

Gázok jellemzése

A gázok jellemzésére a következő négy fizikai mennyiséget használjuk:

- anyagmennyiség n
- hőmérséklet T
- térfogat V
- nyomás p

Boyle-törvény

Robert Boyle(1627-1691)

Állandó hőmérsékleten egy adott mennyiségű gáz térfogata fordítottan arányos a nyomásával.

$$p \propto \frac{1}{V} \text{ (ha } n, T \text{ állandó)}$$

$$p_1 V_1 = p_2 V_2 \text{ (ha } n, T \text{ állandó)}$$

Gay-Lussac-törvények

Állandó nyomáson egy adott mennyiségű gáz térfogata egyenesen arányos a hőmérsékletével.

$$V \propto T \text{ (ha } n, p \text{ állandó)}$$

$$\frac{V_1}{T_1} = \frac{V_2}{T_2} \text{ (ha } n, p \text{ állandó)}$$

Gay-Lussac-törvények

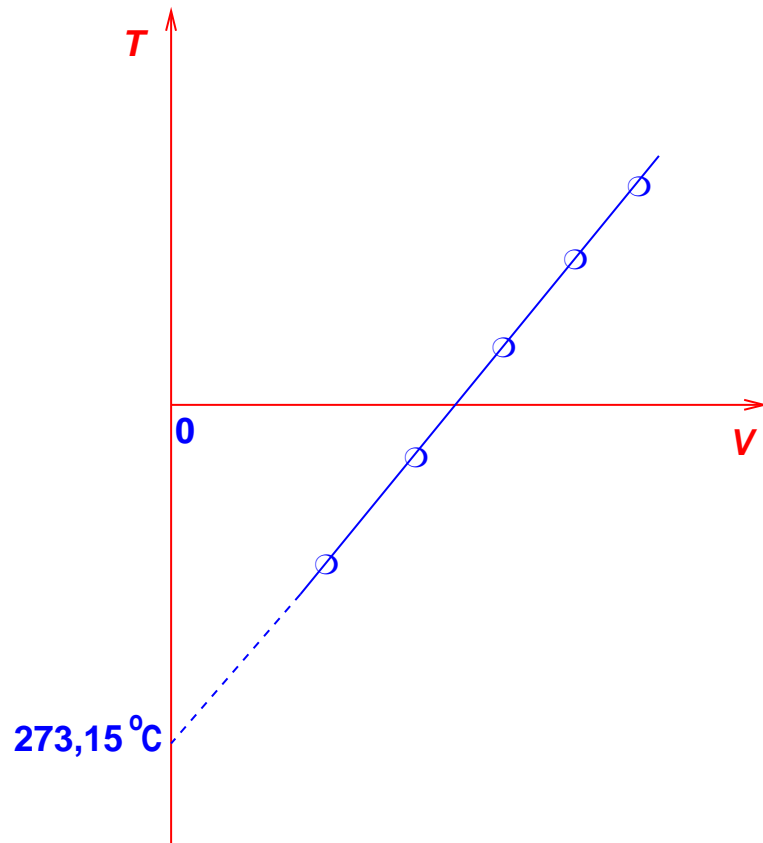
Állandó térfogaton egy adott mennyiségű gáz nyomása egyenesen arányos a hőmérsékletével.

$$p \propto T \text{ (ha } n, V \text{ állandó)}$$

$$\frac{p_1}{T_1} = \frac{p_2}{T_2} \text{ (ha } n, V \text{ állandó)}$$

A termodinamikai hőmérsékleti skála

Lord Kelvin (1824-1907)



$$K = ^{\circ}\text{C} + 273.15^{\circ}.$$

Avogadro tétele (1811)

Ugyanazon a hőmérsékleten és nyomáson azonos gáztérfogatokban azonos számú molekula van.

$$V \propto n \text{ (ha } p, T \text{ állandó)}$$

$$V_m = \frac{V}{n}$$

Standard hőmérsékleten (273.15 K) és nyomásom (1.01325×10^5 Pa):

$$V_m = 22,41 \text{ L/mol}$$

Tökéletes gázok állapotegyenlete

$$pV = nRT$$

$$R = 8,3145 \frac{\text{kPa} \cdot \text{dm}^3}{\text{mol} \cdot \text{K}}$$

Tökéletes gáznak nevezzük azt a gázt amely ennek az egyenletnek megfelelően viselkedik. Szobahőmérsékleten és közönséges nyomáson az egyenlet a legtöbb gázra kielégítően érvényes.

$$V_m = \frac{V}{n} = \frac{RT}{p}$$

Dalton-törvénye: A tökéletes gázok keveréke által kifejtett nyomás egyenlő azon nyomások összegével, amelyet az egyes gázok akkor fejtenének ki, ha egyedül töltенék ki az adott térfogatot.

$$p = p_A + p_B + p_c + \dots$$

Gázkeverékek

Dalton-törvénye: A tökéletes gázok keveréke által kifejtett nyomás egyenlő azon nyomások összegével, amelyet az egyes gázok akkor fejtenének ki, ha egyedül töltенék ki az adott térfogatot.

$$p = p_A + p_B + p_C + \dots$$

$$p = \frac{nRT}{V} = \frac{n_A RT}{V} + \frac{n_B RT}{V} + \frac{n_C RT}{V} \dots$$

Parciális nyomás:

$$p_A = \frac{n_A}{n_t} p$$

Gázok kinetikus elmélete

- A gáZRészecskék közötti távolság sokkal nagyobb mint a részecskék mérete.
- A gáZRészecskék állandó mozgásban vannak.
- A gáZRészecskék átlagos kinetikus energiája ($\overline{E_{kin}}$) csak a hőmérséklettől függ. Legyen v egy gáZRészecske sebessége, \bar{v} pedig a részecskék átlagos sebessége.

$$\overline{E_{kin}} = \frac{1}{2}m\bar{v}^2 \propto T$$

Gázok kinetikus elmélete

- Magasabb hőmérsékleten nagyobb a részecskék átlagos sebessége.
- A nagyobb tömegű gázrészecskék átlagos sebessége kisebb.
- **Maxwell-egyenlet:**

$$\sqrt{\overline{v^2}} = \sqrt{\frac{3RT}{M}}$$

Diffúzió

Diffúzió: egy edényben ahol kezdetben térben egyenetlen koncentráció eloszlás van, a molekulák állandó mozgásának eredményeként anyagáramlás alakul ki a nagyobb koncentrációjú hely felől a kisebb koncentrációjú hely felé.

Az időegység alatt egységnyi felületen átáramlott anyagmennyiség arányos a koncentráció gradienssel:

$$J = -D \frac{dc}{dx}$$

Tökéletes gázok esetén:

$$D = \frac{1}{3} \lambda \bar{v}$$

Effúzió

Effúzió gázok kiáramlása egy kis átmérőjű lyukon keresztül. A Graham-féle effúziós törvény szerint az effúzió sebessége fordítottan arányos a molekulatömeg négyzetgyökével. Egy gázkeverékben a kisebb molekulatömegű komponens effúziója gyorsabb.

Az A_0 területű lyukon az időegység alatt kilépő molekulák száma:

$$\frac{pA_0}{(2\pi mkT)^{1/2}}$$

Az ^{235}U dúsítása:

Az urániumot átalakítjuk UF_6 -dá, amelyet porózus anyagon áramoltatunk keresztül. A könnyebb $^{235}\text{UF}_6$ gyorsabban diffundál át mint a nehezebb $^{238}\text{UF}_6$.

