

# Kislexikon

2015. december 10.

*A termodinamika főtételei:*

*0. főtétele:* 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. főtétele:* (1)  $\Delta U = q + w$ , ahol  $\Delta U$  a rendszer belső energiájának megváltozása,  $q$  a hőközlés a rendszerrel,  $w$  a rendszer által végzett munka. (2) Nem létezik elsőfajú örökmozgó.

*2. főtétele:* (1) Hőt nem lehet teljes mértékben munkává átalakítani. (2) Hő önként csak magasabb hőmérsékletű helyről áramlik alacsonyabb hőmérsékletű hely felé. (3) Nem létezik másodfajú örökmozgó. (4) A környezetével kölcsönhatásban nem álló (elszigetelt) rendszer entrópiája nem csökkenhet (entrópiatétel)

*3. főtétele:* A tökéletesen kristályos, tiszta anyagok entrópiája a  $T=0$  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 [ $\text{m}^3$ ],  $n$  az anyagmennyiség [mol],  $R$  a gázállandó ( $8,3145 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ ),  $T$  a hőmérséklet [K]

*nyomásegységek átszámítása:* 1 bar =  $10^5$  Pa; 1 atm = 760 Hgmm = 760 torr = 101325 Pa

*parciális nyomás:* az a nyomás, amit akkor mérhetnénk, ha az adott komponens egyedül töltené be a rendelkezésre álló teljes térfogatot.

*Dalton törvénye:* Egy gázelegy nyomása a komponensek parciális nyomásainak összege.

*kompresszibilitási tényező:*  $Z = \frac{pV_m}{RT}$ , ahol  $p$  a nyomás,  $V_m$  a moláris térfogat  $\left(\frac{V}{n}\right)$ ,  $R$  az egyetemes

gázállandó,  $T$  a hőmérséklet

*Boyle-hőmérséklet:* ezen a hőmérsékleten, ha  $p \rightarrow 0$  (vagyis  $V_m \rightarrow \infty$ ), akkor  $Z \rightarrow 1$  és

$\frac{dZ}{dp} = \frac{dZ}{d\left(\frac{1}{V_m}\right)} = 0$ . Más szóval Boyle hőmérsékleten a  $Z(p)$  görbe vízszintesen indul.

*Viriál állapotegyenlet:*  $pV_m = RT(1 + B'p + C'p^2 + \dots)$  avagy  
 $Z = (1 + B'p + C'p^2 + \dots)$

ahol  $p$  a nyomás,  $V_m$  a móltérfogat,  $R$  az egyetemes gázállandó,  $T$  a hőmérséklet,  $B'$ ,  $C'$ , ... a viriál együtthatók.

*van der Waals-egyenlet:*  $\left(p + \frac{n^2 a}{V^2}\right)(V - nb) = nRT$ , ahol  $a$  és  $b$  tapasztalati állandók

*gázok izotermái:* gázok állandó hőmérsékleten felvett  $p(V)$  görbéi

*kritikus izoterma:* reális gázok  $V_m$ - $p$  görbéjén az az izoterma, amelyen egy vízszintes érintőjű inflexiós pont található

*kritikus hőmérséklet:* a kritikus izotermához tartozó  $T_c$  hőmérséklet.  $T_c$  alatt a térfogat csökkentésére nem a nyomás növekedése, hanem a légnemű anyag lecsapódása következik be.

*kritikus nyomás:* a kritikus izoterma inflexiós pontjához tartozó  $P_c$  nyomás

*kritikus moláris térfogat:* a kritikus izoterma inflexiós pontjához tartozó  $V_c$  moláris térfogat

*gőz:* légnemű anyag a kritikus hőmérséklet alatt

*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* (másképpen *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 kiegyenlíthető

*reverzibilis folyamat*: a rendszer megváltozása egyensúlyi állapotok sorozatán keresztül. Reverzibilis körfolyamat lejátszódása után a rendszer és a környezete minden állapotjelzője is az eredeti értékét veszi fel. Reverzibilis folyamat nem létezik, de a lassú változások közel ilyenek.

