

FOGALOMGYŰJTEMÉNY

TERMODINAMIKA

munka (w, J) az erő és az irányába eső elmozdulás szorzata (rendezett mozgás).

energia (E, J) a rendszer munkavégzőképessége.

hő (q, J) a hőmérséklet-különbség okozta energiaváltozás.

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

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

belső energia (U, J) egy testet felépítő részecskék kölcsönhatási és kinetikus energiája; abszolút értéke határozatlan, változását a termodinamika I. főtétele írja le. A belső energia állapotfüggvény és extenzív mennyiség.

állapotfüggvény olyan mennyiség, amelyet az állapotjelzők értékei határoznak meg. Megváltozása csak az állapotjelzők kezdeti és végső értékétől függ és független attól, hogy az állapotjelzők a változás során milyen közbenső értékeken mentek át.

termodinamika 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 ($T_A = T_B = T_C$).

termodinamika I. főtétele Zárt rendszer belső energiája állandó, míg munkavégzés vagy hőcsere meg nem változtatja. Egyenlettel kifejezve: $dU = \delta q + \delta w$.

reverzibilis változás az a változás, mely egyensúlyi folyamatokon keresztül játszódik le és ezért infinitezimális hatásra megfordítható.

entalpia (H, J) $H=U+pV$, amelynek egy adott folyamatban bekövetkező változása megadja az állandó nyomáson felvett/leadott hőt, amennyiben nincs hasznos munkavégzés.

hőkapacitás ($C, J/K$) állandó térfogaton: $C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V$ és állandó nyomáson: $C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_p$

reakcióentalpia a reakció során fellépő entalpiaváltozás.

standard képződési entalpia 1 mol standard állapotú anyag standard állapotú stabilis elemeiből való képződése során fellépő entalpiaváltozás. Standard állapot: 1 atm nyomás, 1 mol vagy aktivitásnyi anyag adott hőmérsékleten.

Hess-tétele Eredő reakcióentalpia azon egyedi reakciók entalpiáinak összege, melyre a bruttó reakció felbontható.

termodinamika II. főtétele Izolált (elszigetelt) rendszer entrópiája önként végbemenő folyamatok során nő, azaz $dS_{\text{teljes}} > 0$. (egyensúlyi rendszerben = 0).

entrópia ($S, J/K$) a rendezetlenség mértéke $dS = \delta q_{\text{rev}}/T$.

termodinamika III. főtétele Kristályos tiszta anyagok entrópiája $T=0$ K-en 0.

szabadenergia $A=U-TS$, amelynek egy adott folyamatban bekövetkező változása megadja a maximális (hasznos) munka mennyiségét állandó térfogaton és hőmérsékleten.

szabadentalpia $G=H-TS$, amelynek egy adott folyamatban bekövetkező változása megadja a maximális hasznos munka mennyiségét állandó nyomáson és hőmérsékleten.

Carnot-hatásfok $\eta = \frac{\text{maximális termelt munka}}{\text{hőként közölt energia}} = \frac{|w_{\max}|}{|q_m|} = 1 - \frac{T_h}{T_m}$, ahol T_h az alacsonyabb, míg T_m a magasabb hőmérsékletet jelenti.

teljesítménytényező $c = \frac{\text{hideg testtől elvont hő}}{\text{befektetett munka}} = \frac{|q_h|}{|w|}$

maximális teljesítménytényező $c_{\max} = \frac{|q_h|}{|q_m| - |q_h|} = \frac{T_h}{T_m - T_h}$, ahol T_h az alacsonyabb, míg T_m a magasabb hőmérsékletet jelenti.

kémiai potenciál a parciális moláris szabadentalpia, mely adott i-edik komponensre $\mu_i = \left(\frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{p, T, n_j, j \neq i}$

Gibbs-Duhem-egyenlet $\sum_{i=1}^K n_i d\mu_i = 0$, ahol K a komponensek száma.

