



AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA
IM. STANISŁAWA STASZICA W KRAKOWIE



WYDZIAŁ
ODLEWNICTWA

Chemia ogólna

dr hab. dr Urszula Lelek-Borkowska, prof. AGH



AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA
IM. STANISŁAWA STASZICA W KRAKOWIE



WYDZIAŁ
ODLEWNICTWA

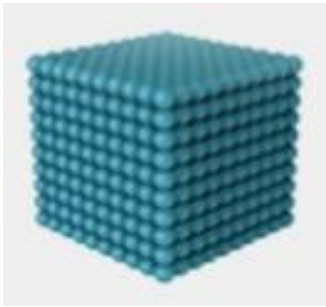
Stany skupienia materii

Stany skupienia materii

SOLID

Stany skupienia materii

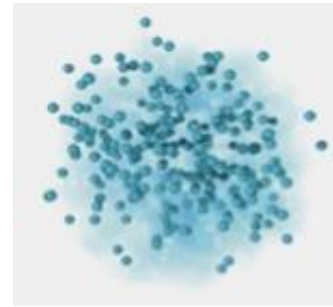
ciało stałe



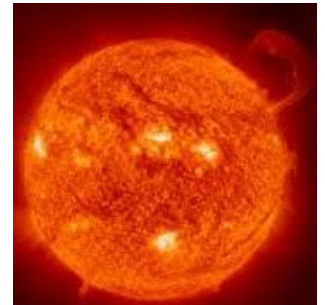
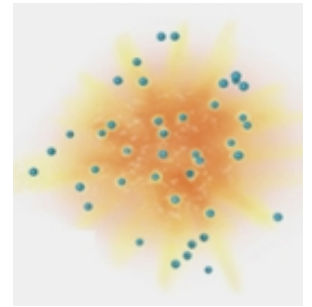
ciecz



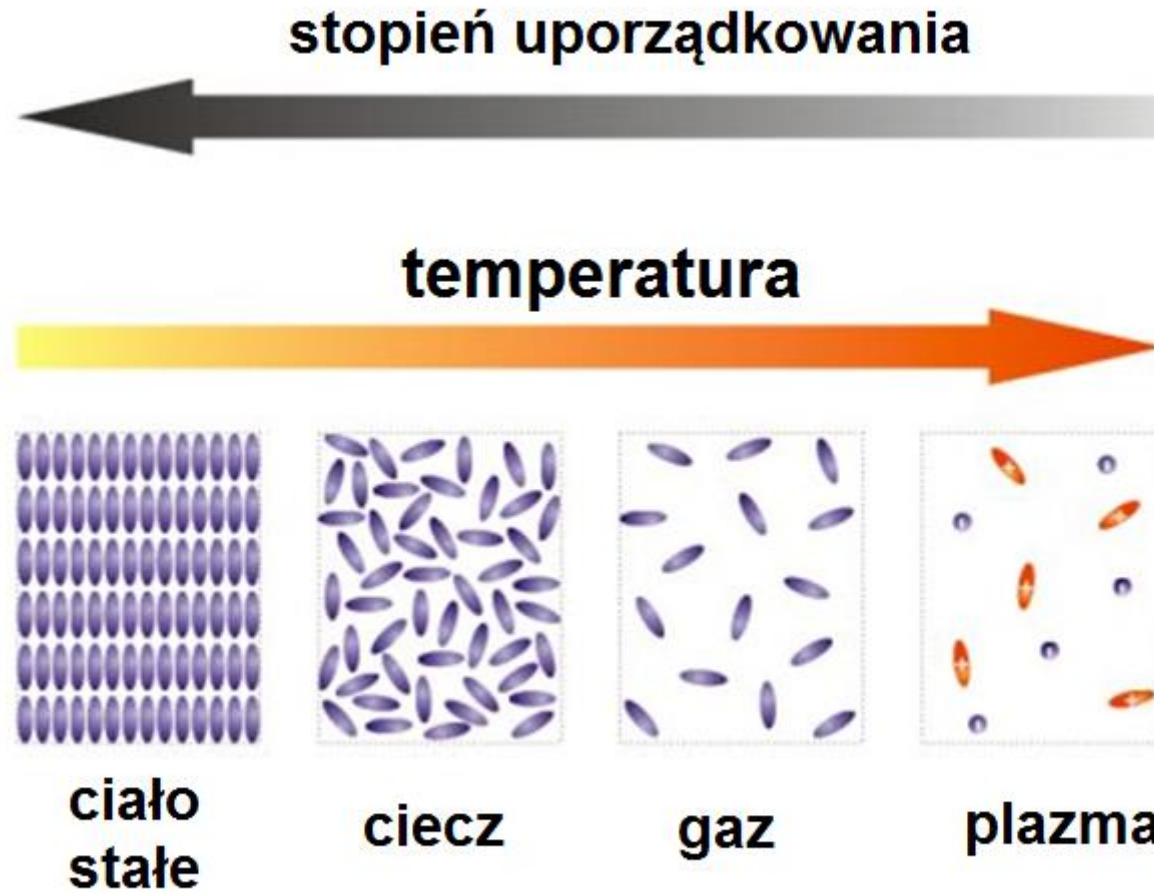
gaz



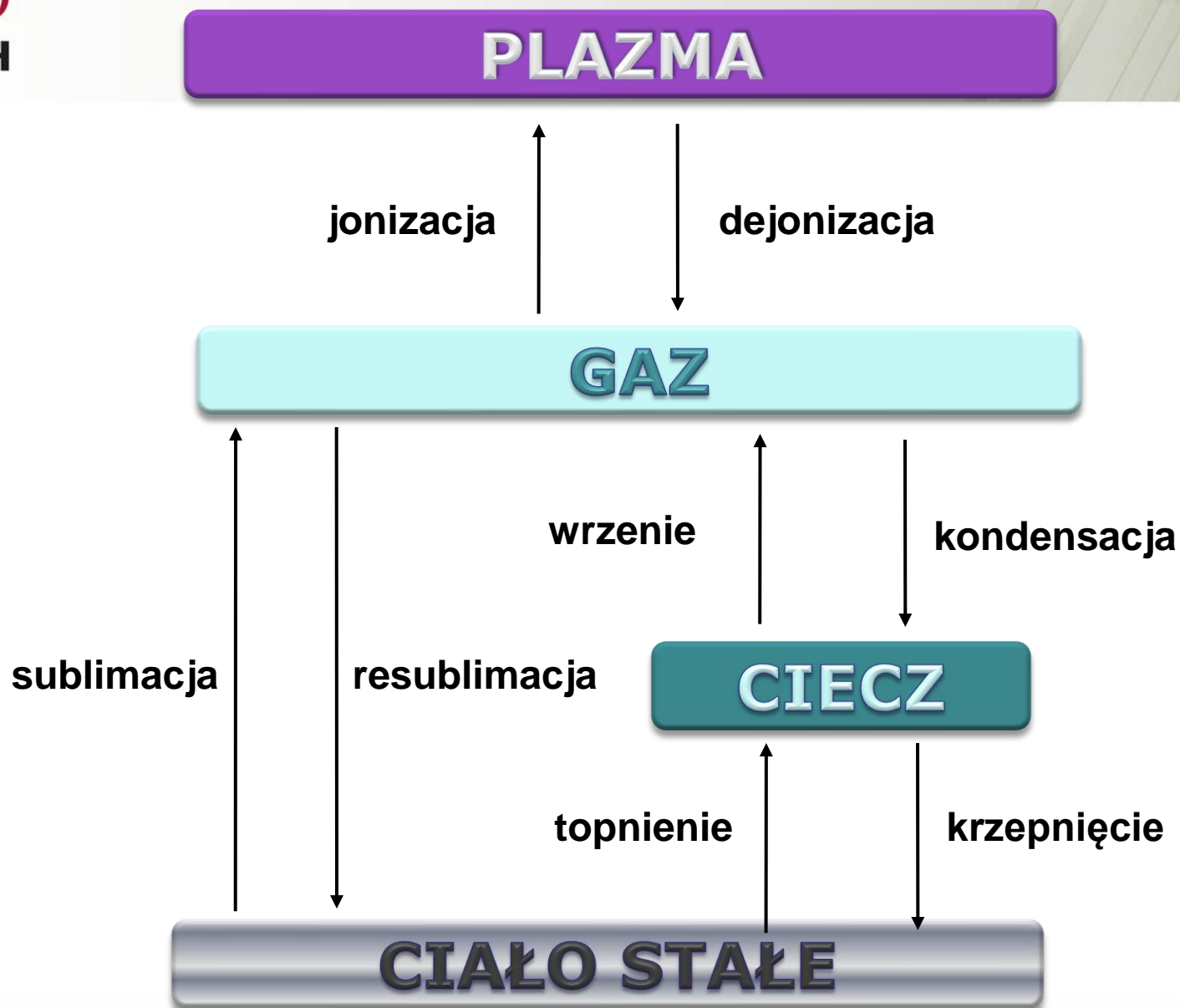
plazma



Stany skupienia materii



Przemiany fazowe



Naturalne stany skupienia pierwiastków

1 H Hydrogen 1.008																	2 He Helium 4.002602						
3 Li Lithium 6.94	4 Be Beryllium 9.0121831																	5 B Boron 10.81	6 C Carbon 12.011	7 N Nitrogen 14.007	8 O Oxygen 15.999	9 F Fluorine 18.9984031	10 Ne Neon 20.1797
11 Na Sodium 22.98976928	12 Mg Magnesium 24.305																	13 Al Aluminium 26.9815385	14 Si Silicon 28.085	15 P Phosphorus 30.973761998	16 S Sulfur 32.06	17 Cl Chlorine 35.45	18 Ar Argon 39.948
19 K Potassium 39.0983	20 Ca Calcium 40.078	21 Sc Scandium 44.955909	22 Ti Titanium 47.867	23 V Vanadium 50.9415	24 Cr Chromium 51.9961	25 Mn Manganese 54.938044	26 Fe Iron 55.845	27 Co Cobalt 58.933194	28 Ni Nickel 58.6934	29 Cu Copper 63.546	30 Zn Zinc 65.38	31 Ga Gallium 69.723	32 Ge Germanium 72.630	33 As Arsenic 74.921595	34 Se Selenium 78.971	35 Br Bromine 79.904	36 Kr Krypton 83.799						
37 Rb Rubidium 85.4678	38 Sr Strontium 87.62	39 Y Yttrium 88.90584	40 Zr Zirconium 91.224	41 Nb Niobium 92.90637	42 Mo Molybdenum 95.95	43 Tc Technetium (98)	44 Ru Ruthenium 101.07	45 Rh Rhodium 102.90550	46 Pd Palladium 106.42	47 Ag Silver 107.8682	48 Cd Cadmium 112.414	49 In Indium 114.818	50 Sn Tin 118.710	51 Sb Antimony 121.760	52 Te Tellurium 127.60	53 I Iodine 126.90447	54 Xe Xenon 131.293						
55 Cs Caesium 132.90545196	56 Ba Barium 137.327	57 - 71 Lanthanoids	72 Hf Hafnium 178.49	73 Ta Tantalum 180.94788	74 W Tungsten 183.84	75 Re Rhenium 186.207	76 Os Osmium 190.23	77 Ir Iridium 192.227	78 Pt Platinum 195.084	79 Au Gold 196.966569	80 Hg Mercury 200.592	81 Tl Thallium 204.38	82 Pb Lead 207.2	83 Bi Bismuth 208.98040	84 Po Polonium (209)	85 At Astatine (210)	86 Rn Radon (211)						
87 Fr Francium (223)	88 Ra Radium (226)	89 - 103 Actinoids	104 Rf Rutherfordium (261)	105 Db Dubnium (268)	106 Sg Seaborgium (269)	107 Bh Bohrium (270)	108 Hs Hassium (278)	109 Mt Meitnerium (278)	110 Ds Darmstadtium (285)	111 Rg Roentgenium (288)	112 Cn Copernicium (289)	113 Nh Nihonium (289)	114 Fl Flerovium (289)	115 Mc Moscovium (289)	116 Lv Livermorium (293)	117 Ts Tennessine (294)	118 Og Oganesson (294)						

- ciała stałe
- ciecze
- gazy
- nieokreślony stan skupienia, pierwiastki nietwale

57 La Lanthanum 138.90547	58 Ce Cerium 140.16	59 Pr Praseodymium 140.90766	60 Nd Neodymium 144.242	61 Pm Promethium (145)	62 Sm Samarium 150.36	63 Eu Europium 151.964	64 Gd Gadolinium 157.25	65 Tb Terbium 158.92535	66 Dy Dysprosium 162.505	67 Ho Holmium 164.93033	68 Er Erbium 167.259	69 Tm Thulium 168.93422	70 Yb Ytterbium 173.045	71 Lu Lutetium 174.967
89 Ac Actinium (227)	90 Th Thorium 232.0377	91 Pa Protactinium 231.03688	92 U Uranium 238.02891	93 Np Neptunium (237)	94 Pu Plutonium (244)	95 Am Americium (243)	96 Cm Curium (247)	97 Bk Berkelium (247)	98 Cf Californium (251)	99 Es Einsteinium (252)	100 Fm Fermium (257)	101 Md Mendelevium (258)	102 No Nobelium (259)	103 Lr Lawrencium (260)

Parametry stanu

Faza - część układu jednorodna w całej swojej objętości zarówno pod względem chemicznym, jak i fizycznym.




Parametry stanu - wielkości opisujące stan termodynamiczny układu.

Temperatura, T	parametry intensywne niezależne od ilości materii w układzie
Ciśnienie, p	
Gęstość, d	
Objętość, v	parametry ekstensywne zależne od ilości materii w układzie
Masa, m	
liczba moli, n	



Temperatura

Temperatura – miara energii kinetycznej układu.

		Kelvin [K]	Celsjusz [°C]	Fahrenheit [°F]
	zero absolutne	0	-273,15	-459,67
	zamarzanie wody	273,15	0	32
	wrzenie wody	373,15	100	212

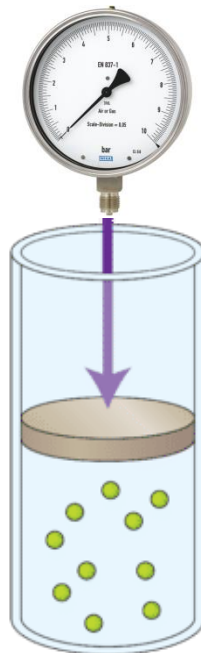
Zero absolutne – temperatura, przy której zanika ruch cząsteczek.

Ciśnienie

Ciśnienie – miara siły działającej na daną powierzchnię

$$p = \frac{F}{A} \quad \left[\frac{\text{N}}{\text{m}^2} \right]$$

jednostka	symbol	wartość
paskal	1 Pa	1 N/m ²
bar	1 bar	10 ⁵ Pa
atmosfera	1 atm	101 325 Pa
tor	1 Tr	133,322 Pa
milimetr słupa rtęci	1 mmHg	1 Tr



Objętość

Objętość – miara przestrzeni, którą zajmuje dane ciało w przestrzeni trójwymiarowej.

jednostka	symbol	wartość
metr sześcienny	1 m ³	1000 l
decymetr sześcienny	1 dm ³	1 l
centymetr sześcienny	1 cm ³	1 ml
litr	1 l	1 dm ³
mililitr	1 ml	1 cm ³





Gaz - stan skupienia materii, w którym cząsteczki:

- mają wysoką energię,
- są w dużych odległościach od siebie,
- poruszają się ruchem translacyjnym prostoliniowym, mogą oscylować i rotować,
- nieustannie zderzają się między sobą i ze ścianami naczynia.
- wypełniają całą objętość naczynia i przyjmują jego kształt.
- są ściśliwe, dyfundują.

