

Varga Andrea

# Híd a kémiához



***A földtudományok  
általános, szervetlen és  
fizikai kémiai alapjai***

Szegedi Tudományegyetem  
2019



# Híd a kémiához

## *A földtudományok általános, szervetlen és fizikai kémiai alapjai*

Egyetemi tankönyv

Írta:  
Varga Andrea

Szegedi Tudományegyetem  
2019



Jelen tananyag a Szegedi Tudományegyetemen készült az Európai Unió támogatásával.  
Projekt azonosító: EFOP-3.4.3-16-2016-00014.

Szegedi Tudományegyetem  
Cím: 6720 Szeged, Dugonics tér 13.  
[www.u-szeged.hu](http://www.u-szeged.hu)  
[www.szechenyi2020.hu](http://www.szechenyi2020.hu)



MAGYARORSZÁG  
KORMÁNYA

**Európai Unió**  
Európai Szociális  
Alap



**BEFEKTETÉS A JÖVŐBE**

**Varga Andrea**

*egyetemi adjunktus, PhD*

Szegedi Tudományegyetem  
Természettudományi és Informatikai Kar  
Földrajzi és Földtudományi Intézet  
Ásványtani, Geokémiai és Közettani Tanszék

## **Híd a kémiához**

### ***A földtudományok általános, szerves- és fizikai kémiai alapjai***

Egyetemi tankönyv

**Lektorálta:**

**Hetényi Magdolna**

*professor emerita  
a Magyar Tudományos Akadémia rendes tagja*

*Számítógépes ábrakészítés, képfeldolgozás, szerkesztés:*

Varga Andrea

**Szegedi Tudományegyetem  
2019**

*Jelen tananyag hivatkozási formája:*

Varga, A. (2019): Híd a kémiához. A földtudományok általános, szerves és fizikai kémiai alapjai. Egyetemi tankönyv (elektronikus tananyag), Szegedi Tudományegyetem, TTIK Földrajzi és Földtudományi Intézet, Szeged

# Tartalomjegyzék

<b>Előszó</b>	<b>9</b>
<b>Bevezetés</b>	<b>10</b>
<b>1. Tudtad már? Általános kémiai alapfogalmak</b>	<b>11</b>
<b>1.1. Az anyag: atom, elem, vegyület, és ami mögötte van</b>	<b>13</b>
➤ az anyag felfedezése nanoléptékben	
➤ az atom felépítése és a szubatomi részecskék tulajdonságai	
➤ izotópatomok és elemek; a vegyjel – földrajzi kitekintéssel	
➤ atomok, elemek, molekulák, vegyületek; szemléltetésük kémiai modellekkel	
➤ ionok és ionvegyületek	
<b>1.2. Az anyag halmazállapotai és tulajdonságai</b>	<b>25</b>
➤ gáz, folyadék, szilárd anyag: fizikai változások és tulajdonságok	
➤ kémiai változások, kémiai tulajdonságok	
➤ keverékek és vegyületek	
➤ mérhető tulajdonságok – mérési lehetőségek	
<b>2. Tudtad már? Fizikai kémiai alapfogalmak</b>	<b>41</b>
<b>2.1. Fizika a kémiában: az anyag és az energia</b>	<b>43</b>
➤ gyakori energiafajták (mozgási, helyzeti) és kapcsolatuk a munkával	
➤ a kinetikus és a potenciális energia és jelentősége a kémiában	
➤ energia és hőátadás: fizikai és kémiai folyamatok hőváltozása	
➤ viszonyítási alap: a rendszer és a környezete	
➤ törvények a természetben: tömegmegmaradás, energiamegmaradás, anyagmegmaradás	
<b>2.2. A kémiai reakciók termodinamikai megközelítése</b>	<b>50</b>
➤ kémiai reakciók és a reakcióegyenlet: reaktánsok és termékek	
➤ kémiai reakciók hőváltozása: a reakcióhő	
➤ egyirányú és megfordítható kémiai reakciók	
<b>3. Gyakori anyagok és tulajdonságaik</b>	<b>59</b>
<b>3.1. Elemek és szervesetlen vegyületek</b>	<b>61</b>
➤ a nemfémes elemek (nemesgázok, hidrogén, nitrogén, oxigén, halogének, foszfor, kén, szén) és gyakori szervesetlen vegyületeik fizikai és kémiai tulajdonságai, legfontosabb földtudományi vonatkozások	
➤ a fémek elemek (pl. nátrium, kálium, magnézium és kalcium) általános jellemzői és gyakori szervesetlen vegyületeik	
<b>3.2. Szerves vegyületek</b>	<b>82</b>
➤ szerves kémiai alapfogalmak (izomerek, funkciócsoportok)	
➤ néhány szerves vegyület (szénhidrogének, oxigén- és nitrogéntartalmú szénvegyületek) jellemzése	
<b>4. Az atomszerkezettől a periódusos rendszerig</b>	<b>101</b>
<b>4.1. Az elektronburok felépülése</b>	<b>103</b>
➤ atommodellek, az atomok elektronszerkezete	
➤ kvantummechanikai megközelítés: atompályák, kvantumszámok, héjak és alhéjak; alapfogalmak és alapvető szabályok	
➤ az elektronkonfiguráció	
<b>4.2. Az elemek periódusos rendszere</b>	<b>117</b>
➤ a periódusos rendszer felépítése, elemcsoportok (főcsoportok, mellékcsoportok)	
➤ tájékozódás a periódusos rendszerben	
<b>4.3. Periodikusan változó tulajdonságok</b>	<b>125</b>
➤ a tulajdonságok periodikus változása (atomtömeg, atom- és ionsugár, első ionizációs energia, elektronegativitás, elektronegativitás, a vegyérték	

<b>5. Kölcsönhatások: a kémiai kötések és jelentőségük</b>	<b>135</b>
<b>5.1. Elsőrendű kémiai kölcsönhatások</b>	<b>137</b>
➤ a kémiai kötés és jellemzése (kötéshossz, kötési energia)	
➤ az ionos kötés és kialakulásának általános feltételei	
➤ a kovalens kötés: egyszeres és többszörös kötések, kötésrend, a molekulák alakja (kötésszög), szigma- és pi-kötés, hibridizáció, datív kötés, delokalizált kötés, a kovalens kötés polaritása (dipólusmomentum)	
➤ a fémes kötés és kialakulásának általános feltételei	
<b>5.2. Másodrendű kémiai kölcsönhatások</b>	<b>156</b>
➤ dipól-dipól, ion-dipól kölcsönhatások; hidrogénkötés; diszperziós kölcsönhatás	
<b>6. Kémiai kölcsönhatás és halmazállapot</b>	<b>163</b>
<b>6.1. Szilárd halmazállapot: ásványok és kristályrácsok</b>	<b>165</b>
➤ amorf és kristályos anyagok; tömegpont és térrács, koordináció	
➤ átmenet az ideális kötéstípusok között: a polarizáció	
➤ ionrácsok–ionkristályok: a kősórács, a cézium-klorid rácsa, a fluoritrács; az ionrácsos vegyületek általános fizikai tulajdonságai	
➤ atomrácsok: a gyémántrács és a szfaleritrács; az atomrácsos kristályok általános fizikai jellemzői; a grafitrács	
➤ fémek és ötvözetek: fémrácsok (réz-típusú rács) és fizikai tulajdonságaik	
➤ a molekularács és a molekularácsos kristályok fizikai jellemzői	
<b>6.2. Folyadékok: viszkozitás, felületi feszültség, gőznyomás</b>	<b>182</b>
➤ a folyadékok általános jellemzése, legfontosabb tulajdonságaik	
<b>6.3. Gázok és gáztörvények</b>	<b>190</b>
➤ ideális és reális gázok, gáztörvények	
<b>7. A természetben lejátszódó folyamatok feltételei</b>	<b>203</b>
<b>7.1. Spontán folyamatok hajtóereje: termodinamikai alapok</b>	<b>205</b>
➤ a termodinamikai alapfogalmak kiegészítése: entalpia, képződéshő, entrópia, szabadenergia, szabadentalpia, kémiai potenciál	
➤ a termodinamika alaptörvényei (főtételek), spontán változások iránya	
<b>7.2. Egyensúlyi termodinamika: fázisegyensúlyok</b>	<b>220</b>
➤ a kémiai egyensúly: aktivitás, tömeghatás törvénye; alapfogalmak (fázis, komponens, szabadsági fok), a Gibbs-féle fázisszabály	
➤ fázisegyensúlyok: egykomponensű rendszerek (p–T diagram)	
➤ két- és többkomponensű rendszerek (folyadék–folyadék és folyadék–szilárd rendszerek) fázisdiagramjainak értelmezése	
<b>7.3. A kémiai reakciók sebessége: reakciókinetikai alapok</b>	<b>241</b>
➤ reakciókinetikai alapfogalmak: reakciósebesség, reakciórend	
➤ a kémiai reakciók lejátszódásának kinetikai feltétele (aktiválási energia)	
➤ katalizált reakciók, homogén és heterogén katalízis	
➤ a diffúzió, mint anyagáramlási folyamat	
<b>8. Vizes oldatok: oldhatóság és egyensúly</b>	<b>257</b>
<b>8.1. Vizes közegű kémiai reakciók: savak és bázisok, oldhatóság</b>	<b>259</b>
➤ a víz autoprotolízise, a vízionszorzat és a pH-skála	
➤ savak és bázisok, a sav–bázis reakciók elméleti alapjai	
➤ oldhatóság és egyensúly, ásványok oldódása	
➤ adszorpció és ioncsere	
<b>8.2. Redoxireakciók, elektrokémiai alapok</b>	<b>277</b>
➤ redoxireakció, oxidáció, redukció, oxidációs szám	
➤ elektrokémiai alapok: elektrolízis, galváncella, elektródpotenciál	
➤ feszültségi sor és korrózió	
<b>Angol–magyar kisszótár</b>	<b>291</b>
<b>Felhasznált irodalom</b>	<b>297</b>
<b>Tantárgyleírás</b>	<b>299</b>

## Előszó

*Kedves Olvasó!*

*Jelen tananyag az EFOP-3.4.3-16-2016-00014 azonosító jelű „A Szegedi Tudományegyetem oktatási és szolgáltatási teljesítményének innovatív fejlesztése a munkaerőpiaci és a nemzetközi verseny kihívásaira való felkészülés jegyében” című pályázat keretében készült. Szervesen kapcsolódik azokhoz az alprogramokhoz, amelyek kiemelt célja a hallgatói lemorzsolódás csökkentése (AP1), illetve a tanulási eredmény alapú tananyagfejlesztés megvalósítása a kutatói szakokon, valamint a természettudományos tanárképzési területeken (AP2).*

*A felsőoktatási tankönyv tartalmi és formai felépítése során egyrészt arra törekedtem, hogy a kémia, mint közoktatási tantárgy megváltozott alaptantervi követelményeihez igazodjak, másrészt olyan segédanyagot biztosítsak, amit a speciális képzési szükségletű (pl. diszlexiás) egyetemi hallgatók is eredményesen használhatnak. Ezek eredményeként e tananyag számos megközelítésben eltér a hagyományos egyetemi tankönyvektől. A bevezető fejezetek felidézik és összefoglalják a szükséges előzetes ismereteket. A tárgyalt témák a középiskolai elméleti ismeretek célorientált ismételtesével kezdődnek, ezzel megteremtve a felzárkózás lehetőségét azoknak, akik ezt igénylik. A formai megjelenés (12-es betűméretű Arial betűk használata, szellős szöveg, színes alap, szövegdobozos kiemelés színes betűk alkalmazásával) célja az olvasás és megértés hatékonyságának növelése.*

*Oktatási tapasztalatom alapján a kémia nem tartozik a Földtudományi vagy Földrajz BSc szakos hallgatók kedvenc tárgyai közé, pedig a kémia az életünk természetes része. Aki a kémiát nem szereti, önmagát nem szereti, hiszen minden kötődik a kémiához. Mi magunk vagyunk a „kémia”, csak meg kell ismernünk, fel kell fedeznünk benne a hétköznapi szépségét! E tankönyv egyik célja nem is lehet más, mint közelebb hozni a kémiát mindenkihez, aki e sorokat olvassa.*

*Szeged, 2019. május 30.*

*Varga Andrea  
SZTE TTIK FFI Ásványtani,  
Geokémiai és Kőzettani Tanszék  
egyetemi adjunktus  
Földtudományi BSc szak mentor-tanácsadó  
okleveles kémia-földrajz-geológia spec. szakos  
középiskolai tanár (JATE), okleveles geológus (ELTE)*



## Bevezetés

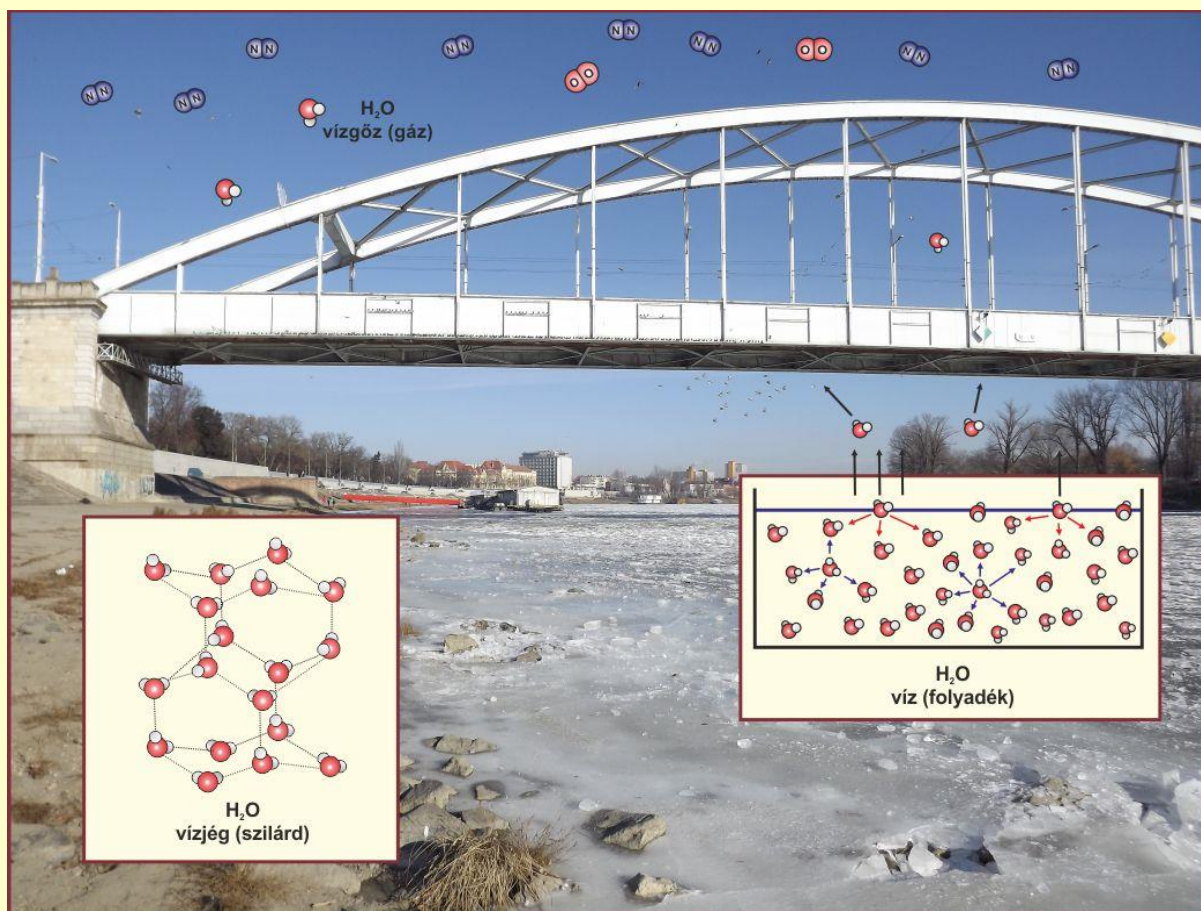
A SZTE Természettudományi és Informatikai Karán a Földtudományi BSc, a Földrajz BSc és az osztatlan földrajztanár szakokon az első évfolyam első szemeszterében kötelező „A földtudományok/földrajz kémiai alapjai” megnevezésű előadási kurzus a legfontosabb általános, szerves és fizikai kémiai alapokat ismerteti. Az atomok elektronszerkezetének bemutatásán keresztül tárgyalja az elemek periódusos rendszerét, majd a kémiai kölcsönhatások jellemzőit, továbbá ezek hatását az anyag halmazállapotára és a természetben önként lejátszódó folyamatokra. A tárgy alapvető célja, hogy a kémiai háttérismereteket földtudományi példákon keresztül ismerjék meg a hallgatók, ezzel megteremtve a kapcsolódási lehetőséget a párhuzamosan futó vagy későbbi szaktárgyi kurzusokkal. Kiemelt cél, hogy a kémiai összefüggéseket eredményesen alkalmazzák az ásványtani, a kőzettani és a geokémiai ismeretek elsajátításakor.

Igazodva a XXI. század megváltozott igényeihez, illetve a természettudományos tárgyak közoktatási óraszámának lecsökkenéséhez, ez a tankönyv számos esetben a részismeretek alapjaira is kitér (pl. atom, elem, vegyület, munka, energia, pH fogalmának meghatározása). Tapasztalatom szerint ugyanis a kurzus hallgatóinak többsége nem érettségizett kémiából, sokan az egyetemi tanulmányaik megkezdése előtti 2–3 évben nem is tanulták már ezt a tárgyat. A témakörök tárgyalásakor ezért arra törekedtem, hogy az ismeretterjesztő szintről fokozatosan jussunk el az egyetemi tanulmányok sikeres befejezéséhez szükséges szintre, amit a felhasznált irodalmak jellege is tükröz.

E tankönyv első három fejezete a kémiai (és bizonyos fizikai) elméleti ismeretek alapszintre hozását, a felzárkóztatást célozza meg. Ezt követően az *anyag* felépítésétől kiindulva jutunk el a természetben lejátszódó legfontosabb folyamatok tárgyalásáig úgy, hogy az összefüggések felismerésével komplex természettudományos látásmód (integrált kémiai, fizikai, természeti földrajzi és geológiai ismeretek) alakuljon ki. A szövegben kiemelt legfontosabb alapfogalmak az egyes fejezetek végén megtalálható fogalomtárban kaptak helyet. Az elméleti ismeretek elsajátítását, illetve gyakorlati alkalmazását számos önellenőrző kérdés segíti, amelyek megoldásait is megtaláljuk e tankönyvben. A szakkifejezések útvesztőjében történő eligazodást az angol–magyar kisszótár segíti.

# 1.

## Tudtad már? Általános kémiai alapfogalmak



### Témakörök

#### 1.1. Az anyag: atom, elem, vegyület, és ami mögötte van

- az anyag felfedezése nanoléptékben
- az atom felépítése és a szubatomi részecskék tulajdonságai
- izotópatomok és elemek; a vegyjel – földrajzi kitekintéssel
- atomok, elemek, molekulák, vegyületek; szemléltetésük kémiai modellekkel
- ionok és ionvegyületek

#### 1.2. Az anyag halmazállapotai és tulajdonságai

- gáz, folyadék, szilárd anyag: fizikai változások és tulajdonságok
- kémiai változások, kémiai tulajdonságok
- keverékek és vegyületek
- mérhető tulajdonságok – mérési lehetőségek

## **1. Tudtad már? Általános kémiai alapfogalmak**

### **1.1. Az anyag: atom, elem, vegyület, és ami mögötte van**

### **1.2. Az anyag halmazállapotai és tulajdonságai**



### ***Ha megtanulod ezt a fejezetet, képes leszel arra, hogy***

- az anyaggal és annak halmazállapotaival kapcsolatos egyszerű kémiai kifejezéseket elmagyarázd és helyesen használd;
- megítéld, hogy mikor beszélünk atomról, elemről, ionról, molekuláról és vegyületről;
- a vegyjelek, egyszerű kémiai képletek világában eligazodj;
- elemezd gyakori elemek, molekulák és vegyületek kémiai modelljeit;
- egyszerű kémiai modellek segítségével szemléltesd egy anyag eltérő halmazállapotai közötti különbséget;
- elmagyarázd a fizikai és a kémiai tulajdonságok közötti különbséget;
- összehasonlítsd a fizikai és a kémiai folyamatokat;
- elmagyarázd a különbséget a keverékek és a vegyületek között;
- megtervezd egyszerű keverékek szétválasztásának lépéseit;
- alkalmazd az anyag tulajdonságait, mennyiségét és állapotát leíró különböző mértékegységeket.

## 1.1. Az anyag: atom, elem, vegyület, és ami mögötte van

Az „**anyag**” nagyon tág fogalom. Gyakorlatilag minden ide tartozik, aminek tömege van, illetve egy adott térrészt foglal el. A **tömeg** (jele:  $m$ ; SI mértékegysége a kilogram, mértékegységének jele:  $kg$ ;  $1\text{ kg} = 10^3\text{ g}$ ) tulajdonképpen bármely anyag mennyiségének megadását, mérését lehetővé teszi számunkra (1. ábra). Még a színtelen, szagtalan, íztelen és megfoghatatlan levegőnek is van tömege, az szintén anyag (Whitten et al., 2014). A napi rutinunk során aligha jut eszünkbe egy adag levegő tömegének mérése, pedig maga a tömegmérés teljesen hétköznapi művelet. Szobamérlegen megmérhetjük a saját tömegünket, ha tudni szeretnénk, hogy felszedtünk-e vagy éppen leadtunk egy-két „kilót”. Egyszerű konyhai mérlegen kimérhetjük a süteményhez szükséges alapanyagokat (pl. lisztet, cukrot), vagy megmérhetjük a lekvárhoz előkészített gyümölcsöt (2. ábra). A mindennapokban azonban általában nem foglalkozunk azzal, hogy az adott anyag milyen parányi részecskékből áll.



1. ábra

Tömegmérés a múlt században: sárgaréz súlysorozat (balra) és öntöttvas súly (jobbra)

A világegyetemet felépítő, temérdek számú és tulajdonságú anyag — legyen szó a Napról, a Bakony vagy a Mátra kőzeteiről, a Tisza vizéről, a telefon akkumulátorjáról, egy szemüvegről, vagy éppen az ebédünkről — érdekes módon azonban alig több mint 90 alapvető anyagi halmazból, úgynevezett **elemből** áll

(Atkins, 1995; Greenwood, Earnshaw, 2004). Mindennapi tapasztalatunk makroléptékű, az anyag építőkövei, a parányi **atomok** és molekulák azonban nanoléptéket képviselnek (**1. táblázat**). Minden anyag atomokból épül fel, azokban az atomok különböző módon elemeket, molekulákat, vegyületeket képeznek. Az anyag tulajdonságát alapvetően az határozza meg, hogy milyen atomokból épül fel, és az alkotói milyen módon kapcsolódnak egymáshoz (Whitten et al., 2014). Ahhoz, hogy



megértsük a természetben lejátszódó folyamatokat, el tudjunk igazodni az élő és az élettelen világban, megértsük az ásványok és a kőzetek képződési mechanizmusát és annak hajtóerejét, alapvető fontosságú az atomok, illetve a belőlük felépülő elemek, molekulák, vegyületek tulajdonságainak ismerete.

## 2. ábra

Tömegmérés a háztartásban: egyszerű konyhai mérleg

## 1. táblázat

A mértékegységek megadásakor használt gyakori előtagok (prefixumok) és jelentésük

Prefixum	Rövidítés	Jelentés	Példa
mega-	M	$10^6$	1 megaméter (Mm) = $1 \times 10^6$ m
kilo-	k	$10^3$	1 kilogram (kg) = $1 \times 10^3$ g (1000 g)
deci-	d	$10^{-1}$	1 deciméter (dm) = $1 \times 10^{-1}$ m
centi-	c	$10^{-2}$	1 centiméter (cm) = $1 \times 10^{-2}$ m
milli-	m	$10^{-3}$	1 milligram (mg) = $1 \times 10^{-3}$ g (1 ezred g)
mikro-	$\mu$	$10^{-6}$	1 mikrogram ( $\mu$ g) = $1 \times 10^{-6}$ g
nano-	n	$10^{-9}$	1 nanogram (ng) = $1 \times 10^{-9}$ g
piko-	p	$10^{-12}$	1 pikogram (pg) = $1 \times 10^{-12}$ g

Az atom görög eredetű szó, jelentése oszthatatlan, nem osztható. Ma azonban már tudjuk, hogy tovább bontható kisebb, úgynevezett szubatomi részecskékre (Whitten et al., 2014; Gill, 2015). A kémiai szempontból egységesen viselkedő, legkisebb önálló részecskét nevezzük ezért atomnak. Mai ismereteink szerint az atom **elemi** (szubatomi) **részecskékből** (egységekből) álló, pozitív töltésű **atommagból** (proton és neutron), illetve az azzal kölcsönhatásban lévő egy vagy több negatív töltésű elektronból felépülő, elektromosan semleges részecske (Boksay et al., 1987; Rózsahegyi, 1993; Atkins, 1995; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

### Megjegyzés:

Az atomok szubmikroszkópos világának megismerése első pillanatra feleslegesnek tűnhet a köznapis földtudományi kérdések (földrengések, vulkánkitörések, szökőárak, csuszamlások) megválaszolásához. A „geológiai anyag” számos fontos tulajdonsága azonban attól függ, hogy azt milyen atomok építik fel, továbbá azok milyen kémiai kötással kapcsolódnak egymáshoz. A legtöbb atom (illetve ion) átmérője 0,1–0,3 nm, azaz 100–300 pm közé esik. Az atomok dimenziójának hagyományos mértékegysége az „Ångström” volt ( $1 \text{ Å} = 0,1 \text{ nm} = 1 \times 10^{-10} \text{ m}$ ), amit az anyag szerkezetének svéd kutatójáról, Anders Jonas Ångströmről neveztek el (Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

Az **atommagot** pozitív töltésű proton(ok) és elektromosan semleges, töltést nem hordozó neutron(ok) alkotják, ezeket együttesen **nukleon**nak nevezzük. **Kémiai reakciók** során az atommag változatlan marad. Az atomban található protonok száma a **rendszám** (jele: Z), a neutronok száma a **neutronsám** (jele: N), míg összegük a **tömegszám** (jele: A;  $A = Z + N$ ). Ez az elnevezés arra utal, hogy az atom tömegét döntően az atommagot alkotó szubatomi részecskék száma határozza meg, hiszen az elektron tömege nagyságrendekkel kisebb (2. táblázat), az atommag tömegéhez képest gyakorlatilag elhanyagolható (Boksay et al., 1987; Rózsahegyi, 1993; Atkins, 1995; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

### 2. táblázat

Az anyagot (atomot) alkotó szubatomi részecskék jelölése és legfontosabb jellemzőik  
Boksay et al. (1987), Atkins (1995) és Whitten et al. (2014) nyomán

<b>Részecske (jelölés)</b>	<b>Hozzávetőleges tömeg (amu)</b>	<b>Relatív töltés</b>
<b>proton</b> (p vagy $p^+$ )	1	+1
<b>neutron</b> (n vagy $n^0$ )	1	0
<b>elektron</b> (e vagy $e^-$ )	0*	–1

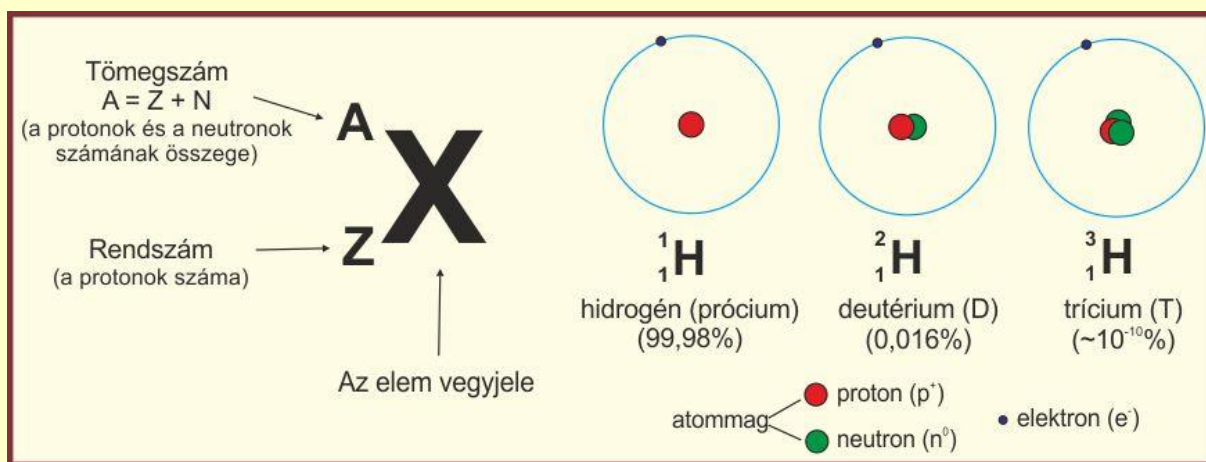
amu: atomi tömegegység (*atomic mass unit*);  $1 \text{ amu} = 1,6605 \times 10^{-24} \text{ g}$

\*az elektron tömege a proton tömegének 1/1836 része

Az atommagot annyi negatív töltésű elektron veszi körül, ahány protont tartalmaz, azaz az atom elektromosan semleges. Ez azt jelenti, hogy az atomban a protonok és az elektronok száma azonos. Léteznek olyan atomok is, amelyek magjában a protonok száma megegyezik (azonos a rendszámuk és így az elektronszámuk is), viszont a neutronok számában eltérést mutatnak. Ezeket az azonos rendszámú, de eltérő tömegszámú, ezért különböző atomokat („**izotóp**

**atomok**”) együttesen elemnek nevezzük. Az **elem** tehát azonos rendszámú atomok halmaza. Azt az elemet, amelynek magjában kizárólag egy proton van ( $Z=1$ ), hidrogénnek nevezzük. A hidrogén három különböző tömegszámú izotóp — a prócium (hidrogén, H), a deutérium (D) és a trícium (T) — keveréke (Atkins, 1995; Greenwood, Earnshaw, 2004; Schiller, 2013). A magjukban két protont tartalmazó atomok rendszere a hélium ( $Z=2$ ); a három protont tartalmazó atomagokból álló atomi halmaz a lítium ( $Z=3$ ), és folytathatnánk tovább a sort az elemek birodalmában a rendszám fokozatos növelésével (Nyilasi, 1975; Atkins, 1995; Whitten et al., 2014).

Az elemeket a latin vagy görög nevükből származó rövidítéssel, a **vegyjellel** jelöljük (3. ábra), ami általában egy (pl. hidrogén, H) vagy két betűből áll (lítium, Li; az első betűt nagybetűvel írjuk). A mesterségesen előállított elemek között találhatunk 3 betűs elnevezést is (pl. Uup, ununpentium,  $Z=115$ ) a korábbi táblázatokban, ez az elem latin nyelvű rendszámának rövidítése (Rózsahegyi, 1993; Atkins, 1995; Greenwood, Earnshaw, 2004). A 3. táblázat olyan gyakori elemeket tartalmaz, amelyeknek kiemelkedő jelentősége van a világegyetem és a Föld felépítésében.



**3. ábra**

Az elem vegyjele és az atom felépítése a hidrogén példáján (Boksay et al., 1987; Atkins, 1995; Whitten et al., 2014; Gill, 2015)

A középkorban még csak kilenc elemet ismertek: az aranyat (Au, *aurum*: sárga), az ezüstöt (Ag, *argentum*: fénylő), a rezet (Cu, *cuprum*: ciprusi), az ónt (Sn, *stannum*: könnyen olvadó), az ólmot (Pb, *plumbum*: nehéz), a higanyt (Hg, *hydrargyrum*: ezüstös víz), a vasat (Fe, *ferrum*), a ként (S, *sulphur*) és a szenet (C, *carbon*). Ezeket többnyire valamelyik jellemző tulajdonságukról nevezték el (Atkins, 1995; Whitten et al., 2014). Ma azonban már meghaladja a 115-öt az ismert elemek száma, közülük számos neve földrajzi vonatkozású (4. táblázat).

### 3. táblázat

A csillagok (pl. Nap; H és He), a hidroszféra (víz; H és O), a bioszféra (C, H, O, N, P, S) és a földkéreg leggyakoribb elemei Greenwood és Earnshaw (2004), Albarède (2009), Whitten et al. (2014) és Gill (2015) nyomán

Rendszám	Vegyjel	Név	Rendszám	Vegyjel	Név
1	H	hidrogén	15	P	foszfor
2	He	hélium	16	S	kén
6	C	szén	19	K	kálium
7	N	nitrogén	20	Ca	kalcium
8	O	oxigén	22	Ti	titán
11	Na	nátrium	25	Mn	mangán
12	Mg	magnézium	26	Fe	vas
13	Al	alumínium	28	Ni	nikkel
14	Si	szilícium	92	U	urán

A földkéregben a vastagon szedett elemek átlagos koncentrációja oxidos formára vonatkoztatva (pl.  $\text{Na}_2\text{O}$ ,  $\text{MgO}$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$  stb.) meghaladja az 0,1 tömeg%-ot (ún. főelemek)

A földrajzi névből származó elemnevek között az öreg kontinens, Európa szolgáltatja a legtöbb *elemi* nevet, maga a kontinens is névadó (Eu: eurórium), de országai, tartományai, városai is szép számmal képviseltetik magukat; sőt egy folyója, a Rajna (rénium) szintén felfedezhető a nevek sorában (4. ábra).



4. ábra

Európához kapcsolódó földrajzi vonatkozású elemnevek Whitten et al. (2014) nyomán, kiegészítve (iupac.org)

#### 4. táblázat

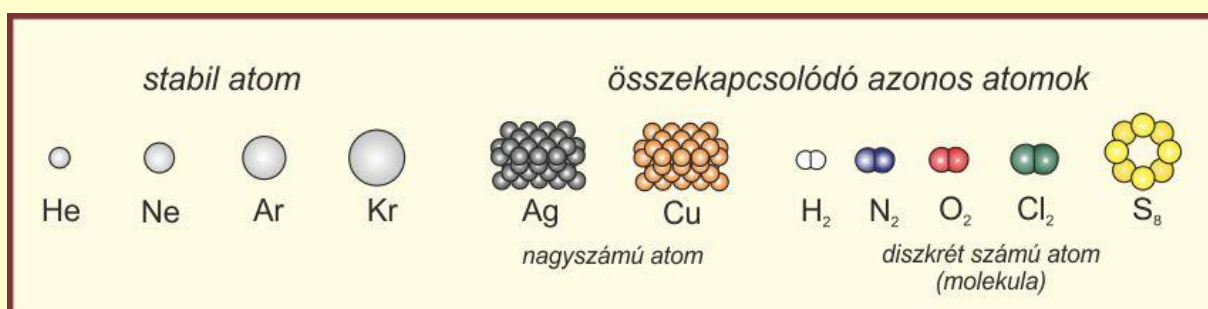
Földrajzi vonatkozású elemnevek Atkins (1995), Greenwood és Earnshaw (2004) és Whitten et al. (2014) nyomán, kiegészítve (iupac.org)

Z	Vegyjel	Név	Név eredete (földrajzi megnevezés)
12	Mg	magnézium	az ókori görögországi (thesszáiai) Magnésziában lévő fehér földön (latinul <i>magnes carneus</i> ) található ércből állítható elő; <i>magnesia alba</i> (MgCO <sub>3</sub> )
21	Sc	szkandium	Skandinávia
25	Mn	mangán	az ókori görögországi (thesszáiai) Magnésziában található ércből állítható elő; <i>magnesia nigri</i> (MnO <sub>2</sub> )
29	Cu	réz	<i>cuprum</i> , Ciprus szigetén gazdag lelőhelye volt
31	Ga	gallium	1. Franciaország, latinul <i>Gallia</i> 2. felfedezőjének neve (rejtetten magáról nevezte el): François Lecoq de Boisbaudran (a francia kakas, <i>le coq</i> , latinul <i>Gallus gallus</i> )
32	Ge	germánium	Németország
38	Sr	stroncium	Strontian község, Skócia
39	Y	ittrium	Ytterby svéd város Stockholm közelében
44	Ru	ruténium	Ruthenia (Oroszország)
48	Cd	kadmium	kadmeiai föld, ókori Görögország (Théba)
63	Eu	európium	Európa
65	Tb	terbium	Ytterby svéd város Stockholm közelében
67	Ho	holmium	Stockholm, latinul <i>Holmia</i>
68	Er	erbium	Ytterby svéd város Stockholm közelében
69	Tm	túlium	Skandinávia régi neve Thulium
70	Yb	ytterbium	Ytterby svéd város Stockholm közelében
71	Lu	lutécium	Párizs, latinul <i>Lutetia</i> , a fény városa
72	Hf	hafnium	Koppenhága, latinul <i>Hafnia</i>
75	Re	rénium	Rajna folyó, latinul <i>Rhenus</i>
84	Po	polónium	Lengyelország
87	Fr	francium	Franciaország
95	Am	amerícium	Amerika
97	Bk	berkélium	Berkeley város (a Berkeley-ben lévő University of California kutatóinak állít emléket), USA
98	Cf	kalifornium	Kalifornia állam (a Berkeley-ben lévő University of California kutatóinak állít emléket), USA
105	Db	dubnium	Dubna orosz város
108	Hs	hasszium	Hessen, latinul <i>Hassia</i> , németországi tartomány
110	Ds	darmstadtium	Darmstadt német város
113	Nh	nihonium	Japán, japánul <i>Nihon</i>
115	Mc	moszkovium	Moszkvai terület, Oroszország
117	Ts	tennesszium	Tennessee állam, USA

#### Tipp tanárszakosoknak:

Európa földrajzának tanításakor érdemes beépíteni az óra anyagába a „kémiai elemek földrajzát”. A periódusos rendszer és egy térkép segítségével a földrajzi nevek és a róluk elnevezett elemek összepárosíthatók.

Az elemek az anyag olyan formáját képviselik, ami kémiai úton tovább nem bontható, azaz egy elem *egyféle* atomból áll. A természetben találunk olyan elemeket, amelyek atomjai stabilak, ezért elemi állapotban gyakorlatilag független atomok halmazaként jelennek meg (5. ábra). Ilyenek a nemesgázok: a hélium (He), a neon (Ne), az argon (Ar), a kripton (Kr) és a xenon (Xe). Szobahőmérsékleten és normál légköri nyomáson azonban az izolált atomok általában nem stabilak, ezért az atomok többsége összekapcsolódva alkot stabil formát (Atkins, 1995; Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014).



### 5. ábra

Atomból elem: az anyag stabil, kémiai változással kisebb részekre nem bontható formái

A fémes elemeknél nagyszámú atom kapcsolódik össze, háromdimenziós végtelen rácsnak megfelelően, ami az adott tiszta fém elemi állapotát jelenti. Ilyenek például a nemesfémek (Au, arany; Ag, ezüst; Cu, réz; Pt, platina), a higany (Hg) vagy a vas (Fe). A félfémek és a nemfémes elemek között is találunk hasonló, nagyszámú atom összekapcsolódásával kialakított stabil formát, ilyen például a szén (C) két ásványtani szempontból is jelentős módosulata, a grafit és a gyémánt. Annak ellenére, hogy ezekben az elemekben összekapcsolódnak az atomok, azokat nem tudjuk megszámolni, ezért ezeket az elemeket egyszerűen szintén a vegyjelükkel adjuk meg (Atkins, 1995; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

A nemfémes elemeknél a reakcióképes, kémiai szempontból instabil atomok úgy is stabilizálódhatnak, hogy két vagy több azonos atom kapcsolódik össze nagyon kicsi, elektromosan semleges, diszkrét egységeket, úgynevezett molekulákat formálva. A **molekula** erős kémiai kötéssel összekapcsolódott, véges atomok halmazát jelenti. A kapcsolódó atomok számát pontosan meg tudjuk határozni, annak fontos szerepe van a molekula összegképletének megadásakor (Boksay et al., 1987; Rózsahegyi, 1993; Atkins, 1995; Whitten et al., 2014).

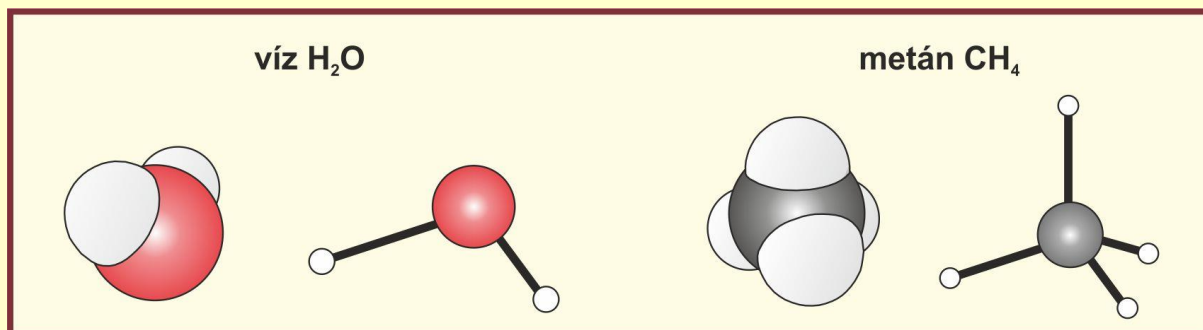
Mind az atomok, mind a molekulák mérete olyan kicsi, hogy megjelenésük, illetve a közöttük lévő különbség gyakorlatilag elképzelhetetlen, megfoghatatlan számunkra. A szemléltetés eszközeként az erősen felnagyított modelljük terjedt el. A különböző atomoknak különböző színek felelnek meg, ezek közül a legfontosabbak: hidrogén – fehér, szén – fekete, nitrogén – kék, oxigén – piros, klór – zöld, jód – lila, bróm – vörösbarna, kén – sárga. Az alkalmazott modellek bizonyos szempontokat kiragadva mutatják be az atomokat és a molekulákat. A szorosan érintkező, gömbszerű formákból álló kalottamodell a kapcsolódó atomok számát és anyagi minőségét mutatja meg egy molekulában. A gömb- és pálcikamodell segítségével viszont a kapcsolódás módja is látható (Whitten et al., 2014). Az **5. ábrán** néhány egyszerű molekula alakját bemutató kalottamodell rajza szintén megtalálható.

A magányos hidrogénatom (H), nitrogénatom (N), oxigénatom (O) nem stabil. Szobahőmérsékleten ezek az atomok párosával összekapcsolódnak, kétatomos (diatomos) molekulákat képeznek (**5. ábra**). Ilyen körülmények között tehát a hidrogén elemi formájának **molekulaképlete**  $H_2$ , az oxigéné  $O_2$ , a nitrogéné  $N_2$ . Szintén kétatomos molekulákat alkotnak a sóképző halogénatomok, a fluor ( $F_2$ ), a klór ( $Cl_2$ ), a bróm ( $Br_2$ ) és a jód ( $I_2$ ). Más elemek azonban ezeknél bonyolultabb, többatomos (poliatomos) molekulát hozhatnak létre. Közöséges körülmények között a foszfor egyik elemi módosulata négyatomos ( $P_4$ ), az egyik kénváltozat pedig nyolcatomos gyűrűből álló molekulával ( $S_8$ ) rendelkezik (Boksay et al., 1987; Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014).

A természetben több mint 30 azoknak a kémiai elemeknek a száma, amelyek a légkörben, illetve a földkéregben elemi formában megtalálhatók (Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014). Ezeket összefoglaló néven **terméselemek**nek nevezzük. A szilárd állapotú terméselemek önálló **ásvány**ként fordulnak elő, a gyakoribb elemek sorrendje a következő: szén, kén, arany, platinafémek, réz és bizmut. A természetes eredet és a „tisztá” elemi összetétel kihangsúlyozására ezeket gyakran a „termés-” előtaggal látják el: terméskén, *termésfém*, termésarany, termésréz, termésbizmut stb. (Koch, Sztrókay, 1994).

Molekulákat nem csak azonos atomok képezhetnek (**6. ábra**). A közismert víz például két hidrogénatom és egy oxigénatom összekapcsolódásával jön létre, molekulaképlete:  $H_2O$ . A földgáz egyik legfontosabb összetevője, a metán szintén különböző atomok alkotta molekula, képlete:  $CH_4$ . A metánban egy központi szénatomhoz kapcsolódik négy hidrogénatom úgy, hogy a térben a lehető

legtávolabb helyezkedjenek el egymástól (ún. tetraéderes elrendeződés). Ezeket és a hozzájuk hasonló, két vagy több különböző elemből álló anyagi halmazokat (pl.  $\text{CO}_2$ ,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{HCl}$ ) tágabb értelemben a vegyületek közé soroljuk (Whitten et al., 2014).



**6. ábra**

Különböző elemekből álló molekulák: a V-alakú víz és a tetraéderes elrendeződésű metán kalotta (térkitöltő)- (balra), illetve gömb- és pálcikamodelljének (jobbra) rajza. Mindkét esetben a különböző elemek erős kötéssel kapcsolódnak össze a molekula képződésekor. Ezek nem elemek, hanem vegyületek, hiszen megfelelő kémiai reakciókkal kisebb, önállóan létező elemekre bonthatók (a víz hidrogénre és oxigénre; a metán szénre és hidrogénre).

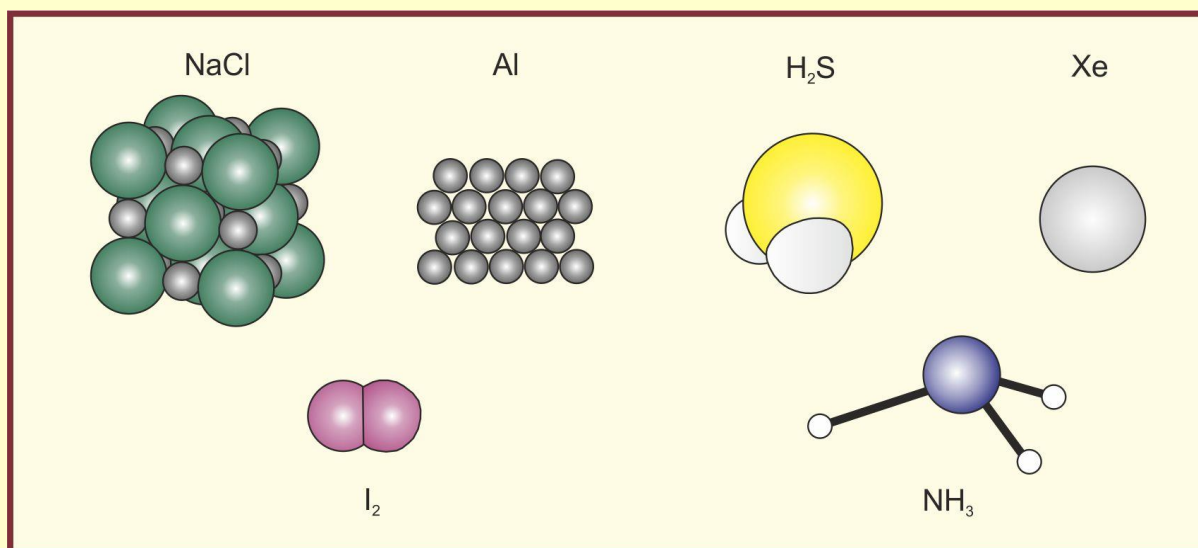
Itt az idő, hogy pontosabban megfogalmazzuk azt, hogy mit értünk **vegyület** alatt! A vegyületek az anyag olyan stabil formái, amelyek felépítésében kettő vagy több, különböző elem vesz részt (Rózsahegyi, 1993; Whitten et al., 2014). A vegyületek egyik típusát alkotják a fentebb tárgyalt, diszkrét számú atomból álló, két- vagy többelemes molekulák (6. ábra). Ezeknél pontosan meg tudjuk adni a kapcsolódó atomok számát, amit a molekulaképlet szintén kifejez.

Vannak azonban olyan vegyületek is, amelyeknél meg tudjuk adni a kapcsolódó elemek mennyiségi arányát, azaz az összetételi **sztoichiometriát**, azonban nem kisszámú (véges, diszkrét számú) atom kapcsolódik össze, azaz nem beszélhetünk molekuláról. Ilyen vegyület például a közönséges konyhasó vagy kősó, ásványtani nevén a halit. Ennek tapasztalati-, azaz összegképlete  $\text{NaCl}$  (nátrium-klorid); benne a komponensek 1:1 arányban kapcsolódnak össze (Koch, Sztrókay, 1994). További érdekesség, hogy a kősót nem egyszerű atomok alkotják, hanem a nátriumatomból egy elektron leadásával keletkezett, egyszeres pozitív töltésű nátriumion ( $\text{Na}^+$ ) és a klóratomból egy elektron felvételével keletkezett, egyszeres negatív töltésű kloridion ( $\text{Cl}^-$ ) között jön létre kémiai kölcsönhatás. A semleges atomból elektronleadással létrejött pozitív töltésű **ion** a **kation**, míg elektronfelvétel során **anion** keletkezik (Rózsahegyi, 1993; Whitten et al., 2014). Az ellentétes töltésű ionok között fellépő elektrosztatikus vonzás nagyszámú iont rendez „végtelen”

térrácsba, ezzel kialakítva a nátrium-kloridot; ennek egy kis részletét mutatja be a **7. ábra**. Ebben a vegyületben minden nátriumiont hat kloridion, illetve minden kloridiont hat nátriumion vesz körül azonos távolságban, ez ismétlődik a tér mindhárom irányában (Koch, Sztrókay, 1994; Whitten et al., 2014). Az ellentétes töltésű ionokból álló, összességében elektromosan semleges vegyületeket, a fentebb ismertetett molekulákat, illetve a terméselemeket összetartó kémiai kölcsönhatások, kémiai kötések részletes tárgyalására az **5. fejezet** tér majd ki.

A kémiai alapok eddigi áttekintésekor láttuk, hogy a molekulák építőkövei az atomok, továbbá számos elem és vegyület molekulákból áll. Vegyületet azonban ellentétes töltésű ionok is formálhatnak. Ha megtanultad az alapfogalmakat, kémiai szakkifejezéseket, és figyelmesen megnézted az eddigi magyarázó rajzokat, válaszolni tudsz a **7. ábrával** kapcsolatos kérdésekre is.

- 1. Melyik modell ábrázol atomot?
- 2. Melyik modell ábrázol molekulát?
- 3. Melyik modell felel meg az anyag elemi formájának?
- 4. Melyik modell mutat be vegyületet?
- 5. Melyik modell állhat összekapcsolódó ionokból?



**7. ábra**

Atomok (ionok), elemek, molekulák, vegyületek: modellezhető különbség

Az első kérdésre nagyon gyorsan megtalálhatod a választ, ha arra gondolsz, hogy az atom az elemek legkisebb egysége. Ennek az ábrán a xenont (Xe) jelölő gömb felel meg, ami egyike a nemesgázoknak.

A molekula összekapcsolódott két vagy több (véges, diszkrét, azaz meghatározott számú) atomot jelent, ezt a feltételt a **7. ábrán** a  $\text{H}_2\text{S}$ , az  $\text{I}_2$  és az  $\text{NH}_3$  elégíti ki. Az egy — sárga színnel jelölt — kénatomból és két hidrogénatomból (fehér) álló, a vízhez hasonló alakú molekula a kén-hidrogén ( $\text{H}_2\text{S}$ ). Ez egy színtelen, kellemetlen, záptojás-szagú, mérgező gáz. Kéntartalmú szerves anyagok (pl. fehérjék) rothadása során keletkezik. A két jódatomból álló jódmolekula ( $\text{I}_2$ ) a korábban bemutatott klórhoz hasonlóan egy halogén. Ez közönséges körülmények között lilásfekete színű, fémesen csillogó kristályos szilárd anyag. A gömb- és pálcikamodell pedig az ammónia ( $\text{NH}_3$ ) összetételét és szerkezetét mutatja, ami egy nitrogénatomból (kék) és három hidrogénatomból (fehér) álló molekula. Szúrós szagú, maró hatású, mérgező gáz. Nitrogéntartalmú szerves anyagok rothadásakor keletkezhet, illetve oldott anyag formájában a vízben is megtalálható (Greenwood, Earnshaw, 2004).

Az elemek definíció szerint egyféle atomból állnak, ezek vagy önállóak, vagy összekapcsolódva alkotják az anyag stabil formáját. A **7. ábrán** ezért három elemet tudunk megkülönböztetni: a nagyszámú összekapcsolódó fématomot képviselő alumíniumot (Al), az atomos formában stabil nemesgázt, a xenont (Xe) és a diatomos molekulákból álló jódot ( $\text{I}_2$ ).

Bármely vegyületet legalább kétféle, különböző elem alkot, ezért a vegyületek közé a nátrium-kloridot ( $\text{NaCl}$ ), a kén-hidrogént ( $\text{H}_2\text{S}$ ), és az ammóniát ( $\text{NH}_3$ ) sorolhatjuk. A kőso modellje a nagyszámú összekapcsolódó ion által alkotott háromdimenziós szerkezet egy kis részletét mutatja csak, az összegképlet viszont az összetevők 1:1 arányát tükrözi (**7. ábra**). A modell és a tapasztalati képlet közötti különbség már utal arra, hogy ebben az esetben nem molekuláról, hanem vegyületről van szó. A fentiek közül ez az egyedüli olyan anyag, ami ionok összekapcsolódásával jön létre.

A vegyületek — akár molekulákból, akár ionokból állnak — elektromosan semlegesek, ezért ionvegyületeknél a kapcsolódó ionok töltései kiegyenlítik egymást. Ahhoz, hogy egy ilyen vegyület összegképletét fel tudjuk írni, ismernünk kell az alkotó ionok töltését. A kalcium-klorid kalciumionokból ( $\text{Ca}^{2+}$ ) és kloridionokból ( $\text{Cl}^-$ ) áll, a vegyület elektromos töltést nem hordoz, ezért benne a kloridionok mennyisége kétszerese a kalciumionokénak (1:2 arány), azaz  $\text{CaCl}_2$  a vegyület **tapasztalati képlete**. Mind a kationok, mind az anionok között vannak egyszerű ionok, ezek egyféle atomból jönnek létre, továbbá vannak összetett ionok, amiket többféle

összekapcsolódó atom alkot, azaz poliatomosak. Ilyen gyakori összetett ion az ammóniumion ( $\text{NH}_4^+$ ) és a szulfátion ( $\text{SO}_4^{2-}$ ), ezek kombinációjakor létrejövő ionvegyület az ammónium-szulfát. A töltésszemlegesség miatt az összetett kationból kétszeres mennyiség kell, amit az összegképletben a következő módon jelölünk:  $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ , azaz zárójelbe tesszük az összetett iont, ha annak aránya egynél nagyobb. A leggyakoribb egyszerű és összetett ionokat az **5. táblázat** foglalja össze.

### 5. táblázat

A leggyakoribb egyszerű és összetett ionok (Whitten et al. 2014, módosítva)

Gyakori kationok (pozitív töltés)			Gyakori anionok (negatív töltés)		
Jelölés	Töltés	Név	Jelölés	Töltés	Név
$\text{H}^+$	1+	hidrogénion	$\text{F}^-$	1–	fluoridion
$\text{Li}^+$	1+	lítiumion	$\text{Cl}^-$	1–	kloridion
$\text{Na}^+$	1+	nátriumion	$\text{Br}^-$	1–	bromidion
$\text{K}^+$	1+	káliumion	$\text{I}^-$	1–	jodidion
$\text{NH}_4^+$	1+	ammóniumion	$\text{OH}^-$	1–	hidroxidion
$\text{Ag}^+$	1+	ezüstion	$\text{CH}_3\text{COO}^-$	1–	acetátion
$\text{H}_3\text{O}^+$	1+	oxóniumion	$\text{NO}_2^-$	1–	nitrition
$\text{Mg}^{2+}$	2+	magnéziumion	$\text{NO}_3^-$	1–	nitrátion
$\text{Ca}^{2+}$	2+	kalciumion	$\text{O}^{2-}$	2–	oxidion
$\text{Zn}^{2+}$	2+	cinkion	$\text{S}^{2-}$	2–	szulfidion
$\text{Cu}^+$	1+	réz(I)-ion	$\text{SO}_3^{2-}$	2–	szulfition
$\text{Cu}^{2+}$	2+	réz(II)-ion	$\text{SO}_4^{2-}$	2–	szulfátion
$\text{Fe}^{2+}$	2+	vas(II)-ion (ferro-)	$\text{CO}_3^{2-}$	2–	karbonátion
$\text{Fe}^{3+}$	3+	vas(III)-ion (ferri-)	$\text{HCO}_3^-$	1–	hidrogénkarbonátion
$\text{Al}^{3+}$	3+	alumíniumion	$\text{PO}_4^{3-}$	3–	foszfátion

Azoknál a fém kationoknál, ahol többféle töltésű ion is stabil lehet, a név megadásakor a töltést római számmal, zárójelben adjuk meg, pl. vas(II)-ion. Az anionok végződése utal arra, hogy milyen (pl. egyszerű vagy összetett) ionról van szó, ezért erre kiemelten figyelni szükséges!

### Megjegyzés:

Ahhoz, hogy a kémiai reakcióegyenleteket helyesen fel tudd írni, a későbbiekben is emlékezned kell azokra a gyakori elemekre, amelyek közönséges körülmények között kétatomos molekulákat formálnak! Ezek:  $\text{H}_2$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{F}_2$ ,  $\text{Cl}_2$ ,  $\text{Br}_2$  és  $\text{I}_2$ .

A molekulaképletben és az ionvegyületek összegképletében az összekapcsolódó atomok számát, illetve arányát megadó egynél nagyobb egész számot az adott elem vegyjele után alsó indexben írt számmal adjuk meg (pl.  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{CaCl}_2$ ).

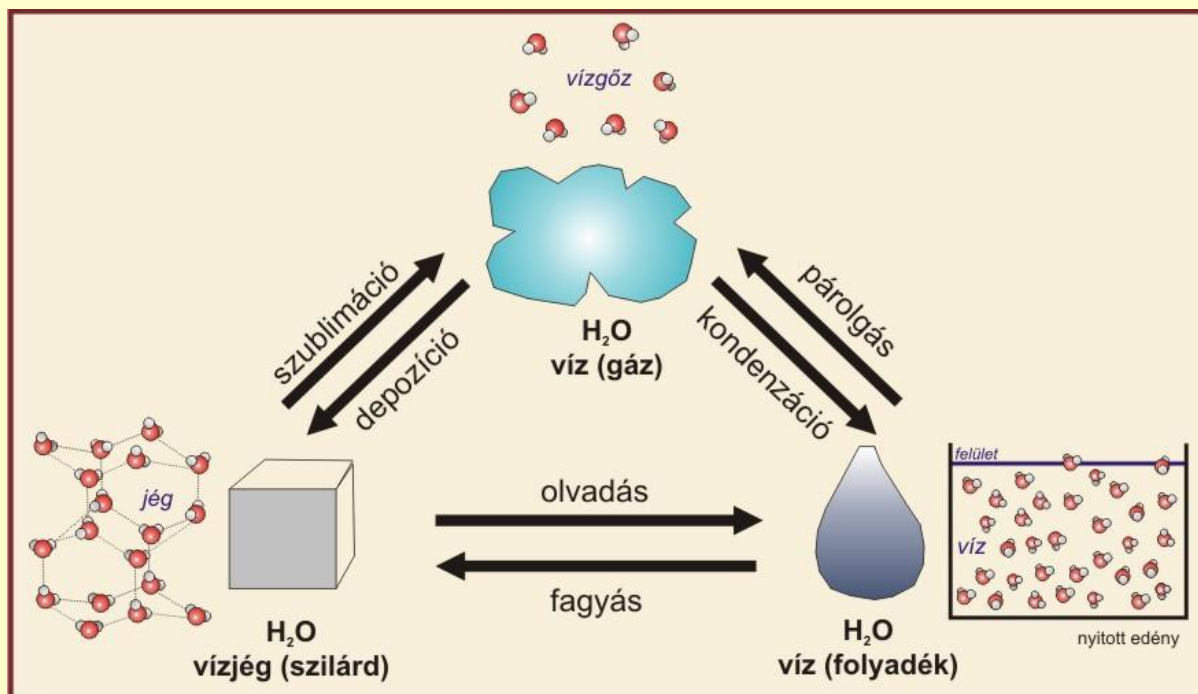
Az ionok töltését jobb felső indexben adjuk meg úgy, hogy többszörös töltés esetén a számot a töltés jele (+ vagy –) elé kell írni (pl.  $\text{Na}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Fe}^{3+}$ ,  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{O}^{2-}$ )!

Nagyon fontos, hogy megtanuld a gyakori egyszerű és összetett (poliatomos) ionok nevét, képletét és töltését! Ez elengedhetetlen ahhoz, hogy felismerd őket a különféle ionvegyületek összegképletében (pl.  $\text{CaCO}_3$ :  $\text{Ca}^{2+}$  és  $\text{CO}_3^{2-}$ -ionokból áll, azaz kalcium-karbonát).

Az ionvegyületek elnevezésekor és tapasztalati képletének megadásakor általában a kationt vesszük előre (pl. kalcium-fluorid:  $\text{CaF}_2$ ; de nátrium-acetát:  $\text{CH}_3\text{COONa}$ ).

## 1.2. Az anyag halmazállapotai és tulajdonságai

Bármely anyag alapvetően három különböző halmazállapotú formában létezhet: lehet szilárd, folyékony vagy gáz (8. ábra). A **szilárd anyagok** általában merevek, és határozott alakkal rendelkeznek. Térfogatuk nem változik számottevően a hőmérséklet vagy a nyomás megváltozása során. A szilárd anyagot alkotó részecskék helyhez kötöttek, általában valamilyen szabályos rendnek megfelelően egymáshoz közel helyezkednek el, közöttük erős kölcsönhatás lép fel. A **folyadékok** térfogata szintén állandó, azonban a folyékony anyagok folynak, felveszik a tárolóedény alakját. A folyadékrészecskék, noha egymáshoz közel vannak, többnyire véletlenszerűen helyezkednek el. Az őket összetartó erők jóval gyengébbek, mint a szilárd anyagokban. A **gázokat** alkotó atomok vagy molekulák egymástól távol vannak, a közöttük fellépő kölcsönhatás gyakorlatilag elhanyagolható. A gázok kitöltik a rendelkezésükre álló teret, azaz képesek a kiterjedésre; másrészt nagymértékben összenyomhatók (Boksay et al., 1987; Whitten et al., 2014).



8. ábra

Anyag és halmazállapot: fizikai változás állandó kémiai összetétel mellett a víz példáján keresztül bemutatva

Egy elem szobahőmérsékleten és normál légköri nyomáson, azaz közönséges körülmények között, lehet gáz (pl. hélium, He; nitrogén, N<sub>2</sub>; oxigén, O<sub>2</sub>; fluor, F<sub>2</sub>, klór, Cl<sub>2</sub>), folyékony (bróm, Br<sub>2</sub> vagy higany, Hg), vagy szilárd (pl. réz, Cu; arany, Au; ezüst, Ag; jód, I<sub>2</sub>) halmazállapotú (Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014). Az anyag halmazállapota a környezet fizikai tulajdonságainak (pl. nyomás és/vagy a hőmérséklet) megváltozásakor megváltozhat. A halmazállapot-változások tehát **fizikai változások** (Whitten et al., 2014).

Az a fizikai folyamat, amikor a szilárd anyag közvetlenül gáz halmazállapotúvá alakul (a folyékony állapot kihagyásával) a **szublimáció**. Ellentétes változás a kondenzáció vagy **depozíció, lerakódás** (gáz–szilárd átalakulás). A folyadék gázzá (gőzzé) alakulása a **párolgás (evaporáció)**, míg a gázok a **kondenzáció (le- vagy kicsapódás)** során alakulnak folyékony halmazállapotúvá. A szilárd anyagok az **olvadás** révén válnak folyadékká, míg a folyadék a **fagyás** során vesz fel szilárd halmazállapotot (Rózsahegyi, 1993; Whitten et al., 2014). A víz egy olyan közönséges anyag, aminek mindhárom halmazállapotú formáját (vízgőz, folyékony víz, vízjég) jól ismerjük. Normál légköri nyomáson a kémiaiilag tiszta jég 0 °C-on megolvad, 100 °C-on pedig a víz felforr, gőzzé alakul (8. ábra). Földtudományi szempontból különleges jelentőségű a víz. Nem csak a vízburok (hidroszféra) és az élővilág szempontjából alapvető a jelenléte, de az ásványok szerkezetébe is beépülhet, továbbá a légköri (meteorológiai) jelenségek között is meghatározó a szerepe (Koch, Sztrókay, 1994; Péczely, 1994; Hetényi, 1999; Gelencsér et al., 2012; Farsang, 2014). Gázként a vízgőz a levegő egyik alkotója, folyadékként a felhőképződés szempontjából kell megemlítenünk. A folyékony halmazállapotú hulló csapadék a jól ismert eső, a harmat pedig a földfelszínen, illetve felszínközeli (pl. növényzeten) vízcseppek formájában megfigyelhető, nem hulló csapadék (Farsang, 2014). A szilárd halmazállapotú csapadékok között szintén megkülönböztethetünk hulló (jégeső, hó) és nem hulló (dér, zúzmara) változatokat (9. ábra).

#### **Megjegyzés:**

Szobahőmérsékleten és normál légköri nyomáson összesen két elem halmazállapota folyadék. Egyikük az egyetlen cseppfolyós fém, a higany (Hg), amit jó hővezetőképessége és hőtágulása miatt lázmérőkben, hőmérőkben alkalmaznak. A másik a bróm (Br<sub>2</sub>), ami egy halogénelem, vörösbarna színű, könnyen párolgó, maró hatású, mérgező folyadék (Greenwood, Earnshaw, 2004). Ezeket tanuld meg!

A higany elemi formában, terméshiganyként is megjelenik a természetben, ami egy ásvány, kivételként a folyékony halmazállapotú ásványok egyike.



### 9. ábra

A szilárd halmazállapotú csapadékok jellegzetes formái

**Jég** (balra fent): a felszínre hullott akár több mm-es (ritkán cm-es nagyságrendű), gömbölyded jég szemek egy nyári zivatart követően; **hópehely** (jobbra fent): hatágú csillaghoz hasonló jégkristályokból álló, fagyott hulló csapadék; **dér** (balra lent): a földfelszínen, illetve felszínközben megjelenő, szilárd, nem hulló csapadék („fagyott harmat”); **zúzmara** (jobbra lent): mozgó levegőből kicsapódó, szilárd (jégkristályokból álló), nem hulló csapadék (Farsang, 2014).

#### Megjegyzés:

Az ásvány olyan természetes eredetű, döntő részben elem vagy szervesetlen vegyület, amely általában határozott belső szerkezettel, általában adott kémiai összetétellel és fizikai sajátsággal rendelkezik, néhány kivételtől eltekintve szilárd halmazállapotú (Koch, Sztrókay, 1994). Ennek megfelelően a szilárd vízjég (pl. a hópehely, a zúzmara) is ásvány, hiszen természetes anyag, szervesetlen vegyület alkotja, határozott (kristályos) belső szerkezetű, ismert kémiai összetételű ( $H_2O$ ), illetve fizikai tulajdonságai (pl. olvadási- és forráspont) szintén megadhatók. Ilyen értelemben a víz is ásvány, ami kivételtként a folyékony halmazállapotú ásványok egyike.

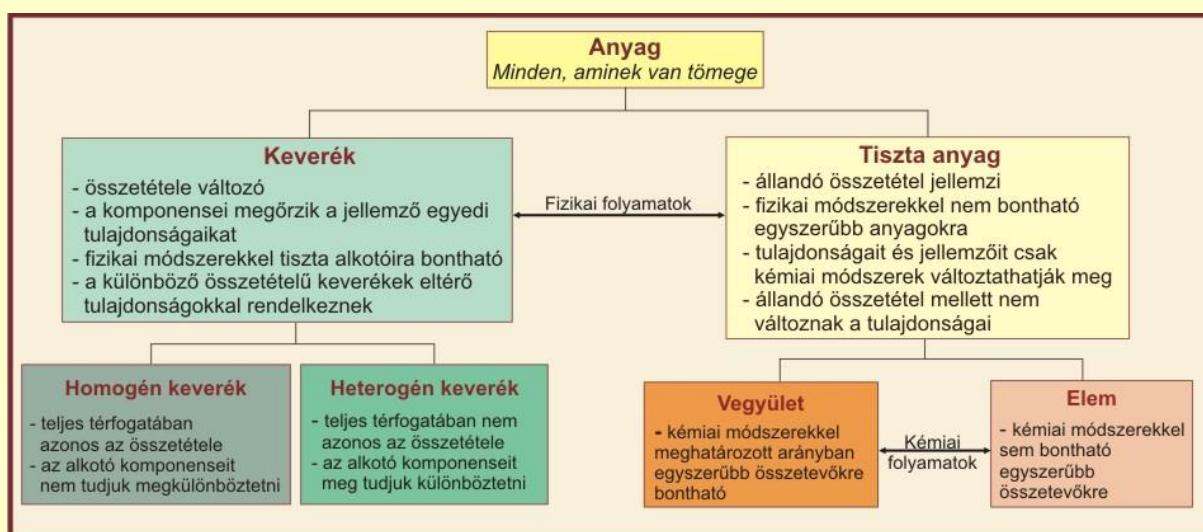
A halmazállapoton túl minden anyag rendelkezik olyan tulajdonságokkal, amiket meg tudunk figyelni, miközben a kémiai összetétel nem változik meg. Ezek az úgynevezett **fizikai tulajdonságok** (6. táblázat). A leggyakoribb fizikai tulajdonságok a következők: szín, sűrűség, keménység, **olvadáspont** és **forráspont**, elektromos- és hővezetőképesség (Whitten et al., 2014). A fizikai tulajdonságok között tartjuk számon az oldhatóságot is (pl. egy adott anyag oldódik-e vízben vagy nem). Abban az esetben azonban, ha a kiindulási anyagunk kémiai összetétele megváltozik, már kémiai változásról, **kémiai reakció**ról van szó. Ezek anyagi minőség megváltozásával járó folyamatok. Kémiai változás a hidrogéngáz égése (oxidáció), azaz a hidrogén és az oxigén reakciója, amely során víz (tehát új anyag) keletkezik. Kémiai változás a metán égése is, ekkor víz és szén-dioxid lesz a reakció terméke. Egy anyag **kémiai tulajdonságai** azt tükrözik, hogy egy adott másik anyaggal kémiai reakcióba lép-e vagy sem, illetve ez a változás milyen gyorsan (pl. robbanásszerű, heves, lassú, melegítést igényel, fény váltja ki a reakciót stb.) megy végbe, azaz milyen jellemzők írják le a kémiai átalakulási folyamatait (6. táblázat).

#### 6. táblázat

Néhány gyakori anyag legfontosabb fizikai és kémiai tulajdonságai közönséges körülmények között (Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014)

elem/vegyület	fizikai tulajdonságok				kémiai tulajdonságok
	szín	olvadáspont (°C)	forráspont (°C)	egyéb	
hidrogén (H <sub>2</sub> )	színtelen	-259,1	-252,9	gáz; nem fémes	éghető, gyúlékony, redukálószer
oxigén (O <sub>2</sub> )	színtelen	-218,8	-183,0	gáz; nem fémes	táplálja az égést, erős oxidálószer
metán (CH <sub>4</sub> )	színtelen	-182,5	-161,5	gáz, a levegőnél kisebb sűrűségű; vízben alig oldódik	éghető, gyúlékony
víz (H <sub>2</sub> O)	színtelen	0	100	folyadék; jó oldószer (pl. ionvegyületek); sűrűsége 4 °C-on a maximális	nem éghető, nátriummal hevesen reagál (H <sub>2</sub> fejlődik)
szén-dioxid (CO <sub>2</sub> )	színtelen	-78	-57	gáz; a levegőnél nagyobb sűrűségű	nem éghető, kevésbé reakcióképes
vas (Fe)	szürkés-fehér	1538	2861	szilárd; fémes, szívós, jól alakítható, mágnesezhető	oxidálódik, vízzel, lúgokkal nem reagál

Az anyag halmazállapotainak és tulajdonságainak tárgyalásakor eddig kizárólag tiszta anyagokról esett szó. Vannak azonban olyan anyagok, amiket két vagy több tiszta anyag épít fel úgy, hogy a komponensek megőrzik saját kémiai összetételüket és a rájuk jellemző fizikai és kémiai tulajdonságaikat. Ezek a **keverékek** (10. ábra). Egyszerű gázkeverék például a levegő, amiben ~78% nitrogén (N<sub>2</sub>) és ~21% oxigén (O<sub>2</sub>) található. A fennmaradó 1%-ot nemesgázok, szén-dioxid és vízgőz alkotja. A keverékek összetétele nem állandó, továbbá azok összetevői megfelelő fizikai eljárásokkal (pl. bepárlás, desztilláció, fagyasztás, mágneses elválasztás) elkülöníthetők, azaz szeparálhatók egymástól (Whitten et al., 2014).



**10. ábra**

Az anyagok osztályozásának elvi sémája Whitten et al. (2014) nyomán

A természetes anyagok jelentős része olyan keveréknek tekinthető, amelyben szemmel láthatóan elkülöníthetők a komponensek, azaz a keverék nem egységes, idegen szakkifejezéssel *heterogén*. Ilyen például a köd, amelyet a gáz halmazállapotú levegőben finom eloszlású vízcseppek (folyadék) alkotnak. A füstben szintén két eltérő halmazállapotú anyag alkot heterogén keveréket: a szilárd halmazállapotú részecskék (pl. korom) a levegőben diszpergálódnak (nagyon finom eloszlásban jelennek meg). Heterogén keveréknek tekinthető az iszapos, azaz lebegő szilárd (szuszpendált) részecskéket tartalmazó folyóvíz. Amennyiben a keverék egységes tulajdonságokkal rendelkezik, *homogén* keverékről van szó, ilyen gázkeverék a tiszta levegő (Whitten et al., 2014). A homogén keverékek gyakorlatilag elegyeknek vagy oldatoknak tekinthetők (pl. sós víz, bizonyos fémötvözetek).

Az összetevők jellemző tulajdonságai alapján fizikai értelemben minden keverék szétválasztható (10. ábra). Ez azt jelenti, hogy például egy sóoldatot bepárlással az összetevőire tudunk bontani: a víz elpárologtatását követően kikristályosodik a feloldott só. Ha kvarchomok és kősó keverékét szeretnénk alkotóira szétválasztani, a sót vízzel kioldva visszamarad a tiszta kvarchomok, amit szűréssel el tudunk választani. A sóoldatból bepárlással pedig kinyerhetjük a kősót. Vasreszelék és kvarchomok keverékét mágnes segítségével lehet egyszerűen szétválasztani: a finom vasport vonzza a mágnes, ezáltal elkülöníthető a kvarchomokot alkotó ásvány szemcséktől.

Ezek az elválasztások többnyire olyan fizikai tulajdonságokra épülnek, amelyeket meg is tudunk mérni (pl. sűrűség, oldhatóság, olvadáspont). Szükség van tehát a legfontosabb mérhető paraméterek alapegységeinek áttekintésére is. A tudományos világ a metrikus rendszer nemzetközileg elfogadott egységeit használja (SI = *le Système International*, francia kifejezés rövidítése). A következőkben a tömeg, a hosszúság, a térfogat, a sűrűség, az anyagmennyiség, a nyomás és a hőmérséklet nemzetközi egységeinek rövid meghatározására térünk ki.



**11. ábra**

A tömeg nagy pontosságú mérését lehetővé tevő analitikai mérlegek egy laboratóriumban

E fejezet bevezetőjében már szó esett arról, hogy bármely testet alkotó anyag mennyiségének számszerűsítésére a tömeg megadása szolgál (11. ábra). Egy adott test tömege független a helyzetétől, azaz helyváltoztatás során nem változik meg. A

tömeg jele:  $m$ ; SI alapegysége a kilogram ( $\text{kg}$ ;  $1 \text{ kg} = 1000 \text{ g}$ ;  $1 \text{ g} = 1000 \mu\text{g}$ ). Az atomok tömegének megadásakor a szénatom tömegéhez viszonyított relatív atomtömeget használják. A **relatív atomtömeg** megadja, hogy egy atom tömege hányszor nagyobb egy 12-es tömegszámú szénatom ( $^{12}\text{C}$ ) tömegének egytizenketted részénél (Nyilasi, 1975; Boksay et al., 1987; Rózsahegyi, 1993; Atkins, 1995; Greenwood, Earnshaw, 2004; Albarède, 2009; Whitten et al., 2014).

A hosszúság (távolság; jele:  $l$ ) sztenderd egysége a méter ( $\text{m}$ ;  $1 \text{ m} = 1000 \text{ mm}$ ;  $1 \text{ mm} = 1000 \mu\text{m}$ ). Az anyagok térbeli kiterjedése miatt azonban a kémiában a tömeg mellett egy adott anyag mennyiségének megadására a térfogat terjedt el (**12. ábra**). A térfogat jele:  $V$ ; SI egysége a köbméter ( $\text{m}^3$ ), a laboratóriumi eszközökön viszont gyakran találkozunk a hétköznapiakban is használt liter ( $\text{L}$  vagy  $\text{l}$ ) mértékegységgel. A számolási feladatok helyes megoldásához ezért elengedhetetlen az átváltások rutinszerű elvégzése. Egy liter azonos egy köbdeciméterrel ( $1 \text{ l} = 1 \text{ dm}^3 = 1000 \text{ cm}^3$ ), azaz egy milliliter felel meg egy köbcentiméternek ( $1 \text{ ml} = 1 \text{ cm}^3$ ).



**12. ábra**

Egyszerű térfogatmérésre szolgáló laboratóriumi üvegeszközök: főzőpohár (balra fent), mérőhenger (balra lent), mérőlombik (jobbra)

A tömeg és a térfogat kombinációjából vezethető le a sűrűség (jele:  $\rho$ , ró), ami nem más, mint a tömeg és a térfogat hányadosa (sűrűség = tömeg / térfogat), azaz egy adott anyag egységnyi térfogatának a tömege adja meg a sűrűségét ( $\rho = m / V$ ). A különböző anyagok sűrűségét leggyakrabban  $\text{g/cm}^3$ -ben fejezik ki. Néhány gyakori

anyag szobahőmérsékleten és normál légköri nyomáson meghatározott sűrűségét a **7. táblázat** tartalmazza. A sűrűség olyan fizikai tulajdonság, aminek segítségével különbséget tudunk tenni két anyag között, vagy felhasználhatjuk egy ismeretlen anyag meghatározásakor (Whitten et al., 2014).

**7. táblázat**

Néhány gyakori anyag sűrűsége közönséges körülmények között (Whitten et al., 2014)

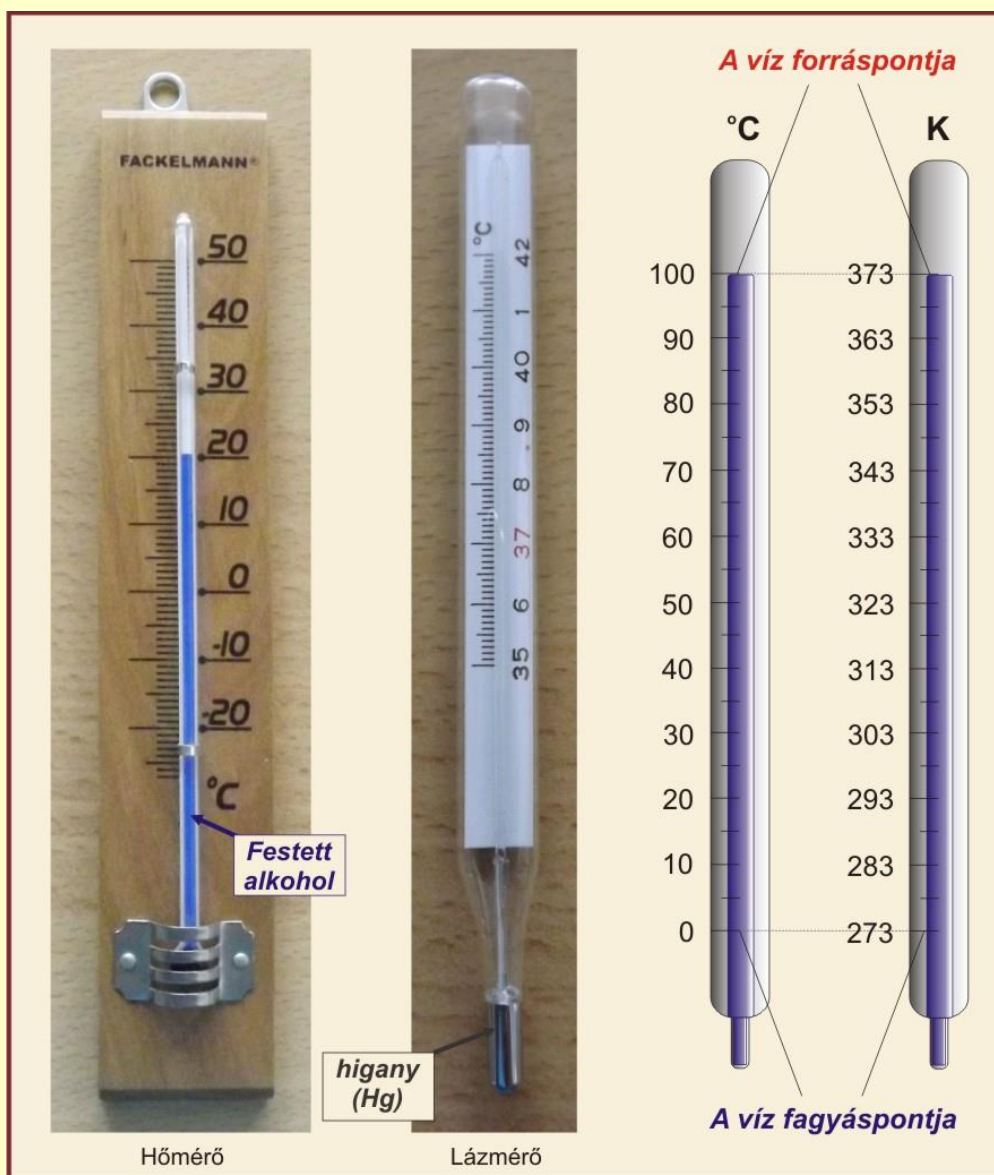
<b>Tiszta anyag</b>	<b>Sűrűség (g/cm<sup>3</sup>)</b>	<b>Tiszta anyag</b>	<b>Sűrűség (g/cm<sup>3</sup>)</b>
<b>hidrogén</b> (H <sub>2</sub> )	0,000089	<b>magnézium</b> (Mg)	1,74
<b>szén-dioxid</b> (CO <sub>2</sub> )	0,0019	<b>alumínium</b> (Al)	2,70
<b>víz</b> (H <sub>2</sub> O)	1,00	<b>vas</b> (Fe)	7,86
<b>etil-alkohol</b> (C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O)	0,789	<b>ólom</b> (Pb)	11,34
<b>konyhasó</b> (NaCl)	2,16	<b>arany</b> (Au)	19,30

A kémiában az anyag mennyiségének megadására — a makrovilágban régóta használt tömegmérésen túl — bevezették az **anyagmennyiség** (jele: n, mértékegysége: mól, mértékegységének jele: mol) fogalmát. Egy mol annak a rendszernek az anyagmennyisége, ami annyi elemi egységet (atomot, iont, molekulát stb.) tartalmaz, mint ahány atom van 0,012 kg 12-es tömegszámú szénizotópban. A kérdéses részecskék számát **Avogadro törvénye** alapján az Avogadro-szám adja meg: egy mólnyi anyag  $6 \cdot 10^{23}$  db részecskét (elemi egységet) tartalmaz. Moláris mennyiségekkel jóval könnyebben boldogulunk a kémiai számítások során, ezért az elemek tömegének megadásakor szintén a moláris mennyiségre vonatkoztatott relatív atomtömeget (**moláris tömeg**, jele: M, mértékegysége: g/mol) szokták megadni (Nyilasi, 1975; Boksay et al., 1987; Rózsahegyi, 1993; Atkins, 1995).

A különböző anyagok halmazállapotának ismertetésekor a hivatkozási alap az előzőekben a „közönséges körülmények között” volt, ami a szobahőmérsékletet és a normál légköri nyomást jelentette. Ennek megfelelően a nyomás és a hőmérséklet fogalmát is tekintsük át! A fizika megfogalmazása szerint a nyomást a felületegységre merőlegesen (és egyenletesen) ható nyomóerővel adhatjuk meg (jele: p; mértékegysége a pascal; mértékegységének jele: Pa;  $1 \text{ Pa} = 1 \text{ N/m}^2$ ). Egy pascal a nyomás akkor, ha a felület  $1 \text{ m}^2$ -ére 1 newton (N) erő hat (Atkins, 1992).

A meteorológiában és a gyakorlati életben a **hőmérséklet** megadására a Celsius-féle hőmérsékleti skála terjedt el (**13. ábra**). Ennek egyik fix pontja az 1 atmoszféra nyomáson a tiszta jég és víz keverékével termikus egyensúlyban lévő rendszer hőmérséklete ( $0 \text{ }^\circ\text{C}$ ), a másik a forrásban levő víz fölötti gőzzel termikus

egyensúlyban lévő rendszer hőmérséklete ( $100\text{ }^{\circ}\text{C}$ ). Ennek megfelelően a hőmérőn a két referenciapont (**olvadáspont** vagy fagyáspont, illetve **forráspont**) között egyenlő távolságban 100 osztás található. A gyakorlati életben elterjedt folyadék hőmérők festett alkoholt („borszesz-hőmérő”) vagy higanyt tartalmaznak. Ekkor a zárt üvegcsőben a hőmérséklet növekedésével párhuzamosan gyorsan kiterjedő folyadék a hőmérséklet jelzésének az alapja (**13. ábra**). A tudományos világban a hőmérséklet megadására az abszolút hőmérsékleti skála vagy Kelvin-skála használatos (Whitten et al., 2014; Gill, 2015); a hőmérséklet jele: T, SI mértékegysége a Kelvin (jele: K). A számolási feladatoknál a két skála egyszerűen átszámítható egymásba (**13. ábra**).

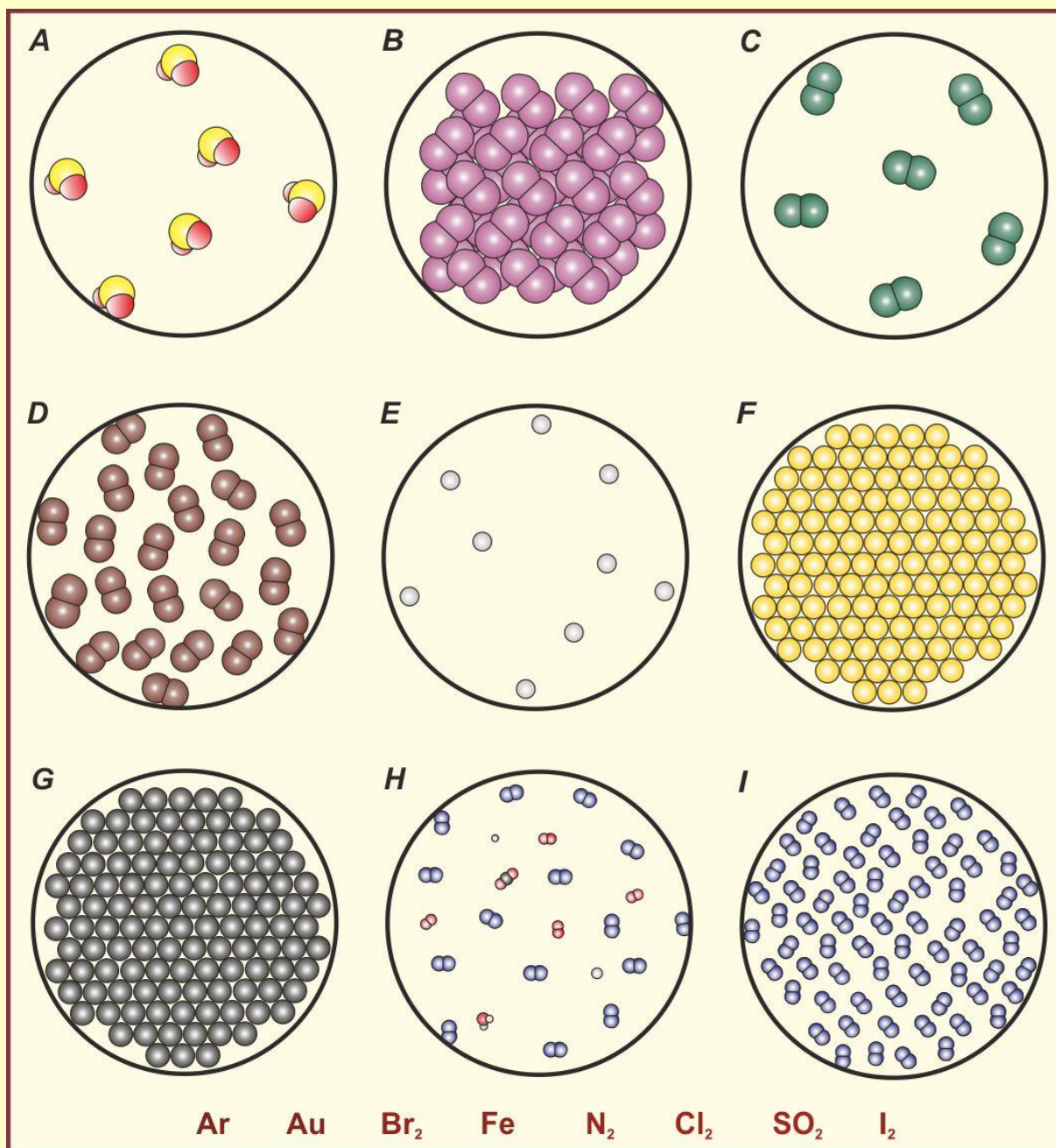


**13. ábra**

Közönséges alkoholos hőmérő, higanyos lázmérő, illetve a Celsius-féle hőmérsékleti skála és az abszolút hőmérsékleti skála (Kelvin) közötti összefüggés

A két skála közötti különbség  $273,15^{\circ}$  ( $^{\circ}\text{K} = ^{\circ}\text{C} + 273,15^{\circ}$ ;  $^{\circ}\text{C} = \text{K} - 273,15^{\circ}$ ), amit a gyakorlatban többnyire  $273^{\circ}$ -ra kerekítenek (Whitten et al., 2014).

Az első fejezet zárásaként érdemes értelmezni a **14. ábrát**! Amennyiben megértetted az anyag osztályozásával (pl. atom, molekula, elem, vegyület, tiszta anyag, keverék) és halmazállapotával (szilárd, folyadék, gáz) kapcsolatos alapfogalmakat, továbbá a színek és formák segítségével meg tudod különböztetni az egyszerű kémiai modelleket, nem okozhat problémát a különböző anyagok (Au, Ar, Br<sub>2</sub>, Fe, N<sub>2</sub>, Cl<sub>2</sub>, SO<sub>2</sub>, I<sub>2</sub>) azonosítása. Az egyik anyagunk kakukktojás. Meg tudod fogalmazni, hogy miért? A megoldást a fogalomtár után megtalálod.



**14. ábra**

Anyag és halmazállapot: tudod már?

## 1. Tudtad már? Általános kémiai alapfogalmak: fogalomtár

**Anion:** negatív töltésű ion (pl. kloridion,  $\text{Cl}^-$ ).

**Anyag:** bármi, ami tömeggel rendelkezik és helyet foglal el.

**Anyagmennyiség** (n): 1 mol az anyagmennyisége annak a rendszernek, ami annyi elemi egységet tartalmaz, ahány atom van 12 g tömegű  $^{12}\text{C}$ -ben (12-es tömegszámú szénizotópban). Ezt adja meg az Avogadro-szám ( $6 \cdot 10^{23}$  db atom 1 mol anyagban).

**Atom:** kémiai úton tovább nem bontható, pozitív töltésű atommagból és azzal kölcsönhatásban álló, egy vagy több negatív töltésű elektronból felépülő, elektromosan semleges részecske. *Más megfogalmazásban:* egy elem olyan legkisebb része, ami annak összes kémiai jellemzőjét hordozza bármely kémiai vagy fizikai változás során.

**Atommag:** pozitív töltésű protonokból és töltés nélküli neutronokból áll. Ha egy atomról az összes elektront eltávolítjuk, akkor az atommag marad vissza. Az atommag kémiai reakciók alkalmával változatlan marad.

**Avogadro törvénye:** különböző gázok azonos térfogataiban (azonos állapotban) azonos számú részecske van. Az Avogadro-állandó:  $N_A = 6 \cdot 10^{23}$  1/mol.

**Ásvány:** olyan természetes eredetű, döntő részben elem vagy szervetlen vegyület, amely általában határozott belső szerkezettel, általában adott kémiai összetétellel és fizikai sajátossággal rendelkezik, néhány kivételtől (pl. terméshigany) eltekintve szilárd halmazállapotú.

**Depozíció:** lerakódás; az a folyamat, amikor a gáz közvetlenül szilárd anyaggá alakul (a szublimáció ellentéte). A vízgőz jégkristályokká alakulása a meteorológiában.

**Elem:** olyan atomok rendszere, amelyek magjában meghatározott számú proton van. Lehet gáz (pl. He), folyékony (pl. Hg) vagy szilárd (pl. Cu). Azonos rendszámú atomok halmaza. Kémiai értelemben nem bontható egyszerűbb anyagokra.

**Elemi** (szubatomi) **részecskék:** proton, neutron, elektron.

**Evaporáció:** párolgás (folyadék–gáz átalakulás).

**Fagyás:** az a folyamat, amelyben a folyadék halmazállapotú anyag szilárd anyaggá alakul.

**Fizikai tulajdonság:** bármely anyag általános jellemzői állandó kémiai összetétel mellett.

**Fizikai változás:** egy anyag olyan átalakulása, amikor egyik halmazállapotából a másikba alakul anélkül, hogy új anyag keletkezne.

**Folyadékok:** a molekulák között jelentős kölcsönhatás van, de nincsenek helyhez kötve, ezért nincs állandó alakjuk, térfogatuk közel állandó.

**Forráspont:** az a hőmérséklet, amelyen a folyadék gőznyomása egyenlővé válik a külső nyomással.

**Gázok:** a részecskék között viszonylag nagy a távolság, sem állandó alakjuk, sem állandó térfogatuk nincs.

**Hőmérséklet** (T): a hő intenzitásának a mértéke. Egy objektum „forróságának” vagy „hűvösségének” mértékét számszerűsíti. Mértékegysége a Kelvin (K) vagy a Celsius fok ( $^{\circ}\text{C}$ ).

**Ion:** pozitív vagy negatív töltéssel rendelkező atom vagy atomcsoport. Olyan egységek (atomok, molekulák, atomcsoportok), amelyek *elektromos töltést* hordoznak (pl.:  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$ ).

**Izotóp atomok:** a rendszámuk azonos, de a tömegszámuk különböző, mert az azonos számú proton mellett különböző számú neutron tartalmaz az atommagjuk.

**Kation:** pozitív töltésű ion (pl. nátriumion,  $\text{Na}^+$ ; kalciumion,  $\text{Ca}^{2+}$ ).

**Keverék:** két vagy több szeparálható (elválasztható, elkülöníthető) anyagból áll, a komponensek aránya (mennyisége) változó. A keverék alkotói megőrzik saját fizikai és kémiai tulajdonságaikat.

**Kémiai reakció** (kémiai változás): olyan kémiai folyamat, amely során atomok között kötés szakad fel és/vagy új kötés alakul ki. A kémiai reakciók anyagi változással járó folyamatok.

**Kémiai tulajdonság:** kémiai átalakulások során az anyag viselkedését leíró jellemzők.

**Kicsapódás:** kondenzáció (gáz–folyadék átalakulás).

**Kondenzáció:** az a folyamat, amelyben a gáz halmazállapotú anyag folyadékká (vagy szilárd halmazállapotúvá) alakul.

**Lecsapódás:** kondenzáció (gáz–folyadék átalakulás).

**Lerakódás:** depozíció (gáz–szilárd átalakulás).

**Moláris tömeg:** 1 mol anyagmennyiségű anyag tömege. Egysége: g/mol.

**Molekula:** (kovalens) kémiai kötéssel összetartott atomok véges halmaza. A molekula atommagokból és elektronokból felépülő, azok kölcsönhatása által szerveződött rendszer.

**Molekulaképlet:** olyan képlet, ami megadja a molekulában kapcsolódó atomok tényleges számát (pl. víz:  $\text{H}_2\text{O}$ ).

**Neutronsám (N):** az atommagban található neutronok száma.

**Nukleon:** az atommagot alkotó protonok és neutronok összefoglaló, közös neve.

**Olvadás:** az a folyamat, amelyben a szilárd halmazállapotú anyag folyadékká alakul.

**Olvadáspont:** az a hőmérséklet, amelyen a szilárd anyag és a folyadék egyensúlyban van egymással.

**Párolgás:** az a folyamat, amelyben a folyadék halmazállapotú anyag gázzá alakul.

**Relatív atomtömeg:** azt mutatja meg, hogy egy atom tömege hányszorosa a 12-es tömegszámú szénizotóp tömegének 1/12 részének (jele:  $A_r$ ).

**Rendszám (Z):** az atommagban található protonok száma.

**Szilárd anyagok:** a részecskék szabályos geometriai rendben helyezkednek el, helyzetüket egymáshoz képest nem változtathatják meg. Önálló alakjuk és határozott térfogatuk van.

**Sztöchiometria:** az alkotóelemek (atomok, ionok), illetve anyagok mennyiségi aránya egy vegyületben (*összetételi sztöchiometria*), illetve egy kémiai reakcióban (*reakció sztöchiometria*).

**Szublimáció:** az a folyamat, amelyben a szilárd halmazállapotú anyag közvetlenül légnemű halmazállapotú anyaggá alakul át.

**Tapasztalati (összeg) képlet:** egy vegyületet alkotó elemek moláris arányát írja le.

**Terméselem:** a természetben gyakorlatilag tiszta elemi állapotban is előforduló elemek összefoglaló neve.

**Tömeg (m):** az anyag mennyiségének mérőszáma egy élő vagy élettelen objektumban. Mértékegysége a gram (g), illetve a kilogram (kg). Alapmennyiség, a tehetetlenség mértéke a tömeg.

**Tömegszám (A):** az atommagban található protonok és neutronok számának összege.

**Vegyjel:** az elemek nevének egy vagy kétbetűs (ritkán hárombetűs) rövidítése.

**Vegyület:** olyan anyag, aminek felépítésében kettő vagy többféle elem vesz részt.

#### Megoldás a 14. ábrához:

**A:**  $\text{SO}_2$  (kén-dioxid), molekula, vegyület, tiszta anyag, gáz; **B:**  $\text{I}_2$  (jód), molekula, elem, tiszta anyag, szilárd; **C:**  $\text{Cl}_2$  (klór), molekula, elem, tiszta anyag, gáz; **D:**  $\text{Br}_2$  (bróm), molekula, elem, tiszta anyag, folyadék; **E:**  $\text{Ar}$  (argon), atom, elem, tiszta anyag, gáz; **F:**  $\text{Au}$  (arany), elem, tiszta anyag, szilárd; **G:**  $\text{Fe}$  (vas), elem, tiszta anyag, szilárd; **H:** nem adható meg hozzá állandó kémiai összetétel, azaz keverék; elemekből (atomok: nemesgázok, molekulák:  $\text{N}_2$ ,  $\text{O}_2$ ) és vegyületekből (molekulák:  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2$ ) áll (**levegő**), gáz; **I:**  $\text{N}_2$  (nitrogén), molekula, elem, tiszta anyag, folyadék

#### Megjegyzés:

A vegyjelek első betűjét nagybetűvel írjuk (pl. Na), az elemek neve a magyar helyesírás szerint azonban nem tulajdonnév, ezért kisbetűvel írandó (Na: nátrium)!

A hagyományos magyar kémiai fogalmaktól eltérően (pl. Rózsahegyi, 1993), egyes kémiai szakirodalomban (pl. Whitten et al., 2014) a **molekula** (*molecule*) kifejezés tágabb értelemben használatos. E szerint a molekula az elemek vagy vegyületek olyan legkisebb stabil része, ami önállóan (függetlenül) létezik. Ebben az értelemben a nemesgázok (He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn) olyan molekulák, amiket csak egy atom alkot, azaz az atom és a molekula megegyezik.

A hőmérséklet megadásakor a Celsius fok mértékegységekor  $^{\circ}\text{C}$  („fok Celsius”) jelölést kell alkalmazni, az abszolút skálánál viszont nem használatos a fok, ott kizárólag Kelvin (K) a hőmérséklet mértékegysége!

## 1. Tudtad már? Önellenőrző kérdések, feladatok

**1.1.** A legtöbb atom átmérője 0,1–0,3 nanométer (nm), azaz 100–300 pikométer (pm) közé esik. Az atomok dimenziójának hagyományos mértékegysége azonban az „Ångström” volt ( $1 \text{ Å} = 0,1 \text{ nm} = 1 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ ). Egy régi könyvben közölt adat szerint a foszforatom sugara 1,1 Å. Mennyi ez pikométerben és centiméterben kifejezve?

**1.2.** A magnézium atomsugara 160 pm. Az atomok dimenziójának hagyományos mértékegysége azonban az „Ångström” volt ( $1 \text{ Å} = 0,1 \text{ nm}$ ). Mennyi egy magnéziumatom sugara Å-ben kifejezve?

**1.3.** Végezzük el a következő átváltásokat!

- 846,3 m hány km?
- 26,7 km hány m?
- 112 mm hány cm?
- 250  $\mu\text{m}$  hány mm?

**1.4.** Végezzük el a következő átváltásokat!

- 376 kg hány g?
- 2356 g hány kg?
- 115 mg hány kg?
- 14 g hány  $\mu\text{g}$ ?

**1.5.** Végezzük el a következő átváltásokat!

- 0,15 mg hány kg?
- 13 pm hány mm?
- 1,36 l hány ml?
- 460 ml hány  $\text{dm}^3$ ?
- 634 l hány  $\text{cm}^3$ ?

**1.6.** Párosítsd az alábbi elemek nevét a vegyjelükkel! Elemnév: nitrogén, neon, nátrium, fluor, foszfor, ólom, oxigén; vegyjel: F, Pb, N, Na, P, O, Ne

**1.7.** Párosítsd az alábbi elemek nevét a vegyjelükkel! Elemnév: kalcium, magnézium, szén, mangán, vas, arany, réz; vegyjel: Mn, Mg, C, Au, Cu, Ca, Fe

**1.8.** Mely gyakori elemek vegyjelét rejtik az alábbi szavak?

- fonal
- Alpok
- casco

**1.9.** Közönséges körülmények között a felsoroltak közül mely elemek fordulnak elő stabil atomokként a természetben? H, He, N, Na, Ne, Ni, Au, As, Ag, Ar

**1.10.** A felsoroltak közül mely elemek alkotnak kétatomos molekulákat? H, He, N, Ni, P, F, O, S, B

**1.11.** A felsoroltak közül melyik a kakukktójas? Miért?  $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ , NaCl,  $\text{Br}_2$ , CO (szén-monoxid),  $\text{NO}_2$  (nitrogén-dioxid),  $\text{CH}_4$ ,  $\text{CCl}_4$  (szén-tetraklorid)

**1.12.** A felsorolt vegyületek közül melyek tartoznak a molekulák szűkebb csoportjába? HF (hidrogén-fluorid), NaCl, KCl,  $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CaCO}_3$ ,  $\text{SO}_2$  (kén-dioxid),  $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{CaCl}_2$ ,  $\text{KNO}_3$

**1.13.** Mi az összegképlete az alábbi vegyületeknek? kalcium-bromid, nátrium-fluorid, vas(II)-szulfát, vas(III)-foszfát, cink-foszfát

**1.14.** Mi az összegképlete az alábbi vegyületeknek? vas(II)-karbonát, nátrium-acetát, kálium-nitrát, kalcium-szulfát, ezüst-jodid

**1.15.** Mi a neve az alábbi vegyületeknek?  $\text{Ag}_2\text{S}$ ,  $\text{AgNO}_3$ ,  $\text{ZnCl}_2$ ,  $(\text{NH}_4)_2\text{S}$ ,  $\text{FeCO}_3$ ,  $\text{FeCl}_3$

**1.16.** Mi a neve az alábbi vegyületeknek? NaOH,  $\text{NaNO}_3$ ,  $\text{Na}_2\text{CO}_3$ ,  $\text{CaCl}_2$ ,  $\text{CaCO}_3$ ,  $\text{Ca}(\text{OH})_2$

**1.17.** Milyen kémiai szimbólum tartozik az alábbi ionokhoz? Az ionok képletének megadása után sorold be őket az egyszerű és az összetett (poliatomos) ionok két csoportjába! magnéziumion, réz(I)-ion, szulfidion, szulfition, ammóniumion, hidroxidion

**1.18.** Milyen kémiai szimbólum tartozik az alábbi ionokhoz? Az ionok képletének megadása után sorold be őket az anionok és a kationok két csoportjába! oxidion, szulfátion, káliumion, alumíniumion, nitrition, ammóniumion

**1.19.** Mi a tapasztalati képlete azoknak a vegyületeknek, amelyek az alábbi ionpárokból képződhetnek? Nevezd el a kapott vegyületeket! a)  $\text{Ca}^{2+}$  és  $\text{OH}^-$ ; b)  $\text{Na}^+$  és  $\text{SO}_4^{2-}$ ; c)  $\text{Al}^{3+}$  és  $\text{OH}^-$ ; d)  $\text{Fe}^{2+}$  és  $\text{PO}_4^{3-}$ ; e)  $\text{Cu}^{2+}$  és  $\text{SO}_4^{2-}$

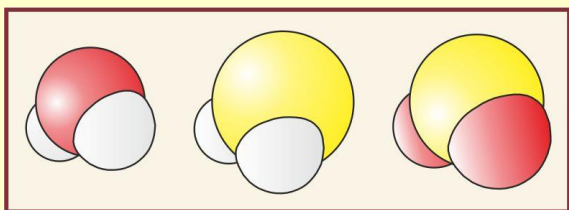
**1.20.** Milyen ionok keletkeznek az alábbi vegyületekből? a)  $\text{Na}_3\text{PO}_4$ ; b)  $\text{FeCl}_3$ ; c)  $\text{NH}_4\text{NO}_3$ ; d)  $\text{K}_2\text{SO}_4$ ; e)  $\text{MgCO}_3$

**1.21.** Adjuk meg az előző feladat ionjait egyszerű, illetve összetett, továbbá anion és kation bontásban!

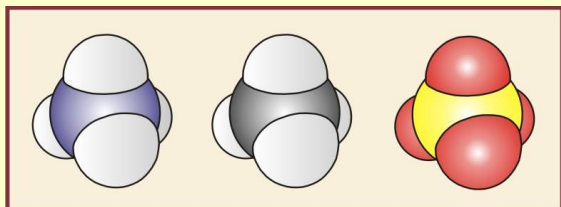
**1.22.** Melyik összegképlet hibás? Adjuk meg a vegyület helyes tapasztalati képletét! a) NaOH,

KOH, CaOH; b)  $\text{NaSO}_4$ ,  $\text{CaSO}_4$ ,  $\text{MgSO}_4$ ; c)  $\text{NH}_4\text{NO}_3$ ,  $\text{KNO}_3$ ,  $\text{MgNO}_3$

**1.23.** A képen látható rajzok egyszerű molekulák kalottamodelljeit szemléltetik. Felismered őket? Nevezd meg valamennyit!



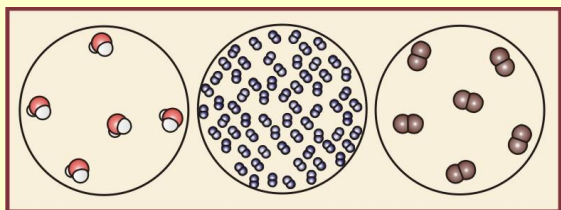
**1.24.** A képen látható nem méretarányos rajzok hasonló szerkezetű (tetraédres elrendeződésű) anyagok kalottamodelljeit szemléltetik. Ez az ábrázolási forma azonban nem mutatja az összetett ionok töltését. Figyelembe véve a gyakori atomokat jelölő színeket, add meg a hozzájuk tartozó helyes kémiai szimbólumokat! Melyik a kakukktójás? Miért?



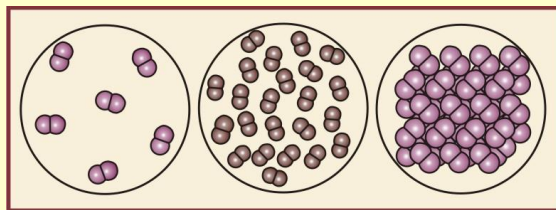
**1.25.** Közös körülmények között a természetben előforduló elemek közül csak kettő folyékony halmazállapotú. Ki tudod ezeket választani a felsorolt elemekből? Melyek ezek? klór, oxigén, bróm, arany, higany, kobalt, jód, nitrogén, titán, fluor

**1.26.** Közös körülmények között a felsorolt elemek halmazállapotát figyelembe véve melyik a kakukktójás? a) fluor, klór, jód; b) bróm, higany, ezüst; c) klór, nitrogén, bróm; d) vas, jód, higany

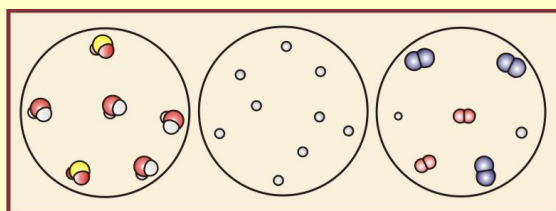
**1.27.** Milyen halmazállapotú anyagokat jelölnek az alábbi ábrák? A kalottamodellrajzainak segítségével nevezd meg az anyagokat! A molekulák megadásában segítenek a gyakori elemeket jelölő színek.



**1.28.** Milyen halmazállapotú anyagokat jelölnek az alábbi ábrák? A kalottamodellrajzainak segítségével nevezd meg az anyagokat! Közös körülmények között melyik a kakukktójás? Miért?



**1.29.** Az alábbi ábrán különböző anyagok (gázok) egyszerűsített modelljei láthatók. A három közül melyik a kakukktójás? Miért?



**1.30.** Egy elem vegyjele több módon értelmezhető: azonosítja a kiválasztott elemet, az adott elem egy darab atomját jelenti, illetve az adott elem egy mólnyi mennyiségét jelölheti. Az „Na” vegyjele a nátrium azonosítását teszi lehetővé a kémia nyelvén, egy db nátriumatomot, továbbá 1 mol nátriumot ( $6 \cdot 10^{23}$  db atom) jelölhet. A molekulaképletek értelmezésekor szintén beszélhetünk atomi mennyiségekről, ionvegyületeknél azonban moláris mennyiségekkel célszerű dolgoznunk. Értelmezzük a fentiek alapján az alábbi kémiai képleteket! a)  $\text{NaCl}$ ; b)  $\text{CaCl}_2$ ; c)  $\text{MgCO}_3$ ; d)  $\text{H}_2\text{O}$ ; e)  $\text{CH}_4$ ; f)  $\text{NH}_3$ ; g)  $\text{NH}_4\text{OH}$ ; h)  $\text{Na}_3\text{PO}_4$ ; i)  $\text{KNO}_3$ ; j)  $\text{Na}_2\text{SO}_4$

**1.31.** Melyik a kakukktójás? Miért? hővezetőképesség, forráspont, éghetőség, sűrűség, olvadáspont

**1.32.** Milyen módszerrel választanád szét az alábbi keverékeket?  
a) kőszó vizes oldata  
b) alumínium- és vasreszelék keveréke  
c) kénpor és kristálycukor keveréke

### Megjegyzés:

Ionvegyületek elnevezésekor a két összetevőt kötőjellel választjuk el.

## 1. Tudtad már? Önellenőrző kérdések, feladatok: megoldások

**1.1.** Első lépésben értelmezzük a megadott mértékegységeket (Å, pm, cm), majd fejezzük ki a foszforatom sugarát SI alapegységben (m)! Ezt követően egyszerűen elvégezhetők az átszámítások.

- $1 \text{ Å} = 1 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ ,  $1 \text{ pm} = 1 \cdot 10^{-12} \text{ m}$  és  $1 \text{ cm} = 1 \cdot 10^{-2} \text{ m}$
- $\underline{1,1 \text{ Å} = 1,1 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 110 \cdot 10^{-12} \text{ m} = 110 \text{ pm}}$
- $\underline{1,1 \text{ Å} = 1,1 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 1,1 \cdot 10^{-2} \cdot 10^{-8} \text{ m} = 1,1 \cdot 10^{-8} \text{ cm}}$

**1.2.** Értelmezzük a mértékegységeket (pm, Å), majd végezzük el az átszámításokat!

- $1 \text{ pm} = 1 \cdot 10^{-12} \text{ m}$ ,  $1 \text{ nm} = 1 \cdot 10^{-9} \text{ m}$
- $1 \text{ Å} = 0,1 \text{ nm} = 1 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 1 \cdot 100 \cdot 10^{-12} \text{ m} = 100 \text{ pm}$
- $\underline{160 \text{ pm} = 160/100 \text{ Å} = 1,6 \text{ Å}}$

**1.3.** Értelmezzük a mértékegységeket, majd végezzük el az átszámításokat!

- $1 \text{ km} = 1000 \text{ m}$  ( $1 \text{ m} = 10^{-3} \text{ km}$ ),  $1 \text{ cm} = 10 \text{ mm}$ ,  $1 \text{ mm} = 1000 \text{ µm}$
- a)  $\underline{846,3 \text{ m} = 846,3/1000 \text{ km} = 0,8463 \text{ km}}$
- b)  $\underline{26,7 \text{ km} = 26,7 \cdot 1000 \text{ m} = 26700 \text{ m}}$
- c)  $\underline{112 \text{ mm} = 112/10 \text{ cm} = 11,2 \text{ cm}}$
- d)  $\underline{250 \text{ µm} = 250/1000 \text{ mm} = 0,25 \text{ mm}}$

**1.4.** Értelmezzük a mértékegységeket, majd végezzük el az átszámításokat!

- $1 \text{ kg} = 1000 \text{ g}$  ( $1 \text{ g} = 10^{-3} \text{ kg}$ ),  $1 \text{ mg} = 10^{-6} \text{ kg}$ ,  $1 \text{ µg} = 10^{-9} \text{ kg} = 10^{-6} \text{ g}$
- a)  $\underline{376 \text{ kg} = 376 \cdot 1000 \text{ g} = 3,76 \cdot 10^5 \text{ g}}$
- b)  $\underline{2356 \text{ g} = 2356/1000 \text{ kg} = 2,356 \text{ kg}}$
- c)  $\underline{115 \text{ mg} = 115 \cdot 10^{-6} \text{ kg}}$
- d)  $\underline{14 \text{ g} = 14 \cdot 10^6 \text{ µg}}$

**1.5.** Értelmezzük a mértékegységeket, majd végezzük el az átszámításokat!

- $1 \text{ mg} = 10^{-3} \text{ g}$ ,  $1 \text{ pm} = 10^{-12} \text{ m}$ ,  $1 \text{ mm} = 10^{-3} \text{ m}$ ;  $1 \text{ l} = 1000 \text{ ml}$ ,  $1 \text{ l} = 1 \text{ dm}^3$ ,  $1 \text{ ml} = 1 \text{ cm}^3$
- a)  $\underline{0,15 \text{ mg} = 0,15 \cdot 10^{-6} \text{ kg} = 1,5 \cdot 10^{-7} \text{ kg}}$
- b)  $\underline{13 \text{ pm} = 13 \cdot 10^{-12} \text{ m} = 13 \cdot 10^{-9} \text{ mm} = 1,3 \cdot 10^{-8} \text{ mm}}$
- c)  $\underline{1,36 \text{ l} = 1,36 \cdot 1000 \text{ ml} = 1360 \text{ ml}}$
- d)  $\underline{460 \text{ ml} = 460 \text{ cm}^3 = 460/1000 \text{ dm}^3 = 0,46 \text{ dm}^3}$
- e)  $\underline{634 \text{ l} = 634 \text{ dm}^3 = 634 \cdot 1000 \text{ cm}^3 = 634000 \text{ cm}^3 = 6,34 \cdot 10^5 \text{ cm}^3}$

**1.6.** nitrogén: N, neon: Ne, nátrium: Na, fluor: F, foszfor: P, ólom: Pb, oxigén: O

**1.7.** kalcium: Ca, magnézium: Mg, szén: C, mangán: Mn, vas: Fe, arany: Au, réz: Cu

**1.8.** Megoldások:

- a) fonal: F, fluor; O, oxigén; N, nitrogén; Al, alumínium (Na, nátrium)
- b) Alpok: Al, alumínium; P, foszfor; O, oxigén; K, kálium
- c) casco: Ca, kalcium; S, kén; C, szén; O, oxigén (Sc, szkandium; Co, kobalt)

**1.9.** He: hélium, Ne: neon, Ar: argon (nemesgázok)

**1.10.** H: hidrogén ( $\text{H}_2$ ), N: nitrogén ( $\text{N}_2$ ), F: fluor ( $\text{F}_2$ ), O: oxigén ( $\text{O}_2$ )

**1.11.**  $\text{Br}_2$ : elem (azonos atomokból áll); a többi vegyület (két vagy több különböző atom alkotja)

**1.12.** HF,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{S}$

**1.13.**  $\text{CaBr}_2$ , NaF,  $\text{FeSO}_4$ ,  $\text{FePO}_4$ ,  $\text{Zn}_3(\text{PO}_4)_2$

**1.14.**  $\text{FeCO}_3$ ,  $\text{CH}_3\text{COONa}$  (kivétel),  $\text{KNO}_3$ ,  $\text{CaSO}_4$ , AgI

**1.15.** ezüst-szulfid, ezüst-nitrát, cink-klorid, ammónium-szulfid, vas(II)-karbonát, vas(III)-klorid

**1.16.** nátrium-hidroxid, nátrium-nitrát, nátrium-karbonát, kalcium-klorid, kalcium-karbonát, kalcium-hidroxid

**1.17.** Egyszerű ionok:  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Cu}^+$ ,  $\text{S}^{2-}$ ; összetett ionok:  $\text{SO}_3^{2-}$ ,  $\text{NH}_4^+$ ,  $\text{OH}^-$

**1.18.** Anionok:  $\text{O}^{2-}$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$ ,  $\text{NO}_2^-$ ; kationok:  $\text{K}^+$ ,  $\text{Al}^{3+}$ ,  $\text{NH}_4^+$

**1.19.** a)  $\text{Ca}(\text{OH})_2$ , kalcium-hidroxid; b)  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ , nátrium-szulfát; c)  $\text{Al}(\text{OH})_3$ , alumínium-hidroxid; d)  $\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2$ , vas(II)-foszfát; e)  $\text{CuSO}_4$ , réz(II)-szulfát

**1.20.** a) nátriumion ( $\text{Na}^+$ ) és foszfátion ( $\text{PO}_4^{3-}$ ); b) vas(III)-ion ( $\text{Fe}^{3+}$ ) és kloridion ( $\text{Cl}^-$ ); c) ammóniumion ( $\text{NH}_4^+$ ) és nitrátion ( $\text{NO}_3^-$ ); d) káliumion ( $\text{K}^+$ ) és szulfátion ( $\text{SO}_4^{2-}$ ); e) magnéziumion ( $\text{Mg}^{2+}$ ) és karbonátion ( $\text{CO}_3^{2-}$ )

**1.21.** Egyszerű ion: nátriumion ( $\text{Na}^+$ ), vas(III)-ion ( $\text{Fe}^{3+}$ ), kloridion ( $\text{Cl}^-$ ), káliumion ( $\text{K}^+$ ), magnéziumion ( $\text{Mg}^{2+}$ ); összetett ion: foszfátion ( $\text{PO}_4^{3-}$ ), ammóniumion ( $\text{NH}_4^+$ ), nitrát ( $\text{NO}_3^-$ ) - ion, szulfátion ( $\text{SO}_4^{2-}$ ), karbonátion ( $\text{CO}_3^{2-}$ ); anion: foszfátion ( $\text{PO}_4^{3-}$ ), kloridion ( $\text{Cl}^-$ ), nitrátion ( $\text{NO}_3^-$ ), szulfátion ( $\text{SO}_4^{2-}$ ), karbonátion

( $\text{CO}_3^{2-}$ ); kation: nátriumion ( $\text{Na}^+$ ), vas(III)-ion ( $\text{Fe}^{3+}$ ), ammóniumion ( $\text{NH}_4^+$ ), káliumion ( $\text{K}^+$ ), magnéziumion ( $\text{Mg}^{2+}$ )

**1.22.** a) a kalciumion ( $\text{Ca}^{2+}$ ) és a hidroxidion ( $\text{OH}^-$ ) töltését figyelembe véve az elektromos töltést nem hordozó vegyületben a hidroxidion kétszeres arányban szerepel:  $\text{Ca}(\text{OH})_2$ ; b) a nátriumion ( $\text{Na}^+$ ) és a szulfátion ( $\text{SO}_4^{2-}$ ) töltését figyelembe véve az elektromos töltést nem hordozó vegyületben a nátriumion kétszeres arányban szerepel:  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ ; c) a magnéziumion ( $\text{Mg}^{2+}$ ) és a nitrátion ( $\text{NO}_3^-$ ) töltését figyelembe véve az elektromos töltést nem hordozó vegyületben a nitrátion kétszeres arányban szerepel:  $\text{Mg}(\text{NO}_3)_2$

**1.23.** fehér: hidrogén, piros: oxigén, sárga: kén; azaz  $\text{H}_2\text{O}$  (víz),  $\text{H}_2\text{S}$  (kén-hidrogén),  $\text{SO}_2$  (kén-dioxid)

**1.24.** fehér: hidrogén, piros: oxigén, sárga: kén, kék: nitrogén, fekete: szén; azaz  $\text{NH}_4^+$  (ammóniumion),  $\text{CH}_4$  (metán),  $\text{SO}_4^{2-}$  (szulfátion); kakukktójás:  $\text{CH}_4$ , mert ez semleges molekula, a másik kettő töltéssel rendelkező összetett (poliatomos) ion

**1.25.** bróm ( $\text{Br}_2$ ), higany (Hg)

**1.26.** a) jód: szilárd (a többi gáz); b) ezüst: szilárd (a többi folyékony); c) bróm: folyékony (a többi gáz); d) higany: folyékony (a többi szilárd)

**1.27.** fehér: hidrogén, piros: oxigén, kék: nitrogén, vörösbarna: bróm; gáz ( $\text{H}_2\text{O}$ , vízgőz); folyadék ( $\text{N}_2$ , cseppfolyós nitrogén); gáz ( $\text{Br}_2$ , brómgőz)

**1.28.** lila: jód; vörösbarna: bróm; gáz ( $\text{I}_2$ , jódgőz); folyadék ( $\text{Br}_2$ , bróm); szilárd ( $\text{I}_2$ , kristályos jód); kakukktójás: jódgőz (közönséges körülmények között a jód szilárd anyag)

**1.29.** a második (középső): az tiszta anyagot képvisel, míg a másik kettő keveréket mutat be (különböző molekulákból, illetve atomokból álló gázok)

**1.30.** Első lépésben válasszuk külön a molekulákat az ionvegyületektől!

Molekulák: d)  $\text{H}_2\text{O}$ ; e)  $\text{CH}_4$ ; f)  $\text{NH}_3$ ; ezek képlete egyrészt egy darab molekulát, másrészt 1 mol molekulát is jelölhet. A  $\text{H}_2\text{O}$  (víz) molekula két

hidrogénatomból és egy oxigénatomból áll, 1 mol vízmolekula felépítéséhez viszont 2 mol hidrogénatomra (1 mol  $\text{H}_2$ ) és 1 mol oxigénatomra (0,5 mol  $\text{O}_2$ ) van szükség. Hasonlóan, a  $\text{CH}_4$  képlet egy metánmolekulát (egy szénatomot és 4 hidrogénatomot tartalmaz) vagy 1 mol metánt (1 mol szénből és 2 mol  $\text{H}_2$ -ből jön létre) jelöl. Az  $\text{NH}_3$  (ammónia) egy nitrogénatomból és három hidrogénatomból felépülő molekula; azaz 1 mol  $\text{NH}_3$  1 mol nitrogén-, illetve 3 mol hidrogénatomot tartalmaz.

Ionvegyületek: a)  $\text{NaCl}$ ; b)  $\text{CaCl}_2$ ; c)  $\text{MgCO}_3$ ; g)  $\text{NH}_4\text{OH}$ ; h)  $\text{Na}_3\text{PO}_4$ ; i)  $\text{KNO}_3$ ; j)  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ . Az elektromosan semleges (töltésük zéró) ionvegyületek nagyszámú összekapcsolódó ionból jönnek létre úgy, hogy a kationok és az anionok arányát fejezi ki a tapasztalati képletük. Ennek megfelelően az  $\text{NaCl}$  képlet értelmezése a következő: nátrium-klorid; 1 mol  $\text{NaCl}$  1 mol ( $6 \cdot 10^{23}$  db) nátriumionból ( $\text{Na}^+$ ) és 1 mol ( $6 \cdot 10^{23}$  db) kloridionból ( $\text{Cl}^-$ ) áll (1:1 arány).  $\text{CaCl}_2$ : kalcium-klorid; 1 mol  $\text{CaCl}_2$  1 mol ( $6 \cdot 10^{23}$  db) kalciumionból ( $\text{Ca}^{2+}$ ) és 2 mol ( $12 \cdot 10^{23}$  db) kloridionból ( $\text{Cl}^-$ ) áll (1:2 arány).  $\text{MgCO}_3$ : magnézium-karbonát; 1 mol  $\text{MgCO}_3$  1 mol magnéziumionból ( $\text{Mg}^{2+}$ ) és 1 mol karbonátionból ( $\text{CO}_3^{2-}$ ) áll (1:1 arány).  $\text{NH}_4\text{OH}$ : ammónium-hidroxid; 1 mol  $\text{NH}_4\text{OH}$  1 mol ammóniumionból ( $\text{NH}_4^+$ ) és 1 mol hidroxidionból ( $\text{OH}^-$ ) áll (1:1 arány).  $\text{Na}_3\text{PO}_4$ : nátrium-foszfát; 1 mol  $\text{Na}_3\text{PO}_4$  3 mol nátriumionból ( $\text{Na}^+$ ) és 1 mol foszfátionból ( $\text{PO}_4^{3-}$ ) áll (3:1 arány).  $\text{KNO}_3$ : kálium-nitrát; 1 mol  $\text{KNO}_3$  1 mol káliumionból ( $\text{K}^+$ ) és 1 mol nitrátionból ( $\text{NO}_3^-$ ) áll (1:1 arány).  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ : nátrium-szulfát; 1 mol  $\text{Na}_2\text{SO}_4$  2 mol nátriumionból ( $\text{Na}^+$ ) és 1 mol szulfátionból ( $\text{SO}_4^{2-}$ ) áll (2:1 arány).

**1.31.** éghetőség, mert ez kémiai tulajdonság (a többi fizikai)

**1.32.** a) az oldatot bepárolva kiválik a kősó, az elpárologtatott víz megfelelő berendezéssel felfogható (a vízgőz elvezethető, majd kondenzálható)

b) a vasreszelék mágneses tulajdonságú, ezért mágneses szeparálással elkülöníthető az alumíniumreszeléktől

c) a cukor vízzel oldható, a kén nem; vízzel összekeverve, majd szűrőpapíron átszűrve visszamarad a kénpor, a szűrletet bepárolva kikristályosítható a cukor

# 2.

## *Tudtad már?* **Fizikai kémiai alapfogalmak**



### ***Témakörök***

#### **2.1. Fizika a kémiában: az anyag és az energia**

- gyakori energiafajták (mozgási, helyzeti) és kapcsolatuk a munkával
- a kinetikus és a potenciális energia és jelentősége a kémiában
- energia és hőátadás: fizikai és kémiai folyamatok hőváltozása
- viszonyítási alap: a rendszer és a környezete
- törvények a természetben: tömegmegmaradás, energiamegmaradás, anyagemmaradás

#### **2.2. A kémiai reakciók termodinamikai megközelítése**

- kémiai reakciók és a reakcióegyenlet: reaktánsok és termékek
- kémiai reakciók hőváltozása: a reakcióhő
- egyirányú és megfordítható kémiai reakciók

## **2. *Tudtad már?* Fizikai kémiai alapfogalmak**

### **2.1. Fizika a kémiában: az anyag és az energia**

### **2.2. A kémiai reakciók termodinamikai megközelítése**



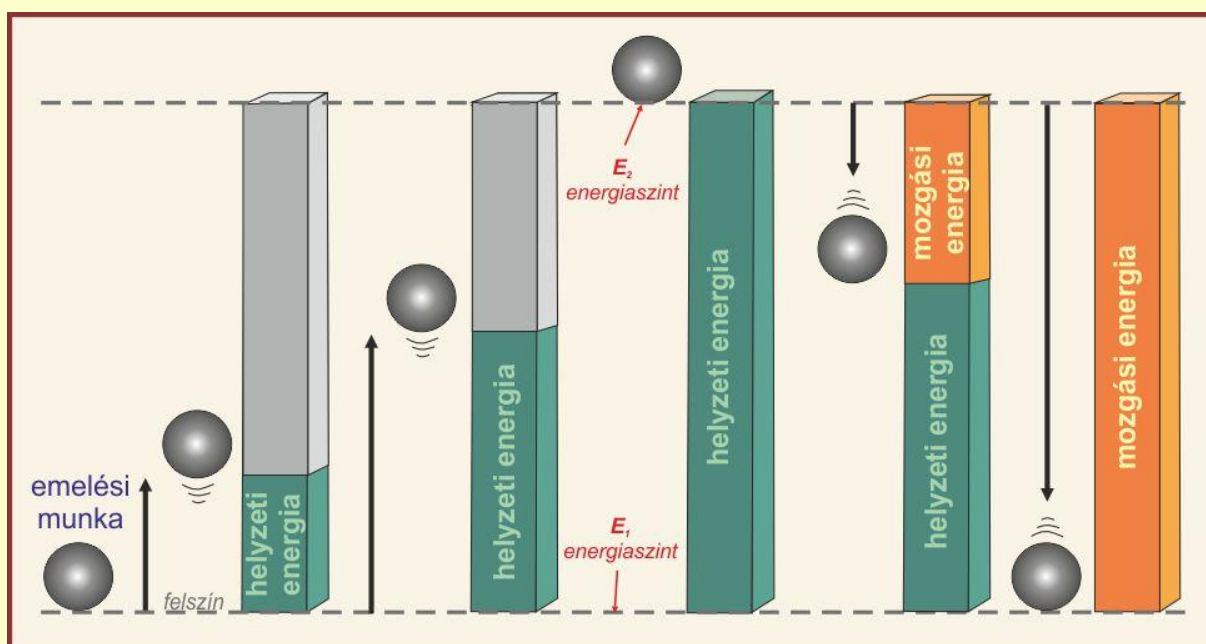
### ***Ha megtanulod ezt a fejezetet, képes leszel arra, hogy***

- a fizikai és a kémiai folyamatokat kísérő energiaváltozással kapcsolatos kifejezéseket elmagyarázd és helyesen használd;
- egyszerű folyamatokban értékeld a rendszer jellegét;
- a tömegmegmaradás törvényének segítségével egyszerű kémiai egyenleteket elemezz és helyesen felírj;
- végiggondolj és elmagyarázz endoterm és exoterm kémiai reakciókat;
- a kémiai egyenlet ismeretében megítéled az egyirányú, illetve a megfordítható reakciókat.

## 2.1. Fizika a kémiában: az anyag és az energia

Az **energia** nem más, mint **munkavégző** vagy **hőközlő képesség**. Az energia jele:  $E$ , mértékegysége az SI rendszerben a joule (J). Mindennapi tevékenységünk során számos fajtájával találkozunk: közismert a mechanikai energia, a fényenergia, az elektromos energia vagy a hőenergia (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

A mozgások különböző típusaihoz kapcsolódik a **mechanikai energia**. Egy mozgó test (pl. elgurított golyó) ütközést követően képes meglökni, mozgásba hozni egy nyugalmi helyzetben levő másik golyót, azaz képes munkavégzésre, **mozgási energiával** rendelkezik. Egy összenyomott rugó elengedést követően képes meglökni egy elé helyezett golyót, azaz munkát végez, **rugalmas energiával** rendelkezik. Ha egy testet (pl. vasgolyót, súlyzót) felemelünk egy bizonyos magasságba, mozgásba hozzuk, megváltoztatjuk a helyzetét, miközben emelési munkát végzünk (Whitten et al., 2014; Gill, 2015). A test felemelésekor energiát közlünk vele, hiszen olyan helyzetbe került, ahonnan leesve munkát tud végezni (pl. összetörni az alatta levő törékeny tárgyat). Az emelési munkához kapcsolódó energia a **helyzeti energia** (15. ábra).



**15. ábra**

Az emelési munka, a helyzeti energia és a mozgási energia közötti összefüggés egy vasgolyó példáján szemléltetve

A Napból érkező fényenergia segítségével fotoszintetizálnak a növények, azaz növekedésük során használják fel ezt az energiatípust. Az elektromos energia az emberiség mindennapjainak részévé vált. Ezt használjuk fel, amikor feltöltjük a telefonunk akkumulátorát, bekapcsoljuk a számítógépet vagy a televíziót, illetve felkapcsoljuk a villanyt, vagy a nyári melegben klimatizáljuk a szobánkat, irodánkat. A hőenergia segítségével pedig ételünket készíthetjük el, továbbá lakásunkat fűthetjük (16. ábra). Annak ellenére, hogy többféle energiatípus ismert, az energia két alapvető típusra osztható: kinetikus és potenciális energia különíthető el (Whitten et al., 2014).



