

A tantárgy neve:	magyarul:	Fizikai kémia és gyakorlati alkalmazások	Kódja:	TTKME4401
	angolul:	Physical chemistry and practical applications		

A képzés 2. féléve (1. tavaszi félév)

Felelős oktatási egység:	DE TTK, Fizikai Kémiai Tanszék			
--------------------------	---------------------------------------	--	--	--

Kötelező előtanulmány neve:		Kódja:	
-----------------------------	--	--------	--

Típus	Heti óraszámok						Követelmény	Kredit	Oktatás nyelve	
	Előadás		Gyakorlat		Labor					
Nappali	x	Heti	2	Heti	1	Heti	0	kollokvium	3	magyar
Levelező		Féléves		Féléves		Féléves				

Tantárgyfelelős oktató	neve:	Dr. Lente Gábor	beosztása:	egyetemi tanár
------------------------	-------	------------------------	------------	-----------------------

A kurzus célja, hogy a hallgatók

jobban megismerik a modern fizikai kémiával s az ebben szereplő alapelvek használatával a folyamatanalízis illetve reaktortervezés.

Tanulás eredmények, kompetenciák:

Tudás:

A hallgató olyan matematikai, fizikai, és fizikokémiai ismereteket szerez, amelyek révén tájékozódni tud a fizikai kémia tárgyalt területein. Megismeri a kapcsolódó diszciplínák legújabb kutatási eredményeit, fejlődési irányait is. Jártasságot szerez tudományos közlemények feldolgozásában.

Képesség:

Legyen tisztában az előadásokon használt fogalmak jelentésével.

Tudja beilleszteni a kurzuson megtanultakat korábbi termodinamikai, kinetikai és anyagszerkezeti ismeretei rendszerébe.

Legyen képes fizikai kémiai ismereteit felhasználni a vegyész mesterképzési szak speciális szakmai ismereteinek az elsajátításakor.

Tudja alkalmazni a gyakorlatban a tantárgy tanulásakor megszerzett ismereteket.

Attitűd:

A tantárgy elősegíti, hogy a hallgató, megfelelő és átfogó fizikai kémiai tudás, továbbá korszerű szemlélet birtokában a későbbi tanulmányai során és a végzés után az új szakmai információkat, kutatási eredményeket megfelelően értelmezni és értékelni tudja továbbá a természettudományos tudását folyamatosan gyarapítsa. A hallgató ennek köszönhetően szilárd elméleti alapokkal bír a fizikai kémia területén, ami hozzásegíti ahhoz, hogy a szakmai feladatait pontosan, hatékonyan végezze.

Autonómia és felelősség:

A kurzus hozzásegíti a hallgatót ahhoz, hogy munkájában innovatív és hatékony legyen, továbbá szakmai és nem szakmai körökben a biotechnológiai és természettudományos kérdésekben megalapozottan és felelősséggel formáljon véleményt.

A kurzus tartalma, témakörei

Termodinamika axiomatikus felépítésben.

Alapvető fogalmak és alkalmazásuk az irreverzibilis termodinamika területéről.

Alapvető fogalmak és alkalmazásuk a statisztikus termodinamika területéről.

Radiokémia

Fotokémia

Anyagszerkezet, szupramolekuláris kémia

Tervezett tanulási tevékenységek, tanítási módszerek

A hallgatók a heti két óra előadáson és egy óra szemináriumon vesznek részt. Az ismereteket az előadó(k) előadások formájában adják át, amelyekben animációk és videók használata is segíti a megértést. A tárgyhoz kapcsolódó szemináriumon közvetlenül az előadás anyagához kapcsolódó számolási feladatokat oldanak meg.

Értékelés

A félév során a hallgatók vizsgadolgozatot készíthetnek egy az előadóval egyeztetett témáról, ennek alapján jegymegajánlás történik. Emellett a vizsgajegy szóbeli vizsgán is megszerezhető.

Kötelező olvasmány:

1. P. W. Atkins: Fizikai kémia II-III. (Tankönyvkiadó, Budapest, 2002)
2. Póta György (szerkesztő): Modern fizikai kémia (Digitális Tankönyvtár, 2013)

Ajánlott szakirodalom:

1. Keszei Ernő: Bevezetés a kémiai termodinamikába (ELTE egyetemi jegyzet, <http://keszei.chem.elte.hu/fizkem1/Tankonyv.pdf>)
2. Baranyai András, Schiller Róbert: Statisztikus mechanika vegyészeknek (Akadémiai Kiadó, Budapest, 2003)
3. Zrínyi Miklós: A fizikai kémia alapjai I-III. (Műszaki Könyvkiadó, 2006)
4. Zrínyi Miklós: [A fizikai kémia alapjai](#) (Semmelweis Kiadó, Budapest, 2015)
5. Bazsa György (szerkesztő): Nemlineáris dinamika és egzotikus kinetikai jelenségek kémiai rendszerekben (egyetemi jegyzet, Debrecen-Budapest-Gödöllő, 1992)
6. Péter Érdi, Gábor Lente: [Stochastic Chemical Kinetics](#) (Springer, 2014)

