

Általános kémia

A kémia tudományának tárgya, módszerei.

Mennyiségek, mértékegységek, mérés.

Az atomelmélet fejlődése.

Radioaktivitás.

Kvantumelmélet, az atomszerkezet leírása, kvantumszámok és jelentésük.

A periódusos rendszer, periodikus tulajdonságok.

A kémiai kötés típusai, kötéselméletek

A molekulák alakja

Anyagi halmazok, halmazállapotok, halmazállapot-változások, fázisdiagramok

Az anyagi halmazok jellemzése, szerkezet és tulajdonság kapcsolata

Az oldatok, kolloid rendszerek.

A szilárd anyagok szerkezete, rácstípusok.

Kémiai reakciók típusai, a sztöchiometria alapjai.

A termokémia alapfogalmai

A reakciósebesség, a kémiai egyensúly

Egyensúlyok híg vizes oldatokban, pH, oldhatóság és komplexképződés.

Az elektrokémia alapjai

Kémia a minden napokban, környezet és kémia.

Általános kémia

- Veszprémi Tamás Általános Kémia, 3. kiadás 2020, Akadémiai Kiadó, (ebből ábrák is!)
- Náray-Szabó Gábor, Kémia, 2006, Akadémiai Kiadó (ez valószínűleg csak annak hasznos, aki már ismeri az anyagot)
- Ábrák vannak még az Inorganic Chemistry (Oxford Un. Press) 7th Edition tankönyvből, a kiadó engedélyével kizárolag oktatási célra!
- **Eszterházy egyetemistáknak:** mersz.hu oldalon elérhetők a magyar könyvek bejelentkezés után (pl. eduid)
- Benkő Zoltán (szerk.) Kémiai alapok, BME 2011,
https://regi.tankonyvtar.hu/hu/tartalom/tamop425/0028_BenkoZ_Kemiai-alapok/adatok.html
- bárkinek elérhetők az angol könyv "Student Resources"-e: <https://learninglink.oup.com/access/ichem7e> , különösen hasznosak a periódikus trendekről szóló fejezet, mega többi bevezető fejezet is
- számtalan internetes forrás van bárki számára elérhető formában; angol nyelven kifejezetten ajánlott a Chemistry Library oldal: <https://chem.libretexts.org>; ami szinte minden témát kiválóan feldolgoz

A kémia tudományának tárgya, módszerei.

- kémia: az ember által megszokott körülmények között és azon túl is létező anyag felépítésének, tulajdonságainak, az anyagfajták egymásba alakulásának a tudománya
- megszokott körülmények: a Földön uralkodó hőmérsékleti és nyomásviszonyok, a fény- és radioaktív sugárzás megszokott szintje
- módszerek: tudományos megismerés módszerei általában: megfigyelés, kísérletezés, hipotézis, fogalomalkotás, definiálás, dedukció, reprodukálás, jóslás, ellenőrzés, hibabecslés, stb.
- specifikusan:
 - mérés (fizikai módszerek, mértékegységek (szinte minden mérés eredményét valaminek az elmozdulásából kapjuk! pl. időmérés, súlymérés, áramerősség, feszültség, stb.)),
 - reakciók elvégzése és mérés előtte-közben-utána, összehasonlítások
 - felfedező kutatások - optimalizálások (pl. egy ipari folyamatot)

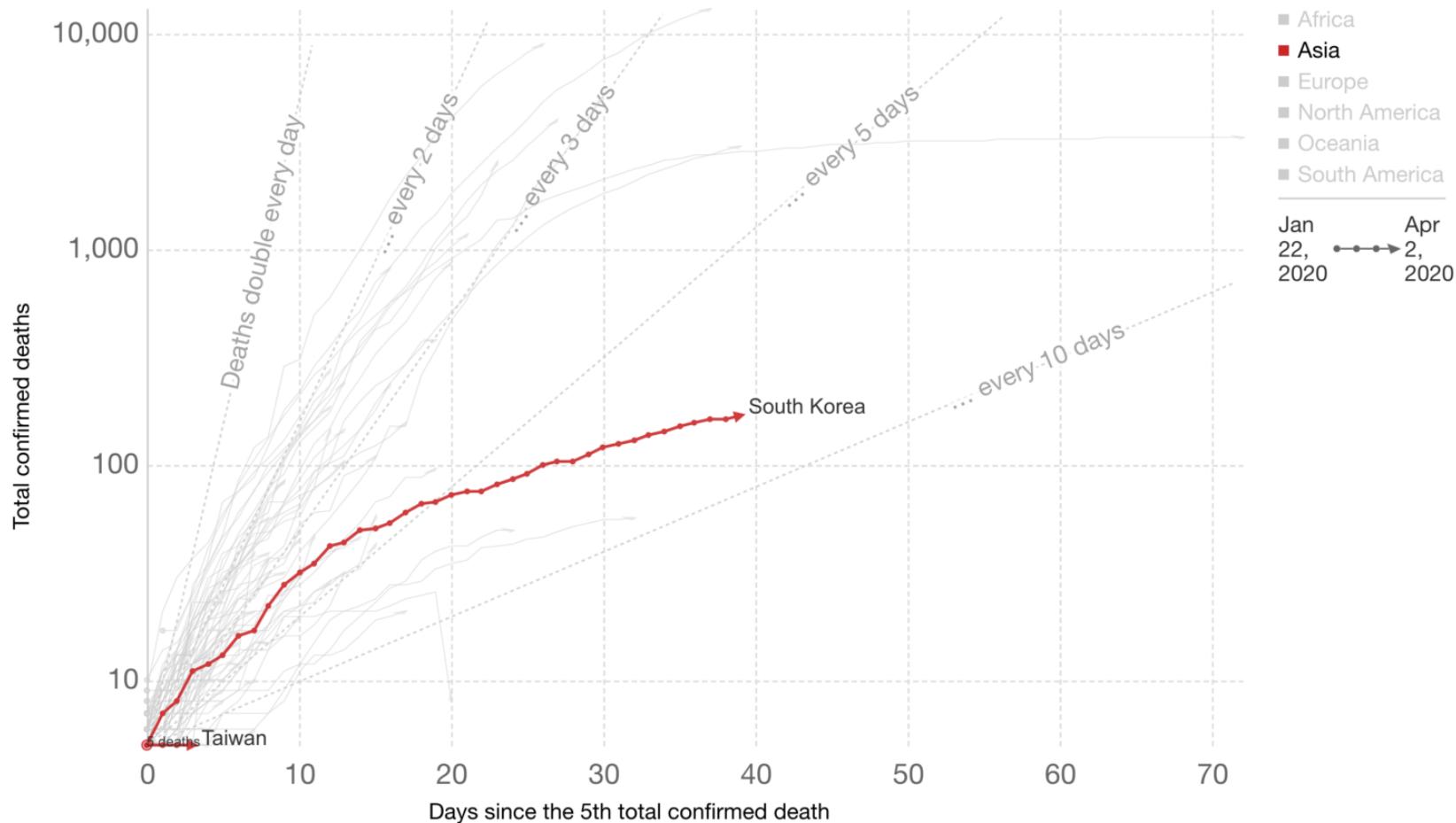
- függvények
 - trigonometrikus (pl. spektroszkópia (pl. Fourier Tr.), krisztallográfia)
 - exponenciális függvény (pl. kinetika, radioaktivitás)
 - logaritmusfüggvény (pl. pH, elektromotoros erő, szabadenergia és egyensúly)
 - differenciálszámítás (pl. kinetika, áram, diffúzió, spektrumoknál deriváltspektrum (pl. ESR))
 - integrálás (pl. termodinamika, munkavégzés, reakciókinetika, magkémia)
 - differenciálegyenletek
 - speciális eset: $y' = c*y$ (pl. radioaktív bomlás, elsőrendű reakció sebessége, Lambert-Beer törvény, stb.)
 - interpoláció, extrapoláció
 - görbefittelés, regresszió
 - hibaszámítás, statisztika, eloszlások
 - geometria, Pitagorasz tételek, térfogatok számítása (pl. kristályok szerkezete, szoros illeszkedés)
-
- adatok pontossága, mérési pontosság
 - értékes jegyek megadása projektek végén: a legkevésbé pontos adat határozza meg
 - kerekítések, mikor, melyik projekt-fázisban kerekítsünk és hogyan (spoiler: **lehetőleg** csak a legvégén)

hogyan értelmezzünk logaritmikus görbét:

Total confirmed deaths of COVID-19

Limited testing and challenges in the attribution of the cause of death means that the number of confirmed deaths may not be an accurate count of the true number of deaths from COVID-19.

Our World
in Data

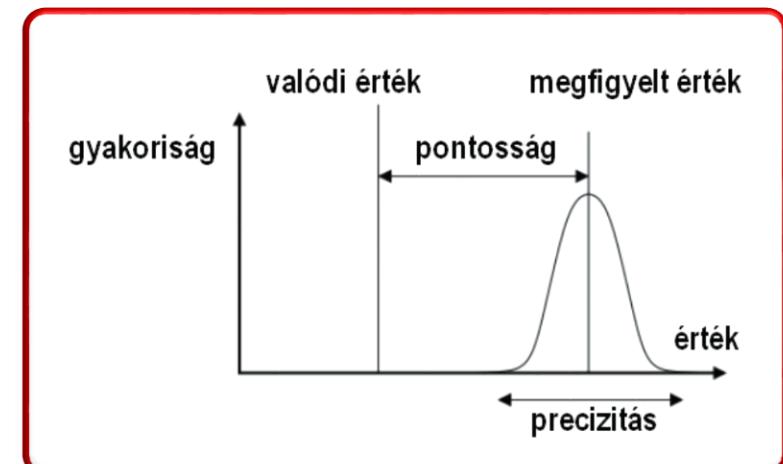


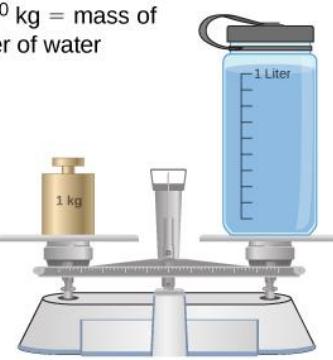
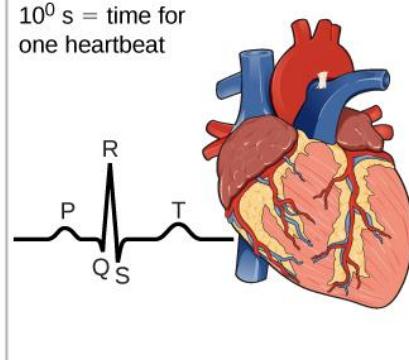
Source: European CDC – Situation Update Worldwide – Last updated 2nd April, 11:45 (London time)

OurWorldInData.org/coronavirus • CC BY

Mértékegységek, SI, mérés

- alapmértékegységek (hosszúság, tömeg, áramerősség, hőmérséklet, idő, anyagmennyiség, fényerősség)
- SI egységek: m, kg, A, K, s, mól, Kandela
- előtagok (pl. kilo, mega, giga, peta, centi, milli, nano, stb)
- tisztázandó egy projektben, hogy mik a mértékegységek, mik az egységek (pl. atomi egységek, CGS, SI (MKS))
- a képletek, számítások nagymértékben egyszerűsödhetnek
- vigyázni kell, hogy ne keveredjenek a számítások során, és figyelni kell a nem-alapmennyiségekre (pl. Joule, kcal/mol, univerzális gázállandó mértékegysége, térfogat, súly, stb.)
- egyéb (régi vagy külföldi) mértékegységek (pl. hüvelyk, incs, aranykorona, hektár, hold, tonna, regisztertonna, angol vs amerikai tonna, Fahrenheit, Celsius, cinkotai nagycicce, stb.)
- mérés: összehasonlítás a mértékegységgel
 - mérési hiba: véletlen és szisztematikus
 - pontosság (reprodukálhatóság, torzítatlanság) és precízitás (szabatosság)
 - mérés szelektivitása
 - mérés érzékenysége (pl. kimutathatósági határ)



Length in Meters (m)	Masses in Kilograms (kg)	Time in Seconds (s)
$10^{-15} \text{ m} = \text{diameter of proton}$	$10^{-30} \text{ kg} = \text{mass of electron}$	$10^{-22} \text{ s} = \text{mean lifetime of very unstable nucleus}$
$10^{-14} \text{ m} = \text{diameter of large nucleus}$	$10^{-27} \text{ kg} = \text{mass of proton}$	$10^{-17} \text{ s} = \text{time for single floating-point operation in a supercomputer}$
$10^{-10} \text{ m} = \text{diameter of hydrogen atom}$	$10^{-15} \text{ kg} = \text{mass of bacterium}$	$10^{-15} \text{ s} = \text{time for one oscillation of visible light}$
$10^{-7} \text{ m} = \text{diameter of typical virus}$	$10^{-5} \text{ kg} = \text{mass of mosquito}$	$10^{-13} \text{ s} = \text{time for one vibration of an atom in a solid}$
$10^{-2} \text{ m} = \text{pinky fingernail width}$	$10^{-2} \text{ kg} = \text{mass of hummingbird}$	$10^{-3} \text{ s} = \text{duration of a nerve impulse}$
$10^0 \text{ m} = \text{height of 4 year old child}$	$10^0 \text{ kg} = \text{mass of liter of water}$  	$10^0 \text{ s} = \text{time for one heartbeat}$ 
$10^2 \text{ m} = \text{length of football field}$	$10^2 \text{ kg} = \text{mass of person}$	$10^5 \text{ s} = \text{one day}$
$10^7 \text{ m} = \text{diameter of Earth}$	$10^{19} \text{ kg} = \text{mass of atmosphere}$	$10^7 \text{ s} = \text{one year}$
$10^{13} \text{ m} = \text{diameter of solar system}$	$10^{22} \text{ kg} = \text{mass of Moon}$	$10^9 \text{ s} = \text{human lifetime}$
$10^{16} \text{ m} = \text{distance light travels in a year (one light-year)}$	$10^{25} \text{ kg} = \text{mass of Earth}$	$10^{11} \text{ s} = \text{recorded human history}$
$10^{21} \text{ m} = \text{Milky Way diameter}$	$10^{30} \text{ kg} = \text{mass of Sun}$	$10^{17} \text{ s} = \text{age of Earth}$
$10^{26} \text{ m} = \text{distance to edge of observable universe}$	$10^{53} \text{ kg} = \text{upper limit on mass of known universe}$	$10^{18} \text{ s} = \text{age of the universe}$

forrás:www.bartleby.com/questions-and-answers/length-in-meters-m-masses-in-kilograms-kg-time-in-seconds-s-10-22-s-mean-lifetime-of-very-or-10-15-m/c004de34-c0c0-4be4-a251-dcd161f168ed

Néhány alapvető fogalom

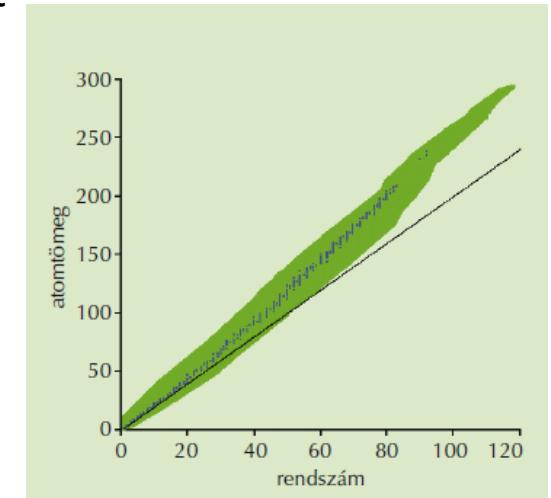
- kémiai elemek, elnevezésük
- vegyjel
- képlet:
 - tapasztalati képlet: csak az atomarányok az adott anyag halmazában: pl. SiO_2 , H_2O , C
 - molekulaképlet: 1 molekulában az atomarányok. pl C_{60} , O_3
 - például: mit jelentenek a következő képletek: FeO , Fe_3O_4 , Hg_2Cl_2 , H_2O_2 vs. OH, O_3 vs. O
- molekulatömeg
- szerkezeti képlet
- atom, molekula definíciója
- kémiai kötés

Az atomelmélet fejlődése.

- ókori görögök (Demokritosz, Arisztotelész, Leukipposz)
- alkimisták
- Lavoisier
- Proust
- Dalton
- Gay-Lussac
- Avogadro
- Mengyelejev
- Thomson
- Rutherford
- Röntgen
- Becquerel
- Curie
- Bohr, de Broglie, Planck, Einstein, Heisenberg, Schrödinger, Dirac, Neuman, Wigner, Fermi, stb.

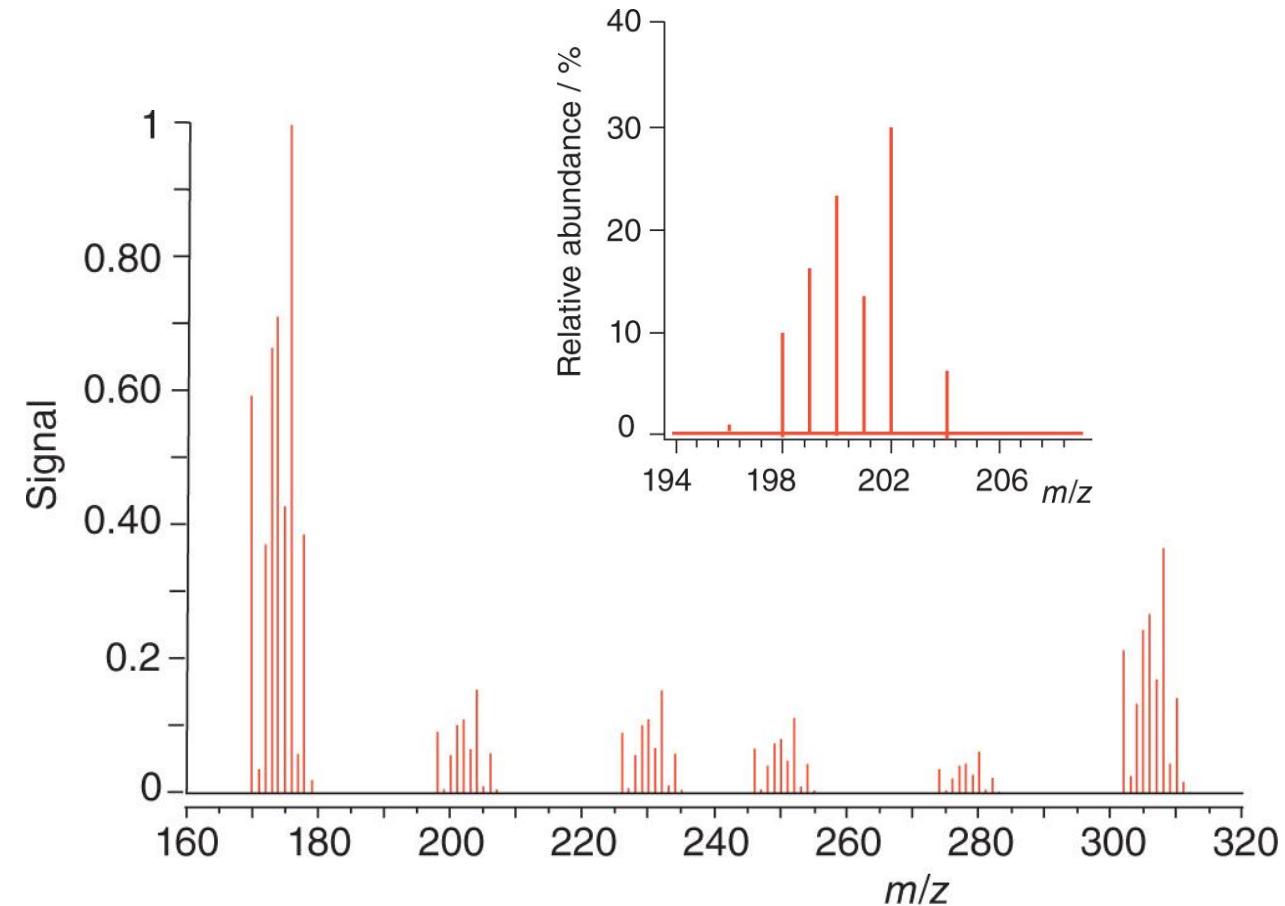
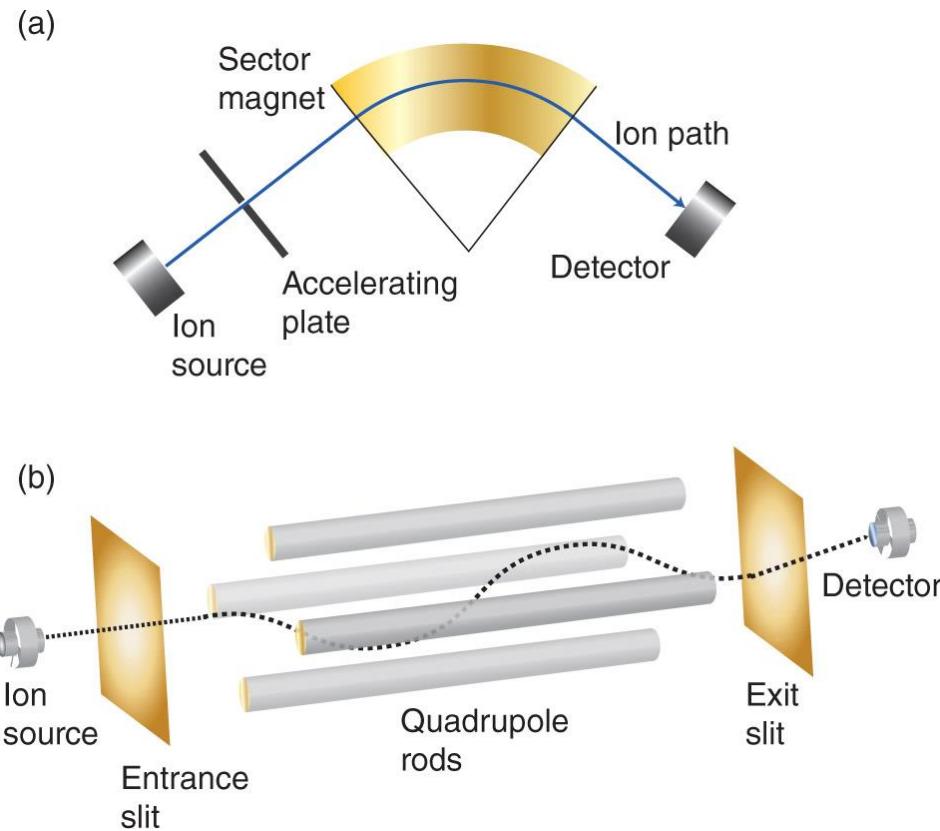
Atomszerkezeti ismeretek

- atomelméletek
- modern fizika eredményei alapján
 - atommag, nukleonok: proton, neutron, töltés, tömeg
 - elektron, töltés, tömeg
- rendszám, tömegszám, nuklid, izotópok,
- atomi tömegegység (semleges ^{12}C izotóp atom tömegének 1/12-e, Dalton), atomtömeg, relatív atomtömeg (vagy "atomsúly", vagy "atomtömeg", ez az átlagos atomtömeg), mól (Avogadro szám)
- tömegszám (nincs dimenziója, egész szám) – relatív atomtömeg (nincs dimenziója)
- táblázatokban ma gyakran tartomány az atomtömegre, mivel izotópösszetétel változhat
- példák: deutérium, trícium, ^{13}C , K-Ar; Br izotópok tengerben, stb.



Atomszerkezeti ismeretek

- izotópok mérése, megkülönböztetése: tömegspektrometria



Atomszerkezet, radioaktivitás

- izotópok
- instabil izotópok: magreakciók (pl. α -bomlás, β -bomlás, elektronbefogás, maghasadás)
- α -bomlás: ${}^4_2\text{He}^{2+}$ ion távozik; pl.: ${}^{238}_{92}\text{U} \rightarrow {}^{234}_{90}\text{Th}^{2-} + \alpha$
- β -bomlás:
 - neutron bomlik, elektron távozik; pl. ${}^{137}_{55}\text{Cs} \rightarrow {}^{137}_{56}\text{Ba}^+ + e^-$ (+ e-antineutrino)
 - proton bomlik és pozitron távozik; pl. ${}^{22}_{11}\text{Na} \rightarrow {}^{22}_{10}\text{Ne} + e^+$ (+ e-neutrino)
- elektronbefogás (belő héjról protonnal neutrónná egyesül; pl. ${}^{64}_{29}\text{Cu} \rightarrow {}^{64}_{28}\text{Ni} + e^-$ (+ e-neutrino))
- példa: földi ${}^{40}_{18}\text{Ar}$ nagy része ${}^{40}_{19}\text{K}$ bomlásából származik (elektron-befogás és β^+), a világűrben máshol az ${}^{36}_{18}\text{Ar}$ a leggyakoribb, meg a ${}^{38}_{18}\text{Ar}$
- új elemek létrejötte: fúzió, maghasadás
- legstabilabb elemek Ni, Fe, addig fúzió, utána maghasadás stabilizál

**Atomszerkezet: elektronszerkezet.
kvantumelmélet, az atomszerkezet leírása,
a kvantumszámok és jelentésük.**

- kvantummechanika sikeresen megmagyarázta az atomi sajátosságokat
- megalapozta a modern, elektronszerkezeti értelmezésen alapuló kémiát
- periódusos rendszer és periódikus sajátosságok magyarázata
- kémiai kötés magyarázata
- vegyérték magyarázata
- fémkomplexek szerkezete, alakja, reaktivitása, spektroszkópiai és mágneses tulajdonságainak magyarázata
- reaktivitás magyarázata

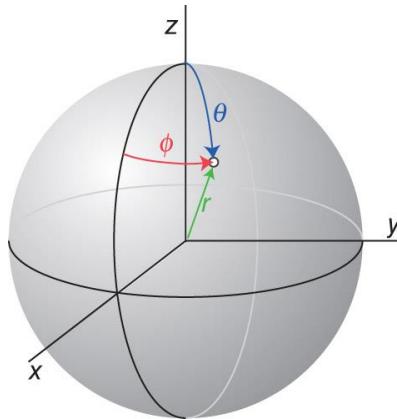
**Atomszerkezet: elektronszerkezet.
kvantumelmélet, az atomszerkezet leírása,
a kvantumszámok és jelentésük.**

- kísérleti előzmények: fekete-test sugárzás, fényelektromos effektus (kvantum), részecske-hullám kettőssége (de Broglie), H-atom vonalas színképe, Rutherford atommodellje
- részecskék leírása: hullámfüggvénnyel
- valószínűségi értelmezés
- kvantálás értelmezése és szükségszerűsége (kísérleti eredmények, értelmezési nehézségek)
- a Schrödinger egyenlet: megoldása energiákat és állapotokat ad (alapállapot, gerjesztett állapot)
- a Schrödinger egyenlet megoldása H-atomra, megoldások, kvantumszámok
- főkvantumszám, mellékkvantumszám, mágneses kvantumszám
- héj, alhéj
- a spin-kvantumszám

- csak a leírást nézzük és értelmezzük, levezetések nélkül!

$$\Psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)Y(\vartheta, \varphi)$$

$$\Psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} e^{-\frac{r}{2}} r^l L_{n-l-1}^{2l+1}(r) Y_l^m(\vartheta, \varphi)$$



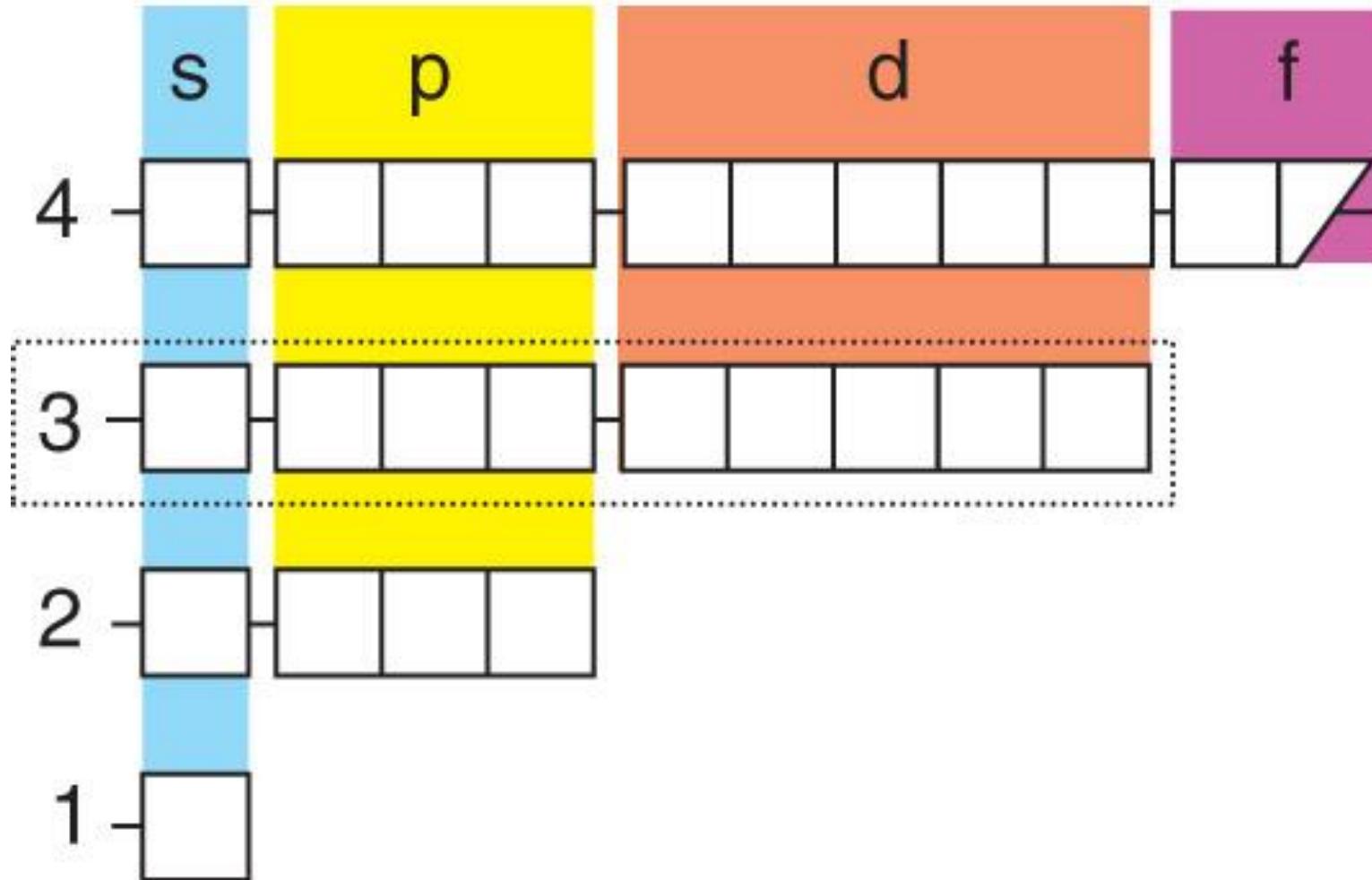
atomi egységek:

- bohr (a_0)
- e^- töltése
- $\hbar = h/2\pi$
- atomi tömegegység

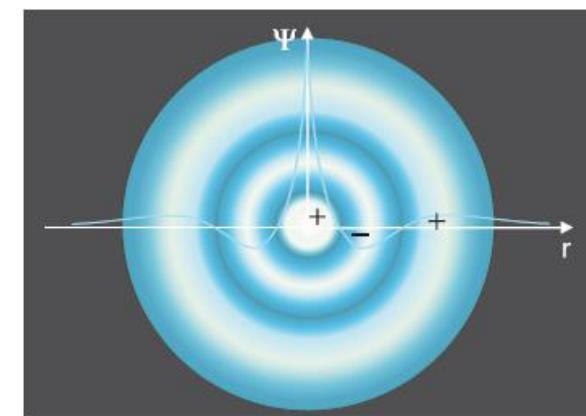
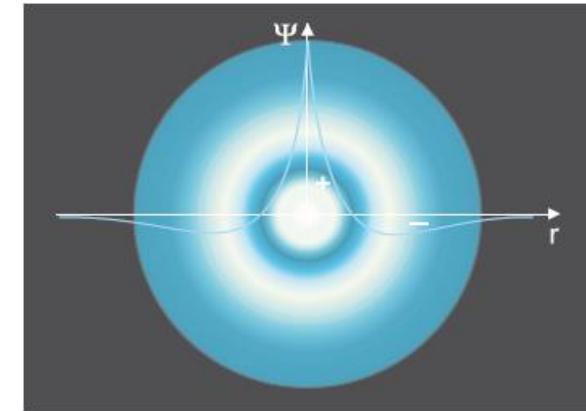
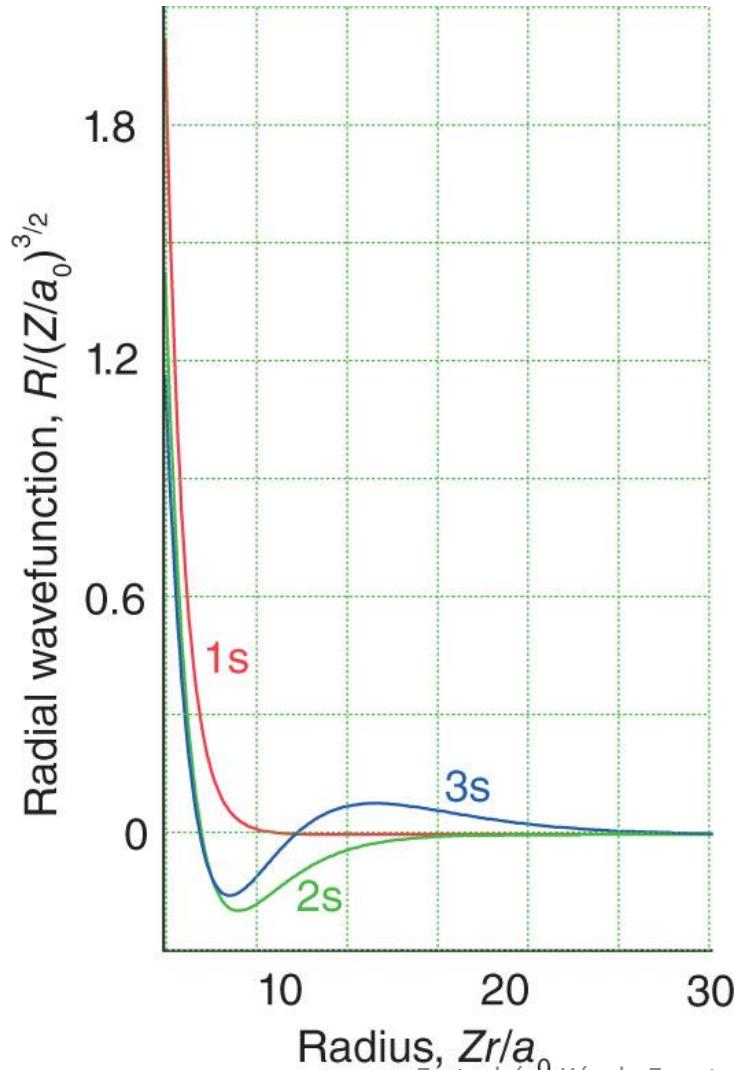
- $n = 1, 2, 3, \dots$ (héj)
- $l = 0, 1, \dots n-1$ (alhéj)
- $m = -l, -(l-1), \dots 0, 1, \dots (l-1), l$
- pl. $n=1$: $l=0, m=0$;
- pl. $n=3$: $l=0, m=0; l=1, m= -1, 0, 1; l=2, m= -2, -1, 0, 1, 2$

$R(r)$	$Y(\vartheta, \varphi)$
$R_{10}(r) = \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} 2 \exp\left[-\frac{r}{a_0}\right]$	$s = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
$R_{20}(r) = \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) \exp\left[-\frac{r}{2a_0}\right]$	$p_z = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta$
$R_{21}(r) = \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{r}{a_0} \exp\left[-\frac{r}{2a_0}\right]$	$p_y = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \vartheta \sin \varphi$
$R_{30}(r) = \left(\frac{1}{3a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{2}{27} \left(27 - \frac{18r}{a_0} + \frac{2r^2}{a_0^2}\right) \exp\left[-\frac{r}{3a_0}\right]$	$p_x = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \vartheta \cos \varphi$
$R_{31}(r) = \left(\frac{1}{3a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{4}{27\sqrt{2}} \left(\frac{6r}{a_0} - \frac{r^2}{a_0^2}\right) \exp\left[-\frac{r}{3a_0}\right]$	$d_{z^2} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (1 - 3 \cos^2 \vartheta)$
$R_{32}(r) = \left(\frac{1}{3a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{4}{27\sqrt{10}} \frac{r^2}{a_0^2} \exp\left[-\frac{r}{3a_0}\right]$	$d_{xz} = \sqrt{\frac{15}{4\pi}} \sin \vartheta \cos \vartheta \cos \varphi$
	$d_{yz} = \sqrt{\frac{15}{4\pi}} \sin \vartheta \cos \vartheta \sin \varphi$
	$d_{x^2-y^2} = \sqrt{\frac{15}{16\pi}} \sin^2 \vartheta \cos 2\varphi$
	$d_{xy} = \sqrt{\frac{15}{16\pi}} \sin^2 \vartheta \sin 2\varphi$

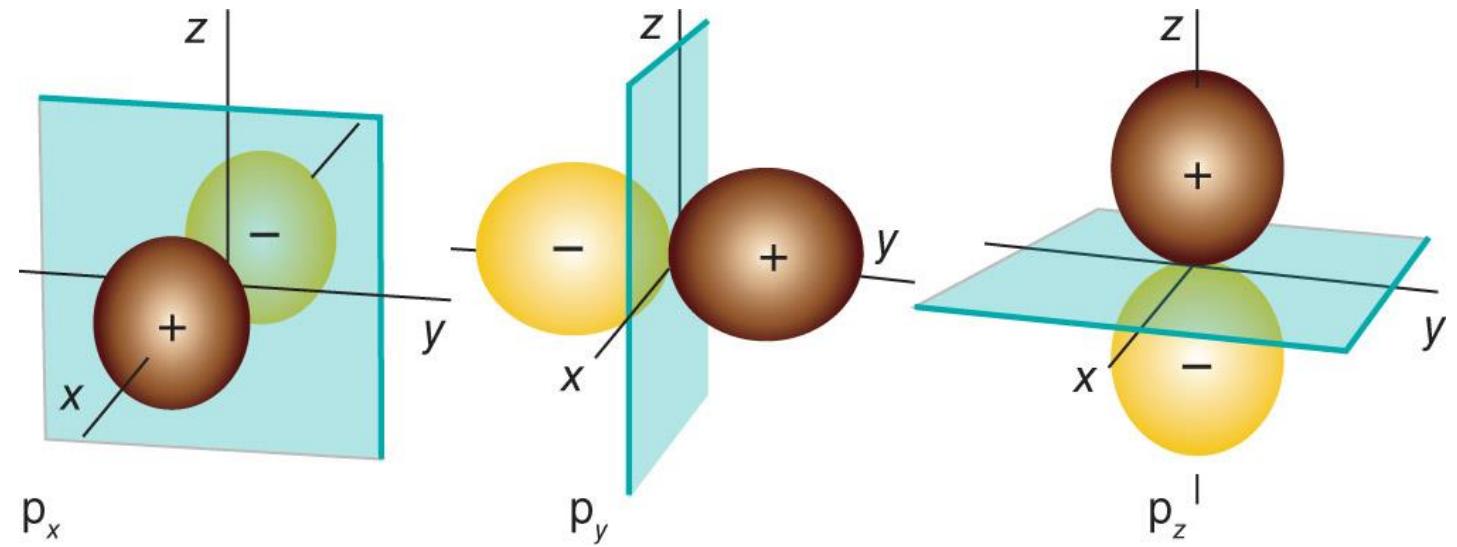
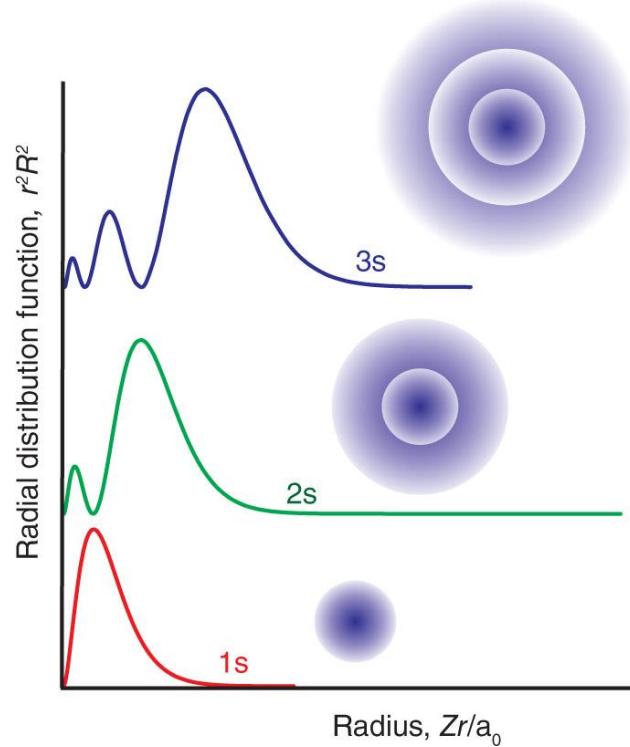
csak a pirossal bekeretezett rész a vizsga része, a többi csak érdekkesség, nem kell tudni!!!



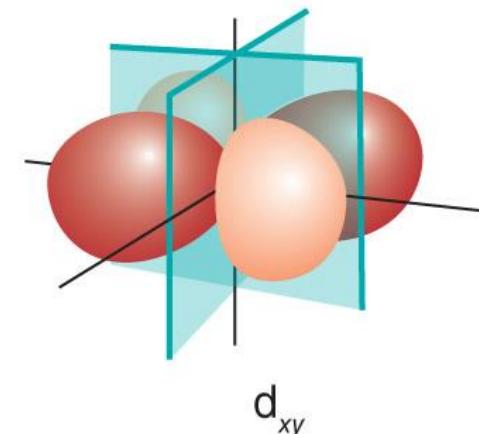
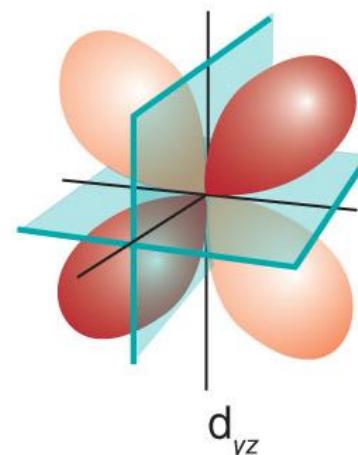
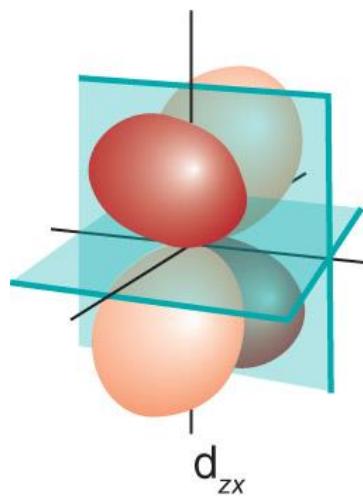
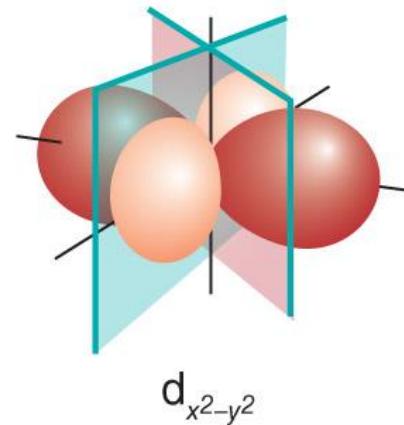
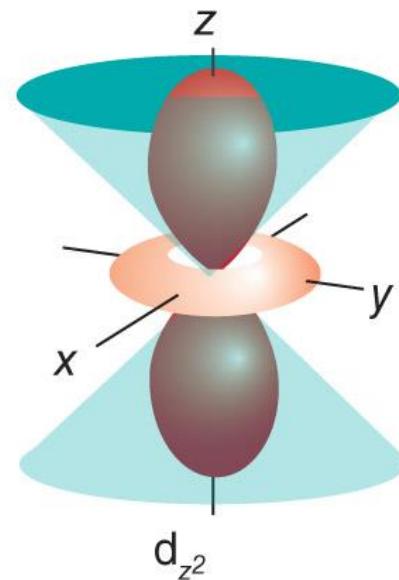
**Atomszerkezet: elektronszerkezet.
kvantumelmélet, az atomszerkezet leírása,
a kvantumszámok és jelentésük.**



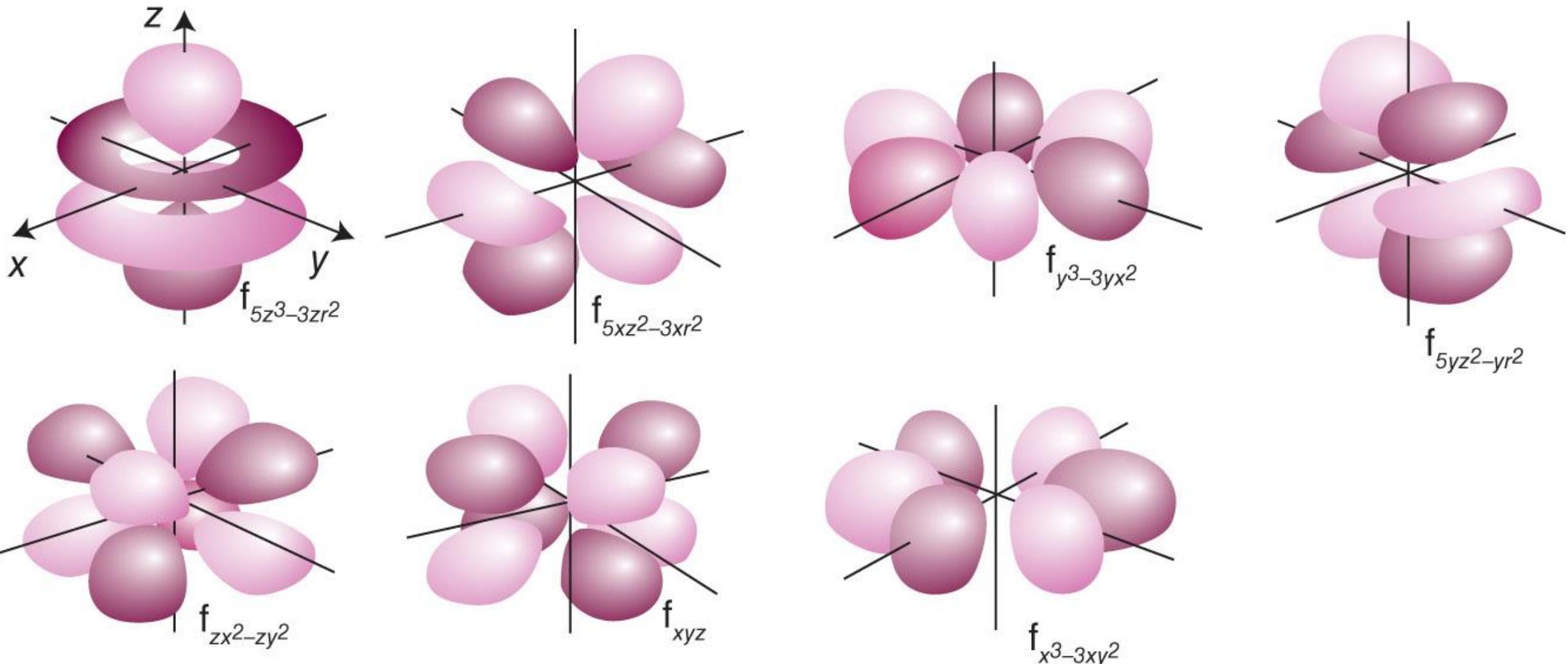
Atomszerkezet: elektronszerkezet.
kvantumelmélet, az atomszerkezet leírása,
a kvantumszámok és jelentésük.



