

FIZIKAI KÉMIA SZIGORLATI TÉTELEK

(2023/2024)

Ismerni kell a differenciál- és integrálszámítás alapjait. Tudni kell a formulákban szereplő fizikai kémiai mennyiségek dimenzióját (mértékegységét).

Fizikai kémia I

1. A termodinamikai rendszer állapotának jellemzése

Extenzív és intenzív mennyiségek. Elszigetelt, zárt és nyílt rendszer. Homogén, inhomogén, heterogén, izotróp, anizotróp rendszerek. Állapotfüggvény, útfüggvény. Reverzibilis és irreverzibilis folyamatok. A fázisok és komponensek számának a kapcsolata (Gibbs-féle fázisszabály).

2. A belső energia és a termodinamika első főtétele

A belső energia fogalma, összetevői. A belső energia megváltozása és az alapvető termodinamikai kölcsönhatások. Mechanikai kölcsönhatások (térfogati munka), felületi kölcsönhatások, kémiai kölcsönhatások, termikus kölcsönhatások. Az első főtétel megfogalmazása elszigetelt, ill. zárt rendszerben.

3. Az entrópia és a termodinamika második főtétele

Termikus kölcsönhatás, az entrópia termodinamikai definíciója. Entrópia-változások számítása. A második főtétel megfogalmazása az entrópiával.

4. Az entalpia, termokémia

Az entalpia definíciója és változásának fizikai értelme. Az entalpia hőmérséklet-függése. Fizikai és kémiai folyamatok entalpia-változása. Hess tétele. Standard entalpiák. Reakcióhő számítása képződéshőkből és égéshőkből.

5. Szabadenergia, szabadentalpia, a termodinamika karakterisztikus függvényei

A belső energia transzformált (Legendre) függvényei. A szabadenergia és a szabadentalpia definíciója, teljes differenciálja és tulajdonságai.

6. Az entrópia statisztikus értelmezése

A termodinamikai valószínűség. Az entrópia statisztikus értelmezése.

7. Egykomponensű fázisegyensúlyok

p-T fázisdiagram. A Clapeyron-egyenlet levezetése. A fázisdiagram értelmezése. A Clausius-Clapeyron egyenlet.

8. Az elegyképződésre jellemző mennyiségek (elegyedési mennyiségek, parciális moláris mennyiségek)

Elegyedési mennyiségek (elegyedési térfogat, entalpia, entrópia, szabadentalpia). Ideális elegy elegyedési entrópiája. Az elegyedés termodinamikai feltételei. Parciális moláris mennyiségek. Az extenzív és parciális moláris mennyiségek kapcsolata. A Gibbs-Duhem egyenlet.

9. A kémiai potenciál

A kémiai potenciál definíciója a belső energia, entalpia, szabadenergia és szabadentalpia segítségével. A kémiai potenciál mint parciális moláris mennyiség. A kémiai potenciál kapcsolata mérhető mennyiségekkel (ozmózisnyomás). Standard állapotok és aktivitások (tökéletes gázokban, reális gázokban, ideális folyadékegyekben, reális folyadékegyekben).

10. Ideális viselkedés - híg oldatok fagyáspontja, forráspontja és ozmózisnyomása

Híg ideális oldatok tulajdonságai (ozmózisnyomás, forrpontemelkedés, fagyáspont-csökkenés).

11. Kétkomponensű gőz-folyadék és szilárd-folyadék egyensúlyok

Ideális és reális folyadékelegyek gőznyomása. Raoult törvénye. Kétkomponensű folyadékelegyek tenzió- és forrpontdiagramja. Azeotrópok. Szilárd-folyadék fázisegyensúlyok eutektikumot képező anyagpár esetén.

12. Kémiai reakciók egyensúlyának a jellemzése

A kémiai egyensúly termodinamikai megfogalmazása, reakció-szabadentalpia. Az egyensúlyi állandó definíciója (aktivitásokkal). A standard reakció-szabadentalpia és az egyensúlyi állandó kapcsolata. Tökéletesgáz-reakciók egyensúlya. A nyomás hatása az egyensúlyi összetételre. Az egyensúlyi állandó hőmérsékletfüggése. Heterogén kémiai egyensúlyok.

13. Elektrokémiai egyensúlyok

Disszociációs egyensúlyok. pH, a víz ionszorzata. Oldhatósági szorzat. Kémiai potenciálok és aktivitások elektrolitokban. A Debye-Hückel elmélet alapjai. Elektrolitok vezetése.