*irreverzibilis folyamat*: a rendszer megváltozása nemegyensúlyi állapotok sorozatán keresztül. Irreverzibilis körfolyamat lejátszódása után a rendszer visszakerül eredeti állapotába, de a környezete nem. 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)

*elsőfajú örökmozgó*: olyan elképzelt gép, amely munkát végez a rendszer energiájának csökkenése nélkül.

*másodfajú örökmozgó*: olyan elképzelt gép, amelynek egyetlen hőtartálya van, és ennek hűlése árán körfolyamatban (ciklikusan) munkát végez. A másodfajú örökmozgó 100% hatásfokkal lenne képes hőt munkává alakítani.

*térfogati munka*: rendszer munkavégzése, ha térfogata megváltozik nemnulla 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]

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

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

*izoterm Joule-Thomson együttható*:  $\mu_T = \left(\frac{\partial H}{\partial p}\right)_T$ , ahol  $T$  a hőmérséklet,  $p$  a nyomás és  $H$  az

entalpia.  $\mu_T$  izoterm körülmények között ( $T$  állandó) megmutatja, hogy a nyomásváltozás mekkora entalpiaváltozással jár.

*adiabatikus Joule-Thomson együttható*:  $\mu = \left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_H$ , ahol  $T$  a hőmérséklet,  $p$  a nyomás és  $H$  az

entalpia.  $\mu$  adiabatikus körülmények között ( $H$  állandó) megmutatja, hogy a nyomásváltozás mekkora hőmérsékletváltozással jár. Ha a nyomás csökkenésére egy gáz lehül, akkor  $\mu > 0$ . [ $\text{K Pa}^{-1}$ ]

*inverziós hőmérséklet*: az inverziós hőmérséklet felett egy gáz kiterjedéskor (tehát nyomás csökkenésekor) felmelegszik ( $\mu < 0$ ), alatta pedig lehül ( $\mu > 0$ ).

*hőkapacitás (általános definíció)*:  $C = \frac{\delta q}{dT}$  ahol  $\delta q$  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. [ $\text{J K}^{-1}$ ] 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  $\partial T$  hőmérséklet-változáshoz szükséges  $\partial U$

belső energia változás állandó térfogaton. [ $\text{J K}^{-1}$ ]

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

entalpia változás állandó nyomáson. [J K<sup>-1</sup>]

*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 ( $\nu_j$ ):* 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  $\nu_j$  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 kémiaileg egynemű (tisza) és nyomása  $p^\ominus = 1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa}$  (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<sup>-1</sup>]

*standard moláris képződési entalpia  $\Delta H_{fj}^\ominus$ :* egy vegyület referenciaállapotú elemeiből való képződésének standard reakcióentalpiája. Referenciaállapotú elemek standard moláris képződési entalpiája nulla. [J mol<sup>-1</sup>]

*referenciaállapotú elem:* az elem standard nyomáson és az adott hőmérsékleten legstabilisabb állapota. (Kivételek: 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,  $\Delta C_p$  a reakcióban résztvevő anyagok hőkapacitásainak sztoichiometriai 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  $\delta q_{\text{rev}}$  a rendszer által reverzibilis folyamatban felvett vagy leadott hő  $T$  hőmérsékleten. Az entrópia állapotfüggvény és extenzív sajátság. [J K<sup>-1</sup>]

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

*Clausius-egyenlőtlenség:*  $dS \geq \frac{\delta q}{T}$ , ahol  $dS$  az entrópiaváltozás,  $\delta q$  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:  $\eta_C = \frac{|w_{\max}|}{|q_m|}$ , 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  $\Omega$  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]

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

integrált alak ideális gáz esetén:

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

*G hőmérsékletfüggése 1:*  $\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_p = -S$

