

## Képletgyűjtemény

A könyv szövegében jellemzően csak a számmal jelzett alap-képletek találhatók meg, mint pl. az (1.11) egyenlet. Itt azonban több származtatott képletet is megadok, mint pl. az (1.11a-c) egyenleteket, amelyek számozása az alapképlet számozásától egy-egy kisbetűben különbözik. Ezen származtatott képleteket az alapképletekből feltehetőleg az Olvasó is ki tudja következtetni, ezeket itt a „biztonság kedvéért” adom meg, illetve azért, hogy ez a könyv kézikönyvként is hasznos legyen és minden elképzelhető képletet tartalmazzon anélkül, hogy a rengeteg képlet olvashatatlanná tenné a tankönyv szövegét.

### Képletgyűjtemény az 1. fejezethez

Az átmérő és a sugár közötti kapcsolat:

$$d \equiv 2 \cdot r \quad (1.1)$$

A kör átmérője és kerülete közötti kapcsolat:

$$c_{\text{kör}} = \pi \cdot d_{\text{kör}} \quad (1.2)$$

A felület és a hossz közötti formális kapcsolat:

$$A = L^2 \quad (1.3)$$

A kör alapterülete és sugara közötti konkrét kapcsolat:

$$A_{\text{kör}} = \pi \cdot r_{\text{kör}}^2 \quad (1.4)$$

A felület és az azt alkotó egységek saját felülete közötti kapcsolat:

$$A = \frac{A_{\text{saját}}}{f_s} \quad (1.5)$$

A gömb felülete és sugara közötti kapcsolat:

$$A_{\text{gömb}} = 4 \cdot \pi \cdot r_{\text{gömb}}^2 \quad (1.6)$$

A térfogat, a hossz és az alapterület közötti lehetséges formális kapcsolatok:

$$V = L^3 \quad (1.7)$$

$$V = A^{3/2} \quad (1.8)$$

$$V = L \cdot A \quad (1.8a)$$

A gömb térfogata és sugara közötti kapcsolat:

$$V_{\text{gömb}} = \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r_{\text{gömb}}^3 \quad (1.9)$$

A por térfogata és a port alkotó szemcsék saját térfogata közötti kapcsolat (ugyanaz igaz egy fázis és az atomok saját térfogata közötti kapcsolatra):

$$V_{\text{por}} = \frac{V_{\text{szemcsék}}}{f_b} \quad (1.10)$$

$$V_{\text{fázis}} = \frac{V_{\text{atomok}}}{f_b} \quad (1.10a)$$

Az atomok száma és az anyagmennyiség közötti kapcsolat:

$$N_a = N_{Av} \cdot n \quad (1.11)$$

$$N_{a,i} = N_{Av} \cdot n_i \quad (1.11a)$$

$$N_{a,\Phi} = N_{Av} \cdot n_\Phi \quad (1.11b)$$

$$N_{a,i(\Phi)} = N_{Av} \cdot n_{i(\Phi)} \quad (1.11c)$$

A tömeg és az anyagmennyiség közötti kapcsolat:

$$m = M \cdot n \quad (1.12)$$

$$m_i = M_i \cdot n_i \quad (1.12a)$$

$$m_\Phi = M_\Phi \cdot n_\Phi \quad (1.12b)$$

$$m_{i(\Phi)} = M_i \cdot n_{i(\Phi)} \quad (1.12c)$$

A sűrűség definíciói:

$$\rho \equiv \frac{m}{V} \quad (1.3)$$

$$\rho_\Phi \equiv \frac{m_\Phi}{V_{ab,\Phi}} \quad (1.13a)$$

A por átlagos sűrűsége és a port alkotó szemcsék saját sűrűsége közötti összefüggés:

$$\rho_{por} = f_b \cdot \rho_{szemcsék} \quad (1.14)$$

A  $\Phi$  fázis integrális moláris térfogatának definíciója és számítási módjai:

$$V_\Phi \equiv \frac{V_{ab,\Phi}}{n_\Phi} \quad (1.15)$$

$$V_\Phi = \frac{M_\Phi}{\rho_\Phi} \quad (1.16)$$

$$V_\Phi = \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r_a^3 \cdot \frac{N_{Av}}{f_b} \quad (1.17)$$

A moláris felület definíciója és számítási módjai:

$$A_\Phi \equiv \frac{A_{ab,\Phi}}{n_{s,\Phi}} \quad (1.18)$$

$$A_\Phi = \pi \cdot r_a^2 \cdot \frac{N_{Av}}{f_s} \quad (1.19)$$

$$A_\Phi = f \cdot V_\Phi^{2/3} \cdot N_{Av}^{2/3} \quad (1.20)$$

$$f_m = 1,21 \cdot f_b^{2/3} / f_s \quad (1.20a)$$

A fajlagos felület definíciója és számítási módjai:

$$A_{s,\Phi} \equiv \frac{A_{ab,\Phi}}{V_{ab,\Phi}} \quad (1.21)$$

$$A_{s,gömb} = \frac{3}{r_{gömb}} \quad (1.22)$$

A tömegegységre definiált fajlagos felület és a fajlagos felület kapcsolata:

$$A_{s,m,\Phi} \equiv \frac{A_{ab,\Phi}}{m_\Phi} \quad (1.23)$$

$$A_{s,\Phi} = A_{s,m,\Phi} \cdot \rho_{\Phi} \quad (1.24)$$

Egy folyamat sebessége és gyorsulása:

$$v \equiv \frac{\Delta n}{\Delta t} \quad (1.25)$$

$$a \equiv \frac{\Delta v}{\Delta t} \quad (1.26)$$

Az erő definíciója:

$$F \equiv m \cdot a \quad (1.27)$$

A tömegvonzás törvénye:

$$F_g = g^* \cdot \frac{m_1 \cdot m}{L^2} \quad (1.28)$$

A súlyerő számítása:

$$F_g = m \cdot g \quad (1.28a)$$

ahol 
$$g \equiv g^* \cdot \frac{m_1}{L^2} \quad (1.28b)$$

A nyomás definíciója és a súlyerőből származó nyomás számítási képlete:

$$p \equiv \frac{F}{A} \quad (1.29)$$

$$p_g = \frac{m \cdot g}{A} \quad (1.29a)$$

A  $h$  vastagságú,  $\rho$  sűrűségű folyadékréteg nyomása gravitációs térben külső nyomás nélkül és külső  $p^o$  nyomással:

$$p_g = \rho \cdot g \cdot h \quad (1.30)$$

$$p_g = p^o + \rho \cdot g \cdot h \quad (1.30a)$$

A munka és a térfogati munka definíciói:

$$\Delta W \equiv F \cdot \Delta L \quad (1.31)$$

$$\Delta W = p \cdot \Delta V \quad (1.31a)$$

A teljesítmény definíciója:

$$P \equiv \frac{\Delta W}{\Delta t} \quad (1.32)$$

A helyzeti energia és egy súly ereszkedéséből nyerhető munka:

$$E_h = m \cdot g \cdot h \quad (1.33)$$

$$\Delta W = m \cdot g \cdot \Delta h \quad (1.33a)$$

A moláris Gibbs energia, belső energia, entalpia és entrópia definíciói:

$$G_{\Phi} \equiv \frac{G_{ab,\Phi}}{n_{\Phi}} \quad (1.34)$$

$$U_{\Phi} \equiv \frac{U_{ab,\Phi}}{n_{\Phi}} \quad (1.34a)$$

$$H_{\Phi} \equiv \frac{H_{ab,\Phi}}{n_{\Phi}} \quad (1.34b)$$

$$S_{\Phi} \equiv \frac{S_{ab,\Phi}}{n_{\Phi}} \quad (1.34c)$$

Az Ampere-törvény (két, végtelen hosszú vezető között fellépő mágneses erő):

$$\frac{F_m}{L} = \frac{\mu_o}{2 \cdot \pi} \cdot \frac{I_1 \cdot I_2}{d} \quad (1.35a)$$

A Coulomb-törvény (két, pontszerű töltés között fellépő elektromos erő):

$$F_e = \frac{1}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_o} \cdot \frac{Q_1 \cdot Q_2}{L^2} \quad (1.35b)$$

Az elektromos konstans, a mágneses konstans és a fénysebesség kapcsolata:

$$\epsilon_o \equiv \frac{1}{\mu_o \cdot v_{\infty}^2} \quad (1.35c)$$

Az elektromos töltés definíciója:

$$Q \equiv I \cdot t \quad (1.36)$$

A potenciálkülönbség, az elektromos ellenállás és a fajlagos elektromos ellenállás definíciói:

$$\Delta E \equiv \frac{\Delta G}{Q} \quad (1.37)$$

$$R^* \equiv \frac{\Delta E}{I} \quad (1.38)$$

$$\rho^* \equiv R^* \cdot \frac{A}{L} \quad (1.39)$$

Faraday törvénye (az elektrokémiailag leválasztható anyagmennyiség):

$$n = \frac{I \cdot t}{z \cdot F} \quad (1.40)$$

Egy izotóp moláris tömege:

$$M_{E-Y} = N_{Av} \cdot [Z \cdot (m_p + m_e) + Z_n \cdot m_n + Y \cdot \Delta m] \quad (1.41)$$

$$\Delta m = \frac{\Delta E_i}{v_{\infty}^2} \quad (1.42)$$

$$M_{E-Y} = N_{Av} \cdot Y \cdot u \quad (1.43)$$

Egy elem átlagos moláris tömege:

$$M_E = \sum_Y x_{E-Y} \cdot M_{E-Y} \quad (1.44)$$

$$M_E \cong -1,57 + 2,14 \cdot Z + 0,00491 \cdot Z^2 \quad (1.45)$$

$$M_E \cong \frac{\sum_Y \tau_{E-Y} \cdot M_{E-Y}}{\sum_Y \tau_{E-Y}} \quad (1.46)$$

## Képletgyűjtemény a 2. fejezethez

A  $\Phi$  fázis és az azt alkotó komponensek tömege, anyagmennyisége és térfogata közötti összefüggések:

$$n_{\Phi} = \sum_i n_{i(\Phi)} \quad (2.1)$$

$$m_{\Phi} = \sum_i m_{i(\Phi)} \quad (2.1a)$$

$$V_{ab,\Phi} = \sum_i V_{ab,i(\Phi)} \quad (2.1b)$$

Fenti egyenletek kétkomponensű  $\Phi$  fázisra:

$$n_{\Phi} = n_{A(\Phi)} + n_{B(\Phi)} \quad (2.1c)$$

$$m_{\Phi} = m_{A(\Phi)} + m_{B(\Phi)} \quad (2.1d)$$

$$V_{ab,\Phi} = V_{ab,A(\Phi)} + V_{ab,B(\Phi)} \quad (2.1e)$$

A  $i$  komponens móltörtje egy  $\Phi$  fázisban:

$$x_{i(\Phi)} \equiv \frac{n_{i(\Phi)}}{n_{\Phi}} \quad (2.2)$$

Az  $i$  komponens tömegszázaléka egy  $\Phi$  fázisban (definíció és átszámítás móltörtbe, illetve vissza):

$$C_{i(\Phi)}^{m\%m} \equiv 100 \cdot \frac{m_{i(\Phi)}}{\sum_i m_{i(\Phi)}} = 100 \cdot \frac{m_{i(\Phi)}}{m_{\Phi}} \quad (M2.1) \quad (2.2a)$$

$$x_{i(\Phi)} = \frac{C_{i(\Phi)}^{m\%m} / M_i}{\sum_i C_{i(\Phi)}^{m\%m} / M_i} \quad (M2.2) \quad (2.2b)$$

$$C_{i(\Phi)}^{m\%m} = 100 \cdot \frac{x_{i(\Phi)} \cdot M_i}{\sum_i x_{i(\Phi)} \cdot M_i} \quad (M2.3) \quad (2.2c)$$

Az  $i$  komponens molaritása egy  $\Phi$  fázisban (definíció és átszámítás móltörtbe, illetve vissza):

$$C_{i(\Phi)}^{n/V} \equiv \frac{n_{i(\Phi)}}{V_{ab,\Phi}} \quad (M2.4) \quad (2.2d)$$

$$x_{i(\Phi)} = \frac{C_{i(\Phi)}^{n/V}}{\sum_i C_{i(\Phi)}^{n/V}} \quad (M2.5) \quad (2.2e)$$

$$x_{i(\Phi)} = C_{i(\Phi)}^{n/V} \cdot V_{\Phi} \quad (M2.6) \quad (2.2f)$$

$$C_{i(\Phi)}^{n/V} = \frac{x_{i(\Phi)}}{V_{\Phi}} \quad (M2.7) \quad (2.2g)$$

Az összes komponens móltörtjeinek és tömegszázalékainak összege egy  $\Phi$  fázisban:

$$\sum_i x_{i(\Phi)} = 1 \quad (2.3)$$

$$\sum_i C_{i(\Phi)}^{m\%m} = 100 \quad (2.3a)$$

Fenti egyenletek kétkomponensű  $\Phi$  fázisra:

$$x_{A(\Phi)} + x_{B(\Phi)} = 1 \quad (2.3b)$$

$$C_{A(\Phi)}^{m\%m} + C_{B(\Phi)}^{m\%m} = 100 \quad (2.3c)$$

A rendszer és az azt alkotó fázisok anyagmennyisége, tömege és térfogata közötti összefüggések:

$$n = \sum_{\Phi} n_{\Phi} \quad (2.4)$$

$$m = \sum_{\Phi} m_{\Phi} \quad (2.4a)$$

$$V = \sum_{\Phi} V_{ab,\Phi} \quad (2.4b)$$

Fenti egyenletek kétfázisú rendszerre:

$$n = n_{\alpha} + n_{\beta} \quad (2.4c)$$

$$m = m_{\alpha} + m_{\beta} \quad (2.4d)$$

$$V = V_{ab,\alpha} + V_{ab,\beta} \quad (2.4e)$$

A fázisarány definíciója:

$$y_{\Phi} \equiv \frac{n_{\Phi}}{n} \quad (2.5)$$

A térfogatarány definíciója és átszámítása fázisarányba és vissza:

$$\phi_{\Phi} \equiv \frac{V_{ab,\Phi}}{V} \quad (M2.8) \quad (2.5a)$$

$$\phi_{\Phi} = \frac{y_{\Phi} \cdot V_{\Phi}}{\sum_{\Phi} y_{\Phi} \cdot V_{\Phi}} \quad (M2.9) \quad (2.5b)$$

$$y_{\Phi} = \frac{\phi_{\Phi} / V_{\Phi}}{\sum_{\Phi} \phi_{\Phi} / V_{\Phi}} \quad (M2.10) \quad (2.5c)$$

A rendszert alkotó fázisok fázisarányainak és térfogatarányainak összege:

$$\sum_{\Phi} y_{\Phi} = 1 \quad (2.6)$$

$$\sum_{\Phi} \phi_{\Phi} = 1 \quad (2.6a)$$

A fenti egyenletek, ha a rendszerben két fázis van:

$$y_{\alpha} + y_{\beta} = 1 \quad (2.6b)$$

$$\phi_{\alpha} + \phi_{\beta} = 1 \quad (2.6c)$$

A rendszerben lévő  $i$  komponens teljes anyagmennyisége, tömege és térfogata:

$$n_i = \sum_{\Phi} n_{i(\Phi)} \quad (2.7)$$

$$m_i = \sum_{\Phi} m_{i(\Phi)} \quad (2.7a)$$

$$V_{ab,i} = \sum_{\Phi} V_{ab,i(\Phi)} \quad (2.7b)$$

A fenti egyenletek, ha a rendszerben csak két fázis van:

$$n_i = n_{i(\alpha)} + n_{i(\beta)} \quad (2.7c)$$

$$m_i = m_{i(\alpha)} + m_{i(\beta)} \quad (2.7d)$$

$$V_{ab,i} = V_{ab,i(\alpha)} + V_{ab,i(\beta)} \quad (2.7e)$$

A rendszerben lévő  $i$  komponens átlagos móltörtjének definíciója:

$$x_i \equiv \frac{n_i}{n} \quad (2.8)$$

A rendszerben lévő  $i$  komponens átlagos tömegszázaléka (definíció és átszámítás móltörtbe, illetve vissza):

$$C_i^{m\%m} \equiv 100 \cdot \frac{m_i}{\sum_{\Phi} m_{i(\Phi)}} = 100 \cdot \frac{m_i}{m} \quad (2.8a)$$

$$x_i = \frac{C_i^{m\%m} / M_i}{\sum_i C_i^{m\%m} / M_i} \quad (2.8b)$$

$$C_i^{m\%m} = 100 \cdot \frac{x_i \cdot M_i}{\sum_i x_i \cdot M_i} \quad (2.8c)$$

A rendszerben lévő komponensek átlagos koncentrációi közötti összefüggések:

$$\sum_i x_i = 1 \quad (2.9)$$

$$\sum_i C_i^{m\%m} = 100 \quad (2.9a)$$

A fenti egyenletek, ha a rendszerben csak két komponens van:

$$x_A + x_B = 1 \quad (2.9b)$$

$$C_A^{m\%m} + C_B^{m\%m} = 100 \quad (2.9c)$$

A rendszer átlagos összetétele és a fázisok összetételei közötti kapcsolat:

$$x_i = \sum_{\Phi} y_{\Phi} \cdot x_{i(\Phi)} \quad (2.10)$$

Amennyiben a rendszerben csak két fázis van, a fenti képlet:

$$x_i = y_{\alpha} \cdot x_{i(\alpha)} + y_{\beta} \cdot x_{i(\beta)} \quad (2.10a)$$

