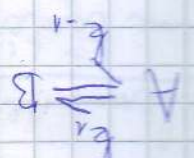


21. 2h (100 g) - 200 g
 - 30 g

Gleiches

Beispiel (Beispiel)

reinstes (reinstes) - 200 g



$$K = \frac{[A]}{[B]}$$

$[A], [B]$ eigenständig berechnen

- eigenständig (nicht)
 (nicht)

standard enthalpy / Gibbs free energy
 - mit anderen Faktoren zusammenrechnen

$$-\Delta G = \Delta G_0 + R \cdot T \cdot \ln \frac{[A]}{[B]}$$

$$-\Delta G = 0 \Rightarrow \Delta G_0 = -R \cdot T \cdot \ln K$$

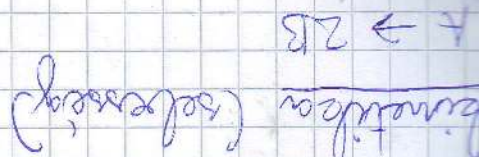
$$-\Delta G < 0 \Rightarrow \frac{[A]}{[B]} = Q < K$$

$$-\Delta G > 0 \Rightarrow \frac{[A]}{[B]} = Q > K$$

Gleichgewicht
 (Gleichgewicht)

- eigenständig berechnen $\Delta G < 0$
 (Gleichgewicht)

kinetische Reaktionsgeschwindigkeit
 (Gleichgewicht)

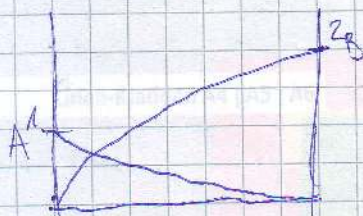


molekula száma/idő v. konzentráció/idő

$$v_1 = - \frac{d[A]}{dt} \quad (\text{A molekula fogyása})$$

+ lesz a mennyiség

$$v_2 = \frac{d[B]}{dt} \quad (\text{B molekula keletkezése})$$



$$v_1 \neq v_2$$

$$v_2 = 2 \cdot v_1$$



$$v = -\frac{1}{3} \cdot \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{4} \cdot \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{5} \cdot \frac{d[C]}{dt} = \frac{1}{6} \cdot \frac{d[D]}{dt}$$

$$v = \mp \frac{1}{n} \cdot \frac{d[x]}{dt} \quad - \text{ kémiai reakció sebessége}$$

sebességi egyenlet

$$v = f(c_1, c_2, \dots, c_n)$$



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

$\nwarrow$ *rendiség*
 $\nwarrow$ *bizonylattal meghatározható*
 $\uparrow$ *sebességi állandó / együttható*
 $\uparrow$ *bizonylattal meghatározható*

hogy ismerősek

$k(T, p)$ - *intenzív adatok*

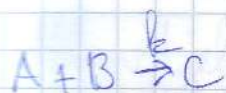
$$k(T, p, C)$$

$C \gg 0$ - *extenzív adatok*
 nagy érték

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

$\rightarrow 0$ (általában)

bármilyen lehet (törtétszám is)



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

bruttó reakció $\rightarrow$ harmadrendű
 $\hookrightarrow$ A-ra nézve $\Rightarrow$ másodrendű
 $\hookrightarrow$ B-re nézve $\Rightarrow$ elsőrendű

k mértékegység: $\frac{M}{s} = k \cdot M^3 \Rightarrow k = \frac{1}{M^2 \cdot s} = \frac{1}{\text{conc.}^2 \cdot \text{ide}} \cdot \frac{1}{s}$
 $\hookrightarrow$ rendűség határozza meg

reakciómechanizmus

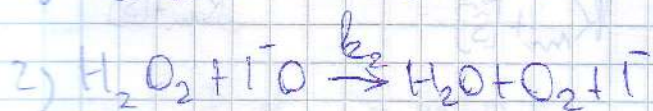
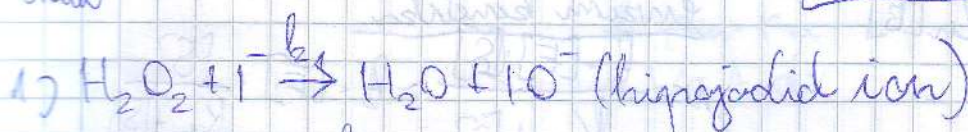
egy modell, amely megmagyarázza a bruttó reakciót elemi reakciók összegeként

elemi reakciók

mi történik a molekulák/atomok szintjén $\Rightarrow$ ütközések nem bonthatók tovább egyszerűbb reakciókra



$$v_B = -\frac{1}{2} \cdot \frac{d[H_2O_2]}{dt} = \frac{1}{2} \cdot \frac{d[H_2O]}{dt} = \frac{d[O_2]}{dt} = \boxed{k \cdot [H_2O_2] \cdot [I^-]} \quad \text{-- kísérlet}$$



$$\begin{aligned} v_1 &= k_1 \cdot [H_2O_2] \cdot [I^-] \\ v_2 &= k_2 \cdot [H_2O_2] \cdot [IO^-] \end{aligned}$$



sebességmeghatározó lépés 1) $\rightarrow$ 2)

$\hookrightarrow$ kisebb sebességű reakció határozza meg az egész sebességet

$\hookrightarrow$ 1-es kísérlet $\Rightarrow v_B = v_1 = k_1 \cdot [H_2O_2] \cdot [I^-]$

$$v_1 = -\frac{d[H_2O_2]}{dt} = k_1 \cdot [H_2O_2] \cdot [I^-]$$

$$v_B = -\frac{1}{2} \cdot \frac{d[H_2O_2]}{dt} = k_1 \cdot [H_2O_2] \cdot [I^-] = \frac{-d[H_2O_2]}{dt} = \boxed{2 \cdot k_1 \cdot [H_2O_2] \cdot [I^-]}$$

2.) Stacioner állapot / steady state



$$\frac{d[I^-]}{dt} = 0 = k_1 \cdot [H_2O_2] \cdot [I^-] - k_2 \cdot [H_2O_2] \cdot [IO^-]$$

$$k_1 \cdot [H_2O_2] \cdot [I^-] = k_2 \cdot [H_2O_2] \cdot [IO^-]$$

$$[IO^-] = \frac{k_1}{k_2} \cdot [I^-]$$

$$v_2 = k_2 \cdot [H_2O_2] \cdot \frac{k_1}{k_2} \cdot [I^-] = k \cdot [H_2O_2] \cdot [I^-]$$

$$\frac{d[O_2]}{dt} = k_1 \cdot [H_2O_2] \cdot [I^-]$$



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

$[A_0] / \text{mM}$	$[B_0] / \text{mM}$	$v_0 / \text{mM/s}$
---------------------	---------------------	---------------------

1

5

0,001

$$v_0 \sim [A_0]^2$$

5

5

0,025

10

5

0,1

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



enzim kinetika

$$v = \frac{k \cdot [E] \cdot [S]}{K_m + [S]} = k \cdot [E] \cdot \frac{[S]}{K_m + [S]}$$

Michaelis-Mendell

$$[S] \ll K_m \Rightarrow k \cdot [E] \cdot [S] \cdot \frac{1}{K_m} = \frac{k}{K_m} \cdot [E] \cdot [S]$$

$$[S] \gg K_m \Rightarrow v = k \cdot [E]$$

Gyakorlat

izolált rendszer - se anyag, se energia
zárt rendszer - csak energia

termodinamika

Lámpajelzők (T, V, n)

Lámpajelzők.

