

A tantárgy neve:	magyarul:	Fizikai kémia I. (előadás)						Kódja:	TTKBE0401	
	angolul:	Physical Chemistry I lecture								
A képzés 3. féléve										
Felelős oktatási egység:		DE TTK, Fizikai Kémiai Tanszék								
Kötelező előtanulmány neve:		Általános kémia I. Matematika I. Fizika alapjai I.						Kódja:	TTKBE0101 TTMBE0808 TTFBE2111	
Típus		Heti óraszámok						Követelmény	Kredit	Oktatás nyelve
		Előadás		Gyakorlat		Labor				
Nappali	x	Heti	2	Heti	0	Heti	0	kollokvium	3	magyar
Levelező		Féléves		Féléves		Féléves				
Tantárgyfelelős oktató		neve:		Dr. Ósz Katalin				beosztása:	egyetemi docens	
A kurzus célja, hogy a hallgatók megismerjék a fizikai kémiai alapjait, a kémia termodinamika fogalmait.										
Tanulás eredmények, kompetenciák: <i>Tudás:</i> A hallgató olyan matematikai, fizikai, és fizikai-kémiai ismereteket szerez, amelyek révén tájékozódni tud a fizikai kémia tárgyalt területein. Megismeri a kémiai termodinamikai leírás módjait, a klasszikus termodinamikát. Rendelkezik azokkal a kémiai alapismeretekkel, amelyek lehetővé teszik az alapvető kémiai reakciók leírását, az erre épülő gyakorlat elemeinek megismerését, az ismeretek rendszerezését. Birtokában van annak a tudásnak, amelynek alkalmazása szükséges természeti folyamatok, természeti erőforrások, élő és élettelen rendszerek kémiai vonatkozású alapvető gyakorlati problémáinak megoldásához. Anyanyelvén tisztában van a természeti folyamatokat megnevező fogalomrendszerrel és terminológiával. <i>Képesség:</i> Legyen tisztában az előadásokon előforduló/használt fogalmak jelentésével. Tudja alkalmazni a korábbi matematikai, fizikai és általános kémiai ismereteit a rendszerek fizikai-kémiai leírására. Tudja alkalmazni a gyakorlatban (laborban, illetve számolási szemináriumon) a tantárgy tanulásakor megszerzett ismereteket, fogalmakat, összefüggéseket. Képes a természeti és antropogén kémiai folyamatokkal kapcsolatos törvényszerűségek ismeretében gyakorlati problémák megoldására. <i>Attitűd:</i> A tantárgy elősegíti, hogy a hallgató megfelelő és átfogó fizikai-kémiai alaptudást sajátítson el. A hallgató szilárd elméleti alapjai a fizikai kémia területén hozzásegítik ahhoz, hogy a szakmai feladatait pontosan, hatékonyan végezze. Nyitott a szakmai eszmecserére mind a kémiai szakterületen, mind a kapcsolódó területeken dolgozó szakemberekkel. Hitelesen képviseli a természettudományos világnézetet, és közvetíteni tudja azt a szakmai és nem szakmai közönség felé. <i>Autonómia és felelősség:</i> A kurzus hozzásegíti a hallgatót ahhoz, a fizikai és matematikai ismereteit konkrét kémiai rendszerekre is alkalmazni tudja, továbbá szakmai és nem szakmai körökben a fizikai-kémiai és természettudományos kérdésekben megalapozottan formáljon véleményt. A természettudományos világnézetet szakmai megbeszélések, viták során felelősséggel vállalja.										
A kurzus tartalma, témakörei Gázok leírása A termodinamika főtételei Termokémia Egy- és többkomponensű rendszerek leírása Egyensúly										

Tervezett tanulási tevékenységek, tanítási módszerek

A hallgatók heti 2 óra előadás keretében ismerik meg a kémiai termodinamika alapjait, alapvető összefüggéseit, a kémiai egyensúly termodinamikai jellemzőit. Az ismereteket az előadó(k) előadások formájában adják át, ezeknek az ismereteknek a mélyebb elsajátítását pedig egy, az előadásokkal azonos félévben tartott számolási szeminárium segíti. Az előadások során magyar és angol nyelvű szemléltető videókat mutatunk be, melyeket a hallgatók rendelkezésére bocsátunk.