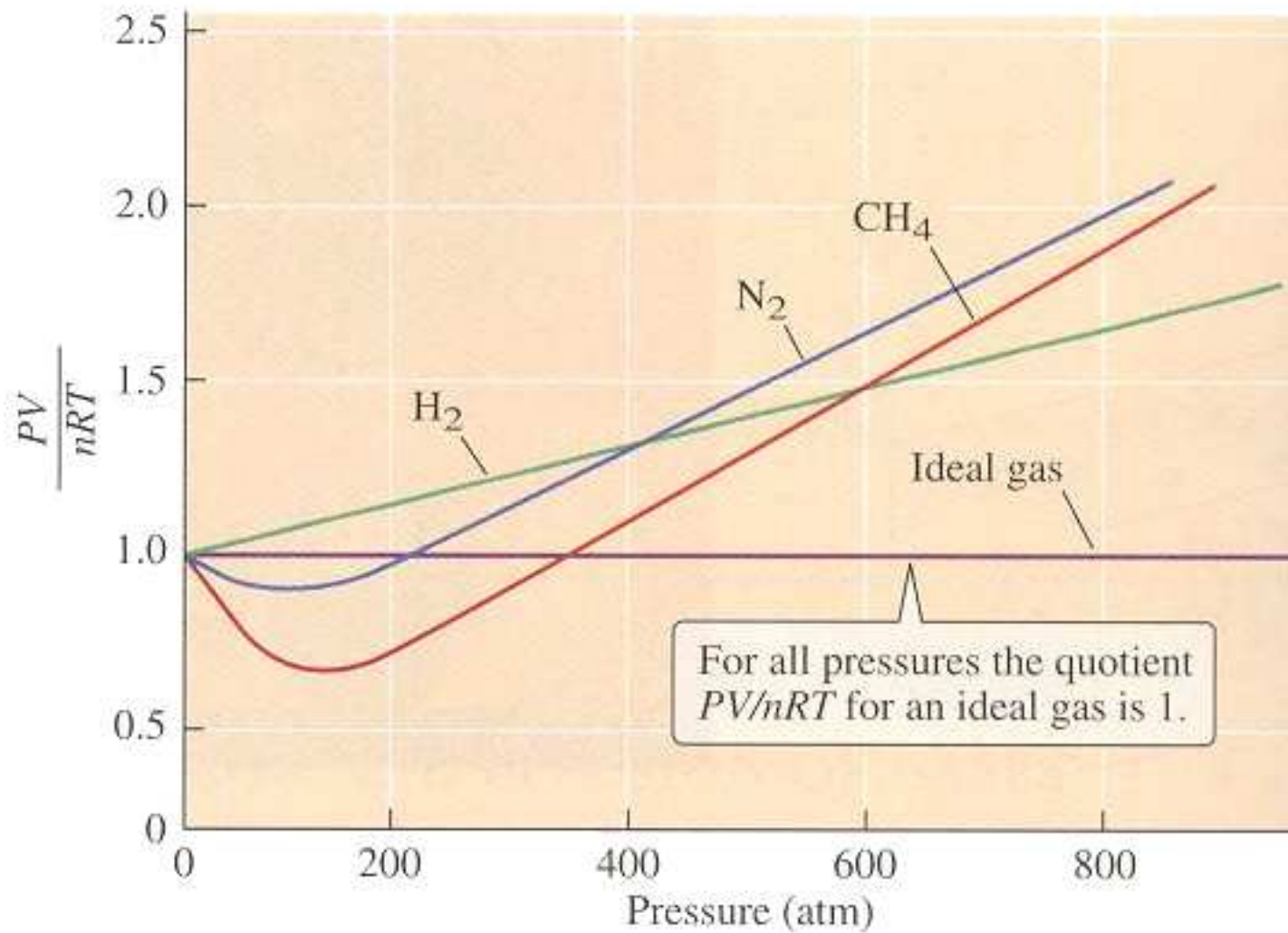
Reális gázok

Ideális gáz:

1. az anyagi minőség nem befolyásolja a gáz viselkedését
2. nincs kölcsönhatás a gázcseppcsek között
3. a gázcseppcsek mérete elhanyagolható a köztük lévő távolsághoz képest

Az ideális viselkedéstől való eltérés különösen akkor jelentős, ha nagy a nyomás és alacsony a hőmérséklet, de különösképpen ha a gáz közel van a cseppfolyósodáshoz.

Reális gázok



Reális gázok

Johannes van der Waals (1837-1923)

$$V - nb$$

Az nb korrekció a molekulák térfogatát veszi figyelembe. Nagyobb méretű molekulákhoz nagyobb b érték tartozik.

$$p + \frac{n^2 a}{V^2}$$

Ebben a korrekcióban a nagyobb a érték erősebb kölcsönhatást jelent.

Reális gázok

van der Waals-egyenlet

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right)(V - nb) = nRT$$

Az a és b mennyiségeket kísérletesen meghatározhatóak, és jellemzőek az

		$a/(\text{atmL}^2/\text{mol}^2)$	$b/(10^{-2}\text{L/mol})$
adott gázra.	Ar	1,345	3,22
	N ₂	1,390	3,913
	NH ₃	4,17	3,71
	CO ₂	3,592	4,267

Folyadékok

- Felveszik a tartóedény alakját
- Meghatározott térfogattal rendelkeznek, csak igen kis mértékben nyomhatóak össze.
- A részecskék között számottevő kölcsönhatás van.
- A részecskék eltávolodhatnak egymástól.
- A folyadékok jellemzői részecskék közötti másodlagos kötések jellegétől függenek.

Viszkozitás

A viszkozitás (belső súrlódás) a folyadékoknak a folyással szemben kifejtett ellenállása.

- Általánosságban az erősebb intermolekuláris kölcsönhatás nagyobb viszkozitást eredményez.
- A hőmérséklet növelésével csökken a viszkozitás.

Felületi feszültség Az a munka amely egységnyi szabad folyadékfelszín létrehozásához be kell fektetni.

$$\gamma = \frac{\Delta W}{\Delta A}$$

- A legkedvezőbb állapot az amelyben minimális a felület.



- A hőmérséklet növelésével csökken a felületi feszültség:
Eötvös-szabály

$$\gamma V_m^{2/3} = k(T'_{kr} - T)$$

Folyadékok-gőz egyensúly

folyadék \rightleftharpoons gőz

- A párolgás során a folyadékfelszínen lévő molekulák gázfázisba kerülnek. A kondenzáció ennek az ellentettje.
- Csak a megfelelően nagy energiával rendelkező molekulák képesek elhagyni a folyadék fázist, így a párolgás során a folyadék lehűl.
- Gőznyomás: a folyadékkal egyensúlyban lévő gőz parciális nyomása
- Forráspont: az a hőmérséklet ahol a folyadék gőznyomása eléri a külső nyomás értékét.

Folyadékok

Jellemző	Illékony foly. gyenge másodlagos kötőerők	Nem illékony foly. erős másodlagos kötőerők
viszkozitás	kicsi	nagy
felületi feszültség	kicsi	nagy
gőznyomás	nagy	kicsi
forráspont	alacsony	magas

Termodinamika

A termodinamika a természetben végbemenő folyamatok energetikai leírásával foglalkozik.

Termodinamika

A termodinamika a természetben végbemenő folyamatok energetikai leírásával foglalkozik.

Feynman: „Van egy tény – ha úgy tetszik – törvény, amely az összes eddig ismert természeti jelenséget irányítja. . .

Ez az energia megmaradás törvénye, amely azt mondja ki, hogy van egy bizonyos, energiának nevezett mennyiség, amely változatlan marad a természetben végbemenő sokfajta változás során. . .

A fizika mai állása mellett valójában nem tudjuk, mi is az **energia**.”

Mozgási energia:

$$E_{kinetic} = \frac{1}{2}mv^2$$

Potenciális energia:

$$E_{pot} = mgh$$

Amennyiben a rendszer és környezete között lévő hőmérsékletkülönbség eredményezi a rendszer energiaváltozását, akkor azt mondjuk, hogy az energia **hő** formájában áramlott át.

Termodinamika

A **rendszer** a világnak az a része, ami iránt érdeklődünk (pl. egy reakcióedény, egy galvánelem...).

A **környezet** mindaz ami a rendszert körbeveszi.

A rendszer **termodinamikai állapotát** leíró fizikai mennyiségeket állapotjezőknek hívjuk (p, V, T, n).

A rendszer teljes energiáját **belső energiának** hívjuk (magenergia, a molekulák mozgási és potenciális energiája...).

Termodinamika

Azokat a folyamatokat amelyekben ez energia hő formájában szabadul fel, **exotermnek** nevezzük (pl. égések). Az energiát hőként abszorbeáló folyamatokat **endotermnek** nevezzük (pl. a víz párolgása).

Azt a hőmennyiséget amely a rendszer hőmérsékletének $1\text{ }^{\circ}\text{C}$ -kal való emeléséhez szükséges **hőkapacitásnak** hívjuk.

Fajlagos hőkapacitás (fajhő) 1 g anyag hőmérsékletének $1\text{ }^{\circ}\text{C}$ -kal való emeléséhez szükséges hőmennyiség.

Moláris hőkapacitás 1 mol anyag hőmérsékletének $1\text{ }^{\circ}\text{C}$ -kal való emeléséhez szükséges hőmennyiség.

A termodinamika első főtétele

A rendszer belső energiája mindaddig állandó, míg azt munkavégzés, vagy hőcsere meg nem változtatja.

$$\Delta U = q + w$$

- q pozitív: a rendszer hőt von el a környezetétől.
- q negatív: a rendszer hőt ad át a környezetének.
- w pozitív: a környezet munkát végez a rendszeren.
- w negatív: a rendszer munkát végez a környezeten.

Térfogati munka

Állandó nyomáson a térfogat V_1 -ről V_2 -re változik:

$$w = -p(V_2 - V_1) = -p\Delta V$$

Kompresszió: a környezet végez munkát a rendszeren. $V_2 < V_1$ így $\Delta V < 0$ és $w > 0$.

