

A kémia tárgya és felosztása

A kémia tárgya:

Az atomok összekapcsolódásával, átrendeződésével járó változások összessége

A kémia felosztása:

- általános kémia/fizikai kémia (elméleti kémia/kolloidika)
- szervetlen kémia/szerves kémia/biokémia
- analitikai kémia/alkalmazott kémia (technológia)

részterületek/határterületek (pl. szervetlen kémián belül): koordinációs/eleomorganikus/bioszervetlen kémia

1

Daltoni atomelmélet (1804)

A kémiaiilag tiszta anyagok (elemek) tovább nem osztható részecskékből – atomokból – állnak.

Az atomok jellemzői:

Adott elem összes atomja azonos tulajdonságú (méret, tömeg, stb.)

1. Különböző elemek atomjai különböző tulajdonságúak
2. Az atomok a kémiai átalakulások egységei. A kémiai reakciók az atomok kombinálódásával, átrendeződésével járnak.
3. Az atomok egyesülése csak adott arányok szerint mehet végbe. Az arány egész számokkal kifejezhető.
4. A vegyületek összetett atomokból – molekulákból – állnak, amelyek a kémiai reakciók során széteshetnek egyszerű atomokká, majd újraegyesülhetnek más molekulákká, mindig egész számarányok szerint.
5. Az atomokat nem lehet megbontani, létrehozni, megváltoztatni. 2

Az atomot felépítő elemi részecskék

Rutherford (1905)

Az atom tömege és pozitív töltése egy az atom méretéhez képest is kicsiny térrészben koncentrálódik, ezt nevezzük atommagnak.

$$r_{\text{atom}} \sim 10^{-10} \text{ m}, \quad r_{\text{atommag}} \sim 10^{-15} \text{ m}$$

Az atom alkotórészei:

atommag + elektronok

Az atommag összetétele:

proton + neutron

Az atom elektromosan semleges: $\rightarrow$

Az atomban található protonok és elektronok száma megegyezik.

3

Az atomok és elemi részecskék tömegviszonyai és töltése

Elektron: $m_e = 9,109389 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$ (Stoney-1874
Thomson-1897)
 $e_e = -1,602177 \cdot 10^{-19} \text{ C}$

Proton: $m_p = 1,672623 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ (Rutherford - 1919)
 $e_p = 1,602177 \cdot 10^{-19} \text{ C}$

Neutron: $m_n = 1,674928 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ (Chadwick -1932)
 $e_n = 0$

$$m_p/m_e = 1836$$

$$m_n/m_p = 1,00138$$

A hidrogénatom tömege:

$$m_p + m_e = 1,6735 \cdot 10^{-27} \text{ kg} = 1,6735 \cdot 10^{-24} \text{ g}$$

4

Az atomot felépítő elemi részecskék

Az atomok jellemzésére használt paraméterek:

Jelölés:



X = vegyjel

Z = protonok száma (rendszám)

N = neutronok száma

A = tömegszám (= nukleonok száma)

Izotópok: azonos protonszámú (rendszámú) de eltérő neutronszámú (tömegszámú) atomok

5

Kvantummechanikai atommodell (1925-26)

A kvantummechanikai modell szerint nem az elektron tartózkodásának pontos helyét, hanem egy adott helyen való tartózkodásának valószínűségét adhatjuk meg.

Az elektron töltéssűrűségének az atommag körüli eloszlását adhatjuk meg.

Atompálya: az atommag körül az a térrész, amelyen belül az elektron megtalálási valószínűsége 90 %.

Az elektronokat (atompályákat) kvantumszámokkal jellemezhetjük.

6

Kvantumszámok és jelentésük

1. Főkvantumszám:

Jele: n értéke: $n = 1, 2, 3, \dots$

$E = f(n)$ $r = f(n)$

A főkvantumszám az elektron energiáját és a pálya sugarát határozza meg.

Az azonos főkvantumszámú elektronok (fő)h n jakat alkotnak:

$n=1$: K-héj $n=2$: L-héj (M, N, ...)

7

Kvantumszámok és jelentésük

2. Mellékvantumszám:

Jele: l értéke: $0, 1, 2, \dots, n-1$

Az atompálya alakját határozza meg.

Az azonos mellékvantumszámú elektronok alkotják az alhéjakat.

$l=0$: s alhéj, $l=1$: p alhéj, $l=2$: d alhéj, $l=3$: f alhéj

8

ha $n = 1$ akkor $l = 0$ **1s alhéj**

ha $n = 2$ akkor $l = 0$ **2s alhéj**
 $l = 1$ **2p alhéj**

ha $n = 3$ akkor $l = 0$ **3s alhéj**
 $l = 1$ **3p alhéj**
 $l = 2$ **3d alhéj**

ha $n = 4$ akkor $l = 0$ **4s alhéj**
 $l = 1$ **4p alhéj**
 $l = 2$ **4d alhéj**
 $l = 3$ **4f alhéj**

9

Kvantumszámok és jelentésük

3. Mágneses kvantumszám:

Jele: m_l értéke: $-l, \dots, 0, \dots, +l$ összes: $2l+1$

Jelentése: mágneses térben az elektron pályamenti impulzusmomentuma hányféle szöget zárhat be (az azonos energiájú atompályák milyen térbeli irányultságúak lehetnek)

Az m_l értéke szabja meg az adott alhéjhoz tartozó atompályák számát:

s: $l = 0, m_l = 0$ (s alhéjhoz csak 1 pálya tartozhat)

p: $l = 1, m_l = -1, 0, +1$ (p alhéjhoz 3 pálya tartozhat)

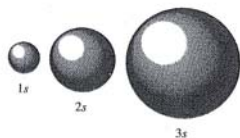
d: $l = 2, m_l = -2, -1, 0, +1, +2$ (d alhéjhoz 5 pálya tartozhat)

f: $l = 3, m_l = -3, \dots, 0, \dots, +3$ (f alhéjhoz 7 pálya tartozhat)

10

Az s atompályák jellemzői

A főkvantumszámtól függetlenül minden s-pálya alakja gömb.

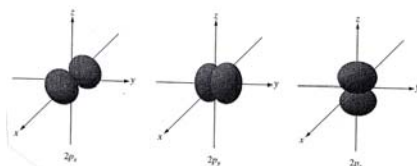


11

A p atompályák jellemzői

Az $l = 1$ mellékvantumszámhoz 3 különböző mágneses kvantumszám rendelhető $(-1, 0, +1)$, így az $n = 2$ főkvantumszámtól kezdődően

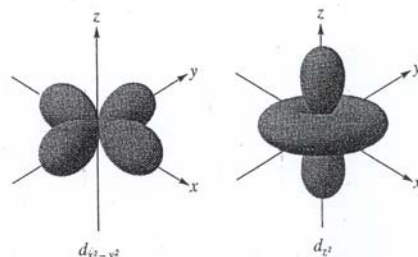
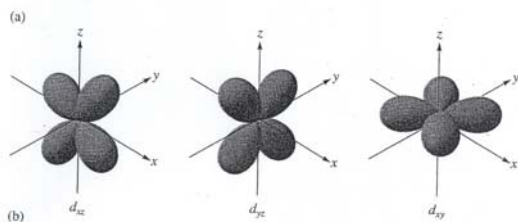
3 egymásra merőleges p pálya lehetséges: p_x, p_y, p_z



12

A d atompályák jellemzői

Ha $l = 2$, $m_l = -2, -1, 0, +1, +2$ lehet,
azaz 5 különböző d pálya lehetséges.



14

Kvantumszámok és jelentésük

4. Mágneses spinkvantumszám:

Jele: m_s (gyakran s) értéke: $\pm 1/2$
(2 lehetséges értéke van: $+1/2$ és $-1/2$)

Minden atompályán legfeljebb 2 elektron tartózkodhat
($+1/2$ és $-1/2$ spinnel)

Az egyes héjakon tartózkodó elektronok száma:

$$N = 2n^2$$

$n=1$: $N = 2$, $n=2$: $N = 8$, $n=3$: $N = 18$

15

Többelektronos atomok

Pályenergia: az adott atompályán levő elektron energiája az alapállapotú atomban (az az energia, ami akkor szabadulna fel, ha egy elektront az atommagtól végtelen távolságból (ahol nem hat rá az atommag vonzó és a többi elektron taszító hatása) rákerülne az adott atompályára.

A tárgyalt megállapítások a hidrogénatom alap- és gerjesztett állapotait jellemezték:

$$Z = 1$$

$$E(3s) = E(3p) = E(3d) \quad \text{elfajult (degenerált) állapot}$$

16

Többelektronos atomok

Többelektronos atomok atompályáinak energiája:

A hidrogénatom ($Z = 1$): $E(3s) = E(3p) = E(3d)$

Egyéb atomok: $Z > 1$

Az atompályák energiája a rendszám függvényében csökken.