**16. ábra**

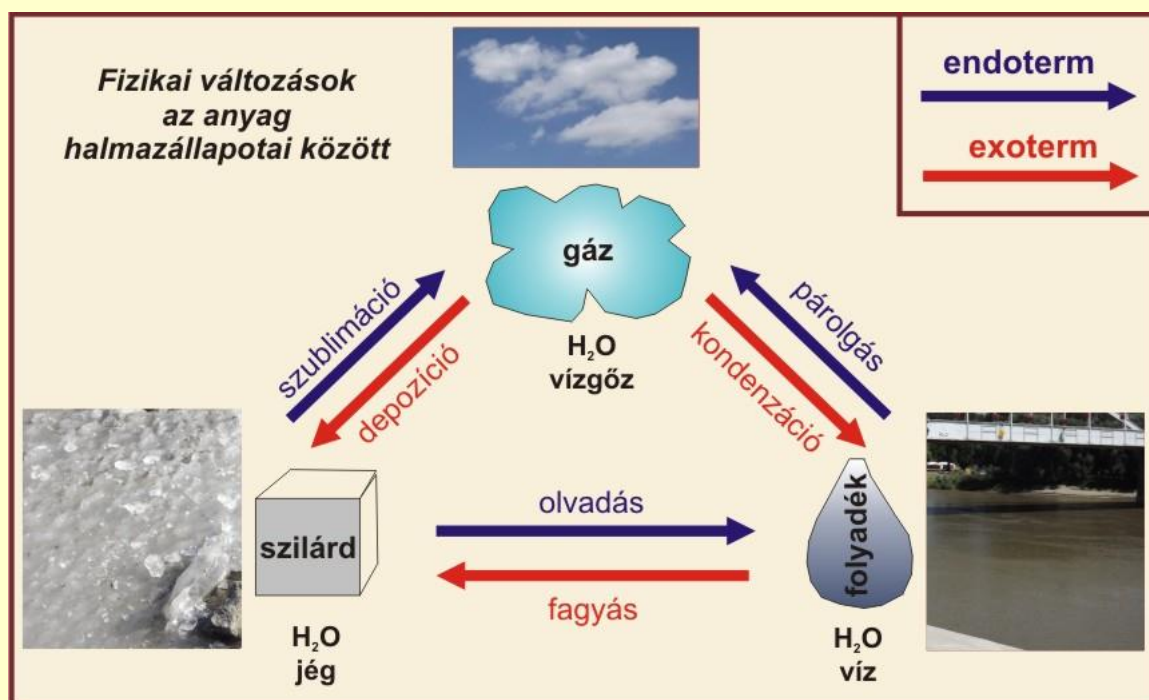
Fa égése egy kandallóban (balra): kémiai energia átalakulása hőenergiává;  
Paksi atomerőmű (jobbra): nukleáris energia átalakítása elektromos energiává

Minden mozgó test a mozgása révén energiával rendelkezik. Ez **kinetikus energia** (Whitten et al., 2014). Ha egy lávafolyás, kőomlás vagy árvíz pusztító, környezetalakító hatására gondolunk, egyértelmű, hogy a mozgási energia fontos szerepet játszik a földtudományokban. Ez az energia a közvetlen **munkavégző képességet** jelenti, ami a testek, tárgyak között könnyen átadható. A **munka** tehát az energiaátadás egyik formája. A munka jele a  $W$ , SI mértékegysége — hasonlóan az energiához — a joule,  $J$  (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

A testek helyzetéből, állapotából, összetételéből származó energia a **potenciális energia**. A hegytetőn elhelyezkedő kőtömb nyugalmi állapotban helyzeti energiával rendelkezik, hiszen a gravitáció miatt, ha mozgásba kerül (pl. földrengés, vihar miatt), már közvetlen munkavégzésre képes. Helyzeti energiája mozgási energia formájában nyilvánul meg. Az éghető fa, lignit, kőszén, kőolaj vagy földgáz

összetételéből adódóan rendelkezik potenciális energiával (*energiahordozó*), ezt kémiai energia néven különítjük el. A hőerőműben az égés során nyert hőt alakítják át elektromos árammá, azaz elektromos energiává (Whitten et al., 2014). A radioaktív urán (U) összetételéből adódóan szintén rendelkezik potenciális energiával: a maghasadás során felszabaduló nukleáris energia atomerőművekben, szabályozott körülmények között elektromos árammá alakítható (**16. ábra**).

Az anyaggal kapcsolatos számos fizikai változás (pl. halmazállapot-változások), továbbá valamennyi kémiai folyamat energiaváltozással jár; ezek tanulmányozásával a **termodinamika** szakterülete foglalkozik. Vannak olyan folyamatok, amikor az energia felszabadul, leggyakrabban hőenergiaként adódik át a környezetnek. Ezeket az átalakulásokat **exoterm folyamatoknak** nevezzük. A fenti példák közül ilyen kémiai változás az égés. Az energiaelnyeléssel járó változások során a fizikai vagy kémiai folyamat lejátszódásához szükséges energia leggyakrabban hő formájában vonódik el a környezettől, ezek az **endoterm folyamatok**. Endoterm fizikai átalakulás például a jég olvadása (**17. ábra**). Tiszta anyagok halmazállapot-változásai közül a fagyás, a kondenzáció és a depozíció exoterm fizikai folyamat, míg az olvadás, a párolgás és a szublimáció endoterm fizikai változás (Atkins, 1992; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).



**17. ábra**

Halmazállapot-változás és energia: hőváltozással járó fizikai folyamatok a víz példáján keresztül bemutatva

A folyamatokat kísérő hőváltozást mérni, ezáltal számszerűsíteni lehet. A különböző anyagok halmazállapot-változásaihoz kapcsolódóan megkülönböztethető az olvadáshő (ellentéte a fagyáshő), a párolgáshő (ellentéte a kondenzációs hő) és a szublimációhő (ellentéte a depozíciós hő), amelyek megadásakor egységnyi tömegre (pl. fajlagos olvadáshő, mértékegysége: J/kg) vagy moláris mennyiségre (pl. moláris olvadáshő, mértékegysége: J/mol) vonatkozik az energiaváltozás. A moláris **olvadáshő** az a hőmennyiség, ami 1 mol szilárd anyag folyadékká alakításához szükséges az olvadáspontja hőmérsékletén (Rózsahegyi, 1993). A fagyáshő számértékét tekintve megegyezik az olvadáshővel, de ez felszabaduló hőmennyiséget jelent. A moláris **párolgáshő** az a hőmennyiség, ami 1 mol folyadék gőzzé alakításához szükséges a forráspontja hőmérsékletén. A kondenzációs hő azonos nagyságú, de ellentétes előjelű, felszabaduló hőmennyiséget jelent. A moláris **szublimációhő** (szublimációs hő) pedig az a hőmennyiség, ami 1 mol szilárd anyag gőzzé alakításához szükséges a szublimációpont hőmérsékletén (Atkins, 1992; Rózsahegyi, 1993; Whitten et al., 2014).

Ahhoz azonban, hogy meg tudjuk mondani egy folyamatról, hogy endoterm vagy exoterm módon játszódott-e le, meg kell határoznunk a viszonyítási alapot. Meg kell adnunk, hogy az adott fizikai vagy kémiai folyamat során mit vizsgálunk, illetve mit tekintünk környezetnek. A termodinamikában a *vizsgált, kiválasztott, középpontba helyezett részt* rendszernek nevezzük. A **rendszer** a világnak az a képzelt vagy valós határfelülettel elkülönített része, amelynek tulajdonságait vizsgáljuk. Értelmszerűen, mindent, ami a rendszeren kívül van, **környezetnek** hívunk (Anderson, 2005; Bárány et al., 2011). Bármely energiaváltozás megítélésekor mindig a rendszer a viszonyítás központja! Ezeket a kifejezéseket tehát nem csak a köznapi jelentésük szerint kell ismernünk, hanem termodinamikai meghatározásukat alkalmazva használnunk kell egy-egy fizikai vagy kémiai változás értelmezésekor. Exoterm folyamat során a hő felszabadul a rendszerből, azaz a rendszer energiája csökken. A rendszer szempontjából az energiaváltozás negatív előjelű. Ezzel ellentétben, endoterm átalakuláskor a rendszer vesz fel energiát a környezetétől, tehát ekkor pozitív az energiaváltozás előjele.

Az előző fejezetben láttuk, hogy az eltérő halmazállapotú anyagokat felépítő részecskék (atomok, molekulák, ionok) eltérő távolságban helyezkednek el egymáshoz képest, ezért a közöttük kialakuló kölcsönhatás is különböző erősségű. A szilárd jeget alkotó vízmolekulák szabályos rendben, egymáshoz közel

elhelyezkedve helyhez kötöttek. Az olvadás során felbomlik ez a rend, ehhez azonban energiát kell befektetni (pl. *hőközlés* formájában). A felvett energia biztosítja a vízmolekulák szabadabb mozgását (*hőmozgás*), ezért azok már többnyire véletlenszerűen helyezkednek el, a jég megolvad. Az olvadás folyamatában a rendszert a kapcsolódó vízmolekulák halmaza alkotja (jég); minden, ami ezen kívül van (pl. tárolóedény, levegő, asztal stb.) a környezet. A szükséges energia a környezet felől hő formájában áramlik a rendszerbe, tehát az olvadás endoterm fizikai változás (az olvadáshő előjele pozitív). A **8. táblázat** a hőváltozás mértékét mutatja be néhány gyakori anyag halmazállapot-változásakor.

**8. táblázat**

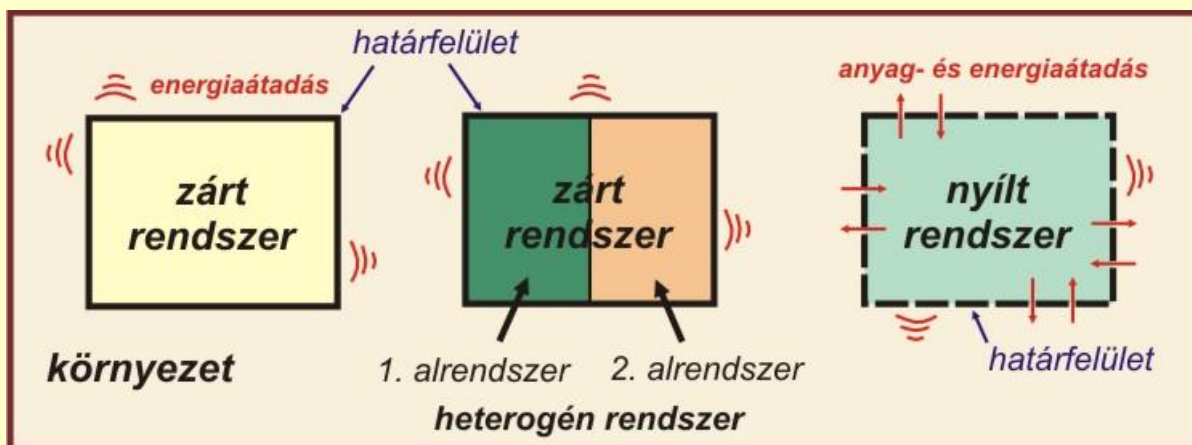
Néhány anyag olvadáshője és párolgáshője normál légköri nyomáson (Whitten et al., 2014)

	<b>T<sub>Op</sub></b>	<b>olvadáshő</b>	<b>T<sub>Fp</sub></b>	<b>párolgáshő</b>
<b>H<sub>2</sub>O</b> (jég/víz)	0 °C	334 kJ/kg (J/g) 6,02 kJ/mol	100 °C	2260 kJ/kg (J/g) 40,7 kJ/mol
<b>CH<sub>4</sub></b> (metán)	−182 °C	58,6 kJ/kg (J/g) 0,92 kJ/mol	−164 °C	-
<b>Fe</b> (vas)	1530 °C	267 kJ/kg (J/g) 14,9 kJ/mol	2735 °C	6340 kJ/kg (J/g) 354 kJ/mol
<b>Hg</b> (higany)	−39 °C	11 kJ/kg (J/g) 23,3 kJ/mol	357 °C	292 kJ/kg (J/g) 58,6 kJ/mol

T<sub>Op</sub>: olvadáspont hőmérséklete; T<sub>Fp</sub>: forráspont hőmérséklete

A rendszer a környezetével határfelületen keresztül érintkezik. A határfelületet hívhatjuk falnak, gátnak vagy akadálnak is (Bárány et al., 2011). Attól függően, hogy a rendszer a környezetével milyen kölcsönhatásban van, három alaptípust különböztetünk meg: elszigetelt, zárt, illetve nyílt rendszert (**18. ábra**). Az **elszigetelt** vagy **izolált rendszer** és környezete között sem anyag-, sem energiacsere nem lehetséges. A **zárt rendszer** és környezete között nincs anyagátadás, de energiaátadás lehetséges. **Nyílt (nyílt) rendszer** esetén mind anyag-, mind energiacsere van a rendszer és a környezete között (Bárány et al., 2011; Gill, 2015).

A termodinamikai rendszereket a fizikai és kémiai tulajdonságok változása szerint is csoportosíthatjuk. Abban az esetben, ha valamennyi tulajdonság a rendszer minden pontjában azonos, **homogén rendszerről** van szó. Ha legalább egy tulajdonság helyről helyre változik, a rendszer inhomogén. A **heterogén rendszer** két vagy több olyan alrendszerből áll, amelyeket valós határfelület választ el (**18. ábra**). Az alrendszerek legalább egy fizikai vagy kémiai tulajdonságukban eltérnek egymástól (Bárány et al., 2011).



**18. ábra**

Termodinamikai szemlélet: rendszer és környezet

Amennyiben a rendszert alkotó anyagot is vizsgáljuk, a rendszer lehet *egykomponensű*, azaz csak egyetlen alkotóból áll; illetve megkülönböztetünk *többkomponensű* rendszereket, amelyek két vagy több kémiai különböző anyagból állnak (Bárány et al., 2011; Gill, 2015). Egy desztillált vízzel teljesen megtöltött és lezárt palack egykomponensű (zárt) rendszert alkot. Egy levegővel töltött tartály viszont többkomponensű rendszer, hiszen a levegő gázkeverék.

Kémiai tulajdonságuk, reakcióhajlamuk, azaz reagálóképességük szerint is osztályozhatjuk a rendszereket. Az a rendszer **reaktív**, amelyben kémiai változások végbemehetnek; amelyekben nem, az **inert** (nem reaktív) rendszer (Bárány et al., 2011). A desztillált vízzel megtöltött palack, a levegővel töltött tartály nem reaktív rendszert képez. Hasonlóan, ha egy palackot nitrogéngázzal (egykomponensű rendszer), vagy nemesgázok keverékével (többkomponensű rendszer) töltünk meg, az szintén nem reaktív, azaz inert. Ha viszont egy tartályba hidrogént és levegőt, illetve metánt és oxigént töltünk, már olyan többkomponensű rendszerünk lesz, ami reaktív, hiszen megfelelő körülmények között abban kémiai változás mehet végbe.

Bármely rendszer pillanatnyi állapotát makroléptékben a rendszert jellemző mérhető fizikai paraméterek (pl. nyomás, hőmérséklet, térfogat) segítségével írhatjuk le, ezért ezeket *állapotváltozóknak* nevezzük. Az állapotváltozók két fő típusba sorolhatók attól függően, hogy értékük függ-e a rendszer tömegétől vagy sem. A rendszer tömegétől függő változókat **extenzív változóknak** nevezzük, ilyen például a térfogat. A tömegtől független állapotváltozók alkotják az **intenzív változók** csoportját, ide tartozik a nyomás és a hőmérséklet (pl. olvadáspont). Minden kémiai tulajdonság intenzív tulajdonság (Atkins, 1992; Anderson, 2005; Whitten et al., 2014).

Az eddig tárgyalt fizikai változások közös tulajdonsága, hogy ezek csak az anyag állapotát befolyásolják, a mennyiségét nem, azaz egy adott folyamatban résztvevő anyag tömege nem csökken és nem is növekszik. A megfigyelések azt is kimutatták, hogy a kémiai reakciókban résztvevő anyagok tömege sem változik meg. Egy reakcióban résztvevő kiindulási anyagok össztömege pontosan azonos a termékek össztömegével. Ezt fejezi ki a **tömegmegmaradás törvénye**: zárt rendszerben egy fizikai változás vagy kémiai reakció során az anyag mennyisége nem változik meg, a résztvevő anyagok tömegének összege mindig állandó. Ez egyike a legrégebben felismert megmaradási törvényeknek (Atkins, 1992; Rózsahegyi, 1993; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

Az exoterm kémiai reakciókban az energia általában hőenergiává alakul. Néhány exoterm folyamat azonban más típusú energiaváltozással jár, fényenergia szabadulhat fel hőenergia nélkül, de akár elektromos energia is keletkezhet hőfelszabadulás és fénykibocsátás nélkül. Az endoterm reakciók során hő-, fény- vagy elektromos energia alakul át kémiai energiává. A kémiai változások mindig energiaváltozással járnak, bár nem minden energiaátalakítást kísér kémiai átalakulás. A tudományos kísérletek tapasztalata bebizonyította, hogy elszigetelt rendszerben az energia nem keletkezhet, illetve nem tűnhet el sem kémiai, sem fizikai folyamatok során, csak átalakul, azaz az energia formája változtatható meg. Ez a természeti törvény az **energiamegmaradás törvénye** (Anderson, 2005; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

A nukleáris reakciókban az anyag energiává alakulhat. A tömeg és az energia közötti összefüggést Albert Einstein fogalmazta meg híres egyenletében (relativitáselmélet, 1905):  $E = m \cdot c^2$ , ahol  $E$  a test nyugalmi energiája,  $m$  a test tömege,  $c$  pedig a fénysebesség vákuumban. Ez kimondja, hogy a tömeg és az energia nem függetlenek egymástól, hanem egymással arányosak. A tömeg-energia ekvivalenciájának (egyenértékűségének) felismerésével a **tömeg- és energiamegmaradás**, azaz az **anyagmegmaradás törvénye** a következőként fogalmazható meg: a világegyetem energiája állandó (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014). Az energia nem keletkezik, nem is szűnik meg, csak átalakul.

**Megjegyzés:**

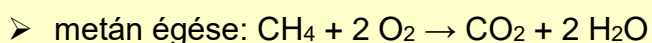
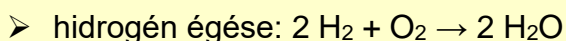
A magreakciók (nukleáris reakciók), amelyek során a tömeg energiává (vagy néha az energia tömeggé) alakul nem kémiai reakciók, ezért nem érvényes rájuk a tömegmegmaradás törvénye (Whitten et al., 2014)!

## 2.2. A kémiai reakciók termodinamikai megközelítése

A kémiai reakciók anyagi változással járó folyamatok, amelyek során atomok vagy ionok között erős kémiai kölcsönhatás, kötés szakad fel és/vagy új kötés jön létre. A kémiai reakciók lejátszódásakor egy vagy több anyag egy vagy több új (a kiindulástól eltérő, attól különböző) anyaggá alakul, azaz az atomok vagy ionok átrendeződnek (Whitten et al., 2014).

Egy kémiai reakció leírása a reakcióegyenlet vagy **kémiai egyenlet** segítségével történik. Balról jobbra haladva ezt úgy írjuk fel, hogy az egyenlet bal oldalára kerülnek a kiindulási anyagok vagy **reaktánsok**, jobb oldalára pedig a **termékek**. A reakció irányát a reaktánsok felől a termékek felé mutató nyíl jelzi. A reakcióegyenletnek tükröznie kell a reagáló, illetve keletkező anyagok mennyiségi arányát is, ezt a sztöchiometriai együtthatók adják meg (Rózsahegyi, 1993; Whitten et al., 2014). Bármely reakcióegyenlet felírásakor célszerű egész számok segítségével megadni a reakcióban résztvevő anyagok mennyiségét (1 mol, illetve annak legkisebb többszöröse).

Az első fejezetben a hidrogén, illetve a metán égése szerepelt egy-egy példaként a kémiai reakcióra. Írjuk fel most ezeket a folyamatokat a kémia nyelvén, a reakcióegyenlet segítségével!

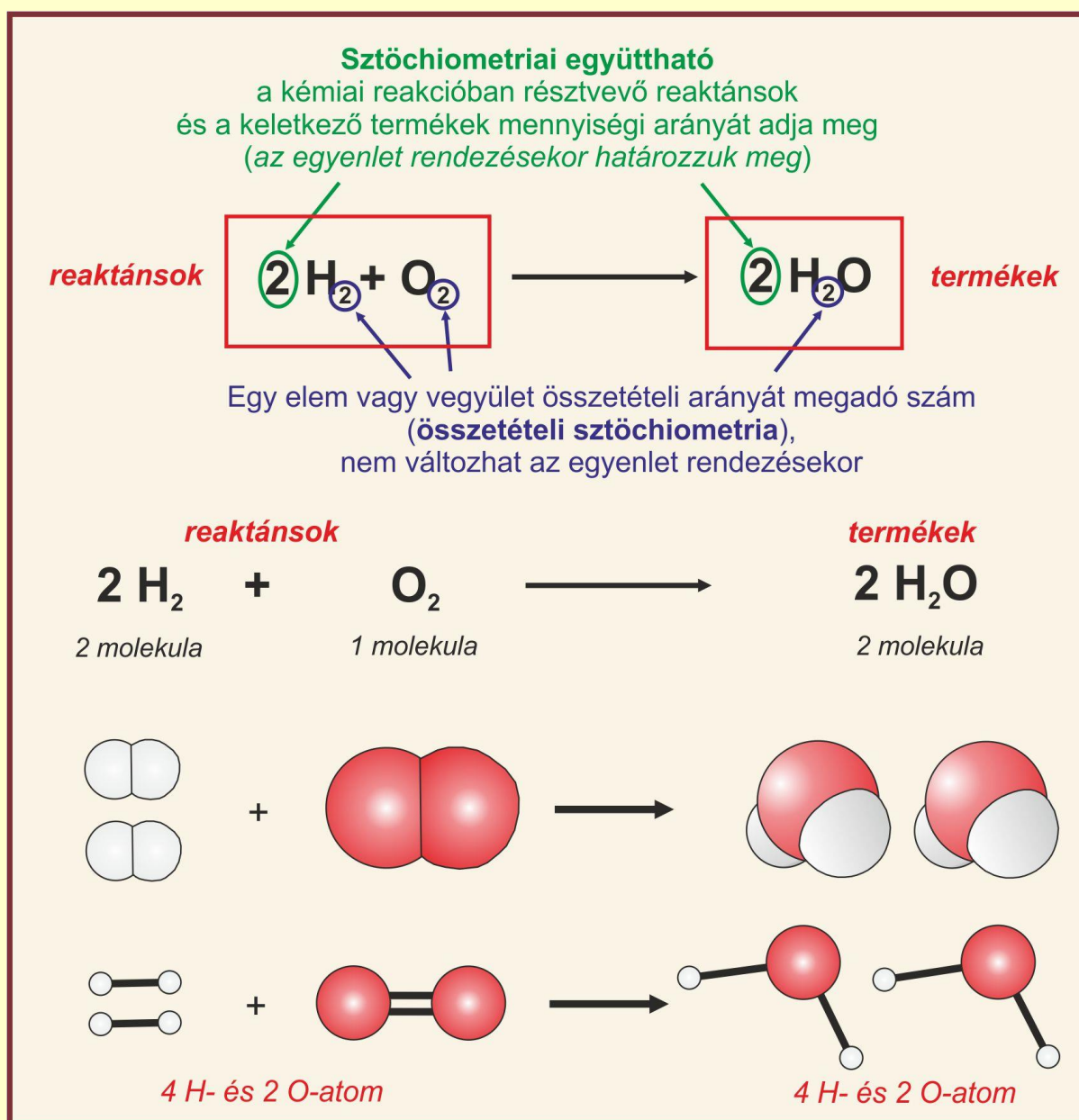


Ha jól megfigyeljük ezeket a kémiai egyenleteket, láthatjuk, hogy mind a hidrogén, mind az oxigén stabil (elemi) formában, kétatomos molekulaként szerepel. A molekulák és a vegyületek képlete megadja az azokban szereplő atomok (ionok) mennyiségi arányát, amit a tömegmegmaradás törvényének értelmében figyelembe kell vennünk az egyenlet rendezésekor. Ennek segítségével tudjuk megadni a kémiai egyenletben feltüntetett anyagok vegyjele, illetve képlete előtti egész szám, az úgynevezett sztöchiometriai együttható értékét (Whitten et al., 2014).

### Megjegyzés:

A reakcióegyenlet felírásakor a vegyületek összetételi sztöchiometriáját (alsó indexben szereplő számok a molekula- vagy összegképletben) nem változtathatjuk meg. Az anyagmértéknek megfelelő arányokat a sztöchiometriai együtthatókkal jelöljük.

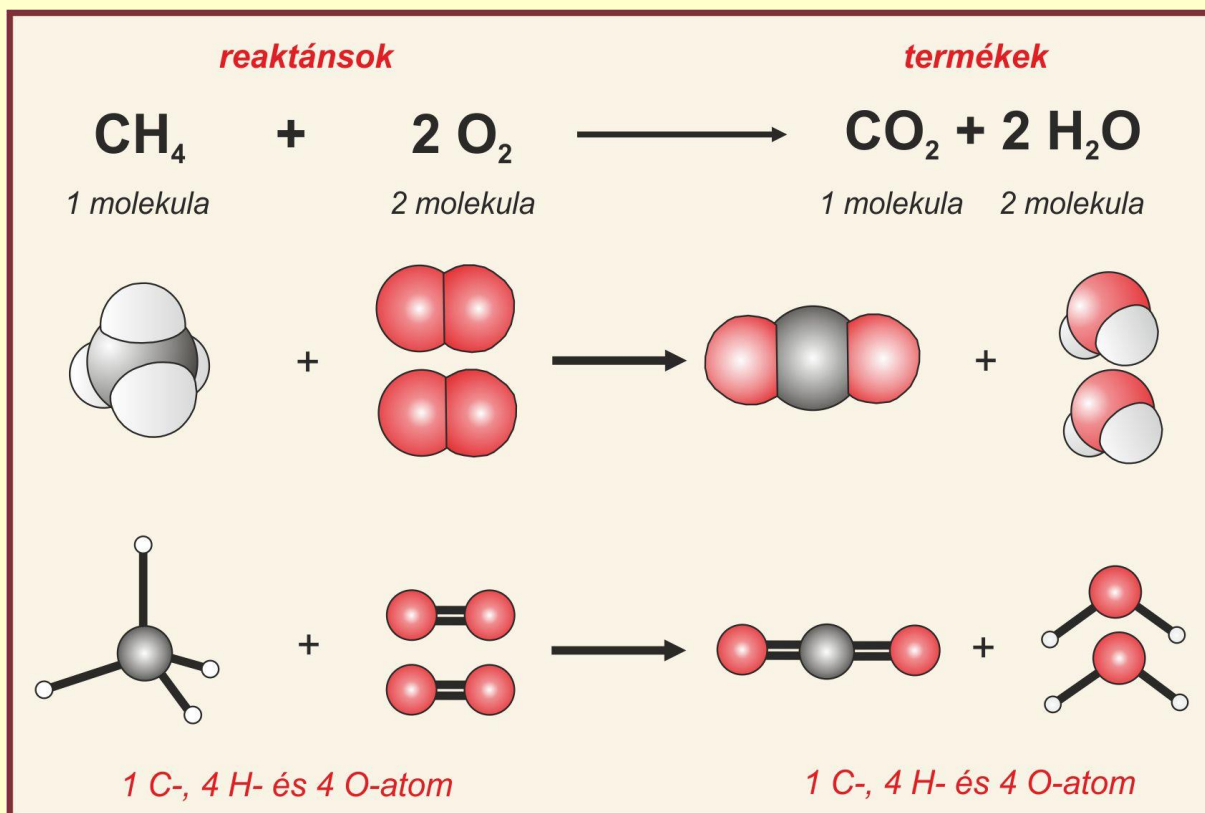
A hidrogén égésekor hidrogénmolekula (2 H-atom) és oxigénmolekula (2 O-atom) alakul vízmolekulává (2 H-atom + 1 O-atom). Ha a mennyiségi arányokat figyelembe vesszük, egy oxigénmolekula két vízmolekulához elegendő O-atomot tartalmaz, ezért két vízmolekula keletkezik. Ehhez viszont összesen 4 H-atomra van szükség, amit két hidrogénmolekula tud biztosítani. Ezek alapján a helyesen felírt (rendezett) egyenletben mind a hidrogénmolekula, mind a keletkezett víz együtthatója 2. Amennyiben egy anyag sztöchiometriai együtthatója 1 a reakcióegyenletben, azt számmal kiírva külön nem jelöljük (19. ábra).



**19. ábra**

Kémiai egyenlet: a hidrogén égése  
A reakcióegyenletet felírhatjuk a kémiai képletek segítségével, illetve szemléltethetjük kalotta- vagy gömb- és pálcikamodell felhasználásával.

A metán égésének folyamatát hasonló elvi alapon írhatjuk fel. A metán C-tartalmából szén-dioxid, H-tartalmából víz keletkezik. Egy metánmolekula egy C-atomot tartalmaz, ami egy CO<sub>2</sub>-molekulát eredményez. A metán négy hidrogénje két vízmolekulához elegendő. Ha a tömegmegmaradásnak megfelelően összeadjuk a termékek O-tartalmát, összesen 4 O-atomra van szükségünk a helyesen rendezett egyenletben, tehát a reaktánsok oldalán az oxigénmolekula együtthatója 2 lesz (20. ábra). Természetesen a kémiai gyakorlatban nem egy-egy darab molekulát veszünk figyelembe, hanem moláris mennyiségekkel célszerű dolgozni. Az egyenlet tehát úgy is olvasható, hogy egy mol metán és két mol oxigén reakciója során egy mol szén-dioxid és két mol víz keletkezik (1 mol =  $6 \cdot 10^{23}$  db részecske).



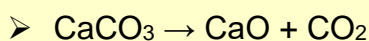
**20. ábra**

Kémiai egyenlet: a metán égése képletekkel felírva, illetve modellekkel szemléltetve  
A gömb- és pálcikamodell segítségével illusztrált egyenletből látható, hogy az oxigénmolekulában és a szén-dioxidban kettős kötés teremt kapcsolatot az atomok között.

A fenti két reakció közös jellemzője, hogy mindkettőben az oxigéngáz az egyik reakciópartner (oxidáció játszódik le). Mind a hidrogéngáz, mind a metán éghető anyag, ezek a molekulák összetételükből adódóan energiát raktároznak, tárolnak kémiai energia formájában (energiahordozók). Égésük során felszabadul ez az

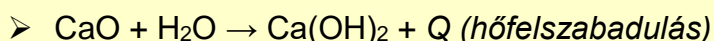
energia, tehát ez a két kémiai reakció exoterm. A fenti reakciók hőváltozása negatív előjelű, hiszen a rendszert alkotó reaktánsok kémiai energiája részben hőenergiává alakul, átadódik a környezetnek; a reakció lejátsszódását követően a termékek energiatartalma kisebb lesz. A fizikai változások hőváltozásához hasonlóan a kémiai reakciók hőváltozása is számszerűsíthető: ezt a **reakcióhő** segítségével adhatjuk meg. A reakcióhő megmutatja, hogy mekkora a hőváltozás, ha a reakcióegyenletben feltüntetett minőségű és mennyiségű anyagok alakulnak át (Rózsahegyi, 1993). Exoterm kémiai reakciónál a reakcióhő negatív előjelű, endoterm kémiai reakciónál pedig pozitív (mértékegysége: J/mol, illetve kJ/mol).

Földtudományi szempontból fontos endoterm kémiai reakció az úgynevezett „mészégetés”. A gyakorlatban ez a mészkeő zárt térben történő hevítése, ami egy hőbontási reakció. A mészkeő döntően kalcium-karbonátból álló kőzet, legfontosabb ásványa a kalcit ( $\text{CaCO}_3$ , ionos vegyület, **5. táblázat**). A kémiai egyenletünk bal oldalára ez kerül, ez a reaktáns. Hőközlés hatására (kb. 800–1000 °C-on) széndioxid (egyik termék) fejlődése közben elbomlik a kalcium-karbonát, a visszamaradó anyag a szilárd kalcium-oxid ( $\text{CaO}$ , ionos vegyület, **5. táblázat**) lesz (másik termék). A  $\text{CaO}$  hagyományos, hétköznapi elnevezése ezért „égetett mész”, ezt az anyagot az építőipar használja fel nagy mennyiségben (cementgyártás).



Látható, hogy itt szó sincs kémiai értelemben vett égésről (oxigénnel történő reakció, oxidáció). A mészkeő bomlásához energiát kell befektetni (hőközlés), ami egy része kémiai energiává alakulva raktározódik a termékekben (döntően a  $\text{CaO}$ -ban). A mészégetés ezért endoterm kémiai reakció. Egy kg mészkeőből kb. 0,5 kg égetett mész keletkezik.

Felmerülhet a kérdés, hogy visszanyerhetjük-e ezt a tárolt energiát? Ha igen, hogyan? A választ a „mészoltás” adja meg. A mészoltás kémiai értelemben az a reakció, amikor az égetett mész ( $\text{CaO}$ ) reagál vízzel. A mészoltás jelentős hőfelszabadulással járó folyamat, azaz exoterm kémiai reakció.



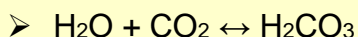
A reakciótermék közönséges neve: „oltott mész”, kémiai elnevezése: kalcium-hidroxid (ionos vegyület, **5. táblázat**). Ez egy veszélyes, erősen maró (**lúgos**) hatású anyag. Az oltott meszet habarcs (malter) készítésére használják az építőiparban, továbbá környezetbarát fertőtlenítőszer, illetve festék lakások belső falfelületének festésekor (meszelés).

A mészégetés során keletkezett termékek (CaO és CO<sub>2</sub>) vissza tudnak alakulni kalcium-karbonáttá, ezért a bomlás során felszabaduló CO<sub>2</sub>-ot el kell vezetni. A CaO reakcióba tud lépni a levegő CO<sub>2</sub>-tartalmával, ezért légmentesen kell tárolni.



Ez a reakció a kalcium-karbonát bomlásának ellentéte, egy egyesülés (két anyag egymással egyesülve egy harmadik, új anyagot hoz létre). Azokat a kémiai reakciókat, amelyek mindkét irányba végbemehetnek, megfordítható vagy **reverzibilis** reakcióknak nevezzük. A **megfordítható kémiai átalakulások** egy bizonyos idő elteltével egyensúlyra vezetnek. **Kémiai egyensúly**ról akkor beszélünk, amikor a megfordítható (reverzibilis) kémiai reakcióban az oda- és visszaalakulás sebessége egyenlő (Atkins, 1992; Rózsahegyi, 1993). Az egyirányú kémiai reakciót **irreverzibilis** reakciónak nevezzük (Atkins, 1992; Bárány et al., 2011).

A megfordítható (reverzibilis) kémiai reakciók egyenletének felírásakor általában nem egyirányú nyilat, hanem kettős nyilat ( $\leftrightarrow$ ) vagy egyenlőségjelet (=) szokás tenni a reaktánsok és a termékek közé, ezzel is kihangsúlyozva azt, hogy a folyamat egyensúlyra vezet. A kalcium-karbonát hőbontási reakciója tehát felírható egyensúlyi folyamatként:  $\text{CaCO}_3 \leftrightarrow \text{CaO} + \text{CO}_2$ . A köznapi életben gyakran találkozunk egy másik egyensúlyi kémiai reakcióval, amikor a szén-dioxid (gáz) és a víz (folyadék) reagál egymással, a keletkezett termék az enyhén savanyú ízű, **savas** hatású szénsav (H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>). A szódavízben, a szén-dioxiddal dúsított ásványvízben, a szénsavas üdítőitalokban ez a megfordítható kémiai reakció játszódik le.



Ez olyan egyesülés, amikor gáz oldódik folyadékban, tehát oldódásnak tekinthető a reakció. A savas és lúgos hatású anyagokról, az oldatok és az oldódási reakciók jellemzőiről későbbi fejezetekben esik szó részletesebben. A termodinamikai alapfogalmak zárásaként azonban célszerű még megemlíteni az oldáshőt. Az **oldáshő** megmutatja, hogy mekkora hő szabadul fel, vagy mennyi hőt vesz fel a rendszer, ha 1 mol anyagból nagyon híg oldatot készítünk (Boksay et al., 1987; Rózsahegyi, 1993). Az oldódás tehát lehet exoterm vagy endoterm folyamat.

#### **Megjegyzés:**

A CO<sub>2</sub> **üvegházhatású gáz**, ezért a globális felmelegedés és a klímaváltozás kérdéskörénél fontos szerepet kap az emberi tevékenység során a légkörbe juttatott CO<sub>2</sub> mennyisége. A cementgyártás egyike a jelentős **antropogén** CO<sub>2</sub>-forrásoknak.

## 2. Tudtad már? Fizikai kémiai alapfogalmak, fogalomtár

**Antropogén:** az embertől, illetve az emberi tevékenységtől függő, az ember által kiváltott hatás.

**Anyagmegmaradás törvénye:** a tömeg és az energia egyenértékűségének értelmében a világegyetem energiája állandó. Az energia nem keletkezik, nem is szűnik meg, csak átalakul; „raktározódik”.

**Elszigetelt rendszer:** nincs anyagátadás, nincs energiaátadás. Sem kémiai anyagátmenet, sem energiaátmenet nem lehetséges.

**Endoterm folyamat:** olyan folyamat, amely során a rendszer hő formájában energiát nyel el a környezetéből. Az endoterm reakciók hőelnyeléssel járó folyamatok (energiabefektetést igényelnek). Az „endo-” előtag azt jelenti, hogy befelé; a „term” a hőre utal.

**Energia:** munkavégző vagy hőközlő képesség. Jele: E, mértékegysége: joule (J).

**Energiamegmaradás törvénye:** elszigetelt rendszerben az energia nem keletkezhet, illetve nem tűnhet el sem kémiai, sem fizikai folyamatok során; csak átalakul, azaz az energia formája változtatható meg.

**Exoterm folyamat:** olyan folyamat, amely során az energia hő formájában felszabadul a rendszerből. Hőfejlődéssel (energia-felszabadulással) járó folyamatok. Az „exo-” előtag azt jelenti, hogy kifelé; a „term” a hőre utal.

**Extenzív változó:** a rendszer tömegétől függő állapotváltozó (pl. V).

**Helyzeti energia:** emelési munkát követően a felemelt test helyzete megváltozik, munkavégzésre lesz képes. Az emelési munka során kapott energia a helyzeti energia, ami a potenciális energia egyik fajtája.

**Heterogén rendszer:** egymástól határfelületekkel elválasztott fázisokból álló anyagi rendszer.

**Homogén rendszer:** egy fázisból álló anyagi rendszer, nincsenek benne határfelületek.

**Hőközlő képesség (hőközlés):** az energiaátadás egyik formája. Ha a rendszer és környezete között hőmérséklet-különbség van, hőáramlás jön létre, amit a rendszer és környezete közötti eltérő hőmozgás vált ki.

**Hőmozgás:** a részecskék (atomok, molekulák, ionok) kaotikus és véletlenszerű mozgása. Minden anyagban, amelynek hőmérséklete nagyobb az abszolút nulla foknál, a részecskék hőmozgást végeznek.

**Inert rendszer:** nem reaktív rendszer, nem mehetnek végbe benne kémiai változások.

**Intenzív változó:** a rendszer tömegétől független állapotváltozó (pl. p és T).

**Irreverzibilis:** egyirányú (nem megfordítható) folyamat.

**Izolált rendszer:** elszigetelt rendszer.

**Kémiai egyenlet:** azt fejezi ki, hogy milyen anyagok vesznek részt, illetve keletkeznek a reakcióban és milyen anyagmennyiség-arányban.

**Kémiai egyensúly:** megfordítható (reverzibilis) kémiai reakcióban az oda- és visszaalakulás sebessége egyenlő, vagyis a reakció eredő sebessége nulla.

**Kinetikus energia:** mozgási energia, egy test mozgásához kapcsolódó energia.

**Lúgos:** lúgos hatású anyagok vizes oldatában hidroxidion ( $\text{OH}^-$ ) szabadul fel. A hétköznapi életben az egyik legismertebb lúg az ammónia-oldat (szalmiákszesz), illetve a mosószóda (nátrium-karbonát) oldata. A lúgok (bázisok) savakkal sókat képeznek.

**Mechanikai energia:** valamilyen mechanikai kölcsönhatáshoz kapcsolódó energia (pl. mozgási, forgási vagy rugalmas energia).

**Megfordítható kémiai átalakulás:** egyensúlyra vezető folyamat, amelyben a keletkezett termék vagy termékek visszaalakulnak a kiindulási anyagokká (reverzibilis átalakulás).

**Mozgási energia:** egy test mozgásához kapcsolódó energia, munkavégző vagy hőközlő (pl. súrlódási hő) képesség.

**Munka:** a rendezett mozgás mértéke a munka ( $W$  [J = Nm, erő x elmozdulás];  $1 \text{ J} = 1 \text{ kg m}^2 \text{ s}^{-2}$ ). A munka az energiaátadás egyik formája.

**Munkavégző képesség (munkavégzés):** munkavégzés történik, ha valamilyen folyamattal egy súly magasságát a környezetben meg tudjuk változtatni. A munkát a rendszer végzi, ha a környezetben

levő súly felemelkedik. A munkát a rendszeren végzik, ha a súly lesüllyed.

**Nyitott (nyílt) rendszer:** anyagátesztő (van energiaátadás). Kémiai anyagátmenet és energiaátmenet lehetséges.

**Oldáshő:** megmutatja, hogy mekkora hő szabadul fel, vagy mennyi hőt vesz fel a rendszer, ha 1 mol anyagból nagyon híg oldatot készítünk.

**Olvadáshő:** az a hőmennyiség, ami 1 mol szilárd anyag folyadékká alakításához szükséges az olvadáspont hőmérsékletén. Az anyagi minőségtől függő tulajdonság.

**Párolgáshő:** az a hőmennyiség, ami 1 mol folyadék gőzzé alakításához szükséges a forráspont hőmérsékletén. Az anyagi minőségtől függő tulajdonság.

**Potenciális energia:** egy test helyzetéből (helyzeti), állapotából vagy összetételéből (kémiai, nukleáris) származó energia.

**Reakcióhő:** a reakcióhő megmutatja, hogy mekkora a hőváltozás, ha a reakcióegyenletben feltüntetett minőségű és mennyiségű anyagok alakulnak át.

**Reaktáns:** a kémiai reakció kiindulási anyaga.

**Reaktív rendszer:** olyan rendszer, amelyen kémiai változások végbemehetnek.

**Rendszer:** a világnak az a képzelte vagy valós határfelülettel elkülönített része, amelynek tulajdonságait vizsgáljuk, amelyet elhatárolunk a környezetétől.

**Reverzibilis:** megfordítható folyamat.

**Rugalmas energia:** a rugalmas alakváltozáshoz kapcsolódó energia (pl. összenyomást követően elengedett rugó energiája).

**Savas:** savas hatású anyagok vizes oldatában a protonleadás ( $p^+$ , azaz  $H^+$ ) miatt oxóniumion ( $H_3O^+$ ) található ( $H^+ + H_2O = H_3O^+$ ). A gyenge savak (pl. szén-sav, ecetsav, citromsav) híg vizes oldatának íze általában savanyú, innen származik a magyar sav elnevezés. A savak lúgokkal só képeznek.

**Szublimációhő:** az a hőmennyiség, ami 1 mol szilárd anyag gőzzé alakításához szükséges a szublimációpont hőmérsékletén. Az anyagi minőségtől függő tulajdonság.

**Termék:** a kémiai reakció során keletkezett anyag.

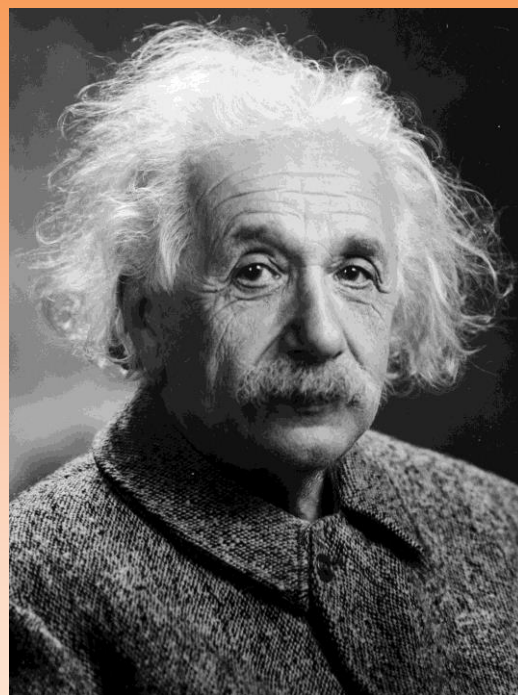
**Termodinamika:** az energiaátalakulással kapcsolatos tudományterület („*hőtan*”).

**Tömegmegmaradás törvénye:** zárt rendszerben egy fizikai változás vagy kémiai reakció során az anyag mennyisége nem változik meg, a résztvevő anyagok tömegének összege mindig állandó.

**Üvegházhatású gáz:** olyan gáz, ami elnyeli és kisugározza az infravörös fényt, ezáltal megnövelve a légkör hőmérsékletét.

**Zárt rendszer:** nincs anyagátadás, energiaátadás lehetséges. Kémiai anyagátmenet nem, csak energiaátmenet lehetséges.

A tömeg és az energia közötti összefüggést Albert **Einstein** fogalmazta meg híres egyenletében:  $E = m \cdot c^2$ , ahol E a test nyugalmi energiája, m a test tömege, c pedig a fénysebesség vákuumban (~300 ezer km/s).

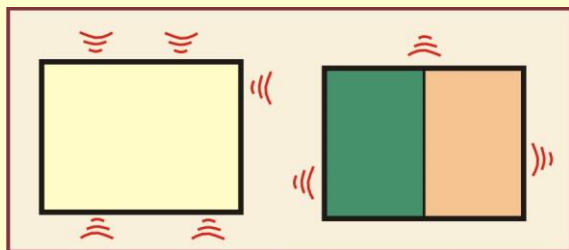


Ez a kép az Egyesült Államok Kongresszusi Könyvtárának Nyomdai és Fotográfiai Osztályától származik az alábbi azonosítóval: cph.3b46036. Közkinccs (By Photograph by Orren Jack Turner, Princeton, N.J. modified with Photoshop by PM\_Poon and later by Dantadd)  
<https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=925243>

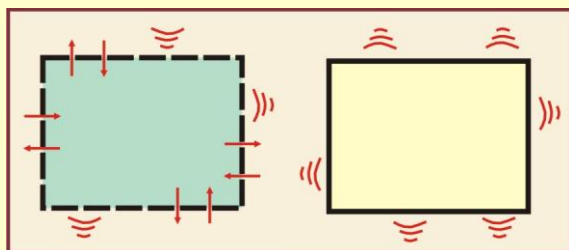
## 2. Tudtad már? – Önellenőrző kérdések, feladatok

**2.1.** Hőváltozás szempontjából melyik fizikai folyamat a kakukktojás? Miért? a) olvadás, fagyás, párolgás; b) lecsapódás, szublimáció, fagyás

**2.2.** A rendszereket leíró általános jellemzők közül mely tulajdonságok ismerhetők fel egyértelműen az alábbi rajzokon?



**2.3.** A rendszereket leíró általános jellemzők közül mely tulajdonságok ismerhetők fel egyértelműen az alábbi rajzokon?



**2.4.** Határozd meg a következő fogalmakat, és adj meg mindegyikre egy-egy jellemző földrajzi vagy földtudományi példát!

- endoterm kémiai reakció
- kinetikus energia
- exoterm kémiai változás
- potenciális energia
- intenzív tulajdonság

**2.5.** Az alábbi folyamatok közül melyik exoterm? a) a jég megolvadása, a forró víz elpárolgása, a gyertya égése; b) a páralecsapódás, a papír égése, a mészlötés; c) a fa égése, a csokoládé megolvasztása, jégkocka készítése vízből

**2.6.** A felsoroltak közül melyik alkalmas a potenciális és melyik inkább a kinetikus energia szemléltetésére? üstökös, ceruzaelem, uránérc, bolygó, akkumulátor, kőszén, Tisza, kötőm (hegycsúcs), lávafolyam, gleccser

**2.7.** A kémiai reakciókat kísérő energiaváltozás jellemzően néhány száz kJ/mol nagyságrendű; míg a jellemző moláris tömegek általában 0,1 kg/mol nagyságúak. Az Einstein-féle összefüggés segítségével számoljuk ki, hogy

400 kJ energia mennyi tömeggel egyenértékű! A fényterjedés sebessége vákuumban közelítőleg  $c = 3 \cdot 10^8$  m/s (300 ezer km/s).

**2.8.** Írd fel az alábbi kémiai reakciók egyenletét!

- napfény hatására a hidrogéngáz és a klórgáz robbanásszerű hevességgel reagál, miközben hidrogén-klorid gáz keletkezik
- a hidrogéngáz szikra hatására az oxigéngázzal hevesen reagál, miközben vízgőz keletkezik

**2.9.** Hogyan kell helyes formában felírni az alábbi kémiai reakciókat? Az elemek stabil formájának javítását követően rendezd az egyenleteket!

- $N + O \rightarrow NO_2$
- $CH_4 + O \rightarrow CO_2 + H_2O$
- $H + Br \rightarrow HBr$  (hidrogén-bromid, molekula)
- $P + O \rightarrow P_4O_{10}$
- $H + F \rightarrow HF$  (hidrogén-fluorid, molekula)

**2.10.** Rendezd az alábbi egyszerű kémiai egyenleteket!

- $H_2 + O_2 \rightarrow H_2O$
- $C + O_2 \rightarrow CO$  (szén-monoxid, molekula)
- $C + O_2 \rightarrow CO_2$
- $H_2 + Cl_2 \rightarrow HCl$  (hidrogén-klorid, molekula)
- $H_2 + I_2 \rightarrow HI$  (hidrogén-jodid, molekula)

**2.11.** Rendezd az alábbi kémiai egyenleteket!

- $Na + H_2O \rightarrow NaOH + H_2$
- $K + H_2O \rightarrow KOH + H_2$
- $CaO + CO_2 \rightarrow CaCO_3$
- $H_2O + CO_2 \rightarrow H_2CO_3$
- $NaOH + HCl \rightarrow NaCl + H_2O$

**2.12.** A kémiai egyenletek alapján különítsd el az egyirányú és a megfordítható reakciókat!

- $CH_4 + 2 O_2 \rightarrow CO_2 + 2 H_2O$
- $CO_2 + H_2O \rightleftharpoons H_2CO_3$
- $S + O_2 \rightarrow SO_2$
- $H_2CO_3 + CaCO_3 \rightleftharpoons 2 HCO_3^- + Ca^{2+}$
- $CaSO_4 \rightleftharpoons Ca^{2+} + SO_4^{2-}$

**2.13.** Rendezd az alábbi kémiai egyenleteket!

- $C_2H_6 + O_2 \rightarrow CO_2 + H_2O$
- $Na + O_2 \rightarrow Na_2O$
- $NH_3 + H_2SO_4$  (kénsav)  $\rightarrow (NH_4)_2SO_4$
- $CaCl_2 + AgNO_3 \rightarrow Ca(NO_3)_2 + AgCl$
- $HgO \rightarrow Hg + O_2$

**2.14.** Rendezd az alábbi kémiai egyenleteket!

- $C_4H_{10} + O_2 \rightarrow CO_2 + H_2O$
- $Ca + O_2 \rightarrow CaO$
- $Al + H_2SO_4 \rightarrow Al_2(SO_4)_3 + H_2$
- $CaCO_3 + HCl \rightarrow CaCl_2 + CO_2 + H_2O$
- $NaOH + H_3PO_4 \rightarrow Na_3PO_4 + H_2O$

## 2. Tudtad már? – Önellenőrző kérdések, feladatok: megoldások

**2.1.** a) fagyás, mert ez exoterm folyamat (az olvadás és a párolgás endoterm); b) szublimáció, mert ez endoterm folyamat (a lecsapódás és a fagyás exoterm)

**2.2.** balra: homogén zárt rendszer, ami a környezetétől energiát von el, azaz endoterm; jobbra: heterogén zárt rendszer, ami a környezetének energiát ad át, azaz exoterm

**2.3.** balra: homogén nyílt (nyitott) rendszer, ami anyag- és energiacserét mutat a környezetével; jobbra: homogén zárt rendszer, ami energiát ad át a környezetének, azaz exoterm

**2.4.** a) endoterm kémiai reakció: hőelnyeléssel járó folyamat (energiabefektetést igényel), pl. mészegetés (a  $\text{CaCO}_3$  hőbontása)

b) kinetikus energia: egy test mozgásához kapcsolódó energia, pl. egy hegyomlás felszínalakító munkája; házakat, utakat romboló hatása

c) exoterm kémiai változás: hőfejlődéssel (energia-felszabadulással) járó folyamat, pl. fosszilis energiahordozók (földgáz, kőolaj, kőszén) elégetése

d) potenciális energia: egy test helyzetéből (helyzeti), állapotából vagy összetételéből (kémiai, nukleáris) származó energia, pl. urántartalmú fűtőelemekben lezajló maghasadás során termelt energia az atomerőműben

f) intenzív tulajdonság: a rendszer tömegétől független, pl. a hőmérséklet

**2.5.** a) a gyertya égése; b) a páralecsapódás, a papír égése, a mésztöltés; c) a fa égése, jégkocka készítése vízből

**2.6.** potenciális (helyzethez, összetételhez kapcsolódik): ceruzaelem, uránérc, akkumulátor, kőszén, kőtömb (hegycsúcson) kinetikus (mozgáshoz kapcsolódik): üstökös, bolygó, Tisza (folyó), lávafolyam, gleccser

**2.7.** Az Einstein-féle összefüggés:  $E = m \cdot c^2$ . Adatok:

$$E = 400 \text{ kJ} = 4 \cdot 10^5 \text{ J} = 4 \cdot 10^5 \text{ kg} \cdot \text{m}^2/\text{s}^2$$

$$c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$$

$$m = ?$$

$$E = m \cdot c^2 \rightarrow m = E / c^2$$

$$m = 4 \cdot 10^5 \text{ J} / (3 \cdot 10^8 \text{ m/s})^2$$

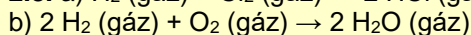
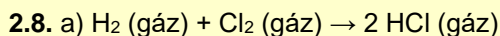
$$m = 4 \cdot 10^5 \text{ kg} \cdot \text{m}^2/\text{s}^2 / 3^2 \cdot 10^{16} \text{ m}^2/\text{s}^2$$

$$m = 4/9 \cdot 10^{5-16} \text{ kg} = 4/9 \cdot 10^{-11} \text{ kg}$$

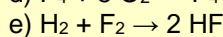
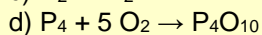
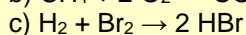
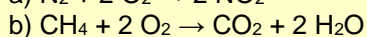
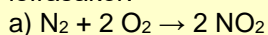
$$m \approx 4,4 \cdot 10^{-12} \text{ kg}$$

A fenti számolási példa rávilágít arra, hogy egy jellemző kémiai reakciót kísérő energiaváltozás

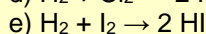
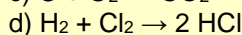
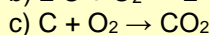
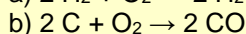
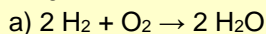
a reakcióban részt vevő anyagok moláris tömegéhez képest rendkívül kicsi tömeggel egyenértékű.



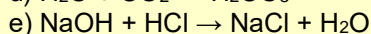
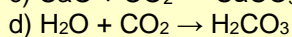
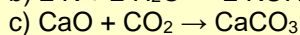
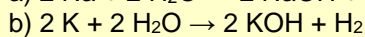
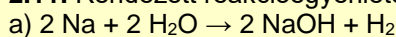
**2.9.** A nitrogén, az oxigén, a hidrogén, a bróm és a fluor kétatomos, a foszfor négyatomos molekulát alkot, ez a stabil forma, ezért így kell feltüntetni ezeket az elemeket a kémiai reakciók leírásakor.



**2.10.** Rendezett reakcióegyenletek:

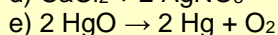
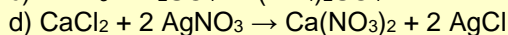
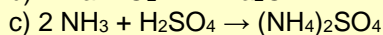
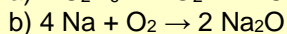
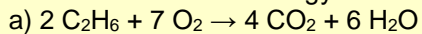


**2.11.** Rendezett reakcióegyenletek:

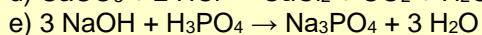
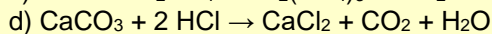
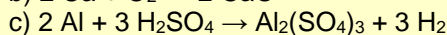
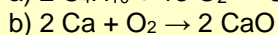
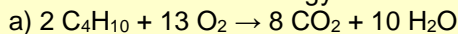


**2.12.** Az egyirányú reakciókban a kiindulási anyagokat és a termékeket egyirányú nyíllal különítjük el, míg megfordítható reakcióknál oda-vissza mutató nyíllal (kettős nyíl) vagy egyenlőségjelet alkalmazunk, tehát egyirányú: a és c; megfordítható: b, d és e

**2.13.** Rendezett reakcióegyenletek:



**2.14.** Rendezett reakcióegyenletek:



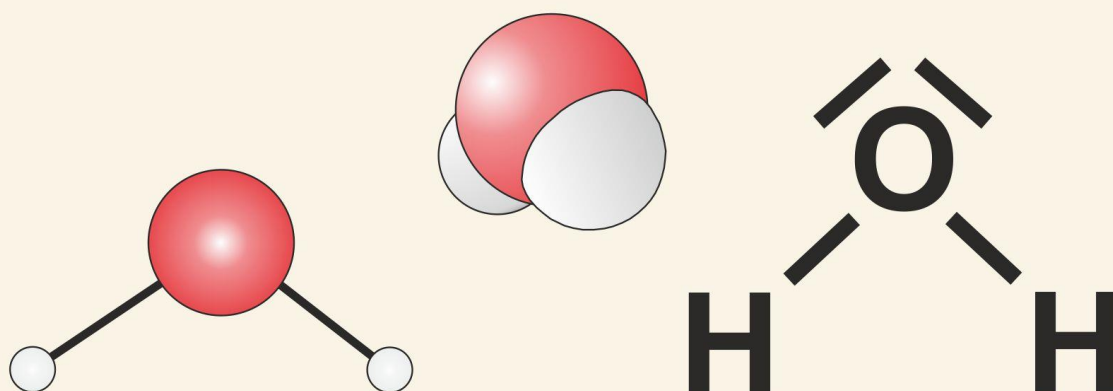
### Megjegyzés:

A HCl (hidrogén-klorid) vizes oldata a sósav.

# 3.

## Gyakori anyagok és tulajdonságaik

HA A  $\text{H}_2\text{O}$  VEGYÜLET,



AKKOR A VÍZIPISZTOLY  
VEGYIFEGYVER?

### Témakörök

#### 3.1. Elemek és szervesetlen vegyületek

- a nemfémes elemek (nemesgázok, hidrogén, nitrogén, oxigén, halogének, foszfor, kén, szén) és gyakori szervesetlen vegyületeik fizikai és kémiai tulajdonságai, legfontosabb földtudományi vonatkozások
- a fémek elemek (pl. nátrium, kálium, magnézium és kalcium) általános jellemzői és gyakori szervesetlen vegyületeik

#### 3.2. Szerves vegyületek

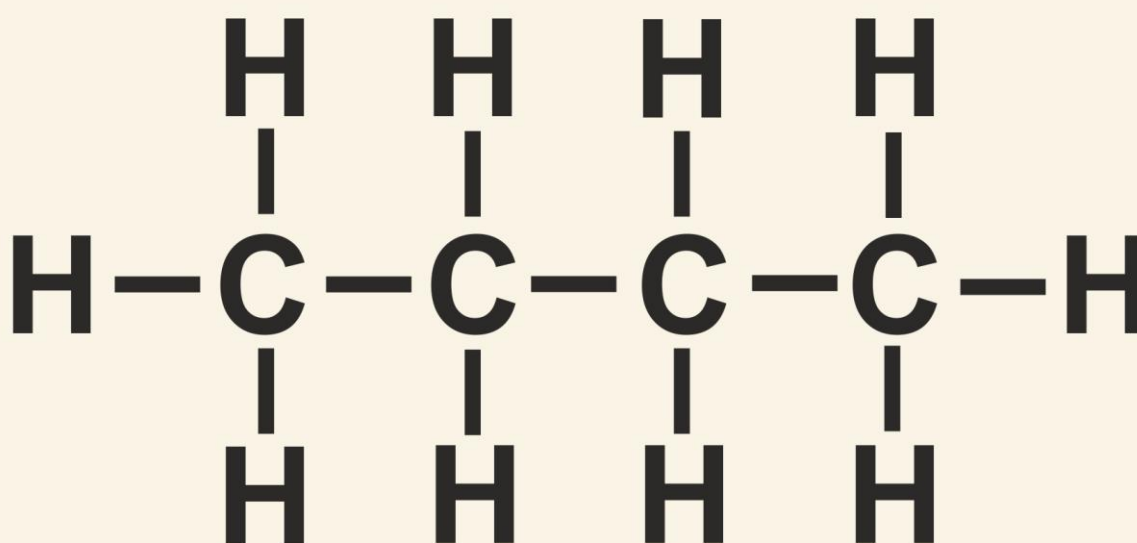
- szerves kémiai alapfogalmak (izomerek, funkciós csoportok)
- néhány szerves vegyület (szénhidrogének, oxigén- és nitrogéntartalmú szénvegyületek) jellemzése

### 3. Gyakori anyagok és tulajdonságaik

#### 3.1. Elemek és szervetlen vegyületek

#### 3.2. Szerves vegyületek

**HA NEM TANULOD A KÉMIÁT,**



**HALSZ MEG!**

***Ha megtanulod ezt a fejezetet, képes leszel arra, hogy***

- a mindennapi életben, illetve a laboratóriumban gyakran használt elemek és vegyületek hasznos (pl. oldószer), illetve veszélyes (pl. mérgező, maró anyag, gyúlékony) tulajdonságait megfogalmazd;
- elmagyarázd az egyszerű vegyületek közötti különbséget;
- a megismert elemeket, szervetlen, illetve szerves vegyületeket egyszerű tulajdonságok alapján (pl. vízben oldódik, mérgező, éghető, savas hatású stb.) összehasonlítsd.

### 3.1. Elemek és szervetlen vegyületek

Ahhoz, hogy el tudjunk igazodni a földtudományi folyamatokban, ismernünk és használnunk kell a kémia nyelvét, azaz tisztában kell lennünk a kapcsolódó vegyjelek, képletek, kémiai egyenletek jelentésével. Ehhez elengedhetetlen, hogy a leggyakoribb szervetlen és szerves anyagok alapvető tulajdonságait és jellemző reakcióit megtanuljuk. A légkörben lejátszódó folyamatok (pl. ózonképződés; szmogképződés), a felszíni és a felszín alatti vizek kémiai összetétele (pl. sós tengervíz; karsztvíz), a kémiai mállás, a talajképző folyamatok, a cseppkőképződés, a magma kristályosodása, illetve a forróvizes oldatokból történő ásványkiválás, a földgáz- és a kőolajképződés mind-mind olyan folyamatok, amelyek tárgyalása és megértése kémiai háttérismeret hiányában szinte lehetetlen feladat.

Az előző fejezetekben láttuk, hogy az egyedi atomokat, illetve a belőlük felépülő elemeket a vegyjel segítségével adhatjuk meg. Közöséges körülmények között izolált atomok formájában azonban csak a nemesgázok stabilak. Összekapcsolódó, véges számú atomnál a vegyjel mögötti, alsó indexben szereplő szám tükrözi az elemmolekula atomjainak a számát (pl.  $H_2$ ,  $N_2$ : kétatomos molekulát jelent elemi állapotban). Néhány elem azonban többféle formában létezhet, ilyen a korábban említett grafit és gyémánt. Mind a grafit, mind a gyémánt az elemi szén módosulata (nagy számú összekapcsolódó C-atom), ezért kémiai jelölésük azonos (C), kristályszerkezetük viszont eltérő (Koch, Sztrókay, 1994; Greenwood, Earnshaw, 2004). Egy másik közöséges anyag, az oxigén, különböző összetételű molekulákat alkothat: kétatomos oxigéngáz ( $O_2$ ) és háromatomos **ózon** ( $O_3$ ) formájában egyaránt megtalálható a természetben. Egyazon elem különböző szerkezetű módosulatait **allotróp módosulat**nak nevezzük (Boksay et al., 1990; Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014). Jóval nagyobb számban találunk azonban vegyületeket a természetben, amelyek között a **szervetlen** (pl. víz:  $H_2O$ , ammónia:  $NH_3$ , kalcit:  $CaCO_3$ ) és a **szerves vegyületek** (pl. metán:  $CH_4$ ) szokás megkülönböztetni. A szerves vegyületek C—C vagy C—H kapcsolatot (vagy mindkettőt) tartalmaznak. Ebben a fejezetben olyan elemek és vegyületek rövid bemutatása kapott helyet, amelyek a földrajzi és földtudományi folyamatok megértése szempontjából kiemelkedő szerepűek, továbbá e tankönyv gyakori példáit képviselik.

A **nemesgázok** (hélium, He; neon, Ne; argon, Ar; kripton, Kr; xenon, Xe; radon, Rn) rendkívül stabil (inert), nemfémes elemek. Erre utal a természetben atomos formában előforduló (5. **ábra**), színtelen, szagtalan, nem mérgező gázok összefoglaló neve (Szabó, Nyilasi, 1981; Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014; Gill, 2015). A világegyetem második leggyakoribb eleme a hélium (23% He), azonban mivel túl könnyű elem (moláris tömege 4 g/mol), a földi gyakorisága jóval kisebb. A nemesgázok a földi légkörnek, az atmoszférának kevesebb, mint 1 térfogat%-át alkotják, aminek döntő része argon. Kereskedelmi célokra a levegő cseppfolyósításával és elválasztásával nyerik ki őket. Felhasználási területük változatos: izzólámpák és reklámcsövek töltésére, laboratóriumokban palackozott formában analitikai vivőgázként, cseppfolyós formában hűtőközegként (He), mélytengeri búvárok légzőkészülékében a nitrogén helyettesítésére (He), meteorológiai léggömbök töltésére (He), illetve inert atmoszféra biztosítására egyaránt alkalmazzák a nemesgázokat (Greenwood, Earnshaw, 2004; White, 2013).

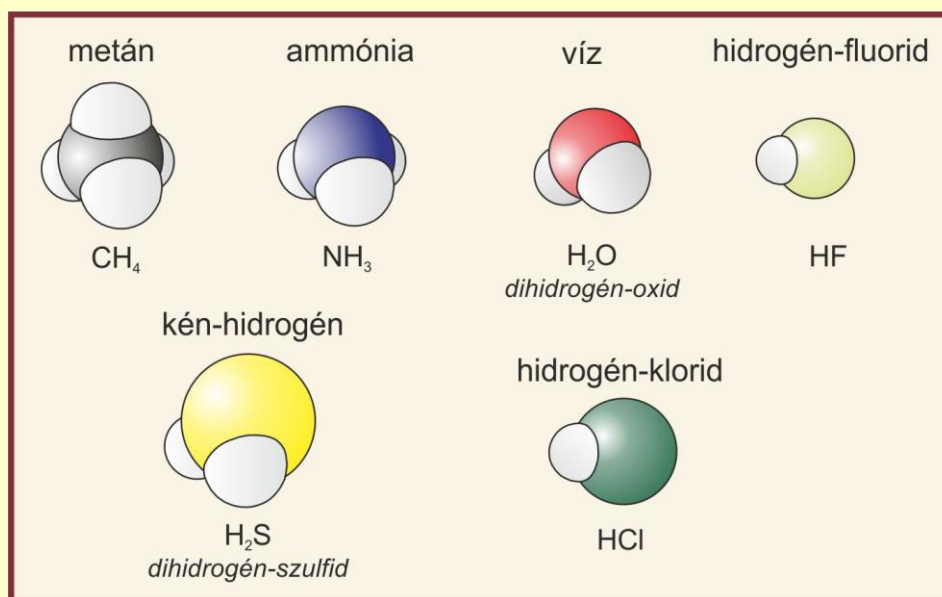
A diszkrét számú atomok összekapcsolódásával kialakult elemmolekulák közül kiemelkedő szerepe van a **hidrogéngáznak** ( $H_2$ ; 5. **ábra**). A hidrogén a természetben két stabilis (prócium és deutérium) és egy radioaktív (trícium) izotóp formájában található meg (3. **ábra**), amelyek a legkisebb és legkönnyebb atomok. A világegyetemben a leggyakoribb elem. A Föld felszínén szintén kiemelkedik gyakoriságával, hiszen az oxigén és a szilícium után ez a harmadik legnagyobb mennyiségben előforduló elemünk. Elemi állapotban azonban csak kis mennyiségben fordul elő a Földön, elsősorban vulkanikus gázokban és a légkör magasabb rétegeiben. Mind a földkéregben, mind az óceánokban (hidroszférában) vegyületeiben található meg, melyek közül a legfontosabb a víz, továbbá az élővilág „építőkövei”, a szerves vegyületek (Szabó, Nyilasi, 1981; Boksay et al., 1990; Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014; Gill, 2015). A nemfémek hidrogénvegyületei általában egyedi, önálló molekulákból állnak (21. **ábra**).

A hidrogéngáz ( $H_2$ ) színtelen, szagtalan, alacsony olvadás- és forráspontú anyag (6. **táblázat**), sűrűsége jóval kisebb, mint a levegő átlagsűrűsége. Oldószerekben, így a vízben is, csak kis mértékben oldódik. Egyes fémek, például a palládium (Pd) vagy a platina (Pt) viszont jól oldják: 1 térfogat palládium szobahőmérsékleten 800 térfogat hidrogéngázt képes feloldani atomos formában, ezért a kapott „oldat” nagyon reakcióképes (Boksay et al., 1990; Greenwood, Earnshaw, 2004). Kémiai tulajdonságai közül kiemelendő, hogy éghető anyag; égése

során exoterm folyamatban víz keletkezik ( $2 \text{ H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{ H}_2\text{O}$ ; **19. ábra**). Előállításuk többek között a víz elektrolitikus bontásával ( $2 \text{ H}_2\text{O} \rightarrow 2 \text{ H}_2 + \text{O}_2$ ), vagy bizonyos fémek vízzel (pl. alkálifémek: Na, K) vagy híg savakkal (pl. Al, alumínium kénsavval; Zn, cink sósavval) történő reakciójával lehetséges (Atkins, 1995; Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014). Az előző fejezetben szereplő példák közül az ide vonatkozó egyenletek a következők:

- $2 \text{ H}_2 + \text{O}_2 = 2 \text{ H}_2\text{O}$
- $2 \text{ Na} + 2 \text{ H}_2\text{O} \rightarrow 2 \text{ NaOH} + \text{H}_2$
- $2 \text{ K} + 2 \text{ H}_2\text{O} \rightarrow 2 \text{ KOH} + \text{H}_2$
- $2 \text{ Al} + 3 \text{ H}_2\text{SO}_4 \rightarrow \text{Al}_2(\text{SO}_4)_3 + 3 \text{ H}_2$
- $\text{Zn} + \text{H}_2\text{SO}_4 \rightarrow \text{ZnSO}_4 + \text{H}_2$
- $\text{Zn} + 2 \text{ HCl} \rightarrow \text{ZnCl}_2 + \text{H}_2$

A hidrogénmolekulát összetartó kémiai kötés olyan erős, hogy szobahőmérsékleten a hidrogén kevésbé reakcióképes elem. Ennek köszönhető, hogy a hidrogéngáz és az oxigéngáz elegye akár hosszú ideig stabil lehet, nem megy végbe reakció a komponensek között. Elegendő azonban egy parányi szikra ahhoz, hogy a gázkeverék felrobbanjon. A néhány százalékos oxigéngázt tartalmazó hidrogéngáz is robban szikra vagy hő hatására (Boksay et al., 1990).



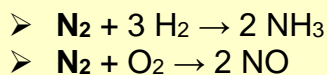
**21. ábra**

Gyakori hidrogénvegyületek kalotta-modelljének rajzai

A nemfémek hidrogénvegyületei diszkrét atomokból álló molekulákat formálnak.

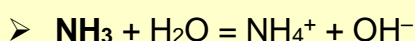
A nem reakcióképes (inert), színtelen, szagtalan és íztelen *nitrogéngáz* ( $\text{N}_2$ , dinitrogén; **5. ábra**) a levegő egyik fő alkotója (78 térfogat%). Ez a leggyakoribb elemi állapotban hozzáférhető elem. Szobahőmérsékleten nem reakcióképes; a nitrogén

és a hidrogén megfelelő körülmények között azonban ammóniává egyesül (21. ábra). A természetben oxigénnel csak magas hőmérsékleten (~3000 °C) lép reakcióba (pl. villámláskor), a folyamat során nitrogén-oxid keletkezik (Boksay et al., 1990; Greenwood, Earnshaw, 2004). A kapcsolódó reakcióegyenletek a következők:



A nitrogéngáz ipari előállítása a levegő cseppfolyósításával és **frakcionált desztillációjával** történik. Az elemi nitrogén egyik kiterjedt gyakorlati alkalmazása a hűtőanyagként történő felhasználás, amit a földtudományi műszeres anyagvizsgálatban szintén megtalálunk. A folyékony nitrogén állandó alacsony hőmérsékletet biztosít (–196 °C), kényelmes kezelhetősége miatt elterjedt laboratóriumi gáz (Greenwood, Earnshaw, 2004; Gill, 2015).

Gyakori szervetlen nitrogénvegyület az ammónia (NH<sub>3</sub>); illetve a salétromsav (HNO<sub>3</sub>) sói, a különböző nitrátok elterjedtek (pl. NaNO<sub>3</sub>, nátrium-nitrát, „chilei salétrom”) a természetben (9. táblázat). A nitrogén vegyületei vízben általában jól oldódnak (Boksay et al., 1990). Az ammónia színtelen, szúrós szagú, a levegőnél könnyebb gáz, könnyen cseppfolyósítható. A cseppfolyós ammónia jó oldószer; hűtésre, illetve műtrágyának is használják. Az ammónia vízben történő oldódása során ún. ammónium-hidroxid-oldat jön létre, ami a hidroxidionok miatt lúgos kémhatású. A folyamat reakcióegyenlete a következő:



Ezt az oldatot fémek és textíliák tisztítására alkalmazzák. Kereskedelmi forgalomba az 5, illetve 25 tömeg% ammóniát tartalmazó vizes oldat, köznapin néven a **szalmiákszesz** kerül (Boksay et al., 1990; Greenwood, Earnshaw, 2004).

A különböző nitrogén-oxidok (közös jelölésük: NO<sub>x</sub>; N<sub>2</sub>O, NO, N<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, NO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, N<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, NO<sub>3</sub>) gáz halmazállapotúak, többnyire mérgező vegyületek; üvegházhatású gázok. A dinitrogén-monoxid (N<sub>2</sub>O) kis mennyiségben nem toxikus, íztelen, ezért hajtóanyagnak, fagyaltok és tejszín habosítására használható. Kis mennyiségben belélegezve nevetést idéz elő, érzéstelenítő hatású (nevetőgáz vagy kéjgáz). A gépkocsik kipufogó gázaiban lévő, a **fotokémiai szmog** egyik kiváltóját jelentő nitrogén-oxidokkal kapcsolatos környezeti problémák a fejlett országokban jól ismertek (Boksay et al., 1990; Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014).

A tiszta salétromsav (HNO<sub>3</sub>) színtelen, levegőn füstölgő folyadék, vízben nagyon jól oldódik. Fény hatására NO<sub>2</sub> (nitrogén-dioxid) képződése mellett bomlik,

ami oldódik a salétromsavban, ezért a salétromsav tárolás közben sárgás árnyalatú, majd vörösbarna színű lesz. Ennek elkerülése érdekében a salétromsavat sötét üvegben tárolják. A salétromsavat **választóvíz**nek is nevezik, mert a nemesfémek közül az ezüstöt oldja, az aranyat viszont nem, így a tiszta arany, illetve az ezüstöt is tartalmazó aranyötvözet megkülönböztethető egymástól; továbbá az arany kinyerhető az ötvözetekből. A salétromsavat műtrágyagyártáshoz (pétisó: mészkőliszttel kevert ammónium-nitrát,  $\text{NH}_4\text{NO}_3$ ), robbanószer előállításához (pl. TNT, „nitroglicerín”), festékgyártáshoz, gyógyszergyártáshoz, illetve laboratóriumi vegyszerként használják fel (Boksay et al., 1990; Greenwood, Earnshaw, 2004).

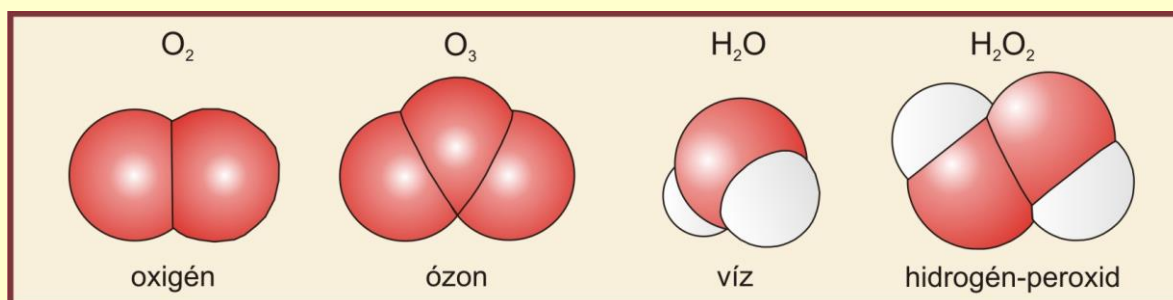
### 9. táblázat

A nitrogén és gyakori szervesetlen nitrogénvegyületek jellemző tulajdonságai (Boksay et al., 1990; Koch, Sztrókay, 1994; Greenwood, Earnshaw, 2004; Gill, 2015)

Név, képlet	Fizikai tulajdonságok	Kémiai tulajdonságok	Földtudományi vonatkozások
<b>nitrogén</b> $\text{N}_2$	színtelen, szagtalan gáz, vízben kis mértékben oldódik	szobahőmérsékleten nem reakcióképes	a levegő egyik fő alkotója (78 térfogat%); a folyékony nitrogén laboratóriumi hűtőanyag
<b>ammónia</b> $\text{NH}_3$	színtelen, szúrós szagú, a levegőnél könnyebb gáz, könnyen cseppfolyósítható, vízben jól oldódik	vizes oldata lúgos kémhatású (ammónium-hidroxid-oldat; szalmiákszesz)	műtrágya- és műanyaggyártási alapanyag; vizes oldatát fémek és textíliák tisztításához használják fel; oldószer
<b>nitrogén-oxidok</b> $\text{NO}_x$ (összevont, közös jelölés)	mérgező gázok	reakcióképes vegyületek	üvegházhatású gázok; villámláskor keletkezhetnek a légkörben; kipufogógázok komponensei; fontos szerepet játszanak a fotokémiai szmog kialakulásában
<b>salétromsav</b> $\text{HNO}_3$	színtelen, levegőn füstölgő, maró hatású folyadék	fény hatására bomlik, reakcióképes, oxidálószer, erős sav	ipari alapanyag (műtrágyagyártás, robbanószer előállítás, festékgyártás, gyógyszergyártás), laboratóriumi vegyszer; a salétromsav sói a nitrátok
<b>salétrom</b> (kálisalétrom) $\text{KNO}_3$	színtelen, kristályos anyag (szilárd), vízben jól oldódik	oxidáló hatású	a feketelőpor (puskapor) egyik összetevője
<b>chilei salétrom</b> (nátronsalétrom) $\text{NaNO}_3$	színtelen (fehér), szemcsés-kristályos anyag (szilárd), nedvszívó, vízben jól oldódik	oxidáló hatású	híres lelőhely: a chilei Atacama-sivatag; műtrágya- és robbanószergyártási alapanyag; tartósítószer

A nitrogén az élővilágban létfontosságú, az aminosavak, a fehérjék és a nukleinsavak (szerves vegyületek) építőeleme. A növényvilág szempontjából limitáló tápelem, pótlását műtrágyázással biztosítják a mezőgazdaságban (Kajtár, Varga, 1988; Papp, Kümmel, 1992; Greenwood, Earnshaw, 2004; Gill, 2015).

Az *oxigén* a Föld leggyakoribb eleme, hiszen a földkéreg tömegének majdnem felét (~45 tömeg%) oxigén teszi ki döntően ásványok alkotóelemeként. Az oxigén elemi állapotban az atmoszféra állandó összetevője (21 térfogat%). Biológiai jelentőségét a fotoszintézisben és a légzésben betöltött szerepe mutatja (Szabó, Nyilasi, 1981; Papp, Kümmel, 1992; Hetényi, 1999; Greenwood, Earnshaw, 2004; Gill, 2015). A kétatomos dioxid (O<sub>2</sub>; **22. ábra**) vagy egyszerűen oxigén színtelen, szagtalan gáz (**10. táblázat**). Kis mértékben, de a nitrogéngáznál jobban oldódik vízben, és így a vízi élőlények oxigénellátását biztosítja. Közös körülmények között viszonylag stabil (pl. levegő), magasabb hőmérsékleten viszont nagyon reakcióképes, sok elemet képes közvetlenül oxidálni (pl. égés folyamata), azaz **oxidálószer**; e folyamatok során oxidok keletkeznek. A reakciókat gyakran kíséri fényjelenség, illetve energiefelszabadulással járnak (exoterm kémiai változás). Előállításuk többek között a levegő cseppfolyósításával és frakcionált desztillációjával, vagy a víz elektrolitikus bontásával lehetséges. Kék színnel jelzett acélpalackokban hozzák forgalomba (Boksay et al., 1990; Greenwood, Earnshaw, 2004).



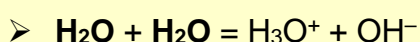
**22. ábra**

Az oxigén allotróp módosulatai és hidrogénvegyületei

Az oxigén hámatomos (trioxigén) allotróp módosulata, az **ózon** (O<sub>3</sub>; **22. ábra**) bomlékony, kékszíű, jellegzetes, átható szagú, üvegházhatású gáz. A földi élet szempontjából kiemelt jelentőségű tulajdonsága, hogy az elektromágneses spektrum ibolyántúli (UV) tartományában erős a fényelnyelése, ezáltal a légkör felső részében képződő ózon (sztratoszférikus ózon) megvédi a bioszférát a Nap intenzív ibolyántúli sugárzásától (Boksay et al., 1990; Greenwood, Earnshaw, 2004;

Gelencsér et al., 2012; White, 2013; Whitten et al., 2014; Gill, 2015). Az ózon erős oxidálószer, magas hőmérsékleten gyorsan bomlik atomos oxigén képződése közben. Fertőtlenítésre (sterilizálás), vízkezelésre, fehéritésre, italok érlelésére használják (Boksay et al., 1990; Greenwood, Earnshaw, 2004).

Az oxigén legelterjedtebb, legkönnyebben hozzáférhető és a leginkább tanulmányozott kémiai vegyülete a víz ( $\text{H}_2\text{O}$ ; **22. ábra**), amely közönséges körülmények között folyadék, olvadás- és forráspontja viszonylag magas, sűrűsége  $+4\text{ }^\circ\text{C}$ -on a legnagyobb. A leggyakrabban használt oldószer (Boksay et al., 1990; Greenwood, Earnshaw, 2004; White, 2013). Gyenge savnak és gyenge bázisnak egyaránt tekinthető, hiszen hidrogénion (proton) megkötésére és leadására is képes.



A folyamat során oxóniumion és hidroxidion keletkezik (**5. táblázat**); amelyek koncentrációja a tiszta vízben egyenlő. Ez az átalakulás a kémhatás, illetve az annak számszerűsítésére szolgáló pH (kiejtés: *pé-há*) skála alapja. A víz semleges kémhatású anyag. A savak és a bázisok erősségét vízhez való viszonyuk alapján szokás megadni (Boksay et al., 1987, 1990; Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014). Földtudományi jelentősége miatt e könyv későbbi fejezeteiben — például a kémiai kötések, a folyadékok és az oldatok tárgyalásakor — a víz fizikai és kémiai tulajdonságait részletesen meg fogjuk ismerni.

### 10. táblázat

Az oxigén allotróp módosulatainak és hidrogénnel alkotott vegyületeinek néhány jellemző tulajdonsága (Boksay et al., 1990; Greenwood, Earnshaw, 2004)

Név, képlet	Fizikai tulajdonságok	Kémiai tulajdonságok	Földtudományi vonatkozások
<b>oxigén</b> $\text{O}_2$	színtelen, szagtalan gáz; vízben kis mértékben oldódik	magasabb hőmérsékleten reakcióképes, oxidálószer	a légkör állandó összetevője (21 térfogat%); a fotoszintézis terméke
<b>ózon</b> $\text{O}_3$	kékszínű, jellegzetes, átható szagú gáz	bomlékony, reakcióképes, oxidálószer	erős a fényelnyelése az UV-tartományban; fertőtlenítő-, sterilizáló- és fehéritőszer
<b>víz</b> $\text{H}_2\text{O}$	színtelen, könnyen mozgó folyadék; olvadás- és forráspontja viszonylag magas; oldószer	kitűnő oldószer (kémiai oldódás), sav-bázis, illetve oxidációs-redukciós reakciókban vesz részt	a Föld felszínének ~71%-a víz (óceánok); ásványokba beépülhet (pl. kristályvíz)
<b>hidrogén-peroxid</b> $\text{H}_2\text{O}_2$	sűrűn folyó, színtelen folyadék; vízzel minden arányban elegyedik	bomlékony, erős oxidálószer	fertőtlenítő- és fehéritőszer

Az oxigén másik hidrogénvegyülete a *hidrogén-peroxid* ( $\text{H}_2\text{O}_2$ , dihidrogén-peroxid) sűrűn folyó, színtelen, szagtalan, a víznél nagyobb sűrűségű folyadék (22. ábra; 10. táblázat). Olvadás- és forráspontja viszonylag magas, vízzel minden arányban elegyedik, oxigénfejlődés közben könnyen bomlik, erős oxidálószer. Fertőtlenítő és színtelenítő, fehéritő hatású (Boksay et al., 1990; Greenwood, Earnshaw, 2004).

A **halogének** kétatomos molekulákból álló, könnyen illó, nemfémes elemek (kivételt képez a rendkívül instabil, ritka asztácium, ami félfémes karakterű), színük egyenletesen mélyül a rendszám növekedésével (11. táblázat). A fluor ( $\text{F}_2$ ) világossárga, a klór ( $\text{Cl}_2$ ; 5. ábra) zöldessárga gáz, a bróm ( $\text{Br}_2$ ; 5. ábra) sötétvörös, könnyen folyó folyadék, a jód ( $\text{I}_2$ ; 7. ábra) fényes szürkésfekete, lilás árnyalatú, kristályos, szilárd anyag. Igen reaktív, agresszív kémiai anyagok („sóképzők”), erélyes oxidálószeresek. Reakciókészségük azonban a rendszám növekedésével csökken. Fémekkel hevesen reagálnak, halogenidek (pl.  $\text{NaCl}$ : nátrium-klorid, kősó) keletkeznek. A hidrogénnel kétatomos molekulákat képeznek (hidrogén-halogenidek; 23. ábra). Nagy reakciókészségük miatt a természetben csak vegyületként fordulnak elő, a halogénvegyületek a legrégebbi időktől kezdve ismertek (Szabó, Nyilasi, 1981; Boksay et al., 1990; Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

A fluor neve a folyátnak (fluorit,  $\text{CaF}_2$ ) „folyósítószerként” (latin *fluor*: folyós, folyó) való korai alkalmazásából, azaz az olvadáspontot csökkentő hatásából ered. A műanyaggyártásban a tapadásmentes bevonat, illetve nemragadó műanyag kifejlesztése (teflon, poli-tetrafluor-etilén), valamint a freon-gázok (hűtőgáz mélyfagyasztáshoz; aeroszolok hajtóanyaga) széleskörű elterjedése a fluorvegyületek hétköznapi jelentőségét mutatja (Boksay et al., 1990; Koch, Sztrókay, 1994; Atkins, 1995; Greenwood, Earnshaw, 2004; Gill, 2015).

A klór volt az első izolált halogén, fertőtlenítő és fehéritő hatása az 1700-as évek vége óta ismert. Hidrogénnel alkotott vegyülete, a hidrogén-klorid ( $\text{HCl}$ ), illetve annak vizes oldata, a **sósav** egyike a legfontosabb ipari alapanyagoknak, illetve a köznapi életben, háztartási tisztítószerként található meg. A klór legismertebb vegyülete azonban a nátrium-klorid ( $\text{NaCl}$ ; 7. ábra), azaz kősó vagy konyhasó, ásványtani nevén halit (Boksay et al., 1990; Koch, Sztrókay, 1994; Greenwood, Earnshaw, 2004; Gill, 2015).

A bróm és a jód szabad állapotban nem fordul elő a természetben, a különböző bromidok, illetve jodidok a kloridok kísérői. Megtalálhatók a tengervízben

és egyes ásványvizekben (pl. bükkszéki Salvus). Sebfertőtlenítésre alkalmas a jód alkoholos oldata, az úgynevezett **jódtinktúra** (Boksay et al., 1990).

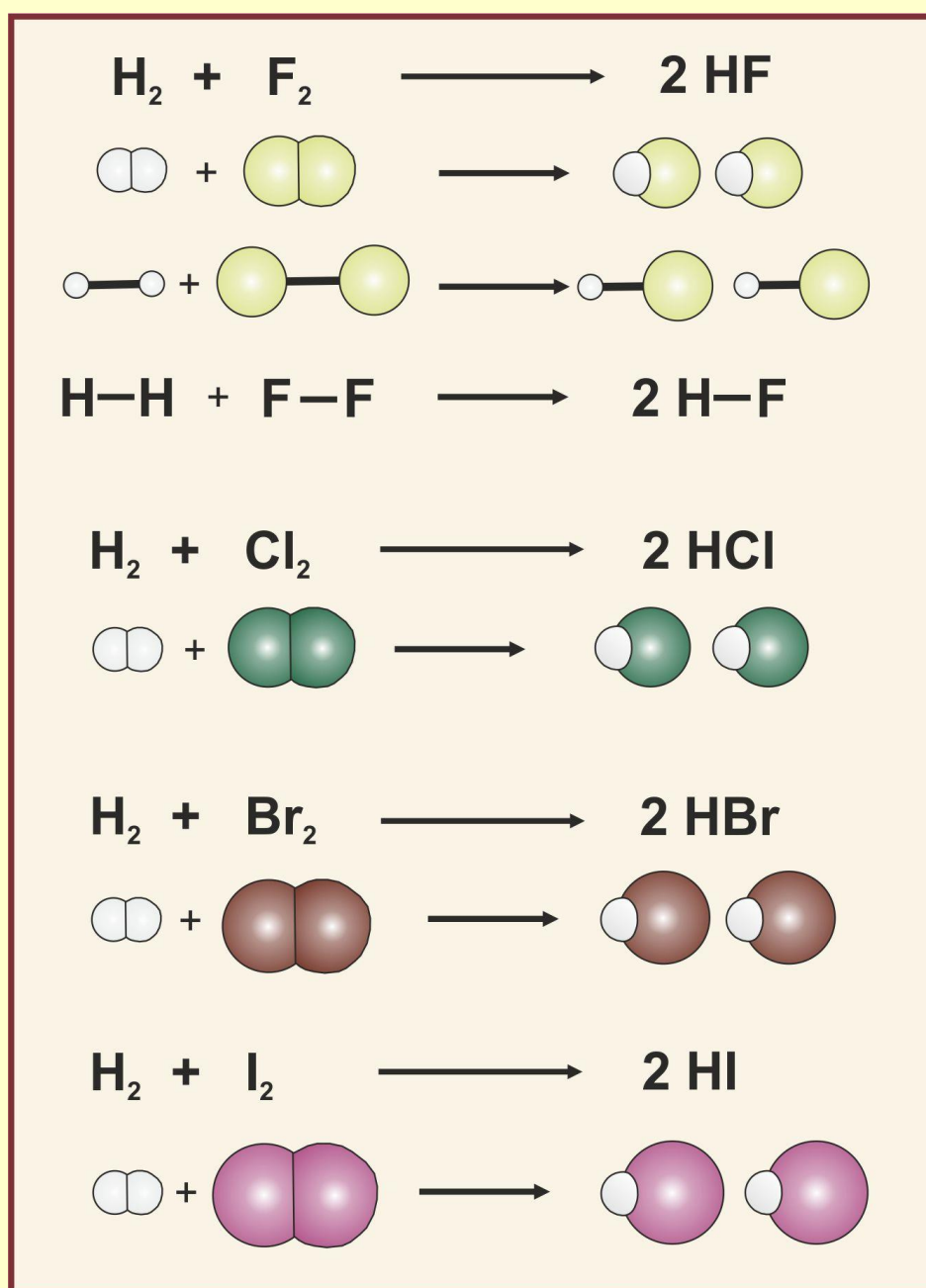
### 11. táblázat

A halogénelemek és vegyületeik néhány jellemző tulajdonsága (Boksay et al., 1990; Koch, Sztróky, 1994; Greenwood, Earnshaw, 2004; Gill, 2015)

Név, képlet	Fizikai tulajdonságok	Kémiai tulajdonságok	Földtudományi vonatkozások
<b>fluor</b> F <sub>2</sub>	zöldessárga gáz	reakcióképes, oxigénfejlődés közben hevesen bontja a vizet	legfontosabb ásványa a fluorit (CaF <sub>2</sub> , kalcium-fluorid); műanyaggyártási alapanyag
<b>klór</b> Cl <sub>2</sub>	sárgászöld színű, szúrós szagú, mérgező gáz; a levegőnél nehezebb; vízben elég jól oldódik („klóros víz”)	reakcióképes, erős oxidálószer	vizes oldata színtelenítő- és fertőtlenítőszer; legjelentősebb ásványa a kősó (NaCl); sósav- és műanyaggyártási alapanyag
<b>bróm</b> Br <sub>2</sub>	vörösbarna folyadék; vízben elég jól oldódik	reakcióképes, oxidálószer	vegyipari alapanyag (gyomirtószer, festék- és gyógyszergyártás)
<b>jód</b> I <sub>2</sub>	lilásfekete, fémesen csillogó, szilárd, kristályos anyag; könnyen párolog; vízben rosszul oldódik	a halogének között a legkevésbé reakcióképes, gyenge oxidálószer	vegyipari alapanyag
<b>kősó (halit)</b> NaCl	színtelen, szagtalan, sós ízű, kristályos (szilárd) ionvegyület, vízben jól oldódik; vizes oldata és olvadáka vezeti az elektromos áramot	stabil vegyület; vizes oldata semleges kémhatású; „lángfestő” tulajdonságú	oldva sós tavakban, világtengerekben, óceánokban fordul elő (~3,5% oldott só); tengerek bepárlódásával kősótelepek keletkeznek
<b>hidrogén-halogenidek</b> HF, HCl, HBr, HI	színtelen, szúrós szagú gázok (a HF illékony folyadék); vízben jól oldódnak	reakcióképes anyagok; vizes oldataik erős savak	a HCl előfordul vulkáni gázokban; a sósav gyógyszer-, festék- és műanyaggyártási alapanyag; ipari és háztartási tisztítószer; a HF szilikátok és üveg oldására használható

A halogének hidrogénnel alkotott vegyületei, a hidrogén-halogenidek (11. táblázat; 23. ábra) kétatomos molekulák; színtelen, szúrós szagú, mérgező gázok (a HF folyadék; forráspontja: 19,5 °C). Vízben jól oldódnak, vizes oldatuk erősen savas tulajdonságú; savas jellegük a hidrogén-fluoridtól a hidrogén-jodid irányába növekszik. A hidrogén-fluorid (HF) fájdalmas égési sebeket okoz a bőrön. A HF-gáz és oldata egyaránt agresszív anyag, az üveg (pl. ajtó, ablak, pohár) díszítő

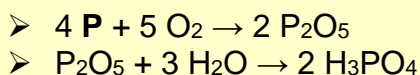
maratására használatos, üvegedényben nem tárolható vegyszer. A hidrogén-fluorid vizes oldata a **folysav**. A hidrogén-klorid (HCl) a levegőnél nehezebb gáz, vizes oldata a sósav. A gyomornedv egyik összetevője. A sósav fontos laboratóriumi vegyszer, ipari alapanyag (gyógyszer-, festék-, műagyaggyártás), ipari és háztartási tisztítószer (Boksay et al., 1990; Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014). A **királyvíz** a tömény salétromsav és a tömény sósav 1:3 molarányú elegye, ami még az aranyat (illetve a platinát) is feloldja (Boksay et al., 1990).



**23. ábra**

A hidrogén-halogenidek képződési reakciói (molekulaképlettel, kalotta-, illetve gömb- és pálcikamodellek egyszerűsített rajzaival, továbbá **szerkezeti képlettel** felírva)

A kétatomos nemfémes elemmolekulák után a többatomos molekulát formáló foszfor és vegyületei következnek (12. táblázat). A foszfornak több allotróp módosulata ismert (pl. fehér- vagy sárgafoszfor, vörösfoszfor, feketefoszfor). Közöséges körülmények között a fehérfoszfor áll négyatomos (P<sub>4</sub>), tetraédes szerkezetű molekulákból (Boksay et al., 1987, 1990; Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014). A fehérfoszfor lágy, késsel vágható, erősen mérgező, gyúlékony, kristályos anyag; zsírokban, olajokban oldódik, bőrre kerülve nehezen gyógyuló égési sérülést okoz (Boksay et al., 1987; Greenwood, Earnshaw, 2004). Az amorf (nem kristályos, polimer szerkezetű) vörösfoszfor viszont gyakorlatilag oldhatatlan, nem mérgező. Meggyújtva mindkét módosulat foszfor(V)-oxidáé ég el, ami vízzel foszforsavvá egyesül. A vonatkozó egyenletek:



Vízgőz jelenlétében a fehérfoszfor oxidációját fénykibocsátás kíséri, ez a jelenség a foszforeszkálás alapja (Boksay et al., 1990).

### 12. táblázat

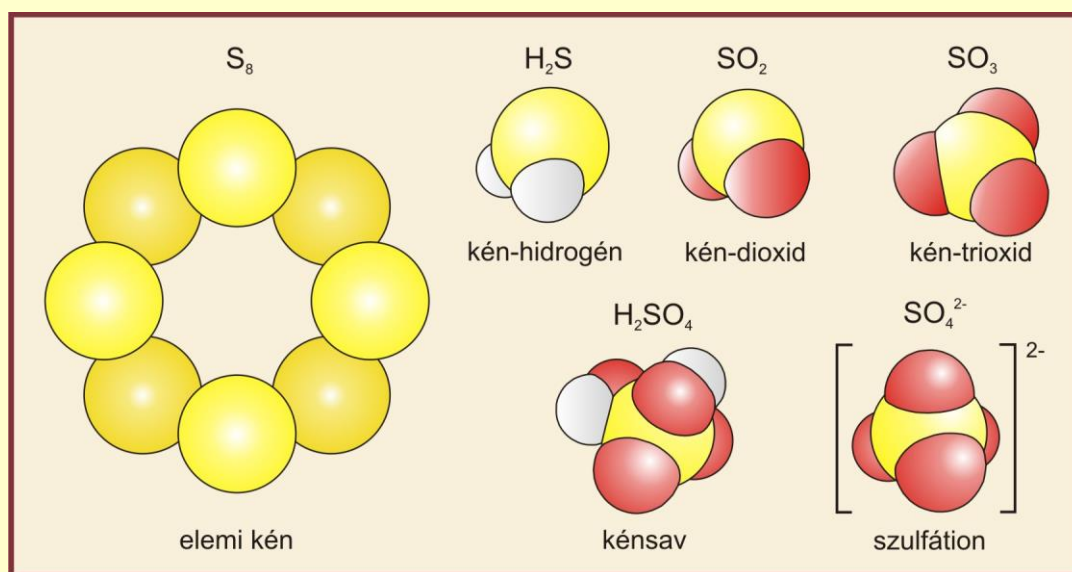
A foszfor és az ortofoszforsav néhány jellemző tulajdonsága (Boksay et al., 1990; Koch, Sztrókay, 1994; Greenwood, Earnshaw, 2004)

Név, képlet	Fizikai tulajdonságok	Kémiai tulajdonságok	Földtudományi vonatkozások
<b>fehérfoszfor</b> (sárgafoszfor) P <sub>4</sub>	fehéres színű, viasszerű, szilárd anyag; lágy, késsel vágható, zsírokban oldódik, mérgező; illékony, gyulladási hőmérséklete ~60 °C	gyúlékony, éghető	a természetben vegyületei fordulnak elő; legfontosabb ásványai kalcium-foszfát változatok (pl. apatit-sor: fluor-apatit, hidroxil-apatit, klór-apatit, karbonát-apatit)
<b>vörösfoszfor</b> P	sötétvörös porszerű szilárd anyag (amorf); oldhatatlan, nem mérgező; gyulladási hőmérséklete ~400 °C	éghető, kevésbé reakcióképes	
<b>foszforsav</b> (orto)foszforsav H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub>	fehér, kristályos anyag, savanyú ízű; vízben oldódik	vizes oldata savas kémhatású; sóképző	származékai (sói) a foszfátok; gyógyszer- és élelmiszeripari alapanyag; fontos vegyipari sav (pl. növényvédőszer és műtrágyagyártás)

A foszfor az élő szervezetek nélkülözhetetlen eleme (pl. csontok, fogak, növényi magvak), de a természetben csak vegyületeiben található meg. A foszforsav

származékai a foszfátok. Legismertebb ásványai a kalcium foszfátjai (pl. apatit, illetve foszforit), amelyekből ipari mennyiségben előállítható. A foszfort legnagyobb mennyiségben gyufagyártásra használják. A foszforsav nem mérgező, viszonylag gyenge sav; gyógyszergyártási alapanyag, az élelmiszeriparban savanyításra használják. A tömény foszforsav fontos vegyipari sav, nagy mennyiségben használják fel foszfátműtrágyák előállításakor. A vízben oldódó foszfátok — például az ammónium-foszfát,  $(\text{NH}_4)_3\text{PO}_4$  — fontos műtrágyák (Boksay et al., 1990; Greenwood, Earnshaw, 2004).

A kén elemi állapotban (pl. vulkanikus területeken; bepárlódott tengeri üledékekhez kapcsolódva, kőszótelepek fedőközetében) és vegyületek formájában (pl. oxidok, szulfidok, szulfátok) egyaránt előfordul a természetben. A szervesetlen kénvegyületek közül a dihidrogén-szulfid ( $\text{H}_2\text{S}$ ), a kén-dioxid ( $\text{SO}_2$ ), a kén-trioxid ( $\text{SO}_3$ ) és a kénsav ( $\text{H}_2\text{SO}_4$ ) a legjelentősebbek (24. ábra). A kén nélkülözhetetlen az élő szervezetek felépítésében, egyes aminosavak alkotórésze (Boksay et al., 1990; Koch, Sztrókay, 1994; Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014).

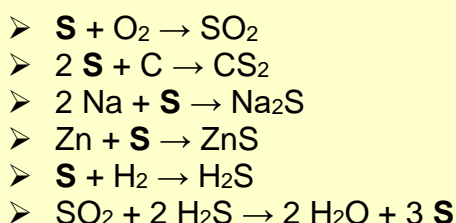


**24. ábra**

A kén és a leggyakoribb szervesetlen kénvegyületek kalotta-modelljeinek rajzai

Az elemi kén nyolcatomos gyűrűkből áll ( $\text{S}_8$ ), számos allotróp módosulata ismert (Boksay et al., 1990; Koch, Sztrókay, 1994; Greenwood, Earnshaw, 2004; Gill, 2015). A kén sárga színű, közönséges körülmények között szilárd halmazállapotú anyag (13. táblázat). Vízben gyakorlatilag oldhatatlan, szén-diszulfidban ( $\text{CS}_2$ ) és bizonyos szerves oldószerekben viszont jól oldódik. Szobahőmérsékleten nem

reakcióképes, de magasabb hőmérsékleten a legtöbb elemmel reagál. Reakcióba lép az oxigénnel; a szénnel, illetve fémekkel szulfidokat alkot. A hidrogénnel dihidrogén-szulfid ( $\text{H}_2\text{S}$ ) képződése közben reagál. Ez utóbbi vegyület és a kén-dioxid reakciójának termékeként viszont elemi kén képződik; ezért ezt a folyamatot a kéngyártásnál hasznosítják. A vonatkozó egyenletek a következők (a reakciók felírásakor a kén általában nem  $\text{S}_8$ , hanem egyszerűsítve  $\text{S}$  formában szerepel):



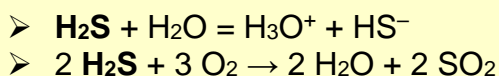
A kén fontos ipari nyersanyag. Felhasználják kénsavgyártásra, továbbá a gumigyártásban, növényvédőszeres, festékek, gyógyszerek készítésére (Boksay et al., 1990; Greenwood, Earnshaw, 2004).

### 13. táblázat

A kén és a gyakori szervesetlen kénvegyületek jellemző tulajdonságai (Boksay et al., 1990; Koch, Sztrókay, 1994; Greenwood, Earnshaw, 2004)

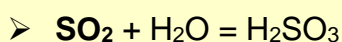
Név, képlet	Fizikai tulajdonságok	Kémiai tulajdonságok	Földtudományi vonatkozások
<b>kén</b> $\text{S}$ ( $\text{S}_8$ )	sárga színű, szilárd; olvadáspontja viszonylag alacsony; vízben oldhatatlan	magasabb hőmérsékleten reakcióképes; éghető, fémekkel szulfidokat képez	elemi állapotban is előfordul a természetben; vegyületei gyakoriak; fontos ipari nyersanyag (pl. kénsavgyártás)
<b>kén-hidrogén</b> dihidrogén-szulfid $\text{H}_2\text{S}$	színtelen, kellemetlen (záptojás) szagú, mérgező gáz; vízben elég jól oldódik	éghető; vízzel szemben gyenge savként viselkedik	vulkáni gázokban és kénes ásványvizekben előfordulhat; sói a szulfidok
<b>kén-dioxid</b> $\text{SO}_2$	színtelen, szúrós szagú, köhögésre ingerlő, mérgező gáz; könnyen cseppfolyósítható; vízben oldódik	nem éghető, az égést nem táplálja; vizes oldata savas kémhatású (kénessav)	vulkáni gázokból, illetve a tüzelőanyagok égéstermékeként nagy mennyiségű $\text{SO}_2$ kerül a légkörbe; üvegházhatású gáz; a savasesők kialakulásában elsődleges a szerepe; a $\text{SO}_3$ kénsavgyártási alapanyag
<b>kén-trioxid</b> $\text{SO}_3$	színtelen, maró hatású, mérgező, nedvszívó folyadék	nem éghető; vizes oldata erősen savas kémhatású (kénsav)	
<b>kénsav</b> $\text{H}_2\text{SO}_4$	színtelen, nagy sűrűségű folyadék; higroszkópos; vízzel minden arányban elegyedek	vizes oldata erősen savas kémhatású; sóképző; roncsolja a szerves vegyületeket	vulkáni vidékek folyóiban előfordulhat; sói a szulfátok; fontos ipari alapanyag, laboratóriumi vegyszer

A dihidrogén-szulfid (H<sub>2</sub>S), vagy hétköznapi nevén a kén-hidrogén, színtelen, záptojás szagú, mérgező gáz. Vízen jól oldódik, vizes oldata (kén-hidrogénes víz) savas kémhatású; meggyújtva elég (**13. táblázat**). A kapcsolódó egyenletek:



Kéntartalmú szerves vegyületek (pl. fehérjék) bomlásakor oxigénmentes környezetben gyakran keletkezik kén-hidrogén. A H<sub>2</sub>S a vulkáni gázok egyik gyakori komponense. Egyes fémekkel alkotott szulfidjai (pl. FeS<sub>2</sub>: pirit, PbS: galenit, ZnS: szfalerit) fontos ércek (Boksay et al., 1990; Koch, Sztrókay, 1994; Greenwood, Earnshaw, 2004; Gill, 2015).

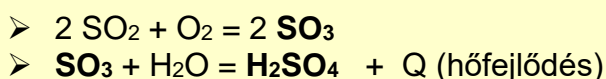
A kén oxidjai közül a kén-dioxid (SO<sub>2</sub>) gyakori a természetben, vulkánkitörések során viszonylag jelentős mennyiségben juthat a légkörbe. További jelentős SO<sub>2</sub>-forrás a közlekedés és a fosszilis energiahordozók (elsősorban a kőszén) elégetése. A SO<sub>2</sub> színtelen, szúrós, fojtó szagú, mérgező gáz (**13. táblázat**). Vízen jól oldódik, a vízzel kémiai reakcióba lép, amely során kénessav (dihidrogén-szulfid: H<sub>2</sub>SO<sub>3</sub>) keletkezik. A kénessav sói a szulfitok (szulfition: SO<sub>3</sub><sup>2-</sup>). Az oldódás egyenlete a következő:



A kén-dioxid erős mérgező, amelyre különösen a tűlevelű növények (pl. fenyőfélék) érzékenyek. A légköri, illetve a lecsapódó nedvességben oldódva megbontja a klorofillt, ami a növényzet pusztulását eredményezi. A kén-dioxid fehérítőszer, illetve fertőtlenítő hatású, a borászatban hordók fertőtlenítésére („borkén”) használják (Boksay et al., 1990; Greenwood, Earnshaw, 2004; Gill, 2015).

A kén-trioxid (SO<sub>3</sub>) a kén-dioxid katalitikus oxidációjával állítható elő, síkháromszög alakú molekula. Szobahőmérsékleten színtelen, cseppfolyós, maró hatású, mérgező, nedvszívó anyag. Vízzel reagálva a kén-trioxid kénsavat (H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>) képez, ami színtelen, nagy sűrűségű folyadék. A kénsav **higroszkópos** anyag, azaz környezetéből megköti a vízgőzt; vízzel minden arányban elegyedik (Boksay et al., 1990; Greenwood, Earnshaw, 2004).

A kénsav oldódása vízben erősen exoterm folyamat; a fejlődő hő az oldatot forrássá felmelegítheti, ezért nagyon óvatosan kell eljárni a kénsav hígításakor (Boksay et al., 1990). A fenti folyamatok reakcióegyenletei:



### **Megjegyzés:**

A tömény kénsav (96–98 tömeg%-os) hígításakor mindig a kénsavat öntjük a vízhez, lassan, vékony sugárban, üvegbot mellett, illetve keverés közben. Így kerülhető el, hogy a hőfelszabadulás következtében gőzzé alakuló víz és sav kifröccsenjen, továbbá súlyos marási-égési sérüléseket okozzon (Boksay et al., 1990; Greenwood, Earnshaw, 2004).

A kénsav fontos nyersanyag. Felhasználják az iparban és a mezőgazdaságban, elterjedt laboratóriumi vegyszer. Legnagyobb arányban műtrágyagyártáshoz használják fel. Oldószerként, festékek, gyógyszerek készítésére, ólomakkumulátorok töltésére alkalmazzák (Boksay et al., 1990; Greenwood, Earnshaw, 2004). A kénsav származéka, a szulfátion ( $\text{SO}_4^{2-}$ ) vízben jól oldódik, mennyisége a világtengerekben meghatározó jelentőségű. Sói, a szulfátok viszonylag gyakori vegyületek (pl. anhidrit:  $\text{CaSO}_4$ , gipsz:  $\text{CaSO}_4 \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$ , barit:  $\text{BaSO}_4$ ). Az anhidrit és a gipsz általában üledékes környezetben, a bepárlódó tengervízből válik ki (úgynevezett evaporit ásványok); míg a barit többnyire szulfidokhoz társulva alacsony hőmérsékletű hidrotermás ércesedések ásványa (Koch, Sztrókay, 1994; Gill, 2015).

A nemfémes elemek és vegyületeik közül végezetül a szénnel és a legfontosabb szervesetlen szénvegyületekkel kell foglalkoznunk (**14. táblázat**). A szén elemi állapotban (grafit, gyémánt) és vegyületeiben (szervesetlen karbonátok; szerves vegyületek) egyaránt előfordul a természetben. A szén-dioxid a légkör kis mennyiségű, de lényeges komponense. Számottevő a széntartalma a kőszénnek, a kőolajnak és a földgáznak, az élet szempontjából nélkülözhetetlen elem (Boksay et al., 1990; Koch, Sztrókay, 1994; Greenwood, Earnshaw, 2004; Gill, 2015).

A szénatomok egymással nem képeznek diszkrét számú atomokból felépülő molekulákat a természetben, az elemi szén (C) nagyszámú összekapcsolódó szénatomból áll, ezért szilárd halmazállapotú. Kristálymódosulatai (allotróp módosulatok) vagy a szomszédos szénatomok számában és elrendeződésében, vagy a szénatomok alkotta rétegek kristálybeli elhelyezkedésének sorrendjében térnek el egymástól. A grafit fekete, csillogó, lemezes, „pikkelyes” megjelenésű, lágy (a papíron nyomot hagy), zsíros tapintású, félfémes jellegű, elektromos vezető anyag (**14. táblázat**). A gyémánt ezzel szemben átlátszó, nagy fénytörőképességű anyag, elektromos vezetése elhanyagolható; valamennyi ásvány között a legkeményebb és a legellenállóbb. Értékes drágakő; az iparban üvegágó, gravírozó eszközök,

csapágyak alapanyaga, továbbá csiszolóanyagként, illetve fúrófejekhez használják (Boksay et al., 1990; Koch, Sztrókay, 1994; Greenwood, Earnshaw, 2004; Gill, 2015).

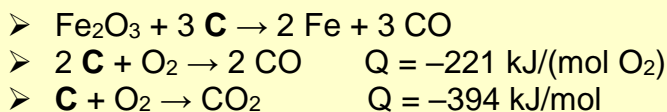
#### 14. táblázat

A szén és a gyakori szervesetlen szénvegyületek jellemző tulajdonságai (Boksay et al., 1990; Koch, Sztrókay, 1994; Greenwood, Earnshaw, 2004; Gill, 2015)

Név, képlet	Fizikai tulajdonságok	Kémiai tulajdonságok	Földtudományi vonatkozások
<b>grafit</b> (elemi szén) C	sötétszürke, puha, hasítható, szilárd anyag; olvadás- és forráspontja magas; vezeti az elektromos áramot	közönséges körülmények között nem, magasabb hőmérsékleten reakcióképes; éghető, redukálószer	elektrodok, hőálló anyagok gyártása; ceruzagyártás; karbonszálak gyártása
<b>gyémánt</b> (elemi szén) C	színtelen, nagy fénytörőképességű, kemény, szilárd anyag; olvadás- és forráspontja magas; az elektromos áramot nem vezeti		a legkeményebb ásvány; drágakő; ipari nyersanyag (véső- és vágószerszámok, csiszolóanyag)
<b>szén-diszulfid</b> szénkénege CS <sub>2</sub>	színtelen, illékony folyadék, erősen mérgező; vízben nem oldódik; fénytörése nagy	könnyen bomlik; gyúlékony	oldószer (pl. szerves vegyületek, zsírok, olajok, gyanták; jód, foszfor, kén); viszkóz- és cellofángyártási alapanyag
<b>szén-monoxid</b> CO	színtelen, szagtalan, mérgező gáz; nehezen cseppfolyósítható; vízben rosszul oldódik	magasabb hőmérsékleten reakcióképes; éghető, gyúlékony, redukálószer	vegyipari alapanyag
<b>szén-dioxid</b> CO <sub>2</sub>	színtelen, szagtalan, a levegőnél nehezebb gáz; könnyen cseppfolyósítható; vízben jól oldódik	az égést nem táplálja; vízzel szénsavvá egyesül	a levegő állandó komponense; üvegházhatású gáz; ipari alapanyag (pl. szódagyártás, hűtés)
<b>szénsav</b> H <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	vízben kiválóan oldódik, csak vizes oldatban létező vegyület	enyhe sav; könnyen bomlik	sói a karbonátok (pl. kalcit, dolomit) és a bikarbonátok (hidrogén-karbonátok)

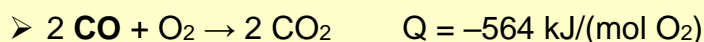
A szénmódosulatok olvadás- és forráspontja magas, közönséges körülmények között nincs oldószerük, illetve közülük a grafit a legstabilabb. A szén nem reakcióképes, magasabb hőmérsékleten azonban sok elemmel és vegyülettel reagál. A legtöbb fém-oxidot fémmé redukálja, azaz kiváló **redukálószer**. Oxigénnel hőfejlődés (exoterm reakció) közben szén-monoxiddá (tökéletlen égés) vagy szén-

dioxiddá (tökéletes égés) alakul (Boksay et al., 1990; Greenwood, Earnshaw, 2004; Gill, 2015). Az említett reakcióegyenletek a következők:

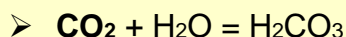


A szén-diszulfid ( $\text{CS}_2$ , szénkéneg) színtelen, illékony, nagy fénytörésű, mérgező folyadék. Vízben nem oldódik, viszont nagyon sok vízben nem vagy nehezen oldódó elem (pl. jód, foszfor, kén) és vegyület (pl. szerves vegyületek, zsírok, olajok) oldószere (Boksay et al., 1990; Greenwood, Earnshaw, 2004). Ezt a tulajdonságát használják fel az iparban, illetve a laboratóriumokban. A textilipar a viszkózgyártásban (műselyem) alkalmazza (Greenwood, Earnshaw, 2004).

A szén-monoxid (CO) színtelen, szagtalan, mérgező gáz. Nehezen cseppfolyósítható, vízben nagyon kis mértékben oldódik. A szén-monoxid szobahőmérsékleten nem reakcióképes, magasabb hőmérsékleten azonban több elemmel és vegyülettel reagál. Meggyújtva kékes színű lánggal szén-dioxiddá ég el (Boksay et al., 1990; Greenwood, Earnshaw, 2004). A reakcióegyenlet a következő:

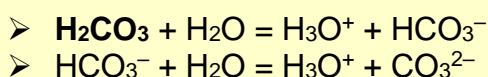


A szén-dioxid ( $\text{CO}_2$ ) színtelen, szagtalan, a levegőnél nehezebb, könnyen cseppfolyósítható gáz. Az égést nem táplálja. Vízben jól oldódik, vízzel reagálva szénsavat képez. Az egyensúlyi folyamat egyenlete:



A szén-dioxidot a szódagyártásban (ásványvíz, üdítő italok gyártása), illetve hűtési célokra alkalmazzák. A szilárd szén-dioxid száraz jég néven ismert. A  $\text{CO}_2$  az atmoszféra állandó komponense, üvegházhatású gáz, ezért szerepe döntő a Föld és légköre hőmérsékletének szabályozásában (Boksay et al., 1990; Papp, Kümmel, 1992; Koch, Sztrókay, 1994; Greenwood, Earnshaw, 2004; Gill, 2015).

A szénsav ( $\text{H}_2\text{CO}_3$ ) csak vizes oldatban létező vegyület. Savanykás ízű, gyenge sav. Vízzel való kölcsönhatása két lépésre bontható. A folyamatok egyenletei:



A szénsav származékai a hidrogén-karbonátok (bikarbonátok), illetve a karbonátok. Utóbbiak közül a kalcit ( $\text{CaCO}_3$ ) és a dolomit [ $\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$ ] kőzetalkotó (mészkö, dolomit) ásványok (Boksay et al., 1990; Koch, Sztrókay, 1994; Greenwood, Earnshaw, 2004; Gill, 2015).

A fémes elemeknél nagyszámú atom kapcsolódik össze erős kémiai kötéssel (ennek részletezését egy későbbi fejezet tartalmazza), háromdimenziós végtelen rácsnak (úgynevezett „fémrács”) megfelelően, ami az adott tiszta fém elemi állapotát jelenti. A **fémek** közé tartozik az ismert elemek négyötöde (Boksay et al., 1990). Számos fém elemi állapotban, természetfémként is megtalálható a természetben, ilyenek például a nemesfémek (Au, arany; Ag, ezüst; Cu, réz; Pt, platina) vagy a higany (Hg). A reakcióképes elemek (pl. Na, nátrium; K, kálium; Mg, magnézium; Ca, kalcium) azonban csak vegyületeik formájában fordulnak elő (Boksay et al., 1987, 1990; Koch, Sztrókay, 1994; Greenwood, Earnshaw, 2004).

A korábban bemutatott nemfémek és a fémek tulajdonságai között nem húzható meg éles határ, de az elektromos vezetőképesség alapján a két csoport egyértelműen megkülönböztethető. A fémek elektromos vezetőképessége ugyanis a hőmérséklet emelésével csökken. A fémek közönséges körülmények között — a cseppfolyós higany (Hg) kivételével — szilárd halmazállapotúak. Szürke színűek, a réz (vörös) és az arany (sárga) kivételével. A fémekre jellemző, úgynevezett fémes tulajdonságok szilárd és folyékony halmazállapotban figyelhetők meg. A fémek fémes fényűek, gyakran jól alakíthatók, kovácsolhatók, nyújthatók, formálhatók; nagy elektromos- és hővezető képességűek (Boksay et al., 1990; Koch, Sztrókay, 1994; Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014; Gill, 2015). Olvadás- és forráspontjuk erősen változó. Sűrűségük alapján a fémeket két nagy csoportra bonthatjuk: a könnyűfémek sűrűsége  $5 \text{ g/cm}^3$ -nél kisebb, míg a nehézfémek  $5 \text{ g/cm}^3$ -nél nagyobb sűrűségűek (Boksay et al., 1990; Greenwood, Earnshaw, 2004).

A fémeknek közönséges értelemben vett oldószere nincs. Néhány fém, mint például a nátrium és a kálium, oldódnak cseppfolyós ammóniában. Több fém oldódik higanyban. Folyékony állapotban a fémek többnyire elegyednek egymással, megszilárdulva **ötvözet**eket képeznek (Boksay et al., 1990; Koch, Sztrókay, 1994; Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014).

A fémek kémiai reakcióképessége nagyon változatos, ezek rövid tárgyalására az atomszerkezet és a periódusos rendszer ismertetését követően kerül sor. Érdemes kiemelni azonban, hogy a fémeszközök környezeti hatásra változhatnak, egy részük tönkremegy, azaz korrodálódik (**8.2. alfejezet**). **Korrózió**nak nevezzük a környezeti hatásra (pl. levegővel történő érintkezés, nedvesség), az anyagok felületéről kiinduló kémiai változást, ilyen folyamat a vastárgyak rozsdásodása (Boksay et al., 1990; Rózsahegyi, 1993; Whitten et al., 2014).

Néhány gyakori fémvegyület (pl.  $\text{NaNO}_3$ , chilei salétrom;  $\text{KNO}_3$ , salétrom;  $\text{NaCl}$ , kősó) már előkerült a nemfémes elemek vegyületeinek bemutatásakor (**9. és 11. táblázat**). Mind a nátrium, mind a kálium nélkülözhetetlen az élő szervezetek számára, vegyületeik ősidők óta ismertek. A nátrium az idegrendszer és az agy működéséhez elengedhetetlen. A kálium szintén lényeges szerepet játszik az idegműködésben, továbbá a növények **esszenciális** eleme, ezért a mezőgazdaságban műtrágyázással biztosítják a haszonnövények káliumigényét (Boksay et al., 1990; Greenwood, Earnshaw, 1999; Whitten et al., 2014).

A nátrium angol neve, a „sodium” a *soda* (szóda) szóból, míg a káliumé a „potassium”, a *potash* (hamuzsír, kálilúg) szóból ered (Atkins, 1995; Greenwood, Earnshaw, 2004). Elterjedt ionvegyületeik különböző összetételű sók (**15. táblázat**), azonban kőzetalkotó ásványokat (pl. szilikátok: földpátok) is képeznek, azaz földtudományi szempontból is jelentősek (Koch, Sztrókay, 1994; Greenwood, Earnshaw, 2004; Albarède, 2009; Appelo, Postma, 2009; White, 2013; Gill, 2015). A nátrium előfordul kősó vagy halit ( $\text{NaCl}$ ), karbonát ( $\text{Na}_2\text{CO}_3$ , természetes szóda, sziksó), nitrát ( $\text{NaNO}_3$ , chilei salétrom), szulfát ( $\text{Na}_2\text{SO}_4$ , keserűsó, glaubersó), borát (bórax: nátrium-tetraborát) sói formájában. A kálium sói közül leggyakoribb az egyszerű kloridja ( $\text{KCl}$ ), a szilvin (Boksay et al., 1990; Koch, Sztrókay, 1994; Greenwood, Earnshaw, 1999; Whitten et al., 2014).

A magnézium és a kalcium szintén kőzetalkotó ásványokat képez (szilikátok, karbonátok, szulfátok, foszfátok), vegyületeik régóta ismertek (Szabó, Nyilasi, 1981; Koch, Sztrókay, 1994; Atkins, 1995; Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014; Gill, 2015). A magnézium leggyakoribb karbonátvegyülete a magnezit ( $\text{MgCO}_3$ ) és a dolomit ( $\text{MgCa}[\text{CO}_3]_2$ ), ez utóbbi az azonos nevű üledékes kőzet ásványaként kőzetalkotó, hegységek felépítésében vesz részt (pl. Olaszország, Dolomitok). A növények zöld színanyagát adó klorofill Mg-tartalmú komplex, jelentősége a fotoszintézisben kiemelkedő (Koch, Sztrókay, 1994; Atkins, 1995; Greenwood, Earnshaw, 2004; Gill, 2015).

A kalcium neve a latin *calx*, *calcis* (mész) szavakból származik. A magnéziumhoz hasonlóan karbonátvegyületei (kalcit, aragonit, dolomit) gyakori kőzetalkotók. Döntően kalcitból áll a mészkő, illetve a mészkő metamorf átalakulása, átkristályosodása során képződött kőzet, a márvány. Érdekesség, hogy a rómaiak építkezéseiken homokból és a mészkő hevítésével nyert mészből (égetett mész,  $\text{CaO}$ ) készített habarcsot használtak. Az egyiptomi habarcs szintén kalcium-tartalmú

ásványból, részben dehidratált gipszből ( $\text{CaSO}_4 \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$ ) készült. Biológiai jelentősége egyrészt a mészvázú élőlények (pl. kagylók, csigák, korallak, mészvázú egysejtűek) szilárdító anyagaként (aragonit, kalcit), másrészt a csontok, fogak alkotójaként (apatit,  $\text{Ca}_5[\text{PO}_4]_3[\text{F}, \text{Cl}, \text{OH}]$ ) kiemelkedő (Koch, Sztrókay, 1994; Greenwood, Earnshaw, 2004; Gill, 2015).

A magnézium- és kalciumvegyületek többsége fehér színű, ionvegyület (16. táblázat), amelyek egy része rosszul oldódik vízben (Boksay et al., 1990; Greenwood, Earnshaw, 1999; Whitten et al., 2014).

### 15. táblázat

Néhány gyakori nátrium- és káliumvegyület jellemző tulajdonságai (Boksay et al., 1990; Koch, Sztrókay, 1994; Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014)

Név, képlet	Fizikai tulajdonságok	Kémiai tulajdonságok	Földtudományi vonatkozások
<b>nátrium-hidroxid</b> lúgkő, marónátron $\text{NaOH}$	fehér színű, erősen higroszkópos, vízben nagyon jól oldódik (oldódása exoterm), erős mérgező	a szerves anyagot roncsolja; vizes oldata erősen lúgos kémhatású; sóképző	ipari alapanyag (timföld- és szappangyártás; textil- és papíripar), laboratóriumi vegyszer
<b>nátrium-karbonát</b> szóda, sziksó $\text{Na}_2\text{CO}_3$	fehér, higroszkópos, szilárd, kristályos anyag; vízben jól oldódik	vizes oldata erősen lúgos kémhatású; savak hatására szén-dioxid keletkezik belőle	szikes talajokon a száraz időszakokban kiválhat; ipari alapanyag (pl. üveggyártás, textilipar); vízlágyítószer
<b>nátrium-hidrogén-karbonát</b> szódabikarbóna $\text{NaHCO}_3$	fehér, kristályos anyag, vízben jól oldódik; a környezetre ártalmatlan	a savakat szén-dioxid ( $\text{CO}_2$ ) felszabadulás mellett semlegesíti	gyógyszer- és élelmiszeripari alapanyag (pl. sütőpor), gyomorsavmegkötő hatású
<b>nátrium-foszfát</b> trisó $\text{Na}_3\text{PO}_4$	fehér, szilárd anyag, vízben jól oldódik	vizes oldata erősen lúgos kémhatású	zsírolószer; vízlágyításra használják
<b>nátrium-szulfát</b> $\text{Na}_2\text{SO}_4$	fehér, kristályos anyag	stabil, közönséges körülmények között nem reakcióképes; vizes oldata semleges kémhatású	üveggyártási, papírgyártás adalék, illetve tisztítószer alapanyag; hashajtó (keserűsítő)
<b>kálium-klorid</b> szilvin $\text{KCl}$	színtelen, fehér (sárgás, vöröses), kristályos anyag; sós, kesernyés ízű; vízben oldódik		sótelepek ásványa; műtrágyaként alkalmazzák
<b>kálium-karbonát</b> hamuzsír $\text{K}_2\text{CO}_3$	fehér, szilárd anyag, vízben jól oldódik;	vizes oldata erősen lúgos kémhatású	üveggyártási alapanyag; kenőszappanok készítésére, illetve vízlágyításra használják

Mind a köznapi életben, mind a laboratóriumi munka során további fémvegyületekkel találkozhatunk, ezek közül néhány rövid jellemzése szintén megtalálható a **16. táblázat**ban.

**16. táblázat**

Néhány gyakori magnézium- és kalciumvegyület, továbbá egyéb fémvegyület jellemzője  
(Boksay et al., 1990; Koch, Sztrókay, 1994; Greenwood, Earnshaw, 2004)

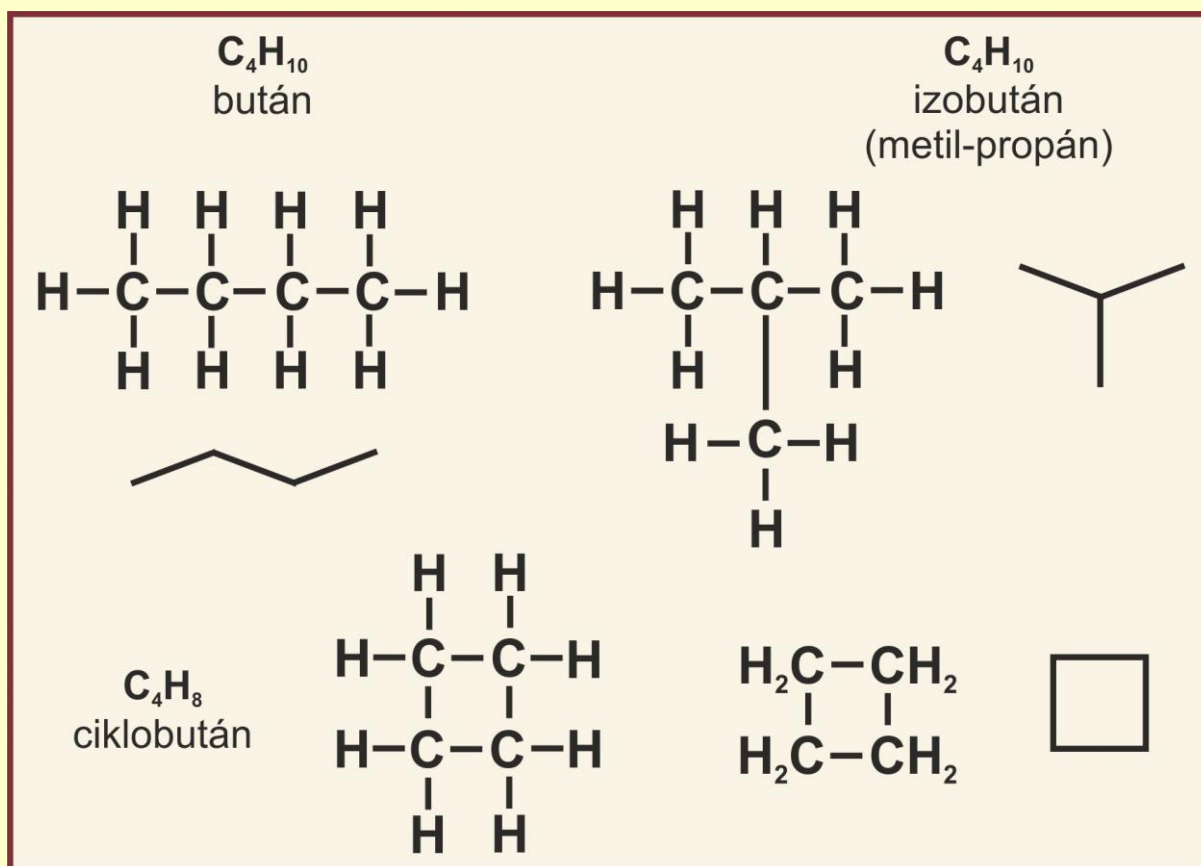
<b>Név, képlet</b>	<b>Fizikai tulajdonságok</b>	<b>Kémiai tulajdonságok</b>	<b>Földtudományi vonatkozások</b>
<b>magnézium-oxid</b> égetett magnézia $\text{MgO}$	fehér, szilárd (porszerű) anyag, kitűnő hővezető, elektromos szigetelő; erősen higroszkópos	vízzel magnézium-hidroxiddá alakul	ipari nyersanyag (tűzálló téglák, edények készítésére; élelmiszeripari adalék); gyógyászatban gyomorsav megkötésére használják
<b>magnézium-karbonát</b> magnezit $\text{MgCO}_3$	fehér, szilárd anyag; vízben rosszul oldódik		tisztítószerként, savanyúságot szabályozó anyagként alkalmazzák
<b>magnézium-szulfát</b> keserűsó $\text{MgSO}_4$	fehér, szilárd, higroszkópos anyag, vízben jól oldódik		textilipari segédanyag (pácok készítése); műtrágya; szárítóanyag, hashajtó
<b>kalcium-oxid</b> égetett mész $\text{CaO}$	fehér, erősen nedvszívó, szilárd anyag	vízzel hevesen, hőfejlődés közben egyesül (mészoltás)	építőipari felhasználás (pl. cementgyártás, habarcskészítés); vízkezelés, papíripar
<b>kalcium-karbonát</b> kalcit, aragonit $\text{CaCO}_3$	tiszta állapotban fehér, szilárd anyag; vízben rosszul oldódik	híg sósav hatására pezseg ( $\text{CO}_2$ fejlődése közben oldódik)	kőzetalkotó karbonát; építőanyag, építőipari nyersanyag
<b>alumínium-oxid</b> korund, smirgel (timföld) $\text{Al}_2\text{O}_3$	fehér, szilárd anyag; kristályos változata rendkívül kemény; vízben nem oldódik	savakban és lúgokban egyaránt oldódik	csiszolópor, csiszolókorong alapanyaga; tiszta változata drágakő; a timföld (a bauxitból előállított $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) az alumíniumgyártás alapanyaga
<b>kálium-alumínium-szulfát (víztartalmú)</b> timsó $\text{KAl}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12 \text{H}_2\text{O}$	fehér, kristályos anyag; fanyar, összehúzó ízű; vízben jól oldódik	vizes oldata savas kémhatású	vérzéscsillapító, fertőtlenítő anyag; a textiliparban pácnak, bőrcserzésre alkalmazzák
<b>kálium-permanganát</b> $\text{KMnO}_4$	vörösesibolya színű, fémesen csillogó, kristályos anyag; vízben jól oldódik	oxidálószer	oxidáló- és fertőtlenítőszer; laboratóriumi vegyszer
<b>réz(II)-szulfát (víztartalmú)</b> rézgálic (kalkantit) $\text{CuSO}_4 \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$	kék, kristályos anyag; mérgező (hányást okoz); vízben jól oldódik		festékgyártás, vetőmagcsávázás, permetezőszer (gombaölő), hánytatószer

## 3.2. Szerves vegyületek

A szerves vegyületek összetételüket tekintve általában szenet, hidrogént, továbbá oxigént, nitrogént és ként tartalmaznak (Kajtár, Varga, 1988; Whitten et al., 2014). Jellegzetes közös szerkezeti vonásuk, hogy molekuláik fő vázát egymáshoz kapcsolódó szénatomok láncra vagy gyűrűje alkotja. A szénatom a legegyszerűbb olyan atom, ami négy másik atommal képes erős kémiai kötést létesíteni. Ennek eredményeként stabilis, elektromosan semleges molekulák képződnek. A legegyszerűbb ilyen molekula a közismert metán ( $\text{CH}_4$ ; **21. ábra**). A szénvegyületek molekulái azonban általában sok összekapcsolódó atomból épülnek fel, ezért nem elég tudnunk az összekapcsolódó atomok fajtáját és számát, azok kapcsolódási sorrendjét is ismernünk kell (Kajtár, Varga, 1988; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

A szerves szénvegyületek között gyakori, hogy azonos összegképletű és így azonos molekulatömegű vegyületek eltérő szerkezetűek, ami eltérő fizikai és kémiai tulajdonságokban nyilvánul meg (más vegyületek). Az azonos összegképletű, de eltérő molekulaszerkezetű vegyületeket **izomereknek** nevezzük (Kajtár, Varga, 1988; Rózsahegy, 1993; Whitten et al., 2014).

