

Zárthelyi háttéranyag

Tartalom

1	Matematikai háttér.....	1
1.1	Preferencia szabály	1
1.2	Hatványozás és fordítottjai (inverzei).....	1
1.2.1	Gyökvonás	2
1.2.2	Logaritmus	2
2	Számítástechnikai háttér.....	3
3	Fizikai kémiai háttér.....	3
3.1	Egyensúlyi reakciók.....	3
3.2	Disszociáció oldatokban	4
3.2.1	Disszociáció híg oldatokban.....	4
3.2.2	Víz disszociációja.....	5
3.2.3	Savak, lúgok, sók disszociációja	5

1 Matematikai háttér

1.1 Preferencia szabály

A matematikai kifejezések, képletek, egyenletek stb. nem balról jobbra egymást követően olvasandók, végzendők. A kijelölt műveletek, függvények között szigorú rangsor szerinti (*hierarchikus*) elsőbbségi (*preferencia*) sorrend érvényes. Ezek az (előny)szabályok bármi külön jelölések nélkül kötelezőek. Ezekről eltérő eseteket zárójelekbe foglalással kell jelölni. E szabályok (nagyjából) a következők:¹

- A függvények (log, sin, tg, abs, int stb.) kiszámítása, behelyettesítése.
- A hatványozások, illetve gyökvonások kiszámítása, behelyettesítése.
- A zárójellel összefogott, kiemelt műveletek kiszámítása, behelyettesítése.
- A (+ vagy – műveleti jelekkel elválasztott) *tagokon* belüli (· vagy / műveleti jelekkel elválasztott) *tényezők* szorzatának, illetve hányadosának kiszámítása, behelyettesítése.
- A *tagok* összevonása (összeadás, kivonás).

Például: $1 + 2^3 \cdot 4 - 5/6 = 1 + 8 \cdot 4 - 5/6 = 1 + 32 - 0,8333 = 32,1666$

Ettől eltérő sorrendet zárójelekkel kell kiemelni.

Például: $(1 + 2)^3 \cdot (4 - 5)/6 = 3^3 \cdot (-1)/6 = 3^3 \cdot (-1/6) = -9/6 = 1,5$

Az egyenletek, függvények „helyesírásához” tartozik, hogy a változókat *dőlt* (*a*, *b*, *x*, *y* stb.), a számokat és függvényjeleket (1, 2, 3, log, sin, tg stb.) álló betűkkel írják, továbbá szokt **csak** a tagokat elválasztó + és – műveleti jelek, valamint a relációs jelek (<, =, > stb.) előtt és után hagynak.

1.2 Hatványozás és fordítottjai (inverzei)

A hatványozás két argumentuma, a (hatvány)*alap* és (hatvány)*kitevő* (*exponens*) **nem** fölcserélhetők (nem *kommutatív*): $2^3 \neq 3^2$

Ezért kétféle, egymástól különböző megfordításuk létezik.

¹ E szabályok formailag és értelmileg is hasonlíthatók a KRESZ jobbkéz-szabályához. Ezt semmilyen jel nem mutatja. A szükséges eltéréseket viszont lámpák, táblák stb. jelzik.

1.2.1 Gyökvonás

A hatványozás során kapott *hatvány* és az ott alkalmazott *kitevő* (itt: *gyökkitevő*) segítségével keressük az alapot (itt: *gyök*).

$$\text{Ha } 2^3 = 8 \quad \text{akkor } \sqrt[3]{8} = 2$$

A műveletre utaló különleges jel a „radix” (gyök) szó első betűjének stilizált alakjából származik.

A matematikában előszeretettel alkalmazott rövidítésekkel összhangban a **2** gyökkitevőt nem szokás kiírni („négyzetgyök”): a kitevő **nélkül** alkalmazott „gyökjel” mindig négyzetgyököt jelent.

Az **1** kitevő értékével fölösleges foglalkozni, mivel:

$$\text{Mivel } x^1 = x \quad \text{ezért } \sqrt[1]{x} = x$$

A gyökvonás művelete bármikor helyettesíthető a törtekitevőjű hatványozással, mivel

$$\sqrt[m]{x} = x^{\frac{1}{m}} \quad \text{illetve} \quad \sqrt[m]{x^n} = \left(\sqrt[m]{x}\right)^n = x^{\frac{n}{m}}$$

Ebből kitűnik, hogy az egyidejű gyökvonás és a hatványozás elvégzési sorrendje közömbös, továbbá a gyökkitevő **nem** lehet **0**, mert a jobb oldalon ekkor értelmezhetetlen 0 nevezőjű tört keletkezne.