Az atompályák alakja (s, p, d, f) a rendszám függvényében nem változik.

$$E(3s) < E(3p) < E(3d)$$

17

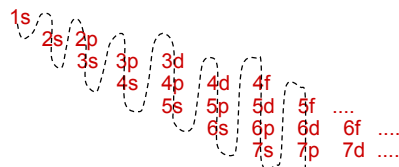
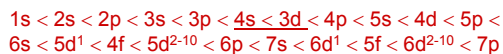
ha $n = 1$ akkor	$l = 0$	1s alhéj	
ha $n = 2$ akkor	$l = 0$ $l = 1$	2s alhéj 2p alhéj	
ha $n = 3$ akkor	$l = 0$ $l = 1$ $l = 2$	3s alhéj 3p alhéj 3d alhéj	
ha $n = 4$ akkor	$l = 0$ $l = 1$ $l = 2$ $l = 3$	4s alhéj 4p alhéj 4d alhéj 4f alhéj	

18

Többelektronos atomok

Az adott főkvantumszámhoz tartozó alhéjak energiái erősen szétválnak és „keveredhetnek”.

Az alhéjak energetikai sorrendje:



19

Elektronszerkezet kiépülése

Az elektronhéjak feltöltődésének elvei:

- **energiaminimum elve:** Az elektronok mindig a legkisebb energiájú állapotokat foglalják el.

- **Pauli elv:** Az atomban levő elektronoknak nem lehet minden kvantumszáma azonos.

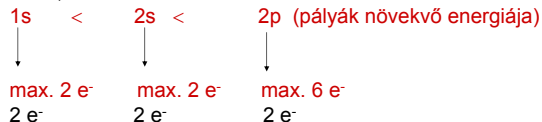
- **Hund szabály** (maximális multiplicitás elve): Az azonos energiájú állapotokat az elektronok először azonos spinnel foglalják el.

20

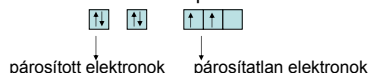
Elektronszerkezet kiépülése

Az atom rendszáma: $Z \rightarrow Z$ elektron található az atomban
elektronszerkezet kiépülését a 3 alapelv határozza meg:

$Z = 6$, 6 elektron:



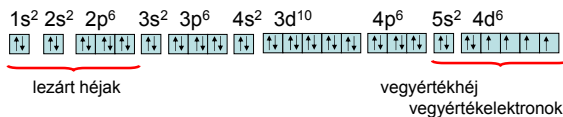
Jelölés: $1s^2 2s^2$



21

Elektronszerkezet kiépülése

Z = 44, 44 elektron:



22

Idősek képződése

Megfigyelés: lezárt héjak energiája kiugróan alacsony → az anyagok ilyen állapotok elérésére törekszenek

Főcsoportbeli elemek: külső elektronhéjukon nyolc elektront tartalmazó konfiguráció elérésére törekszenek

Elérése: elektronfelvétel vagy elektronleadás

Elektronegativitás: A molekulában kötött atom elektronvonzó képessége.

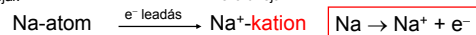
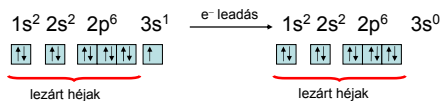
Pauling-féle skála: $EN(F) = 4,00$

23

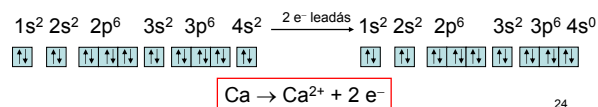
Kationok képződése

pl. Na-atom: $Z = 11 \rightarrow$ 11 protont és 11 elektront tartalmaz:

e⁻ szerkezete (konfiguráció)



Ca-atom: $Z = 20$, 20 elektront tartalmaz

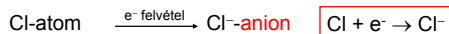
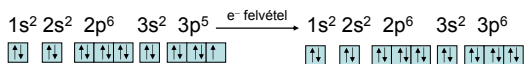


24

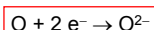
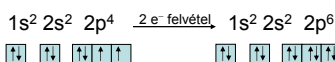
Anionok képződése

pl. Cl-atom: $Z = 17 \rightarrow$ 17 proton és 17 elektront tartalmaz:

e^- szerkezete (konfiguráció)



O-atom: $Z = 8$, 8 elektront tartalmaz

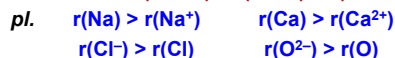


25

Atom és ionméretek változása

atomsugár - ionsugár (kation, anion):

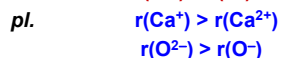
$r(\text{anion}) > r(\text{atom}) > r(\text{kation})$



töltés változása:

$r(\text{E}) > r(\text{E}^+) > r(\text{E}^{2+})$

$r(\text{E}^{2-}) > r(\text{E}^-) > r(\text{E})$



26

A kémiai kötés

Elsőrendű kémiai kötőerők

(atomok vagy ionok között jön létre)

a/ Ionos kötés

$\Delta EN > 2$

előfordulás: - ionrácsos kristályok

b/ Kovalens kötés

$\Delta EN < 0,5$

előfordulás: - diszkrét molekula
 - atomrácsos kristályok

c/ Fémes kötés

$\Delta EN \sim 0$

előfordulás: fémrácsos anyagok

27

A kémiai kötés

1. Ionkötés

Feltétel: nagy elektronegativitás-különbség ($\Delta EN > 2$)

kationok, anionok képződnek $\rightarrow$ kationok és anionok között elektrosztatikus kölcsönhatás alakul ki, az ionok bizonyos távolságban megközelítik egymást $\rightarrow$ **ionpár**

rácsenergia: a két ion közötti összetartó erő

pl. NaCl: $EN(\text{Na}) = 0,9$, $EN(\text{Cl}) = 3,0$ $\Delta EN = 2,1$

halogenidek, oxidok (NaCl, KBr, fémoxidok)

28

A kémiai kötés

2. Kovalens kötés

Feltétel: közel azonos és lehetőleg nagy EN ($\Delta EN < 0,5$)

A kötést elektronpárok hozzák létre, amelyek a kötésben résztvevő mindkét atomtörzshöz tartoznak.

A kötés kialakulását az atompályák átfedése teszi lehetővé. Két ellentétes spinű elektron elektronpárt képez $\rightarrow$ **kötő elektronpár**

Atompályákból **molekulapálya** alakul ki, amelyeken 2 elektron tartózkodhat és legalább 2 atommag erőterébe tartoznak.

előfordulás: - diszkrét molekula (H_2 , H_2O , CH_4)

- atomrácsos anyagok (C, SiO_2)

29

Kovalens kötés

„ σ ”-pálya (σ -kötés):

A töltéssűrűségeloszlás hengerszimmetrikus az atompályákat összekötő tengely mentén

Kialakul: $s + s$, $s + p$, ..., $p_x + p_x$

(az atompályák tengelye egybeesik)

„ π ”-pálya (π -kötés):

A töltéssűrűségeloszlásnak az atommagokat összekötő tengely mentén csomósíkja van (töltéssűrűség síkszimmetrikus)

Kialakul: $p_y + p_y$, $p_z + p_z$, ...

