



**SEMMELWEIS EGYETEM**

Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet,  
Nanokémiai Kutatócsoport

Lágy Anyagok  
Laboratóriuma

## **TERMODINAMIKA**


egyensúlyok és transzportjelenségek  
legáltalánosabb tudománya

**Zrínyi Miklós**

*egyetemi tanár, az MTA levelező tagja*

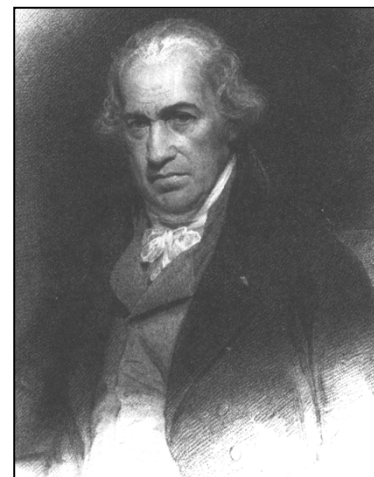
*[mikloszrinyi@gmail.com](mailto:mikloszrinyi@gmail.com)*

## Történeti visszatekintés

- A *hőmérséklet* fogalom a hideg-, ill. melegérzetből fejlődött ki.
- Alapvető felismerés: *a hő és a hőmérséklet nem azonos*. (Joseph Black skót kémikus)
- Az első hőmérséklet-mérő készüléket **Galileo Galilei** alkotta meg. 
- **Jean Rey** francia orvos megalkotta az első lázmérőt 1631-ben
- A mai hőmérsékletskálát **Anders Celsius**nak köszönhetjük (1742). A víz forráspontját 0 foknak vette, az olvadáspontját pedig 100 foknak.
- A 100 fokos hőmérsékleti skálát **Carl von Linné** fordította meg, úgy ahogy napjainkban is használjuk.



# Történeti visszatekintés



*James Watt (1736-1819) skót feltaláló*



Termodinamika=Hőtan?

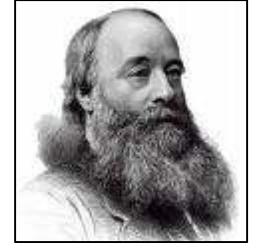
$$\Delta U = \Delta Q + \Delta W$$



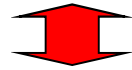
**A hő az energia egyik megjelenési formája !**



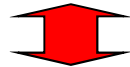
## Az energiamegmaradás tétele



**Leibniz** (1676-1689) megfigyelte, hogy sok mechanikai rendszerben a mozgási energia (*élőerő*) megmarad.



**Newton** és **Descartes** megfogalmazzák az impulzusmegmaradás törvényét.



**Rumford** 1798-ban megfigyelte, hogy az ágyúcsövek fűrése hőkeltéssel jár: a mechanikai munka hővé alakítható!

**Mayer** felismerte, hogy a hő is, meg a mechanikai munka is, az energia egy formája.

**Joule** 1843-ban kísérletekkel meghatározta a hő mechanikai egyenértékét.

**Helmholtz** 1847-ben megfogalmazza az energiamegmaradás tételét

<u>École Polytechnique</u>	<u>Glasgow school</u>	<u>Berlin school</u>	<u>Edinburgh school</u>
			
<u>Sadi Carnot</u> (1796-1832)	<u>William Thomson</u> (1824-1907)	<u>Rudolf Clausius</u> (1822-1888)	<u>James Maxwell</u> (1831-1879)
<u>Vienna school</u>	<u>Gibbsian school</u>	<u>Dresden school</u>	<u>Dutch school</u>
			
<u>Ludwig Boltzmann</u> (1844-1906)	<u>Willard Gibbs</u> (1839-1903)	<u>Gustav Zeuner</u> (1828-1907)	<u>Johannes der Waals</u> (1837-1923)

A termodinamika a fizikának a hőjelenségekkel foglalkozó ágából mára az **energetikai kölcsönhatások folytán fellépő egyensúlyok és folyamatok** tudományává vált.

**fenomenologikus- és statisztikus termodinamika**

**Fő feladata:** a kölcsönhatások folytán fellépő változások és átalakulások

**irányának,  
mozgató erőinek, és  
befolyásoló tényezőinek**

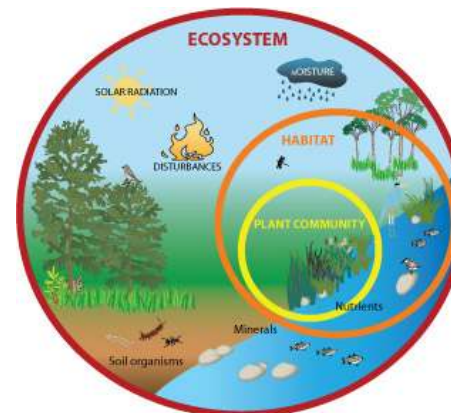
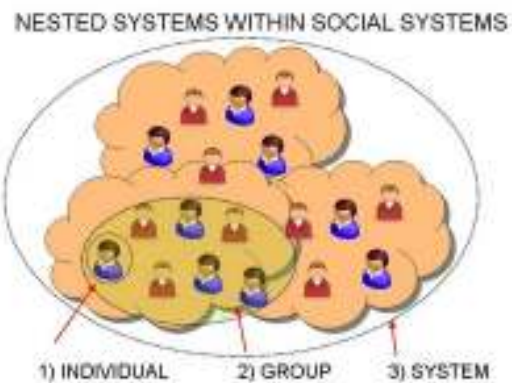
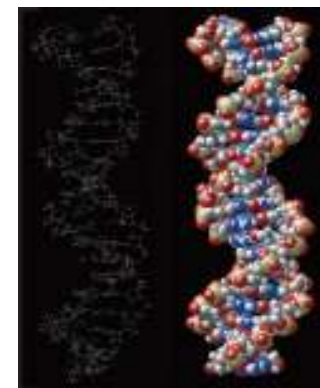
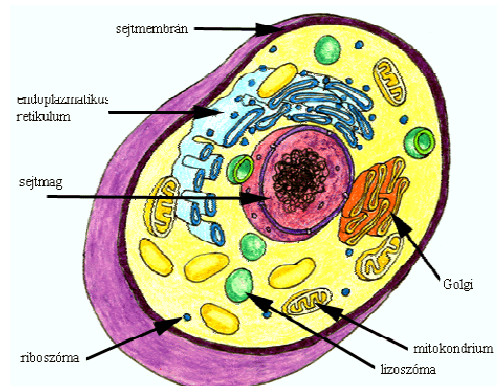
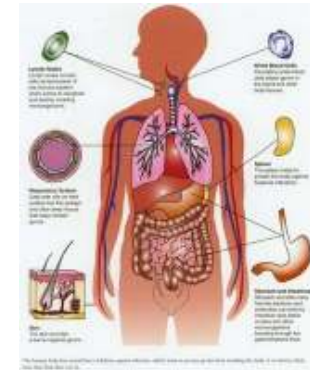
felderítése.

**Törvényei általánosíthatók**

**biológiai-**, társadalmi-, gazdasági-, pénzügyi- és egyéb... rendszerekre.



# A termodinamikai leírás rendszerei



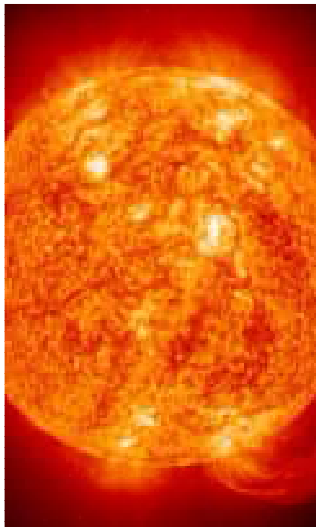
# ENERGIA

*a mindenség mozgatóereje*

Mozdulatlan mozgató (*Arisztotelész*)

Mechanika inga, szabadesés (*Galilei*)

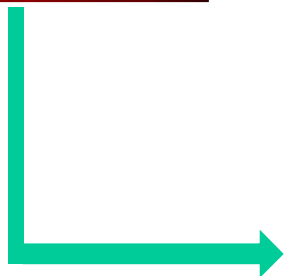
(*Descarte, Newton, Leibniz, Carno, Young*)



$$5 \cdot 10^{18} \text{ MJ} / \text{év}$$



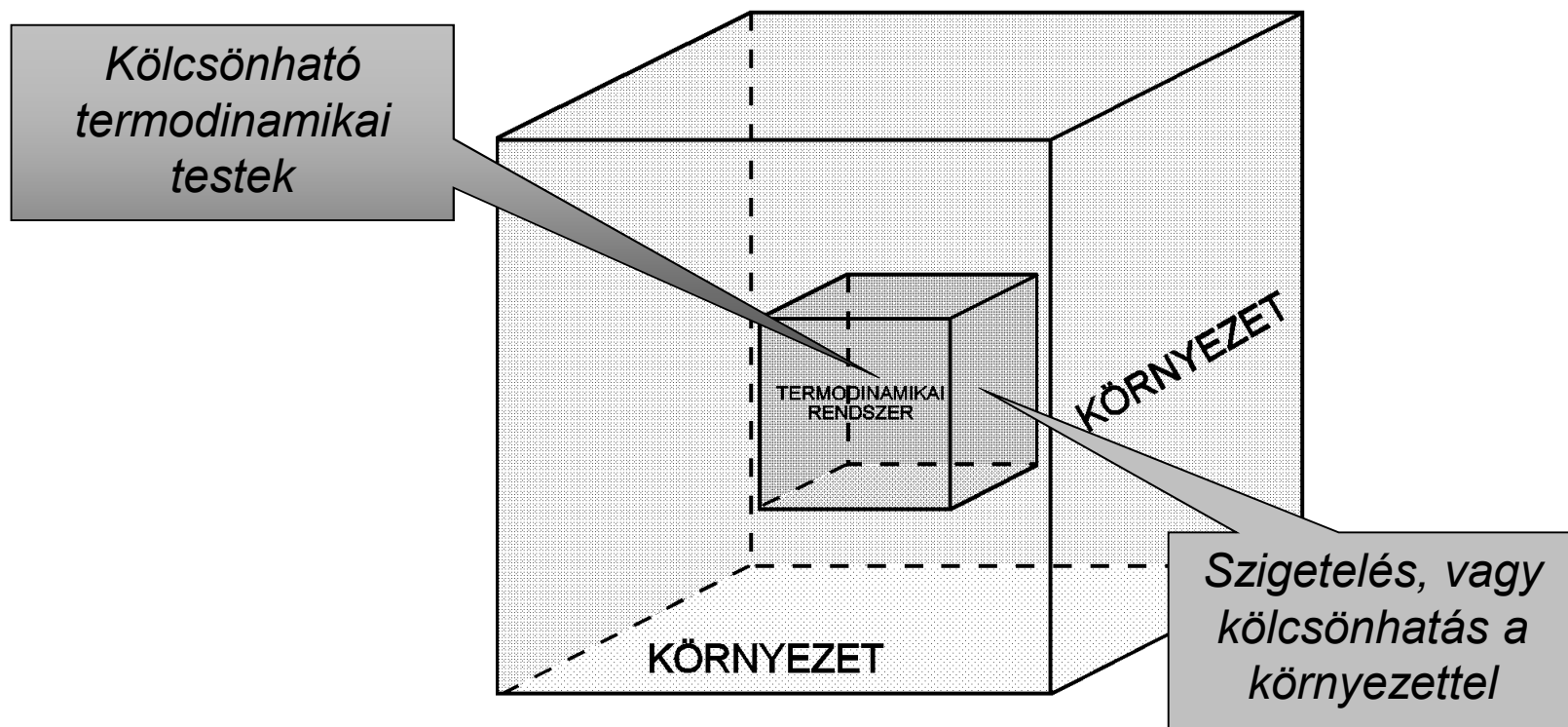
$$1,7 \cdot 10^{17} \text{ J} / \text{s}$$