Średnia energia
cząsteczek gazu:

$$E_k = \frac{3}{2} kT$$

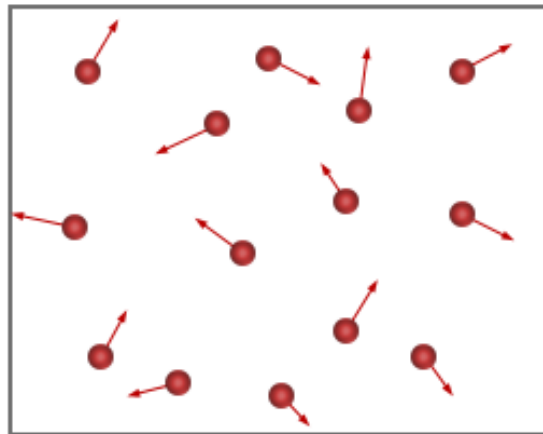
k - stała Boltzman'a,

T - temperatura bezwzględna

$$k_B = \frac{R}{N_A}$$

Gaz doskonały

- składa się z cząsteczek (atomów) będących w nieustającym, przypadkowym ruchu,
- cząsteczki (atomy) można traktować jako punkty bezwymiarowe, można zaniedbać wymiary cząsteczek,
- zderzenia między cząsteczkami są doskonale sprężyste.



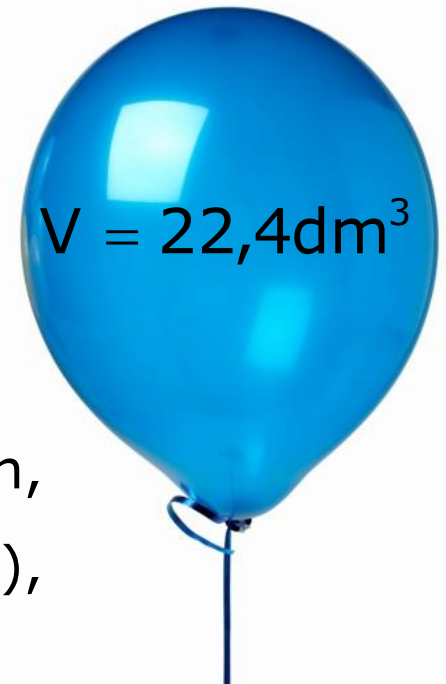
Prawo Avogadro:

Jednakowe objętości różnych gazów znajdujących się pod tym samym ciśnieniem i w tej samej temperaturze zawierają jednakową liczbę cząsteczek

$$N = 6,023 \times 10^{23}$$

N - liczba Avogadro

1 mol każdego gazu w warunkach normalnych,
 $T = 273,15\text{K}$ (0°C) $p = 1013,25\text{hPa}$ (1atm.),
zajmuje taką samą objętość równą $22,4 \text{ dm}^3$.



Prawo Boyle – Mariotte'a:

W stałej temperaturze (warunki izotermiczne) iloczyn ciśnienia i objętości jest wartością stałą.

$$pV = \text{const.}$$

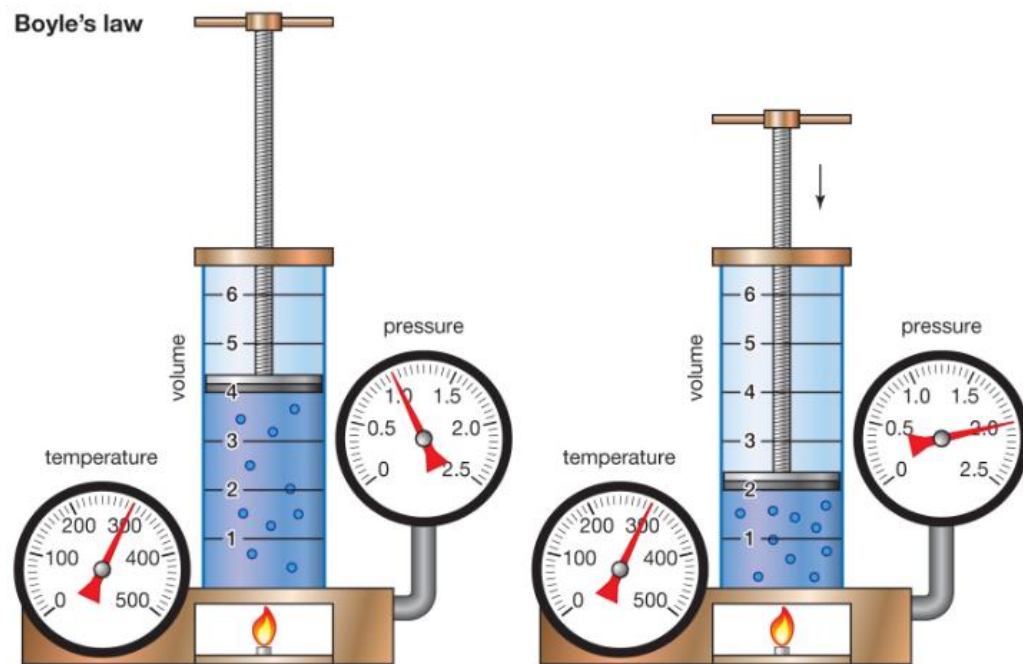
Stąd

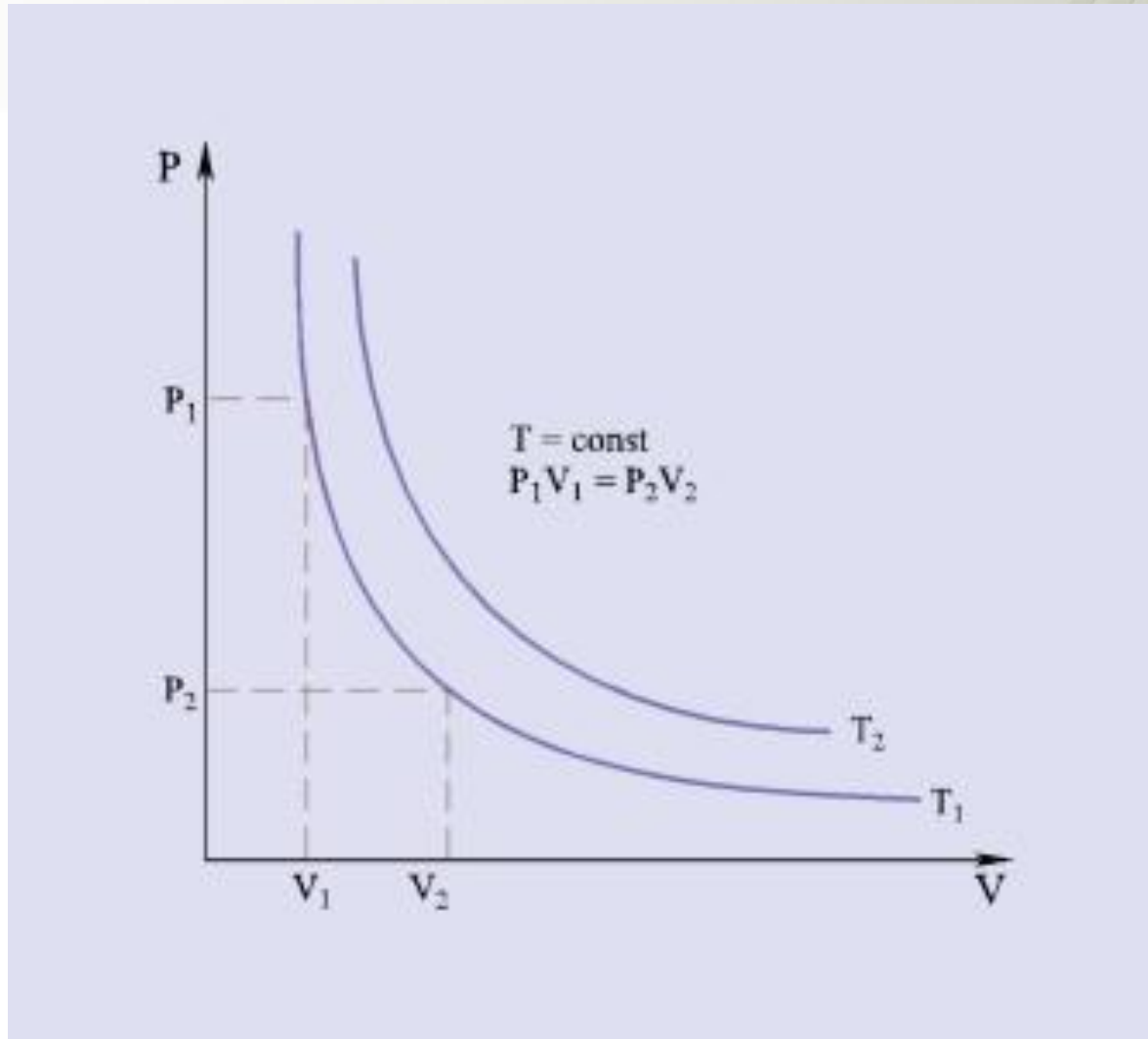
$$p_1V_1 = p_2V_2$$

$$\frac{p_1}{p_2} = \frac{V_2}{V_1}$$

$$p_2 = \frac{V_1}{V_2} p_1$$

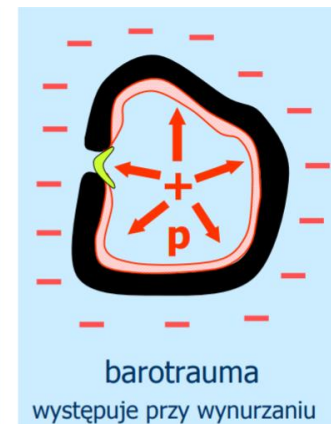
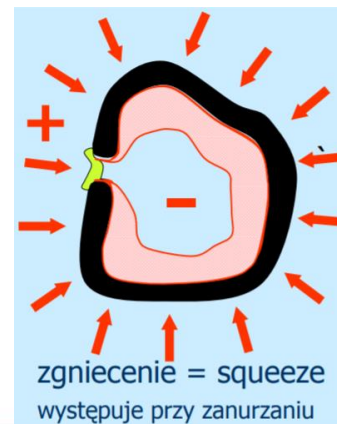
Boyle's law





Izotermy dla różnych temperatur

Ciśnienie na powierzchni wynosi 1 atm. Na każde 10 metrów głębokości ciśnienie rośnie o 1 atm. Na głębokości 10 m - 2 atm., 30 m - 4 atm., 40 m - 5 atm. Nurek na głębokości 10 metrów oddycha powietrzem pod ciśnieniem 2 bar. Ma płuca o objętości ok. 5 litrów. Jeśli nagle wypłynie na powierzchnię, nie wypuszczając powietrza z płuc – pęcherzyki płucne pękną. Taki uraz to barotrauma płuc. Najwięcej urazów występuje u początkujących nurków podczas niekontrolowanego wynurzenia z głębokości ok. 10 metrów - różnica ciśnienia jest dwukrotna.



Drugi ważny efekt prawa Boyle'a-Mariotte'a to zużycie powietrza. Na powierzchni potrzeba ok. 4 litry powietrza na oddech, na głębokości 10 metrów potrzeba ok. 8 litrów.

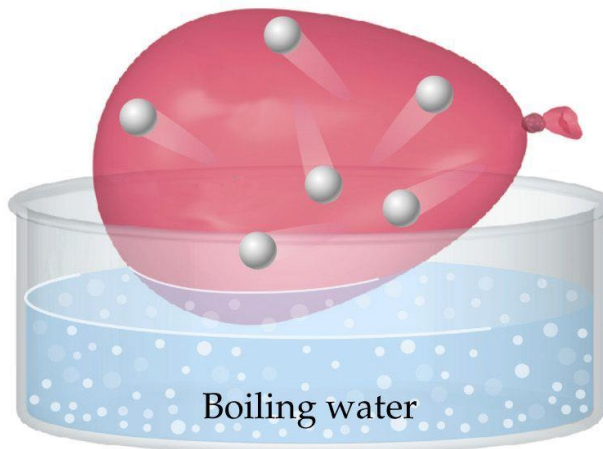
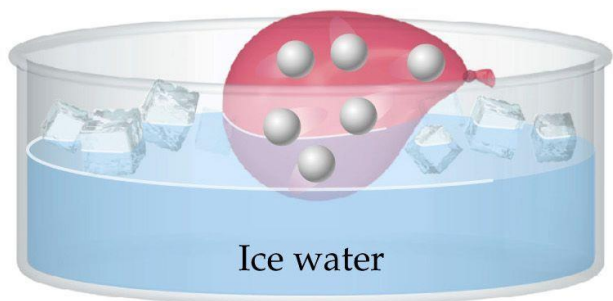


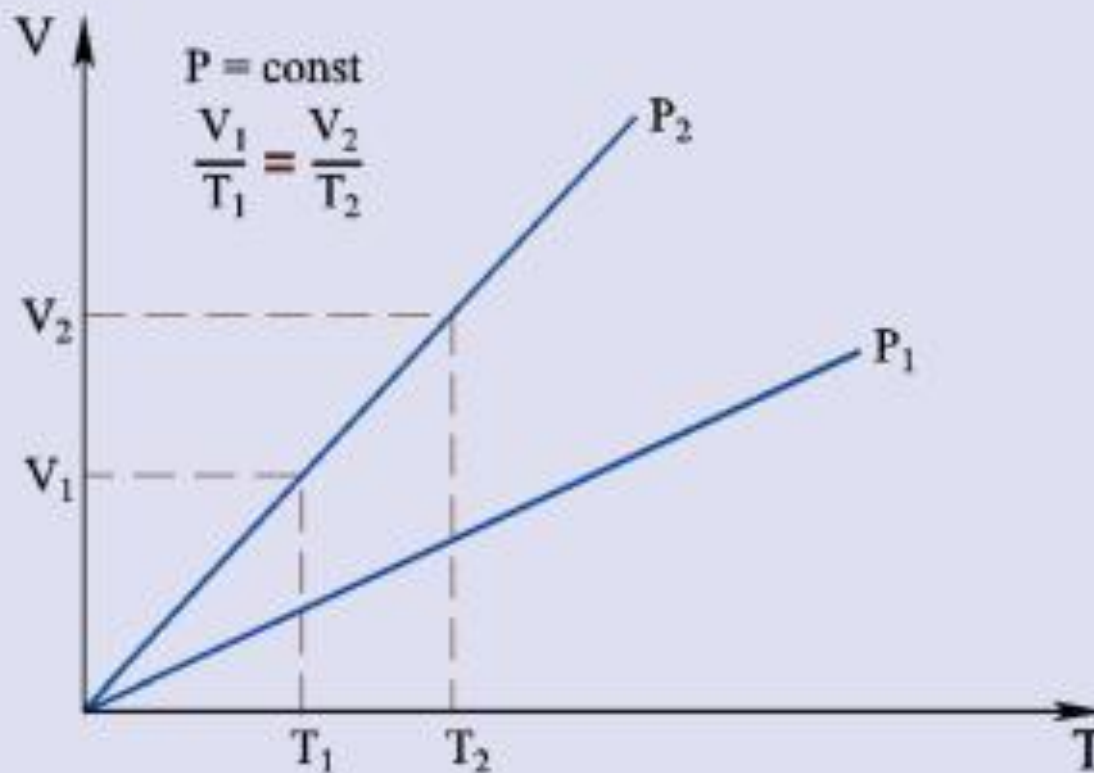
Prawo Gay – Lussac'a:

przy stałym ciśnieniu (warunki izobaryczne) objętość danej masy gazu zmienia się proporcjonalnie do temperatury.

