

A Molekulák Világa Szervetlen Kémia

Erdélyi Áron

2018.09.12.

Tartalomjegyzék

1	Izotópok	4
1.1	Mik azok az izotópok és miért lehet instabil egy izotóp?	4
1.2	Izotóptáblázat	4
1.2.1	Mi az Izotóptáblázat?	4
1.2.2	Stabil és instabil izotópok elhelyezkedése	4
1.2.3	Izotóptáblázat használata bomlási tulajdonságoknál	4
1.2.4	Bomlási sor	4
1.2.5	Példa: U-238	4
1.3	Radioaktív atommagok bomlásának főbb módjai	4
1.3.1	α bomlás	4
1.3.2	β bomlás	4
1.3.3	γ bomlás	5
1.4	Pozitron emissziós topográfia	5
1.4.1	Célja	5
1.4.2	Működési elve	5
2	Elektron szerkezet	6
2.1	Bohr modell	6
2.2	Kvantumszámok	6
2.2.1	Főkvantumszám	6
2.2.2	Mellékkvantumszám	6
2.2.3	Mágneses kvantumszám	6
2.2.4	Spinkvantumszám	6
2.3	Kvantummechanikai törvények	6
2.3.1	Pauli-elv	6
2.3.2	Hund-szabály	7
2.3.3	Töltődési sorrend	7
2.3.4	Törvények alkalmazása	7
2.4	Kettős természet	7
2.4.1	de Broglie hipotézis	7
2.4.2	Hullámtulajdonság	8
2.4.3	Schrödinger-elektronmodell	8
2.4.4	Az elektron hullámfüggvénye	8
2.5	Spektroszkópia	8
2.5.1	Abszorpciós spektroszkópia	8
2.5.2	Emissziós spektroszkópia	8
3	Kémiai kötések	9
3.1	Lewis féle kötési elmélet	9
3.1.1	Oktett szabály	9
3.1.2	Példák	9
3.2	Vegyérték elmélet	9
3.3	Hibridizáció	9
3.4	Rezonancia vagy határszerkezetek	10
3.5	Vegyértékhéj elektronpár taszítási elmélet (VSEPR)	10
3.6	Molekulapálya elmélet	10
3.6.1	Kötőpálya	10
3.6.2	Lazítópálya	10
3.7	Energia diagramm	10
3.8	Elsőrendű kötések	11
3.8.1	Kovalens kötés	11
3.8.2	Ionos kötés	11
3.8.3	Fémes kötés	11
3.9	H-híd kötés	12
3.9.1	Példák	12
3.10	A víz tulajdonságai	12
3.10.1	Fizikai tulajdonságai	12

3.10.2	Kémiai tulajdonságai	12
4	Egyensúlyi reakciók	13
4.1	Kémiai reakciók egyensúlyára érvényes összefüggés	13
4.2	Tömeghatás törvénye	13
4.3	Legkisebb kényszer elve	13
4.4	Sav-Bázis elméletek	13
4.4.1	Arrhenius-Ostwald féle sav-bázis elmélet	13
4.4.2	Brønsted-Lowry féle sav-bázis elmélet	13
4.4.3	Lewis féle sav-bázis elmélet	13
4.4.4	A Lewis-féle sav-bázis elmélet Pearson-féle értelmezése (Hard-Soft elmélet)	14
4.5	Szupersavak	14
5	Halmazállapotok	15
5.1	Gáz halmazállapot	15
5.1.1	A gáz halmazállapot jellemzői	15
5.1.2	Kinetikus gázelmélet	15
5.1.3	Maxwell-Boltzmann eloszlás	15
5.1.4	Ideális és reális gázok	15
5.1.5	Egyesített gáztörvény ideális és reális gázokra	15
5.2	Folyékony halmazállapot	15
5.2.1	A folyékony halmazállapot jellemzői	15
5.2.2	Felületi feszültség	16
5.2.3	Nedvesítés	16
5.2.4	Kapilláris hatások	16
5.3	Szilárd halmazállapot	16
5.3.1	A szilárd halmazállapot jellemzői	16
5.3.2	Kristályos szerkezet	16
5.4	Fázisdiagramm	16
5.5	Plazma halmazállapot	16
6	Termodinamika	18
6.1	Kémiai mennyiségek	18
6.1.1	Intenzív mennyiségek	18
6.1.2	Extenzív mennyiségek	18
6.1.3	Mennyiségek összefüggése	18
6.1.4	Egyensúly	18
6.2	Termodinamika főtételei	18
6.2.1	0. Termodinamikai főtétel: A termodinamikai egyensúlyról	18
6.2.2	1. Termodinamikai főtétel: Energiamegmaradás törvénye	18
6.2.3	2. Termodinamikai főtétel: Entrópia	18
6.2.4	3. Termodinamikai főtétel: Abszolút 0 fok	18
6.3	Entalpia: Reakcióhő	19
6.3.1	Képződéshő	19
6.3.2	Égéshő	19
6.3.3	Reakcióhő	19
6.3.4	Képződési szabad entalpia	19
6.4	Kolligatív tulajdonságok	19
6.4.1	Raoult törvénye	19
6.4.2	Gőznyomáscsökkenés	19
6.4.3	Fagyáspontcsökkenés	19
6.4.4	Forráspont-emelkedés	19
6.4.5	Ozmózisnyomás	20

7	Elektrokémia	21
7.1	Elektrolitok	21
7.2	Elektromotoros Erő	21
7.2.1	Elektródpotenciál	21
7.2.2	Elektromotoros erő levezetése	21
7.2.3	Elektromotoros erő kapcsolata a koncentrációkkal	21
7.3	Galván elem	21
7.4	Elektrolízis	22
7.5	Faraday törvényei	22
7.5.1	Faraday I. törvénye	22
7.5.2	Faraday II. törvénye	22

1 Izotópok

1.1 Mik azok az izotópok és miért lehet instabil egy izotóp?

Az izotópok **azonos rendszámú, különböző tömegszámú** atomok. Az instabil atommagok hosszabb-rövidebb idő elteltével alacsonyabb energiaszintű állapotba mennek át, és eközben emberi érzékszervekkel nem észlelhető, de műszerekkel jól kimutatható **radioaktív sugárzást** bocsátanak ki. Ezeket radioaktív izotópoknak, magát az átalakulást radioaktív bomlásnak nevezzük.

1.2 Izotóptáblázat

1.2.1 Mi az Izotóptáblázat?

Az izotóptáblázatban ábrázoljuk a különböző elemek különböző izotópjait a következő módon: az x koordináta egyenlő a neutronok számával, az y koordináta egyenlő a protonok számával.

1.2.2 Stabil és instabil izotópok elhelyezkedése

Láthatjuk, hogy a stabil izotópokat mindkét oldalról instabil, azaz **radioaktív izotópok veszik körül jobbról és balról**, hiszen túl kevés neutron esetén túlságosan erős lesz a protonok taszítása, viszont túl sok neutron esetén kisebb lesz a magerő, így **az atommag hasad**.

1.2.3 Izotóptáblázat használata bomlási tulajdonságoknál

Az izotóptáblázatból látható, hogy különféle bomlásokkal, milyen új atomokat kapunk: α **bomlás** esetén, mivel egy Hélium atommag (α részecske: 2 proton, 2 neutron) hagyja el az atommagot, kettővel kevesebb protonja és neutronja lesz az atomnak, ezért a táblázatban lévő eredeti helyéhez hozzáadva a $(-2,-2)$ vektort, kapjuk a terméket.

Elektron emissziós β bomlás (β^-) esetén a tömegszám azonos marad, viszont a rendszám egyel nő, tehát az eredeti elemhez ha hozzáadva a $(-1,1)$ vektort, megkapjuk a terméket.

Pozitron emisszió esetén (β^+) a tömegszám állandó, a rendszám csökken 1-el, a neutronok száma nő 1-el, tehát az eredeti koordinátákhoz hozzáadva a $(1,-1)$ vektort, a terméket kapjuk.

1.2.4 Bomlási sor

Egy a különböző atomokból álló felsorolást **bomlási sornak** nevezünk, ha leírja azt az "utat" amit egy atommag megtesz, amikor instabil izotópból bomlásokkal "eljut" egy stabil izotóphoz.

