

Válaszok a Fizkém II alapkérdésekre, keresztévfolyam, 2006

(A képletekben szereplő betűk jelentését és mértékegységét is tudni kell)

1. A belső energia a rendszert felépítő mikroszkopikus részecskék a rendszer tömegközéppontjára vonatkoztatott kinetikus és potenciális energiájának az összege.
2. Az I. főtétel: az energiamegmaradás tétele, vagyis energia nem keletkezhet és nem semmisülhet meg, hanem csak átalakulhat az egyik formából a másikba.

- elszigetelt rendszerre: $\Delta U = 0$, nincs sem anyag, sem energia transzport, a belső energia változása zérus

- zárt rendszerre: $\Delta U = W + Q$, a rendszerrel történő konduktív energiaközlés megengedett, ahol W a munkát, Q a hőt jelöli.

3. A térfogati munka: $dW = -p_k dV$, ahol p_k a külső nyomás, dV a rendszer térfogatváltozása. A térfogati munka véges összenyomásra vagy kiterjedésre:

$$W = - \int_{V_1}^{V_2} p_k dV$$

4. Az entalpia állapotfüggvény, definícióegyenlete: $H \equiv U + pV$, ahol U a belső energia, p és V a rendszer állapotjelzői (nyomás és térfogat).
5. Az entalpiaváltozás fizikai értelmét az adja, hogy izobár reverzibilis folyamatban, ha csak térfogati munka van, az entalpiaváltozás a hővel egyenlő. Vagyis, ha a külső nyomás és a rendszer nyomása megegyezik, és $dp = 0$, akkor $dH = \delta Q_p$.
6. Az I. főtétel nyitott rendszerre: $\Delta U = Q + W + H_{be} - H_{ki}$, ahol Q a rendszer és a környezet közötti hőcsere, W a munkavégzés, H pedig az entalpia.

7. Az entrópia termodinamikai definíciója: $dS = \frac{\delta Q_{rev}}{T}$, ahol a δQ infinitezimálisan kicsi hőt, a T pedig az abszolút hőmérsékletet jelenti.

8. $\Delta S = \int_{T_1}^{T_2} \frac{C_{mp}}{T} dT$, ahol C_{mp} az állandó nyomáson mért hőkapacitás.

9. Ha egy elszigetelt rendszerben makroszkopikus folyamat játszódik le, az entrópia nő. Az egyensúlyt az entrópia maximuma jellemzi. $\Delta S \geq 0$ (elszigetelt rendszer esetén).

10. A termodinamika III. főtétele: semmilyen eljárással nem lehet véges számú lépésben a 0 K- t elérni. Másképpen megfogalmazva a tiszta, hibátlan kristályszerkezetű anyagok zérusponthi entrópiája nulla.

11. A szabadenergia definíciója: $A \equiv U - TS$, ahol T a hőmérséklet, S az entrópia, U a belső energia.

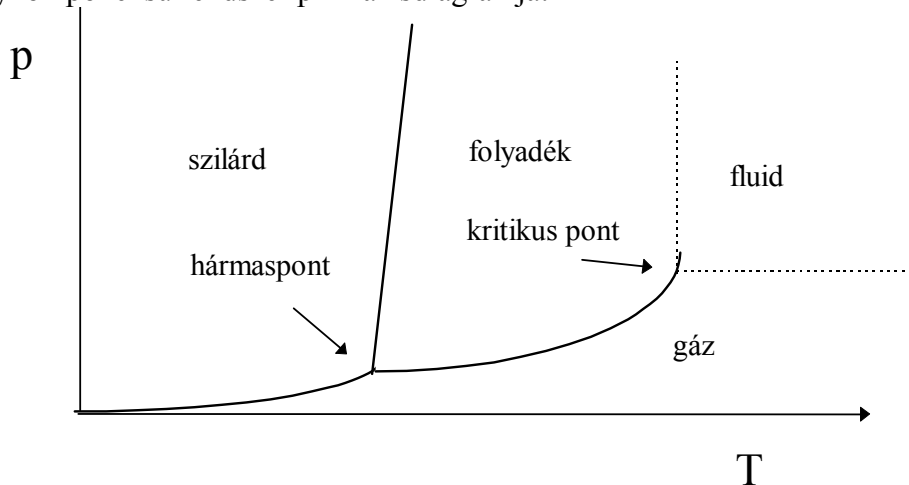
12. A szabadentalpia definíciója: $G \equiv H - TS$, ahol T a hőmérséklet, S az entrópia, H pedig az entalpia.