$$\frac{V_1}{T_1} = \text{const.}$$

$$\frac{V_1}{T_1} = \frac{V_2}{T_2}$$





Izobary dla różnych ciśnień

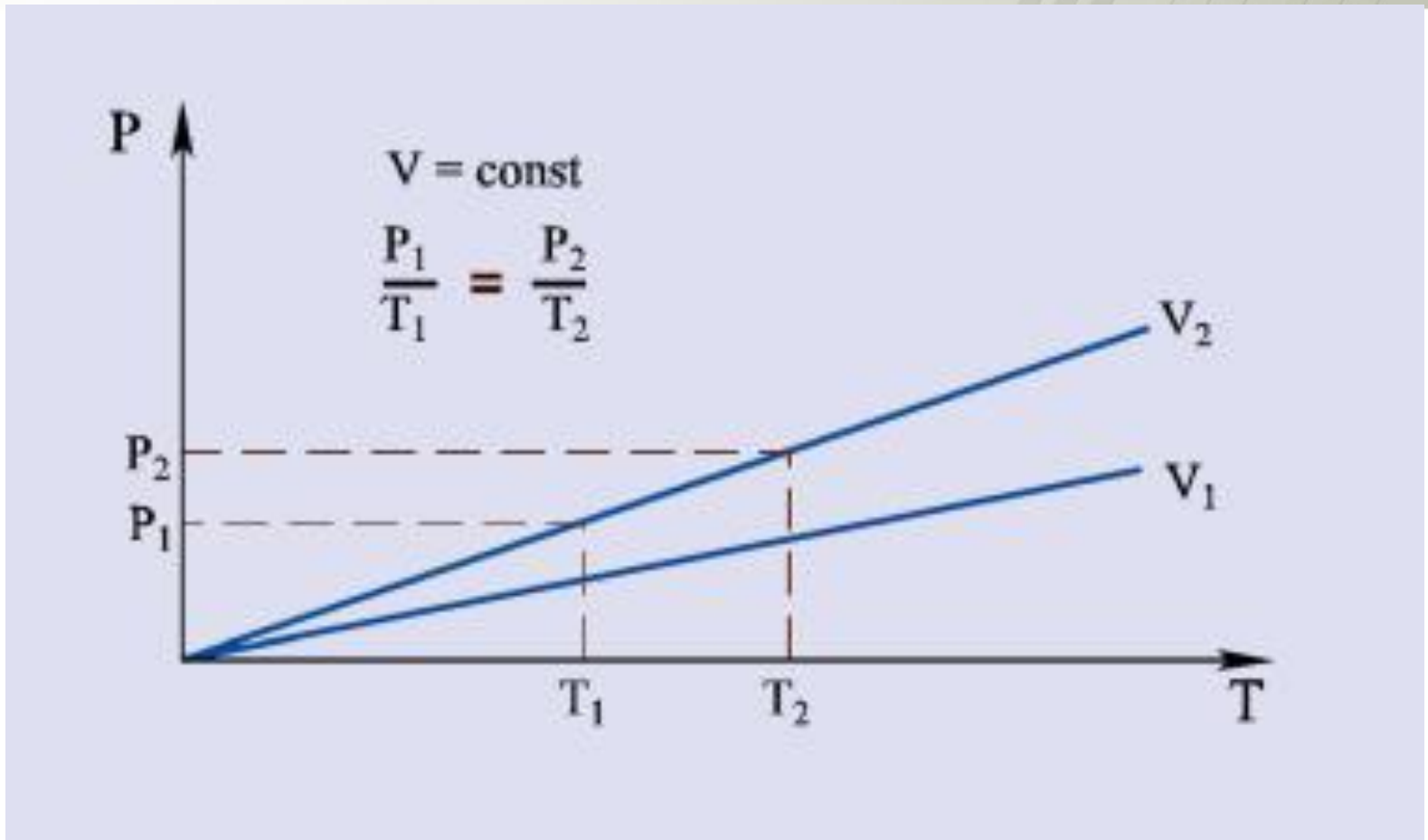
Prawo Charles'a:

przy stałej objętości (warunki izochoryczne) ciśnienie gazu zmienia się proporcjonalnie do zmian temperatury.

$$\frac{p_1}{T_1} = \text{const.}$$

$$\frac{p_1}{T_1} = \frac{p_2}{T_2}$$





Izochory dla różnych objętości gazu

Równanie stanu gazu doskonałego Clausiusa-Clapeyrona:

$$pV = nRT$$

p - ciśnienie [Pa],

V - objętość [m^3],

n - liczba moli gazu [mol],

R - uniwersalna stała gazowa 8,314 [J/mol·K],

T - temperatura bezwzględna [K].



Rudolf Clausius



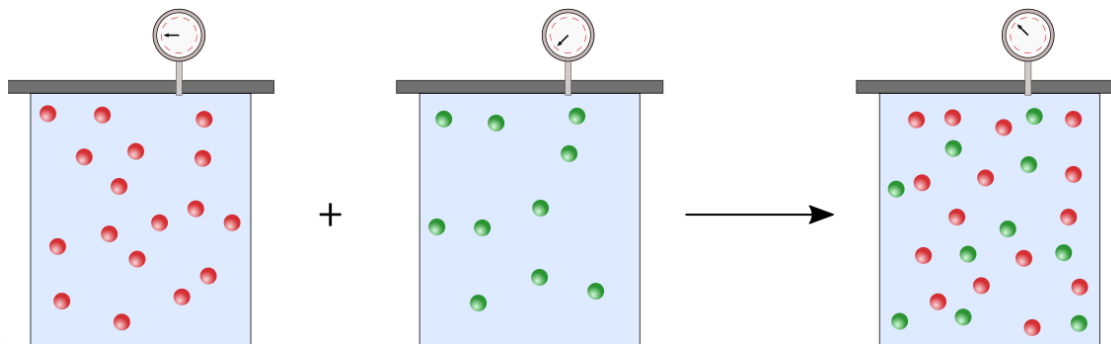
Benoît Paul
Émile Clapeyron

Prawo Daltona:

ciśnienie całkowite mieszaniny gazów jest sumą ciśnień cząstkowych składników.

$$p_{\text{total}} = p_1 + p_2 + \dots + p_i = \sum p_i$$

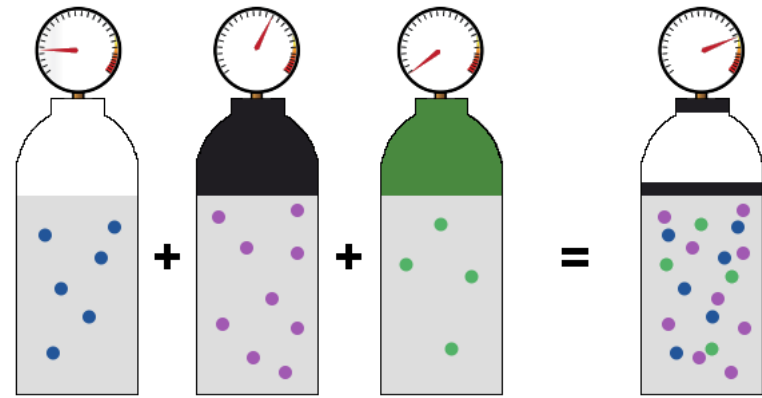
Ciśnienie parcjalne (cząstkowe) – jest to ciśnienie składnika mieszaniny gazów, jakie wywierałby na ścianki naczynia, gdyby znajdował się w nim sam.



wiedząc, że: $p_1 = \frac{n_1 RT}{V}, \dots, p_i = \frac{n_i RT}{V}$

oraz: $\frac{n_i}{\sum_i n_i} = x_i$

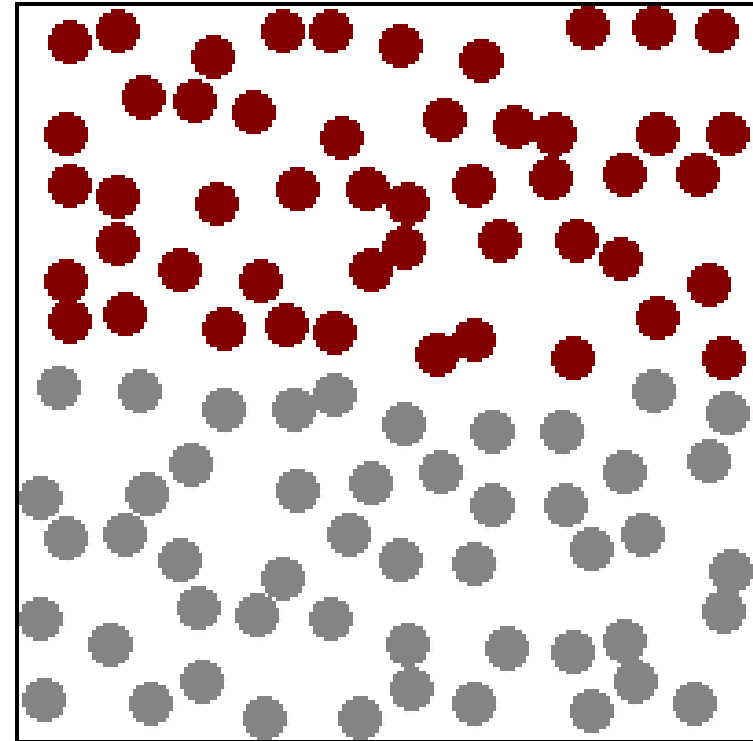
$$p_i = p \cdot x_i$$



Ciśnienie parcjalne (cząstkowe) gazu jest równe iloczynowi ciśnienia całkowitego i ułamka molowego tego składnika w mieszaninie gazu.

Dyfuzja gazów

Dyfuzja jest to spontaniczne rozprzestrzenianie się cząsteczek gazu wywołane nieustannym ruchem molekularno-kinetycznym.

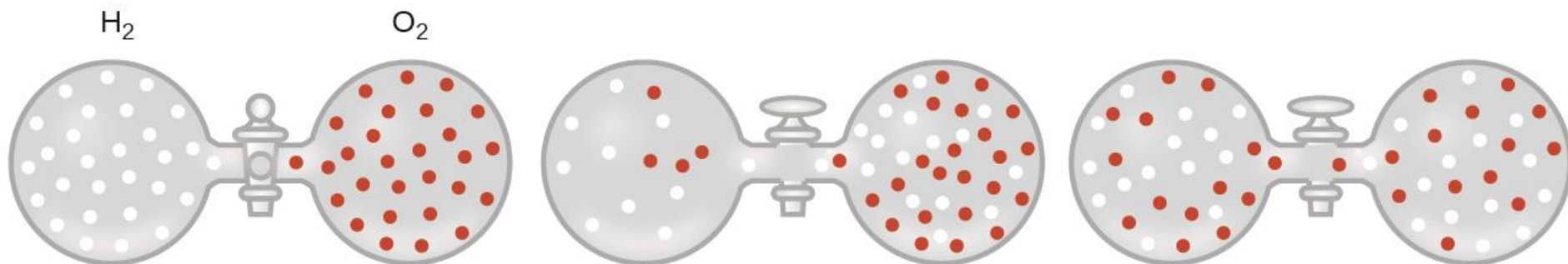


Prawo dyfuzji Bunsena-Grahama:

$$\frac{u_1}{u_2} = \frac{t_1}{t_2} = \frac{\sqrt{d_2}}{\sqrt{d_1}} = \frac{\sqrt{M_2}}{\sqrt{M_1}}$$

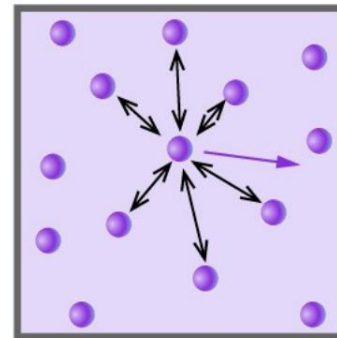
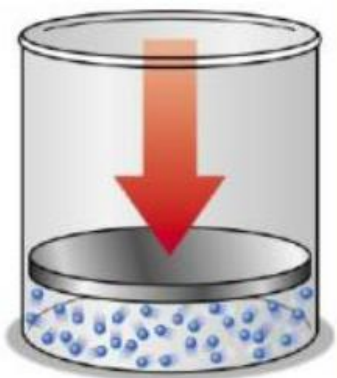
u – szybkość dyfuzji,
 t – czas przepływu,
 d – gęstość gazu,
 M – masa molowa.

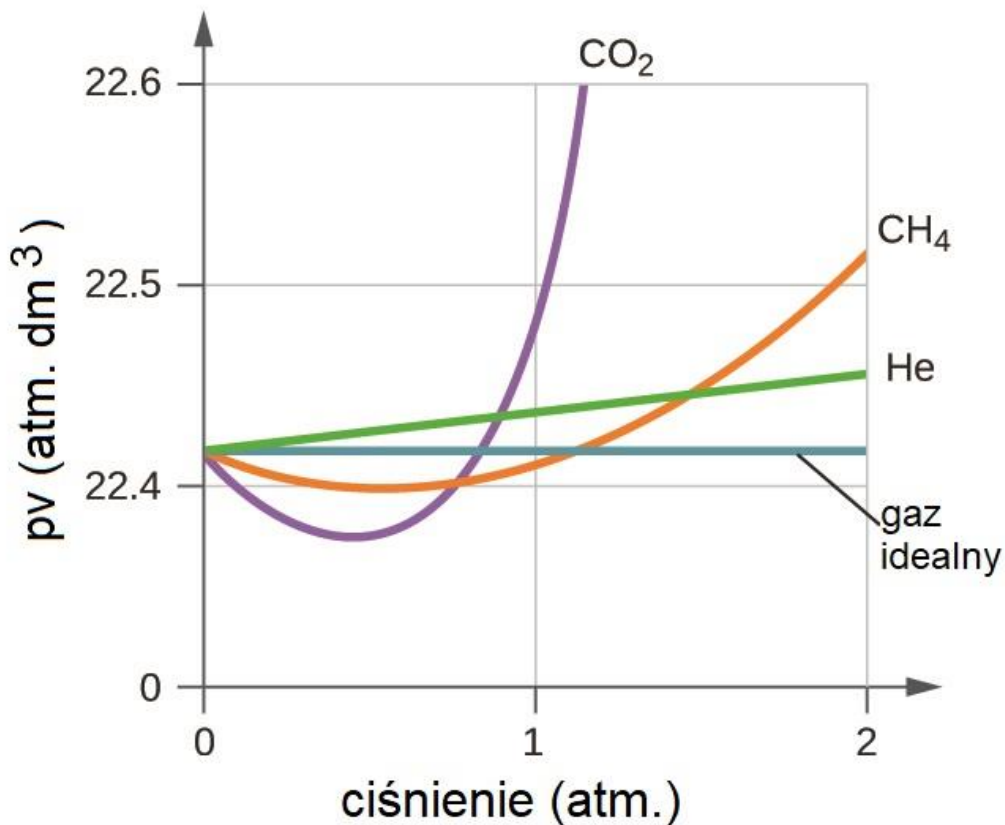
Szybkość dyfuzji gazu jest odwrotnie proporcjonalna do pierwiastka jego masy cząsteczkowej.



Gaz rzeczywisty

- cząsteczki gazu rzeczywistego posiadają objętość własną,
- występują pomiędzy nimi oddziaływania międzycząsteczkowe,
- zderzenia cząstek nie są doskonale sprężyste.





Gazy rzeczywiste w warunkach niskiego ciśnienia i wysokiej temperatury stosują się do praw gazu doskonałego.