A *törtekitevőjű* hatványok műveletei megegyeznek az *egészszámú* kitevőjű hatványokéval.

FONTOS! Általában a **törtekitevőjű** hatványok csak **egész** alapon értelmezhetők ($x = \text{egészszám}$).

1.2.2 Logaritmus

A hatványozás során kapott *hatvány* és az ott alkalmazott *alap* (itt: *logaritmusalap*) segítségével keressük a *kitevőt* (itt: *logaritmus*).

$$\text{Ha } 2^3 = 8 \quad \text{akkor } \log_3 8 = 2$$

Míg a hatványozásnál (és gyökvonásnál) a kitevő *felső* indexbe kerül, itt a (*logaritmus*)alap az *alsó* indexbe kerül!

A tudományos, műszaki, gyakorlati életben egyes logaritmusalapoknak kiemelt jelentősége van. Ezeket szintén rövidített írásmóddal szokás jelölni.

10 alapú	$\log_{10} x \equiv \lg x$
$e = 2,718182\dots$ alapú („természetes”) ²	$\log_e x \equiv \ln x$
2 alapú („bináris”)	$\log_2 x \equiv \lg x$

FONTOS! Csak $x > 0$ (pozitív) valós számok logaritmusa értelmezhető.

A számok logaritmusát általában vagy táblázatok, vagy a számológépek, számítógépek alkalmasan választott végtelensoros közelítő számításai adják. Ezek általában a 10 vagy e alappal férhetők hozzá. Bármely $n > 0$ valós szám alapú logaritmus előállítható egy másik alapú logaritmusból.

$$\log_a x = \frac{\log_b x}{\log_b a}$$

Szavakkal: egy x szám a alapú logaritmusa egyenlő az x szám b alapú logaritmusának és az a alap b alapú logaritmusának hányadosával.

Például:

$$\lg x = \frac{\ln x}{\ln 10} \quad \text{illetve} \quad \ln x = \frac{\lg x}{\lg_e e}$$

² A $dy = dx/x$ típusú differenciálegyenletekkel leírt természetes folyamatok (pl. radioaktív bomlás, reakciósebesség, fényelnyelés stb.) integrált egyenleteiben jelenik meg: $\int (1/x) dx = \ln x$.

2 Számítástechnikai háttér

A négy alapl művelet leírása a számítástechnikai programnyelvekben általában megegyezik a hagyományos matematikai leírással, kivéve a szorzás műveletjelét, amely a szokásos sorközépi pont (·) helyett rendszerint csillag (*).

Az egyenletes sorokban írandó különböző programnyelvekben a **hatványozás alapja** és **kitevője** közé, a műveletre utaló különböző különleges jeleket kell tenni. Ezek közül leggyakoribbak a két csillag (**), a „kalap” vagy „sapka” (^ vagy [AltGr]3 vagy Unicode: 005E vagy ASCII: 94), nyíl (↑ vagy Unicode: 2191).

Például: $2^3 \rightarrow 2**3 \rightarrow 2^3 \rightarrow 2\uparrow 3$

A programnyelvek általában csak a „négyzetgyök” függvényt tudják kezelni, és leírása a függvények szabályai szerint történik, általában: **operátor**(argumentum). Az operátor betűkódja itt legtöbbször sqrt,³ a magyar változatoknál pedig GYÖK, az argumentum pedig a szám, aminek a gyökét keressük.

Bármely más (**nem 2**) kitevőjű gyököt törtkitevős hatványként kell a programnyelvekbe írni.

Például: $2^{3/5} \rightarrow 2**(3/5) \rightarrow 2^{(3/5)} \rightarrow 2\uparrow(3/5)$

FONTOS! A zárójelezés ilyenkor mindig kötelező.

A **logaritmus** számítására a programnyelvek saját függvénnyel rendelkeznek. Ezek alakja általában szintén **operátor**(argumentum). Az operátor betűkódja utal a logaritmus alapra.