Ahhoz, hogy pontosan jellemezni tudjunk egy szénvegyületet, azt is tudnunk kell, hogy a molekulát felépítő atomok milyen sorrendben (és térbeli elrendeződésben) kapcsolódnak egymáshoz. A molekulát felépítő atomok kapcsolódási sorrendjét konstitúciónak nevezzük. Ezt tükrözi az úgynevezett **konstitúciós képlet** (Kajtár, Varga, 1988; Rózsahegy, 1993), amely felírásakor gyakran egyszerűsítéseket alkalmaznak. A C- és a H-atomok közötti kötéseket jelző vonalakat sokszor nem rajzolják meg; sőt, az is előfordul, hogy még a vegyjeleket sem írják ki, csak rövid, gyufaszálszerű vonalakat rajzolnak — gyakran cikk-cakk elrendeződésben —, ami az úgynevezett szénvázat tükrözi (**25. ábra**). A szénváz lehet nyílt szénláncú (normális vagy elágazó, de végekkel rendelkező), illetve gyűrűs is (Kajtár, Varga, 1988; Whitten et al., 2014; Gill, 2015). Ebben a fejezetben azonban nincs mód arra, hogy a szerves kémia hatalmas ismeretanyagát bemutassuk. A legfontosabb szerves vegyületek rövid és erősen leegyszerűsített jellemzésére kerülhet csak sor, szem előtt tartva a földtudományok alapszintű elsajátítása során felmerülő témaköröket (pl. szénhidrogének; gyakori szerves oldószerek).



### 25. ábra

A négy szénatomot tartalmazó egyszerű szénvegyületek (szénhidrogének) szerkezeti felépítése az úgynevezett konstitúciós képlet, illetve az egyszerűsített szénváz megadásával. Az egyenes szénláncú bután és az elágazó izobután összegképlete azonos ( $C_4H_{10}$ ), de szerkezetük eltérő, azaz konstitúciós izomerek. A ciklobután gyűrűsen összekapcsolódó szénvázzal rendelkezik, erre utal nevének *ciklo*- előtagja.

A szén egy másik szénatommal nem csak egyszeres kémiai kötéssel kapcsolódhat, hanem kettős (kétszeres), sőt hármas (háromszoros) kötés is kialakulhat közöttük. Ha egy szénvegyület kizárólag egyszeres kötések tartalmaz, telítettnek nevezzük. Abban az esetben, ha egy vagy több, kétszeres vagy háromszoros kötés is van benne, telítetlen szénvegyületről van szó (Kajtár, Varga, 1988; Whitten et al., 2014; Gill, 2015). A telítetlen kötések eltérő tulajdonságokkal ruházzák fel az így kialakuló molekulát, ezért ezt a kis részt (atomcsoportot) **funkciós csoport**nak nevezzük (26. ábra), és ez alapvetően meghatározza a szénvegyület fizikai és kémiai tulajdonságait (Kajtár, Varga, 1988; Rózsahegyi, 1993; Whitten et al., 2014; Gill, 2015). A telítetlen szénvegyületek speciális típusát képviselik az **aromás vegyületek**, amelyekben a gyűrűszerűen összekapcsolódó szénatomok közötti kötések úgy alakítják ki az elektronok, hogy azok kettőnél több szénatomhoz tartoznak egyszerre, azaz nem helyhez kötöttek, idegen

szakkifejezéssel delokalizáltak. Ilyen gyűrűszerű elektronrendszerrel rendelkezik például a hat szénatomból felépülő benzol ( $C_6H_6$ ), ami a legegyszerűbb aromás szénhidrogén (Kajtár, Varga, 1988; Rózsahegyi, 1993; Whitten et al., 2014).

	<i>funkciós csoport</i>	<i>osztály</i>	<i>példák</i>
A szerves szénvegyületek funkciós csoportjai	$\begin{array}{c} \diagup \\ \text{C}=\text{C} \\ \diagdown \end{array}$	alkének	etilén
	$-\text{C}\equiv\text{C}-$	alkinek	acetilén
	$-\text{X}$ (X = F, Cl, Br, I)	halogéntartalmú szerves vegyületek	kloroform, freonok, teflon
	$-\text{OH}$	alkoholok	etil-alkohol, glikol, glicerín
		fenolok (aromás—OH)	fenol
	$\text{C}-\text{O}-\text{C}$	éterek	dietil-éter
	$\begin{array}{c} \text{O} \\    \\ -\text{C}- \end{array}$	aldehidek (láncvégi)	formaldehid
		ketonok (láncközi / aromás)	aceton
	$\begin{array}{c} \text{O} \\    \\ \text{C}-\text{C}-\text{OH} \end{array}$	karbonsavak	hangyasav, ecetsav, olajsav
	$\begin{array}{c} \text{O} \\    \\ \text{C}-\text{C}-\text{O}-\text{C} \end{array}$	észterek	etil-acetát

**26. ábra**

A leggyakoribb funkciós csoportok és az általuk meghatározott szénvegyületek (Kajtár, Varga, 1988; Whitten et al., 2014; módosítva)

A kizárólag szénből és hidrogénből felépülő szénvegyületekben, a szénhidrogénekben csak a kettős vagy a hármas kötés jelenhet meg funkciós csoportként. Ha egy szénvegyület molekulájának felépítésében a szénen és a hidrogénen kívül egy vagy több másik elem, azaz heteroatom (pl. O, N, S, P vagy valamelyik halogénelem) is részt vesz, a molekulának jellegzetes molekularésze jön létre, ami szintén befolyásolja a tulajdonságait. A legtöbb funkciós csoport egy vagy több heteroatomot tartalmaz (26. ábra). Ilyen funkciós csoport az oxigéntartalmú hidroxilcsoport ( $\text{—O—H}$ ), illetve a két szénatomhoz egyszeres kötésekkel kapcsolódó (éterkötésű) oxigénatom ( $\text{—O—}$ ). Abban az esetben, ha a szénatomhoz kétszeres kötéssel kapcsolódik egy oxigénatom, karbonilcsoportról van szó, ha pedig a szénatomhoz a kétszeres kötésű oxigénatomon túl egy hidroxilcsoport is tartozik, a funkciós csoport neve karboxilcsoport. A gyakori funkciós csoportokat, illetve az általuk meghatározott szerves vegyületcsoportokat jellemző példákkal a 26. ábra mutatja be (Kajtár, Varga, 1988; Whitten et al., 2014).

A gyakori és közismert oxigéntartalmú szénvegyületek közül a metil-alkohol és az etil-alkohol összegképlete más (nem izomerek), tulajdonságaik azonban nagyon hasonlóak, hiszen mindkét molekulában hidroxilcsoport alkotja a funkciós csoportot (úgynevezett alkoholok). Ettől eltérően, az azonos összegképletű, tehát konstitúciós izomer etil-alkohol és dimetil-éter lényegesen eltérő fizikai és kémiai tulajdonságokkal rendelkezik (17. táblázat). Ennek oka az eltérő funkciós csoportban keresendő (Kajtár, Varga, 1988).

**17. táblázat**

Oxigéntartalmú szerves vegyületek jellemző tulajdonságai (Kajtár, Varga, 1988)

Konstitúció név	Összeg- képlet	T <sub>Op</sub> (°C)	T <sub>Fp</sub> (°C)	Oldhatóság vízben	Reakció Na-mal
<b>CH<sub>3</sub>—OH</b> metil-alkohol	CH <sub>4</sub> O	−97,8	64,7	kitűnő	heves
<b>CH<sub>3</sub>—CH<sub>2</sub>—OH</b> etil-alkohol	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O	−114,5	78,4	kitűnő	heves
<b>CH<sub>3</sub>—O—CH<sub>3</sub></b> dimetil-éter	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O	−138,5	−23,7	rossz	nincs

T<sub>Op</sub>: olvadáspont hőmérséklete; T<sub>Fp</sub>: forráspont hőmérséklete

A legegyszerűbb szénvegyületek a *szénhidrogének*, amelyek molekulái kizárólag szén- és hidrogénatomokból épülnek fel, bennük szén–szén, illetve szén–hidrogén közötti kötések találhatók. Az egymáshoz kapcsolódó szénatomok által

létrehozott szénváz alakja szerint egyrészt nyílt szénláncú, illetve gyűrűs szénhidrogéneket különböztetünk meg. Másrészt lényeges szerkezeti tulajdonság, hogy a szénatomok kizárólag egyszeres kötéssel kapcsolódnak-e egymáshoz, vagy előfordulnak az adott vegyületben kettős vagy hármas kötésű szénatompárok is, illetve aromás gyűrű jellemzi-e a szerkezetüket (Kajtár, Varga, 1988; Whitten et al., 2014; Gill, 2015). Ez utóbbi alapján a szénhidrogének két elsődleges csoportra bonthatók: megkülönböztetjük az aromás gyűrűt nem tartalmazó, úgynevezett **alifás szénhidrogéneket** az aromás szénhidrogénektől (27. ábra). Azokat az alifás szénhidrogéneket (nyílt láncú és gyűrűs), amelyekben a szénatomok csak egyszeres kötéssel kapcsolódnak egymáshoz, **telített szénhidrogéneknek** nevezzük. A telített szénhidrogének molekuláiban minden szénatomhoz négy másik atom (C vagy H) kapcsolódik, azaz minden szénatomnak maximális számú közvetlen szomszédja van (25. ábra). Az egy vagy több kettős vagy hármas kötést tartalmazó alifás szénhidrogéneket a **telítetlen szénhidrogének** csoportjába soroljuk. Ezek is lehetnek nyílt láncúak vagy gyűrűsek (Kajtár, Varga, 1988; Whitten et al., 2014).



**27. ábra**

A szénhidrogének osztályozása (Whitten et al., 2014 alapján, módosítva)

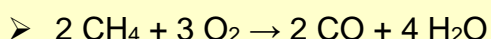
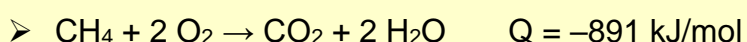
### Megjegyzés:

A kőolaj és a földgáz döntően telített szénhidrogénekből áll, a földgáz legfontosabb komponense a metán (Kajtár, Varga, 1988; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

A telített szénhidrogének nyílt szénláncú csoportját az **alkánok (paraffinok)** alkotják. Több szénatom kapcsolódásával rövidebb-hosszabb láncok jöhetnek létre, amelyek el is ágazhatnak (pl. izobután; **25. ábra**). Az elágazás nélküli szénláncot normális szénláncnak nevezzük (Kajtár, Varga, 1988). A **cikloalkánok** olyan telített szénhidrogének, amelyekben a szénatomok gyűrűt képezve kapcsolódnak össze. Minden telített szénhidrogén neve **-án** szótagra végződik. A metán, illetve a **25. ábrán** bemutatott bután és izobután egy-egy alkán, a ciklobután pedig a cikloalkánok képviselője (Kajtár, Varga, 1988; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

A legegyszerűbb alkán a metán, színtelen, szagtalan gáz. Az üvegházhatású gázok közé tartozik, ezért a globális felmelegedés és a klímaváltozás kérdésköre miatt az utóbbi néhány évtizedben a légköri koncentrációjával foglalkozó környezeti kutatások kiemelt szerepet kaptak (Gelencsér et al., 2012; Gill, 2015). Vízben gyakorlatilag oldhatatlan, de szerves oldószerekben, mint például a benzin (döntően nyílt láncú, telített szénhidrogének keverékéből álló folyadék) vagy a benzol, jól oldódik (Kajtár, Varga, 1988; Whitten et al., 2014).

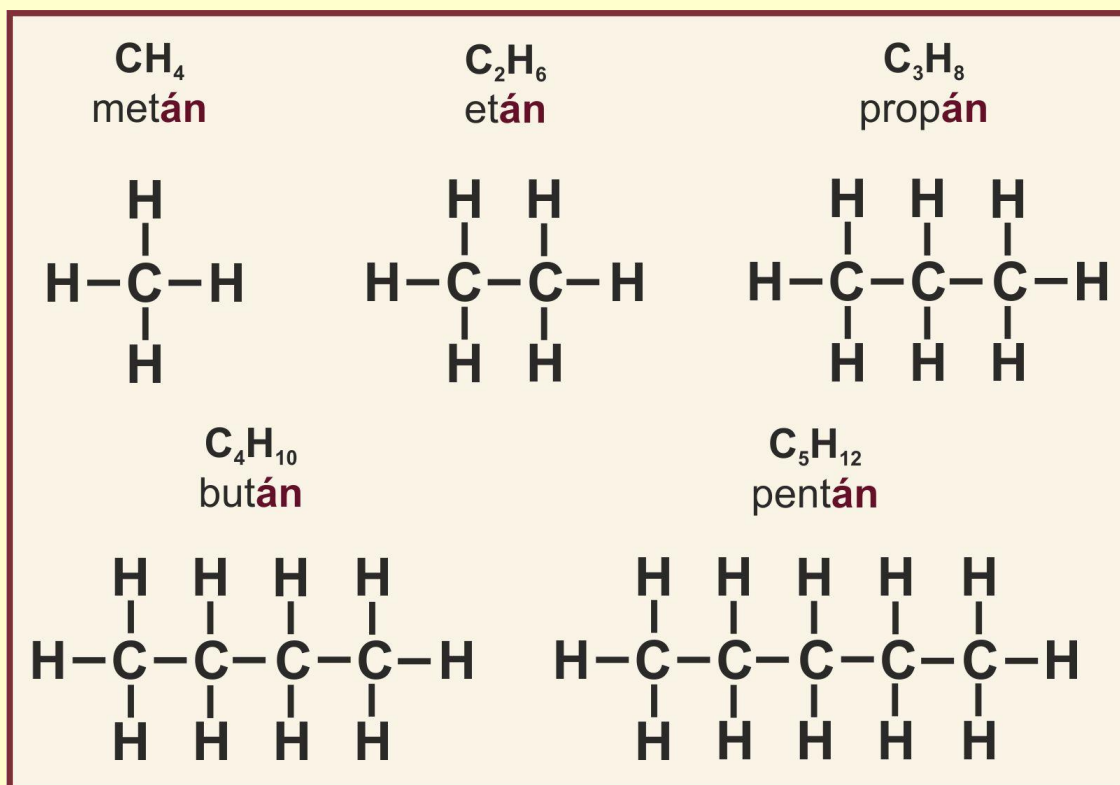
A szimmetrikus térbeli elrendeződésű metánmolekula stabil, ezért közönséges körülmények között nem reakcióképes; sem erős savak vagy lúgok (bázisok), sem oxidáló- vagy redukálószer hatására nem alakul át. Magas hőmérsékleten azonban számos reakciója ismert. A metán 500 °C fölötti hőmérsékleten bomlani kezd, hidrogénmolekula, illetve más szénhidrogén vagy elemi szén keletkezik belőle. Meggyújtva a metán a levegő oxigénjével szén-dioxiddá és vízzé ég el (**21. ábra**). Oxigénhiányos környezetben azonban szén-monoxid és víz keletkezik. A folyamatok egyenletei az alábbiak:



Ha a metán levegővel keveredik, veszélyes robbanóelegy jön létre, ami már szikra hatására is fölrobban. A kőszénbányákban a metán-levegő elegy robbanását nevezik sújtólégrobbanásnak (Kajtár, Varga, 1988; Whitten et al., 2014).

Az egy szénatomot tartalmazó metánon túl a földgázban több láncszerűen összekapcsolódó szénatomból álló molekula is található, ilyen az etán, a propán és a bután (Kajtár, Varga, 1988; Whitten et al., 2014; Gill, 2015). Ha két szénatom kapcsolódik egyszeres kötéssel egymáshoz úgy, hogy a maradék három vegyértékét hidrogén köti le, az etánt ( $\text{C}_2\text{H}_6$ ) kapjuk. Három szénatom láncja alkotja a propánt, a négy szénatomból álló, normális szénláncú alkán pedig a bután. Tovább folytatva a

sort, az 5 szénatomot tartalmazó pentánt kapjuk, ami azonban közönséges körülmények között már folyadék (28. ábra; 18. táblázat).



**28. ábra**

A legegyszerűbb normális szénláncú alkánok és szerkezeti képletük

**18. táblázat**

Az első tíz normális szénláncú alkán neve, képlete és tulajdonságai (Kajtár, Varga, 1988)

Név	Összegképlet	Molekula-tömeg	Konstitúciós képlet	$T_{\text{Op}}$ (°C)	$T_{\text{Fp}}$ (°C)
metán	$\text{CH}_4$	16	$\text{CH}_4$	-182,5	-161,5
etán	$\text{C}_2\text{H}_6$	30	$\text{CH}_3\text{CH}_3$	-183,2	-88,6
propán	$\text{C}_3\text{H}_8$	44	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3$	-187,7	-42,1
bután	$\text{C}_4\text{H}_{10}$	58	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	-138,3	-0,5
pentán	$\text{C}_5\text{H}_{12}$	72	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	-129,7	36,1
hexán	$\text{C}_6\text{H}_{14}$	86	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_4\text{CH}_3$	-95,3	68,7
heptán	$\text{C}_7\text{H}_{16}$	100	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_5\text{CH}_3$	-90,6	98,4
oktán	$\text{C}_8\text{H}_{18}$	114	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_6\text{CH}_3$	-56,8	125,7
nonán	$\text{C}_9\text{H}_{20}$	128	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_7\text{CH}_3$	-53,6	150,8
dekán	$\text{C}_{10}\text{H}_{22}$	142	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_8\text{CH}_3$	-29,7	174,0

**Megjegyzés:**

A szénvegyületek elnevezése a funkciós csoporttal, illetve a szerkezettel összefüggő szabályszerűségeket követ. Minden telített szénhidrogén (alkán, cikloalkán) neve **-án** szótagra végződik (Kajtár, Varga, 1988; Whitten et al., 2014).

A normális szénláncú alkánok (normál alkánok vagy röviden n-alkánok) a metán többszörözéséből vezethetők le, azaz a metán polimerjei. A képleteket megfigyelve látható, hogy a szomszédok csupán egy  $\text{—CH}_2\text{—}$  egységben (úgynevezett *metilén*csoport) térnek el egymástól, azaz a n-alkánok konstitúciója felírható a  $\text{H—(CH}_2)_n\text{—H}$  alakban, ahol  $n$  a szénatomok számát jelenti. Ennek megfelelően a nyílt szénláncú alkánok (normális vagy elágazó egyaránt; a konstitúciós izomerek miatt) általános összegképlete  $\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$ . A gyűrűs alkánok végei összekapcsolódnak, ezért molekulánként két H-atommal kevesebb található bennük, mint normális láncú megfelelőikben, így a cikloalkánok  $\text{C}_n\text{H}_{2n}$  összegképlettel jellemezhetők (Kajtár, Varga, 1988; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

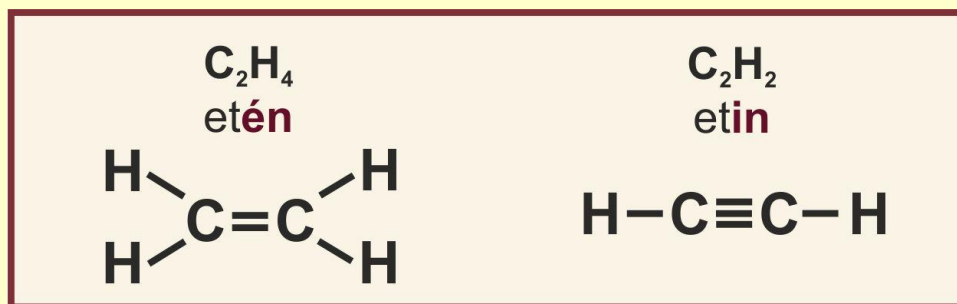
Az alifás telítetlen szénhidrogének (27. ábra) további két nagy csoportra bonthatók: megkülönböztetjük a kettős kötést tartalmazó **alkéneket** és a hármas kötést tartalmazó **alkineket**. További alcsoportjaik a többszörös kötések száma (egy vagy több), illetve a gyűrűsen összekapcsolódó szénatomok megjelenése (pl. cikloalkének, illetve cikloalkinek) alapján különíthetők el (Whitten et al., 2014).

Az alkének, vagy olefinek kettős kötésű szénatompárt tartalmazó telítetlen szénhidrogének. Nevüket az alkánokéhoz hasonlóan képezzük, de *-én* végződéssel. A legegyszerűbb alkén az etén ( $\text{C}_2\text{H}_4$ ), hétköznapi nevén etilén (29. ábra). Az etilén színtelen, jellegzetes szagú gáz, vízben rosszul, szerves oldószerekben viszont jól oldódik (Kajtár, Varga, 1988; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

Az etilén a kettős kötésű szénatomok miatt (funkciós csoport) nagyon reakcióképes vegyület. Meggyújtva gyengén kormozó lánggal ég el. Megfelelő körülmények között (platinakatalizátor) az etilén hidrogénnel egyesülve etánná telítődik. Katalizátorok hatására azonban az etilén molekulái egymással is reakcióba lépnek (**polimerizáció**), mely folyamat során hosszú paraffinláncok (*polietilén*) jönnek létre. Az etilén polimerizációja alapvető a műanyaggyártásban, hiszen ez az egyik legnagyobb mennyiségben használt csomagolóanyag, a polietilén fólia; illetve a polietilén hab (polifoam) nyersanyaga (Kajtár, Varga, 1988; Whitten et al., 2014).

#### **Megjegyzés:**

A cikloalkánok közül a természetben az öt- és hattagú gyűrűt tartalmazó molekulák (*ciklopentán*, *ciklohexán* és származékaik) a legelterjedtebbek. Gyakoriak a többgyűrűs vázák is, közülük biológiai szempontból a legjelentősebb vegyületek az úgynevezett *szteroidok*. A szteroidok alapváza három hattagú és egy öttagú gyűrű összekapcsolódó rendszeréből áll, amit szteránváznak nevezünk (Kajtár, Varga, 1988).



### 29. ábra

A legismertebb telítetlen szénhidrogének: a kettős kötést tartalmazó etilén (etén) és a hármas kötésű szénatompárt tartalmazó acetilén (etin) szerkezeti képlete  
A legegyszerűbb alkén az etén, a legegyszerűbb alkin pedig az etin; nevüket az alkánokéhoz hasonlóan képezzük, de -én, illetve -in végződéssel.

Az etilénen kívül nagyon sok olyan telítetlen szénhidrogén van, ami kettős kötést tartalmaz. A három szénatomos propilén (propén) polimerizációjával állítják elő a polipropilént, amiből nagy szakítószilárdságú műanyagszálak húzhatók, illetve az acélt helyettesítő öntvények készíthetők (Kajtár, Varga, 1988). Az élő természetben — főleg a növényekben — szintén sokféle telítetlen szénhidrogén, illetve oxigéntartalmú szénhidrogén-származék fordul elő. Ilyen anyagok a terpének, amelyeket például fenyőgyantából (terpentinolaj) vagy fűszernövények (pl. gyömbér, kömény, kapor) illó olajából nyernek ki, illetve a karotinoidok (színanyagok: likopin a paradicsomban, karotin a sárgarépában). Gyakorlati szempontból azonban az egyik legfontosabb telítetlen szénhidrogén a természetes kaucsuk, ami nyúlós, képlékeny anyag. A természetes kaucsukból vulkanizálással (néhány % kénporral és egyéb adalékokkal összekeverve melegítik) állítják elő a vulkanizált kaucsukot, azaz a térhálós szerkezetű, rugalmas gumit (Kajtár, Varga, 1988; Whitten et al., 2014).

A hármas kötésű szénatompárt tartalmazó, telítetlen szénhidrogéneket összefoglalóan alkinoknak nevezzük (*acetilén-szénhidrogének*), legegyszerűbb képviselőjük az acetilén (etin,  $\text{C}_2\text{H}_2$ ). Szabályos nevüket az alkánokéhoz hasonlóan képezzük, de *-in* végződéssel (Kajtár, Varga, 1988; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

Az acetilén (29. ábra) szobahőmérsékleten színtelen, szagtalan gáz. Vízben gyengén, acetonban viszont nagyon jól oldódik. Az acetilén fokozottan reakcióképes vegyület. Meggyújtva erősen kormozó és világító lánggal ég; oxigénnel keverve közel 3000 °C-os lángot ad, ezért hegesztésre használják. Különösen jelentős ipari alapanyag, a hidrogén-kloriddal (HCl) történő reakciójának terméke a vinil-klorid, ami polimerizálható; így állítják elő az egyik legismertebb műanyagot, a poli(vinil-klorid)-ot, köznapin nevén a PVC-t (Kajtár, Varga, 1988; Whitten et al., 2014).

**Megjegyzés:**

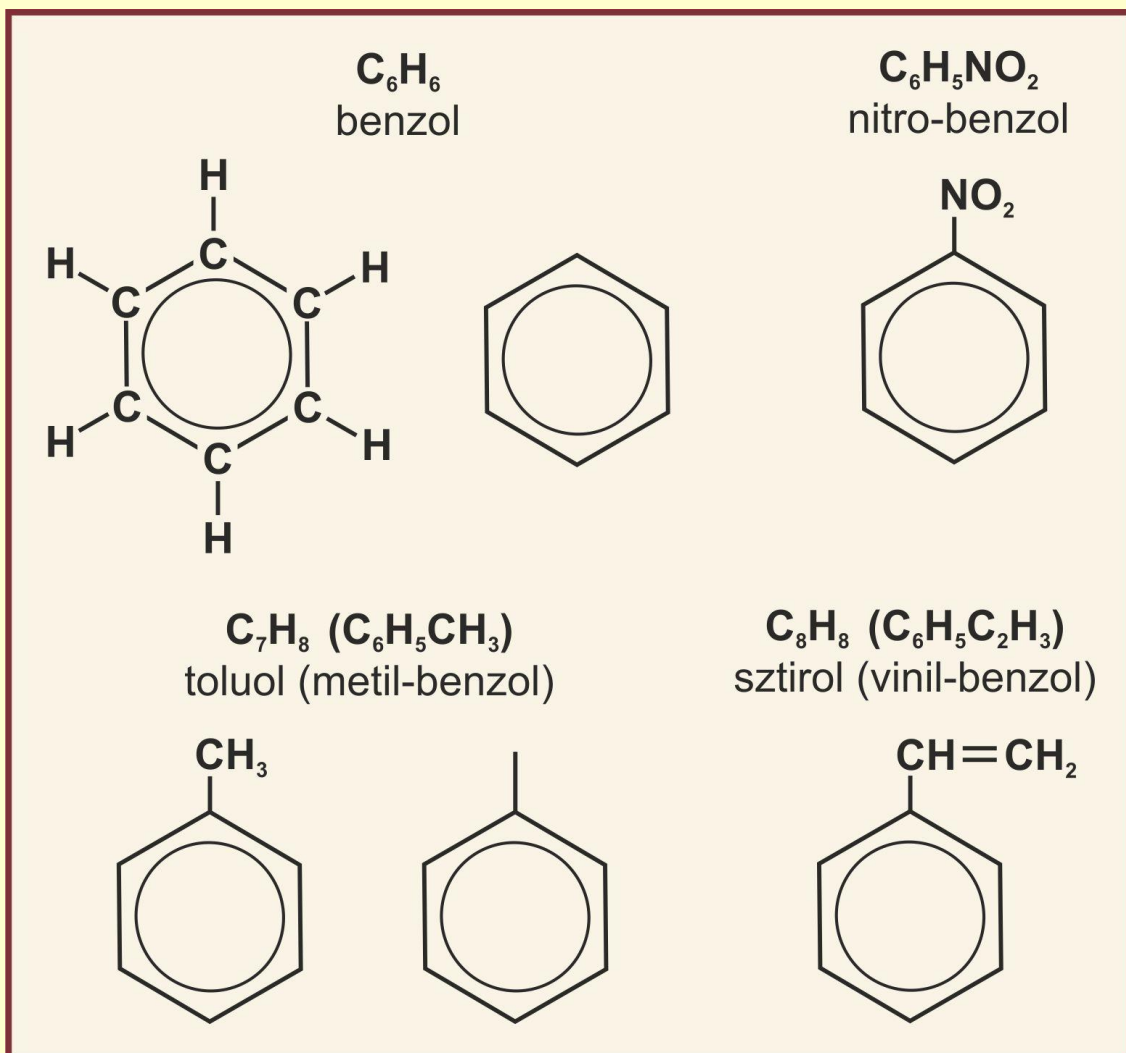
Erős fényű lángja miatt használták korábban a bányászok, a barlangászok, a geológusok és a természetjárók barlangok, tárok világítására az acetilént az úgynevezett *karbidlámpákban*. A lámpába helyezett kalcium-karbidra ( $\text{CaC}_2$ ) vizet csepegtetve ugyanis acetilén keletkezik, ami meggyújtva világító lánggal ég (Kajtár, Varga, 1988).

A szénhidrogének különleges csoportját alkotják az aromás szénhidrogének, melyek nevüket az előállításuk során felhasznált anyagok (gyanták, balzsamok) kellemes illatáról kapták. Az aromás vegyületek az alkénekhez hasonlóan telítetlenek, de azoktól eltérően itt nem helyhez kötöttek a kettős kötések, azaz nem egy adott szénatompárhoz, hanem kettőnél több szénatomhoz tartoznak a kötést létrehozó elektronok. Ez azt jelenti, hogy a molekulán belül szabadon elmozdulva gyűrűs elektronrendszert alkotnak (delokalizáltak). Az egyik legstabilisabb ilyen gyűrűs szerkezetű szénvegyület a benzol ( $\text{C}_6\text{H}_6$ ), színtelen, jellegzetes szagú, vízzel nem elegyedő, erősen fénytörő, egészségre ártalmas (rákkeltő) folyadék (Kajtár, Varga, 1988; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

A benzol és származékai (30. ábra) fontos vegyipari alapanyagok. A tömény salétromsavval történő reakciója termékeként keletkezett nitro-benzol (mérgező, vízzel nem elegyedő folyadék) kiváló szerves oldószer, gyógyszer- és festékgyártási alapanyag. Szintén ipari oldószer a toluol (metil-benzol). A telítetlen oldalláncot tartalmazó sztírol (vinil-benzol) pedig polimerizálható, kiemelt jelentőségű a műanyaggyártásban (poliszttírol). Kettős gyűrűből épül fel a jellegzetes szagú naftalinmolekula ( $\text{C}_{10}\text{H}_8$ ), ami színtelen, csillogó felületű lemezekben kristályosodó anyag. A kőszénkátrányból nyerhető ki nagy mennyiségben; a háztartásokban régóta ismert a molylepkék elriasztása miatt, az iparban műanyag- és festékipari alapanyagokat gyártanak belőle (Kajtár, Varga, 1988; Whitten et al., 2014).

A *halogéntartalmú szénhidrogének* csoportosítása az alapszénhidrogén típusa (telített, telítetlen, aromás) alapján lehetséges. A több klóratomot tartalmazó egy- és kétszénatomos vegyületek — mint például a kloroform (triklór-metán), a szén-tetraklorid és a triklór-etilén — kitűnő ipari, illetve laboratóriumi oldószerek, amelyek nem gyúlékonyak, de mérgezőek. Ruhatisztításra, zsírok és olajok növényekből történő kivonására használhatók fel. A fluortartalmú freonokat (pl. diklór-difluor-metán,  $\text{CF}_2\text{Cl}_2$ ) korábban spray-hajtógázként (pl. illatszereket, rovarirtókat permetező palackokban), illetve hűtőgépekben hűtőfolyadékként alkalmazták, azonban

üvegházhatásuk miatt használatuk korlátozott. A vinil-klorid műanyaggyártási alapanyag; a tetrafluor-etilén polimerizációjával gyártják a teflont, ami tapadásmentes bevonatot képez (pl. teflonbevonatú edények); hő-, sav- és lúgálló anyag (Kajtár, Varga, 1988; Whitten et al., 2014).



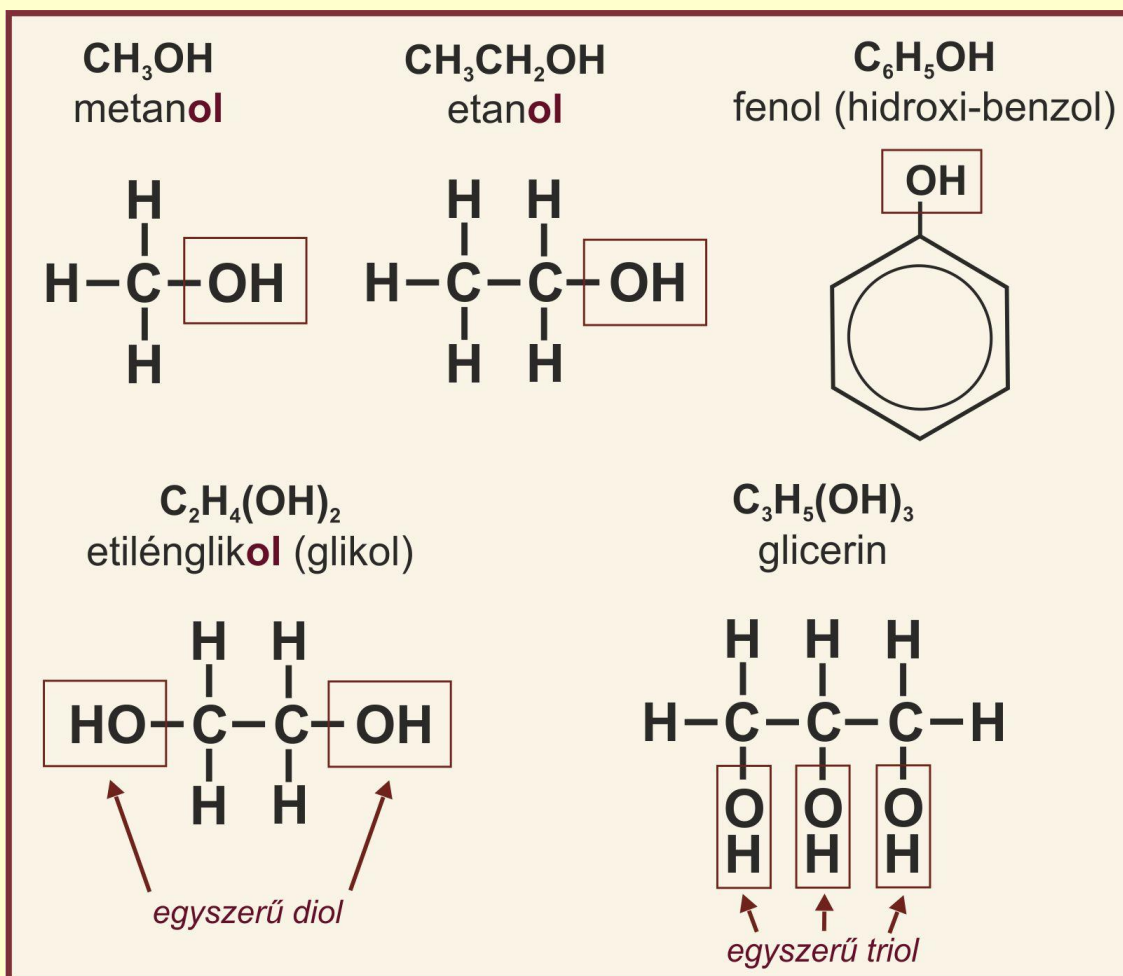
**30. ábra**

A benzol és gyakori származékainak szerkezeti képlete

Az *oxigéntartalmú szénvegyületek* alapvető szerepet játszanak a növény- és állatvilág felépítésében. Ezek gyakran viszonylag bonyolult szerkezetű vegyületek. Megkülönböztetünk egy oxigénatomos funkciós csoportokat (hidroxilcsoport, étercsoport, oxocsoport), illetve összetett funkciós csoportokat (karboxilcsoport, észtercsoport) (Kajtár, Varga, 1988; Whitten et al., 2014).

Egy oxigénatom három eltérő módon épülhet be a szerves molekulákba (**26. ábra**). A *hidroxivegyületekben* az oxigénatom egyszeres kötéssel kapcsolódik egy

szénatomhoz és egy hidrogénatomhoz (hidroxilcsoport). Amennyiben a hidroxilcsoport telített szénatomhoz kapcsolódik ( $\text{—C—O—H}$ ), a kapott vegyületeket **alkoholoknak** (31. ábra), amennyiben aromás gyűrű tagját képező szénatomhoz kötődik, **fenoloknak** nevezzük (Kajtár, Varga, 1988; Rózsahegyi, 1993; Whitten et al., 2014). A legegyszerűbb fenoltípusú vegyület a fenol, azaz a hidroxibenzol (31. ábra), ami erősen mérgező, fertőtlenítő hatású anyag (Kajtár, Varga, 1988; Whitten et al., 2014).



**31. ábra**

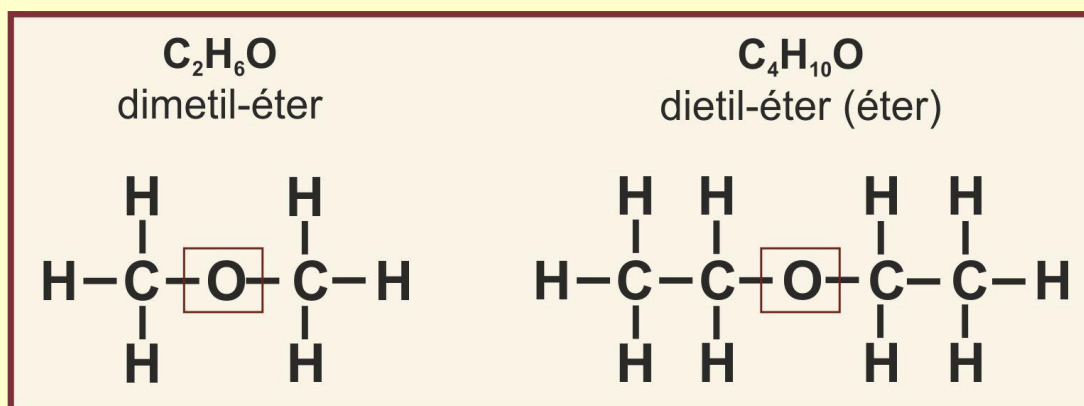
Egyszerű egy- és többértékű alkoholok, illetve a legegyszerűbb fenoltípusú vegyület, a fenol szerkezeti képlete  
A funkciós csoport (hidroxilcsoport) bekeretezve látható.

Közismert alkohol a metanol (metil-alkohol, CH<sub>3</sub>OH) és az etanol (etil-alkohol, CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OH), mindkettő kitűnő oldószer (17. táblázat; 31. ábra). A metanol már kis mennyiségben is nagyon erős mérgező (görcsöket, vakságot, halált okoz). Az etanol (borszesz) viszont kellemes illatú folyadék, ami szeszes erjedés során cukortartalmú gyümölcsleiből (pl. must, azaz szőlőlé), illetve burgonya, kukorica, gabonafélék

erjesztésével állítható elő. A mindennapi életben az etanolt (etil-alkohol) nevezik egyszerűen alkoholnak, ami vízzel minden arányban elegyedik (Kajtár, Varga, 1988; Whitten et al., 2014). Az alkohol, illetve vizes oldata oldószer és fertőtlenítőszer, amit laboratóriumi eszközök tisztítására is felhasználnak („mosóalkohol”).

Egy molekulában több hidroxilcsoport is lehet. Két hidroxilcsoport található a glikolban (úgynevezett kétértékű alkohol, azaz diol), három pedig a legegyszerűbb háromértékű alkoholban (triol), a glicerinben (31. ábra). Mindkettő sűrűn folyó, szirupszerű folyadék. A glikol vizes oldatát fagyálló hűtőfolyadékként használják fel, mert a 60% glikolt és 40% vizet tartalmazó elegy csak  $-60\text{ }^{\circ}\text{C}$ -on fagy meg. A glicerin édeskés ízű, színtelen, szagtalan, nem mérgező; illatszeripari alapanyag, krémek alkotórésze (Kajtár, Varga, 1988; Whitten et al., 2014).

Az **éterek**ben éterkötésű oxigénatom a funkciós csoport (Kajtár, Varga, 1988; Rózsahegyi, 1993; Whitten et al., 2014). A legismertebb éter a korábban altatásra is használt dietil-éter (32. ábra), ennek köznapi neve egyszerűen: éter. A dietil-éter édeskés, bódító szagú, alacsony forráspontú, tűzveszélyes folyadék; kitűnő oldószer (Kajtár, Varga, 1988; Whitten et al., 2014).



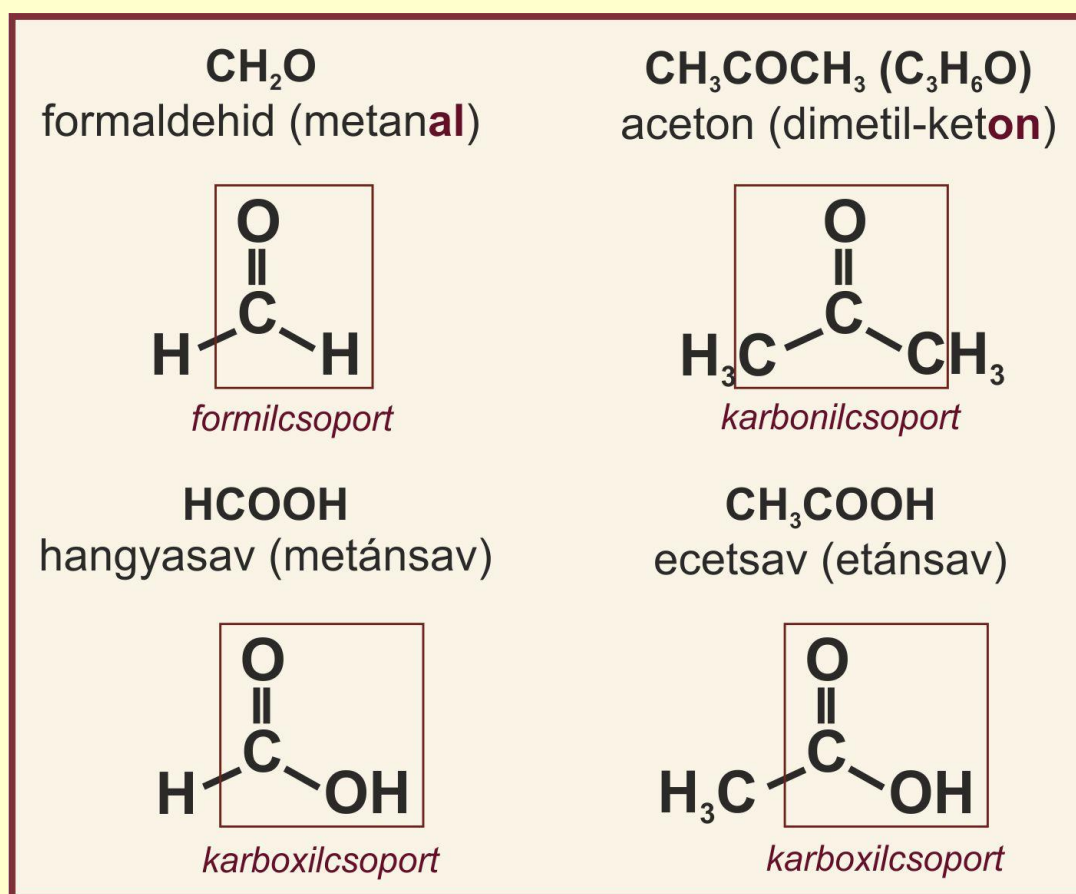
**32. ábra**

A legegyszerűbb éterek szerkezeti képlete  
A funkciós csoport (étercsoport) bekeretezve látható.

Az **oxovegyületek**ben kettős kötésű oxigénatom (oxocsoport) található. Ha ez láncvégi szénatomhoz kapcsolódik, a funkciós csoport neve formilcsoport (33. ábra), a kialakult vegyületek az **aldehidek** (Kajtár, Varga, 1988; Rózsahegyi, 1993; Whitten et al., 2014). A legegyszerűbb aldehid a formaldehid (metanal,  $\text{CH}_2\text{O}$ ), szúrós szagú gáz. A gyakorlatban használt, 40%-os vizes oldata a formalin. Sejtméreg,

baktériumölő hatású, ezért fertőtlenítőszerként, illetve biológiai preparátumok konzerválására használható. Fontos műanyagipari alapanyag (Kajtár, Varga, 1988).

A láncközi vagy gyűrűs szénatomhoz kapcsolódó oxocsoport alkotja a karbonilcsoportot (33. ábra), ami az úgynevezett **ketonok** jellemző funkciós csoportja (Kajtár, Varga, 1988; Rózsahegyi, 1993; Whitten et al., 2014). A legegyszerűbb keton az aceton. Az aceton jellegzetes, viszonylag kellemes szagú, könnyen párologó folyadék. Kitűnő oldószer, festékek, lakkok oldására használják (Kajtár, Varga, 1988).



### 33. ábra

A legegyszerűbb aldehid, keton és karbonsavak szerkezeti képlete  
 A funkciós csoportok bekeretezve láthatók.

Az összetett funkciós csoportot tartalmazó oxigéntartalmú szénvegyületek közül a **karbonsavakban** azonos szénatomhoz kapcsolódik az oxo- és a hidroxilcsoport (33. ábra), amit együtt karboxilcsoportnak nevezünk (Kajtár, Varga, 1988; Rózsahegyi, 1993; Whitten et al., 2014). A szerves molekulák savas viselkedése a karboxilcsoport jelenlétéhez kapcsolódik, a karbonsavak többnyire gyenge savak (Whitten et al., 2014; Gill, 2015). A karbonsavak egyes képviselőit (pl.

olajsav, palmitinsav, sztearinsav) a természetes zsírokból lehet előállítani, ezért zsírsavaknak is szokás nevezni ezt a csoportot. A legegyszerűbb karbonsav a hangyasav (metánsav,  $\text{HCOOH}$ ) és az ecetben előforduló ecetsav (etánsav,  $\text{CH}_3\text{COOH}$ ). A hangyasav (először vöröshangyák váladékából izolálták) csípős szagú és ízű, maró folyadék; az egyszerű karbonsavak közül a legerősebb sav. Bőr- és textilipari felhasználása (pl. bőrcserzés) a legelterjedtebb. Az ecetsav csípős szagú, savanyú ízű, maró folyadék; sóvegyületei az acetátok (acetátion:  $\text{CH}_3\text{COO}^-$ ). Kitűnő oldószer, illetve élelmiszeripari felhasználása adja jelentőségét (Kajtár, Varga, 1988; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

Az **észterek** olyan összetett funkciós csoportot tartalmazó oxigéntartalmú szénvegyületek, amelyekben azonos szénatomhoz oxo- és étercsoport kapcsolódik (Kajtár, Varga, 1988; Rózsahegyi, 1993; Whitten et al., 2014). Az észtereket (pl. etil-acetát) a karbonsavakból lehet elkészíteni, a karbonsavmolekula ugyanis — egyensúlyra vezető folyamatban — alkohollal észterré alakítható, miközben víz keletkezik (Kajtár, Varga, 1988; Whitten et al., 2014).

A **nitrogéntartalmú szénvegyületek** a szerves vegyületek hatalmas csoportját képviselik. A legegyszerűbb képviselőikben a nitrogénatom egyszeres kötéssel kapcsolódik egy, kettő vagy három szénatomhoz, ezek az **aminok**, amelyek aminosavak és a fehérjék formájában széles körben elterjedtek a természetben. Abban az esetben, ha a molekulában egy szénatomhoz közvetlenül kapcsolódik egy oxigénatom (kettős kötéssel) és egy nitrogénatom, **amidokat** kapunk. Az amidcsoport a fehérjék és a nukleinsavak jellegzetes funkciós csoportja (Kajtár, Varga, 1988; Rózsahegyi, 1993; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

#### **Megjegyzés:**

A természetben nem csak szerves eredetű ásványok fordulnak elő, ismerünk több szerves eredetű ásványt, illetve ásványszerű (mineraloid) amorf anyagot. A kristályos szerves ásványok közül karbonsav sója a *whewellit* ( $\text{CaC}_2\text{O}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ , kalcium-oxalát-monohidrát; kristályvíztartalmú oxálsav-só) és a *mellit* [ $\text{Al}_2\text{C}_6(\text{COO})_6 \cdot 18 \text{H}_2\text{O}$ ; benzol-hexakarbonsav, azaz mellitsav alumínium-sója], amelyek gyakran kőszéntelepekben fordulnak elő. Kőszénképződéshez kötődik az amorf *borostyánkő* képződése is, ami fenyőfélék fosszilis gyantája. Hasonló mineraloid a 3–4% ként is tartalmazó *ajkait*, ami Ajka (Veszprém megye) környéki előfordulásáról kapta nevét (Koch, Sztrókay, 1994).

A borostyánkő megdörzsölve elektrosztatikusan feltöltődik. A görög „*elektron*” szó jelentése borostyánkő (Ludwig, 1988).

### 3. Gyakori anyagok és tulajdonságaik, fogalomtár

**Aldehidek:** lánc végi oxocsoportot (kettős kötésű oxigénatom) tartalmazó szénvegyületek. A legegyszerűbb aldehid a formaldehid.

**Alifás szénhidrogének:** olyan szénhidrogének, amelyek nem tartalmaznak aromás gyűrűt. Kizárólag egyszeres, kétszeres (kettős) és háromszoros (hármás) szén–szén-kötéseket tartalmaznak.

**Alkánok:** nyílt szénláncú (normális vagy elágazó), telített szénhidrogének (paraffinok). Az első négy normális szénláncú alkánnak hagyományos neve van (metán, etán, propán, bután), majd a szénatomszámnak megfelelő görög számnév tövéhez illesztjük az *-án* végződést (pl. pentán, hexán).

**Alkének:** egy vagy több szén–szén kettős kötetést tartalmazó, alifás telítetlen szénhidrogének (olefinek). A legegyszerűbb alkén az etén (etilén).

**Alkinek:** egy vagy több szén–szén hármás kötetést tartalmazó, alifás telítetlen szénhidrogének. A legegyszerűbb alkin az etin (acetilén).

**Alkoholok:** telített szénatomhoz kapcsolódó hidroxilcsoportot tartalmazó szénvegyületek (pl. metanol, etanol, glikol, glicerin).

**Allotróp módosulat:** egy elem eltérő szerkezetű formái (pl. oxigéngáz,  $O_2$  és ózon,  $O_3$ ; grafit, C és gyémánt, C).

**Amidok:** olyan karbonsavak, amelyekben a hidroxilcsoport helyett aminocsoport található.

**Aminok:** olyan nitrogéntartalmú szénvegyületek, amelyekben a nitrogénatom egyszeres kötéssel kapcsolódik egy, kettő vagy három szénatomhoz, a fennmaradó vegyérték pedig hidrogéntomok kötik le.

**Aromás vegyületek:** gyűrűsen delokalizált (nem helyhez kötött, kettőnél több atomhoz tartozó), stabilis elektronrendszerrel rendelkező vegyületek (pl. benzol).

**Cikloalkánok:** gyűrűszerűen összekapcsolódó szénvázalattal rendelkező, telített szénhidrogének (pl. ciklopentán, ciklohexán).

**Esszenciális:** alapvető fontosságú, lényeges, jelentős. Az esszenciális elemek az élő szervezetek normális működéséhez,

élettevékenységéhez (pl. növekedés, fejlődés) nélkülözhetetlenek.

**Észterek:** észtercsoportot (azonos szénatomhoz kapcsolódó oxo- és étercsoportot) tartalmazó szénvegyületek.

**Éterek:** éterkötésű oxigénatomot ( $-O-$ ) tartalmazó szénvegyületek.

**Fenolok:** aromás gyűrű tagját képező szénatomhoz kapcsolódó hidroxilcsoportot tartalmazó szénvegyületek.

**Fémek:** olyan fémes tulajdonságú elemek, amelyek elektromos vezetőképessége a hőmérséklet emelésével csökken. A fémes tulajdonságok cseppfolyós és szilárd halmazállapotban figyelhetők meg.

**Folsav:** a hidrogén-fluorid (HF) vizes oldata; agresszív, maró hatású anyag.

**Fotokémiai szmog:** a levegő minőségét erősen rontó füstköd, ami sok nagyvárosban forró nyári napokon alakul ki a napsugárzás és a szennyezőanyagok (pl. kipufogógáz) kölcsönhatásakor.

**Frakcionált desztilláció:** szakaszos lepárlás; folyadékkeverékek (pl. cseppfolyós levegő, kőolaj) szétválasztására használható eljárás. Eltérő forráspont-tartományú páratok nyerhetők egymás után.

**Funkciós csoport:** a molekulának az a részlete (atom vagy atomcsoport), amelyik a vegyület sajátságait döntő módon meghatározza.

**Halogének:** rendkívül reakcióképes elemek, sóképzők. Atomos formában nem stabilak, kétatomos molekulákat alkotnak: fluor ( $F_2$ ), klór ( $Cl_2$ ), bróm ( $Br_2$ ), jód ( $I_2$ ).

**Higroszkópos:** vízmegkötő tulajdonságú anyag, ezért szárítószerként alkalmazható. A higroszkópos anyagok száraz állapotban a levegőből is képesek nedvességet megkötöni.

**Izomerek:** azonos összegképletű, de eltérő molekulaszerkezetű vegyületek. A kifejezés görög eredetű (*izosz:* azonos, *merosz:* rész).

**Jódtinktúra:** sebek fertőtlenítésére alkalmas oldat; 5% jódot tartalmaz 80%-os etil-alkoholban feloldva.

**Karbonsavak:** egy vagy több karboxilcsoportot tartalmazó szénvegyületek (pl. hangyasav, ecetsav).

**Ketonok:** olyan szénvegyületek, amelyekben az oxocsoport láncközi vagy gyűrűs szénatomhoz kapcsolódik (pl. aceton).

**Királyvíz:** erőyes oldószer, a salétromsav ( $\text{HNO}_3$ ) és a sósav ( $\text{HCl}$ ) 1:3 molarányú elegye. A királyvíz az aranyat és a platinát is feloldja (a választóvíz nem).

**Konstitúciós képlet:** a molekulát felépítő atomok kapcsolódási sorrendjét megadó szerkezeti képlet. A *constitutio* latin szóból származik, mely jelentése: alkat, alkotmány, összeállítás.

**Korrózió:** környezeti hatásra az anyagok (pl. fémek, ötvözetek) felületéről kiinduló kémiai változás. A vas rozsdásodása, a réztárgyak, rézötvözetek (pl. bronz) felületén keletkező zöldes bevonat, a patina („rézrozsa”) a korrózió eredménye.

**Nemesgázok:** rendkívül stabil, nem reakcióképes, azaz inert elemek; stabilis izolált atomok formájában találhatók meg a természetben; közönséges körülmények között gáz halmazállapotúak (pl. He: hélium, Ne: neon, Ar: argon, Kr: kripton).

**Olefinek:** alkének.

**Oxidálószer:** elektronátmenettel járó reakcióban (redoxireakció) elektront vesz fel, miközben redukálódik (pl. oxigén, ózon, klórgáz).

**Ózon:** az elemi oxigén háromatomos allotróp módosulata ( $\text{O}_3$ ).

**Ötvözet:** olyan fémes sajátságú összetett anyagok, amelyek cseppfolyós és szilárd állapotban (makroszkóposan) is homogének.

**Paraffinok:** nyílt szénláncú, telített szénhidrogének (alkánok). A latin „parum affinis” jelentése: kevésbé reakcióképes.

**Polimerizáció:** olyan folyamat, mely során egy telítetlen vegyület sok azonos molekulája melléktermék képződése nélkül egyesül egymással (pl. etilénből polietilén képződése; felhasználás: pl. poliolefin zsugorfólia gyártása).

**Redukálószer:** elektronátmenettel járó reakcióban (redoxireakció) elektront ad le, miközben oxidálódik (pl. grafit, szén-monoxid).

**Sósav:** a hidrogén-klorid ( $\text{HCl}$ ) vizes oldata, fertőtlenítő- és fehéritószer; a gyomornedv alkotója.

**Szalmiákszesz:** az ammónia ( $\text{NH}_3$ ) vizes oldata, köznapin néven ammónium-hidroxid-oldat. Kereskedelmi forgalomba a 25, vagy 5 tömeg% ammóniát tartalmazó oldat kerül (háztartási szalmiákszesz). Tisztítószer: réztárgyakról, illetve rézötvözetekről leoldja az oxidbevonatot. Lúgos kémhatásánál fogva eltávolítja a zsíros szennyeződések a zománc-, az üveg- és a műanyagfelületről.

**Szerkezeti képlet:** megmutatja, hogy egy vegyületben hogyan kapcsolódnak az atomok egymáshoz. A kémiai kötések vonalakkal, az atomokat (atomcsoportokat) vegyjelek segítségével ábrázoljuk.

**Szerves vegyület:**  $\text{C}-\text{C}$  vagy  $\text{C}-\text{H}$  (vagy mindkettőt) kötést tartalmaz, gyakran nitrogénnel, oxigénnel, kénnel vagy más elemmel kombinálódva (pl. metán:  $\text{CH}_4$ , ecetsav:  $\text{CH}_3\text{COOH}$ ).

**Szervetlen vegyület:** nem tartalmaz  $\text{C}-\text{H}$  kötést, azaz amennyiben széntartalmú, az kizárólag szervetlen kötést létesít (pl.  $\text{C}-\text{O}$  kötés a karbonátokban;  $\text{CO}_3^{2-}$ ).

**Telítetlen szénhidrogének:** molekuláikban egy vagy több kettős vagy hármas kötést is tartalmaznak (pl. etilén, acetilén).

**Telített szénhidrogének:** molekuláikban minden szénatomhoz négy másik atom (C vagy H) kapcsolódik (alkánok és cikloalkánok). Kizárólag egyszeres kötések tartalmaznak (pl. metán, propán, bután; ciklopentán).

**Választóvíz:** a salétromsav ( $\text{HNO}_3$ ) hétköznapi megnevezése; az ezüstöt (Ag) oldja, az aranyat (Au) viszont nem, ezért egyszerű oldási próbával a színarany tárgy (pl. pénzérme, ékszer) megkülönböztethető az ezüsttartalmú ötvözetektől.

### **Tipp a tanuláshoz:**

Az idegen nyelvek tanuláshoz hasonlóan az idegen eredetű kémiai szakkifejezések memorizálása sem egyszerű feladat. Ahogy a nyelvtanulás során fontos szerepet kap az ismétlés, úgy meghatározó a szerepe a kémia nyelvének elsajátításakor is. Ahhoz, hogy biztosan megtanuld az alapfogalmakat, célszerű az új kifejezéseket egy óra múlva átismételni. A következő ismétlést egy nap múlva, majd egy hét múlva tedd meg! A legtöbb embernek legalább hatszor látnia/hallania kell az új szót, mire emlékszik rá.

### 3. Gyakori anyagok – Önellenőrző kérdések, feladatok

**3.1.** A kén, a vas és az oxigén közül melyik elemre igaz az alábbi állítás? a) szürke fém, levegőn nedvesség hatására rozsdásodik; b) az égést táplálja, közönséges körülmények között gáz; c) sárga, szilárd anyag

**3.2.** Melyik sav vizes oldata a sósav? a)  $\text{HNO}_3$ ; b)  $\text{HCl}$ ; c)  $\text{H}_2\text{SO}_4$

**3.3.** Melyik a kakukktójás? Miért? a) fluor; b) bróm; c) halit; d) jód; e) klór

**3.4.** Melyik anyag gáz halmazállapotú szobahőmérsékleten és normál légköri nyomáson? a) kén-hidrogén; b) grafit; c) víz

**3.5.** Mi az ammónia összegképlete? a)  $\text{N}_2$ ; b)  $\text{NH}_3$ ; c)  $\text{HNO}_3$

**3.6.** Melyik a kakukktójás? Miért? a) kalcium-oxid; b) kálium-klorid; c) kén-hidrogén; d) szén-dioxid; e) metán; f) víz; g) hidrogén-klorid

**3.7.** Melyik ionvegyület a mészkő legfontosabb alkotója? a)  $\text{MgCO}_3$ ; b)  $\text{CaSO}_4$ ; c)  $\text{CaCO}_3$

**3.8.** Mi a kalcium-oxid köznap elnevezése? a) kalcit; b) keserűsó; c) szalmiák; d) égetett mész; e) oltott mész

**3.9.** Milyen vegyület keletkezik mészsoltáskor? Hőváltozás szempontjából ez milyen kémiai reakció?

**3.10.** Jellegzetes fizikai tulajdonsága alapján melyik a kakukktójás? Miért? a) szén-dioxid; b) nitrogén; c) oxigén; d) vízgőz; e) ammónia

**3.11.** Melyik gyakori sav köznap elnevezése a választóvíz? a) kénsav; b) sósav; c) salétromsav

**3.12.** Jellegzetes fizikai tulajdonsága alapján melyik a kakukktójás? Miért? a) szén-dioxid; b) nitrogéngáz; c) klórgáz; d) oxigéngáz; e) neon

**3.13.** Melyik vegyület köznap elnevezése a chilei salétrom? a)  $\text{NaNO}_3$ ; b)  $\text{KNO}_3$ ; c)  $\text{NaCl}$ ; d)  $\text{HNO}_3$ ; e)  $\text{NaF}$

**3.14.** A felsoroltak közül melyik anyagok oldódnak jól vízben? a) nitrogén; b) ammónia; c) szén-diszulfid; d) kálsalétrom; e) nátrium-foszfát

**3.15.** A felsoroltak közül melyik anyagok oldódnak rosszul vízben? a) foszforsav; b)

alumínium-oxid; c) magnézium-karbonát; d) kálium-karbonát; e) szén-dioxid

**3.16.** A felsoroltak közül melyik anyagok mérgező tulajdonságúak? a) klór; b) nitrogén; c) szén-dioxid; d) dihidrogén-oxid; e) fenol; f) oxigén; g) szén-diszulfid; h) nátrium-klorid

**3.17.** A felsoroltak közül válaszd ki a hidrogénvegyületeket! a) ózon; b) ammónia; c) víz; d) halit; e) metán

**3.18.** Melyik a kakukktójás? Miért? a) nátrium-hidroxid; b) kálium-karbonát; c) szén-diszulfid; d) nátrium-karbonát; e) foszforsav; f) nátrium-foszfát; g) kálsalétrom; h) ammónia

**3.19.** Melyik a kakukktójás? Miért? a) foszforsav; b) sósav; c) szénsav; d) hangyasav; e) salétromsav

**3.20.** Melyik a kakukktójás? Miért? a) palmitinsav; b) olajsav; c) szénsav; d) ecetsav; e) hangyasav

**3.21.** Melyik a kakukktójás? Miért? a) kalkantit; b) aragonit; c) gipsz

**3.22.** Válogasd külön a kénvegyületeket a nitrogénvegyületektől! anhidrit, salétrom, gipsz, pirit, ammónia, szalmiákszesz, dihidrogén-szulfid, választóvíz

**3.23.** Melyik két sav elegye a királyvíz?

- a) salétromsav és kénsav
- b) sósav és ecetsav
- c) hangyasav és folyasav
- d) foszforsav és sósav
- e) salétromsav és sósav

**3.24.** Melyik vegyület vizes oldatának neve a folyasav?

**3.25.** Melyik szénvegyület mérgező? a) szénsav; b) szén-monoxid; c) szén-dioxid

**3.26.** Melyik a kakukktójás? Miért? a) etán; b) izobután; c) acetón; d) heptán; e) propán

**3.27.** Melyik a kakukktójás? Miért? a) etanol; b) glikol; c) metanol

**3.28.** Milyen oldószer szükséges a jódinktúra készítéséhez? a) víz; b) etil-alkohol; c) fenol; d) szén-tetraklorid; e) ammónia

**3.29.** A szerves vegyületek melyik csoportjába tartozik a teflon?

### 3. Gyakori anyagok – Önellenőrző kérdések, feladatok: megoldások

3.1. a) vas; b) oxigén; c) kén

3.2. b) HCl

3.3. c) halit; a halit halogénvegyület (NaCl), a többi elem

3.4. a) kén-hidrogén

3.5. b) NH<sub>3</sub>

3.6. e) metán; ez szerves vegyület, a többi szervesetlen

3.7. c) CaCO<sub>3</sub>

3.8. d) égetett mész

3.9. Kalcium-hidroxid, Ca(OH)<sub>2</sub>; hőfelszabadulással járó, azaz exoterm

3.10. e) ammónia; szúrós szagú, a többi szagtalan

3.11. c) salétromsav

3.12. c) klórgáz; sárgászöld színű, a többi színtelen

3.13. a) NaNO<sub>3</sub>

3.14. A felsoroltak közül melyik anyagok oldódnak jól vízben? b) ammónia; d) kálsalétrom; e) nátrium-foszfát

3.15. b) alumínium-oxid; c) magnézium-karbonát

3.16. a) klór; e) fenol; g) szén-diszulfid

3.17. b) ammónia; c) víz; e) metán

3.18. c) szén-diszulfid; vízben rosszul oldódik, a többi jól oldódik vízben

3.19. d) hangyasav; szerves sav, a többi szervesetlen sav

3.20. c) szénsav; szervesetlen sav, a többi szerves sav (karbonsav)

3.21. b) aragonit; vízmentes vegyület, a másik kettő kristályvizet tartalmaz

3.22. Kénvegyületek: anhidrit, gipsz, pirit, dihidrogén-szulfid; nitrogénvegyületek: salétrom, ammónia, szalmiákszesz, választóvíz

3.23. Melyik két sav elegye a királyvíz? e) salétromsav és sósav

3.24. hidrogén-fluorid (HF)

3.25. b) szén-monoxid

3.26. c) aceton; ez keton (oxigéntartalmú szénvegyület), a többi szénhidrogén

3.27. b) glikol; ez kétértékű alkohol, a többi egy funkciós csoportot tartalmaz

3.28. b) etil-alkohol

3.29. halogéntartalmú szénvegyület

#### Jó tudni!

##### Szerves savak a háztartásban

A háztartási ecet, az ételecet 5–20 térfogat%-os ecetsavoldat. Kiválóan használható saláták, savanyúságok és egyéb ételek ízesítésére.

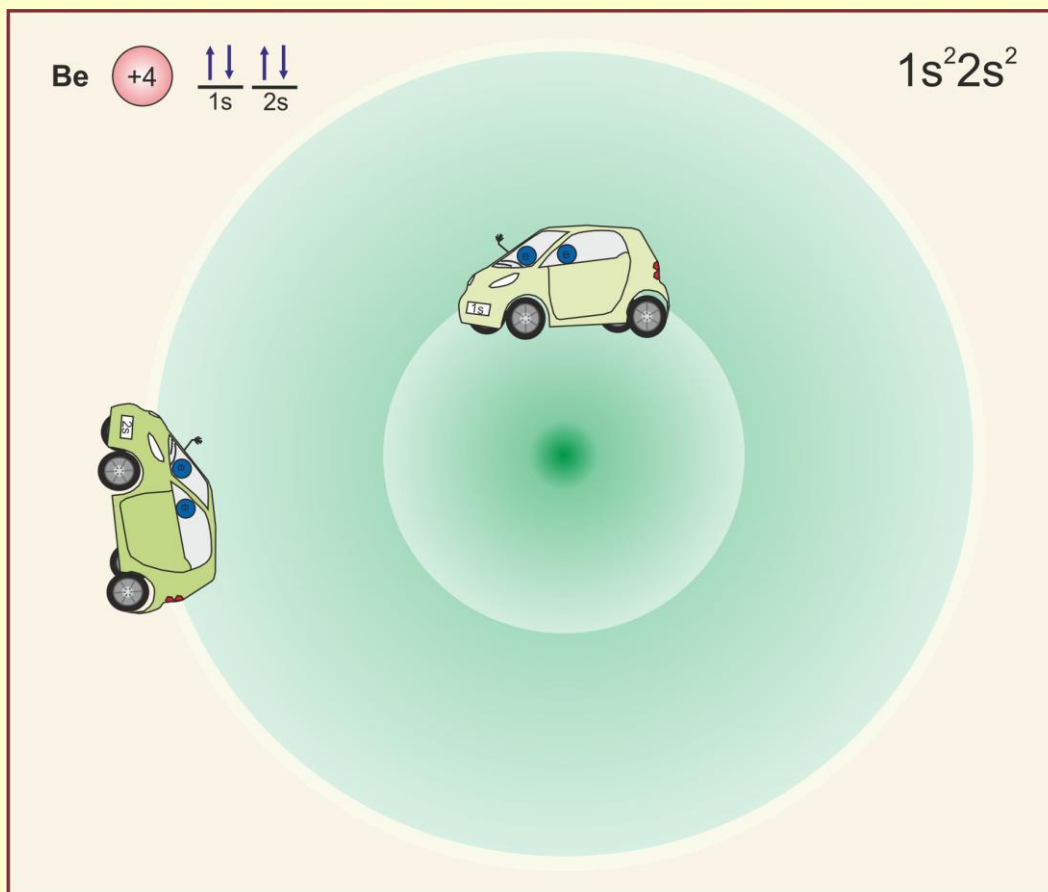
A *citromsav* szörpök, befőttek, savanyúságok ízesítésére használható, vízben jól oldódó, fehér, kristályos anyag. A citromsav oldata gyengén savas hatású, ezért a vízkő kéméletes eltávolítására szintén alkalmas (pl. vízforraló, kávéfőző tisztításakor). A citrom ~6–7 tömeg% citromsavat tartalmaz.

A *borkősav* (szőlősav) színtelen, kristályos, vízben jól oldódó anyag; enyhén savas kémhatású oldatát savanyúság-szabályozó adalékként szörpök, savanyúságok készítésénél használhatjuk fel.

A *szalicilsav* (fehér, kristályos, vízben jól oldódó anyag) gyógyszerek alapanyagán túl sokáig elterjedt befőzési tartósítószer volt, napjainkban azonban a nátrium-benzoát használata javasolt. Ez utóbbi vegyület a *benzoésav* (C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>COOH) Na-sója.

# 4.

## Az atomszerkezettől a periódusos rendszerig



### Témakörök

#### 4.1. Az elektronburok felépülése

- atommodellek, az atomok elektronszerkezete
- kvantummechanikai megközelítés: atompályák, kvantumszámok, héjak és alhéjak; alapfogalmak és alapvető szabályok
- az elektronkonfiguráció

#### 4.2. Az elemek periódusos rendszere

- a periódusos rendszer felépítése, elemcsoportok (főcsoportok, mellékcsoportok)
- tájékozódás a periódusos rendszerben

#### 4.3. Periodikusan változó tulajdonságok

- a tulajdonságok periodikus változása (atomtömeg, atom- és ionsugár, első ionizációs energia, elektronegativitás, elektronegativitás), a vegyérték

## **4. Az atomszerkezettől a periódusos rendszerig**

### **4.1. Az elektronburok felépülése**

### **4.2. Az elemek periódusos rendszere**

### **4.3. Periodikusan változó tulajdonságok**

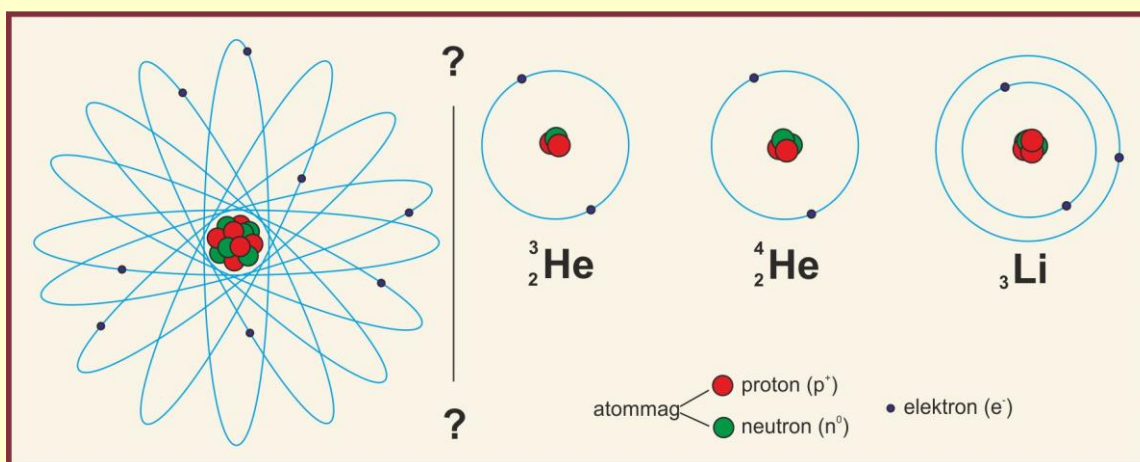


***Ha megtanulod ezt a fejezetet, képes leszel arra, hogy***

- kis rendszámú atomok elektronszerkezetét önállóan elmagyarázd;
- a rendszám ismeretében kis rendszámú elemek elektronkonfigurációját ábrázold;
- a megadott elektronkonfiguráció alapján elemezd a kérdéses elem kémiai jellegét (pl. inert, aktív) és helyét a periódusos rendszerben (pl. főcsoport száma, mellékcsoportok);
- bemutasd az elemek periódusos rendszerben elfoglalt helye és a kémiai jellege közötti kapcsolatot (pl. anionképző, kationképző, fém);
- hatékonyan használd a periódusos rendszert a földtudományi tanulmányaid során.

## 4.1. Az elektronburok felépülése

Az előző fejezetekben láthattuk, hogy az anyag fizikai és kémiai tulajdonságait alapvetően az határozza meg, hogy milyen atomokból épül fel, továbbá az alkotói milyen módon kapcsolódnak egymáshoz. Arról azonban eddig nem esett szó, hogy miért van ilyen fontos szerepe az egyedi atomoknak. Miért képeznek az atomok vegyületeket? A különböző elemek miért rendelkeznek eltérő tulajdonságokkal? Miért vannak fémek és nemfémek? Miért vannak hasonló tulajdonságú elemcsoportok (pl. nemesgázok, halogének)? Az atomok, illetve az elemek kémiai tulajdonságát uralkodóan az elektronok száma és atommag körüli elrendeződése, az **atomszerkezet** befolyásolja (Whitten et al., 2014). Nem lényegtelen tehát, hogy az atommag körül hogyan képzeljük el az „elektronfelhőt”. Minél nagyobb rendszámú elemet vizsgálunk, annál több negatív töltésű elektront kell elhelyeznünk az atommag vonzásterében úgy, hogy az azonos töltésű elektronok egymásra taszító hatást gyakorolnak. Van-e valamilyen szabályszerűség az elektronok elrendeződésében? Tetszőlegesen felrajzolhatjuk az elektront az atommag körüli pásztyákra vagy bonyolult matematikai törvényszerűséget követve tudjuk megadni az elektronok elhelyezkedését (34. ábra)? Az atomszerkezet leírására számos megközelítés született a tudományos múltban. Ahhoz, hogy megértsük a legfontosabb összefüggéseket, röviden néhány atomszerkezeti modellt is érdemes megismerni.



**34. ábra**

Az atomszerkezet szemléltetése két lehetséges modell segítségével: az atommag körül azonos sugarú pályákon keringenek (balra) vagy az atommaghoz közel koncentrikus pályákon helyezkednek el (jobbra) az elektronok?

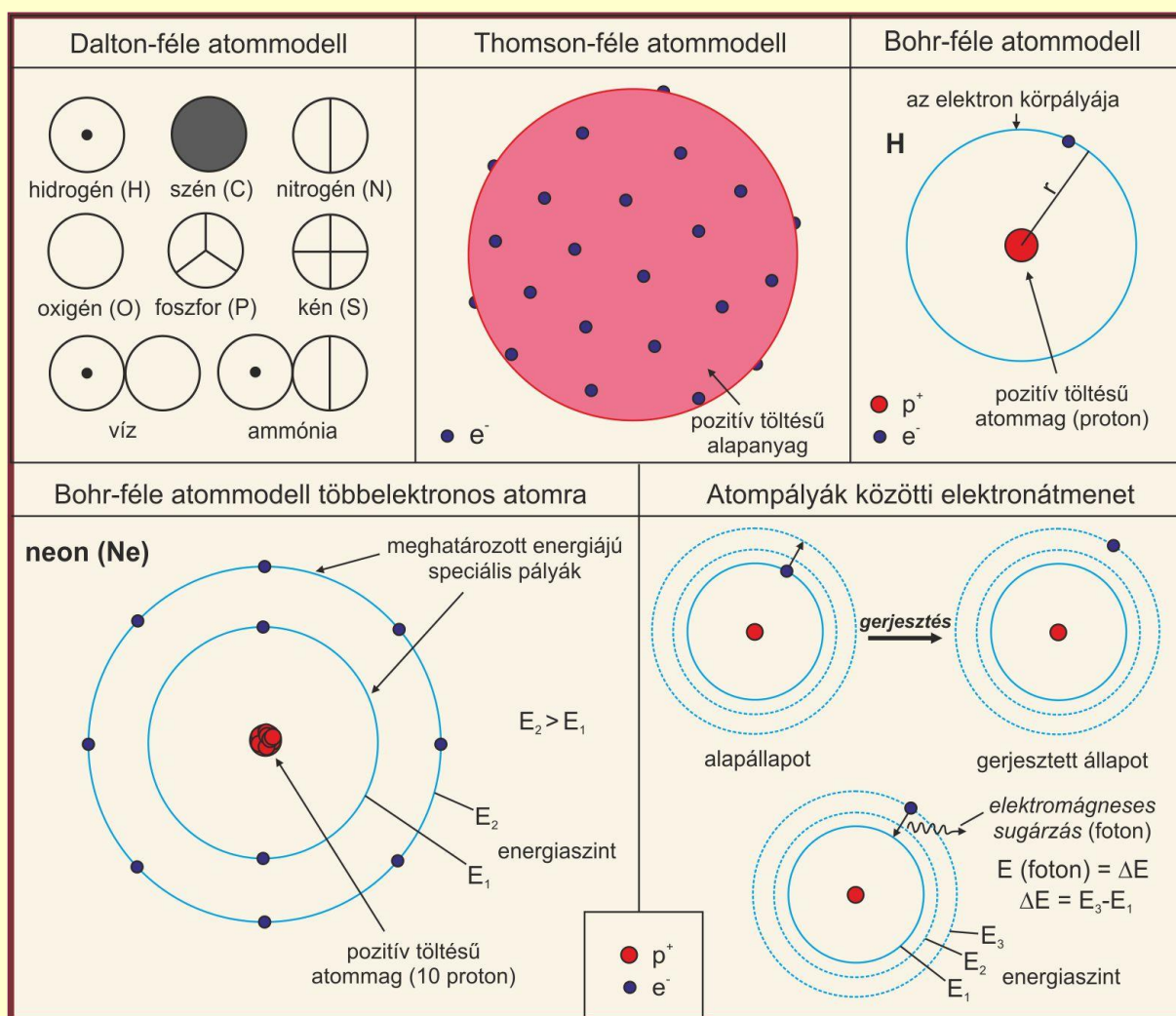
Már az ókori görög filozófusok is törekedtek arra, hogy az anyagok szerkezetét leírják. A Démokritosz-féle atomelmélethez hasonlóan, a XIX. század hajnalán John Dalton (1766–1844) az atomokat még apró, oszthatatlan részecskéknek, golyóknak képzelte el. A daltoni atomelmélet szerint az anyagokat felépítő atomoknak meghatározott kiterjedésük és állandó tömegük van, így ez a modell összhangban van a tömegmegmaradás törvényével. Dalton 36 elemet különböztetett meg, elmélete szerint minden elemnek jól definiálható atomfajta felel meg (35. ábra). A modell értelmében az egyszerű anyagokat azonos atomok, az összetett anyagokat, a vegyületeket különböző atomok alkotják (Cooper, 1994; Schiller, 2013; Whitten et al., 2014).

Az elektron felfedezése (1897, Joseph John Thomson) azonban mérföldkővé vált az atomszerkezet megértése szempontjából, hiszen az addig oszthatatlan atomot kísérletileg bizonyítottan kisebb egységekre sikerült bontani. Az új ismeret új elméleteket eredményezett: Thomson megalkotta a „mazsolás puding”-atommodellt (1904), amiben a negatív töltésű részecskék, az elektronok egy pozitív töltésű, kocsonyaszerű „masszában” helyezkednek el (35. ábra). Úgy gondolták, hogy az atom tömegének jelentős része ebben a tömör alapanyagban szétszórva, egyenletesen oszlik el (Cooper, 1994; Atkins, 1995; Whitten et al., 2014). A továbblépést természetesen a pozitív töltésű „massza” jobb megismerése hozta.

Kísérleti tapasztalatok alapján Ernest Rutherford (1871–1937) állapította meg, hogy a pozitív rész koncentrált, kis térfogatban összpontosul, ez a mag. Véleménye szerint az atommag pozitív töltésű részecskéket, protonokat (görög eredetű szó, jelentése: „első dolgok”) tartalmaz. Az elektronok az ellentétes töltésű részecskék közötti elektrosztatikus vonzás hatására a mag körül keringenek, attól viszonylag nagy távolságban (Cooper, 1994; Whitten et al., 2014). Ez a modell a Naprendszerhez hasonlítható: az atommagnak a Nap feleltethető meg, a Föld és a bolygók pedig a körülötte keringő „elektronok” (34. ábra, balra).

Ezt a „Naprendszer”-modellt Niels Bohr (1885–1962) pontosította. A Bohr-féle atommodell (1913) értelmében a hidrogénatom egy pozitív töltésű részecskéből (atommag) és egy elektrontól áll, az elektron  $r$  sugarú körpályán kering a mag körül energiavesztés nélkül. Bohr elméletében az elektronnak annál nagyobb az energiája, minél messzebb van az atommagtól. Többelektronos atomban az elektronok csak bizonyos megengedett sugarú és meghatározott energiájú pályákon keringhetnek az atommag körül (34. ábra, jobbra). Nagy hőmérséklet vagy ütközések

hatására az elektronok gerjesztődnek, energiafelvétellel magasabb energiaszintre ugorhatnak (35. ábra). Az atom gerjesztését követően lehetőség van a pályák közötti elektronátmenetre úgy, hogy miközben az elektron a nagyobb energiaszintű pályáról (**gerjesztett állapot**) az alacsonyabb energiaszintű pályára „ugrik”, a két állapot közötti energiakülönbség **elektromágneses sugárzás** formájában szabadul fel (Wilbraham et al., 2008; Whitten et al., 2014). Az elektromágneses sugárzás egyszerre hullám- és részecsketermészetű, részecskéi az úgynevezett fotonok (kvantumok vagy „sugárzáscsomagok”). Az elektromágneses hullám terjedéséhez nem szükséges közeg; vákuumban a sebessége azonos a fénysebességgel (Gelencsér et al., 2012; Whitten et al., 2014). Annak ellenére, hogy a Bohr-féle atommodellel csak az egy elektronnal rendelkező hidrogén szerkezete magyarázható jó eredménnyel, átláthatósága és egyszerűsége miatt napjainkban is használatos.



### 35. ábra

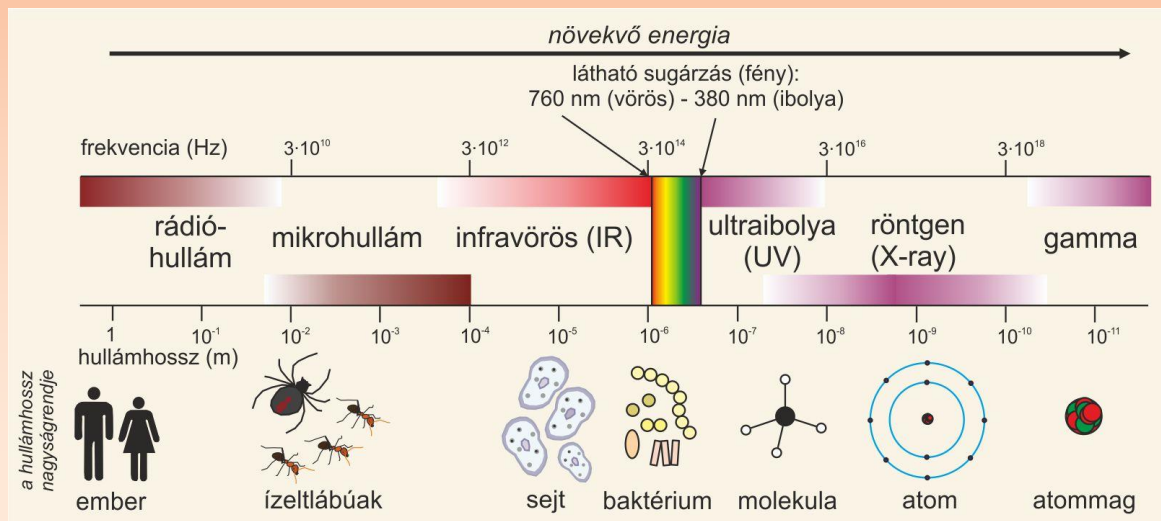
Az atomszerkezet szemléltetése a legismertebb atommodellek segítségével (Cooper, 1994; Atkins, 1995; Schiller, 2013; Whitten et al., 2014)

### Megjegyzés:

Az **elektromágneses sugárzás** hullámhossza (jele:  $\lambda$ , görög kis lambda) és a fotonok energiája (jele:  $E$ ) fordítottan arányosak egymással (Planck-törvény). Minél nagyobb a sugárzás hullámhossza, annál kisebb a fotonok energiája (Cooper, 1994; Gelencsér et al., 2012; Whitten et al., 2014).

A hagyományos elnevezéseket alkalmazva a hullámhossz csökkenésével és az energia növekedésével párhuzamosan megkülönböztetjük a rádió- és mikrohullámokat, az infravörös (*infrared*, IR), a látható és az ultraibolya (*ultraviolet*, UV) sugárzást, valamint a röntgen- és a gammasugárzást. Ezek a hullámok együttesen képezik az elektromágneses spektrumot, ennek vizsgálatával, kutatásával a spektroszkópia tudományága foglalkozik (Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

A 380 nm (ibolya) és 760 nm (vörös) közötti hullámhosszú elektromágneses sugárzás az emberi szem számára is érzékelhető, ezért ezt látható fénynek nevezzük, ebben az eltérő színű sugarak hullámhossza, illetve energiája különböző. A testünk által kisugárzott energiát (hőenergia), hasonlóan a Föld által kisugárzott energiához, szemünk nem érzékeli, hiszen az az infravörös (azaz a láthatónál kisebb energiájú és nagyobb hullámhosszú) tartományba esik.



**Az elektromágneses sugárzás hullámhossz szerinti felbontása**

A pozitív töltésű szubatomi részecske, a proton (1919, Ernest Rutherford) és az elektromosan semleges neutron (1932, James Chadwick) felfedezését követően nyilvánvalóvá vált, hogy az atomok tulajdonságainak megértéséhez, a belőlük képződő vegyületek jellemzéséhez és a kémiai reakciók értelmezéséhez az atomszerkezet mélyebb leírása szükséges. Kísérletek és elméletek sokasága vezetett el az atomszerkezet napjainkban használatos, kvantummechanikai leírásához. Ennek egyik alapja az a megállapítás volt, hogy a mikrovilág törvényszerűségeinek jellemzését, így az elektronok atommag körüli mozgását nem lehet a mozgásokra általánosan érvényes Newton-féle mechanikával leírni. Newton klasszikus fizikájában egy  $m$  tömegű testre ható  $F$  nagyságú erő következtében a

test állapotát a tér bármely pontjában és minden időpillanatra ( $t$ ) jellemezni tudjuk egy matematikai differenciálegyenlet segítségével, aminek a megoldása egy függvény. Ez azt jelenti, hogy a test helyét, helyzetét mindig pontosan meg tudjuk adni. Egy elektron pályáját azonban ebben az értelemben képtelenség megfigyelni (Schiller, 2013; Whitten et al., 2014). Ezt mondja ki a Heisenberg-féle határozatlansági összefüggés: a kvantummechanikában léteznek olyan fizikai mennyiségek, amelyeket egyszerre, nagy pontossággal nem lehet megmérni (ilyen például a hely és az impulzus, azaz a lendület, ami a tömeggel és a sebességgel arányos paraméter; Whitten et al., 2014).

Louis de Broglie (1892–1987) 1924-ben fogalmazta meg az elektron kettős természetét, azaz az elektron egyszerre részecske és hullám, így az elektron mozgását a hullámokra jellemző törvényszerűségek figyelembevételével jellemezhetjük (Whitten et al., 2014). Ez vezetett el a hullámfüggvény (jele:  $\psi$ , görög pszi) és az úgynevezett Schrödinger-egyenlet megalkotásához, illetve az **atompálya**, mint az elektron tartózkodási helyének átértelmezéséhez. A kvantummechanikai megközelítés meg sem próbálja egy konkrét elektron pontos helyét meghatározni, viszont megmondja, hogy az elektronok milyen valószínűséggel haladnak valamilyen pálya mentén (Atkins, 1992; Albarède, 2009; Schiller, 2013; Whitten et al., 2014).

Noha az atomszerkezet kvantummechanikai jellemzése meglehetősen bonyolult — ezért részletes ismertetése meghaladja e könyv kereteit —, megállapításai egyszerűek és könnyen alkalmazhatóak komoly matematikai levezetések és bizonyítások nélkül. A következőkben tekintsük át azokat a legfontosabb összefüggéseket, amiket a kvantummechanika eszköztára révén az atomszerkezet leírására használhatunk!

A kvantummechanikai jellemzés a matematikai valószínűségi számítás irányából közelíti meg az atomszerkezetet. Az atomon belül azt a térrészt, ahol az elektron nagy (90%-os vagy nagyobb) valószínűséggel megtalálható, atompályának nevezzük. Az atom — és így az atompálya — energiája kvantált, azaz csak meghatározott értékeket vehet fel, ami összhangban van a korábbi Bohr-féle atommodell egyik megállapításával (Atkins, 1992; Greenwood, Earnshaw, 2004). Egy adott atom energiaállapotához számokat rendelhetünk, az egyes elektronok energiaszintjét a **kvantumszámok** segítségével adhatjuk meg (Whitten et al., 2014). Az elektronok atomon belüli elrendeződését négy kvantumszámmal jellemezhetjük; ezek többek között az elektron térbeli eloszlását és energiáját határozzák meg.

A **főkvantumszám** (jele:  $n$ ; értéke:  $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, \dots$  pozitív egész számok; értékeinek betűjele rendre K, L, M, N, O, P, Q) megadja az elektron atommagtól való távolságát. Az atom mérete és ezzel párhuzamosan az elektron általános energiaszintje elsősorban a főkvantumszámtól függ. A kisebb főkvantumszámú pályák az atommaghoz közelebb helyezkednek el. A nagyobb főkvantumszám nagyobb méretű atompályát jelent (Rózsahegyi, 1993; Atkins, 1995; Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014). Az azonos főkvantumszámú atompályák **héjakat** (**elektronhéjakat**) alkotnak (36. ábra).

<div style="writing-mode: vertical-rl; transform: rotate(180deg);"> növekvő energiaszint </div>	n=1	$l=0$	$m=0$	s alhéj	K (elektron)héj	1s
	n=2	$l=0$	$m=0$	s alhéj	L (elektron)héj	2s
		$l=1$	$m=-1$ $m=0$ $m=+1$	p alhéj		2p
	n=3	$l=0$	$m=0$	s alhéj	M (elektron)héj	3s
		$l=1$	$m=-1$ $m=0$ $m=+1$	p alhéj		3p
		$l=2$	$m=-2$ $m=-1$ $m=0$ $m=+1$ $m=+2$	d alhéj		3d

**36. ábra**

A kvantumszámok lehetséges értékei

A kvantumszámok az elektron atomon belüli elhelyezkedését és energiáját jellemző paraméterek a kvantummechanikai leírásban.

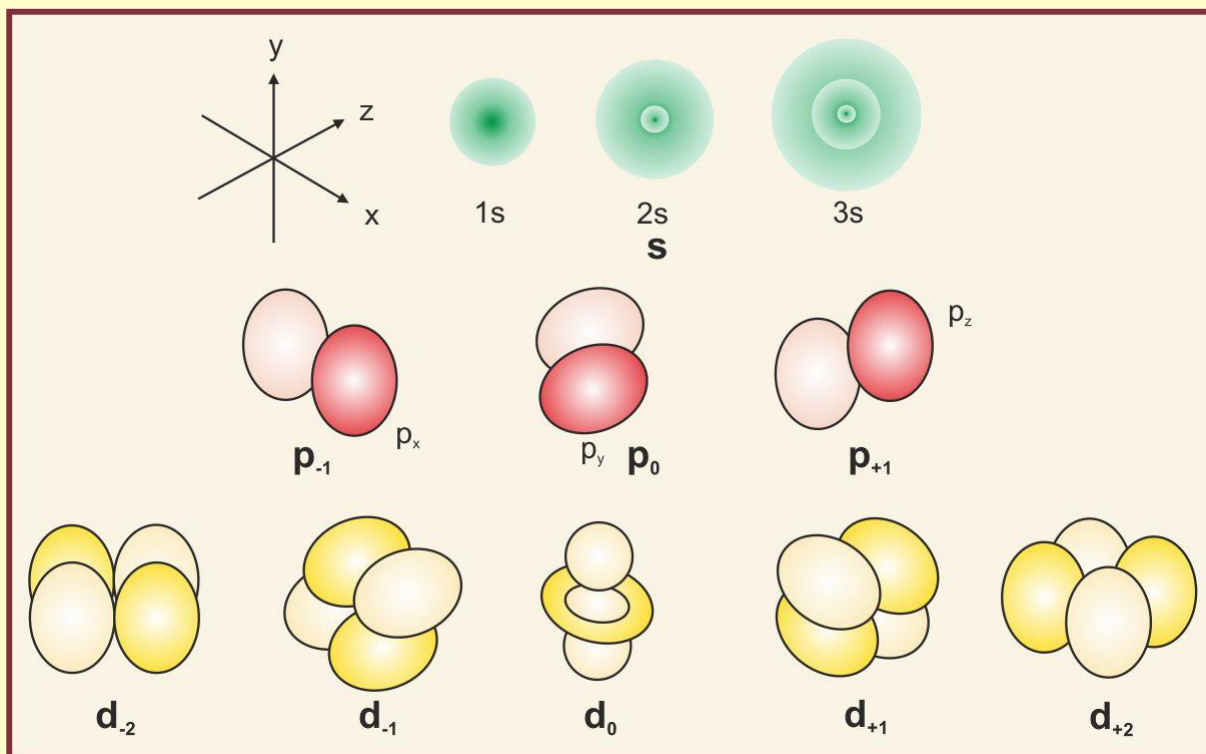
Egy héjon belül (amit a főkvantumszám értéke határoz meg) különböző energiájú alszintek vagy **alhéjak** lehetségesek, amelyek jellegzetes alakkal is rendelkeznek. Ezek megadására szolgál a **mellékkvantumszám**. A mellékkvantumszám (jele  $l$ ; értéke:  $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$ ; értékeinek betűjele rendre s, p, d, f) az atompálya „alakját”, azaz az elektron töltéssűrűség-eloszlásának alakját és a pálya perdületét, valamint részben az energiáját határozza meg. A

mellékkvantumszám értéke tehát nullától a főkvantumszámnál eggyel kisebb számig változhat. Az azonos mellékkvantumszámú atompályák alhéjakat alkotnak (Atkins, 1992; Rózsahegyi, 1993; Greenwood, Earnshaw, 2004; Albarède, 2009; Whitten et al., 2014). Ha  $n = 1$  (első héj vagy K héj), a mellékkvantumszám  $l = 1 - 1 = 0$ , azaz egy alhéj lehetséges, az úgynevezett s-alhéj. A második héjon ( $n = 2$ ; L héj) viszont már két, eltérő energiaszintű alhéj létezhet, egyik s-alhéj ( $l = 0$ ), a másik p-alhéj ( $l = 1$ ). A harmadik, M héjon az elektron három eltérő energiaszintet képviselő alhéjon (s-, p- és d-alhéj) helyezkedhet el (36. ábra).

A kvantummechanikai megközelítésben a mellékkvantumszám értéke az atompálya alakját is kijelöli. Ennek szemléltetéséhez azonban meg kell határozni az elektron valószínűség sűrűség-eloszlását („elektronfelhő”), amit a kvantummechanikai egyenletek megoldásával érhetünk el. Ha az atom minden pontjára meghatározzuk az elektron megtalálási valószínűségét, majd az eredményt grafikusán ábrázoljuk, megkapjuk az atompálya közelítő alakját. Azt a térrészt (síkot, gömbfelületet), ahol az atomon belül az elektron nem fordulhat elő (a megtalálási valószínűsége nulla) **csomósíknak** nevezzük. A levezetések szerint az s-pálya gömbszimmetrikus, az elektronok a mag helyén is előfordulhatnak, azaz az s-pályának nincs csomósíkja. A p-pályák elektroneeloszlása súlyzószerű, egy csomósíkjuk van: az elektron számára a mag helye tiltott (az elektron soha nem tartózkodhat abban a képzeletbeli síkban, ami a magon keresztül fektethető). A d- és f-pályák alakja bonyolult formákkal közelíthető (37. ábra). A d-pályák csomósíkjainak száma kettő, így a tiltás nagyobb mértékű, míg az f-pályák három csomósíkja miatt még nagyobb mértékű tiltás érvényesül (Atkins, 1995; Whitten et al., 2014).

Az azonos energiájú atompályák térbeli orientációját, azaz „irányát” a **mágneses kvantumszám** (jele:  $m$ ; értéke:  $m = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$ ) határozza meg (Atkins, 1992; Rózsahegyi, 1993; Greenwood, Earnshaw, 2004; Albarède, 2009; Whitten et al., 2014). Bevezetésének alapja, hogy külső mágneses térben az atomon belül definiálható egy olyan irány, amihez képest a pálya irányultsága megadható (x, y és z irányok a derékszögű koordináta-rendszer szerint). A mágneses kvantumszám  $2l+1$ , azaz a mellékkvantumszám kétszeresénél eggyel több értéket vehet fel. Ez azt jelenti, hogy a gömbszimmetrikus pályán mozgó s elektronoknak csak egy beállása lehet ( $l=0, m=1$ ), így bármely héj s-alhéját egy atompálya alkotja. Ettől eltérően a p-pályákat jelképező súlyzó a mágneses térben három különböző irányba fordulhat ( $l=1$ ), ezért a p-alhéjat három azonos energiaszintű, de eltérő orientációjú pálya ( $p_x$ ,

$p_y$  és  $p_z$ ) alkotja. A d-pályák esetén 5 (37. ábra), az f-pályák esetén 7 különböző lehetőség létezik, ezért bármely d-alhéjat 5 atompálya, f-alhéjat 7 atompálya épít fel (Atkins, 1992; Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014).



**37. ábra**

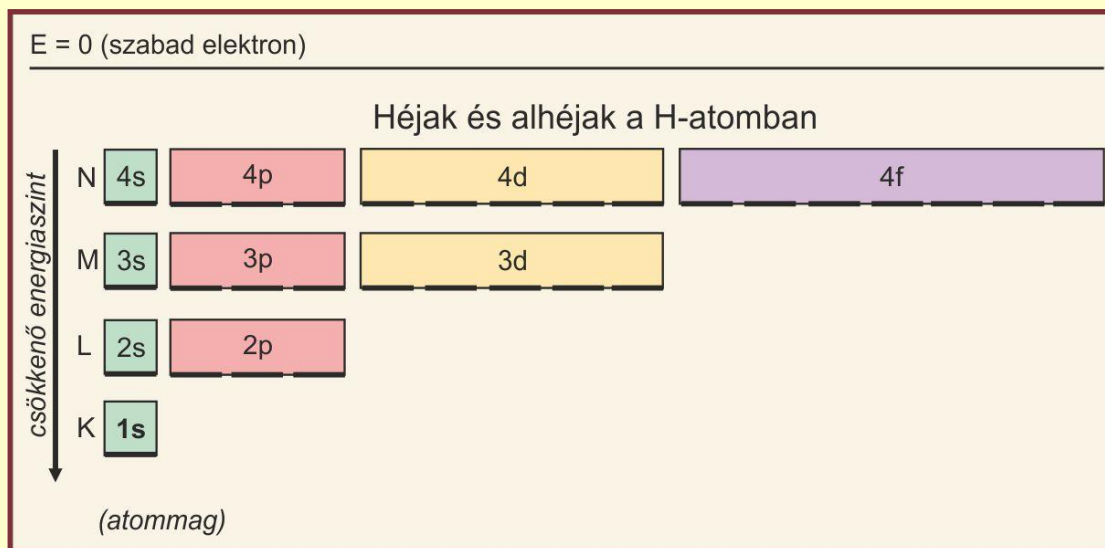
A különböző atompályák lehetséges alakja a burkolófelületek grafikus szemléltetésével (Atkins, 1992; Schiller, 2013; Whitten et al., 2014; Gill, 2015; módosítva)

Bármely atompálya a fő-, a mellék- és a mágneses kvantumszámmal egyértelműen megadható. Az atompályán elhelyezkedő elektron jellemzéséhez azonban egy további kvantumszám is szükséges, ez a spin vagy **spinkvantumszám**. Az elektron spinje mágneses jellemző, két lehetséges értéke van (jele  $s$  vagy  $m_s$ ; értéke:  $m_s = +\frac{1}{2}$  vagy  $-\frac{1}{2}$ ), ami a négydimenziós kvantummechanikában a hullámfüggvény szimmetriasajátságaival függ össze (Greenwood, Earnshaw, 2004; Albarède, 2009; Whitten et al., 2014).

A kvantummechanika értelmében az atomban található bármely elektron leírható a fenti négy kvantumszám segítségével úgy, hogy azok legalább egy kvantumszámukban (a spinben) különböznek. Ezt a törvényszerűséget először 1924-ben Pauli fogalmazta meg (**Pauli-elv** vagy Pauli-féle tilalmi elv), aki megállapította, hogy egy atomon belül nem lehet két olyan elektron, aminek minden kvantumszáma megegyezik (Atkins, 1992; Rózsahegyi, 1993; Greenwood, Earnshaw, 2004;

Albarède, 2009; Whitten et al., 2014). Köznapi értelemben ez azt jelenti, hogy egy atompálya olyan, mint egy kétszemélyes „smart-autó”. A két autóülés — vezető oldali és „anyósülés” — felel meg az atompályán a két ellentétes spinű elektronállapotnak. Tudjuk tehát, hogy az elektronok a kvantumszámok által meghatározott, szigorú, szabályos rendben sorakoznak az atomban. Nézzük meg, hogy mit jelent ez az energiaszint szempontjából!

Megállapodás szerint a szabad elektron energiaszintje felel meg a nulla-szintnek, ebben az állapotban az elektronra nem hat az atommag vonzása. Az atomhoz tartozó, kötött elektron energiája (**pályaeenergia**) ennek megfelelően negatív érték úgy, hogy annál kisebb az elektron energiaszintje, minél közelebbi atompályán helyezkedik el a maghoz. Az elektron maghoz való kötődése a K héjon a legnagyobb, azaz itt helyezkedik el a legmélyebb helyzetű atompályán (**38. ábra**). A növekvő főkvantumszámmal az atommagtól egyre távolabb kerülnek az elektronok, energiaszintjük egyre magasabb lesz, ezzel párhuzamosan egyre kevésbé kötődnek az atommaghoz. Az egyes elektronok relatív energiaszintje anyagi minőségtől függő paraméter, ezért a különböző elemek relatív elektron energiái is különböznek (Varsányi, 2009; Whitten et al., 2014).



**38. ábra**

A hidrogénatom lehetséges pályái az energiaszintek jelölésével (Gill, 2015; módosítva)

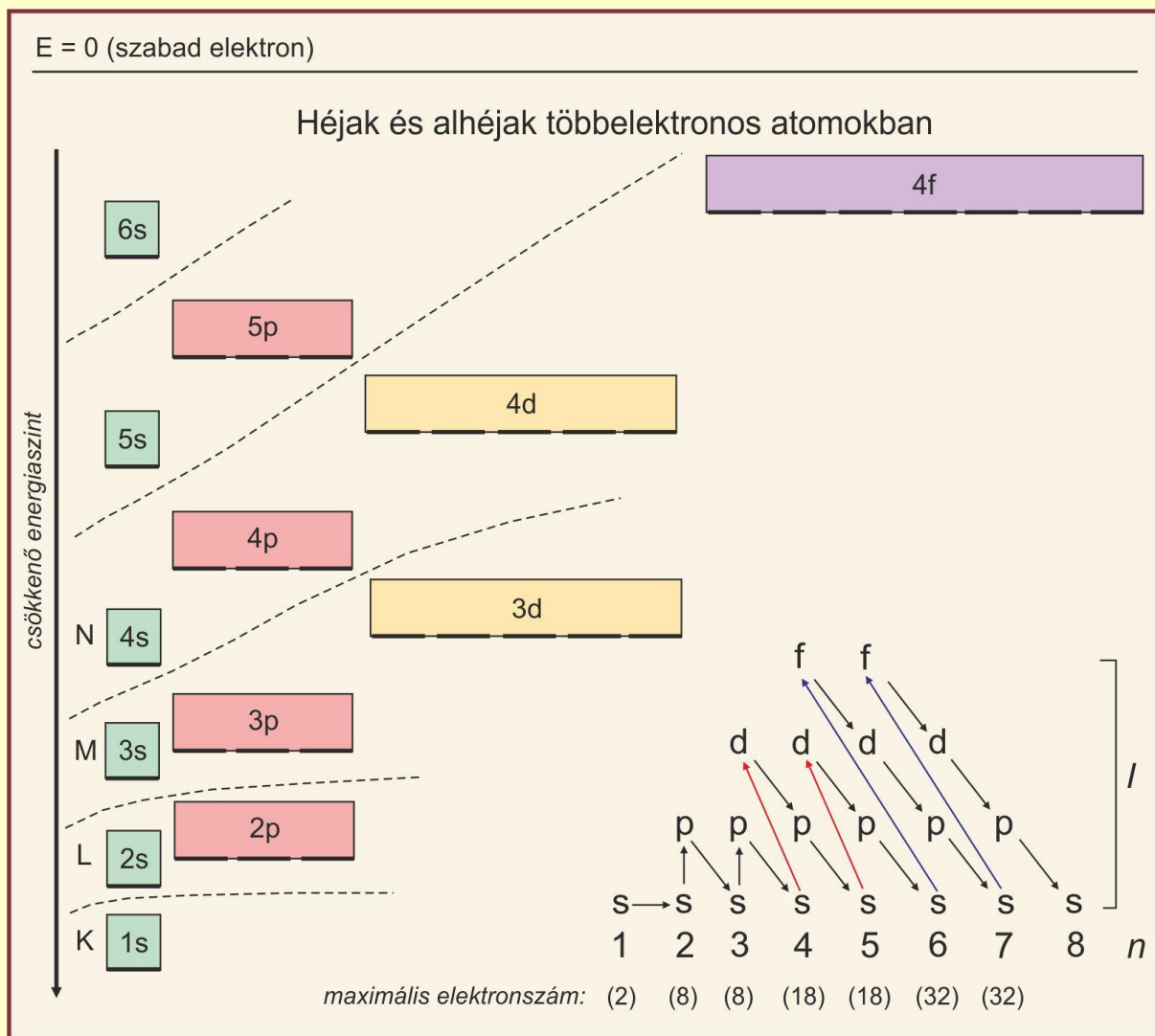
Az elektronburok felépülése során az elektronok a magtól bármilyen távolságra előfordulhatnak, de a legnagyobb valószínűséggel a lehető legalacsonyabb energiaszintű, legerősebb vonzást biztosító pályán tartózkodnak („Aufbau” elv, **felépülési elv** vagy az **energiaminimumra törekvés elve**). Bármely

atom esetén a legalacsonyabb energiaállapotot képviselő elektronszerkezetet tekintjük **alapállapot**nak. Az alapállapotú atomban az elektronok kvantumszámokkal megadható sorrendje az **elektronkonfiguráció** (Atkins, 1992; Whitten et al., 2014). Az egy elektronnal rendelkező hidrogénatomban ez a K héj s-alhéját jelenti (38. ábra). Ha több energia áll rendelkezésre, azaz gerjesztjük az atomot (**gerjesztett állapot**), az elektron magasabb energiaállapotú pályára kerülhet. Elegendő energia hatására akár a 3s-pályán, vagy a három 3p-pálya, illetve az öt 3d-pálya egyikén helyezkedhet el (és így tovább). Az egy elektronnal rendelkező hidrogénatomban az azonos héjhoz tartozó alhéjak energiaszintje nem tér el egymástól (Atkins, 1992; Varsányi, 2009; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

Többelelektronos atomoknál, azaz a hidrogénnél nagyobb rendszámú elemeknél az elektronok között fellépő taszítással, továbbá a növekvő magtöltéssel is számolni kell, ami az alhéjak energiaszintjének eltolódását eredményezi (39. ábra). Alapállapotban az elektronok fokozatos feltöltődése egyrészt az energiaminimumra törekvés elvét, másrészt a Pauli-elvet követi. Az elektronkonfiguráció szimbolikus leírása nem is jelent problémát az ötödik elemig: a hidrogén elektronszerkezete  $1s^1$  (azaz az  $n=1$  főkvantumszámú és  $l=0$  mellékkvantumszámú pályán egy, párosítatlan elektron van; az elektronok számát felső indexben adjuk meg), a héliumé  $1s^2$  (párosított elektronok), a lítiumé  $1s^2 2s^1$ , a berilliumé  $1s^2 2s^2$ , a bóré  $1s^2 2s^2 2p^1$  (40. ábra). Hogyan írhatjuk viszont le a hat elektronnal rendelkező szén vagy a hét elektront tartalmazó nitrogén elektronszerkezetét? Hogyan helyezkednek el az elektronok az azonos energiájú, de eltérő mágneses orientációjú p-pályákon? A választ az elektronburok felépülésének harmadik fő szabálya adja meg: azonos energiájú szintek közül a különböző mágneses kvantumszámúak („térbelileg különbözőek”) töltődnek be először, azonos spinnel (így vannak az elektronok a legmesszebb egymástól). Ezt az összefüggést **Hund-szabálynak** vagy a *maximális multiplicitás elvének* nevezzük (Whitten et al., 2014). A korábbi köznapi hasonlattal élve: ha az atompályákat smart-autóknak tekintjük, azokba először a vezetők ülnek, utasok csak akkor foglalnak helyet, ha valamennyi sofőr már indulásra kész.

A kvantumszámok segítségével tehát bármely elem elektronszerkezetét egyszerűen meg tudjuk adni. Ennek értelmében az 1s-pálya önmagában alkotja az atom első héját (K), a második héjat (L) a 2s- és a 2p-pályák, a harmadikat (M) a 3s-, 3p- és 3d-pályák képezik. Ezeket a héjakat legegyszerűbben úgy képzelhetjük el, mint a hagyma rétegeit. Ha egy alhéj a rajta elférő összes elektront tartalmazza (az

s-alhéjak kettőt, a p-alhéjak hatot, a d-alhéjak tizet, az f-alhéjak tizennégyet), az alhéj telített vagy zárt (**40. ábra**). Ha egy héj s- és p-alhéja egyaránt lezárt, maga a héj is lezárt (amennyiben vannak, a d- és f-alhéjaknak nem kell lezártnak lenniük).



**39. ábra**

A többelektronos atomok lehetséges atompályái az energiaszinttől függő kiépülési sorrend megadásával (Whitten et al., 2014; Gill, 2015; módosítva)

Az elektronburok felépülése során az atom legkülső héját, amelyben az atomot felépítő legutolsó elektronokat befogadó pályák vannak, **vegyértékhéj**nek nevezzük. A belső héjak az **atomtörzs** részét képezik. A lezárt, **telített alhéj** stabil elektronszerkezetnek felel meg, az ilyen atomok (pl. a hélium vagy a neon) nem reakcióképesek, idegen szóval inerte. A telítetlen, nem lezárt alhéj azonban aktív, nagy reakcióhajlamú elemet eredményezhet, hiszen a kémiai kötések kialakításában döntően a vegyértékelektronok vesznek részt. Ezek száma szoros összefüggésbe

hozható a reakciókészséggel, illetve szerkezetükben periodicitás figyelhető meg (pl. a lítium és a nátrium vegyértékhéján egyetlen külső elektron található). Az analóg elektronszerkezet az atomok tulajdonságainak periodikus ismétlődését eredményezi, ami a periódusos rendszer alapja (Nyilasi, 1975; Atkins, 1995; Whitten et al., 2014).

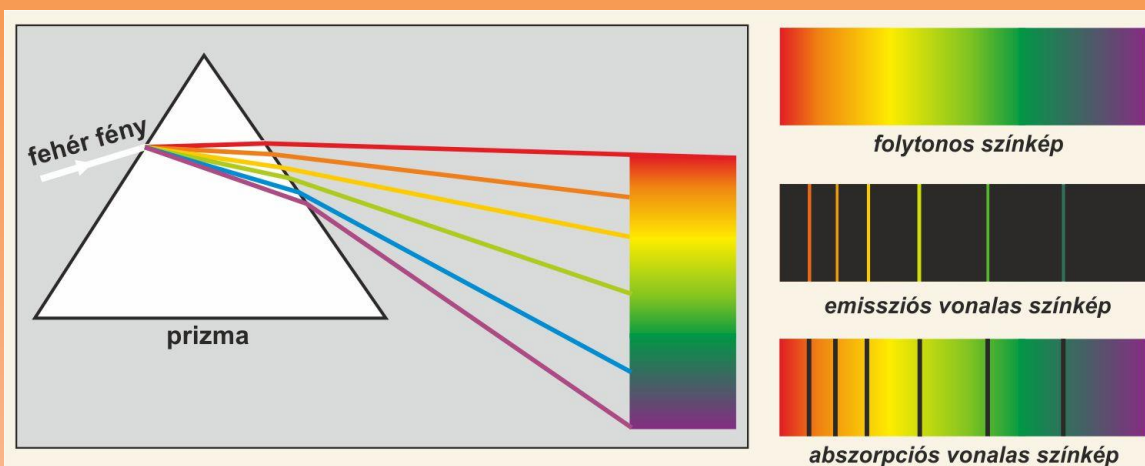
		K	L	M	
<div>H</div>	+1	<div><div>↑</div><div>1s</div></div>	Aktív!	$1s^1$	
<div>He</div>	+2	<div><div>↑↓</div><div>1s</div></div>	telített alhéj, inert	$1s^2 = [\text{He}]$	
<div>Li</div>	+3	<div><div>↑↓</div><div>1s</div></div>	<div><div>↑</div><div>2s</div></div> Aktív!	$[\text{He}]2s^1$	
<div>Be</div>	+4	<div><div>↑↓</div><div>1s</div></div>	<div><div>↑↓</div><div>2s</div></div>	$[\text{He}]2s^2$	
<div>B</div>	+5	<div><div>↑↓</div><div>1s</div></div>	<div><div>↑↓</div><div>2s</div></div>	<div><div>↑</div><div>2p</div></div>	$[\text{He}]2s^2 2p^1$
<div>C</div>	+6	<div><div>↑↓</div><div>1s</div></div>	<div><div>↑↓</div><div>2s</div></div>	<div><div>↑</div><div>2p</div></div>	$[\text{He}]2s^2 2p^2$
<div>N</div>	+7	<div><div>↑↓</div><div>1s</div></div>	<div><div>↑↓</div><div>2s</div></div>	<div><div>↑</div><div>2p</div></div>	$[\text{He}]2s^2 2p^3$
<div>O</div>	+8	<div><div>↑↓</div><div>1s</div></div>	<div><div>↑↓</div><div>2s</div></div>	<div><div>↑↓</div><div>2p</div></div>	$[\text{He}]2s^2 2p^4$
<div>F</div>	+9	<div><div>↑↓</div><div>1s</div></div>	<div><div>↑↓</div><div>2s</div></div>	<div><div>↑↓</div><div>2p</div></div>	Aktív! $[\text{He}]2s^2 2p^5$
<div>Ne</div>	+10	<div><div>↑↓</div><div>1s</div></div>	<div><div>↑↓</div><div>2s</div></div>	<div><div>↑↓</div><div>2p</div></div>	telített alhéj, inert $[\text{He}]2s^2 2p^6 = [\text{Ne}]$
<div>Na</div>	+11	<div><div>↑↓</div><div>1s</div></div>	<div><div>↑↓</div><div>2s</div></div>	<div><div>↑↓</div><div>2p</div></div>	<div><div>↑</div><div>3s</div></div> Aktív! $[\text{Ne}]3s^1$
<div>Mg</div>	+12	<div><div>↑↓</div><div>1s</div></div>	<div><div>↑↓</div><div>2s</div></div>	<div><div>↑↓</div><div>2p</div></div>	<div><div>↑↓</div><div>3s</div></div> $[\text{Ne}]3s^2$

**40. ábra**

Az elektronburok felépülése és az elektronkonfiguráció szimbolikus jelölése a hidrogéntől a magnéziumig (az ellentétes spinű elektronokat az eltérő irányú kék nyilak jelzik)

**Jó tudni!**

**Mi és mire jó a spektroszkópia?**



***A fehér fény felbontható eltérő színű komponenseire, ez a spektrum vagy színekép***

A *spectrum* kifejezést először Newton használta arra a fényjelenségre, amikor a Napból érkező fehér fény egy prizmán (a prizma környezetétől eltérő optikai sűrűségű, átlátszó anyagból készült test) áthaladva eltérő színű komponensekre bomlik. A spektroszkópia a spektrumok készítésére, vizsgálatára és értelmezésére irányuló módszerek és tudományágak összefoglaló megnevezése. A spektroszkópia történetének kezdeti szakaszában a módszerek a fény látható tartományára korlátozódtak, később azonban ezeket kiterjesztették a teljes elektromágneses spektrumra. A műszeres analitikában az anyag és az elektromágneses sugárzás közötti kölcsönhatást használják fel az atomok, molekulák felépítése és színekük közötti összefüggések vizsgálatára, ami az anyagok minőségi és mennyiségi összetételének meghatározását teszi lehetővé (Burger, 1992; Schiller, 2013; Whitten et al., 2014).

Napjainkban a spektroszkópia többféle csoportosítása lehetséges, attól függően, hogy milyen hullám (pl. elektromágneses sugárzás, elektronsugárzás, nyomáshullám) vagy kölcsönhatás vizsgálata a cél (pl. elnyelés, kibocsátás). A különböző anyagok által elnyelt (abszorpciós) vagy kibocsátott (emissziós) fény színfelbontása adja a színeképet, ami az elnyelt vagy kibocsátott sugárzás intenzitáseloszlása a hullámhossz függvényében (Nagy, 1992; Schiller, 2013). A Nap fehér fényének felbontásában a látható spektrum valamennyi színe megjelenik, egymást folytonosan követve, ez folytonos színekép (ilyen természeti jelenség a szivárvány). A folytonos színeképet adó sugárzás hullámhossza egy bizonyos színeképtartományban folyamatosan változik, és a legnagyobb felbontóképességű műszerekben sem tudjuk különböző hullámhosszú komponensekre bontani. Izzó szilárd vagy folyékony anyagok bocsátanak ki folytonos sugárzást. A színekép vonalas, ha abban csak nagyon szűk frekvenciatartományba eső színeképvonalak jelennek meg (pl. atomos vagy egyszerű molekulákból álló gázok gerjesztésekor jöhet létre). Ha az egymás melletti vonalak különálló csoportokba rendeződnek, a színekép sávos (pl. összetett molekulákból álló anyagok színeképe; Nagy, 1992).

### **Jó tudni!**

Annak ellenére, hogy a színeképek elemzése már a XIX. században ismert módszer volt, a hidrogén színeképének értelmezése a Bohr-féle atommodellhez kötődik. Mivel az atomban az elektronok csak meghatározott energiájú pályákon helyezkedhetnek el, a vonalas színeképek a fényt kibocsátó anyagra jellemző szerkezetűek, ezért az egyes atomok azonosítására alkalmasak (Burger, 1992; Nagy, 1992). Magyarországon a geológiai céllal készült elemzések jelentős része a XX. század végéig klasszikus analitikai módszerekkel, lángfotometriával és színeképelemzéssel készült, részben földtani térképezési feladatokhoz, részben nyersanyagkutatáshoz kapcsolódóan (Harangi et al., 2003).

A kvantummechanikában a hidrogén elektronszerkezetének leírásakor a gömbszerű atompályát s-pályának nevezik. A jelölés eredete szintén az anyag szerkezetét kutató spektroszkópia eredményeire vezethető vissza, ahol az „s” bizonyos, ehhez a pályához rendelhető spektrumvonalak éles, határozott („*sharp*”) jellegére utalt. A p, d és f jelölések szintén spektroszkópiai eredetűek, és rendre a „principális (*principal*)”, a „diffúz (*diffuse*)” és a „finom (*fine*)” megjelölésre utalnak (Atkins, 1995; Whitten et al., 2014).

### **Megjegyzés:**

Ahhoz, hogy a periódusos rendszerben könnyen el tudj igazodni, néhány egyszerű számot már most meg kell tanulnod! Az elektronkonfiguráció szempontjából kiemelt szerepe van az egyes alhéjakat alkotó atompályák, illetve az azokon maximálisan elhelyezhető elektronok számának. Az s-alhéjat egy, a p-alhéjat három, a d-alhéjat öt, az f-alhéjat 7 atompálya épít fel (Atkins, 1992; Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014). A megjegyzendő számsor tehát (s-, p-, d-, f-atompályák száma): 1, 3, 5, 7. A Pauli-elv értelmében minden atompályán két elektron tartózkodhat, tehát az elektronok maximális száma (a telített s-, p-, d-, f-alhéj elektronkapacitása) rendre a következő: 2, 6, 10, 14. Ez utóbbi számsor (s: 2; p: 6; d: 10; f: 14 elektron) fontos szerepet kap a periódusos rendszer értelmezésekor.

Az elektronkonfiguráció bemutatásakor nem esett szó a nagyobb rendszámú elemek elektronszerkezetéről (d- és f-alhéjak kiépülése), illetve az energiaszintek speciális változásairól, az általános szabály alóli kivételekről. Ezek tárgyalása meghaladja e könyv kereteit, azonban a részletes kémia tankönyvekben (pl. Atkins, 1992; Whitten et al., 2014) ezekről is olvashatsz.

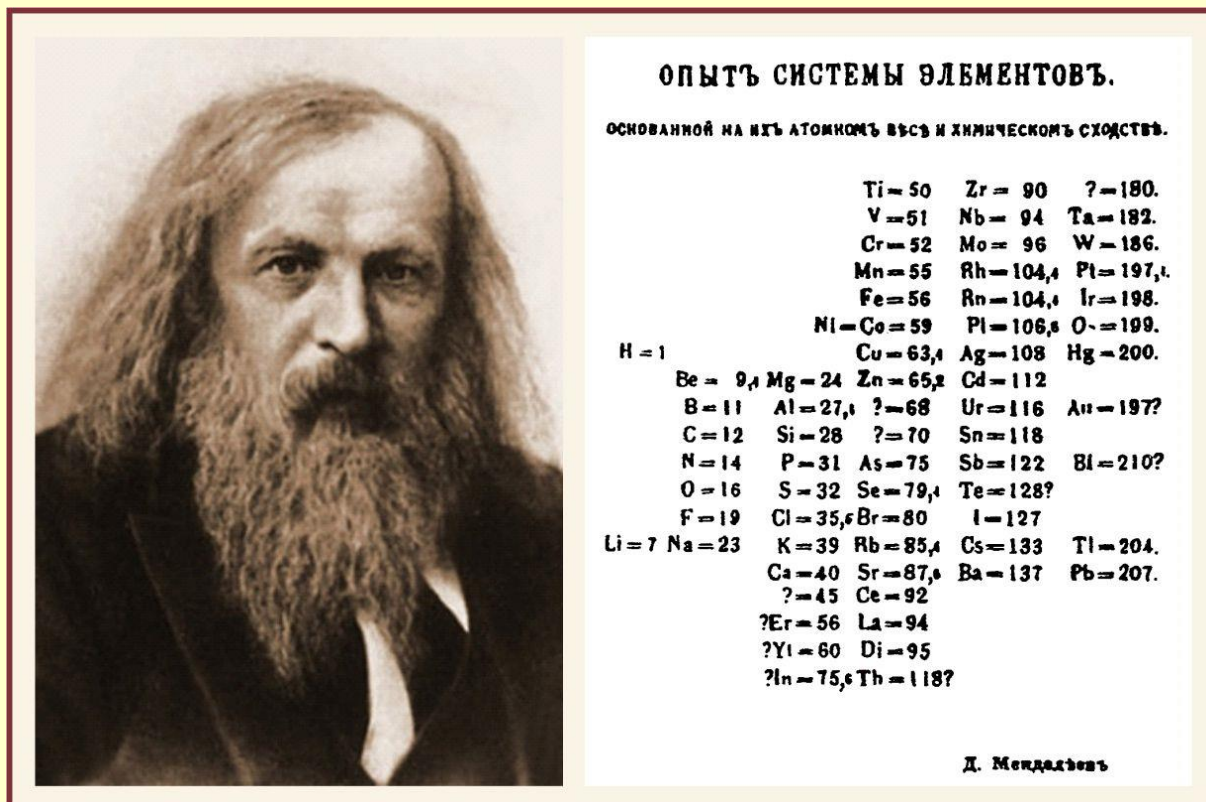
Az elektron energiáját gyakran nem az energia SI mértékegységében adják meg, hanem úgynevezett „elektronvolt”-ban (eV). Egy elektronvolt az az energia, amelyet egy elektron 1 V elektromos feszültségkülönbség hatására nyer ( $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ ).

## 4.2. Az elemek periódusos rendszere

A periódusos rendszer — mind elméleti, mind gyakorlati szempontból — a kémia egyik legfontosabb fogalma; sem a szervetlen kémia, sem a geológia (és a geokémia) kémiai alapjait nem érthetjük meg előzetes tárgyalása nélkül (Atkins, 1995; Greenwood, Earnshaw, 2004; White, 2013). A természetben előforduló és a mesterségesen előállított elemek az atommag növekvő protonszáma, a rendszám szerint hosszú sorozatba rendezhetők, de ez a lánc csak részben tükrözi az elemek és a belőlük felépülő anyagok tulajdonságait (pl. fokozatosan növekvő atomtömeg). Az analóg elektronszerkezetű kémiai elemek hasonló tulajdonságú csoportokat, sorozatokat jelölnek ki az elemek birodalmában, melyhez a szabatos rendszerezési keretet a periódusos rendszer biztosítja (Atkins, 1995; Whitten et al., 2014).

A periodicitás jelenségének központi szerepe miatt napjainkig számos (kb. 700) különböző periódusos táblázatot javasoltak, ezek közel 150-féle típusba vagy altípusba sorolhatók (Greenwood, Earnshaw, 2004). Valamennyi közül a legkiemelkedőbb az 1869-es Mengyelejev-féle periódusos rendszer (**41. ábra**). Dimitrij Ivanovics Mengyelejev (1834–1906), orosz kémikus az addig ismert 60 elemet atomtömeg alapján rendezte, továbbá megjósolta bizonyos elemek felfedezését (ezeknek üres mezőket hagyott ki, várható tömegüket előre megbecsülte). Munkássága során a periódusos táblázat több formáját publikálta (Atkins, 1995; Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014). Noha az elektron későbbi felfedezését, majd az elektronszerkezet összefüggéseinek feltárását követően az atomtömeg rendszerező szerepe háttérbe szorult, Mengyelejev meghatározó eredményének tiszteletére a 101-es rendszámú (Md, mendelévíum), mesterségesen előállított elemet róla nevezték el (White, 2013).

Az elektronszerkezet periodicitására épülő periódusos rendszert szintén többször módosították és bővítették, de a leggyakrabban használt forma, az úgynevezett „hosszú periódusos rendszer” még ma is hasonlít Mengyelejev eredeti ábrájára. Ebben több mint 110 elem található, amelyek négy nagyobb blokkot alkotnak, ezek a „mező”-k. Az elektronkonfiguráció szempontjából a periódusos rendszerben megkülönböztetünk továbbá függőleges oszlopokat, ezek a **csoportok**, valamint vízszintes sorokat, ezek a **periódusok** (**42. ábra**).



#### 41. ábra

Mengyelejev és az általa megalkotott, tömeg szerint rendezett periódusos rendszer  
([hu.wikipedia.org](http://hu.wikipedia.org); *közkinccs*)

A periódusos rendszer minden egyes oszlopában olyan elemeket találunk egymás alatt, amelyek azonos számú **vegyértékelektron**nal rendelkeznek, ezért hasonló tulajdonságúak. A sorok az elektronhéjak fokozatos feltöltődését mutatják balról jobbra a rendszám (és így az elektronszám) növekedésével, azaz az első sor (periódus) a benne elhelyezkedő két elemmel (hidrogén és hélium) a K héjnak felel meg. A második sor az L héj két alhéját tartalmazza, a zárt K héjat követően először az L héj s-alhéján helyezkedik el az első, majd a második elektron, majd a p-alhéj töltődik fel fokozatosan a maximális 6 elektronnal; ennek megfelelően ebben a periódusban 8 oszlop (csoport) különül el. Hasonlóan, a harmadik periódusban (M héj) szintén 8 elemnyi egység különíthető el. Látható, hogy közvetlen összefüggés van a periódusos táblázatban található egyes mezők (blokkok) és az abban található atomok elektronkonfigurációja között: az s-mező 2 elemnyi szélességű, a p-mező 6, a d-mező 10, és az f-mező 14 elem szélességű (Nyilasi, 1975; Greenwood, Earnshaw, 2004), azaz mindig annyi oszlop (csoport) található a táblázatban, ahány elektron maximálisan tartózkodhat az adott alhéjon (42. ábra).



**halogének** (pl. F, fluor; Cl, klór; Br, bróm; I, jód) és **nemesgázok** (pl. Ne, neon; Ar, argon). Figyeljük meg, hogy a nemesgázok elektronszerkezete telített, zárt (ezért tartozik ide a hélium is)! Ennek megfelelően kémiaiag inert elemeket alkotnak. A vegyértékhéjon a szomszédos nemesgáz szerkezetéhez (ún. oktett:  $ns^2np^6$ ) képest több (pl. alkálifémek, alkáliföldfémek) vagy kevesebb (pl. halogének) elektront tartalmazó atomok igen reakcióképesek (**40. ábra**); elektron(ok) leadásával vagy elektron(ok) felvételével a stabil oktett-szerkezet elérésére törekednek (**oktett-szabály**), azaz kémiai kötést hoznak létre egy vagy több másik atommal.

Az s- és a p-mező 8 oszlopát szokás főcsoportoknak (A csoport) nevezni, mert ezeknél a vegyértékhéjon az s- és a p-alhéj töltődik fel fokozatosan elektronokkal (Whitten et al., 2014). Az első (Ia vagy IA) és a második (IIa vagy IIA) főcsoport alkotja az s-mezőt, a harmadik–nyolcadik főcsoport (IIIa–VIIIa) a p-mezőt (**42. ábra**). E kettő közötti helyzetben, mintegy összekötő hídként találjuk a d-mezőt (B csoport), benne 10 rövidebb oszloppal (ún. mellékcsoportok, Ib–VIIIb vagy IB–VIIIB). Az itt található elemeket összefoglalóan átmeneti elemeknek vagy **átmenetifémeknek** nevezik (pl. Fe, vas; Mn, mangán; Cu, réz; Ag, ezüst; Au, arany). Közös jellemzőjük, hogy a legkülső, telítetlen héj s-alhéján egy vagy két elektront tartalmaznak, tulajdonságaikat azonban a belső, telítetlen d-alhéj fokozatos kiépülése határozza meg (Atkins, 1995; Whitten et al., 2014). Erre az energiaszintek figyelembevételével (**39. ábra**) először a 4s-alhéj betöltődését követően van mód (3d-alhéj), azaz a negyedik periódusban kezdődik a d-mező. A „hosszú periódusos rendszerben” az s-mezőt jobbról a d-, majd azt a p-mező követi, a bennük elhelyezkedő oszlopokat ezért szokás egytől tizennyolcig folyamatosan számozva felsorakoztatni (**42. ábra**).

