

Képletgyűjtemény a Kémiai számítások c. tárgy vizsgazárthelyijéhez

1. Koncentrációsámítás:

$\% = 10^{-2}$, $\text{‰} = 10^{-3}$, $\text{‰‰} = 10^{-4}$, ..., ppm = 10^{-6} , ppb = 10^{-9} , ppt = 10^{-12} , ...

(w/w), (v/v), (n/n) koncentrációk, vizes híg oldatokra gyakran: mg/L = ppm

mól/L = M = "molaritás" koncentráció

mól/kg oldószer = c_R = „molalitás” koncentráció

$$\text{Anyagmérleg: } c_1 \cdot m_1 + c_2 \cdot m_2 = (m_1 + m_2) \cdot c_{\text{eredő}}$$

2. Gáztörvények:

egyesített gáztörvény: $p \cdot V = n \cdot R \cdot T$ ahol $R = 8,314 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mól}^{-1}$

Boyle-Mariotte törvény: $p_1 \cdot V_1 = p_2 \cdot V_2$ ($T =$ állandó)

Gay-Lussac (vagy Charles) törvények: $p_1/T_1 = p_2/T_2$ ($V =$ állandó)

$$V_1/T_1 = V_2/T_2$$
 ($p =$ állandó)

parciális nyomás: $p_i \cdot V_{\text{összes}} = n_i \cdot R \cdot T$ $p_1 + p_2 + p_3 + \dots + p_n = p_{\text{összes}}$ (n komponensű gázban)

parciális térfogat: $p_{\text{összes}} \cdot V_i = n_i \cdot R \cdot T$ $V_1 + V_2 + V_3 + \dots + V_n = V_{\text{összes}}$

3. Híg oldatok törvényei:

Kolligatív sajátságok = részecskeszámától függenek (sók, erős savak-bázisok vizes oldatban teljes mértékben disszociálnak! ϕ)

fagyáspontcsökkenés: $\Delta T/c_R = \Delta T_M/1$ ahol ΔT_M a 'molális' fagyáspontcsökkenés, c_R = egységnyi koncentrációjú oldat fagyáspontcsökkenése.

ozmózisnyomás: $\pi = c \cdot R \cdot T$ (mértékegységek! $[T] = \text{K}$ itt is, s ha $[\pi] = \text{kPa}$, akkor $[c] = \text{mól/L}$)

Henry-törvény: $p_{\text{gáz}}[\text{N/m}^2] = k_H[\text{J/mól}] \cdot c_{\text{gáz a folyadékban}}[\text{mól/m}^3]$ ahol célszerűen $[k_H] = \text{J/mól}$

megoszlási hányados v. állandó: $k = c_1/c_2$

Megoszlási feladatok (folyadék-folyadék, vagy gáz-folyadék), **anyagmérleg**:

„a kezdeti, első fázisban lévő anyag = az első fázisban maradó anyag + az új fázisba átjutott anyag”

azaz: $c_0 \cdot V_{\text{folyadék-1}} = c_1 \cdot V_{\text{folyadék-1}} + k \cdot c_1 \cdot V_{\text{folyadék-2}}$ amelyet megismételve:

$c_1 \cdot V_{\text{folyadék-1}} = c_2 \cdot V_{\text{folyadék-1}} + k \cdot c_2 \cdot V_{\text{folyadék-2}}$ amelybe az előzőből c_1 -t behelyettesítve:

$$c_2 = c_1 \cdot \frac{V_{\text{folyadék-1}}}{V_{\text{folyadék-1}} + k \cdot V_{\text{folyadék-2}}} = c_0 \cdot \left(\frac{V_{\text{folyadék-1}}}{V_{\text{folyadék-1}} + k \cdot V_{\text{folyadék-2}}} \right)^2$$

s ezt n -szer megismételve:

$$c_n = c_0 \cdot \left(\frac{V_{\text{folyadék-1}}}{V_{\text{folyadék-1}} + k \cdot V_{\text{folyadék-2}}} \right)^n$$