(az atompályák tengelye párhuzamos)

30

Kovalens kötés

Egyszeres kovalens kötés: egy elektronpár által létrehozott kötés (σ kötés)

pl. H_2^- , CH_4 -molekulában: jelölés: $H:H$, $H-H$

Kétszeres kovalens kötés: két elektronpár által létrehozott kötés ($\sigma + \pi$ kötés)

pl. O_2^- , CO_2 -molekulában: jelölés: $\ddot{O}::\ddot{O}$, <O=O> , <O=C=O>

Háromszoros kovalens kötés: három elektronpár által létrehozott kötés ($\sigma + 2 \pi$ kötés)

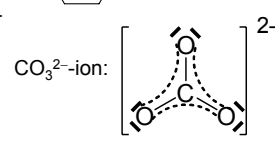
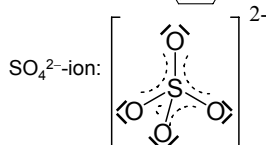
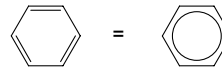
pl. N_2 , C_2H_2 -molekula: jelölés: $:N:::N:$, $IN\equiv Ni$, $H-C\equiv C-H$

31

Kovalens kötés

Delokalizált elektronrendszer: π -kötés elektronjai nem egy atompárhoz, hanem több atomhoz tartoznak:

C_6H_6 -molekula:



Datív (donor-akceptor) kötés: Mindkét elektron ugyanattól az atomtól származik: pl. CO $:C:::O:$

32

Atompályák hibridizációja

Az atompályák „keverése” olyan új atompályákká, amelyek térbeli helyzete alkalmas a molekula vázának leírására

sp hibridizáció (s és p pálya hibridizációja):
2 pálya, lineáris



sp^2 hibridizáció (s és 2 p pálya hibridizációja):
3 pálya, trigonális



sp^3 hibridizáció (s és 3 p pálya hibridizációja):
4 pálya, tetraéder



33

Atompályák hibridizációja

sp^3d hibridizáció (s, 3 p és d

pálya hibridizációja):

5 pálya, trigonális bipiramis vagy négyzetes piramis



sp^3d^2 hibridizáció:

6 pálya, oktaéder,



sp^3d^3 hibridizáció:

7 pálya, pentagonális bipiramis

34

Atompályák hibridizációja

Be: $Z = 4$, elektronszerkezete: $1s^2 2s^2$

Reakciópartner hatására a külső elektron gerjesztődik $\rightarrow$ promóció: $1s^2 2s^1 2p_x^1$

sp hibridizáció: $1s^2 h_1^1 h_2^1$



a két hibridpálya átfedése a másik atom atompályájával $\rightarrow$ 2 egyforma σ -kötés jön létre

35

A szénatom hibridállapotai

A szénatom alapállapota: $Z = 6$

$1s^2 2s^2 2p^2 = 1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$

4 kötés $\rightarrow$ 4 párosítatlan elektron

(promóció): $2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$

sp^3 hibridizáció: $h_1^1 h_2^1 h_3^1 h_4^1$



4 σ kötés kialakítása lehetséges

pl. metán és alkánok, CCl_4 , gyémánt

36

A szénatom hibridállapotai

sp^2 hibridizáció: $h_1^1 h_2^1 h_3^1 p_z^1$
 $3 \sigma + 1 \pi$ kötés
 pl. etén, karbonátion, grafit



sp hibridizáció: $h_1^1 h_2^1 p_y^1 p_z^1$
 $2 \sigma + 2 \pi$ kötés
 pl. acetilén, CO_2



37

A molekulák térszerkezete

A molekulák térbeli felépítését (geometriáját) a σ -kötőpályák és a nemkötőpályák együttes száma (σ -váz) határozza meg.

Vegyértékelektronpár-taszítási elmélet:

taszítás mértéke:

két nemkötő elektronpár között > egy nemkötő és egy kötő elektronpár között > két kötő elektronpár között

Általános jelölés: AX_nE_m

A: központi atom **X:** ligandum

E: nemkötő elektronpár

N = n + m: koordinációs szám

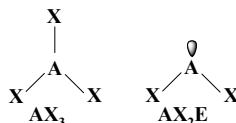
38

A molekulák térszerkezete

N = 2: AX_2 vagy AXE ,
 lináris molekulák, kötésszög: 180°
 pl. BeX_2 , HgX_2 , C_2H_2 , CO , ..



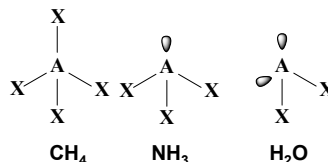
N = 3: AX_3 , AX_2E vagy AXE_2 ,
 trigonális (síkháromszög) molekulák, kötésszög: 120° ,
 pl. BX_3 , SO_2 , $NOCl$, C_2H_4 , ..



39

A molekulák térszerkezete

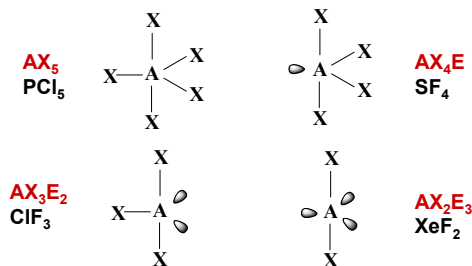
N = 4: AX_4 , AX_3E , AX_2E_2 ,..
 tetraéder, kötésszög: $109,5^\circ$
 pl. CH_4 , NH_3 , H_2O ,



40

A molekulák térszerkezete

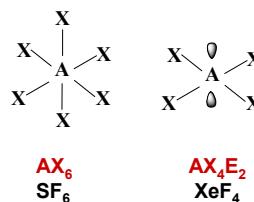
N = 5: AX_5 , AX_4E , AX_3E_2 , AX_2E_3 ,..
 trigonális bipiramis (négyzetes piramis)
 kötésszög: $120^\circ/90^\circ$ (90°) pl. PCl_5 , SF_4 , ClF_3 , XeF_2 ,...



41

A molekulák térszerkezete

N = 6: AX_6 , AX_5E , AX_4E_2 ,..
 oktaédres molekulák, kötésszög: 90°
 pl. SF_6 , IF_5 , XeF_4 , ..

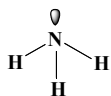


42

A molekulák térszerkezete

(Kiegészítő szabályok)

1. A tasztítás mértéke: $E-E > E-X > X-X$

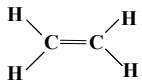


NH_3 (107°)

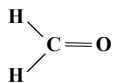


H_2O ($104,5^\circ$)

2. Többszörös kötés (π -kötés) hatása:



etén ($117,7^\circ$)



formaldehid ($115,6^\circ$)

43

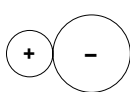
Fémes kötés

A fémes kötésben levő atomok vegyértékelektronjainak energiája kisebb, mint a szabad atomban levő elektronoké
→ kötés kialakulásának hajtóereje

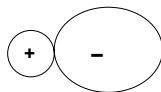
Elektrosztatikus kölcsönhatás a vegyértékelektronok és az atomtörzsek között

44

Átmenet a kötéstípusok között



ideális ionpár



polarizált ionpár

Az ionok polarizáló hatása:

- kation $\gg$ anion
- kedvező: nagy töltés, kis méret

Az ionok polarizálhatósága:

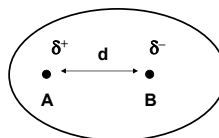
- anion $>$ kation
- kedvező: kis töltés, nagy méret

45

Kovalens kötés polaritása

elektronegativitás különbség: $\Delta x > 0$

pl. $x_B > x_A$



Jellemző fizikai mennyiség:
dipólusmomentum (μ)

$$\mu = q \cdot d$$

- q : parciális töltés
- d : távolság

Általában: $0,5 > \Delta x > 0$: apoláris kovalens kötés
 $\Delta x > 0,5$: poláris kovalens kötés

46

Összetett molekulák polaritása

- poláris kovalens kötés
- a molekula aszimmetriája

molekula	dipólus	apoláris
AB	HCl	H_2
AB_2	H_2O	CO_2
AB_3	NH_3	BF_3
AB_4 (AB_3X)	- ($CHCl_3$)	CH_4

47

Másodrendű kémiai kötőerők

1. Dipólus-dipólus kölcsönhatás

Előfordulás: dipólus molekulák között
szabályos elrendeződés kondenzált fázisban



dipólus – ion kölcsönhatás

dipólus - indukált dipólus kölcsönhatás

2. Diszperziós kölcsönhatás:

Előfordulás: apoláris molekulák között

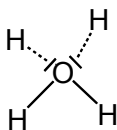
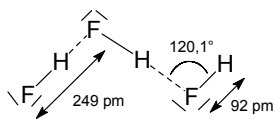
48

Másodrendű kémiai kötőerők

3. Hidrogénkötés

- Feltétel:**
- poláris HX kötés
 - nemkötő elektronpár X-en

Előfordulás: F-, O- és N-tartalmú szervesetlen (HF, H₂O, NH₃) és szerves vegyületek (karbonsavak, aminosavak, fehérjék, nukleinsavak, stb.)



