



Tárgytematika

Félév:	2011/12/1
Tárgynév:	Fizikai kémia számítási gyakorlat
Tárgykód:	VEMKFKB322A
Felelős szervezet neve:	Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék
Felelős szervezet kódja:	MKFK
Tárgyfelelős neve:	dr. Boda Dezső

Oktatás célja:

A fizikai kémia gyakorlati számítási problémáinak megoldása.

Tantárgy tartalma:

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 állapotösszegekből. 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. Kemisorpció. Adszorpciós hő, többretegű 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 galváncella 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.

Számonkérési és értékelési rendszere:

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



Tárgytematika

Félév:	2011/12/1
Tárgynév:	Fizikai kémia számítási gyakorlat
Tárgykód:	VEMKFKB322A
Felelős szervezet neve:	Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék
Felelős szervezet kódja:	MKFK
Tárgyfelelős neve:	dr. Boda Dezső

Számonkérési és értékelési rendszere:

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, 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.