (a és b) is királis, míg a belső szimmetriasíkkal rendelkező *cisz* izomer (c) akirális:



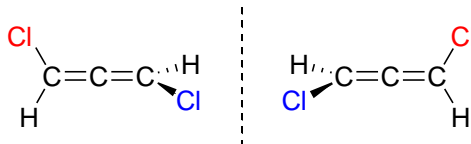
Ezen vegyületek konstitúciós izomerjei például: metil-ciklobután (d), ciklopentán (e), pent-1-én (f), *cisz*- (g) és *transz*-pent-2-én (h), 2-metil-but-2-én (i).



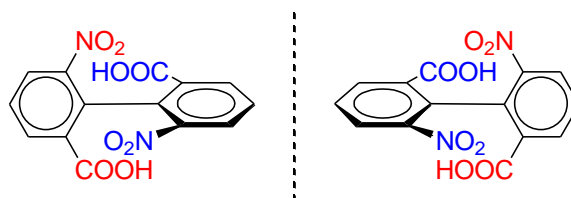
Így az a) és c), b) és c), illetve g) és h) szerkezetek diasztereomer viszonyban állnak.

Mint korábban említettük, a kiralitásnak nem szükséges feltétele, hogy a molekula rendelkezzen királis szénatommal. (Az aszimmetriás szénatom következtében létrejött kiralitást szokás centrális kiralitásnak nevezni.) Az alábbiakban erre is szeretnénk bemutatni néhány példát az érdekesség kedvéért.

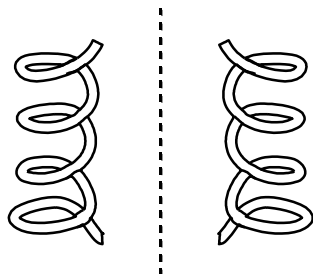
Axiális (tengelyes) kiralitás: például allénvegyületek (C=C=C egységet tartalmazó vegyületek) esetén lép fel, ha a szénatomokhoz különböző szubsztituensek kapcsolódnak.



Atropizoméria: gátolt rotáció esetén jön létre. Az atropizoméria az axiális kiralitás egyik fajtája. Például bifenilek esetén különböző és megfelelően nagy szubsztituenseket alkalmazva atropizomereket kapunk:



Helikális kiralitás: spirálszerűen „tekeredő” molekulák esetén a jobbra és balra csavarodó spirál egymás tükörképe:



11.1.6. A szerves vegyületek csoportosítása

A szénváz alapján:

- ♦ alifás:
 - nyílt láncú (aciklusos):
 - el nem ágazó (normális),
 - elágazó láncú,
 - gyűrűs (ciklusos, alicikus),
- ♦ aromás.

Megjegyzés: az alifás kifejezés bizonyos irodalmakban nyílt láncú szénhidrogént jelent. Az IUPAC jelenlegi ajánlása alapján az alifás olyan szénhidrogént jelent, mely nem aromás.

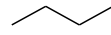

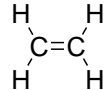
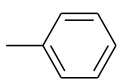
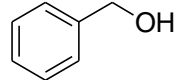


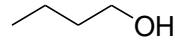
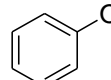

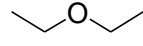


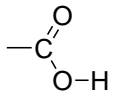
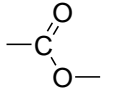
Az alifás vegyületekben a szénatomok közötti kötés fajtája szerint tovább csoportosíthatunk:


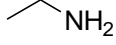

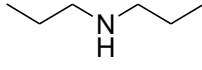

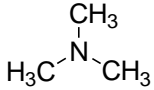

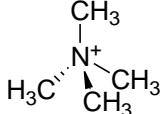
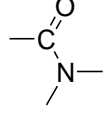
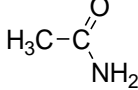

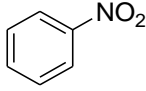

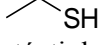

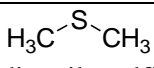
- ♦ telített (csak szén-szén egyszeres kötést tartalmaz),

- ♦ telítetlen:
 - szén-szén kettős kötést (kötéseket) tartalmazó,
 - szén-szén hármas kötést (kötéseket) tartalmazó,
 - esetleg szén-szén kettős és hármas kötést is tartalmazó vegyületek.

A funkciós (jellemző) csoportok alapján:

A legfontosabb funkciós csoportok és vegyületcsoportok:

Funkciós csoport	Vegyületcsoport	Képlet	Példa
Alkil	Alkánok	$-(\text{CH}_2)_n\text{CH}_3$	 bután
Alkenil	Alkének		 etén
Alkinil	Alkinek	$-\text{C}\equiv\text{C}-$	$\text{HC}\equiv\text{CH}$ etin
Aril	Aromás vegyületek	aromás gyűrű, például fenil: 	 fenil-metanol
Halogén	Halogénszármazékok	$-\text{X}$ fluoro: $-\text{F}$ kloro: $-\text{Cl}$ bromo: $-\text{Br}$ jodo: $-\text{I}$	 2-klór-propán
Hidroxi	Alkoholok (nem aromás csoporthoz kapcsolódik) Fenolok (aromás csoporthoz kapcsolódik)		 butanol (butil-alkohol)  fenol
Éter	Éterek		 dietil-éter
Aldehyd	Aldehydek		$\text{H}_3\text{C}-\text{C}(=\text{O})\text{H}$ acetaldehyd
Keton (karbonil)	Ketonok		$\text{H}_3\text{C}-\text{C}(=\text{O})-\text{CH}_3$ aceton
Karboxil	Karbonsavak		HCOOH hnagyasav
Észter	Észterek		$\text{H}_3\text{C}-\text{C}(=\text{O})\text{O}-\text{C}_2\text{H}_5$ etil-acetát

Amino	Aminok	primer: 	 etil-amin
		szekunder: 	 dipropil-amin
		tercier: 	 trimetil-amin
		kvaterner: 	 tetrametil-ammónium ion
Amid	Amidok		 acetamid
Nitro	Nitrovegyületek		 nitro-benzol
Szulfhidril	Tiolok		 etántiol
Szulfid	Szulfidok (tiéterek)		 dimetil-szulfid

A szerves vegyületek elemi összetétele alapján:

- **Szénhidrogének:** csak szénből és hidrogénből épülnek fel.
 - ♦ Alifás szénhidrogének:
 - Telített szénhidrogének:
 - Alkánok: nyílt láncú szénhidrogének, melyekben csak egyszeres (σ) kötés van a szénatomok között.
 - Cikloalkánok: gyűrűs telített szénhidrogének, csak σ -kötés van a szénatomok között.
 - Telítetlen szénhidrogének:
 - Alkének: legalább egy szénatompár között kettős kötés ($C=C$) található a szénhidrogén-molekulában.
 - Alkinek: legalább egy szénatompár közt hármas kötés ($C\equiv C$) található a szénhidrogénben.
 - ♦ Aromás vegyületek: aromás delokalizációval rendelkező gyűrűs vegyületek.
- **Heteroatomot tartalmazó szerves vegyületek:**

A szén- és hidrogénatomokon kívül a molekula tartalmaz heteroatomot, azaz halogén-, oxigén-, nitrogén-, kén- stb. atomot.

A teljesség igénye nélkül lehetnek például:

– Halogéntartalmú vegyületek

Halogénatomot (fluort, klórt, brómot, jódot) tartalmaznak.

– Oxigénatomot tartalmazó vegyületek

- ♦ Alkohokok, fenokok, enokok: –OH, hidroxilcsoportot tartalmaznak.
- ♦ Éterek: R–O–R', étercsoport van bennük.
- ♦ Oxovegyületek: =O, oxocsoportot tartalmaznak.
 - Aldehidek: –CHO, aldehidcsoportot tartalmaznak.
 - Ketonok: C=O, karbonilcsoportot tartalmaznak, helyhez egy-egy szénatom kapcsolódik.
 - Karbonsavak: –COOH, karboxilcsoportot tartalmaznak.
 - Észterek: –COO– észtercsoport található bennük.
 - Amidok: –CO–NH–, amidcsoportot tartalmaznak.
- ♦ Egyéb vegyületek.

– Nitrogénatomot tartalmazó vegyületek

- ♦ Aminok: –NH₂ aminocsoportot tartalmaznak.
- ♦ Amidok: –CO–NH– amidcsoport található bennük.
- ♦ Nitrovegyületek: –NO₂, nitrocsoport van bennük.
- ♦ Nitrogéntartalmú heterociklusos vegyületek.

– Kénatomot tartalmazó vegyületek:

- ♦ Tiokok: –SH, tiolcsoportot (szulfhidrilcsoportot) tartalmaznak.
- ♦ Tioéterek (szulfidok): –S–, szulfidcsoport található bennük.
- ♦ Diszulfidok: –S–S–, diszulfidcsoportot tartalmaznak.
- ♦ Szulfonsavak: –SO₃H, szulfonsavcsoport található bennük.

11.1.7. A homológ sor fogalma:

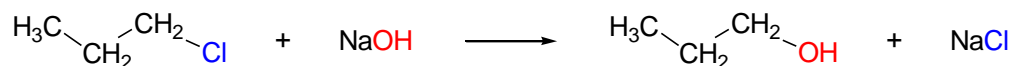
A különböző szerves vegyületek olyan sora, ahol az egymást követő tagok egy metilén-csoportban (CH₂) különböznek.

Például: alkánok homológ sora, karbonsavak homológ sora, alkoholok homológ sora.

11.1.8. A szerves kémiai reakciók alapvető fajtái:

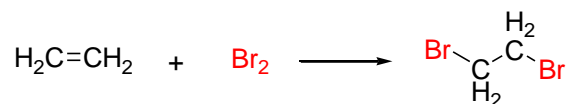
Szubsztitúció (kicszerélődés): egy molekula atomja vagy atomcsoportja másik atomra vagy atomcsoportra cserélődik ki, melléktermék keletkezése mellett.

Jele: S



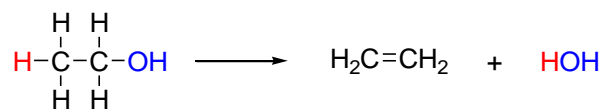
Addíció (egyesülés): két vagy több molekulából egy molekula keletkezik melléktermék keletkezése nélkül.

Jele: A

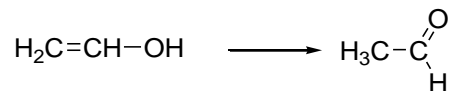


Elimináció: egy molekulából kettő vagy több molekula keletkezik. Gyakran egy kis molekula (például hidrogén-halogenid, víz stb.) szakad ki a nagyobb molekulából.

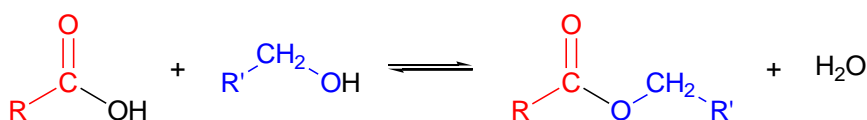
Jele: E



Izomerizáció: egy molekulából annak izomerje keletkezik, így tulajdonképpen egy átrendeződés.

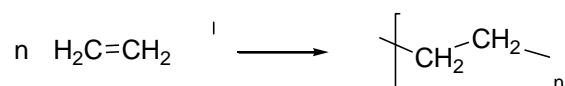


Kondenzáció: két vagy több molekulából egy molekula képződik kis molekulájú melléktermék keletkezése közben.

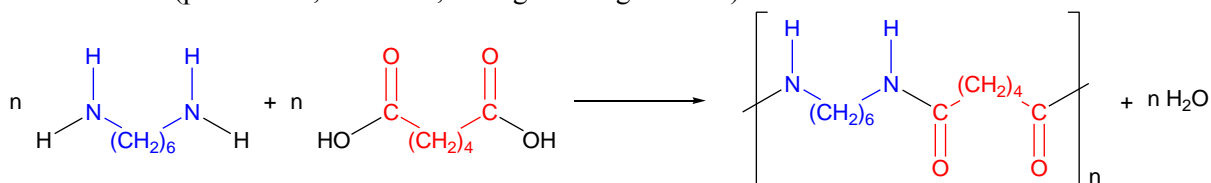


Polimerizáció: kis molekulák (monomerek) óriásmolekulává alakulnak, melléktermék keletkezése nélkül.

Jele: P



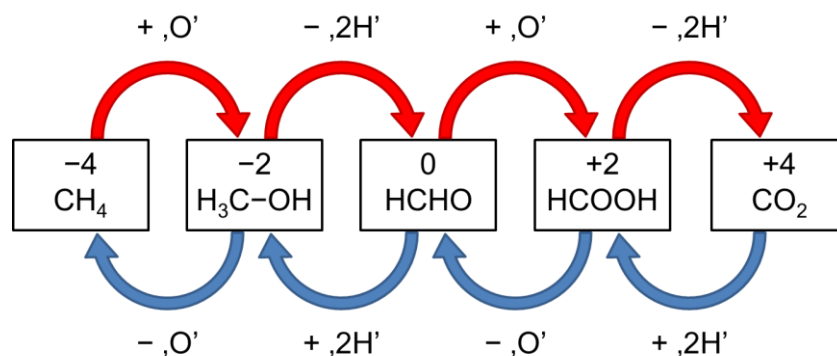
Polikondenzáció: kis molekulájú monomerekből óriásmolekula képződik kis molekulájú melléktermék (például víz, ammónia, hidrogén-halogenid stb.) keletkezése közben.



Oxidáció és redukció

Oxidáció: a hidrogénatomok száma csökken vagy az oxigénatomok száma nő a molekulában. (A szénatom oxidációfoka nő.)

Redukció: a hidrogénatomok száma nő vagy az oxigénatomok száma csökken a molekulában. (A szénatom oxidációfoka csökken.)



11.1.9. A nevezéktan szabályai

A szerves vegyületek elnevezése szempontjából meg kell különböztetnünk a szénláncot és a funkciós csoportot. Először a funkciós csoportot nem tartalmazó telített szénhidrogének elnevezésével foglalkozunk.

Telített szénhidrogének elnevezése

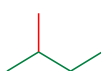
1. Megkeressük a leghosszabb szénláncot (alaplánc).
2. Amennyiben több azonos hosszúságú is van, akkor azt választjuk, amelyiknél több az elágazás.
3. Elnevezzük az aplláncot a szénatomszámnak megfelelően:

1	metán	6	hexán
2	etán	7	heptán
3	propán	8	oktán
4	bután	9	nonán
5	propán	10	dekán

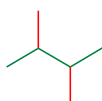
4. Attól a láncvégről kezdjük számozni a szénatomokat, amelyhez legközelebb esik az elágazás. Ha a láncvégtől két elágazás azonos helyzetben van, akkor az ábécérendben előbb álló kapja a kisebb számot.
5. A helyettesítőket, oldalláncokat az apllánc neve előtt, ábécérendben felsoroljuk a helyzetüket megadó számmal együtt.
6. Ha az azonos csoport többször szerepel di-, tri-, tetra- stb. szócskával jelezzük. Ezek a sokszorozótágok nem számítanak az 5. pont szerinti ábécérendbe.

1	mono-	6	hexa-
2	di-	7	hepta-
3	tri-	8	okta-
4	tetra-	9	nona-
5	penta-	10	deka-

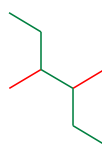
Az alábbi ábrákon az aplláncot **zölddel** jelöljük.



2-metil-bután



2,3-dimetil-bután



3,4-dimetil-hexán



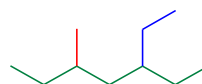
2,2,4-trimetil-pentán



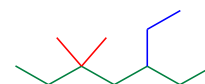
3,3-dimetil-hexán



2,4,4-trimetil-hexán



3-etil-5-metil-heptán



5-etil-3,3-dimetil-heptán

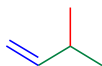
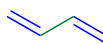
Telítetlen szénhidrogének elnevezése

1. Megkeressük azt a szénláncot, amely a legtöbb telítetlenséget tartalmazza. Ha több ilyen is van, akkor a több szénatomot tartalmazót választjuk! Amennyiben ebből is több van, azt választjuk, melyben több a kettős kötés.
2. Úgy számozzuk a láncot, hogy minél kisebb számot kapjanak a kettős és hármas kötések. Ha több ilyen is van, akkor a kettős kötések száma legyen a legkisebb.

3. A helyettesítőket, oldalláncokat az alaplánc neve előtt, ábécérendben felsoroljuk a helyzetüket megadó számmal együtt.
4. Ha az azonos csoport többször szerepel, di-, tri-, tetra- stb. szócskával jelezzük.
5. Az alapláncot elnevezzük a szénatomszám alapján: a megfelelő alkán nevéből eltávolítjuk az -án végződést, mely helyett kettős kötések esetén -én, hármas kötések esetén -in végződést alkalmazunk. A végződés előtt jelöljük a telítetlenségek helyét (a kisebbik számú szénatomot). A kettős kötés végződése megelőzi a hármas kötését.



hex-2-in

3-metil-
but-1-én

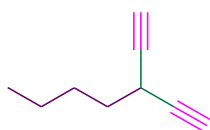
buta-1,3-dién



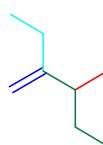
3,3-dimetil-hex-1-in



but-1-én-3-in



3-pentil-penta-1,4-diin

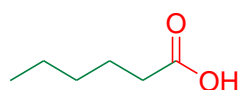
2-etil-3-metil-
pent-1-én4,4-dimetil-
hex-1-én-5-in

Funkciós csoportot tartalmazó vegyületek elnevezése

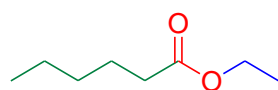
1. Megkeressük azt a szénláncot, mely a legtöbb utótagként megnevezhető funkciós csoportot tartalmazza. (Például a halogén- és nitrocsoport csak előtagként nevezhető meg.) Ha több ilyen is van, akkor a legtöbb többszörös kötést tartalmazót választjuk! Amennyiben ebből is több van, azt választjuk, melyben a több szénatomot (illetve ezután a legtöbb a kettős kötést) tartalmazza.
2. Megállapítjuk a fő funkciós csoportot (amennyiben több is van). Ezt az alábbi prioritási sorrend alapján határozzuk meg (a legalacsonyabb prioritású csoport a fő funkciós csoport).

Prioritás	Név	Csoport	Előtag	Utótag
1	karbonsav	-COOH	karboxi-	-karbonsav
2	észter	-COOR	R-oxikarbonil-	-oát
3	amid	-CONH ₂	karbamoil-	-amid
4	aldehid	-CHO	formil-	-al
5	keton	-CO-	oxo-	-on
6	alkohol	-OH	hidroxi-	-ol
7	fenol	-OH	hidroxi-	-ol
8	amin	-NH ₂	amino-	-amin
9	éter	-O-	alkoxi-	
10	halogén	-X	halogén-	

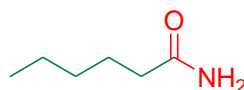
3. Az alapláncot elnevezzük a fő funkciós csoport alapján: a megfelelő alkán, alkén stb. nevéhez a fenti utótagot illesztjük.
4. Úgy számozzuk a láncot, hogy minél kisebb számot kapjanak a funkciós csoportok. Ha több ilyen is van, akkor a többszörös kötések száma legyen a legkisebb.
5. A helyettesítőket, oldalláncokat az alaplánc neve előtt, ábécérendben felsoroljuk a helyzetüket megadó számmal együtt.
6. Ha az azonos csoport többször szerepel di-, tri-, tetra- stb. szócskával jelezzük.



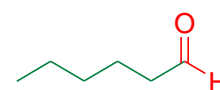
hexánkarbonsav



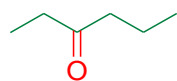
etil-hexanoát



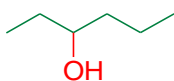
hexánamid



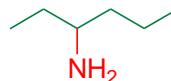
hexanal



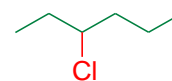
hexan-3-on



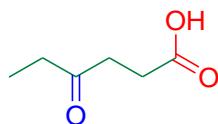
hexan-3-ol



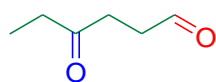
hexán-3-amin



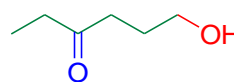
3-klór-hexán



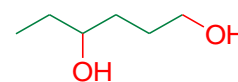
4-oxo-hexánkarbonsav



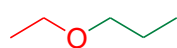
4-oxo-hexanal



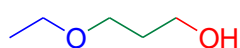
6-hidroxi-hexan-3-on



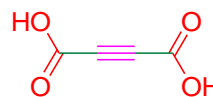
hexán-1,4-diol



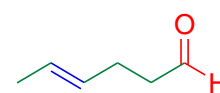
1-etoxi-propán



3-etoxi-propan-1-ol



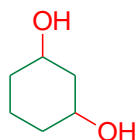
but-2-indikarbonsav



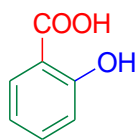
hex-4-énal

Egyszerűbb gyűrűs vegyületek elnevezése

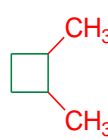
A gyűrű számozásánál a legkisebb számot a legalacsonyabb prioritású helyettesítő kapja.



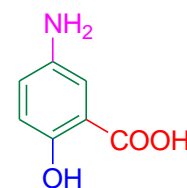
ciklohexán-1,3-diol



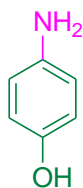
2-hidroxi-benzoésav



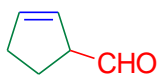
1,2-dimetil-ciklobután



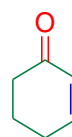
5-amino-2-hidroxi-benzoésav



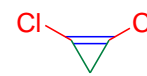
4-amino-fenol



ciklopent-2-énkarbaldehid



ciklohex-2-énon



1,2-diklór-cikloprop-1-én

11.2. Alkánok

11.2.1. Alkánok: telített, nyílt láncú szénhidrogének (így maximális a hidrogéntartalmuk a többi szénhidrogénnel összehasonlítva).

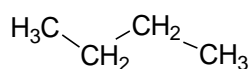
Az alkánok nevei **-án** végződésűek.

Az alkánok régies elnevezése: **paraffinok**.

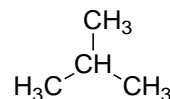
11.2.2. Homológ sor, egyszerűbb képviselők és elnevezésük

Az alkánok általános összegképlete: C_nH_{2n+2}

CH ₄	metán	
C ₂ H ₆	etán	H ₃ C–CH ₃
C ₃ H ₈	propán	H ₃ C–CH ₂ –CH ₃
C ₄ H ₁₀	bután	két konstitúciós (szerkezeti) izomerje van:



H₃C–CH₂–CH₂–CH₃
normál bután
(n-bután)



HC(CH₃)₃
izobután
(i-bután)

Alkils csoport: az alkánból egy hidrogénatom eltávolításával keletkező csoport.

Az alkils csoportok nevei **-il** végződésűek.

Jele: R.

H ₃ C–	metils csoport
H ₃ C–CH ₂ –	etilcs csoport
H ₃ C–CH ₂ –CH ₂ –	propilcs csoport (egyenes)
(H ₃ C) ₂ CH–	izopropilcs csoport (elágazó)
H ₃ C–CH ₂ –CH ₂ –CH ₂ –	butilcs csoport (egyenes)
(H ₃ C) ₂ CH–CH ₂ –CH ₂ –	izobutilcs csoport (elágazó)
H ₃ C–CH ₂ –CH(CH ₃)–	<i>szek</i> -butilcs csoport (elágazó, szekunder szénatommal kapcsolódik)
(H ₃ C) ₃ C–	<i>terc</i> -butilcs csoport (elágazó, terciér szénatommal kapcsolódik)

11.2.3. Előállítás

A földgáz főleg metánt és C₂–C₄-es gáz-halmazállapotú alkánokat tartalmaz.

A kőolaj folyékony szénhidrogének elegye, amely oldva tartalmaz gáz- és szilárd halmazállapotú alkánokat is.

a) Desztillációs elválasztás

A kőolaj frakcionált desztillációjával különböző szénatomszámú szénhidrogének elegyét lehet előállítani (a desztilláció párlatait nyers párlatoknak nevezik).

- **Nyersbenzin:** forráspontja 50–150 °C (C₅–C₁₀ szénatomszámú frakció),
- **Petróleum vagy petrolátum:** a kerozin alapanyaga, forráspontja 150–250 °C (C₁₁–C₁₂),
- **Nyersgázolaj:** a dízelolaj alapanyaga, forráspont 250–350 °C (C₁₃–C₁₅),
- **Pakura, fenéktermék:** a forráspontja 350 °C feletti, fűtőanyagként használják, vagy további vákuumdesztillációnak vetik alá.

A pakura vákuumdesztillációjával: **finom-, közép- és nehézkenőolaj-párlatokat**, illetve **gudront**, a bitumen-, illetve aszfaltgyártás alapanyagát állítják elő.

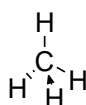
b) Kémiai előállítás

- a kőolajleparlás nyerspárlataiból krakkolással (lásd később), majd a telítetlen komponensek hidrogénezésével.
- szén-monoxid és hidrogéngáz reakciójával, melyet átmenetifém (Fe, Co, Ni, Ru) katalizátorral végeznek (Fischer–Tropsch-eljárás).

11.2.4. Szerkezet

– Metán, CH₄.

Szabályos tetraéder alakú molekula, a H–C–H kötésszög 109,5°.



– Etán, H₃C–CH₃.

A C–C kötéstengely elfordulásával létrejövő két szélső konformációs állás a nyitott állás és a fedő állás. Ennek oka, hogy a C–C kötés tengelye körül a két metilcsoport elfordulhat (szabad rotáció). A nyitott állás energetikailag kedvezőbb.



11.2.4.1. animáció: Az etán térszerkezete

Nagyobb szénatom számú alkánok szerkezete

A szén körüli elrendeződés továbbra is tetraéderes, bár a kötésszögek az eltérő térkitöltésű csoportok miatt már nem azonos a metánban találhatóval. A nem elágazó szénláncú alkánok láncá cikkcakkos, és energetikailag kedvezőbb a nyitott állású. Megjegyzendő, hogy a hosszabb szénláncú szénhidrogének egy adott izomerjének számos konformációja lehetséges, melyek között rendszerint igen csekély az energiakülönbség. A normál hexán cikkcakkos láncelrendeződése:



Izomerek: a butánnak már van két konstitúciós izomerje, majd a szénatomszám növekedésével az izomerek száma egyre nő (például a nonánnak 35, míg a dekánnak 75 konstitúciós izomerje van). A heptántól kezdve a konstitúciós izomerek mellett már optikai izomerek is lehetségesek.

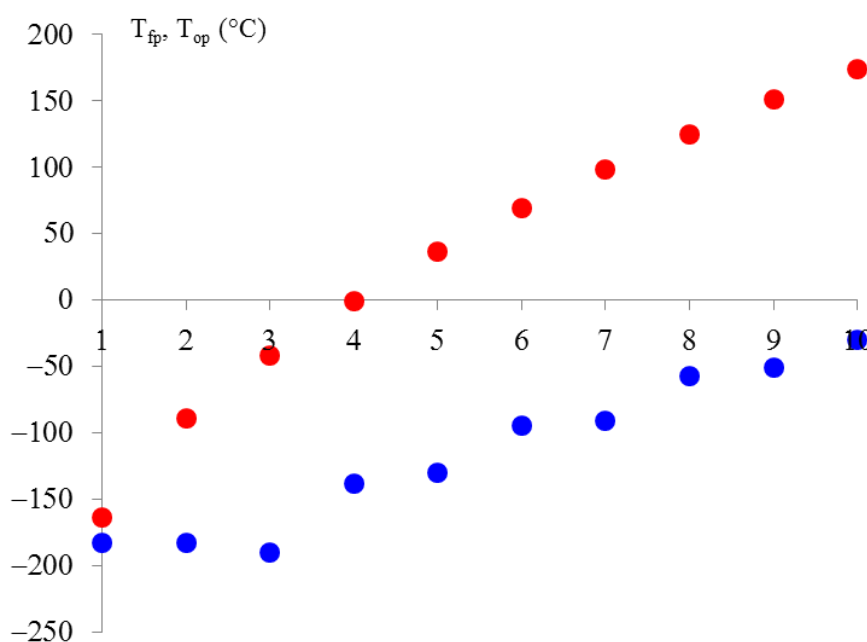
Képlet	Név	Konstitúciós izomer	Összes izomer
--------	-----	---------------------	---------------

C_4H_{10}	bután	2	2
C_5H_{12}	pentán	3	3
C_6H_{14}	hexán	5	5
C_7H_{16}	heptán	9	11
C_8H_{18}	oktán	18	24

11.2.5. Fizikai tulajdonságok

– Mint minden szénhidrogén, az alkánok is apolárisak. Az apoláris molekulák között csak a leggyengébb másodrendű kötés, a diszperziós kötés hat.

– Olvadás- és forráspontjuk, továbbá a sűrűségük is a moláris tömeggel nő. Az egyes izomerek eltérő tulajdonsággal rendelkeznek. Azonos moláris tömegnél többnyire az elágazó izomerek olvadáspontja nagyobb, a normális (el nem ágazó) láncúnak a forráspontja a magasabb.



– A C_1 – C_4 szénatomszámúak gáz-halmazállapotúak, az *el nem ágazó láncú* C_5 – C_{16} szénatomszámúak folyadékok, C_{17} -től pedig szilárdak 25 °C hőmérsékleten és normál légköri nyomáson.

– Mivel apolárisak, vízben rosszul oldódnak.

– A sűrűségük kisebb a víz sűrűségénél, ezért a víz felszínén helyezkednek el. (Megjegyzés: vízzel nem lehet oltani a benzint, mely bizonyos alkánok elegye!)

11.2.6. Kémiai tulajdonságok és reaktivitás

A paraffin elnevezés kicsi reakciókészséget jelent [*parum* (= kevésbé) + *affinis* (= képesség) latin szavak összetételéből származik].

A kis reakciókészség oka a molekulában lévő kötések nagy kötési energiája. (A C–C egyszeres kötés kötésfeszítési energiája 344 kJ/mol, a C–H kötésé pedig 315 kJ/mol).

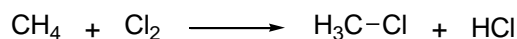
Szobahőmérsékleten gyakorlatilag nem vihetők spontán reakcióba. Melegítve vagy ultrabolya fényvel (UV-fénnyel) megvilágítva reakcióba vihetők, és ilyenkor a jellemző reakciótypusuk a szubsztitúció.

a) Halogénezés

Halogénezés: olyan kémiai folyamat, amikor a szerves vegyületbe halogénatomot (F, Cl, Br, I) viszünk be.

Kis reakciókészségük miatt az alkánok csak erélyes körülmények között halogénezhetőek (ezért a brómos vizet közönséges körülmények közt nem színtelenítik el).

Például a metán klórozása magas hőmérsékleten vagy UV-fény hatására:

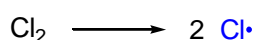


A termék szabályos neve: klórmetán (köznapi vagy triviális név: metil-klorid).

A reakció a szubsztitúciós reakciók csoportjába tartozik: egy hidrogénatomot „cserélünk ki” klóratomra.

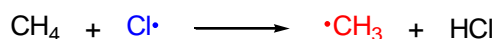
Ez más részről egy láncreakció, melyben a láncvivő részecskék a gyökök. (A **gyök** párosítatlan elektronnal rendelkező, nagy reakcióképességű részecske.)

A láncreakció első lépése (láncindítás) a gyökök keletkezése:

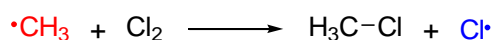


(A kötés felszakításához szükséges a hő vagy a nagy energiájú fény.)

A klórgyök egy metánmolekuláról leszakít egy hidrogénatomot, így egy metilgyök keletkezik:

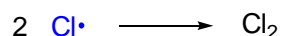


A metilgyök egy klórmolekulával ütközve – a klór-metán keletkezése mellett – klórgyököt generál:

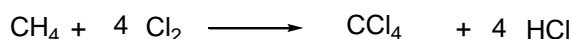
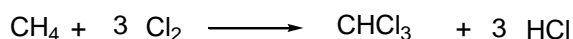
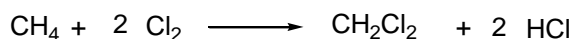


A klórgyök és a metilgyök **láncvivő** szerepet tölt be.

A lánczáró lépések a gyökök összekapcsolódása:



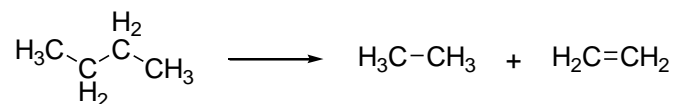
A reakcióban többféle termék is keletkezhet: a klór-metán tovább reagálhat a klórral, és így diklór-metán, triklór-metán (kloroform) és tetraklór-metán (szén-tetraklorid) keletkezhet. Ezen vegyületek keletkezésének reakcióegyenletei:



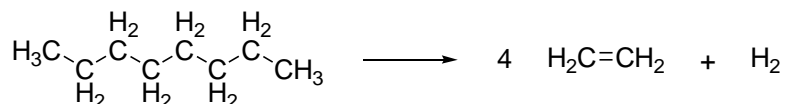
Megjegyzés: a klórozás és brómozás jól irányítható, ám a fluorozás igen heves reakció. A paraffinok elemi jódal nem reagálnak.

b) Hőbontás (levegőtől elzárt térben hevítés)

– 650 °C-ig a hőbontás primer folyamata a **krakkolás**, azaz C–C kötés felbontása (láncszakadás), amelynek során a kiindulási alkánál rövidebb szénláncú alkánok és alkének keletkeznek.



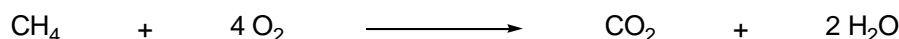
– 650 °C felett **pirolízisről** beszélünk, mert a C–C kötés felbomlásával párhuzamosan a C–H kötések felbontása is lejátszódik (dehidrogénezés) és a telített és telítetlen szénhidrogének mellett hidrogéngáz és korom is keletkezik.



c) Égés

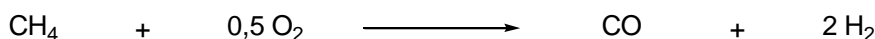
Az égés tulajdonképpen az alkánok oxidációja, melynek során rendszerint igen jelentős energia szabadul fel.

Tökéletes égés esetén szén-dioxid és víz keletkezik:

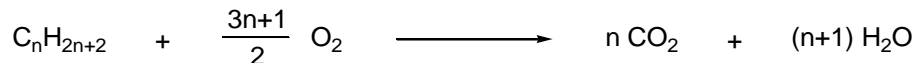


Egy $\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$ általános összegképlettel leírható alkán tökéletes égése:

A részleges (parciális) oxidáció úgynevezett szintézis gázelegyet eredményez:



Egy alkán tökéletes égésének általános reakcióegyenlete:



11.2.7. Felhasználás

a) Energiahordozók (tüzelőanyagok és üzemanyagok)

Oktánszám (a benzin kompressziótűrésének mértéke): megmutatja, hogy a benzin kompressziótűrése hány %-os izooktántartalmú izooktán–heptán modellelegy kompressziótűrésével egyezik meg.

Az izooktán (2,2,4-trimetil-pentán) kompressziótűrése igen jó (oktánszáma 100), a heptáné rossz (oktánszáma 0).

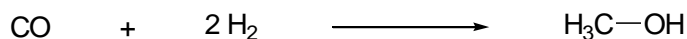
Az oktánszám nem csak 0 és 100 közötti értéket vehet fel (például a benzol oktánszáma 137).

Cetánszám (a gázolaj vagy dízelolaj öngyulladás tulajdonságait méri): megmutatja, hogy a gázolaj öngyulladás tulajdonsága hány %-os cetántartalmú cetán–1-metil-naftalin modellelegy tulajdonságaival egyezik meg.

A cetán (egyenes láncú hexadékan: $\text{C}_{16}\text{H}_{34}$) öngyulladásképesége kiváló, míg az 1-metil-naftaliné igen csekély.

b) Ipari méretű szintézisek segítségével különféle alapanyagokat lehet előállítani, amellyel a **petrolkémia** foglalkozik.

Például a szintézisgázból metil-alkoholt lehet előállítani katalitikus úton:



11.2.8. Legfontosabb képviselők

Metán (CH₄):

- szintelen, szagtalan, normál légköri nyomáson –182 °C olvadáspontú és –161 °C forráspontú, a levegőnél kisebb sűrűségű gáz 25 °C hőmérsékleten és normál légköri nyomáson,
- éghető, a levegővel robbanóelegyet képez (a bányákban a sújtólégrobbanás okozója),
- apoláris, vízben rosszul oldódik, de apoláris oldószerben, például benzinben jól oldódik,
- tüzelőanyag,
- szintézisgáz, etilén, acetilén, kloroform stb. előállítására használják.






11.3. Cikloalkánok

11.3.1. Cikloalkánok: telített, gyűrűs szénhidrogének.

A cikloalkánok nevei a **ciklo-** előtaggal kezdődnek és **-án** utótagra végződnek.

Általános összegképlet: **C_nH_{2n}**

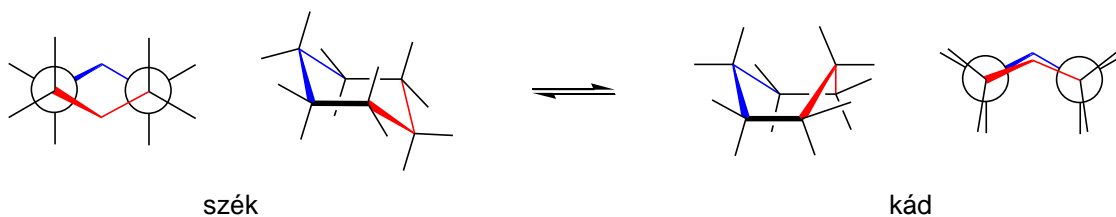
11.3.2. Homológ sor, egyszerűbb képviselők és elnevezésük

Név	Összegképlet	Szerkezeti képlet
Ciklopropán	C ₃ H ₆	
Ciklobután	C ₄ H ₈	
Ciklopentán	C ₅ H ₁₀	
Ciklohexán	C ₆ H ₁₂	
Cikloheptán	C ₇ H ₁₄	

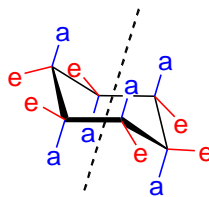
11.3.3. Szerkezet

Legstabilabb az öt-, a hat- és héttagú gyűrű. A ciklopropán kivételével a cikloalkánok gyűrűje nem planáris szerkezetű. Itt részletesen csak a ciklohexán szerkezetével foglalkozunk.

A ciklohexán két szélső konformációja: a szék és a kád, ám emellett más – kevésbé fontos – konformációk is lehetségesek. A Fischer-projekción jól megfigyelhető, hogy a székkonformáció esetén a csoportok nyitott állásban vannak, míg a kádkonformáció esetén fedő állás jön létre, mely energetikailag kedvezőtlenebb. Ezért a székkonformáció a stabilabb. A két konformáció között egyensúly áll fenn, a konformációk könnyen egymásba tudnak alakulni.



A molekulában kétféle helyzetű hidrogénatom van, az egyik helyzete: a székkonformáció közepén áthaladó képzeletbeli tengellyel párhuzamos (lefelé-, felfelé mutató) **axiális (a)** helyzet, a másik, a kifelé mutató **ekvatoriális (e)** helyzetű.



11.4. Alkének

11.4.1. Alkének: szén-szén kettős kötést tartalmazó telítetlen szénhidrogének.

Az alkének nevei **-én** végződésűek.

Az alkének régies elnevezése: **olefinek**.

Az alkének csoportosítása

– A szénlánc jellege szerint:

- nyílt láncú,
- gyűrűs.

– A kettős kötés száma alapján:

- monoolefinek: alkének, egy kettős kötés,
- diolefin: alkadién, két kettős kötés,
- poliolefin: alkapolién, sok kettős kötés.

– A kettős kötés helyzete alapján:

- C=C=C– kumulált,
- C=C–C=C– konjugált (legstabilabb), ha sok ilyen van színes a vegyület,
- C=C–C–C=C– izolált.

