2. óra

<u>Egykomponensű ideális gáz fundamentális egyenlete:</u>

$$S(U,V,n) = nR\left[\frac{f}{2}\ln\left(\frac{2U}{fnRT_0}\right) + \ln\frac{p_0V}{nrT_0}\right] + nS_m^0,$$

ahol:

- S az entrópia
- n az anyagmennyiség (vagy mólszám)
- R a moláris gázállandó
- f a „szabadsági fokok száma" (a molekula energiájában a gerjesztett kvadratikus energiatagok száma)
- U a belső energia
- V a térfogat
- p_0 a standard nyomás
- T_0 a standard hőmérséklet
- $S_m^0 \equiv S(T_0, p_0)$ a standard moláris entrópia

A fundamentális egyenletet lederiválva változói szerint megkapható az ekvipartíció-tétel és az állapotegyenletet is:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)_{n,V} = nR\frac{1}{2}\frac{1}{U} = \frac{1}{T} \qquad \Longrightarrow \qquad U = \frac{f}{2}nRT$$

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_{n,U} = nR\frac{1}{V} = \frac{p}{T} \qquad \Longrightarrow \qquad pV = nRT$$

$$\left(\frac{\partial S}{\partial n}\right)_{U,V} = R\left[\frac{f}{2}\ln\left(\frac{2U}{fnRT_0}\right) + \ln\frac{p_0V}{nrT_0}\right] - \frac{f+2}{2}R + S_m^0 = -\frac{\mu}{T} \qquad \Longrightarrow$$

$$\Longrightarrow \mu = \frac{f+2}{2}RT\left(1 - \ln\frac{T}{T_0}\right) + RT\ln\frac{p}{p_0} - TS_m^0$$

HF1: A kémiai potenciál átrendezésének ellenőrzése. (Tipp: fel kell használni az első két derivált eredményét!)

<u>Következmények:</u>

1)

$$S(T,V,n) = nR\left[\frac{f}{2}\ln\frac{T}{T_0} + \ln\frac{p_0V}{nrT_0}\right] + nS_m^0$$

Állandó térfogaton vett hőkapacitás:

$$C_V = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{V,n} = \frac{f}{2}nR$$

Szabadenergia:

$$F(T,V,n) = U - TS = nR\left[\frac{f}{2}\ln\frac{T}{T_0} + \ln\frac{p_0 V}{nrT_0}\right] + nTS_m^0$$

Megjegyzés: $S(T,V,n)$ **nem** fundamentális egyenlet, mivel – például – azt az információt, hogy U nem függ V-től nem tartalmazza:

$$\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{V,n} = C_V = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{V,n} = \frac{f}{2}nR \qquad \Longrightarrow$$

$$\Longrightarrow\ \ U(T,V,n) = \frac{f}{2}nRT + nc\left(\frac{V}{n}\right),$$

ahol $c\left(\frac{V}{n}\right)$ T szempontjából integrálási állandó és így $\frac{V}{n}$ határozatlan függvénye.

2)

$$S(T,p,n) = nR\left[\frac{f+2}{2}\ln\frac{T}{T_0} - \ln\frac{p}{p_0}\right] + nS_m^0$$

Állandó nyomáson vett hőkapacitás:

$$C_p = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{V,n} = \frac{f+2}{2}nR$$

Szabadentalpia:

$$G(T,p,n) = n\mu = nRT\left[\frac{f+2}{2}\left(1 - \ln\frac{T}{T_0}\right) + \ln\frac{p}{p_0} - \frac{1}{R}S_m^0\right]$$