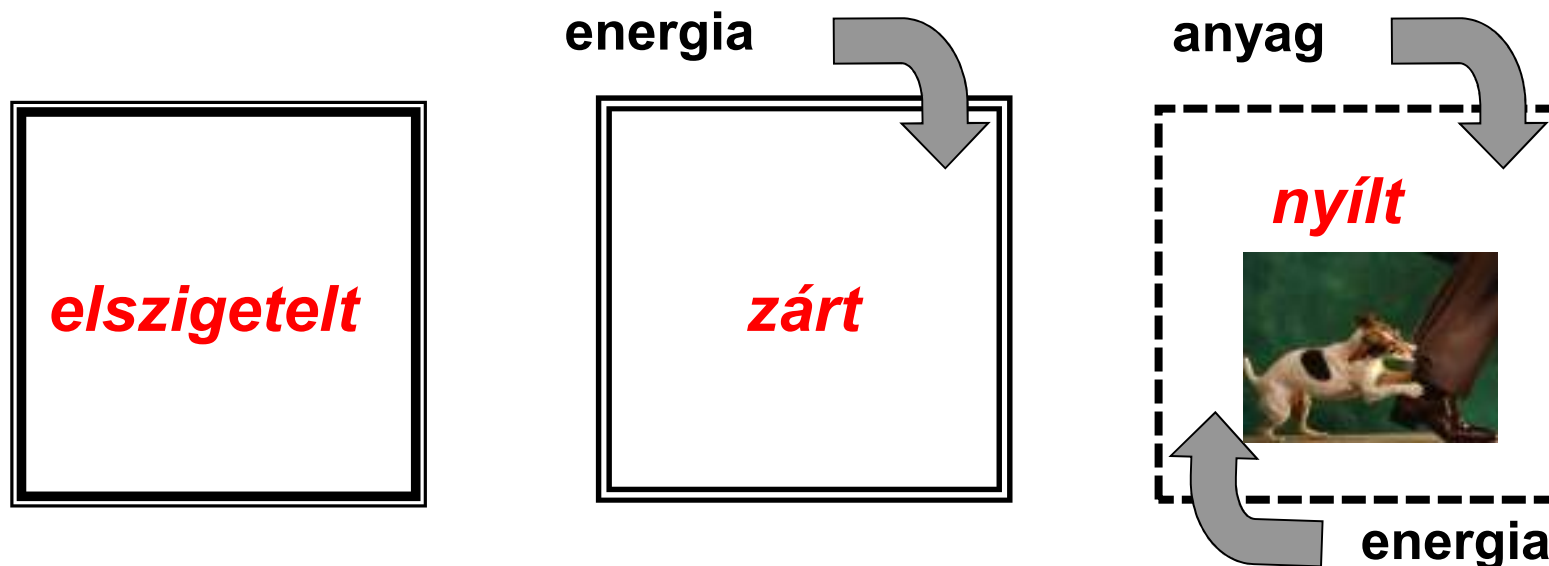
fotoszintézisre: **0,025%**



# A TERMODINAMIKAI RENDSZER



# Termodinamikai rendszerek típusai környezeti kapcsolatuk alapján



**izoterm**  
**T**=állandó



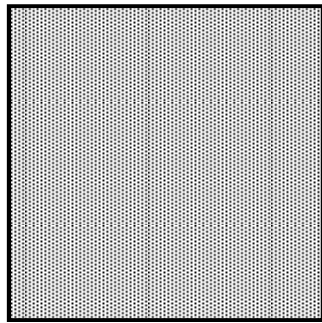
**izobár**  
**p**=állandó



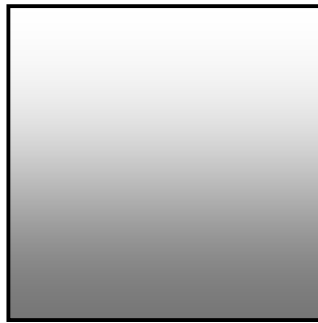
**adiabatikus**  
 **$\Delta Q = 0$**



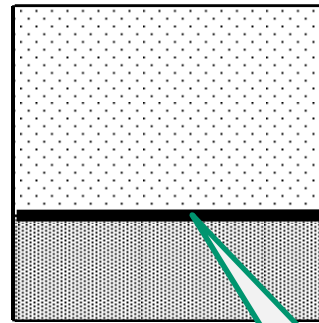
## Termodinamikai rendszerek típusai az anyag eloszlása alapján



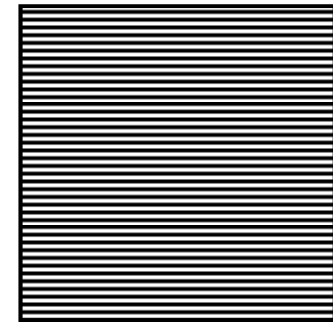
*homogén*



*inhomogén*



*heterogén*



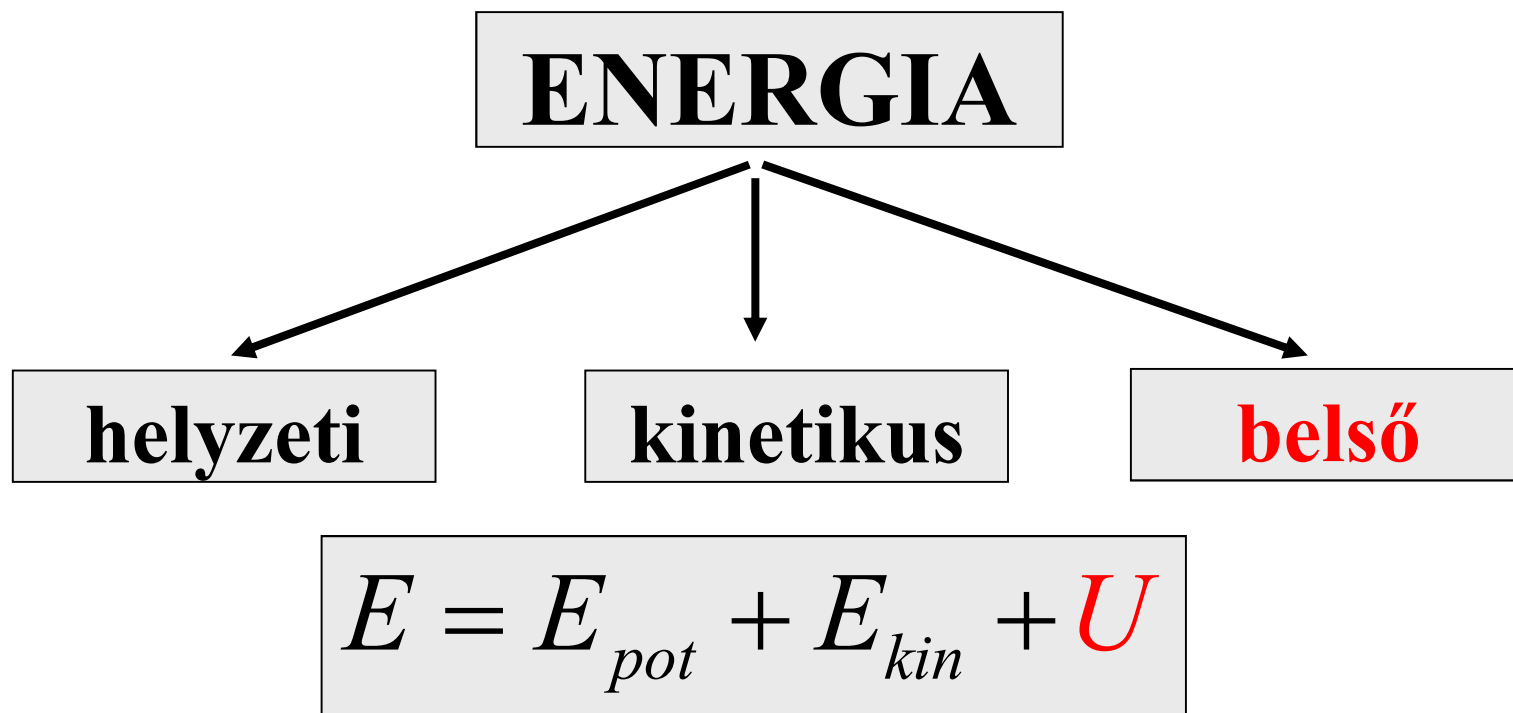
*anizotróp*

*határfelület*

### Jellemző mennyiségek:

Az **extenzív** mennyiségek függenek a rendszer méretétől és additívak ( $m$ ,  $V$ ,  $E$ ...).

Az **intenzív** mennyiségek nem függenek a rendszer méretétől és nem additívak ( $T$ ,  $p$ ,  $\rho$ ,  $c$ ...).