13. Állandó hőmérsékletű és nyomású zárt rendszerben, ha egyéb munka nincs, a szabadentalpia spontán folyamatban csökken, egyensúlyban minimuma van:
 $\Delta G_{T,p} \leq 0$, $dG_{T,p} \leq 0$.

14. A belső energia teljes differenciálja zárt rendszerben, ha nincs egyéb munka (zárt rendszer fundamentális egyenlete): $dU = -pdV + TdS$, ahol $-pdV = \delta W$ a differenciális munka és $TdS = \delta Q$ a differenciális hő.

15. A szabadentalpia teljes differenciálja zárt rendszerben, ha nincs egyéb munka
 $dG = Vdp - SdT$

16. Egykomponensű rendszer p-T fázisdiagramja:



17. A Clapeyron egyenlet: $\frac{dp}{dT} = \frac{\Delta H_m}{T \Delta V_m}$, ahol ΔH_m a moláris entalpiaváltozás (látens

hő), ΔV_m a fázisátalakulással járó móltérfogatváltozás, T az abszolút hőmérséklet.
 (A moláris mennyiségek helyett fajlagosakat is használhatunk.)

18. A Clausius - Clapeyron egyenlet: $\ln\{p\} = -\frac{\lambda}{RT} + C$, $\ln \frac{p_2}{p_1} = \frac{\lambda}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$, ahol λ
 a moláris párolgáshő.

19. A tökéletes gáz moláris szabadentalpiája (kémiai potenciálja): $G_m = G_m^0 + RT \ln \frac{p}{p^0}$
 ahol G_m^0 a standard szabadentalpia, $p^0 = 10^5$ Pa (a standard nyomás), p az aktuális nyomás.

20. A standard reakciószabadentalpia és az egyensúlyi állandó kapcsolata:
 $\Delta_r G^0 = -RT \ln K$

21. Az egyensúlyi állandó tökéletesgáz-reakciókban $K = \frac{\prod \left(\frac{p_B}{p^0} \right)^{\nu_B}}{\prod \left(\frac{p_A}{p^0} \right)^{\nu_A}}$,

ahol Π a produktum jele (a mögötte álló mennyiségeket összeszorozzuk), ν_i a reakcióban szereplő anyagok sztöchiometriai együtthatója, p_i az egyes komponensek parciális nyomása,

$p^0 = 10^5$ Pa standard nyomás. Az A index a kiindulási anyagokra, a B index a termékekre vonatkozik.

22. A Le-Chatelier elv: Az egyensúlyban lévő rendszer a külső megzavarásra úgy válaszol, hogy a zavarás hatásait minimálisra csökkentse. Pl. a kémiai reakciók egyensúlyát a hőmérséklet emelése az endoterm ("hőemésztő") irányba tolja el.

23. Az egyensúlyi állandó hőmérsékletfüggése:

$$\frac{d \ln K}{dT} = \frac{\Delta_r H^0}{RT^2}, \text{ ahol } \Delta_r H^0 \text{ a standard reakcióhő.}$$

24. Endoterm reakciók esetén ($\Delta_r H^0 > 0$) az egyensúlyi állandó nő a hőmérséklet növelésével, exoterm reakciók esetén ($\Delta_r H^0 < 0$) az egyensúlyi állandó csökken a hőmérséklet növelésével

25. A kémiai potenciál definícióegyenlete $\mu_i = \left(\frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{T,p,n_j} \quad j \neq i \quad [\text{J / mol}]$

26. Valamely komponens kémiai potenciálja megegyezik a rendszer szabadentalpiájának a megváltozásával, ha végtelen mennyiségű elegyhez a komponens egy mólját adjuk állandó hőmérsékleten és nyomáson.

