

FOGALOMGYŰJTEMÉNY

kémia: az anyag összetételével, és annak változásával, foglalkozó tudomány.

I. A KÉMIAI RENDSZEREK ÁLLAPOTÁNAK LEÍRÁSA

anyagmennyiség: (jele: n ; mértékegysége: 1 mol) az anyag azon mennyisége, amely annyi egységet, részecskét tartalmaz, mint amennyi atom van 12 g 12 -es tömegszámú (^{12}C) szén nuklidban.

nuklid: egy atommag, amelyet a rendszáma és tömegszáma jellemez.

rendszer: a tér általunk vizsgálni kívánt, véges része.

környezet: a rendszeren kívüli, az azt körülvevő, teljes tér.

nyílt rendszer: olyan rendszer, amely és környezete között, mind energia-, mind anyagátmenet lehetséges.

zárt rendszer: olyan rendszer, amely és környezete között, csak energiaátmenet lehetséges, de anyagátmenet nem.

elszigetelt rendszer/izolált rendszer: olyan rendszer, amely és környezete között, sem energia-, sem anyagátmenet nem lehetséges

szilárd állapot: az anyag azon állapota, amikor határozott alakja és térfogata van, sűrűsége magas, és rendezett belső szerkezet jellemzi (kristályos szilárd testek).

amorf állapot: határozott térfogatú és alakú állapota az anyagnak, de hiányzik a rendezett belső szerkezet, üvegszerű állapotban van. Valójában igen nagy viszkozitású, vagy túlhűtött folyadéknak tekinthető.

folyadék állapot: az anyag azon állapota, amikor határozott térfogata van, de nincs meghatározott alakja, a tartóedény alakját veszi fel. Sűrűsége (általában) kicsit kisebb, mint a szilárd állapoté, de nincs rendezett belső szerkezete.

légnemű állapot: az anyag azon állapota, amikor sem határozott térfogata, sem határozott alakja nincs, kitölti a tároló edény teljes térfogatát, és felveszi alakját. Sűrűsége jelentősen kisebb a szilárd, és a folyadék állapoténál. Légnemű a gőz, és a gáz állapot is!

gőz: az anyag olyan légnemű állapota, amely az adott hőmérsékleten megfelelő nyomás alkalmazásának a hatására cseppfolyósodik.

gáz: az anyag olyan légnemű állapota, amely az adott hőmérsékleten a nyomás növelésének segítségével nem cseppfolyósítható.

olvadás/fagyás: a kristályos szilárd testek, egyensúlyi folyamatban történő folyadékká válása, illetve olvadékká, egyensúlyi folyamatban, kristályos szilárd testekké válása.

párolgás: a folyadék állapotú anyag egy részének gőz állapotba történő átmenete. Minden hőmérsékleten megtörténik!

kondenzáció: A gőz halmazállapotú anyag kondenzált állapotba (folyadék vagy szilárd) való átmenete.

lecsapódás: A gőz halmazállapotú anyag folyadék állapotba való átmenete.

kristályosodás: A gőz halmazállapotú, vagy oldott anyag kristályos szilárd állapotba való átmenete. Tágabb értelemben a fagyás is a kristályosodás egyik formája!

szublimáció: az a folyamat, amely során a szilárd állapotú anyag, egyensúlyi folyamatban, közvetlenül légneművé alakul. Nem azonos a szilárd anyag lassú elpárolgásával!

fluid fázisok: az anyag olyan állapotai, amikor annak nincs határozott alakja, és képes áramlásra, azaz a folyadék és a légnemű állapot.

kondenzált fázisok: az anyag azon állapotai, amikor annak határozott térfogata van, azaz a szilárd és folyadék állapot.

fázis: az anyag olyan megjelenési formája, amelyen belül kémiai összetételét, fizikai állapotát tekintve egységes. A fázison belül az intenzív tulajdonságok a helytől nem függenek, mindenütt azonosak.

állapothatározó/állapotjelző: egy fizikai rendszer makroszkopikus tulajdonságát meghatározó mennyiség.

extenzív tulajdonság: a rendszer olyan tulajdonsága, amely függ a rendszerben lévő anyag mennyiségétől, a rendszer méretétől, és a részrendszerek egyesítésekor összeadódik (pl. tömeg, anyagmennyiség)

intenzív tulajdonság: a rendszer olyan tulajdonsága, amely nem függ a rendszerben lévő anyag mennyiségétől, a rendszer méretétől, és a részrendszerek egyesítésekor kiegyenlítődik (pl. hőmérséklet, nyomás).

I.1. A gázállapot leírása

Boyle-(Mariotte) törvény: az ideális viselkedésű gázok állapotát állandó hőmérsékleten –(izoterm körülmények között) – leíró állapotegyenlet, mely szerint állandó hőmérsékleten, egy adott mennyiségű gáz nyomásának, és térfogatának a szorzata konstans.

$$pV = \text{konst. ill. } p_1V_1 = p_2V_2$$

Gay-Lussac I. (Charles) törvénye: az ideális viselkedésű gázok állapotát állandó nyomáson – izobár körülmények között – leíró állapotegyenlet, mely szerint állandó nyomáson, egy adott mennyiségű gáz térfogatának és az abszolút hőmérsékleti skálán mért hőmérsékletének hányadosa konstans.

$$\frac{V}{T} = \text{konst. ill. } \frac{V_1}{T_1} = \frac{V_2}{T_2}$$

Gay-Lussac II. (Amontons) törvénye: az ideális viselkedésű gázok állapotát állandó térfogaton – izoszter/izochor körülmények közt – leíró állapotegyenlet, mely szerint állandó térfogaton, egy adott mennyiségű gáz nyomásának és az abszolút hőmérsékleti skálán mért hőmérsékletének hányadosa konstans.

$$\frac{p}{T} = \text{konst. ill. } \frac{p_1}{T_1} = \frac{p_2}{T_2}$$

egyesített gáztörvény: az ideális viselkedésű gázok egy adott mennyiségének viselkedését leíró állapotegyenlet, mely szerint, a gáz nyomásának és térfogatának szorzata és az abszolút hőmérsékleti skálán mért hőmérsékletének hányadosa konstans.

$$\frac{pV}{T} = \text{konst. ill. } \frac{p_1V_1}{T_1} = \frac{p_2V_2}{T_2}$$

Avogadro törvénye: azonos térfogatú, de eltérő minőségű gázok, azonos nyomáson, és hőmérsékleten azonos számú részecskét tartalmaznak.

egyetemes/ideális gáztörvény: ideálisan viselkedő gázok állapotegyenlete, mely szerint a gáz nyomásának és térfogatának a szorzata egyenlő a gáz anyagmennyiségének, az egyetemes gázállandóval, és az abszolút hőmérsékleti skálán mért hőmérsékletének a szorzatával.

$$pV = nRT \text{ ahol } R = 8,314 \text{ J/(mol K)}$$

moláris térfogat: egy mol gáz térfogata egy adott nyomáson és hőmérsékleten.

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

egyetemes gázállandó: az egy mol ideálisan viselkedő gázra vonatkozó, az egyesített gáztörvényből származó konstans.

$$\frac{pV_m}{T} = R = 8,314 \text{ J/(mol K)}$$

állapotegyenlet: az állapotváltozók között fennálló összefüggés.

ideális/tökéletes gáz: elméleti modell, amely szerint a gáz részecskéinek, amelyek teljesen véletlenszerűen mozognak, a saját térfogata elhanyagolható a gáz rendelkezésére álló térfogathoz képest, és a részecskék között sem vonzó, sem taszító kölcsönhatás nincs, ezért ütközésük teljesen rugalmas.

reális gázok: a valós gázok, amikor a gáz részecskéinek saját térfogata nem nulla, és a részecskék között vonzó és taszító kölcsönhatások is lehetségesek, az ütközések emiatt nem teljesen rugalmasak.

kompresszibilitási tényező: (jele: Z ; mértékegysége: *nincs*) egy mol gáz nyomásának (p) és térfogatának (V_m) a szorzata, osztva az egyetemes gázállandóval (R) és az abszolút hőmérsékleti skálán mért hőmérsékletének (T) a szorzatával.

$$Z = \frac{pV_m}{RT} \text{ ahol } V_m = \frac{V}{n}$$

van der Waals egyenlete reális gázokra: az ideális és reális gázok közötti különbséget első közelítésben figyelembe vevő állapotegyenlet:

$$\left(p + \frac{an^2}{V^2}\right)(V - nb) = nRT$$

ahol a a vonzó és taszító kölcsönhatásokat, míg b a részecskék saját térfogatát figyelembe vevő, az adott gázra jellemző állandó.

1.2. A folyadék állapot leírása

felületi feszültség: (jele: γ ; mértékegysége $1 \text{ J/m}^2 = 1 \text{ N/m}$)

(a) az egységnyi új felület létrehozásához szükséges energia. (1 J/m^2)

(b) a felületben az egységnyi hosszúságú szakaszon fellépő összehúzó erő. (1 N/m)

viszkozitás: a folyadék belső súrlódásából eredő, a folyással szembeni ellenállásának a mértéke.

gőznyomás: a folyadék párolgásából eredő, a folyadék felszíne felett kialakuló gőztérben, a saját részecskéinek a parciális nyomása.

tenzió/telített gőznyomás: egy adott hőmérsékleten, a folyadékkal egyensúlyban lévő, saját részecskéinek a gőznyomása.

forráspont: az a hőmérséklet, amikor a folyadék gőznyomása eléri a külső nyomást.

Jellemzője, a párolgástól eltérően, hogy a folyadék belsejében is keletkeznek gőzbuborékok.

túlhevítés: az a folyamat, amelynek során a folyadék állapotú anyagot forráspontja fölé melegítünk, anélkül, hogy az felforrna, azaz anélkül, hogy a folyadékfázis belsejében buborékok keletkeznének.

1.3. A szilárd állapot leírása

polimorf módosulat: az azonos összetételű, de eltérő kristályszerkezetű anyagok egymás polimorf módosulatai.

allotróp módosulat: egy elem, különböző számú atomok, vagy különböző módon történt összekapcsolódásával létrejött változata. Pl. az oxigén esetén – az O_2 és az ózon O_3 vagy a szén esetén – a grafit és a gyémánt.

olvadáspont/fagyáspont: az a hőmérséklet, amelynél összeomlik a szilárd test belső, rendezett szerkezete, és folyadék állapotba megy át, és a szilárd- és a folyadékfázis egyensúlyban van egymással.

túlhűtés: az a folyamat, amelynek során az anyagot fagyáspontja alá hűtjük anélkül, hogy a kristályosodás megindulna, a rendezett belső szerkezet kialakulna.

