

Seznam vztahů pro předmět Fyzikální chemie I (N403011)

Pro použití na cvičení a při zápočtových testech v Mostu-Velebudicích. Seznam není povolen při zkuškové písemce!

Konstanty

$$R = 8,314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1} \quad N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1} \quad F = 96\,485 \text{ C mol}^{-1} \quad p^{\text{st}} = 101,325 \text{ kPa}$$

Koeficienty

$$\begin{aligned} \text{izobarické roztažnosti: } \alpha_p &= \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p & \text{izotermické stlačitelnosti: } \kappa_T &= -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T \\ \text{izochorické rozpínivosti: } \beta_V &= \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V & \text{kompresibilitní faktor: } z &= \frac{pV}{nRT} \end{aligned}$$

Stavové rovnice

$$\text{ideální plyn: } pV = nRT \quad \text{van der Waals: } \left(p + \frac{a}{V_m^2} \right) (V_m - b) = RT$$

Poissonovy rovnice

$$pV^\kappa = \text{const} \quad \kappa = \frac{C_{pm}}{C_{Vm}}$$

Termodynamika

$$\text{objemová práce: } dW = -p_{\text{vn}} dV \quad \text{1. věta: } dU = dQ + dW$$

$$\text{2. věta: } dS = \frac{dQ}{T} \text{ (vratně), } dS > \frac{dQ}{T} \text{ (nevratně)}$$

$$\text{entalpie: } H = U + pV \quad \text{Helmholtzova energie: } F = U - TS \quad \text{Gibbsova energie: } G = U + pV - TS$$

$$\text{Gibbsovy rovnice: } dU = TdS - pdV, \quad dH = TdS + Vdp, \quad dF = -SdT - pdV, \quad dG = -SdT + Vdp$$

$$\text{Výpočet entropie: } dS = \frac{C_V}{T} dT + \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V dV, \quad dS = \frac{C_p}{T} dT - \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p dp$$

Směsi

$$\text{směšovací veličiny: } Y^M = Y_m - \sum_{i=1}^k x_i Y_{mi}^\bullet \quad [p, T] \quad \text{dodatkové veličiny: } Y^E = Y_m - Y_m^{\text{id. směs}} \quad [p, T]$$

$$Y_m^{\text{id. směs}} = \begin{cases} \sum_i Y_{mi}^\bullet & \text{pro } Y = U, H, C \\ \sum_i Y_{mi}^\bullet + RT \sum_i x_i \ln x_i & \text{pro } Y = G, F \\ \sum_i Y_{mi}^\bullet - R \sum_i x_i \ln x_i & \text{pro } Y = S \end{cases} \quad [p, T]$$

$$\text{parciální molární veličiny: } \bar{Y}_i = \left(\frac{\partial Y}{\partial n_i} \right)_{T, p, n_{j \neq i}} \quad \text{Euler: } Y = \sum_i n_i \bar{Y}_i \quad \text{chemický potenciál: } \mu_i = \bar{G}_i$$

Aktivita a standardní stavy

$$\mu_i = \mu_i^\ominus + RT \ln a_i$$

stav	aktivita	$\gamma, \phi = 1$ pro
id. plyn při p^{st}	$a_i^\circ = \frac{p_i}{p^{\text{st}}} \phi = \frac{x_i p}{p^{\text{st}}} \phi$	$p_i \rightarrow 0$
čistá látka	$a_i^\bullet = x_i \gamma_i^\bullet$	$x_i \rightarrow 1$

nekonečné zředění	$a_i^{[x]} = x_i \gamma_i^{[x]}$	$x_i \rightarrow 0$
	$a_i^{[c]} = \frac{c_i}{c^{\text{st}}} \gamma_i^{[c]}$	$c_i \rightarrow 0$
	$a_i^{[m]} = \frac{m_i}{m^{\text{st}}} \gamma_i^{[m]}$	$m_i \rightarrow 0$

Gibbsovo fázové pravidlo

$$v = k - f + 2 - C$$

počet stupňů volnosti počet složek počet fází počet vazných podmínek

Jednosložkové rovnováhy

Clapeyron: $\left(\frac{dp}{dT}\right)_{\text{fáz. rovn.}} = \frac{\Delta_{\text{fáz}} H_m}{T \Delta_{\text{fáz}} V_m}$ Clausius-Clapeyron: $\frac{d \ln p^s}{dT} = \frac{\Delta_{\text{výp}} H_m}{RT^2}$ Antoine: $\ln p^s = A - \frac{B}{T + C}$

VLE směsi

Raoult (id. směs): $p_i = p y_i = x_i p_i^s$ Dalton: $p = \sum_i p_i$ nemísitelné kapaliny: $p_i = p_i^s$

Henryho zákon

$$p_2 = K_H x_2 \quad (1)=\text{rozpouštědlo}, (2)=\text{rozpuštěný plyn}$$

Chemická rovnováha

$$K = \exp\left(-\frac{\Delta_r G_m^\ominus}{RT}\right) = \prod_{i=1}^k a_i^{\nu_i} \quad \left(= \frac{\text{produkty}}{\text{výchozí látky}}\right)$$

van't Hoff: $\frac{d \ln K}{dT} = \frac{\Delta_r H_m^\ominus}{RT^2}$

Faradayův zákon

$$Q = znF$$

Nernstova rovnice

$$A + B \rightleftharpoons C + D : \quad E = E^\ominus - \frac{RT}{zF} \ln \frac{a_C a_D}{a_A a_B}$$

Kinetika

$$r = \frac{1}{\nu_i} \frac{dc_i}{d\tau} = k c_A^\alpha c_B^\beta \dots \quad n = \alpha + \beta + \dots \quad \text{Arrhenius: } k = A \exp\left(-\frac{E^*}{RT}\right)$$