Odchylenia od praw gazu doskonałego

Równanie stanu gazu rzeczywistego:

$$\left(p + \frac{n^2 \cdot a}{V^2} \right) \cdot (V - n \cdot b) = nRT$$



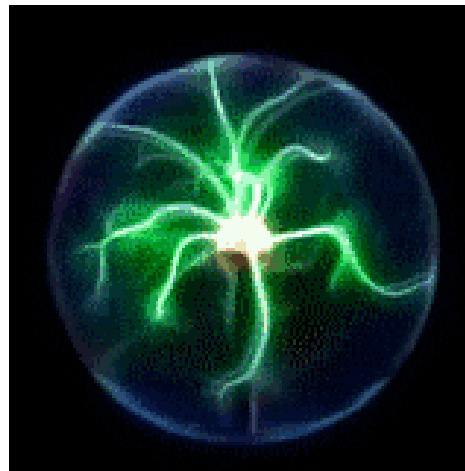
a, b - stałe charakterystyczne dla danego gazu,
 (n^2a/V) - korekta ciśnieniowa,
 (nb) - korekta objętościowa.

Gaz rzeczywisty, a gaz doskonały:

	Gaz doskonały	Gaz rzeczywisty
$pV = nRT$	spełnia zawsze	spełnia przy niskim ciśnieniu i wysokiej temperaturze
przyciąganie międzycząsteczkowe	0	występują
odpychanie międzycząsteczkowe	0	występują
objętość własna cząstek	0	występuje
zderzenia cząstek	doskonale sprężyste	niedoskonale sprężyste

Plazma

Plazma - stan typowy dla gazów zjonizowanych. Występują w niej neutralne cząsteczki, zjonizowane atomy oraz elektrony, jednak cała objętość zajmowana przez plazmę jest elektrycznie obojętna. Plazma przewodzi prąd elektryczny, a jej opór elektryczny, inaczej niż w przypadku metali, maleje ze wzrostem jej temperatury.



Ciecz

- cząsteczki mają swobodę przemieszczania się w objętości zajmowanej przez ciecz, poruszają się ruchami chaotycznymi,
- występują między nimi oddziaływania międzycząsteczkowe, które w obrębie objętości cieczy znoszą się nawzajem,

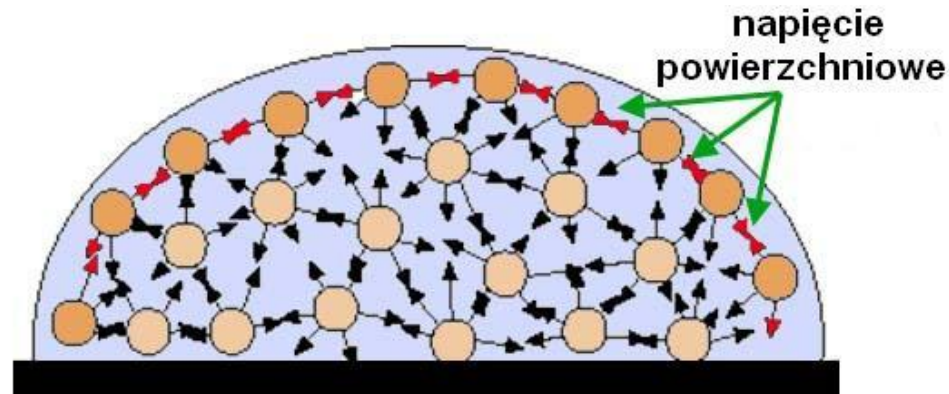
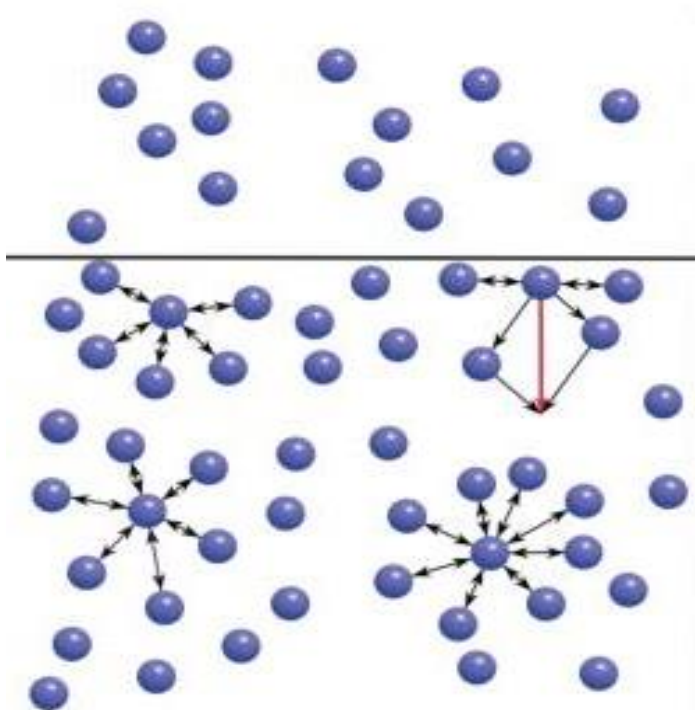


- ciecz przyjmuje kształt naczynia, w którym się znajduje,
- energia cząstek jest wyższa od energii oddziaływań międzycząsteczkowych.
- energia kinetyczna oddziaływań pomiędzy cząsteczkami cieczy jest wyższa niż pomiędzy cząsteczkami gazu.

$$E_{(\text{oddział.})} > k \cdot T$$

Właściwości cieczy

Napięcie powierzchniowe - oddziaływania między- cząsteczkowe nie znoszą się na granicy cieczy z inną fazą na skutek czego występuje zjawisko zwane napięciem powierzchniowym,



Napięcie powierzchniowe – praca potrzebna do zwiększenia powierzchni cieczy o jednostkę.

$$\sigma = \frac{W}{A} \left[\frac{\text{J}}{\text{m}^2} \right]$$

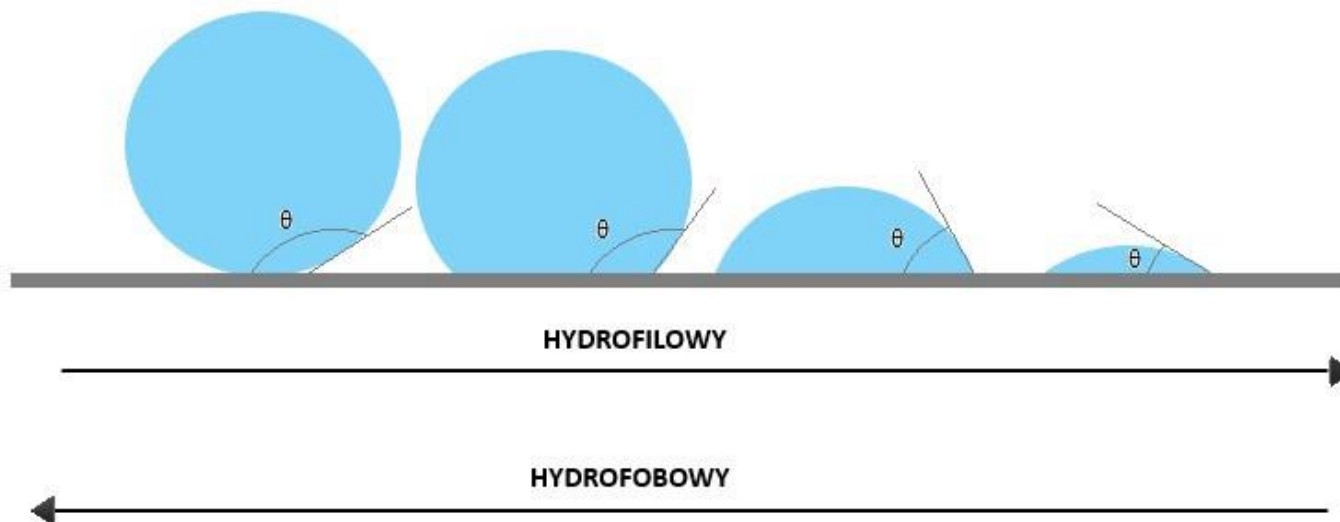


Efekt występowania napięcia powierzchniowego wody.

Kąt zwilżania Θ – miara zwilżania ciała stałego przez ciecz, kąt utworzony przez ciecz na granicy styku trzech faz.

$$\cos \theta = \frac{\gamma_{sg} - \gamma_{sc}}{\gamma_{cg}}$$

KĄT ZWILŻANIA

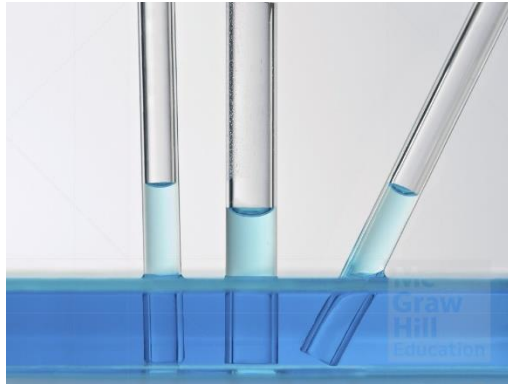
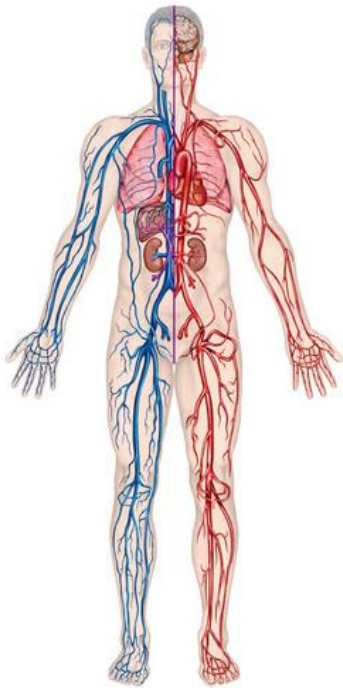


$\theta > 140^\circ$ materiał superhydrofobowy

$\theta > 90^\circ$ materiał hydrofobowy

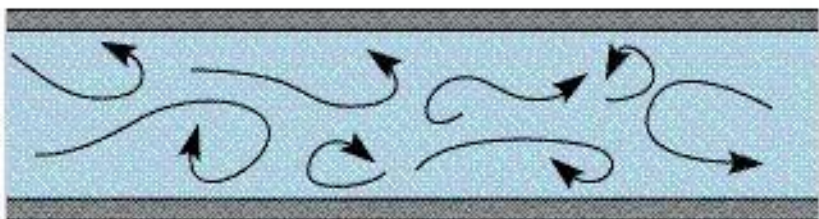
$\theta < 90^\circ$ materiał hydrofilowy

Efekt kapilarny – podnoszenie się cieczy w naczyniu włoskowatym (kapilarnym) w wyniku działania sił adhezji (przylegania) i kohezji (spójności).



Lepkość

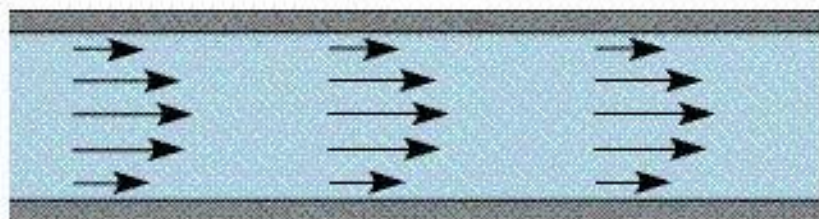
przepływ turbulentny



$Re > 50\ 000$



przepływ laminarny



$Re < 2\ 000$



$$Re = \frac{DVd}{\eta}$$

D – średnica rury,
V – średnia prędkość cieczy w rurze,
d – gęstość cieczy,
 η – lepkość dynamiczna.

Siła potrzebna do nadania gradientu prędkości pomiędzy dwoma warstwami cieczy wyraża się wzorem:

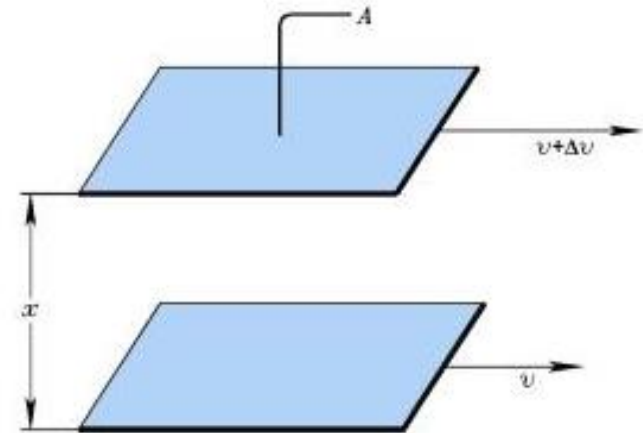
$$F = \eta A \frac{dv}{dx}$$

η - lepkość dynamiczna,

A - powierzchnia,

v - szybkość,

x - odległość pomiędzy warstwami cieczy.



Lepkość – miara oporu wewnętrznego cieczy przeciw płynięciu.

$$\eta = [\text{Pa} \cdot \text{s}] = [\text{P}] (\text{puaz})$$

Lepkość maleje ze wzrostem
temperatury zgodnie z równaniem
Arheniusa:

$$\eta = Ae^{\frac{E_A}{RT}}$$

A - stała, charakterystyczna dla cieczy,

E_A - energia aktywacji przepływu,

R - stała gazowa,

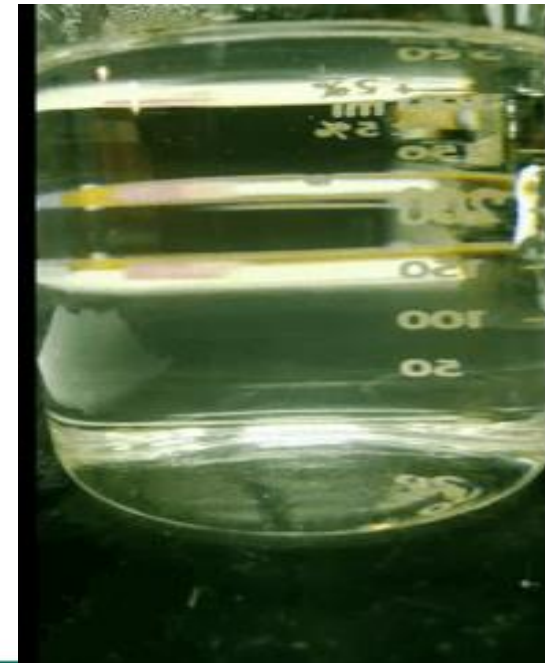
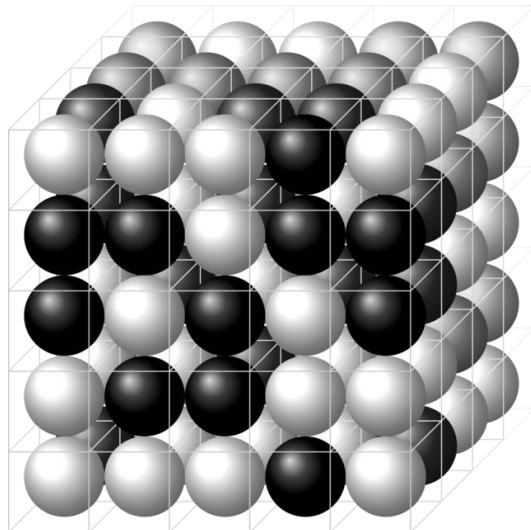
T - temperatura bezwzględna.



