

11 Előrendezésre minősített egyezménytől, de rendelkezési korára az ÖG eltele

$$\Delta G = \Delta G^0 + RT \ln \frac{[B]}{[A]}$$

lehet +/-

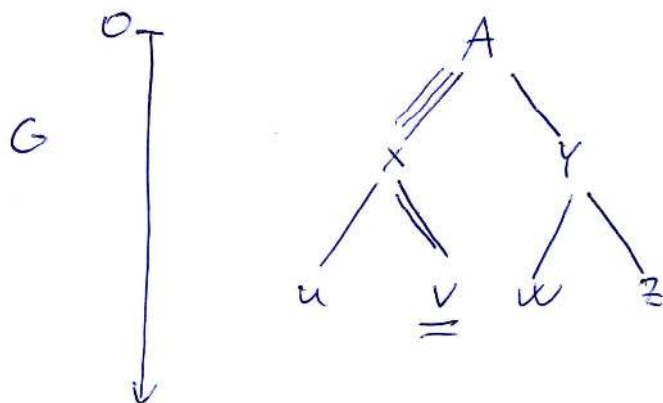
~~Definíció 2~~

Art határozta meg, hogy milyen messze vagyunk az egyensúlytól előjel megmondja, hogy milyen irányba megy spontánul. mēdēn a duobor. A nagyság a hānyzhetē / befeltetett energiamennyisēget jelent.

$$\frac{[B]}{[A]} = K_{eq} \Rightarrow \Delta G = 0 \rightarrow \text{egyensúly}$$

$$\frac{[B]}{[A]} < K_{eq} \quad \Delta G < 0 \quad A \rightarrow B \text{ irányba megy a reakció}$$

$$\frac{[B]}{[A]} > K_{eq} \quad \Delta G > 0 \quad B \rightarrow A \text{ irányba megy}$$



← termodinamikai szempontból egyensúlyiállás lenne az átalakulás gyorsasága is befolyásolja, hogy milyen kisméretű lehetőségek. Itt V lett többségben. REAKCIÓKINETIKA fontossága energiával alacsonyabbra a reakciókat. ⇒ Szevességen luximatihas reakció

Definíció 2

Reakció-sémáj A → 2B

$$v_1 = - \frac{d[A]}{dt} \quad \text{A koncentrációjának időbeli megváltozása}$$

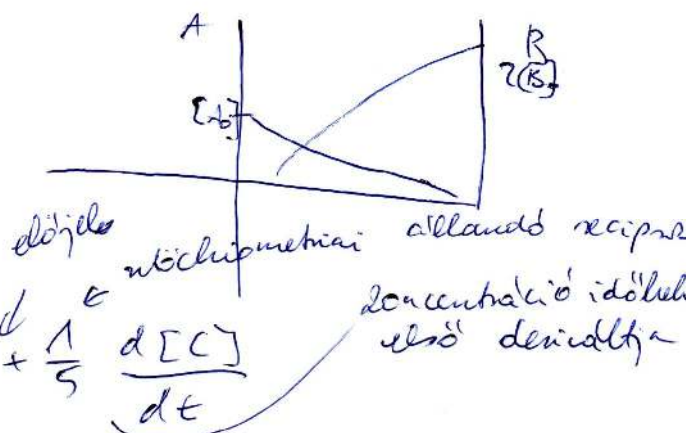
vagy $v_2 = + \frac{d[B]}{dt}$ - : fogy + : termelődik

$$v_2 = + \frac{d[B]}{dt}$$



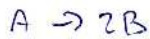
stöchiometria allandó?

$$v = - \frac{1}{3} \frac{d[A]}{dt} = - \frac{1}{4} \frac{d[B]}{dt} = + \frac{1}{5} \frac{d[C]}{dt}$$



Reakciósebességi egyenlet

megmutatja az összefüggést a sebesség között és a reakcióban résztvevő anyagok koncentrációi között
(matematikai összefüggés) $V = f(c_1, c_2, \dots, c_n)$



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

k = sebességi állandó

m = a reakció rendje

három részre osztva a reakciókat:
1. egyszerű pontok bomlása

2. nem levezethető,
valószínűleg katalizálható

pl. $v = - \frac{d[A]}{dt} = k[A]^m[B]^n$

$$= k[A]^m[B]^0$$

ebben a reakcióban

B nulla rendű, nem van részt az ütközésben

3. nagyon kis valószínűséggel

0. olyan anyagokra nézve,
amelyek már termékként,
az ütközésnél nem működnek

másik pl.

