

VÁLASZOK A FIZKÉM I ALAPKÉRDÉSEKRE, BSC, 2012

1. Az elszigetelt rendszer határfelületén át nem áramlik sem energia, sem anyag.

A zárt rendszer határfelületén energia léphet át, anyag nem.

A nyitott rendszer határfelületén keresztül mind az energia- mind az anyagtranszport megengedett.

2. Az állapotfüggvény az állapotváltozók olyan többváltozós egyértékű függvénye, amelyeknek értéke csak az adott állapottól, megváltozása pedig csakis a kezdeti és végállapottól függ (U, H, S, A, G). Azokat a függvényeket, amelyek értéke attól függ, hogy a rendszer milyen úton jutott a kezdetitől a végső állapotba, útfüggvényeknek nevezzük (W, Q).

3. Az extenzív mennyiségek arányosak a rendszerben foglalt anyagmennyiséggel (pl. m, V). Az intenzív mennyiségek nem függenek a rendszer méretétől (pl. T, p).

4. A belső energia a rendszert felépítő mikroszkopikus részecskék kinetikus és potenciális energiájának az összege. Nem foglalja magába az egész rendszernek mint makroszkopikus testnek a kinetikus és potenciális energiáját.

5. Zárt rendszerben állandó térfogaton, ha egyéb munka sincs, a belső energia változása egyenlő a hővel ($\Delta U = Q_V$).

6. Az I. főtétel: az energia-megmaradás 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 energiaközlés megengedett, ahol W a munkát, Q a hőt jelöli.

7. A térfogati munka: $\delta W = -p_k dV$, ahol p_k a külső nyomás, dV a rendszer térfogatváltozása. A térfogati munka véges összenyomásra vagy kiterjedésre:

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

8. A moláris hőkapacitás definíciója:

$$C_m = \frac{1}{n} \frac{\delta Q}{dT}$$

Állandó térfogaton:

$$C_{mv} = \frac{1}{n} \frac{\delta Q_v}{dT} = \frac{1}{n} \frac{dU}{dT}$$

Állandó nyomáson:

$$C_{mp} = \frac{1}{n} \frac{\delta Q_p}{dT} = \frac{1}{n} \frac{dH}{dT}$$

9. Az entalpia állapotfüggvény, definícióegyenlete: $H \equiv U + pV$, ahol U a belső energia, p és V a rendszer állapotjelzői (nyomás és térfogat).

10. Az entalpiaváltozás fizikai értelmét az adja, hogy izobár reverzibilis folyamatban, ha csak térfogati munka van, az entalpiaváltozás a hővel egyenlő: $\Delta H = Q_p$.

11. Reakcióhőnek nevezzük az állandó hőmérsékleten a felírt reakcióegyenletnek megfelelő mennyiségű átalakulás közben a reaktorba betáplált (pozitív reakcióhő, endoterm reakció) vagy elvont (negatív reakcióhő, exoterm reakció) hőt.

12. A standard reakcióhő egy a felírt reakcióegyenletnek megfelelő mennyiségű átalakulás közben a reaktor és a környezet között kicserélt hő, miközben p^0 (10^5 Pa) nyomású tiszta reagensekből ugyanilyen nyomású és azonos hőmérsékletű tiszta termékek keletkeznek.

13. Hess tétele szerint a reakcióhő független attól, hogy a reakció milyen közbenső termékeken keresztül megy végbe.

14. A reakcióhőt megkapjuk, ha a kiindulási anyagok égéshőinek összegéből kivonjuk a termékek égéshőinek összegét: $\Delta_r H = - \Delta_r (\Delta_c H)$

15. Egy vegyület képződéshője annak a reakciónak a standard reakcióhője, amelynek során a vegyület az elemei legstabilabb módosulataiból képződik.

16. A reakcióhőt megkapjuk, ha a termékek képződéshőinek összegéből kivonjuk a kiindulási anyagok képződéshőinek összegét: $\Delta_r H = \Delta_r (\Delta_f H)$

17.. 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.