*G hőmérsékletfüggése 2: a Gibbs-Helmholtz egyenlet:*  $\left(\frac{\partial}{\partial T} \frac{G}{T}\right)_p = -\frac{H}{T^2}$ ,

ahol  $G$  a szabadentalpia,  $H$  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  $\nu_j$  a  $j$ -edik anyag

sztoichiometriai együtthatója,  $G_{mj}^\ominus$  (más jelöléssel  $\mu_j^\ominus$ ) 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

*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 = 10<sup>5</sup> 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 = 10<sup>5</sup> 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,  $\Delta S_m$ ,  $\Delta V_m$ ,  $\Delta H_m$ : a

fázisátlépéskor bekövetkező moláris entrópia, térfogat, illetve entalpiaváltozás.

*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,  $\Delta H_m$  a

moláris párolgási illetve szublimációs entalpiaváltozás

*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  $\Delta H_{vap}$  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  $\Delta H_{vap}$  a párolgási entalpia.

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

*termodinamikai rendszer szabadsági fokainak száma*: azon intenzív állapotjelzők száma, amelyek egymástól függetlenül megváltoztathatók anélkül, hogy új fázisok keletkeznének vagy fázisok tűnnének el

*elegy*: makroszkopikusan homogén többkomponensű rendszer

*Gibbs féle fázis szabály*:  $F + S_z = K + 2$ , ahol  $F$  a fázisok száma,  $S_z$  a rendszer termodinamikai szabadsági fokainak száma,  $K$  a komponensek száma.

*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

*tömegtört*: 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<sup>-3</sup>]

*molalitás*: oldott anyag egységnyi tömegű **oldószerre** jutó anyagmennyisége. [mol kg<sup>-1</sup>]

*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<sup>-1</sup>].

*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.

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

edik. anyag parciális nyomása,  $G_{m,i}^*(p^\theta, T)$  a tiszta  $i$ -edik anyag moláris szabadentalpiája standard (1 bar = 10<sup>5</sup> 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 = 10<sup>5</sup> 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 gázelegyben 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  $\Delta T$  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 ('mólsúlya'),  $\Delta H_{vap}$  az oldószer moláris párolgási entalpiaváltozása,  $R$  a gázállandó

*krioszkópos állandó*: csak az oldószertől függő  $K_f$  arányossági tényező egy oldat  $m$  molalitása és  $\Delta T$  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 ('mólsúlya'),  $\Delta H_{fus}$  az oldószer moláris olvadási entalpiaváltozása,  $R$  a gázállandó

*van't Hoff egyenlet az ozmózis nyomásra*:  $\Pi V = nRT$ , ahol  $\Pi$  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 [ $\text{mol m}^{-3}$ ].

*Raoult törvénye*: ideális folyadékkelegy 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 folyadékkelegyben,  $p_i^*$  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 folyadékkelegyben,  $K_i$  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 folyadékkelegy, ahol a szilárd komponensek nem képeznek elegykristályt.

*eutektikus hőmérséklet*: eutektikus elegy megszilárdulásának hőmérséklete

*eutektikus összetétel*: eutektikum összetétele

$K_x$  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* ( $\xi$ ): változása megegyezik egy anyag kémiai reakció következtében bekövetkező mólszám változásával, osztva annak sztöchiometriai együtthatójával. Jellemző a reakció előrehaladására és független a kiválasztott anyagtól.  $d n_j = \nu_j d \xi$

$K_x$  egyensúlyi állandó számítása termodinamikai adatokból:  $\Delta_r G^* = -RT \ln K_x$ , ahol  $\Delta_r G^*$  a reakció-szabadentalpia  $p$  nyomáson és  $T$  hőmérsékleten:  $\Delta_r G^* = \sum_j \nu_j G_{m_j}^*(p, T)$ , 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:  $\Delta_r G^\theta = \sum_j \nu_j G_{m_j}^\theta(T)$  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 móltörtekkal kifejezett egyensúlyi állandó,  $\Delta_r H^*$  a reakcióentalpia  $p$  nyomáson és

$\Delta_r G^*$  a reakció-szabaddentalpia  $p$  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-szabaddentalpia.