Kitágulás: a rendszer végez munkát a környezetén. $V_2 > V_1$ így $\Delta V > 0$ és $w < 0$.

A belső energia megváltozása

Állandó térfogaton $w = 0$, így a

$$\Delta U = q + w$$

egyenlet a következő formára egyszerűsödik:

$$\Delta U = q_v$$

Állandó térfogaton belső energia megváltozása egyenlő a rendszer által elnyelt vagy kibocsájtott hővel.

A belső energia megváltozása

A kémiai folyamatok gyakran állandó nyomáson (pl. légköri nyomáson) mennek végbe.

Állandó nyomáson a

$$\Delta U = q + w$$

egyenlet a következő módon írható át:

$$\Delta U = q_p - p\Delta V$$

Az állandó nyomáson bekövetkezett hőcsere a rendszer H entalpiájának megváltozásával egyenlő.

$$q_p = \Delta H = \Delta U + p\Delta V \text{ (állandó } T, p)$$

Az entalpia

Definíciószerűen:

$$H = U + pV$$

$$\Delta H = \Delta U + p\Delta V \text{ (állandó } T, p)$$

Ideális gázokra:

$$p\Delta V = (\Delta n)RT$$

így,

$$\Delta H = \Delta U + (\Delta n)RT$$

Természetesen ha $\Delta n = 0$, akkor $\Delta H = \Delta U$.

Folyadékok és szilárd anyagok esetében a térfogatváltozás elhanyagolhatóan kicsi ezért ($\Delta H \approx \Delta U$).

Kalorimetria

A belső energia változásnak mérésére szolgál a kalorimetria.

A kaloriméter ismert mennyiségű vizet tartalmazó hőszigetelt edényből, a vizet magában foglaló tartályból és a hőmérőt tartalmazó reakcióedényből áll.

A folyamat következtében a kaloriméter hőmérsékletében bekövetkező változás egyenesen arányos a felszabaduló vagy elnyelt hővel.

Standardállapot

Egy anyag **standardállapota** valamilyen adott hőmérsékleten (általában 25°C) tiszta formájában, 1 bar nyomáson valósul meg.

1. Tiszta folyadék vagy szilárd anyag számára a standardállapot a folyadék illetve a szilárd állapot (C(grafit), H₂O(l), CaCO₃(s)).
2. Gázok standard állapota a gázállapot 1 bar nyomáson; gázkeverékben az adott gáz parciális nyomásának kell, hogy 1 bar legyen.
3. Oldatokban a standard állapot az egységnyi molaritású oldatra vonatkozik.

Standardentalpia-változás

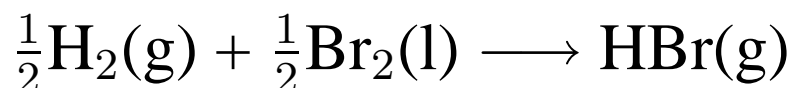
Egy reakció **standardentalpia-változása (reakcióhője)**, ΔH_r^0

reaktánsok \longrightarrow termékek

az az entalpiaváltozás, amikor a standard állapotú reaktánsok standardállapotú termékekké alakulnak át.

A **standard képződési entalpia (képződéshő)**, ΔH_f^0 , mólnyi mennyiségű anyag referenciaállapotú elemeiből való képződésének standardentalpia-változása. Egy elem referenciaállapotának az adott hőmérsékleten és nyomáson legstabilabb állapotát nevezzük. Az elemek standard képződési entalpiája referenciaállapotukban, valamennyi hőmérsékleten zérus.

Reakcióentalpia (reakcióhő)



$$\Delta H_r^0 = -36,4 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H_f^0 \text{ HBr}(\text{g}) = -36,4 \text{ kJ/mol}$$

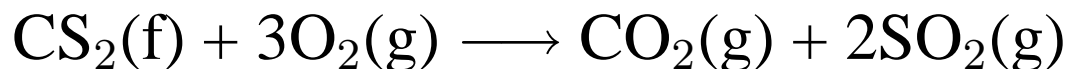
A standard-reakcióentalpiát (reakcióhőt) megkapjuk, ha termékek standard képződési entalpiáinak (képződéshő) összegéből kivonjuk a reaktánsok standard képződési entalpiáinak összegét.

$$\Delta H_r^0 = \sum \Delta H_f^0 \text{ termékek} - \sum \Delta H_f^0 \text{ reaktánsok}$$

Reakcióentalpia (reakcióhő)

Példa:

Számítsuk ki a szén-diszulfid égéshőjét.



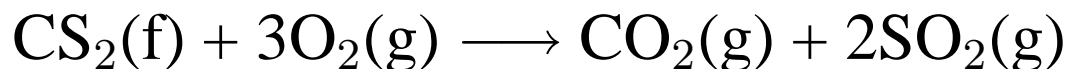
$$\Delta H_f^0(\text{CO}_2(\text{g})) = -393,5 \text{ kJ}, \quad \Delta H_f^0(\text{SO}_2(\text{g})) = -296,8 \text{ kJ}$$

$$\Delta H_f^0(\text{CS}_2(\text{f})) = +87,9 \text{ kJ}$$

Reakcióentalpia (reakcióhő)

Példa:

Számítsuk ki a szén-diszulfid égéshőjét.



$$\Delta H_f^0(\text{CO}_2(g)) = -393,5 \text{ kJ}, \quad \Delta H_f^0(\text{SO}_2(g)) = -296,8 \text{ kJ}$$

$$\Delta H_f^0(\text{CS}_2(f)) = +87,9 \text{ kJ}$$

$$\Delta H_r^0 = \sum \Delta H_f^0 \text{ termékek} - \sum \Delta H_f^0 \text{ reaktánsok}$$

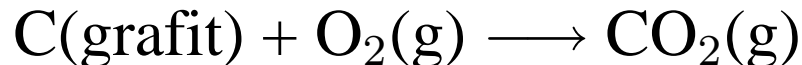
$$\Delta H_r^0 = \Delta H_f^0(\text{CO}_2(g)) + 2\Delta H_f^0(\text{SO}_2(g)) - \\ - (\Delta H_f^0(\text{CS}_2(f)) + 3\Delta H_f^0(\text{O}_2(f)))$$

$$\Delta H_r^0 = (-393,5 + 2 \cdot 296,8) - (87,9 + 0) = -1057 \text{ kJ}$$

Hess tétele

G. H. Hess (1802-1850)

Az eredő reakcióentalpia (reakcióhő) csak a reaktánsok és a termékek minőségétől függ és független a kezdeti állapottól a végállapotig vezető úttól, vagyis attól, hogy a kémiai változás egy vagy több lépésben megy-e végbe.

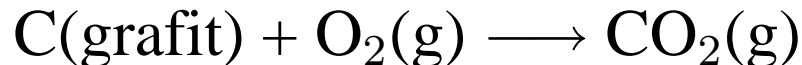


$$\Delta H = -393,5 \text{ kJ}$$

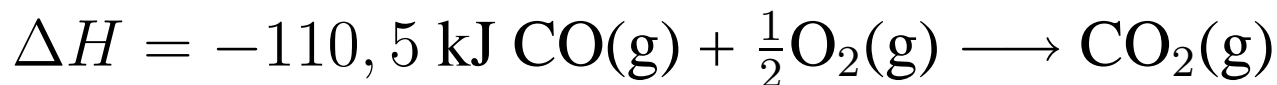
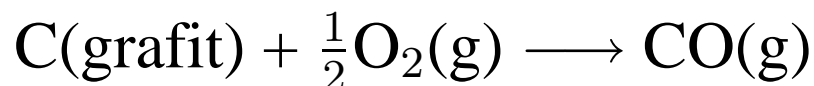
Hess tétele

G. H. Hess (1802-1850)

Az eredő reakcióentalpia (reakcióhő) csak a reaktánsok és a termékek minőségétől függ és független a kezdeti állapottól a végállapotig vezető úttól, vagyis attól, hogy a kémiai változás egy vagy több lépésben megy-e végbe.