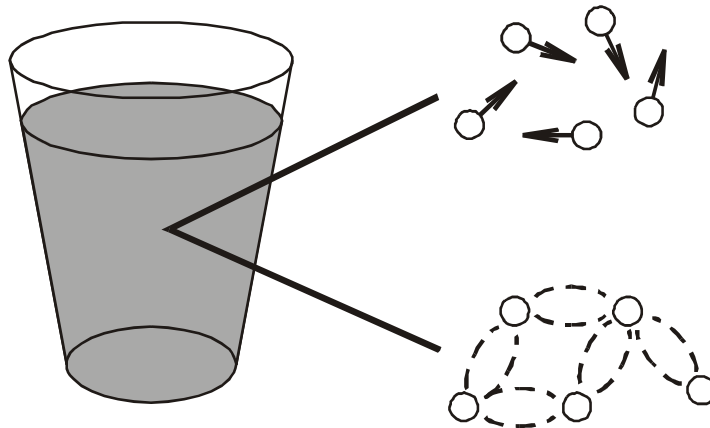


A **belső energia** kémiai szerkezettől függő molekuláris kinetikus és kölcsönhatási energiákból tevődik össze. Magában foglalja a molekulák haladó, forgó és rezgési mozgásának kinetikus energiáját, az elektrongerjesztési energiákat, a molekuláris kölcsönhatások energiáját, valamint az zéruspont energiát:

$$U = U_0 + U_{trans} + U_{rot} + U_{vibr} + U_{gerj} + U_{kölcs}$$

$$E = E_{pot} + E_{kin} + U$$

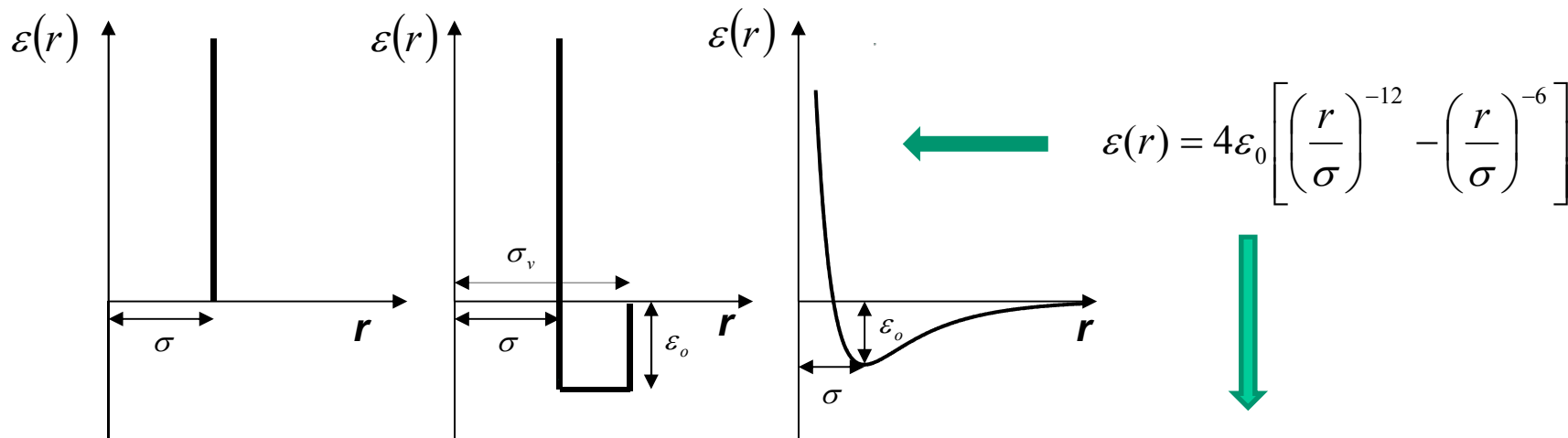
A makroszkopikus  
test potenciális- és  
kinetikus energiája  
**nem része a belső  
energiának**



A molekuláris  
potenciális és  
kinetikus energia  
**része a belső  
energiának**



# Molekuláris kölcsönhatások modellezése



$$\begin{aligned}
 U = & \sum_{i < j} \sum 4\varepsilon_0 \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \\
 & + \sum_{i < j} \sum \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \\
 & + \sum_{\text{bonds}} \frac{1}{2} k_s (r - r_0)^2 \\
 & + \sum_{\text{angles}} \frac{1}{2} k_\theta (\theta - \theta_0)^2 \\
 & + \sum_{\text{torsions}} k_\phi [1 + \cos(n\phi - \delta)]
 \end{aligned}$$

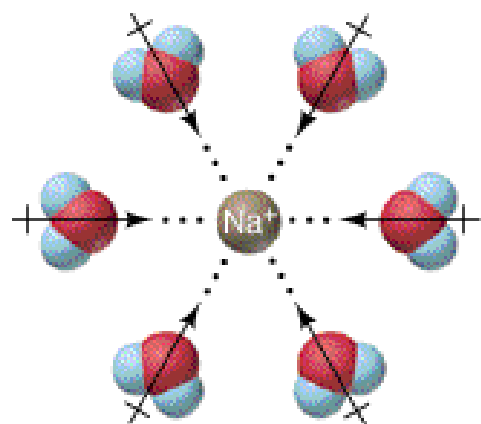
The diagrams illustrate the physical meaning of the terms in the potential energy equation:

- Pair potential:** A diagram showing two particles (one red, one blue) with a potential energy curve  $U(r)$  that has a minimum at  $r_o$ .
- Bond stretching:** A diagram showing two particles connected by a spring with equilibrium distance  $r_0$ .
- Angle bending:** A diagram showing three particles forming an angle  $\theta$  with equilibrium angle  $\theta_0$ .
- Torsion:** A diagram showing a chain of four particles with a torsional angle  $\phi$  and equilibrium angle  $\delta$ .

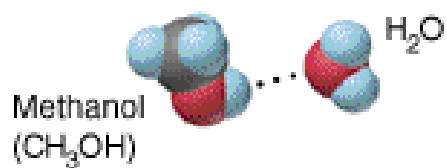
## Van der Waals típusú kölcsönhatások

- ion – permanens dipól
- ion – indukált dipól
- permanens dipole – permanens dipól
- permanens dipole – indukált dipól
- indukált dipole - indukált dipole
- H-hid
- *hidrofób kölcsönhatás*

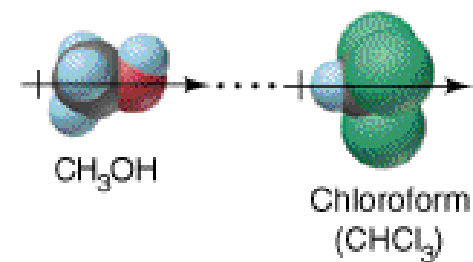




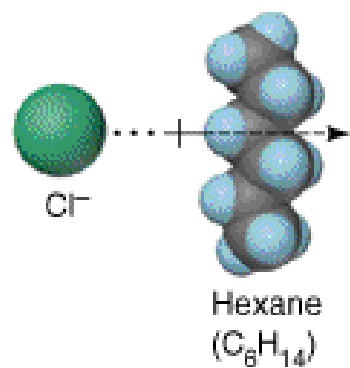
Ion-dipole



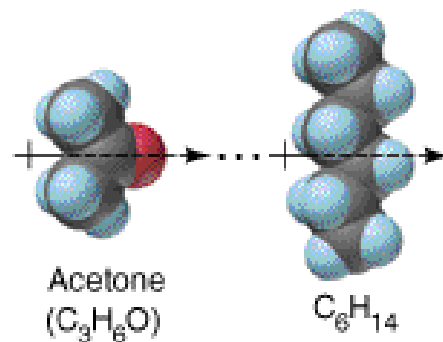
H bond



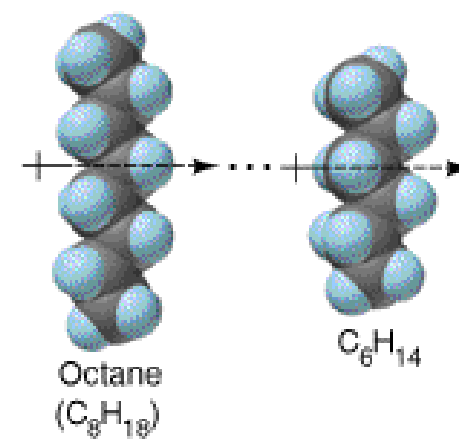
Dipole-dipole



Ion-induced dipole



Dipole-induced dipole



Dispersion

<b>kölcsönhatás</b>	<b>RT egységben mért energia</b>
<i>kémiai reakció</i>	40 - 200
<i>ion-ion</i>	80 - 100
<i>ion – dipólus</i>	10 - 20
<i>H-hid</i>	10 - 15
<i>dipólus –dipólus</i>	0,5 - 2
<i>indukált dipólus – indukált dipólus</i>	0,3 - 2

$\varepsilon_o$ Vákuum permittivitása:  $\varepsilon_o$ Relatív permittivitás:  $\varepsilon_r$ Ionizációs energia:  $I$ Molekulák közötti távolság:  $r$ 

ion-ion

$$\left( \frac{1}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_{rel}} \right) \cdot \frac{q_1q_2}{r}$$

ion-dipolus

$$-\left( \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \right)^2 \frac{\mu_1q_2}{r^2}$$

dipolus-dipolus

$$-\left( \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \right)^2 \cdot \frac{2}{3k_BT} \cdot \frac{\mu_1^2\mu_2^2}{r^6}$$

indukált dipolus-dipolus

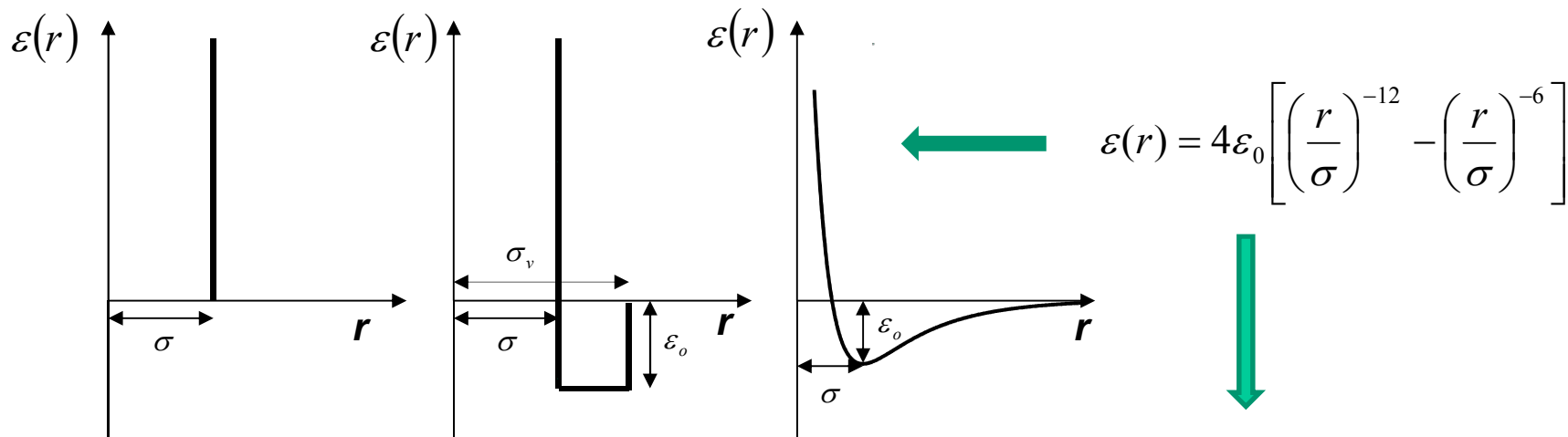
$$-\left( \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \right)^2 \cdot \frac{\mu_1^2\alpha_2}{r^6}$$

indukált dipolus- indukált dipolus

$$-\left( \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \right)^2 \cdot \frac{3}{2} \cdot \frac{I_1I_2}{I_1+I_2} \frac{\alpha_1\alpha_2}{r^6}$$



