



TANTÁRGYI ADATLAP

| | | | |
|-----------------------------|--|---------------------------------|---------------------|
| Tárgy neve: | | Kódja: | |
| Fizikai kémia I. | | VEMKFKB212A | |
| Physical Chemistry I. | | | |
| Tárgyfelel s oktató: | | Tárgyfelel s tanszék: | |
| dr. Kristóf Tamás | | Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék | |
| Elmélet (óra): | | Kredit: | Számonkérés: |
| 2 (/hét) | | 2 | Vizsga |

A tárgy oktatója:

| név | kurzus típusa | kurzus kódja | nyelv |
|-------------------|---------------|--------------|--------|
| dr. Kristóf Tamás | Elmélet | 04 | magyar |

Tantárgy képzési célja:

A fizikai kémia alapjainak megismertetése.

Tantárgy tematikája:

A kémiai termodinamika alapfogalmai (fal, rendszer, tulajdonság, konvenciók). Extenzív és intenzív tulajdonságok. Hőmérséklet. Egyensúly. Termikus energia. Homogenitás. Komponensek. Belső energia. Munka, térfogati munka, reverzibilis munka. Körfolyamat. Hő. A termodinamika első főtétele. A termodinamika második főtétele. Az entrópia. Irreverzibilis folyamatok. A hő integráló tényezője. Harmadik főtétel. Az entrópiamaximum és az energiaminimum elve. Kinetikus gázelmélet. Molekulák sebességeloszlása és az ideális gáz nyomása. Gibbs-egyenlet. Az intenzív állapotjelzők definíciói. Az empirikus és a termodinamikai hőmérséklet azonossága. Euler-egyenlet. Köttött energia, konjugált tulajdonságok. Az egyensúly feltétele intenzív paraméterekkel megfogalmazva. Termikus, mechanikai és komponensegyensúly. Carnot-ciklus, termodinamikai határfok. Hőerőgép, hűtőgép, hőszivattyú. Termodinamikai tartályok és energiafüggvények. Entalpia. Szabadenergia. Szabadentalpia. Intenzív tulajdonságok H, F és G parciális deriváltjaiból. Gibbs-Helmholtz- és Gibbs-Duhem-egyenletek. Kémiai potenciál. Maxwell-relációk. Volumetrikus tulajdonságok és hőkapacitások. U, H és S változásai p-V-T függvényében. F és G változásai. Termokémia. Hess-tétel, Kirchoff-egyenlet. Ideális gáz állapotváltozásai: izoterm, izobár, izochor és adiabatikus folyamatok. Az adiabata egyenlete. Poisson-egyenletek. Ideális gáz termodinamikai tulajdonságainak számítása: U, H és S változásai. F és G változásai. Térfogati munka és hőforgalom számítása. Intermolekuláris kölcsönhatások. Lennard-Jones-potenciál. Reális gázok állapotegyenletei. Kompresszibilitási tényező. Viriálegyenlet, van der Waals-egyenlet. A van der Waals-egyenlet és a kritikus tulajdonságok kapcsolata. Megfelelő állapotok tétele. Reális gázok tulajdonságai. Az entalpia változása, az entalpia izoterm nyomáskorrekciója. A reális gáz szabadentalpiája állandó hőmérsékleten. Fugacitás. Joule-Thomson-effektus. Kondenzált fázisok. Pár-korrelációs függvény. Kristályszerkezetek. Ionkristályok Madelung-energiája. Kristályenergia Born-Haber körfolyamatból. Einstein/ Debye-fajhőfüggvény. Folyadékok tulajdonságai: viszkozitás, Hagen-Poiseuille-törvény. Különlleges szerkezetek: víz, folyadék-kristályok, üvegek. Molekulák elektromos tulajdonságai. Dielektrikum polarizációja. A moláris polarizáció Debye-egyenlete. Dielektromos relaxáció. Mágneses tulajdonságok. Langevin-egyenlet. Elegyek. Gázelegyek. Parciális moláris mennyiségek. Ideális elegyedési entrópia- és szabadentalpia-változás. Az aktivitás. Referenciaállapotok. Reális elegyek, termodinamikai többlettulajdonságok. Reguláris és atermikus elegyek. Ionszolvatáció. Reális elektrolit oldatok. Debye-Hückel-egyenlet. Egykomponensű rendszerek fázisegyensúlya. Gibbs-féle fázisszabály. Gőz-folyadék egyensúly. Clausius-Clapeyron-egyenlet, Antoine-egyenlet. Gőzhányad. p-V, p-T, T-S és H-S diagramok. Szilárd-gőz és szilárd-folyadék egyensúly. Fázisdiagramok. A víz és a kén fázisdiagramja. A fázisok stabilitásának feltételei. Első- és másodrendű fázisátalakulás. Félévi összefoglalás.



TANTÁRGYI ADATLAP

| |
|--|
| Tantárgy követelménye: |
| Nincs. |
| Tantárgyhoz kapcsolódó irodalom: |
| Liszi, J.: Fizikai kémia, Veszprém, 1993. Kézirat. Liszi, J., Ruff, I., Schiller, R., Varsányi, Gy.: Bevezetés a fizikai kémiába, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1993. Atkins, W., P.: Fizikai Kémia I-III., Tankönyvkiadó, Budapest, 1990. |