Gibbs-féle fázisszabály $Sz = K - F + 2$, ahol Sz a szabadsági fokok, K a komponensek, és F a fázisok száma.

szabadsági fok (termodinamikai) azon intenzív állapotjelzők száma, amelyek egymástól függetlenül megváltoztathatók anélkül, hogy új fázisok keletkeznének vagy fázisok tűnnének el.

kémiai potenciál kifejezése ideális gázokra $\mu = \mu^0 + RT \ln(p/p^0)$, ahol μ^0 a standard kémiai potenciál.

kémiai potenciál kifejezése reális gázokra $\mu = \mu^0 + RT \ln(f/p^0)$ ahol $f = \gamma p$ a gáz fugacitása és μ^0 a standard kémiai potenciál (hipotetikus állapot, ahol $f = p^0$ és a gáz ideálisan viselkedik).

Clapeyron-egyenlet $\frac{dp}{dT} = \frac{\Delta S_m}{\Delta V_m}$, ahol ΔS_m és ΔV_m a fázisátalakulás során bekövetkező moláris entrópia- illetve térfogatváltozás.

Clausius-Clapeyron-egyenlet

$$\frac{d(\ln p)}{dT} = \frac{\Delta H_m}{RT^2}, \quad \text{integrált alakban:} \quad \ln \frac{p_2}{p_1} = \frac{\Delta H_m}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$$

ahol ΔH_m a fázisátalakulás során bekövetkező moláris entalpiaváltozás 1 és 2 állapot között.

ideális elegyek elegyedési szabadentalpiája $\Delta G_{\text{mix}} = nRT \sum_{i=1}^K x_i \ln x_i$, ahol n az összes anyagmennyiség, K az elegyben levő komponensek száma, és x_i az adott komponens móltörtje az elegyben.

ideális elegyek elegyedési entrópiája $\Delta S_{\text{mix}} = -nR \sum_{i=1}^K x_i \ln x_i$, ahol n az összes anyagmennyiség, K az elegyben levő komponensek száma, és x_i az adott komponens móltörtje az elegyben.

ideális elegy azon elegy, amelyben Raoult-törvénye bármilyen összetételnél bármelyik komponensre érvényes. (ok: $\Delta H_{\text{mix}} = 0$ és $\Delta V_{\text{mix}} = 0$)

Raoult-törvény $p_{\text{oldósz}} = p_{\text{oldósz}}^* x_{\text{oldósz}}$, ahol $p_{\text{oldósz}}$ a gőztérben az oldósz gőznyomása, $p_{\text{oldósz}}^*$ a tiszta oldósz gőznyomása és $x_{\text{oldósz}}$ a folyadékelegyben az oldósz móltörtje.

Henry-törvény a gázok folyadékban való oldhatóságát írja le: $p_{\text{oldott a.}} = K_H x_{\text{oldott a.}}$, ahol p az oldódó gáz parciális nyomása az oldat felett, K_H pedig az adott gázra jellemző Henry-együttható és $x_{\text{oldott a.}}$ a folyadékelegyben az oldott anyag móltörtje.

ideálisan híg oldat azon oldat, amelyben az oldószere Raoult-törvénye, az oldott anyagra pedig Henry-törvénye érvényes.

aktivitás $\mu_i = \mu_i^* + RT \ln a_i$, ahol a_i az i-dik komponens aktivitása és μ_i^* a standard kémiai potenciál, amely oldószer esetén a tiszta oldószer kémiai potenciálja ($a = p/p^*$), míg oldott anyag esetén a végtelen híg oldatban az oldott anyag kémiai potenciálja ($a=p/K_H$).

aktivitási együttható $a_i = \gamma_i x_i$, ahol γ_i az i-dik komponens móltörtre vonatkoztatott aktivitási együtthatója.

elektrolit azok a vegyületek, melyek oldat vagy olvadék állapotukban vezetnek az elektromos áramot.

közepes ionaktivitás $a_{\pm} = (a_+^{v_+} \cdot a_-^{v_-})^{1/v}$, ahol $v = v_+ + v_-$.

ionerősség $I = 1/2 \sum_{i=1}^K c_i z_i^2$, ahol K a töltéssel bíró komponensek száma, c az adott komponens koncentrációja, z pedig a töltése.