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

19. Az entrópia hőmérsékletfüggése állandó nyomáson:

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

20. Az entrópia hőmérsékletfüggése állandó térfogaton:

$$\Delta S = n \int_{T_1}^{T_2} \frac{C_{mv}}{T} dT, \text{ ahol } C_{mv} \text{ az állandó térfogaton mért moláris hőkapacitás.}$$

21. Izoterm folyamat entrópiaváltozása: $\Delta S = Q_{rev}/T$

22. A II. főtétel szerint ha elszigetelt rendszerben makroszkopikus folyamat játszódik le, az entrópia nő. Az egyensúlyt az entrópia maximuma jellemzi.

$\Delta S \geq 0$ (elszigetelt rendszer esetén).

23. Az entrópia statisztikus definíciója: $S = k \ln W$, ahol k a Boltzmann-állandó (a gázállandó és az Avogadro-állandó hányadosa), és W a termodinamikai valószínűség (megadja azt, hogy az adott makroállapot hányféle különböző mikroállapottal valósítható meg).

24. 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.

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

26. A szabadenergia zárt rendszerben, izoterm, izochor folyamatban, ha nincs munkavégzés, csak csökkenhet, egyensúlyban minimuma van:

$$\Delta A_{T,V} \leq 0, \quad dA_{T,V} \leq 0$$

27. Izoterm reverzibilis folyamatban a szabadenergia változása egyenlő a munkával:

$$\Delta A_T = W_{rev}.$$

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

29. Állandó hőmérsékletű és nyomású zárt rendszerben, ha egyéb munka nincs, a szabadentalpia spontán folyamatban csökken, egyensúlyban minimuma van:

$$\Delta G_{T,p} \leq 0, \text{ (vagy } dG_{T,p} \leq 0).$$

30. Izoterm izobár reverzibilis folyamatban a szabadentalpia változása egyenlő az egyéb (nemtérfogati) munkával, $\Delta G_{T,p} = W_{egyéb}$, (vagy $dG_{T,p} = \delta W_{egyéb}$).

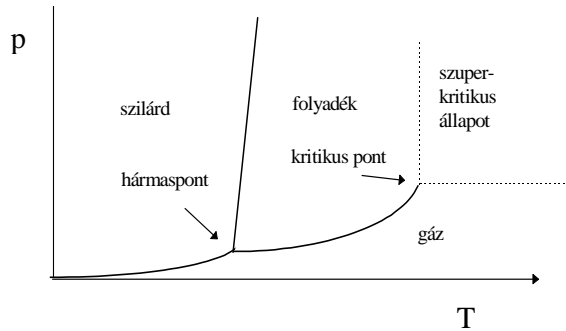
31. A belső energia teljes differenciálja zárt rendszerben, ha nincs egyéb munka (zárt rendszer fundamentális egyenlete): $dU = -pdV + TdS$, ahol $-pdV = \delta W$ a differenciális munka és $TdS = \delta Q$ a differenciális hő.

$$32. dH = Vdp + TdS$$

$$33. dA = -pdV - SdT$$

$$34. dG = Vdp - SdT$$

35. p-T diagram



36. 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.)

37. 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 közelítőleg

a moláris párolgáshő.

38. A standard képződési szabadentalpia annak a reakciónak a szabadentalpia-változása, amelynek során a vegyület elemeiből képződik úgy, hogy valamennyi reaktáns standard állapotban van.

39. 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.

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

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

42. A szabadentalpia teljes differenciálja nyitott rendszerben, ha nincs egyéb munka:

$dG = Vdp - SdT + \sum \mu_i \cdot dn_i$, részletezve:

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

43. Tiszta anyagok kémiai potenciálja egyenlő a moláris szabadentalpiával,

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

44. Egyensúlyban valamely szabadon megoszló komponens kémiai potenciálja az összes egymással érintkező fázisban azonos.

45. Ha nincs egyensúly, önként végbemenő folyamatban a komponens abból a fázisból, amelyben kémiai potenciálja nagyobb, abba a fázisba megy át, amelyben kémiai potenciálja kisebb.