1.2.5 Példa: U-238

A kiindulási anyagunk a $^{238}_{92}\text{U}$. Az izotóptáblázatban kiválasztva az anyagot láthatjuk, hogy α bomlással bomlik, tehát a keletkező anyag, a $^{234}_{90}\text{Th}$. Ez β^- bomlással bomlik tehát a keletkező anyag, a $^{234}_{91}\text{Pa} \rightarrow ^{234}_{92}\text{U} \rightarrow ^{230}_{90}\text{Th} \rightarrow ^{226}_{88}\text{Ra} \rightarrow ^{222}_{86}\text{Rn} \rightarrow ^{218}_{84}\text{Po} \rightarrow ^{214}_{82}\text{Pb} \rightarrow ^{214}_{83}\text{Bi} \rightarrow ^{214}_{84}\text{Po} \rightarrow ^{210}_{82}\text{Pb} \rightarrow ^{210}_{83}\text{Bi} \rightarrow ^{210}_{84}\text{Po} \rightarrow ^{206}_{82}\text{Pb}$. Tehát a keletkező atommag egy Pb-206 stabil izotóp lesz.

1.3 Radioaktív atommagok bomlásának főbb módjai

1.3.1 α bomlás

Az α bomlás során az eredeti atommagból kilép az ún. α **részecske**, ami nem más mint egy hélium atommag (2 proton, 2 neutron). Az α sugárzás a radioaktív sugárzások közül a leggyengébb, egy papírlappal kivédhető.

1.3.2 β bomlás

Az elektron emissziós, azaz β^- bomlás során, az atommag **egy neutronja** egy elektront és egy elektron-neutrínót kibocsátva **átalakul protonná**. Tehát az atom tömegszáma változatlan marad, viszont a **rendszáma növekszik**.

A pozitron emissziós, azaz β^+ bomlás során, az atommag **egy protonja** egy pozitront (pozitív töltésű elektron) és egy pozitron neutrínót kibocsátva **átalakul neutronná**. Tehát az atom tömegszáma változatlan marad, viszont a **rendszám csökken**.

A β sugárzás kivédéséhez elég egy alumínium lap.

1.3.3 γ bomlás

A γ bomlás alatt azokat a bomlásokat értjük, amikor egy atommag kisebb energiaszintre lépésekor **magasfrekvenciájú elektromágneses hullámokat** bocsát ki (10^{19} Hz feletti). A magas frekvencia, illetve pikométer nagyságrendű hullámhossz miatt a γ sugárzás **ionizáló hatású**, ezért is nagyon veszélyes. Kivédése több méteres ólomfal mögött sem garantált.

1.4 Pozitron emissziós topográfia

1.4.1 Célja

A daganatos betegségeknek tűnő rendellenességek részletes kivizsgálásának céljából készült a PET.

1.4.2 Működési elve

A beteg olyan cukor alapú gyógyszert fogyaszt, amely β^+ bomlással bomlik, majd a beteg befekszik egy érzékelő műszerbe.

Ahogy bomlik a gyógyszer, pozitronok fognak keletkezni, amik elektronokkal találkozáskor anihilálódnak, azaz a pozitron és az elektron megsemmisül, és két γ foton emitálódik, majdnem pontosan 180° -ban egymáshoz képest. Ezt a műszer beméri, és így megállapítható, hogy a beteg testében hol szivódik fel sok cukor.

2 Elektron szerkezet

2.1 Bohr modell

A Bohr-féle atommodell a Rutherford-féle atommodell javított változata. A pozitívan töltött atommag körül keringenek az elektronok – hasonlóan a Naprendszerhez. Ez a modell sikeresen magyarázta a Rydberg-formulát és a hidrogén színképét, viszont más, finomabb részleteket nem tudott megindokolni. Ma már az atom kvantummechanikai leírása teljesebb, ezt a modellt azonban egyszerűsége miatt még mindig tanítják.

A Bohr modell félig kvantumozott jellegű, és így posztulátumokra támaszkodik:

- Az elektron az atommag körül körpályán mozog a klasszikus mechanika törvényei szerint. (A centripetális erőt a Coulomb-erő szolgáltatja.)
- Az elektronok csak bizonyos megengedett sugarú pályákon keringhetnek, amelyeken nem sugároznak. Mivel az E energia ezeken a pályákon állandó, az elektron stacionárius állapotban van.
- A stacionárius állapotok közti átmenetek úgy mennek végbe, hogy az elektron átugrik egyik állapotból a másikba, és eközben az atom elektromágneses hullámokat bocsát ki. A két energiaállapot közti különbség egyenlő a kibocsátott vagy elnyelt sugárzás energiakvantumával.
- Az elektronok impulzusnyomatéka csak $L = mv_n r_n = n \frac{h}{2\pi}$, ahol n a főkvantumszám, h a Planck állandó. Ezt átrendezve kapjuk: $2\pi r_n = n \frac{h}{mv_n} = n\lambda$

A Bohr modell a hidrogént még leírja, de bonyolultabb molekulák finomabb részleteit már nem tudja leírni.

Később Sommerfeld kiegészítette ezt a modellt. A **Bohr-Sommerfeld atommodell** leírja, hogy eipisz alakú pályán is mozoghatnak az elektronok az atommag körül.

2.2 Kvantumszámok

2.2.1 Főkvantumszám

A főkvantumszámot $n = 1, 2, 3, \dots$ jelöli. A szám növekedése az elektron és a mag távolságát is jelzi, ezért azt mondjuk, hogy a különböző főkvantumszámhoz tartozó elektronok különböző elektronhéjon vannak.

2.2.2 Mellékkvantumszám

A mellékkvantumszámot az $l = 0, 1 \dots n-1$ jelöli, ahol n a főkvantumszám. Ez adja meg az atompálya alakját és erős hatással van a kémiai kötésekre és a kötésszögre. Az $l=0,1,2,3,\dots$ pályákat rendre s,p,d,f,... pályáknak hívjuk.

2.2.3 Mágneses kvantumszám

Jelölése: $m = -l, -l+1 \dots 0 \dots l-1, l$, ahol l a mellékkvantumszám. Az m mágneses kvantumszám az elektron pályájának térbeli elhelyezkedését írja le.

2.2.4 Spinkvantumszám

A spin csak kétféle lehet, felfelé vagy lefelé mutathat. A felfelé vagy lefelé irányok a külső mágneses térhez képest történő elhelyezkedést jelentik. A felfelé irány azt jelzi, hogy az elektron saját "mágnesűje" egyirányú a külső mágneses mezővel, a lefelé irány pedig azt jelenti, hogy azzal éppen ellentétes. A felfelé és lefelé mutató spinnek a mágneses térhez képest különböző irányú forgást jelentenek.

Ez a leírás megmutatta, hogy a spin szorosan kapcsolódik a mágneses tér atomokra gyakorolt hatásához. A spinkvantumszám értéke $m_s = +1/2$ vagy $-1/2$.