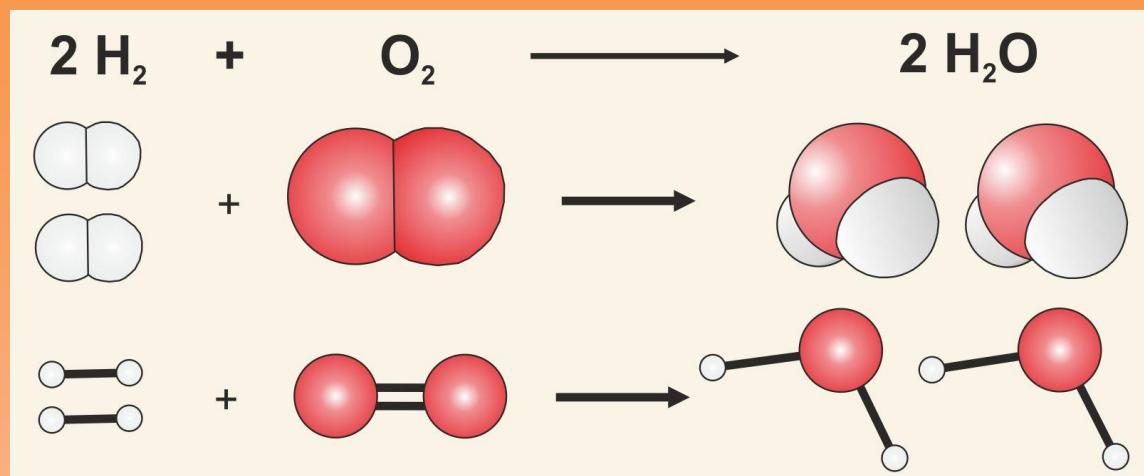
Az átmenetifémek közül kiemelve, a periódusos táblázat alsó részén, elkülönülten találjuk az f-mezőt, illetve az azt alkotó 14 rövid oszlopot (**42. és 43. ábra**). Az itt elkülönülő elemek a **belső átmeneti elemek** (*f-átmeneti elemek*). Ha figyelmesen megnézzük a megfelelő rendszámokat, az f-mező első sora a d-mezőben található lantán (La) után következik, ezért ezeket összefoglaló néven lantanidáknak vagy lantanoidáknak (lantánszerű elemek) nevezik; magyar megnevezésük: **ritkaföldfémek** (pl. eurórium, Eu). Az f-mező második sorát a d-mezőben található aktíniumot (Ac) követő 14 elem, az aktinidák vagy aktinoidák (aktíniumszerű elemek) alkotják. A kizárólag radioaktív elemekből álló csoport legismertebb és kiemelkedő jelentőségű tagja a tórium (Th) és az urán (U). Az uránt követő elemek a transzuránok, melyek a természetben nem fordulnak elő





## Jó tudni!

### A hidrogén, mint a jövő energiaforrása



*A hidrogén égésekor csupán víz keletkezik*

A népességnövekedés és a gazdasági fejlődés miatt megnövekedett energiaigény komoly kihívást jelent a világ gazdaságára, hiszen a globális felmelegedés problémája miatt a nagyobb energiatermelést korlátozott mennyiségű üvegházhatású gáz (pl. szén-dioxid, metán, nitrogén-oxidok stb.) kibocsátásával párhuzamosan kell megoldani. Az antropogén (emberi tevékenységhez köthető) forrásból származó üvegházhatású gázok döntő része a fosszilis energiahordozók (földgáz, kőolaj, kőszén) elégetéséből származik, ezért kiemelt kutatások övezik a környezetbarát energiatermeléssel kapcsolatos technológiákat. A hidrogén lehet a jövő egyik energiaforrása, hiszen égésekor csupán víz keletkezik. A hidrogénalapú gazdaságban az energia tárolása, szállítása cseppfolyós vagy gáz halmazállapotú hidrogén formájában történhet (Greenwood, Earnshaw, 2004; Abbas, Wan Daud, 2010; Schiller, 2013; Whitten et al., 2014; Ashik et al., 2015).

A hidrogén egyik potenciális előállítási lehetősége a szénhidrogének, különösen a metán bontása. A metán termikus vagy termokatalitikus bontásakor ugyanis szén (ami nanoszként a folyamat nagy tisztaságú, értékes mellékterméke) és hidrogén jön létre, szén-dioxid képződése nélkül, ezért a hidrogén ipari nagyságrendű előállítására irányuló technológiai kérdések megválaszolása a kutatások célkeresztjébe került (Greenwood, Earnshaw, 2004; Abbas, Wan Daud, 2010; Ashik et al., 2015).

Másik lehetőség a hidrogén elektromos úton való előállítása vízből, azaz az elektrolízis. Ez a folyamat, illetve a nagy tömegben való tárolás technológiája már régóta ismert, hatalmas mennyiségű cseppfolyós hidrogént tárolnak rutinszerűen szigetelt és hűtött tartályokban az űrprogramokhoz kapcsolódva, mint rakétahajtóanyag (Greenwood, Earnshaw, 2004; Schiller, 2013). A tárolásnak azonban egyszerűnek, olcsónak és veszélytelennek kell lennie, ezért olyan fizikai vagy kémiai rendszereket kell találni, amelyek könnyen elérhető módon számottevő mennyiségű hidrogént vesznek fel és adnak le, ciklusosan megismételhető módon (Schiller, 2013). Figyelembe kell továbbá vennünk azt is, hogy számos hétköznapi tevékenységhez, mint a közlekedés, mindezt viszonylag kis mennyiségre kell megoldani.

Néhány hagyományos belsőégésű motort már egyszerűen és hatékonyan átalakítottak hidrogénalapú működésűre. A hidrogén gépkocsi-üzemanyagként való széleskörű alkalmazása azonban még aktív kutatási terület (Greenwood, Earnshaw, 2004).



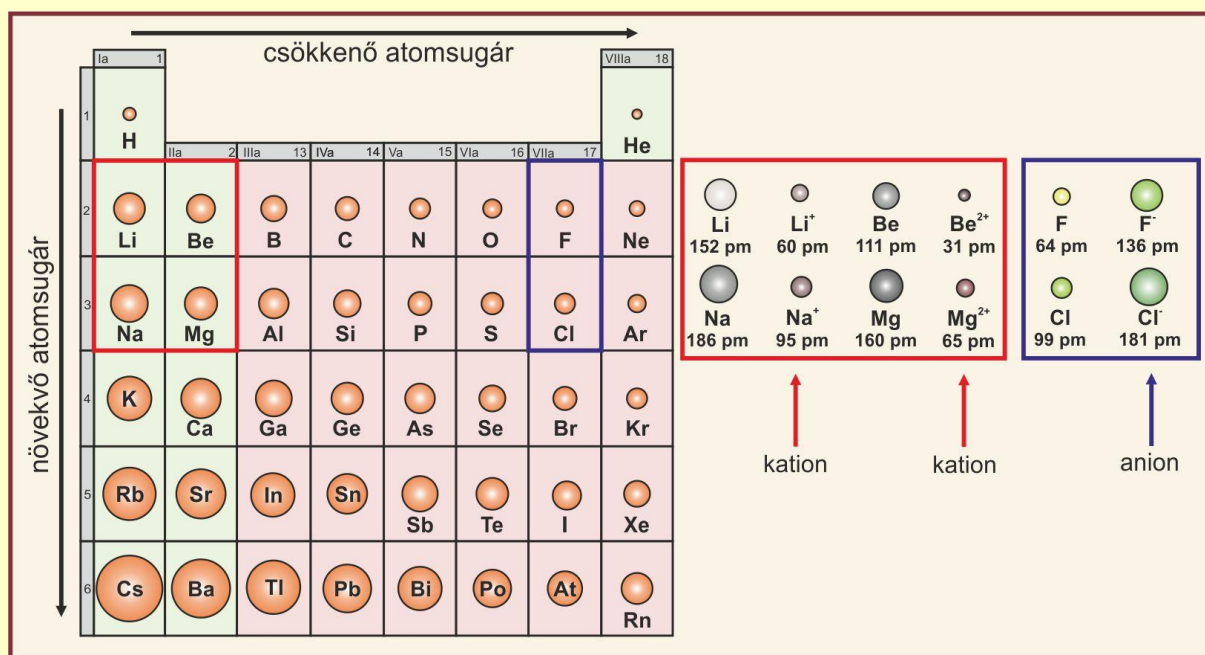
### 4.3. Periodikusan változó tulajdonságok

A Mengyelejev-féle periódusos rendszer rendezési elve az atomtömeg volt; ami periodikus változást mutat, ha a rokon kémiai tulajdonságú elemeket egymás alatt helyezzük el. A relatív atomtömeg a periódusos táblázatban a rendszám növekedésével, azaz egy sorban balról jobbra haladva általában növekszik, míg egy oszlopban fentről lefelé haladva szintén nő. A tömegén túl több fizikai és kémiai tulajdonság is periodicitást mutat a növekvő rendszámmal, ilyen a fémes jelleg, az atomtérfogat, a sűrűség, az atomsugár, illetve az **ionizációs energia**, az **elektronaffinitás** és az **elektronegativitás**. Segítségükkel az atomok és az elemek viselkedését könnyen értelmezhetjük (Nyilasi, 1975; Atkins, 1995; Greenwood, Earnshaw, 2004; Varsányi, 2009; White, 2013; Whitten et al., 2014).

Bár az atomok határa diffúz, a gömbnek tekintett atomokat méretükkel, azaz átmérőjükkel vagy sugarukkal (az átmérő fele) szintén jellemezhetjük. Egy atom sugarát egyrészt megadhatjuk az atommag (mint középpont) és az elektron legkülső maximális távolságaként (90%-os tartózkodási valószínűség); másrészt szilárd halmazállapotban, kémiai kötéssel összekapcsolódó — az atom- vagy fémrácsban elhelyezkedő — atomok távolságának feleként. Az atomok sugarainak változása azonban sokkal kisebb, mint az atomtömegeké. A nehéz uránatom (U, 238 g/mol;  $r = 175$  pm) sugara csupán három–négyeszerese a legkönnyebb elem, a hidrogénatom (H, 1 g/mol; számított atomsugár: 53 pm) sugarának (Atkins, 1995; Greenwood, Earnshaw, 2004). Az **atomsugár** a rendszám növekedésével egy perióduson belül általában csökken (kivétel az átmenetifémek között található), egy csoporton belül viszont fentről lefelé haladva növekszik (45. ábra).

Amennyiben egy elektromosan semleges atom elektront ad le, vagy elektront vesz fel, elektromos töltéssel rendelkező ionná alakul. Az ionok méretét az **ionsugár**al jellemezhetjük, ami a közelítőleg gömb alakú ion sugara. Ha egy atom elektront ad le, pozitív töltésű lesz egy, két vagy három pozitív töltéssel attól függően, hogy egy, két vagy három elektront adott-e le. A töltés növekedésével a kation sugara csökken, hiszen az atommagban a változatlan számú pozitív töltésű proton a kevesebb számú elektront nagyobb erővel tudja magához vonzani. Ha egy atom elektront vesz fel, belőle negatív töltésű ion, anion képződik (Atkins, 1995; White,

2013; Whitten et al., 2014). A kationok mérete mindig kisebb, az anionok mérete ellenben nagyobb a megfelelő semleges atomok méreténél (45. ábra).



**45. ábra**

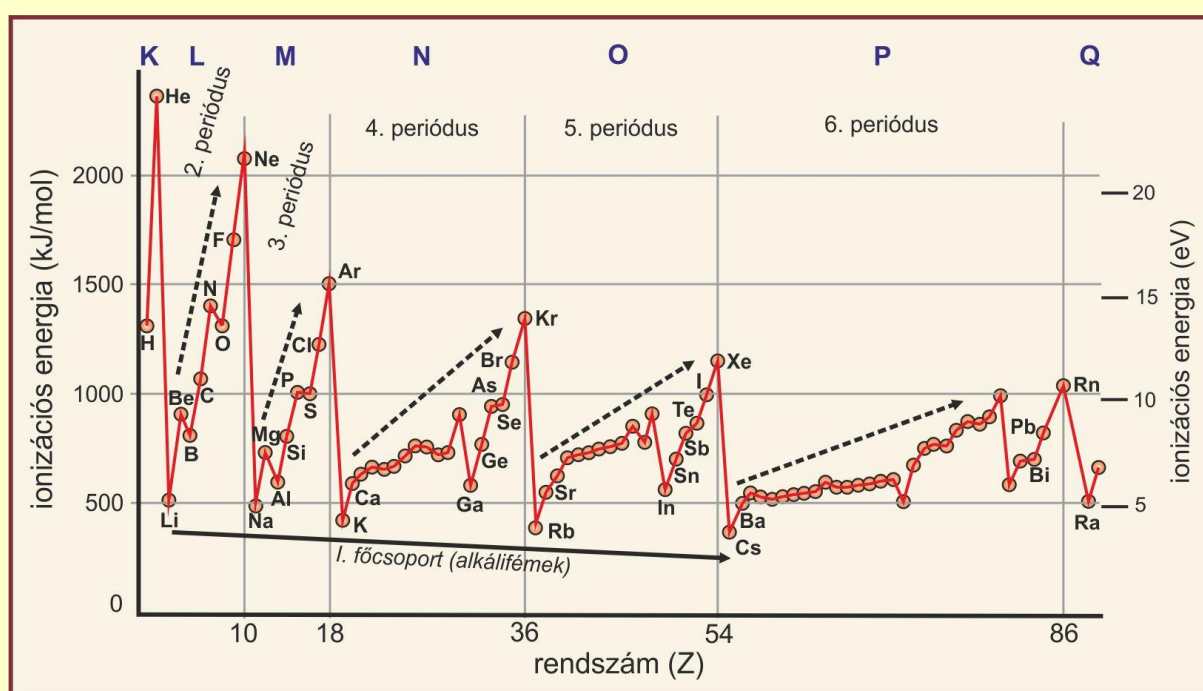
Az atomok és az ionok méretének változása a periódusos rendszer főcsoportjaiban (Atkins, 1992; Gill, 2015; módosítva)

Az ionsugár kitüntetett szerepet játszik számos geokémiai tulajdonság meghatározásában, mint például a szilárd anyagok kristályszerkezetében megfigyelhető elemhelyettesítés, az oldhatóság vagy a diffúziósebesség. A nagyobb méretű ionok körül több ellentétes töltésű ion helyezkedhet el („koordinációs szám”; 6.1. Szilárd halmazállapot: ásványok és kristályszerkezet), mint a kisebb ionok körül, ami szintén a kristályszerkezet geometriai felépítésében kap szerepet (White, 2013).

A semleges atomokról nagy energia (pl. radioaktív sugárzás, ütközések) hatására elektronok szakadhatnak le, az atom ionizálódik. Az első elektron eltávolításához szükséges energia kitüntetett szerepet kap a kémiában. **Ionizációs energiának** nevezzük azt az energiát, ami ahhoz szükséges, hogy a semleges atom leglazábban kötött elektronját eltávolítsuk („első” ionizációs energia; jele:  $E_i$ ; mértékegysége: kJ/mol). A folyamat hatására pozitív töltésű ionok, kationok jönnek létre (Rózsahegyi, 1993; Atkins, 1995; White, 2013; Whitten et al., 2014).

A periódusos rendszer első főcsoportja (alkálifémek) tartalmazza azokat az elemeket (Li, Na, K, Rb, Cs), amelyek első ionizációs energiája a legkisebb, azaz amelyek a legnagyobb kationképző hajlammal rendelkeznek. A telített, zárt

elektronhéjjal rendelkező nemesgázok elektronszerkezetét viszont nehéz megbontani, ezért a legnagyobb ionizációs energia a nyolcadik főcsoport elemeire jellemző (He, Ne, Ar stb.). Általánosan elmondható, hogy egy héjon belül az első ionizációs energia értéke növekszik a rendszámmal (az adott periódusban balról jobbra nő). Egy csoporton belül viszont a rendszám növekedésével csökken, hiszen minél távolabb helyezkedik el a vegyértékelektron az atommagtól, annál kisebb energia szükséges a leszakításához (46. ábra). Ennek megfelelően az első két főcsoport elemei (alkálifémek, alkáliföldfémek) igen reakcióképes kationképzők, aktivitásuk a csoporton belül fentről lefelé haladva fokozódik (Whitten et al., 2014).



**46. ábra**

Az elemek első ionizációs energiájának változása a rendszám függvényében (Gill, 2015; módosítva)

Az atomok nemcsak „elektronhiányosak” lehetnek, mint a kationok, hanem bizonyos mértékű „elektronfelesleggel” is rendelkezhetnek. Az anionok képződése egyes elemeknél energia-felszabadulással jár, másoknál a folyamat lejátézkodásához energiát kell befektetni. Ennek megfelelően az elektron felvételi hajlandóságot („affinitást”) szintén számszerűsíthetjük: az **elektronaffinitás** az elektronfelvétel során felszabaduló vagy befektetendő energia ( $E_a$  vagy  $E_{ea}$ ; mértékegysége: kJ/mol). Hatására a semleges atomokból negatív töltésű ionok, anionok képződnek (Rózsahegyi, 1993; Atkins, 1995; White, 2013; Whitten et al., 2014). Az

elektronaffinitás szintén periodikusan változik a rendszám függvényében: a halogén elemeké (pl. F, fluor) és az oxigéné erősen negatív (energia szabadul fel az elektronfelvételkor), azaz ezek kiváló anionképzők (Whitten et al., 2014). Ennek oka az elektronszerkezetben keresendő, hiszen ezek az elemek elektronfelvétellel érik el a szomszédos nemesgázra jellemző stabil, telített vegyértékhéj-szerkezetet (**40. ábra**). Természetesen a zárt héjjal vagy alhéjjal rendelkező elemek (pl. nemesgázok, alkáliföldfémek) nehezen kényszeríthetők további elektron felvételére, azaz aniont spontán módon (önként) nem képeznek.

Az eddigi tárgyalás során a szabad atomokat, illetve az azokból keletkezett önálló ionokat érintettük. Mind az atomok, mind az ellentétes töltésű ionok azonban meghatározott törvényszerűségeket követve összekapcsolódhatnak, kémiai kötést létesíthetnek egymással (**5. Atomokból anyag: a kémiai kötések és jelentőségük** fejezet). Az **elektronegativitás** (jele: EN) a kémiai kötést létesítő atomok azon képessége, hogy a molekulán belül, a szomszédos atomoktól elektronokat (azaz közös elektrópárokat) vonzanak magukhoz (*Pauling-féle meghatározás*). A molekulában kötött atom elektronvonzó képessége szintén periodicitást mutat, a periódusos rendszerben a rendszám növekedésével balról jobbra nő egy periódusban; illetve egy csoporton belül fentről lefelé haladva gyengén csökken (Rózsahegyi, 1993; Atkins, 1995; Greenwood, Earnshaw, 2004; White, 2013; Whitten et al., 2014). A Pauling-féle elektronegativitás mértékegység nélküli relatív paraméter; a halogének közötti fluor (F) elektronegativitása választott, értéke: 4,0 (**47. ábra**). A F elektronegativitása nagyobb, mint a hidrogéné (2,1), tehát az általuk képzett hidrogén-fluorid (HF) molekulában a kötést létesítő elektronok nagyobb valószínűséggel tartózkodnak a fluor közelében, mint a hidrogén környezetében. Az elektronegativitás segítségével tehát a kémiai kapcsolat jellegét, a kötés természetét tudjuk leírni (White, 2013).

Láttuk, hogy a rendszám növekedésével számos fizikai és kémiai paraméter periodicitást mutat (**48. ábra**). Az elektronszerkezettel szorosan összefüggő tulajdonságok meghatározzák az atomok (elemek) fémes jellegét (fémek, átmenetifémek, félfémek vagy metalloidek, nemfémes elemek), továbbá a kémiai reakciókban betöltött szerepét. Az atomok és az ionok közötti kapcsolat, a kémiai kötés jellegének leírására felhasználhatjuk az elektronegativitást, azonban figyelembe kell vennünk azt is, hogy egy adott atom vagy ion hány kötést képes

létesíteni. Azoknak a kötéseknek a számát, amit valamely atom egy molekula vagy vegyület részeként létesíthet, **vegyérték**nek nevezzük (Varsányi, 2009; Gill, 2015).

A kémiai reakciók során a kapcsolódó atomok arra törekednek, hogy a stabil nemesgáz konfigurációt éri el. Az alkálifémek (pl. Na:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ ) vegyértékhéján csupán egy elektron található, ezért egy kémiai kötést képesek létesíteni, azaz egyvegyértékűek. Az alkáliföldfémek (pl. Mg:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$ ) két vegyértékelektronnal rendelkeznek, ezért kémiai kötés létesítésekor kétvegyértékűek. A kis ionizációs energiájú (erősen „elektropozitív”) elemeknél tehát a vegyérték megegyezik a vegyértékhéjon található elektronok számával, azaz a periódusos rendszerben elfoglalt hely (főcsoport száma) alapján könnyen meghatározható. Az alumínium (Al, III. főcsoport) vegyértéke három, a szén és a szilícium (C és Si, IV. főcsoport) általában négy, míg a foszfor (P, V. főcsoport) ötvegyértékű (Szabó, Nyilasi, 1981; Greenwood, Earnshaw, 2004; Gill, 2015).

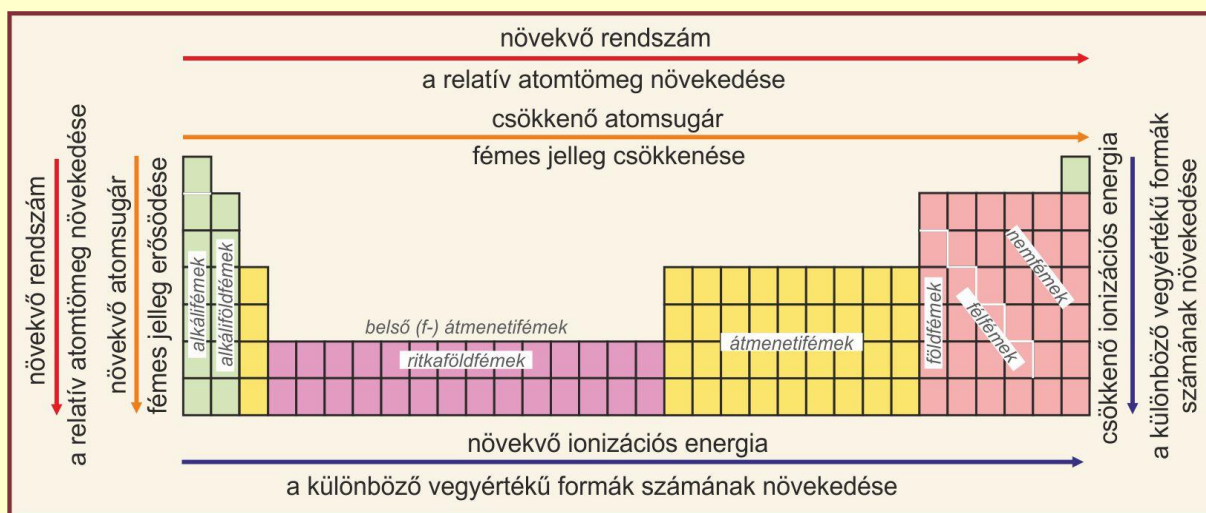
																		VIIa		18															
1a	1																	VIIa		18															
1	H 2,1																	He																	
IIa		2																																	
2	Li 1,0	Be 1,5																																	
IIIa		3																																	
3	Na 0,9	Mg 1,2																																	
IIb			3	IVb										4	Vb	5	VIb	6	VIIb	7	VIIIb	8	VIIIb	9	VIIIb	10	IIb	11	IIb	12					
4	K 0,8	Ca 1,0	Sc 1,3	Ti 1,5	V 1,6	Cr 1,6	Mn 1,5	Fe 1,8	Co 1,9	Ni 1,9	Cu 1,9	Zn 1,6	Ga 1,6	Ge 1,8	As 2,0	Se 2,5	Br 2,8	Kr																	
5	Rb 0,8	Sr 1,0	Y 1,2	Zr 1,4	Nb 1,6	Mo 1,8	Tc	Ru 2,2	Rh 2,2	Pd 2,2	Ag 1,9	Cd 1,7	In 1,7	Sn 1,8	Sb 1,9	Te 2,1	I 2,5	Xe																	
6	Cs 0,7	Ba 0,9	La 1,0	Hf 1,3	Ta 1,5	W 1,7	Re 1,9	Os 2,2	Ir 2,2	Pt 2,2	Au 2,4	Hg 1,9	Tl 1,8	Pb 1,9	Bi 1,9	Po 2,2	At 2,2	Rn																	
7	Fr 0,7	Ra 0,9	Ac 1,1																																
ARTINDAK 50-103																																			
LANTANIDAK 58-71																																			
				Ce 1,0	Pr 1,0	Nd 1,0	Pm	Sm 1,0	Eu 1,1	Gd 1,1	Tb 1,1	Dy 1,1	Ho 1,1	Er 1,1	Tm 1,2	Yb 1,2	Lu 1,2																		
				Th 1,3	Pa 1,4	U 1,4	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr																		

**47. ábra**

Az elemek elektronegativitása (White, 2013 nyomán, módosítva)

A nagy elektronegativitású elemeknél, mint az oxigén (O, VI. főcsoport) vagy a fluor (F, VII. főcsoport, halogének), a vegyérték azt az elektronszámot jelenti, ami az adott atom vegyértékhéjáról hiányzik (*vakancia*) ahhoz, hogy a stabil nemesgáz konfigurációt elérje. Az oxigén vegyértékhéján hat elektron tartózkodik, azaz a stabil

oktett-szerkezet eléréséhez két extra elektron felvételére van szükség, így kétvegyértékű. A halogének hét vegyértékelektronnal rendelkeznek, ennek megfelelően kémiai kötés kialakításakor csupán egy vegyértékkel szerepelnek. A periódusos táblázat központi részén található elemek (pl. átmenetifémek), illetve a p-mező nehezebb elemei (pl. kén, S; arzén, As) ennél jóval bonyolultabb viselkedésűek. Vegyértékük a környezet oxidációs állapotától függően változhat, ami gyakran nem vezethető le a periódusos rendszerben elfoglalt helyükből. Minden különböző oxidációs állapot eltérő vegyértéknek felel meg. A természetben gyakori vas (Fe) például elektronleadással (azaz oxidáció hatására) kétvegyértékű ferro-ionná ( $\text{Fe}^{2+}$ ), vagy háromvegyértékű ferri-ionná ( $\text{Fe}^{3+}$ ) alakulhat; vannak azonban olyan elemek, amelyek jóval több vegyértékkel szerepelhetnek (Szabó, Nyilasi, 1981; Greenwood, Earnshaw, 2004; Gill, 2015).



**48. ábra**

A jellemző tulajdonságok periodikus változása a hosszú periódusos rendszerben

### **Megjegyzés:**

A nagy elektronegativitású elemek (nemfémes elemek) gyakran elektront vesznek fel, hogy anionná alakuljanak. Minél nagyobb egy elem elektronegativitása, annál stabilabb aniont képez.

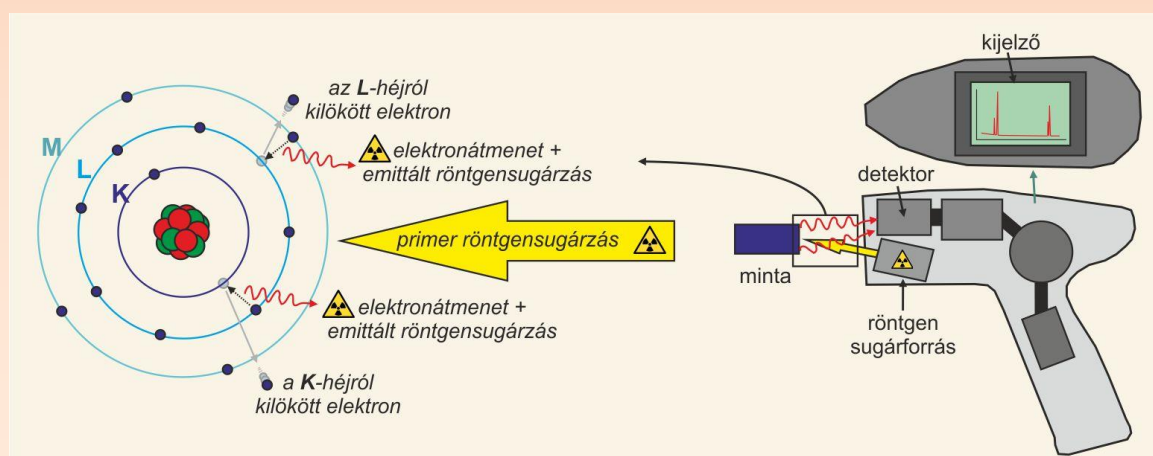
A kis elektronegativitású elemek (fémek) gyakran elektront adnak le, hogy kationná alakuljanak. Minél kisebb egy elem elektronegativitása, annál stabilabb kationt képez (Whitten et al., 2014).

## Jó tudni!

### Elektronátmenet, mint az elemek ujjenyomata

Az elektronszerkezet tárgyalásakor láttuk, hogy egy atomban az elektronok a magtól bármilyen távolságra előfordulhatnak, de alapállapotban a legnagyobb valószínűséggel a lehető legalacsonyabb energiaszintű pályákon tartózkodnak (Atkins, 1992; Gill, 2015). Az atomok azonban képesek energiát elnyelni a környezetükből, azaz nagy hőmérséklet, sugárzás vagy ütközések hatására az elektronok gerjesztődnek, energiafelvétellel magasabb energiaszintre ugorhatnak, de akár ki is szakadhatnak az atommag vonzásteréből (szabad elektronok). Az így keletkezett, instabilis, gerjesztett állapotú atomban a kis energiájú, betöltetlen atompálya („vakancia”) egy nagyobb energiaszintű pályán lévő elektronnal töltődik be, az atom visszatér az alapállapotba. A folyamat során a két állapot közötti energiakülönbség elektromágneses sugárzás formájában szabadul fel (Wilbraham et al., 2008; Gill, 2015). A gerjesztett atom által kibocsátott emissziós spektrumban az éles csúcsok megadott hullámhosszknál jelentkeznek. Miután az elektronok energiaszintje rendszámfüggő (elemenként más és más), a gerjesztést követően megfigyelhető emissziós spektrum, különösen a kibocsátott röntgensugárzás (a hullámhossza  $10^{-8}$  és  $10^{-11}$  m közötti), felhasználható a kémiai összetétel meghatározására (Varsányi, 2009; Gill, 2015).

A nagyenergiájú röntgensugárzás az atom belső héjairól (K és L héjakon zajló elektronátmenet) származik, a spektrumban viszonylag kevés, jól elkülöníthető vonalat eredményezve. Segítségével lehetőség nyílik ásványok, kőzetek, különböző tárgyak (pl. szobrok, festmények) elemi összetételének meghatározására. Az egyik legelterjedtebb analitikai technika a röntgenfluoreszcens spektrometria (XRF, X-ray Fluorescence). Az XRF módszernél egy elsődleges röntgenforrásból (röntgenső) származó röntgensugárral történik a minta gerjesztése, majd a keletkezett másodlagos röntgensugárzás („fluoreszcens röntgensugárzás”) segítségével lehet meghatározni a kémiai összetételt (Gill, 2015). A technika előnye, hogy nem csak laboratóriumi körülmények között, a mintát roncsolva (pl. porítva, pasztillázva vagy feloldva) juthatunk kémiai összetételi adathoz, hanem kézi, hordozható készüléket alkalmazva terepen (pl. feltárásban, fúrómag felületén, ásatáson) is sikerrel megadható a vizsgált mintát alkotó elemek sora. Ez különösen hasznos lehet például, ha ércutatáshoz kapcsolódva ki szeretnénk jelölni az ércet tartalmazó szakaszokat, vagy egy fémtárgyról (pl. kard, övveret, ékszer) szeretnénk eldönteni az ötvözet összetételét úgy, hogy az ne sérüljön.



A röntgenfluoreszcens analízis elvi alapja a kézi készülék vázlatrajzával

## 4. Az atomszerkezettől a periódusos rendszerig, fogalomtár

**Alapállapot:** az az állapot, amelyben az atom elektronjai a legmélyebb energiaszinteket foglalják el. Az egyedülálló atomnak az az állapota, amelyben minden elektronja a lehető legerősebben kötődik az atommaghoz.

**Alhéj:** az azonos energiájú, azonos mellékvantumszámú pályák alkotják.

**Alkálifémek:** az első főcsoport elemei (a nemfém hidrogén kivételével); külső elektronhéjuk konfigurációja  $ns^1$ , a legkisebb elektronegativitású elemek (lítium, Li; nátrium, Na; kálium, K; rubídium, Rb; cézium, Cs; francium, Fr). Kémiai kötések létesítésekor vegyértékük +1. Elemi állapotban ezüstfehér színű (a cézium enyhe sárga árnyalattal), puha, könnyen alakítható, késsel könnyen vágható fémek. Sűrűségük kicsi, a hőt és az elektromosságot jól vezetik, olvadás- és forráspontjuk alacsony. Elektronszerkezetükből adódóan igen reakcióképesek, ezért elemi állapotban nem fordulnak elő a természetben.

**Alkáliföldfémek:** a második főcsoport elemei; külső elektronhéjuk konfigurációja  $ns^2$ , ezért kémiai kötések létesítésekor vegyértékük +2. (berillium, Be; magnézium, Mg; kalcium, Ca; stroncium, Sr; bárium, Ba; rádium, Ra). Elemi állapotban ezüstfehér (Be, Mg), illetve halványsárga (Ca, Sr, Ba) színű, csillogó fényű, kis sűrűségű, viszonylag puha (az alkálifémeknél keményebb) fémek. Elektronszerkezetükből adódóan igen reakcióképesek, ezért elemi állapotban nem fordulnak elő a természetben.

**Atompálya:** olyan térrész, ahol az elektron nagy (90%-nál nagyobb) valószínűséggel megtalálható; jellemzése kvantumszámokkal ( $n$ ,  $l$ ,  $m$ ) történik.

**Atomsugár:** a szabad atomban a legkülső atompálya sugara.

**Atomszerkezet:** az elektronok elrendeződése az atommag körül.

**Atomtörzs:** az atommag és a belső, lezárt alhéjakon található elektronok együttese.

**Átmenetifémek:** d-átmeneti elemek; a mellékcsoportok alkotói (B csoport); a rendszám növekedésével a legkülső héj alatti héj  $d$ -pályái épülnek ki:  $(n-1)d^{1-10}$ .

**Csomósík:** az a térrész (sík, gömbfelület), ahol az atomon belül az elektron nem fordulhat elő (a megtalálási valószínűsége nulla).

**Csoportok:** a periódusos rendszer függőleges oszlopai.

**Elektromágneses sugárzás:** közvetítőközeg nélkül, hullám formájában terjedő energiaáram, részecskéi (kvantumai) a fotonok.

**Elektronaffinitás:** az elektronaffinitás az elektronfelvétel során felszabaduló vagy befektetendő energia. Negatív töltésű ionok (anionok) képződéséhez szükséges energia ( $E_a$  [J/mol]). Az elektronaffinitás azt fejezi ki, hogy mekkora energia szükséges 1 mol gázalmazállapotú negatív ionból a töltést okozó elektron eltávolításához.

**Elektronegativitás** (Pauling-féle meghatározás): a kémiai kötést létesítő atomok azon képessége, hogy a molekulán belül, a szomszédos atomoktól elektronokat (azaz közös elektronpárokat) vonzanak magukhoz. A F (fluor) elektronegativitása választott: 4,0. Az elektronegativitás a kötött atomok elektronvonzó képességét jellemzi. Az elektronegativitás az ionizációs energiából és az elektronaffinitásból kiszámítható mértékegység nélküli szám. Jele: EN.

**Elektronhéj:** az azonos főkvantumszámú pályák héjat alkotnak.

**Elektronkonfiguráció:** az elektronok atomon belüli elrendeződése.

**Energiaminimumra törekvés elve (felépülési elv, Aufbau elv):** az atompályák feltöltődése során az elektronok mindig a legalacsonyabb energiájú pályákat foglalják el. Az alapállapotú atomban az elektronok a lehető legkisebb energiájú szabad helyet foglalják el.

**Félfémetek:** olyan anyagok, amelyek elektromos ellenállása a hőmérséklet emelésével csökken (pl. félfémek: szilícium, germánium).

**Földfémek:** a harmadik főcsoport elemei (a félfém bór kivételével), külső elektronhéjuk konfigurációja  $ns^2np^1$  (pl. alumínium, Al). A földfémek közül csak az alumínium fordul elő nagy mennyiségben a Földön (vegyületek formájában), a főcsoport többi tagja igen ritka. Az alumínium puha, vágható, hengerelhető, ezüstfehér, porrá törve szürke könnyűfém.

**Főkvantumszám ( $n$ ):** megadja az elektron magtól való távolságát. Az atom mérete és az elektron energiaszintje elsősorban  $n$ -től függ.  $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, \dots$  pozitív egész szám lehet; betűjelzése: K, L, M, N, O, P, Q. Az azonos

főkvantumszámú atompályák héjat (elektronhéj) alkotnak.

**Gerjesztett állapot:** egy vagy több elektron távolabb helyezkedik el a magtól, mint alapállapotban, de még mindig hat rá a mag vonzása. A gerjesztett állapot nem stabilis, miközben a gerjesztett elektron visszajut az alapállapotba, a két szint energiája közötti különbséget az atom rendszerint fény (elektromágneses sugárzás) formájában kisugározza (emittálja).

**Halogének:** a periódusos rendszer hetedik főcsoportját alkotó nemfémes elemek, vegyértékhéjuk szerkezete:  $ns^2np^5$  (pl. F, Cl, Br, I). Reakcióképes elemek, sóképzők.

**Héj:** elektronhéj; az azonos főkvantumszámú pályák héjat alkotnak.

**Hund-szabály:** azonos energiájú szintek közül a különböző mágneses kvantumszámúak („térbelileg különbözőek”) töltődnek be először azonos spinnel (maximális multiplicitás). Egy alhéjon adott számú elektron úgy helyezkedik el, hogy közülük minél több legyen párosítatlan, azaz azonos spinű.

**Ionizációs energia:** az az energia, ami ahhoz szükséges, hogy a semleges atom leglazábban kötött elektronját eltávolítsuk („első” ionizációs energia;  $E_i$  [J/mol]). Pozitív töltésű ionok (kationok) képződéséhez szükséges energia.

**Ionsugár:** az ion méretét jellemző számadat. A pozitív ion sugara kisebb, a negatív ioné nagyobb, mint a megfelelő szabad atom sugara.

**Kvantumszámok:** az atom energiaállapotához számokat rendelhetünk, az egyes elektronok energiaszintjét a kvantumszámok segítségével adhatjuk meg.

**Mágneses kvantumszám ( $m$ ):** az atompálya „irányát”, térbeli orientációját határozza meg; azonos energiájú pályákat jellemez, értékét a mellékkvantumszámhoz viszonyítjuk ( $m = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$ )

**Mellékkvantumszám ( $l$ ):** az atompálya „alakját” határozza meg; az atompálya „alakja” (és energiája)  $l$ -től függ, értékét a

főkvantumszámhoz viszonyítjuk ( $l = 0, 1, \dots, n-1$ ), betűjelzése: s, p, d, f. Egy héjon belül az azonos mellékkvantumszámú pályák alhéjat alkotnak.

**Nemesgázok:** a periódusos rendszer nyolcadik főcsoportját alkotó nemfémes elemek, vegyértékhéjuk szerkezete:  $ns^2np^6$ . Rendkívül stabilak, inerte (pl. He, Ne, Ar, Kr).

**Nitrogéncsoport:** a periódusos rendszer ötödik főcsoportját alkotó elemek, vegyértékhéjuk szerkezete:  $ns^2np^3$  (pl. N, P).

**Oktett-szabály:** kémiai kötések kialakításakor az atomok arra törekednek, hogy legkülső elektronhéjukon 8 elektron legyen, azaz elérjék a telített nemesgáz-konfigurációt ( $ns^2np^6$ ).

**Oxigéncsoport:** a periódusos rendszer hatodik főcsoportját alkotó elemek, vegyértékhéjuk szerkezete:  $ns^2np^4$  (pl. O, S).

**Pauli-elv:** egy atomon belül nem lehet két olyan elektron, amelynek minden kvantumszáma megegyezik. Egy pályán maximálisan két elektron helyezkedhet el ellentétes spinnel.

**Pályaenergia:** az adott atompályán lévő elektron energiája az alapállapotú atomban. A pályaenergia előjele negatív.

**Ritkaföldfémek:** lantanidák (belső átmeneti elemek), az f-mező első sorát alkotják (pl. Eu).

**Spinkvantumszám ( $m_s$ ):** az elektron spinje mágneses jellemző. Az elektron „forgási irányát” határozza meg ( $m_s = +1/2; -1/2$ ).

**Széncsoport:** a periódusos rendszer negyedik főcsoportját alkotó elemek, vegyértékhéjuk szerkezete:  $ns^2np^2$  (pl. C, Si).

**Telített alhéj:** az alhéjon éppen a megengedett számú elektron van.

**Vegyérték:** azoknak a kötéseknek a száma, amit valamely atom egy molekula vagy vegyület részeként létesíthet.

**Vegyértékelektronok:** a legkülső elektronhéjon vagy egy telítetlen belső (d- vagy f-) alhéjon elhelyezkedő elektronok; ezek vesznek részt a kötésekben, reakciókban.

#### 4. Atomszerkezet... – Önellenőrző kérdések, feladatok

4.1. Az elektronhéjak betűjelzését (K, L, M, N) melyik kvantumszám határozza meg? a) A főkvantumszám; b) A főkvantumszám és a mellékvantumszám együttesen; c) A mellékvantumszám

4.2. Add meg a kén (S) elektronkonfigurációját!

4.3. Írd fel az alumínium elektronkonfigurációját!

4.4. Add meg annak az elemnek az elektronkonfigurációját, amelyik rendszáma 20!

4.5. Melyik elem elektronkonfigurációja az  $1s^2 2s^2 2p^5$ ?

4.6. Melyik elem elektronkonfigurációja az  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$ ?

4.7. Melyik főcsoportba tartozik az az elem, amelyik elektronkonfigurációja  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ ? a) Nemesgázok (VIIIa); b) Alkálifémek (Ia); c) Alkáliföldfémek (IIa)

4.8. Melyik főcsoportba tartozik az az elem, amelyik elektronkonfigurációja  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$ ? a)

Nemesgázok (VIIIa); b) Alkálifémek (Ia); c) Alkáliföldfémek (IIa)

4.9. Melyik főcsoportba tartozik az az elem, amelyik elektronkonfigurációja  $1s^2 2s^2 2p^5$ ? a) Halogének; b) Alkáliföldfémek; c) Földfémek

4.10. Hol találjuk a földfémeket a periódusos rendszerben? a) Az s-mezőben; b) A d-mezőben; c) A p-mezőben

4.11. Hol találjuk a ritkaföldfémeket a periódusos rendszerben? a) Az s-mezőben; b) A p-mezőben; c) Az f-mezőben

4.12. Hol találjuk az átmenetifémeket a periódusos rendszerben? a) Az s-mezőben; b) A d-mezőben; c) A p-mezőben

4.13. Hol találjuk a radioaktív uránt a periódusos rendszerben? a) Az s-mezőben; b) A d-mezőben; c) Az f-mezőben

4.14. Hol találjuk az alkálifémeket a periódusos rendszerben? a) Az s-mezőben; b) A d-mezőben; c) Az f-mezőben

#### 4. Atomszerkezet... – Önellenőrző kérdések, megoldások

4.1. a) A főkvantumszám

4.2. Kén (S):  $Z = 16$ , azaz 16 elektront kell elhelyezni a megismert sorrend szerint, az elektronkonfiguráció:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$

4.3. Alumínium (Al):  $Z = 13$ , azaz 13 elektront kell elhelyezni, az elektronkonfiguráció:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$

4.4.  $Z = 20$ , azaz 20 elektront kell elhelyezni, az elektronkonfiguráció:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$ , ez az elem a kalcium (Ca)

4.5.  $1s^2 2s^2 2p^5$ : a felső indexben szereplő számok összege adja meg az elektronok számát, ami 9, semleges atomban az elektronok száma azonos a protonok számával, tehát a rendszám:  $Z = 9$ , ez az elem a fluor (F)

4.6.  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$ : az előző levezetéshez hasonlóan  $Z = 2+2+6+2+3 = 15$ , ez a foszfor

4.7.  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ : a vegyértékhéj az M héj, ezen egy elektron van az s-alhéjon ( $3s^1$ ), azaz az első főcsoportból van szó; b) Alkálifémek (Ia)

4.8.  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$ : a vegyértékhéj az M héj, két elektron van az s-alhéjon ( $3s^2$ ), azaz a második főcsoportból van szó; c) Alkáliföldfémek (IIa)

4.9.  $1s^2 2s^2 2p^5$ : a vegyértékhéj az L héj, ezen összesen 7 elektron van ( $2s^2 2p^5$ ), azaz a hetedik főcsoportból van szó; a) Halogének

4.10. c) A p-mezőben

4.11. c) Az f-mezőben

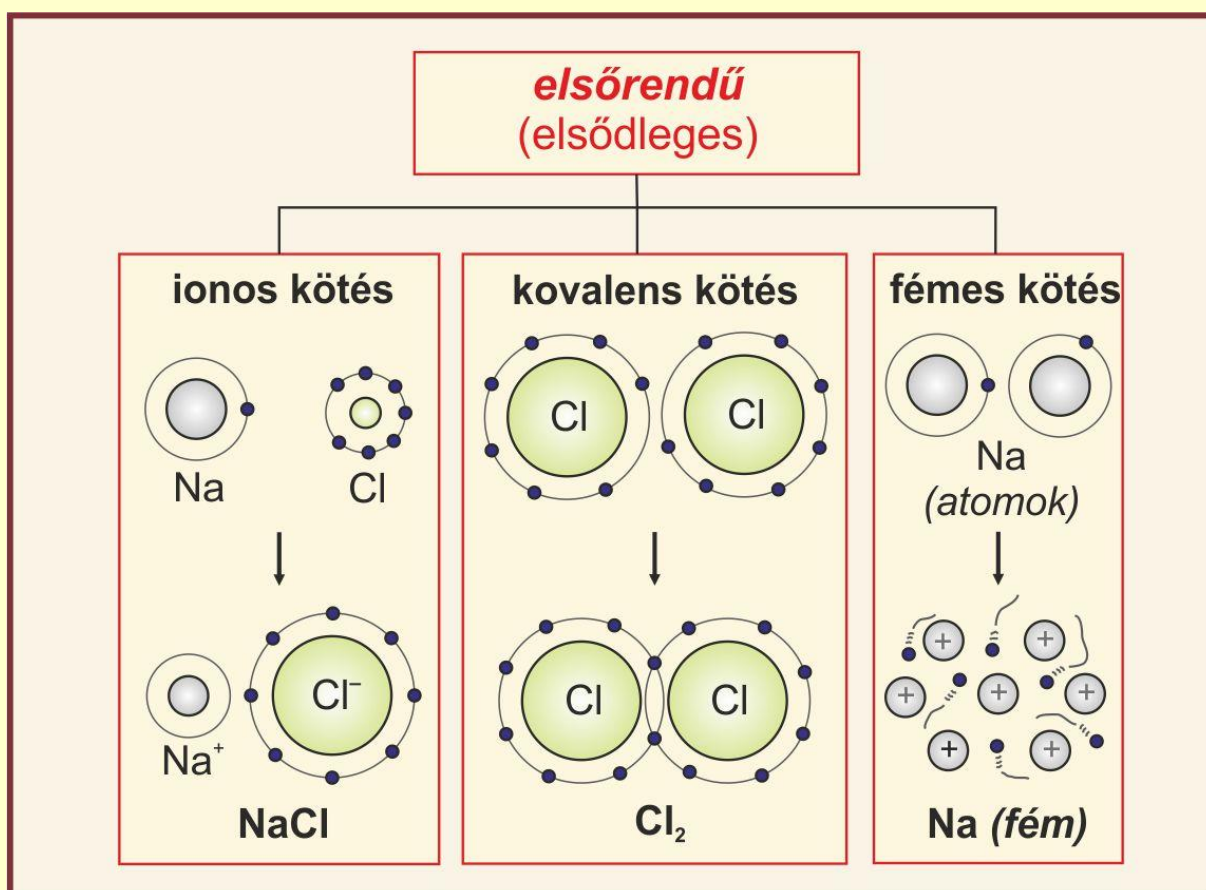
4.12. b) A d-mezőben

4.13. c) Az f-mezőben

4.14. a) Az s-mezőben

# 5.

## Kölcsönhatások: a kémiai kötések és jelentőségük



### Témakörök

#### 5.1. Elsőrendű kémiai kölcsönhatások

- a kémiai kötés és jellemzése (kötéshossz, kötési energia)
- az ionos kötés és kialakulásának általános feltételei
- a kovalens kötés: egyszeres és többszörös kötések, kötésrend, a molekulák alakja (kötésszög), szigma- és pi-kötés, hibridizáció, datív kötés, delokalizált kötés, a kovalens kötés polaritása (dipólusmomentum)
- a fémes kötés és kialakulásának általános feltételei

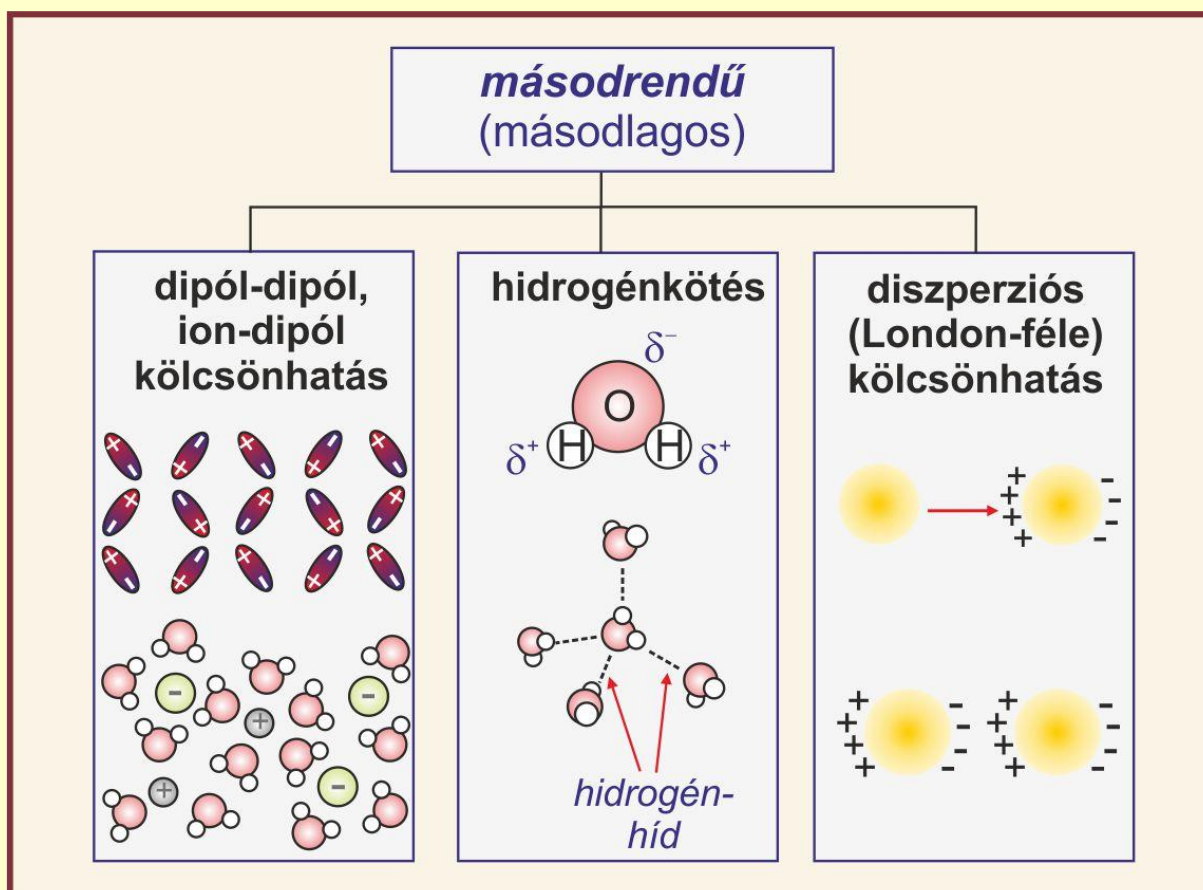
#### 5.2. Másodrendű kémiai kölcsönhatások

- dipól-dipól, ion-dipól kölcsönhatások; hidrogénkötés; diszperziós kölcsönhatás

## 5. Kölcsönhatások: a kémiai kötések és jelentőségük

### 5.1. Elsőrendű kémiai kölcsönhatások

### 5.2. Másodrendű kémiai kölcsönhatások

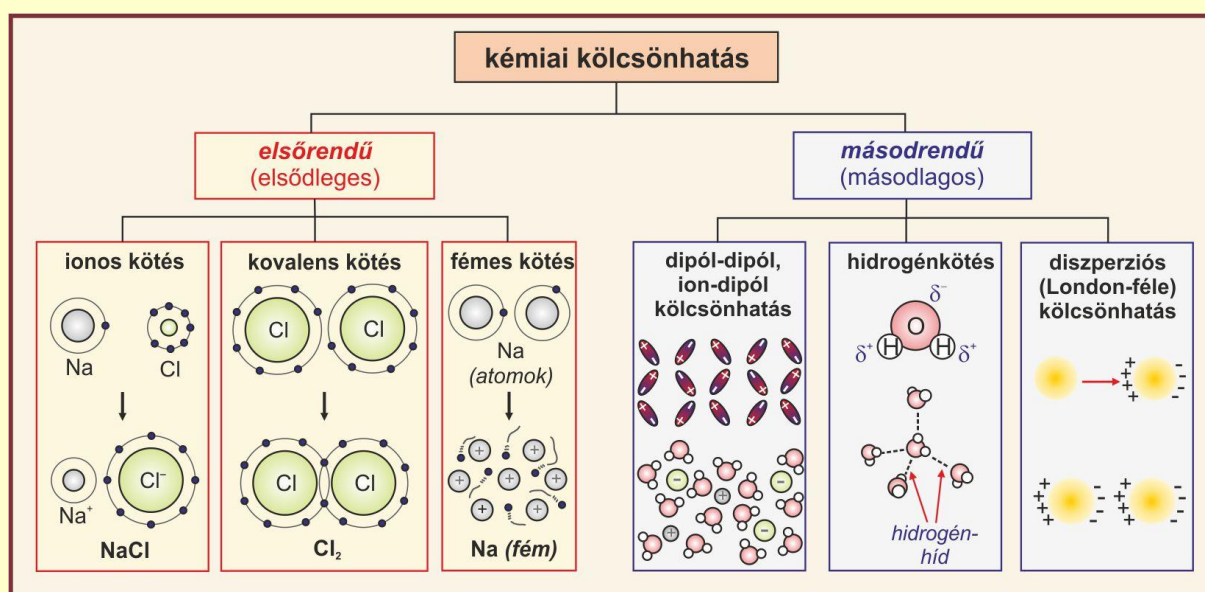


***Ha megtanulod ezt a fejezetet, képes leszel arra, hogy***

- megfogalmazd a kémiai kötések (elsőrendű, másodrendű) típusait és azok legfontosabb jellemzőit;
- általános szimbólumokkal ábrázold a kémiai kötés jellegét;
- bemutasd a kapcsolódó elemek elektronegativitása és a kémiai kötés jellege közötti kapcsolatot;
- a vegyértékelektronok jellemzésének segítségével igazold, mely elemek vesznek részt elektronátadásban (ionos kötés);
- elmagyarázd bizonyos kiválasztott elemek közötti kapcsolat jellegét.

## 5.1. Elsőrendű kémiai kölcsönhatások

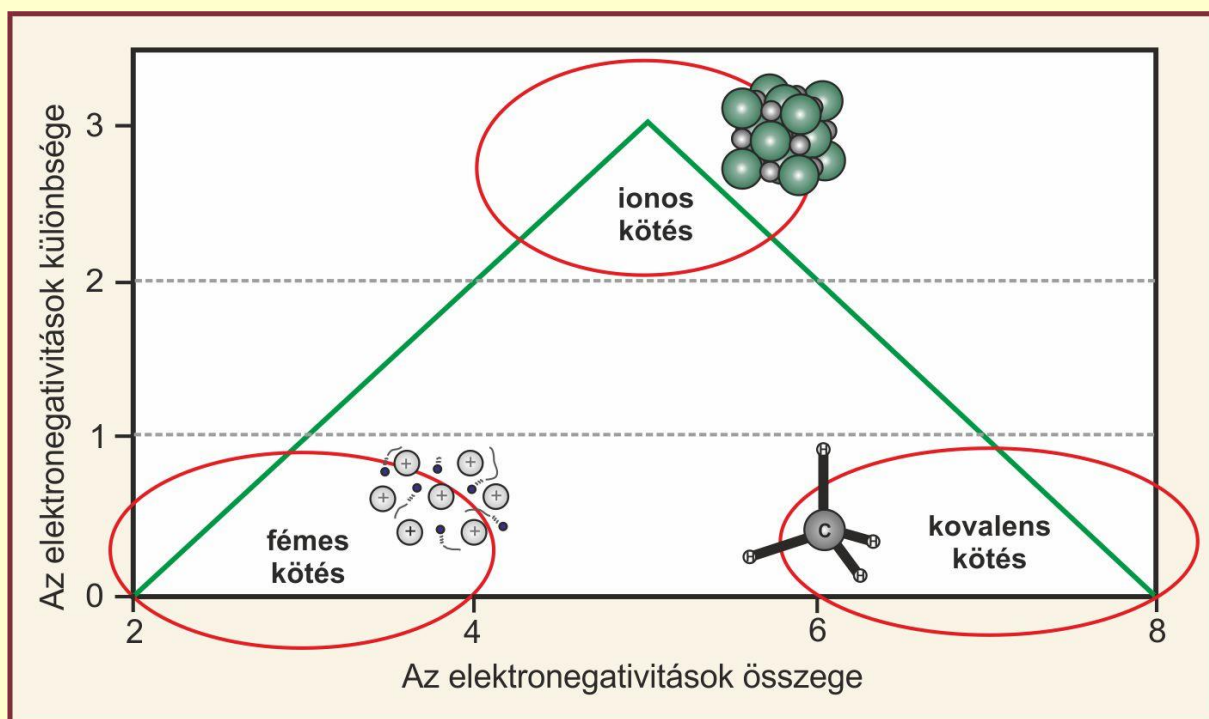
Az alapfogalmakat tárgyaló **1. fejezet**ben már láthattuk, hogy szobahőmérsékleten és normál légköri nyomáson az izolált atomok többsége nem stabilis, ezért azok összekapcsolódva elemmolekulákat, illetve különböző vegyületeket alkotnak (Atkins, 1995; Whitten et al., 2014). Az atomok között létrejövő kapcsolatot nevezzük **kémiai kötésnek**. Ez azonos vagy különböző elemek atomjai közötti olyan kölcsönhatás, ami következtében az atomok összekapcsolódnak, és így atomcsoportokat, molekulákat, összetett ionokat vagy vegyületeket alkotnak. A kötések kialakításában az atomok vegyértékhéján lévő elektronok vesznek részt, létrejöttükkel a rendszer stabilabb (alacsonyabb energiaszintű) állapotba jut. A kémiai kölcsönhatás erősségét egyrészt a kapcsolódó atomok (atommagok) közötti távolsággal, az úgynevezett **kötéshosszal** számszerűsíthetjük. Minél erősebb egy kötés, a két atom közötti kötéshossz általában annál kisebb (Atkins, 1992; Rózsahegyi, 1993; Gill, 2015). A kötés erősségét másrészt a **kötési energia** segítségével jellemezhetjük, ami megadja, hogy az adott típusú kémiai kötés felbontásához átlagosan mennyi energia szükséges (vagy a kötés létrejöttékor mennyi energia szabadul fel) 1 mol anyagra viszonyítva (kJ/mol). Ez alapján a kémiai kötések két nagy típusa különíthető el: az **elsőrendű (elsődleges) kémiai kötések** és a **másodrendű (másodlagos) kötések** (**49. ábra**).



**49. ábra**

A kémiai kötések típusai

Az elsőrendű kémiai kötések olyan erős kölcsönhatások, amelyek kialakulása során a kapcsolódó atomok vegyértékhéj-szerkezete változik meg. Az elektronszerkezet szempontjából ennek a legfontosabb hajtóereje, hogy a nemesgáz-konfiguráció elérése energetikailag kedvező. Az atomok ezért arra törekednek, hogy vegyértékhéjuk a nemesgázokra jellemző oktett-szerkezetet kövesse. A nemesgáz-konfiguráció kialakulhat úgy, hogy az egyik atom elektront ad le, a másik pedig elektront vesz fel (*ionos kötés* vagy ionkötés). Másik lehetőség, ha a kapcsolódó atomok egy vagy több elektron megosztásával közös elektronpárt vagy elektronpárokat hoznak létre (*kovalens kötés*), illetve úgy, ha a sok azonos vagy nagyon hasonló tulajdonságú atom közötti kapcsolatot közös elektronokból álló „elektronfelhő” hozza létre (*fémes kötés*). Az elsőrendű kötések általános jellemzője, hogy felszakításukhoz viszonylag nagy energia (100–1000 kJ/mol) szükséges (Atkins, 1992; Rózsahegyi, 1993; Gill, 2015). A legtöbb kémiai kötés az ideális kötéstípusok közötti átmenetnek tekinthető (50. ábra). A kötés jellemző típusát a kapcsolódó atomok egymáshoz viszonyított elektronegativitása határozza meg, az elektronegativitások különbsége és összege egyaránt fontos tényező (Nyilasi, 1975; Atkins, 1992; Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).



**50. ábra**

Az elsőrendű kémiai kötés jellegének (ionos, kovalens vagy fémes, illetve átmenet az ideális kötéstípusok között) változása a kapcsolódó atomok elektronegativitásának függvényében

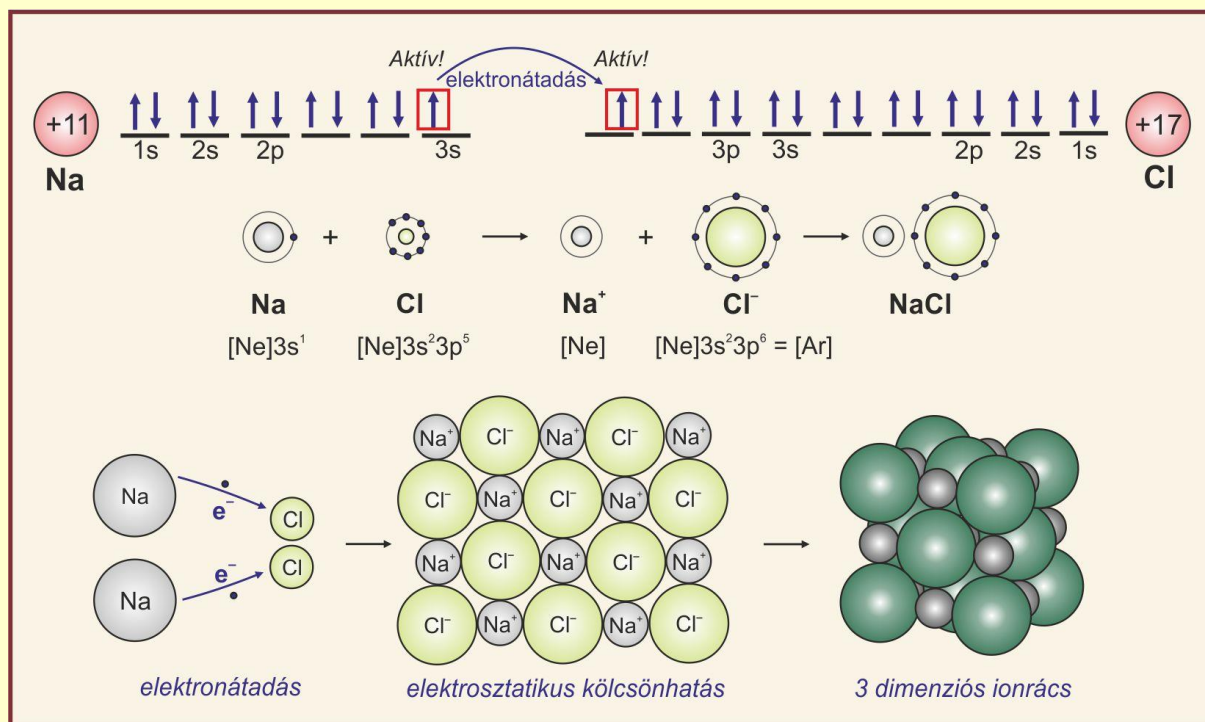
Az ionos és a kovalens kötések kialakításának szemléltetésére elterjedt módszer, ha a kapcsolódó atomok vegyjele köré a vegyértékelektronoknak megfelelő számú pontot rajzolunk (úgynevezett *Lewis-féle szimbólumok*). A párosítatlan elektronnak egy pont felel meg, míg a pontpár a párosított elektront jelzi. Az így kapott szerkezeti képletekben az elektronpárokat gyakran vonallal ábrázolják (Whitten et al., 2014). Mindkét jelölési módra látunk példákat ebben az alfejezetben.

Az **ionos kötés** (vagy *ionkötés*), mint a neve is mutatja, az atomokból kialakult ionok, azaz az elektromos töltést hordozó, ellentétes töltésű anionok (negatív) és kationok (pozitív) közötti vonzásból származó kölcsönhatás. Az ionos kötésben résztvevő atomok ideális esetben teljesen ionizálódnak, az elektronátadással létrejövő anionokat és kationokat Coulomb-féle elektrosztatikus vonzóerő tartja össze. Két atom között akkor jöhet létre ez a kötéstípus, amikor az egyik atom képes a másik vegyértékhéjáról „elvenni” egy vagy több elektront. Ez akkor lehetséges, ha az egyik atomnak nagy az elektronegativitása (anionképző), a másiké viszont kicsi (kationképző), azaz a kapcsolódó atomok között lényeges elektronegativitáskülönbség áll fenn ( $\Delta EN > 2$ ). A gyakorlatban ez azt jelenti, hogy általában a fémek (különösen az alkálifémek és az alkáliföldfémek) adnak át a vegyértékhéjukról elektront vagy elektronokat az elektronhiányos nemfémes elemeknek (pl. halogének, oxigéncsoport elemei), így jön létre közöttük az ionos kötés (Rózsahegyi, 1993; Atkins, 1995; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

Mivel az elektrosztatikus erők a tér minden irányában hatnak, az ionos kötés nem irányított kölcsönhatás (kötés). Ez azt eredményezi, hogy az ionos kötésben lévő ionok minden oldalán (azonos távolságban) kell, hogy legyen a töltést kompenzáló ellentétes töltésű ion, hiszen valamennyit — az adott ion közelében lévő, ellentétes töltésű ion — azonos mértékben vonzza. Ezért az ionos kötésű vegyületek a tér mindhárom irányában, azaz három dimenzióban ismétlődő egységekből álló rácsot, úgynevezett **ionrácsot** alkotnak (Nyilasi, 1975; Rózsahegyi, 1993; Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

Az ionos kötéshez szükséges hatások egyszerűen levezethetők és megérthetők a korábban megismert kősó, azaz a nátrium-klorid példáján (**7. ábra**). Ha a nátriumatomok gázát (elektronszerkezete:  $[\text{Ne}]3s^1$ ;  $EN = 0,9$ ) a periódusos táblázat harmadik periódusának másik végén található klóratomokkal (elektronszerkezete:  $[\text{Ne}]3s^23p^5$ ;  $EN = 3,0$ ) elegyítjük, a jelentős elektronegativitási különbség ( $\Delta EN = 2,1$ ; azaz  $\Delta EN > 2$ ) miatt a nátrium leadja a vegyértékelektronját,

így a neonnal analóg szerkezetű nátriumionná alakul. Az elektron felvételével a klóratomból keletkezett kloridion is nemesgáz-konfigurációt ér el (az argonnal lesz analóg). Amíg az elektromosan semleges atomok vegyértékhéján volt egy-egy párosítatlan elektron, az elektronátadást követően létrejött ionokban nincs (51. ábra).

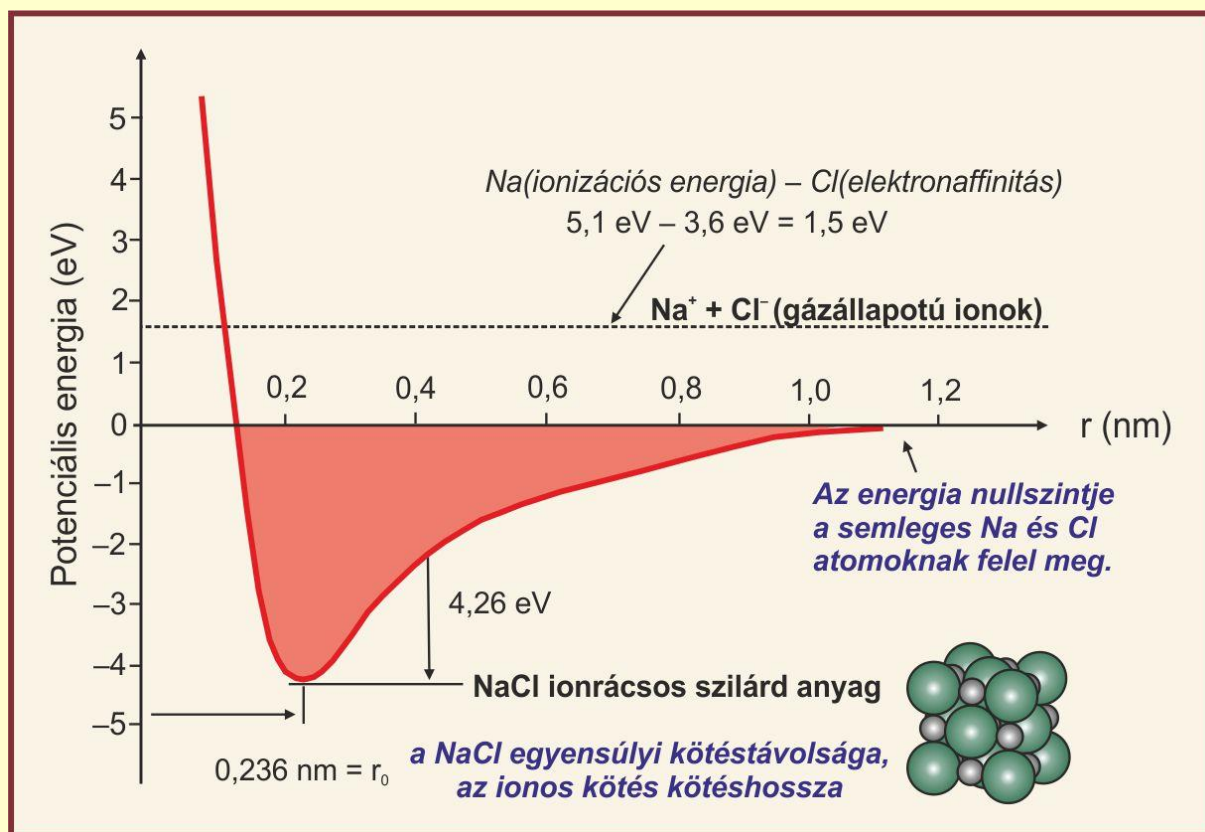


**51. ábra**

Az ionos kötés kialakulása a nátrium-klorid (kősó) példáján

Az ellentétes töltésű ionok (a példában a Na<sup>+</sup> és a Cl<sup>-</sup>) vonzzák egymást, ez a vonzás pedig növekszik, ahogy az ionok egyre közelebb kerülnek egymáshoz. Az atommagok közeledésével párhuzamosan a rendszer potenciális energiája egyre kisebb lesz, negatív értéket vesz fel. Ez azt jelzi, hogy a különálló ionokhoz képest a kapcsolódó ionok stabilabb állapotot képviselnek. Az ionok közeledése azonban nem lehet tetszőleges mértékű, hiszen amikor az elektronfelhők átfedésbe kerülnek, az azonos töltésű elektronok közötti tasztítás fokozódik, ami megakadályozza az anion és a kation további közeledését. A nátrium kation és a klorid anion között fellépő elektrosztatikus vonzás, illetve a közeledő elektronfelhők elektrosztatikus tasztítása miatt a lehetséges legkisebb energiájú rendszer a potenciális energia minimumának megfelelő, jól meghatározott iontávolságban lesz (egyensúlyi kötéstávolság;  $r_0$ , nanométerben vagy pikométerben megadva;  $1 \text{ nm} = 1 \cdot 10^{-9} \text{ m}$ ,  $1 \text{ pm} = 1 \cdot 10^{-12} \text{ m}$ ), ami az ionos kötés kötэшossza (52. ábra). Ennek megfelelően a kationok és az

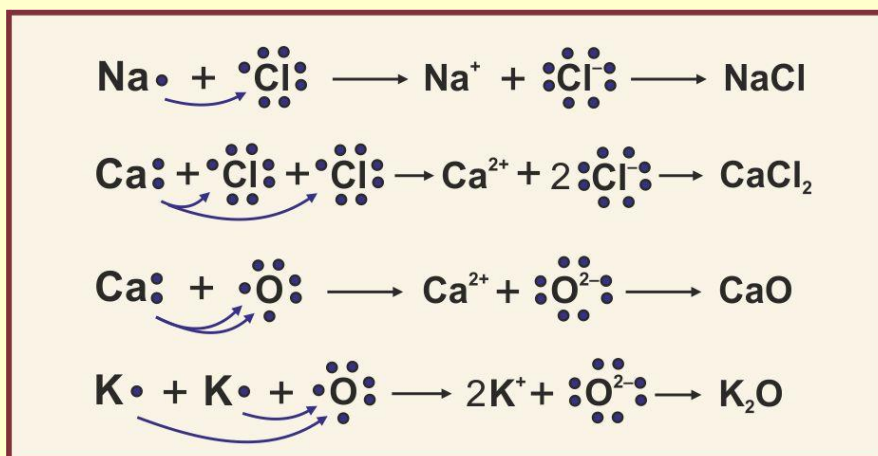
anionok úgy rendeződnek el a térben, hogy minden kation körül anionok, továbbá minden anion körül kationok legyenek. A kapott háromdimenziós szerkezet az ionrács, azaz a kőszó ionrácsos szilárd vegyület, ionrácsos kristály (Atkins, 1995; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).



**52. ábra**

A potenciális energia változása a kötéstávolság függvényében ionos kötés esetén (Whitten et al., 2014; Gill, 2015; módosítva)

A nátrium-klorid példájából kiindulva általánosan kijelenthető, hogy a periódusos rendszer első főcsoportjának elemei a hetedik főcsoport elemeivel egy-egy arányban hoznak létre ionos vegyületeket, hiszen az alkálifémek egy elektron leadására, a halogének pedig egy elektron felvételére képesek. Azt, hogy a kapcsolódó ionok milyen arányban kombinálódnak, az ionos vegyületek sztöchiometriájának nevezzük. Ahhoz, hogy egy egyszerű ionos vegyület tapasztalati (összeg) képletét meg tudjuk adni, meg kell néznünk a periódusos rendszerben, hogy a kiválasztott atomok mekkora töltésű iont képesek képezni, ezt követően mind az anionból, mind a kationból annyit kell venni (moláris mennyiségre viszonyítva), hogy kompenzálják egymás töltését (**53. ábra**).



**53. ábra**

Ionos kötésű vegyületeket eredményező jellegzetes reakciók (atomokból kiindulva, Lewis-féle szimbólumokkal szemléltetve az elektronátadást)

A **kovalens** (jelentése: „közös vegyértékű”) **kötés** az atomok különleges kombinációja, amelyet az elektronpárok megosztása hoz létre. Ebben az esetben az energetikailag kedvező nemesgáz-konfiguráció úgy alakul ki, hogy a kapcsolódó atomok egy (vagy több) közös elektronpárt alakítanak ki egy-egy (vagy több) párosítatlan elektron megosztásával. Kovalens kötés egyrészt azonos atomok ( $\Delta \text{EN} = 0$ ), másrészt olyan atomok között jöhet létre, amelyek elektronegativitása viszonylag nagy (nemfémes elemek), azaz elektronegativitásuk különbsége kicsi ( $\Delta \text{EN} < 1$ ), így elektronátadás nem történhet, mert mindkét atom „ragaszkodik” az elektronjához (Atkins, 1995; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

A kapcsolódó atomok közötti közös elektronpár felel meg a kémiai kötésnek, ezért az atomok vegyértéke határozza meg a létesíthető kötések számát. Minden egyes megosztott elektronpár egy kovalens kötésnek számít, így az atomok között **egyszeres kötés** (egy megosztott elektronpár), **kettős kötés** (két megosztott elektronpár), illetve **hármass kötés** (három megosztott elektronpár) jöhet létre. A gyakorlatban ez azt jelenti, hogy egy atom annyi kötést tud kialakítani, ahány párosítatlan elektronja van a vegyértékhéján. A párosítatlan elektronok kombinálódásával létrejött (ellentétes spinű), megosztott elektronpárt ezért **kötő elektronpár**nak nevezik. Az atomhoz tartozó azon elektronpárok, amelyek nem vesznek részt a kötésben a **nemkötő** vagy magányos **elektronpárok** (Rózsahegyi, 1993; Atkins, 1995; Whitten et al., 2014).

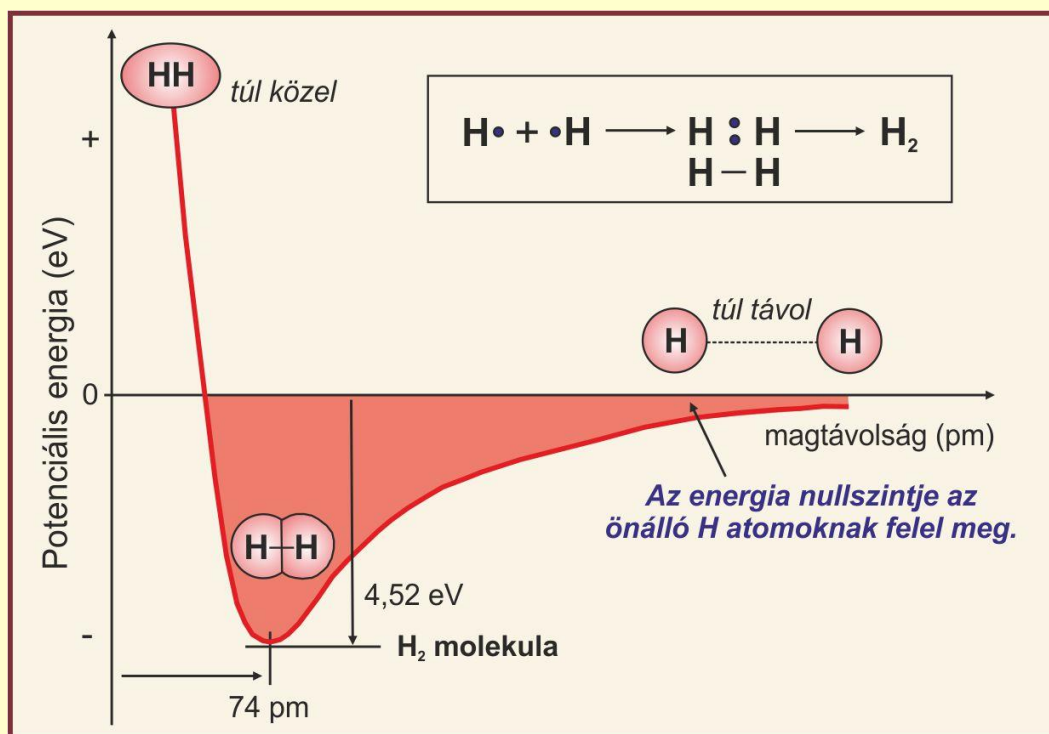
A kovalens kötés olyan erős, elsőrendű kémiai kölcsönhatás, amely révén lehetőség van arra, hogy végtelen számú atom háromdimenziós térrácsban

kapcsolódjon össze szilárd anyagot formálva. Ilyen például az igen kemény gyémánt (C) és a csiszolóanyagként elterjedt szilícium-karbid (SiC), továbbá a puha, elektromosan vezető tulajdonságú grafit (C). Ezek jellemzőivel külön alfejezet foglalkozik (**6.1. Szilárd halmazállapot: ásványok és kristályrácsok**). Ha véges számú atom között alakul ki kovalens kötés, a kapcsolódó atomok kisméretű, diszkrét egységeket, molekulákat formálnak. Ezek gyakran gáz halmazállapotúak (pl. oxigén, O<sub>2</sub>; nitrogén, N<sub>2</sub>; klór, Cl<sub>2</sub>; metán, CH<sub>4</sub>), vagy közönséges körülmények között folyadékok (pl. bróm, Br<sub>2</sub>; víz, H<sub>2</sub>O), vagy szilárdak (jód, I<sub>2</sub>; kén, S<sub>8</sub>) is lehetnek (**3.1. Elemek és szervesetlen vegyületek alfejezet**).

Itt az idő, hogy pontosítsuk a már használt *molekula* szakkifejezés fogalmát: a kovalens kötéssel összekapcsolt véges számú atomok együttesét nevezzük molekulának. A kovalens kötés — szemben a korábban tárgyalt ionos, illetve a később részletezett fémes kötéssel — **irányított kötés**, azaz a kötések a molekulára jellemző szöget zárnak be egymással. Ennek következtében a molekuláknak határozott alakja van. A kapcsolódó atomok térbeli elrendeződését, azaz a molekulák alakját döntően a központi atom kötő, illetve nemkötő elektronpárjainak száma és ezek aránya határozza meg. A kovalens kötés jellemzőinek megadásakor ezért a kötési energián és a kötéstávolságon (kötéshossz) túl a **kötésszög** értékét is meg kell adni. A kötésszög nem más, mint a kapcsolódó atomok kötései (az atommagokat gondolatban összekötő egyenesek) által bezárt szög (Rózsahegyi, 1993; Atkins, 1995; Wilbraham et al., 2008; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

Az atomok elektronszerkezeténél láttuk, hogy az elektronok elhelyezkedésének egyik alapvető szempontja az atompálya energiaszintje. Ha két atom közel kerül egymáshoz, a vegyértékhéjak elektroneloszlása már nem csak az egyes, különálló atomokra terjed ki, hanem mindkettőjükre. Az atompálya analógiájára ezért bevezették a **molekulapálya** fogalmát. Az atomok közötti kémiai kölcsönhatás során kovalens kötésű molekulák azért jönnek létre, mert az elektronok a **kötő molekulapályákon** alacsonyabb energiájú állapotban vannak, mint amikor az atomi pályákon helyezkednek el. A molekulapályák nagyobbak és bonyolultabbak, mint az atompályák, de az atompályákra érvényes legfontosabb elvek (Pauli-elv, felépülési elv, Hund-szabály) a molekulapályákon elhelyezkedő elektronpárok jellemzőit is meghatározzák. Ennek megfelelően bármely molekulapályán legfeljebb csak két elektron tartózkodhat, ezért áll a kovalens kötés egy elektronpárból (Atkins, 1992, 1995; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

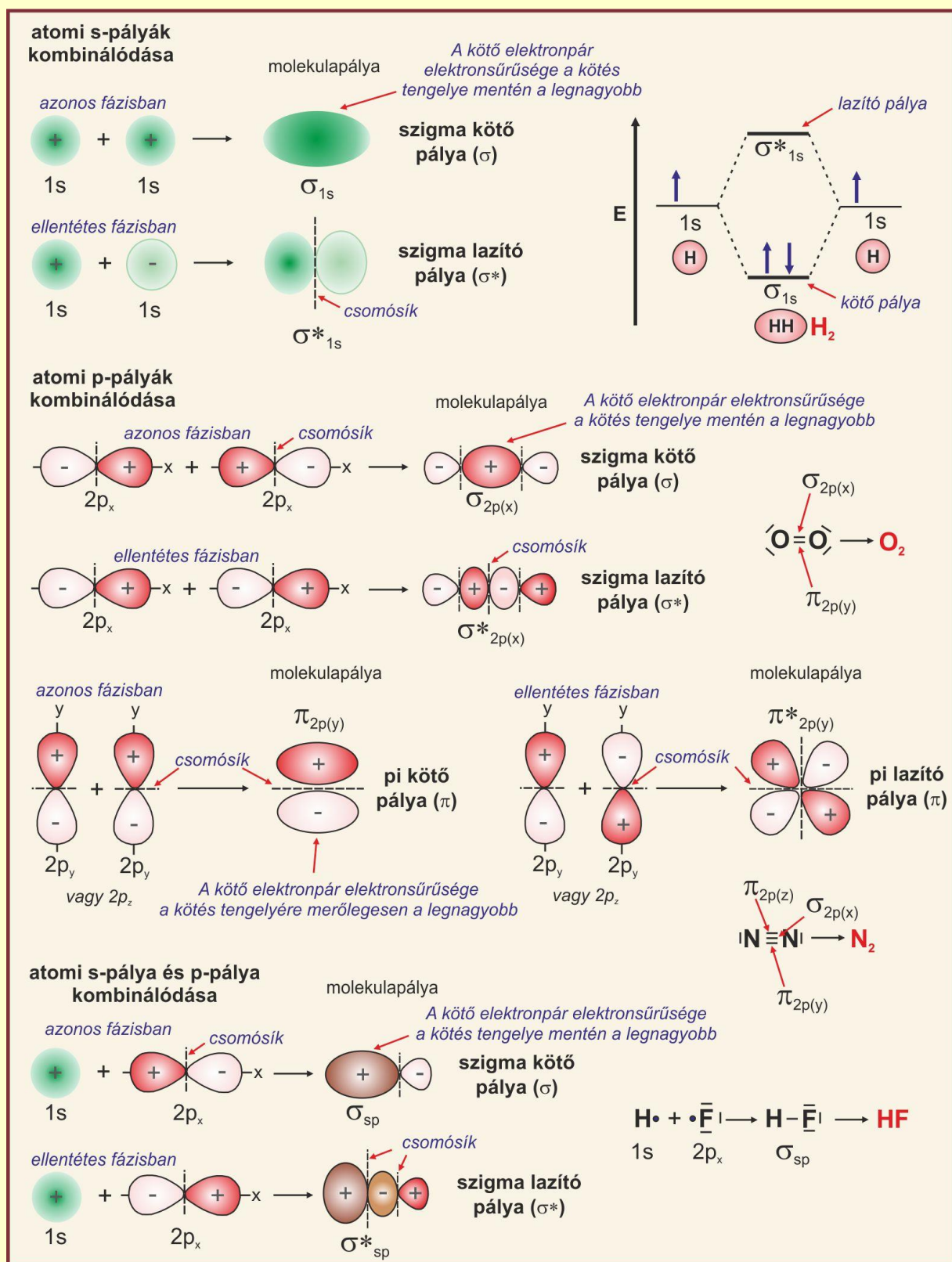
A kovalens kötés létrejöttének feltételei könnyen megérthetők a két hidrogénatomból képződő hidrogénmolekula ( $H_2$ ) példáján. Az atomos hidrogén egy vegyértékelektronnal ( $1s^1$ ) rendelkezik, ami nem stabilis. Ezért, ha két hidrogénatom a vegyértékelektronok megosztásával hidrogénmolekulát hoz létre, a héliumra jellemző elektronkonfiguráció ( $1s^2$ ) alakul ki, ami az elektronpár számára alacsonyabb energiaszintet biztosít (54. ábra).



54. ábra

A potenciális energia változása a kötéstávolság függvényében kovalens kötés esetén (Whitten et al., 2014; módosítva)

Az elektron hullámtermészetére épülő kvantummechanikai értelmezés szerint a kötés létrejöttékor a két atomi s-pálya átlapolódásával (a találkozó „hullámok” erősítő, illetve gyengítő interferenciájával) valójában két molekulapálya jön létre: egy az atompályákhoz képest kisebb energiájú kötő ( $\sigma$ , szigma), illetve egy magasabb energiaszintet képviselő **lazító** ( $\sigma^*$ ) **pálya**. A hidrogénmolekulában a két párosított elektron az alacsonyabb energiaszintű kötő pályára kerül, amit  $\sigma_{1s}$  molekulapályaként jelölnék, a kötést pedig  $\sigma$ -kötésnek (**szigma-kötés**) nevezik (Whitten et al., 2014; Gill, 2015). A gömbszimmetrikus s-pályákból hengerszimmetrikus  $\sigma$ -molekulapálya jön létre, ahol a kötő elektronpár elektronsűrűsége a kötés tengelye mentén a legnagyobb. Abban az esetben is kialakulhat  $\sigma$ -kötés, ha két p-pálya a végei felől fed át, illetve, ha egy p-pálya egy s-pályával kerül átfedésbe (55. ábra).



### 55. ábra

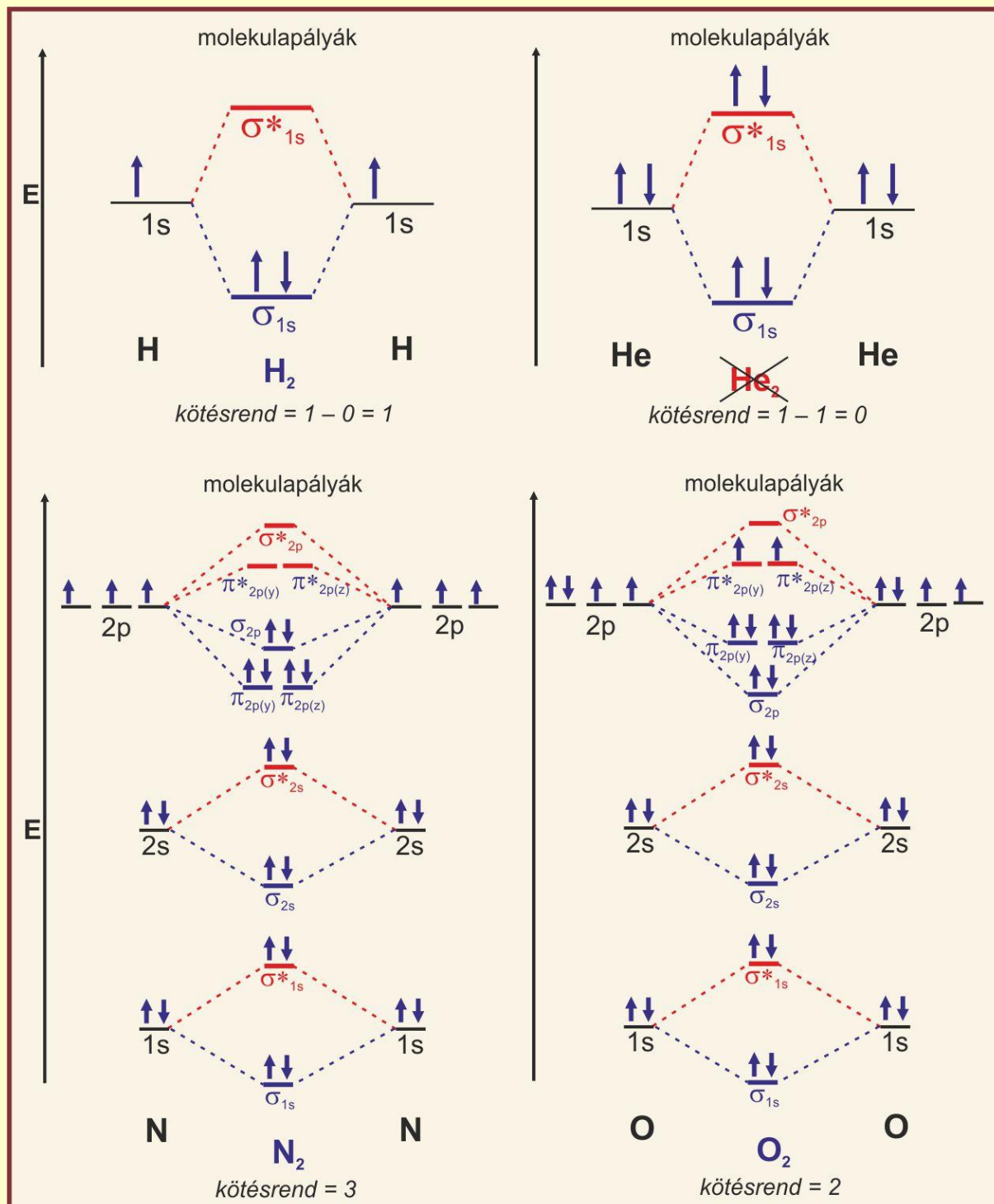
A kovalens kötés típusai: az atompályák kombinálódása (Whitten et al., 2014; módosítva)  
 Az átlapolódó atompályákat leíró hullámfüggvények erősítő (konstruktív) interferenciája (azonos fázisban kombinálódó hullámok) eredményezi a kötet, kialakul a kötő molekulapálya. A gyengítő (destruktív) interferencia (ellentétes fázisú átlapolódás; a hullám „kioltódik”, megszűnik) viszont lazító molekulapályát eredményez. A lazító pályán lévő elektron destabilizálja a molekulát.

Geometriai okokból ugyanazon két atom között csak egy  $\sigma$ -kötés jöhet létre (az egyszeres kötés mindig szigma-kötés), a molekula alakját ez a  $\sigma$ -váz fogja meghatározni. Ha egynél több párosítatlan elektron áll rendelkezésre, a p-pályák oldalirányú átfedése révén a  $\sigma$ -kötésre merőleges  $\pi$ -molekulapályák alakulhatnak ki (kettős, illetve hármass kötés), melyeknek csomósíkja van a  $\sigma$ -kötés síkjában. A  $\pi$ -kötésnél (***pi-kötés***) a kötő elektronpár elektronsűrűsége a kötés tengelyére merőlegesen a legnagyobb (55. ábra), azaz az első  $\pi$ -kötésnél az elektronsűrűség a kötés alatt és felett, míg a másodiknál a kötés előtt és mögött lesz a legnagyobb (Atkins, 1992; Whitten et al., 2014; Gill, 2015). Természetesen minden  $\pi$ -kötő pályához tartozik egy  $\pi^*$ -lazító pálya, aminek magasabb az energiaszintje, ezért ennek betöltése (***lazító elektronpár*** a molekulában) nem kedvez a kovalens kötés kialakulásának (erre utal a „lazító” megjelölés).

Amennyiben a kapcsolódó atomok atompályáiból rendre levezetjük a kialakuló molekulapályákat, és a vegyértékelektronokat a kötő és a lazító pályákhoz rendeljük úgy, hogy minden molekulapályán maximálisan két elektron tartózkodhat, megadhatjuk a létrejövő kovalens kötés jellegét. Ha a kötő elektronpárok számából kivonjuk a lazító elektronpárok számát, megkapjuk az úgynevezett ***kötésrendet***. A hidrogénmolekulában egy kötő elektronpár van, lazító nincs (55. és 56. ábra), tehát a kötésrend egy ( $1 - 0 = 1$ ): a molekulában egyszeres kovalens kötés jön létre. Gondolatban próbálkozhatunk két héliumatom ( $1s^2$ ) összekapcsolásával is, ekkor négy elektront kell elhelyeznünk a két molekulapályán. Mind a kötő ( $\sigma$ ), mind a lazító ( $\sigma^*$ ) pályára két-két elektron kerül, ennek megfelelően a kötésrend:  $1 - 1 = 0$ , azaz nincs mód arra, hogy kétatomos „héliummolekula” képződjön (Whitten et al., 2014).

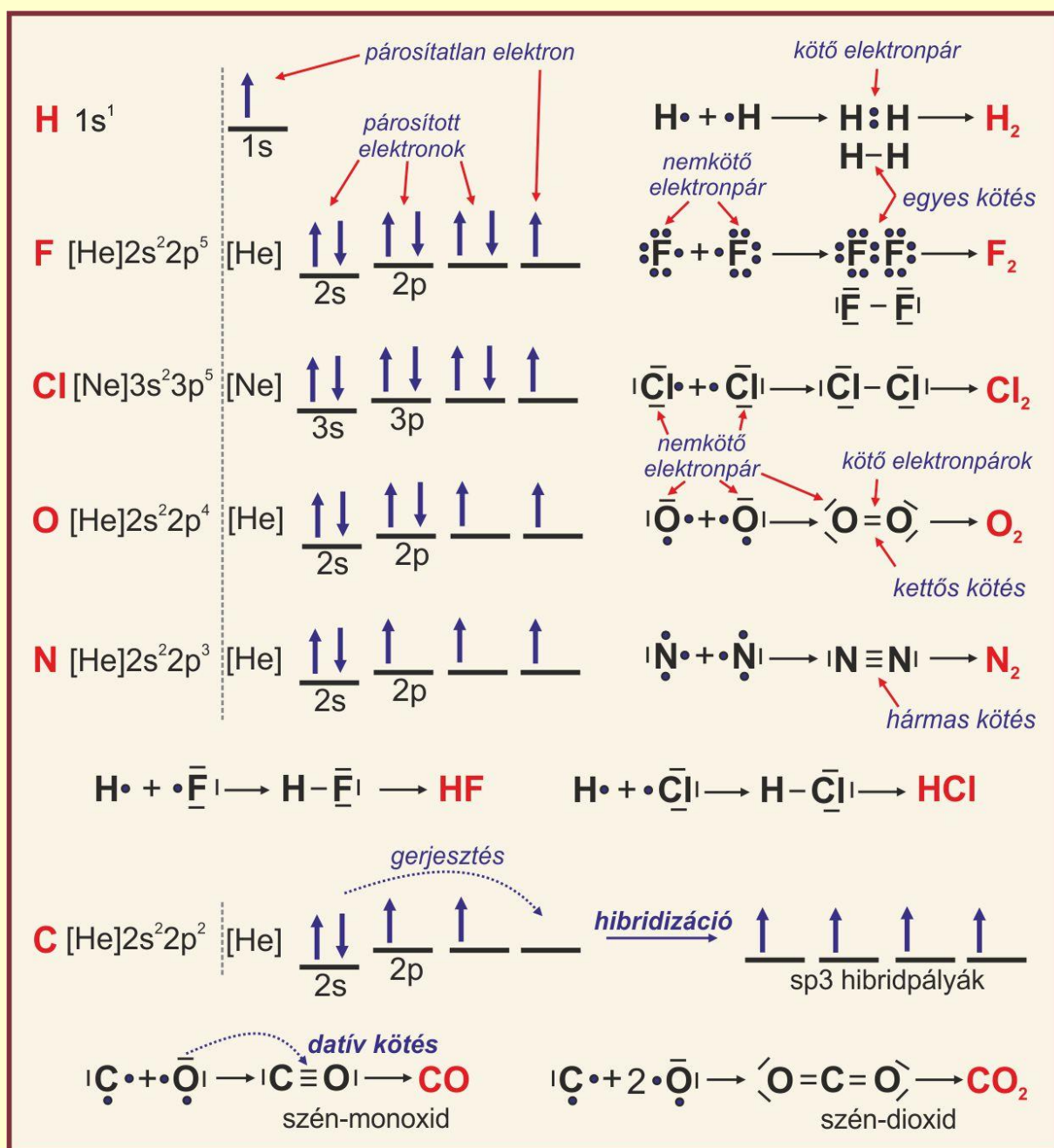
Tekintsünk olyan nemfémes atomokat, amelyek vegyértékhéján egy párosítatlan elektron van! A vegyértékhéjak elektronszerkezete alapján a kétatomos hidrogénmolekulában ( $H_2$ ) vagy a szintén kétatomos fluor- és klórmolekulában ( $F_2$ ,  $Cl_2$ ) egyszeres kovalens kötés biztosítja a kapcsolatot; az előbbinek nincs nemkötő elektronpárja (egy vegyértékelektron), míg a halogének (hét vegyértékelektron) molekulájában mindkét kapcsolódó atomhoz három-három nemkötő elektronpár tartozik (57. ábra). Most vizsgáljuk meg a két vagy a három párosítatlan vegyértékelektronnal rendelkező nemfémes atomok kapcsolódási lehetőségeit! A többszörös kötésekre olyan hétköznapi anyagban találunk kiváló példákat, mint a levegő. Ebben a kétatomos oxigénmolekula (21 térfogat%  $O_2$ ) már kettős kötést tartalmaz, oxigénenként két-két nemkötő elektronpárral (hat vegyértékelektron). A

levegő 78 térfogat%-át kitevő, igen stabilis nitrogénmolekulában (N<sub>2</sub>) az atomok közötti kémiai kapcsolatot erős, hármas kötés biztosítja (56. és 57. ábra), a nitrogénekhez egy-egy nemkötő elektronpár tartozik (öt vegyértékelektron).



**56. ábra**

A kötésrend: a molekulapályák és energiaszintjeik egyszerű kétatomos molekulákban  
A hidrogénmolekulában (H<sub>2</sub>) egyes, az oxigénmolekulában (O<sub>2</sub>) kettős, a nitrogénmolekulában (N<sub>2</sub>)  
hármas kovalens kötés jön létre, míg a hélium atomos formában stabil (Whitten et al., 2014;  
módosítva).



57. ábra

Kovalens kötésű molekulák: egyszerű példák az elektronkonfiguráció (párosított, párosítatlan vegyértékelektronok) és a kötés jellege (kötő és nemkötő elektronpárok, többszörös kötések) közötti összefüggés bemutatásával

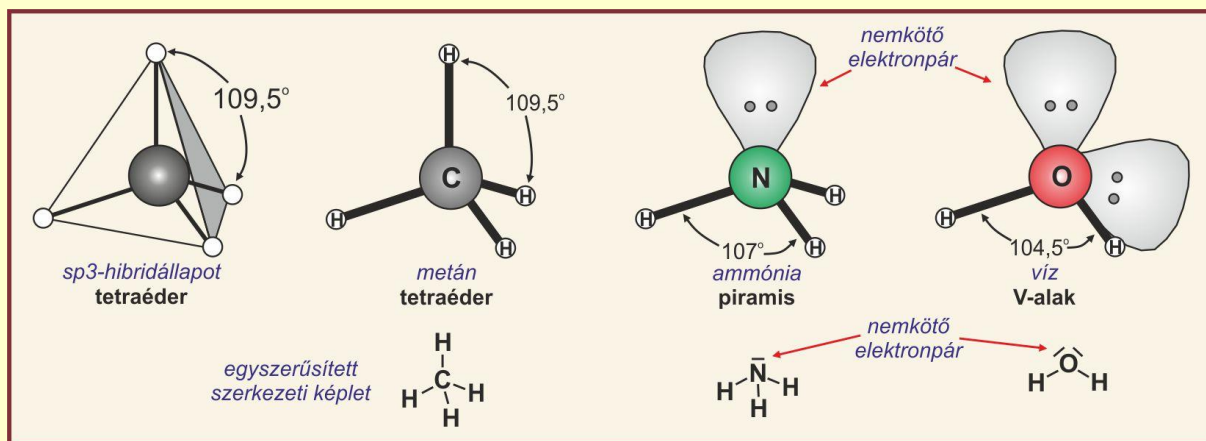
A fenti példák azonos atomok között kialakult kovalens kötések tartalmazzák. Két atom között úgy is kialakulhat ilyen kölcsönhatás, ha a kapcsolódó atomok eltérőek. Erre példa a hidrogén-fluorid (HF) vagy a hidrogén-klorid (HCl), ezekben egyszeres kovalens kötést találunk. Különleges a helyzet azonban a „csendes gyilkosnak” is nevezett színtelen, szagtalan, de igen mérgező szén-monoxid (CO) molekulában, ami a szén nem tökéletes égés során keletkezett (pl. kipufogógázban,

helytelenül működő kazánokban) oxidja. Ebben a kétatomos molekulában a két kapcsolódó atom között hármass kötés van, noha sem a szén, sem az oxigén vegyértékhéján nem találunk három párosítatlan elektront (57. ábra). A szintén színtelen, szagtalan, de nem mérgező, a tökéletes égést kísérő oxidjában, a széndioxidban (ami a levegő kis mennyiségű, de állandó komponense) a szén négy vegyértékkel szerepel, kettős kötések kialakítva egy-egy oxigénnel. A legegyszerűbb szénhidrogénben, a metánban ( $\text{CH}_4$ ) viszont négy egyszeres kovalens kötést alakít ki a hidrogénnel. Hogyan magyarázható meg ez a változékonyság? Mi határozza meg ezeknek a molekuláknak az alakját? Ha a szén elektronszerkezetére tekintünk, a vegyértékhéján négy elektron van, alapállapotban ezek közül kettő párosított és kettő párosítatlan. A korábbi gondolatmenet alapján azt várnánk, hogy a szén két vegyértékkel hoz létre kötést a molekulaképzés során, továbbá egy nemkötő elektronpárja lesz. A periódusos rendszerben elfoglalt helye szerint (a negyedik főcsoportban helyezkedik el) azonban négyvegyértékű. A látszólagos ellentmondás feloldása egyrészt a **datív kötés**, másrészt a **hibridizáció** ismeretében lehetséges (Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

A datív kötés során úgy jön létre molekula, hogy a kötésben részt vevő egyik kötő elektronpárt kizárólag az egyik atom szolgáltatja. Ezt az atomot idegen szakkifejezéssel donornak, a másikat akceptornak nevezzük (Rózsahegyi, 1993; Whitten et al., 2014). A CO-ban a hármass kötéshez szükséges elektronok a  $\sigma$ - és az első  $\pi$ -kötésnél mind a szén, mind az oxigén párosítatlan vegyértékelektronjaiból származnak. A második  $\pi$ -kötés mindkét elektronját azonban kizárólag az oxigénatom biztosítja, az egyik nemkötő elektronpár lép be a megfelelő molekulapályára, és hozza létre a datív kötést (az oxigén a donor).

A hibridizáció az a folyamat, amely során a vegyértékhéj atompályái úgy kombinálódnak, hogy az atompályák energiaszintjei azonossá válnak, így azokon egyenletes elektroneloszlás jön létre. A gyémánt, a metán ( $\text{CH}_4$ ) és a telített szénhidrogének szerkezetét a hibridizáció segítségével sikerült megmagyarázni. Alapállapotban a szénatomnak ugyanis — a Hund-szabály szerint — két párosítatlan elektrona van, de már kis gerjesztés hatására az  $s^2p^2$  konfigurációból  $sp^3$  konfiguráció (tetraédes hibridállapot) alakul ki négy párosítatlan elektronnal. Amikor négy azonos vagy hasonló atom kapcsolódik a központi szénatomhoz, akkor négy egyenértékű, vagy nagyon hasonló kötő elektronpár lesz az atom körül. Ezek taszítják egymást, ami akkor a legkisebb, ha a kötések egy tetraéder négy csúcsa

irányába mutatnak (ennek közepén van a C-atom, a központi atom), azaz a kovalens kötések irányítottak (**58. ábra**). A metán C-atomja körül négy azonos H-atom van, ezért a molekula tetraéderes szerkezetű (kötésszög:  $109,5^\circ$ ). A több egymáshoz kapcsolódó szénatomot tartalmazó szénhidrogén molekulák C-atomjai körül is egy képzeletbeli tetraéder csúcsai felé mutatnak a kötések. Ha a szén kettőst kötést képez, azaz nem négy, hanem három atommal kapcsolódik, eltérő szerkezetű  $sp^2$ -hibridpályák (síktrigonális vagy síkháromszög hibridállapot; kötésszög:  $120^\circ$ ) jönnek létre. Ilyet találunk a grafitban, valamint a telítetlen szénhidrogénekben, mint az etilén ( $C_2H_4$ ) vagy a legegyszerűbb aromás szénhidrogénben, a benzolban ( $C_6H_6$ ). A szén hármas kötés kialakítására is képes, ami az  $sp$ -hibridállapotnak felel meg. Ebben az esetben egy szénatom csak két másik atommal kapcsolódik (pl. acetilén,  $C_2H_2$ ) lineáris elrendeződésben (Whitten et al., 2014; Gill, 2015).



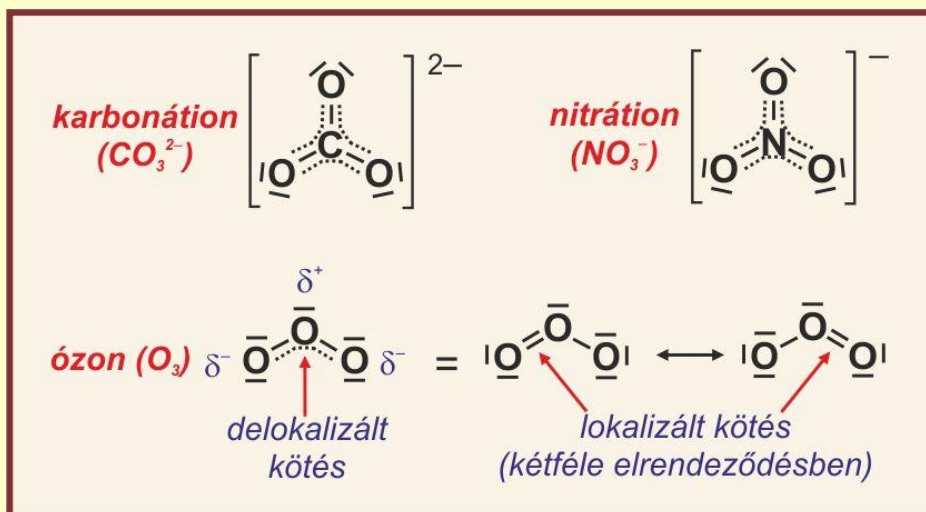
**58. ábra**

A tetraéderből levezethető  $sp^3$ -hibridállapotú molekulák alakja (Whitten et al., 2014; Gill, 2015, módosítva)

Bár a kapcsolódó atomok száma eltér, de a metánra ( $CH_4$ ) jellemző tetraéderes elrendeződésből vezethető le a négyatomos ammónia ( $NH_3$ ) és a háromatomos vízmolekula ( $H_2O$ ) alakja is (**58. ábra**). Az ammóniában úgy jön létre az  $sp^3$ -hibridállapot, hogy a nitrogén egyszeres kovalens kötésekkel keresztül három hidrogénhez kapcsolódik, a tetraéder csúcsát pedig a kötő elektronpároknál nagyobb térigényű — *nemkötő molekulapályán* elhelyezkedő — nemkötő elektronpár foglalja el. Ez a tetraéder kötésszögében kismértékű csökkenést fog eredményezni: az ammónia piramis-alakú molekulájában a  $N-H$  kötésszög  $107^\circ$ . A vízmolekulában a kapcsolódó három atom egymáshoz képest V-alakban rendeződik, ugyanis az oxigén  $sp^3$ -hibridállapotának megfelelően a tetraéderes elrendeződés két ágát az  $O-H$

kötések adják, a másik két irányba pedig a nemkötő elektronpárok helyezkednek el. A kötésszög ebben az esetben is kisebb lesz, mint a szabályos tetraéderben, a vízben az O—H kötésszög  $104,5^\circ$  (Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

Eddig olyan diszkrét molekulákról esett szó, amelyek elektromosan semlegesek, nem rendelkeznek töltéssel. Vannak azonban olyan töltéssel rendelkező atomcsoportok, amelyekben egy központi atomhoz kovalens kötéssel kapcsolódnak atomok úgy, hogy elektronhiányos vagy elektronfelesleggel rendelkező összetett ion jön létre. Az összetett ionok nagyon gyakran  $H^+$  (hidrogénion, azaz proton) leadásával vagy felvételével képződnek olyan közismert szervetlen savból (pl. kénsav,  $H_2SO_4$ ) vagy bázisból (pl. ammónia,  $NH_3$ ), amelyek vízben oldott ionként, illetve sóképző tulajdonságuk miatt (ionrácsos szilárd anyagok) ásványok formájában kiemelt földtudományi jelentőségűek. A kénsavból ( $H_2SO_4$ ) keletkezett szulfátion, a foszforsavból ( $H_3PO_4$ ) keletkezett foszfátion, a salétromsavból ( $HNO_3$ ) képződött nitrátion, a szénsavból ( $H_2CO_3$ ) kialakuló karbonátion mind-mind összetett ion, amelyen belül irányított kovalens kötéssel kapcsolódnak egymáshoz az atomok. Közös tulajdonságuk, hogy a központi atomhoz (S, P, N, C) egy vagy két oxigénatom kettős kötéssel, a továbbiak egyszeres kovalens kötéssel kapcsolódnak, majd ezekhez az oxigénekhez tartozik az ionos formában könnyen leadható hidrogén. A hidrogén-átmenetet követően a képződött összetett ionok közül tetraéderes elrendeződés jellemzi az ammóniából egy hidrogénion (proton) felvételével képződött ammóniumiont ( $NH_4^+$ ), illetve a szulfátion ( $SO_4^{2-}$ ) és a foszfátion ( $PO_4^{3-}$ ). Síkháromszög alakú pedig a vízmolekulából hidrogénion felvételével kialakuló oxóniumion ( $H_3O^+$ ), továbbá a karbonátion ( $CO_3^{2-}$ ) vagy a nitrátion ( $NO_3^-$ ). Ez utóbbi összetett ionokban a lokalizált, azaz helyhez kötött kettős kötés energetikailag nem kedvező, ezért a molekulaion szigma-vázát nem helyhez kötött, úgynevezett **delokalizált**  $\pi$ -elektronok stabilizálják (Whitten et al., 2014), így szimmetrikus elektroneloszlást kialakítva (59. ábra). Ahogy a neve is mutatja, ebben az esetben a kovalens kötést létrehozó elektronok nem „rögzülnek” két atomhoz, hanem helyüket változtathatják. A delokalizált kötés tehát olyan többcentrumú kötés, amit kettőnél több atomhoz tartozó kötőelektronok hoznak létre (a szerkezeti képletben általában szaggatott vonallal jelölik). Ilyen delokalizált kötés található a háromatomos oxigénmolekulában, az ózonban ( $O_3$ ), a háromdimenziós térrács-szerkezetű grafitban, de a fentebb említett benzolban ( $C_6H_6$ ) is, ahol a  $\pi$ -molekulapályán elhelyezkedő elektronok delokalizálódnak (Whitten et al., 2014; Gill, 2015).



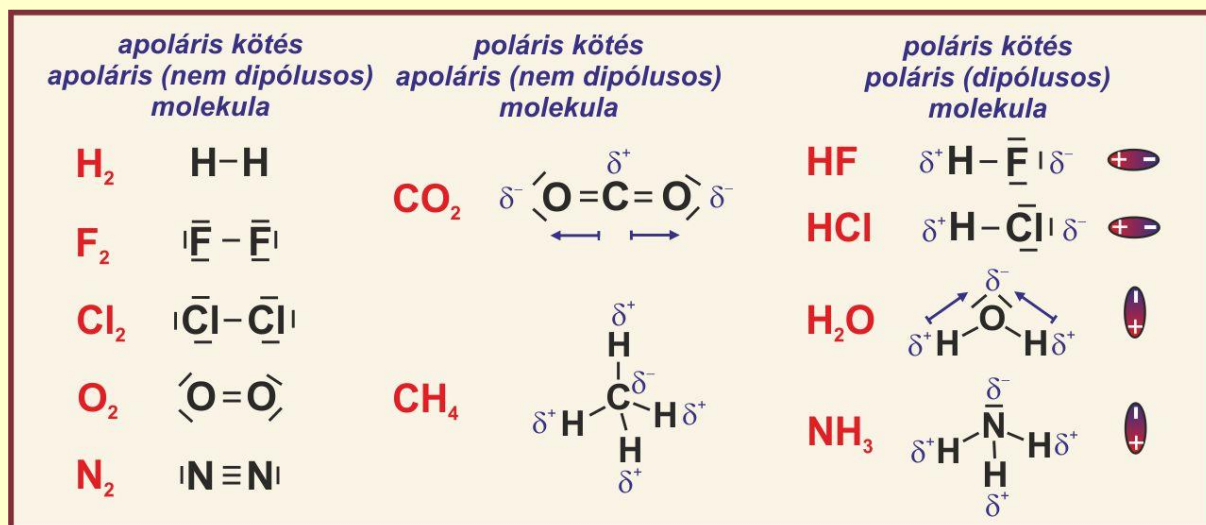
**59. ábra**

A delokalizált kovalens kötés

A kovalens kötés tárgyalásánál láttuk, hogy a kötő elektronok eredete alapján egyrészt kialakulhat úgy a kötés, hogy mindkét kötésben lévő atom hozzájárul a közös elektronpárhoz egy-egy elektronnal; másrészt úgy, hogy azokat csak egy atom adja. Ez utóbbi a datív kötés (pl. szén-monoxid, ammóniumion, oxóniumion). Másik csoportosítási lehetőség, ha azt vizsgáljuk, az adott kötés hány atomot kapcsol össze. Ebben az esetben megkülönböztethető a lokalizált kötés (két atom közötti kapcsolat) és a delokalizált kötés, amikor a közös elektronpár kettőnél több atomhoz tartozik. Az ózon példáján láttuk (59. ábra), hogy a semleges molekulán belül is kialakulhat lokális különbség a töltéseloszlásban, hiszen az elektronfelesleggel rendelkező helyek látszólagos (lokális) negatív töltést ( $\delta^-$ ), az elektronhiányos molekularészek pedig lokális pozitív töltést ( $\delta^+$ ) hordoznak. Mi ennek a magyarázata? Csoportosíthatjuk a kovalens kötet, illetve az elektromosan kifelé semleges kovalens molekulákat a töltéseloszlás helyzete szerint? A kérdésre a választ a kovalens kötés polaritásának vizsgálata adja meg, ami szerint megkülönböztetünk **apoláris** és **poláris kötések**et (Whitten et al., 2014).

A kovalens kötés polaritásakor a kapcsolódó atomok elektronegativitásának különbségét kell figyelembe vennünk. Azonos atomok kapcsolódásakor ez a különbség nulla ( $\Delta\text{EN} = 0$ ), azaz a két atom egyenlő mértékben vonzza maga közelébe a kötő elektronpárt, a töltéseloszlás szimmetrikus, a kötés apoláris. Abban az esetben azonban, ha különböző elektronegativitású atomok kapcsolódnak össze, a kötés poláris lesz ( $\Delta\text{EN} > 0$ ). Ebben az esetben a kötő elektronpár a nagyobb elektronegativitású atomhoz nagyobb mértékben tartozik, ami

aszimmetrikus töltéeloszlást eredményez. Kéttomos molekula polaritását a benne található kovalens kötés polaritása határozza meg. Többatomos molekula polaritása azonban nem csak a benne kialakuló kötések polaritásától függ, hanem a molekula alakjától is. Ha a poláris kötések elhelyezkedése a molekulában szimmetrikus, azaz a lokális pozitív és negatív töltés nagyság és irány szerint (vektoriálisan) kioltja egymást, a molekulának nem lesz dipólusmomentuma, apoláris lesz (pl. metán, szén-dioxid). Vannak azonban olyan aszimmetrikus molekulák, amelyekben a molekula egyik felén pozitív, a másik felén negatív pólus alakul ki (pl. ammónia, víz). Ezekben a molekulákban — noha kifelé elektromosan semlegesek — a kötést létrehozó elektronpár a nagyobb elektronegativitású atom közelében többet tartózkodik, ezért ott látszólagos (lokális, helyi) negatív töltés jön létre (60. ábra). A kisebb elektronegativitású atom ezért lokális pozitív töltésű része lesz a molekulának, ami így két pólussal rendelkezik, azaz dipólusos (poláris). A poláris molekuláknak dipólusmomentuma van, azaz közöttük gyenge elektrosztatikus kölcsönhatás léphet fel, ami a másodrendű kötések egyik altípusát alkotja (Whitten et al., 2014).



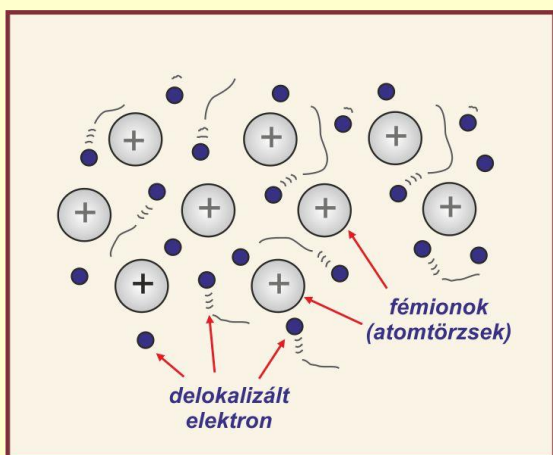
60. ábra

Kapcsolat a kovalens kötés polaritása és a kovalens kötésű molekula polaritása között

#### Megjegyzés:

A kovalens kötés akkor alakul ki, ha a kapcsolódó atomok elektronegativitásának különbsége nulla, vagy viszonylag kis érték (nemfémek). Az egyszeres kovalens kötés mindig szigma-kötés, a szigma-váz alakja (kötésszög) határozza meg a molekula vagy összetett ion alakját. A kettős kötés egy szigma- és egy pi-kötést tartalmaz, a hármas kötés egy szigma- és két pi-kötésből áll (Whitten et al., 2014).

Az elsőrendű kémiai kötések harmadik fő típusa a fémekre jellemző **fémes kötés**. Ezekben, annak ellenére, hogy azonos atomok között jön létre a kölcsönhatás ( $\Delta EN = 0$ ), nem alakulhat ki a kovalens kötés, hiszen nincs mód a stabil nemesgáz-szerkezetű vegyértékhéj kialakítására. Elektronegativitásuk és ionizációs energiájuk kisebb, mint a nemfémes elemeké, továbbá a fématomok legkülső elektronhéján (a vegyértékhéjon) kevés, viszonylag lazán kötött elektron van (Gill, 2015). Ezek a vegyértékelektronok könnyen gerjeszthetők, könnyen elmozdíthatók az adott atom környezetéből, ezért szilárd állapotban a pozitív töltésű fémionok kristályrácsba rendeződnek (fémrács), a fématomtörzsek közötti kapcsolatot pedig a nem helyhez kötött, azaz delokalizált elektronrendszer teremti meg, ez a fémes kötés (61. ábra).



**61. ábra**

A fémes kötés kialakulása: közös elektronfelhő

Ez gyakorlatilag azt jelenti, hogy a kapcsolódó összes fématom leadja a vegyértékelektronját, így valamennyi fématomtörzs az összes elektron („elektronfelhő”) közös gazdája lesz. A fémrács rácspontjaiban a fématomok atomtörzsei találhatók, az elektronok pedig szabadon mozognak a kristályrácsban. A vegyértékelektronok mobilitása miatt — az ionos kötéshez hasonlóan — a fémes kötés sem irányított kölcsönhatás. Ez teszi lehetővé, hogy a fémek jó hő- és elektromos vezetőképeségű anyagok. A fémek nem átlátszóak (opakok), fémes fényűek, legtöbbjük szilárd és kemény, de alakítható. A fémes kötés erősségét mutatja, hogy forráspontjuk általában magas (Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014; Gill, 2015). Az átmenetifémek olvadás- és forráspontja egyaránt magas (kivéve a higanyt), és köztük vannak a legnagyobb sűrűségű elemek (pl. platinacsoport fémek).

Érdekesség, hogy a nemfémes elemek klasszikus példája, a hidrogén a kovalens kötésnél megismert elemi formáján, a kétatomos molekulán ( $H_2$ ) túl kialakíthat a fémekre jellemző elektronszerkezetet. Extrém nagy nyomású kísérletek tapasztalatai alapján úgy gondolják, hogy ilyen körülmények között fémes hidrogén jön létre. A Naprendszer külső óriásbolygói közül a Jupiter és a Szaturnusz erős mágneses mezejét a bolygók belsejében „összenyomott” (komprimált) fémes

hidrogén mozgása okozhatja, amit a dinamóelvvvel magyaráznak (Moore, Nicolson, 1992; Gill, 2015).

### **Jó tudni!**

#### **A kovalens kötés rejtélye: a Lewis-féle kötésmodelltől a kvantummechanikai megközelítésig**

A Lewis-féle kötésmodell (1916) szerint a kovalens kötés két atom között elektronpár megosztásával létrejött kémiai kapcsolat, amely során a kapcsolódó atomok egy-egy párosítatlan elektronjukat „közös használatba adják”. Ezek ellentétes spinnel történő párosításából alakul ki a közös elektronpár. Ennek kvantummechanikai értelmezése szerint az ellentétes spinnel párosított elektronok a kötést úgy hozzák létre, hogy a kötő elektronpárt adó atompályák maximálisan átfedjenek. Alapvető tehát, hogy kötés abban az irányban fog kialakulni, amelyik irányba az atomi pályák mutatnak (vegyértékkötés-elmélet, „*Valence Bond theory*”, VB-elmélet). A vegyértékkötés-elmélet kiválóan alkalmazható olyan kétatomos molekulák, mint a hidrogénmolekula ( $H_2$ ) vagy a fluormolekula ( $F_2$ ) szerkezetének az értelmezésére. Problémát okozott viszont, hogy ezzel a megközelítéssel bizonyos egyszerű és közönséges molekulák, mint például a víz ( $H_2O$ ) alakja kellő pontossággal nem magyarázható. Ennek feloldására kidolgozták a vegyértékelektronpár taszítási elméletet („*Valence Shell Electron Pair Repulsion theory*”, VSEPR-elmélet), ami szerint a központi atom körüli elektronpárok taszítják egymást. Ezek az elektronpárok úgy próbálnak elhelyezkedni a molekulában, hogy a lehető legmesszebb kerüljenek egymástól. Az úgynevezett hibridizáció és a hibridpályák (pl.  $sp$ ,  $sp^2$ ,  $sp^3$ ) segítségével létre lehetett hozni a megfelelő irányba mutató molekulapályákat, azonban a számított kötésszög nem lett minden esetben helyes. Ezt azzal a kiegészítő feltételezéssel oldották fel, hogy a nemkötő (magányos) elektronpárnak nagyobb a térigénye — és így a taszító hatása — mint egy kötő elektronpárnak, ami a szimmetrikus térbeli alakzatokhoz képest a kötésszögek kismértékű változását eredményezi (Whitten et al., 2014).

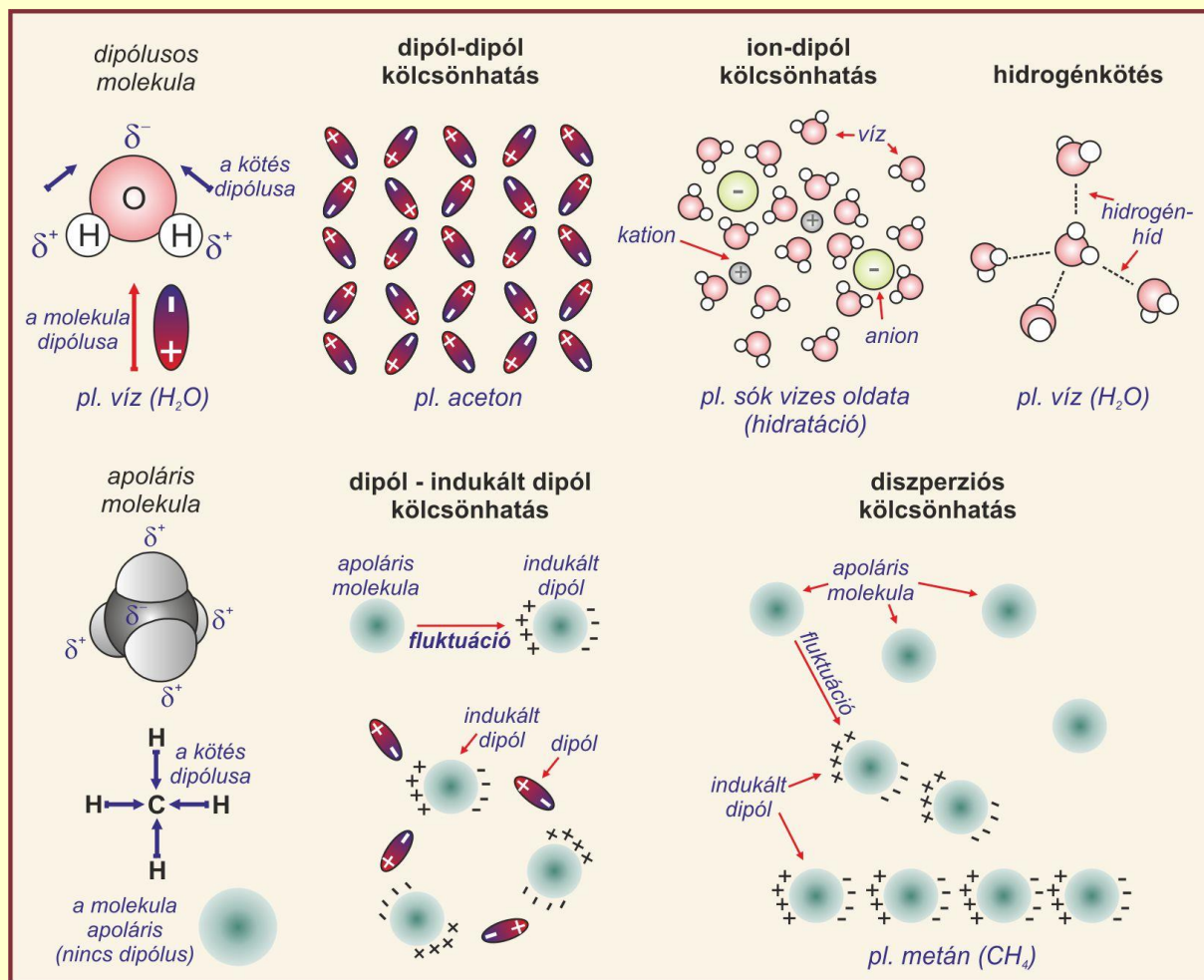
Mai ismereteink szerint a molekulák elektronszerkezetének leírása nem alapulhat más törvényszerűségeken, mint amiket az atomok szerkezetének leírásakor megismertünk. Így született meg a molekulapálya-módszer („*Molecular Orbital*”, MO-elmélet), aminél az atomszerkezettel kapcsolatos ismereteket a molekulákra is kiterjesztették.

E szerint a kovalens kötést létrehozó közös elektronpár molekulapályán helyezkedik el, ami nem más, mint az atompályák átfedéséből kialakult, két vagy több atomhoz tartozó közös elektronok pályája. A molekulapálya a kvantummechanikai definíció szerint az a térrész a molekulában, ahol a kötőelektronpár legalább 90%-os valószínűséggel megtalálható. Természetesen a molekulapályák száma megegyezik a kombinációban felhasznált összes atompálya számával. A kialakult molekulapályákat — az atompályákhoz hasonlóan — a növekvő energiaszint szerint rendezzük, majd a legalacsonyabb energiájú pályától kezdve „betöltjük” a rendelkezésre álló elektronokkal.

Az atompályák azonos fázisú kombinációjával kötő molekulapálya, ellentétes fázisú kombinációjával lazító molekulapálya jön létre. Az MO-elmélet szerint tehát bármely molekulában az elektronpárok nem kizárólag a kötést létrehozó két meghatározott atom között találhatók (mint a VB-elméletben), hanem a molekulapályák révén az egész molekulára kiterjedhetnek. A molekulák azért jönnek létre, mert az elektronok a molekulapályákon alacsonyabb energiájú állapotban vannak, mint amikor atomi pályákon helyezkednek el (Atkins, 1992; Whitten et al., 2014).

## 5.2. Másodrendű kémiai kölcsönhatások

A semleges molekulák és a lezárt elektronhéjú, inert atomok (pl. nemesgázok) között fellépő kölcsönhatások az elsőrendű kémiai kölcsönhatásoknál néhány nagyságrenddel gyengébbek, ezért összefoglaló nevük másodrendű (másodlagos, intermolekuláris) kémiai kötések (62. ábra). A másodrendű kötések felszakítása kisebb energiát (általában 10–40 kJ/mol; <60 kJ/mol) igényel. Az anyagi halmazok részecskéi (molekulák, ionok, atomok) között gyenge elektrosztatikus kölcsönhatás révén alakulnak ki. Poláris molekulák között megkülönböztetünk dipól-dipól vagy ion-dipól kölcsönhatást; a dipól-dipól kölcsönhatás egyik altípusa a hidrogénkötés. Apoláris molekulák és stabil atomok között a **diszperziós kölcsönhatás** lép fel (Atkins, 1992; Rózsahegyi, 1993; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).



62. ábra

A másodrendű kémiai kölcsönhatások leggyakoribb típusai

A **dipól-dipól kölcsönhatás** („dipóluskötés”, dipólus-dipólus kölcsönhatás) poláris molekulák között jön létre, amelyekben az egyenlőtlen elektroneloszlás állandó (permanens) dipólusmomentumot eredményez. A dipólusos molekulák között fellépő elektrosztatikus erők miatt azok ellentétes töltésű centrumai kerülnek egymás közelébe, azaz a szomszédos molekulák többé-kevésbé azonos irányba állnak be dipólusaik szerint (62. ábra), ezért a dipól-dipól kölcsönhatás térben irányított. Erőssége 4–8 kJ/mol nagyságrendű. A dipól-dipól kölcsönhatások bizonyos anyagi tulajdonságokat (pl. magasabb forráspont) befolyásolnak.

Ionok és dipólusok között is kialakulhat elektrosztatikus kölcsönhatás, például ionos vegyületek poláris oldószerben (pl. aceton) való oldásakor. Az úgynevezett ion-dipól kölcsönhatás során az oldhatóság többnyire ennek a gyenge másodrendű kölcsönhatásnak tulajdonítható. A víz szintén poláris oldószer, ezért az ionos kötésű vegyületek (pl. konyhasó, NaCl) vízben való oldódása ion-dipól kölcsönhatásnak tekinthető; ezt a folyamatot **hidratációnak** nevezzük (Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

A poláris vízmolekulák között fellépő speciális dipól-dipól kölcsönhatás a **hidrogénkötés** (hidrogénhíd), ami a legerősebb intermolekuláris kölcsönhatás (a hidrogénkötés kötési energiája általában 10–60 kJ/mol). Ezen belül egy hidrogénkötés akkor tekinthető gyengének, ha energiája <25 kJ/mol; közepes erősségű, ha energiája 25–40 kJ/mol tartományba esik; az erős hidrogénhíd kötési energiája 40–60 kJ/mol közötti (Greenwood, Earnshaw, 2004). Kialakulásának feltétele, hogy a molekulában a H-atom kovalens kötéssel kapcsolódjon egy kisméretű, de nagy elektronegativitású és nemkötő elektronpárral rendelkező atomhoz (62. ábra). Elsősorban három elem képes ilyen kötés kialakítására, a fluor (F), az oxigén (O) és a nitrogén (N). A hidrogénhidat általában az egyik molekula hidrogénje hozza létre egy másik molekula nagy elektronegativitású atomjának nemkötő elektronpárjával (intermolekuláris hidrogénkötés), tehát a hidrogénkötés térben irányított. Ilyen összetartó erő felel a víz (H<sub>2</sub>O) kis molekulatömegéhez képest kiemelkedően magas olvadás- és forráspontjáért, hiszen a hasonló szerkezetű, de jóval nagyobb molekulatömegű kén-hidrogén (H<sub>2</sub>S) — hidrogénhidak hiányában — szobahőmérsékleten gáz halmazállapotú. A hidrogénkötés molekulán belül is kialakulhat (intramolekuláris hidrogénkötés a cukrokban), ekkor gyűrűképződés jöhet létre (pl. a DNS kettős hélix szerkezetének kialakítása). Gyakorlati szempontból a hidrogénkötés jelentősen befolyásolja az olvadás- és forráspontot, továbbá fontos szerepe van a nukleinsavak, a fehérjék és más biopolimerek térszerkezetének

kialakításában (Atkins, 1992; Rózsahegyi, 1993; Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

Állandó dipólussal nem rendelkező, azaz apoláris molekulák átmenetileg dipólussá válhatnak abban az esetben, ha az elektronok valamely külső hatásra ideiglenesen aszimmetrikus elrendeződést vesznek fel. Ilyen külső hatás lehet például egy dipólusos molekula polarizáló hatása (dipól-indukált dipól kölcsönhatás), vagy az apoláris molekulák pillanatnyi elektroneloszlásának megváltozása az elektronok rezgése következtében (indukált dipól-indukált dipól kölcsönhatás). Az így keletkező, úgynevezett indukált (kiváltott, gerjesztett) dipólusok a szomszédos molekulákra is hatnak, torzítják azok szimmetrikus elektroneloszlását (pillanatnyi polarizáció), így további átmeneti dipólusokat indukálnak. Az egymásra ható molekulák között igen gyenge, nem irányított kötőerő lép fel, ami nagyon rövid hatótávolságon belül, de stabilizálja a töltéseltolódásokat (**62. ábra**). Ezt a gyenge másodrendű kölcsönhatást diszperziós, vagy *London-féle kölcsönhatás*nak, illetve **van der Waals-kötés**nek nevezzük (Whitten et al., 2014; Gill, 2015). A diszperziós kölcsönhatás hétköznapi analógiája a közönséges tépőzár lehet: egy összekapcsolódó kampó és hurok rögzítő hatása elhanyagolhatóan gyenge, de ha egymás mellett nagyszámú kampó és hurok között jön létre kapcsolat, az együttes rögzítő hatás („vonzás”) már számottevő (Whitten et al., 2014).