Debye-Hückel határtörvény $\lg \gamma_{\pm} = -0,509 |z_+ z_-| \sqrt{I / (\text{mol dm}^{-3})}$, ahol γ_{\pm} a közepes aktivitási együttható.

kolligatív tulajdonságok azon anyagi minőségtől független tulajdonságok, melyek csak az oldott anyag részecskeszámától függenek. pl. forráspont-emelkedés, fagyáspontcsökkenés és gőznyomáscsökkenés, ozmózisnyomás.

ozmózis az oldószer mozgása féligáteresztő hártán keresztül.

ozmózisnyomás $\pi = c_{\text{oldott}} RT$, ahol c_{oldott} a membránon gátolt mozgású anyag koncentrációja. Az ozmózisnyomás mérése a magasságkülönbség alapján: $\pi = \rho gh$, ahol h a magasságkülönbség.

fagyáspontcsökkenés mennyiségi kifejezése $\Delta T_{\text{fagy}} = \Delta T_{M,\text{fagy}} \bar{m}_B$, ahol vizes oldatra $\Delta T_{M,\text{fagy}} = 1,86 \text{ K kg/mol}$

forráspont-emelkedés mennyiségi kifejezése $\Delta T_{\text{forr}} = \Delta T_{M,\text{forr}} \bar{m}_B$, ahol vizes oldatra $\Delta T_{M,\text{forr}} = 0,52 \text{ K kg/mol}$.

koncentráció (c , mol/dm³) az oldott anyag anyagmennyiségének, n_B és az oldat térfogatának hányadosa V_{oldat} , azaz $c_B = n_B / V_{\text{oldat}}$.

molalitás (\bar{m} , mol/kg) az oldott anyag anyagmennyiségének, n_B és az oldószer tömegének, m_A hányadosa, azaz $\bar{m}_B = n_B / m_A$.

megoszlás valamely anyag oldódása két, egymással nem elegyedő folyadékban.

Nernst-féle megoszlási törvény $\frac{c_{X,A}}{c_{X,B}} = K_{m,c}$

oktanol-víz megoszlási hányados $K_{o/v} = \frac{c_{X,o}}{c_{X,v}}$

reakciókoordináta $\xi = (n_i - n_i^0) / \nu_i$, ahol n_i az i-edik komponens anyagmennyisége, n_i^0 a kiindulási anyagmennyisége, és ν_i a reakcióban az adott komponens sztöchiometriai száma.

LeChatelier-elv szerint, ha az egyensúlyban levő rendszer külső körülmények hatására változik, akkor olyan folyamatok mennek végbe, amelyek ezen külső változások hatását csökkenteni igyekeznek.

egyensúlyi állandó $K_a = \frac{a_K^k \cdot a_L^l \cdot a_M^m \dots}{a_A^a \cdot a_B^b \cdot a_C^c \dots} = \frac{(c_K \gamma_K)^k \cdot (c_L \gamma_L)^l \cdot (c_M \gamma_M)^m \dots}{(c_A \gamma_A)^a \cdot (c_B \gamma_B)^b \cdot (c_C \gamma_C)^c \dots} = K_c K_\gamma$

egyensúlyi állandó kapcsolata a szabadentalpiával $\Delta G_r^0 = -RT \ln K_a$, melyből $K_a = e^{-\Delta G_r^0 / (RT)}$

ΔG_r^0 számítása $\Delta G_r^0 = \Delta H_r^0 - T \Delta S_r^0$

REAKCIÓKINETIKA

reakciósebesség (térfogattal osztott) $v = (1/\nu_j) dc_j/dt$, ahol ν_j az adott j komponens sztöchiometriai együtthatója.

empirikus sebességi egyenlet $v = k \prod_{i=1}^r c_i^{\beta_i}$

sebességi együttható a sebességi egyenletben a reakciósebesség és a koncentrációk megfelelő hatványon vett szorzata közti arányossági tényező.

részrend (egy adott komponensre) a sebességi egyenletben az adott komponens koncentrációjához tartozó hatványkitevő.

bruttó rend a reakcióban résztvevő összes anyagra vonatkozó részrend összege.