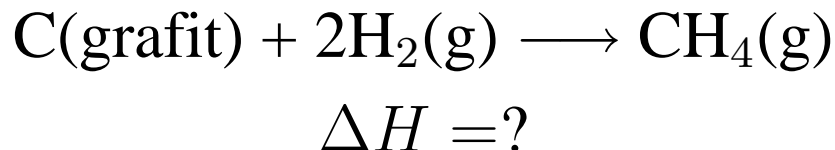
$$\Delta H = -393,5 \text{ kJ}$$



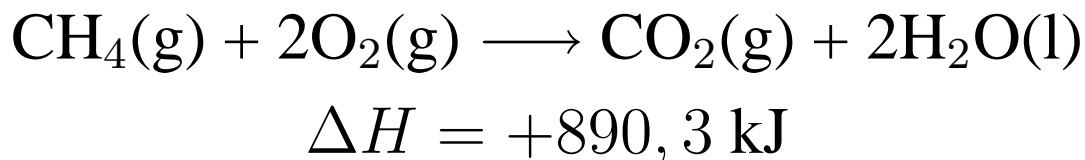
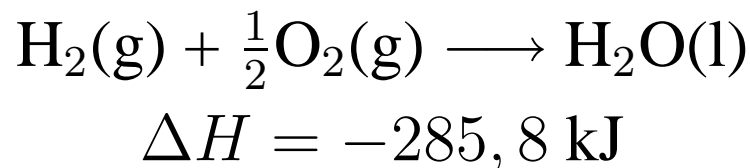
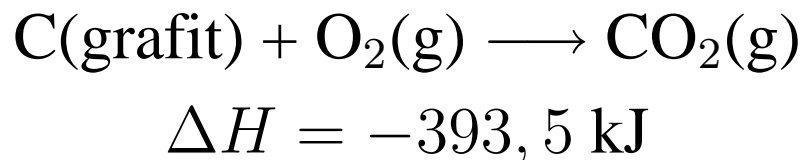
$$\Delta H = -283,0 \text{ kJ}$$

Hess tétele

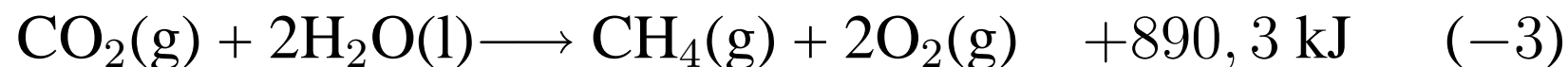
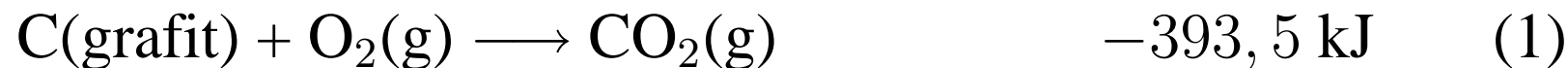
Számoljuk ki a következő reakció során bekövetkező standard entalpiaváltozást.



a következő adatokból:



Hess tétele



Termodinamika

I. Főtétel: $\Delta U = q + w$ Térfogati munka: $w = -p(V_2 - V_1) = -p\Delta V$
(állandó nyomáson) (felületi munka, nyújtási munka, elektromos munka)

$$q = C\Delta T$$

$$q = cm\Delta T$$

Állandó térfogaton:

$$\Delta U = q_v = C_v\Delta T$$

Entalpia: $H = U + PV$

$$\Delta H = \Delta U + p\Delta V \text{ (állandó } T, p)$$

Állandó nyomáson:

$$\Delta H = q_p = C_p\Delta T$$

$$C_p > C_v$$

- **Párolgáshő:** egy mól folyadéknak a forráspontján történő elpárologtatásához szükséges hő (entalpia).

- **Párolgáshő:** egy mól folyadéknak a forráspontján történő elpárologtatásához szükséges hő (entalpia).
- **Olvadáshő** egy mól szilárd anyagnak az olvadáspontján történő megolvasztásához szükséges hő (entalpia).

- **Párolgáshő:** egy mól folyadéknak a forráspontján történő elpárologtatásához szükséges hő (entalpia).
- **Oladáshő** egy mól szilárd anyagnak az olvadáspontján történő megolvasztásához szükséges hő (entalpia).
- **Semlegesítési hő:** ekvivalens mennyiségű sav és bázis reakciójában felszabaduló hő (entalpia).

- **Oldáshő** egy mól anyag oldódását kísérő hő (entalpia változás).

- **Oldáshő** egy mól anyag oldódását kísérő hő (entalpia változás).
- **Égéshő:** egy mól anyag oxigén jelenlétében történő elégetésekor felszabaduló hő.

- **Oldáshő** egy mól anyag oldódását kísérő hő (entalpia változás).
- **Égéshő:** egy mól anyag oxigén jelenlétében történő elégetésekor felszabaduló hő.
- **Átalakulási hő:** egy mól anyag allotróp módosulatai közötti átalakulását kísérő entalpia változás (hő).

A termodinamika második főtétele

Mi határozza meg a spontán végbemenő folyamatok irányát?

A termodinamika második főtétele

Mi határozza meg a spontán végbemenő folyamatok irányát?

- Hőfelszabadulás
- A rendezetlenség növekedése

A termodinamika második főtétele

Mi határozza meg a spontán végbemenő folyamatok irányát?

- Hőfelszabadulás
- A rendezetlenség növekedése

A spontán változások irányát az **entrópia, S** , segítségével adjuk meg.

A második főtétele: Egy izolált rendszer entrópiája spontán, önként lejátszódó folyamat során növekszik:

$$\Delta S_{tot} > 0$$

Az entrópia

Spontán folyamatokban

$$\Delta S(\text{rendszer}) + \Delta S(\text{környezet}) > 0$$

Reverzibilis folyamatról akkor beszélünk ha a folyamat iránya az állapotjelzők végtelen kis megváltoztatásával megfordítható.

$$\Delta S_{rev} = \frac{q_{rev}}{T}$$

A reverzibilis folyamat idealizált határeset. Valós folyamatokban:

$$\Delta S > \frac{q}{T}$$

Állandó térfogaton:

$$\Delta U = q_v \leq T \Delta S$$

A termodinamika harmadik főtétele

A tiszta, tökéletes kristályos anyagok entrópiája abszolút nulla hőmérsékleten nulla.

$$\Delta S \rightarrow 0, \text{ ha } T \rightarrow 0$$

A standard reakcióentrópia: a tiszta, különálló termékek és kiindulási anyagok entrópiái közötti különbség, miközben valamennyi anyag standard állapotban van.

Entrópia

Néhány jelentő entrópiaváltozással járó folyamat:

- Fázisátalakulások (pl. olvadás $\Delta S(\text{rendszer}) > 0$, fagyás $\Delta S(\text{rendszer}) < 0$)

Entrópia

Néhány jelentő entrópiaváltozással járó folyamat:

- Fázisátalakulások (pl. olvadás $\Delta S(\text{rendszer}) > 0$, fagyás $\Delta S(\text{rendszer}) < 0$)
- Hőmérséklet illetve térfogatváltozás

Entrópia

Néhány jelentő entrópiaváltozással járó folyamat:

- Fázisátalakulások (pl. olvadás $\Delta S(\text{rendszer}) > 0$, fagyás $\Delta S(\text{rendszer}) < 0$)
- Hőmérséklet illetve térfogatváltozás
- Elegyedés, oldódás

Entrópia

Néhány jelentő entrópiaváltozással járó folyamat:

- Fázisátalakulások (pl. olvadás $\Delta S(\text{rendszer}) > 0$, fagyás $\Delta S(\text{rendszer}) < 0$)
- Hőmérséklet illetve térfogatváltozás
- Elegyedés, oldódás
- Mólszámváltozással járó folyamatok (mólszámnövekedés esetén $\Delta S(\text{rendszer}) > 0$)

Entrópia



Ziya

Neema

Gibbs függvény

Ha állandó nyomáson, hőátadás van és más munkavégzés nincs, mint térfogati munka, akkor

$$\Delta H = q_p$$

$$\Delta H \leq T\Delta S$$

Szabadentalpia (Gibbs-függvény):

$$G = H - TS$$

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

Gibbs függvény

Egy folyamatból állandó nyomáson és hőmérsékleten kinyerhető maximális hasznos munkát (nem térfogati, pl. elektromos) a folyamatra jellemző ΔG értéke adja meg.

$$\Delta H = q + w + p\Delta V \text{ (állandó } p\text{)}$$

Reverzibilis határesetben (T állandó)

$$q = T\Delta S$$

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

$$\Delta G = T\Delta S + w + p\Delta V - T\Delta S$$

Gibbs függvény

legyen

$$w = w_e - p\Delta V$$

így,

$$\Delta G = w_e - p\Delta V + p\Delta V$$

$$\Delta G = w_e \text{ (állandó } p, T)$$

Gibbs függvény

Állandó nyomáson és hőmérsékleten a spontán változás kritériuma:

$$\Delta G \leq 0$$

1. Ha $\Delta G < 0$ a folyamat végbe mehet, a folyamat során hő fejlődik (exoterm)
2. Ha $\Delta G > 0$ a folyamat nem mehet végbe magától, a folyamat endoterm
3. Ha $\Delta G = 0$ a rendszer egyensúlyi állapotban van.