11.4.2. Homológ sor, egyszerűbb képviselők és elnevezésük

Általános összegképlet: C_nH_{2n}

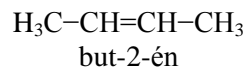
Képlet	Név	Triviális név
$H_2C=CH_2$	etén	etilén
$H_2C=CH-CH_3$	propén	propilén

Alkenilcsoport: egy alkénből egy hidrogén eltávolításával keletkező csoport.

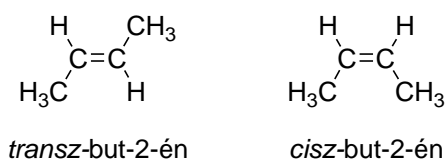
Képlet	Név	Triviális név
$H_2C=CH-$	etenil	vinil
$H_3C-CH=CH-$	1-propenil	
$H_2C=CH-CH_2-$	2-propenil	allil
$H_2C=C(CH_3)-$	1-metil-etenil	izopropenil

A konstitúciós izomerek száma nagyobb az alkánokénál, mert a kettős kötés helye szerint is különbözhetnek a molekulák.

Például a buténnek (C_4H_8) a kettős kötés helyzete alapján két (helyzeti) konstitúciós izomerje van:



A but-2-énnél és minden olyan alkén esetében, ahol a kettős kötés mindkét szénatomjához különböző atomok, atomcsoportok kapcsolódnak, fellép a geometriai izoméria is.



(Ne feledjük, az izoméria oka ebben az esetben a szén-szén kettős kötés gátolt rotációja! A π -kötés a molekula síkja alatt és felett helyezkedik el, ezért a két sztereoizomer nem tud átalakulni egymásba.)

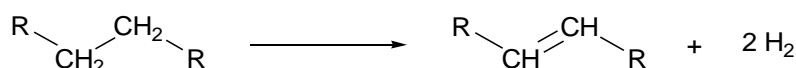
A *cisz-transz* izomerek fizikai és kémiai tulajdonságai eltérnek: például a *cisz-but-2-én* forráspontja normál légköri nyomáson 4 °C, míg a *transz-but-2-én*é 1 °C.

11.4.3. Előállítás

a) Alkánok dehidrogénezésével

A dehidrogénezés olyan szerves kémiai folyamat, ahol hidrogén eltávolítása valósul meg.

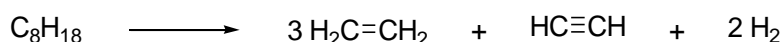
Alkánok levegőtől elzárt hevítésével alkének állíthatók elő. Az alábbi reakció egy dehidrogénezésnek tekinthető:



Például etán 700–900 °C hőmérsékleten etánból etilént lehet előállítani.

b) Kőolajpárlatok hőbontásával

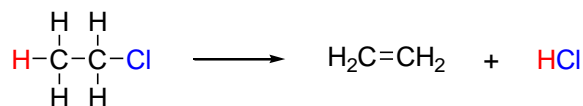
Krakkolás során alkánok és alkének keletkeznek. Magas hőmérsékleten dehidrogéneződés is végbemegy, ilyenkor alkinek is keletkezhetnek. Az egyes szénhidrogéneket desztillációval lehet szétválasztani.



c) Eliminációval

– Halogénszármazékból eliminációval

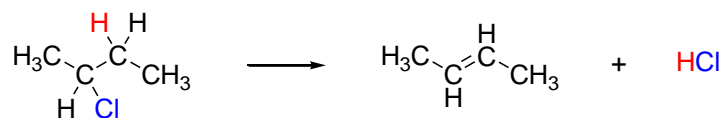
Például klór-etánból tömény nátrium-hidroxid-oldat hatására etiléngáz képződik:



A reakcióban természetesen nem hidrogén-klorid keletkezik, hanem a lúgos közeg (NaOH) következtében nátrium-klorid és víz. A fenti formában felírva az egyenletet azonban az elimináció ténye sokkal szemléletesebben bemutatható.

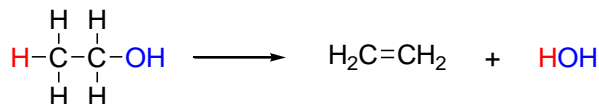
Hidrogén-halogenid eliminációjakor a **Zajcev-szabály** érvényesül: a proton mindig a magasabb rendű szénatomtól lép ki. (Azaz a proton mindig onnan lép ki, ahol eleve kevesebb van.)

Így a 2-klór-butánból elsősorban but-2-én keletkezik (but-1-én sokkal kisebb mennyiségben keletkezik):



– Alkoholokból vízeliminációval

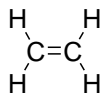
Például etil-alkoholból vízelvonó szer (például tömény kénsav) hatására magas (160 °C fölött) etilén keletkezik:



11.4.4. Szerkezet

Az etén szerkezete:

A molekulában mind a hat atom egy síkban van. A H–C–H kötésszög kisebb, mint 120 °, ennek oka a π-kötés nagyobb térigénye.



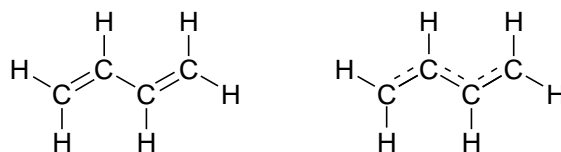
A szén-szén kettős kötés „erősebb” kötés, mint a szén-szén egyszeres kötés, ez megmutatkozik a kötéshosszakban is (erősebb kötés esetén a kötéshossz kisebb).

Kötés	C–C	C=C
Kötéshossz (pm)	154	133
Kötési energia (kJ/mol)	344	615

A kettős kötésnek nem kétszer akkora a kötési energiája, mint egy egyes kötésnek: a „második” azaz a π-kötés kötési energiája: 615 kJ/mol – 344 kJ/mol = 271 kJ/mol.

Ennek következménye, hogy a kettős kötésű vegyületek reakcióképesebbek, mint az alkánok, ugyanis a π-kötés energiája kisebb, mint a σ-kötésé, ezért könnyebben felszakad.

A buta-1,3-dién szerkezete:



A molekulában a két π-kötés delokalizálódik a teljes szénláncra, és a kötések hossza közel azonos lesz (137 pm, illetve 147 pm). Mint korábban láttuk, a szén-szén egyszeres kötés körül a rotáció (forgás) könnyen végbemehet, ám a buta-1,3-dién esetén a delokalizáció következtében a két –CH=CH₂ csoport viszonylag nagy aktiválási gáton keresztül tud csak elfordulni. A molekula a delokalizáció következtében sík szerkezetű.

11.4.5. Fizikai tulajdonságok

– Hasonlóan az alkánokhoz, mint minden szénhidrogén, az alkének is apolárisak. Az apoláris molekulák között csak a leggyengébb másodrendű kötés, a diszperziós kötés hat.

- Az olvadáspont, forráspont, és a sűrűség a molekula „méretével”, a moláris tömeggel nő (C_2 – C_4 gáz, C_5 -től folyadék, C_{17} -től szilárdak 25 °C hőmérsékleten és normál légköri nyomáson).
- Mivel apolárisak, vízben rosszul oldódnak.

11.4.6. Kémiai tulajdonságok és reaktivitás

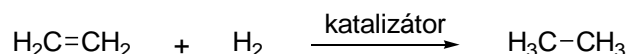
Az alkánokhoz képest jelentősen nagyobb a reakciókészségük, bizonyos reagensekkel már szobahőmérsékleten reakcióba lépnek (a szén-szén π -kötés könnyebben felbontható, mint a szén-szén σ -kötés).

Jellemző reakciótípusok:

- addíció,
- polimerizáció,
- égés.

a) Hidrogénaddíció

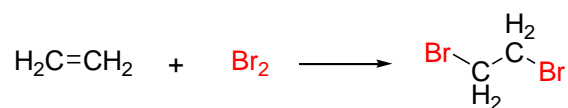
Az alkének katalizátor (például platina, palládium vagy finom eloszlású nikkel) jelenlétében hidrogénezhetők, melynek során alkánok keletkeznek:



Azért szükséges katalizátor a hidrogénezéshez, mivel a hidrogén-hidrogén kötés igen erős (igen jelentős a disszociációs energiája). A katalizátor felületén megkötődik az alkén és a hidrogén is, majd részben vagy teljesen felbomlik a H–H kötés. Így a katalizátor felületén jóval kisebb aktiválási energiával megy végbe a hidrogénaddíció. Az alkének hidrogénezése egyébként energetikailag igen kedvező folyamat (exoterm). Ennek oka, hogy a keletkező két erős C–H kötés energetikailag kedvezőbb, mint az erős H–H és a gyengébb szén-szén π -kötés. Tulajdonképpen ez az alapja általánosságban az addíciós reakcióknak.

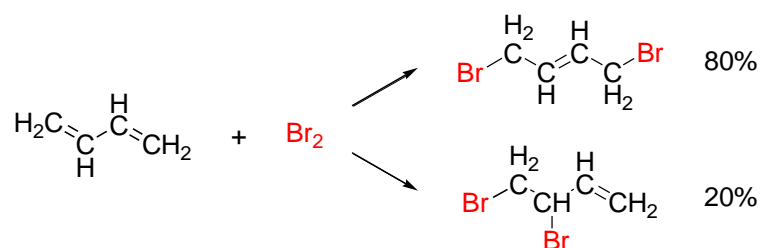
b) Halogénaddíció

Az alkének szobahőmérsékleten reagálnak az elemi halogénnal (a telítetlenségek kimutathatóak brómos vízzel: a brómos víz elszíntelenedik).



A bróm-bróm kötés disszociációs energiája kisebb a hidrogén-hidrogén kötésénél, ezért a brómadaddíció esetén nincs szükség katalizátorra.

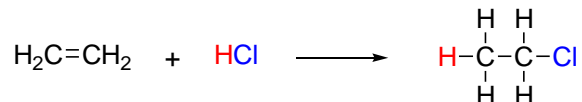
A buta-1,3-dién brómadaddíciójánál mintegy 80%-ban 1-4 addíció történik és csak 20%-ban van 1-2 addíció:



Ez a delokalizált π -kötésekkel van összefüggésben, mivel lokalizált kettős kötések esetén elsősorban 1-2 addíció történne.

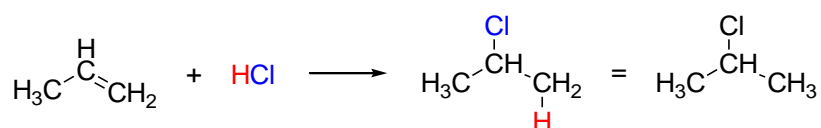
c) Hidrogén-halogenidek addíciója

Az alkének hidrogén-halogenideket is addicionálnak:



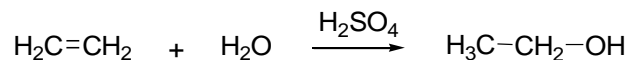
A hidrogén-halogenidek addíciója a **Markovnyikov-szabály** szerint megy végbe: ha a π -kötéssel kapcsolt szénatomok rendüské eltérő, akkor az alacsonyabb rendű szénatomhoz kapcsolódik a proton. (A hidrogén mindig odamegy, ahol eleve több van.)

Így a propén HCl-addíciójával 2-klór-propán keletkezik:



d) Vízaddíció

Kénsav (H_2SO_4) katalizátor jelenlétében vízaddíció történik:

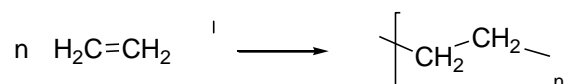


Hasonló módon előállítható propénből propan-2-ol is.

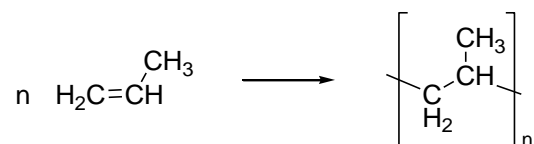
e) Polimerizáció

Az etilén katalitikus polimerizációjával hőre lágyuló (termoplasztikus) polietilén (PE), propilén polimerizációjával hőre lágyuló polipropilén (PP) keletkezik. (Ezen egyedi rövidítések [például PE, PP] segítik a szelektív hulladékgyűjtést is.)

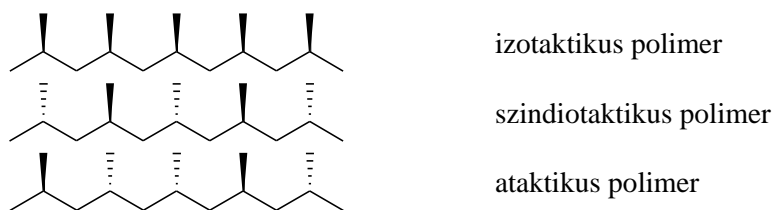
A polietilén képződése:



A polipropilén képződése:

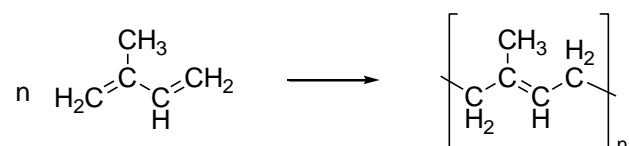


A polimerizációs reakciókban mutatott nagy reaktivitás oka, hogy ilyenkor a „gyengébb” π -kötés helyett két „erősebb” σ -kötés keletkezik. A katalizátornak (általában átmenetifém-vegyületek, például titánsók) a szerepe, hogy a π -kötést „felszakítsa”, illetve bizonyos esetekben a katalizátor befolyásolja a termék térszerkezetét. Például polipropilén esetén a hidrogénatomok és a metilcsoportok a láncon belül kétféleképpen is állhatnak, és ezek sorozatos elrendeződése hatással van a keletkező polimer mechanikai stabilitására. Például az alábbi szerkezetű polimereknek eltérőek a mechanikai tulajdonságai és megmunkálhatóságuk (a vonalképletben nem jelöltük a hidrogénatomokat, csak a metilcsoportok irányultságát):

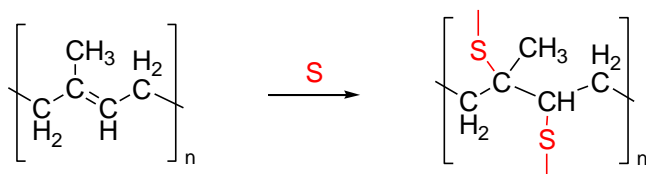


A gumigyártás

Izoprén (2-metil-buta-1,3-dién) polimerizációjával poliizoprén keletkezik, mely tulajdonképpen a természetes kaucsukkal azonos szerkezetű:

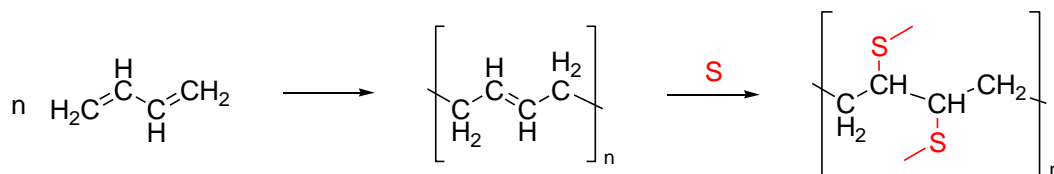


Vulkanizálás: a nem túl jó mechanikai tulajdonságokkal rendelkező poliizoprénból (nyersgumiból) keményebb, ellenállóbb gumi előállításához a poliizoprént kénnel főzik, így a polimerláncok között szulfid- (–S–) és diszulfid- (–S–S–) hidak alakulnak ki. Így a szerkezet térhálósá válik (hőre keményedő polimer), mely jelentős hatással van a gumi mechanikai tulajdonságaira. (Megjegyzés: a vulkanizált gumi például a gumiabroncs alapanyaga.)



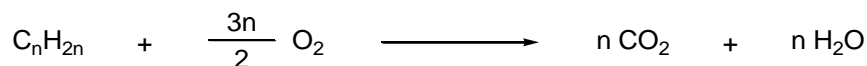
Ebonit vagy keménygumi: legalább 30%-os kéntartalom (szigetelőanyagként használják).

A műgumi gyártása hasonló a természetes gumi gyártásához, csak itt buta-1,3-diénből indulnak ki izoprén helyett.



f) Égés

Egy alkén tökéletes égésének általános reakcióegyenlete:



11.4.7. Felhasználás

Szerves vegyipari alapanyagok előállítása:

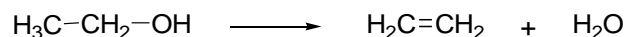
- polimerek gyártása,
- alkoholok előállítása,
- halogéntartalmú vegyületek előállítása.

11.4.8. Legfontosabb képviselők

Etén:

- színtelen, édeskés szagú gáz,
- olvadáspontja és forráspontja igen alacsony,
- éghető; meggyújtva enyhén kormozó lánggal ég, mert magasabb a széntartalma, mint az etáné,
- a levegővel robbanóelegyet képez,
- apoláris, vízben rosszul, de apoláris oldószerben jól oldódik.

Előállítása a laborban etil-alkohol dehidratálásával (160 °C fölött tömény kénsav jelenlétében):



Előállítás az iparban: benzín pirolízisével.

Felhasználása: polietilén, PVC, glikol (HO-CH₂-CH₂-OH) előállítása.

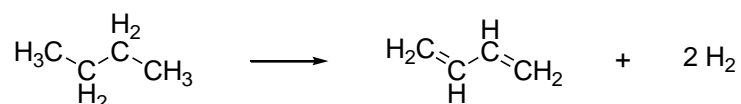
Propén:

Előállítása iparban: kőolajpárlatok hőbontásával.

Felhasználása: polipropilén, acetón (H₃C-CO-CH₃) előállítása.

Buta-1,3-dién:

Előállítása butánból dehidrogénezéssel:



Felhasználása: műgumigyártás.

2-metilbuta-1,3-dién (köznapi neve **izoprén**) egységekből áll a kaucsukfa nedve, de az α-karotin, a β-karotin, és az A-vitamin is ilyen egységekből áll (konjugált kettős kötésűek).

11.5. Alkinek

11.5.1. Alkinek: szén-szén hármass kötetést tartalmazó telítetlen szénhidrogének.

Az alkinek nevei **-in** végződésűek.

11.5.2. Homológ sor, egyszerűbb képviselők és elnevezésük

Általános összegképlet: C_nH_{2n-2}

Képlet	Név	Triviális név
HC≡CH	etin	acetilén
HC≡C-CH ₃	propin	metil-acetilén
HC≡C-CH ₂ -CH ₃	but-1-in	
H ₃ C-C≡C-CH ₃	but-2-in	

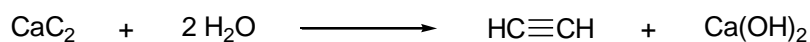
Alkenilcsoport: egy alkénből egy hidrogén eltávolításával keletkező csoport.

Képlet	Név
HC≡C-	etinil
CH ₃ -C≡C-	1-propinil
HC≡C-CH ₂ -	2-propinil

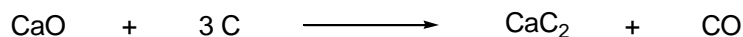
11.5.3. Előállítás

Az acetilén előállítása:

a) Laboratóriumban kalcium-karbidból:



A kalcium-karbidot kalcium-oxid és szén reakciójából lehet előállítani:



A karbidlámpában is hasonló módon acetiléngázt fejlesztenek, amelyet meggyújtva a kormozó lánggal világítanak.

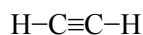
b) Iparban metán termikus bontásával:



A magasabb szénatomszámú homológokat rendszerint acetilénből állítják elő szubsztitúciós reakciókkal.

11.5.4. Szerkezet

Itt részletesen az acetilén szerkezetével foglalkozunk:



- a szénatomok között egy σ -kötés és két π -kötés található,
- a két π -kötés egymásra merőleges,
- a H, C, C és H atomok egy vonalba esnek, a molekula lineáris,
- a H–C–C kötésszög 180° .

Az egyszeres, a kettős és a hármas kötést összehasonlítva a hármas kötés a legrövidebb, ennek a legnagyobb a kötési energiája:

Kötés	C–C	C=C	C≡C
Kötéshossz (pm)	154	133	121
Kötési energia (kJ/mol)	344	615	812

Ezek alapján a három kötés közül a hármas kötés a legerősebb kötés (ám nem háromszor olyan erős, mint egy egyszeres kötés).

11.5.5. Fizikai tulajdonságok

- Hasonló az alkánokhoz és alkénekhez, az apoláris molekulák között csak diszperziós kötés hat.
- Olvadáspont, forráspont, a sűrűség a moláris tömeggel nő (C_2 - C_4 gáz, C_5 - folyadék a magasabb szénatomszámúak szilárdak (C_{17} -től) 25°C hőmérsékleten és normál légköri nyomáson).
- Mivel apolárisak, vízben rosszul oldódnak.

11.5.6. Kémiai tulajdonságok és reaktivitás

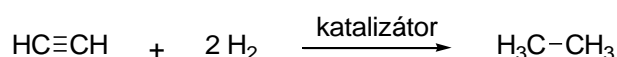
Már szobahőmérsékleten jelentős reakciókészséggel rendelkeznek.

Jellemző reakciójuk:

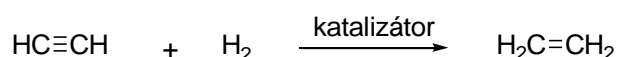
- addíció,
- oxidáció,
- gyenge savként viselkednek.

a) Hidrogénaddíció

Két lépésben, katalitikus úton (Pd, Pt vagy Ni) az alkinek alkánokká redukálhatóak:



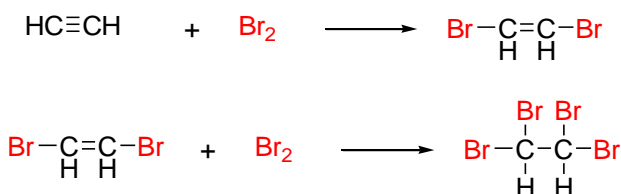
Az első lépés a hármas kötés telítése kettős kötéssé:



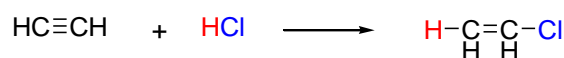
Amennyiben csak alkénig szeretnénk redukálni az alkint, rendszerint csökkentett aktivitású (mérgezett) katalizátort kell alkalmazni, mivel a reakció könnyen eredményezhet teljes telítődést.

b) Halogén- és hidrogénhalogénid-addíció

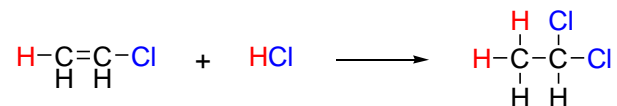
Az alkinek elemi halogénnal és hidrogén-halogénidekkel addíciós reakcióba vihetők. Például a brómos vizet elszíntelenítik, a reakció első lépésében 1,2-dibróm-etén keletkezik, melyből brómfeleslegben 1,1,2,2-tetrabróm-etán keletkezik.



Az alkinek reakciója hidrogén-halogénidekkel szintén kétlépéses folyamat: először vinil-halogénid (HCl esetén vinil-klorid) keletkezik:

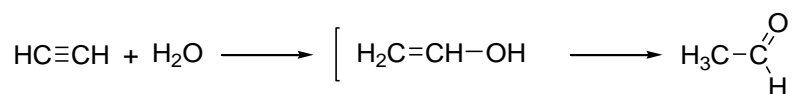


A második lépésben 1,1-diklór-etán keletkezik:



c) Vízaddíció

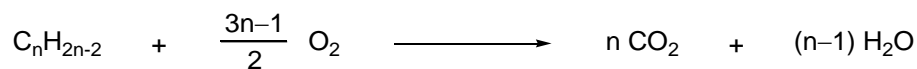
Hg^{2+} -sók és kénsav jelenlétében vinil-alkohol keletkezik első lépésben, ám ez átalakul a stabilabb acetaldehiddé:



A reakciót **Kucserov-reakciónak** is nevezik. Régen ezzel a reakcióval állítottak elő acetaldehidet.

c) Égés

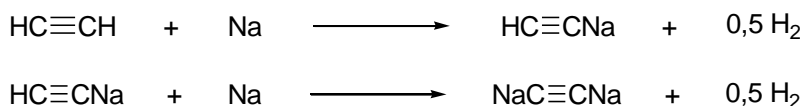
Az alkinek éghetőek, ám levegőn égetve rendszerint kormozó lánggal égnek, mivel nagy a relatív széntartalmuk. Tiszta oxigénben szén-dioxiddá és vízzé égnek el:

**d) Acetilidképzés**

Az acetilén gyenge savként viselkedik, megfelelő körülmények között protont képes leadni.

Az acetilén savanyú sói a hidrogén-acetilidek (ezek gyakran robbanékonyak), például $\text{HC}\equiv\text{CAg}$, szabályos sói az acetilidek például CaC_2 kalcium-acetilid vagy más néven kalcium-karbid. (A biner szénvegyületeket szokás karbidoknak nevezni, így a kalcium-acetilid triviális neve kalcium-karbid.)

Alkálifémek (például nátrium) hidrogéngázt fejleszt az acetilénből:

**11.5.7. Felhasználás**

Az olefinekből kiinduló technológiák háttérbe szorították az acetilén alapú technológiákat.

Az acetilén műanyagok, alkoholok, karbonsavak gyártásának alapanyaga.

11.5.8. Legfontosabb képviselők**Acetilén: $\text{HC}\equiv\text{CH}$**

- színtelen, szagtalan gáz,
- sűrűsége kisebb a levegő sűrűségénél,
- olvadáspontja és forráspontja alacsony,
- éghető, meggyújtva kormozó lánggal ég, mert magas a széntartalma, viszont tiszta oxigénnel keverve tökéletesen elég és a lánghőmérséklet akár 2500°C hőmérsékletű, ezért hegesztésre használják, disszugiál a neve,
- a levegővel robbanóelegyet képez,
- apoláris, ezért vízben rosszul, de apoláris oldószerben jól oldódik, például acetonban. Így is hozzák forgalomba sárga színű gázpalackban, kovaföldben felitatott acetont tartalmazza oldott állapotban.

11.6. Aromás vegyületek**11.6.1. Aromás vegyületek:**

Olyan gyűrűs szénhidrogének, amelyekben a szénatomok egy síkban helyezkednek el (legalábbis közel planárisak) és a π -elektronok száma $4n + 2$. Az aromáság további feltétele, hogy folytonos ciklikus (gyűrűszerű) delokalizáció tudjon kialakulni (tehát a delokalizáció ne legyen megszakítva például egy CH_2 -csoporttal).

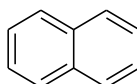
Léteznek heteroaromás rendszerek is, ezekben szénatom mellett más elem atomja is részt vesz a delokalizációban.

Az aromás vegyületek csoportosítása

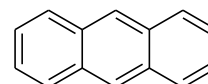
a) A gyűrűk száma alapján:



benzol

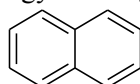


naftalin

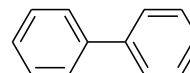


antracén

b) kondenzált vagy izolált gyűrűs aromás vegyületek:



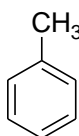
naftalin



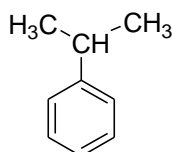
bifenil

A naftalin kondenzált, a bifenil izolált aromás vegyület.

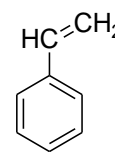
c) Oldallánc alapján:



metil-benzol (toluol)



izopropil-benzol (kumol)

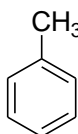


vinil-benzol (sztírol)

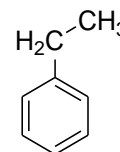
11.6.2. Homológ sor, egyszerűbb képviselők és elnevezésük



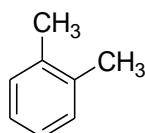
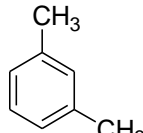
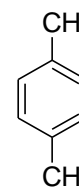
benzol



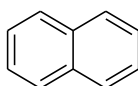
metil-benzol (toluol)



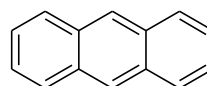
etil-benzol

1,2-dimetilbenzol
orto-dimetilbenzol
o-xilol1,3-dimetilbenzol
meta-dimetilbenzol
m-xilol1,4-dimetilbenzol
para-dimetilbenzol
p-xilol

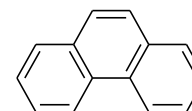
benzol



naftalin

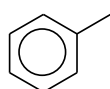


antracén

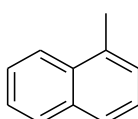
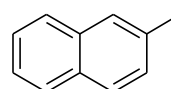
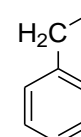


fenantren

Arilcsoport: az aromás vegyületből egy hidrogénatom eltávolításával keletkező csoport.



fenilcsoport

1-naftilcsoport
(α -naftilcsoport)2-naftilcsoport
(β -naftilcsoport)

benzilcsoport

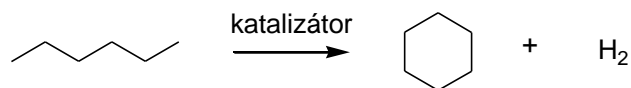
11.6.3. Előállítás

Régebben a kőszén száraz lepárlásával történt az aromás vegyületek előállítása (kőszénkátrányból).

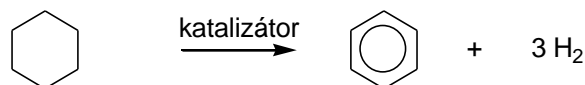
Napjainkban a benzin katalitikus reformálásával állítják elő az aromás vegyületeket.

Például a benzol előállítása:

Gyűrűzárás:



Aromatizálás (dehidrogénezés):



11.6.4. Szerkezet

Kekulé szerint a benzol (C₆H₆) szerkezeti képlete:



Az ábrán lokalizált kettős kötések láthatók, ám ez nem tükrözi a kísérleti tapasztalatokat: a benzol nem reagál brómos vízzel, ami az olefinekre amúgy jellemző. Delokalizált kettős kötések találhatók a molekulában: aromás szerkezet jellemzi a benzolt. Ez az extra stabilizáció a magyarázata annak, hogy a benzol nem reagál a brómos vízzel. A benzol delokalizált elektronszerkezetét az alábbi formában is szoktuk jelölni:



A benzol molekulaszervezete:

- Szabályos hatszög alakú gyűrű, a szénatomok egy síkban helyezkednek el, (planáris molekula).
- A szénatomok három σ -kötést alakítanak ki: egyszeres σ -kötéssel kapcsolódnak egymáshoz és a hidrogénatomokhoz.
- A szénatomok negyedik elektronja π -kötést alakít ki, így a benzol gyűrűjében a 6 π -elektron delokalizált elektronfelhőként a gyűrű síkjára merőlegesen helyezkedik el. Ez energetikailag sokkal kedvezőbb, mint három lokalizált kettős kötés.
- A delokalizált elektronfelhő a szénváz alatt és felett helyezkedik el, erősítve a σ -kötéseket.
- Valamennyi szén-szén kötés egyforma hosszúságú. (Az aromás C–C kötéshossz és kötési energiája [139 pm, illetve 500 kJ/mol] az egyes kötés és a kettős kötés kötéshossza és kötési energiája közötti értékek.)
- Apoláris molekula.

11.6.5. Fizikai tulajdonságok

A **benzol** színtelen, jellegzetes szagú, könnyen párologó folyadék (25 °C hőmérsékleten és normál légköri nyomáson, olvadáspontja 5,5 °C, forráspontja 80 °C).

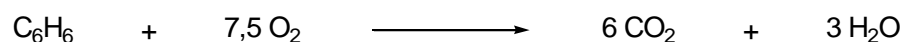
Apoláris, mint minden szénhidrogén, ezért apoláris oldószerekkel (éter, benzin) jól elegyedik, poláris oldószerek (víz) rosszul oldják. A víznél kisebb sűrűségű, ezért a tetején úszik.

A **naftalin** fehér, jellegzetes szagú, apoláris szilárd anyag (25 °C hőmérsékleten és normál légköri nyomáson).

11.6.6. Kémiai tulajdonságok és reaktivitás

a) Égés

Az aromás vegyületek kormozó lánggal égnék a magas széntartalmuk miatt. A benzol tökéletes égésének reakcióegyenlete:

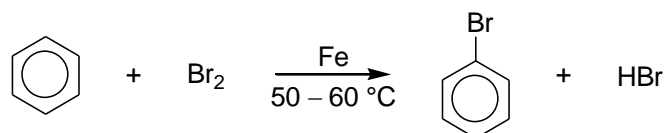


b) Szubsztitúciós reakciók

Nem telítetlen vegyületként viselkednek, **nem lépnek addíciós reakcióba**. A brómos vizet nem szintelenítik el 25 °C hőmérsékleten és normál légköri nyomáson.

– Halogénezés az aromás gyűrűben

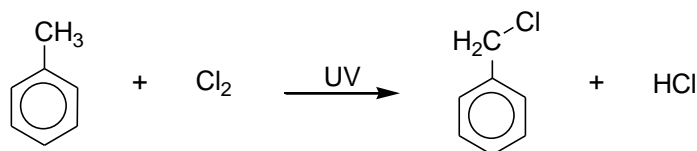
Fém vas és melegítés hatására az aromás gyűrűhöz kapcsolódó hidrogénatom szubsztitúciója történik:



A keletkezett termék triviális neve brómbenzol.

– Halogénezés az oldalláncban

Melegítés vagy UV-fény hatására az aromás gyűrűhöz kapcsolódó alkillánc halogénezhető:

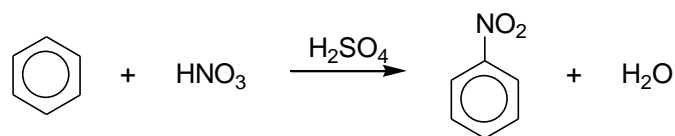


A keletkezett termék triviális neve benzil-klorid (klórmetil-benzol).

– Nitrálás

Nitrálás: nitrocsoport (–NO₂) bevitele a szerves vegyületbe

A nitrocsoport bevitele **nitrálóeleggyel** (tömény salétromsav és tömény kénsav elegyével) történik:

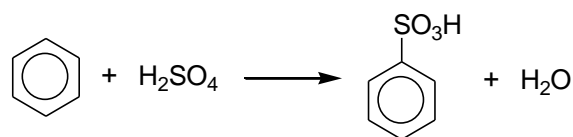


A keletkezett termék neve nitrobenzol.

– **Szulfonálás**

Szulfonálás: szulfonsav-csoport ($-\text{SO}_3\text{H}$) bevitele a szerves vegyületbe.

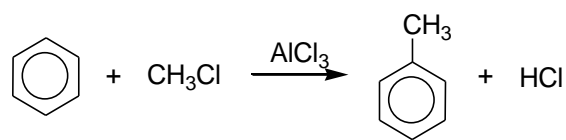
A reakció tömény (96%-os) kénsavval, vagy füstölő (100%-os) kénsavval, vagy óleummal (a 100%-os kénsav még tartalmaz kén-trioxidot is) végezhető:



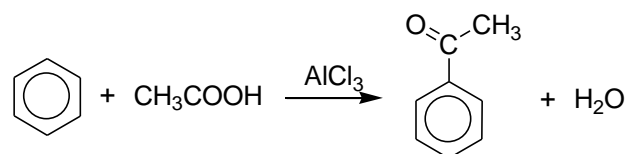
A keletkezett termék neve benzolszulfonsav.

– **Fridel–Crafts-reakció:**

– **Alkilezés:** alkilcsoport bevitele a szerves vegyületbe.



– **Acilezés:** acilcsoport (lásd később) bevitele a szerves vegyületbe.

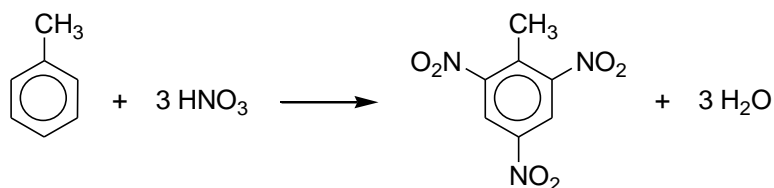


A keletkezett termék neve acetofenon.

11.6.7. Legfontosabb képviselők

Benzol: oldószer, klór-benzolt, vinil-benzolt, nitrobenzolt, benzolszulfonsavat stb. állítanak elő belőle.

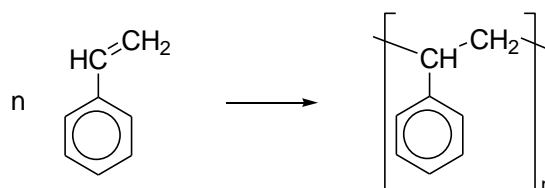
Toluol: benzolhoz hasonló szagú, vízzel nem elegyedő, mérgező folyadék, oldószerként használják. Toluolból tömény kénsav jelenlétében egy robbanószert, trinitrotoluolt (TNT vagy trotil) állítanak elő.



o-xilol, m-xilol, p-xilol: jó oldószerek, a toluolhoz hasonlóak, az o-xilol műanyagipari alapanyag.

Etil-benzol: jó apoláris oldószer.

Vinil-benzol, sztírol: színtelen, kellemes illatú folyadék. Sztírolt polimerizálva polisztirolt állítanak elő, mely egy hőre lágyuló lánc alakú molekulákból álló polimer.



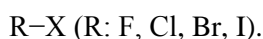
Naftalin: molyirtó, színezékipari alapanyag.

Antracén és fenantrén: a színezékiparban használják.

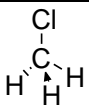
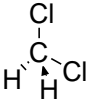
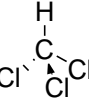
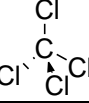
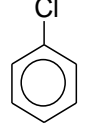
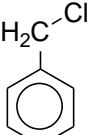
11.7. Halogéntartalmú szénhidrogének

11.7.1. Halogéntartalmú szénhidrogének: olyan szerves vegyületek, melyeknek egy vagy több, az alifás vagy aromás lánchoz kapcsolódó hidrogénatomját halogénatom (F, Cl, Br, I) helyettesíti.

Általános képlet:



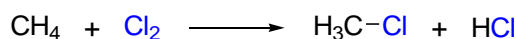
11.7.2. Homológ sor, egyszerűbb képviselők és elnevezésük

Képlet	Szerkezeti képlet	Szisztematikus név	Triviális név
CH ₃ Cl		klór-metán	metil-klorid
CH ₂ Cl ₂		diklór-metán	metilén-klorid
CHCl ₃		triklór-metán	kloroform
CCl ₄		tetraklór-metán	szén-tetraklorid
C ₆ H ₅ Cl		klór-benzol	
C ₆ H ₅ CH ₂ Cl		klórmetil-benzol	benzil-klorid

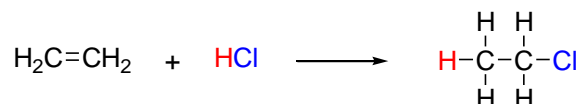
11.7.3. Előállítás

Az előző fejezetekben már talákoztunk számos reakcióval, melynek terméke halogéntartalmú szénhidrogén.

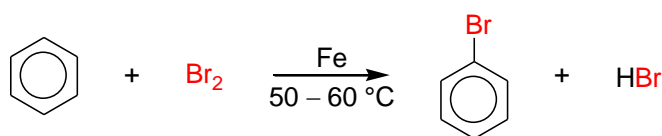
Alkánok halogénszubsztitúciója magas hőmérsékleten vagy UV-fény hatására:



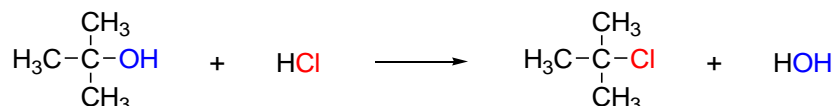
Alkének és alkinek halogén- és hidrogén-halogenid addíciója. Például:



Aromások szubsztitúciója:



Hidroxivegyületek szubsztitúciója:



11.7.4. Szerkezet

A szén és a halogének elektronegativitása igen eltérő, ezért a szén-halogén kötés poláris. Ennek következtében a halogéntartalmú szénhidrogének gyakran poláris molekulájúak. A megfelelő szimmetriával rendelkező halogénezett szénhidrogén-molekulák (például CCl_4) továbbra is apolárisak, ám ezen molekulák között is erősebb a diszperziós kötés. A poláris molekulák között még az erősebb dipólus-dipólus kötés is hat.

