

Varga Attila

A szénvegyületek „oxidált állapota” – iskolai használatra

Redoxi-történések atomi szinten

Környezetünket, élő és élettelen világunkat sokmillió szénvegyület építi fel, a legegyszerűbbtől, a metán nevű földgáz alkotórésztől kezdve a több százezer vagy millió szénatomot tartalmazó DNS-molekuláig a legváltozatosabb képét adják a vegyületek világának. Ez a sokféle szénvegyület igen sokféle kémiai reakcióban vesz részt, akár spontán módon a természetben, pl. élő szervezetekben, akár az emberi átalakító folyamatok révén a gyárakban, pl. gyógyszerek vagy műanyagok előállításánál.

A kémiai reakciókban résztvevő vegyületekkel, elemekkel mindig „történik” valami, többé-kevésbé megváltoznak, átalakulnak. Kézenfekvő, hogy ilyenkor a változás az atomok vagy molekulák „külső felületén”, az atomok külső elektronhéján kezdődik, ill. megy végbe. Ha két autó összeütközik, a külső burok, a karosszéria sérül. Így van ez az atomok és molekulák ütközésénél is.

Összefoglalóan azt mondhatjuk, hogy *kétféle dolog történhet* az atommal kémiai reakció közben: *elektront (elektronokat) „nyer”,* tehát elektrontöltésben „gazdagszik” vagy éppen ellenkezőleg, *elektront (elektronokat) „veszít”,* azaz elektrontöltésben „szegényebb lesz”. Itt általában nem egységnyi (-1) töltésváltozásról van szó, rendszerint ennek csupán igen kis törtrészéről, persze a „sok kicsi sokra megy” elve itt is érvényesül. A szerves molekulát több-kevesebb atom építi fel, tehát a kémiai reakciók során *az egész molekulát érintik* azok atomjaival történő, előbb említett változások, tehát a molekulák között kialakult kapcsolatok az egész molekulára nézve elektrontöltésben való kissé „gyarapodást” vagy kissé „szegényedést” jelent. Ha például egy H₂-molekula megfelelő körülmények között úgy ütközik egy O₂-molekulával, hogy ezek atomjai a H₂O jelű vízmolekulát hozzák létre, ez az esemény *a hidrogénnek* elektrontöltésben „gyarapodást”, *az oxigénnek „vesztéséget”* jelent. (A mélyebb értelmezésekre itt nem térünk ki.) A kémiában tudományos alapon az „elektrontöltés vesztesét” *oxidációnak*, az „elektrontöltés gyarapodását” *redukciónak* nevezik. Az előbbi példánkban a *hidrogén oxidálódott, az oxigén redukálódott*. Nem szójáték akar lenni, de úgy is

mondhatjuk, hogy az oxigén „oxidálta” a hidrogént, miközben a hidrogén redukálta az oxigént.

L. Pauling, a pasadenai egyetem professzora, aki kémiából Nobel-díjat kapott, később Béke Nobel-díjat is, az atomokra bevezetett egy igen fontos állandót, melyet „*elektronegativitásnak*”, másképpen – főként az oktatásban – „*elektronvonzó képességnek*” nevezünk. Ez az állandó *kötési energiák* vizsgálata kapcsán született meg, tehát lényegében *energiajellelű*, dimenzió nélküli szám. Ma már minden „*valamire való*” periódusos rendszer feltünteti a vegyjelek mellett ezt a számot, mely matematikai mértékét adja meg annak az atomi tulajdonságnak, hogy az atom mennyire „ragaszkodik” az elektronjaihoz, vagy másképpen mennyire „*vágyik*” újabb elektronra. A kémiai reakciókban való szereplésnek ez igen fontos jellemzője.

