

Kislexikon biológus-hallgatóknak

2017. november 5.

A termodinamika főtételei:

0. *főétel*: Ha az A test termikus egyensúlyban van a B testtel, és a B test termikus egyensúlyban van a C testtel, akkor A és C is termikus egyensúlyban vannak egymással.

1. *főétel*: $\Delta U = q + w$, ahol ΔU a rendszer belső energiájának megváltozása, q a hőközlés a rendszerrel, w a rendszer által végzett munka.

2. *főétel*: (1) Hőt nem lehet teljes mértékben munkává átalakítani. (2) Hő önként csak magasabb hőmérsékletű helyről áramlik alacsonyabb hőmérsékletű hely felé. (3) A környezetével kölcsönhatásban nem álló (elszigetelt) rendszer entrópiája nem csökkenhet (entrópiatétel)

3. *főétel*: Tökéletesen kristályos, tiszta anyagok entrópiája $T = 0$ K hőmérsékleten zérus.

állapotjelző: egy fizikai rendszer makroszkopikus állapotát meghatározó mennyiség

állapotegyenlet: az állapotjelzők között fennálló összefüggés

ideális gáz: az a (képzeletbeli) gáz, amelyre pontosan érvényes az általános gáztörvény $pV = nRT$, ahol p a nyomás [Pa], V a térfogat [m^3], n az anyagmennyiség [mol], R a gázállandó ($8,3145 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$), T a hőmérséklet [K]

nyomás egységek átszámítása: $1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa}$; $1 \text{ atm} = 760 \text{ Hgmm} = 760 \text{ torr} = 101325 \text{ Pa}$

rendszer: az általunk vizsgált térrész

környezet: a rendszert körülvevő tér

nyitott rendszer: anyag és energia is áramolhat a rendszer és a környezete között

zárt rendszer: csak energiaátadás lehetséges a rendszer és a környezete között

izolált rendszer: a rendszer és a környezet között semmiféle kölcsönhatás nincs

állapotfüggvény: Megváltozása csak az állapotjelzők kezdeti és végső értékétől függ és független attól, hogy az állapotjelzők a változás során milyen közbenső értékeken mentek át. Megváltozását teljes differenciál írja le.

útfüggvény (másnéven folyamatfüggvény): Megváltozása nem csak az állapotjelzők kezdeti és végső értékétől függ, de függ attól is, hogy az állapotjelzők a változás során milyen közbenső értékeken mentek át. Megváltozását teljes differenciál nem írja le.

extenzív mennyiség: értéke függ a rendszer anyagmennyiségétől és **azonos** részrendszerek egyesítésekor mindig összeadódik

intenzív mennyiség: értéke független a rendszer anyagmennyiségétől és részrendszerek egyesítésekor kiegyenlítődhet

reverzibilis folyamat: a rendszer megváltozása egyensúlyi állapotok sorozatán keresztül. Reverzibilis folyamat nem létezik, de a lassú változások közel ilyenek.

irreverzibilis folyamat: a rendszer megváltozása nemegyensúlyi állapotok sorozatán keresztül. A valódi folyamatok mind irreverzibilisek.

belső energia: egy testet felépítő részecskék kölcsönhatási és kinetikus energiája; abszolút értéke határozatlan. A belső energia (U) állapotfüggvény és extenzív mennyiség. [J]

egocentrikus előjelkonvenció: (magyarul: rendszerközpontú előjel megállapodás) a rendszer által végzett munka és leadott hő negatív előjelű (ilyenkor a rendszer energiája csökken), a rendszeren végzett munka és az általa felvett hő pozitív előjelű (ilyenkor a rendszer energiája növekszik)

térfogati munka: rendszer munkavégzése, ha térfogata megváltozik nem nulla külső nyomás esetén.

elemi térfogati munka: $\delta w = -p_{\text{ex}} dV$

entalpia: $H = U + pV$, ahol U a belső energia, p a nyomás és V a térfogat. Az entalpia állapotfüggvény és extenzív mennyiség. [J]

$U(T,V)$ teljes differenciálja:
$$dU = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V dT + \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T dV$$

$H(T,p)$ teljes differenciálja:
$$dH = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_p dT + \left(\frac{\partial H}{\partial p}\right)_T dp$$

hőkapacitás (általános definíció): $C = \frac{\delta q}{dT}$ ahol δq a rendszer által felvett vagy leadott hő, dT az

eközben bekövetkező hőmérsékletváltozás. Pontatlanul, de szemléletesen a hőkapacitás az a hőmennyiség, ami a rendszer hőmérsékletét 1 Kelvinnel növeli meg. [J K⁻¹] Az általános hőkapacitás fogalomnál nincs kikötésünk arra, hogyan változik a hőközlés közben a térfogat, a nyomás, vagy mekkora a rendszer anyagmennyisége!

hőkapacitás állandó térfogaton: $C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V$, tehát ∂T hőmérséklet-változáshoz szükséges ∂U

belső energia változás állandó térfogaton. [J K⁻¹]

hőkapacitás állandó nyomáson: $C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_p$, tehát ∂T hőmérséklet-változáshoz szükséges ∂H

entalpia változás állandó nyomáson. [J K⁻¹]

moláris hőkapacitás: 1 mól anyag hőkapacitása.

