

Formelsammlung

Wichtige Gleichungen PC I

$$1. \quad x_i = \frac{n_i}{\sum n_i} = \frac{p_i}{p}, \quad c_i = \frac{n_i}{V}, \quad \rho = \frac{m}{V} = \frac{M}{V_M}$$

$$n_i = \frac{N_i}{N_A} = \frac{m_i}{M_i}$$

$$c_i = \frac{n_i}{V} = \frac{N_i}{N_A V} \rightarrow \frac{V}{N_i} = \frac{1}{c_i N_A} = \frac{4}{3} \pi r^3 \rightarrow d = 2 r$$

$$2. \quad pV = nRT, \quad pV_m = RT$$

$$\left(p + \frac{a}{V_m^2} \right) (V_m - b) = RT$$

$$pV^\kappa = p_0 V_0^\kappa$$

$$3. \quad dW = -p dV \quad \begin{array}{l} \rightarrow p = \text{konst} \rightarrow W = -p(V_2 - V_1) \\ \rightarrow p = \frac{nRT}{V} \rightarrow W = -nRT \ln \frac{V_2}{V_1} \end{array}$$

$$dW = c_v dT \quad \rightarrow W = c_v (T_2 - T_1)$$

$$4. \quad E = \bar{\varepsilon} N_A = U - U_0 = N_A (\bar{\varepsilon}_{\text{kin}} + \bar{\varepsilon}_{\text{pot}}), \quad k_B = \frac{R}{N_A}$$

$$\varepsilon_{\text{pot}} = 0 \quad (\text{id. Gas}), \quad \varepsilon_{\text{kin}} = \frac{1}{2} mv^2, \quad \bar{\varepsilon} (\text{pro Freiheitsgrad}) = \frac{1}{2} k_B T$$

$$\sqrt{\overline{v_A^2}} = \sqrt{\frac{3RT}{M_A}}, \quad \overline{v_A} = \sqrt{\frac{8RT}{\pi M_A}}, \quad \overline{v_{\text{relativ}}} = \sqrt{\frac{8RT}{\pi \mu}}, \quad \mu = \frac{M_A M_B}{M_A + M_B}$$

$$\bar{\varepsilon} = Z \cdot \frac{1}{2} k_B T, \quad Z = Z(\text{Trans}) + Z(\text{Rot}) + 2 Z(\text{Schwingung})$$

$$\sigma_{AB} = \pi (r_A + r_B)^2, \quad Z_{AB} = \frac{N(A)}{V} \frac{N(B)}{V} \sigma_{AB} \overline{v_{\text{relativ}}}$$

$$5. \quad U - U_0 = \bar{E}_{\text{kin}} + \bar{E}_{\text{pot}}, \quad dU = dQ + dW = dQ - pdV$$

$$H = U + pV, \quad dH = dQ + dW + d(pV) = dQ + Vdp$$

$$\left(\frac{dQ}{dT} \right)_v \equiv c_v \rightarrow \left(\frac{dU}{dT} \right)_v = c_v, \quad \left(\frac{dH}{dT} \right)_p = c_p$$

Kreisprozesse: Heß'scher Satz, Kirchoff'scher Satz

$$6. \quad dS = \frac{dQ}{T} = \frac{dU + pdV}{T} = \frac{dH - Vdp}{T}$$

$$G \equiv H - TS, \quad dG = Vdp - SdT$$

$$S = k_B \ln \Omega$$

$$7. \quad \left. \begin{aligned} \Delta_r H &= \sum_i \nu_i H_i = \sum_i \nu_i \Delta_f H_i \\ \Delta_r S &= \sum_i \nu_i S_i \\ \Delta_r G &= \sum_i \nu_i \mu_i = \sum_i \nu_i \Delta_f G_i \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \Delta_f H_{298}^\ominus \\ \text{Tabellen: } S_{298}^\ominus \\ \Delta_f G_{298}^\ominus \end{array}$$

$$d\xi = \nu_i dn_i$$

$$\Delta_r G^\ominus = -RT \ln K^\ominus$$

$$\Delta_r G = \sum_i \nu_i \mu_i = \sum_i \nu_i \mu_i^\ominus + RT \ln \prod_i x_i^{\nu_i} = \Delta_r G^\ominus + RT \ln Q$$