27. A szabadentalpia teljes differenciálja nyitott rendszerben: $dG = Vdp - SdT + \sum \mu_i dn_i$, részletezve:

$$dG = \left(\frac{\partial G}{\partial p} \right)_{T,n_i} dp + \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_{p,n_i} dT + \sum_i \left(\frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{p,T,n_j} dn_i, \quad j \neq i$$

28. Tiszta anyagok kémiai potenciálja megegyezik a moláris szabadentalpiával:

$$\mu = G_m \text{ vagy } \mu^* = G_m^*$$

29. A Gibbs-féle fázisszabály: $Sz = K - F + 2$, Sz: szabadsági fokok száma, K: komponensek száma, F: fázisok száma.

30. A fugacitás olyan mennyiség, amellyel a nyomást helyettesítve a tökéletes gáz kémiai potenciáljának számítására szolgáló összefüggés reális gázokra is érvényes.

31. $\mu = \mu^0 + RT \ln \frac{f}{p^0} \quad \left(G_m = G_m^0 + RT \ln \frac{f}{p^0} \right)$, ahol $\mu^0 = G_m^0$, a standard kémiai potenciál (a moláris szabadentalpia) p^0 nyomáson, tökéletesgáz-viselkedést feltételezve) és f a gáz fugacitása.

32. $V_i = \left(\frac{\partial V}{\partial n_i} \right)_{p,T,n_j}$, $n_j \neq n_i$. Egy komponens parciális móltérfogata egyenlő az elegy térfogatának megváltozásával, ha az illető komponensből egy mólt adunk az elegy végtelen mennyiségéhez állandó hőmérsékleten és nyomáson.

$$\text{Kétkomponensű elegyre } V_1 = \left(\frac{\partial V}{\partial n_1} \right)_{p,T,n_2} \quad V_2 = \left(\frac{\partial V}{\partial n_2} \right)_{p,T,n_1}$$

33. Az extenzív sajátosságok a parciális moláris mennyiségekből additíve tevődnek össze. (Ez igaz reális és ideális elegyekre is, az utóbbi esetben a parciális moláris mennyiség megegyezik a tiszta komponens moláris sajátosságával.)

$$\text{pl.: } V = n_1 V_1 + n_2 V_2, \quad G = n_1 \mu_1 + n_2 \mu_2$$

34. A parciális moláris szabadentalpia egyenlő a kémiai potenciállal:

$$\mu_i = \left(\frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{T,p,n_j} \quad n_j \neq n_i \quad [\text{J / mol}]$$

35. Az elegy szabadentalpiája a komponensek kémiai potenciáljából additíve tevődik össze: $G = \sum n_i \mu_i$, kétkomponensű elegyben: $G = n_1 \mu_1 + n_2 \mu_2$
36. A Raoult-törvény: $p_i = x_i p_i^*$ (ideális folyadékelegy, tökéletes gáz)
 $p_i = a_i p_i^*$ (reális folyadékelegy, tökéletes gáz)
 p_i : parc. nyomás a gőztérben p_i^* : tiszta komp. gőznyomása
 x_i : móltört a folyadékfázisban a_i : racionális aktivitás a folyadékban
37. A kémiai potenciál ideális folyadékelegyben: $\mu_i = \mu_i^* + RT \ln x_i$ μ_i^* : tiszta komponens kémiai potenciálja (moláris szabadentalpiája)
38. A kémiai potenciál reális folyadékelegyben: $\mu_i = \mu_i^* + RT \ln a_i$ a_i : a komponens racionális aktivitása
39. Az aktivitás (racionális aktivitás) egy olyan mennyiség, amelyet a móltört helyébe írva a reális elegyben a kémiai potenciált ugyanazzal az összefüggéssel számítjuk ki, mint ideális elegyben.
40. Az elegyedési entrópia ideális elegyben: $\Delta_e S_{id} = -n R \sum x_i \ln x_i = -R \sum n_i \ln x_i$
41. A közepes aktivitás: $a_{\pm} = \sqrt{a_K^{v_K} a_A^{v_A}}$, ha az elektrolit $\nu = \nu_A + \nu_K$ ionra disszociál, a_K és a_A a kation, ill. az anion egyéni aktivitása.
42. A közepes aktivitási koefficiens: $\gamma_{\pm} = \sqrt{\gamma_K^{v_K} \gamma_A^{v_A}}$, ha az elektrolit $\nu = \nu_A + \nu_K$ ionra disszociál, γ_K és γ_A a kation ill. az anion egyéni aktivitási koefficiense.
43. Az ionerősség: $I_m = 0,5 \sum m_i z_i^2$, z_i : töltésszám, m_i : molalitás
vagy $I_c = 0,5 \sum c_i z_i^2$, c_i : koncentráció.
44. Az elektromotoros erő és a cellareakció szabadentalpiaváltozásának kapcsolata:
 $\Delta G = -zFE$
45. Az elektromotoros erő és a cellareakció entrópiaváltozásának kapcsolata:
 $\Delta S = zF \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_p$
46. Az elektromotoros erő és a cellareakció entalpiaváltozásának kapcsolata:
 $\Delta H = zF \left(T \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_p - E \right)$
47. Nernst egyenlet: $E = E^0 - \frac{RT}{zF} \ln \frac{\Pi a_B^{v_B}}{\Pi a_A^{v_A}}$, ahol E az elektromotoros erő, E^0 a standard elektromotoros erő, a_A -k a kiindulási anyagok, a_B -k a termékek aktivitásai a cellareakcióban. Π a produktum jele.
48. A standard elektromotoros erő és a cellareakció egyensúlyi állandójának kapcsolata:
 $E^0 = \frac{RT}{zF} \ln K$, vagy $K = e^{\frac{zF}{RT} E^0}$
49. Az elektródpotenciál egy olyan galváncella elektromotoros ereje, amelynek jobboldali elektródja a kérdéses elektród, a baloldali elektródja standard hidrogénelektrod.
50. Standard hidrogénelektrod: platina fém merül olyan oldatba, amelyben a hidrogén-ionok aktivitása egységnyi, és a platinát 1 bar nyomású hidrogéngáz veszi körül.