Reakciók spontaneitása

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S, \text{ (állandó } p, T\text{)}$$

ΔH ΔS

— + a reakció spontán

minden hőmérsékleten

— — a reakció spontán

egy meghatározott hőmérséklet alatt

+ + a reakció spontán

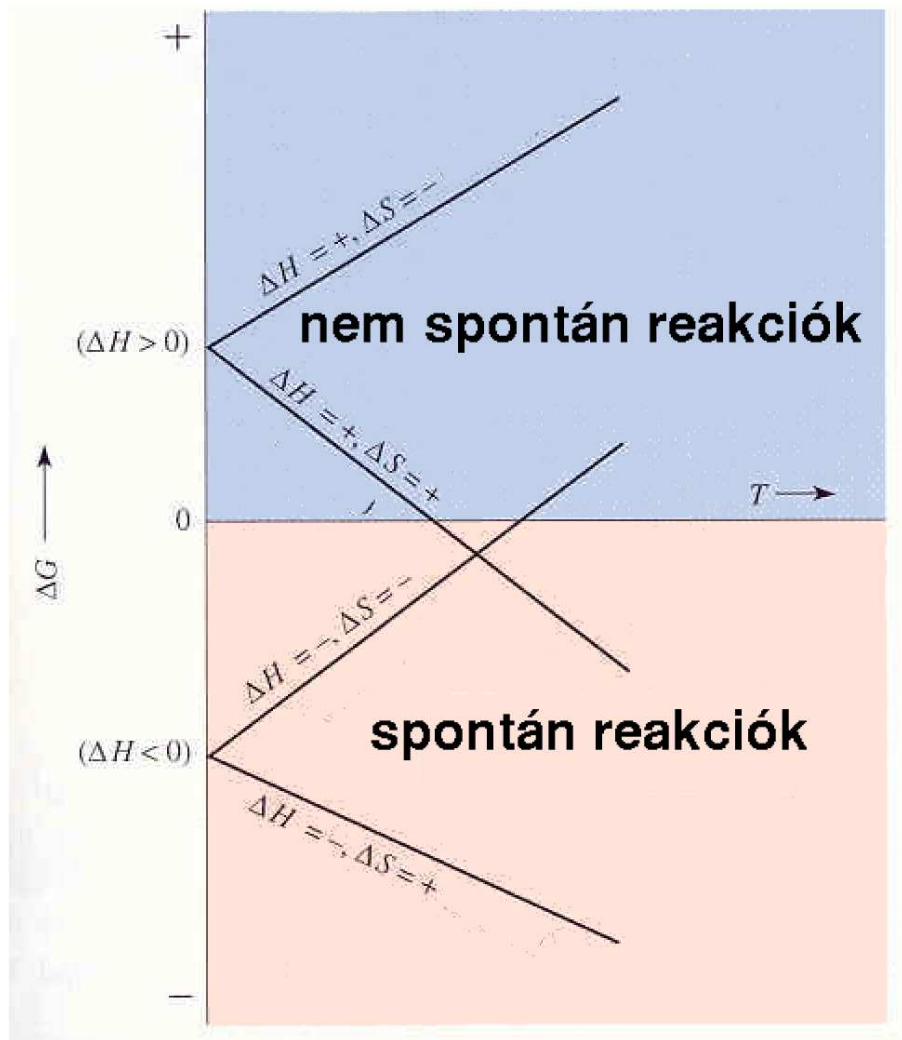
egy meghatározott hőmérséklet felett

+ — a reakció nem megy végbe

spontán módon

Reakciók spontaneitása

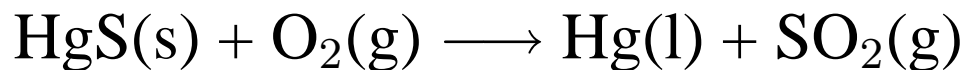
$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S, \text{ (állandó } p, T)$$



Reakciók spontaneitása

Feladat:

Végbemehet-e spontán módon a következő reakció:

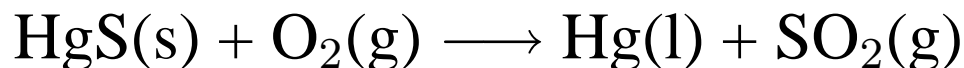


	HgS(s)	O ₂ (g)	Hg(l)	SO ₂ (g)
ΔH_f^0 (kJ/mol)	-58,2	0	0	-296,8
S_f^0 (J/mol·K)	82,4	205,0	76,0	248,1

Reakciók spontaneitása

Feladat:

Végbemehet-e spontán módon a következő reakció:



$$\Delta H_r^0 = 0 - 296,8 - (-58,2 + 0) = -238,6 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta S_r^0 = 76,02 + 248,1 - (82,4 + 205,0) = +36,7 \text{ J/molK}$$

Ez a reakció végbemeget spontán módon, függetlenül a hőmérséklettől

Egyensúlyi reakciók

$$\Delta G_r^0 = -RT \ln K$$

$\Delta G_r^0 < 0$ $K > 1$ az egyensúly a termékek képződése
felé van eltolva

$\Delta G_r^0 = 0$ $K = 1$ (nagyon ritka)

$\Delta G_r^0 > 0$ $K < 1$ az egyensúly a reaktánsok képződése
felé van eltolva

Összefoglalás

I. főtétele $\Delta U = q + w$

II. főtétele $\Delta S > 0$ $\Delta S \geq \frac{q}{T}$

III. főtétele $S_{T=0} = 0$

Összefoglalás

A folyamatokat kísérő hőváltozás:

Állandó térfogaton $q_V = \Delta U$

Állandó nyomáson $q_p = \Delta H$

$$H = U + pV$$

$$\Delta H = \Delta U + p\Delta V \quad (\text{állandó } p, T)$$

Összefoglalás

Munkavégzés:

$$\Delta U = q - p\Delta V + w_h$$

Összefoglalás

Munkavégzés:

$$\Delta U = q - p\Delta V + w_h$$

$$w_h = \Delta U - q + p\Delta V$$

Összefoglalás

Munkavégzés:

$$\Delta U = q - p\Delta V + w_h$$

$$w_h = \Delta U - q + p\Delta V$$

$$w_h = \Delta H - q$$

Munkavégzés:

$$\Delta U = q - p\Delta V + w_h$$

$$w_h = \Delta U - q + p\Delta V$$

$$w_h = \Delta H - q$$

$$w_h = \Delta G \text{ (állandó } p, T)$$

Munkavégzés:

$$\Delta U = q - p\Delta V + w_h$$

$$w_h = \Delta U - q + p\Delta V$$

$$w_h = \Delta H - q$$

$$w_h = \Delta G \text{ (állandó } p, T)$$

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S \text{ (állandó } p, T)$$

Összefoglalás

Kémiai reakciók spontaneitása, kémiai egyensúly (állandó T , p)

$\Delta G > 0$ a reakció nem megy végbe spontán

$\Delta G < 0$ a reakció spontán módon megy végbe

$\Delta G = 0$ a rendszer egyensúlyban van

$$(\Delta G_r^0 = -RT \ln K)$$



Általános Kémia
Reakciókinetika



- A kémiai reakciók sebessége a pillanatszerű reakcióktól a végtelen lassú reakciókig terjed.



- A kémiai reakciók sebessége a pillanatszerű reakcióktól a végtelen lassú reakciókig terjed.
- A gyors reakciók a másodperc tört része alatt mennek végbe. Ilyenek például a robbanások, a sav-bázis reakciók vagy az egy-elektronváltozással végbemenő redoxi reakciók.



- A kémiai reakciók sebessége a pillanatszerű reakcióktól a végtelen lassú reakciókig terjed.
- A gyors reakciók a másodperc tört része alatt mennek végbe. Ilyenek például a robbanások, a sav-bázis reakciók vagy az egy-elektronváltozással végbemenő redoxi reakciók.
- A közepesen gyors reakciók néhány másodperc vagy óra alatt mennek végbe. Például ide tartozik az észterek lúgos hidrolízise.



- A kémiai reakciók sebessége a pillanatszerű reakcióktól a végtelen lassú reakciókig terjed.
- A gyors reakciók a másodperc tört része alatt mennek végbe. Ilyenek például a robbanások, a sav-bázis reakciók vagy az egy-elektronváltozással végbemenő redoxi reakciók.
- A közepesen gyors reakciók néhány másodperc vagy óra alatt mennek végbe. Például ide tartozik az észterek lúgos hidrolízise.
- A lassú reakciók napok vagy évek alatt mennek végbe.



- Ha a reakcióban szereplő összes komponens azonos fázisban van akkor homogén reakcióról beszélünk.



- Ha a reakcióban szereplő összes komponens azonos fázisban van akkor homogén reakcióról beszélünk.
- Ha a reakcióban szereplő komponensek különböző fázisban vannak akkor heterogén reakcióról beszélünk.