állapotjelzők fgyv.-ei
egyensúlyi állapotban viszálják őket

állapotjelzők $\begin{cases} \text{extenzív (függnek az anyagmennyiségtől) pl.: tömeg} \\ \text{intenzív (nem —————) pl.: hőmérséklet} \end{cases}$

axiómák (főtételek)

1. minden mozgáshoz energia szükséges

$$dU = dq + dW \quad \text{hő munka}$$

belsőenergia hő munka

2. $T_1 > T_2$ csak a magasabb T felől áramolhat spontán
míg a kisebb felé a hő

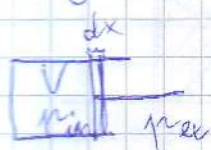
$$dq_1 + dq_2 = 0$$

$$dq_1 = -dq_2$$

entropia

$dS \geq \frac{dq}{T}$ — " reverszibilis folyamatoknál (ideális folyamatok)

térfigati munka



A

$$p_{int} = p_{ext} \\ dV = A \cdot dx$$

$$dW = -F \cdot dx = -p \cdot dV \quad p = \frac{F}{A}$$

$$dU = dq + dW \leq T \cdot dS - p \cdot dV \Rightarrow dS \geq \frac{1}{T} dU - \frac{p}{T} dV$$

$\left. \begin{matrix} dU=0 \\ dV=0 \end{matrix} \right\} dS \geq 0$
szigorúan monoton növekvő
egyensúlyi (köz. max.)

hő rendszer - állandó p, T

szabványos entalpia

$$G = U + p \cdot V - T \cdot S$$

$$dG = dU + p \cdot dV + V \cdot dp - T \cdot dS - S \cdot dT$$

$$dG \leq V \cdot dp - S \cdot dT$$

$$dG \leq 0$$

$$\left. \begin{matrix} dT=0 \\ dp=0 \end{matrix} \right\}$$

$$dU = dQ + dW_N + dW_e \text{ (egyenlet)}$$

$$dG \leq dW_e$$

Előadás

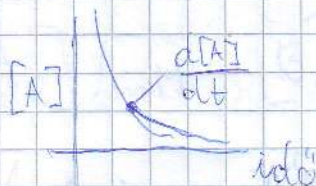
reakciókinetika

- ↳ életfolyamatok elemi szintű megértése, kvantitatív leírása
- ↳ nagyszámú részecskék tudománya
- ↳ reakció sebességi egyenlet (= differenciál egyenlet)

integrálás

1. rendű reakció (RX) $A \rightarrow B$

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



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

$$\ln[A] - \ln[A]_0 = -k \cdot t \Rightarrow \ln \frac{[A]}{[A]_0} = -k \cdot t$$

$$[A] = [A]_0 \cdot e^{-kt} \quad \tau = \frac{1}{k} \text{ - relaxációs idő}$$

$$\frac{[A]}{[A]_0} = e^{-k \cdot t}$$

$$[k] = \text{sec}^{-1}$$

$$[A] = [A]_0 \cdot e^{-k \cdot t}$$

pl.:

radioaktív bomlás - $k = \lambda$ - bomlási állandó

$$\frac{1}{k} = \tau = \text{élettideő}$$

$$\text{ha } t = \tau, \text{ akkor } n = n_0 \cdot e^{-1} \quad n = \frac{n_0}{2,718}$$

$$\frac{1}{2} \tau = t \Rightarrow n = \frac{n_0}{2}$$

$$\frac{1}{2} = e^{-\tau_1/\tau} \Rightarrow \tau = e^{\tau_1/\tau} \Rightarrow \ln 2 = 0,693 = \tau_1/\tau \Rightarrow \tau_1 = 0,693 \cdot \tau$$

2. rendű reakciók



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

$$-\int_{[A]_0}^{[A]} \frac{d[A]}{[A]^2} = \int_0^t k \, dt$$

$$\left[\frac{1}{[A]} \right]_{[A]_0}^{[A]} = k \cdot t$$

Arrhenius (1889)



$$V = \pi (r_A + r_B)^2 \cdot r_A$$

teljes ütközések száma = $\pi \cdot (r_A + r_B)^2 \cdot r_A \cdot [A] \cdot [B]$

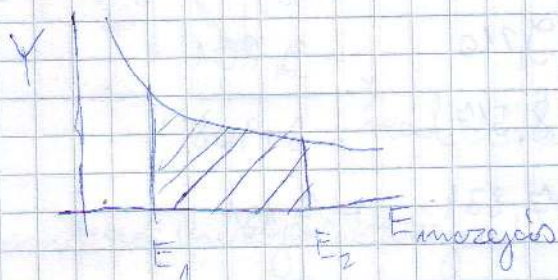


lírikus: $\frac{1}{2} m \cdot v^2 = \frac{3}{2} \cdot k_B \cdot T \Rightarrow v = \sqrt{\frac{3 k_B T}{m}}$

relatív sebesség: $v_{rel} = \sqrt{\frac{8}{\pi} \cdot \frac{k_B \cdot T}{M}}$

μ - redukált tömeg = $\frac{m_A \cdot m_B}{m_A + m_B}$

Boltingen
Maxwell eloszlás



$$\text{terület} = \int_{E_1}^{E_2} Y \, dE = \frac{n(E_2) - n(E_1)}{N}$$

$$Y = \frac{1}{RT} \cdot e^{-\frac{E}{RT}}$$



P = valószínűségi faktor = 1 - 0,1

$$v = k \cdot [A] \cdot [B]$$

$$v = \underbrace{\pi \cdot (r_A + r_B)^2 \cdot \frac{8 \cdot k_B \cdot T}{\pi \cdot M}}_{\text{állandó}} \cdot \underbrace{P \cdot e^{-E^*/R \cdot T}}_k \cdot [A] \cdot [B]$$

$$k = A \cdot e^{-E^*/R \cdot T}$$

definíciók A' - t

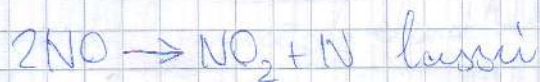
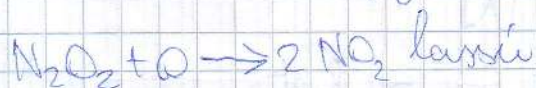
$$A = A' \cdot t^{1/2}$$

$$A' = \pi \cdot (r_A + r_B)^2 \cdot \left[\frac{8 \cdot k_B}{\pi M} \right]^{1/2} \cdot P \Rightarrow \frac{k}{T^{1/2}} = A' \cdot e^{-E^*/R \cdot T}$$