↑ keine Glgew.konz. ↑

$$\Delta_r G^\ominus = -RT \ln \prod_i (x_i^{\nu_i})_{\text{Gl}} = -RT \ln K^\ominus$$

$$\Delta_r G^\ominus = \Delta_r H^\ominus - T\Delta_r S^\ominus, \quad \Delta_r G^\ominus = \Delta_r H^\ominus - T\Delta_r S^\ominus$$

Berechnung von Gleichgewichtskonstanten:

$$A + B \rightleftharpoons 2C \quad K = \frac{[C]^2}{[A][B]}$$

Gegeben Anfangswerte der Konzentrationen: A_0, B_0, C_0

Die Änderung bei Gleichgewichtseinstellung wird über Reaktionsvariable berechnet.

$$dn_i = \nu_i d\xi$$

Reaktionsvariable wird errechnet aus einer Anfangskonzentration und einer

Gleichgewichtskonzentration. Wir nennen $d\xi = x$

Tabelle:

	A	B	C
Anfang	A_0	B_0	C_0
Änderung	$dn_A = \nu_A d\xi$ $= -x$	$dn_B = \nu_B d\xi$ $= -x$	$dn_C = \nu_C d\xi$ $= 2x$
Gleichgewicht	$A_0 - x$	$B_0 - x$	$C_0 + 2x$

- K gegeben \longrightarrow x wird berechnet \longrightarrow Gleichgewichtskonzentrationen
- $d\xi$ gegeben (aus Anfang- und Endkonzentration) \longrightarrow K wird berechnet

$$\alpha = \frac{[\text{HA}]_{\text{diss}}}{[\text{HA}]_0} \rightarrow K = \frac{\alpha^2}{(1-\alpha)} [\text{HA}]_0$$

8. T-Abhängigkeit von K^0

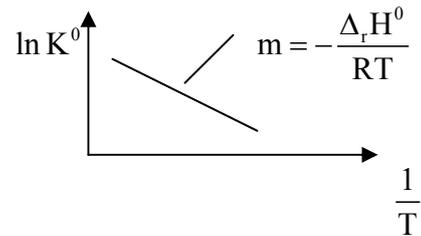
$$\left(\frac{d \ln K^0}{dT} \right)_p = \frac{\Delta_r H^0}{RT^2}$$

Bestimmte Integration:

$$\int_{K_1}^{K_2} d \ln K^0 = \frac{\Delta_r H^0}{R} \int_{T_1}^{T_2} \frac{1}{T^2} dT$$

$$\ln \frac{K_2^0}{K_1^0} = -\frac{\Delta_r H^0}{R} \left[\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right]$$

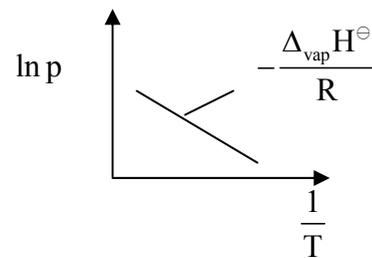
unbestimmte Integration:



In dieser Gleichung stehen 5 unbekannte Größen, 4 müssen gegeben sein, die 5 wird ausgerechnet.

