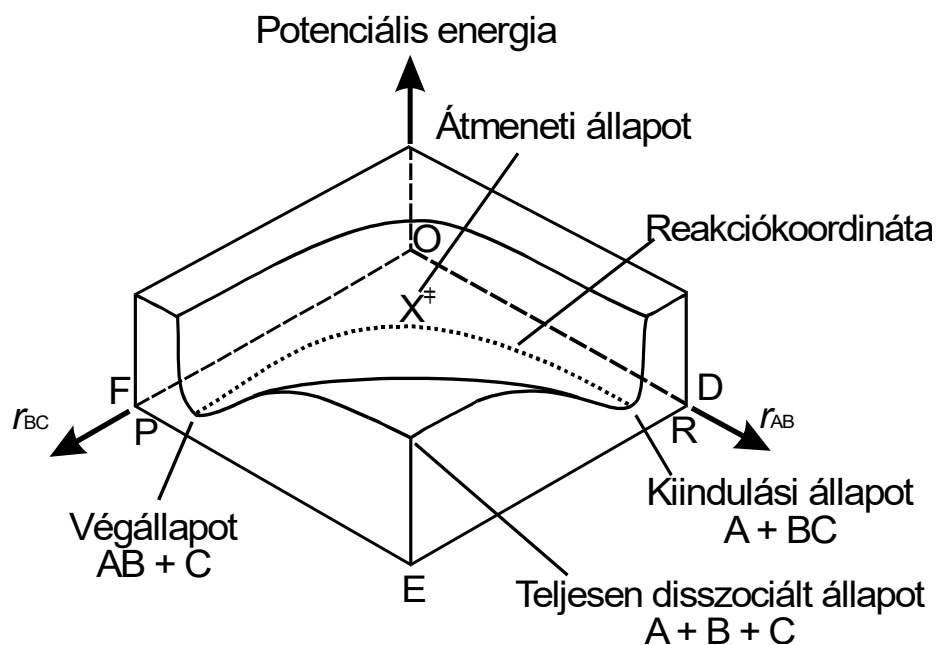




Fizikai Kémia

Instant Jegyzetek



Tartalomjegyzék:

1. Tökéletes és reális gázok
2. A termodinamika I. főtétele
3. Termokémia
4. A termodinamika II. és III. főtétele
5. Termodinamikai potenciálfüggvények
6. Tiszta anyagok fázisegyensúlyai és a fázisátmenetek
7. Elegyek és oldatok termodinamikája
8. Fázistörvény
9. Kémiai egyensúly
10. Ionok termodinamikai sajátosságai oldatokban
11. Egyensúlyi elektrokémia
12. Kinetikus gázelmélet
13. Transzportjelenségek
14. A reakciókinetika alapjai

Sokszorosítható jegyzetlap

Poszter

1. Tökéletes és reális gázok

Állapotjelzők	<p>anyagmennyiség: $n = N/N_A$, $N_A = 6,022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$</p> <p>nyomás: p, $p^\ominus = 1,0 \text{ bar} = 100 \text{ kPa}$ (pontosan)</p> <p>térfogat: V, $V_m = V/n$, $V_m^\ominus = 24,790 \text{ L mol}^{-1}$ (298,15 K)</p> <p>hőmérséklet: T, $T^\ominus = 298,15 \text{ K}$, $T(\text{K}) = t(^{\circ}\text{C}) + 273,15$</p>
Tökéletes gázok állapotegyenlete (határtörvény)	$pV = nRT$ $pV_m = RT$ $R = 8,314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1} = 8,206 \times 10^{-2} \text{ L atm mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$
Dalton-törvény	$p = \sum_j p_j = \sum_j x_j p, \quad x_j = \frac{n_j}{n},$ <p>a j-edik anyagféleség parciális nyomása p_j, móltörtje x_j, mólszáma n_j. A teljes nyomás p, az összes mólszám n.</p>
Reális gázok kompresszibilitása	$Z = \frac{pV_m}{RT} \neq 1$
Viriál-egyenletek	$pV_m = RT (1 + B'p + C'p^2 + \dots),$ $pV_m = RT \left(1 + \frac{B}{V_m} + \frac{C}{V_m^2} + \dots \right),$ <p>B', C', ... illetve B, C, ... az ún. viriál együtthatók.</p>
Boyle-hőmérséklet (T_B)	Az a hőmérséklet, amelynél $(dZ/dp) = B' = 0$, ha $p \rightarrow 0$.
A van der Waals-egyenlet	$\left(p + \frac{an^2}{V^2} \right) (V - nb) = nRT$ $\left(p + \frac{a}{V_m^2} \right) (V_m - b) = RT$
Kritikus állapot, kritikus állapotjelzők	$p_c = \frac{a}{27b^2}, \quad V_c = 3b, \quad T_c = \frac{8a}{27Rb},$ $Z_c = \frac{3}{8}, \quad T_B = \frac{a}{bR} = \frac{27T_c}{8}$
Megfelelő állapotok tétele, redukált állapotjelzők	<p>A reális gázok azonos redukált nyomást (p_r) fejtenek ki, amennyiben redukált térfogatuk (V_r) és redukált hőmérsékletük (T_r) megegyezik.</p> $p_r = \frac{p}{p_c}, \quad V_r = \frac{V_m}{V_c}, \quad T_r = \frac{T}{T_c}$
A van der Waals-egyenlet a redukált állapotjelzőkkel	$p_r = \frac{8T_r}{3V_r - 1} - \frac{3}{V_r^2}$

