

# Kémiai reakciók

**Anyagtan; Környezeti elemek  
védelmének alkalmazott  
kémiaja 1.  
11. előadás**

# Kémiai reakció

- Kémiai reakció:
  - különböző anyagok kémiai összetételének, ill. szerkezetének megváltozásával járó folyamatok, amelyeket
  - 40-400 kJ/mol nagyságrendű energiaváltozások kísérnek
  - az atomok vegyértékelektron-szerkezetében történik változás
  - reverzibilis vagy irreverzibilis

# Reakcióegyenletek

- A kémiai reakciókat képletek segítségével írjuk fel.



- A reakcióegyenletek tartalmazzák:
  - Bal oldalon: kiindulási anyagok (reaktáns) mennyiségét, képletét
  - Jobb oldalon: keletkezett anyagok (reakciótermékek) mennyiségét
  - Sztöchiometriai együtthatók
  - Kiindulási anyagokban és a reakciótermékekben az
    - atomok számának meg kell egyeznie
    - ionegyenletek esetén a töltésszámoknak meg kell egyezni
    - anyagmérleg

# Reakciótípusok (formális felosztás)

- **Egyesülés** ha két vagy több reagáló anyagból egyetlen termék keletkezik ( $A + B = AB$ )

- Egyszerű egyesülés



- **Addíció** Különböző anyagok egyesülése, amely során telítetlen kötést tartalmazó molekula  $\pi$ -kötése felbomlik, s alakít ki két újabb  $\sigma$ -kötést



- **Polimerizáció** Ha azonos, többszörös kovalens kötést tartalmazó molekulák (monomerek) hoznak létre óriásmolekulát.



# Reakciótípusok (formális felosztás)

- **Bomlás** kémiai kötés megszakad, a reagáló anyag két vagy több molekulára, atomra, ionra bomlik.
  - Homolízis (kovalens kötő elektronpár felbomlik)  
Pl.:  $\text{Br}_2 \rightarrow 2\text{Br}$
  - Heterolízis (kovalens kötő elektronpár mindkét elektronja egyik bomlástermékben marad)  
Pl.:  $\text{HCl} \rightarrow \text{H}^+ + \text{Cl}^-$
  - Disszociáció (reverzibilis bomlás)
    - Elektrolitikus disszociáció (elektrolit oldatban szolvatáció hatására)  
Pl.:  $\text{NaOH} \leftrightarrow \text{Na}^+ + \text{OH}^-$  (vízben)
    - Termikus disszociáció (hő hatására a bomlás irányába játszódik le, alacsonyabb hőmérsékleten az egyesülés irányába)



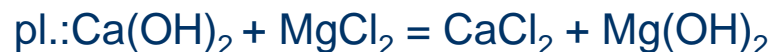
A nemfémes elemek oxidjai alacsony hőmérsékleten vízzel ált.savat képeznek, magasabb hőmérsékleten ez a folyamat a bomlás irányába mutat.



# Reakciótípusok (formális felosztás)

- Cserebomlás (egyidőben végbemenő egyesülés és bomlás)

a reagáló vegyületek hasonló jellemű alkotórészei kicserélődnek.



- Csapadékképződés

- oldat+oldat = csapadék+ oldat



- Közömbösítés

- sav + bázis = só + víz



- Gázképződéssel járó

- Pl.: karbonát + sav = só + víz + szén-dioxid



# Reakciótípusok reakciómechanizmus szerint

- **Egyszerű reakció** telített molekulák egy lépésben lezajló reakciói



- **Láncreakció láncfolyamatok** szabad atomok, gyökök részvételével

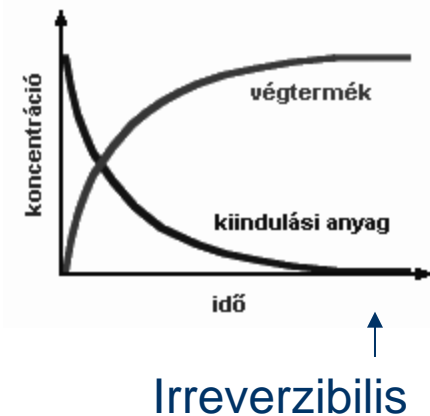
– **láncindítás, lánc fenntartás, lánczáró lépések**