Új fogalom régi alapokon

Az itt bemutatott folyamatrendszert redoxireakcióknak nevezzük. Most továbblépve vezessünk be egy új fogalmat: az „*oxidált állapot*” (a továbbiakban: OX) fogalmát, mely fogalmat a szerves molekuláknál alkalmazzuk. Most egy nagyon csúnya definíció következik, melyet majd meg kell magyaráznunk. „*A szerves molekula oxidált állapotán a molekulában lévő összes különböző atomok által képviselt elektronegativitás és a szénatom elektronegativitása (2,5) közötti különbségek, statisztikai átlagban egy szénatomra jutó, összességét értjük.*” Ez egy szerves molekulára *jellemző állandó* lesz, mely a molekula egy bizonyos *állapotát* fejezi ki. Mi is ez az állapot? Az, hogy amikor ez a molekula keletkezik, a benne lévő összes szénatom átlagosan *milyen mértékig lesz* az elektronok töltéséből „*kielégítve*”. Minél nagyobb a szénatom és a másik atom elektronegativitása között a *különbség* (ΔEN), és minél kevesebb szénatom „*osztózik*” a különbségen, *annál oxidáltabb* állapotba kerül a molekula. Pl. a CO₂-ban a C- és O-atom elektronegativitása közötti különbség: $(3,5 - 2,5) \times 2 = 2$. Mivel a C-atomnak nem kell „*osztóznia*” másik C-atommal ezen a különbségen, ennyi a szén-dioxid oxidációs állapota. Ez egy elég nagy szám. Ha megnézzük ilyen szempontból a CH₄ (metán) molekulát az alábbi eredményt kapjuk: $(2,1 - 2,5) \times 4 = -1,6$. A negatív jel mutatja, hogy a C-atomnak a H-atommal való „*házaság*” nem volt szerencsés, mert az egyetlen C-atomnak „*elektronéhséget*” okozott. Ezért a metán *redukálószer*, „*kívánja*”

az elektront, szemben a széndioxiddal, mely *oxidálószerként* képes működni.

Az „oxidált állapot” (vagy „oxidációs állapot”) nem tévesztendő össze az „oxidációs számmal” és az „oxidációfokkal”. Az „oxidált állapot” a szerves molekuláknak *azon állapotát* fejezi ki, amelybe került a reakció során azáltal, hogy atomok épültek be a molekulába ill. atomok váltak le a molekuláról. Ez a kémiai esemény ugyanis megváltoztatta a szerves molekula anyagi minőségét, egyúttal megváltoztatta a szerves molekulán belül a *kötésviszonyokat*, ami által megváltozott a kötő elektronoknak az egyes *szénatomokra gyakorolt hatása*, s ezt a változást az *elektronegativitás különbségeinek (ΔEN) változása* jelzi, s ezt a *különbségek (ΔEN) egy szénatomra jutó átlagában* tudjuk matematikailag megragadni. A változás, különösen egy nagyobb molekulánál, nem minden szénatomra nézve egyenlő mértékű, de az egy szénatomra jutó statisztikai átlag jellemző lehet a molekula azon állapotára, hogy a redoxireakciós folyamatban mi történt vele, redukálódott, vagy oxidálódott.

Az „oxidált állapot” (OX) számítása nagyon egyszerű, ha a molekula *csak egy szénatomot* tartalmaz:

$$OX = A_1(EN_1 - 2,5) + A_2(EN_2 - 2,5) + \dots, \text{ ahol}$$

A = a szénatomhoz kapcsolódó „idegen” atomok száma,

EN = a kapcsolt atomok elektronegativitása, 2,5 = a szénatom (C) elektronegativitása.

Példa a számításra:

a diklór-metán (CH_2Cl_2) oxidált állapota = $2(2,1 - 2,5) + 2(3,0 - 2,5) = -0,1 + 1 = 0,2$.

Több szénatomot tartalmazó molekula oxidált állapotának számításánál a szénatomok OX értékeinek átlagát kell venni, a számítás az alábbi képlet szerint történhet:

$$OX = \frac{1}{c} [A_1(EN_1 - 2,5) + A_2(EN_2 - 2,5) + \dots + A_n(EN_n - 2,5)]$$

(c = a szénatomok száma a molekulában)

Összegezve:

$$OX = \frac{1}{c} \sum_{i=1}^n A_i(EN_i - 2,5)$$

Példa a számításra: az aminosav (H₂NCH₂COOH) oxidált állapota = $\frac{1}{2} [5(2,1 - 2,5) + 2(3,5 - 2,5) + (3,0 - 2,5)] = \frac{1}{2} [-2 + 2 + 0,5] = 0,25$.