- A termodinamikai szempontból spontán reakciók nem feltétlenül mennek gyorsan végbe.



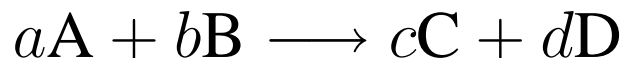
- A termodinamikai szempontból spontán reakciók nem feltétlenül mennek gyorsan végbe.
- Az erős savak és bázisok reakciója spontán reakció és pillanatszerű.
$$2\text{HCl}(\text{aq}) + \text{Mg}(\text{OH})_2(\text{s}) \longrightarrow \text{MgCl}_2(\text{aq}) + 2 \text{H}_2\text{O}(\text{l}) \quad \Delta G_r^0 = -97 \text{ kJ/mol}$$



- A termodinamikai szempontból spontán reakciók nem feltétlenül mennek gyorsan végbe.
- Az erős savak és bázisok reakciója spontán reakció és pillanatszerű.
$$2\text{HCl}(\text{aq}) + \text{Mg}(\text{OH})_2(\text{s}) \longrightarrow \text{MgCl}_2(\text{aq}) + 2 \text{H}_2\text{O}(\text{l}) \quad \Delta G_r^0 = -97 \text{ kJ/mol}$$
- A gyémánt égése is spontán termodinamikailag, de a tapasztalat szerint szobahőmérsékleten még igen hosszú idő alatt sem reagál a gyémánt az oxigénnel.



A reakciósebesség



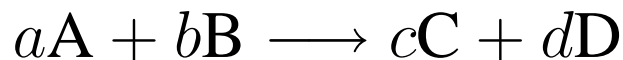
a kiindulási anyagokkal kifejezve:

$$\text{reakciósebesség} = -\frac{1}{a} \left(\frac{\Delta[A]}{\Delta t} \right) = -\frac{1}{b} \left(\frac{\Delta[B]}{\Delta t} \right)$$

a termékekkel kifejezve:

$$\text{reakciósebesség} = \frac{1}{c} \left(\frac{\Delta[C]}{\Delta t} \right) = \frac{1}{d} \left(\frac{\Delta[D]}{\Delta t} \right)$$

A reakciósebesség



a kiindulási anyagokkal kifejezve:

$$\text{reakciósebesség} = -\frac{1}{a} \left(\frac{\Delta[\text{A}]}{\Delta t} \right) = -\frac{1}{b} \left(\frac{\Delta[\text{B}]}{\Delta t} \right)$$

a termékekkel kifejezve:

$$\text{reakciósebesség} = \frac{1}{c} \left(\frac{\Delta[\text{C}]}{\Delta t} \right) = \frac{1}{d} \left(\frac{\Delta[\text{D}]}{\Delta t} \right)$$

Mivel a reakciósebesség minden időpillanatban más és más ezért differenciálhányadosokkal írjuk fel:

$$v = -\frac{1}{a} \left(\frac{d[\text{A}]}{dt} \right) = -\frac{1}{b} \left(\frac{d[\text{B}]}{dt} \right) \dots$$

A reakciósebesség



A reakciósebességet a következő tényezők befolyásolják:

- a reagáló anyagok természete

A reakciósebesség



A reakciósebességet a következő tényezők befolyásolják:

- a reagáló anyagok természete
- a reagáló anyagok koncentrációja

A reakciósebesség



A reakciósebességet a következő tényezők befolyásolják:

- a reagáló anyagok természete
- a reagáló anyagok koncentrációja
- a hőmérséklet

A reakciósebesség



A reakciósebességet a következő tényezők befolyásolják:

- a reagáló anyagok természete
- a reagáló anyagok koncentrációja
- a hőmérséklet
- egyéb anyagok jelenléte

A reakciósebesség



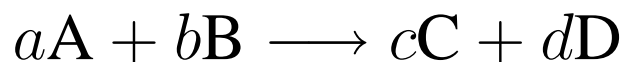
A reakciósebességet a következő tényezők befolyásolják:

- a reagáló anyagok természete
- a reagáló anyagok koncentrációja
- a hőmérséklet
- egyéb anyagok jelenléte
- heterogén reakcióknál a határfelület és annak minősége

A sebességi egyenlet



Guldberg és Waage (1864)



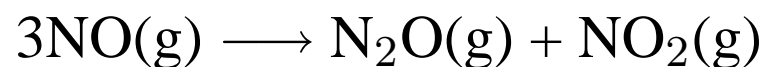
$$v = k[A]^x[B]^y$$

A k állandót az adott reakció **sebességi állandójának** nevezzük.

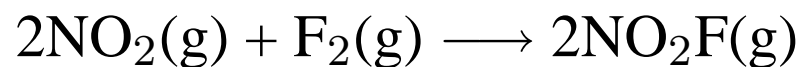
A hatványkitevőket (x , y) az adott reaktánsra vonatkoztatott **reakciórendnek** nevezzük. Általánosságban x és y nem egyezik meg a sztöchiometria számokkal (a és b).

A sebességi egyenletben szereplő hatványkitevők összegét a **reakció bruttó rendjének** nevezzük.

