

A tantárgy neve:	magyarul:	Fizikai kémia II. előadás						Kódja:	TTKBE0402	
	angolul:	Physical Chemistry II lecture								
A képzés 3. féléve										
Felelős oktatási egység:		DE TTK, Fizikai Kémiai Tanszék								
Kötelező előtanulmány neve:		Fizikai kémia I. Szervetlen kémia I. Szerves kémia I.						Kódja:	TTKBE0401 TTKBE0201 TTKBE0301	
Típus		Heti óraszámok						Követelmény	Kredit	Oktatás nyelve
		Előadás		Gyakorlat		Labor				
Nappali	x	Heti	2	Heti	0	Heti	0	kollokvium	2	magyar
Levelező		Féléves		Féléves		Féléves				
Tantárgyfelelős oktató		neve:		Dr. Ósz Katalin				beosztása:	egyetemi docens	
A kurzus célja , hogy a hallgatók megismerjék az egyensúlyi elektrokémia és a reakciókinetika alapjait.										
Tanulás eredmények, kompetenciák: <p><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 kinetika alapjait.</p> <p><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.</p> <p><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.</p> <p><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.</p>										
A kurzus tartalma, témakörei <p>Homogén egyensúlyi elektrokémia Transzportfolyamatok Homogén és heterogén reakciók kinetikája</p>										
Tervezett tanulási tevékenységek, tanítási módszerek <p>A hallgatók heti 2 óra előadás keretében ismerik meg a kémiai kinetika és az elektrokémia alapjait, alapvető összefüggéseit, valamint a transzportfolyamatokat. 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.</p>										
Értékelés <p>A vizsgajegy szóbeli és/vagy írásbeli vizsgán szerezhető meg.</p>										
Kötelező olvasmány: <ol style="list-style-type: none"> P. W. Atkins: Fizikai kémia II. (Tankönyvkiadó, Budapest, 2002) Fizikai Kémia II. Kulcsfogalmak: http://fizkem.unideb.hu/oktatas/kulcsfogalomtar/fizkem2.pdf 										

Ajánlott szakirodalom:

1. Póta György: Fizikai kémia gyógyszerészhallgatók számára, Kossuth Egyetemi Kiadó, 6. kiadás, Debrecen, 2008.
2. Michael J. Pilling, Paul W. Seakins: Reakciókinetika (Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 1997)

Heti bontott tematika	
1. hét	<p>Homogén egyensúlyi elektrokémia. Elektrolitoldatok termodinamikája</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megismeri a következő fogalmakat: Ionok képződésének termodinamikai függvényei. Az ionok standard állapota. Az aktivitás definíciója elektrolitokban, a közepes aktivitási együttható fogalma. Az aktivitási együttható kísérleti meghatározása. A Debey–Hückel-határtörvény. Az ionerősség fogalma. Sók oldékonysági egyensúlya és az ionerősség hatása az oldhatóságra. Oldékonyság számítása termodinamikai táblázatokból. Az Ostwald-féle hígítási törvény.</p>
2. hét	<p>Heterogén egyensúlyi elektrokémia. Elektródok termodinamikája</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megismeri a következő fogalmakat: Az elektródokon lejátszódó folyamatok jellemzése. Az elektródok fontosabb típusai: gázelektrodok, első-, másodfajú elektródok, redoxi elektródok. Az elektródpotenciálok függése a koncentrációtól (az elektródpotenciál Nernst-egyenlete), a standard érték. A pH mérése. Az üvegelektrod. A redoxi potenciálok és alkalmazásaik.</p>
3. hét	<p>A galvánelemek termodinamikája</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megismeri a következő fogalmakat: Elektródok és galváncellák. Az elektrokémiai cella Nernst-egyenlete. A diffúziós potenciál és kiküszöbölése. A galváncellák típusai, a bennük lejátszódó folyamatok kémiája. A cellareakció és termodinamikája, kapcsolat az elektromotoros erő és a reakció-szabadentalpia között. A galvánelemek standard potenciálja. Termodinamikai függvények meghatározása elektrokémiai mérésekből.</p>
4. hét	<p>Transzportfolyamatok</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megismeri a következő fogalmakat: A fluxus fogalma. A diffúzió: Fick I. törvénye, a diffúziós együttható. A diffúziós együttható kiszámítása: Einstein-egyenlet, Nernst–Einstein-egyenlet, Stokes–Einstein-egyenlet. Fick II. törvénye: a diffúzióegyenlet és megoldásai. Konvekció, diffúzió és kémiai reakció kapcsolódása. A hővezetés. A viszkozitás.</p>
5. hét	<p>Ionok mozgása oldatokban: elektrolitok vezetése</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megismeri a következő fogalmakat: A vezetés mérése elektrolitokban. Fajlagos vezetés, moláris vezetés, ezek függése a koncentrációtól. Gyenge és erős elektrolitok vezetési sajátosságai: Kohlrausch-törvény, az ionok független vándorlása. Az ionok mozgásának mechanizmusa: vándorlási sebesség elektromos erőterben, mozgékonyág és kapcsolata a vezetéssel. Átviteli szám és meghatározása. Kölcsönhatás a vándorló ionok között.</p>
6. hét	<p>Reakciókinetika: a kémiai reakciók sebessége és a reakciósebességi egyenlet</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megismeri a következő fogalmakat: A reakciósebesség fogalma. A reakciók indításának és a reakciók előrehaladása követésének módszerei. Gyorsreakciók vizsgálati módszerei: áramlásos, relaxációs és más technikák. Reaktortípusok. A sebességi egyenlet: a sebességi együttható és a rendűség. A sebességi egyenlet kísérleti meghatározása, a mérési eredmények értékelésének módszerei.</p>
7. hét	<p>Egyszerű reakciók kinetikája</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megismeri a következő fogalmakat: Első- és másodrendű reakciók sebességi egyenletei, azok integrálása. Harmadrendű reakciók. Az egyensúlyra vezető reakciók formálkinetikai leírása. Sorozatos reakciók, sebességmeghatározó lépés. Egyszerű sebességi egyenletek integrálása, analitikus megoldása. Felezési idő és diagnosztikus értéke.</p>
8. hét	<p>Összetett reakciók kinetikája</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megismeri a következő fogalmakat: Elemi reakciók, molekularitás. Egyszerűsítő eljárások: a steady-state és előegyensúlyos közelítés. Az unimolekuláris reakciók Lindemann–Hinshelwood-mechanizmusa. Enzimreakciók, a Michaelis–Menten-mechanizmus.</p>
9. hét	<p>Reakciórendszerek</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megismeri a következő fogalmakat: Láncreakció és alapvető lépései: láncindí-</p>