Arrhenius ábrázolás



Gyakorlat



$$v_o = k \cdot [\text{NO}]^m \cdot [\text{O}_2]^n$$

konstans

egyeses meredekség $\Rightarrow n=1 \Rightarrow v = k \cdot [\text{NO}]^2$

$$a = \frac{\sum_{i=1}^n x_i \cdot y_i - \sum_{i=1}^n x_i \cdot \sum_{i=1}^n y_i}{n \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i\right)^2} = 1$$

$$\ln v_o = \ln(k \cdot [\text{NO}]^m \cdot [\text{O}_2]^n) + n \cdot \ln [\text{O}_2]$$

$[\text{O}_2]$ M (mol/dm ³)	v_o	$\ln [\text{O}_2]$	$\ln v_o$	$(\ln [\text{O}_2])^2$
0,1	$6,968 \cdot 10^{-2}$	-9,210	-9,601	
0,2	$1,354 \cdot 10^{-1}$	-8,517	-8,908	
0,4	$2,707 \cdot 10^{-1}$	-7,824	-7,151	
0,8	$5,414 \cdot 10^{-1}$	-7,131	-7,521	
1,6	1,083	-6,438	-6,828	
		<u>-39,120</u>	<u>-41,092</u>	<u>310,884</u>

$$\ln [\text{O}_2] \cdot \ln v_o$$

$$456,882$$

$$v = k_2 \cdot [\text{N}_2\text{O}_2] \cdot [\text{O}_2] \quad K = \frac{[\text{N}_2\text{O}_2]}{[\text{NO}]^2} \quad [\text{N}_2\text{O}_2] = K \cdot [\text{NO}]^2$$

$$v = k_2 \cdot K \cdot [\text{NO}]^2 \cdot [\text{O}_2]$$

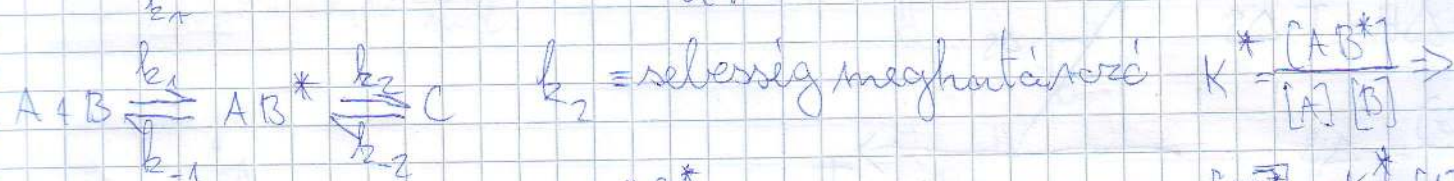
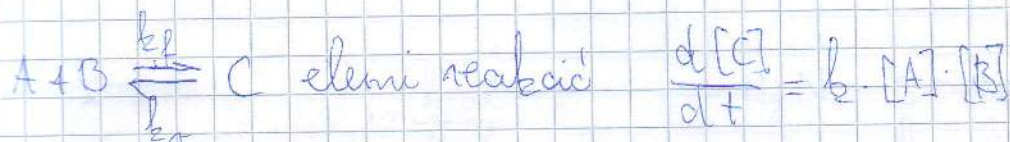
$$v = k_1 \cdot [\text{NO}]^2$$

Előadás

1884, van't Hoff $\Rightarrow k = A \cdot e^{-\frac{B}{R \cdot T}}$

1889, Arrhenius $\Rightarrow k = A \cdot e^{-\frac{E^*}{R \cdot T}}$

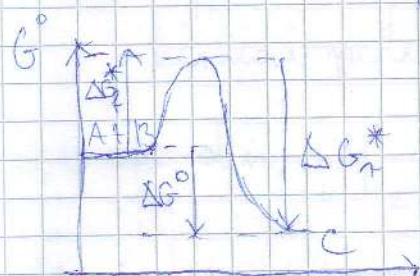
1935, Polanyi, Michaelis / Eyring $\Rightarrow$ átmeneti állapot / aktivált komplex



$[AB^*] = K^* \cdot [A] \cdot [B]$

$\Delta G_f^* = -R \cdot T \cdot \ln K^* \Rightarrow K^* = e^{-\frac{\Delta G_f^*}{R \cdot T}}$

$[AB^*] = [A] \cdot [B] \cdot e^{-\frac{\Delta G_f^*}{R \cdot T}}$



$\Delta G^\circ = \Delta G_{A \rightarrow B^*}^* - \Delta G_{B^* \rightarrow C}^*$

reakciókoordináta

termikus mozgáshőzős: $k_B \cdot T$ $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$

rezgési energia: $E = h \cdot \nu$ $h = 6,63 \cdot 10^{-34} \frac{J \cdot s}{s}$

$k_B \cdot T = h \cdot \nu \Rightarrow \nu = \frac{k_B \cdot T}{h}$ (frekvencia)

Eyring feltételezése: $k_2 = \nu$ $\frac{d[C]}{dt} = k_2 \cdot [AB^*] = \nu \cdot [AB^*] \left(\frac{1}{s}\right)$

$\frac{d[C]}{dt} = \frac{k_B \cdot T}{h} \cdot [AB^*]$

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

$\frac{d[C]}{dt} = \frac{k_B \cdot T}{h} \cdot e^{-\frac{\Delta G_f^*}{R \cdot T}} \cdot [A] \cdot [B]$

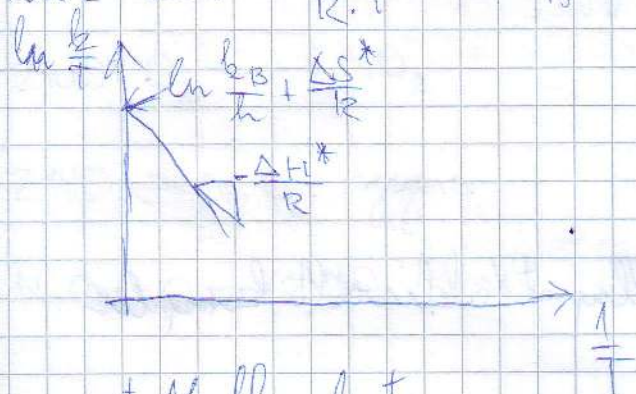
$k = \frac{k_B \cdot T}{h} \cdot e^{-\frac{\Delta G_f^*}{R \cdot T}}$

$\ln k = \ln \left(\frac{k_B \cdot T}{h} \right) - \frac{\Delta H^*}{R \cdot T} + \frac{\Delta S^*}{T}$

$\Leftarrow k = \left(\frac{k_B \cdot T}{h} \right) \cdot \left(e^{-\frac{\Delta H^*}{R \cdot T}} \right) \cdot \left(e^{\frac{\Delta S^*}{T}} \right)$

$\ln k = \ln k_B + \ln T - \ln h - \frac{\Delta H^*}{R \cdot T} + \frac{\Delta S^*}{T}$