entalpia hőmérsékletfüggése: ha ismerjük az entalpiát T_1 hőmérsékleten, akkor a C_p ismeretében kiszámíthatjuk T_2 hőmérsékletre:

$$H(T_2) = H(T_1) + \int_{T_1}^{T_2} C_p dT$$

Ha C_p -t a hőmérséklettől függetlennek tekinthetjük a T_1 - T_2 hőmérséklettartományban, akkor

$$H(T_2) = H(T_1) + C_p(T_2 - T_1)$$

exoterm folyamat: olyan kémiai vagy fizikai folyamat, amelyben hő szabadul fel

endoterm folyamat: olyan kémiai vagy fizikai folyamat, amelyben hő nyelődik el

sztoichiometriai együttható (ν_j): reakcióegyenletben a reaktánsok és termékek elfogyási-keletkezési arányait kifejező szám. Értéke függ a reakcióegyenlet felírásától, reaktánsokra negatív, termékekre pozitív.

kémiai reakció egyenletének általános alakja: $\sum_j \nu_j A_j = 0$, ahol ν_j a j -edik anyagfajta

sztoichiometriai együtthatója, A_j pedig a j -edik anyagfajta képlete.

termokémia: a termodinamikának az az ága, amely kémiai reakciók hőhatásával foglalkozik.

standard állapot: egy anyag akkor van standard állapotban, ha (1) kémiailag egynemű (tisza) és (2) nyomása $p^\ominus = 1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa}$. A hőmérséklete tetszőleges lehet!

termokémiai egyenlet: olyan kémiai egyenlet, amiben feltüntetik a reaktánsok és a termékek állapotát is (pl. halmazállapot, szolvatációs állapot).

standard reakcióentalpia $\Delta_r H^\ominus$: a standard állapotú reaktánsoktól a standard állapotú termékekig vezető reakció során bekövetkező entalpiaváltozás tetszőleges, de adott hőmérsékleten. [J mol⁻¹]

standard moláris képződési entalpia ΔH_{fj}^\ominus : egy vegyület referenciaállapotú elemeiből való képződésének standard reakcióentalpiája. Referenciaállapotú elemek standard moláris képződési entalpiája nulla. [J mol⁻¹]

referenciaállapotú elem: az elem standard nyomáson és az adott hőmérsékleten legstabilisabb állapota. (Kivételesen: szobahőmérsékleten a fehér foszfort tekintjük referencia-állapotú elemnek.)

standard reakcióentalpia számítása a standard moláris entalpiákból: $\Delta_r H^\ominus = \sum_j \nu_j H_{m,j}^\ominus$

standard reakcióentalpia számítása a standard moláris képződési entalpiákból:

$$\Delta_r H^\ominus = \sum_j \nu_j \Delta H_{fj}^\ominus$$

Hess tétele: Az eredő reakcióentalpia azon egyedi reakciók entalpiáinak összege, amelyekre a bruttó reakció felosztható.

standard reakcióentalpia hőmérsékletfüggése (avagy Kirchhoff tétele):

$$\left(\frac{\partial \Delta_r H^\ominus}{\partial T}\right)_p = \sum_j \nu_j c_p^j = \Delta c_p, \text{ ahol } \Delta_r H^\ominus \text{ a standard reakcióentalpia, } \nu_j \text{ a } j\text{-edik anyag}$$

sztoichiometriai együtthatója, c_p^j a j -edik anyag állandó nyomáson vett moláris hőkapacitása, Δc_p a

reakcióban résztvevő anyagok hőkapacitásainak sztöchiometriai számmal súlyozott összege. Integrált alak:

$$\Delta_r H^\ominus(T_2) = \Delta_r H^\ominus(T_1) + \int_{T_1}^{T_2} \Delta C_p dT$$

$$\Delta_r H^\ominus(T_2) = \Delta_r H^\ominus(T_1) + \Delta C_p (T_2 - T_1); \quad (\Delta C_p \text{ állandó}).$$

entrópia (S): Megváltozása: $dS = \frac{\delta q_{\text{rev}}}{T}$, ahol δq_{rev} a rendszer által reverzibilis folyamatban felvett

vagy leadott hő T hőmérsékleten. Az entrópia állapotfüggvény és extenzív sajátság. [J K^{-1}]

entrópiatétel: A környezetével kölcsönhatásban nem álló (elszigetelt) rendszer entrópiája nem csökkenhet.

Clausius-egyenlőtlenség: $dS \geq \frac{\delta q}{T}$, ahol dS az entrópiaváltozás, δq a rendszer által felvett vagy

leadott hő, T a rendszer hőmérséklete. Irreverzibilis változás esetére a $>$ jel, reverzibilis esetre az $=$ jel vonatkozik.

hőerőgép: olyan gép, amely hőt mechanikai munkává alakít át. Egy hőerőgépnek legalább két hőtartállyal van kapcsolata.