Az alábbi táblázatban néhány egyszerűbb szénvegyület *oxidált (oxidációs) állapotát* adjuk meg:

Metán:	-1,6	Etán:	-1,2
Etén (etilén):	-0,8	Etanol (etilalkohol):	-0,7
Etin (acetilén):	-0,4	Etanal (acetaldehid):	-0,3
Metanol (metilalkohol):	-0,6	Etánsav (ecetsav):	0,2
Metánsav (hangyasav):	1,2	Oxálsav:	1,6
Szénsav:	2,2	Glükóz (szőlőcukor):	0,2
Szén-dioxid:	2	Szacharóz (répacukor):	0,18
Szén-monoxid:	1	Borkősav:	0,9
Kalcium-karbonát	1,6		

Miben segít az új fogalom?

Rögtön felvetődhet a kérdés, egy új fogalom bevezetésére miért lenne szükség a kémiában, egyébként is elég sok új fogalommal kell megbirkóznunk a fiataloknak a kémia tanulása során. Aki a kémiai folyamatok értelmezésében kellően jártas, tudja, hogy e területén bizony akadnak nehézségek. A kémiai reakciók lejátszódásának mechanizmusát tekintve *két fő csoportra* osztjuk a reakciókat, protolitikus folyamatokra és redoxireakciókra, azonban a besorolás nem mindig teljesen egyértelmű. A redoxireakciók értelmezése is olykor nehézségekbe ütközik, ha nem elektronátmenettel, hanem *elektron-eltolódással* járó reakciókról van szó. Zavart okozhat az is, hogy a szerves kémia területén a korszerű elektronátmenetes ill. eltolódásos értelmezés mellett még ma is gyakran használatos a régi, „*hagyományos*” értelmezés, ami szerint az oxigénfelvétel vagy hidrogénleadás oxidációnak, ennek a fordítottja pedig redukciónak tekintendő.

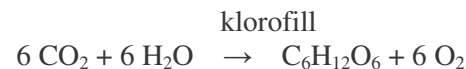
A fentebb közölt új fogalom bevezetése és alkalmazása megoldást jelenthet a dilemmák kiküszöbölésére. Viszonylag egyszerű matematikai műveletsorokról van szó, melyek eredménye segíthet a megoldásban. Ehhez természetesen az alábbi szabályt alkalmazni kell: az oxidált állapot *növekedése oxidációt, csökkenése redukciót* jelent. Ha tudjuk, hogy mi oxidálódott mivé és mi redukálódott mivé, akkor már azt is könnyű eldönteni, mi az oxidálószer és mi a redukálószer.

Lássunk mindezekre példákat, egyenlőre a fenti táblázat alkalmazásával. Ha a szénatom (C) elégetjük szén-dioxid (CO₂) keletkezik. A

szén, mint elem OX értéke nulla és a szén-dioxidé 2. Nőtt az oxidált állapot, a szén szén-dioxiddá oxidálódott, miközben, nyilván az egyetlen „partnerének”, az oxigénnek redukálódni kellett ugyanezzé a vegyületté. Itt a szén a redukálószer, az oxigén az oxidálószer. Természetesen ilyen igen egyszerű folyamat értelmezéséhez még nem kell az oxidált állapotot ismerni. Egy kicsit nehezebb a helyzet, ha a hagyományos tüzelésnél szintén lejátszódó alábbi folyamatról van szó: a szén-dioxid az izzó szénrétegen (pl. koksgrétegen) megy keresztül: $\text{CO}_2 + \text{C} = 2\text{CO}$ (Ez a folyamat teszi igen mérgezővé a füstgázokat.) Mi redukálódott, mi oxidálódott? A CO_2 OX=2 értéke a szén-monoxid (CO) OX=1 értékére csökkent. Ez redukció, a C redukálta a CO_2 -ot szén-monoxiddá, de mi oxidálódott? Tudvalevő, hogy e két részfolyamat, a redukció és oxidáció mindig együtt játszódik le. Úgy is mondhatjuk, ha valami redukálódott, valaminek oxidálódni is kellett. A szén OX=0 értéke egyúttal 1-re nőtt, tehát a szén-dioxid a szén szén-monoxiddá oxidálta. A folyamatban tehát a két résztvevő anyag közül a C a redukálószer, a CO_2 az oxidálószer.

