



TANTÁRGYI ADATLAP

Tárgy neve:		Kódja:	
Fizikai kémia számítási gyakorlat		VEMKFKB322A	
Problem Solving Practice In Physical Chemistry			
Tárgyfelel s oktató:		Tárgyfelel s tanszék:	
dr. Boda Dezs		Fizikai Kémia	
Gyakorlat (óra):		Kredit:	Számonkérés:
2 (/hét)		2	Gyakorlati jegy

A tárgy oktatója:			
név	kurzus típusa	kurzus kódja	nyelv
dr. Boda Dezső	Szeminárium	01	magyar
dr. Boda Dezső	Szeminárium	02	magyar

Tantárgy képzési célja:

A fizikai kémia gyakorlati számítási problémáinak megoldása.

Tantárgy tematikája:

1. A kémiai termodinamika alapjai. Egyensúlyok. A belső energia, a térfogati munka és a hő számítása. A termodinamika főtételei. Körfolyamat. Carnot-ciklus, termodinamikai hatásfok. Hőerőgépek, hűtőgépek. Entrópia, entalpia, szabadenergia, szabadentalpia, moláris hőkapacitások. 2. Termokémia: Hess-tétel, Kirchoff-egyenlet. 3. Maxwell-relációk. Volumetrikus tulajdonságok. U, H és S változásai p-V-T függvényében. F, G változásai. 4. A tökéletes gáz termodinamikai tulajdonságai. Termodinamikai tulajdonságok számítása a molekuláris állapotösszegeből. A tökéletes gáz állapotváltozásai. A Poisson-egyenlet. 5. Reális gázok p-V-T jellemzői. Fugacitás. Viriálegyenlet. Reális gázok állapotegyenletei. Megfelelő állapotok tétele. Reális gázok tulajdonságai. Joule-Thomson-effektus. 6. Molekulák elektromos és mágneses tulajdonságainak számítása. Kristályenergia Born-Haber körfolyamatból. Kristályok termodinamikai tulajdonságainak számítása. Hagen-Poiseuille-törvény. 7. Elegyek. Gázelegyek. Parciális moláris mennyiségek. Ideális elegyek. Az aktivitás. Reális elegyek, termodinamikai többlettulajdonságok. Reális elektrolit oldatok. 8. Vezetékes transzportegyenletek. Diffúzió kondenzált fázisokban. Elektrolit oldatok vezetése, ionmozgékonyosság, disszociációs állandó meghatározása. 9. Fázistörvény egykomponensű rendszerekre. Gőz-folyadék egyensúly. Telített gőz, telített folyadék, gőzarány. Clausius-Clapeyron-egyenlet. Egykomponensű szilárd-folyadék és szilárd-szilárd egyensúly. 10. Fázistörvény többkomponensű rendszerekre. Biner elegyek gőz-folyadék egyensúlya: Raoult-törvény. Henry-törvény. Nernst-féle megoszlási állandó. Kolligatív sajátságok: forráspontemelkedés, fagyáspont-csökkenés, ozmózisnyomás számítása. 11. Felületi feszültség, Young-Laplace-egyenlet. Felületi munka. Gibbs adszorpciós izoterma egyenlete, kapilláráktív anyagok. A Langmuir-egyenlet. Kemiszorpció. Adszorpciós hő, többrétegű adszorpció, a BET-egyenlet. 12. A kémiai egyensúly termodinamikai feltétele. A reakció standard szabadentalpia-változása. A tömeghatástörtek meghatározása. Kémiai egyensúly gázfázisban. Heterogén egyensúlyok. Disszociációs egyensúlyok elektrolit oldatokban. 13. Az elektródpotenciál. Elsőfajú-, másodfajú-, gáz-, redoxi elektródok. Koncentrációs cella. A galvancia cella termodinamikai jellemzői. 14. Reakciókinetika. Elsőrendű reakciók. Felezési idő. Másodrendű reakciók. Egyensúlyra vezető reakciók. A reakciósebesség hőmérsékletfüggése: Arrhenius-egyenlet. Ionreakciók oldatban. Elektródreakciók kinetikája. Tafel-egyenlet. Diffúziós túlfeszültség. A kémiai reakciók entrópiatermelése. 15. Zárthelyi dolgozat.

Tantárgy követelménye:

A szemináriumon kötelező a részvétel. 2x45 perces zárthelyi dolgozat megírása.

Tantárgyhoz kapcsolódó irodalom:

1. Liszi, J.: Fizikai kémia, Veszprém, 1993. Kézirat. 2. Liszi, J., Ruff, I., Schiller, R., Varsányi, Gy.: Bevezetés a fizikai kémiába, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1993. 3. Atkins, W., P.: Fizikai Kémia I-III., Tankönyvkiadó, Budapest, 1990. 4. Tanszéki munkaközösség: Fizikai kémiai példatár I-II. Veszprém, 1995.