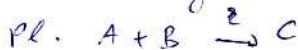


// a reakció A-ban másodrendű

// a reakció A-ban elsőrendű

egyszerűen $A \rightarrow B$

komplex reakció esetében a stoichiometriától nem követlenül
mikor egyenlő a rendje



$$v = - \frac{d[A]}{dt} = k[A]^2[B]$$

hisztetileg

A-ban 2. rendű

B-ben 1. rendű

egyszerűen harmadrendű reakció

Mechanizmus - modell

Van egy komplex reakció, felírjuk róla egy modellt,
az addig ismerjük, amíg valaki meg nem találja.
Kísérlet alapján gondolkodás útján állíthat fel.

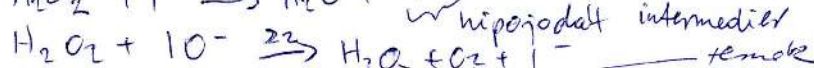
Elemi reakció

Ami az atomos és a molekulát szintjén történik

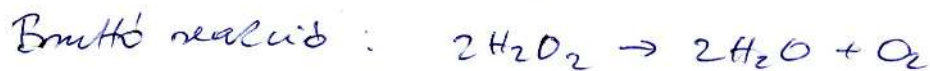


Kísérletileg megfigyelve: $v_{OA} = k[H_2O_2][I^-]$

reagens katalizátor intermediár teljes reakció (overall)



It jodidiont nirozshapom, ő csak katalizátor.

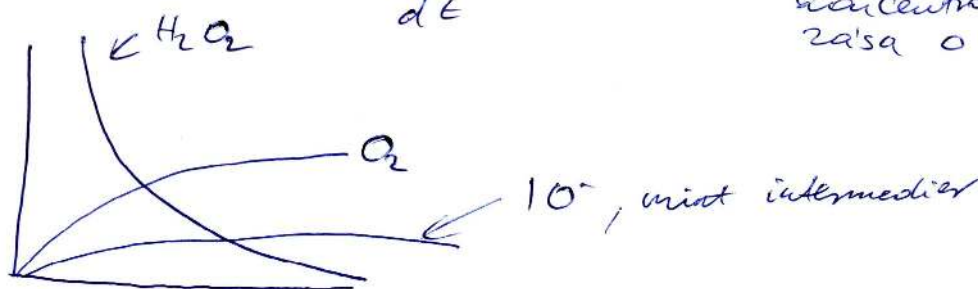


Konzekutív / sorakos reakció, fontos, hogy melyik sebesség
állandó melhora, 2. hogy minnyul 2. -tör,
amelyik kisebb, az len a reakció sebességmeghatározó
lépése.

Feltételezések / bonyolult reakciók esetén feltételezéssel kell elni)

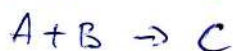
① (Melyik a) sebességmeghatározó lépés, ebből indulunk ki

② Steady state $\frac{d[\text{IO}^-]}{dt} = 0$, ekkor a hipotetikus
koncentráció idő-
zása 0.



↑ steady state: egyenanyagi foggy, mint
amennyi termelődik

A reakció kinetisége



$v = k \cdot [A]^m [B]^n$

Kísérlet

3 körös	$[A]_0$ / mmol	$[B]_0$ / mmol	V_0 / mmol/min	
1.	1	5	0.001	} A-kon mérésrendű
2.	5	5	0.025	
3.	10	5	0.100	

$v = k[A]^m[B]^n$ ~~ps~~ / ln

$\ln v = \ln k + m \ln [A] + n \ln [B]$

$\ln v = \ln k + m \cdot \ln [A] + n \cdot \ln [B]$



→ tengelymetret: $\ln k + m \ln [B]_0$

Két kísérletkorlatból meg tudjuk m-et, n-et, k-t határozni

Ha mi változik, a cél, hogy meg tudjam állapítani a
jelenlegi állapotokat.