11.7.5. Fizikai tulajdonságok

– Az olvadáspont és a forráspont nagyobb, mint a megfelelő szénhidrogénéké (ez a szerkezet következménye).

– Az olvadáspont, a forráspont és a sűrűség a halogénatomok számától és minőségétől függ. Például 25°C hőmérsékleten és légköri nyomáson a CH_3Cl légnemű, ám a CH_2Cl_2 már folyadék, a CH_2I_2 folyadék és a CHI_3 szilárd halmazállapotú.

– Vízben rosszul oldódnak, apoláris oldószerben jól oldódnak, maguk is zsíroldószerek.

– Sűrűségük nagyobb, mint az azonos szénatomszámú szénhidrogénéké.

11.7.6. Kémiai tulajdonságok és reaktivitás

A szén-halogén kötés poláris, a szénatomon parciális pozitív töltés, míg a halogénatomon parciális negatív töltés található. Ennek következtében a halogéntartalmú szénhidrogének reaktivitása sokkal jelentősebb, mint a szénhidrogénéké (a szén-halogén kötés támadható).

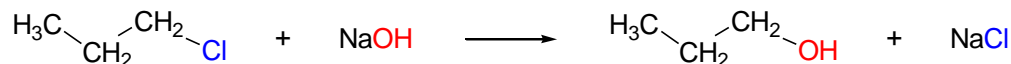
Jellemző reakciójuk a szubsztitúció és az elimináció.

A reakciókészség függ:

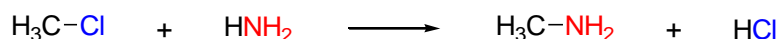
- a halogénatom minőségétől,
- a halogénatom helyzetétől.

a) Szubsztitúciós reakciók

Híg vizes lúgoldatok (például NaOH-oldat) hatására szubsztitúciós reakció megy végbe:



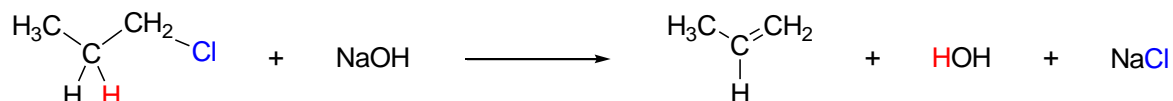
Alkil-halogenidekből ammónia segítségével – megfelelő nyomáson és hőmérsékleten – aminokat lehet előállítani:



Ezzel a módszerrel nemcsak primer, hanem szekunder és tercier aminok, sőt kvaterner ammónium-vegyületek is keletkezhetnek (lásd később). A reakcióban keletkező termékelegy összetétele az ammónia és a halogenid molarányától függ.

b) Eliminációs reakciók

Töményebb lúgoldatokkal melegítve az alkil-halogenidek eliminációs reakcióba is vihetők:



A szubsztitúció és elimináció rendszerint egymással versengő (konkurens) folyamatok. Híg lúgoldatokkal főképpen szubsztitúció, míg töményebb lúgoldatok hatására inkább elimináció megy végbe. A hőmérséklet növelése az eliminációnak kedvez.

11.7.7. Legfontosabb képviselők

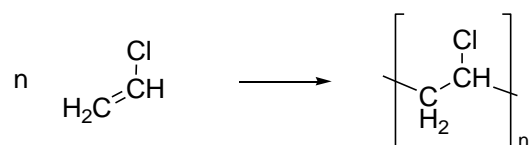
A **diklór-metán** (CH_2Cl_2); a **kloroform** (CHCl_3) és a **szén-tetraklorid** (CCl_4) oldószerként használatosak. (A diklór-metán és a kloroform poláris, míg a szén-tetraklorid apoláris oldószer, vízzel nem elegyednek.)

A **jodoform** (CHI_3) fertőtlenítő hatású, ezért sebhintőporban alkalmazzák.

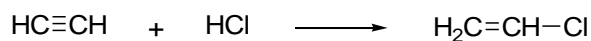
Difluor-diklór-metán: Freon 12 (CF_2Cl_2): egy CFC (klórozott-fluorozott szénhidrogén: chlorofluorocarbons) vegyület, régen az aeroszolos készítményekben hajtógázként és hűtőfolyadékként (hűtőszekrényben) alkalmazták. Mivel bontja az ózonpajzsot, betiltották a használatát.

Vinil-klorid ($\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{Cl}$): a PVC-gyártás alapanyaga. [A PVC szó egy angol kifejezés rövidítése: poly(vinyl-chloride), magyarul poli(vinil-klorid).]

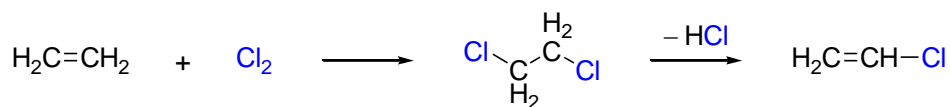
A PVC előállítása fény hatására történő polimerizációval:



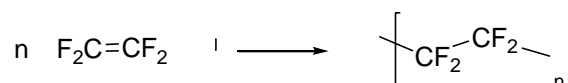
A vinil-kloridot régebben acetilénből állították elő:



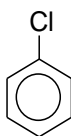
Ma már – sokkal gazdaságosabban – etilénből állítják elő. A hidrogén-klorid (HCl) melléktermékként keletkezik az eljárás során:



Tetrafluoretén ($\text{F}_2\text{C}=\text{CF}_2$): a teflon (egy rendkívül ellenálló polimer) előállításának alapanyaga:



Klórbenzol:



Anilint ($\text{C}_6\text{H}_5-\text{NH}_2$) és fenolt ($\text{C}_6\text{H}_5-\text{OH}$) állítanak elő belőle.

11.8. Alkohokok

11.8.1. Alkohokok: olyan szerves vegyületek, ahol a hidroxilcsoport ($-\text{OH}$ csoport) telített szénatomhoz kapcsolódik.

Az alkohokok nevei **-ol** végződésűek. (Megjegyzés: az -ol végződés nem feltétlen jelent alkoholt. Például a fenokok nevei is -olra végződnek, de más, nem hidroxivegyület neve is lehet -ol végű: benzol, toluol.)

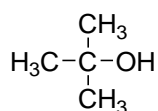
Általános képlet: $\text{R}-\text{OH}$ (R: alifás csoport).

11.8.2. Homológ sor, egyszerűbb képviselők és elnevezésük

Képlet	Szerkezeti képlet	Szisztematikus név	Triviális név
H ₃ C–OH	H ₃ C–OH	metanol	metil-alkohol, faszesz
H ₃ C–CH ₂ –OH		etanol	etil-alkohol, borszesz
H ₃ C–CH ₂ –CH ₂ –OH		propan-1-ol	propil-alkohol
(H ₃ C) ₂ CH–OH		propan-2-ol	izopropanol
C ₆ H ₁₁ OH		ciklohexanol	ciklohexil-alkohol
C ₆ H ₅ CH ₂ OH		fenil-metanol	benzil-alkohol
HO–CH ₂ –CH ₂ –OH		etán-1,2-diol	etilénglikol
HO–CH(CH ₂ –OH) ₂		propán-1,2,3-triol	glicerin

A legegyszerűbb stabil kétértékű alkohol az etilénglikol, míg a legegyszerűbb háromértékű alkohol a glicerin (a geminális diolok nem stabilak, mivel vízvesztés közben oxovegyületekké alakulnak).

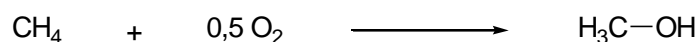
Az etanol egy elsőrendű (primer) alkohol, az izopropanol másodrendű (szekunder), míg a *terc*-butanol egy harmadrendű (tercier) alkohol.

*terc*-butanol

11.8.3. Előállítás

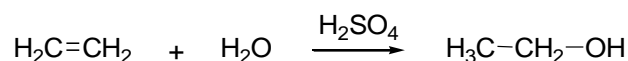
a) Oxidációval

Alkán, alkén, alkin és aromás vegyületek közvetlen oxidációja:



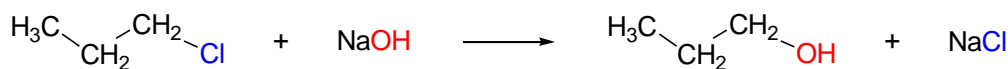
b) Addícióval

Alkénekre történő vízaddícióval:

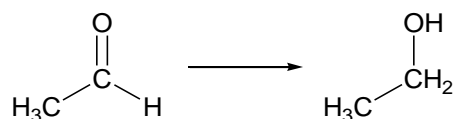


c) Szubsztitúcióval

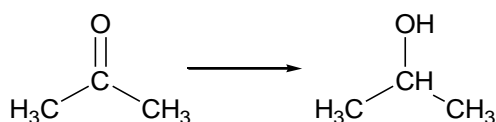
Halogénszármazékokból a halogénatomot hidroxilcsoportra cserélve:

**d) Redukcióval**

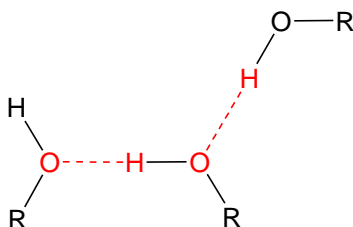
– Aldehidből primer alkohol lesz:



– Ketonból szekunder alkohol lesz:

**11.8.4. Szerkezet**

A szén elektronegativitása 2,5, a hidrogéné 2,1, ellenben az oxigéné 3,5. Ennek következtében az alkoholokban az O–H kötés (és az O–C kötés is) poláris, az oxigénatom parciális negatív töltésű, ezért a hidroxilcsoportok között hidrogénkötések alakulnak ki. Mivel az alkoholok molekuláinak geometriája rendszerint nem középpontosan szimmetrikus, az alkoholok rendszerint dipólusmolekulák. A tulajdonságokat jelentősen befolyásolja a molekulán belüli poláris (OH-csoport) és apoláris (alkilcsoport) rész aránya, ha hosszú az alkilánc (például oktanol), a fizikai tulajdonságokat inkább az apoláris rész határozza meg.



A poláris kötések következtében a szén-oxigén és az oxigén-hidrogén kötések is támadhatóak megfelelő reagensek segítségével.

11.8.5. Fizikai tulajdonságok

– Az alkoholmolekulák között a legerősebb másodrendű kötés, a hidrogénkötés hat, ezért az alkoholok olvadás- és forráspontja sokkal magasabb a megfelelő szénhidrogénekénél.

– Az olvadás- és forráspont, a sűrűség a szénatomok számával nő. A kisebb szénatomszámúak folyadékok, a hosszabb szénláncú alkoholok szilárdak 25 °C hőmérsékleten és normál légköri nyomáson.

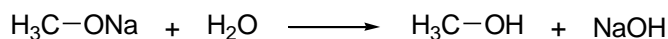
– A rövidebb szénláncú alkoholok polárisak, ezért vízben oldódnak, ám a vízoldhatóság a szénatomszám növekedésével csökken (nő az apoláris rész aránya).

11.8.6. Kémiai tulajdonságok és reaktivitás**a) Savasság**

A vízhez hasonlóan a hidroxilcsoport hidrogénatomja parciálisan pozitív töltésű, és más kationokkal helyettesíthető. Például metanolt reagáltatva elemi nátriummal, a következő egyenlet szerinti reakció megy végbe:



A reakció teljesen analóg a víz és a nátrium között végbemenő reakcióval. A keletkezett metoxid (vagy metilát) anion azonban csak vízmentes közegben stabil, mivel víz jelenlétében a következő reakció megy végbe:



Ennek az oka, hogy a metoxidion sokkal erősebb bázis, mint a víz, tehát a vizet deprotonálni képes. Ebből következik, hogy a metanol gyengébb sav, mint a víz (konjugált bázisa erősebb!). Tulajdonképpen a metanol olyan gyenge sav, hogy vizes oldatban gyakorlatilag nem is disszociál, nem képes protonálni a vizet. Éppen ezért a metanol (és általában az alkoholok) vizes oldatában a pH semleges.

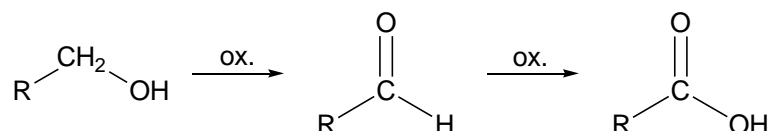
Vízmentes körülmények között azonban (például ha az oldószer a tiszta, vízmentes alkohol) az alkoholátok tulajdonképpen az alkoholok (mint savak) sóinak tekinthetők.

Megjegyzés: az alkoholok nemcsak savként, hanem bázisként is viselkedhetnek, tehát amfoter jellegűek, hasonlóan a vízhez. Ez könnyen megérthető, ha belegondolunk, hogy az alkohol levezethető a következő módon is: egy vízmolekula hidrogénatomját „lecseréljük” egy alkilcsoportra.

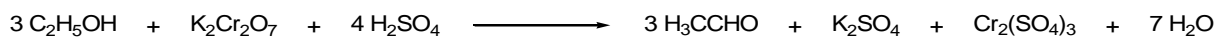
Az alkoholokból keletkező anion általános neve alkoholát- vagy alkoxidion.

b) Oxidáció

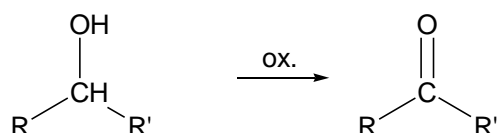
– primer alkohol enyhe oxidációjával első lépésben aldehid, tovább oxidálva karbonsav keletkezik:



Az alkoholszonda működése: Az alkoholszondába fűjt levegő alkoholtartalmától függően a szondában lévő anyag megzöldül a keletkező króm(III)-szulfáttól.

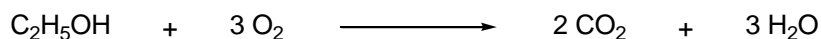


– szekunder alkohol enyhe oxidációjával keton keletkezik (további oxidációval láncszakadással karbonsavelegy keletkezik, lásd a ketonoknál):



– tercier alkohol csak erélyesen oxidálható, ilyenkor láncszakadással karbonsavelegy keletkezik.

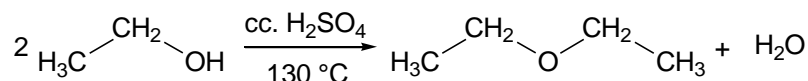
Az alkoholok éghető anyagok, például az etanol tökéletes égésének reakcióegyenlete:



c) Dehidratáció

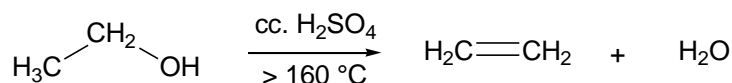
A dehidratáció olyan folyamat, mely során víz lép ki a kiindulási anyagokból. Alkohokok dehidratációja során lehetőség van éterek és alkének keletkezésére is. A dehidratáció (vízelvonás) rendszerint valamilyen vízelvonó anyag jelenlétében történik. Gyakran például tömény kénsavat alkalmazunk vízelvonó szernek.

Alacsonyabb hőmérsékleten (130 °C) elsősorban éter keletkezik az alkoholból:



Ekkor tulajdonképpen két alkoholmolekulából lép ki egy vízmolekula.

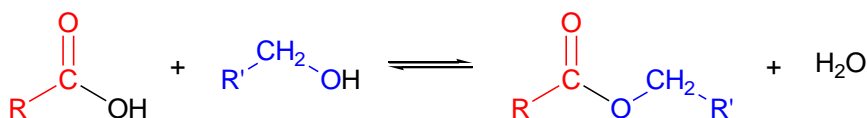
Magasabb hőmérsékleten (160 °C) egy alkoholmolekulából hasad ki egy vízmolekula, ilyenkor az alkén a főtermék:



Ez a reakció eliminációs reakciónak tekinthető.

d) Észterképzés

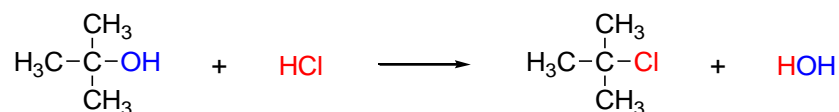
Az alkohokok és savak között megfordítható, egyensúlyra vezető reakció megy végbe. A keletkezett termék neve **észter**: egy alkoholból és egy savból vízkilépéssel keletkező vegyület. A reakcióhoz rendszerint valamilyen vízmegkötőt (például tömény kénsavat, foszfor-pentoxidot) használnak katalizátornak.



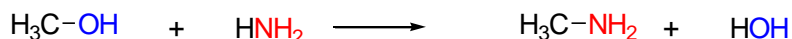
Nemcsak szerves savak észterei ismertek, hanem például a kénsavnak, foszforsavnak vagy a salétromsavnak is lehetnek észterei.

e) Szubsztitúciós reakciók

Alkoholokból hidrogén-halogenidekkel halogéntartalmú szénhidrogének állíthatók elő:



Ehhez hasonlóan ammóniával aminokat lehet előállítani szubsztitúciós reakcióban:



11.8.7. Legfontosabb képviselők

Metanol: oldószerként és metilezőszerként használják, formaldehidet, hangyasavat állítanak elő belőle. Mérgező! Régen a fa száraz lepárlásával állították elő, ma szintézisgázból vagy metán parciális (részleges) oxidációjával történik az előállítása.

Etanol: ipari oldószer, acetaldehidet, ecetsavat állítanak elő belőle.

Előállítható a szőlőcukor alkoholos erjedésével:



Így maximálisan 10-12%-os alkohololdat keletkezik, desztillációval lehet tömény (96%-os) alkohololdatot előállítani.

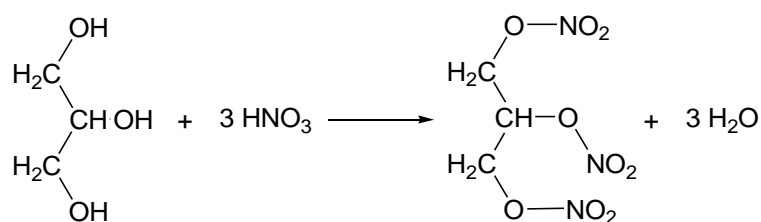
Bután-2-ol: oldószerként és lakkipari alapanyagként használják.

Glikol: fagyálló folyadék. Méreg!

Glicerin: fagyálló folyadékként használják és mivel higroszkópos (vízmegekötő), ezért krémekben alkalmazzák.

A glicerin salétromsavval alkotott észtere a glicerin-trinitrát (nitroglicerin), mely egy robbanóanyag.

Előállítását Sobrero fedezte fel, szállíthatóságát Nobel dolgozta ki.



Nitroglicerintartalmú szívgyógyszereket is készítenek.

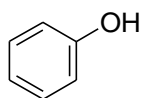
11.9. Fenolok

11.9.1. Fenolok: olyan szerves vegyületek, ahol a hidroxilcsoport (OH) aromás gyűrű szénatomjához kapcsolódik.

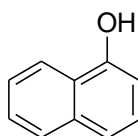
A fenolok nevei **-ol** végződésűek.

Általános képlet: **R-OH** (R: aromás csoport).

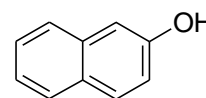
11.9.2. Egyszerűbb képviselők és elnevezésük



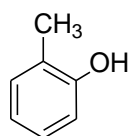
fenol



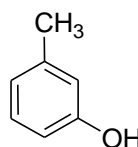
1-naftol



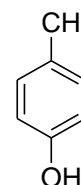
2-naftol



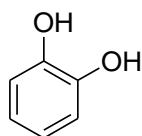
orto-metil-fenol
o-krezol



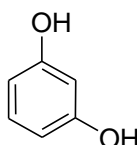
meta-metil-fenol
m-krezol



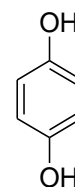
para-metil-fenol
p-krezol



pirokatechin



rezorcin



hidrokinon

11.9.3. Előállítás

Régen a fa, a szén vagy a koksztól származó kátrányból nátrium-hidroxiddal kimosták, majd szén-dioxiddal felszabadították a fenolokat. Manapság a szénhidrogéniparból származik a fenolok többsége.

11.9.4. Szerkezet

A hidroxicsoprot polaritása miatt a fenolok – az alkoholokhoz hasonlóan – dipólusmolekulák, a molekulái között hidrogénkötések alakulnak ki. Az aromás gyűrű planáris, ezért a fenolok általában könnyen rendeződnek kristályrácsba.

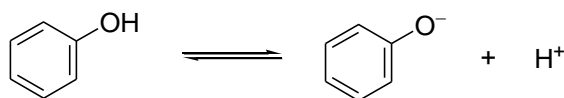
11.9.5. Fizikai tulajdonságok

A fenolok tisztán fehér színű, jellemző szagú, kristályos szilárd vegyületek, melyek levegőn könnyen oxidálódnak és elszíneződnek, elfolyósodnak. Éterben, alkoholban jól, vízben általában csak kismértékben oldódnak (a hidrofób, azaz víztaszító aromás gyűrű hatása). Élettani hatás: maró, mérgező, baktériumölő hatásúak.

11.9.6. Kémiai tulajdonságok és reaktivitás

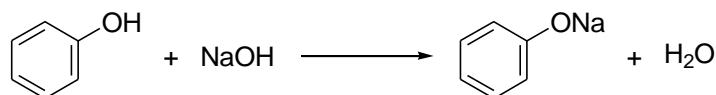
a) Savasság

A fenolok gyenge savak, ám jóval erősebbnek tekinthetők, mint az alkoholok. Ennek köszönhetően már vizes oldatban is disszociálnak részlegesen, így vizes oldatuk kémhatása enyhén savas:

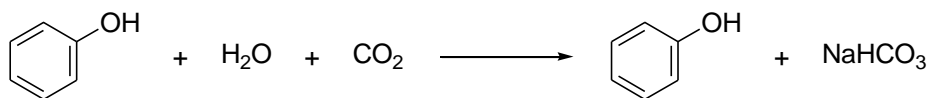


A keletkezett anion neve fenolátanion.

A gyenge savakhoz hasonlóan a fenolok is közömbösíthetők erős lúgokkal, például nátrium-hidroxiddal, melynek során nátrium-fenolát keletkezik:



A fenol disszociációs állandója $1,02 \cdot 10^{-10}$, mely kisebb még a szénsav első disszociációs állandójánál is ($4,47 \cdot 10^{-7}$). Ennek következtében a nátrium-fenolát-oldatból a szénsav felszabadítja a fenolt (mint gyengébb savat). Ez jól megfigyelhető, ha nátrium-fenolát vizes oldatán szén-dioxidot buborékolatunk keresztül: a vízben nem túl jól oldódó fenol kicsapódik:

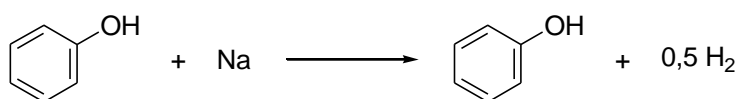


Ezzel ellentétben a fenol nátrium-karbonát (vagy nátrium-hidrogén-karbonát) vizes oldatából nem fejleszt szén-dioxid-gázt.

Megjegyzés: A tény, hogy a fenolok erősebb savak, mint az alkoholok, elektronszerkezeti különbségekkel magyarázható. A fenolátionban az oxigénatom egyik magános elektronpárja kölcsönhatásba tud lépni a fenilcsoport delokalizált elektronrendszerével. A hét atomra kiterjedő delokalizáció stabilizálja a fenolátiont, így a disszociáció kedvezőbbé válik, mint az alkoholok esetén.

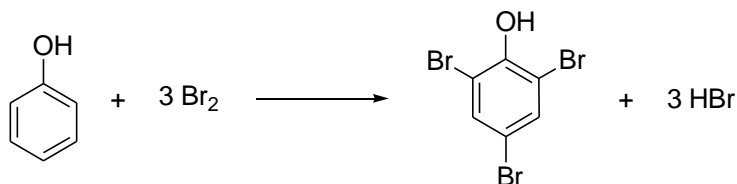
b) Aktív hidrogén reakciói

A fenolok hidroxilcsoportjának hidrogénje – az alkoholokéhoz hasonlóan – elemi hidrogénné redukálható alkálifémek segítségével:



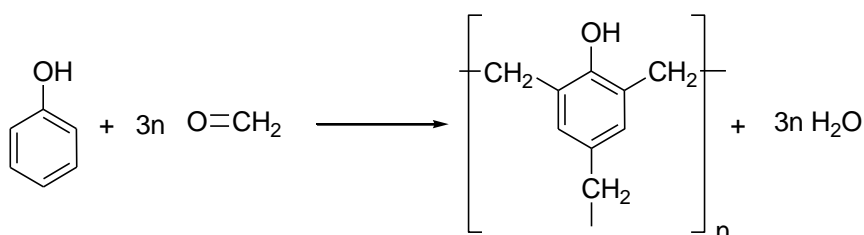
c) Halogénezés

Elemi brómmal (brómos vízzel) reagáltatva a fenolt tribróm-fenol keletkezik. Ez fehér csapadékként kicsapódik az oldatból, mivel nem oldódik jól vízben.



d) Polikondenzáció

A fenol és formaldehid (H_2CO) polikondenzációs reakciójában keletkező bakelit térhálós, hőre keményedő műanyag, a fenoplasztok közé tartozik. A bakelit egy kemény műanyagfajta, melyet például kapcsolók, foglalatok előállítására használnak.



11.10. Éterek

11.10.1. Éterek: olyan szerves vegyületek, melyekben két szénhidrogéncsoportot étercsoport ($-\text{O}-$) kapcsolja össze.

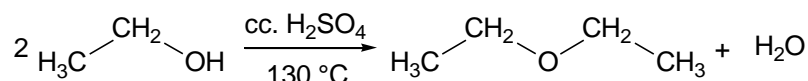
Általános képlet: $\text{R}-\text{O}-\text{R}'$.

11.10.2. Egyszerűbb képviselők és elnevezésük

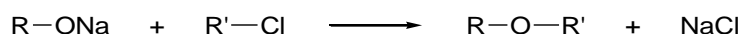
Képlet	Szerkezeti képlet	Szisztematikus név
$\text{H}_3\text{C}-\text{O}-\text{CH}_3$		dimetil-éter
$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$		dietil-éter
$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{O}-\text{CH}_3$		etil-metil-éter
$\text{C}_6\text{H}_5-\text{O}-\text{C}_6\text{H}_5$		difenil-éter
		oxirán (etilén-oxid)
		tetrahydrofuran
		1,4-dioxán
		18-korona-6

11.10.3. Előállítás

a) alkoholból vízelvonással:



b) halogénezett szénhidrogénből alkoholáttal:



11.10.4. Szerkezet

Az éterek polaritása rendszerint nem túl nagy, ezért apoláris molekuláknak tekinthetők. A molekulák között nem tud hidrogénkötés létrejönni, ezért illékonyabbak, mint az izomer alkoholok. A parciálisan negatív töltésű oxigénatom hidrogénkötés akceptora lehet, ezért igen korlátozottan elegyednek vízzel is.

11.10.5. Fizikai tulajdonságok

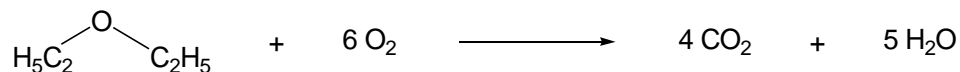
Az éterek színtelenek, általában jellegzetes szagúak. Gyakorlatilag apolárisnak tekinthetők, ezért vízben rosszul oldódnak, apoláris oldószerekkel elegyednek.

25 °C hőmérsékleten és normál légköri nyomáson a dimetil-éter gáz, a dietil-éter folyadék (forráspontja 35 °C).

11.10.6. Kémiai tulajdonságok és reaktivitás

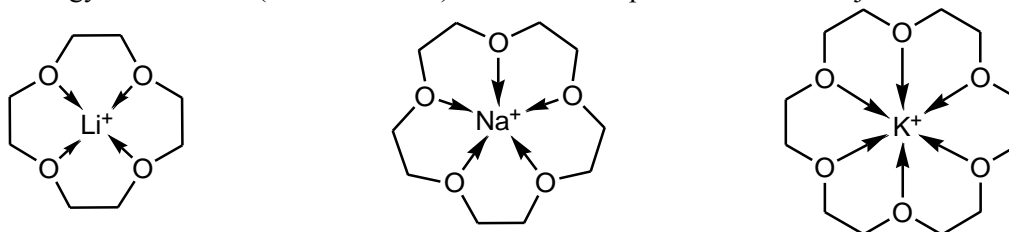
Az éterkötés igen stabil (állandó), kicsi a reakciókészsége, ezért lehet az étert reakcióközegként alkalmazni. A feszült gyűrűs éterek ezzel ellentétben viszonylag reaktív vegyületek, például az oxiránt gyűrűfelnnyílással számos más vegyületté lehet átalakítani.

Meggyújtva lángra lobbannak, éghetőek. Például a dietil-éter égése:



Az éterek csak igen körülmények között vihetők reakcióba, például savas hidrolízissel alkohollá alakulnak.

Az alábbi gyűrűs étereket (koronaétereket) fémionok komplexálására használják:



11.10.7. Legfontosabb képviselők

Dietil-éter: apoláris oldószer, reakcióközegként alkalmazzák, régen a gyógyászatban altatásra használták, ám ma már nem használják, mert mérgező.

11.11. Aldehidek és ketonok

11.11.1. Aldehidek: olyan szerves vegyület, amelyekben a karbonilcsoport ($-\text{CO}-$) egy hidrogénatomhoz és egy szénatomhoz kapcsolódik (azaz a lánc végén helyezkedik el).

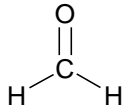
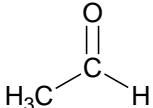
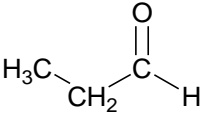
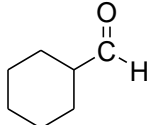
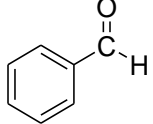
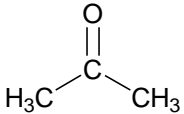
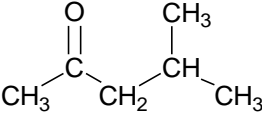
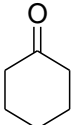
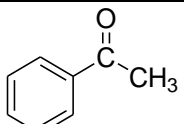
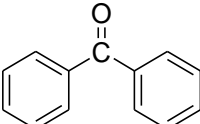
Az aldehidek jellemző funkciós csoportja a formilcsoport: $-\text{CHO}$.

Az aldehidek nevei **-al** végződésűek.

Ketonok: olyan szerves vegyületek, amelyekben a karbonilcsoport ($-\text{CO}-$) két szénatomhoz kapcsolódik (azaz lánc közben helyezkedik el).

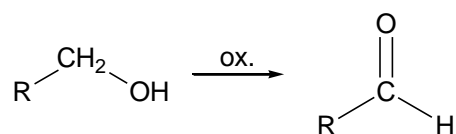
A ketonok nevei **-on** végződésűek.

11.11.2. Egyszerűbb képviselők és elnevezésük

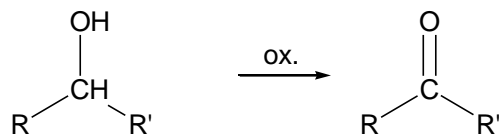
Képlet	Szerkezeti képlet	Szisztematikus név	Triviális név
HCHO		metanal	formaldehid
H ₃ C-CHO		etanal	acetaldehid
H ₃ C-CH ₂ -CHO		propanal	propionaldehid
C ₆ H ₁₁ CHO		ciklohexán-karbaldehid	
C ₆ H ₅ CHO		benzaldehid	
H ₃ C-CO-CH ₃		propanon	aceton
H ₃ C-CO-CH ₂ -CH(CH ₃) ₂		4-metil-pentan-2-on	metil-izobutil-ke-ton
		ciklohexanon	
C ₆ H ₅ -CO-CH ₃			acetofenon
C ₆ H ₅ -CO-C ₆ H ₅			benzofenon

11.11.3. Előállítás

– primer alkohol enyhe oxidációjával aldehid keletkezik:

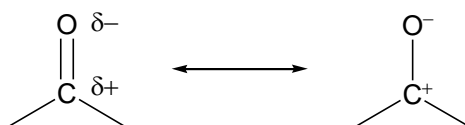


– szekunder alkohol enyhe oxidációjával keton keletkezik (további oxidációval láncszakadással karbonsavelegy keletkezik, lásd a ketonoknál):



11.11.4. Szerkezet

A karbonilcsoportban a szén-oxigén kötés igen poláris, a szénatomon parciális pozitív, míg az oxigéne parciális negatív töltés található. Ennek következtében a karbonilvegyületek igen reakcióképes vegyületek. A töltéseltolódást az alábbi formában szokás jelölni:



11.11.5. Fizikai tulajdonságok

A szénatomszám növekedésével nő az olvadáspont, a forráspont, a sűrűség, ám csökken a vízdoldhatóság, mivel nő az apoláris szénlánc hossza. 25 °C-on és légköri nyomáson a formaldehid és acetaldehid gáz-, a többi folyadék- vagy szilárd halmazállapotú.

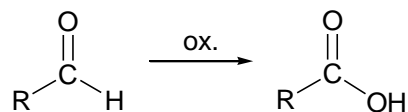
A rövid szénláncú aldehidek és ketonok jellegzetes szagú anyagok, vízben jól oldódnak, mivel a poláris karbonilcsoport oxigénatomja hidrogénkötés akceptora lehet. A hosszabb szénláncú és aromás aldehidek és ketonok vízben nem oldódnak jól.

11.11.6. Kémiai tulajdonságok és reaktivitás

a) Oxidáció

Az aldehidek könnyen oxidálhatóak karbonsavvá, ezzel ellentétben a ketonok csak erősebb körülmények között oxidálhatóak. Ennek oka, hogy a ketoncsoport csak láncszakadással oxidálható, ilyenkor karbonsavak elegye keletkezik. (A ketonok oxidációja rendszerint változó összetételű termékelegyhez vezet, a reakció nem irányítható jól.)

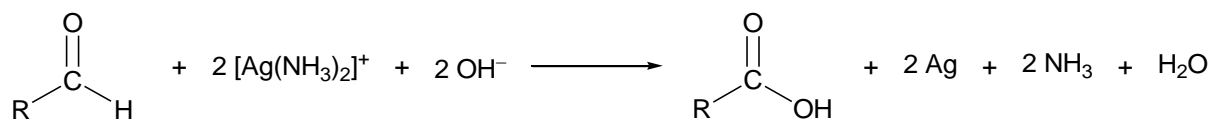
Aldehidek oxidációja:



Az aldehidek kimutatása szintén a könnyű oxidálhatóságon alapul: az ezüsttükörpróba (vagy Tollens-próba) és a Fehling-reakció alkalmas a redukáló hatású aldehidcsoport azonosítására. Ezeket a reakciókat a ketonok nem adják.

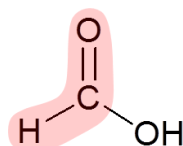
Ezüsttükörpróba:

Egy kémcsőben lévő ezüst-nitrát-oldathoz annyi ammóniaoldatot öntünk, amíg a leváló csapadék fél nem oldódik, majd hozzáadjuk az aldehid vizes oldatát és melegítjük az oldatot. Az oldat a leváló ezüsttől megszűrül, és kialakul a kémcső belső falán a csillogó ezüsttükör. Az ezüstionok fém-ezüsttől redukálódnak, míg az aldehid karbonsavvá oxidálódik.

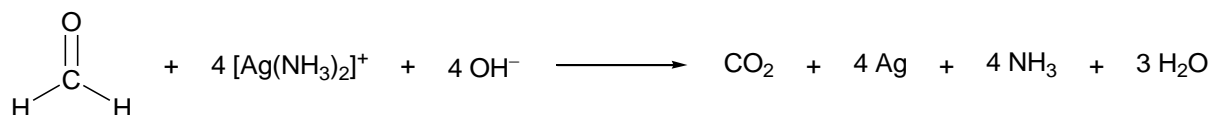


11.11.6.1. ábra: Az ezüsttükörpróba

Megjegyzés: a formaldehid oxidációjakor keletkező hangyasav szintén redukáló hatású. Ez jól megfigyelhető a hangyasav szerkezeti képletén (tartalmaz egy formilcsoportot):

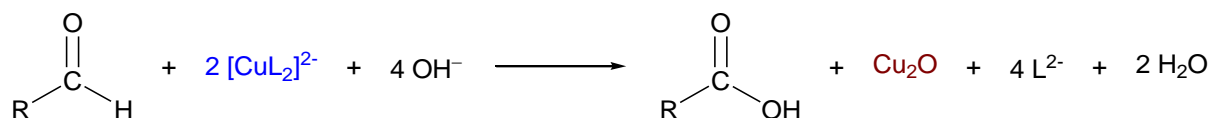


Ennek következtében a hangyasav is adja az ezüsttükörpróbát, illetve a formaldehid oxidációjakor keletkező hangyasav szén-dioxiddá oxidálódik. Összességében a formaldehid kétszer annyi ezüstiont képes redukálni, mint a többi egyértékű aldehid:



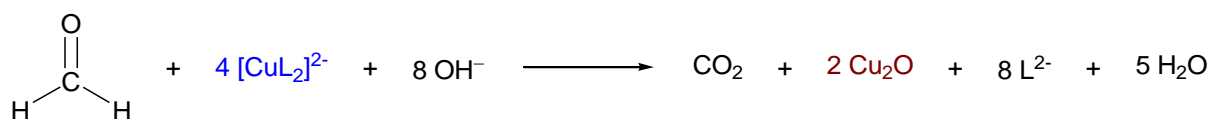
Fehling-reakció:

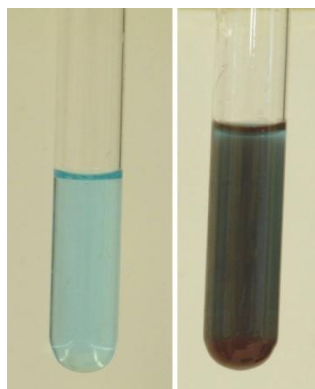
Kevés Fehling I.-oldathoz (CuSO_4 -oldat) annyi Fehling II.-oldatot (lúgos kálium-nátrium-tartarát-oldat) öntünk, hogy a kezdetben leváló csapadék feloldódjon. Az oldathoz aldehid vizes oldatát öntjük és forralásra vörösbarna színű réz(I)-oxid csapadék válik ki.



A tartarátok a borkósav sói (lásd később). Az egyenletben a tartarátion rövidítése: L^{2-} .

A formaldehid ebben az esetben is szén-dioxiddá oxidálódik, hasonlóan a fentiekhez:

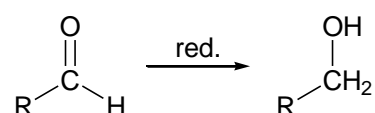




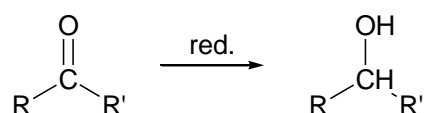
11.11.6.2. ábra: A Fehling-reakció

b) Redukció

Aldehidek redukációjakor primer alkohol keletkezik:



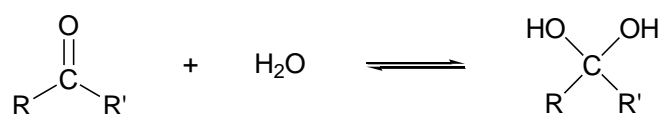
Ketonok redukációjakor szekunder alkohol keletkezik:



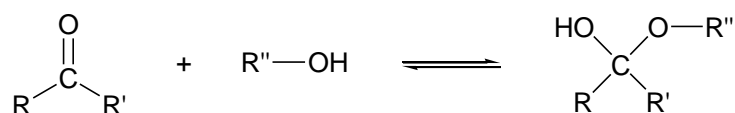
Megfelelő körülmények között akár szénhidrogénekig is redukálhatóak a karbonilvegyületek.

c) Addíciós reakciók

A C=O kettős kötés bizonyos vegyületekkel addíciós reakcióba vihető. Ezen vegyületek nem mindig stabilak, például a vízáddícióval keletkező geminális diolok vízvesztéssel visszaalakulhatnak a kiindulási oxovegyületekké:



A fentihez hasonló reakció megy végbe alkoholokkal is:

**11.11.7. Legfontosabb képviselők**

Formaldehid: fontos szintetikus és műanyagipari alapanyag. Szúrós szagú gáz 20 °C hőmérsékleten és normál légköri nyomáson, a 30-40%-os vizes oldata a formalin.