2.3 Kvantummechanikai törvények

2.3.1 Pauli-elv

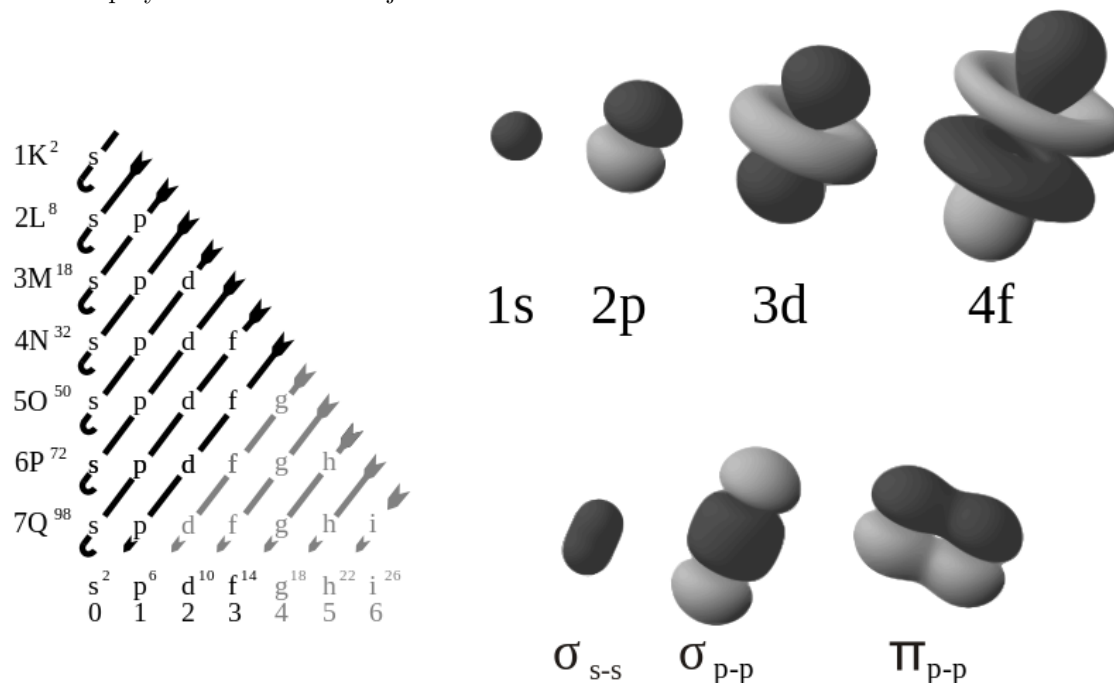
Nem létezhet egy atomon belül két olyan elektron, aminek megegyezik mind a 4 kvantumszáma.

2.3.2 Hund-szabály

Az elektronok az egyes atompályákon úgy helyezkednek el, hogy lehetőleg minél több párosítatlan spinű elektron legyen.

2.3.3 Töltődési sorrend

Az atompályák töltődési sorrendje:



A különböző pályák energia szintjei miatt ebben a sorrendben töltődnek fel az elektronok az atomra.

2.3.4 Törvények alkalmazása

Nézzük meg az O atom feltöltését elektronokkal, figyelembevéve az előző két szabályt.

Az Oxigénnek 8 elektronja van. Először feltöltődik az első héj. Mivel $n=1$, l csak 0 lehet, tehát m is 0. Tehát mivel a spin kettő értéket vehet fel, ezért a Pauli-elv szerint az első elektronhélyon 2 elektron helyezkedik el. Ezt így jelöljük: $1s^2$.

A második elektronhélyon $n=2$, tehát l lehet 0 és 1 is. Ha $l=0$, akkor $m=0$, tehát azt kapjuk, hogy $2s^2$. Ha $l=1$, akkor $m=-1/0/1$, tehát 6 elektront tud felvenni. Mivel már csak 4 elektron maradt, csak ennyi töltődik fel így ennek a jelölése $2p^4$.

Ezeket összeillesztve kapjuk az elektronszerkezet leírását: $[O]=1s^2 2s^2 2p^4$.

2.4 Kettős természet

2.4.1 de Broglie hipotézis

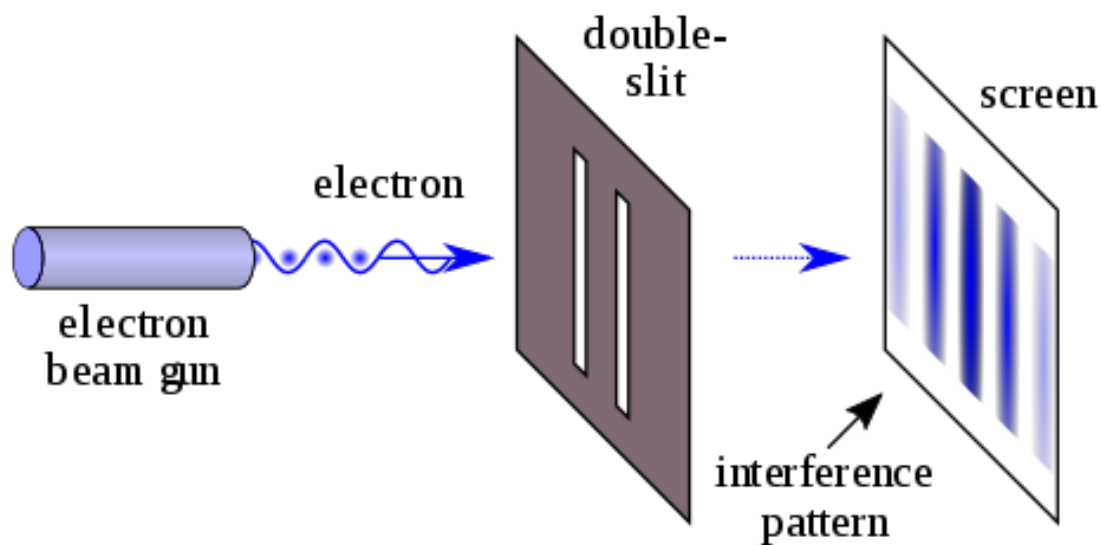
Minden mozgó részecskéhez vagy objektumhoz tartozik egy hozzárendelt hullám. Ezzel, a fény és az anyag fizikáját egyesítve teremtette meg a fizikában a hullámmechanikát, amiért 1929-ben megkapta a fizikai Nobel-díjat.

Ez teljesen passzol Bohr modellhez, hiszen így az elektronok hullámtulajdonságát is beleszámítva, az elektronok energiája és sugara közötti összefüggés felírható.

Ennek egyik, látványos alkalmazása az elektronmikroszkóp, ami sokkal jobb felbontást ad az optikai mikroszkópnál, mivel az elektron hullámhossza a látható fényénél rövidebb.

2.4.2 Hullámtulajdonság

Talán a legegyszerűbb mód a hullámtulajdonság bemutatására a **kétrés kísérlet**. Egy részecske alaptól nem alkotna interferenciát, ez csak hullámtulajdonsággal lehetséges.



2.4.3 Schrödinger-elektronmodell

Az elektronnak hullámra és részecskére jellemző tulajdonságai is vannak, helyét nem ismerhetjük, csak meghatározhatjuk előfordulási esélyét.

2.4.4 Az elektron hullámfüggvénye

A kvantummechanika a részecskék hullámtermészetét komplex értékű függvénnyel írja le. Ez a hullámfüggvény, amit görög betűvel, Ψ -vel jelölnek. Ha ennek abszolútértékét négyzetre emelik, akkor megkapjuk annak a valószínűségét, hogy a részecske mely hely közelében milyen valószínűséggel figyelhető meg. Ez a **valószínűségi sűrűség**, az elektron itt 90%-os valószínűséggel megtalálható.

2.5 Spektroszkópia

Az elektromágneses sugárzás és az anyag közötti kölcsönhatás vizsgálata.

2.5.1 Abszorpciós spektroszkópia

Az **abszorpciós** spektroszkópiában az elnyelt sugárzást vizsgálja:

- **UV/Vis spektroszkópia:** színes vegyületek, gerjesztés.
- **Infra vörös spektroszkópia:** Molekula kötési gerjesztődnek.
- **NMR spektroszkópia:** Adott atommagok mágneses tulajdonságaiból molekulaszervezet megállapítása.

2.5.2 Emissziós spektroszkópia

Az **emissziós** spektroszkópiában a kibocsátott sugárzást vizsgáljuk:

- **Fluoreszcens spektroszkópia:** Gerjesztésre látható fény kibocsátása.
- **Röntgen fluoreszcens spektroszkópia:** Gerjesztésre röntgen sugarak kibocsátása. Elektron-szerkezet felderítése.

3 Kémiai kötések

3.1 Lewis féle kötési elmélet

Lewis szerint az atomok legkülső (vegyérték) elektronhéján lévő elektronok hozzák létre a kötéseket.

- Egyik atomtól a másiknak átadott elektronok pozitív és negatív ionokat hoznak létre; a közöttük ható elektrosztatikus kölcsönhatás = **ionos kötés**.
- Az atomok között egy vagy több elektronpár megosztásával **kovalens kötés** létesül.

Az elektronok átadásával vagy megosztásával minden atom körül nemesgáz konfiguráció alakul ki - 8 külső elektronnal.