1.4. A tiszta anyagok fázisdiagramja

fázisdiagram: az anyag egyensúlyi fázisátalakulásait bemutató, nyomás – hőmérséklet (p-T) diagram.

forráspont görbe: a p-T fázisdiagramon azon görbe, amely megmutatja, hogy hogyan függ a forráspont a nyomástól, amikor a folyadék és a gőzfázis egyensúlyban van egymással, azaz azonos a gőznyomásuk.

olvadáspont/fagyáspont görbe: a p-T fázisdiagramon azon görbe, amely megmutatja, hogy hogyan függ az olvadáspont/fagyáspont a nyomástól, amikor a szilárd és a folyadék fázis egyensúlyban van egymással, azaz azonos a gőznyomásuk.

szublimációs görbe: a p-T fázisdiagramon azon görbe, amely megmutatja, hogy hogyan függ a szublimációs hőmérséklet a nyomástól, amelyen a szilárd és a gőzfázis egyensúlyban van egymással, azaz azonos a gőznyomásuk.

hármaspont: a p-T fázisdiagram azon pontja, ahol mindhárom fázis létezik, és egymással egyensúlyban van, azaz ahol az olvadáspont, a forráspont és a szublimációs görbe metszi egymást.

kritikus pont: a p-T fázisdiagramon a forráspontgörbe végpontja, ahol a folyadék és a gőzfázis már nem különböztethető meg egymástól.

kritikus hőmérséklet: a p-T fázisdiagramon, a kritikus ponthoz tartozó hőmérséklet, amely felett a légnemű anyag, csak a nyomás növelésével már nem cseppfolyósítható.

kritikus nyomás: a p-T fázisdiagramon, a kritikus ponthoz tartozó nyomás.

A KÉMIAI RENDSZEREK ÖSSZETÉTELÉNEK LEÍRÁSA

alkotórészek: a rendszerben lévő kémiai anyagfajták - atomok, molekulák, ionok is lehetnek.

komponens: a rendszer olyan kémiailag független alkotórészei együtt, melyek fizikai módszerekkel nem választhatók szét, és elégségesek minden fázis összetételének a leírásához. Pl. a víz, a vízmolekulákon (H_2O) kívül mindig tartalmaz hidroxónium- (H_3O^+), és hidroxid- (OH^-) ionokat is, mégis a tiszta víz, egykomponensű rendszer, mert hiába desztilláljuk le a vizet, a lekondenzálás után újra beáll a víz saját disszociációs egyensúlya, és az ionok újra megjelennek.

atom: a kémiai tulajdonságok legkisebb hordozója, az anyagot felépítő részecske, mely kémiai módszerekkel nem bontható további részekre.

elem: az az anyagfajta, mely azonos rendszámú atomokból áll.

vegyjel: egy elemek jelölésére használt egy-, vagy kétbetűs jelkombináció. Az első nagybetű a második kicsi. A vegyjel egyértelműen megadja az elem rendszámát.

molekula: két vagy több atomból, jól meghatározott, állandó arányban felépülő részecske.

ion: töltéssel rendelkező atom, vagy molekula.

gyök: párosítatlan elektronnal rendelkező molekula.

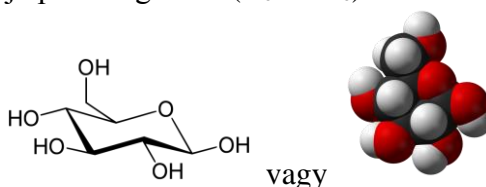
vegyület: két vagy több különböző elemből, jól meghatározott, állandó arányban felépülő anyag.

kémiai képlet: a vegyületek megadására szolgáló, a vegyületet alkotó atomok vegyjeleiből, a vegyületben lévő atomok mennyiségi viszonyait is tükröző jel. A mennyiségi viszonyokat a vegyjelek után jobb alsó indexben megadott számok tükrözik. A vegyjelek sorrendje függ a vegyület típusától – szerves ill. szervetlen vegyület – és a képlet típusától, hogy tapasztalati képlet, molekula képlet, vagy szerkezeti képlet. Pl. KHCO_3 , CH_4 , $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COOH}$

tapasztalati képlet: a vegyületet alkotó atomok kémiai anyagmennyiségének arányát adja meg, a vegyjelek utáni lehető legkisebb számokkal. Nem mindig egyértelmű, mert pl. CH lehet acetilén, $\text{HC}\equiv\text{CH}$, vagy benzol, C_6H_6 is. Ilyen képlettel írjuk le a kristályos ionvegyületeket is pl. NaCl ami helyesen $(\text{NaCl})_n$ lenne, ahol n függene a kristály méretétől.

molekulaképlet: a vegyületet alkotó atomok arányát úgy adja meg, hogy megmutatja, hogy az adott vegyület egy molekuláját alkotó atomokból hány van benne. Pl. HCl , $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$, C_6H_6

szerkezeti képlet: tartalmaz információt a különböző atomok egymáshoz való kapcsolódásáról, esetleg a molekula térbeli szerkezetéről is. A legegyszerűbb a csoportok egymás utáni felsorolása pl.: $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$, ezt lehet a kötési viszonyokra utaló jelekkel kiegészíteni pl.: $\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$, a térszerkezetre is utalhat, vagy a teljes háromdimenziós képet is megadhatja pl. a D-glükóz ($\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$):



állandó súlyviszonyok törvénye: egy adott vegyületben az elemek tömegének aránya állandó és az adott vegyületre jellemző. Pl. a NaCl esetében 22,999:35,453, vagy a H_2O esetében 2,016:15,999.

többszörös súlyviszonyok törvénye: két vagy több elem, ha többféle vegyületet alkothat egymással, akkor az egyes elemek tömegviszonyának aránya egyszerű egész számmal adható meg a két vegyületben. pl. a CO esetén az állandó súlyviszonyok törvényéből 12,011:15,999 és a CO_2 esetén 12,011:31,998, ezeket összehasonlítva szén esetében 1:1, míg az oxigén esetében 1:2 arányt kapunk.

relatív atomtömeg: (jele: A_r ; mértékegysége: *nincs*) a természetes nuklidösszetételű elem egy atomjának átlagos tömegének a viszonya, egy 12-es tömegszámú szénatom (^{12}C) tömegének 1/12 részéhez. Pl. $A_r(\text{O})=15,999$.

relatív molekulatömeg: (jele: M_r ; mértékegysége: *nincs*) a természetes nuklidösszetételű vegyület képlet szerinti egységének, átlagos tömegének viszonya egy 12-es tömegszámú szénatom (^{12}C) tömegének 1/12

részéhez. Pl. $M_r(\text{H}_2\text{O}) = 18,021$. Kiszámítható a relatív atomtömegek súlyozott összegéből. pl. . Pl.

$$M_r(\text{H}_2\text{O}) = 2 \cdot A_r(\text{H}) + A_r(\text{O}) = 2 \cdot 1,011 + 15,999 = 15,999 = 18,021.$$

moláris tömeg (jele: M ; mértékegysége: 1 g/mol) egy mol vegyület tömege, azaz $M = m/n$, ahol m a vegyület tömege, n az anyagmennyisége. Mérészáma megegyezik a relatív molekulatömeggel.

keverék: két vagy több anyagból álló rendszer, ahol az alkotó elemeket makroszkopikus határfelületek választják el, azokat szemcsék, cseppek formájában keverik össze, azaz többkomponensű heterogén rendszer.

elegy: két vagy több anyagból álló rendszer, ahol az alkotórészeket molekuláris szinten oszlatják el egymásban, azaz többkomponensű homogén rendszer.

oldat: egy olyan folyékony halmazállapotú elegy, amelyben az egyik komponens nagy feleslege, vagy valamilyen más tulajdonsága miatt kiemelt jelentőségű. Ezt az anyagot oldószernek, a többit oldott anyagnak nevezzük.

homogén rendszer/egyfázisú rendszer: az a rendszer, ahol nincsenek makroszkopikus határfelületek, a rendszer intenzív tulajdonságai a rendszer minden részében megegyeznek.

heterogén rendszer/többfázisú rendszer: az a rendszer, ahol a rendszer intenzív tulajdonságai ugrásszerű változást mutatnak, a rendszeren belül makroszkopikus határfelületek választják el, az egyes fázisokat egymástól.

inhomogén rendszer: az az egyfázisú rendszer, ahol az intenzív paraméterek ugyan nem egyeznek meg a rendszer minden részében, de azok változása folytonos, nem ugrásszerű, nincsenek benne makroszkopikus határfelületek.

parciális nyomás: az a nyomás, amit az adott, egy gázelegyben lévő, ideálisan viselkedő gáz, kifejtene, ha azon a hőmérsékleten egyedül tölténé ki a rendelkezésre álló térfogatot.

$$p_i V_{telj.} = n_i RT$$

parciális térfogat: az a térfogat, amit az adott, egy gázelegyben lévő, ideálisan viselkedő gáz, elfoglalna, ha azon a hőmérsékleten és a gázelegy összes nyomásán egyedül lenne.

$$p_{össz.} V_i = n_i RT$$

Dalton törvénye: ideálisan viselkedő gázok elegyének összes nyomása egyenlő a parciális nyomások összegével.

$$p_{össz.} = \sum_{i=1}^k p_i$$

Henry-törvénye: híg oldatok esetében, az oldott anyag parciális nyomása (p_i) az oldat felett, arányos az oldatbeli móltörtjével (x_i), de az arányossági tényező nem a tiszta oldott anyag gőznyomása, hanem egy ettől eltérő állandó, a Henry-együttható (K_H) azaz $p_i = K_H x_i$. Az így viselkedő oldatokat ideálisan híg oldatoknak nevezzük.

szolvatáció: az az összetett folyamat, amely során az oldószer részecskéi körbeveszik az oldott anyag részecskéit, és az oldatba viszik, illetve az oldatban molekulárisan eloszlatják, és az oldatban tartják azokat.

hidratáció: az a folyamat, amely során a víz, mint oldószer, szolvatálja az oldott anyag részecskéit.

koncentráció/molaritás/moláris koncentráció: (jele: c ; mértékegysége: 1 mol/dm^3) az oldott anyag, anyagmennyiségének, (n_B vagy n_2) és az oldat térfogatának (V_{oldat}) hányadosa, azaz

$$c_B = \frac{n_B}{V_{oldat}}$$

hígítás: (jele: V ; mértékegysége: $1 \text{ dm}^3/\text{mol}$) a (moláris) koncentráció (c_B vagy c_2) reciproka, annak az oldatnak a térfogata, amelyben egy mol oldott anyag van, azaz

$$V_B = \frac{1}{c_B}$$

tömegkoncentráció: (jele: ρ ; 1 g/dm^3) az oldott anyag tömegének, (m_B vagy m_2), és az oldat térfogatának (V_{oldat} - dm^3 egységekben!) hányadosa (Nem azonos a sűrűséggel!), azaz

$$\rho_B = \frac{m_B}{V_{oldat}}$$

vegyes százalék: (jele: $v\%$; mértékegysége: $\%$) a tömegkoncentráció százalékban kifejezett értéke, amely megmutatja, hogy hány gramm oldott anyag van 100 köbcentiméter oldatban, azaz

$$v\%_B = \rho_B \cdot \frac{1}{10} \% = \frac{m_B}{V_{oldat}} \cdot 100\%$$

térfogattört: (jele: ϕ ; mértékegysége: *nincs*) az oldott anyag térfogatának, (V_B vagy V_2), és az oldat térfogatának, (V_{oldat}), hányadosa, ahol az oldat térfogata nem egyenlő a komponensek térfogatának az összegével, hanem az oldat tömegének és a sűrűségének a hányadosából kell számolni, azaz

$$\phi_B = \frac{V_B}{V_{oldat}} \text{ ahol } V_{oldat} = \frac{m_{oldat}}{\rho_{oldat}} \neq \sum_{i=1}^k V_i$$

térfogatszázalék: (jele: $\varphi\%$; mértékegysége: $\%$) a térfogattört százalékban kifejezett értéke, amely megadja, hogy hány köbcentiméter oldott anyag van 100 köbcentiméter oldatban, azaz