- **Ionos reakció** főleg oldatokban játszódnak le, ahol az oldószer molekulák elősegítik az ionok képződését



# A kémiai reakciók sebessége



- **Reakciósebesség** a reakció sebessége: az egységnyi idő alatt egységnyi térfogatban átalakult reaktáns vagy a képződött termék mennyisége
- **Befolyásoló tényezők**
  - Koncentráció
  - Hőmérséklet
  - Aktiválási energia
  - Katalizátorok
  - Fajlagos felület, szemcseméret
  - Keverés

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



# Koncentráció, hőmérséklet

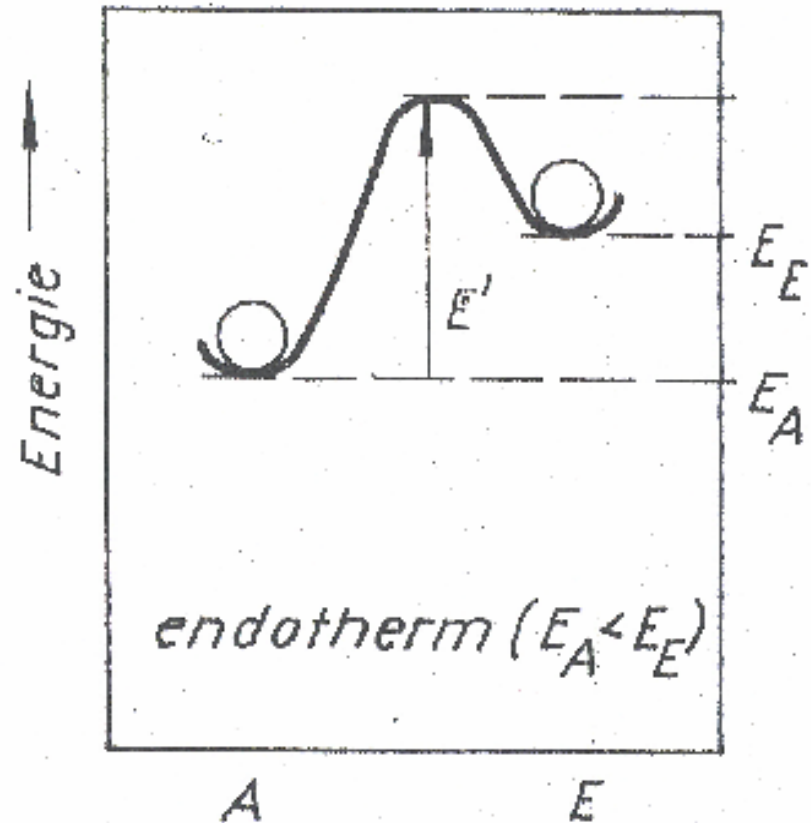
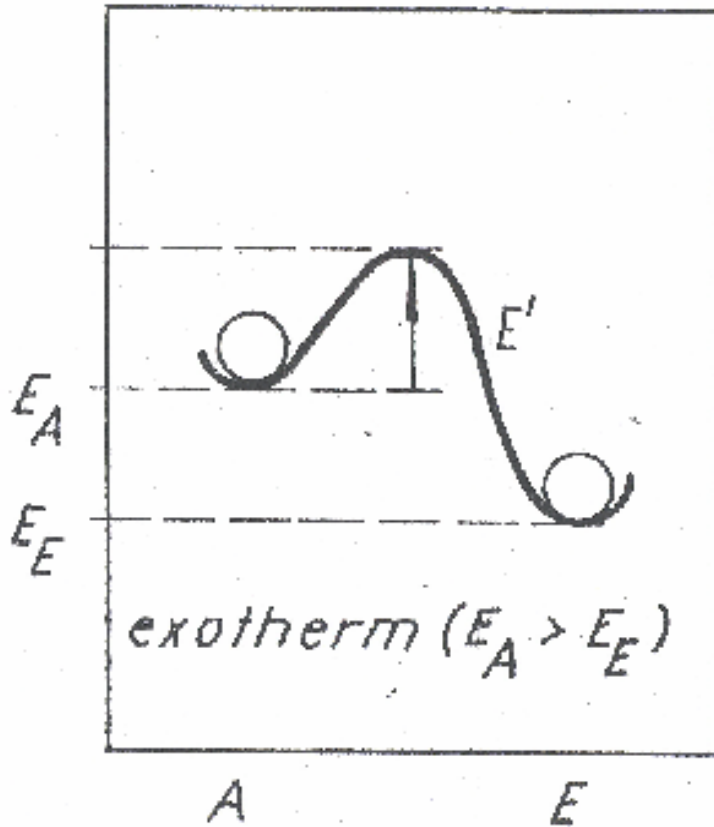