2. A termodinamika I. főtétele

Belső energia $U = U(V, T)$	Entalpia $H = H(p, T)$
$\Delta U = q + w$ I. főtétele $dU = \delta q + \delta w$ $dw = -p_{\text{ex}} dV$ térfogati munka $q = C \Delta T$ kalorimetria	$H = U + pV$ definíció $\Delta H = \Delta U + \Delta(pV)$ $dH = dU + d(pV) = dU + p dV + V dp$
$V = \text{állandó, nincs egyéb munka}$ $\Delta U = q_V = C_V \Delta T$ $C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V$ hőkapacitás állandó térfogaton $C_{V,m}$ – moláris hőkapacitás állandó térfogaton	$p = \text{állandó, nincs egyéb munka}$ $\Delta H = q_p = C_p \Delta T$ $C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p$ hőkapacitás állandó nyomáson $C_{p,m}$ – moláris hőkapacitás állandó nyomáson
$dU = \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T dV + \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V dT$ $\pi_T = \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T$ az ún. "belső nyomás" $dU = \pi_T dV + C_V dT$ tökéletes gázra $\pi_T = 0$ (Joule-kísérlet), ezért ΔU (tökételes gáz) = $C_V \Delta T$	$dH = \left(\frac{\partial H}{\partial p} \right)_T dp + \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p dT$ $\left(\frac{\partial H}{\partial p} \right)_T = - \left(\frac{\partial T}{\partial p} \right)_H \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p = - \mu_{JT} C_p$ $\mu_{JT} = \left(\frac{\partial T}{\partial p} \right)_H$ Joule–Thomson- együtttható $dH = - \mu_{JT} C_p dp + C_p dT$ tökéletes gázra $\mu_{JT} = 0$, ezért ΔH (tökételes gáz) = $C_p \Delta T$
$\left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_p = \pi_T \alpha V + C_V$ $\alpha = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p$ hőtágulási együtttható	$\left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_V = \left(1 - \frac{\mu_{JT} \alpha}{\kappa_T} \right) C_p$ $\kappa_T = - \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T$ izoterm kompresszibilitás
tökéletes gázra: $\alpha = 1/T$, $\pi_T = 0$ $\left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_p = C_V$	tökéletes gázra: $\kappa_T = 1/p$, $\mu_{JT} = 0$ $\left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_V = C_p$
bármely anyagra: $C_p - C_V = \frac{\alpha^2 T V}{\kappa_T}$ tökéletes gázra: $C_p - C_V = nR$	

3. Termokémia

Termokémia	A kémiai reakciók által termelt vagy elfogyasztott hő tanulmányozza. $\Delta U = Q_V$ (állandó térfogat, nincs egyéb munkavégzés) $\Delta H = Q_p$ (állandó nyomás, csak térfogati munka)
Standard állapot	Az anyag tiszta formájában $p^\ominus = 1 \text{ bar}$ (10^5 Pa) nyomáson. A hőmérséklet nem szerepel a definícióban, de történelmi és gyakorlati okok miatt a standard állapotra vonatkozó termodinamikai adatokat 298,15 K hőmérsékletre adjuk meg.
Standardentalpia-változás	A különböző fizikai és kémiai változásokhoz rendelhető standardentalpia-változást ΔH^\ominus különböző nevekkkel illetjük, bár termodinamikai értelemben azonosak: $\Delta H^\ominus = H_2^\ominus - H_1^\ominus,$ H_1^\ominus a kezdeti, H_2^\ominus pedig a végállapothoz tartozó standardentalpia.
Standard képződési entalpia <i>f</i> : formation = képződés	$\Delta_f H^\ominus$ az adott vegyület standard állapotú elemekből való képződését kísérő entalpiaváltozás.
Hess-tétel	Az eredő reakcióentalpia azon egyedi reakciók entalpiájának összege, amelyekre a bruttó reakció felbontható.
Standard reakcióentalpia <i>r</i> : reaction = reakció	Számítása a standard képződési entalpiákból: $\Delta_r H^\ominus = \sum \Delta_f H^\ominus(\text{termékek}) - \sum \Delta_f H^\ominus(\text{reaktánsok})$ illetve a standard égéshőkből (c: combustion = égés) $\Delta_r H^\ominus = \sum \Delta_c H^\ominus(\text{reaktánsok}) - \sum \Delta_c H^\ominus(\text{termékek})$
Ionok képződési entalpiája	Referencia (vonatkoztatási) állapot: $\Delta_f H^\ominus(H^+, aq) = 0$
Kirchhoff-törvény	A reakcióentalpiák hőmérsékletfüggése a következő összefüggések alapján számítható: $\Delta_r H^\ominus(T_2) = \Delta_r H^\ominus(T_1) + \int_{T_1}^{T_2} \Delta C_p^\ominus(T) dT$ $\Delta C_p^\ominus(T) = \sum C_p^\ominus(T)(\text{termékek}) - \sum C_p^\ominus(T)(\text{reaktánsok})$ $C_p^\ominus(T) = a + bT + \frac{c}{T^2} \text{ empirikus függvény}$
Born–Haber-ciklus	A Hess-tétel körfolyamatban történő alkalmazása a rácsentalpia ill. hidratációs entalpia indirekt meghatározására a részfolyamatokra vonatkozó, ismert entalpiaértékek alapján.

4. A termodinamika II. és III. főtétele

Különböző megfogalmazások:

- Egy izolált rendszer entrópiája valamely spontán, önként lejátszódó folyamat során növekszik: $\Delta S_{\text{tot}} > 0$, ahol ΔS_{tot} az izolált rendszer teljes entrópiája.
- *Reverzibilis változás* esetén az izolált rendszer teljes entrópiája nem változik.
- *Irreverzibilis változás* esetén az izolált rendszer teljes entrópiája mindig növekszik.
- Mivel reverzibilis folyamat nincs, az entrópia mindig nő, vagyis nem létezik semmiféle "entrópiamegmaradási" törvény.
- Az entrópia a rendezetlenség mértéke. Egy izolált rendszerben lejátszódó irreverzibilis folyamat során a rendezetlenség mértéke mindig nő.
- Nem valósítható meg olyan ciklikus folyamat, amelynek az az *egyedüli* eredménye, hogy egy hőtartályból hőt vonunk el és azt munkává alakítjuk. Másképpen: amíg a munka teljesen hővé alakítható (I. főtétel), addig a hőt nem lehet munkává alakítani úgy, hogy közben a rendszerben vagy környezetében *semmi más változás* ne történjék.
- Nem lehetséges, hogy egy olyan hőerőgép, amely T_h hőmérsékleten $|q_h|$ hőt vesz fel és T_c hőmérsékleten $|q_c|$ hőt ad le, több munkát $|w|$ végezzen, mint az ugyanilyen körülmények között reverzibilisen működő ún. Carnot-gép, melynek hatásfoka:

$$\eta = \frac{|w|}{|q_h|} = \frac{|q_h| - |q_c|}{|q_h|} = \frac{T_h - T_c}{T_h} = 1 - \frac{T_c}{T_h}.$$