**Atomszerkezet: elektronszerkezet.
kvantumelmélet, az atomszerkezet leírása,
a kvantumszámok és jelentésük.**



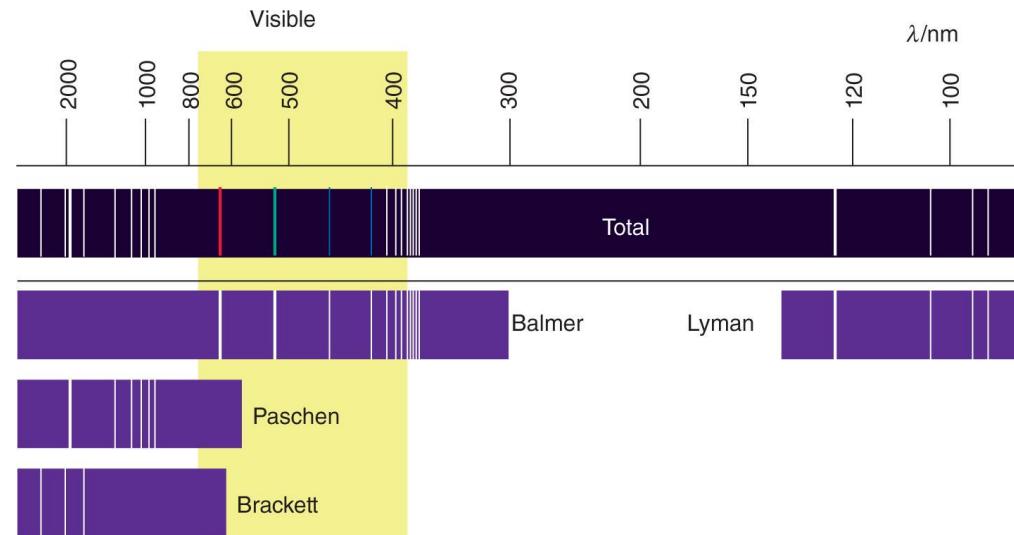
Atomszerkezet: elektronszerkezet.
kvantumelmélet, az atomszerkezet leírása,
a kvantumszámok és jelentésük.



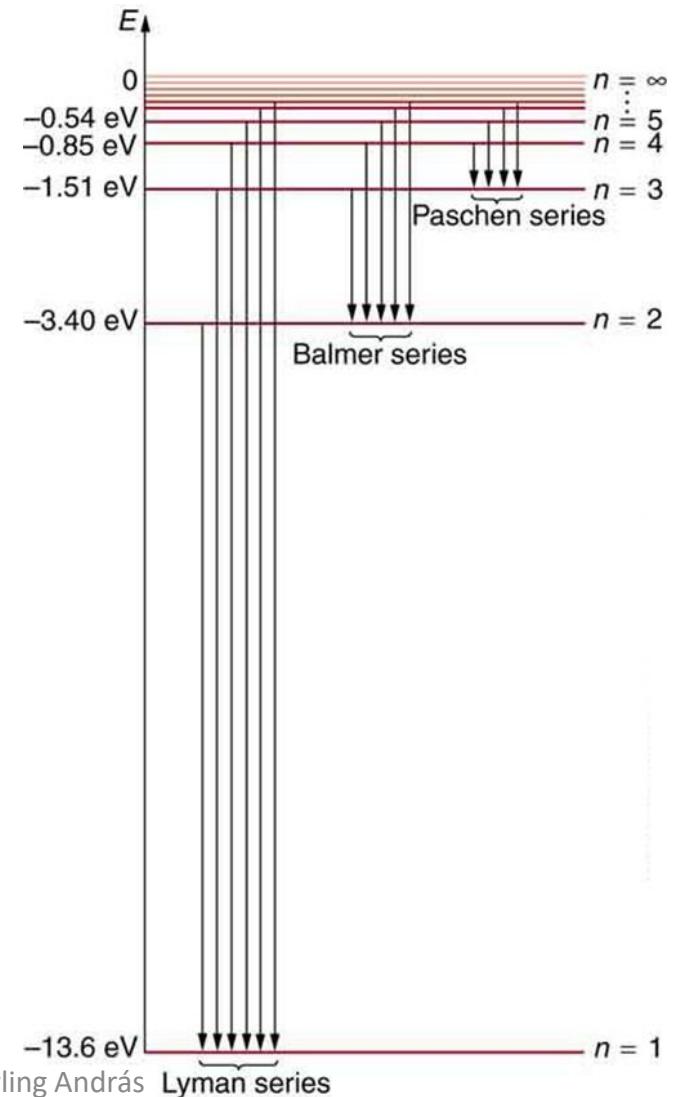
Atomszerkezet: elektronszerkezet a H-atom energiaszintjei

$$E_n = - \left(\frac{m_e k^2 e^2}{2 \hbar^2} \right) \left(\frac{1}{n^2} \right) = -E_0 \left(\frac{1}{n^2} \right), \quad E_0 = 13.6 \text{ eV}$$

- megegyezik a Bohr modell energiaszintjeivel
- csak a főkvantumszámtól függ
- egészen jól magyarázza a H vonalas spektrum kvantáltságát és a vonalak helyét

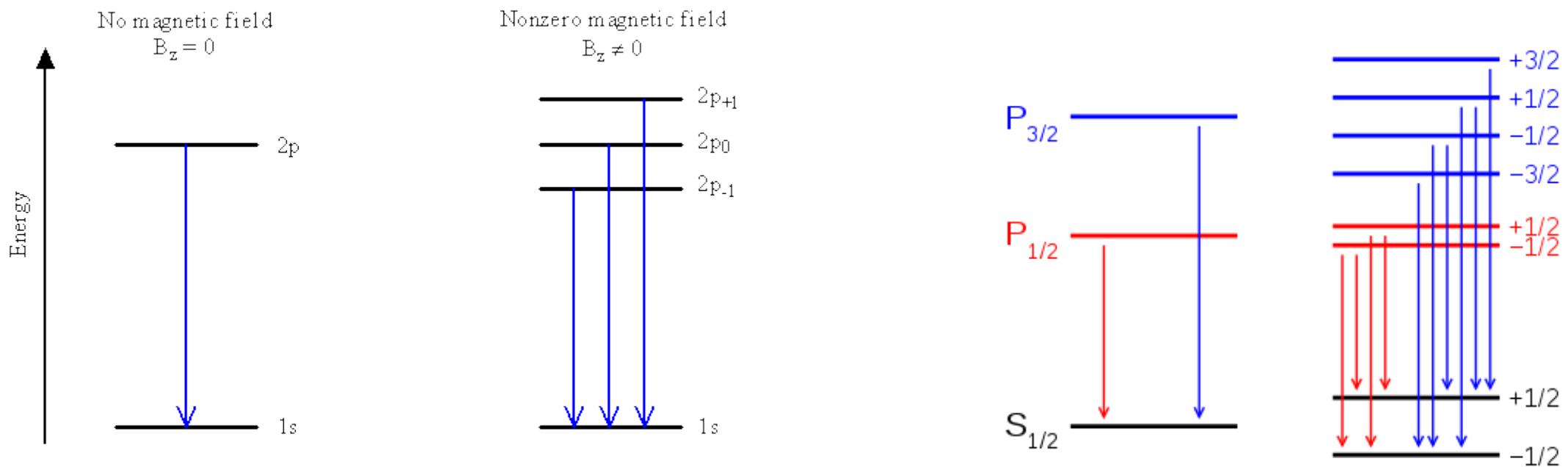


$$\frac{\nu}{c} = \frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_2} - \frac{1}{n_1} \right) \sim \Delta E$$



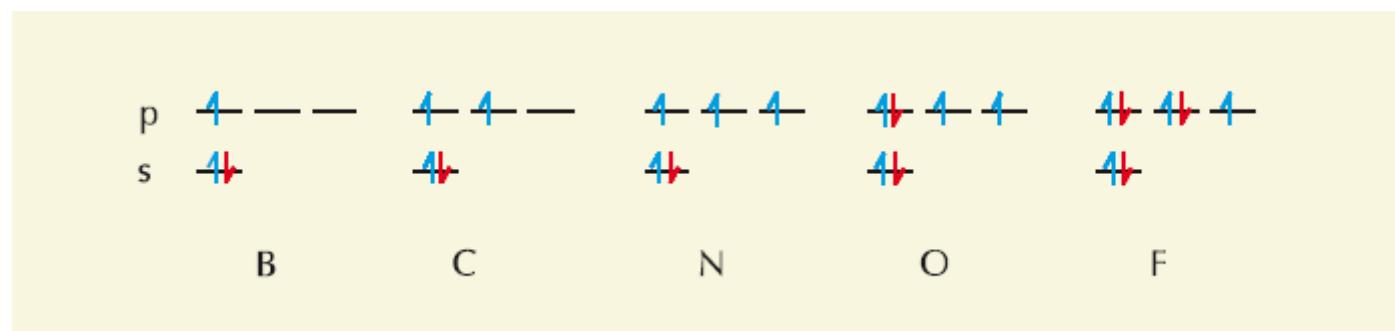
Atomszerkezet: elektronszerkezet. a spin és a spinkvantumszám

- elektronpályák mágneses kvantumszáma utal arra, hogy mágneses térben nem ugyanakkora energiájuk lesz
- kiderült, hogy van az elektronnak (pályától függetlenül) mágneses momentum: ez a spin
- a hozzáartozó kvantumszám a spin kvantumszám ($+1/2, -1/2$)



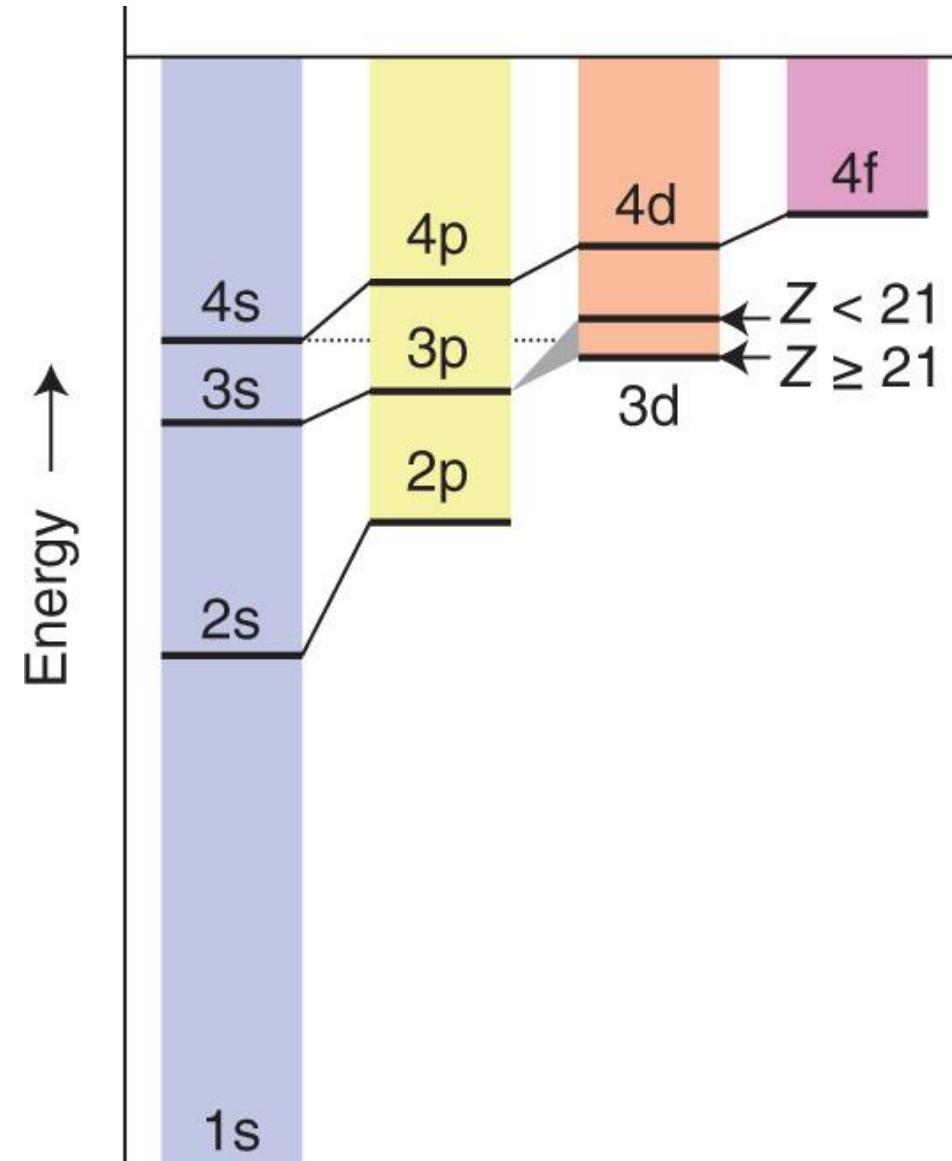
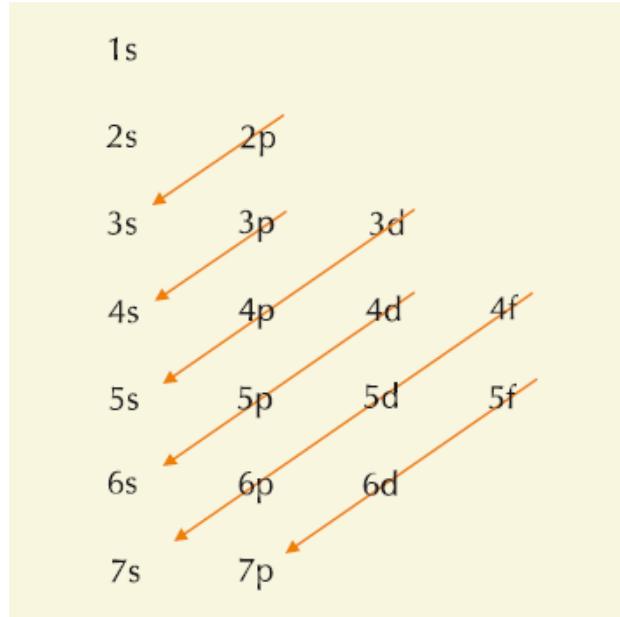
Atomszerkezet: többelektronos elektronszerkezet

- atomi elektronszerkezet felépülését elvek szabályozzák
- energia minimumra való törekvés
- Pauli elv
 - elektronok felcserélésére a hullámfüggvény antiszimmetrikus
 - nem lehet egy atomban 2 elektron ugyanazokkal a kvantumszámokkal
 - következmény: egy pályán legfeljebb 2 elektron lehet
- Hund szabály

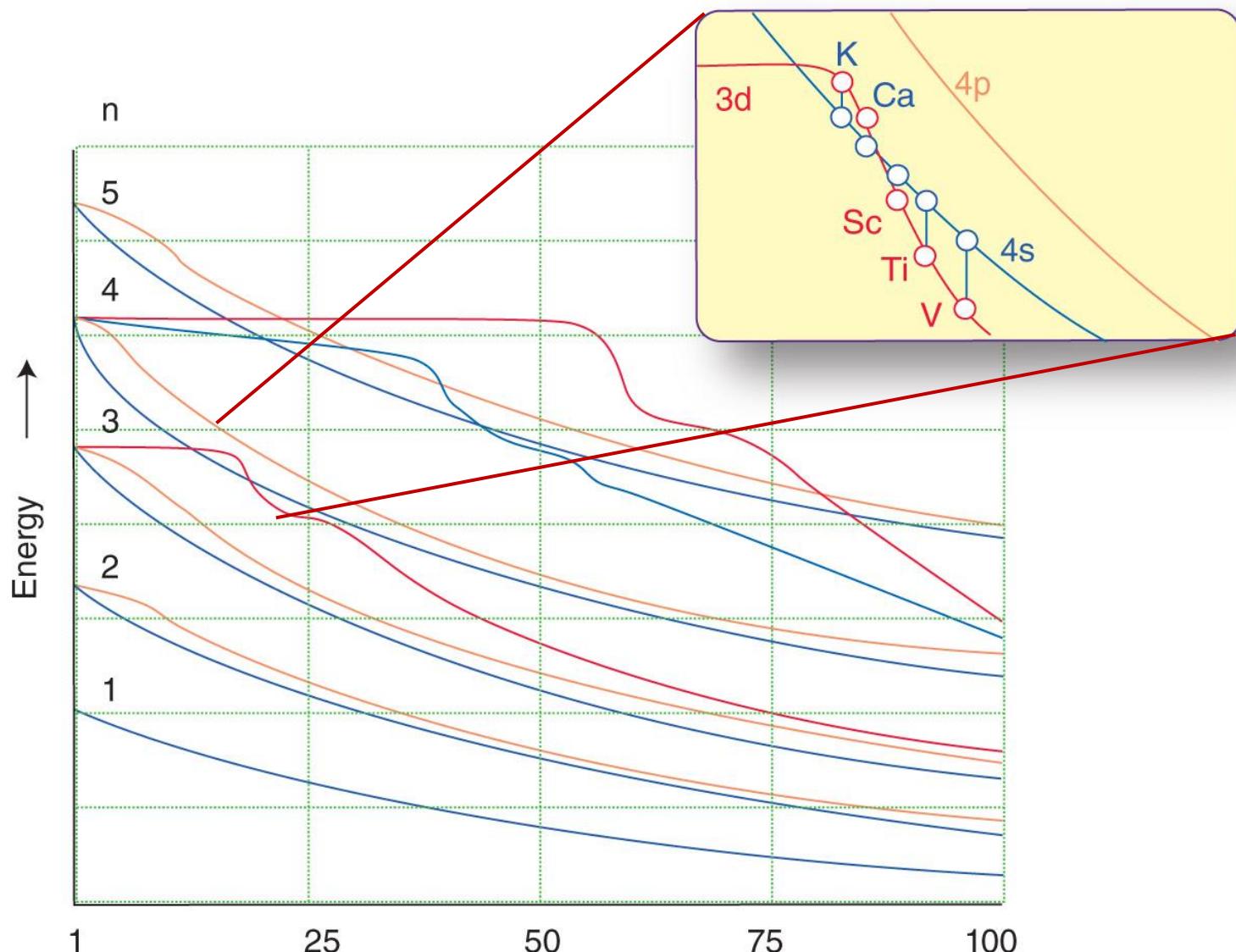


Atomszerkezet: többelektronos elektronszerkezet

- atompályák betöltődése a rendszám növekedésével
- alhéjak, héjak félleg betöltődése, lezáródása
- nemesgázszerkezet, elektronkonfiguráció
- periódikus sajátosságok
- periódusos rendszer
- ionok e-konfigurációja, mely ionállapotok stabilak?



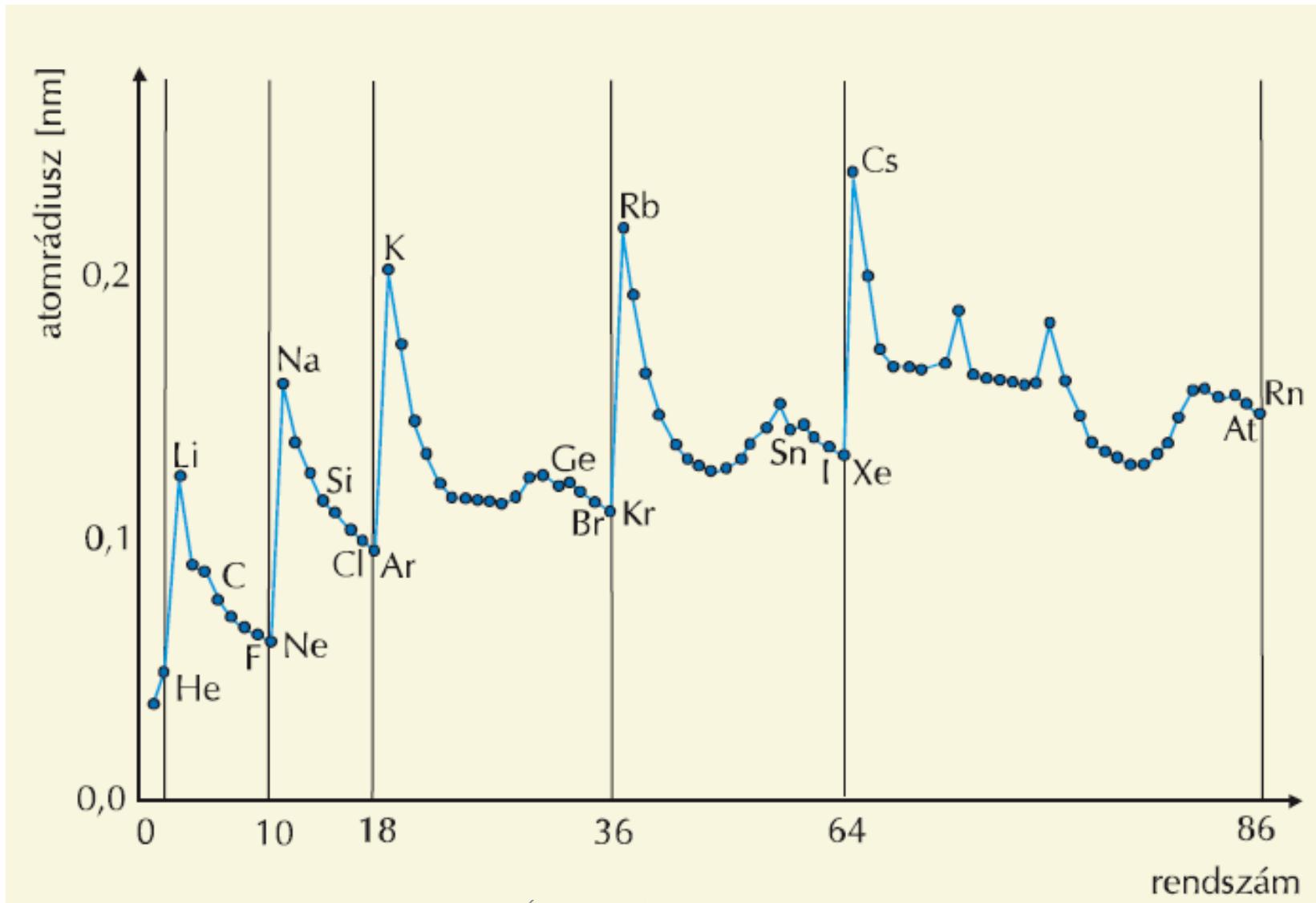
Atomszerkezet: többelektronos elektronszerkezet



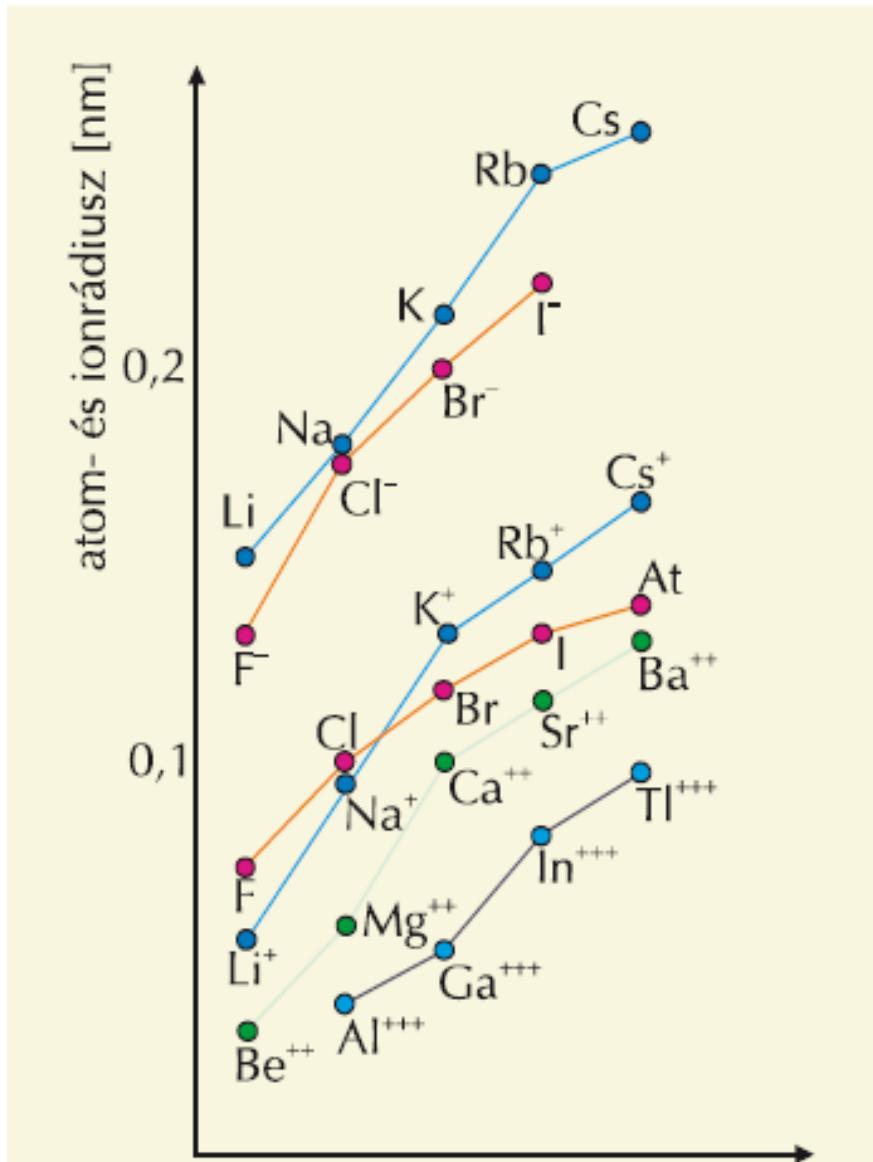
1 H 1s ¹	2 He 1s ²
3 Li [He]2s ¹	4 Be [He]2s ²
11 Na [Ne]3s ¹	12 Mg [Ne]3s ²
19 K [Ar]4s ¹	20 Ca [Ar]4s ²
37 Rb [Kr]5s ¹	38 Sr [Kr]5s ²
55 Cs [Xe]6s ¹	56 Ba [Xe]6s ²
Lantanoидák 57-70	71 Lu [Xe]4f ⁴ 5d ¹ 6s ²
Aktinoidák 82-102	72 Hf [Xe]4f ⁴ 5d ² 6s ²
	73 Ta [Xe]4f ⁴ 5d ³ 6s ²
	74 W [Xe]4f ⁴ 5d ⁴ 6s ²
	75 Re [Xe]4f ⁴ 5d ⁵ 6s ²
	76 Os [Xe]4f ⁴ 5d ⁶ 6s ²
	77 Ir [Xe]4f ⁴ 5d ⁷ 6s ²
	78 Pt [Xe]4f ⁴ 5d ⁸ 6s ¹
	79 Au [Xe]4f ⁴ 5d ⁹ 6s ¹
	80 Hg [Xe]4f ⁴ 5d ¹⁰ 6s ²
	81 Tl [Xe]4f ⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ¹
	82 Pb [Xe]4f ⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ²
	83 Bi [Xe]4f ⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ³
	84 Po [Xe]4f ⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁴
	85 At [Xe]4f ⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁵
	86 Rn [Xe]4f ⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁶
87 Fr [Rn]7s ¹	88 Ra [Rn]7s ²
Aktinoidák 89-102	103 Lr [Rn]5f ⁴ 6d ¹ 7s ²
	104 Rf [Rn]5f ⁴ 6d ² 7s ²
	105 Db [Rn]5f ⁴ 6d ³ 7s ²
	106 Sg Bh Hs Mt Ds Rg Cn Uut Fl Uup Lv Uus Uuo
5 B [He]2s ² 2p ¹	6 C [He]2s ² 2p ²
7 N [He]2s ² 2p ³	8 O [He]2s ² 2p ⁴
9 F [He]2s ² 2p ⁵	10 Ne [He]2s ² 2p ⁶
13 Al [Ne]3s ² 3p ¹	14 Si [Ne]3s ² 3p ²
15 P [Ne]3s ² 3p ³	16 S [Ne]3s ² 3p ⁴
17 Cl [Ne]3s ² 3p ⁵	18 Ar [Ne]3s ² 3p ⁶

Lantanoидák 57-70	57 La [Xe]5d ¹ 6s ²	58 Ce [Xe]4f ² 6s ²	59 Pr [Xe]4f ³ 6s ²	60 Nd [Xe]4f ⁴ 6s ²	61 Pm [Xe]4f ⁵ 6s ²	62 Sm [Xe]4f ⁶ 6s ²	63 Eu [Xe]4f ⁷ 6s ²	64 Gd [Xe]4f ⁷ 5d ¹ 6s ²	65 Tb [Xe]4f ⁸ 6s ²	66 Dy [Xe]4f ⁹ 6s ²	67 Ho [Xe]4f ¹⁰ 6s ²	68 Er [Xe]4f ¹¹ 6s ²	69 Tm [Xe]4f ¹² 6s ²	70 Yb [Xe]4f ¹⁴ 6s ²
Aktinoidák 89-102	89 Ac [Rn]6d ¹ 7s ² Eszterházy Karoly Egyetem, Ajtalamos Késemlő NBT	90 Th [Rn]6d ² 7s ² Egyetem, Ajtalamos Késemlő NBT	91 Pa [Rn]5f ⁶ d ¹ NBT	92 U [Rn]5f ⁶ d ¹ NBT	93 Np [Rn]5f ⁷ s ² NBT	94 Pu [Rn]5f ⁷ s ² NBT	95 Am [Rn]5f ⁷ s ² NBT	96 Cm [Rn]5f ⁷ 6d ¹ LISK3	97 Bk [Rn]5f ⁷ 6d ¹ LISK3	98 Cf [Rn]5f ⁷ 7s ² Surányi András	99 Es [Rn]5f ⁷ 7s ² Surányi András	100 Fm [Rn]5f ⁷ 7s ² Surányi András	101 Md [Rn]5f ⁷ 7s ² Surányi András	102 No [Rn]5f ⁷ 7s ²

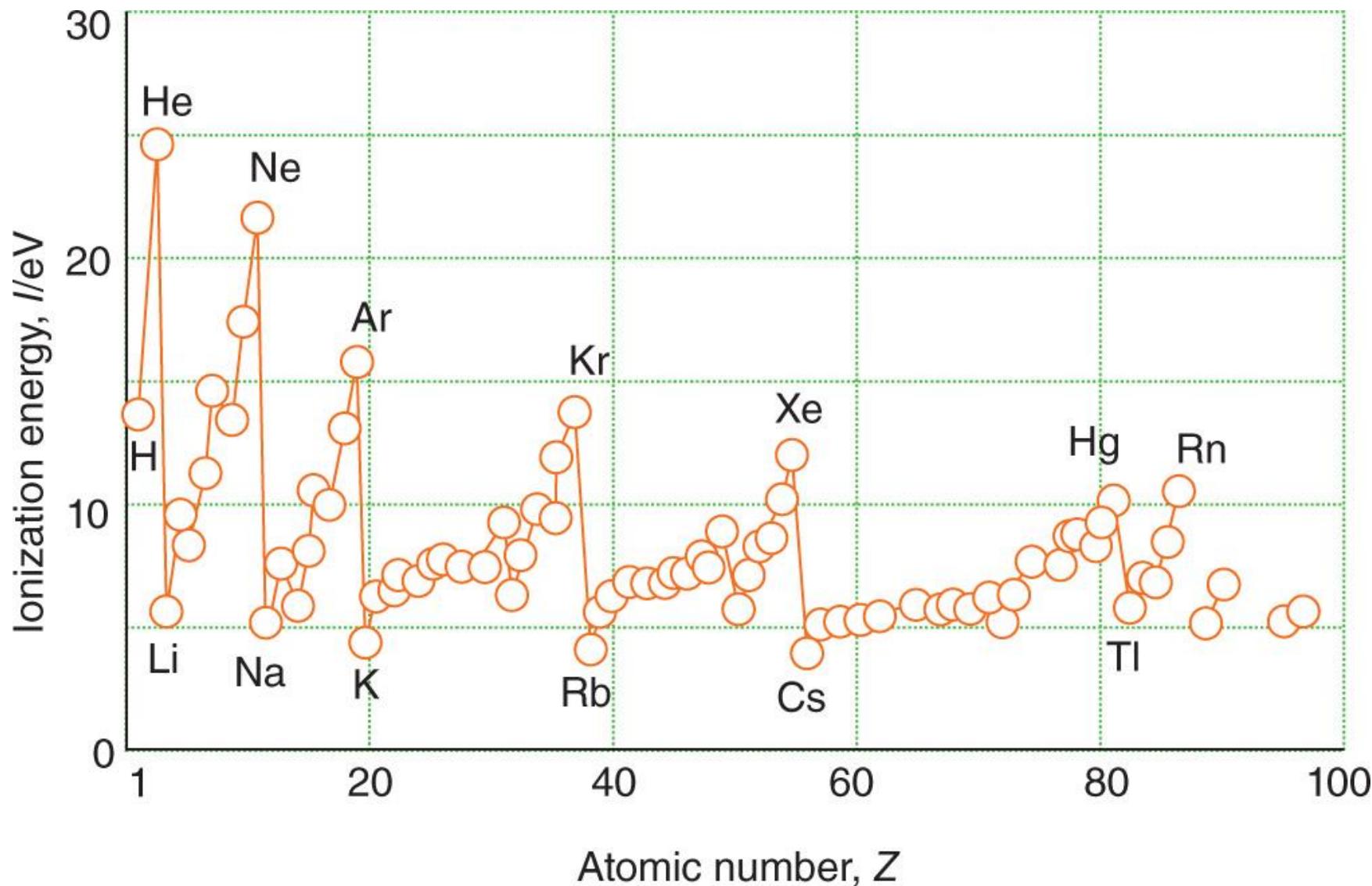
A periódusos rendszer, periódikus tulajdonságok.



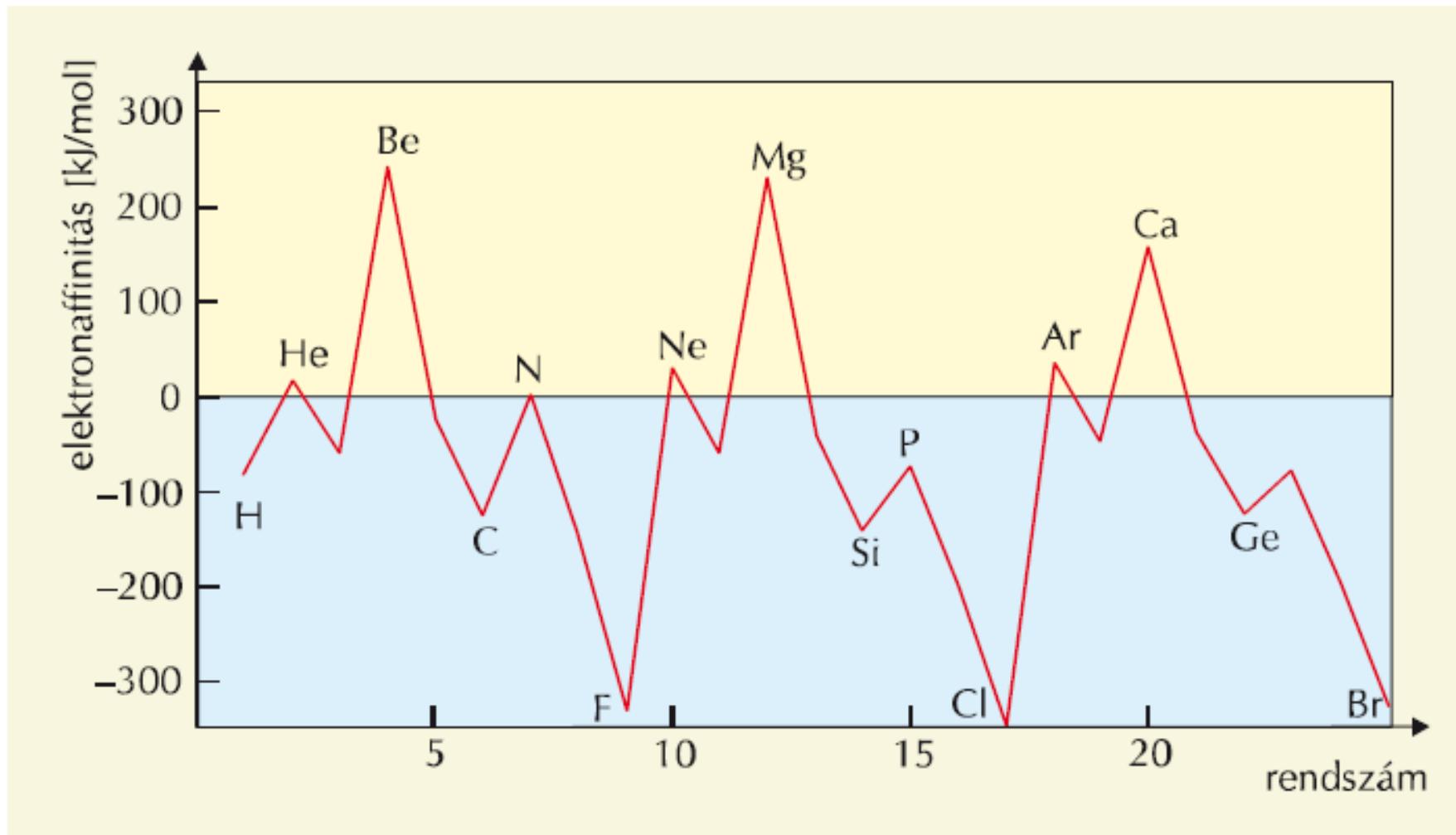
A periódusos rendszer, periódikus tulajdonságok.



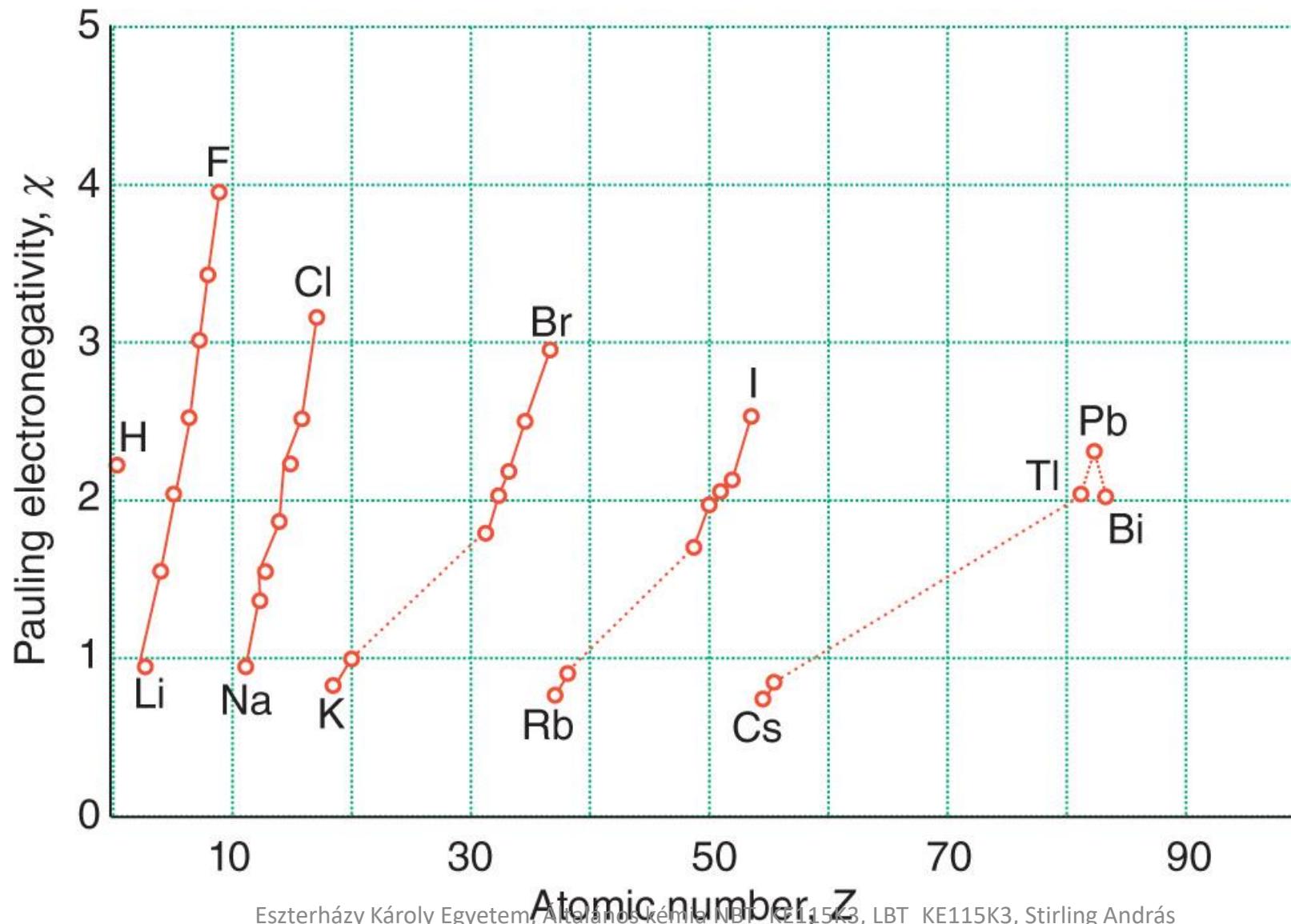
A periódusos rendszer, periódikus tulajdonságok.



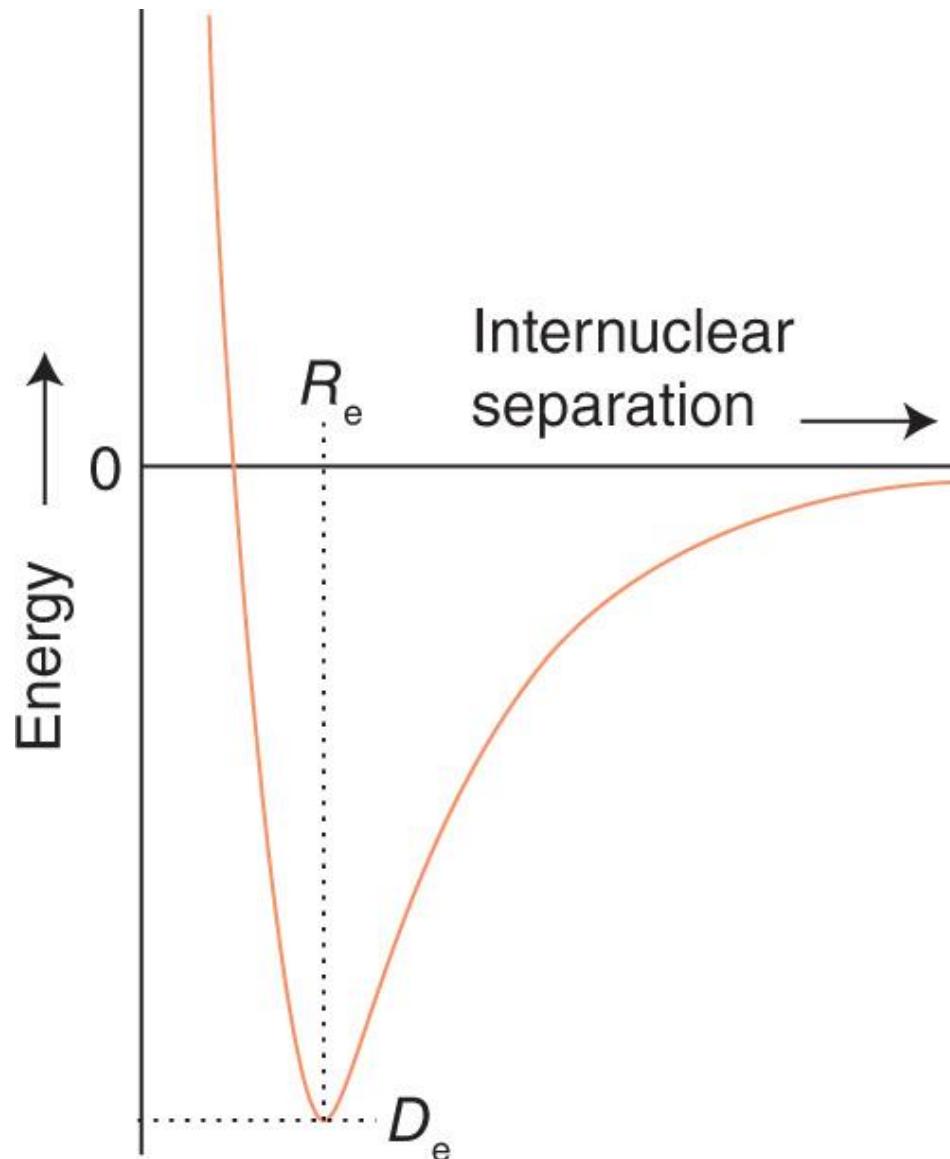
A periódusos rendszer, periódikus tulajdonságok.