51. Az elektródpotenciál: $\varepsilon = \varepsilon^o + \frac{RT}{nF} \ln \frac{a_{\text{ox}}}{a_{\text{red}}}$, vagy $\varepsilon = \varepsilon^o + \frac{RT}{nF} \ln \frac{\Pi a_{\text{ox}}^{\nu_{\text{ox}}}}{\Pi a_{\text{red}}^{\nu_{\text{red}}}}$,

ahol ε az elektródpotenciál, ε^o a standard elektródpotenciál (amelyet akkor mérünk, ha minden aktivitás egységnyi), a_{ox} -ok az oxidált formák, a_{red} -ek a redukált formák aktivitásai az elektródreakcióban, Π a produktum jele.

52. Reakciósebesség definíciója: $v = \frac{1}{\nu_i V} \left| \frac{dn_i}{dt} \right|$, ahol i a reaktáns vagy termék indexe,

ν_i sztöch. Együttható, V a térfogat.

53. Reakciókoordináta definíciója: $\xi = \frac{n_A^0 - n_A}{\nu_A}$

54. Konverziófok definíciója: $w_A = \frac{n_A^0 - n_A}{n_A^0}$, ahol A valamelyik reaktáns.

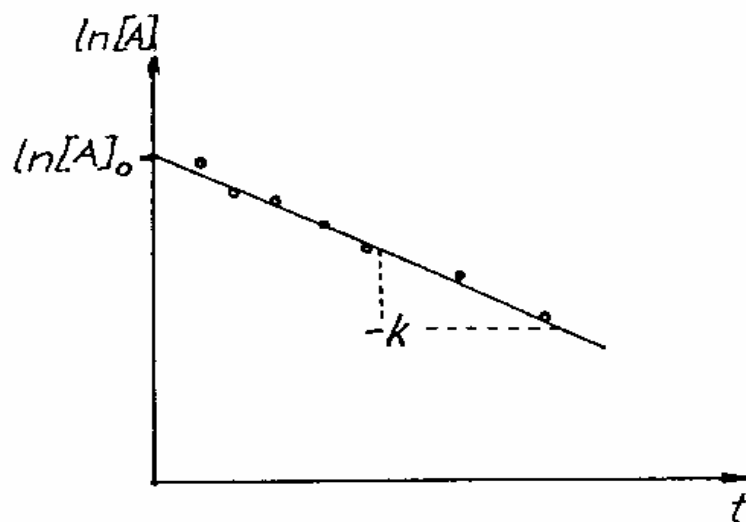
55. Egy elemi reakció molekularitásának azoknak a molekuláknak a számát nevezzük, amelyeknek a reakció létrejötte érdekében ütközniük kell.