Ciecz	Współczynnik lepkości [cP=10 ⁻² P] (war. standardowe)
aceton	0.306
benzen	0.604
etanol	1.074
glikol etylenowy	16.01
gliceryna (20°C)	1200
rtęć	1.526
olej silnikowy SAE 10 (20°C)	65
olej silnikowy SAE 40 (20°C)	319
ciekły azot (77K = -196°C)	0.158
oliwa z oliwek	81
pak (smoła)	2.3×10 ¹¹
woda (20°C)	0.894

Ciała stałe

- atomy, bądź cząsteczki ciała stałego są ściśle upakowane w przestrzeni,
- odległości między cząsteczkami są stałe i ściśle określone,
- przy zastosowaniu odpowiedniej siły ułożenie cząstek w sieci krystalicznej może ulec trwałej deformacji,

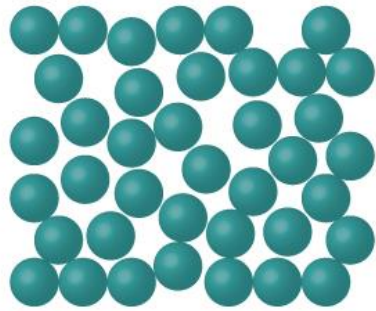


Ciała stałe

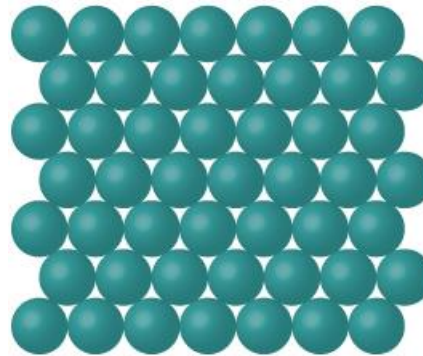


- cząsteczki ciała stałego drgają i rotują wokół położenia równowagi w sieci krystalicznej.
- energia oddziaływań między cząsteczkami jest wyższa niż energia cząstek.

Ciała stałe



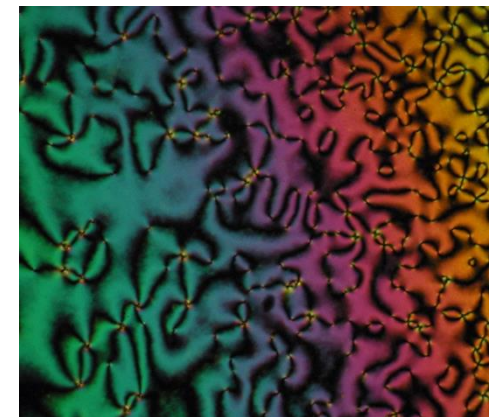
amorficzne



krystaliczne

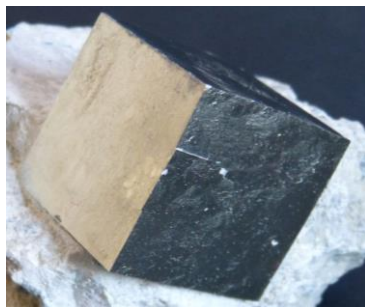
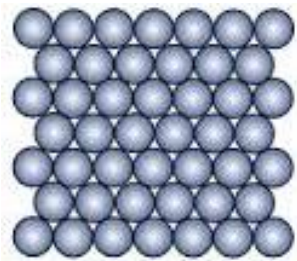


ciekłe kryształy

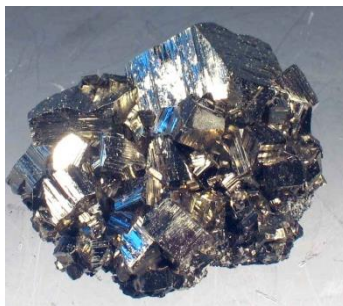
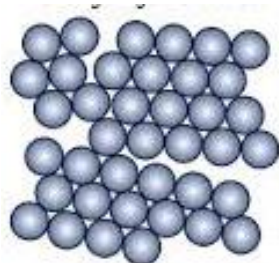


Kryształ – ciało stałe, w którym cząsteczki, atomy, bądź jony są ułożone w regularnym porządku we wszystkich trzech wymiarach.

monokryształy

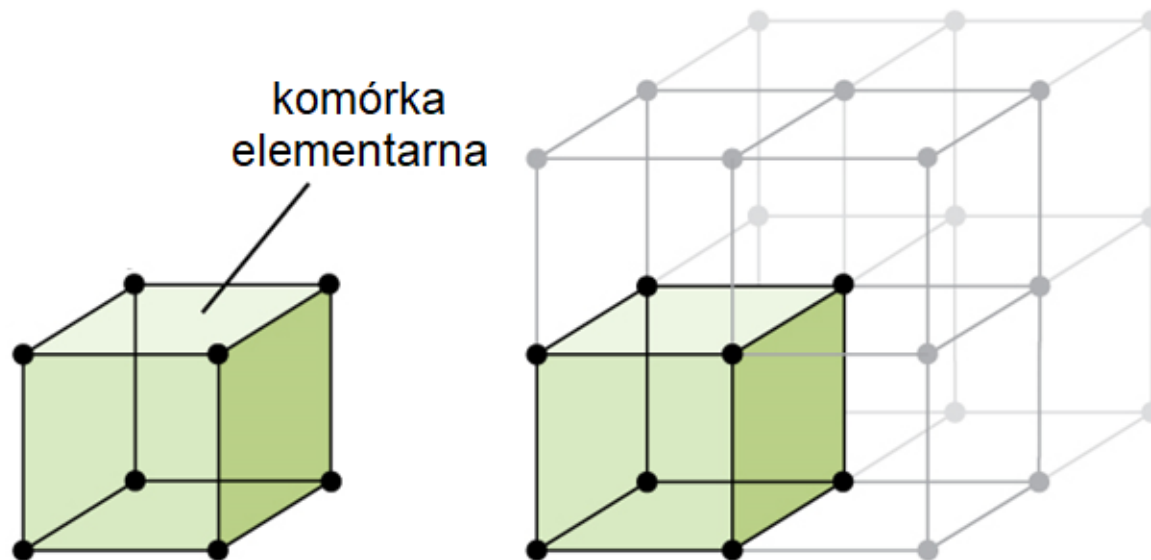


polikryształy



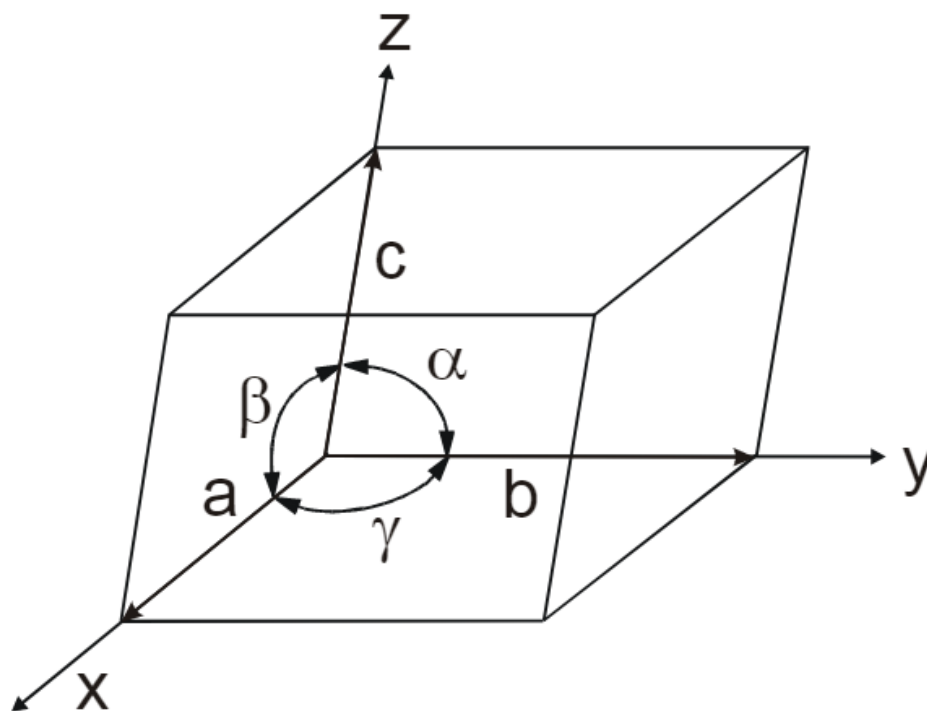
Struktura kryształu

Komórka elementarna - najmniejsza, powtarzalna część struktury kryształu, zawierająca wszystkie rodzaje cząsteczek, jonów i atomów, które tworzą określoną sieć krystaliczną. Komórka elementarna powtarza się we wszystkich trzech kierunkach i odwzorowuje strukturę całego kryształu.



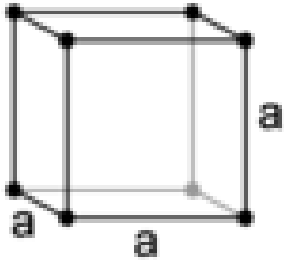
Struktura kryształu

Komórka elementarna jest charakteryzowana przez parametry sieci: odległości międzycząsteczkowe i kąty pomiędzy nimi.

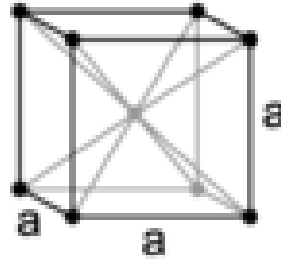


Typy komórek elementarnych

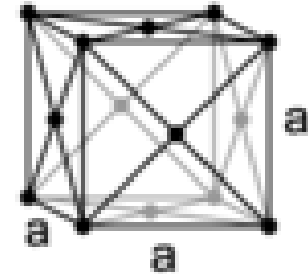
układ regularny



prosty



przestrzennie
centrowany



ściennie
centrowany

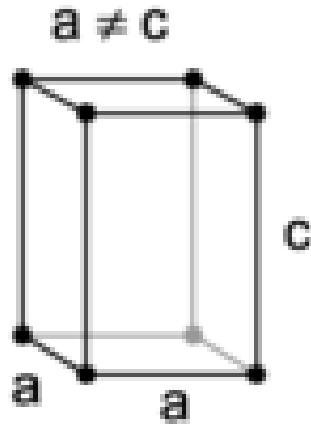


piryt FeS

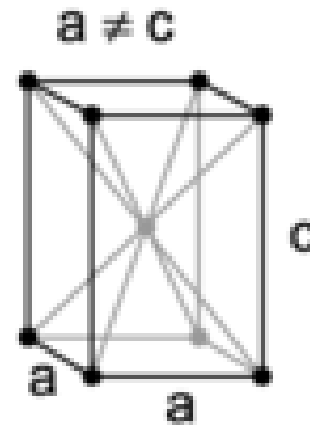


sól kuchenna NaCl

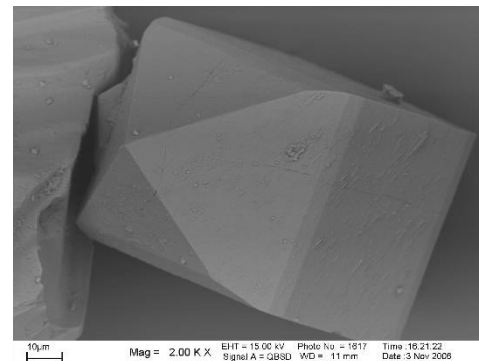
układ tetragonalny



prosty

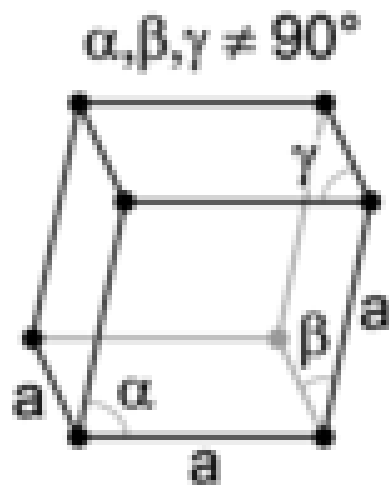


przestrzennie centrowany



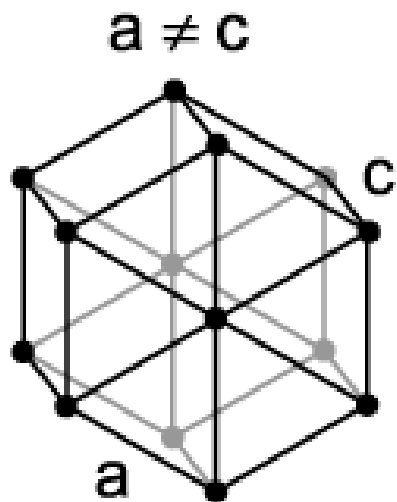
cyrkon $ZrSiO_4$

układ trygonalny



kwarc
 SiO_2

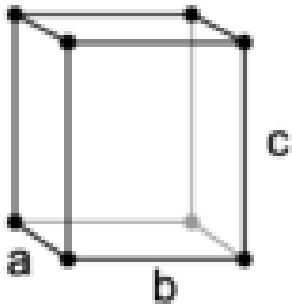
układ heksagonalny



vanadyt
 $\text{Pb}_5(\text{VO}_4)_3\text{Cl}$

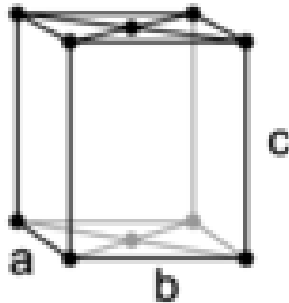
układ rombowy

$a \neq b \neq c$



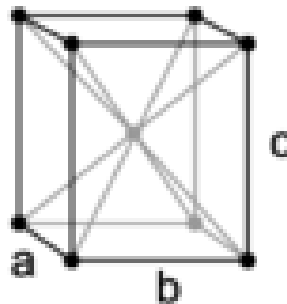
prosty

$a \neq b \neq c$



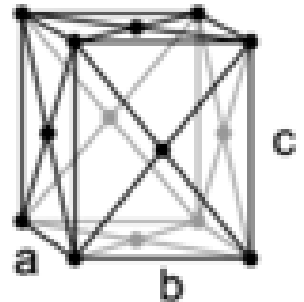
dwuściennie
centrowany

$a \neq b \neq c$



przestrzennie
centrowany

$a \neq b \neq c$

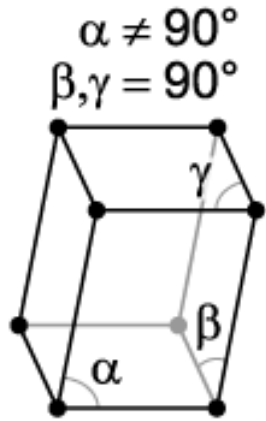


ściennie
centrowany

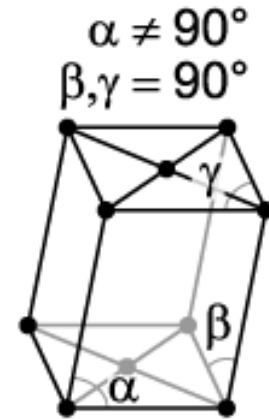


aragonit CaCO_3

układ jednoskośny



prosty



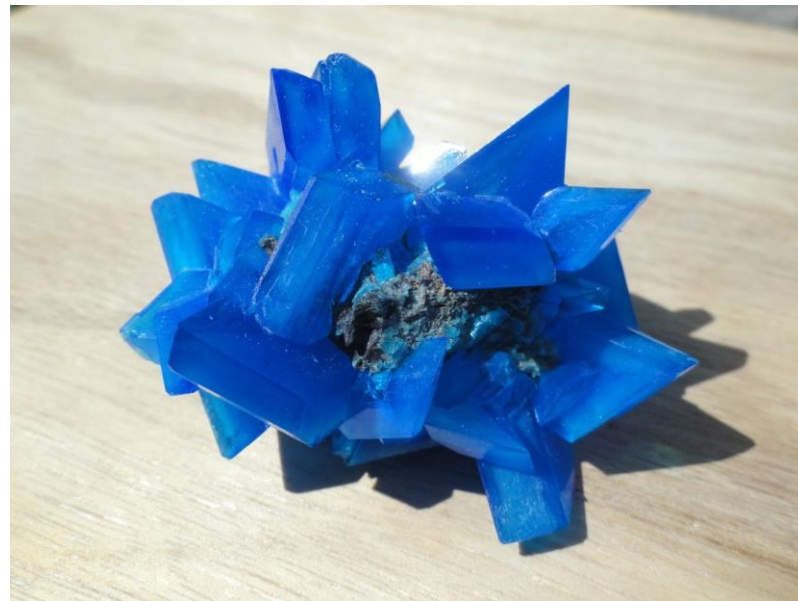
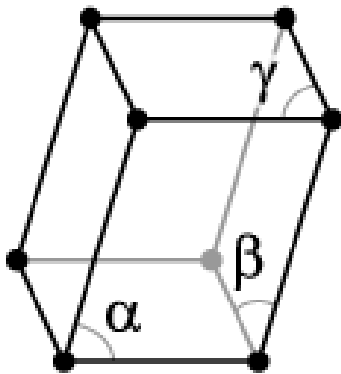
ściennie centrowany