3.1.1 Oktett szabály

Az oktett szabály azt jelenti, hogy az elemek, amikor lehetséges, nyolc külső elektronra (4 elektron pár) "törekcszenek" a külső héjon. Mivel a nyolc külső elektron viszonylag stabil, sok elem elektron leadással, vagy felvétellel éri el a legközelebbi nemesgázhoz hasonló külső elektronhéjat.

3.1.2 Példák

- Ionos kötés: $\text{Na}\cdot + \cdot\ddot{\text{Cl}}\cdot \rightarrow \text{Na}:\ddot{\text{Cl}}:$
- Kovalens kötés: $\text{H}\cdot + \cdot\ddot{\text{O}}\cdot + \cdot\text{H} \rightarrow \text{H}:\ddot{\text{O}}:\text{H}$.

3.2 Vegyérték elmélet

A vegyértékkötés-elmélet szerint kovalens kötés két atom között a két atom félig betöltött, egy párosítatlan elektront tartalmazó vegyértékpályáinak átfedésével jön létre. A vegyértékkötés szerkezet hasonló a Lewis szerkezethez, de ha nem lehetséges egyetlen Lewis szerkezetet felírni, akkor több vegyértékkötés szerkezetet használnak. Minden ilyen VB szerkezet egy adott Lewis szerkezetet ábrázol. A vegyértékkötés szerkezetek ezen kombinációja a rezonancia-elmélet legfőbb pontja. A vegyértékkötés-elmélet szerint a kémiai kötést az abban részt vevő atomok atompályáinak átfedése hozza létre. Az átfedés következtében az elektronok a legnagyobb valószínűséggel a kötés körüli térrészben tartózkodnak. A vegyértékkötés-elméletet jellemzően könnyebb alapállapotú molekulákra alkalmazni.

Az átfedő atompályák különbözőek lehetnek és két típusuk van: **szigma** és **pi**. Szigma-kötés jön létre, ha a két megosztott elektron pályái fej-fej átfedésben vannak. Pi-kötés keletkezik, ha két egymással párhuzamos pálya között van átfedés. Például két s-pályán levő elektron között szigma-kötés alakul ki, mivel két gömbnek mindig van közös tengelye. A kötésrend tekintetében **az egyszeres kötésben egy szigma-kötés van, a kettős kötések egy szigma- és egy pi-kötésből állnak, a hármas kötésben pedig egy szigma- és két pi-kötés található**. A kötést kialakító atompályák **hibridpályák** is lehetnek. A kötést létesítő atompályák sokszor több lehetséges pályatípus jellegzetességeivel rendelkeznek. A kötéshez megfelelő típusú (karakterű) atompálya előállítására szolgáló módszer neve **hibridizáció**.

3.3 Hibridizáció

A hibridizáció lényege, hogy megmagyarázza az olyan jelenségeket, mint például amit a C-atom szokott csinálni, mégpedig azt, hogy bár csak 3 kovalens kötésre lehetne elvileg képes, mégis a metánban 4-t hoz létre.

Gyakorlatilag úgy működik, hogy a nemkötő elektronpár egyik elektronja átugrik ugyan azon elektronhéj egy betöltetlen pozíciójába. Tehát a szén esetében ekkor az 2s pályán csak 1 elektron lesz, viszont a 2p pályáján 3 kötő elektron lesz. Így 4 kötést fog tudni létrehozni.

Kiszámítása egyszerű. Vegyük a centrális atomhoz csatlakozó ligandumok számát, és ezt kezdjük el felírni mintha egy elektron feltöltődést néznénk, azzal a különbséggel, hogy minden alhéjon fele annyi elektront számolunk.

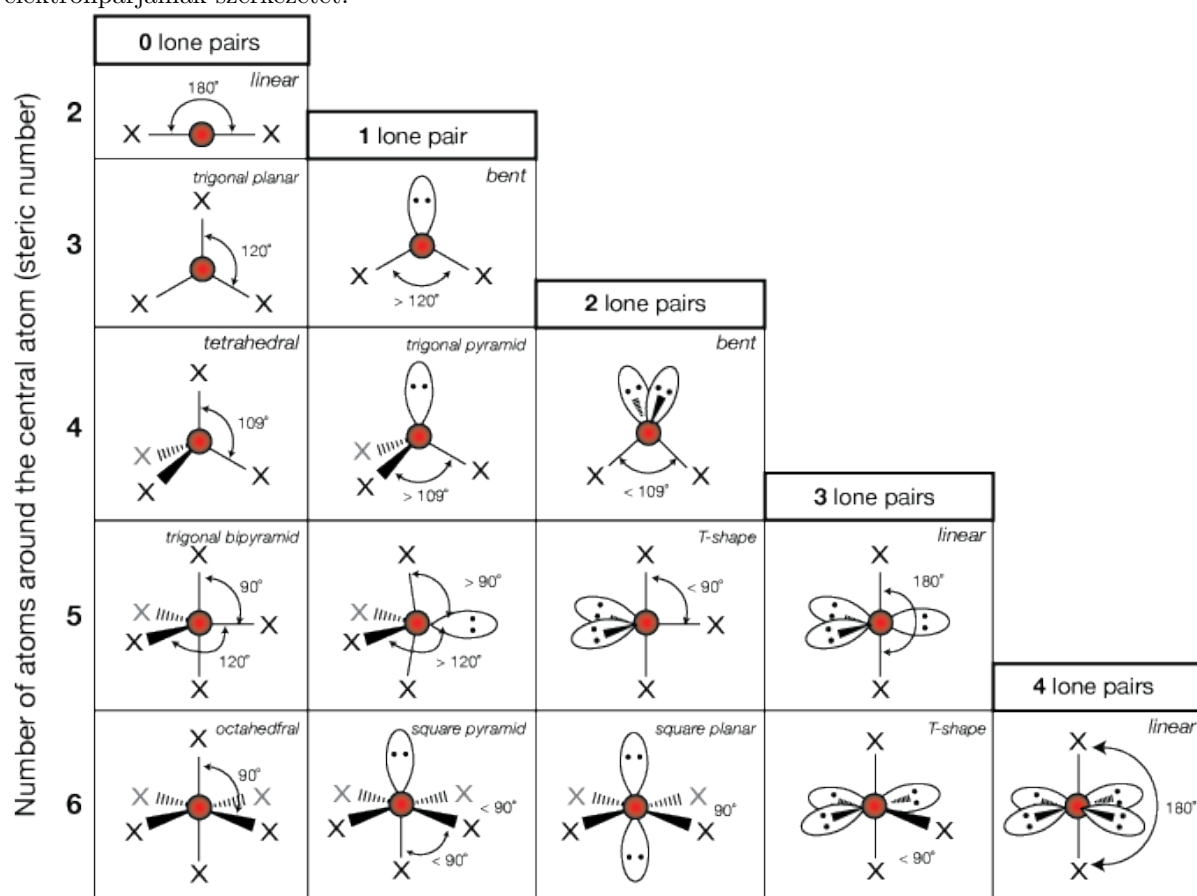
Példák: $\text{CH}_4 \rightarrow sp^3$, $\text{SF}_6 \rightarrow sp^3d^2$

3.4 Rezonancia vagy határszerkezetek

Bizonyos molekulák esetében egyetlen Lewis-képlet nem írja le helyesen az elektronszerkezetet. Ilyenkor jobb híján több Lewis-szerkezetet írunk fel, amelyek között egyenlő értékűek is találhatóak. A rezonanciaelmélet szerint ezek a szerkezetek fiktívek, amelyek közül a "valóságot" önmagában egyikük sem írja le helyesen. Ezeket határszerkezeteknek hívjuk és a tényleges molekulakerkezetet összességükkel jellemezzük.

3.5 Vegyértékhéj elektrópár taszítási elmélet (VSEPR)

A VSEPR elméletet a molekulák geometriájának meghatározásához használjuk (főleg az egyszerűbb molekulák esetében), ahol egy középső atomhoz kettő vagy több ligandum csatlakozik. Ennek a geometriának a megállapításához figyelembe vesszük a ligandumokat és a középső atom nemkötő elektrópárjainak szerkezetét.