Egy rendszer entrópiájának termodinamikai definíciója:

- Ha egy T hőmérsékletű rendszer dq hőt cserél *reverzibilisen* a környezetével, akkor a rendszer entrópiájának növekedése: $dS = dq_{\text{rev}}/T$.
- A $T = 0$ hőmérsékleten $S = 0$ valamennyi tökéletesen tiszta kristályos anyagra, beleértve a vegyületeket is (III. főtétel).

$$S(T) = S(0) + \int_0^{T_f} \frac{C_p(s)}{T} dT + \frac{\Delta_{\text{fus}}H}{T_f} + \int_{T_f}^{T_b} \frac{C_p(l)}{T} dT + \frac{\Delta_{\text{vap}}H}{T_b} + \int_{T_b}^T \frac{C_p(g)}{T} dT$$

Clausius-féle egyenlőtlenség: $dS \geq dq/T$,

ahol dS a vizsgált rendszer entrópiájának változása és dq a vizsgált rendszer által felvett vagy leadott hő az adott folyamatban. Az egyenlőség akkor áll fenn, ha a folyamat reverzibilis.

Standard reakcióentrópia: $\Delta_r S^\ominus = \sum S^\ominus(\text{termékek}) - \sum S^\ominus(\text{reaktánsok})$

A termodinamikai hőmérsékleti skála:

- $T = (|q|/|q_3|) \times T_3$, ahol $|q_3|$ egy Carnot-gép által a víz hármaspontjának hőmérsékletén ($T_3 = 273,16$ K) felvett hő és $|q|$ a T hőmérsékleten leadott hő.
- A nulla pont az a hőmérséklet, ahol a Carnot-hatásfok $\eta = 1$; azaz $|q| = 0$, amiből a II. főtétel értelmében következik az abszolút zérusfok elérhetetlensége.
- A skála egysége ($T = 1$ K) az a hőmérséklet, ahol a leadott hő a hármasponton felvett hőnek pontosan $1/273,16$ -od része.

Az entrópia statisztikus definíciója: $S = k \ln W$,

ahol $k = R/N_A = 1,381 \times 10^{-23}$ J/K a Boltzmann-állandó, W pedig az ún. termodinamikai valószínűség: a legvalószínűbb makroállapothoz tartozó mikroállapotok száma.

Az entrópia mértékegysége: J/K. Az entrópia értéke azt adja meg, hogy 1 K-en lejátszódó reverzibilis folyamatban mennyi hőt kellene közölni a rendszerrel ahhoz, hogy a rendezetlenség mértéke ugyanannyit *változzon*, mint a T hőmérsékleten lejátszódó folyamatban.

5. Termodinamikai potenciálfüggvények

Középpontban a rendszer	<p>A spontán (irreverzibilis) folyamatok iránya:</p> <ul style="list-style-type: none"> • ha a rendszer és környezete termikus egyensúlyban van ($T = T'$) és • nincs egyéb (nem-térfogati) munkavégzés $dS_{U,V} \geq 0 \quad dS_{U,p} \geq 0$ $dU_{S,V} \leq 0 \quad dH_{S,p} \leq 0$
Szabadenergia (Helmholtz) $A = A(T, V)$	$A = U - TS$ <p>A spontán (irreverzibilis) folyamatok iránya: $dA_{T,V} \leq 0$</p> $\Delta A = \Delta U - \Delta(TS) = w_{\max}$ <p>ahol w_{\max} a maximális munka</p>
Szabadentalpia (Gibbs) $G = G(T, p)$	$G = H - TS$ <p>A spontán (irreverzibilis) folyamatok iránya: $dG_{T,p} \leq 0$</p> $\Delta G = \Delta H - \Delta(TS) = w_{e,\max}$ <p>ahol $w_{e,\max}$ a maximális hasznos (nem-térfogati) munka</p>
Standard reakció-szabadentalpia, $\Delta_r G^\ominus$	$\Delta_r G^\ominus = \Delta_r H^\ominus - T\Delta_r S^\ominus \quad (T - \text{állandó})$
Standard képződési szabadentalpia, $\Delta_f G^\ominus$	<p>egy mól standard állapotú vegyület standard állapotú elemekből való képződésének reakció-szabadentalpiája. A standard állapotú elemek képződési szabadentalpiája megállapodás szerint $\Delta_f G^\ominus(\text{elem}) = 0 \text{ kJ mol}^{-1}$.</p>
$\Delta_r G^\ominus$ számítása $\Delta_r G^\ominus$ értékek ismeretében	$\Delta_r G^\ominus = \sum \Delta_f G^\ominus(\text{termékek}) - \sum \Delta_f G^\ominus(\text{reaktánsok})$
A td-i potenciálfüggvények infinitézimális változása	$dU = -p dV + T dS \quad dH = V dp + T dS$ $dA = -p dV - S dT \quad dG = V dp - S dT$
A szabadentalpia változása az összetétel változásával	$dG = V dp - S dT + \sum_j \mu_j dn_j$ $dG_{p,T} = \sum_j \mu_j dn_j \quad (p, T - \text{állandó})$
Kémiai potenciál	$\mu_j = \left(\frac{\partial G}{\partial n_j} \right)_{p,T,n_i} - \text{ún. parciális moláris szabadentalpia}$
Tökéletes gáz kémiai potenciálja	$\mu = \mu^\ominus + RT \ln \frac{p}{p^\ominus}, \text{ ahol } \mu^\ominus \text{ a standard kémiai potenciál}$
Reális gáz kémia potenciálja	$\mu = \mu^\ominus + RT \ln \frac{f}{p^\ominus}$ <p>$f = \gamma p$ az ún. fugacitás (szökési hajlam), $\gamma \leq 1$ fugacitási együttható ($\gamma \rightarrow 1$, amint $p \rightarrow 0$).</p>