Ha a nyelv alapkészletében csak természetes (e alapú) logaritmus függvény található, akkor az operátor betűkódja általában: log. Ilyenkor más alapú logaritmusokhoz külön függvény készíthető az 1.2.2 szakasz szerint. Például:

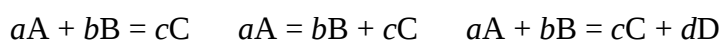
$$\lg x \rightarrow \log_{10}(x) = \log(x) / \log(10)$$

Egyes nyelvek alapkészlete értelmezi a 10 alapú logaritmust is. Ilyenkor az annak megfelelő operátort (rendszerint: lg, esetleg ln) kell alkalmazni.

3 Fizikai kémiai háttér

3.1 Egyensúlyi reakciók

A kiindulási anyag(ok)ból a kémiai reakció során végtermék(ek) keletkeznek. Például (egyesülés, bomlás, cserebomlás):



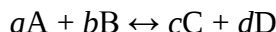
Itt az (álló) nagybetűk az egyes vegyületek teljes képletét, a (*dőlt*) kisbetűk betűk pedig a molekulák számát vagy a vegyületek mólszámát jelentik.

A reakció pillanatnyi sebessége általában arányos a kiindulási anyag(ok) pillanatnyi töménységével (*koncentráció*). A különböző koncentrációkat az indexelés nehézkességének elkerülésére szokás a képletek szögletes zárójelbe tételével jelezni, például: [A].

A reakciók jelentős hányadában a reakció során keletkező végtermék(ek) megjelenésével ellenkező reakció is megindul: a végtermék(ek)ből az eredeti kiindulási anyag(ok) keletkeznek, most a végtermék(ek) pillanatnyi töménységével arányos sebességgel. Miközben az előre haladó reakció pillanatnyi sebessége – a kiindulási anyagok fogyása miatt – lassul, aközben a visszaforduló reakció pillanatnyi sebessége – a végtermékek dúsulása miatt – gyorsul. Amikor az ellenkező irányban változó két sebesség egyenlő lesz, a reakció **kvázi-stacioner** állapotba kerül. Miközben a reakció most már

³ square root = négyzetgyök

állandó sebességgel mindkét irányban folyik, aközben a töménységek változatlanok maradnak. Az egyenletben az egyenlőségjel helyett a $\leftrightarrow$ jel szokásos. Például (a betűk jelentése, mint előbb):



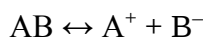
Tömeghatás törvénye (Guldberg – Waage): Egyensúly esetén a végtermékek és a kiindulási anyagok egyensúlyi koncentrációi megfelelő hatványú szorzatának hányadosa – állandó nyomáson és hőmérsékleten – a reakcióra jellemző (dimenzió nélküli) szám, a **K egyensúlyi állandó**.

$$K = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b} = \text{állandó}$$

3.2 Disszociáció oldatokban

Sok vegyület oldódik vízben vagy más folyékony oldószerben. A tiszta, tömény oldandó anyag lehet gázállapotú (pl. sósavgáz, ammónia), folyadék (pl. salétromsav, kénsav stb.) vagy szilárd fázisú (pl. hamuszír, konyhasó stb.). Ezek jelentős hányada oldódás közben (visszafordítható = *reverzibilis* módon) részekre bomlik: **disszociál**. Elvben a disszociáció *egyensúlyi folyamat*.

A disszociált részek a korábbi kötő elektronokon rendszerint egyenlőtlenül osztoznak: egyikük elektron fölösleggel rendelkező **anion**, másikuk elektronhiányos **kation** lesz úgy, hogy a keletkezett **ionok** töltéseinek algebrai összege természetesen nulla marad. Legegyszerűbb példa:



Erre is érvényes a fenti tömeghatás törvénye. Itt a disszociációs állandó (K_d):

$$K_d = \frac{[A^+][B^-]}{[AB]} = \text{állandó}$$

Hígítási törvény (Ostwald). Legyen a kiindulási anyag disszociáció előtti összes koncentrációja: c_0 és legyen a disszociált hányad: α (**disszociáció fok**).