3.6 Molekulapálya elmélet

Mivel az atomban delokalizálva helyezkedik el az elektron, ezért a molekulában is az atompályák kombinálódásával, delokalizált pályán, több atomhoz is tartozhat.

3.6.1 Kötőpálya

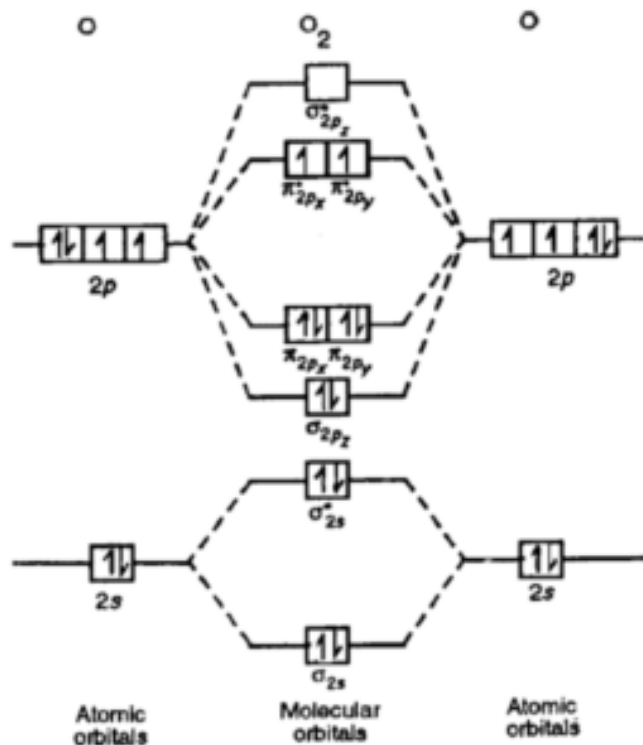
Azonos fázisú atompályák kombinálódásakor kötő molekulapálya alakul ki.

3.6.2 Lazítópálya

Ellentétes fázisú atompályák kombinálódásával lazító molekulapálya jön létre.

3.7 Energia diagramm

Az y tengely az E szint. Jobb és baloldalt a különböző atomok elektronszerkezetének energiáit láthatjuk, középen a molekuláét:



3.8 Elsőrendű kötések

3.8.1 Kovalens kötés

Mindegyik ütköző atom hozzáad legalább egy elektront, hogy minden atom **nemesgáz szerkezetet** tudjon felvenni.

Apoláris kovalens kötés esetében a kötéskialakító elektronfelhő, az atommagokat összekötő képzeletbeli szakasz felezőpontjára emelt merőleges síkhoz viszonyítva szimmetrikus (a sűrűség egyforma). Az apoláris kovalens kötés olyan atomok között jön létre, amelyek elektronegativitása közel azonos. A "tisztá" kovalens kötés teljesen apoláris jellegű. Ilyen például az elemek atomjai közötti kötés (hidrogén, kén).

Vegyületek esetén az elektronfelhő sűrűsége a képzeletbeli síkhoz viszonyítva nem lesz szimmetrikus, a sűrűség nagyobb lesz a nagyobb elektronegativitású atom közelében. Ennek a szélsőséges formája az ionos kötés.

3.8.2 Ionos kötés

Az ionos kötés elsőrendű kémiai kötés, mely **ellentétes töltésű ionokat** tartalmazó anyagokban fordul elő. Az ionok közötti elektrosztatikus vonzás és taszítás szabályos szerkezetbe, **ionrácsba** rendezi az anyagot alkotó ionokat, melynek a rácspontjain szabályosan váltakozva **kationok** és **anionok** találhatók. A nagy kötési energia miatt az ionrácsos anyagok általában magas olvadáspontúak.

Az erős kötés miatt az ionok a rácsban nem tudnak elmozdulni, ezért szilárd halmazállapotban az ionos vegyületek nem vezetnek az elektromos áramot, olvadátkban és oldatban azonban az ionok elmozdulhatnak, így ilyen állapotban vezetők.

Ionkötés általában **egy fém és egy nemfém** találkozásánál jön létre. Ennek oka főként az, hogy a fémek az I., II., és III. főcsoportban találhatóak, és az itt keletkező ionok pozitív töltésűek, elektront adnak le. Ezzel szemben a nemfém ionok többsége elektron felvétellel keletkezik, negatív töltésű.

Ezek a molekulák a nagy elektronegativitás különbség miatt **polárisak**.

3.8.3 Fémes kötés

A fémes kötés az egész kristályra kiterjedő **közös elektronfelhő** által létrehozott kémiai kapcsolat, mely fémek szerkezetében jelentkezik. A fémekben az elektronok delokalizáltan helyezkednek el, így az egyes pozitívan töltött fémionok (atommagok) között oszlanak meg.

Kialakulásának feltétele, hogy a fématomok vegyértékhéján lévő elektronok az atommagtól viszonylag távol tartózkodjanak és kis energiával kötődjenek, ezt mutatja a fémek kicsi ionizációs energiája is.

A fémes kötés sem tiszta fémekben, sem ötvözetekben nem jelentékenyen poláris, mivel vagy nincs vagy nagyon kicsi a kötésben részt vevő atomok közti elektronegativitásbeli különbség.

3.9 H-híd kötés

A másodrendű kötéseknek azt a fajtáját, ahol egy hidrogénatom létesít kötést két másik atom között **hidrogénkötésnek** nevezzük. Az olyan molekulák között, amelyekben a nagy elektronegativitású (és kis rendszámú) fluor- oxigén- vagy nitrogénatom hidrogénhez kapcsolódik, jóval nagyobb összetartó erők lépnek fel, mint a van der Waals-erők. Az ilyen molekulák között asszociáció figyelhető meg gáz, folyékony és szilárd állapotban egyaránt.

A hidrogénkötés kialakulásának oka, hogy ezek a kis rendszámú, nagy elektronegativitású atomok a velük kovalens kötésben lévő hidrogén elektronját magukhoz vonzzák, ezzel a hidrogénatomból mintegy proton képződik. Az elektronburkától csaknem teljesen megfosztott proton elektronigényét a szomszédos molekulában lévő, elektronokkal jól ellátott atom (fluor, oxigén, nitrogén) elektronpárjával elégíti ki. Ebben a molekulában is van azonban elektronburkától csaknem teljesen megfosztott proton, ez is kölcsönhatásba lép a következő molekulával és így tovább.

3.9.1 Példák

Egy jó példa erre a víz felületi feszültsége, ami ebből adódik.

Egy másik példa a DNS lánc bázisai így kapcsolódnak egymáshoz, és így lesz kettős hélix alakú.

3.10 A víz tulajdonságai

3.10.1 Fizikai tulajdonságai

A víz színtelen, szagtalan anyag, a természetben mind légnemű, mind cseppfolyós, mind a szilárd halmazállapotban előfordul. Poláris oldószer.

3.10.2 Kémiai tulajdonságai

A víz kémiai szempontból stabilis vegyület. Égéskor a hidrogén és legtöbb szerves anyag hidrogéntartalma vízzé alakul. A vizet csak magas hőmérsékleten (2000°C fölött) vagy elektromos áram segítségével lehet elemeire bontani.

4 Egyensúlyi reakciók

4.1 Kémiai reakciók egyensúlyára érvényes összefüggés

A kémiai reakciók egyensúlyára érvényes összefüggés, amely szerint homogén (egyfázisos) rendszerben, kémiai egyensúlyban a kiindulási anyagok koncentrációi szorzatának és a keletkező anyagok koncentrációi szorzatának hányadosa meghatározott hőmérsékleten állandó.

$$K_c = \frac{C_A C_B}{C_C C_D}$$

ahol C_A és C_B kiindulási, C_C , C_D pedig keletkező anyagok moláris koncentrációi.

4.2 Tömeghatás törvénye

A tömeghatás törvénye kimondja, hogy a kémiai reakció sebessége arányos a reagáló anyagok aktív tömegeinek szorzatával. A reagáló anyagok aktív tömegét moláris koncentrációban adják meg.

Például: $xA + yB$ termékek reakciójára a sebességet a következő egyenlet adja: $R = k[A]^x[B]^y$, ahol k a sebességi konstans.