$$v = k \cdot [A]^a \cdot [B]^b$$

- Az „C és D” keletkezéséhez az „A” és „B”-nek ütköznie kell
- Állandó hőmérsékleten az ütközések annál gyakoribbak, minél nagyobb a koncentráció
- A hőmérséklet növelése gyorsítja a reakciópartnerek mozgását, így növeli az ütközések számát

# Aktiválási energia

$E'$ : a folyamat megindításához szükséges aktiválási Energia (fényE, hőE, ...)  
az az energia, amely egy mol aktivált komplexum keletkezéséhez szükséges.



$E_A$  (kiindulási állapot) és  $E_E$  (végállapot) közötti különbség a reakcióhő.

- A reakcióhő nagysága az aktiválási energiától független.
- Az aktiválási E befolyásolja a reakciósebességet, minél kisebb, annál gyorsabb a reakció.

## Katalizátor

- A reakció sebességét növelik, miközben a folyamatban maradandóan nem változnak.



(Az inhibitor lassítja a kémiai folyamatot.)

## Fajlagos felület, szemcseméret

- Heterogén fázisú reakciók esetén a részecskék szemcseméretének csökkentése növeli a reakció sebességét

# Keverés

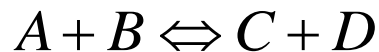
- Heterogén fázisú reakció esetén
  - Gyorsítja a reakciósebességet
    - segíti a reakciótermékek eltávolítását a reakciózónából

# Egyensúlyra vezető reakciók



- A kiindulási anyag és a termék kölcsönösen át tud alakulni egymásba
- Egyensúlyi állapot, amikor a keletkezés és fogyás egyforma sebességgel történik,  $v_1 = v_2$
- **(Az egyirányú - irreverzibilis - kémiai folyamatok valamilyen reakcióképességgel csak egy irányban végbemenő kémiai folyamatok. Pl.: a vizes közegben a gáz, csapadék, komplex, víz és más rosszul disszociálódó anyag keletkezésével járó folyamatok.)**

