

**ELTE Kémiai Intézet, Fizikai Kémiai Tanszék**  
**Vegyész MSc Fizikai Kémia szigorlati tételek (2016. márciustól)**

1. A termodinamikai rendszer jellemzői. A klasszikus termodinamika főtételei. A termodinamika Callen-féle axiómái és azok kapcsolata a főtételekkel. Hő, munka, energia és entrópia. Reverzibilis, irreverzibilis és adiabatikus folyamatok. A Carnot ciklus. A hatásfok definíciója.
2. Termodinamikai egyensúly feltétele összetett rendszerekben. Fundamentális és állapotegyenletek. Energia reprezentáció és entrópia reprezentáció. Mérhető mennyiségek ( $C_V$ ,  $C_P$ ,  $\kappa_T$ ,  $\kappa_S$ ,  $\alpha$ ) definíciója és alkalmazása. Az entrópia abszolút értékének meghatározása.
3. A termodinamika matematikai formalizmusa. Az Euler formula. A Gibbs-Duhem egyenlet. Az  $S$ ,  $U$  (vagy  $E$ ),  $H$ ,  $A$  (vagy  $F$ ) és a  $G$  függvények és azok teljes differenciálja. Konjugált változópárok. Maxwell relációk.
4. A statisztikus termodinamika alapjai. Atomok, ionok, molekulák alapvető kölcsönhatásainak (Coulomb törvény, Lennard-Jones potenciál, stb.) és mozgásformáinak (transzláció, rezgés, forgás) leírása. Energiaeloszlás és partíciós függvény (állapotösszeg) a kanonikus és a mikrokanonikus sokaságon. Molekuláris állapotösszeg. A termodinamikai potenciálfüggvények és az állapotösszegek kapcsolata. A nagy számok szerepe.
5. Fázisegyensúlyok. Egykomponensű rendszer fázisstabilitásának kritériumai. A Gibbs-féle fázis szabály. Egykomponensű rendszerek fázisegyensúlyai és fázisdiagramjai. A Clapeyron és a Clausius-Clapeyron egyenlet. Kétkomponensű elegyek és fázisdiagram-típusaik. Eutektikum, eutektoid, peritektikum. Korlátolt elegyedés. A kritikus pont. Első és másodrendű fázisátmenetek.
6. Ideális és reális elegyek. A kémiai potenciál definíciója és koncentrációfüggése. A Raoult törvény. Desztilláció. Fugacitás, aktivitás. Kolligatív sajátságok. Azeotrópos elegy. Izotópeffektus. A Joule-Thomson effektus.
7. Gázok állapotegyenletei. A megfelelő állapotok tétele. A van der Waals és a viriál egyenlet. Folyadékok és szilárd kristályok szerkezete. Elemi cella. Bravais cellák. Kristályszerkezetek kísérleti meghatározása. Üveges állapot, kvázikristályok. Folyadék-kristályok.
8. Kémiai egyensúlyok reagáló rendszerekben. Homogén reakciók egyensúlyi állandója és a reakcióra jellemző standard mennyiségek különböző körülmények között és különböző vonatkoztatási állapotokkal kifejezve. Heterogén reakciók egyensúlyai, egyensúlyi állandói. Az egyensúlyi állandó nyomás- és hőmérsékletfüggése. A Gibbs-Helmholtz egyenlet.
9. Kémiai reakciók molekuláris elméletei: az ütközési elmélet és az átmeneti állapot-elmélet. Elemi reakciók sebességi egyenletének általános alakjai, azok megoldása. Reakciók mechanizmusa. Összetett reakciók sebességi egyenleteinek megoldása. A kvázistacionaritás elve. Láncreakciók és robbanások. Katalízis és inhibíció. Oszcilláló reakciók és kémiai káosz.
10. Transzportfolyamatok. Hővezetés, diffúzió, viszkozitás, elektromos vezetés. Kapcsolatuk az összetett rendszer egyensúlyával. A kontinuitási egyenlet. Megmaradó mennyiségek egyenlete. Kereszteffektusok.
11. Érzékelők, mérőrendszerek. A mérőeszközök hitelesítésének alapelvei. Az irányítási folyamat, vezérlés és szabályozás. A nyomás és a hőmérséklet szabályozásához használható eszközök. A koncentrációmérés módszerei és a koncentráció időfüggésének mérése különböző időskálák esetén. Számítógép alkalmazása az adatgyűjtésben és -feldolgozásban.
12. A kalorimetriás mérések alapelvei. A kalorimetria alkalmazási területei a fizikai kémiában. Ötvözetek termikus analízise. Kétkomponensű fémötvözetek fázisdiagramjának kísérleti meghatározása.
13. Elegyek folyadék-gőz egyensúlyainak tanulmányozása. A desztilláló-berendezések működését jellemző adatok meghatározása. Megoszlási egyensúlyok. A párolgáshő meghatározása közvetett módszerrel.