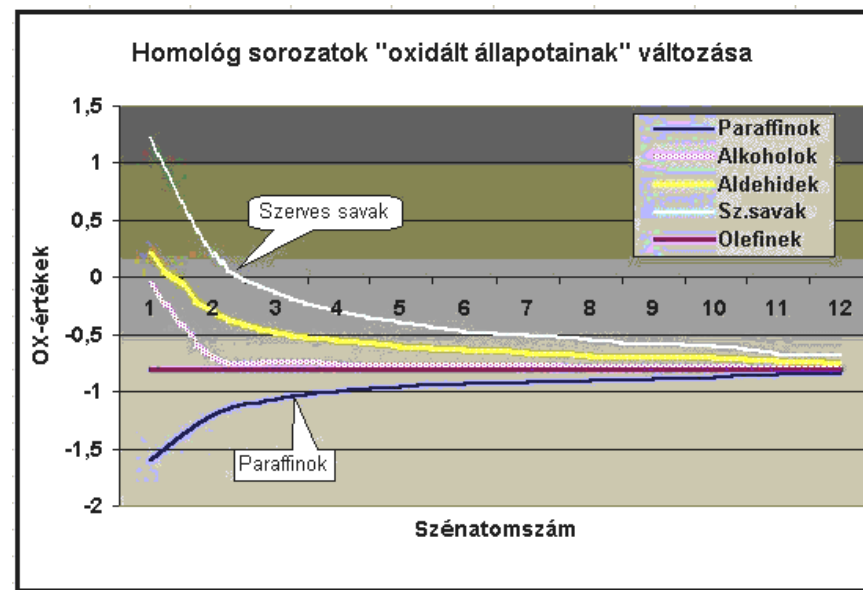
Ez még mindig nem volt „nehéz dió”, de mi történik a mészkő bomlási reakciójában (Az égetett mész gyártási folyamata.) A reakcióegyenlet: $\text{CaCO}_3 = \text{CaO} + \text{CO}_2$. A kalcium-karbonát OX értéke = 1,6. Ez a szén-dioxidban 2-re növekedett, tehát a kalcium-karbonát szén-dioxiddá oxidálódott, egyúttal kalcium-oxiddá (égetett mész) redukálódott. Itt a redoxireakció értelmezése az OX értékek ismerete nélkül nem lehetséges. Még bizarrabb példa a szénsav bomlási folyamata: $\text{H}_2\text{CO}_3 = \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$. Erre a mai érettségizett azt mondja: ez sav-bázis reakció, azaz protolitikus folyamat. Ez igaz is, ha azonban az itt szereplő felírásnak megfelelően, a kiindulási anyagok molekulái és a keletkezett anyagok molekulái alapján ítéljük meg a reakciót, miért ne lehetne ez is redoxireakció. A szénsav 2,2 OX értéke a szén-dioxidban 2-re csökkent, tehát a szénsav szén-dioxiddá redukálódott, miközben vízzé oxidálódott. Az oxidált állapot bevezetésével tehát kissé ki is szélesíthetjük a redoxireakciók fogalmát, legalább is a szénvegyületek kémiájában.

Még egy érdekes folyamatot van módunk itt bemutatni, a *fotoszintézis* folyamatát, mely igen fontos, hiszen a földi lét alapját biztosítja. A zöld növényvilág szén-dioxidból és vízből a nap energiájának segítségével, a klorofill közreműködésével glükózt (szőlőcukrot) „gyárt” és oxigéngázt termel. A folyamat összesítve az alábbi:



A folyamatban a CO_2 (OX = 2) glükózzá (OX = 0,2) redukálódik, miközben a H_2O oxigénné oxidálódik (hidrogénvesztés → oxidáció). A redukációs folyamatok *energiaigényesek*, ezért kell a napenergiát csapdába ejtő klorofill.

