



Tárgytematika

Félév:	2010/11/2
Tárgynév:	Fizikai kémia III. számítási gyakorlat
Tárgykód:	VEMKFKM122A
Felelős szervezet neve:	Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék
Felelős szervezet kódja:	MKFK
Tárgyfelelős neve:	dr. Boda Dezső

Oktatás célja:

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

Tantárgy tartalma:

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. 8. 2. Elegyedési tulajdonságok. 3. Fázisegyensúlyok egy- és többkomponensű rendszerekben. 9. 4. Adszorpciós egyensúlyok (a Langmuir-izoterma statisztikus mechanikai értelmezése; többrétegű adszorpció). 5. Elektrolitok és elektrokémiai kettősréteg. 10. 6. Kolloid rendszerek (DLVO-elmélet). 7. Fluidumok transzporttulajdonságai. 11. 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).

Számonkérési és értékelési rendszere:

A félév végén egy zárthelyi dolgozat megírása.

Kötelező és ajánlott 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.:



Tárgytematika

Félév:	2010/11/2
Tárgynév:	Fizikai kémia III. számítási gyakorlat
Tárgykód:	VEMKFKM122A
Felelős szervezet neve:	Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék
Felelős szervezet kódja:	MKFK
Tárgyfelelős neve:	dr. Boda Dezső

Kötelező és ajánlott irodalom:

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.