A fázisarány az (A2.10a) egyenletből kifejezve:

$$y_{\beta} = \frac{x_i - x_{i(\alpha)}}{x_{i(\beta)} - x_{i(\alpha)}} \quad (2.10b)$$

A tökéletes gáztörvény:

$$V_g = \frac{R \cdot T}{p} \quad (2.11)$$

$$V_{ab,g} = n_g \cdot \frac{R \cdot T}{p} \quad (2.11a)$$

Az egyensúly általános feltétele:

$$G \rightarrow \min \quad (2.12)$$

A Gibbs energia általános alakja:

$$G = a + b \cdot p + c \cdot T \quad (2.12a)$$

A rendszer Gibbs energiája és a fázisok integrális Gibbs energiái közötti kapcsolat:

$$G = \sum_{\Phi} y_{\Phi} \cdot G_{\Phi} \quad (2.13)$$

Ha a rendszerben csak a két fázis van, a fenti egyenlet:

$$G = y_{\alpha} \cdot G_{\alpha} + y_{\beta} \cdot G_{\beta} \quad (2.13a)$$

A rendszer és a fázisok moláris belső energiája, entalpiája, térfogata és entrópiája közötti kapcsolatok:

$$U = \sum_{\Phi} y_{\Phi} \cdot U_{\Phi} \quad (2.13b)$$

$$H = \sum_{\Phi} y_{\Phi} \cdot H_{\Phi} \quad (2.13c)$$

$$V = \sum_{\Phi} y_{\Phi} \cdot V_{\Phi} \quad (2.13d)$$

$$S = \sum_{\Phi} y_{\Phi} \cdot S_{\Phi} \quad (2.13e)$$

A fázis integrális Gibbs energiája és a komponensek parciális Gibbs energiái közötti kapcsolat:

$$G_{\Phi} = \sum_i x_{i(\Phi)} \cdot G_{i(\Phi)} \quad (2.14)$$

Ha a fázisban csak két komponens van, a fenti egyenlet

$$G_{\Phi} = x_{A(\Phi)} \cdot G_{A(\Phi)} + x_{B(\Phi)} \cdot G_{B(\Phi)} \quad (2.14a)$$

A fázisok integrális és a fázisban oldott komponensek parciális moláris belső energiái, entalpiái, térfogatai és entrópiái közötti kapcsolatok:

$$U_{\Phi} = \sum_i x_{i(\Phi)} \cdot U_{i(\Phi)} \quad (2.14b)$$

$$H_{\Phi} = \sum_i x_{i(\Phi)} \cdot H_{i(\Phi)} \quad (2.14c)$$

$$V_{\Phi} = \sum_i x_{i(\Phi)} \cdot V_{i(\Phi)} \quad (2.14d)$$

$$S_{\Phi} = \sum_i x_{i(\Phi)} \cdot S_{i(\Phi)} \quad (2.14e)$$

A heterogén egyensúly kiegészítő feltétele egy 2-fázisú és 2-komponensű rendszerben

$$G_{A(\alpha)} = G_{A(\beta)} \quad (2.15a)$$

$$G_{B(\alpha)} = G_{B(\beta)} \quad (2.15b)$$

Az egyenletek száma, a független paraméterek száma, az egymással egyensúlyt tartó fázisok maximális száma, a szabadon változtatható, kötött értékű és összes állapotváltozó száma egy  $K$  komponensű,  $F$  fázisú rendszerben:

$$EGY = K \cdot (F - 1) \quad (2.16)$$

$$PAR = 2 + F \cdot (K - 1) \quad (2.17)$$

$$F_{\max} = K + 2 \quad (2.18)$$



$$\dot{A}_{SZ} \equiv PAR - EGY \quad (2.19)$$

$$\dot{A}_{SZ} = 2 + K - F \quad (2.20a)$$

$$\dot{A} = K + 1 \quad (2.20b)$$

$$\dot{A} = \dot{A}_{SZ} + \dot{A}_{K\ddot{o}} \quad (2.20c)$$

$$\dot{A}_{K\ddot{o}} = F - 1 \quad (2.20d)$$

A Gibbs energia és a belső energia kapcsolata  $p = 0$  Pa és  $T = 0$  K mellett:

$$G_{\Phi} = U_{\Phi} \quad (2.21)$$

A Gibbs energia és a belső energia kapcsolata  $T = 0$  K mellett:

$$G_{\Phi} = U_{\Phi} + p \cdot V_{\Phi} \quad (2.22)$$

Az entalpia definíciója:

$$H_{\Phi} \equiv U_{\Phi} + p \cdot V_{\Phi} \quad (2.23)$$

A Gibbs energia és az entalpia kapcsolata  $T = 0$  K mellett:

$$G_{\Phi} = H_{\Phi} \quad (2.24)$$

A Gibbs energia és az entrópia kapcsolata  $H_{\Phi} = 0$  mellett:

$$G_{\Phi} = -T \cdot S_{\Phi} \quad (2.25)$$

A  $\Phi$  fázis moláris Gibbs energiájának összevont képlete:

$$G_{\Phi} = U_{\Phi} + p \cdot V_{\Phi} - T \cdot S_{\Phi} \quad (2.26)$$

$$G_{\Phi} = H_{\Phi} - T \cdot S_{\Phi} \quad (2.26a)$$

A  $\Phi$  fázis oldott  $i$  komponens parciális moláris Gibbs energiájának összevont képlete:

$$G_{i(\Phi)} = H_{i(\Phi)} - T \cdot S_{i(\Phi)} \quad (2.26b)$$

$$G_{i(\Phi)} = U_{i(\Phi)} + p \cdot V_{i(\Phi)} - T \cdot S_{i(\Phi)} \quad (2.26c)$$

A rendszer moláris Gibbs energiájának összevont képlete:

$$G = U + p \cdot V - T \cdot S \quad (2.26d)$$

$$G = H - T \cdot S \quad (2.26e)$$

Egy folyamatot kísérő Gibbs energiaváltozás:

$$\Delta G \equiv G^{vég} - G^{ind} \quad (2.27)$$

Egy folyamatot kísérő belső energia-, entalpia-, entrópia és térfogatváltozás:

$$\Delta U \equiv U^{vég} - U^{ind} \quad (2.27a)$$

$$\Delta H \equiv H^{vég} - H^{ind} \quad (2.27b)$$

$$\Delta S \equiv S^{vég} - S^{ind} \quad (2.27c)$$

$$\Delta V \equiv V^{vég} - V^{ind} \quad (2.27d)$$

Az olvadást ( $m$ ), kristályosodást ( $k$ ), párolgást ( $v$ ), szublimációt ( $s$ ), kondenzációt ( $c$ ) kísérő moláris Gibbs energia változások definíciói:

$$\Delta_m G \equiv G_l - G_s \quad (2.28)$$

$$\Delta_k G \equiv G_s - G_l \quad (2.28a)$$

$$\Delta_v G \equiv G_g - G_l \quad (2.28b)$$

$$\Delta_s G \equiv G_g - G_s \quad (2.28c)$$

$$\Delta_c G \equiv G_s - G_g \quad (\text{az olvadáspont alatt}) \quad (2.28d)$$

$$\Delta_c G \equiv G_l - G_g \quad (\text{az olvadáspont felett}) \quad (2.28e)$$

Fenti mennyiségek a moláris belső energiára felírva:

$$\Delta_m U \equiv U_l - U_s \quad (2.28f)$$

$$\Delta_k U \equiv U_s - U_l \quad (2.28g)$$

$$\Delta_v U \equiv U_g - U_l \quad (2.28h)$$

$$\Delta_s U \equiv U_g - U_s \quad (2.28i)$$

$$\Delta_c U \equiv U_s - U_g \quad (\text{az olvadáspont alatt}) \quad (2.28j)$$

$$\Delta_c U \equiv U_l - U_g \quad (\text{az olvadáspont felett}) \quad (2.28k)$$

Fenti mennyiségek a moláris entrópiára felírva:

$$\Delta_m S \equiv S_l - S_s \quad (2.28l)$$

$$\Delta_k S \equiv S_s - S_l \quad (2.28m)$$

$$\Delta_v S \equiv S_g - S_l \quad (2.28n)$$

$$\Delta_s S \equiv S_g - S_s \quad (2.28o)$$

$$\Delta_c S \equiv S_s - S_g \quad (\text{az olvadáspont alatt}) \quad (2.28p)$$

$$\Delta_c S \equiv S_l - S_g \quad (\text{az olvadáspont felett}) \quad (2.28q)$$

Fenti mennyiségek a moláris térfogatra felírva:

$$\Delta_m V \equiv V_l - V_s \quad (A.28r)$$

$$\Delta_k V \equiv V_s - V_l \quad (A.28s)$$

$$\Delta_v V \equiv V_g - V_l \quad (A.28t)$$

$$\Delta_s V \equiv V_g - V_s \quad (2.28u)$$

$$\Delta_c V \equiv V_s - V_g \quad (\text{az olvadáspont alatt}) \quad (2.28v)$$

$$\Delta_c V \equiv V_l - V_g \quad (\text{az olvadáspont felett}) \quad (2.28w)$$

Fenti mennyiségek a moláris entalpiára felírva:

$$\Delta_m H \equiv H_l - H_s \quad (2.28x)$$

$$\Delta_k H \equiv H_s - H_l \quad (2.28y)$$

$$\Delta_v H \equiv H_g - H_l \quad (2.28z)$$

$$\Delta_s H \equiv H_g - H_s \quad (2.28aa)$$

$$\Delta_c H \equiv H_s - H_g \quad (\text{az olvadáspont alatt}) \quad (2.28ab)$$

$$\Delta_c H \equiv H_l - H_g \quad (\text{az olvadáspont felett}) \quad (2.28ac)$$

A különböző folyamatokat kísérő moláris Gibbs energiaváltozások közötti kapcsolatok:

$$\Delta_m G \equiv -\Delta_k G \quad (2.29)$$

$$\Delta_v G \equiv -\Delta_c G \quad (\text{az olvadáspont felett}) \quad (2.29a)$$

$$\Delta_s G \equiv -\Delta_c G \quad (\text{az olvadáspont alatt}) \quad (2.29b)$$

Fenti egyenletek a moláris belső energia-változásokra felírva:

$$\Delta_m U \equiv -\Delta_k U \quad (2.29c)$$

$$\Delta_v U \equiv -\Delta_c U \quad (\text{az olvadáspont felett}) \quad (2.29d)$$

$$\Delta_s U \equiv -\Delta_c U \quad (\text{az olvadáspont alatt}) \quad (2.29e)$$

Fenti egyenletek a moláris entrópia-változásokra felírva:

$$\Delta_m S \equiv -\Delta_k S \quad (2.29f)$$

$$\Delta_v S \equiv -\Delta_c S \quad (\text{az olvadáspont felett}) \quad (2.29g)$$

$$\Delta_s S \equiv -\Delta_c S \quad (\text{az olvadáspont alatt}) \quad (2.29h)$$

Fenti egyenletek a moláris térfogat-változásokra felírva:

$$\Delta_m V \equiv -\Delta_k V \quad (2.29i)$$

$$\Delta_v V \equiv -\Delta_c V \quad (\text{az olvadáspont felett}) \quad (2.29j)$$

$$\Delta_s V \equiv -\Delta_c V \quad (\text{az olvadáspont alatt}) \quad (2.29k)$$

Fenti egyenletek a moláris entalpia-változásokra felírva:

$$\Delta_m H \equiv -\Delta_k H \quad (2.29l)$$

$$\Delta_v H \equiv -\Delta_c H \quad (\text{az olvadáspont felett}) \quad (2.29m)$$

$$\Delta_s H \equiv -\Delta_c H \quad (\text{az olvadáspont alatt}) \quad (2.29n)$$

Az olvadást kísérő moláris Gibbs energia-, belső energia-, térfogat-, entrópia- és entalpia-változások közötti kapcsolat:

$$\Delta_m G = \Delta_m U + p \cdot \Delta_m V - T \cdot \Delta_m S \quad (2.30)$$

$$\Delta_m G = \Delta_m H - T \cdot \Delta_m S \quad (2.30a)$$

A fenti egyenletek alkalmazása a kristályosodás ( $k$ ), párolgás ( $v$ ), szublimáció ( $s$ ) és kondenzáció ( $c$ ) folyamatokra:

$$\Delta_k G = \Delta_k U + p \cdot \Delta_k V - T \cdot \Delta_k S \quad (2.30b)$$

$$\Delta_k G = \Delta_k H - T \cdot \Delta_k S \quad (2.30b)$$

$$\Delta_v G = \Delta_v U + p \cdot \Delta_v V - T \cdot \Delta_v S \quad (2.30d)$$

$$\Delta_v G = \Delta_v H - T \cdot \Delta_v S \quad (2.30e)$$

$$\Delta_s G = \Delta_s U + p \cdot \Delta_s V - T \cdot \Delta_s S \quad (2.30f)$$

$$\Delta_s G = \Delta_s H - T \cdot \Delta_s S \quad (2.30g)$$

$$\Delta_c G = \Delta_c U + p \cdot \Delta_c V - T \cdot \Delta_c S \quad (2.30h)$$

$$\Delta_c G = \Delta_c H - T \cdot \Delta_c S \quad (2.30i)$$

Az entrópia-változás és az entalpiaváltozás kapcsolata az olvadásra és általános érvényes:

$$\Delta_m S = \frac{\Delta_m H}{T_m} \quad (2.31)$$

$$\Delta S = \frac{\Delta H}{T} \quad (2.31a)$$

A moláris entrópia és a termodinamikai valószínűség kapcsolata:

$$S = R \cdot \ln W \quad (2.32)$$

Az entrópia és a moláris térfogat kapcsolata:

$$S_V = S_{V_o} + R \cdot \ln \left( \frac{V_\Phi}{V_{\Phi,o}} \right) \quad (2.33)$$

A tökéletes gázok entrópiája és nyomása közötti összefüggés:

$$S_{p(g)} = S_{p_o(g)} - R \cdot \ln \left( \frac{p}{p_o} \right) \quad (2.34)$$

A konstans nyomáson értelmezett hőkapacitás definíciója:

$$C_p \equiv \frac{\Delta H}{\Delta T} \quad (2.35)$$

Egy anyag  $T^o$  hőmérsékletéről  $T$  hőmérsékletre történő melegítését kísérő entalpiaváltozás:

$$\Delta_h H = C_p \cdot (T - T^o) \quad (2.36)$$

Az entalpia átszámítása  $T^o$  hőmérsékletéről  $T$  hőmérsékletre:

$$H_T = H_{T^o} + \Delta_h H = H_{T^o} + C_p \cdot (T - T^o) \quad (2.37)$$

Az entrópia átszámítása  $T^o$  hőmérsékletéről  $T$  hőmérsékletre:

$$\Delta S = \frac{\Delta H}{T} = C_p \cdot \frac{\Delta T}{T} \quad (2.38)$$

$$S_T = S_{T^o} + C_p \cdot \ln \left( \frac{T}{T^o} \right) \quad (2.39)$$

A Gibbs energia átszámítása  $T^o$  hőmérsékletéről  $T$  hőmérsékletre:

$$G_T = (H_{T^o} - T^o \cdot C_p) + [C_p \cdot (1 + \ln T^o) - S_{T^o}] \cdot T - C_p \cdot T \cdot \ln T \quad (2.40)$$

A határfelületi energia ( $\sigma_\Phi$ , J/m<sup>2</sup>) definíciója:

$$\sigma_\Phi \equiv \frac{\Delta_s G_\Phi}{A_\Phi} \quad (2.41)$$

Az integrális moláris Gibbs-energia kiegészítve a felületi taggal:

$$G_\Phi = U_\Phi + p \cdot V_\Phi - T \cdot S_\Phi + A_{s,\Phi} \cdot V_\Phi \cdot \sigma_\Phi \quad (2.42a)$$

$$G_\Phi = U_\Phi + p \cdot V_\Phi - T \cdot S_\Phi + \left( \frac{36 \cdot \pi \cdot N_{Av}}{N_{a,\Phi}} \right)^{1/3} \cdot V_\Phi^{2/3} \cdot \sigma_\Phi \quad (2.42b)$$

$$G_\Phi = H_\Phi - T \cdot S_\Phi + A_{s,\Phi} \cdot V_\Phi \cdot \sigma_\Phi \quad (2.42c)$$

$$G_\Phi = H_\Phi - T \cdot S_\Phi + \left( \frac{36 \cdot \pi \cdot N_{Av}}{N_{a,\Phi}} \right)^{1/3} \cdot V_\Phi^{2/3} \cdot \sigma_\Phi \quad (2.42d)$$