gips $\text{CaSO}_4 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$

układ trójskośny

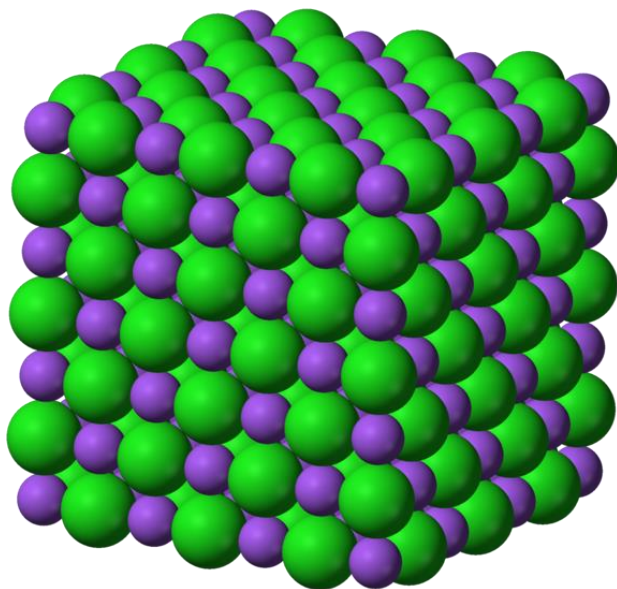
$\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$



chalkandyt
 $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$

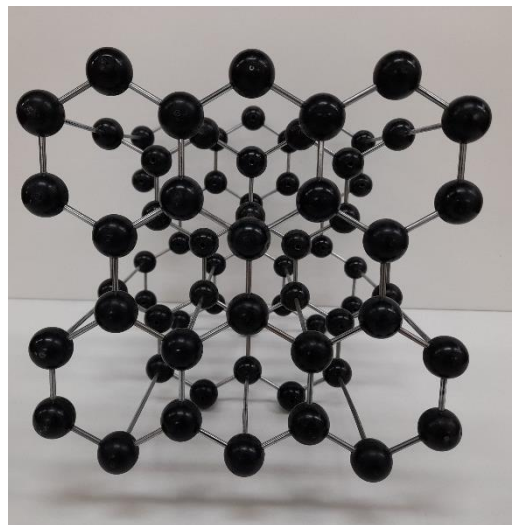
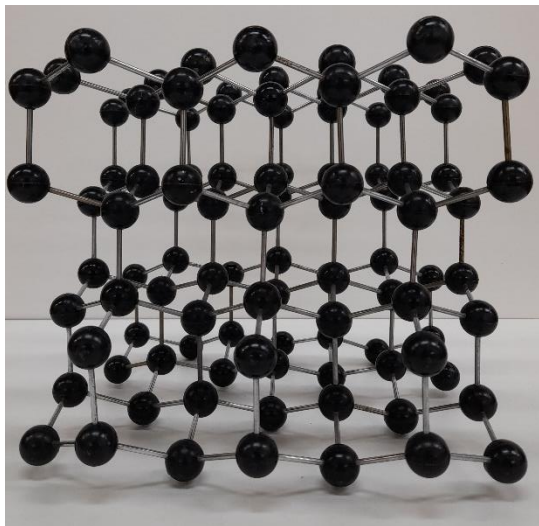
Rodzaje kryształów

Kryształy jonowe – węzły sieci są obsadzone przez jony.



NaCl – sól kuchenna

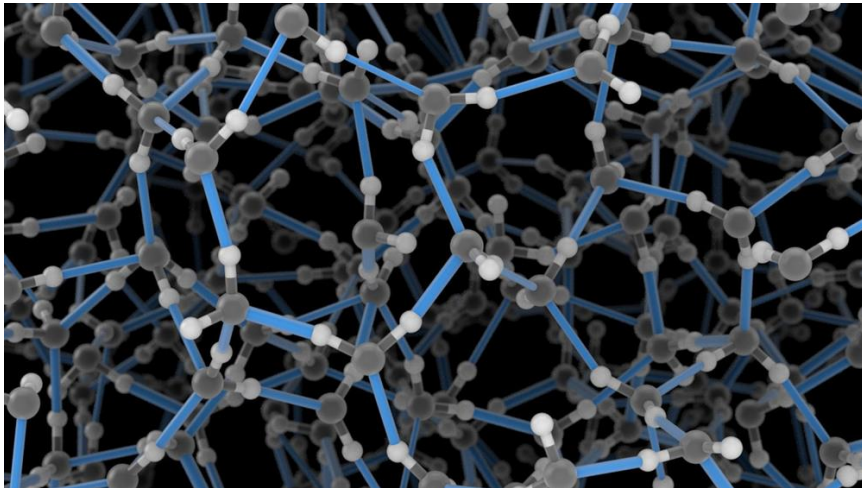
Kryształy kowalენტne – węzły sieci są zajęte przez obojętne atomy.



C - diament

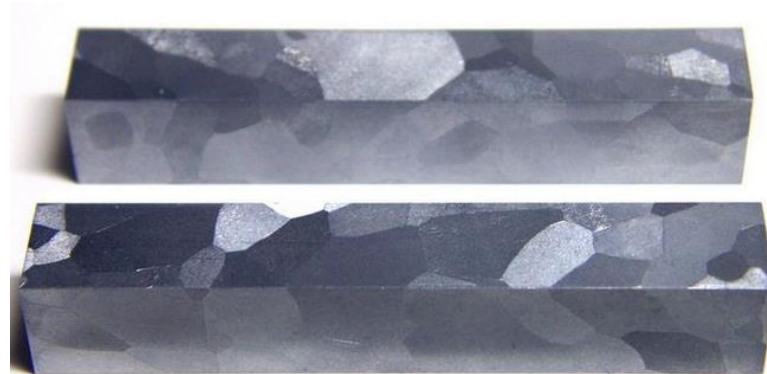
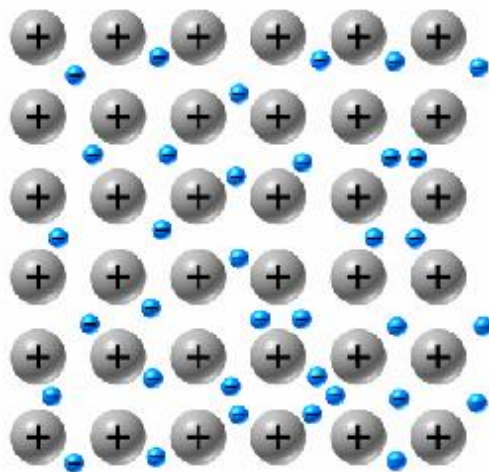


Kryształy molekularne – węzły sieci są obsadzone przez cząsteczki powiązane:



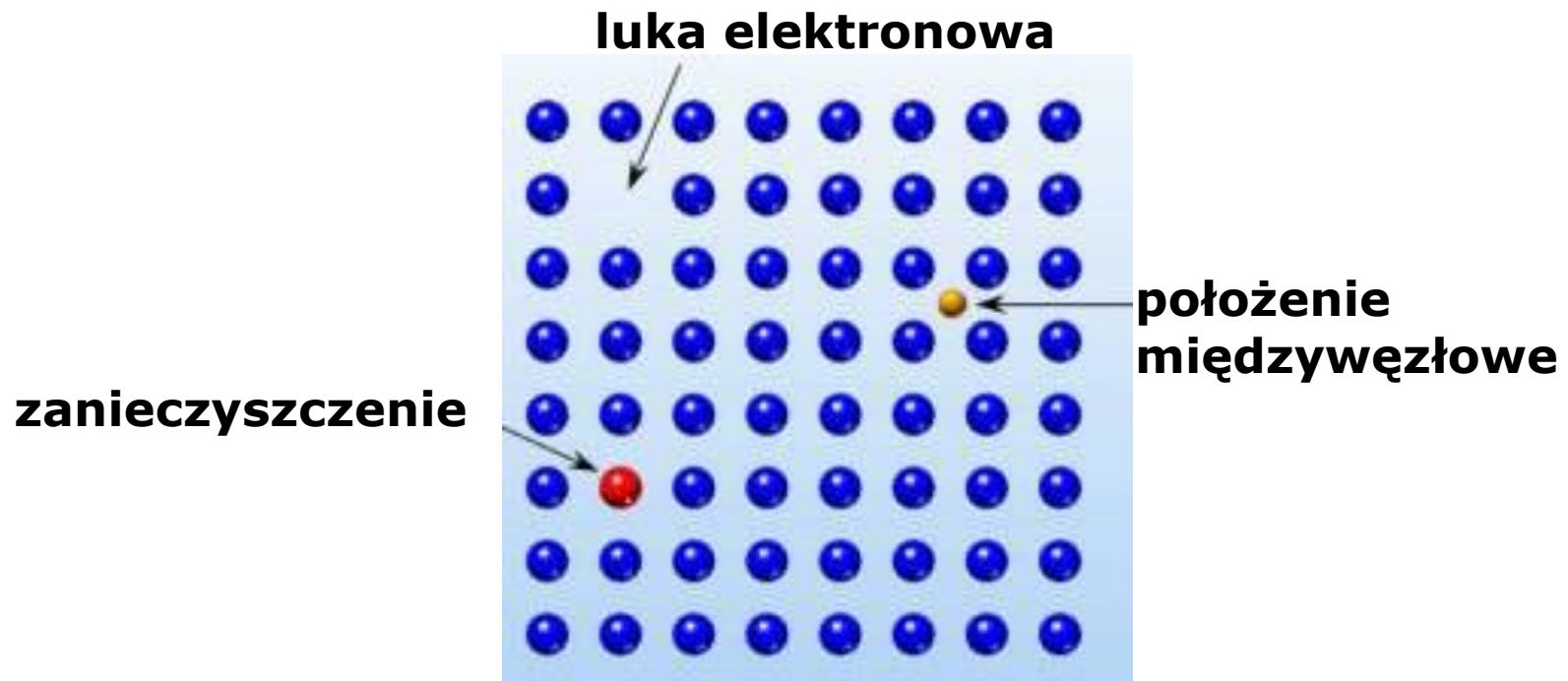
mostkami wodorowymi, np. lód.

Kryształy metaliczne – węzły sieci są obsadzone dodatnio naładowanymi zrębami atomowymi, pomiędzy którymi poruszają się wolne elektrony, tzw. „gaz elektronowy”. Po przyłożeniu ładunku zewnętrznego ruch elektronów staje się uporządkowany i mamy do czynienia z przepływem prądu elektrycznego.

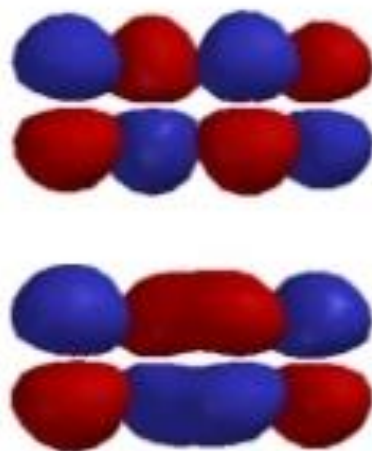
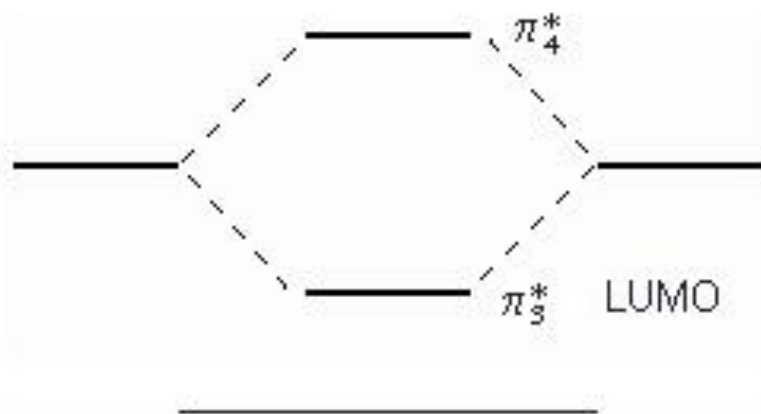


Defekty kryształów

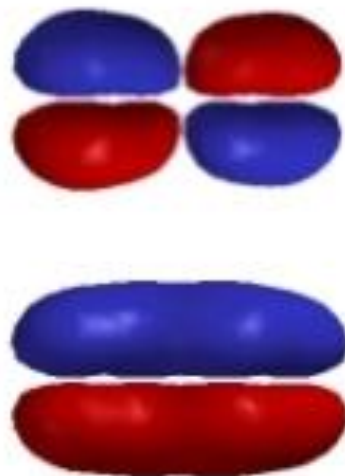
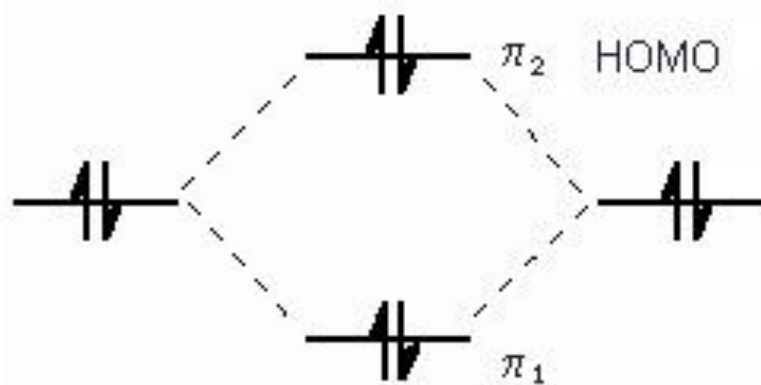
Defekty punktowe – defekty sieci krystalicznej takie, jak: luki elektronowe, położenia międzywęzłowe zanieczyszczenia struktury.