# Egyensúlyra vezető reakciók

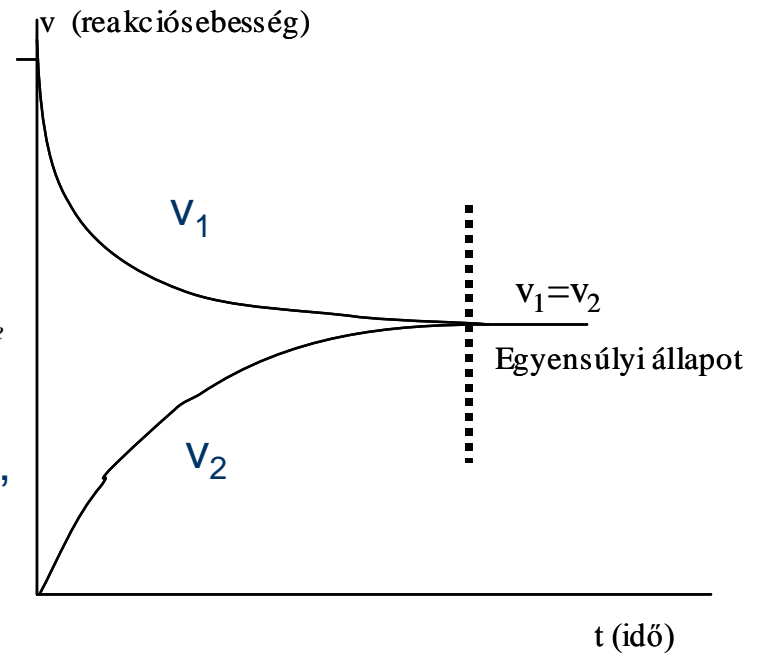


$$v_1 = k_1 \cdot [A] \cdot [B] \quad v_2 = k_2 \cdot [C] \cdot [D]$$

$$v_1 = v_2 \Rightarrow k_1 \cdot [A]_e \cdot [B]_e = k_2 \cdot [C]_e \cdot [D]_e$$

Mivel a  $k_1$  és  $k_2$  sebességi állandók  
állandó T-n függetlenek a koncentrációtól,  
Felírható:

$$K = \frac{k_1}{k_2} = \frac{[C]_e \cdot [D]_e}{[A]_e \cdot [B]_e}$$



# Egyensúlyi állandó (K)

- Közepes és nagy koncentrációjú oldatok esetén

$$a = f \cdot c \quad K = \frac{a_C \cdot a_D}{a_A \cdot a_B} \quad K = \frac{[C] \cdot f_C \cdot [D] \cdot f_D}{[A] \cdot f_A \cdot [B] \cdot f_B} = \frac{[C] \cdot [D]}{[A] \cdot [B]} \cdot \frac{f_C \cdot f_D}{f_A \cdot f_B}$$

- Híg oldatok esetén

$a \approx 1$ , aktivitással nem kell számolni

- Általánosságban



$$K = \frac{[C]_e^q \cdot [D]_e^z}{[A]_e^x \cdot [B]_e^y}$$

**TÖMEGHATÁS törvénye**

K: Állandó T-n , p-n állandó érték

# Tömeghatás törvénye

Ha valamely dinamikus egyensúlyba jutott rendszerben úgy változtatjuk meg az egyik, vagy több anyag koncentrációját, hogy a koncentrációkból képzett tört értéke más lesz, mint az egyensúlyi állandóé, olyan folyamat indul meg, amelynek következtében a tört lecsökkent értéke nőni, megnőtt értéke pedig csökkenni fog.



# Le Chatelier – Braun elv (legkisebb kényszer elve)

- Ha egy kémiai rendszer egyensúlyban van, mindaddig nem észlelünk változást amíg valamelyik körülmény meg nem változik.
- **Le Chatelier elve** szerint egy egyensúlyi rendszert, ha külső hatás ér, akkor az egyensúly úgy változik meg, hogy a külső hatást csökkenteni tudja
  - Ha nyomás, hőmérséklet, koncentráció változik, akkor végeredményben az oda- vagy visszajátszódó reakciósebesség változik meg
  - Pl.: A nyomás növelése a rendszerben a térfogatcsökkenés irányába hat ( pl.: jég megolvad)
  - Az egyensúlyi reakciók egyik irányban exotermek a másik irányban endotermek. Ha növeljük a hőmérsékletet, akkor az egyensúly mindig az endoterm (hőelnyelő) irányba fog eltolódni.

# Disszociáció

- Elektrolitos disszociáció:
  - a vegyületek elmozdulásra képes ionokra bomlása oldás vagy olvasztás hatására
  - a poláros oldószerben való oldás mindig együtt jár solvatációval (ill. hidratációval), de nem szükségszerűen jár együtt elektrolitikus disszociációval)
- Disszociációfok ( $\alpha$ ):
  - megadja, hogy a kiindulási anyag hányad része bomlott el (törtszám)
    - teljesen disszociáló anyagok: erős elektrolitok
    - gyengén disszociáló anyagok gyenge elektrolitok
- Oldhatósági szorzat ( $L$ ):
  - rosszul disszociáló vagy rosszul oldódó elektrolitok disszociációja során képződő ionok megfelelő hatványon vett koncentrációinak szorzata

# Víz disszociációja

- A kémiaailag tiszta víz kismértékben vezeti az elektromos áramot, ez azt jelenti, hogy a víz molekulák kismértékben disszociálnak oxónium ( $H_3O^+$ ) és hidroxid ( $OH^-$ ) ionra.