A sebességi egyenlet



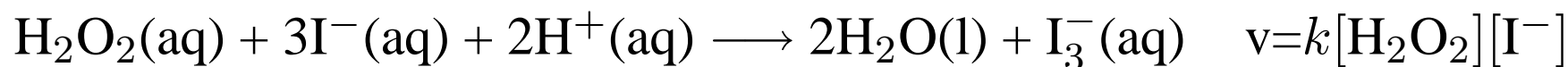
$$v = k[\text{NO}]^2$$



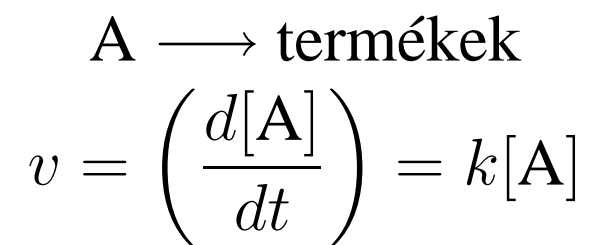
$$v = k[\text{NO}_2][\text{F}_2]$$



$$v = k[\text{NO}_2]^2$$



$$v = k[\text{H}_2\text{O}_2][\text{I}^-]$$





$$v = \left(\frac{d[A]}{dt} \right) = k[A]$$

$$-\frac{d[A]}{[A]} = kdt$$



$$v = \left(\frac{d[A]}{dt} \right) = k[A]$$

$$-\frac{d[A]}{[A]} = kdt$$

$$-\int_{[A]_0}^{[A]} \frac{d[A]}{[A]} = k \int_0^t dt$$



$$v = \left(\frac{d[A]}{dt} \right) = k[A]$$

$$-\frac{d[A]}{[A]} = kdt$$

$$-\int_{[A]_0}^{[A]} \frac{d[A]}{[A]} = k \int_0^t dt$$

$$-(\ln[A] - \ln[A]_0) = k(t - 0)$$



$$v = \left(\frac{d[A]}{dt} \right) = k[A]$$

$$-\frac{d[A]}{[A]} = kdt$$

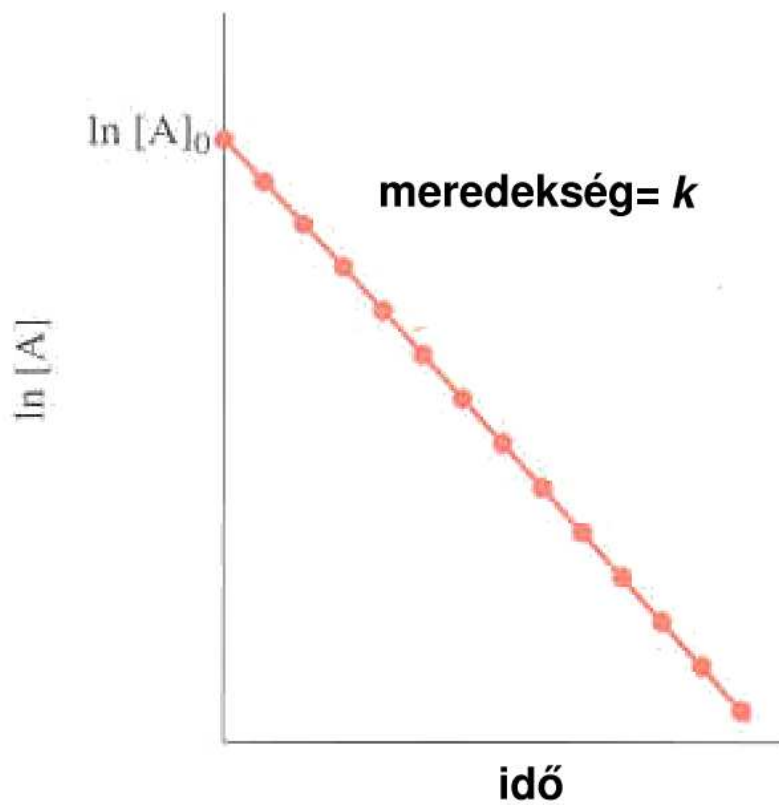
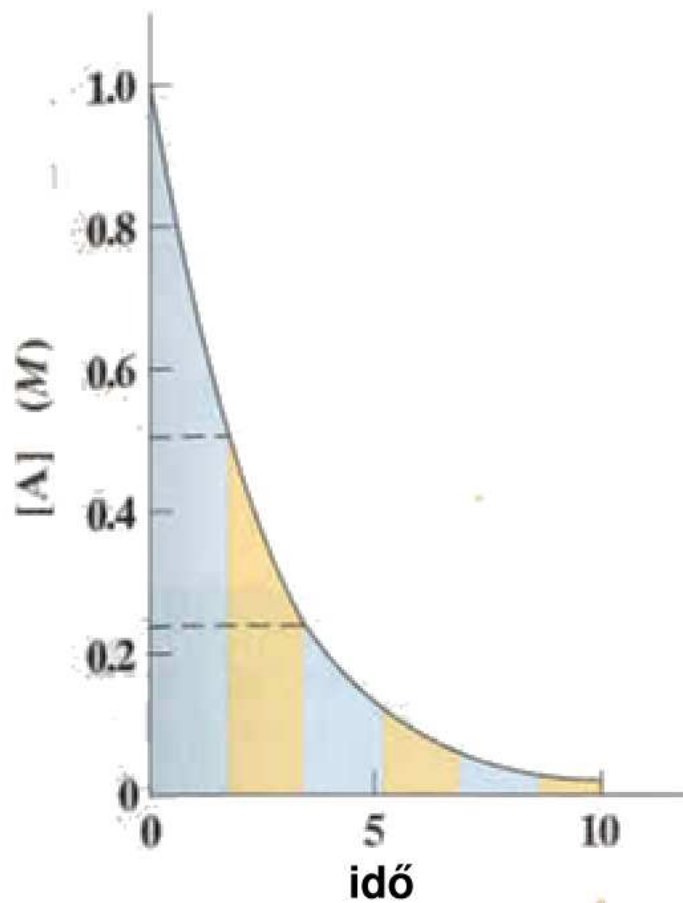
$$-\int_{[A]_0}^{[A]} \frac{d[A]}{[A]} = k \int_0^t dt$$

$$-(\ln[A] - \ln[A]_0) = k(t - 0)$$

$$\ln \frac{[A]_0}{[A]} = kt$$

$$[A] = [A]_0 e^{-kt}$$

Elsőrendű reakciók





Felezési idő ($t_{1/2}$)

A felezési idő az az idő, amely ahhoz szükséges, hogy a kiindulási anyagok fele átalakuljon.



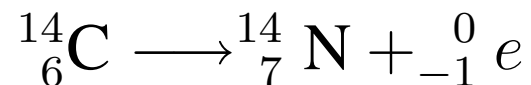
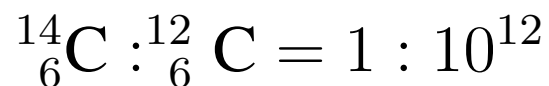
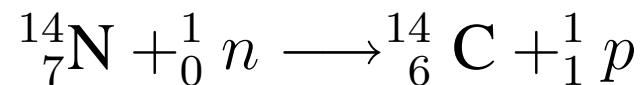
$$\ln \frac{[A]_0}{[A]} = kt$$

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

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k} = \frac{0,693}{k}$$

Elsőrendű reakcióba a felezési idő nem függ a kiindulási koncentrációtól.

Radioaktív kormeghatározás



$$t_{1/2} = 5730 \text{ év}$$



Feladat:

Egy ásatáson talált fadarab szén-14 aktivitása csak 63,6 %-a egy mai fadarabénak. Milyen idős lehet a lelet?

$$t_{1/2} = \frac{0,693}{k}$$

$$k = \frac{0,693}{t_{1/2}}$$

$$k = \frac{0,693}{5730} = 1,21 \times 10^{-4} \frac{1}{\text{év}}$$



Feladat:

Egy ásatáson talált fadarab szén-14 aktivitása csak 63,6 %-a egy mai fadarabénak. Milyen idős lehet a lelet?

$$N = 0,636N_0$$

$$\ln \frac{N_0}{N} = kt$$

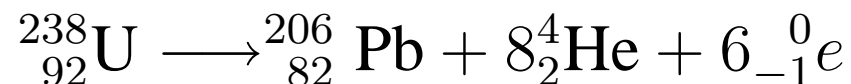
$$\ln \frac{N_0}{0,636N_0} = 1,21 \times 10^{-4}t$$

$$t = 3740 \text{ év}$$

Radioaktív kormeghatározás

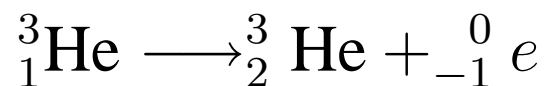


Kőzetek esetében:



$$t_{1/2} = 4,5 \times 10^9 \text{ év}$$

Borok kormeghatározása:



$$t_{1/2} = 12,3 \text{ év}$$

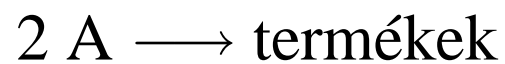


$$\text{A} \longrightarrow \text{termékek}$$
$$v = \left(\frac{d[\text{A}]}{dt} \right) = k[\text{A}]^0 = k$$

$$[\text{A}] = [\text{A}]_0 - kt$$

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

Ilyen folyamat például a szilárd gyógyszerek felszívódása a szervezetben, ha a gyógyszer és az oldószere is feleslegben van.

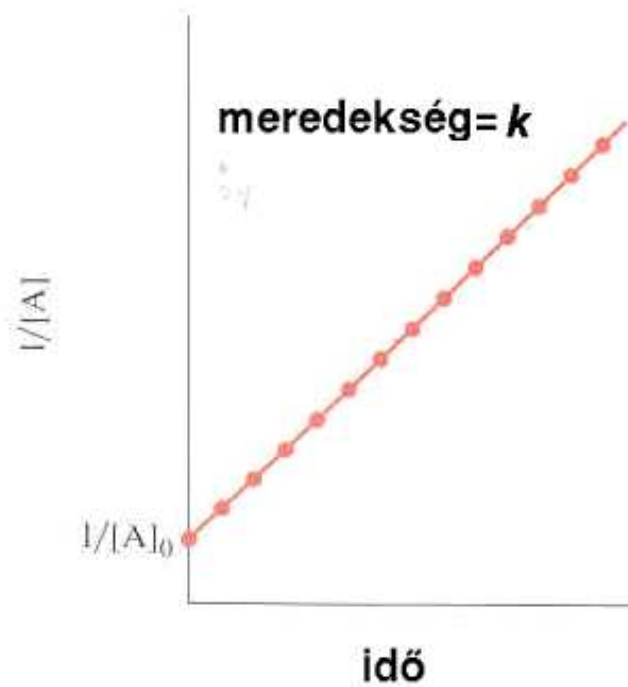
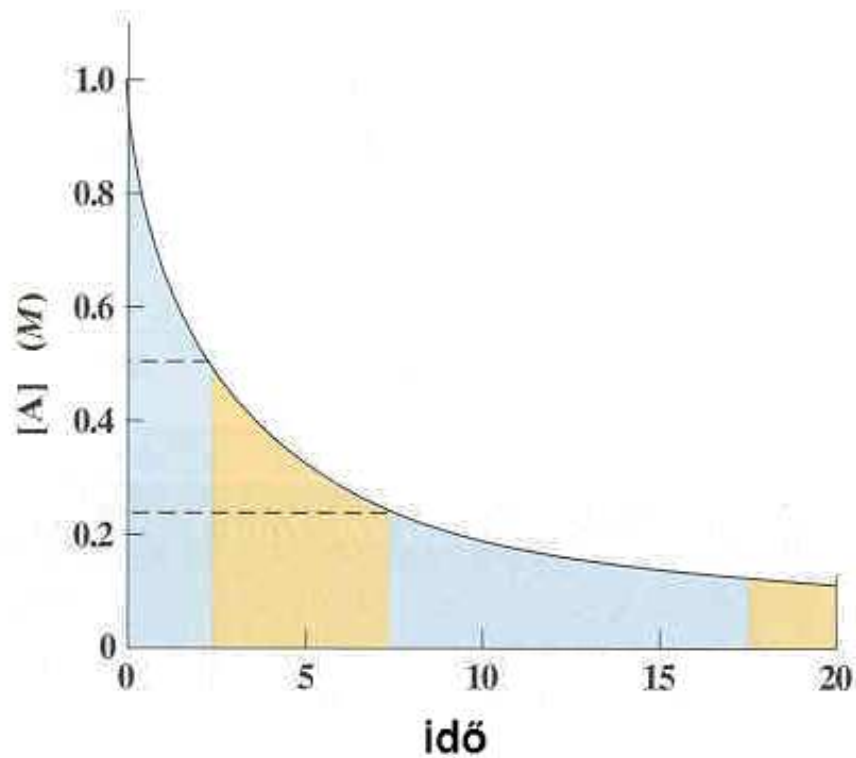


