



Tárgytematika

Félév:	2010/11/2
Tárgynév:	Fizikai kémia III.
Tárgykód:	VEMKFKM112A
Felelős szervezet neve:	Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék
Felelős szervezet kódja:	MKFK
Tárgyfelelős neve:	dr. Kristóf Tamás

Oktatás célja:

A fizikai kémia molekuláris(részecske-) szemlélet alapján történő tárgyalása, a fizikai-kémiai jelenségek statisztikus termodinamikai kiindulópontból történő értelmezése.

Tantárgy tartalma:

1. Klasszikus termodinamikai összefoglaló. A termodinamika statisztikus értelmezése. 2. Energiaeloszlás részecskék között. Makroállapot és mikroállapot, termodinamikai valószínűség. Maxwell-Boltzmann-eloszlás. Molekuláris állapotösszeg. A molekuláris állapotösszeg és a termodinamikai tulajdonságok kapcsolata. 3. A statisztikus sokaságok elméletének alapjai. Kanonikus sokaság. Fluktuációk. Nagykanonikus sokaság, adiabatikus sokaságok. A sokaságok állapotösszege és a karakterisztikus termodinamikai függvények. 4. Hamilton-függvény. A részecskék kölcsönhatásainak modellezése: Born-Oppenheimer-közelítés, holonom kényszerek. Intermolekuláris kölcsönhatási potenciálok. Korrelációs függvények, konfigurációs tulajdonságok. 5. A viriál és a van der Waals állapotegyenlet tárgyalása statisztikus mechanikai alapon. Állapotegyenlet merev gömb fluidumra. 6. Termodinamikai tulajdonságok számítása statisztikus modellek alapján: Tiszta anyagok p-V-T-jellemzői és egyéb termokémiai-termodinamikai tulajdonságai. 7. Az elegyedési és a konfigurációs tulajdonságok. Elegymodellek. Fázisegyensúlyok egy- és többkomponensű rendszerekben. 8. Az adszorpció statisztikus termodinamikája. A Langmuir-izoterma statisztikus mechanikai értelmezése. Többretegű adszorpció. 9. Elektrolitok modellezése. Elektrokémiai kettősréteg. Kolloid rendszerek modellezése. A DLVO-elmélet. 10. Fluidumok transzporttulajdonságainak tárgyalása statisztikus mechanikai alapon. 11. A kémiai egyensúly statisztikus termodinamikai tárgyalása. Kémiai reakciók statisztikus termodinamikai modellezése. 12. Szerkezeti és termodinamikai tulajdonságok meghatározása molekuláris szimulációkkal: ergodikusság, sokaság- és időátlagok. Monte Carlo szimulációk. 13. Molekuladinamika egyensúlyi és nemegyensúlyi rendszerekre. A molekuláris szimulációk ipari (technológiai-tervezési, anyagtervezési) alkalmazásai. 14. Termodinamikai tulajdonságok statisztikus mechanikai alapokon nyugvó közelítő számításai: válogatás modern becslési módszerekből. 15. Összefoglalás.

Számonkérési és értékelési rendszere:

None.

Kötelező és ajánlott irodalom:



Tárgytematika

Félév:	2010/11/2
Tárgynév:	Fizikai kémia III.
Tárgykód:	VEMKFKM112A
Felelős szervezet neve:	Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék
Felelős szervezet kódja:	MKFK
Tárgyfelelős neve:	dr. Kristóf Tamás

Kötelező és ajánlott irodalom:

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.