Az atomok száma és a fázisszabály nano-rendszerekben:

$$N_a = \sum_\Phi N_{a,\Phi} \quad (2.43a)$$

$$\acute{A}_{nano} = K + 2 \quad (2.43b)$$

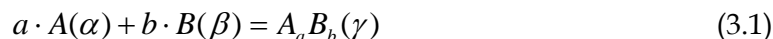
$$PAR_{nano} = 3 + F \cdot (K - 1) \quad (2.43c)$$

$$F_{max,nano} = K + 3 \quad (2.43.d)$$

$$\acute{A}_{sz,nano} = 3 + K - F \quad (2.43e)$$

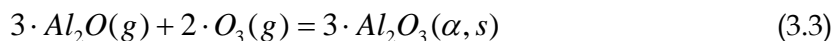
## Képletgyűjtemény a 3. fejezethez

Egy vegyület képződését leíró reakcióegyenlet és az azt kísérő entalpiaváltozás:



$$\Delta_{r(3.1)} H^o = H_{A_a B_b(\gamma)}^o - (a \cdot H_{A(\alpha)}^o + b \cdot H_{B(\beta)}^o) = H_{A_a B_b(\gamma)}^o \quad (3.2)$$

Egy kémiai reakció és az azt kísérő entalpiaváltozás:



$$\Delta_{r(3.3)} H^o = 3 \cdot H_{Al_2O_3(\alpha)}^o - (3 \cdot H_{Al_2O(g)}^o + 2 \cdot H_{O_3(g)}^o) \quad (3.4)$$

A standard hőkapacitás definíciója:

$$C_{p,i(\alpha)}^o \equiv \frac{\Delta H_{i(\alpha)}^o}{\Delta T} \quad (3.5)$$

A melegítéshez szükséges standard entalpiaigény, illetve a standard entalpia hőmérsékletfüggése:

$$\Delta_h H_{i(\alpha)}^o = C_{p,i(\alpha)}^o \cdot (T_2 - T_1) \quad (3.6)$$

$$H_{i(\alpha, T_2)}^o = H_{i(\alpha, T_1)}^o + C_{p,i(\alpha)}^o \cdot (T_2 - T_1) \quad (3.7)$$

Az olvadást és kristályosodást kísérő standard entalpiaváltozások definíciója, hőmérsékletfüggése és a közöttük lévő kapcsolat:

$$\Delta_m H_i^o \equiv H_{i(l)}^o - H_{i(s)}^o \quad (3.8a)$$

$$\Delta_m H_{i,T}^o = \Delta_m H_{i, T_{m,i}^o}^o + (C_{p,i(l)}^o - C_{p,i(s)}^o) \cdot (T - T_{m,i}^o) \quad (3.8b)$$

$$\Delta_k H_i^o \equiv H_{i(s)}^o - H_{i(l)}^o \quad (3.8c)$$

$$\Delta_k H_i^o = -\Delta_m H_i^o \quad (3.8d)$$

$$\Delta_k H_{i,T}^o = \Delta_k H_{i, T_{m,i}^o}^o + (C_{p,i(s)}^o - C_{p,i(l)}^o) \cdot (T - T_{m,i}^o) \quad (3.8e)$$

A forrást, a párolgást, a szublimációt és a kondenzációt kísérő standard entalpiaváltozások definíciója, hőmérsékletfüggése és a közöttük lévő kapcsolat:

$$\Delta_b H_{i(T_{b,i}^o)}^o \equiv H_{i(g, T_{b,i}^o)}^o - H_{i(l, T_{b,i}^o)}^o \quad (3.9a)$$

$$\Delta_v H_i^o \equiv H_{i(g)}^o - H_{i(l)}^o \quad (3.9b)$$

$$\Delta_v H_{i,T}^o = \Delta_v H_{i, T_{b,i}^o}^o + (C_{p,i(g)}^o - C_{p,i(l)}^o) \cdot (T - T_{b,i}^o) \quad (3.9c)$$

$$\Delta_s H_i^o \equiv H_{i(g)}^o - H_{i(s)}^o \quad (3.9d)$$

$$\Delta_s H_{i,T}^o = \Delta_s H_{i, T_{m,i}^o}^o + (C_{p,i(g)}^o - C_{p,i(s)}^o) \cdot (T - T_{m,i}^o) \quad (3.9e)$$

$$\Delta_s H_i^o = \Delta_m H_i^o + \Delta_v H_i^o \quad (3.9f)$$

$$\Delta_c H_i^o \equiv H_{i(s)}^o - H_{i(g)}^o \quad \text{ha } T < T_{i,m}^o \quad (3.9g)$$

$$\Delta_c H_i^o \equiv H_{i(l)}^o - H_{i(g)}^o \quad \text{ha } T \geq T_{i,m}^o \quad (3.9h)$$

$$\Delta_c H_i^o = -\Delta_s H_i^o \quad \text{ha } T < T_{i,m}^o \quad (3.9i)$$

$$\Delta_c H_i^o = -\Delta_v H_i^o \quad \text{ha } T \geq T_{i,m}^o \quad (3.9j)$$

$$\Delta_c H_{i,T}^o = \Delta_c H_{i,T_{m,i}^o}^o + (C_{p,i(s)}^o - C_{p,i(g)}^o) \cdot (T - T_{m,i}^o) \quad \text{ha } T < T_{i,m}^o \quad (3.9k)$$

$$\Delta_c H_{i,T}^o = \Delta_c H_{i,T_{m,i}^o}^o + (C_{p,i(l)}^o - C_{p,i(g)}^o) \cdot (T - T_{m,i}^o) \quad \text{ha } T \geq T_{i,m}^o \quad (3.9l)$$

A szilárd, folyékony és gáz halmazállapotú fázisok standard entalpiájának számítása a hőmérséklet függvényében, 100 bar nyomás alatt:

$$H_{i(s),T}^o = H_{i(s)}^o + C_{p,i(s)}^o \cdot (T - T^o) \quad (3.9m)$$

$$H_{i(l),T}^o = H_{i(s)}^o + C_{p,i(s)}^o \cdot (T_{m,i}^o - T^o) + \Delta_m H_i^o + C_{p,i(l)}^o \cdot (T - T_{m,i}^o) \quad (3.9n)$$

$$H_{i(g),T}^o = H_{i(s)}^o + C_{p,i(s)}^o \cdot (T_{m,i}^o - T^o) + \Delta_m H_i^o + C_{p,i(l)}^o \cdot (T_{b,i}^o - T_{m,i}^o) + \Delta_b H_i^o + C_{p,i(g)}^o \cdot (T - T_{b,i}^o) \quad (3.9o)$$

Ugyanaz, mint az előző egyenlet, de olyan anyagra, aminek hármasponti nyomása 1 bar feletti:

$$H_{i(g),T}^o = H_{i(s)}^o + C_{p,i(s)}^o \cdot (T_{s,i}^o - T^o) + \Delta_s H_i^o + C_{p,i(g)}^o \cdot (T - T_{s,i}^o) \quad (3.9p)$$

A standard entrópia hőmérsékletfüggése:

$$S_{i(\alpha),T}^o = S_{i(\alpha)}^o + C_{p,i(\alpha)}^o \cdot \ln\left(\frac{T}{T^o}\right) \quad (3.10)$$

A fázisátalakulásokat kísérő standard entrópiaváltozások definíciója, számítási módszere, hőmérsékletfüggése és a köztük lévő kapcsolatok:

$$\Delta_m S_i^o \equiv S_{i(l)}^o - S_{i(s)}^o \quad (3.11a)$$

$$\Delta_m S_{i(T_{m,i}^o)}^o = \frac{\Delta_m H_{i(T_{m,i}^o)}^o}{T_{m,i}^o} \quad (3.11b)$$

$$\Delta_b S_{i(T_{b,i}^o)}^o = \frac{\Delta_b H_{i(T_{b,i}^o)}^o}{T_{b,i}^o} \quad (3.11c)$$

$$\Delta_b S_{i(T_{b,i}^o)}^o \equiv S_{i(g),T_{b,i}^o}^o - S_{i(l),T_{b,i}^o}^o \quad (3.11d)$$

$$\Delta_v S_i^o \equiv S_{i(g)}^o - S_{i(l)}^o \quad (3.11e)$$

$$\Delta_s S_i^o \equiv S_{i(g)}^o - S_{i(s)}^o \quad (3.11f)$$

$$\Delta_s S_{i(T_{s,i}^o)}^o = \frac{\Delta_s H_{i(T_{s,i}^o)}^o}{T_{s,i}^o} \quad (3.11g)$$

$$\Delta_k S_i^o \equiv S_{i(s)}^o - S_{i(l)}^o \quad (3.11h)$$

$$\Delta_c S_i^o \equiv S_{i(s)}^o - S_{i(g)}^o \quad \text{ha } T < T_{i,m}^o \quad (3.11i)$$

$$\Delta_c S_i^o \equiv S_{i(l)}^o - S_{i(g)}^o \quad \text{ha } T \geq T_{i,m}^o \quad (3.11j)$$

$$\Delta_k S_i^o = -\Delta_m S_i^o \quad (3.11k)$$

$$\Delta_s S_i^o = \Delta_m S_i^o + \Delta_v S_i^o \quad (3.11l)$$

$$\Delta_c S_i^o = -\Delta_s S_i^o \quad \text{ha } T < T_{i,m}^o \quad (3.11m)$$

$$\Delta_c S_i^o = -\Delta_v S_i^o \quad \text{ha } T \geq T_{i,m}^o \quad (3.11n)$$

$$\Delta_k S_{i(T_{m,i}^o)}^o = \frac{\Delta_k H_{i(T_{m,i}^o)}^o}{T_{m,i}^o} \quad (3.11o)$$

$$\Delta_c S_{i(T_{b,i}^o)}^o = \frac{\Delta_c H_{i(T_{b,i}^o)}^o}{T_{b,i}^o} \quad (3.11p)$$

$$\Delta_c S_{i(T_{s,i}^o)}^o = \frac{\Delta_c H_{i(T_{s,i}^o)}^o}{T_{s,i}^o} \quad (3.11q)$$

$$\Delta_m S_{i,T}^o = \Delta_m S_{i,T_{m,i}^o}^o + (C_{p,i(l)}^o - C_{p,i(s)}^o) \cdot \ln\left(\frac{T}{T_{m,i}^o}\right) \quad (3.11r)$$

$$\Delta_k S_{i,T}^o = \Delta_k S_{i,T_{m,i}^o}^o + (C_{p,i(s)}^o - C_{p,i(l)}^o) \cdot \ln\left(\frac{T}{T_{m,i}^o}\right) \quad (3.11s)$$

$$\Delta_v S_{i,T}^o = \Delta_b S_{i,T_{b,i}^o}^o + (C_{p,i(g)}^o - C_{p,i(l)}^o) \cdot \ln\left(\frac{T}{T_{b,i}^o}\right) \quad (3.11t)$$

$$\Delta_s S_{i,T}^o = \Delta_s S_{i,T_{m,i}^o}^o + (C_{p,i(g)}^o - C_{p,i(s)}^o) \cdot \ln\left(\frac{T}{T_{m,i}^o}\right) \quad (3.11u)$$

$$\Delta_c S_{i,T}^o = \Delta_c S_{i,T_{m,i}^o}^o + (C_{p,i(s)}^o - C_{p,i(g)}^o) \cdot \ln\left(\frac{T}{T_{m,i}^o}\right) \quad \text{ha } T < T_{i,m}^o \quad (3.11v)$$

$$\Delta_c S_{i,T}^o = \Delta_c S_{i,T_{b,i}^o}^o + (C_{p,i(l)}^o - C_{p,i(g)}^o) \cdot \ln\left(\frac{T}{T_{b,i}^o}\right) \quad \text{ha } T \geq T_{i,m}^o \quad (3.11w)$$

A standard entrópia nyomásfüggése:

$$S_{i(g,p,T)}^o = S_{i(g,T)}^o - R \cdot \ln\left(\frac{p}{p^o}\right) \quad (3.12)$$

A párolgást, szublimációt és kondenzációt kísérő entrópia-változások nyomásfüggése:

$$\Delta_v S_{i,p}^o = \Delta_b S_i^o - R \cdot \ln\left(\frac{p}{p^o}\right) \quad (3.12a)$$

$$\Delta_s S_{i,p}^o = \Delta_s S_i^o - R \cdot \ln\left(\frac{p}{p^o}\right) \quad (3.12b)$$

$$\Delta_c S_{i,p}^o = \Delta_c S_i^o + R \cdot \ln\left(\frac{p}{p^o}\right) \quad (3.12c)$$

A szilárd, folyékony és gáz halmazállapotú anyagok standard entrópiájának hőmérséklet- és nyomásfüggése 100 bar nyomás alatt:

$$S_{i(s),p,T}^o = S_{i(s)}^o + C_{p,i(s)}^o \cdot \ln\left(\frac{T}{T^o}\right) \quad (3.12d)$$

$$S_{i(l),p,T}^o = S_{i(s)}^o + C_{p,i(s)}^o \cdot \ln\left(\frac{T_{m,i}^o}{T^o}\right) + \frac{\Delta_m H_i^o}{T_{m,i}^o} + C_{p,i(l)}^o \cdot \ln\left(\frac{T}{T_{m,i}^o}\right) \quad (3.12e)$$

$$S_{i(g)p,T}^o = S_{i(s)}^o + C_{p,i(s)}^o \cdot \ln\left(\frac{T_{m,i}^o}{T^o}\right) + \frac{\Delta_m H_i^o}{T_{m,i}^o} + C_{p,i(l)}^o \cdot \ln\left(\frac{T_{b,i}^o}{T_{m,i}^o}\right) + \frac{\Delta_b H_i^o}{T_{b,i}^o} + C_{p,i(g)}^o \cdot \ln\left(\frac{T}{T_{b,i}^o}\right) - R \cdot \ln\left(\frac{p}{p^o}\right) \quad (3.12f)$$

Ugyanaz, mint az előző egyenlet, de olyan anyagra, aminek hármasponti nyomása 1 bar-nál nagyobb:

$$S_{i(g)p,T}^o = S_{i(s)}^o + C_{p,i(s)}^o \cdot \ln\left(\frac{T_{s,i}^o}{T^o}\right) + \frac{\Delta_s H_i^o}{T_{s,i}^o} + C_{p,i(g)}^o \cdot \ln\left(\frac{T}{T_{s,i}^o}\right) - R \cdot \ln\left(\frac{p}{p^o}\right) \quad (3.12g)$$

A standard Gibbs energia definíciója:

$$G_{i(\alpha)}^o \equiv H_{i(\alpha)}^o - T \cdot S_{i(\alpha)}^o \quad (3.13)$$

A szilárd, folyékony és gáz halmazállapotú anyagok standard Gibbs energiájának hőmérséklet- és nyomásfüggése:

$$G_{i(s,T,p)}^o = H_{i(s)}^o + C_{p,i(s)}^o \cdot (T - T^o) - T \cdot \left[ S_{i(s)}^o + C_{p,i(s)}^o \cdot \ln\left(\frac{T}{T^o}\right) \right] \quad (3.13a)$$

$$G_{i(l,T,p)}^o = H_{i(s)}^o + C_{p,i(s)}^o \cdot (T_{m,i}^o - T^o) + \Delta_m H_i^o + C_{p,i(l)}^o \cdot (T - T_{m,i}^o) - T \cdot \left[ S_{i(s)}^o + C_{p,i(s)}^o \cdot \ln\left(\frac{T_{m,i}^o}{T^o}\right) + \frac{\Delta_m H_i^o}{T_{m,i}^o} + C_{p,i(l)}^o \cdot \ln\left(\frac{T}{T_{m,i}^o}\right) \right] \quad (3.13b)$$

$$G_{i(g,T,p)}^o = H_{i(g)}^o + C_{p,i(g)}^o \cdot (T - T^o) - T \cdot \left[ S_{i(g)}^o + C_{p,i(g)}^o \cdot \ln\left(\frac{T}{T^o}\right) \right] + R \cdot T \cdot \ln\left(\frac{p}{p^o}\right) \quad (3.13c)$$

$$G_{i(g,T,p)}^o = H_{i(s)}^o + C_{p,i(s)}^o \cdot (T_{m,i}^o - T^o) + \Delta_m H_i^o + C_{p,i(l)}^o \cdot (T_{b,i}^o - T_{m,i}^o) + \Delta_b H_i^o + C_{p,i(g)}^o \cdot (T - T_{b,i}^o) + R \cdot T \cdot \ln\left(\frac{p}{p^o}\right) - T \cdot \left[ S_{i(s)}^o + C_{p,i(s)}^o \cdot \ln\left(\frac{T_{m,i}^o}{T^o}\right) + \frac{\Delta_m H_i^o}{T_{m,i}^o} + C_{p,i(l)}^o \cdot \ln\left(\frac{T_{b,i}^o}{T_{m,i}^o}\right) + \frac{\Delta_b H_i^o}{T_{b,i}^o} + C_{p,i(g)}^o \cdot \ln\left(\frac{T}{T_{b,i}^o}\right) \right] \quad (3.13d)$$

$$G_{i(g,T,p)}^o = H_{i(s)}^o + C_{p,i(s)}^o \cdot (T_{s,i}^o - T^o) + \Delta_s H_i^o + \Delta_s H_i^o + C_{p,i(g)}^o \cdot (T - T_{s,i}^o) + R \cdot T \cdot \ln\left(\frac{p}{p^o}\right) - T \cdot \left[ S_{i(s)}^o + C_{p,i(s)}^o \cdot \ln\left(\frac{T_{s,i}^o}{T^o}\right) + \frac{\Delta_s H_i^o}{T_{s,i}^o} + C_{p,i(g)}^o \cdot \ln\left(\frac{T}{T_{s,i}^o}\right) \right] \quad (3.13da)$$

