

## ELTE Kémiai Intézet, Fizikai Kémiai Tanszék

Kémia BSc. Fizikai Kémiai Záróvizsga tételek

2009.

1. A termodinamikai rendszer jellemzői. A termodinamika axiómái. Entrópia, energia, munka és hő. Egyensúly izolált és izentropikus rendszerekben. A klasszikus termodinamika főtételei.
2. Entrópia- és energiabázisú fundamentális egyenletek. Állapotegyenletek. Energia és entrópia bázisú intenzív változók. Termodinamikai egyensúly izobár, izoterm, valamint izoterm-izobár rendszerekben. Az egyensúly feltétele intenzív és extenzív mennyiségekkel kifejezve.
3. A termodinamika matematikai formalizmusa. Az  $S$ ,  $U$ ,  $H$ ,  $F$  és  $G$  függvények, azok deriváltjai. Euler formula, Gibbs-Duhem egyenlet, Maxwell relációk, Gibbs-Helmholtz egyenlet.
4. A statisztikus termodinamika alapjai. Energiaeloszlás és partíciós függvény mikrokanonikus és kanonikus sokaságokban. Kanonikus állapotösszeg számítása molekuláris partíciós függvények segítségével. Termodinamikai mennyiségek ( $S$ ,  $U$ ,  $H$  és  $F$ ) számítása a partíciós függvényekből.
5. Fázisegyensúlyok. A Gibbs-féle fázisszabály és alkalmazása. Egykomponensű rendszerek fázisegyensúlyai, fázisdiagramjai. Kétkomponensű rendszerek egyensúlyai, fázisdiagramjai. Kettőnél több komponensű elegyek fázisegyensúlyai, fázisdiagramjai, azok kísérleti tanulmányozása. Megoszlási egyensúlyok.
6. Ideális és reális elegyek. Fugacitás, aktivitás, standard mennyiségek. Kolligatív tulajdonságok (fagyáspontcsökkenés, forráspont-emelkedés, gőznyomáscsökkenés, ozmózis), ezek termodinamikai leírása.
7. Kémiai egyensúlyok reagáló rendszerekben. Az egyensúlyi állandó és a reakcióra jellemző standard mennyiségek. Az egyensúlyi állandó nyomás- és hőmérsékletfüggése. Az egyensúlyi állandó számítása kanonikus sokaságban.
8. Transzportfolyamatok. Az általános transzportegeyenlet, annak alkalmazása diffúzióra és viszkózus folyásra. Transzportfolyamatok elektrolitoldatokban (diffúzió, diffúziós potenciál, elektromos vezetés).
9. Kémiai reakciók ütközési elmélete. Az átmenetiállapot-elmélet bimolekulás reakciók és unimolekulás reakciók esetén. Elemi reakciók sebességi egyenletének általános alakjai, azok megoldása. A reakciórend kísérleti meghatározása. A reakciósebességi együttható nyomás- és hőmérsékletfüggése.
10. Reakciók mechanizmusa. Összetett reakciók sebességi egyenleteinek megoldási módszerei. A kvázistacionaritás elve, használhatósága. Láncreakciók.
11. Katalízis és inhibíció. Autokatalízis, autoinhibíció, ezek kimutatása a reakciórend megváltozásának alapján. Sav-bázis katalízis. Heterogén reakciók, heterogén katalízis.
12. Érzékelők, szenzorok, mérőberendezések. Vezérlés és szabályozás. Számítógépes adatgyűjtés és vezérlés.
13. Optikai mérési módszerek alkalmazása kémiai reakciók egyensúlyának, kinetikájának vizsgálatában.
14. Töltött részecskéket tartalmazó fázisok termodinamikája. (Elektroneutralitás elve, elektrokémiai potenciál, közepes aktivitás, Born-formula, Debye-Hückel határtörvény.) Galvánecellák termodinamikai leírása. Elektródok jellemzése, osztályozása.
15. Elektrokémiai áramforrások, elektrolízis. Elektrokémiai korrózió és korrózióvédelem.
16. Elektrokémiai mérési módszerek alkalmazása kémiai reakciók termodinamikai tulajdonságainak, egyensúlyának, kinetikájának vizsgálatában.
17. A kvantummechanika alapelvei: fizikai mennyiségek, ezek mérése, állapotfüggvény, várható érték, Schrödinger-egyenlet, stacionárius állapotok, fizikai mennyiségek egyidejű mérése, Heisenberg-féle határozatlansági reláció.

