

Fizikai kémia 1. vizsgatételek (termodinamika és statisztikus termodinamika)

1. Termodinamikai rendszerek. A munka, a hő és a belső energia, ezek mérése.
2. A termodinamika axiómái. Termodinamikai állapotfüggvények.
3. Entrópia- és energia-alapú fundamentális egyenletek. Állapotegyenletek és azok viszonya a fundamentális egyenletekhez.
4. Az ideális gáz termodinamikai tulajdonságai.
5. Reális gázok. A van der Waals- és a viriálegyenlet. Folyadékok és szilárd anyagok állapotegyenletei.
6. A termodinamikai egyensúly feltétele mechanikai, termikus és kémiai kölcsönhatás esetén.
7. Egyensúlyok termosztátban, manosztátban, valamint állandó nyomáson és hőmérsékleten. A H , F , G függvények definíciója, tulajdonságai, és szerepük a feltételes egyensúlyok leírásában.
8. Az $U(S, V, n)$, $H(S, P, n)$, $F(T, V, n)$ és $G(T, P, n)$ függvények, azok parciális deriváltjai. A függvényekre vonatkozó formális összefüggések. Mérhető mennyiségek és viszonyuk a potenciálfüggvényekhez.
9. Körfolyamatok, hőerőgépek és hűtőgépek. Hő, munka és hatásfok számítása termodinamikai táblázatok, diagramok alapján.
10. Parciális moláris mennyiségek és számításuk kísérleti adatokból. Ideális elegyek tulajdonságai. A kémiai potenciál koncentrációfüggése ideális elegyekben.
11. Reális elegyek termodinamikai tulajdonságai. Felesleg-függvények, azok viszonya az aktivitásokhoz.
12. Kémiai potenciál, fugacitás és aktivitások.
13. Fázisegyensúlyok termodinamikája egykomponensű rendszerekben. Fázisdiagramok és koegzisztenciafeltételek. A Clausius-Clapeyron egyenlet.
14. Fázisegyensúlyok termodinamikája többkomponensű rendszerekben. A Gibbs-féle fáziszabály. Az elegyedés feltételei.
15. Kétkomponensű folyadék-gőz és folyadék-szilárd egyensúlyok és fázisdiagramjaik.
16. Desztilláció, frakcionált kristályosítás, zónaolvasztás, vízgőzdesztilláció, extrakció. Az emelőszabály.
17. Kolligatív tulajdonságok: egyensúlyok egy tiszta és egy elegyfázis között.
18. Háromkomponensű rendszerek fázisdiagramjai. Többkomponensű fázisdiagramok kezelésének lehetősége.
19. Kémiai egyensúlyok termodinamikai leírása. Az egyensúlyi állandó különböző alakjai.
20. Kémiai reakciók egyensúlyi állandójának hőmérséklet- és nyomásfüggése.
21. A Gibbs-Helmholtz és a van't Hoff egyenlet.
22. Az egyensúlyi állandó számítása termodinamikai adatok alapján.
23. Az egyszerű rendszer leírásának kiterjesztése további kölcsönhatásokra.
24. Sík és görbült felületek termodinamikai leírása.
25. Töltéssel rendelkező részecskéket tartalmazó rendszerek termodinamikai leírása. Az elektroneutralitás oka és következményei. Az elektrokémiai potenciál. Ionos oldatok aktivitása és közepes aktivitása.
26. Töltéssel rendelkező részecskéket tartalmazó rendszerek egyensúlyai. Az elektromos potenciálkülönbség termodinamikai értelmezése. Galváncellák termodinamikai jellemzése. Elektródok és elektródfolyamatok.
27. Mikrokanonikus sokaság. A sokaság statisztikus jellemzése. Termodinamikai függvények számítása mikrokanonikus sokaságon.
28. Kanonikus sokaság. A sokaság statisztikus jellemzése. Termodinamikai függvények számítása kanonikus sokaságon.
29. Energiaeloszlás kanonikus sokaságon. Az energia várható értéke és szórása. Az ekvipartíció.
30. Az entrópia általános értelmezése, annak alkalmazása mikrokanonikus és kanonikus sokaságra. Az entrópia értelmezhetőségének korlátai „rendezetlenségként”.
31. Kanonikus partíciós függvény (állapotösszeg) számítása. Egyatomos ideális gáz partíciós függvénye és termodinamikai függvényei.
32. Molekuláris partíciós függvények számítása kanonikus sokaságon. Termodinamikai mennyiségek számítása molekuláris partíciós függvényből.
33. Kémiai reakciók kanonikus sokaságban. A kémiai egyensúlyi állandó statisztikus termodinamikai számítása.
34. Kinetikus gázelmélet. Az ütközési szám és a közepes szabad úthossz. (Atkins 27-36. és 906-907. oldal)
35. Egyszerű lineáris transzportegyenletek. A hővezetés, az elektromos vezetés és a viszkózus folyás.
36. A diffúzió leírása. Fick I. és II. törvénye.