A szénvegyületek oxidált állapotait (OX értékeit) táblázatosan megadhatjuk, de diagrammon ábrázolva érdekes összefüggésekre juthatunk. Az 1. ábrán nézzük meg néhány homológ sorozat OX értékeinek változását és tegyük meg következtetéseinket.



1. ábra. Homológ sorozatok „oxidált állapotainak” változása

Jól látható, hogy a telített szerves savak, aldehidek, alkohokok oxidált állapotai a szénatomszám növekedésével *csökkennek*, az olefinek (hasonlóan viselkednek a cikloparaffinok) OX értéke nem változik a szénatomszám változásával, a paraffin szénhidrogéneké pedig *növekszik* a szénatomszám növekedésével. A görbék alulról ill. felülről az olefinek egyeneséhez tartanak, ahogy a szénatomszám növekszik.

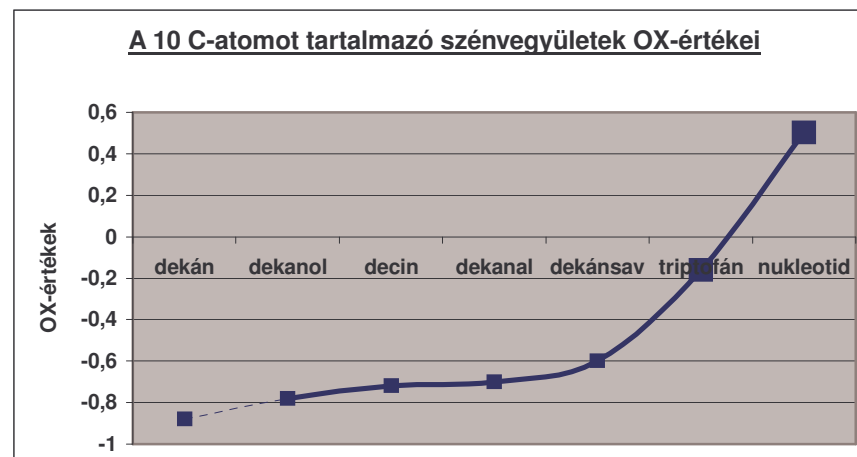
Ez azt is kifejezi, hogy a paraffinok a szénatomszám növekedésével egyre *oxidáltabb* állapotba kerülnek. A metánhoz képest, a propán-bután gáz (a palackos gáz) oxidáltabb állapotban van. Fordított a helyzet a szerves savak, az aldehidek és a alkoholok esetében. Ezeknél a szénvegyületeknél a szénatomszám növelése *redukciót* jelent, mert csökken az oxidált állapot értéke. Az ecetsavhoz (ételecet) képest a sztearinsav vagy palmitinsav (zsírsavak) lényegesen redukáltabb állapotban vannak. Hasonló állapítható meg a telített aldehidek vagy alkoholok sorozatánál: a sorozat egy-két szénatomot tartalmazó tagjaihoz képest a magasabb szénatomszámúak lényegesen redukáltabbak.

Az 1. ábra látványosan tudósít arról is, hogy a fenti sorozatok tagjai a szerves savaktól indulva a paraffin szénhidrogének irányába egyre redukáltabb állapotban vannak, ill. fordított irányban egyre oxidáltabb állapotúak. Azaz, egy szerves sav mindig oxidáltabb állapotú egy aldehidnél, de az is oxidáltabb egy alkoholnál, az alkoholok pedig a szénhidrogénekénél. Ez pedig a tapasztalattal is teljes mértékig egybevág, hiszen pl. etilénből kiindulva oxidációval tudunk etilalkoholt, további oxidációval acetaldehidet, majd ecetsavat előállítani. Összefoglalóan megállapíthatjuk, hogy a szénhidrogének oxidációjával alkoholokat, ezek oxidációjával, aldehideket, még további oxidációval szerves savakat állíthatunk elő ill. származtathatunk. (Az előállítás a gyakorlatban nem minden esetben valósítható meg.)