# Molekuláris kölcsönhatások modellezése

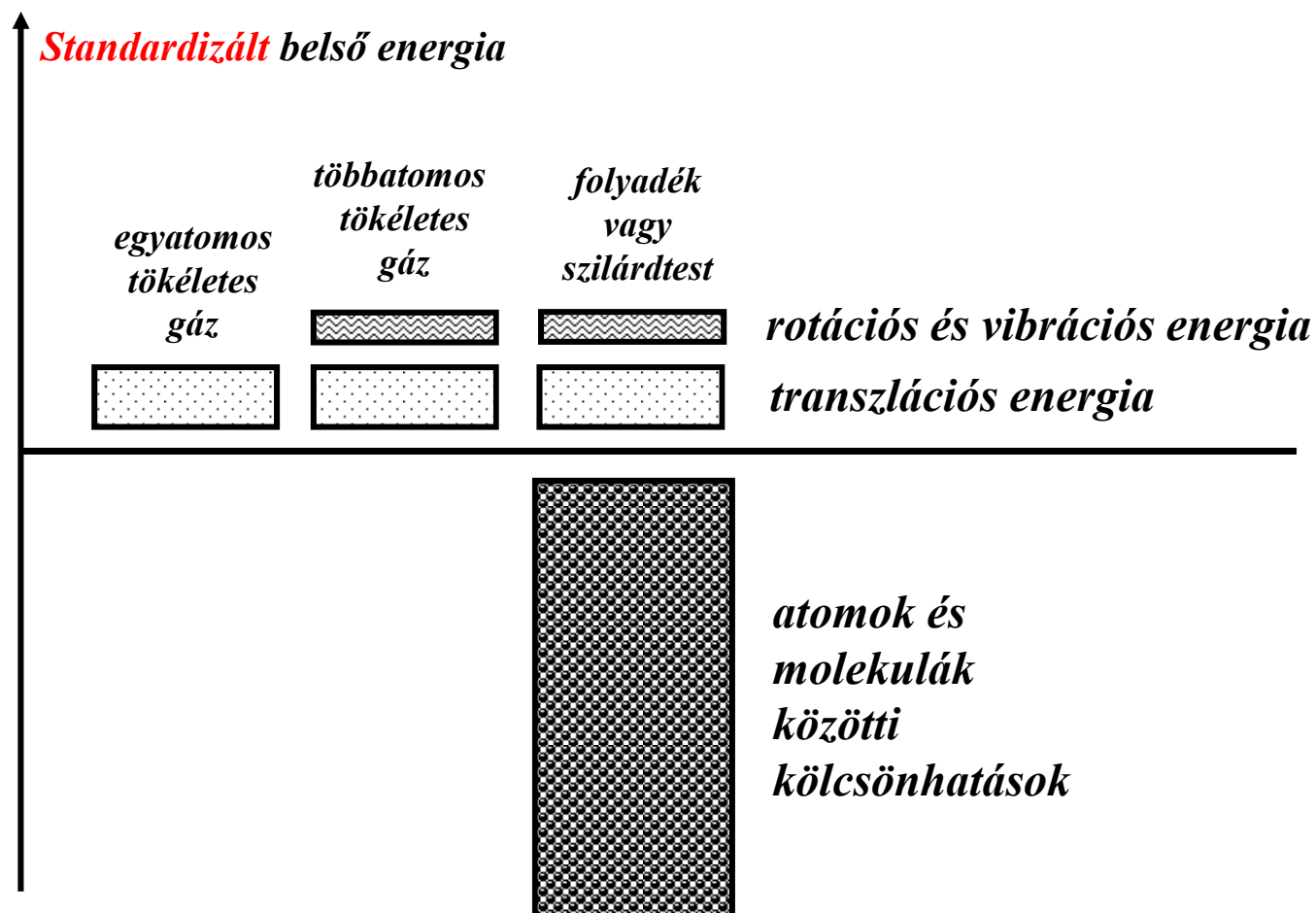


$$\begin{aligned}
 U = & \sum_{i < j} \sum 4\varepsilon_0 \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \\
 & + \sum_{i < j} \sum \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \\
 & + \sum_{\text{bonds}} \frac{1}{2} k_s (r - r_0)^2 \\
 & + \sum_{\text{angles}} \frac{1}{2} k_\theta (\theta - \theta_0)^2 \\
 & + \sum_{\text{torsions}} k_\phi [1 + \cos(n\phi - \delta)]
 \end{aligned}$$

The diagrams illustrate the physical meaning of the terms in the potential energy equation:

- Pair potential:** A diagram showing two particles (one red, one blue) with a potential energy curve  $U$  versus distance  $r$ .
- Electrostatic interaction:** A diagram showing two charged particles (one red, one blue) with a potential energy curve  $U$  versus distance  $r$ .
- Bond stretching:** A diagram showing two particles connected by a spring with equilibrium distance  $r_0$ .
- Angle bending:** A diagram showing three particles forming an angle  $\theta$  with equilibrium angle  $\theta_0$ .
- Torsion:** A diagram showing four particles in a chain with a torsional angle  $\phi$  and equilibrium angle  $\delta$ .

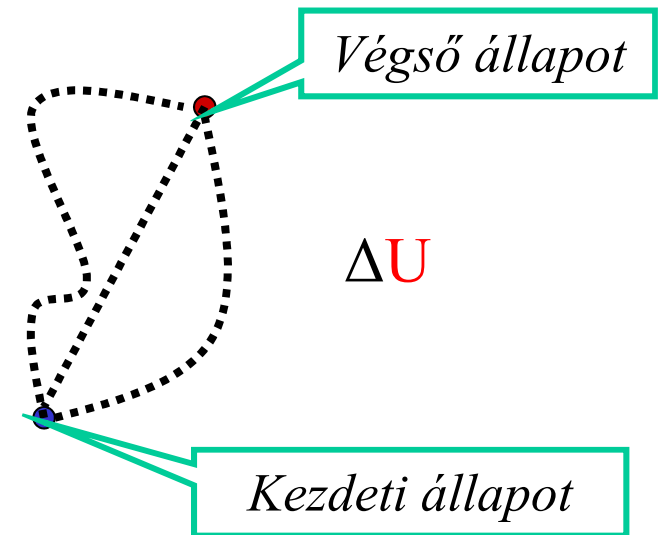
# A belső energia járulékai (**molekuláris kinetikus energiák**) azonos hőmérsékleten összehasonlítva



A belső energia **extenzív** mennyiség.

A belső energia **állapotfüggvény**.

A belső energia **értékét nem ismerjük**.



## A belső energia megváltozik,

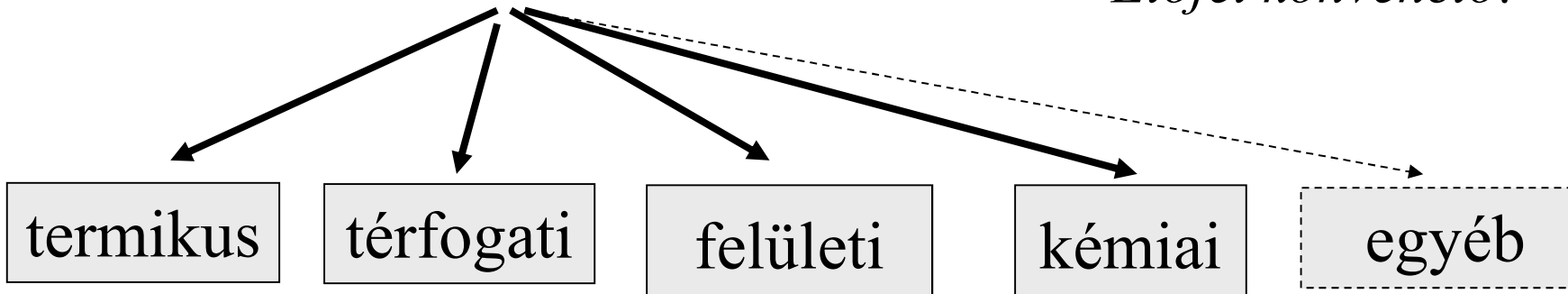
- amikor változik a hőmérséklet,
- amikor változik a molekuláris vagy halmaz szerkezet,
- amikor változik az intermolekuláris kölcsönhatásokból származó energia, valamint
- amikor valamelyik elektronpálya gerjesztett állapotba kerül.

# Belső energia megváltozása

## *Elemi energiaközlési típusok*



*Előjel konvenció!*



A belső energia változása annyi tagból tevődik össze, ahányféle kölcsönhatásban a részt vesz a vizsgált test vagy rendszer.

$$\Delta U = \Delta Q + \sum_i \Delta W_i$$

## *Elemi energiaközlési típusok (1)*

- *mechanikai kölcsönhatás*  $dW_{mech} = -f(x) \cdot dx$

Az ellenerővel szemben végzett munka csökkenti a rendszer belső energiáját !

$$W_{mech} = - \sum_{x_k}^{x_v} f(x) \Delta x$$

- *térfogati munka*

$$f(x) = p(V) \cdot A_s$$

$$dW_{térf} = -p(V) A_s dx = -p(V) dV$$

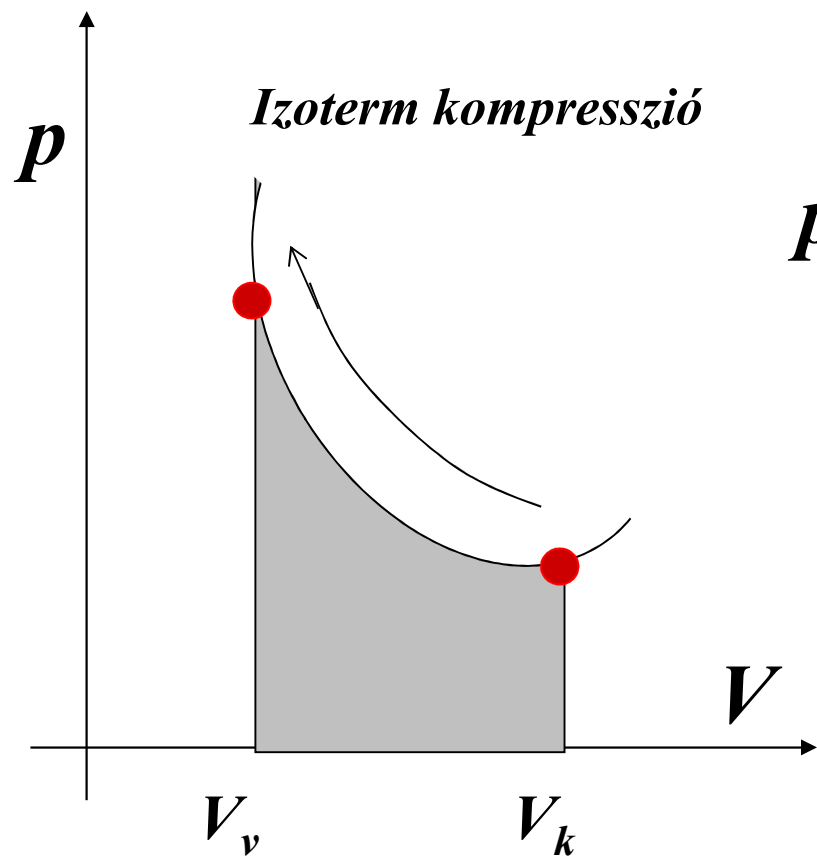
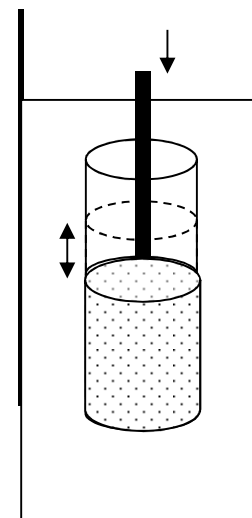