Értékelés

A vizsgajegy szóbeli és/vagy írásbeli vizsgán szerezhető meg.

Kötelező olvasmány:

1. P. W. Atkins: Fizikai kémia I. (Tankönyvkiadó, Budapest, 2002)
2. Fizikai Kémia I. Kulcsfogalmak: <http://fizkem.unideb.hu/oktatas/kulcsfogalomtar/fizkem1.pdf>

Ajánlott szakirodalom:

1. Póta György: Fizikai kémia gyógyszerészhallgatók számára, Kossuth Egyetemi Kiadó, 6. kiadás, Debrecen, 2008.
2. Keszei Ernő: Bevezetés a kémiai termodinamikába (ELTE egyetemi jegyzet, <http://keszei.chem.elte.hu/fizkem1/Tankonyv.pdf>)
3. Baranyai András, Schiller Róbert: Statisztikus mechanika vegyészeknek (Akadémiai Kiadó, Budapest, 2003)
4. László K., Grofcsik A., Kállay M., Kubinyi M.: Fizikai kémia I. – Kémiai termodinamika (<http://www.interkonyv.hu/konyvek/Fizikai%20kemia%20I.%20-%20Kemiai%20termodinamika>)
5. Zrínyi Miklós: A fizikai kémia alapjai, Semmelweis Kiadó, Budapest, 2015. (<http://real.mtak.hu/30641/>)

Heti bontott tematika	
1. hét	<p>Tökéletes és reális gázok</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megismeri a következő fogalmakat: A tökéletes gáz és állapotegyenlete. Állapotváltozások: izoterm, izobár és izochor. A gázok nyomásának értelmezése a kinetikus elmélet alapján. Tökéletes gázok elegyei, a móltört fogalma, a parciális nyomás, Dalton-törvény. A reális gázok viselkedése (izotermák). A kompresszibilitási tényező. A reális gázok van der Waals-egyenlete, a nyomás- és térfogatkorrekció molekuláris magyarázata. Kritikus állapot.</p>
2. hét	<p>A termodinamika I. főtétele</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megismeri a következő fogalmakat: A termodinamika első főtétele néhány megfogalmazása. A belső energia definíciója és molekuláris értelmezése. A munka fogalma, térfogati és egyéb (hasznos) munka. A hő fogalma. 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. Gázok cseppfolyósítása.</p>
3. hét	<p>Termokémia</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megismeri a következő fogalmakat: Termokémiai egyenletek, standard állapot fogalma. A reakcióhő termodinamikai definíciója. A Hess-tétel. A képződési és égési entalpia fogalma és alkalmazása reakcióentalpia számítására. A reakcióhő kísérleti meghatározása, kalorimetria. Hőkapacitás, moláris hőkapacitás és fajtái. A reakcióentalpia hőmérsékletfüggése: Kirchoff-tétel.</p>
4. hét	<p>A termodinamika II. főtétele</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megismeri a következő fogalmakat: 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 adiabatikus folyamatok entrópiaváltozása. A hő átalakítása munkává: a hatásfok fogalma. Hőerőgépek, hűtőgépek és hőszivattyúk működésének lényege.</p>
5. hét	<p>A termodinamika III. főtétele</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megismeri a következő fogalmakat: Az entrópia termodinamikai és statisztikus definíciója. A moláris hőkapacitások értéke igen alacsony hőmérsékleteken. Az abszolút zérus fok elérhetetlensége. A harmadik főtétel néhány megfogalmazása. Az entrópia függése a hőmérséklettől. Az entrópia abszolút és standard értéke. Standard reakcióentrópia.</p>
6. hét	<p>Termodinamikai potenciálfüggvények</p> <hr/>