- Egyensúlyi reakció, ezért felírható a tömeghatás törvénye

$$K_D = \frac{[H_3O^+]_e \cdot [OH^-]_e}{[H_2O]_e^2}$$

# Víz disszociációja

- A disszociált molekulák száma nagyon kevés szobahőmérsékleten, ezért a disszociálatlan molekulák koncentrációja nem változik, az értéke konstans, összevonható az egyensúlyi állandóval ( $K_D$ ), s megkapjuk a víz ionszorzatát:

$$K_D[\text{H}_2\text{O}]_e^2 = [\text{H}_3\text{O}^+]_e[\text{OH}^-]_e \quad K_D[\text{H}_2\text{O}]_e^2 = K_V$$

$$K_V = [\text{H}_3\text{O}^+]_e[\text{OH}^-]_e$$

- A  $K_V$  értéke 25°C-on  $10^{-14}$  mol/dm<sup>3</sup>

$$K_V = [\text{H}_3\text{O}^+]_e[\text{OH}^-]_e = 10^{-14}$$

- Mivel a víz autodisszociációja miatt az oxóniumionok és hidroxidionok száma megegyezik:

$$[\text{H}_3\text{O}^+] = [\text{OH}^-] = 10^{-7} \text{ mol/dm}^3$$

# Kémhatás

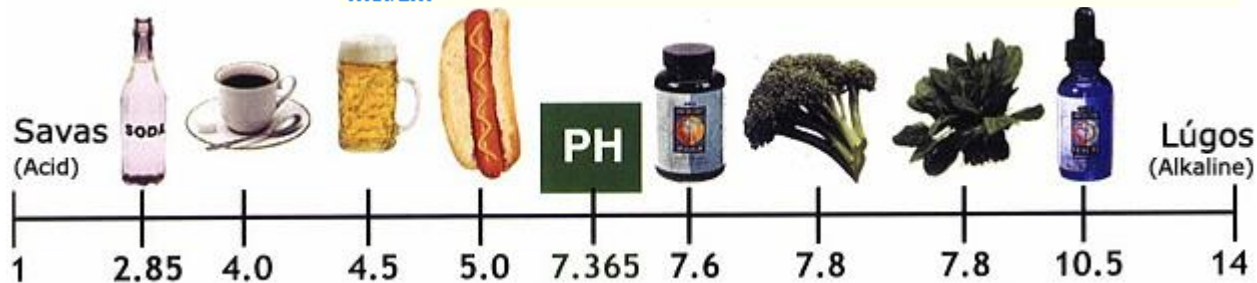
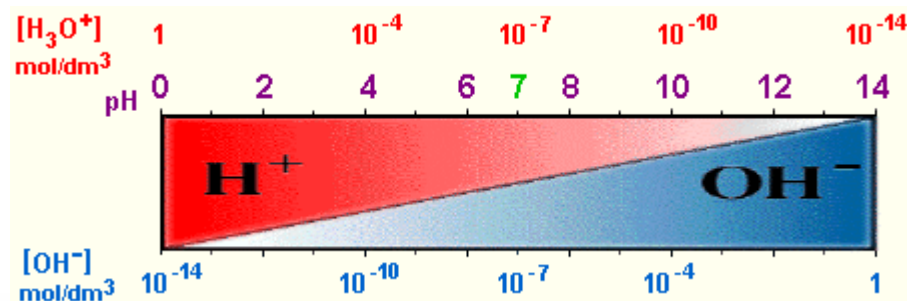


$$pK_v = -\lg K_v = -\lg 10^{-14} = 14$$

$$pH = -\lg[H^+]$$

$$pH + pOH = 14$$

$$pH = -\lg a_{H^+}$$



# Sav bázis egyensúlyok vizes oldatban

- Savak - bázisok - sók fogalma nem egységes

## sav-bázis elméletek

- **Arrhenius - Ostwald:** vízben - **sav**  $H^+$ -ra és anionra, a **bázis** kationra és  $OH^-$ -ra disszociál, reakciójukban só és víz képződik
- **Oldószerelmélet:** disszociáció során a **savak** az oldószer kationját, a **bázisok** pedig anionját növelik
- **Brönsted-Lowry:** a **sav**  $H^+$ -t ad át a **bázisnak**, a reakció konjugált sav-bázis párok között, nem kategorikus csoportok
- **Lewis-elmélet:** **savak** azok a vegyületek amelyek elektronpár felvételére alkalmasak, **bázisok** amelyek elektronpár átadásra képesek