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

47. Az eleyedési térfogat az eleyedés során bekövetkező térfogat-változás állandó hőmérsékleten és nyomáson. Kétkomponensű eleyben:

$\Delta_e V = V - (n_1 \cdot V_{m1}^* + n_2 \cdot V_{m2}^*)$, ahol V az eley térfogata, V_{m1}^* és V_{m2}^* a tiszta komponensek móltérfogata, n_1 és n_2 a mennyiségük mólokban.

48. A moláris eleyedési térfogat egy mól eley készítése során bekövetkező térfogat-változás állandó hőmérsékleten és nyomáson. Kétkomponensű eleyben: $\Delta_e V_m = V_m - (x_1 \cdot V_{m1}^* + x_2 \cdot V_{m2}^*)$, ahol

V_m az elegy móltérfogata, V_{m1}^* és V_{m2}^* a tiszta komponensek móltérfogata, x_1 és x_2 a komponensek móltörtje.

49. $V_i = \left(\frac{\partial V}{\partial n_i} \right)_{p,T,n_j}$, $j \neq i$. Egy komponens parciális móltérfogata egyenlő az elegy

térfogatának megváltozásával, ha az illető komponensből egy mólt adunk az elegy végtelen mennyiségéhez állandó hőmérsékleten és nyomáson.

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

50. 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.)

pl. kétkomponensű elegy esetén: $V = n_1 V_1 + n_2 V_2$, $G = n_1 \mu_1 + n_2 \mu_2$

51. A parciális moláris szabadentalpia megegyezik a kémiai potenciállal:

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

52. $G = \sum n_i \mu_i$, kétkomponensű elegyben: $G = n_1 \mu_1 + n_2 \mu_2$

Az elegy szabadentalpiája a komponensek kémiai potenciáljából additíve tevődik össze.

53. A Gibbs-Duhem egyenlet kémiai potenciálokra: $\sum n_i d\mu_i = 0$, kétkomponensű elegyben:

$$n_1 d\mu_1 + n_2 d\mu_2 = 0$$

54. Raoult törvénye: $p_i = x_i p_i^*$ (ideális folyadékelegy, tökéletes gáz)

$$p_i = a_i p_i^* \quad (\text{reális folyadékelegy, tökéletes gáz})$$

p_i : parc. nyomás a gőztérben, p_i^* : tiszta komp. gőznyomása

x_i : móltört a folyadékfázisban a_i : racionális aktivitás a folyadékban

55. Az i-ik komponens kémiai potenciálja ideális folyadékelegyben: $\mu_i = \mu_i^* + RT \ln x_i$

μ_i^* : tiszta komponens kémiai potenciálja (moláris szabadentalpiája)

56. Az i-ik komponens kémiai potenciálja reális folyadékelegyben: $\mu_i = \mu_i^* + RT \ln a_i$, a_i : a komponens racionális aktivitása

57. 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.

58. Az elegyedési entrópia ideális elegyben:

$$\Delta_e S_{id} = -n R \sum x_i \ln x_i = -R \sum n_i \ln x_i$$

59. Az elegyedési szabadentalpia ideális elegyben:

$$\Delta_e G_{id} = n R T \sum x_i \ln x_i = RT \sum n_i \ln x_i$$

60. Konovalov I. törvénye: Ha a komponenspár nem képez azeotrópot, akkor az illékonyabb komponens móltörtje a gőzben mindig nagyobb, mint a folyadékban.

61. Konovalov II. törvénye: Annak a komponensnek a móltörtje, amelynek növekvő mennyisége az össztenziót növeli, a gőzben nagyobb, mint a folyadékban.