4.3 Legkisebb kényszer elve

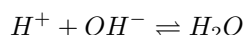
Ha egy rendszer dinamikus egyensúlyi állapotban van, addig nem észlelünk változást, míg a körülmények változatlanok. Egy dinamikus egyensúlyban lévő rendszer megzavarásakor annak a folyamatnak lesz nagyobb a sebessége, amely a zavaró hatást csökkenteni igyekszik.

- Ha az egyensúlyi rendszer hőmérsékletét növeljük, az endoterm, míg ha csökkentjük, az exoterm irányba toljuk el a folyamatot.
- A katalizátor használata nem befolyásolja a kémiai egyensúlyt, csak a reakciósebességet növeli.
- A térfogatváltozással járó reakciókban az egyensúly a nyomás változtatásával is befolyásolható. A nyomás növelése a térfogatcsökkenésnek, míg csökkentése a térfogat növekedésének kedvez.

4.4 Sav-Bázis elméletek

4.4.1 Arrhenius-Ostwald féle sav-bázis elmélet

Az elmélet szerint a savak olyan anyagok, amelyek hidrogénionra (és anionra), a bázisok pedig hidroxidionra (és kationra) disszociálnak vizes oldatban. A sav-bázis reakciók lényege a bázisok hidroxidionjainak (OH^-) és a savak hidrogénionjainak (H^+) vízképzési reakciója:



Az erős és gyenge savak – ugyanígy az erős és gyenge bázisok – között csak a disszociáció mértékében van különbség.

4.4.2 Brønsted-Lowry féle sav-bázis elmélet

Egyszerű sav-bázis rendszer: sav az a molekula vagy ion, amely protont ad le, és bázis az amelyik protont vesz fel.

Ennek az elméletnek a jelentőségét az is növeli, hogy nem csak vizes közegre, hanem más – proton tartalmú – oldószeres reakciókra is alkalmazható.

4.4.3 Lewis féle sav-bázis elmélet

Lewis szerint sav az az anyag, ami elektronpár-akceptor, vagyis elektronpár felvételére képes. A bázisok pedig elektronpár-donorok (elektronpár leadására képesek).

4.4.4 A Lewis-féle sav-bázis elmélet Pearson-féle értelmezése (Hard-Soft elmélet)

Pearson két csoportba osztotta Lewis-féle savakat és bázisokat: kemény (hard) savak és bázisok, ill. lágy (soft) savak és bázisok.

A kemény savak tulajdonságai:

- Kis méret
- Nagy pozitív töltés
- Kis polarizálhatóság
- Erősen protonkedvelő részecskékhez (kemény bázisokhoz) kapcsolódik szívesen
- Példa: H^+

A kemény bázisok tulajdonságai:

- Kis méret
- Nagy elektronegativitás
- Kis polarizálhatóság
- Nehezen oxidálhatóak.
- Példa: OH^-

A lágy savak tulajdonságai:

- Nagy méret
- Kis pozitív töltés
- Nagy polarizálhatóság
- Gyengén protonkedvelő részecskékhez (lágy bázisokhoz) kapcsolódik szívesen.
- Példa: I^+

A lágy bázisok tulajdonságai:

- Nagy méret
- Kis elektronegativitás
- Nagy polarizálhatóság
- Könnyen oxidálhatóak.
- Példa: I^-

4.5 Szupersavak

A Lewis-savval felerősített protonsavakat szupersavaknak nevezzük. Ilyen vegyület a már régóta ismert óleum is, melyet úgy nyerünk, hogy 100%-os kénsavban kén-trioxidot (SO_3) oldunk, és ezáltal a kénsav protonátadó képességét (savasságát) fokozzuk.

Az így kapott vegyület nagyon magas szinten protonál bármit.

5 Halmazállapotok

5.1 Gáz halmazállapot

5.1.1 A gáz halmazállapot jellemzői

A gázoknak **nincs alak-, és térfogattartó képessége**. A molekulákban **folyamatos** haladó-, forgó-, és rezgő**mozgás** figyelhető meg. Ez egy teljesen **rendezetlen állapot**.

További tulajdonságai:

- Jól diffundál
- Kitölti a rendelkezésre álló teret
- Összenyomható

5.1.2 Kinetikus gázelmélet

A jelenlévő molekulák mérete elhanyagolható távolságukhoz képest. Ezek a részecskék egyenes vonalú egyenletes mozgást végeznek. És bár sebességeik részecskékként különbözőek, az átlaguk állandó.

Rugalmasan ütköznek egymással és a fallal, továbbá elmondható, hogy:

- $\sum W_{kinetikus} = \text{állandó}$
- $\overline{W}_{kinetikus} = \text{állandó}$
- $\overline{W}_{kinetikus} \sim T$, ahol T a hőmérséklet.

5.1.3 Maxwell-Boltzmann eloszlás

Adott hőmérsékleten a gázmolekulák sebességének valószínűségét adja meg. A hőmérsékletet növelve a gázmolekulák lehetséges állapotainak száma nő, azaz a rendszer rendezetlensége is nő.

5.1.4 Ideális és reális gázok

Azokat a gázokat nevezzük ideális gáznak, ahol a részecskék közötti kölcsönhatások kimerül a részecskék ütközésében. Ha más kölcsönhatás is létezik (pl.: vonzás a részecskék között), akkor reális gázokról beszélünk.

5.1.5 Egyesített gáztörvény ideális és reális gázokra

Ideális gázok esetén az egyesített gáztörvény:

$$\frac{p_1 V_1}{T_1} = \frac{p_2 V_2}{T_2}$$

Reális gázok esetén az egyesített gáztörvény:

$$\frac{(p_1 + \frac{a}{v^2})(V_1 - b)}{T_1} = \frac{(p_2 + \frac{a}{v^2})(V_2 - b)}{T_2}$$

ahol a a kohéziós erőkből eredő nyomáskorrekció mértéke $[(\text{Pa} \cdot \text{m}^6)/\text{mol}^2]$, és b a gázcsepp részecskék saját térfogata (m^3/mol)

5.2 Folyékony halmazállapot

5.2.1 A folyékony halmazállapot jellemzői

A gázokhoz hasonlóan a folyékony halmazállapotú anyagoknak sincs alaktartó tulajdonsága. Ugyanakkor ez már térfogattartó. A molekulák rezgő- és forgó mozgását figyelhetjük meg.

A molekulák csak lokálisan rendezettek (H-híd kötés), viszont pont emiatt érvénybe lépnek új kohéziós erők (a víz esetében: felületi feszültség).

5.2.2 Felületi feszültség

Ha egy folyadékban érvénybe lép a felületi feszültség, akkor arra fog törekedni, hogy minél kevesebb felülete legyen. Ez a hidrogén-híd kötésből következik.

5.2.3 Nedvesítés

A folyadék molekulái és szomszédos anyagok közötti kölcsönhatás. Mértékét a szomszédos vegyület és a vízcsepp által bezárt szög alapján határozhatjuk meg.

5.2.4 Kapilláris hatások

Egy folyadék emelkedése vagy süllyedése, ha kis sugarú vertikális tárolóeszközbe rakjuk.