A periódusos rendszer, periódikus tulajdonságok.

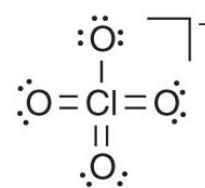
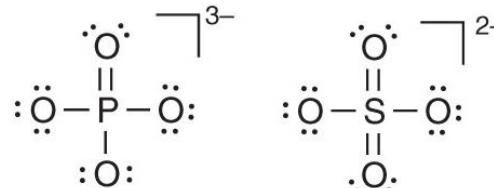
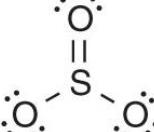
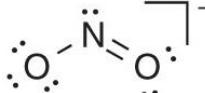
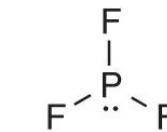
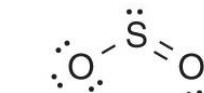
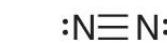
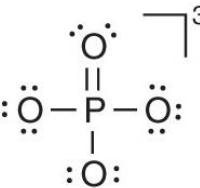
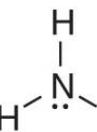
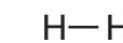


A kémiai kötés

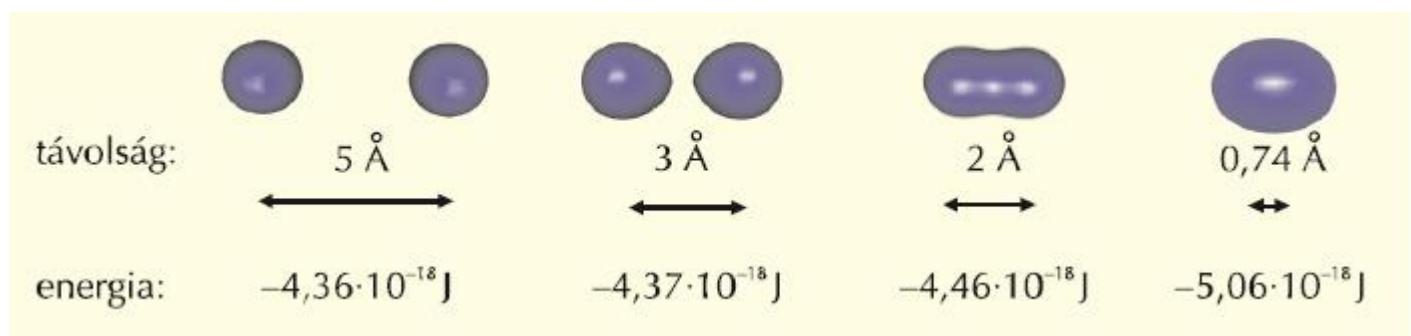
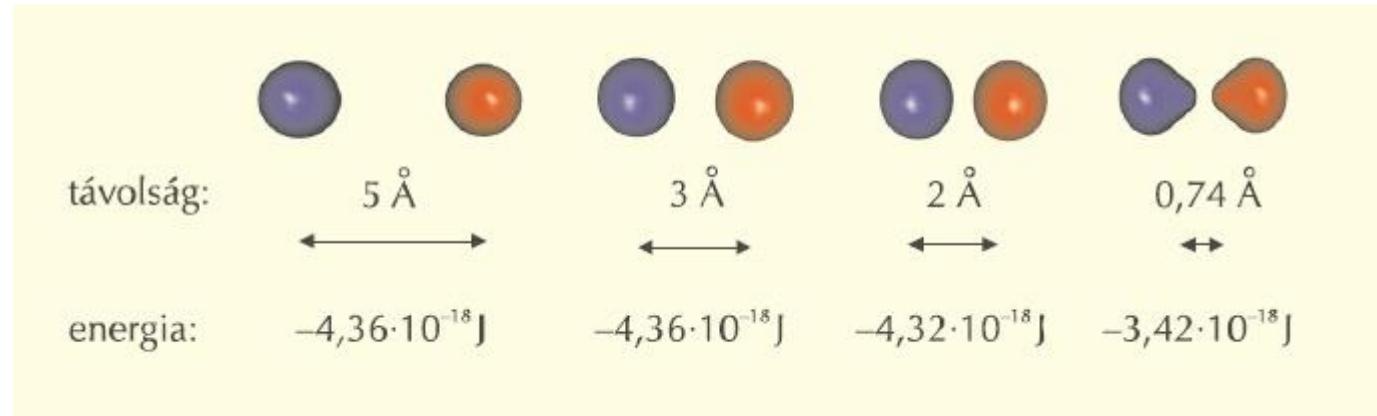
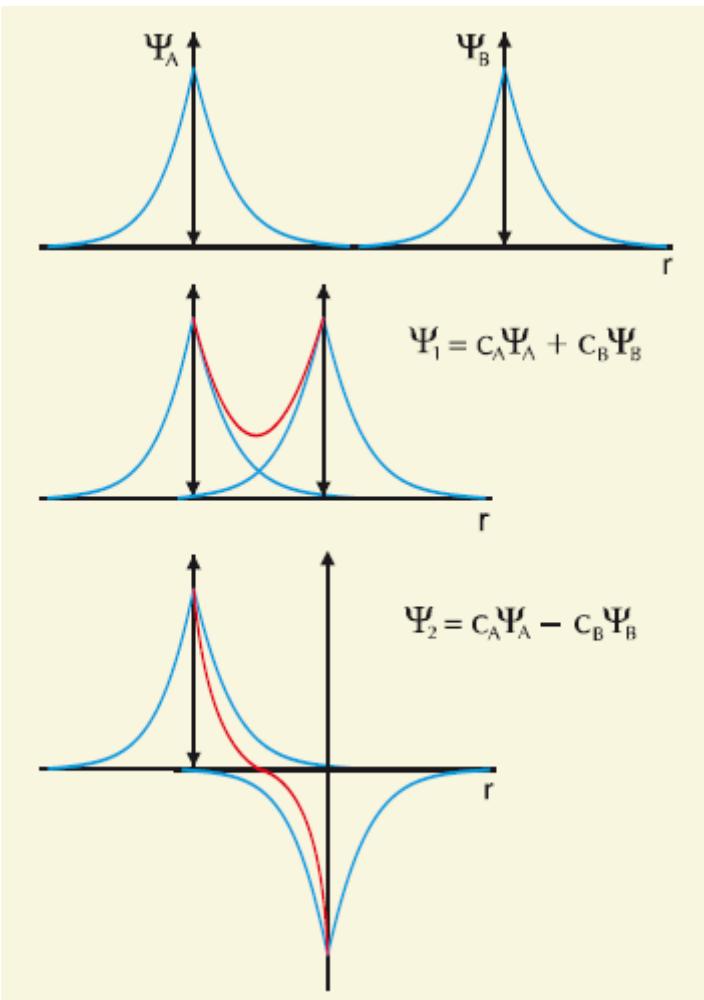


A kémiai kötés

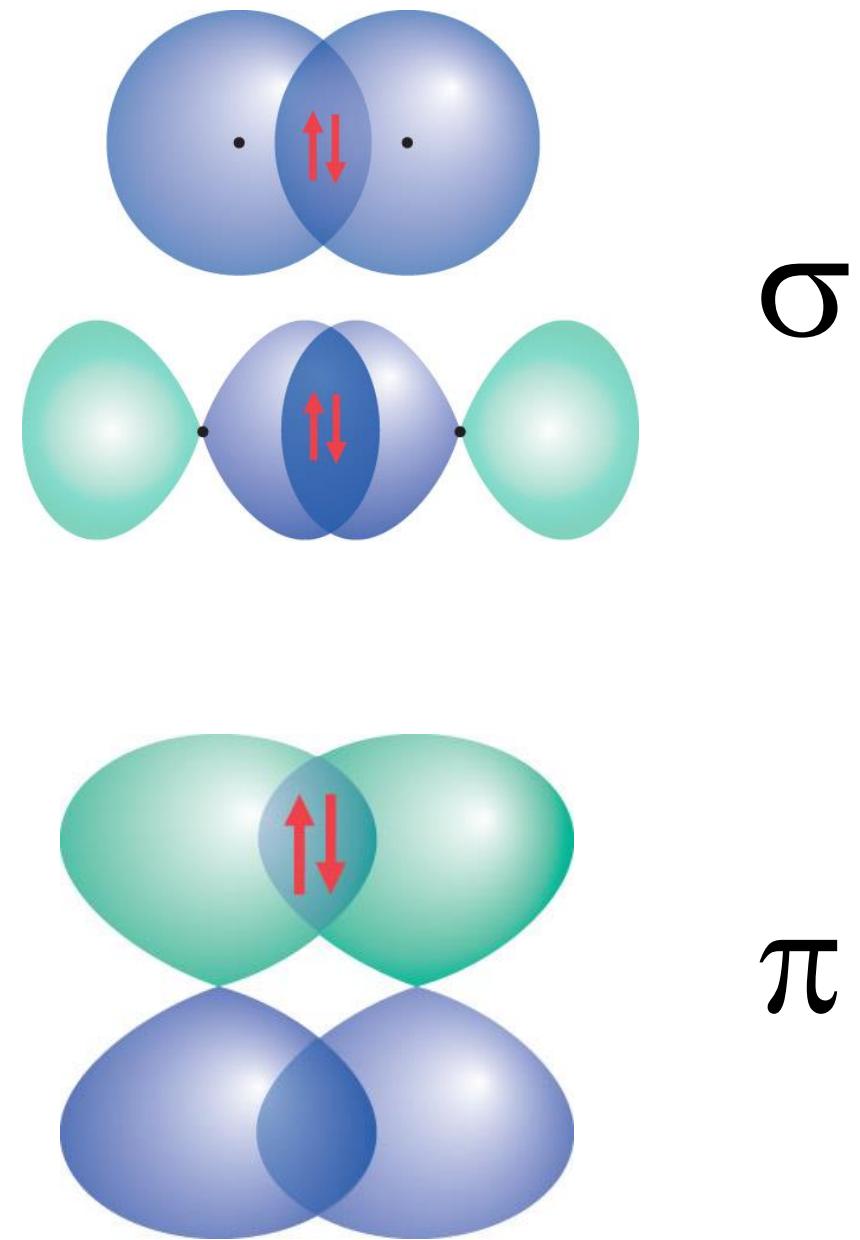
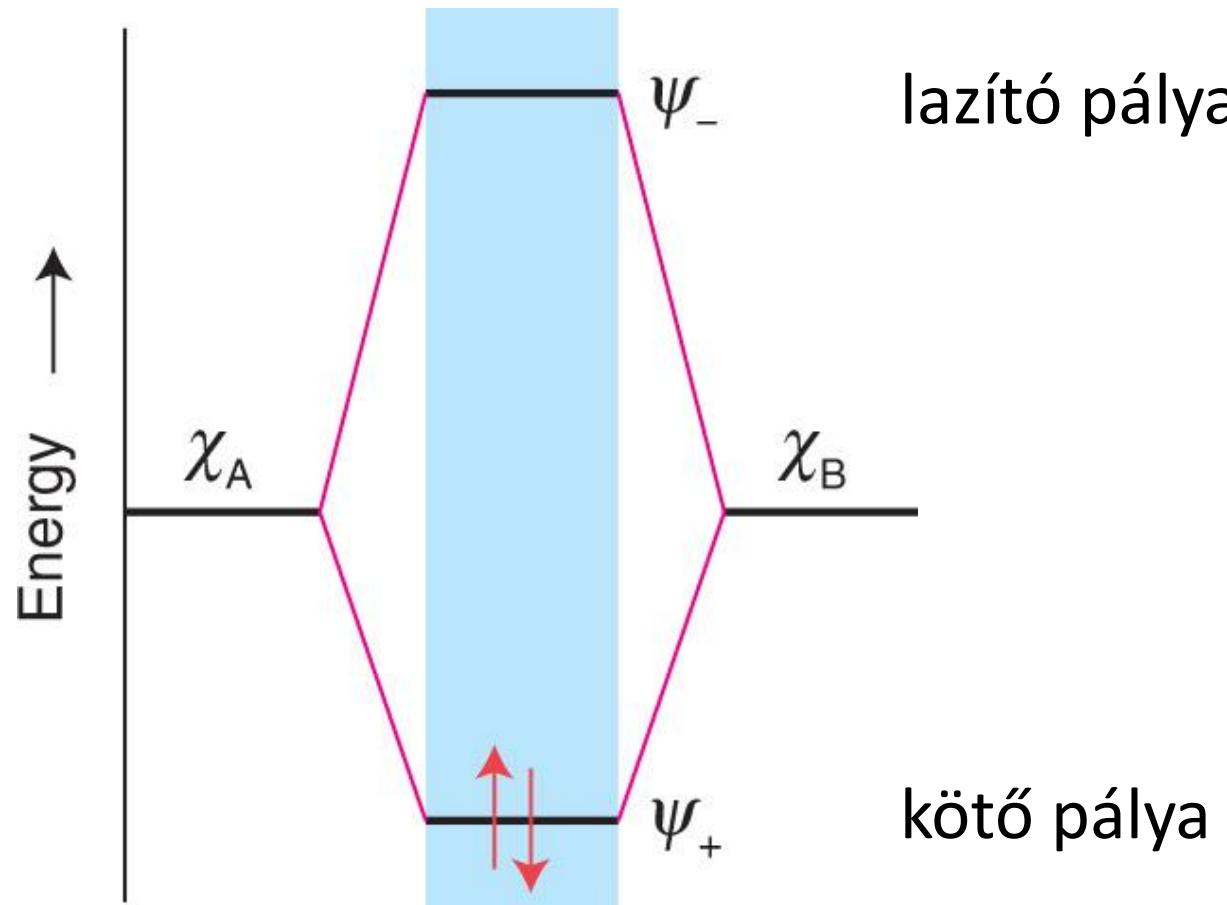
- Lewis: oktett szabály: egy kötés két elektronról jelent és minden atom egy molekulában 8 elektronról szeretne a vegyértékhéjában, vagyis nemesgáz elektronszerkezetet
- kvantummechanika: kovalens kötés két elektronpálya átfedéséből
 - a kétatomos molekulák elektronszerkezeti leírása a kvantummechanika egyik korai diadala volt
- kovalens kötés vs. ionos kötés
- kovalens kötés: két atom együtt osztozik egy elektronpáron
- kötések többatomos (óriás)molekulákban, delokalizáció, fémes kötés, ionos kötés
- elsőrendű és másodlagos kötések
- elsőrendű: kovalens, ionos, fémes
- másodrendű: H-kötés, van der Waals kötések
- σ , π és δ kötések
- datív kötés (pl BF_4^- ; Lewis sav-bázis elméletnél fontos)



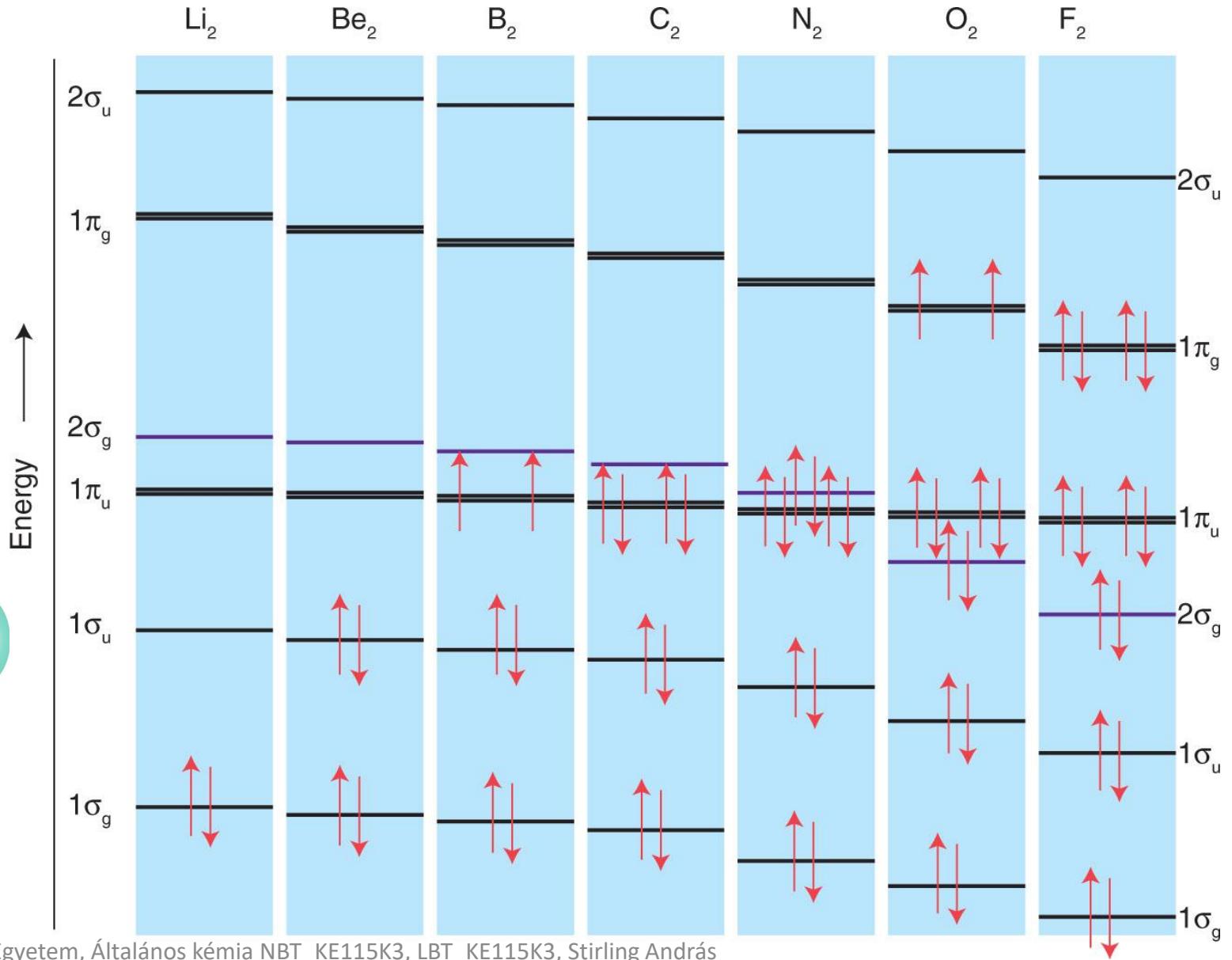
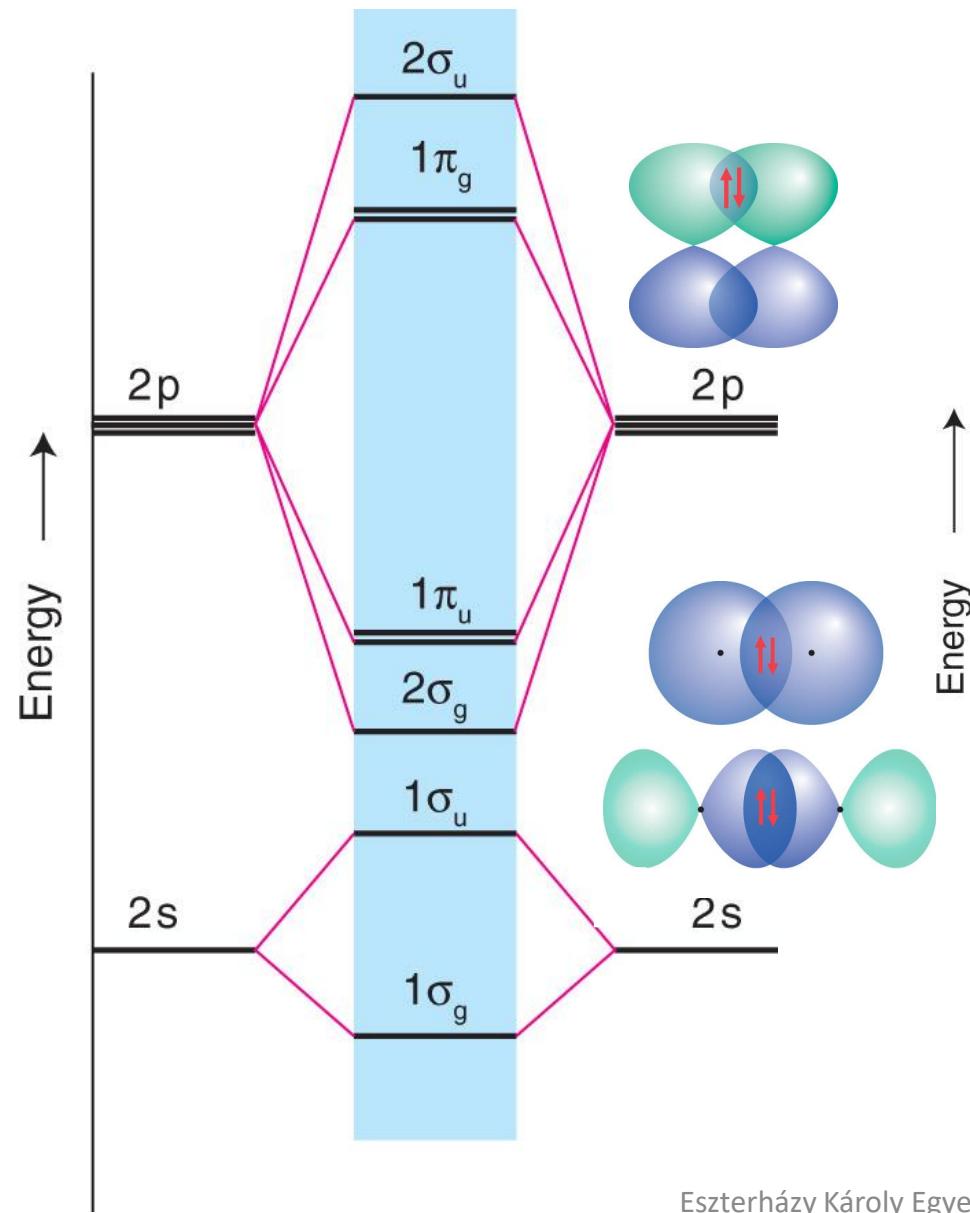
A kémiai kötés



A kémiai kötés



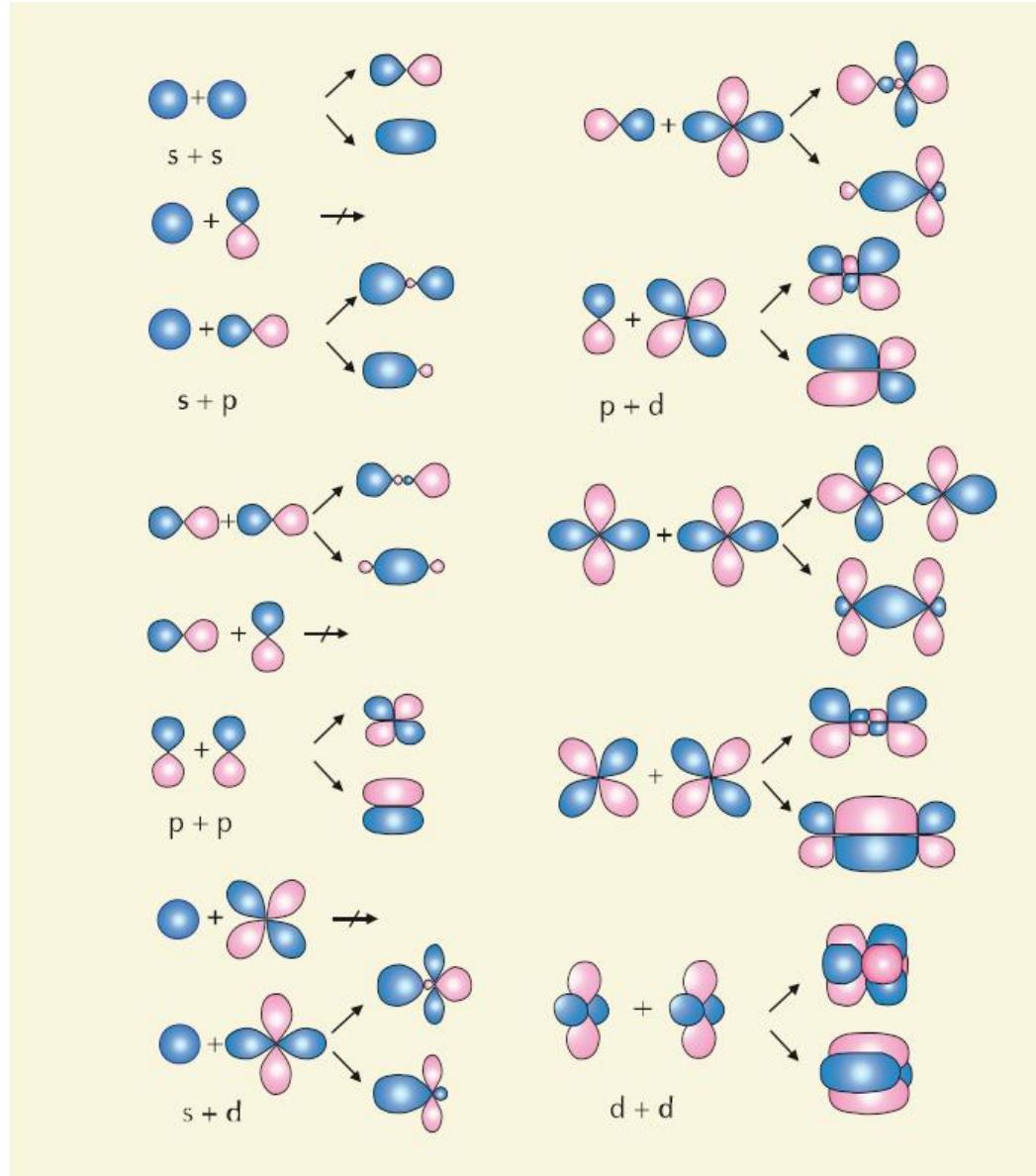
A kémiai kötés



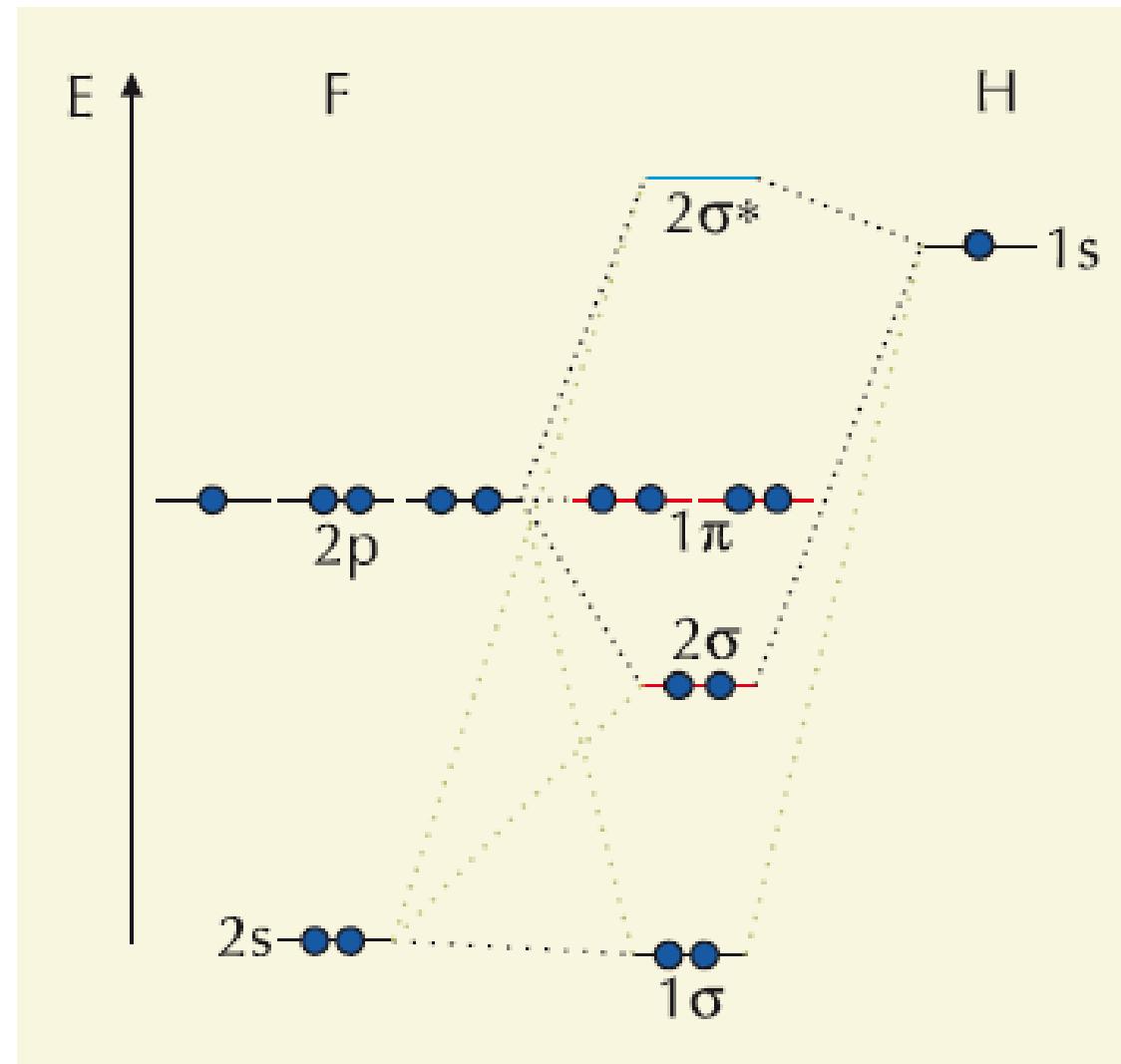
A kémiai kötés

- a kétatomos kötésrendszer kvalitatíven megmagyarázza
 - kötésrendet (hányszorosak a kötések)
 - trendet a kötéshosszakban, kötéserősségekben
 - ionizáció hatását a kötéserősségre, szerkezetre
 - O₂ gyökös (paramágneses) jellegét
 - analóg módon lehet értelmezni a heteronukleáris kétatomos molekulákat
 - például NO vagy NO⁺ molekulában lesz rövidebb a kötéshossz?
 - rezgési frekvenciákat, azok változását elektronszám változás hatására
- kötéstávolság: az alkotó atomok magjainak távolsága: pl. C-H metánban 1.1 Å (= $1.1 \cdot 10^{-10}$ m)
- kötésrend: kötő elektronpárok száma - lazító elektronpárok száma (lehet félegész szám is)
- például: etán, etén, etin, etén-anion, etin-kation, O₂, O₂⁻, O₂⁺, N₂, N₂⁻, N₂⁺

A kémiai kötés



A kémiai kötés

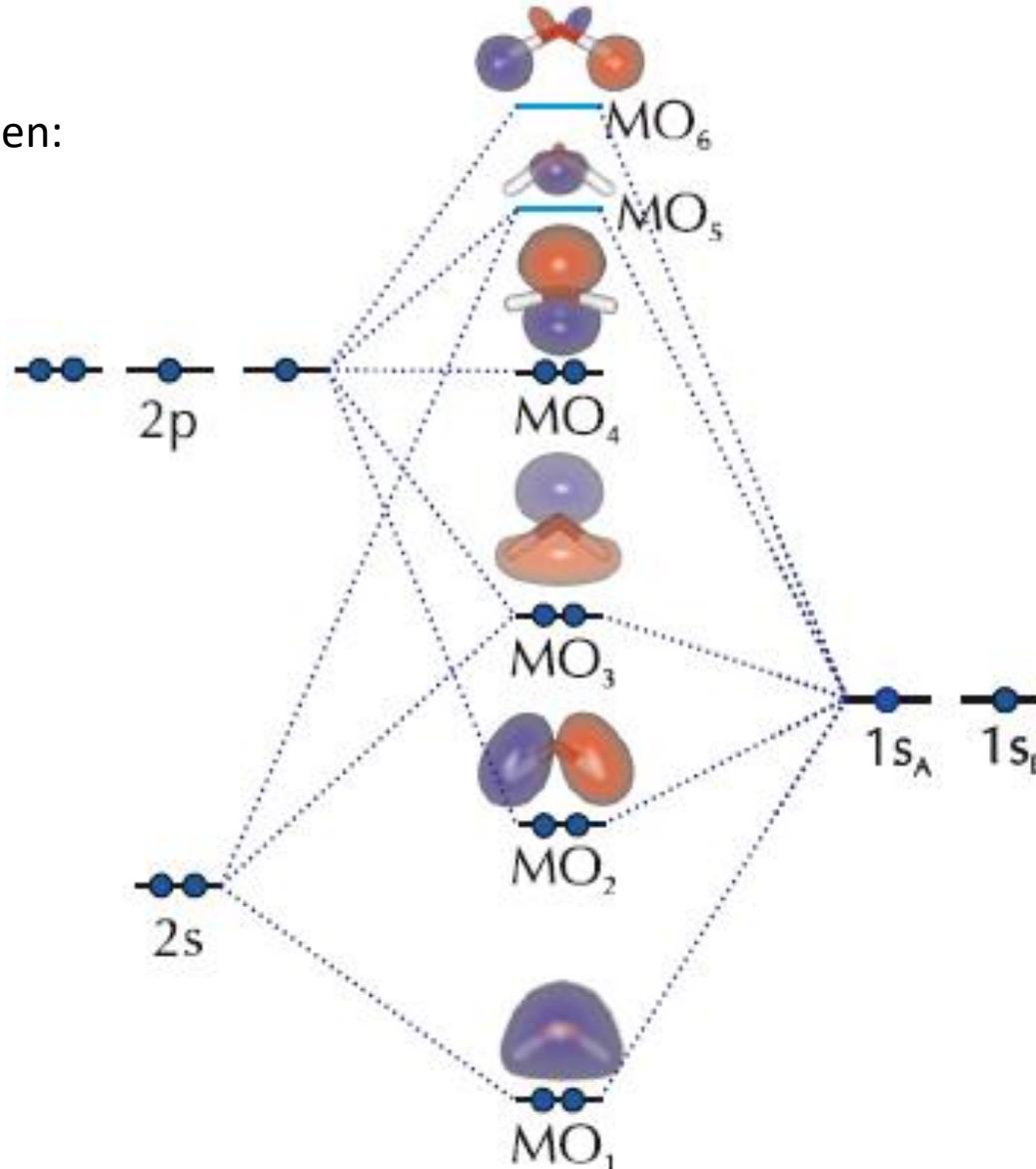


Többatomos molekulák kötésrendszere

- legtöbbször nem értelmezhető egyszerűen (nem olyan szemléletesek)
- az elektronpályák (molekulapályák) a molekula nagy részére kiterjednek (delokalizáltak)
- sokszor segít a szimmetria
- speciális csoportok jelenlété megkönnyíti az értelmezést (karbonil-csoport, aromás gyűrű, fémkomplexek)
- molekulapálya-elmélet: a molekulapályák az eredeti atompályák lineáris kombinációja
- érdekesség: a számítások végén ún. lokalizációs eljárásokkal a kémiai szemléletnek megfelelő molekulapályákhoz lehet jutni, amik jól tükrözik a kémiai szemléletet, a Lewis szerkezetet
- nagyon hasznos szemlélet/eljárás: hibridizáció

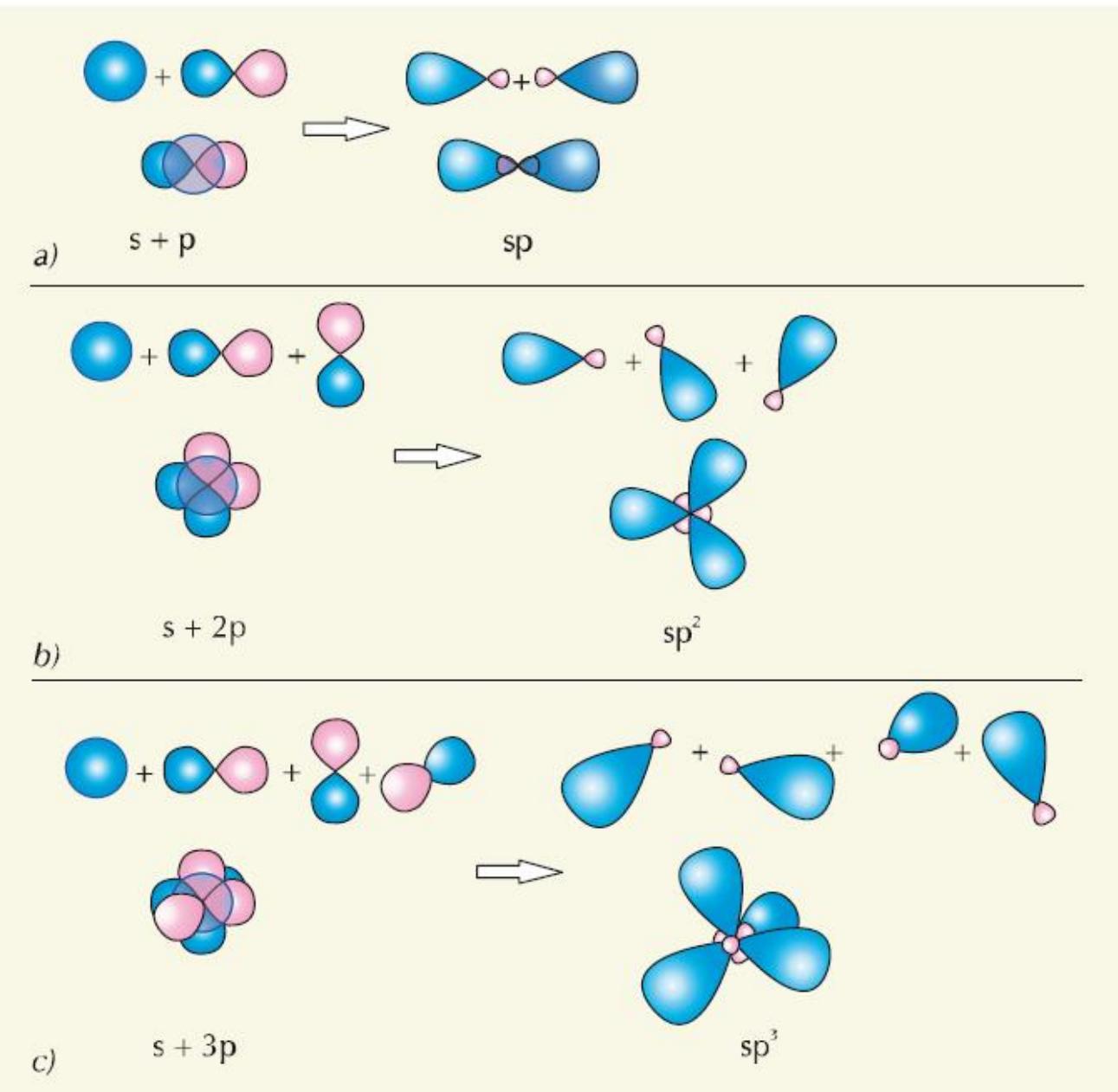
Többatomos molekulák

H₂O kötésrendszere MO képben:



Hibridizáció

- egy atomon belül a vegyértékhéjon lévő néhány (akár az összes) pálya keverése
- pl.: C $2s^2 2p^2$; 4 db pálya, ebből 4 másik pályát lehet kikeverni (hibridpályák):
 - 1. lehetőség: 1 db s és 1 db p-t keverünk, másik 2 p változatlan (sp hibridizáció)
 - $s+p$
 - $s-p$
 - 2. lehetőség: 1 db s és 2 db p-t keverünk, 1 p változatlan (sp^2 hibridizáció)
 - $s + a_1p_y$
 - $s + a_2p_x - a_3p_y$
 - $s - a_2p_x - a_3p_y$
 - 3. lehetőség, minden a 4 pályát összekeverjük (sp^3 hibridizáció)
 - $s + p_x + p_y + p_z$
 - $s - p_x + p_y - p_z$
 - $s + p_x - p_y - p_z$
 - $s - p_x - p_y + p_z$
- további számtalan hibridizációs lehetőség (pl. sp^3d (trigonális bipiramis), sp^3d^2 (oktaéder), stb.)