Az apoláris molekulák és a stabil atomok (nemesgázok) között kialakuló kötés létrejöttének oka a fenti diszperziós effektus, amit az egymás közelébe kerülő atomok vagy molekulák elektronfelhőjének egymásra kifejtett deformáló hatása eredményez. Ez a hatás annál erősebb, minél gyengébben kötődnek a külső elektronok az atommaghoz, azaz minél nagyobb méretű a molekula. A kétatomos apoláris halogénmolekulák példáján kiválóan megfigyelhetjük a méret (és atomtömeg) növekedésével erősödő másodrendű kötés hatását. Valamennyi halogénatom aktív vegyértékhéj-szerkezetű (hetedik főcsoport: hét vegyértékelektron), ezért kovalens kötéssel összekapcsolódva elemi formában kétatomos molekulákat alkotnak ( $F_2$ ,  $Cl_2$ ,  $Br_2$ ,  $I_2$ ), elérve a stabil nemesgáz-szerkezetet. Az így képződött molekulák nem rendelkeznek dipólusmomentummal, közöttük gyenge diszperziós kölcsönhatás kialakulására van mód. A legkisebb méretű fluormolekulában, illetve a valamivel nagyobb klórmolekulában ez a kapcsolat olyan gyenge, hogy normál légköri nyomáson, szobahőmérsékleten mindkét elem gáz halmazállapotú. A brómmolekula mérete már olyan nagy, hogy azokat a másodrendű kölcsönhatás képes tartósan

összekapcsolni viszonylag rendezett anyagi halmazzá, a bróm közönséges körülmények között folyadék. A főcsoport legnehezebb eleme a jód, a jódmolekulákat összetartó diszperziós kölcsönhatás már olyan erős, hogy a jód szilárd halmazállapotú, kristályos anyag (Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014). A cseppfolyós nitrogénben vagy szén-dioxidban („szárazjég”), illetve a nemesgázok atomjai között cseppfolyós és szilárd állapotban diszperziós eredetű indukált dipólusok között fellépő kapcsolat jön létre. Ha nem léteznének a diszperziós erők, a szimmetrikus, apoláris molekulákat, illetve az egyatomos anyagokat (nemesgázok) nem lehetne kondenzálni, azaz kis hőmérsékleten és/vagy nagy nyomáson cseppfolyós vagy szilárd halmazállapotban tárolni (Whitten et al., 2014).

#### **Megjegyzés:**

A kémiai kötések megismerését követően érdemes átismételni az első (1. *Tudtad már? Alapfogalmak*) és a negyedik (4. *Az atomszerkezettől a periódusos rendszerig*) fejezet témaköreit! Az atomokból szerveződő anyag (pl. levegő, víz, ásványok és kőzetek) számos fizikai és kémiai tulajdonsága az atomok elektronszerkezetétől, illetve az általa szabályzott kémiai kötések jellegétől függ. Ezek az ismeretek nélkülözhetetlenek a természetben lejátszódó földtudományi folyamatok elemzéséhez és megértéséhez.

## 5. Kölcsönhatások, fogalomtár

**Apoláris kötés:** a kapcsolódó atomok elektronegativitásának különbsége nulla ( $\Delta EN = 0$ ). Azonos atomok kapcsolódásakor a két atom egyenlő mértékben vonzza maga közelébe a kötő elektronpárt, ezért a töltéeloszlás szimmetrikus.

**Datív kötés:** a kötésben részt vevő elektronpárt csak az egyik atom szolgáltatja. Ezt az atomot donornak, a másikat akceptornak nevezzük.

**Delokalizált kötés:** többcentrumú kötés, kettőnél több atomhoz tartozó kötőelektronok hozzák létre (pl. ózon, karbonát-ion, benzol). A kötést létesítő elektronok azonos valószínűséggel egyszerre több atomtörzshöz tartoznak.

**Dipól-dipól kölcsönhatás:** gyenge másodrendű kémiai kölcsönhatás, a poláris molekulák között lép fel.

**Diszperziós kölcsönhatás:** gyenge másodrendű kémiai kölcsönhatás, az apoláris részecskék közötti másodrendű kötés.

**Egyszeres kötés:** olyan kovalens kötés, amelyet egy megosztott elektronpár hoz létre. Az egyszeres kötés mindig szigma-kötés.

**Elsőrendű (elsődleges) kémiai kötések:** azok a kötések, amelyek kialakulása során a kapcsolódó atomok vegyértékhéj-szerkezete megváltozik. Kovalens, ionos, fémes (a kötési energia általában  $>20$  kJ/mol).

**Fémes kötés:** a rácspontokban lévő fématomtörzseket delokalizált elektronok tartják össze. A fémekben a részecskék közötti kapcsolatot az ún. delokalizált (nem helyhez kötött) elektronrendszer teremti meg, ez a fémes kötés. Szilárd állapotban a fémionok kristályrácsokba rendeződnek (fémrács).

**Hármas kötés:** olyan kovalens kötés, amelyet három megosztott elektronpár (egy szigma- és két pi-kötés) hoz létre.

**Hibridizáció:** a vegyértékhéj atompályái úgy kombinálódnak, hogy az atompályák energiaszintjei azonosra válnak, így azokon egyenletes elektroneloszlás jön létre.

**Hidratáció:** vízben való oldódáskor az oldott anyag és a víz között kialakuló kölcsönhatás következtében az oldott anyag részecskéi körül vízburok (*hidrátburok*) jön létre.

**Hidrogénkötés (hidrogénhíd):** a legerősebb másodrendű kölcsönhatás (a dipól-dipól kölcsönhatás altípusa). A molekulában kötött H-atom hozza létre a kötést egy másik molekula

nagy elektronegativitású atomjával (F, N, O), vagyis egy hidrogénatom létesít kötést két másik atom között.

**Ionos kötés:** a fémes és a nemfémes elemek között úgy jön létre, hogy a fématomok elektronleadással pozitív, a nemfém-atomok elektronfelvétellel negatív ionná alakulnak. Az ellentétes töltésű ionok elektrosztatikus vonzást gyakorolnak egymásra, és így kristályrácsba rendeződnek.

**Ionrács:** a kristályrács rácspontjaiban pozitív és negatív ionok helyezkednek el.

**Irányított kötés:** csak meghatározott irányban alakulhat ki a kémiai kötés. A kovalens kötés jellemzője. A kötések a molekulára jellemző szöget zárnak be egymással, ezért a molekuláknak határozott alakja van. A kapcsolódó atomok térbeli elrendeződését, azaz a molekulák alakját döntően a központi atom kötő, illetve nemkötő elektronpárjainak száma és ezek aránya határozza meg.

**Kettős kötés:** olyan kovalens kötés, amelyet két megosztott elektronpár (egy szigma- és egy pi-kötés) hoz létre.

**Kémiai kötés:** azonos vagy különböző elemek atomjai közötti olyan kölcsönhatás, ami következtében az atomok összekapcsolódnak, és így atomcsoportokat, molekulákat, összetett ionokat vagy vegyületeket alkotnak.

**Kovalens kötés:** közös elektronpár által létrehozott kötés. Lehet egyszeres, kétszeres és háromszoros aszerint, hogy egy, két vagy három elektronpár hozza létre. Lehet apoláris, ha a kötő elektronpárok mindkét atomhoz egyenlő mértékben tartoznak. Lehet poláris, ha a kötő elektronpár eltolódik a nagyobb elektronegativitású atom felé.

**Kötéshossz:** a kapcsolódó atomok (atommagok) közötti távolság.

**Kötési energia:** az adott típusú kémiai kötés felbontásához szükséges (vagy a kötés létrejöttkor felszabaduló) energia átlagos értéke, 1 mol anyagra viszonyítva ([kJ/mol]).

**Kötésrend:** megkapjuk, ha a kötő elektronpárok számából kivonjuk a lazító elektronpárok számát (kovalens kötés).

**Kötésszög:** a kapcsolódó atomok atommagjait gondolatban összekötő egyenesek által bezárt szög.

**Kötő elektronpár:** két atommag erőteréhez egyaránt tartozó (megosztott), párosítatlan

elektronok kombinálódásával létrejött, ellentétes spinű két elektron, azaz elektronpár (kötő molekulapályán található).

**Lazító elektronpár:** lazító molekulapályán elhelyezkedő elektronpár.

**Lazító pálya** (molekulapálya): a lazító molekulapálya energiaszintje magasabb, mint az azt kialakító atompályák energiaszintje. Ezért, ha elektronokkal töltődik fel, a molekula vagy ion instabillá válik. Jelölése felső indexbe helyezett \* karakterrel történik (pl.  $\sigma^*$  vagy  $\pi^*$ ).

**Másodrendű (másodlagos) kötések:** azok a kötések, amelyek gyenge elektrosztatikus kölcsönhatás révén az anyagi halmazok részecskéi (atomok, molekulák, ionok) között alakulnak ki (a kötési energia általában 1–20 kJ/mol). Megkülönböztethetők a dipól-dipól, az ion-dipól és a diszperziós kölcsönhatások, illetve a hidrogénkötés (speciális dipól-dipól kölcsönhatás).

**Molekulapálya:** a molekulák képződése során a kapcsolódó atomok atompályáiból alakul ki,

energiája és alakja eltér az atompályákétól. Lehet nemkötő, kötő vagy lazító.

**Nemkötő elektronpár:** egyetlen atommag környezetében helyezkedik el; nem vesz részt a kötésben (nemkötő molekulapályán található).

**Pi-kötés:** a kötő elektronpár elektronsűrűsége a kötés tengelyére merőlegesen a legnagyobb. Kettős vagy hármas kötésre (kovalens) jellemző.

**Poláris kötés:** ha különböző elektronvonzó képességű atomok kapcsolódnak össze, a kötő elektronpár a nagyobb elektronegativitású atomhoz nagyobb mértékben tartozik, ami aszimmetrikus töltéeloszlást eredményez, tehát a kötés poláris lesz ( $\Delta EN > 0$ ).

**Sigma-kötés:** a kötő elektronpár elektronsűrűsége a kötés tengelye mentén a legnagyobb. Az egyszeres kovalens kötés mindig szigma-kötés.

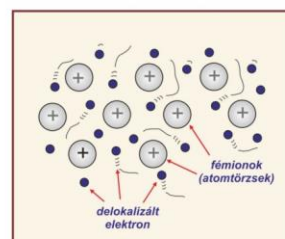
**Van der Waals-kötés:** gyenge elektrosztatikus vonzóerőn alapuló és semleges atomok, illetve molekulák között fellépő, igen gyenge kötőerők.

### Tipp a tanuláshoz:

A kinyomtatott és kivágott információs kártya közepén kettéhajtva, majd összeragasztva könnyen elkészíthető. A tanulás és az ismétlés praktikus eszköze lehet.

#### fémek kötés

A fémekre jellemző kémiai kapcsolat, amelyet a delokalizált elektronrendszer teremt meg.



Az idegen szavak, szakkifejezések, fogalmak (definíciók), bonyolult szerkezeti képletek tanulását megkönnyíti, ha *információs kártyák* segítségével tanulod azokat. Az eddig ismeretlen vagy nehezen megjegyezhető (könnyen elfelejthető) képletekből, illetve a hozzájuk kapcsolódó fogalmakból érdemes nyomtatható, kétoldalas kártyákat készíteni. A kártya egyik oldalára csak a fogalom kerüljön, a másik oldalára a meghatározás, illetve a kapcsolódó jellemző ábra (ha van). A kártyák használatakor célszerű oda-vissza felidézni a szükséges ismereteket, azaz egyszer megadni a fogalom pontos meghatározását, másszor a meghatározás alapján felidézni az annak megfelelő fogalmat. Az információs kártyák rendszeres használata egyrészt gyors és kiváló eszköze az ismétlésnek, másrészt az ismeretek hosszú távú rögzítését segíti elő.

## 5. Kölcsönhatások – Önellőrző kérdések, feladatok

**5.1.** Milyen kötésű vegyület (ionos vagy kovalens) várható az alábbi kiindulási anyagok reakciójának termékeként? a)  $H_2 + O_2$ ; b)  $C + O_2$ ; c)  $Na + Cl_2$ ; d)  $N_2 + H_2$ ; e)  $Ca + Cl_2$

**5.2.** Milyen kötésű vegyület (ionos vagy kovalens) várható az alábbi kiindulási anyagok reakciójának termékeként? a)  $H_2 + S$ ; b)  $S + O_2$ ; c)  $K + Cl_2$ ; d)  $Mg + F_2$ ; e)  $H_2 + C$

**5.3.** Milyen kötésű vegyület (ionos vagy kovalens) várható az alábbi kiindulási anyagok reakciójának termékeként? a)  $Li + Br_2$ ; b)  $P + O_2$ ; c)  $Na + I_2$ ; d)  $Sr + Cl_2$ ; e)  $Ba + Cl_2$

**5.4.** Milyen kémiai kötések vannak az alábbi vegyületekben? a)  $NH_4Cl$ ; b)  $KNO_3$ ; c)  $Na_2SO_4$

**5.5.** A kötéstípus alapján melyik molekula a kakukktójás? Miért? a)  $HCl$ ; b)  $H_2O$ ; c)  $N_2$ ; d)  $CH_4$ ; e)  $F_2$

**5.6.** A kötéstípus alapján melyik molekula a kakukktójás? Miért? a)  $HF$ ; b)  $CO_2$ ; c)  $O_2$ ; d)  $C_2H_4$

**5.7.** Az elektronegativitás értékek (47. ábra) segítségével becsüld meg a kialakuló kötés jellegét a következő kapcsolódó atomok között! a)  $Rb + F$ ; b)  $Al + O$ ; c)  $Cs + Cl$ ; d)  $S + O$

**5.8.** A periódusos rendszerben elfoglalt helyük alapján gyakori vegyületeikben milyen kémiai kötés kialakítására hajlamosak az alábbi atomok? a)  $H$ ; b)  $Ne$ ; c)  $Br$ ; d)  $Mg$ ; e)  $K$

**5.9.** Az intermolekuláris kölcsönhatások alapján melyik a kakukktójás? Miért? a)  $H_2O$ ; b)  $NH_3$ ; c)  $H_2S$

**5.10.** A molekula polaritása alapján melyik a kakukktójás? a)  $H_2O$ ; b)  $HF$ ; c)  $CH_4$

**5.11.** Milyen kémiai kölcsönhatásokkal jellemezhető a víz?

**5.12.** Milyen kémiai kölcsönhatásokkal jellemezhető a nitrogéngáz?

**5.13.** Milyen kémiai kölcsönhatásokkal jellemezhető a cseppfolyós nitrogén?

## 5. Kölcsönhatások – Önellőrző kérdések, megoldások

**5.1.** a) kovalens; b) kovalens; c) ionos; d) kovalens; e) ionos

**5.2.** a) kovalens; b) kovalens; c) ionos; d) ionos; e) kovalens

**5.3.** a) ionos; b) kovalens; c) ionos; d) ionos; e) ionos

**5.4.** a)  $NH_4Cl$ : ionos kötés az ammóniumion és a kloridion között, az ammóniumion összetett ion, amin belül a nitrogén és a hidrogén kovalens kötéssel kapcsolódik; b)  $KNO_3$ : ionos kötés a káliumion és a nitrátion között, a nitrátion összetett ion, amin belül a nitrogén és az oxigén kovalens kötéssel kapcsolódik; c)  $Na_2SO_4$ : ionos kötés a nátriumion és a szulfátion között, a szulfátion összetett ion, amin belül a kén és az oxigén kovalens kötéssel kapcsolódik

**5.5.** c)  $N_2$ ; ebben hármass kovalens kötés van, a többiben egyszeres

**5.6.** a)  $HF$ ; ebben egyszeres kovalens kötés van (csak szigma), a többiben pi-kötés (kettős kötés) is

**5.7.** a)  $Rb(EN)=0,8$  és  $F(EN)=4,0$ ,  $\Delta EN=4,0-0,8=3,2$ , azaz a kötés ionos ( $\Delta EN > 2$ ); b)

$Al(EN)=1,5$  és  $O(EN)=3,5$ ,  $\Delta EN=2$ , azaz a kötés ionos, gyenge kovalens jelleggel; c)  $Cs(EN)=0,7$  és  $Cl(EN)=3,0$ ,  $\Delta EN=2,3$ , azaz a kötés ionos ( $\Delta EN > 2$ ); d)  $S(EN)=2,5$  és  $O(EN)=3,5$ ,  $\Delta EN=1,0$ , azaz a kötés kovalens

**5.8.** a)  $H$ : első főcsoport, nemfémes, kovalens; b)  $Ne$ : nyolcadik főcsoport, nemfémes, stabil oktett-szerkezetű vegyértékhéj, inert; c)  $Br$ : hetedik főcsoport, nemfémes, anionképző, ionos; d)  $Mg$ : második főcsoport, alkáliföldfém, kationképző, ionos; e)  $K$ : első főcsoport, alkálifém, kationképző, ionos

**5.9.** c)  $H_2S$ , nem alakul ki hidrogénhíd

**5.10.** c)  $CH_4$ , ez apoláris molekula

**5.11.** A víz ( $H_2O$ ) poláris molekula, a vízmolekulák között hidrogénkötés jön létre; egy molekulán belül egyszeres kovalens kötések ( $H-O$ ) találhatók.

**5.12.** A  $N_2$  apoláris molekula, az intermolekuláris kötőerő gyenge, diszperziós kölcsönhatás. Intramolekuláris kötés: hármass kovalens kötés

**5.13.** Intermolekuláris: diszperziós kölcsönhatás; intramolekuláris: hármass kovalens kötés

# 6.

## Kémiai kölcsönhatás és halmazállapot



### Témakörök

#### 6.1. Szilárd halmazállapot: ásványok és kristályrácsok

- amorf és kristályos anyagok; tömegpont és térrács, koordináció
- átmenet az ideális kötéstípusok között: a polarizáció
- ionrácsok–ionkristályok: a kősórács, a cézium-klorid rácsa, a fluoritrács; az ionrácsos vegyületek általános fizikai tulajdonságai
- atomrácsok: a gyémántrács és a szfaleritrács; az atomrácsos kristályok általános fizikai jellemzői; a grafitrács
- fémek és ötvözetek: fémrácsok (réz-típusú rács) és fizikai tulajdonságaik
- a molekularács és a molekularácsos kristályok fizikai jellemzői

#### 6.2. Folyadékok: viszkozitás, felületi feszültség, gőznyomás

- a folyadékok általános jellemzése, legfontosabb tulajdonságai

#### 6.3. Gázok és gáztörvények

- ideális és reális gázok, gáztörvények

## 6. Kémiai kölcsönhatás és halmazállapot

6.1. Szilárd halmazállapot: ásványok és kristályrácsok

6.2. Folyadékok: viszkozitás, felületi feszültség, gőznyomás

6.3. Gázok és gáztörvények



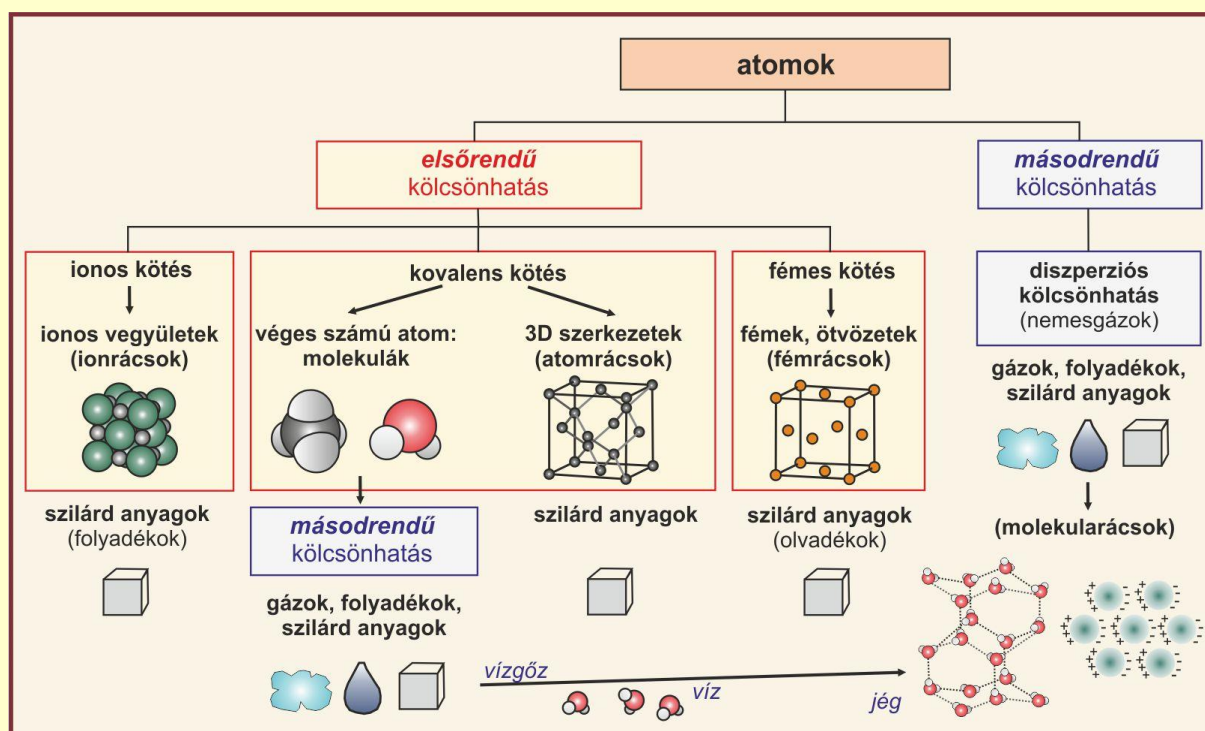
***Ha megtanulod ezt a fejezetet, képes leszel arra, hogy***

- megfogalmazd a különböző halmazállapotok (szilárd, folyékony, gáz) legfontosabb tulajdonságait;
- földtudományi példákon keresztül elmagyarázd az amorf és a kristályos szilárd anyagok általános jellemzői közötti különbséget;
- bemutasd a különböző rács típusok (ion-, atom-, fém- és molekularács) és a jellemző fizikai tulajdonságok közötti kapcsolatot;
- földtudományi példákon keresztül elmagyarázd a folyadékok általános jellemzőit (viszkozitás, felületi feszültség, tenzió) és azok jelentőségét;
- alkalmazd a gázok állapotváltozói közötti legfontosabb összefüggéseket (ideális gázok törvényei).

## 6.1. Szilárd halmazállapot: ásványok és kristályrácsok

Az ötödik fejezetben, a halogének és a nemesgázok példáján már felmerült a kapcsolat a molekulák és az egyatomos elemek halmazállapota és a közöttük fellépő kémiai kölcsönhatás között. Ismereteink szerint valamely anyag halmazállapotát egyrészt annak kémiai tulajdonságai, másrészt a környezetének alapvető fizikai tulajdonságai (a nyomás és a hőmérséklet) határozzák meg. A kémiai tulajdonságok döntően az anyagot alkotó elemek elektronszerkezetétől, illetve a kémiai kötések jellegétől függenek. Normál légköri nyomáson és szobahőmérsékleten a periódusos rendszer legtöbb eleme szilárd halmazállapotú, csupán a bróm ( $\text{Br}_2$ ) és a higany ( $\text{Hg}$ ) cseppfolyós. A hidrogén ( $\text{H}_2$ ), a nitrogén ( $\text{N}_2$ ), az oxigén ( $\text{O}_2$ ), a fluor ( $\text{F}_2$ ), a klór ( $\text{Cl}_2$ ) és a nemesgázok légneműek (42. ábra). Láttuk azonban, hogy a legtöbb elem nem fordul elő atomos (vagy elemi) formában a Földön. Az atomok és az ionok között kialakuló, elsőrendű kémiai kölcsönhatások révén a szilárd anyagok változatos világa jött létre. Az ionos kötés megadott, optimális távolságban rögzíti egymáshoz képest az aniont és a kationt, ezért az ionvegyületek **kristályos anyagok** (ionrács), szilárd halmazállapotúak. A kovalens kötés diszkrét számú atomot összekapcsolva viszonylag kisméretű molekulákat eredményez, amelyek kifelé semlegesek, közöttük gyenge másodrendű kölcsönhatás léphet csak fel. Ennek megfelelően a kovalens kötésű molekulák többnyire gázok (hasonlóan az egyatomos nemesgázokhoz), illetve folyadékok; de a környezet nyomásától és hőmérsékletétől függően szilárd halmazállapotban (**molekularács**) is ismertek. A kovalens kötéssel összekapcsolódó nagyszámú atom (pl. gyémánt, grafit) viszont háromdimenziós (3D), úgynevezett **atomrácsos** szerkezetű. Szilárd halmazállapotúak továbbá a fémes kötésű fémek és ötvözetek, amelyekre a **fémrács** jellemző (63. ábra). Földünk felépítésében kiemelt szerepe van a szilárd anyagoknak, ezeken belül is a kristályos szilárd fázisoknak, ezért a halmazállapotok legfontosabb jellegzetességeinek tárgyalását a szilárd halmazállapottal kezdjük.

A Föld-típusú bolygók és holdjaik közetövé, valamint a meteoritok szilárd anyagát, kémiai heterogén, nagy kiterjedésű **ásványtársulások**, azaz a **kőzetek** alkotják. A különböző eredetű, összetételű és tulajdonságú kőzetek határozott belső szerkezettel, továbbá adott kémiai összetétellel rendelkező ásványokból (pl. szilikátok, karbonátok, oxidok, szulfidok) állnak (Koch, Sztrókay, 1994; Gill, 2015).



**63. ábra**

A kémiai kölcsönhatás jellege és az anyagok halmazállapota közötti összefüggés

Szilárd halmazállapotban minden anyagnak — beleértve az ásványokat is — önálló térfogata és alakja, azaz állandó formája van. A szilárd anyagban az ionok, atomok vagy molekulák egymáshoz viszonyított helyzete közel állandó (csak rugalmas alakváltozás lehetséges), egymáshoz képest tetszőleges távolságra nem mozdulhatnak el. A szilárd anyagokat szerkezetük alapján **amorf** és kristályos **anyagokra** oszthatjuk fel (Koch, Sztrókay, 1994; Bárány et al., 2011; Gill, 2015).

Az amorf (formátlan, alakatlan) anyagok nem kristályosak, melegítéskor fokozatosan lágyulnak meg. Nincs határozott olvadáspontjuk és összetételük sem állandó, tehát kémiai képlettel nehezen jellemezhetőek. Kisebb egységeik gömbszerűek vagy a gömbfelület részeihez hasonló felületűek, mert a növekedési sebességük a tér minden irányában egyenlő (**izotróp**). Ilyen természetes anyag például a vulkáni üveg (pl. obszidián), ami túlhűlt olvadék, illetve a beszáradt gélként értelmezhető opál (víztartalmú  $\text{SiO}_2$ -változat) és a vas-oxihidroxidokból álló limonit vagy barnavaskő (Bognár, 1987; Koch, Sztrókay, 1994). Közismert mesterséges amorf anyag az üveg, valamint a műanyagok többsége (pl. gumi).

A kristályos anyagok részecskéi rendezetten, az illető anyagra jellemző módon, a tér három irányában megszabott távolságokban ismétlődve foglalnak helyet, azaz térrácsszerkezetük van. Az ionok, atomok, atomtörzsek vagy molekulák

(az úgynevezett **tömegpontok**) a **térrács** rácspontjaiban helyezkednek el. A térrács olyan háromdimenziós szerkezet, amelyben az egymással párhuzamos irányok egyenértékűek, a nem párhuzamos irányokban azonban a tömegpontok száma és elrendeződése különböző lehet. Ez azt eredményezi, hogy a kristályban a fizikai és a kémiai tulajdonságok (pl. keménység, hővezetés, fénytani jellemzők) irány szerint változhatnak, azaz a legtöbb kristály **anizotróp**. A kristályok térrácsát az egymáshoz legközelebb eső nyolc azonos értékű tömegpont által meghatározott egyszerű geometriai testtel, az úgynevezett **elemi cellával** lehet jellemezni. Ez a kristályos anyag legkisebb ismétlődő szerkezeti egysége, amit önmagával párhuzamosan, sorozatosan eltolva megkapjuk az adott anyag kristályrácsát. A kristályrács külső megnyilvánulása gyakran egy síklapokkal határolt mértani test, ami utal az adott ásványra, ezért fontos határozóbélyeg lehet (Bognár, 1987; Koch, Sztrókay, 1994).

A kristályos anyagok jellemzője, hogy melegítéskor egy meghatározott hőmérsékleten olvadnak meg. Ezt a hőmérsékletet nevezzük olvadáspontnak. A határozott olvadáspont az egész kristályra kiterjedő rend (térrácsszerkezet) következménye, ezért a kristály minden része ugyanazon a hőmérsékleten válik folyadékká. Az olvadás oka a hőmérséklet emelkedése következtében megerősödő hőmozgás. A hőmozgás nagyrészt abból áll, hogy a tömegpontok a kristályrácsban egyensúlyi helyzetük körül rezegnek. A rezgés kitérése annál nagyobb, minél magasabb a hőmérséklet. Ha a hőmérséklet emelkedése miatt a kitérések annyira megnőnek, hogy a szomszédos tömegpontok egymásba ütköznek, akkor a kristályrács összeomlik, azaz a szilárd anyag megolvad (Atkins, 1992; Koch, Sztrókay, 1994; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

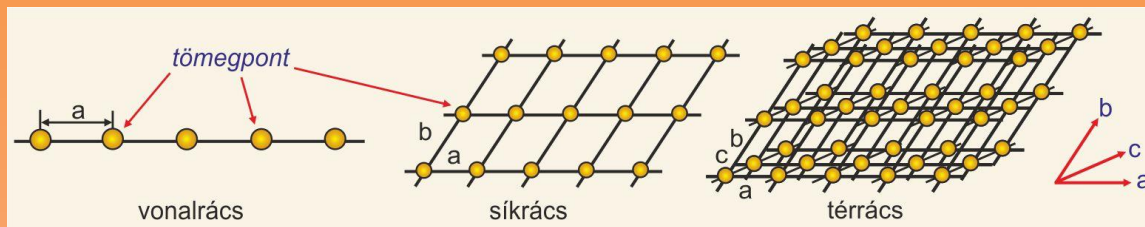
#### **Megjegyzés:**

A szilícium neve a latin *silix*, azaz kovakő szóból ered, ami a kőkorszaktól kezdődően (~500 ezer éve) a szilícium vegyületeinek és az emberiség fejlődésének szoros kapcsolatát jelzi. A szilícium-dioxid ( $\text{SiO}_2$ ) természetes módosulatai (pl. kvarc, kalcedon, opál) és a különböző módon összekapcsolódó, tetraéderes elrendeződésű  $\text{SiO}_4^{4-}$ -egységekből álló szilikátok (pl. földpátok, csillámok, agyagásványok) a földkéreg mintegy 90%-át alkotják (Koch, Sztrókay, 1994; Gill, 2015).

A szilícium szénnel alkotott vegyülete a szilícium-karbid ( $\text{SiC}$ , „karborundum”), ami majdnem olyan kemény anyag, mint a gyémánt (Koch, Sztrókay, 1994; Greenwood, Earnshaw, 2004; Gill, 2015). Technikai — és földtudományi — jelentősége kitűnő csiszolóképeségében rejlik: a kőzettani mintaelőkészítésben (pl. vékonycsiszolatok készítése) szintén elterjedt csiszolóanyag.

## Jó tudni!

### A bűvös hetes: a kristályrendszerek



#### A térrács levezetése az egyszerű pontsorból

A kristályos szilárd anyagokban az azonos részecskék (ionok, atomok, fématomtörzsek, molekulák) az adott anyagra jellemző szabályos rend szerint, egymástól meghatározott távolságra helyezkednek el, azaz az anyag nem folytonos, idegen szóval *diszkontinuális* felépítésű. A tömör gömbként leegyszerűsített részecskék, a tömegpontok egy egyenes mentén elhelyezve pontsort alkotnak, ezt önmagával párhuzamosan végtelen sokszor eltolva síkhálót vagy síkrácsot kapunk. Ha a tér harmadik irányában is elvégezzük ezt az eltolást, eljutunk a térrácshoz. A térrácsban a párhuzamos irányok egyenértékűek, azaz homogének; az egymással nem párhuzamos irányok azonban fizikai és kémiai értelemben eltérő tulajdonságúak, azaz inhomogének (iránytól függőek, anizotrópok). A kristálytan ezt összefoglalva úgy fogalmazza meg, hogy a kristály térrácsszerkezettel rendelkező, bizonyos tulajdonságaiban anizotróp, homogén diszkontinuum. A térrács legkisebb ismétlődő egysége, a kristályszerkezet jellemzőinek hordozója, az elemi cella, amit a cella éleinek hosszával, a rácsállandókkal lehet jellemezni (jelölésük a tér három irányában rendre  $a_0$ ,  $b_0$  és  $c_0$ ). A rácsállandó nagyságrendje általában  $10^{-10}$  m, azaz kisebb, mint egy nanométer (Bognár, 1987; Koch, Sztrókay, 1994). Klasszikus mértékegysége az Ångström ( $10 \text{ Å} = 1 \text{ nm}$ ;  $1 \text{ Å} = 100 \text{ pm}$ ).

Bravais, francia kutató 1842-ben kimutatta, hogy azonos tömegpontok esetén a kristályrács geometriai elrendeződése 14 különböző elemi cella szerint lehetséges („belső szimmetria”). Ezek közül csupán 7 olyan egyszerű elemi test létezik, amelyben a tömegpontok csak a cella csúcsain helyezkednek el. Ezek a kitüntetett elemi cellák, pontosabban azok élei határozzák meg nagyság és irány szerint a kristályrendszerek tengelykeresztjét, azaz koordináta rendszerét (Bognár, 1987; Koch, Sztrókay, 1994). Az elkülönített kristályrendszerek a szimmetriaelemek számának és bonyolultságának fokozatos növekedésével a következők: triklin (háromhajlású), monoklin (egyhajlású), rombos, tetragonális (négyszöges), trigonális (háromszöges), hexagonális (hatszöges) és köbös (szabályos).

Bármely kristályos anyag belső szerkezete besorolható valamelyik kristályrendszerbe, a kristályt jellemző lapok és élek szintén törvényszerűen ismétlődhetnek. A kristályok külső alakja, a kristályt határoló lapok, élek, csúcsok elrendeződése szintén jellegzetes szimmetriasajátságokat mutat. A kristály belső szimmetriáját az eltolás (transzláció) segítségével írhatjuk le, míg a külső szimmetriát egyszerű geometriai fedési műveletek (forgatás, sík szerinti tükrözés, középpontos tükrözés vagy inverzió) segítségével jellemezhetjük. A külső szimmetriaelemek a kristályok alakján is észlelhetők, ezért komoly szerepet kapnak a hagyományos ásványhatározásban. A szimmetriaviszonyok alapján a 7 kristályrendszeren belül 32 kristályosztály különíthető el, ezek részletezésével a kristályalaktan foglalkozik (Bognár, 1987; Koch, Sztrókay, 1994).

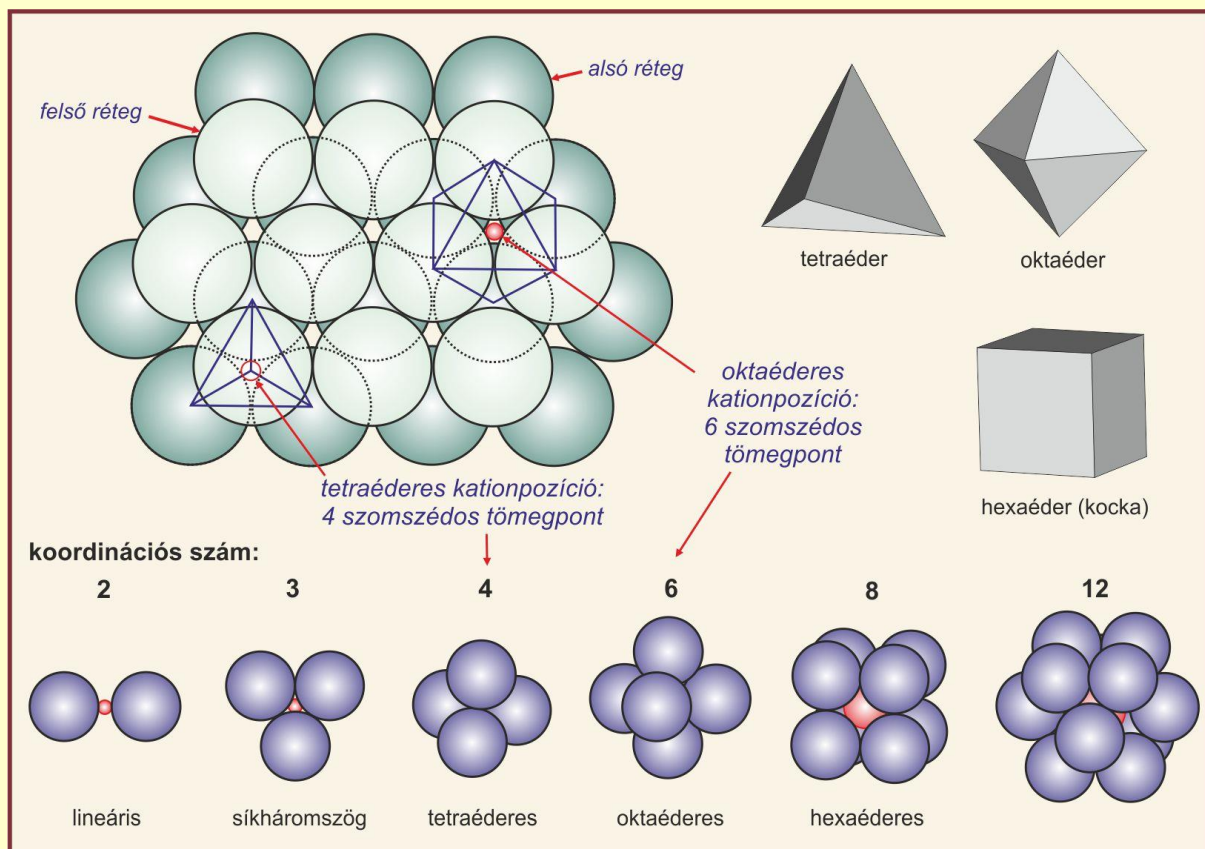
A különböző kristályrácsokban a kapcsolódó részecskék a legstabilabb szerkezet kialakítására törekednek. Ez azt jelenti, hogy a rácsban minden atom vagy ion annyi közvetlen szomszéddal igyekszik körülvenni magát, amennyi csak lehetséges. Ha a tömegpontokat merev gömbökkel közelítjük, a lehetséges szomszédok térbeli elhelyezkedése geometriailag koordinációs poliéderekkel (sokszögekkel határolt mértani test, „soklap”) jellemezhető (64. ábra). Ez azt jelenti, hogy meg tudjuk adni azt a térbeli testet, aminek a kiválasztott tömegpont a középpontjában van, az azonos távolságra elhelyezkedő szomszédok pedig a csúcsait jelölik ki. Egy-egy központi helyzetűnek tekintett atom, fématomtörzs, ion vagy molekula közvetlen szomszédainak a számát a **koordinációs szám** adja meg, az elrendeződés módja pedig a **koordináció**. A különböző koordinációs számoknak értelemszerűen különböző geometriai elrendeződés felel meg, amiben a kapcsolódó tömegpontok sugarának kiemelkedő a szerepe. Attól függően, hogy a gömbként leegyszerűsített tömegpontok sugarainak aránya, az úgynevezett **rádiuszhányados** ( $r_{\text{kation}}/r_{\text{anion}}$  vagy  $r_{\text{központi atom}}/r_{\text{kapcsolódó atom}}$ ) milyen értéket vesz fel, megkülönböztethető lineáris (0,155), háromszöges (0,155–0,225) és **tetraéderes** (0,225–0,414) geometriai elrendeződés, ahol a koordinációs szám rendre 2, 3 és 4. Az **oktaéderes** (0,414–0,732) elrendeződésnek megfelelő szomszédok száma 6 (hat csúccsal és nyolc lappal rendelkező forma az oktaéder), a **hexaéderes** (0,732–1) elrendeződésben 8 közvetlen szomszéd található (nyolc csúccsal és hat lappal rendelkező forma a szabályos hexaéder vagy kocka). A szoros illeszkedésű (a rádiuszhányados  $> 1$ ) geometriai elrendeződésre jellemző koordinációs szám 12 (Koch, Sztrókay, 1994; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

### Megjegyzés:

Ásványtani (ásványkémi) szempontból kitüntetett szerepe van az egyes ásványok kristályrácsában a kapcsolódó tömegpontok koordinációs viszonyainak. Leggyakrabban a kristályrácsban helyet foglaló anionhoz (pl. szilikátokban az  $\text{SiO}_4^{4-}$ -egységek) képest adjuk meg a szomszédos kationok helyzetét, ez az úgynevezett **kationpozíció**.

Nagyon fontos, hogy a koordinációval kapcsolatos alapfogalmakat (pl. koordinációs szám, tetraéderes/oktaéderes/hexaéderes koordináció) pontosan megtanuld, hiszen ezek más földtudományi kurzusokon is szerepelni fognak!

A lineáris (egyenes), a síkháromszög (trigonális) és a tetraéderes elrendeződés felismerése és használata általában nem okoz problémát. Az oktaéderes és a hexaéderes koordináció biztos tudás nélkül azonban könnyen eltéveszthető. Az „okta”-jelentése nyolc, de ebben az esetben 6 a koordinációs szám (a csúcsok száma kell, nem pedig a soklapú forma lapjainak a száma). A hexaéderes („hexa”- jelentése hat) koordinációnak megfelelő koordinációs szám a 8, hiszen a kockának nyolc csúcsa van.

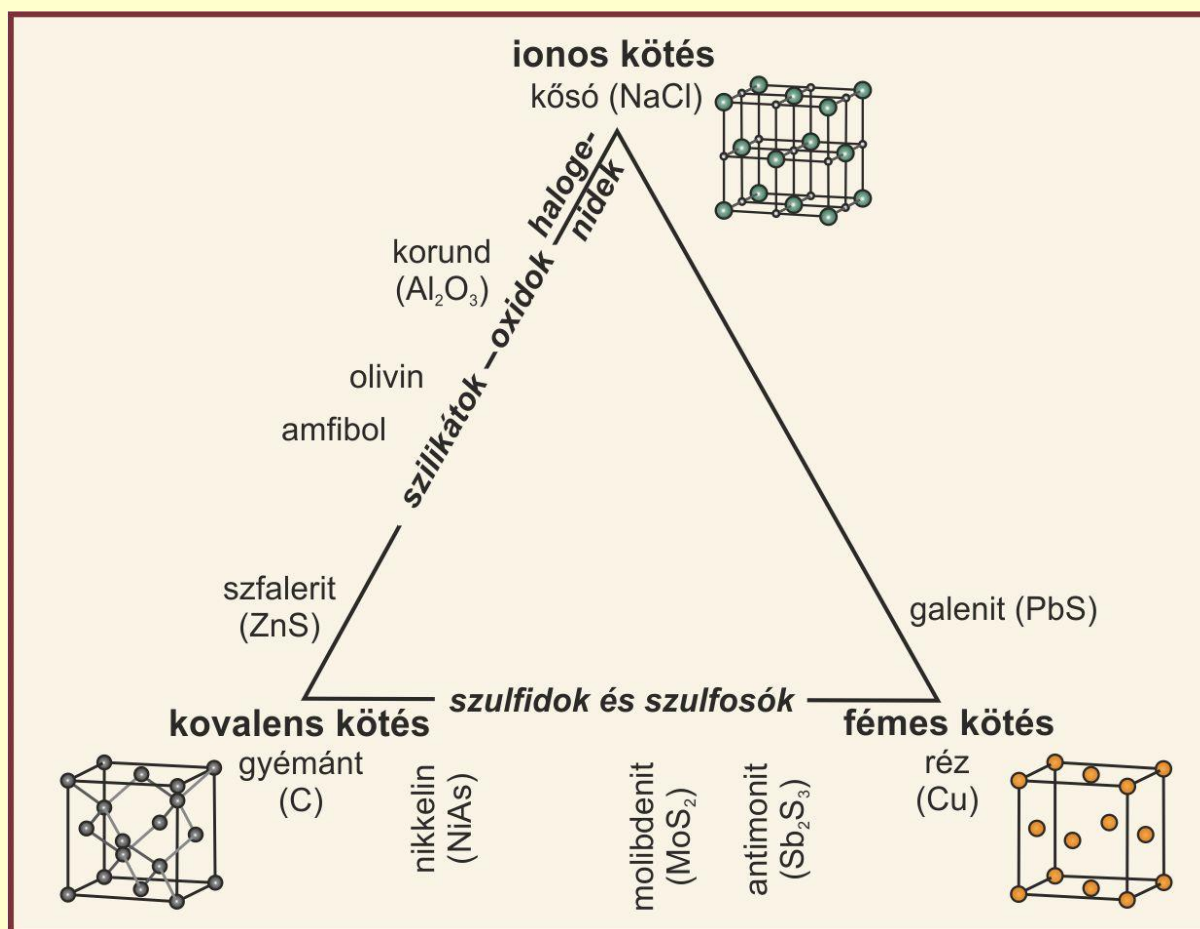


#### 64. ábra

A tömegpontok illeszkedése a kristályrácsban: a koordináció (Koch, Sztrókey, 1994; Gill, 2015; módosítva)

A térrácsokat természetesen nem csak a tömegpontok mérete határozza meg, hanem a kötés jellege is. Az elsőrendű kémiai kölcsönhatásoknál láttuk, hogy az ionos, a kovalens és a fémes kötésre irányuló hajlam a kapcsolódó atomok elektronegativitásának függvényében változik (50. ábra). Ez a szilárd kristályrácsokra is érvényes, az ásványok alkotóit összetartó erők az ideális kötéstípusok közötti átmenetnek tekinthetők (65. ábra). A tiszta ionos (pl. NaCl) és a tiszta kovalens kötés (pl. gyémánt) ideális szélső tagokat, határeseteket képviselnek. A legtöbb kötésben azonban változó arányban mind az ionos, mind a kovalens jelleg érvényesül. Amennyiben ideális ionos kötésből indulunk ki, az egymás közelében lévő ionok elektronburka kölcsönhatásba lép egymással, a kation vonzza az anion szimmetrikus elektronrendszerét, deformálja azt. Ezt a folyamatot **polarizációnak** nevezzük. A kation polarizálóképességének, illetve az anion polarizálhatóságának növekedésével az ionos kötésre jellemző elektronátadást fokozatosan felváltja az elektronok megosztása, azaz a két kötéstípus között folytonos átmenet figyelhető meg. Különösen a kisméretű, nagy töltésű kationok (pl.  $\text{Al}^{3+}$ ,  $\text{Si}^{4+}$ ) tudnak erős polarizáló

hatást kifejteni, ezért például a szilikátokban átmeneti, „félionos, félkovalens” kötés jellemző. A nagyobb méretű anionok nagyobb mértékben polarizálhatók, ez az oka annak, hogy míg az oxigén által alkotott oxidok döntően ionvegyületek, az azonos főcsoportban található kén által formált szulfidokban a kötés ionos jellege lecsökken, a kovalens és a fémes kötés között mutat átmenetet (Koch, Sztrókay, 1994; Gill, 2015). A következőkben nézzük meg, hogy az egyes kémiai kölcsönhatásoknak milyen rács típusok felelnek meg, és azok milyen alapvető tulajdonságokat okoznak!

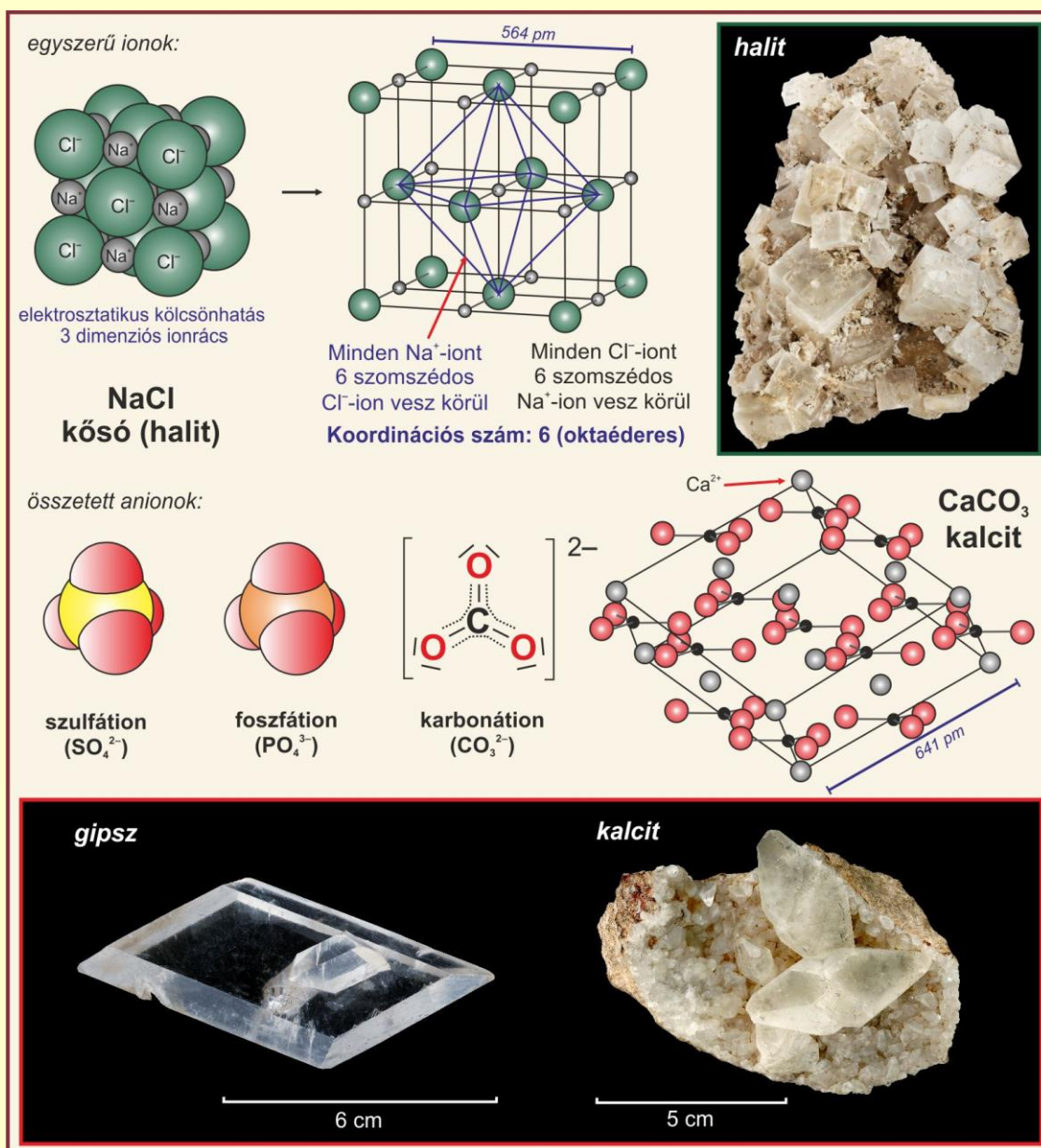


**65. ábra**

Ásványok és kristályrácsok: átmenet az ideális kötéstípusok között

Az ionos kötés erős elsőrendű kémiai kölcsönhatás; kialakulása nagy energia felszabadulásával jár, ezért az ionos kötésű vegyületek szilárd halmazállapotú, kristályos anyagok. Az ionkristályok ionos (vagy erősen ionos jellegű) kötések tartalmazó háromdimenziós térrácsok, azaz ionrácsos szerkezetűek. A rácspontokban egyrészt egyszerű (pl.  $\text{Na}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{Br}^-$ ), másrészt összetett ionok (pl.  $\text{SO}_4^{2-}$ ,  $\text{CO}_3^{2-}$ ) egyaránt előfordulhatnak (5. táblázat). A kőszó — mint egyszerű

ionrácsos vegyület — térrácsában a  $\text{Cl}^-$ -ionok egy kocka csúcsain és közepén ülnek, a kocka lapjainak közepén pedig  $\text{Na}^+$ -ionok találhatók (66. ábra). Miután a rácsban a tömegpontok szabályosan ismétlődnek, továbbá abban tetszőlegesen jelölhetjük ki az elemi cellát, a  $\text{Na}^+$ -ionok is egy kocka csúcsainak és közepének tekinthetők. Minden nátriumiont hat kloridion, illetve minden kloridiont hat nátriumion vesz körül, azaz a kősóban oktaédes a koordináció (koordinációs szám: 6). A halogenidek közül a szilvin ( $\text{KCl}$ ), továbbá a szulfidok közül az ólom egyik legjelentősebb ásványa, a galenit (ólom-szulfid) szintén kősórácsú vegyület (Koch, Sztrókay, 1994).



**66. ábra**

Ionrácsos vegyületek szerkezete (Koch, Sztrókay, 1994; Whitten et al., 2014; módosítva)  
Ásványfotók (Pál-Molnár, 2013): halit ( $\text{NaCl}$ ), Parajd (Románia), a minta magassága 15 cm; gipsz ( $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ), Gánt (Magyarország); kalcit ( $\text{CaCO}_3$ ) szkaleonéderekből álló kontakt ikerkristályok, Kis-Sváb-hegy (ma Martinovics-hegy), Buda (Magyarország).

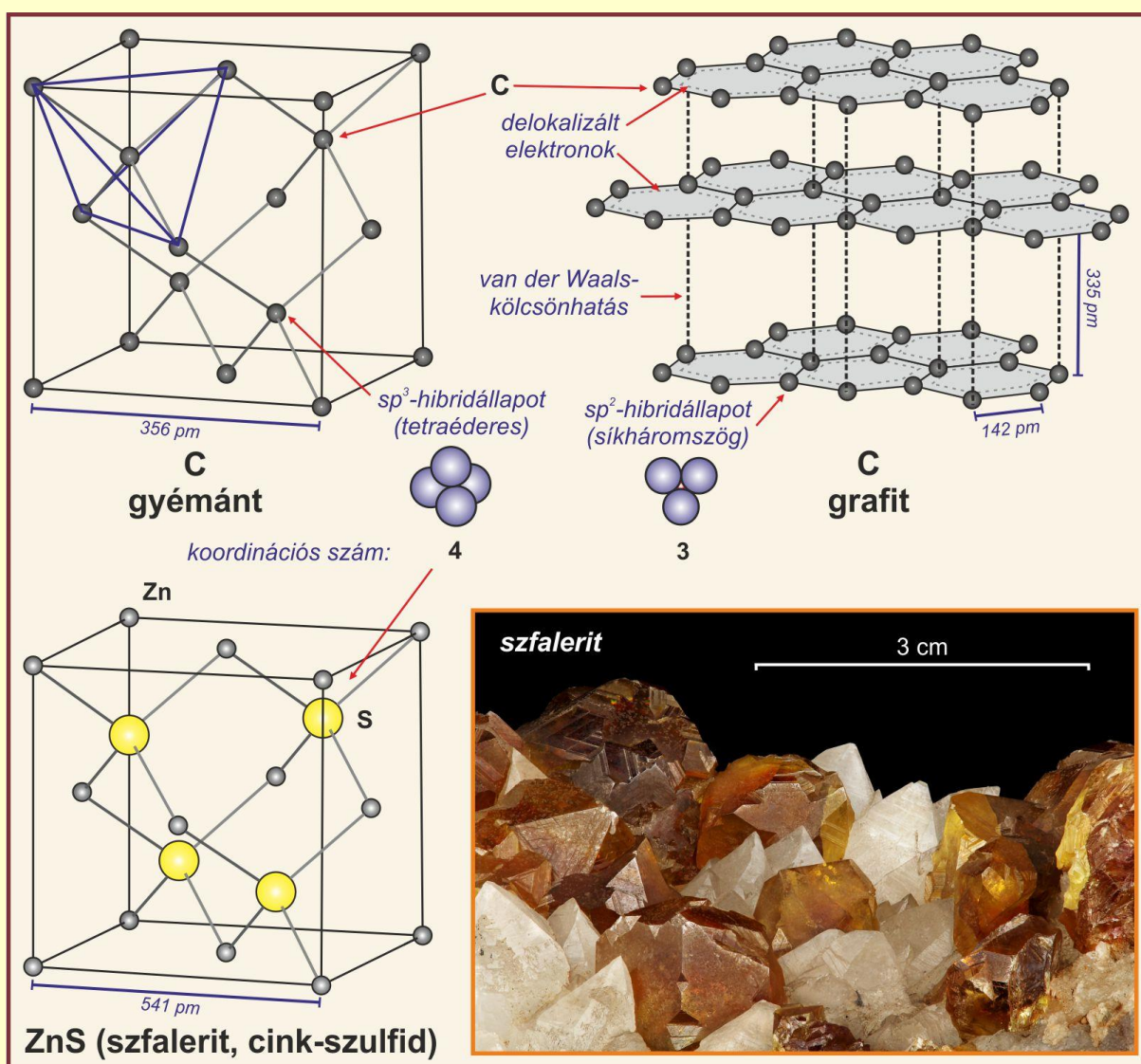
A nátriumionhoz képest nagyobb méretű céziumiont már nyolc kloridion veszi körül, ezért a cézium-klorid (CsCl) rácsában hexaéderes a koordináció (a koordinációs szám: 8). Az ionrácsok harmadik fontos alaptípusa a fluoritrács (CaF<sub>2</sub>-típus), amiben a fluoridionok (F<sup>-</sup>) koordinációja tetraéderes, a kalciumionoké (Ca<sup>2+</sup>) viszont hexaéderes. A kapcsolódó anion és kation töltéskülönbsége miatt a semleges vegyület ionjai a rácsban úgy rendeződnek, hogy minden kalciumiont nyolc fluoridion vegyen körül, egy fluoridionnak pedig négy kalciumion közvetlen szomszédja van. Az uránszurokérc (UO<sub>2</sub>) tipikus fluoritrácsú ásvány. Számos további ionrácsos szerkezetet tartanak nyilván az ásványtanban, ezek részletes bemutatása azonban meghaladja e könyv kereteit. Az ionos kötés tárgyalásánál láttuk, hogy annak kialakulásához nagy elektronegativitás-különbség szükséges, ezért az egyszerű ionrácsos vegyületeket az alkáli- és alkáliföldfémek (és általában a fémes elemek), valamint a nemfémek közül a halogének és az oxigéncsoport elemei alkotják (Koch, Sztrókay, 1994; Gill, 2015).

A többatomos, azaz összetett (komplex) ionok atomjait egymás között kovalens kötések tartják össze, ilyen összetett kation a tetraéderes elrendeződésű ammóniumion (NH<sub>4</sub><sup>+</sup>). A kovalens kötés tárgyalásánál összetett anionokra is több példát láttunk, ebbe a csoportba tartozik a szintén tetraéderes elrendeződésű szulfátion (SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>) és foszfátion (PO<sub>4</sub><sup>3-</sup>), továbbá a háromszöges elrendeződésű karbonát- (CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>) vagy nitrátion (NO<sub>3</sub><sup>-</sup>). Az általuk formált ionkristályok többsége só, azaz fém kationból és savmaradék-anionból felépülő vegyület (pl. kalcium-karbonát: a szénsav Ca-sója); az összetett anion neve a megfelelő sav nevéből származik (66. *ábra*). A legtöbb halogenid (pl. halit, fluorit), karbonát (pl. kalcit, aragonit, dolomit), szulfát (pl. anhidrit, gipsz), foszfát (pl. apatit), arzenát, sok oxid (pl. rutil), illetve szilikát (tetraéderes SiO<sub>4</sub><sup>4-</sup>-csoportot tartalmazó vegyület) ionrácsú kristályokat alkot (Koch, Sztrókay, 1994; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

A szerkezet ismeretében most nézzük meg, hogy milyen általános fizikai tulajdonságok jellemzik az ionrácsos vegyületeket! Az ionrács jellemző koordinációs száma  $\geq 6$ . Az ionkristályok közepes vagy nagy keménységűek, de a merev kristályszerkezet miatt ridegek, törékenyek. Általában színtelenek, átlátszóak vagy áttetszőek. A sók egy része vízben viszonylag jól oldódik. Az oldódás során a dipólusos vízben az ionrács szétesik, ami az ion-dipól kölcsönhatás eredménye (hidratáció). Az olvadás- és forráspontjuk magas (pl. a NaCl olvadáspontja 800 °C, forráspontja 1441 °C). Szilárd halmazállapotban rossz hővezetők, kevésbé vagy nem

vezetik az elektromosságot (Koch, Sztrókay, 1994). Olvadékban és vizes oldatban azonban a könnyen elmozduló, elektromos töltéssel rendelkező ionok miatt vezetik az elektromos áramot (**másodfajú vezetők**: az áramvezetés ionvezetés).

Azokat a térrácsokat, amelyek rácspontjaiban kovalens kötéssel összekapcsolódó atomok foglalnak helyet, atomrácsoknak nevezzük. A kovalens kötés irányított jellegéből adódóan az atomrácsokban a szomszédos atomok száma és elrendeződése korlátozott (**67. ábra**). Az atomrácsos kristályokban a koordinációs szám ennek megfelelően  $\leq 4$  (Koch, Sztrókay, 1994).



**67. ábra**

Gyakori atomrácsos kristályok szerkezete (Koch, Sztrókay, 1994; Gill, 2015; módosítva)  
 Ásványfotó (Pál-Molnár, 2013): szfalerit (ZnS), Selmecebánya (Szlovákia); a gyantásárga szfaleritkristályok mellett fehér kvarckristályok (SiO<sub>2</sub>) láthatók.

A kovalens kötésű atomrácsok tipikus példája a gyémánt szerkezete (**67. ábra**). A gyémántban a szén  $sp^3$ -hibridállapotának megfelelően tetraéderez

koordináció alakul ki, minden szénatom négy másik szénatommal hoz létre erős elsőrendű kölcsönhatást. Ez a szerkezet ismétlődik a háromdimenziós térrácsban. Analóg geometriai elrendeződésű az atomrácsok másik fontos szerkezeti típusa, a szfaleritrács (ZnS-rács): ebben minden cinkatomot négy kénatom, és minden kénatomot négy cinkatom vesz körül szintén tetraéderes elrendeződésben (Koch, Sztrókay, 1994; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

Az atomrácsos kristályok az erős kovalens kötéseknek megfelelően rendkívül kemények (pl. gyémánt; szilícium-karbid, SiC; **68. ábra**), magas olvadás- és forrásponttal. Szilárd halmazállapotban és olvadékban is szigetelők, mert mobilis, szabad elektronok vagy ionok sem a kristályrácsban, sem az olvadékban nincsenek jelen. Az atomrácsos kristályok színtelenek, színesek, átlátszók vagy átlátszatlanok egyaránt lehetnek (Koch, Sztrókay, 1994; Greenwood, Earnshaw, 2004).



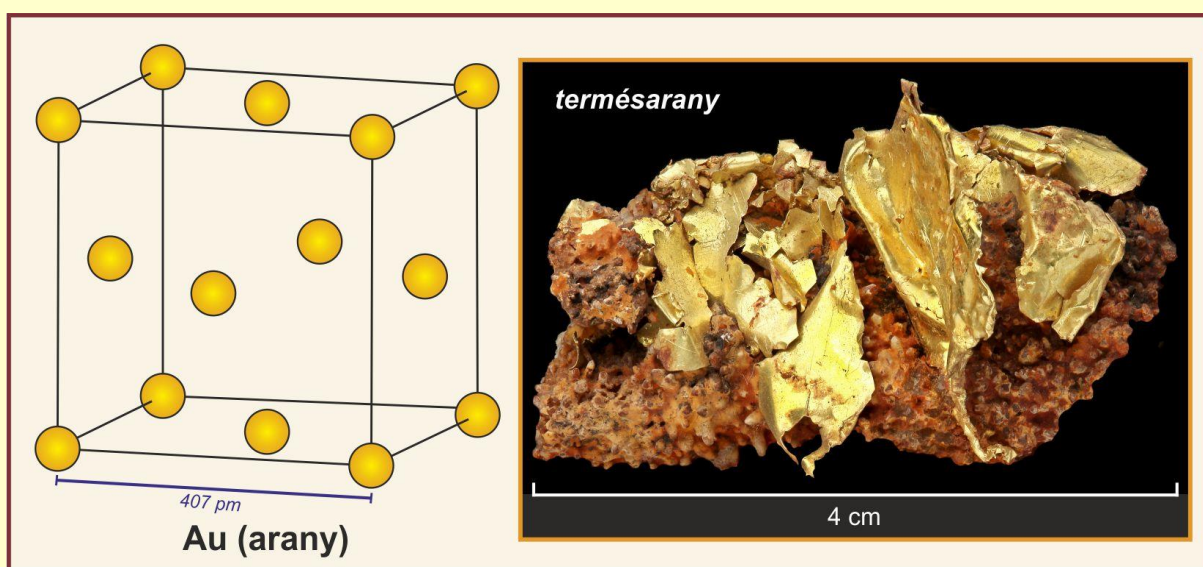
**68. ábra**

A szilícium-karbid (SiC, „karborundum”) porának felhasználása az ásvány- és kőzettani anyagvizsgálatban: vékonycsiszolatok készítésére szolgáló berendezés és csiszolóporok az SZTE Ásványtani, Geokémiai és Kőzettani Tanszékének mintaelőkészítő laboratóriumában

A szén másik módosulata, a grafit részben atomrácsos anyag. A grafit szerkezetét  $sp^2$ -hibridállapotú, síkháromszög elrendeződésben összekapcsolódó szénatomok alkotta hatszögekből álló síkok, rétegek határozzák meg (**67. ábra**). A rétegrácsban minden szénatom három másik szénatommal kapcsolódik kovalens kötéssel úgy, hogy a negyedik vegyértékelektron delokalizálódik. Ennek köszönhető az, hogy a grafit átlátszatlan (**opak**), továbbá vezeti az elektromos áramot, azaz

fémes tulajdonságokkal is rendelkeznek. Az egymást követő rétegek között gyenge másodrendű kötőerők lépnek fel (van der Waals-kötés), ezért azok egymáshoz képest könnyen elmozdulhatnak. Ez az oka annak, hogy — eltérően a tisztán atomrácsos kristályoktól — a grafit puha, kenhető, kitűnő hasadású ásvány (Koch, Sztrókay, 1994; Greenwood, Earnshaw, 2004; Gill, 2015).

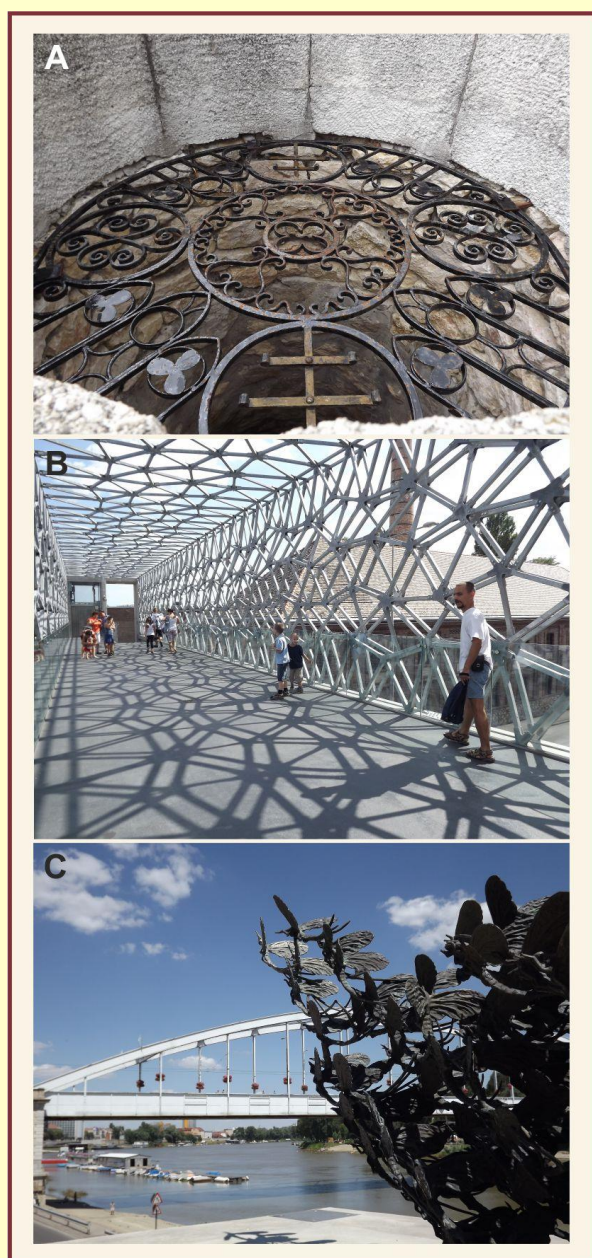
A fémek kristályrácsában a tömegpontok fématomtörzsek, azaz a rácspontokban pozitív töltésű fémionok találhatók (69. ábra), amelyek között a kapcsolatot a fémes kötés teremti meg. Ennek lényege, hogy a fémrácsban mobilis, kollektív elektronrendszer található (61. ábra). Ez teszi lehetővé, hogy a fémeknek jó a hő- és elektromos vezetőképessége. A fémek **elsőfajú vezetők** (elektronvezetés), a vezetőképességük a hőmérséklet növekedésével csökken. A fémek nem átlátszóak (opakok), fémes fényűek, legtöbbjük szilárd és kemény. A kötés erősségét mutatja, hogy olvadás- és forráspontjuk általában magas. A fémrácsban a fématomtörzsek szorosan illeszkednek (szabályos szoros, valamint hatszöges szoros illeszkedés), ami tömör szerkezetet eredményez, ezért a fémek között találjuk a legnagyobb sűrűségű elemeket. A koordinációs szám általában 12 (pl. réz, ezüst, arany, platina, ólom, nikkel, kobalt), de több fémben nyolcas koordináció (szabályos tércentrált elemi cella, pl. volfrám) figyelhető meg (Koch, Sztrókay, 1994; Atkins, 1995; Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).



**69 ábra**

Jellegzetes fémrács (koordinációs szám: 12): az arany (Au) és termésarany Abrudbányáról (Erdélyi-középhegység, Románia), Szegedi Tudományegyetem Koch Sándor Ásványgyűjteménye (Pál-Molnár, 2013)

A fémrács a természetben természetállapotban előforduló fémekre (pl. réz, ezüst, arany; réz-típusú rács) és félfémekre (pl. termésarzén; arzén-típusú rács) jellemző szerkezeti típus, de fémes jelleg figyelhető meg számos szulfidásványban (pl. galenit), illetve a bizonyos tulajdonságait tekintve átmeneti jellegű grafitban is (Koch, Sztrókay, 1994). Ennek ellenére a természetes anyagok között a fémrácsos kristályok háttérbe szorulnak, különösen az ionrácsos vegyületek gyakoriságához és jelentőségéhez viszonyítva. Ha az atomrács, ionrács, fémrács és molekularács szavakat halljuk, általános ismereteink alapján azonban egyedül a „fém” és a fémrács kifejezés köznapi, bár a makrovilágban tapasztalt tulajdonságokról ritkán jut eszünkbe a mikroszerkezet (70. ábra).



### 70. ábra

Fémek a makrovilágban: változó mechanikai tulajdonságok – sokrétű alkalmazás

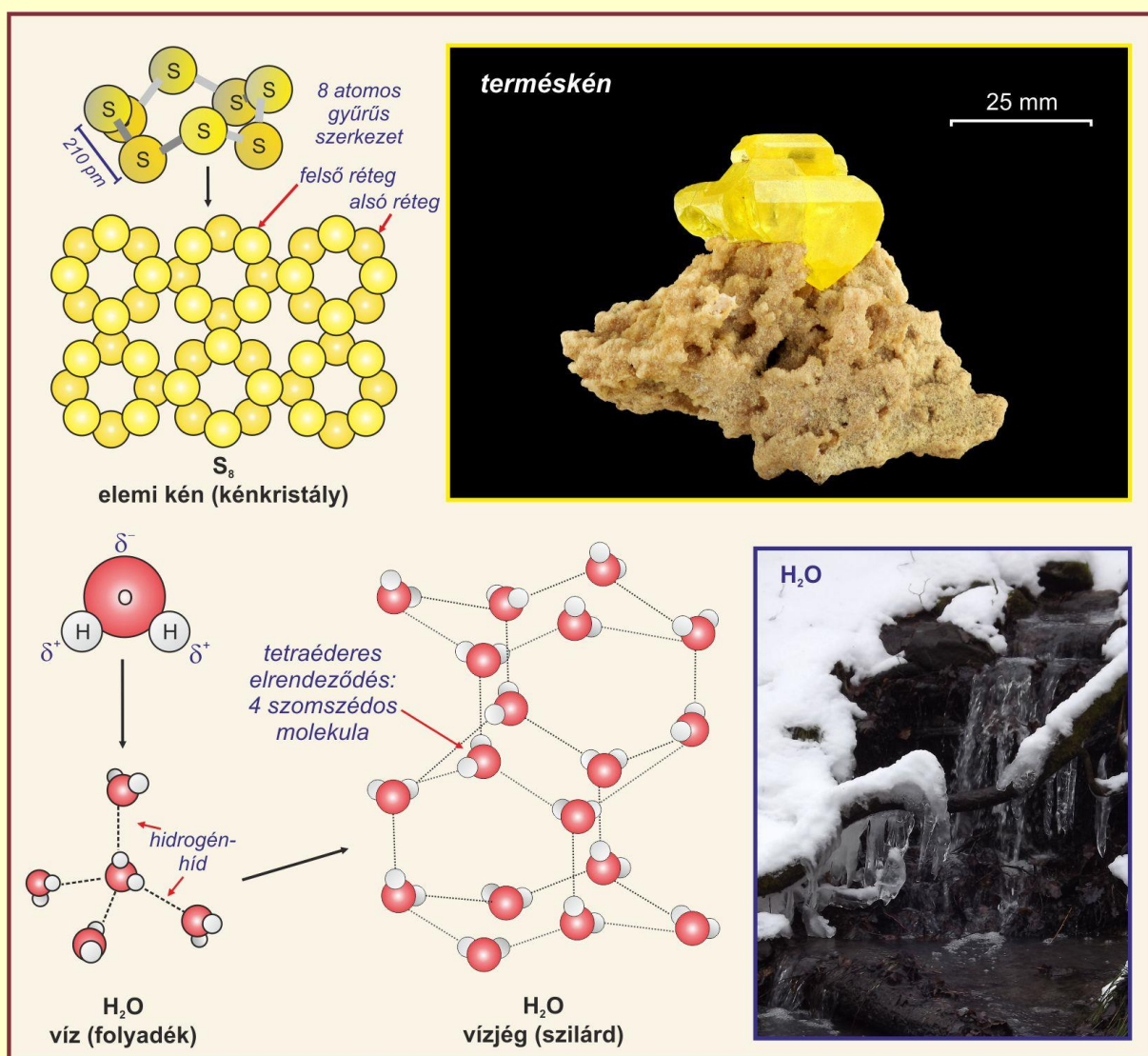
A. A csókakői vár kútjának „fémrácsa” (Fejér megye); B. A pécsi Zsolnay Kulturális Negyed Híd-épülete (vezető tervező: Herczeg László); C. A Tiszavirágzás szobra (bronz, 1998, Farkas Pál alkotása) Szegeden, a háttérben a Belvárosi híd (1883, Feketeházy János és Gustave Eiffel tervei alapján) fém szerkezete látható.

A fémek egy része rugalmas, jól megmunkálható, ezért a mesterségesen előállított anyagok között kiemelt szerepe van a fémeknek és az ötvözeteknek, illetve a fémfeldolgozásnak (Koch, Sztrókay, 1994; Whitten et al., 2014; Gill, 2015). Egy-egy fémdarab nem egyetlen hatalmas kristály, hanem legtöbbször mikroszkopikus méretű kristályokból áll, amelyek sokféleképpen rendeződhetnek, elcsúszhatnak egymáshoz képest, ezért külső deformáló hatásra a fémdarab nem törik el (nyújtható, hengerelhető).

Minél tisztább egy fém, annál lágyabb, és annál jobban vezeti az elektromos áramot, ami szintén a szerkezet következménye. A fémek további jellegzetessége, hogy a hasonló méretű fématomok a kristályrácsban egymást helyettesíthetik, ami az ötvözetek előállításakor — a szilárdság növelésén túl — számos kedvező tulajdonsághoz vezet. A mangán, mint ötvözőfém jelenléte növeli az acél keménységét. A vanádium az acélnak nagy kopásállóságot és magas hőmérsékleten nagy szilárdságot kölcsönöz. A krómacél rozsdamentes, igen kemény acélváltozat. A kobalt felhasználási területei közül a mágneses ötvözeteket célszerű kiemelni: az alumínium-, nikkel- és kobalttartalmú „Alnico” acélötvözet permanens mágnesek készítésére kiváló. A rozsdamentes acélok kb. 8% nikkelt tartalmaznak. A nem vastartalmú ötvözetek közül az újezüst vagy alpakka (10–30% nikkel, 55–65% réz, továbbá cink) az evőeszközök anyagaként köznap felhasználású. A közismert sárgarézt réz és cink (20–50%), a bronz réz és 7–10% ón ötvöze (Koch, Sztrókay, 1994; Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

A molekularácsú kristályok rácspontjaiban gyenge másodrendű kötőerőkkel összekapcsolódó semleges molekulák találhatók. A molekulán belüli, intramolekuláris kötéstávolságok kisebbek, mint a molekulák közötti (intermolekuláris) távolságok. A másodrendű kötőerők miatt a molekularácsos anyagok lágyak, olvadáspontjuk alacsony. Elektromos és optikai tulajdonságaik a rácsot alkotó molekulák megfelelő tulajdonságaihoz hasonlóak (Atkins, 1992; Koch, Sztrókay, 1994).

A természetben előforduló ásványok közül a kénnek ( $S_8$ ), a realgárnak ( $As_2S_2$ ) és az auripigmentnek ( $As_2S_3$ ) van molekularácsa (71. ábra). Szilárd halmazállapotban a víz (jég) is molekularácsban kristályosodik, továbbá az apoláris nemesgázatomok és az apoláris molekulák (pl. jód, szén-dioxid), valamint a szerves vegyületek nagy többsége szilárd halmazállapotban molekularácsos kristályt alkot (Koch, Sztrókay, 1994; Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014; Gill, 2015). A kénrács rácspontjaiban nyolcatomos gyűrűk találhatók, amelyeket kovalens kötés kapcsol össze kénmolekulává. A jég szerkezetére tetraéderesen elhelyezkedő vízmolekulák jellemzőek, amelyek között viszonylag erős másodrendű kölcsönhatás, a hidrogénkötés teremt kapcsolatot (71. ábra). Olvadáskor az egész kristályra kiterjedő szerkezet összeomlik, de a vízmolekulák kristályrácsszerű elrendeződése folyadék halmazállapotban is fennmarad, csak nincs minden vízmolekula irányított hidrogénkötéssel a szomszédjához kapcsolva, ezért a szerkezet valamivel tömöttebb (Koch, Sztrókay, 1994).



**71. ábra**

Molekularácsos kristályok szerkezete (Koch, Sztrókay, 1994; Gill, 2015; módosítva)  
 Ásványfotó (Pál-Molnár, 2013): természen (S), Agrigento (Szicília, Olaszország); a sárga kénkristályok aragoniton ( $CaCO_3$ ) ülnek. A víz különböző halmazállapotait bemutató kép Mátrafüreden készült.

### Megjegyzés:

A klasszikus kristálykémia az ionrácsok osztályozása során a rács különböző pontjain érvényesülő kötések jellege (ionos, illetve kovalens átmenet) és erőssége alapján három szerkezeti altípust különböztetett meg. Ha a rácsban az ionok között azonos erősségű ionos kötőerők hatnak — azaz nem lépnek fel zárt, elkülöníthető csoportok —, *izodezmikus* szerkezetről van szó (pl. NaCl-rács, cézium-klorid-rács, fluoritrács). Ha a rácsban elhatárolható csoportok különböztethetők meg, de a kötések erősségében nincs lényeges különbség, *mezodezmikus* szerkezet alakul ki. A mezodezmikus szerkezet jellemző példái a szilikátok, amelyekben az  $SiO_4^{4-}$  tetraéderek, mint összetett ionok különíthetők el. Itt az összetett ionon belül a központi kation polarizáló hatása miatt az ionos és a kovalens kötés közötti átmeneti kötéstípus dominál (65. ábra). Ha az összetett ionon (komplex anion) belüli kötések erősebbek (kovalens jelleggel), mint a rács szomszédos kationjaival kialakított ionos kölcsönhatás, *anizodezmikus* szerkezetek jönnek létre. A szulfátok, karbonátok, nitrátok, foszfátok az anizodezmikus szerkezetek képviselői (Koch, Sztrókay, 1994).

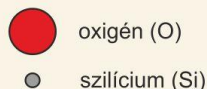
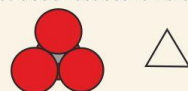
## Jó tudni! Szilikátok, mint a földkéreg építőkövei

Az  $[\text{SiO}_4]$ -egység kétféle nézetben:

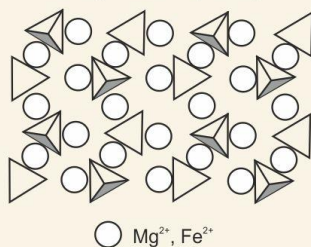
a tetraéder csúcsával felfelé



a tetraéder csúcsával lefelé



szigetszilikát (olivin)



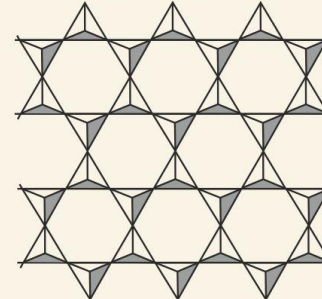
láncszilikát (piroxén)



szalagszilikát (amfibol)



rétegszilikát (csillám)



**A szilikátok önálló vagy O-atomokon keresztül kapcsolódó  $[\text{SiO}_4]$ -egységekből állnak**

A földkéreg üde kőzetei (pl. gránit, bazalt), illetve azok átalakulási és mállási termékei — a különböző agyagásványokból álló agyagok, agyagkövek, továbbá a homok és a homokkő, sőt, a talajalkotó ásványok döntő része — szilikátásványokból és szilícium-dioxidból állnak. Ezek legfontosabb alkotója az  $\text{SiO}_4^{4-}$ -csoport ( $[\text{SiO}_4]$ -egység), amiben a központi szilíciumatomhoz tetraédes elrendeződésben (azaz szimmetrikusan, egyenletes távolságra elhelyezkedve a térben) négy oxigénatom kapcsolódik komplex iont formálva. Ezek az  $[\text{SiO}_4]$ -egységek önállóan, izoláltan is elhelyezkedhetnek a kristályrácsban (sziget- vagy neozsilikátok), de közös O-atomon keresztül gyűrűket, láncokat, szalagokat, rétegeket vagy akár háromdimenziós térhálót is létrehozhatnak, miközben a töltésmérlegnek megfelelően további kationok csatlakozhatnak hozzájuk (az ásványok elektromosan semlegesek). Ez a hatalmas variációs lehetőség a szilikátásványok népes csoportját eredményezi, melyek földtudományi szerepe vitathatatlan (Koch, Sztrókay, 1994; Greenwood, Earnshaw, 2004; Gill, 2015).

A szigetszilikátokban a különálló  $[\text{SiO}_4]$ -egységeket oktaédes elrendeződésű fémkationok kapcsolják össze. Ebbe a csoportba tartozik a vas(II)- és magnéziumtartalmú olivin  $[(\text{Mg},\text{Fe})_2\text{SiO}_4]$ , ami a földköpeny kőzeteinek egyik fontos ásványa, de bazaltban szintén megjelenhet. A kémiai mállás hatására a felszínen, illetve felszínközelségben az olivin könnyen átalakul. A cirkónium szigetszilikátja, a cirkon ( $\text{ZrSiO}_4$ ) viszont nagyon stabil ásvány, akár milliárd éveket is túlélhet, ezért nagy szerepet kap az idősebb, illetve az ősi földkéreg kőzeteinek korhatározásában. A gyűrűs- vagy cikloszilikátok képviselője a berill ( $\text{Be}_3\text{Al}_2[\text{Si}_6\text{O}_{18}]$ ), melynek több változata drágakő. A lánc- és szalagszilikátok (inoszilikátok) különösen elterjedtek a természetben. A piroxének és az amfibolok különböző összetételű (vas-, magnézium-, kalcium-, nátrium-tartalmú) ásványfajai fontos kőzetalkotók, legyen szó a földköpenyről vagy a földkéregről. Ha az  $[\text{SiO}_4]$ -egységek közös oxigéneken keresztül kétdimenziós síkot hoznak létre, a rétegszilikátok alapszerkezetét kapjuk; gyakori képviselőik a csillámok (pl. muszkovit, biotit). A háromdimenziós, térhálós szilikátásványok (tektoszilikátok) szerkezete viszonylag bonyolult, ugyanakkor ez a csoport foglalja magában a földpátokat, amelyek — mint a nevük is mutatja — kiemelt szerepet kapnak a földkéreg kőzeteinek felépítésében (a földkéreg ~60%-át alkotják). A zeolitok szintén tektoszilikátok, amelyek környezettudományi és kémiai felhasználási jelentőségét molekulaszűrőként, ioncserélőként, továbbá vízlágyítóként történő alkalmazásuk adja (Koch, Sztrókay, 1994; Greenwood, Earnshaw, 2004).

## **Jó tudni!**

### **A Szegedi Tudományegyetem Koch Sándor Ásványgyűjteménye**



A Szegedi Tudományegyetem Ásványtani, Geokémiai és Kőzettani Tanszékének gondozásában található hazánk egyik legjelentősebb ásványkollekciója, a Koch Sándor Ásványgyűjtemény. Koch Sándor (mineralógus, egyetemi tanár) 1896-ban született Kolozsváron (Szegeden hunyt el 1983-ban). Egyetemi tanulmányait Budapesten kezdte, ahol 1919-ben természetrajz-vegytan tanári oklevelet, majd egy évvel később doktori címet szerzett. Ezt követően a Nemzeti Múzeum Ásványtárában segédmuzeológus, majd muzeológus. Kutatómunkája a Kárpát-medence bányahelyeinek ásványaira irányult. 1935-ben a múzeumokat, levéltárat és könyvtárat összefogó Elnöki Hivatal élére került, majd 1940 októberében egyetemi tanárnak nevezték ki a Szegeden megalapított Horthy Miklós Tudományegyetemre. A szegedi Ásvány- és Kőzettani Intézet vezetését 1969-ig látta el. Megteremtette az ásványtani oktatási-kutatási irányvonalat, amivel párhuzamosan létrehozta a mai gyűjtemény elődjét. A gyűjteményfejlesztés alapját a Szentpétery Zsigmond által 1924-ben kialakított ásvány-kőzettani gyűjtemény jelentette. Ezt kiegészítendő, számos gyűjtőutat szervezett a szatmári bányavidékre és a Felvidék híres bányavidékeire, ahová kollégája Mezősi József (petrológus, mineralógus, egyetemi tanár) is elkísérte. Önzetlen módon magángyűjteményének egy részét szintén az egyetemi oktatás-kutatás rendelkezésére bocsátotta. Az így kibővült kollekció lehetőséget adott arra, hogy genetikai osztályozási szempontok (magma, üledékes, metamorf kőzetek ásványai) szerint rendszerezze a gyűjtemény ásványfajait. 1965-ben az akkori Ásványtani, Geokémiai és Kőzettani Tanszék megvásárolta a teljes Koch Sándor magángyűjteményt, ami lehetővé tette a kiállítás látványos bővítését. Koch Sándort követően Mezősi József vette át a gyűjtemény kezelését, ami Grasselly Gyula és Szederkényi Tibor tanszékvezetése alatt is értékes darabokkal bővült (Pál-Molnár, 2013).

A gyűjtemény legutóbbi átrendezése (költöztetése) 2014-ben volt Pál-Molnár Elemér (petrológus, egyetemi docens) irányításával, aki 1997-től a Koch Sándor Ásványgyűjtemény szakmai vezetője.

A közel 3000 darabos kollekció jelenleg az Ásványtani, Geokémiai és Kőzettani Tanszék folyosóján kialakított, igényes kivitelű vitrinekben látható. A gyűjtemény leggazdagabb része rendszertani jellegű, geokémiai szempontok alapján (kémiai összetétel) a terméselemektől kezdődően kalauzolja el a látogatót az ásványok világában. A kiállított példányok legértékesebb részét azonban a pótolhatatlan Kárpát-medence gyűjtemény jelenti, ami a bányahelyek genetikája szerint rendszerezi a különleges darabokat. A csodálatos ásványritkaságokról egy szép kivitelű album készült (Pál-Molnár, 2013), amiből több ásványfotóval ebben a könyvben is találkozhat a kedves Olvasó.

## 6.2. Folyadékok: viszkozitás, felületi feszültség, gőznyomás

A szilárd anyagok — legyenek kristályosak vagy alaktalanok — változatlan nyomásviszonyok mellett a hőmérséklet növekedésével párhuzamosan többnyire megolvadnak, folyékony (cseppfolyós) halmazállapotba mennek át. Noha a folyadékot alkotó részecskék között még jelentős kölcsönhatás van, azokban a másodrendű kötőerők dominálnak. Az apoláris molekulák között diszperziós (indukált dipól-indukált dipól), poláris molekulák között dipól-dipól kölcsönhatás vagy hidrogénkötés (pl. a vízben) teremtet kapcsolatot (63. ábra). Eltérően a szilárd anyagoktól, a folyadékrészecskék már nincsenek helyhez kötve, azaz mozognak, ezért többnyire rendszertelenül helyezkednek el (rövidtávú, helyi rendezettség létezik), továbbá bizonyos irányokban elmozdulhatnak. A folyadékoknak ennek megfelelően nincs állandó alakjuk, de térfogatuk közel állandó. Ez azt jelenti, hogy amíg a folyadék alakja könnyen, térfogata nem, illetve csak nehezen — például nagy nyomáson — változtatható meg. A cseppfolyós anyag kis mennyisége gömb alakot vesz fel (72. ábra), nagyobb mennyisége a nehézségi erő, a gravitáció hatására szétfolyik, illetve felveszi a tárolóedény alakját (Atkins, 1992; Koch, Sztrókey, 1994; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).



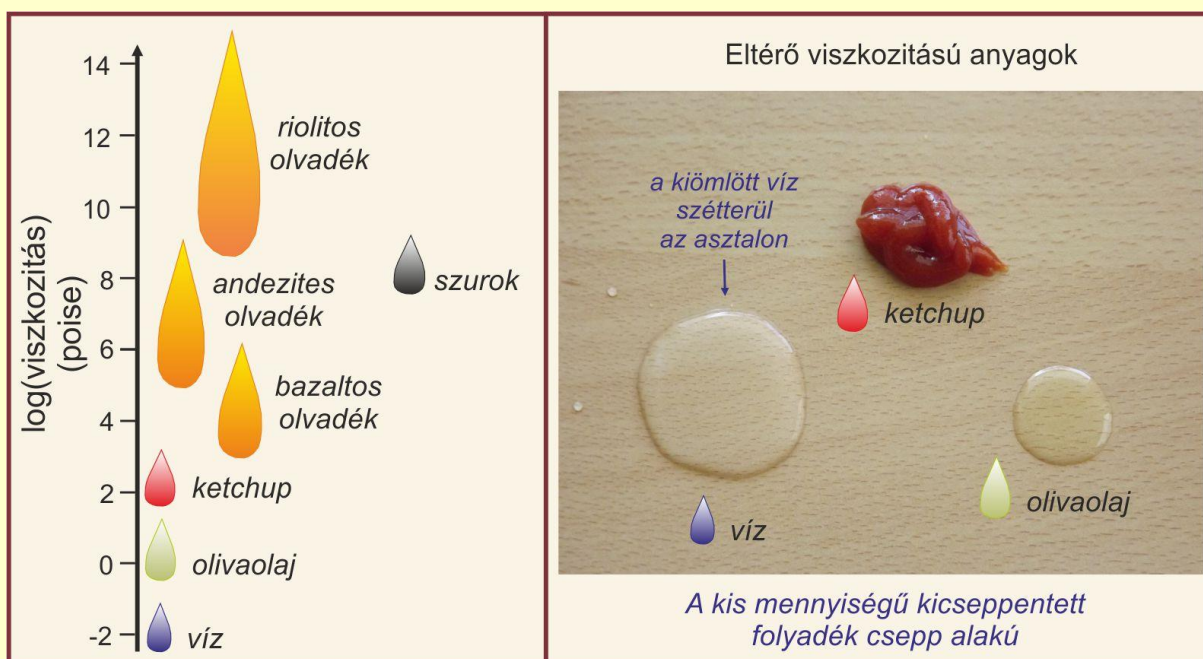
**72. ábra**

A folyadékok kis mennyisége gömb alakot vesz fel  
Ködből kondenzálódó vízcseppek pókháló, illetve növények felületén (Világosi várhegy, Románia).

A folyadékok tulajdonságai átmenetet képeznek a gázok és a szilárd testek között. A folyadék halmazállapotú anyagok kémiai szerkezete rendkívül változatos. A korábban említett molekuláris folyadékokon (pl. bróm, víz, aceton) túl, a különböző

fémek és sók olvadékai, sőt a kőzetolvadékok is ide sorolhatók. A sokféle szerkezet és a változatos tulajdonságok ellenére vannak azonban olyan általános jellemzők, amelyek mindegyik folyadéktípusra érvényesek (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014). Ezek közül kiemelkedő jelentőségű a **viszkozitás**, a szabad felülettel összefüggő **felületi feszültség** és a **gőznyomás (tenzió)**. A következőkben nézzük meg ezeket a földtudományok szemszögéből!

A folyadékok egyik legfontosabb tulajdonsága, hogy képesek alakváltoztatásra, azaz folynak. A folyás mértékében azonban lényeges különbségek lehetnek, amit hétköznapijainkban is meg tapasztalhatunk. Folyadék a víz, az étolaj, a méz vagy akár a ketchup. Valamennyi felsorolt anyag folyik, ha kiöntjük a tárolóedényből, de a folyás mértékében komoly eltéréseket vehetünk észre. Hasonlóan, a természetben előforduló folyadékok — mint például az esővíz, a kőolaj vagy a vulkánkitöréskor felszínre kerülő láva — folyásviszonyai sem egyformák. Ezt a különbséget jellemezni és számszerűsíteni a viszkozitással lehet (73. ábra).



**73. ábra**

A viszkozitás változása a víztől a riolitos olvadékig (Bárány et al., 2011; Harangi, 2015; módosítva) néhány jellemző köznap példával

A viszkozitás olyan anyagi minőségtől függő paraméter, ami egyszerűen a folyással szembeni belső ellenállásnak, belső súrlódásnak nevezhető. A viszkozitás miatt az áramló folyadék egymáson elcsúszó rétegei között a relatív elmozdulást akadályozó súrlódási erő lép fel, azaz az egyes szomszédos rétegek egymás

mozgását gátolják. Miután a viszkozitás a folyadék mozgásával (folyásával) kapcsolatos tulajdonság, a viszkozitás transzportsajátság (Atkins, 1992; Bárány et al., 2011). A fizikai kémia megfogalmazása szerint a viszkozitás egyenlő a nyírófeszültség és a folyás irányára merőlegesen egységnyi hosszra jutó sebességváltozás hányadosával, ezért SI mértékegysége a Pas (Pascal másodperc), elterjedt egysége azonban a poise ( $1 \text{ P} = 0,1 \text{ Pas}$ ). A belső súrlódás tehát az az erő, ami két, egységnyi területű réteg egymáshoz képest egységnyi sebességgel történő elmozdításához szükséges. A víz viszkozitása szobahőmérsékleten  $1 \text{ mPas}$  (milliPascal másodperc), a benziné  $0,65 \text{ mPas}$ , a kenőolajok közelítő viszkozitása  $300\text{--}800 \text{ mPas}$ . A hőmérséklet emelkedésével a folyadékok belső súrlódása csökken (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

Azonos hőmérsékleten a lassabb folyás nagyobb viszkozitásra utal, a viszkózus folyadékokban ugyanis nehezebben mozdulnak el egymás mellett a molekulák (Whitten et al., 2014). Ennek oka egyrészt a másodlagos kötőerők erőssége, másrészt a molekulák alakja. Minél jobban eltér egy molekula alakja az izometrikustól (a gömbszerűtől), annál több lehetőség nyílik arra, hogy azok mozgásuk során „összeakadjanak, összegabalyodjanak”. A hosszú, elágazó láncokat tartalmazó folyadékok ezért általában nagyobb viszkozitásúak. Ennek köszönhető, hogy a nagy szénláncú, bonyolult szénhidrogéneket tartalmazó kőolaj (nyersolaj) sűrűn folyó, a rövidebb szénláncú komponensekben gazdagabb, finomított változatok (pl. benzin) azonban hígabbak. A döntően metánból és további, rövid szénláncú, egyszerű szénhidrogén-molekulákból (etán, propán, bután, izopentán) álló földgáz közönséges körülmények között gáz halmazállapotú, ami a molekulák közötti nagyon gyenge kötőerők eredménye.

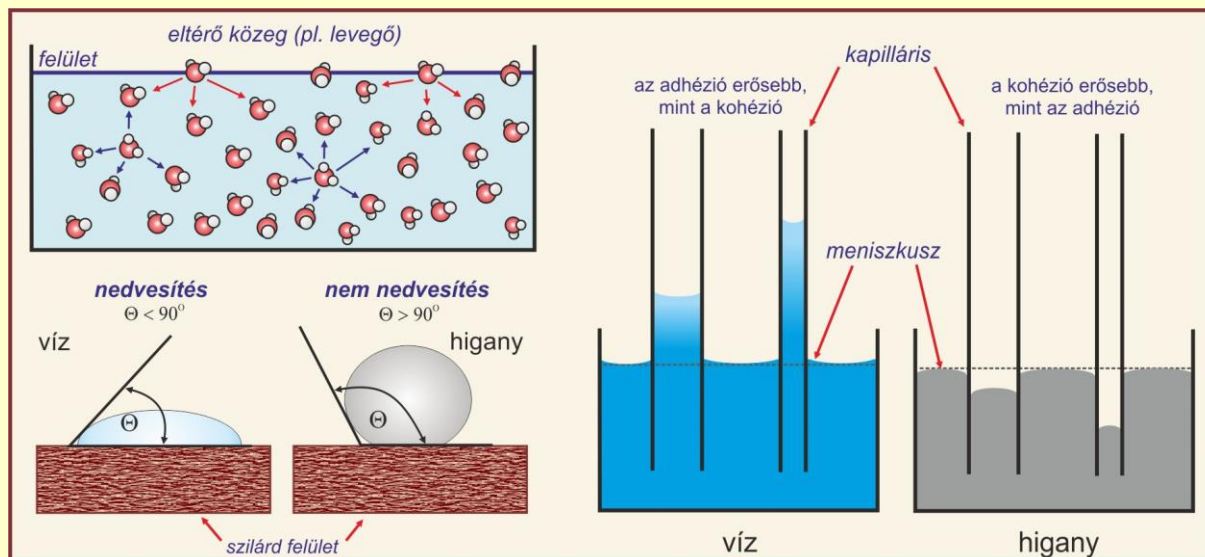
A folyadék (olvadék) belső súrlódása a magmás folyamatok szempontjából sem lényegtelen. Gondoljunk csak a szilikátok szerkezetére! Az elkülönült, tetraédes elrendeződésű  $\text{SiO}_4^{4-}$ -ionokon túl a szilikátokban az  $[\text{SiO}_4]$ -egységek gyűrűkké, láncokká, szalagokká, rétegekké kapcsolódhatnak össze, ami természetesen maga után vonja a növekvő „összegabalyodási” lehetőséget (Koch, Sztrókay, 1994; Gill, 2015; Harangi, 2015). A geokémiában a kőzetek — és így a kőzetolvadékok (pl. magma vagy láva) — tömeg%-os kémiai összetételét oxidos formában szokás megadni, ezért a szilíciumtartalmat  $\text{SiO}_2$ -re vonatkoztatják. Egy kőzetolvadékban a növekvő  $\text{SiO}_2$ -tartalommal párhuzamosan a viszkozitás szintén növekszik (**73. ábra**). Ennek megfelelően a bazaltos ( $\text{SiO}_2 = 44\text{--}53$  tömeg%),  $\text{SiO}_2$ -

ben szegényebb kémiai összetételű olvadék hígabban folyó, több kilométerre eljuthat a kitörés helyétől, ezért kiterjedt lávafolyásokat eredményezhet. Az  $\text{SiO}_2$ -ben gazdagabb, úgynevezett savanyú, riolitos ( $\text{SiO}_2 > 64$  tömeg%) olvadék viszkózus, sűrűn folyó, ezért a riolitláva általában csak kisebb távolságra (~néhány száz méter) jut el a kürtőtől. Természetesen a növekvő hőmérséklettel a kőzetolvadék viszkozitása csökken, azonban ez függ az úgynevezett „illótartalomtól” is. Ez leegyszerűsítve azt jelenti, hogy az illó (könnyen gáz-halmazállapotba vihető) komponensek relatív aránya, azaz több komponens együttes hatása határozza meg a kőzetolvadék folyási képességét. A víztartalom csökkent, a szén-dioxid-tartalom ellenben növeli a magma viszkozitását (Harangi, 2015).

A folyadékok további jellegzetes tulajdonsága, hogy szabad felszínnel rendelkeznek, a környezetüktől éles határfelület választja el őket (Bárány et al., 2011). Köznapi értelemben teljesen természetes, ha egy tó vagy folyó vízszintjéről hallunk, de akkor is ezt a határfelületet figyeljük, amikor valamilyen italt (folyadékot) pohárba töltünk. Mi az oka azonban annak, hogy bizonyos tárgyak nagyobb sűrűségük ellenére nem süllyednek el azonnal a vízben (pl. egy falevél), hanem a vízfelületen maradnak? Mivel magyarázható, hogy a kis mennyiségű kicseppentett folyadék csepp alakú, a szappanbuborék pedig gömb? Valamennyi felsorolt példa a folyadékok határfelülettel kapcsolatos alapvető tulajdonságával, a *felületi feszültséggel* van összefüggésben.

Bármely folyadék határfelületét alkotó részecskék más mikrokörnyezetben, magasabb energiaszinten vannak, mint a folyadék belsejében lévő társaik, hiszen a határfelületen a folyadékot alkotó molekulák, ionok másik közeggel (pl. levegővel) érintkeznek (74. ábra). Az a részecske, amelyik a folyadék határfelületére került, a belsejében lévő részecskékhez képest kevesebb részecskével van kapcsolatban, így rá a szomszédos részecskék a folyadék belseje felé irányuló vonzást fejtenek ki. Gravitációmentes környezetben a folyadékrészecskék között fellépő összetartó erő (**kohéziós erő**) felelős azért, hogy a folyadék az adott térfogathoz tartozó legkisebb felülettel rendelkező alakzatot, gömbalakot próbál felvenni, hiszen a kisebb felület alacsonyabb energiaállapotot képvisel. A cseppalak a gravitáció hatásának eredménye (Atkins, 1992; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014). Pontosabb meghatározása szerint a felületi feszültség a folyadék felületének egységnyi megnöveléséhez szükséges energia (munka) úgy, hogy a folyadék belsejéből molekulákat juttatunk a felületére (mértékegysége:  $\text{J/m}^2$ ). A felületi feszültség

egyrészt az anyagi minőségtől, másrészt a hőmérséklettől függ. Levegőn a víz felületi feszültsége 20 °C-on 72,9 mJ/m<sup>2</sup>, 25 °C-on 72,0 mJ/m<sup>2</sup>; míg azonos körülmények között a higanyé 486,5 mJ/m<sup>2</sup>, illetve 485,5 mJ/m<sup>2</sup> (Bárány et al., 2011).



**74. ábra**

A folyadékok határfelületének mikrokörnyezete és a folyadékok felületi feszültségének következménye: a nedvesítési peremszög és a meniszkusz alakja kapillárisban (Atkins, 1992; Bárány et al., 2011; módosítva)

A nedvesítési peremszöget a fizikában a görög théta ( $\Theta$ ) betűvel jelölik.

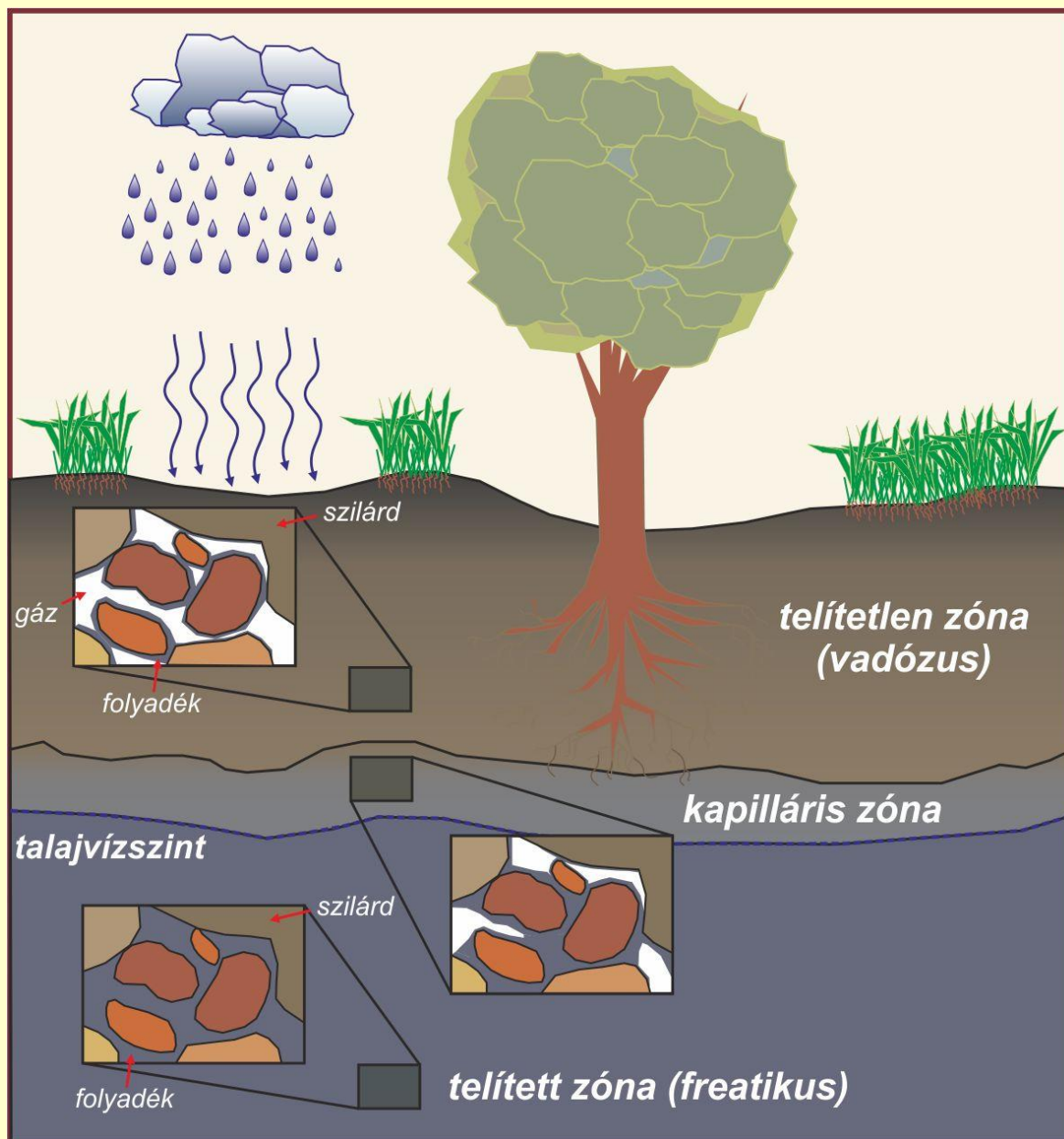
Nem csak a folyadékrészecskék között lép fel összetartás (**kohézió**), hanem a folyadékkal érintkező másik anyag, például egy szilárd test (asztal, pohár, üvegcső) részecskéi és a folyadékrészecskék között is. A másik anyag részecskéinek a folyadékrészecskékre kifejtett vonzó hatása az **adhézió** („tapadás”), a közöttük fellépő erő az **adhéziós erő**. A kohézió és az adhézió aránya határozza meg, hogy egy folyadék az adott szilárd anyagot nedvesíti-e (Whitten et al., 2014). Ez az oka annak, hogy a kiömlött víz szétterül az asztalon (**73. ábra**), az eső tócsát formál a járdán. Továbbá ez az oka, hogy az összetört lázmérőből vagy hőmérőből a nagyobb felületi feszültségű higany golyókat formálva elgurul. A fizikai háttér részletezése nélkül a nedvesítés jellemzésére a nedvesítési peremszög vagy kontaktszög fogalmát érdemes még megismernünk (**74. ábra**). Ha a szilárd felület és a folyadékcsepp érintkezési pontjából a folyadékcsepphez érintőt húzunk, és megmérjük az érintő és a szilárd felszín közötti szöget, megkapjuk a nedvesítési peremszöget. Ha ez kisebb, mint 90°, a folyadék nedvesíti az adott szilárd anyag felületét, ha nagyobb 90°-nál, nem nedvesítőként viselkedik (Bárány et al., 2011).

A felületi feszültséggel, illetve azon keresztül a nedvesítéssel függ össze a kapilláris-emelkedés jelensége, amit földtudományi szempontból szintén hasznos ismernünk. Ennek megértéséhez képzeljünk el egy klasszikus kísérletet! Egy-egy üvegtálba vizet, illetve higanyt öntünk, majd mindkettőbe vékony üvegcsöveket, úgynevezett kapillárisokat állítunk (74. ábra). Ha megfigyeljük a folyadékszinteket, a víz esetében a kapillárisokban magasabb vízszintet tapasztalunk, mint a tálban lévő vízszint (kapilláris-emelkedés jelensége). A higanynál viszont a kapillárisokban alacsonyabb lesz a folyadék szintje (kapilláris-süllyedés). A víz az üveggel szemben nedvesítő folyadékként viselkedik, azaz a vízmolekulák és az üvegcső fala közötti adhézió erősebb, mint a vízmolekulák közötti kohézió. Ez azt eredményezi, hogy az üvegcsőben a víz határfelülete nem vízszintes, hanem szélein felfelé hajló (konkáv) lesz. Ezzel ellentétben a nem nedvesítő higany felfelé domborodó (konvex) határfelületű a kapillárisban. Ezt a konkáv vagy konvex, görbülő folyadékfelszínt **meniszkusznak** nevezzük (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

A kapilláris hatásnak komoly szerepe van a növényi gyökerek vízfelvételében (Whitten et al., 2014). A laza üledékben, illetve a talajban az összekapcsolódó parányi „lukacsákat”, a szilárd anyaggal kitöltetlen pórusokat talajvíz (pontosabban talajnedvesség), valamint változó mennyiségű gáz („talajlevegő”) tölti ki. A víz képes nedvesíteni a talajszemcséket, ezért a gravitációs erő által meghatározott felszín alatti víz (talajvíz) szintje felett a kapilláris-emelkedés zónája alakul ki (Farsang, 2014), ahonnan a növények gyökerei képesek felvenni a vizet (75. ábra).

Az előzőekben láttuk, hogy a folyadékokat környezetüktől határfelület választja el. Ez a határfelület azonban nem merev, rögzített határ, hanem állandóan változó, átjárható a mozgó folyadékrészecskék számára. Bármely folyadékban vannak olyan részecskék, molekulák, amelyek energiája meghaladja az átlagos energiát. Ha ez az energia nagyobb, mint a molekulákat összetartó energia, és a nagyobb energiájú részecskék eléri a folyadékfelszínt, akkor ezek képesek kilépni a folyadékfázisból a gáztérbe (76. ábra). Ezt a folyamatot nevezzük párolgásnak. A folyadékok minden hőmérsékleten párolognak; a párolgás az egyenetlen energia-eloszlás következménye (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

Nyitott edényben a párolgás addig tart, amíg a folyadék teljesen gőzzé nem alakul. Ezért szárad meg a frissen mosott vizes ruha; ezt tapasztaljuk, amikor télen a fűtött lakásban egy tálba vizet teszünk, hogy párásabb legyen a levegő; de ez az oka annak is, hogy a nyári záport követően gyorsan felszáradnak a víztócsák.



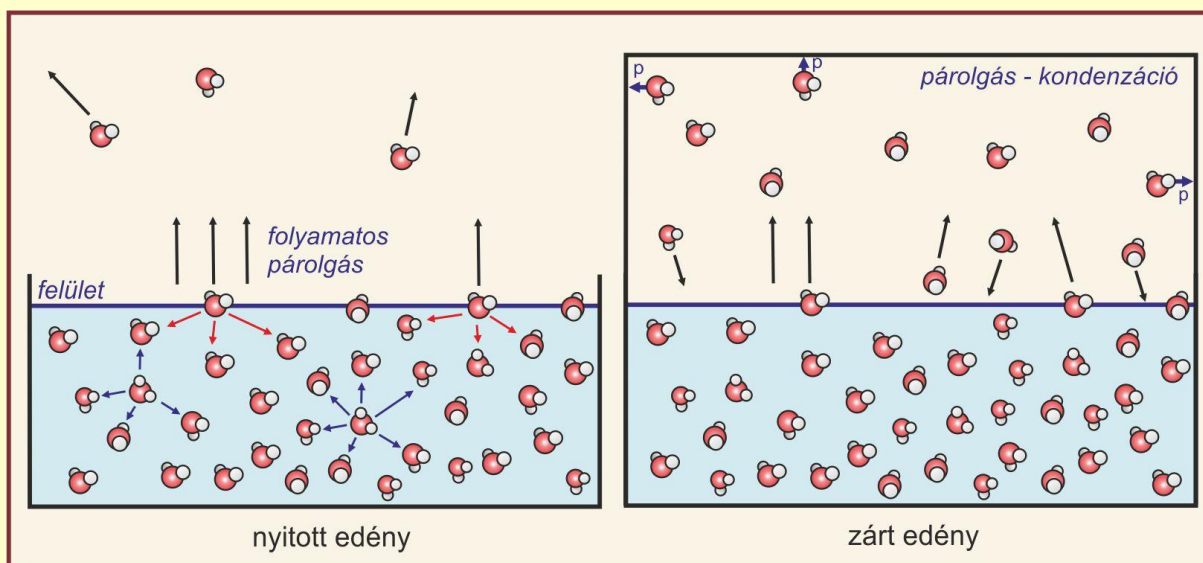
**75. ábra**

A kapilláris-emelkedés jelentősége a talajban

A talajvíz szintje alatti zónában a szilárd üledék- és talajszemcsék közötti pórusteret teljes egészében kitölti a folyadék (telített, kétfázisú vagy freatikus zóna), míg a felszín és a talajvízszint között a pórusokban önálló gázfázis, „talajlevegő” is található (telítetlen, háromfázisú vagy vadózus zóna). A víz nedvesíti a talajszemcséket (talajnedvesség), ezért a telített zóna felett kialakul a kapilláris-emelkedés zónája, ahonnan a növények gyökerei képesek felvenni a talajvizet.

Zárt edényben a folyadék csak részben párolog el. A párolgás következtében ugyanis növekszik a gőz nyomása a folyadék felett, ami egy idő után állandó értéket ér el, hiszen a gázfázisból a folyadék felületébe ütköző molekulák megkötődhetnek (76. ábra). Ezt a párolgással ellentétes folyamatot nevezzük kondenzációnak. Ha a kondenzáció sebessége megegyezik a párolgás sebességével, a két ellentétes folyamat között dinamikus egyensúly áll be, azaz a gőz telítődik. A telített gőz

nyomását röviden *gőznyomásnak* vagy *tenzió*nak nevezzük, amelynek értéke a folyadék anyagi minőségén kívül csak a hőmérséklettől függ (Atkins, 1992; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).



**76. ábra**

A szabad folyadékfelszínen bekövetkező párolgás nyitott és zárt edényben  
A gázrészecskék mozgásuk során gyakran ütköznek a környezetük valós határaival (pl. az edény falával), ezek az ütközések okozzák a gáz nyomását (p).

A könnyen párolgó folyadékokat **illékony folyadékok**nak nevezzük, ezeknek viszonylag nagy a gőznyomása. Minél erősebb azonban egy folyadékban a molekulák közötti másodrendű kölcsönhatás, azaz az összetartó (kohéziós) erő, annál kisebb lesz az adott folyadék gőznyomása. A szerves oldószerek közül a dietil-éter illékony folyadék, míg a metanol kevésbé illékony. A metanol-molekulák közötti hidrogénhidak miatt a metanol gőznyomása kisebb, mint a dietil-éteré. A nagyon erős hidrogénkötés miatt a víz gőznyomása szokatlanul kicsi, továbbá magas forrásponttal rendelkezik (Whitten et al., 2014).

A légköri folyamatok szempontjából különleges jelentősége van a víz gőznyomásának: egy gáz vagy gázkeverék (mint amilyen a levegő is) maximális víztartalmát egy adott hőmérsékleten a víz tenziója szabja meg, ami a nedvességtartalmat szabályozza (Péczy, 1994; Farsang, 2014). A meteorológiában az észlelt (mért) hőmérséklethez tartozó telítettségi gőznyomáshoz viszonyítva (százalékban kifejezve) a levegő aktuális gőznyomását, megkapjuk a relatív nedvességet. A vízgőz nélküli levegő relatív nedvessége 0%, míg a vízgőzzel telített levegő relatív nedvessége 100% (Péczy, 1994).

### 6.3. Gázok és gáztörvények

Amíg szilárd halmazállapotban az anyagokat alkotó részecskék egymáshoz viszonyított helyzete viszonylag állandó, a folyadék-részecskék már elmozdulnak egymáshoz képest. A közel állandó térfogatú folyadékok szabad felszínnel rendelkeznek, a gázokban viszont az azonos részecskék rendszertelenül helyezkednek el, és állandó mozgásban vannak, ennek következtében szétterjednek a teljes rendelkezésre álló térfogatban. Ez azt jelenti, hogy a gázoknak sem határozott alakjuk, sem határozott térfogatuk nincs, megfelelő körülmények között összenyomhatók, miközben sűrűségük növekszik. A fizikai tulajdonságok jellemzői (pl. a hang vagy a fény terjedése) egy adott gáztérben a tér minden irányában azonosak, azaz a gázok — az amorf szilárd anyagokhoz hasonlóan — izotróp közegeként viselkednek (Atkins, 1992; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

Láttuk, hogy a külső fizikai tényezők, mint a nyomás és a hőmérséklet változásával a szilárd anyagok a folyadék halmazállapoton keresztül gázokká alakulhatnak. Természetesen, a halmazállapot megváltozása fordított folyamat szerint is lejátszódhat: minden gáz lehűtés és összenyomás (kompresszió) hatására cseppfolyósítható (Whitten et al., 2014).

A kémiai anyagok három — eddig bemutatott — halmazállapotán kívül létezik egy negyedik is, ez a **plazmaállapot**. A plazma az adott anyag gázállapotú részecskéiből keletkezik extrém nagy hőmérsékleten (pl. speciális lángban, fúziós reaktorban, villámláskor, csillagokban) úgy, hogy a gázmolekulák disszociálnak (megfordítható, azaz reverzibilis módon szétesnek), valamint az atomokból elektronok szakadnak le. A plazma tehát elektronokból és ionokból álló gázelegy, ionizált gáz (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

A gázokat alkotó atomok vagy molekulák egymástól viszonylag nagy távolságra helyezkednek el, ezért közöttük nem alakul ki számottevő kémiai kölcsönhatás. Nem véletlen, hogy a szilárd anyagok tárgyalásától a gázokig eljutva egyre kevesebb szó esett a kémiai kötésekről, viszont egyre több, a klasszikus fizikából ismert fogalom (hőmérséklet, nyomás, térfogat) került előtérbe. A gázok legfontosabb anyagi jellemzőinek tárgyalásához a fizika eszköztárát kell segítségül hívnunk, hogy az úgynevezett „gáztörvények”-en keresztül eljussunk azokhoz az

alapvető megállapításokhoz, amelyeket a fizikai kémia a természetben lejátszódó folyamatok hajtóerejének tart (Atkins, 1992; Bárány et al., 2011; Schiller, 2013; Whitten et al., 2014).

Számos lényeges kémiai anyag (közeg) gázokból áll. A Föld légköre, az atmoszféra — folyékony és szilárd összetevőket is tartalmazó — gázkeverék. Nem meglepő, hogy életünk egyik fontos meghatározója az aktuális időjárás. Nem mindegy, hogy 40 fokos kánikulára, vagy éppen szakadó esőre kell készülnünk a reggeli öltözködéskor. Az időjárásjelentést hallgatva gyakran elhangzanak olyan kifejezések, hogy melegfronti vagy hidegfronti hatás várható, alacsony nyomású mérsékelt övi ciklon éri el hazánkat, vagy ellenkezőleg, magas nyomású anticiklon határozza meg a következő napok időjárását. Nem csak a levegő hőmérséklete és nyomása fontos információ a földtudományokban. Bármely gáz, mint anyagi halmaz egy-egy időpillanatra vonatkoztatott jellemzőit, azaz „állapotát” ezek segítségével írhatjuk le. A gázok tárgyalásakor célszerű még egy állapotjelzőt vizsgálnunk, ami a gáz mennyiségével, kiterjedésével kapcsolatos paraméter, ez a térfogat. Egy gáz állapotát leíró állapotjelzők nem függetlenek egymástól. A nyomás ( $p$ ), a hőmérséklet ( $T$ ) és a térfogat ( $V$ ) között fennálló kapcsolatokat a klasszikus fizika legelső kísérletei már megállapították (Atkins, 1992; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

Minden gázkeverék komponensei elegyednek, azaz tökéletesen elkeverednek anélkül, hogy egymással kémiai reakcióba lépnének. Gázokban az atomok vagy a molekulák rendezetlen mozgást végeznek (hőmozgás), folyamatosan haladó és forgó mozgásban vannak, továbbá bármely gázmolekulán belül a kapcsolódó atomok egymáshoz képest is rezegnek. Ez a rendezetlen mozgás annak a következménye, hogy a gázrészecskék mozgásuk során gyakran ütköznek egymással, illetve a környezetük valós határaival (pl. a terem falával). Ez utóbbi ütközések okozzák a gáz nyomását (Atkins, 1992; Péczely, 1994; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

#### **Megjegyzés:**

Nem szabad elfelejteni, hogy a fizika megfogalmazása szerint *a nyomást a felületegységre merőlegesen (és egyenletesen) ható nyomóerővel adhatjuk meg* (jele:  $p$ ; SI mértékegysége a pascal; mértékegységének jele: Pa;  $1 \text{ Pa} = 1 \text{ N/m}^2$ ). Egy pascal a nyomás akkor, ha a felület  $1 \text{ m}^2$ -ére 1 newton (N) erő hat. A légköri nyomás mérésére több módszer is használatos volt (pl. higanyos barométer), illetve a nyomást különféle mértékegységben (pl. mm Hg, torr, bar, atm) fejezték ki, ezért ezeket hasznos ismerni (Atkins, 1992; Péczely, 1994; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

$$\begin{aligned} 1 \text{ atmoszféra (atm)} &= 760 \text{ mm Hg (0 } ^\circ\text{C-on)} = 760 \text{ torr} = 1,01 \text{ bar} \\ 1 \text{ bar} &= 100 \text{ kPa} = 10^5 \text{ Pa} \end{aligned}$$

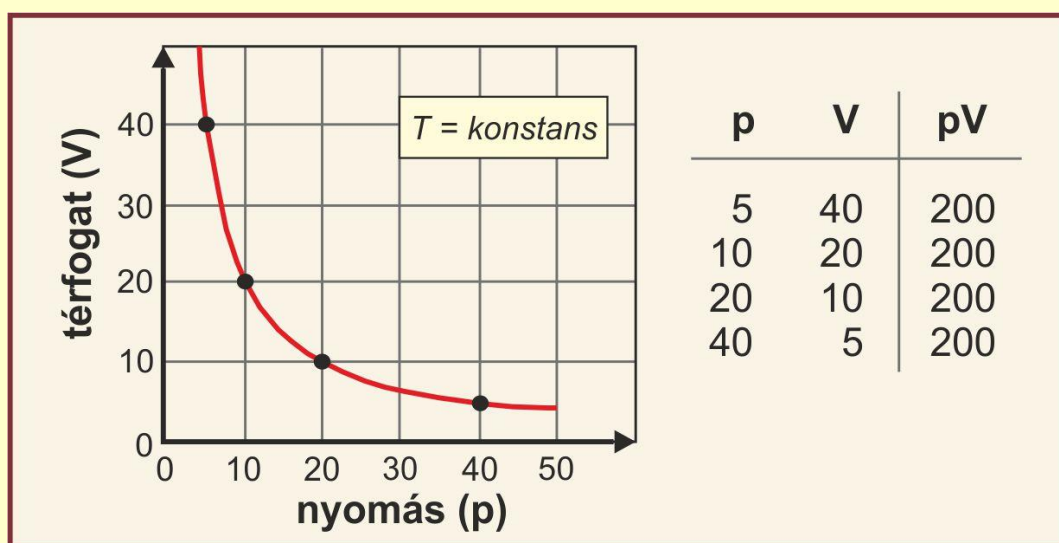
### Tipp tanárszakosoknak:

A közoktatásban a természettudományok gyakran elkülönült tantárgyak formájában jelennek meg. A különböző órákon hallott ismeretek felidézése, összekapcsolása és alkalmazása nem mindig egyszerű. A légköri folyamatok tárgyalásakor a nyomás mértékegységével kapcsolatos ismeretek felelevenítését segítheti az alábbi vicc:

*A fizikusok bújócskáznak, Einstein a hunyó. Mindenki elbújik, ám Newton nem talál magának rejtkehelyet. Gondol egyet, és egy krétával rajzol maga köré a padlóra egy 1 méter oldalú négyzetet. A számolás végén Einstein meglátja Newtont és ezt mondja:*

- Megvagy, Newton, te vagy a hunyó! Newton a fejét rázva megjegyzi:
- Nem, nem, én egy newton vagyok 1 m<sup>2</sup>-en, tehát te nem engem találtál meg, hanem Pascalt!

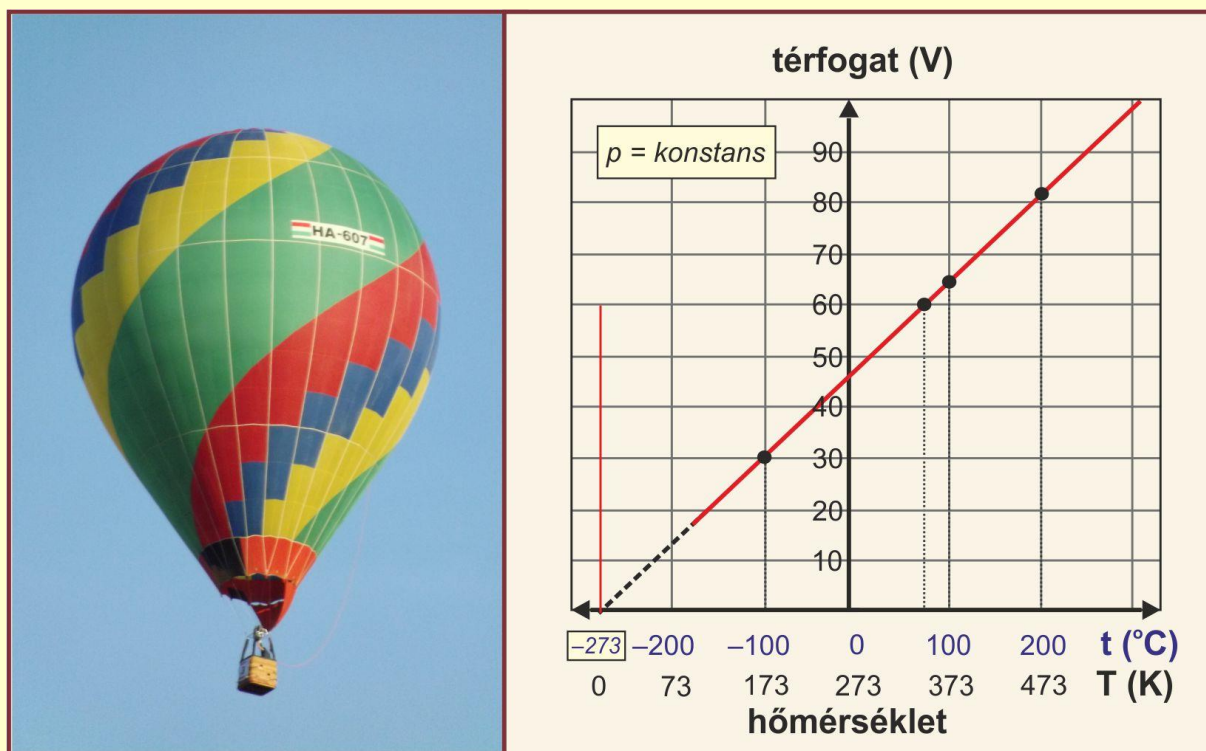
A 17–19. században a gázok viselkedését több kiváló kutató vizsgálta. Közülük kiemelkednek Robert Boyle (1627–1691), Edme Mariotte (1620–1684), Joseph Gay-Lussac (1778–1850) és Jacques Charles (1746–1823) kísérletei. Boyle és Mariotte egy adott hőmérsékleten (konstans  $T$ ), adott mennyiségű (konstans  $n$ ) gáz nyomása és térfogata közötti kapcsolat tanulmányozása során — egymástól függetlenül — megállapították, hogy a gáz nyomásának és térfogatának szorzata mindig azonos szám, azaz állandó ( $pV = k$ , konstans  $n$ ,  $T$ ). Ez az összefüggés egyike a gáztörvényeknek, ez a **Boyle–Mariotte-törvény** vagy egyszerűen **Boyle-törvény** (Whitten et al., 2014). Amennyiben — konstans hőmérséklet mellett — ábrázoljuk a gáz térfogatát a nyomás függvényében (77. ábra), a kapott görbe egy hiperbola egyik ága lesz. Közhelyes körülmények között a legtöbb gáz követi a Boyle-törvényt, amit a gázok ideális viselkedésének nevezünk (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).



77. ábra

A Boyle–Mariotte-törvény grafikus megjelenítése: az ideális gázok térfogatát a nyomás függvényében ábrázolva (konstans hőmérsékleten) egy hiperbola egyik ágát kapjuk

Gay-Lussac az **ideális gázok** állandó térfogat melletti változását tanulmányozva megállapította, hogy egy adott mennyiségű gáz nyomása arányos a hőmérsékletével (**Gay-Lussac-törvény**). Hőlégballonos megfigyelései során a hőmérséklet növekedésével párhuzamosan a gázok kiterjedését szintén tanulmányozta. Hasonló megfigyeléseket végzett Charles is. Felfedezésük alapján állandó nyomáson (izobár feltételek mellett) a hőmérséklet növekedésével egy adott mennyiségű gáz kiterjedésének mértéke állandó, és megegyezik minden általuk vizsgált gázra (**78. ábra**). Ez a megfigyelés volt az abszolút hőmérsékleti skála (Kelvin-skála) bevezetésének az alapja. Amennyiben abszolút hőmérsékletet alkalmazunk, adott mennyiségű és állandó nyomású ideális gázra a térfogat és a hőmérséklet hányadosa állandó ( $V/T = k$ , konstans  $n$ ,  $p$ ). Ezt **Charles-törvénynek** vagy **Charles–Gay-Lussac-törvénynek** nevezik. A fenti összefüggéseket összevonva jutunk el az **egyesített gáztörvényhez** (**19. táblázat**). Valamennyit felírhatjuk több állapotra is, ami lehetőséget biztosít arra, hogy egy ismeretlen állapotjelzőt a többi ismeretében kiszámoljunk (Atkins, 1992; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).



**78. ábra**

Adott mennyiségű ideális gáz térfogata konstans nyomáson arányos a hőmérsékletével: a Charles–Gay-Lussac-törvény grafikus megjelenítése  
A hőmérséklet növekedésével egy adott mennyiségű gáz ( $n$ ,  $p$  konstans) kiterjedésének mértéke állandó, ami az abszolút hőmérsékleti skála (Kelvin-skála) bevezetésének az alapja.

**Megjegyzés:**

Lord Kelvin (brit fizikus) 1848-ban állapította meg, hogy ha az ideális gázok hőmérséklete és térfogata közötti összefüggés (Charles-törvény) grafikus megjelenítésekor a mérési pontokra illeszkedő egyenest a térfogat nulla értékéig meghosszabbítjuk, az a hőmérsékleti tengelyt minden esetben  $-273,15\text{ }^{\circ}\text{C}$ -nál metszi. Kelvin ezt a hőmérsékletet nevezte el abszolút nulla foknak, ami a tiszteletére elnevezett hőmérsékleti skálán nulla Kelvinnek (0 K) felel meg (Whitten et al., 2014).