Acetaldehid: fontos vegyipari alapanyag. Iparilag az etilén oxidációjával állítják elő (réz- és palládiumsók jelenlétében).

Benzaldehid: színtelen, keserűmandula szagú, vízzel nem elegyedő folyadék. Színezék- és illatszeripari alapanyag.

Aceton: oldószerként és vegyipari alapanyagként használják.

11.12. Karbonsavak

11.12.1. Karbonsavak: karboxilcsoportot ($-COOH$) tartalmazó szerves vegyületek

Általános képlet: $R-COOH$.

11.12.2. Homológ sor, egyszerűbb képviselők és elnevezésük

A karboxilcsoportok számától függően ismerünk egy- és többértékű karbonsavakat. A legfontosabbnak a monokarbonsavak, dikarbonsavak és trikarbonsavak tekinthetők.

A többi vegyületcsoporthoz hasonlóan a karbonsavak is csoportosíthatóak a szénlánc alapján: vannak alifás és aromás karbonsavak. Az alifás karbonsavak lehetnek gyűrűsek és nyílt láncúak, illetve telítettek és telítetlenek.

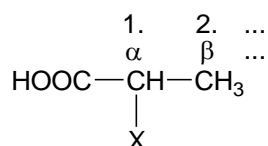
Megjegyzés: A nagy szénatomszámú, egyértékű karbonsavakat zsírsavaknak nevezik, például: $C_{15}H_{31}COOH$ palmitinsav.

Képlet	Szerkezeti képlet	Szisztematikus név	Triviális név
$HCOOH$		metánsav	hangyasav
$H_3C-COOH$		etánsav	ecetsav
H_3C-CH_2-COOH		propánsav	propionsav
$C_6H_{11}COOH$		ciklohexán-karbonsav	
$H_2C=CH-COOH$		propénsav	akrilsav
C_6H_5COOH		benzoesav	

HOOC-COOH		etándisav	oxálsav, sóskasav
HOOC-CH ₂ -COOH		propándisav	malonsav
HOOC-(CH ₂) ₂ -COOH		butándisav	borostyánkősav
HOOC-CH=CH-COOH		<i>transz</i> -buténdisav	fumársav
HOOC-CH=CH-COOH		<i>cisz</i> -buténdisav	maleinsav
C ₆ H ₅ (COOH) ₂		benzol-1,2-dikarbonsav	ftálsav
C ₆ H ₅ (COOH) ₂		benzol-1,4-dikarbonsav	tereftálsav

Szénvázban helyettesített karbonsavak

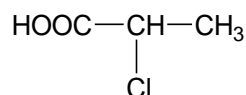
A lánc számozása az alábbi formában történik:



Mind a számozás, mind a régiesebb görög betűkkel történő jelölés a karboxilcsoporttól (annak szénatomját 0-nak véve) kezdődik.

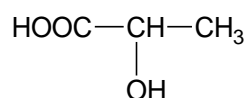
– Halogénezett karbonsavak

Például: 2-klór-propánsav (α -klór-propánsav)



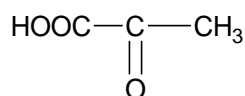
– Hidroxi-karbonsavak

Például: 2-hidroxi-propánsav, tejsav



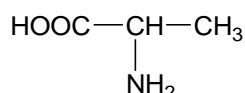
– Oxokarbonsavak

Például: 2-oxo-propánsav, piroszőlősav

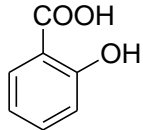


– Aminosavak

Például: 2-amino-propánsav, alanin



A legfontosabb helyettesített savak és ionjaik:

Szerkezeti képlet	Szisztematikus név	Triviális név	Anion neve
$\text{HO}-\text{CH}_2-\text{COOH}$	hidroxi-ecetsav	glikolsav	glikolát
$\begin{array}{c} \text{OH} \\ \\ \text{H}_3\text{C}-\text{CH}^*-\text{COOH} \end{array}$	2-hidroxi-propánsav	tejsav	laktát
$\begin{array}{c} \text{OH} \\ \\ \text{HOOC}-\text{CH}_2-\text{CH}^*-\text{COOH} \end{array}$	hidroxi-borostyánkősav	almasav	maloát
$\begin{array}{c} \text{OH} \\ \\ \text{HOOC}-\text{CH}^*-\text{CH}^*-\text{COOH} \\ \\ \text{OH} \end{array}$	2,3-dihidroxi-borostyánkősav	borkősav	tartarát
$\begin{array}{c} \text{HO} \quad \text{COOH} \\ \diagdown \quad / \\ \text{C} \\ / \quad \diagdown \\ \text{HOOC}-\text{CH}_2 \quad \text{CH}_2-\text{COOH} \end{array}$	2-hidroxi-propán-1,2,3-trikarbonsav	citromsav	citrát
$\begin{array}{c} \text{OHC}-\text{COOH} \\ \\ \text{H}_3\text{C}-\text{C}-\text{COOH} \\ \\ \text{O} \end{array}$	oxálaldehidsav	glioxálsav	glioxalát
$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C}-\text{C}-\text{COOH} \\ \\ \text{O} \end{array}$	2-oxo-propánsav	piroszőlősav	piruvát
$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C}-\text{C}-\text{CH}_2-\text{COOH} \\ \\ \text{O} \end{array}$	3-oxo-butánsav	acetecetsav	acetoacetát
	2-hidroxi-benzoésav	szalicilsav	szalicilát

11.12.3. Előállítás

a) Oxidációval

– **Szénhidrogénből:** például nagy szénatomszámú alkánokból erélyes oxidációval zsírsavak elegye keletkezik.

– **Alkoholokból:**

– primer alkohol → aldehid → karbonsav

– szekunder alkohol → keton

– tercier alkohol → láncszakadással karbonsavak elegye

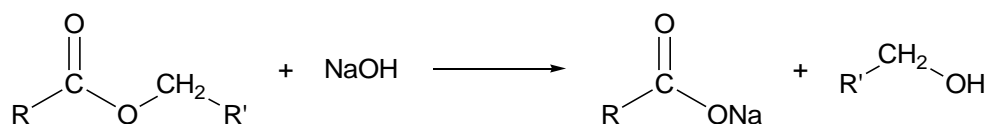
– **Oxovegyületekből:**

– aldehid → karbonsav

– keton → láncszakadással karbonsavak elegye

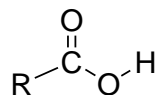
b) Hidrolízissel

Savszármazékokból (észterből, savamidből, stb.) hidrolízissel karbonsav keletkezik.
Az észterek hidrolízise:



A kapott sóból a karbonsav erős savval történő protonálás útján felszabadítható.

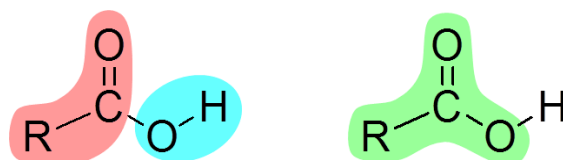
11.12.4. Szerkezet



Az egyszerű karbonsavak esetén R szénhidrogéncsoport, vagy a metánsavnál hidrogénatom. A karboxilcsoport (–COOH) egy olyan összetett funkciós csoport, amelyben a szénatomhoz két oxigénatom kapcsolódik, az egyik mint az oxocsoport, a másik mint hidroxilcsoport oxigénje.

Acilcsoport: a karbonsavból a hidroxilcsoport (–OH) eltávolításával keletkező csoport. Például az ecetsavból (H₃C–COOH) keletkező acilcsoport az acetilcsoport (H₃C–CO–).

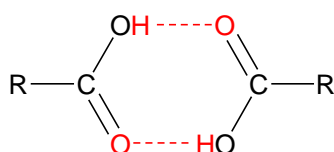
Karboxilátion: a karboxilcsoport deprotonálódásával keletkező savmaradékion, Például az ecetsavból (H₃C–COOH) keletkező az anion az acetátion (H₃C–COO[–]).



	Karbonsav	Acilcsoport	Savmaradékion
HCOOH	hangyasav, metánsav	formil, metanoil	formiát, metanoát
CH ₃ COOH	ecetsav, etánsav	acetyl, etanoil	acetát, etanoát
CH ₃ CH ₂ COOH	propionsav, propánsav	propionil	propionát
CH ₃ (CH ₂) ₂ COOH	vajsav, butánsav	butiril	butirát
CH ₃ (CH ₂) ₃ COOH	valeriánsav, pentánsav	valeril	valerát
C ₁₅ H ₃₁ COOH	palmitinsav, hexadekánsav	palmitoil	palmiát
C ₁₇ H ₃₅ COOH	sztearinsav, oktadekánsav	sztearoil	sztearát
C ₁₇ H ₃₃ COOH	olajsav, oktadec-9-énsav	oleil	oleát
(COOH) ₂	oxálsav, etándisav	oxalil	oxalát
HOOC-CH ₂ -COOH	malonsav, propándisav	malonil	malonát
HOOC-(CH ₂) ₂ -COOH	borostyánkősav, butándisav	szukcinil	tartarát
HOOC-(CH ₂) ₄ -COOH	adipinsav, hexándisav	adipoil	adipát
C ₆ H ₅ COOH	benzoesav	benzoil	benzoát

A karbonsav szénhidrogéncsoportja (R) apoláris, ezért hidrofób (víztaszító), karboxilcsoportja (COOH) erősen poláris, hidrofil (vízkedvelő).

A karboxilcsoportok között két erős hidrogénkötés jöhet létre, ezáltal a kis szénatomszámú monokarbonsavak dimerek formájában fordulnak elő még gázfázisban is:



11.12.5. Fizikai tulajdonságok

A molekulák közötti erős hidrogénkötések miatt magas az olvadáspont, a forráspont (a többi szénhidrogénnel és oxigéntartalmú vegyülettel összehasonlítva).

A szénatomszám növekedésével nő a telített monokarbonsavak olvadáspontja és forráspontja.

A kisebb szénatomszámú (C₁-C₈) telített monokarbonsavak színtelen, szúrós szagú, maró, vízzel elegyedő (a vízzel hidrogénkötést tudnak kialakítani) folyadékok 25 °C hőmérsékleten és normál légköri nyomáson. Az első négy homológ vízzel korlátlanul elegyednek. (A tiszta ecetsavat azért hívják jégecetnek, mert magas az olvadáspontja: 16,7 °C.)

C₉-től szagtalan, szilárd halmazállapotúak (25 °C hőmérsékleten és normál légköri nyomáson). Mivel a poláris karboxilcsoport hatása egyre kisebb mértékben érvényesül, vízben gyakorlatilag nem oldódnak.

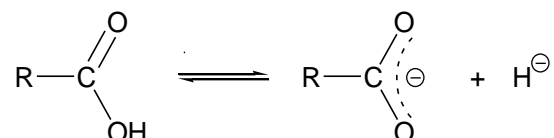
Már legkisebb dikarbonsav (oxálsav) 25 °C hőmérsékleten és normál légköri nyomáson szilárd, vízben jól oldódó anyag.

Az aromás karbonsavak vízben rosszul oldódó, színtelen szilárd vegyületek.

11.12.6. Kémiai tulajdonságok és reaktivitás

a) Savasság

A karboxilcsoportról könnyen leszakítható hidrogénion miatt vizes oldataik savas kémhatásúak.



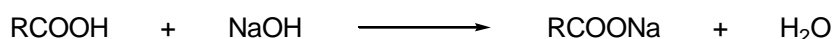
A karbonsavak gyengébb savak az ásványi savaknál, egyik sem tekinthető igazán erős savnak. A szénatomszám növekedésével a saverősség csökken, a legerősebb telített monokarbonsav a hangyasav.

Megjegyzés: a karbonsavak azért jóval erősebbek az alkoholoknál, mert a negatív töltés delokalizálódni tud a karboxilát anion szén- és oxigénatomjain. Ezzel ellentétben az alkoholát anionban nincs lehetőség delokalizált szerkezet kialakulására. A karbonsavak erőssége befolyásolható az oldallánc módosításával. Például a halogénezett oldalláncú karbonsavak erősebb savak, mint alifás társaik.

Saverősség növekedése:

hangyasav > ecetsav > propionsav,
triklór-ecetsav > diklór-ecetsav > monoklór-ecetsav,
klór-ecetsav > bróm-ecetsav > jód-ecetsav.

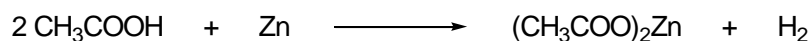
A karbonsavak lúgokkal közömbösíthetőek, ilyenkor a fém sója képződik:



A karbonsavak rendszerint erősebb savak a szénsavnál, ezért a nátrium-hidrogén-karbonát (NaHCO_3) és nátrium-karbonát (Na_2CO_3) is reagál a karbonsavakkal, só képződik, és szén-dioxid (CO_2) szabadul fel:

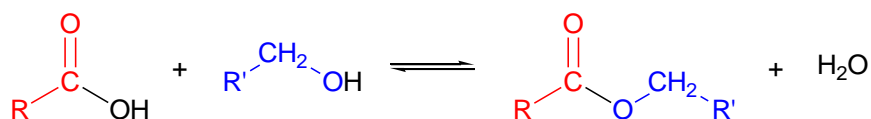
Egy alkalmazás: a borkősav vagy a citromsav vizes oldatából a nátrium-hidrogén-karbonát szén-dioxid-gázt fejleszt. Ezen alapul a pezsgőtabletták működése.

A negatív standard potenciálú fémekkel hidrogénfejlődés közben reagálnak a karbonsavak, például:



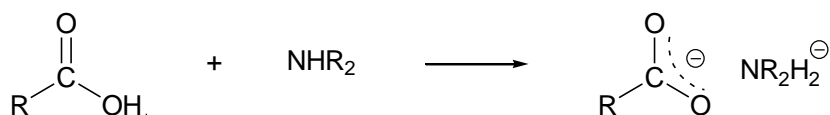
b) Észterképzés

A karbonsavak alkoholokkal egyensúlyi reakciókban észtert képeznek:

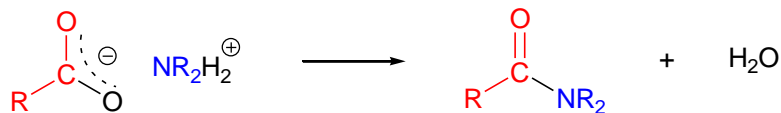


c) Amidképzés

A karbonsavak ammóniával és aminokkal első lépésben sót képeznek:

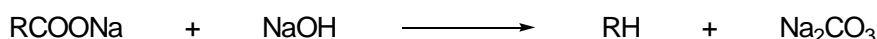


Az ammónium-karboxilátot hevítve vízkilépéssel amid keletkezik:



d) Dekarboxileződés

A karbonsavak nátriumsóját szilárd nátrium-hidroxiddal hevítve eggyel rövidebb szénláncú szénhidrogén keletkezik:



11.12.7. Legfontosabb képviselők és felhasználásuk

Hangyasav: a hangya-, a csalán-, a méh-, a szúnyogcsípés hatóanyaga, formilezőszer (–CHO csoport bevitele).

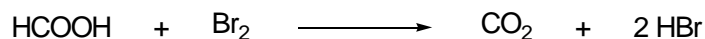
Előállítása: nátrium-hidroxid karbonilezésével:



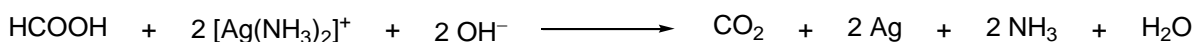
Speciális reakciói:

Szén-dioxidá oxidálható, ezért reagál a brómos vízzel és adja az ezüstitűkőpróbát is.

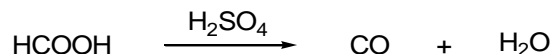
– Reakció brómos vízzel:



– Ezüstitűkőpróba:



– Vízfelvonó szerrel (például tömény kénsavval) szén-monoxiddá alakítható (a hangyasav pszeudoanhidridje a szén-monoxid):



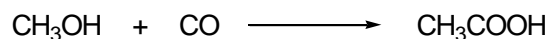
Ecetsav: a köznap életben tartósítószerként használják. Ipari alapanyag és oldószerként is használják.

Előállítása:

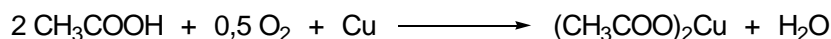
Fermentációval: cukorból mikroorganizmusok (ecetsav-baktériumok) segítségével történő biológiai erjesztéssel. Glükózból etil-alkoholon keresztül keletkezik az ecetsav. Biológiai erjesztéssel maximum 15%-os ecetsavat lehet előállítani.

Szintetikus úton:

- kőolajból benzint állítanak elő, majd a benzin pirolízisével etént nyernek. Az eténből etil-alkoholt, majd ebből oxidációval ecetsavat állítanak elő.
- metanol karbonilezésével: átmenetifém-komplexek jelenlétében, megfelelő körülmények között az alábbi reakció megy végbe:



Vigyázat! A rézedényeket levegő jelenlétében kismértékben oldja, mérgező Cu^{2+} -só keletkezik:



Benzoésav és sója, a **nátrium-benzoát**: tartósítószer (E211).

Oxálsav: az analitikai kémiában használják.

Szappanok: nagy szénatomszámú karbonsavak nátrium- és káliumsói.

A nátriumsók a keményszappanok, a káliumsók a kenőszappanok.

A sók anionjai (például a sztearát-anion $\text{C}_{17}\text{H}_{35}\text{COO}^-$) amfipatikus vagy amfifil tulajdonságúak:

- az apoláris szénhidrogénlánc hidrofób (víztaszító),
- a karboxilcsoport hidrofil (vízkedvelő).

Néhány kolloidkémiai alapfogalom:

Kolloid rendszer: a részecskék átmérője 1 és 500 nm közötti ($1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$). Ez a mérettartomány meghaladja a kisméretű molekulák és ionok átlagos méretét, ezért a kolloid rendszerek speciális tulajdonságokkal rendelkeznek.

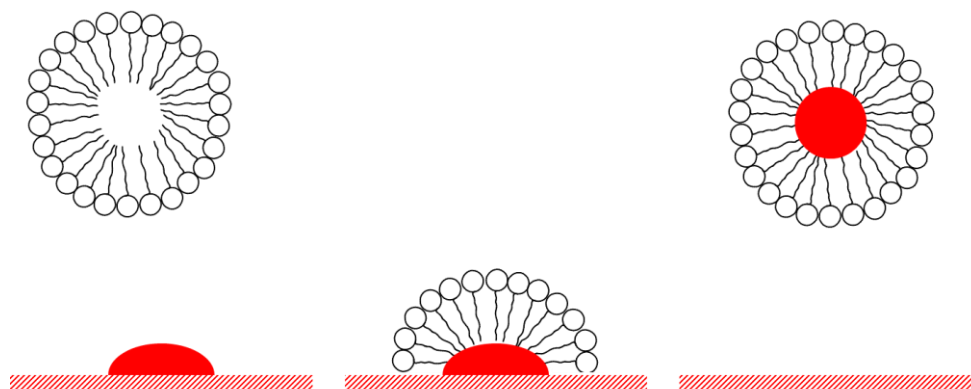
Hab: folyadékokban elosztatott gázbuborékok. Vannak szilárd habok is, ezek szilárd anyagban elosztatott gázbuborékok.

Micella: amfifil molekulák gömbszerű csoportosulása.

A szappanok vízben kolloidoldatot képeznek. Az anionok a víz felületén egy hártát alkotnak, ezzel csökkentik a víz felületi feszültségét, és fokozzák a habzást. A vizes oldat belsejében a szappanból micellák képződnek.

Mosás művelete:

A szappan a hidrofób részével az apoláris olajos szennyezés felé mutat, a dörzsölés hatására a micella hidrofób belsejébe kerülnek a szennyeződések, és ezeket a szappan lemosásával eltávolíthatjuk.



11.12.7.1. ábra: A mosás művelete

11.13. Észterek

11.13.1. Észterek: egy sav hidroxilcsoportját alkoxi- esetleg ariloxicsoport helyettesíti (másképp: az acilcsoporthoz oxigénatomon keresztül alkil- vagy arilcsoport kapcsolódik).

Általános képlet: $R-COO-R'$.

a) Gyümölcsészterek

Kis szénatomszámú, egyértékű alkoholok és kis szénatomszámú, egyértékű karbonsavak észterei. Kellemes ízű és illatú folyadékok (25 °C hőmérsékleten és normál légköri nyomáson). Vízben csak kismértékben oldódnak, apoláris oldószerek jól oldják őket.

Például:

etil-formiát ($HCOO-CH_2-CH_3$): a málna, a ribizli egyik íz- és illatanyaga.

etil-propionát ($CH_3-CH_2-COO-CH_2-CH_3$): a rumaroma.

butil-acetát ($CH_3-COO-(CH_2)_4-CH_3$): a császárkörte, a banán és az ananász egyik íz- és illatanyaga.

b) Viaszok

Nagy szénatomszámú (C_{30-32}) egyértékű alkoholok és nagy szénatomszámú (C_{16-18}) egyértékű karbonsavak észterei, vízben nem oldódó szilárd anyagok.

c) Gliceridek: zsírok és növényi olajok

– **Zsír:** glicerinnel és nagy szénatomszámú, egyértékű, telített karbonsavak észterei, apolárisak, vízben nem oldódnak, szobahőmérsékleten szilárd anyagok, például zsírmolekula a glicerín-tripalmitát vagy a glicerín-palmitát-disztearát. Az olvadáspont alacsony a moláris tömeghez képest, mivel nem tud kialakulni hidrogénkötés a molekulák között.

– **Növényi olaj:** glicerinnel és nagy szénatomszámú, egyértékű, telítetlen karbonsavak észterei. Apolárisak, vízben nem oldódó, szobahőmérsékleten folyékony anyagok.

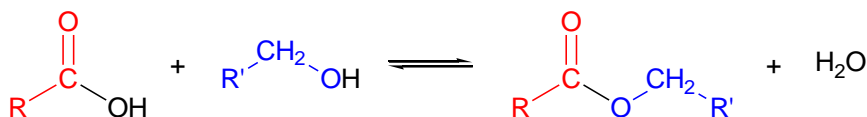
Margarinyártás:

A telítetlen kötést tartalmazó növényi olajokat (folyékonyak szobahőmérsékleten és légköri nyomáson) katalizátor jelenlétében hidrogénnel telítik, és így kapják a szobahőmérsékleten szilárd halmazállapotú margarint (a zsírt).

11.13.2. Előállítás

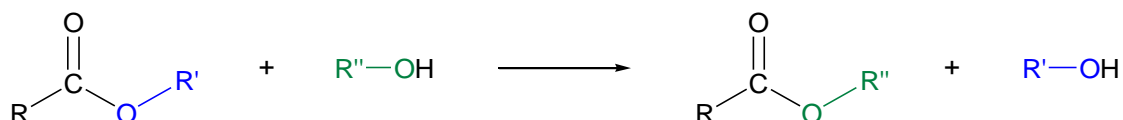
a) Közvetlen (direkt) észterezéssel

A karbonsavak alkoholokkal egyensúlyi reakciókban észtert képeznek:



b) Átészterezéssel

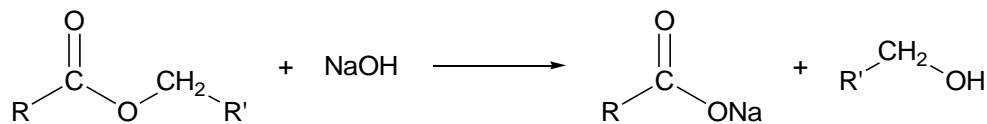
Katalizátor jelenlétében alkoholokat és észtereket reagáltatva egymással újabb észtereket lehet előállítani:



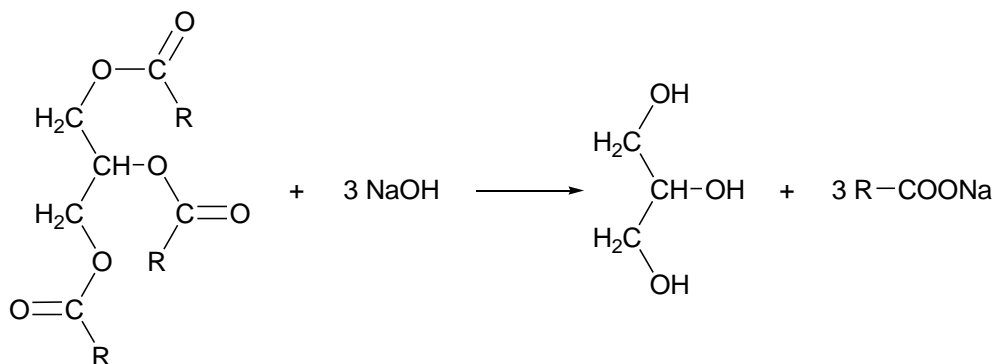
Biodízel előállítása: növényi olajokat (például repceolajat), metil-alkohollal átészterezik. A kapott biodízel a nagy szénatomszámú karbonsavak metil-észtere.

11.13.3. Kémiai tulajdonságok és reaktivitás

Elszappanosítás, lúgos hidrolízis



A szappanfőzés általános egyenlete:



Egyéb savszármazékok

A karbonsavban található karboxilcsoport (–COOH) hidroxilcsoportját (–OH) vagy a hidroxilcsoportját (–OH) és oxocsoportját (=O) más atom vagy atomcsoport helyettesíti.

Az észterek mellett egyéb savszármazékokat is ismerünk:

– Savanhidrid: például $\text{CH}_3\text{-CO-O-CO-CH}_3$ ecetsavanhidrid. Két karbonsavból vízkilépéssel levezethető vegyületek.

– Karbonsavhalogenid: például $\text{CH}_3\text{-COCl}$ acetyl-klorid. A karbonsav hidroxilcsoportját halogénatom helyettesíti.

– Savamid: például $\text{CH}_3\text{-CO-NH}_2$ acetamid. A karbonsav hidroxilcsoportját aminocsoport helyettesíti.

– Savnitril: például $\text{CH}_3\text{-C}\equiv\text{N}$ acetonitril. Az amidokból vízkilépéssel levezethető vegyületek.

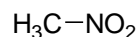
A savamidokkal részletesebben is foglalkozunk, ám a többi savszármazékkal csak egyetemi tanulmányaink során ismerkedünk meg részletesebben.

11.14. Nitrovegyületek

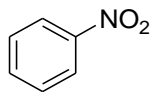
11.14.1. Nitrovegyületek: a szerves vegyületben nitrocsoport (–NO₂) található.

Általános képlet: R-NO_2 .

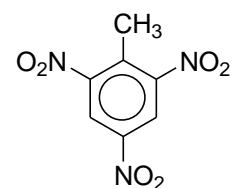
11.14.2. Egyszerűbb képviselők és elnevezésük



nitro-metán



nitro-benzol

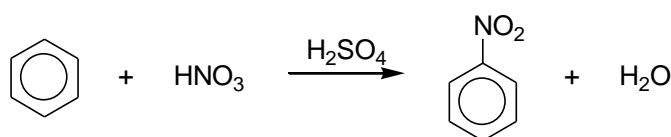


2,4,6-trinitro-toluol

11.14.3. Előállítás

Nitrálással

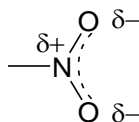
Aromás vegyületekbe a nitrocsoport bevitele **nitrálóeleggyel** (tömény salétromsav és tömény kénsav elegyével) történik (szubsztitúció):



Gázfázisban az alkánok is nitrálhatók salétromsavval, ilyenkor rendszerint többféle termék is keletkezik.

11.14.4. Szerkezet

A nitrocsoportban a nitrogénatom parciálisan pozitív, míg az oxigénatomok parciálisan negatív töltésűek, a π -elektronok delokalizálódnak az O–N–O sík felett és alatt. Ezt az alábbi jelölésmóddal szokás érzékeltetni:



A poláris nitrocsoport következtében a nitrovegyületek rendszerint dipólusmolekulák, így közöttük a viszonylag erős dipólus-dipólus kölcsönhatás jöhet létre.

11.14.5. Fizikai tulajdonságok

A dipólus-dipólus kötések következtében a nitrovegyületek olvadás- és forráspontja magas, a legkisebb homológ, a nitrometán is folyadék szobahőmérsékleten és normál légköri nyomáson. A nitrobenzol keserű mandula szagú magas forráspontú, sárga színű folyadék

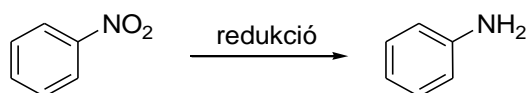
11.14.6. Kémiai tulajdonságok és reaktivitás

Redukció

A nitrovegyületek különböző nitrogénvegyületekké redukálhatóak, ezek közül a legfontosabbak az aminok. A redukció történhet:

- katalizátor mellett molekuláris hidrogénnel,
- a reakcióterben előállított atomos (nascensz) hidrogénnel.

Például a nitrobenzol redukciója anilinné:



11.14.7. Legfontosabb képviselők

Nitrometán: oldószer.

Nitrobenzol: az anilinyártás alapanyaga, oldószer.

2,4,6-trinitro-toluol (trotil, TNT): robbanószer.

11.15. Aminok

11.15.1. Aminok: olyan szerves vegyületek, amelyekben az ammónia egy vagy több hidrogénjét szénhidrogéncsoport helyettesíti.

Általános képlet: $\text{NRR}'\text{R}''$.

11.15.2. Homológ sor, egyszerűbb képviselők és elnevezésük

Képlet	Szerkezeti képlet	Szisztematikus név	Triviális név
$\text{H}_3\text{C}-\text{NH}_2$	$\text{H}_3\text{C}-\text{OH}$	metánamin	metil-amin
$(\text{H}_3\text{C})_2\text{NH}$			dimetil-amin
$(\text{H}_3\text{C})_3\text{N}$			trimetil-amin
$(\text{H}_3\text{C})_4\text{N}^+$			tetrametil-ammónium-kation
$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{NH}_2$		etánamin	etil-amin
$\text{C}_6\text{H}_{11}\text{NH}_2$		ciklohexánamin	ciklohexil-amin
$\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{NH}_2$		fenil-metán-amin	benzil-amin
$\text{H}_2\text{N}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{NH}_2$		etán-1,2-diamin	etilén-diamin
$\text{C}_6\text{H}_5-\text{NH}_2$		anilin	
$(\text{C}_6\text{H}_5)_2\text{NH}$		difenil-amin	
$\text{C}_6\text{H}_5-\text{N}(\text{CH}_3)_2$		<i>N,N</i> -dimetil-anilin	

Az aminok rendősége: a nitrogénatomhoz kapcsolódó szénatomok száma alapján ismerünk:

- elsőrendű: metil-amin, anilin stb.
 - másodrendű: difenil-amin, etil-metil-amin stb.
 - harmadrendű: trietil-amin, *N,N*-dimetil-anilin stb.
 - negyedrendű: tetrametil-ammónium-klorid stb.
- aminokat.

11.15.3. Előállítás

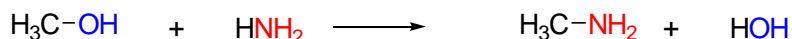
a) Szubsztitúciós reakciókkal

Halogéntartalmú szénhidrogénekből:



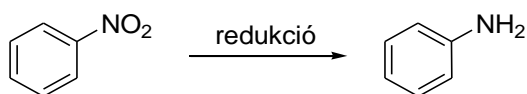
Ezzel a módszerrel nemcsak primer, hanem szekunder és tercier aminok, sőt kvaterner ammónium-vegyületek is keletkezhetnek. A reakcióban keletkező termékelegy összetétele az ammónia és a halogenid mólarányától függ.

Alkoholokból:



b) Redukcióval

Például a nitrobenzol redukciója anilinné:

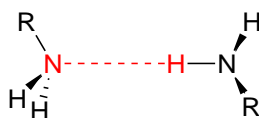


11.15.4. Szerkezet

Az aminok szerkezete – az ammóniához hasonlóan – piramisos.



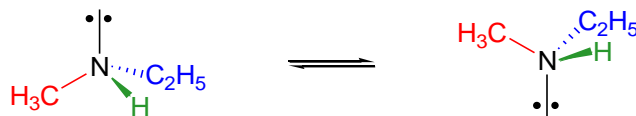
Első- és másodrendű aminok esetén a nitrogénatomhoz kapcsolódik hidrogénatom is. Mivel a nitrogén-hidrogén kötés poláris, és a nitrogénatomnak van magános elektronpárja, ki tud alakulni hidrogénkötés a molekulák között.



A tercier aminok molekulái között nem tud kialakulni hidrogénkötés.

A $\text{H} \cdots \text{N}$ hidrogénkötés gyengébb, mint a $\text{H} \cdots \text{O}$ hidrogénkötés, ezért az aminok olvadáspontja és forráspontja alacsonyabb, mint a megfelelő szénatomszámú alkoholé.

Megjegyzés: felmerülhet a kérdés, hogy királisak-e azok az aminok, melyek három különböző helyettesítővel rendelkeznek. Elméletileg lehetőség van királis konfigurációk kialakulására, ám a nitrogénatom már szobahőmérsékleten képe a konfigurációjának változtatására:



11.15.5. Fizikai tulajdonságok

– A metil-aminok és az etil-amin az ammóniára emlékeztető szagú gázok, a többi alkil-amin undorító szagú folyadék. A C₁₀-nél nagyobb szénatomszámú aminok pedig szilárd halmazállapotúak és szagtalanok.

– Különböző rendűségű izomer aminok közül a magasabb rendű az alacsonyabb forráspontú.

– Az első- és másodrendű aminok között hidrogénkötések alakulhatnak ki (a terciér aminok nitrogénatomjához nem kapcsolódik hidrogén!) Harmadrendű aminok esetén csak gyengébb dipólus-dipólus kölcsönhatás jöhet létre.

– Az aminok forráspontja rendszerint alacsonyabb az azonos moláris tömegű alkoholokénál, mert kevésbé erős a hidrogénkötésük. (A nitrogén-hidrogén kötés kevésbé poláris, mint az oxigén-hidrogén kötés, mivel a nitrogén elektronegativitása kisebb, mint az oxigéné.)

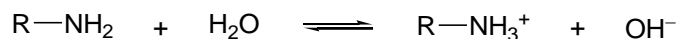
– A kis szénatomszámú alkil-aminok jól oldódnak vízben.

– Az aromás aminok, például az anilin: színtelen, jellegzetes szagú, apoláris folyadék, levegőn oxidálódik és sötétbarnára változik a színe.

11.15.6. Kémiai tulajdonságok és reaktivitás

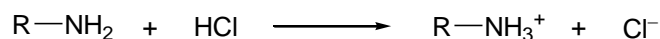
a) Bázicitás

Az aminok gyenge bázisok, a nitrogénatom magános elektronpárja – az ammóniához hasonlóan – protonálható. Az alkil-aminok az alábbi egyenlet szerint reagálnak vízzel, így vizes oldatuk lúgos kémhatású.



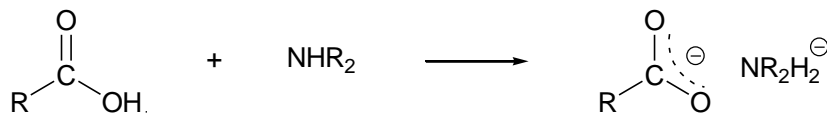
Az anilin és a hozzá hasonló aromás aminok az ammóniánál sokkal gyengébb bázisok. Ennek oka, hogy az aminocsoport a fenilgyűrű delokalizált π -elektronrendszerével kölcsönhatásba tud lépni, ezért sokkal kisebb a protonmegkötő-képessége.

Az aminok savakkal reagálnak, és alkil-, illetve aril-ammónium-sókká alakulnak.

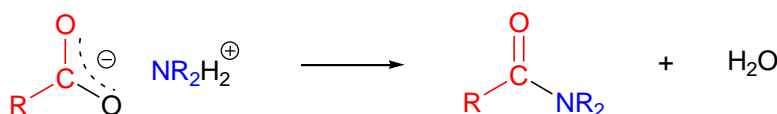


b) Amidképzés

A karbonsavak ammóniával és aminokkal első lépésben sókat képeznek:



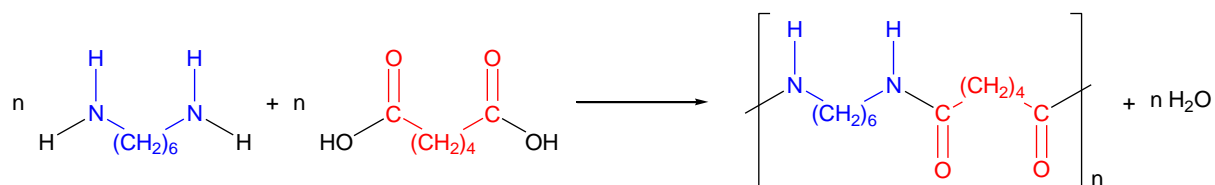
Az ammónium-karboxilátot hevítve vízkilépéssel amid keletkezik:



11.15.7. Legfontosabb képviselők

Trietil-amin: szerves reakciókban bázisként alkalmazzák.

Hexametilén-diamin: a nejlón 66 nevű polimer alapanyaga, mely egy poliamid. A nejlón előállítása polikondenzációval történik adipinsavból (1,6-hexándisav) és hexametilén-diaminból (hexán-1,6-diamin):



Anilin: színezékeket állítanak elő belőle, például indigó, orange II, vajsárga színezék.

11.16. Savamidok

11.16.1. Savamidok: a karbonsav hidroxilcsoportját aminocsoport ($-\text{NH}_2$) helyettesíti (az acilcsoporthoz aminocsoport kapcsolódik).

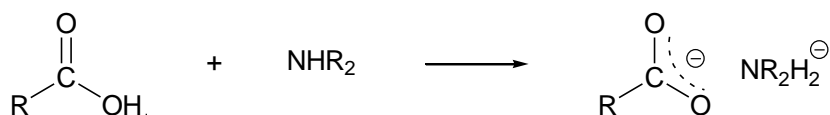
Általános képlet: $\text{R}-\text{CO}-\text{NH}_2$.

11.16.2. Homológ sor, egyszerűbb képviselők és elnevezésük

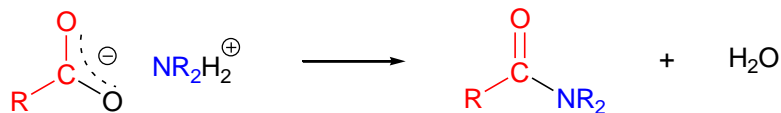
Képlet	Szerkezeti képlet	Szisztematikus név	Triviális név
$\text{HCO}-\text{NH}_2$		metánamid	formamid
$\text{H}_3\text{C}-\text{CO}-\text{NH}_2$		etánamid	acetamid
$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{CO}-\text{NH}_2$		propánamid	propionamid
$\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{CO}-\text{NH}_2$		propénamid	akrilamid
$\text{C}_6\text{H}_5\text{CO}-\text{NH}_2$		benzamid	

11.16.3. Előállítás

A karbonsavak ammóniával és aminokkal első lépésben sók képeznek:

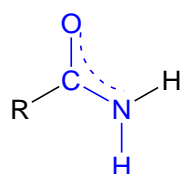


Az ammónium-karboxilátot hevítve, vízkilépéssel amid keletkezik:

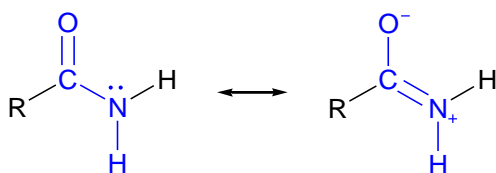


11.16.4. Szerkezet

Az amidmolekulákban a C=O és N-H csoportok egy síkban találhatóak, mivel a nitrogénatom magános elektronpárja és a karbonilcsoport π -kötésének részvételével delokalizált elektronrendszer jön létre:

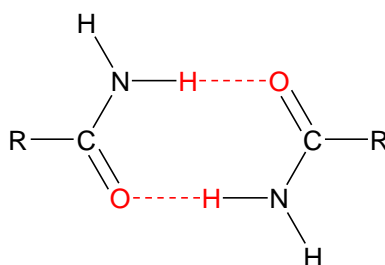


Ez az alábbi jelöléssel szokták érzékeltetni:



A delokalizációnak fontos következménye van: a C-N kötés tengelye körüli elfordulás gátolt. Gondoljunk csak bele, a szén-szén kettős kötés rotációja is gátolt (például az etán esetén). Az amidkötés esetén a C-N kötés „kettőskötés-jellege” megnövekszik a delokalizáció következtében, ezért nem tud elfordulni a négy ligandum a C-N tengely körül. Az amidcsoport szerkezete gyakorlatilag planáris.