felezési idő az az időtartam, amely alatt az anyag kiindulási koncentrációja a felére csökken.

sebességi egyenlet elsőrendű reakcióra $v = -d[A]/dt = k[A]$, ahol $[A]$ a reaktáns koncentrációja.

integrált sebességi egyenlet elsőrendű reakcióra

$$[A] = [A]_0 e^{-kt} \quad \text{vagy} \quad \ln \frac{[A]}{[A]_0} = -kt,$$

ahol $[A]_0$ a reaktáns kiindulási koncentrációja, $[A]$ a t időponthoz tartozó reaktáns-koncentráció, t az eltelt idő és k a sebességi együttható.

felezési idő elsőrendű reakcióra $t_{1/2} = \ln 2/k$, ahol k az elsőrendű reakció sebességi együtthatója.

Arrhenius-egyenlet $k = A \exp(-E_A/RT)$ vagy linearizált alakban $\ln k = \ln A - E_A/RT$, ahol A a preexponenciális tényező, E_A a folyamat aktiválási energiája és T a hőmérséklet.

elemi reakció olyan reakciólépés, mely a felírt egyenlet szerint valóban végbemegy.

reakciómechanizmus azon elemi lépések sokasága, mely a rendszer viselkedését leírja.

katalizátor a reakció sebességét új utak nyitásával növelő anyagfajta, mely a reakció végén változatlan mennyiségben visszamarad.

katalízis katalizátor közreműködésével végbemenő reakció.

autokatalizátor A reakció terméke a reakció katalizátora, azaz a termék saját képződésének sebességét növeli.

autokatalízis olyan katalízis, ahol valamelyik reakciótermék a katalizátor.

párhuzamos reakciók több egyidőben futó reakció együttese.

sorozatos reakciók egymás után következő reakciók együttese.

kvázistacionárius közelítés egy adott anyagra $dc_i/dt \approx 0$ közelítés, azaz az adott komponens koncentrációjának változása elhanyagolható a többi komponens koncentrációváltozásához képest. A komponens koncentrációja minden időben számítható a többi komponens koncentrációjából a közelítést figyelembe véve. A közelítés a kezdeti időpontokban nem érvényes.

Michaelis-Menten-egyenlet

$$v = \frac{v_{\max} [S]}{[S] + K_M},$$

ahol v a képződés sebessége, v_{\max} a maximális képződési sebesség, és K_M a Michaelis-állandó.

Lineweaver-Burk ábrázolás $1/v - 1/[S]$ függvény, mely egyenest ad. Az egyenes meredekségéből és tengelymetszetéből különböző mechanizmusok esetén is számítható K_M és v_{\max} .

$$\frac{1}{v} = \frac{1}{v_{\max}} + \frac{K_M}{v_{\max}} \frac{1}{[S]}$$

láncreakció azon reakciók együttese, ahol reaktív köztitermékek keletkeznek, melyek a kiindulási anyaggal reagálva a láncvívök újraképződését eredményezik.

láncvívő a lánc haladásáért felelős reaktív köztitermék.

láncindító lépés a láncvívök keletkezését eredményező reakció.

láncfolytató lépés során a reakcióban a láncvívök száma nem változik.

láncelágazó lépés során a reakcióban a láncvívök száma nő.

késleltetés során a láncvívök száma nem változik, de a végtermék fogy.

lánclezáró lépés során a láncvívök száma csökken.

SPEKTROSKÓPIA ÉS FOTOKÉMIA

spektroszkópia az anyag által elnyelt illetve kibocsátott elektromágneses sugárzás vizsgálatával foglalkozó tudományág.

fotokémia a sugárzás elnyelésének illetve a gerjesztett részecskék további reakcióinak vizsgálatával foglalkozó tudományág.