**19. táblázat**

Az ideális gázok állapotváltozói közötti legfontosabb összefüggések (Whitten et al., 2014)

<b>A gáztörvény neve</b>	<b>A gáztörvény megfogalmazása</b>	<b>A gáztörvény matematikai alakja</b>	<b>Két állapotra vonatkozó összefüggés</b>
<b>Boyle–Mariotte-törvény</b> ( <i>Boyle-törvény</i> )	Adott hőmérsékleten egy adott mennyiségű ideális gáz nyomásának és térfogatának szorzata állandó (konstans, $k$ ).	$pV = k$ (konstans $n$ , $T$ )	$p_1V_1 = k$ és $p_2V_2 = k$ , azaz $p_1V_1 = p_2V_2$
<b>Gay-Lussac-törvény</b>	Adott térfogaton egy adott mennyiségű ideális gáz nyomásának és hőmérsékletének hányadosa állandó ( $k$ ).	$p/T = k$ (konstans $n$ , $V$ )	$p_1/T_1 = k$ és $p_2/T_2 = k$ , azaz $p_1/T_1 = p_2/T_2$
<b>Charles–Gay-Lussac-törvény</b> ( <i>Charles-törvény</i> )	Állandó nyomáson egy adott mennyiségű gáz térfogata közvetlenül arányos az abszolút hőmérséklettel.	$V = kT$ $V/T = k$ (konstans $n$ , $p$ )	$V_1/T_1 = k$ és $V_2/T_2 = k$ , azaz $V_1/T_1 = V_2/T_2$
<b>egyesített gáztörvény</b>			$\frac{p_1V_1}{T_1} = \frac{p_2V_2}{T_2}$

Amedeo Avogadro 1811-ben arra a következtetésre jutott, hogy azonos nyomású, térfogatú és hőmérsékletű gázokban a részecskeszám (atomok, illetve molekulák száma) is azonos. Hipotézisét, amit ma **Avogadro-törvény** néven ismerünk, később számos kísérlet igazolta (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014). Az Avogadro-törvény értelmében állandó nyomáson és hőmérsékleten (konstans  $p$ ,  $T$ ) egy ideális gáz által elfoglalt térfogat közvetlenül arányos a gáz mennyiségével, azaz  $V = kn$ , ahol  $k$  (konstans) az arányossági tényező (Atkins, 1992; Whitten et al., 2014). Ez az összefüggés lehetővé teszi számunkra azt, hogy különböző nyomás és hőmérséklet értékek mellett megadjuk bármely ideálisan viselkedő gáz moláris térfogatát ( $V/n = V_m$ , ahol  $V_m$  a moláris térfogat [ $\text{m}^3/\text{mol}$ ]).

A gáztörvények tárgyalása során láttuk, hogy a gázok térfogatát (illetve ezen keresztül a sűrűséget) a gáz nyomása és a hőmérséklete egyaránt befolyásolja. A gázok viselkedésének leírásakor ezért célszerű néhány referencia állapotot

(viszonyítási alapot) kiválasztani. Nemzetközi megállapodás szerint **sztenderd nyomás**nak az 1 atmoszféra ( $1 \text{ atm} = 101,325 \text{ kPa}$ ) nyomást tekintik. Hőmérséklet szempontjából azonban több kitüntetett értéket is meg kell különböztetni. Az ideális gázok **normál állapot**ának az 1 atm nyomásnak és  $0^\circ\text{C}$  hőmérsékletnek megfelelő körülményeket nevezzük, ekkor a gáz kísérletileg meghatározott moláris térfogata  $22,41 \text{ dm}^3/\text{mol}$ . Szobahőmérsékleten ( $20^\circ\text{C}$ ) és 1 atm nyomáson 1 mol ideális gáz térfogata  $24 \text{ dm}^3$ . **Sztenderd állapot**nak a  $25^\circ\text{C}$  hőmérsékletnek és 1 atm nyomásnak megfelelő körülményeket tekintjük. Bármely ideálisan viselkedő gáz moláris térfogata sztenderd állapotban  $24,5 \text{ dm}^3/\text{mol}$  (Atkins, 1992).

Összefoglalva az ideális gázok állapotváltozói közötti összefüggéseket, bármely ideális gáz leírható a nyomás, az abszolút hőmérséklet, a térfogat és az anyagmennyiség segítségével úgy, hogy bármely három paraméter egyértelműen meghatározza a negyediket. Figyelembe véve, hogy egy ideális gáz térfogata arányos a nyomás reciprokával ( $V \sim 1/p$ , Boyle–Mariotte-törvény), az abszolút hőmérséklettel ( $V \sim T$ , Charles–Gay-Lussac-törvény) és az anyagmennyiséggel ( $V \sim n$ , Avogadro-törvény), az arányossági tényező megadásával felírhatjuk az ideális gázok állapotegyenletét:

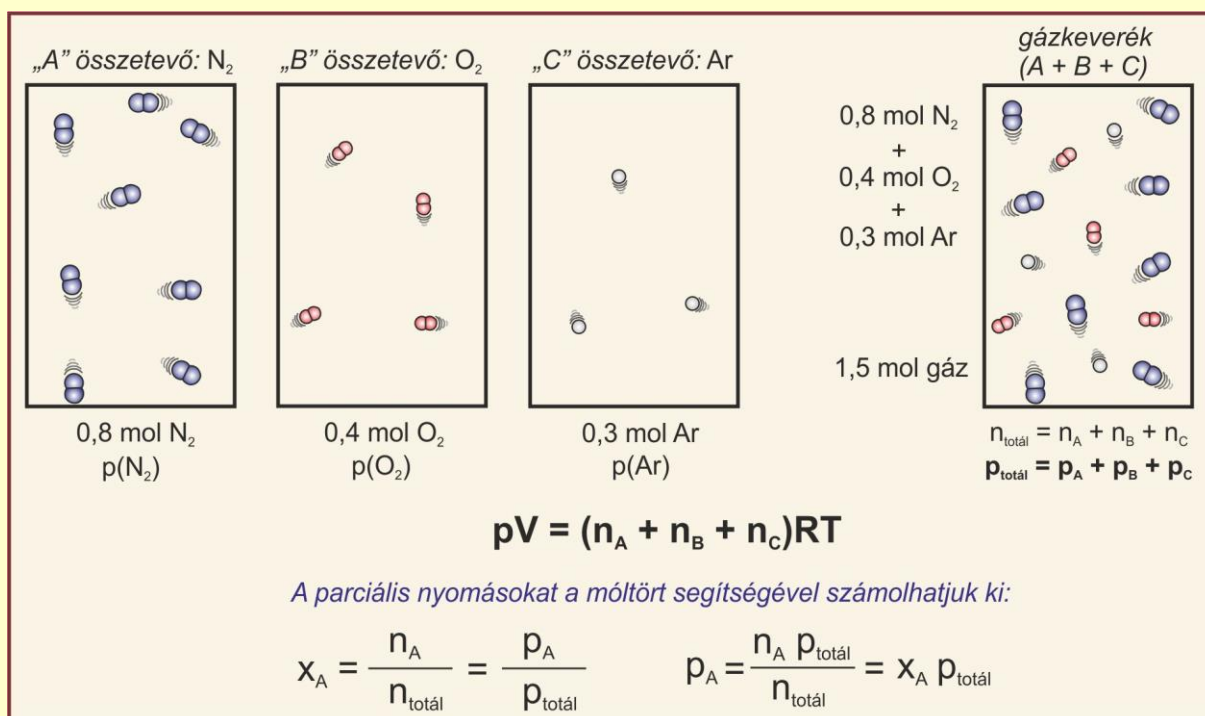
$$V = R(nT/p), \text{ átrendezve: } pV = nRT, \text{ ahol } R \text{ az arányossági tényező.}$$

Ez az összefüggés az **ideális gáztörvény**, a benne szereplő  $R$  arányossági tényező az univerzális vagy **egyetemes gázállandó**, értéke:  $R=8,314 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$  (Atkins, 1992; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

Az ideális gázok állapotát leíró összefüggések nem csak tiszta anyagokra érvényesek, hanem gázkeverékekre is kiterjeszthetők. Bármely gázkeverék össznyomása az összetevők **parciális** (részleges) **nyomás**ának összegeként adható meg. Ezt az összefüggést nevezzük **Dalton-törvénynek** (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014). Ha ismerjük a gázkeverék összetételét (pl.  $n_{\text{totál}} = n_A + n_B + n_C$ ; ahol A, B és C a háromkomponensű keverék összetevői), a móltörtek ( $x_A = n_A/n_{\text{totál}}$ ) segítségével kiszámolhatjuk az egyes komponensek parciális nyomását (**79. ábra**). A **móltört** az összetételre vonatkozó állapotjelző, ami megadható az összetevő mólszáma és az összmólszám hányadosaként (Bárány et al., 2011).

#### Megjegyzés:

A „sztenderd” hőmérséklet megadása nem egységes. Egyes tankönyvekben a sztenderd hőmérséklet és nyomás (Standard Temperature and Pressure, STP)  $0^\circ\text{C}$ -ot ( $273,15 \text{ K}$ ) és 1 atm nyomást jelent (Whitten et al., 2014).




### 79. ábra

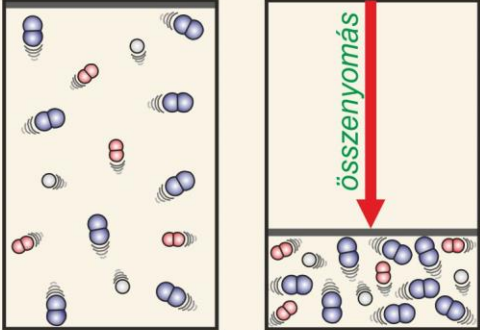
Dalton-törvény: egy gázkeverék össznyomása ( $p_{\text{totál}}$ ) az összetevők parciális nyomásának ( $p_A$ : „A” komponens parciális nyomása,  $p_B$ : „B” komponens parciális nyomása,  $p_C$ : „C” komponens parciális nyomása) összege

A gázok állapotát leíró állapotjelzők közötti összefüggések, az eddig megismert gáztörvények alapvetően az ideális gázok viselkedésére érvényesek. Ezek makroszkopikus tulajdonságait a gázcseppkék mozgása alapján a **kinetikus gázelmélet** foglalja össze, ami bizonyos megszorításokat, érvényességi feltételeket tartalmaz (Atkins, 1992; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014). Az ideális vagy **tökéletes gáz** olyan gázhalmazállapotú rendszer, amelyben a gázcseppkék (diszkrét molekulák; nemesgázok esetén atomok) közötti kölcsönhatást teljesen elhanyagoljuk. Feltételezzük, hogy saját térfogatuk kicsi (tömegpontoknak tekinthetők) és elhanyagolható a rendelkezésre álló térfogathoz képest. Mivel méretük a közöttük lévő távolsághoz viszonyítva nem számottevő, az ideális gázok összenyomhatók. További feltételezés, hogy az ideális gáz részecskéi állandó mozgásban vannak, mozgásuk két ütközés (egymással vagy az edény falával) között véletlenszerű, különböző irányú és sebességű, de egyenes vonalú egyenletes mozgás (**Brown-mozgás**). Ütközésük tökéletesen rugalmas (Newton törvényeivel leírható), ezért az ütközések során teljes energiájuk megőrződik. Átlagos mozgási energiájuk hőmérsékletfüggő: mozgásuk gyorsul a hőmérséklet növekedésével (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

Közönséges hőmérsékleti és nyomásviszonyok között a legtöbb gáz viselkedése ideális, a kondenzációs hőmérséklethez közeledve (amikor a gáz cseppfolyósodik) azonban lényeges eltérések tapasztalhatók. A gázok ideálistól eltérő viselkedését Johannes *van der Waals* (1837–1923) vizsgálta. Megállapította, hogy nagy nyomáson és/vagy kis hőmérsékleten a gáztomok és molekulák között fellépő vonzás vagy taszítás egyre nagyobb mértékű lesz (Atkins, 1992; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014). Amennyiben a hőmérséklet elég alacsony, a lassan mozgó részecskék között fellépő vonzás jelentős lesz. Ez megváltoztatja a részecskék egyenes vonalú mozgását. Lassabban érik el a rendszer falát, azaz egységnyi idő alatt kevesebb ütközés jön létre, ami befolyásolja a gáz nyomását. Figyelembe kell venni azt is, hogy nagy nyomáson az összenyomott gáz részecskéinek mozgásához rendelkezésre álló térfogat — a részecskék saját térfogata miatt — kisebb, mint a mért térfogat (**80. ábra**). A „valódi”, azaz **reális gázok** állapotegyenletében (van der Waals-egyenlet) ezért térfogatkorrekciónak is kell alkalmazni (Whitten et al., 2014). A reális gázok viselkedése tehát nem ideális, de 1 atm körüli (vagy kisebb) nyomáson az ideális gázok törvényei jól használhatók, segítségükkel egyszerű számításokat közelítő pontossággal el tudunk végezni.



ütközéskor a gázcseppkék között vonzóerő lép fel (intermolekuláris vonzóerő) → nem rugalmas az ütközés



nagy nyomáson a gázmolekulák térfogata jelentős az össztérfogathoz képest

**Reális gázok van der Waals-egyenlete:**

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

nyomáskorrekción az intermolekuláris vonzás miatt

ahol  $a$  és  $b$  konstans

térfogatkorrekción a gázcseppkék (atomok, molekulák) térfogata miatt

**80. ábra**

Reális gázok: a „valódi” gázok viselkedése nem ideális, az állapotegyenletben nyomás- és térfogatkorrekciónak van szükség (reális gázok van der Waals-egyenlete)

## 6. Kémiai kölcsönhatás és halmazállapot, fogalomtár

**Adhézió:** tapadás (odaragadás), vonzó kölcsönhatás különböző anyagok (pl. víz és üvegedény fala) között.

**Adhéziós erő:** a folyadék és a vele érintkező szilárd felszín (pl. az edény fala) részecskéi között fellépő vonzó kölcsönhatási erő.

**Amorf anyagok:** „formátlan”, alakatlan anyagok, nem kristályosak, melegítéskor fokozatosan lágyulnak meg. Nincs határozott olvadáspontjuk, összetételük nem állandó, ezért kémiai képlettel nehezen jellemezhetőek (pl. üveg, gumi, opál, viasz).

**Anizotróp:** térbeli iránytól függő. Olyan közeg, amelyben bizonyos tulajdonságok (pl. keménység, hővezetés, fénytani jellemzők) irány szerint változnak.

**Atomrács:** olyan háromdimenziós térrács, amely rácspontjaiban atomok vannak, a szomszédos atomokat kovalens kötés tartja össze (pl. gyémánt szerkezete).

**Avogadro-törvény (Avogadro-tétel):** azonos hőmérsékleten és nyomáson egyenlő térfogatú gázokban a részecskeszám (gázatomok és/vagy molekulák száma) is azonos.

**Boyle–Mariotte-törvény (Boyle-törvény):** állandó hőmérsékleten egy adott mennyiségű gáz térfogata fordítottan arányos a nyomással ( $pV = k$ , konstans  $n$ ,  $T$ ).

**Brown-mozgás:** hőmozgás; folyamatos, véletlenszerű (rendsztelen), egyenes vonalú és egyenletes sebességű mozgás (pl. gárrészecskék mozgása).

**Charles-törvény (Charles–Gay-Lussac-törvény):** állandó nyomáson egy adott mennyiségű gáz térfogata egyenesen arányos a gáz abszolút hőmérsékletével ( $V/T = k$ , konstans  $n$ ,  $p$ ).

**Dalton-törvény:** bármely gázkeverék össznyomása azonos az összetevők parciális (részleges) nyomásainak összegével ( $p_{\text{totál}} = p_A + p_B + p_C + \dots$ , ahol A, B és C a gázkeverék összetevői).

**Egyesített gáztörvény:** ideális gázok adott mennyiségére vonatkoztatva a nyomás, a térfogat és az abszolút hőmérséklet közötti összefüggés ( $p_1V_1/T_1 = p_2V_2/T_2$ , konstans  $n$ ).

**Elemi cella:** a kristályrácznak az a legkisebb része (az egymáshoz legközelebb eső nyolc azonos értékű tömegpont által meghatározott egyszerű geometriai test), amely még vagy már rendelkezik a rácsszerkezet tulajdonságaival,

azonos értékű, egymással felcserélhető (identikus) tömegpontok alkotják, sorozatos eltolásával (transzlációjával) a kristály térrácsa felépíthető.

**Elsőfajú vezetők:** szabadon elmozdulható elektronokat tartalmazó vezetők (elektronvezetés). A fémek és ötvözetek elsőfajú vezetők (a vegyértékelektronok alkotják a kollektív elektronrendszert).

**Érc:** kőzet vagy ásvány, amelyből valamilyen elem (pl.: Fe, Pb, Au, Al) hasznosan, adott technológiai és gazdasági viszonyok között gazdaságosan kinyerhető.

**Felületi feszültség:** a folyadék felületének egységnyi megnöveléséhez szükséges energia ( $J/m^2 = N/m$ ). Az az energia, ami ahhoz szükséges, hogy az adott folyadék felületét megnöveljük úgy, hogy a folyadék belsejéből molekulákat juttatunk a felületre (a hőmérséklettől és az anyagi minőségtől függ).

**Fémrács:** a fémekre és ötvözetekre jellemző rácstípus. Ezek kristályráczában a tömegpontok fématomtörzsek (pozitív töltésű fémionok), közöttük a kapcsolatot a fémes kötés teremti meg, ami mobilis, kollektív elektronrendszerből (negatív töltés) áll.

**Gay-Lussac-törvény:** állandó térfogaton egy adott mennyiségű ideális gáz nyomása egyenesen arányos a hőmérséklettel ( $p/T = k$ , konstans  $n$ ,  $V$ ).

**Gőznyomás (tenzió):** a folyadékkal egyensúlyban lévő telített gőz nyomása.

**Hexaéder (szabályos):** kocka; nyolc csúccsal és hat négyzetlappal rendelkező forma (a központi atom koordinációs száma 8).

**Ideális gáz (tökéletes gáz):** azt a hipotetikus gázt, ami tetszőleges nyomáson és hőmérsékleten pontosan az ideális gáztörvényeknek megfelelően viselkedik, ideális gáznak nevezzük.

**Ideális gáztörvény:** egy ideális gáz nyomásának és térfogatának szorzata közvetlenül arányos a gáz anyagszámaival és az abszolút hőmérséklettel ( $pV = nRT$ ).

**Illékony folyadékok:** könnyen párolgó folyadékok (pl. dietil-éter).

**Izotróp:** térbeli iránytól független. Olyan közeg, amelynek fizikai tulajdonságai a különböző irányokban megegyeznek. Az amorf szilárd anyagok és a gázok izotróp közegeként viselkednek.

**Kinetikus gázelmélet:** a gázok makroszkópos tulajdonságait a gázrészecskék (gázatomok, illetve diszkrét gázmolekulák) molekuláris (mikroszkopikus) sajátságai alapján megmagyarázó elmélet.

**Kohézió:** összetartás, összetapadás.

**Kohéziós erő:** a folyadékrészecskék között fellépő összetartó erő.

**Koordináció:** egy kiválasztott tömegponttól azonos távolságra elhelyezkedő, közvetlen szomszédok elrendeződésének módja (geometriai test, melynek csúcsait a szomszédos tömegpontok jelölik ki).

**Koordinációs szám:** a rácspontokban elhelyezkedő részecskéket (atomok, ionok, molekulák) körülvevő szomszédos részecskék (tömegpontok) száma.

**Kőzet:** a Föld-típusú bolygók és holdjaik kőzetövét (litoszféráját), valamint a meteoritok szilárd anyagát alkotó, kémiai heterogén, regionális elterjedésű ásványtársulás.

**Kristály:** térrács szerkezettel rendelkező szilárd test, amely egyes sajátságait tekintve anizotróp, homogén diszkontinuum (homogén, diszkontinuális térkitöltésű, anizotróp térrács). Külső megnyilvánulása a síklapokkal határolt mértani (geometriai) test.

**Kristályforma:** a kristálytanban az egybevágó lapok összessége, amelyet az adott szimmetriaelem-készlet megkövetel. Vannak az alapformák (pedion, véglap, szfenoid, dóma), ezekből vezethetjük le további szimmetriaelemek hozzáadásával a többi kristályformát.

**Kristályos anyagok:** a kristályos anyagok részecskéi rendezetten, a tér három irányában megszabott távolságokban ismétlődve foglalnak helyet, azaz térrácsszerkezetük van (kristályrács). Melegítéskor egy meghatározott hőmérsékleten (olvadáspont) olvadnak meg.

**Másodfajú vezetők:** sóoldatok vagy sóolvadékok (elektrolitok), amelyek szabadon elmozdulható ionokat tartalmaznak (ionvezetés).

**Meniszkusz:** görbülő folyadékfelszín (pl. kémcsőben, kapillárisban).

**Molekularács:** a molekularácsú kristályok rácspontjaiban semleges molekulák foglalnak helyet, melyeket gyenge másodrendű erők kapcsolnak össze (pl. vízjég).

**Móltört:** az összetételre vonatkozó állapotjelző, ami megadható az összetevő mólszáma és az összmólszám hányadosaként ( $x_A = n_A/n_{\text{totál}}$ ).

**Normál állapot:** bármely ideális gáz normál állapotát a 0 °C hőmérsékletnek és 1 atm nyomásnak megfelelő körülmény jelenti.

**Oктаéder:** hat csúccsal és nyolc háromszöglappal rendelkező forma (a központi atom koordinációs száma 6).

**Opak („átlátszatlan”):** a fényt át nem eresztő anyagok csoportja. Az opak ásványok a felületükre eső fény jelentős részét elnyelik, más részét viszont visszaverik, így még a nagyon vékony metszetén sem tud a fény áthatolni. A fémek és az ásványok egy része (főleg a szulfidok, telluridok, arzenidek, néhány oxidos érc), mint pl. a pirit, a hematit tartozik ebbe a csoportba.

**Parciális nyomás:** részleges nyomás; több összetevőből álló gázkeverék egy adott komponense által kifejtett nyomás.

**Plazmaállapot:** a plazma az adott anyag gázállapotú részecskéiből keletkezik nagy hőmérsékleten úgy, hogy az atomokból elektronok szakadnak le. Plazmaállapotban tehát az adott anyag nagy hőmérsékleten elektronokból és ionokból áll (ionizált gáz).

**Polarizáció:** az anion szimmetrikus elektronburkának deformációja, torzulása; a kation vonzása miatt alakul ki. A kicsi, de nagy töltéssel rendelkező kationok (pl.  $Al^{3+}$ ,  $Si^{4+}$ ) rendelkeznek erős polarizáló hatással.

**Poliéder:** sokszögekkel határolt mértani test („soklap”).

**Rácsenergia:** az az energia, ami 1 mol kristályos anyag gázhalmazállapotú ionokból való képződésekor szabadul fel. Jele:  $E_r$  [kJ/mol].

**Rádiuszhányados:** a gömbként leegyszerűsített szomszédos tömegpontok (pl. kation/anion) sugarainak aránya a térrácsban (kristályrácsban).

**Reális gáz:** „valódi” gáz, a viselkedése nem ideális; a gázrészecskék (atomok, molekulák) közötti vonzóerő és a saját térfogatuk nem hanyagolható el.

**Sztenderd állapot** (standard állapot): bármely ideális gáz sztenderd állapotában a hőmérséklet 25 °C és a nyomás 1 atm.

**Sztenderd nyomás** (standard nyomás): 1 atmoszféra (atm) nyomás.

**Tenzió:** gőznyomás.

**Tetraéder:** négy háromszöglappal határolt test, négy csúccsal és négy lappal rendelkező forma (a központi atom koordinációs száma 4).

**Térrács:** a térrács olyan háromdimenziós szerkezet, amelyben az egymással párhuzamos irányok egyenértékűek, a nem párhuzamos irányokban azonban a tömegpontok száma és elrendeződése különböző lehet. Az ionok, atomok, atomtörzsek vagy molekulák (az úgynevezett tömegpontok) a térrács rácspontjaiban helyezkednek el.

**Tökéletes gáz:** ideális gáz.

**Tömegpont:** olyan egyszerűsített anyagi pont, aminek csak a tömege lényeges, kiterjedése elhanyagolható. A kristályrácsok tárgyalásakor

(szilárd, kristályos anyagokban) a rácspontokban elhelyezkedő atomok, atomtörzsek, ionok vagy molekulák összefoglaló jellegű, általános megnevezése.

**Vakancia:** „üresedés”, olyan rácspont a kristályban, ami ideális esetben betöltött lenne, de az adott esetben nem tölti be tömegpont.

**Viszkozitás:** a folyással szembeni belső ellenállás. A folyadék folyási képességét fejezi ki (a hőmérséklettől és az anyagi minőségtől függ). A viszkózus folyadékokban nehezebben mozdulnak el egymás mellett a molekulák.

### **Megjegyzés:**

A termésmékek között gyakoriak a *természetes ötvözetek*. A természetes elemi arany általában nem „tiszt”, többnyire legalább 4–5% ezüstöt tartalmaz. Ha az ezüsttartalom nagyobb, mint 15% (~30–40% körüli), az Au–Ag-elegysor tagjait önálló ásványnévvel különítik el, ez a természetes ötvözet az *elektrum*. A meteorikus vas többnyire nikkellel ötvöződik, a meteoritokban átlagosan 6–10% a Ni-tartalom. A platinafémek a természetben szintén egymással, illetve más fémmel (pl. Fe, Cu, Ni) elegyedve fordulhatnak elő (Koch, Sztrókay, 1994).

## 6. Kémiai kölcsönhatás... – Önellenőrző kérdések, feladatok

**6.1.** Szerkezete alapján melyik szilárd anyag a kakukktójas? Miért? a) síküveg; b) obszidián kőpenge; c) műanyagflakon; d) grafitrúd

**6.2.** Szerkezete alapján melyik szilárd anyag a kakukktójas? Miért? a) hegyikristály (kvarc); b) gumi; c) gipsz; d) kalcit

**6.3.** Szerkezete alapján melyik szilárd anyag a kakukktójas? Miért? a) vízjég; b) szárazjég; c) dolomit; d) kénkristály

**6.4.** Melyik szilárd anyag a kakukktójas? Miért? a) vörösréz; b) sárgaréz; c) bronz; d) alpakka

**6.5.** A kémiai kölcsönhatások segítségével jellemezd a jég (vízjég) és a szárazjég fizikai tulajdonságaiban (pl. olvadás- és forráspont) megfigyelhető különbséget!

**6.6.** Jellemezd a különböző szerkezetű (térrácsú) szilárd anyagokat! Legalább két-két példát sorolj fel minden típusnál (ionrácsos, atomrácsos, fémrácsos, molekulárcsós)!

**6.7.** Földtudományi példán keresztül magyarázd el a folyadékok viszkozitásának jelentőségét!

**6.8.** Földtudományi példán keresztül magyarázd el a folyadékok felületi feszültségének jelentőségét!

**6.9.** Földtudományi példán keresztül magyarázd el a folyadékok gőznyomásának jelentőségét!

**6.10.** Különböző gázokból álló keverék szétválasztható-e eltérő tömegű összetevőire úgy, hogy hosszabb ideig állni hagyjuk? Válaszodat indokold meg!

**6.11.** Egy gázminta térfogata 1 atmoszféra nyomáson 25 liter. Mennyi lesz a térfogata, ha a nyomás 3,5 atmoszférára növekszik (a hőmérséklet nem változik)?

**6.12.** A 2,4 atm nyomású gáz 6 l térfogatú. Mennyi lesz a térfogata állandó hőmérséklet mellett, ha a nyomása a felére csökken?

**6.13.** Mit nevezünk ideális és reális gáznak? Jellemezd a legfontosabb különbségeket!

### Megjegyzés:

A reális gázok ideálistól való eltéréseinek mértékét fejezi ki a *kompresszibilitási faktor* ( $Z$ ). A reális gázok azért mutatnak eltérést az ideális gázok állapotegyenletétől, mert részecskéik (atomjaik vagy molekuláik) nem kiterjedés nélküli tömegpontok, illetve azok kölcsönhatásban vannak egymással. Az ideálistól való eltérés nagysága az „összenyomhatósági”, szakkifejezéssel *kompresszibilitási* tényezővel adható meg:

$$Z = pV_m/RT$$

Tökéletes gáznál  $Z = 1$ ; a  $Z$  eltérése ettől a nem tökéletes viselkedés mértéke (Bárány et al., 2011).

## 6. Kémiai kölcsönhatás... – Önellenző kérdések, megoldások

**6.1.** d) grafitrúd, mert ez kristályos szilárd anyag, a többi amorf

**6.2.** b) gumi, mert ez amorf, a többi kristályos szilárd anyag

**6.3.** c) dolomit, mert ez ionrácsos, a többi molekulárcsoszilárd anyag

**6.4.** a) vörösréz, ez elemi fém (termésmém), a többi ötvözet

**6.5.** A jég (vízjég) és a szárazjég egyaránt molekulárcsoszilárd anyag. A jégkristályrácspontjaiban poláris vízmolekulák találhatók, amelyek között másodrendű kötőerő (dipól-dipól kölcsönhatás, ezen belül hidrogénkötés) teremt kapcsolatot. A szárazjégben apoláris molekulák (szén-dioxid) találhatók, közöttük igen gyenge diszperziós kölcsönhatás lép fel. Ennek megfelelően a szárazjég olvadás- és forráspontja alacsonyabb lesz, mint a vízjégé.

**6.6.** Ionrácsos szilárd anyagok (pl. kősó, kalcit): a rácspontokban egyszerű vagy összetett ionok foglalnak helyet; az összetartó erő erős elsőrendű kötés (ionos kötés); koordinációs szám:  $\geq 6$ , közepes–nagy keménységűek, ridegek, színtelenek, átlátszóak/áttetszőek, rossz hővezetők, nem vezeték az elektromos áramot, olvadáskor és oldatkor viszont elektromos vezetők (ionvezetők).

Atomrácsos szilárd anyagok (pl. gyémánt, szfalerit): a rácspontokban semleges atomok foglalnak helyet; az összetartó erő erős elsőrendű kötés (kovalens kötés); koordinációs szám:  $\leq 4$ , általában rendkívül kemények, szigetelők.

Fémrácsos szilárd anyagok (pl. termésarany, termésréz): a rácspontokban pozitív töltésű fémionok (fématomtörzsek) foglalnak helyet; az összetartó erő erős elsőrendű kötés (fémek kötés); koordinációs szám nagy (8, 12), opakok, fémek fényűek, jó elektromos- és hővezetők (elsőfajú vezetők).

Molekulárcsoszilárd anyagok (pl. jég, termésken): a rácspontokban semleges molekulák (vagy nemesgázatomok) foglalnak helyet; az összetartó erő gyenge másodrendű kötés; lágyak, puhák, olvadás- és forráspontjuk alacsony.

**6.7.** Folyadékok viszkozitásának földtudományi jelentősége: a) kőolaj: a hosszú, elágazó láncokat tartalmazó folyadékok nagyobb

viszkozitásúak, ezért a nagy szénláncú, bonyolult szénhidrogének tartalmazó kőolaj (nyersolaj) sűrűn folyó, a rövidebb szénláncú komponensekben gazdagabb, finomított változatok (pl. benzín) azonban hígabban folynak; b) kőzetolvadékok: egy kőzetolvadékokban a növekvő  $\text{SiO}_2$ -tartalommal párhuzamosan a viszkozitás növekszik.

**6.8.** Felületi feszültség: meghatározza egy folyadék nedvesítőképességét. A víz képes nedvesíteni a talajszemcséket, ezért a talajvíz szintje felett kialakul a kapilláris-emelkedés zónája, ahonnan a növények gyökerei képesek felvenni a vizet.

**6.9.** Folyadékok gőznyomása: az illékonyságot befolyásolja; a légköri folyamatok szempontjából a víz gőznyomása a levegő nedvességtartalmát szabályozza.

**6.10.** Különböző gázokból álló keverék nem választható szét eltérő tömegű összetevőire úgy, hogy hosszabb ideig állni hagyjuk. A gázkeverékekben ugyanis a gázrészecskék a folyamatos és véletlenszerű mozgás (hőmozgás) miatt tökéletesen elkeverednek.

**6.11.** A gáz minta térfogata ( $V_1 = 25 \text{ l}$ ) és nyomása ( $p_1 = 1 \text{ atm}$ ) ismert egy állapotra ( $T, n$  konstans), a másik állapotra a nyomása ( $p_2 = 3,5 \text{ atm}$ ) adott, a térfogat az ismeretlen ( $V_2 = ?$ ). Két állapotra alkalmazva a Boyle-törvényt:  $p_1 V_1 = p_2 V_2$ , ebből  $V_2 = p_1 V_1 / p_2$ ;  $V_2 = 1 \text{ atm} \cdot 25 \text{ l} / 3,5 \text{ atm} = \sim 7,14 \text{ l}$ .

**6.12.** Az előző feladathoz hasonlóan a Boyle-törvényt kell alkalmazni. Adatok:  $p_1 = 2,4 \text{ atm}$ ,  $V_1 = 6 \text{ l}$ ;  $p_2 = p_1 / 2 = 2,4 / 2 \text{ atm} = 1,2 \text{ atm}$ ,  $V_2 = ?$ . Figyelembe véve, hogy  $p_1 V_1 = p_2 V_2$ , ebből  $V_2 = p_1 V_1 / p_2$ ;  $V_2 = 2,4 \text{ atm} \cdot 6 \text{ l} / 1,2 \text{ atm} = 12 \text{ l}$ . Tehát állandó hőmérséklet mellett, ha a nyomása a felére csökken, a térfogata a kétszeresére nő.

**6.13.** Ideális gázok: az ideális gáztörvényeknek (pl. Boyle-törvény) megfelelően viselkednek tetszőleges nyomáson és hőmérsékleten; a gázrészecskék (atomok, molekulák) között nincs kölcsönhatás, továbbá azok saját térfogata elhanyagolható a rendelkezésre álló térfogathoz képest.

Reális gázok: „valódi” gázok, a viselkedésük nem ideális; a gázrészecskék közötti vonzóerő és a saját térfogatuk nem hanyagolható el.

# 7.

## A természetben lejátszódó folyamatok feltételei



### Témakörök

#### 7.1. Spontán folyamatok hajtóereje: termodinamikai alapok

- a termodinamikai alapfogalmak kiegészítése: entalpia, képződéshő, entrópia, szabadenergia, szabadentalpia, kémiai potenciál
- a termodinamika alaptörvényei (főtételek), spontán változások iránya

#### 7.2. Egyensúlyi termodinamika: fázisegyensúlyok

- a kémiai egyensúly: aktivitás, tömeghatás törvénye; alapfogalmak (fázis, komponens, szabadsági fok), a Gibbs-féle fázisszabály
- fázisegyensúlyok: egykomponensű rendszerek ( $p$ – $T$  diagram)
- két- és többkomponensű rendszerek (folyadék–folyadék és folyadék–szilárd rendszerek) fázisdiagramjainak értelmezése

#### 7.3. A kémiai reakciók sebessége: reakciókinetikai alapok

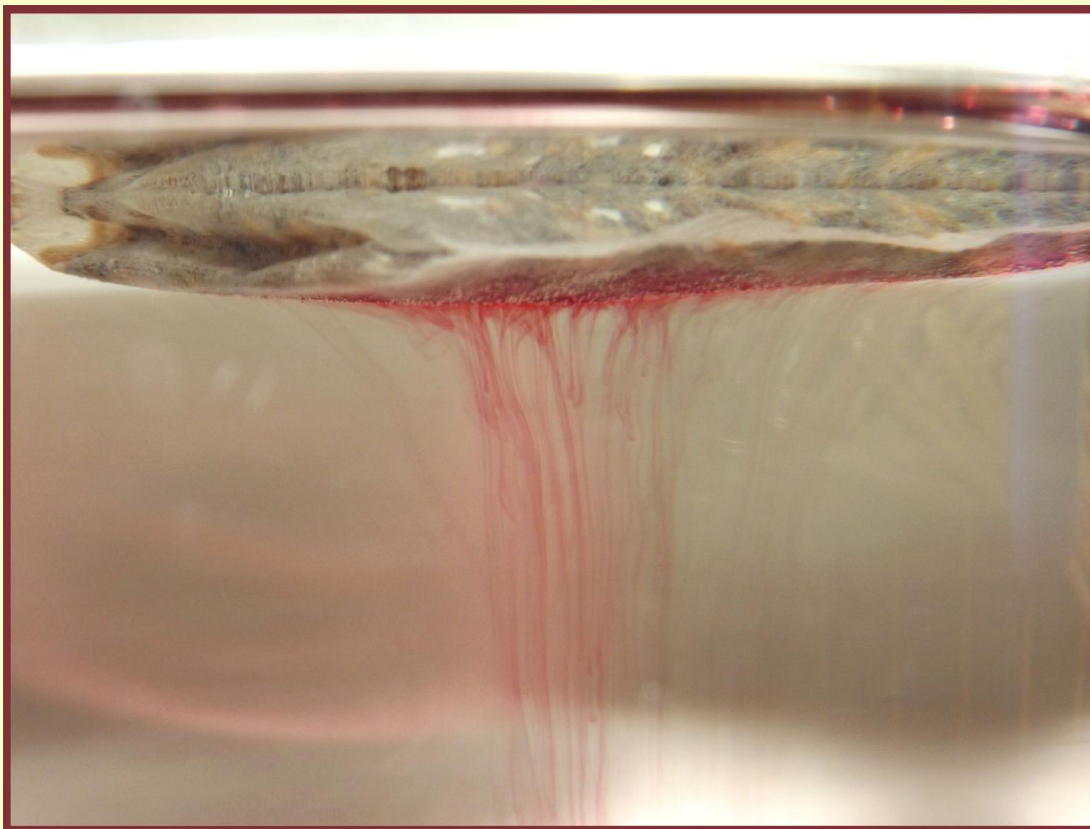
- reakciókinetikai alapfogalmak: reakciósebesség, reakciórend
- a kémiai reakciók lejátszódásának kinetikai feltétele (aktiválási energia)
- katalizált reakciók, homogén és heterogén katalízis
- a diffúzió, mint anyagáramlási folyamat

## 7. A természetben lejátszódó folyamatok feltételei

7.1. Spontán folyamatok hajtóereje: termodinamikai alapok

7.2. Egyensúlyi termodinamika: fázisegyensúlyok

7.3. A kémiai reakciók sebessége: reakciókinetikai alapok



***Ha megtanulod ezt a fejezetet, képes leszel arra, hogy***

- földtudományi folyamatok jellemzésekor helyesen használd a termodinamika és a kinetika alapfogalmait;
- megfogalmazd a termodinamika legfontosabb törvényszerűségeit;
- elmagyarázd a természetben lejátszódó spontán (irreverzibilis) és egyensúlyi (reverzibilis) folyamatok közötti különbségeket;
- a kémiai reakciók hőváltozásához kapcsolódva (képződéshő, reakcióhő) megoldj egyszerű számítási feladatokat;
- egyszerű kémiai folyamatokra felírd a tömeghatás törvényét;
- önállóan értelmezd az egyszerű fázisdiagramokat (pl.:  $p$ – $T$  diagram, korlátozottan elegyedő folyadékok összetétel–hőmérséklet diagramja, kétkomponensű szilárd oldatok összetétel–hőmérséklet diagramja);
- háromkomponensű rendszerek összetételét ábrázold és értelmezd háromszögdiagramban;
- elmagyarázd a reakciósebességet befolyásoló tényezőket.

## 7.1. Spontán folyamatok hajtóereje: termodinamikai alapok

A termodinamika olyan speciális tudományterület, ami a rendszerek és a különböző állapotban lévő anyagok energiaszintjével, továbbá a közöttük fellépő energiaátadás folyamataival foglalkozik. Legyen szó bármely természettudományi ágról (pl.: fizika, kémia, biológia, geológia, környezettudomány) a természetben lejátszódó folyamatok irányát és hajtóerejét a termodinamika eszköztára segítségével adhatjuk meg (Atkins, 1992; Anderson, 2005; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014). A parányi kristálycsírákból növekedő ásványoktól a magmaképződésen át a magashegységek felszíni eróziójáig az energia minden földtudományi folyamatban központi szerepet tölt be (Varsányi, 2009; Gill, 2015).

Tudományos értelemben az energia ( $E$  [J]) munkavégző vagy hőközlő képességet jelent (**2.1. Fizika a kémiában: az anyag és az energia**). Energiaátadás kísérhet egy fizikai változást, továbbá az atomok átrendeződésével járó kémiai reakciók során szintén fellép energiaváltozás (Atkins, 1992; Anderson, 2005; Whitten et al., 2014; Gill, 2015). Nézzünk néhány egyszerű példát! Ha egy jégkockákkal teli edényt az asztalra teszünk, a jég olvadni kezd, majd kis idő elteltével teljes mennyisége vízzé alakul, felmelegszik a környezete hőmérsékletére (**81. ábra**). A jég olvadása energiát igényel, amit ebben az esetben hő formájában von el a környezetétől (a jeget körülvevő levegőtől vagy víztől). A folyamat során a jég belső energiája növekszik, ami halmazállapot-változást eredményez, vízzé (azaz folyadékká) alakul. Ha a vízzel teli edényt visszatesszük a fagyasztóba, rövid időn belül ismét megfagy, szilárd halmazállapotú jég lesz belőle. Nyilvánvaló, hogy a kiválasztott víz ( $H_2O$ ) olyan anyag, aminek legalább két olyan eltérő formája van, amelyek a környezettől függően önként (spontán módon) átalakulhatnak egymásba (Anderson, 2005; Gill, 2015). Elgondolkodtató azonban, hogy az elemi szénnek is több módosulata van, a természetben előforduló két allotróp módosulat, a grafit és a gyémánt önként mégsem alakul át egymásba. Csupán speciális technológiai folyamatok során (nagy nyomáson) állítható elő grafitból a mesterséges gyémánt. Most vegyünk egy nyers tojást, majd néhány percig tegyük a forró főzőlapra! Ezt követően az asztalra téve, ha ismét felveszi a környezete hőmérsékletét, a főtt tojás

már nem lesz soha többé nyers. Ez a változás nem fordítható meg, azaz irreverzibilis (Anderson, 2005).



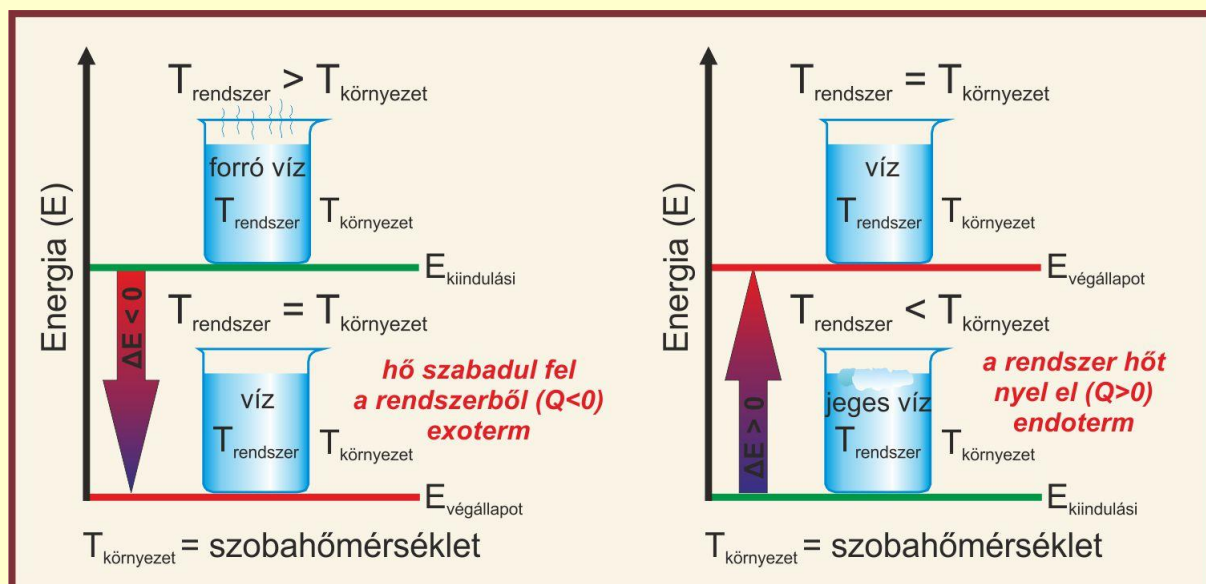
**81. ábra**

A jég olvadása szobahőmérsékleten: a jégkásával teli pohárban a jég olvadni kezd, majd kis idő elteltével teljes mennyisége vízzé alakul, felmelegszik a környezete hőmérsékletére

A bemutatott egyszerű folyamatok a termodinamika alapvető kérdéseire hívják fel a figyelmet. Mi a változások (reakciók) hajtóereje? Mi az oka annak, hogy az egyik folyamat oda és vissza egyaránt lejátszódik, a másik pedig nem? Földtudományi szempontból alapvető, hogy ezeket a kérdéseket megválaszoljuk. Ahhoz például, hogy egy magmás kőzetekből felépülő hegység kialakulását megértsük, rekonstruálnunk kell a magmaképződés és a kristályosodás történetét, még akkor is, ha az a múltban (akár millió évekkel ezelőtt) játszódott le. Amennyiben a termodinamika törvényeinek segítségével meg tudjuk adni a spontán folyamatok irányát, időgép nélkül is fel tudjuk tárni a lehetséges olvadék- és ásványképződési reakciókat. Sőt, a termodinamika olyan eszköz lesz a kezünkben, amivel előre tudunk jelezni várható folyamatokat, így akár a jövőbe is láthatunk (pl. a klímaváltozással kapcsolatos modellezés, radioaktív hulladékok felszín alatti tárolásához kapcsolódó környezetvédelmi hatástanulmányok készítése).

Az energiaátadás gyakori formája a hőcsere (pl. jég  $\rightarrow$  víz átalakulás szobahőmérsékleten), ezért a termodinamika legfontosabb alapmennyisége a hőmérséklet (**82. ábra**). Ez olyan intenzív mennyiség, amelyik a hő áramlási irányát, intenzitását határozza meg (Atkins, 1992; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014). Ha egy „A” rendszerből hő áramlik „B” rendszerbe, akkor „A” nagyobb hőmérsékletű „B”-nél, közöttük termikus kölcsönhatás (hőáramlás) lép fel. Ha két rendszer között nincs hőáramlás, akkor hőmérsékletük azonos, tehát **termikus egyensúlyban** vannak egymással. A **termodinamika „nulladik” főtétele** kimondja a termikus egyensúly létezését: ha „A” rendszer termikus egyensúlyban van „B”-vel, „B”

rendszer pedig „C”-vel, akkor „A” rendszer termikus egyensúlyban van „C” rendszerrel is; a hőmérséklet tehát **állapotfüggvény** (Atkins, 1992; Bárány et al., 2011).



**82. ábra**

A termikus egyensúly kialakulása szobahőmérsékleten: forró víz lehűlése (balra), illetve jeges víz felmelegedése (jobbra) példáján  
 Az energiaátadás gyakori formája a hőcsere.

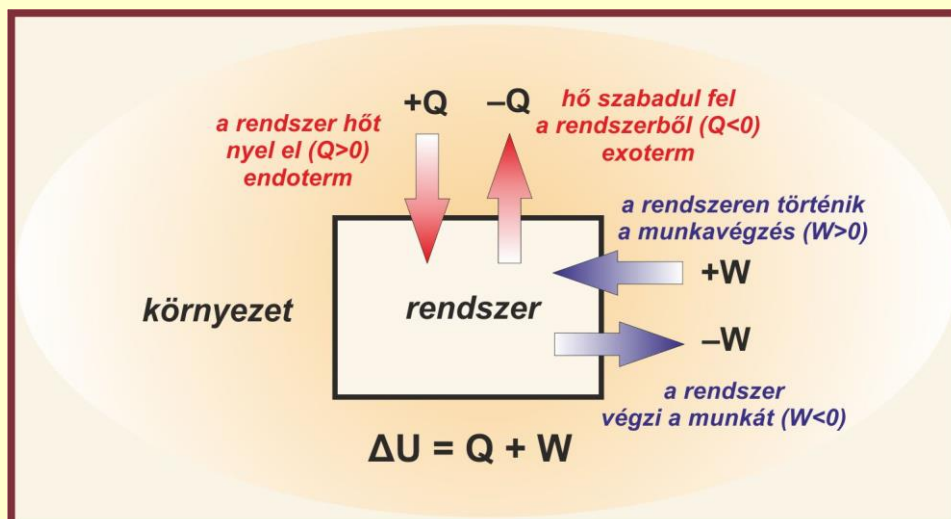
A következőkben térjünk vissza az energia megadásához! A rendszer energiája egyrészt a helyváltoztatásból eredő kinetikus energiából ( $E_{kin} = \frac{1}{2}mv^2$ , ahol  $m$  a mozgó rendszer tömege,  $v$  a sebessége), másrészt a térbeli helyzetéből, állapotából, összetételéből származó potenciális energiából ( $E_{pot}$ ) áll. Ez utóbbit felbonthatjuk a térbeli helyzettől függő helyzeti energiára ( $E_h$ ) és az úgynevezett **belső energiára** ( $U$ ), azaz a rendszer teljes energiája:  $E = E_{kin} + E_{pot} = E_{kin} + E_h + U$  (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014). A mechanikától eltérően azonban a termodinamikában általában nyugvó rendszert vizsgálunk, ezért a kinetikus és a helyzeti energiától eltekintünk. A termodinamikai rendszer teljes energiájának megadásakor azt a belső energiájával tekintjük azonosnak ( $E = U$ ). Az **energiamegmaradás törvénye** viszont kimondja, hogy elszigetelt rendszerben csak az energia formája változtatható meg (**2.1. alfejezet**), így az elszigetelt termodinamikai rendszer belső energiája is állandó. Ez az összefüggés a **termodinamika első főtétele**, ami valójában az energiamegmaradás törvényének egyik változata (Atkins, 1992; Anderson, 2005; Bárány et al., 2011).

A belső energia nem más, mint egy adott mennyiségű anyaghoz (zárt rendszerhez) kapcsolódó összenergia (pl.: a részecskék mozgásával kapcsolatos *termikus energia*, a kémiai kölcsönhatásokhoz tartozó *kémiai energia*, illetve az atommagban fellépő magerőkkel kapcsolatos *magerenergia*). Állapotfüggvény, nagysága a rendszer tömegétől függ, tehát extenzív sajátosság. A termodinamikai rendszer teljes energiatartalmát nem tudjuk meghatározni, de nincs is szükség arra, hogy a számszerű értékét pontosan ismerjük. A természetben lejátszódó folyamatok jellemzésekor ugyanis nem a belső energia abszolút értékét ( $U = ?$ ), hanem a *változását* ( $\Delta U = ?$ ) kísérik figyelemmel (Anderson, 2005; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

Zárt rendszer belső energiája kizárólag hő ( $Q$ ) vagy munka ( $W$ ) hatására változhat meg (83. ábra). A hő olyan energiaátadás, ami a rendszer határán keresztül áramlik a ***hőmérsékleti grádiens***nek megfelelően: a rendszer hőt vesz fel a környezetéből (*endoterm* változás), vagy hőt ad át annak (*exoterm* változás). A belső energia változásával jár az is, ha a rendszer munkát végez a környezetén, vagy a környezet végez munkát a rendszeren. A belső energia változása zárt rendszerben tehát a következő alakban írható fel:  $\Delta U = Q + W$ , ami a termodinamika első főtételenek matematikai kifejezése (Atkins, 1992; Anderson, 2005; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014). A hő és a munka energia jellegű mennyiségek; közöttük a különbség az, hogy *a munka rendezett energiaátadásnak, a hő viszont rendezetlen energiakicserélődésnek* felel meg (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014). A hő és a munka nem állapotfüggvény; értékük függ attól, hogy milyen úton ment végbe a változás, tehát ***útfüggvények***.

### **Megjegyzés:**

Bármely rendszer termodinamikai állapotát olyan változókkal írhatjuk le, amelyek a rendszer minden tulajdonságát pontosan meghatározzák. Ilyen korábban megismert állapotváltozók a nyomás ( $p$ ), a hőmérséklet ( $T$ ), a térfogat ( $V$ ) és az anyagmennyiség ( $n$ ). A nyomás és a hőmérséklet tömegtől független (intenzív), míg a térfogat és az anyagmennyiség tömegtől függő (extenzív) változók. Miután értékük csak a rendszer pillanatnyi állapotától függ, *állapotjelzőknek*, *állapothatározóknak* vagy *állapotfüggvényeknek* is nevezik őket. A termodinamikában központi szerepet betöltő belső energia ( $U$ ) szintén tömegtől függő állapotfüggvény. A termodinamikai rendszerek állapotának leírásában betöltött szerepük kiemelésére gyakran nagybetűvel jelölik valamennyi állapotfüggvényt (pl.:  $P$ ,  $T$ ,  $V$ ,  $U$ ); míg az *útfüggvények* jelölésekor (pl.: hő,  $q$ ; munka,  $w$ ) kisbetűket használnak (pl. Anderson, 2005; Whitten et al., 2014). E tankönyv nem alkalmazza ezt a jelölési módot, a fizikai mennyiségek megadásakor az SI rendszert veszi figyelembe.



**83. ábra**

A belső energia változása zárt rendszerben: a termodinamika első főtételének szemléltetése

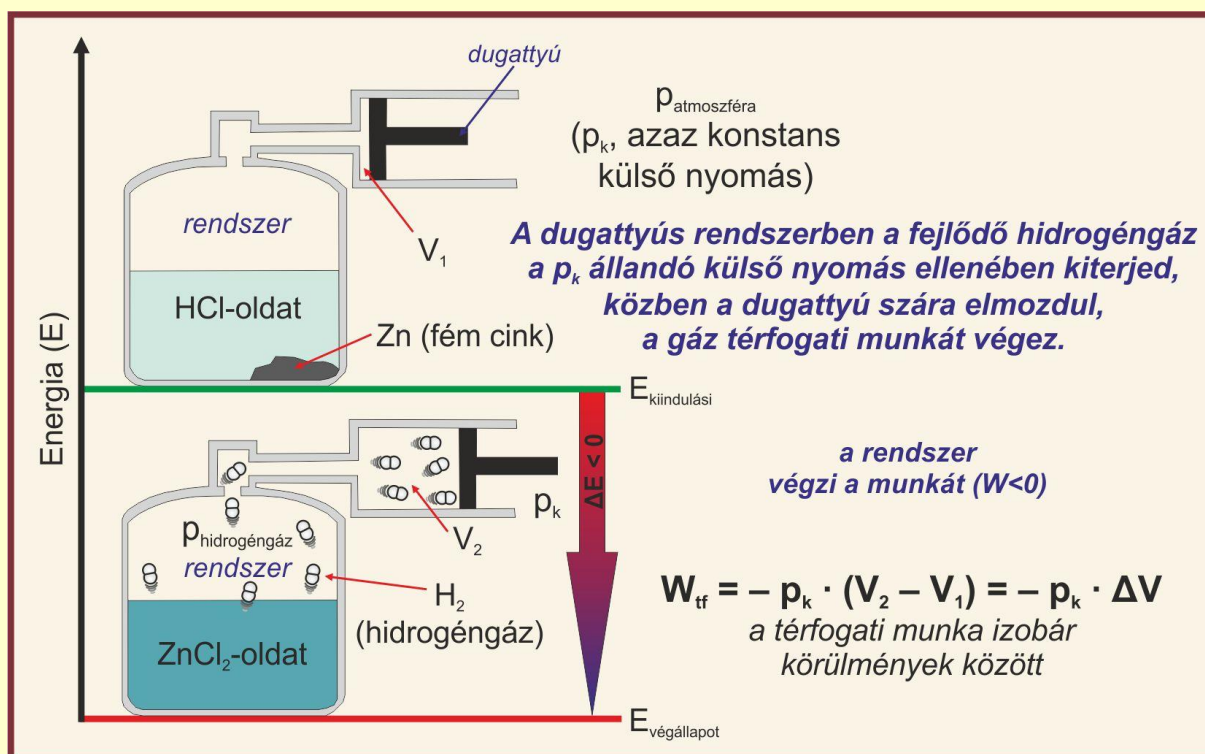
Számos különféle módon végezhetünk munkát a rendszeren, és a rendszer is eltérő módokon végezhet munkát. Ha felemelünk egy tárgyat a gravitáció ellenében, emelési munkát végzünk rajta. Ha melegítünk egy gázt, az kiterjed, miközben erőt tud kifejteni, így térfogati munkát tud végezni. Az akkumulátorban lejátszódó kémiai reakció feszültségkülönbséget eredményez, a keletkezett elektromos árammal pedig munkát tudunk végezni. Ezek közül a termodinamikai folyamatokban a **térfogati munka** kap kiemelt jelentőséget (Atkins, 1992; Anderson, 2005; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014). Ha állandó külső nyomás ( $p_k = \text{konstans}$ ) ellenében egy folyamat hatására megnő a rendszer térfogata, akkor a nyomás ellenében munkát kell végeznie (pl.  $\text{Zn} + 2 \text{HCl} \rightarrow \text{ZnCl}_2 + \text{H}_2$  gázfejlődéssel járó kémiai reakció; **84. ábra**). Ha viszont csökken a térfogata, a külső nyomás végez munkát a rendszeren (Anderson, 2005; Bárány et al., 2011). Ezt a térfogatváltozáshoz ( $\Delta V$ ) kapcsolódó munkát nevezzük térfogati munkának (jele:  $W_{\text{tf}}$ ).

#### **Megjegyzés:**

A munka útfüggvény, ezért a kiszámításakor tekintettel kell lennünk a munkavégzés körülményeire. Állandó nyomáson ( $p_k$ , külső nyomás), azaz izobár körülmények között egy gáz kiterjedésekor  $\Delta V$  térfogatváltozás lép fel, a térfogati munka ( $W_{\text{tf}}$ ) a következő egyenlet szerint számolható ki:

$$W_{\text{tf}} = - p_k \cdot (V_2 - V_1) = - p_k \cdot \Delta V$$

A kiindulási térfogat kisebb, mint a végső, a rendszer végezte a munkát a környezetén, ezért a térfogati munka előjele negatív. Állandó térfogaton végbemenő folyamatoknál nincs térfogati munkavégzés (Atkins, 1992; Andreson, 2005; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014)!



**84. ábra**

A belső energia változása munkavégzés hatására: a térfogati munka szemléltetése

A kémiai reakciók és a fizikai változások jelentős része konstans nyomáson (atmoszférikus, azaz normál légköri nyomáson;  $p_k$ ) megy végbe. Az ilyen folyamatok általában elválaszthatatlanok a térfogati munkától. A rendszer jellemzésére ezért célszerű a belső energia mellett egy másik állapotfüggvény, az **entalpia** (jele: H) bevezetése (Atkins, 1992; Anderson, 2005; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014; Gill, 2015). Az entalpia definícióegyenlete:

$$H = U - W, \text{ ahol } H \text{ az entalpia (mértékegysége: Joule [J])}.$$

Egy rendszer abszolút entalpiáját, azaz teljes „hőtartalmát” — a belső energiához hasonlóan — nem lehet meghatározni, de nincs is erre szükség. A fizikai vagy kémiai változások során a rendszert kísérő hőváltozást (hőtranszfer) az **entalpiaváltozás** ( $\Delta H$ ) adja meg (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014; Gill, 2015). Állandó külső nyomás ( $p_k$ ) ellenében lejátszódó folyamatokra az entalpiaváltozás meghatározására szolgáló egyenlet a következő alakban írható fel:

$$\Delta H = \Delta U - W, \text{ ahol a munka felírható térfogati munkaként } (W_{\text{tf}} = -p_k \Delta V), \text{ azaz}$$

$$\Delta H = \Delta U + p_k \Delta V \quad p_k = \text{konstans és } W = W_{\text{tf}}.$$

Állandó térfogaton nincs térfogati munkavégzés ( $W_{\text{tf}} = 0$ ), tehát az entalpiaváltozás megegyezik a hőváltozással:  $\Delta H = \Delta U$ , azaz  $\Delta H = Q$  (Atkins, 1992; Anderson, 2005; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

Az entalpia az anyagok által „tárolt” hővel kapcsolatos, energia jellegű paraméter. Megváltozása egyrészt a fizikai folyamatok (pl.: halmazállapot-változások) hőváltozását ( $\Delta H = H_{\text{végállapot}} - H_{\text{kezdeti állapot}}$ ), illetve a kémiai reakciókat kísérő hőváltozást, azaz a **reakcióhőt** ( $\Delta H_r$ ) jelzi. Az entalpiaváltozás ( $\Delta H$ ) tehát nem más, mint a termékek „hőtartalmának”, azaz entalpiájának és a kiindulási anyagok entalpiájának a különbsége:  $\Delta H = H_{\text{termék(ek)}} - H_{\text{kiindulási anyag(ok)}}$  (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014). Itt az idő, hogy az entalpia segítségével pontosítsuk a **2. fejezetben** megismert termodinamikai alapfogalmakat!

Egy kémiai reakció során bekövetkező hőváltozást közvetlenül (mérés segítségével) vagy számítás útján határozhatunk meg. Ez utóbbihoz szükség van a pontosan felírt (rendezett) reakcióegyenletre, illetve olyan megállapodás szerinti (egységes) viszonyítási alapra, amihez képest az entalpia megváltozását viszonyítjuk. Ezt a viszonyítási alapot **sztenderd (standard) állapot**nak nevezzük. A reakcióhő értékét is feltüntető termodinamikai reakcióegyenletben sztenderd állapotú anyagok szerepelnek. Egy anyag sztenderd állapotán azt értjük, hogy tiszta állapotban van 1 atm nyomáson és 25 °C hőmérsékleten. A sztenderd reakcióhő ( $\Delta H_r^0$ ) az az entalpiaváltozás, amit akkor mérhetünk, ha a kiindulási anyagok és a keletkezett termékek is sztenderd állapotban vannak. Vegyületek képződése során kitüntetett szerepe van annak a reakciónak, amelyben az adott vegyület elemeiből képződik. Megállapodás szerint a sztenderd állapotú elemek képződéshője nulla. Így egy vegyület sztenderd **képződéshője** ( $\Delta H_k^0$ ) annak a reakciónak az entalpiaváltozása egy mólra vonatkoztatva, amiben a vegyület sztenderd állapotú elemeiből képződik (**20. táblázat**). Bármely kémiai reakcióra a sztenderd képződéshők kombinálása megadja a sztenderd reakcióhőt (**85. ábra**). A reakcióhő csak a kezdeti és a végállapottól függ (az entalpia állapotfüggvény), de független attól az úttól, amelyen a reakció a kezdeti állapotból a végállapotba jutott. Ez az összefüggés a **Hess-törvény**, ami a termokémia alaptétele (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

#### **Megjegyzés:**

Egy kémiai vagy fizikai folyamatot kísérő energiaváltozás közvetlen meghatározását a **kalorimetria** teszi lehetővé. Ez a kísérleti technika a hőmérsékletváltozás mérésén alapul, miközben a rendszer hő formájában energiát nyel el vagy ad le. A kémiai reakciók reakcióhőjének kísérleti meghatározására az úgynevezett **kalorimétert** használják (Atkins, 1992; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

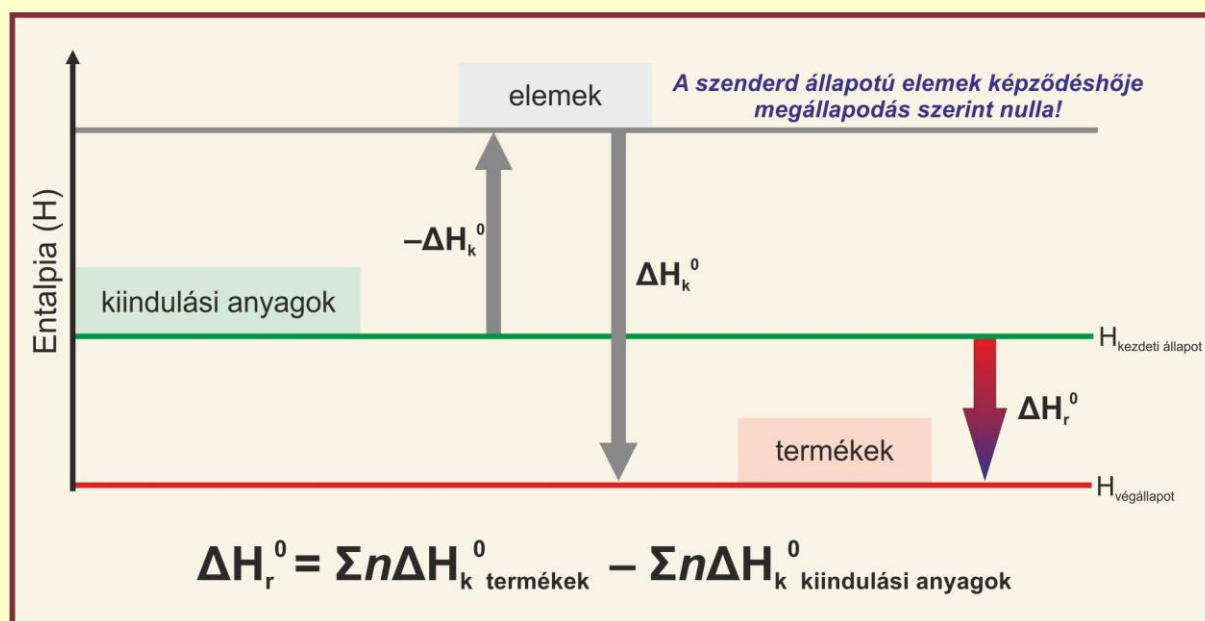
### Megjegyzés:

Ha egy anyagnak több különböző formája is ismert (pl. elemi szén grafit vagy gyémánt módosulata), a sztenderd állapotán a 25 °C-on és 1 atm nyomáson legstabilabb formáját értjük. A gyakorlatban ez azt jelenti, hogy a kevésbé stabil elemi forma (pl. gyémánt) sztenderd képződéshője nullától eltérő lesz (Whitten et al., 2014).

### 20. táblázat

Néhány gyakori anyag sztenderd moláris képződéshője (Whitten et al., 2014)  
Jelmagyarázat: g = gáz; f = folyadék; sz = szilárd

Tiszta anyag	$\Delta H_k^0$ (kJ/mol)	Tiszta anyag	$\Delta H_k^0$ (kJ/mol)
C (sz, gyémánt)	1,897	CaCO <sub>3</sub> (sz)	-1207,0
C (sz, grafit)	0	H <sub>2</sub> O (f)	-285,8
CH <sub>4</sub> (g)	-74,81	H <sub>2</sub> O (g)	-241,8
CO (g)	-110,5	NaCl (sz)	-411,0
CO <sub>2</sub> (g)	-393,5	SiO <sub>2</sub> (sz)	-910,9

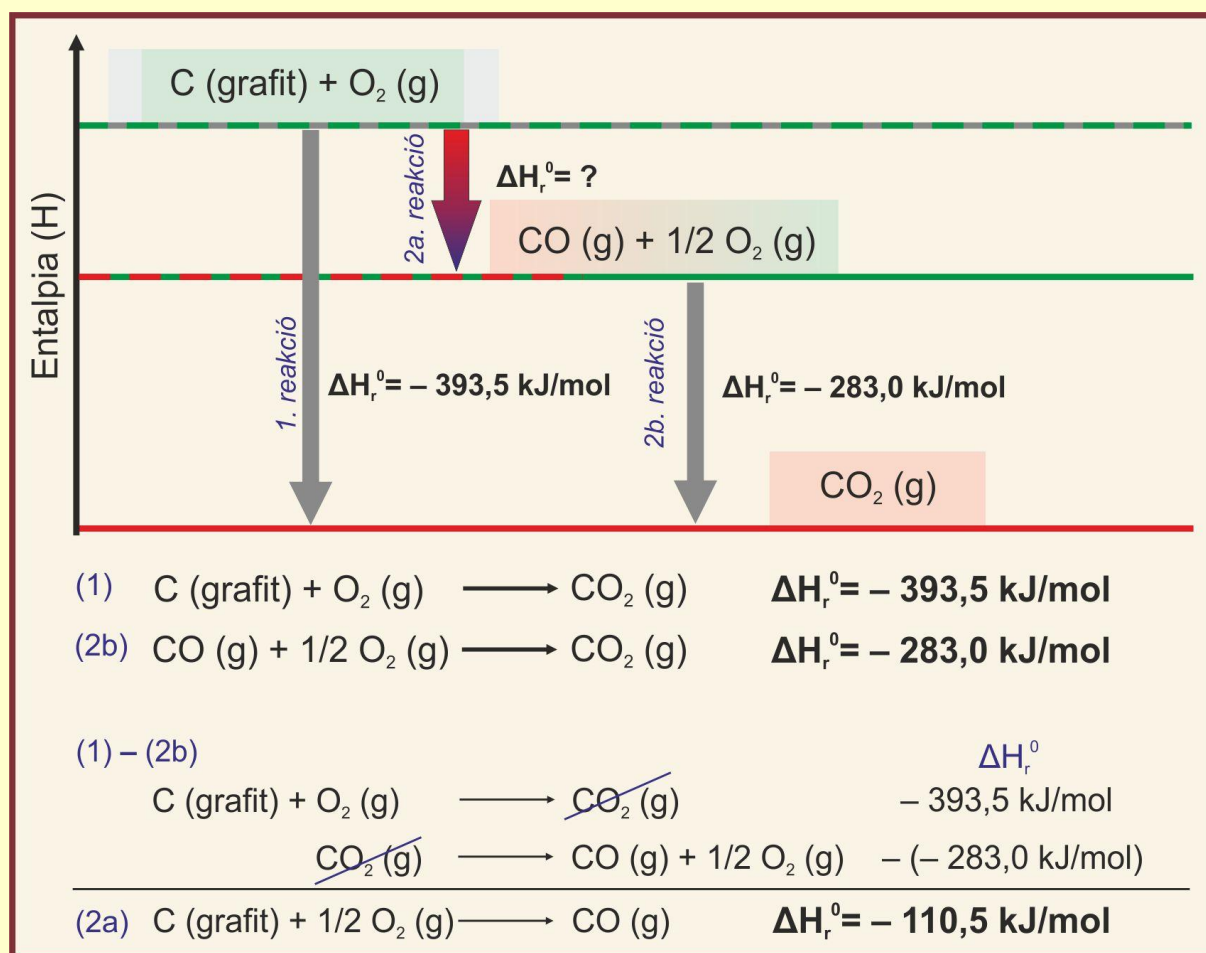


### 85. ábra

A sztenderd reakcióhő ( $\Delta H_r^0$ ), mint entalpiaváltozás megadása a termékek és a kiindulási anyagok sztenderd moláris képződéshőjének ( $\Delta H_k^0$ ) segítségével  
A reakcióhőt megkapjuk, ha a termékek képződéshőinek összegéből ( $\Sigma n\Delta H_k^0$ ) kivonjuk a kiindulási anyagok képződéshőinek összegét ( $\Sigma n\Delta H_k^0$ ), ahol  $n$  az adott vegyület (termék, illetve kiindulási anyag) reakcióban szereplő sztöchiometriai együtthatója. Ez az egyenlet a Hess-törvény matematikai megfogalmazása (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

A képződéshő segítségével olyan termokémiai egyenleteket írhatunk fel — a nyomás, a hőmérséklet és a halmazállapot megadása mellett —, amelyekben a kémiai képletek nem az anyag mólnyi mennyiségét, hanem annak képződéshőjét jelentik (Bárány et al., 2011). A reakcióhőt megkapjuk, ha a reakcióegyenletnek

megfelelően a termékek képződéshőinek összegéből kivonjuk a kiindulási anyagok képződéshőinek összegét (85. ábra). Ha egy reakció többféle úton mehet végbe, a reakciót kísérő hőváltozások összege független a részfolyamatok minőségétől és sorrendjétől (ez a Hess-törvény következménye), csak attól függ, hogy milyen kiindulási anyagokból milyen termékek keletkeznek (86. ábra). Többlépcsős reakciók eredő reakcióhője ezért kiszámítható abban az esetben, ha ismerjük az egyes részfolyamatok reakcióhőit. Az eredő reakcióhő a részfolyamatok reakcióhőinek összege (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).



**86. ábra**

A sztenderd moláris képződéshő meghatározása reakcióhők (ΔH<sub>r</sub><sup>0</sup>) ismeretében a szén-monoxid példáján (Whitten et al., 2014)

CO<sub>2</sub> egyrészt a grafit tökéletes égésével (1. reakció), másrészt két lépésben, szén-monoxid képződésén (2a. reakció), majd további égésén (2b. reakció) keresztül egyaránt keletkezhet. Amennyiben ismerjük a CO<sub>2</sub> keletkezési reakciók sztenderd reakcióhőit, a Hess-törvény értelmében a két folyamat különbségeként meghatározhatjuk a 2a. reakció sztenderd reakcióhőjét is; ami nem más, mint a CO sztenderd moláris képződéshője.

A kémiai reakciók hőváltozása megadja, hogy egy folyamat lejátszódásakor mekkora hő fejlődik vagy nyelődik el, azonban arról nem ad információt, hogy adott

körülmények között a folyamat önként lejátszódik-e. A spontán folyamatok irányát csak a **termodinamika második főtétele** alapján tudjuk meghatározni, amit az energia szétszóródásának tapasztalati elvére támaszkodva *Clausius* fogalmazott meg. Ez kimondja, hogy hő önként nem mehet át hidegebb testről melegebb testre (Atkins, 1992; Bárányi et al., 2011; Whitten et al., 2014).

Nézzünk néhány egyszerű példát olyan folyamatra, ami az energia szétszóródásával jár! Amikor egy forró fém lehűl, a hőmozgást végző, rezgő atomjai energiájuk egy részét spontán módon a környezetnek adják át. Önként megy végbe két egymástól elkülönített gáz keveredése is, ha azonos nyomáson elegyítjük őket. A gázcseppkék véletlenszerű mozgása tökéletes keveredéshez vezet. Azt viszont nem várhatjuk el, hogy ez a gázkeverék spontán szétváljon tiszta összetevőire (Whitten et al., 2014). Most vizsgáljunk meg egy padlón pattogó labdát! A lepattanás után az egymást követő felpattanások egyre kisebbek lesznek a súrlódás miatt, végül a labda a padlón nyugalomba kerül (spontán változás). Nyilvánvaló, hogy ellentétes irányú folyamat önként nem fog bekövetkezni, azaz egy meleg padlón nyugvó labda nem fog spontán módon pattogni. Termodinamikai megközelítésben ez egy olyan izolált rendszer, amiben a labda képviseli a zárt rendszert, a padló pedig a környezetet (Varsányi, 2009). Az első főtétel értelmében spontán változás során az izolált rendszer belső energiája nem változhat, a zárt rendszeré viszont igen: ha a zárt rendszer teljes energiája csökken, a környezet energiája spontán növekszik (és fordítva). Példánkban a labda rendezett mozgása alakult át a padló atomjainak termikus mozgási energiájává. A véletlenszerű, rendezetlen hőmozgás viszont már nem fog rendezett mozgássá alakulni. Spontán változás során tehát az energia minősége változik meg (Varsányi, 2009; Whitten et al., 2014).

A tapasztalati ismeretek alapján bármely fizikai vagy kémiai változás spontán lejátszódása kedvezményezett, ha a folyamatban hő szabadul fel (exoterm), vagy ha a folyamat növeli az anyag (pl. gázok elkeveredése) és az energia rendezetlenségét. Egy termodinamikai rendszerben az energia szétszóródása azt jelenti, hogy nem néhány részecskében koncentrálódik (pl. a fémtömb vagy a labda anyaga), hanem a lehető legtöbb részecskére (padlót alkotó részecskék, levegő) szétterjed. A termodinamika második főtétele azt is tükrözi, hogy az önként végbemenő folyamatok irányát meghatározó tényező kapcsolatban van a hőenergiával. Az energia szétszóródása egy adott hőmérsékleten a hőáramlás (hőcsere) nagyságától függ. Minden energiafajta átalakulhat hővé, hőt azonban teljes mértékben nem lehet

munkává alakítani, ezért nem készíthető *perpetuum mobile*, azaz örökmozgó gép (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

A második főtétel tapasztalati tényekre épülő megfogalmazásai számításokra nem alkalmasak, ezért a gyakorlatban hasznosítható matematikai leírást kellett erre keresni. A folyamatok irányát egy olyan új állapotfüggvény változása alapján határozzuk meg, ami megfelel az energia-szétszóródás mértékének, továbbá kapcsolatban van a hőváltozással és a hőmérséklettel. Ez az állapotfüggvény az **entrópia** (jele:  $S$ , mértékegysége: Joule/Kelvin [J/K]), segítségével a valóságos folyamatok irányára és egyensúlyára következtethetünk. Az entrópia extenzív mennyiség, vagyis a rendszer entrópiája arányos az anyag mennyiségével (Atkins, 1992; Anderson, 2005; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014). Minél nagyobb az energia szétszóródásának a mértéke egy rendszerben, annál nagyobb az entrópiája. A rendezetlenség mértékének növekedése szintén az entrópia növekedését vonja maga után (Atkins, 1992; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

Elszigetelt rendszerben az entrópia reverzibilis (megfordítható) folyamatban nem változik ( $\Delta S = 0$ ), irreverzibilisben viszont csak nőhet ( $\Delta S > 0$ ). Ha az irreverzibilis folyamatban a rendszer egyensúlyi állapotba kerül, akkor entrópiája maximális lesz. A spontán folyamatok irreverzibilisek, továbbá minden irreverzibilis változásnál az entrópia növekszik, így az entrópia nem más, mint a termodinamikai rendszer rendezetlenségének a mértéke (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

#### **Megjegyzés:**

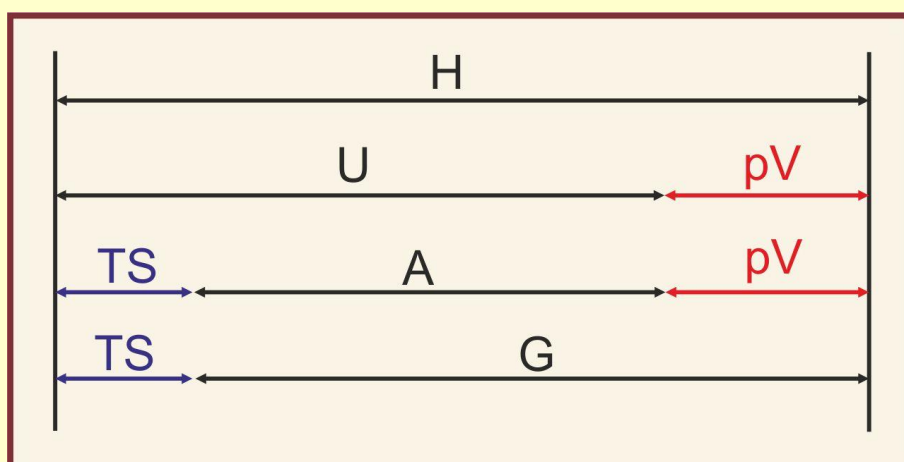
Az entrópia a termodinamikában az energia szétszóródásának, illetve az anyag rendezetlenségének a mértékét számszerűsíti (Atkins, 1992; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014). A fogalom könnyebb megértéséhez nézzünk néhány olyan egyszerű és gyakori példát, ami az entrópia megváltozásával jár!

A szilárd anyag részecskéi rendezettek, helyhez kötötten rezegnek. A folyadékrészecskék könnyen elmozdulhatnak, ezért rendezetlenebbek. A gázzészecskék közötti kölcsönhatás már szinte elhanyagolható, a részecskék mozgása véletlenszerű, a gázok kiterjednek. Ennek megfelelően az olvadás, a párolgás és a szublimáció mindig az entrópia növekedésével jár ( $\Delta S_{\text{rendszer}} > 0$ ). Az ellentétes folyamatok (fagyás, kondenzáció, depozíció) a rendszer entrópiáját csökkentik (Whitten et al., 2014).

Bármely anyag entrópiája a halmazállapotának megváltozása során ezért a következő sorrendben növekszik: szilárd < folyadék < gáz. Az entrópia növekedését eredményezi, ha bármely anyag hőmérséklete növekszik; ha a gázok térfogata növekszik (kiterjednek); ha különböző anyagok keverednek, valamint szilárd anyagok folyadékban oldódnak (Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

A természetes folyamatok leírása során lehatárolható rendszerek nincsenek elszigetelve a környezetüktől, ezért az entrópia általában nem állandó. Az entrópia megváltozása viszont kísérletileg nem mérhető, ezért olyan új paramétert kell keresni, amelyik közvetlenül alkalmazható zárt, de nem elszigetelt rendszerekre (Bárány et al., 2011). Egy zárt rendszer belső energiája, illetve entalpiája két részből tevődik össze: (1) a spontán folyamatok során szétszóródó, hőveszteséggént jelentkező energiából, ami összefügg az entrópiával; és (2) a szabadon munkává alakítható, azaz közvetlenül hasznosítható energiából. Ez utóbbi számszerűsítéséhez két újabb állapotfüggvényt vezettek be. Az egyik a **szabadenergia** (jele:  $A$ , mértékegysége: Joule [J]; definícióegyenlete:  $A = U - TS$ ), a másik a **szabadentalpia** (jele:  $G$ , mértékegysége: Joule [J]; definícióegyenlete:  $G = H - TS$ ), amelyek egymástól csupán a térfogati munkában különböznek. A szabadenergia állandó térfogaton és hőmérsékleten írja le a rendszer állapotát; ezt szokás Helmholtz-energiának vagy Helmholtz-függvénynek is nevezni. A szabadentalpia viszont olyan extenzív paraméter, ami állandó nyomás és hőmérséklet mellett jellemzi a rendszert; ezt gyakran Gibbs-energiának vagy Gibbs-függvénynek nevezik. Mindkét függvény kizárólag a vizsgált rendszerre vonatkozik, a környezet tulajdonságait nem veszi figyelembe. Abszolút értékük nem, csak a változásuk határozható meg (Atkins, 1992; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

A szabadenergia és a szabadentalpia különbsége a belső energiától, illetve az entalpiától a hőmérséklet és az entrópia szorzatából álló ( $TS$ ) tagban mutatkozik meg (87. ábra). Ez az úgynevezett kötött energia, ami nem alakítható át munkává, mert a folyamat lejátszódásakor hőenergiává alakul (Bárány et al., 2011).



**87. ábra**

A termodinamika legfontosabb állapotfüggvényei közötti összefüggés (Bárány et al., 2011)

**Megjegyzés:**

A termodinamika harmadik főtétele megadja az entrópiaskála nullapontját. Ez kimondja, hogy egy tiszta és tökéletesen kristályos anyag (tökéletesen rendezett, hibamentes) entrópiája az abszolút nulla fokon ( $T = 0 \text{ K}$ ) nullával egyenlő. Az anyag hőmérsékletének növekedésével párhuzamosan a részecskéi egyre intenzívebben rezegnek, tehát az entrópiája növekszik (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

A természetben lejátszódó folyamatok többsége állandó (légköri) nyomáson megy végbe, ezért a gyakorlatban a spontán változások irányát a szabadentalpia változásával ( $\Delta G = \Delta H - T \Delta S$ ;  $T$  és  $p$  konstans) adhatjuk meg. Egy fizikai vagy kémiai változás során maximálisan annyi energia alakítható szabadon munkává, amennyivel a rendszer szabadentalpiája csökken. Ha  $\Delta G$  negatív ( $\Delta G < 0$ ), a folyamat önként végbemegy az adott irányban. A szabadentalpia csökkenése annál jelentősebb, minél negatívabb az entalpiaváltozás (minél több hő szabadul fel), valamint minél nagyobb az entrópiánövekedés (a folyamat minél nagyobb rendezetlenséget eredményez). Ha egy folyamatban a rendszer szabadentalpiája növekszik ( $\Delta G > 0$ ), az önként nem mehet végbe az adott körülmények között. Amennyiben nincs szabadentalpia-változás ( $\Delta G = 0$ ), az adott folyamat mindkét irányba egyaránt lejátszódhat (oda- és visszaalakulás), azaz a rendszer egyensúlyban van (Atkins, 1992; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

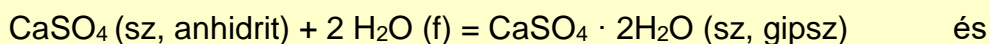
Az entalpiaváltozáshoz ( $\Delta H$ , képződéshő és reakcióhő viszonya) hasonlóan egy adott folyamatban részt vevő kiindulási anyagok és termékek szabadentalpia-változása segítségével meg tudjuk határozni a reakció szabadentalpia-változását. Mivel a  $\Delta G$  hőmérsékletfüggő, ebben az esetben is célszerű kiválasztani egy viszonyítási alapot, ami azonos a korábban megismert sztenderd állapottal (1 atm nyomás és  $25^\circ\text{C}$ ). A sztenderd állapotú kémiai elemek képződési szabadentalpiája nulla. Számos anyagra kísérletileg meghatározott és adatbázisokban megtalálható a sztenderd moláris képződési szabadentalpia ( $\Delta G_k^0$ ) értéke (21. táblázat). A pontosan felírt reakcióegyenletnek megfelelően, ha ezek kombinációjával kiszámoljuk a reakció szabadentalpiájának változását ( $\Delta G_r^0 = \sum n \Delta G_k^0_{\text{termékek}} - \sum n \Delta G_k^0_{\text{kiindulási anyagok}}$ ), meg tudjuk mondani, hogy meghatározott körülmények között az adott folyamat önként lejátszódhat-e. Spontán folyamatok kizárólag a szabadentalpia csökkenésének irányába ( $\Delta G < 0$ ) mennek végbe (Atkins, 1992; Anderson, 2005; Varsányi, 2009; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014). Nézzünk erre egy gyakorlati példát!

### 21. táblázat

Néhány anyag sztenderd képződési szabadentalpiája (Anderson, 2005; Whitten et al., 2014)  
Jelmagyarázat: g = gáz; f = folyadék; sz = szilárd

Tiszta anyag	$\Delta G_k^0$ (kJ/mol)	Tiszta anyag	$\Delta G_k^0$ (kJ/mol)
C (sz, gyémánt)	2,9	CaSO <sub>4</sub> (sz, anhidrit)	-1321,8
C (sz, grafit)	0	CaSO <sub>4</sub> · 2H <sub>2</sub> O (sz)	-1797,3
CH <sub>4</sub> (g)	-50,75	H <sub>2</sub> O (f)	-237,2
CO (g)	-137,2	H <sub>2</sub> O (g)	-228,6
CO <sub>2</sub> (g)	-394,4	NaCl (sz)	-384,0
CaO (sz)	-604,0	HCl (g)	-95,3
CaCO <sub>3</sub> (sz, kalcit)	-1129,0	SiO <sub>2</sub> (sz, kvarc)	-856,7
CaCO <sub>3</sub> (sz, aragonit)	-1128,0	FeS <sub>2</sub> (sz, pirit)	-166,9
CaF <sub>2</sub> (sz, fluorit)	-1167,3	NH <sub>3</sub> (g)	-16,45

A gyakori szulfátok közül a kristályvizet tartalmazó gipsz (CaSO<sub>4</sub> · 2H<sub>2</sub>O) és a vízmentes anhidrit (CaSO<sub>4</sub>) egyaránt elterjedt ásvány a Föld felszínén. Földtudományi szempontból azonban nem mindig egyértelmű, hogy melyik a stabil fázis. Az anhidrit ↔ gipsz átalakulási folyamat termodinamikai egyenlete és a sztenderd moláris képződési szabadentalpia adatok (21. táblázat) ismeretében egyszerűen kiszámolhatjuk a reakció szabadentalpia-változását, így megadhatjuk a spontán átalakulás irányát. Az átalakulás egyenlete és szabadentalpia-változása:



$$\Delta G_r^0 = \sum n \Delta G_k^0 \text{termékek} - \sum n \Delta G_k^0 \text{kiindulási anyagok}, \quad \text{azaz}$$

$$\Delta G_r^0 = \Delta G_k^0 \text{gipsz} - \Delta G_k^0 \text{anhidrit} - 2 \Delta G_k^0 \text{víz}$$

$$\Delta G_r^0 = -1797,3 - (-1321,8) - 2(-237,2) \text{ kJ/mol} = -1,1 \text{ kJ/mol}, \text{ vagyis } \Delta G_r^0 < 0.$$

Ez azt jelenti, hogy felszíni körülmények között (1 atm nyomáson és 25 °C-on) az anhidrit vízfelvétele a kedvezményezett reakció, azaz *víz jelenlétében a gipsz stabilabb fázis, mint az anhidrit* (Anderson, 2005). Vegyük észre, hogy az átalakulási folyamat sebességéről (milyen gyorsan játszódik le) azonban nem kaptunk információt!

#### Megjegyzés:

Konstans hőmérsékleten és nyomáson bármely fizikai változás vagy kémiai reakció spontán lejátszódásának indikátora a szabadentalpia (G) megváltozása. Az angol megnevezés (*Gibbs free energy*) tükörfordításaként azonban találkozhatunk „Gibbs-szabadenergia” (vagy csak egyszerűen szabadenergia) megnevezéssel is. Törekedjünk arra, hogy a két állapotfüggvényt (Helmholtz-féle szabadenergia és Gibbs-energia) ne keverjük össze!

Az eddig tárgyalt termodinamikai összefüggéseknél olyan zárt rendszereket vizsgáltunk, amelyekben az összetétel (az anyag mennyisége) változatlan volt. A természetben lejátszódó folyamatok során azonban a rendszer összetétele gyakran változik. Az ilyen nyitott rendszerekre, amelyekben az egyes összetevők mennyisége egymástól függetlenül változhat, célszerű további kiegészítéseket tennünk (Bárány et al., 2011). A természetes rendszerek általában többféle anyagot tartalmaznak. Ha egyetlen anyag egy mólnyi mennyiségét hozzáadjuk a rendszerhez állandó nyomáson és hőmérsékleten, miközben az összes többi mennyisége állandó marad, megváltozik a rendszer szabadentalpiája. Ennek számszerűsítésére vezették be a **kémiai potenciál** (jele:  $\mu$ , mértékegysége: Joule/mol [J/mol]) fogalmát, ami nem más, mint a tiszta anyag parciális moláris szabadentalpiája:

$$\mu = G_m \quad G_m: \text{parciális moláris szabadentalpia.}$$

A tiszta anyag kémiai potenciálja 1 atm nyomáson és 25 °C hőmérsékleten a standard kémiai potenciál ( $\mu^0 = G_m^0$ ). Figyelembe véve, hogy a reakció szabadentalpia-változása felírható az alábbi egyenlet szerint:

$$\Delta G_r^0 = \sum n \Delta G_k^0 \text{termékek} - \sum n \Delta G_k^0 \text{kiindulási anyagok},$$

amiben az egyes komponensek moláris szabadentalpiáját a kémiai potenciállal helyettesíthetjük, felírható az alábbi általános összefüggés:

$$\Delta G_r^0 = \sum \mu_i^0 \Delta n_i \text{ ahol } n_i: \text{ az } i\text{-edik komponens anyagmennyisége és} \\ \mu_i^0: \text{ az } i\text{-edik komponens sztenderd kémiai potenciálja;}$$

$\Delta n_i$  (az  $i$ -edik komponens anyagmennyiségének a változása) előjele a kiindulási anyagokra és a termékekre különböző. A kémiai potenciál tehát megmutatja, hogy egy rendszer összetételének változása hogyan hat a szabadentalpiára. A kémiai reakció hajtóereje nem más, mint a kiindulási anyagok és a termékek kémiai potenciáljának a különbsége. Mivel a spontán folyamatok a szabadentalpia csökkenésének irányába játszódnak le ( $\Delta G < 0$ ;  $p$ ,  $T$  állandó), a reakció szabadentalpiájának változása felírható a kémiai potenciál és a komponensek anyagmennyiségének segítségével: spontán folyamatra  $\sum \mu_i \Delta n_i < 0$ . Ha  $\Delta G = 0$ , illetve  $\sum \mu_i \Delta n_i = 0$ , a rendszer egyensúlyban van. Az önként lejátszódó folyamatok addig mehetnek végbe, amíg be nem áll a termodinamikai egyensúly (Atkins, 1992; Anderson, 2005; Varsányi, 2009; Bárány et al., 2011).

## 7.2. Egyensúlyi termodinamika: fázisegyensúlyok

A termodinamikai egyensúly jellemzésekor egyrészt egykomponensű rendszerek átalakulási folyamatait (pl. halmazállapot-változások), másrészt két- vagy többkomponensű rendszerek állapotváltozásának törvényszerűségeit kell termodinamikai szempontból leírunk. Ehhez az anyagmennyiség mellett további, az összetételre vonatkozó származtatott paraméterek ismerete is szükséges (Atkins, 1992; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

Amennyiben a vizsgált rendszer homogén, és azt egynél több komponens alkotja, az összetevők egymáshoz viszonyított aránya alapján **elegy** és **oldat** különböztethető meg. Bármely elegyben a komponensek mennyisége azonos nagyságrendű, az oldatokban viszont az egyik komponens mennyisége nagy (ez az oldószer) a másikhoz, vagy a többihez (oldott anyag) képest (Bárány et al., 2011). A gáztörvények tárgyalásakor a gázkeverék összetevőinek arányát a *móltört* segítségével fejeztük ki. A rendszer tömegének vagy térfogatának ismeretében az összetétel számszerűsítésére további lehetőségeink is vannak (22. táblázat).

**22. táblázat**

Két- vagy többkomponensű rendszerek összetételének megadása (Whitten et al., 2014)

<b>Megnevezés</b>	<b>Meghatározás</b>	<b>Mértékegység</b>
<b>móltört</b> (jele: $x$ )	az adott összetevő mólszáma és az összmólszám hányadosa	–
<b>molaritás</b> (jele: $c$ )	az adott összetevő (oldott anyag) anyagmennyisége (mol) a rendszer egységnyi térfogatához ( $1\text{ dm}^3$ ) viszonyítva	$\text{mol/dm}^3$
<b>tömegszázalék</b> (tömeg% vagy g/g%)	az adott összetevő tömege a rendszer tömegéhez viszonyítva, százalékban kifejezve (pl. 100 g oldatban hány g oldott anyag van; 100 g mintában hány g az adott összetevő)	% (g/g%)
<b>molalitás</b> (jele: $m$ )	az adott összetevő (oldott anyag) anyagmennyisége (mol) az oldószer egységnyi tömegéhez ( $1\text{ kg}$ ) viszonyítva	$\text{mol/kg oldószer}$
<b>tömegkoncentráció</b>	az adott összetevő (oldott anyag) tömege a rendszer (oldat) egységnyi térfogatához ( $1\text{ dm}^3$ ) viszonyítva	$\text{g/dm}^3$

Az elegyek összetevői lehetnek gázok, folyadékok vagy szilárd anyagok, ennek megfelelően megkülönböztethetünk gáz- és folyadékelegyeket, sőt szilárd elegyeket, amelyeket gyakran **szilárd oldat**nak neveznek (pl. szilárd halmazállapotú, két- vagy többkomponensű ötvözetek). A folyékony halmazállapotú és a szilárd elegyekre alapvetően ugyanolyan termodinamikai összefüggések érvényesek, mint a gázelegyekre (Atkins, 1992; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

Az elegy kialakulása mindig az összetevők keveredésével jár, tehát az elegy gyakorlatilag homogén keverék. Ha a keveredés mikroszkopikus (molekuláris vagy atomi) léptékben történik, és az egyik komponens nagyobb mennyiségben — tehát oldószerként — van jelen, általában oldatról beszélünk. Az oldatokban az oldószer leggyakrabban valamilyen folyadék, az oldott anyag azonban lehet szilárd, folyadék vagy gáz halmazállapotú. Amennyiben az összetevők csak makroszkopikus szinten elegyednek (megtartják saját fizikai és kémiai tulajdonságaikat) heterogénebb tulajdonságú keverék jön létre (Bárány et al., 2011). Az elegy- és oldatképződés a szabadentalpia csökkenésével és az entrópia növekedésével járó folyamat, ami mindig a kémiai potenciál csökkenése irányában játszódik le (Atkins, 1992; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

Az oldatokban az oldott komponensek többnyire töltéssel rendelkező, ionos formában vannak jelen, ezért közöttük elektrosztatikus kölcsönhatások (vonzás és taszítás) lépnek fel. Az elektrosztatikus árnyékoló hatás miatt az oldat összetevőinek viselkedése nem lesz ideális, az ionok reaktivitása csökken. Minél nagyobb az oldott ionok koncentrációja, annál nagyobb lesz az elektrosztatikus árnyékoló hatás, ezért annál nagyobb mértékű lesz az ideális viselkedéstől való eltérés. Ennek kiküszöbölésére vezették be az **aktivitás** (jele:  $a$ ) fogalmát, ami nem más, mint a reális oldatra jellemző, hatékony (effektív) koncentráció (Atkins, 1992; Bárány et al., 2011). Az aktivitás általában kisebb, mint a tényleges koncentráció (pl. móltört vagy molaritás). Minél nagyobb az oldott ionok koncentrációja, annál nagyobb az eltérés az aktivitás és az ideális koncentráció között. Az aktivitás és az ideális koncentráció közötti összefüggés matematikai alakja (Varsányi, 2009; Bárány et al., 2011):

$$[a_i] = \gamma_i x_i$$

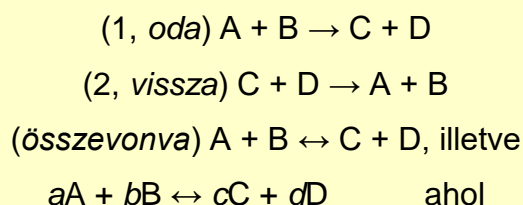
ahol  $[a_i]$ : az  $i$ -edik komponens aktivitása,

$\gamma_i$  : az aktivitási tényező,

$x_i$ : az  $i$ -edik komponens móltörtje.

Az aktivitási tényező értéke ideális esetben  $\gamma_i = 1$  (pl. híg oldatok), azaz az aktivitás megegyezik az ideális elegyre jellemző koncentrációval (Bárány et al., 2011).

Az aktivitás alkalmazásával bármely reális, többkomponensű elegy, illetve oldat egyensúlyi állapota leírható. **Kémiai egyensúly**ról akkor beszélünk, ha két ellentétes irányú reakció egymással párhuzamosan (szimultán módon), azonos sebességgel játszódik le. A mindkét irányba lejátszódó, azaz reverzibilis reakciókat összevonva, általános formában is felírhatjuk úgy, hogy az összetevőket nagybetűkkel jelöljük:



A és B a kiindulási anyagot, C és D a reakció termékeit jelöli, a kisbetűk pedig az adott komponens sztöchiometriai együtthatójának felelnek meg a rendezett reakcióegyenletben (Atkins, 1992; Anderson, 2005; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014). A kémiai egyensúly dinamikus állapot, ezért az odaalakulás és a visszaalakulás sebessége azonos lesz ( $v_1 = v_2$ ), ha a rendszer elérte az egyensúlyi állapotot. A **reakciósebesség** (jele:  $v$ ) megadható a koncentrációváltozás és a változáshoz szükséges idő hányadosaként, ami arányos a komponensek aktivitásával. A fenti általános egyensúlyi reakcióra az alábbi összefüggés érvényes:

$$v_1 = k [A]^a [B]^b \quad \text{és} \quad v_2 = k' [C]^c [D]^d \quad \text{továbbá} \quad v_1 = v_2$$

azaz  $k [A]^a [B]^b = k' [C]^c [D]^d$  ahol  $k$  és  $k'$ : reakciósebességi állandók.

Ezt az összefüggést átrendezve, illetve a reakciósebességi állandókat összevonva ( $k/k' = K$ ; *állandók hányadosa is állandó*) megkapjuk a termodinamikai egyensúlyra jellemző alapegyenletet, amit a tömeghatás törvényének is neveznek:

$$k/k' = [C]^c [D]^d / [A]^a [B]^b$$

$$K = [C]^c [D]^d / [A]^a [B]^b \quad \text{ahol } K: \text{ az egyensúlyi állandó.}$$

A **tömeghatás törvénye** alapján reverzibilis folyamatok egyensúlyi állapotában a termékek megfelelő hatványon vett aktivitásainak (koncentrációinak) szorzatát osztva a kiindulási anyagok megfelelő hatványon vett aktivitásainak szorzatával, megkapjuk az egyensúlyi állandót ( $K$ ), ami a hőmérséklettől és a nyomástól egyaránt függ. Ez más megfogalmazásban azt jelenti, hogy bármely reverzibilis reakció egyensúlyi reakcióhányadosa ( $K$ ) adott hőmérsékleten és nyomáson ( $T$ ,  $p$  állandó) konstans, függetlenül attól, hogy milyen egyensúlyi koncentrációkat helyettesítünk bele (Atkins, 1992; Varsányi, 2009; Bárány et al., 2011; Gill, 2015). Az egyensúlyi állandó gyakorlati alkalmazására a **8. fejezet**ben találunk példákat.

Figyelembe véve a termodinamika alaptörvényeit, bármely egyensúlyi rendszer egyértelműen leírható a hőmérséklet, a nyomás és a kémiai összetétel segítségével (Atkins, 1992; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014; Gill, 2015). Ahhoz, hogy a sokváltozós rendszerek jellemzésére szolgáló összefüggéseket megértsük, nézzünk először egy egyszerű fizikai változást! Ha egy szilárd kristályos anyagot állandó nyomáson melegíteni kezdünk (hőközlés), a hőmérséklete egészen addig emelkedni fog, amíg el nem érjük az olvadáspontja hőmérsékletét ( $T_{op}$ ). További hőközlés hatására addig nem változik meg a hőmérséklete, amíg a teljes anyag meg nem olvad. Ebben a tartományban a hőközlés az olvadáshőt fedezi, konstans nyomás és hőmérséklet mellett a tiszta anyag két különböző halmazállapotban lesz jelen. A megolvadást követően melegítve a folyadékot, az forrni kezd, amint a gőznyomása eléri a külső nyomást. A forráspont hőmérsékletén ( $T_{fp}$ ) hőközlés hatására nem tapasztalunk addig hőmérsékletnövekedést, amíg az összes folyadék gázzá nem alakul (88. ábra). Ez a példa rávilágít arra, hogy egyetlen tiszta anyag (egykomponensű rendszer) esetében sem változtathatjuk meg tetszőlegesen a rendszert leíró intenzív változók értékét úgy, hogy közben az anyag állapota meg ne változzon. Egy szilárd anyag melegítésekor — az állandó külső nyomás mellett — lesz egy-egy olyan hőmérséklet, amikor a szilárd, illetve a folyékony halmazállapotú anyag már nem stabil.



**88. ábra**

Egy szilárd anyag melegítése során megfigyelhető hőmérsékletváltozás a halmazállapot-változások tükrében ( $T_{fp}$ : forráspont;  $T_{op}$ : olvadáspont)  
 Az olvadáspont hőmérsékletén a szilárd anyag és a folyadék, a forráspont hőmérsékletén a folyadék és a gáz van egyensúlyban egymással ( $p$  és  $T$  állandó az adott pontokban).

A termodinamikában **fázisdiagram**oknak nevezik azokat a diagramokat, amelyek megmutatják a zárt rendszert alkotó összetevők stabil formáit az állapotváltozók (nyomás, hőmérséklet, összetétel) bizonyos értékei mellett (Atkins, 1992; Anderson, 2005; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014; Gill, 2015). A fizikai kémiában a **fázis** (jele: F) a rendszer homogén, mechanikailag szeparálható, a rendszer többi részétől megkülönböztethető (határfelületekkel elkülönülő) részét jelenti. Minden egyes fázis azonos fizikai és kémiai tulajdonságokkal rendelkezik (pl. egy adott térfogatot foglal el). Egy tiszta anyag eltérő halmazállapotai (pl. jég, víz, vízgőz) különböző fázisok. A fázis azonban nem azonos a halmazállapottal. A korlátozottan elegyedő folyadékok (pl. víz–olaj) határfelülettel elválasztott, külön fázisokat képeznek, bár halmazállapotuk azonos (Atkins, 1992; Bárány et al., 2011).

Szilárd halmazállapotban az elemek és vegyületek azonos kémiai összetételű, de különböző szerkezetű változatai szintén önálló fázisként jelenhetnek meg. Az elemek tárgyalásakor láttuk, hogy egyazon elem (pl. C) különböző szerkezetű módosulatait (pl. grafit és gyémánt; **67. ábra**) allotróp módosulatlak nevezzük (Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014). Földtudományi szempontból kiemelt jelentősége van az azonos kémiai összetételű, de eltérő szerkezetű kristályos anyagoknak, amelyek között a vegyületek szintén gyakoriak. Az ásványtanban az azonos kémiai összetételű, de eltérő kristályszerkezetű ásványokat **polimorf módosulat**oknak nevezik. Ezek közül a grafit és a gyémánt (C); az aragonit és a kalcit ( $\text{CaCO}_3$ ); a kvarc, a tridimit és a krisztobalit ( $\text{SiO}_2$ ); továbbá a kianit, az andaluzit és a szillimanit ( $\text{Al}_2\text{SiO}_5$ ) a legfontosabb változatok (Koch, Sztrókay, 1994; Anderson, 2005; Varsányi, 2009; Gill, 2015).

A zárt rendszer összetételét az összetevők, azaz a **komponensek** (jele: K) segítségével adhatjuk meg. Általános értelemben az anyagot alkotó atomokat, elemeket és vegyületeket nevezzük komponenseknek. A termodinamikában azonban a komponensek száma nem mindig egyezik meg a rendszert felépítő anyagok számával. Ha a komponensek között kémiai reakció mehet végbe, akkor azok nem függetlenek egymástól, ami csökkenti a rendszer leírásához szükséges anyagok számát. A fázisegyensúlyok tárgyalásakor a komponensek száma nem más, mint azoknak a független anyagoknak a minimális száma, amelyek koncentrációja szükséges a rendszerben jelen lévő összes fázis összetételének megadásához. A komponensek számát úgy határozhatjuk meg, ha a rendszer összes alkotórészének

számából levonjuk a közöttük lehetséges független kémiai reakciók számát (Atkins, 1992; Varsányi, 2009; Bárány et al., 2011; Gill, 2015).

### **Jó tudni! Polimorf módosulatok az ásványvilágban**

A polimorfizmus témakörénél olyan ásványfajok szerepeltek, amelyekkel érdemes kicsit közelebbről megismerkednünk! Az alábbiakban — a kristályszerkezet mélyebb bemutatása nélkül — a gyakori polimorf módosulatok néhány jellemző tulajdonsága olvasható (Koch, Sztrókay, 1994; Pál-Molnár, 2013; Gill, 2015).

Az elemi szén (C) természetes polimorf (és allotróp) módosulata a grafit és a gyémánt. A grafit szürkésfekete–fekete színű, fémfényű, puha, kenődő ásvány, vékonytáblás, pikkelyes termetű, hasadása tökéletes. Átalakult (metamorf) kőzetek *hexagonális* kristályrendszerű ásványa. A *köbös* kristályrendszerű gyémánt szintelen vagy színezett, gyémántfényű, rideg, kemény ásvány. Uralkodó kristályformája az oktaéder és a hexaéder, az oktaéderlapokkal párhuzamosan hasadása tökéletes. Keletkezése speciális mélységi magmás folyamatokhoz kapcsolódik.

A leggyakrabban különböző hőmérsékletű vizes oldatokból (biogén vagy vegyi hatásra) kikristályosodó kalcium-karbonát ( $\text{CaCO}_3$ ) két kőzetalkotó módosulata az aragonit és a kalcit (*fotó: cseppkő metszete, ismeretlen lelőhely*). A *rombos* kristályrendszerű, fehér, sárgás színű aragonit többnyire szálás, rostos, tűs vagy sugaras kifejlődésű, jól hasadó ásvány. A gyakran fehér vagy szintelen kalcit a *trigonális* kristályrendszerbe tartozik. Megjelenése változatos, romboéderlapok szerint kitűnően hasad, üvegfényű.



A szilícium-dioxid ( $\text{SiO}_2$ ) leggyakoribb módosulata a kvarc (*fotó: dúcos kvarc, Selmecbánya; Pál-Molnár, 2013*), a tridimit és a krisztobalit. Ezek közül a *trigonális* kristályrendszerű kvarc nem hasad, törése kagylós vagy szilánkos. Rideg, üvegfényű, törési felületén zsírfényű, víztiszta (gyakran színezett), átlátszó ásvány. A *hexagonális* tridimit  $870\text{ }^\circ\text{C}$  felett kristályosodó, üvegfényű, fehéres, áttetsző módosulat. A krisztobalit  $1470\text{ }^\circ\text{C}$  felett *köbös* rendszerű, lehűlve *tetragonális* módosulattá változik. Hasadása nincs, törékeny, szintelen vagy fehér ásvány.

Az alumínium-szilikát ( $\text{Al}_2\text{SiO}_5$ ) polimorf módosulata a kianit, az andaluzit és a szillimanit. A kianit *triklin* kristályrendszerű ásvány, általában halványkék, kitűnő hasadású, üveg- vagy gyöngyházfényű kristályok formájában jelenik meg. A *rombos* rendszerű andaluzit üvegfényű vagy fénytelen, hasadása rossz, gyakran rózsaszínű, zömök kristályokat alkot, vagy szálás, rudas, szemcsés halmazok formájában gyakori. A szillimanit szintén *rombos*, többnyire szintelen, szálás, rostos vagy prizmás habitusú, üvegfényű és jól hasadó kristályokat alkot.

A komponensek száma és a kémiai összetevők száma közötti különbség könnyebben megérthető az olivin példáján (Gill, 2015). Ez a szigetszilikátok közé tartozó, gyakori kőzetalkotó ásvány négy elemből épül fel: magnéziumot, vasat, szilíciumot és oxigént tartalmaz (6.1. fejezet). Az olivin összetétele ezért megadható e négy elem koncentrációjával: Mg, Fe, Si és O. Ez a forma azonban nem tükrözi a szilikátok egyik fontos tulajdonságát: az oxigéntartalom nem független sajátság, azt a kationok vegyértéke határozza meg. Az olivin összetétele ezért a három összetevő oxidos formájában is felírható: MgO, FeO és SiO<sub>2</sub>. Amennyiben kristálykémiail ismereteket is figyelembe veszünk, a szigetszilikátok kationokon keresztül összekapcsolódó [SiO<sub>4</sub>]-egységekből épülnek fel, ezért az olivin összetétele az X<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub> általános képletnek felel meg. A képletben az X a magnéziummal és a vassal betöltött kationpozíciókat jelöli, azaz az olivin összegképlete: (Mg,Fe)<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub>. Ez azt jelenti, hogy a négy kémiai elemet tartalmazó olivinben csak két független összetevő van. Az olivint így olyan kétkomponensű rendszernek kezelhetjük, amelyet két szélsőtag alkot: Mg<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub> és Fe<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub>. Az ásványtanban ennek a két szélsőtagnak önálló neve van (Koch, Sztrókay, 1994; Gill, 2015): a tisztán Mg-tartalmú komponens a forsterit (Fo), a csak Fe-tartalmú változat a fayalit (Fa).

A termodinamikai egyensúly jellemzéséhez a fázis és a komponens meghatározását követően meg kell még adnunk azoknak az állapotjelzőknek a számát, amelyek a rendszert egyértelműen meghatározzák. Bármely rendszerben azoknak az intenzív változóknak a számát, amelyeket egymástól függetlenül, szabadon változtathatunk anélkül, hogy az egyensúlyi rendszerben megváltozna a fázisok száma, **szabadsági fok**nak (jele: Sz) nevezzük (Atkins, 1992; Varsányi, 2009; Bárány et al., 2011; Gill, 2015).

A komponensek, a fázisok és a szabadsági fokok száma közötti összefüggést a **Gibbs-féle fázisszabály** adja meg, ami kimondja, hogy a szabadsági fokok számát megkapjuk, ha a független állapotjelzők számából kivonjuk a közöttük fennálló kapcsolatokat leíró független egyenletek számát. A gyakorlatban a fázisok és a szabadsági fokok összege egyenlő a komponensek kettővel megnövelt számával (a két intenzív fizikai változó, a nyomás és a hőmérséklet miatt): Sz + F = K + 2 (Bárány et al., 2011; Gill, 2015). Ez alapján a szabadsági fok meghatározásának egyenlete:

$$Sz = K - F + 2$$

ami a Gibbs-féle fázisszabály elterjedt matematikai alakja (Atkins, 1992; Varsányi, 2009; Bárány et al., 2011; Gill, 2015).

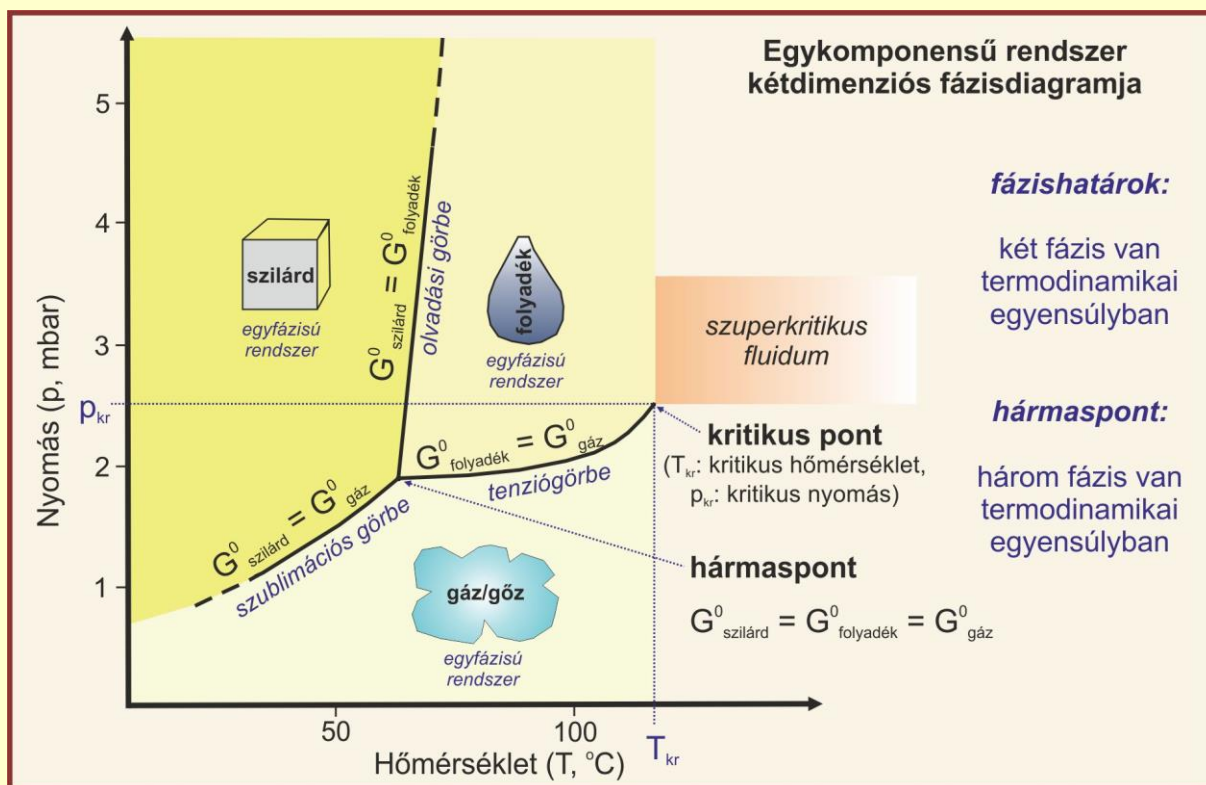
Egy zárt rendszer fázisai között fennálló viszonyokat fázisdiagramokon szemléltethetjük. A síkban ábrázolható, kétdimenziós fázisdiagramok általában két paraméter egymáshoz viszonyított változását mutatják. Ilyenek a hőmérséklet ( $T$ ) – nyomás ( $p$ ), az összetétel – hőmérséklet ( $T$ ), az összetétel – nyomás ( $p$ ) és az összetétel – összetétel diagramok (Atkins, 1992; Koch, Sztrókay, 1994; Anderson, 2005; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

Állandó összetétel mellett a legegyszerűbb fázisdiagramok azok, amelyek egy tiszta anyag (egykomponensű zárt rendszer) egyensúlyi fázisai közötti nyomás–hőmérséklet összefüggést mutatják be (89. ábra). Az úgynevezett  $p$ – $T$  diagramokon a hőmérséklet függvényében ( $x$ -tengely) ábrázolják a nyomás lehetséges értékeit ( $y$ -tengely). A diagramterületet olyan kitüntetett görbék (úgynevezett fázishatárok) osztják fel, amelyek páronként az egymással egyensúlyban lévő fázisok (olvadási görbe: szilárd és folyadék; szublimációs görbe: szilárd és gáz; továbbá tenziógörbe: folyadék és gáz fázishatár) hőmérséklet–nyomás kombinációjának felelnek meg. A görbék közötti tartományokban csak egyetlen fázis lehetséges. A fázishatárokat jelölő három görbe egy pontban, a **hármaspontban** metszi egymást. A hármaspontnak megfelelő nyomáson és hőmérsékleten a tiszta anyag mindhárom fázisa egyszerre stabil, egymással egyensúlyban van. Egyensúlyi állapotban nincs szabadentalpia-változás ( $\Delta G = 0$ ), ezért a fázishatárokon, illetve a hármaspontban jelen lévő fázisok sztenderd szabadentalpiája megegyezik (Atkins, 1992; Anderson, 2005; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

A hármaspontból kiinduló tenziógörbe vagy gőznyomásgörbe — a másik két fázishatártól eltérően — egy adott hőmérséklet–nyomás kombinációnál elvégződik. Ezt a pontot **kritikus pontnak** nevezzük. A kritikus pontnak megfelelő hőmérsékleti, illetve nyomásérték a **kritikus hőmérséklet** és a **kritikus nyomás** (89. ábra). Ennél nagyobb hőmérsékleten az adott anyag már nem cseppfolyósítható, úgynevezett **szuperkritikus fluidumként** lesz jelen (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

#### **Megjegyzés:**

A gázhalmazállapoton belül megkülönböztethetünk gázokat (*gas phase*) és gőzöket (*vapour or vapor phase*). Gázokról akkor beszélünk, ha a körülmények nem teszik lehetővé a kondenzációt. Gőzök viszont az olyan gázhalmazállapotú rendszerek, amelyeknél a kondenzáció termodinamikai feltételei adottak. Ez azt jelenti, hogy egy anyag kritikus hőmérséklet alatti hőmérsékletű gázfázisa a gőz. A gőzök a nyomás növelésével — a hőmérséklet csökkentése nélkül — folyadékká kondenzálhatók (Bárány et al., 2011).



**89. ábra**

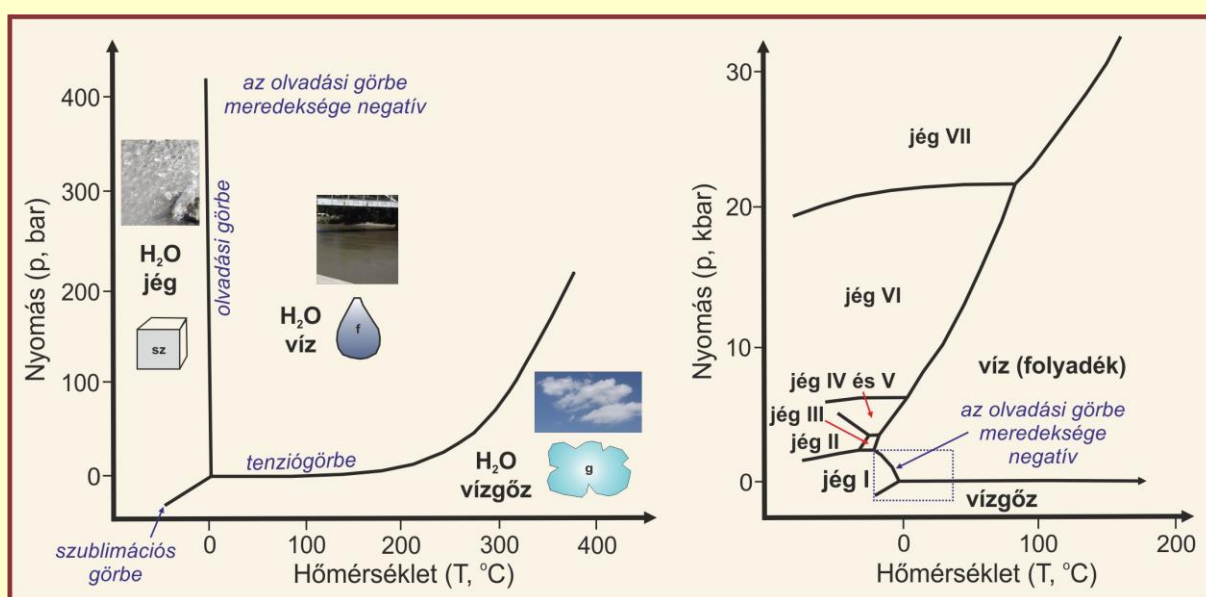
Egy tiszta anyag (egykomponensű zárt rendszer) egyensúlyi fázisai közötti nyomás–hőmérséklet összefüggés (Anderson, 2005; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014)

A hármaspontból kiinduló olvadási görbe meredeksége az adott anyag szilárd, illetve folyadék halmazállapotban mérhető sűrűségével van összefüggésben. A legtöbb anyagnál a folyadék sűrűsége kisebb, mint a szilárd halmazállapotú változaté, ezért állandó hőmérsékleten a nyomás növelése az anyag fagyásának kedvez (pl. szén-dioxid). Az olvadási görbe meredeksége pozitív lesz (felfelé és jobbra dől), mint amelyet a hipotetikus anyagot ábrázoló **89. ábra** is mutat. Néhány anyag (pl. víz) azonban szilárd halmazállapotban kisebb sűrűségű, mint folyadékként. Az ilyen anyagok p–T diagramján az olvadási görbe meredeksége negatív (felfelé és balra dől). Az olvadási görbe negatív meredekségének következménye, hogy a nyomás növekedésének hatására a szilárd fázis felülete megolvad (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

#### **Megjegyzés:**

A szilárd–folyadék egyensúly környezetében a jég sűrűsége kisebb, mint a vízé. Ez a vízmolekulák között fellépő hidrogénkötések miatt van: a jégben sokkal kiterjedtebb a hidrogénhidak hálózata, ezért a vízmolekulák távolabb helyezkednek el egymástól. Ennek következménye, hogy a jég úszik a vízben (Anderson, 2005; Whitten et al., 2014).

A víz kellően alacsony hőmérsékleten szilárd halmazállapotú, azaz jég formájában van jelen (90. ábra). Viszonylag kis nyomáson ez nem más, mint a „közönséges” jég (jég I). Nagynyomású körülmények között azonban a jég nem egységes anyag, több különböző polimorf módosulata ismert (Anderson, 2005). Viszonylag kis nyomásértékeken, az egyfázisú, szilárd rendszer tartományában a Gibbs-féle fázisszabály értelmében  $Sz=2$  ( $K=1$  és  $F=1$ ,  $Sz=1-1+2$ ), a jégnek két szabadsági foka van, a rendszer *bivariáns*. Bizonyos határok között szabadon változtathatjuk a nyomást és a hőmérsékletet, a fázisok száma nem fog megváltozni (Anderson, 2005; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).



**90. ábra**

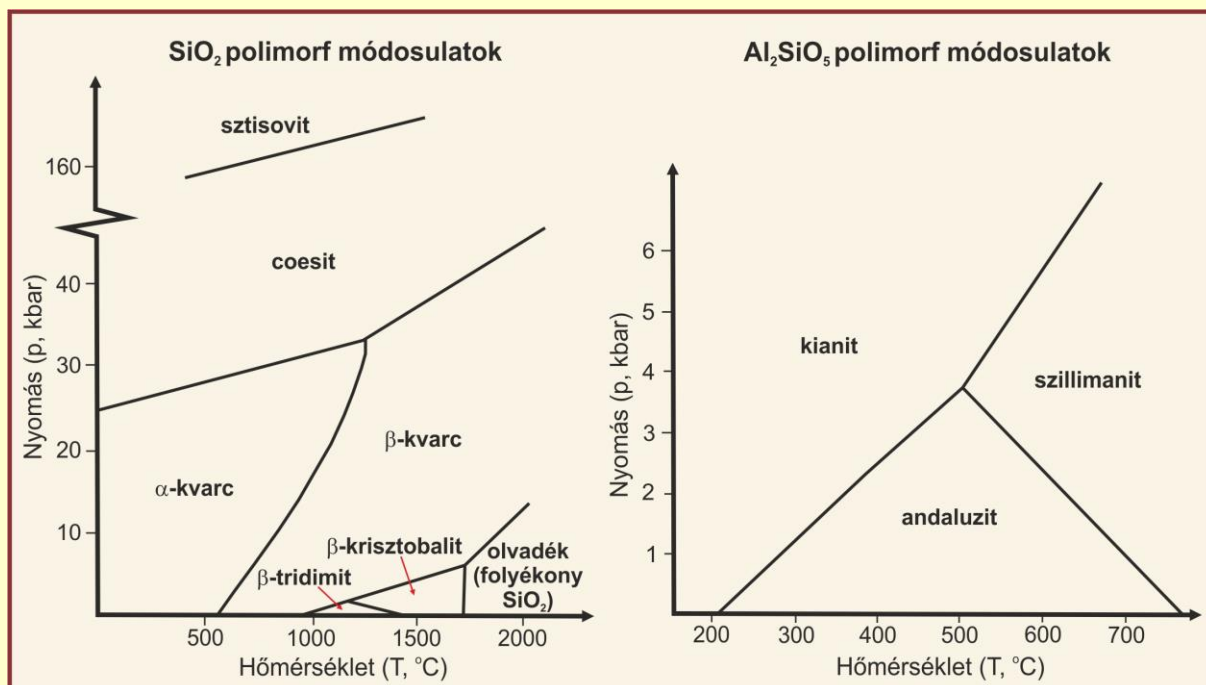
A víz fázisdiagramja viszonylag kis nyomásértékeken (balra) és nagynyomású körülmények között (jobbra) Anderson (2005) alapján, módosítva  
A víz fázisdiagramján az olvadási görbe negatív meredeksége csak ~2 kbar nyomás alatti tartományra terjed ki, ami megfelel a „közönséges” jég (jég I) és a víz egyensúlyának ( $1 \text{ kbar} = 10^3 \text{ bar} = 10^8 \text{ Pa}$ ).

Ha a rendszer hőmérsékletét állandó nyomás mellett megnöveljük, az olvadási görbét elérve a jég olvadni kezd, új fázis jelenik meg: a folyékony víz. Hasonlóan, ha jégből kiindulva állandó hőmérséklet mellett csökkentjük a rendszer nyomását, elérjük a szublimációs görbét (a jég telített gőzének a nyomását az adott hőmérsékleten), új fázis jelenik meg: a vízgőz. Mindkét esetben a fázishatáron két fázis lesz egyensúlyban egymással ( $K=1$ ,  $F=2$ ), ezért a szabadsági fokok száma lecsökken ( $Sz=1-2+2=1$ ), a rendszer *monovariáns* lesz (Anderson, 2005; Bárány et al., 2011). Amennyiben azt szeretnénk, hogy két fázis legyen egyszerre jelen a rendszerben, csak a hőmérsékletet, vagy csak a nyomást változtathatjuk meg

bizonyos határok között. Minden nyomáshoz csak egy olvadáspont, illetve minden hőmérsékletre csak egy tenzió tartozik. Az olvadási görbe a jég–víz, a szublimációs görbe a jég–vízgőz, a tenziógörbe pedig a víz–vízgőz kétfázisú rendszer összetartozó hőmérsékleti és nyomásértékeit köti össze. A tenziógörbe feletti tartományban a víz, az alatt a vízgőz a stabilis fázis (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014). A tenziógörbe a víz kritikus pontjában végződik. A víz kritikus hőmérséklete 374 °C, kritikus nyomása ~22 MPa (218 atm; Whitten et al., 2014).

A kétfázisú rendszereknek megfelelő görbék metszéspontja a víz hármaspontja (90. ábra). A jég, a víz és a vízgőz csak az ennek megfelelő hőmérsékleten és nyomáson lehet egymással egyensúlyban. A hármaspontban a szabadsági fokok száma nulla ( $K=1$  és  $F=3$ ,  $Sz=1-3+2=0$ ), tehát ez *invariáns* pont. A víz hármaspontjának hőmérséklete ~0,01 °C, nyomása 610,1 Pa (Anderson, 2005; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

A Föld egyik leggyakoribb kőzetalkotó ásványa a kvarc, ami a szilícium-dioxid egyik polimorf módosulata. Az  $\text{SiO}_2$  módosulatok, továbbá az átalakult (metamorf) kőzetek szempontjából lényeges alumínium-szilikát ( $\text{Al}_2\text{SiO}_5$ ) módosulatok szintén az egykomponensű rendszereket képviselik, ezek p–T diagramját a 91. ábra mutatja be.

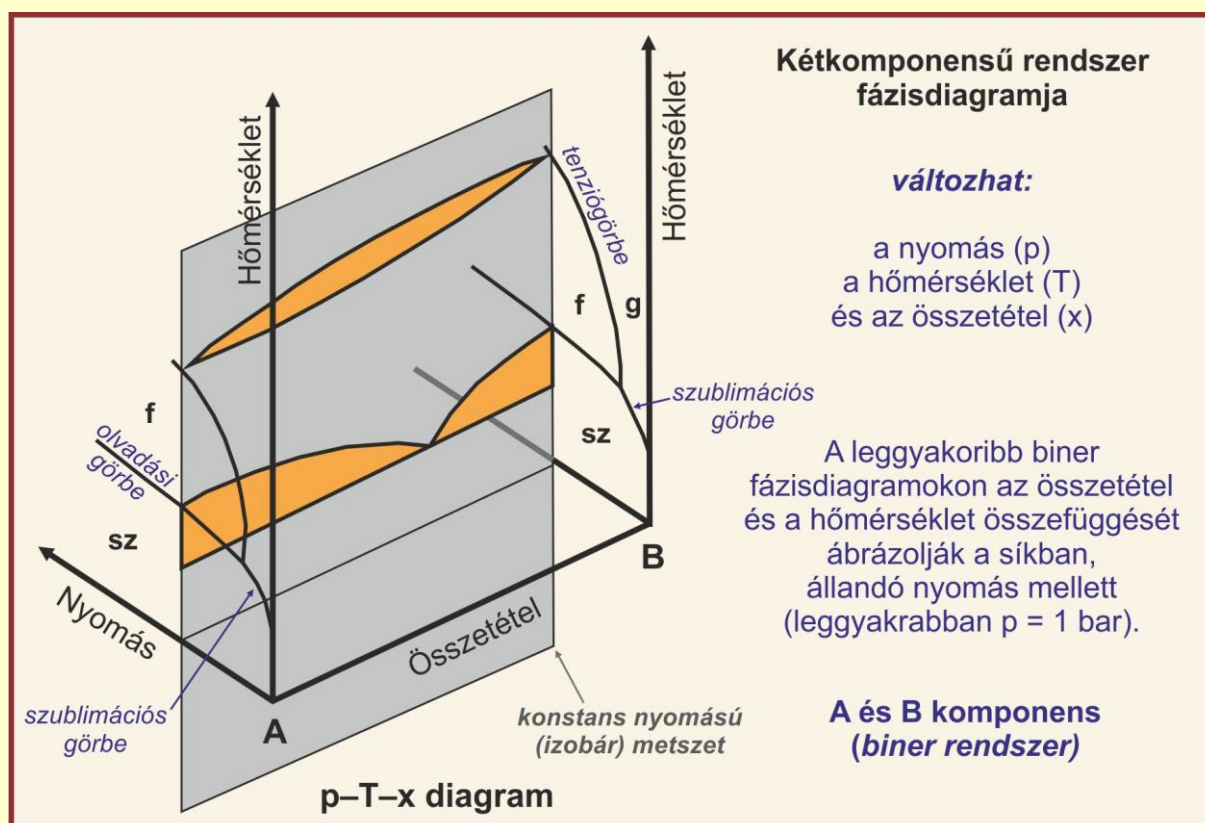


**91. ábra**

A szilícium-dioxid ( $\text{SiO}_2$ ) és az alumínium-szilikát ( $\text{Al}_2\text{SiO}_5$ ) polimorf módosulatainak p–T diagramja Anderson (2005) és Gill (2015) alapján, módosítva

A nagynyomású  $\text{SiO}_2$  módosulatokat (sztisovit, coesit) meteoritkráterekben azonosították a becsapódás hatásának termékeként (Koch, Sztrókay, 1994).

Amennyiben egy tiszta anyag vizsgálata helyett egy kétkomponensű, azaz **biner** rendszer fázisai közötti összefüggéseket szeretnénk meghatározni, a fázisdiagramhoz egy új dimenziót kell hozzárendelnünk. A nyomás és a hőmérséklet mellett az összetétel változását is külön tengelyen szükséges ábrázolnunk, azaz már térbeli fázisdiagramot kellene szerkesztenünk (92. ábra). A gyakorlatban kétkomponensű zárt rendszereknél is praktikusabb a síkban történő ábrázolás, ezért az összetétel változása mellett, vagy csak a nyomás, vagy csak a hőmérséklet változását célszerű tanulmányozni (Anderson, 2005). A természetben lejátszódó folyamatokra a nyomás változása általában nincs, vagy csak elhanyagolható mértékben van hatással. Ennek megfelelően a biner fázisdiagramokon leggyakoribb az összetétel hőmérsékletfüggésének bemutatása konstans nyomáson (Anderson, 2005; Bárány et al., 2011; Gill, 2015). A két elegyedő komponens (pl. „A” és „B” tiszta anyag) koncentrációjának függvényében az összetételt leggyakrabban móltörtben vagy tömeg%-ban (22. táblázat) adják meg a biner fázisdiagramokon. Mindkettőre találunk példát ebben a tankönyvben.



**92. ábra**

Egy hipotetikus kétkomponensű (biner) zárt rendszer nyomás ( $p$ ) – hőmérséklet ( $T$ ) – összetétel ( $x$ ) diagramja (Anderson, 2005, módosítva)

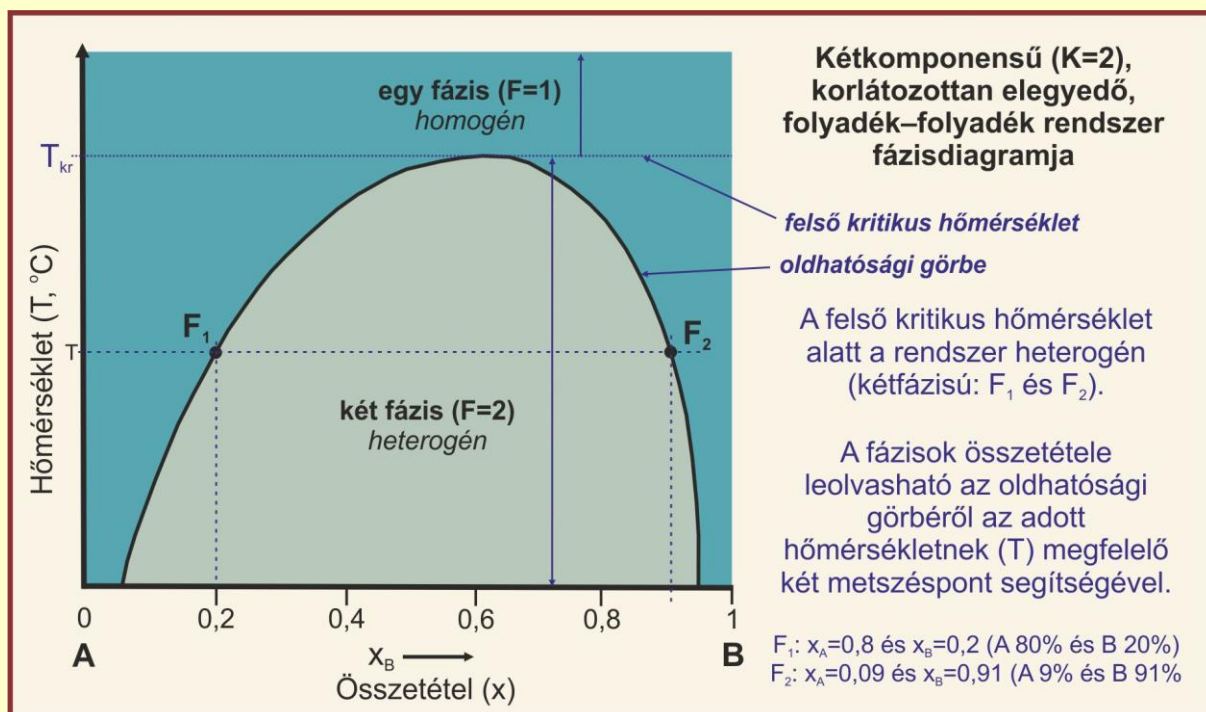
Rövidítések: sz = szilárd; f = folyadék; g = gáz/gőz.