Amennyiben a nitrogénatomon legalább egy hidrogénatom található, az amidmolekulák között hidrogénkötés alakulhat ki.



11.16.5. Fizikai tulajdonságok

Az amidok olvadáspontja, forráspontja a hidrogénkötés következtében rendszerint magas. A formamid folyadék, a többi szilárd halmazállapotú, 25 °C hőmérsékleten és normál légköri nyomáson. A rövidebb szénatomszámú amidok vízben jól oldódnak.

11.16.6. Kémiai tulajdonságok és reaktivitás

Sav-bázis tulajdonságok

Az amidok nitrogénje nem túl bázisos kémhatású – ellentétben az aminokkal –, mivel a nitrogénatom magános elektronpárja részt vesz a delokalizációban, így kevésbé képes protont megkötni. Vizes oldatuk kémhatása gyakorlatilag semleges.

Megjegyzés: az amidok nitrogénjéhez kapcsolódó hidrogént igen erős bázisokkal protonként eltávolíthatjuk. Vizes oldatban azonban az amidok nem mutatnak savas kémhatást.

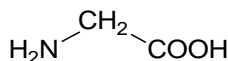
Hidrolízis

Az amidok igen ellenállóak hidrolízissel szemben, csak erélyes körülmények között (például erős savval főzve) alakíthatóak a megfelelő karbonsavvá.

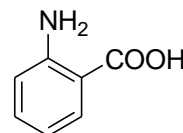
11.17. Aminosavak

11.17.1. Aminosavak: olyan karbonsavak, melyek szénvázához aminocsoport ($-NH_2$) kapcsolódik.

Ismerünk alifás és aromás aminosavakat is. Az alifásra egy példa az aminosav vagy glicin, az aromásra az antranilsav vagy *orto*-amino-benzoészav.

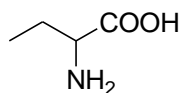


glicin

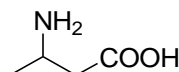
*orto*-amino-benzoészav

Az aminosavakat az aminocsoport és a karboxilcsoport egymáshoz viszonyított helyzete alapján csoportosíthatjuk:

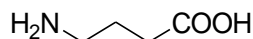
- α -aminosavak: például a 2-amino-vajsav:



- β -aminosavak: például a 3-amino-vajsav:



- γ -aminosavak: például a 4-amino-vajsav:



A sort hasonlóan folytathatjuk a görög ábécének megfelelően.

Az aminocsoport helyzetétől függően rendkívül sokféle aminosavat ismerünk, ám a továbbiakban csak a legfontosabb természetes aminosavakkal foglalkozunk.

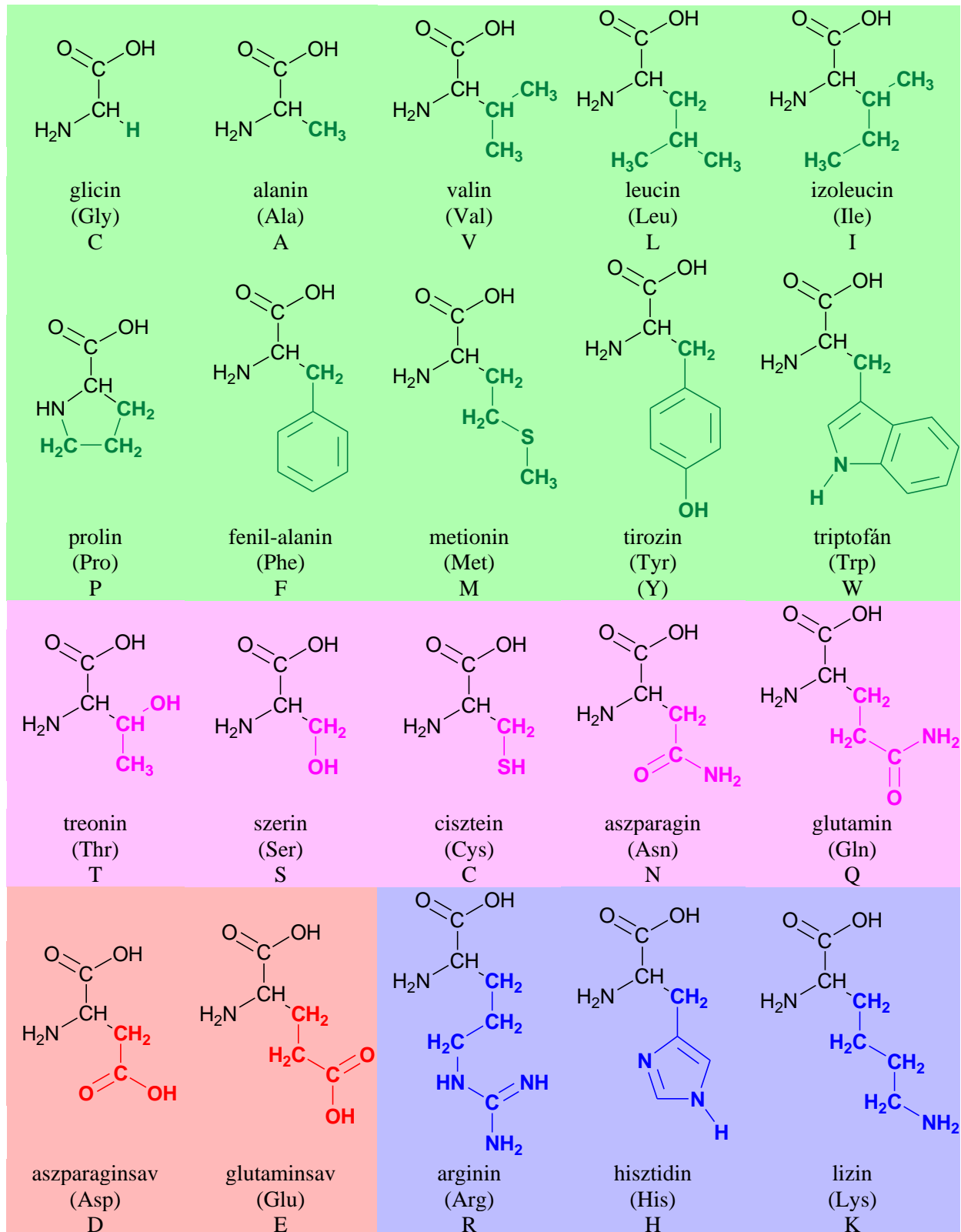
11.17.2. A legfontosabb természetes aminosavak

A természetes aminosavak közül kiemelkedően fontosak a fehérjeépítő aminosavak, melyekből 22-t ismerünk (ezeket szokás standard aminosavaknak nevezni). A 22 aminosav közül 20-at tartalmaz az univerzális genetikai kód (lásd később), a maradék kettő (szeleno-cisztein, pirrolizin, az utóbbi csak alacsonyabb rendű élőlényekben) egyéb úton kerül be a fehérjébe.

A fehérjeépítő aminosavakat (melyek α -aminosavak) az oldalláncuk szerint szokás csoportosítani:

- apoláris oldalláncúak,
- poláris, de savasan vagy bázikusan nem disszociáló oldalláncúak,

- savasan vagy bázikusan disszociáló oldalláncú (mint később látjuk, ezek a fiziológiai pH-n – mely 7,40 – ionizált formában vannak jelen):
 - o savas oldalláncú,
 - o bázisos oldalláncú.



A következő animáción a leggyakoribb aminosavak térszerkezetét láthatjuk:



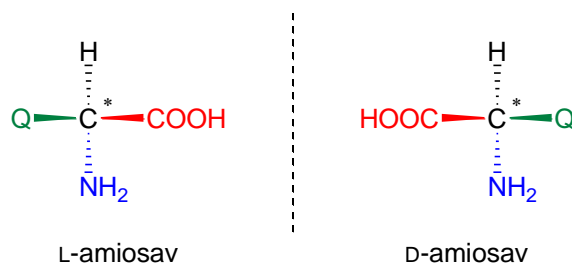
11.17.2.1. animáció: Az aminosavak térszerkezete

11.17.3. Előállítás

Az aminosavakat mesterséges úton bonyolult, többlépéses szintézisekkel lehet előállítani, az élő szervezetekben pedig enzimkatalizált reakciókban keletkeznek aminosavak. Aminosavak keverékének előállítása történhet polipeptidek hidrolízisével, ilyenkor a keletkezett aminosavelegy komponenseit fizikai és kémiai módszerekkel lehet szétválasztani.

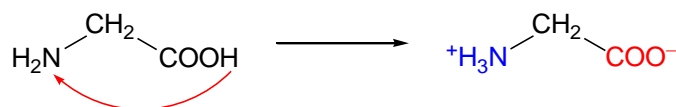
11.17.4. Szerkezet

Az α -aminosavak a glicin kivételével királis molekulák. Az α -szénatom konfigurációja az L- és D-aminosavak esetén:



A természetben többnyire az L-aminosavak fordulnak elő, ám D-aminosavak is ismertek.

Az aminosavakban egyaránt található savas ($-\text{COOH}$) és bázikus ($-\text{NH}_2$) csoport, melyek intramolekuláris sav-bázis reakcióban vehetnek részt:



A létrejövő ikerionos szerkezet nemcsak oldatban jöhet létre, hanem kristályos fázisban is ikerionok találhatóak a rácspontokban. A rácsot így elektrosztatikus kölcsönhatások tartják össze, mely megmutatkozik a fizikai tulajdonságokban is.

11.17.5. Fizikai tulajdonságok

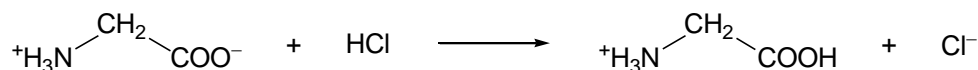
Fehér, kristályos szilárd anyagok, az olvadáspontjuk magas, mert ionrácsos vegyületek (ikerionos formában). Vízben jól oldódnak, apoláris oldószerekben gyakorlatilag oldhatatlanok.

11.17.6. Kémiai tulajdonságok és reaktivitás

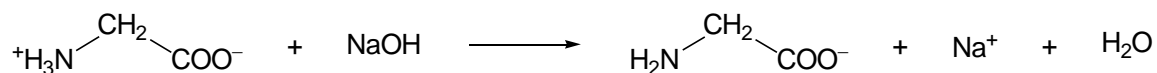
Sav-bázis tulajdonságok

Mivel az aminosavak savas ($-\text{COOH}$) és bázikus ($-\text{NH}_2$) csoportot is tartalmaznak, amfoter vegyületek, savakkal és lúgokkal is reagálnak.

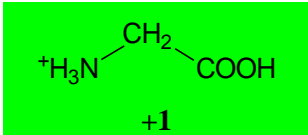
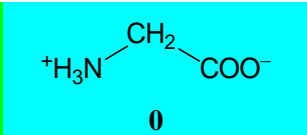
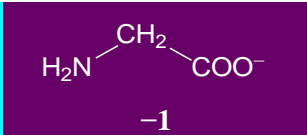
Az ikerionos szerkezetű glicin erősebb savak hatására protont vesz fel, kationná alakul:



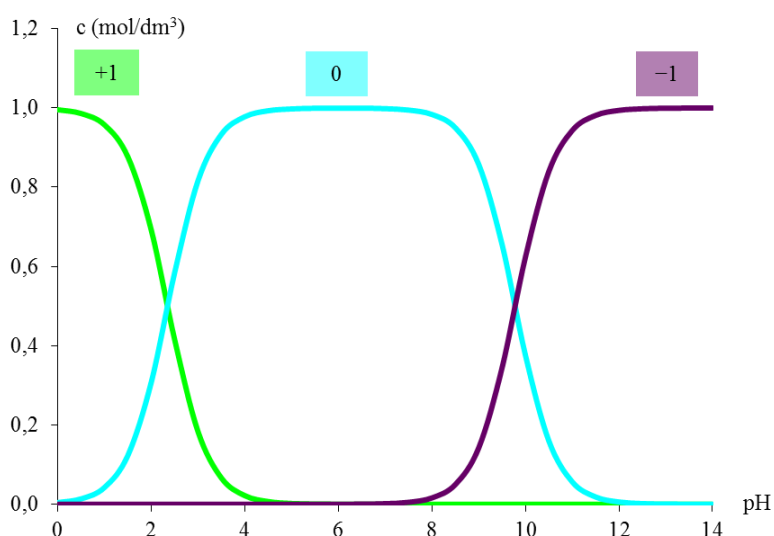
Lúgos oldatban a glicin protont ad le, anionná alakul:



Mivel a karboxilcsoport gyenge savként, az aminosocsoport pedig gyenge bázisként viselkedik, az oldat pH-jának változtatásával változik a különböző mértékben protonált formák aránya. Például a glicin esetén:

Forma			
Töltés	+1	0	-1

A különböző protonáltsági fokú részecskék megoszlása a pH függvényében:



11.17.6.1. ábra: Aminosavformák megoszlása a pH függvényében

Értelemszerűen alacsony pH-értékeknél a karboxilcsoport nem disszociál jelentős mértékben, és az aminosocsoport gyakorlatilag teljesen protonálódik. A pH-t növelve a karboxilcsoport deprotonálódik, és kialakul az ikerionos szerkezet, melynek az össztöltése 0. Ez egy adott pH-értéknél maximumot ér el, majd mennyisége csökken. Ennek oka, hogy lúgosabb pH-n az aminosocsoport is deprotonálódik, és így kialakul az anion.

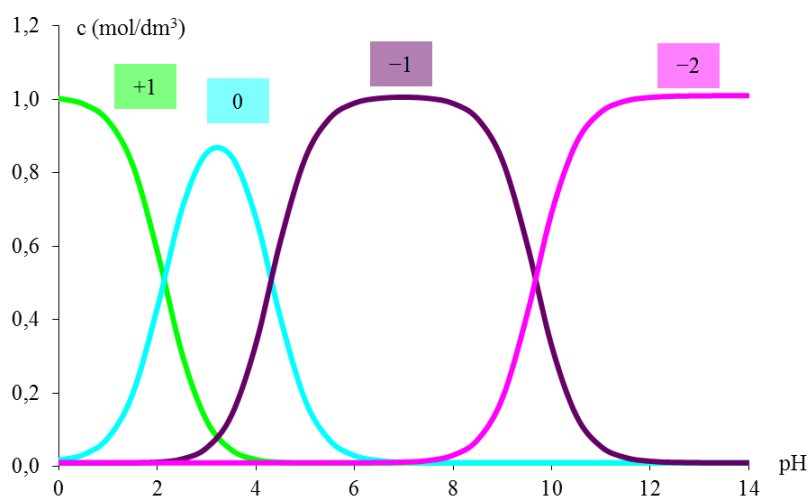
Izoelektromos pont (pI): az a pH-érték, amelynél az aminosav vizes oldatában sem az anód, sem a katód felé nem vándorol. Ez tehát azt a pH-t jelenti, mely esetén az oldatban maximális az elektromosan semleges (tehát ikerionos formában lévő, tehát 0 össztöltésű) aminosavak mennyisége. Az aminosavakra jellemző az izoelektromos pont.

Mint ahogy azt a Kémiai egyensúlyok című fejezetben láttuk, az izoelektromos pont könnyen megkapható az aminosav savi disszociációs állandóinak ismeretében. A glicin esetén

$$\text{pI} = \frac{\text{pK}_{s1} + \text{pK}_{s2}}{2} = \frac{2,35 + 9,70}{2} = 6,03$$

Kicsit bonyolultabb a helyzet, ha savasan vagy bázisosan disszociáló csoportot is tartalmaz a molekula oldallánca.

Például a glutaminsav két karboxilcsoportot és egy aminocsoportot tartalmaz, így az egyes részecskék koncentrációja a pH függvényében:



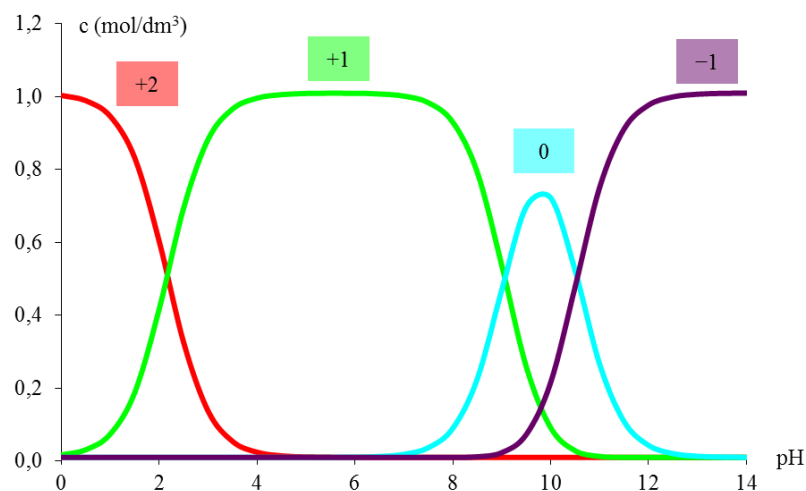
11.17.6.2. ábra: Savasan disszociáló csoportot tartalmazó aminosav formáinak megoszlása a pH függvényében

Jól megfigyelhető, hogy az ikerionos (semleges) forma koncentrációjának maximuma sokkal savasabb pH-nál van, mint a glicin esetén. Ennek oka, hogy az izoelektromos pont esetén a két karboxilcsoport közül az egyiknek protonálnak kell lennie, melyhez értelemszerűen savas közegre van szükség.

A glicinhez hasonlóan a glutaminsav izoelektromos pontja is számítható, csak itt a két karboxilcsoportoz tartozó pK_s -értéket kell alkalmazni:

$$pI = \frac{pK_{s1} + pK_{s2}}{2} = \frac{2,13 + 4,31}{2} = 3,22$$

Ezek után nem túl meglepő, hogy a bázikus oldallánccú aminosavak izoelektromos pontja lúgos pH-n található. Például a lizin esetén az egyes részecskék megoszlása:



11.17.6.3. ábra: Bázisosan disszociáló csoportot tartalmazó aminosav formáinak megoszlása a pH függvényében

A bázikus oldalláncú aminosavak izoelektromos pontja szintén könnyen számítható, ám itt a két bázikus csoport konjugált savának disszociációs állandójával kell számolnunk:

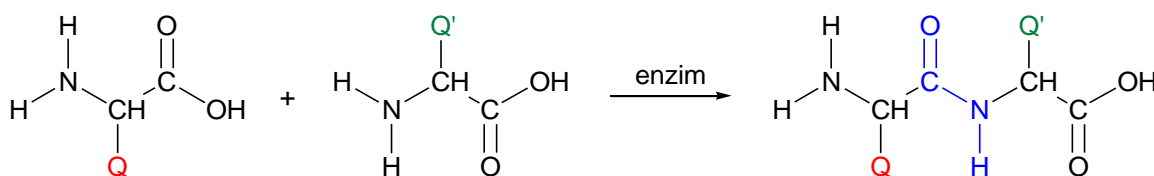
$$pI = \frac{pK_{s2} + pK_{s3}}{2} = \frac{9,06 + 10,54}{2} = 9,80$$

Az ábrák alapján az is könnyen megérthető, hogy $pH = 7,40$ (fiziológiai pH) esetén a savas oldalláncot tartalmazó aminosavak anionos, míg a bázikus oldalláncúak kationos formában fordulnak elő vizes oldatokban.

Polimerizáció

A fehérjék alapszerkezete a **polipeptidlánc**, amely az α -L-aminosavak karboxil- és aminosocsoportja között alakul ki víz kilépésével. A polipeptid láncban az egyes aminosavrészek **peptidkötéssel** kapcsolódnak össze.

A polipeptidlánc kialakulása:



11.18. Fehérjék

11.18.1. Fehérjék: elsősorban α -L-aminosavakból felépülő biopolimerek.

A fehérjék bonyolult szerkezetű, az élőszervezetekben nagy mennyiségben előforduló anyagok, jelenlétük gyakran elengedhetetlenül szükséges az életfolyamatok fenntartásához.

Proteinek: egyszerű, csak aminosavakból felépülő polipeptidek. Például a tojásfehérje egy protein.

Proteidek: aminosavakon kívül más szerkezeti elemeket is tartalmazó proteinek. Például a foszforproteidek foszforsavat is tartalmaznak, például kazein a tej egyik fehérjéje.

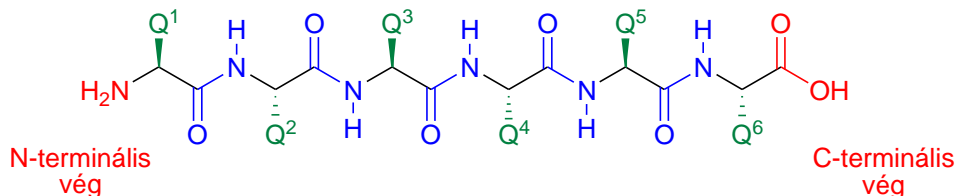
11.18.2. A fehérjék jellemzői

- A sokféle fehérjét alapvetően 20-féle α -L-aminosav építi fel.
- Akár egy-egy sejtben is ezer felett lehet az előforduló fehérjemolekulák száma.
- Egy adott fehérje mindig ugyanazokból az aminosavakból, ugyanolyan kapcsolódási sorrendben épül fel (**szekvencia:** kapcsolódási sorrend).
- A fehérjék szerkezete egyedi és a molekulát alkotó alapegységek sorrendjétől függ.
- Egy fehérjét gyakran akár 100-nál is több (sőt akár több százezer) α -L-aminosavból épülhet fel, moláris tömegük 10^4 – 10^7 g/mol.
- Az aminosavak kapcsolódási sorrendje alapján elméletileg rendkívül sok fehérjemolekula lehetséges, és ezek közül nagyon sok fehérje meg is található az élő szervezetekben.
- A lánc elágazásmentes.
- A fehérjéket alkotó aminosavak egyenkénti hidrolízisével megállapítható az adott fehérje szekvenciája. Az inzulin egy kis moláris tömegű fehérje, 51 aminosavból áll, 10 év kutatás után tudták megállapítani a kapcsolódási sorrendjét. 1958-ben Sanger kapott érte Nobel-díjat. Ma már a számítógépes kiértékeléssel lerövidült a vizsgálati idő.

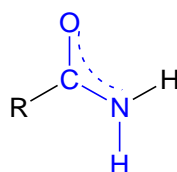
11.18.3. Szerkezet

a) A fehérjék elsődleges, primer szerkezete: az α -L-aminosavak kapcsolódási sorrendje (aminosav-szekvencia).

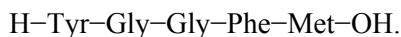
Egy általános esetben:



A kék színnel jelölt peptidkötésben a π -elektronrendszer delokalizációja miatt a $-C-N-$ kötés nem foroghat (gátolt rotáció), az amidkötés merev.



Ez az adott sorrend (szekvencia) egy adott fehérjére jellemző. Például a szintetikusán előállított enkefalin pentapeptid (mely az endorfinok közé tartozó fájdalomcsillapító anyag) szekvenciája:



Tehát az enkefalint tirozin-glicin-glicin-fenil-alanin-metionin építi fel ebben a sorrendben az N-terminálistól a C-terminális vége irányába.

b) A fehérjék másodlagos, szekunder szerkezete: a fehérjemolekulában előforduló rendezett és rendezetlen szerkezetek, melyeket hidrogénkötések tartanak össze.

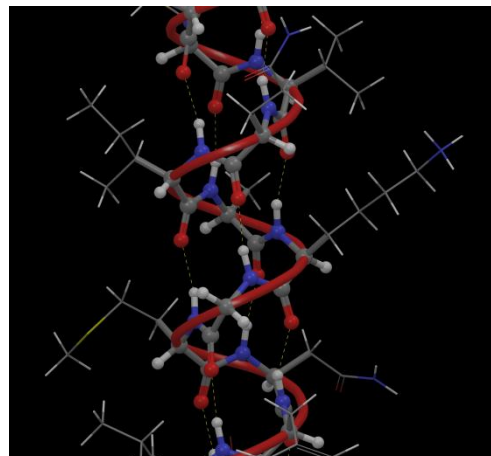
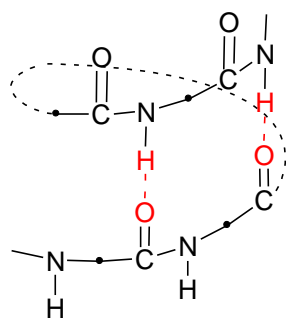
A rendezett szerkezetek lehetnek:

- α -hélix,
- β -redő szerkezetűek.

Bizonyos szekvenciáknál a β -redő, más nagyobb csoportoknál az α -hélix elrendeződés a kedvezőbb.

 α -hélix:

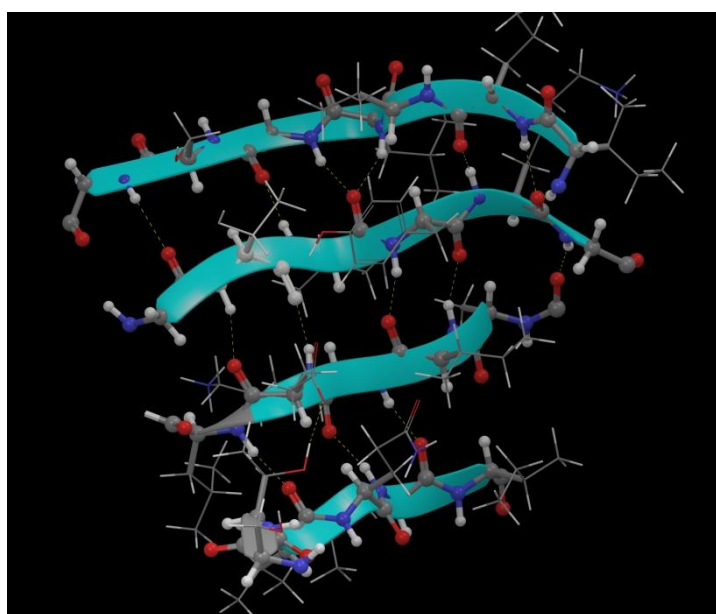
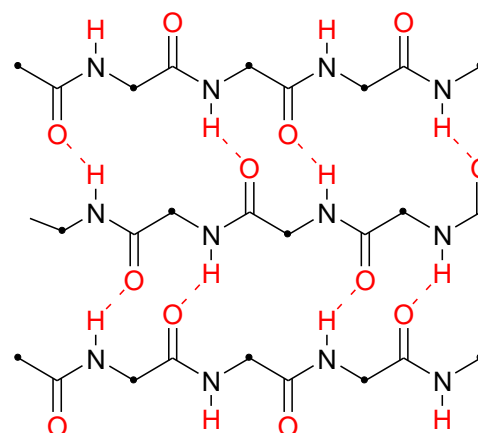
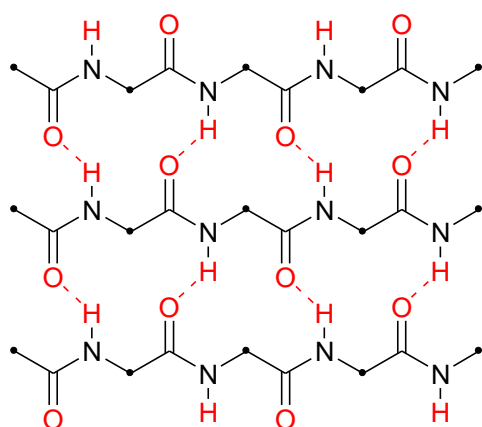
Jobbra csavarodó spirál, egy menetre 3,6 aminosavrész jut. A C=O és H-N egységek között tengelyirányú hidrogénkötések alakulnak ki.



11.18.3.1. ábra: Az α -hélix szerkezete

β -redő:

A szomszédos láncok között hidrogénkötések stabilizálják a szerkezetet. Két lehetséges elrendeződés:



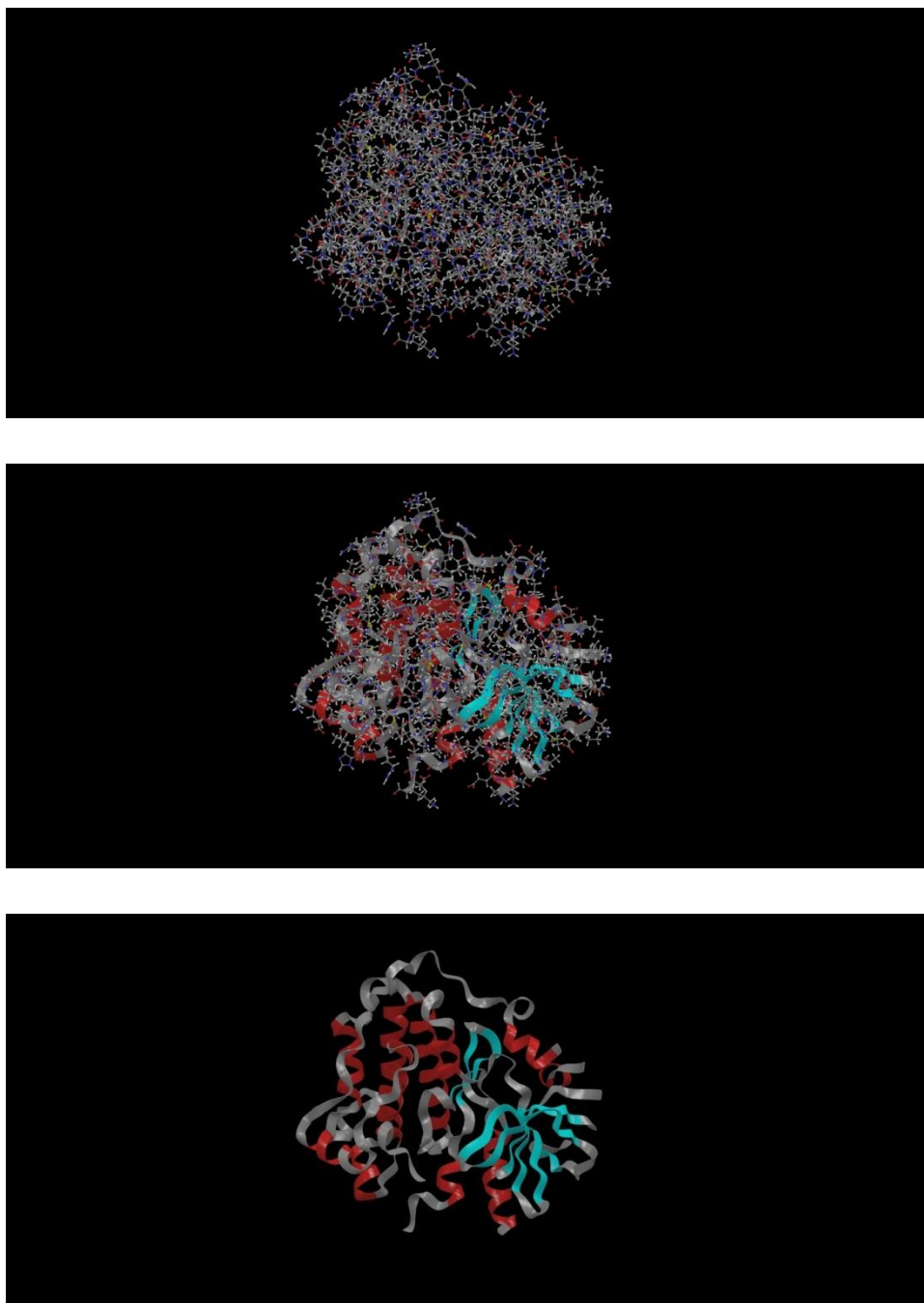
11.18.3.2. ábra: A β -redő szerkezete

c) **A fehérjék harmadlagos, terciér szerkezete:** a különböző másodlagos struktúrák egymáshoz való viszonya.

Fibrilláris (szálas szerkezetű) a fehérje: a molekula végig vagy csak α -hélix, vagy β -redő konformációjú, például β -redő a selyemszál, α -hélix szerkezetű a keratin, amelyet tartalmaz a haj, a köröm, a gyapjú és a toll.

Globuláris (gombolyag alakú) fehérje: a kétféle konformáció vegyesen fordul elő a fehérjemolekulában. Ezekon kívüli szakaszokon rendezetlen struktúrák jönnek létre. Például ilyen egy tejfehérje, az albumin.

Az alábbi ábrán egy fehérje rendezett és rendezetlen szerkezeteit jelenítettük meg. A piros részek α -hélixet, a kék részek β -redőt, a szürke részek pedig rendezetlen szerkezeteket mutatnak.



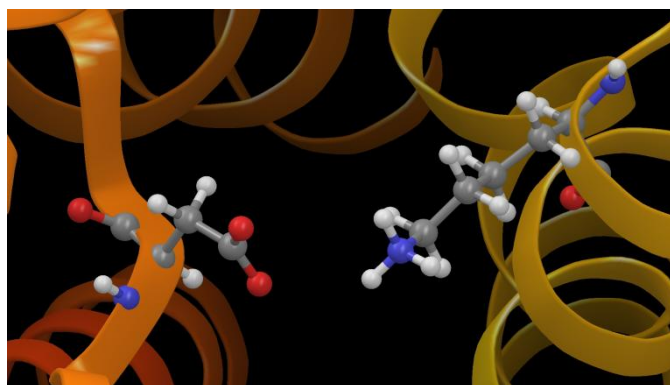
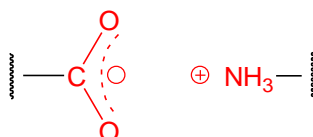
11.18.3.3. ábra: Egy globuláris fehérje



11.18.3.1. animáció: Egy fehérje térszerkezete

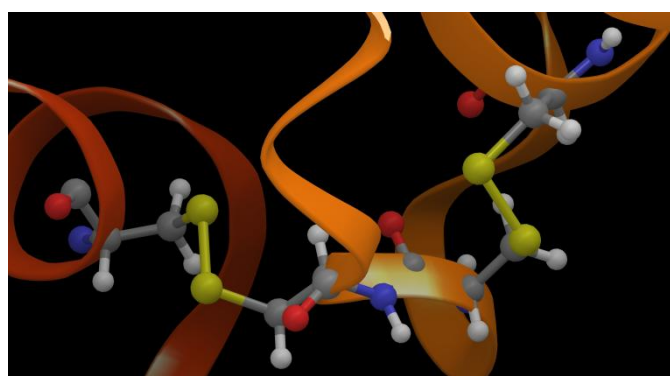
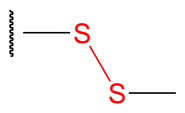
A láncok közt kialakulhat:

- Coulomb-kölcsönhatás: kationos (protonált bázikus csoport) és anionos (deprotonált savas oldallánc) részek között jöhet létre:



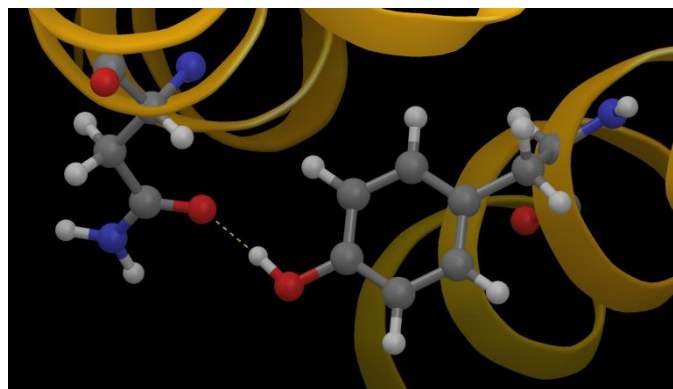
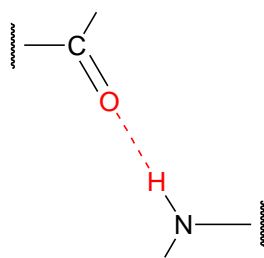
11.18.3.4. ábra: Coulomb-kölcsönhatás

- Kovalens kötés (diszulfidhidak cisztein oldalláncok között):



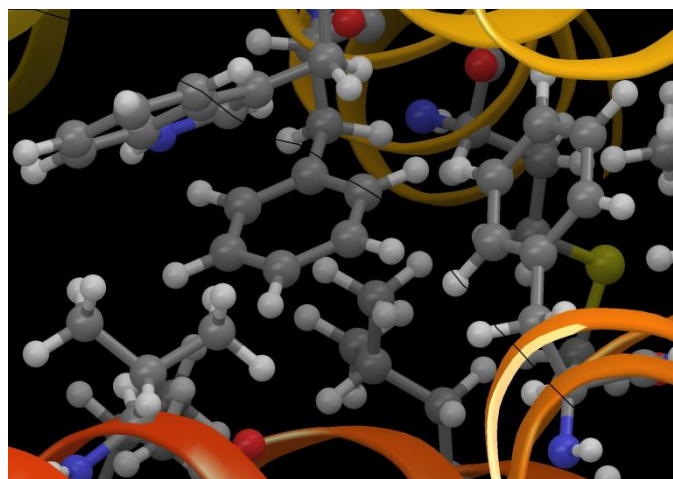
11.18.3.5. ábra: Diszulfidhidak

Hidrogénkötés:



11.18.3.6. ábra: Hidrogénkötés

– van der Waals-kölcsönhatások:



11.18.3.7. ábra: Van der Waals-kölcsönhatások

d) A fehérjék negyedleges, kvaterner szerkezete: több proteinegység egymáshoz viszonyított helyzete, térbeli elrendeződése.

11.18.4. Kémiai tulajdonságok

a) Fehérjék kimutatási reakciói

– **Xantoprotein-reakció**

Fehérjeoldat + tömény salétromsav- (HNO_3 -) oldat \rightarrow sárga csapadék.
A fehérjéket alkotó aromás gyűrűt tartalmazó aminosavak nitrálódnak.



11.18.4.1. ábra: A xantoprotein-reakció

– **Biuret-reakció**

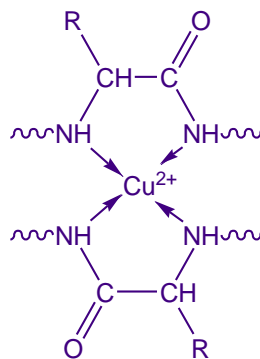
Fehérjeoldat + 1 cm^3 1 mol/dm^3 koncentrációjú NaOH-oldat + 1–2 csepp 1%-os CuSO_4 -oldat \rightarrow ibolyaszínű lesz az oldat.

A fehérje peptidkötését lehet kimutatni a biuret-reakcióval.



11.18.4.2. ábra: A biuret-reakció

Megjegyzés: a biuret képlete: $\text{H}_2\text{N}-\text{CO}-\text{NH}-\text{CO}-\text{NH}_2$, ennek kimutatására is alkalmas a próba. A fehérje kimutatási reakciója során nem ez a vegyület keletkezik, hanem az alábbi rézkomplex:

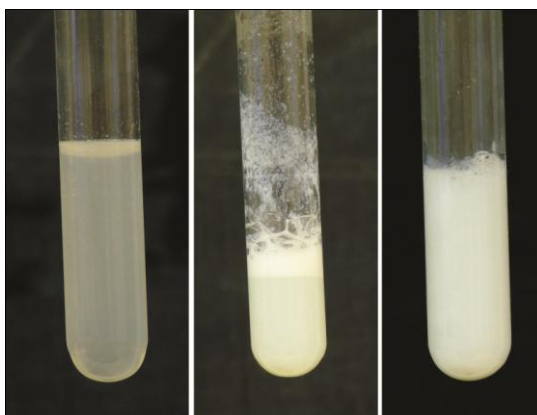


b) Kísérletek

– Fehérjeoldat + könnyűfém-sók (például nátrium-klorid) \rightarrow az oldat zavarossá válik.

A fehérje könnyűfémsók hatására történő kicsapása reverzibilis folyamat, mivel sok víz hozzáadására kitisztul az oldat (visszaoldódik a fehérje).

