

A fizikai kémia záróvizsga tételei (2008)

Minden vizsgázó egy tételt kap a „fő” tételsorból (a három sorozatból az, amelyik szorosan kapcsolódik a témaköréhez).

Ezen túlmenően kap egy másik tételt („melléktétel”) a másik két sorozat tételei közül is.

A vizsgán ezt a két tételt fejti ki részletesen a hallgató, de a többiből is lehet kérdezni.

A felkészüléshez ajánlott irodalom

P. W. Atkins: Fizikai kémia, Budapest, 2002

Keszei Ernő: Bevezetés a kémiai termodinamikába

(készülő jegyzet, <http://keszei.chem.elte.hu/1alapFizkem/Jegyzet.pdf>)

M. J. Pilling, P. W. Seakins: Reakciókinetika, Budapest, 1997

Inzelt György: Az elektrokémia korszerű elmélete és módszerei, I. - II., Budapest, 1999.

Gilányi Tibor: Kolloidkémia: Nanorendszerek és határfelületek, ELTE TTK jegyzet, 2005

Török Ferenc, Pulay Péter: Elméleti Kémia I, Nemzeti Tankönyvkiadó, 1994

Török F. szerkesztő: A kémiai szerkezetvizsgáló módszerek elmélete, ELTE TTK jegyzet, 1974

Kiss László: Bevezetés az elektrokémiába, Budapest, 1993

Beke Gyula: Elegyek termodinamikája, Budapest, 1986

H.B. Callen: Thermodynamics and Thermostatistics, New York, 1985

E. A. Guggenheim: Thermodynamics. An Advanced Treatment for Chemists and Physicists. Amsterdam-Oxford-New York-Tokyo. 7th ed. 1985

A (kémiai termodinamika, reakciókinetika, elektrokémia, fizikai-kémiai mérések)

- A1. A termodinamika tárgya. A termodinamikai rendszer jellemzői. A termodinamika axiómái. Az entrópia tulajdonságai. Energia, munka és hő. Egyensúly izolált és adiabatikus rendszerekben. A klasszikus termodinamika főtételei.
- A2. A termodinamika fundamentális egyenletei és az állapotegyenletek. Energia és entrópia bázisú intenzív változók. Termodinamikai egyensúly izobár, izoterm, valamint izoterm-izobár rendszerekben. Az egyensúly feltétele intenzív és extenzív mennyiségekkel kifejezve.
- A3. Az S , U , H , F és G függvények, azok kifejezése mérhető mennyiségek (α_T , κ_T , C_P , C_V) segítségével. Formális összefüggések: Euler formula, Gibbs-Duhem egyenlet, Maxwell relációk, Gibbs-Helmholtz egyenlet.
- A4. A statisztikus termodinamika alapjai. Energiaeloszlás és partíciós függvény mikrokanonikus és kanonikus sokaságokban. Kanonikus állapotösszeg számítása molekuláris partíciós függvények segítségével. Termodinamikai mennyiségek (S , U , H , F és G , α_T , κ_T , C_P , C_V) számítása a partíciós függvényekből.
- A5. Fázisegyensúlyok. A Gibbs-féle fázis szabály és alkalmazása. Egykomponensű rendszerek fázisegyensúlyai, fázisdiagramjai. Kétkomponensű rendszerek egyensúlyai. Folyadék-gőz és szilárd folyadék fázisdiagramok, ezek típusai. Kettőnél több komponensű elegyek fázisegyensúlyai, fázisdiagramjai. Megoszlási egyensúlyok.
- A6. Ideális és reális elegyek. Fugacitás, aktivitás, standard mennyiségek. Parciális moláris mennyiségek és meghatározásuk. Kolligatív tulajdonságok (fagyáspontcsökkenés, forráspontemelkedés, gőznyomáscsökkenés, ozmózis), ezek termodinamikai leírása.
- A7. Kémiai egyensúlyok reagáló rendszerekben. Az egyensúlyi állandó és a reakcióra jellemző standard mennyiségek. A reakcióhő és az egyensúlyi állandó nyomás- és hőmérsékletfüggése.
- A8. Nemeqyensúlyi termodinamika. Transzportfolyamatok. Az általános transzportegyenlet és alkalmazása diffúzióra és viszkózus folyásra. Transzportfolyamatok elektrolitoldatokban (diffúzió, diffúziós potenciál, elektromos vezetés).
- A9. Kémiai reakciók molekuláris dinamikája. Reakció potenciálfelületek. Aktiválási energia. Reakcióutak. Az ütközési elmélet és az átmenetiállapot-elmélet bimolekulás reakciók és unimolekulás reakciók esetén.