Az elegyedés (oldódás) homogén (pl. gáz–gáz vagy folyadék–folyadék) és heterogén (pl. folyadék–gáz, folyadék–szilárd) rendszerekben egyaránt megtörténhet. A folyadékok egy része korlátlanul elegyedik egymással (pl. víz és alkohol), sok folyadék azonban csak korlátozottan elegyíthető (pl. víz és olaj). Ez azt jelenti, hogy adott hőmérsékleten az elegyítést követően kialakuló egyensúly beállta után a két folyadékból két olyan kétkomponensű folyadékfázis képződik, amelyekben mindkét összetevő egyaránt jelen van, de eltérő koncentrációban. Ezt a jelenséget nevezzük kölcsönös oldhatóságnak. Mivel az egymásban való oldódásnak határa van, ezért jelenik meg a két külön fázis (Bárány et al., 2011). Földtudományi szempontból kiemelt jelentőségűek a felszín alatti fluidumok (pl. felszín alatti víz, kőolaj, földgáz), amelyek szintén korlátozottan elegyedő rendszereket alkothatnak.

A kölcsönös oldhatóság folyamatának összetétel- és hőmérsékletfüggését az oldhatósági görbe segítségével ábrázolhatjuk a fázisdiagramban, ami az egyfázisú homogén és a kétfázisú heterogén területet választja el egymástól (93. ábra). Az oldhatósági görbéről leolvasható a rendszert alkotó két fázis ( $F_1$  és  $F_2$ ) összetétele egy adott hőmérsékleten. A korlátozott elegyedést mutató rendszerek fázisdiagramjában található egy (vagy két) nevezetes hőmérsékleti pont, az alsó és/vagy a felső kritikus elegyedési hőmérséklet ( $T_{kr}$ ), ami alatt (vagy felett) a rendszer homogén. Ez azt jelenti, hogy csak egy fázis található, mivel ezen a hőmérsékleten az elegyedés korlátlanul válik (Varsányi, 2009; Bárány et al., 2011).

A korlátozott elegyedés és a kölcsönös oldhatóság folyamatának megértése érdekében elemezzünk egy általános oldhatósági görbét, ami egy felső kritikus hőmérséklettel rendelkező, korlátozottan elegyedő, folyadék–folyadék rendszer fázisdiagramját mutatja be (93. ábra)! Legyen egy „A” folyadékunk, amelynek nagy mennyiségébe „B” komponenst keverünk. Az elegyedés során először a „B” komponens kis mennyisége még beoldódik az „A”-ba, a rendszer homogén marad (egy fázis). Bizonyos mennyiségű „B” anyag hozzáadását követően azonban kétfázisúvá válik a rendszer (heterogén). Ennek eredményeként két oldat alakul ki: az egyikben „A” az oldószer és „B” az oldott anyag ( $F_1$ ), a másikban fordítva, a „B” az oldószer és „A” az oldott anyag ( $F_2$ ). További „B” hozzáadását követően elérjük azt az állapotot, amikor „B” olyan feleslegben lesz, hogy abba az „A” folyadék még beoldódik; ismét kialakul a homogén, egyfázisú rendszer. A hőmérséklet növekedésével a két homogén oldat koncentrációja nő mindaddig, amíg — a felső kritikus elegyedési hőmérsékletet elérve — ki nem alakul a teljes összetételi

tartományban egyfázisú rendszer. Természetesen vannak olyan rendszerek is, ahol nem felső, hanem alsó kritikus pont van; sőt olyanok is, ahol mindkét pont megtalálható (Bárány et al., 2011).



**93. ábra**

Egy korlátozottan elegyedő biner folyadékrendszer  $x$ – $T$  diagramja állandó nyomáson

Az egykomponensű rendszerek fázisdiagramjánál láttuk, hogy alacsony hőmérsékleten a szilárd, magasabb hőmérsékleteken pedig a folyékony fázis módosulatai a stabilabbak. Ez az összefüggés a biner rendszerekre is érvényes, ahol azonban az összetétel változására szintén figyelemmel kell lennünk az olvadás során. A szilárd anyagok folyadékban (olvadékban) való oldhatóságának hőmérsékletfüggésére grafikusán a megfelelő fázisdiagramok olvadásgörbéi (fagyásgörbéi) adnak felvilágosítást (Bárány et al., 2011; Gill, 2015).

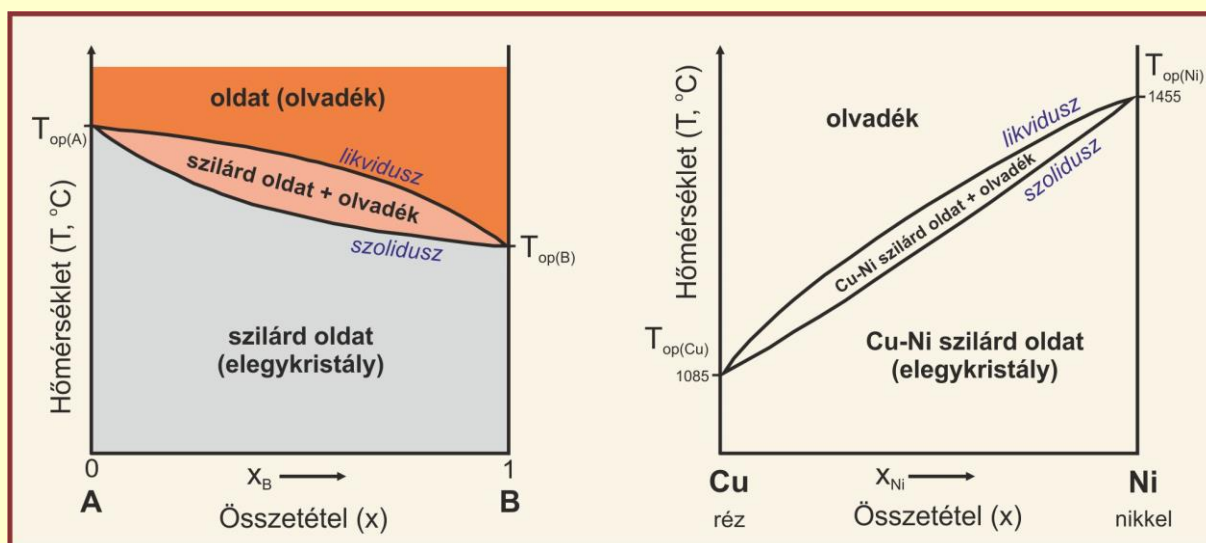
A kétkomponensű rendszerekben lehetséges szilárd–folyadék egyensúlyok legelterjedtebb osztályozásának alapja a két komponensnek és az esetlegesen keletkező új komponensnek (vegyületnek) az érintett fázison belüli oldhatósága. A leggyakoribb elegyedési típusok fázisdiagramjai a következők:

- egymást korlátlanul oldó, biner rendszer egyensúlyi diagramja (a két komponens olvadt és szilárd állapotban egyaránt korlátlanul elegyedik egymással, nem keletkezik új vegyület);

- egymást szilárd állapotban korlátozottan oldó, biner rendszer egyensúlyi diagramja (a két alkotó olvadt állapotban teljesen, szilárd állapotban korlátozottan elegyedik egymással, nem keletkezik új vegyület);
- egymást szilárd állapotban nem oldó, biner rendszer egyensúlyi diagramja (a két komponens olvadt állapotban teljesen, szilárd állapotban egyáltalán nem elegyedik egymással, nem keletkezik új vegyület);
- egymást szilárd állapotban korlátozottan oldó, vegyüetfázist tartalmazó biner rendszer egyensúlyi diagramja;
- egymást szilárd állapotban nem oldó, vegyüetfázist tartalmazó biner rendszer egyensúlyi diagramja (Atkins, 1992; Bárány et al., 2011; Gill, 2015).

A következőkben csupán két jellemző szilárd–folyadék fázisdiagramot kiragadva, a közöttan szempontjából kiemelt jelentőségű alaptípusok jellemzésére kerül sor.

Az egymást minden fázisban korlátlanul oldó biner egyensúlyi rendszerre (94. ábra) az a jellemző, hogy a komponenseknek szilárd állapotban azonos, vagy nagyon hasonló a kristályrácsuk. Elemek (ötvözetek) esetén közel azonos értékű az elektronegativitásuk, valamint az atomsugaruk is közel azonos (pl. az átmenetifémek közül a réz és a nikkell ötvözete). Ennek megfelelően kölcsönösen oldják egymást mind folyadék, mind szilárd halmazállapotban. Ha a komponensek korlátlanul beépülhetnek egymás kristályrácsába, akkor egyetlen szilárd fázis, a szilárd oldat keletkezik (Anderson, 2005; Varsányi, 2009; Bárány et al., 2011; Gill, 2015).



**94. ábra**

Egy egymást minden fázisban korlátlanul oldó, biner egyensúlyi rendszer hőmérséklet (T) – összetétel (x) diagramja állandó nyomáson (balra), valamint a Cu–Ni ötvözet fázisdiagramja (jobbra) Anderson (2005) és Bárány et al. (2011) alapján, módosítva

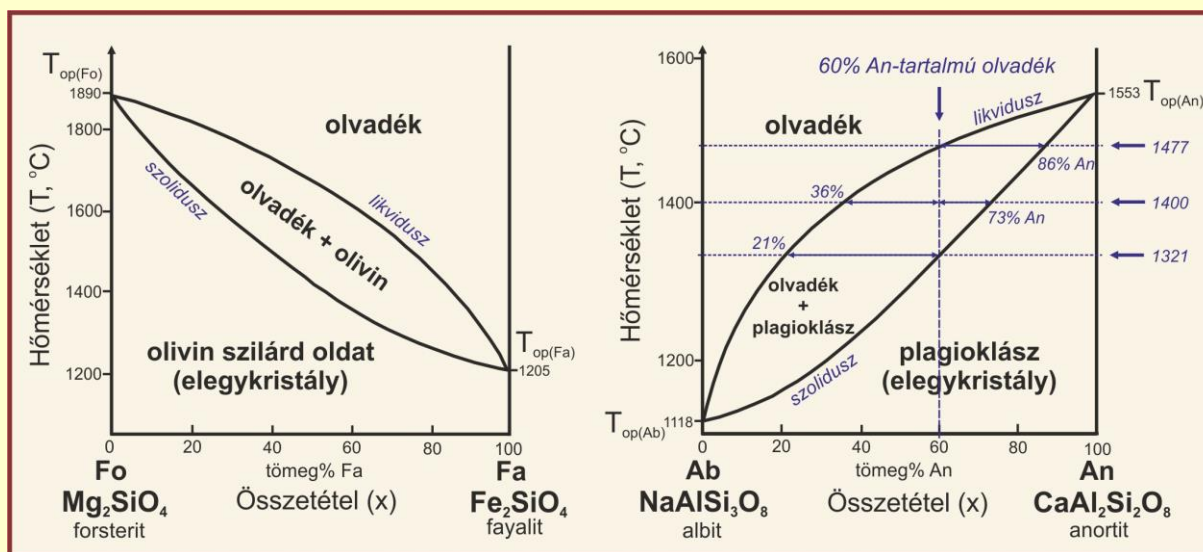
Az egyensúlyi rendszert leíró fázisdiagramon a görbék alatti terület a telítetlen szilárd oldatnak (egy fázis), a görbék feletti terület pedig a telítetlen folyékony elegyfázisnak (homogén oldatnak, olvadéknak) felel meg (94. ábra). A két görbe közötti terület a heterogén (kétfázisú) rendszer tartománya, ahol adott hőmérsékleten a „B” komponensre nézve telített folyadékfázis és az „A”-ra nézve telített szilárd fázis van egymással egyensúlyban (Bárány et al., 2011).

A felső görbe a **likvidusz**, ami egyrészt a rendszer olvadáspontját ( $T_{op}$ ) a folyadékfázis összetétele függvényében feltüntető görbe, másrészt a „B” anyag „A” anyagban való oldhatóságának hőmérsékletfüggését is ábrázolja. Az alsó görbe a **szolidusz**, ami az olvadáspont változását adja meg a szilárd fázis összetételének a függvényében. Figyeljük meg, hogy az elegykristály olvadáspontja a teljes összetételi tartományban a tiszta anyagok olvadáspontja között van (94. ábra)! A két görbe sehol sem érinti egymást, ezért az adott hőmérséklethez tartozó szilárd és folyékony (oldat vagy olvadék) fázis összetétele mindig eltér egymástól, és a folyadékfázis mindig többet tartalmaz a kisebb olvadáspontú (az általános ábrán a „B”) komponensből. Ennek megfelelően az adott hőmérsékleten egymással egyensúlyban lévő szilárd és folyadék fázis összetétele mindig eltérő, az olvadékból való megfelelő számú átkristályosítás révén a tiszta komponensek kinyerhetők. Ezt a folyamatot nevezzük frakcionált átkristályosításnak (Anderson, 2005; Atkins, 1992; Varsányi, 2009; Bárány et al., 2011; Gill, 2015).

Ásványtani és közettani szempontból kiemelt jelentőségű, hogy a különböző kationhelyettesítések következtében számos szilikátásvány szilárd oldatot, ásványtani értelemben **elegykristályt** képez (Anderson, 2005; Koch, Sztrókay, 1994; Gill, 2015). A legismertebb szilárd oldat az olivin, ami a *forsterit* ( $Mg_2SiO_4$ ) és a *fayalit* ( $Fe_2SiO_4$ ), továbbá a plagioklász földpát, ami az *albit* ( $NaAlSi_3O_8$ ) és az *anortit* ( $CaAl_2Si_2O_8$ ) szélsőtagok közötti elegykristály (95. ábra). A kiindulási olvadék összetételének függvényében a kikristályosodó ásvány összetétele változik. Az egyensúlyi kristályosodás során az olvadékfázis és a szilárd oldat összetétele leolvasható a fázisdiagramról. Nézzük meg ezt a plagioklász példáján!

Ha 60% anortitot (An) tartalmazó, 1600 °C hőmérsékletű olvadékot hűteni kezdünk, nem tapasztalunk változást addig, amíg 1477 °C-ra le nem hűl a rendszer (95. ábra). Ekkor megjelennek az első parányi plagioklász kristálycsírák, a kikristályosodó ásvány An-tartalma a szoliduszgörbe alapján 86%, albittartalma (Ab) 14%) lesz. Ideális esetben, tökéletesen egyensúlyi kristályosodáskor, ha

folyamatosan hűtjük a rendszert, a plagioklász kristályosodása is folyamatos lesz, de a korábban keletkezett kristályok összetétele mindig megváltozik az új egyensúlyi összetételnek megfelelően. Minden kristály összetétele azonos lesz, nem alakul ki összetételi különbség. 1400 °C-on a plagioklász 73% An-ot tartalmaz. Ha a szilárd fázis összetétele eléri a kiindulási olvadék összetételét (60% An, 1321 °C), az olvadék eltűnik, nem lesz további változás a plagioklász összetételében (Anderson, 2005; Gill, 2015).



### 95. ábra

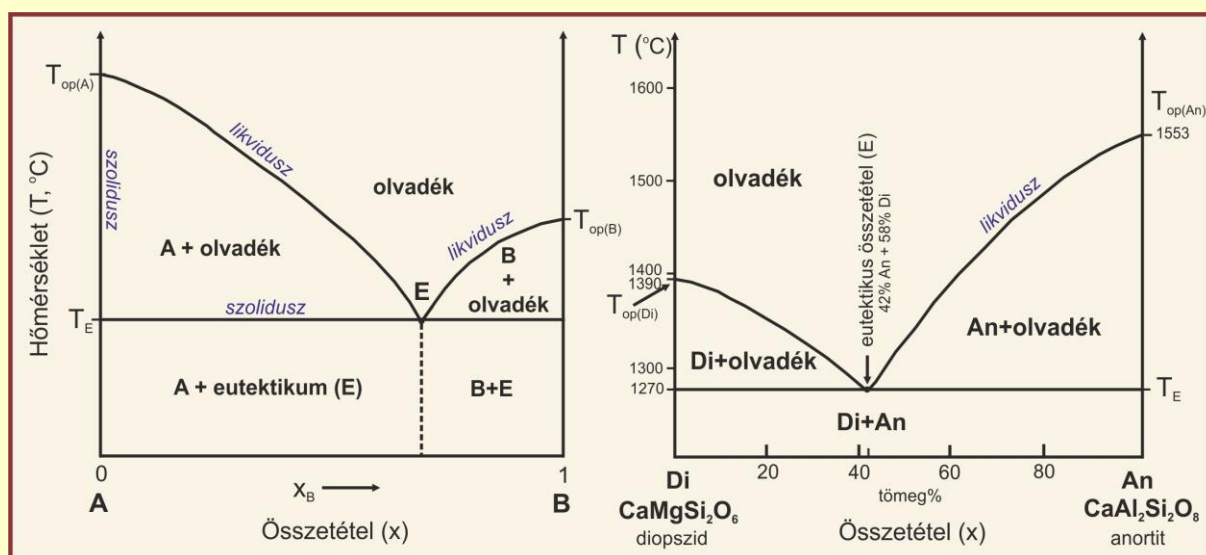
Az olivin (forsterit és fayalit) és a plagioklász (albit és anortit), mint biner szilárd oldat fázisdiagramja 1 bar nyomáson Anderson (2005) és Gill (2015) alapján  
Az adott hőmérsékleten egymással egyensúlyban lévő elegykristály és olvadék összetétele eltérő.

A természetes rendszerekben a kristályosodás többnyire nem elég lassú folyamat ahhoz, hogy a korábban megjelenő kristályok összetétele az új egyensúlyi állapotnak megfelelően módosuljon. Viszonylag gyors kristályosodáskor (pl. frakcionációs kristályosodás) csak a kristály felszínén változik meg az összetétel az új egyensúlynak megfelelően, a kristály belsejében nem. Ez azt eredményezi, hogy a plagioklász magja anortitban gazdagabb lesz, mint a pereme, amit albitdús plagioklász alkot. Egy kristályon belül tehát változik a kémiai összetétel (Ca-, Na-, Al- és Si-tartalom), koncentrációkülönbség alakul ki. Ezt az összetételi változást nevezik az ásványtanban zónásságnak (Anderson, 2005; Koch, Sztrókay, 1994; Gill, 2015).

Szilárd–olvadék egyensúlyoknál gyakran találkozunk olyan rendszerekkel, amelyekben vannak úgynevezett invariáns pontok ( $S_z=0$ ). Ezek olvadáspontja kisebb, mint bármelyik tiszta komponens („A” vagy „B” anyag) olvadáspontja. Ilyen

invariáns pont csak akkor keletkezik, ha a szilárd fázisban az elegyedés nem teljes, hanem korlátozott, vagy a komponensek között semmiféle elegyedés nincs. A létrejövő fázist **eutektikus elegy**nek vagy eutektikumnak (görög eredetű szó, jelentése „könnyen olvadó”), az invariáns pontot eutektikus pontnak (E) nevezzük (Anderson, 2005; Bárány et al., 2011; Gill, 2015).

Az eutektikus rendszerek egyensúlyi fázisdiagramja arra az állapotra jellemző, amelyben „B” komponens szilárd állapotban nem oldódik az „A” komponensben (és fordítva), viszont folyékony állapotban korlátlan az elegyedés közöttük (96. ábra). Ennek lehetséges oka, hogy az „A” és a „B” komponens különböző kristályszerkezetben kristályosodik (pl. a szilikátásványok közül a *diopszid* és az *anortit*), így nincs tökéletes oldódás a fázisok között, vagy a komponensek között fellépő taszító kölcsönhatás eredményezheti az elegyedés korlátját a szilárd fázisban (Anderson, 2005; Bárány et al., 2011; Gill, 2015).



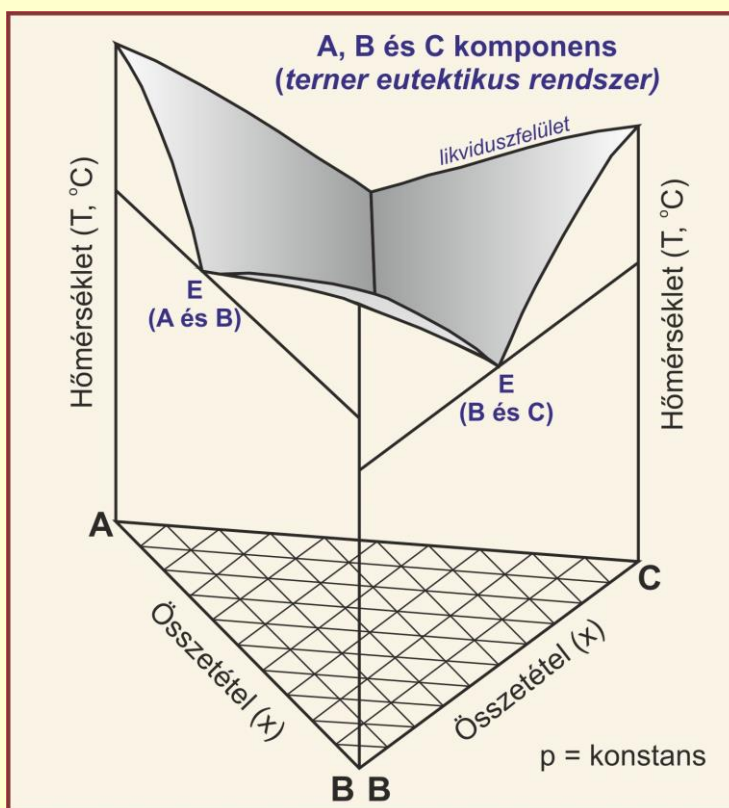
**96. ábra**

Egy eutektikus, biner egyensúlyi rendszer hőmérséklet (T) – összetétel (x) diagramja állandó nyomáson (balra), valamint a diopszid–anortit rendszer fázisdiagramja (jobbra) 1 bar nyomáson Anderson (2005) és Bárány et al. (2011) alapján, módosítva

Egy egyszerű, kétkomponensű rendszer olvadása során (ahol a két komponens nem képez elegykristályt vagy új vegyületet), az eutektikus pontnak megfelelő legalacsonyabb hőmérsékleten ( $T_E$ ) — bármely kiindulási kőzetösszetétel mellett — azonos összetételű olvadék keletkezik. A hőmérséklet növelésével azonban a keletkező olvadék összetétele a kiindulási összetétel irányába tolódik el. Megfelelően széles nyomás- és hőmérséklet-tartományban szilárd anyag és olvadék

egyszerre van jelen a rendszerben, melyek határa a diagramon a szolidusz és a likvidusz. Az ilyen biner rendszer fázisdiagramjának likvidusza rendszerint kétágú, szolidusza pedig vízszintes, ami a tiszta komponenseknek (pl. ötvözetek esetén a színfémeknek) megfelelő helyen függőleges vonallal záródik a likviduszgörbéhez (96. ábra). A likvidusz két ágának találkozásánál kialakuló eutektikum két részre bontja a diagramot. Az eutektikus összetételtől (E) balra a kristályosodás a folyadékfázisból mindig az „A” komponens kristályainak kiválásával kezdődik (A+olvadék); a „B” komponens csak az eutektikus kristályok egyik alkotójaként jelenik meg a dermedés befejeződésekor (A+eutektikum). Az eutektikus ponttól jobbra viszont a kristályosodás a „B” komponens kristályosodásával kezdődik (B+olvadék). A tiszta „A” komponens kristályai nem válnak ki a rendszerben, az kizárólag az eutektikus kristály egyik fázisaként jelenik meg (Koch, Sztrókay, 1994; Anderson, 2005; Varsányi, 2009; Bárány et al., 2011; Gill, 2015).

Tovább növekszik az elegyedési típusok száma, ha nem két, hanem három komponenst tartalmazó, úgynevezett **turner** rendszert vizsgálunk. Ekkor az összetétel hőmérsékletfüggő változása már csak a térben jeleníthető meg (97. ábra).



**97. ábra**

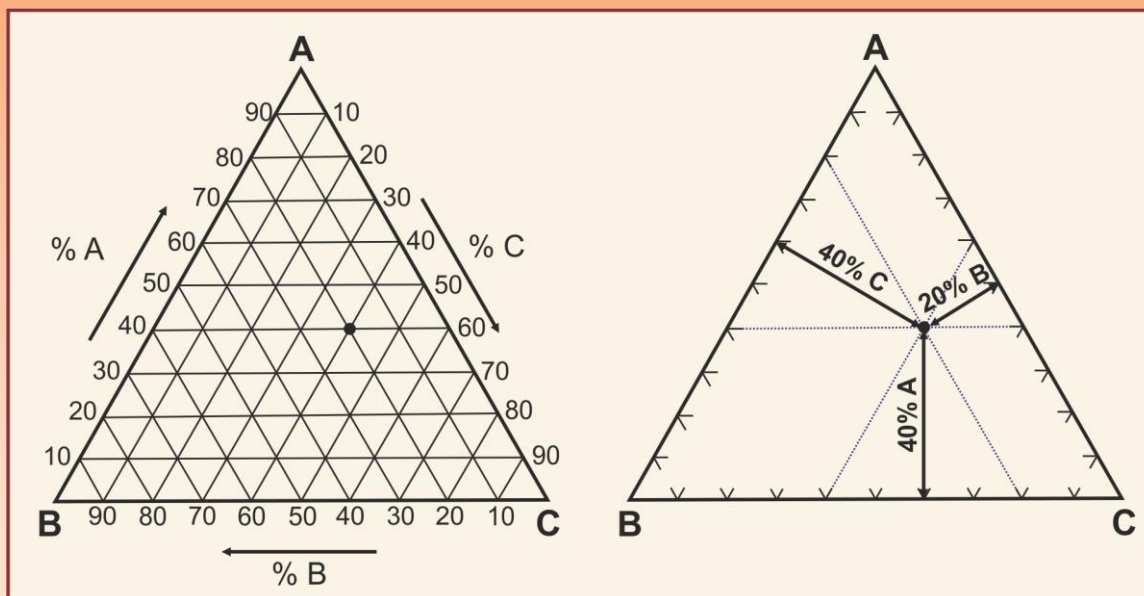
Egy hipotetikus turner eutektikus rendszer hőmérséklet (T) – összetétel (x) diagramja állandó nyomáson (Anderson, 2005, módosítva)

Bármely terner fázisdiagram alapját egy háromszögdiagram alkotja, amin a három komponens összetételét ábrázolhatjuk a síkban (Anderson, 2005; Gill, 2015). A rendszer olvadáspontját a terner folyadékfázis összetétele függvényében egy bonyolultabb felület, a likvidusfelület tükrözi (97. ábra). Az azonos hőmérsékletnek megfelelő görbék (izotermikus kontúrvonalak) segítségével — a domborzati térképek magasságot jelölő szintvonalaihoz hasonlóan — megszerkeszthető a likvidusfelület síkvetülete, amit politermális projekciónak neveznek (Anderson, 2005). Ennek ismertetése azonban meghaladja e könyv kereteit.

### **Jó tudni! Hogyan használjuk a háromszögdiagramot?**

Bármely terner rendszer összetételét állandó nyomáson és hőmérsékleten háromszögdiagramban ábrázolhatjuk. A leggyakrabban egyenlő oldalú háromszögből álló diagram minden egyes csúcsa az adott komponens 100%-os mennyiségének felel meg (pl. A csúcs: A=100%, B=0% és C=0%). Az oldalak pedig olyan biner rendszerek, ahol a harmadik komponens mennyisége 0% (pl. az A és B csúcsot összekötő oldalon A+B=100%, C=0%). A háromszögdiagram belsejében valódi terner rendszert képvisel az összetétel úgy, hogy a három komponens mennyiségének összege  $A+B+C=100\%$ . Egy adott pont összetétele úgy adható meg, hogy minden egyes komponensre meghatározzuk az összetételi pont távolságát ahhoz az oldalhoz viszonyítva, ami a kérdéses komponenst jelölő csúccsal szemben van (Anderson, 2005; Gill, 2015).

Az alábbi ábrán szereplő pont összetétele: 40% A, 20% B és 40% C komponens.

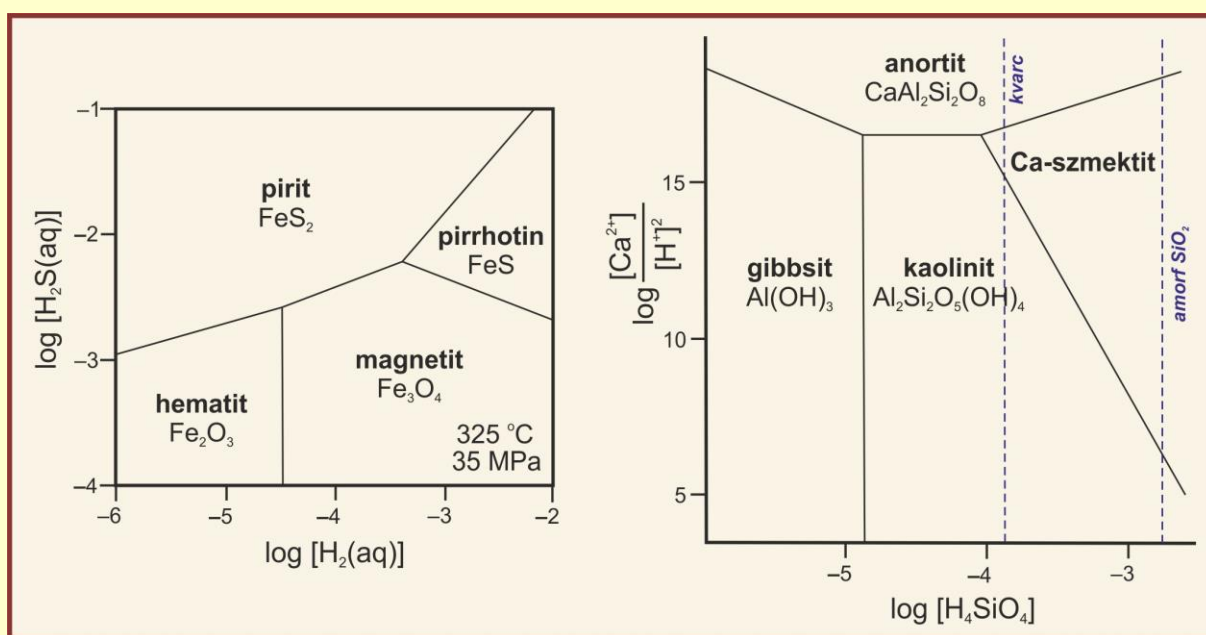


Figyeljünk arra, hogy ha az összetevők mennyisége nem százalékban van kifejezve, az ábrázolás előtt át kell számolnunk a mennyiségi arányokat az  $A+B+C=100\%$  véges összegnek megfelelően!

**Példafeladat:** Egy adott térfogatban 2 mol A, 1 mol B és 2 mol C anyag van. Ábrázoljuk a rendszer összetételét háromszögdiagramban!

**Megoldás:** A rendszer összmólszáma:  $2+1+2=5$ ; az egyes összetevők %-os aránya így A:  $2/5 \cdot 100=40\%$ ; B:  $1/5 \cdot 100=20\%$ ; C:  $2/5 \cdot 100=40\%$ , ami megfelel a diagramon szereplő pontnak.

A természetben a többkomponensű rendszerek jellemzőek, ezért könnyen belátható, hogy a földtudományi szempontból érdekes olvadási (pl. magmaképződés), illetve oldódási folyamatok jellemzéséhez bizonyos egyszerűsítések szükségesek. Amennyiben háromnál több összetevő egyensúlyi viszonyait szeretnénk megadni, az úgynevezett *aktivitási diagramok*at kell megszerkesztenünk. Ezek leggyakrabban ásványok stabilitási viszonyait jelzik egy kiválasztott nyomáson és hőmérsékleten (98. ábra). Az aktivitási diagramok tengelyein többnyire a vízben oldott komponensek aktivitását, vagy több komponens aktivitásának arányát ábrázolják logaritmikus skálán (Anderson, 2005; Appelo, Postma, 2009; Varsányi, 2009). Segítségükkel megadható, hogy melyik ásvány stabil az adott környezet bizonyos feltételei (pl. az oldat kémhatása, oldott oxigéngáz vagy kénhidrogén jelenléte, egyéb ionok hozzáférhetősége) mellett, illetve ezek megadott irányú változását figyelembe véve a lehetséges ásványátalakulásokat (pl. földpátok agyagásvánnyá alakulása a kémiai mállás során) tudjuk feltárni.



**98. ábra**

Jellegzetes aktivitási diagramok: ásványok stabilitási viszonyait jelzik kiválasztott, vízben oldott (aq) komponensek aktivitásának [a] függvényében állandó nyomáson és hőmérsékleten (Anderson, 2005 és Appelo, Postma, 2009, módosítva)  
 Balra: lehetséges vasásványok az oxigén, illetve a szulfidkén hozzáférhetőségének függvényében. A diagramon a  $[\text{H}_2\text{S}(\text{aq})]$  jelölés a vízben oldott kénhidrogén aktivitását jelenti. Jobbra: az anortit (plagioklász földpát) átalakulási lehetőségei attól függően, hogy a  $\text{Ca}^{2+}$ -ionok és az  $\text{SiO}_2$ -tartalom milyen mértékben szállítódik el a vizes rendszerből. Lehetséges mállástermékek: gibbsit (bauxitásvány), illetve agyagásványok (kaolinit, Ca-szeckit).

### 7.3. A kémiai reakciók sebessége: reakciókinetikai alapok

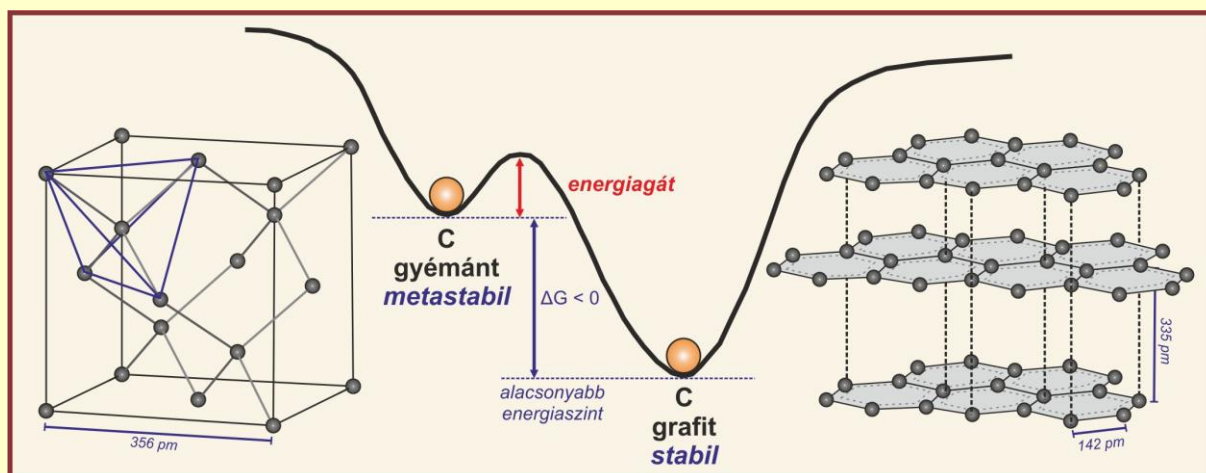
Az előző alfejezetekben megismert termodinamikai ismeretek segítségével el tudjuk dönteni, hogy egy kiválasztott reakció önként lejátszódhat-e adott körülmények között vagy nem; továbbá azt is, hogy a lejátszódása energia felszabadulásával vagy elnyelésével fog-e járni. Arra a kérdésre azonban eddig nem kaptunk választ, hogy az adott reakció milyen gyorsan fog végbemenni. Tapasztalati alapon kijelenthető, hogy a különböző típusú kémiai reakciók lejátszódásához általában eltérő mértékű időre van szükség. Ezt a reakciósebesség segítségével számszerűsíthetjük, ami nem más, mint a koncentráció vagy anyagmennyiség időegységre eső megváltozása (Anderson, 2005; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

Vannak olyan reakciók, amelyek gyorsan lejátszódnak, ilyen például a metán vagy a benzin égése. A kültéri vastárgyak rozsdásodása szintén önként végbemegy, bár ennek az átalakulásnak jóval kisebb a sebessége. Egy termodinamikailag spontán folyamat azonban nem biztos, hogy mérhető sebességgel meg is tud valósulni (Whitten et al., 2014). Erre kiváló földtudományi példa a gyémánt  $\rightarrow$  grafit átalakulás (99. ábra). Földfelszíni körülmények között a tiszta szén stabil módosulata a grafit. Nagy nyomáson és hőmérsékleten — mint amilyen körülmények a földkéreg alatti belső övet, a földköpenyt jellemzik — a grafit spontán módon gyémánttá alakul. Ha azonban tektonikus vagy magmás folyamatok révén a gyémánt a felszínre kerül, nem fog visszaalakulni grafittá (szerencsére), úgynevezett *metastabil* módosulatként lesz jelen (Anderson, 2005).

A kémiai folyamatok sebességének tanulmányozása és a reakciók mechanizmusának felderítése a *reakciókinetika* fő feladata. A legtöbb reakció összetett, azaz nem egyetlen lépés eredménye, hanem több egymás után vagy egymás mellett végbemenő egyszerű folyamat (reakciólépés) eredője. A reakció sebességét a leglassúbb reakciólépés fogja meghatározni (Bárány et al., 2011).

#### Megjegyzés:

A reakciósebesség intenzív, vagyis a reakcióelegy nagyságától független tulajdonság. Az időegységre eső változás kiemelésére a reakciósebesség jele többnyire megegyezik a sebesség jelével ( $v$ ), de angol nyelvű szakirodalomban gyakran találkozhatunk az  $r$  (*rate*) jelöléssel is (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).



### 99. ábra

Az elemi szén polimorf módosulatainak mechanikai analógiája a Föld felszínén: a grafit energiatartalma a legkisebb, ezért ez a stabil forma (Anderson, 2005, módosítva). A gyémánt energiaszintje magasabb, de a gyémánt → grafit átalakulás gátolt. A mechanikai analógián ezt a metastabil gyémánt és a stabil grafit között magasodó „hegy”, mint *energiagát* jelképezi.

Egy összetett kémiai reakció mechanizmusának feltárása során a reakció egyes részfolyamatait, illetve a fennálló egyensúlyokat kell meghatározni, továbbá az esetleg képződő közti termékeket szükséges megadni. A mechanizmus feltárásának első lépése a reakciókinetikai mérések elvégzése. Ezek elsődleges célja a kiválasztott folyamat sebességének megállapítása, illetve a reakció időbeli lefolyását leíró *bruttó sebességi egyenlet* megadása. Ehhez a reakció előrehaladása során — különböző időpillanatokban — meg kell határozni a reagáló anyagok és a termékek koncentrációját (Anderson, 2005; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

A reakciókinetikai kísérletek rámutattak arra, hogy a reakciósebesség több tényező függvénye: függ a kiindulási anyagok kémiai és fizikai tulajdonságától, koncentrációjától, a reagáló felület nagyságától, továbbá a hőmérséklettől (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014). Ez utóbbi alapvető jelentőségű a földtudományi folyamatokban, hiszen mind a magmás, mind a metamorf kőzetek kristályosodása a földfelszíni körülményektől jóval magasabb hőmérsékleten megy végbe (Anderson, 2005; Gill, 2015). Bizonyos anyagok, az úgynevezett **katalizátorok** képesek egy-egy reakció sebességét felgyorsítani, ezért ezek reakciókinetikai jellemzése szintén fontos feladat (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014). Ez az alfejezet a reakciókinetika legfontosabb alapfogalmait és a kémiai reakciók lejátszódásának kinetikai feltételeit ismerteti annak érdekében, hogy az alapvető földtudományi folyamatok lejátszódásának irányán túl (termodinamikai kontroll) az azok sebességét meghatározó tényezőket (kinetikai kontroll) is megértsük.

Nyilvánvaló, hogy a kémiai reakciók sebessége függ a reagáló anyagok jellegétől, a komponenseket összetartó kémiai kötések típusától és erősségétől. Az ionos kötések tartalmazó karbonátásványok közül például a kalcit ( $\text{CaCO}_3$ ) már hideg, híg sósav (HCl-oldat) hatására is hevesen pezsegni kezd, oldódik; a dolomit ( $\text{MgCa}[\text{CO}_3]_2$ ) viszont nem, azt csak a forró sósavoldat oldja szemmel látható mértékben (Koch, Sztrókay, 1994; Whitten et al., 2014). A terepi és a makroszkópos vizsgálatok során ezért ez a reakció felhasználható a két gyakori kőzetalkotó ásvány elkülönítésére. A kovalens jellegű kötések felszakításával járó kémiai reakciók (pl. földpátok oldódása) általában lassabban játszódnak le (Anderson, 2005; Appelo, Postma, 2009; Varsányi, 2009; Whitten et al., 2014).

A gyakorlatban egy kémiai reakciótól azt várjuk el, hogy „megfelelő” sebességgel menjen végbe, azaz se túl lassú, se túl gyors ne legyen. Az üzemanyagok (pl. benzin, gázolaj) szabályozott égése a belsőégésű motorokban ilyen folyamat. Az anyagok reaktivitása azonban — az anyagi minőségen túl — a fizikai tulajdonságoktól is függ. A cseppfolyós benzin (pl. egy kiöntött kis benzintócsa) viszonylag nyugodt, csendes módon elégethető. A benzingőz begyulladása azonban akár robbanásszerű hevességgel is lejátszódhat. Az elemi foszfor allotróp módosulatai közül a fehérfoszfor gyúlékony (**12. táblázat**), a levegő oxigéntartalmával érintkezve gyorsan felizzik és elég, ezért víz alatt szokás tárolni. A vörösfoszfor azonban kevésbé reakcióképes, ezért nyitott edényben is hosszabb ideig eltartható számottevő átalakulás nélkül (Whitten et al., 2014).

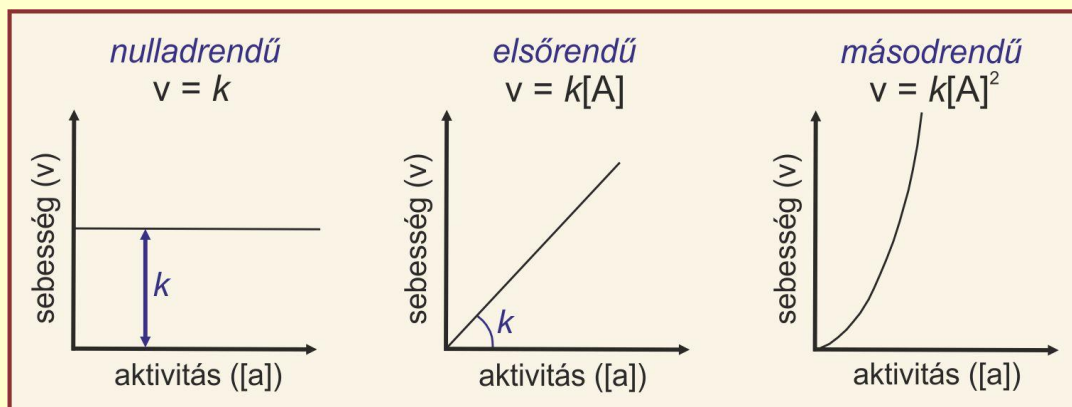
A reakciósebességet a reagáló felület nagysága szintén befolyásolja. Minél nagyobb a reagáló felület, időegység alatt annál több kiindulási anyag tud részt venni a reakcióban. Ha híg sósavoldatba teszünk egy darab mészkövet (> 90% kalcium-karbonátból álló üledékes kőzet), az pezsegni kezd, mert szén-dioxid fejlődése közben lassan feloldódik. Amennyiben azonban előzőleg elporítjuk, és a mészkőport tesszük a híg sósavoldatba, az oldat felhabzik a hirtelen gázfelszabadulástól, az oldódás sokkal hevesebben játszódik le. A kisebb szemcseméret miatti nagyobb reagáló felület okozza az úgynevezett szénporrobbanást is. A fosszilis energiahordozók közé tartozó szénkőzetek éghető anyagok, a kitermelt kőszén azonban önmagától nem gyullad meg, a levegővel érintkezve szállítható, tárolható. A kőszénbányákban keletkező lebegő szénpor viszont — egy bizonyos mennyiség fölött — a levegővel robbanóképes keveréket alkothat. E két példa rámutat arra, hogy a határfelület nagysága, illetve az anyag felosztásának mértéke lényegesen

befolyásolja a reakciósebességet. Különösen heterogén reakcióknál, ahol több fázis van jelen, lényeges ez a hatás, hiszen a reakcióban részt vevő komponensek (pl. szilárd  $\text{CaCO}_3$  és oldott  $\text{H}^+$ , illetve szilárd szénvegyületek és oxigéngáz) a fázishatárokon érintkezve vagy azon átlépve (pl. korlátozottan elegyedő folyadékoknál) vehetnek részt az adott folyamatban. A nagyobb határfelület nagyobb sebességet eredményez, ami mechanikai tényezők hatására (pl. keverés vagy áramoltatás) tovább fokozható (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

A reakciósebesség koncentrációfüggése kísérletileg meghatározható minden egyes kémiai reakcióra. Tapasztalati alapon megállapították, hogy bizonyos reakcióknál, ha a kiindulási anyagok egyikének koncentrációját a duplájára növelték, a kezdeti reakciósebesség is a duplájára nőtt. Ha viszont mindkét reaktáns koncentrációját megduplázták, a reakciósebesség megnégyszereződött. Ez egyértelműen jelzi, hogy a reakciósebesség arányos a reaktánsok koncentrációjával. A kémiai egyensúly tárgyalásakor láttuk (7.2. alfejezet), hogy egy általános egyensúlyi reakcióra a reakciósebesség a  $v = k[\text{A}]^x[\text{B}]^y$  sebességi egyenlet segítségével fejezhető ki, ahol a  $k$  arányossági tényező a reakciósebességi állandó, „A” és „B” a reaktánsok. A bruttó sebességi egyenletet azonban nem lehet a rendezett sztöchiometriai egyenletből levezetni. Két különböző reakció eltérő sebességgel játszódik le még akkor is, ha a kiindulási anyagok koncentrációja azonos, tehát a  $k$  értéke reakciónként különböző, azt kísérletileg kell meghatározni. A reakciósebességi állandó értéke független a koncentrációtól, viszont függ a hőmérséklettől (Varsányi, 2009; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

A tömegmegmaradás törvénye alapján a reakcióban résztvevő anyagok teljes mennyisége zárt rendszerben állandó ugyan, de az egyes komponensek koncentrációja a folyamat előrehaladtával változik. Van olyan reakció, amely sebessége a  $v = k[\text{A}][\text{B}]$  alakban írható fel, azaz a reakciósebesség mind a két reaktáns első hatványával arányos ( $x=1$  és  $y=1$  az általános egyenletben). A komponensek hatványkitevője kitüntetett szerepet kap a reakciókinetikában. Az adott komponens koncentrációjának (aktivitásának) hatványkitevője a sebességi egyenletben megadja az adott komponensre vonatkozó **reakciórendet** (vagy egyszerűen a reaktáns rendjét). A példában a reakciósebesség mind az „A”, mind a „B” komponens aktivitásával egyenesen arányos, azaz mindkét összetevőre nézve **elsőrendű** a reakció. A teljes reakciórendet, azaz a reakció bruttó rendjét a reaktánsok rendjének összege ( $x + y$  az általános egyenletben) adja meg (Varsányi,

2009; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014), tehát a példareakció *másodrendű* ( $1+1=2$ ). A reaktánsok rendjét jelző  $x$  és  $y$  értéke általában kis egész szám, vagy nulla (**100. ábra**). Egyes esetekben azonban törtszám, vagy akár negatív szám is lehet (Whitten et al., 2014).

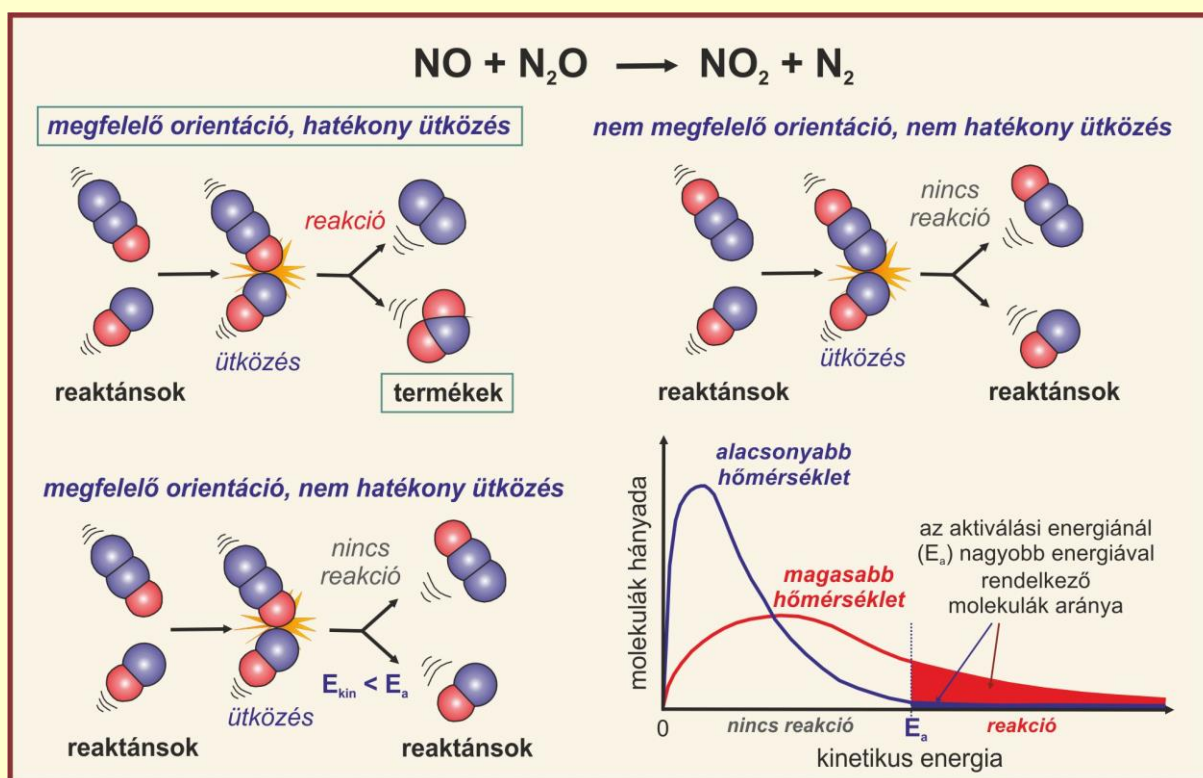


**100. ábra**

A reakciósebesség koncentrációfüggése különböző rendű reakciókban a  $v = k[A]^x[B]^y$  alakú bruttó sebességi egyenlet alapján (Varsányi, 2009, módosítva)

A reakció bruttó rendje a reaktánsok rendjének összege ( $x + y$  az általános egyenletben). A nulladrendű reakció sebessége független a koncentrációtól ( $x=0$  és  $y=0$ ); az elsőrendű reakció sebessége egyetlen anyag aktivitásával egyenesen arányos ( $x=1$  és  $y=0$ ); a másodrendű reakció sebessége egy komponens aktivitásának négyzetével ( $x=2$  és  $y=0$ ), vagy két komponens aktivitásának szorzatával arányos ( $v = k[A][B]$ ;  $x=1$  és  $y=1$ ).

A reakciósebességet meghatározó legfontosabb tényezők áttekintését követően most nézzük meg, hogy miért lesz az egyes reakciók sebességében lényeges eltérés! A reakciósebesség elméleti hátterének alapjait könnyen megérthetjük az *ütközési elmélet* ismeretében (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014). Amennyiben egy elemi, gázfázisú, bimolekuláris reakcióból indulunk ki, a reakció alapfeltétele, hogy a reaktánsok összeütközzenek egymással. Minél nagyobb a koncentrációjuk, annál nagyobb az időegység alatt bekövetkező ütközések száma. Nem minden ütközés vezet el azonban a reakció lejátszódásához, azaz nem minden ütközés lesz hatékony (**101. ábra**). Ahhoz, hogy egy ütközés tényleges reakciót eredményezzen, a reaktánsoknak egyrészt rendelkezniük kell azzal a minimális energiával, ami az elektronszerkezet átrendeződéséhez szükséges. Másrészt az ütközés pillanatában megfelelő orientációban kell érintkezniük. Ez a két tényező alapvető ahhoz, hogy a folyamatban a meglévő kötések felszakadhassanak, majd újak alakulhassanak ki. Az átlagos kinetikus energia viszont arányos az abszolút hőmérséklettel, ezért magasabb hőmérsékleten több molekula rendelkezik a reakció lejátszódásához szükséges energiával (Whitten et al., 2014).



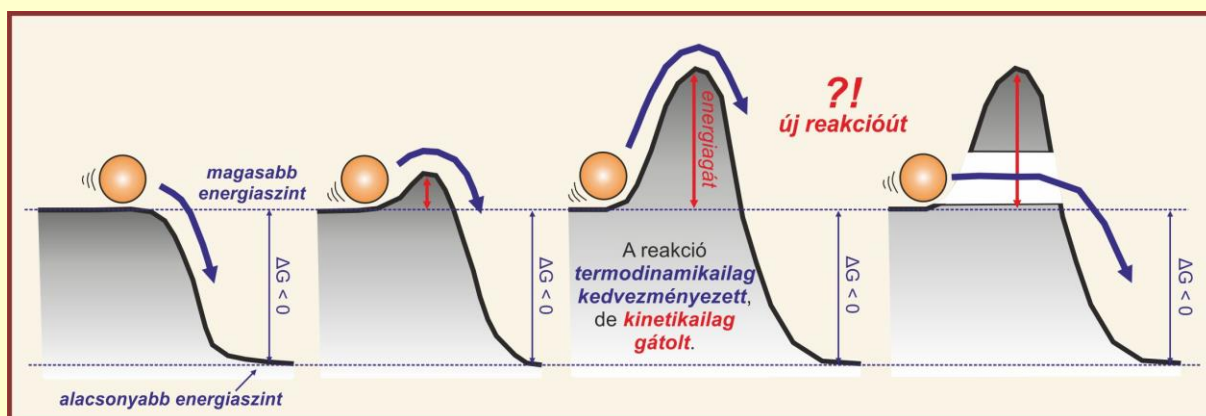
**101. ábra**

Az ütközési elmélet szemléltetése egy bimolekuláris, gázfázisú reakció segítségével: a sikeres reakcióhoz az elegendő energiával rendelkező molekuláknak megfelelő orientációban kell ütközniük (Whitten et al., 2014; Gill, 2015, módosítva)  
A nitrogén-monoxid és a dinitrogén-monoxid megfelelő körülmények között nitrogén-dioxiddá és elemi nitrogénné alakul a légkörben.

A nagyobb energiájú — ezért reakcióra már képes — „molekulát” **aktivált komplexnek** vagy átmeneti állapotú komplexnek nevezzük (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014; Gill, 2015). A létrejöttéhez szükséges minimális energia az **aktiválási energia** (jele:  $E_a$ ), ami a reaktánsok termikus energiájából származik. A hatékony ütközés egyik feltétele tehát az, hogy a molekulák rendelkezzenek a szükséges aktiválási energiával (**101. ábra**). Ez az energia ahhoz kell, hogy a kötés felszakadhasson, vagy pedig ahhoz, hogy a reakcióban résztvevő molekulák megfelelő mértékben megközelíthessék egymást. Magasabb hőmérsékleten a reaktánsok átlagos kinetikus energiája is nagyobb, ezért több molekula rendelkezik az aktiválási energiánál nagyobb energiával, ami növeli a hatékony ütközések számát (Atkins, 1992; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

Az aktiválási energiát, mint a kémiai reakciók lejátszódásának kinetikai feltételét mechanikai analógia segítségével is megközelíthetjük. Egy lejtő eltérő tengerszint feletti magasságú felső és alsó része megfeleltethető a kémiai reakció

kiindulási és végállapotát jellemző energiaszintnek (102. ábra). Egy golyót nagyon gyorsan le tudunk gurítani a lejtőn. Ha azonban a lejtő előtt egy kis domb magasodik, már nagyobb energiát kell befektetnünk a golyó legurításához. Minél nagyobb ez a gát, annál nehezebb lesz ezen keresztül áthelyezni a golyót, míg végül már nem tudjuk megvalósítani a célunkat. A golyó áthelyezéséhez új utat (pl. egy alagutat) kell választanunk. Lefordítva ezt a kinetika nyelvére: abban az esetben, ha az aktiválási energia nagyon kicsi, a reakció nagyon gyorsan lejátszódhat (pl. a kis ionizációs energiájú alkálifémek reakciója vízzel), hasonlóan a sík terepről a lejtőn legurított golyóhoz. Minél nagyobb energia szükséges azonban a reaktánsok aktiválásához, annál nehezebben játszódhat le a reakció. Ha valamely reakció aktiválási energiája olyan nagy, hogy a molekulák termikus energiája nem elegendő az aktiváláshoz, akkor az adott reakció nem fog lejátszódni (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).



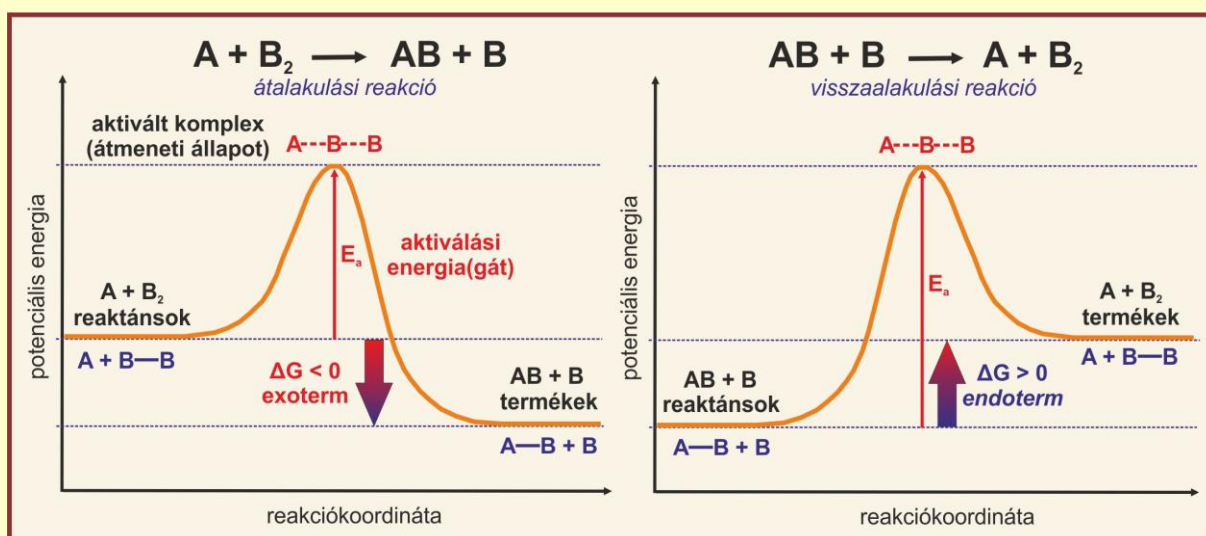
**102. ábra**

Az aktiválási energia, mint energiaszint mechanikai analógiája

Ha nagyon nagy az aktiválási energia, az adott reakció nem játszódik le (kinetikailag gátolt). A termékek előállításához egy új reakcióút feltételeit kell megteremteni (pl. katalizátor alkalmazása).

A kémiai reakciók során új kötések jönnek létre, illetve kötések szakadnak fel. A kémiai kötésekhez kapcsolódó energia viszont a potenciális energia egyik fajtája, ezért a kémiai reakció értelemszerűen a potenciális energia megváltozásával jár (Whitten et al., 2014). Nézzük meg, hogy az aktiválási energia hogyan jellemezhető a potenciális energia megváltozásának segítségével! Ehhez tekintsünk egy általános, egylépéses reakciót (103. ábra)! Az átalakulási reakcióban „A” és „B<sub>2</sub>” anyag a reaktánsok, „AB” és „B” pedig a termékek. A termékek energiaszintje kisebb, tehát az átalakulás exoterm folyamat. Az *aktivált komplex* (vagy *átmeneti állapot*) *elmélet* szerint a megfelelő orientációjú és elegendő energiájú ütközést követően a

reaktánsok egy rövid élettartamú, a reaktánsok és a termékek közötti átmeneti állapotot képviselő komplexen keresztül alakulnak át a termékekké. Ez az aktivált komplex, amelyben egyszerre vannak jelen a régi, felszakadó, valamint az új, kialakuló kötések. Ennek megfelelően az aktiválási energia nem más, mint a potenciális energiának az a része, ami az átmeneti állapot eléréséhez szükséges (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014; Gill, 2015). Bizonyos lassú, vagy kinetikailag gátolt reakciók aktiválási energiája lecsökkenthető úgy, ha katalizátort adunk a reakcióelegyhez (Whitten et al., 2014).



**103. ábra**

A potenciális energia megváltozása egy egy lépéses, egyszerű reakció előrehaladása (az úgynevezett *reakciókoordináta*) során (Whitten et al., 2014, módosítva)  
Figyeljük meg, hogy az átalakulási és a visszaalakulási folyamatot eltérő nagyságú energia aktiválja!

### Megjegyzés:

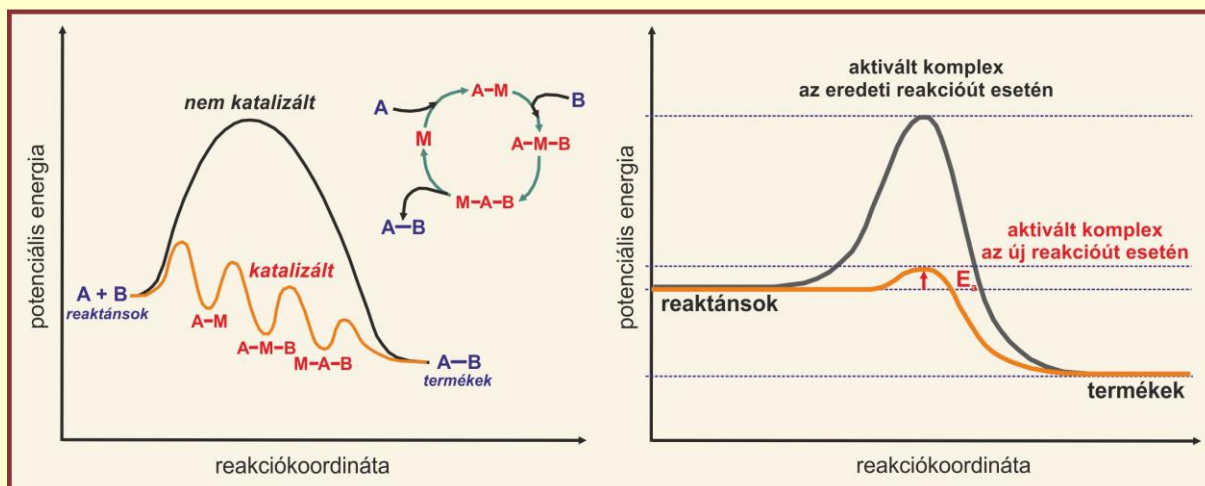
Általános tapasztalat, hogy a reakciók sebessége nő, ha a hőmérsékletet növeljük. Arrhenius kísérleti vizsgálatok alapján megállapította, hogy az egyszerű reakciók sebessége és a hőmérséklet között az alábbi összefüggés érvényes:

$$\ln k = \ln A - E_a/RT, \text{ ahol}$$

$k$ : a reakciósebességi állandó;  $A$ : pre-exponenciális tényező (állandó), a részecskék ütközési gyakoriságának a mértéke;  $E_a$ : az aktiválási energia;  $R$ : az egyetemes gázállandó (6.3. alfejezet) és  $T$ : az abszolút hőmérséklet.

Az Arrhenius-egyenlet alapján a reakciósebességi állandó nő a hőmérséklettel, és igen nagy hőmérsékleten a  $k$  értéke  $A$ -hoz közelít. A legtöbb reakciónál már viszonylag kis hőmérsékleten észlelhetjük a folyamat lejátszódását, ezért közelítőleg exponenciális mértékű a reakciók sebességnövekedése a hőmérséklet növekedésének hatására (Atkins, 1992; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

A katalizátorok olyan anyagok, amelyek képesek a reakciósebességet megnövelni — és a reakciót egy meghatározott irányba vezetni — anélkül, hogy a reakció termékében megjelennének. Ezt úgy érik el, hogy kisebb aktiválási energiájú, alternatív reakcióutat biztosítanak (104. ábra). A katalizált reakciók általában összetett folyamatok, amelyek több egymást követő lépésből állnak. A katalizátorok a reakcióban „látszólag” nem vesznek részt, ezért a reakció lejátszódása után változatlanul visszanyerhetők (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).



**104. ábra**

A katalizátor hatása a reakciósebességre: a katalizátor kisebb aktiválási energiájú, alternatív reakcióutat nyit meg (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014, módosítva)

Példareakció: „A” és „B” reaktsók, „M” katalizátor, „A-B” termék; a katalizátor a reakciópartnerekkel átmeneti komplexet képez, ezáltal megváltoztatja a reakció mechanizmusát.

A katalizált reakcióknak két nagy típusát különböztetjük meg: a homogén és a heterogén katalízist. **Homogén katalízis**kor a katalizátor ugyanabban a fázisban van, mint a reakciórendszer. Az észterek savkatalizált hidrolízise homogén katalitikus folyamat, amely során például az etil-acetát erős sav jelenlétében vízzel reakcióba lépve ecetsavvá és etil-alkohollá alakítható (3.2. alfejezet). Biológiai szempontból alapvető jelentősége van az élő szervezetekben található fehérjéknek, amelyek jelentős része enzim. Az enzimek által katalizált biokémiai folyamatok szintén homogén katalitikus módon játszódnak le (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

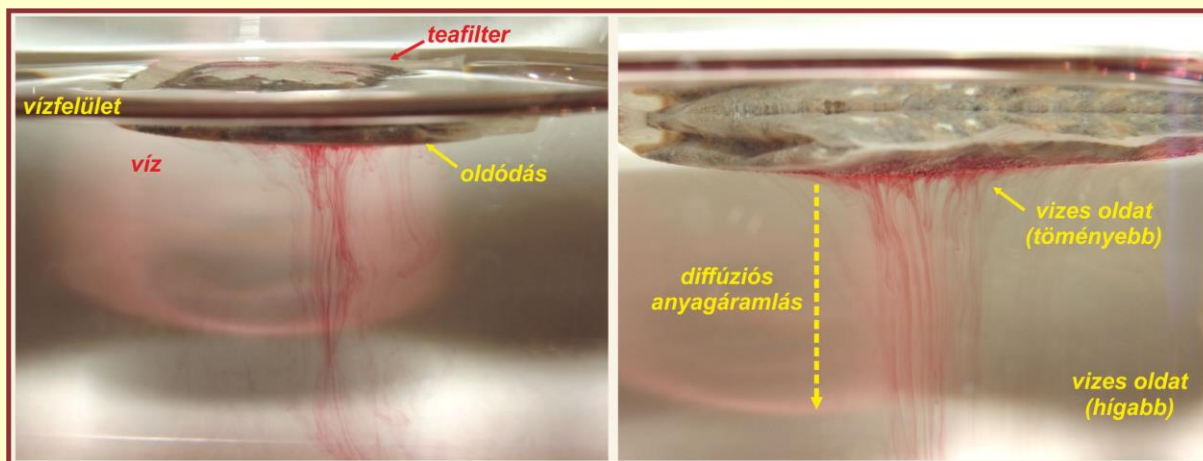
#### **Megjegyzés:**

Abban az esetben, ha egy reakció megvalósulását gátolni szeretnénk, „negatív” katalizátorra van szükségünk. Ezek az anyagok az úgynevezett *inhibitorok*, amelyek segítségével lassíthatók, illetve befagyaszthatók a reakciók (Bárány et al., 2011).

**Heterogén** (vagy kontakt) **katalízis**kor a katalizátor és a reagáló anyagok egymással érintkező, de különböző fázisokban vannak. Ebben az esetben a szilárd katalizátor felületén folyadékok vagy gázok reakciója megy végbe (pl. ammóniagyártás, kénsavgyártás). A katalitikus reakció első lépése általában az **adszorpció** (8.1. alfejezet), amely során a reaktánsok megkötődnek a katalizátor (pl. fémek, fém-oxidok, fém-szulfidok stb.) felületén. Ezt követően a folyamat elemi lépései a szilárd felületen játszódnak le, amelyet a befejező lépés során hagynak el a termékek (Atkins, 1992; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014). Az átmenetifémek közül a platina (Pt), a palládium (Pd) és a nikkel (Ni; oxidos formában) gyakran alkalmazott, kiváló katalizátorok (Whitten et al., 2014).

A heterogén katalitikus folyamatok egyik meghatározó részlépése a reaktánsok oda-, illetve a termékek elszállítása. Ezt az anyagtranszportot alapvetően a **diffúzió** szabályozza, ami bármely halmazállapotban lejátszódhat (Bárány et al., 2011). A diffúzió az anyagot felépítő részecskék (pl. atomok, molekulák, ionok) hőmozgás (Brown-mozgás) következtében kialakult, önálló mozgását jelenti gázokban (pl. szagok terjedése), folyadékokban (105. ábra) és szilárd anyagokban. Valamely anyagi rendszerben a különböző koncentrációjú vagy sűrűségű részecskék kölcsönös mozgását értjük alatta mindaddig, amíg a különbség ki nem egyenlítődik. A diffúziós anyagáramot tehát nem külső hatás (pl. légáramlat) hozza létre, hanem önként indul be az inhomogén fázisban. A diffúzió a nagyobb koncentrációjú helyekről a kisebb koncentrációjú helyek felé irányul; továbbá a komponensek homogén eloszlását eredményezi. A mozgás sebessége a koncentráció-különbséggel arányos, valamint — a reakciósebességhez hasonlóan — hőmérsékletfüggő folyamat. Ha elegendően hosszú idő áll rendelkezésre, az anyag részecskéi minden irányba egyforma valószínűséggel diffundálnak. Az egyensúly elérését követően a diffúziós áramlás megszűnik (Bárány et al., 2011; Gill, 2015).

Gázokban a diffúzió mértéke nagyságrendekkel nagyobb, mint folyékony vagy szilárd közegben. Ez érthető, ha meggondoljuk, hogy az anyag részecskéinek helyváltoztatását akadályozzák az adott részecske és a szomszédok közötti kötőerők, kölcsönhatások. Mindezek annál jobban gátolják a mozgást, minél jobban közelítünk a gázhalmazállapottól a folyékony, illetve a szilárd halmazállapotú közeg felé. Szilárd fázisban az ugyanolyan mértékű diffúzió hosszabb ideig tart, mint folyadékban vagy gázban, hiszen a kristályos, rendezett szerkezetű anyagban sokkal korlátozottabb a diffundáló részecskék helyváltoztatása (Bárány et al., 2011).

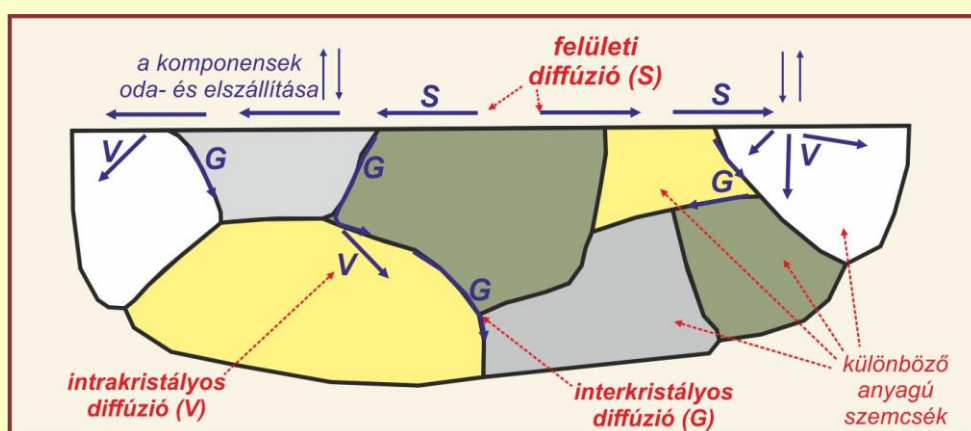


**105. ábra**

A diffúzió megfigyelése folyadékban: a víz felszínére helyezett teafilterből a kioldódó festékanyag fokozatosan a folyadékba diffundál

A folyamat addig tart, amíg az oldott komponensek koncentrációja homogén nem lesz.

A földtudományokon belül valamennyi fázisban szerepet kap a diffúziós anyagtranszport, legyen szó légköri folyamatokról, felszíni vagy felszín alatti vizek inhomogén koncentráció-eloszlásáról, vagy az ásványokban, kőzetekben rejlő kémiai inhomogenitások kiegyenlítéséről (pl. szilárd fázisú metamorf ásványreakciók; hidrotermális átalakulási folyamatok). A legtöbb kristályos anyag nem egyetlen kristály, hanem polikristályos aggregátum, amelyben a diffúzió két különböző módon mehet végbe (**106. ábra**). Egyrészt az egyedi kristályokon, szemcséken belül, ez a térfogati (vagy intrakristályos; *volume diffusion*) diffúzió; másrészt a kristályhatárok, határfelületek mentén (szemcsehatármenti vagy interkristályos diffúzió; *grain-boundary diffusion*). Ez utóbbi gyorsabb anyagtranszportot biztosít (Gill, 2015).



**106. ábra**

A térfogati (V, *volume*) és a határfelületi diffúzió szilárd anyagokban (Varsányi, 2009)  
A szilárd anyag külső határfelületén felületi diffúzió (S, *surface*) játszódik le, a szilárd anyagon belül a szemcsehatárok mentén zajlik az interkristályos (G, *grain-boundary*) diffúzió.

## 7. A természetben lejátszódó folyamatok, fogalomtár

**Aktiválási energia:** azt fejezi ki, hogy mekkora energia szükséges egy mol aktivált komplex keletkezéséhez.

**Aktivált komplex:** rövid élettartamú, nagy energiájú átmeneti állapot, amelyben egyszerre vannak jelen a felszakadó régi és a képződő új kémiai kötések.

**Aktivitás (a):** a reális folyadékelegyek, oldatok termodinamikai leírásakor alkalmazott, koncentráció jellegű mennyiség (effektív vagy hatékony koncentráció). A komponensek közötti elektrosztatikus kölcsönhatásokra (vonzás, taszítás) jellemző sajátosság, ami az ideális viselkedéstől való eltérést jelzi.

**Állapotfüggvény:** a rendszer állapotát meghatározó változó; olyan függvény, ami független attól az úttól, amin keresztül a rendszer az adott állapotba jutott (értéke csak a kiindulási és a végállapottól függ). A termodinamikai rendszer tulajdonságai, mint a nyomás (p), térfogat (V) és hőmérséklet (T), állapotfüggvények.

**Belső energia:** a rendszert felépítő részecskék összenergiája, azaz teljes energiakészlete. Jele: U, mértékegysége: Joule [J].

**Biner:** kétkomponensű rendszer.

**Diffúzió:** ha szilárd, folyékony vagy gáz fázisban a komponensek eloszlása nem egyenletes, azaz a fázis egyik részében koncentrációjuk nagyobb, mint egy másik részben, akkor egy tényleges, *atomi léptékű (molekuláris) mozgás* történik, ezt nevezzük diffúciónak. A diffúzió a nagyobb koncentrációjú helyekről a kisebb koncentrációjú helyek felé irányul; továbbá a komponensek homogén eloszlását eredményezi.

**Elegy:** olyan homogén rendszer, amelyben a komponensek mennyisége azonos nagyságrendű.

**Elegykristály:** szilárd oldat, korlátlan elegyedés szilárd fázisban.

**Entalpia:** a rendszer hőtartalmával kapcsolatos állapotfüggvény állandó nyomáson (jele: H, mértékegysége: Joule [J]).  $H = U - W$  (p = konstans), ahol U a belső energia, W a munka.

**Entalpiaváltozás:** az a hőmennyiség, ami a termodinamikai rendszerbe vagy a rendszerből áramlik, miközben valamilyen fizikai változás vagy kémiai reakció lezajlik (állandó nyomáson). Jele:  $\Delta H$ , mértékegysége: Joule [J].

**Entrópia:** az „energiaszétzóródás” mértékének, illetve a rendszert alkotó anyag rendezetlenségének megfelelő állapotfüggvény (jele: S; mértékegysége: J/K); kapcsolatban van a hőmennyiséggel (Q) és a hőmérséklettel (T).

**Eutektikus elegy:** komponensei nem képeznek sem vegyületet, sem elegykristályt, és egymásban való oldhatóságuk korlátozott.

**Fázis (F):** A rendszer *homogén*, mechanikailag szeparálható, a rendszer többi részétől *megkülönböztethető* része. Azonos fizikai és kémiai tulajdonságokkal rendelkezik (pl. egy adott térfogatot foglal el).

**Fázisdiagram:** olyan diagram, amely megmutatja a rendszert alkotó összetevők stabil fázisait az állapotváltozók (nyomás, hőmérséklet, összetétel) bizonyos értékei mellett.

**Gibbs-féle fázisszabály:** a fázisok (F) és a szabadsági fokok (Sz) összege egyenlő a komponensek (K) kettővel megnövelt számával. Elterjedt matematikai alakja:  $Sz = K - F + 2$ .

**Hármaspont:** annak a nyomás és hőmérsékleti értéknek megfelelő pont a fázisdiagramon, amikor egy anyag három különböző halmazállapotú (szilárd, folyadék, gáz) formája egyszerre stabil és egymással egyensúlyban van.

**Hess-törvény** (a termokémia alaptétele): ha egy reakció többféle úton mehet végbe, a reakciót kísérő hőváltozások összege független a részfolyamatok minőségétől és sorrendjétől, csak attól függ, hogy milyen kiindulási anyagokból milyen termékek keletkeznek.

**Heterogén katalízis:** a katalizátor és a reagáló anyagok egymással érintkező, különböző fázisokban vannak.

**Homogén katalízis:** a katalizátor ugyanabban a fázisban van, mint a reakciórendszer.

**Hőmérsékleti grádiens:** a hőmérséklet értékváltozásának helytől függő értéke. Ha egy „A” rendszerből hő áramlik „B” rendszerbe, akkor „A” nagyobb hőmérsékletű „B”-nél, azaz közöttük hőáramlás lép fel a hőmérsékleti grádiensnek megfelelően. Ha két rendszer hőmérséklete azonos, közöttük nincs hőáramlás (*termikus egyensúly*).

**Katalizátor:** olyan anyag, ami a reakció sebességét gyorsítja és egy meghatározott irányba vezeti anélkül, hogy a reakció végtermékében megjelenne. A katalizátor a

reakcióban „látszólag” nem vesz részt és a reakció lejártszódása után visszajutunk.

**Kémiai egyensúly:** kémiai egyensúlyról akkor beszélünk, ha két ellentétes irányú reakció egymással párhuzamosan (szimultán módon), azonos sebességgel játszódik le.

**Kémiai potenciál:** tiszta anyag moláris szabadentalpiája (Jele:  $\mu$ ;  $G_m = \mu$ ).

**Képződéshő:** azt fejezi ki, hogy mekkora a hőváltozás 1 mol anyagnak meghatározott állapotú elemeiből való képződésekor.

**Komponens (K):** Egy rendszerben azoknak a független anyagoknak a minimális száma, amelyek koncentrációja szükséges a jelen levő összes fázis összetételének megadásához.

**Kritikus hőmérséklet:** az a hőmérséklet, ami felett egy gáz nem cseppfolyósítható. A kritikus hőmérséklet felett az anyag szuperkritikus állapotban van.

**Kritikus nyomás:** egy gáz (gőz) cseppfolyósításához szükséges nyomás annak kritikus hőmérsékletén.

**Kritikus pont:** egy anyag kritikus hőmérséklete és kritikus nyomása által meghatározott pont a fázisdiagramon.

**Likvidusz:** a likviduszgörbe (vagy felület) az olvadáspont változását mutatja meg az összetétel függvényében.

**Oldat:** homogén rendszer; benne az egyik komponens mennyisége nagy (oldószer) a másikhoz, vagy a többihez (oldott anyag) képest.

**Polimorf módosulat:** az azonos kémiai összetételű, de eltérő kristályszerkezetű anyagokat nevezzük polimorf módosulatoknak.

**Reakcióhő:** a reakció során bekövetkező entalpiaváltozás ( $\Delta H_r$  [kJ/mol]). A reakcióhő megmutatja, hogy mekkora a hőváltozás, ha a reakcióegyenletben feltüntetett minőségű és mennyiségű anyagok alakulnak át.

**Reakciórend:** az adott komponens koncentrációjának (aktivitásának) hatványkitevője a sebességi egyenletben.

**Reakciósebesség (ráta):** az adott reakcióban időegység alatt az egységnyi térfogatban átalakult anyagmennyiség ( $v$  [mol/s]).

**Szilárd oldat:** elegykristály, korlátlan elegyedés szilárd fázisban.

**Sztenderd (standard) állapot:** egy anyag *standard állapotán* azt értjük, hogy tiszta állapotban van 1 atm (101,325 kPa) nyomáson és 25 °C (298,15 K) hőmérsékleten.

**Szabadenergia (Helmholtz-energia):** a belső energia munkává alakítható része állandó hőmérsékleten és térfogaton (jele:  $A$ , mértékegysége: Joule [J]; definícióegyenlete:  $A = U - TS$ ).

**Szabadentalpia (Gibbs-energia):** a rendszer energiájának munkává alakítható része állandó hőmérsékleten és nyomáson (jele:  $G$ , mértékegysége: Joule [J]; definícióegyenlete:  $G = H - TS$ ).

**Szabadsági fok (Sz):** Egy rendszerben azoknak az *intenzív változóknak a száma*, amelyeket egymástól függetlenül, szabadon változtathatunk anélkül, hogy az egyensúlyi rendszerben megváltozna a fázisok száma.

**Szolidusz:** a szoliduszgörbe a fagyáspont változását mutatja az összetétel függvényében.

**Szuperkritikus fluidum:** a kritikus hőmérséklete feletti hőmérsékletű anyag. Sem folyadékként, sem gázként nem írható le, mindkét halmazállapot tulajdonságait mutatja.

**Termikus egyensúly:** olyan állapot, amikor két rendszer között nincs hőáramlás, tehát hőmérsékletük azonos.

**Termodinamika „nulladik” főtétele:** ha „A” rendszer termikus egyensúlyban van „B”-vel, „B” rendszer pedig „C”-vel, akkor „A” rendszer termikus egyensúlyban van „C” rendszerrel is.

**Termodinamika első főtétele:** a világegyetem (univerzum) teljes energiakészlete állandó. Fizikai vagy kémiai változások során az energia nem keletkezik, és nem is tűnik el. Azonos az energiamegmaradás törvényével. Matematikai alakja:  $\Delta U = Q + W$ , ahol  $U$  a belső energia,  $Q$  a hő,  $W$  a munka.

**Termodinamika második főtétele:** izolált rendszerben önként olyan folyamat megy végbe, ami a teljes energia szétszóródását, azaz az entrópia növekedését eredményezi. Bármely spontán folyamatban a világegyetem entrópiája növekszik. *Más megfogalmazásban:* globális izolált rendszer entrópiája valamely spontán lejátszódó folyamat során növekszik.

**Terner:** három összetevőt tartalmazó rendszer.

**Tömeghatás törvénye:** egyensúlyi állapotban a termékek koncentrációinak megfelelő hatványon vett szorzata osztva a kiindulási anyagok megfelelő hatványon vett koncentrációinak a szorzatával, egy állandó érték. A tört értéke a kémiai egyensúlyi állandó. Jele:  $K$ .

**Útfüggvény:** olyan változó, aminek értéke függ attól, hogy milyen úton ment végbe a változás. A hő ( $Q$ ) és a munka ( $W$ ) útfüggvények.

## 7. A természetben lejátszódó... – Önellenőrző kérdések, feladatok

**7.1.** Melyik változó extenzív a rendszert jelző állapotváltozók közül? a) a nyomás ( $p$ ); b) a hőmérséklet ( $T$ ); c) a térfogat ( $V$ )

**7.2.** Melyik két változó intenzív a rendszert jelző állapotváltozók közül a termodinamikában? a) a nyomás ( $p$ ) és a hőmérséklet ( $T$ ); b) a térfogat ( $V$ ) és a hőmérséklet ( $T$ ); c) a térfogat ( $V$ ) és az anyagsűrűség ( $\rho$ )

**7.3.** Melyik állítás igaz a munkavégzésre a termodinamikában? a) a részecskék (molekulák, atomok) kaotikus és véletlenszerű mozgása a munka; b) a rendezett mozgás mértéke a munka; c) a rendezetlen mozgás mértéke a munka

**7.4.** Melyik állítás igaz a hőmozgásra? a) a részecskék kaotikus és véletlenszerű mozgása a hőmozgás; b) a részecskék rendezett mozgása a hőmozgás; c) a részecskék véletlenszerű mozgása a hőmozgás, ami a hőmérséklet emelkedésével csökken

**7.5.** Változhat-e egy spontán folyamat során az izolált rendszer belső energiája? a) az izolált rendszer zárt, ezért belső energiája csökkenhet és növekedhet is; b) spontán változás során az izolált rendszer belső energiája akkor változhat, ha anyagáramlás történik; c) spontán változás során az elszigetelt (izolált) rendszer belső energiája nem változhat

**7.6.** Melyik állítás igaz egy endoterm reakcióra? a) endoterm folyamatok során az energia hő formájában felszabadul a rendszerből, ezért az entalpiaváltozás pozitív; b) endoterm folyamatok során a rendszer hő formájában energiát nyel el, ezért a rendszer entalpiaváltozása pozitív; c) az endoterm reakció hőfelszabadulással járó reverzibilis folyamat

**7.7.** Milyen tulajdonság jellemző az eutektikus összetételű, kétkomponensű rendszerekre? a) nem olvadnak meg; b) a tiszta összetevőkhöz képest alacsonyabb hőmérsékleten olvadnak meg; c) a tiszta összetevőkhöz képest magasabb hőmérsékleten olvadnak meg

**7.8.** Milyen összetétel nem fordulhat elő egy terner (háromkomponensű) rendszer összetételét jelző háromszögdiagram csúcsán? a) A: 80% B: 0% C: 20%; b) A: 0% B: 0% C: 100%; c) A: 100% B: 0% C: 0%

**7.9.** Milyen összetétel nem fordulhat elő egy terner (háromkomponensű) rendszer összetételét jelző háromszögdiagram csúcsán? a) A: 0% B: 0% C: 100%; b) A: 10% B: 0% C: 0%; c) A: 100% B: 0% C: 0%

**7.10.** Milyen összetétel nem fordulhat elő egy terner (háromkomponensű) rendszer összetételét jelző háromszögdiagram oldalvonalán? a) A: 80% B: 0% C: 20%; b) A: 0% B: 50% C: 50%; c) A: 10% B: 30% C: 60%

**7.11.** Milyen összetétel nem fordulhat elő egy terner (háromkomponensű) rendszer összetételét jelző háromszögdiagram belsejében? a) A: 80% B: 10% C: 10%; b) A: 30% B: 20% C: 50%; c) A: 0% B: 40% C: 60%

**7.12.** Milyen összetétel nem fordulhat elő egy terner (háromkomponensű) rendszer összetételét jelző háromszögdiagram belsejében? a) A: 90% B: 5% C: 5%; b) A: 35% B: 50% C: 25%; c) A: 10% B: 28% C: 62%

**7.13.** Mit jeleznek a többkomponensű rendszerek aktivitási diagramjai? a) egy adott ásvány fázisátalakulásait mutatják a nyomás és a hőmérséklet függvényében; b) különböző ásványok stabilitási viszonyait jelzik adott hőmérsékleten és nyomáson; c) a szilárd oldatok összetételének változását mutatják a hőmérséklet függvényében

**7.14.** Függ-e a reakciósebesség a hőmérséklettől? a) igen, a reakciósebesség hőmérsékletfüggő folyamat; b) nem, csak a termékek koncentrációja határozza meg; c) nem, csak a kiindulási anyagok koncentrációjától függ

**7.15.** Melyik állítás *nem igaz* egy katalizált reakcióra? a) a katalizátor csak a láncreakciók sebességére hat; b) a katalizátor a reakció sebességét gyorsítja; c) a katalizátort változatlanul kapjuk vissza a reakció lejátszódása után

**7.16.** Melyik állítás *nem igaz* a diffúzióra? a) szilárd anyagokban a térfogati diffúzió sebessége nagyobb, mint a felületi diffúzió sebessége; b) a diffúzió gáz, folyékony és szilárd halmazállapotban egyaránt lejátszódhat; c) a diffúzió a nagyobb koncentrációjú helytől a kisebb koncentrációjú hely felé irányuló transzportfolyamat

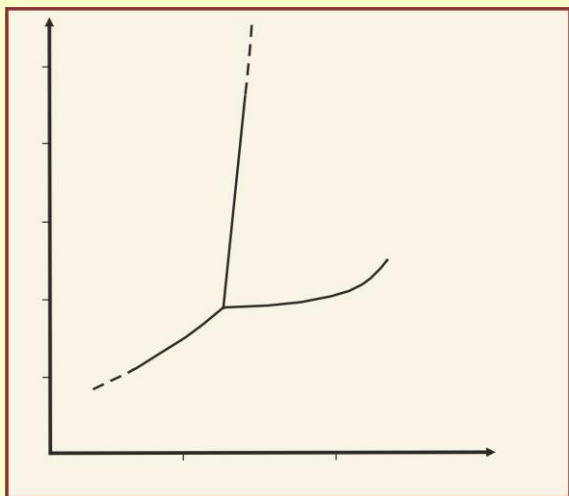
**7.17.** Egy kémia reakció reakcióhője  $\Delta H_r = 550$  kJ/mol. A reakcióelegy a folyamat lejátszódásakor hőt ad le a környezetének vagy hőt vesz fel attól?

**7.18.** A hidrogén égésének egyenlete a következő:  $2 \text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{H}_2\text{O}$ . Adjuk meg a reakció sztenderd hőváltozását! A számoláshoz szükséges adatokat a **20. táblázat** tartalmazza.

**7.19.** A metán égésének egyenlete a következő:  $\text{CH}_4 + 2 \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + 2 \text{H}_2\text{O}$ . Adjuk meg a reakció sztenderd hőváltozását! A számoláshoz szükséges adatokat a **20. táblázat** tartalmazza.

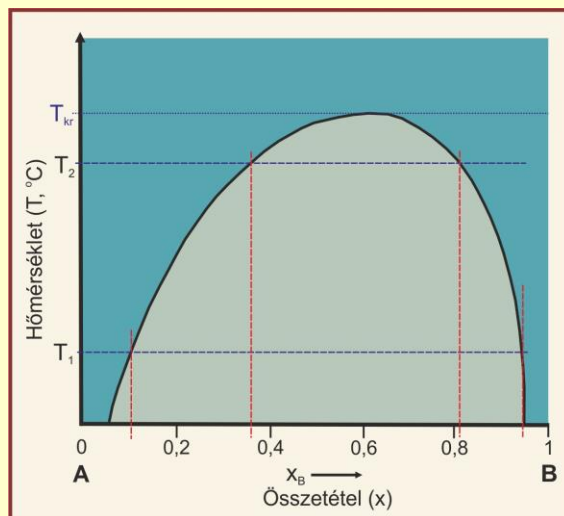
**7.20.** A szabadentalpia változásának segítségével értelmezd a mészégetés folyamatát közönséges körülmények között! A számoláshoz szükséges adatokat a **21. táblázat** tartalmazza.

**7.21.** Értelmezd az alábbi sablont! Nevezd meg az egykomponensű zárt rendszerek fázisdiagramjának részeit (tengelyek, nevezetes görbék és pontok, lehatárolható területek)!

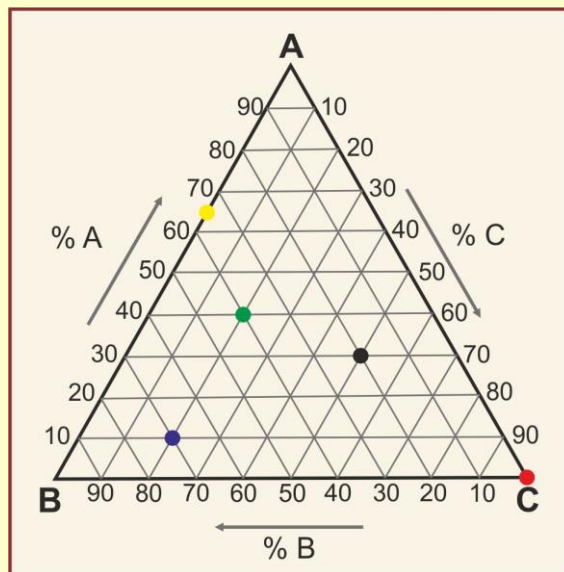


**7.22.** Mi történik akkor, ha egy vízzel teli, zárt üveget lefagyasztunk? Miért?

**7.23.** Az alábbi fázisdiagramon milyen összetétel jellemzi a korlátozottan elegyedő rendszer két fázisát  $T_1$ , illetve  $T_2$  hőmérsékleten?



**7.24.** Milyen összetétel jellemzi a terner rendszert a megadott pontokban?



## 7. A természetben lejátszódó... – Önellenőrző kérdések, megoldások

7.1. c

7.5. c

7.9. b

7.13. b

7.2. a

7.6. b

7.10. c

7.14. a

7.3. b

7.7. b

7.11. c

7.15. a

7.4. a

7.8. a

7.12. b

7.16. a

7.17. Mivel a reakcióhő pozitív ( $\Delta H_r = 550$  kJ/mol), a rendszer hőt vesz fel a környezetétől, azaz a reakció endoterm.

7.18. Reakcióegyenlet:  $2 \text{H}_2 (\text{g}) + \text{O}_2 (\text{g}) \rightarrow 2 \text{H}_2\text{O} (\text{f})$ , ez alapján a reakció sztenderd entalpiaváltozása:

$\Delta H_r^0 = \sum n \Delta H_{\text{k}}^0 \text{termékek} - \sum n \Delta H_{\text{k}}^0 \text{kiindulási anyagok}$ ; figyelembe véve, hogy a sztenderd állapotú elemek képződéshője megállapodás szerint nulla, a fenti reakció hőváltozása az alábbi:

$\Delta H_r^0 = 2 \Delta H_{\text{k}}^0 \text{víz} = 2 \text{ mol } (-285,8 \text{ kJ/mol}) = -571,6 \text{ kJ/(mol O}_2\text{)}$ . Vegyük észre, hogy a hidrogénre vonatkoztatott sztenderd moláris reakcióhő (égéshő) megegyezik a víz sztenderd moláris képződéshőjével.

7.19. Reakcióegyenlet:  $\text{CH}_4 (\text{g}) + 2 \text{O}_2 (\text{g}) \rightarrow \text{CO}_2 (\text{g}) + 2 \text{H}_2\text{O} (\text{f})$ , ez alapján a reakció sztenderd entalpiaváltozása:

$\Delta H_r^0 = \sum n \Delta H_{\text{k}}^0 \text{termékek} - \sum n \Delta H_{\text{k}}^0 \text{kiindulási anyagok}$ ; figyelembe véve, hogy a sztenderd állapotú elemek képződéshője megállapodás szerint nulla, a fenti reakció hőváltozása az alábbi:

$\Delta H_r^0 = \Delta H_{\text{k}}^0 \text{szén-dioxid} + 2 \Delta H_{\text{k}}^0 \text{víz} - \Delta H_{\text{k}}^0 \text{metán}$

$\Delta H_r^0 = -393,5 + 2 (-285,8) - (-74,81)$

$\Delta H_r^0 = -890,29 \text{ kJ}$ .

7.20. A mészégetés egyenlete az alábbi:

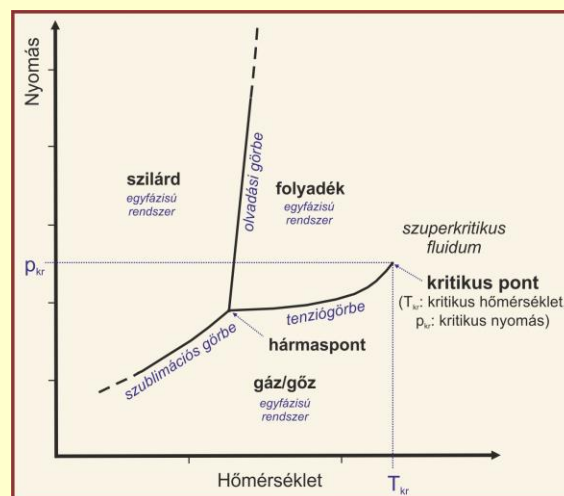
$\text{CaCO}_3 (\text{sz, kalcit}) \leftrightarrow \text{CaO} (\text{sz}) + \text{CO}_2 (\text{g})$

A reakció sztenderd szabadentalpia-változása:

$\Delta G_r^0 = \Delta G_{\text{k}}^0 \text{CaO} + \Delta G_{\text{k}}^0 \text{szén-dioxid} - \Delta G_{\text{k}}^0 \text{kalcit}$

$\Delta G_r^0 = -604,0 + (-394,4) - (-1129,0) \text{ kJ/mol}$ , azaz  $\Delta G_r^0 = 130,6 \text{ kJ/mol}$ . A folyamat során  $\Delta G_r^0 > 0$ , azaz közönséges körülmények között a kalcit bomlása önként nem megy végbe. Az ellentétes irányú folyamat, az égetett mész (CaO) szén-dioxid felvétele viszont spontán módon lejátszódik.

7.21. Egykomponensű zárt rendszer fázisdiagramja az ún. p–T diagram.



7.22. Az üvegedény széttörik. A vízhez képest a jég sűrűsége kisebb, ezért fagyáskor kitágul. A zárt üvegedény a térfogatnövekedés hatására széttörik. A vízhez képest a jégben a hidrogénkötések sokkal kiterjedtebb hálózatot alkotnak, így a vízmolekulák elszeparálódása nagyobb mértékű.

7.23. A fázisok összetétele leolvasható az oldhatósági görbéről az adott hőmérsékletnek megfelelő metszéspontok segítségével.  $T_1$  hőmérsékleten:  $F_1$  összetétele 90% A és 10% B,  $F_2$  összetétele ~5% A és 95% B;  $T_2$  hőmérsékleten:  $F_1$  összetétele ~64% A és 36% B,  $F_2$  összetétele ~19% A és 81% B.

7.24. sárga: 65% A, 35% B, 0% C; piros: 0% A, 0% B, 100% C; zöld: 40% A, 40% B, 20% C; kék: 10% A, 70% B, 20% C; fekete: 30% A, 20% B, 50% C

# 8.

## Vizes oldatok: oldhatóság és egyensúly



### **Témakörök**

#### **8.1. Vizes közegű kémiai reakciók: savak és bázisok, oldhatóság**

- a víz autoprotolízise, a vízionszorzat és a pH-skála
- savak és bázisok, a sav–bázis reakciók elméleti alapjai
- oldhatóság és egyensúly, ásványok oldódása
- adszorpció és ioncsere

#### **8.2. Redoxireakciók, elektrokémiai alapok**

- redoxireakció, oxidáció, redukció, oxidációs szám
- elektrokémiai alapok: elektrolízis, galvánelement, elektródpotenciál
- feszültségi sor és korrózió

## 8. Vizes oldatok: oldhatóság és egyensúly

### 8.1. Vizes közegű kémiai reakciók: savak és bázisok, oldhatóság

### 8.2. Redoxireakciók, elektrokémiai alapok



### ***Ha megtanulod ezt a fejezetet, képes leszel arra, hogy***

- földtudományi folyamatok jellemzésekor helyesen használd a sav–bázis reakciók és az elektrokémia (redoxireakciók) alapfogalmait;
- földtudományi példákon keresztül elmagyarázd a vizes oldatok általános jellemzőit;
- elmagyarázd a pH-skálát és annak gyakorlati jelentőségét;
- megfogalmazd az oldhatóság és az ásványok oldódásának legfontosabb törvényszerűségeit;
- egyszerű redoxireakciókban meghatározd a kiindulási anyagokat és a termékeket alkotó atomok oxidációs számát;
- elmagyarázd a korróziót befolyásoló elektrokémiai tényezőket.

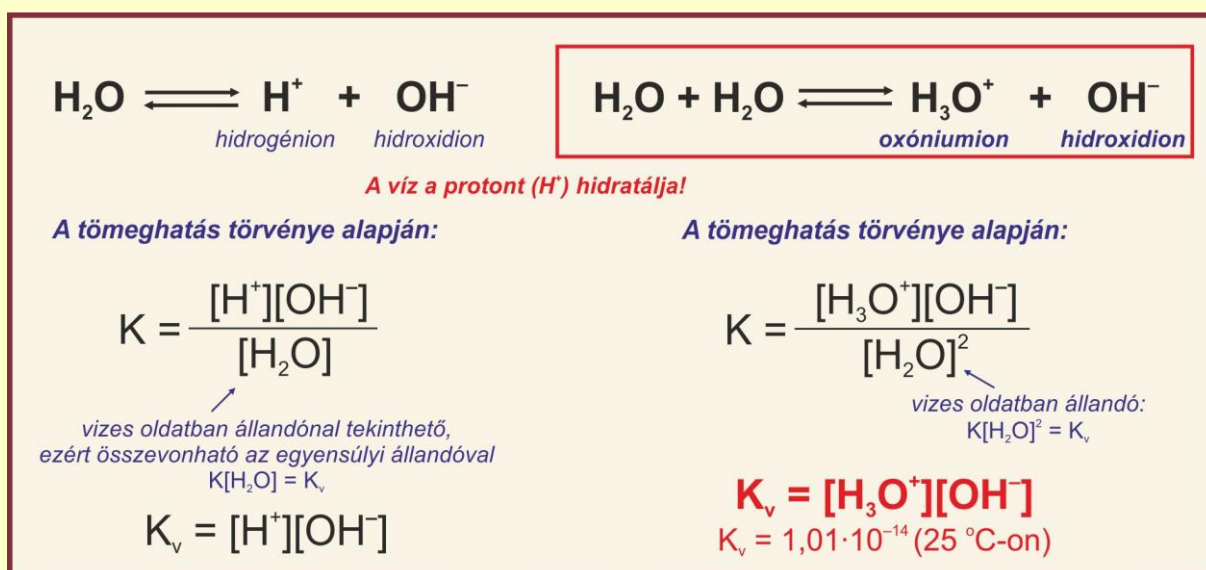
## 8.1. Vizes közegű kémiai reakciók: savak és bázisok, oldhatóság

A Föld felszínén (pl. óceánok, világtengerek, élővilág) és a felszín közelében lejátszódó folyamatok szempontjából megkerülhetetlen szerepe van a víznek és az olyan oldatoknak, amelyekben a víz az oldószer (**vizes oldatok**). A légkörben alapvető folyamat a vízgőz kondenzációja, a keletkezett csapadék pedig vizes oldat. A földfelszínre jutva a csapadékvíz hatására bekövetkező kőzetmállás szintén számos vizes közegű kémiai reakció segítségével írható le. A víz–kőzet kölcsönhatásokban a víz univerzális oldószer, ami — mechanikai és kémiai értelemben egyaránt — az eróziós folyamatok egyik legfontosabb hajtóereje és szállítóközege. A hidro- és bioszférában betöltött szerepén túl a víz a kőzetburok (litoszféra) nagyobb mélységeiben is kiemelt szerepet kap. Számos, a földkéregben zajló geológiai folyamat (pl. ércképződés, kőzetátalakulások, metamorf ásványreakciók) forró vizes oldatok vándorlásához kapcsolódik (Koch, Sztrókay, 1994; Hetényi, 1999; Anderson, 2005; Appelo, Postma, 2009; Gill, 2015).

A víz és a vele érintkező fázisok között különböző reakciók játszódhatnak le. Gyakoriak a protonátmenettel járó **sav–bázis reakciók**, de az oldódás–kiválás, az úgynevezett **szorpció jelenségek** (pl. **adszorpció**) és az elektronátmenettel járó reakciók (**8.2. alfejezet**) szintén kiemelt jelentőségűek a természetben (Anderson, 2005; Appelo, Postma, 2009; Varsányi, 2009; Bárány et al., 2011; Gill, 2015). Földtudományi példák (pl. kémiai mállás, cseppkőképződés) segítségével látni fogjuk, hogy ezek a reakciótípusok többnyire nem választhatók el egymástól.

Amennyiben kémiai oldalról vizsgáljuk meg a vizet, mint tiszta anyagot, a V-alakú vízmolekulában ( $H_2O$ ) az oxigénatom és a hidrogénatomok erős elsőrendű, kovalens kötéssel kapcsolódnak össze (**58. ábra**). Ez a kötés a kapcsolódó atomok elektronegativitás-különbsége miatt poláris (**62. ábra**). Az aszimmetrikus alak következtében a kötés polaritása a molekula polaritását is eredményezi, ezért a poláris (dipólusos) vízmolekulák között viszonylag erős másodlagos kötőerők lépnek fel. Folyadék és szilárd halmazállapotban a vízben hidrogénkötések jönnek létre (az egyik vízmolekula lokális pozitív töltést képviselő hidrogénje kapcsolódik egy másik vízmolekula lokális negatív töltésű oxigénatomjának egyik nemkötő elektronpárjához; **71. ábra**) tetraéderes elrendeződésben (Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

A víz elektromos vezetőképességének mérésére irányuló kísérletek rámutattak arra, hogy a tiszta víz — nagyon kis mértékben — vezeti az elektromos áramot, azaz abban ionok is jelen vannak. A víz ionizálódik, protonátadással ( $\text{H}^+$ -ion) pozitív töltésű oxóniumionok ( $\text{H}_3\text{O}^+$ ; a víz a protont hidratálja) és negatív töltésű hidroxidionok ( $\text{OH}^-$ ) jönnek létre, bár ennek mértéke nagyon kicsi. Ezt a folyamatot nevezik **disszociációnak** vagy **autoprotolízisnek**, autoionizációnak (Whitten et al., 2014). Az autoprotolízis olyan folyamat, amelyben azonos molekulák között hidrogénion, azaz protonátadás történik. Az egyensúlyra vezető reakcióra felírható a tömeghatás törvénye, amiből levezethető a víz disszociációjának egyensúlyi állandója ( $K_{\text{víz}}$  vagy  $K_v$ ;  $K_v = [\text{H}_3\text{O}^+]\cdot[\text{OH}^-]$ ), amit **vízionszorzatnak** nevezünk (107. ábra). A vízionszorzat hőmérsékletfüggő, értéke 25 °C-on  $\sim 1\cdot 10^{-14}$ . Annak ellenére, hogy ez az összefüggés tiszta vízre vonatkozik, híg vizes oldatokra egyaránt érvényes az adott hőmérsékleten, ami a kémhatás meghatározásának az elvi alapja (Rózsahegyi, 1993; Varsányi, 2009; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).



### 107. ábra

A víz disszociációja: az autoprotolízis vagy autoionizáció

Az egyensúlyi folyamatra felírható a tömeghatás törvénye, amiből meghatározható az oxóniumionok aktivitása (tiszta vízben a víz aktivitása 1, ezért ezt nem kell figyelembe venni az egyensúlyi állandóban). Híg vizes oldatokban az aktivitás megegyezik a koncentrációval. Tiszta víz esetén 25 °C-on  $K_v = \sim 1\cdot 10^{-14}$ , illetve  $[\text{H}_3\text{O}^+] = [\text{OH}^-]$ , ezért  $[\text{H}_3\text{O}^+] = 10^{-7} \text{ mol/dm}^3$  és  $[\text{OH}^-] = 10^{-7} \text{ mol/dm}^3$ .

#### Megjegyzés:

A hidrogénion vizes oldatban önállóan nem létezhet, azt a víz (*aqua*) hidratálja:  $\text{H}^+_{(\text{aq})}$ . A hidratált hidrogéniont nevezzük oxóniumionnak ( $\text{H}_3\text{O}^+$ ). A hidratált formát (aq) jelöléssel különböztetik meg (Whitten et al., 2014).

Kémiai értelemben azokat az anyagokat, amelyek disszociációjuk során protont ( $\text{H}^+$ ) adnak át egy másik anyagnak — azaz proton donorok —, **savaknak** nevezzük (pl. hidrogén-fluorid:  $\text{HF} + \text{H}_2\text{O} = \text{F}^- + \text{H}_3\text{O}^+$ ). A proton felvételére képes anyagok — azaz proton akceptorok — a **bázisok** (pl. ammónia:  $\text{NH}_3 + \text{H}_2\text{O} = \text{NH}_4^+ + \text{OH}^-$ ). A víz savként és bázisként is viselkedhet ( $\text{H}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O} = \text{H}_3\text{O}^+ + \text{OH}^-$ ), ezért **amfoter** tulajdonságú anyag. A sav–bázis reakciók közös jellemzője a protonátadás vagy protontranszfer (Atkins, 1992; Rózsahegyi, 1993; Whitten et al., 2014).

A gyakori szervetlen és szerves vegyületek (3. fejezet) között számos olyan vízben oldódó anyag szerepelt, amelyeket savas vagy lúgos tulajdonságuk alapján a köznap életből is ismerünk. A szervetlen savak képletét általában a hidrogén vegyjelével kezdjük (hidrogén-klorid:  $\text{HCl}$ ), míg a szerves savak képletében a  $\text{COOH}$ -csoport fordul elő. A bázisok vizes oldatában hidroxidion található, ami az oldat lúgos kémhatását eredményezi (Wilbraham et al., 2008; Whitten et al., 2014; Gill, 2015). A kovalens kötés részletezésekor (5.1. alfejezet), az összetett ionok bemutatásánál szintén szó esett több olyan szervetlen vegyületről (pl. kénsav, salétromsav, ammónia), ami a sav–bázis reakciók szempontjából kiemelt jelentőségű.

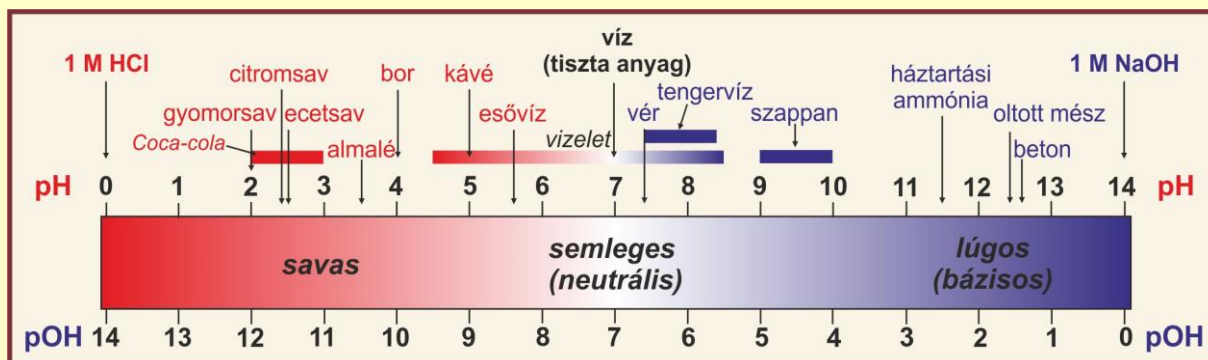
Savas oldatokban az oxóniumionok mennyisége mindig nagyobb, mint a hidroxidionoké (savas:  $[\text{H}_3\text{O}^+] > [\text{OH}^-]$ ), lúgos oldatokban viszont fordítva (lúgos:  $[\text{H}_3\text{O}^+] < [\text{OH}^-]$ ). Amennyiben az oxóniumionok és a hidroxidionok koncentrációja megegyezik, az oldat semleges (neutrális:  $[\text{H}_3\text{O}^+] = [\text{OH}^-]$ ). Egy vizes oldat savasságának vagy lúgosságának a mértékét, azaz a kémhatását a vízionszorzat alapján definiált **pH**-skála (vagy **pOH**-skála) segítségével számszerűsíthetjük. A tiszta víz semleges kémhatású, abban  $25\text{ }^\circ\text{C}$ -on az oxóniumionok és a hidroxidionok mennyisége megegyezik:  $10^{-7}\text{ mol/dm}^3$  ( $K_v = 10^{-14}$ ). A hatványkitevő számértékét a koncentráció tízes alapú negatív logaritmusával ( $\log$ ) fejezhetjük ki, ami nem más, mint a pH vagy a pOH (Varsányi, 2009; Whitten et al., 2014). Ezek tehát az alábbiak:

$$\begin{aligned}\text{pH} &= -\log[\text{H}_3\text{O}^+] &\rightarrow & [\text{H}_3\text{O}^+] = 10^{-\text{pH}} \\ \text{pOH} &= -\log[\text{OH}^-] &\rightarrow & [\text{OH}^-] = 10^{-\text{pOH}}.\end{aligned}$$

#### Megjegyzés:

A pH és a pOH a megfelelő alakban megadott koncentráció hatványkitevőjéből származó szám, ezért nincs mértékegysége. A kémhatás megadására leggyakrabban a pH szolgál. Annak ellenére, hogy vizes oldatban a hidrogénion hidratált formában, oxóniumionként van jelen, a kémhatást nem  $\text{pH}_3\text{O}$  segítségével fejezzük ki! Amikor a pH fogalmát bevezették, a  $\text{H}_3\text{O}^+$ -t még a  $\text{H}^+$  képviselte (Whitten et al., 2014).

A tömeghatás törvénye alapján a tiszta víz pH-ja 7 (semleges), továbbá 25 °C-on a pH és a pOH összege 14 ( $\text{pH} + \text{pOH} = 14$ ). Ez azt eredményezi, hogy vizes oldatokban a pH értéke 0 és 14 közötti. Savas oldatokban a  $\text{pH} < 7$ , lúgos oldatokban viszont a  $\text{pH} > 7$  összefüggés érvényes (108. ábra). A savak és a lúgok (bázisok) erősségét a vízhez való viszonyuk alapján határozzák meg (Whitten et al., 2014).



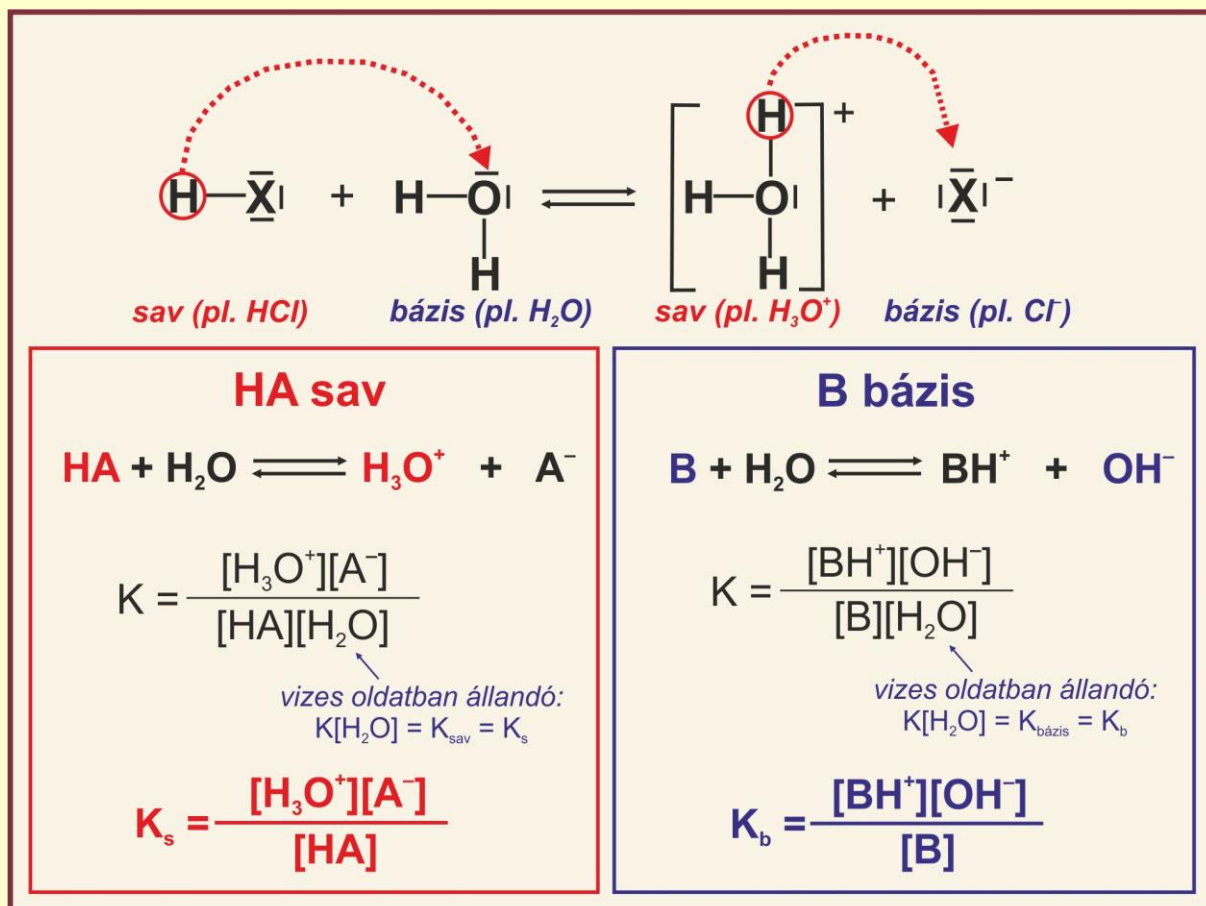
108. ábra

A kémhatás számszerűsítésére elterjedt pH-skála gyakori savas, semleges, illetve lúgos tulajdonságú anyagok feltüntetésével

Egy oldat pH értéke műszeresen (pH-méter segítségével), **indikátor** módszerrel vagy univerzális indikátorpapírral közvetlenül meghatározható. A sav–bázis indikátorok (pl. lakmusz, metilnarancs, metilvörös, fenolftalein) olyan erős színű, komplex szerves vegyületek, amelyek színe különböző pH mellett eltérő, így színváltozással jelzik az oldat kémhatásának megváltozását (Whitten et al., 2014).

A sav–bázis reakciók során egy sav protont leadva *konjugált bázissá*, egy bázis protont felvéve *konjugált savvá* alakul. A savak és a bázisok erősségét a vizes oldatban bekövetkező disszociáció mértékét jelző egyensúlyi állandó segítségével számszerűsíthetjük (109. ábra). Ez a pH-hoz hasonló módon fejezhető ki a tömeghatás törvényének felírásával. Sav esetén a hőmérsékletfüggő disszociációs állandó jele:  $K_{\text{sav}}$  vagy  $K_s$ , ennek tízes alapú negatív logaritmus, a  $\text{p}K_s$  érték ( $-\log K_s = \text{p}K_s$ ), ami a saverősség jellemző paramétere. Minél gyengébb egy sav, annál kisebb a  $K_s$  értéke ( $\text{p}K_s$  annál nagyobb). Az erős savak vizes oldatban teljesen ionizálódnak ( $K_s > 1$ ;  $\text{p}K_s < 0$ ). A gyenge savak azonban kevésbé ( $K_s < 1$ ;  $\text{p}K_s > 0$ ), disszociációjuk mértéke több tényezőtől függ (pl. hőmérséklet, sótartalom). Közismert gyenge sav a két hidrogéniont leadni képes, ezért két lépésben disszociáló szénsav ( $\text{H}_2\text{CO}_3$ :  $\text{p}K_{s1} = 5,85$ ), amely oldódásakor hidrogénkarbonát- ( $\text{HCO}_3^-$ ) vagy karbonátion ( $\text{CO}_3^{2-}$ ) keletkezhet, illetve a foszforsav ( $\text{p}K_{s1} = 2,15$ ;  $\text{H}_3\text{PO}_4$ ;  $\text{H}_2\text{PO}_4^-$ ,

$\text{HPO}_4^{2-}$ ,  $\text{PO}_4^{3-}$ ), ami háromértékű gyenge sav, ezért három lépésben disszociálhat (Rózsahegyi, 1993; Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014). Analóg módon, a bázisok erősségének mértékét a  $K_{\text{bázis}}$  vagy  $K_b$ , illetve a  $\text{p}K_b$  érték ( $-\log K_b = \text{p}K_b$ ) adja meg. Minél erősebb egy bázis, annál nagyobb  $K_b$  és kisebb  $\text{p}K_b$  értékkel jellemezhető (Atkins, 1992; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).



**109. ábra**

Savak és bázisok: a konjugált sav-bázis pár kialakulása és a disszociációs állandók levezetése egy általános „HA” sav és „B” bázis példáján

### Megjegyzés:

Az oxóniumion a legerősebb sav, ami vizes oldatban létezhet. Minden olyan sav, ami erősebb sav az oxóniumionnál ( $\text{H}_3\text{O}^+_{(\text{aq})}$ ), reakcióba lép a vízzel, és teljes egészében hidratált oxóniumionná és a megfelelő konjugált bázissá (savmaradék anion) alakul (pl. HI, HBr, HCl,  $\text{HNO}_3$ ). A gyengébb savak (pl. HF,  $\text{CH}_3\text{COOH}$ ,  $\text{H}_2\text{CO}_3$ ) vizes oldatában az adott hőmérsékletnek megfelelő egyensúly szerint a nemionizált savmolekulák, a konjugált bázisuk és a hidratált oxóniumionok keveréke lesz jelen, a disszociáció mértéke általában <5% (Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014).

Analóg módon, a hidroxidion a legerősebb bázis, ami vizes oldatban létezhet. Minden olyan bázis, ami erősebb a hidratált hidroxidionnál ( $\text{OH}^-_{(\text{aq})}$ ), reakcióba lép a vízzel (pl. NaOH), és teljes egészében konjugált savvá alakul, miközben hidratált hidroxidion képződik (Whitten et al., 2014).

### **Jó tudni!**

A hidrogénion (proton) leadására képes savak vizes oldata jellegzetes tulajdonságokkal rendelkezik. Ezek a hidratált hidrogénion (oxóniumion) jelenléte miatt jönnek létre. A savas oldatok általános jellemzői a következők (Whitten et al., 2014):

- savanyú ízűek (pl. ecet, citrom);
- megváltoztatják az indikátorok színét (az indikátorok olyan jellegzetes színű festékanyagok, amelyek színe a vizes oldat savas vagy lúgos jellegétől függ);
- a nem oxidáló savak fémekkel hidrogéngáz fejlődése közben reagálhatnak,  
*például:*  $2 \text{HCl}_{(\text{aq})} + \text{Zn}_{(\text{sz})} \rightarrow \text{Zn}^{2+}_{(\text{aq})} + \text{Cl}^{-}_{(\text{aq})} + \text{H}_{2(\text{g})}$ ;
- fém-oxidokkal és fém-hidroxidokkal sóképződés mellett reagálnak, miközben víz keletkezik;
- az erősebb sav a gyengébbet sójából felszabadítja, miközben a gyenge sav mellett az erősebb sav sója keletkezik,  
*például:*  $3 \text{HCl}_{(\text{aq})} + \text{Na}_3\text{PO}_{4(\text{aq})} \rightarrow \text{H}_3\text{PO}_{4(\text{aq})} + 3 \text{NaCl}_{(\text{aq})}$ ;
- a savak vizes oldata teljesen vagy részlegesen ionizált, ezért vezeti az elektromos áramot.

A hidratált hidroxidion miatt a lúgok vizes oldata szintén jellegzetes tulajdonságokat mutat. Ezek a következők (Whitten et al., 2014):

- a lúgos vizes oldat keserű ízű;
- selymes, „sikamlós” tapintásúak, erre jó példa az enyhén lúgos szappan;
- megváltoztatják az indikátorok színét;
- savakkal sóképződés mellett reagálhatnak, miközben víz keletkezik;
- a lúgok vizes oldata szintén vezeti az elektromos áramot.

Ne felejtsük el, hogy egy laboratóriumi vegyszert sohasem szabad megkóstolni!

Ha egy sav reagál egy bázissal, semlegesítődés történik: az oxóniumionok és a hidroxidionok vízzé alakulnak, továbbá só képződik. A semlegesítési reakció egyszerűsített formában a következő:  $\text{H}^{+}_{(\text{aq})} + \text{OH}^{-}_{(\text{aq})} \rightarrow \text{H}_2\text{O}_{(\text{f})}$ . A sók olyan ionvegyületek, amelyek a  $\text{H}^{+}$ -től eltérő kationt, valamint az  $\text{OH}^{-}$ -től (vagy  $\text{O}^{2-}$ -től) eltérő aniont tartalmaznak (Whitten et al., 2014).

A víz autoprotolízisének és a sav–bázis reakciók elvi alapjainak áttekintését követően nézzük meg, hogy milyen tényezők szabályozzák a vizes oldatok létrejöttét! Az oldódás és a különböző anyagok vízben való oldhatósága komplex folyamat, azonban néhány általános szabályt érdemes megjegyeznünk. A gyakori szerves savak, továbbá a kis molekulatömegű szerves savak jól oldódnak vízben. A gyakori kationok közül az alkálifémionok és az ammóniumion vízoldható. A gyakori anionok közül a kloridok, nitrátok, szulfátok általában szintén jól oldódnak (23. táblázat). A legtöbb szulfid ( $\text{S}^{2-}$ ), oxid ( $\text{O}^{2-}$ ), hidroxid ( $\text{OH}^{-}$ ), karbonát ( $\text{CO}_3^{2-}$ ) és foszfát ( $\text{PO}_4^{2-}$ )

azonban csak mérsékelten oldódik, sok közülük vízben feloldhatatlan ionvegyület (Greenwood, Earnshaw, 2004; Appelo, Postma, 2009; Whitten et al., 2014).

### 23. táblázat

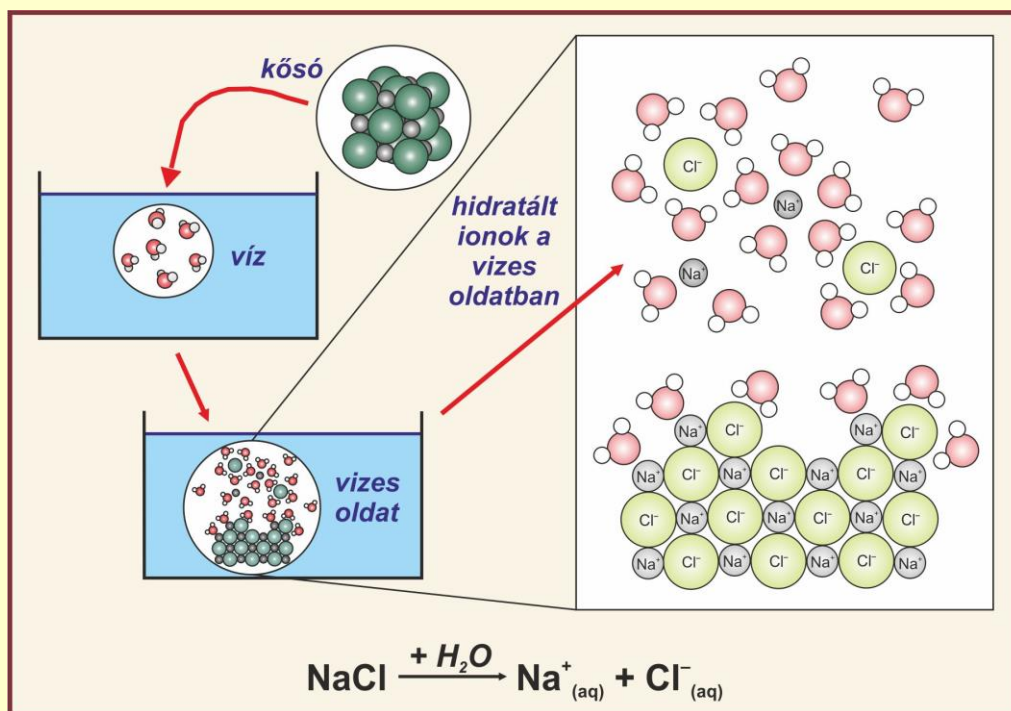
Gyakori vízben oldódó anyagok (Hetényi, 1999; Appelo, Postma, 2009; Whitten et al., 2014)

Oldható komponensek (általában)	Kivételek
$\text{Na}^+$ , $\text{K}^+$ , $\text{NH}_4^+$ vegyületek	nincs gyakori kivétel
fluoridok ( $\text{F}^-$ ), kloridok ( $\text{Cl}^-$ ), bromidok ( $\text{Br}^-$ ), jodidok ( $\text{I}^-$ )	<i>oldhatatlan:</i> $\text{MgF}_2$ , $\text{CaF}_2$ , $\text{SrF}_2$ , $\text{BaF}_2$ , $\text{PbF}_2$ , $\text{AgCl}$ , $\text{Hg}_2\text{Cl}_2$ , $\text{AgBr}$ , $\text{Hg}_2\text{Br}_2$ , $\text{PbBr}_2$ , a legtöbb nehézfém-jodid <i>forró vízben oldható:</i> $\text{PbCl}_2$ <i>mérsékelten oldható:</i> $\text{HgBr}_2$
szulfátok ( $\text{SO}_4^{2-}$ ); nitrátok ( $\text{NO}_3^-$ )	<i>oldhatatlan:</i> $\text{BaSO}_4$ , $\text{PbSO}_4$ , $\text{HgSO}_4$ <i>mérsékelten oldható:</i> $\text{CaSO}_4$ , $\text{SrSO}_4$ , $\text{Ag}_2\text{SO}_4$
acetátok ( $\text{CH}_3\text{COO}^-$ )	<i>mérsékelten oldható:</i> $\text{CH}_3\text{COOAg}$

Láttuk, hogy a savak, a lúgok, illetve a gyakori sók (ionvegyületek) általában jól oldódnak vízben, de eddig nem esett szó arról, hogy a különböző halmazállapotú (gáz, folyadék, szilárd) anyagok oldhatóságát, a belőlük készíthető vizes oldat töménységét milyen tényezők határozzák meg. Ennek jellemzésére és számszerűsítésére az **oldhatóság** segítségével nyílik lehetőség. Egy anyag oldhatósága azt fejezi ki, hogy adott hőmérsékleten hány grammja oldódik 100 g oldószerben (jele: S; mértékegysége: g/100 g oldószer). Az olyan oldat, amiben az adott hőmérsékleten több anyagot nem tudunk feloldani, a **telített oldat**. Az oldhatóság így a telített oldat összetételét adja meg. A szilárd és folyékony anyagok oldhatósága függ az oldott anyag jellegétől, az oldószertől (ami vizes rendszereknél a víz), valamint a hőmérséklettől (Rózsahegyi, 1993; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

A víz poláris oldószer, ezért a poláris molekulákat és az ionvegyületeket fogja jól oldani („hasonló a hasonlóban oldódik” elv; az apoláris molekulák apoláris oldószerekben oldódnak, például az elemi kén a szén-tetrakloridban vagy a szén-diszulfidban). Azokat az anyagokat, amelyek vízben oldódva ionokra disszociálnak, **elektrolitok**nak nevezzük (110. ábra). A hidratált ionok következtében ezek az oldatok vezetnek az elektromos áramot. Az erős elektrolitok (pl. erős savak vagy bázisok, vízoldható sók) teljesen disszociált formában vannak jelen az oldatban (pl. az oldott NaCl teljes mennyisége hidratált  $\text{Na}^+$ - és  $\text{Cl}^-$ -ionként). A gyenge elektrolitok viszont csak részlegesen disszociálnak (pl. foszforsav). Vannak olyan anyagok,

amelyek bár vízben oldódnak, oldódásuk során nem következik be disszociáció (pl. metanol); ezért ezek ionizáció nélkül, molekulaként lesznek jelen az oldatban. Az ilyen anyagokat nem-elektrolitoknak nevezzük, mert vizes oldatuk nem vezeti az elektromos áramot (Whitten et al., 2014; Gill, 2015).



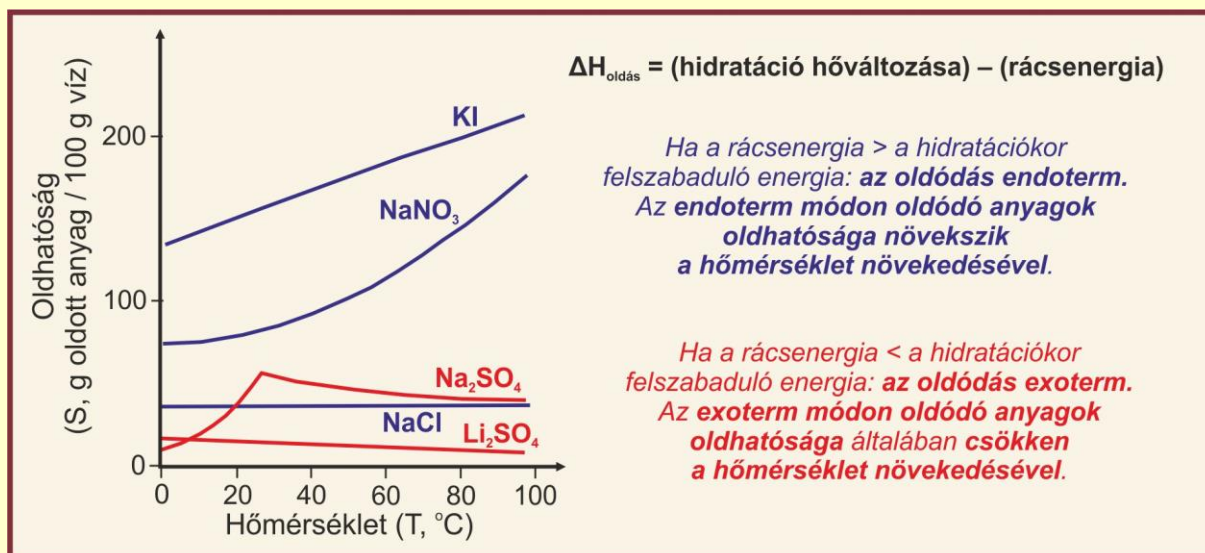
### 110. ábra

Elektrolitok oldódása a kősó példáján: a vízoldható sók teljes mértékben ionokra disszociálnak; az oldódás végén az oldott anyag teljes mennyisége hidratált ionok formájában lesz jelen a vizes oldatban (Whitten et al. 2014, módosítva)

Az oldhatóság hőmérsékletfüggését (**111. ábra**) az oldáshő segítségével tudjuk megadni, azonban ez a kapcsolat további magyarázatot igényel. Ha az oldódást kísérő energiaváltozást vesszük figyelembe, az *oldáshő* ( $\Delta H_{\text{oldás}}$ ) mutatja meg, hogy mekkora hő szabadul fel, vagy mennyi hőt vesz fel a rendszer, ha 1 mol anyagból nagyon híg oldatot készítünk (Boksay et al., 1987; Rózsahegyi, 1993; Whitten et al., 2014). Az oldódás tehát exoterm vagy endoterm folyamat egyaránt lehet (**2.2 alfejezet**). Ez attól függ, hogy az oldott anyag és az oldószer részecskéi között milyen erős kölcsönhatások alakulnak ki (Whitten et al., 2014).