18. A hidrogénatom kvantummechanikai leírása: a Schrödinger-egyenlet megoldásai (energia, sajátfüggvények), degeneráció, pályák ábrázolása, elektronsűrűség, elektronspin.
19. Többelektronos rendszerek kvantummechanikai leírása: Hamilton-operátor, Schrödinger egyenlet, a független elektron modell (FEM), a Pauli-elv, Slater-determináns. Többelektronos atomok elektronszerkezete: pálya, pályaenergia, Aufbau-elv, elektronkonfiguráció, az atom állapotainak jellemzése és jelölése, Hund-szabály.
20. Molekulák elektronszerkezete: Hamilton-operátor,  $H_2^+$ -ion pályái, LCAO-MO közelítés, a hidrogénmolekula elektronszerkezete VB és MO leírásban; kétatomos molekulák elektronszerkezete; a vízmolekula elektronszerkezete az MO és VB elméletek keretében: kanonikus és lokalizált pályák, hibridpályák.
21. Szerkezetvizsgáló módszerek elméletének alapjai: spektroszkópiai mérés elve, a spektrumot meghatározó tényezők, a spektroszkópiai módszerek megkülönböztetése energia, illetve a jellemző mozgás alapján; egyszerű spektrumok értelmezése.
22. Forgási és rezgési spektroszkópia. Kétatomos molekulák leírása merev rotátor közelítésben, energiaszintek, kiválasztási szabályok, pörgettyűtípusok, a forgási spektroszkópia alkalmazásai. Kétatomos molekulák rezgése, harmonikus közelítés, klasszikus és kvantumos leírás, energiaszintek, kiválasztási szabályok, általánosítás többatomos molekulák esetére, belső koordináták, normál koordináták, szimmetria szerepe, alkalmazások (IR és Raman spektroszkópia).
23. Elektronspektroszkópia: UV és látható spektroszkópia elvei, kiválasztási szabályok, rezgési finomszerkezet, gyakorlati alkalmazások, gerjesztett állapotok megszűnése, fluoreszcencia, foszforeszcencia; fotoionizációs spektroszkópia elvi alapjai, kiválasztási szabályok, ESCA.
24. NMR és ESR spektroszkópia: részecskék mágneses tulajdonságai, azok kvantummechanikai leírása, magspin kvantummechanikai leírása, az NMR mérés elve, a spektrum kvalitatív leírása, kémiai eltolódás, spin-spin csatolás; az ESR spektroszkópia alapelve, alkalmazása.
25. Határfelületi többletenergia és következményei. Felületi feszültség, nyomásegyensúly görbült felülettel elválasztott fázisok között, folyadékcsepp egyensúlyi gőznyomása, kis részecskék oldhatósága.
26. A (Gibbs-féle) határfelületi termodinamika alapjai. A Gibbs adszorpciós egyenlet és alkalmazása. Kapilláráktív és inaktív anyagok. Adszorpciós izotermák. Az adszorpciós réteg állapotegyenlete.
27. A kolloidstabilitás klasszikus (DLVO) elmélete. A koaguláció kinetikája. Az elektrolitkoncentráció hatása a koaguláció sebességére. Szedimentáció, izoterm átkristályosodás, aggregáció.
28. Asszociációs kolloidok, micellaképződés. A hidrofób kölcsönhatás. Keverékmicellák. Szolubilizáció, polimer-tenzid komplexképződés.
29. Makromolekulás kolloidok. Polimeroldatok. A statisztikus gombolyag. Polimergélek. Polielektrolitok.
30. Reológiai alapfogalmak. Folyástípusok, azok anyagszerkezeti magyarázatai. Gumirugalmasság.