- Fehérjeoldat + szerves oldószer (például aceton) → irreverzibilis kicsapódás.
A fehérje nem oldható vissza, mivel szerkezete visszafordíthatatlanul megváltozik.
- Fehérjeoldat + nehézfém-só vagy oldata (például Pb^{2+} -só oldata) → irreverzibilis kicsapódás.
- Fehérjeoldat melegítése → irreverzibilis kicsapódás.



11.18.4.3. ábra: Fehérjeoldat kicsapása: 1) konyhasóoldattal 2) melegítéssel 3) acetonnal

11.19. Szénhidrátok

11.19.1. Szénhidrátok: többnyire természetes eredetű polihidroxi-oxovegyületek.

Összegképletük gyakran $C_n(H_2O)_m$, ahol $n \geq 3$.

Monoszacharidok (egyszerű cukrok): kisebb egységre nem hidrolizálható szénhidrátok.

Az egyszerű szénhidrátok nevei -óz végződésűek.

Összegképletük gyakran $C_n(H_2O)_n$, ahol $7 \geq n \geq 3$.

A karbonilcsoport alapján:

- aldóz: $-CHO$, aldehidsoportot tartalmazó,
- ketóz: $-CO-$, ketoncsoportot tartalmazó.

A szénatomszám alapján:

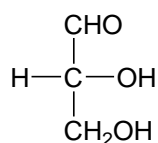
- 3 szénatomot tartalmazó: trióz,
- 4 szénatomot tartalmazó: tetróz,
- 5 szénatomot tartalmazó: pentóz,
- 6 szénatomot tartalmazó: hexóz.

Legfontosabbak a pentózok és a hexózok.

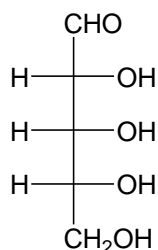
Oligoszacharidok: 2–10 monoszacharidegységre hidrolizálható szénhidrátok.

Poliszacharidok: egyszerű cukrokból felépülő, nagy moláris tömegű, vízben nem oldódó biopolimerek.

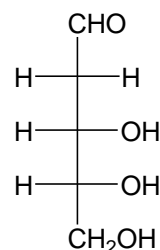
11.19.2. Egyszerűbb képviselők és elnevezésük



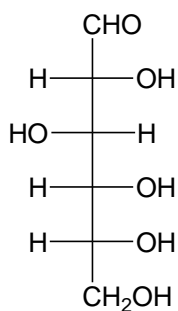
glicerin-aldehid



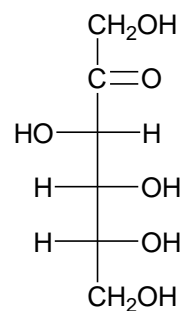
ribóz



dezoxi-ribóz



glükóz



fruktóz

11.19.3. Előállítás

Szacharidokat mesterséges úton bonyolult, többlépcsős szintézisekkel lehet előállítani, az élő szervezetekben pedig enzimekatalizált reakciókban keletkeznek szacharidok. Egyszerű cukrok előállíthatóak összetett szacharidok (oligo- és poliszacharidok) hidrolízisével.

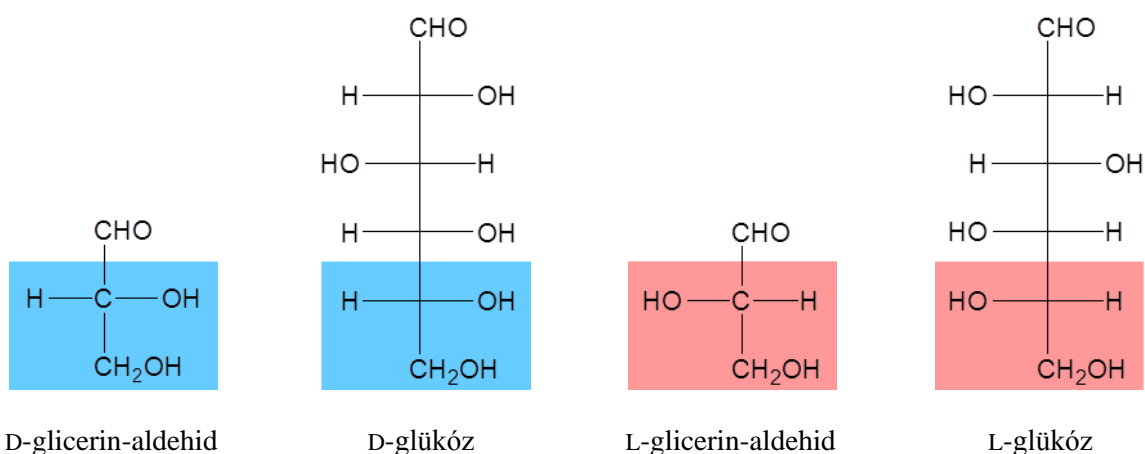
11.19.4. Szerkezet

A legtöbb monoszacharidban több királis szénatom is található. A térizomerek száma kiszámítható a 2^n képlettel, ha n a királis szénatomok száma, ám az izomerek közül csak kevés fordul elő a természetben.

Relatív konfiguráció

Ha az oxocsoporttól legtávolabbi királis szénatom térbeli elrendeződése megegyezik D-glicerin-aldehidével, akkor D-betűvel jelöljük a konfigurációt, ha nem, akkor L-lel. Az L- és D-izomerek egymás tükörképei.

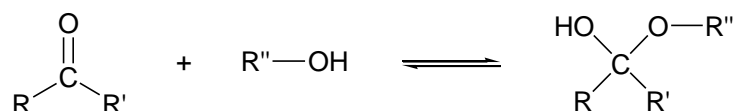
Például a glükózok konfigurációja:



Az élővilágban elsősorban a D-sorba tartozó szénhidrátok terjedtek el.

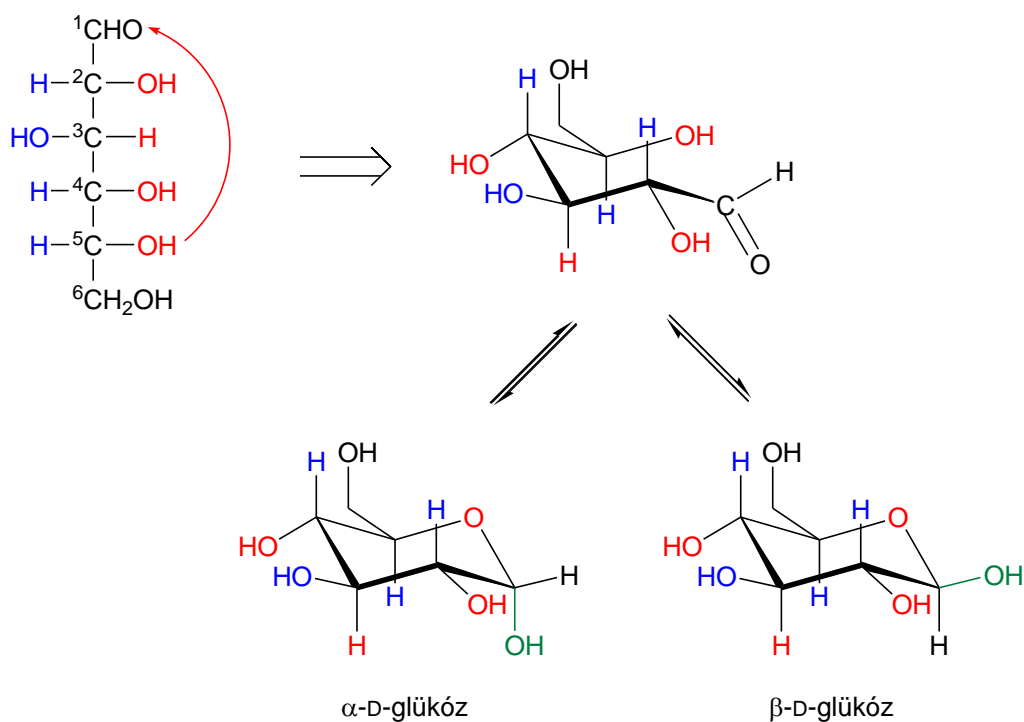
Gyűrűs szerkezetek kialakulása

Mint az oxovegyületek addíciós reakcióinál láttuk, oxovegyületekből alkoholokkal egyensúlyi reakcióban hidroxil-éterek keletkezhetnek:



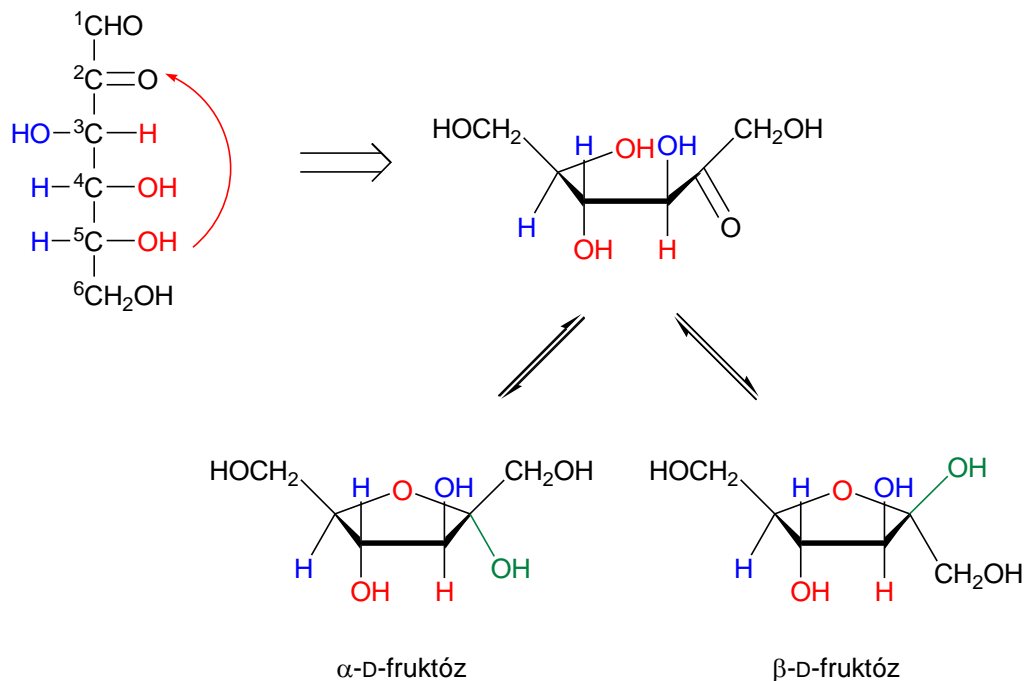
Ehhez hasonló reakció végbemehet egyszerű cukrok esetén is: ebben az esetben gyűrű képződik (intramolekuláris reakció). Rendszerint öt- és hattagú gyűrűk keletkeznek, melyek egy oxigénatomot tartalmaznak.

Például a glükóz hattagú gyűrűs szerkezetének kialakulása esetén az 5. szénatom hidroxilcsoportja és a karbonilcsoport között jön létre éterkötés:



Vizes oldatban egyensúly áll be a nyílt láncú és a gyűrűs szerkezetek között (ezt a folyamatot mutarotációnak nevezzük). A glikozidos hidroxilcsoport (zölddel jelölve) kétféle helyzetű lehet: ha ekvatoriális helyzetű β -D-glükózzal (kb. 63%), ha axiális helyzetű α -D-glükózzal (kb. 36%) beszélünk. A nyílt láncú forma csak 1% alatti részarányban van jelen.

Más cukrok esetén is keletkezik gyűrűs forma, de például a fruktóz esetén ez öttagú. Az 5. szénatom hidroxilcsoportjából alakul ki az éterkötés, míg az oxocsoportból a glikozidos hidroxilcsoport.



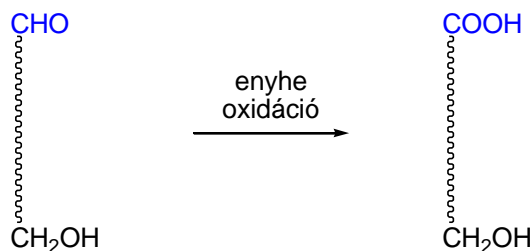
11.19.5. Fizikai tulajdonságok

A monoszacharidok fehér színű, poláris, kristályos vegyületek, édes ízűek, vízben jól, éterben rosszul oldódnak. Molekuláik közt az erős hidrogénkötések hatnak, emiatt szilárdak, a hidroxilcsoportok biztosítják a vízdoldhatóságot.

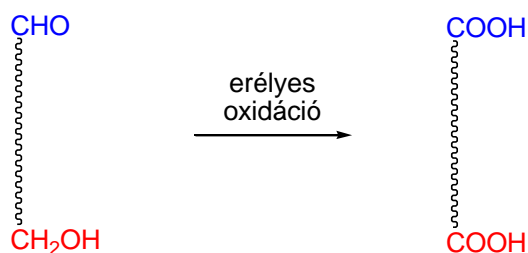
11.19.6. Kémiai tulajdonságok és reaktivitás

a) Oxidáció

Enyhe oxidálószer hatására az aldehidesoport karboxilcsoporttá oxidálódik. Például brómosvíz hatására:

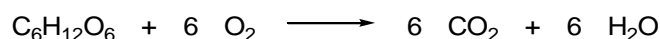


Erélyes oxidáció hatására (például salétromsavval oxidálva) a hidroximetil-csoport is oxidálódik:



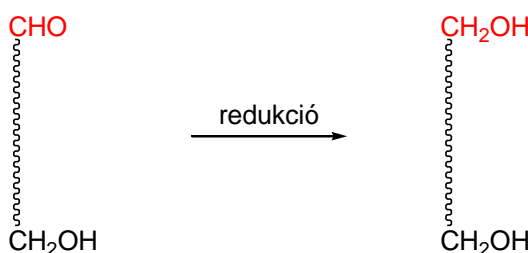
A redukáló aldehidcsoportot tartalmazó aldózok adják az ezüstitűkőr- és Fehling-reakciókat. A ketózok is adják ezeket a próbákat, mert lúgos közegben aldózokká képesek izomerizálódni (például fruktózból glükóz lesz) és így pozitív lesz a próba.

Élő szervezetekben a cukrok szén-dioxiddá és vízzé „égnek el”:



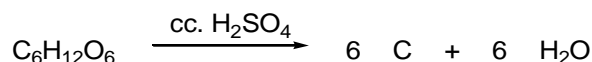
b) Redukció

Az aldehid- és ketonesoport redukciójával hidroxilcsoport keletkezik. Tehát a cukrok redukciójával polihidroxi-vegyületek (polialkoholok) keletkeznek:



c) Dehidratáció

Vízelvontó szerek (például töménye kénsav) hatására a cukrok elszenesednek:



11.19.7. Legfontosabb képviselők

Monoszacharidok

D-glükóz (szőlőcukor, burgonyacukor, $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$)

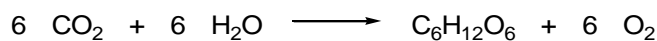


11.19.7.1. animáció: A glükóz térszerkezete

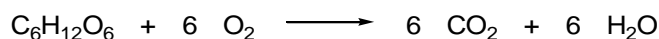
Fehér, édes ízű, vízben oldódó szilárd anyag. Redukálócukor, adja az ezüstitűkőr- és Fehling-próbát. Édes gyümölcsben, mézben található. A vér cukorszintjét az inzulin (a hasnyálmirigy hormonja) szabályozza. A szervezet a felesleges szőlőcukrot glikogén formájában a májban és az

izomban raktározza el. Gyorsan elég a szervezetben, gyors energiatermelése miatt sportolók, vizsgázók szívesen fogyasztják.

A glükóz a növényekben keletkezik a **fotoszintézis** útján:



A növényekben tovább alakul összetett szénhidrátokká, például keményítővé, cellulózzá. Az emberi és állati szervezet a felvett összetett szénhidrátokat enzimek hatására lebontja szőlőcukorra, esetleg elégeti:



Az **alkoholos erjedés** során a szőlőcukorból etil-alkohol keletkezik:



D-fruktóz (gyümölcs-cukor, C₆H₁₂O₆)



11.19.7.2. animáció: A fruktóz térszerkezete

Fehér, nagyon édes, vízben oldódó, nehezen kristályosodó szilárd anyag. A szervezetben a glükóznál gyorsabban ég el, csökkenti a pulzusszámot, növeli a vérnyomást. Előfordul gyümölcsökben, paradicsomban, mézben.

Diszacharidok

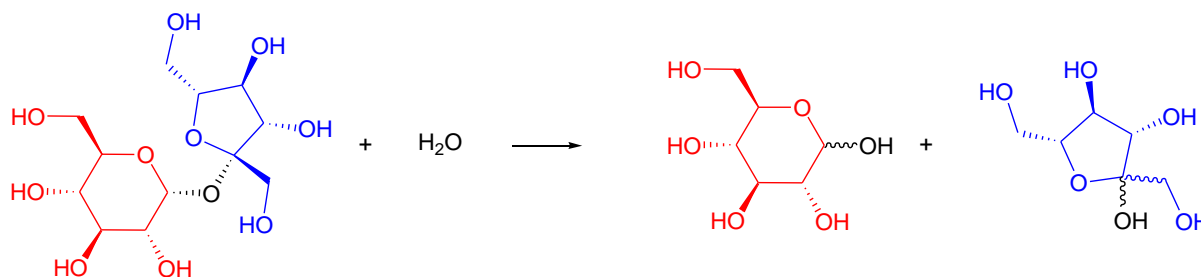
A szervezetben enzim hatására keletkeznek két monoszacharidból, víz kilépésével, éterkötés kialakulásával. Savas hidrolízis során visszaalakulnak monoszacharidokká. Fehér színű, édes ízű, szilárd halmazállapotú anyagok, víz jól oldódnak.

Szacharóz (répa- vagy nádcukor, C₁₂H₂₂O₁₁)



11.19.7.3. animáció: A szacharóz térszerkezete

α -D-glükózból és β -D-fruktózból keletkezik vízkilépéssel, 1–2 kapcsolattal (a glükóz 1. és fruktóz 2. szénatomjáról történik a víz kilépése). Vizes oldatban egyik gyűrű sem tud felszakadni, oxocsoporttá alakulni, így a szacharóz nem redukál, nem adja az ezüsttükör- és Fehling-próbát. Csak savas főzés, hidrolízis után redukál, és adja az ezüsttükör- és Fehling-próbát, mert visszaalakul glükózzá és fruktózzá:



Szintelen, kristályos, édes ízű, vízben oldódó szilárd anyag. Édesebb a szőlőcukornál. Cukorrépából (15–18% cukortartalmú) és cukornádból vonják ki. A méz mintegy 20% vizet, 1–10% szacharózt és 70–80% invertcukrot tartalmaz, mely 1:1 arányú elegye a glükóznak és a fruktóznak. A konzerv-, szesz- és élelmiszeripar használja.

Poliszacharidok

Keményítő

Alapegysége: α -D-glükóz molekulákból épül fel 1–4 kapcsolódással, ezért nincs szabad glikozidos hidroxilcsoport.

Szerkezete: spirál alakú, helikális szerkezetű. Kétféle makromolekulából áll, 20%-ban **amilózból** (lánc alakú, vízben oldódó keményítőmolekula) és 80%-ban **amilopektinből** (elágazó, vízben nehezebben oldódó keményítőmolekula) áll.

Általános képlete: $(C_6H_{10}O_5)_n$, ahol n 100-as nagyságrendű.

Előfordulása: növényekben, például búza, kukorica, burgonya, de emlősök szervében is, például a májban.

Tulajdonságai: fehér, finom szemcséjű, szagtalan, íztelen szilárd anyag. Hideg vízben nem, de meleg vízben kolloidálisan oldódik. Az amilózmolekuláknak vannak szabad hidroxilcsoportjai, amelyek nem vesznek részt a hélix összetartásában, így ezek a vízzel hidrogénkötést tudnak kialakítani.

Kimutatása: kálium-jodidos jóoldattal (Lugol-oldattal) kék színeződés ad.

Az ezüsttükörpróbát és a Fehling-reakciót csak savas hidrolízis után adja, mivel ekkor keletkeznek glükózmolekulák.

Felhasználása: szesz-, édes-, gyógyszer- és textiliparban használják.

Cellulóz

Alapegysége: β -D-glükóz, 1–4 kapcsolattal, így nincs szabad glikozidos hidroxilcsoport.

Szerkezete: lánc alakú makromolekula.

Általános képlete: $(C_6H_{10}O_5)_n$, ahol $n > 1000$.

Előfordulása: vázszenhidrát. A fa mintegy 50%-a, a gyapot 90%-a cellulóz, ám a len, a kender, a vatta és a papír is sok cellulózt tartalmaz.

Tulajdonságai: rostos, fehér szilárd anyag, vízben, éterben és híg savakban nem oldódik.

Az ezüsttükörpróbát és a Fehling-reakciót csak savas hidrolízis után adja, mivel ekkor keletkeznek glükózmolekulák.

Az ember és a magasabb rendű állatok nem tudják megemészteni, de a lovak, a szarvasmarhák igen.

Felhasználása: a textil-, a papíriparban használják, nitrálva nitrolakkot, lőgyapotot nyerhetnek belőle. Lúgos szén-diszulfidban oldva, majd kicsapva szálát (viszkózszelymet), fóliát (celofánt) lehet belőle előállítani.

11.20. Heterociklusok

11.20.1. Heterociklusok: olyan gyűrűs vegyületek, ahol a gyűrűben a szénatomon kívül más atom (heteroatom: például nitrogén, oxigén, kén) is található.

A telített heterociklusok tulajdonságai rendszerint nem különböznek jelentős mértékben a hasonló nyílt láncú vegyületekétől (kivéve a feszült gyűrűjű három- és négytagú heterociklusokat).

Ezzel ellentétben az úgynevezett heteroaromás vegyületek speciális tulajdonságokkal rendelkeznek. Ezért a továbbiakban csak a legfontosabb heteroaromás vegyületekkel foglalkozunk.

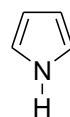
11.20.2. Egyszerűbb képviselők és elnevezésük



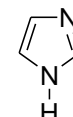
furán



tiofén



pirrol



imidazol



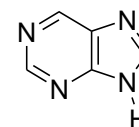
piridin



pirimidin



1,3,5-triazol

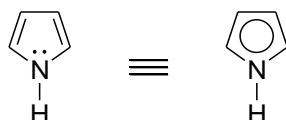


purin

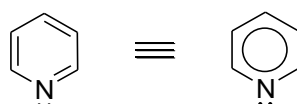
11.20.3. Szerkezet

Elméletileg minden nitrogén-, oxigén- és kéntartalmú heteroaromás vegyület ki tudja alakítani az aromás elektronrendszert (6π -elektron), mert a heteroatomok képesek a delokalizációhoz adni egy vagy több végelektronjukat.

Például a pirrol esetén a nitrogénatom magános elektronpárja vesz részt a delokalizációban:



A piridin esetén a nitrogénatom egy elektronja vesz részt a delokalizációban:



A heteroatom jellegéből adódóan az egyes heterociklusok aromássága között jelentős különbségek lehetnek.

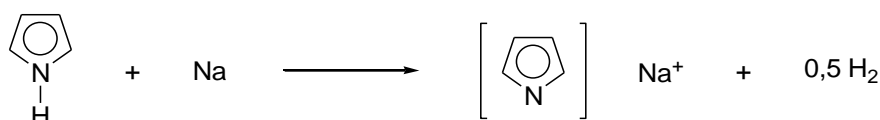
11.20.4. Nitrogéntartalmú heterociklusos vegyületek tulajdonságai

Pirrol (C₄H₅N)

Szintelen, éterre emlékeztető, kellemetlen szagú folyadék. Gyengén dipólusos, ezért viszonylag magas a forráspontja. Vízben rosszul oldódik.

A pirrol sokkal egyengébb bázis, mint például a dietil-amin, melynek oka, hogy a nitrogénatom magános elektronpárja részt vesz a delokalizációban, ezért sokkal nehezebben köt meg elektront, mint egy szekunder amin (lásd anilinnél).

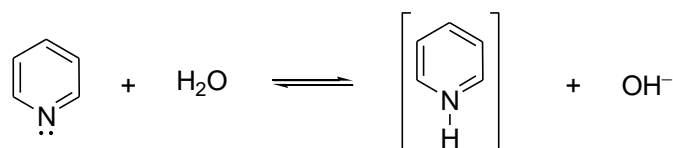
Ezzel ellentétben a pirrol gyenge savként viselkedhet, például alkálifémekkel hidrogénfejlődés közben reagál:



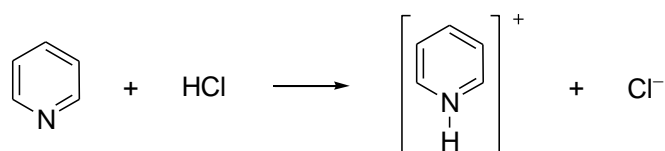
A pirrolgyűrű előfordul a klorofillban, hemoglobinban, B₁₂-vitaminban.

Piridin (C₅H₅N)

Kellemetlen szagú folyadék, poláris, vízben jól oldódik, mert a nitrogénatom magános elektronpárja a vízzel hidrogénkötést tud kialakítani. Vizes oldata enyhén lúgos kémhatású, mert protont képes megkötni:



Erősebb savakkal is reakcióba lép:



A piridingyűrű előfordul vitaminokban, alkaloidokban. A piridint az etil-alkohol denaturálására használják.

Pirimidin összegképlete: (C₄H₄N₂)

Poláris, vízben oldódó folyadék, a piridinhez hasonlóan gyenge bázis. A pirimidingyűrű egyes vitaminok, alkaloidok alkotórésze.

Imidazol (C₃H₄N₂)

Vízben oldódó, poláris kristályos vegyület, amfoter a kétféle tulajdonságú nitrogénatom miatt. Kristályában az erős hidrogénkötések miatt magas az olvadáspontja. Enzimekben is előfordul az imidazolgyűrű.

Purin (C₅H₄N₄)

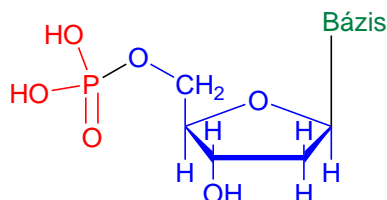
Kondenzált többgyűrűs molekula, egy pirimidin és egy imidazolmolekulából származtatható.

Vízben oldódó, poláris, hidrogénkötést tartalmazó, amfoter tulajdonságú szilárd vegyület. Purinvázis vegyületek a koffein és a kakaóban lévő teobromin.

11.21. Nukleinsavak

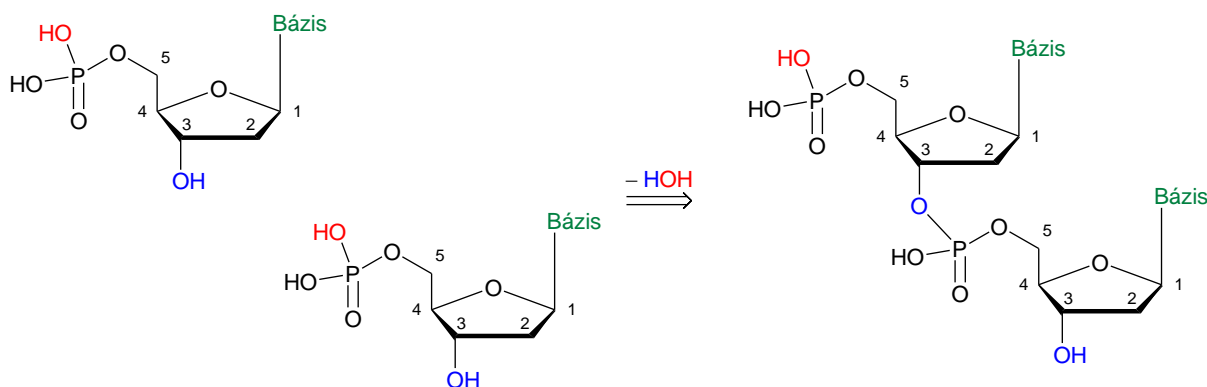
11.21.1. Nukleotidok: foszforsavból, egy pentózból és nitrogéntartalmú bázisból felépülő egységek.

Egy nukleotid általános felépítése:



Nukleinsavak: nukleotidokból felépülő biopolimerek.

A polimerláncok az alábbi módon épülnek fel: az egyik nukleotid 3. szénatomján található hidroxilcsoport a másik nukleotid foszforsavegységével észterkötést létesít:



További nukleotidok beépülésével létrejön a polinukleotid-lánc, azaz a nukleinsav (a savas jelleg abból adódik, hogy a foszforsavnak még marad egy hidroxilcsoportja, mely deprotonálható).

Egy adott nukleinsav váza ugyanazokból a cukor- és foszforsavegységekből épül fel, a különbség a bázisokban van. A DNS és az RNS nemcsak a bázisokban, hanem a cukoregységekben is különbözik:

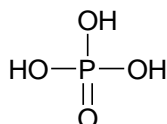
DNS: dezoxiribonukleinsav

RNS: ribonukleinsav

A nukleinsavak a sejtmag és a protoplazma fontos építőkövei. Az élő szervezetben fehérjékhez kötötten fordulnak elő. Biológiai információátáról, illetve -átadó rendszerek.

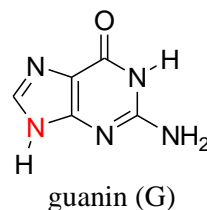
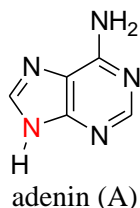
11.21.2. Nukleotidok összetétele

a) **Foszforsav:** H_3PO_4

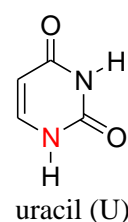
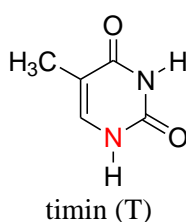
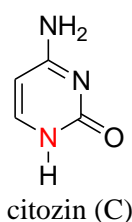


b) Heterociklusos bázisok:

Purinbázisok: adenin, guanin.



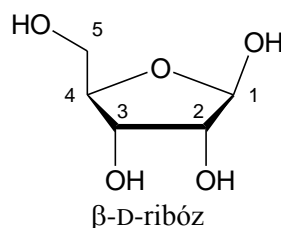
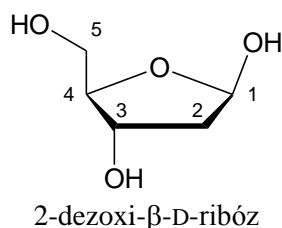
Pirimidin bázisok: citozin, emellett a DNS-nél még timin, az RNS-nél még uracil.



A bázisok mindig szén-nitrogén kötéssel kapcsolódnak a cukorrészhez. Pirossal jelöltük a kapcsolódó nitrogénatomokat.

c) Cukorrész:

DNS-nél 2-dezoxi- β -D-ribóz, az RNS-nél β -D-ribóz.

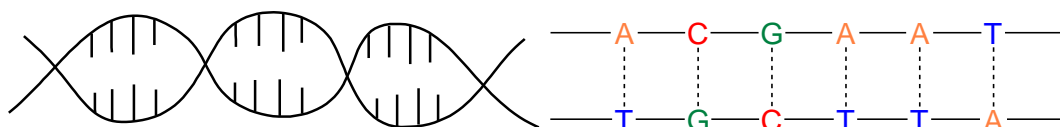


A bázis mindig az 1. szénatomhoz kapcsolódik, a foszforsav pedig az 5. szénatomhoz.

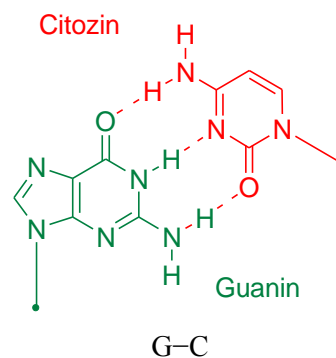
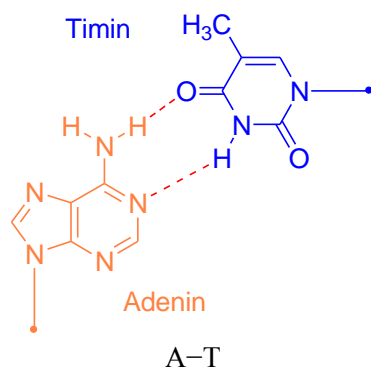
11.21.3. DNS, dezoxiribonukleinsav

A cukoralkotórész 2-dezoxi- β -D-ribóz, heterociklusos bázisként pedig adenin, guanin, timin és citozin szerepel. Genetikai információhordozó, örökítőanyag és az anyagcsere irányítója.

A DNS-molekulák kettős spirált (hélixet) alkotnak, a két spirál komplementere egymásnak. Ez azt jelenti, hogy az adeninnel szemben mindig timin, míg a guaninnal szemben mindig citozin található, és fordítva.



A két láncot hidrogénkötések rögzítik az alábbi formában:



11.24.4. RNS, ribonukleinsav

A cukoralkotórész β -D-ribóz, heterociklusos bázisként pedig, adenin, guanin, timin és uracil szerepel.

A DNS-en lévő információt közvetíti, szállító, hírvivő.

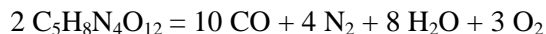
Egysoros lánc, helyenként hidrogénkötéssel rögzített hurkok.

12. PÉLDATÁR

12.1. Gáztörvények

1. Egy gáz térfogatát háromszorosára növeljük. Hogyan változik a hőmérséklete, ha a nyomást állandó értéken tartjuk?
2. Egy 10,132 MPa nyomású gázt tartalmazó, 50,0 dm³ űrtartalmú gázpalackot mekkora tartállyal kell összekötni, ha azt akarjuk, hogy a két tartályban a gáz nyomása 506,6 kPa legyen? (A hőmérséklet állandó!)
3. 2,00 g egyatomos gáz 0,0 °C-on 810,6 kPa nyomáson 1,39 dm³ térfogatú. Mi a relatív atomtömege a gáznak? Melyik lehet ez a gáz?
4. Egy gázpalackban 16,2 MPa nyomású, 300,0 K hőmérsékletű gáz van. Mekkora lesz a palackban a gáz nyomása, ha a gáz 25,0 százalékát kiengedve, a hőmérséklet 280,0 K-re csökken?
5. Egy edényben levő levegő nyomása 202,65 kPa. A benne levő levegőnek hányad részét kell kiengedni 20,0 °C-on, ha azt akarjuk, hogy a bennmaradó levegő nyomása 35,0 °C-on is 202,65 kPa legyen? Mennyi lesz az edényben a nyomás 20,0 °C-on?
6. Egy kén-klór vegyület hidrogénre vonatkoztatott gőzsűrűsége 67,5. Mekkora a vegyület moláris tömege és melyik vegyületről van szó?
7. Hány hidrogénmolekula van 22,4 dm³ térfogatban 0,0 °C-on és 1013 Pa nyomáson?
8. 110,0 dm³ térfogatú ballonban 0,800 kg hidrogén és 1,60 kg oxigén van. Mekkora a keverék nyomása, ha hőmérséklete 27,0 °C?
9. Mekkora a vízgőz parciális nyomása abban a H₂O–H₂ elegyben, amelynek sűrűsége 100,0 °C-on és 152 kPa nyomáson 0,620 g/dm³?
10. Mekkora a levegő sűrűsége 60,0 százalékos relatív nedvesség mellett 80,0 kPa össznyomáson, 37,5 °C-on, ha a száraz levegő 80,0 térfogatszázalék nitrogénből, 19,0 térfogatszázalék oxigénből, 1,00 térfogatszázalék argonból áll? 37,5 °C-on a telített vízgőz nyomása 5,47 kPa.
11. 0,123 g folyadékot teljesen elpárolgatva és azt 25,0 °C-on víz felett felfogva, 23,0 cm³ 102,39 kPa nyomású gőzt nyerünk, amely vízzel nem elegyedik. Mennyi az elpárolgatott vegyület moláris tömege? (25,0 °C-on a vízgőz tenziója: 3,173 kPa)
12. 2,00 dm³-es lombikba, melyben levegő van, a nyomás 100 kPa, a hőmérséklet 20,0 °C, 3,04 g kámfort teszünk. (A kámfor térfogatát elhanyagoljuk.) A zárt lombikot 120,0 °C-ra melegítve a kámfor szublimál. Mekkora lesz a nyomás a rendszerben? Hány gramm kámfort lehet a lombikba tölteni, ha a nyomás legfeljebb 0,300 MPa lehet? (M(C₁₀H₁₆O) = 152,0 g/mol)
13. Egy 20,0 dm³-es nitrogénpalackban a nyomás 20,00 MPa, a hőmérséklet 27,0 °C. A palack aljában víz van. A palackból a nitrogént védőgázként akarjuk felhasználni atmoszférikus nyomáson (100 kPa), a védőgázban azonban a vízgőz parciális nyomása maximálisan 0,400 kPa lehet. Feltéve, hogy a palackban lévő gáz mindig telített vízgőzre nézve, mekkora az a legkisebb nyomás a palackban, amikor a védőgáz még éppen megfelel a követelményeknek? 25,0 °C-on a vízgőz tenziója 3,173 kPa, 30,0 °C-on a vízgőz tenziója 4,240 kPa.

14. Számítsuk ki, hogy az ipari robbantáshoz használt nitropentaeritrit ($C_5H_8N_4O_{12}$, sűrűsége: $1,900 \text{ g/cm}^3$) alábbi egyenlet szerinti robbantásakor mekkora lesz a nyomás, ha a hőmérséklet $2500 \text{ }^\circ\text{C}$ és a keletkező gázelegy térfogata a folyadékéval azonos!



15. Egy $2,00 \text{ dm}^3$ térfogatú lombikban – melyet acetonnal (CH_3COCH_3) mosogattunk el – bennmaradt $10,0 \text{ g}$ cseppfolyós aceton. Ha bedugaszoljuk a lombikot, akkor legfeljebb hány százaléka tud elpárologni az acetonnak $40,0 \text{ }^\circ\text{C}$ -on, ha annak gőztenziója ezen a hőmérsékleten $50,0 \text{ kPa}$? A cseppfolyós aceton térfogatát hanyagoljuk el!
16. Egy $10,00 \text{ m}^3$ -es, légmentesen lezárt tartályban $340,0 \text{ K}$ hőmérsékletű, vígőzre telített levegő van, a tartályban az össznyomás $101,0 \text{ Pa}$. Hány gramm cseppfolyós víz fog kicsapódni, ha a tartályban a hőmérsékletet $300,0 \text{ K}$ -re csökkentjük? A folyamat során a tartály térfogata nem változik. A keletkező cseppfolyós víz térfogatát hanyagolja el! A víz gőztenziója 340 K -en $29,80 \text{ kPa}$, 300 K -en $2,60 \text{ kPa}$.

12.2. Koncentrációk

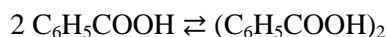
17. Egy vizes kálium-klorid-oldat sűrűsége $1,120 \text{ g/cm}^3$, ebben a kálium-klorid móltörtje $0,240$. Számítsuk ki az oldat Raoult-féle koncentrációját, tömegszázalékos összetételét, molaritását!
18. Adjuk meg a tömény, $98,00$ tömegszázalékos kénsav koncentrációját mol/dm^3 -ben, g/dm^3 -ben, mólszázalékban! $d = 1,836 \text{ g/cm}^3$
19. Mekkora tömegű nátrium-hidroxidra van szükség
 a) $1,00 \text{ kg}$ $15,0$ tömegszázalékos,
 b) $1,00$ liter $15,0$ tömegszázalékos,
 c) $1,00 \text{ kg}$ $0,500$ móltörtű NaOH -oldat készítéséhez?
 A $15,0$ tömegszázalékos NaOH -oldat sűrűsége $1,164 \text{ g/cm}^3$.
20. Mekkora tömegű nátrium-kromátot (Na_2CrO_4) kell oldani 100 gramm vízben, hogy a keletkező oldat
 a) $10,0$ tömegszázalékos legyen?
 b) egységnyi Raoult-koncentrációjú legyen?
 c) $1,00 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú legyen? (Az $1,00 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú Na_2CrO_4 -oldat sűrűsége $1,13 \text{ g/cm}^3$.)
 d) $15,0$ mólszázalékos legyen?
21. $17,0$ tömegszázalékos ($1,12 \text{ g/cm}^3$ sűrűségű) kénsavoldatot kell előállítani $5,00 \text{ dm}^3$ $65,2$ tömegszázalékos kénsavoldat (sűrűsége $1,56 \text{ g/cm}^3$) hígításával. Mennyi víz szükséges ehhez?
22. Hány gramm 78 tömegszázalékos és 48 tömegszázalékos oldatot kell venni ahhoz, hogy 30 gramm 66 tömegszázalékos oldatot kapjunk?
23. 100 gramm $10,0$ mólszázalékos kénsavoldathoz 150 gramm $15,0$ mólszázalékos kénsavoldatot adunk. Számítsuk ki a keletkező oldat mólszázalékos összetételét!
24. Összeöntünk 75 cm^3 $10,0$ tömegszázalékos $1,09 \text{ g/cm}^3$ sűrűségű és 220 cm^3 $33,0$ tömegszázalékos $1,32 \text{ g/cm}^3$ sűrűségű kálium-hidroxid-oldatot. Adjuk meg a keletkezett oldatban a kálium-hidroxid móltörtjét!
25. Írjuk fel annak az ammónia- (NH_3 -) oldatnak a mólszázalékos összetételét, melynek $20,0$ grammját $85,0$ gramm vízzel hígítva, $0,500 \text{ mol/kg}$ oldószer összetételű oldatot nyerünk!

