

Kémia reakciók általános jellemzése

(11. fejezet)

A kémiai reakciók lényegében az anyagok átváltozását jelentik. Egy vagy több anyagból egy vagy több másik anyag képződik miközben az eredeti kötések felbomlanak és újak jönnek létre. Ezeknek a folyamatoknak a **gyors kvalitatív (minőségi) és kvantitatív (mennyiségi) leírására szolgál a reakcióegyenlet.**

Egy reakcióegyenletben mindenképpen **fel kell tüntetnünk a reagáló és képződő anyag(ok) képletét(eit)** illetve, hogy **milyen anyagmennyiség arányban vannak** (mólarányban) **egymáshoz képest.** Az egyenletben ezeket **sztoichiometriai számoknak** hívjuk, és ezekkel elégtjük ki az **anyagmegmaradás elvét**, azaz, hogy az anyag nem vész el csupán átalakul (vagyis az egyenlet két oldalán az azonos minőségű atomok darabszámának meg kell egyeznie).

Vannak olyan esetek azonban, amikor ennél több adatot is fel kell tüntetni. Vegyük például a víz képződési egyenletét. Ha azt szeretnénk az egyenlettel kifejezni, hogy mekkora a víz képződéshője, akkor a reakcióegyenletben a halmazállapotokat és a reakcióhőt (jelen esetben ez maga a képződéshő) is fel kell tüntetni. Ennek az az oka, hogy a reakcióhő erősen függ a reagáló és képződő anyagok halmazállapotától, így, ha nem írjuk ki például, hogy milyen halmazállapotú vízről van szó, akkor az esetleges termokémiai számításokban durva hibákat követhetünk el.



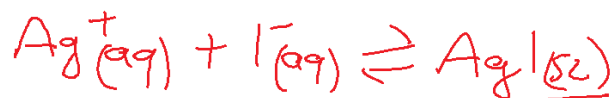
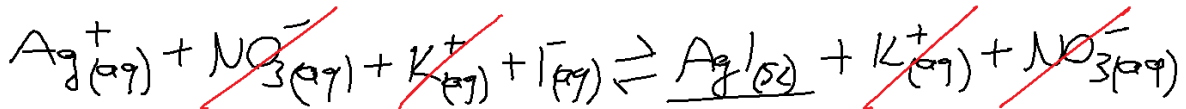
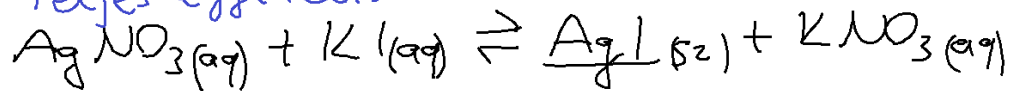
Jól látszik a példán, hogy a két reakcióegyenlet teljesen ugyanaz, azonban az első esetben vízgőz, a másodikban a kondenzált, folyékony víz keletkezik. Mivel a kondenzáció exoterm (hőtermelő) folyamat, ezért a második esetben több hő szabadul fel, mert a kondenzáció során felszabaduló látens hő (olyan hőváltozás, mely során nem változik a rendszer

hőmérséklete) hozzáadódik a folyamathoz. Ha nem íránk halmazállapotokat, akkor nem tudnánk melyik folyamatról van szó.

A lényege a dolognak az, hogy **képletek és sztöchiometriai számok egy reakcióegyenletbe mindenképp kellene még a legegyszerűbb esetben is**, néhány esetben azonban ennél többet is fel kell tüntetni, de ez témakör függő, lásd a fenti példát példának.

A kémiai reakciókat úgynevezett **ionegyenlettel** is fel lehet írni. Az ionegyenletben csak a reakcióhoz létfontosságú ionok, molekulák, atomok szerepelnek. Vízben oldott ionos vegyületeket, erős savakat, bázisokat szét lehet szedni ionjaikra, ugyanis **diszociált állapotban vannak jelen a vizes oldatban**. Ha ezeket szétszedjük, akkor a reakcióegyenletet tudjuk egyszerűsíteni és az így kapott egyszerűsített egyenlet lesz az ionegyenlet. Fontos, hogy az **ionegyenlet felírásának teljes mértékben tükröznie kell valós folyamatot**, azaz molekulákat és szilárd anyagokat ne szedjünk szét alkotóikra (mert ők fizikailag molekulaként vagy szilárd halmazként vannak jelen):

Teljes egyenlet:



ionegyenlet

Kémiai reakciók csoportosítása

A kémiai reakciókat számos szempont szerint lehet csoportosítani:

- **hőváltozás szerint** lehet
 - exoterm (hőtermelő, negatív előjelű reakcióhővel, rendszer belső energiája csökken, környezeté nő)
 - endoterm (hőelnyelő, azaz pozitív előjelű reakcióhővel, rendszer belső energiája nő, a környezeté csökken)

Ezzel a termokémia foglalkozik, bővebben ott fogunk róla tanulni.

