

## Fizikai kémia és gyakorlati alkalmazások (TKME4401)

**A tantárgyfelelős neve:** dr.Gáspár Vilmos

**A tárgy oktatói:** dr. Ósz Katalin

**Óraszám/hét:** 2 óra előadás + 1 óra szeminárium

**Kreditszám:** 3

**A tantárgy felvételének előzetes követelménye:**

Mintatanterv alapján: <http://tk.unideb.hu/oldal/kovetelmenyek/97>

**Tantárgyteljesítési követelmény:**

**a.) a tanórákon való részvétel követelményei és a távolmaradás pótlásának lehetősége:** A szemináriumokon a részvétel kötelező. Megfelelően indokolt hiányzás két alkalommal lehetséges.

**b.) a félévközi ellenőrzések száma, témaköre, időpontja, pótlás és javítás lehetősége:** ---

**c.) a teljesítésértékelés (számonkérés) módja:** A félév utolsó hetében lehetőség van egy jegymegajánló ZH írására. Ha ez nem sikerül, szóbeli vagy írásbeli vizsgázni lehet a kiadott tételsor alapján.

**A tárgy tematikája:** (a kurzus heti bontásbeli tematikája)

### **1. Klasszikus és racionális termodinamika**

A termodinamika első főtétele, belső energia, entalpia, hőkapacitás, a második főtétel, entrópia, szabadenergia, szabadentalpia, a harmadik főtétel, fontos deriváltak, parciális moláris mennyiségek, kémiai potenciál, a klasszikus termodinamika kritikája, racionális termodinamika alapjai.

### **2. Irreverzibilis folyamatok termodinamikája: fogalmak**

A nemfolytonos rendszer, entrópiaprodukció, áramok és erők a transzportfolyamatoknál, az Onsager-féle reciprocitási relációk, Seebeck-hatás és Peltier-hatás, az Onsager-elmélet kritikája, minimális entrópia-produkció elve, általános evolúciós kritérium.

### **3. Irreverzibilis folyamatok termodinamikája: alkalmazás**

Hőátadás izolált rendszerben, termoozmózis, Knudsen-gázok, áramlási potenciál, elektroozmózis, egyéb elektrokinetikai jelenségek, nemegyensúlyi reakciórendszerek, a folytonos formalizmus.

### **4. Statisztikus termodinamika: fogalmak**

A molekuláris állapotok eloszlása, konfiguráció és statisztikus súly, pillanatnyi és legvalószínűbb konfiguráció, molekuláris állapotösszeg, az állapotösszeg fizikai értelmezése, belső energia, statisztikus entrópia, kanonikus állapotösszeg és a benne tárolt termodinamikai információ.

## 5. Statisztikus termodinamika: alkalmazás

Az állapotösszeg összetevői (haladó mozgás hozzájárulása, forgási hozzájárulás, rezgési hozzájárulás, elektronok hozzájárulása), független és megkülönböztethetetlen részecskék, termodinamikai függvények (átlagos energia, hőkapacitás, zéruspont-entrópia, egyensúlyi állandó) kapcsolata az állapotösszeggel.

## 6. Klasszikus kinetikai alapok, kinetikai egyszerűsítő elvek

Reakciósebesség, sebességi egyenlet, kinetikai differenciálegyenletek és megoldásuk, direkt és inverz feladat, Arrhenius-egyenlet, ütközési elmélet, átmeneti komplex elmélete, kinetikai egyszerűsítő elvek (megmaradó mennyiségek, nagy feleslegben alkalmazott reaktáns, gyors előegyensúly, sebességmeghatározó lépés, kvázistacionárius közelítés).

## 7. Reakciómechanizmusok analízise

Reakciómechanizmusok analízise, reakcióutak, reakciómechanizmusok redukciója, redukció időskála-analízis nélkül, redukció nagyon különböző időskálák alapján, lokális és globális érzékenység- és bizonytalanságanalízis, a bizonytalanságanalízis fontossága.

## 8. Kinetikai folyamatok reaktorokban

Reaktorok típusai, CSTR és alkalmazása a reakciókinetikában (szükséges reaktortérfogat meghatározása, konverzió számolása, sorba kapcsolt reaktorok), fluidizációs reaktor, csőreaktor, ideális kiszorítású csőreaktor és alapegyenlete, a reaktor adott mértékű átalakulást biztosító térfogata állandó nyomáson és hőmérsékleten, valamint adiabatikus folyamatoknál, katalitikus reakciók csőreaktorban.

## 9. Sztochasztikus kinetikai modellek

Makroszkopikus, mikroszkopikus és mezoszkopikus elméletek, példák sztochasztikus kinetikai reakciókra (molekuláris biokémia, szelekció, sugárkémia, bolondóra-reakció, Soai-reakció), CDS modell és alapfeltételei.

## 10. Sztochasztikus kinetikai alkalmazások

Általános formális mechanizmus, infinitézimális reakcióvalószínűség, az alapegyenlet, Kurtz tétele, stacionárius valószínűségek, várható érték és szórás, a generátorfüggvény, sztochasztikus szimulációk, Gillespie-algoritmus, sztochasztikus térképezés és példák (elsősorú reakciórendszerek, racemizáció, enzimkinetika, királis autokatalízis, erősítés).

## A felkészüléshez ajánlott irodalmak:

1. P. W. Atkins: Fizikai kémia I-III. (Tankönyvkiadó, Budapest, 2002)
2. Póta György (szerkesztő): [Modern fizikai kémia](#) (Digitális Tankönyvtár, 2013)
3. Zrínyi Miklós: A fizikai kémia alapjai I-III. (Műszaki Könyvkiadó, 2006)
4. Zrínyi Miklós: [A fizikai kémia alapjai](#) (Simmelweis Kiadó, Budapest, 2015)
5. Keszei Ernő: [Bevezetés a kémiai termodinamikába](#) (ELTE egyetemi jegyzet)
6. Baranyai András, Schiller Róbert: [Statisztikus mechanika vegyészeknek](#) (Akadémiai Kiadó, Budapest, 2003)
7. Bazsa György (szerkesztő): Nemlineáris dinamika és egzotikus kinetikai jelenségek kémiai rendszerekben (egyetemi jegyzet, Debrecen-Budapest-Gödöllő, 1992)
8. Péter Érdi, Gábor Lente: [Stochastic Chemical Kinetics](#) (Springer, 2014)