$$\varphi\%_B = \phi_B \cdot 100\% = \frac{V_B}{V_{oldat}} \cdot 100\%$$

tömegtört: (jele: w ; mértékegysége: *nincs*) az oldott anyag tömegének, (m_B vagy m_2), és az oldat tömegének hányadosa, (m_{oldat}), ahol az oldat tömege az összes komponens tömegének az összege, azaz

$$w_B = \frac{m_B}{m_{oldat}} \text{ ahol } m_{oldat} = \sum_{i=1}^k m_i$$

tömegszázalék: (jele: $w\%$; mértékegysége: $\%$) a tömegtört százalékban kifejezett értéke, amely megadja, hogy hány gramm oldott anyag van 100 gramm oldatban, azaz

$$w\%_B = w_B \cdot 100\% = \frac{m_B}{m_{oldat}} \cdot 100\% \text{ ahol } m_{oldat} = \sum_{i=1}^k m_i$$

tömegarány: (jele: *nincs*; mértékegysége: *nincs*) az oldott anyag tömegének (m_B vagy m_2), és az oldószer tömegének (m_A vagy m_1) a hányadosa szorozva százzal. Csak oldhatóság megadására használják, megadja, hogy 100 gramm oldószer hány gramm oldott anyagot képes feloldani, azaz

$$\text{tömegarány}_B = \frac{m_B}{m_A} \cdot 100$$

molalitás/Raoult koncentráció: (jele: \bar{m} ; mértékegysége: Imol/kg) az oldott anyag anyagmennyiségének, (n_B vagy n_2) és az oldószer tömegének, (m_A vagy m_1) hányadosa, azaz

$$\bar{m}_B = \frac{n_B}{m_A}$$

anyagmennyiség-tört/móltört: (jele: x ; mértékegysége: *nincs*) az oldott anyag anyagmennyiségének, (n_B vagy n_2) és az oldat anyagmennyiségének (n_{oldat}) a hányadosa, ahol az oldat anyagmennyisége az összes komponens anyagmennyiségének az összege, azaz

$$x_B = \frac{n_B}{n_{oldat}} \text{ ahol } n_{oldat} = \sum_{i=1}^k n_i$$

mólszázalék: (jele $x\%$; mértékegysége: $\%$) az anyagmennyiség-tört/móltört százalékban kifejezett értéke, amely megadja, hogy hány mol oldott anyag van 100 mol oldatban, azaz

$$x\%_B = x_B \cdot 100\% = \frac{n_B}{n_{oldat}} \cdot 100\%$$

korlátlan elegyedés: korlátlanul elegyedik két anyag, ha belőlük tetszőleges összetételű elegy előállítható, anélkül, hogy új fázis jönne létre, azaz a rendszer heterogénné válna.

korlátozott elegyedés: korlátozottan elegyedik két anyag, ha van olyan összetétel tartomány, amely belőlük nem állítható elő, mert a rendszer heterogénné válik.

telített oldat: olyan oldat, amelynek a koncentrációját, az adott hőmérsékleten már nem lehet további oldandó anyag hozzáadásával emelni. Amennyiben a hőmérséklet változtatásával, vagy kémiai reakció segítségével ennél magasabb koncentrációjú, ún. túltelített oldatot állítunk elő, akkor az úgy kerül egyensúlyi állapotba, hogy az oldott anyag egy része kicsapódik, mindaddig, amíg az oldat el nem éri a telített oldat koncentrációját.

oldhatóság: (jele: S ; mértékegysége 1 g/dm^3 - nem egységes!) a telített oldat összetételét megadó mennyiség, amely alapján megadható a telített oldatban lévő oldott anyag és oldószer mennyisége. A leggyakrabban alkalmazott meghatározás szerint a feloldott anyag tömegének (m_B vagy m_2), és az oldószer térfogatának (V_A vagy V_1) a hányadosa, azaz

$$S_B = \frac{m_B}{V_A}$$

A táblázatokban, általában tömegarányban találjuk meg az oldhatóságot, de meg lehet adni bármely más összetételt kifejező mennyiség, pl: moláris koncentráció, molalitás, tömegkoncentráció, mólfraktó stb. segítségével is.

kolligatív tulajdonság: a híg oldatok azon tulajdonságai, amelyek csak az oldott részecskék számától függ, és nem függ a részecskék minőségétől. Pl.: forráspont emelkedés, fagyáspont csökkenés és gőznyomás csökkenés, ozmózisnyomás.

Raoult törvénye: híg oldatok esetében, az oldószer gőznyomása (p_{osz}) arányos az oldószer mólfraktójával (x_{osz}) az oldatban, és az arányossági tényező, a tiszta oldószer gőznyomása (p^o_{osz}), azaz

$$p_{osz} = p^o_{osz} \cdot x_{osz}$$

forráspontemelkedés: (jele: ΔT_{forr} ; mértékegysége: 1 K) híg oldatok forráspontjának emelkedése ($\Delta T_{forr} = T_{forr,oldat} - T_{forr,oldoszer}$) arányos az oldat molalításban/Raoult koncentrációban (\bar{m}) kifejezett összetételével, és az arányossági tényező a molális forráspontemelkedés ($\Delta T_{m,forr}$), amely az oldószerre jellemző mennyiség, azaz

$$\Delta T_{forr} = \Delta T_{\bar{m},forr} \cdot \bar{m}$$

fagyáspontcsökkenés: (jele: ΔT_{fagy} ; mértékegysége: 1 K) híg oldatok fagyáspontjának csökkenése ($\Delta T_{fagy} = T_{fagy,oldoszer} - T_{fagy,oldat}$) arányos az oldat molalításban/Raoult koncentrációban (\bar{m}) kifejezett összetételével, és az arányossági tényező a molális fagyáspontcsökkenés ($\Delta T_{m,fagy}$), amely az oldószerre jellemző mennyiség, azaz

$$\Delta T_{fagy} = \Delta T_{\bar{m},fagy} \cdot \bar{m}$$

ozmózis: az oldószer, féligáteresztő/szemipermeábilis hártán keresztül történő áramlásával kapcsolatos jelenség, amikor a hártya két eltérő koncentrációjú oldatot választ el, és az oldott anyagok nem képesek a hártán áthatolni. Az oldószer áramlása az oldott anyagot alacsonyabb koncentrációban tartalmazó oldatból, az azt magasabb koncentrációban tartalmazó oldat irányába történik.

ozmózis nyomás: (jele: π ; mértékegysége. 1 Pa) az a mechanikai nyomás, amelyet az oldott anyagot magasabb koncentrációban tartalmazó oldat felől alkalmazva megakadályozható az oldószernek a féligáteresztő hártán keresztül történő áramlása. Értéke, a tiszta oldószerhez képest, arányos az összes oldott anyag moláris koncentrációjának az összegének ($c_{\bar{o}} = \sum_{i=1}^{k-1} c_i$), az egyetemes gázállandónak ($R=8,314 \text{ J/(mol K)}$) és a hőmérsékletnek, az abszolút skálán megadott értékének (T), a szorzatával, azaz

$$\pi = c_{\bar{o}} RT \text{ ahol } c_{\bar{o}} = \sum_{i=1}^{k-1} c_i$$

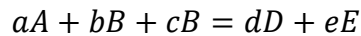
SZTÖCHIOMETRIA

sztochiometria: a kémiai reakciók kiindulási anyagainak, a reaktánsoknak, és a belőlük keletkező termékeknek az összetételével és azok mennyiségi viszonyaival, az ezekkel való számolással foglalkozó tudományág.

reaktáns: a kémiai reakció kiindulási anyagainak az összefoglaló neve, a kémiai egyenlet, hétköznapi formájában annak a baloldalán szereplő anyagok, együttes neve.

kémiai egyenlet/sztochiometriai egyenlet: a kémiai reakciót leíró mérlegegyenlet, amely a reaktánsok és a termékek közötti mennyiségi viszonyokat, azok vegyjeleinek, képleteinek, ún. sztochiometriai együtthatóinak, és matematikai jelek segítségével írja le. Két formája használatos. A hétköznapi forma az, amikor a

reaktánsok az egyenlőségjeltől balra, a termékek jobbra vannak feltüntetve, és közöttük csak az összeadás jele szerepelhet, azaz pl.:



A másik a tudományos, vagy más néven nullára rendezett forma, amikor a természettudományokban elfogadott konvenció szerint, a második állapot leírásából kivonjuk az első állapot leírását, azaz a termékek oldalára visszük át a reaktánsokat, természetesen ekkor a kivonás jele is szerepelhet az egyenletben, azaz

$$dD + eE - aA - bB - cC = 0 \text{ általánosan } \sum_{i=1}^k \nu_i A_i = 0$$

ahol ν_i – az ún. sztöchiometriai együttható

sztöchiometriai együttható: (jele: ν ; mértékegysége: *nincs*) a sztöchiometriai egyenlet nullára rendezett változatában a komponensek képleteinek az együtthatói. A termékekre vonatkozóak pozitívak, reaktánsokra vonatkozóak negatívak.

a vegyjel, és a kémiai képlet hármass jelentése: a sztöchiometriai számítások alapja a kémiai egyenletekben szereplő vegyjelek, képletek hármass jelentése. Eszerint azok jelentik az adott anyag *egy részecskéjét*, amikor a kémiai történésének mikéntjét kívánjuk leírni vele. Jelentik az anyag *egy mólját*, amikor azt kívánjuk leírni, hogy milyen arányokban reagálnak egymással a reaktánsok, és milyen arányban keletkezik belőlük a termékek. A harmadik jelentés a kémiai anyagmennyiségeknek a mérleggel megmérhető mennyiségekké való átalakítását szolgálják, azaz jelentenek *annyi grammot* az adott anyagból, *amennyi a relatív atom, illetve molekulatömege*.

sztöchiometriai/sztöchiometrikus összetétel: egy reakciórendszer azon összetétele, amelyben az egyes reaktánsok mennyisége (n_i) megfelel a sztöchiometriai együtthatók (ν_i) arányának, azaz

$$\frac{n_1}{|\nu_1|} = \frac{n_2}{|\nu_2|} = \frac{n_3}{|\nu_3|} = \dots = \frac{n_k}{|\nu_k|}$$

limitáló komponens: amennyiben az összemért reaktánsok mennyisége nem felel meg a kémiai egyenlet sztöchiometriai arányainak, akkor az a komponens, amelynek az $n_i/|\nu_i|$ hányadosa a legkisebb, azaz a reakcióban legelőször fogy el, a limitáló komponens.

oxidációs szám: egy elemre, egy vegyületben jellemző mennyiség, amely megadja, hogy a semleges atomhoz képest mekkora elektrontöbblettel vagy hiánnyal rendelkezne az atom, ha a kötéseket teljesen ionosak lennének, azaz a kötést létrehozó elektronokat a magasabb elektronegativitású atomhoz tartoznának. Pozitív értéke, az elemi állapothoz képest, oxidált, a negatív, redukált állapotot jelez.

elektronegativitás: az atomoknak a kémiai kötésben megnyilvánuló tulajdonsága, az atom elektronvonzó képessége, amely a kötést létrehozó elektronokra hat.

oxidáció: olyan kémiai folyamat, amely során egy atom/vegyület elektront ad le, és az alkotó atomok közül legalább egy oxidációs száma nő.

redukció: olyan kémiai folyamat, amely során egy atom/vegyület elektront vesz fel, és az alkotó atomok közül legalább egy oxidációs száma csökken.

sav-bázis elméletek:

Arrhenius szerint: sav az az anyag, amely vízben oldva a hidrogénionok koncentrációját növeli, bázis az az anyag, amely vízben oldva a hidroxilionok koncentrációját növeli.