Enkor: differenciálegyenlet

Schrodinger egyenlet integrálása

1. rész

A $\rightarrow$ B



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

Integráljuk!

$$\frac{d[A]}{[A]} = -k \cdot dt \quad / \int$$

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

$$\ln [A] \Big|_{[A]_0}^{[A]} = -kt \Big|_0^t$$

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

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

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

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

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

$$\frac{1}{2} = e^{-kt}$$

$$\ln \frac{1}{2} = \ln e^{-kt}$$

$$\ln \frac{1}{2} = -kt$$

$$t = \frac{\ln \frac{1}{2}}{-k} = \frac{\ln 2}{k}$$

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

$\frac{1}{2} = k$: életideje v. relaxációs ideje a stabilizációnak

H4: félreérthető idő kifejezése

A megfigyelt anyagból mielőtt len $\frac{A}{2}$,

a) mi a kinevezés 2-hoz és k -hoz

b) hol tart a kinevezés k idő múlva

elérhető stabilizáció: exponenciális, egy paraméterrel

2 dimenzió $\frac{1}{s}, \frac{1}{min}, \frac{1}{h}$

k s, min, h

félreérthető idő

Györffy Dániel
users . itk . ppke . hu / ~gyoda
gyoda cf @ exim . hu

Termodinamikai alappfogalmak

Rendszerek

A rendszer az a rész, amit vizsgálunk.
Körülhatárolt v. elhatárolt.

Környezet

Minden más

Kapcsolatok

R - K : NYÍLT Rendszer
- anyag)
- energia)
- energia : zárt rendszer
- $\emptyset$: izolált rendszer

Ma'sok

hőmegtartó :
csak anyagcsere,
energia nem,
zolt : $\emptyset$

Állapotjelölő

Rendszer állapotát jellemzők

$pV = nRT$ egytlenes gáztörvény

$pV = Nk_B T$

- nyomás
- térfogat
- hőmérséklet
- mennyiség

extenzív : mennyisége függ az anyagmennyiségtől (V, m)

intenzív : nem függ a mennyiségtől az anyagmennyiségtől

1. Főtétele

Munka (W) : az energia átvett típusa

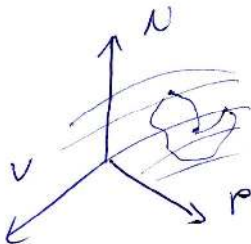
Hő (Q) : az energia átvett hőmorgáshoz rendelhető formájában

belső energia : U

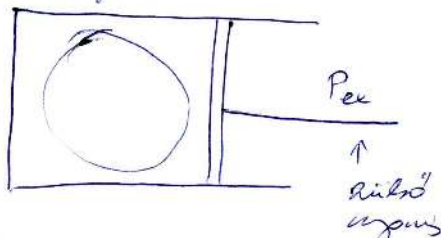
$$dU = \delta Q + \delta W$$

A rendszer belső energiájának megváltozása egyenlő a munkával és a hővel (azaz a hővel).

A belső energia állapotfüggvény, a teljes megvaltozási
a kezdeti és a megvaltozási függ, a köztes álla-
potokból nem



Ideális gáz



V_{ig}
 P_{ig}
 T_{ig}

Ha nem történik a dugattyú: $P_{ex} = P_{ig}$
Ha végletekig kicsiny mértékben megváltoztatjuk,
egyenlő maradnak. Reversibilisen

$$d = F \cdot x$$

$$P = F/A$$

$$A dx = dV$$

$$\delta w = F dx \quad \delta w = -p dV_{ig}$$

$$dU = \delta q - p dV$$

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = \left(\frac{\delta q}{dT} \right)_V$$