A (3.13a-d) egyenletek mindegyike felírható az  $a_{i(\Phi)}$ ,  $b_{i(\Phi)}$  és  $c_{i(\Phi)}$  félempirikus paraméterekkel  $p^o = 1$  bar standard nyomáson:

$$G_{i(\Phi,T)}^o = a_{i(\Phi)} + b_{i(\Phi)} \cdot T + c_{i(\Phi)} \cdot T \cdot \ln T \quad (3.13e)$$

A (3.13e) egyenlet kiterjesztése  $p$  nyomású, egykomponensű gázra:

$$G_{i(\Phi,T)}^o = a_{i(\Phi)} + b_{i(\Phi)} \cdot T + c_{i(\Phi)} \cdot T \cdot \ln T + R \cdot T \cdot \ln\left(\frac{p}{p^o}\right) \quad (3.13ea)$$

A fázisátalakulásokat kísérő standard Gibbs energia változások definíciója, számítási módszere, és a köztük lévő kapcsolatok:



$$\Delta_m G_i^o \equiv G_{i(l)}^o - G_{i(s)}^o \quad (3.13f)$$

$$\Delta_b G_{i(T_{b,i}^o)}^o \equiv G_{i(g,T_{b,i}^o)}^o - G_{i(l,T_{b,i}^o)}^o \quad (3.13g)$$

$$\Delta_v G_i^o \equiv G_{i(g)}^o - G_{i(l)}^o \quad (3.13h)$$

$$\Delta_s G_i^o \equiv G_{i(g)}^o - G_{i(s)}^o \quad (3.13i)$$

$$\Delta_k G_i^o \equiv G_{i(s)}^o - G_{i(l)}^o \quad (3.13j)$$

$$\Delta_c G_i^o \equiv G_{i(s)}^o - G_{i(g)}^o \quad \text{ha } T < T_{i,m}^o \quad (3.13k)$$

$$\Delta_c G_i^o \equiv G_{i(l)}^o - G_{i(g)}^o \quad \text{ha } T \geq T_{i,m}^o \quad (3.13l)$$

$$\Delta_k G_i^o = -\Delta_m G_i^o \quad (3.13m)$$

$$\Delta_s G_i^o = \Delta_m G_i^o + \Delta_v G_i^o \quad (3.13n)$$

$$\Delta_c G_i^o = -\Delta_s G_i^o \quad \text{ha } T < T_{i,m}^o \quad (3.13o)$$

$$\Delta_c G_i^o = -\Delta_v G_i^o \quad \text{ha } T \geq T_{i,m}^o \quad (3.13p)$$

$$\Delta_m G_i^o = \Delta_m H_i^o - T \cdot \Delta_m S_i^o \quad (3.13q)$$

$$\Delta_k G_i^o = \Delta_k H_i^o - T \cdot \Delta_k S_i^o \quad (3.13r)$$

$$\Delta_b G_i^o = \Delta_b H_i^o - T \cdot \Delta_b S_i^o \quad (3.13s)$$

$$\Delta_v G_i^o = \Delta_v H_i^o - T \cdot \Delta_v S_i^o \quad (3.13t)$$

$$\Delta_c G_i^o = \Delta_c H_i^o - T \cdot \Delta_c S_i^o \quad (3.13u)$$

A (3.13q) egyenletbe  $\Delta_m H_i^o$  helyére helyettesítve a (3.11b) egyenletet, és elhanyagolva a szilárd és folyadék hőkapacitásai közötti különbséget, a következő egyenlethez jutunk:

$$\Delta_m G_i^o = (T_{m,i}^o - T) \cdot \Delta_m S_i^o \quad (3.13v)$$

Egy vegyület standard képződéshőjének számítása, ha a vegyület elemeiből standard körülmények között keletkezett, és  $n_{AaBb}$  móljának keletkezése során  $\Delta T$  hőmérsékletváltozás volt mérhető a  $k$  kaloriméter állandójú kaloriméterben:

$$H_{AaBb(\gamma)}^o = -k \cdot \frac{\Delta T}{n_{AaBb}} \quad (3.14)$$

A folyékony és gáz halmazállapotú  $\text{CaCl}_2$  sűrűségének hőmérsékletfüggése:

$$\rho_{\text{CaCl}_2(l)} = 2,5261 - 0,0004225 \cdot T \quad (3.15a)$$

$$\rho_{\text{CaCl}_2(g)} = \frac{M_{\text{CaCl}_2} \cdot P_{\text{CaCl}_2}^o}{R \cdot T} \quad (3.15b)$$

A tiszta A folyadék és tiszta A gőz fázisok egyensúlyának feltétele:

$$G_{A(l,T)}^o = G_{A(g,T)}^o + R \cdot T \cdot \ln\left(\frac{P_A^o}{P^o}\right) \quad (\text{ha } T \geq T_{m,A}^o) \quad (3.16a)$$

$$P_A^o = P^o \cdot \exp\left(\frac{-\Delta_v G_{A(T)}^o}{R \cdot T}\right) \quad (\text{ha } T \geq T_{m,A}^o) \quad (3.16b)$$

$$p_A^o = p^o \cdot \exp\left(\frac{-\Delta_s G_{A(T)}^o}{R \cdot T}\right) \quad (\text{ha } T \leq T_{m,A}^o) \quad (3.16c)$$

A tiszta A folyadék nyomás-függő forráspontja:

$$T_{b,A,p}^o \cong \frac{\Delta_v H_A^o}{\Delta_v S_A^o - R \cdot \ln\left(\frac{p}{p^o}\right)} \quad (3.16d)$$

A tiszta A szilárd és tiszta A folyadék fázisok egyensúlyának feltétele:

$$H_{A(s)}^o + (p - p^o) \cdot V_{A(s)}^o - T \cdot S_{A(s)}^o = H_{A(l)}^o + (p - p^o) \cdot V_{A(l)}^o - T \cdot S_{A(l)}^o \quad (3.17a)$$

$$-(p - p^o) \cdot \Delta_m V_A^o = \Delta_m H_A^o - T \cdot \Delta_m S_A^o \quad (3.17b)$$

$$T_{m,A} \cong T_{m,A}^o + (p - p^o) \cdot \frac{\Delta_m V_A^o}{\Delta_m S_A^o} \quad (3.17c)$$

A szilárd és folyékony fázisok Gibbs energiájának nyomásfüggése (100 bar felett):

$$G_{A(s)}^o = H_{A(s)}^o + (p - p^o) \cdot V_{A(s)}^o - T \cdot S_{A(s)}^o \quad (3.17d)$$

$$G_{A(l)}^o = H_{A(l)}^o + (p - p^o) \cdot V_{A(l)}^o - T \cdot S_{A(l)}^o \quad (3.17e)$$

A Gibbs energia függése a gravitációtól:

$$G_{i(\Phi)} = G_{i(\Phi)}^o + g \cdot (h - h^o) \cdot M_i \quad (3.18a)$$

Egyensúly alacsonyan és magasan lévő gázrétegek között:

$$G_{A(g,T)}^o + R \cdot T \cdot \ln\left(\frac{p_A^o}{p^o}\right) = G_{A(g,T)}^o + R \cdot T \cdot \ln\left(\frac{p_A}{p^o}\right) + g \cdot (h - h^o) \cdot M_g \quad (3.18b)$$

$$p_A = p_A^o \cdot \exp\left[\frac{-g \cdot (h - h^o) \cdot M_g}{R \cdot T}\right] \quad (3.18c)$$

A Calphad formalizmusban használt képletek a standard Gibbs energia tagjaira:

$$G_{i(\Phi)}^o = G_{i(\Phi),temp}^o + G_{i(\Phi),pres}^o + G_{i(\Phi),magn}^o \quad (3.19)$$

A hőmérsékletfüggő standard Gibbs energia, entrópia, entalpia és hőkapacitás képletei:

$$G_{i(\Phi),temp}^o = a_{i(\Phi)} + b_{i(\Phi)} \cdot T + c_{i(\Phi)} \cdot T \cdot \ln T + \sum_n d_{n,i(\Phi)} \cdot T^n \quad (3.20a)$$

$$S_{i(\Phi),temp}^o = -b_{i(\Phi)} - c_{i(\Phi)} \cdot (1 + \ln T) - \sum_n n \cdot d_{n,i(\Phi)} \cdot T^{n-1} \quad (3.20b)$$

$$H_{i(\Phi),temp}^o = a_{i(\Phi)} - c_{i(\Phi)} \cdot T - \sum_n (n-1) \cdot d_{n,i(\Phi)} \cdot T^n \quad (3.20c)$$

$$C_{p,i(\Phi),temp}^o = -c_{i(\Phi)} - \sum_n n \cdot (n-1) \cdot d_{n,i(\Phi)} \cdot T^{n-1} \quad (3.20d)$$

A standard entrópia, entalpia és hőkapacitás származtatása a standard Gibbs energia ismert hőmérséklet függéséből:

$$\left(\frac{dG_{i(\Phi)}^o}{dT}\right)_p = \left(\frac{dH_{i(\Phi)}^o}{dT}\right)_p - S_{i(\Phi)}^o - T \cdot \left(\frac{dS_{i(\Phi)}^o}{dT}\right)_p \quad (3.21a)$$

$$S_{i(\Phi)}^o = - \left( \frac{dG_{i(\Phi)}^o}{dT} \right)_p \quad (3.21b)$$

$$H_{i(\Phi)}^o = G_{i(\Phi)}^o + T \cdot S_{i(\Phi)}^o \quad (3.21c)$$

$$C_{p,i(\alpha)}^o = \left( \frac{dH_{i(\alpha)}^o}{dT} \right)_p \quad (3.21d)$$

A Calphad formalizmusban használt képletek a standard Gibbs energia nyomásfüggésére:

$$G_{i(\Phi),pres}^o = V_{i(\Phi),T,0bar}^o \cdot \frac{[1 + n_{i(\Phi)} \cdot p \cdot K(T)]^{-n_{i(\Phi)} - 1}}{(n_{i(\Phi)} - 1) \cdot K(T)} \quad (3.22a)$$

$$V_{i(\Phi),T,0bar}^o = V_{i(\Phi),0K,0bar}^o \cdot \exp \left( \begin{aligned} & a_{o,i(\Phi)} \cdot T + \frac{a_{1,i(\Phi)}}{2} \cdot T^2 + \\ & + \frac{a_{2,i(\Phi)}}{3} \cdot T^3 + \frac{a_{3,i(\Phi)}}{T} \end{aligned} \right) \quad (3.22b)$$

$$K(T) = K_{o,i(\Phi)} + K_{1,i(\Phi)} \cdot T + K_{2,i(\Phi)} \cdot T^2 \quad (3.22c)$$

A standard moláris térfogat származtatása a standard Gibbs energiából és annak formája a Calphad formalizmusban:

$$V_{i(\Phi)}^o = \left( \frac{dG_{i(\Phi)}^o}{dp} \right)_T \quad (3.22d)$$

$$V_{i(\Phi),T,p}^o = \frac{V_{i(\Phi),T,0bar}^o}{[1 + n_{i(\Phi)} \cdot p \cdot K(T)]^{1/n_{i(\Phi)}}} \quad (3.22e)$$

A Calphad formalizmusban használt képletek a standard Gibbs energia mágneses tagjára:

$$G_{i(\Phi),magn}^o = R \cdot T \cdot g(\tau_{i(\Phi)}) \cdot \ln(1 + B_{0,i(\Phi)}) \quad (3.23a)$$

$$\tau_{i(\Phi)} \equiv \frac{T}{T_{Curie,i(\Phi)}}, \quad \text{vagy} \quad \tau \equiv \frac{T}{T_{Neel,i(\Phi)}} \quad (3.23b)$$

$$\text{ha } \tau_{i(\Phi)} \leq 1: g(\tau_{i(\Phi)}) = 1 - \frac{1}{D_{i(\Phi)}} \cdot \left[ \frac{79}{140 \cdot \tau_{i(\Phi)} \cdot \chi_{i(\Phi)}} + \frac{474}{497} \cdot \left( \frac{1}{\chi_{i(\Phi)}} - 1 \right) \cdot \left( \frac{\tau_{i(\Phi)}^3}{6} + \frac{\tau_{i(\Phi)}^9}{135} + \frac{\tau_{i(\Phi)}^{15}}{600} \right) \right] \quad (3.23c)$$

$$\text{ha } \tau_{i(\Phi)} > 1: g(\tau_{i(\Phi)}) = - \frac{1}{D_{i(\Phi)}} \cdot \left( \frac{\tau_{i(\Phi)}^{-5}}{10} + \frac{\tau_{i(\Phi)}^{-15}}{315} + \frac{\tau_{i(\Phi)}^{-25}}{1500} \right) \quad (3.23d)$$

$$D_{i(\Phi)} = \frac{518}{1125} + \frac{11692}{15975} \cdot \left( \frac{1}{\chi_{i(\Phi)}} - 1 \right) \quad (3.23e)$$

A heterogén fázisegyensúly általános feltétele nano-rendszerben:

$$\begin{aligned} H_{i(\alpha)}^o - T \cdot S_{i(\alpha)}^o + \left( \frac{36 \cdot \pi \cdot N_{Av}}{N_{a,i(\alpha)}} \right)^{1/3} \cdot (V_{i(\alpha)}^o)^{2/3} \cdot \sigma_{i(\alpha)}^o = \\ = H_{i(\beta)}^o - T \cdot S_{i(\beta)}^o + \left( \frac{36 \cdot \pi \cdot N_{Av}}{N_{a,i(\beta)}} \right)^{1/3} \cdot (V_{i(\beta)}^o)^{2/3} \cdot \sigma_{i(\beta)}^o \end{aligned} \quad (3.24a)$$

Ugyanez szilárd/folyadék egyensúlya:

$$\left( \frac{36 \cdot \pi \cdot N_{Av}}{N_a} \right)^{1/3} \cdot \left[ (V_{i(s)}^o)^{2/3} \cdot \sigma_{i(s)}^o - (V_{i(l)}^o)^{2/3} \cdot \sigma_{i(l)}^o \right] = \Delta_m S_i^o \cdot (T_{m,i}^o - T_{m,i}) \quad (3.24b)$$

$$T_{m,i} = T_{m,i}^o - \left( \frac{36 \cdot \pi \cdot N_{Av}}{N_a} \right)^{1/3} \cdot \frac{(V_{i(s)}^o)^{2/3} \cdot \sigma_{i(s)}^o - (V_{i(l)}^o)^{2/3} \cdot \sigma_{i(l)}^o}{\Delta_m S_i^o} \quad (3.24c)$$

Ugyanez folyadék/gőz egyensúlya:

$$\begin{aligned} H_{i(l)}^o - T \cdot S_{i(l)}^o + \left( \frac{36 \cdot \pi \cdot N_{Av}}{N_a} \right)^{1/3} \cdot (V_{i(l)}^o)^{2/3} \cdot \sigma_{i(l)}^o = \\ = H_{i(g)}^o - T \cdot S_{i(g)}^o + R \cdot T \cdot \ln \left( \frac{p_i}{p^o} \right) \end{aligned} \quad (3.24d)$$

$$p_i = p^o \cdot \exp \left( \frac{-\Delta_v G_i^o}{R \cdot T} \right) \cdot \exp \left[ \left( \frac{36 \cdot \pi \cdot N_{Av}}{N_a} \right)^{1/3} \cdot \frac{(V_{i(l)}^o)^{2/3} \cdot \sigma_{i(l)}^o}{R \cdot T} \right] \quad (3.24e)$$

Ugyanez szilárd/gőz egyensúlya:

$$p_i = p^o \cdot \exp \left( \frac{-\Delta_s G_i^o}{R \cdot T} \right) \cdot \exp \left[ \left( \frac{36 \cdot \pi \cdot N_{Av}}{N_a} \right)^{1/3} \cdot \frac{(V_{i(s)}^o)^{2/3} \cdot \sigma_{i(s)}^o}{R \cdot T} \right] \quad (3.24f)$$

A felületi Gibbs-energiatöbblet:

$$\Delta_s G_\Phi = f_m \cdot N_{Av}^{1/3} \cdot \sigma_\Phi \cdot V_\Phi^{2/3} \quad (3.24g)$$

## Képletgyűjtemény a 4. fejezethez

A standard keverékek átlagos Gibbs energiája:

$$G^o = (1 - y_\beta) \cdot G_{A(\alpha)}^o + y_\beta \cdot G_{B(\beta)}^o \quad (4.1a)$$

$$G^o = (1 - x_B) \cdot G_{A(\alpha)}^o + x_B \cdot G_{B(\beta)}^o \quad (4.1b)$$

$$G_\Phi^o = (1 - x_B) \cdot G_{A(\Phi)}^o + x_B \cdot G_{B(\Phi)}^o \quad (4.1c)$$

A standard keverék belső energiája, entalpiája, entrópiája és moláris térfogata:

$$U_\Phi^o = (1 - x_B) \cdot U_{A(\Phi)}^o + x_B \cdot U_{B(\Phi)}^o \quad (4.1d)$$

$$H_\Phi^o = (1 - x_B) \cdot H_{A(\Phi)}^o + x_B \cdot H_{B(\Phi)}^o \quad (4.1e)$$

$$S_\Phi^o = (1 - x_B) \cdot S_{A(\Phi)}^o + x_B \cdot S_{B(\Phi)}^o \quad (4.1f)$$

$$V_\Phi^o = (1 - x_B) \cdot V_{A(\Phi)}^o + x_B \cdot V_{B(\Phi)}^o \quad (4.1g)$$

