



TANTÁRGYI ADATLAP

Tárgy neve:		Kódja:		
Fizikai kémia I.		VEMKFK2343A		
Physical Chemistry I.				
Tárgyfelel s oktató:		Tárgyfelel s tanszék:		
Liszi János Dr.		Fizikai Kémia		
Elmélet (óra):	Gyakorlat (óra):	Kredit:	Számonkérés:	
2 (/hét)	1 (/hét)	3	Vizsga	

A tárgy oktatója:				
név	kurzus:	min. limit (fő)	max. limit (fő)	nyelv
Kristóf Tamás dr.	Vizsgakurzus	0	30	

A tantárgy célkitűzése

Oktatási cél: előadások és szemináriumok segítségével megismertetni a fizikai kémiát. A fizikai-kémiai alapszámítások elsajátítása és megfelelő gyakorlat szerzése.

- 1.
- 2.
- 3.
- 4.
- 5.
- 6.
- 7.
- 9.
- 10.
- 11.
- 12.
- 13.
- 14.
- 15.

Tantárgy képzési célja:

A fizikai kémia alapjainak megismertetése a mérnökhallgatókkal



TANTÁRGYI ADATLAP

Tantárgy tematikája:

A kémiai termodinamika alapfogalmai (fal, rendszer, tulajdonság). Extenzív és intenzív tulajdonságok. Hőmérséklet. Egyensúly. Termikus energia. Belső energia. Munka, térfogati munka, körfolyamat. Reverzibilis munka. A hő, integráló tényezője, a redukált hő mint entrópia.

A termodinamika első főtétele. Kémiai potenciál. Gibbs-egyenlet. Intenzív állapotjelzők definíciói. Euler-egyenlet. Kötött energia. A második főtétel. Irreverzibilis folyamatok. Harmadik főtétel. Az entrópiamaximum és az energiaminimum elve. Az egyensúly feltétele intenzív paraméterekkel megfogalmazva. Carnot-ciklus, termodinamikai hatások, hűtőgépek.

Entalpia. Szabadenergia. Szabadentalpia. Intenzív tulajdonságok H, F és G parciális deriváltjaiból. Planck-függvény Massieu-függvény. Moláris hőkapacitások. Termokémia: Hess-tétel, Kirchoff-egyenlet.

Energiaeloszlás részecskék között. Termodinamikai valószínűség. Legvalószínűbb eloszlás. Bose-Einstein-statisztika. A multiplikátorok fizikai tartalma és a Boltzmann-eloszlás.

A munka, a hő és az entrópia statisztikus mechanikai értelmezése. $S = k \ln W$. Entrópia és rendezetlenség. Elegyedési és konfigurációs entrópia.

Maxwell-relációk. Volumetrikus tulajdonságok és hőkapacitások. Gibbs-Helmholtz- és Gibbs-Duhem-egyenletek.

U, H és S változásai p-V-T függvényében. F, G, J és Y változásai. Energiafüggvények és a konfigurációs entrópia. A gáz nyomása. Molekulák energia- és sebességeloszlása. Ütközési számok. Átlagos szabad úthossz. Knudsen-diffúzió. Dielektrikum polarizációja. A moláris polarizáció Debye-egyenlete. Dielektromos relaxáció. Komplex relatív permittivitás, Cole-Cole-diagram.

Az eltolódási polarizáció frekvenciafüggése, a spektrum keletkezése. Mágneses és elektromos tulajdonságok. A tökéletes gáz termodinamikai tulajdonságai. A tökéletes gáz állapotváltozásai. A Poisson-egyenlet.

Intermolekuláris kölcsönhatások, Mie-egyenlet, Lennard-Jones-potenciál.

Viriálegyenlet. Reális gázok állapotegyenletei. Megfelelő állapotok tétele. Reális gázok tulajdonságai. Joule-Thomson-effektus. Pár-korrelációs függvény. Kristályszerkezetek. Ionkristályok Madelung-energiája. Kristályenergia Born-Haber körfolyamatból. Einstein- és Debye-fajhőfüggvény.

Folyadékok tulajdonságai: viszkozitás és Hagen-Poiseuille-törvény. Különleges szerkezetek: víz, folyadékkristályok, üvegek. Elegyek. Gázelegyek. Parciális moláris mennyiségek.

Ideális elegyek, Ge, Se. Az aktivitás, referencia állapotok. A különböző skálán vett aktivitások közötti összefüggés. Reális elegyek, termodinamikai többlettulajdonságok. Reguláris elegyek. Atermikus elegyek.

Ionok szolvatációja elektrolit oldatban. Reális elektrolit oldatok: az aktivitási tényező és a Debye-Hückel-elmélet. Vezetékes transzportegyenletek (Fourier, Newton, Fick). Instacionárius diffúzió. Vezetékes transzport tökéletes gázban. Diffúzió kondenzált fázisokban, Einstein-Smoluchowski-egyenlet.

Stokes-Einstein-egyenlet. Elektrolit oldatok vezetése, ionmozgékonyosság. Relaxációs és elektroforetikus effektus. Nernst-Einstein-egyenlet. Diffúziós potenciál. Jones-Dole-egyenlet. Elektrokémiai potenciál.

Összefoglalás

Tantárgy követelménye:

A vizsgára bocsátás feltétele: elégséges eredménnyel megírt zárthelyi és a kiadott házi feladatok, esszék legalább 80%-nak határidőre történő beadása. A szemináriumokon való részvétel kötelező, a megszerzett szemináriumi jegy a következő félévi gyakorlati jegybe beleszámít.

Tantárgyhoz kapcsolódó irodalom:

Liszi, J.: Fizikai kémia, Veszprém, 1993. Kézirat.
 Liszi, J., Ruff, I., Schiller, R., Varsányi, Gy.: Bevezetés a fizikai kémiába, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1993.
 Moore, J., W.: Chimica Fisica, Piccin, 1983.
 Atkins, W., P.: Physical Chemistry, Oxford University Press, 1990.