14. A moláris tömeg meghatározására alkalmas fizikai kémiai módszerek. Az aktivitás és az aktivitási tényező meghatározására alkalmas kísérleti módszerek. Kolligatív tulajdonságok kísérleti vizsgálata.
15. Elektrodok, az elektrokémiai cella. Az elektromotoros erő mérése. Az elektromotoros erő hőmérsékletfüggésének vizsgálata alapján meghatározható termodinamikai mennyiségek. Elektrokémiai áramforrások.
16. Töltött részecskéket tartalmazó fázisok termodinamikai vizsgálatára alkalmas kísérleti módszerek. Elektrolitok közepes aktivitásának, aktivitási tényezőjének meghatározása. A pH definíciója és mérése. Módszerek a korlátozott oldódás törvényszerűségeinek vizsgálatára.
17. Homogén illetve heterogén kémiai reakciók előrehaladásának követésére alkalmazott fizikai-kémiai módszerek, az alkalmazott mérőeszközök működése. Kémiai reakciók kinetikus rendjének meghatározása. Katalitikus és autokatalitikus reakciók vizsgálata.
18. Elektrodreakciók kinetikája. Az elektrod folyamatok kísérleti vizsgálata. Elektrolízis. Elektrolitoldatok elektromos vezetésének kísérleti meghatározása. A konduktometriás mérések elve és eszközei. Az átviteli szám meghatározására alkalmas módszerek.
19. Folyadékok és gázok viszkozitásának meghatározása. A viszkozus folyás aktiválási energiája és az abból levonható következtetések. A diffúziós együttható meghatározására alkalmas módszerek.
20. Felületek termodinamikai jellemzése. A felületi feszültség mérésére alkalmas módszerek, és a mérésekből levonható következtetések.
21. A kvantummechanika alapelvei. Fizikai mennyiségek, ezek mérése, állapotfüggvény, várható érték, időfüggő és időfüggetlen Schrödinger-egyenletek, stacionárius állapotok, fizikai mennyiségek egyidejű mérése, Heisenberg-féle határozatlansági reláció.
22. A H-atom és a több-elektronos atomok kvantummechanikai leírása. Hamilton-operátor, időfüggetlen Schrödinger-egyenlet (energia, sajátfüggvények), degeneráció, pályák ábrázolása, elektronsűrűség, elektronspin, a független elektron modell (FEM), a Pauli-elv, a Slater-determináns, pályák és ábrázolásuk, pályenergia, Aufbau-elv, elektronkonfiguráció, állapotok jellemzése és jelölése, Hund-szabály.
23. Molekulák elektronszerkezete. Hamilton-operátor; a  $H_2^+$ -ion kvantummechanikai tárgyalása, energia, pályák, LCAO-MO közelítés; a hidrogénmolekula elektronszerkezete VB és MO leírásban; kétatomos molekulák elektronszerkezete; a vízmolekula elektronszerkezete az MO elmélet keretében: kanonikus és lokalizált pályák.
24. Kémiai szerkezetvizsgáló módszerek elméletének alapjai. A spektroszkópiai mérések elve, a spektrumot meghatározó tényezők, a spektroszkópiai módszerek megkülönböztetése energia, illetve a jellemző mozgás alapján; egyszerű spektrumok értelmezése.
25. Forgási és rezgési spektroszkópia. Kétatomos molekulák leírása a merev rotátor közelítésben, energiaszintek és kiválasztási szabályok, pörgettyűtípusok, a forgási spektroszkópia alkalmazásai. Két- és többatomos molekulák.
26. Az elektron és az NMR spektroszkópia. Az UV és látható spektroszkópia elvei, kiválasztási szabályai, rezgési finomszerkezet, gyakorlati alkalmazások, gerjesztett állapotok megszűnése, fluoreszcencia, foszforeszcencia, a fotoionizációs spektroszkópia elvi alapjai, ESCA. Atommagok mágneses tulajdonságai, magspin kvantummechanikai leírása, az NMR mérés elve, a spektrum kvalitatív leírása, kémiai eltolódás, spin-spin csatolás, alkalmazások.
27. Határfelületi többletenergia és következményei. Felületi feszültség, nyomásegyensúly görbült felülettel elválasztott fázisok között, folyadékcsepp és buborék egyensúlyi gőznyomása, kis részecskék oldhatósága.
28. A (Gibbs-féle) határfelületi termodinamika alapjai. A Gibbs adszorpciós egyenlet és alkalmazása. Kapilláraktív és inaktív anyagok. Adszorpciós izotermák. Az adszorpciós réteg állapotegyenlete.

29. A kolloidstabilitás klasszikus (DLVO) elmélete. A koaguláció kinetikája. Az elektrolitkoncentráció hatása a koaguláció sebességére. Szedimentáció, izoterm átkristályosodás, aggregáció.
30. Asszociációs kolloidok, micellaképződés. A hidrofób kölcsönhatás. Keverékmicellák. Szolubilizáció, polimer-tenzid komplexképződés.
31. Makromolekulás kolloidok. Polimeroldatok. A statisztikus gombolyag. Polimergélek. Polielektrolitok.
32. Reológiai alapfogalmak. Folyástípusok, azok anyagszerkezeti magyarázatai. Gumirugalmasság.