6. Tiszta anyagok fázisegyensúlyai és a fázisátmenetek

A fázis fogalma	Egy anyagi rendszer makroszkópikus méretű, azonos fizikai tulajdonságokkal jellemezhető része
Fázistípusok (halmazállapot)	<ul style="list-style-type: none"> • Gáz (gőz) (g) – gas • Folyadék (l) – liquid • Szilárd (s) – solid
Fázisegyensúlyok	$A(l) \rightleftharpoons A(g)$ párolgás (forrás) \leftrightarrow kondenzálás $A(s) \rightleftharpoons A(l)$ olvadás \leftrightarrow fagyás $A(s) \rightleftharpoons A(g)$ szublimáció \leftrightarrow lerakódás $A(\alpha) \rightleftharpoons A(\beta)$ módosulatváltozás
A fázisegyensúly termodinamikai jellemzése	Egyensúlyban ($dG = 0$) a vizsgált anyag kémiai potenciálja a rendszer minden fázisában azonos, $\mu(1) = \mu(2) = \dots$
Fázisdiagramok ($p - T$)	<ul style="list-style-type: none"> • sík tartományban – egy stabilis fázis (s, l vagy g) • vonalak mentén – két stabilis fázis (s-l, s-g vagy l-g) • hármaspontban – három fázis (s, l és g) egyensúlya
A hőmérséklet hatása a tiszta anyagok fázisstabilitására	Mivel $\left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_p = -S_m$ és $S_m(s) < S_m(l) < S_m(g) > 0$, a μ kémiai potenciál értéke a s, l, g sorrendben egyre meredekebben csökken T növelésével ($p = \text{áll.}$). <ul style="list-style-type: none"> • Ha $\mu(s) = \mu(l)$, $T = T_f$ – olvadás- ill. fagyáspont • Ha $\mu(l) = \mu(g)$, $T = T_b$ – forráspont
A nyomás hatása a tiszta anyagok fázisstabilitására	Mivel $\left(\frac{\partial \mu}{\partial p}\right)_T = V_m$ és általában $V_m(s) < V_m(l) < V_m(g) > 0$, a μ értéke általában a s, l, g sorrendben egyre nagyobb mértékben nő p növelésével ($T = \text{áll.}$). <i>A víz kivétel!</i>
Fázishatárok meredeksége a fázisdiagramban	<i>Szilárd–folyadék fázishatár:</i> $\frac{dp}{dT} = \frac{\Delta_{\text{fus}} H^\ominus}{T_f \Delta V_m}$, azaz $(p - p^\ominus) = \frac{\Delta_{\text{fus}} H^\ominus}{\Delta V_m} \ln\left(\frac{T_f}{T_f^\ominus}\right)$
<i>Clapeyron–egyenlet:</i> $\frac{dp}{dT} = \frac{\Delta S_m}{\Delta V_m}$	<i>Folyadék–gőz fázishatár:</i> $\frac{dp}{dT} = \frac{\Delta_{\text{vap}} H^\ominus}{T_b \Delta V_m}$ és feltéve, hogy $\Delta V_m \approx \frac{RT}{p}$ és $T \sim T_b$, adódik a <i>Clausius–Clapeyron–egyenlet:</i> $\frac{d \ln p}{dT} = \frac{\Delta_{\text{vap}} H^\ominus}{RT^2}$, azaz $\ln p = -\frac{\Delta_{\text{vap}} H^\ominus}{R} \left(\frac{1}{T}\right) + \text{konstans}$
	<i>Szilárd–gőz fázishatár:</i> $\frac{d \ln p}{dT} = \frac{\Delta_{\text{sub}} H^\ominus}{RT^2}$, azaz $\ln p = -\frac{\Delta_{\text{sub}} H^\ominus}{R} \left(\frac{1}{T}\right) + \text{konstans}$
A folyadék fázisra ható külső nyomás ($P = p^* + \Delta P$) hatása a gőznyomásra	$p = p^* e^{\frac{V_m \Delta P}{RT}}$ Görbült (r) gőz–folyadék határfelület esetén: $\Delta P = \pm \frac{2\gamma}{r}$

