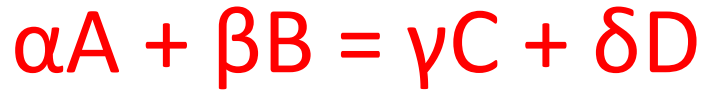


KÉMIAI EGYENSÚLYOK

A reakció szabadentalpia változása



reaktáns

reaktáns

termék

termék

$\alpha; \beta; \gamma; \delta$: sztöchiometriai együtthatók.

Általános jele: v

A; B; C; D: vegyjelek

Általános jele: M

$$\sum v_r M_r = \sum v_t M_t$$

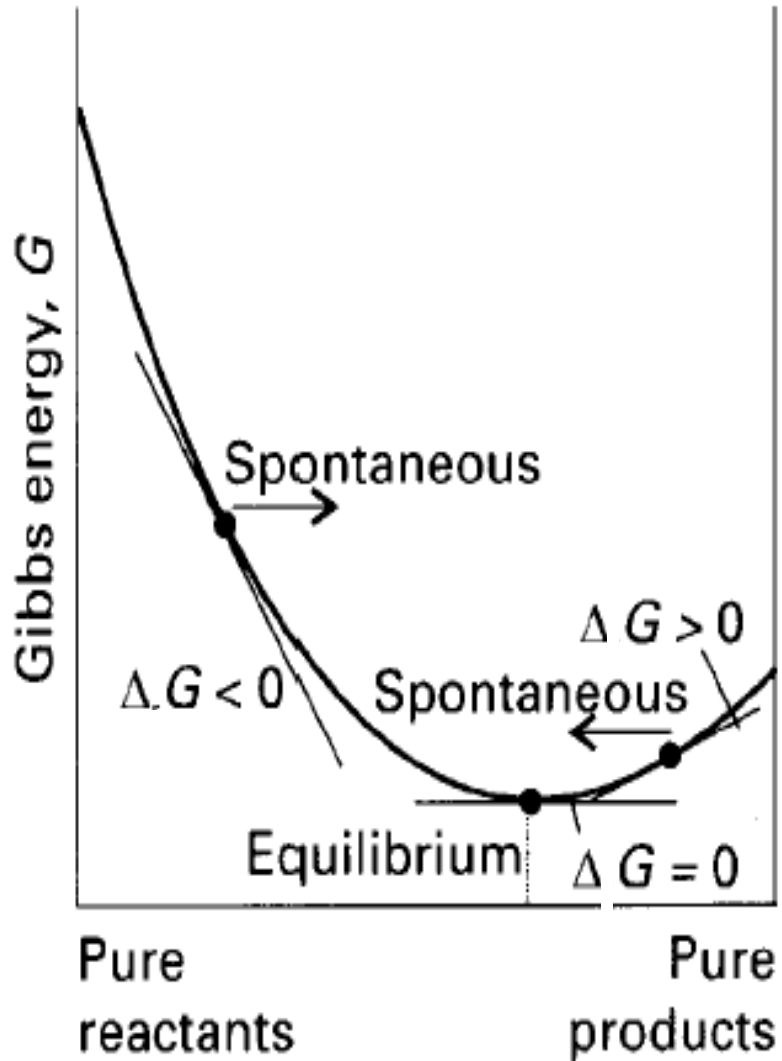
A reakció során a G változása: $G_{\text{termékek}} - G_{\text{reaktánsok}}$



$$\Delta_r G = \sum v_{\text{termék}} G_{\text{termék}} - \sum v_{\text{reaktáns}} G_{\text{reaktáns}}$$

(p, T = áll)

Szabadentalpia változás kémiai reakcióban



Spontán változás: $\Delta_r G < 0$, p és T áll.

Egyensúly: $\Delta_r G = 0$, p és T áll.

$$\Delta_r G = \Delta_r H - T\Delta_r S$$

ΔH	ΔS	$\Delta G < 0$	$K > 1$
-	+	minden hőmérsékleten	
+	-	nincs ilyen hőmérséklet	
-	-	ha $T < \frac{\Delta H}{\Delta S}$	
+	+	ha $T > \frac{\Delta H}{\Delta S}$	

Standard reakció szabadentalpia

Standard állapot: $p = 1 \text{ bar} = 100000 \text{ Pa}$; ($c = 1 \text{ mol}\cdot\text{dm}^{-3}$)

$\Delta_r G^\ominus$: a reakció standard szabadentalpiaváltozása

Minden vegyülethez rendelhető egy ΔG^\ominus standard (\ominus) szabadentalpia.