49

Periódusos rendszer

Elem: azonos rendszámú atomok alkotják

– XIX. sz. eleje: az elemek tulajdonságai periódikusan változnak →

törekvés az elemek rendszerének megalkotására

50

Periódusos rendszer

– **1869: Mendelejev:** "az elemek tulajdonságai az atomsúly függvényében periódikusan változnak"

rendszerezés elve: növekvő atomtömeg (atomsúly) szerint rakja sorba az elemeket, az azonos tulajdonságúak egymás alá kerülnek

(üres helyeket hagy, helyenként eltér az atomtömegetől várható sorrendtől)

megelőlegezi (és megelőzi) az atom szerkezeti ismereteket

→ óriási hatás a kémiára

51

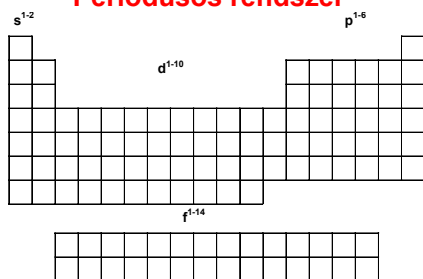
Periódusos rendszer

– **rövid periódusos rendszer:** 7 periódus, fő- és mellékcsoportok (vegyértékállapot hasonlósága alapján)

– **hosszú periódusos rendszer** (XX. sz. közepétől): szemléletesen tükrözi az atomok elektronhéjának fokozatos feltöltődését

52

Periódusos rendszer



Csoportosítás:

- főcsoportok, mellékcsoportok
- IUPAC: 1-18 csoport
- vegyértékelektron szerinti:

53

A periódusos rendszer és felépítése

$n = 1 \quad l = 0 \quad m_l = 0 \quad m_s = \pm \frac{1}{2} \quad 2 e^-: 1s^1 - H \rightarrow 1s^2 - He$

$n = 2 \quad l = 0 \quad m_l = 0 \quad m_s = \pm \frac{1}{2} \quad 2 e^-: 2s^1 - Li \rightarrow 2s^2 - Be$

$l = 1 \quad m_l = 1 \quad m_s = \pm \frac{1}{2} \quad 2 e^-:$

$m_l = 0 \quad m_s = \pm \frac{1}{2} \quad 2 e^-:$ összesen: 6 e^-

$m_l = -1 \quad m_s = \pm \frac{1}{2} \quad 2 e^-: 2p^1 - B \rightarrow 2p^6 - Ne$

$n = 3 \quad l = 0 \quad m_l = 0 \quad 2 e^-: 3s^1 - Na \rightarrow 3s^2 - Mg$

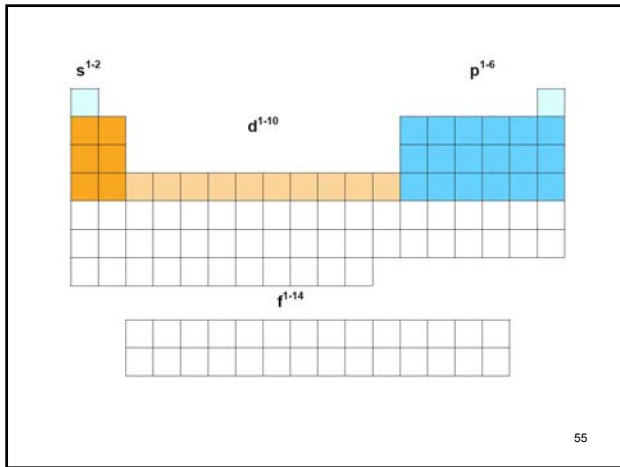
$l = 1 \quad m_l = -1, 0, 1 \quad 6 e^-: 3p^1 - Al \rightarrow 3p^6 - Ar$

$n = 4 \quad l = 0 \quad 2 e^-: 4s^1 - K \rightarrow 4s^2 - Ca$

$n = 3 \quad l = 2 \quad m_l = -2, -1, 0, 1, 2 \quad 10 e^-: 3d^1 - Sc \rightarrow 3d^{10} - Zn$

$n = 4 \quad l = 1 \quad m_l = -1, 0, 1 \quad 6 e^-: 4p^1 - Ga \rightarrow 4p^6 - Kr$

54

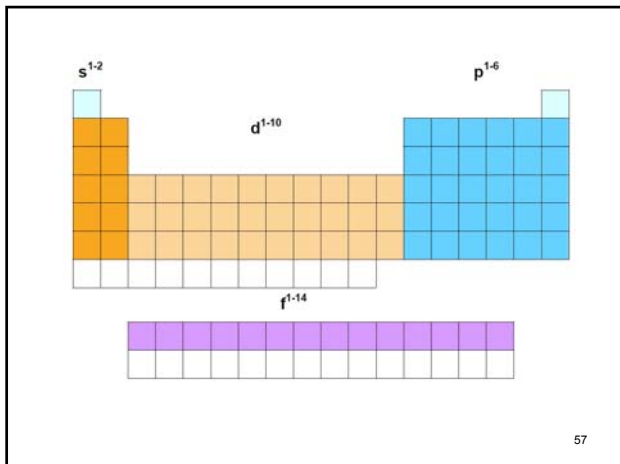


55

A periódusos rendszer és felépítése

$n = 5 \quad l = 0$ $n = 4 \quad l = 2 \quad m_l = -2, -1, 0, 1, 2$ $n = 5 \quad l = 1 \quad m_l = -1, 0, 1$	$2 e^-$ $10 e^-$ $6 e^-$	$5s^1 - Rb \rightarrow 5s^2 - Sr$ $4d^1 - Y \rightarrow 3d^{10} - Cd$ $5p^1 - Ga \rightarrow 5p^6 - Kr$
$n = 6 \quad l = 0$ $n = 5 \quad l = 2 \quad m_l = -2, -1, 0, 1, 2$	$2 e^-$ $10 e^-$	$6s^1 - Cs \rightarrow 4s^2 - Ba$ $5d^1 - La$
$n = 4 \quad l = 3 \quad m_l = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$ $n = 5 \quad l = 2 \quad m_l = -2, -1, 0, 1, 2$ $n = 6 \quad l = 1 \quad m_l = -1, 0, 1$	$14 e^-$ $10 e^-$ $6 e^-$	$4f^1 - Ce \rightarrow 4f^{14} - Lu$ $5d^2 - Hf \rightarrow 5d^{10} - Hg$ $6p^1 - In \rightarrow 6p^6 - Xe$

56

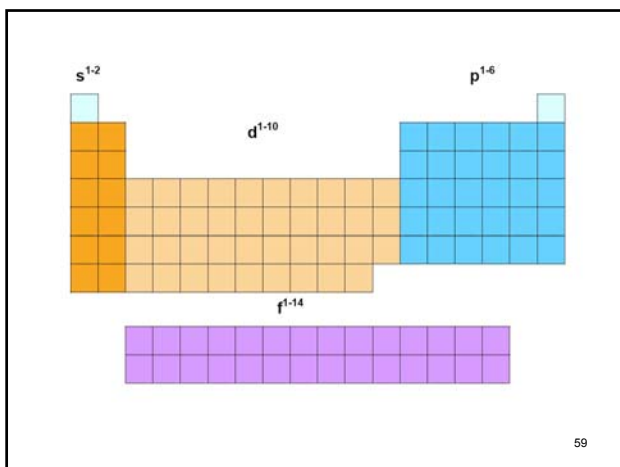


57

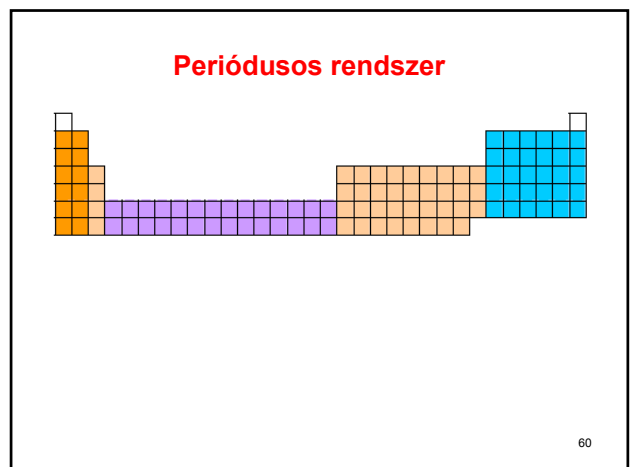
A periódusos rendszer és felépítése

$n = 7 \quad l = 0$ $n = 6 \quad l = 2 \quad m_l = -2, -1, 0, 1, 2$	$2 e^-$ $10 e^-$	$7s^1 - Fr \rightarrow 7s^2 - Ra$ $6d^1 - Ac$
$n = 5 \quad l = 3 \quad m_l = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$ $n = 6 \quad l = 2 \quad m_l = -2, -1, 0, 1, 2$	$14 e^-$ $10 e^-$	$5f^1 - Th \rightarrow 5f^{14} - Lr$ $6d^2 - Rf \rightarrow 6d^7 - Mt$