7. Elegyek és oldatok termodinamikája

Parciális moláris mennyiségek	$Y_j = \left(\frac{\partial Y}{\partial n_j} \right)_{p,T,n'}$ <p>a j-edik anyagféleség parciális moláris mennyisége, n' azt jelzi, hogy az összes többi jelen levő anyagféleség mennyiségét állandó értéken tartjuk.</p> $V_j = \left(\frac{\partial V}{\partial n_j} \right)_{p,T,n'}$ <p>parciális moláris térfogat</p> $\mu_j = \left(\frac{\partial G}{\partial n_j} \right)_{p,T,n'}$ <p>parciális moláris szabadentalpia, kémiai potenciál</p>
Binér elegy (A, B)	$V = n_A V_A + n_B V_B$ $G = n_A \mu_A + n_B \mu_B$ $V_m = x_A V_A + x_B V_B$ $G_m = x_A \mu_A + x_B \mu_B$
Gibbs–Duhem-egyenlet	$\sum_j n_j d\mu_j = 0$
Az elegyedés termodinamikája	$\Delta G_{\text{mix}} = nRT(x_A \ln x_A + x_B \ln x_B)$ $\Delta S_{\text{mix}} = -nR(x_A \ln x_A + x_B \ln x_B)$
Ideális elegyek és ideálisan híg oldatok	$\mu_A(l) = \mu_A^*(l) + RT \ln \frac{p_A}{p_A^*} = \mu_A^*(l) + RT \ln x_A$
Raoult-törvény	$p_A = x_A p_A^*$, ahol p_A^* a telített gőznyomás a tiszta komponens felett
Henry-törvény	$p_B = x_B K_B$, ahol x_B az oldott anyag móltörtje, K_B a Henry-állandó
Kolligatív sajátságok	<p><i>Forráspont-emelkedés:</i> $\Delta T = \left(\frac{RT^{*2} M}{\Delta H_{\text{vap}}} \right) m_B = K_b m_B$</p> <p><i>Fagyáspont-csökkenés:</i> $\Delta T = \left(\frac{RT^{*2} M}{\Delta H_{\text{fus}}} \right) m_B = K_f m_B$</p> <p>$K_b$ – ebulioszkópos állandó, K_f – krioszkópos állandó M – az oldószer móltömege, m_B – az oldott anyag molalitása (az 1 kg oldószerben oldott B anyag mennyisége mólokban) <i>Ozmózisnyomás (van't Hoff-egyenlet):</i> $\Pi V = n_B RT$</p>
Oldhatóság	<p>Az oldhatóság változása a hőmérséklettel ideális oldatokban:</p> $\ln x_B = -\frac{\Delta_{\text{fus}} H}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T^*} \right)$, ahol T^* az anyag olvadáspontja
Reális elegyek és oldatok	<p><i>Az oldószer aktivitása:</i> $a_A = \gamma_A x_A$, ahol γ ún. aktivitási koefficiens $\mu_A = \mu_A^* + RT \ln a_A = \mu_A^* + RT \ln(\gamma_A x_A)$, $a_A \rightarrow x_A$ és $\gamma_A \rightarrow 1$, amint $x_A \rightarrow 1$ (standard állapot)</p> <p><i>Az oldott anyag aktivitása:</i></p> $\mu_B = \mu_B^* + RT \ln \frac{K_B}{p_B} + RT \ln a_B = \mu_B^+ + RT \ln a_B$ $a_B = \frac{p_B}{K_B} = \gamma_B x_B \rightarrow x_B \text{ és } \gamma_B \rightarrow 1, \text{ ha } x_B \rightarrow 0 \text{ (standard állapot)}$

8. Fázistörvény

A fázis (F) fogalma	Egy anyagi rendszer makroszkópikus méretű, azonos fizikai tulajdonságokkal bíró része. Egy vagy több komponensből áll.
A komponensek (K) száma	Az anyagi minőségek azon minimális száma, ami ahhoz szükséges, hogy a rendszerben lévő valamennyi fázis összetételét megadjuk.
Szabadsági fok (Sz)	Azon <i>intenzív</i> változók (p, T, x_i) száma, amelyeket egymástól függetlenül változtathatunk anélkül, hogy egy egyensúlyi rendszerben megváltozna a fázisok száma.
Gibbs-féle fázistörvény	$Sz = K - F + 2$
Egykomponensű rendszerek (K = 1)	Példa: víz (p vs. T) fázisdiagramja $F = 1, Sz = 2$ (p, T) – kétdimenziós terület $F = 2, Sz = 1$ (p vagy T) – fázishatár görbék $F = 3, Sz = 0$ – hármaspont
Kétkomponensű rendszerek (K = 2)	<i>Illékony folyadékok ideális elegye:</i> (Raoult-törvény): $p = p_A + p_B = x_A p_A^* + x_B p_B^*$ $y_A = \frac{p_A}{p} = \frac{x_A p_A^*}{p_B^* + x_A (p_A^* - p_B^*)}$ $p = \frac{p_A^* p_B^*}{p_B^* + y_A (p_B^* - p_A^*)}$ <p>a folyadékelegy fölötti egyensúlyi gőznyomás p, az A és B komponensek parciális nyomása az egyensúlyi gőzfázisban p_A és p_B, a tiszta A és B komponensek telített gőznyomása p_A^* és p_B^* x_A, x_B – az A és B komponensek móltörtje a folyadékfázisban, y_A, y_B – az A és B komponensek móltörtje a gőzfázisban <i>Alkalmazás:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • egyensúlyi gőznyomás – összetétel diagramok Emelőszabály: $n'l' = nl$ n a folyadék, n' a gőz mennyisége, l és l' a vízszintes összekötő szakaszok hossza • hőmérséklet – összetétel diagramok (desztilláció) <p><i>Folyadék–folyadék fázisdiagramok</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • fázisszétválás <ul style="list-style-type: none"> ○ alsó kritikus hőmérséklettel ○ felső kritikus hőmérséklettel • elegyedés a forrás előtt • forrás a teljes elegyedés előtt <p><i>Folyadék–szilárd fázisdiagramok</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • eutektikumok • reaktív rendszerek • frakcionált kristályosítás
Háromkomponensű rendszerek (K = 3)	<i>Háromszög-fázisdiagramok</i> $x_A + x_B + x_C = 1$

