



Tárgytematika

Félév:	2016/17/1
Tárgynév:	Fizikai kémia számítási gyakorlat
Tárgykód:	VEMKFKB324A
Felelős szervezet neve:	Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék
Felelős szervezet kódja:	MKFK
Tárgyfelelős neve:	Dr. Valiskó Mónika

Oktatás célja:

A fizikai kémia gyakorlati számítási problémáinak megoldása.

Tantárgy tartalma:

1. A kémiai termodinamika alapjai. Egyensúlyok. Körfolyamatok. Belső energia, hő, munka. Entrópia, entalpia, szabadenergia, szabadentalpia, moláris hőkapacitások. Termokémia. 2. U, H, F, G és S változásai p-V-T függvényében. Gázok állapotváltozásai. Reális gázok p-V-T jellemzői. 3. Viriálegyenlet. Reális gázok állapotegyenletei. Megfelelő állapotok tétele. Reális gázok tulajdonságai. Fugacitás. Nomogramok alkalmazása. Joule-Thomson-effektus. 4. Kinetikus gázelmélet, Maxwell-féle sebességeloszlási törvény, effúzió, ütközési számok. 5. Molekulák elektromos és mágneses tulajdonságainak számítása. 6. Kristályenergia Born-Haber körfolyamatból. Kristályok termodinamikai tulajdonságainak számítása. Hagen-Poiseuille-törvény. 7. Elegyek. Gázelegyek. Parciális moláris mennyiségek. Ideális elegyek. Az aktivitás. Reális elegyek, termodinamikai többlettulajdonságok. Reális elektrolit oldatok. 8. Vezetékes transzportegyenletek. Diffúzió kondenzált fázisokban. Elektrolit oldatok vezetése, ionmozgékonyosság, disszociációs állandó meghatározása. Zárthelyi dolgozat. 9. Fázistörvény egykomponensű rendszerekre. Gőz-folyadék egyensúly. Telített gőz, telített folyadék, gőzarány. Clausius-Clapeyron-egyenlet. Egykomponensű szilárd-folyadék és szilárd-szilárd egyensúly. 10. Fázistörvény többkomponensű rendszerekre. Biner elegyek gőz-folyadék egyensúlya: Raoult-törvény. Henry-törvény. Nernst-féle megoszlási állandó. Kolligatív sajátságok számítása. 11. Felületi feszültség, Young-Laplace-egyenlet. Felületi munka. Gibbs adszorpciós izoterma egyenlete, kapilláraktív anyagok. A Langmuir-egyenlet. Kemisorpció. Adszorpciós hő, többrétegű adszorpció, a BET-egyenlet. 12. A kémiai egyensúly termodinamikai feltétele. A reakció standard szabadentalpia-változása. A tömeghatástörtek meghatározása. Kémiai egyensúly gázfázisban. Heterogén egyensúlyok. Disszociációs egyensúlyok elektrolit oldatokban. 13. Az elektródpotenciál. Elsőfajú-, másodfajú-, gáz-, redoxi elektródok. Koncentrációs cella. A galvancia cella termodinamikai jellemzői. 14. Reakciókinetika. Elsőrendű reakciók. Felezési idő. Másodrendű reakciók. Egyensúlyra vezető reakciók. A reakciósebesség hőmérsékletfüggése: Arrhenius-egyenlet. Ionreakciók oldatban. Elektródreakciók kinetikája. Tafel-egyenlet. Diffúziós túlfeszültség. 15. Zárthelyi dolgozat.

Számonkérési és értékelési rendszere:

Két zárthelyi dolgozat megírása. A szemináriumon kötelező a részvétel.



Tárgytematika

Félév:	2016/17/1
Tárgynév:	Fizikai kémia számítási gyakorlat
Tárgykód:	VEMKFKB324A
Felelős szervezet neve:	Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék
Felelős szervezet kódja:	MKFK
Tárgyfelelős neve:	Dr. Valiskó Mónika

Számonkérési és értékelési rendszere:



Tárgytematika

Félév:	2016/17/1
Tárgynév:	Fizikai kémia számítási gyakorlat
Tárgykód:	VEMKFKB324A
Felelős szervezet neve:	Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék
Felelős szervezet kódja:	MKFK
Tárgyfelelős neve:	Dr. Valiskó Mónika

Kötelező és ajánlott irodalom:

1. Liszi, J.: Fizikai kémia, Veszprém, 1993. Kézirat. 2. Liszi, J., Ruff, I., Schiller, R., Varsányi, Gy.: Bevezetés a fizikai kémiába, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1993. 3. Atkins, W.P.: Fizikai Kémia I-III., Tankönyvkiadó, Budapest, 1990. 4. Tanszéki munkaközösség: Fizikai kémiai példatár I-II. Veszprém, 1995.