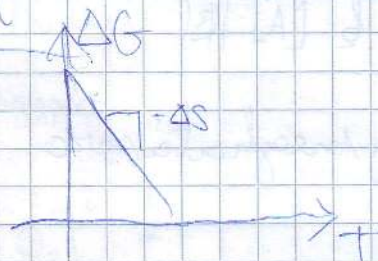
$$\ln k - \ln T = -\frac{\Delta H^\ddagger}{R \cdot T} + \ln k_B - \ln h + \frac{\Delta S^\ddagger}{R}$$



van't Hoff plot

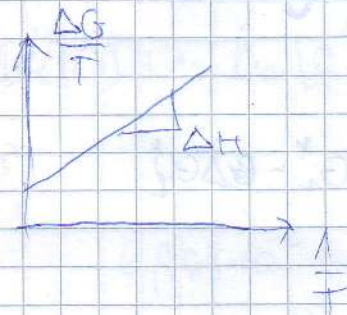
$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

$$\frac{\partial(\Delta G)}{\partial T} = -\Delta S$$



$$\frac{\Delta G}{T} = \frac{\Delta H}{T} - \Delta S = \Delta H \cdot \frac{1}{T} - \Delta S$$

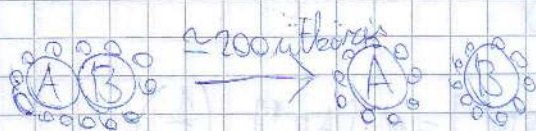
$$\frac{\partial(\frac{\Delta G}{T})}{\partial(\frac{1}{T})} = \Delta H$$



reakciók oldalban



kb. 200 székérs kell a kalitkákhoz való kiválasztáshoz (← diffúzió)



reakció sebesség ⇒ diffúzió

$$k = \frac{4 \pi N_A}{1000} \cdot (D_A + D_B) \cdot (r_A + r_B)$$

oldatok termodinamikája

kémiai potenciál

$$\Delta G = G_{\text{vég}} - G_{\text{kez}} = \text{hasznos munka } T = \text{all}; p = \text{all}$$

$$\Delta G_0 = 1 \text{ mol anyag}$$

298 K, 1 atm standard



$$\Delta G = G_{\text{CO}_2} + G_{\text{H}_2\text{O}} - G_{\text{glükóz}}$$

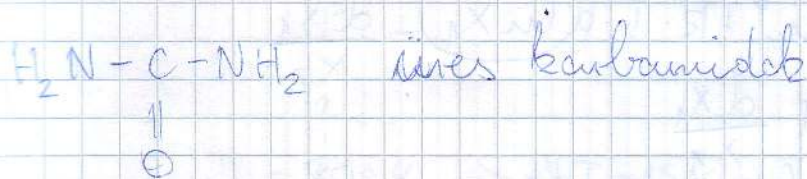
$$\bar{G}^\circ_{\text{H}_2(\text{g})} = 0$$

$$\bar{G}^\circ_{\text{O}_2(\text{g})} = 0$$

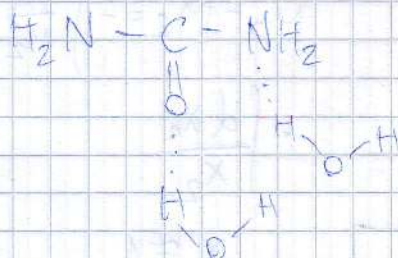


$$\Delta G = \bar{G}^\circ_{\text{H}_2\text{O}(\text{l})} - \bar{G}^\circ_{\text{H}_2(\text{g})} - \bar{G}^\circ_{\text{O}_2(\text{g})}$$

$$\Delta G^\circ = -56,68 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$



$$\Delta G^\circ_{\text{üres}} = -47,12 \frac{\text{kcal}}{\text{mol}}$$



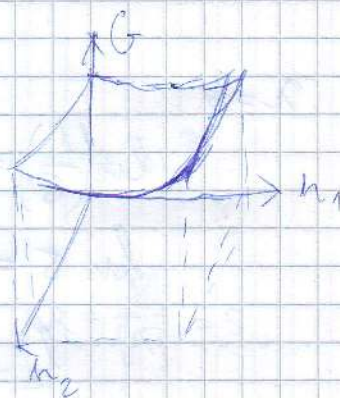
$$dG = \left(\frac{\partial G}{\partial n_1} \right)_{T, P, n_2} \cdot dn_1 + \left(\frac{\partial G}{\partial n_2} \right)_{T, P, n_1} \cdot dn_2$$

||
kémiai potenciál

$n_1 = \text{H}_2\text{O}$, $n_2 = \text{oldott anyag}$

$$dG = \mu_1 \cdot dn_1 + \mu_2 \cdot dn_2$$

μ : intenzív mennyiség



$$dG = \mu_1 \cdot dn_1 + \mu_2 \cdot dn_2$$

$$dG = \mu_1 \cdot dn_1 + \mu_2 \cdot dn_2$$

$$G = \mu_1 \cdot n_1 + \mu_2 \cdot n_2$$

additivitási
szabály

$$dG = \mu_1 \cdot dn_1 + \mu_2 \cdot dn_2 + \mu_1 \cdot n_1 \cdot d\mu_1 + \mu_2 \cdot n_2 \cdot d\mu_2$$

Gibbs-Duhem
egyenlet

$$d\mu_2 = \left(-\frac{\mu_1}{n_2} \right) \cdot d\mu_1 \quad \int d\mu_2 = - \int \frac{\mu_1}{n_2} \cdot d\mu_1 \Rightarrow \mu_2 - \mu_2^\circ = - \int \frac{\mu_1}{n_2} \cdot d\mu_1$$

$$\mu_1 = \mu_1^\circ + R \cdot T \cdot \ln x$$

x : molfrakció

$$x_1 = \frac{n_1}{n_1 + n_2}$$

$$X_1 = \frac{p_1}{p_0} \equiv X_1$$

$$\mu_1 = \mu_1^0 + R \cdot T \cdot \ln \frac{p_1}{p_0}$$

Raoult törvény

$$X_1 = \frac{n_1}{n_1 + n_2} \quad ; \quad X_2 = \frac{n_2}{n_1 + n_2} \Rightarrow \frac{X_1}{X_2} = \frac{n_1}{n_2}$$

$$X_1 + X_2 = 1 \Rightarrow dX_1 + dX_2 = 0 \Rightarrow dX_2 = -dX_1$$

$$d\mu_1 = d\mu_1^0 + R \cdot T \cdot d(\ln X_1) = \frac{dX_1}{X_1}$$

$$d\mu_1 = R \cdot T \cdot \frac{dX_1}{X_1}$$

$$\mu_2 - \mu_2^0 = - \int \frac{n_1}{n_2} \cdot R \cdot T \cdot \frac{dX_1}{X_1} = -R \cdot T \int \frac{X_1}{X_2} \cdot \frac{dX_1}{X_1} = R \cdot T \cdot \ln X_2$$

$$\int \frac{dX_2}{X_2}$$

$$X_1 \approx 1$$

$$X_2 \approx 2$$

Cyáberolat

1.