9. T-Abhängigkeit von Dampfdruck p_D und Sublimationsdruck p_S (Clausius-Clapeyron-Gleichung)

$$\left. \begin{aligned} \frac{d \ln p_D}{dT} &= \frac{\Delta_{\text{vap}} H^\ominus}{RT^2} \\ \frac{d \ln p_S}{dT} &= \frac{\Delta_{\text{sub}} H^\ominus}{RT^2} \end{aligned} \right\} \Delta_{\text{sub}} H^\ominus - \Delta_{\text{vap}} H^\ominus = \Delta_{\text{fus}} H^\ominus$$



Integration und Berechnung wie bei K^\ominus

10. Phasengleichgewichte (Mehrstoffsystem, Index Lösungsmittel: 1, Index gelöster Stoff: 2, T = konstant)

Dampfdruck- erniedrigung	Siedepunkt- erhöhung	Gefrierpunkt- erniedrigung	Osmotischer Druck
$\mu_1(\text{fl}) = \mu_1(\text{gas})$	$\mu_1(\text{fl}) = \mu_1(\text{gas})$	$\mu_1(\text{fest}) = \mu_1(\text{fl})$	$\mu_1^\ominus(p^\ominus, \text{rein}) = \mu_2(p, x_1)$
⋮	⋮	⋮	⋮
⋮	⋮	⋮	⋮
⋮	⋮	⋮	⋮
Raoult: $p_1 = x_1 p_1^0$ oder $x_2 = \frac{p_1^0 - p_1}{p_1^0}$ $p_1^0 =$ Dampfdruck reiner Stoff 1 Henry: $p_1 = K_H x_1$	$\Delta T = E_e c_2$	$\Delta T = -E_k c_2$	$\pi = p - p^0$ $\pi = \frac{RT}{V_m} x_2$ $\pi = c_2 RT$ analog ideales Gas

11. Elektrisches Potential und Feld:

$$\phi = \frac{E_{\text{pot}}}{Q_1}, \quad E_{\text{pot}} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q_1 Q_2}{r}, \quad \vec{E} = \frac{\vec{F}}{Q_1}$$

$$W = Q_1(\phi_2 - \phi_1) = Q_1 U = U I t$$

$$Q_1 = I t = \frac{m_i}{M_i} z_i F$$

$$\frac{U}{I} = R = \sigma \frac{\ell}{A}, \quad \kappa = \frac{1}{\sigma}, \quad \frac{\kappa}{c} = \Lambda = v_+ \Lambda_+ + v_- \Lambda_-, \quad \Lambda = \Lambda_0 - k\sqrt{c}$$

12. $\Delta G = -zFE = \Delta H - T\Delta S$

$$\Delta G^0 = -zFE^0 = -RT \ln K^0$$

$$E = E^0 - \frac{RT}{zF} \ln \prod_i a_i^{v_i}$$

$$a_i \begin{matrix} \nearrow c_i \\ \longrightarrow x_i, \\ \searrow p_i \end{matrix} \quad \text{Schema für Aufstellung von E}$$

Membranpotential: $\Delta\phi = \frac{RT}{zF} \ln \frac{[]_1}{[]_2}$

13. $v = \frac{1}{v_A} \frac{d[A]}{dt} = \text{Defintion}$

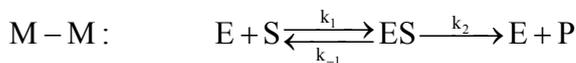
$v = k[A]^a [B]^b$ Reaktionsordnung: (a+b)