56. A $v = k [A]^\alpha [B]^\beta [C]^\gamma$ sebességi egyenletben a kitevők összegét ($\alpha + \beta + \gamma$ -t) a reakció rendjének nevezzük. Az egyes komponensekre vonatkozó kitevőket pedig részrendeknek hívjuk.

57. Elsőrendű reakció sebességi egyenlete: $\ln \frac{[A]}{[A]_0} = -kt$ vagy $[A] = [A]_0 e^{-kt}$

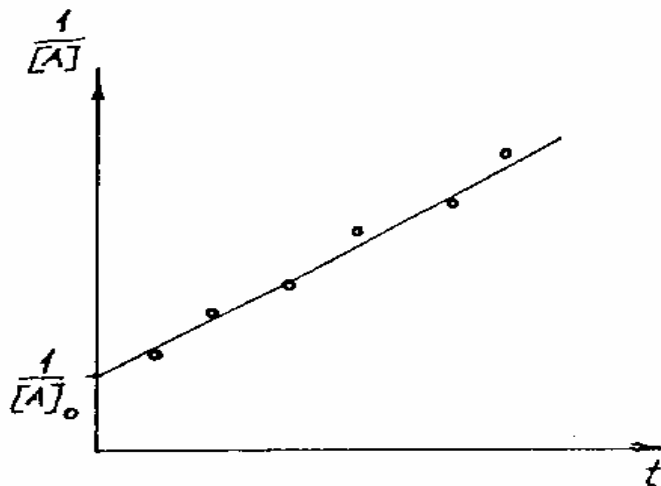
58. A felezési idő és a sebességi állandó kapcsolata elsőrendű reakcióban: $t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k}$

59. Elsőrendű reakcióra vonatkozó koncentráció-idő függvény linearizált alakja $\ln[A] = \ln[A]_0 - kt$, $\text{tg } \alpha = -k$



60. Másodrendű bomlások kinetikájának linearizált formája:

$$\frac{1}{[A]} = \frac{1}{[A]_0} + kt, \quad \text{tg } \alpha = k \quad \text{vagy} \quad \frac{1}{[A]} = \frac{1}{[A]_0} + 2kt, \quad \text{tg } \alpha = 2k$$

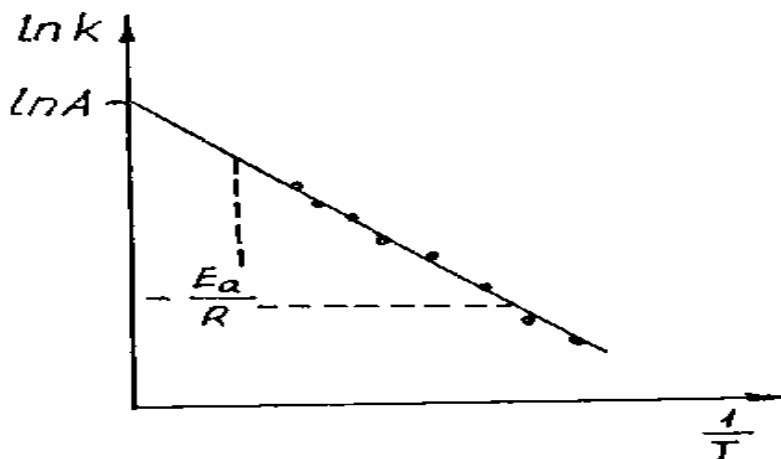


61. Másodrendű bomlás felezési idejének és sebességi állandójának a kapcsolata:

$$t_{1/2} = \frac{1}{2k[A]_0}$$

62. Arrhenius egyenlete: $k = Ae^{-E_a/RT}$, ahol k a sebességi állandó, E_a az aktiválási energia, A a preexponenciális tényező.