Brønstedt és Lowry szerint: sav az a részecske, amely hidrogénion leadására képes, bázis az a részecske, amely hidrogénion felvételére képes.

Lewis szerint: sav az a részecske, amelyik elektrópár felvételére képes, bázis az a részecske, amely elektrópár leadására képes.

titrálás: anyagmennyiség, illetve koncentráció meghatározására szolgáló eljárás. Az ismeretlen koncentrációjú, de pontosan bemért térfogatú oldathoz, fokozatosan, egy pontosan ismert koncentrációjú, olyan mérőoldatot adagolunk, amely a mérendő anyaggal ismert arányban reagál. Szükség van ún. indikátorra is, amely azt jelzi, hogy a mérendő anyag elfogyott. Az indikátor lehet a mérő- vagy a mérendő oldat színe, valamilyen harmadik anyag, amely hirtelen színváltozást mutat, vagy lehet egy műszer, amely az oldat valamely tulajdonságának változását méri.

fogyás: a titrálás során, az indikátor változásának megtörténteig, az ekvivalencia pontig, hozzáadott mérőoldatot térfogata, a fogyás. A mérőoldat fogyásából, és koncentrációjából, a végbemenő reakcióban a két anyag

móljainak arányából az ismeretlen anyag mennyisége kiszámítható. A bemért térfogat segítségével az oldat koncentrációja is megadható.

ekvivalencia pont: a titrálás során az az állapot, amikor a mérőoldattal adagolt reaktáns mennyisége egyenértékű a mérendő anyag mennyiségével. Az egyenértékűség megállapításakor figyelembe kell venni a két anyag közötti reakció sztöchiometriai viszonyait, az egymással reagáló anyagmennyiségek arányát.

TERMODINAMIKA, TERMOKÉMIA

termodinamika: az a tudományág, amely a fizikai és a kémiai folyamatokhoz járuló energiaváltozásokat, és azok összefüggését más termodinamikai mennyiségekkel, vizsgálja.

energia: (jele: E ; mértékegysége: $I J$) a rendszernek azon képessége, hogy munkát képes végezni. (Az energia lehet potenciális és kinetikus energia is.)

munka: (jele: w ; mértékegysége: $I J$) az a fizikai mennyiség, amelyet az erő és az erő irányába eső elmozdulás szorzataként kapunk meg. (Rendezett mozgást feltételez!)

hő: (jele: q ; mértékegysége: $I J$) az energia azon formája, amely a rendszer és környezete, vagy két rendszer között, azok hőmérsékletének a különbség miatt áramlik, cserélődik ki. (Rendezetlen mozgást feltételez!)

hőmérséklet: (jele: T ; mértékegysége: $I K$) egy rendszert alkotó részecskék rendezetlen mozgásából származó, átlagos, kinetikus energiájukra jellemző mennyiség. Természetes nullpontja van. A hőátadást eredményező folyamatok hajtóereje.

endoterm folyamat: olyan kémiai vagy fizikai folyamat, amely során a rendszer hőt vesz fel, azaz a környezete lehül.

exoterm folyamat: olyan kémiai vagy fizikai folyamat, amely során a rendszer hőt ad le, azaz a környezete felmelegszik.

belső energia: (jele: U ; mértékegysége: $I J$) a rendszernek, a rendszert felépítő részecskék közötti kölcsönhatási (potenciális), és azok mozgási (kinetikus) energiájából származó, energiatartalma. Nincs természetes nullpontja, csak két állapot közötti különbsége, változása mérhető. Extenzív mennyiség, amelynek megváltozását a termodinamika I. főtétele írja le.

állapotfüggvény/potenciálfüggvény: (NEM AZONOS AZ ÁLLAPOTEGYENLETTEL!) a rendszerre jellemző olyan mennyiség, amelyet az állapotjelzők értékei határoznak meg. Megváltozása a folyamat vég-, és kezdeti állapotához tartozó értékeinek különbségéből számítható, és nem függ attól, hogy a rendszer milyen úton, az állapotjelzők milyen köztes értékein keresztül, jutott el a kezdeti állapotból, a végállapotba.

Pl.: $U_2 - U_1 = \Delta U$

termodinamika I. főtétele: zárt rendszer belső energiája állandó mindaddig, amíg munkavégzés vagy hőcsere meg nem változtatja, azaz $\Delta U = w + q$

reverzibilis folyamat: olyan folyamat, amely során a rendszer állapotának megváltozása olyan lépéseken keresztül valósul meg, amely során a rendszer és környezete minden pillanatban termikus és mechanikus egyensúlyban van. Ennek következtében az állapotjelzők végtelen kicsi, azaz infinitezimális megváltoztatásával a folyamat iránya megváltoztatható, visszafordítható.

entalpia: (jele: H ; mértékegysége: $I J$) a rendszerre jellemző olyan mennyiség, amely állandó nyomáson megadja a rendszer és környezete között kicserélt hőt, amennyiben nincs hasznos munkavégzés. Nincs természetes nullpontja, csak két állapot közötti különbsége, változása mérhető. Állapotfüggvény, extenzív mennyiség a belső energia és a pV szorzat összege, azaz $H = U + pV$. Bevezetése az állandó nyomáson, a rendszer térfogatváltozása miatt, elkerülhetetlenül bekövetkező térfogati munka leválasztására szolgál a teljes munkavégzésről, hogy megkapjuk a hasznos munkavégzést: $w_{\text{hasznos}} - p_{\text{külső}} \Delta V = w_{\text{teljes}}$

térfogati munka: (jele: $-p_{\text{külső}} \Delta V$; mértékegysége: $I J$) a rendszer térfogatának megváltozása miatt bekövetkező munkavégzés, amely állandó külső nyomáson, reverzibilis folyamatban, azaz $p_{\text{külső}} = p_{\text{belső}}$ minden pillanatban fennáll, történik, akkor állapotfüggvény. A negatív előjelet az indokolja, hogy, ha a rendszer térfogata csökken, akkor a környezet végzi a munkát, tehát előjelének pozitívnak kell lenni, mivel $\Delta V = (V_2 - V_1) < 0$. Ugyanúgy, ha a rendszer térfogata nő, azaz $\Delta V = (V_2 - V_1) > 0$, és a rendszer végzi a munkát, akkor előjelének negatívnak kell lennie.

hőkapacitás: (jele: C ; mértékegysége: $I J/K$) a rendszer által felvett/leadott hő (q) és a rendszerben emiatt bekövetkezett hőmérsékletváltozása (ΔT) közötti arányossági tényező, azaz

$$q = C \cdot \Delta T$$

fajlagos hőkapacitás: (jele c ; mértékegysége: $1 J/g$) az a hőmennyiség, amely leadása vagy felvétele egységnyi tömegű anyag hőmérsékletét egy kelvinnel változtatja meg.

moláris hőkapacitás: (jele C_m ; mértékegysége: $1 J/mol$) az a hőmennyiség, amely leadása vagy felvétele egységnyi anyagmennyiségű anyag hőmérsékletét egy kelvinnel változtatja meg.

állandó térfogaton mért hőkapacitás: (jele: C_v ; mértékegysége: $1 J/(mol K)$) állandó térfogaton, egységnyi mennyiségű anyagban, az egy kelvin hőmérsékletváltozás hatására bekövetkező belső energiaváltozás, azaz differenciális alakban:

$$C_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{v,n}$$

állandó nyomáson mért hőkapacitás: (jele: C_p ; mértékegysége: $1 J/(mol K)$) állandó nyomáson, egységnyi mennyiségű anyagban, az egy kelvin hőmérsékletváltozás hatására bekövetkező entalpiaváltozás, azaz differenciális alakban:

$$C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_{p,n}$$

reakcióentalpia: (jele: ΔH_r ; mértékegysége: $1 J$) az állandó nyomáson végrehajtott reakció közben leadott vagy felvett hőmennyiség.

képződési entalpia: (jele: ΔH_k ; mértékegysége: $1 J/mol$) egy mol anyag, adott hőmérsékleten, stabilis elemeiből való képződését követő entalpiaváltozás.

standard képződési entalpia: (jele: ΔH_k° ; mértékegysége: $1 J/mol$) egy mol standard állapotú anyag, adott hőmérsékleten, standard állapotú, stabilis elemeiből való képződését követő entalpiaváltozás. *Standard állapotú anyag:* adott hőmérsékleten, 1 atm.=101325Pa nyomáson, 1 mol, vagy egységnyi aktivitású anyag.

a kémiai képlet negyedik, termokémiai jelentése: a kémiai egyenletek termokémiai célokra szolgáló változatában a kémiai képletek jelentik az adott anyag standard képződési entalpiáját is. A vegyjelek esetében ez nulla, ha az elem a standard körülmények között stabil állapotában (pl. halmazállapotában, módosulatában) van. Ha ettől eltérő állapotban vannak, akkor pl. a halmazállapot változások, vagy a módosulatok közötti átalakulások entalpiáit jelentik.

Hess-tétele: Az eredő reakció standardentalpiája azon egyedi reakciók standardentalpiáinak összege, amelyre a bruttó reakció felbontható.

Ezzel ekvivalens megfogalmazás, hogy egy körfolyamatban a reakcióentalpiák összege zérus.

$$\sum_{i=1}^k \Delta H_{r,i} = 0$$

KIEGÉSZÍTÉS A TERMOKÉMIA FEJEZETHEZ!

a termodinamika második főtétele:

a legáltalánosabb megfogalmazása: elszigetelt rendszerben a maguktól végbemenő folyamatok az entrópia növekedésének irányába haladnak.

másik, az előzővel ekvivalens megfogalmazás: elszigetelt rendszer entrópiája nem csökkenhet, azaz

$$dS \geq 0$$

ahol dS az entrópia infinitezimális/differenciális megváltozása.

Lord Kelvin (W. Thomson) megfogalmazása: nem létezik olyan folyamat, amely során egy hőtartály által felvett hő, teljes egészében munkává alakítható.

Clausius megfogalmazása: Nincs olyan folyamat, amelynek eredményeként a hő az alacsonyabb hőmérsékletű rendszertől a magasabb hőmérsékletű felé adódna át.

entrópia: (jele: S ; mértékegysége: $1 J/K$) a rendszerre jellemző mennyiség, amely megmutatja a rendszer molekuláris szinten való rendezetlenségét. Állapotfüggvény, természetes nullpontja van $T=0 K$ -nél. Változása kiszámítható a reverzibilis folyamatok során felvett/leadott hő és az aktuális hőmérséklet hányadosából, azaz

$$dS = \frac{dq_{rev.}}{T}$$

Pl: egy mol jég olvadása során bekövetkező entrópia változás, a jég moláris olvadási entalpiájának, és az olvadás hőmérsékletének a hányadosa:

$$\Delta S_m = \frac{\Delta H_{olv.}}{T_{olv.}} = \frac{6010,571 \frac{J}{mol}}{273,15 K} = 22,005 \frac{J}{mol K}$$

azaz az olvadással a rendezetlenség nő.

szabadenergia/Helmholtz energia: (jele A ; mértékegysége: J) a rendszerre jellemző mennyiség, amely megadja a rendszer maximális, hasznos munkavégző képességét állandó térfogaton. Állapotfüggvény, nincs természetes nullpontja.