Carnot-hatásfok definíciója: hőerőgép lehetséges legnagyobb hatásfoka: $\eta_C = \frac{|w_{\text{max}}|}{|q_m|}$, ahol w_{max} a

hőerőgép által végezhető maximális munka, q_m pedig a meleg hőtartályból kivett hő.

Carnot-hatásfok számítása: $\eta_C = 1 - \frac{T_2}{T_1}$, ahol T_1 a meleg hőtartály hőmérséklete és T_2 a hideg

hőtartály hőmérséklete

Boltzmann entrópia egyenlete: $S = k \ln \Omega$, ahol $k = \frac{R}{N_A}$ a Boltzmann-állandó, R az egyetemes

gázállandó ($8,3145 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$), N_A az Avogadro szám ($6,022 \times 10^{23}$) és Ω a rendszer azon lehetséges elrendeződéseinek száma, mely kiadja a rendszer összenergiáját.

dU számítása az 1. és 2. főtételek egyesítése alapján: $dU = -pdV + TdS$

dH számítása az 1. és 2. főtételek egyesítése alapján: $dH = Vdp + TdS$

szabadenergia (Helmholtz-függvény): $F = U - TS$, ahol U a belső energia, T a hőmérséklet, S az entrópia. F állapotfüggvény és extenzív mennyiség. [J]

szabadentalpia (Gibbs-függvény): $G = H - TS$, ahol H az entalpia, T a hőmérséklet, S az entrópia. G állapotfüggvény és extenzív mennyiség. [J]

szabadentalpia nyomásfüggése: $\left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_T = V$

integrált alak ideális gáz esetén:

$$G(p, T) - G(p^\ominus, T) = \int_{p^\ominus}^p V dp = \int_{p^\ominus}^p \frac{nRT}{p} dp = nRT \ln \frac{p}{p^\ominus}$$

szabadentalpia hőmérsékletfüggése 1: $\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_p = -S$; 2: $\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_p = -\frac{H}{T^2}$ (Gibbs-Helmholtz

egyenlet), ahol G a szabadentalpia, S az entrópia, H az entalpia, T a hőmérséklet

standard reakció-szabadentalpia: $\Delta_r G^\ominus = \sum_j \nu_j G_{mj}^\ominus = \sum_j \nu_j \mu_j^\ominus$, ahol ν_j a j -edik anyag

sztoichiometriai együtthatója, G_{mj}^\ominus (más jelöléssel μ_j^\ominus) pedig a j -edik anyagfajta standard nyomáshoz tartozó moláris szabadentalpiája.

standard moláris képződési szabadentalpia: egy vegyület referencia-állapotú elemeiből való képződésének standard reakció-szabadentalpiája. A referencia-állapotú elemek standard moláris képződési szabadentalpiáját nullának tekintjük.

homogén rendszer: Egy rendszer homogén, ha nincsenek benne makroszkopikus felületekkel elválasztott részek és az intenzív állapotjelzők értéke a rendszer minden pontjában ugyanaz.

inhomogén rendszer: nem homogén rendszer

heterogén rendszer: fázisokat tartalmazó rendszer

fázis: makroszkopikus határfelületekkel elválasztott homogén rendszer

fázisegyensúly: zárt rendszerben tiszta anyagok különböző fázisai között fennálló termodinamikai egyensúly

fázisegyensúly feltétele: egy tiszta anyag két fázisa állandó hőmérsékleten és nyomáson egymással egyensúlyban van, ha az anyag moláris szabadentalpiája a két fázisban azonos

olvadási egyensúly: szilárd-folyadék egyensúly

párolgási egyensúly: folyadék-gőz egyensúly

szublimációs egyensúly: szilárd-gőz egyensúly

allotrop egyensúly: allotrop módosulatok közötti egyensúly. Az allotrop módosulatok egy elem különböző kristályszerkezetű formái.

polimorf egyensúly: polimorf módosulatok közötti egyensúly. A polimorf módosulatok egy vegyület különböző kristályszerkezetű formái.

forráspont: az a hőmérséklet, amelynél a folyadék belsejében levő buborékokban a gőznyomás megegyezik a külső nyomással

normális forráspont: forráspont 1 atm külső nyomáson (1 atm = 101325 Pa)

standard forráspont: forráspont 1 bar külső nyomáson (1 bar = 10⁵ Pa)

olvadáspont: az a hőmérséklet, ahol az adott nyomáson a szilárd és a folyadék fázis egyensúlyban van.

normális olvadáspont: olvadáspont 1 atm külső nyomáson (1 atm = 101325 Pa)

standard olvadáspont: olvadáspont 1 bar külső nyomáson (1 bar = 10⁵ Pa)

hármaspont: 1. olvadási hőmérséklet egy anyag saját gőznyomásán

2. adott anyagra jellemző hőmérséklet és nyomásérték, ahol a szilárd-, folyadék- és gőzfázis egyensúlyban van.

Clapeyron-egyenlet: $\frac{dp}{dT} = \frac{\Delta S_m}{\Delta V_m} = \frac{\Delta H_m}{T \Delta V_m}$, ahol p a nyomás, T a hőmérséklet, ΔS_m , ΔV_m , ΔH_m : a

fázisátlépéskor bekövetkező moláris entrópia, térfogat, illetve entalpiaváltozás. A Clapeyron-egyenlet minden fázisegyensúlyra alkalmazható.

