

Dr. Varga Imre

egyetemi docens

ELTE TTK Kémiai Intézet

Egykomponensű anyagi rendszerek

Anyagi halmazok

Nagyszámú részecskét tartalmazó anyagi rendszerek

- **Komponensek:**
a rendszert alkotó anyagok (elemek, vegyületek)



Vörösréz (Cu)
1 komponens



Sárgaréz (Cu + Zn)
2 komponens

Egykomponensű rendszerek

Halmazállapotok



Szilárd



Folyadék



Gáz

Egy adott elem v. vegyület által alkotott egykomponensű anyagi halmaz állapotát a külső körülmények határozzák meg:

Állapothatározók (pl. hőmérséklet, nyomás, térfogat).

Adott állapotban (hőmérsékleten és nyomáson) a különböző anyagok eltérő halmazállapotban lehetnek:

Eltérő kölcsönhatások a halmazt alkotó részecskék között.

Egykomponensű rendszerek

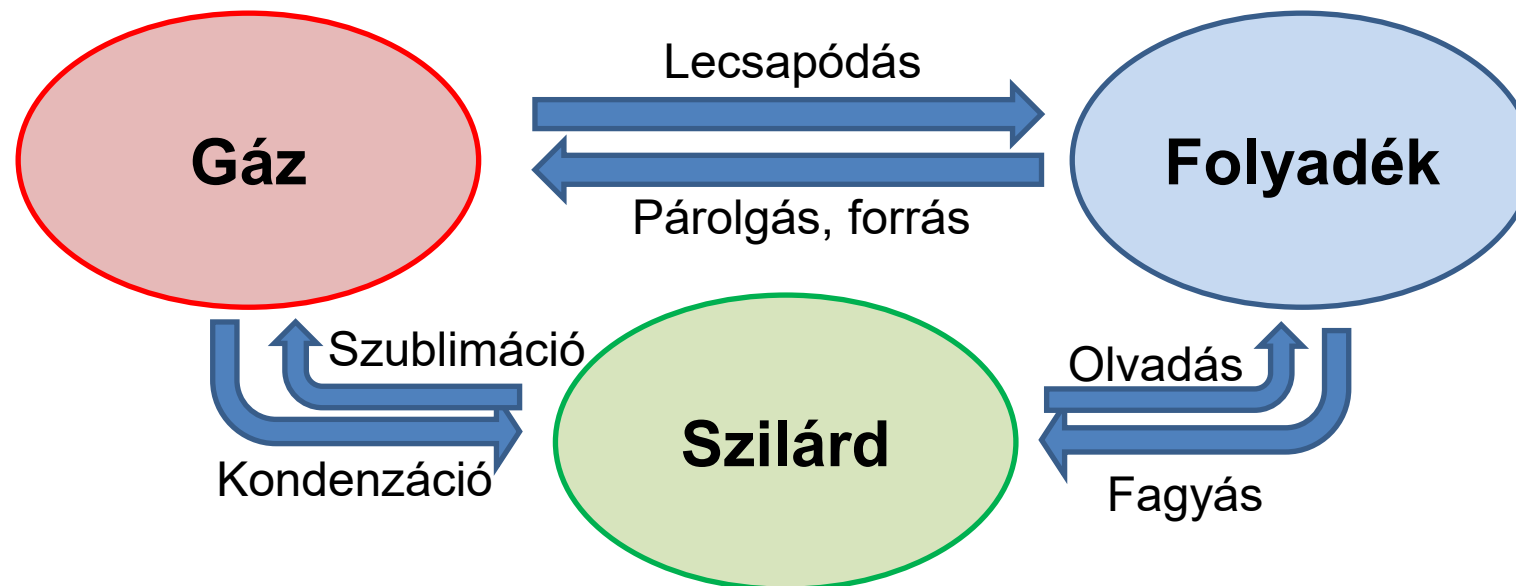
A halmazállapot jellemzéséhez az anyagi minőség mellett meg kell adni az anyag állapotát (hőmérséklet, nyomás).

Adott állapotban általában egy halmazállapot stabil.

Standard állapot: 25 °C hőmérséklet, 0,1 MPa nyomás

Normál állapot: 0 °C hőmérséklet, 0,1 MPa nyomás

Halmazállapot-változások (hőközlés vagy nyomásváltozás hatására)
Egy adott halmazállapotból egy másik halmazállapotba történő átalakulás.