5.3 Szilárd halmazállapot

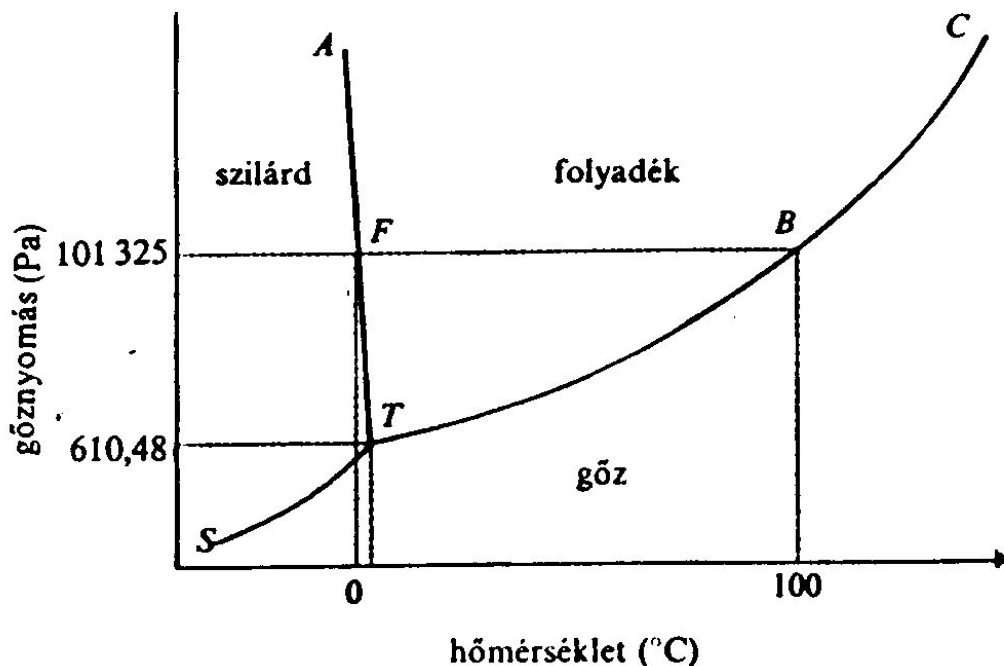
5.3.1 A szilárd halmazállapot jellemzői

A szilárd halmazállapotú anyag nagy alak- és térfogattartó képességgel rendelkezik, a molekuláknál csak rezgőmozgás figyelhető meg. Lehet globálisan (kristályos) és lehet lokálisan (amorf) rendezett.

5.3.2 Kristályos szerkezet

Jellemző a szabályos elrendeződés, rögzített térbeli pozíció. A részecskék csak rezgő mozgást végeznek. A szerkezettől függ a kristály sávstruktúrája és optikai tulajdonságai is.

5.4 Fázisdiagramm



A fázisdiagrammról leolvasható, hogy egy adott anyag (jelen esetben víz) milyen nyomás és hőmérséklet esetén, milyen halmazállapotban lesz.

Vegyük észre a Kritikus pontot (T-vel van jelölve). Itt az anyag felveszi mind a három halmazállapotot.

5.5 Plazma halmazállapot

Ez egy gázszerű halmazállapot, csak itt az atomok, molekulák ionizálva vannak és a delokalizált elektronok is szabadon röpködnek.

A plazma halmazállapotban lévő anyagok vezetnek az áramot és mágnesesíthetők. Előfordulása a természetben nagyon ritka, de egy jó példa erre a sarki fény.

6 Termodinamika

Eredetileg hőtan volt, mára az energia átalakulásával foglalkozó tudomány.

6.1 Kémiai mennyiségek

6.1.1 Intenzív mennyiségek

Az intenzív mennyiségek nem függenek a vizsgált rendszer méretétől, vagy tömegétől.
Például: Hőmérséklet, nyomás

6.1.2 Extenzív mennyiségek

Az extenzív mennyiségek függenek a vizsgált rendszer méretétől, vagy tömegétől.
Például: Tömeg, térfogat, entrópia, entalpia, energia

6.1.3 Mennyiségek összefüggése

Két extenzív mennyiség hányadosa intenzív mennyiség.

Két független rendszer esetén az extenzív mennyiségek összeadódnak, az intenzív mennyiségek kiegyenlítődnek.

6.1.4 Egyensúly

Azt nevezzük egyensúlynak, ha a kölcsönhatásokat jellemző intenzív állapotváltozók azonosak.
Az egyensúlyából önként nem mozdul ki a rendszer.

6.2 Termodinamika főtételei

6.2.1 0. Termodinamikai főtétele: A termodinamikai egyensúlyról

Ha A és B rendszerek egyensúlyban vannak egymással és B és C rendszerek is egyensúlyban vannak egymással, akkor az A és a C rendszer is egyensúlyban vannak.

6.2.2 1. Termodinamikai főtétele: Energiamegmaradás törvénye

Egy nyugvó és zárt rendszer belső energiáját megváltoztatni csak munkavégzéssel és hőközléssel lehet:
 $\Delta U = W + Q$

Tehát:

- Energiát nem lehet a semmiből létrehozni, vagy megsemmisíteni, csak átalakítani.
- Nem lehet olyan periodikusan működő gépet létrehozni, amely hőfelvétel nélkül tudna munkát végezni.

6.2.3 2. Termodinamikai főtétele: Entrópia

Az **entrópia** (S) a molekuláris rendezetlenség mértéke.

$$S = k_B \ln w$$

ahol k_B a Boltzmann állandó, w pedig az állapotok termodinamikai valószínűségének mértéke.

Amikor 2 termodinamikai rendszer kapcsolatba kerül egymással, az entrópiájuk növekszik az egyensúlyi állapotig.

Spontán folyamatokban az entrópia növekszik. $\Delta S = \frac{Q_{rev}}{T}$ reverzibilis melegítés esetén.

Nem lehet olyan periodikusan működő gépet létrehozni, amely a felvett hőt teljes mértékben munkává tudja alakítani.

6.2.4 3. Termodinamikai főtétele: Abszolút 0 fok

Abszolút 0 fokon egy tökéletes kristály entrópiája 0. Tehát az abszolút 0 fok nem érhető el és nincsen teljesen tökéletes kristály.

6.3 Entalpia: Reakcióhő

$$\Delta H = \Delta U + \Delta(pV)$$

$$\Delta H = \Delta U + p\Delta V \text{ állandó nyomáson}$$

$$\Delta H > 0 \iff \text{Exoterm}$$

$$\Delta H < 0 \iff \text{Endoterm}$$

6.3.1 Képződéshő

Az a reakcióhő, amikor az anyag 1 mólnyi mennyisége elemi részecskéiből képződik (h_m)

6.3.2 Égéshő

Mennyi energia szükséges 1 mol vegyület elégetéséhez O_2 -ben.

6.3.3 Reakcióhő

Az a hőmennyiség, amely elnyelődik/felszabadul, amikor a reakcióegyenlet sztöchiometriai együtthatóinak megfelelő átalakulás végbemegy.

A reakcióhő kiszámítható a kiindulási anyagok és a végtermék képződéshőjének különbségeként.

6.3.4 Képződési szabad entalpia

Az az egyéb munka, amely arányos azzal az energiaváltozással, amelyben az anyag 1 mólnyi elemeiből való képződésekor keletkezik.

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

Fontos megemlíteni: $\Delta G^\circ = -RT \ln K$, ahol ΔG° a standard szabad entalpiája, $R=8,314$, K pedig az egyensúlyi állandó.

6.4 Kolligatív tulajdonságok

A többkomponensű anyagi rendszerek sajátságait a rendszer alkotóinak anyagi minőségén túl az állapotjelzők – nyomás, hőmérséklet, térfogat és összetétel – határozzák meg. Van a tiszta anyagoknak azonban néhány olyan sajátsága, amelynek az értéke független a másik komponens anyagi minőségétől, kizárólag annak a koncentrációjától (vagyis a kétféle anyag részecskeszámának az arányától) függ. Ezeket a sajátságokat gyűjtőnéven kolligatív sajátságoknak nevezzük.

6.4.1 Raoult törvénye

Raoult törvénye kimondja, hogy ideális folyadékelegyek telített gőzében az egyes komponensek parciális tenziója mindig kisebb, mint az adott komponens gőznyomása ugyanazon a hőmérsékleten tiszta állapotban. A parciális tenzió a tiszta folyadék tenziójához képest a folyadékállapothoz tartozó móltört arányában csökken.

6.4.2 Gőznyomáscsökkenés

Az oldat gőznyomása (p) ugyanazon a hőmérsékleten mindig kisebb, mint a tiszta oldószeré (p_0). A gőznyomáscsökkenés nagysága a Raoult-törvényből levezethetően az oldott komponens móltörtjével (x_B) egyenesen arányos: $\Delta p = p_0 - p = p_0 x_B$.