A többi termodinamikai állapotfüggvényekből kiszámítható az $A = U - TS$ összefüggés segítségével. Csak az a folyamat megy végbe önmagától, állandó térfogaton, amelyben a szabadenergia megváltozása negatív.

szabadentalpia/Gibbs energia: (jele G ; mértékegysége: J) a rendszerre jellemző mennyiség, amely megadja a rendszer maximális, hasznos munkavégző képességét állandó nyomáson. Állapotfüggvény, nincs természetes nullpontja.

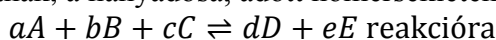
A többi termodinamikai állapotfüggvényekből kiszámítható az $G = H - TS$ összefüggés segítségével. Csak az a folyamat megy végbe önmagától, állandó nyomáson, amelyben a szabadentalpia megváltozása negatív.

EGYENSÚLY

irreverzibilis reakció: olyan kémiai reakció, amelyben a megfelelő sztöchiometriai arányban összemért reaktánsok teljes egészében a terméké alakulnak.

reverzibilis reakció/visszafordítható reakció: olyan kémiai reakció, amelyben a formálisan reaktánsok terméké, és a formálisan termékek reaktánssá alakulása egyszerre, összemérhető sebességgel játszódik le. Ennek eredménye, hogy a reakció egyensúlyra vezet, és a kialakuló dinamikus egyensúly, igen érzékeny a körülmények változására.

tömeghatás törvénye: a hétköznapi formában felírt, egyensúlyra vezető reakció esetén, a termékek, a reakcióegyenletben szereplő együtthatóiknak megfelelő hatványára emelt, egyensúlyi koncentrációik szorzatának, és a reaktánsok, a reakcióegyenletben szereplő együtthatóiknak megfelelő hatványára emelt, egyensúlyi koncentrációik szorzatának, a hányadosa, adott hőmérsékleten, és nyomáson, állandó azaz a



$$K = \frac{[D]^d \cdot [E]^e}{[A]^a \cdot [B]^b \cdot [C]^c}$$

koncentráció standardra vonatkoztatott reakcióhányados: (jele: Q_c ; mértékegysége: *nincs*) a reakció valamennyi komponensének pillanatnyi koncentrációját osztva a standard koncentrációval, majd ezt a hányadost a sztöchiometriai számának megfelelő hatványra emelve kapott tagokból létrehozott szorzat. (Bármely kémiai reakcióra, lezajlásának bármely pillanatában felírható!) azaz a

$$\sum_{i=1}^k \nu_i A_i = 0$$

reakcióra

$$Q_c = \prod_{i=1}^k \left(\frac{c_i}{c^o}\right)^{\nu_i} \text{ ahol } c^o = 1 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3} \text{ a standard koncentráció}$$

nyomás standardra vonatkoztatott reakcióhányados: (jele: Q_p ; mértékegysége: *nincs*) a reakció valamennyi komponensének pillanatnyi parciális nyomását osztva a standard nyomással, majd ezt a hányadost a sztöchiometriai számának megfelelő hatványra emelve kapott tagokból létrehozott szorzat. (Bármely kémiai reakcióra, lezajlásának bármely pillanatában felírható!) azaz a

$$\sum_{i=1}^k \nu_i A_i = 0$$

reakcióra

$$Q_p = \prod_{i=1}^k \left(\frac{p_i}{p^o}\right)^{\nu_i} \text{ ahol } p^o = 1 \text{ atm a standard nyomás}$$

koncentráció standardra vonatkoztatott egyensúlyi állandó: (jele: K_c ; mértékegysége: *nincs*) a koncentráció standardra vonatkoztatott reakcióhányados értéke az egyensúlyi állapotban. Adott hőmérsékleten és nyomáson állandó.

$$\sum_{i=1}^k \nu_i A_i = 0$$

reakcióra

$$K_c = \prod_{i=1}^k \left(\frac{c_i}{c^o}\right)^{\nu_i} \text{ ahol } c^o = 1 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3} \text{ a standard koncentráció}$$

nyomás standardra vonatkoztatott egyensúlyi állandó: (jele: K_p ; mértékegysége: *nincs*) a nyomás standardra vonatkoztatott reakcióhányados értéke az egyensúlyi állapotban. Adott hőmérsékleten és nyomáson állandó.

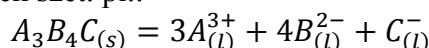
$$\sum_{i=1}^k \nu_i A_i = 0$$

reakcióra

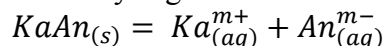
$$K_p = \prod_{i=1}^k \left(\frac{p_i}{p^o}\right)^{\nu_i} \text{ ahol } p^o = 1 \text{ atm a standard nyomás}$$

Le Chatelier-Braun elv: Ha egy *egyensúlyban* lévő rendszer külső hatásra (a nyomás, a hőmérséklet, a komponensek koncentrációjának a változása) változik, akkor a rendszerben végbemenő folyamatok közül azok kerülnek előtérbe, amelyek a külső hatás eredményét csökkentik.

elektrolit: azok a vegyületek, amelyek oldott vagy olvadt állapotukban vezetnek az elektromos áramot, mert pozitív és negatív töltésű ionokra esnek szét. pl.:



bíner elektrolit: azok az elektrolitok, amelyek csak két iont tartalmaznak 1:1 arányban, azaz disszociációjuk, olvadásuk azonos kémiai mennyiségű kationt és aniont eredményez, azaz



disszociációfok: (jele: α , mértékegysége: *nincs*) megadja, hogy a bemért elektrolit hányad része disszociált el, esett szét ionjaira, bíner elektrolitok esetében a keletkezett kationok / anionok anyagmennyiségének / koncentrációjának és a bemért elektrolit anyagmennyiségének / koncentrációjának hányadosa. Értéke nulla és egy közé esik, azaz

$$\alpha = \frac{n_{\text{kation}}}{n_{\text{bemért}}} = \frac{n_{\text{anion}}}{n_{\text{bemért}}} = \frac{c_{\text{kation}}}{c_{\text{bemért}}} = \frac{c_{\text{anion}}}{c_{\text{bemért}}} \text{ ahol } 0 < \alpha < 1$$

erős elektrolitok: olyan elektrolitok, amelyek feloldásakor, megolvasztásukkor teljes mennyiségükben szét-esnek ionjaikra, azaz a disszociáció foka, $\alpha = 1$.

gyenge elektrolitok: olyan elektrolitok, amelyek feloldásakor, megolvasztásukkor nem esnek szét teljes mennyiségükben ionjaikra, azaz a disszociáció foka, $\alpha < 1$.

Ostwald-féle hígítási törvény: gyenge, bíner elektrolit disszociációs egyensúlyára felírt összefüggés, amely, adott hőmérsékleten, kapcsolatot teremt az elektrolit bemérési (c) koncentrációja, a disszociáció foka (α) és a disszociációs folyamat egyensúlyi állandója (disszociációs állandója) (K_d), között:

$$K_d = \frac{\alpha^2 c}{(1 - \alpha)c^o} \text{ ahol } c^o = 1 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3} \text{ a standard koncentráció}$$

vízionszorzat: (jele: K_v ; mértékegysége: *nincs*) a víz saját disszociációjára jellemző egyensúlyi állandó, azaz

$$K_v = \frac{[H_3O^+] \cdot [OH^-]}{(c^o)^2} = 1 \cdot 10^{-14} \text{ szobahőmérsékleten, és } c^o = 1 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}$$

pH: (jele: pH ; mértékegysége: *nincs*) az oldatban lévő hidroxóniumionok moláris koncentrációját, a standard koncentrációval osztva kapott értéknek, a negatív, tízes alapú, logaritmus, azaz

$$pH = -\log_{10} \left(\frac{[H_3O^+]}{c^o}\right) = -\lg \left(\frac{[H_3O^+]}{c^o}\right) \text{ ahol } c^o = 1 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}$$

amfoter elektrolit: az az elektrolit, amely savként és bázisként is képes viselkedni.

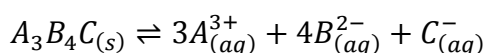
puffer: olyan oldat, amely képes az oldat pH-ját változtató hatások eredményének jelentős csökkentésére. Puffert képes alkotni az az oldat, amelyben egyszerre jelentősebb koncentrációban van jelen egy gyenge sav, és annak egy erős bázissal alkotott sója – savas tartományban működő puffer, illetve az az oldat, amelyben egyszerre jelentősebb koncentrációban van jelen egy gyenge bázis, és annak egy erős savval alkotott sója – lúgos tartományban működő puffer.

heterogén egyensúly: olyan fizikai vagy kémiai egyensúly, ahol a reaktánsok és termékek eltérő fázisban vannak.

oldhatósági szorzat: (jele: L ; mértékegysége: *nincs*) egy elektrolit telített oldata és szilárd állapotú elektrolit között beálló heterogén oldási egyensúly, egyensúlyi állandója. Az általános alakja:

$$L = \prod_{i=1}^k \left(\frac{[A_i^{q_i}]}{c^o} \right)^{v_i} \text{ ahol } c^o = 1 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3} \text{ a standard koncentráció}$$

pl: az



egyensúlyra:

$$L = \frac{[A^{3+}]^3 \cdot [B^{2-}]^4 \cdot [C^{-}]}{(c^o)^8} \text{ ahol } c^o = 1 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3} \text{ a standard koncentráció}$$

Henry-együttható: (jele: K_H ; mértékegysége: 1 Pa) ha a Henry-törvényét alkalmazzuk gázok folyadékokban való oldódására, akkor az oldódás egyensúlyi állandója a Henry-együttható, ami a gáz oldat fölötti parciális nyomása (p_i) és az oldott gáz móltörtje (x_i) közötti arányossági tényező, azaz $p_i = K_H \cdot x_i$

megoszlási hányados: (jele: D ; mértékegysége: *nincs*) az oldott anyag két egymással nem elegyedő folyadékban, egyszerre történő oldódásának egyensúlyi állandója. A két fázisban, azonos molekuláris formában oldott állapotú részecskék egyensúlyi koncentrációjának a az aránya, azaz

$$D = \frac{c_{(sol_1)}}{c_{(sol_2)}}$$

ELEKTROKÉMIA

elsőfajú vezető/fémes vezető/elektronvezető: olyan anyag, amelyben az elektronok elmozdulása hozza létre az áramvezetést.

másodfajú vezető/ionvezető: olyan anyag, amelyben az ionok elmozdulása hozza létre az áramvezetést.

vezetés: (jele: G ; mértékegysége: 1 S) az ellenállás (R) reciproka, azaz

$$G = \frac{1}{R}$$

fajlagos vezetés: (jele: κ ; mértékegysége: 1 S/m) annak a vezetőképességi cellának a vezetése, amelyben egységnyi felületű, egymástól egységnyi távolságra levő nemesfém lemezek merülnek az oldatba, azaz

$$\kappa = G \cdot \frac{l}{A} \text{ ahol } l \text{ a lemezek távolsága, } A \text{ a felülete}$$

moláris fajlagos vezetés: (jele: Λ ; mértékegysége: $1 \text{ S} \cdot \text{m}^2/\text{mol}$) annak a vezetőképességi cellának a vezetése, ahol a nemesfém lemezek közti távolság egységnyi és felületük akkora, hogy közöttük az oldott anyag mennyisége egy mol legyen, azaz

$$\Lambda = \frac{\kappa}{c} \text{ ahol } c \text{ az elektrolit moláris koncentrációja}$$

elektrokémiai cella: olyan rendszer, amelyben két elektronvezető merül egy, vagy egy-egy ionvezetőbe, elektrolitba.