A szilárd anyagok oldódási képességét nagymértékben befolyásolja, hogy milyen kristályszerkezetűek. Az oldás során ugyanis fel kell bontani a kristályrácsot, amihez be kell fektetni az ehhez szükséges *rácsenergiát*. Ez gyakorlatilag nem más, mint a kristályrácsban a tömegpontok között fellépő kémiai kötés energiája, tehát egy

ionvegyületnél (pl. kősó, NaCl) az ellentétes töltésű ionok között fellépő ionos kötés energiája (Koch, Sztrókay, 1994; Whitten et al., 2014). Az oldódás során ez a képzeletbeli első lépés mindig endoterm. A nagy töltésű és/vagy kisméretű ionok között általában erős az elektrosztatikus vonzás, ezért az ilyen vegyületek kristályrácsának felbontásához nagy energia befektetése szükséges. Minél kisebb a rácsenergia, annál könnyebben oldódik fel az adott szilárd anyag. Vizes oldatoknál a vízmolekulák között fellépő hidrogénkötéseket szintén figyelembe kell vennünk, hiszen részben ezeket is fel kell szakítani az oldáskor. A hőváltozást meghatározó harmadik folyamat a hidratáció, amely során a vízmolekulák és az oldott anyag részecskéi között lép fel gyenge kémiai kötés (ion-dipól kölcsönhatás; **5.2 alfejezet**). Ionos vagy poláris kovalens vegyületek oldásakor a hidratáció gyakran erősen exoterm részfolyamat (Boksay et al., 1987; Whitten et al., 2014; Gill, 2015).



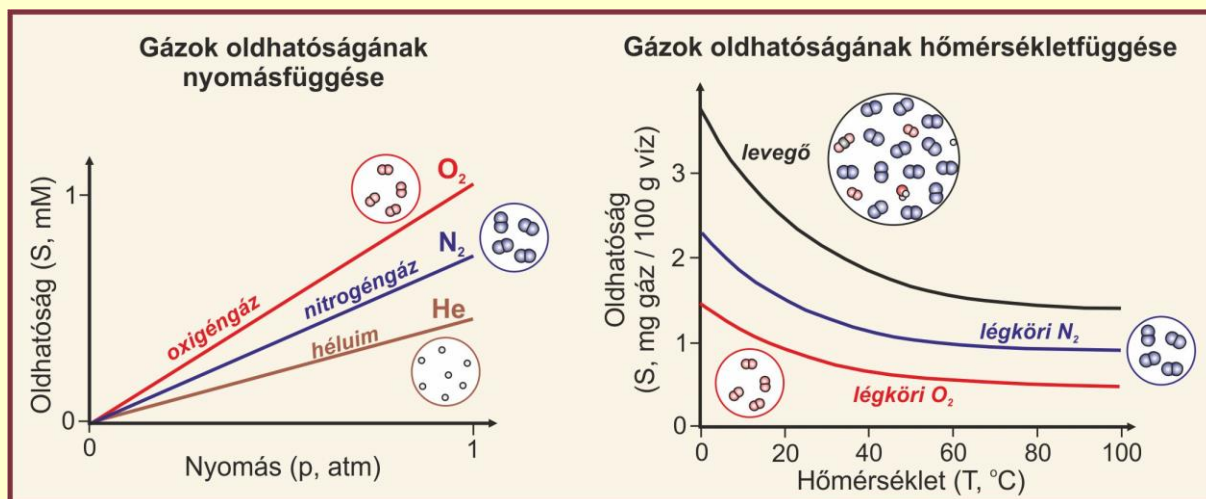
**111. ábra**

Sók oldhatóságának hőmérsékletfüggése (Whitten et al., 2014 alapján módosítva)

Az oldódás hőváltozását e három részfolyamat eredője adja meg:  $\Delta H_{\text{oldás}} = (\text{hidratáció hőváltozása}) - (\text{rácsenergia})$ . Ha a szilárd anyag kristályrácsának felbontásához szükséges energiát meghaladja a hidratációkor felszabaduló energia, az oldódás hőfelszabadulással jár, azaz exoterm lesz (pl. vízmentes nátrium-szulfát,  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ ; kalcium-klorid,  $\text{CaCl}_2$ ; nátrium-hidroxid,  $\text{NaOH}$ ). Ha viszont nem fedezi a hidratációshő a rács felbontásához szükséges energiát, az oldódás során a rendszer a környezettől vesz fel hő formájában energiát, tehát az oldódás endoterm (pl. ammónium-nitrát,  $\text{NH}_4\text{NO}_3$ ; nátrium-nitrát,  $\text{NaNO}_3$ ; kálium-nitrát,  $\text{KNO}_3$ ; nátrium-

klorid, NaCl; kálium-klorid, KCl; kálium-jodid, KI). A hidratációs energia és a rácsenergia a kis töltésű ionokból felépülő vegyületekben (pl. NaCl) gyakran azonos nagyságrendű, ezért ezek oldódása általában csupán kissé endoterm. Az endoterm módon oldódó anyagok oldhatósága növekszik a hőmérséklet növekedésével (**111. ábra**), hiszen magasabb hőmérsékleten több (hő)energia áll rendelkezésre az oldáshoz. Ezzel ellentétben, az exoterm módon oldódó anyagok oldhatósága általában csökken a hőmérséklet emelkedésével. Az exoterm oldódást hűtéssel lehet elősegíteni. A szilárd anyagok, illetve folyadékok vízben való oldhatóságára a nyomás változása nincs számottevő hatással (Whitten et al., 2014).

Gázok oldhatósága folyadékokban a gáz parciális nyomásától, a hőmérséklettől, továbbá az oldószer és a gáz anyagi minőségétől függ (Whitten et al., 2014; Gill, 2015). Adott hőmérsékleten egy gáz oldhatósága — amennyiben a gáz nem lép reakcióba az oldószerrel — arányos az oldattal egyensúlyban levő gáz parciális nyomásával ( $p_{\text{gáz}}$ ). Ezt a fizikai oldódásra vonatkozó összefüggést **Henry-törvénynek** nevezzük, ami a következő egyenlet formájában írható fel:  $S = k_H \cdot p_{\text{gáz}}$ , ahol az arányossági tényező a Henry-állandó ( $k_H$ ). Egy gáz nyomásának növekedése az oldódásának kedvez (Wilbraham et al., 2008; Whitten et al., 2014). A gázok többsége magasabb hőmérsékleten kevésbé oldódik folyadékokban (az oldódásuk exoterm folyamat), ami a vízben való oldhatóságukra is érvényes (**112. ábra**).



**112. ábra**

Gázok oldhatóságának nyomás- és hőmérsékletfüggése (Wilbraham et al., 2008 és Whitten et al., 2014 alapján módosítva)

A levegőben található, vízzel nem reagáló apoláris molekulák (pl. N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>), továbbá a nemesgázok (pl. hélium, He; neon, Ne; argon, Ar; kripton, Kr) vízben

történő oldódása egyszerű fizikai folyamat. A vízi élőlények szempontjából kiemelkedő jelentősége van a vízben (hidroszférában) oldott oxigénnek, hiszen ennek mennyisége a légzési és a lebontási folyamatokat egyaránt szabályozza (Appelo, Postma, 2009; Whitten et al., 2014). A vízben oldott oxigén mennyisége a hőmérséklet növekedésével párhuzamosan csökken. Hosszan tartó nyári hőség esetén ezért hallhatunk arról, hogy kisebb tavakban, holtágakban az oxigénszint csökkenése halak, kagylók pusztulását eredményezi. A vízben oldott nemesgázok (pl. Ar, Kr) radioaktív izotópjainak segítségével felszín alatti vizek kora határozható meg néhány évestől néhány százezer éves időtartamban (Appelo, Postma, 2009).

Bizonyos gázok a fizikai oldódáson túl reakcióba is lépnek a vízzel (kémiai oldódás). Egyes vulkáni gázokban nagyobb mennyiségben fordulhat elő kén-hidrogén ( $\text{H}_2\text{S}$ , gyenge sav), továbbá a kéntartalmú szerves anyag (pl. fehérjék) rothadása is kén-hidrogén felszabadulásával járhat, ami vízben viszonylag jól oldódó, mérgező gáz. Az oldott kén-hidrogén a légzési láncot mérgezi, és a felszíni vizekben erős oxigénfogyasztó. Földtudományi szempontból kiemelt jelentőségű az apoláris szén-dioxid oldódása, ami szénsav ( $\text{H}_2\text{CO}_3$ ) képződését eredményezi. A légköri szén-dioxiddal egyensúlyban levő víz kémhatása ezért mindig gyengén savas, ami a kémiai mállás egyik fontos befolyásoló tényezője (Appelo, Postma, 2009; Gill, 2015).

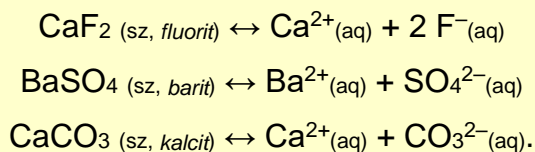
### **Megjegyzés:**

A szénsavas üdítő vagy ásványvíz olyan ital (oldat), ami viszonylag nagy nyomáson telített szén-dioxiddal. Amikor egy ilyen palackot felnyitunk, megbontjuk a benne uralkodó egyensúlyt. A nyitás hatására az ital felszíni nyomása lecsökken a légköri nyomásnak megfelelően, az oldott szén-dioxiddal túltelített lesz a rendszer, ami heves pezsgést, „buborékképződést” idéz elő. A  $\text{CO}_2$  egy része kigázosodik az oldatból, hiszen a nyomás csökkenésével párhuzamosan csökken a  $\text{CO}_2$  oldhatósága is. Ez az egyszerű kísérlet felhasználható a Henry-törvény szemléltetésére (Whitten et al., 2014; Gill, 2015).

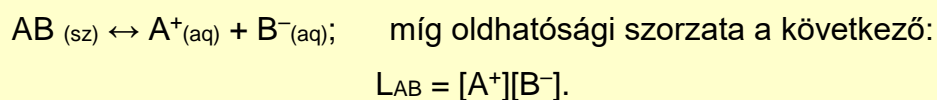
Hasonló folyamat játszódik le az illó komponensekben gazdag kőzetolvadék gyors felszínre jutásakor is: a nyomás csökkenése miatt a magma kigázosodik, ami gyakran heves, pusztító robbanásos kitöréseket eredményez. Az apró cafatokra szakadt magmadarabok a levegővel érintkezve nagyon gyorsan megszilárdulnak, bennük az elkülönülő gázok hólyagüregeket formálhatnak. Ennek eredményeként kerekded vagy elnyúlt, csatornaszerű üregeket tartalmazó kőzetváltozatok (bazaltos törmelék: salak; riolitos törmelék: horzsakő vagy habkő) jönnek létre (Gill, 2015; Harangi, 2015).

Amennyiben egy jól behűtött szénsavas italt bontunk fel, a kigázosodás (pezsgés, habképződés) alig észlelhető. A felmelegedett ital felbontásakor azonban olyan heves is lehet, hogy az ital „kifut” a palackból. Ez a jelenség egyszerűen érzékelteti az oldhatóság hőmérsékletfüggését is: a  $\text{CO}_2$  magasabb hőmérsékleten kevésbé oldódik vízben, ezért az egyensúly megbontásakor (a palack felnyitásakor) intenzívebb az oldat kigázosodása.

A természetben lejátszódó folyamatok szempontjából a vízben kevésbé oldódó, gyakran oldhatatlannak tekintett vegyületek oldhatóságát külön meg kell vizsgálnunk. Ilyen például a kalcium-fluorid ( $\text{CaF}_2$ , fluorit), a bárium-szulfát ( $\text{BaSO}_4$ , barit), továbbá a kalcium-karbonát ( $\text{CaCO}_3$ ), ami kalcitként az egyik legfontosabb kőzetalkotó (pl. mészkő, márvány) karbonátásvány. A csontok, fogak felépítésében meghatározó szerepű kalcium-foszfát [ $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ ] szintén rosszul oldódik vízben (Koch, Sztrókay, 1994; Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014; Gill, 2015). Ezek az anyagok valójában nem oldhatatlanok, csak nagyon kis mértékben oldódnak fel. Oldódásuk egy adott hőmérsékleten dinamikus egyensúlyra vezet: a telített oldat elérését követően több anyag már nem oldódik fel. Az oldatban időegység alatt feloldódó komponensek mennyisége azonos lesz a szilárd fázisként kiváló komponensek mennyiségével. Ebben az esetben az oldódás — és ezen keresztül az oldhatóság — leírható az egyensúlyi termodinamika segítségével (Atkins, 1992; Whitten et al., 2014; Gill, 2015). A folyamat felírásakor az egyenlet bal oldalán a szilárd anyag (ionvegyület), míg a jobb oldalán a telített oldatban levő hidratált ionok szerepelnek:



Az egyensúlyi rendszerre alkalmazható a tömeghatás törvénye, azaz a komponensek aktivitásainak segítségével kifejezhető az egyensúlyi állandó (**113. ábra**). Mivel a szilárd anyag csak egy tiszta komponenst tartalmaz (a móltörtje 1), az adott anyag oldatában egy adott hőmérsékleten a hidratált ionok aktivitásainak megfelelő hatványon vett szorzata állandó. Ezt nevezzük **oldhatósági szorzatnak** (jele:  $L_s$ ), ami a vízben rosszul oldódó vegyületeknél az oldhatóság alternatív megadási módját jelenti (Atkins, 1992; Appelo, Postma, 2009; Whitten et al., 2014; Gill, 2015). Az oldhatóság — a pH-hoz, illetve a  $\text{pK}_s$  és  $\text{pK}_b$  értékekhez hasonló módon — megadható az oldhatósági szorzat tízes alapú negatív logaritmusának segítségével is (Gill, 2015), ami a  $\text{pL}_s$  érték ( $-\log L_s = \text{pL}_s$ ). Egy tetszőleges „AB” ionvegyület (pl. ezüst-klorid,  $\text{AgCl}$ ) oldódása az alábbi egyenlet szerint írható fel:



Néhány gyakori, vízben rosszul oldódó vegyület oldódási egyenletét és oldhatósági szorzatát a **24. táblázat** tartalmazza.



A tömeghatás törvénye alapján:

$$K = \frac{[\text{Ca}^{2+}][\text{F}^{-}]^2}{[\text{CaF}_2]}$$

a szilárd anyag móltörtje 1,  
összevonható az egyensúlyi állandóval:  
 $K[\text{CaF}_2] = L_s$  (oldhatósági szorzat)

$$L_s = [\text{Ca}^{2+}][\text{F}^{-}]^2 = 3,9 \cdot 10^{-11} \quad (25^\circ \text{C})$$



A tömeghatás törvénye alapján:

$$K = \frac{[\text{Ag}^{+}][\text{Cl}^{-}]}{[\text{AgCl}]}$$

a szilárd anyag móltörtje 1,  
összevonható az egyensúlyi állandóval:  
 $K[\text{AgCl}] = L_s$  (oldhatósági szorzat)

$$L_{\text{AgCl}} = [\text{Ag}^{+}][\text{Cl}^{-}] = 1,8 \cdot 10^{-10} \quad (25^\circ \text{C})$$

Általános alakban felírva:



A tömeghatás törvénye alapján:

$$K = \frac{[\text{A}^{+}][\text{B}^{-}]}{[\text{AB}]}$$

a szilárd anyag móltörtje 1,  
összevonható az egyensúlyi állandóval:  
 $K[\text{AB}] = L_s$  (oldhatósági szorzat)

$$L_{\text{AB}} = [\text{A}^{+}][\text{B}^{-}]$$



A tömeghatás törvénye alapján:

$$K = \frac{[\text{A}^{m+}]^n [\text{B}^{n-}]^m}{[\text{A}_n\text{B}_m]}$$

a szilárd anyag móltörtje 1,  
összevonható az egyensúlyi állandóval:  
 $K[\text{A}_n\text{B}_m] = L_s$  (oldhatósági szorzat)

$$L_s = [\text{A}^{m+}]^n [\text{B}^{n-}]^m$$

### 113. ábra

Az oldhatóság, mint egyensúly: az oldhatósági szorzat levezetése (Whitten et al., 2014)

### 24. táblázat

Gyakori vízben rosszul oldódó („oldhatatlan”) komponensek oldhatósága az oldhatósági szorzat segítségével megadva (Whitten et al., 2014 alapján)

Az oldódás egyenlete	Oldhatósági szorzat	$L_s$ (25 °C)
$\text{BaSO}_4 (\text{sz}) \leftrightarrow \text{Ba}^{2+} (\text{aq}) + \text{SO}_4^{2-} (\text{aq})$	$L_s = [\text{Ba}^{2+}][\text{SO}_4^{2-}]$	$1,1 \cdot 10^{-10}$
$\text{CaCO}_3 (\text{sz}) \leftrightarrow \text{Ca}^{2+} (\text{aq}) + \text{CO}_3^{2-} (\text{aq})$	$L_s = [\text{Ca}^{2+}][\text{CO}_3^{2-}]$	$4,8 \cdot 10^{-9}$
$\text{Al}(\text{OH})_3 (\text{sz}) \leftrightarrow \text{Al}^{3+} (\text{aq}) + 3 \text{OH}^{-} (\text{aq})$	$L_s = [\text{Al}^{3+}][\text{OH}^{-}]^3$	$1,9 \cdot 10^{-33}$
$\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2 (\text{sz}) \leftrightarrow 3 \text{Ca}^{2+} (\text{aq}) + 2 \text{PO}_4^{3-} (\text{aq})$	$L_s = [\text{Ca}^{2+}]^3 [\text{PO}_4^{3-}]^2$	$1,0 \cdot 10^{-25}$

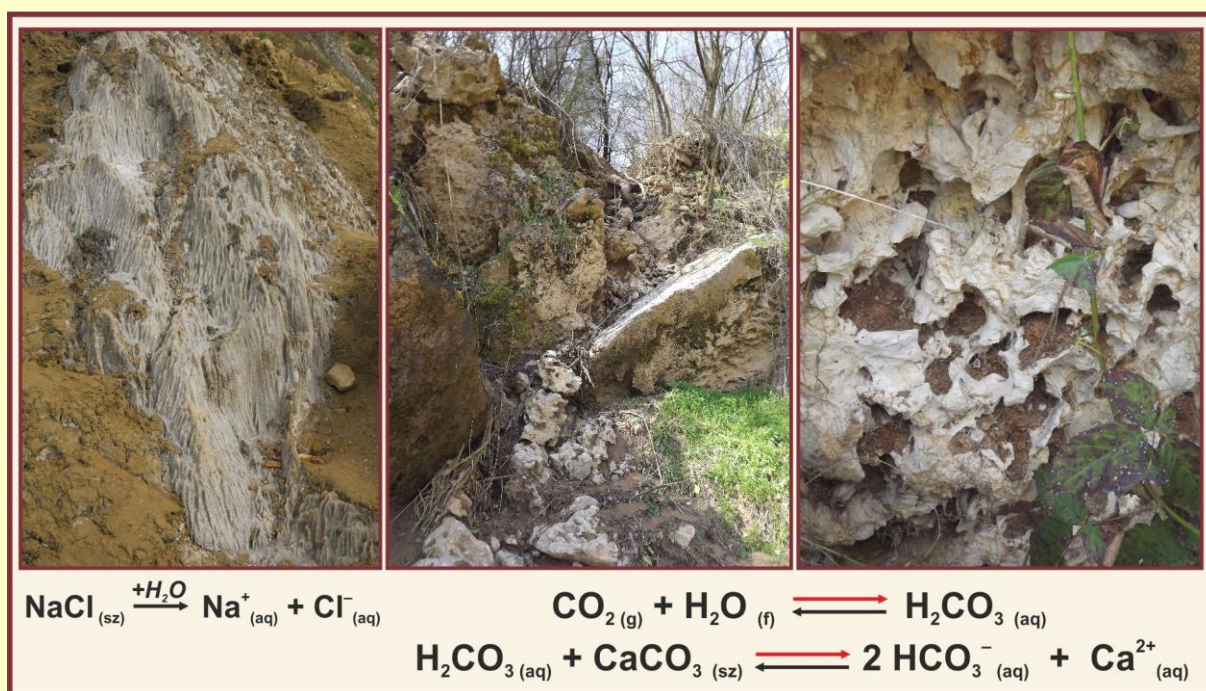
### Megjegyzés:

Az oldhatóság (S) megadásakor több különböző formával találkozhatunk:

- ? g oldott anyag 100 g oldószerben (pl. vízben),
- ? g oldott anyag 1 kg oldószerben (pl. vízben),
- ? mol oldott anyag 1 dm<sup>3</sup> oldatban (molaritás, c),

valamennyi esetben közös viszont az, hogy az oldhatóság az adott körülmények között telített oldat összetételét jelenti (Rózsahegyi, 1993; Whitten et al., 2014).

Az ásványok oldódása két fő mechanizmus szerint mehet végbe a természetben: *kongruens* (latin eredetű szó, jelentése: megegyező, összeillő, egybevágó) vagy *inkongruens* (nem összeillő) módon. A **kongruens oldódás** az ásvány sztöchiometriájának megfelelően történik, azaz a szilárd fázis az adott hőmérséklethez tartozó oldhatóság szerinti mértékben ionokra disszociál. A természetben lejátszódó folyamatok közül ide sorolható az evaporitok (sókőzetek) oldódása (pl. anhidrit:  $\text{CaSO}_4 \leftrightarrow \text{Ca}^{2+} + \text{SO}_4^{2-}$ ) vagy a karbonátoldódás (pl. kalcit:  $\text{CaCO}_3 \leftrightarrow \text{Ca}^{2+} + \text{CO}_3^{2-}$ ). A folyamat a dinamikus egyensúly beálltáig tart (Hetényi, 1999; Appelo, Postma, 2009; Varsányi, 2009; Whitten et al., 2014; Gill, 2015). A kémiai mállás során a kongruens oldódás alapvető szerepet játszik a felszín morfológiájának kialakításában (pl. sókarrok képződése, karsztosodás; **114. ábra**).



#### **114. ábra**

A kongruens oldódás felszínformáló hatása: sókarr Parajdról (balra, fotó: Pál-Molnár E.) és jellegzetes mészkőoldódási formák a Villányi-hegységből (Zuhánya-bánya, triász mészkő)


A légkörben a vízgőz kondenzációjakor a légköri  $\text{CO}_2$  beoldódik a csapadékba, ezért a felszínre hulló esővíz természetes savassága pH=5,6 körüli (**108. ábra**). A  $\text{CaCO}_3$  oldódását ez a gyengén savas környezet elősegíti. A beszivárgás során a légzési folyamatok hatására (pl. növények gyökérlégzése) vagy az elhalt szerves anyag bomlásából további  $\text{CO}_2$  kerülhet a felszín alatti vizekbe, tovább fokozva azok oldó hatását (Appelo, Postma, 2009; Varsányi, 2009).

Ez a folyamat ellentétes módon is lejátszódhat, ha az átalakulás helyett a visszaalakulásnak kedveznek a környezeti feltételek (pl. hőmérséklet, CO<sub>2</sub> parciális nyomásának megváltozása). Az oldódás ellentétes folyamata a szilárd anyag oldatból történő kiválása („kicsapódás”). Mészkegységekben gyakori jelenség, hogy a beszivárgó oldatból a felszín alatti üregek, barlangok falán ásványkiválás következik be, ami eredményeként változatos cseppkőképződmények jönnek létre (115. ábra). Hasonló jelenség a vízkő kiválása a Ca<sup>2+</sup>- és HCO<sub>3</sub><sup>-</sup>-ionokban gazdag termásvizekből (Whitten et al., 2014; Gill, 2015; Varga et al., 2019).

$$\text{H}_2\text{CO}_3(\text{aq}) + \text{CaCO}_3(\text{sz}) \rightleftharpoons 2\text{HCO}_3^-(\text{aq}) + \text{Ca}^{2+}(\text{aq})$$

$$\text{CO}_2(\text{g}) + \text{H}_2\text{O}(\text{f}) \rightleftharpoons \text{H}_2\text{CO}_3(\text{aq})$$

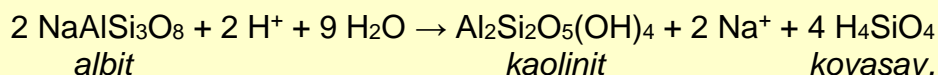
Ha a CO<sub>2</sub> eltávozik a rendszerből (kigázosodás) ásványkiválás következik be.



**115. ábra**

Karbonátkiválás természetes és mesterséges környezetben: cseppkő- és vízkőképződés  
 Cseppkőformák az esztramosi Rákóczi-barlangban (felső képek) és az aggteleki Baradla-barlangban  
 (alsó sor, bal oldali kép), Aggteleki-karszt, Aggteleki Nemzeti Park. A szegedi geotermikus  
 rendszerben (újszegedi geotermikus kaszkádrendszer) kivált nagy vastagságú, kalcit anyagú vízkő  
 (alsó sor, középső és jobb oldali kép; fotók: Varga et al., 2019 alapján)

**Inkongruens oldódás** esetén az ásványból csak bizonyos alkotórészek (pl. a vizes közegben jól oldódó alkálifém- vagy alkáliföldfémionok) oldódnak ki. Az oldódás során másodlagos ásvány keletkezik, ami a mállástermékben felhalmozódhat. Ilyen folyamat a kőzetalkotó szilikátok mállása, ezen belül a legjellemzőbb a földpátmállás. A környezeti paraméterektől függően (pl. hőmérséklet, csapadék mennyisége, pH, domborzati viszonyok) a kémiai mállás termékeként különböző agyagásványok (pl. szmektit, kaolinit) keletkezhetnek (Koch, Sztrókay, 1994; Appelo, Postma, 2009; Varsányi, 2009). Az ásványok stabilitási viszonyait a termodinamika törvényei alapján lehet modellezni (pl. aktivitási diagramok; **98. ábra**). Meleg/forró éghajlaton, viszonylag nagy mennyiségű csapadék és nagy víz/kőzet arány (intenzív átöblítés) mellett, enyhén savas kémhatású rendszerben a földpátok (pl. albit) gyakran kaolinné alakulnak az alábbi egyenlet szerint:



Az inkongruens oldódás szintén alapvető szerepet kap a felszíni formakincs kialakításában és a talajképződési folyamatokban (**116. ábra**), illetve a természetes vizek kémiai összetételének meghatározásában (Hetényi, 1999; Appelo, Postma, 2009; Varsányi, 2009).



**116. ábra**

Az inkongruens oldódás szerepe a talajképződésben: a gránit aprózódása és kémiai mállása során keletkezett kőzettörmelékben (*regolit*, gránitmurva) az üde földpátok (pl. hússzínű káliföldpát) átalakulása agyagásványok képződését eredményezi, ami a talajosodási folyamatok egyik meghatározó lépése (Velencei-hegység, Pákozd). A gránit olyan savanyú mélységi magmás kőzet, amelynek uralkodó elegyrészei a káliföldpát (pl. ortoklász), a kvarc, a plagioklász (Na-dús) és a biotit.

Az ásványkiválás, illetve a másodlagos ásványok képződése fontos szerepet tölt be a természetes vizek kémiai összetételének befolyásolásában. A víz és a vízzel érintkező szilárd anyag között ugyanis speciális megkötődési (pl. **adszorpció**), illetve kicserélődési (pl. **ioncsere**) folyamatok játszódhatnak le. Ezekben bizonyos szilikátok, illetve a rosszul oldódó oxidok/hidroxidok szerepe kiemelkedő (Hetényi, 1999; Appelo, Postma, 2009; Varsányi, 2009).

Az **adszorpció** gáz (gőz), folyadék, illetve diszpergált (finoman elosztatott) szilárd komponens megkötődése egy szilárd anyag felületén. Az adszorpció spontán felületi jelenség, ami lehet tisztán fizikai jellegű (fizikai adszorpció vagy fizisorpció), amikor gyenge másodrendű kötőerők lépnek fel a szilárd felület és a megkötött anyag részecskéi között; illetve kémiai jellegű (kémiai adszorpció vagy kemisorpció), amikor a felületen kémiai reakció is lejátszódik. A megkötődés hőfelszabadulással jár, a lejátszódó spontán folyamat miatt keletkező adszorpciós hő nagyságrendben a szublimációs hővel mérhető össze. Az adszorpció általában megfordítható, azaz reverzibilis folyamat. Ellentéte a **deszorpció**, amikor az adszorbens felületéről távozik a megkötött anyag (Bárány et al., 2011).

Az adszorpcióhoz szükséges szilárd anyagot **adszorbens**nek nevezik, ami nagy aktív felülettel rendelkezik (nagy fajlagos felületű, pl. porózus, lyukacsos szerkezetű). Az iparban ilyen az aktív vagy orvosi szén (fajlagos felület: több száz vagy ezer m<sup>2</sup>/g feletti), a szilikagél (speciális szilícium-dioxid), az aktivált timföld (alumínium-oxid). A természetes rendszerekben hasonló tulajdonsággal bírnak bizonyos amorf vagy kristályos szervetlen vegyületek (pl. Fe<sup>3+</sup>- és Mn<sup>4+</sup>-oxidok/hidroxidok, Al-hidroxid, duzzadó agyagásványok, zeolitok). A földtudományokban számos folyamat adszorpcióhoz kapcsolódik. Ilyen a természetes vizek öntisztulása, a szennyeződések (pl. toxikus fémionok) megkötődése, vagy éppen mobilizációja (Appelo, Postma, 2009; Bárány et al., 2011).

Az adszorpció egyik speciális esete az úgynevezett ioncsereadszorpció vagy **ioncsere**, amikor az elektrolit oldat egyik ionja helyet cserél a szilárd felület valamelyik (vagy több) hasonló töltésű ionjával (Varsányi, 2009; Bárány et al., 2011).

#### **Megjegyzés:**

A mindennapi életben gyakran találkozunk adszorpcióval: ha hajunk vagy ruhánk „beszív” egy kellemes illatot (vagy egy kellemetlen szagot), szintén ezzel a jelenséggel van dolgunk. Hétköznapi deszorpciónak tekinthető viszont a ruhák szellőztetése vagy a vasalás, hiszen ekkor eltávoznak a felülethez gyengén kötődő gázok és gőzök.

### **Jó tudni!**

A kiváló adszorpciós tulajdonságú szilikagéllel (az angol *silica* jelentése szilícium-dioxid, azaz  $\text{SiO}_2$ ) a hétköznapi életben is gyakran találkozhatunk. A szilikagél olyan pórusos adszorbens, amelynek összetevője  $\text{SiO}_2$ . Ezt nátrium- vagy kálium-szilikát savval való kezelésével vizes oldatban állítják elő. Ennek során poliszilícium-savak kocsonyája (innen ered a gél elnevezés) képződik, amiből a víz eltávolításával száraz pórusos adszorbenst nyernek (Bárány et al., 2011). A nedvszívó szilikagél (*desiccant silica gel*) a levegőben található nedvesség (vízpára) megkötésére képes. Ezt a nedvességmegkötő tulajdonságot használják ki, amikor a minőség megőrzése miatt bizonyos termékek (pl. táskák, cipők, elektronikai eszközök) mellé szilikagéllel töltött tasakot tesznek.



*A szilikagél nem mérgező, de nem ehető és nem játéktárgy! Ügyelni kell arra, hogy kisgyermek kezebe ne kerüljön!*

Az ioncsere egyensúlyra vezető folyamat, az egyensúly általában viszonylag rövid idő alatt beáll. Az ioncserének szintén komoly földtudományi (ásványtani) vonatkozásai vannak: bizonyos agyagásványok (pl. szmektitok), illetve a zeolitok kiváló ioncserélő képességűek. A szmektit-csoportba tartozó agyagásványok (rétegszilikátok) kristályszerkezetük rétegek közötti terében cserélhető kationok (pl.  $\text{Na}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ), illetve víz helyezkedhet el. A térhálós szilikátok közé tartozó zeolitok különböző méretű, szilárd vázú pórusrendszerrel rendelkeznek, amelyben kationcserélő (pl.  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ) pozíciók vannak. Az ioncserének komoly szerepe van a vízlágyításban, a víz sómentesítésében, továbbá a nehézfém- és radioaktív ionok vizekből és talajból történő eltávolításában (Koch, Sztrókay, 1994; Hetényi, 1999; Varsányi, 2009; Bárány et al., 2011).

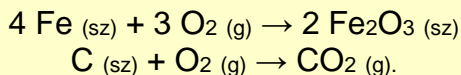
### **Megjegyzés:**

Cseppkőképződés nem csak barlangokban jöhet létre. A 8. fejezet címlapján szereplő fotó a kiskunfélegyházi vár pincéjének falán növekedő parányi cseppkőket mutat be. Számos jelenség mögött egyszerű kémiai folyamat rejlik. Járj nyitott szemmel!

## 8.2. Redoxireakciók, elektrokémiai alapok

Az előző alfejezetben megismerkedtünk a protonátmenettel járó *sav–bázis* reakciókkal, de eddig részletesen nem esett szó az elektronátmenettel járó, úgynevezett oxidációs–redukációs reakciókról (elterjedtebb néven: **redoxireakciók**), amelyek szintén kiemelt jelentőségűek a természetben (Boksay et al., 1987, 1990; Appelo, Postma, 2009; Varsányi, 2009; Bárány et al., 2011; Gill, 2015). A gyakori anyagok és tulajdonságaik bemutatásakor (3. fejezet) több **oxidálószer** (ami elektront vesz fel a redoxireakcióban; pl. oxigén, ózon, klórgáz), illetve **redukálószer** (ami elektront ad le a redoxireakcióban; pl. grafit, szén-monoxid) szerepelt. Itt az ideje, hogy tisztázzuk az *oxidáció* és a *redukció* fogalmát!

Az **oxidáció** kifejezést eredetileg az oxigénnel történő kémiai reakció jellemzésére használták, amely során az adott elem oxidációs állapota növekszik, miközben elektront ad le. Ilyen folyamat a rozsdásodás (a vas, azaz elemi fém oxidációja) vagy az energiahordozók égése (pl. a szén égése szén-dioxiddá). A kapcsolódó reakcióegyenletek az alábbiak:



Az oxidáció ellentétje a **redukció**, ami eredetileg az oxigén eltávolítását jelentette egy adott vegyületből. A fémek előállítását oxidos ércekből redukcióval lehetséges, ami az oxidációs állapot csökkenésével, illetve elektron felvételével jár (Rózsahegyi, 1993; Varsányi, 2009; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

Egy kémiai reakció során az elektronok nem keletkezhetnek és nem is tűnhetnek el, ezért az oxidáció és a redukció mindig egymással párhuzamosan, szimultán módon játszódik le. Az oxidációs állapot megadására az **oxidációs szám** szolgál, ami egyszerű szabályok segítségével számszerűsíthető. Megállapodás szerint az elemekben lévő atomok oxidációs száma nulla. A gyakorlatban az oxidációs szám megadja, hogy egy atomnak mennyi lenne a töltése, ha gondolatban a kémiai kötést létrehozó elektronokat teljes mértékben az elektronegatívabb atomhoz rendelnénk (Boksay et al., 1987, 1990; Whitten et al., 2014).

*Redoxireakció* minden olyan reakció, amely során legalább egy elemnek megváltozik az oxidációs száma (117. ábra). Az ilyen reakciók során a redukálószer

oxidálódik, míg az oxidálószer redukálódik. A redoxi folyamatokban azok az anyagok, amelyek elektront adnak le (ezzel oxidálódnak) az elektron donorok, míg azok, amelyek elektront vesznek fel (ezzel redukálódnak) az elektron akceptorok (Varsányi, 2009). A korábbi példareakciók közül a vas rozsdásodásakor mind az elemi vas, mind az oxigénatomok oxidációs száma az oxigénmolekulában (elemi állapot) nulla. A termékben viszont az oxigénatomok oxidációs száma  $-2$ , míg a vasatomoké  $+3$ . A reakció során a vas oxidálódik, az oxidációs száma növekszik ( $0 \rightarrow +3$ ), míg a redukálódó oxigéné csökken ( $0 \rightarrow -2$ ). A szén égésekor a szén a redukálószer, az elektronleadás következtében az oxidációs száma növekszik ( $0 \rightarrow +4$ ).

### **Jó tudni!**

Egyszerű szabályok az oxidációs szám megállapítására (Boksay et al., 1987, 1990):

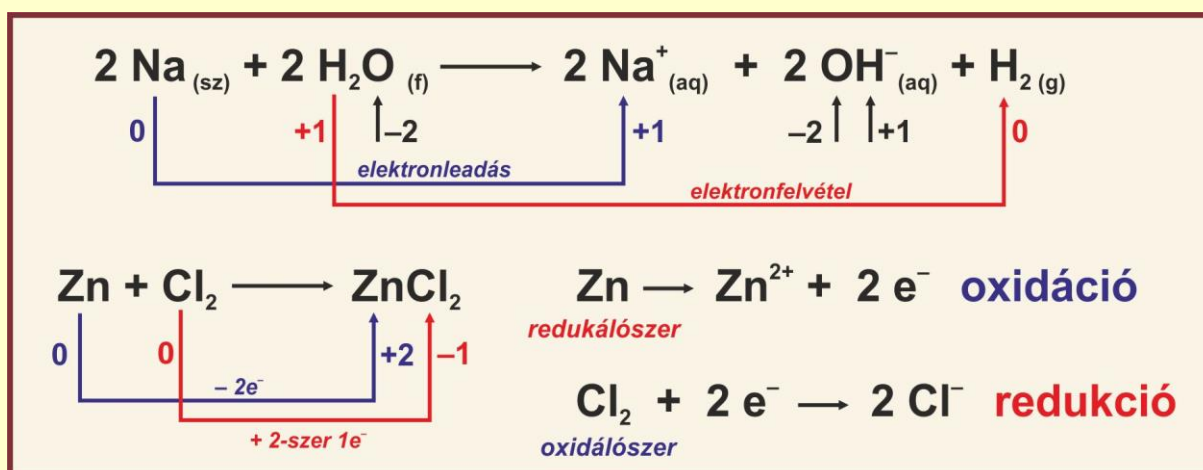
- Elemekben lévő atomok oxidációs száma nulla (pl. Ar, O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, Cl<sub>2</sub>, S<sub>8</sub>, Na, Fe).
- Egyatomos ionokban az atom oxidációs száma az ion töltésével (azaz vegyértékével) egyezik meg (pl.  $+1$ : Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>;  $+2$ : Ca<sup>2+</sup>, Fe<sup>2+</sup>, Cu<sup>2+</sup>;  $-1$ : Br<sup>-</sup>, F<sup>-</sup>).
- Vegyületekben az alkálifémek oxidációs száma  $+1$ , az alkáliföldfémeké  $+2$ , az alumíniumé  $+3$ .
- A F (és a halogének) oxidációs száma mindig  $-1$  (kivéve elem: F<sub>2</sub>, ahol  $0$ ).
- Az O oxidációs száma mindig  $-2$  (kivéve O<sub>2</sub> ( $0$ ); peroxidok, pl. HOOH, ahol  $-1$ ).
- A H oxidációs száma  $+1$  (kivéve H<sub>2</sub> ( $0$ ); fém-hidridek, pl. NaH, ahol  $-1$ ).
- Az atomok oxidációs számának összege egy semleges molekulában (vegyületben) nulla, összetett ionban pedig megegyezik az ion töltésével.

Az oxidációs szám mindig egy atomra vonatkozik. Ha az atomból az adott molekulában több szerepel, a sztöchiometriának megfelelően kell az oxidációs számot szorozni. Egy vegyületben vagy összetett ionban az oxidációs számok meghatározásakor célszerű mindig a kötött oxidációs számú (általában állandó vegyértékű) atomokkal kezdeni.

A Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-ban az oxigén oxidációs száma  $-2$ , tehát a 3 oxigénatomnak összesen  $-6$ , amit két vas kompenzál. Ennek megfelelően a vas oxidációs száma  $+3$  ( $+6/2$ ), hiszen a vas(III)-oxid semleges (töltés nélküli) vegyület. Hasonló megfontolásból a CO<sub>2</sub>-ban a két oxigén oxidációs száma 2-szer  $-2$  (összesen  $-4$ ), tehát a szén oxidációs száma  $+4$ . Néhány gyakori szerves vegyületben az atomok oxidációs száma a következő:

- a szén-monoxidban (CO) a C:  $+2$ , az O:  $-2$ ;
- a kén-hidrogénben (H<sub>2</sub>S) a H:  $+1$ , a S:  $-2$ ;
- a kén-dioxidban (SO<sub>2</sub>) a S:  $+4$ , az O:  $-2$ ;
- a kén-trioxidban (SO<sub>3</sub>) a S:  $+6$ , az O:  $-2$ ;
- a szulfátionban (SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>) a S:  $+6$ , az O:  $-2$  (4-szer  $-2 = -8$ , a szulfátion töltése  $-2$ , azaz a kénre jutó töltéskompenzáció  $-6$ , tehát a kén oxidációs száma  $+6$ );
- a foszfátionban (PO<sub>4</sub><sup>3-</sup>) a P:  $+5$ , az O:  $-2$ .

Az oxidációs szám, illetve oxidációs állapot megértése nagyon fontos számos természeti folyamat (pl. szulfidos ércék felszíni mállása, az elhalt szerves anyag bomlása üledékes környezetben, biogeokémiai körfolyamatok) értelmezése szempontjából, hiszen a környezet oxidációs állapotának függvényében számos vegyület stabilitása megváltozik. Az elektrokémiai folyamatok (elektronátmenethez kapcsolódó kémiai energia átalakítása elektromos energiává) megértéséhez szintén nélkülözhetetlen a redoxireakciók elméleti alapjainak ismerete (Whitten et al., 2014).



117. ábra

Redoxireakció: az oxidációs szám megváltozásával járó kémiai reakció  
A redoxireakció két félreakcióra bontható: ezek az oxidációs és a redukciós félreakciók (Whitten et al., 2014). Az elektronátadásban részt nem vevő atomok oxidációs száma fekete színű.

A redoxireakciók közé tartoznak az **elektrokémiai reakciók**, amelyeknél az oxidáció és a redukció egymástól fizikailag elszeparált helyen játszódik le. Az elektrokémia az elektromos áram hatására bekövetkező kémiai változásokat, illetve a kémiai reakciók során termelődő elektromosságot (pl. elemek, akkumulátorok, üzemanyagcellák) tanulmányozza. Számos fém ércekből történő előállítása és tisztítása, illetve egyes fémek korrózióvédelme (pl. galvanizálás) elektrokémiai folyamat (Whitten et al., 2014). Az elektrolitból és **elektród**ból álló elektrokémiai rendszer az elektrokémiai cellában található, amelyben az elektromos áram nem más, mint az elektródokon keresztül történő töltésáramlás. A cellában elsőrendű vezető (fémes vezető) érintkezik másodrendű vezetővel (ion- vagy elektrolitvezető; sóoldadék vagy elektrolit oldat, pl. fémionok vizes oldata). Az elektrokémiai cellában a két elektród egy elektrolitba, vagy egymással **sóhídon** vagy **diafragmán** keresztül érintkező két különböző elektrolitba merül. Az elektródok felületén játszódnak le a félreakciók (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

Az elektródok nem minden esetben vesznek részt a redoxireakcióban. A nem reagáló elektródot **inert elektród**nak nevezzük. Az elektrokémiai cellában a pozitív töltésű ionok (kationok) a negatív elektród felé mozognak, ezzel szemben a negatív töltésű ionok (anionok) a pozitív elektród irányába vándorolnak. A **katód** az az elektród, ahol a redukció (elektronfelvétel) történik. Az **anód** az elektronleadás helyszíne, tehát az az elektród, ahol az oxidáció játszódik le. Az elektrokémiai cella típusától függően mindkettő lehet pozitív vagy negatív elektród (Whitten et al., 2014).

### **Tipp a tanuláshoz:**

Az elektrokémiai reakciók megértéséhez alapvetően fontos, hogy tudjuk, a redukció mindig a katódon, az oxidáció pedig az anódon játszódik le. Ez könnyen megjegyezhető az alábbi módok segítségével:

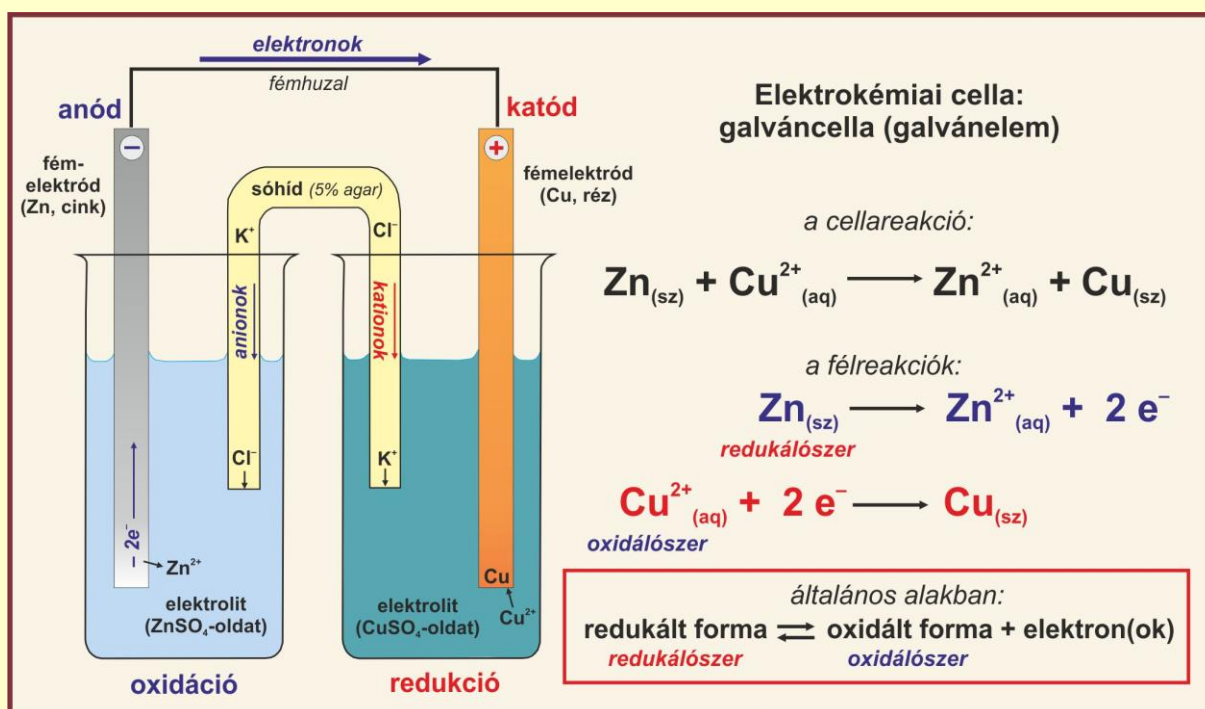
- a magánhangzóval kezdődő nevű elektródon lejátszódó folyamat neve is magánhangzóval kezdődik (anódon oxidáció),
- a mássalhangzóval kezdődő nevű elektródon lejátszódó folyamat neve is mássalhangzóval kezdődik (katódon redukció).

Azoknak, akik gondolkodásmódja nem nyelvtani jellegű, de a nyelvi (pl. angol) fordulatokat megjegyzi, nem kell másra gondolni, csak egy „vörös macskára”. Az angol „red cat” kifejezés ugyanis megadja, hogy a redukció mindig a katódon játszódik le (*reduction* → *cathode*; Whitten et al., 2014).

Az elektrokémiai cellák két típusba sorolhatók: megkülönböztetjük az elektrolizáló (elektrolitikus) és a galvánelemből álló cellát. Az **elektrolizáló cellában** külső forrásból származó elektromos energia segítségével olyan reakció játszódik le, ami önként nem menne végbe. Ez a folyamat az **elektrolízis**. A cella a reakcióban részt vevő anyagot tartalmazó tárolóedényből és az abba merülő elektródokból áll, amelyekhez elektromos áramforrás csatlakozik. Az elektrolizáló cellában minden esetben az anód a pozitív, a katód pedig a negatív elektród. Az elektrolízis során gyakran inert elektródokat alkalmaznak (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014). Számos elektrokémiai cellában vegyületek alkotóelemekre történő bontását valósítják meg. Ilyen folyamat például a vízbontás (**3.1 és 4.2 alfejezet**: a H<sub>2</sub> előállítása, illetve felhasználása), amikor a vizet hidrogén- és oxigéngázra (H<sub>2</sub> és O<sub>2</sub>) bontják (Boksay et al., 1990; Greenwood, Earnshaw, 2004; Whitten et al., 2014). A kősó, azaz nátrium-klorid olvadékának (olvadáspont: 801 °C) elektrolízisével klórgáz (Cl<sub>2</sub>) és fém nátrium (Na) állítható elő; a nátrium-klorid-oldat elektrolízisekor hidrogén- és klórgáz (H<sub>2</sub> és Cl<sub>2</sub>) képződik (Whitten et al., 2014).

A **galvánelemből** (vagy Volta-cellában) spontán kémiai reakció megy végbe elektromos energia képződése mellett. Az egymástól elkülönített félcellák miatt az elektronok áramlása egy külső áramkörön keresztül zajlik. A köznapi gyakorlatban használt szárazelemek, „zseblep”-ek a galvánelemből (galvánelemek) tágabb csoportjába tartoznak. Az egyszerű galvánelemből félcellája egy adott elem egymással érintkező oxidált és redukált formáját egyaránt tartalmazza (**118. ábra**). A félcella leggyakrabban olyan fémelektrodból áll, ami saját ionjait tartalmazó oldatba merül (pl. cinkrúd Zn<sup>2+</sup>-ionokat tartalmazó oldatba; rézrúd Cu<sup>2+</sup>-ionokat tartalmazó oldatba).

Ebben az elektrokémiai cellában a negatív töltésű elektród az anód, a pozitív töltésű a katód. A galváncella két egymástól elkülönülő félcelláját sóhíd (vagy diafragma) kapcsolja össze. Az elektródokat összekötő vezetékben mérhető az elektródok közötti potenciálkülönbség (elektromos áram), ami a spontán redoxireakció eredménye (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

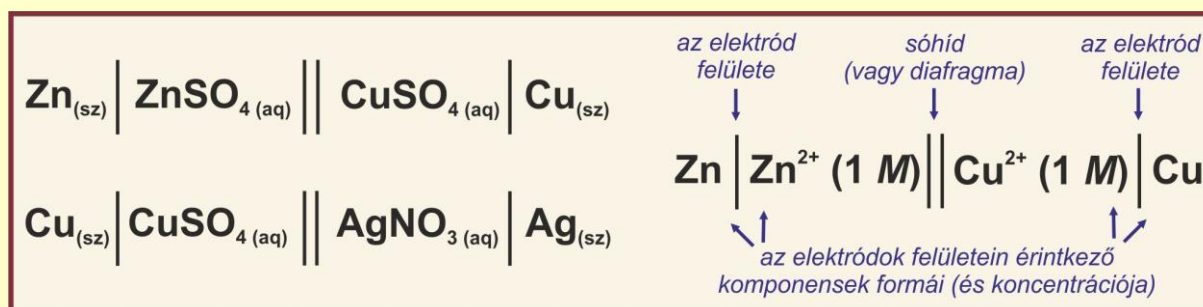


**118. ábra**

Cink–réz galváncella (az úgynevezett Daniell-elem) Whitten et al. (2014) alapján módosítva  
A galváncellában a két elektrolit közötti kapcsolatot a sóhíd teremti meg, ami sóval telített gél (5% agar: az agar-agar alga eredetű, porózus, gélszerű anyag) tartalmaz. A sóhíd biztosítja az elektromos vezetést a két oldat között, de megakadályozza azok keveredését. A sóhíd az ionok ( $\text{K}^+$  és  $\text{Cl}^-$ ) áramlásán keresztül biztosítja a töltésemlegességet (töltéskiegyenlítődést).

Kísérleti tapasztalatok alapján megállapították, hogy a redoxireakció előre haladtával a galváncellában mérhető feszültség a kezdeti feszültséghez képest csökken. A cink–réz galváncellában a cella működése során a cinkelektrod tömege csökken, miközben a cinkionok koncentrációja növekszik az elektrolitban. Ezzel párhuzamosan a rézelektrod tömege növekszik, a rézionok elektrolitban mért koncentrációja viszont csökken. A reakció során a cink oxidálódik, így ionos formában oldatba megy, tehát a cinkelektrod az anód (118. ábra). A katódon a rézionok redukciója zajlik, a fémes réz kiválása okozza a rézelektrod tömegnövekedését. Amikor a cellában mérhető feszültség nulla lesz, a redoxireakció eléri az egyensúlyi állapotot (Boksay et al., 1990; Atkins, 1992; Whitten et al., 2014).

A réz nem csak cink–réz galvánecellában szerepelhet elektródként. A réz–ezüst galvánecellában az egyik félcellát réz-szulfát-oldatba ( $\text{CuSO}_4$ -oldat) merülő rézelektrod, a másikat ezüst-nitrát-oldatba ( $\text{AgNO}_3$ -oldat) merülő ezüstelektrod alkotja. Ebben az esetben a rézelektrod az anód, a redoxireakció során ugyanis a fémes réz oxidálódik, azaz  $\text{Cu}^{2+}$ -ionok formájában oldódik. Ezzel párhuzamosan az elektrolitban található  $\text{Ag}^+$ -ionok redukálódnak fémes ezüstté, tehát az ezüstelektrod a katód. A galvánecellák egyezményes jelölésmódjait a **119. ábra** mutatja be (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).



**119. ábra**

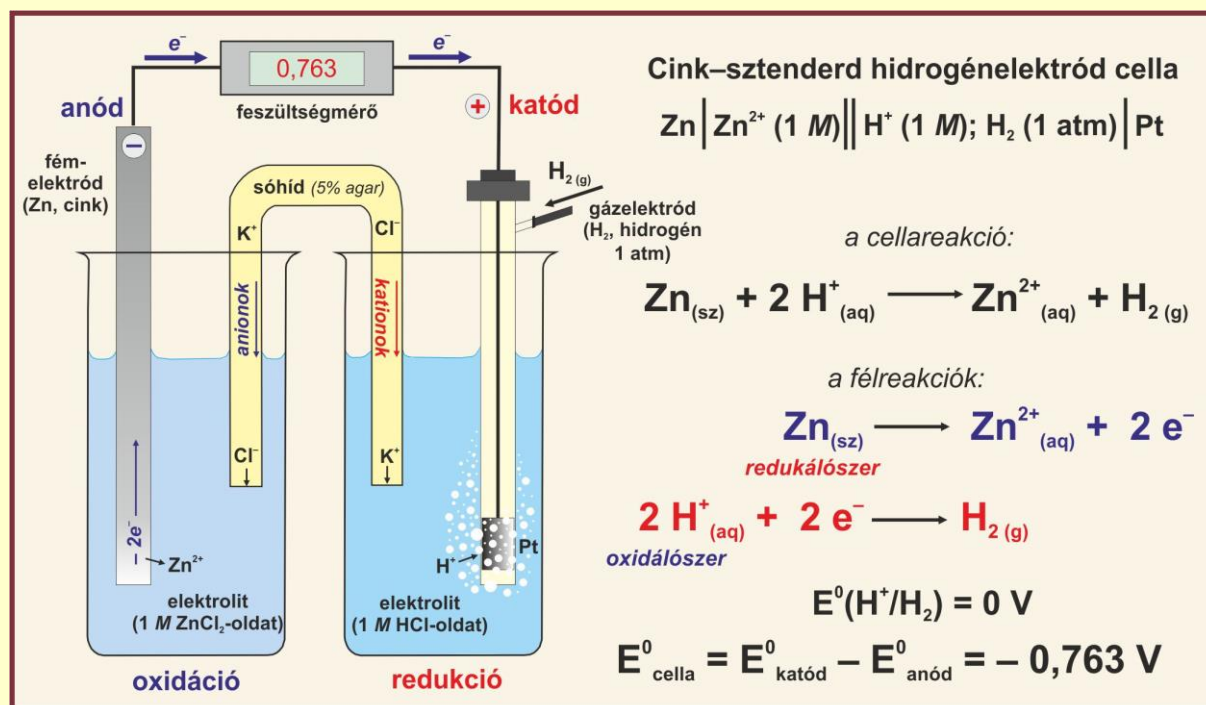
A galvánecella egyezményes megadása (Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014)

Az elektrolit kétféle jelölésével találkozhatunk: hidratált vegyület formájában (balra), illetve ionos formában a koncentráció feltüntetésével (jobbra). Az elektrolitok koncentrációja molaritásban van kifejezve:  $1\text{ M} = 1\text{ mólus oldat}$ , azaz  $1\text{ mol/dm}^3$  az oldatban az oldott anyag (ionok) koncentrációja.

A megismert két galvánecella alapján megállapítható, hogy a réz(II)-ion könnyebben redukálódik, mint a cink(II)-ion. Az ezüst(I)-ion viszont a réz(II)-ionnál is könnyebben redukálódik, azaz erősebb oxidálószer. A növekvő oxidálóképesség szerint sorba rendezhetjük ezeket a komponenseket:  $\text{Zn}^{2+} < \text{Cu}^{2+} < \text{Ag}^+$ . Jegyezzük meg, hogy egy galvánecellában attól függ, hogy egy adott elektród anódként vagy katódként viselkedik, hogy a másik elektród milyen redoxi tulajdonsággal rendelkezik! A galvánecellában mérhető potenciálkülönbség nagysága a redoxireakció lejátszódási hajlamával arányos. A két elektród közötti potenciálkülönbséget, ha a rendszeren keresztül nem folyik át az áram, **elektromotoros erőnek** nevezzük. A galvánecella működése közben termelt maximális munka a cella elektromotoros erejétől függ. Minél nagyobb (pozitívabb) a cellapotenciál, annál könnyebben megy végbe az adott spontán redoxireakció. Ez a sztenderd állapotú komponenseket tartalmazó galvánecellában mérhető feszültség segítségével számszerűsíthető (Boksay et al., 1990; Atkins, 1992; Rózsahegyi, 1993; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

Az oxidáció és a redukció egymástól elválaszthatatlan folyamat, ezért egy kiválasztott elektród potenciálját önmagában nem lehet kísérletileg meghatározni. Ennek kiküszöbölésére vezették be a sztenderd hidrogénelektrod, mint referencia elektród (viszonyítási alap) használatát. Ez az elektród olyan speciális gázelektrod, amelyben 1 atm nyomású (sztenderd állapotú) hidrogéngázt ( $H_2$ ) vezetnek olyan platinával (Pt) bevont fémelektrodra, ami 1 mol/dm<sup>3</sup> koncentrációjú  $H^+$ -ionokat tartalmazó oldatba (pl. sósav) merül. A hidrogéngáz a platinában oldódik, atomjaira disszociál, továbbá a fémekhez hasonlóan ionizálódik ( $H^+$ -ion keletkezik). A sztenderd hidrogénelektrod potenciálja nemzetközi megállapodás szerint nulla (Boksay et al., 1990; Atkins, 1992; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

A gyakorlatban a sztenderd hidrogénelektrod (potenciálja: 0 volt [V]) és egy kiválasztott másik elektród segítségével olyan galvancia készíthető, amely teljes potenciálja (azaz elektromotoros ereje) a kérdéses félcella potenciálját adja meg (120. ábra). Ez a potenciálkülönbség az úgynevezett **elektrodpotenciál**, illetve sztenderd elektrodpotenciál (sztenderdpotenciál; jele:  $E^0$  [volt, V]), ha az elektród egységnyi koncentrációjú (1 mol/dm<sup>3</sup>, azaz 1 M) elektrolitba merül 25 °C-on (Boksay et al., 1990; Rózsahegyi, 1993; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).



**120. ábra**

Cink–sztenderd hidrogénelektrod galvancia (Whitten et al. 2014 alapján, módosítva)  
 Az elektrolitok koncentrációja molaritásban van kifejezve: 1 M = 1 mólos oldat, azaz 1 mol/dm<sup>3</sup> az oldatban az oldott anyag koncentrációja (sztenderd állapot). A cellában mérhető potenciálkülönbség segítségével adható meg a fémelektrod sztenderd elektrodpotenciálja, azaz sztenderdpotenciálja.

A sztenderd elektródpotenciál a **feszültségi sor** (25. táblázat) alapja. Értékének ismeretében meg tudjuk mondani, hogy az adott elem egy másik ionnal szemben hogyan viselkedik, azaz a galvánecellában melyik lesz a pozitív és melyik a negatív pólus. A fémek a náluk pozitívabb elektródpotenciálú ionokat (pl.  $\text{Zn}^{2+} < \text{Cu}^{2+} < \text{Ag}^+$ ) kiválasztják oldatukból, azaz azokat elemi állapotúvá képesek redukálni. Ez tapasztalható, amikor a cink–réz galvánecellában a rézelektrod, a réz–ezüst galvánecellában viszont az ezüstelektrod tömege növekszik meg (Boksay et al., 1990; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014).

### 25. táblázat

Néhány gyakori elektród sztenderd elektródpotenciálja (redukciós potenciál), ami a feszültségi sor megadásának alapja (Boksay et al., 1990; Whitten et al., 2014 alapján)

Elektród	Elektródfolyamat	$E^0$ (V)
$\text{Au} \mid \text{Au}^{3+}$	$\text{Au}^{3+} + 3 e^- \rightarrow \text{Au}$	+1,50
$\text{Ag} \mid \text{Ag}^+$	$\text{Ag}^+ + e^- \rightarrow \text{Ag}$	+0,80
$\text{Cu} \mid \text{Cu}^{2+}$	$\text{Cu}^{2+} + 2 e^- \rightarrow \text{Cu}$	+0,34
$\text{H}_2 \mid \text{H}^+$	$2 \text{H}^+ + 2 e^- \rightarrow \text{H}_2$	<b>0,00</b>
$\text{Pb} \mid \text{Pb}^{2+}$	$\text{Pb}^{2+} + 2 e^- \rightarrow \text{Pb}$	–0,13
$\text{Fe} \mid \text{Fe}^{2+}$	$\text{Fe}^{2+} + 2 e^- \rightarrow \text{Fe}$	–0,44
$\text{Zn} \mid \text{Zn}^{2+}$	$\text{Zn}^{2+} + 2 e^- \rightarrow \text{Zn}$	–0,76
$\text{Al} \mid \text{Al}^{3+}$	$\text{Al}^{3+} + 3 e^- \rightarrow \text{Al}$	–1,66
$\text{Na} \mid \text{Na}^+$	$\text{Na}^+ + e^- \rightarrow \text{Na}$	–2,71
$\text{Ca} \mid \text{Ca}^{2+}$	$\text{Ca}^{2+} + 2 e^- \rightarrow \text{Ca}$	–2,87
$\text{K} \mid \text{K}^+$	$\text{K}^+ + e^- \rightarrow \text{K}$	–2,92

Megállapodás szerint a sztenderd elektródpotenciál megadása mindig redukciós félreakció formájában történik, azaz redukciós potenciált jelent.

Az elektródpotenciál ismeretében azt is meg tudjuk mondani, hogy az adott elem hogyan viselkedik a vízzel, illetve nem oxidáló hatású savakkal (pl. sósav) szemben. A hidrogénnél negatívabb sztenderdpotenciálú elemek, vagyis amelyek annál kevésbé „nemesek”, hidrogéngáz (elemi forma) fejlődése közben oldódnak fel. Az alkálifémek és alkáliföldfémek (pl. nátrium, kálium, kalcium) változó heveséggel reagálnak a vízzel, miközben  $\text{H}_2$  fejlődik (117. ábra); a cink vízből nem, de HCl-oldatból fejleszt hidrogéngázt (84. ábra; Boksay et al., 1990; Whitten et al., 2014).

Gyakorlati szempontból szükség lehet arra, hogy az elektródok potenciálját a sztenderd állapottól eltérő körülmények között (pl. változó koncentráció, eltérő

parciális nyomás vagy hőmérséklet) is meg tudjuk adni (erre szolgál az úgynevezett *Nernst-egyenlet*). Egy redoxireakció iránya a termodinamika törvényeinek ismeretében szintén meghatározható, ugyanis a reakciót kísérő szabadentalpia-változás összefüggésben van a feszültséggel (elektrodpotenciállal), ami a redoxireakció során egy elektrokémiai cellában keletkezhet (Atkins, 1992; Appelo, Postma, 2009; Bárány et al., 2011; Whitten et al., 2014). Ezek egyensúlyi termodinamikai tárgyalása azonban meghaladja e tankönyv kereteit.

### Jó tudni! Egy kis tudománytörténet...

A redoxireakciókat nem csak a kémia tárgyhoz/kurzushoz kapcsolódóan érdemes megjegyezni, számos földtudományi összefüggés megértéséhez is ilyen ismeretekre van szükség. Erre kiváló példát nyújt az 1770-es évekből Born Ignác (Ignatz Edler von Born, lovag, cs. kir. bányatanácsos, a stockholmi királyi, a sienai nagyhercegi tudományos akadémia és a páduai mezőgazdasági tudós társaság tagja stb.) ásványtani és bányászati útleírásának részlete (Born, 2014).

„A bányában fejtett érceken kívül Szomolnokon évente ezer mázsát is elérő mennyiségű cementrezt is termelnek. **A legtöbb bányavíz, mely átszivárog az ereken és teléreken, vitriolsav<sup>1</sup> által feloldott rézrézecskekkel terhes.** Hogy ezekkel még inkább telítsék, ezt a vizet néhány régi aknába vezetik, majd gépekkel kiemelik, ismét különböző hányókon át vezetik, majd az aknák és hányók mellett létesített, vasdarabokkal kirakott csatornába öntik. Itt azután **a vassal közelebbi rokonságban levő vitriolsav azzal összekapcsolódik, és a rézet finom iszap alakjában kiejti.** Az erősebb cementvizetnél ezt az iszapot háromnaponta elválasztják a vastól, mert különben a vasat teljesen körülveszi egy rézből álló héj, mely a vas további feloldódását megakadályozza. Észrevették, hogy minél nagyobb esésűek a csatornák, melyeken át a cementvíz a vasra zúdul, annál jobban és gyorsabban megy végbe a rézkiválás. Négyhetenként kiemelik a csatornában összegyűlt iszapot, a vasat megtisztítják, és ismét behelyezik, amíg teljesen fel nem emésztődik.”

Tizenkilencedik levél, Selmezbánya, 1770. szeptember 5.

<sup>1</sup>vitriolsav: kénsav (H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>)

**Kémiai magyarázat:** a vas (Fe | Fe<sup>2+</sup>; E<sup>0</sup> = –0,44 V) a pozitívabb elektrodpotenciálú réz(II)-ionokat (Cu | Cu<sup>2+</sup>; E<sup>0</sup> = +0,34 V) képes elemi állapotúvá redukálni.



**Réz kinyerése a cementvízből**

$$\text{Cu}^{2+}_{(\text{aq})} + \text{Fe}_{(\text{sz})} \longrightarrow \text{Cu}_{(\text{sz})} + \text{Fe}^{2+}_{(\text{aq})}$$

a félreakciók:

$$\text{Cu}^{2+}_{(\text{aq})} + 2 \text{e}^{-} \longrightarrow \text{Cu}_{(\text{sz})}$$

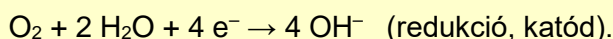
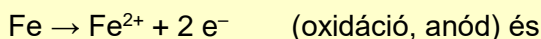
oxidálószer

$$\text{Fe}_{(\text{sz})} \longrightarrow \text{Fe}^{2+}_{(\text{aq})} + 2 \text{e}^{-}$$

redukálószer

Vaspatkóból „rézpatkó” (Fotó: Gatter István, ELTE Ásványtani Tanszék)

Felszíni, illetve felszínközeli rendszerekben a közönséges **korrózió** szintén redoxireakció, amely során a fémek nedvesség jelenlétében a levegő oxigénjének hatására oxidálódnak. Minél pozitívabb egy fém sztenderdpotenciálja, annál stabilabb elemi fémként (pl. réz, ezüst, arany), tehát annál nehezebben oxidálódik. A negatív sztenderdpotenciálú vas azonban könnyen oxidálódik, ami a vastárgyak rozsdásodását eredményezi (**121. ábra**). A vas oxidációjához kapcsolódó egyenletek a következők:



Ez a redoxireakció csak víz jelenlétében képes lejátszódni, a „száraz”  $\text{O}_2$  önmagában nem okoz rozsdásodást (Whitten et al., 2014).



### 121. ábra

Fémtárgyak korróziója: a sztenderdpotenciál ismeretében megbecsülhető az oxidáció. Az aranyozott tiszabezdédi tarsolylemez (balra) és erősen rozsdásodott vaskengyelek (jobbra) a szegedi Móra Ferenc Múzeum „Kincsek – Titkok – Aranyak” című időszakos tárlatában (2016).

Az oxidációs és a redukciós folyamatok lényegesen befolyásolják a felszíni és felszínközeli kémiai mállási folyamatokat, illetve a szerves anyag bomlásához kapcsolódó reakciókat. Számos ezek közül alapvető hatással van a felszín alatti vizek kémiai összetételére: az oldott  $\text{O}_2$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{Fe}^{2+}$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$  koncentrációját határozza meg (Hetényi, 1999; Appelo, Postma, 2009). A természetes rendszerek oxidációs állapotának jellemzésére leggyakrabban a **redoxpotenciált** (egyensúlyi elektródpotenciál; jele: Eh) használják, ami az oxidáló-, illetve a redukálóképesség mértéke. Ez önmagában nem, csak más rendszer redoxpotenciáljához képest értelmezhető. Mindig a pozitívabb redoxpotenciálú rendszer képes oxidálni a negatívabbat, azaz minél pozitívabb egy redoxpotenciál értéke, annál oxidálóbb jellegű a rendszer (Bárány et al., 2011; Appelo, Postma, 2009).

## 8. Vizes oldatok, fogalomtár

**Autoprotolízis** (autoionizáció): olyan folyamat, amelyben azonos molekulák között protonátadás ( $H^+$  formában) történik (pl. a víz disszociációja:  $H_2O + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + OH^-$ ).

**Adsorbens:** nagy fajlagos felületű szilárd anyag (adszorpcióra képes).

**Adszorpció:** az a folyamat, amelyben a szilárd anyagok felületükön gázmolekulákat, oldatok egyes összetevőit vagy más szilárd anyagot megkötnek.

**Amfoter:** görög eredetű szakkifejezés; olyan tulajdonságú anyag; ami két ellentétes jellemzővel rendelkezik. A víz amfoter anyag, mert savként és bázisként is viselkedhet.

**Anód:** az az elektród, amelyen oxidáció megy végbe.

**Bázisok:** protonakceptorok, proton felvételére képes anyagok. A bázis OH-csoportot (hidroxil) tartalmazó anyag, ami vizes oldatban hidroxidion ( $OH^-$ ) képződése mellett disszociál.

**Deszorpció:** a fizikai adszorpció ellentétes folyamata; az adsorbens felületéről távozik a megkötött anyag.

**Diafragma:** porózus, vékony hártya (membrán), ami a sóhídhoz hasonló szerepet tölt be a galvánecellában.

**Disszociáció:** megfordítható, egyensúlyra vezető reakcióban bekövetkező bomlás (pl. a víz disszociációja:  $H_2O \leftrightarrow H^+ + OH^-$ ).

**Elektrokémiai reakció:** olyan redoxireakció, amiben az elektromos energia hatására kémiai változás történik (elektrolízis), vagy a kémiai reakció során elektromos energia jön létre (galvánecella).

**Elektrolit:** olyan oldat vagy olvadék, amelyben szabadon mozgó ionok vannak.

**Elektrolizáló cella:** olyan elektrokémiai cella, amelyben külső forrásból származó elektromos energia segítségével önként végbe nem menő reakció játszódik le. Ez a folyamat az elektrolízis. Az elektrolizáló cellában az anód a pozitív, a katód pedig a negatív elektród.

**Elektrolízis:** olyan elektrokémiai reakció, amely során elektromos energia alakul át kémiai energiává. Az elektrolizáló cellában külső áramforrás hatására lejátszódó folyamatok összessége.

**Elektromotoros erő:** két elektród közötti potenciálkülönbség (feszültség), ha a rendszeren nem folyik át az áram.

**Elektród:** az elektrolitoldattal közvetlenül érintkező fémes vezető.

**Elektródpotenciál:** a vizsgált elektródból és a sztenderd hidrogénelektrodból összeállított galvánecella elektromotoros ereje. Ha az elektród egységnyi koncentrációjú ( $1 \text{ mol/dm}^3$ , azaz  $1 \text{ mólos } [1 \text{ M}]$ ) elektrolitba merül, a vizsgált elektród sztenderd elektródpotenciál értéke határozható meg (sztenderdpotenciál; jele:  $E^0$  [volt, V]).

**Feszültségi sor:** a fémek sztenderd elektródpotenciáljának változása a hidrogénhez képest.

**Galvánecella** (galvánelem, Volta-cella): a galvánecellában spontán kémiai reakció megy végbe elektromos energia képződése mellett. A galvánecellában a pozitív elektród a katód, a negatív elektród az anód.

**Henry-törvény:** adott hőmérsékleten egy gáz oldhatósága arányos az oldattal egyensúlyban levő gáz parciális nyomásával ( $p_{\text{gáz}}$ ). A fizikai oldódásra vonatkozó összefüggés matematikai alakja:  $S = k_H \cdot p_{\text{gáz}}$ , ahol az arányossági tényező a Henry-állandó ( $k_H$ ).

**Indikátorok:** olyan anyagok (általában szerves festékszerek), amelyek színváltozással jelzik az oldat kémhatásának megváltozását.

**Inert elektród:** olyan elektród, ami nem vesz részt az elektrokémiai reakcióban.

**Inkongruens oldódás:** az ásványból csak bizonyos alkotórészek oldódnak ki; az oldódás után másodlagos ásvány marad vissza (pl. agyagásványok keletkezése szilikátok mállásakor).

**Ioncsere:** az adszorpció speciális esete az ioncsereadszorpció vagy ioncsere, amikor az elektrolit oldat egyik ionja helyet cserél a szilárd felület egy vagy több hasonló töltésű ionjával.

**Katód:** az az elektród, amelyen redukció megy végbe.

**Kongruens oldódás:** az oldódás az ásvány sztöchiometriájának megfelelően történik (pl. az *anhidrit* oldódása). A folyamat a dinamikus egyensúly beálltáig tart. A közetalkotó karbonátásványok oldódása is kongruens módon játszódik le.

**Korrózió:** fémek oxidációja légköri nedvesség és levegő (O<sub>2</sub>) jelenlétében.

**Oldhatóság:** a telített oldat összetétele. Egy anyag *oldhatósága* azt fejezi ki, hogy adott hőmérsékleten hány grammja oldódik 100 g oldószerben. Jele: S; mértékegysége: g/100 g oldószer.

**Oldhatósági szorzat:** vízben rosszul oldódó vegyületeknél az adott anyag oldatában egy adott hőmérsékleten a hidratált ionok aktivitásainak megfelelő hatványon vett szorzata állandó. Ezt nevezzük oldhatósági szorzatnak (jele: L<sub>s</sub>).

**Oxidáció:** elektronleadás, vagyis az elem oxidációs száma (oxidációs állapota) nő.

**Oxidációs szám:** egy ion valódi, illetve egy molekulát alkotó atom névleges töltése. Megadja, hogy egy atomnak mennyi lenne a töltése, ha gondolatban a kötő elektronpárokat teljes mértékben az elektronegatívabb atomhoz rendelnénk.

**Oxidálószer:** a redoxireakcióban elektront vesz fel.

**pH:** egy vizes oldat savasságának a mértéke; a hidrogénion-koncentráció negatív logaritmus (10-es alapú).

**pOH:** egy vizes oldat lúgosságának (bázisosságának) a mértéke; a hidroxidion-koncentráció negatív logaritmus (10-es alapú).

**Redoxireakció** (redukciós–oxidációs): minden olyan reakció, amely során legalább egy

elemnek megváltozik az oxidációs száma. Elektronátmenettel járó kémiai átalakulás.

**Redoxpotenciál:** egyensúlyi elektródpotenciál; az oxidáló- vagy redukálóképesség mértéke.

**Redukálószer:** a redoxireakcióban elektront leadó anyag.

**Redukció:** elektronfelvétel, vagyis az elem oxidációs száma (oxidációs állapota) csökken.

**Savak:** olyan anyagok, amelyek molekulája a vízmolekulának protont képes átadni. Azokat az anyagokat, amelyek disszociációjuk során protont (H<sup>+</sup>) adnak át (proton donor) egy másik anyagnak, savaknak nevezzük.

**Sav–bázis reakciók:** protonátmenettel járó kémiai átalakulások.

**Sóhíd:** sóval telített gél tartalmazó U-alakú cső, ami megakadályozza a galványcella két elektrolitjának keveredését, de biztosítja a vezetést (az ionok mozgását) és az töltéskiegyenlítődést.

**Szorpció jelenségek:** az *adszorpció* és a *deszorpció* folyamata.

**Telített oldat:** olyan oldat, amelyben az adott hőmérsékleten több anyagot nem tudunk feloldani.

**Vizes oldatok:** olyan oldatok, amelyekben a víz az oldószer.

**Vízionszorzat:** a víz disszociációjára felírt egyensúlyi reakció disszociációs (egyensúlyi) állandójának (K<sub>víz</sub> vagy K<sub>v</sub>; K<sub>v</sub>=[H<sub>3</sub>O<sup>+</sup>][OH<sup>-</sup>]) megnevezése.

### Megjegyzés:

A vas korróziója során keletkezett rozsdá olyan vegyületeket tartalmaz, ami természetes módon is keletkezhet a szulfidos vasérc oxidációja során. Összefoglaló nevük *limonit*, ennek leggyakoribb ásványa a *goethit*, FeO(OH); ami nagy fajlagos felülete miatt kiváló adszorbens (Koch, Sztrókay, 1994; Appelo, Postma, 2009).

A korrózió nem csak a vastárgyakat érinti, bár a rozsdásodás az egyik legismertebb ilyen folyamat. A levegő nedvességtartalma hatására a réztárgyak, illetve rézötvözetek (pl. bronz) is átalakulnak, oxidálódnak, felületüket a jellegzetes zöld „rézrozsdá” vonja be. Ez nem más, mint réz(II)-hidroxid és réz(II)-karbonát keveréke, megnevezése: *patina*. Az ásványvilágban is ismert a réz hidroxidionnal és karbonáttionnal alkotott vegyülete, ez a *malachit* (Koch, Sztrókay, 1994).

A 8. fejezet második címképén szereplő fotó patinával bevont bronzbékán keresztül szemlélteti ezt az oxidációs folyamatot (szobor részlete, Nyíregyházi Állatpark). Számos jelenség mögött egyszerű kémiai folyamat rejtőzik. Járj nyitott szemmel!

## 8. Vizes oldatok – Önellenőrző kérdések, feladatok

**8.1.** Hogyan határozhatjuk meg a savak erősségét? a) az autoprotolízis az a folyamat, amely segítségével a savak erőssége számszerűsíthető; b) a savak erősségét vízhez való viszonyuk alapján határozzuk meg; c) a savak erősségét a sósavhoz való viszonyuk alapján határozzuk meg

**8.2.** Melyik állítás igaz a gázok oldhatóságára folyadékokban? a) a gázok oldhatósága nem változik a hőmérséklettel; b) a gázok magasabb hőmérsékleten jobban oldódnak folyadékokban; c) a gázok magasabb hőmérsékleten rosszabbul oldódnak folyadékokban

**8.3.** Melyik állítás jellemzi a kongruens oldódást? a) az ásvány nem oldódik, ezért az eutektikus hőmérsékleten megolvad; b) az ásványból csak bizonyos alkotórészek oldódnak ki, az oldódás után másodlagos ásvány keletkezik; c) az ásvány a sztöchiometriai összetételének megfelelően oldódik, a folyamat dinamikus egyensúlyra vezet

**8.4.** Melyik állítás jellemzi az inkongruens oldódást? a) az ásvány nem oldódik, ezért az eutektikus hőmérsékleten megolvad; b) az ásványból csak bizonyos alkotórészek oldódnak ki, az oldódás után másodlagos ásvány keletkezik; c) az ásvány a sztöchiometriai összetételének megfelelően oldódik, a folyamat dinamikus egyensúlyra vezet

**8.5.** Melyik állítás igaz az elemek oxidációs számára? a) az elemekben lévő atomok oxidációs számát táblázatokból kereshetjük ki; b) elemekben lévő atomok oxidációs száma nulla; c) az elemek oxidációs számát a redoxpotenciál adja meg, ami táblázatokból kereshető ki

**8.6.** Milyen folyamat jellemzi az anódot az elektrokémiában? a) anionképződés; b) redukció; c) oxidáció

**8.7.** Milyen folyamat jellemzi a katódot az elektrokémiában? a) ioncsere vagy adszorpció; b) redukció; c) oxidáció

**8.8.** A foszforsav több lépésben disszociáló gyenge sav. Írd fel a disszociációját megadó egyenleteket!

**8.9.** A szén-dioxid vízben történő oldódása során keletkező gyenge sav disszociációjára írd fel a tömeghatás törvényét!

**8.10.** Oldhatósági szempontból melyik a kakukktójás? Miért? a) NaCl, Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, AgCl; b) KCl, BaSO<sub>4</sub>, CaF<sub>2</sub>; c) CaCO<sub>3</sub>, CaCl<sub>2</sub>, CaSO<sub>4</sub>

**8.11.** Oldhatósági szempontból melyik gáz a kakukktójás? Miért? a) He, N<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>; b) Ar, H<sub>2</sub>S, O<sub>2</sub>; c) N<sub>2</sub>, HCl, Kr

**8.12.** Határozd meg a következő vegyületekben az atomok oxidációs számát! a) H<sub>2</sub>O; b) H<sub>2</sub>S; c) Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>; d) FeO; e) SO<sub>3</sub>

**8.13.** Határozd meg a következő vegyületekben az atomok oxidációs számát! a) NO; b) HCl; c) CO; d) C; e) CaCO<sub>3</sub>

**8.14.** Határozd meg a következő vegyületekben az atomok oxidációs számát! a) HNO<sub>3</sub>; b) H<sub>2</sub>SO<sub>3</sub>; c) H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>; d) AgCl; e) H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>

**8.15.** Fogalmazd meg röviden az elektrolizáló cella és a galváncella közötti legfontosabb különbséget!

**8.16.** Melyik pólus a katód az elektrolizáló, illetve a galváncellában?

**8.17.** Mi történik, ha vasszőget teszünk réz(II)-szulfát-oldatba? Miért?

**8.18.** Mi történik, ha rézlemezt teszünk vas(II)-szulfát-oldatba? Miért?

## 8. Vizes oldatok – Önellenőrző kérdések, megoldások

8.1. b

8.3. c

8.5. b

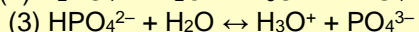
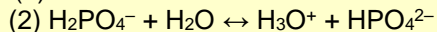
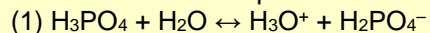
8.7. b

8.2. c

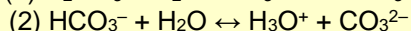
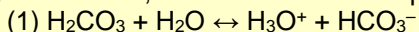
8.4. b

8.6. c

**8.8.** A foszforsav háromértékű gyenge sav:  $\text{H}_3\text{PO}_4$ ; a disszociációja három lépésben zajlik, miközben oxóniumionok képződnek.



**8.9.** Az oldódás során szénssav keletkezik, a folyamat egyenlete:  $\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_2\text{CO}_3$ . A szénssav kétértékű gyenge sav, a disszociációja két lépésben zajlik, miközben oxóniumion és hidrogénkarbonát-, illetve karbonátion képződik.



Az egyensúlyi állandók rendre a következők:

$$K_{s1} = [\text{H}_3\text{O}^+][\text{HCO}_3^-] / [\text{H}_2\text{CO}_3] \text{ és}$$

$$K_{s2} = [\text{H}_3\text{O}^+][\text{CO}_3^{2-}] / [\text{HCO}_3^-]$$

**8.10.** a)  $\text{AgCl}$ , mert ez rosszul oldódó vegyület; b)  $\text{KCl}$ , mert ez jól oldódik vízben; c)  $\text{CaCl}_2$ , mert ez jól oldódik vízben

**8.11.** a)  $\text{CO}_2$ , mert reakcióba lép a vízzel (kémiai oldódás); b)  $\text{H}_2\text{S}$ , mert reakcióba lép a vízzel; c)  $\text{HCl}$ , mert reakcióba lép a vízzel. A  $\text{He}$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{Ar}$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{N}_2$  és  $\text{Kr}$  oldódása fizikai folyamat.

**8.12.** a)  $\text{H}$ : +1,  $\text{O}$ : -2; b)  $\text{H}$ : +1,  $\text{S}$ : -2; c)  $\text{Fe}$ : +3,  $\text{O}$ : -2; d)  $\text{Fe}$ : +2,  $\text{O}$ : -2; e)  $\text{S}$ : +6,  $\text{O}$ : -2

**8.13.** a)  $\text{N}$ : +2,  $\text{O}$ : -2; b)  $\text{H}$ : +1,  $\text{Cl}$ : -1; c)  $\text{C}$ : +2,  $\text{O}$ : -2; d)  $\text{C}$ : 0; e)  $\text{Ca}$ : +2,  $\text{C}$ : +4,  $\text{O}$ : -2

**8.14.** a)  $\text{H}$ : +1,  $\text{N}$ : +5,  $\text{O}$ : -2; b)  $\text{H}$ : +1,  $\text{S}$ : +4,  $\text{O}$ : -2; c)  $\text{H}$ : +1,  $\text{P}$ : +5,  $\text{O}$ : -2; d)  $\text{Ag}$ : +1,  $\text{Cl}$ : -1; e)  $\text{H}$ : +1,  $\text{S}$ : +6,  $\text{O}$ : -2

**8.15.** Mindkettőben redoxireakció játszódik le, de az elektrolizáló cellában külső elektromos áram hatására megy végbe kémiai folyamat, míg a galvánecellában a spontán kémiai reakció termeli az elektromos áramot.

**8.16.** Elektrolizáló cella: a katód a negatív elektród (pólus), ott játszódik le a redukció. Galvánecella: a katód a pozitív elektród.

**8.17.** Ha vasszőget teszünk réz(II)-szulfát-oldatba, a vas felületén rézkiválás történik, mert a réz sztenderd elektródpotenciálja pozitívabb. Az elemi vas képes redukálni a  $\text{Cu}^{2+}$ -ionokat, miközben oxidálódik (feloldódik).

**8.18.** Ha rézlemezt teszünk vas(II)-szulfát-oldatba, nem történik látható változás, mert a vasnál pozitívabb sztenderdpotenciállal rendelkező réz elemi formában stabilabb; nehezebben oxidálódik (erősebb oxidálószer), mint a vas.

## Angol–magyar kisszótár

Ez az angol–magyar kisszótár a tankönyvben előforduló legfontosabb kémiai, továbbá kapcsolódó földtudományi szakkifejezések és szókapcsolatok gyűjteménye. A címszóanyag összeállításakor Kázmér (1995), Anderson (2005), Appelo, Postma (2009), Whitten et al. (2014) és Gill (2015) munkáit vettem figyelembe.

### a

**absolute zero** *abszolút nulla fok*  
**absorb** *elnyel, abszorbeál, felszív*  
**absorption** *elnyelés, elnyelődés, abszorpció*  
**absorption of light** *fényelnyelés*  
**acetic acid** *ecetsav*  
**acid** *sav / savanyú, savas*  
**acid anhydride** *savanhidrid*  
**acid-base system** *sav-bázis rendszer*  
**acidic** *savas, savanyú*  
**acidity** *savasság*  
**actinide elements** *aktinida elemek, aktinidák*  
**actinium** *aktínium*  
**activation energy** *aktiválási energia*  
**activation barrier** *aktivációs korlát, energiagát*  
**active carbon** *aktívszén*  
**activity** *aktivitás (a)*  
**activity coefficient** *aktivitási tényező*  
**adhesion** *adhézió, tapadás*  
**adhesive water** *tapadóvíz, adhézios víz, filmvíz*  
**adhesive force** *adhéziós erő*  
**adsorbed water** *adszorbeált víz*  
**adsorption** *adszorpció, megkötés*  
**A groups** *főcsoportok (periódusos táblázat)*  
**air pollution** *légszennyezés (levegőszennyezés)*  
**alcohol** *alkohol*  
**alkali metals** *alkálifémek*  
**alkaline** *lúgos, alkáli*  
**alkaline earth metals** *alkáliföldfémek*  
**allotrope** *allotróp*  
**allotropic modifications (allotropes)** *allotróp módosulat*  
**alloy** *ötvözet*  
**alumen** *timsó*  
**alumina** *alumínium-oxid, timföld*  
**aluminium** *alumínium*  
**aluminium hydroxide** *alumínium-hidroxid*  
**amino acid** *aminosav*  
**ammonia** *ammónia*  
**ammonia spirit** *szalmiákszesz (ammónium-hidroxid)*  
**amorphous** *amorf*

**amorphous substance** *amorf anyag*  
**amphoteric** *amfoter*  
**anaerobic** *anaerób, oxigénszegény, oxigénmentes*  
**analogy** *analógia, hasonlóság, egyezés*  
**angular momentum** *perdület, impulzusmomentum*  
**angular momentum quantum number** *mellékkvantumszám*  
**anhydrite** *anhidrit*  
**anion** *anion*  
**anisotropic** *anizotróp*  
**anode** *anód*  
**anoxic** *anoxikus, oxigénmentes*  
**anthropogeneous** *antropogén*  
**antibonding electrons** *lazító elektronok*  
**antibonding molecular orbital** *lazító molekulapálya*  
**aqua fortis** *választóvíz*  
**aqua regia** *királyvíz*  
**aqueous solution** *vizes oldat*  
**aqueous vapor** (vapour) *vízgőz*  
**aragonite** *aragonit*  
**argentum** *ezüst*  
**aromatic** *aromás*  
**arsenic** *arzén, termésarzén*  
**atmosphere** *légkör, atmoszféra*  
**atom** *atom*  
**atomic lattice** *atomrács*  
**atomic mass unit (amu)** *atomi tömegegység*  
**atomic number** *rendszám*  
**atomic orbital** *atompálya*  
**atomic radius** *atomsugár*  
**atomic weight** *atomtömeg*  
**attraction** *vonzás*  
**attractive force** *vonzóerő*  
**Aufbau („building up”) principle** *felépülési elv (energiaminimumra törekvés elve)*  
**aurum** *arany*  
**autoionization** *autoionizáció, autoprotolízis*  
**Avogadro's law** *Avogadro-törvény*  
**Avogadro's number** *Avogadro-szám*

**b**

**ball-and-stick model** gömb- és pálcikamodell  
**barite** *barit*  
**barium** *bárium*  
**basalt** *bazalt*  
**base** *bázis*  
**basic** *bázisos*  
**benzene** *benzol*  
**B groups** *mellékcsoportok (periódusos táblázat)*  
**binary system** *kétkomponensű rendszer*  
**bismuth** *bizmut, természetbizmut*  
**bivalent** *kétvegyértékű*

**boiling point** *forráspont*  
**bond energy** *kötési energia*  
**bond length** *kötéshossz*  
**bonding electrons** *kötő elektronok*  
**bonding molecular orbital** *kötő molekulapálya*  
**bonding pair** *kötő elektronpár*  
**bonding sequence** *kapcsolódási sorrend*  
**boron** *bór*  
**boundary surface** *határfelület*  
**Boyle's law** *Boyle-törvény*  
**brittle** *rideg, törékeny, merev*  
**bromine** *bróm*

**c**

**capillary action** *kapillárishatás*  
**carbon (element)** *szén (elem)*  
**carbonic acid** *ecetsav*  
**catalyst** *katalizátor*  
**cathode** *katód*  
**cation** *kation*  
**central atom** *központi atom*  
**Charles's law** *Charles-törvény*  
**chemical bonding** *kémiai kötés*  
**chemical change** *kémiai változás*  
**chemical energy** *kémiai energia*  
**chemical equation** *kémiai egyenlet*  
**chemical formula** *kémiai képlet (összegképlet, molekulaképlet)*  
**chemical kinetics** *kémiai kinetika (reakciókinetika)*  
**chemical periodicity** *kémiai periodicitás*  
**chemical property** *kémiai tulajdonság*  
**chemical reaction** *kémiai reakció*  
**chlorine** *klór*  
**cohesive force** *kohéziós erő*  
**colorless (colourless)** *színtelen*  
**collision** *ütközés*  
**collision theory** *ütközési elmélet*  
**combined gas law** *egyesített gáztörvény*  
**component** *komponens*

**compound** *vegyület*  
**composition** **stoichiometry** *összetételi sztöchiometria*  
**concentration** *koncentráció*  
**condensate** *kondenzátum*  
**condensation** *kondenzáció*  
**constant** *konstans, állandó*  
**coordination number** *koordinációs szám*  
**coordination (co-ordination)** **polyhedron** *koordinációs poliéder*  
**copper** *réz (vörösréz)*  
**corrosion** *korrózió*  
**covalent bond** *kovalens kötés*  
**covalent bonding** *kovalens kötés (kémiai kölcsönhatás)*  
**critical point** *kritikus pont*  
**critical pressure** *kritikus nyomás*  
**critical temperature** *kritikus hőmérséklet*  
**crude oil** *nyersolaj, kőolaj*  
**crystal** *kristály*  
**crystal face** *kristálylap*  
**crystal form** *kristályforma*  
**crystal lattice** *kristályrács*  
**crystalline** *kristályos*  
**cube** *kocka*

**d**

**Dalton's law** *Dalton-törvény*  
**delocalization** *delokalizáció*  
**density** *sűrűség*  
**deposition** *depozíció,*  
**diatomic** *kétagatomos*  
**diffusion** *diffúzió*  
**dilute** *híg*  
**dilute solution** *híg oldat*  
**dimensionless number** *mértékegység nélküli szám*  
**dipole** *dipól, dipólus*

**dipole–dipole interactions** *dipól–dipól kölcsönhatások*  
**directional bond** *irányított kötés*  
**dispersal of energy** *az energia szétszóródása*  
**dispersal of matter** *az anyag rendezetlensége*  
**dispersion forces** *diszperziós erők*  
**dissociation** *disszociáció*  
**dissolved solids** *oldott (szilárd) anyag*  
**divalent** *kétvegyértékű*  
**double covalent bond** *kettős kovalens kötés*  
**d-transition elements** *d-átmeneti elemek (átmenetifémek)*

## e

**effective collision** *hatékony ütközés*  
**electric charge** *elektromos töltés*  
**electrical conductivity** *elektromos vezetőképesség*  
**electrical energy** *elektromos energia*  
**electrode** *elektród*  
**electrode potential** *elektródpotenciál*  
**electrolysis** *elektrolízis*  
**electrolyte** *elektrolit*  
**electrolytic cell** *elektrolizáló cella*  
**electrolytic conduction** *elektrolitvezetés (ionvezetés)*  
**electromagnetic radiation** *elektromágneses sugárzás*  
**electromagnetic spectrum** *elektromágneses spektrum*  
**electron** *elektron*  
**electron affinity** *elektronaffinitás*  
**electron cloud** *elektronfelhő*  
**electron configuration** *elektronkonfiguráció*  
**electron density distribution** *elektron sűrűség-eloszlás*  
**electronegativity** *elektronegativitás*  
**electron transfer** *elektronátadás*

**electron transition** *elektronátmenet*  
**electronic energy state** *elektron energiaállapot*  
**element** *elem (kémiai elem)*  
**elementary cell** *elemi cella*  
**elementary step** *(fundamental step) reakciólépés, elemi lépés (reakciókinetikai)*  
**empirical formula** *tapasztalati (összeg) képlet*  
**end-member** *szélsőtag*  
**endothermic** *endoterm*  
**energy** *energia*  
**energy level** *energiaszint*  
**enthalpy** *entalpia*  
**enthalpy change** *entalpiaváltozás*  
**entropy** *entrópia*  
**equation** *egyenlet*  
**equilibrium** *egyensúly*  
**equilibrium constant** *egyensúlyi állandó*  
**eutectic** *eutektikus*  
**evaporite** *evaporit*  
**excited state** *gerjesztett állapot*  
**exothermic** *exoterm*  
**extensive property** *extenzív tulajdonság*

## f

**fertilizer** *műtrágya*  
**first law of thermodynamics** *a termodinamika első főtétele*  
**fluid** *fluidum*  
**fluorine** *fluor*  
**formula** *képlet*  
**forward reaction** *átalakulási reakció*  
**fossil fuels** *fosszilis tüzelőanyagok*  
**free energy** (A) *szabadenergia*

**free enthalpy** (G) *szabadentalpia*  
**freezing** *fagyás*  
**frequency** *frekvencia*  
**f-transition elements** *f-mező elemei (belső átmeneti elemek)*  
**fuel cell** *üzemanyagcella*  
**functional group** *funkciós csoport*  
**fundamental step** *(elementary step) reakciólépés, elemi lépés (reakciókinetikai)*

## g

**galvanic cell** *galvancia*  
**gas** *gáz*  
**gas constant** *gázállandó (R)*  
**gasoline** *benzin, motorbenzin, könnyűbenzin*  
**geometrical arrangements** *geometriai elrendeződés*  
**Gibbs phase rule** *Gibbs-féle fázisszabály*

**Gibbs free energy (G)** *Gibbs szabadenergia*  
**gold** *arany*  
**grain** *szemcse*  
**grain-boundary diffusion** *határfelületi diffúzió, szemcsehatár mentén történő diffúzió*  
**ground state** *alapállapot*  
**group** (family) *csoport (család, oszlop)*

## h

**half-cell** *félcella (redoxireakciók)*  
**half-reaction** *félreakció (redoxireakciók)*  
**halogens** *halogének*  
**hard water** *kemény víz*  
**hardness** *(víz)keménység*  
**heat (energy)** *hő(energia)*  
**heat of formation** *képződéshő*  
**heat of hydration** *hidratációshő*  
**heat of solution** *oldáshő*  
**heterogeneous mixture** *heterogén keverék*

**homogeneous mixture** *homogén keverék*  
**Hund's rule** *Hund-szabály*  
**hydration** *hidratáció*  
**hybridization** *hibridizáció*  
**hybrid orbitals** *hibridpályák*  
**hydrocarbon** *szénhidrogén*  
**hydrochloric acid** *hidrogén-klorid (HCl)*  
**hydrogen bond** *hidrogénkötés*  
**hydronium ion** *oxóniumion*

## i

**ideal gas** *ideális gáz*  
**ideal gas equation** *ideális gáztörvény (ideális gázok állapotegyenlete)*  
**ideal solution** *ideális oldat*  
**incomplete combustion** *tökéletlen égés*  
**inert gas** *inert (nem reakcióképes) gáz*  
**inner transition elements** *belső átmeneti elemek (f-mező elemei)*  
**insoluble** *feloldhatatlan*  
**intensive property** *intenzív tulajdonság*  
**inter-crystalline diffusion** *interkristályos (kristályközi) diffúzió*  
**internal energy** *belső energia*  
**intra-crystalline diffusion** *intrakristályos diffúzió*

**inorganic chemistry** *szervetlen kémia*  
**invariant** *invariáns*  
**ion** *ion*  
**ionic bonding** *ionos kötés*  
**ionic charge** *iontöltés*  
**ionic compound** *ionvegyület*  
**ionic conduction** *ionvezetés*  
**ionic crystal** *ionkristály*  
**ionic lattice** *ionrács*  
**ionic radius** *ionsugár*  
**ionization energy** *ionizációs energia*  
**ion product for water** *vízionszorzat*  
**iron** *vas*  
**isotope** *izotóp*  
**isotropic** *izotróp*

## k

**kinetic energy** *kinetikus energia*

## l

**law of conservation of energy** *energiamegmaradás törvénye*  
**law of conservation of matter** *anyagmegmaradás törvénye*  
**law of mass action** *tömeghatás törvénye*

**lead** *ólom*  
**ligand** *ligandum*  
**linear** *lineáris (egyenes)*  
**liquid**  *folyadék*  
**lone pair** *nemkötő (magányos) elektronpár*

## m

**macroscopic** *makroszkópikus*  
**magnetic quantum number** *mágneses kvantumszám*  
**mass** *tömeg*  
**mass number** *tömegszám*  
**matter** *anyag*  
**mechanical energy** *mechanikai energia*  
**melt** *olvadék*  
**melting** *olvadás*  
**melting point** *olvadáspont*  
**meniscus** *meniszkusz*  
**mercury** *higany*  
**metallic bonding** *fémes kötés*  
**metallic conduction** *fémes vezetés (fémvezetés)*  
**metallic lustre** *fémfény, fémes fény*

**metalloids** (semimetals) *félfémek*  
**metals** *fémek*  
**methane** *metán*  
**microscopic** *mikroszkópikus*  
**mixture** *keverék*  
**molality** *molalitás (m, [mol/(kg oldószer)])*  
**molar mass** *moláris tömeg*  
**molarity** *molaritás (c, [mol/dm<sup>3</sup>])*  
**mole** *mól (anyagmennyiség)*  
**molecular formula** *molekulaképlet*  
**molecular lattice** *molekularács*  
**molecular weight** *molekulatömeg*  
**molecule** *molekula*  
**mole fraction** *móltört (x)*  
**monoatomic ion** *egyszerű ion*  
**monovalent** *egyvegyértékű*

## n

**native** *elemi állapotú (termés-)*  
**natural** *természetes*  
**natural gas** *földgáz*  
**nitric acid** *salétromsav*  
**noble (rare) gases** *nemesgázok*  
**nodal plane** *csomósík*  
**node** *csomósík (felület)*

**nonbonding molecular orbital** *nemkötő molekulapálya*  
**nondirectional bond** *nem irányított kötés*  
**nonideal** (non-ideal) **gas behavior** (behaviour) *nem ideálisan viselkedő gáz, reális gáz*  
**nonideal** (non-ideal) **solution** *nem ideális (reális) oldat*  
**nonmetals** *nemfémek*

**nonpolar bond** *apoláris kötés*  
**neutron** *neutron*  
**nucleus** *atommag*

**number of degrees of freedom** *szabadsági fokok száma*

## O

**octet rule** *oktett-szabály*  
**oil** *olaj*  
**opaque** *opak*  
**oppositely charged ions** *ellentétes töltésű ionok*  
**orbital** *(atom)pálya*  
**order of a reaction** *reakciórend*  
**organic acids** *szerves savak*  
**organic chemistry** *szerves kémia*

**outermost electrons** *legkülső elektronok (vegyértékelektronok)*  
**outermost shell** *legkülső héj*  
**outer shells** *külső héjak*  
**oxidation number** *oxidációs szám*  
**oxidation state** *oxidációs állapot*  
**oxide** *oxid*  
**oxidizing agent** *oxidálószer*  
**ozone** *ózon*

## P

**paired electrons** *párosított elektron*  
**partial charge** *részleges töltés*  
**partial pressure** *parciális nyomás*  
**particle** *részecske*  
**Pauli exclusion principle** *Pauli-elv*  
**period** *periódus*  
**periodic table** *periódusos rendszer (táblázat)*  
**petroleum** *kőolaj*  
**phase** *fázis*  
**phase boundary** *fázishatár*  
**phosphoric acid** *foszforsav*  
**phosphorus** *foszfor*  
**photon** *foton, fénykvantum*  
**physical change** *fizikai változás*  
**physical chemistry** *fizikai kémia*  
**physical property** *fizikai tulajdonság*

**polar bond** *poláris kötés*  
**polar molecule** *poláris molekula*  
**polarization** *polarizáció*  
**polyatomic** *poliatomos (sokatomos)*  
**polyatomic ion** *összetett ion*  
**polymorph** *polimorf*  
**potassium** *kálium*  
**potential energy** *potenciális energia*  
**precipitate** *csapadék (oldatból kiváló, rosszul oldódó szilárd anyag)*  
**pressure** *nyomás*  
**principal quantum number** *főkvantumszám*  
**probability** *valószínűség*  
**products** *termékek (reakcióban)*  
**proton** *proton*

## Q

**quantum numbers** *kvantumszámok*

## R

**radius (tsz. radii)** *sugár*  
**rare earths** *ritkaföldékek (ritkaföldfémek)*  
**rare earth elements** *ritkaföldfémek*  
**rare gas** *inert gáz*  
**rate constant** *reakciósebességi állandó*  
**rate of reaction** *reakciósebesség*  
**reactants** *reaktánsok (kiindulási anyagok, reakcióban)*  
**reaction** *reakció*  
**reaction mechanism** *reakciómechanizmus*  
**redox reaction** *redoxreakció*  
**redox potential (Eh)** *redoxpotenciál*

**reducing agent** *redukálószer*  
**reduction** *redukció*  
**REE** *ritkaföldfém(ek), RFF*  
**relative atomic mass** *relatív atomtömeg*  
**relative molecular mass** *relatív molekulatömeg*  
**repulsion** *taszítás*  
**reverse reaction** *visszaalakulási reakció*  
**reversible reaction** *reverzibilis, megfordítható reakció*  
**rock** *kőzet (kő, szikla)*

## S

**salt bridge** *sóhíd (elektrokémia)*  
**saturated** *telített*  
**semiconductors** *félvezetők*

**shared pair** *megosztott elektronpár (kötő)*  
**shell** *héj (elektronhéj)*  
**silica** *szilícium-dioxid, SiO<sub>2</sub>*

**silicate** szilikát  
**silicon** szilícium  
**silver** ezüst  
**single covalent bond** egyszeres kovalens kötés  
**sodium** nátrium  
**solid** szilárd (anyag)  
**solidus** szolidusz  
**solubility** oldhatóság  
**solubility product** oldhatósági szorzat  
**solubility product constant ( $K_{sp}$ )** oldhatósági egyensúlyi állandó ( $L_s$ )  
**soluble** oldható  
**solute** oldott anyag  
**solution** oldat  
**solvent** oldószer  
**space-filling model** térkitöltő modell (kalotta)  
**spectrum** (tsz. **spectra**) spektrum

**spherically symmetrical** gömbszimmetrikus  
**spin quantum number** spinkvantumszám  
**spontaneous change** spontán változás  
**state function** állapotfüggvény  
**stoichiometric** sztöchiometrikus  
**stoichiometry** sztöchiometria  
**strong acid (or base)** erős sav (vagy bázis)  
**structural formula** szerkezeti képlet  
**sublimation** szublimáció  
**subshell** alhéj  
**sulfur** kén  
**sulfuric acid** kénsav  
**supercritical** szuperkritikus  
**supersaturated** túltelített  
**surroundings** környezet (rendszeré)  
**symbol** (of an element) vegyjel  
**system** rendszer

## t

**temperature** hőmérséklet  
**ternary system** háromkomponensű rendszer  
**tetrahedral coordination** tetraéderes koordináció  
**tetrahedron** tetraéder  
**thermochemistry** termokémia  
**thermodynamics** termodinamika

**toxic** mérgező, toxikus  
**transition metals** átmenetifémek  
**transition state** átmeneti állapot  
**triple covalent bond** hármas kovalens kötés  
**triple point** hármaspont  
**trivalent** háromértékű  
**tungsten** wolfrám

## u

**universal gas constant** egyetemes gázállandó  
**universe** univerzum, világegyetem  
**unpaired** párosítatlan (elektron)

**unsaturated** telítetlen  
**unshared pair** nemkötő elektronpár

## v

**valence** vegyérték  
**valence electron** vegyértékelektron  
**valence shell** vegyértékhéj  
**valency** vegyérték  
**van der Waals equation** van der Waals-egyenlet  
**vapor** (vapour) gőz

**vapor** (vapour) **pressure** gőznyomás  
**viscosity** viszkozitás  
**visible light** látható fény  
**volatile** illó, illékony  
**Voltaic cell** Volta-féle cella (galvácella)  
**volume** térfogat  
**volume diffusion** térfogati diffúzió

## w

**wavelength** hullámhossz  
**weak acid** gyenge sav

**weight** súly (erő)  
**work** munka

## x

**X-ray** röntgensugár  
**xenon** xenon

- Abbas, H.F., Wan Daud, W.M.A. (2010): Hydrogen production by methane decomposition: A review. *International Journal of Hydrogen Energy*, 35, 1160–1190.
- Albarède, F. (2009): *Geochemistry. An Introduction*, Second Edition, Cambridge University Press
- Anderson, G. (2005): *Thermodynamics of Natural Systems*, Second Edition, Cambridge University Press
- Appelo, C.A.J., Postma, D. (2009): *Geochemistry, groundwater and pollution*, 2nd edition, CRC Press, Fourth corrected reprint
- Ashik, U.P.M., Wan Daud, W.M.A., Abbas, H.F. (2015): Production of greenhouse gas free hydrogen by thermocatalytic decomposition of methane – A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 44, 221–256.
- Atkins, P.W. (1992): *Fizikai kémia I–III.*, Egyensúly/Szerkezet/Változás, Tankönyvkiadó, Budapest
- Atkins, P.W. (1995): *A periódusos birodalom. Utazás a kémiai elemek földjére*, Kulturtrade Kiadó, Budapest
- Bárány, S., Baumli, P., Emmer, J., Hutkainé Göndör, Zs., Némethné Sóvágó, J., Báder, A. (2011): *Fizikai kémia műszakiaknak*, Nemzeti Tankönyvkiadó, elektronikus tankönyv, Miskolc
- Bognár, L. (1987): *Ásványhatározó*, Gondolat Kiadó, Budapest
- Boksay, Z., Csákvári, B., Kónya, J.-né (1990): *Kémia a gimnázium III. osztálya számára* (Hetedik kiadás), Tankönyvkiadó, Budapest
- Boksay, Z., Török, F., Pintér, I., Balázs, L. (1987): *Kémia a gimnázium I. osztálya számára* (Hetedik kiadás), Tankönyvkiadó, Budapest
- Born, I. (2014): *Úti levelek az 1770-es bánsági, erdélyi, felső- és alsó-magyarországi ásványtani utazásról. Eredeti német szöveg és első magyar fordítás*, Milagrossa, Miskolc
- Braun, T. (2018): Kritikus helyzetben a világ ritkaföldfém-ellátása, Mítosz vagy valóság? *Magyar Kémikusok Lapja*, 73, 4, 120–126.
- Burger, K. (1992): *A mennyiségi analízis alapjai: kémiai és műszeres elemzés*, Semmelweis Kiadó, Budapest
- Cooper, C. (1994): *Az anyag*, Park Kiadó, Budapest
- Farsang, A. (2014): *Földrajzi kísérletek és modellek*, GeoLitera, SZTE TTIK Földrajzi és Földtani Tanszékcsoporth, Szeged
- Gelencsér, A., Molnár, Á., Imre, K. (2012): *Az éghajlatváltozás okai és következményei*, Pannon Egyetem
- Gill, R. (2015): *Chemical Fundamentals of Geology and Environmental Geoscience*, Third Edition, Wiley Blackwell, Oxford
- Greenwood, N.N., Earnshaw, A. (2004): *Az elemek kémiája (I–III. kötet)*, Második, javított kiadás, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest
- Harangi, Sz. (2015): *Vulkánok, A Kárpát-Pannon térség tűzhányói*, Második, bővített és javított kiadás, GeoLitera, SZTE TTIK Földrajzi és Földtani Tanszékcsoporth, Szeged
- Harangi, Sz., Lukács, R., Raucsikné Varga, A., Szakmány, Gy., Török, K. (2003): *Elemek természetes geokémiai eloszlása és elemzési módszereik*, ELTE Közzetani és Geokémiai Tanszék, Budapest

- Hetényi, M. (1999): Környezetgeokémia I., A hidroszféra, JATEPress, Szeged
- Kajtár, M., Varga, E. (1988): Kémia a gimnázium I. osztálya számára (Hatodik kiadás), Tankönyvkiadó, Budapest
- Kázmér, M. (1995): Angol–magyar geológiai szótár, Eötvös Kiadó, Budapest
- Koch, S., Sztrókay, K. (1994): Ásványtan I–II., 5. kiadás, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest (első kiadás: 1955)
- Ludwig, G. (1988): A borostyánkő története, Kossuth Könyvkiadó
- Moore, P., Nicolson, I. (1992): A Nap és bolygói, A Világegyetem Enciklopédiája, Helikon Kft., Budapest
- Nagy, B-né (1992): Műszeres analitikai módszerek és alkalmazásuk a geológiai anyagvizsgálatban, Tankönyvkiadó, Budapest
- Nyilasi, J. (1975): Általános kémia, Gondolat Könyvkiadó, Budapest
- Papp, S., Kümmel, R. (1992): Környezeti kémia, Tankönyvkiadó, Budapest
- Pál-Molnár, E. (2013): Az ásványok művészete, GeoLitera, SZTE TTIK Földrajzi és Földtani Tanszékcsoporthoz, Szeged
- Péczely, Gy. (1994): Éghajlat, 3. kiadás, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest
- Rózsahegyi, M. (1993): Kémia zsebkönyv középiskolásoknak, Mozaik Oktatási Stúdió, Szeged
- Schiller, R. (2013): Hidrogén, az elemek királya, A kémia születésétől az energetika jövőjéig, Typotex Elektronikus Kiadó Kft., Budapest
- Szabó, Z., Nyilasi, J. (1981): A szerves kémia alapjai, Műszaki Könyvkiadó, Budapest
- Varga, A., Bozsó, G., Garaguly, I., Raucsik, B., Bencsik, A., Kóbor, B. (2019): Cements, Waters, and Scales: An Integrated Study of the Szeged Geothermal Systems (SE Hungary) to Characterize Natural Environmental Conditions of the Thermal Aquifer, Geofluids, UNSP 4863814
- Varsányi, Z-né (2009): A földtudományok kémiai alapjai, Szegedi Egyetemi Kiadó, Szeged
- White, W.M. (2013): Geochemistry, Wiley-Blackwell
- Whitten, K.W., Davis, R.E., Peck, M.L., Stanley, G.G. (2014): Chemistry, Brooks/Cole, Cengage Learning, Belmont, USA
- Wilbraham, A.C., Staley, D.D., Matta, M.S., Waterman, E.L. (2008): Chemistry, Prentice Hall

## Tantárgyleírás

–a MAB hivatalos űrlapja alapján<sup>1</sup>–

### ALAPSZAK

<b>(1.) Tantárgy neve: A földtudományok kémiai alapjai</b>	<b>Kreditértéke: 2</b>
A tantárgy <b>besorolása: kötelező</b>	
<b>A tantárgy elméleti vagy gyakorlati jellegének mértéke, „képzési karaktere”: 70–30% (kredit%)</b>	
<p><b>A tanóra<sup>2</sup> típusa:</b> előadás és <b>óraszám:</b> <b>28 óra (heti 2 óra)</b> az adott félévben, <i>(ha nem (csak) magyarul oktatják a tárgyat, akkor a nyelve: -)</i></p> <p>Az adott ismeret átadásában alkalmazandó <b>további (sajátos) módok, jellemzők<sup>3</sup></b> <i>(ha vannak):</i> előadás, magyarázat, egyéni és közös feladatmegoldás, feladatlap, közös megbeszélés.</p>	
<p><b>A számonkérés módja</b> (koll. / gyj. / <b>egyéb<sup>4</sup></b>): <b>kollokvium</b></p> <p>Az ismeretellenőrzésben alkalmazandó <b>további (sajátos) módok<sup>5</sup></b> <i>(ha vannak):</i> Földtudományi BSc szakon az előadás teljesítésének párhuzamos feltétele a gyakorlati jegy megszerzése. Aki nem szerez érvényes gyakorlati jegyet, nem vizsgázhat!</p> <p>A kurzus kollokviummal zárul, ennek általános formája <u>írásbeli számonkérés</u>; a tematika témaköreinek megfelelően az órai anyag alapján (a téma megértésének, az elméleti tudás és annak egyszerű, önálló alkalmazási képességének ellenőrzése, földtudományi példák önálló értelmezése).</p> <p>Az írásbeli vizsga két részből áll: (i) 10 db, egyenként 5 pontos feladatból álló <i>feladatsor</i> és (ii) két kifejtős kérdés (<i>esszé</i>). A feladatsorból az első feladat 5 alapfogalom (kiadott jegyzék alapján) definícióját kéri; a további 9 feladat (a megoldásokkal együtt kiadott gyakorlófeladatoknak megfelelően) az alapismeretekre, alaptételekre, illetve azok egyszerű alkalmazására és földtudományi vonatkozásaira kérdez rá (vegyjelek, képletek megadása; reakcióegyenletek rendezése; tesztfeladatok; rövid magyarázat), rendelkezésre álló idő: max. 50 perc. Értékelés: elégséges: &gt; 50%; további szintek: &gt; 65% - közepes, &gt; 75% - jó, &gt; 85% - jeles.</p> <p>Az esszé két, külön-külön 5 pontos kérdést tartalmaz (alapfogalmakhoz kapcsolódó felsorolás, csoportosítás, összehasonlítás, illetve gyakorlati példák bemutatása), amelyek kb. fél-fél A4 oldalas terjedelemben megválaszolhatók. Az esszékérdések kidolgozására rendelkezésre álló idő: max. 30 perc.</p> <p>A kidolgozandó kérdések (<i>esszé</i>) értékelése:</p> <p>0-2 pont: elégtelen 3-4 pont: elégséges 5-6 pont: közepes 7-8 pont: jó 9-10 pont: jeles</p> <p>A vizsgajegy a két részjegyből tevődik össze úgy, hogy mindkét részjegynek legalább elégségesnek kell lennie. Az írásbeli vizsgán segédanyag (pl. periódusos rendszer, függvény táblázat) nem használható!</p> <p>Igény esetén (előre jelzett és egyeztetett módon) lehetőség van szóbeli vizsgára. A <u>szóbeli vizsga</u> témakörei megegyeznek a kurzuson tárgyalt témakörökkel. Az értékelés módja az alábbi:</p> <p><b>Jeles:</b> A hallgató részletesen ismeri és pontosan használja a földtudományi összefüggések megértéséhez szükséges általános, szerves és fizikai kémiai fogalmakat. Érti és értelmezi az atomszerkezet, a kémiai kölcsönhatások és az anyag fizikai és kémiai tulajdonságainak elméleti hátterét, összefüggéseit, különbségeit. A kémiai alapfogalmakat eredményesen alkalmazza földtudományi példák részletes kifejtésekor. A természetben lejátszódó földtudományi folyamatok,</p>	

<sup>1</sup> A Magyar Akkreditációs Bizottság honlapjának 2018. januári állása alapján, az ott szereplő űrlapot - tantárgyleírásra konkretizált résszel – kiegészítve készült.

<sup>2</sup> **Nftv. 108. § 37. tanóra:** a tantervben meghatározott tanulmányi követelmények teljesítéséhez az oktató személyes közreműködését igénylő foglalkozás (előadás, szeminárium, gyakorlat, konzultáció), amelynek időtartama legalább negyvenöt, legfeljebb hatvan perc.

<sup>3</sup> pl. esetismertetések, szerepjáték, tematikus prezentációk stb.

<sup>4</sup> pl. folyamatos számonkérés, évközi beszámoló

<sup>5</sup> pl. esettanulmányok, témakidolgozások, dolgozatok, esszék, üzleti, szervezési tervek stb. bekérése

egyszerű jelenségek értelmezése során alkalmazza a fizikai kémia alaptörvényeit (pl. ideális gáztörvény, tömeghatás törvénye, spontán folyamatok hajtóereje). A vizsgáztatói kérdésekre adekvát válaszokat ad.

**Jó:** Ismeri, érti és értelmezi a földtudományi összefüggések megértéséhez szükséges alapvető általános, szerves és fizikai kémiai fogalmakat, alaptörvényeket, illetve azok összefüggéseit és különbségeit. A természetben lejátszódó földtudományi folyamatok, egyszerű jelenségek értelmezése során többnyire pontosan használja és alkalmazza a kémiai alapfogalmakat és alaptörvényeket. A vizsgáztatói kérdésekre többnyire adekvát válaszokat ad.

**Közepes:** A hallgató ismeri és érti a földtudományi összefüggések megértéséhez szükséges alapvető általános, szerves és fizikai kémiai fogalmakat (pl. atom, elem, molekula, vegyület, keverék, halmazállapotok, munka, energia); összefüggéseiben ismeri az atomszerkezet, a kémiai kölcsönhatások és az anyag fizikai és kémiai tulajdonságainak elméleti hátterét. Ismeri, azonban a természetben lejátszódó földtudományi folyamatok értelmezésekor nem használja pontosan a kémiai fogalmakat, alapelveket. Vizsgáztatói kérdésekre csak részben tud önállóan válaszolni.

**Elégséges:** A hallgató többnyire ismeri a földtudományi összefüggések megértéséhez szükséges általános, szerves és fizikai kémiai alapfogalmakat, de összefüggéseiben nem képes gondolkodni az atomszerkezet, a kémiai kölcsönhatások és az anyag fizikai és kémiai tulajdonságainak kapcsolatáról. Nem használja a kapcsolódó szakkifejezéseket, tudományos fogalmakat; vizsgáztatói kérdésekre önállóan nem tud adekvát válaszokat adni. Rávezető, segítő kérdésekkel azonban elfogadható válaszokat ad.

**Elégtelen:** A hallgató nem ismeri a földtudományi összefüggések megértéséhez szükséges alapvető általános, szerves és fizikai kémiai alapfogalmakat. Nem érti az atomszerkezet és az anyag tulajdonságainak összefüggéseit. Nem használja a szakkifejezéseket, tudományos fogalmakat; vizsgáztatói kérdésekre segítséggel sem tud adekvát válaszokat adni.

A tantárgy **tantervi helye** (hányadik félév): **1. félév**

Előtanulmányi feltételek (ha vannak): -

#### **Tantárgy-leírás:** az elsajátítandó ismeretanyag tömör, ugyanakkor informáló leírása

##### **A tantárgy célja:**

A kurzus a legfontosabb általános, szerves és fizikai kémiai alapokat (szakkifejezések, meghatározások, alaptörvények, elméletek) ismerteti. Részletesen kitér az atomszerkezet és az anyag tulajdonságainak (fizikai jellemzők, kémiai reakcióhajlam) összefüggéseire. Az atomok elektronszerkezetének bemutatásán keresztül tárgyalja az elemek periódusos rendszerét, illetve ismerteti a kémiai kölcsönhatások jellemzőit, továbbá ezek hatását az anyag halmazállapotára és a természetben önként lejátszódó folyamatokra. A tárgy alapvető célja, hogy a kémiai háttérismeretet földtudományi (geológiai) példákon keresztül ismerjék meg a hallgatók, ezzel megteremtve a kapcsolódási lehetőséget a párhuzamosan futó, illetve későbbi szaktárgyi kurzusokkal. A képzési gyakorlatukban ennek megfelelően megjelenik a kémiai és a földtudományi ismeretek integrálása, a kémiai alapfogalmakat eredményesen alkalmazzák az ásványtani, a kőzettani, továbbá a geokémiai jellegű ismeretek elsajátításakor.

##### **Témakörök/tartalom:**

1. Az általános kémiai alapfogalmakkal kapcsolatos előzetes ismeretek feltérképezése. Az anyag felfedezése nanoléptékben; az atom és az elem fogalma, a vegyjel. A molekula és a vegyület fogalma, az anyag szemléltetése kémiai modellek segítségével. Az anyag halmazállapotai és tulajdonságai. Fizikai és kémiai tulajdonságok, fizikai és kémiai változások (gyakori természetes szerves és szerves anyagok és tulajdonságaik bemutatásán keresztül). A keverékek. Mérhető tulajdonságok, mérési lehetőségek.
2. Fizika a kémiában: az anyag és az energia. Fizikai kémiai alapfogalmak (gyakori energiatípusok és kapcsolatuk a munkával). A kémiai reakciók termodinamikai megközelítése (a kémiai reakció, a rendszer és a környezet; a fizikai és a kémiai folyamatok energiatranszferje). Törvények a természetben (tömegmegmaradás, energiamegmaradás, anyagmegmaradás). Az anyaggal és az energiával kapcsolatos ismeretek bemutatása a természetben gyakori (földtudományi szempontból jelentős)

<p>egyszerű szerves és szervetlen anyagok és tulajdonságaik bemutatásán keresztül.</p> <p>3. Atommodellek, atomszerkezet. Az elektronburok felépülése (atompályák, kvantumszámok, héjak és alhéjak, alapvető szabályok). A periódusos rendszer és a tulajdonságok periodikus változása (atomtömeg, atom- és ionsugár, első ionizációs energia, elektronaffinitás, elektronegativitás; fémes jelleg, vegyérték). A földtudományi szempontból kiemelkedő jelentőségű elemcsoportok kémiai tulajdonságai.</p> <p>4. Atomokból anyag: a kémiai kötések és jelentőségük. Elsődleges kémiai kölcsönhatások: az ionos kötés, a kovalens kötés és a fémes kötés. Másodlagos kémiai kölcsönhatások.</p> <p>5. Kémiai kölcsönhatás és halmazállapot. Szilárd halmazállapot: ásványok és kristályrácsok. Ionrácsok – ionkristályok. Atomrácsok. Fémek és ötvözetek: fémrácsok. Molekularácsok. Folyadékok és gázok. A folyadékok általános jellemzése, legfontosabb tulajdonságaik (viszkozitás, felületi feszültség, gőznyomás), földtudományi példák. Ideális és reális gázok, gáztörvények.</p> <p>6. A spontán folyamatok hajtóereje: termodinamikai alapfogalmak ismételése és kiegészítése (képződéshő, entrópia, szabadentalpia). A termodinamika alaptörvényei (főtételek). Egyensúlyi termodinamika: Gibbs-féle fázisszabály, fázisegyensúlyok. A koncentráció és az aktivitás. A tömeghatás törvénye (egyensúlyi folyamatok általános jellemzése). Egykomponensű rendszerek, p–T diagram. Két- és többkomponensű rendszerek (folyadék–folyadék rendszerek, folyadék–szilárd rendszerek): fázisdiagramok. A kémiai reakciók sebessége: reakciókinetikai alapfogalmak (reakciósebesség, reakciórend). A kémiai reakciók lejtőszögének kinetikai feltétele. Katalizált reakciók. Diffúzió.</p> <p>7. Vizes közegű kémiai reakciók. A víz autoprotolízise, a pH. Savak és bázisok. Oldhatóság, ásványok oldódása. Redoxireakciók, elektrokémiai alapok. Az elektródpotenciál mérése. Korrozio.</p>			
<p>A <b>2-5</b> legfontosabb <b>kötelező</b>, illetve <b>ajánlott irodalom</b> (jegyzet, tankönyv) felsorolása bibliográfiai adatokkal (szerző, cím, kiadás adatai, (esetleg oldalak), ISBN)</p>			
<p><b>Kötelező irodalom:</b> -</p> <p><b>Ajánlott irodalom:</b></p> <p>Greenwood, N. N. és Earnshaw, A. (2004): Az elemek kémiája I. – III., Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, Második, javított kiadás</p> <p>Nyilasi J. (1980): Általános kémia, Gondolat kiadó, Budapest</p> <p>Rózsahégyi M. (1993): Kémia zsebkönyv középiskolásoknak, Mozaik Oktatási Stúdió, Szeged, ISBN: 963 8057 23 8</p> <p>Varsányi Z.-né (2009): A földtudományok kémiai alapjai, Szegedi Egyetemi Kiadó, Szeged</p>			
<p>Azoknak az <b>előírt szakmai kompetenciáknak, kompetencia-elemeknek</b> (tudás, képesség stb., <b>KKK 7. pont</b>) a felsorolása, <b>amelyek kialakításához a tantárgy jellemzően, érdemben hozzájárul</b></p>			
<p><b>A KKK-ban szereplő kompetenciák, amelyek kialakításához a tantárgy hozzájárul:</b></p>			
<b>Tudás</b>	<b>Képesség</b>	<b>Attitűd</b>	<b>Autonómia-felelősség</b>
Rendelkezik a természettudományos alapismeretekkel és az erre épülő gyakorlat elemeinek ismeretével, és megszerezni tudja azokat.		Törekszik a természet és az ember viszonyának megismerésére.	Képes önállóan végiggondolni alapvető szakmai kérdéseket, és adott források alapján képes azok megválaszolására.
Ismeri és alkalmazza azokat a terepi, laboratóriumi és gyakorlati anyagokat, eszközöket és módszereket, melyekkel a	Szakterületén szerzett tudása alapján képes a mérési eredmények kiértékelésére, értelmezésére, dokumentálására.	Terepi és laboratóriumi tevékenysége során környezettudatosan jár el.	Saját munkájának eredményét reálisan és felelősséggel értékeli.

szakmáját alapszinten gyakorolni tudja.			
Anyanyelvén tisztában van a természeti folyamatokat megnevező fogalomrendszerrel és terminológiával.	Ismeretei alapján rendelkezik a természettudományos alapokon nyugvó elemi érvelés képességével.	Nyitott a szakmai eszmecserére.	A természettudományos világnézetet felelősséggel vállalja.

**A tantárggyal kialakítandó konkrét tanulási eredmények:**

Tudás	Képesség	Attitűd	Autonómia-felelősség
Tisztában van az anyag felépítésével kapcsolatos alapfogalmak (atom, elem, molekula, vegyület, ion, keverék) és az anyag halmazállapotait (szilárd, folyadék, gáz), fizikai és kémiai tulajdonságait leíró szakkifejezések jelentésével és különbségeivel.	Egyszerű, a természetben előforduló anyagok megnevezése/vegyjele /képlete/modellje alapján azokat felépítés, illetve halmazállapot szerint elemzi. Eligazodik az egyszerű szervetlen anyagok világában, azokat a kémia nyelvén ábrázolja, megnevezi.	Törekszik arra, hogy a földtudományi tanulmányai során a szaknyelvi megnevezéseket, kifejezéseket használja.	A kémiai értelemben helyes fogalomhasználatot önállóan alkalmazza mindennapi tevékenysége során.
Érti a munka, az energia és a kémiai reakciók típusait, összefüggéseit leíró alapfogalmakat és a kapcsolódó természeti törvényeket (tömegmegmaradás, energiamegmaradás, anyagmegmaradás).	Munkavégzés és energiaváltozás szempontjából egyszerű folyamatokat elemez; a kémiai reakciók felírása és rendezése során alkalmazza a tömegmegmaradás törvényét.	Belátja, hogy a természettudományos ismeretek nem korlátozódnak egy szűk szakterületre.	
Ismeri a napjainkban általánosan elfogadott, az atomszerkezet leírására szolgáló eszközöket, szabályokat; illetve az atomszerkezet és az elemek rendszerezése közötti összefüggéseket.	Értelmezi az elemek periódusos rendszerét, a természetben gyakori példákon keresztül bemutatja az elektronszerkezet és a periódusos rendszerben elfoglalt hely közötti közvetlen kapcsolatot.	Elfogadja, hogy a fizikai és a kémiai alapfogalmak, jelölések ismerete szükséges a földtudományi összefüggések megértéséhez.	
Ismeri az elemi egységek (atomok, ionok, molekulák) összekapcsolódását eredményező kémiai kölcsönhatások alapvető típusait.	Alkalmazza a periódusos rendszerben elfoglalt helyből levonható tulajdonságokat a kémiai kölcsönhatás jellegének feltárására.	Törekszik az alapvető kémiai ismeretekhez kötődő ok-okozati összefüggések felismerésére a földtudományok területén.	Önállóan elemmez alapszintű szakmai kérdéseket és azokat természettudományos igényességgel megválaszolja.
A kémiai kölcsönhatás és a halmazállapot kapcsolatának ismeretében	Feltárja az anyag szerkezete és jellemző fizikai tulajdonságai közötti	Nyitott az alapszintű földtudományi problémák megoldására, a	

földtudományi példán keresztül felsorolja a szilárd (kristályos), folyékony és gáz halmazállapotú anyagok általános jellemzőit.	összefüggéseket.	felfedező kutatásra.	
Érti a természetben önként lejátszódó (spontán) folyamatok termodinamikai és reakciókinetikai feltételeit, főtételeit.	Egyszerű földtudományi példákön keresztül egyirányú és megfordítható folyamatokat fogalmaz meg.	Törekszik a kémiai háttérismeretre épülő, logikus gondolkodásra a földtudományi feladatok, problémák megoldásakor.	Felelősséget érez a természettudományos világnézet felvállalására földtudományi szakterületen végzett munkája és mindennapi tevékenysége során egyaránt.
Ismeri és érti a kémiai egyensúly alapvető fogalmait a természetben gyakori folyamatok (pl. oldódás, kristályosodás, sav-bázis reakciók, redoxi-reakciók) során.	A kémiai egyensúly törvényszerűségeit alkalmazza a természetben gyakori megfordítható folyamatok értelmezésekor.		
<b>Tantárgy felelőse</b> (név, beosztás, tud. fokozat): <b>Dr. Raucsikné Dr. Varga Andrea, egyetemi adjunktus, PhD</b>			
<b>Tantárgy oktatásába bevont oktató(k)</b> , ha van(nak) (név, beosztás, tud. fokozat): <b>Dr. Raucsikné Dr. Varga Andrea, egyetemi adjunktus, PhD</b>			

*Aki a tüzet táplálta...*

*Édesanyám emlékére*



Jelen tananyag a Szegedi Tudományegyetemen készült az Európai Unió támogatásával.  
Projekt azonosító: EFOP-3.4.3-16-2016-00014.

Szegedi Tudományegyetem  
Cím: 6720 Szeged, Dugonics tér 13.  
[www.u-szeged.hu](http://www.u-szeged.hu)  
[www.szechenyi2020.hu](http://www.szechenyi2020.hu)

