

ELTE Kémiai Intézet, Fizikai Kémiai Tanszék
Vegyész MSc. Fizikai Kémia szigorlati tételtek

1. A termodinamikai rendszer jellemzői. A klasszikus termodinamika főtételei. A termodinamika Callen-féle axiómái és azok kapcsolata a főtételekkel. Energia, hő, munka és entrópia. A termodinamikai egyensúly fogalma.
2. Termodinamikai egyensúly feltétele összetett rendszerekben. Állapotegyenletek. Energia reprezentáció és entrópia reprezentáció. Konjugált változópárok.
3. A termodinamika matematikai formalizmusa. Az Euler formula. A Gibbs-Duhem egyenlet. Az S , U , H , F (vagy A) és a G függvények és azok teljes deriváltjai. Maxwell relációk.
4. A statisztikus termodinamika alapjai. Energiaeloszlás és partíciós függvény (vagy állapotösszeg) a kanonikus és a mikrokanonikus sokaságban. Molekuláris állapotösszeg. A termodinamikai potenciálfüggvények és az állapotösszegek kapcsolata.
5. Fázisegyensúlyok. A Gibbs-féle fázisszabály. Egykomponensű rendszerek fázisegyensúlyai és fázisdiagramja. Clapeyron egyenlet. Kétkomponensű elegyek és fázisdiagramjaik.
6. Ideális és reális elegyek. A Raoult törvény. Desztilláció. Fugacitás, aktivitás. Kolligatív sajátságok.
7. Kémiai egyensúlyok reagáló rendszerekben. Az egyensúlyi állandó és a reakcióra jellemző standard mennyiségek. Az egyensúlyi állandó nyomás- és hőmérsékletfüggése. A Gibbs-Helmholtz egyenlet.
8. Reakciók mechanizmusa. Kémiai reakciók ütközési elmélete. Elemi reakciók sebességi egyenletének általános alakjai, azok megoldása. Összetett reakciók sebességi egyenleteinek megoldása. Kvázistacionaritás. Láncreakciók. Katalízis és inhibíció.
9. Transzportfolyamatok. Hővezetés, diffúzió, nyíróviszkozitás, elektromos vezetés. Kapcsolatuk az összetett rendszer egyensúlyával. Megmaradó mennyiségek egyenlete (pl. Fick II.)
10. Gázok állapotegyenletei. A megfelelő állapotok tétele. Folyadékok és szilárd kristályok szerkezete. Üveges állapot. Folyadékkristályok. Atomok, ionok, molekulák alapvető kölcsönhatásainak leírása. (Coulomb törvény, Lennard-Jones potenciál, stb.)
11. Érzékelők, mérőrendszerek. A mérőeszközök hitelesítésének alapelvei. Az irányítási folyamat, vezérlés és szabályozás. A nyomás és a hőmérséklet szabályozásához használható eszközök. 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. Elektródok, 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. A felületi feszültség mérésére alkalmas módszerek, és a mérésekből levonható következtetések.
21. A kvantummechanika alapelvei. Fizikai mennyiségek, ezek mérése, állapotfüggvény, várható érték, 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, 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, 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.
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 rezgése, a harmonikus oszcillátor közelítés, klasszikus és kvantumos leírás, energiaszintek, kiválasztási szabályok, belső koordináták, normál koordináták, a szimmetria szerepe, alkalmazások (IR és Raman spektroszkópia).
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 egyensúlyi göznyomása, kis részecskék oldhatósága.
28. A (Gibbs-féle) határfelületi termodinamika alapjai. A Gibbs adszorpciós egyenlet és alkalmazása. Kapilláráktív 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.