$$W_{mech} = - \sum_{x_k}^{x_v} p(V) \Delta V$$

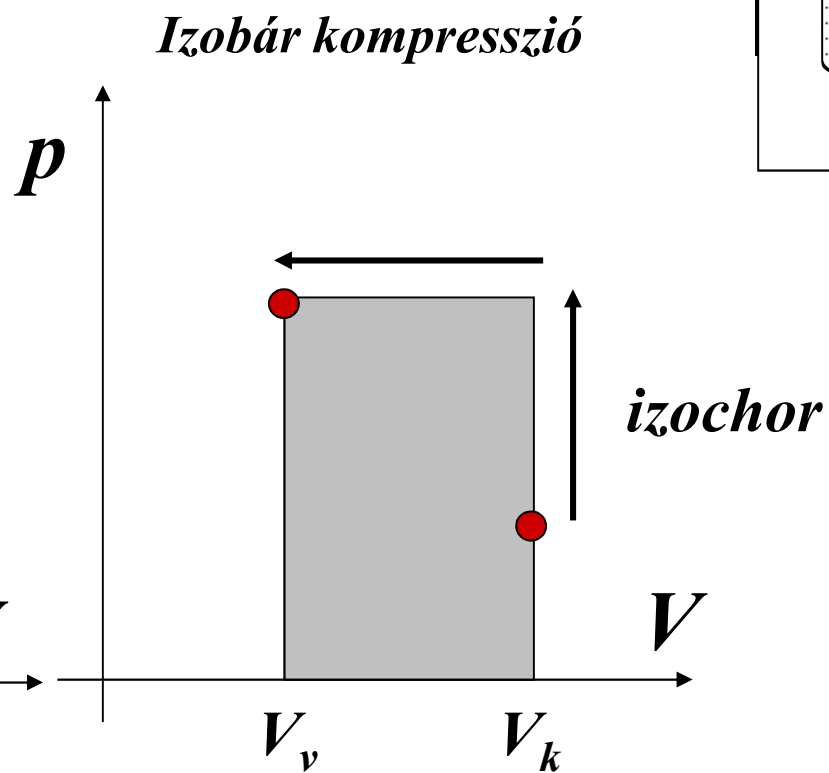


# A munka útfüggvény!

*kompresszió:*  $V_v < V_k$   $W_{\text{térf}} > 0$



$$W = -nRT \ln \frac{V_v}{V_k}$$

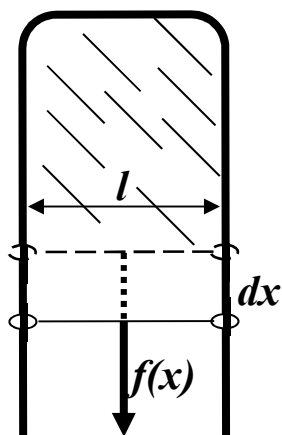


$$W = -p \cdot \Delta V$$

## Elemi energiaközlési típusok (2)

- *Felületi kölcsönhatás*

$$f(x) = -2\gamma \cdot l$$



$$\Delta W_{fel} = 2\gamma l \Delta x = \gamma \Delta A_s$$

$$W_{fel} = \gamma \cdot \Delta A_s$$

- *Kémiai kölcsönhatás*

$$\Delta W_{kém} = \sum_{i=1}^K \left( \frac{\Delta U}{\Delta n_i} \right) \Delta n_i = \sum_{i=1}^K \mu_i \Delta n_i$$

$\mu_i$ : kémiai potenciál

A belső energia változása annyi tagból tevődik össze, ahányféle kölcsönhatásban a részt vesz a vizsgált test vagy rendszer.

$$\Delta U = \sum_i \Delta W_i = \sum_i y_i \cdot \Delta x_i$$

$$\Delta U = -p\Delta V + \gamma\Delta A_s + \Phi\Delta q + \mathbf{H}\Delta\mathbf{M} + \mathbf{E}\Delta\mathbf{P} + \sum_{i=1}^K \mu_i\Delta n_i$$

térfogati

felületi

elektromos

mágneses

elektro-  
sztatikus

kémiai

**És hol van a hőhatás ???**

Minden egyes kölcsönhatáshoz tartozik egy-egy jellemző **intenzív** és **extenzív** mennyiség, melynek szorzata megadja a kölcsönhatáshoz tartozó elemi energiacserét.

$$\Delta W_i = y_i \cdot \Delta x_i$$

Van a belső energiának egy olyan része, amely a többi extenzív mennyiségtől függetlenül is változhat. Ezt az "önmagában történő belső energiaváltozást" célszerű az elemi energiacserékhez hasonlóan egy intenzív és egy extenzív mennyiség szorzataként felírni.