26. Összekeverünk $1,50 \text{ dm}^3$ $8,00 \text{ mol/kg}$ Raoult-koncentrációjú (sűrűsége $1,050 \text{ g/cm}^3$) és 2000 gramm $18,0$ tömegszázalékos sósavoldatot. Számítsuk ki a keletkező oldatban a sósav tömegszázalékát és mólszázalékát!
27. Hány kilogramm $12,5$ tömegszázalékos oldatból kell ledesztillálni $56,0 \text{ kg}$ vizet, hogy ezáltal $20,0$ tömegszázalékos oldat keletkezzék?
28. Egy cukorgyár naponta 300 tonna cukorrépát dolgoz fel. 100 kg répából 130 dm^3 híg cukoroldat keletkezik, melynek sűrűsége $1,103 \text{ g/cm}^3$, cukortartalma $7,50$ tömegszázalék. A híg oldatból addig párolunk le vizet, míg a maradék $90,0$ tömegszázalék oldott anyagot nem tartalmaz. Mennyi vizet kell naponta lepárolni?
29. A $20,0 \text{ }^\circ\text{C}$ -on telített NaCl -oldat $25,8$ tömegszázalékos. Az $50,0 \text{ }^\circ\text{C}$ -on telített NaCl -oldat $27,0$ tömegszázalékos. Mekkora ezen a két hőmérsékleten a nátrium-klorid oldhatósága?
30. $60,0 \text{ }^\circ\text{C}$ -on telített réz-szulfát-oldat előállításához hány gramm vízben kell $12,0 \text{ gramm}$ $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ -t oldanunk? $60,0 \text{ }^\circ\text{C}$ -on 100 gramm víz $40,0 \text{ gramm}$ kristályvízmentes réz-szulfátot old.
31. 250 gramm $80,0 \text{ }^\circ\text{C}$ -on telített vizes kálium-klorid-oldatot $20,0 \text{ }^\circ\text{C}$ -ra hűtünk. Hány gramm kálium-klorid válik ki? $20,0 \text{ }^\circ\text{C}$ -on 100 g víz $34,4 \text{ g}$ KCl -ot, $80,0 \text{ }^\circ\text{C}$ -on 100 g víz $51,12 \text{ g}$ KCl -ot old.
32. Kristályvíz tartalmú magnézium-kloridot kristályosítunk át. 100 gramm $\text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ -ból $80 \text{ }^\circ\text{C}$ -on telített oldatot készítünk. Hány gramm vízre van ehhez szükség? A $80 \text{ }^\circ\text{C}$ -os telített oldatot $20 \text{ }^\circ\text{C}$ -ra hűtjük, közben $\text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ válik ki. Mekkora az átkristályosítás kitermelése? A vízmentes MgCl_2 oldhatósága $20 \text{ }^\circ\text{C}$ -on $54,6 \text{ g} / 100 \text{ g}$ víz; $80 \text{ }^\circ\text{C}$ -on $73,0 \text{ g} / 100 \text{ g}$ víz.

12.3. Híg oldatok törvényei

33. $1,52 \text{ gramm}$ tioacetamidot (CH_3CSNH_2) 100 gramm vízben oldunk. Milyen hőmérsékleten fog az így készített oldat megfagyni? A víz molális fagyáspontcsökkenése $\Delta T_M = 1,86 \text{ }^\circ\text{C}\cdot\text{kg/mol}$.
34. Hány atomos a kénmolekula, ha $0,6140 \text{ grammját}$ $54,80 \text{ gramm}$ szén-diszulfidban (CS_2) oldva $0,1000 \text{ }^\circ\text{C}$ forráspont-emelkedést észlelünk? A szén-diszulfid molális forráspont-emelkedése $2,290 \text{ }^\circ\text{C}\cdot\text{kg/mol}$.
35. Egy vizes glükóz- ($\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$ -) oldat $-0,56 \text{ }^\circ\text{C}$ -on fagy meg. Hány fokon forr ez az oldat atmoszférikus nyomáson? A víz molális forráspont-emelkedése $0,52 \text{ }^\circ\text{C}\cdot\text{kg/mol}$, míg molális fagyáspontcsökkenése $1,86 \text{ }^\circ\text{C}\cdot\text{kg/mol}$.
36. Mekkora annak a proteinnek a molekulatömege, melynek $1,000 \text{ grammját}$ $100,0 \text{ cm}^3$ vízben oldva $17,00 \text{ }^\circ\text{C}$ -on $253,0 \text{ Pa}$ ozmózisnyomást észlelünk? (Az oldat sűrűsége $1,000 \text{ g/cm}^3$.)
37. Ha 250 cm^3 vízben $3,00 \text{ gramm}$ cukrot oldunk fel, az oldat ozmózisnyomása $12,0 \text{ }^\circ\text{C}$ -on $83,09 \text{ kPa}$. Határozzuk meg a cukor molekulatömegét, ha a keletkezett oldat sűrűsége $1,000 \text{ g/cm}^3$!
38. Hány gramm cukrot ($\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11}$) kell $100,0 \text{ gramm}$ vízben feloldani, hogy
 a) az oldat forráspontja $0,100 \text{ }^\circ\text{C}$ -kal emelkedjék,
 b) fagyáspontja $1,000 \text{ }^\circ\text{C}$ -kal csökkenjék?
 A víz molális fagyáspontcsökkenése $\Delta T_M = 1,860 \text{ }^\circ\text{C}\cdot\text{kg/mol}$, molális forráspont-emelkedése $\Delta T_M = 0,5200 \text{ }^\circ\text{C}\cdot\text{kg/mol}$.

39. Valamilyen szerves vegyület 5,70 grammját 100 cm³ kloroformban oldva 2,38 °C fagyáspontcsökkenést észlelünk. A kloroform sűrűsége 1,50 g/cm³, a kloroform molális fagyáspontcsökkenése 4,68 °C·kg/mol. Elemanalízis alapján 32,0 százalék szén, 6,60 százalék hidrogén, 18,7 százalék nitrogén, 42,7 százalék oxigén a vegyület összetétele. Mennyi a kérdéses anyag moláris tömege és mi a vegyület összegképlete?
40. Hány százalék vizet tartalmaz a koncentrált ecetsav, ha +15,8 °C hőmérsékleten fagy meg? A tiszta, vízmentes ecetsav fagyáspontja +16,6 °C. Az ecetsav molális fagyáspontcsökkenése $\Delta T_M = 3,9 \text{ °C}\cdot\text{kg/mol}$.
41. Egy vegyület 2,436 grammját 250 gramm benzolban (C₆H₆) oldva 0,345 °C fagyáspontcsökkenést észlelünk. Számolja ki az ismeretlen vegyület moláris tömegét! A benzol molális fagyáspontcsökkenése $\Delta T_M = 5,12 \text{ °C}\cdot\text{kg/mol}$.
42. 100 gramm desztillált vízben feloldottunk 0,635 g FeCl₂-ot. A keletkezett oldat sűrűsége 1,012 g/cm³. Állapítsuk meg az oldat ozmózisnyomását 23,0 °C-on, illetve forráspontját! A víz molális forráspontemelkedése 0,520 °C·mol/kg.
43. Egy etil-alkoholos oldat 4,00 százalék anilint (C₆H₅NH₂) és 2,60 százalék nitro-benzolt (C₆H₅NO₂) tartalmaz. Milyen fagyáspontcsökkenést észlelünk ennél az oldatnál? Az etanol molális fagyáspontcsökkenése $\Delta T_M = 1,99 \text{ °C}\cdot\text{kg/mol}$.
44. A benzoésav gyenge sav, amely benzolban hidrogénhid kötésekkel keresztül asszociátumot képez a következő reakcióegyenlet szerint:

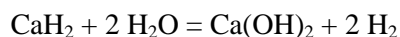


15,0 gramm benzoésavat 250 gramm benzolban oldunk szobahőmérsékleten. Ennek az oldatnak a fagyáspontcsökkenése 1,325 °C. Hány százaléka volt a benzoésavnak dimerizált formában? A benzol molális fagyáspontcsökkenése $\Delta T_M = 5,12 \text{ °C}\cdot\text{kg/mol}$.

45. Egy ismeretlen molekulatömegű anyag vizes oldata 100,09 °C hőmérsékleten forr. Ha az oldat 100 grammjában még 0,496 grammot oldunk az ismeretlen molekulatömegű anyagból, akkor a forráspont 100,13 °C lesz. Mi az anyag molekulatömege? A víz molális forráspont-emelkedése $\Delta T_M = 0,520 \text{ °C}\cdot\text{kg/mol}$.
46. A 0,100 mol/dm³ koncentrációjú vizes NaHCO₃-oldat -0,38 °C hőmérsékleten fagy meg. Hány részre disszociál a nátrium-hidrogén-karbonát? Az oldat sűrűsége: 1,009 g/cm³, a víz molális fagyáspontcsökkenése $\Delta T_M = 1,86 \text{ °C}\cdot\text{kg/mol}$.

12.4. Sztöchiometria

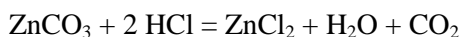
47. 95,0 százalékos tisztaságú CaH₂-ből vízzel H₂-t fejlesztünk. Mennyi CaH₂-re van szükség ahhoz, hogy egy 50,0 dm³-es tartályt 202 650 Pa nyomású 25,0 °C-os H₂-nel megtöltsünk? A fejlesztőkészülékben 4,00% veszteséggel kell számolnunk.



48. Hány m³ 60,0 °C-os és 102 658 Pa nyomású klórgáz szükséges 240 kg KClO₄ előállításához, ha a klórgáz 8,00 százaléka elvész?

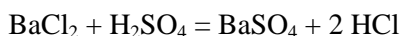


49. Számítsuk ki, hogy hány cm^3 10,0 százalékos sósavoldat (sűrűség $1,05 \text{ g/cm}^3$) szükséges 132 gramm 95,0 százalékos tisztaságú ZnCO_3 oldásához, ha a sósavat 15,0 százalékos feleslegben alkalmazzuk!

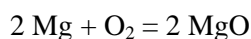


Számítsuk ki, hogy a keletkezett oldatban hány mólszázalék ZnCl_2 van! (A szennyezés HCl-ban oldhatatlan.)

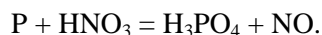
50. 50,0 gramm $40,0^\circ\text{C}$ -on telített BaCl_2 -oldathoz 30,0 gramm 49,0 százalékos vizes kénsavoldatot csepegtetünk. Hány gramm BaSO_4 válik ki és milyen lesz a keletkezett oldat százalékos összetétele? $40,0^\circ\text{C}$ -on 100,0 gramm víz 40,7 gramm BaCl_2 -ot old.



51. A brómot a tárolás és a szállítás megkönnyítése végett vasforgáccsal kötik meg $2\text{FeBr}_3 \cdot \text{FeBr}_2$ alakjában. Mennyi annak az üzemnek az évi vasforgácsszükséglete (250 munkanapot számítva), amely naponta 750 tonna 0,0300 százalékos brómot tartalmazó szilvinitet (ásványi KCl) dolgoz fel?
52. $25,0^\circ\text{C}$ -os és 101 325 Pa nyomású oxigénnel töltött $1,00 \text{ dm}^3$ -es edényben 1,00 g magnéziumforgács van. A magnéziumforgácsot meggyújtjuk, majd az edényt $20,0^\circ\text{C}$ -ra hűtjük. Mekkora lesz az edényben uralkodó nyomás? (A Mg és MgO térfogatát és az edény hőtágulását ne vegyük figyelembe!)



53. Fehér foszforból 63,0 százalékos HNO_3 -oldattal 40,0 százalékos foszforsavoldatot állítanak elő a következő rendezendő egyenlet szerint:



Határozzuk meg az egyenlet együtthatóit és pótolja a hiányzó vizet! Hány kg 40,0 százalékos foszforsav állítható elő 2,500 kg foszforból, ha a kitermelés 80,0 százalékos?

54. Réz kénsavas oldásával rézgálicot ($\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$) állítunk elő. Hány kg 80,0 százalékos tisztaságú réz szükséges 2,00 kg rézgálic előállításához, ha a kitermelés 90,0 százalékos?

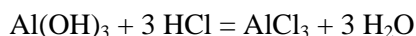


55. Hány m^3 $20,0^\circ\text{C}$ -os 99 990 Pa nyomású klórgáz szükséges 1,00 kg KClO_3 előállításához az alábbi reakcióegyenletek alapján?



A számításnál vegyük figyelembe, hogy a klórgáz elnyelése közben 5,00 százalékos veszteség lép fel, a KClO_3 kristályosítása közben pedig a kitermelés 85,0 százalékos!

56. 2,600 g alumínium-hidroxid [$\text{Al}(\text{OH})_3$] csapadékot 102 cm^3 16 százalékos sósavoldatban (sűrűsége $1,08 \text{ g/cm}^3$) oldunk. Mennyi lesz az így keletkezett oldatban az AlCl_3 móltörtje?

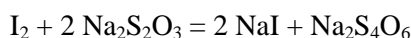
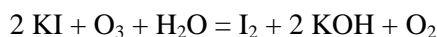


57. A C_4H_8O vegyület gőzét 10,0 százalék levegőfelesleggel égettük el. Mi az égéstermék összetétele térfogatszázalékban, ha az égetés hőmérsékletén vízgőz és szén-dioxid keletkezik? (A levegő összetétele 21,0 mólszázalék O_2 és 79,0 mólszázalék N_2 .)

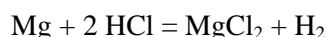
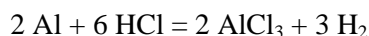
58. 8,00 kg, 20,0 százalék oldhatatlan szennyezést tartalmazó ként oldunk $14,0 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú KOH-oldatban (sűrűség: $1,52 \text{ g/cm}^3$). Hány dm^3 oldat kell az oldáshoz, ha a lúgot 25,0 százalék feleslegben alkalmazzuk? Az oldás az alábbi, kiegészítendő egyenlet szerint megy végbe:



59. Kálium-jodid-oldaton $5,00 \text{ dm}^3$, 20°C -os, $101,3 \text{ kPa}$ nyomású ózontartalmú levegőt vezetünk keresztül. A felszabaduló jód redukálásához $38,0 \text{ cm}^3$ $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú nátrium-tiosulfát-oldat szükséges. Mennyi a levegő ózontartalma térfogatszázalékban?

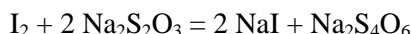
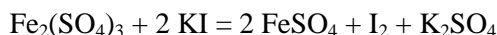


60. $4,200 \text{ g}$ Mg-Al-ötvözetet sósavban oldunk. A reakcióban $4,87 \text{ dm}^3$ $0,00^\circ\text{C}$ -os $101\,325 \text{ Pa}$ nyomású H_2 -gáz keletkezik. Mi az ötvözet összetétele?

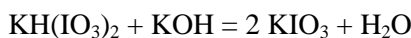


61. Egy NH_4Cl -ből és NH_4Br -ből álló porkeverék $20,0$ grammját NaOH-dal hevítve $7,00 \text{ dm}^3$ $20,0^\circ\text{C}$ -os $101,3 \text{ kPa}$ nyomású NH_3 -gáz keletkezett. Mi volt a keverék összetétele?

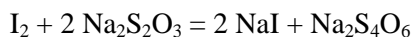
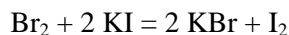
62. Vas(III)-szulfát-oldat $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$ -tartalmát jodometriásan határozzuk meg. Hány mol/dm^3 a vas(III)-szulfát-oldat koncentrációja, ha $25,0 \text{ cm}^3$ -éhez kálium-jodid-felesleget adva a kivált jód titrálására $9,75 \text{ cm}^3$ $0,500 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú $1,026$ faktorú $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ -oldat fogyott?



63. Hány gramm $\text{KH}(\text{IO}_3)_2$ -t tartalmaz az az oldat, amelynek titrálásához $25,10 \text{ cm}^3$ $1,030$ faktorú $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú KOH-oldat szükséges?

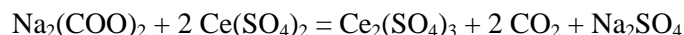


64. Brómos víz brómtartalmát az alábbi egyenletek szerint határozzuk meg:



$20,0 \text{ cm}^3$ brómos víz (sűrűsége: $1,04 \text{ g/cm}^3$) a titrálás során $17,6 \text{ cm}^3$ $0,989$ faktorú $0,500 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ -oldatot fogyasztott. Számítsuk ki a bróm (Br_2) móltörtjét!

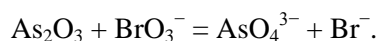
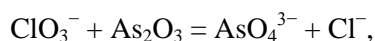
65. $2,000$ gramm kristályos nátrium-oxalátból 100 cm^3 oldatot készítünk. Hány mol kristályvíz tartalmú a nátrium-oxalát, ha a fenti oldat 10 cm^3 -ének titrálására $23,50 \text{ cm}^3$ $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú $\text{Ce}(\text{SO}_4)_2$ -oldat fogy?



66. Mi a H_2S oldhatósága $20,0\text{ }^\circ\text{C}$ -on és 101 kPa nyomáson (cm^3/g oldat mértékegységben), ha az így telített kén-hidrogénes víz $10,0\text{ grammja}$ $30,0\text{ cm}^3$ $0,100\text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú KMnO_4 -oldatot színtelenít el? A kiegészítendő egyenlet:

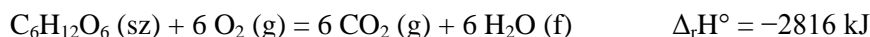


67. $10,0\text{ g}$ telített KClO_3 -oldatot $1,000\text{ dm}^3$ -re hígítunk. A hígított oldat $10,0\text{ cm}^3$ -éhez $25,0\text{ cm}^3$ $0,0250\text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú As_2O_3 -oldatot adunk, majd az As_2O_3 feleslegét $0,0200\text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú KBrO_3 -oldattal visszatitraljuk. Mi volt a telített KClO_3 -oldat koncentrációja, ha $18,0\text{ cm}^3$ KBrO_3 -mérőoldat fogyott? A kiegészítendő egyenletek:

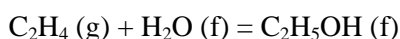


12.5. Termokémia

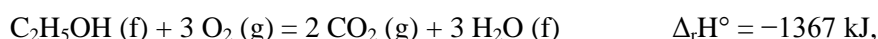
68. Ahhoz, hogy egy $-10,0\text{ }^\circ\text{C}$ -os jégtömböt $10,0\text{ }^\circ\text{C}$ -os vízzé alakítsunk, $2,00 \cdot 10^5\text{ J}$ hő szükséges. Mekkora volt a jégtömb tömege? A jég fajlagos hőkapacitása $2,090\text{ kJ/(kg}\cdot\text{K)}$ víz fajlagos hőkapacitása $4,182\text{ kJ/(kg}\cdot\text{K)}$ és fajlagos olvadáshője 335 kJ/kg .
69. Egy elhanyagolhatóan kis hőkapacitású szigetelt edény 200 gramm $-10\text{ }^\circ\text{C}$ -os jeget tartalmaz. Hány gramm $100\text{ }^\circ\text{C}$ hőmérsékletű, normál légköri nyomású vízgőzt kell az edénybe vezetnünk, hogy az edény tartalma a folyamat végén $30,0\text{ }^\circ\text{C}$ -os legyen? Mi történik $20,0\text{ gramm}$ gőz adagolása esetén? A jég fajlagos hőkapacitása $2,090\text{ kJ/(kg}\cdot\text{K)}$ víz fajlagos hőkapacitása $4,182\text{ kJ/(kg}\cdot\text{K)}$, fajlagos olvadáshője 335 kJ/kg és forráshője 2260 kJ/kg .
70. Mekkora hő keletkezik, ha $100,0\text{ g}$ glükózt ($\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$) égetünk el az alábbi termokémiai reakció szerint?



71. Az etilén vízzel történő reakciójakor etanol keletkezik:



Számítsuk ki a standard reakcióhőt 298 K hőmérsékleten, ha a következő egyenletek szerinti standard reakcióhők adottak:

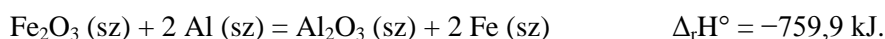


72. Számítsuk ki $1,000\text{ kg}$ $1,500$ tömegszázalékos HNO_3 -oldat és $200,0\text{ cm}^3$ $2,500\text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú NaOH -oldat elegyítése során a reakcióhőt! A következő reakció standard reakcióhőjét ismerjük:

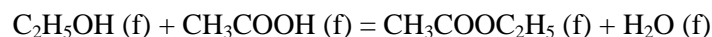


73. Az alábbiak ismeretében határozzuk meg a metángáz (CH_4) standard égéshőjét! Standard képződéshők: $\Delta_f\text{H}^\circ(\text{H}_2\text{O} (\text{f})) = -285,8\text{ kJ/mol}$, $\Delta_f\text{H}^\circ(\text{CO}_2 (\text{g})) = -393,5\text{ kJ/mol}$, $\Delta_f\text{H}^\circ(\text{CH}_4 (\text{g})) = -74,8\text{ kJ/mol}$.

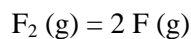
74. Mennyi az Al_2O_3 moláris standard képződéshője, ha a szilárd Fe_2O_3 standard képződéshője $\Delta_f\text{H}^\circ(\text{Fe}_2\text{O}_3 (\text{sz})) = -831,1\text{ kJ/mol}$ és az alábbi reakció standard reakcióhője ismert:



75. Számítsuk ki a következő észterképződési reakció standard reakcióhőjét a standard égéshők ismeretében: $\Delta_{\text{e}}H^{\circ}(\text{C}_2\text{H}_5\text{OH (f)}) = -1366,8 \text{ kJ/mol}$, $\Delta_{\text{e}}H^{\circ}(\text{CH}_3\text{COOH (f)}) = -874,4 \text{ kJ/mol}$, $\Delta_{\text{e}}H^{\circ}(\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5 \text{ (f)}) = -2231,0 \text{ kJ/mol}$.



76. Alkalmazzuk Hess törvényét és számítsuk ki az alábbi reakció standard reakcióhőjének értékét:

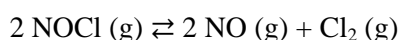


Használjuk fel az alábbi adatokat:



12.6. Kémiai egyensúlyok

77. NOCl-t, NO-t és Cl₂ gázt elegyítettünk 35,0 °C-on egy tartályban. A következő reakció játszódott le és egyensúly állt be.



Az alábbi egyensúlyi koncentrációkat mértük:

$$[\text{Cl}_2] = 3,04 \cdot 10^{-1} \text{ mol/dm}^3$$

$$[\text{NO}] = 8,00 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3$$

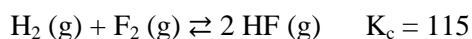
$$[\text{NOCl}] = 7,92 \cdot 10^{-1} \text{ mol/dm}^3$$

Számítsuk ki K_{c} értékét!

78. A foszfor-pentaklorid – PCl₅ – gőzfázisban foszfor-triklorid keletkezése közben bomlik. Számítsuk ki a komponensek egyensúlyi koncentrációit, ha $K_{\text{c}} = 0,800$ 340 °C-on és a kezdeti PCl₅ mennyisége 0,120 mol volt az 1,00 dm³ térfogatú palackban.

79. 15,0 mol NO-t és 9,00 mol O₂-t egy üres palackba vezetünk, majd a palackot lezárás után 350 °C-ra hevítjük. Az egyensúly elérése után a palack 13,2 mol NO₂-t tartalmaz. Számítsuk ki K_{n} értékét! Határozzuk meg K_{p} értékét is, ha az egyensúlyi össznyomás 0,300 MPa.

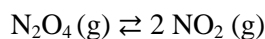
80. Egy kísérlet során 3,00 mol H₂-t és 6,00 mol F₂-t elegyítünk egy 3,00 dm³ térfogatú tartályban. Számítsuk ki a komponensek egyensúlyi koncentrációit!



81. 2,0 mol etanol és 3,0 mol ecetsav reakciója során etil-acetát és víz keletkezett egyensúlyi reakcióban. Számítsuk ki a komponensek egyensúlyi móltörtjeit, ha $K_{\text{x}} = 4,0$.

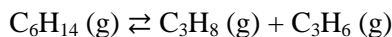
82. Ha 2,20 g HI-t 500 K hőmérsékletre hevítünk, akkor egy része elemeire elbomlik és az egyensúlyi elegyben 1,90 g HI lesz. Számítsuk ki K_{x} értékét!

83. 2,00 g N₂O₄ (g) térfogata 70,0 °C-on és 0,20 MPa nyomáson 0,507 dm³, amikor is a következő egyensúly adható meg:

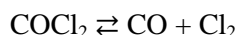


Számítsuk ki K_n értékét és a disszociációfokot, továbbá az egyensúlyi átlagos moláris tömeget!

84. Egy disszociációval járó reakció során az eredeti hexán 49,0 százaléka bomlik el 800 K hőmérsékleten és 40,4 MPa nyomáson. Számítsuk ki az egyensúlyi gázelegy sűrűségét!



85. A foszgén (COCl_2 , színtelen mérgező gáz, amelyet az I. világháborúban harci gázként használtak) kezdeti koncentrációja egy $1,00 \text{ dm}^3$ térfogatú tartályban $390 \text{ }^\circ\text{C}$ -on $0,015 \text{ mol}$. Az egyensúly elérésekor 20 százaléka bomlott el CO -ra és Cl_2 -ra. Számítsuk ki K_c értékét!

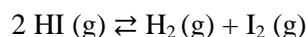


86. Ha az NH_4Cl -ot $0,101 \text{ MPa}$ nyomáson $300 \text{ }^\circ\text{C}$ -ra hevítjük, az egyensúlyi gázelegy sűrűsége $0,619 \text{ g/dm}^3$ lesz. Hány százalék NH_4Cl bomlott el?



87. Számítsuk ki a kalcium-karbonát bomlásának K_c értékét, ha a CO_2 parciális nyomása $35,0 \text{ kPa}$ 600 K hőmérsékleten!

88. Számítsuk ki a disszociált HI gázelegy egyensúlyi parciális nyomásait és a térfogat-százalékos összetételt! $K_x = 1,44 \cdot 10^{-2}$ 600 K hőmérsékleten és $0,505 \text{ MPa}$ nyomáson. A bomlás az alábbi reakció szerint megy végbe:



12.7. Elektrolitegyensúlyok

89. Számítsuk ki a következő koncentrációjú HCl -oldatok pH -értékeit: $1,00 \cdot 10^{-4} \text{ mol/dm}^3$, $1,00 \cdot 10^{-1} \text{ mol/dm}^3$!
90. Számítsuk ki az alábbi koncentrációjú NaOH -oldatok pOH és pH értékeit: $1,00 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3$, $1,00 \text{ mol/dm}^3$!
91. $25,00 \text{ cm}^3$ $0,2000 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú KOH - és $45,00 \text{ cm}^3$ $0,1000 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú HClO_4 -oldatokat elegyítünk, számítsuk ki az elegy pH -ját!
92. Számítsuk ki a $1,00 \cdot 10^{-8} \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú NaOH -oldat pH -ját!
93. Az ecetsav disszociáció állandója $K_s = 1,79 \cdot 10^{-5}$. Számítsuk ki a $2,00 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú ecetsavoldat pH -ját!
94. A klórossav (HClO_2) $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú oldatának pH -ja $1,20$. Számítsuk ki a sav disszociációs állandóját!
95. Számítsuk ki annak az ecetsavoldatnak a móltörtjét, amelyből $15,0 \text{ grammot}$ $5,00 \text{ dm}^3$ -re hígítva $3,20 \text{ pH}$ -jú oldatot nyerünk! $K_s = 1,79 \cdot 10^{-5}$
96. Számítsuk ki a $3,00 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú kénsavoldat pH -ját, ha a második disszociációs állandó $K_{s2} = 1,20 \cdot 10^{-2}$.
97. Számítsuk ki a $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú foszforsavoldat pH -ját! $K_{s1} = 7,5 \cdot 10^{-3}$, $K_{s2} = 6,2 \cdot 10^{-8}$, $K_{s3} = 2,2 \cdot 10^{-13}$.

98. Számítsuk ki a $0,010 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú nátrium-benzoát-oldat pH-ját, ha $K_s = 6,6 \cdot 10^{-5}$!
99. $8,75$ pH-jú vizes oldatot kell készítenünk úgy, hogy a felsorolt sók közül egyet oldunk vízben. Melyik sót használjuk fel és mekkora legyen az oldat molaritása? A rendelkezésre álló sók: NH_4Cl , KHSO_4 , KNO_2 , NaNO_3 . $K_b(\text{NH}_3) = 1,78 \cdot 10^{-5}$, $K_{s2}(\text{H}_2\text{SO}_4) = 1,2 \cdot 10^{-2}$, $K_s(\text{HNO}_2) = 4,60 \cdot 10^{-4}$.
100. $5,00 \text{ cm}^3$ $1,00 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú HCl -oldatot adtunk 100 cm^3 $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú ecetsavoldathoz! Határozzuk meg a pH-t, ha a térfogatok összeadhatóak! $K_s(\text{CH}_3\text{COOH}) = 1,79 \cdot 10^{-5}$
101. Számítsuk ki a $0,200 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú Na_2CO_3 -oldat pH-ját! $K_{s1} = 4,30 \cdot 10^{-7}$, $K_{s2} = 5,60 \cdot 10^{-11}$
102. Adjuk meg annak a puffernek a pH-ját, amely literenként $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációban NH_3 -át és $0,300 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációban NH_4Cl -ot tartalmaz. Számítsuk ki a pH-t abban az esetben is, ha a pufferoldatot $10,0$ -szeres térfogatra hígítottuk. $K_b = 1,78 \cdot 10^{-5}$
103. $50,0 \text{ cm}^3$ $0,600 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú NH_4Cl -oldatba $30,0 \text{ cm}^3$ $0,400 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú NaOH -oldatot öntöttünk. Számítsuk ki, hogy mennyi az így keletkezett pufferoldat pH-ja! $K_b(\text{NH}_3) = 1,78 \cdot 10^{-5}$
104. Mennyi lesz a pH-ja annak az oldatnak, amit úgy készítünk, hogy $2,46 \text{ g}$ nátrium-acetátot ($M: 82,0 \text{ g/mol}$) 100 cm^3 $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú HCl -oldatban oldunk? Tételezzük fel, hogy az oldat sűrűsége $1,00 \text{ g/cm}^3$. $K_s(\text{CH}_3\text{COOH}) = 1,78 \cdot 10^{-5}$
105. Számítsuk ki az egyes komponensek mólarányát $c_0 = 0,10 \text{ mol/dm}^3$ összkoncentrációjú, $8,5$ pH-jú kén-hidrogénes rendszerben! $K_{s1} = 1,1 \cdot 10^{-7}$, $K_{s2} = 1,0 \cdot 10^{-14}$.
106. Mennyi a pH-ja a $0,0100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú nátrium-hidrogén-tartarát-oldatnak? Adja meg ezen a pH-n az egyes formák móltörtjét! (A tartarátion a borkősav savmaradéka.) $K_{s1} = 6,00 \cdot 10^{-4}$, $K_{s2} = 1,50 \cdot 10^{-5}$.
107. Milyen pH-n lesz az oxalátionok mennyisége az oxálsavénak $20,0$ -szorososa? $K_{s1} = 5,90 \cdot 10^{-2}$, $K_{s2} = 6,40 \cdot 10^{-5}$.
108. Egy kétértékűként viselkedő sav savanyú sójának pH-ja $4,41$. Továbbá más mérésből tudjuk, hogy ugyanakkor a szabályos só mennyisége négyszázad része a savanyú sóénak. Számítsuk ki a savi disszociációs állandókat!
109. Számítsuk ki egy $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációban ecetsavat és $0,500 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációban nátrium-acetátot tartalmazó oldat pH-ját! Számítsuk ki az oldat pH-ját, ha $c_{\text{sav}} = 1,00 \cdot 10^{-5} \text{ mol/dm}^3$, $c_{\text{só}} = 5,00 \cdot 10^{-5} \text{ mol/dm}^3$! $K_s = 1,78 \cdot 10^{-5}$
110. Mennyi a pH-ja egy $2,00 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú NaHS -oldatnak? $K_{s1} = 1,10 \cdot 10^{-7}$, $K_{s2} = 1,00 \cdot 10^{-14}$
111. Számítsuk ki a $1,00 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú hidrazónium-klorid- ($\text{NH}_2\text{NH}_3\text{Cl}$ -) oldat pH-ját! $K_{b1} = 1,10 \cdot 10^{-6}$, $K_{s2} = 1,00 \cdot 10^{-14}$
112. Mennyi a $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú KHSO_4 -, illetve K_2SO_4 -oldatok pH-ja? $K_{s2} = 1,20 \cdot 10^{-2}$
113. Mennyi a $0,500 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú ammónium-formiát-oldat pH-ja? $K_s = 1,78 \cdot 10^{-4}$, $K_b = 1,78 \cdot 10^{-5}$

114. Számítsuk ki a $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú NH_4HS -oldat pH-ját! $K_{s1} = 1,10 \cdot 10^{-7}$, $K_{s2} = 1,00 \cdot 10^{-14}$, $K_b = 1,78 \cdot 10^{-5}$
115. Mennyi a pH-ja egy $1,00 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$ -oldatnak? $K_{s1} = 7,50 \cdot 10^{-3}$, $K_{s2} = 6,20 \cdot 10^{-8}$, $K_{s3} = 2,20 \cdot 10^{-13}$, $K_b = 1,78 \cdot 10^{-5}$
116. Számítsuk ki a $0,010 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú $\text{Mn}(\text{N}_2\text{H}_4)^{2+}$ -oldatban a Mn^{2+} -ionok koncentrációját! $K_1 = 5,8 \cdot 10^4$
117. Számítsuk ki a réz(II)-ammin-komplexek móltörtjeit és koncentrációit egy olyan rendszerben, amelyben $c_0 = 0,100 \text{ mol/dm}^3$ és $[\text{NH}_3]_e = 1,00 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3$! $\beta_1 = 1,40 \cdot 10^4$, $\beta_2 = 4,00 \cdot 10^7$, $\beta_3 = 3,00 \cdot 10^{10}$, $\beta_4 = 3,30 \cdot 10^{12}$
118. Mennyi szabad Au^{3+} -ion található egy $5,0 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú $[\text{AuCl}_4^-]$ -oldatban? $\lg \beta_4 = 26$
119. Számítsuk ki a BaSO_4 oldhatósági szorzatát 25°C -on, ha ezen a hőmérsékleten $50,0 \text{ cm}^3$ vízben $0,120 \text{ mg}$ anyag oldódik és ekkor az oldat telített!
120. Mekkora érték a PbI_2 oldhatósága tiszta vízben? $L(\text{PbI}_2) = 8,7 \cdot 10^{-9}$
121. Számítsuk ki az ezüst-kromát (Ag_2CrO_4) oldhatósági szorzatát, ha annak oldhatósága $1,3 \cdot 10^{-4} \text{ mol/dm}^3$ vízben! Számítsuk ki az oldhatóságot a) $0,010 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú AgNO_3 - és b) $0,010 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú K_2CrO_4 -oldatban is!
122. Mekkora az AgIO_3 oldhatósága $0,010 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú HIO_3 -oldatban? $L(\text{AgIO}_3) = 9,20 \cdot 10^{-9}$, $K_s = 1,67 \cdot 10^{-1}$
123. Számítsuk ki az PbF_2 oldhatóságát $3,0 \text{ pH}$ -jú oldatban! $L(\text{PbF}_2) = 3,2 \cdot 10^{-8}$
124. Határozzuk meg a telített $\text{Mn}(\text{OH})_2$ -oldat pH-ját! $L(\text{Mn}(\text{OH})_2) = 2,00 \cdot 10^{-13}$
125. Számítsuk ki a telített $\text{Fe}(\text{OH})_3$ -oldat pH-ját! $L(\text{Fe}(\text{OH})_3) = 1,1 \cdot 10^{-33}$
126. Desztillált vizet PbCl_2 -dal és PbI_2 -dal telítünk. Mekkora egyensúlyban a két anyag oldhatósága? $L(\text{PbCl}_2) = 1,60 \cdot 10^{-5}$, $L(\text{PbI}_2) = 8,70 \cdot 10^{-9}$
127. Hány gramm CaCO_3 -csapadék képződik, ha $1,00 \text{ dm}^3$ $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú CaCl_2 - és $1,00 \text{ dm}^3$ $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú Na_2CO_3 -oldatot öntünk össze? $L(\text{CaCO}_3) = 4,80 \cdot 10^{-9}$

12.8. Elektrokémia

128. Az $1,00 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú NaF -oldat alapján PbF_2 csapadék van. Az oldatba merített ólomelektrod potenciálja $-0,350 \text{ V}$. Mekkora a PbF_2 oldhatósági szorzata? $\varepsilon^\circ(\text{Pb}^{2+}/\text{Pb}) = -0,130 \text{ V}$
129. Valamely Cl^- -ionokat tartalmazó oldatba merülő klórelektrod potenciálja $+1,55 \text{ V}$. Számítsuk ki az oldat Cl^- -ion tartalmát g/dm^3 egységben, ha a klórgáz normál légköri nyomású! $\varepsilon^\circ(\text{Cl}_2/2 \text{ Cl}^-) = +1,360 \text{ V}$
130. A $\text{Cu}(\text{OH})_2$ telített oldatába merített rézelektrod potenciálja $+0,260 \text{ V}$. Számítsuk ki az oldat pH-ját és a $\text{Cu}(\text{OH})_2$ oldhatósági szorzatát! $\varepsilon^\circ(\text{Cu}^{2+}/\text{Cu}) = +0,340 \text{ V}$
131. Ezüst-kloriddal telített $0,10 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú sósavoldatba ezüstelektrod merül. Számítsuk ki az elektrod potenciálját! Az oldatban az ezüst koncentrációját az AgCl oldhatósága szabja meg ($L = 1,56 \cdot 10^{-10}$). $\varepsilon^\circ(\text{Ag}^+/\text{Ag}) = +0,800 \text{ V}$

132. Számítsuk ki a $\text{Zn} | \text{ZnSO}_4 || \text{FeCl}_3 | \text{Fe}$ galvánelem elektromotoros erejét, ha $c(\text{ZnSO}_4) = 0,050 \text{ mol/dm}^3$, illetve $c(\text{FeCl}_3) = 0,050 \text{ mol/dm}^3$! $\varepsilon^\circ(\text{Zn}^{2+}/\text{Zn}) = -0,760 \text{ V}$, $\varepsilon^\circ(\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}) = -0,040 \text{ V}$
133. Számítsuk ki a $\text{Zn} | \text{ZnSO}_4 || \text{HCl} (\text{pH} = 2,00) | \text{H}_2(\text{Pt})$ galvánelem elektromotoros erejét, ha a cinkionok koncentrációja $0,500 \text{ mol/dm}^3$, illetve $0,00100 \text{ mol/dm}^3$! A hidrogéngáz normál légköri nyomású. $\varepsilon^\circ(\text{Zn}^{2+}/\text{Zn}) = -0,760 \text{ V}$
134. Számítsuk ki a $\text{Cd} | \text{Cd}(\text{NO}_3)_2 || \text{HCl} | \text{Cl}_2 (\text{Pt})$ galvánelem elektromotoros erejét! A Cd^{2+} -ion koncentrációja $1,00 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3$, a HCl -oldat pH-ja 2,00. A klórgáz normál légköri nyomású. $\varepsilon^\circ(\text{Cd}^{2+}/\text{Cd}) = -0,400 \text{ V}$, $\varepsilon^\circ(\text{Cl}_2/2 \text{Cl}^-) = +1,360 \text{ V}$
135. Számítsuk ki a
- $\text{Zn} | \text{ZnSO}_4 (c = 5,0 \cdot 10^{-4} \text{ mol/dm}^3) || \text{ZnSO}_4 (c = 5,0 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3) | \text{Zn}$ galvánelem elektromotoros erejét!
 - $\text{Pt} (\text{H}_2) | \text{HCl} (c = 5,0 \cdot 10^{-4} \text{ mol/dm}^3) || \text{HCl} (c = 5,0 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3) | \text{Pt} (\text{H}_2)$ galvánelem elektromotoros erejét! A hidrogéngáz normál légköri nyomású.
136. A $\text{Zn} | \text{Zn}^{2+} (c = 0,080 \text{ mol/dm}^3) || \text{telített Zn}(\text{OH})_2 | \text{H}_2 (\text{Pt})$ galvánelem elektromotoros ereje $+0,231 \text{ V}$. Mekkora a $\text{Zn}(\text{OH})_2$ oldhatósági szorzata? A hidrogéngáz normál légköri nyomású. $\varepsilon^\circ(\text{Zn}^{2+}/\text{Zn}) = -0,760 \text{ V}$
137. Számítsuk ki a következő folyamat egyensúlyi állandóját! $\varepsilon^\circ(\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}) = +0,760 \text{ V}$, $\varepsilon^\circ(\text{I}_2/2 \text{I}^-) = +0,540 \text{ V}$
- $$2 \text{Fe}^{3+} + 2 \text{I}^- \rightleftharpoons 2 \text{Fe}^{2+} + \text{I}_2$$
138. Mekkora a $\text{Cu} + \text{Cu}^{2+} \rightleftharpoons 2 \text{Cu}^+$ folyamat egyensúlyi állandója? $\varepsilon^\circ(\text{Cu}^+/\text{Cu}) = +0,520 \text{ V}$, $\varepsilon^\circ(\text{Cu}^{2+}/\text{Cu}^+) = +0,153 \text{ V}$
139. Mekkora árammenyiségre van szükség 10,0 gramm higany előállításához, ha azt higany(I)-nitrát-, illetve higany(II)-nitrát-oldat elektrolízise révén kívánjuk leválasztani?
140. Hány kg rezet termelhetünk CuSO_4 -oldat elektrolízisével naponta, ha $2,00 \text{ A/dm}^2$ áramsűrűséggel dolgozunk és $42,0 \text{ m}^2$ katódfelület áll rendelkezésünkre?
141. Mennyi elektromos energia szükséges 1,00 kg nátrium, illetve 1,00 kg kálium előállításához, ha az elektrolizáló feszültség $11,0 \text{ V}$?
142. Egy 300 cm^2 összfelületű fémlemezt $0,0150 \text{ mm}$ vastagságú ezüstréteggel vonunk be; az ezüst sűrűsége $10,5 \text{ g/cm}^3$. Mennyi ideig kell $0,500 \text{ A}$ erősségű árammal AgNO_3 -oldatban elektrolizálni, hogy a kívánt vastagságú ezüstréteg leváljék?
143. Réz(II)-klorid vizes oldatát elektrolizálva a katódon $0,520 \text{ gramm}$ réz válik le. Hány cm^3 $20,0 \text{ }^\circ\text{C}$ -os 100 000 Pa nyomású klórgáz fejlődik ugyanekkor az anódon?
144. Az ólomfehér nevű festékanyagot ($\text{Pb}_3(\text{OH})_2(\text{CO}_3)_2$) az ólom anódos oxidációjával állítják elő. Az anódról oldatba lépő Pb^{2+} -ionok az elektrolitban jelen levő CO_3^{2-} - és OH^- -ionokkal reagálnak, majd a reakció során keletkező bázikus só csapadék formájában válik ki. Számítsuk ki, hogy $1,00 \text{ kg}$ festék előállításához hány coulomb szükséges?
145. Higany(II)-nitrát-oldatba régi nikkeltízforintost merítve, az érme tömege $0,100 \text{ grammal}$ változott. Hány gramm higany vált ki az oldatból, illetve mennyi töltés haladt át eközben a felületen?

