



# TANTÁRGYI ADATLAP

<b>Tárgy neve:</b>		<b>Kódja:</b>	
Fizikai kémia III. számítási gyakorlat		VEMKFKM122A	
Program Solving Practice In Physical Chemistry III.			
<b>Tárgyfelel s oktató:</b>		<b>Tárgyfelel s tanszék:</b>	
dr. Boda Dezs		Fizikai Kémia	
<b>Gyakorlat (óra):</b>		<b>Kredit:</b>	<b>Számonkérés:</b>
2 (/hét)		2	Gyakorlati jegy

<b>A tárgy oktatója:</b>			
név	kurzus típusa	kurzus kódja	nyelv
dr. Boda Dezső	Gyakorlat	01	magyar

### Tantárgy képzési célja:

A molekuláris(részecske-) szemlélet alapján és statisztikus termodinamikai kiindulópontból tárgyalt fizikai kémia tananyagának elmélyítése gyakorlati-/számpéldák segítségével.

### Tantárgy tematikája:

1. Klasszikus termodinamikai példák.
2. Energiaeloszlások számítása. Maxwell-Boltzmann-eloszlás. Molekuláris állapotösszeg számítása.
3. Egy-, kettő- és többatomos molekulák állapotösszegének számítása. Termodinamikai tulajdonságok meghatározása molekuláris állapotösszegekből.
4. Termodinamikai tulajdonságok meghatározása molekuláris állapotösszegekből. Különböző statisztikus sokaságok állapotösszege: Kanonikus, izoterm-izobár, nagykanonikus és adiabatikus sokaságok. Fluktuációk számítása.
5. Intermolekuláris kölcsönhatási potenciálok használata. Korrelációs függvények, konfigurációs tulajdonságok számítása.
6. A viriál és a van der Waals állapotegyenlet tárgyalása statisztikus mechanikai alapon. Termodinamikai tulajdonságok meghatározása az állapotegyenletekből.
7. Termodinamikai tulajdonságok számítása statisztikus modellek alapján:
  1. Tiszta anyagok p-V-T-jellemzői és egyéb termokémiai-termofizikai tulajdonságai.
  2. Elegyedési tulajdonságok.
  3. Fázisegyensúlyok egy- és többkomponensű rendszerekben.
  4. Adszorpciós egyensúlyok (a Langmuir-izoterma statisztikus mechanikai értelmezése; többrétegű adszorpció).
  5. Elektrolitok és elektrokémiai kettősréteg.
  6. Kolloid rendszerek (DLVO-elmélet).
  7. Fluidumok transzporttulajdonságai.
  8. A kémiai egyensúlyok.
  9. Kémiai és elektrokémiai reakciók kinetikája.
  12. Szerkezeti és termodinamikai tulajdonságok meghatározása molekuláris szimulációkkal (Monte Carlo / molekuladinamikai szimulációs példák).
  13. Termodinamikai egyensúlyi és nemegyensúlyi tulajdonságok meghatározása molekuláris szimulációkkal. Modern becslési módszerek.
  14. Termodinamikai tulajdonságok becslése statisztikus mechanikai alapokon nyugvó közelítő számításokkal.
  15. Számonkérés (zárthelyi).

### Tantárgy követelménye:

A félév végén egy zárthelyi dolgozat megírása.



## TANTÁRGYI ADATLAP

**Tantárgyhoz kapcsolódó irodalom:**

1. Atkins, P. W.: Fizikai kémia I-III., Tankönyvkiadó, Budapest, 1992.
2. Lucas, K.: Applied Statistical Thermodynamics, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1991.
3. Liszi, J., Ruff, I., Schiller, R., Varsányi, Gy.: Bevezetés a fizikai kémiába, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1983.
4. Liszi, J.: Fizikai kémia, Veszprém, 1993. Kézirat.
5. Reed, T. M., Gubbins, K. E.: Gázok és folyadékok statisztikus termodinamikája, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1978.