$$v = \left(\frac{d[A]}{dt} \right) = k[A]^2$$

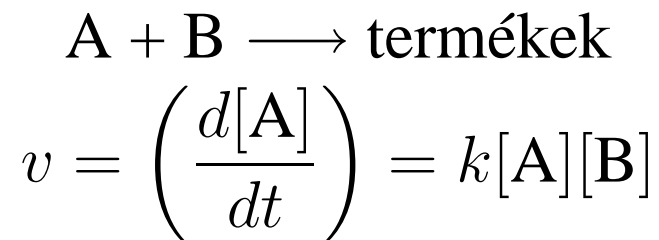
$$\frac{1}{[A]} - \frac{1}{[A]_0} = kt$$

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

Másodrendű reakciók



Pszeudo-elsőrendű reakciók



ha B nagy feleslegben, koncentrációja gyakorlatilag nem változik a reakció során:

$$[B] \approx [B]_0$$

$$v = k[A][B]_0$$

$$v = k'[A]$$

ahol,

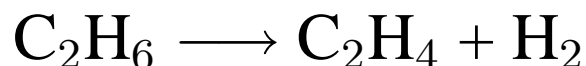
$$k' = k[B]_0$$





Elemi reakciónak nevezzük azokat a reakciókat amelyek egy reakciólépésben mennek végbe. A molekularitás azt mutatja meg, hogy egy elemi reakcióban hány molekula vesz részt.

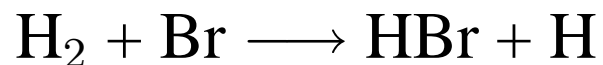
- Monomolekulás reakciók: a reakcióban egy részecske alakul át.
Például az etán bomlása etilénre és hidrogénre:





- Bimolekulás reakciók: a termékek két részecske reakciója során képződnek.

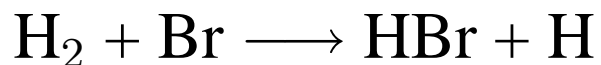
Példák:





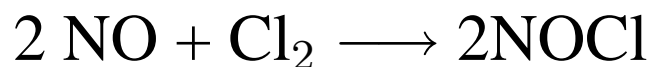
- Bimolekulás reakciók: a termékek két részecske reakciója során képződnek.

Példák:



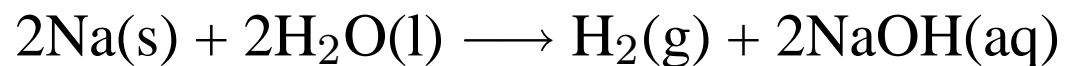
- Trimolekulás reakciók: ezek nagyon ritkák, mivel három részecske egyidejű ütközésének a valószínűsége igen kicsi.

Példa:





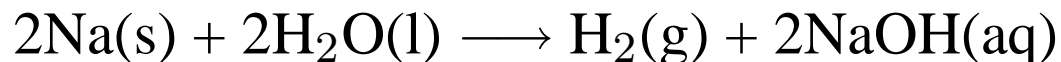
- Mekkora hőfelszabadulással jár amikor 0,143 mol nátrium reagál feleslegben lévő vízzel?



$$\Delta H = -368 \text{ kJ/mol}$$



- Mekkora hőfelszabadulással jár amikor 0,143 mol nátrium reagál feleslegben lévő vízzel?

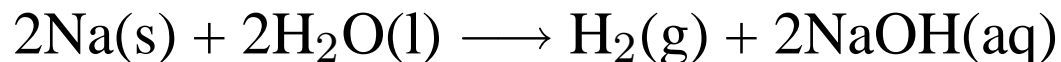


$$\Delta H = -368 \text{ kJ/mol}$$

- Elégetünk 2,88 g lítiumot oxigén feleslegben állandó légköri nyomáson, majd a reakcióelegyet 25°C-ra hűtjük. A folyamat során 68,35 kJ energia szabadul fel. Mennyi a Li_2O képződéshője?



- Mekkora hőfelszabadulással jár amikor 0,143 mol nátrium reagál feleslegben lévő vízzel?

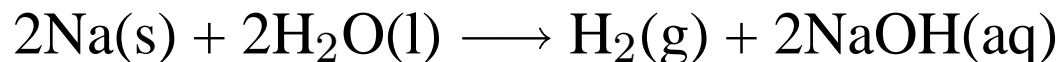


$$\Delta H = -368 \text{ kJ/mol}$$

- Elégetünk 2,88 g lítiumot oxigén feleslegben állandó légköri nyomáson, majd a reakcióelegyet 25°C-ra hűtjük. A folyamat során 68,35 kJ energia szabadul fel. Mennyi a Li_2O képződéshője?
- Melyik folyamatban szabadul fel több energia, mólnyi metán égésekor ha $\text{CO}_2\text{(g)}$ és folyékony víz keletkezik vagy mólnyi metán égésekor ha $\text{CO}_2\text{(g)}$ és vízgőz keletkezik? Miért?



- Mekkora hőfelszabadulással jár amikor 0,143 mol nátrium reagál feleslegben lévő vízzel?

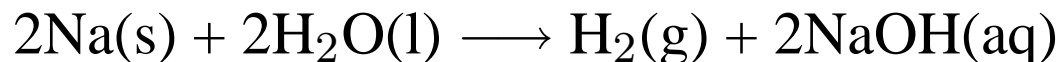


$$\Delta H = -368 \text{ kJ/mol}$$

- Elégetünk 2,88 g lítiumot oxigén feleslegben állandó légköri nyomáson, majd a reakcióelegyet 25°C-ra hűtjük. A folyamat során 68,35 kJ energia szabadul fel. Mennyi a Li_2O képződéshője?
- Melyik folyamatban szabadul fel több energia, mólnyi metán égésekor ha $\text{CO}_2\text{(g)}$ és folyékony víz keletkezik vagy mólnyi metán égésekor ha $\text{CO}_2\text{(g)}$ és vízgőz keletkezik? Miért?



- Mekkora hőfelszabadulással jár amikor 0,143 mol nátrium reagál feleslegben lévő vízzel?



$$\Delta H = -368 \text{ kJ/mol}$$

- Elégetünk 2,88 g lítiumot oxigén feleslegben állandó légköri nyomáson, majd a reakcióelegyet 25°C-ra hűtjük. A folyamat során 68,35 kJ energia szabadul fel. Mennyi a Li_2O képződéshője?
- Melyik folyamatban szabadul fel több energia, mólnyi metán égésekor ha $\text{CO}_2\text{(g)}$ és folyékony víz keletkezik vagy mólnyi metán égésekor ha $\text{CO}_2\text{(g)}$ és vízgőz keletkezik? Miért?



- A nitrogén-dioxid bomlásának másodrendű sebességi állandója $1,70 \text{ M}^{-1}\text{min}^{-1}$. Mennyi idő alatt csökken az kezdeti 2 M -ről $1,25 \text{ M}$ -re a koncentráció?



- A nitrogén-dioxid bomlásának másodrendű sebességi állandója $1,70 \text{ M}^{-1}\text{min}^{-1}$. Mennyi idő alatt csökken az kezdeti 2 M -ről $1,25 \text{ M}$ -re a koncentráció?
- A rádium-233 bomlásának sebességi állandója $0,0606 \text{ 1/nap}$. Mennyi a felezési ideje?



- A nitrogén-dioxid bomlásának másodrendű sebességi állandója $1,70 \text{ M}^{-1}\text{min}^{-1}$. Mennyi idő alatt csökken az kezdeti 2 M -ről $1,25 \text{ M}$ -re a koncentráció?
- A rádium-233 bomlásának sebességi állandója $0,0606 \text{ 1/nap}$. Mennyi a felezési ideje?
- Egy reakció során azt tapasztaltuk, hogy 54 perc alatt a reaktáns koncentrációja $0,75 \text{ M}$ -ről $0,2 \text{ M}$ -re csökkent. Mennyi a sebességi állandó értéke, ha elsőrendű reakcióról van szó?