elektród/félcella: egy elektronvezető, és egy ionvezető, amibe az elektronvezető merül, azaz egy elektróda és egy elektrolit oldat/olvadék együtt.

elektróda: az elektródban az elektronvezető, azaz a fémlemez.

galváncella: olyan elektrokémiai cella, amely két egymáshoz elektromosan kapcsolt elektródból/félcellából áll, és amelyben egy önként végbemenő kémiai reakció következtében elektromosság keletkezik.

anód: az elektrokémiai cellában az elektród, ahol az oxidáció történik.

katód: az elektrokémiai cellában az az elektród, ahol a redukció történik.

elektrolizáló cella: olyan elektrokémiai cella, amelyben külső áramforrás segítségével olyan kémiai reakciót hajtunk végre, amely önként abba az irányba nem játszódna le. A művelet az **elektrolízis**.

elektródpotenciál: (jele: ε ; mértékegysége: $I V$) az elektronvezető és az ionvezető, azaz a fém és az oldat közötti potenciálkülönbség. Közvetlenül nem mérhető, természetes nullpontja nincs. Számszerűen annak az elektrokémiai cellának a cellapotenciáljával egyezik, amelynek anódja az egyensúlyban lévő standard hidrogénelektrod, katódja a kérdéses potenciálú elektród.

standard hidrogén elektród: az elektródpotenciál önkényesen kiválasztott viszonyítási elektródja. Benne, egy platina lemez merül olyan oldatba, amelyben a hidrogénionok aktivitása 1 mol/dm^3 , és az oldaton keresztül 1 atm nyomású hidrogéngáz buborékol. Elektródpotenciálja definíció szerint nulla.

cellapotenciál: (jele E , mértékegysége. $I V$) két félcella elektródpotenciálja közötti különbség.

standard elektródpotenciál: (jele: ε^o ; mértékegysége: $I V$) az az elektródpotenciál, amikor a vizsgált elektród is standard állapotban és egyensúlyban van, azaz az oldat aktivitása 1 mol/dm^3 , és a nyomás 1 atm . A standard hidrogénelektrodé definíció szerint nulla!

elektromotoros erő: (jele: E_{MF} ; mértékegysége: $I V$) az a cellapotenciál, ami akkor mérhető, ha a cellán nem folyik át áram, azaz a terhelésmentes cellapotenciál. Előjele mindig pozitív, mivel $E_{MF} = \varepsilon_{\text{katód}} - \varepsilon_{\text{anód}} > 0$.

Nernst-egyenlet: megadja az elektród potenciáljának (ε) értékét adott hőmérsékleten (T) a standard elektródpotenciál (ε^o) és a redukció irányában felírt félreakció koncentrációstandardra felírt reakcióhányadosának (Q) segítségével, azaz

$$\varepsilon = \varepsilon^o - \frac{RT}{zF} \ln Q$$

ahol z a félreakcióban az átadott elektronok száma, azaz az oxidációs szám változása, és F a Faraday-állandó, egy mol elektron töltésének abszolút értéke, $F = 96485 \text{ C/mol}$

Pl. a cink elsőfajú elektród elektródpotenciálja a Nernst-egyenlet szerint:

a félreakció: $\text{Zn}_{(aq)}^{2+} + 2e^- = \text{Zn}_{(s)}$ a reakcióhányados: $Q = ([\text{Zn}^{2+}]/c^o)^{-1}$ és $z = 2$

behelyettesítve:

$$\varepsilon_{\text{Zn}^{2+}/\text{Zn}} = \varepsilon_{\text{Zn}^{2+}/\text{Zn}}^o - \frac{RT}{2F} \ln \left(\frac{[\text{Zn}^{2+}]}{c^o} \right)^{-1} = \varepsilon_{\text{Zn}^{2+}/\text{Zn}}^o + \frac{RT}{2F} \ln \frac{[\text{Zn}^{2+}]}{c^o}$$

elsőfajú elektród: olyan elektród, amelyben a fémes vezető a saját ionjait jól oldódó só formájában tartalmazó oldatba merül és az elektródpotenciálra érvényes a Nernst-egyenlet.

másodfajú elektród: olyan elektród, amelyben a fémes vezető olyan oldatba merül, amely a saját ionjait rosszul oldódó só formájában tartalmazza, és az oldatban, a rosszul oldódó só szilárd formáján kívül, még ismert koncentrációban jelen van egy olyan jól oldódó só, amelynek az anionja egyezik a rosszul oldódó só anionjával, és az elektród potenciáljára érvényes a Nernst-egyenlet.

redoxi elektród: olyan elektród, amelyben a fémes vezető egy inert elektronvezető, pl. arany vagy platina, és az oldatban jelen van az ionvezető oxidált és redukált formája is, és az elektród potenciáljára érvényes a Nernst-egyenlet.

Faraday törvényei: az elektrolízis folyamán leválasztott anyag tömege (m) arányos az átáramlott töltés (q) mennyiségével, azaz $m = k \cdot q$, és az arányossági tényező kiszámítható a leválasztott anyag molekulatömegéből (M), a leválasztáshoz szükséges elektronok számából (z) és a Faraday állandóból ($F=96485 \text{ C/mol}$):

$$\frac{m}{M} = \frac{q}{zF} = n_{\text{levált}}$$

amit átrendezve:

$$m = \frac{M}{zF} \cdot q \text{ azaz } k = \frac{M}{zF} \left(\frac{g}{C} \right)$$

REAKCIÓKINETIKA

térfogattal osztott reakciósebesség: (jele: v ; mértékegysége: $1 \text{ mol}/(\text{dm}^3 \cdot \text{s})$) egy reakció rendszerben valamely komponens moláris koncentrációjának idő szerinti megváltozása (dc_i/dt), osztva a komponens sztöchiometriai együtthatójával azaz

$$v = \frac{1}{\nu_i} \frac{dc_i}{dt}$$

empirikus sebességi egyenlet: megadja, hogy hogyan függ egy reakció sebessége (v) a reaktánsok koncentrációjától (c_i):

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

ahol k a sebességi együttható, r a reaktánsok száma, és β_i az egyes reaktánsok részrendje.

sebességi együttható: (jele: k ; mérték egysége: $1 (\text{dm}^3/\text{mol})^{\beta-1} \cdot \text{s}^{-1}$, ahol β a reakció bruttó rendje) a sebességi egyenletben a reakciósebesség és a reaktánsok koncentrációinak, a részrendeknek megfelelő hatványon vett szorzata közötti arányossági tényező.

részrend: (jele: β_i ; mértékegysége: *nincs*) egy adott reaktáns koncentrációjának a hatványkitevője az empirikus sebességi egyenletben. (Nem azonos a sztöchiometriai együtthatóval!)

bruttó rend: (jele: β ; mértékegysége: *nincs*) a reakcióban résztvevő összes reaktáns részrendjének az összege, azaz

$$\beta = \sum_{i=1}^r \beta_i \text{ ahol } r \text{ a reaktánsok száma}$$

sebességi egyenlet elsőrendű reakcióra: az $A \rightarrow P$ (termékek) elsőrendű reakcióra: *differenciális alak:*

$$v = -\frac{d[A]}{dt} = k[A]$$

ahol $[A]$ a reaktáns t időbeli koncentrációja, és k a sebességi együttható. *integrális alak:*

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

ahol $[A]$ a reaktáns t időbeli koncentrációja, $[A]_0$ a reaktáns kiindulási koncentrációja, és k a sebességi együttható.

felezési idő: (jele: $t_{1/2}$; mértékegysége: 1 s) az az időtartam, amely alatt a reaktáns koncentrációja a kiindulási koncentráció felére csökken.

felezési idő elsőrendű reakcióra: (jele: $t_{1/2}$; mértékegysége: 1 s): természetes alapú logaritmus 2 és az elsőrendű sebességi együttható (k) hányadosa, azaz

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

Arrhenius-egyenlet: a sebességi együtthatót különböző hőmérsékleten megmérve, annak természetes alapú logaritmusát az abszolút hőmérséklet reciprokával szemben ábrázolva, egy negatív meredekségű, tengelymetszetes egyenest kapunk, azaz

$$\ln k = m \cdot \frac{1}{T} + c = -\frac{E_a}{RT} + \ln A$$

ahol az egyenes meredeksége, az aktiválási energia (E_a) és az egyetemes gázállandó (R) hányadosának mínusz egyszerese, míg a tengelymetszet az ún. preexponenciális tényező (A) természetes alapú logaritmus. Exponenciális alakban:

$$k = A \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}}$$

aktiválási energia: (jele: E_a ; mértékegysége: 1 J/mol) annak az energiagátnak a magassága, amelyet át kell lépniük a reaktánsoknak ahhoz, hogy a reakció végbe tudjon menni.

preexponenciális tényező: (jele: A ; mértékegysége: $1 (\text{dm}^3/\text{mol})^{\beta-1} \cdot \text{s}^{-1}$, ahol β a reakció bruttó rendje) a reakcióra jellemző paraméter, a neve szerint, az exponenciális előtti tag, amely az ütközések gyakoriságával kapcsolatos tényező.

elemi reakció: olyan reakciólépés, mely a felírt egyenlet szerint valóban végbemegy. Lehet *unimolekulás*, amikor egy részecske szétesését, vagy *bimolekulás*, amikor két részecske ütközését, a kötések átrendeződését, írja le. Három vagy több részecske megfelelő módon való ütközése olyan kis valószínűségű, hogy azzal a kémiai reakciók mechanizmusának leírásakor nem kell számolni.

reakciómechanizmus: azon *unimolekulás* és *bimolekulás* elemi lépések együttese, amely a rendszer kinetikai viselkedését leírja.

katalizátor: a reakciórendszerben az a részecske, amely a reaktánsokkal kölcsönhatásba lépve, új, alacsonyabb aktiválási energiájú reakcióutat nyit, és ezáltal, növeli a reakció sebességét. Ráadásul, a termék képződése során változatlan formában visszatermelődik.

katalízis: az a jelenség, amikor a katalizátor jelenléte következtében a reakció felgyorsul.

autokatalízis: a katalízis azon esete, amikor a termék maga a katalizátor.

homogén katalízis: olyan katalízis, amikor a reaktánsok, a katalizátor, és többnyire a termékek is, azonos fázisban vannak.

heterogén katalízis: olyan katalízis, amikor a reaktánsok, és a termékek, más fázisban vannak, mint a katalizátor.

inhibíció: az a jelenség, amikor a reakciórendszerhez adott anyag lassítja a reakció sebességét, gátolja a termékek kialakulását.