Clausius–Clapeyron-egyenlet: $\frac{d \ln p}{dT} = \frac{1}{p} \frac{dp}{dT} = \frac{\Delta H_m}{RT^2}$ ahol p a nyomás, T a hőmérséklet, ΔH_m a

moláris párolgási illetve szublimációs entalpiaváltozás. A Clausius–Clapeyron-egyenlet a párolgási és a szublimációs egyensúlyra alkalmazható.

forráspont változása a nyomással: a Clausius–Clapeyron-egyenlet integrált alakja alapján

$$\ln \frac{p_2}{p_1} = -\frac{\Delta H_{vap}}{R} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$$

ahol T_1 a forráspont p_1 nyomáson, T_2 a forráspont p_2 nyomáson és ΔH_{vap} a párolgási entalpia. *gőznyomás változása a hőmérséklettel:* a Clausius–Clapeyron-egyenlet integrált alakja alapján

$$\ln \frac{p_2}{p_1} = -\frac{\Delta H_{vap}}{R} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$$

ahol p_1 a gőznyomás T_1 hőmérsékleten, p_2 a gőznyomás T_2 hőmérsékleten és ΔH_{vap} a párolgási entalpia.

fázisdiagram: olyan tartományok a nyomás-hőmérséklet diagramon, ahol az egyes fázisok termodinamikailag stabilak.

elegy: makroszkopikusan homogén, többkomponensű rendszer

korlátlan elegyedés: két vagy több anyag tetszőleges arányban elegyet képez

korlátozott elegyedés: két vagy több anyag csak meghatározott arányoknál képez elegyet

oldhatóság: egy anyag maximális elegybeli koncentrációja

tömeg tört: egy komponens tömege osztva az elegy tömegével. 0 és 1 közötti szám. Százszorosa a tömegszázalék.

móltört: egy komponens anyagmennyisége (móljainak száma) osztva az elegy anyagmennyiségével (az elegybeni komponensek móljainak összegével). 0 és 1 közötti szám. Százszorosa a mólszázalék.

molaritás: oldott anyag egységnyi térfogatú **oldatra** jutó anyagmennyisége. [mol dm⁻³]

molalitás: oldott anyag egységnyi tömegű **oldószerre** jutó anyagmennyisége. [mol kg⁻¹]

oldat: olyan elegy, ahol az egyik anyag koncentrációja sokkal nagyobb a többinél

oldószer: oldatban nagy koncentrációban jelenlevő anyag

oldott anyag: oldatban kis koncentrációban jelenlevő anyag

ideális elegy definíciója: olyan elegy, amelynek képződésekor a szabadentalpiaváltozás

$$\Delta G = nRT \sum_i x_i \ln x_i, \text{ ahol } n \text{ az elegy összes mólszáma, } R \text{ az egyetemes gázállandó, } T \text{ az abszolút}$$

hőmérséklet, x_i az i . komponens móltörtje.

reális elegy definíciója: nem ideális elegy, $\Delta G = nRT \sum_i x_i \ln x_i$ nem teljesül

ideális elegy képződésekor az entrópiaváltozás: $\Delta S = -nR \sum_i x_i \ln x_i$, ahol n az elegy összes

mólszáma, R az egyetemes gázállandó, T az abszolút hőmérséklet, x_i az i . komponens móltörtje.

parciális moláris mennyiség: egy extenzív mennyiség változása, ha elegyhez állandó T hőmérséklet, p

nyomás és elegyösszetétel mellett az i -edik komponens egy mólját adjuk. $\left(\frac{\partial Y}{\partial n_i}\right)_{p,T,n_j}$, ahol Y lehet

pl. V térfogat, G szabadentalpia, F szabadenergia. A parciális moláris mennyiségek függenek az elegy összetételétől és lehetnek negatívak is. Tiszta anyagok esetén a parciális moláris mennyiség egyenlő a megfelelő moláris mennyiséggel. A parciális moláris mennyiségnek semmi köze a parciális nyomáshoz.

kémiai potenciál: parciális moláris szabadentalpia $\mu_i = \left(\frac{\partial G}{\partial n_i}\right)_{p,T,n_j}$ Tiszta anyagok esetén a kémiai

potenciál egyenlő a moláris szabadentalpiával ($\mu_i = G_{mi}$). A kémiai potenciál intenzív mennyiség. [J mol⁻¹].

ideális elegyben az i -edik anyag kémiai potenciálja: $\mu_i = G_{m,i}^*(p,T) + RT \ln x_i$, ahol R az egyetemes gázállandó, T az elegy hőmérséklete, x_i az i -edik. anyag móltörtje, $G_{m,i}^*(p,T)$ a tiszta i -edik anyag moláris szabadentalpiája p nyomáson és T hőmérsékleten.

ideális gázok elegyében az i -edik anyag kémiai potenciálja: ideális gázok elegyedésekor mindig ideális elegyet alkotnak. Gázelegyekben szívesebben használják a parciális nyomást az összetétel kifejezésére.