	TE: A hallgató megismeri a következő fogalmakat: Az első és második főtétel egyesítése. Maximális hasznos munka és molekuláris értelmezése. A Helmholtz-függvény (szabadenergia) és Gibbs-függvény (szabadentalpia) definíciója. A termodinamikai potenciálfüggvény fogalma és alkalmazása spontán folyamatok irányának megítélésében. Az egyensúly feltétele zárt illetve nyitott rendszerekben.
7. hét	A kémiai potenciál <hr/> TE: A hallgató megismeri a következő fogalmakat: A kémiai potenciál fogalma és számítása egy- és többkomponensű rendszerekben. A Gibbs–Duhem-egyenlet. A komponensek kémiai potenciálja kétkomponensű gáz- és folyadékelegyekben, valamint ideális és reális oldatokban. Raoult-törvény, Henry-törvény. Fugacitás, aktivitás fogalma és termodinamikai jelentősége. Standard állapot választása.
8. hét	Egykomponensű rendszerek termodinamikája <hr/> TE: A hallgató megismeri a következő fogalmakat: A fázis és a komponens fogalma. A fázisátmenetek típusai. A kémiai potenciál alkalmazása egykomponensű többfázisú rendszerek egyensúlyának leírására. Fázisstabilitás és fázisátmenet. A Clapeyron- és Clausius–Clapeyron-egyenlet. Folyadék–gőz rendszerek: párolgás, forrás, párolgáshő, forráspont, telített gőznyomás, párolgási entrópia, Trouton-szabály. A fázisdiagram fogalma, a CO ₂ és a víz fázisdiagramja.
9. hét	Kétkomponensű rendszerek: elegyek és nagyhígítású oldatok termodinamikája <hr/> TE: A hallgató megismeri a következő fogalmakat: Ideális és reális elegyek. A parciális moláris mennyiségek. A parciális moláris térfogat és meghatározása. Az elegyedés termodinamikája, elegyedési és többletfüggvények, elegyedési szabadentalpia és entrópia. Ideális és reális elegyek szabadentalpiája és entrópiája. Kolligatív sajátságok termodinamikai leírása: fagyáspontcsökkenés, forráspontemelkedés, ozmózis. A kolligatív sajátságok gyakorlati jelentősége.
10. hét	Illékony folyadékok elegyei <hr/> TE: A hallgató megismeri a következő fogalmakat: Folyadékelegyek gőznyomása. Gőznyomás–összetétel, forráspont–összetétel és gőz–folyadék egyensúlyi összetétel diagramok ideális és reális elegyekre. Desztilláció; azeotrop elegyek. Megoszlási egyensúly. Gőznyomás nem elegyedő folyadékok felett. Vízgőzdesztilláció.
11. hét	Fázistörvény <hr/> TE: A hallgató megismeri a következő fogalmakat: Komponensek, fázisok, szabadsági fokok fogalma, számának megadása. A fázistörvény megfogalmazása. Korlátozottan elegyedő folyadékok fázisdiagramja. Eutektikumot képező, kétkomponensű szilárd rendszerek fázisdiagramja, meghatározása lehülési görbék alapján. Háromkomponensű rendszerek jellemzése háromszögdiagram segítségével.
12. hét	Termodinamikai egyensúly reaktív rendszerekben <hr/> TE: A hallgató megismeri a következő fogalmakat: Az egyensúly feltétele kémiai rendszerekben. A reakció-szabadentalpia fogalma, exergonikus és endergonikus folyamatok. Az egyensúlyi állandó fogalma. Standard reakciószabadentalpia és kapcsolata az egyensúlyi állandóval, a kémiai potenciálokkal. Az egyensúlyi állandó meghatározása termodinamikai adatokból. Az egyensúlyi állandó típusai: K_p , K_y , K_a .
13. hét	A körülmények változásának hatása a kémiai egyensúlyra <hr/> TE: A hallgató megismeri a következő fogalmakat: A legkisebb kényszer elve, az egyensúly dinamikus jellege. A nyomásváltozás hatása az egyensúlyi állandóra és az egyensúlyi összetételre. A hőmérsékletváltozás hatása az egyensúlyi állandóra (van't Hoff-egyenlet) és az összetételre. Reaktánsok és termékek hozzáadásának és elvonásának hatása az egyensúlyra. Gyakorlati alkalmazások.
14. hét	Kémiai egyensúly válogatott rendszerekben <hr/> TE: A hallgató megismeri a következő fogalmakat: Az egyensúlyok formai típusai (egylépéses, többlépéses, párhuzamos, konsekutív). Egyensúlyok homogén rendszerekben: sav-bázis, redoxi egyensúlyok; fémkomplexek lépcsőzetes képződése; disszociáció oldat- és gázfázisban; összetett reakciók egyensúlyai; az ATP termodinamikája. Heterogén egyensúlyok: oldhatósági szorzat; szilárd vegyületek hőbontása; gázadszorpciós egyensúly szilárd felületen.