Ugyanígy felírható az **anyagmérleg a gáz-folyadék megoszlásra** is (p a kimosandó komponens parciális nyomása):

$p_0 \cdot V_{\text{gáz}}/R \cdot T = p_1 \cdot V_{\text{gáz}}/RT + V_{\text{folyadék}} : p_1/k_H$ amelyet megismételve:

$p_1 \cdot V_{\text{gáz}}/R \cdot T = p_2 \cdot V_{\text{gáz}}/RT + V_{\text{folyadék}} : p_2/k_H$ s ezt n -szer megismételve:

$$p_n = p_0 \cdot \left(\frac{V_{\text{gáz}}/RT}{V_{\text{gáz}}/RT + V_{\text{folyadék}}/k_H} \right)^n$$

4. Keménységi fok: $1 \text{ nk}^\circ = 10 \text{ mg CaO}$ -val egyenértékű oldott Ca- és Mg-só egy liter vízben. ($10 \text{ mg CaO} = 0,1786 \text{ millimól}$)

5. Termokémia: $\Delta H_{\text{reakció}} + \alpha \cdot A + \beta \cdot B + \dots = \nu \cdot N + \mu \cdot M + \dots$ ahol $A, B, \dots N, M, \dots$ az illető vegyületek előjeles képződéshői.

m tömegű anyag hőmérsékletét ΔT -vel megváltoztatva az energiaváltozás: $Q = c \cdot m \cdot \Delta T$;

Gázok esetében a beslő energia megváltozása pl. állandó nyomáson történő térfogati munkavégzés esetén $\Delta U = \Delta H - p \cdot \Delta V$, ahol

az entalpia változása $\Delta H = C_p \cdot m \cdot \Delta T$ (állandó nyomás), illetve

a belső energia megváltozása: $\Delta U = C_v \cdot m \cdot \Delta T$ (állandó a térfogat)

$C_p = C_v + R$ és $C_p = (f/2) \cdot R \rightarrow f =$ szabadsági fokok száma = 3 egyatomos gázban, 5 lineáris molekulájú gázban; 6 általános kiterjedésű gázmolekula esetén.

6. pH = $-\lg[H^+]$ ill. **pOH** = $-\lg[OH^-]$ ahol $[H^+]$ vagy a $[OH^-]$ = a ténylegesen az oldatban lévő hidrogén(hidroxónium)- vagy hidroxid-ion koncentráció mól/L egységben.

(Erős savak és bázisok teljes mértékben disszociálnak. Az erős savakból és bázisokból keletkező teljes sók (NaCl, Na₂SO₄, CaCl₂, stb.) oldatainak pH-ja semleges.)

7. Egyensúlyi állandó egy $\alpha \cdot A + \beta \cdot B + \dots \leftrightarrow \nu \cdot N + \mu \cdot M + \dots$ egyensúlyi reakcióra:

$$K_p = \frac{\left[\frac{p_{CO}}{p_0} \right] \cdot \left[\frac{p_{O_2}}{p_0} \right]^{1/2}}{\left[\frac{p_{CO_2}}{p_0} \right]}$$

$$K = \frac{[M]^\mu \cdot [N]^\nu \cdot [L]^\lambda \cdot \dots}{[A]^\alpha \cdot [B]^\beta \cdot [C]^\gamma \cdot \dots}$$

ahol pl. $[D]$ = egy D nevű komponens egyensúlyi (ténylegesen és állandósultan jelen lévő) koncentrációja, móltörtje, mólszáma, standard nyomásra vonatkoztatott parciális nyomása (= p_D/p_0) az elegyben.