$$\mu_i = G_{m,i}^*(p^\theta, T) + RT \ln \frac{p_i}{p^\theta}, \text{ ahol } R \text{ az egyetemes gázállandó, } T \text{ az elegy hőmérséklete, } p_i \text{ az}$$

i -edik. anyag parciális nyomása, $G_{m,i}^*(p^\theta, T)$ a tiszta i -edik anyag moláris szabadentalpiája standard (1 bar = 10⁵ Pa) nyomáson és T hőmérsékleten.

reális elegyben az i -edik anyag kémiai potenciálja: $\mu_i = G_{m,i}^*(p,T) + RT \ln a_i$, ahol R az egyetemes gázállandó, T az elegy hőmérséklete, a_i az i -edik. anyag aktivitása, $G_{m,i}^*(p,T)$ a tiszta i -edik anyag moláris szabadentalpiája p nyomáson és T hőmérsékleten.

reális gázok elegyében az i -edik anyag kémiai potenciálja:

$$\mu_i = G_{m,i}^*(p^\theta, T) + RT \ln \frac{f_i}{p^\theta}, \text{ ahol } R \text{ az egyetemes gázállandó, } T \text{ az elegy hőmérséklete, } f_i \text{ az } i\text{-edik.}$$

anyag fugacitása, $G_{m,i}^*(p^\theta, T)$ a tiszta i -edik anyag moláris szabadentalpiája standard (1 bar = 10⁵ Pa) nyomáson és T hőmérsékleten.

aktivitás: reális elegyben egy anyag koncentrációját jellemző dimenziómentes szám, aminek alapján pontos kémiai potenciál értéket számíthatunk a $\mu_i = G_{m,i}^*(p,T) + RT \ln a_i$ egyenlet felhasználásával.

fugacitás: reális gázelegyenben egy anyag „korrigált” parciális nyomását jellemző mennyiség [Pa], aminek alapján pontos kémiai potenciál értéket számíthatunk a $\mu_i = G_{m,i}^*(p^\theta, T) + RT \ln \frac{f_i}{p^\theta}$

egyenlet felhasználásával.

ebullioszkópos állandó: csak az oldószertől függő K_b arányossági tényező egy oldat m molalitása és ΔT forráspont emelkedése között: $\Delta T = K_b m$

ebullioszkópos állandó elméleti értéke: $K_b = \frac{RT^{*2} M_1}{\Delta H_{vap}}$, ahol T^* a tiszta oldószer forráspontja, M_1 az

oldószer moláris tömege (‘mólsúly’), ΔH_{vap} az oldószer moláris párolgási entalpiaváltozása, R a gázállandó

krioszkópos állandó: csak az oldószertől függő K_f arányossági tényező egy oldat m molalitása és ΔT fagyáspont csökkenése között: $\Delta T = K_f m$

krioszkópos állandó elméleti értéke: $K_f = \frac{RT^{*2} M_1}{\Delta H_{fus}}$, ahol T^* a tiszta oldószer olvadáspontja, M_1 az

oldószer moláris tömege (‘mólsúly’), ΔH_{fus} az oldószer moláris olvadási entalpiaváltozása, R a gázállandó

van't Hoff egyenlet az ozmózis nyomásra: $\Pi V = nRT$, ahol Π az ozmózisnyomás, V az oldat térfogata, n az oldott anyag mennyisége, R az egyetemes gázállandó és T az oldat hőmérséklete *avagy* $\Pi = cRT$, ahol c az oldott anyag moláris koncentrációja [mol m⁻³].

Raoult törvénye: ideális folyadékelegy feletti gőztérben egy anyag parciális nyomása egyenlő a tiszta anyag gőznyomásának és az anyag folyadékfázisbeli móltörtjének szorzatával, tehát $p_i = x_i p_i^*$, ahol x_i az i -edik anyag móltörtje a folyadékelegyenben, p_i^* a tiszta i -edik anyag gőznyomása, p_i az i -edik anyag parciális nyomása a gőztérben

Henry törvénye: reális elegy felett egy kis koncentrációjú anyag parciális nyomása arányos a folyadékfázisbeli móltörtjével: $p_i = x_i K_i$, ahol x_i az i -edik anyag móltörtje a folyadékelegyenben, K_i nyomásdimenziójú állandó, p_i az i -edik anyag parciális nyomása a gőztérben.

eutektikum (avagy *eutektikus elegy*) meghatározott hőmérsékleten (*eutektikus hőmérséklet*) változatlan összetétellel (*eutektikus összetétel*) megszilárduló olyan folyadékelegy, ahol a szilárd komponensek nem képeznek elegykristályt.

eutektikus hőmérséklet: eutektikus elegy megszilárdulásának hőmérséklete

eutektikus összetétel: eutektikum folyadékfázisának összetétele az eutektikus hőmérsékleten

K_x egyensúlyi állandó: $K_x = \prod_j x(e)_j^{v_j}$, ahol $x(e)_j$ az j -edik komponens móltörtje egyensúlyi

állapotban, v_j az j -edik komponenshez tartozó sztöchiometriai együttható.