9. Kémiai egyensúly

<p>Reakció-szabadentalpia:</p> $\Delta_r G = \left(\frac{\partial G}{\partial \xi} \right)_{p, T, n_j},$ <p>ahol $0 \leq \xi$ (mol) az ún. reakciókoordináta: $dn_j = \nu_j d\xi$</p>	$\Delta_r G = \sum_j \nu_j \mu_j = \Delta_r G^\ominus + RT \ln Q,$ $\Delta_r G^\ominus = \sum_j \nu_j \mu_j^\ominus$ a standard reakció-szabadentalpia, $Q = \prod_j a_j^{\nu_j}$ az ún. reakcióhányados, a_j a j -edik részecske aktivitása, ν_j pedig a részecske sztöchiometriai együtthatója a reakcióegyenletben (reaktáns: $\nu_j < 0$, termék: $\nu_j > 0$, katalizátor: $\nu_j = 0$).
<p>Az egyensúly feltétele</p>	<p>Az egyensúlyi állapotot ($K = Q_{eq}$) akkor érjük el, amikor a rendszer szabadentalpiája minimális lesz, s ekkor a reakciószabadentalpia:</p> $\Delta_r G_{eq} = \Delta_r G^\ominus + RT \ln K = 0.$
<p>Az egyensúly jellemzése</p>	$\Delta_r G^\ominus = -RT \ln K,$ <p>az egyensúlyi állandó: $K = \prod_j \bar{a}_j^{\nu_j},$ \bar{a}_j a j-edik részecske egyensúlyi aktivitása.</p>
<p>K értéke koncentrációkkal kifejezve</p>	<p>Ha a részecskék közötti kölcsönhatás elhanyagolható (tökéletes gázok, semleges molekulák, híg elektrolitoldatok), az egyensúlyi állandó koncentrációkkal is kifejezhető:</p> $K_c = \prod_j \bar{c}_j^{\nu_j} (c^\ominus)^{-\Delta \nu},$ <p>\bar{c}_j az j-edik részecske egyensúlyi koncentrációja, $c^\ominus = 1,0 \text{ mol dm}^{-3}$ a standard koncentráció, $\Delta \nu = \sum_j \nu_j.$</p>
<p>K értéke gázfázisú reakciókra, és az összetétel változása a nyomással</p>	$K_p = \prod_j \left(\frac{\bar{p}_j}{p^\ominus} \right)^{\nu_j} = \prod_j \left(\frac{x_j p}{p^\ominus} \right)^{\nu_j} = K_x \left(\frac{p}{p^\ominus} \right)^{\Delta \nu},$ <p>\bar{p}_j az j-edik részecske parciális nyomása, p az össznyomás, $p^\ominus = 1,0 \text{ bar}$ a standard nyomás.</p>
<p>Az egyensúlyi állandó értékének változása a hőmérséklettel, van't Hoff-egyenlet</p>	$\left(\frac{d \ln K}{dT} \right) = \frac{\Delta_r H^\ominus}{RT^2},$ $\ln \left(\frac{K_2}{K_1} \right) = \ln K_2 - \ln K_1 = -\frac{\Delta_r H^\ominus}{R} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right).$
<p>A Le Chatelier-elv, a legkisebb kényszer elve</p>	<p>Az egyensúlyban lévő rendszerben külső zavarás hatására olyan folyamatok játszódnak le, amelyek a zavarás hatásait minimálisra csökkentik.</p>

10. Ionok termodinamikai sajátságai oldatokban

Ionok egyedi aktivitása	$a_i = \gamma_i \frac{m_i}{m^\ominus},$ <p>az i-edik ionféleség aktivitása a_i, aktivitási együtthatója $0 \leq \gamma_i \leq 1$, molalitása pedig m_i.</p> <p>A standard koncentráció értéke $m^\ominus = 1,0 \text{ mol kg}^{-1}$.</p>
Közepes ionaktivitási együttható	<p>Az M_pX_q általános képlettel leírható elektrolitok vizes oldatára vonatkozóan az ionok ún. közepes ionaktivitási együtthatója:</p> $\gamma_{\pm} = \sqrt[s]{\gamma_M^p \gamma_X^q}, \quad s = p + q.$
Debye–Hückel-határtörvény ($I < 0,001 \text{ mol kg}^{-1}$)	$\lg \gamma_{\pm} = -A z_+ z_- \sqrt{I/I^\ominus}$ <p>$A = 0,509$ $I^\ominus = 1,0 \text{ mol kg}^{-1}$</p> <p>$z_+, z_-$ az elektrolitot alkotó ionok töltésszáma</p>
Ionerősség	<p>Az ionok közötti elektrosztatikus kölcsönhatás erősségének jellemzésére bevezetett I-i mennyiség:</p> $I = \frac{1}{2} \sum_i m_i z_i^2 \quad (\text{mol kg}^{-1}).$

Rozsul oldódó sók telített vizes oldata (oldhatóság)

Oldhatósági egyensúly 1 : 1 elektrolit esetén	$MX (s) \rightleftharpoons M^+(aq) + X^-(aq)$ $K_s = a_M a_X = \frac{m_M m_X}{(m^\ominus)^2} (\gamma_+ \gamma_-) = \frac{S^2}{(m^\ominus)^2} \gamma_{\pm}^2,$ <p>S az elektrolit oldhatósága (mol kg^{-1}).</p>
Oldhatósági egyensúly 2 : 1 elektrolit esetén	$M_2X (s) \rightleftharpoons 2M^+(aq) + X^{2-}(aq)$ $K_s = a_M^2 a_X = \frac{m_M^2 m_X}{(m^\ominus)^3} (\gamma_+^2 \gamma_-) = \frac{(2S)^2 S}{(m^\ominus)^3} \gamma_{\pm}^3 = \frac{4S^3}{(m^\ominus)^3} \gamma_{\pm}^3$
Idegen elektrolit hatása az oldhatóságra	<p>Ez a hatás az ionerősség, ezen keresztül pedig az ionok közepes ionaktivitási együtthatójának (γ_{\pm}) megváltozásával értelmezhető.</p>
Közös ion hatása az MX típusú rozsul oldódó só oldhatóságra	<p>Az M^+ illetve X^- ionokat tartalmazó idegen elektrolit hatása az oldhatóságra. Például, NaCl-oldat hozzáadásának hatása az AgCl(s) oldhatóságára.</p> $K_s = a_M a_X = \frac{m_M m_X}{(m^\ominus)^2} (\gamma_+ \gamma_-) \approx \frac{S_{AgCl} m_{NaCl}}{(m^\ominus)^2} \gamma_{\pm}^2.$

