



TANTÁRGYI ADATLAP

Tárgy neve:		Kódja:	
Fizikai kémia I.		VEMKFK2215V	
Physical Chemistry I.			
Tárgyfelel s oktató:		Tárgyfelel s tanszék:	
Kristóf Tamás dr.		Fizikai Kémia	
Elmélet (óra):		Kredit:	Számonkérés:
5 (/hét)		5	Vizsga

A tárgy oktatója:			
név	kurzus típusa	kurzus kódja	nyelv
Kristóf Tamás dr.	Elmélet	10	magyar
Tantárgy képzési célja:			
Az előadások segítségével megismertetni a fizikai kémiát az alábbi tematika szerint.			



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. Szabadentalpia. Szabadentalpia. Intenzív tulajdonságok H , F és G parciális deriváltjaiból. Planck-függvény. Massieu-függvény. Moláris hőkacitások. Termokémia: Hess-tétel, Kirchoff-egyenlet. Energiaeloszlás részecskék között. Betöltési számok, degeneráció, makroállapot, mikroállapot. Termodinamikai valószínűség. Legvalószínűbb eloszlás. Bose-Einstein-statisztika. A multiplikátorok fizikai tartalma és a Boltzmann-eloszlás.

Fermi-Dirac-statisztika. Az eloszlások összehasonlítása.

Molekulák kis-amplitudójú rezgései. A harmonikus oszcillátor energiaszintjei. A szimmetrikus és az aszimmetrikus rotátor energiaszintjei. Két- és háromatomos gázok molekuláris állapotösszege. A molekuláris állapotösszeg és a termodinamikai tulajdonságok kapcsolata. Az ammónia - mint ideális gáz - néhány termodinamikai tulajdonsága. A munka, a hő és az entrópia statisztikus mechanikai értelmezése. $S = k \ln \Omega$. Az entrópia és a rendezettség.

Elegyítési és konfigurációs entalpia. A sokaság fogalma. Kanonikus sokaság. Boltzmann-eloszlás. A kanonikus sokaság entrópiája. Összefüggés a molekuláris és a kanonikus állapotösszeg között. Ingadozási jelenségek. Fluktuáció. Mikrokanonikus sokaság. Nagykanonikus sokaság. A kémiai potenciál statisztikus értelmezése. Az ekvipartíció tétele és alkalmazása. Maxwell-relációk. Volumetrikus tulajdonságok és hőkacitások.

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. A Boltzmann-féle transzport-egyenlet és alkalmazása. A Boltzmann-féle H elmélet alapjai. 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. Mágneses dipólusok orientációja mágneses térben, Landé-faktor, Brillouin függvény. A paramágnesesség Curie-törvénye. Mágneses rendszerek termodinamikája. A tökéletes gáz termodinamikai tulajdonságai. A tökéletes gáz állapotváltozásai. A Poisson-egyenlet. Intermolekuláris kölcsönhatások, Mie-egyenlet, Lennard-Jones-potenciál. A viriál-tétel. Viriálegyenlet. Második viriálegyüttható számítása néhány intermolekuláris potenciálra. Reális gázok állapotegyenlete. Megfelelo állapotok tétele.

Reális gázok tulajdonságai. Joule-Thomson-effektus. Joule-Thomson koefficiens számítása néhány gázra. A Maxwell-féle egyenlo területek-elv alkalmazása. Reális gázok kondenzációjának vizsgálata állapotegyenletek alapján. Pár-korrelációs függvény. Kristályszerkezetek. Ionkristályok Madelung-energiája. Kristályenergia Born-Haber körfolyamatból. Einstein- és Debye-fajhőfüggvény. A szilárd testek állapotegyenlete, kompresszibilitás. Fajhő anharmonikus rezgések esetén. Konkrét számítások alkáli fémekre. Folyadékok termodinamikai tulajdonságainak számítása pár-korrelációs függvény alapján. Párkorreláció függvények meghatározása kísérleti és elméleti módszerekkel. 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

Tantárgy követelménye:

Nincs.

Tantárgyhoz kapcsolódó irodalom:

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