

2 kredit ▪ vizsga ▪ Alapozó modul ▪ tavasszal ▪ ajánlott félév: 2.

Foglalkozás/félév: 28 óra előadás + 0 óra gyakorlat + 0 óra szeminárium = összesen 28 óra

Kurzus létszámkorlát: min. 1 fő – max. 100 fő

Előfeltételek: OGA-BM1 teljesített + OGA-AM1 teljesített

Tematika

1. hét: **Tökéletes és reális gázok** (A tökéletes gáz és állapotegyenlete. Állapotváltozások: izoterm, izobár és izochor folyamatok. Tökéletes gázok elegyei, a móltört fogalma, a parciális nyomás, a Dalton-törvény. A reális gázok viselkedése (izotermák). A kompresszibilitási tényező. A van der Waals-egyenlet. Kritikus állapot. A gáznyomás értelmezése a kinetikus elmélet alapján. A nyomás- és térfogatkorrektció molekuláris magyarázata.)
2. hét: **A termodinamika I. főtétele** (A munka fogalma, térfogati és egyéb (hasznos) munka. A hő fogalma. A belső energia definíciója és molekuláris értelmezése. A termodinamika első főtételenek néhány megfogalmazása. Az entalpia fogalma, bevezetésének indoklása. A tökéletes gáz belső energiája. A Joule-kísérlet. A reális gázok belső energiája és entalpiája. A Joule–Thomson-kísérlet, a Joule–Thomson együttható.)
3. hét: **Termokémia** (Termokémiai egyenletek. A reakcióhő termodinamikai definíciója. A standard állapot. Standard képződési entalpia. Hess-tétel. Reakcióentalpia számítása képződési entalpia (képződéshő) és az égési entalpia (égéshő) értékekből. A reakcióhő kísérleti meghatározása, kalorimetria. Hőkapacitás, moláris hőkapacitás és fajtái. A reakcióentalpia hőmérsékletfüggése: Kirchhoff-tétel. A Born–Haber-körfolyamat.)
4. hét: **A termodinamika II. főtétele** (A II. főtétel néhány megfogalmazása. Az entrópia termodinamikai és statisztikus definíciója. Entrópiatétel. A rendszer, a környezet és ezek együttes entrópiájának változása tökéletes gázok reverzibilis és irreverzibilis izoterm expanziója során. Az entrópia változása néhány fontos folyamatban. A hő átalakítása munkává: a Carnot-ciklus lényege és a hatásfok fogalma. Hőerőgépek, hűtőgépek és hőszivattyúk működésének lényege.) **A termodinamika III. főtétele** (A harmadik főtétel néhány megfogalmazása. Az entrópia változása a hőmérséklettel. Az entrópia abszolút és standard értéke. Standard reakcióentrópia.) **Termodinamikai potenciálfüggvények** (Az első és második főtétel egyesítése. A szabadenergia (Helmholtz-függvény) és a szabadentalpia (Gibbs-függvény). A termodinamikai potenciálfüggvény fogalma és alkalmazása spontán folyamatok irányának megítélésében. Az egyensúly feltétele zárt, illetve nyitott rendszerekben. A szabadentalpia függvény tulajdonságai.)
5. hét: **Kémiai potenciál** (A kémiai potenciál fogalma és számítása egy- és többkomponensű rendszerekben. A tökéletes gázok kémiai potenciálja. A reális gázok kémiai potenciálja. Fugacitás. Folyadékok kémiai potenciálja. A kémiai potenciál többkomponensű rendszerekben. A Gibbs–Duhem-egyenlet. Ideális elegyek. A Raoult- és a Henry-törvény. Reális elegyek és oldatok. Az aktivitás termodinamikai jelentősége. Standard állapot választása.) **Egykomponensű rendszerek termodinamikája** (A fázis és komponens fogalma. Fázisdiagramok. A CO₂ és a víz fázisdiagramja. Fázisstabilitás és fázisátmenet. A kémiai potenciál alkalmazása egykomponensű többfázisú rendszerek egyensúlyának leírására. A nyomás hatása a fázisegyensúlyokra. A hőmérséklet hatása a

fázisegyensúlyokra. A Clapeyron-egyenlet. Folyadék–gőz rendszerek: Clausius–Clapeyron-egyenlet. Párolgási entrópia: a Trouton-szabály)