- **sebesség szerint** lehet
 - pillanatszerű (csapadékképződés)
 - véges idő alatt végbenő (hidrogén-jodid szintézise)
 - végtelen lassú folyamat (korrózió)

Ezzel a reakciókinetika foglalkozik, bővebben ott fogunk foglalkozni vele.

- **Homogenitás szerint** lehet
 - heterogén
 - homogén
- **Részecskeátmenet szerint** lehet
 - proton átmenettel járó reakciók (sav-bázis)
 - elektronátmenettel járó reakciók (redoxi)
- **Reagáló anyagok száma szerint**
 - bomlás (HgO bomlása higanyra és oxigénre)
 - egyesülés (kén és oxigén egyesülése kén-dioxiddá)
 - cserebomlás (az alkotók kicserélődnek egymással, pl.: $\text{CaCl}_2 + \text{Na}_2\text{CO}_3 = \text{CaCO}_3 + 2 \text{NaCl}$)
 - stb...
- **egyéb, például vizes fázisban végbemenő reakciók**
 - csapadékképződés
 - komplexképződés

- legtöbb sav-bázis reakció
- számos redoxi reakció

Kémia reakciók csoportosítása homogenitás szerint

A **homogén fázisú reakciók** esetében a **reagáló anyagok egy, ugyanazon fázisban vannak**. Ilyen például az összes olyan reakció, amely oldatfázisban megy végbe. Sósav oldat és nátrium-hidroxid oldat reakciójakor pont ez az eset áll fenn, ugyanis a két reagens egymással elegyedő vizes fázisban van. A homogén reakció a fázisok halmazállapota szerint lehet:

- gázfázisú (pl amikor két gáz reagál, ilyen a durranógáz)
- folyadékfázisú (fent tárgyalt példa)
- szilárd fázisú (ritka, kevés anyag képes egymással úgy reagálni, hogy mind a ketten szilárdak, erre jó példa az alumínium és jóddal egyesülése egy csepp víz hatására alumínium jodiddá)

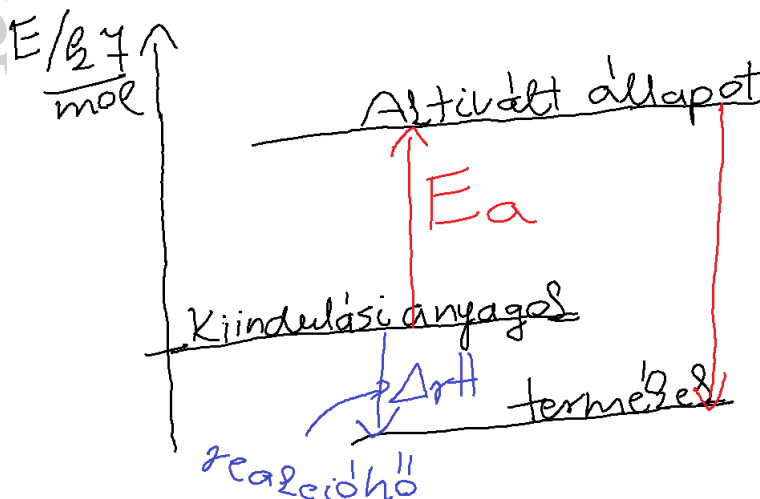
A **heterogén fázisú reakciók** esetében a **reagáló anyagok különböző fázisban vannak**. Erre jó példa az elemi nátrium és víz reakciója. A nátrium szilárd, a víz folyékony halmazállapotú és egymással nem elegyednek, csupán reagálnak. Ilyen esetekben a reakció mindig csak az érintkezési felületen, azaz a határfelületen zajlik, a fázisok belsejében nem. A példánkban a víz és nátrium csak ott reagál, ahol érintkeznek, vagyis a folyadék-szilárd fázishatáron.