Lambert-Beer törvény $A = \lg(I_0/I_T) = \epsilon c l$, ahol A az abszorbancia, I_0 a beeső fény I_T az áthaladó fény intenzitása, ϵ a moláris abszorbancia, l az úthossz.

fluoreszcencia fotoemissziós folyamat, mely során egy szingulett gerjesztett állapotú anyag bocsát ki elsőrendű kinetikai folyamatban fotont.

foszforeszcencia fotoemissziós folyamat, mely során egy triplett gerjesztett állapotú anyag bocsát ki elsőrendű kinetikai folyamatban fotont.

spinváltó átmenet olyan sugárzásmentes folyamat, melynek során szingulett gerjesztett állapotú anyag alakul át triplett gerjesztett állapotú anyaggá.

belső konverzió olyan sugárzásmentes folyamat, melynek során szingulett gerjesztett állapotú anyag alakul át szingulett alapállapotú anyaggá.

adott folyamat kvantumhasznosítási tényezője (Φ)

$$\Phi = \frac{\text{folyamatban résztvevő gerjesztett molekulák száma}}{\text{elnyelt fotonok száma}}$$

$$\Phi = \frac{\text{folyamat sebessége}}{\text{egységnyi térfogatban egységnyi idő alatt elnyelt fotonok száma}}$$

kromofór a molekula azon szerkezeti egysége, melyben a látható fénynek megfelelő elektronátmenet van és ezzel színessé teszi az adott molekulát.

HATÁRFELÜLETI JELENSÉGEK

adszorpció a részecskék felületen történő megkötődése.

abszorpció a részecskék másik fázis/anyag belsejében történő megkötődése.

deszorpció a felületen kötött részecskék felszabadulása.

adszorptívum a felületen megkötődő anyag.

adszorbens a megkötő anyag neve.

fiziszorpció a fizikai eredetű, másodlagos kötőerőkkel létrejövő megkötődés.

kemiszorpció azon megkötődés, melynek során kémiai kötések keletkeznek.

relatív borítottság, (θ)

$$\theta = \frac{\text{adszorbeált helyek száma}}{\text{összes adszorpciós hely száma}}$$

adszorpciós izoterma a relatív borítottság (θ) a nyomás (p) függvényében ábrázolva, állandó hőmérsékleten.

Langmuir-féle adszorpciós izoterma

$$\theta = \frac{Kp}{1 + Kp},$$

ahol K az adszorpció és a deszorpció sebességi együtthatójának hányadosa.

TRANSPORTFOLYAMATOK

transzportfolyamat anyag, energia vagy impulzus egyik helyről másikkra történő áramlása.

fluxus/áramsűrűség (J) adott fizikai mennyiség egységnyi felületen egységnyi idő alatt történő áthaladása.

diffúzió a koncentrációgradiens okozta elmozdulás.

diffúziós áramsűrűség (J_d , $\text{mol m}^{-2}\text{s}^{-1}$) diffúzió hatására egységnyi felületre merőlegesen egységnyi idő alatt áthaladt anyagmennyiség. $J_d = -D \frac{dc}{dz}$, ahol D a diffúzióállandó, c a koncentráció és z az áthaladás iránya (Fick I. törvénye).

konvekció a közeg makroszkópikus áramlása révén történő elmozdulás.

migráció ionok elmozdulása az elektromos potenciál gradiensének hatására.

konvekciós áramsűrűség (J_k , $\text{mol m}^{-2}\text{s}^{-1}$) közegáramlás hatására egységnyi felületre merőlegesen egységnyi idő alatt áthaladt anyagmennyiség. $J_k = cv_z$, ahol c a koncentráció és v_z az áthaladás irányába eső közegmozgás sebessége.

hő áramsűrűsége (J_h , $\text{J m}^{-2}\text{s}^{-1}$) hővezetés hatására egységnyi felületre merőlegesen egységnyi idő alatt áthaladt hőmennyiség. $J_h = -\kappa \frac{dT}{dz}$, ahol κ a hővezetési együttható, T a hőmérséklet és z az áthaladás iránya.

impulzus áramsűrűsége (J_i , $\text{kg m}^{-1}\text{s}^{-2}$) egységnyi felületre merőlegesen egységnyi idő alatt áthaladt impulzus. $J_i = -\eta \frac{dv_x}{dz}$, ahol η a viszkozitás, v_x az áramlás irányába eső mozgás sebessége és z az áramlásra merőleges irányt jelöli.