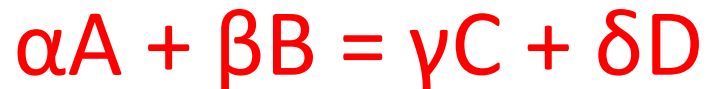
Standard állapotban az *ELEMEK* képződési entalpiája megállapodás szerint nulla. Definíció szerint a *VEGYÜLET* standard állapotú elemeiből való képződésének standard reakcióentalpiája (ΔG^\ominus_k)

ΔG^\ominus mértékegysége a joule (J), gyakran egy mólra vonatkoztatják, ekkor J/mol.

Segítségével számítható, hogy egy tervezett reakcióút eredményes lehet-e:

$$\Delta_r G^\ominus = \sum \nu_{\text{termék}} G^\ominus_{\text{termék}} - \sum \nu_{\text{reaktáns}} G^\ominus_{\text{reaktáns}}$$

Termodinamikai egyensúlyi állandó



általánosan



$$\sum \nu_r M_r = \sum \nu_t M_t$$

$$K = \frac{a_{C,e}^{\gamma} \cdot a_{D,e}^{\delta}}{a_{A,e}^{\alpha} \cdot a_{B,e}^{\beta}}$$

$$K = \frac{\prod a_{t,e}^{\nu_t}}{\prod a_{r,e}^{\nu_r}}$$

e : egyensúlyi összetétel

K DIMENZIÓ MENTES

a: (kémiai) aktivitás

Kémiai aktivitás

DIMENZIÓ MENTES

Oldatok esetén

$$a_i = \gamma_i \frac{c_i}{c_0}$$

a: (kémiai) aktivitás
 γ : aktivitási együttható
 c_i : koncentráció
 c_0 : egységnyi koncentráció

Tökélesten gázok esetén

$$a_i = \frac{p_i}{p_0}$$

a: (kémiai) aktivitás
 p_i : parciális nyomás
 p_0 : egységnyi nyomás

Híg oldatok esetén jó közelítés a mólkoncentráció ($\gamma \approx 1$):

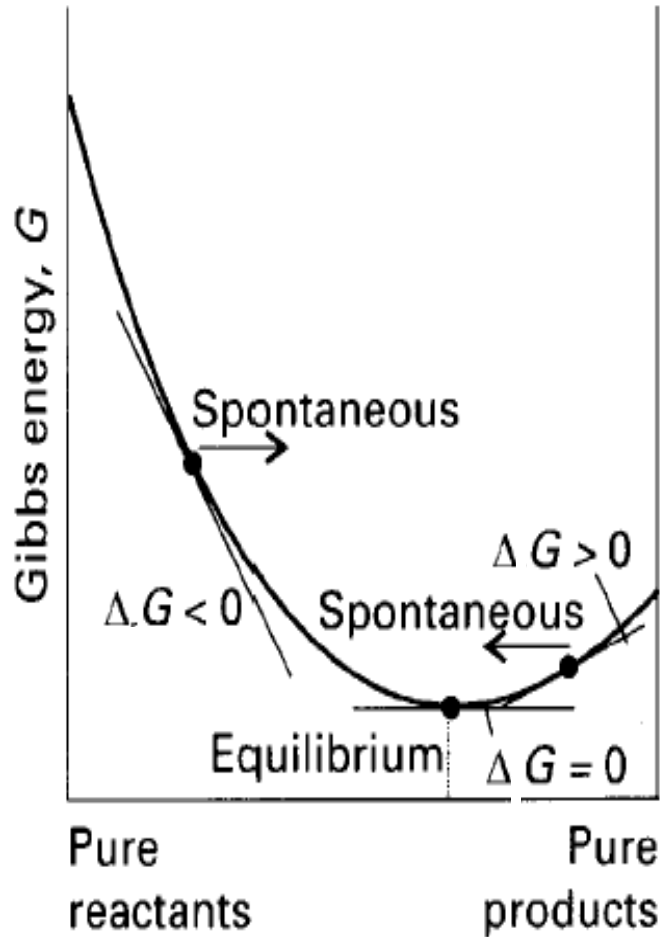
$$K = \frac{\prod a_{t,e}^{\nu_t}}{\prod a_{r,e}^{\nu_r}} \approx \frac{\prod c_{t,e}^{\nu_t}}{\prod c_{r,e}^{\nu_r}}$$

$$K_p = \frac{\prod p_{t,e}^{\nu_t}}{\prod p_{r,e}^{\nu_r}}$$

A szabadentalpia és egyensúlyi állandó kapcsolata

$$\Delta_r G^\ominus = -RT \ln K$$

K ? 1



ΔH	ΔS	$\Delta G < 0$	$K > 1$
-	+	minden hőmérsékleten	
+	-	nincs ilyen hőmérséklet	
-	-	ha $T < \frac{\Delta H}{\Delta S}$	
+	+	ha $T > \frac{\Delta H}{\Delta S}$	

Érdemi termékképződés: $K \gg 1$ ($K > 10^3$).