HOMO, LUMO



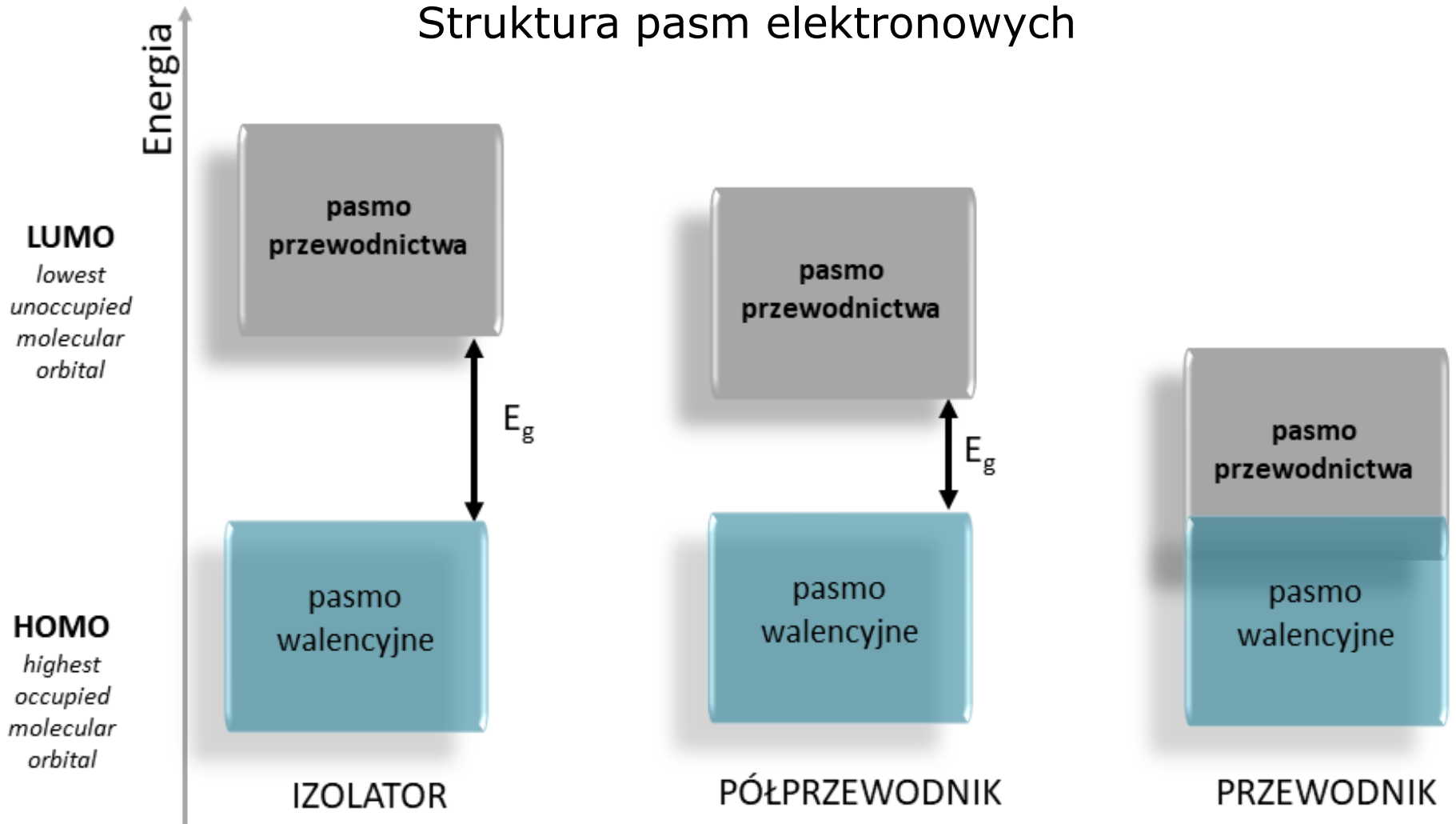
Lowest
Unoccupied
Molecular
Orbital



Highest
Occupied
Molecular
Orbital

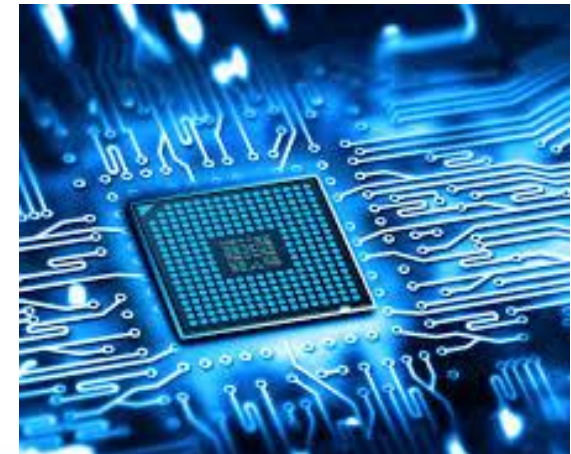
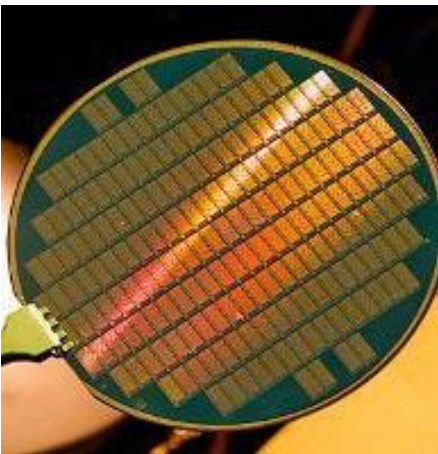
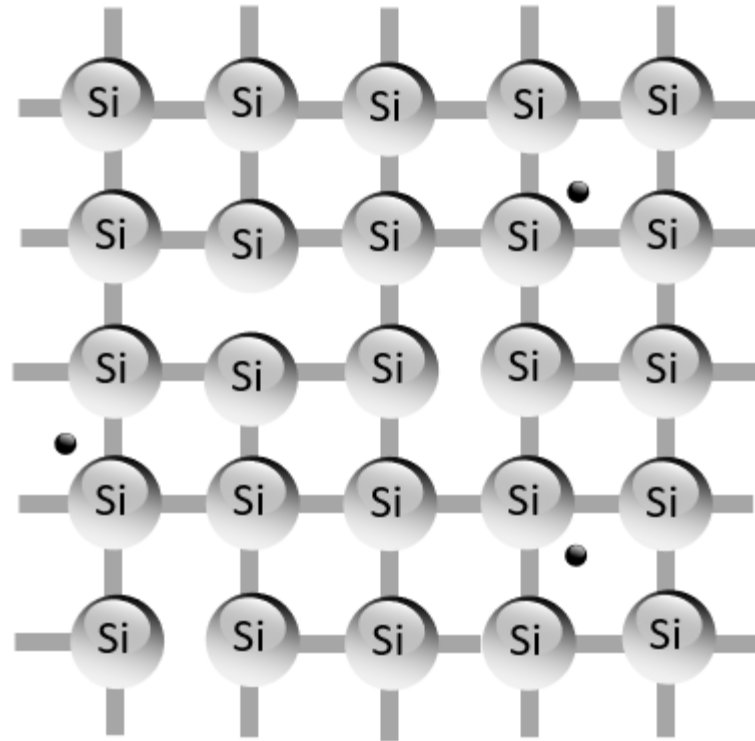
Półprzewodniki

Struktura pasm elektronowych



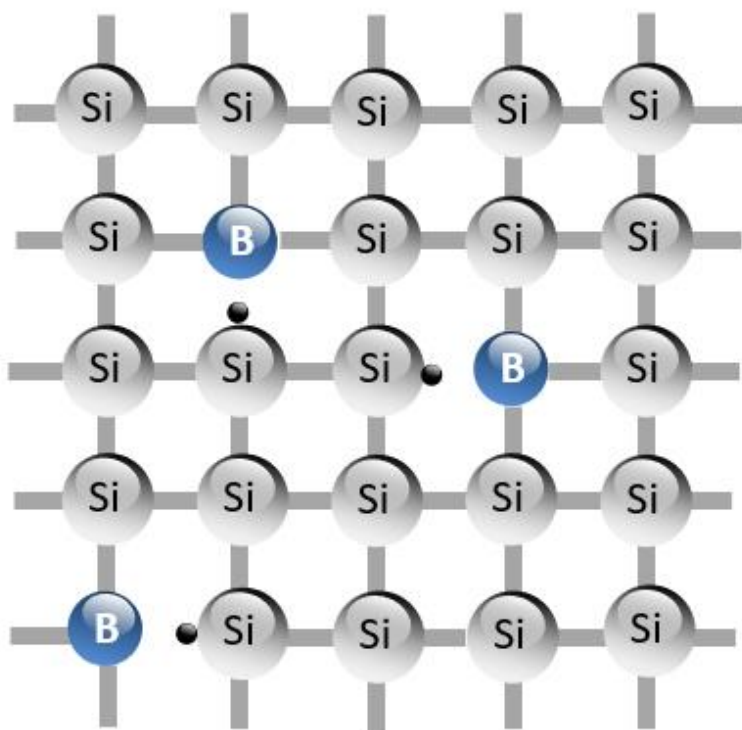
Rodzaje półprzewodników

Półprzewodniki samoistne

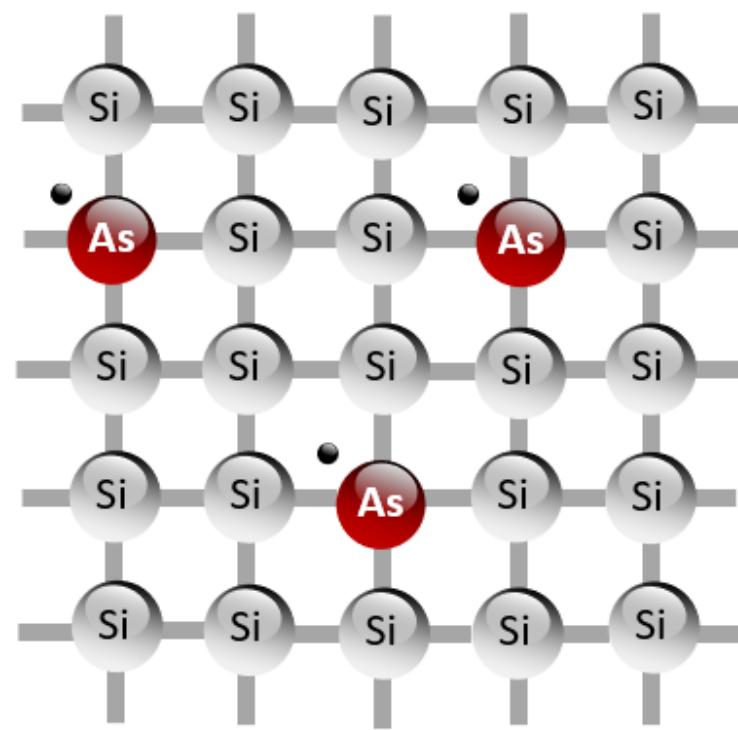


Półprzewodniki domieszkowane

poziom domieszkowania ok. 1 atom/ 10^5 atomów Si



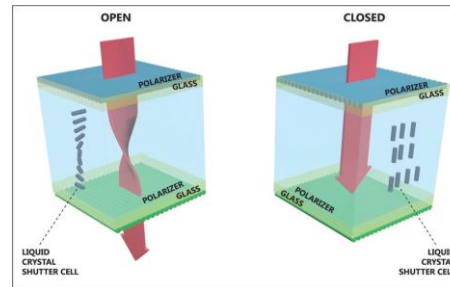
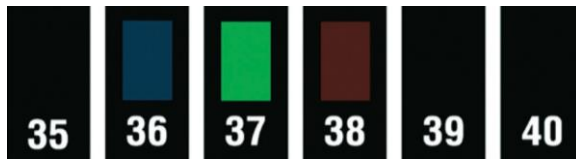
półprzewodnik typu p



półprzewodnik typu n

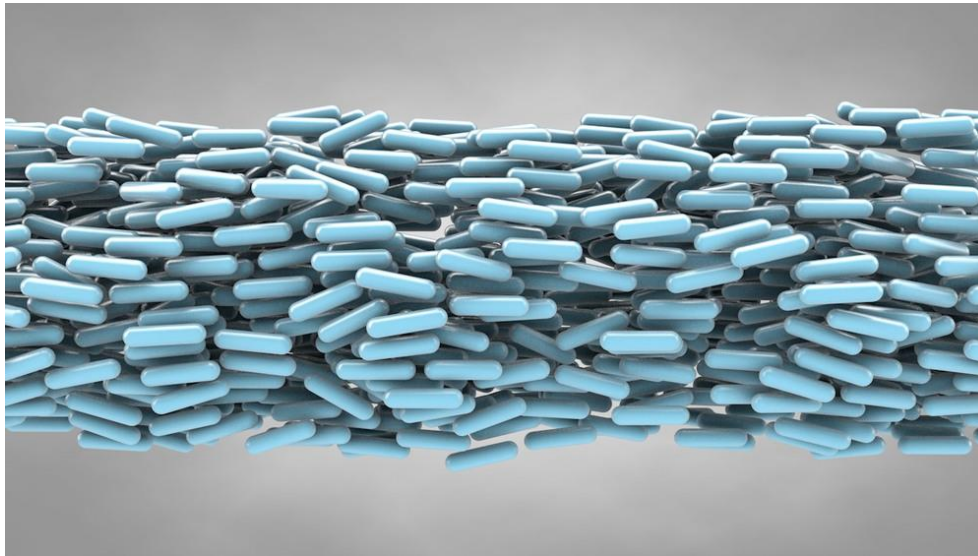
Ciekłe kryształy

Ciekłe kryształy – substancje wykazujące właściwości pośrednie pomiędzy cieciami i ciałami stałymi. Na przykład mogą być płynne, jak ciecz, ale posiadać dwuwymiarowe uporządkowanie cząsteczek, jak w ciele krystalicznym.



Rodzaje ciekłych kryształów

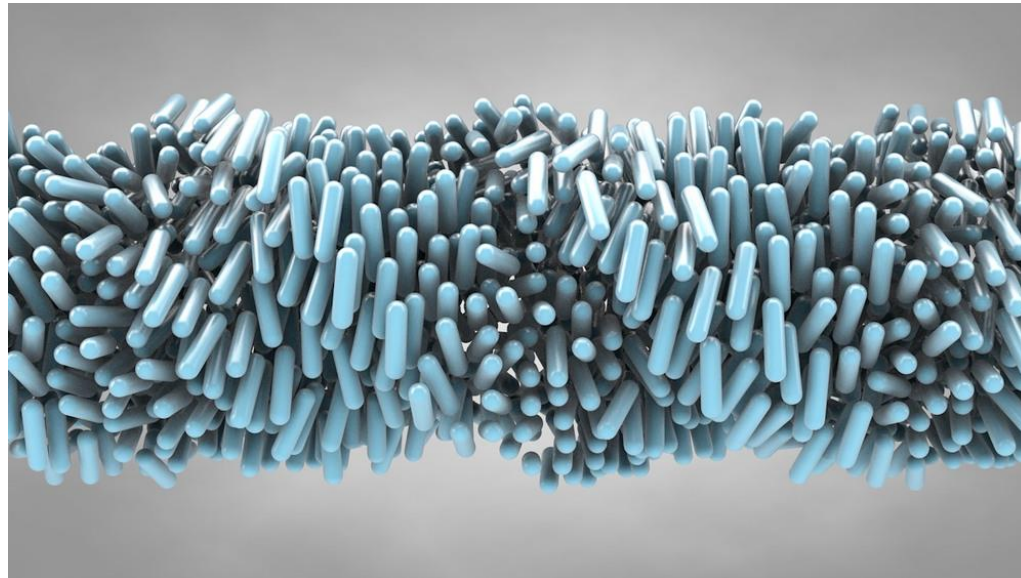
Faza nematyczna - cząsteczki są równoległe względem siebie lecz nie są zorganizowane w płaszczyzny.