$$t = 3 \text{ min} = 180 \text{ sec}$$

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

$$[A] = \frac{[A]_0}{5}$$

$$\frac{[A]_0}{5} = [A]_0 \cdot e^{-k \cdot 180 \text{ s}}$$

$$\frac{1}{5} = e^{-k \cdot 180 \text{ s}}$$

$$2 = k$$

$$\ln\left(\frac{1}{5}\right) = -k \cdot 180 \text{ s}$$

$$\ln 5 = k \cdot 180 \text{ s}$$

$$k = \frac{\ln 5}{180} = 8,94 \cdot 10^{-3} \frac{1}{\text{s}}$$

$$\tau = \frac{1}{k} = 112 \text{ s}$$

$$\tau_{\frac{1}{2}} = \frac{\ln 2}{k} = 77,5 \text{ s}$$

2.

$$E^* = 347 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

$$T_1 = 20^\circ\text{C} = 293 \text{ K}$$

$$k_1 = A \cdot e^{-\frac{E^*}{R \cdot T_1}}$$

$$k_2 = A \cdot e^{-\frac{E^*}{R \cdot T_2}}$$

$$\frac{k_2}{k_1} = \frac{A \cdot e^{-\frac{E^*}{R \cdot T_2}}}{A \cdot e^{-\frac{E^*}{R \cdot T_1}}} = e^{\frac{E^*}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)}$$

$$1000 = e^{-\frac{E^*}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right)}$$

$$\ln 1000 = -\frac{E^*}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right)$$

$$-\ln 1000 \cdot \frac{R}{E^*} = \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}$$

$$\frac{\ln 1000 \cdot R}{E^*} = \frac{1}{T_2}$$

$$T_2 = 308 \text{ K} \Rightarrow \Delta T = 15 \text{ K}$$

$$A \rightleftharpoons B$$

$$\Delta G^\circ = 40 \text{ kJ/mol}$$

$$T = 25^\circ\text{C} = 298 \text{ K}$$

$$K = \frac{[B]_{\text{egy}}}{[A]_{\text{egy}}}$$

$$\Delta G^\circ = -R \cdot T \cdot \ln K = -8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 298 \text{ K} \cdot \ln K$$

$$\ln K = -\frac{\Delta G^\circ}{R \cdot T}$$

$$K = e^{-\frac{\Delta G^\circ}{R \cdot T}} = e^{-\frac{-40000 \text{ J/mol}}{8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 298 \text{ K}}} = 1,027 \cdot 10^2$$

$$\Delta G = \Delta G^\circ + R \cdot T \cdot \ln Q$$

$$Q = \frac{[B]}{[A]} = 5$$

$$\Delta G = -360,125 \text{ J/mol}$$

Előadás

sejt
sejtmembrán { aktív
passzív } transport
összeköt és elhárít

kémiai potenciál (hely szerinti deriváltja erő¹⁾)

$$\mu_i = \left(\frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{T, P, n_j}$$

additivitási szabály: $G = \mu_1 \cdot n_1 + \mu_2 \cdot n_2$

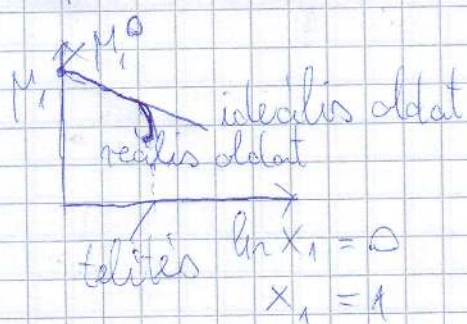
Gibbs-Duhem egyenlet: $n_1 \cdot d\mu_1 + n_2 \cdot d\mu_2 = 0$

$$\mu_1 = \mu_1^0 + R \cdot T \cdot \ln X_1$$

μ_1^0 - tiszta oldószer potenciálja

$$\mu_2 = \mu_2^0 + R \cdot T \cdot \ln X_2$$

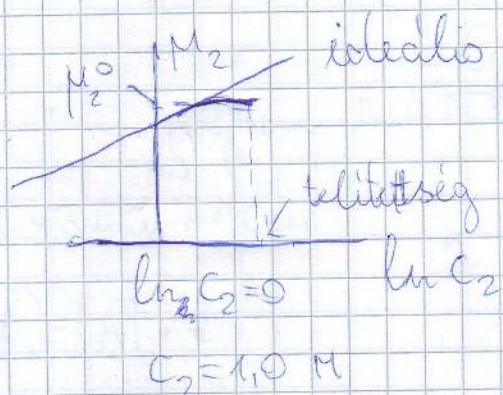
μ_2^0 - integrációs állandó



$$G_{298}^0 = -56,69 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

$$G_{298}^0 = -56,69 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

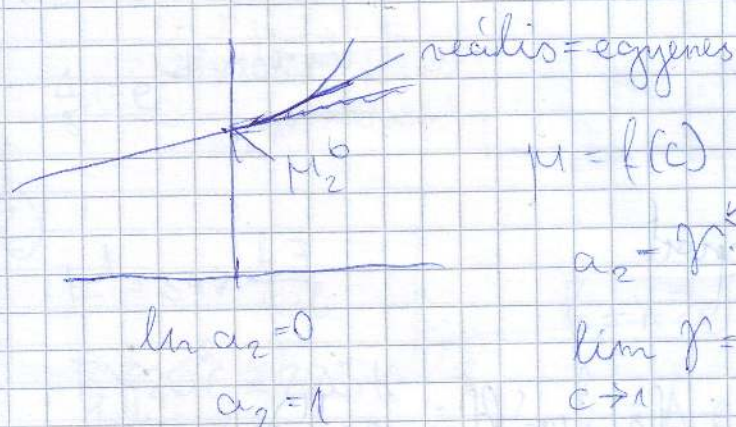
$$X_2 = \frac{n_2}{n_1 + n_2} \xrightarrow{1 \text{ l}} X_2 = \frac{C_2}{C_1 + C_2}$$



def.: a = aktivitás

$$\ln a \equiv \frac{\mu(\text{reális}) - \mu(\text{ideális})}{R \cdot T}$$

$$\mu(\text{reális}) = \mu^0(\text{ideális}) + R \cdot T \cdot \ln a$$



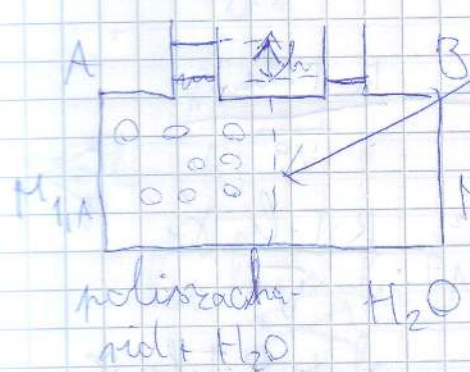
$$\mu = f(C)$$

$$a_2 = \gamma \cdot C_2$$

$$\lim_{C \rightarrow 1} \gamma = 1$$

aktivitási állandó

oszméter



légig áteresztő hártya

négyzetek számát
hossz

π oszmózisnyomás - kóhigatív tel.