*- termikus kölcsönhatás*

$$\Delta Q = T \Delta S$$

$$\Delta U = -p\Delta V + T\Delta S + \sum_{i=1}^K \mu_i \Delta n_i + \dots +$$

$$\mu_i = \mu_{o,i} + RT \ln c_i$$

kémiai potenciál

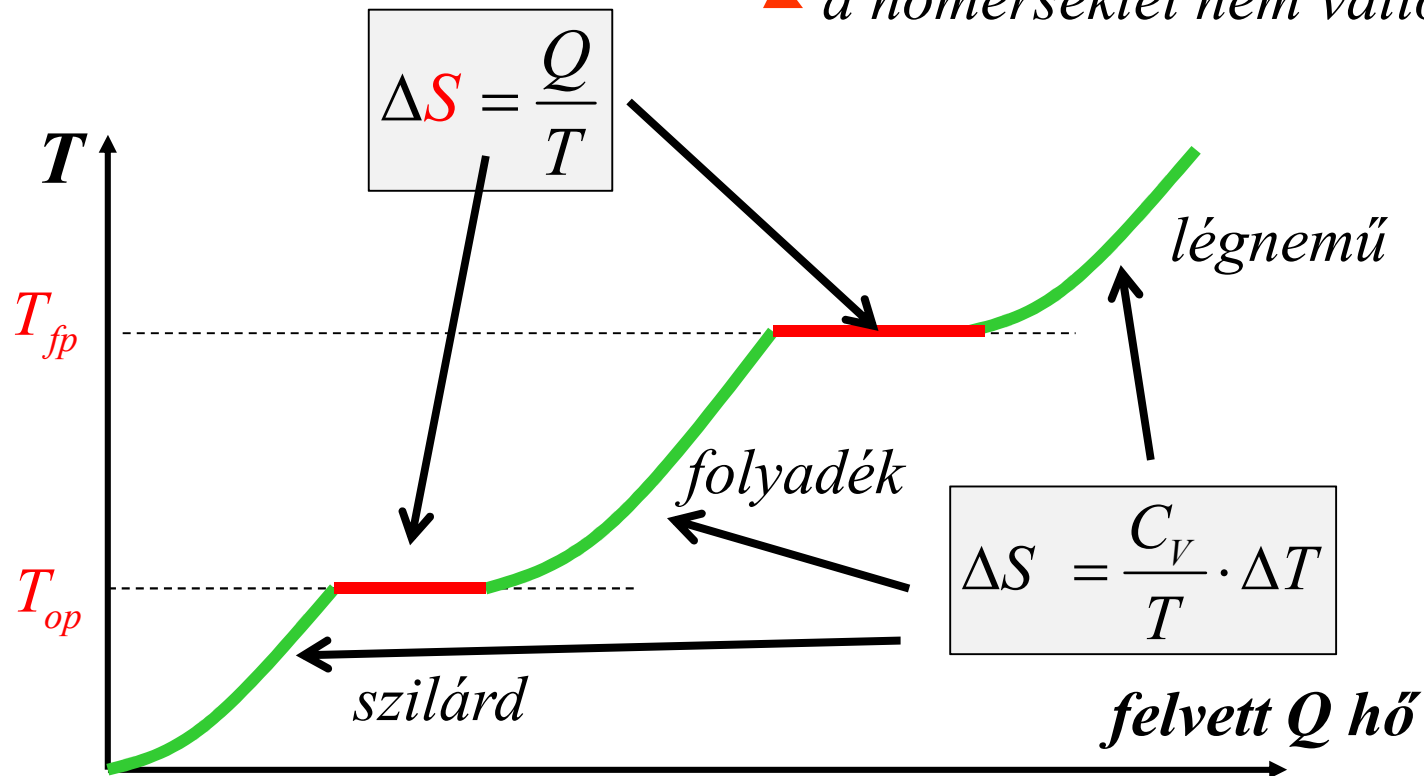
entrópia

# Kétféle termikus kölcsönhatás

Termikus kölcsönhatások

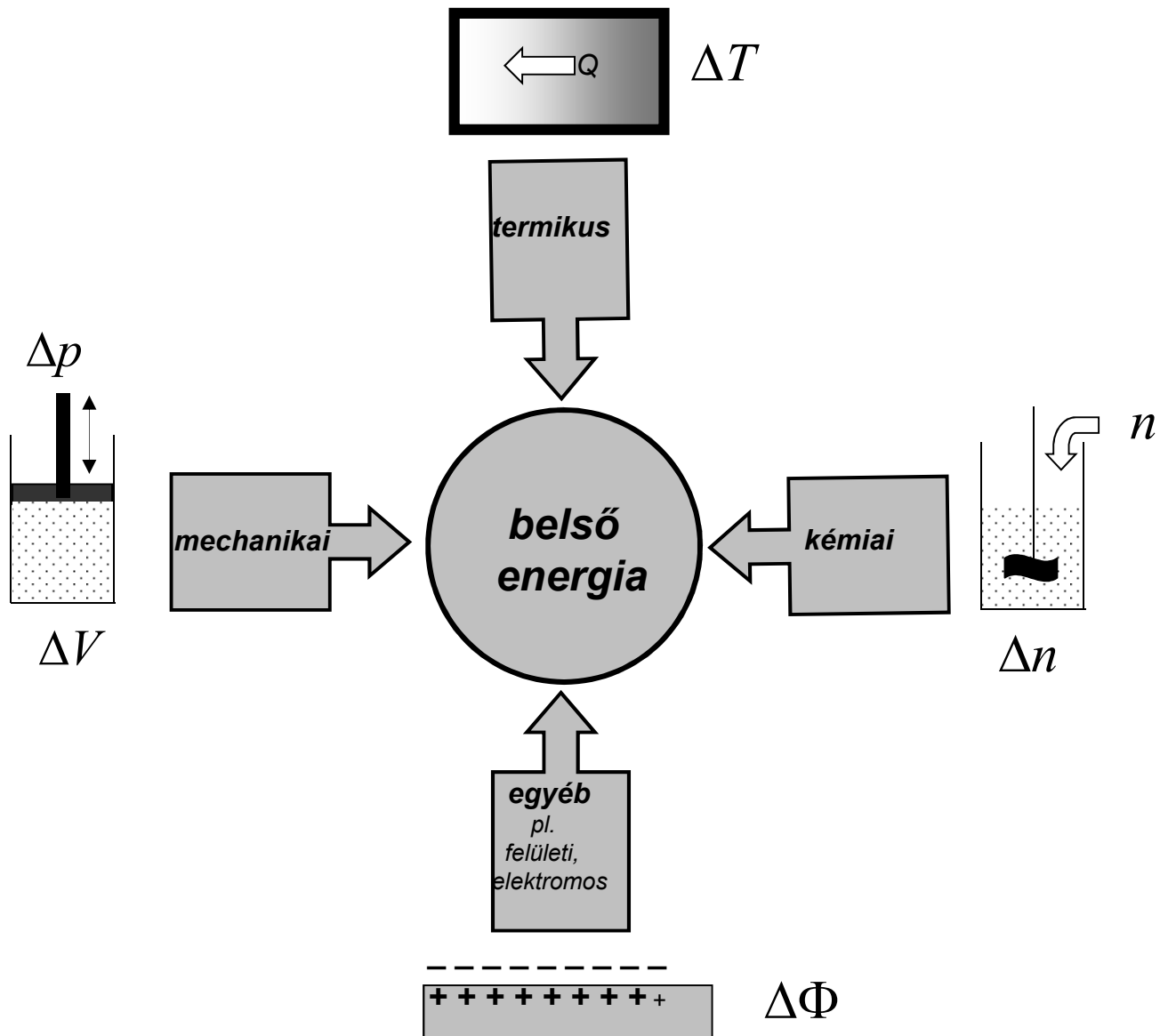
*a hőmérséklet változik*

*a hőmérséklet nem változik*



**Látens hő:** (forráshő, olvadáshő) a molekulák közötti új kapcsolatok létrehozásához szükséges, vagy felszabaduló hő





## *A termodinamika I. főtétele*

$$\Delta U = T\Delta S - p\Delta V + \sum_{i=1}^K \mu_i \Delta n_i + \dots +$$



*Az energiamegmaradás törvényének legáltalánosabb megfogalmazása.*



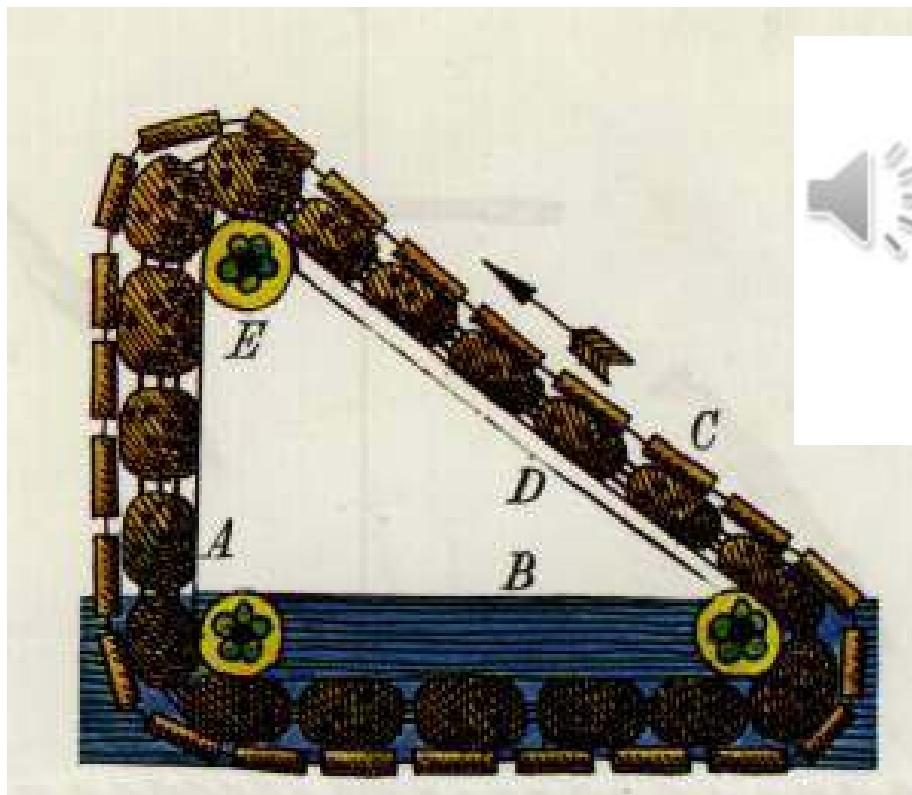
$$\Delta U = \Delta Q + \Delta W_{mech} + \Delta W_{kém} + \dots + \Delta W_i$$

$$\Delta W_{mech} = \Delta U - \Delta Q - \sum_i \Delta W_i$$

Egy termodinamikai rendszer akkor képes munkavégzésre ( $\Delta W_{mech} < 0$ ), ha a belső energiáját csökkenti ( $\Delta U < 0$ ), vagy ha környezetéből hőt von el ( $\Delta Q > 0$ ), vagy más formában energiát ( $\Delta W_i > 0$ ) vesz fel.

Az olyan gépeket, amelyek mechanikai munkát végeznének anélkül, hogy külső forrásból energiát fogyasztanának, **első fajú perpetuum mobile-nek**, vagy más néven **örökmozgónak** nevezzük. A termodinamika első főtételeből következik, hogy első fajú perpetuum mobile nem működhet.

## A termodinamika első főtétele, maga az energia-megmaradás elve!



Egy szellemes perpetuum mobile, amelynek működését kizárja a termodinamika első főtétele.



## *A „misztikus” entrópia*

*- termikus kölcsönhatás*       $\Delta Q = T \Delta S$



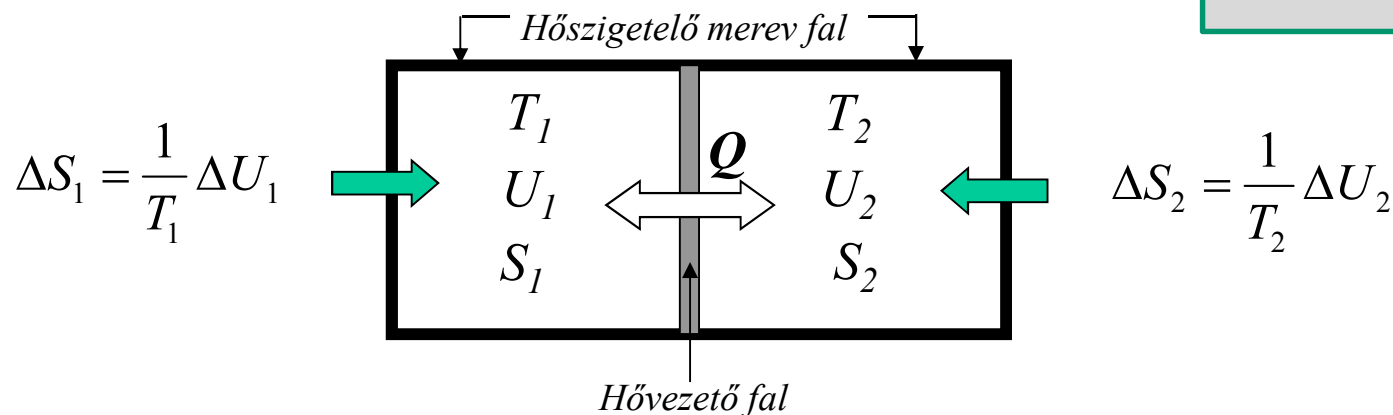
**entrópia**

*Ellentétben az energiával, az entrópia **nem**  
**megmaradó** extenzív mennyiség !*

$$\Delta S > 0$$

# Entrópiaváltozás elszigetelt rendszerben

$$Q = \Delta U_i$$



$$U = U_1 + U_2 = \text{állandó} \quad \Delta U = 0 \quad \longrightarrow \quad \Delta U_1 = -\Delta U_2$$

$$S = S_1 + S_2 = ? \quad \Delta S = \Delta S_1 + \Delta S_2 = ? \quad \Delta S = \frac{1}{T_1} \Delta U_1 + \frac{1}{T_2} \Delta U_2 = \frac{T_2 - T_1}{T_2 T_1} \cdot \Delta U_1 \neq 0$$

$$\text{ha } T_2 > T_1 \text{ akkor } \frac{T_2 - T_1}{T_2 T_1} > 0 \text{ és } \Delta U_1 > 0 \longrightarrow \Delta S > 0$$

$$\text{ha } T_2 < T_1 \text{ akkor } \frac{T_2 - T_1}{T_2 T_1} < 0 \text{ és } \Delta U_1 < 0 \longrightarrow \Delta S > 0$$

$$\text{ha } T_2 = T_1 \text{ akkor } \frac{T_2 - T_1}{T_2 T_1} = 0 \text{ és } \Delta U_1 = 0 \longrightarrow \Delta S = 0$$

**A hőcsere következtében a rendszer teljes entrópiája növekszik!**

**Megadhatjuk tetszőleges termodinamikai kölcsönhatásban álló elszigetelt rendszer entrópia változását.**

$$\Delta U = T\Delta S - p\Delta V + \sum_{i=1}^K \mu_i \Delta n_i + \dots +$$

$$\Delta S = \frac{\Delta U}{T} + \frac{p}{T} \Delta V - \sum_{i=1}^K \frac{\mu_i}{T} \Delta n_i + \dots +$$

$$\Delta S = \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \Delta U_1 + \left( \frac{p_1}{T_1} - \frac{p_2}{T_2} \right) \Delta V_1 - \left( \frac{\mu_1}{T_1} - \frac{\mu_2}{T_2} \right) \Delta n_1$$

***Izoterm nyomás kiegyenlítődési folyamatnál :***

ha  $p_1 > p_2$  akkor  $\frac{p_1}{T} - \frac{p_2}{T} > 0$  és  $\Delta V_1 > 0 \Rightarrow \Delta S > 0$

ha  $p_1 < p_2$  akkor  $\frac{p_1}{T} - \frac{p_2}{T} < 0$  és  $\Delta V_1 < 0 \Rightarrow \Delta S > 0$

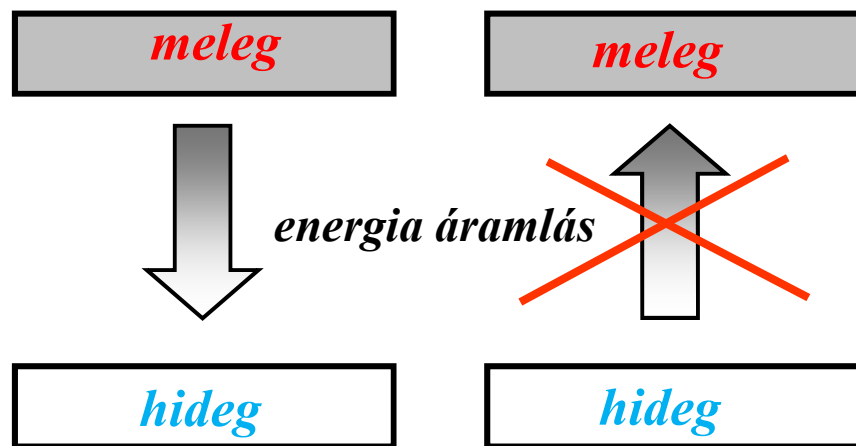
ha  $p_1 = p_2$  akkor  $\frac{p_1}{T} - \frac{p_2}{T} = 0$  és  $\Delta V_1 > 0 \Rightarrow \Delta S = 0$

***Elszigetelt rendszerben a hőmérséklet és a nyomás kiegyenlítődési folyamatok során az entrópia növekszik, egyensúlyban eléri a maximális értékét.***

## *A termodinamika II. főtétele*

**Elszigetelt rendszerben a önként lejátszódó (kiegyenlítődési) folyamatok során az entrópia növekszik.**

Lehetetlen olyan periodikusan működő gépet szerkeszteni, amely egyetlen hőtartályból hőt von el, és azt teljes egészében munkává alakítja.