58

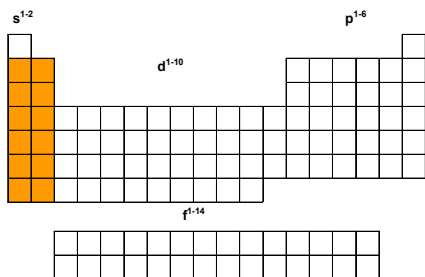


59



60

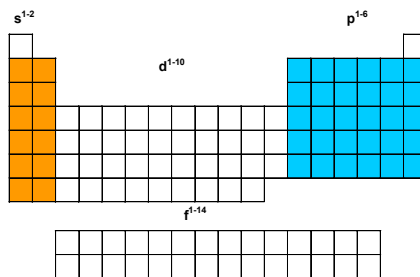
Periódusos rendszer



s-mező: ns^1 : alkálifémek, ns^2 : alkáliföldfémek

61

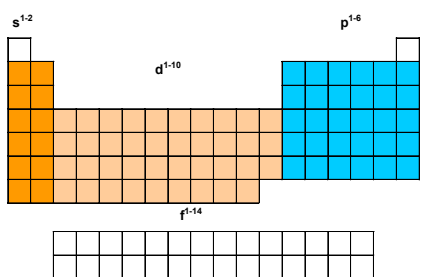
Periódusos rendszer



p-mező: $ns^2 np^{1-6}$ / $ns^2 (n-1)d^{10} np^{1-6}$

62

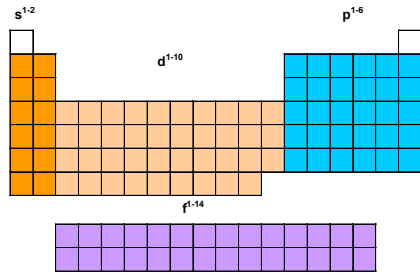
Periódusos rendszer



d-mező: $ns^2 (n-1)d^{1-10}$, átmeneti fémek

63

Periódusos rendszer



f-mező: $ns^2 (n-1)d^1 (n-2)f^{1-14}$, lantanoida fémek, aktinoida fémek

64

Anyagmennyiség

A kémiai anyagok makroszkópikus mennyiségének kezelésére: **anyagmennyiség**. Az a fizikai mennyiség, amely az anyag mennyiségét az azt felépítő elemi egységek száma alapján határozza meg.

jele: n , mértékegysége: mol

1 mol bármely anyag azon mennyisége, amely ugyanannyi elemi egységet tartalmaz, mint ahány ^{12}C atom van 12 g tiszta ^{12}C -izotópban.

elemi egység: atom, molekula, ion, $\Rightarrow$

N_A = Avogadro állandó

$N_A = 6,0221367 (\pm 0,000006) \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1} = 6,0 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

65

Anyagmennyiség

1 mol Na(-atom)	$6,0 \cdot 10^{23}$ Na-atomot jelent
1 mol CH_4 (-molekula)	$6,0 \cdot 10^{23}$ CH_4 -molekulát jelent
2 mol p^+	$2 \cdot 6,0 \cdot 10^{23}$ p^+ -t jelent
1 mol $_{11}\text{Na}$ (-atom)	$11 \cdot 6,0 \cdot 10^{23}$ p^+ -t tartalmaz

$$n = \frac{N}{N_A}$$

$$2,4 \cdot 10^{23} \text{ H}_2\text{-molekula: } n(\text{H}_2) = \frac{2,4 \cdot 10^{23}}{6,0 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}} = 0,40 \text{ mol}$$

66

Relatív atomtömeg

Atomi tömegegység: egy ^{12}C -izotóp tömegének 1/12-része:

$$\text{ATE} = \frac{m(^{12}\text{C})}{12}$$

Relatív atomtömeg: megmutatja, hogy egy atom tömege hányszorosa az atomi tömegegységnek (egy ^{12}C -izotóp tömege 1/12 részének)

$A_r(\text{Na}) = 23,0$, $A_r(\text{F}) = 19,0$

67

$$\text{ATE} = \frac{m(^{12}\text{C})}{12}$$
$$A_r(\text{Na}) = 23,0, \quad A_r(\text{F}) = 19,0$$

Átlagos relatív atomtömeg

A természetben előforduló elemek gyakran izotópok keveréke. Ezek %-os összetétele ismert → természetes izotóp eloszlás.

Átlagos relatív atomtömeg: az elemet alkotó izotópok relatív atomtömegének a %-os izotópeloszlással súlyozott átlaga:

pl: szén: ^{12}C	98,892 %	$A_r(^{12}\text{C}) = 12,0$
^{13}C	1,108 %	$A_r(^{13}\text{C}) = 13,0$
^{14}C	$1 \cdot 10^{-10}$ %	$A_r(^{14}\text{C}) = 14,0$

$$\bar{A}_r = \frac{98,892 \cdot 12,0 + 1,108 \cdot 13,0 + 1 \cdot 10^{-10} \cdot 14,0}{100} = 12,007$$

68

pl: szén: ^{12}C	98,892 %	$A_r(^{12}\text{C}) = 12,0$
^{13}C	1,108 %	$A_r(^{13}\text{C}) = 13,0$
^{14}C	$1 \cdot 10^{-10}$ %	$A_r(^{14}\text{C}) = 14,0$

$$\bar{A}_r = \frac{98,892 \cdot 12,0 + 1,108 \cdot 13,0 + 1 \cdot 10^{-10} \cdot 14,0}{100} = 12,007$$

Átlagos relatív molekulatömeg moláris tömeg

Átlagos relatív molekulatömeg: a molekulát, illetve a képletnek megfelelő legkisebb egységet alkotó atomok átlagos relatív atomtömegének összege:

$$\overline{M}_r(\text{H}_2\text{SO}_4) = 2 \cdot A_r(\text{H}) + A_r(\text{S}) + 4 \cdot A_r(\text{O}) = 98,0$$

Moláris tömeg: 1 mol elem, illetve vegyület tömege.
Jele: M, mértékegysége: g/mol.

$M(\text{Na}) = 23,0 \text{ g/mol}$, $M(\text{Cl}) = 35,5 \text{ g/mol}$
 $M(\text{NaCl}) = 58,5 \text{ g/mol}$, $M(\text{H}_2\text{O}) = 18,0 \text{ g/mol}$
 $M(\text{H}_2\text{SO}_4) = 98,0 \text{ g/mol}$

Jele: M, mértékegysége: g/mol.

$M(\text{Na}) = 23,0 \text{ g/mol}$, $M(\text{Cl}) = 35,5 \text{ g/mol}$
 $M(\text{NaCl}) = 58,5 \text{ g/mol}$, $M(\text{H}_2\text{O}) = 18,0 \text{ g/mol}$
 $M(\text{H}_2\text{SO}_4) = 98,0 \text{ g/mol}$

Anyagmennyiség számítása

tömeg, moláris tömeg → anyagmennyiség számítható:

$$n = \frac{m}{M}$$

$m(\text{C}) = 15,30 \text{ g}$ $n(\text{C}) = \frac{15,30 \text{ g}}{12,0 \text{ g/mol}} = 1,275 \text{ mol}$

$m(\text{CH}_4) = 32,0 \text{ g}$ $n(\text{CH}_4) = \frac{32,00 \text{ g}}{16,0 \text{ g/mol}} = 2,00 \text{ mol}$

Mennyi 3,20 mol oxigéngáz tömege?

$n(\text{O}_2) = 3,20 \text{ mol}$, $M(\text{O}_2) = 32,0 \text{ g/mol}$

$m(\text{O}_2) = n \cdot m = 3,20 \text{ mol} \cdot 32,0 \text{ g/mol} = 102,4 \text{ g}$

70

$$n = \frac{m}{M}$$

$$m(\text{CH}_4) = 32,0 \text{ g} \quad n(\text{CH}_4) = \frac{32,00 \text{ g}}{16,0 \text{ g/mol}} = 2,00 \text{ mol}$$

$$n(\text{O}_2) = 3,20 \text{ mol}, M(\text{O}_2) = 32,0 \text{ g/mol}$$

$$m(\text{O}_2) = n \cdot m = 3,20 \text{ mol} \cdot 32,0 \text{ g/mol} = 102,4 \text{ g}$$

Periódikusan változó tulajdonságok

Kationok képződését jellemző energia

ionizációs energia ($I_1, I_2, \dots$): $E \rightarrow E^+ + e^-$

$I_1 < I_2 < I_3$

Makroszkópikus mennyiségre definiálva:

1 mol gázalmazállapotú atomból a legkülső héjon levő elektron eltávolításához szükséges energia

Mértékegysége: kJ/mol

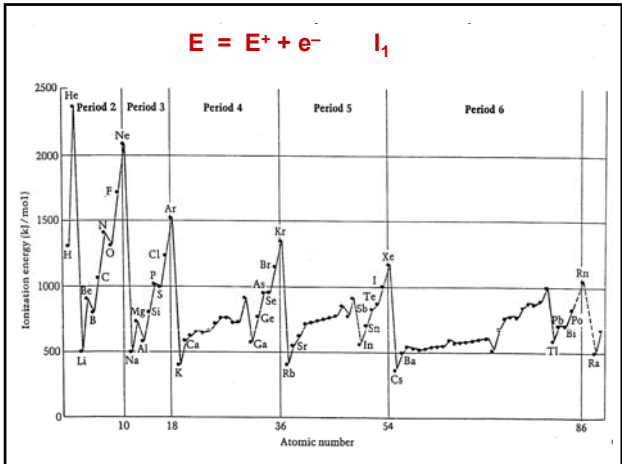
**a rendszám növekedésével periódusban nő,
oszlopban lefelé csökken**