# Savak, bázisok

## Brönsted-Lowry féle sav-bázis elmélet

### • Savak

– Azok a molekulák, ionok, melyek proton leadására hajlamosak

- Erős savak: HCl, HNO<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, HClO<sub>4</sub>
- Gyenge savak: H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, CH<sub>3</sub>COOH

### • Bázisok

– Azok a molekulák, ionok, melyek proton felvételére hajlamosak

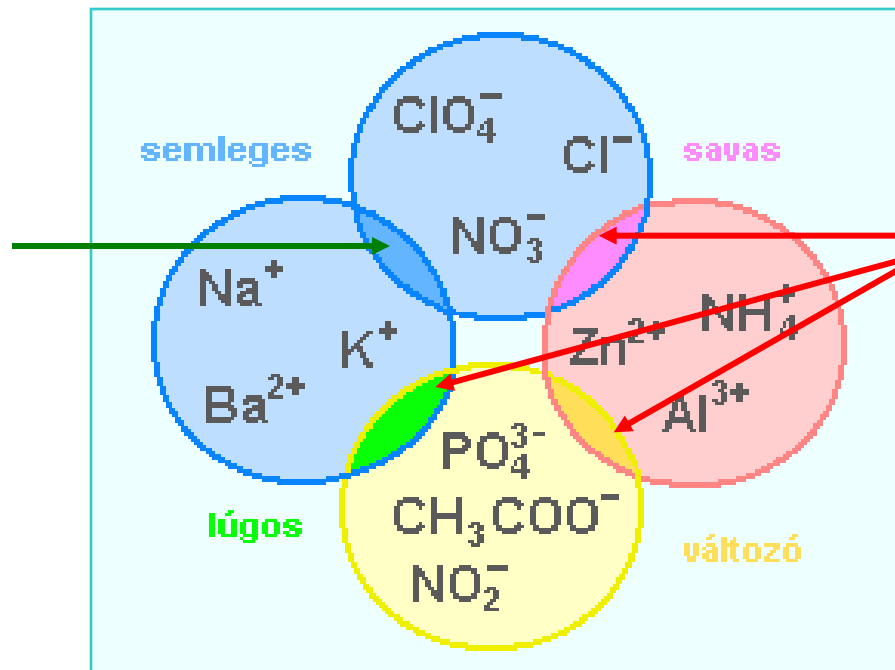
- Erős lúgok: NaOH, KOH, Ca(OH)<sub>2</sub>
- Gyenge lúg: NH<sub>4</sub>OH

	konjugált sav	konjugált bázis	
leg- erősebb	HClO <sub>4</sub>	ClO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	leg- gyengébb
	H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	HSO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	
	HCl	Cl <sup>-</sup>	
	<span style="border: 1px solid black; padding: 2px;">H<sub>3</sub>O<sup>+</sup></span>	<span style="border: 1px solid black; padding: 2px;">H<sub>2</sub>O</span>	
	H <sub>2</sub> SO <sub>3</sub>	HSO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	
	HF	F <sup>-</sup>	
	CH <sub>3</sub> COOH	CH <sub>3</sub> COO <sup>-</sup>	
	HSO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	SO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	
	H <sub>2</sub> S	HS <sup>-</sup>	
	NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>	NH <sub>3</sub>	
	HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	
	<span style="border: 1px solid black; padding: 2px;">H<sub>2</sub>O</span>	<span style="border: 1px solid black; padding: 2px;">OH<sup>-</sup></span>	
leg- gyengébb	HS <sup>-</sup>	S <sup>2-</sup>	leg- erősebb
	OH <sup>-</sup>	O <sup>2-</sup>	
	H <sub>2</sub>	H <sup>-</sup>	