14. 0. Ordnung: $-\frac{dA}{dt} = k \rightarrow A=A_0 - kt$

1. Ordnung: $-\frac{dA}{dt} = kA \rightarrow A=A_0 \exp(-kt), \tau = \frac{\ln 2}{k}$

2. Ordnung: $-\frac{dA}{dt} = kA^2 \rightarrow \frac{1}{A} = \frac{1}{A_0} + kt, \tau = \frac{1}{A_0 k}$

15. Mechanismus: Ablauf einer chemischen Reaktion durch eine Folge von Reaktionsschritten 1. und 2. Ordnung



$\frac{d[ES]}{dt} = k_1 [E][S] - k_{-1} [ES] - k_2 [ES]$

$v_{\max} = k_2 [E]_0, K_M = \frac{k_{-1} + k_2}{k_1}$

$\frac{d[P]}{dt} = v = \frac{v_{\max} [S]}{K_M + S}$

$[E_0] = \text{Gesamtkonzentration}$

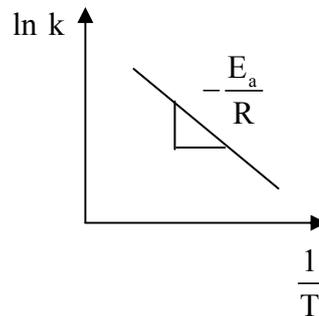
Folgereaktionen, Parallelreaktionen

16. T-Abhängigkeit der Geschwindigkeitskonstanten

$\frac{d \ln k}{dT} = \frac{E_a}{RT^2}$ „Arrhenius Gleichung“

$\int d \ln k = \frac{E_a}{R} \int \frac{1}{T^2} dt \rightarrow \ln k = -\frac{E_a}{R} \frac{1}{T} + \text{konst}$

$k = k_0 \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)$



17. Diffusion

$$J = \frac{dn}{dt A} = \text{Definition des Flusses,}$$

$$J = -D \frac{dc}{dx} = \text{stationäre Diffusion}$$

$$\frac{dc}{dt} = D \frac{d^2c}{dx^2} = \text{instationäre Diffusion,}$$

$$D = \frac{\overline{\Delta x^2}}{2\Delta t}$$

$$D = \frac{k_B T}{f_R} = \frac{k_0 T}{6\pi r \eta}$$

18. Spektroskopie, W W elektromagnetischer Strahlung mit Materie

Absorption: Lambert-Beer: $dI = -\alpha c I_0 dx, I = I_0 \exp(-\alpha c \ell)$

$$A = \lg \frac{I_0}{I} = \epsilon c \ell, \quad \epsilon = \frac{\alpha}{2,303}$$

 $\epsilon = \text{Absorptionskoeffizient}$

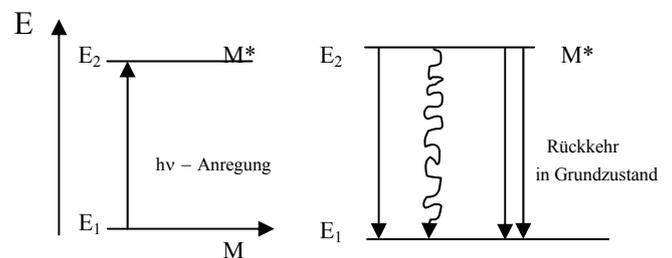
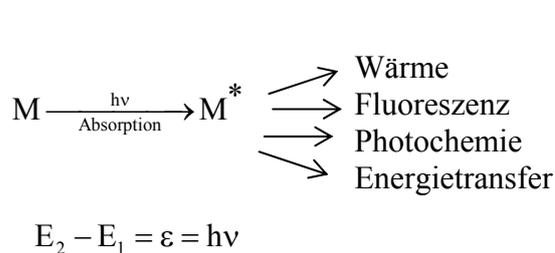
$$\epsilon = h\nu, \quad c = \nu\lambda$$

 $\epsilon = \text{Energie eines Photons}$

Lichtintensität: $I = \frac{dQ}{dt A} = \frac{\sum \epsilon_i dN_i}{dt A}$

Wenn nur Photonen einer Frequenz(Wellenlänge) vorhanden sind, gilt:

$$I = \frac{\epsilon N}{t A}$$



19. Mathe: $dy = x^n dx, \quad y = \frac{1}{n+1} x^{n+1} + \text{konst}$

Für $n = -1$ gilt: $y = \ln x + \text{konst}$

$$a \ln b = \ln b^a, \quad \ln a + \ln b = \ln ab$$

$$ax^2 + bx + c = 0 \quad \rightarrow \quad x_{1/2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$