- A10. Reakciók mechanizmusa. Elemi reakciók és összetett reakciók. Elemi reakciók sebességi egyenletei. Reakciósebességi egyenletek általános alakja, azok megoldása. A reakciók rendje, a rend alkalmazhatósága, annak kísérleti meghatározása a sebességi egyenlet alapján. A reakciósebességi együttható nyomás- és hőmérsékletfüggése.
- A11. Összetett reakciók sebességi egyenleteinek megoldási módszerei. A kvázistacionaritás elve, használhatósága. Összetett reakciók vizsgálatára alkalmas módszerek, azok diszkutálása. Láncreakciók és robbanások.
- A12. Molekuláris mozgások sebessége, elemi reakciók sebessége. Gyors reakciók tanulmányozására alkalmas kísérleti berendezések.
- A13. Katalízis és inhibíció. Autokatalízis, autoinhibíció, ezek kimutatása a reakciórend megváltozásának alapján. Sav-bázis katalízis. Heterogén reakciók mechanizmusa, heterogén katalízis.
- A14. Töltött részecskéket tartalmazó fázisok termodinamikája. (Elektroneutralitás elve, elektrokémiai potenciál, közepes aktivitás, Born-formula, Debye-Hückel határtörvény.)
- A15. Heterogén elektrokémiai rendszerek. Galvánecellák jellemzése és termodinamikai leírása. Elektródok jellemzése, osztályozása és termodinamikai leírása.
- A16. Elektródfolyamatok kinetikája és polarizációs görbék. Elektródfolyamatok vizsgálata potenciosztatikus és galvanosztatikussal. Elektrokémiai áramforrások, elektrolízis. Elektrokémiai korrózió és korrózióvédelem.
- A17. Érzékelők, szenzorok, mérőberendezések. Vezérlés és szabályozás. Számítógépes adatgyűjtés és vezérlés.
- A18. Termokémiai mérések, kalorimetria. Kétkomponensű elegyek fázisdiagramjainak tanulmányozása.
- A19. Optikai mérési módszerek alkalmazása kémiai reakciók egyensúlyának, kinetikájának vizsgálatában.
- A20. Elektrokémiai mérési módszerek alkalmazása kémiai reakciók termodinamikai tulajdonságainak, egyensúlyának, kinetikájának vizsgálatában.

E (atomok és molekulák szerkezete, spektrumok elmélete, ezek számítása)

- E1. A kvantummechanika axiómái és fontos fogalmai: fizikai mennyiségek, ezek mérése, állapotfüggvény, várható érték, stacionárius állapotok, fizikai mennyiségek egyidejű mérése, Heisenberg-féle határozatlansági reláció.
- E2. Egy- és többelektronos rendszerek kvantummechanikai leírása: Hamilton-operátor, a Schrödinger-egyenlet megoldási módszerei, az egzakt megoldás elve a hidrogénatom esetében, a hullámfüggvény általános alakja, különböző közelítései; a független elektron modell (FEM), a Hartree- és a Hartree-Fock-módszer (mint a Hartree-módszer általánosítása); Pauli-elv, Slater-determináns.
- E3. Atomok kvantummechanikai leírása: a hidrogénatomra kapható eredmények értelmezése, sajátértékek, sajátfüggvények, kvantumszámok, pályák ábrázolása, degeneráció, Zeeman-effektus (mágneses tér hatása), elektronspin; többelektronos atomok elektronszerkezete a FEM keretében: pálya, pályaenergia, héj, Aufbau-elv, elektronkonfiguráció, az atom állapotainak jellemzése és jelölése, Hund-szabály, spin-pálya kölcsönhatás.
- E4. Molekulák elektronszerkezete: Hamilton-operátor, H_2^+ -ion pályái, pályaenergiák függése a kötés-hossztól, LCAO-MO közelítés, a hidrogénmolekula elektronszerkezete VB és MO leírásban, az A_2 típusú molekulák elektronszerkezete az MO elmélet keretében.
- E5. A vízmolekula elektronszerkezetének jellemzése az MO és VB elméletek keretében: kanonikus és lokalizált pályák, hibridpályák. Metán, etán, acetilén és ammónia molekulák, valamint az allilgyök elektronszerkezete a VB elmélet keretében. A VB elmélet és a Lewis-féle szerkezet kapcsolata.
- E6. A szerkezetkutató módszerek általános áttekintése: történet, közelítések, energiaszintek, kiválasztási szabályok, az elektromágneses spektrum, a szimmetria szerepe a spektrumok értelmezésében, az eltűnő integrálok szabálya.
- E7. Forgási spektroszkópia: többatomos molekulák forgásának klasszikus- és kvantummechanikája, pörgettyű típusok, energiaszintek és kiválasztási szabályok.

