



Tárgytematika

Félév:	2009/10/2
Tárgynév:	Fizikai kémia I.
Tárgykód:	VEMKFK2215V
Felelős szervezet neve:	Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék
Felelős szervezet kódja:	MKFK
Tárgyfelelős neve:	dr. Kristóf Tamás

Oktatás célja:

Az előadások segítségével megismertetni a fizikai kémiát az alábbi tematika szerint.

Tantárgy tartalma:

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 hatásfok, hűtőgépek. Entalpia. Szabadenergia. Szabadentalpia. Intenzív tulajdonságok H , F és G parciális deriváltjaiból. Planck-függvény, Massieu-függvény. Moláris hőképességek. 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. $S = k \ln w$. 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 hőképességek. 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-



Tárgytematika

Félév:	2009/10/2
Tárgynév:	Fizikai kémia I.
Tárgykód:	VEMKFK2215V
Felelős szervezet neve:	Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék
Felelős szervezet kódja:	MKFK
Tárgyfelelős neve:	dr. Kristóf Tamás

Tantárgy tartalma:

potenciál. A viriál-tétel. Viriálegyenlet. Második viriálegyütthető számítása néhány intermolekuláris potenciálra. Reális gázok állapotegyenlete. Megfelelo állapotok tétele. Reális gázok tulajdonságai. Joule-Thomson-effektus. Joule-Thomson koeficiens 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-fajhofüggvény. A szilárd testek állapotegyenlete, kompresszibilitás. Fajho 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

Számonkérési és értékelési rendszere:

Nincs.

Kötelező és ajánlott irodalom:

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