$$\pi \left(\frac{\text{dim}}{\text{cm}^2} \right) = h(\text{cm}) \cdot \rho(\text{g/cm}^3) \cdot g(\text{cm/sec}^2)$$

$$1 \text{ atm} = 1,01 \cdot 10^6 \text{ dim/cm}^2$$

$$\rho_{\text{H}_2\text{O}} = 1,0 \text{ g/cm}^3$$

$$g = 980 \text{ cm/sec}^2$$

$$M = 25000 \rightarrow h = 10 \text{ cm}$$

$$M_{1,A} = M_{1,B}$$

$$M_{1,A}(P + \pi, X_{1,A}) = M_{1,A}^0(P + \pi) + R \cdot T \cdot \ln(\gamma_{1,A} \cdot X_{1,A})$$

$$M_{1,B}(P, X_{1,B}) = M_{1,B}^0(P) + R \cdot T \cdot \ln(\gamma_{1,B} \cdot X_{1,B})$$

$$X_{1,B} = 1 \leftarrow \text{B víz}$$

$$\gamma_{1,B} = 1$$

$$M_{1,A}^0(P + \pi) + R \cdot T \cdot \ln \gamma_{1,A} X_{1,A} = M_{1,B}^0(P)$$

$$M_{1,A}^0(P + \pi) - M_{1,B}^0(P) = -R \cdot T \cdot \ln X_{1,A} - R \cdot T \cdot \ln \gamma_{1,A}$$

$$\left(\frac{\partial G}{\partial P} \right)_{T,m} = V$$

$$\left(\frac{\partial G}{\partial n} \right)_{T,P} = \mu$$

$$\frac{\partial \mu}{\partial P} = \left[\frac{\partial}{\partial P} \left(\frac{\partial G}{\partial n} \right)_{T,P} \right]_{T,m} = \left[\frac{\partial}{\partial n} \left(\frac{\partial G}{\partial P} \right)_{T,m} \right]_{T,P}$$

$$= \frac{\partial}{\partial n} (V)_{T,P} = \left(\frac{\partial V}{\partial n} \right)_{T,P} = \bar{V} \text{ (parciális fajlagos térfogat)}$$

$$\frac{\partial \mu_i^0}{\partial P} = \bar{V}_i^0 \Rightarrow \boxed{\partial \mu_i^0 = \bar{V}_i^0 \cdot \partial P}$$

$$\partial \mu_i^0 = \bar{V}_i^0 \cdot \partial P \Rightarrow \mu_i^0(P + \pi) - \mu_i^0(P) = \bar{V}_i^0(P + \pi) - \bar{V}_i^0(P)$$

$$\pi = R \cdot T \cdot \sum_{i=1}^n c_i =$$

②

$$v = b \cdot [A]^n$$

$$\ln v = \ln b + n \cdot \ln [A]$$

$$n=3 \quad y = ax + b$$

$[A]$	v	$\ln [A]$	$\ln v$	$(\ln [A])^2$	$\ln [A] \cdot \ln v$
5	1,7	1,61	0,53	2,59	0,85
10	8,4	2,3	2,13	5,30	4,90
15	21,0	2,71	3,04	7,33	8,24
		6,62	5,70	15,26	14,00

$$n = \frac{n \cdot \sum \ln [A] \cdot \ln v - \sum \ln [A] \cdot \sum \ln v}{n \cdot \sum \ln [A]^2 - (\sum \ln [A])^2} = \frac{3 \cdot 14 - 6,62 \cdot 5,70}{3 \cdot 15,26 - 6,62^2} = 2,3$$

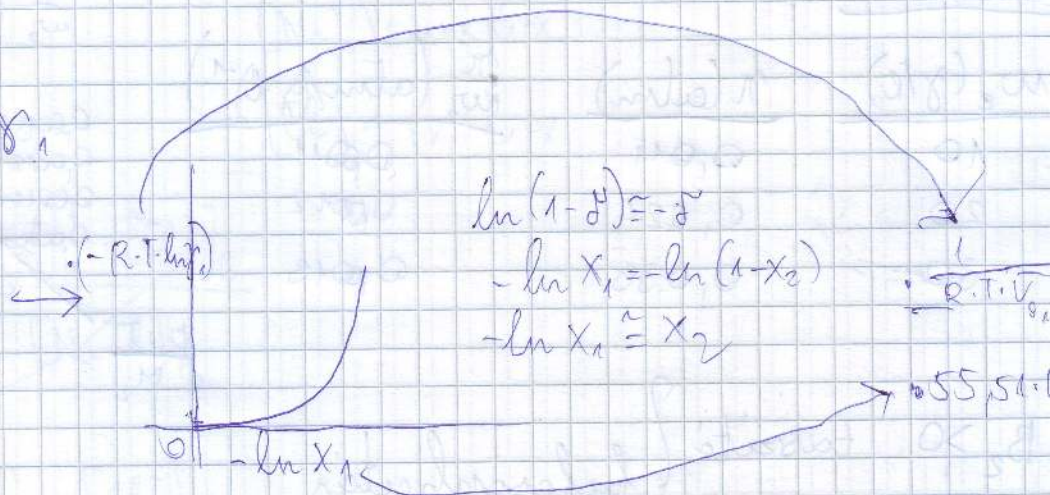
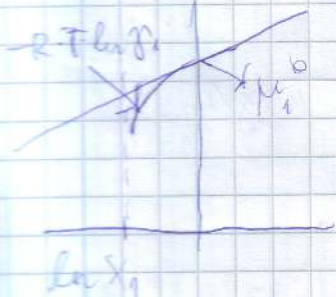
$$b = \frac{\sum \ln v \cdot \sum \ln [A]^2 - \sum \ln [A] \cdot \ln v \cdot \sum \ln [A]}{n \cdot \sum \ln [A]^2 - (\sum \ln [A])^2} = \frac{5,70 \cdot 15,26 - 14 \cdot 6,62}{3 \cdot 15,26 - 6,62^2} =$$

$$= -3,15 \quad \frac{\ln M}{S} = \frac{M_1}{M_2} = -3,15 \quad \frac{1}{\ln M_{1,5} S}$$

Előadás

oszmózis nyomái

$$\pi = \frac{R \cdot T}{M_2} - \frac{R \cdot T}{V_1} \cdot \ln \gamma_1$$



$$\ln X_1 = 55,51 M_2$$

$$X_2 \Rightarrow W_2$$

$$X_2 = \frac{n_2}{n_1 + n_2} = \frac{m_2}{m_1} = \frac{c_2}{c_1} = \frac{c_2}{55,51}$$

Taylor sor

$$-\frac{1}{V_1} \cdot \ln \gamma_1 = B_0 + B_1 \cdot w_2 + B_2 \cdot w_2^2 + \dots$$