Fizikai kémia II

1. Galvánelemek termodinamikája, elektródpotenciálok

Az elektrokémiai potenciál. Az elektrokémiai cellák felépítése. Galvánelemek és elektrolizáló cellák. Az elektromotoros erő és kapcsolata a cellareakció szabadentalpia- entrópia- és entalpia-változásával. A Nernst-egyenlet. A standard elektromotoros erő kapcsolata a cellareakció egyensúlyi állandójával. Az elektródpotenciál definíciója, a standard hidrogén-elektrod. Elsőfajú (fém- gáz- és redox-) és másodfajú elektródok. Üvegelektrod.

2. Első- és másodrendű kémiai reakciók

A reakciósebesség fogalma, molekularitás és rendűség. Első- és másodrendű reakciók sebességi egyenletei azok megoldása (differenciális, integrális és linearizált formák). Koncentráció-idő diagramok. A felezési idő és a sebességi állandó kapcsolata.

3. Összetett (párhuzamos, egyensúlyra vezető, sorozatos) reakciók kinetikája

A párhuzamos, egyensúlyra vezető, és sorozatos reakciók sebességi egyenletei és megoldásai. A koncentrációk ábrázolása az idő függvényében.

4. A rendűség meghatározásának módszerei

A reakciósebesség kísérleti meghatározása. Bruttó rend és részrend meghatározása. Differenciál- és integrálmódszer. A rendűség és a sebességi együttható meghatározása a sebességi egyenletből. A kezdeti sebesség módszere.

5. A hőmérséklet hatása a reakciósebességre

Az Arrhenius-egyenlet. Gáz-halmazállapotú reakciók ütközési elmélete. Az aktivált komplex elmélete.

6. Heterogén reakciók kinetikája

A heterogén reakciók lépései. A reakciósebesség definíciója heterogén reakciókban. Kontakt katalízis. Diffúziókontrollált heterogén reakciók.

7. Transzportfolyamatok általános jellemzése

Komponensáram-, energiaáram- töltésáram és impulzusáram-sűrűség. Konvektív és konduktív áramlás. Globális és lokális mérlegegyenletek. A termodinamikai hajtóerő, keresztteffektusok, Onsager-féle reciprocitási reláció.

8. Diffúzió

A diffúzió makroszkópikus elmélete, Fick I és II. törvénye. Egyirányú stacionárius diffúzió.

9. Hővezetés

A hővezetés Fourier egyenletei. A hővezetési tényező és a hőmérsékleti vezetési tényező kapcsolata. Egyirányú stacionárius hőáram.

10. Viskozitás

Impulzustranszport. Viskozitás (dinamikus és kinematikus). Folyadékok áramlása két sík között. Newton-törvénye. Newtoni és nem-Newtoni folyadékok.

11. Fluidumok áramlása

Folyadékok áramlása csőben: a Bernoulli egyenlet, a Hagen-Poiseuille törvény. Gázok áramlása kapillárisban.

12. Az elektródkinetika alapegyenlete

A töltésátvitel sebessége elektród-reakciókban. A reakciósebesség és az áramsűrűség kapcsolata. Az aktiválási szabadentalpia. A Butler-Volmer egyenlet értelmezése. Polarizációs görbe. A Tafel egyenlet.

13. Elektrokémiai korrózió, elektrokémiai áramforrások

A vas korróziója – a barna rozsda képződése, pH függés, védekezés. Primer és szekunder elemek, tüzelőanyag cellák.

A nanotechnológia kolloidkémiai alapjai

1. A kolloid rendszerek fogalma és osztályozása, a kolloid részecskék legfontosabb tulajdonságai, gyakorlati jelentőség. A Tyndall-jelenség. A kolloid rendszerek szerepe a nanotechnológiákban.
2. A kolloid rendszerek stabilitását megszabó tényezők. Elektromosan és nem elektromosan stabilizált szolok. A stabilitás befolyásolása adalékanyagokkal (elektrolitok, tenzidek és makromolekulák).
3. Kolloid rendszerek előállítása. Peptizálás.
4. A kolloid részecskék méretét jellemző mennyiségek és függvények. A részecske nagyság és alak vizsgálati lehetőségei.
5. Tenzidek, habok és emulziók.
6. Asszociációs kolloidok. Vizes oldatok felületi feszültsége.
7. A kritikus micellaképződési koncentráció befolyásolása. Krafft- és felhősödési jelenség.
8. A felületi feszültség és a folyadékfelszínek görbültségével kapcsolatos jelenségek.
9. Sztetterülés folyadék és szilárd felületeken. Nedvesedés.
10. Adszorpció (Az adszorbeált mennyiség értelmezése különböző határfelületeken. Fajlagos felület meghatározásának elvi háttere.).
11. Kolloid rendszerek reológiája (híg rendszerek és tömény diszperziók).