71

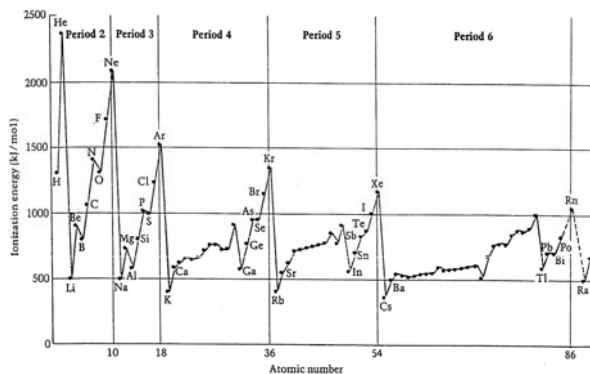
$$l_1 < l_2 < l_3$$

Mértékegysége: kJ/mol

a rendszám növekedésével periódusban nő,
oszlopban lefelé csökken



$$E = E^+ + e^- \quad I_1$$



Periódikusan változó tulajdonságok

Anionok képződését jellemző energia

Elektronaffinitás (E_A): $E + e^- \rightarrow E^-$

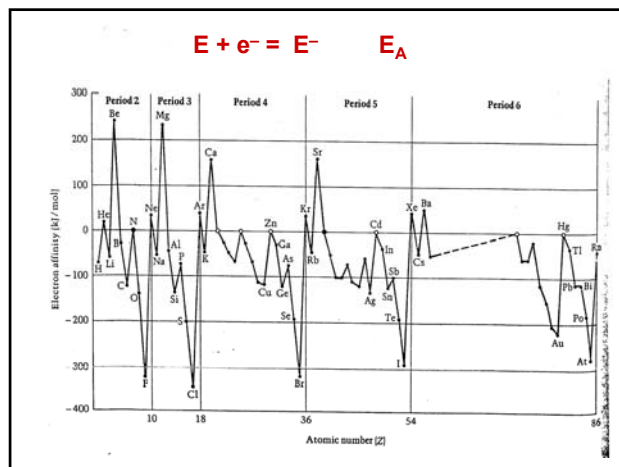
Makroszkópikus mennyiségre definiálva:

Az az *energiamennyiség*, amely akkor szabadul fel vagy ahhoz szükséges, hogy 1 mol gázalmazállapotú atom egy elektron felvételével egynegatív töltésű ionná alakuljon

Mértékegysége: kJ/mol

a periódusban: alkálifémek $\rightarrow$ halogének irányába
csökken
oszlopban lefelé csökken

73



Periódikusan változó tulajdonságok

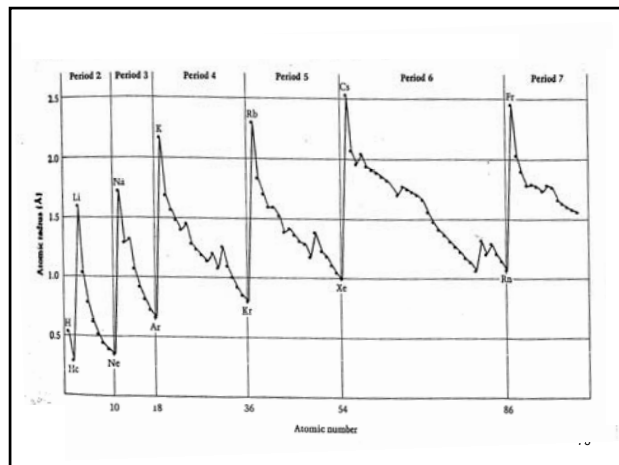
Elektronegativitás: vegyületben kötött atom elektronvonzó képessége

változása: a rendszám növekedésével
periódusban nő, oszlopban csökken

Atom- és ionméret:

változása: a rendszám növekedésével
periódusban csökken, oszlopban nő

75



Elemek és vegyületek jelölése

Elemek jelölése: név – vegyjel

pl. hidrogén – H, oxigén – O, vas – Fe, nátrium – Na, stb.

¹⁰³ Lr laurencium	¹⁰⁸ Hs hassium
¹⁰⁴ Rf rutherfordium	¹⁰⁹ Mt meitnerium
¹⁰⁵ Db dubnium	¹¹⁰ Ds darmstadtium
¹⁰⁶ Sg seaborgium	¹¹¹ Rg röntgenium
¹⁰⁷ Bh bohrium	

Vegyületek jelölése:

pl. víz	képlet
ammónia	H ₂ O
folsav	NH ₃
	C ₁₉ H ₁₉ N ₇ O ₆

77

Elemek és vegyületek jelölése

Tapasztalati képlet: megmutatja az alkotó atomok minőségét és az alkotó atomok arányát (legkisebb egész számokkal kifejezve):

(Tömegszázalékos összetétel alapján felírható legegyszerűbb képlet): CH₄, CO₂, NaCl, CaCl₂, (CH)_x

Molekulaképlet: A molekulát alkotó atomok pontos számát adja meg:

(CH)_x tapasztalati képlet $\rightarrow$ lehetséges molekulaképlet

C₂H₂ – acetilén

C₆H₆ – benzol

(Tömegszázalékos összetétel és egyéb paraméter, pl. moláris tömeg alapján határozható meg)

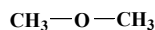
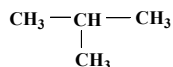
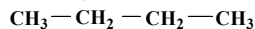
78

Vegyületek jelölése

Szerkezeti képlet: atomok kapcsolódási sorrendjét is szemlélteti

Izomerek: azonos molekulaképlettel (összegképlettel), eltérő szerkezeti képlettel rendelkező molekulák

Konstitúciós izomerek: eltér az atomok kapcsolódási sorrendje:

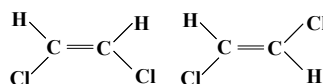


79

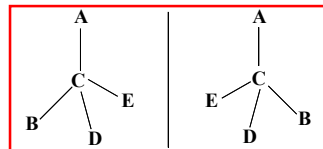
Vegyületek jelölése

2. Konfigurációs izoméria (sztereoizoméria): eltér az atomok, atomcsoportok térbeli elhelyezkedése

A) geometriai izoméria (cisz-transz izoméria)



B) optikai izoméria (tükörképi izoméria)



80

Ionok elnevezése

Kationok: egyszerű kation (egy atomból áll)
az elem neve + ion (kation): K^+ - kálium-ion
 Al^{3+} - alumínium-ion

Összetett kation (több atomból áll):
vegyület nevéből képezzük: NH_4^+ - ammónium-ion

Anionok: egyszerű anion
az elem nevéből képezzük + **id** végződés:

Cl^- - klorid-ion
 S^{2-} - szulfid-ion
 N^{3-} - nitrid-ion
 H^- : hidrid-ion

81

Ionok elnevezése

Anionok: összetett anion
 OH^- - hidroxid-ion, CN^- : cianid-ion

egyéb oxigéntartalmú anionok (savból származtathatók):
sav neve + **-át, -it** végződés (esetleg **hipo-, per-, di** előtag)

SO_4^{2-} - szulfát-ion SO_3^{2-} - szulfit-ion
 NO_3^- - nitrát-ion NO_2^- - nitrit-ion
 CO_3^{2-} - karbonát-ion
 PO_4^{3-} - foszfát-ion
 MnO_4^{2-} - manganát-ion MnO_4^- - permanganát-ion

82

Ionok elnevezése

ClO_3^- - klorát-ion ClO_4^- - perklorát-ion
 ClO_2^- - klorit-ion
 ClO^- - hipoklorit-ion
 CrO_4^{2-} - kromát-ion $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ - dikromát-ion

oxigén cseréje kénatomra: **tio**-előtag:

SO_4^{2-} - szulfát-ion $\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$ - tioszulfát-ion
 OCN^- - cianát-ion SCN^- - tiocianát-ion

HSO_4^- - hidrogén-szulfát-ion
 HCO_3^- - hidrogén-karbonát-ion
 HPO_4^{2-} - hidrogén-foszfát-ion,
 H_2PO_4^- - dihidrogén-foszfát-ion

83

Vegyületek képlete, elnevezése

Ionvegyületek (sók):

