



TANTÁRGYI ADATLAP

Tárgy neve:		Kódja:	
Fizikai kémia I.		VEMKFKB212A	
Physical Chemistry i.			
Tárgyfelel s oktató:		Tárgyfelel s tanszék:	
Kristóf Tamás dr.		Fizikai Kémia	
Elmélet (óra):		Kredit:	Számonkérés:
2 (/hét)		2	Vizsga

A tárgy oktatója:			
név	kurzus típusa	kurzus kódja	nyelv
Kristóf Tamás dr.	Vizsgakurzus	CV	magyar

Tantárgy képzési célja:

A fizikai kémia alapjainak megismertetése.

Tantárgy tematikája:

A kémiai termodinamika alapfogalmai (fal, rendszer, tulajdonság, konvenciók). Extenzív és intenzív tulajdonságok. Hőmérséklet. Egyensúly. Termikus energia. Homogenitás. Komponensek. Belső energia. Munka, térfogati munka, reverzibilis munka. Körfolyamat. Hő. A termodinamika első főtétele. A termodinamika második főtétele. Az entrópia. Irreverzibilis folyamatok. A hő integráló tényezője. Harmadik főtétel. Az entrópiamaximum és az energiaminimum elve.

Kinetikus gázelmélet. Molekulák sebességeloszlása és az ideális gáz nyomása. Gibbs-egyenlet. Az intenzív állapotjelzők definíciói. Az empirikus és a termodinamikai hőmérséklet azonossága. Euler-egyenlet. Kötött energia, konjugált tulajdonságok. Az egyensúly feltétele intenzív paraméterekkel megfogalmazva. Termikus, mechanikai és komponensegyensúly.

Carnot-ciklus, termodinamikai hatásfok. Hőerőgép, hűtőgép, hőszivattyú. Termodinamikai tartályok és energiafüggvények. Entalpia. Szabadenergia. Szabadentalpia. Intenzív tulajdonságok H, F és G parciális deriváltjaiból.

Gibbs-Helmholtz- és Gibbs-Duhem-egyenletek. Kémiai potenciál. Maxwell-relációk. Volumetrikus tulajdonságok és hőkapacitások. U, H és S változásai p-V-T függvényében. F és G változásai.

Termokémia. Hess-tétel, Kirchoff-egyenlet. Ideális gáz állapotváltozásai: izoterm, izobár, izochor és adiabatikus folyamatok. Az adiabata egyenlete. Poisson-egyenletek.

Ideális gáz termodinamikai tulajdonságainak számítása: U, H és S változásai. F és G változásai. Térfogati munka és hőforgalom számítása.

Intermolekuláris kölcsönhatások. Lennard-Jones-potenciál. Reális gázok állapotegyenletei. Kompresszibilitási tényező. Viriálegyenlet, van der Waals-egyenlet. A van der Waals-egyenlet és a kritikus tulajdonságok kapcsolata. Megfelelő állapotok tétele.

Reális gázok tulajdonságai. Az entalpia változása, az entalpia izoterm nyomáskorrekciója. A reális gáz szabadentalpiája állandó hőmérsékleten. Fugacitás. Joule-Thomson-effektus.

Kondenzált fázisok. Pár-korrelációs függvény. Kristályszerkezetek. Ionkristályok Madelung-energiája. Kristályenergia Born-Haber körfolyamatból. Einstein/ Debye-fajhőfüggvény. Folyadékok tulajdonságai: viszkozitás, Hagen-Poiseuille-törvény. Különleges szerkezetek: víz, folyadékkristályok, üvegek.

Molekulák elektromos tulajdonságai. Dielektrikum polarizációja. A moláris polarizáció Debye-egyenlete. Dielektromos relaxáció. Mágneses tulajdonságok. Langevin-egyenlet.

Elegyek. Gázelegyek. Parciális moláris mennyiségek. Ideális elegyedési entrópia- és szabadentalpia-változás. Az aktivitás. Referenciaállapotok. Reális elegyek, termodinamikai többlettulajdonságok.

Reguláris és atermikus elegyek. Ionszolvatáció. Reális elektrolit oldatok. Debye-Hückel-egyenlet. Egykomponensű rendszerek fázisegyensúlya. Gibbs-féle fázisszabály. Gőz-folyadék egyensúly. Clausius-Clapeyron-egyenlet, Antoine-egyenlet. Gőzhányad. p-V, p-T, T-S és H-S diagramok. Szilárd-gőz és szilárd-folyadék egyensúly.

Fázisdiagramok. A víz és a kén fázisdiagramja. A fázisok stabilitásának feltételei. Első- és másodrendű fázisátalakulás. Félévi összefoglalás.



TANTÁRGYI ADATLAP

Tantárgy követelménye:
Nincs.
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. Atkins, W., P.: Fizikai Kémia I-III., Tankönyvkiadó, Budapest, 1990.