Pl. $CO_2 \leftrightarrow CO + \frac{1}{2} O_2$ egyensúlyi gázreakcióra a **nyomásokkal kifejezett**

K_p egyensúlyi állandó ↑. Vagy a $CH_3COOH \leftrightarrow CH_3COO^- + H^+$ **gyenge sav disszociációjára** a

koncentrációkkal kifejezett K_d disszociációs egyensúlyi állandó: $K_d = \frac{[CH_3COO^-] \cdot [H^+]}{[CH_3COOH]}$ Ennek

segítségével az egyensúlyi anion és az egyensúlyi gyenge sav koncentrációjából a $[H^+]$ és így a pH kiszámítható, ha K_d adott. Hasonlóan járunk el gyenge bázis esetében: a pOH-t számíthatjuk ki így.

Pufferoldatok: gyenge sav + ezen gyenge sav erős bázissal képezett sója, ill. gyenge bázis és ezen gyenge bázis erős savval képezett sója ugyanabban az oldatban. (A sóból képződő anionok adják jó közelítéssel a "sókoncentráció"-t, pl. a $[CH_3COO^-]$ -t)

Heterogén egyensúlyok: a különálló, egységes fázis koncentrációját a K -ban beszámítjuk. Pl. oldhatósági szorzat $Mg(OH)_2$ -ra: $Mg(OH)_2 \leftrightarrow Mg^{2+} + 2 OH^-$ ahol az oldódó $Mg(OH)_2$ különálló, szilárd fázisban van. Ezért ill "oldhatósági szorzatot" adunk meg:

$$K_{oldás} = \frac{[Mg^{2+}] \cdot [OH^-]^2}{[Mg(OH)_2]} \rightarrow L_{Mg(OH)_2} = [Mg^{2+}] \cdot [OH^-]^2$$

Ehhez hasonlóan adódik a víz "ionszorzata" is, a víz kb. állandó koncentrációját az egyensúlyi állandóba olvasztva: $L = 10^{-14}$ kb. szobahőmérsékleten, ezért itt $pH + pOH = 14$.

8. Nernst-egyenlet, elektródpotenciál: $\varepsilon = \varepsilon^0 + \frac{R \cdot T}{z \cdot F} \ln \frac{[ox]}{[red]} = \varepsilon^0 + \frac{0,0592}{z} \lg \frac{[ox]}{[red]}$, amelyből ha a

redukált forma pl. tiszta Me fém, amelyből z db elektron leadásával Me^{z+} ionok lesznek az oldatban:

$$\varepsilon = \varepsilon^0 + \frac{0,0592}{z} \lg [Me^{z+}]$$

(pl. klórgázelektrodnál az oxidált forma van oldatban, ezért: $\varepsilon_{Cl_2/Cl^-} = \varepsilon_{Cl}^0 - 0,0592 \lg [Cl^-]$!!)

Galvánelem elektromotoros ereje: $EME = e_{elektrod1} - e_{elektrod2}$, ha $EME = 0 \rightarrow e_{elektrod1} = e_{elektrod2}$. Ebből az elektródreakcióhoz rendelhető redoxreakció egyensúlyi állandója kiszámolható.

Koncentrációs elem: az elektródok ugyanazok, csak az oldatok koncentrációi különböznek. Elektromotoros ereje $\rightarrow \rightarrow \rightarrow$

$$EME = \frac{0,0592}{z} \lg \frac{c_1}{c_2}$$

Redoxi-elektrod: semleges anyagú elektród mellett kétfajta oxidációs állapotú anyag is jelen van. Pl. $Fe^{2+} \leftrightarrow Fe^{3+} + e^- \rightarrow$

$$\varepsilon = \varepsilon_{Fe^{2+}/Fe^{3+}}^0 + \frac{0,0592}{1} \lg \frac{[Fe^{3+}]}{[Fe^{2+}]}$$

9. Faraday törvény: egy mólnyi, z töltésű ion semlegítéséhez z mól elektronra van szükség. 1 mól $e^- = 96500 C = 26,8 Ah$ töltést jelent. (Pl. 1 mól Cu^{2+} fém rézzé redukálásánál $z=2$, vagy 1 mól Cl^- -ionból $\frac{1}{2}$ mól Cl_2 előállításánál $z=1$.)

x-x-x-x