Az oldat kialakulását kísérő Gibbs energia-, belső energia, entalpia-, entrópia- és moláris térfogat változás definíciói:

$$\Delta G_\Phi \equiv G_\Phi - G_\Phi^o \quad (4.2)$$

$$\Delta U_\Phi \equiv U_\Phi - U_\Phi^o \quad (4.2a)$$

$$\Delta H_\Phi \equiv H_\Phi - H_\Phi^o \quad (4.2b)$$

$$\Delta S_\Phi \equiv S_\Phi - S_\Phi^o \quad (4.2c)$$

$$\Delta V_\Phi \equiv V_\Phi - V_\Phi^o \quad (4.2d)$$

A parciális oldódási Gibbs energia-, belső energia-, entalpia-, entrópia- és moláris térfogat változás definíciói:

$$\Delta G_{i(\Phi)} \equiv G_{i(\Phi)} - G_{i(\Phi)}^o \quad (4.3)$$

$$\Delta U_{i(\Phi)} \equiv U_{i(\Phi)} - U_{i(\Phi)}^o \quad (4.3a)$$

$$\Delta H_{i(\Phi)} \equiv H_{i(\Phi)} - H_{i(\Phi)}^o \quad (4.3b)$$

$$\Delta S_{i(\Phi)} \equiv S_{i(\Phi)} - S_{i(\Phi)}^o \quad (4.3c)$$

$$\Delta V_{i(\Phi)} \equiv V_{i(\Phi)} - V_{i(\Phi)}^o \quad (4.3d)$$

Az integrális és parciális oldódási Gibbs energiák közötti kapcsolatok:

$$\Delta G_\Phi = (1 - x_{B(\Phi)}) \cdot \Delta G_{A(\Phi)} + x_{B(\Phi)} \cdot \Delta G_{B(\Phi)} \quad (4.4)$$

$$\Delta G_{B(\Phi)} = \Delta G_{(\Phi)} + (1 - x_{B(\Phi)}) \cdot \frac{d\Delta G_{(\Phi)}}{dx_{B(\Phi)}} \quad (4.4a)$$

$$\Delta G_{A(\Phi)} = \Delta G_{(\Phi)} - x_{B(\Phi)} \cdot \frac{d\Delta G_{(\Phi)}}{dx_{B(\Phi)}} \quad (4.4b)$$

Az integrális és parciális oldódási belső energiák közötti kapcsolatok:

$$\Delta U_\Phi = (1 - x_{B(\Phi)}) \cdot \Delta U_{A(\Phi)} + x_{B(\Phi)} \cdot \Delta U_{B(\Phi)} \quad (4.4c)$$

$$\Delta U_{B(\Phi)} = \Delta U_{(\Phi)} + (1 - x_{B(\Phi)}) \cdot \frac{d\Delta U_{(\Phi)}}{dx_{B(\Phi)}} \quad (4.4d)$$

$$\Delta U_{A(\Phi)} = \Delta U_{(\Phi)} - x_{B(\Phi)} \cdot \frac{d\Delta U_{(\Phi)}}{dx_{B(\Phi)}} \quad (4.4e)$$

Az integrális és parciális oldódási entalpiák közötti kapcsolatok:

$$\Delta H_{\Phi} = (1 - x_{B(\Phi)}) \cdot \Delta H_{A(\Phi)} + x_{B(\Phi)} \cdot \Delta H_{B(\Phi)} \quad (4.4f)$$

$$\Delta H_{B(\Phi)} = \Delta H_{(\Phi)} + (1 - x_{B(\Phi)}) \cdot \frac{d\Delta H_{(\Phi)}}{dx_{B(\Phi)}} \quad (4.4d)$$

$$\Delta H_{A(\Phi)} = \Delta H_{(\Phi)} - x_{B(\Phi)} \cdot \frac{d\Delta H_{(\Phi)}}{dx_{B(\Phi)}} \quad (4.4e)$$

Az integrális és parciális oldódási entrópiák közötti kapcsolatok:

$$\Delta S_{\Phi} = (1 - x_{B(\Phi)}) \cdot \Delta S_{A(\Phi)} + x_{B(\Phi)} \cdot \Delta S_{B(\Phi)} \quad (4.4f)$$

$$\Delta S_{B(\Phi)} = \Delta S_{(\Phi)} + (1 - x_{B(\Phi)}) \cdot \frac{d\Delta S_{(\Phi)}}{dx_{B(\Phi)}} \quad (4.4g)$$

$$\Delta S_{A(\Phi)} = \Delta S_{(\Phi)} - x_{B(\Phi)} \cdot \frac{d\Delta S_{(\Phi)}}{dx_{B(\Phi)}} \quad (4.4h)$$

Az integrális és parciális oldódási moláris térfogatok közötti kapcsolatok:

$$\Delta V_{\Phi} = (1 - x_{B(\Phi)}) \cdot \Delta V_{A(\Phi)} + x_{B(\Phi)} \cdot \Delta V_{B(\Phi)} \quad (4.4i)$$

$$\Delta V_{B(\Phi)} = \Delta V_{(\Phi)} + (1 - x_{B(\Phi)}) \cdot \frac{d\Delta V_{(\Phi)}}{dx_{B(\Phi)}} \quad (4.4j)$$

$$\Delta V_{A(\Phi)} = \Delta V_{(\Phi)} - x_{B(\Phi)} \cdot \frac{d\Delta V_{(\Phi)}}{dx_{B(\Phi)}} \quad (4.4k)$$

A parciális Gibbs energiák, belső energiák, entalpiák, entrópiák és moláris térfogatok határértékei:

$$\Delta G_{i(\Phi)} = 0 \quad \text{és} \quad G_{i(\Phi)} = G_{i(\Phi)}^o, \quad \text{ha } x_{i(\Phi)} = 1 \quad (4.5)$$

$$\Delta U_{i(\Phi)} = 0 \quad \text{és} \quad U_{i(\Phi)} = U_{i(\Phi)}^o, \quad \text{ha } x_{i(\Phi)} = 1 \quad (4.5a)$$

$$\Delta H_{i(\Phi)} = 0 \quad \text{és} \quad H_{i(\Phi)} = H_{i(\Phi)}^o, \quad \text{ha } x_{i(\Phi)} = 1 \quad (4.5b)$$

$$\Delta S_{i(\Phi)} = 0 \quad \text{és} \quad S_{i(\Phi)} = S_{i(\Phi)}^o, \quad \text{ha } x_{i(\Phi)} = 1 \quad (4.5c)$$

$$\Delta V_{i(\Phi)} = 0 \quad \text{és} \quad V_{i(\Phi)} = V_{i(\Phi)}^o, \quad \text{ha } x_{i(\Phi)} = 1 \quad (4.5d)$$

A két oldatból álló keverék átlagos Gibbs energiája, belső energiája, entalpiája, entrópiája és moláris térfogata:

$$G^{kev} = (1 - y_{\beta}) \cdot G_{\alpha} + y_{\beta} \cdot G_{\beta} \quad (4.6)$$

$$U^{kev} = (1 - y_{\beta}) \cdot U_{\alpha} + y_{\beta} \cdot U_{\beta} \quad (4.6a)$$

$$H^{kev} = (1 - y_{\beta}) \cdot H_{\alpha} + y_{\beta} \cdot H_{\beta} \quad (4.6b)$$

$$S^{kev} = (1 - y_{\beta}) \cdot S_{\alpha} + y_{\beta} \cdot S_{\beta} \quad (4.6c)$$

$$V^{kev} = (1 - y_{\beta}) \cdot V_{\alpha} + y_{\beta} \cdot V_{\beta} \quad (4.6d)$$

A folyékony oldat és a gőzelegy egyensúlya egy  $i$  komponensre:

$$G_{i(l)}^o + \Delta G_{i(l)} = G_{i(g)}^o + R \cdot T \cdot \ln\left(\frac{p_i}{p^o}\right) \quad (4.7a)$$

$$p_i = p^o \cdot \exp\left(\frac{\Delta G_{i(l)} - \Delta_v G_{i(T)}^o}{R \cdot T}\right) \quad (4.7b)$$

$$p_i = p_i^o \cdot \exp\left(\frac{\Delta G_{i(l)}}{R \cdot T}\right) \quad (4.7c)$$

$$p_i = p_i^o \quad \text{ha } x_{i(l)} = 1 \quad (4.7d)$$

$$p_i = a_{i(\Phi)} \cdot p_i^o \quad (4.7e)$$

Az  $i$  komponens aktivitásának definíciója egy  $\Phi$  fázisban:

$$a_{i(\Phi)} \equiv \exp\left(\frac{\Delta G_{i(\Phi)}}{R \cdot T}\right) \quad (4.8a)$$

$$a_{i(\Phi)} = 0 \quad \text{ha } x_{i(\Phi)} = 0 \quad (4.8b)$$

$$a_{i(\Phi)} = 1 \quad \text{ha } x_{i(\Phi)} = 1 \quad (4.8c)$$

Az  $i$  komponens aktivitási tényezőjének definíciója egy  $\Phi$  fázisban:

$$\gamma_{i(\Phi)} \equiv \frac{a_{i(\Phi)}}{x_{i(\Phi)}} \quad (4.8d)$$

$$\gamma_{i(\Phi)} = 1 \quad \text{ha } x_{i(\Phi)} = 1 \quad (4.8e)$$

Az  $i$  komponens parciális oldódási Gibbs energia változása egy  $\Phi$  fázisban:

$$\Delta G_{i(\Phi)} = R \cdot T \cdot \ln a_{i(\Phi)} \quad (4.9a)$$

Az  $i$  komponens parciális Gibbs energiája egy  $\Phi$  fázisban:

$$G_{i(\Phi)} = G_{i(\Phi)}^o + R \cdot T \cdot \ln a_{i(\Phi)} \quad (4.9b)$$

Az integrális oldódási Gibbs energia-, belső energia, entalpia-, entrópia és moláris térfogatváltozások közötti összefüggések:

$$\Delta G_{\Phi} = \Delta H_{\Phi} - T \cdot \Delta S_{\Phi} \quad (4.10)$$

$$\Delta G_{\Phi} = \Delta U_{\Phi} + p \cdot \Delta V_{\Phi} - T \cdot \Delta S_{\Phi} \quad (4.10a)$$

$$\Delta H_{\Phi} = \Delta U_{\Phi} + p \cdot \Delta V_{\Phi} \quad (4.10b)$$

A parciális oldódási Gibbs energia-, belső energia, entalpia-, entrópia és moláris térfogatváltozások közötti összefüggések:

$$\Delta G_{i(\Phi)} = \Delta H_{i(\Phi)} - T \cdot \Delta S_{i(\Phi)} \quad (4.11)$$

$$\Delta G_{i(\Phi)} = \Delta U_{i(\Phi)} + p \cdot \Delta V_{i(\Phi)} - T \cdot \Delta S_{i(\Phi)} \quad (4.11a)$$

$$\Delta H_{i(\Phi)} = \Delta U_{i(\Phi)} + p \cdot \Delta V_{i(\Phi)} \quad (4.11b)$$

Az integrális oldódási entalpia számítása kaloriméteres mérés eredményéből:

$$\Delta H_{\Phi} = -k \cdot \frac{\Delta T}{n_{A(\Phi)} + n_{B(\Phi)}} \quad (4.12)$$

Az integrális oldódási Gibbs energia és entrópia felbontása ideális és többlet tagokra:

$$\Delta G_{\Phi} = \Delta G_{\Phi}^{id} + \Delta G_{\Phi}^E \quad (4.13a)$$

$$\Delta S_{\Phi} = \Delta S_{\Phi}^{id} + \Delta S_{\Phi}^E \quad (4.13b)$$

Az integrális oldódási belső energia, entalpia és moláris térfogat értéke ideális oldatban:

$$\Delta U_{\Phi}^{id} \equiv 0, \quad \Delta H_{\Phi}^{id} \equiv 0 \quad \Delta V_{\Phi}^{id} \equiv 0 \quad (4.13c)$$

Az integrális oldódási Gibbs energia és entrópia közötti összefüggés ideális oldatokban:

$$\Delta G_{\Phi}^{id} = -T \cdot \Delta S_{\Phi}^{id} \quad (4.13d)$$

Az integrális oldódási többlet Gibbs energiára érvényes képletek:

$$\Delta G_{\Phi}^E = \Delta H_{\Phi} - T \cdot \Delta S_{\Phi}^E \quad (4.13e)$$

$$\Delta G_{\Phi}^E = \Delta U_{\Phi} + p \cdot \Delta V_{\Phi} - T \cdot \Delta S_{\Phi}^E \quad (4.13f)$$

A parciális oldódási Gibbs energia felbontása ideális és többlet tagokra:

$$\Delta G_{i(\Phi)} = \Delta G_{i(\Phi)}^{id} + \Delta G_{i(\Phi)}^E \quad (4.14a)$$

$$\Delta G_{i(\Phi)} = R \cdot T \cdot \ln x_{i(\Phi)} + R \cdot T \cdot \ln \gamma_{i(\Phi)} \quad (4.14b)$$

$$\Delta G_{i(\Phi)}^{id} = R \cdot T \cdot \ln x_{i(\Phi)} \quad (4.14c)$$

$$\Delta G_{i(\Phi)}^E = R \cdot T \cdot \ln \gamma_{i(\Phi)} \quad (4.14d)$$

A parciális oldódási entrópiaváltozás ideális- és többlet- tagjai:

$$\Delta S_{i(\Phi)} = \Delta S_{i(\Phi)}^{id} + \Delta S_{i(\Phi)}^E \quad (4.14e)$$

Az ideális oldat képződését kísérő parciális belső energia-, entalpia- és moláris térfogat változások értékei definíció szerint:

$$\Delta U_{i(\Phi)}^{id} \equiv 0, \quad \Delta H_{i(\Phi)}^{id} \equiv 0 \quad \Delta V_{i(\Phi)}^{id} \equiv 0 \quad (4.14f)$$

Az ideális oldat kialakulását kísérő parciális oldódási Gibbs energia- és entrópia-változás kapcsolata:

$$\Delta G_{i(\Phi)}^{id} = -T \cdot \Delta S_{i(\Phi)}^{id} \quad (4.14g)$$

A parciális oldódási többlet Gibbs energia képletei:

$$\Delta G_{i(\Phi)}^E = \Delta H_{i(\Phi)} - T \cdot \Delta S_{i(\Phi)}^E \quad (4.14h)$$

$$\Delta G_{i(\Phi)}^E = \Delta U_{i(\Phi)} + p \cdot \Delta V_{i(\Phi)} - T \cdot \Delta S_{i(\Phi)}^E \quad (4.14i)$$

$$\Delta H_{i(\Phi)} = \Delta U_{i(\Phi)} + p \cdot \Delta V_{i(\Phi)} \quad (4.14j)$$

A fenti integrális és parciális mennyiségek közötti kapcsolatok:

$$\Delta G_{\Phi}^{id} = (1 - x_{B(\Phi)}) \cdot \Delta G_{A(\Phi)}^{id} + x_{B(\Phi)} \cdot \Delta G_{B(\Phi)}^{id} \quad (4.14k)$$

$$\Delta S_{\Phi}^{id} = (1 - x_{B(\Phi)}) \cdot \Delta S_{A(\Phi)}^{id} + x_{B(\Phi)} \cdot \Delta S_{B(\Phi)}^{id} \quad (4.14l)$$

$$\Delta G_{\Phi}^E = (1 - x_{B(\Phi)}) \cdot \Delta G_{A(\Phi)}^E + x_{B(\Phi)} \cdot \Delta G_{B(\Phi)}^E \quad (4.14m)$$

$$\Delta S_{\Phi}^E = (1 - x_{B(\Phi)}) \cdot \Delta S_{A(\Phi)}^E + x_{B(\Phi)} \cdot \Delta S_{B(\Phi)}^E \quad (4.14n)$$

$$G_{\Phi}^{id} = (1 - x_{B(\Phi)}) \cdot G_{A(\Phi)}^{id} + x_{B(\Phi)} \cdot G_{B(\Phi)}^{id} \quad (4.14o)$$

$$S_{\Phi}^{id} = (1 - x_{B(\Phi)}) \cdot S_{A(\Phi)}^{id} + x_{B(\Phi)} \cdot S_{B(\Phi)}^{id} \quad (4.14p)$$

$$G_{\Phi} = (1 - x_{B(\Phi)}) \cdot G_{A(\Phi)} + x_{B(\Phi)} \cdot G_{B(\Phi)} \quad (4.14q)$$

$$S_{\Phi} = (1 - x_{B(\Phi)}) \cdot S_{A(\Phi)} + x_{B(\Phi)} \cdot S_{B(\Phi)} \quad (4.14r)$$