146. Egy krómsó oldatából 2,00 órán tartó 5,00 A áramerősséggel végzett elektrolízisével 6,47 gramm krómot választunk le. Mennyi a krómion oxidációfoka?
147. Cinket ZnCl_2 -oldat elektrolízisével állítunk elő. Mennyi cink állítható elő 24,0 óra alatt 20 000 kW teljesítmény felhasználásával, ha 4,50 V kapocsfeszültséget alkalmazunk és az áramkihasználás 90,0 százalékos?
148. A telített BaSO_4 -oldat fajlagos vezetése $2,95 \cdot 10^{-6} \text{ S/cm}$. A Ba^{2+} - és a SO_4^{2-} -ionok mozgékonyságának ismeretében határozzuk meg a BaSO_4 oldhatósági szorzatát! $u(1/2\text{Ba}^{2+}) = 63,7 \text{ S}\cdot\text{cm}^2\cdot\text{mol}^{-1}$, $u(1/2\text{SO}_4^{2-}) = 79,8 \text{ S}\cdot\text{cm}^2\cdot\text{mol}^{-1}$.
149. A $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú ammóniaoldat fajlagos ellenállása $2,72 \cdot 10^3 \Omega \cdot \text{cm}$. Számítsuk ki az oldat pH-ját! $u(\text{NH}_4^+) = 73,7 \text{ S}\cdot\text{cm}^2\cdot\text{mol}^{-1}$, $u(\text{OH}^-) = 200,0 \text{ S}\cdot\text{cm}^2\cdot\text{mol}^{-1}$.
150. A $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú ecetsavoldat fajlagos ellenállása $2,17 \cdot 10^3 \Omega \cdot \text{cm}$. Számítsuk ki az ecetsavoldat végtelen híg oldatra extrapolált moláris fajlagos vezetését! Mekkora az ecetsav disszociációfoka a $0,100 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú oldatban? $K_s(\text{CH}_3\text{COOH}) = 1,79 \cdot 10^{-5}$

12.9. Megoldások

1. Háromszorosára nő
2. 950 dm^3 -es tartállyal
3. $4,0 \text{ g/mol}$, He
4. $11,3 \text{ MPa}$
5. $4,87\%$ -át, 193 kPa
6. 135 g/mol , S_2Cl_2
7. $6,0 \cdot 10^{21}$
8. $10,2 \text{ MPa}$
9. 101 kPa
10. $0,881 \text{ g/dm}^3$
11. 134 g/mol
12. $0,167 \text{ MPa}$, $15,4 \text{ g}$
13. 900 kPa nyomásig
14. 1732 MPa
15. $22,3\%$
16. 1710 g
17. $17,5 \text{ g/dm}^3$, $56,7$ tömegszázalék, $8,52 \text{ mol/dm}^3$

18. $18,36 \text{ mol/dm}^3, 1800 \text{ g/dm}^3, 90,00 \text{ mólszázalék}$
19. a) 150 g, b) 175 g, c) 690 g
20. a) 11,1 g, b) 16,2 g, c) 16,7 g, d) 159 g
21. 22,1 kg
22. 18 g 78 tömegszázalékos és 12 g 48 tömegszázalékos
23. 12,8 mólszázalékos
24. 0,111
25. 4,71 mólszázalékos
26. 20,0 tömegszázalék, 11,0 mólszázalék
27. 149 kg
28. 394 t
29. $20,0 \text{ }^\circ\text{C}$ -on 34,8 g/100 g víz, $50,0 \text{ }^\circ\text{C}$ -on 37,0 g/100 g víz
30. 14,9 g
31. 27,7 g
32. 11,1 g, 66,2%
33. $0,377 \text{ }^\circ\text{C}$
34. 8
35. $100,16 \text{ }^\circ\text{C}$
36. 95 350 g/mol
37. 342 g/mol
38. a) 6,58 g, b) 18,39 g
39. 75 g/mol, $\text{C}_2\text{H}_5\text{NO}_2$
40. 0,37 százalék
41. 145 g/mol
42. $100,078 \text{ }^\circ\text{C}$, 371 kPa
43. $1,37 \text{ }^\circ\text{C}$
44. 94,8 százalék
45. 65,2 g/mol

46. 2
47. 94,1 kg
48. 305 m³
49. 800 cm³ 10,0 százalékos HCl, 2,26 mólszázalékos ZnCl₂-ra nézve
50. 16,2 g BaSO₄, 8,0 tömegszázalék HCl, 12,4 tömegszázalék H₂SO₄ és 79,6 tömegszázalék H₂O
51. 14,8 t
52. 49 500 Pa
53. $3 \text{ P} + 5 \text{ HNO}_3 + 2 \text{ H}_2\text{O} = 3 \text{ H}_3\text{PO}_4 + 5 \text{ NO}$, 15,8 kg
54. 0,707 kg
55. 0,739 m³
56. 0,0059
57. 12,8 térfogatszázalék CO₂, 12,8 térfogatszázalék H₂O, 1,7 térfogatszázalék O₂ és 72,7 térfogatszázalék N₂
58. $4 \text{ S} + 6 \text{ KOH} = 2 \text{ K}_2\text{S} + 4 \text{ K}_2\text{S}_2\text{O}_3 + 3 \text{ H}_2\text{O}$, 26,8 dm³
59. 0,91 térfogatszázalék
60. 26,5 tömegszázalék Mg, 73,5 tömegszázalék Al
61. 10,2 g NH₄Cl és 9,8 g NH₄Br
62. 0,100 mol/dm³
63. 1,01 g
64. 0,00388
65. 2 mol
66. 2,71 cm³/g
 $8 \text{ KMnO}_4 + 3 \text{ H}_2\text{S} = 8 \text{ MnO}_2 + 3 \text{ K}_2\text{SO}_4 + 2 \text{ KOH} + 2 \text{ H}_2\text{O}$
67. 7,46 g / 100 g víz
- $$2 \text{ ClO}_3^- + 3 \text{ As}_2\text{O}_3 + 9 \text{ H}_2\text{O} = 6 \text{ AsO}_4^{3-} + 2 \text{ Cl}^- + 18 \text{ H}^+$$
- $$3 \text{ As}_2\text{O}_3 + 2 \text{ BrO}_3^- + 9 \text{ H}_2\text{O} = 6 \text{ AsO}_4^{3-} + 2 \text{ Br}^- + 18 \text{ H}^+$$
68. 0,503 kg
69. 37,7 g, 76,0 százalék víz és 24,0 százalék jég

70. 1564 kJ
71. -44 kJ
72. -12,86 kJ
73. -890 kJ/mol
74. -1591 kJ
75. -10,2 kJ
76. +158 kJ
77. $3,10 \cdot 10^{-5}$
78. $[\text{PCl}_3]_e = 0,014 \text{ mol/dm}^3$, $[\text{PCl}_5]_e = [\text{Cl}_2]_e = 0,106 \text{ mol/dm}^3$
79. $K_n = 22,4$, $K_p = 132$
80. $[\text{H}_2]_e = 0,032 \text{ mol/dm}^3$, $[\text{F}_2]_e = 1,03 \text{ mol/dm}^3$, $[\text{HF}]_e = 1,94 \text{ mol/dm}^3$
81. $x_{\text{ecetsav}} = 0,29$, $x_{\text{etil-alkohol}} = 0,086$, $x_{\text{etil-acetát}} = 0,31$, $x_{\text{viz}} = 0,31$
82. $6,23 \cdot 10^{-3}$
83. $K_n = 0,096$, $\alpha = 0,64$, $M_{\text{át}} = 56 \text{ g/mol}$
84. $d = 351 \text{ g/dm}^3$
85. $7,5 \cdot 10^{-4}$
86. 83,2 százalék
87. $7,02 \cdot 10^{-3}$
- 88.

	Térfogat-százalékos összetétel	Parciális nyomás
HI	80,7	407 kPa
H₂	9,65	49 kPa
I₂	9,65	49 kPa

89. 4,0, 1,0
90. pOH: 3,0, 0,0; pH: 11,0, 14,0
91. 11,85
92. 7,02
93. 2,22
94. $K_s = 0,108$

95. 0,203
96. 2,29
97. 1,62
98. 8,09
99. 1,45 mol/dm³ koncentrációjú KNO₂
100. 1,32
101. 11,77
102. 8,77, hígítás után ugyanennyi
103. 9,07
104. 5,05
105. [H₂S] : [HS⁻] : [S²⁻] = 1,0 : 35 : 0,00011
106. 4,02; x(H₂A) = 0,12, x(HA⁻) = 0,76, x(A²⁻) = 0,12
107. 3,36
108. K₁ = 1,6 · 10⁻², K₂ = 9,7 · 10⁻⁸, kénessav
109. 5,45, 5,60
110. 10,5
111. 4,02
112. 1,54, 7,46
113. 6,50
114. 8,10
115. 4,79
116. 4,1 · 10⁻⁴ mol/dm³
117. x(M) = 1,13 · 10⁻²,
x(ML) = 1,59 · 10⁻¹,
x(ML₂) = 4,53 · 10⁻¹,
x(ML₃) = 3,40 · 10⁻¹,
x(ML₄) = 3,74 · 10⁻²,
[M] = 1,13 · 10⁻³ mol/dm³,
[ML] = 1,59 · 10⁻² mol/dm³,
[ML₂] = 4,53 · 10⁻² mol/dm³,
[ML₃] = 3,40 · 10⁻² mol/dm³,
[ML₄] = 3,74 · 10⁻³ mol/dm³,

118. $2,9 \cdot 10^{-6} \text{ mol/dm}^3$
119. $1,06 \cdot 10^{-10}$
120. $1,30 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3$
121. $L = 8,8 \cdot 10^{-12}$, a) $8,8 \cdot 10^{-8} \text{ mol/dm}^3$, b) $1,5 \cdot 10^{-5} \text{ mol/dm}^3$
122. $9,7 \cdot 10^{-7} \text{ mol/dm}^3$
123. $1,0 \cdot 10^{-3} \text{ mol/dm}^3$
124. 9,87
125. 7,0
126. $S(\text{PbCl}_2) = 1,58 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3$, $S(\text{PbI}_2) = 3,68 \cdot 10^{-4} \text{ mol/dm}^3$
127. 9,99 g
128. $3,49 \cdot 10^{-8}$
129. $0,022 \text{ g/dm}^3$
130. 11,6, $2,93 \cdot 10^{-8}$
131. 0,28 V
132. 0,73 V
133. 0,651 V, 0,730 V
134. 1,97 V
135. a) 0,059 V, b) 0,120 V
136. $1,75 \cdot 10^{-14}$
137. $2,79 \cdot 10^7$
138. $6,17 \cdot 10^{-7}$
139. 4810 C, 9620 C
140. 239 kg
141. $4,61 \cdot 10^7 \text{ J}$, $2,72 \cdot 10^7 \text{ J}$
142. 2 óra 21 perc
143. 200 cm^3
144. $7,47 \cdot 10^5 \text{ C}$
145. 0,142 g, 137 C

146. +3
147. 116 t
148. $1,06 \cdot 10^{-10}$
149. 11,1
150. $4,61 \text{ (S} \cdot \text{cm}^2\text{)}/\text{mol}$, 1,18 százalék

FELHASZNÁLT IRODALOM

- William M. Haynes (2010): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 91th Edition, Aqueous Solubility of Inorganic Compounds at Various Temperatures, Colorado, USA
- Steven S. Zumdahl (1989): Chemistry (Second edition), USA, D. C. Health and Company
- Jean B. Umland (1993): General Chemistry, USA, West Publishing Co.
- Veszprémi Tamás (2002): Kémiai Számítási Gyakorlatok, Budapest, Műegyetemi Kiadó
- Veszprémi Tamás (2008): Általános Kémia, Budapest, Akadémiai Kiadó
- Berecz Endre (1991): Kémia Műszakiaknak, Budapest, Nemzeti Tankönyvkiadó
- P. W. Atkins (1992): Fizikai Kémia I. (Egyensúlyok) és III. (változás), Budapest, Tankönyvkiadó
- Fodorné Csányi Piroska – Simándi László (1995): Szervetlen Kémia Nevezéktana, Budapest, Magyar Kémikusok Egyesülete
- Nyitrai József – Nagy József (1998): Útmutató a Szerves Vegyületek IUPAC-nevezéktanához, Budapest, Magyar Kémikusok Egyesülete
- Novák Lajos – Nyitrai József (2001): Szerves Kémia, Budapest, Műegyetemi Kiadó
- Novák Lajos – Nyitrai József – Hazai László (2001): Biomolekulák Kémiája, Budapest, Műegyetemi Kiadó
- Furka Árpád (1998): Szerves Kémia, Budapest, Nemzeti Tankönyvkiadó
- Siposné Kedves Éva – Horváth Balázs – Péntek Lászlóné (2004): KÉMIA 10. Szerves Kémiai Ismeretek, Szeged, Mozaik Kiadó
- Siposné Kedves Éva – Horváth Balázs – Péntek Lászlóné (2004): Munkafüzet KÉMIA 10. Szerves Kémia, Szeged, Mozaik Kiadó
- Villányi Attila (2008): Kémia 10., Szerves Kémia, Budapest, Műszaki Kiadó
- Villányi Attila (2010): Kémia Összefoglaló Középiskolásoknak, Budapest, Műszaki Kiadó
- Négyjegyű Függvénytáblázatok, Összefüggések és Adatok (2005), Budapest, Nemzeti Tankönyvkiadó

ÁBRÁK, ANIMÁCIÓK, VIDEÓK JEGYZÉKE

Ábrák

1.1.2.1. ábra: Az egyenes arányosság.....	8
1.1.2.2. ábra: A fordított arányosság.....	10
1.1.3.1. ábra: Hatványfüggvények.....	13
1.1.3.2. ábra: Gyökfüggvények.....	14
1.1.3.3. ábra: Exponenciális függvények.....	14
1.1.3.4. ábra: Logaritmusfüggvények.....	15
1.1.4.1. ábra: A két változó közti kapcsolat.....	16
1.1.4.2. ábra: A két változó logaritmusai közti kapcsolat.....	16
1.1.4.3. ábra: A két változó közti kapcsolat log-log diagramon ábrázolva.....	17
1.1.4.4. ábra: Az $y = f(x) = a \cdot x^n$ függvény.....	17
1.1.4.5. ábra: Az $y = f(x) = a \cdot 10^{b \cdot x}$ függvény.....	18
1.1.4.6. ábra: Az $y = f(x) = a \cdot \lg x$ függvény.....	18
1.1.5.1. ábra: Az extrapoláció hibái.....	19
1.1.5.2. ábra: Az oldat sűrűsége a tömegszázalék függvényében.....	20
1.1.5.3. ábra: A sűrűség számítása interpolációval.....	21
1.1.5.4. ábra: Az interpoláció szemléltetése hasonló háromszögekkel.....	22
1.1.5.5. ábra: Példa a lineáris extrapolációra.....	23
1.1.6.1. ábra: Az eredmények konvergenciája.....	25
1.1.6.2. ábra: Az iterációs eljárás szemléltetése.....	26
1.1.6.3. ábra: A nem megfelelő függvénykapcsolat következménye.....	27
1.1.6.4. ábra: A $g(x) = x^3 + 4 \cdot x^2 - 1$ függvény.....	28
1.2.3.1. ábra: A folyadékok hidrosztatikai nyomása.....	35
1.2.3.2. ábra: A munka.....	36
1.2.4.1. ábra: Coulomb törvénye.....	37
1.2.4.2. ábra: A belső ellenállás szemléltetése.....	39
1.2.4.3. ábra: A kapocsfeszültség az áramerősség függvényében.....	39
1.2.6.1. ábra: A fény mint hullám.....	42
1.2.6.2. ábra: A fény hullámhossza.....	43
2.3.1. ábra: Különböző atompályák alakja.....	48
2.3.2. ábra: A p-pálya lehetséges irányultságai.....	49
2.3.3. ábra: Az alhéjak betöltési sorrendje.....	51
2.5.1. ábra: Az elektronok betöltődési sorrendje a periódusos rendszerben.....	58
2.5.2. ábra: A periódusos rendszer mezői.....	59
2.5.3. ábra: A periódusos rendszer.....	60
2.5.4. ábra: A periódusos rendszer felosztása az atomok fémes jellege szerint.....	62
2.6.1.1. ábra: A neutronszám és protonszám aránya a tömegszám függvényében.....	63
2.6.1.2. ábra: A relatív atomtömeg a rendszám függvényében.....	63
2.6.2.1. ábra: Az atomsugár változása a periódusos rendszerben.....	64
2.6.3.1. ábra: Az elemek halmazállapota.....	65
2.6.4.1. ábra: Az elemek maximális vegyértéke a periódusos rendszerben.....	66
2.6.5.1. ábra: Az ionizációs energia változása a periódusos rendszerben.....	71
2.6.5.2. ábra: Az elektronegativitás változása a periódusos rendszerben.....	73
3.1.1. ábra: A kötés jellege és az elektronegativitás.....	79
3.1.1.2. ábra: Példák átmeneti jellegű kötésekre.....	79
3.1.1.3. ábra: Az oktettszabály.....	80
3.1.1.4. ábra: A σ -kötés.....	82
3.1.1.5. ábra: A nitrogénmolekula kialakulása.....	83
3.1.1.6. ábra: A nitrogénmolekula σ -kötése.....	83
3.1.1.7. ábra: A nitrogénmolekula π -kötései.....	83

3.1.2.1. ábra: A dipólus-dipólus kötés.....	88
3.1.2.2. ábra: A hidrogénkötés	88
3.1.2.3. ábra: A dipólus-indukált dipólus kötés.....	89
3.1.2.4. ábra: A diszperziós kölcsönhatás.....	89
3.2.3.1. ábra: Tetraédes elrendeződés.....	99
3.2.3.2. ábra: Négyzetes elrendeződés.....	100
4.1.1. ábra: Homogén, inhomogén és heterogén rendszerek	105
4.3.1.1. ábra: Fázisátalakulások.....	107
4.3.1.2. ábra: Hőmérséklet–idő diagram állandó nyomás mellett	108
4.3.1.3. ábra: Fázisátalakulások hőváltozásai.....	110
4.3.3.1. ábra: A gőztenzió kialakulása.....	115
4.3.3.2. ábra: A gőztenzió különböző hőmérsékleteken.....	116
4.3.3.3. ábra: A forráspont.....	117
4.3.4.1. ábra: A gőznyomás a hőmérséklet függvényében	119
4.3.4.2. ábra: Tiszta anyagok fázisdiagramja	120
4.3.4.3. ábra: A szén-dioxid felületi feszültségének a hőmérsékletfüggése	121
4.3.4.4. ábra: A szén-dioxid sűrűségének a hőmérsékletfüggése	122
4.3.4.5. ábra: A szén-dioxid moláris párolgáshőjének a hőmérsékletfüggése.....	122
4.3.5.1.1. ábra: Boyle–Mariotte-törvény	123
4.3.5.1.2. ábra: Charles-törvény (Gay-Lussac I. törvénye)	124
4.3.5.1.3. ábra: Gay-Lussac-törvény (Gay-Lussac II. törvénye).....	125
5.6.5.1. ábra: Telített oldatban oldott anyag tömegszázaléka a hőmérséklet függvényében.....	176
5.6.5.2. ábra: Inverz oldhatóság	177
5.6.5.3. ábra: A nátrium-klorid oldhatósága a hőmérséklet függvényében	182
6.1.1. ábra: Víz és etilén-glikol elegy fagyáspontja az összetétel függvényében.....	193
6.2.1.1. ábra: Különböző anyagok fagyáspontcsökkenése a Raoult-koncentráció függvényében	195
6.2.2.1. ábra: Az oxálsav oldat fagyáspontcsökkenése a koncentráció függvényében.....	196
6.2.2.2. ábra: Az oxálsav van 't Hoff-faktora a koncentráció függvényében.....	196
6.3.1. ábra: Az ozmózis szemléltetése.....	197
7.4.1. ábra: Krómionok színei	223
7.4.2. ábra: Vanádiumionok színe	223
7.6.1. ábra: A vizsgált rendszer és környezete	272
7.6.1.1. ábra: Réz (piros) és víz (kék) hőmérséklete az idő függvényében	275
7.6.2.1. ábra: Az endoterm és exoterm oldódás	280
7.6.3.1. ábra: Bombakaloriméter sematikus rajza	281
7.6.3.2. ábra: A Hess-tétel szemléltetése	283
7.6.3.3. ábra: A Hess-tétel szemléltetése	285
7.7.1.1. ábra: Az egyes anyagok koncentrációja az idő függvényében	294
7.7.1.2. ábra: A reakciósebesség az idő függvényében	295
7.7.2.1. ábra: Nulladrendű reakció sebessége az idő függvényében	296
7.7.2.2. ábra: Az A anyag koncentrációja az idő függvényében nulladrendű reakció esetén.....	297
7.7.2.3. ábra: Elsőrendű reakció sebessége az idő függvényében	298
7.7.2.4. ábra: Az A anyag koncentrációja az idő függvényében elsőrendű reakció esetén	298
7.7.2.5. ábra: Másodrendű reakció sebessége az idő függvényében	299
7.7.2.6. ábra: Az A anyag koncentrációja az idő függvényében másodrendű reakció esetén	299
7.7.2.7. ábra: Sorozatos reakció komponenseinek koncentrációja az idő függvényében.....	301
7.7.2.7. ábra: Párhuzamos reakciók komponenseinek koncentrációja az idő függvényében	302
7.7.2.7. ábra: Egyensúlyi reakció komponenseinek koncentrációja az idő függvényében.....	303
7.7.3.1. ábra: Az aktiválási energia és az aktivált komplex.....	304
7.7.3.2. ábra: Katalizátor hatása az aktiválási energiára.....	305
7.8.1. ábra: Az A anyag koncentrációja az idő függvényében	307
7.8.2. ábra: Az eredmények ábrázolása elsőrendű reakciót feltételezve	309
7.8.3. ábra: Az eredmények ábrázolása másodrendű reakciót feltételezve	309
8.3.3.1. ábra: A van 't Hoff-egyenlet linearizált formája	326
8.3.3.2. ábra: Az egyensúlyi állandót ábrázolva a hőmérséklet függvényében	326

8.6.1.4.1. ábra: Erős sav extrém híg oldatának pH-ja.....	360
8.6.1.5.1. ábra: A disszociációfok koncentrációfüggése két különböző savi disszociációs állandójú gyenge sav esetén.....	363
8.6.1.5.2. ábra: Két gyenge sav pH-jának koncentrációfüggése.....	364
8.6.1.8.1. ábra: Egy erős sav pH-ja a koncentráció függvényében.....	371
8.6.1.8.2. ábra: Egy gyenge sav pH-ja a koncentráció függvényében.....	373
8.6.1.8.3. ábra: Nagyon gyenge sav pH-ja a koncentráció függvényében.....	374
8.6.1.8.4. ábra: A disszociációfok a koncentráció függvényében.....	374
8.6.1.8.5. ábra: A pH a koncentráció függvényében.....	375
8.6.1.8.6. ábra: Savoldatok pH-ja a koncentráció függvényében.....	376
8.6.1.10.2. ábra: KH_2PO_4-, illetve K_2HPO_4-oldatok pH-ja a koncentráció függvényében.....	393
8.6.1.10.3. ábra: Különböző foszfátoldatok pH-ja.....	403
8.6.1.10.4. ábra: Különböző foszfátoldatok pH-ja univerzális indikátorral jelezve.....	403
8.6.1.11.1. ábra: A pufferkapacitás.....	416
8.6.1.13.1. ábra: HCl-oldat titrálási görbéje.....	433
8.6.1.13.2. ábra: Különböző koncentrációjú oldatok titrálási görbéje.....	434
8.6.1.13.3. ábra: NaOH-oldat titrálási görbéje.....	435
8.6.1.13.4. ábra: A fenolftalein indikátor.....	435
8.6.1.13.5. ábra: Indikátorok átcsapása: az egymás mellett található oldatok pH-ja között 0,1 egység a különbség.....	436
8.6.1.13.6. ábra: Az univerzális indikátor összetevői.....	437
8.6.1.13.7. ábra: Univerzális indikátor.....	437
8.6.1.13.8. ábra: A fenolftalein átcsapási tartománya.....	438
8.6.1.13.9. ábra: A metilnarancs indikátor.....	438
8.6.1.13.10. ábra: A fenolftalein és a metilnarancs átcsapási tartománya.....	439
8.6.1.13.11. ábra: Az ecetsav titrálási görbéje.....	440
8.6.1.13.12. ábra: Három különböző sav azonos koncentrációjú oldatának titrálási görbéje.....	440
8.6.1.13.13. ábra: A fenolftalein és a metilnarancs átcsapási tartománya gyenge sav esetén.....	441
8.6.1.13.14. ábra: A fenolftalein és a metilnarancs átcsapási tartománya gyenge bázis esetén.....	441
8.6.1.13.14. ábra: A kénessav titrálási görbéje.....	442
8.6.1.13.15. ábra: Többértékű sav titrálási görbéje.....	442
8.6.1.13.16. ábra: Az oxálsav titrálási görbéje.....	443
8.6.1.13.17. ábra: Az oxálsav titrálási görbéje.....	443
8.6.1.13.18. ábra: A foszforsav titrálási görbéje.....	444
8.6.1.13.19. ábra: A foszforsav titrálási görbéje.....	444
8.6.1.14.1. ábra: Egyensúlyi koncentrációk a pH függvényében egyértékű gyenge sav esetén.....	445
8.6.1.14.2. ábra: Egyensúlyi koncentrációk logaritmusai a pH függvényében, egyértékű gyenge sav esetén.....	446
8.6.1.14.3. ábra: Egyensúlyi koncentrációk a pH függvényében, kétértékű gyenge sav esetén.....	447
8.6.1.14.4. ábra: Egyensúlyi koncentrációk logaritmusai a pH függvényében, kétértékű gyenge sav esetén.....	448
8.6.1.14.5. ábra: Egyensúlyi koncentrációk a pH függvényében, háromértékű sav esetén.....	449
8.6.1.14.6. ábra: Egyensúlyi koncentrációk logaritmusai a pH függvényében, háromértékű sav esetén.....	449
8.6.2.1. ábra: Az egyes ionok koncentrációja az egyensúlyi szabad ammóniakoncentráció logaritmusának függvényében.....	453
8.6.2.2. ábra: Az egyes ionok koncentrációjának logaritmusai az egyensúlyi szabad ammóniakoncentráció logaritmusának függvényében.....	454
8.6.2.3. ábra: Az egyes ionok koncentrációjának logaritmusai az egyensúlyi szabad ammóniakoncentráció logaritmusának függvényében.....	455
8.6.2.4. ábra: Réz(II)-amin komplexek megoszlási diagramja.....	456
8.6.2.5. ábra: Vas(III)-tiocianát komplexek megoszlási diagramja.....	457
8.6.2.6. ábra: Vas(III)-fluorid komplexek megoszlási diagramja.....	457
8.6.2.7. ábra: Kobalt(III)-amin komplexek megoszlási diagramja.....	458
8.6.2.8. ábra: Higany(II)-klorid komplexek megoszlási diagramja.....	459

8.6.3.1.1. ábra: Az Ag^+ - és Cl^- -ionok koncentrációja az idő függvényében	464
8.6.3.2.1. ábra: A számított $[\text{K}^+] \cdot [\text{ClO}_4^-]$ szorzat	472
8.6.3.2.2. ábra: A telítéshez szükséges térfogatok	473
8.6.3.2.3. ábra: A mérhető $[\text{K}^+] \cdot [\text{ClO}_4^-]$ szorzat	473
8.6.3.2.4. ábra: A kivált kálium-perklorát a nyagmennyisége	474
8.6.3.2.5. ábra: A számított $[\text{K}^+] \cdot [\text{ClO}_4^-]$ szorzat különböző kiindulási koncentrációk esetén	475
8.6.3.3.1. ábra: Csillogó ólom(II)-jodid	481
8.6.3.4.1. ábra: Az oldhatóság pH-függése	487
8.6.3.4.2. ábra: Az oldhatóság logaritmusa a pH függvényében	488
8.6.3.4.3. ábra: Az oldhatóság logaritmusa a pH függvényében	489
8.6.3.4.4. ábra: A BaF_2 , SrF_2 és CaF_2 oldatossági görbéje a pH függvényében	490
8.6.3.4.5. ábra: A vas(II)-szulfid oldhatóságának logaritmusa a pH függvényében	492
8.6.3.4.6. ábra: Szulfidesapadékok oldhatósága	493
8.6.3.4.7. ábra: Szulfidesapadékok	494
8.6.3.4.8. ábra: Karbonátsapadékok oldhatósága	494
8.6.3.4.9. ábra: Az ezüst-klorid oldhatóságának logaritmusa a szabad ammóniakoncentráció függvényében	496
8.6.3.4.10. ábra: Az AgCl , AgBr és AgI oldhatóságának logaritmusa a szabad ammóniakoncentráció függvényében	498
8.6.3.4.11. ábra: A $\text{Zn}(\text{OH})_2$ oldhatóságának logaritmusa a pH függvényében	499
8.6.3.4.12. ábra: A $\text{Zn}(\text{OH})_2$ oldhatóságának logaritmusa a pH függvényében	500
8.6.3.4.13. ábra: A $\text{Zn}(\text{OH})_2$, a $\text{Pb}(\text{OH})_2$ és a $\text{Sn}(\text{OH})_2$ csapadékok oldhatóságának logaritmusa a pH függvényében	501
8.7.1. ábra: Vizes jóoldat extrakciója szén-tetrakloriddal	502
8.7.2. ábra: A választótölcsér	502
8.7.3. ábra: A kiindulási oldottanyag-tartalom aránya az extrakció ismétlésszámának függvényében	507
8.7.4. ábra: A szükséges extrahálószer össztérfogata az extrakció lépésszámának a függvényében ..	509
8.7.5. ábra: A vízbe átvitt fenol anyagmennyisége a pH függvényében	512
8.7.6. ábra: Két különböző gyenge sav vízbe átvitt anyagmennyisége a pH függvényében	512
9.1.1. ábra: A galvánelem	514
9.5.1. ábra: Ólomra kivált ezüst („Szaturnusz fája”)	538
9.5.2. ábra: Higanyra kivált ezüst („Diána fája”)	538
9.5.3. ábra: Egyes redoxirendszerek pH-függése	542
9.6.1. ábra: Az elektromotoros erő a reakcióhányados logaritmusának függvényében	545
9.7.1. ábra: Az áramerősség a feszültség függvényében	549
9.7.2. ábra: CuBr_2 -oldat elektrolízise (a jobb oldali elektród az anód)	550
9.7.1.1. ábra: Cink-jodid-oldat elektrolízise grafit-elektrodok között (a jobb oldali elektród az anód) ..	550
9.7.1.2. ábra: Nátrium-szulfát-oldat elektrolízise platina-elektrodok között (a jobb oldali elektród az anód) ..	551
9.7.2.1. ábra: Cink-nitrát és salétromsav koncentrációjának változása az idő függvényében	562
9.8.1. ábra: $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]\text{Cr}_2\text{O}_7$ -oldat elektrolízise	565
9.8.1. ábra: Különböző anyagok vizes oldatának fajlagos vezetése a koncentráció függvényében	569
9.8.2. ábra: Különböző anyagok vizes oldatának moláris fajlagos vezetése a koncentráció reciprokának a függvényében	570
9.8.3. ábra: Különböző anyagok vizes oldatának moláris fajlagos vezetése a koncentráció gyökének függvényében	571
9.8.4. ábra: Konduktometriás titrálási görbe	578
9.8.5. ábra: Konduktometriás titrálási görbe	579
11.11.6.1. ábra: Az ezüsttükörpróba	651
11.11.6.2. ábra: A Fehling-reakció	652
11.12.7.1. ábra: A mosás művelete	660
11.17.6.1. ábra: Aminosavformák megoszlása a pH függvényében	672
11.17.6.2. ábra: Savasan disszociáló csoportot tartalmazó aminosav formáinak megoszlása a pH függvényében	673
11.17.6.3. ábra: Bázisosan disszociáló csoportot tartalmazó aminosav formáinak megoszlása a pH függvényében	673

11.18.3.1. ábra: Az α -hélix szerkezete.....	676
11.18.3.2. ábra: A β -redő szerkezete.....	676
11.18.3.3. ábra: Egy globuláris fehérje.....	677
11.18.3.4. ábra: Coulomb-kölcsönhatás.....	678
11.18.3.5. ábra: Diszulfidhidak.....	678
11.18.3.6. ábra: Hidrogénkötés.....	679
11.18.3.7. ábra: Van der Waals-kölcsönhatások.....	679
11.18.4.1. ábra: A xantoprotein-reakció.....	680
11.18.4.2. ábra: A biuret-reakció.....	680
11.18.4.3. ábra: Fehérjeoldat kicsapása: 1) konyhasóoldattal 2) melegítéssel 3) acetonnal.....	681

Animációk, videók

1.1.6.1. animáció: Az iteráció.....	26
2.5.1. animáció: Az elektronok betöltődési sorrendje és a periódusos rendszer.....	58
3.1.1.1. animáció: Az ionos kötés kialakulása.....	75
3.1.1.2. animáció: A fémes kötés kialakulása.....	76
3.1.1.3. animáció: A kovalens kötés kialakulása.....	77
3.1.2.1. animáció: A dipólus-dipólus kötés kialakulása.....	88
3.1.2.2. animáció: A dipólus-indukált dipólus kötés kialakulása.....	89
3.2.2.1. animáció: A molekulák térszerkezete.....	98
4.3.3.1. videó: A szökőkút kísérlet.....	114
4.3.3.2. videó: Az „ugráló” nátrium.....	115
5.6.1.1. animáció: A keverési egyenlet.....	168
5.6.2.1. animáció: Oldatok hígítása.....	173
5.6.3.1. animáció: Oldatok töményítése oldott anyag hozzáadásával.....	174
5.6.5.1. videó: Kristálykiválás.....	177
5.6.5.2. videó: Kristálykiválás elősegítése kaparással.....	177
5.6.5.3. videó: Kristálykiválás elősegítése oltókristállyal.....	178
6.3.1. videó: „A vegyész virágoskertje”.....	199
7.1.1. videó: A kalcium-karbonát és sósav reakciója.....	208
7.4.1. videó: A nátrium és klór reakciója.....	216
7.4.2. videó: A mangántartalmú ionok színei.....	224
7.6.2.1. videó: Oldódás során tapasztalható hőváltozások.....	279
7.6.3.1. videó: Alumínium és jód reakciója.....	280
7.6.3.2. videó: Cink és jód reakciója.....	281
7.6.3.3. videó: Az ammónium-dikromát bomlása.....	281
7.7.1. videó: A bárium-szulfát leválása.....	292
7.7.2. videó: Elemi kén leválása.....	293
7.7.3. videó: Landolt reakciók.....	293
7.7.4. videó: Vas(III)-komplexek képződése.....	293
8.3.1. videó: Kromát-dikromát egyensúly.....	327
8.3.2. videó: Réz(II)ionok komplexképzési egyensúlya.....	327
8.3.3. videó: Kobalt(II)ionok komplexálódása.....	327
8.3.4. videó: Réz(I)-jodid képződése.....	327
8.3.5. videó: Nitrogén-oxidok egyesülése és bomlása.....	328
8.6.3.2.1. videó: Ezüst-klorid és ezüst-kromát csapadékok leválása.....	465
11.1.5.1. animáció: Tükörképi párok.....	606
11.2.4.1. animáció: Az etán térszerkezete.....	617
11.17.2.1. animáció: Az aminosavak térszerkezete.....	671
11.18.3.1. animáció: Egy fehérje térszerkezete.....	678
11.19.7.1. animáció: A glükóz térszerkezete.....	685
11.19.7.2. animáció: A fruktóz térszerkezete.....	686
11.19.7.3. animáció: A szacharóz térszerkezete.....	686