- E8. Rezgési spektroszkópia: Többatomos molekulák rezgésének klasszikus és kvantummechanikai leírása, harmonikus oszcillátor, normálkoordináták, szimmetria és a rezgési spektrum, kiválasztási szabályok. Rezgési Raman spektroszkópia. Egyszerű spektrumok értelmezése.
- E9. Elektronspektroszkópia: a látható-ultraibolya (UV-VIS) spektroszkópia alapelvei, Jablonski-diagram, kiválasztási szabályok, elektronszínképek rezgési finomszerkezete (Franck-Condon-elv), radiatív és nem-radiatív folyamatok: belső konverzió, spinváltó átmenet, disszociáció és predisszociáció, fluoreszcencia és foszforeszcencia; fotoelektron-spektroszkópia, Koopmans-elv.
- E10. Az NMR spektroszkópia: általános elvek, NMR spektrumok mérése, a kémiai eltolódás és a spin-spin csatolás. Egyszerű spektrumok értelmezése.

K (kolloidkémia, felületi kémia, nanoszerkezetek, polimerek tulajdonságai)

- K1. Határfelületi többletenergia és következményei. Felületi feszültség, nyomásegyensúly görbült felülettel elválasztott fázisok között, folyadékcsepp egyensúlyi gőznyomása, részecskék oldhatósága.
- K2. A (Gibbs-féle) határfelületi termodinamika alapjai. A Gibbs adszorpciós egyenlet és alkalmazása. Kapilláraktív és inaktív anyagok.
- K3. Adszorpció különböző határfelületeken. Adszorpciós izotermák. Az adszorpciós réteg állapotegyenlete.
- K4. A határfelület elektromos szerkezete. A töltésszeparáció oka. Helmholtz modell. Gouy-Chapman modell. Specifikus és nem-specifikus ionadszorpció. Stern modell.
- K5. A kolloidstabilitás klasszikus (DLVO) elmélete. A koaguláció kinetikája. Az elektrolitkoncentráció hatása a koaguláció sebességére. Sztérikus stabilizálás.
- K6. Diszperz kolloid rendszerben lejátszódó folyamatok. Szedimentáció, izoterm átkristályosodás, aggregáció. Az egyes folyamatokat meghatározó fontosabb paraméterek szerepe.
- K7. Asszociációs kolloidok. A micellaképződés pszeudo-fázisszeparációs és tömeghatás modellje. A hidrofób kölcsönhatás. Keverékmicellák. Szolubilizáció, polimer-tenzid komplexképződés.
- K8. Makromolekulás kolloidok. Polimeroldatok. A statisztikus gombolyag. A láncvégtávolságot meghatározó paraméterek. Polimergélek. Polielektrolitok.
- K9. Reológiai alapfogalmak. Folyástípusok fenomenológiai osztályozása. Az egyes folyástípusok anyagszerkezeti magyarázatai. A kolloid rendszerek reológiai tulajdonságainak komplex jellemzése. Gumirugalmasság.
- K10. Elektrokinetikai jelenségek. Fényszóródás kolloid rendszerekben.