Hibridizáció

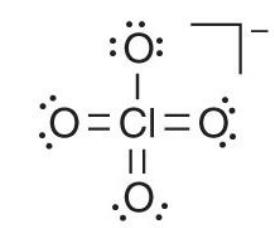
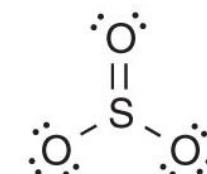
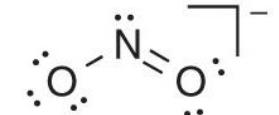
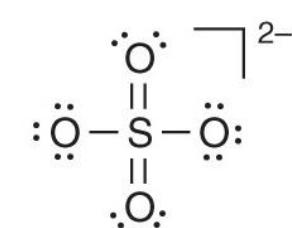
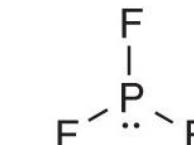
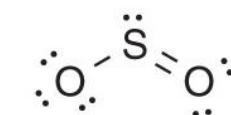
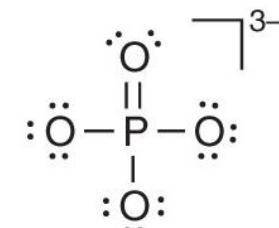
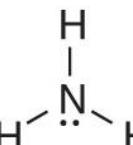
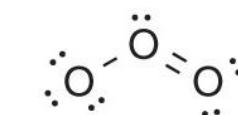
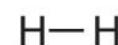
- hibridizáció egy szemléletes model
- hibridizáció más irányból megközelítve:
 - CH_4 molekulában C-H kötéshosszakat egyre jobban növeljük, de kötésszög nem változik
 - hidrogénatomok a végtelenben és visszamarad egy sp^3 hibridállapotú C
 - mind a 4 vegyértékelektron ekvivalens pályán van, egyforma energiájú
 - kiinduláskor 2 s és 2p elektron volt
 - tehát, hogy eljussunk a hibridállapotba, két fiktív lépésre volt szükség:
 - 1 db s elektron p állapotba juttatni (gerjesztés, felléptetés, promóció)
 - a 4 elektronpályából kikeverni az új, ekvivalens pályákat (hibridizáció)

Hibridizáció

- gyakorlatban a hibridállapot meghatározása:
 - a kérdéses atom körül található atomok elrendeződése határozza meg; pl C esetén:
 - 4 atom, tetraéderes elrendeződés, vagy 3 atom és nem a C-nel egysíkban: sp^3
 - 3 atom és egy síkban a C-nel, vagy 2 atom, de nem egy egyenes: sp^2
 - 2 atom a C körül lineárisan: sp
 - hasonlóan más atomokra, pl. NH_3 , ($N sp^3$), BH_3 -ban B, karbonil csoportban C sp^2
 - lehet úgy is megközelíteni, hogy a nemkötő elektronpárok ligandumnak számítanak

Többatomos molekulák kötésrendszere

- Lewis kötés elmélet; Lewis kötésrendszer, rezonanciaszerkezetek
- Lewis kötésrendszer felírása (váz felrajzolása egyszeres kötésekkel, oktett szabály a központi atomra további többszörös kötésekkel, vagy nemkötő elektronpárral, a kapcsolódó atomokra az oktett szabály ellenőrzése és az elektronszám és a molekula töltésének egyeztetése)
- oktett szabály nem mindenkor érvényes (pl. H, Li, Be, BH₃, stb)
- a szabadság a Lewis kötésrendszer felírásában: rezonancia szerkezetek
- Lewis kötés nem tud elszámolni pl. O₂ paramégnesességével

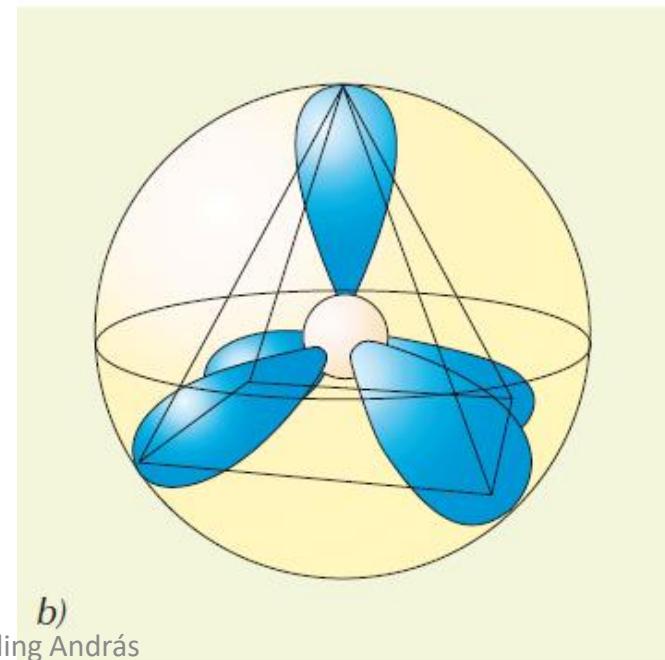
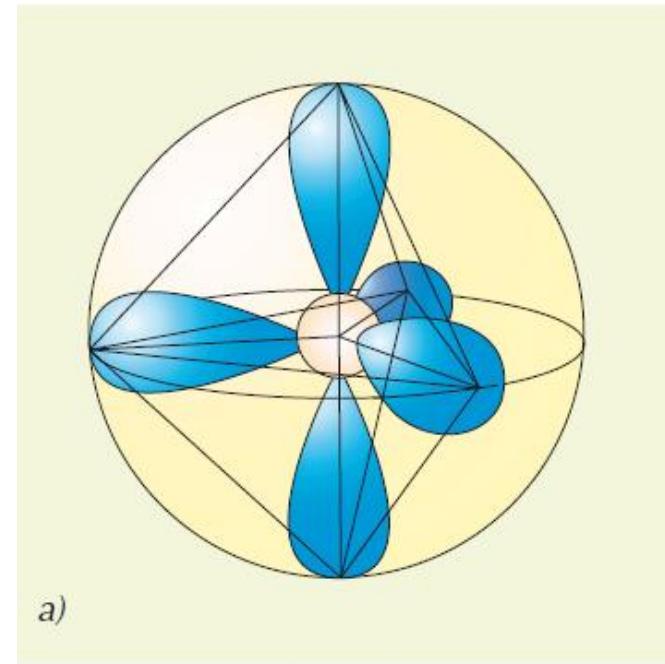


A többatomos molekulák alakja

- molekulageometria: az atomok térbeli elhelyezkedése
- kötéshosszak, kötésszögek, torziós szögek megadása
- hány szabadsági fokunk van egy N atomos molekula szerkezeténél:
 - $3N$ Descartes koordináta
 - $3N-6$ belső koordináta (mindegy, hogy a tömegközéppont hol van (-3 db), és mi a térbeli orientációja a molekulának (-3 db)
- diffrakciós módszerekkel lehet meghatározni a szerkezetet
- egyéb spektroszkópiával is ki lehet találni a szerkezetet, de nem lesznek geometriai információink
- hogy lehet megmagyarázni a kapott szerkezetet?
 - kötések figyelembevételével
 - VSEPR elmélet

A többatomos molekulák alakja: VSEPR

- valence shell electron pair repulsion
- vegyértékhéj elektronpár taszítási elmélet
- minél nagyobb egy szerkezeti részlet elektronsűrűsége, annál jobban taszítja a többi ilyen szerkezeti részt
- kötések, nemkötő elektronpárok taszítják egymást
- ennek alapján rendeződnek el a ligandumok (kötődő atomok) és nemkötő elektronpárok
- kettős kötés térigénye nagy
- szimmetrikus, aszimmetrikus szerkezetek
- példák

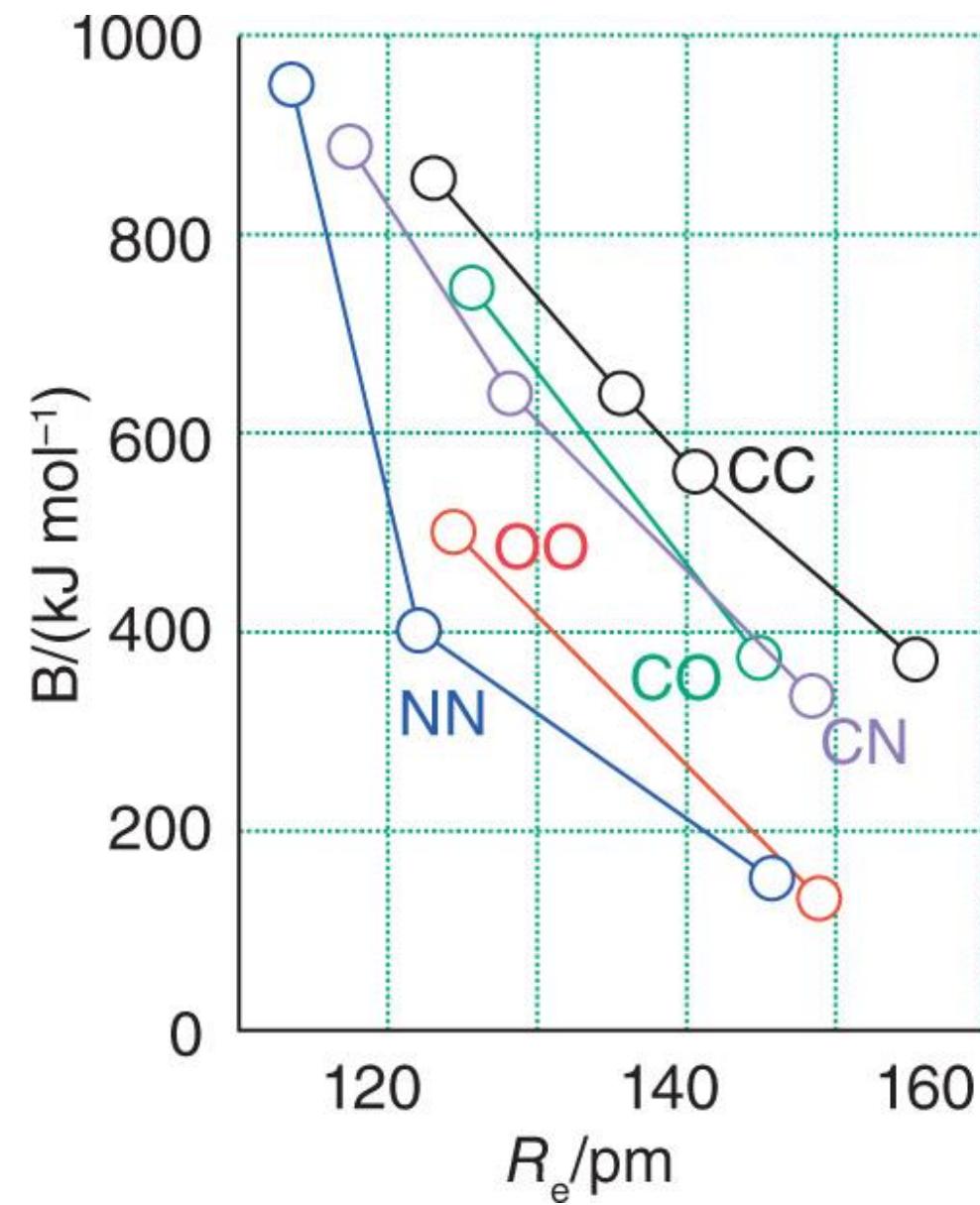
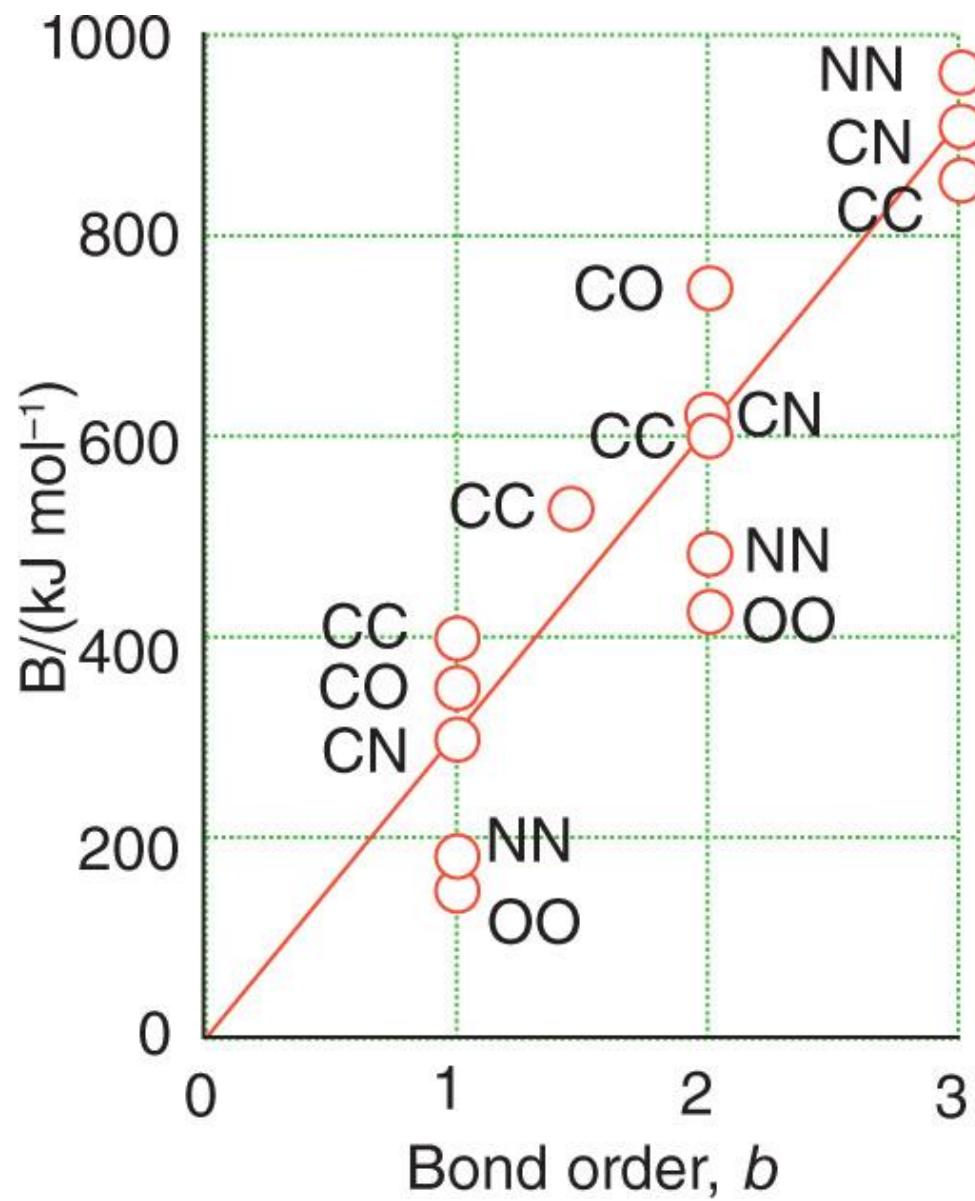


A többatomos molekulák alakja

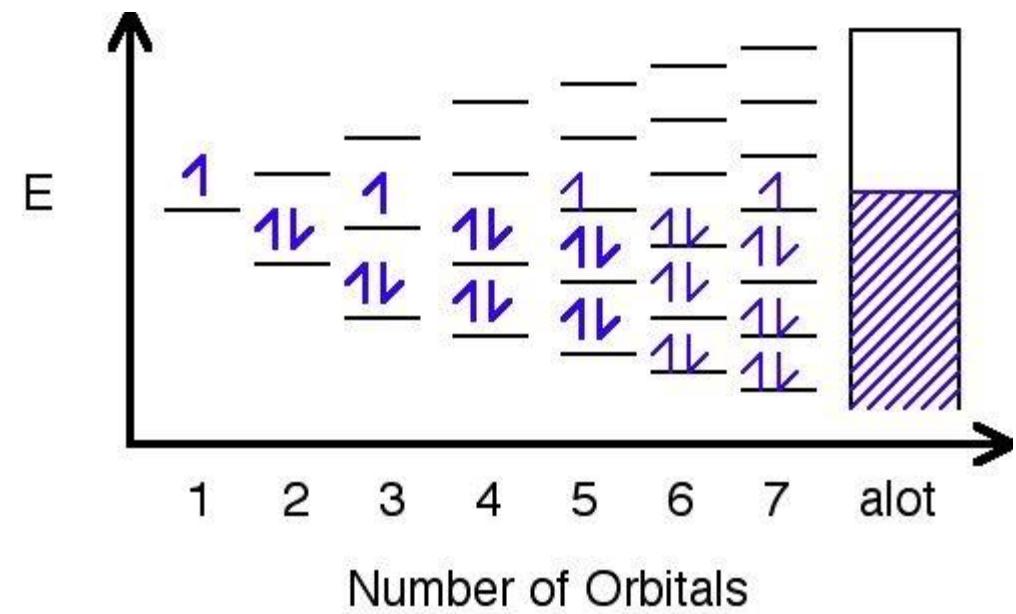
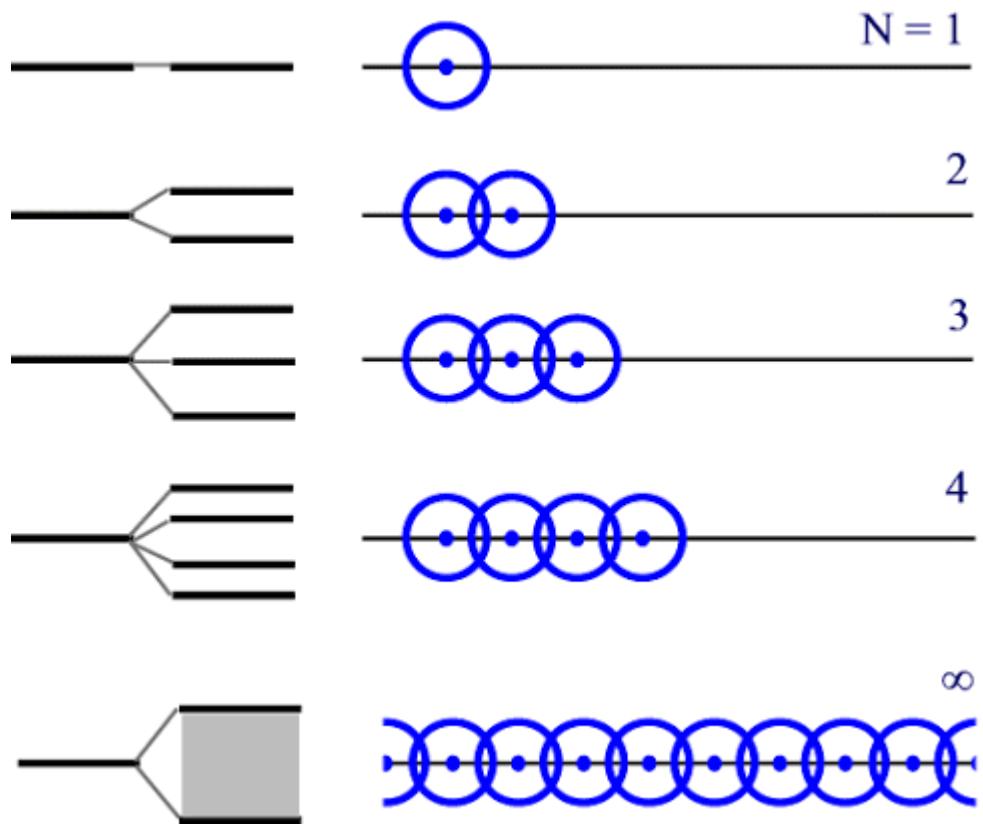
- általános stratégia molekulageometria kitalálásához:
 - Lewis kötésszerkezet
 - VSEPR alkalmazása
 - hibridizáció megadása
- példa: etilén, hangyasav, amidkötés
- a molekulák alakja lényeges:
 - dipólusmomentum, elektroneloszlás
 - kiralitás
 - izomerek, konformációk
 - reaktivitás
 - anyagi halmazok létrejötte, makroszkópikus tulajdonságok (op, fp, szilárdság, stb)

A kötési energia

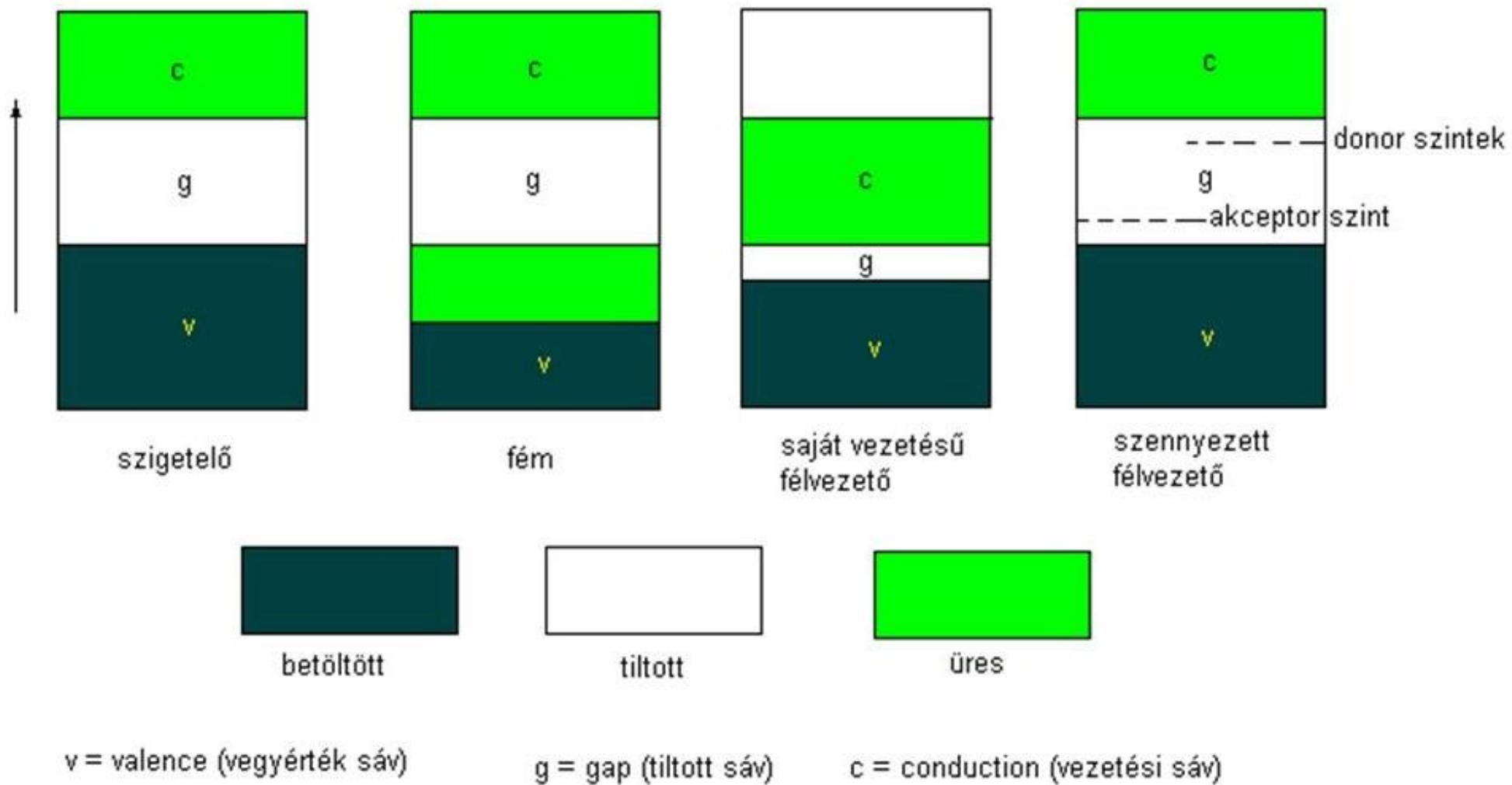
- kötés nincs jól definiálva, ezért nem evidens, hogy mi egy kötés energiája!
- olyan definíció kell, ami kifejezi, amit a kémiai intuícióink sugall
- reakcióval definiáljuk: a kötés-disszociációs energiával definiáljuk
- a kötés energia (átlagos kötési entalpia) az az átlagos mért entalpiaérték, ami ahhoz kell, hogy gázfázisban az összes azonos típusú (lehet, hogy csak egy) kötés disszociáljon (pl. CH₄)
- nem tudjuk külön a σ és a π kötést mérni egy molekularészletben
- (entalpia - energia kérdés)
- példák (kJ/mól): H-H: 435; F-F: 155; O-H: 464; N₂: 946; N=N: 418; N-N: 163; C=O: 736; C-O: 360
- következik-e ezekből az értékekből, hogy a π kötés gyengébb, mint a σ ?



Kiterjedt kötésrendszer

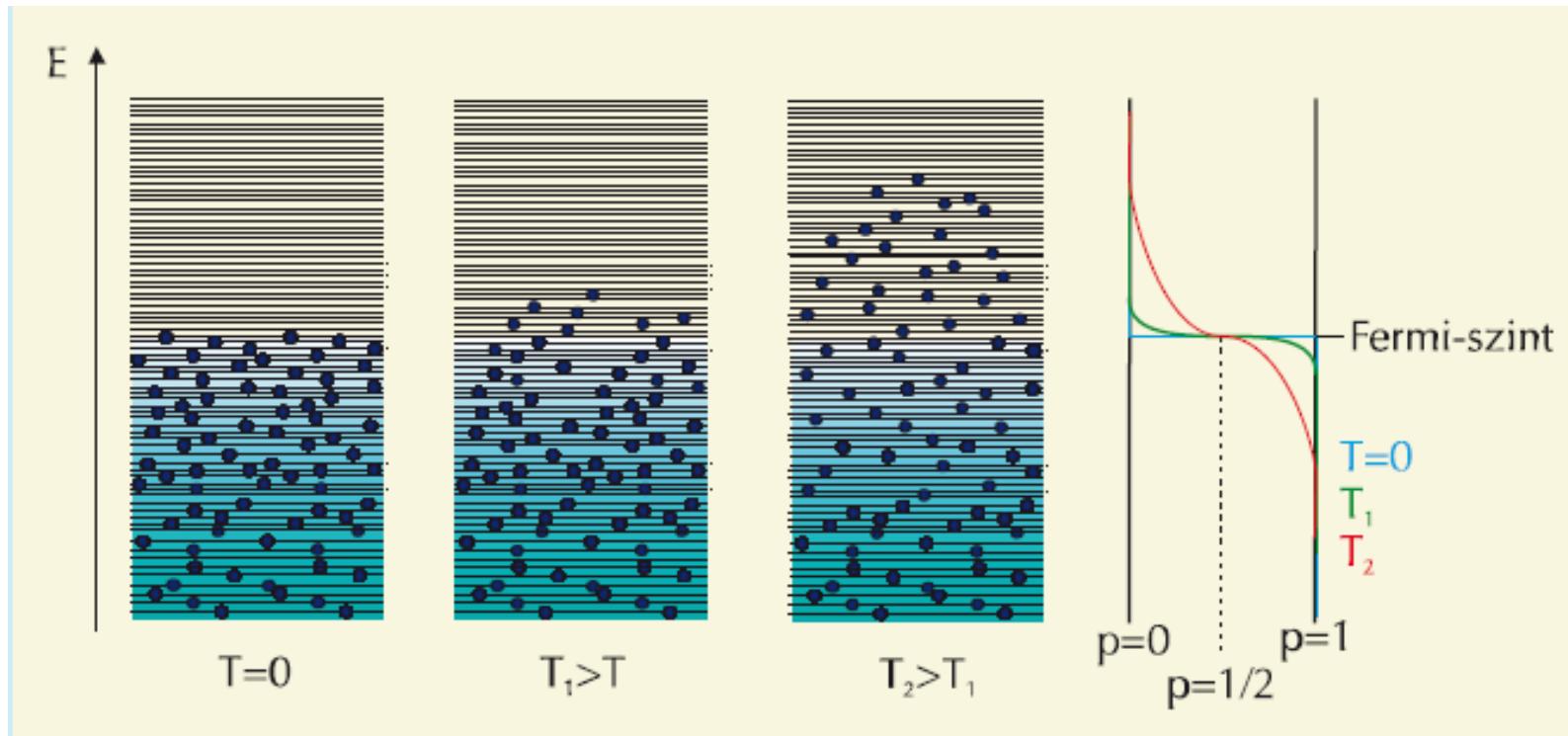


Kiterjedt kötésrendszer



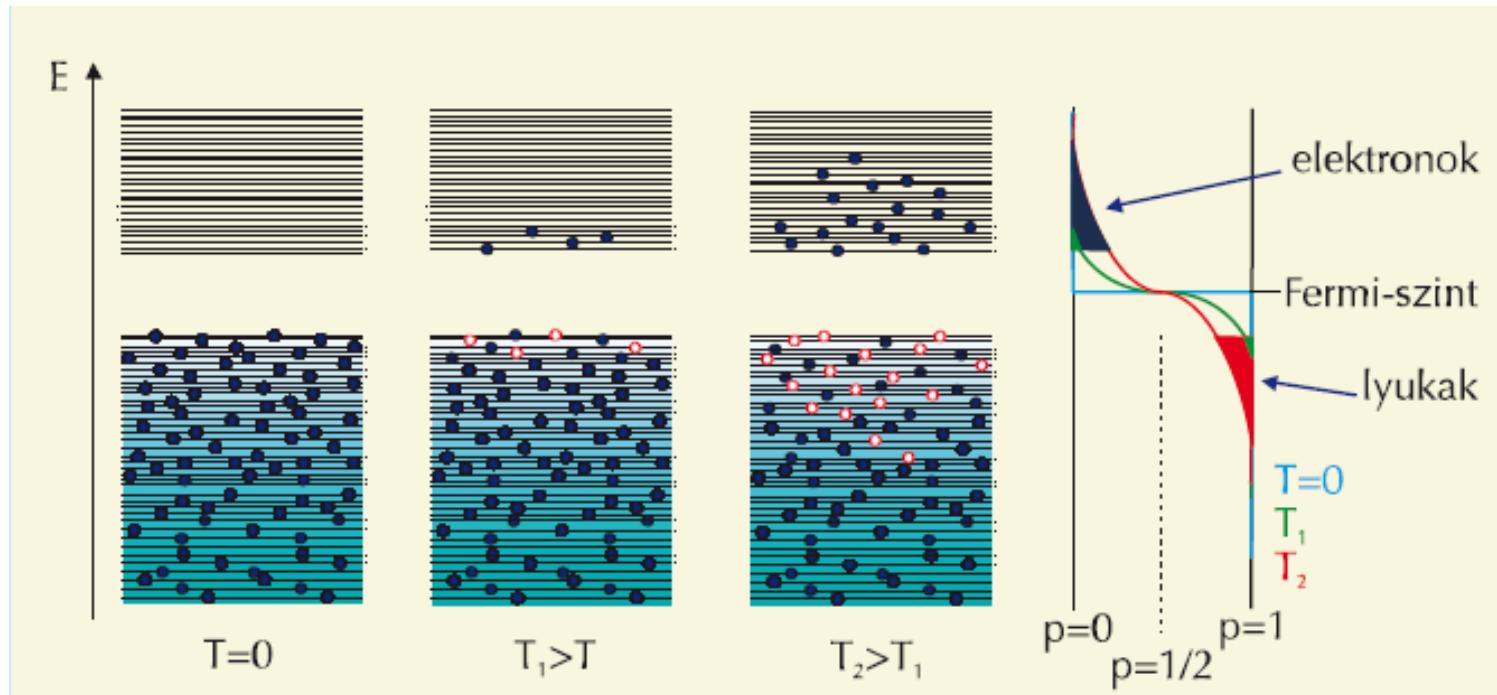
Kiterjedt kötésrendszer

- az elektronszerkezet energetikájának jó jellemzője a Fermi szint: mekkora energiával lehet egy extra elektronat (a végtelenből) a rendszerhez adni



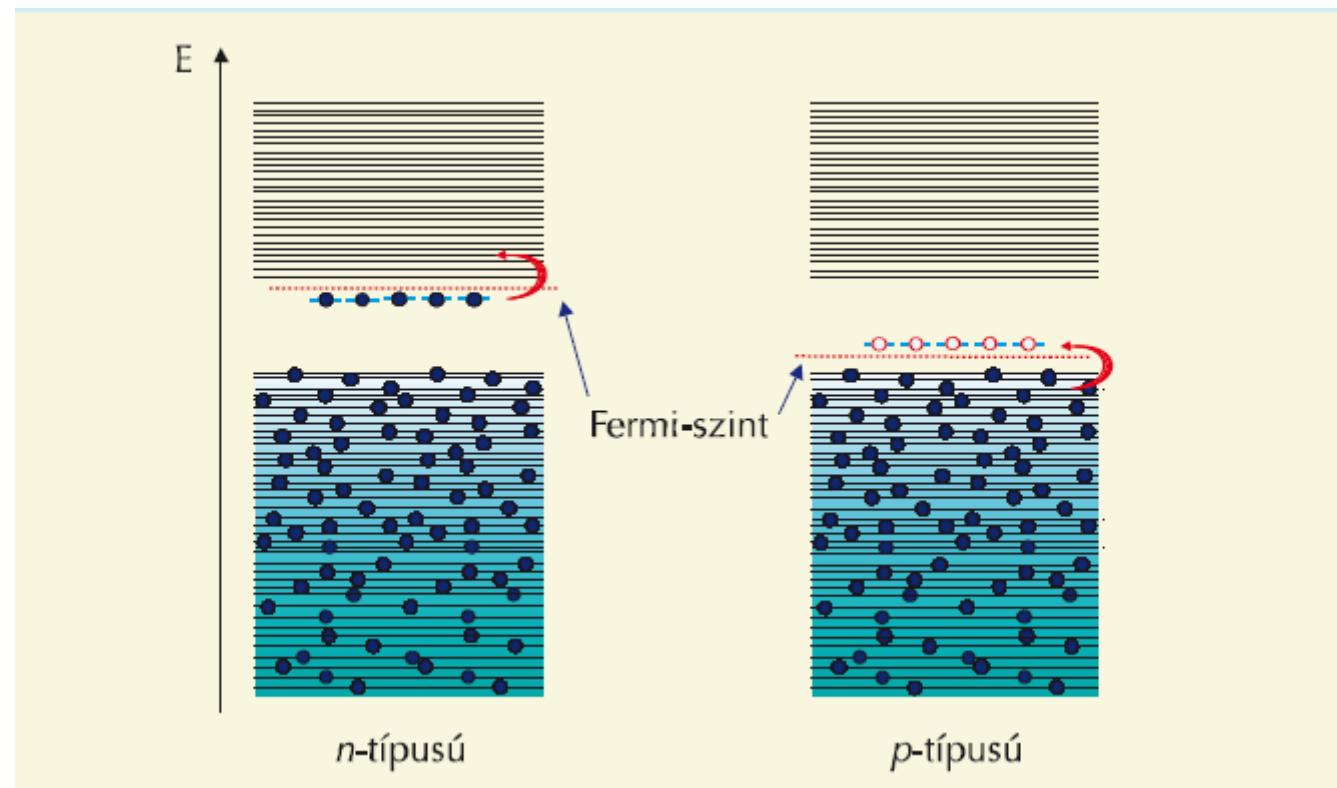
- fémek esetén a hőmérséklet hatása
- az ilyen kötésrendszert **fémes kötésnek** hívjuk, csak kiterjedt rendszerekben (nem két atom között)

Kiterjedt kötésrendszer



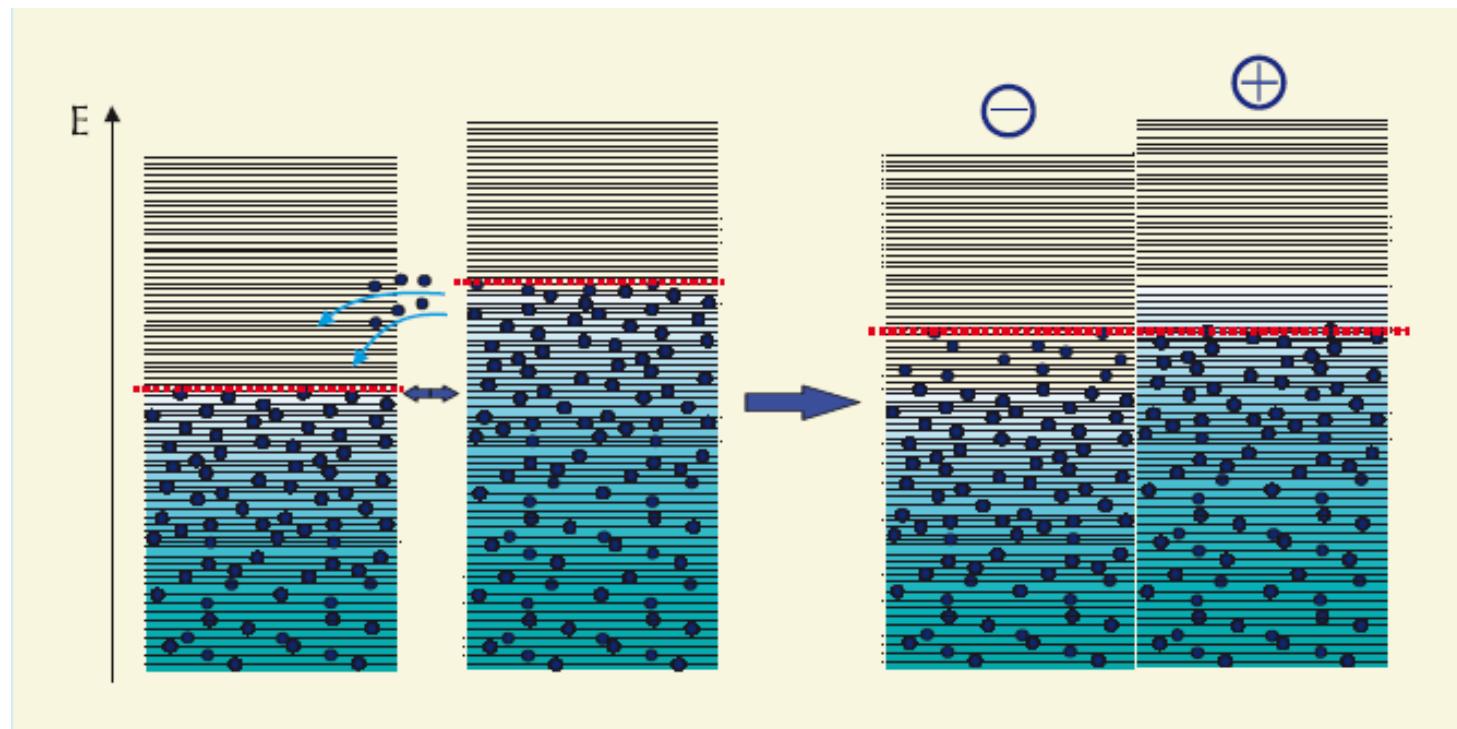
félvezetők esetén a hőmérséklet hatása

Kiterjedt kötésrendszer



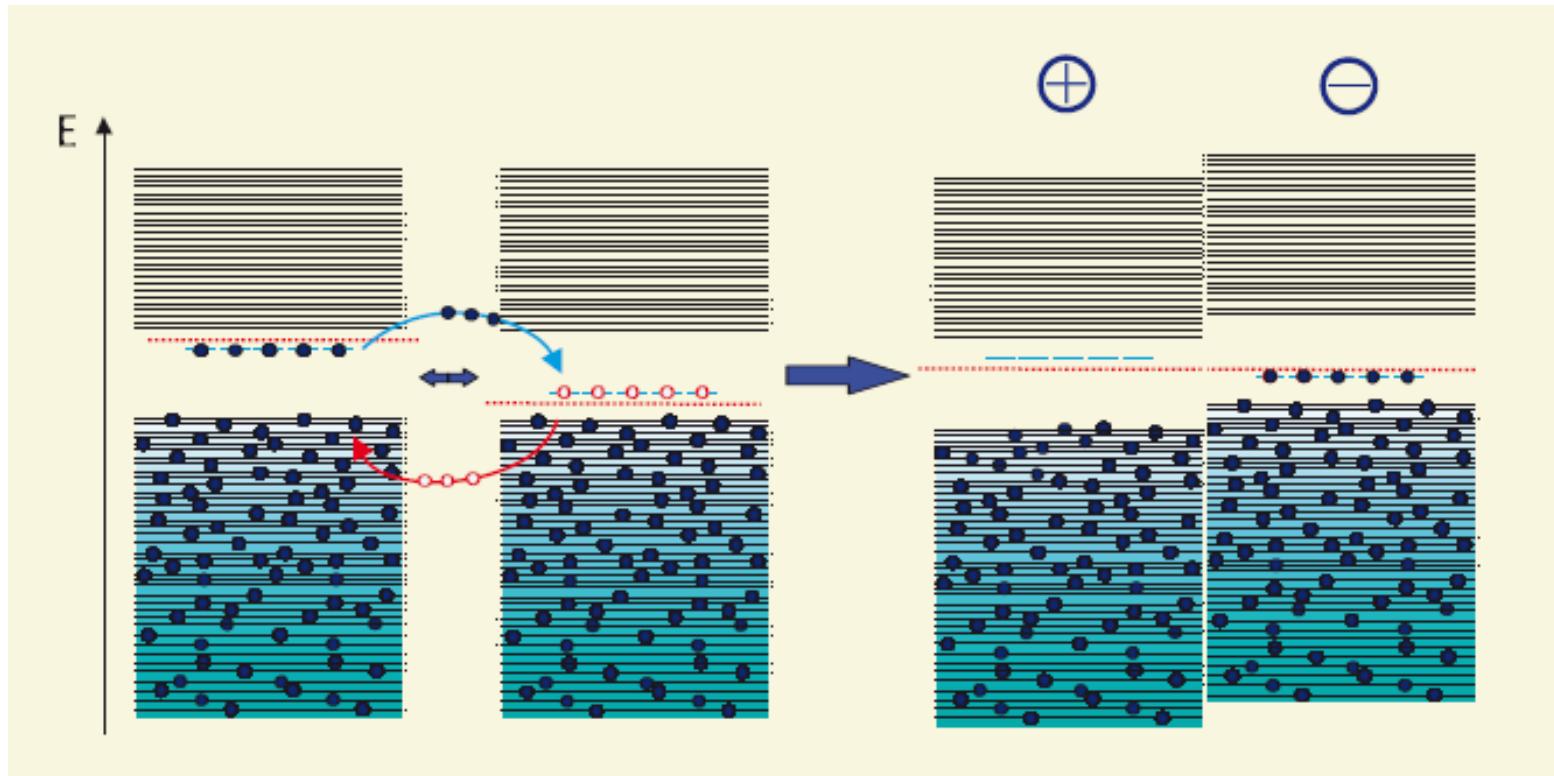
félvezetők szándékos szennyezése
pl. *n*-típus: Si-ban P; *p*-típus: Si-ban Ga

Többatomos molekulák kötésrendszere



- két különböző fém érintkezése: az új rendszernek is lesz egy adott Fermi szintje egyensúlyban
- az egyensúly beálltához elektronoknak el kell mozdulniuk

Kiterjedt kötésrendszer



- egy p és egy n félvezető érintkezése: az új rendszernek is lesz egy adott Fermi szintje egyensúlyban
- az egyensúly beálltához elektronok és lukak mozognak
- extra elektronok az egyik irányba könnyen mennek, a másikba viszon nem (félvezetés!)

Másodrendű kötések

- két molekula között jön létre, vagy nem közvetlenül kapcsolódó molekularészletek között
- hidrogén(híd) kötés
 - hidrogén nagy EN-ú atomhoz kötődik
 - a polarizált hidrogén (egyik molekula) és a nagy EN-ú atom nemkötő elektronpárja között
- dipólus-dipólus
- dipólus-indukált dipólus
- indukált dipólus - indukált dipólus (London féle erők vagy diszperziós erők)
- szilárd fázisban rács összetartás (molekularács)
- H-kötés biológiában is nagyon fontos (pl. DNS szál, fehérjék szerkezete)

Anyagi halmazok

- anyag (makroszkópikus mennyisége):
 - tiszta: egyszerű, tiszta formája egy elemnek, vagy vegyületnek. pl.: H_2 gáz, desztillált víz
 - keverék: több tiszta anyag együtt
- anyag:
 - egyszerű (csak egyféllel elemet tartalmaz),
 - összetett: minden más anyag
- tiszta anyag állapota függ a körülményektől (T, p): szilárd, folyékony, gázhalmazállapotú
- gyakorlatban tiszta: kevés a szennyeződés; jelzik a szennyezés mértékét (pl. analitikai tisztaságú, spektroszkópiai tisztaságú, stb.)

Anyagi halmazok

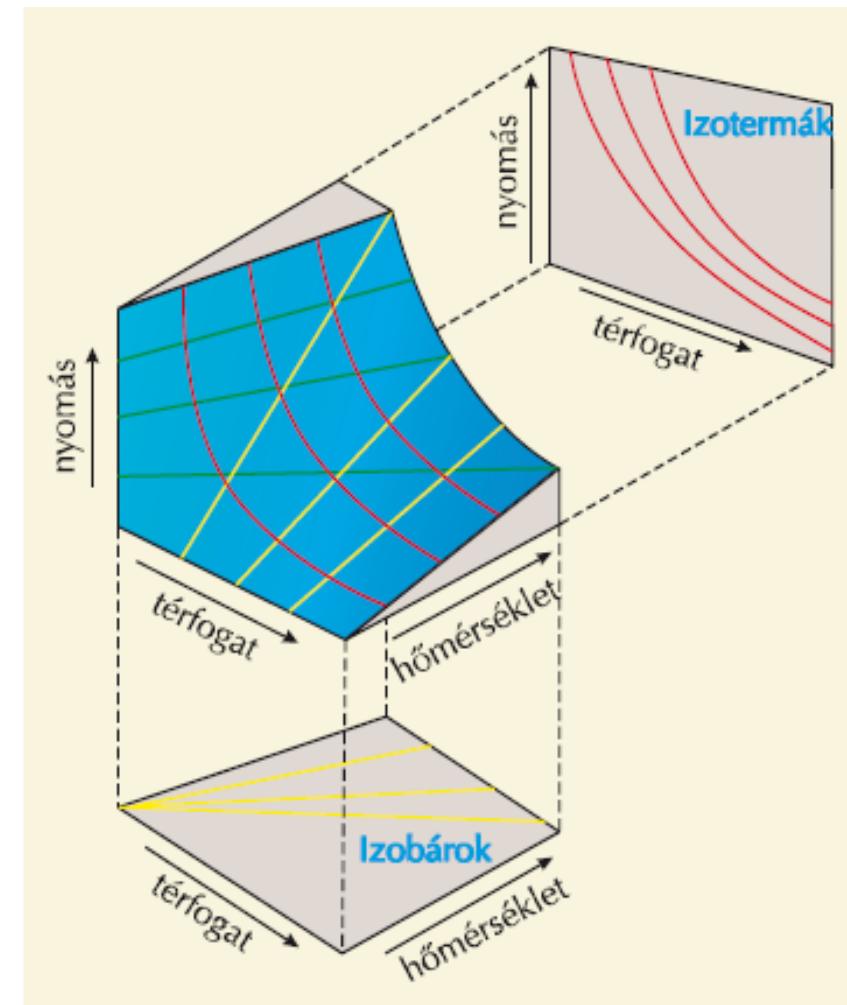
- keverékek:
 - homogén: makroszkópikus sajátosságok (pl. nyomás, hőmérséklet) minden pontban azonos
 - inhomogén: makroszkópikus sajátosságok folytonosan változnak
 - heterogén: egy vagy több makroszkópikus sajátosság ugrásszerűen változik egy adott pontban
 - fázis: egy heterogén rendszerben a rendszer homogén kémiai összetételű és homogén vagy inhomogén fizikai szerkezetű része a fázis (pl. vízben ovadó jégkocka: 2 fázis)
 - komponens: a rendszernek a kémiai tulajdonság alapján megkülönböztethető része
 - keverékek létrehozása, homogenizálása fontos technológia (homogenizálás, pl. összeőrlés)
 - keverékek szétválasztása: szintén fontos technológia; pl. szitálás, szűrés, centrifugálás, sűrűséggükönbség alapján (pl. flotálás, választótölcsér, stb.), stb.