ANYAGSZERKEZET

természetes radioaktivitás: a természetben megtalálható instabil atommagok, radioaktív bomlásból származó sugárzás kibocsátása melletti stabilizálódása, átalakulása.

rendszám: (jele: Z ; mértékegysége: *nincs*) az atom minőségét meghatározó mennyiség, az atom magjában lévő nukleonok egyikének, a pozitív töltésű, közel egységnyi relatív tömegű protonoknak a száma. A vegyjel ugyan önmagában jelzi a rendszámot, de ha szükséges, akkor a vegyjel bal alsó indexében adjuk meg. Pl.: 1H , vagy ${}_{92}U$ stb.

tömegszám: (jele: A ; mértékegysége: *nincs*) az atom tömegét meghatározó mennyiség, az atom magjában lévő közel egységnyi relatív tömegű részecskék, a pozitív töltésű protonok, és a töltéssel nem rendelkező neutronok, számának az összege, azaz az összefoglaló nevükön a nukleonok száma. A tömegszámot a vegyjel bal felső indexében adjuk meg. Pl.: 2H , vagy ${}^{12}C$.

neutronsám: (jele: N ; mértékegysége: *nincs*) az atom magjában lévő nukleonok egyikének, a töltéssel nem rendelkező, közel egységnyi relatív tömegű, neutronok száma. A tömegszám, és a rendszám különbségeként kapható meg: $A - Z = N$. A vegyjel indexeként nem tüntetjük fel!

izotóp atomok: azonos rendszámú, de eltérő tömegszámú atomok. Pl.: a hidrogén izotópjai, amelyeknek külön neve is van: prócium (1H); deutérium (2H), és trícium (3H), vagy a szén izotópjai: ${}^{12}C$, ${}^{13}C$ és ${}^{14}C$ atomok

izobár atomok: azonos tömegszámú, de eltérő rendszámú atomok. Pl.: ${}^{40}_{20}Ca$ és ${}^{40}_{19}K$ vagy ${}^{40}_{18}Ar$.

izotón atomok: azonos neutronsámú, de eltérő rendszámú és tömegszámú atomok. Pl.: 3_1H és 4_2He .

izotóparány: egy elemnek a természetben megtalálható izotópjainak az aránya. (A minta származási helyétől független!)

izotóp dúsított anyag: olyan minta, amelyben az izotóp arányát mesterségesen megváltoztatták, a használni, vizsgálni kívánt izotóp koncentrációját valamilyen elválasztási módszerrel emeljük a mintában.

izotóp hígítás: izotóphígítás olyan analitikai eljárás, amikor az elemzendő mintához izotópjelölt mérendő anyagot adnak, majd annak egyenletes eloszlása után mintát véve, abban az izotópjelzett anyag mennyiségét mérve, a mérendő anyag teljes mennyiségére lehet következtetni.

kvantummechanika: a mikrorészecskék viselkedésének magyarázatára kifejlesztett, a newtoni klasszikus fizikát felváltó elmélet. Jellegzetessége, a determinisztikus világkép feladása, a jelenségek statisztikus kezelése. Egységesíti a részecskék, és az elektromágneses hullámok leírását, mind részecske, mind hullámtulajdonságokkal is felruhazza a korábban, a klasszikus fizika által, szigorúan elválasztott részecskéket, és hullámokat. Magyarázza a kvantált állapotok létét, az ebből eredő jelenségeket, pl. a spektroszkópiák alapjait.

hullám: valamely fizikai mennyiség, időben, és térben történő periódikus terjedése.

hullámhossz: (jele: λ ; mértékegysége: 1 m) a hullám két, egymáshoz legközelebbi, azonos fázisú pontjának a távolsága a térben.

hullámszám: (jele: σ ; mértékegysége: 1 m^{-1}) a hullámhossz reciproka.

periódusidő: (jele: T ; mértékegysége: 1 s) az az idő, ami aközben telik el, hogy a hullám két, egymáshoz legközelebbi, azonos fázisú pontja áthalad a tér egy pontján.

frekvencia: (jele: ν ; 1 s^{-1}) a periódusidő reciproka.

hullámfüggvény: részecske állapotát leíró függvény, a kvantummechanika szerint.

operátor: a függvényekre ható, azokból egy másik függvényt létrehozó műveleti utasítás. A kvantummechanika a fizikai mennyiségekhez operátorokat rendel. A jelölésük a „kalap” segítségével történik. Pl.: a lendület x -irányú komponensének az operátora:

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

ahol az $\hbar = h/2\pi$ ($h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ Js a Planck állandó), és $i = \sqrt{-1}$ az immaginárius egység. Egy függvényre alkalmazva, ez azt jelenti, hogy a függvényt először x -szerint deriválni kell, majd megszorozni a \hbar/i konstanssal, és megkapjuk az új függvényt.

sajátérték egyenlet: a kvantummechanikában használatos olyan egyenlet, amelyben egy operátort alkalmazva a részecskét leíró hullámfüggvényre, eredményként az eredeti függvénynek egy valós számmal való szorzatát kapjuk vissza, azaz

$$\hat{\Omega}\Psi = \omega\Psi$$

ahol ω valós szám adja meg annak a fizikai mennyiségnek a mérhető értékét, amihez az operátort rendelték.

Schrödinger-egyenlet: a teljes energia operátor, a Hamilton operátor (\hat{H}) sajátérték egyenlete azaz

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

megadja a Ψ hullámfüggvénnyel jellemzett részecske teljes energiájának mérhető értékét (E). A Hamilton operátor két tag, a kinetikus és a potenciális energia operátor összege, azaz

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

Heisenberg-féle bizonytalansági reláció: olyan összefüggés, amely, a mikrorészecskék világában, korlátot állít fel két, ún. komplementer mennyiség bizonytalanságának szorzatára. A legismertebb a lendület ($p = mv$) és a helykoordináta (q) bizonytalanságára vonatkozó egyenlőtlenség:

$$\Delta p \Delta q \geq \frac{\hbar}{4\pi}$$

ahol $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ Js a Planck-állandó. Hasonló összefüggés áll fent az energia (E) és az idő (t) bizonytalansága között is:

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{4\pi}$$

kvantált állapotok: a részecskék diszkrét, egymástól elkülönülő energiájú állapotai, amelyben a részecske létezhet, míg a közti állapotokban nem tud megmaradni.

hidrogénszerű atom: olyan atom, amely egy Z^+ magból, és az annak erőterében mozgó egyetlen elektronból áll. Pl. a hidrogén atom maga, vagy a He^+ ion, Li^{2+} ion stb.

többelektronos atom: olyan atom, amely egy Z^+ magból, és az annak erőterében mozgó, több mint egy elektronból áll. Pl. a valós atomok.

atomi pálya: az a hullámfüggvény, amelyik egy atomon belül, leírja az elektronok állapotát.

atomi pálya energiája: (jele: E ; mértékegysége: 1 eV) annak a munka, amit a Z^+ magtöltés akkor végez, amikor az elektront (e^-) magához vonzza a végtelenből, az atomi pálya által meghatározott átlagos magtávolságra. $E < 0$. Jó közelítéssel megegyezik a megfelelő ionizációs energia mínusz egyszeresével.

spektroszkópia: az anyag kvantált állapotai közötti átmeneteket okozó kölcsönhatásokkal foglalkozó tudomány. Az elektromágneses sugárzás, és az anyag részecskéje a két szereplő. Mérhetünk elnyelési (abszorpció), emissziós (foton kibocsátásával járó), reflexiós (amikor a foton visszaverődik az anyagról) spektrumot.

spektrum: valamely intenzitás, energia, vagy azzal arányos mennyiség, hullámhossz, hullámszám, frekvencia stb. szerinti eloszlása.

foton: az elektromágneses sugárzás részecskéje.

a foton energiája megadható az elektromágneses sugárzásnak, mint hullámnak a jellemzői, a periódusidő (T), a frekvencia (ν), a hullámhossz (λ), a hullámszám (σ), és a Planck-állandó ($h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ Js) segítségével:

$$E = \frac{h}{T} = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = hc\sigma$$

általános sorozattörvény: a hidrogénatom emissziós spektrumának vonalait leíró összefüggés, amely megadja az egyes vonalak hullámszámát (σ), a két állapot főkvantumszáma (n_1 és n_2) és a hidrogén Rydberg állandója ($R_H = 109677 \text{ cm}^{-1}$) segítségével:

$$\sigma = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \text{ ahol } n_1 = 1, 2, 3 \dots; \text{ és } n_2 = (n_1 + 1), (n_1 + 2), (n_1 + 3), \dots$$

Ritz féle kombinációs elv: két spektroszkópiai term különbségeként megadja két kvantált állapot közötti átmenethez tartozó szinképsáv helyét, hullámszám egységekben.

$$\sigma = T_{\nu_{ég}} - T_{\text{kezd.}} \text{ ahol } T_i \text{ a megfelelő állapot spektroszkópiai termje}$$

spektroszkópiai term: (jele T_i ; mértékegysége: 1 m^{-1}) a részecske i -edik kvantált állapotára jellemző mennyiség, az állapot energiáját (E_i) osztva a Planck-állandó (h) és a fénysebesség (c) szorzatával, azaz

$$T_i = \frac{E_i}{hc}$$

első ionizációs energia: az az energia, amely ahhoz szükséges, hogy gáz halmazállapotú, alapállapotú atomról leszakítsuk a legkülső, leggyengébben kötött elektronját.

eletronaffinitás: az az energia, amely akkor szabadul fel, amikor gázhalmazállapotú semleges atom egy elektront megkötve anionná válik.

főkvantumszám: (jele: n ; mértékegysége: *nincs*) egy atomban az elektron állapotát jellemző egyik kvantumszám, amelyik a hidrogénszerű atomok esetében teljes mértékben meghatározza az atomi pálya energiáját, míg a többielektronos atomoknál csak döntő mértékben teszi ezt. Értéke $n = 1, 2, 3, \dots$ bármely természetes számot felveheti.

elektronhøj: egy atomban, az azonos főkvantumszámú (n), elektronok állapotát leíró atomi pályák összessége.

mellékkvantumszám: (jele: ℓ ; mértékegysége: *nincs*) egy atomban az elektron állapotát jellemző második kvantumszám, amely meghatározza az elektron mag körüli gömbi forgó mozgásából származó perdületvektor hosszát:

$$|\vec{\ell}| = \sqrt{\ell \cdot (\ell + 1)} \frac{h}{2\pi}$$

Lehetséges értékeit a főkvantumszám korlátozza, mert azok csak az $\ell = 0, 1, 2 \dots n-1$ egész számok lehetnek. A hidrogénszerű atomok esetében nincs szerepe az atomi pálya energiájának a meghatározásában, viszont a többielektronos atomoknál kis mértékben módosítja azt. Meghatározza viszont a leíró függvények alakját.

alhøj: egy atomban, az azonos fő- (n), és mellékkvantumszámú (ℓ) elektronok állapotát leíró atomi pályák összessége.

mágneses mellékkvantumszám: (jele: m_ℓ ; mértékegysége: *nincs*) egy atomban az elektron állapotát jellemző harmadik kvantumszám, amely, külső, pl. mágneses tér jelenléte esetén, meghatározza az elektron mag körüli gömbi forgó mozgásából származó perdületvektornak a külső tér irányára eső vetületének a hosszát, és irányát.

$$\vec{\ell}_z = m_\ell \cdot \frac{h}{2\pi}$$

Lehetséges értékeit a mellékkvantumszám (ℓ) korlátozza, mert azok csak az $m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \pm \ell$ értékeket vehetik fel. Külső tér hiányában nincs szerepe az elektron energiájának a meghatározásában.

mágneses spinkvantumszám: (jele: m_s ; mértékegysége: *nincs*) egy atomban az elektron állapotát jellemző negyedik kvantumszám, amely megadja az elektronok saját perdületének / a spinvektorának / a spinjének, az egymáshoz képesti, térbeli irányítottságát, illetve külső, pl. mágneses tér jelenlétében a spinvektor térre eső

vetületének a hosszát és irányát. Lehetséges értékeit az elektron spinkvantumszáma ($s=1/2$) korlátozza, mert csak a $\pm 1/2$ értékeket veheti fel.

$$\vec{s}_z = m_s \cdot \frac{h}{2\pi}$$

spinkvantumszám: (jele: s ; mértékegysége: *nincs*) az elemi részecskék saját perdületének, /a spinvektorának, /a spinjének a hosszát megadó kvantumszám.

$$|\vec{s}| = \sqrt{s \cdot (s + 1)} \frac{h}{2\pi}$$

Az atomot alapvetően felépítő részecskéknek, a nukleonoknak, és az elektronnak a spinkvantumszáma $s=1/2$, de léteznek más, $s=k \cdot 1/2$ spinkvantumszámú részecskék is, ahol k elvileg nulla és bármely természetes szám lehet.

felépülési / Aufbau elv: az alapállapotú atomok konfigurációjának megadásához szükséges első elv, amely szerint a következő elektron a rendelkezésre álló pályák közül a legalacsonyabb energiájú, még be nem töltött pályára kerül, azaz azok növekvő energiasorrend szerint töltődnek fel.