X^{n+} -kation + Y^{m-} -anion $\rightarrow \text{X}_m\text{Y}_n$ semleges vegyület

Na^+ -kation + S^{2-} -anion $\rightarrow \text{Na}_2\text{S}$ - nátrium-szulfid
 Li^+ -kation + N^{3-} -anion $\rightarrow \text{Li}_3\text{N}$ - lítium-nitrid
 Ca^{2+} -kation + PO_4^{3-} -anion $\rightarrow \text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ - kalcium-foszfát
 Fe^{2+} -kation + SO_4^{2-} -anion $\rightarrow \text{FeSO}_4$ - vas(II)-szulfát
 Fe^{3+} -kation + SO_4^{2-} -anion $\rightarrow \text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$ - vas(III)-szulfát
 Mg^{2+} -kation + HCO_3^- -anion $\rightarrow \text{Mg}(\text{HCO}_3)_2$ -
magnézium-hidrogén-karbonát

84

Vegyületek képlete, elnevezése

(Szervetlen) molekulavegyületek, egyéb vegyületek alkotó atomok neve előtt: **mono-, di-, tri-, tetra-, penta-, hexa-, hepta-, okta-** előtag, **-id**-végződés

NO – nitrogén- mon oxid,	N ₂ O – di nitrogén-oxid
NO ₂ – nitrogén- di oxid	N ₂ O ₃ – di nitrogén- tri oxid
N ₂ O ₄ – di nitrogén- tetra oxid	N ₂ O ₅ – di nitrogén- penta oxid
CO ₂ – szén- di oxid	CS ₂ – szén- di szulfid
MnO ₂ – mangán- di oxid, mangán(IV)-oxid	
P ₂ O ₅ – (di)foszfor- penta(a) oxid	
SiO ₂ – szilícium- di oxid	

85

Vegyületek képlete, elnevezése

Savak elnevezése

HCl – <i>hidrogén-klorid</i> , HBr – <i>hidrogén-bromid</i>	
H ₂ S – <i>dihidrogén-szulfid</i> (kén-hidrogén)	
HClO – <i>hipoklórossav</i>	HClO ₂ – <i>klórossav</i>
HClO ₃ – <i>klórsav</i>	HClO ₄ – <i>perklórsav</i>
HNO ₃ – <i>salétromsav</i>	HNO ₂ – <i>salétromossav</i>
H ₂ SO ₄ – <i>kénsav</i>	H ₂ SO ₃ – <i>kénessav</i>
H ₂ CO ₃ – <i>szénsav</i>	

Bázisok elnevezése

NaOH – *nátrium-hidroxid*, KOH – *kálium-hidroxid*
NH₃ – *ammónia*

86

Anyagi rendszerek

kémiailag tiszta anyag:
egykomponensű

homogén (egyfázisú) heterogén (többfázisú)

keverék:
két- vagy többkomponensű

homogén (egyfázisú):
oldat, elegy heterogén (többfázisú)

87

Anyagi rendszerek

homogén: a rendszer tulajdonságai (pl. *sűrűség, szín, összetétel, stb.*) annak valamennyi részében ugyanazok (pl. *valódi oldatok*)

heterogén:

inhomogén: a tulajdonságok nem egyeznek meg mindenhol, de folytonosan változnak (pl. *a Föld légköre*)

valódi heterogén: vannak olyan makroszkópikus határfelületek, amelyek mentén a tulajdonságok ugrásszerűen változnak (pl. *jég-víz rendszer*)

fázisok: a heterogén rendszerek határfelületekkel körülhatárolt homogén részei

komponens: az egyes fázisok kémiailag különböző (független) összetevői

88

Halmazállapotok jellemzői

Gázok:

Nincs sem önálló alakjuk, sem önálló térfogatuk. Az alkotórészek haladó mozgást végeznek. Kitöltik a rendelkezésre álló teret.

Folyadékok:

Nincs önálló alakjuk, de van önálló térfogatuk. Térkitöltés nem teljes. Az alkotórészek rezgő és haladó mozgást végeznek.

Szilárd anyagok:

Önálló alakjuk és térfogatuk van. Az alkotórészek csak rezgőmozgást végeznek.

89

Egykomponensű, egyfázisú rendszerek jellemzése

Gázok általános jellemzői

- a részecskék állandó mozgásban, rendezetlen állapotban vannak
- a részecskék ütközése rugalmas
- sebesség: *változó*

tökéletes (ideális) gáz:

- a gázcseppnek nincs önálló térfogata
- nincs közöttük kölcsönhatás ("p" kicsi, "T" nagy) (nemesgázok, O₂, N₂, H₂,...)
- ⇒ *a gáz állapota független az anyagi minőségtől*

reális gázok: pl. CO₂, NH₃, H₂O,...

90

Gáztörvények

Avogadro törvénye

Azonos állapotú (nyomás, hőmérséklet), egyenlő térfogatú gázokban a molekulák száma egyenlő.

Moláris térfogat (V_M): Adott hőmérsékleten és nyomáson egy mol gáz térfogata → A gáz térfogatából és a moláris térfogatból (adott hőmérsékleten és nyomáson) a gáz anyagszáma meghatározható:

$$n = \frac{V}{V_M}$$

Standard állapot: $t = 25\text{ °C}$, $p = 101325\text{ Pa}$, $V_M = 24,5\text{ dm}^3/\text{mol}$

Normál állapot: $t = 0\text{ °C}$, $p = 101325\text{ Pa}$, $V_M = 22,41\text{ dm}^3/\text{mol}$

Gáztörvények

Mennyi $4,90\text{ dm}^3$ standard állapotú oxigéngáz anyagszáma?

$$n(\text{O}_2) = \frac{4,90\text{ dm}^3}{24,5\text{ dm}^3/\text{mol}} = 0,20\text{ mol}$$

32,0 g metángáznak mennyi a térfogata 0 °C -on 101325 Pa nyomáson.

$$n(\text{CH}_4) = \frac{32,0\text{ g}}{16,0\text{ g/mol}} = 2,00\text{ mol}$$

$$V = n \cdot V_M = 2,00\text{ mol} \cdot 22,41\text{ dm}^3/\text{mol} = 44,82\text{ dm}^3$$

92

Gáztörvények

Boyle-(Mariotte)-törvény: (állandó hőmérséklet)

Két állapotra felírva:

$$p_1 \cdot V_1 = p_2 \cdot V_2 \quad p_1/p_2 = V_2/V_1$$

Általánosan: állandó hőmérsékleten

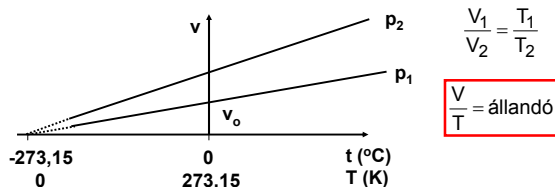
$pV = \text{állandó}$,

93

Gáztörvények

Gay-Lussac törvények (Charles törvények)

Általánosan (állandó nyomáson):



termodinamikai hőmérsékleti skála

$$t_0 = -273,15\text{ °C} \rightarrow T = 0\text{ K}, T = t(\text{°C}) + 273,15$$

94

Gáztörvények

Gay-Lussac törvények (Charles törvények)

Általánosan (állandó térfogaton):

$$\frac{p_1}{p_2} = \frac{T_1}{T_2} \quad \frac{p}{T} = \text{állandó}$$

Egyesített gáztörvény: (minden gázra)

$$\frac{p_1 \cdot V_1}{T_1} = \frac{p_2 \cdot V_2}{T_2} \quad \frac{p \cdot V}{T} = \text{állandó}$$

95

Gáztörvények

Általános gáztörvény: (minden gázra)

$$p \cdot V = n \cdot R \cdot T$$

n : anyagszáma [mol]

p : nyomás [Pa]

V : térfogat [m^3]

T : hőmérséklet [K]

R : egyetemes gázállandó

$$R = 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$$

Mennyi $12,0\text{ dm}^3$ 21 °C -os, $105\,000\text{ Pa}$ nyomású hidrogéngáz anyagszáma?

$$n(\text{H}_2) = \frac{p \cdot V}{R \cdot T} = \frac{105000\text{ Pa} \cdot 12,0 \cdot 10^{-3}\text{ m}^3}{8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot (21 + 273,15)\text{ K}} = 0,515\text{ mol}$$

96

Folyadékok jellemzése

- Állandó térfogat, változó alak
- Nagyon kis összenyomhatóság → folyadékok használhatók hidraulikus berendezésekben
- A folyadékokban a molekulák elmozdulnak, helyüket változtatják → diffúzió

Viszkozitás:

A folyadékok belső súrlódására jellemző mennyiség, a **"folyósság" mértéke**

pl. víz – viszkozitása kicsi, méz – viszkozitása nagy
Hőmérséklet növelésével csökken.

