

ALKALMAZOTT KÉMIA

A fizikai kémia alapjai

László Krisztina

Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

F ép. I. lépcsőház 1. emelet 135

klaszlo@mail.bme.hu

Domán Andrea

F ép. I. lépcsőház 1. emelet 136

doman.andrea@mail.bme.hu

<http://oktatas.ch.bme.hu/oktatas/konyvek/fizkem/kornymern>

Alkalmazott kémia 1.

1

Követelmények:

- részvétel az előadások 70 %-án
- íb. részvizsga: min. 50%
márc. 10. után, egyeztetett időpontban
vizsgaidőszakban

Ajánlott tankönyvek:

Grofcsik et al: Fizikai kémia I

P. W. Atkins: Fizikai kémia

Szántó Ferenc: A kolloidkémia alapjai

D. J. Shaw: Bevezetés a kolloid- és felületi kémiába

Alkalmazott kémia 1.

2

**Termodinamikai alapok
Kinetika (a folyamatok időbeli lefolyása)
Egyensúlyok
Felületkémia**

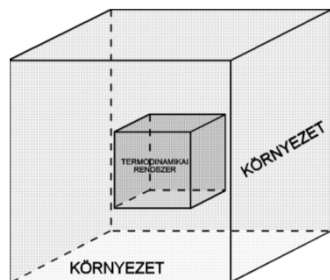
Feladatmegoldás

1. A TERMODINAMIKA ALAPJAI

**A TERMÉSZETES FOLYAMATOK IRÁNYA
HŐCSERÉVEL JÁRÓ FOLYAMATOK
FÁZISDIAGRAMOK ÉRTELMEZÉSE
HALMAZÁLLAPOT, ~VÁLTOZÁSOK
GÁZOK, FOLYADÉKOK
TÖBBKOMPONENSŰ RENDSZEREK; KONCENTRÁCIÓK; HÍG OLDATOK**

A termodinamikai rendszer

Megfigyeléshez ki kell választanunk egy kezelhető méretű rendszert



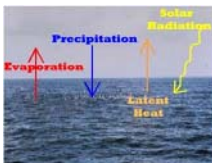
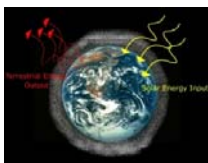

TD rendszer: a világ azon határfelülettel elválasztott része, amelynek tulajdonságait vizsgáljuk

Környezet: minden ami a rendszeren kívül van

7

TD rendszer csoportosítása

Anyag és energiatranszport szerint

| | NYÍLT | ZÁRT | (EL)SZIGETELT |
|-------------------|---|---|---|
| Anyagáram | ✓ | ✗ | ✗ |
| Energiatranszport | ✓ | ✓ | ✗ |
| Példa | Óceán | Föld légkörével együtt | Zárt, merev falú termosz |
| |  |  |  |

8

TD rendszer csoportosítása

A rendszer folytonossága szerint

HOMOGÉN: makroszkopikus tulajdonságok minden pontban azonosak

Példa: Jól elkevert oldatok



INHOMOGÉN: egyes makroszkopikus tulajdonságok helyről helyre (folytonosan) változnak

Példa: egyik végén melegített fémrúd; nem jól elkevert oldat



HETEROGÉN: makroszkopikus tulajdonságok ugrásszerűen változnak

Példa: Jeges víz; homok a vízben



FÁZIS: a rendszer homogén kémiai összetételű és homogén vagy inhomogén fizikai szerkezetű része. A fázis lehet diszpergált (széttöredezett), ilyenkor egy fázisba soroljuk az azonos összetételű részeket.

KOMPONENS: a rendszernek a kémiai tulajdonság alapján megkülönböztethető része.

Jeges víz

1 komponens (H_2O)

2 fázis (szilárd és folyadék)



10

A rendszer **makroszkopikus** jellemzői

A rendszer állapota a mérhető fizikai tulajdonságok összessége.

Mérhető fizikai tulajdonságok a TD nyelvén:

állapotjelző/állapothatározó

| | |
|------------------------|----------------------|
| tömeg (m) | nyomás (p) |
| térfogat (V) | hőmérséklet (t) |
| anyagmennyiség (n) | koncentráció (c) |
| | sűrűség (ρ) |

Extenzív állapotjelzők

Függenek a rendszer méretétől (kiterjedésétől)

Intenzív állapotjelzők

Függetlenek a rendszer méretétől (kiterjedésétől)

2 extenzív hányadosa mindig intenzív

11

Az állapotegyenlet

Az egyensúlyi rendszer állapothatározói között teremt kapcsolatot.