6.4.3 Fagyáspontcsökkenés

Oldat esetében a tiszta oldószerhez viszonyítva az egyensúlyi hármaspont a kisebb hőmérséklet felé eltolódik. Ennek a nagysága az oldott komponens molalitásával (m_B) egyenesen arányos, az arányossági tényező az oldószer anyagi állandója az ún. molális fagyáspontcsökkenés vagy krioszkópos állandó ($\Delta_m T_m$): $\Delta_m T = \Delta_m T_m m_B$

6.4.4 Forráspont-emelkedés

Oldat esetében a tiszta oldószerhez viszonyítva az egyensúlyi forráspont megnő. Ennek a nagysága az oldott komponens molalitásával (m_b) egyenesen arányos, az arányossági tényező az oldószer anyagi állandója az ún. molális forráspont-növekedés vagy ebullioszkópos állandó ($\Delta_b T_m$): $\Delta_b T = \Delta_b T_m m_B$

6.4.5 Ozmózisnyomás

Ha egy oldat és egy c_B koncentrációjú oldat féligáteresztő hártyán keresztül érintkezik egymással, akkor önként olyan folyamat játszódik le, hogy a koncentráció kiegyenlítődjék. E folyamat hajtóerejét jellemzi az ozmózisnyomás, amelynek értéke: $\pi = c_B RT$, ahol R az egyetemes gázállandó.

7 Elektrokémia

Elektromos és kémiai energia kapcsolatát írja le. Maga az elektrokémiai reakció elektródok és elektroli-
tok határfelületén játszódik le. Ezekon a fázishatárokon elektronvezetésből ionos vezetésbe megy át a
töltésvándorlás, vagy a fordított irányba.

Ha a reakció önként megy végbe, akkor Galvánelemről, ha külső erő hatására, akkor elektrolízisről
beszélünk.

7.1 Elektrolitok

Olyan oldatok, amelyekben szabad ionok találhatók amelyek az elektromos töltést tudják szállítani.
Mérhető tulajdonságuk a vezetőképesség.

7.2 Elektromotoros Erő

Az elektromotoros erő egy áramforrás üresjáratú feszültsége, a két elektród közötti maximális feszültség
(potenciálkülönbség), amit akkor mérhetünk, ha az áramforráson keresztül nem folyik áram.

7.2.1 Elektródpotenciál

Az elektródpotenciál abszolút értékben ugyanannyira nem határozható meg, mint ahogy a reakcióhő
kiszámításánál sem tudtuk megmondani egy-egy vegyület abszolút energiáját.

Az elektrokémiában a standardhidrogénelektrod potenciálja a viszonyítási alap. Az 1,00 mol/dm³ H⁺-
tartalmú oldatba merülő platinaelektrodra 25°C-os, 101,3 kPa nyomású hidrogéngázt vezetve alakul ki a
H⁺/H₂ gázelektrod, amelynek potenciálja megállapodás szerint 0 V.

(A standardpotenciálabszolút értéke megegyezik annak a galvánelemnek az elektromotoros erejével, ame-
lyet egy standard hidrogénelektrod és a vizsgált standardállapotú elektród összekapcsolásával hoztunk
létre.)

7.2.2 Elektromotoros erő levezetése

Tehát az elektromotoros erő a páronkénti elektród-elektrolit standard elektródpotenciál értékeinek különbsége.

7.2.3 Elektromotoros erő kapcsolata a koncentrációkkal

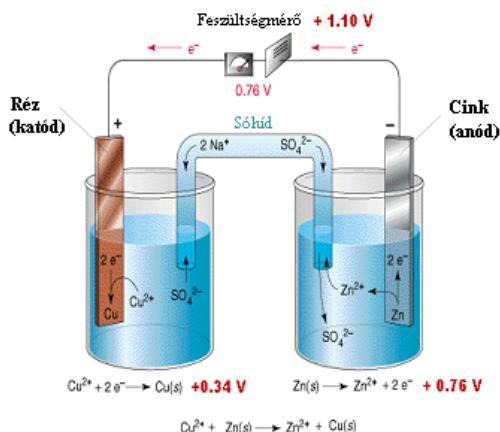
$$\epsilon = \epsilon_0 + \frac{RT}{zF} \ln \frac{[ox]^b}{[red]^a} = \epsilon_0 + \frac{0,059}{z} \log \frac{[ox]^b}{[red]^a}$$

Ahol: ϵ a T hőmérsékleten mért elektródpotenciál ϵ_0 a T hőmérsékleten mért standardpotenciál R az
egyetemes gázállandó T a hőmérséklet z az elektronszám változás a redoxi reakcióban F a Faraday-féle
szám [ox] illetve [red] a folyamatban résztvevő oxidált illetve redukált állapotú anyag koncentrációja a
illetve b a redoxi folyamatban a sztöchiometriai számok.

7.3 Galván elem

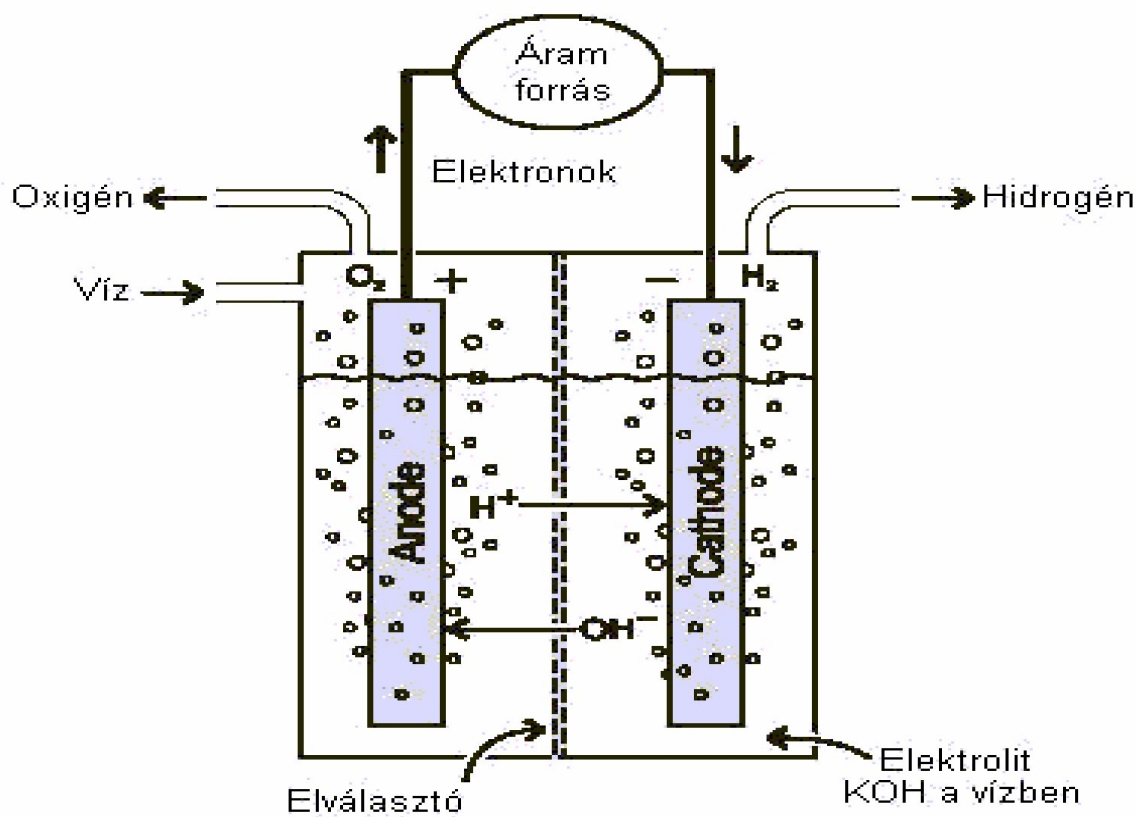
Spontán végbemenő elektrokémiai reakciók.

A Galván elem célja a kémiai energia átalakítása elektromos energiába.



7.4 Elektrolízis

Külső árammal, spontán **nem** végbemenő reakciókat hajtunk meg. Általában elektrolitot elektrolizálunk. Az elektrolízis célja az elemek szétválasztása.



7.5 Faraday törvényei

7.5.1 Faraday I. törvénye

Az elektródon lerakódó anyag tömege (m) arányos az áthaladt töltésmennyiséggel (Q).

7.5.2 Faraday II. törvénye

Azonos töltésmennyiséggel (Q) azonos kémiai egyenértékű anyag (M/z) választható le (az egyenértékű arányos a móltömegeg).