K_p egyensúlyi állandó: $K_p = \prod_j \left(\frac{p(e)_j}{p^\theta} \right)^{v_j}$, ahol $p(e)_j$ az j -edik komponens parciális nyomása

egyensúlyi állapotban, v_j az j -edik komponenshez tartozó sztöchiometriai együttható.

reakciófok változó (ξ): változása megegyezik egy anyag kémiai reakció következtében bekövetkező mólszám változásával, osztva annak sztöchiometriai együtthatójával. Jellemző a reakció előrehaladására és független a kiválasztott anyagtól. $dn_j = v_j d\xi$

K_x egyensúlyi állandó számítása termodinamikai adatokból: $\Delta_r G^* = -RT \ln K_x$, ahol $\Delta_r G^*$ a reakció-szabadentalpia p nyomáson és T hőmérsékleten: $\Delta_r G^* = \sum_j v_j G_{m,j}^*(p, T)$, és K_x a móltörtekkal kifejezett egyensúlyi állandó.

K_p egyensúlyi állandó számítása termodinamikai adatokból: $\Delta_r G^\theta = -RT \ln K_p$, ahol $\Delta_r G^\theta$ a standard reakció-szabadentalpia T hőmérsékleten: $\Delta_r G^\theta = \sum_j v_j G_{m,j}^\theta(T)$ és K_p a parciális nyomásokkal kifejezett egyensúlyi állandó.

K_x egyensúlyi állandó hőmérsékletfüggése: $\frac{d \ln K_x}{dT} = -\frac{d}{dT} \left(\frac{\Delta_r G^*}{RT} \right) = \frac{\Delta_r H^*}{RT^2}$, ahol

K_x a móltörtekkel kifejezett egyensúlyi állandó, $\Delta_r H^*$ a reakcióentalpia p nyomáson és $\Delta_r G^*$ a reakció-szabadentalpia p nyomáson.

K_p egyensúlyi állandó hőmérsékletfüggése: $\frac{d \ln K_p}{dT} = -\frac{d}{dT} \left(\frac{\Delta_r G^\theta}{RT} \right) = \frac{\Delta_r H^\theta}{RT^2}$, ahol

K_p a parciális nyomásokkal kifejezett egyensúlyi állandó, $\Delta_r H^\theta$ a standard reakcióentalpia és $\Delta_r G^\theta$ a standard reakció-szabadentalpia.

K_x egyensúlyi állandó nyomásfüggése:

$\frac{d \ln K_x}{d p} = -\frac{\Delta_r V}{RT}$, ahol K_x a móltörtekkel kifejezett egyensúlyi állandó és $\Delta_r V$ a reakcióterfogat.

$$\Delta_r V = \sum_j \nu_j V_{m,j}$$

K_p egyensúlyi állandó nyomásfüggése: K_p nem függ a nyomástól

K_p és K_x átszámítása egymásba: $K_x = K_p \left(\frac{p}{p^\theta} \right)^{-\Delta \nu}$, ahol p az aktuális nyomás, p^θ a standard

nyomás (1 bar), és $\Delta \nu$ a mólszámváltozás a reakcióban ($\Delta \nu = \sum_j \nu_j$)

felületi feszültség: γ arányossági tényező egy folyadék felületének ΔA növekedése és az ehhez szükséges ΔE energia között: $\Delta E = \gamma \Delta A$. [J m^{-2}]=[N m^{-1}]

felületi energia: határfelületen levő részecskék többletenergija a belső (tömbfázisban levő) részecskékhez képest

Kelvin-egyenlet: $\ln \frac{p}{p^*} = \pm \frac{2 \gamma V_m}{RT r}$, ahol p a gömbült felület gőznyomása, p^* a síkfelszín

gőznyomása,

+ használandó felülről domború felszín (\cap , pl. Hg), – használandó felülről homorú felszín (\cup , pl. víz) esetén, γ a folyadék–gőz határfelületi feszültség [J m^{-2}], V_m a **folyadék** moláris térfogata, R az egyetemes gázállandó, T a folyadék hőmérséklete, r a folyadék sugara.

kapillárisemelkedés számítása: $h = \pm 2 \gamma / r \rho g$, ahol + előjel: emelkedés, – előjel: süllyedés, γ a folyadék–gőz határfelületi feszültség [J m^{-2}], r a folyadékfelszín görbületi sugara [m], ρ a folyadék sűrűsége [kg m^{-3}], g a nehézségi gyorsulás [9.81 m s^{-2}].

