



TANTÁRGYI ADATLAP

Tárgy neve:		Kódja:	
Fizikai kémia III. számítási gyakorlat		VEMKFKM122A	
Program Solving Practice In Physical Chemistry III.			
Tárgyfelel s oktató:		Tárgyfelel s tanszék:	
dr. Boda Dezs		Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék	
Gyakorlat (óra):		Kredit:	Számonkérés:
2 (/hét)		2	Gyakorlati jegy

A tárgy oktatója:

név	kurzus típusa	kurzus kódja	nyelv
dr. Boda Dezső	Gyakorlat	03	magyar

Tantárgy képzési célja:

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

Tantárgy tematikája:

- Klasszikus termodinamikai példák.
- Energiaeloszlások számítása. Maxwell-Boltzmann-eloszlás. Molekuláris állapotösszeg számítása.
- Egy-, kettő- és többatomos molekulák állapotösszegének számítása. Termodinamikai tulajdonságok meghatározása molekuláris állapotösszegekből.
- Termodinamikai tulajdonságok meghatározása molekuláris állapotösszegekből. Különböző statisztikus sokaságok állapotösszege: Kanonikus, izoterm-izobár, nagykanonikus és adiabatikus sokaságok. Fluktuációk számítása.
- Intermolekuláris kölcsönhatási potenciálok használata. Korrelációs függvények, konfigurációs tulajdonságok számítása.
- A viriál és a van der Waals állapotegyenlet tárgyalása statisztikus mechanikai alapon. Termodinamikai tulajdonságok meghatározása az állapotegyenletekből.
- Termodinamikai tulajdonságok számítása statisztikus modellek alapján:
 - Tiszta anyagok p-V-T-jellemzői és egyéb termokémiai-termofizikai tulajdonságai.
 - Elegyedési tulajdonságok.
 - Fázisegyensúlyok egy- és többkomponensű rendszerekben.
 4. Adszorpciós egyensúlyok (a Langmuir-izoterma statisztikus mechanikai értelmezése; többrétegű adszorpció).
 - Elektrolitok és elektrokémiai kettősréteg.
 6. Kolloid rendszerek (DLVO-elmélet).
 - Fluidumok transzporttulajdonságai.
 8. A kémiai egyensúlyok.
 - Kémiai és elektrokémiai reakciók kinetikája.
 - Szerkezeti és termodinamikai tulajdonságok meghatározása molekuláris szimulációkkal (Monte Carlo / molekuladinamikai szimulációs példák).
 - Termodinamikai egyensúlyi és nemegyensúlyi tulajdonságok meghatározása molekuláris szimulációkkal. Modern becslési módszerek.
 - Termodinamikai tulajdonságok becslése statisztikus mechanikai alapokon nyugvó közelítő számításokkal.
 - Számonkérés (zárthelyi).

Tantárgy követelménye:

A félév végén egy zárthelyi dolgozat megírása.

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.