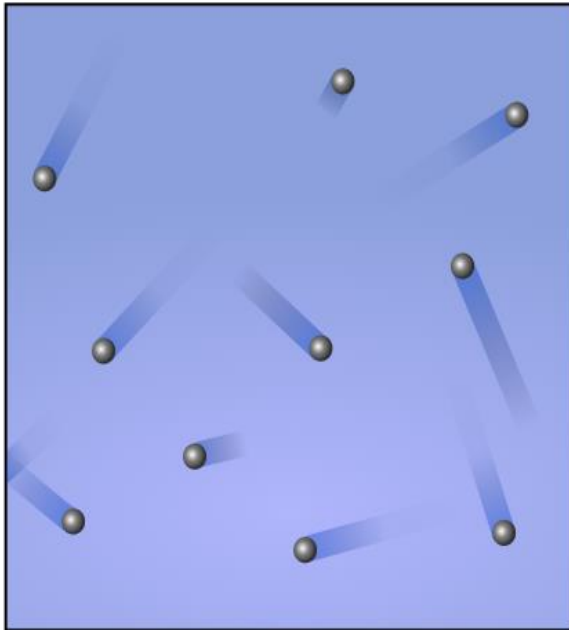
Két stabil halmazállapot

- *Forráspont*
- *Fagyáspont*

Gáz halmazállapot



Gázok



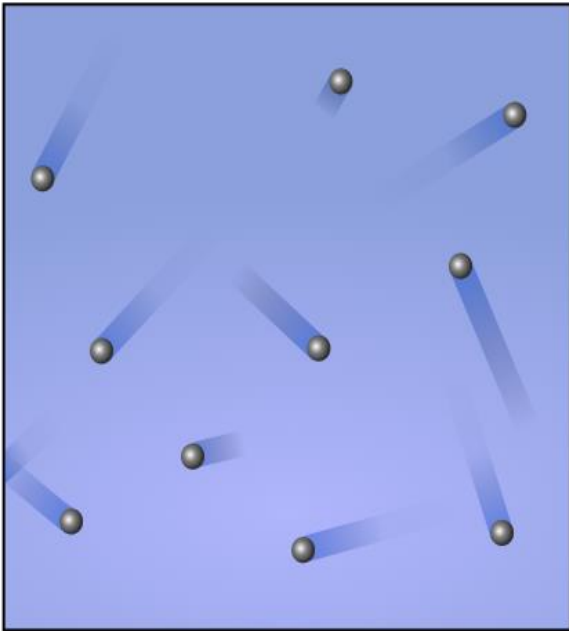
Halmaz tulajdonságai	Térfogat	Nagymértékben függ az állapothatározóktól (T, p - összenyomható)
	Alak	Kitölti a rendelkezésre álló teret
Részecskék jellemzői	Kölcsönhatása	Elhanyagolható
	Mozgása	- Transzláció (egyenes vonalú egyenletes mozgás, időnként ütközések) - Molekularezgések - Molekula forgása
	Távolsága	Nagy

Diffúzió: a gázok hőmozgás következtében lejátszódó, külső hatások nélküli keveredése, ami a koncentrációkülönbségek kiegyenlítésére vezet.

Ideális (Tökéletes) gáz:

- a részecskék kölcsönhatása elhanyagolható a hőmozgás energiájához képest
- a részecskék térfogata elhanyagolható a gáz térfogatához képest
- standard körülmények között ideálisan viselkedő gázok pl.: N_2 , O_2 , H_2 , He

Gázok



Ideális gázok állapotátározói:

$$T, p, V, n$$

Ideális gáztörvény

$$pV = nRT$$

R – egyetemes gázállandó, értéke 8.31 J/(mol·K)

Avogadro törvénye: Azonos mennyiségű gázok azonos hőmérsékleten és nyomáson az anyagi minőségüktől függetlenül azonos térfogatot töltenek be.

Moláris térfogat:

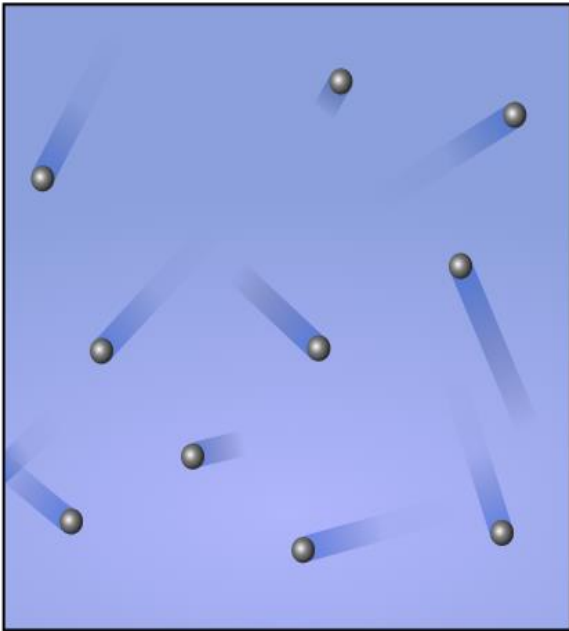
1 mol ($6 \cdot 10^{23}$ db) részecske térfogata

$$V_m = \frac{V}{n} = \frac{RT}{p}$$

Standard moláris térfogat ($t = 25 \text{ °C}$, $p = 0,1 \text{ MPa}$): 24,5 dm³

Normál moláris térfogat ($t = 0 \text{ °C}$, $p = 0,1 \text{ MPa}$): 22,41 dm³

Gázok



Gázok sűrűsége

$$\rho = \frac{m}{V}$$

$$V = n \cdot V_m$$

$$m = n \cdot M$$

$$\rho = \frac{M}{V_m}$$

Gázok relatív sűrűsége, adott hőmérsékleten és nyomáson

$$\rho_{rel} = \frac{\rho_1}{\rho_2} = \frac{\frac{M_1}{V_m}}{\frac{M_2}{V_m}} = \frac{M_1}{M_2}$$