Eötvös-szabály: a felületi feszültség hőmérséklet-függését írja le: $\gamma V_m^{\frac{2}{3}} = k_E (T'_E - T)$, ahol γ a

folyadék felületi feszültsége, V_m a folyadék moláris térfogata (ezért $V_m^{\frac{2}{3}}$ -ot mólfelületnek is hívják), k_E

az Eötvös állandó, T'_E az adott folyadékra jellemző, a kritikus hőmérséklettől 4-6 K-nel eltérő érték.

adszorpció: felszínen való megkötődés

abszorpció: megkötődés egy anyag belsejében

fizisorpció: megkötődés másodlagos kötőerőkkel. Kémiai kötések nem keletkeznek.

kemisorpció: megkötődés, amely során kémiai kötések keletkeznek.

aktív hely: olyan hely a felületen, mely képes részecske megkötésére

relatív borítottság: az elfoglalt aktív helyek számának és az összes aktív hely számának hányadosa

$$\theta = \frac{N_j}{N}$$

adszorpció izoterma: a relatív borítottság (θ) az adszorbeálódó anyag parciális nyomásának függvényeként ábrázolva, állandó hőmérsékleten.

Langmuir-izoterma, $\theta = \frac{Kp}{1 + Kp}$, ahol θ a relatív borítottság, p az adszorbeálódó anyag parciális

nyomása, K az adszorpció állandó. ($K = \frac{k_a}{k_d}$, ahol k_a és k_d az adszorpció illetve deszorpció sebességi

együtthatója.) Akkor kapunk Langmuir izotermát, ha egy rétegű az adszorpció, a felület minden aktív helye egyenértékű és az adszorpció képességük nem változik a környezet borítottságával.

BET-izoterma (Brunauer–Emmett–Teller izoterma): állandó hőmérsékleten egy felületre rakódó anyag mennyisége az anyag parciális nyomása függvényében, ha ez az anyag több rétegben képes lerakódni.

diffúziós áramsűrűség (J_d): diffúzió hatására egységnyi felületen merőlegesen, egységnyi idő alatt áthaladt anyagmennyiség [$\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$]

diffúziós együttható: D arányossági tényező a Fick I. diffúzióegyenletben: $J_d = -D \frac{\partial c}{\partial x}$, ahol J_d a

diffúziós áramsűrűség és $\frac{\partial c}{\partial x}$ a koncentráció x irányú gradiense.

Fick I. törvénye, $J_d = -D \frac{\partial c}{\partial x}$, ahol J_d a diffúziós áramsűrűség, D a diffúziós együttható és $\frac{\partial c}{\partial x}$ a

koncentráció x irányú gradiense.

Fick II. törvénye, $\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$, ahol D a diffúziós együttható, $\frac{\partial c}{\partial t}$ a koncentrációváltozási

sebesség és $\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$ a koncentráció távolság szerinti második deriváltja.

konvekciós áramsűrűség (J_k): áramlás hatására egységnyi felületen merőlegesen, egységnyi idő alatt áthaladt anyagmennyiség [$\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$] $J_k = c v_x$, ahol c a koncentráció, v_x a közeg x irányú elmozdulása.

reakció-diffúzió-konvekció egyenlet, $\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial c}{\partial x} + f$, ahol a baloldal a

koncentrációváltozási sebesség egy adott helyen, a jobboldali tagok pedig balról jobbra rendre leírják a diffúzió, a konvekció (áramlás) és a kémiai reakciók hatását.

hőáram sűrűsége, J_q : hővezetés hatására egységnyi felületen merőlegesen, egységnyi idő alatt áthaladt hőmennyiség [$\text{J m}^{-2} \text{s}^{-1}$]

hővezetési együttható: λ arányossági tényező Fourier hővezetési egyenletében: $J_q = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x}$,

ahol J_q a hőáram-sűrűség és $\frac{\partial T}{\partial x}$ a hőmérséklet x irányú gradiense.

Fourier hővezetési egyenlete: $J_q = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x}$, ahol J_q a hőáram-sűrűség, λ a hővezetési együttható

és $\frac{\partial T}{\partial x}$ a hőmérséklet x irányú gradiense.

termodiffúzió: hőmérsékletkülönbség hatására végbemenő anyagvándorlás

koncentrációváltozási sebesség: egy anyag koncentrációjának idő szerinti deriváltja $\frac{dc_j}{dt}$

reakciósebesség: Egy reakcióban tetszőleges anyag koncentrációváltozási sebessége osztva annak sztöchiometriai együtthatóval. Jellemző a reakció sebességére és független a kiválasztott anyagtól. $r = \frac{1}{\nu_j} \frac{dc_j}{dt}$

$$r = \frac{1}{\nu_j} \frac{dc_j}{dt}$$

reakciósebességi együttható: a sebességi egyenletben a koncentrációk megfelelő hatványon vett szorzata és a reakciósebesség közötti arányossági tényező. $r = k \prod_j c_j^{\alpha_j}$ A reakciósebességi együttható nem változik a koncentrációkkal, de változhat a hőmérséklettel és nyomással.

j-edik anyag részrendje: a $r = k \prod_j c_j^{\alpha_j}$ sebességi egyenletben a j-edik anyag koncentrációjához tartozó α_j hatványkitevő. **Általában nem azonos a sztöchiometriai együtthatóval!**

bruttó rend: az összes anyagra vonatkozó részrend összege $\alpha = \sum_j \alpha_j$

kinetikai tömeghatás törvénye: elemi reakciók sebessége mindig kiszámítható a

$r = k \prod_j c_j^{\nu_j^B}$ képlettel, ahol k a sebességi együttható, c_j a j-edik anyag koncentrációja és ν_j^B a j-edik

anyag sztöchiometriai együtthatója a reakcióegyenlet **bal** oldalán. (A ν_j^B sztöchiometriai együtthatók mindig pozitívak.)