Anyagi halmazok

- keverékek: komponensek mérettartománya kisebb, mint 1 nm
 - szilárd-szilárd: pl ötvözetek (ha nem vegyületek)
 - folyadék-szilárd: oldatok
 - folyadék - folyadék: oldatok
 - szilárd-gáz: intersticiális hidridek (Pt hidrogént old)
 - folyadék - gáz: oldat (folyadékban oldott gáz, pl vízben kevés O₂)
 - gáz - gáz : gázkeverék (pl. levegő)
- keverékek esetén, ha az egyik komponens 1-100 nm mérettartományba esik: kolloid rendszerek:
- kolloid részecske állapota szerint:
 - szilárd: szol (szilárd szol (ötvözetek), kolloid oldat (pl kolloid kén, Au), aeroszol (füst, vírusok levegőben))
 - folyadék: emulzió (szilárd emulzió (vaj), folyadékemulzió (pl. tej, majonéz), aeroszol (köd))
 - gáz: szilárd hab, folyadékhab (sör, tejszínhab)
- kolloidok: kérdéses, hogy homogén, vagy heterogén rendszerek - egyik sem
- kolloid mérettartomány: nagy felület, abszorpciós jelenségek, szóródási jelenségek

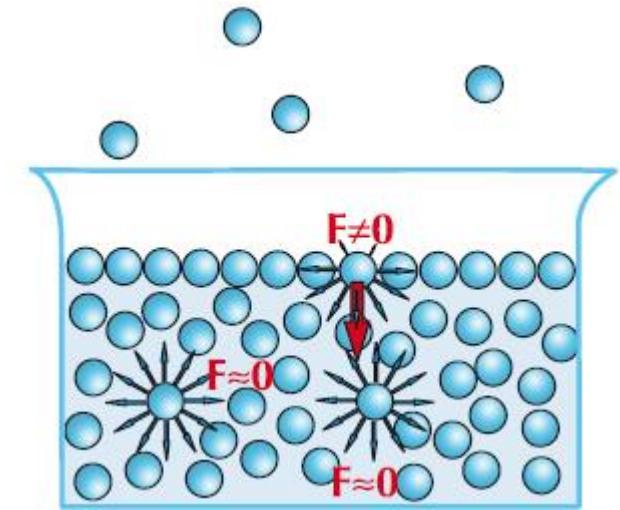
Anyagi halmazok, egykomponensű rendszerek: gázok

- **állapotjelzők** általában: az egyensúlyban lévő rendszer/en/ben mérhető makroszkópikus jellemzők az állapotjelzők (pl. nyomás, térfogat, hőmérséklet, stb.)
- gázok állapotát jellemzi: nyomás, hőmérséklet, térfogat, tömeg, stb.
- hőmérséklet: állapotok összehasonlításához az abszolút hőmérséklet (Kelvin skála)
- idális gáz: úgy tekintjük a gárezsécskéket, mintha nem lenne köztük kölcsönhatás, kivéve, mikor ütköznek, mert akkor tökéletesen rugalmas az ütközés két pontszerű részecske között
- **állapotegyenlet** (gáztörvény) ideális gázra: $pV = nRT = m/M \cdot RT = NkT$, ahol R az univerzális gázállandó, k a Boltzmann állandó, n : mólszám, N : részecskeszám, m a gáz össztömege, M a gáz moláris tömege
- ebből származtathatók a Boyle-Mariotte ($pV = \text{állandó}$ adott T -n, állandó gázmennyiségre)
- és a Gay-Lussac törvények ($p/T = \text{állandó}$, ha a térfogat állandó, illetve $V/T = \text{állandó}$, ha a nyomás állandó)
- Dalton törvény: két összekeverett gáz össznyomása a két gáz parciális nyomásainak az összege



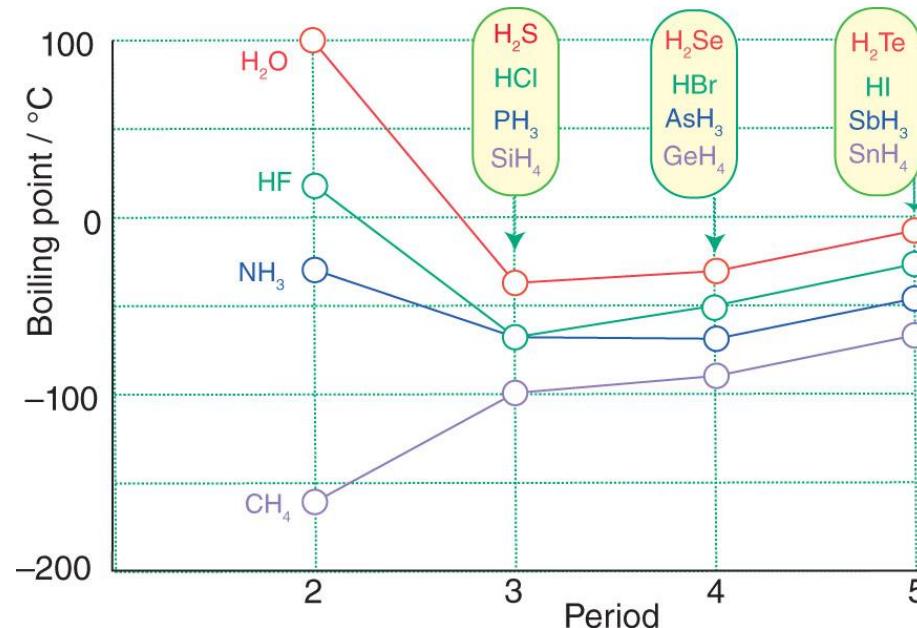
Anyagi halmazok, egykomponensű rendszerek: folyadékok

- folyadék: felveszi az edényt alakját, másodrendű kötőerők dominánsak, térfogat nagyon nehezen változik, alak viszont könnyen
- kohéziós erő: folyadék részecskéi között (vonzó)
- adhéziós erők: folyadék és az edény között fellépő erő (vonzó)
- jellemzői: sűrűség, felületi feszültség, viskozitás, góznyomás
- felületi feszültség:
 - felületi feszültség jellemzése az a munka, amellyel egységnyi új felület létrehozható ($W = \gamma A$), ahol γ , az arányossági tényező a felületi feszültség
 - habok képződése, nedvesedés kérdése, molnárkák a vízen, stb
 - detergensek felületi feszültség csökkentő hatása
- viskozitás:
 - folyóképesség, belső súrlódás; erő hatására történő elmozduláskor mekkora a súrlódási erő
 - nem Newtoni folyadék: tixotrópia: először alig folyik, de nagy behatásra (pl. rázásra) jól folyik; pl. ketchup, kukoricakeményítő
 - függ: másodlagos kötőerőktől, részecskék alakjától, hőmérséklettől



Anyagi halmazok, egykomponensű rendszerek: folyadékok

- folyadékok fizikai sajátosságai (pl. fp, sűrűség, viszkozitás, stb) függnek:
 - nagyon kis mértékben: nyomás
 - nagymértékben: hőmérséklet
 - másodlagos kötőerők erőssége, azaz anyagi minőség:
 - H-kötés erősebb, mint a van der Waals erők

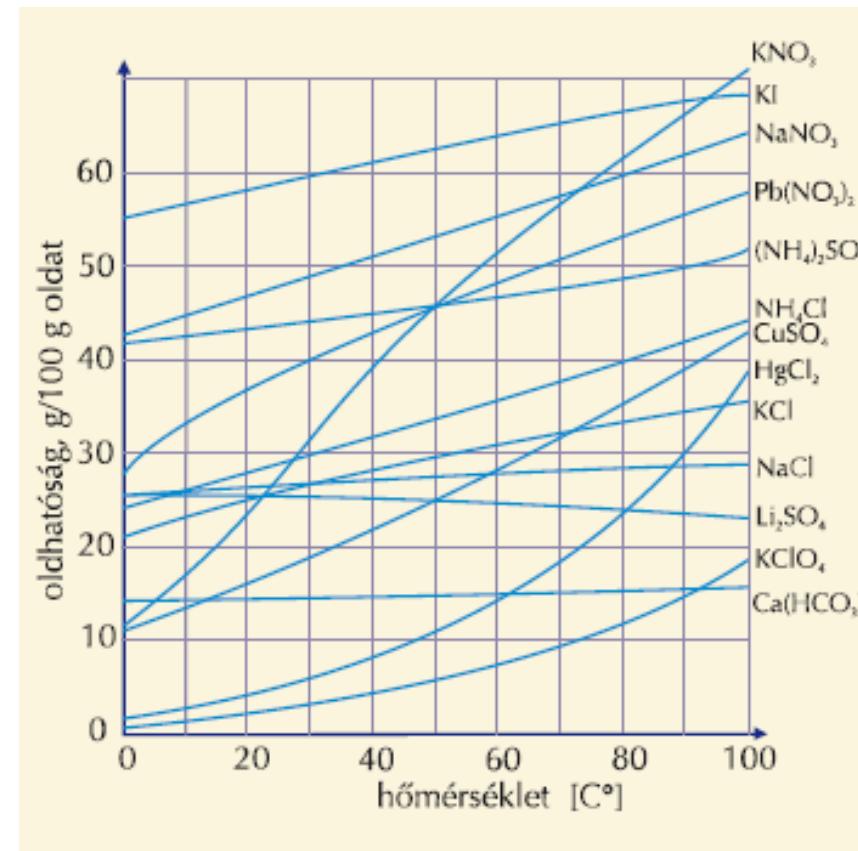


Anyagi halmazok, többkomponensű rendszerek: oldatok

- többkomponensű homogén keverékek: elegyek, ha a komponensek közel azonos mennyiségen vannak jelen, egyébként oldatok
- oldószer: a feleslegben lévő komponens, oldott anyag a másik komponens
- oldat lehet szilárd, folyékony és gáznemű
- oldott anyag lehet szilárd, folyékony és gáz
- oldószer lehet gáz (csak gáznak), folyékony és szilárd (mind a három állapotú oldott anyagnak)
- koncentráció: az oldott anyag mennyisége az oldószerhez képest
- tömegszázalék, mólszázalék, molaritás, molalitás, móltört, stb.
- telített oldatok, nincs mindenkorlátlan elegyedés (de pl. gázoknál mindenkorlátlan)
- oldhatóság (100 g oldószerben maximum mennyi oldott anyag lehet oldva), oldhatósági szorzat

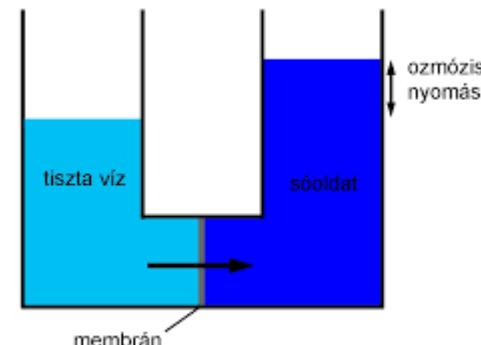
Anyagi halmazok, oldatok

- oldhatóság hőmérsékletfüggő
- oldhatóság: egyensúlyi sajátosság, energetikájáról később



Anyagi halmazok, oldatok híg oldatok néhány törvényszerűsége

- csak jelenségszinten; a részletes magyarázatot a fizikai kémia adja
- híg oldat tenziócsökkenése: a gőznyomás a híg oldat felett kisebb, mintha csak tiszta oldószer lenne jelen; mértéke: $\Delta p = p_0 - p = x \cdot p_0$, ahol p_0 az oldószer gőznyomása tiszta állapotban, p az aktuálisan mért gőznyomás és x az oldott anyag móltörte (nem függ az anyagi minőségtől, csak az anyagmennyiségtől!)
- forráspontemelkedés; mértéke: $\Delta T = T - T_0 = K_b \cdot m_R$, ahol T az aktuálisan mért forráspont, T_0 a tiszta oldószer forráspontja, m_R az oldott anyag molalitása, és K_b a molális forrpontemelkedés vagy más néven ebullioszkópos együttható.
- fagyáspontcsökkenés; mértéke: $\Delta T = T_0 - T = K_0 \cdot m_R$, ahol T az aktuálisan mért fagyáspont, T_0 a tiszta oldószer fagyáspontja, m_R az oldott anyag molalitása, és K_0 a molális fagyáspontcsökkenésnek, más néven krioszkópos együttható.
- ozmózis, ozmózisnyomás: féligáteresztő hártya (más néven diafragma, amely az oldószer-molekulákat átereszti, de az oldott anyag molekuláit nem) két oldalán különböző koncentrációjú oldatok vannak, akkor oldószervándorlás indul meg, addig, míg a túlnyomás meg nem állítja a folyamatot. Ez az ozmózisnyomás; mértéke: $\pi = cRT$, ahol π az ozmózisnyomás, c az oldott anyag molaritása, R a gázállandó, T az abszolút hőmérséklet.
- ozmózist a minden napokban is megfigyelhetünk pl. gyümölcsök esetén



Anyagi halmazok, egykomponensű rendszerek: szilárd anyagok

- kristályos anyagok, amorf anyagok
- kristályos anyagok:
 - hosszútávú rendezettség, határozott szimmetriaműveletek
 - éles olvadásponnal rendelkeznek
 - szabályos hasadások
- amorf anyagok:
 - hosszútávú rendezettséggel nem, rövidtávú rendezettséggel rendelkeznek
 - nincs éles olvadáspon
 - nincs szabályos hasadás
 - túlhűtött folyadékoknak tekinthetők: metastabil állapot
- kristályrács 4 típusa az összetartó erők és rácsponti részecskék alapján:
 - molekularács
 - ionrács
 - atomrács
 - fémrács

Anyagi halmazok, egykomponensű rendszerek: szilárd anyagok

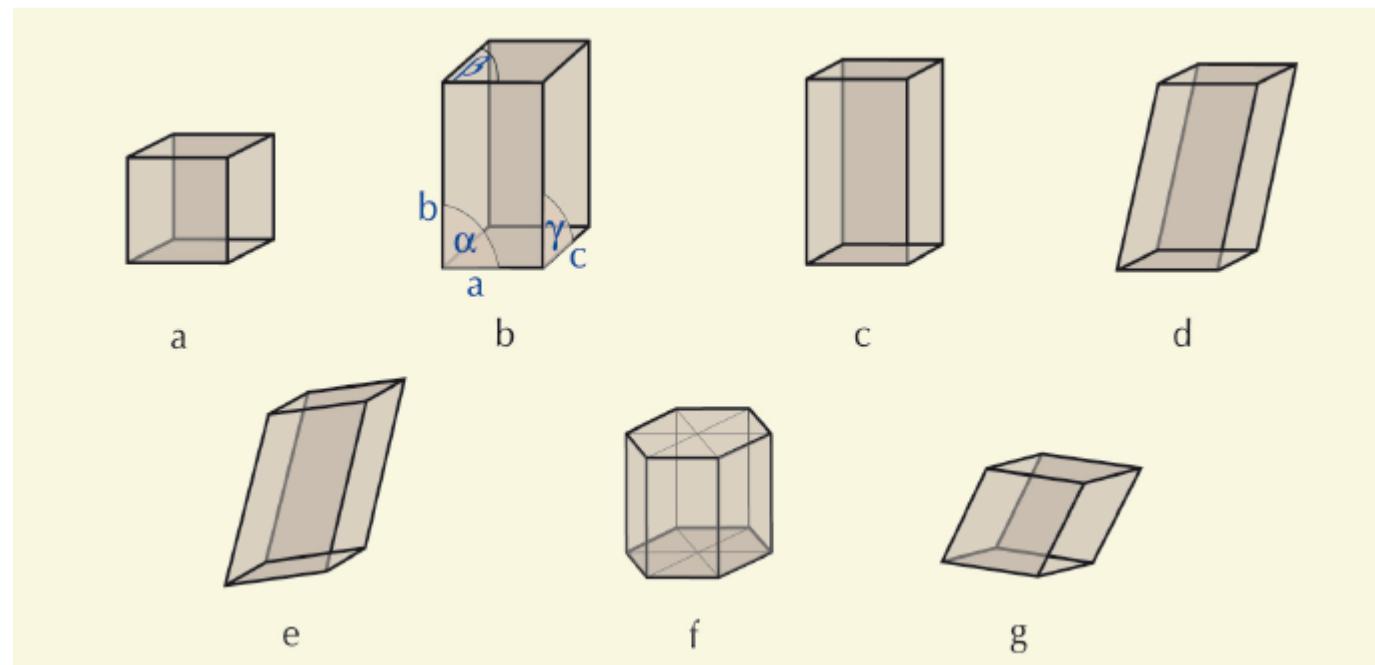
- molekularács:
 - rácspontokban molekulák
 - összetartó erők: másodlagos kötőerők
 - relatíve alacsony olvadáspont, erősen függ a másodlagos kötőerőktől
 - kiváló szigetelők
 - példák: S_8 , I_2 , jég, kámfor, stb.
- ionrács:
 - rácspontokban kationok és anionok
 - összetartó erők: elsődleges kötőerő: Coulomb erő
 - magas olvadáspont
 - kiváló szigetelők
 - példák: NaCl, CsF, stb.

Anyagi halmazok, egykomponensű rendszerek: szilárd anyagok

- fémrács
 - rácspontokon fém-atomtörzsek
 - összetartó erő: elsődleges, fémes kötés (korábban már volt róla szó)
 - op, keménység, sűrűség attól függ, hogy mennyi vegyértékelektron van a fémen
 - pl alkálifémek viszonylag lágyak, d-fémek keményebbek, magasabb op
 - vezetők, fémes csilllogás
 - gyakran igen képlékenyek
 - elemek között a leggyakoribb rácstípus
- atomrács:
 - rácspontokban atomok
 - összetartó erő: elsődleges, kovalens kötés
 - op. keménység nagy
 - szigetelők vagy félvezetők
 - elemek: Si, gyémánt, grafit, stb.
 - vegyületek: ZnS, SiO_2 , GaN, stb.

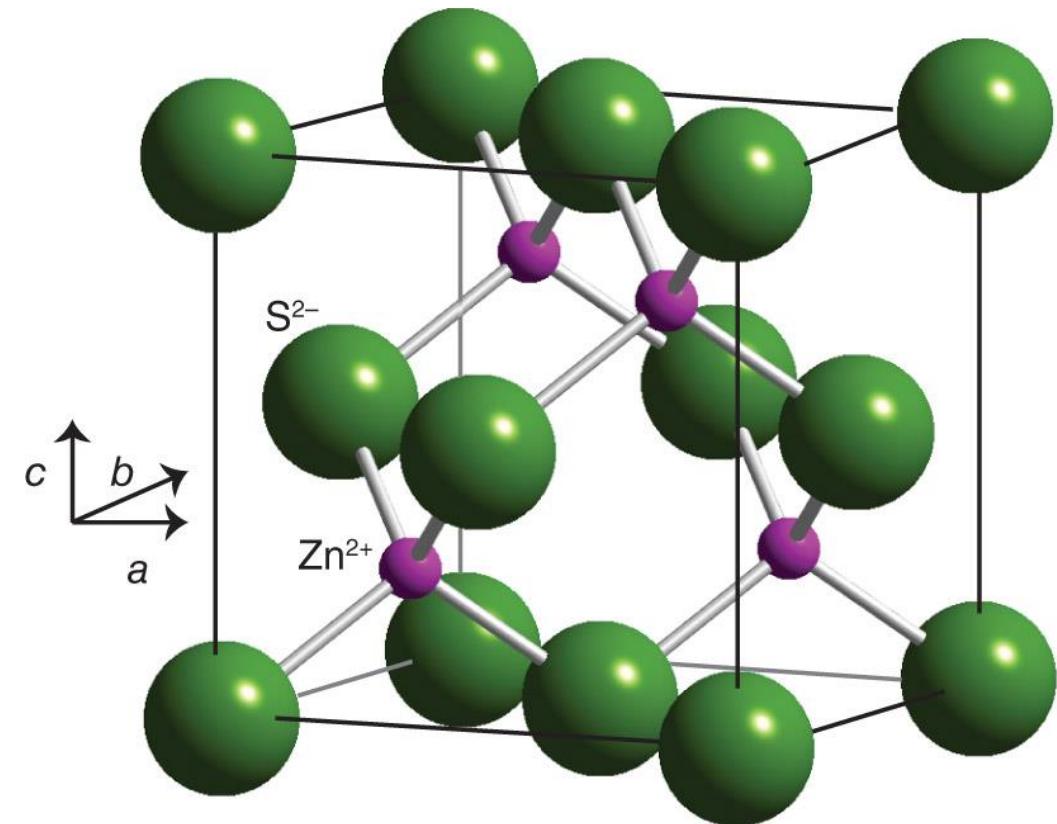
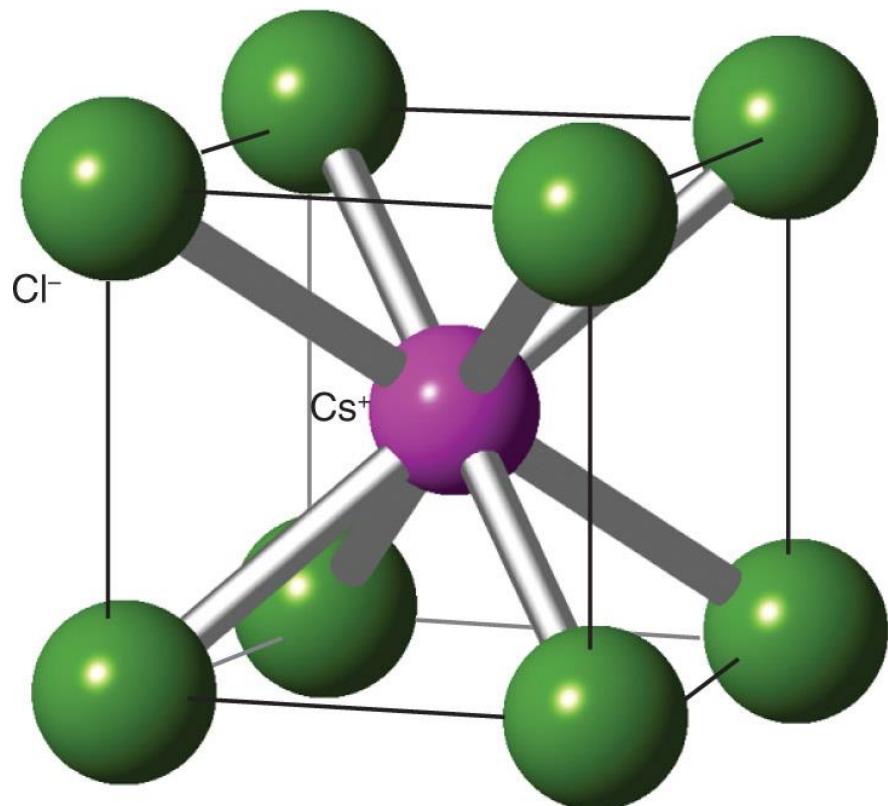
Anyagi halmazok, egykomponensű rendszerek: kristályok szerkezete

- kristályokat nagyfokú szimmetria jellemzi: eltolási szimmetria és egyéb szimmetriák
- elemi cella: a legkisebb része a kristálynak, amelyet a tér három lineárisan független irányában eltolva a kristály felépíthető
- alapvető elemi cellák: köbös, tetragonális, rombos, monoklin, triklin, hexagonális, romboéderes (trigonális)
- rácsállandók: $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$



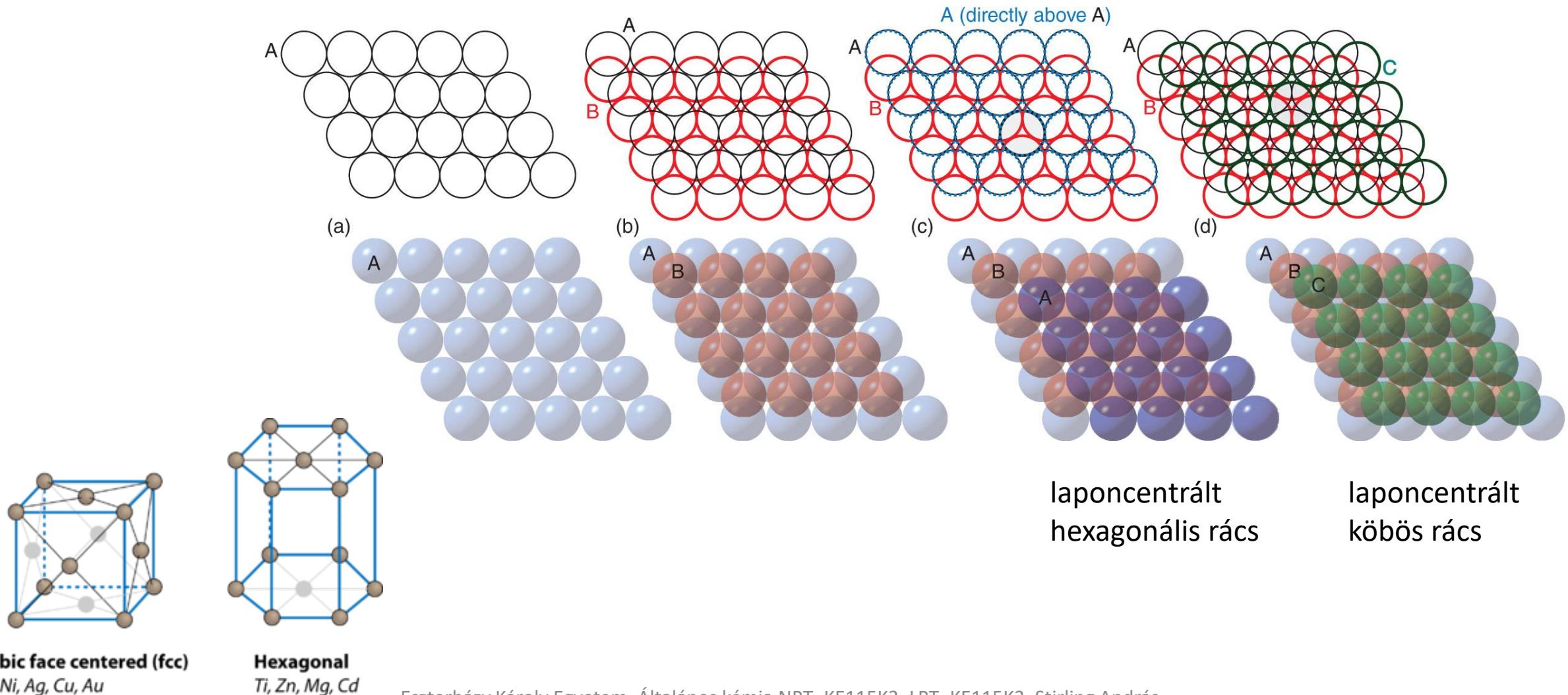
Anyagi halmazok, egykomponensű rendszerek: szilárd anyagok

- elemi cellán belüli szimmetriaviszonyok is izgalmasak
- hogyan határozzuk meg, hogy hány atom tartozik egy elemi cellához?



Anyagi halmazok, egykomponensű rendszerek: kristályok szerkezete

- szoros illeszkedés a rácsban:

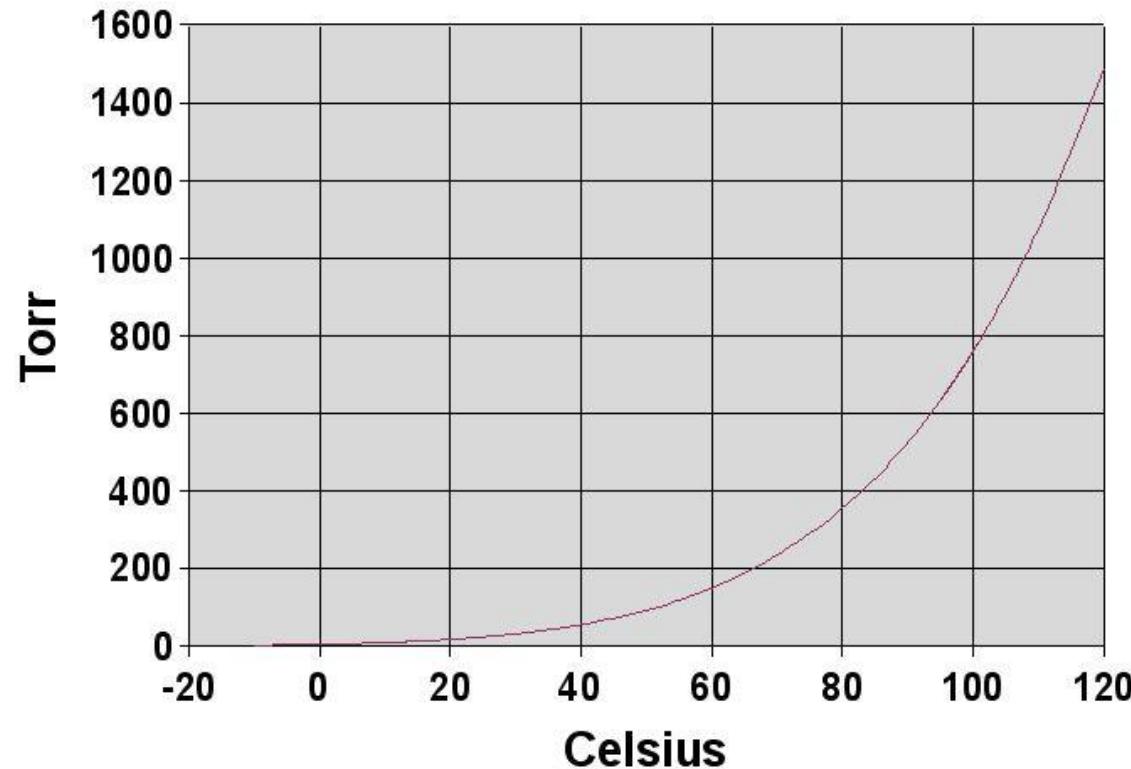


Anyagi halmazok, halmazállapotok, halmazállapot-változások, fázisdiagramok

- halmazállapotváltozások (fázisátalakulások) (csak tiszta anyagokra igaz, és egyensúlyi körülmények között; pl. amorf anyagokra (pl. üveg) nem, mert azok nincsenek egyensúlyban)
 - szilárd-folyadék: olvadás, fagyás
 - olvadáspont, olvadási hőmérséklet; T, p függő
 - olvadáshő (befektetendő); fagyáshő (felszabadul): $\Delta E_{olvadás} = -\Delta E_{fagyás}$ (tipikus, laborban történő méréskor kapott hőértéket entalpiának hivjuk és H-val jelöljük: $\Delta H_{olvadás} = -\Delta H_{fagyás}$)
 - folyadék - gáz: párolgás, forrás, lecsapódás
 - forráspont, forrási hőmérséklet, kondenzációs pont; T, p függő
 - párolgáshő
 - szilárd - gáz: szublimáció, kondenzáció (iparban kémiai gőzfázisú leválasztás (chemical vapor deposition, CVD) (tipikus "jól" szublimáló anyagok: kámfor, jód, menthol, stb.)
- keverékeknek nincs éles olvadáspontjuk és nem jól definiáltak a halmazállapotok: pl. vaj, tejszínhab
- egyensúly: ha az adott rendszer térben és időben nem mutat változást a makroszkópikus mérés során

Anyagi halmazok, egykomponensű rendszerek: folyadék - gáz egyensúly

- tiszta folyadék párolgása: folyadékrézszecke elegendő energiával a gáztérbe átugrik
- folyadék fölött zárt térben kialakul egy állandó gőznyomás - gyakran tenzióként szokták emlegetni nyomás helyett

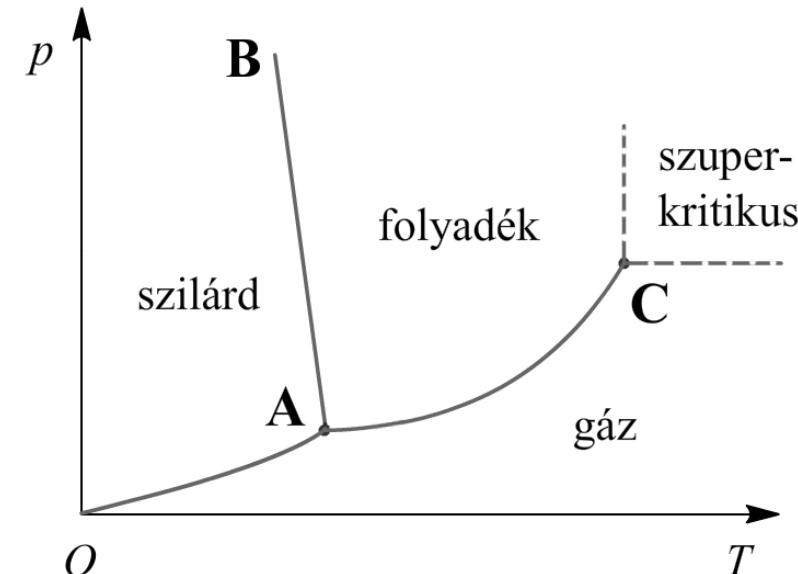
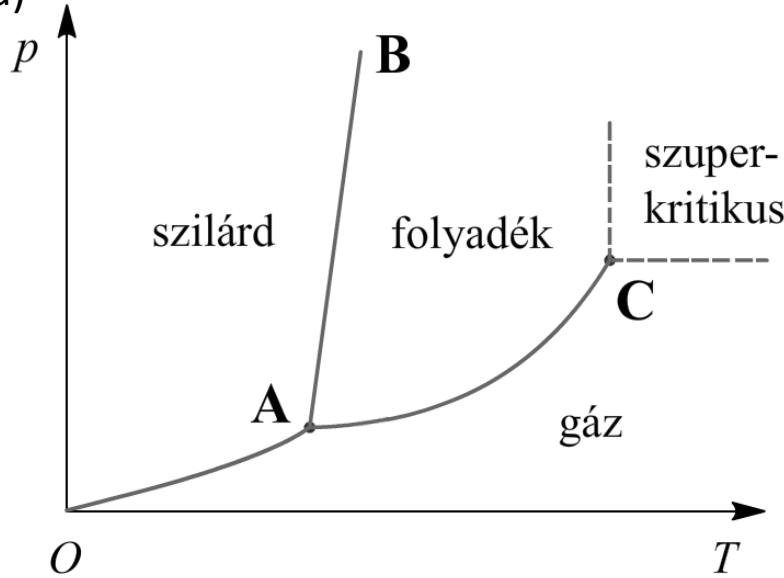


Anyagi halmazok, egykomponensű rendszerek: folyadék - gáz egyensúly

- tiszta folyadék párolgása: folyadékrészecske elegendő energiával a gáztérbe átugrik
- folyadék fölött zárt térben kialakul egy állandó gőznyomás - gyakran tenzióként szokták mondani nyomás helyett; ez a telített gőztér nyomása
- nem függ a külső nyomástól, csak a hőmérséklettől (térfogat csökkentésekor nem nő a telített gőznyomás, hanem lecsapódik a gőz egy része)
- relatív páratartalom: a telített páratartalom hány százaléka az aktuális páratartalom
- párolgáshő: egységnyi folyadék eltávolításához szükséges hőmennyiség (1 mól esetén moláris párolgáshő); kritikus pont felett 0 (miért?)
- forrásPont: az a hőmérséklet, amelyen a tenzió eléri az aktuális külső nyomást (pl. előző ábrán 100 °C 760 torrnál)

Anyagi halmazok, egykomponensű rendszerek: fázisdiagramok

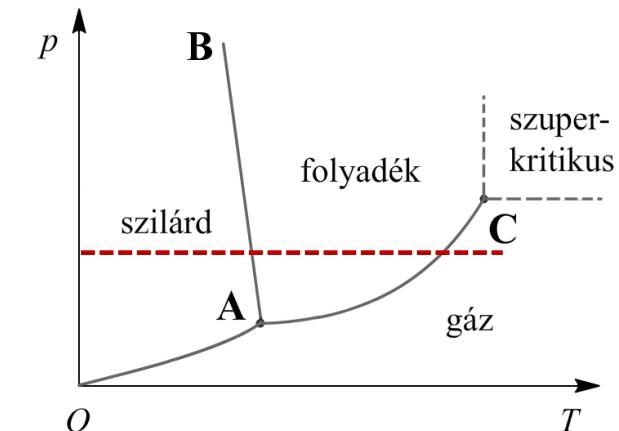
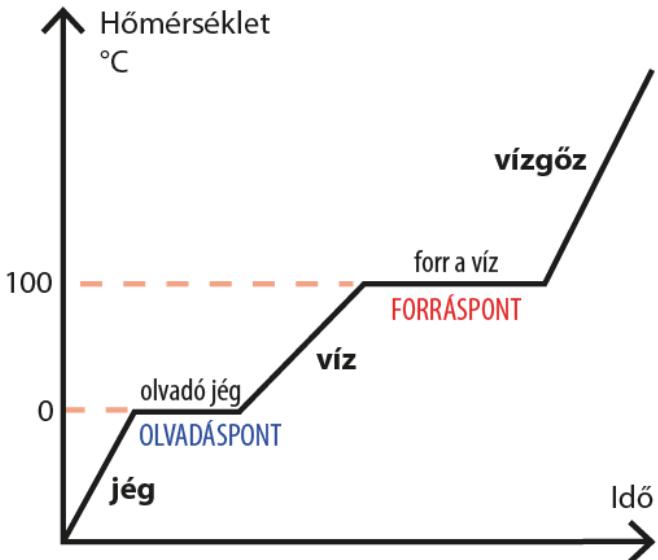
- a fázisdiagramon az állapotjelzők függvényében tüntetjük fel a fázisokat; görbekkel (illetve komplikáltabb (3D) esetben) felületek jelzik a fázisátmeneteket
- a fázisdiagramon csak a forráspont, mert ott egyezik meg a tenzió és a külső nyomás (ami a folyadékfázis nyomása)



- ha olvadáskor nő a térfogat (ez a tipikus): bal oldali fázisdiagram
- ha csökken (pl. víz esetén): jobb oldali fázisdiagram
- a vonalak jelentik azokat a pontokat, amikor két fázis ugyanolyan T és p értéknél van egyensúlyban
- a tartományokban csak az adott fázis létezik egyensúlyi körülmények között
- a hármaspontban együtt létezik mind a három fázis, ez jellemző az adott anyagra

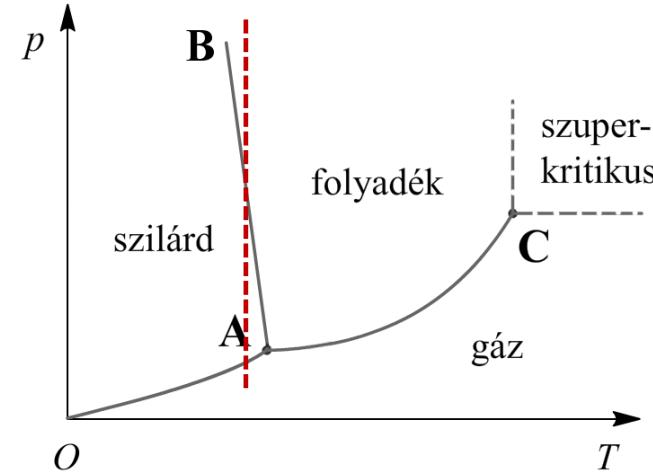
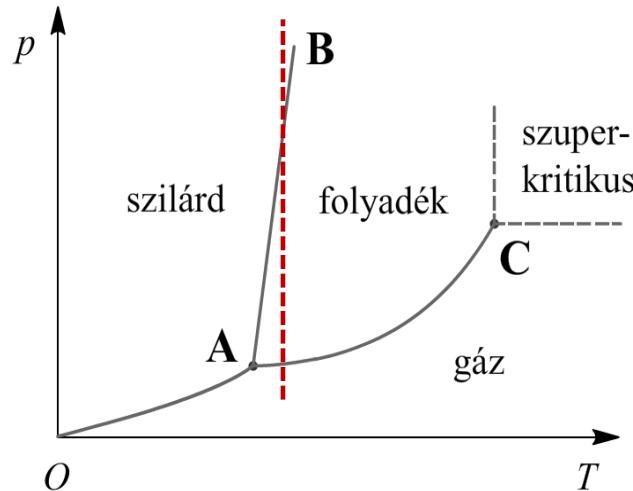
Anyagi halmazok, egykomponensű rendszerek: folyadékok fázisátalakulásai

- egyensúlyi körülmények között:
 - folyadékok forrásakor a folyadékfázis hőmérséklete állandó marad
 - folyadékok fagyásakor a folyadékfázis hőmérséklete állandó marad
- nem egyensúlyi körülmények között metastabil állapotok:
 - túlhevülés előfordulhat, forráspontnál magasabb a folyadék hőmérséklete belül;
 - túlhűlés, folyadék hőmérséklete fagyáspont alá süllyed anélkül, hogy szilárd fázis képződne
 - oka: fázisátalakuláshoz kell góc, azaz új határfelületnek kell képződnie a folyadék belséjében akár forráskor, akár fagyáskor



Anyagi halmazok, egykomponensű rendszerek: szilárd - folyadék fázisátalakulás

- olvadás: olvadásponti hőmérsékleten a részecskék elegendő kinetikus energiája legyőzi a rácsenergiát
- függ a nyomástól: pl tipikus esetben növekvő nyomással ráccsá lehet rendezni a kristályt
- víz esetében ellenkező a nyomás hatása (korcsolyázás ...)
- szilárd anyagok átalakulhatnak gázzá közvetlenül: szublimáció



Kémiai reakciók típusai, a sztöchiometria alapjai.

- kémiai reakció: olyan folyamat, amelyben a résztvevő anyagok szerkezete és/vagy összetétele megváltozik
- a reakciók lehet úgy vezetni, hogy végül elérjék az egyensúlyt (energiaminimumra való törekvés, fizikai kémiai megfontolások segítenek, hogy melyik energiafüggvény lesz adott körülmények között egyensúlyban minimális) - dinamikus egyensúly: makroszkópikusan állandó, mikroszkopikusan nem
- ha az egyensúlyban alig van valamelyik reakciópartnerből, vagy nem egyensúlyiak a körülmények: gyakorlatilag teljesen végbemegy a reakció: egyirányú folyamat
- reakciókat reakcióegyenlettel írjuk le: képletek és együtthatók úgy rendezve, hogy a megmaradási törvények teljesüljenek (tömeg- és töltésmegmaradás)
- reakcióegyenlet két oldalán reaktánsok (reagensek) és termékek, de attól függ, hogy melyik irányba követkük a reakciót; együtthatók a reagensek (termékek) mólarányát fejezik ki
- attól még, hogy egy reakcióegyenlet megmaradási szempontból korrekt, kémiailag még lehet blöðség; például: $\text{CaCO}_3 + 2 \text{ HCl} = \text{Ca(OH)}_2 + \text{COCl}_2$, hiszen $\text{CaCO}_3 + 2 \text{ HCl} = \text{CaCl}_2 + \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$
- reakcióegyenlet: gyakran nagyon komplikált folyamatokat összegez (sok egymást követő elemi lépés)
- ha egy reakcióegyenletnek több olyan felírása van, ahol az együtthatók arányai különböznek, az azt jelzi, hogy több független reakcióegyenlet lineáris kombinációja az adott reakcióegyenlet
- sztöchiometria: kémiai reakciók mennyiségi viszonyai

Kémiai reakciók típusai, a sztöchiometria alapjai.

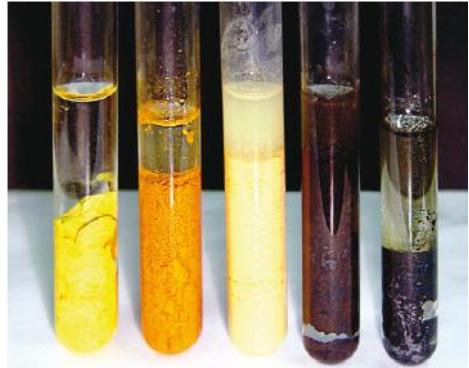
reakciók csoportosítása (nagyon sokféle szempont szerint lehetséges):

- résztvevő anyagok száma szerint:
 - **egyesülés:** amikor több anyagfajtából egy, vagy kevesebb keletkezik; pl. $H_2 + C_2H_4 = C_2H_6$ (addícionak, illetve szintézisnek is hívják)
 - ezen belül pl.: dimerizáció, trimerizáció, polimerizáció, stb
 - **bomlás:** egy összetett molekula több részletre esik szét; pl. $HgO = Hg + 0.5 O_2$ sd
 - ezen belül pl. elimináció, krakkolódás, stb.
 - **szubsztitúció** (kicserélés, kicsérélődés): egy molekularészlet, atom, atomcsoport egy másikra cserélődik: pl. $CH_3OH + Cl^- = CH_3Cl + OH^-$ (tipikus szerves S_N2 reakció)
 - **metatézis** reakció (dupla szubsztitúció, cserebomlás): kötések áthelyeződése, amikor két vegyület, vagy molekularészlet két új vegyületet, vagy molekularészletet hoz létre: általánosan: $A-B + C-D = A-C + B-D$; pl.: $H_2 + Cl_2 = 2 HCl$
 - ezen belül pl. olefin metatézis, átrendeződési reakciók, hidrolízis, észterképződés, stb.

Kémiai reakciók típusai, a sztöchiometria alapjai.

reakciók csoportosítása:

- fázisok száma szerint, azaz történik-e új fázis megjelenése, vagy eltűnése a reakció során:
 - homogén fázisú; pl. gázfázisú reakció: $2 \text{H}_2(\text{g}) + \text{O}_2 = 2 \text{H}_2\text{O}(\text{g})$
 - heterogén fázisú; pl. csapadékképződés:
 $2 \text{AgNO}_3(\text{aq}) + 2 \text{NaOH}(\text{aq}) = \text{Ag}_2\text{O}(\text{s}) + 2 \text{NaNO}_3(\text{aq}) + \text{H}_2\text{O}(\text{aq})$, vagy
gázfejlődés és szilárd fázis eltűnés : $\text{Zn}(\text{s}) + 2\text{HCl}(\text{aq}) = \text{ZnCl}_2(\text{aq}) + \text{H}_2(\text{g})$
 - érdekesség: ionvadászat egyik stratégiája (cation-osztályok, Fresenius rendszer) csapadékok képződésén, oldhatóságán alapszik (HCl , H_2S savas közegben, $(\text{NH}_4)_2\text{S}$, $(\text{NH}_4)_2\text{CO}_3$)



Kémiai reakciók típusai, a sztöchiometria alapjai.

reakciók csoportosítása:

- energetika szerint, balról jobbra tekintve a reakcióegyenletet
 - **exoterm**: hő felszabadulással járó; pl. $\text{Fe}_2\text{O}_3 + \text{Al} = \text{Al}_2\text{O}_3 + \text{Fe}$ (termit reakció)
 - **endoterm**: hőelnyeléssel járó; pl. szénhidrogének krakkolódása
 - kérdés: miért zajlódik le egy endoterm reakció
 - válasz: lezajlódhat, bizonyos körülmények között
 - további probléma: honnan tudható, hogy egy reakció lezajlódHAT-E egyáltalán adott körülmények között, vagy pedig kár a fáradtságért?
 - válasz: a fizikai kémia bizonyítja, hogy a megfelelő **potenciálfüggvénynek** csökkennie kell. Pl. normális laboratóriumi (főzőpoharas) kísérletnél a p és T állandó, ezért a szabadentalpia csökkenés egy szükséges (de nem elégséges - kinetika!) feltétel.
 - exergonikus folyamat: szabadentalpia csökkenéssel jár
 - endergonikus folyamat: szabadentalpia növekedéssel jár
 - megváltoztatva a körülményeket, megváltoznak az energiaviszonyok és emiatt új reakciókat lehet kapni, amik más körülmények között esetleg nem játszódnak le

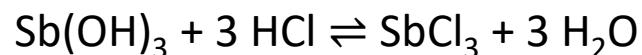
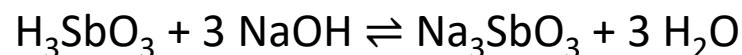
Kémiai reakciók típusai, a sztöchiometria alapjai.

reakciók csoportosítása:

- részecske átmenet szempontjából
 - sav-bázis (proton (Bronsted), elektronpár (Lewis))
 - elektron (redoxi folyamatok)
 - elektron leadás: oxidáció
 - elektron felvétel: redukció

Sav-bázis elmélet

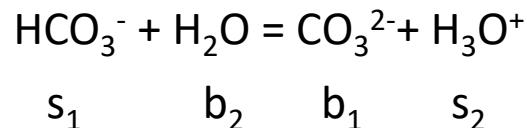
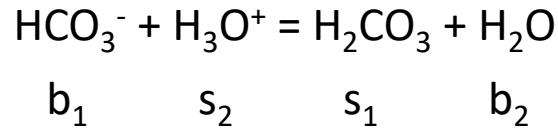
- Arrhenius féle sav-bázis elmélet
 - bevezetett hasznos fogalmakat, de ma már nem ezzel értelmezünk sav-bázis folyamatokat
 - sav: ami vízben H^+ (H_3O^+) ionra és savmaradékra disszociál
 - bázis, ami OH^- ionra (hidroxid-, vagy hidroxil ionra) és kationra disszociál
 - erős sav, erős bázis: teljes disszociáció; gyengesav, gyenge bázis: részleges disszociáció
 - közömbösítés: sav és bázis megfelelő elegyítése sót és vizet eredményez
 - csak vizben lejátszódó folyamatokra használható
 - amfotéria: egy adott vegyület sav is és bázis is, pl. $\text{Sb}(\text{OH})_3 \equiv \text{H}_3\text{SbO}_3$:



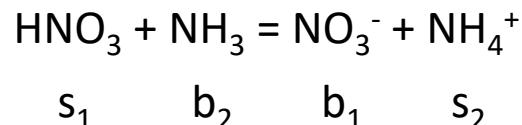
- saverősség, báziserősség eldöntése: abszolút skála, a savi (ill. bázis) disszociációs (ionizációs) állandók alapján; pl. $K_{\text{ecetsav}} = 1.76 \cdot 10^{-5} \text{ mol/dm}^3$, $K_{\text{hangyasav}} = 2.0 \cdot 10^{-4} \text{ mol/dm}^3$, azaz a hangyasav 10x erősebb

Sav-bázis elmélet

- Bronsted (Bronsted-Lowry) féle sav-bázis elmélet
 - minden aktuális folyamatban kapnak a résztvevők sav vagy bázis szerepet
 - savak: amik protont adnak le egy adott folyamatban
 - bázis: amik protont vesznek fel az adott folyamatban
 - egy adott speciesz lehet sav egy folyamatban és bázis egy másikban, pl. HCO_3^- anion



- savak és bázisok sóképzése is sav-bázis folyamat:



- szinte minden anyag lehet amfoter, kivéve a protont

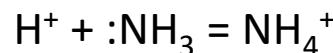
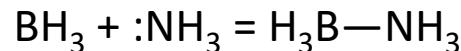
Sav-bázis elmélet

- Bronsted (Bronsted-Lowry) féle sav-bázis elmélet
 - konjugált sav-bázis párok
 - erős savból gyengébb bázis; gyenge savból erősebb bázis
 - erős bázisból gyengébb sav; gyenge bázisból erősebb sav képződik
 - sók hidrolízise is értelmezhető:
 - erős sav és erős bázis reakciójából gyengébb sav és gyengébb bázis képződik, nem aktívak
 - erős sav és gyenge bázis esetén erősebb konjugált sav képződik; pl. NH_4Cl
$$\text{NH}_4^+ + \text{H}_2\text{O} = \text{NH}_3 + \text{H}_3\text{O}^+$$
 - erős bázis és gyenge sav esetén erősebb konjugált bázis képződik; pl. Na_3PO_4
$$\text{PO}_4^{3-} + \text{H}_2\text{O} = \text{HPO}_4^{2-} + \text{OH}^-$$
 - nem csak vizes oldatokban érvényes, pl. folyékony ammóniában is értelmezhető
$$\text{NH}_3 + \text{NH}_3 = \text{NH}_2^- + \text{NH}_4^+$$
 - saverősség, báziserősség: nincs abszolút skála: függ a partnertől, oldószertől (speciális eset a víz, ekkor az Arrhenius sav-bázis erősséget kaphatjuk meg - másszóval az Arrhenius skála referencia pontja a víz sav- és báziserőssége)

Sav-bázis elmélet

Lewis sav-bázis elmélet

- (Lewis) bázis az a molekula, amely elektronpárt tud átadni (elektronpár donor)
- (Lewis) sav az a molekula, amely elektronpárt tud fogadni (elektronpár akceptor)
- tulajdonképpen a datív (koordinatív) kötés sav-bázis típusú leírása



- a Lewis savak elektronhiányosak, elektrofil karakterűek
- Lewis bázisok nemkötő elektronpárral rendelkeznek, nukleofil karakterűek
- a képződött vegyületekben általában az atomok körül a (Lewis) oktett szerkezet megvalósul
- szerves kémiában, fémorganikus kémiában, komplexkémiában használatos sav-bázis elmélet
- Lewis savak: kationok (pl. Cu^{2+} , H^+ , stb.); elektronhiányos molekulák (pl. BF_3 , AlCl_3 , $\text{Al}(\text{CH}_3)_3$, stb.)
- Lewis bázisok: anionok (H^- , Cl^- , Cp^- , CN^- , stb.); magányos elektronpárt tartalmazó molekulák (pl. NH_3 , $\text{P}(\text{CH}_3)_3$, piridin, aminok, CO , stb.); többszörös kötést tartalmazó vegyületek (pl. olefinek, aromás vegyületek, stb.)