A szerves kémiában a hidrogénvesztés is oxidáció, ha tehát pl. az etánt dehidrogénezük, etilént, ebből további dehidrogénezéssel acetilént állíthatunk elő. Ha e három vegyület oxidált állapotait a táblázatból megnézzük, láthatjuk, hogy ebben az irányban valóban nő az OX értéke, tehát oxidációról van szó.

Érdekes összefüggések

Az oxidált állapot kiszámítása még érdekesebb összehasonlításokra ad lehetőséget összetettebb, bonyolultabb szerves vegyületek esetében. Ha pl. ábrázoljuk a 10 szénatomot tartalmazó szerves vegyületek oxidált állapotának értékeit, egy hiperbolához meglepően hasonló görbét kapunk (2. ábra).



2. ábra. Tíz szénatomot tartalmazó szénvegyületek OX-értékei

A triptofán fehérje eredetű aminosav, a „nukleotid” megnevezéshez tartozó OX érték pedig nyolc DNS-alkotó nukleotid oxidált állapotainak átlaga ($OX_{\text{átlag}} = 0,5$). Megjegyzendő, hogy e nukleotidok szénatomszám átlaga megközelíti a 10-et (9,6). Az „életet hordozó” molekulák alkotórészeinek *oxidált állapotai* tehát *magasabbak* az élettelen világ hasonló szénatomszámú szénvegyületeinek oxidált állapotaitól. Teljesen hasonló észrevételt tehetünk a hat szénatomot tartalmazó szénvegyületek (hexán, hexanol, hexin, hexanal, hexánsav, 6 szénatomot tartalmazó aminosav, glükóz, citromsav) esetében.

Ha a fenti görbe hozzávetőlegesen hiperbola, az OX értékek köbei hozzávetőlegesen emelkedő egyenes mentén helyezkednek el. Az ábrázolások valóban ezt támasztották alá. További vizsgálódásokkal és összehasonlításokkal érdekes, akár filozófiai értékű megállapítások tehetők az oxidált állapotok segítségével.

A számítástechnikában jártas fiatalok jó játéknak is tekinthetik az OX értékek számítását, az értékek összevetéseit és ábrázolásait, sőt, a programozásban is jártas fiatal akár programot is szerkeszthet az OX számítására. Így a kémia szeretetének megerősítéséhez is egyféle utat jelenthet e fogalom bevezetése és alkalmazása az oktatás megfelelő szintjén és helyén, pl. szakkörökön, fakultatív foglalkozásokon.

Jegyzet

- [1] HACK FRIGYES – KUGLER SÁNDORNÉ – TÓTH GÉZA (mint eredeti szerzők): *Négyjegyű függvénytáblázatok – Matematikai. Fizikai, kémiai összefüggések* Nemzeti tankönyvkiadó, Budapest, 1993. 222-243. oldal.
- [2] VARGA ATTILA: *A szénvegyületek oxidációs állapota* (Országos tanterv- és tankönyvfejlesztési pályázat anyaga, 1987.. Jelige: „OXÁLL”, terjedelem: 27 oldal, azonosítási szám: 17/VIII.)

Irodalom

- [1] Dr. BALÁZS LÓRÁNT: *A kémia története II.* Nemzeti tankönyvkiadó, Budapest, 1996. 728-731, 812-813, 841 és 956. oldal.
- [2] CLYDE R. DILLARD – DAVID E. GOLDBERG: *KÉMIA – Reakciók, szerkezetek, tulajdonságok* Gondolat, Budapest, 1982. 102-113, 277, 288-298, 311-325. oldal.
- [3] Dr. KOVÁCS KÁLMÁN – Dr. HALMOS MIKLÓS: *A szerves kémia alapjai* Tankönyvkiadó, Budapest, 1976.
- [4] NYILASI JÁNOS: *Általános kémia* Gondolat, Budapest, 1975. 73-77, 249-259. oldal.