- Kísérleti tapasztalat
- Mikroszkopikus modellek
- Diagramok, táblázatok

Példa: Tökéletes gáz állapotegyenlete

$$PV = nRT \quad (R = 8,314 \text{ J/molK})$$

Egyensúlyban: az állapothatározók időben állandók (nincs makroszkopikus folyamat). DE az egyensúly **dinamikus** (molekuláris folyamatok vannak)

Nem-egyensúlyi rendszer: az állapothatározók időben változnak, a rendszer az egyensúly felé tart.

12

Az anyagok energiája



$$E = E_{pot} + E_{kin} + U$$

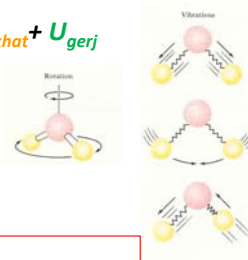
$$E_{pot} = m \cdot g \cdot h$$

$$E_{kin} = \frac{1}{2} m \cdot v^2$$

rendszer energiája = helyzeti energia + mozgási energia + belső energia

Belsőenergia részei $U = U_0 + U_{trans} + U_{rot} + U_{vibr} + U_{khat} + U_{gerj}$

- Nullponti energia
- Termikus energia
- Kölcsönhatási energia
- Gerjesztési energia



U abszolút értéke nem ismert, csak a változása értéke csak a végső és kiindulási állapot közti különbségtől függ = ÁLLAPOT FÜGGVÉNY

13

A kölcsönhatások fajtái

Erős
1

atommag felépítése

Elektromágneses
 10^{-2}

töltéssel vagy elektromos/mágneses nyomatékkal rendelkező részecskék között

Coulomb 80-100 RT
H-híd 10-15 RT
van der Waals 0,5-20 RT
diszperziós
hidrofób

Gyenge
 10^{-14}

magátalakulások, termonukleáris fúzió (Nap energiatermelése)

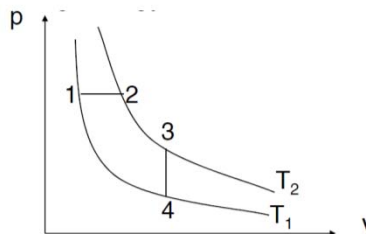
Gravitációs
 10^{-39}

kozmikus méretekben jelentős

14

A rendszer megváltoztatása

| | | |
|------------------|---------------------|-------|
| izobár | ($p=\text{áll.}$) | 1 → 2 |
| izoterm | ($T=\text{áll.}$) | 2 → 3 |
| izochor/izosztér | ($V=\text{áll.}$) | 3 → 4 |
| adiabatikus | ($\Delta Q=0$) | |



Állapotfüggvény: az állapothatározók olyan többváltozós egyértékű függvénye, melynek értéke csak az adott állapottól, megváltozása pedig **csak a végső és a kezdeti állapottól függ** (pl. a **belső energia, U**)

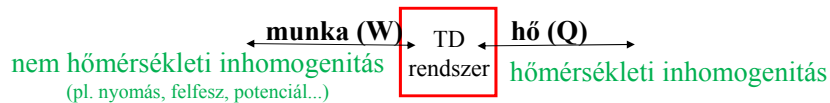
Útfüggvény: értéke a kezdeti és a végállapot között megtett úttól függ

reverzibilis (absztrakt határeset) ↔ irreverzibilis (valós folyamatok)

15

Alkalmazott kémia 1.

A rendszer **energiaállapotának** megváltoztatása



Energia megmaradás tétele:

$$dU = dQ + dW$$

Előjelkonvenció:
központban a rendszer

A termodinamikai rendszer **belső energiája** csak a környezettel történő kölcsönhatás révén változhat (**a TD I. főtétele**)

Zárt rendszer $dU = dQ + dW$

Elszigetelt rendszer $dU = 0$ ha nincs munkavégzés

16

A munka (W)

Mechanikai munka (középiskola) $W = F \cdot l$

Más munkák is vannak. Az elemi munka egy intenzív mennyiség és egy extenzív mennyiség megváltozásának szorzata.

| Munka fajtája | Intenzív | Extenzív | W | dW |
|---------------|---------------|--------------|----|------|
| Térfogati | nyomás (p) | térfogat (V) | pV | -pdV |
| Felületi | felfesz (γ) | felület (A) | γA | γdA |
| Elektromos | potenciál (φ) | töltés (Q) | φQ | φdQ |

A munka útfüggvény!

Megváltozása nem csak a kiindulási és végállapottól függ, de a megtett úttól is.

17

A belső energia megváltozása

Belső energia megváltozása térfogati munka esetén.

$$dU = dQ + dW = dQ - pdV \quad (\text{Zárt rendszerben})$$

Állandó térfogaton: $dV = 0 \rightarrow dW = 0$

$$dU = dQ \quad (\text{Zárt rendszerben, állandó térfogaton})$$

**Állandó térfogaton (ha nincs egyéb munka)
a belső energia megváltozása a hővel egyenlő.**

18