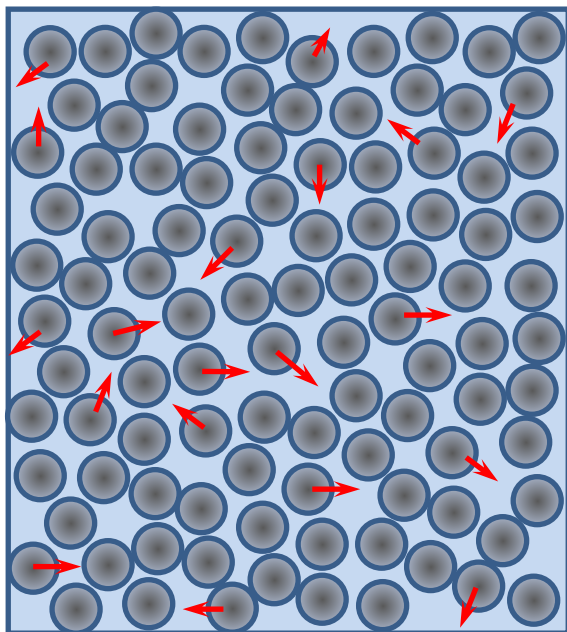
Egy gáz ismeretlen moláris tömege meghatározható sűrűségméréssel

A levegő átlagos moláris tömege: 29 g/mol.

Folyadék halmazállapot

2

Folyadékok



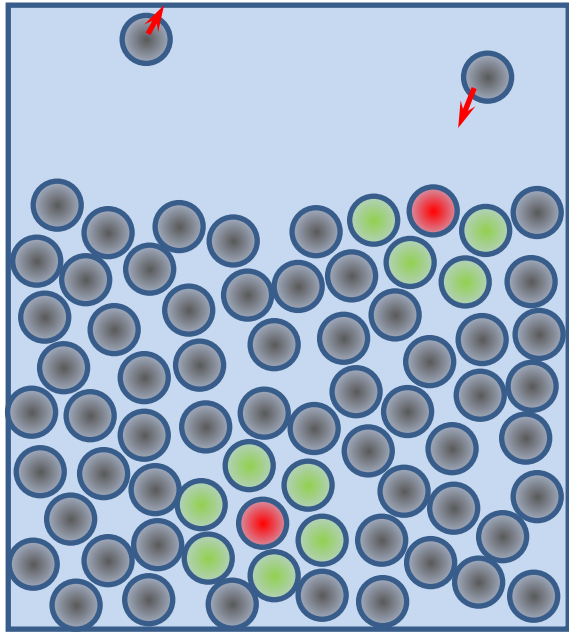
Halmaz tulajdonságai	Térfogat	Gyakorlatilag állandó (nagy nyomás hatására is kis térfogatváltozás – összenyomhatatlan)
	Alak	Felveszi az edény alakját
Részecskék jellemzői	Kölcsönhatása	Erős kölcsönhatás
	Mozgása	- Transzlációs (Molekulák elgördülnek egymáson, a részecskék között kialakuló lyukakba lépnek) - Molekularezgések, Molekula forgása
	Távolsága	Kicsi (molekula méretével összemérhető)

Diffúzió: Külső hatás nélküli keveredés. Lyukvándorlás – lassabb mint gázokban.

Viszkozitás: a folyadék mozgékonyságának a mértéke

- Ha a részecskék könnyen elmozdulnak egymáshoz képest, a folyadék viszkozitása kicsi, „könnyen folyik”
- Minél erősebb kölcsönhatások vannak a molekulák között, annál nehezebben mozdulnak el, annál nagyobb a viszkozitás
pl.: Glicerín (több hidrogénkötés), láncmolekulák (összegabalyodnak)

Folyadékok



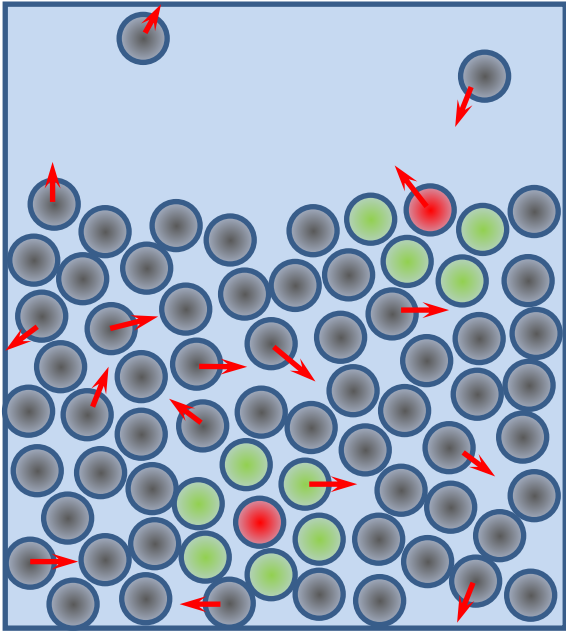
Felületi feszültség:

- A felületen lévő molekuláknak kevesebb szomszédja van, mint a tömbfázisban lévő molekuláknak.
- A molekulák közötti erős vonzás miatt ez azt jelenti, hogy a felületen lévő molekulák kevésbé kötött, azaz nagyobb energiájú állapotban vannak.
- Ennek következménye a felületi feszültség, amely csökkenteni igyekszik a folyadék felületét, ezáltal a rendszer energiáját.
- Mivel adott térfogat esetén a gömb térfogata a legkisebb, kisméretű cseppek mindig gömb alakúak.
- A víz nagy felületi feszültsége teszi

lehetővé, hogy víznél nagyobb, de kis méretű tárgyak ússzanak a víz felszínén.



Folyadékok



Párolgás:

A folyadék felszínről a molekulák a gáztérbe lépnek.

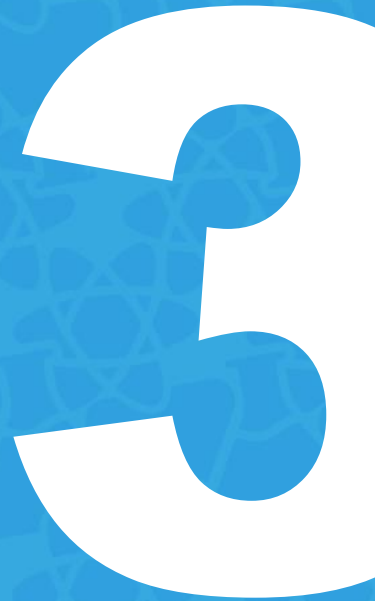
- Csak azok a molekulák képesek rá, melyeknek elegendő energiája van a vonzóerők leküzdéséhez.
- A hőmérséklet emelkedésével a párolgás mértéke nő.
- A párolgás hatására a folyadék lehűl.

Forrás: Amikor a folyadék belsejében képződő gőzbuborékok nyomása eléri a külső nyomás értékét. Ilyenkor a párolgás a folyadék belsejében is megindul.

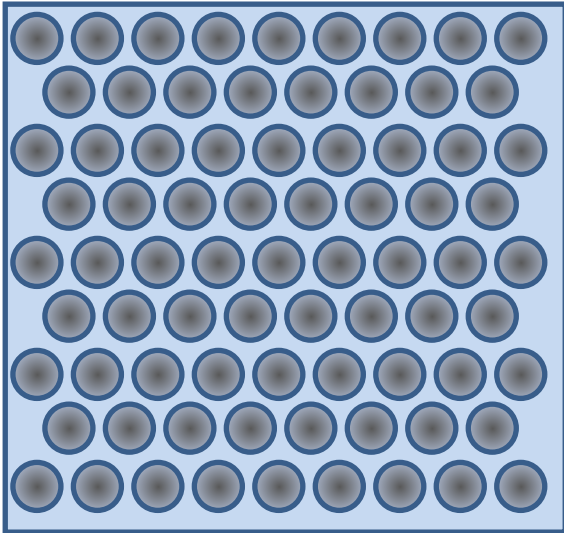
- Adott nyomáson meghatározott hőmérsékleten következik be (forráspont).
- A forrás folyamatos hőközlést igényel, hogy a folyadék gőzzé alakuljon át.



Szilárd halmazállapot



Szilárd anyagok



Halmaz tulajdonságai	Térfogat	Gyakorlatilag állandó (nagy nyomás hatására is kis térfogatváltozás – összenyomhatatlan)
	Alak	Állandó
Részecskék jellemzői	Kölcsönhatása	Erős kölcsönhatás (nagyobb mint a hőmozgás energiája)
	Mozgása	Molekularezgések
	Távolsága	Kicsi (általában kisebb mint a folyadékoknál)

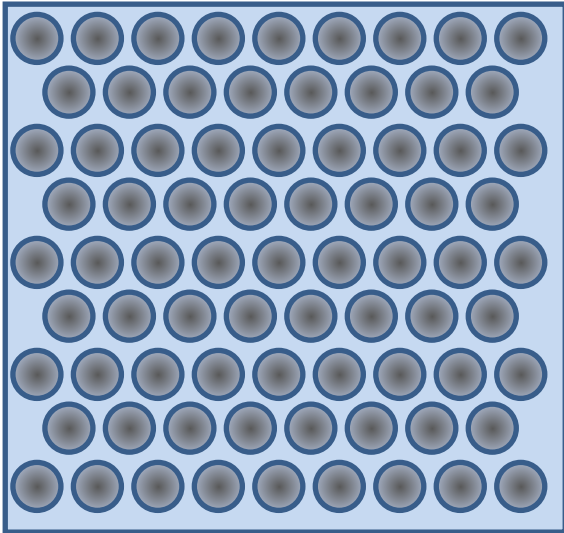
Amorf anyagok:

A részecskék helyhez kötöttek, de a szerkezet nem rendezett, a folyadékok szerkezetére hasonlít:

- Részecskék különböző mértékben helyhez kötöttek, így melegítés hatására fokozatos lágyulnak meg, nincs határozott olvadáspontjuk.
- Példák: Üveg, obszidián (vulkáni üveg), opál, amorf kén



Szilárd anyagok

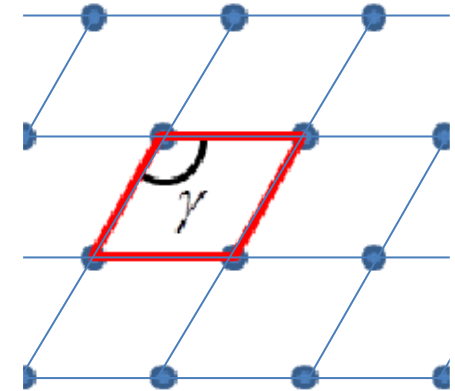


Kristályos anyagok:

- A részecskék egy szabályos térrács rácspontjaiban helyezkednek el.

Elemi cella:

A kristályrácsnak az a legkisebb egysége, melyet a tér három irányában eltolva felépíthető az egész kristály.



Koordinációs szám:

A rácsot felépítő részecskék közvetlen szomszédjainak számát adja meg.

Rácsenergia:

A rács szabad alkotórészeire bontásához szükséges moláris energia. Nagyságát a rácsot alkotó részecskék között ható kölcsönhatások erőssége határozza meg.

Olvadáspont:

A kristályos anyagoknak jól definiált olvadáspontjuk van. A részecskék elmozdulnak, a rendezett szerkezet összeomlik.



Kristályrácsok típusai

A részecskék között ható kölcsönhatások típusa szerint:

- Atomrács – Kovalens kötések.
 - Fémrács – Fémes kötés.
 - Ionrács – Ionos kötés
 - Molekularács – Másodlagos kémiai kötőerők
- } Elsődleges kémiai kötések

A részecskék között kialakuló kölcsönhatások stabilizálják a kristályrácsot, így a kölcsönhatás típusa alapvetően befolyásolja a kristályrács tulajdonságait.

Atomrácsos anyagok

A rácspontokban *atomtörzsek* helyezkednek el, melyeket *kovalens kötések* kötnek össze.

Kovalens kötés:

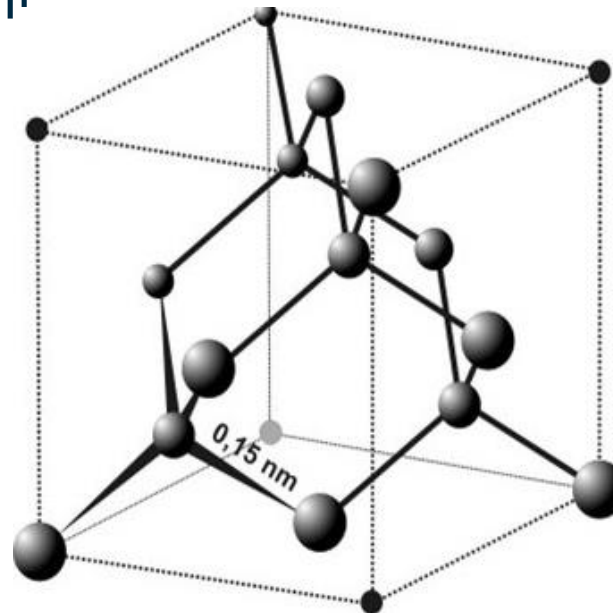
- Az atomtörzseket közös elektronpárok tartják össze.
- Erős, elsőrendű kémiai kötés.
- Nagy elektronegativitású atomok között alakulhat ki.

Tulajdonságok:

- Nagyon magas olvadás- és forráspont
- Nagyon kemények.
- Törékenyek.
- Nincs oldószerük.
- Nem vezetik az elektromos áramot (lokalizált kovalens kötések)

Példák:

szén-csoport elemi közül C, Si, Ge.
vegyület: SiO_2

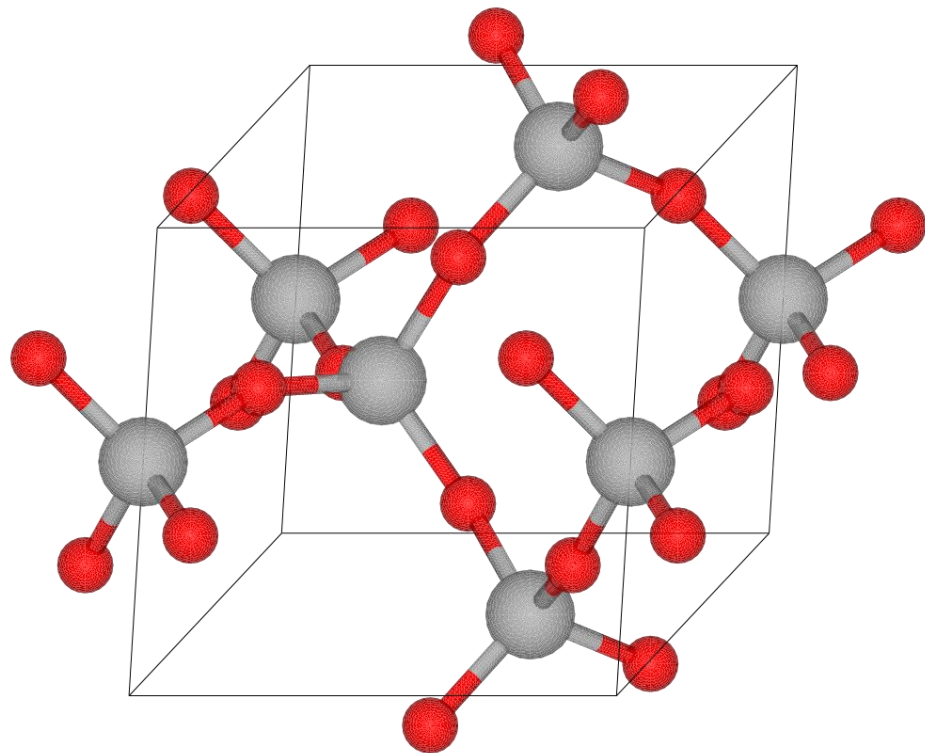


Gyémánt

Atomrácson anyagok

Szilícium-dioxid:

- A szilícium nagy mérete miatt nem alakulnak ki a CO_2 -hoz hasonló kettős kötések.
- Minden szilícium 4 db oxigénatomhoz kötődik
- Minden oxigén két szilícium atomhoz kötődik



Fémrácsos anyagok

A rácspontokban *atomtörzsek* helyezkednek el, melyeket *delokalizált elektronfelhő* tart össze.

Fémes kötés:

- A vegyérték elektronok teljes kristályrácsra kiterjedő delokalizációja által létrehozott elektronfelhő tartja össze a pozitív atomtörzseket.
- Erős, elsőrendű kémiai kötés.
- Kevés vegyérték elektronnal rendelkező kis elektropositív atomok között alakulhat ki.

Tulajdonságok:

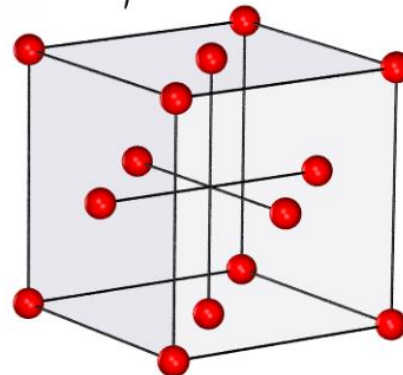
- Olvadáspontjuk, keménységük széles határok között változhat.
- Rugalmasak, de jól megmunkálhatók (maradandó alakváltozás).
- Jól vezetik az elektromos áramot (delokalizált elektronok)
- A fényt hullámhosszától függetlenül visszaturkózzák, jellegzetes fémes szín.

Példák:

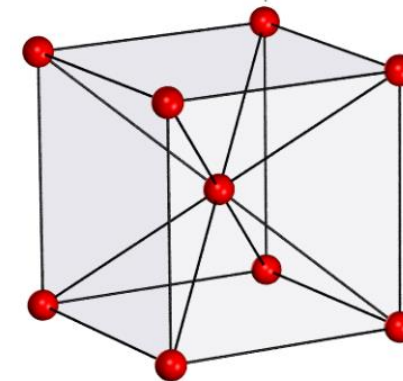
s-mező elemei: pl. Na, K, Ca.
d-mező elemei: Fe, Cu, Au, W, Hg.



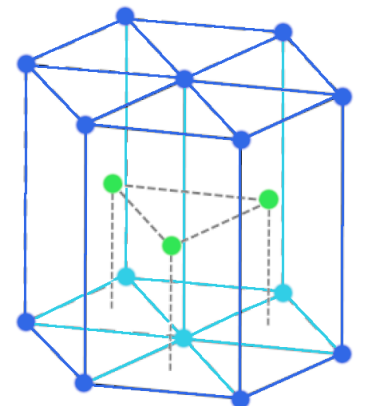
Lapon
középpontos



Térben
középpontos



Hatszögös



Ionrácsos anyagok

A rácspontokban **ellentétesen töltött ionok** helyezkednek el, melyeket **elektrosztatikus vonzás** tart össze.

Ionos kötés:

- Az ellentétesen töltött ionok között fellépő Coulomb-vonzás.
- Erős, elsőrendű kémiai kötés.
- **Csak vegyületekben** alakul ki, ha a vegyületet létrehozó atomok elektronegativitásai között nagy a különbség.

