



TANTÁRGYI ADATLAP

Tárgy neve:		Kódja:	
Fizikai kémia III.		VEMKFKM112A	
Physical Chemistry III.			
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, dr. Boda Dezső	Elmélet	03	magyar

Tantárgy képzési célja:

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

Tantárgy tematikája:

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

Tantárgy követelménye:

None.

Tantárgyhoz kapcsolódó irodalom:

- Atkins, P. W.: Fizikai kémia I-III., Tankönyvkiadó, Budapest, 1992.
- Lucas, K.: Applied Statistical Thermodynamics, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1991.
- Liszi, J., Ruff, I., Schiller, R., Varsányi, Gy.: Bevezetés a fizikai kémiába, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1983.
- Liszi, J.: Fizikai kémia, Veszprém, 1993. Kézirat.
- Reed, T. M., Gubbins, K. E.: Gázok és folyadékok statisztikus termodinamikája, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1978.