Heti bontott tematika	
1. hét	Klasszikus és racionális termodinamika <hr/> TE: A hallgató átismétli a termodinamika néhány alapfogalmát és főtételeit, megismerkedik a korábban tanult termodinamikában jelen lévő logikai ellentmondásokkal és képes lesz ezek többféle feloldására is.
2. hét	Hagyományos termodinamika axiomatikus megközelítésben <hr/> TE: A hallgató megismerkedik az axiomatikus termodinamika alapjaival, képes fogalomrendszerének használatára és konkrét példákban fel tudja használni a különböző egyensúlyok jellemzésére. A hallgató világos különbséget tesz a kémiai és termikus egyensúly fogalmi között.
3. hét	Irreverzibilis folyamatok termodinamikája: fogalmak. <hr/> TE: A hallgató ismeri az irreverzibilis termodinamika fogalomrendszerét és az entrópiaprodukciónak a definícióját, azonosítani tudja a termodinamikai erőket és a hozzájuk tartozó áramokat és tudja alkalmazni az Onsager-féle reciprocitási relációkat.
4. hét	Irreverzibilis folyamatok termodinamikája: Alkalmazások. <hr/> TE: A hallgató bármely termodinamikai erőhöz definiálni tudja a fenomenologikus egyenletekben hozzá tartozó vezetési együtthatókat, ismeri a kémiai affinitás szabatos termodinamikai definícióját és a De Donder-egyenlőtlenség használatával véleményt tud mondani az irreverzibilis rendszerekben lezajló kémiai reakciók irányáról.
5. hét	Statisztikus termodinamika: Fogalmak. <hr/> TE: A hallgató ismeri a molekuláris állapot, a konfiguráció és az állapotösszeg fogalmát, s ezek segítségével tetszőleges diszkrét energiájú rendszerekben meg tudja adni a belső energiára és entrópiára vonatkozó összefüggéseket.
6. hét	Statisztikus termodinamika: Alkalmazások. <hr/> TE: A hallgató a statisztikus termodinamika eszközeivel ki tudja fejezni egy molekuláris rendszer translációs, forgási, rezgési és elektronenergia-járulékait, s ezek segítségével elsajátítja a hőkapacitás, zérusponthi entrópia és az egyensúlyi állandó kifejezéséhez szükséges alapösszefüggéseket.
7. hét	Klasszikus kinetikai alapok, kinetikai egyszerűsítő elvek <hr/> TE: A hallgató haladó szinten tudja használni a sebesség-meghatározó lépésre, steady-state közelítésre, előegyensúlyra, nagy feleslegben használt reaktánsokra és kinetikailag elkülönülő lépésekre alapozott egyszerűsítő elveket. Felismeri azt is, hogy ezek indokolatlan használata milyen torzításokhoz illetve hibákhoz vezet.
8. hét	Reakciómechanizmusok analízise.

	TE: A hallgató egy összetett reakciórendszerben felismer különböző reakcióutakat. Megfelelő körülmények esetén képes modellredukciót végrehajtani illetve ismeri a globális és lokális érzékenységanalízis módszereit és tudományos jelentőségét.
9. hét	Kinetikai folyamatok reaktorokban. TE: Az hallgató ismeri a folytonosan kevert tankreaktor (CSTR), fluidizációs reaktor, csőreaktor működésének alapelveit, a korábban megismert matematikai egyenleteket képes használni ezek kinetikai analízisében. A hallgató betekintést nyer a TAP (Temporal Analysis of Products) reaktor működési elvébe.
10. hét	Sztocasztikus kinetikai modellek. TE: A hallgató megismeri a reakciókinetika egyedi molekulákra alapozott (sztocasztikus) elméletét. A determinisztikus sebességi egyenlet alapján tetszőleges rendszerre fel tudja írni a sztocasztikus vezéregyenletet, tisztában van a vezéregyenlet alapvető sajátságaival.
11. hét	Sztocasztikus kinetikai alkalmazások. TE: A hallgató meg tudja adni az elsőrendű reakciórendszerek általános determinisztikus és sztocasztikus leírását. Sztocasztikus térképek alapján el tudja dönteni, mikor nem lehetséges a determinisztikus megközelítés használata a gyakorlati problémákban.
12. hét	Fotokémiai alapfogalmak, a fotonok és a molekulák kölcsönhatása. TE: A hallgató ismeri a következő fogalmakat: Franck-Condon elv, elektronátmenetek fényelnyelés során, oszcillátorerősség és hatáskeresztmetszet.
13. hét	Fotofizikai folyamatok jellemzése. TE: A hallgató ismeri a fluoreszcencia, foszforeszcencia, sugárzásmentes fotofizikai folyamatok, intra- és intermolekuláris energiaátadás fogalmát, érti a fotofizikai folyamatok kinetikáját.
14. hét	Fotokémiai folyamatok leírása. TE: A hallgató ismeri a fotoizomerizáció, fotodisszociáció, fotoszubsztitúció, fotoaddíció, fényel indukált redoxireakciók fogalmát, példákat tud mondani ezekre.