Tulajdonságok:

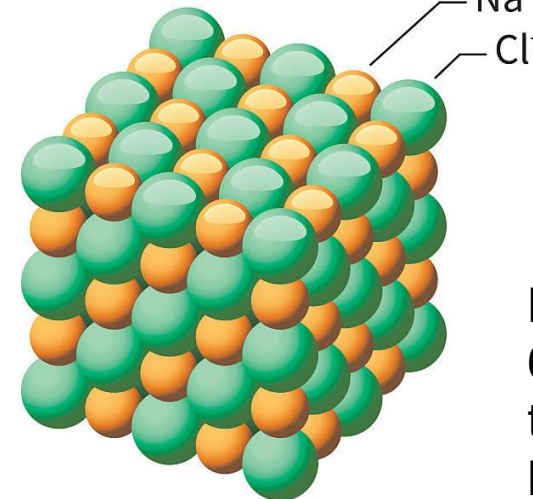
- Olvadáspontjuk magas.
- Kéménységük változó
- Ridegek, törnek.
- Dipólus molekulájú oldószerekben (víz) oldódnak.
Hidratáció – erős kölcsönhatás a vízmolekulák és az ionok között.
- Olvadékuk vezeti az elektromos áramot.

Példa:

Nátrium-klorid



Mind két ion lapon középpontos kockarácstot alkot.



Minden iont 6 ellentétesen töltött ion vesz körül

Ionrácsos anyagok

Az ionok keletkezése és típusai

Egyszerű ionok:

Kationok: Pozitív töltésű ionok.

1, 2 vagy 3 vegyérték elektront tartalmazó atomokból keletkeznek elektronleadással.



Anionok: Negatív töltésű ionok.

6 vagy 7 vegyérték elektronnal rendelkező atomokból keletkeznek elektronfelvétellel.

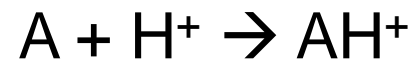


Ionrácsos anyagok

Összetett ionok:

Két vagy több atomból álló elektromos töltéssel rendelkező részecskék.
Általában proton felvétellel / leadással keletkeznek sav-bázis reakciókban.

Összetett kationok:



Víz	H ₂ O	Oxóniumion	H ₃ O ⁺
Ammónia	NH ₃	Ammóniumion	NH ₄ ⁺

Ionrácsos anyagok

Összetett anionok:



Szénsav	H_2CO_3	Hidrogén-karbonát Karbonát	HCO_3^- CO_3^{2-}
Kénsav	H_2SO_4	Hidrogén-szulfát Szulfát	HSO_4^- SO_4^{2-}
Foszforsav	H_3PO_4	Dihidrogén-foszfát Hidrogén-foszfát Foszfát	$H_2PO_4^-$ HPO_4^{2-} PO_4^{3-}
Salétromsav	HNO_3	Nitrát	NO_3^-
Kénessav	H_2SO_3	Hidrogén-szulfit Szulfit	HSO_3^- SO_3^{2-}
Salétromossav	HNO_2	Nitrit	NO_2^-
Hangyasav	$HCOOH$	Formiát	$HCOO^-$
Ecetsav	CH_3COOH	Acetát	CH_3COO^-

Molekularácsos anyagok

A rácspontokban *semleges molekulák (atomok)* helyezkednek el, melyeket *másodrendű kémiai kötések* tartanak össze.

Másodrendű kémiai kötés:

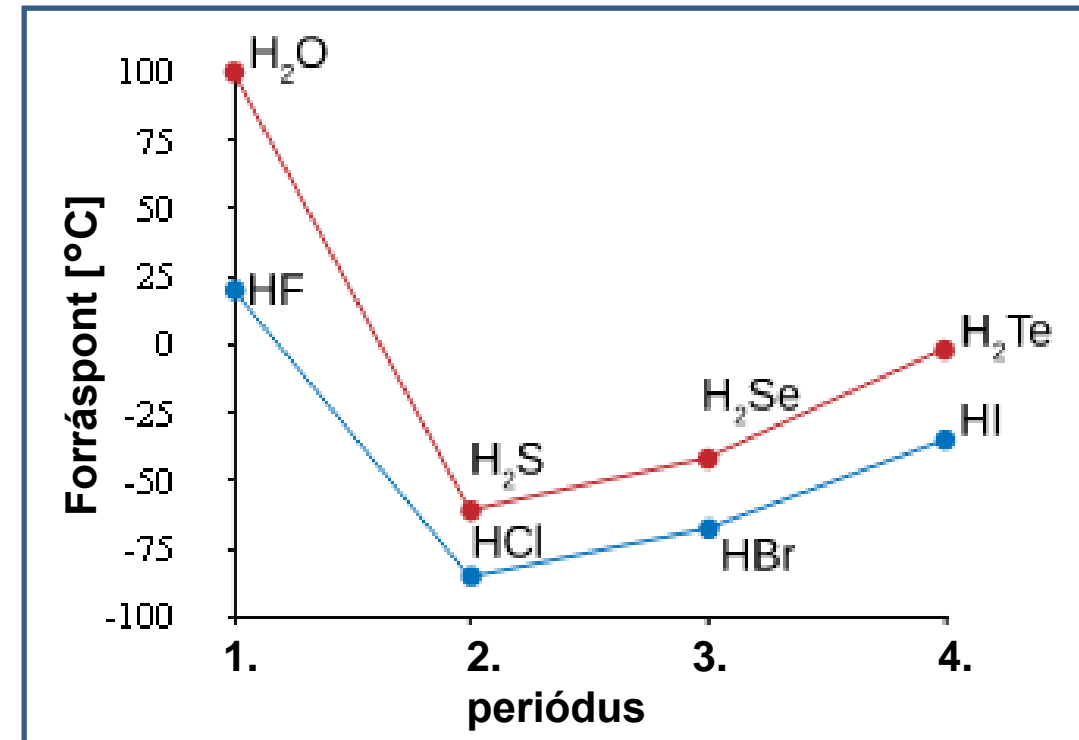
- Sokkal gyengébbek az elsőrendű kémiai kötésekénél.
- Típusai: H-kötés, dipól-dipól kölcsönhatás, diszperziós kölcsönhatás.
- A diszperziós kölcsönhatás a molekula méretének növekedésével erősödik.