6. hét: **Többkomponensű rendszerek: elegyek és oldatok** (Az elegy fogalma. A parciális moláris mennyiségek. A parciális moláris térfogat és meghatározása. Az elegyedés termodinamikája. Az elegyedés szabadentalpiája és entrópiája. Többletfüggvények. Ideális és reális elegyek jellemzése. Kolligatív sajátságok termodinamikai leírása: forráspontemelkedés, fagyáspont-csökkenés, oldhatóság, megoszlás, ozmózis. A kolligatív sajátságok gyakorlati jelentősége.) **Illékony folyadékok elegyei** (Folyadékelegyek gőznyomása. Gőznyomás–összetétel diagramok. Hőmérséklet–összetétel diagramok. Desztilláció. Azeotróp elegyek. Gőznyomás nem elegyedő folyadékok felett. Vízgőzdesztilláció. A desztilláció jelentősége.)
7. hét: **Fázistörvény** (Komponensek, fázisok, szabadsági fokok fogalma, számának megadása. A fázistörvény megfogalmazása és levezetése. A fázistörvény alkalmazása egy-, két- és háromkomponensű rendszerekre. Fázisátalakulások és detektálásuk. Reaktív rendszerek.)
8. hét: **Kémiai egyensúly** (Az egyensúly fogalma és feltétele kémiai rendszerekben. Az egyensúlyi állandó fogalma. A reakció-szabadentalpia fogalma, exergonikus és endergonikus folyamatok. Standard reakció-szabadentalpia és kapcsolata a standard kémiai potenciálokkal. Az egyensúly formális és termodinamikai leírásának összekapcsolása. Az egyensúlyi állandó más kifejezései: K_p , K_x , K_a . Az egyensúlyi állandó meghatározása termodinamikai adatokból.) **A körülmények változásának hatása a kémiai egyensúlyra** (Az egyensúly dinamikus jellege. A legkisebb kényszer elve (Le Chatelier-elv). A nyomásváltozás hatása az egyensúlyi állandóra és az egyensúlyi összetételre. A hőmérsékletváltozás hatása az egyensúlyi állandóra (van't Hoff-egyenlet) és az összetételre. A reaktánsok és termékek hozzáadásának és elvonásának hatása az egyensúlyra. Gyakorlati alkalmazások. Egyensúlyok biológiai rendszerekben.)
9. hét: **Egyensúlyi elektrokémia** (Elektrolitok termodinamikája. Elektrolitok jellemzése. Ionok termodinamikai képződési függvényei, aktivitása oldatokban, Debye–Hückel elmélet. Galvánelemek és elektródok termodinamikája. A galváncella részei és felírásmódja. A galváncella potenciálja. Koncentrációs galvánelemek. A cellapotenciál mérése. Gyakorlati galvánelemek. Tüzelőanyag-cellák. Elektródok. Az elektródpotenciál függése az összetételtől. Az elektródpotenciál mérése, skálája. Az elektródok fajtái.)
10. hét: **Dinamikus elektrokémia** (Az elektrolitoldatok vezetése. Az ionok független vándorlásának Kohlrausch-törvénye. Erős elektrolitok. Kohlrausch vezetési törvénye. Gyenge elektrolitok. Ostwald-féle hígítási törvény. Az ionok mozgékonyasága, átviteli szám fogalma és mérése. Heterogén dinamikus elektrokémia: áramsűrűség–túlfeszültség, kapcsolatuk, csereáram(ok), Tafel-egyenlet. A kettősréteg és modelljei. Volta- és Galvani-potenciál. Az elektródfolyamat kinetikája. Butler–Volmer egyenlet. Polarizáció, diffúziós határáram.) **Transzportfolyamatok** (Különböző halmazállapotok (fázisok) és ezek jellemzése. Transzportfolyamatok: diffúzió, hővezetés, viszkozitás. Transzportfolyamatok értelmezése a kinetikus gázelmélettel. Effúzió. Barometrikus formula.)
11. hét: **Reakciókinetika** (A reakciósebesség fogalma. A sebességmérés kísérleti módszerei. A vizsgált rendszerek típusai, körülményei. Sebességi egyenlet, sebesség, rendűség, sebességi együttható fogalma. A sebességi egyenlet analitikus és numerikus integrálása. Mért és

számított $c = f(t)$ görbék. A felezési idő. Egy- és többtagú sebességi egyenletek és kezelésük. A gyors előegyensúlyi és a steady state közelítés, a sebesség-meghatározó lépés fogalma.) **Reakciómechanizmusok** (Az elemi reakció fogalma, sajátosságai. A kinetikai tömeghatás törvénye. Unimolekuláris reakciók. Lindemann–Hinshelwood-mechanizmus. Termolekuláris reakciók. Magasabb részrendek értelmezése. Negatív részrendek értelmezése. Az enzimkatalízis kinetikája, Michaelis–Menten-mechanizmus. Hidrogén-halogenidek képződésének a mechanizmusa. Láncreakciók. Katalízis, autokatalízis és oszcilláció.)