62. Konovalov III. törvénye: Ha a két komponens azeotrópot képez, ott, ahol az össztenzióknak szélső értéke van, a gőz összetétele azonos a folyadékéval (azeotróp összetétel).

63. Két egymással nem elegyedő folyadék feletti gőztérben a nyomás egyenlő a két tiszta komponens tenziójának összegével.

64. A relatív tenziócsökkenés (tenziócsökkenés per a tiszta oldószer tenziója) egyenlő az oldott anyag móltörtjével: $x_2 = \Delta p_1 / p_1^*$.

65. A forrpontemelkedés $\Delta T = K_f \cdot m_2$, ahol K_f a molális forrpontemelkedés (csak az oldószertől függ), m_2 az oldott anyag molalitása.

66. A fagyáspontcsökkenés $\Delta T = K_0 \cdot m_2$, ahol K_0 a molális fagyáspontcsökkenés (csak az oldószertől függ), m_2 az oldott anyag molalitása.

67. Híg oldatban az ozmózisnyomás $\pi = c_2 \cdot R \cdot T$, ahol c_2 az oldott anyag koncentrációja.

68. Az integrális oldáshő (moláris elegyedési hő) egy mol adott összetételű elegy komponenseiből való előállításakor felszabadult vagy elnyelt hő (fellépő entalpiaváltozás) állandó nyomáson és hőmérsékleten.

69. Ha nincs halmazállapotváltás elegyedéskor, az ideális elegyedési hő nulla. (Egyébként a halmazállapotváltási hővel egyenlő)

70. A differenciális oldáshő az a hő, amely akkor nyelődik el vagy szabadul fel, ha az oldat végtelen mennyiségéhez adjuk az egyik komponens egy molját állandó nyomáson és hőmérsékleten.

$$Q_{m1} = \left(\frac{\partial Q_s}{\partial n_1} \right)_{p,T,n_2}, \quad Q_{m2} = \left(\frac{\partial Q_s}{\partial n_2} \right)_{p,T,n_1}$$

71. Henry törvénye: $p_2 = k_H x_2$, híg oldatokban érvényes, a 2-es komponens az oldott anyag, k_H a Henry-állandó.

72. Le Chatelier elve szerint az egyensúlyban lévő rendszer a külső zavarásra úgy reagál, hogy a zavarás hatásait csökkentse.

73. A gázok oldhatósága folyadékokban a hőmérséklet növelésével általában csökken.

74. Az elegyek termodinamikai stabilitásának feltétele, hogy az elegyedési szabadentalpia negatív legyen, és az elegyedési szabadentalpia móltört szerinti második deriváltja pozitív legyen.

$$\Delta_e G_m < 0, \quad \left(\frac{\partial^2 \Delta_e G_m}{\partial x^2} \right)_{p,T} > 0$$

75. Ha egy vegyület oldódik két egymással nem elegyedő oldószerben, akkor híg oldatban adott hőmérsékleten a két oldószerben mért koncentrációk hányadosa állandó.

$$K_c = \frac{c_i^B}{c_i^A}$$

ahol K_c a megoszlási hányados

76. A kompresszibilitási tényező:

$$Z = \frac{pV_m}{RT}$$

77. A redukált nyomás: $\pi = p/p_K$, ahol p_K a kritikus nyomás

A redukált hőmérséklet: $\theta = T/T_K$, ahol T_K a kritikus hőmérséklet.

78. A megfelelő állapotok tétele szerint ha két különböző gáz két redukált állapotjelzője megegyezik, akkor a harmadik is megegyezik.

Ha két gáz redukált hőmérséklete és redukált nyomása megegyezik (vagyis megfelelő állapotban vannak), akkor a kompresszibilitási tényezőjük is azonos.

