



Tárgytematika

Félév:	2014/15/2
Tárgynév:	Fizikai kémia I.
Tárgykód:	VEMKFKB212A
Felelős szervezet neve:	Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék
Felelős szervezet kódja:	MKFK
Tárgyfelelős neve:	Dr. Kristóf Tamás

Oktatás célja:

A fizikai kémia alapjainak megismerése.

Tantárgy tartalma:

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. Kötött energia, konjugált tulajdonságok. Az egyensúly feltétele intenzív paraméterekkel megfogalmazva. Termikus, mechanikai és komponensegyensúly. Carnot-ciklus, termodinamikai hatásfok. 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. Különleges 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-



Tárgytematika

Félév:	2014/15/2
Tárgynév:	Fizikai kémia I.
Tárgykód:	VEMKFKB212A
Felelős szervezet neve:	Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék
Felelős szervezet kódja:	MKFK
Tárgyfelelős neve:	Dr. Kristóf Tamás

Tantárgy tartalma:

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.

Számonkérési és értékelési rendszere:

Vizsgajegy kialakításának módja: A szóbeli vizsga beugró kérdésekkel kezdődik, amelyek között egyszerű számítási feladat is lehet. A sikeresen megválaszolt beugró kérdések után következhet csak tétel kidolgozása (erre 20 perc áll rendelkezésre) és előadása.

Az órák látogatása kötelező.

Kötelező és ajánlott 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.