12. hét: **A reakciósebesség elméletei** (A reakciósebesség hőmérsékletfüggése. Arrhenius-elmélet. Az ütközési elmélet, sztérikus faktor, reaktív hatáskeresztmetszet. Reakciók oldatfázisban, diffúziógátolt és energiagátolt reakciók. Az oldószer permittivitásának hatása. Az ionerősség hatása. A nyomás hatása. Az aktivált komplex elmélete.)
13. hét: jegymegajánló ZH (időpont: 2018. május 9., hely: SZKK-B001)

A félév elfogadásának feltételei

Kollokvium.

A vizsga egy rövid zárthelyi dolgozattal kezdődik. Ennek során a hallgató alapösszefüggések, definíciók megadásával igazolja felkészültségét. A zárthelyi dolgozat sikertelensége (50% alatti eredmény) elégtelen osztályzatot eredményez. A zárthelyi kérdések 50%-át sikerrel megoldó hallgatók két tételt húznak és felkészülési idő után ezekből a tételekből felelnek. A felelet a tételekről szóló beszámolóval kezdődik, majd a felmerülő, a tananyaggal kapcsolatos egyéb kérdésekre adott válaszokkal folytatódik. A vizsgajegyet ez alapján a felelet alapján kapják a hallgatók.

A vizsgát megelőző rövid zárthelyi dolgozatot nem kell megírni abban az esetben, ha a hallgató a jegymegajánló ZH-n (13. hét) legalább 50%-ot ért el.

Amennyiben a jegymegajánló ZH-n (13. hét) elért teljesítmény 75% feletti, akkor ez alapján a hallgató megajánlott jegyet kap (75% felett jó (4), illetve 90% felett jeles (5) érdemjegyet); ennek elfogadása esetén szóbeli vizsgát már nem kell tennie. A jegymegajánló ZH-n alapösszefüggéseket, definíciókat, ábrákat kell megadni, feleletválasztós kérdésekre válaszolni, valamint a tételsorban szereplő témák közül általunk megadottól rövid esszét írni.

Félévközi ellenőrzések

nincs

Távolszolgatársaság pótlásának lehetőségei

A hallgató a tankönyvből, illetve hallgatótársai jegyzetéből pótolhatja a távollétében elhangzott előadások anyagát. Az előadásokon bemutatott illusztrációs anyagot a hallgatóság rendelkezésére bocsátjuk a <http://www.oszk.ttk.pte.hu/eloadas.html#OGA-FZ1> internetes oldalon.

A tananyag elsajátításához szükséges segédanyagok

- Ajánlott irodalom

P. W. Atkins: Fizikai kémia I., Egyensúly (Tankönyvkiadó, Budapest, 2002)

P. W. Atkins: Fizikai kémia III., Változás (Tankönyvkiadó, Budapest, 2002)

Póta György: Fizikai kémia gyógyszerészhallgatók számára (Kossuth Egyetemi Kiadó, 6. kiadás, Debrecen, 2008)

László Krisztina, Grofcsik András, Kállay Mihály, Kubinyi Miklós: Fizikai kémia I. – Kémiai termodinamika

Zrínyi Miklós: A fizikai kémia alapjai (Semmelweis Kiadó, Budapest, 2015)

Michael J. Pilling, Paul W. Seakins: Reakciókinetika (Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 1997)

- *Saját oktatási anyag*

Az előadásokon bemutatott illusztrációs anyagot a hallgatóság rendelkezésére bocsátjuk a <http://www.oszk.ttk.pte.hu/eloadas.html#OGA-FZ1> internetes oldalon.

- *Jegyzet*

Külön jegyzet nem készült.