Szupersavak

- nagyon erősen tudnak protonálni, pl metánt (CH_5^+); ilyen sav a HF és a SbF_5 keveréke, ami tkp. $\text{H}^+ + \text{SbF}_6^-$
- mind Bronsted, mind Lewis elmélet szerint értelmezhető a szupererőssége

Redoxi reakciók, oxidációfok

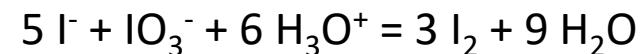
- oxidációfok vagy oxidációs szám
- önkényes fogalom, a kötő elektronpárokat önényesen a kötésben résztvevő atomok között szétoztjuk
- elvileg bárhogy csinálhatjuk, mivel fiktív mennyiség; célszerű az elektronegativitásokat figyelembevenni
- szabályok:
 - elemek oxidációfoka 0, még ha többatomos molekulákat alkotnak (O_2 , Br_2 , P_4 , S_8)
 - a részecskét alkotó atomok oxidációfokainak összege kiadja a részecske össztöltését
 - ha nem O_2 -ről, peroxidról, vagy szuperoxidról van szó, akkor az O oxidációfoka -2
 - ha nem H_2 -ről vagy hidridről van szó, akkor a H oxidációfoka 1
 - fémkationok oxidációfoka a töltésük
 - stb.

Redoxi reakciók, oxidációfok

- példák:
 - KMnO_4 : K:+1, Mn: +7, O: -2; így az össztöltés 0.
 - NO_2 : N: +4, O: -2.
 - $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$: Na: +1, S: +2, O: -2
 - KO_2 : K: +1, O: -0.5 (kálium-szuperoxid)
 - HPO_4^{2-} : H: +1, P: +5, O: -2, így az össztöltés kijön: $1+5-4\cdot(-2)=-2$
- egy redoxreakcióban amelyik anyagban valamelyik atomnak csökken az oxidációfoka, az az oxidálószer, míg amelyik anyagban egy atomnak nő az oxidációfoka, akkor az a redukálószer

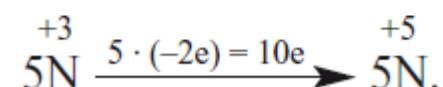
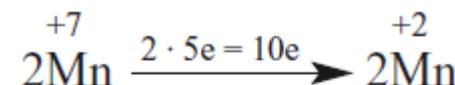
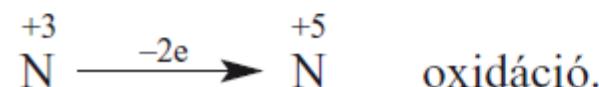
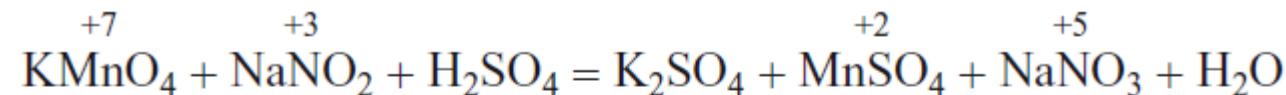
Redoxi reakciók

- oxidáció: elektronleadás; redukció: elektronfelvétel
- kémiai reakciókban az elektronszám megmarad: oxidáció és redukció egymást kiegészítő folyamatok
- oxidálószer: más vegyületet oxidál, tehát maga redukálódik
- redukálószer: más vegyületet redukál, tehát önmaga oxidálódik
- az, hogy egy vegyület redukálószer, vagy oxidálószer, az a folyamattól függ, egy vegyület lehet néha oxidálószer, máskor redukálószer
- példa:
 - $2\text{H}_2 + \text{O}_2 = 2\text{H}_2\text{O}$ (hidrogén redukálószer, oxigén oxidálószer)
 - $\text{H}_2 + 2 \text{Na} = 2 \text{NaH}$ (hidrogén oxidálószer, nátrium redukálószer)
- diszproporcionálódás: köztes oxidációfokú elem oxidálódik és redukálódik is:
$$\text{Cl}_2 + \text{H}_2\text{O} = \text{HCl} + \text{HOCl}$$
- szinproporció (komproporció): egy elem magas és alacsony oxidációfokú részecskéi egy köztes oxidációfokú vegyületet hoznak létre

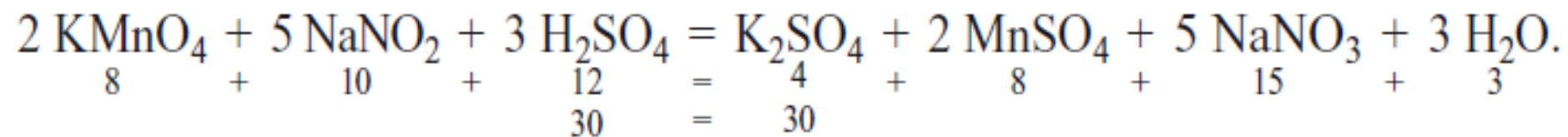
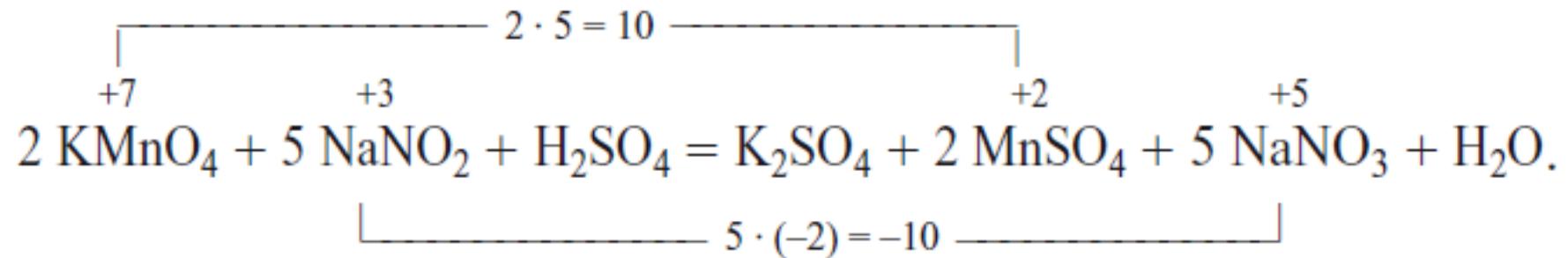


Redoxi reakciók

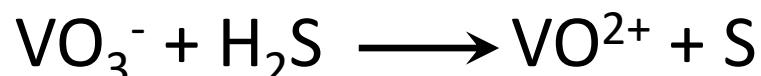
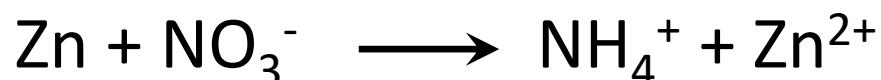
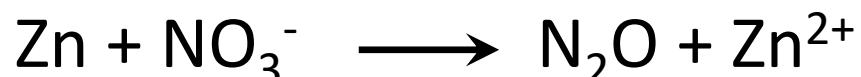
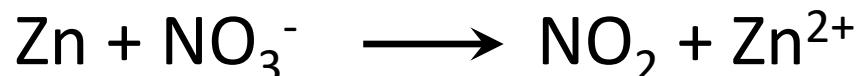
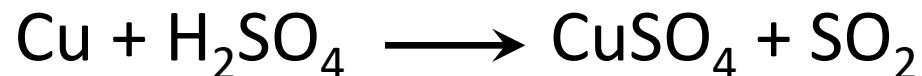
redoxi folyamatok egyenleteinek rendezése: azt használjuk ki, hogy a leadott elektronok és a felvett elektronok száma megegyezik



Redoxi reakciók

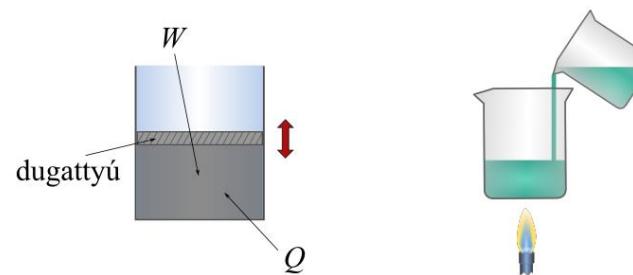
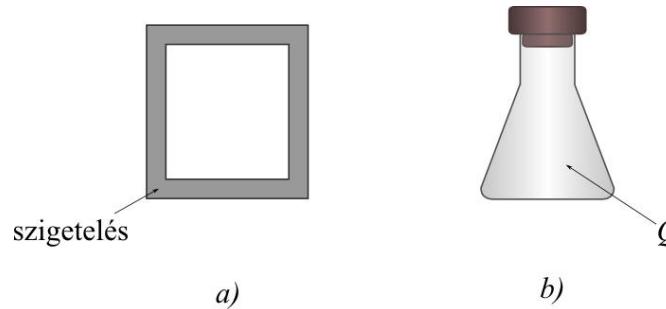


Redoxi reakciók, kiegészítendő egyenletek



A termokémia alapfogalmai

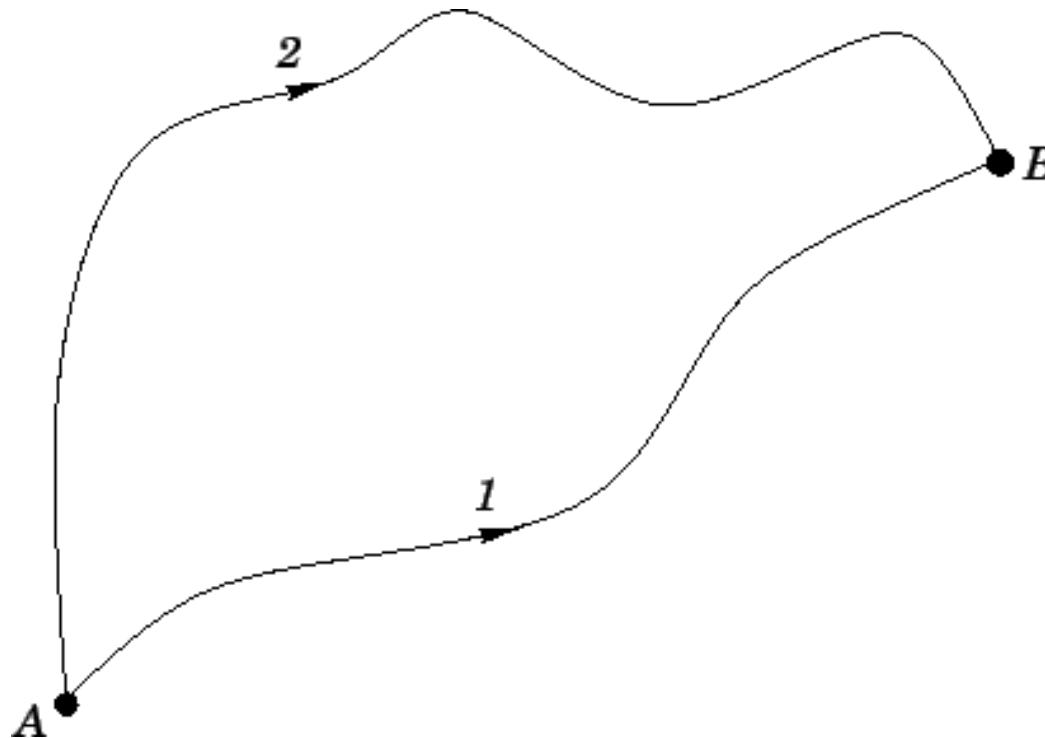
- **rendszer**: a világ egy hipotetikus, vagy valódi határral elzárt része, amit vizsgálunk, amivel foglalkozunk
- **környezet**: a világ azon része, ami nem az aktuális rendszerünk
- **rendszer**
 - **nyílt** (nyitott): anyag és energiacsere a rendszer és környezet között
 - **zárt**: csak energiacsere a rendszer és környezet között
 - **elszigetelt**: nincs sem anyag sem energiacsere a rendszer és környezet között



A termokémia alapfogalmai

- **hő:** olyan energiamennyiség, amelyet hőmérsékletkülönbség vált ki, hő mindenkor a melegebb helyről a hidegebb hely felé áramlik
- termikus egyensúly: hőmérsékletkülönbség megszűnik, hőcsere leáll
- **belső energia (U):** a rendszer teljes energiából kivonjuk a rendszer tömegközéppontjának mozgási energiát és a rendszerre mint egészre ható potenciális energiát; a maradék a belső energia
- belső energia (U): a részecskék kinetikus energiája és a köztük ható potenciális energiák (intermolekuláris, sőt akár intramolekuláris potenciálok) összege;
- belső energia (U): nem tudjuk meghatározni pontosan, de valójában minket energiakülönbségek érdekelnek, azokat viszon meg tudjuk határozni méréssel
- $\Delta U = U_{\text{későbbi}} - U_{\text{korábbi}} = U_2 - U_1$ (így számolunk Δ -kat; a különbség lehet + vagy -, de ez nem baj!)
- belső energia megváltozik: hőközlés és/vagy rendszeren történő munkavégzés hatására:
- $\Delta U = Q + W$

A termokémia alapfogalmai

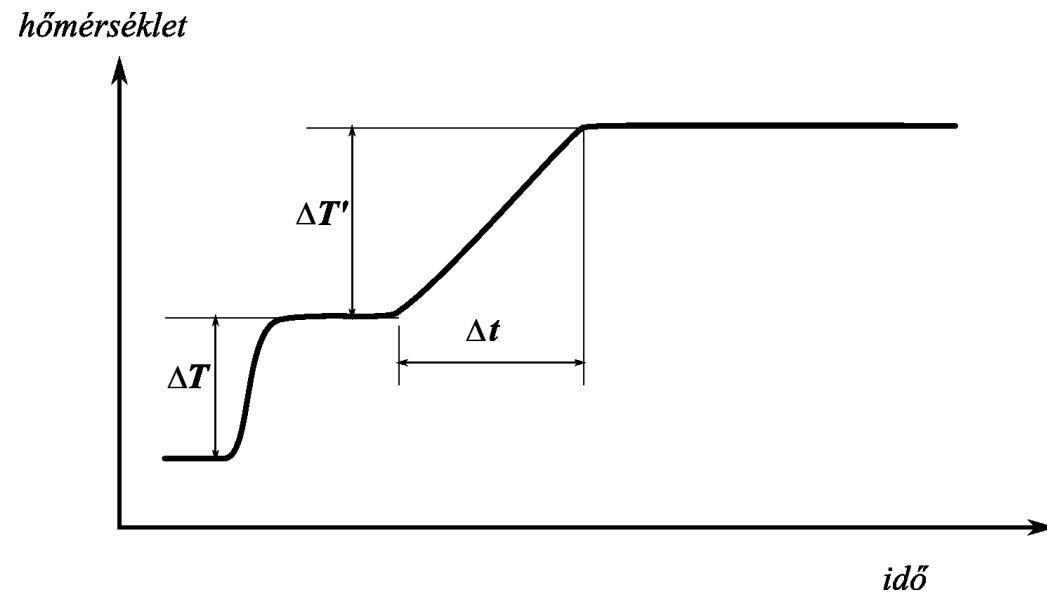
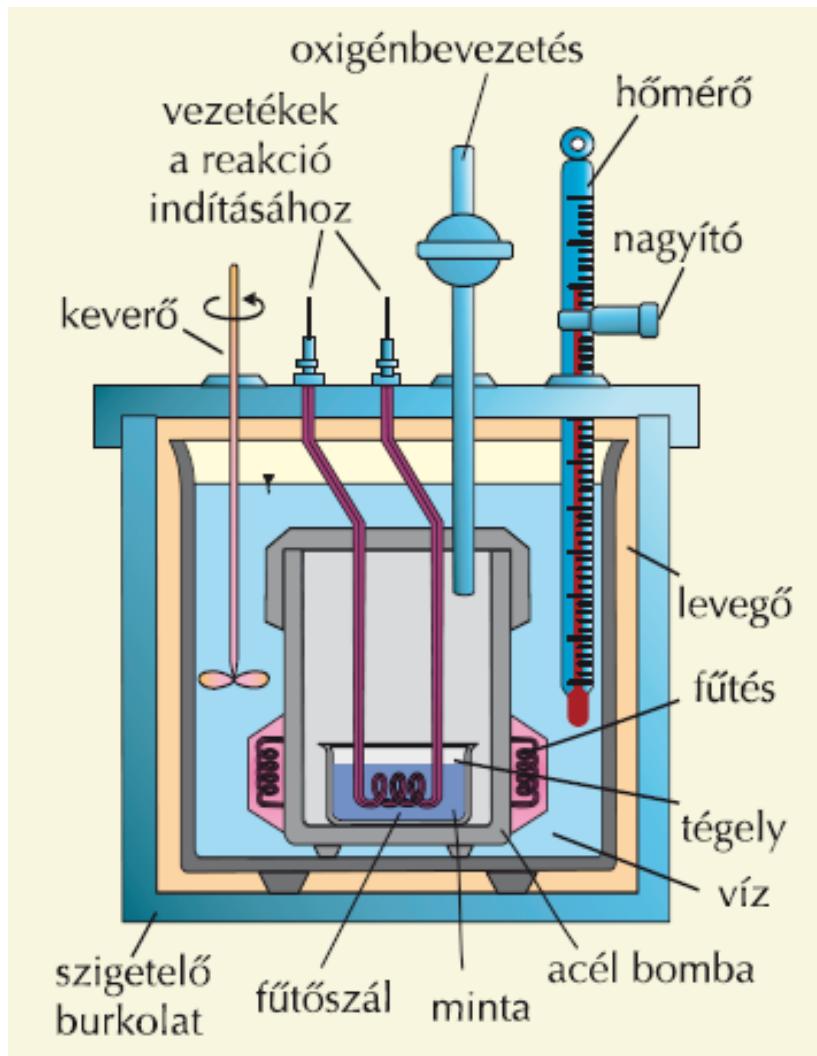


- belső energia: állapotfüggvény: értéke csak az állapotjelzők aktuális értékétől függ
- felvett hő, leadott hő, elvégzett munka: értékük a folyamattól függ:
- példa ilyen mennyiségre a való világból: súrlódási erő munkája két pont között
- ideális gázoknál (elhanyagolt kölcsönhatások) az U csak a T függvénye!

A termokémia alapfogalmai

- $\Delta U = Q + W$
- W: tipikus a térfogati munka; kémiában ez akkor érdekes, ha a folyamat térfogatváltozással jár (vagyis szinte minden), mert akkor arrébb kell "tolni" a környezetet, vagyis a rendszer munkát végez a környezeten. Ilyen szituáció például egy főzőpohárban végzett kísérlet: a térfogatváltozás miatt arrébb kell tolni a levegőt a folyadékfázis felett, (vagy fel, vagy "le")
- attól függően, hogy milyen ez a térfogatváltozás, a munka + vagy - ; azaz a rendszer energiát nyer a környezettől, vagy energiát veszt
- mivel a leggyakoribbak az olyan kémiai folyamatok, ahol a T és p állandó és W csupán a térfogati munka, bevezették az entalpiát:
 - $\Delta H = \Delta U - W$; azaz $\Delta H = Q$, ha nincsen más munka...
- vagyis ha $W = 0$, azaz nincs térfogatváltozás (nem kell arrébb tolni semmilyen irányba a környezetet) akkor $\Delta U = Q$
- ha viszont van térfogatváltozás, akkor végezzük minden állandó nyomáson és hőmérsékleten a folyamatokat a jó összehasonlíthatóság érdekében és akkor $\Delta H = Q$
- tehát, ha a Q-t, azaz a felvett (vagy leadott) hőt tudjuk mérni, akkor folyamattól függően a rendszer belső energiájáról, vagy entalpijáról kaphatunk információkat
- Q mérése: kaloriméter, pl. állandó térfogatnál kaloriméterbomba

A termokémia alapfogalmai



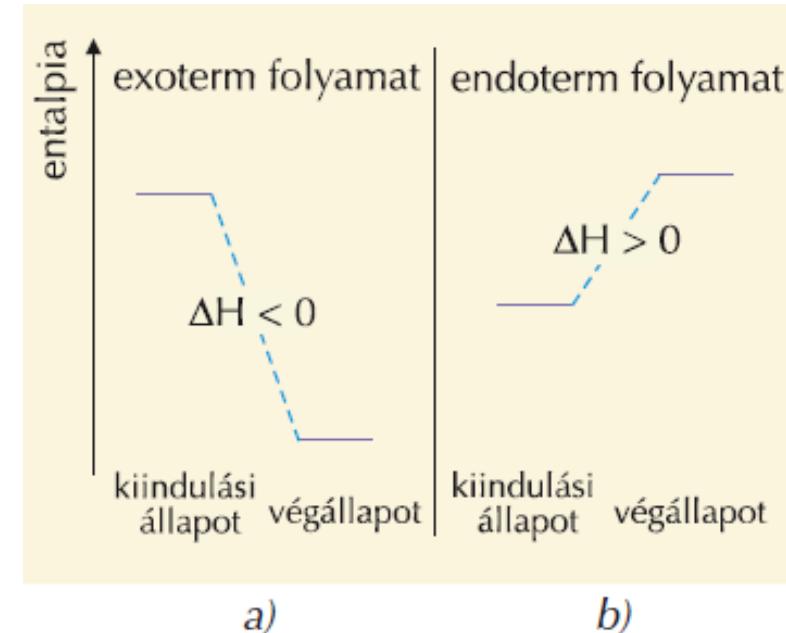
kaloriméterbomba égéshő meghatározáshoz:

első változás: a reakció

második: a hőkapacitás meghatározása a fűtőszálas melegítéssel

A termokémia alapfogalmai

- folyamatok hőközlés szempontjából:
 - exoterm: hő szabadul fel
 - endoterm: hő nyelődik el
- példák hőtípusokra:
 - folyamatok esetén:
 - reakcióhő, oldáshő, párolgáshő, stb
 - kapcsolatok kialakulása/megszűnése:
 - ionizációs energia, elektronaffinitás, kötési energia, atomizációs energia, rácsenergia
- felvett hőmennyiség: hőkapacitás; egységnnyi anyag egységnnyi hőmérsékletváltozásához szükséges energia egy adott folyamatban; $Q = C \cdot \Delta T$
 - fajlagos (tömegegységre vonatkozó)
 - moláris (1 mólra vonatkoztatva)
- Látens hő: hő felvételekor/leadásakor nem változik a hőmérséklet (fázisátalakuláskor):
 - olvadáshő, fagyáshő; párolgáshő, kondenzációs hő; szublimációs hő; oldáshő
 - ilyen folyamatban a hőkapacitás végtelen - ez fázisátalakulást jelez

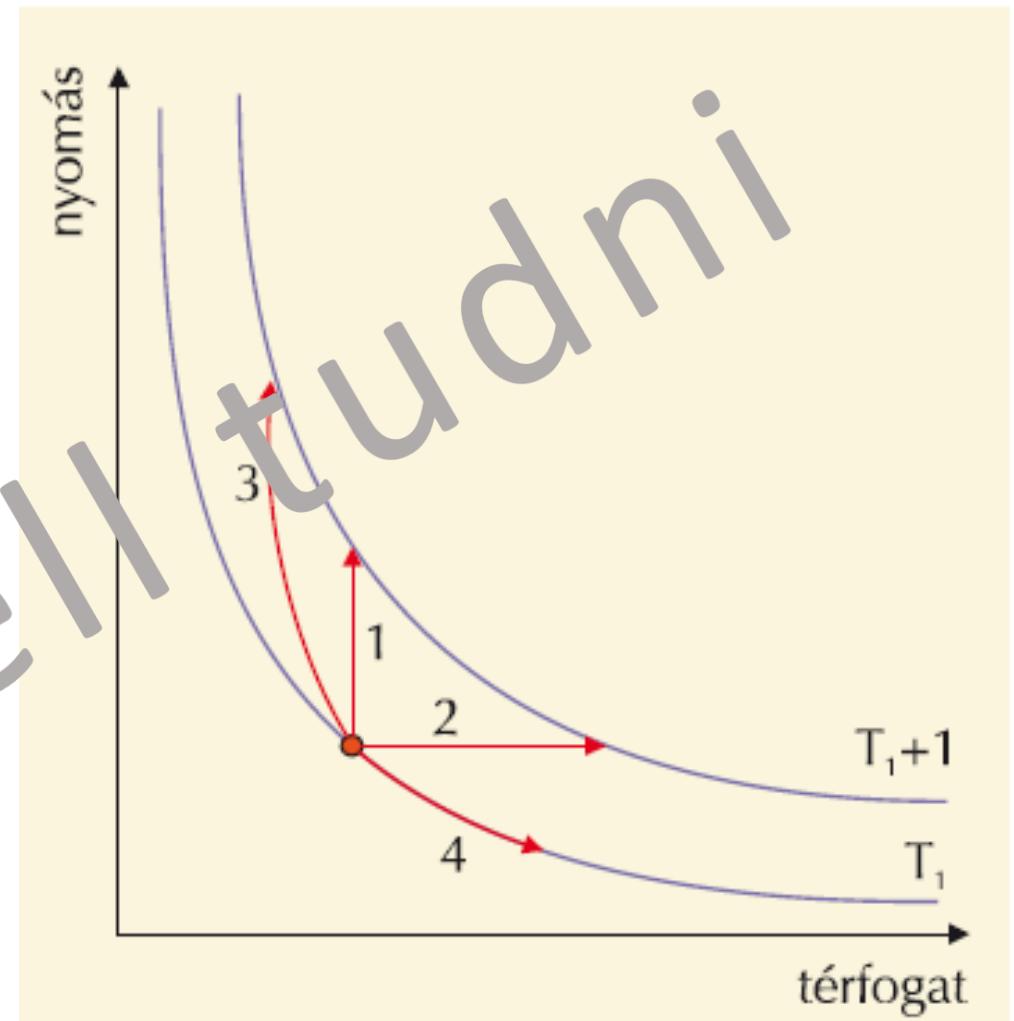


A termokémia alapfogalmai
(ez az ábra nem anyag, csak érdekesség!)

- a hőkapacitás: folyamattól függ
 - állandóan tartott térfogatnál: C_v
 - állandóan tartott nyomás: C_p
 - állandóan tartott hőmérséklet: végtelen
 - adiabatikus út: nulla
 - C_p nagyobb, mint C_v (mert még ki is kellett terjedni)
 - minden folyamatra más lehet, végtelen féle hőkapacitás van

példák hőkapacitásra (C_p ; $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$):

- He, Ar: 20.78
- H₂: 28.70
- H₂O(f, 40 °C) 75.21
- NaCl (1413 °C) 51,48



A termokémia alapfogalmai

- a körülmények egységesítése: standard állapot (298 K, 101 kPa, adott anyag a tipikus állapotában (pl. szén grafitként és nem gyémántként)
- folyamatokkal kapcsolatos hőváltozásokat is ilyen körülményekre (tehát állandó T és p (azaz 298 K és 101 kPa): standard reakcióhő, standard képződészűrő, standard oldódáshő, stb, ami ugyanaz, mint standard reakció entalpia, standrad képződési entalpia, stb
- mivel átadott hőmennyiségek mérése adja az entalpia-változásokat, nincsenek egyedi entalpiaértékeink - ezeket seholnan nem tudhatjuk meg (két szám különbség ugyanannyi lesz, ha mindenkhöz ugyanazt a számot hozzáadom és úgy végzem el a kivonást)
- érdemes rögzíteni a skála 0 pontját: legyen az elemek képződészűrője 0
- vegyület képződészűrője: az a hőmennyiség, amely vegyületet felépítő kémiai elemek legstabilabb módosulatából, a termokémiai reakcióegyenletnek megfelelően történő képződését kíséri
- standard moláris képződési entalpia, $\Delta_m H^\circ$, 1 mól vegyület standard képződészűrője
- termokémiai egyenlet: a halmazállapotokat is feltüntetjük; pl.:



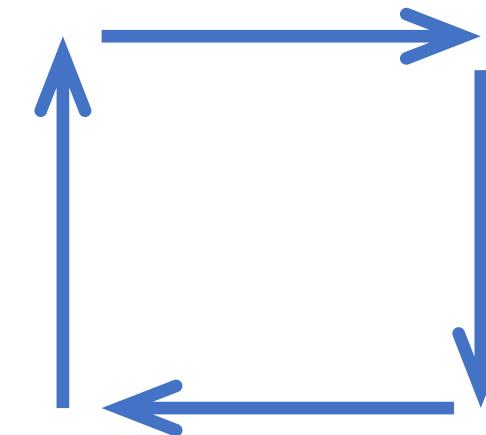
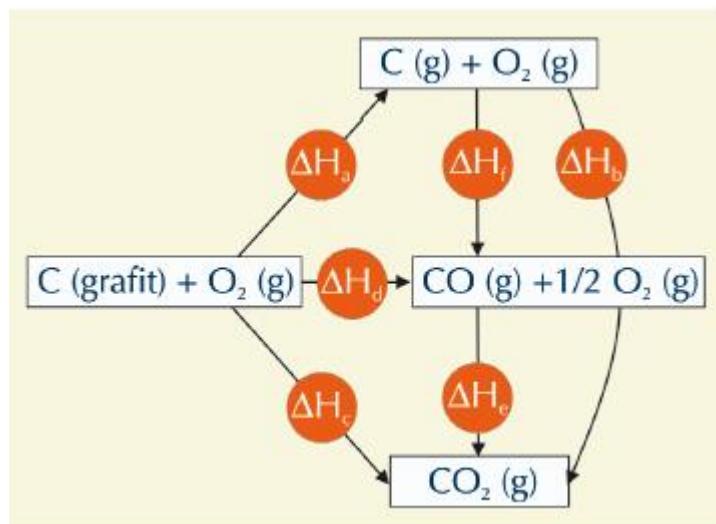
- $\Delta_r H^\circ$ a standard reakcióhő
- Hess tétele: kémiai reakciók standard reakcióhője csak a kiindulási anyaguktól, a végtermékektől és azok állapotától függ. (pl. mindegy, hogy hány és milyen közbenső lépés történt)

A termokémia alapfogalmai

- példa: standard reakcióhő számítása: a $2\text{H}_2 + \text{O}_2 = 2\text{H}_2\text{O}$ folyamat reakcióhőjét így számoljuk:

$$\Delta_r H^0 = 2 \Delta_m H^0(\text{H}_2\text{O}) - 2 \Delta_m H^0(\text{H}_2) - \Delta_m H^0(\text{O}_2)$$

- reakcióknál, körfolyamatok esetén kihasználhatjuk a Hess tételeit ismeretlen adatok meghatározására
- körfolyamatok energetikája: redundáns kísérleti adatok
- hiányzó lépés számítható a többiből



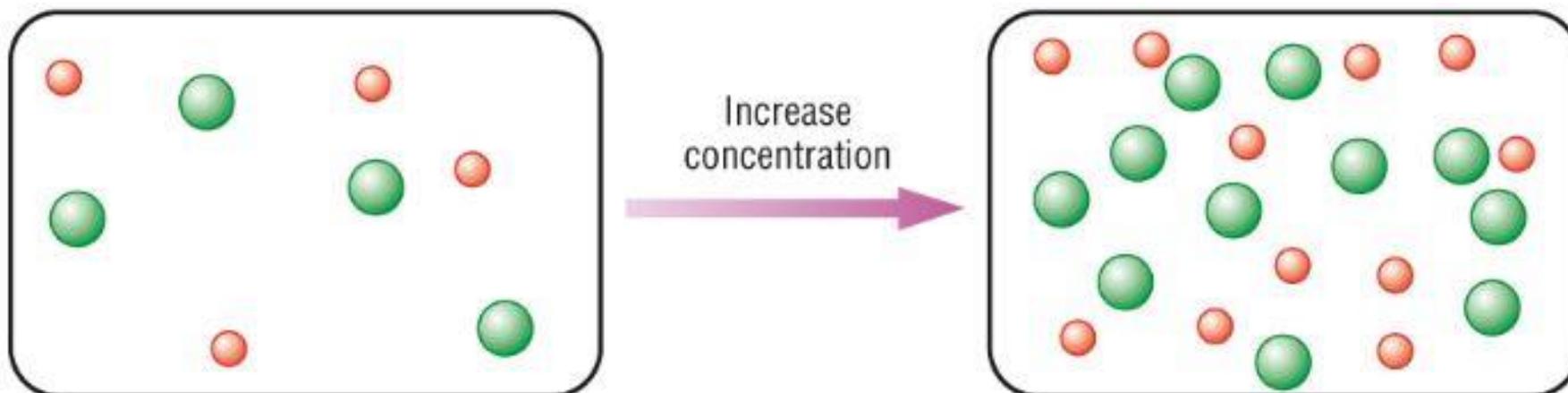
standard reakcióentalpiák összege 0

A reakciósebesség

- kémiai reakció sebességén a koncentrációk időbeli változását értjük
- lehetne így: $v(t) = d[c(t)]/dt$, ahol $[c(t)]$ a t időpontban a koncentráció értéke
- közelítőleg: $v(t) = \Delta c/\Delta t$, így is kifejezi azt, hogy először nagy, aztán folyamatosan csökken
- termékek koncentrációjával: pozitív szám lesz, a reaktánsok koncentrációjával negatív szám
- egy $a + bB = cC + \dots$ reakcióra
- $v(t) = -\frac{1}{a} \frac{\Delta n_A}{V \cdot \Delta t} = -\frac{1}{b} \frac{\Delta n_B}{V \cdot \Delta t} = \frac{1}{c} \frac{\Delta n_C}{V \cdot \Delta t} = \dots$
- ahol V a rendszer térfogata, Δn a mólszámváltozás a t időpont környékén;
- koncentrációkkal kifejezve a sebességet:
- $v(t) = -\frac{1}{a} \frac{\Delta c_A}{\Delta t} = -\frac{1}{b} \frac{\Delta c_B}{\Delta t} = \frac{1}{c} \frac{\Delta c_C}{\Delta t} = \dots$
- miért kell osztani a sztöichiometriai együtthatókkal?
- szeretnénk egy olyan mennyiséget, ami a reakcióra jellemző; ha nem osztanánk a sztöichiometriai együtthatóval, akkor nem vennénk figyelembe, hogy egy nagyobb együtthatójú szereplő mennyisége nagyobbat változik ugyanannyi idő alatt

A reakciósebesség

- a reakciósebességgel kifejezhetjük az egyes anyagok koncentrációjának aktuális változását:
 - pl.: $\Delta c_A(t) = -a \cdot v(t)$
- reakciósebesség függ:
 - milyen reakciót vizsgálunk
 - állapotjelzőktől (koncentrációk, hőmérséklet, nyomás, stb.)
 - katalizátor (igazából reakciópartner)



forrás:www.pathwayz.org/Tree/Plain/RATES+OF+REACTION+-FACTORS

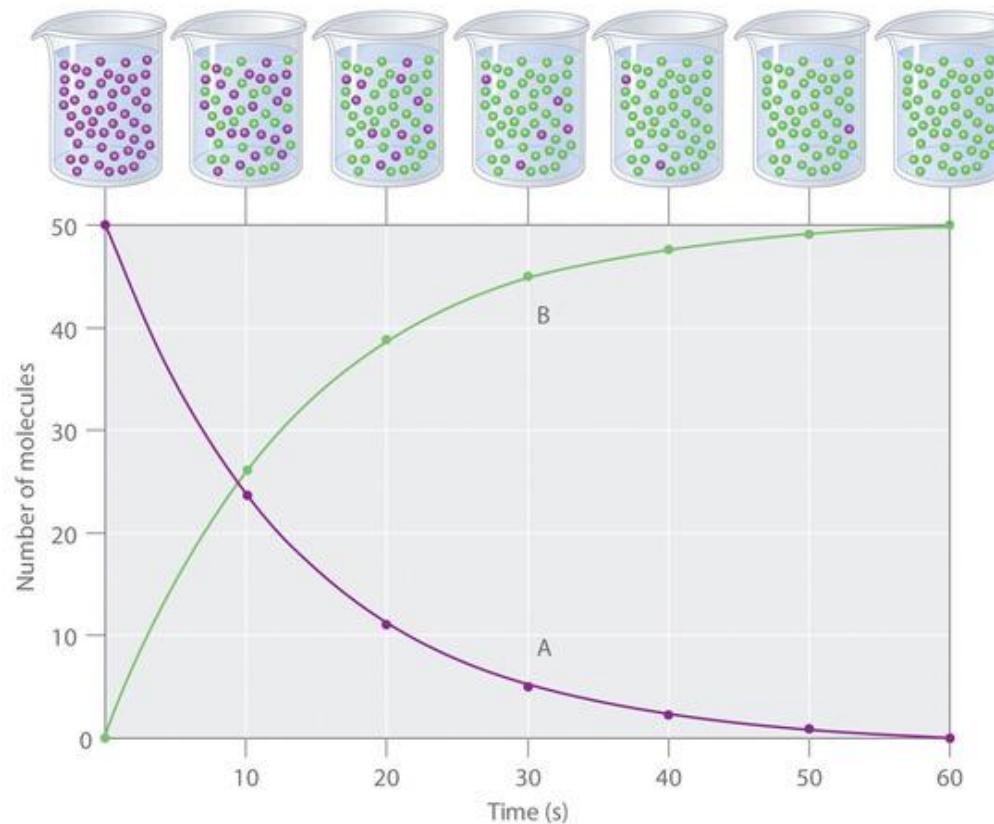
A reakciósebesség

konzentrációfüggés:

- régi kísérleti megfigyelés:

$$v(t) = k \cdot [c_A]^p [c_B]^q$$

$p, q = 0, 1, 2$, stb.



forrás:chem.libretexts.org/Bookshelves/General_Chemistry/Map:_Chemistry_-_The_Central_Science_(Brown_et_al.)/14:_Chemical_Kinetics/14.2:_Reaction_Rates

A reakciósebesség

$$v(t) = k \cdot [c_A]^p [c_B]^q$$

- a $p+q$ számot a reakció bruttó rendjének, röviden a reakció rendjének hívjuk
- pl.:
 - $H_2 + I_2 = 2 HI$
 - $v(t) = k [H_2][I_2]$
 - a reakció rendje 2

A reakciósebesség

- pl.:
 - $\text{N}_2\text{O}_5 = 2\text{NO}_2 + \frac{1}{2}\text{O}_2$
 - $v(t) = k [\text{N}_2\text{O}_5]$
 - elsőrendű a kísérletek szerint IS
 - DE: $2\text{N}_2\text{O}_5 \rightarrow 4\text{NO}_2 + \text{O}_2$
 - $v(t) = k [\text{N}_2\text{O}_5]^2$???
 - NEM: a sebességi törvény kísérlet alapján jön ki, és nagyon gyakran kitalálható a reakcióegyenletből
- pl.:
 - $\text{H}_2 + \text{Br}_2 \rightarrow 2\text{HBr}$; nem felel meg a sebességi törvény alakjának

$$v(t) = \frac{k[\text{H}_2][\text{Br}_2]^{3/2}}{[\text{Br}_2] + k'[\text{HBr}]}$$

A reakciósebesség

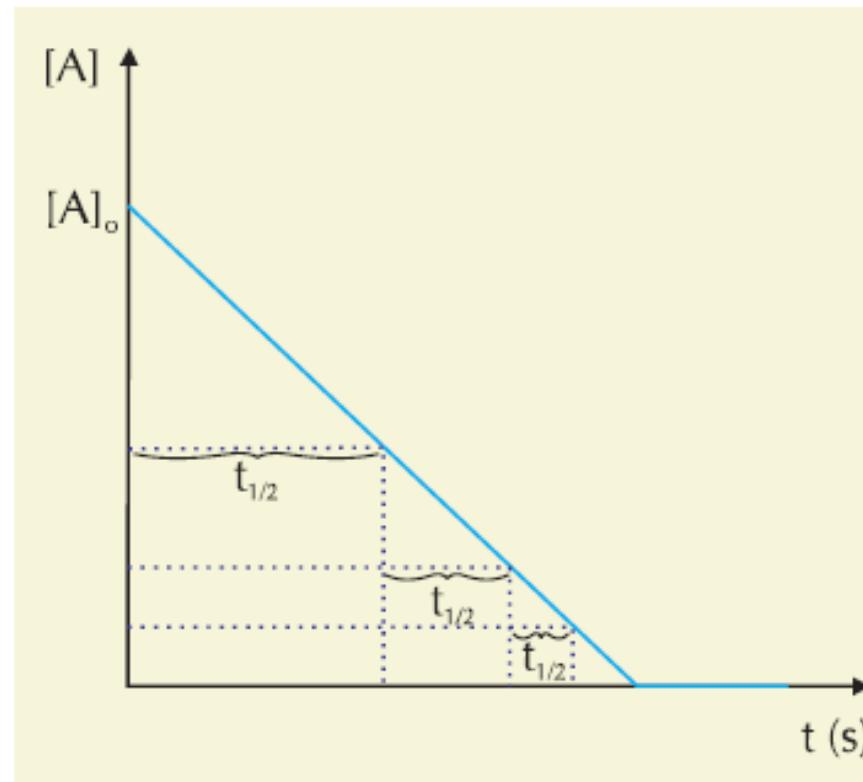
- elemi reakciók: amik követik a sebességi törvényt: molekulák között az történik, amit az egyenlet mutat
- összetett reakció: elemi reakciókból áll:
 - $A + B \longrightarrow C + D + \dots \longrightarrow E + F \dots \longrightarrow \dots \longrightarrow$ termékek
 - közti termékek jelennek meg (pl. C, D, E, F, stb.)
- sebességi egyenlet differenciálegyenlet formájában (**NEM KELL TUDNI!**, csak érdekességeképpen):

$$\frac{dc_A(t)}{dt} = kc_A(t)$$

- reakciók rendűsége és a koncentrációk időbeli változása összefügg
- kísérletek alapján meg lehet határozni, ha a koncentrációk változását elegendő pontosan tudjuk követni