**Másodfajú perpetuum mobile** működése nem ellenkezne az első főtételel, de megvalósítását a termodinamika második főtétele kizárja.

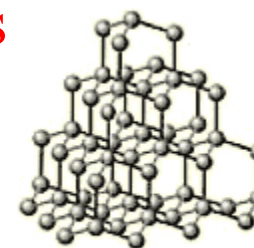
Önként lejátszódó (spontán) folyamatok során az entrópia növekszik!

*entrópia* → *az idő iránya*

## *A termodinamika III. főtétele*

Tiszta kristályos anyagok entrópiája nulla az abszolút zérus ponton:

$$\lim_{T \rightarrow 0} S(T) = 0$$



diamond

*Nernst kísérleti úton, Planck pedig az entrópia statisztikus értelmezése alapján fogalmazta meg.*

A III. főtétele lehetővé teszi **abszolút entrópia skála** bevezetését

$$S(T) = \int_0^T \frac{C_P}{T} dT + \Delta S_{\text{konfig}}$$



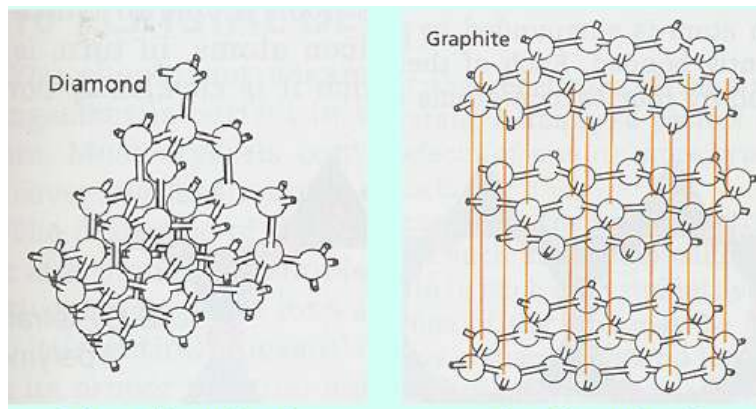
$$S(T) = S^0(T^0) + \int_{T^0}^T \frac{C_P}{T} dT + \Delta S_{\text{konfig}}$$

Standard entrópia

*Minél bonyolultabb szerkezetű egy molekula, annál nagyobb a standard entrópiája.*

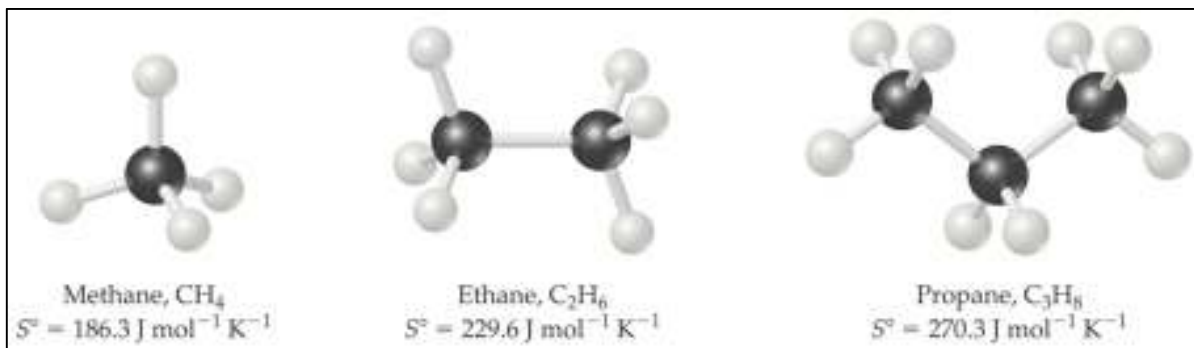


## Standard moláris entrópia értékek 298 K-en.



**TABLE 19.2** Standard Molar Entropies of Selected Substances at 298 K

Substance	$S^\circ$ , J/mol-K
<b>Gases</b>	
$\text{H}_2(\text{g})$	130.6
$\text{N}_2(\text{g})$	191.5
$\text{O}_2(\text{g})$	205.0
$\text{H}_2\text{O}(\text{g})$	188.8
$\text{NH}_3(\text{g})$	192.5
$\text{CH}_3\text{OH}(\text{g})$	237.6
$\text{C}_6\text{H}_6(\text{g})$	269.2
<b>Liquids</b>	
$\text{H}_2\text{O}(\text{l})$	69.9
$\text{CH}_3\text{OH}(\text{l})$	126.8
$\text{C}_6\text{H}_6(\text{l})$	172.8
<b>Solids</b>	
$\text{Li}(\text{s})$	29.1
$\text{Na}(\text{s})$	51.4
$\text{K}(\text{s})$	64.7
$\text{Fe}(\text{s})$	27.23
$\text{FeCl}_3(\text{s})$	142.3
$\text{NaCl}(\text{s})$	72.3

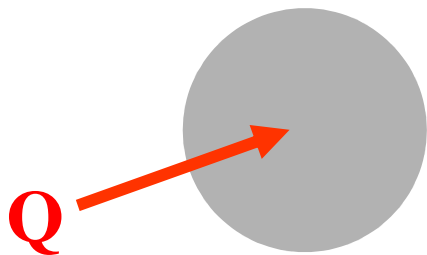


## Környezeti hatások

környezet	→ izoterm	$T = konst.$
	→ izobár	$p = konst.$
	→ izochor	$V = konst.$
	→ adiabatikus	$S = konst.$

**A belső energia egy része a környezet állandóságának biztosítására fordítódik!**

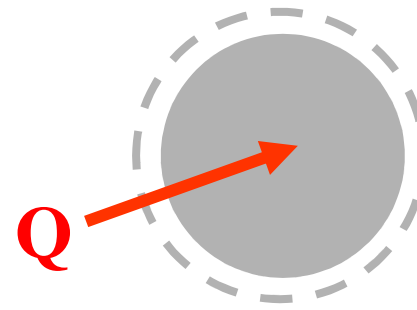
Hasznosítható energia  $\neq$  Belső energia változása



$V = konst.$

$$\left( \frac{\Delta Q}{\Delta T} \right)_V < \left( \frac{\Delta Q}{\Delta T} \right)_p$$

$$C_V < C_p$$



$p = konst.$

A belső energia állandó nyomáson hasznosítható része:

**Izobár esetben** a belső energia egy része a nyomás állandóságának biztosítására fordítódik. A hasznosítható rész az **entalpia**.

**H** entalpia



$$H = U + pV$$

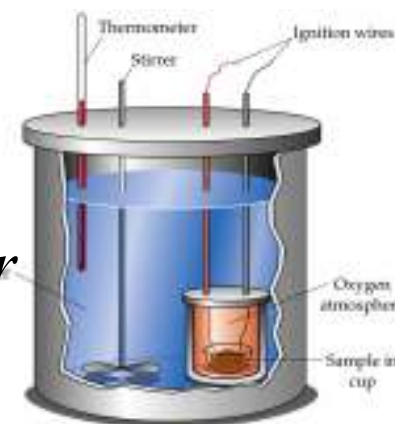
$$\Delta H = \Delta U + p\Delta V$$



$$\Delta H = T\Delta S - p\Delta V + p\Delta V = T\Delta S = Q$$

← **hőhatás**

*kaloriméter*



A **H** entalpia az **U** belső energiának izobár **hőközléssel** hasznosítható része.

$$\Delta S = \frac{Q}{T} = \frac{\Delta H}{T}$$

**A belső energia állandó hőmérsékleten hasznosítható része:**

**Izoterm** esetben a belső energia egy része a hőmérséklet állandóságának biztosítására fordítódik. A hasznosítható rész az **szabadenergia**.

szabadenergia



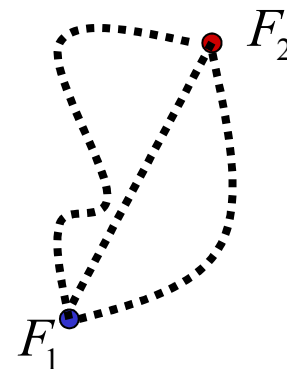
$$F = U - TS$$

extenzív mennyiség

$$\Delta F = \Delta U - T\Delta S$$



$$\Delta F = T\Delta S - p\Delta V - T\Delta S = -p\Delta V = W_{mech}$$



$$\Delta F = F_2 - F_1$$

Az  $F$  szabadenergia az  $U$  belső energiának izoterm munkavégzéssel hasznosítható része.

A belső energia állandó hőmérsékleten és állandó nyomáson között hasznosítható része:

**Izoterm – izobár** esetben a belső energia egy része a hőmérséklet és a nyomás állandóságának biztosítására fordítódik. A hasznosítható rész az **szabadentalpia**.