B_0 ? $w_2 = 0$ $-\frac{1}{V_1} \cdot \ln \gamma_1 = B_0$
 mértékpont $B_0 = 0$

B_1 ? $\frac{\gamma(-\frac{1}{V_1} \cdot \ln \gamma)}{\gamma \cdot w_2} = B_1$ $B_1 = 0$
 kezdeti meredekség

$$\boxed{-\frac{1}{V_1} \cdot \ln \gamma_1 = B_2 \cdot w_2^2 + B_3 \cdot w_2^3 + \dots} \rightarrow \pi = R \cdot T \cdot \frac{w_2}{M_2} + R \cdot T \cdot (B_2 \cdot w_2^2 + B_3 \cdot w_2^3 + \dots)$$

$$\frac{\pi}{w_2} = R \cdot T \cdot \left(\frac{1}{M_2} + B \cdot w_2 \right)$$

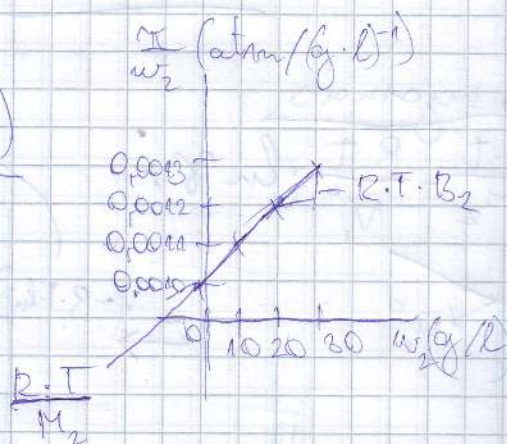
↑
 Virial biterjesztés

$\frac{1}{M_2}$ - 1. Virial együttható (molekula tömeg)

B_2 - 2. ——— (közcsinhatás)

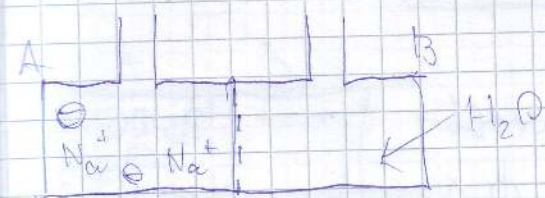
Kísérlet

w_2 (g/100)	π (atm)	$\frac{\pi}{w_2}$ (atm/(g·l) ⁻¹)
10	0,011	0,0011
20	0,024	0,0012
30	0,039	0,0013



$B_2 > 0$ taszító } közcsinhatás
 $B_2 < 0$ vonzó }

Elektrolitok - felhígítás, ionok



$$\pi = R \cdot T \cdot 2a$$

μ = kémiai potenciál ^{H₂O} NaCl

$$G = \mu_{H_2O} \cdot n_{H_2O} + \mu_{NaCl} \cdot n_{NaCl}$$

$$[P^{\ominus}] = a \quad [Na^+] = a$$

$$= \mu_{H_2O} \cdot n_{H_2O} + \mu_+ \cdot n_+ + \mu_- \cdot n_-$$

$$n_{NaCl} = n_{Na^+} = n_{Cl^-}$$

$$\mu_+ = \mu_+^{\circ} + R \cdot T \cdot \gamma_+ \cdot c_+ \quad \mu_- = \mu_-^{\circ} + R \cdot T \cdot \gamma_- \cdot c_-$$

$$\mu_{NaCl} = \mu_+ + \mu_- = \mu_+^{\circ} + \mu_-^{\circ} + R \cdot T \cdot (\ln \gamma_+ \cdot \gamma_- \cdot c_+ \cdot c_-)$$

$$\mu_{\pm}^{\circ} = \frac{\mu_+^{\circ} + \mu_-^{\circ}}{2} \quad \text{átlagos standard ion kémiai potenciál}$$

$$\gamma_{\pm}^2 = \gamma_+ \cdot \gamma_- \quad || \quad \text{ion aktivitási együtthatók}$$

$$\mu_{NaCl} = 2 \cdot \mu_{\pm}^{\circ} + R \cdot T \cdot \ln \gamma_{\pm}^2 \cdot c_+ \cdot c_-$$

$$c_+ = c_-$$

nem feltétlen igaz

korláti állapot $[NaCl] = b$ egyensúly

A	B
$[P^{\ominus}] = a$	0
$[Na^+] = a$	b
$[Cl^-] = 0$	b

A	B
$[P^{\ominus}] = a$	0
$[Na^+] = a + x$	$b - x$
$[Cl^-] = x$	$b - x$

$$K_D = \frac{[Na^+]_A \cdot [Cl^-]_A}{[NaCl]_A} = \frac{[Na^+]_B \cdot [Cl^-]_B}{[NaCl]_B}$$

$$[Na^+]_A \cdot [Cl^-]_A = [Na^+]_B \cdot [Cl^-]_B$$

$$(a+x) \cdot x = (b-x)^2$$

$$\pi = R \cdot T (a + a + x + x - (b-x) - (b-x)) = R \cdot T \cdot (2a + 4x - 2b)$$

$$\pi = R \cdot T \left(\frac{2a^2 + 2ab}{a + 2b} \right)$$

$$\boxed{b=0}$$

$$\pi = R \cdot T \cdot 2a$$

in Na^+ kalciuma betűn

$$\pi = R \cdot T (a + n \cdot ax - x - (b-x) - (b-x)) = R \cdot T \cdot (n+1) \cdot a$$

Gyakorlat

8.

$$w = 10 \text{ g/l}$$

$$M_w = 45 \text{ kDa}$$

$$T = 22^\circ\text{C}$$

$$\pi = 2,152 \cdot 10^{-2} \text{ dm}$$

$$\pi_f = R \cdot T \cdot c =$$

$$c_f = 2,22 \cdot 10^{-4} \text{ M} = \frac{w}{M}$$

$$\pi = R \cdot T \cdot \sum c$$

$$\sum c = \frac{\pi}{R \cdot T} = 8,88 \cdot 10^{-4} \text{ M}$$

$$\sum c = (n+1) \cdot c_f$$

5.



$$v = k_2 [\text{O}] \cdot [\text{O}_3]$$

$$v = \cancel{k_2} \cdot \frac{k_1}{\cancel{k_2}} [\text{O}_3] = k_1 [\text{O}_3]$$

$$k_1 [\text{O}_3] = k_2 [\text{O}] \cdot [\text{O}_3] \quad k_1 = k_2 [\text{O}] \quad [\text{O}] =$$