Az egyensúlyi állandó befolyásolása

Külső tényezők hatása az egyensúlyi állandóra

nyomás

$$\Delta_r G^\ominus = -RT \ln K$$

$\Delta_r G^\ominus$ -hoz standard nyomás tartozik

nincs hatással

hőmérséklet

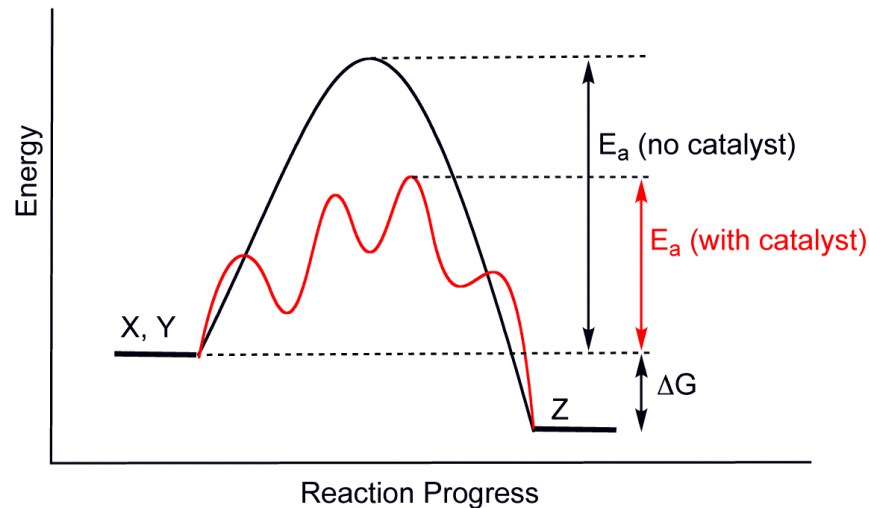
$$\ln \frac{K'}{K} = \frac{\Delta_r H^\ominus}{RT} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T'} \right)$$

exoterm: $T \uparrow$ $K \downarrow$

endoterm: $T \uparrow$ $K \uparrow$

hatással van

katalizátor



A katalizátor csak a reakció útját változtatja.

$\Delta_r G^\ominus$ nem függ a reakció útjától.

nincs hatással

Az egyensúlyi elegy összetételének befolyásolása

A **Le Chatelier-Brown elv**: Az egyensúlyban lévő rendszer a külső zavarásra úgy válaszol, hogy a zavaró hatás következményeit csökkentse.

$$K = \frac{\prod a_{t,e}^{\nu_t}}{\prod a_{r,e}^{\nu_r}} \approx \frac{\prod c_{t,e}^{\nu_t}}{\prod c_{r,e}^{\nu_r}}$$

Termékelvezetés: Amennyiben a reakció termékét(termékeit) valamilyen módon eltávolítjuk, az segíti a további termék(ek) képződését.

Nyomás hatása gázreakciókra



$$K_p = \frac{p_{NH_3}^2}{p_{N_2} p_{H_2}^3}$$

$\Delta n < 0$ nyomásnövelés segíti a termékképződést

$\Delta n = 0$ nyomásnak nincs hatása

$\Delta n > 0$ nyomásnövelés visszaszorítja a termékképződést

Az egyensúlyi állandó meghatározása mérésekből

Híg oldatok esetén

$$K = \frac{\prod a_{t,e}^{\nu_t}}{\prod a_{r,e}^{\nu_r}} \approx \frac{\prod c_{t,e}^{\nu_t}}{\prod c_{r,e}^{\nu_r}}$$

Alkotók egyensúlyi koncentrációjának meghatározása

Tökéletes gázok esetén

$$K_p = \frac{\prod p_{t,e}^{\nu_t}}{\prod p_{r,e}^{\nu_r}}$$

$$K = K_p(p_0)^{-\Delta \nu}$$

Gázelegy alkotók parciális nyomásának meghatározása