Persze itt:

$$0 < \alpha \leq 1$$

Ekkor

$$[A^+] = [B^-] = \alpha c_0 \quad \text{és} \quad [AB] = (1 - \alpha)c_0$$

Innen:

$$K_d = \frac{\alpha c_0 \alpha c_0}{(1 - \alpha)c_0} = \frac{\alpha^2}{1 - \alpha} c_0$$

Vagyis a K_d disszociációs állandó egyenesen arányos a c_0 kezdeti töménységgel.

3.2.1 Disszociáció híg oldatokban

Ha az anyag oldódása csekély, vagyis az α disszociációs együttható kicsi, az utóbbi képlet nevezője: $1 - \alpha \approx 1$.

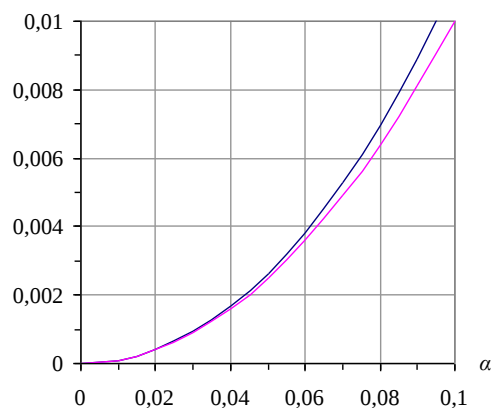
Ekkor:

$$K_d \approx \alpha^2 c_0$$

A grafikon *felső*, illetve *alsó* görbéje mutatja K_d disszociációs állandó előző *pontos*, illetve utóbbi *közelítő* értékének alakulását a kis α disszociáció fok függvényében. Az eltérés láthatóan csekély.

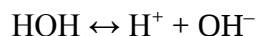
Ha az eltérés elviselhető, a disszociációs állandó helyett csak annak számlálójával, az ionszorzzattal (I) szokás számolni.

$$I = [A^+][B^-]$$



3.2.2 Víz disszociációja

A tiszta, semleges víz önmagában is disszociál, bár csekély mértékben:⁴



A víz ionszorzata (25°C-on): $I = [\text{H}^+][\text{OH}^-] = 1,0 \cdot 10^{-14}$

Persze a kétféle ion töménysége egymással egyenlő:

$$[\text{H}^+] = [\text{OH}^-] = 1,0 \cdot 10^{-7}$$

Hidrogén kitevő (hidrogén exponens, p_{H}). *Sørensen* ajánlatára (a megjelenítés megkönnyítése érdekében) a hidrogénion töménység 10 alapú negatív logaritmusát adják meg. Ez tiszta, semleges vízben az előbbieket folytatán:

$$p_{\text{H}} = -\lg [\text{H}^+] = 7$$

Elvben ugyanígy lehetséges megadni a p_{OH} értéket is, csak fölösleges, mivel a definíció folytán:

$$-\lg I = p_{\text{H}} + p_{\text{OH}} = 14 \quad \text{vagyis} \quad p_{\text{OH}} = 14 - p_{\text{H}}$$

Vagyis a p_{H} megadásával a p_{OH} egy kivonással kiszámítható.

$[\text{H}^+]$	10^0	10^{-1}	10^{-2}	10^{-3}	10^{-4}	10^{-5}	10^{-6}	10^{-7}	10^{-8}	10^{-9}	10^{-10}	10^{-11}	10^{-12}	10^{-13}	10^{-14}
p_{H}	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
$[\text{OH}^-]$	10^{-14}	10^{-13}	10^{-12}	10^{-11}	10^{-10}	10^{-9}	10^{-8}	10^{-7}	10^{-6}	10^{-5}	10^{-4}	10^{-3}	10^{-2}	10^{-1}	10^0
p_{OH}	14	13	12	11	10	9	8	7	6	5	4	3	2	1	0

Természetesen nemcsak egészszámú értékek léteznek.