kinetikai differenciálegyenlet-rendszer felírása a reakciómechanizmus alapján:

$$\frac{dY_j}{dt} = \sum_i \nu_{ij} r_i; \quad j = 1, 2, \dots, n$$

ahol r_i az i -edik reakciólépés sebessége, $\nu_{ij} = \nu_{ij}^J - \nu_{ij}^B$ a j-edik anyagfajta mólszám változása az i -edik reakciólépésben és dY_j/dt a j-edik anyagfajta termelődési sebessége.

felezési idő: az az időtartam, amely alatt a kezdeti koncentráció a felére csökken. Elsőrendű bomlás esetén független a kezdeti koncentrációtól, minden más esetben függ a kezdeti koncentrációtól.

elsőrendű bomlásnál a koncentráció csökkenése: $c = c_0 e^{-kt}$ (linearizált alak: $\ln \frac{c}{c_0} = -kt$), ahol c a

t időponthoz tartozó koncentráció, c_0 a kezdeti koncentráció, k a sebességi együttható.

elsőrendű bomlás felezési ideje: $t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k}$ ahol k a sebességi együttható.

másodrendű bomlásnál a koncentráció csökkenése: $\frac{1}{c} = kt + \frac{1}{c_0}$, ahol c a t időponthoz tartozó

koncentráció, c_0 a kezdeti koncentráció, k a sebességi együttható.

másodrendű bomlás felezési ideje: $t_{1/2} = \frac{1}{kc_0}$ ahol k a sebességi együttható és c_0 a kezdeti

koncentráció.

sebességi együttható mértékegysége: Függ a rendüségétől. Ha az időt „s”, a koncentrációt „M”

(mol dm⁻³) egységben adják meg, akkor elsőrendű reakció k -ja esetén: [s⁻¹], másodrendű reakció k -ja esetén: [s⁻¹ M⁻¹], harmadrendű reakció k -ja esetén: [s⁻¹ M⁻²].

elemi reakció: olyan reakciólépés, mely a felírt egyenlet szerint valójában is végbemeget

molekularitás: egy elemi reakcióban az ütköző részecskék száma

unimolekulás reakció: nemreaktív ütközések vagy fényelnyelés következtében lejártszó elemi reakció

bimolekulás reakció: két részecske ütközése következtében lejártszó elemi reakció

trimolekulás reakció: három részecske egyidejű ütközése következtében lejártszó elemi reakció.

Arrhenius-egyenlet: leírja a sebességi együttható hőmérsékletfüggését: $k = A e^{-\frac{E_a}{RT}}$, ahol k a sebességi együttható, A a preexponenciális tényező, E_a az aktiválási energia, R az egyetemes gázállandó és T a hőmérséklet [K].

Arrhenius-ábrázolás: $\ln k$ ábrázolva $\frac{1}{T}$ függvényében. Ha a sebességi együttható hőmérsékletfüggése

leírható az Arrhenius egyenlettel, az $\ln k$ értékeket $\frac{1}{T}$ függvényében ábrázolva egyenest kapunk.

(Tehát az x -tengely: $\frac{1}{T}$; az y -tengely: $\ln k$)

bruttó reakció: a felírt reakcióegyenlet megadja az elreagáló és a keletkező anyagok arányát, de ilyen reakció valójában nem megy végbe. A bruttó reakció sok elemi reakció eredőjeként játszódik le.

reakciómechanizmus: az elemi reakciólépések listáját és a reakciólépések sebességi együtthatóinak hőmérséklet- és nyomásfüggését tartalmazó táblázat

láncvivő: nagyon reaktív közti termék láncreakcióban

láncreakció: a láncreakciókban nagyon reaktív közti termékek (láncvivők) keletkeznek, amelyek reagálnak a kiindulási anyaggal és elősegítik átalakulását végtermékké, miközben a láncvivők újraképződnek.

láncindítás, iniciáció	láncindító <i>avagy</i> lánckezdő reakciólépés
láncfolytatás	láncfolytató reakciólépés
láncelágazás	láncelágazó reakciólépés
lánclezárás, láncvégződés, termináció	lánczáró reakciólépés
inhibíció	inhibíciós reakciólépés

láncindító reakciólépés: olyan reakciólépés, amelyben láncvivők keletkeznek

láncfolytató reakciólépés: a reakciólépésben ugyanannyi láncvivő keletkezik, ahány elfogy.

láncágazó reakciólépés: a reakciólépésben több láncvivő keletkezik, mint ahány elfogy.

lánclezáró reakciólépés: olyan reakciólépés, amelyben a láncvivők száma csökken.

inhibíciós reakciólépés: a reakciólépésben ugyanannyi láncvivő keletkezik, ahány elfogy, de közben a végtermék is fogy.

nyílt láncú reakció: olyan láncreakció, amelyben nincs láncelágazás

elágazó láncú reakció: láncelágazást tartalmazó láncreakció