11. Egyensúlyi elektrokémia

Az elektródpotenciál Nernst-egyenlete	$aA + ze^- \rightarrow bB$ általános elektródreakciót feltételezve: $\varepsilon = \varepsilon^\ominus - \frac{RT}{zF} \ln Q,$ ahol ε^\ominus a standard elektródpotenciál (V), F a Faraday-állandó (96485 C mol ⁻¹), $Q = \prod_i a_i^{v_i}$ a reakcióhányados.
A galványcella cellapotenciálja	$E = \varepsilon_k - \varepsilon_a = E^\ominus - \frac{RT}{zF} \ln Q = -\frac{\Delta_r G}{zF}$ $E^\ominus = \varepsilon_k^\ominus - \varepsilon_a^\ominus = \frac{RT}{zF} \ln K = -\frac{\Delta G^\ominus}{zF}$
A galványcella termodinamikája	$\Delta G^\ominus = -zFE^\ominus = -RT \ln K$ $\Delta S^\ominus = zF \left(\frac{\partial E^\ominus}{\partial T} \right)_p$ $\Delta H^\ominus = -zF \left(E^\ominus - T \left(\frac{\partial E^\ominus}{\partial T} \right)_p \right)$
Standard hidrogénelektrod	$\text{Pt} \text{H}_2(\text{g}) \text{H}^+(\text{aq}) \quad 2\text{H}^+(\text{aq}) + 2e^- \rightarrow \text{H}_2(\text{g})$ $p(\text{H}_2) = p^\ominus$ $a(\text{H}^+) = 1$ valamennyi hőmérsékleten $\varepsilon^\ominus(\text{H}^+/\text{H}_2) = 0$.
Hidrogénelektrod és a pH	$\varepsilon(\text{H}^+/\text{H}_2) = \frac{RT}{F} \ln \frac{a(\text{H}^+)(p^\ominus)^{1/2}}{f(\text{H}_2)^{1/2}} = -\frac{2,303RT}{F} \text{pH}$
Elsőfajú elektrod	$\text{M}(\text{s}) \text{M}^{z+}(\text{aq}) \quad \text{M}^{z+}(\text{aq}) + ze^- \rightarrow \text{M}(\text{s})$ $\varepsilon(\text{M}^{z+}/\text{M}) = \varepsilon^\ominus(\text{M}^{z+}/\text{M}) + \frac{RT}{zF} \ln a_{\text{M}^{z+}}$
Másodfajú elektrod	$\text{M}(\text{s}) \text{MX}(\text{s}) \text{X}^-(\text{aq}) \quad \text{MX}(\text{s}) + e^- \rightarrow \text{M}(\text{s}) + \text{X}^-(\text{aq})$ $\varepsilon(\text{MX}/\text{M}, \text{X}^-) = \varepsilon^\ominus(\text{MX}/\text{M}, \text{X}^-) - \frac{RT}{F} \ln a_{\text{X}^-}$
Redoxielektrodok	$\text{Pt}(\text{s}) \text{Ox}(\text{aq}), \text{Red}(\text{aq}) \quad \text{Ox}(\text{aq}) + ze^- \rightarrow \text{Red}(\text{aq})$ $\varepsilon(\text{Ox}/\text{Red}) = \varepsilon^\ominus(\text{Ox}/\text{Red}) + \frac{RT}{zF} \ln \frac{a_{\text{Ox}}}{a_{\text{Red}}}$
Koncentrációs galvánelemek	$\text{M}(\text{s}) \text{M}^{z+}(\text{aq}, \text{B}) \text{M}^{z+}(\text{aq}, \text{J}) \text{M}(\text{s})$ $\text{M}^{z+}(\text{aq}, \text{J}) \rightarrow \text{M}^{z+}(\text{aq}, \text{B})$ $E = \frac{RT}{zF} \ln \frac{a(\text{M}^{z+}, \text{J})}{a(\text{M}^{z+}, \text{B})}$

12. Kinetikus gázelmélet

Átlagos kinetikus energia	$E_k = \frac{1}{2} m \langle v \rangle^2$ <p>m a részecske tömege, $\langle v \rangle$ átlagsebesség.</p>
Átlagos nyomás	$p = \frac{1}{3} N m c^2$ <p>$N = n/V$ a részecskesűrűség, m a részecske tömege, $c = \langle v^2 \rangle^{1/2}$ a sebességnégyzet átlagának négyzetgyöke.</p>
Molekulasebesség négyzete átlagának négyzetgyöke	$c = \left(\frac{3kT}{m} \right)^{1/2}$
Maxwell–Boltzmann-féle sebességeloszlási függvény	$f(v_x) = \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{1/2} e^{-\frac{mv_x^2}{2kT}}$
Maxwell-féle sebességeloszlási függvény	$f(v) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} v^2 e^{-\frac{mv^2}{2kT}}$
Átlagsebesség	$\bar{c} = \left(\frac{8kT}{\pi m} \right)^{1/2}$
Legvalószínűbb sebesség	$c^* = \left(\frac{2kT}{m} \right)^{1/2}$
Ütközési gyakoriság	$z = \frac{2^{1/2} \bar{c} p}{kT}$ <p>$\sigma = d^2\pi$ az ütközési hatáskeresztmetszet, d a részecske átmérője.</p>
Átlagos szabad úthossz	$\lambda = \frac{\bar{c}}{z}$
Ütközési szám egységnyi idő alatt	$Z_{AA} = \sigma \left(\frac{4kT}{\pi m} \right)^{1/2} N_A^2 [A]^2,$ $Z_{AB} = \sigma \left(\frac{8kT}{\pi \mu} \right)^{1/2} N_A^2 [A][B]$
A falba történő ütközések száma egységnyi idő alatt, egységnyi felületen	$Z_w = \frac{p \bar{c}}{4kT} = \frac{p}{(2\pi m kT)^{1/2}}$