Vizsgatételek

1. **Tökéletes és reális gázok** (A tökéletes gáz és állapotegyenlete. Állapotváltozások: izoterm, izobár és izochor folyamatok. Tökéletes gázok elegyei, a móltört fogalma, a parciális nyomás, a Dalton-törvény. A reális gázok viselkedése (izotermák). A kompresszibilitási tényező. A van der Waals-egyenlet. Kritikus állapot. A gáznyomás értelmezése a kinetikus elmélet alapján. A nyomás- és térfogatkorrektció molekuláris magyarázata.)
2. **A termodinamika I. főtétele** (A munka fogalma, térfogati és egyéb (hasznos) munka. A hő fogalma. A belső energia definíciója és molekuláris értelmezése. A termodinamika első főtételenek néhány megfogalmazása. Az entalpia fogalma, bevezetésének indoklása. A tökéletes gáz belső energiája. A Joule-kísérlet. A reális gázok belső energiája és entalpiája. A Joule–Thomson-kísérlet, a Joule–Thomson együttható.)
3. **Termokémia** (Termokémiai egyenletek. A reakcióhő termodinamikai definíciója. A standard állapot. Standard képződési entalpia. Hess-tétel. Reakcióentalpia számítása képződési entalpia (képződéshő) és az égési entalpia (égéshő) értékekből. A reakcióhő kísérleti meghatározása, kalorimetria. Hőkapacitás, moláris hőkapacitás és fajtái. A reakcióentalpia hőmérsékletfüggése: Kirchhoff-tétel. A Born–Haber-körfolyamat.)
4. **A termodinamika II. főtétele** (A II. főtétel néhány megfogalmazása. Az entrópia termodinamikai és statisztikus definíciója. Entrópiatétel. A rendszer, a környezet és ezek együttes entrópiájának változása tökéletes gázok reverzibilis és irreverzibilis izoterm expanziója során. Az entrópia változása néhány fontos folyamatban. A hő átalakítása munkává: a Carnot-ciklus lényege és a hatásfok fogalma. Hőerőgépek, hűtőgépek és hőszivattyúk működésének lényege.)
5. **A termodinamika III. főtétele** (A harmadik főtétel néhány megfogalmazása. Az entrópia változása a hőmérséklettel. Az entrópia abszolút és standard értéke. Standard reakcióentrópia.)
6. **Termodinamikai potenciálfüggvények** (Az első és második főtétel egyesítése. A szabadenergia (Helmholtz-függvény) és a szabadentalpia (Gibbs-függvény). A termodinamikai potenciálfüggvény fogalma és alkalmazása spontán folyamatok irányának

- megítélésében. Az egyensúly feltétele zárt, illetve nyitott rendszerekben. A szabadentalpia függvény tulajdonságai.)
7. **Kémia potenciál** (A kémiai potenciál fogalma és számítása egy- és többkomponensű rendszerekben. A tökéletes gázok kémiai potenciálja. A reális gázok kémiai potenciálja. Fugacitás. Folyadékok kémiai potenciálja. A kémiai potenciál többkomponensű rendszerekben. A Gibbs–Duhem-egyenlet. Ideális elegyek. A Raoult- és a Henry-törvény. Reális elegyek és oldatok. Az aktivitás termodinamikai jelentősége. Standard állapot választása.)
 8. **Egykomponensű rendszerek termodinamikája** (A fázis és komponens fogalma. Fázisdiagramok. A CO_2 és a víz fázisdiagramja. Fázisstabilitás és fázisátmenet. A kémiai potenciál alkalmazása egykomponensű többfázisú rendszerek egyensúlyának leírására. A nyomás hatása a fázisegyensúlyokra. A hőmérséklet hatása a fázisegyensúlyokra. A Clapeyron-egyenlet. Folyadék–gőz rendszerek: Clausius–Clapeyronegyenlet. Párolgási entrópia: a Trouton-szabály)
 9. **Többkomponensű rendszerek: elegyek és oldatok** (Az elegy fogalma. A parciális moláris mennyiségek. A parciális moláris térfogat és meghatározása. Az elegyedés termodinamikája. Az elegyedés szabadentalpiája és entrópiája. Többletfüggvények. Ideális és reális elegyek jellemzése. Kolligatív sajátságok termodinamikai leírása: forráspontemelkedés, fagyáspont-csökkenés, oldhatóság, megoszlás, ozmózis. A kolligatív sajátságok gyakorlati jelentősége.)
 10. **Illékony folyadékok elegyei** (Folyadékelegyek gőznyomása. Gőznyomás–összetétel diagramok. Hőmérséklet–összetétel diagramok. Desztilláció. Azeotróp elegyek. Gőznyomás nem elegyedő folyadékok felett. Vízgőzdesztilláció. A desztilláció jelentősége.)
 11. **Fázistörvény** (Komponensek, fázisok, szabadsági fokok fogalma, számának megadása. A fázistörvény megfogalmazása és levezetése. A fázistörvény alkalmazása egy-, két- és háromkomponensű rendszerekre. Fázisátalakulások és detektálásuk. Reaktív rendszerek.)
 12. **Kémiai egyensúly** (Az egyensúly fogalma és feltétele kémiai rendszerekben. Az egyensúlyi állandó fogalma. A reakció-szabadentalpia fogalma, exergonikus és endergonikus folyamatok. Standard reakció-szabadentalpia és kapcsolata a standard kémiai potenciálokkal. Az egyensúly formális és termodinamikai leírásának összekapcsolása. Az egyensúlyi állandó más kifejezései: K_p , K_x , K_a . Az egyensúlyi állandó meghatározása termodinamikai adatokból.)
 13. **A körülmények változásának hatása a kémiai egyensúlyra** (Az egyensúly dinamikus jellege. A legkisebb kényszer elve (Le Chatelier-elv). A nyomásváltozás hatása az egyensúlyi állandóra és az egyensúlyi összetételre. A hőmérsékletváltozás hatása az egyensúlyi állandóra (van't Hoff-egyenlet) és az összetételre. A reaktánsok és termékek hozzáadásának és elvonásának hatása az egyensúlyra. Gyakorlati alkalmazások. Egyensúlyok biológiai rendszerekben.)
 14. **Egyensúlyi elektrokémia** (Elektrolitok termodinamikája. Elektrolitok jellemzése. Ionok termodinamikai képződési függvényei, aktivitása oldatokban, Debye–Hückel elmélet. Galvánelemek és elektródok termodinamikája. A galváncella részei és felírásmódja. A galváncella potenciálja. Koncentrációs galvánelemek. A cellapotenciál mérése. Gyakorlati galvánelemek. Tüzelőanyag-cellák. Elektródok. Az elektródpotenciál függése az