A reakciósebesség

- $A \xrightarrow{\hspace{1cm}} B$
- nulladrendű reakció: $v = k \cdot t$



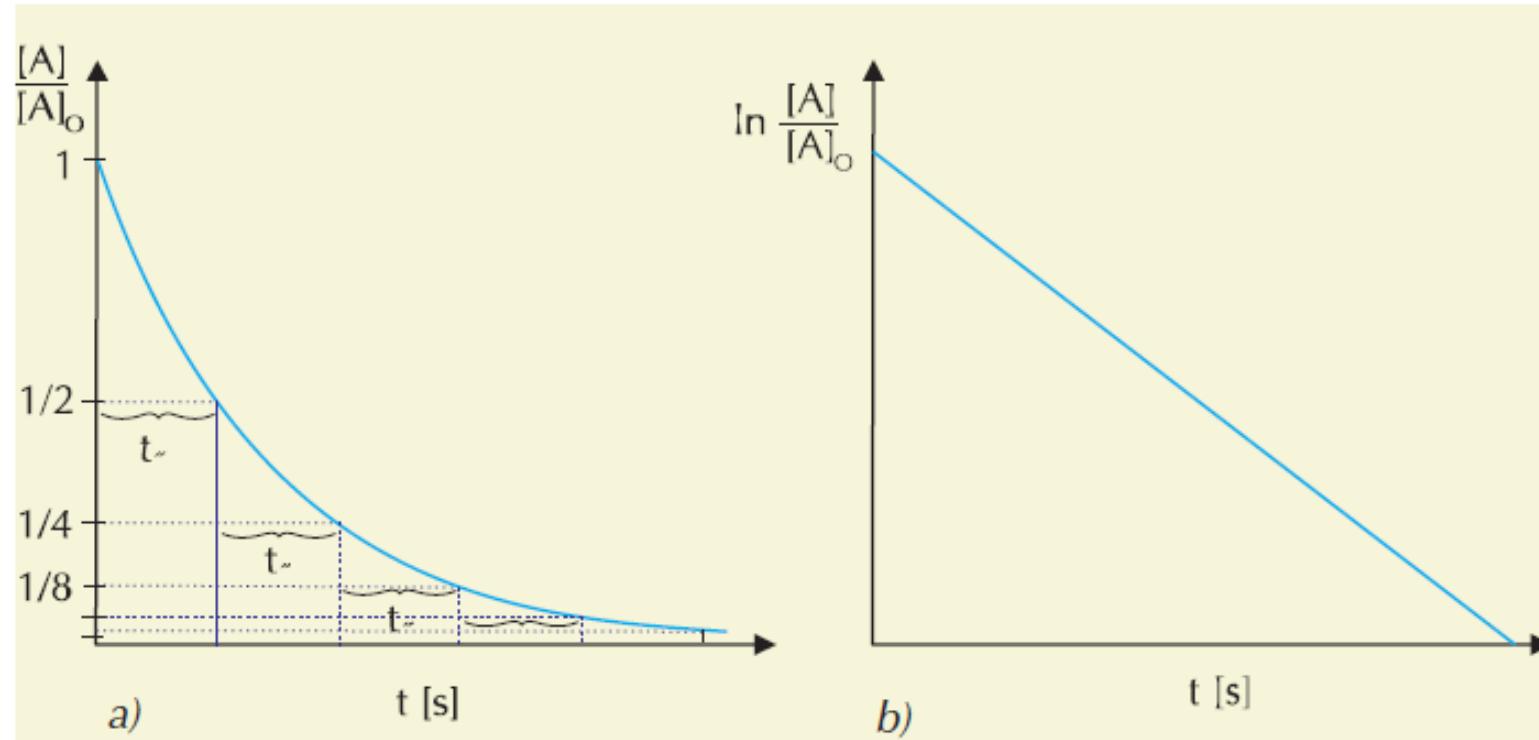
A reakciósebesség

- $A \longrightarrow B$
- elsőrendű reakció:

$$v_A(t) = -k[A]_t$$

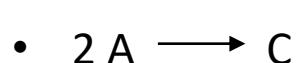
$$[A]_t = [A]_0 e^{-kt}$$

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



A reakciósebesség

- másodrendű reakciók



$$v_A(t) = -k[A]_t^2$$

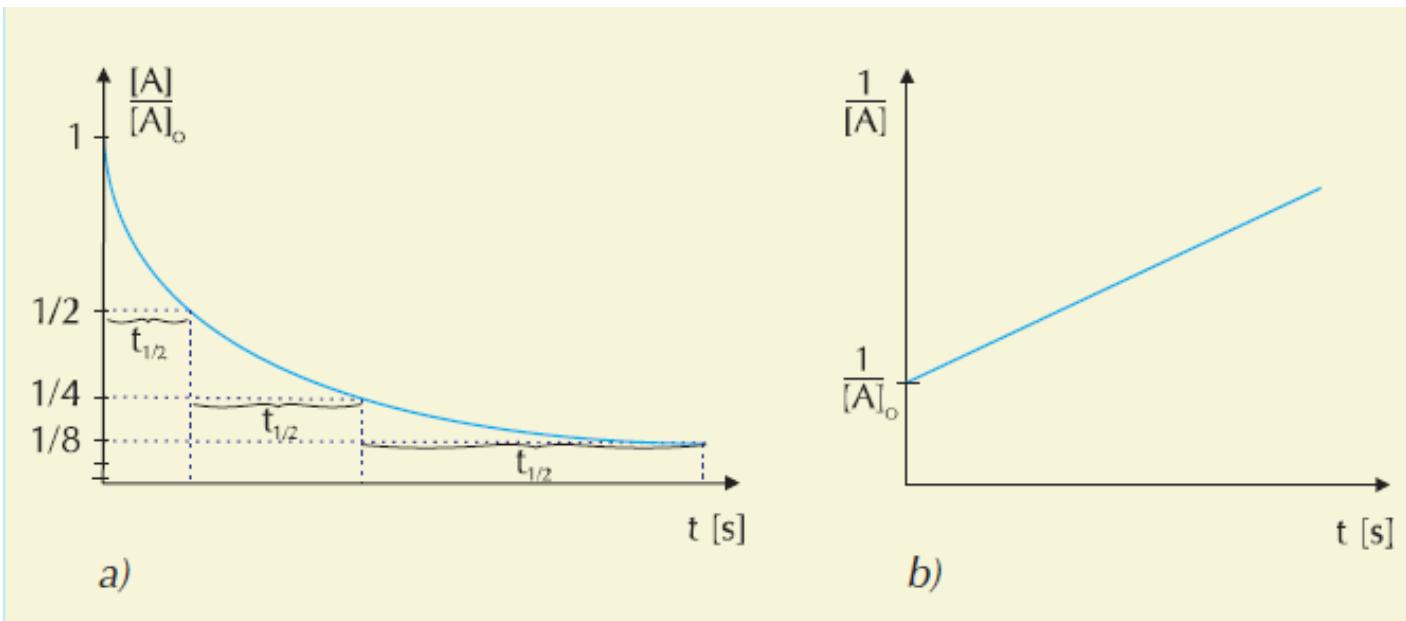


$$v_A(t) = -k[A]_t[B]_t$$

- koncentrációfüggések:

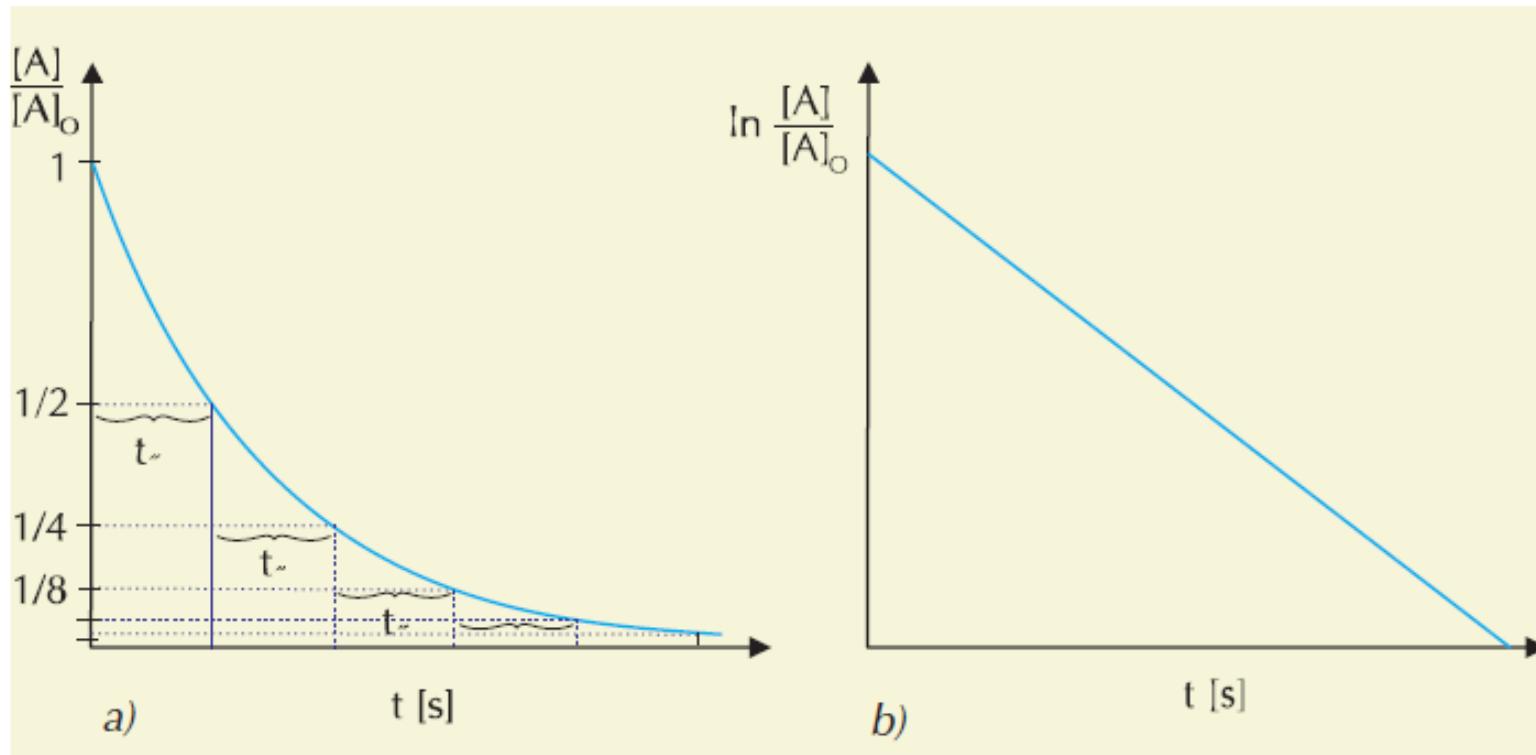
$$\frac{1}{[A]_t} = \frac{1}{[A]_0} + kt$$

$$\frac{1}{[B]_t} = \frac{1}{[B]_0} + kt$$



A reakciósebesség

- felezési idő ($t_{1/2}$): ami alatt a koncentráció a felére csökken
- ha ez koncentrációtól független: elsőrendű reakció



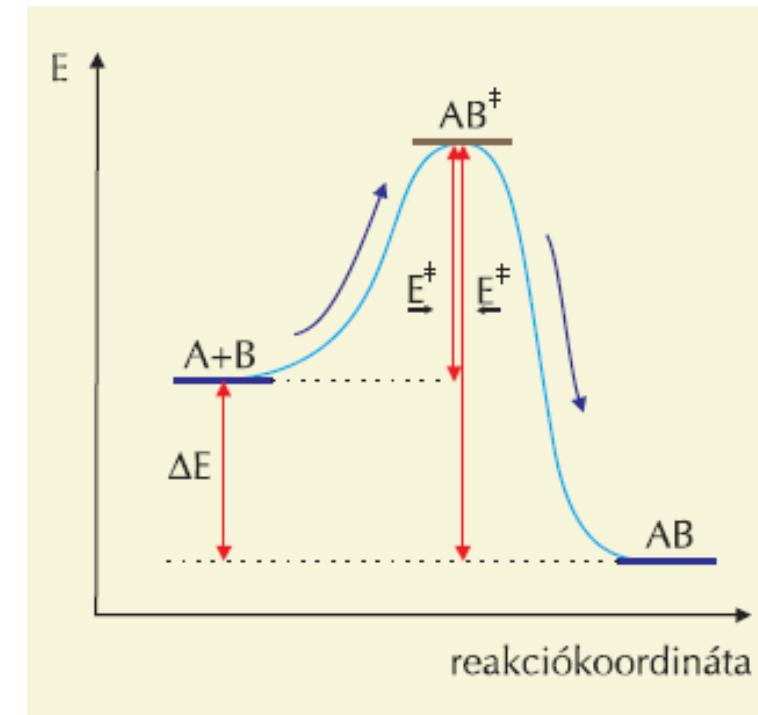
A reakciósebesség

- felezési idő és radioaktivitás
- radioaktív kormeghatározás: ^{14}C -meghatározás
 - kozmikus sugárzás: ^{14}N átalakul ^{14}C -vé a légkörben
 - N mennyiség állandó, kozmikus sugárzás állandó: ^{14}C tartalom a légkörben állandó
 - fotoszintézis miatt bekerül az élő szervezetekbe; amíg élnek, állandó a mennyiségük
 - pusztuláskor a mennyiség elkezd csökkenni: $t_{1/2}=5730$ év
 - mintegy 80 év pontossággal, de függ az időtől; 50000 évnél régebbit nem lehet (mert túl kevés ^{14}C marad már
 - más radioaktív elemekkel más időskálákon lehet kort meghatározni

A reakciósebesség

- a reakciósebesség hőmérsékletfüggése
- praktikus szabály: 10 fok hőmérsékletelemelés 2-3 X reakciósebesség
- reakciók: molekulák ütköznek
- de nem minden ütközés vezet reakcióra
- hőmérsékletelemelés: megnöveli az ütközések számát, így a sikereseket is
- Arrhenius tapasztalata:

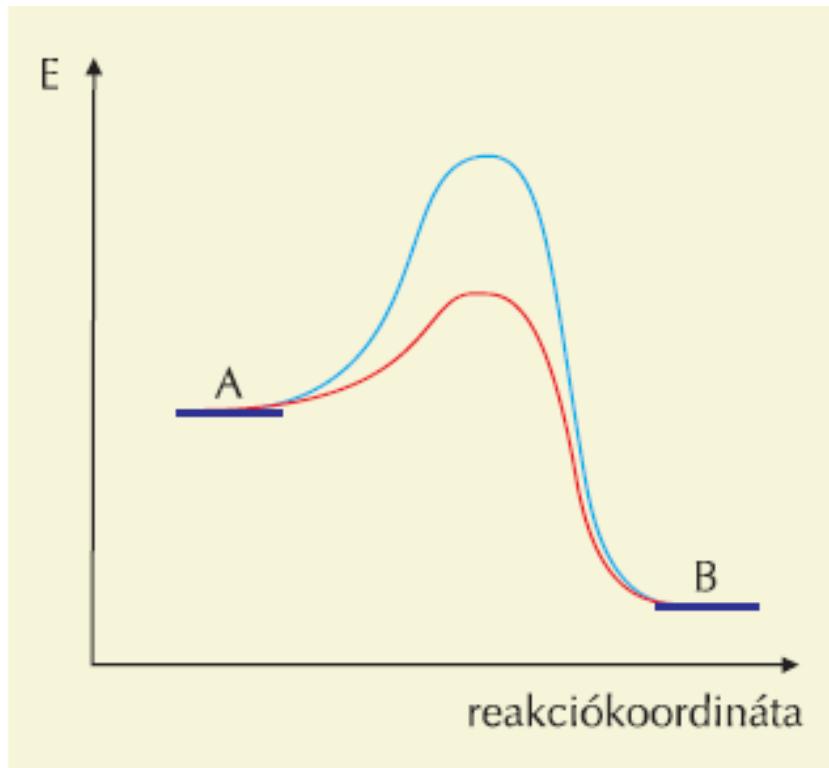
$$k(T) = A \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}}$$



- értelmezés: aktivált állapot, aktivált komplex
- reakciót tetején található az aktivált komplex
- a molekulák mozgási energája, ha elég nagy, akkor keresztül viszi őket a reakciót
- egy reakció gyorsabb, ha az aktiválási energiája kisebb

A reakciósebesség

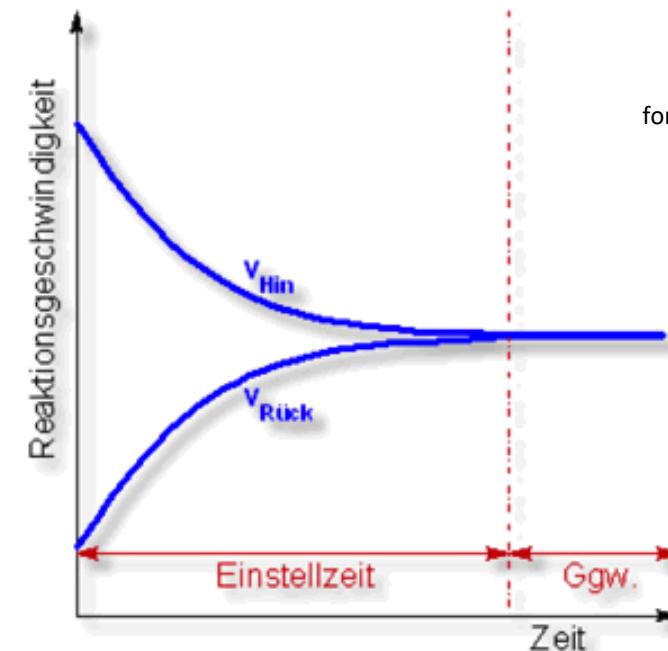
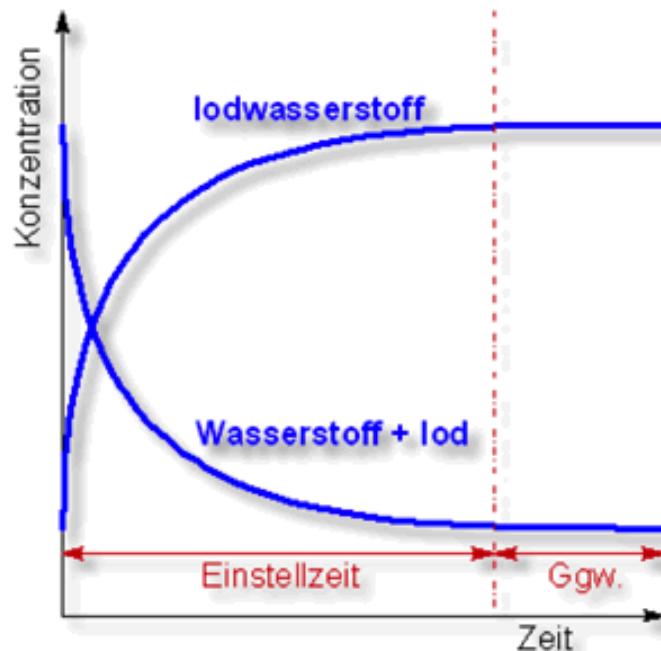
- katalizátorok: meggyorsítják a reakcót, mert új utat nyitnak meg, alacsonyabb gáttal
- a reakcióegyenletben nem szerepelnek, mivel összességében nem változik a mennyiségük



- katalizátorok: iparban, közlekedésben (katalizátoros kocsik), természetben
- természetben: enzimek, biokatalízis, de mesterségesen is csinálják már

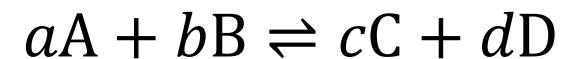
A reakciósebesség

- eddig nem vettük számításba, hogy a termékek vissza is tudnak alakulni:
 - megfordítható kémiai folyamatok
 - ez megváltoztatja a koncentrációk időfüggését
 - ahogy a reakció halad előre, úgy növekszik a termékkoncentráció
 - ez gyorsítja a visszafelé alakulás sebességét és kialakul egy dinamikus egyensúly
 - pl: $H_2 + I_2 = 2 HI$; $v_1(t) = k_1 [H_2][I_2]$; $v_2(t) = k_2 [HI]^2$



forrás:genderi.org/chemische-reaktionen-mwg.html?page=3

A kémiai egyensúly



$$v_1 = k_1[A]^a[B]^b$$

$$v_2 = k_2[C]^c[B]^d$$

$$v_1 = v_2$$

$$k_1[A]^a[B]^b = k_2[C]^c[B]^d$$

$$\frac{k_1}{k_2} = \frac{[C]^c[D]^d}{[A]^a[B]^b} = K$$

A kémiai egyensúly jellemzése

- az egyensúlyt az egyensúlyi állandó jellemzi
- a reakció felírásának megfelelően kell az egyensúlyi állandó törtjét megállapítani
- a koncentrációk az egyensúlyban mérhető koncentrációk
- a kiindulási koncentrációk: bemérési, vagy analitikai koncentrációk:
 - ezek addig változnak, amíg ki nem alakul az egyensúly
 - a változásuk a reakció sztoichiometriája szerint történik
- az egyensúlyi állandó függ:
 - attól, hogy mi a reakció
 - hőmérséklet
 - bizonyos esetekben a nyomástól is
- nem függ:
 - koncentrációktól
 - katalizátortól
- a reakció energetikája megjelenik az egyensúlyi állandóban (**a következő két sort nem kell tudni!**):
 - $\Delta G_0 = -RT \ln(K)$, ahol ΔG_0 a reakció szabadentalpiája, T a hőmérséklet
 - figyelem! nem reakció-entalpia, hanem reakció-szabadentalpia; az okokat a fizikai kémia tisztázza

A kémiai egyensúly jellemzése

- az egyensúlyi állandót nyomásokkal, vagy móltörtekkel is ki lehet fejezni
- a reakció nyomásfüggése gázreakciók esetén:

$$K_c = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b} \quad K_p = \frac{p_C^c p_D^d}{p_A^a p_B^b}$$

$$K_p = K_c \left(\frac{RT}{p_0} \right)^{c+d-a-b} = K_c \left(\frac{RT}{p_0} \right)^{\Delta n}$$

- azaz nincs nyomásfüggés, ha a reakció nem jár mólszámváltozással

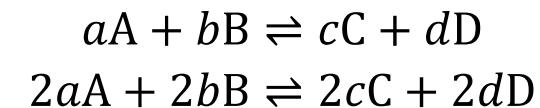
A kémiai egyensúly jellemzése

- **Le Chatelier elv (legkisebb kényszer elve):** ha egy rendszert egyensúlyi állapotában megzavarnak, a rendszer úgy állítja helyre az egyensúlyát, hogy a zavaró hatást csökkenti
- pl. endoterm reakciók egyensúlyának megzavarása melegítésre (K hőmérsékletfüggése miatt): az egyensúly a kiindulási anyagok irányába tolódik el
- pl. nyomásnövelés: ha van mólszámváltozás, akkor a kisebb összegyütthatójú oldal felé; ha nincs, akkor nem történik változás
- valamelyik oldalon szereplő anyag mennyiségét növeljük: a másik oldal felé tolódik el az egyensúly
- pl ammónia keletkezés: $N_2 + 3H_2 = 2NH_3$, $\Delta H_r^0 = -92.2 \text{ kJ/mól}$; 25°C-on $K_p = 6.9 \cdot 10^5 \text{ Pa}^2$
 - a körülmények: 450-550 °C (pedig exoterm reakció!), 250-350 bar, vaskatalízis (20% NH₃)
 - ammóniaképződésnek kedvez: hűtés (de akkor még katalizátorral is szörnyen lassú), és nyomásnövelés
 - reakciósebességnek kedvez: melegítés; az ipari körülmények kompromisszumok

A kémiai egyensúly jellemzése

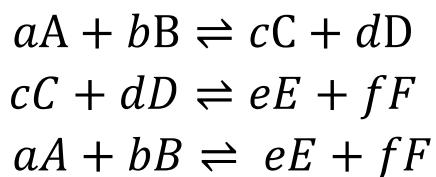
- néhány érdekesség:

- ha a reakcióegyenlet együtthatóit egy számmal megszorzzuk, akkor más egyensúlyi állandót kell használni:



$$K_1 = \frac{[C]^c[D]^d}{[A]^a[B]^b} \quad K_2 = \frac{[C]^{2c}[D]^{2d}}{[A]^{2a}[B]^{2d}} = K_1^2$$

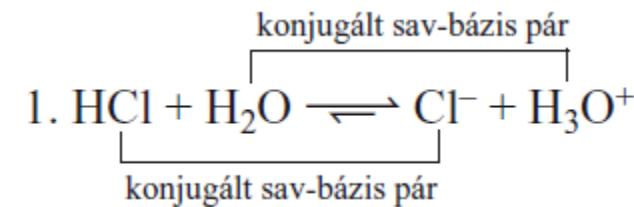
- a megfordítva felírt reakció egyensúlyi állandója az eredeti inverze
- egy reakció, amely felírható két másik reakció összegeként, annak az egyensúlyi állandója a két reakció egyensúlyi állandójának szorzata:



$$K_1 = \frac{[C]^c[D]^d}{[A]^a[B]^b} \quad K_2 = \frac{[E]^e[F]^f}{[C]^c[D]^d} \quad K_3 = \frac{[E]^e[F]^f}{[A]^a[B]^b} = K_1 \cdot K_2$$

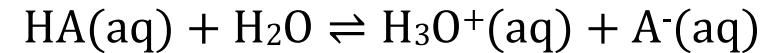
Egyensúlyok híg vizes oldatokban, pH, oldhatóság és komplexképződés

- a vizes oldatokban lezajlódó egyensúlyi folyamatok közül most a sav-bázis folyamatokat vizsgáljuk
- általánosan: elektrolitos disszociáció; olyan folyamat, amit oldatokban ionizációs jár
- Bronsted sav-báziselmélet: adott (aktuális) folyamatban vizsgáljuk a szerepeket
- Bronsted sav: ami protont ad át egy másik részecskének
- Bronsted bázis: ami protont vesz át egy Bronsted savtól



Egyensúlyok híg vizes oldatokban, pH, oldhatóság és komplexképződés

- korábban megismert sav-bázis elméletek közül az Arrhenius is jól alkalmazható vízben disszociáló savak és lúgok esetén
- a saverősséget és báziserősséget a vízhez képest határozzuk meg a vizes oldatban
- savak erőssége:



$$K_c = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+][\text{A}^-]}{[\text{H}_2\text{O}][\text{HA}]}$$

$$K_s = K_c \cdot [\text{H}_2\text{O}] = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+][\text{A}^-]}{[\text{HA}]}$$

Egyensúlyok híg vizes oldatokban, pH, oldhatóság és komplexképződés

- bázisok erőssége:



$$K_c = \frac{[BH^+][OH^-]}{[H_2O][B]}$$

$$K_b = K_c \cdot [H_2O] = \frac{[BH^+][OH^-]}{[B]}$$

- víz sav-bázis erőssége:

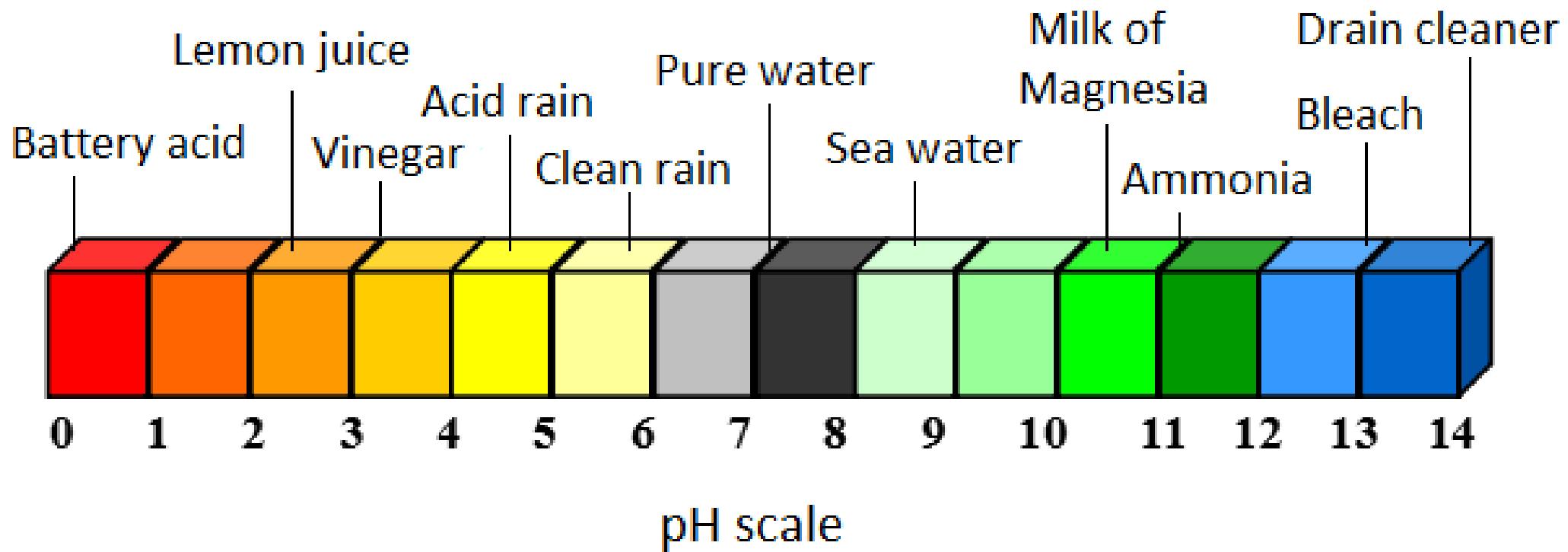


$$K_v = [H_3O^+][OH^-]$$

- $K_v = 1.0 \cdot 10^{-14}$ (mól/dm³)²
- pH fogalom: a hidrogénion koncentráció negatív 10-es alapú logaritmusa, ha a koncentráció mól/dm³ koncentrációban van mérve
- nem túl tömény oldatokban a pH 1-14 közötti értékek a tipikusak
- $pH + pOH = 14$

Egyensúlyok híg vizes oldatokban, pH, oldhatóság és komplexképződés

- egy oldat pH-ja, savasságának, bázisosságának a mértéke az oldat **kémhatása**



Egyensúlyok híg vizes oldatokban, pH, oldhatóság és komplexképződés

- disszociációfok: a disszociált molekulák az eredeti mennyiség hányadrésze
- higításra növekszik a disszociációfok (Le Chatelier elv)
- erősebb savaknak ugyanolyan koncentrációnál nagyobb a disszociációfoka
- 1 (100%) az erős savak és bázisok disszociációfoka
- nagyon tömény oldatokban ritka a teljes disszociáció
- többértékű savak és bázisok esetén a második, harmadik, stb disszociációfok kisebb
 - pl. savknál: a negatív töltésű savmaradékból kevésbé szívesen válik le egy újabb proton (pozitív töltés)

Egyensúlyok híg vizes oldatokban, pH, oldhatóság és komplexképződés

sók hidrolízise:

- sók teljesen disszociálnak vízben, viszont a keletkező ionok reagálhatnak vízzel
- erős sav és erős bázis esetén nincs kémhatásváltozás a semleges kémhatáshoz (pH=7) képest
- erős sav és gyenge bázis esetén savas lesz a kémhatás; pl NH_4Cl
 - $\text{NH}_4^+ + \text{H}_2\text{O} = \text{NH}_3 + \text{H}_3\text{O}^+$
- gyenge sav és erős bázis esetén lúgos lesz a kémhatás; pl CH_3COONa
 - $\text{CH}_3\text{COO}^- + \text{H}_2\text{O} = \text{CH}_3\text{COOH} + \text{OH}^-$
- definiálhatjuk a hidrolízisállandót, ami a hidrolízis aktuális folyamatához tartozó egyensúlyi állandó:

$$K_h = \frac{[\text{CH}_3\text{COOH}][\text{OH}^-]}{[\text{CH}_3\text{COO}^-]} = \frac{[\text{CH}_3\text{COOH}][\text{OH}^-][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{CH}_3\text{COO}^-][\text{H}_3\text{O}^+]} = \frac{K_v}{K_s}$$

- bázisoknál analóg módon lehet: K_s helyett K_b van a nevezőben
- gyenge sav és gyenge bázis sójánál komplikáltabb a szituáció: a relatív erősség dönt; pl. $(\text{NH}_4)_2\text{S}$
- többértékű savak és bázisok esetén szintén komplikált, de kezelhető a szituáció; pl Na_2CO_3
- savanyú sók, bázikus sók szintén kissé komplikáltabbak; pl $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$, $(\text{NH}_4)\text{H}_2\text{PO}_4$, NaHCO_3 , $(\text{NH}_4)\text{HS}$

Egyensúlyok híg vizes oldatokban, pH, oldhatóság és komplexképződés

pufferoldatok olyan oldatok, amelyben

- vagy egy gyenge sav és annak egy erős bázissal alkotott sója,
- vagy egy gyenge bázis és annak egy erős savval alkotott sója van

miért hasznosak a pufferoldatok?

- a hozzáadott erős sav, vagy erős lúg sokkal kisebb mértékben tolja el a kémhatást a jelenlétékben, mint tiszta vízben
- pl. ecetsav-nátriumacetát puffer:
 - ha savat adunk hozzá: ecetsav keletkezik, nagyságrendekkel gyengébb sav
 - ha lúgot adunk hozzá, akkor a jelenlévő ecetsav nagy mértékben (nem teljesen) közömbösíti

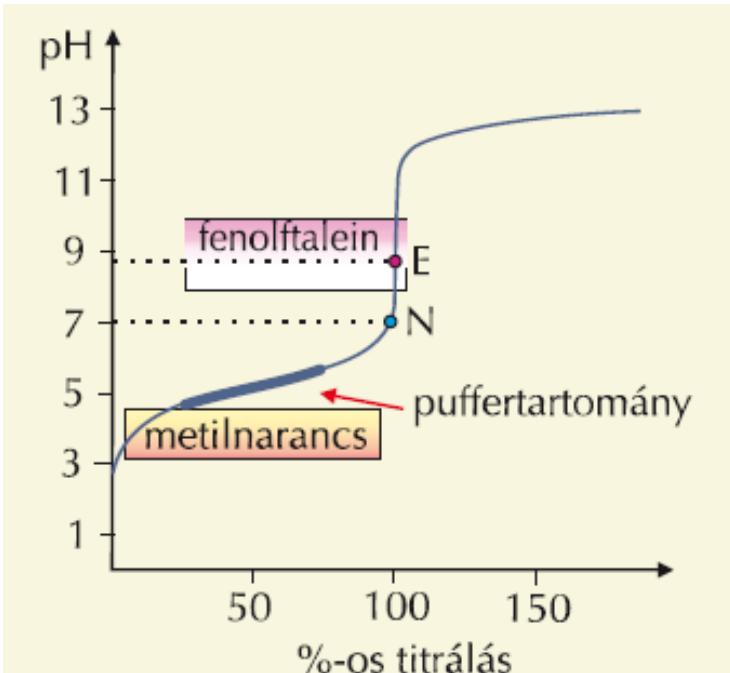
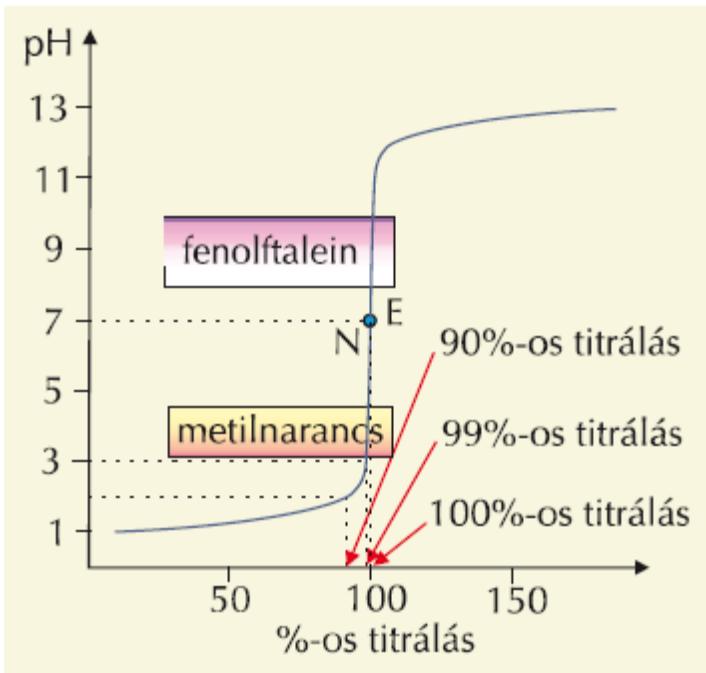
$$[\text{H}_3\text{O}^+] = K_s \frac{c_{\text{sav}}}{c_{\text{só}}} \quad [\text{OH}^-] = K_b \frac{c_{\text{bázis}}}{c_{\text{só}}}$$

- pufferkapacitás: hány mól sav- vagy lúgoldat hatására változik 1 liter pufferoldat pH-ja 1 egységet
- legnagyobb, ha a pufferarány 1:1
- pl. élő szervezetekben igen hasznosak

Egyensúlyok híg vizes oldatokban, pH, oldhatóság és komplexképződés

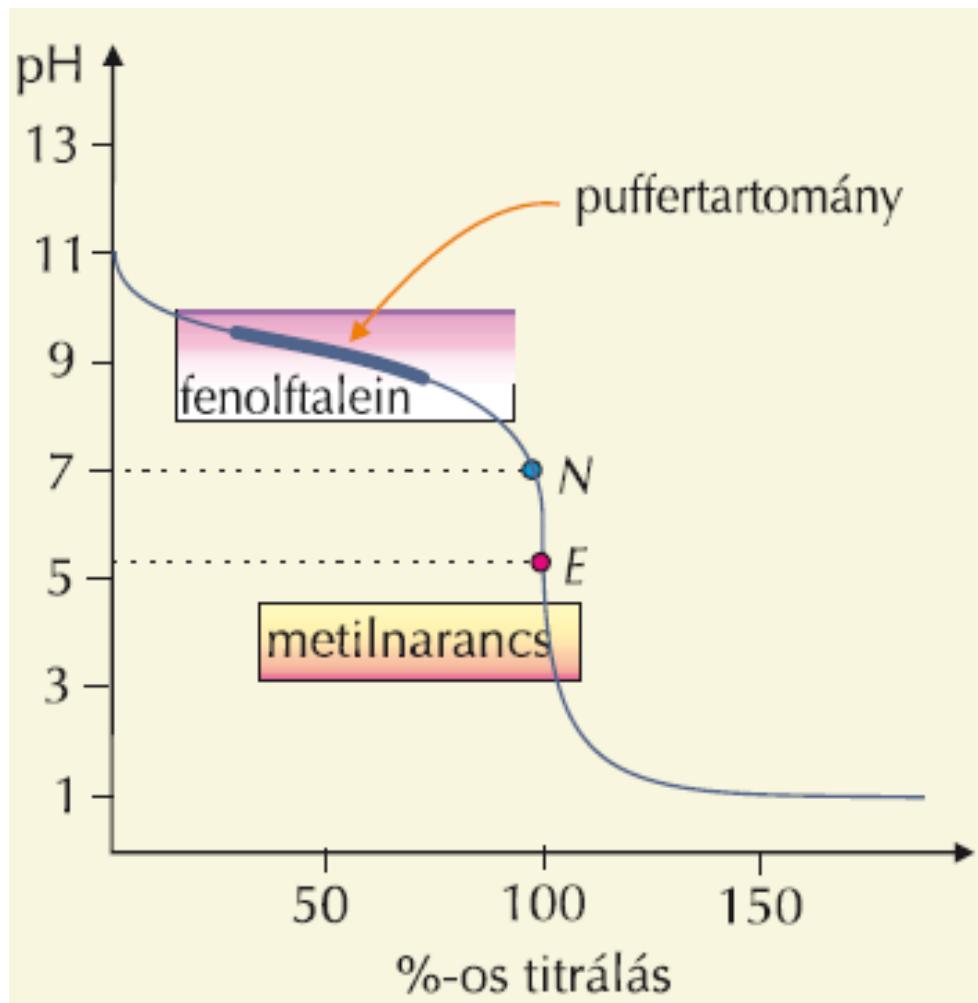
titrálás, indikátorok:

- térfogatmérés alaján történő koncentrációmeghatározás
- sav-bázis titrálás: savat bázissal, bázist savval
- indikátorok jelzik a közömbösítési pontot
- két lehetőség: vagy azonos erősségűek, vagy nem

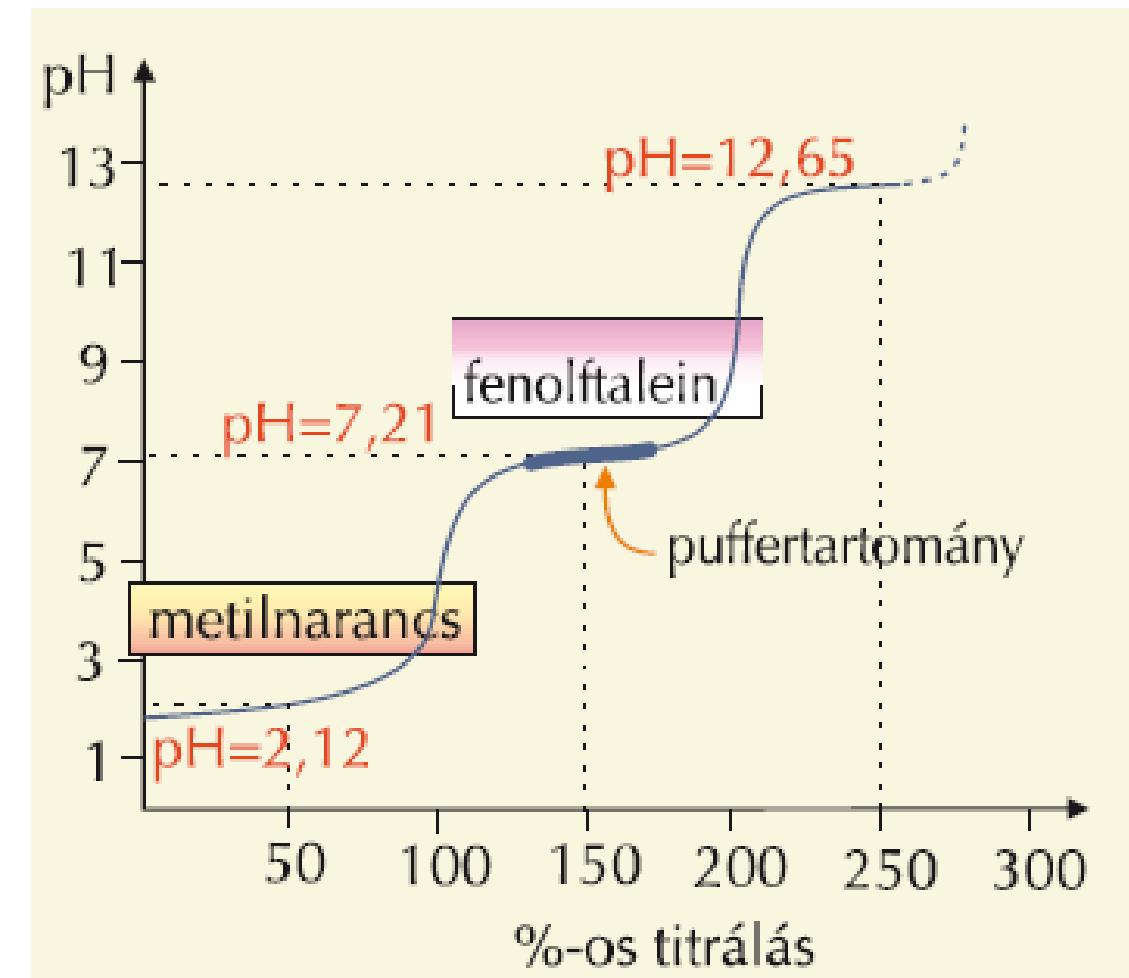


forrás:www.thoughtco.com/definition-of-equivalence-point-605101

Egyensúlyok híg vizes oldatokban, pH, oldhatóság és komplexképződés



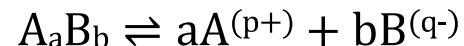
NH_3 oldat titrálása sósavoldattal



foszforsav titrálása nátriumhidroxiddal

Egyensúlyok híg vizes oldatokban, pH, oldhatóság és komplexképződés

- oldhatósági szorzat: vízben nehezen oldódó vegyületek (csapadékok) jellemzése
- tulajdonképpen heterogén egyensúly: a szilárd fázisú anyag egyensúlyban van a vízben disszociált ionjaival
- heterogén egyensúlynál az egyensúly a szilárd fázis mennyiségtől független (szilárd fázis mennyisége, koncentrációja nem szerepel az egyensúlyi kifejezésben)



$$K = [A]^a[B]^b = L_{A_aB_b}$$

- rosszul oldódó anyagok esetén használjuk, pl. PbS, Al(OH)₃, BiI₃, CdS, stb.
- ha ismerjük a bemérési "koncentrációt", akkor az ionszorzatot képezve, ha az nagyobb, mint az L, akkor kiválik a csapadék, ha az kisebb, akkor minden anyag feloldódik, ha éppen egyenlő, akkor telített az oldat

Egyensúlyok híg vizes oldatokban, pH, oldhatóság és komplexképződés

$$K = [A]^a[B]^b = L_{A_aB_b}$$

- az értéke függ a só sztöichiometrijától, ezért nem evidens az összehasonlítás két érték között (ráadásul a mértékegységek is különbözhetnek)
- hőmérsékletfüggő mennyiség
- sajáton hatás: saját, oldott ion visszaszorítja az oldhatóságot (Le Chatelier elv)
- komplexképzés segíti az oldhatóságot (csak a szabad ionkoncentráció számít az ionkoncentrációba)
- pH hatása összetett, a jelenlévő H_3O^+ illetve OH^- ionok reagálhatnak a só ionjaival és a Le Chatelier és ezért növelhetik, vagy ritkábban csökkenthetik az oldhatóságot

Koordinációs vegyületek: komplexképződési egyensúly

- komplexképződés, ligandumcsere egyensúlyi folyamat
- egyensúlyi állandó jellemzi
- a képződés irányában felírt lépésekre adott egyensúlyi állandók a stabilitási állandók
- egy adott species kiindulási komponenseivel felírt egyensúlyi állandója: bruttó stabilitási állandó vagy kumulált komplexstabilitási állandó (β)



$$K_1 = \frac{[ML]}{[M][L]}$$

$$\beta_n = \frac{[ML_n]}{[M][L]^n}$$



$$K_2 = \frac{[ML_2]}{[ML][L]}$$

$$\beta_n = K_1 K_2 \cdots K_n$$



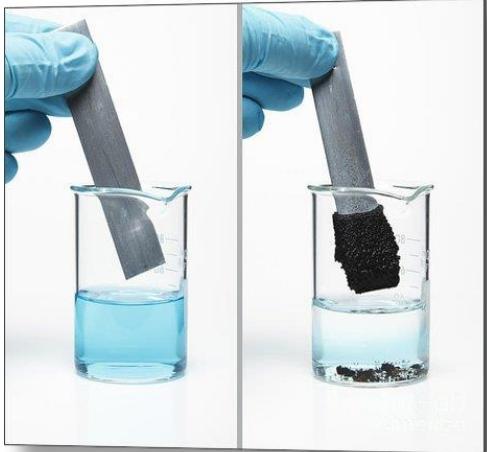
$$K_n = \frac{[ML_n]}{[ML_{n-1}][L]}$$

- a komplexképződés csökkenti a szabad fémionok koncentrációját; eltolja az oldhatósági egyensúlyokat, több fémiont vihetünk oldatba
- komplexek igen nagy stabilitással is rendelkezhetnek, teljesen új tulajdonságú, stabil vegyületek is létrejöhetsznek; pl ciano-komplexek (vörös és sárgavérlúgsó)