Egy oldat kialakulásának sematikus folyamata:

$$0,25 \cdot (A - A) + 0,25 \cdot (B - B) = 0,5 \cdot (A - B) \quad (4.15)$$

Egy oldat kialakulását kísérő belső energia változás:

$$\Delta U = 0,5 \cdot U_{AB} - 0,25 \cdot (U_{AA} + U_{BB}) \quad (4.16)$$

Az ideális  $\Phi$  oldatban lévő  $i$  komponens parciális oldódási entrópiája:

$$\Delta S_{i(\Phi)}^{id} \equiv S_{i(\Phi)}^{id} - S_{i(\Phi)}^o \quad (4.17a)$$

$$S_{i(\Phi)}^{id} = S_{i(\Phi)}^o + \Delta S_{i(\Phi)}^{conf} \quad (4.17b)$$

$$\Delta S_{i(\Phi)}^{id} = \Delta S_{i(\Phi)}^{conf} \quad (4.17c)$$

$$\Delta S_{i(\Phi)}^{conf} = R \cdot \ln W_{i(\Phi)}^{conf} \quad (4.17d)$$

$$\Delta S_{i(\Phi)}^{id} = -R \cdot \ln x_{i(\Phi)} \quad (4.17e)$$

Az ideális  $\Phi$  oldat integrális oldódási entrópiája:

$$\Delta S_{\Phi}^{id} = -R \cdot \left[ (1 - x_{B(\Phi)}) \cdot \ln(1 - x_{B(\Phi)}) + x_{B(\Phi)} \cdot \ln x_{B(\Phi)} \right] \quad (4.17f)$$

Az ideális  $\Phi$  oldat parciális és integrális oldódási Gibbs energiái:

$$\Delta G_{i(\Phi)}^{id} = R \cdot T \cdot \ln x_{i(\Phi)} \quad (4.18a)$$

$$\Delta G_{\Phi}^{id} = R \cdot T \cdot \left[ (1 - x_{B(\Phi)}) \cdot \ln(1 - x_{B(\Phi)}) + x_{B(\Phi)} \cdot \ln x_{B(\Phi)} \right] \quad (4.18b)$$

Az ideális  $\Phi$  oldat parciális és integrális Gibbs energiái:

$$G_{i(\Phi)}^{id} = G_{i(\Phi)}^o + R \cdot T \cdot \ln x_{i(\Phi)} \quad (4.19a)$$

$$G_{\Phi}^{id} = (1 - x_{B(\Phi)}) \cdot G_{A(\Phi)}^o + x_{B(\Phi)} \cdot G_{B(\Phi)}^o + R \cdot T \cdot \left[ (1 - x_{B(\Phi)}) \cdot \ln(1 - x_{B(\Phi)}) + x_{B(\Phi)} \cdot \ln x_{B(\Phi)} \right] \quad (4.19b)$$

Az ideális  $\Phi$  oldatban lévő  $i$  komponens aktivitása és aktivitási tényezője:

$$a_{i(\Phi)}^{id} = x_{i(\Phi)} \quad (4.20a)$$

$$\gamma_{i(\Phi)}^{id} = 1 \quad (4.20b)$$

Ideális gőzelegy és gázelegyben érvényes parciális nyomás, összes nyomás és móltört:

$$x_{i(g)} = \frac{p_i}{p} \quad (4.21a)$$

$$p = p_A + p_B \quad (4.21b)$$

$$p_i = x_{i(g)} \cdot p \quad (4.21c)$$

Ideális gőzelegyben lévő  $i$  komponens parciális Gibbs energiája:

$$G_{i(g,p)}^{id} = G_{i(g)}^o + R \cdot T \cdot \ln \left( \frac{x_{i(g)} \cdot p}{p^o} \right) \quad (4.22a)$$

$$G_{i(g,p)}^{id} = G_{i(g)}^o + R \cdot T \cdot \ln \left( \frac{p_i}{p^o} \right) \quad (4.22b)$$

Ideális gőzelegy integrális Gibbs energiája:

$$G_{g,p}^{id} = \frac{p_A}{p} \cdot G_{A(g)}^o + \frac{p_B}{p} \cdot G_{B(g)}^o + R \cdot T \cdot \left[ \frac{p_A}{p} \cdot \ln \left( \frac{p_A}{p^o} \right) + \frac{p_B}{p} \cdot \ln \left( \frac{p_B}{p^o} \right) \right] \quad (4.22c)$$

Ideális folyékony oldat és ideális gőzelegy egyensúlyának feltétele egy  $i$  komponensre:

$$G_{i(l)}^o + R \cdot T \cdot \ln x_{i(l)} = G_{i(g)}^o + R \cdot T \cdot \ln \left( \frac{p_i}{p^o} \right) \quad (4.23a)$$

$$p_i^{id} = x_{i(l)} \cdot p^o \cdot \exp \left( \frac{G_{i(l)}^o - G_{i(g)}^o}{R \cdot T} \right) \quad (4.23b)$$

$$p_i^{id} = x_{i(l)} \cdot p_i^o \quad (4.23c)$$

Az A-A párok kialakulása egy kondenzált oldatban és a párkölcsönhatási energia képlete:

$$A_g = A_l = 0,5 \cdot (A - A)_l \quad (4.24a)$$

$$\Delta_c U_A^o = 0,5 \cdot U_{AA} - U_{A(g)}^o \quad (4.24b)$$

$$U_{AA} = -2 \cdot \Delta_v U_A^o = -2 \cdot (\Delta_v H_A^o - p^o \cdot \Delta_v V_A^o) \quad (\text{ha } T \geq T_{m,A}^o) \quad (4.24c)$$

$$U_{AA} = -2 \cdot \Delta_s U_A^o = -2 \cdot (\Delta_s H_A^o - p^o \cdot \Delta_s V_A^o) \quad (\text{ha } T \leq T_{m,A}^o) \quad (4.24d)$$

A fenti két egyenlet a B-B párokra:

$$U_{BB} = -2 \cdot \Delta_v U_B^o = -2 \cdot (\Delta_v H_B^o - p^o \cdot \Delta_v V_B^o) \quad (\text{ha } T \geq T_{m,B}^o) \quad (4.24e)$$

$$U_{BB} = -2 \cdot \Delta_s U_B^o = -2 \cdot (\Delta_s H_B^o - p^o \cdot \Delta_s V_B^o) \quad (\text{ha } T \leq T_{m,B}^o) \quad (4.24f)$$

Az  $(1-x_{B(\Phi)})$  mol,  $\Phi$  állapotú tiszta A és  $x_{B(\Phi)}$  mol  $\Phi$  állapotú tiszta B oldásából kialakuló, 1 mol atomot tartalmazó,  $\Phi$  állapotú A-B oldat képződése és az azt kísérő belső energia-változás a reguláris oldatmodell keretein belül:

$$\frac{1-x_{B(\Phi)}}{2} \cdot (A-A)_\Phi + \frac{x_{B(\Phi)}}{2} \cdot (B-B)_\Phi = \frac{1}{2} \cdot \left[ \begin{array}{l} x_{AA(\Phi)} \cdot (A-A)_\Phi + \\ + x_{BB(\Phi)} \cdot (B-B)_\Phi + \\ + x_{AB(\Phi)} \cdot (A-B)_\Phi \end{array} \right] \quad (4.25a)$$

$$\Delta U_\Phi^{reg} = \frac{1}{2} \cdot \left[ \begin{array}{l} (x_{AA(\Phi)} \cdot U_{AA(\Phi)} + x_{BB(\Phi)} \cdot U_{BB(\Phi)} + x_{AB(\Phi)} \cdot U_{AB(\Phi)}) - \\ - (1-x_{B(\Phi)} \cdot U_{AA(\Phi)} + x_{B(\Phi)} \cdot U_{BB(\Phi)}) \end{array} \right] \quad (4.25b)$$

$$\Delta U_\Phi^{reg} = \frac{1}{2} \cdot \left[ \begin{array}{l} (1-x_{B(\Phi)})^2 \cdot U_{AA(\Phi)} + x_{B(\Phi)}^2 \cdot U_{BB(\Phi)} + \\ + 2 \cdot (1-x_{B(\Phi)}) \cdot x_{B(\Phi)} \cdot U_{AB(\Phi)} - \\ - (1-x_{B(\Phi)}) \cdot U_{AA(\Phi)} - x_{B(\Phi)} \cdot U_{BB(\Phi)} \end{array} \right] \quad (4.25c)$$

$$\Delta U_\Phi^{reg} = (1-x_{B(\Phi)}) \cdot x_{B(\Phi)} \cdot \left[ U_{AB(\Phi)} - \frac{1}{2} \cdot (U_{AA(\Phi)} + U_{BB(\Phi)}) \right] \quad (4.25d)$$

A párkölcsönhatási energiaváltozás definíciója és az integrális és parciális oldódási entalpiák, belső energiák és Gibbs többletenergiák a reguláris oldatmodell keretein belül:

$$\Omega_\Phi \equiv U_{AB(\Phi)} - \frac{1}{2} \cdot (U_{AA(\Phi)} + U_{BB(\Phi)}) \quad (4.25e)$$

$$\Delta G_\Phi^{E,reg} \equiv \Delta H_\Phi^{reg} \equiv \Delta U_\Phi^{reg} = \Omega_\Phi \cdot (1-x_{B(\Phi)}) \cdot x_{B(\Phi)} \quad (4.25f)$$

$$\Delta G_{B(\Phi)}^{E,reg} \equiv \Delta H_{B(\Phi)}^{reg} \equiv \Delta U_{B(\Phi)}^{reg} = \Omega_\Phi \cdot (1-x_{B(\Phi)})^2 \quad (4.25g)$$

$$\Delta G_{A(\Phi)}^{E,reg} \equiv \Delta H_{A(\Phi)}^{reg} \equiv \Delta U_{A(\Phi)}^{reg} = \Omega_\Phi \cdot x_{B(\Phi)}^2 \quad (4.25h)$$

A parciális és integrális Gibbs energiák a reguláris oldatmodell keretein belül:

$$G_{i(\Phi)}^{reg} = G_{i(\Phi)}^o + R \cdot T \cdot \ln x_{i(\Phi)} + \Omega_{\Phi} \cdot (1 - x_{i(\Phi)})^2 \quad (4.26a)$$

$$G_{\Phi}^{reg} = \sum_i x_{i(\Phi)} \cdot \left[ G_{i(\Phi)}^o + R \cdot T \cdot \ln x_{i(\Phi)} + \Omega_{\Phi} \cdot (1 - x_{i(\Phi)})^2 \right] \quad (4.26b)$$

$$G_{\Phi}^{reg} = (1 - x_{B(\Phi)}) \cdot \left[ G_{A(\Phi)}^o + R \cdot T \cdot \ln(1 - x_{B(\Phi)}) \right] + x_{B(\Phi)} \cdot \left( G_{B(\Phi)}^o + R \cdot T \cdot \ln x_{B(\Phi)} \right) + \Omega_{\Phi} \cdot (1 - x_{B(\Phi)}) \cdot x_{B(\Phi)} \quad (4.26c)$$

A két oldat keverékéből kialakuló egy stabil oldat megjelenésének feltétele és kritikus hőmérséklete:

$$\frac{d^2 G}{dx_{B(\Phi)}^2} > 0 \quad (4.26d)$$

$$T_{kr,\Phi} = \frac{\Omega_{\Phi}}{2 \cdot R} \quad (4.26e)$$

A többlet oldódási entrópia és az oldáshő közötti összefüggés és a többlet Gibbs energia innen következő  $T$ -függése:

$$\Delta S_{\Phi}^E \cong \frac{\Delta H_{\Phi}}{\tau_S} \quad (4.27a)$$

$$\Delta G_{\Phi}^E = \Delta H_{\Phi} \cdot \left( 1 - \frac{T}{\tau_S} \right) \quad (4.27b)$$

A termodinamika IV. főtételének matematikai megfogalmazása:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \Delta G_{i(\Phi)}^E = \lim_{T \rightarrow \infty} \Delta G_{\Phi}^E = 0 \quad (4.28a)$$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \gamma_{i(\Phi)} = 1 \quad (4.28b)$$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} a_{i(\Phi)} = x_{i(\Phi)} \quad (4.28c)$$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \Delta S_{i(\Phi)}^E = \lim_{T \rightarrow \infty} \Delta S_{\Phi}^E = 0 \quad (4.28d)$$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \Delta H_{i(\Phi)} = \lim_{T \rightarrow \infty} \Delta H_{\Phi} = 0 \quad (4.28e)$$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \Delta U_{i(\Phi)} = \lim_{T \rightarrow \infty} \Delta U_{\Phi} = 0 \quad (4.28f)$$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \Delta V_{i(\Phi)} = \lim_{T \rightarrow \infty} \Delta V_{\Phi} = 0 \quad (4.28g)$$

Az oldódási hőkapacitás változás definíciója és az oldáshő, illetve oldódási többlet entrópia változás hőmérsékletfüggése:

$$\Delta C_{p,\Phi} \equiv \frac{d\Delta H_{\Phi}}{dT} \quad (4.29a)$$

$$\Delta H_{\Phi,T} = \Delta H_{\Phi,T^o} + \Delta C_{p,\Phi} \cdot (T - T^o) \quad (4.29b)$$

$$\Delta S_{\Phi,T}^E = \Delta S_{\Phi,T^o}^E + \Delta C_{p,\Phi} \cdot \ln \left( \frac{T}{T^o} \right) \quad (4.29c)$$

A IV. főtétellel összhangban lévő, a többlet oldódási Gibbs energia  $T$ -függését leíró egyenlet:

$$\Delta G_{\Phi}^E = \Delta H_{\Phi,0K} \cdot \exp\left(-\frac{T}{\tau_{\Phi}}\right) \quad (4.30a)$$

Az előző egyenlet és a reguláris oldatmodell kombinációja:

$$\Delta G_{\Phi}^E = \Omega_{\Phi} \cdot x_{B(\Phi)} \cdot (1 - x_{B(\Phi)}) \cdot \exp\left(-\frac{T}{\tau_{\Phi}}\right) \quad (4.30b)$$

A Calphad közösség által használt, a többlet oldódási Gibbs energia koncentrációfüggését leíró egyenlet:

$$\Delta G_{\Phi}^E = x_{B(\Phi)} \cdot (1 - x_{B(\Phi)}) \cdot \sum_{j=0} L_{\Phi,j} \cdot (1 - 2 \cdot x_{B(\Phi)})^j \quad (4.31a)$$

$$\Delta G_{\Phi}^E = x_{B(\Phi)} \cdot (1 - x_{B(\Phi)}) \cdot [L_{\Phi,0} + L_{\Phi,1} \cdot (1 - 2 \cdot x_{B(\Phi)}) + L_{\Phi,2} \cdot (1 - 2 \cdot x_{B(\Phi)})^2] \quad (4.31b)$$

$$\Delta G_{A(\Phi)}^E = x_{B(\Phi)}^2 \cdot [L_{\Phi,0} + L_{\Phi,1} \cdot (3 - 4 \cdot x_{B(\Phi)}) + L_{\Phi,2} \cdot (5 - 16 \cdot x_{B(\Phi)} + 12 \cdot x_{B(\Phi)}^2)] \quad (4.31c)$$

$$\Delta G_{B(\Phi)}^E = (1 - x_{B(\Phi)})^2 \cdot [L_{\Phi,0} + L_{\Phi,1} \cdot (1 - 4 \cdot x_{B(\Phi)}) + L_{\Phi,2} \cdot (1 - 8 \cdot x_{B(\Phi)} + 12 \cdot x_{B(\Phi)}^2)] \quad (4.31d)$$

A kölcsönhatási energiák hőmérsékletfüggése a klasszikus módon leírva és összhangban a IV. főtétellel:

$$L_{\Phi,j} = h_{\Phi,j} \cdot \left(1 - \frac{T}{\tau_{\Phi,j}}\right) \quad (4.31e)$$

$$L_{\Phi,j} = h_{\Phi,j} \cdot \exp\left(-\frac{T}{\tau_{\Phi,j}}\right) \quad (4.31f)$$

Egy A-B oldatfázis integrális Gibbs energiája:

$$G_{\Phi} = (1 - x_{B(\Phi)}) \cdot G_{A(\Phi)}^o + x_{B(\Phi)} \cdot G_{B(\Phi)}^o + R \cdot T \cdot [(1 - x_{B(\Phi)}) \cdot \ln(1 - x_{B(\Phi)}) + x_{B(\Phi)} \cdot \ln x_{B(\Phi)}] + \Delta G_{\Phi}^E \quad (4.32a)$$

Az AB asszociátumok keletkezésének reakcióegyenlete:



A modell-oldat integrális Gibbs energiája az asszociált oldatmodellben:

$$G_{\Phi}^{\text{mod}} = x_{A1} \cdot G_{A(\Phi)}^o + x_{B1} \cdot G_{B(\Phi)}^o + x_{AB} \cdot G_{AB(\Phi)}^o + R \cdot T \cdot [x_{A1} \cdot \ln x_{A1} + x_{B1} \cdot \ln x_{B1} + x_{AB} \cdot \ln x_{AB}] \quad (4.32c)$$

$$G_{\Phi} = n_{\text{mod}} \cdot G_{\Phi}^{\text{mod}} \quad (4.32d)$$

$$\Delta G_{\Phi}^E = (n_{\text{mod}} \cdot x_{A1} + x_{B(\Phi)} - 1) \cdot G_{A(\Phi)}^o + (n_{\text{mod}} \cdot x_{B1} - x_{B(\Phi)}) \cdot G_{B(\Phi)}^o + n_{\text{mod}} \cdot x_{AB} \cdot G_{AB(\Phi)}^o + R \cdot T \cdot \left[ \begin{aligned} &n_{\text{mod}} \cdot x_{A1} \cdot \ln x_{A1} + n_{\text{mod}} \cdot x_{B1} \cdot \ln x_{B1} + n_{\text{mod}} \cdot x_{AB} \cdot \ln x_{AB} - \\ &-(1 - x_{B(\Phi)}) \cdot \ln(1 - x_{B(\Phi)}) - x_{B(\Phi)} \cdot \ln x_{B(\Phi)} \end{aligned} \right] \quad (4.32e)$$