Másik megfogalmazás: az elektronok az alapállapotban lévő atomban, a be nem töltött pályákra, növekvő ($n + \ell$) szerint épülnek be, és azonos ($n + \ell$) esetén a kisebb n értékű pálya töltődik fel.

Pauli-féle kizárási elv: az alapállapotú atomok konfigurációjának megadásához szükséges második elv, amely megmutatja, hogy mely pálya a még be nem töltött. Az elv szerint egy pályán, egyszerre két elektron tartózkodhat, és azok spinvektora ellentétes irányítottaságú, azaz a mágneses spinkvantumszámuk, $m_s = +1/2$ illetve $-1/2$ lehet.

Másik megfogalmazás: egy atomban nem létezhet két azonos állapotú elektron, azaz nem lehetséges, hogy az állapotukat meghatározó mind a négy kvantumszámuk azonos legyen. (Legalább a mágneses spinkvantumszámuk (m_s) eltérő!)

Hund-féle maximális multiplicitás elve: az alapállapotú atomok konfigurációjának megadásához szükséges harmadik elv, alkalmazására akkor kerül sor, ha a betöltéshez rendelkezésre álló, legalacsonyabb energiájú, be nem töltött pályák azonos energiájúak, ún. elfajult/degenerált pályák. Az elv szerint elfajult pályák betöltése úgy történik, hogy a lehető legtöbb, párosítatlan, és párhuzamos irányítottaságú spinű elektron legyen a pályákon, azaz az állapot multiplicitása legyen maximális.

az állapot spinmultiplicitása: az állapot eredő spinkvantumszámából (S) számítható mennyiség:

$$\text{Spinmultiplicitás} = 2S + 1$$

Megegyezik az S kvantumszámmal jellemzett perdületvektor külső, pl. mágneses tér jelenlétében létrejövő lehetséges orientációinak a számával.

eredő spinkvantumszám: (jele: S ; mértékegysége: *nincs*) egy atomban az eredő spinkvantumszámot az atomban lévő elektronok mágneses spinkvantumszámainak az összege adja meg, azaz

$$S = \sum_{i=1}^Z m_{s,i}$$

vegyértékelektronok: egy atom azon elektronjai, amelyek a periódusos rendszerben az adott elemet megelőző nemesgáz elektronszerkezetének megfelelő elektronokon kívül helyezkednek el.

nemesgázok: a periódusos rendszerben a periódusokat lezáró, igen kis reaktivitású egyatomos gázokat alkotó elemek. Közös tulajdonságuk, hogy külső elektronehéjuk s^2p^6 konfigurációjú.

elektronkonfiguráció: a kérdéses atom olyan alhéjainak, amelyeken elektronok találhatóak, energiasorrendben megadott felsorolása. A felsorolásban a főkvantumszámmal (n) és a mellékvantumszámból (ℓ) származtatott betűvel jelöljük az egyes alhéjakat, és jobb felső indexben adjuk meg az alhéjon lévő elektronok számát. Pl.: az oxigén alapállapotú elektronkonfigurációja: O: $1s^2 2s^2 2p^4$ vagy csak a vegyértékelektronokat részletezve O: $[\text{He}] 2s^2 2p^4$

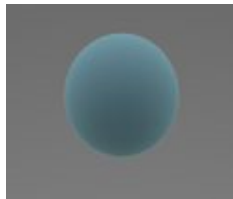
az alhéjak jelölése: az alhéjak betűjelét az alhéjon lévő elektronok mellékvantumszámából (ℓ) származtatjuk:

Az $\ell = 0$ mellékvantumszámú alhéjakat, és pályákat s betűvel jelöljük. Alhéjanként egy gömbszimmetrikus pályát jelöl.

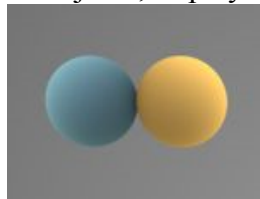
Az $\ell = 1$ mellékvantumszámú alhéjakat, és pályákat p betűvel jelöljük. Alhéjanként három hengersizmetrikus, két ellentétes előjelű lebenyből álló pályát jelöl, amelyek a koordináta tengelyek irányába mutatnak – p_x, p_y, p_z .

Az $\ell = 2$ mellékvantumszámú alhéjakat, és pályákat d betűvel jelöljük. Alhéjanként összesen öt pálya tartozik ide, ebből négy síkszimmetrikus, pálya, amelyek négy lebenyből állnak, amelyek átlósan azonos, azonban egymás mellett páronként ellentétes előjelű lebenyekből állnak $-d_{xy}$, d_{xz} , d_{yz} és $d_{x^2-y^2}$. Az ötödik, a d_{z^2} jelű, hengersizmetrikus két, azonos előjelű lebenyből áll, amit egy ellentétes előjelű gyűrű vesz körbe.

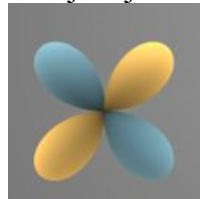
Az $\ell = 3$ mellékvantumszámú alhéjakat, és pályákat f betűvel jelöljük. Alhéjanként hét pályát jelöl.



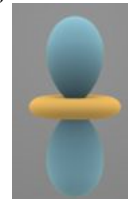
s-pályák



p-pályák



d-pályák



és

elsődleges kémiai kötés: az anyagon belüli, azt összetartó, az atomok között fellépő vonzóerőn alapuló kötés. Három fő típusát különböztetjük meg: az ionos, a kovalens és a fémes kötést.

ionos kötés: olyan kötés, amelyhez az összetartó erőt az ellentétes töltésű ionok közötti elektrosztatikus vonzóerő biztosítja. Nem irányított, általában nem zárt molekulát, hanem elvileg végtelen kristályos rendszert eredményez.

kovalens kötés: olyan kötés, amelyhez az összetartó erőt két vagy több atommag erőterében mozgó elektronok, és a magok között fellépő elektrosztatikus vonzás biztosítja. Irányított, zárt molekulát eredményező kötéstípus. A kovalens kötésű anyagok szilárd fázisú állapotában, az összetartó erőt, a molekulák között működő másodlagos kötőerők biztosítják.

fémes kötés: olyan kötés, amelyhez az összetartó erőt az igen nagyszámú atommag erőterében mozgó elektronok, és a magok közötti elektrosztatikus vonzóerő biztosítja. Nem irányított, általában nem zárt molekulát, hanem elvileg végtelen kristályos rendszert eredményez.

másodlagos kötés: a zárt molekulák között fellépő, az elsődleges kötésekhez képest jóval gyengébb vonzóerőn alapuló kölcsönhatások. Típusai a van der Waals kötés, és a hidrogénhid kötés.

van der Waals kötés: a molekulában az elektroneloszlás állandó vagy átmeneti/pillanatnyi eltolódásból származó vonzóerőn alapuló kötés. Három, a permanens dipól – permanens dipól, a permanens dipól – indukált dipól, és az indukált dipól – indukált dipól kölcsönhatás eredője. Nem irányított kötés.

hidrogénhid kötés: egy molekula nagy elektronegativitású atomjának nem kötő elektronpárja és egy másik molekula hidrogénatomja között fellépő kölcsönhatás. Részben irányított kötés.

vegyértékkötés/VB-elmélet: a kovalens kémiai kötés leírására kialakult egyik elmélet, amely szerint a kémiai kötés abból származik, hogy az atomok között párosított spinű elektronpárok alakulnak ki. Önállóan nem képes a molekulák szerkezetének a leírására, különböző kiegészítő elméletek segítségével azonban szemléletesen magyarázza a molekulák szerkezetét.

rezonancia: a VB-elmélet kiegészítő elmélete, amely szerint azon molekulák esetében, ahol az elmélet alapján több egyenértékű szerkezet írható fel, a molekula valós szerkezete ezeknek, az ún. rezonancia alakoknak, az átlagaként írható le, eszerint viselkedik.

delokalizáció: azon molekulák esetében, amikor a lokalizált többes kötés máshol található a felírható rezonancia alakokban, az átlagolás következtében létrejövő elektroneloszlás.

hibridizáció: a VB-elmélet kiegészítő elmélete, a molekulák alakjának a magyarázatára. Ún. hibrid pályák létrehozásával magyarázza a kémiai kötések, olyan irányba történő kialakulását, amely nem magyarázható az atomi pályák irányítottságával. Pl.: a szénatom sp^3 , sp^2 , és az sp hibridjei.

vegyértékhéj-elektronpár taszítási/VSEPR-elmélet: a VB-elmélet kiegészítő elmélete, amely az atomokon lévő kötő, és nem kötő elektronpárok közötti taszítás alapján magyarázza a molekulák alakját. A központi atom körül lévő elektronpárok száma alapján az elektronpárok olyan elrendeződését feltételezi, amely a lehető legkisebb taszítást biztosítja közöttük. Az így választott szabályos elrendeződésből származtatható kötésszögektől való eltérést, a kötő, és a nem kötő elektronpárok térigényének eltéréseivel magyarázza, azaz a nem kötő, ún. magányos párok taszítását erősebbnek, térigényét nagyobbak feltételezi, és ennek megfelelően torzítja a választott geometriát.

molekulapálya/MO-elmélet: a kémiai kötés leírására kialakult elmélet, amely szerint a kémiai kötés kialakulása annak köszönhető, hogy az elektronok atomi pályáról, a molekula létrejöttkor kialakuló molekulapályákra kerülve a rendszer energiája csökken. Önállóan képes az ionos, a kovalens és a fémes kötés magyarázatára, a molekulák szerkezetének a leírására. Legelterjedtebb változata az LCAO-MO-elmélet.

molekulapálya: azok a hullámfüggvények, amelyek leírják az elektronok állapotát az atomokból keletkezett molekulákban. Az LCAO-MO elmélet az atomi pályák lineáris kombinációjából származtatja a molekulapályát, azaz

$$\Psi_{MO} = \sum_{i=1}^k c_i \Psi_{AO,i}$$

kötő molekulapálya: olyan molekulapálya, amelynek energiája alacsonyabb, mint azoknak az atomi pályák energiájának az átlaga, amelyek lineáris kombinációjával leírjuk a molekulapályát.

lazító molekulapálya: olyan molekulapálya, amelynek energiája magasabb, mint azoknak az atomi pályák energiájának az átlaga, amelyek lineáris kombinációjával leírjuk a molekulapályát.

nem kötő molekulapálya: olyan molekulapálya, amelynek energiája közel azonos, azoknak az atomi pályák energiájának az átlagával, amelyek lineáris kombinációjával leírjuk a molekulapályát.

a második periódus homonukleáris kétatomos molekuláinak kötésrendje: a kötő (n) és a lazító (n^*) molekulapályákon lévő elektronok számának különbsége, osztva kettővel, azaz

$$b = \frac{n - n^*}{2}$$