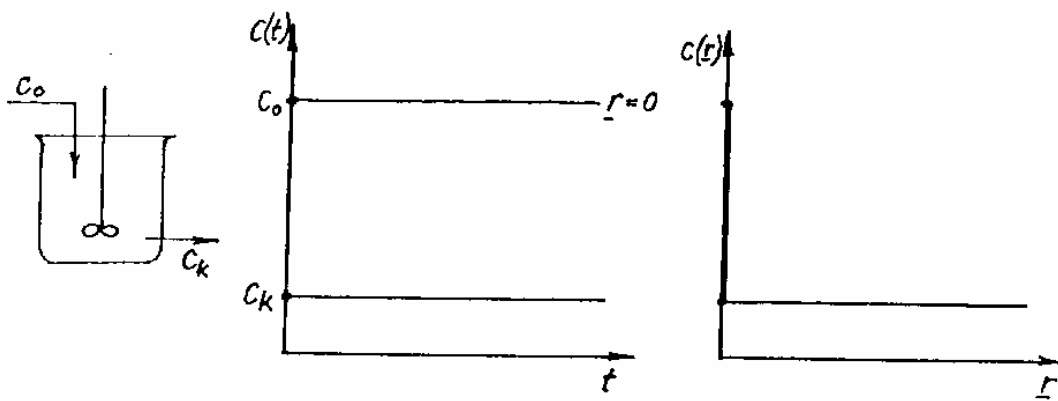
63. Az Arrhenius egyenlet linearizált formája: $\ln k = \ln A - \frac{E_a}{RT}$, $\text{tg } \alpha = -E_a/R$



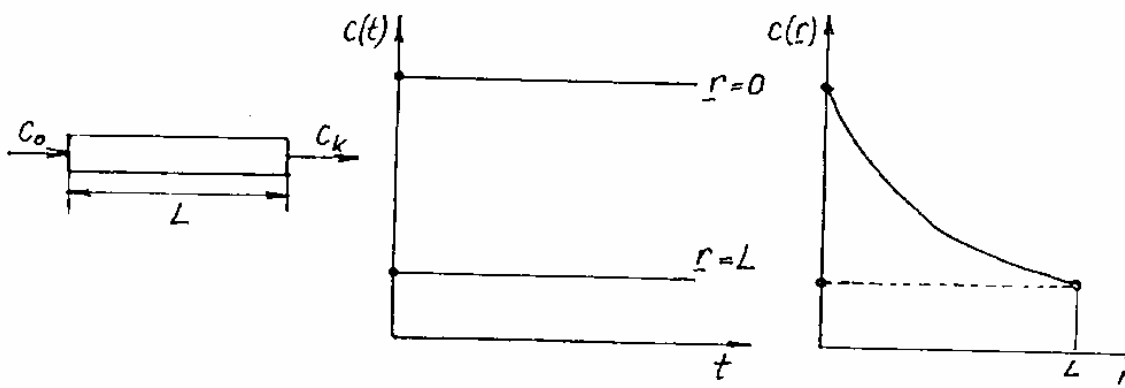
64. Heterogén reakciók sebessége (Időegység alatt felületegységen átalakult

anyagmennyiség): $v = \frac{1}{\nu_A} \frac{1}{A_s} \left| \frac{dn_A}{dt} \right|$, ahol A_s a felület nagysága

65. A koncentráció az idő és a hely függvényében ideális kevert reaktorban:



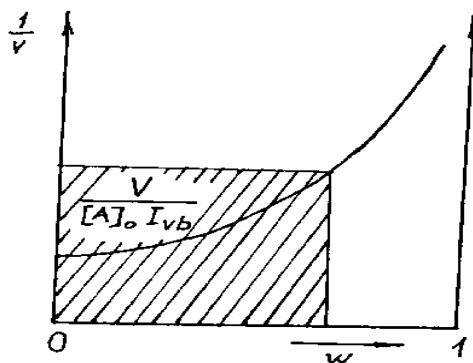
66. A koncentráció az idő és a hely függvényében ideális csőreaktorban:



67. Ideális kevert reaktor alapegyenlete: $\frac{1}{S} \equiv \frac{V}{I_{vb}} = [A]_0 \frac{w}{v}$, ahol S a t érsebesség,

V a reaktor térfogata, I_{vb} az időegység alatt betáplált össz-térfogat, $[A]_0$ valamelyik reaktáns betáplálási koncentrációja w a konverziófok A -ra nézve és v a reakciósebesség.