A kémia reakciók feltételei

Kémiai reakció csak olyan részecskék között mehet végbe, melyek megfelelő körülmények biztosítása mellett **egymással képesek reakcióba lépni (legyen „affinitásuk” egymáshoz)**. Az ilyen részecskék esetén a sikeres kémiai átalakulásoknak még számos feltétele van. Sok szempont közül érdemes talán a legnyilvánvalóbbal kezdeni, ez pedig nem más, mint hogy a **reagálandó részecskék találkozzanak, ütközzenek egymással**.

Az égés egyik feltétele az oxigén jelenléte. Mindenki tudja, hogy a benzin nagyon jól és hevesen ég. (Az égés tulajdonképpen nem más, mint oxigénnel való reakció.) Ha az éghető anyag biztosított, akkor az oxigén jelenléte mellett a harmadik elengedhetetlen feltétele az égésnek a gyulladási hőmérséklet biztosítása. Ezért van, hogy a benzin nem gyullad meg magától a levegőn, azonban, ha szikra vagy láng, esetleg csak magasabb hőmérséklet éri, a reakció már beindulhat. Minden kémiai folyamat végbemeneteléhez alapvetően szükséges **egy minimális energiával rendelkeznie a reagálandó részecskéknek** ahhoz, hogy a megfelelően orientált ütközés, un. **hatásos – vagyis reakcióhoz vezető – ütközés** lehessen. A kémiai reakciók elemi lépéseit úgy képzeljük el, hogy a hatásos ütközések során a kiindulási anyagokból egy un. **aktivált komplex, egy átmeneti állapot** jön létre. **Ebben átmeneti kötések találhatók**, s a reakció végén ez az aktivált komplex szétesik a reakciótermékekké.

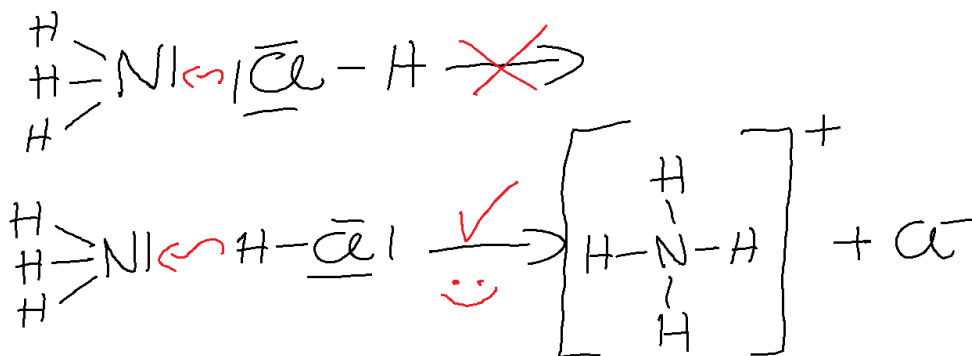
Egy adott elemi reakciólépésben az aktivált komplex energiája mindig a legnagyobb, hozzá képest a termékek és a kiindulási anyagok bizonyosan alacsonyabb energiaszinten helyezkednek el, kialakulása tehát endoterm folyamat.



Azt az energiát, mely 1 mól aktivált komplex kialakulásához szükséges, **aktiválási energiának** nevezzük. Jele E_{akt} , mértékegysége kJ/mol.

Amennyiben tehát a reagáló anyagok, ill. az a rendszer, amiben a reakciót véghez kívánjuk vinni nem rendelkeznek akkora energiával, ami az aktiválási energia biztosításához szükséges, akkor még megfelelően orientált ütközések esetén sem keletkeznek reakciótermékek, tehát nem történik kémiai reakció.

Ha már a reagálandó részecskék képesek kölcsönhatásba lépni egymással, képesek ütközni és még a megfelelő energiával is rendelkeznek, akkor a következő szempont a kémiai átalakulás végbemeneteléhez, hogy a megfelelő oldalról találkozzanak, vagyis **a részecskék az átalakuláshoz szükséges térbeli helyzetben legyenek ütközéskor**. Egy klasszikus példával élve, hidrogén-klorid és ammóniagáz reakciójakor csak azokból az ütközésekből lesz reakció, amelyeknél az ammónia a nitrogénatomja felől találkozik a HCl hidrogénatomjával:



A kémiai reakciók végbemeneteléhez ezek alapján a következő feltételek szükségesek:

- a részecskék képesek **legyenek egymással reagálni (kémiai affinitás)**
- a reagálandó részecskék **ütközzenek (legyenek egy térben), ráadásul a megfelelő térbeli helyzetben (orientáció)**
- az **aktiválási energia biztosítása.**