szabadentalpia



$$G = H - TS$$

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

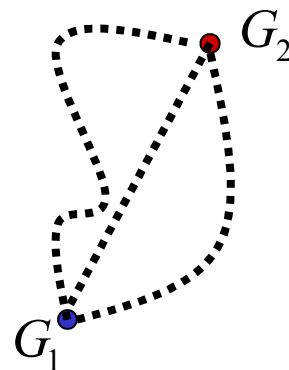


$$\Delta G = T\Delta S - T\Delta S + \sum_i \mu_i \Delta n_i == W_{kém}$$

kémiai potenciál



extenzív mennyiség



$$\Delta G = G_2 - G_1$$

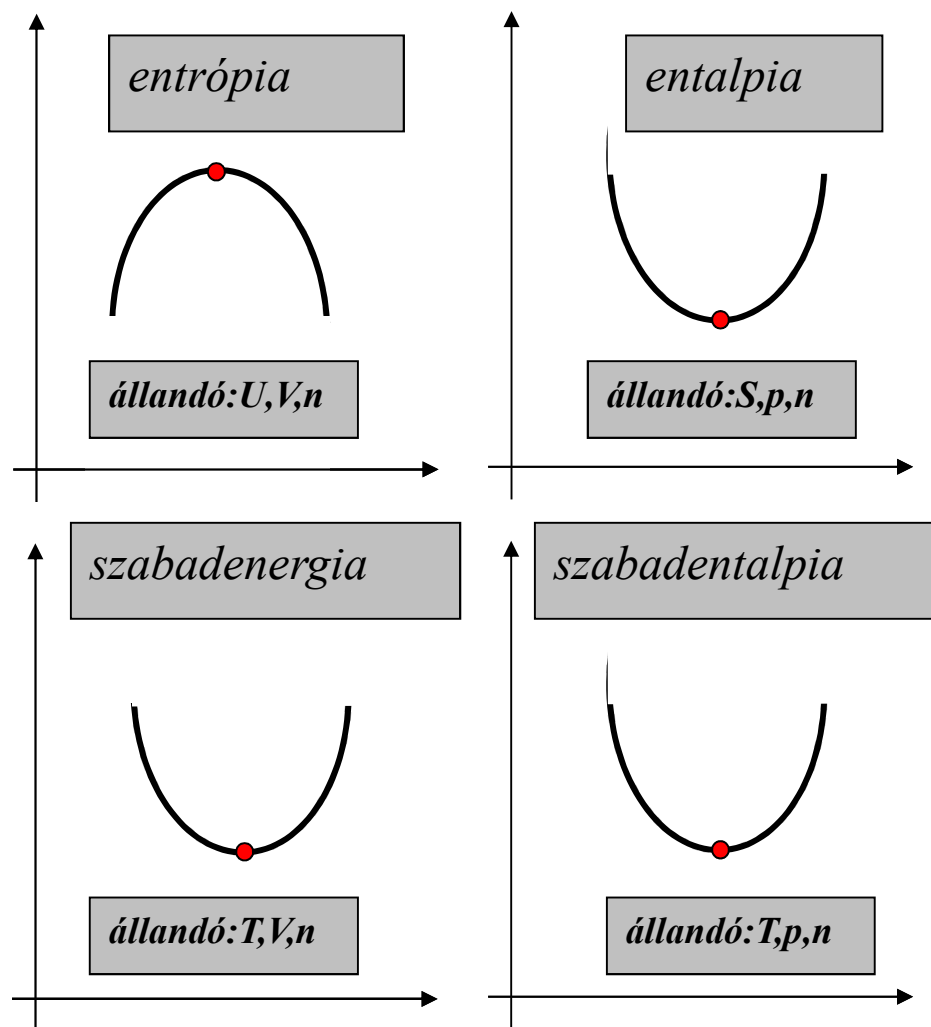
Az **G** szabadentalpia az **U** belső energiának **kémiai** folyamatokkal hasznosítható része.

## *A termodinamikai egyensúly feltétele*

<i>karakterisztikus függvény</i>	<i>környezeti kölcsönhatás</i>	<i>"szigetelés"</i>	<i>az egyensúlyhoz tartozó szélsőérték</i>	<i>önként lejátszódó folyamat során</i>
$S(U, V, n)$	elszigetelt	$U, V, n$	maximum	$\Delta S > 0$
$U(S, V, n)$	-	$S, V, n$	minimum	$\Delta U < 0$
$H(S, p, n)$	mechanikai	$S, -, n$	minimum	$\Delta H < 0$
$F(T, V, n)$	termikus	$-, V, n$	minimum	$\Delta F < 0$
$G(T, p, n)$	mechanikai és termikus	$-, -, n$	minimum	$\Delta G < 0$

**Intenzív mennyiségek homogén eloszlása!**

## *A termodinamikai egyensúly feltétele*

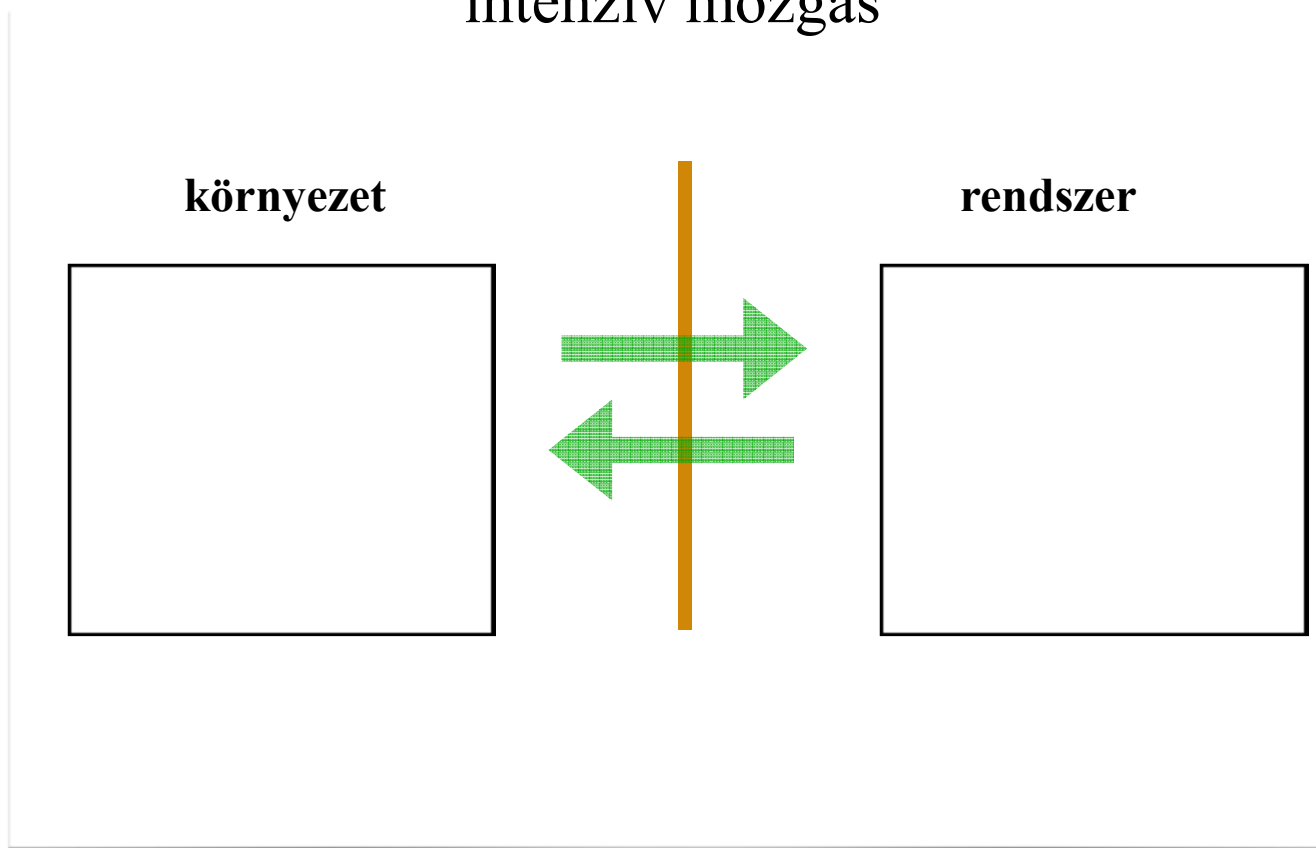


termodinamikai egyensúly  $\longleftrightarrow$  Szélsőérték meghatározás

# Termodinamikai egyensúly

**Makroszkopikusan:** az intenzív mennyiségek homogén eloszlása,  
látszólagos mozdulatlanság

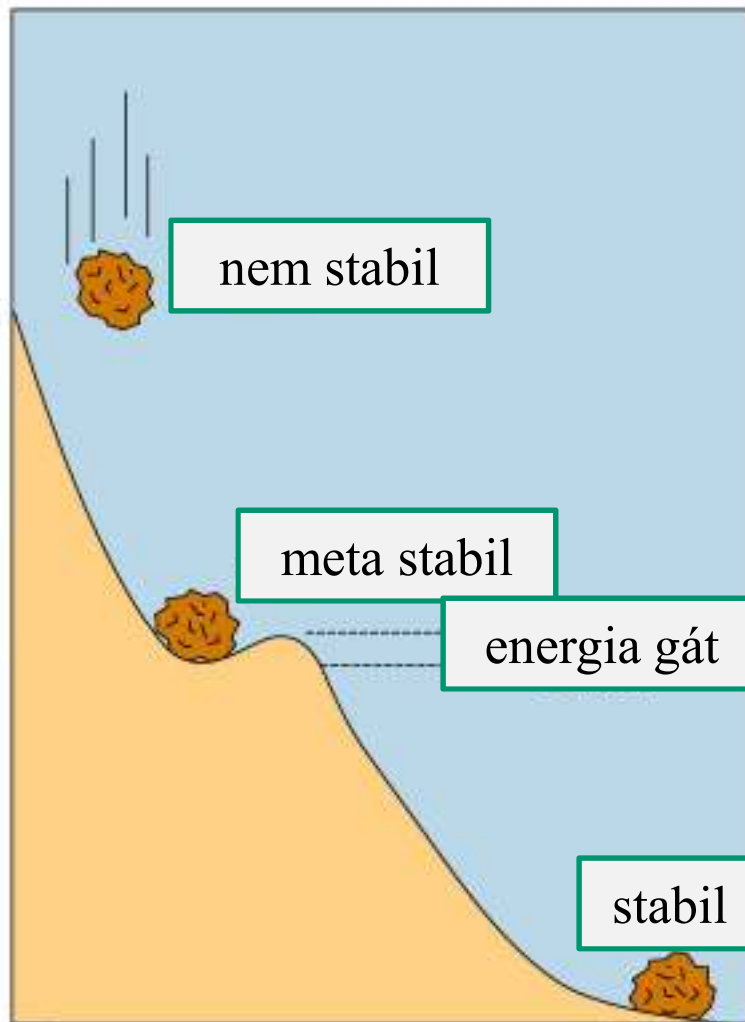
**Molekuláris szinten:** folyton változó állapotok összessége,  
intenzív mozgás





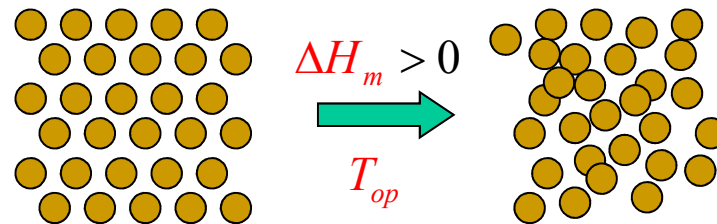
$F$

$G$



## *Az entrópia, mint a molekuláris rendezetlenség mértéke*

**Olvasás:**

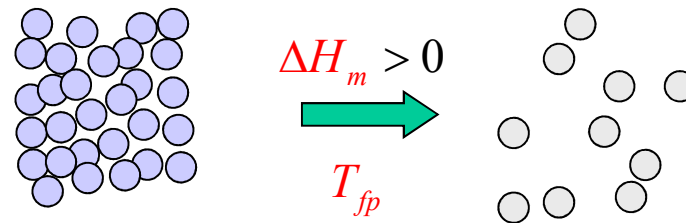


kristály

olvadék

$$\Delta S_m(T_{op}) = \frac{\Delta H}{T_{op}} > 0$$

**Forrás:**



folyadék

gőz

$$\Delta S_m(T_{fp}) = \frac{\Delta H}{T_{fp}} > 0$$

Az állandó hőmérsékleten lejátszódó (fázis)átalakulás során az **entrópia a rendezetlenség növekedésével együtt nő.**