- összetételről. Az elektródpotenciál mérése, skálája. Az elektródok fajtái.)
15. **Dinamikus elektrokémia** (Az elektrolitoldatok vezetése. Az ionok független vándorlásának Kohlrausch-törvénye. Erős elektrolitok. Kohlrausch vezetési törvénye. Gyenge elektrolitok. Ostwald-féle hígítási törvény. Az ionok mozgékonyasága, átviteli szám fogalma és mérése. Heterogén dinamikus elektrokémia: áramsűrűség-túlfeszültség, kapcsolatuk, csereáram(ok), Tafel-egyenlet. A kettősréteg és modelljei. Volta- és Galvani-potenciál. Az elektródfolyamat kinetikája. Butler–Volmer egyenlet. Polarizáció, diffúziós határáram.)
16. **Transzportfolyamatok** (Különböző halmazállapotok (fázisok) és ezek jellemzése. Transzportfolyamatok: diffúzió, hővezetés, viszkozitás. Transzportfolyamatok értelmezése a kinetikus gázelmélettel. Effúzió. Barometrikus formula.)
17. **Reakciókinetika** (A reakciósebesség fogalma. A sebességmérés kísérleti módszerei. A vizsgált rendszerek típusai, körülményei. Sebességi egyenlet, sebesség, rendűség, sebességi együttható fogalma. A sebességi egyenlet analitikus és numerikus integrálása. Mért és számított $c = f(t)$ görbék. A felezési idő. Egy- és többtagú sebességi egyenletek és kezelésük. A gyors előegyensúlyi és a steady state közelítés, a sebesség-meghatározó lépés fogalma.)
18. **Reakciómechanizmusok** (Az elemi reakció fogalma, sajátosságai. A kinetikai tömeghatás törvénye. Unimolekuláris reakciók. Lindemann–Hinshelwood-mechanizmus. Termolekuláris reakciók. Magasabb részrendek értelmezése. Negatív részrendek értelmezése. Az enzimkatalízis kinetikája, Michaelis–Menten-mechanizmus. Hidrogén-halogenidek képződésének a mechanizmusa. Láncreakciók. Katalízis, autokatalízis és oszcilláció.)
19. **A reakciósebesség elméletei** (A reakciósebesség hőmérsékletfüggése. Arrhenius-elmélet. Az ütközési elmélet, sztérikus faktor, reaktív hatáskeresztmetszet. Reakciók oldatfázisban, diffúziógátolt és energiagátolt reakciók. Az oldószer permittivitásának hatása. Az ionerősség hatása. A nyomás hatása. Az aktivált komplex elmélete.)