Tulajdonságok:

- Olvadás- és forráspontjuk alacsony.
Nő a másodrendű kötés erősödésével.
- Kéménységük kicsi
- Oldhatóságuk polaritásuktól függ.
- Elektromos áramot nem vezetnek.

Példák:

Halogének, hidrogén, oxigén, kén, szerves vegyületek (pl. cukor).



Átmenet a kémiai kötések típusai között

A kémiai kötés típusát a kötésben részt vevő atomok elektronegativitásai határozzák meg

Ionos kötés:

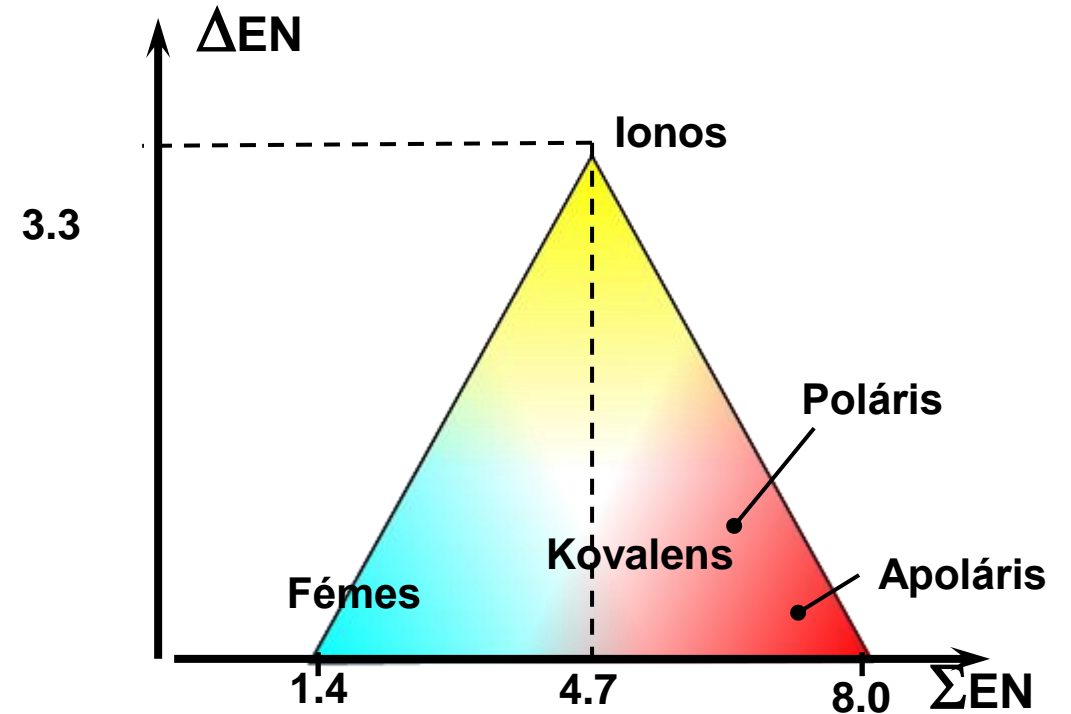
- Az atomok elektronegativitásának különbsége nagy.

Kovalens kötés:

- Az atomok elektronegativitásának összege nagy, különbsége kicsi.

Fémes kötés:

- Az atomok elektronegativitásának összege is kicsi, különbsége is kicsi.



Átmenet a kristályrácsok típusai között

Vannak kristályos anyagok, melyek több rács típus jellegzetességeit is mutatják

Grafit:

- Rácssíkokban kovalens kötés a hatszögekbe rendeződött szénatomok között (**atomrács**).
- A rácssíkokkal párhuzamosan a szénatomok negyedik elektronja delokalizálódik (**fémrács**).
- A rác síkok között gyenge diszperziós kölcsönhatás (**molekularács**).