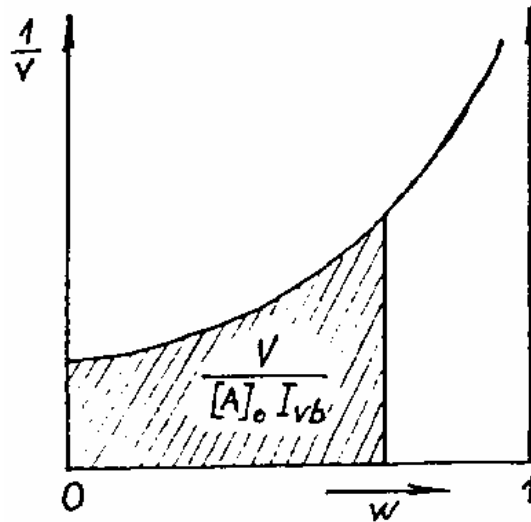
68. Kever reaktor alapegyenletének grafikus megoldása:



69. Ideális csőreaktor alapegyenlete: $\frac{1}{S} \equiv \frac{V}{I_{vb}} = [A]_0 \int_0^w \frac{dw}{v}$, ahol S a terebesség,

V a reaktor térfogata, I_{vb} az időegység alatt betáplált össz-térfogat, $[A]_0$ valamelyik reaktáns betáplálási koncentrációja w a konverzió fok A-ra nézve és v a reakciósebesség.

70. Csőreaktor alapegyenletének grafikus megoldása:



71. Az elektródreakció sebessége (v) és az áramsűrűség (j) közötti kapcsolat: $v = \frac{j}{zF}$

72. A túlfeszültség a cellapotenciál (E) eltérése az egyensúlyi (E_{eq}) értéktől:

$$\eta = E - E_{eq}$$

73. A Tafel-egyenlet: $\eta = a + b \log j$, ahol η a túlfeszültség, j az áramsűrűség, a és b konstansok.

74. A diffúziós koefficiens (D) mértékegysége m^2/s , folyadékokban 10^{-9} , gázokban 10^{-5} m^2/s nagyságrendű.

75. Fick I. törvénye: $\frac{\partial n}{\partial t} = -DA \frac{\partial c}{\partial x}$, $j_n = -D \frac{\partial c}{\partial x}$, ahol $\frac{\partial n}{\partial t}$ az A keresztmetszeten

időegység alatt átdiffundált anyagmennyiség, D a diffúziós koefficiens, j_n az anyagáram-sűrűség.

Három dimenzióban: $j_n = -D \text{grad } c$

76. Fick II. törvénye: $\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$,

három dimenzióban: $\frac{\partial c}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right)$

77. Fourier hővezetési törvénye: $\frac{\partial q}{\partial t} = -\lambda A \frac{\partial T}{\partial x}$ $j_u = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x}$,

ahol $\frac{\partial q}{\partial t}$ az A keresztmetszeten időegység alatt átment energia, λ a hővezetési tényező, j_u az energiaáram-sűrűség.

78. A hővezetési tényező mértékegysége: $J m^{-1} s^{-1} K^{-1}$.

79. Newton viszkozitási törvénye: $F_x = -\eta A \frac{\partial v_x}{\partial y}$, $\tau = \eta \frac{\partial v_x}{\partial y}$

ahol F_x két, egymáshoz képest (x irányban) mozgó, A felületű folyadékréteg között fellépő erő (nyíróerő) η a viszkozitás (belső súrlódás). $\frac{\partial v_x}{\partial y}$ kifejezi az x irányú

sebesség változását a rá merőleges y irányban (sebesség-gradiens), τ a nyírófeszültség (impulzusáram-sűrűség).

80. A Hagen-Poiseuille egyenlet: kör keresztmetszetű kapillárisban az időegység alatt átáramló folyadékmennyiség: $\frac{dV}{dt} = \frac{R^4 \pi}{8\eta l} (p_1 - p_2)$, ahol R a kapilláris sugara, l a hossza, p_1 és p_2 a nyomások a kapilláris két oldalán, η a folyadék viszkozitása.