$K_x$  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,  $p^\theta$  a standard

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

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

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

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

gőznyomása,

+ használandó felülről domború felszín ( $\cap$ , pl. Hg), – használandó felülről homorú felszín ( $\cup$ , pl. víz) esetén,  $\gamma$  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.

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

*Eötvös-szabály:* a felületi feszültség hőmérséklet-függését írja le:  $\gamma_m^{\frac{2}{3}} = k_E (T'_e - T)$ , ahol  $\gamma$  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 ( $\theta$ ) az adszorbeálódó anyag parciális nyomásának függvényeként ábrázolva, állandó hőmérsékleten.

*Langmuir izoterma,*  $\theta = \frac{K p}{1 + K p}$ , ahol  $\theta$  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 a felület minden aktív helye egyenértékű és az adszorpció sebességük nem változik a környezet borítottságával.

viszkózitási együttható:  $\eta$  arányossági tényező a  $F = \eta A \frac{dv_x}{dy}$  egyenletben. Két folyadék rétege

laminárisan áramlik párhuzamosan  $x$  irányba. Az  $x$ -re merőleges  $y$  irányban  $dy$  távolságra  $dv_x$  a két réteg ( $x$  irányú) sebességének különbsége,  $A$  a rétegek érintkezési felülete és  $F$  a rétegek közötti (súrlódási) erő nagysága. SI alapegysége [Pa s], régi mértékegysége [1 poise (P) = 0.1 Pa s]

Stokes-féle ellenállástörvény:  $F = 6\pi\eta r v$ , ahol  $F$  a mozgó részecskére ható közegellenállási erő,  $\eta$  a viszkózitás,  $r$  a mozgó részecske sugara,  $v$  a részecske sebessége. Gömb alakú részecskékre érvényes.  
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 baloldali 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:  $\lambda$  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,  $\lambda$  a hővezetési együttható

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

termo-diffúzió: 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.  $r = \frac{1}{\nu_j} \frac{dc_j}{dt}$

*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  $\alpha_j$  hatványkitevő. **Általában nem azonos a sztöchiometriai együtthatóval!**

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

*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  $\nu_j^B$  a j-edik anyag sztöchiometriai együtthatója

a reakcióegyenlet **bal** oldalán. (A  $\nu_j^B$  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 rendűségtől. Ha az időt „s”, a koncentrációt „M” (mol dm<sup>-3</sup>) egységben adják meg, akkor elsőrendű reakció  $k$ -ja esetén: [s<sup>-1</sup>], másodrendű reakció  $k$ -ja esetén: [s<sup>-1</sup> M<sup>-1</sup>], harmadrendű reakció  $k$ -ja esetén: [s<sup>-1</sup> M<sup>-2</sup>].

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

*molekularitás:* egy elemi reakcióban az ütköző részecskék száma

*unimolekulás reakció:* nemreaktív ütközések vagy fényelnyelés következtében lejátszódó elemi reakció

*bimolekulás reakció:* két részecske ütközése következtében lejátszódó elemi reakció

*trimolekulás reakció:* három részecske egyidejű ütközése következtében lejátszódó elemi reakció lenne, de ilyen nincs

*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

**lánctermék:** nagyon reaktív köztitermék láncreakcióban

**kinetikai egyszerűsítő elvek:** módszerek reakciómechanizmusok átalakítására olyan alakra, amely egyszerűbb és az eredetivel csaknem azonos megoldást ad. Ezek a módszerek: sebességmeghatározó lépés, kvázistacionárius közelítés, gyors előegyensúly, nagy feleslegben alkalmazott reaktáns.