	tás, láncterjedés, késleltetés, lánclágazás, lánctörés. A hidrogén-halogenidek képződése. Termikus és láncrobbanások, a lánclágazás, a robbanási határok értelmezése: a Hinshelwood–Szemjonov mechanizmus. A katalízis fogalma, sajátosságai, formál-kinetikája és energetikai diagramjai. A katalízis fajtái: homogén és heterogén katalízis. Autokatalízis, kémiai visszacsatolás. Folyamatos és nyílt reaktorok.
10. hét	A kémiai reakciók ütközési elmélete <hr/> TE: A hallgató megismeri a következő fogalmakat: A sebességi együttható hőmérsékletfüggése: az Arrhenius-egyenlet. Az aktiválási energia Arrhenius-féle értelmezése, az ütközési elmélet. Az ütközési elmélet kiindulási feltevései. A preexponenciális tényező értelmezése, számítása. A sztérikus faktor, szigony mechanizmus. Diffúzió- és energiagátolt reakciók.
11. hét	A kémiai reakciók aktivált komplex elmélete <hr/> TE: A hallgató megismeri a következő fogalmakat: Az aktivált komplex elmélet eredete és alap gondolata. Az aktivált komplex fogalma, koncentrációja, kísérleti kimutatása. Statisztikus mechanikai megfontolások. A termodinamikai megközelítés: az aktiválási szabadentalpia, entrópia és entalpia fogalma. Az aktiválási paraméterek meghatározása.
12. hét	Folyamatok szilárd felületeken <hr/> TE: A hallgató megismeri a következő fogalmakat: A felületek szerkezete, a hibahelyek típusai, szerepük. Fiziszorpció és kemiszorpció sajátosságai, megkülönböztetésük. A Langmuir- és a BET-izotermák, levezetésük alapelvei. Az adszorpció entalpia. A felületi folyamatok alaplépései, lehetséges sebességmeghatározó lépések. A heterogén katalízis Langmuir–Hinshelwood- és Eley–Ridealmechanizmusa. A vegyipar fontosabb heterogén katalitikus folyamatai.
13. hét	Dinamikus elektrokémia <hr/> TE: A hallgató megismeri a következő fogalmakat: Az áramsűrűség, a nyugalmi potenciál és a túlfeszültség fogalma. A Tafel-egyenlet. A Butler–Volmer-egyenlet, a csereáramsűrűség, a túlfeszültség alsó és felső határa. Az elektromos kettős réteg és annak Helmholtz-, Gouy–Chapman- és Stern-féle modellje. A Voltapotenenciál, a felületi potenciál és a Galvani-potenenciál. Az elektrokémiai potenciál. A polarizáció típusai, polarizációs túlfeszültség, Nernst-féle diffúziós réteg, diffúziós határáramsűrűség.
14. hét	Nemtermikus aktiválás <hr/> TE: A hallgató megismeri a következő fogalmakat: Az elektromágneses sugárzás és a molekulák kölcsönhatása. A fényelnyelés Lambert–Beer-törvénye. A gerjesztett állapot kialakulásának és megszűnésének leírása (termikus relaxáció, fluoreszcencia, foszforeszcencia), egyszerűsített Jablonski-diagram. Fotokémiai és sugárhatáskémiai reakciók. A fotokémia törvényei: a Grotthus–Draper-, a Bunsen–Roscoe- és az Einstein–Stark-törvény, kvantumhatásfok, kvantumhasznosítási tényező. A fotokémiai sebességi egyenlet. Mikrohullámú aktiválás. A mechanokémia és a szonokémia alapjai.