A (4.32b) reakcióegyenlet egyensúlya:

$$G_{AB(\Phi)}^o = G_{A(\Phi)}^o + G_{B(\Phi)}^o + \Delta_f G_{AB(\Phi)}^o \quad (4.32f)$$

$$\Delta_f G_{AB(\Phi)}^o = \Delta_f H_{AB(\Phi)}^o - T \cdot \Delta_f S_{AB(\Phi)}^o \quad (4.32g)$$

$$G_{A(\Phi)}^o + R \cdot T \cdot \ln x_{A1} + G_{B(\Phi)}^o + R \cdot T \cdot \ln x_{B1} = G_{AB(\Phi)}^o + R \cdot T \cdot \ln x_{AB} \quad (4.32h)$$

$$\frac{x_{AB}}{x_{A1} \cdot x_{B1}} = \exp\left(\frac{G_{A(\Phi)}^o + G_{B(\Phi)}^o - G_{AB(\Phi)}^o}{R \cdot T}\right) \quad (4.32i)$$

$$\frac{x_{AB}}{x_{A1} \cdot x_{B1}} = \exp\left(\frac{-\Delta_f G_{AB(\Phi)}^o}{R \cdot T}\right) \equiv K \quad (4.32j)$$

Anyagmérlegek az asszociált oldatmodellben:

$$1 - x_{B(\Phi)} = n_{A1} + n_{AB} \quad (4.32k)$$

$$x_{B(\Phi)} = n_{B1} + n_{AB} \quad (4.32l)$$

$$n_{A1} = 1 - x_{B(\Phi)} - n_{AB} \quad (4.32m)$$

$$n_{B1} = x_{B(\Phi)} - n_{AB} \quad (4.32n)$$

$$n_{\text{mod}} = 1 - n_{AB} \quad (4.32o)$$

$$x_{A1} = \frac{1 - x_{B(\Phi)} - n_{AB}}{1 - n_{AB}} \quad (4.32p)$$

$$x_{B1} = \frac{x_{B(\Phi)} - n_{AB}}{1 - n_{AB}} \quad (4.32q)$$

$$x_{AB} = \frac{n_{AB}}{1 - n_{AB}} \quad (4.32r)$$

Az asszociált oldatmodell megoldó képletei:

$$\frac{n_{AB} \cdot (1 - n_{AB})}{(1 - x_{B(\Phi)} - n_{AB}) \cdot (x_{B(\Phi)} - n_{AB})} = K \quad (4.32s)$$

$$n_{AB} = \frac{1}{2} \cdot \left[ 1 - \sqrt{1 - \frac{4 \cdot K}{K + 1} \cdot x_{B(\Phi)} \cdot (1 - x_{B(\Phi)})} \right] \quad (4.32t)$$

$$\begin{aligned} \Delta G_{\Phi}^E &= n_{AB} \cdot \Delta_f G_{AB(\Phi)}^o + \\ &+ R \cdot T \cdot \left[ (1 - x_{B(\Phi)} - n_{AB}) \cdot \ln(1 - x_{B(\Phi)} - n_{AB}) + (x_{B(\Phi)} - n_{AB}) \cdot \ln(x_{B(\Phi)} - n_{AB}) + \right. \\ &\left. + n_{AB} \cdot \ln n_{AB} - (1 - n_{AB}) \cdot \ln(1 - n_{AB}) - (1 - x_{B(\Phi)}) \cdot \ln(1 - x_{B(\Phi)}) - x_{B(\Phi)} \cdot \ln x_{B(\Phi)} \right] \end{aligned} \quad (4.32u)$$

Az aktivitás és a parciális többlet Gibbs energiák az asszociált oldatmodellben:

$$a_{A(\Phi)} = x_{A1} \quad (4.33a)$$

$$\Delta G_{A(\Phi)}^E = R \cdot T \cdot \ln\left(\frac{1 - x_{B(\Phi)} - n_{AB}}{(1 - n_{AB}) \cdot (1 - x_{B(\Phi)})}\right) \quad (4.33b)$$

$$a_{B(\Phi)} = x_{B1} \quad (4.33c)$$

$$\Delta G_{B(\Phi)}^E = R \cdot T \cdot \ln\left(\frac{x_{B(\Phi)} - n_{AB}}{(1 - n_{AB}) \cdot x_{B(\Phi)}}\right) \quad (4.33d)$$

Egy kémiai reakcióegyenlet és annak egyensúlyát leíró képletek:

$$a \cdot A + b \cdot B = c \cdot C \quad (4.34a)$$

$$a \cdot (G_{A(\Phi)}^o + R \cdot T \cdot \ln a_{A(\Phi)}) + b \cdot (G_{B(\Phi)}^o + R \cdot T \cdot \ln a_{B(\Phi)}) = c \cdot (G_{C(\Phi)}^o + R \cdot T \cdot \ln a_{C(\Phi)}) \quad (4.34b)$$

$$\frac{a_{C(\Phi)}^c}{a_{A(\Phi)}^a \cdot a_{B(\Phi)}^b} = \exp\left(\frac{a \cdot G_{A(\Phi)}^o + b \cdot G_{B(\Phi)}^o - c \cdot G_{C(\Phi)}^o}{R \cdot T}\right) \quad (4.34ba)$$

$$\Delta_{4.34a} G^o = c \cdot G_{C(\Phi)}^o - (a \cdot G_{A(\Phi)}^o + b \cdot G_{B(\Phi)}^o) \quad (4.34c)$$

$$\frac{a_{C(\Phi)}^c}{a_{A(\Phi)}^a \cdot a_{B(\Phi)}^b} = \exp\left(\frac{-\Delta_{4.34a} G^o}{R \cdot T}\right) \quad (4.34d)$$

$$K_{4.34a} \equiv \exp\left(\frac{-\Delta_{4.34a} G^o}{R \cdot T}\right) \quad (4.34e)$$

$$\frac{a_{C(\Phi)}^c}{a_{A(\Phi)}^a \cdot a_{B(\Phi)}^b} = K_{4.34a} \quad (4.34f)$$

Egy  $A^{+n}$  kationokra és  $B^{-m}$  anionokra disszociáló  $A_a B_b$  ionos vegyület elektrokémiai bomlásához szükséges elektronok száma:

$$z \equiv a \cdot n = b \cdot m \quad (4.35a)$$

Az  $A_a B_b$  ionos vegyület bomlásának reakcióegyenlete és az azt kísérő standard Gibbs energia változás:

$$A_a B_b(\gamma) = a \cdot A(\alpha) + b \cdot B(\beta) \quad (4.35b)$$

$$\Delta_{4.35b} G^o = (a \cdot G_{A(\alpha)}^o + b \cdot G_{B(\beta)}^o) - G_{AaBb(\gamma)}^o \quad (4.35c)$$

$$\Delta_{4.35b} G^o = -\Delta_f G_{AaBb(\gamma)}^o \quad (4.35d)$$

A (4.35b) bruttó folyamat lépései:

$$A_a B_b(\gamma) = a \cdot A^{+n}(\gamma) + b \cdot B^{-m}(\gamma) \quad (4.35e)$$

$$\text{A katódon: } a \cdot A^{+n}(\gamma) + z \cdot e^- = a \cdot A(\alpha) \quad (4.35f)$$

$$\text{Az anódon: } b \cdot B^{-m}(\gamma) - z \cdot e^- = b \cdot B(\beta) \quad (4.35g)$$

A potenciálkülönbség által létrehozott Gibbs energia változás és (4.35b) folyamat végbemenetelének feltétele: :

$$\Delta G_e = z \cdot F \cdot \Delta E \quad (4.35h)$$

$$\Delta E \geq -\frac{\Delta_f G_{AaBb(\gamma)}^o}{z \cdot F} \quad (4.35i)$$

Az  $A_a B_b$  ionos vegyület standard bomlásfeszültsége:

$$\Delta E_b^o = -\frac{\Delta_f G_{AaBb(\gamma)}^o}{z \cdot F} \quad (4.35j)$$

A (4.35b) reakcióegyenletet kísérő Gibbs energiaváltozás nem standard állapotban:

$$\Delta_{4.35b} G = a \cdot (G_{A(\alpha)}^o + R \cdot T \cdot \ln a_{A(\alpha)}) + b \cdot (G_{B(\beta)}^o + R \cdot T \cdot \ln a_{B(\beta)}) - (G_{AaBb(\gamma)}^o + R \cdot T \cdot \ln a_{AaBb(\gamma)}) \quad (4.35k)$$

$$\Delta_{4.35b} G = -\Delta_f G_{AaBb(\gamma)}^o + R \cdot T \cdot \ln \frac{a_{A(\alpha)}^a \cdot a_{B(\beta)}^b}{a_{AaBb(\gamma)}} \quad (4.35l)$$

Az  $A_aB_b$  ionos vegyület bomlásfeszültsége (a Nernst egyenlet):

$$\Delta E_b = \Delta E_b^o + \frac{R \cdot T}{z \cdot F} \cdot \ln \frac{a_{A(\alpha)}^a \cdot a_{B(\beta)}^b}{a_{AaBb(\gamma)}} \quad (4.35m)$$

Kapcsolat a szilárd és folyékony oldatok oldódási entalpiái között:

$$\Delta H_s \cong \Delta H_l \cdot (1 + 0,01 \cdot \Delta H_l) \quad (4.36)$$

Kétkomponensű oldat felületének egyensúlya (a Butler egyenlet):

$$\sigma_\Phi = \sigma_{A(\Phi)} = \sigma_{B(\Phi)} \quad (4.37a)$$

A parciális felületi feszültség képlete:

$$\sigma_{i(\Phi)} \equiv \frac{\Delta_s G_{i(\Phi)}}{A_{i(\Phi)}} \quad (4.37b)$$

$$\Delta_s G_{i(\Phi)} \equiv G_{i(\Phi)}^* - G_{i(\Phi),b} \quad (4.37c)$$

$$G_{i(\Phi),b} \cong G_{i(\Phi)}^o + R \cdot T \cdot \ln x_{i(\Phi)} + \Omega_\Phi \cdot (1 - x_{i(\Phi)})^2 \quad (4.37d)$$

$$G_{i(\Phi)}^* \cong G_{i(\Phi)}^{o*} + R \cdot T \cdot \ln x_{i(\Phi)}^* + k^* \cdot \Omega_\Phi \cdot (1 - x_{i(\Phi)}^*)^2 \quad (4.37e)$$

$$\sigma_{i(\Phi)} = \sigma_{i(\Phi)}^o + \frac{R \cdot T}{A_{i(\Phi)}} \cdot \ln \left( \frac{x_{i(\Phi)}^*}{x_{i(\Phi)}} \right) + \frac{\Omega_\Phi}{A_{i(\Phi)}} \cdot \left[ k^* \cdot (1 - x_{i(\Phi)}^*)^2 - (1 - x_{i(\Phi)})^2 \right] \quad (4.37f)$$

$$\sigma_{i(\Phi)}^o \equiv \frac{G_{i(\Phi)}^{o*} - G_{i(\Phi)}^o}{A_{i(\Phi)}^o} \quad (4.37g)$$

Kétkomponensű oldat felületének egyensúlya - a (4.37a) egyenlet teljes alakja:

$$\sigma_{A(\Phi)} = \sigma_{A(\Phi)}^o + \frac{R \cdot T}{A_{A(\Phi)}} \cdot \ln \left( \frac{1 - x_{B(\Phi)}^*}{1 - x_{B(\Phi)}} \right) + \frac{\Omega_\Phi}{A_{A(\Phi)}} \cdot \left[ k^* \cdot (x_{B(\Phi)}^*)^2 - x_{B(\Phi)}^2 \right] = \quad (4.37h)$$

$$= \sigma_{B(\Phi)}^o + \frac{R \cdot T}{A_{B(\Phi)}} \cdot \ln \left( \frac{x_{B(\Phi)}^*}{x_{B(\Phi)}} \right) + \frac{\Omega_\Phi}{A_{B(\Phi)}} \cdot \left[ k^* \cdot (1 - x_{B(\Phi)}^*)^2 - (1 - x_{B(\Phi)})^2 \right] = \sigma_{B(\Phi)}$$

Az előző egyenlet egyszerűsített megoldása:

$$K_{s,B(\Phi)} \cong \exp \left[ \frac{A_{(\Phi)} \cdot (\sigma_{A(\Phi)}^o - \sigma_{B(\Phi)}^o)}{R \cdot T} \right] \quad (4.37i)$$

$$x_{B(\Phi)}^* = \frac{K_{s,B(\Phi)} \cdot x_{B(\Phi)}}{1 + x_{B(\Phi)} \cdot (K_{s,B(\Phi)} - 1)} \quad (4.37j)$$

$$\sigma_\Phi = \sigma_{A(\Phi)}^o + \frac{R \cdot T}{A_\Phi} \cdot \ln \left( \frac{1 - x_{B(\Phi)}^*}{1 - x_{B(\Phi)}} \right) \quad (4.37k)$$

Egy  $A_aB_b$  típusú,  $\gamma$  fázisban lévő, sztöchiometrikus vegyület standard Gibbs-energiája:

$$G_{A_aB_b(\gamma)}^o = a \cdot G_{A(\alpha)}^o + b \cdot G_{B(\beta)}^o + \Delta_f G_{A_aB_b(\gamma)}^o \quad (4.38a)$$

Az  $x$  paraméter definíciója, az így definiált reakcióegyenlet és az ennek megfelelő standard Gibbs-energia egy sztöchiometrikus vegyületre:

$$x \equiv \frac{b}{a + b} \quad (4.38b)$$

$$(1 - x) \cdot A(\alpha) + x \cdot B(\beta) = A_{1-x} B_x(\gamma) \quad (4.38c)$$

$$G_{A_{1-x}B_x(\gamma)}^o = (1-x) \cdot G_{A(\alpha)}^o + x \cdot G_{B(\beta)}^o + \Delta_f G_{A_{1-x}B_x(\gamma)}^o \quad (4.38d)$$

A (4.38a, d) egyenletekkel definiált mennyiségek közötti kapcsolatok:

$$G_{A_{1-x}B_x(\gamma)}^o = \frac{G_{A_d B_b(\gamma)}^o}{a+b} \quad (4.38e)$$

$$\Delta_f G_{A_{1-x}B_x(\gamma)}^o = \frac{\Delta_f G_{A_d B_b(\gamma)}^o}{a+b} \quad (4.38f)$$

A képződési standard Gibbs-energia képletei sztöchiometrikus vegyületre:

$$\Delta_f G_{A_{1-x}B_x(\gamma)}^o = a_{A_{1-x}B_x(\gamma)}^o + b_{A_{1-x}B_x(\gamma)}^o \cdot T + c_{A_{1-x}B_x(\gamma)}^o \cdot T \cdot \ln T + \sum_n d_{A_{1-x}B_x(\gamma),n}^o \cdot T^n \quad (4.38g)$$

$$\Delta_f G_{A_{1-x}B_x(\gamma)}^o = a_{A_{1-x}B_x(\gamma)}^o + b_{A_{1-x}B_x(\gamma)}^o \cdot T \quad (4.38h)$$

$$\Delta_f G_{A_{1-x}B_x(\gamma)}^o = \Delta_f H_{A_{1-x}B_x(\gamma)}^o - T \cdot \Delta_f S_{A_{1-x}B_x(\gamma)}^o \quad (4.38i)$$

A (4.38i) egyenlet tagjai közötti közelítő kapcsolat:

$$\Delta_f S_{A_{1-x}B_x(\gamma)}^o \cong \Delta_f S_{A_{1-x}B_x(\gamma)}^{o*} + \frac{\Delta_f H_{A_{1-x}B_x(\gamma)}^o}{\tau_{A_{1-x}B_x(\gamma)}^o} \quad (4.38j)$$

Közelítő kapcsolat a sztöchiometrikus vegyület képződési entalpiája és a szilárd oldat oldáshője között:

$$\Delta_f H_{A_{1-x}B_x(\gamma)}^o \cong k_H \cdot \Delta H_{s(x=x)} \quad (4.38k)$$

Egy nem-sztöchiometrikus vegyület Gibbs-energiája:

$$G_{A_{1-x}B_x(\gamma)} = (1-x) \cdot G_{A(\alpha)}^o + x \cdot G_{B(\beta)}^o + \Delta_f G_{A_{1-x}B_x(\gamma)} \quad (4.39a)$$

A B komponens anyagmérége egy nem-sztöchiometrikus vegyület alrácsaiban:

$$x_B = \frac{(1-x) \cdot y_B^A + x \cdot y_B^B}{(1-x) \cdot (y_B^A + y_A^A) + x \cdot (y_B^B + y_A^B)} \quad (4.39b)$$