**sebességmeghatározó lépés:** Az a reakciólépés, amelyik a sebességi együtthatójának kis megváltoztatására a végtermék termelődési sebessége jelentősen megnő. Sorozatos elsőrendű reakciólépések esetén a legkisebb sebességi együtthatójú reakciólépés a sebességmeghatározó és a végtermék keletkezési sebessége egyenlő a sebességmeghatározó lépés sebességi együtthatója és reaktánsa koncentrációjának szorzatával.

**kvázistacionárius közelítés** avagy **QSSA** (quasi steady-state approximation): A reakciómechanizmus anyagfajtái közül kiválasztunk egyes anyagokat, melyeket kvázistacionárius (QSSA) anyagoknak fogunk nevezni. Ezen anyagok koncentrációváltozását leíró differenciálegyenletek bal oldalát lenullázzuk, a maradék jobb oldalak egy implicit algebrai egyenletrendszerre alkotnak amely leírja, hogyan függenek a QSSA anyagok koncentrációi a többi (nem QSSA) anyagok koncentrációjától. A nem QSSA anyagokra vonatkozó differenciálegyenlet-rendszert és a QSSA anyagokra vonatkozó algebrai egyenletrendszerrel egyszerre megoldva az eredeti kinetikai differenciálegyenlet-rendszerrel csaknem azonos megoldást kapunk. Szerencsés esetben az algebrai egyenletrendszer külön is megoldható és a megoldást vissza lehet írni a nem QSSA anyagok differenciálegyenlet-rendszerébe. A QSSA anyagok általában a nagy reaktivitású és kis koncentrációjú anyagok, mint pl. a gyökök.

**gyors előegyensúly:** Ha egy gyors egyensúlyi reakció reaktánsait sokkal lassabb reakciók fogyasztják, akkor az egyensúlyi reakció reaktánsainak koncentrációját csak az egyensúly alapján lehet számítani, a többi reakció hatását itt nem kell figyelembe venni. Ez egyszerűsíti a többi reakció termékeinek képződési sebességére felírt egyenletet is.

**nagy feleslegben alkalmazott reaktáns:** Ha az egyik reaktáns nagy feleslegben van, akkor a reakció során koncentrációja elhanyagolható mértékben változik és állandónak tekinthető. Ennek alapján pl. másodrendű reakciólépés elsőrendűvé alakítható át a nagy feleslegben alkalmazott reaktáns

koncentrációjának a sebességi együtthatóba való beolvasztásával:  $\frac{d[C]}{dt} = k[A][B] = k'[A]$ , ahol

$k' = k[B]$ . Ha másodrendű reakciót ennek alapján elsőrendűként kezelünk, azt pseudo-elsőrendű közelítésnek hívják.

**láncreakció:** a láncreakciókban nagyon reaktív köztitermékek (lánctermékek) keletkeznek, amelyek reagálnak a kiindulási anyaggal és elősegítik átalakulását végtermékké miközben a lánctermékek újraképződnek.

lánctermék, iniciáció	lánctermék <i>avagy</i> lánctermék keletkező reakciólépés
lánctermék	lánctermék reakciólépés
lánctermék	lánctermék reakciólépés
lánctermék, lánctermék, termináció	lánctermék reakciólépés
inhibíció	inhibíciós reakciólépés

**lánctermék reakciólépés:** olyan reakciólépés, amelyben lánctermékek keletkeznek

**lánctermék reakciólépés:** a reakciólépésben ugyanannyi lánctermék keletkezik, ahány elfogy.

**lánctermék reakciólépés:** a reakciólépésben több lánctermék keletkezik, mint ahány elfogy.

**lánctermék reakciólépés:** olyan reakciólépés, amelyben a lánctermékek száma csökken.

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

**nyílt lánctermék reakció:** olyan lánctermék, amelyben nincs lánctermék

**elágazó lánctermék reakció:** lánctermék tartalmazó lánctermék