97

Folyadékok jellemzése

Felületi feszültség:

A folyadékok mindig a legkisebb felszín kialakítására törekszenek → vízcsepp gömb alakja

Az az energia, amely ahhoz szükséges, hogy a folyadék felszínét egységnyi felülettel megnöveljük.

Hőmérséklet növelésével csökken.

Mosószer: csökkenti a felületi feszültséget → nagyobb buborékok alakulnak ki, nő a mosóhatás

98

Szilárd anyagok jellemzése

- Állandó térfogat, állandó alak
- Kis összenyomhatóság

Amorf anyagok: részecskék "véletlenszerű" elrendeződése, de nagy összetartó erő

nem rendelkeznek határozott olvadásponttal

pl. makromolekulák (pl. gumi, műanyagok, stb.) és üvegek ("üvegszerű" állapotban lévő anyagok vagy túlhűtött folyadékok)

99

Szilárd anyagok jellemzése

Kristályos szilárd anyagok: a részecskék szabályosan ismétlődő elrendeződése

elemi cella: az a legkisebb térbeli egység, amelynek a tér három irányába történő eltolásával felépíthető a teljes kristályrács

Rácsenergia: a rácsot összetartó kötés felbontásához szükséges energia (mértékegysége: kJ/mol)

Rács típusok:

- ionrács
- atomrács
- molekularács
- fémrács

100

Ionrács

Előfordulás: csak vegyületekben
(NaCl, KBr,..., fém-halogenidek, oxidok,...)

Rács pontokban: ellentétes töltésű ionok

Kötés: ionos

Rácsenergia: nagy

Tulajdonságok:

- magas olvadás- és forráspont
- nagy keménység
- ridegek (törékeny, hasad)
- szigetelők (szilárd fázisban), vezetők (olvadékban és oldatban)
- oldódás poláris oldószerekben (pl. víz, cseppf. NH_3)

101

Atomrács

Előfordulás: elemekben és vegyületekben
(C, B, Si,.../SiC, SiO_2 ,...)

Rács pontokban: atomok

Kötés: kovalens

Rácsenergia: nagy

Tulajdonságok:

- magas olvadás- és forráspont
- nagy keménység
- ridegek (törékeny)
- szigetelők (szilárdan és olvadékban is)
- fizikailag oldhatatlanok

102

Molekularács

Előfordulás: elemekben és vegyületekben
(H_2 , O_2 , P_4 , He / H_2O , NH_3 , szerves vegyületek)

Rácspontokban: molekulák (nemesgázok esetén atomok)

Kötés: másodrendű (molekulán belül: kovalens)

Rácsenergia: kicsi

Tulajdonságok:

- alacsony olvadás-, forráspont
- puha/képlékeny
- szigetelő (szilárdan), (oldat vezethet)
- oldódás (hasonló a hasonlóban, HCl - H_2O , I_2 - CCl_4)

103

Fémrács

Előfordulás: elemekben és vegyületekben
(Fe, Co, Na,... / karbidok, hidridek,...)

Rácspontokban: atomtörzsek

Kötés: fémes

Rácsenergia: nagy

Tulajdonságok:

- változó olvadás-, forráspont
- változó keménység
- megmunkálhatóság (rugalmas alakváltozás)
- jó vezető (szilárdan és olvadékban)
- fizikailag oldhatatlan

104

Rétegrács

Előfordulás: pl. grafit

Rácspontokban: atomok

Kötés: kovalens a rétegeken belül
másodrendű kötés a rétegek között

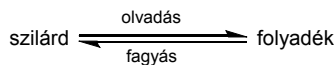
Rácsenergia: nagy a rétegen belül

Tulajdonságok:

- magas olvadás- és forráspont
- viszonylag puhák
- ridegek (törékeny)
- lehetnek vezetők (ha a rácssík tartalmaz delokalizált elektronokat)
- fizikailag oldhatatlanok

105

Halmazállapotváltozások



Olvadás: hőmérséklet emelése → a rezgőmozgás amplitúdója nő, adott hőmérsékleten a kristályrács összeomlik.

Olvadási hőmérséklet: az a hőmérséklet, amelynél adott nyomáson csak folyadék és szilárd anyag van együtt egyensúlyban.

(Normális) olvadáspont: a 101325 Pa nyomáshoz tartozó olvadási hőmérséklet:

106

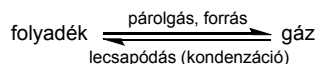
Halmazállapotváltozások

Moláris olvadáshő: Az az energiamennyiség, ami ahhoz szükséges, hogy 1 mol szilárd anyag az olvadáspontjának hőmérsékletén 1 mol azonos hőmérsékletű folyadékká alakuljon. Mértékegysége: kJ/mol.

Moláris fagyáshő: Az az energiamennyiség, ami ahhoz szükséges, hogy 1 mol folyadék az olvadáspontjának hőmérsékletén 1 mol azonos hőmérsékletű szilárd anyaggá alakuljon. Mértékegysége: kJ/mol.

107

Halmazállapotváltozások

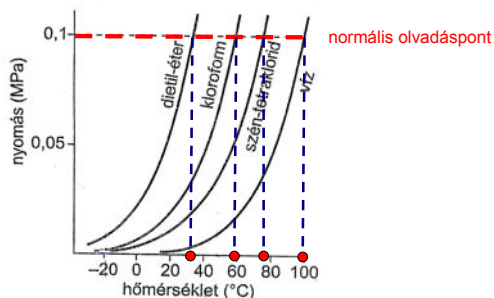


Párolgás: a folyadék felületéről molekulák kerülnek a gőztérbe → *nyitott edényben* a folyadék elpárolog
zárt edényben: **dinamikus egyensúly** alakul ki a folyadék és felette levő gőztér között (a folyadékból kilépő molekulák száma = a gőztérből kondenzálódó molekulák száma)

Tenzió (gőznyomás): zárt rendszerben a folyadék felett kialakult telített gőznek a nyomása.

A tenzió a hőmérséklet növelésével nő.

108



A folyadékok gőznyomásának változása a hőmérséklettel

109

Halmazállapotváltozások

Moláris párolgáshő: Az az energiamennyiség, ami ahhoz szükséges, hogy 1 mol folyadék 1 mol azonos hőmérsékletű és nyomású gázzá alakuljon. Mértékegysége: kJ/mol. A párolgáshő a hőmérséklet növelésével csökken.

Forráshőmérséklet: Az hőmérséklet, amelyen a folyadék gőznyomása eléri a külső nyomás értékét → a folyadék belsejében is buborékok keletkeznek, a folyadék **forrásba jön**.
(Normális) forráspont: a 101325 Pa nyomáshoz tartozó forráshőmérséklet. *pl. víz esetén: 100 °C.*

110

Halmazállapotváltozások

Kritikus hőmérséklet, kritikus nyomás

Zárt rendszerben levő folyadék melegítése → nő a gőznyomás, egyidejűleg nő a gőz sűrűsége → adott hőmérsékleten és nyomáson elérhető:
gőz sűrűsége = folyadék sűrűsége, a fázis határfelülete eltűnik

Kritikus hőmérséklet felett a *gázok* nem cseppfolyósíthatók.

111

Kritikus nyomás (p_k) és hőmérséklet (t_k) értékek

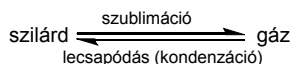
Anyag	Forráspont (°C)	t_k (°C)	p_k (Pa)
H ₂ O	100	374,2	$2,21 \cdot 10^7$
NH ₃	-33	132,4	$1,13 \cdot 10^7$
CO ₂	-78,5(sz)	31	$7,4 \cdot 10^6$
O ₂	-183	-118,8	$5,04 \cdot 10^6$
N ₂	-196	-147,1	$3,39 \cdot 10^6$
H ₂	-253	-239,9	$1,3 \cdot 10^6$

légköri nyomáson cseppfolyósítható (gázpalackban cseppfolyós)

légköri nyomáson nem cseppfolyósítható (gázpalackban gázhalmazállapotú)

112

Halmazállapotváltozások



Szublimáció: a szilárd anyag felületéről a szilárd anyagnak megfelelő molekulák kerülnek a gőztérbe → *nyitott edényben* a szilárd anyag egésze elszublimálhat („eltűnik, mint a kámför”)

Szublimációs nyomás: zárt rendszerben a szilárd anyag felett kialakult telített gőznek a nyomása. A hőmérséklet növelésével a szublimációs nyomás nő. Molekularácsos, szobahőmérsékleten szilárd anyagok szublimációs nyomása jelentős (pl. jód, kámför stb.).

113