Az elektrokémia alapjai

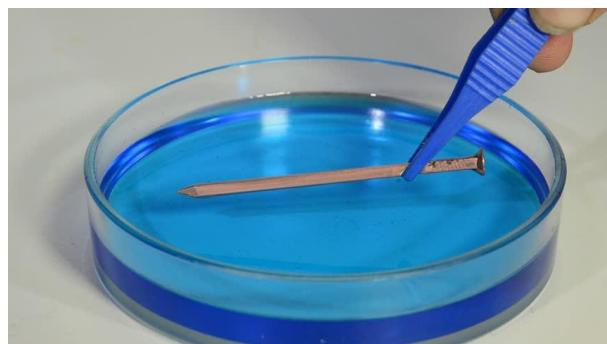
- Alapfogalmak:
 - töltés (q , Q), alapmennyiség, Coulomb
 - 1 db elektron töltése: $-1.60217662 \cdot 10^{-19}$ C; protonnak ugyanennyi számértékben; töltéskvantum
 - 1 mólnyi elektron töltése: $=1.60217662 \cdot 10^{-19}$ C $\times 6.022 \cdot 10^{23} = -96483$ C ≈ -96500 C (= 1 Faraday)
 - áramerősség, I , mértékegysége: Amper; $\Delta Q/\Delta t$ módon számolható, ha a Δt idő alatt nincs ingadozás ($dQ(t)/dt$ a pillanatnyi áramerősség)
 - elektromos potenciál a tér egy r pontjában $V(r)$: mekkora munkát kell végezni, hogy egy egységnyi töltést a referenciapontból (a végtelenből) eljutassunk az adott pontba,
 - feszültség, U , mértékegysége: Volt; mennyi munkát végez az elektromos tér, amíg az egységnyi töltés elmozdul az egyik pontból a másikba; tehát a feszültség két pont között van definiálva, U_{AB} az A és B pontok közötti feszültség
 - potenciálkülönbségnek (elektromos potenciálkülönbségnek) is szoktuk mondani: $U_{AB} = V(r_B) - V(r_A)$

Az elektrokémia alapjai



cinklemez rézgálic oldatban

forrás:fineartamerica.com/featured/zinc-reacting-with-copper-sulfate-giphotosstock.html?product=metal-print



vasszög rézgálic oldatban

forrás:www.shutterstock.com/video/clip-1009948583-iron-nail-dipped-coppersulfate-solution-held-there



vörösréz drót ezüstnitrát oldatban

forrás:www.flinnsci.com/mole-ratios---copper-and-silver-nitrate---student-laboratory-kit/ap6363/

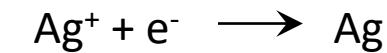
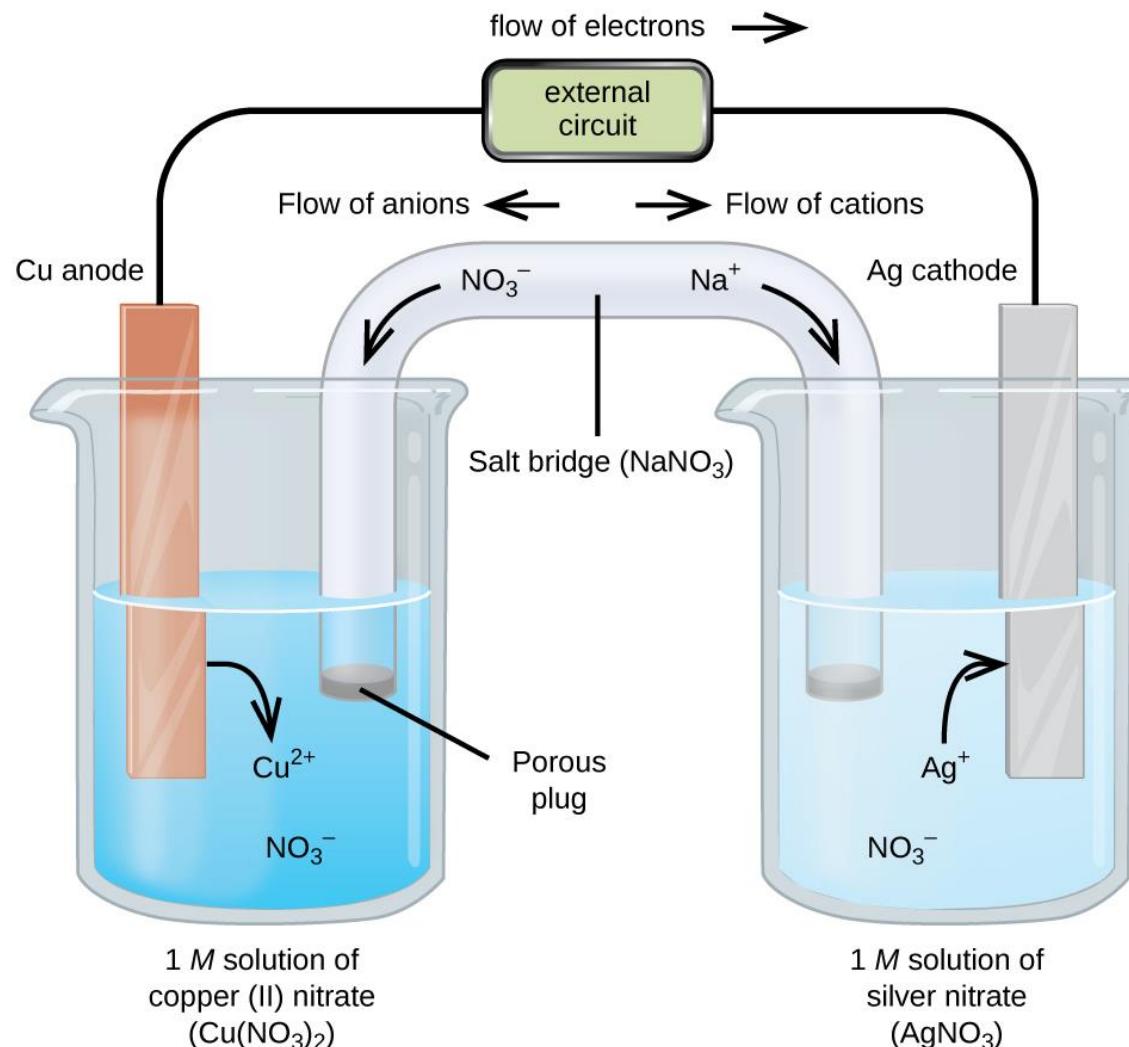


nikkel lemez rézgálic oldatban

forrás:fineartamerica.com/featured/nickel-reacting-with-copper-sulfate-giphotosstock.html?product=acrylic-print

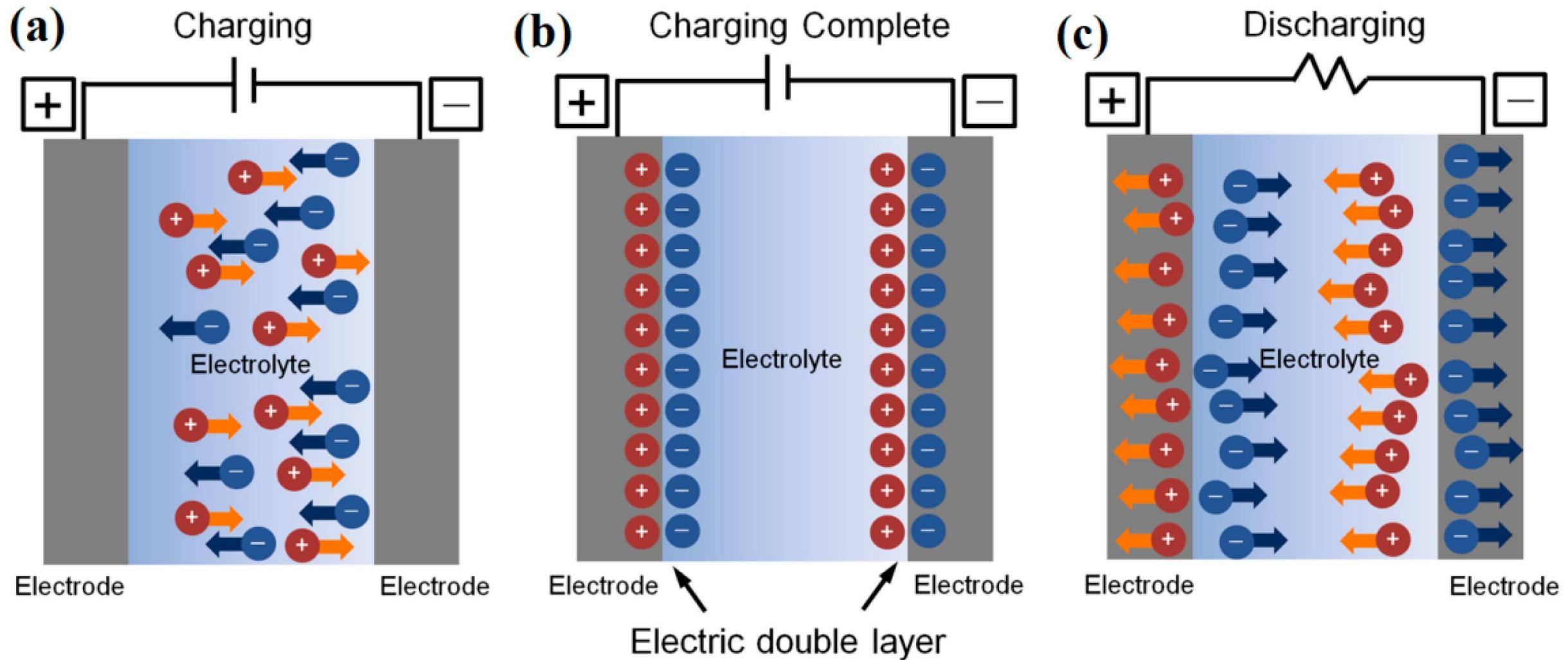
Az elektrokémia alapjai

- térben szét lehet választani a redoxfolyamatokat és az elektronvándorlást áramként hasznosítani



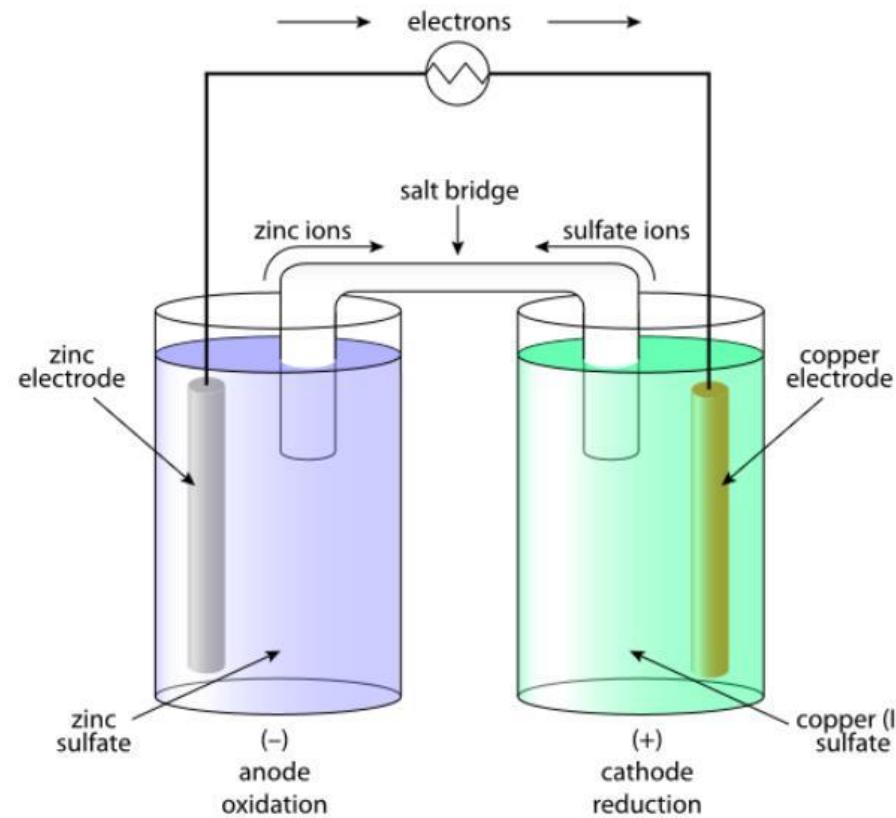
forrás:commons.wikimedia.org/wiki/File:CNX_Chem_17_02_Galvanicel.png

Mi történik a féblemez és az oldat között:



forrás:link.springer.com/article/10.1007/s10853-015-9121-y/figures/4

Daniell Cell: 1.10 volts

$$\text{Zn(s)} + \text{Cu}^{2+}(\text{aq}) \rightarrow \text{Zn}^{2+}(\text{aq}) + \text{Cu(s)}$$


http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Galvanic_cell_labeled.svg

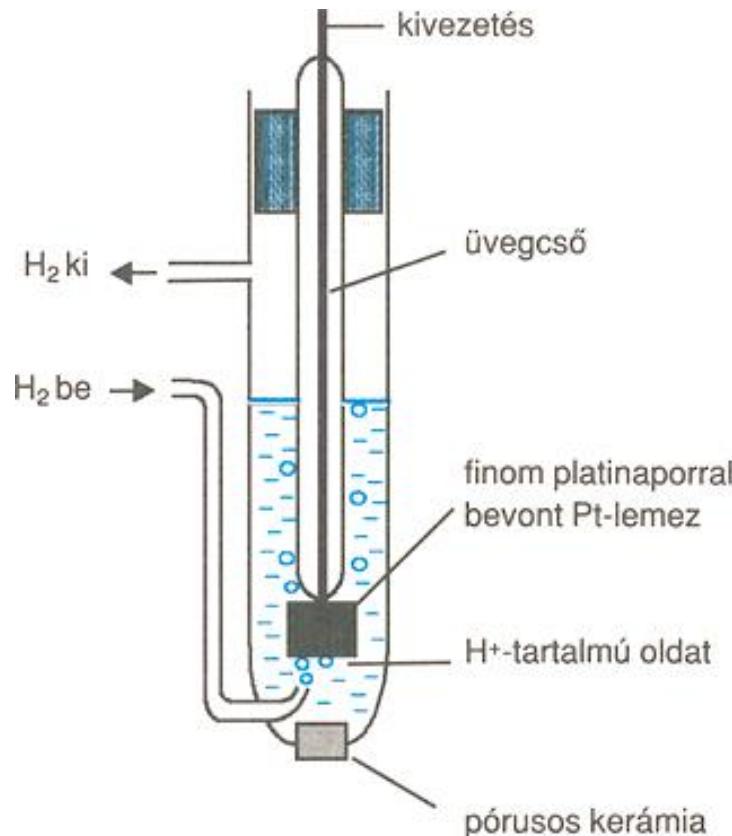
forrás:chemistrycorners.com/topic-8-electrochemistry/

Az elektrokémia alapjai

- elektród: kétféle értelemben is használják manapság
 - fém és a saját ionját tartalmazó sóoldat (elektrolit) együttesen
 - azaz az oxidált és redukált forma együttesen adja az elektródot
 - ebben az összefüggésben tudunk beszélni fémelektródról, gázelektródról, redoxielektródról
 - csak a fém, ami belemerül az elektrolitba; ez egy leszűkített, leegyszerűsített kép
- galvánelem: két elektród térben elválasztva, hogy elektrolitok ne keveredjenek, de vezető sóhíddal, vagy diafragmán keresztül érintkezik a két elektród, hogy elektromos vezetés történhessen
- katód: az az elektród, ahol redukció játszódik le, miközben a rendszer áramot termel
- anód: az az elektród, ahol oxidáció játszódik le, miközben a rendszer áramot termel
- cella jelölése:
 - $Zn | ZnSO_4 \text{ (aq)} || CuSO_4 \text{ (aq)} | Cu$
 - $Zn | Zn^{2+} \text{ (aq)} || Cu^{2+} \text{ (aq)} | Cu$
- a két elektród között mérhető feszültség az **elektromotoros erő**, EME) (amikor nem folyik áram!)
- $EME = U_{\text{egyik elektród}} - U_{\text{másik elektród}} = \mathcal{E}_1 - \mathcal{E}_2$

Az elektrokémia alapjai

- vajon mekkora egy elektród potenciálja (elektromos potenciálja - nem szokás ilyen hosszan kimondani...)?
- nem lehet megmérni; egy referenciát választunk: standard hidrogén elektród (SHE), aminek a standard elektromos potenciálját, vagy röviden standardpotenciálját 0-nak vesszük
- tehát az **elektród potenciáljának** megállapodás szerint azt az electromotoros erőt nevezzük, amit egy olyan cellában mérhetünk, amelynek egyik fele a kérdéses elektród, a másik fele pedig egy *standard hidrogénelektród*.



Standard H-elektród:

- 25 °C
- 101 kPa H₂ gáz
- 1 M HCl oldat
- Pt lemez az elektród része
- beállt az egyensúly

Az elektrokémia alapjai

- a többi elektródot potenciálját a SHE-hez képest mérjük

TABLE 18.1 Standard Reduction Potentials at 25°C		E° (V)	
	Reduction Half-Reaction		
Stronger oxidizing agent	$F_2(g) + 2 e^- \longrightarrow 2 F(aq)$	2.87	Weaker reducing agent
	$H_2O_2(aq) + 2 H^+(aq) + 2 e^- \longrightarrow 2 H_2O(l)$	1.78	
	$MnO_4^-(aq) + 8 H^+(aq) + 5 e^- \longrightarrow Mn^{2+}(aq) + 4 H_2O(l)$	1.51	
	$Cl_2(g) + 2 e^- \longrightarrow 2 Cl^-(aq)$	1.36	
	$Cr_2O_7^{2-}(aq) + 14 H^+(aq) + 6 e^- \longrightarrow 2 Cr^{3+}(aq) + 7 H_2O(l)$	1.33	
	$O_2(g) + 4 H^+(aq) + 4 e^- \longrightarrow 2 H_2O(l)$	1.23	
	$Br_2(l) + 2 e^- \longrightarrow 2 Br^-(aq)$	1.09	
	$Ag^+(aq) + e^- \longrightarrow Ag(s)$	0.80	
	$Fe^{3+}(aq) + e^- \longrightarrow Fe^{2+}(aq)$	0.77	
	$O_2(g) + 2 H^+(aq) + 2 e^- \longrightarrow H_2O_2(aq)$	0.70	
	$I_2(s) + 2 e^- \longrightarrow 2 I^-(aq)$	0.54	
	$O_2(g) + 2 H_2O(l) + 4 e^- \longrightarrow 4 OH^-(aq)$	0.40	
	$Cu^{2+}(aq) + 2 e^- \longrightarrow Cu(s)$	0.34	
	$Sn^{4+}(aq) + 2 e^- \longrightarrow Sn^{2+}(aq)$	0.15	
	$2 H^+(aq) + 2 e^- \longrightarrow H_2(g)$	0	
Weaker oxidizing agent	$Pb^{2+}(aq) + 2 e^- \longrightarrow Pb(s)$	-0.13	Stronger reducing agent
	$Ni^{2+}(aq) + 2 e^- \longrightarrow Ni(s)$	-0.26	
	$Cd^{2+}(aq) + 2 e^- \longrightarrow Cd(s)$	-0.40	
	$Fe^{2+}(aq) + 2 e^- \longrightarrow Fe(s)$	-0.45	
	$Zn^{2+}(aq) + 2 e^- \longrightarrow Zn(s)$	-0.76	
	$2 H_2O(l) + 2 e^- \longrightarrow H_2(g) + 2 OH^-(aq)$	-0.83	
	$Al^{3+}(aq) + 3 e^- \longrightarrow Al(s)$	-1.66	
	$Mg^{2+}(aq) + 2 e^- \longrightarrow Mg(s)$	-2.37	
	$Na^+(aq) + e^- \longrightarrow Na(s)$	-2.71	
	$Li^+(aq) + e^- \longrightarrow Li(s)$	-3.04	

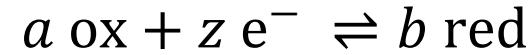
forrás:commons.princeton.edu/motorcycledesign/wp-content/uploads/sites/70/2018/07/battery_workshop.pdf

Az elektrokémia alapjai

- elektródpotenciál függ:
 - anyagi minőségtől (elektród, elektrolit összetétele, fém tisztasága, szerkezete, szennyezések, stb.)
 - hőmérséklettől, nyomástól (pl. gázelektródoknál)
 - elektrolit összetétele, koncentrációviszonyok
- standard elektródpotenciál:
 - az elektróreakcióban szereplő minden komponens koncentrációja egységnyi (1 mól/dm^3)
 - a hőmérséklet 298 K , azaz 25°C
 - a reakciókban szereplő gázok nyomása 101 kPa
 - minden anyag tiszta, a viszonyok és a mérés reprodukálható, az egyensúly beállt

Az elektrokémia alapjai

- az elektródpotenciál függése a körülményektől (koncentráció, hőmérséklet, nyomás)
 - az itt következő eredményeket értelmezzük, alapvető elvekből történő levezetésük a fizikai-kémia anyaga
- Nernst egyenlet:



$$\varepsilon = \varepsilon_0 + \frac{RT}{zF} \ln \frac{[\text{ox}]^a}{[\text{red}]^b}$$

- ahol ε_0 az adott rendszer standard redoxi potenciálja, T az abszolút hőmérséklet, R a gázállandó, F a Faraday szám (azaz 1 mól elektron töltése) és z az átadott elektron száma
- például látszik, hogy 1 mol/dm³ koncentrációk esetén a logaritmusos tag nullává válik
- gyakorlatban, 25 °C esetén a Nernst képlet átírható:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + \frac{0,059}{z} \lg \frac{[\text{ox}]^a}{[\text{red}]^b}$$

- a galváncella feszültsége a két aktuális elektródpotenciál különbsége
- úgy számítjuk, hogy a pozitívabb értékből vonjuk ki a negatívbabb értéket

Az elektrokémia alapjai

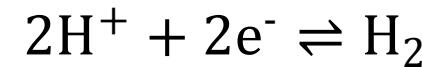
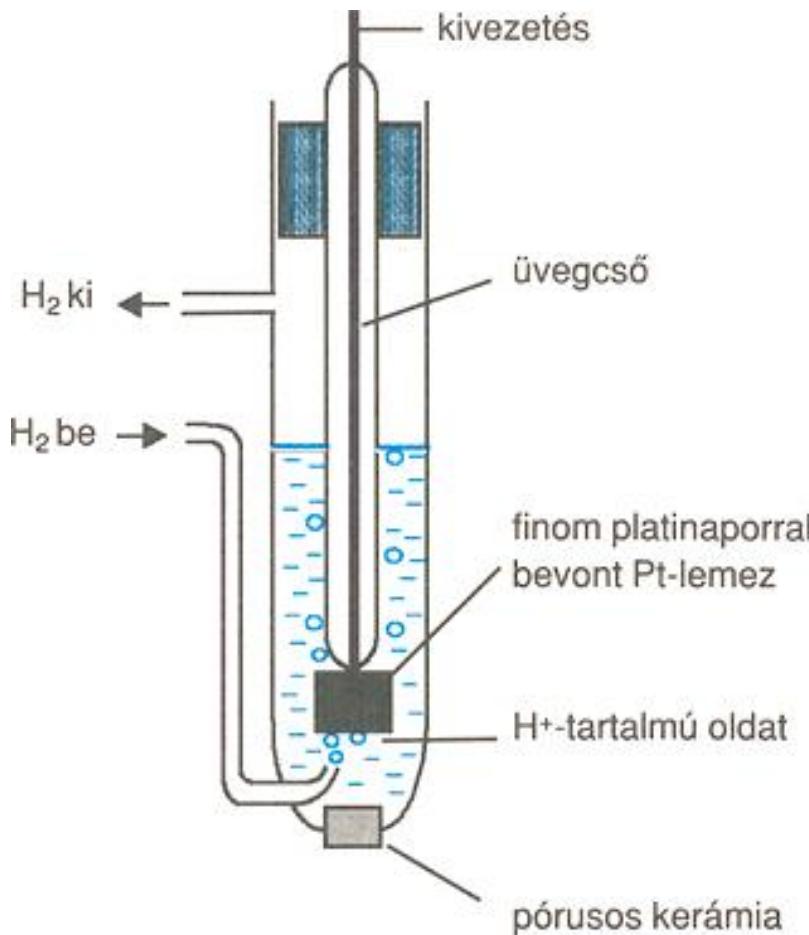
- elektródok fajtái:
 - **elsőfajú fémelektród:** fém belemerül a saját sóját tartalmazó oldatba; pl Cu lemez CuSO₄ oldatba:
$$\varepsilon^{\text{Cu}^{2+}/\text{Cu}} = \varepsilon_0^{\text{Cu}^{2+}/\text{Cu}} + \frac{RT}{zF} \ln [\text{Cu}^{2+}] \xrightarrow{25^\circ\text{C}-\text{on}} \varepsilon_0^{\text{Cu}^{2+}/\text{Cu}} + \frac{0,059}{2} \lg [\text{Cu}^{2+}]$$
 - a redukált forma (az elemi réz) koncentrációját állandónak tekintjük (nem a folyadékfázisban van, és be van "olvasztva" a standard redoxipotenciál értékébe)
 - **másodfajú fémelektród:** fémet bevonja egy rosszul oldódó sója és minden a só telített oldatába merül (a só jelenlévő ellenionja más sóból is származhat); pl. ezüst-ezüstklorid elektród, ahol fém Ag merül telített AgCl oldatba, amiben még van oldott KCl is és szilárd AgCl; az Ag⁺ ion koncentráció állandó

$$\varepsilon^{\text{Ag-AgCl}} = \varepsilon_0^{\text{Ag-AgCl}} + \frac{0,059}{1} \lg \frac{L_{\text{AgCl}}}{[\text{Cl}^-]}$$

Az elektrokémia alapjai

- elektródok fajtái:

- **gázelektród**: egy elem gáz halmazállapotban érintkezik az ionját tartalmazó elektrolittal; pl hidrogénelektród, klórelektród; a gáz fémmel is érintkezik, abban "oldódik", ez gyakran Pt lemez



$$\varepsilon^{\text{H}^+/\text{H}_2} = \varepsilon_0^{\text{H}^+/\text{H}_2} + \frac{0,059}{2} \lg \frac{[\text{H}^+]^2}{p^{\text{H}_2}/p_0}$$

Az elektrokémia alapjai

- elektródok fajtái:
 - **redoxi elektród:** inert fém merül egy redoxrendszer minden formáját tartalmazó oldatba; pl Pt vezető merül egy oldatba, amiben Fe^{2+} és Fe^{3+} is van; vagy $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}/\text{Cr}^{3+}$

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + \frac{0,059}{z} \lg \frac{[\text{ox}]^a}{[\text{red}]^b}$$

- gyakran ismerni kell a teljes folyamatot, mert a hidrogénion koncentráció számít



$$\varepsilon^{\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}/\text{Cr}^{3+}} = \varepsilon_0^{\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}/\text{Cr}^{3+}} + \frac{0,059}{6} \lg \frac{[\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}][\text{H}^+]^{14}}{[\text{Cr}^{3+}]^2}$$

- pH függő az elektródpotenciál:

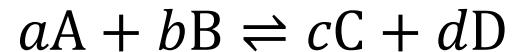
$$\varepsilon^{\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}/\text{Cr}^{3+}} = \varepsilon_0^{\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}/\text{Cr}^{3+}} - \frac{0,059 \cdot 14}{6} \text{pH} + \frac{0,059}{6} \lg \frac{[\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}]}{[\text{Cr}^{3+}]^2}$$

A redoxi reakciók iránya, nem csak galvánelemekben

- emlékeztető: a galvánelemek térben szétválasztják az oxidációt és redukciót, és így áramot lehet termelni
- ha nem lenne szétválasztva térben a két folyamat, akkor hőenergia szabadulna fel
- de a reakció ugyanaz lenne
- a galvánelemben az aktuális redoxpotenciálok meghatározzák a lezajlódó folyamatot
- vagyis a redoxpotenciálok ismeretében meg tudjuk mondani egy redoxi reakció irányát akkor is, amikor nem galvánelemről van szó, hanem egy közös reakciótérben történik a redoxi reakció; azaz hogy mi oxidálódik és mi redukálódik az adott körülmények között
- első közelítésben a standard potenciálokat használjuk, bár tudjuk, hogy az aktuális koncentrációviszonyok és más effektusok is fontosak lehetnek (Nernst képletben szerepelhetnek koncentrációk, nyomás, pH, stb)
- standard körülmények között: a negatívabb standardpotenciálú rendszer redukált formája redukálja a pozitívabb standardpotenciálú rendszer oxidált formáját, miközben ő maga oxidálódik
- másképp is ki lehet mondani az állítást: a pozitívabb standardpotenciálú rendszer oxidált formája oxidálja a negatívabb standardpotenciálú rendszer redukált formáját, miközben ő maga redukálódik

Energiaviszonyok a galvánelemekben

- ha egy galvánelemet magára hagyunk, végül "lemerül", azaz a lezajlik az összes elektronátadás és végül kiegyenlítődnek a redoxpotenciálok
- beáll az egyensúly: ekkor az elektródpotenciál kifejezés átírható úgy is, hogy szerepeljen benne a redox folyamat egyensúlyi állandója



- a részfolyamatok:
$$aA \rightleftharpoons cC + ze^-$$
$$dD \rightleftharpoons bB + ze^-$$
- ekkor így írható fel a galvánelem elektromotoros ereje (ami pont nullával egyenlő, mert lemerült és beállt az egyensúly):

$$EME = \varepsilon_1 - \varepsilon_2 = \varepsilon_1^0 - \frac{0.059}{z} \lg \frac{[C]^c}{[A]^a} - \varepsilon_2^0 + \frac{0.059}{z} \lg \frac{[B]^b}{[D]^d} = 0$$

$$\varepsilon_1^0 - \varepsilon_2^0 = \frac{0.059}{z} \lg \frac{[C]^c}{[A]^a} - \frac{0.059}{z} \lg \frac{[B]^b}{[D]^d} = \frac{0.059}{z} \lg \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b} = \frac{0.059}{z} \lg K$$

Energiaviszonyok a galvánelemekben

$$\varepsilon_1^0 - \varepsilon_2^0 = \frac{0.059}{z} \lg \frac{[C]^c}{[A]^a} - \frac{0.059}{z} \lg \frac{[B]^b}{[D]^d} = \frac{0.059}{z} \lg \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b} = \frac{0.059}{z} \lg K$$

$$\varepsilon_1^0 - \varepsilon_2^0 = \frac{0.059}{z} \lg K$$

$$\varepsilon_1^0 - \varepsilon_2^0 = \frac{RT}{zF} \ln K$$

az egyensúlyi állandó egy lehetséges meghatározása

emlékeztető: egy folyamat egyensúlyi állandója és a folyamat szabadentalpiája közötti összefüggés:

$$\Delta G_0 = RT \ln K$$

$$\Delta G_0 = RT \ln K \Rightarrow \frac{\Delta G_0}{zF} = \frac{RT}{zF} \ln K \Rightarrow \frac{\Delta G_0}{zF} = \varepsilon_1^0 - \varepsilon_2^0 = E_0$$

$$\Delta G_0 = zFE_0$$

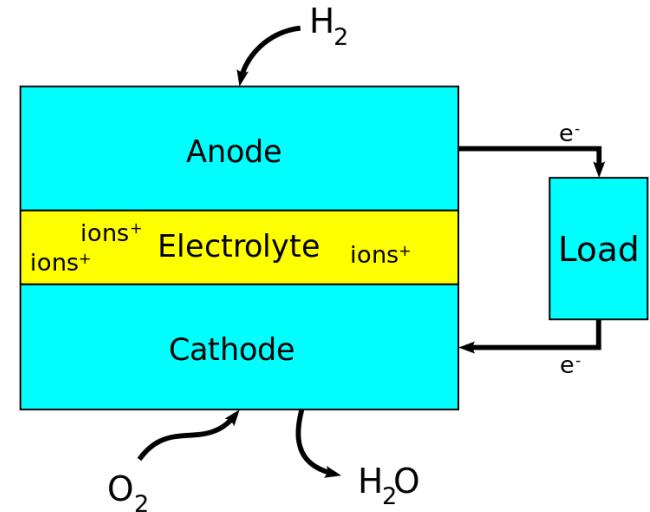
E_0 a standardpotenciálokban számolható elektromotoros erő

Galvánelemek a minden napokban

- nem újratölthető (primer) elemek
 - pl. szárazelemek ($Zn-MnO_2$), litium elem, ezüst-oxidos elemek (gombelemek egy része), stb.
 - pl citromból, krumpliból készíthető elemek, stb.



forrás:www.mikeeckman.com/wp-content/uploads/2020/04/CameraBatteries.jpg

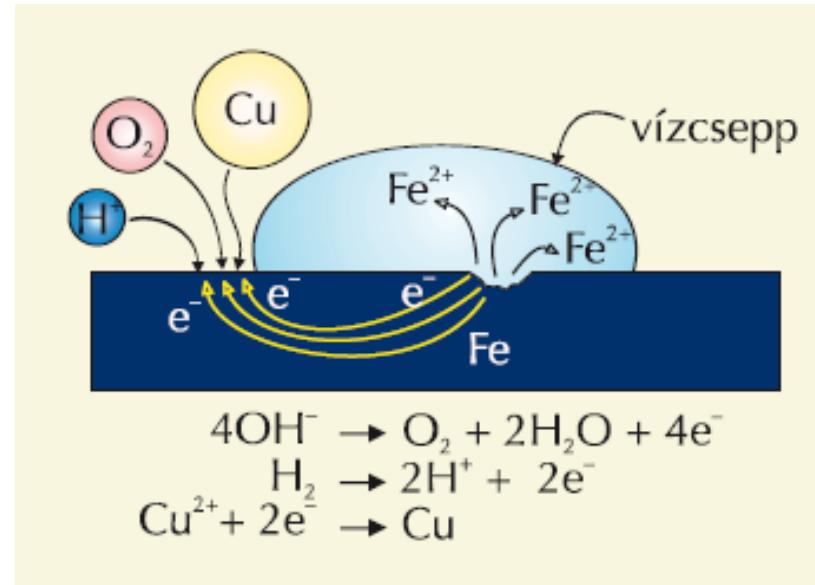


forrás:en.wikipedia.org/wiki/Fuel_cell

- újratölthető elemek (akkumulátorok)
 - savas, lúgos akkumulátorok (pl. kocsikban), újratölthető elemek: pl. lítium-ion elem, Ni-Cd elem, stb.
- tüzelőanyagcellák: nem újratölthetők, de folyamatosan adagolható az "üzemanyag"

Korrózió és korrózióvédelem

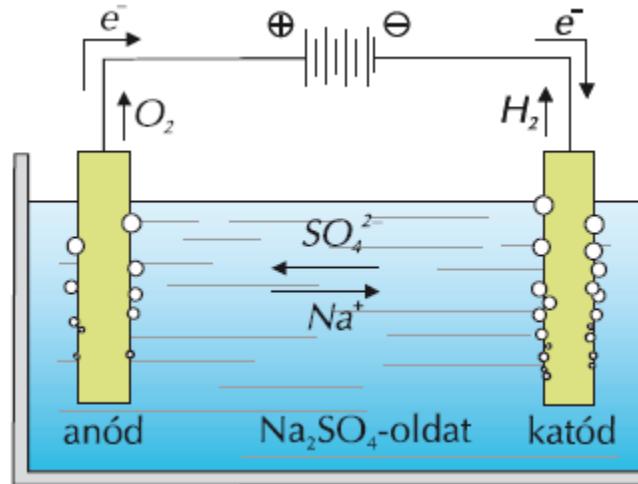
- fémek korróziója: mindenkor oxidációs folyamat
- a kiegészítő redukciós folyamat legtöbbször a levegő oxigénjének redukálódása; de lehet a H^+ redukciója is



- passzív korrózióvédelem: bevonatképzés (mínium, krómozás, eloxálás, stb); addig működik, amíg a bevonat hibátlan
- aktív korrózióvédelem: katódos védelem, azaz megakadályozzuk, hogy a védendő fém oxidálódjon, azaz anód legyen: pl cinkkel bevonjuk, ekkor a cink – a reaktívabb fém – fog oxidálódni, ő lesz az anód; addig működik, amíg nyomokban van cink, tehát jóval tovább, mint a passzív védelem

Elektrolízis

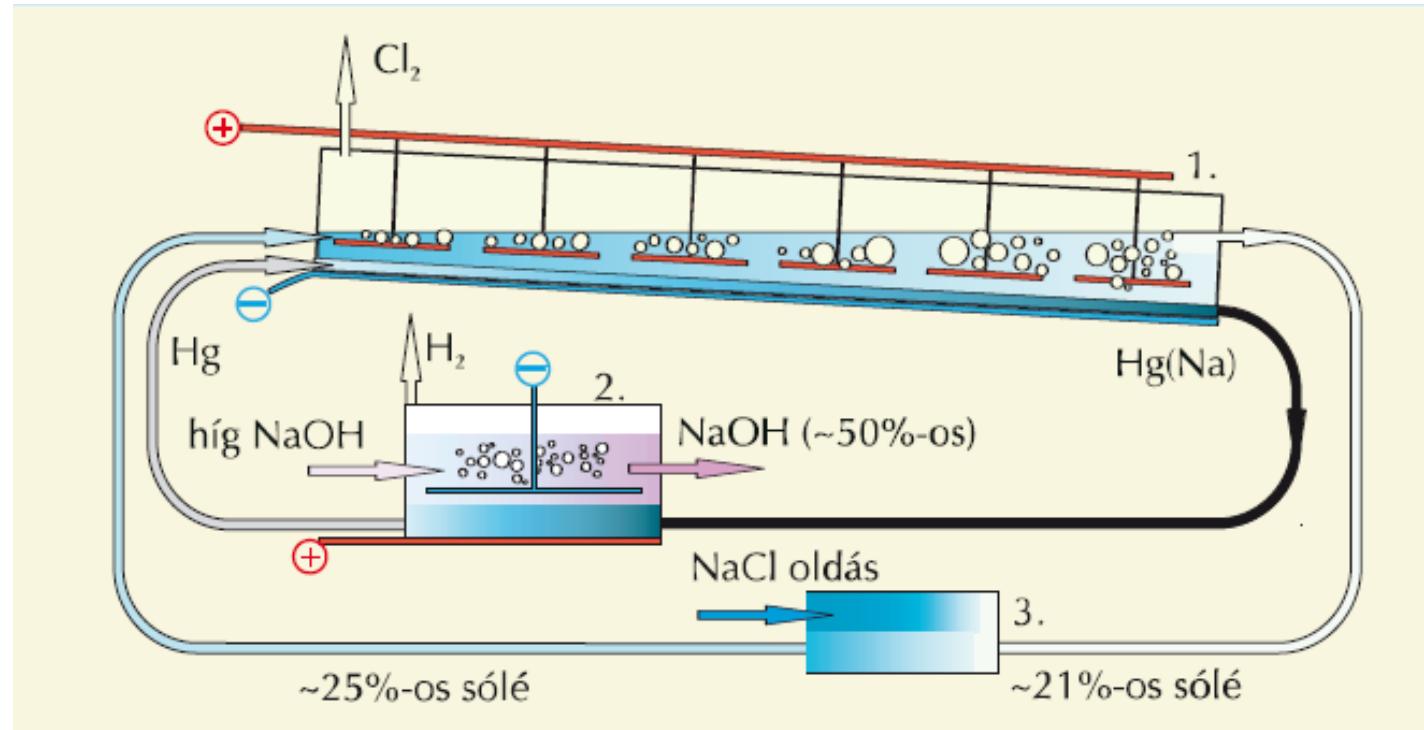
- ha galváncellára elegendően nagy feszültséget kapcsolunk, akkor olyan folyamatot tudunk elindítani, ami spontán nem játszódna le
- a feszültségnek meg kell haladnia az elektrolízis során kialakuló galváncella potenciálját, különben nem fog áram folyni a kívánt irányban
- a bomlásfeszültség az a legkisebb feszültség, amivel még elektrolízist lehet csinálni ($= \varepsilon_k - \varepsilon_a$)



- a katód most is az az elektród, ahol a redukció történik, de most ez lesz a negatív elektród
- az anód most is az az elektród, ahol az oxidáció történik, de most ez lesz a pozitív elektród
- egy elektrolitból az elektromos áram hatására leválasztott anyagmennyisége (Δm) egyenesen arányos az áram erősségevel és a leválasztás időtartamával (Δt); $\Delta m = k \cdot I \cdot \Delta t$ (Faraday)
- 1 mólnyi, oldatban z töltésű anyag elektrolíziséhez $z \cdot F$ töltésre van szükség , ahol $F = 96500 \text{ C}$, ami egy mólnyi elektron töltése (Faraday)

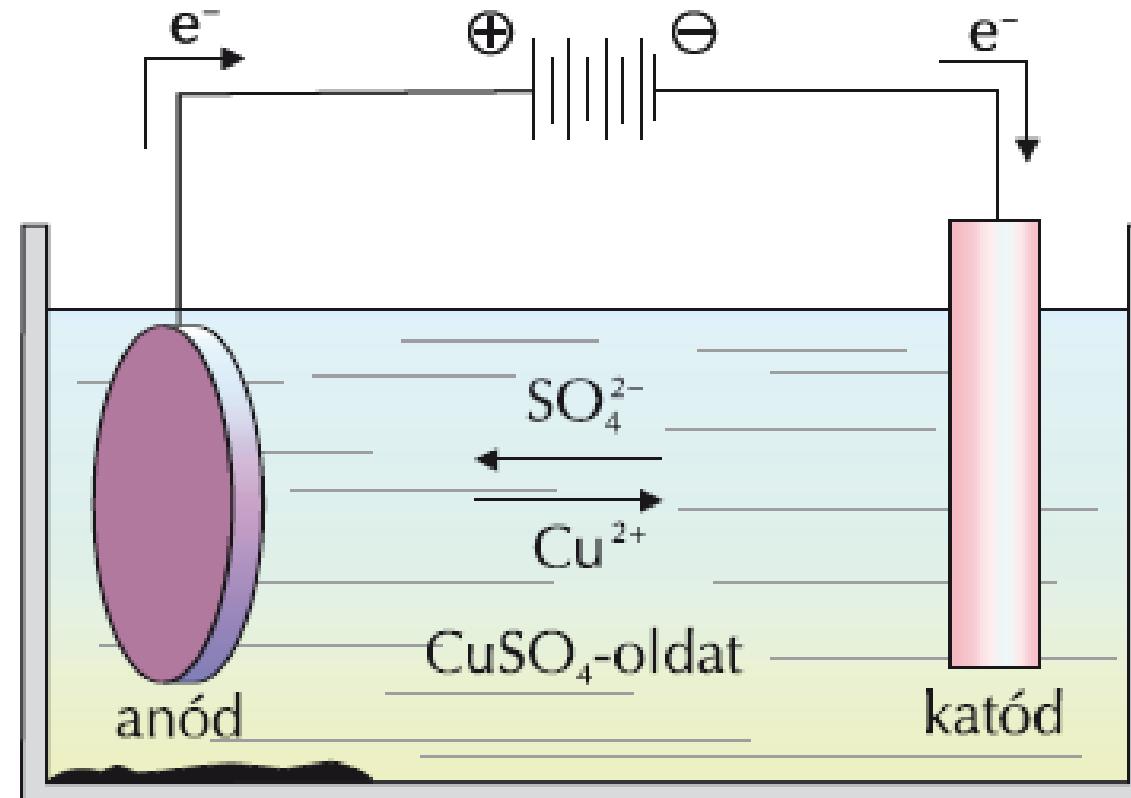
Elektrolízis

- elektrolízis alkalmazásai: fémpar, vegyipar
- pl. alumíniumgyártás (timföldből, elektrolízissel)
- pl. NaCl oldat elektrolízise
 - Hg katódos eljárás, hidrogén nem válik le (túlfeszültség; amikor a várt cellapotenciálnál nagyobb feszültséggel lehet a kívánt reakciót elektrolízissel beindítani)
 - Cl₂ gáz a grafit vagy titán anódon és végeredményben H₂ és NaOH képződik



Elektrolízis

- galvanizálás
 - tiszta fémbevonatok állíthatók elő (arany, ezüst, nikkel, stb bevonatok)
 - például réztisztítás (réz-raffinálás, minden elektród réz, a tisztított a katód)



Kémia a mindennapokban, környezet és kémia

- otthon (ecet, szódabikarbóna, sütőporok, majonéz, főzési-sütési technológiák, szénsavas üdítők, rágógumi, ízesítőanyagok, méz, gyógyszerek, illatszerek, kozmetikai szerek, tisztítószer, fertőtlenítőszerek, tartósítószer, kertészkedés vegyszerei, kártevő irtó-távoltartó anyagok, építkezés-barkácsolás vegyi vonatkozásai, higítók, oldószerek, stb.)
- táplálkozás, alapvető tápanyagok (fehérjék, szénhidrátok, zsírok, vitaminok, nyomelemek, mesterséges tápanyagok, doppingszerek és izomtömeg növelők, növekedésserkentők, hormonok, koleszterin, mesterséges édesítők, napi kalóriabevitel, egyéb határértékek, sör, bor, kábítószer, stb.)
- ivóvíz, szennyvíz, ivóvíz tisztítás és a klóros tisztítás miatt keletkező káros anyagok
- levegő szennyezettsége, belső égésű motorok, ózonréteg problémái; globális felmelegedés, metán és CO₂ források, vulkáni tevékenység kémiai vonatkozásai, savas esők okai, következményei
- műanyagok, polimerek: felhasználásuk, lebomlásuk-lebontásuk, környezetszennyezési kérdések
- kultúra és kémia: papírgyártás, nyomtatás, kémia a képzőművészletekben: pl. festékek, pigmentek kémiája, fényképezés és színes nyomtatás
- vegyipar, mint rengeteg más ipar beszállítója: pl. autógyártás, járműipar, elektronika, textílipar, stb.
- hadiipar, puskaporok, lőfegyverek, robbanószerek, tüzijáték
- régi, új és megújuló energiaforrások (szén, kőolaj, földgáz, hidrogén-alapú gazdaság, metanol-alapú gazdaság, áramforrások, üzemanyagcellák, napelemek, atomreaktorok), energiatárolás
- természet nyújtotta szépségek: kristályok, cseppkőbarlangok, korallzátonyok és pusztulásuk, növények és állatok színei, pókhálók, a tűz és a láng, a víz sokféle megjelenési formája és jelentősége, stb.