↑ hőkapacitás, állandó nyomáson
lelőlyeltesen $dU = \delta q$

H: entalpia, állapotfüggvény

$$H = U + pV$$

Változik, p állandó, hőhöztes hatására mérték 2, tehát

$$dU = \delta q - p dV$$

$$dH = dU + p dV + V dp = \delta q + V dp$$

A entalpia függ változik, ahogy hő körlíve $dp=0$

2. kötet

entropia, állapotfüggvény

$$dS = \frac{\delta q}{T}$$

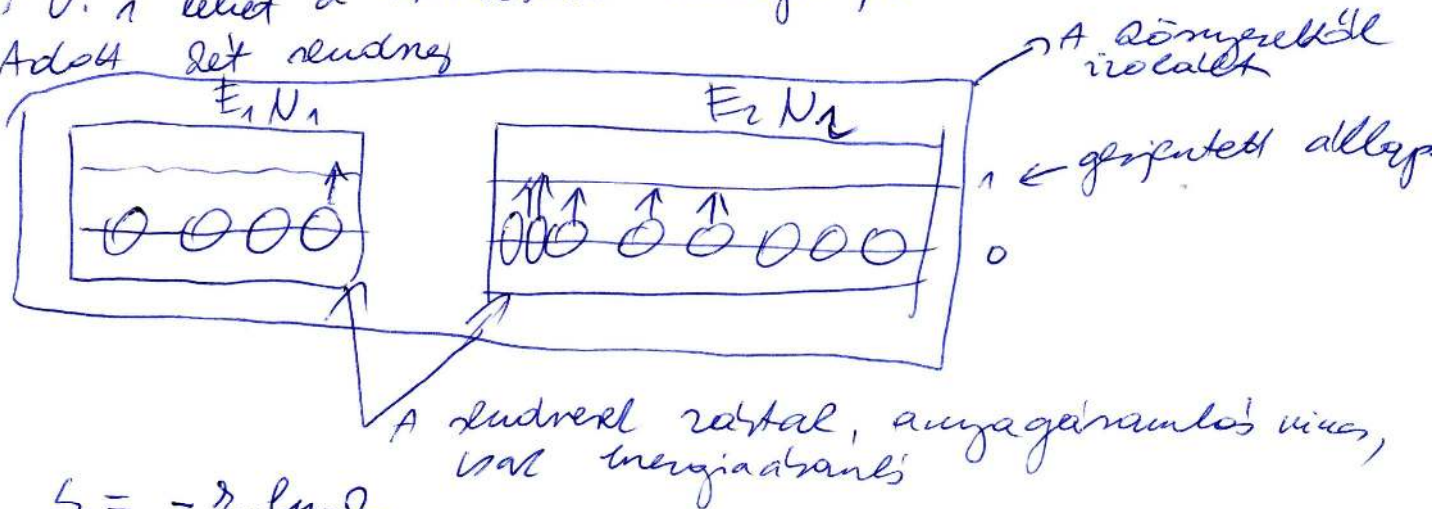
$$dS \geq 0$$

Isolated rendszer egyensúlyában a maximális entropia felé törekszik.

Példa: egyenértékes modell

○ v. 1 lehet a részecske energiája

Adott két rendszer



$$S = -k_B \ln \Omega$$

↑ multiplicitás, de kell mérni a mikroállapot

2. A egy makroállapotok rendelkezhető mikroállapotok száma

makroállapot egyen

mikro: részecske egyen

$$E = E_1 + E_2 = 6 \quad \text{↑ hány van egyenértékes állapotok}$$

$$N = N_1 + N_2 = 12 \quad \text{↑ hány golyó van összesen}$$

$$S = S_1 + S_2$$

$$\binom{4}{1} = \frac{4!}{1!(4-1)!} = 4$$

$$\binom{9}{5}$$

$$\Omega = \Omega_1 \cdot \Omega_2$$

itt 224

Ha

0

6

$$\binom{4}{0} = 1$$

$$\binom{8}{6} = 28$$

$$\Sigma = 28$$

Ha

2

4

$$\binom{4}{2} = 6$$

$$\binom{8}{4} = 70$$

$$\Sigma = 420 \leftarrow$$

ez közbülső lépés volt, lehet még

→ nagyobb a valószínűsége ennek a makroállapotnak