Előadás



Daniell-potencial

$$\Delta \phi_B$$

$$V = \frac{1}{C} \cdot C^{-1}$$

F = Faraday-convertációs faktor

1 coulombot szorítja 1 mol protonban

$$F = N_A \cdot e = 96485 \text{ C} \cdot \text{mol}^{-1}$$

↓
Avogadro szám

töltésmozgatóis elektronos térben

$$W = \text{munka} = \sum \cdot \underbrace{N_A \cdot e}_F \cdot \phi = \sum \cdot F \cdot \phi$$

$$e = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

$$\phi_B = \phi_B - \phi_A \quad \text{kisérlet: } 360 \text{ mV}$$

elektrokémiai potencial

$\bar{\mu}$

$$\bar{\mu}_+ = \left(\frac{\partial G}{\partial n_+} \right)_{T, P, n_-} = \mu_+^0 + R \cdot T \cdot \ln \gamma_+ \cdot c_+ + z \cdot F \cdot \phi$$

$$(\bar{\mu}_+)_A = (\bar{\mu}_+)_B$$

$$(\bar{\mu}_+)_B = \bar{\mu}_B^0(P) + R \cdot T \cdot \ln(\gamma_+ \cdot c_+)_B + z \cdot F \cdot \phi_B$$

$$-(\bar{\mu}_+)_A = \bar{\mu}_A^0(P) + R \cdot T \cdot \ln(\gamma_+ \cdot c_+)_A + z \cdot F \cdot \phi_A$$

$$0 = -\underbrace{\pi \cdot V_+^0}_{V_+} + R \cdot T \cdot \ln \frac{(\gamma_+ \cdot c_+)_B}{(\gamma_+ \cdot c_+)_A} + z \cdot F \cdot (\phi_B - \phi_A)$$

$$\Delta \phi_B = \phi_B - \phi_A = - \frac{R \cdot T}{z \cdot F} \cdot \ln \left[\frac{(\gamma_+ \cdot c_+)_B}{(\gamma_+ \cdot c_+)_A} \right]$$

$$\Delta \phi = - \frac{R \cdot T}{z \cdot F} \cdot \ln [(c_+)_B]$$

$$[p^{\ominus}] = a \quad a < b$$

$$[NaCl] = b$$

	A	B
$[p^{\ominus}]$	a	0

$$x = \frac{b^2}{a + 2b}$$

$[Na^+]$	$a + x$	$b - x$
----------	---------	---------

$[Cl^-]$	x	$b - x$
----------	---	---------

$$-\frac{RT}{z_2} \ln\left(\frac{b}{a+b}\right) = 0$$

Debye-Hückel elmélet

$$\kappa = \frac{z_1 \cdot z_2}{D \cdot r^2} \quad z_1, z_2 = \text{öltérsegek}$$

$$r = \text{távolság (m)}$$

$$\kappa = \kappa^4$$

D = dielektrikus állandó

E = elektromos térerő

$$E = \frac{\kappa}{z_2} = \frac{z_1 \cdot z_2}{D \cdot r^2 \cdot z_2} = \frac{z_1}{D \cdot r^2}$$

potenciál negatív deriváltja az κ^4

$$-\frac{\partial \phi}{\partial r} = E = \frac{\kappa}{z_2}$$

koncentráció: $I = \frac{1}{2} \sum c_i \cdot z_i^2$

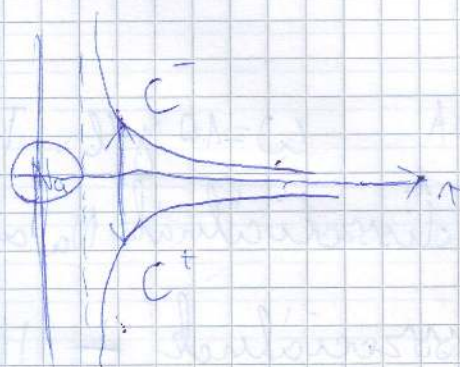
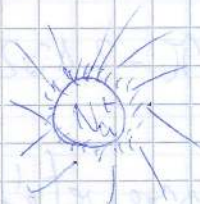
$$\bar{\mu}_{NaCl} = 2\mu_{\pm}^{\ominus} + R \cdot T \cdot \ln \gamma_{\pm}^2 \cdot c_+ \cdot c_- = 2\mu_{\pm}^{\ominus} + \underbrace{R \cdot T \cdot \ln \gamma_{\pm}^2}_{\text{Energia}} + R \cdot T \cdot \ln c_+$$

$\frac{Na^+}{Na^+}$
 $\frac{Na^+}{Cl^-}$
 $\frac{Cl^-}{Cl^-}$

$$\log \gamma_{\pm} = -0.51 \left| \frac{z_+ \cdot z_-}{z_+ + z_-} \right| \cdot I^{\frac{1}{2}}$$

1) Coulomb természetű erők dominálnak

2) ionatmoszféra



3) gömb szimmetrikus erők

4) szuperpozíció, töltésekbe töltésselasszó helyettesíthető



$$\phi_{i.a.} = \frac{z}{D \cdot r} \cdot e^{-K \cdot r}, \text{ ahol } K^2 = \frac{8 \pi N_A \cdot e^2}{1000 \cdot D \cdot \epsilon_B T} \cdot I$$

Gyakorlat

①



$$\left. \begin{aligned} \mu_A &= \mu_A^0 + R \cdot T \cdot \ln C_A \\ \mu_B &= \mu_B^0 + R \cdot T \cdot \ln C_B \end{aligned} \right\} \mu_A^0 + R \cdot T \cdot \ln C_A = \mu_B^0 + R \cdot T \cdot \ln C_B$$

$$\mu_A = \mu_B$$

$$K = \frac{[B]}{[A]} = \frac{C_B}{C_A}$$

$$\mu_A^0 - \mu_B^0 = R \cdot T \cdot \ln C_B - R \cdot T \cdot \ln C_A = R \cdot T \cdot \ln \frac{C_B}{C_A}$$

$$\ln + 2.303 \cdot \lg = -13.800 \frac{1}{K} \cdot \lg$$

$$\ln K = \frac{-178000 \text{ J/mol}}{R \cdot T}$$

$$K = e^{\frac{178000 \text{ J/mol}}{8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 310 \text{ K}}} \approx 10^{-3}$$

②

$$M_w = 45 \text{ kDa} \quad \omega = 10 \text{ g/l} \quad T = 22^\circ\text{C} \quad \pi = 2,132 \cdot 10^{-2} \text{ atm}$$

2 eset $\left\{ \begin{array}{l} \text{nem disszociálnak Na atomok} \\ \text{disszociálnak} \end{array} \right\}$ disszociáció

$$\pi_f = R \cdot T \cdot c_f \quad c_f = a = \frac{10 \text{ g/l}}{45000 \text{ g/mol}} = 2,22 \cdot 10^{-4} \text{ M} \quad \left. \vphantom{\frac{10 \text{ g/l}}{45000 \text{ g/mol}}} \right\} 1.$$

$$\pi_f = 5,383 \cdot 10^{-3} \text{ atm}$$

$$\frac{\pi}{\pi_f} = 4 \rightarrow 3 \text{ Na}^+ \text{ disszociál}$$

$$\pi = R \cdot T \cdot \ln \left(\sum_i^A c_i - \sum_i^B c_i \right) = R \cdot T \cdot \left(\frac{n \cdot (n+1) \cdot a^2 + 2al}{na + 2l} \right) = 5,404 \cdot 10^{-3}$$

$$\approx R \cdot T \cdot a$$