Például: ha $[\text{H}^+] = 2,5 \cdot 10^{-3}$ akkor $p_{\text{H}} = -\lg (2,5 \cdot 10^{-3}) = 2,6$

3.2.3 Savak, lúgok, sók disszociációja

A szervesetlen vegyületek jelentős hányada besorolható a *sav*, *lúg* (*bázis*), *só* vagy az ezekkel rokon csoportok (pl. savanhidrid, bázisanhidrid, savanyú vagy bázikus só stb.) egyikébe. Ezek vizes oldatban szintén disszociálnak. Az előbbi szemlélet és kifejezőmód az ionosan disszociált vizes oldatok ionjaira is értelmezhető. Például:

Sav (sósav): $\text{HCl} \leftrightarrow \text{H}^+ + \text{Cl}^-$

Savanyú só (szódabikarbóna): $\text{NaHCO}_3 \leftrightarrow \text{Na}^+ + \text{H}^+ + \text{CO}_3^{2-}$

Semleges só (konyhasó): $\text{NaCl} \leftrightarrow \text{Na}^+ + \text{Cl}^-$

Bázikus só: $\text{Fe}(\text{OH})\text{CO}_3 \leftrightarrow \text{Fe}^{3+} + \text{OH}^- + \text{CO}_3^{2-}$

Bázis (nátronlúg): $\text{NaOH} \leftrightarrow \text{Na}^+ + \text{OH}^-$

Látható, hogy a **savak** és **bázisok**, meg a **savanyú** és **bázikus sók** híg vizes oldatában a disszociáció során is keletkeznek a vízben amúgy is jelenlevő, további H^+ , illetve OH^- ionok. Mivel a víz ionszorzata (állandó hőmérsékleten) állandó, az oldott anyaggal bevitt újabb H^+ , illetve OH^- ionok csak a kétféle ion egymáshoz képesti arányát tudják módosítani az előbbi táblázat szerint.⁵

A **semleges sók** híg vizes oldataira is kiterjeszthető ez a szemlélet és kifejezőmód. Ilyen sók a víz H^+ , illetve OH^- ionjainak koncentrációját általában nem zavarja, így az oldat p_{H} értéke nem változik. Viszont a kismértékben oldódó vegyület (pozitív) kationjára ugyanúgy értelmezhető egy exponens. Például:

⁴ A hidrogénion az egyetlen elektronját vesztett hidrogénatom. Az ion az atommag egyetlen pozitív töltésű protonjából áll. Ennek mérete az atomok méretének csupán 10^{-5} -szöröse. Ez a proton rendszerint egy disszociálatlan vízmolekula elektronburkába merülve H_3O^+ oxonium vagy hidroxonium iont alkot.

⁵ Az egyik ion (pl. H^+) koncentrációjának növelése a másik (pl. OH^-) koncentrációját visszaszorítja, és fordítva, az egyik ion (pl. H^+) koncentrációjának csökkentése a másik (pl. OH^-) koncentrációját megnöveli.

Semleges só (ezüst-klorid): $\text{AgCl} \leftrightarrow \text{Ag}^+ + \text{Cl}^-$

Az egyenletből látható, hogy $[\text{Ag}^+] = [\text{Cl}^-]$

Ha az oldódás csekély, itt is elegendő az ionszorzat megadása, és az előbbieket analógiájára itt is felírható:

$$p_{\text{Ag}} = -\lg [\text{Ag}^+] = p_{\text{Cl}} = -\lg [\text{Cl}^-]$$

Tehát itt is elegendő a (pozitív) kation értékének megadása.

Bonyolultabb összetételű sók esetén a számítás is bonyolultabbá válik.

1. példa: (alumínium-szulfát): $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3 \leftrightarrow 2\text{Al}^{3+} + 3\text{SO}_4^{2-}$

Az egyenletből látható, hogy $[\text{Al}^{3+}]^2 = [\text{SO}_4^{2-}]^3$

Híg oldat esetén: $p_{\text{Al}} = -\lg [\text{Al}^{3+}]^2 = -2\lg [\text{Al}^{3+}]$

2. példa: (alumínium-szulfát): $\text{Ba}_3(\text{PO}_4)_2 \leftrightarrow 3\text{Ba}^{2+} + 2\text{PO}_4^{3-}$

Az egyenletből látható, hogy $[\text{Ba}^{2+}]^3 = [\text{PO}_4^{3-}]^2$

Híg oldat esetén: $p_{\text{Ba}} = -\lg [\text{Ba}^{2+}]^3 = -3\lg [\text{Ba}^{2+}]$

További jó munkát és szórakozást!