79. A Joule-Thomson koefficiens gázok adiabatikus kiterjedésekor az egységnyi nyomásváltozásra eső hőmérséklet-változás:

$$\mu_{JT} = \lim_{\Delta p \rightarrow 0} \frac{\Delta T}{\Delta p} = \left(\frac{\partial T}{\partial p} \right)_H$$

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

81. Reális gáz kémiai potenciálja: $\mu = \mu^0 + RT \ln \frac{f}{p^0} \left(G_m = G_m^0 + RT \ln \frac{f}{p^0} \right)$, ahol $\mu^0 = G_m^0$, a

standard kémiai potenciál (a moláris szabadentalpia p^0 nyomáson, tökéletesgáz-viselkedést feltételezve) és f a gáz fugacitása.

82. Tökéletes gázok elegyében az i-ik komponens aktivitása: $a_i = p_i/p^\circ$ (parciális nyomás per standard nyomás)

83. Reális gázok elegyében az i-ik komponens aktivitása: $a_i = f_i/p^\circ$ (parciális fugacitás per standard nyomás)

84. Lewis-Randall szabály: $f_i = \phi_i y_i p$, ahol f_i az i-ik komponens parciális fugacitása, ϕ_i a p össznyomáson számolt fugacitási koefficiens, y_i a móltört.

85. Kémiai egyensúly esetén $\Delta_r G = 0$

86. A standard reakciószabamentalpia ($\Delta_r G^\circ$) és az egyensúlyi állandó (K) kapcsolata:

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

87. Az egyensúlyi állandó definíciója:

$$K = \frac{\prod a_B^{v_B}}{\prod a_A^{v_A}}$$

, ahol Π a produktum jele (az utána következő mennyiségeket össze kell szorozni), v_i a reakcióban szereplő anyagok sztöchiometriai együtthatója, a_i az egyes komponensek aktivitása. (A B index a termékekre, az A index a kiindulási anyagokra vonatkozik.)

88. A termodinamikai egyensúlyi állandó és K_p kapcsolata reális gázok esetén:

$K = K_\phi K_p (p^\circ)^{-\Delta v}$, ahol K_ϕ a fugacitási koefficiensekből képzett reakcióhányados

89. Az egyensúlyi állandó tökéletes gázok reakciójában: $K = \frac{\Pi \left(\frac{p_B}{p^\circ} \right)^{v_B}}{\Pi \left(\frac{p_A}{p^\circ} \right)^{v_A}}$, ahol Π a produktum jele

(az utána következő mennyiségeket össze kell szorozni), v_i a reakcióban szereplő anyagok sztöchiometriai együtthatója, p_i az egyes komponensek parciális nyomása, $p^\circ = 10^5$ Pa standard nyomás. (A B index a termékekre, az A index a kiindulási anyagokra vonatkozik.)

90. Molekulaszám-növekedéssel járó gázreakciók esetén a kisebb nyomás, molekulaszám-csökkenéssel járó gázreakciók esetén nagyobb nyomás kedvez a termékek keletkezésének.

91. Az egyensúlyi állandó hőmérsékletfüggése:

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

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

93. A Faraday-állandó ($F = 96485$ As/mol) egy mól egyszeresen pozitív töltésű ion töltésével egyenlő.

94. A közepes aktivitás $a_\pm = \sqrt[|v|]{a_A^{v_A} \cdot a_K^{v_K}}$, ahol v az anion v_A és a kation v_K szöchiometriai számának összege. (v_A és v_K kitevőként szerepelnek.)

95. A közepes aktivitási koefficiens $\gamma_\pm = \sqrt[|v|]{\gamma_A^{v_A} \cdot \gamma_K^{v_K}}$, ahol $v = v_A + v_K$, v_A az anion, v_K a kation szöchiometriai száma. (v_A és v_K kitevőként szerepelnek.)

96. Az ionerősség $I = 0,5 \cdot \sum m_i \cdot z_i^2$ vagy $I = 0,5 \cdot \sum c_i \cdot z_i^2$, ahol m_i az i-ik ion molalitása, c_i a koncentrációja, z_i a töltésszáma.