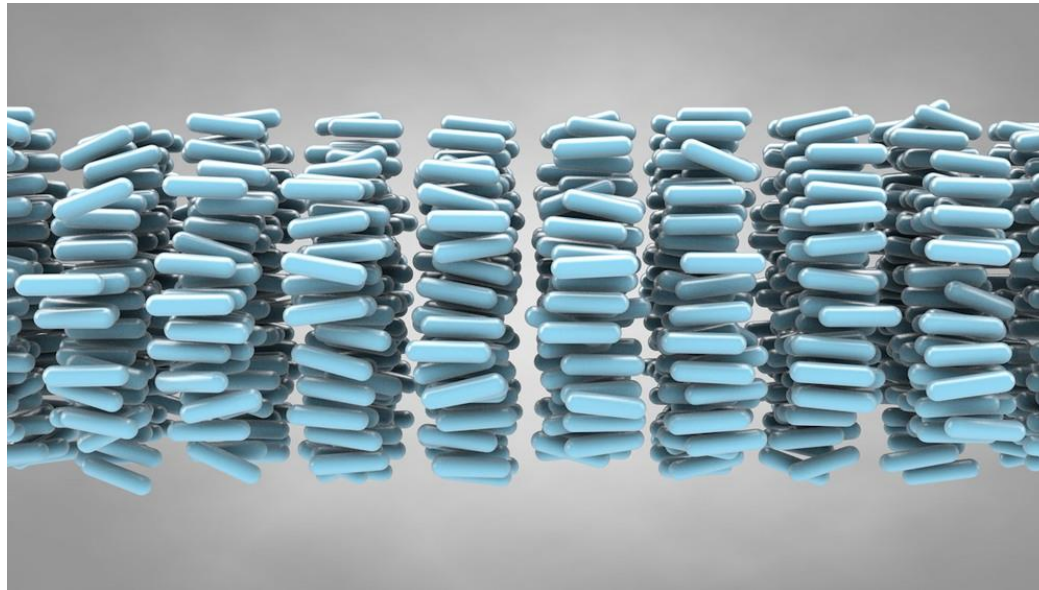


AGH

Faza chiralna - (cholesteryczna) cząsteczki w poszczególnych płaszczyznach są obrócone wokół osi prostopadłych do ich środków i tworzą spiralę.



Faza smektyczna – cząsteczki w poszczególnych warstwach są ułożone równolegle.

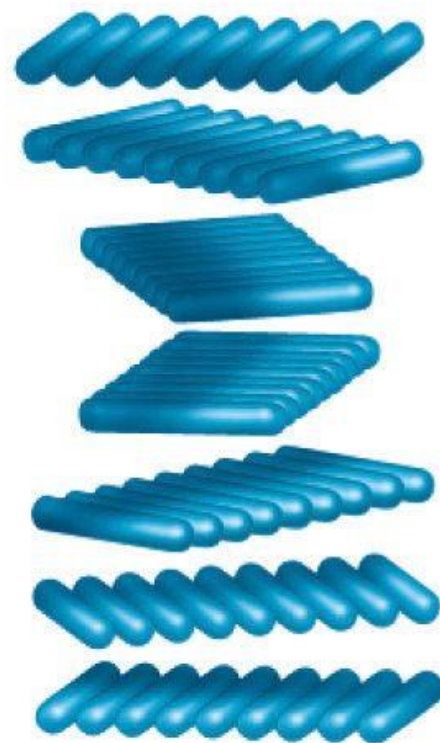




faza nematyczna



faza smektyczna



faza chiralna

Reguła faz Gibbs'a

Każdy układ chemiczny określony jest przez liczbę faz β oraz liczbę składników niezbędnych do zbudowania tego układu α . Ilość faz oraz składników jaka może występować w danym układzie jest zależna od temperatury, ciśnienia.

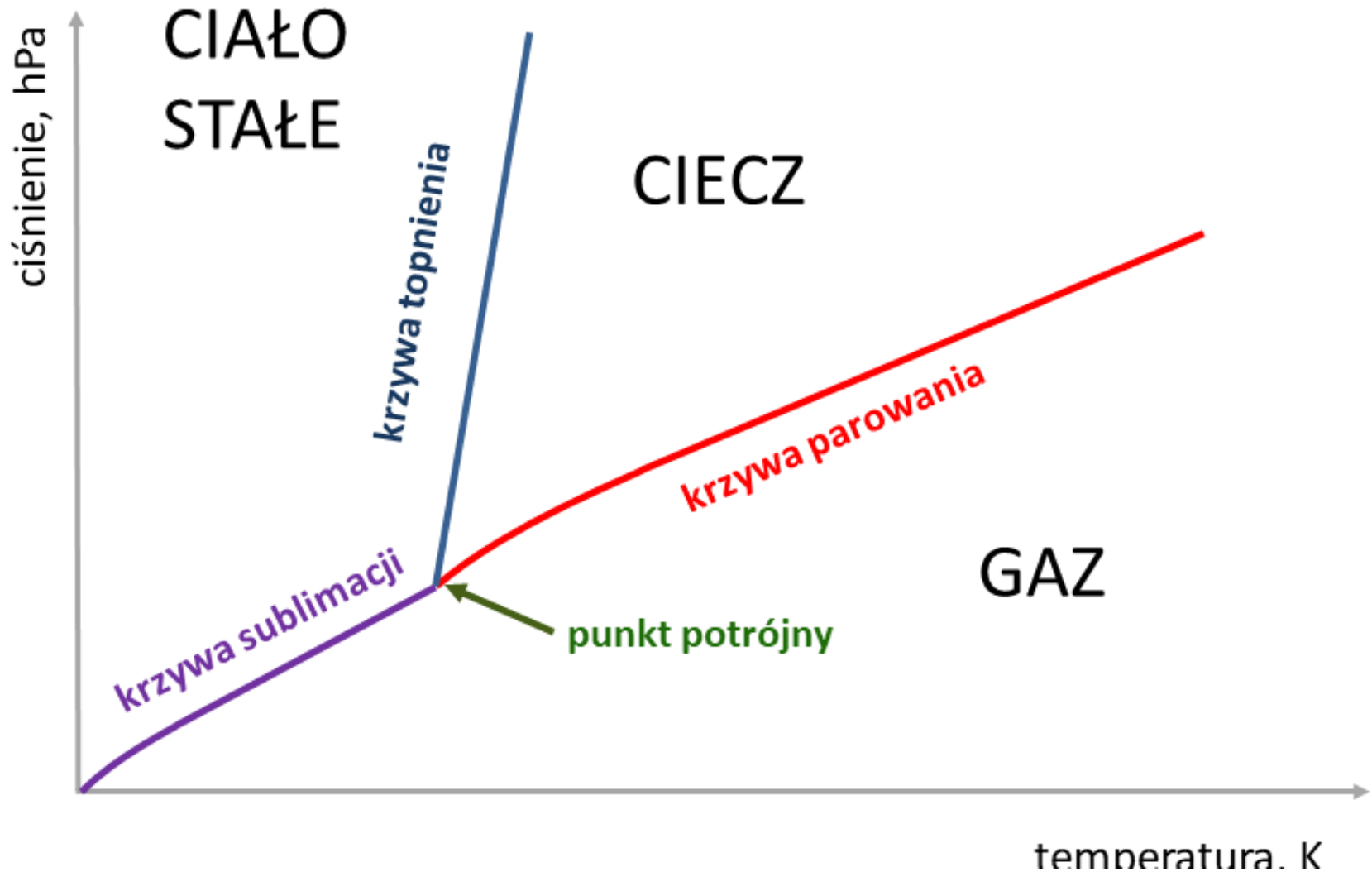
$$S = \alpha + 2 - \beta$$

s - liczba stopni swobody (liczba parametrów ekstensywnych, które można zmienić nie zmieniając ilości faz w układzie),

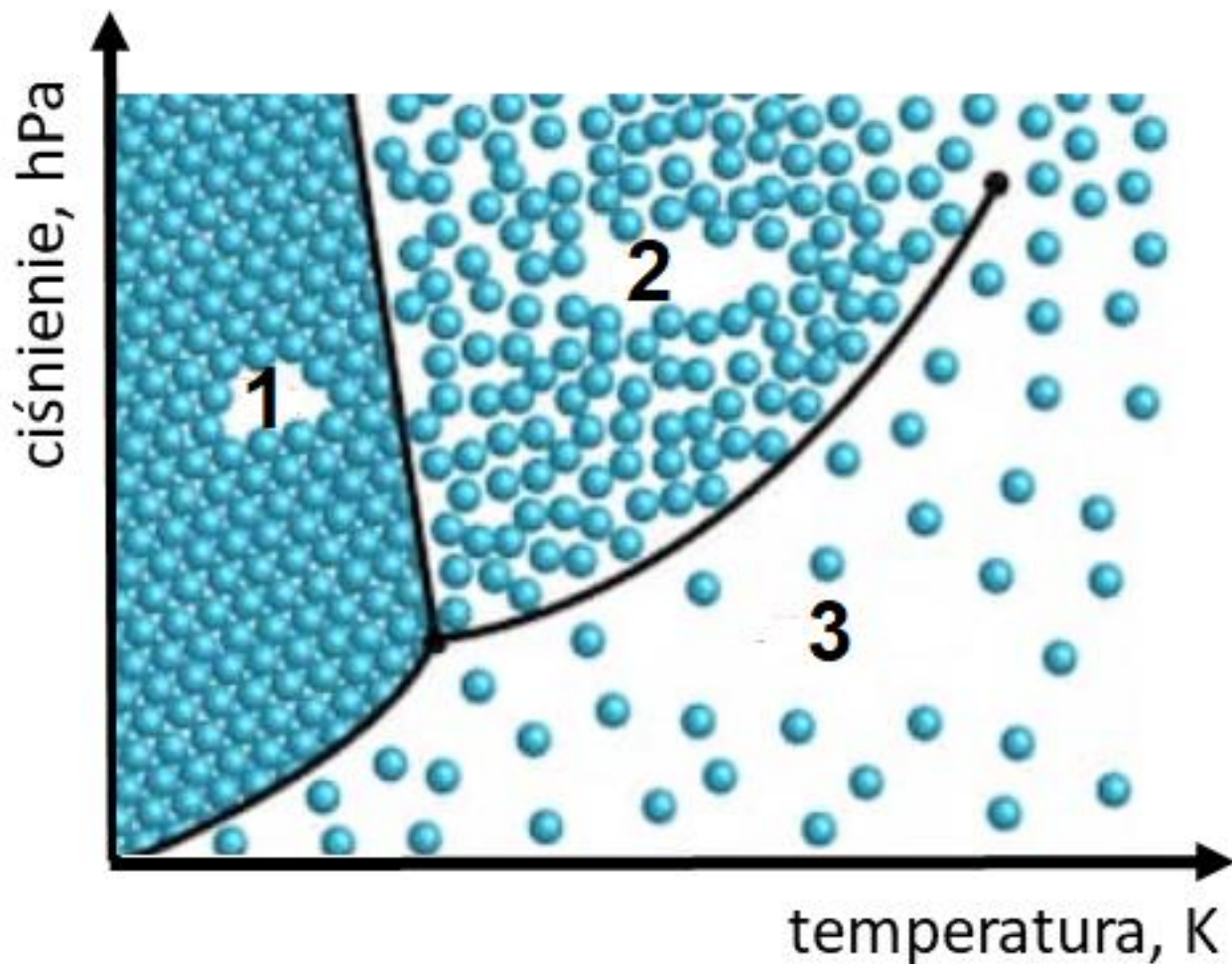
α - liczba składników niezależnych,

β - ilość faz.

Układy jednoskładnikowe



Układy jednoskładnikowe



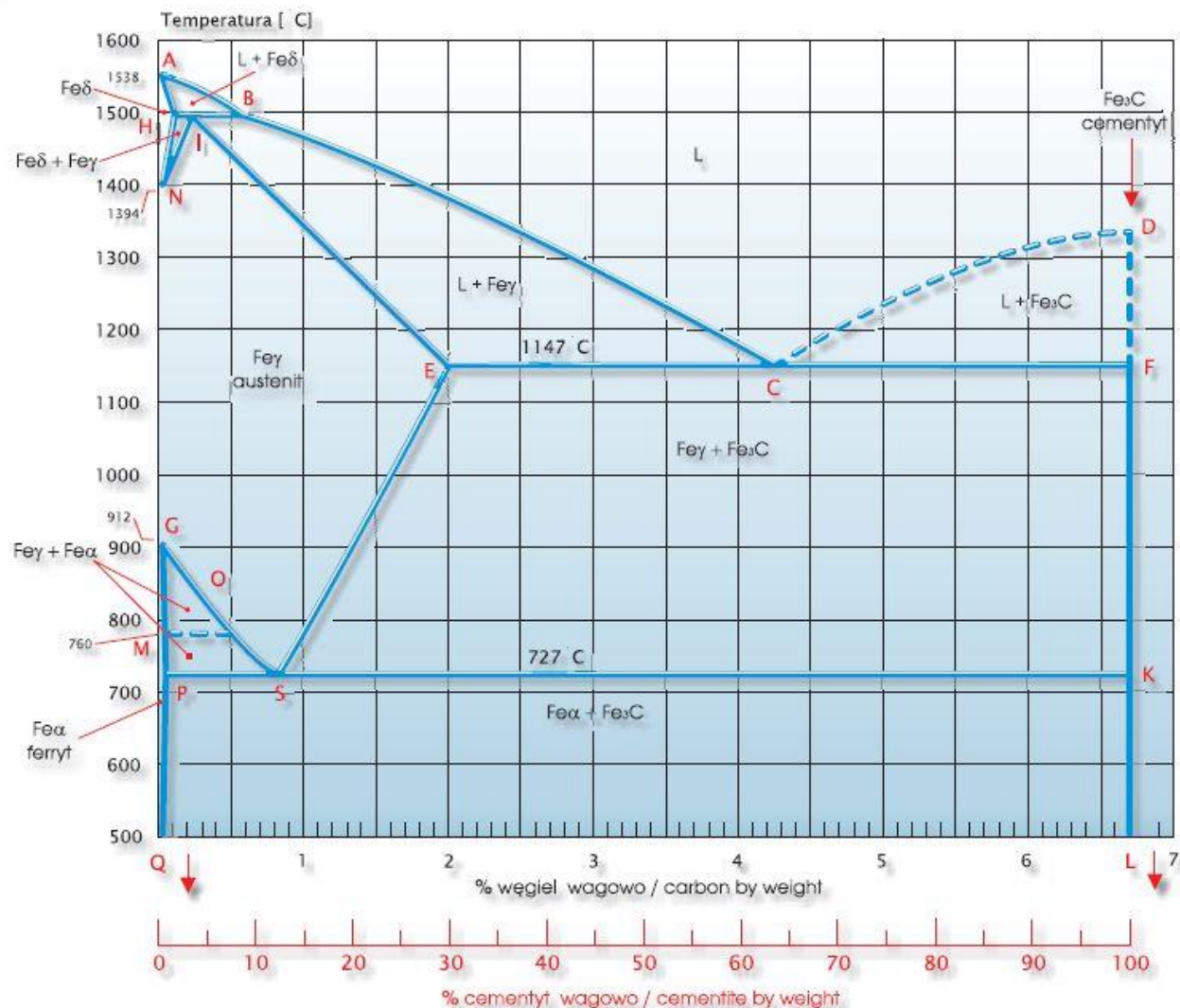
- 1 – ciało stałe, lód
- 2 – ciecz, woda
- 3 – gaz, para



AGH

Układy dwuskładnikowe

UKŁAD ŻELAZO-CEMENTYT / $Fe - Fe_3C$ phase diagram



Dziękuję za uwagę