Egy  $(A,B)_{1-x}(B,A)_x$  szerkezeti képletű, nem-sztöchiometrikus vegyület képződési Gibbs-energiája:

$$\begin{aligned} \Delta_f G_{A_{1-x}B_x(\gamma)} &= (1-x) \cdot y_A^A \cdot y_B^A \cdot \Omega_{A,B}^A + x \cdot y_A^B \cdot y_B^B \cdot \Omega_{B,A}^B + \\ &+ R \cdot T \cdot \left[ (1-x) \cdot (y_A^A \cdot \ln y_A^A + y_B^A \cdot \ln y_B^A) + x \cdot (y_A^B \cdot \ln y_A^B + y_B^B \cdot \ln y_B^B) \right] + \\ &+ y_A^A \cdot y_B^B \cdot G_{A:A}^o + y_A^A \cdot y_B^B \cdot G_{A:B}^o + y_B^A \cdot y_A^B \cdot G_{B:A}^o + y_B^A \cdot y_B^B \cdot G_{B:B}^o \end{aligned} \quad (4.39c)$$

Közelítő összefüggések a (4.39c) egyenlet paramétereit között:

$$\Omega_{A,B}^A \cong \Omega_{B,A}^B \cong \Omega_s \quad (4.39d)$$

$$G_{A:A}^o \cong R \cdot T_{m,A}^o \quad (4.39e)$$

$$G_{B:B}^o \cong R \cdot T_{m,B}^o \quad (4.39f)$$

$$G_{B:A}^o \cong G_{A:B}^o \quad (4.39g)$$

Egyszerűsített képlet egy  $A_{0,5}B_{0,5}$  típusú vegyületre:

$$\begin{aligned} \Delta_f G_{A_{0,5}B_{0,5}(\gamma)} &= x_B \cdot (1-x_B) \cdot (\Omega_s + 2 \cdot G_{A:B}^o) + R \cdot T \cdot [x_B \cdot \ln x_B + (1-x_B) \cdot \ln(1-x_B)] + \\ &+ (1-x_B)^2 \cdot G_{A:A}^o + x_B^2 \cdot G_{B:B}^o \end{aligned} \quad (4.39h)$$

Ugyanez  $x_B = x = 0,5$  összetételnél:

$$\Delta_f G_{A_{0,5}B_{0,5}(\gamma), x_B=0,5} = 0,25 \cdot (\Omega_s + G_{A:A}^o + 2 \cdot G_{A:B}^o + G_{B:B}^o) - 0,693 \cdot R \cdot T \quad (4.39i)$$

A komponensek parciális képződési Gibbs-energiái:

$$G_{A(A_{0,5}B_{0,5}(\gamma))} = G_A^o + R \cdot T \cdot \ln(1-x_B) + x_B^2 \cdot (\Omega_s + 2 \cdot G_{A:B}^o - G_{B:B}^o) + (1-x_B^2) \cdot G_{A:A}^o \quad (4.39j)$$

$$G_{B(A_{0,5}B_{0,5}(\gamma))} = G_B^o + R \cdot T \cdot \ln(x_B) + (1-x_B)^2 \cdot (\Omega_s + 2 \cdot G_{A:B}^o - G_{A:A}^o) + x_B \cdot (2-x_B) \cdot G_{B:B}^o \quad (4.39k)$$



Az  $A_{0,5}(B,A)_{0,5}$  szerkezeti képletű vegyület moláris térfogata:

$$V_{A_{0,5}(B,A)_{0,5}} \cong 0,5 \cdot V_A + 0,5 \cdot [y_B^B \cdot V_B + (1 - y_B^B) \cdot V_A] \quad (4.40a)$$

$$V_{A_{0,5}(B,A)_{0,5}} \cong 0,5 \cdot V_A + 0,5 \cdot [2 \cdot x_B \cdot V_B + (1 - 2 \cdot x_B) \cdot V_A] \quad (4.40b)$$

Az  $A_{0,5}(B,Va)_{0,5}$  szerkezeti képletű vegyület moláris térfogata:

$$V_{A_{0,5}(B,Va)_{0,5}} \cong \frac{0,5 \cdot V_A + 0,5 \cdot V_B}{0,5 + 0,5 \cdot y_B^B} \quad (4.40c)$$

$$V_{A_{0,5}(B,Va)_{0,5}} \cong (1 - x_B) \cdot (V_A + V_B) \quad (4.40d)$$

Többkomponensű oldatok Gibbs-energiája:

$$G_\Phi = G_\Phi^o + \Delta G_\Phi^{id} + \Delta G_\Phi^E \quad (4.41a)$$

$$G_\Phi^o = \sum_{i=1}^K x_{i(\Phi)} \cdot G_{i(\Phi)}^o \quad (4.41b)$$

$$\Delta G_\Phi^{id} = R \cdot T \cdot \sum_{i=1}^K x_{i(\Phi)} \cdot \ln x_{i(\Phi)} \quad (4.41c)$$

$$\Delta G_\Phi^E \cong \sum_{i=1}^{K-1} \sum_{j>i}^K x_{i(\Phi)} \cdot x_{j(\Phi)} \cdot \Omega_{ij(\Phi)} \cdot \exp\left(-\frac{T}{\tau_{ij(\Phi)}}\right) \quad (4.41d)$$

A (4.41c) egyenlet minimális értéke (nagyentrópiájú ötvözetek):

$$\Delta G_\Phi^{id, \min} = R \cdot T \cdot \ln\left(\frac{1}{K}\right) \quad (4.41e)$$

Az  $i$  komponens parciális Gibbs-energiája egy többkomponensű oldatban:

$$G_{i(\Phi)} = G_{i(\Phi)}^o + R \cdot T \cdot \ln x_{i(\Phi)} + \Delta G_{i(\Phi)}^E \quad (4.41f)$$

$$\Delta G_{i(\Phi)}^E = (1 - x_{i(\Phi)}) \cdot \sum_{j \neq i} x_{j(\Phi)} \cdot \Omega_{ij(\Phi)} \cdot \exp\left(-\frac{T}{\tau_{ij(\Phi)}}\right) - \sum_{j \neq i} \sum_{k \neq i, j} x_{j(\Phi)} \cdot x_{k(\Phi)} \cdot \Omega_{jk(\Phi)} \cdot \exp\left(-\frac{T}{\tau_{jk(\Phi)}}\right) \quad (4.41g)$$

## Képletgyűjtemény az 5. fejezethez

A redukált fázis-szabály képletei ( $p = \text{const}$ ):

$$PAR = 1 + F \cdot (K - 1) \quad (5.1)$$

$$F_{\max} = K + 1 \quad (5.2)$$

$$\dot{A}_{SZ} = 1 + K - F \quad (5.3)$$

$$\dot{A} = K + 1 \quad (5.4)$$

$$\dot{A}_{K\ddot{o}} = F \quad (5.5)$$

A kétkomponensű A-B ideális  $\alpha$  szilárd oldat és ideális folyékony oldat egyensúlyi móltörtjeinek számítása ( $p < 100$  bar):

$$x_{B(\alpha)}^e = \frac{K_A - 1}{K_A - K_B} \quad (5.6c)$$

$$x_{B(l)}^e = K_B \cdot x_{B(\alpha)}^e \quad (5.6d)$$

$$K_A \equiv \exp\left(\frac{G_{A(\alpha)}^o - G_{A(l)}^o}{R \cdot T}\right) \quad (5.6e)$$

$$K_B \equiv \exp\left(\frac{G_{B(\alpha)}^o - G_{B(l)}^o}{R \cdot T}\right) \quad (5.6f)$$

A kétkomponensű A-B ideális folyékony oldat és az ideális gőzelegy egyensúlyi móltörtjeinek számítása ( $p = 1$  bar):

$$x_{B(g)}^e = \frac{K_A - 1}{K_A - K_B} \quad (5.6g)$$

$$x_{B(l)}^e = K_B \cdot x_{B(g)}^e \quad (5.6h)$$

$$K_A \equiv \exp\left(\frac{G_{A(g)}^o - G_{A(l)}^o}{R \cdot T}\right) \quad (5.6i)$$

$$K_B \equiv \exp\left(\frac{G_{B(g)}^o - G_{B(l)}^o}{R \cdot T}\right) \quad (5.6j)$$

A kétkomponensű A-B ideális  $\alpha$  szilárd oldat és az ideális gőzelegy egyensúlyi móltörtjeinek számítása ( $p = 1$  bar):

$$x_{B(g)}^e = \frac{K_A - 1}{K_A - K_B} \quad (5.6o)$$

$$x_{B(\alpha)}^e = K_B \cdot x_{B(g)}^e \quad (5.6p)$$

$$K_A \equiv \exp\left(\frac{G_{A(g)}^o - G_{A(\alpha)}^o}{R \cdot T}\right) \quad (5.6q)$$

$$K_B \equiv \exp\left(\frac{G_{B(g)}^o - G_{B(\alpha)}^o}{R \cdot T}\right) \quad (5.6r)$$

Az azeotrópos pont hőmérsékletének és összetételének számítása (először  $T_{az}$  értékét számítjuk numerikusan az (5.7d) egyenletből, majd  $x_{B,az}$ -t az (5.7c) egyenletből:

$$x_{B,az} = \frac{1}{2} \cdot \left( 1 - \frac{\Delta_m G_A^o - \Delta_m G_B^o}{\Omega_l - \Omega_\alpha} \right) \quad (5.7c)$$

$$(\Omega_l - \Omega_\alpha)^2 + (\Delta_m G_B^o - \Delta_m G_A^o)^2 + 2 \cdot (\Omega_l - \Omega_\alpha) \cdot (\Delta_m G_B^o + \Delta_m G_A^o) = 0 \quad (5.7d)$$

A minimális és maximális azeotrópos pont megjelenésének feltételei a szilárd/folyadék egyensúlyi görbéken:

$$(\Omega_l - \Omega_\alpha)_{\min} < -\Delta_m G_{A,T_{m,B}^o}^o \quad (\text{ha } T_{m,B}^o < T_{m,A}^o) \quad (5.7f)$$

$$(\Omega_l - \Omega_\alpha)_{\max} > -\Delta_m G_{B,T_{m,A}^o}^o \quad (\text{ha } T_{m,B}^o < T_{m,A}^o) \quad (5.7g)$$

$$(\Omega_l - \Omega_\alpha)_{\min} < -\Delta_m G_{B,T_{m,A}^o}^o \quad (\text{ha } T_{m,B}^o > T_{m,A}^o) \quad (5.7h)$$

$$(\Omega_l - \Omega_\alpha)_{\max} > -\Delta_m G_{A,T_{m,B}^o}^o \quad (\text{ha } T_{m,B}^o > T_{m,A}^o) \quad (5.7i)$$

Egy ideális szilárd oldat és egy reguláris folyékony oldat egyensúlyi móltörtjeinek számítása: először az (5.8d) egyenletet oldjuk meg numerikusan  $x_{B(l)}$ -re, majd az (5.8c) egyenletből számítjuk ki  $x_{B(\alpha)}$ -t:

$$x_{B(\alpha)} = x_{B(l)} \cdot \exp \left[ \frac{\Delta_m G_B^o + \Omega_l \cdot (1 - x_{B(l)})^2}{R \cdot T} \right] \quad (5.8c)$$

$$R \cdot T \cdot \ln \left\{ 1 - x_{B(l)} \cdot \exp \left[ \frac{\Delta_m G_B^o + \Omega_l \cdot (1 - x_{B(l)})^2}{R \cdot T} \right] \right\} - \quad (5.8d)$$

$$-\Delta_m G_A^o - R \cdot T \cdot \ln(1 - x_{B(l)}) - \Omega_l \cdot x_{B(l)}^2 = 0$$

Egy ideális gőzelegy és egy reguláris folyékony oldat egyensúlyi móltörtjeinek számítása: először az (5.9a) egyenletet oldjuk meg numerikusan  $x_{B(l)}$ -re, majd az (5.9b) egyenletből számítjuk ki  $x_{B(g)}$ -t:

$$R \cdot T \cdot \ln \left\{ 1 - x_{B(l)} \cdot \exp \left[ \frac{\Delta_c G_B^o + \Omega_l \cdot (1 - x_{B(l)})^2}{R \cdot T} \right] \right\} - \quad (5.9a)$$

$$-\Delta_c G_A^o - R \cdot T \cdot \ln(1 - x_{B(l)}) - \Omega_l \cdot x_{B(l)}^2 = 0$$

$$x_{B(g)} = x_{B(l)} \cdot \exp \left[ \frac{\Delta_c G_B^o + \Omega_l \cdot (1 - x_{B(l)})^2}{R \cdot T} \right] \quad (5.9b)$$

A minimális és maximális azeotrópos pont megjelenésének feltételei a folyadék / gőz egyensúlyi görbéken:

$$(\Omega_g - \Omega_l)_{\min} < -\Delta_v G_{A,T_{b,B}^o}^o \quad (\text{ha } T_{b,B}^o < T_{b,A}^o) \quad (5.10a)$$

$$(\Omega_g - \Omega_l)_{\max} > -\Delta_v G_{B,T_{b,A}^o}^o \quad (\text{ha } T_{b,B}^o < T_{b,A}^o) \quad (5.10b)$$

$$(\Omega_g - \Omega_l)_{\min} < -\Delta_v G_{B,T_{b,A}^o}^o \quad (\text{ha } T_{b,B}^o > T_{b,A}^o) \quad (5.10c)$$

$$(\Omega_g - \Omega_l)_{\max} > -\Delta_v G_{A,T_{b,B}^o}^o \quad (\text{ha } T_{b,B}^o > T_{b,A}^o) \quad (5.10d)$$

Két, azonos kristályszerkezetű, de a kis hőmérséklet és a komponensek taszítása miatt egymással nem elegyedő szilárd oldat egyensúlyi hőmérsékletének és móltörtjének számítása a másik móltört ismeretében:

$$x_{B(\alpha 1)}^e = 1 - x_{B(\alpha 2)}^e \quad (5.11b)$$

$$T = \frac{\Omega_\alpha}{R} \cdot \frac{2 \cdot x_{B(\alpha 2)}^e - 1}{\ln \frac{x_{B(\alpha 2)}^e}{1 - x_{B(\alpha 2)}^e}} \quad (5.11d)$$

Egy ideális folyékony oldat és egy reguláris szilárd oldat egyensúlyi móltörtjeinek számítása:

$$R \cdot T \cdot \ln \left\{ 1 - x_{B(\alpha)} \cdot \exp \left[ \frac{-\Delta_m G_B^o + \Omega_\alpha \cdot (1 - x_{B(\alpha)})^2}{R \cdot T} \right] \right\} - \quad (5.12a)$$

$$+ \Delta_m G_A^o - R \cdot T \cdot \ln(1 - x_{B(\alpha)}) - \Omega_\alpha \cdot x_{B(\alpha)}^2 = 0$$

$$x_{B(l)} = x_{B(\alpha)} \cdot \exp \left[ \frac{-\Delta_m G_B^o + \Omega_\alpha \cdot (1 - x_{B(\alpha)})^2}{R \cdot T} \right] \quad (5.12b)$$

Egy ideális folyékony oldat és egy reguláris szilárd oldat által alkotott eutektikus pont koordinátáinak számítása (először megadunk egy  $x_{B(\alpha 2)}$  értéket, azt behelyettesítjük az (5.13i)-be, az onnan kifejezett  $T$ -t behelyettesítjük (5.13g-be), majd addig iteráljuk  $x_{B(\alpha 2)}$ -t, amíg az (5.13g) nem teljesül, innen következik az (5.13e, f, i) egyenletekből az eutektikum három másik koordinátája):

$$x_{B(\alpha 1)}^e = 1 - x_{B(\alpha 2)}^e \quad (0,5 < x_{B(\alpha 2)}^e < 1) \quad (5.13e)$$

$$x_{B(l)} = x_{B(\alpha 2)} \cdot \exp \left[ \frac{-\Delta_m G_B^o + \Omega_\alpha \cdot (1 - x_{B(\alpha 2)})^2}{R \cdot T} \right] \quad (5.13f)$$

$$\begin{aligned} G_{A(\alpha)}^o + R \cdot T \cdot \ln(1 - x_{B(\alpha 2)}) + \Omega_\alpha \cdot x_{B(\alpha 2)}^2 = \\ = G_{A(l)}^o + R \cdot T \cdot \ln \left\{ 1 - x_{B(\alpha 2)} \cdot \exp \left[ \frac{-\Delta_m G_B^o + \Omega_\alpha \cdot (1 - x_{B(\alpha 2)})^2}{R \cdot T} \right] \right\} \end{aligned} \quad (5.13g)$$

$$T = \frac{\Omega_\alpha}{R} \cdot \frac{2 \cdot x_{B(\alpha 2)} - 1}{\ln \frac{x_{B(\alpha 2)}}{1 - x_{B(\alpha 2)}}} \quad (5.13i)$$

Az eutektikus folyamat és anyagmérleg az eutektikus pontban:

$$l = \alpha_1 + \alpha_2 \quad (5.14a)$$

$$x_{B(l)}^e = y_l \cdot x_{B(l)}^e + y_{\alpha 1} \cdot x_{B(\alpha 1)}^e + (1 - y_l - y_{\alpha 1}) \cdot x_{B(\alpha 2)}^e \quad (5.14b)$$

$$y_{\alpha 1} = (1 - y_l) \cdot \frac{(x_{B(l)}^e - x_{B(\alpha 2)}^e)}{x_{B(\alpha 1)}^e - x_{B(\alpha 2)}^e} \quad (5.14c)$$

A peritektikus folyamat:

$$\alpha_2 = \alpha_1 + l \quad (5.15)$$