13. Transzportjelenségek

Fluxus (áramsűrűség)	<p>Az áramlás mértékét jellemzi. Definíció szerint az egységnyi felületen egységnyi idő alatt áthaladó fizikai mennyiség mértéke, pl.:</p> <p>anyagáramsűrűség ($\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$), $J_z = -D \frac{dN}{dz}$</p> <p>energiaáram-sűrűség ($\text{J m}^{-2} \text{s}^{-1}$), $J_z = -\kappa \frac{dT}{dz}$</p> <p>impulzusáram-sűrűség ($\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-2}$) $J_x = -\eta \frac{dv_x}{dz}$</p>
Transzportjelenségek gázokban	<p>Diffúzió: $D = \frac{1}{3} \lambda \bar{c}$ ($\text{m}^2 \text{s}^{-1}$)</p> <p>Hővezetés: $\kappa = \frac{1}{3} \lambda \bar{c} C_v [A]$ ($\text{J K}^{-1} \text{m}^{-1} \text{s}^{-1}$)</p> <p>Viszkozitás: $\eta = \frac{1}{3} m \lambda \bar{c} N_A [A]$ ($\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1} = 10 \text{ P}$)</p>
Ionok vándorlása oldatokban elektromos erőtér hatására	<p>Vándorlási sebesség $s = uE$ (cm s^{-1})</p> <p>Ionmozgékonyosság $u = \frac{ze}{6\pi\eta a}$ ($\text{cm}^2 \text{s}^{-1} \text{V}^{-1}$)</p>
Vezetés	<p>$G = \frac{1}{R} = \frac{\kappa}{C}$ ($\Omega^{-1} \equiv \text{Siemens} \equiv \text{S}$)</p> <p>cellaállandó $C = \frac{\kappa^*}{G^*}$ (cm^{-1})</p> <p>meghatározása * ismert elektrolittal</p>
Fajlagos vezetés	$\kappa = G C$ (S cm^{-1})
Moláris fajlagos vezetés	$\Lambda_m = \frac{1000 \kappa}{c}$ ($\text{S cm}^2 \text{mol}^{-1}$), ha $[c] = \text{mol dm}^{-3}$
Erős elektrolitok	$\Lambda_m = \Lambda_m^0 - K\sqrt{c}$ Kohlrausch-törvény
Gyenge elektrolit	$\frac{1}{\Lambda_m} = \frac{1}{\Lambda_m^0} + \frac{c\Lambda_m}{K_a(\Lambda_m^0)^2}$ Ostwald-féle hígítási törvény
Ionok független vándorlása	$\Lambda_m^0 = \nu_+ \lambda_+^0 + \nu_- \lambda_-^0$, ahol $\lambda_i^0 = z_i u_i^0 F$
Átviteli szám	$t_i = \frac{I_i}{I} = \frac{\nu_i \lambda_i}{\Lambda_m}$
Mozgékonyság és diffúzió	$D = uRT / zF$ Einstein-összefüggés
Diffúzió oldatokban	<p>$J_x = -D \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)_t$ Fick I. törvénye</p> <p>$\left(\frac{\partial c}{\partial t} \right)_x = D \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right)_t$ Fick II. törvénye</p>

14. A reakciókinetika alapjai

<p>Reakciósebesség</p> $d\xi = dn_j / \nu_j,$ <p>ahol dn_j a j-edik anyagféleség mólszámváltozása</p>	<p>A reakciókoordináta (ξ) időegység alatti változása térfogategységre vonatkoztatva:</p> $v = \frac{1}{V} \frac{d\xi}{dt} = \frac{1}{\nu_j} \frac{d[J]}{dt},$ <p>ahol ν_j a j-edik anyagféleség sztöichiometriai együtthatója, $[J]$ pedig a koncentrációja (mol dm^{-3}).</p>
<p>Kinetikai tömeghatástörvény</p>	<p>A <u>kísérletesen meghatározott</u> reakciósebességi egyenlet általános alakja:</p> $v = k[A]^\alpha[B]^\beta[C]^\gamma \dots,$ <p>ahol k a reakciósebességi együttható, $[A]$, $[B]$, $[C]$, ... aktuális koncentrációk, α, β, γ, ... az A, B, C, ... anyagféleség kinetikai részrendősége, ($\alpha + \beta + \gamma + \dots$) a reakció bruttó rendősége.</p>
<p>Nulladrendű reakció $A \rightarrow P$</p>	$-\frac{d[A]}{dt} = k_0, \quad [A] = [A]_0 - k_0 t$ $[k_0] = \text{M s}^{-1}, \quad t_{1/2} = \frac{[A]_0}{2k_0}$
<p>Elsőrendű reakció $A \rightarrow P$</p>	$-\frac{d[A]}{dt} = k_1[A], \quad [A] = [A]_0 e^{-k_1 t}, \quad \ln[A] = \ln[A]_0 - k_1 t$ $[k_1] = \text{s}^{-1}, \quad t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k_1}$
<p>Másodrendű reakció $2A \rightarrow P$</p>	$-\frac{1}{2} \frac{d[A]}{dt} = k_2[A]^2, \quad \frac{1}{[A]} = \frac{1}{[A]_0} + 2k_2 t$ $[k_2] = \text{M}^{-1} \text{s}^{-1}, \quad t_{1/2} = \frac{1}{2k_2[A]_0}$
<p>Másodrendű reakció $A + B \rightarrow P$</p>	$-\frac{d[A]}{dt} = -\frac{d[B]}{dt} = k_2'[A][B]$ $k_2' t = \frac{1}{[A]_0 - [B]_0} \ln \frac{[A][B]_0}{[A]_0[B]}$ $[k_2'] = \text{M}^{-1} \text{s}^{-1}$
<p>„Megfordítható” reakciók $A \rightleftharpoons P$</p>	$\frac{d[A]}{dt} = -k[A] + k'[P], \quad [A] = \left\{ \frac{k' + k e^{-(k+k')t}}{k + k'} \right\} [A]_0$ $K = \frac{[P]_{\text{eq}}}{[A]_{\text{eq}}} = \frac{k}{k'}$
<p>A reakciósebességi együttható hőmérséklet-függése</p>	<p>Arrhenius-egyenlet: $k = A e^{-\frac{E_a}{RT}}$, $\ln k = \ln A - \frac{E_a}{RT}$</p>
<p>Kezdeti sebességek módszere</p>	$v_0 = k[A]_0^\alpha[B]_0^\beta \dots, \quad \lg v_0 = \lg k + \alpha \lg[A]_0 + \beta \lg[B]_0 + \dots$

