

Az oxidációs szám

A szerves kémiai nevezéktanban és a redoxi egyenletek rendezésénél nagy segítséget jelent az atomok oxidációs állapotának, illetve az oxidációs számának ismerete.

Az **oxidációs állapot**, vagy **oxidációs szám** alatt azt a fiktív – egész számú – töltést értjük, amelyet úgy kapunk, hogy a kötést kialakító elektronokat az elektronegatívabb atomhoz rendeljük. Egy kötés hozzárendelése az oxidációs szám -1 értékét jelenti, egy kötés elvétele pedig +1-et.

- Egyes tananyagokban találkozhatunk az oxidációs szám és állapot elkülönülésével, amikor az azonos atomok oxidációs állapotának átlagaként értelmezik az oxidációs számot.

Az **oxidációs számot a vegyjel jobb felső sarkában indexként** tüntetjük fel, mégpedig **először mindig az előjelet, majd a töltés számát leírva**. A jelölésnél ügyelni kell arra, hogy a **pozitív előjelet is és az 1-es számot is** mindig ki kell írni, mert különben tévesztésre ad lehetőséget. Pl.:

Cl^- = egyszeresen negatív kloridion Cl^{-1} = olyan klóratom, amelynek oxidációs száma -1
 Na = nátriumatom Na^+ = egyszeresen pozitív nátriumion
 Na^{+1} = olyan nátriumatom, amelynek oxidációs száma +1

Egyféle atom egyazon vegyületben többféle oxidációs állapotú is lehet. Az összegképletből csupán átlagértéket tudunk kiszámolni (numerikus módszer). A szerkezeti képlet alapján az egyes alkotó atomokhoz tartozó oxidációs szám is meghatározható (grafikus módszer).

Az oxidációs szám meghatározása történhet

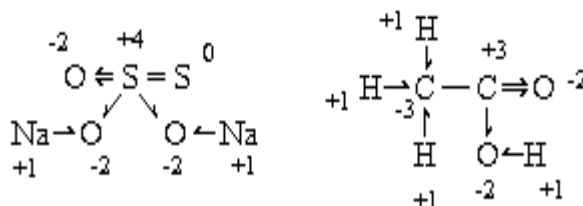
grafikus módszerrel: a pontos szerkezeti képlet ismerete szükséges hozzá, a vegyület atomjainak oxidációs állapotát azok elektronegativitása alapján állapítjuk meg. Előnye, hogy a molekulában, ionban szereplő **összes atom oxidációs állapota meghatározható**.

A kötő elektrópárokat \rightarrow -lal jelöljük. A nyíl hegye mindig a nagyobb elektronegativitású atomhoz mutat. Az azonos elektronegativitású atomok közötti kötés(ek)e)t az oxidációs szám megállapításánál nem vesszük figyelembe.

A nyíl hegye -1-nek, a talppontja pedig +1-nek felel meg. Az egyes atomok oxidációs állapotát megkapjuk, ha az atomtól kiinduló (+1) és az atomhoz érkező (-1) nyilak algebrai összegét vesszük.

Pl. a $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ nátrium-tioszulfát és a CH_3COOH ecetsav.

| | Na | S | O | C | H |
|----|-----|-----|-----|-----|-----|
| EN | 0,9 | 2,5 | 3,5 | 2,5 | 2,1 |



Ezek alapján a Na +1, az O -2, a S +4 és 0 (átlaga +2); a H +1, az O -2, a C +3 és -3 (átlaga 0). Vagyis meg kell állapítani, hogy **az oxidációs szám nem egyszerűen a vegyértéket, nem a kötések számát jelöli!**

numerikus módszerrel: szabályok alapján történik az oxidációs állapot meghatározása. Nem kell ismerni a pontos szerkezeti képletet, *gyorsabb a grafikus módszernél*. Ha egy kémiai részecskében több azonos atom van, akkor csak az **oxidációs számok átlagát** kapjuk meg.

A numerikus módszer alkalmazását a következő szabályok teszik lehetővé:

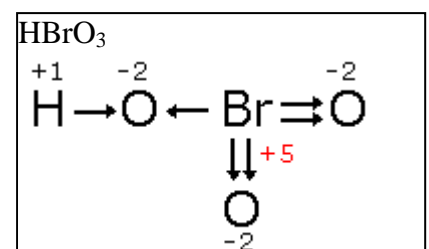
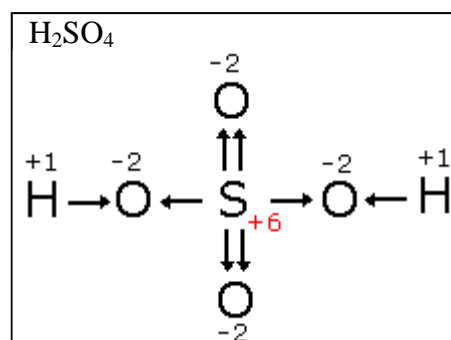
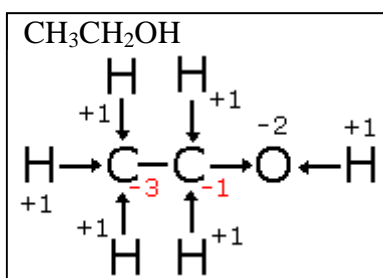
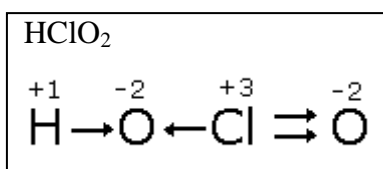
- az **elemek** oxidációs száma mindig nulla (pl. a Fe, Ne, O₂, O₃, P₄ és S₈ minden atomja 0 oxidációs számú),
- a **fluor** vegyületeiben mindig -1-es oxidációs számmal rendelkeznek (pl. NaF, H₂F₂, SF₆, CaF₂, CCl₂F₂)
- vegyületeikben az **alkálifémek** és az **ezüst** mindig +1-es (pl. NaBr, K₂CO₃, NaHSO₄, AgNO₃), az **alkáliföldfémek** és a **cink** +2-es oxidációs számúak /pl. Ba(NO₃)₂, CaCl₂, ZnSO₄/, az **alumínium** pedig mindig +3-as /pl. Al₂O₃, AlCl₃, Al(NO₃)₃/
- a **hidrogén** nemfémekkel alkotott kovalens vegyületeiben általában +1 állapotú (pl. H₂O, CH₄, HCl), kivétel a PH₃ és a H₂Te, ahol mindkét atom 0 oxidációs számú, mert EN-uk megegyezik. Fémekkel alkotott hidridekben -1 oxidációs számú a hidrogén, mert kis elektronegativitását atomhoz kapcsolódik (pl. NaH, LiAlH₄).
- az **oxigén** kovalens vegyületeiben mindig -2-es oxidációs számú (pl. CO, CO₂, H₂O, SO₃); legtöbbször ionos vegyületeiben is -2-es állapotú (pl. FeO, Fe₂O₃, CaO és Na₂O). **Kivételek:** a peroxidok (pl. H₂O₂, Na₂O₂) (-1) és a szuperoxidok (pl. KO₂) (-0,5), valamint a F-O kötést tartalmazó vegyületek (pl. F₂O) (+2).
- biner vegyületeikben a **17. oszlop elemei -1**, a **16. csoport nemfémes elemei -2**, a **15. csoport elemei pedig -3** oxidációs állapotúak.
- a semleges vegyületekben az alkotó atomok oxidációs számának összege = 0, az egyszerű ionok oxidációs száma megegyezik a töltéssel, az összetett ionokban az oxidációs számok összege egyenlő az iontöltéssel /NaCl = (+1) + (-1) = 0; Cl⁻ = -1; SO₄²⁻ = (+6) + 4*(-2) = -2/

Példák:

1. Határozza meg az alábbi vegyületekben az egyes atomok oxidációs állapotát (vagy azok átlagát) numerikus módszerrel!

| | | | |
|---------------------------------|------------------|---------------------------|----------------|
| CaSO ₄ | Ca = +2; O = -2; | 0 = +2 + 4*(-2) + S | S = +6 |
| NH ₄ NO ₂ | H = +1; O = -2; | 0 = 4*(+1) + 2*(-2) + 2*N | N = 0 (átlag) |
| KBrO ₃ | K = +1; O = -2; | 0 = +1 + 3*(-2) + Br | Br = +5 |
| Mg ₃ P ₂ | Mg = +2; | 0 = 3*(+2) + 2*P | P = -3 (átlag) |
| MnO ₄ ⁻ | O = -2; | -1 = 4*(-2) + Mn | Mn = +7 |
| PF ₃ | F = -1 | 0 = 3*(-1) + P | P = +3 |

2. Rajzolja fel az alábbi molekulák szerkezeti képletét, és határozza meg az egyes atomok oxidációs állapotát grafikus módszerrel! Az elektronegativitásnak megfelelő irányú nyilakkal:



Feladatok

1. Határozzuk meg a *döltbetűs* atomok oxidációs számát a numerikus módszer szabályai szerint!

| | | | | | | | |
|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|---------------------------------|------------------|--------------------------------|--------------------------------|-----------------------------------|
| CO | CO ₂ | IF ₇ | Li ₃ N | K ₂ S | SnCl ₄ | BaSO ₄ | OF ₂ |
| +2 | +4 | +7 | -3 | -2 | +4 | +6 | +2 |
| Cr ₂ O ₃ | PO ₄ ³⁻ | BO ₃ ³⁻ | PCl ₃ | SO ₂ | SCl ₂ | Fe ₂ O ₃ | Ca(NO ₂) ₂ |
| +3 | +5 | +3 | +3 | +4 | +2 | +3 | +3 |
| ZrI ₃ ⁻ | IO ₃ ⁻ | Mg ₃ P ₂ | Li ₂ SO ₃ | LiClO | CaC ₂ | V ₂ O ₅ | Au(CN) ₃ |
| +2 | +5 | -3 | +4 | +1 | -1 | +5 | +3 |
| HIO ₄ | CrO ₄ ²⁻ | SeO ₃ ²⁻ | NO ₂ ⁻ | LiH | Al ₂ O ₃ | KMnO ₄ | HCN |
| +7 | +6 | +4 | +3 | -1 | +3 | +7 | +2 |

2. Állapítsuk meg a nitrogén oxidációs számát az alábbi vegyületekben, ionokban!

| | | | | | | | | |
|-------------------|------------------|-------------------------------|--------------------------------|------------------|------------------------------|-------------------------------|------------------------------|-----------------------------|
| Li ₃ N | NH ₃ | N ₂ H ₄ | NO | N ₂ O | NO ₂ | NO ₂ ⁻ | NO ₃ ⁻ | N ₂ |
| -3 | -3 | -2 | +2 | +1 | +4 | +3 | +5 | 0 |
| NaNO ₃ | HNO ₂ | NH ₄ OH | Mg ₃ N ₂ | HNO ₃ | NH ₄ ⁺ | N ₂ O ₄ | NOCl | N ₃ ⁻ |
| +5 | +3 | -3 | -3 | +5 | -3 | +4 | +3 | -1/3 |