# A sók csoportjai

vízzel nem  
reagálnak

NaCl  
KNO<sub>3</sub>  
MgSO<sub>4</sub>  
KClO<sub>4</sub>



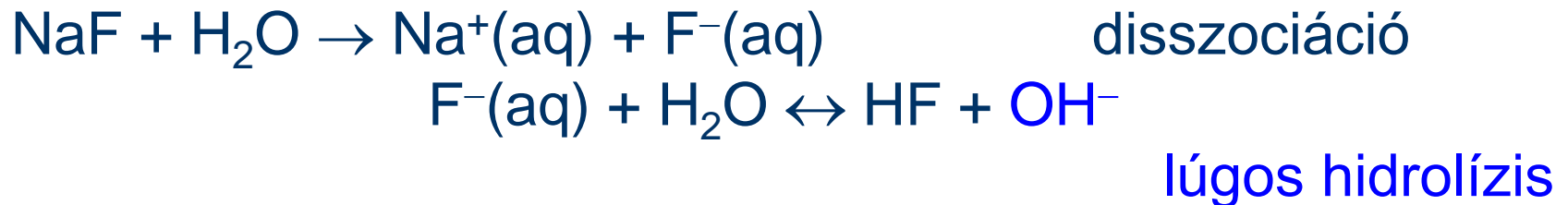
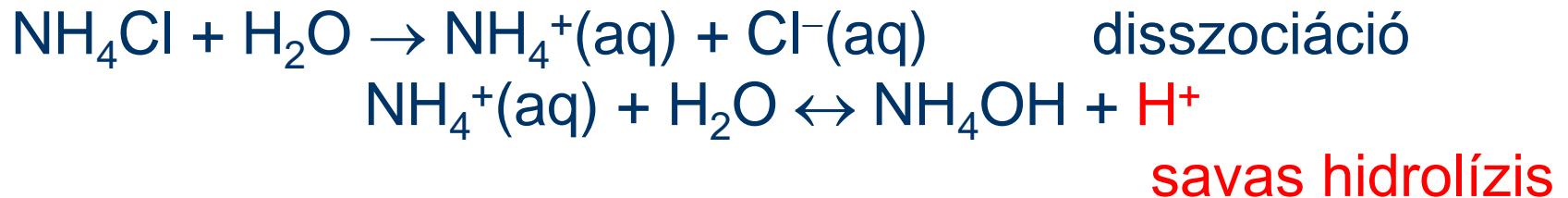
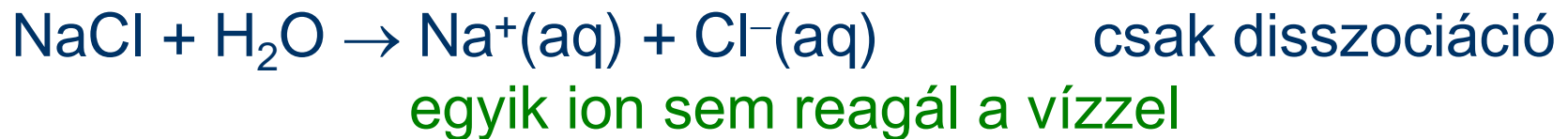
vízzel  
reakcióba  
lépnek

hidrolizáló sók

Zn(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>  
AlCl<sub>3</sub>  
CH<sub>3</sub>COONa  
Na<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>



# Sók hidrolízise



# Irodalmak

- Dr. Berecz Endre: Kémia műszakiaknak. Tankönyvkiadó, Budapest, 1991
- Horváth Attila – Sebestyén Attila – Zábó Magdolna: Általános kémia, Veszprémi Egyetem, Veszprém, 1991
- Dr. Bot György: Általános és szerves kémia. Medicina, Budapest, 1987
- Dr. Németh Zoltán: Radiokémia. Veszprémi Egyetem, Veszprém, 1996
- Dr. Mészárosné dr. Bálint Ágnes (szerk.): Műszaki kémia. (pdf), SZIE Gépészmérnöki Kar, Gödöllő, 2008
- Csányi Erika: Oktatási segédanyag az építőkémia tárgyhoz. (pdf), BME



Köszönöm a figyelmet!