

# Fizikai Kémia 3 tematika

## Ajánlott tananyag:

<http://turilaszlo.web.elte.hu/teaching/physchem1/lecture/KeszeiTankonyv.pdf>

## Termodinamika

Termodinamikai rendszer, jellemzői, extenzív vs. intenzív mennyiségek; a termodinamika főtételei, axiómái, definíciók, összehasonlítás. Belső energia, entrópia, fundamentális egyenletek, differenciális fundamentális egyenletek; egyensúly feltételeinek kifejezése extenzív és intenzív mennyiségekkel. Fundamentális egyenletek - állapotegyenletek. Ideális gáz fundamentális egyenlete. Termodinamikai egyensúly fogalmának kiterjesztése állandó  $S$ ,  $p$ , állandó  $T$ ,  $V$ , állandó  $T$ ,  $p$  mellett. Termodinamikai potenciálfüggvények. Maxwell összefüggések. Mérhető termodinamikai mennyiségek, hőkapacitás, hőtágulási együttható, izoterm kompresszibilitás. Termodinamikai átalakítások. Termodinamikai folyamatok, kvázistacionárius folyamatok, reverzibilis folyamatok, irreverzibilis folyamatok. Termodinamikai gépek. Egyéb munka a termodinamikában. Elegyek. Termodinamikai függvények az összetétel függvényében. Parciális moláris mennyiségek. Kémiai potenciál. Ideális gázelegyek, ideális elegyek. Ideális elegyek elegyedési mennyiségei. A kémiai potenciál és a referenciaállapotok, standard kémiai potenciál. Abszolút aktivitás, relatív aktivitás. Reális gázelegyek, fugacitás, fugacitási tényező. Reális elegyek kémiai potenciálja, relatív aktivitása. Reális elegyek elegyedési mennyiségei. Kémiai reakciók egyensúlyának termodinamikája. Az egyensúlyi állandó különböző alakjai. A kémiai reakció egyensúlyi állandójának hőmérséklet- és nyomásfüggése.

## Statisztikus termodinamika

Statisztikus termodinamika. Sokaság fogalma. Különböző típusú sokaságok. Átlagolás sokaságokon. Várható érték fogalma. A mikrokanonikus sokaság. Valószínűségi sűrűségfüggvény, mikroállapotok száma. Fundamentális egyenlet. A mikrokanonikus sokaság. Az Einstein kristály és kétállapotú molekulák példája. A kanonikus sokaság. Valószínűségi sűrűségfüggvény és az állapotösszeg. A kanonikus sokaság. Fundamentális egyenlet és termodinamikai mennyiségek kifejezése. Az entrópia statisztikus termodinamikai interpretációja. Kanonikus sokaság. Molekuláris állapotösszeg bevezetése. Az Einstein kristály és a kétállapotú molekulák példája. Az ideális gázok statisztikus termodinamikai leírása. A molekuláris állapotösszeg felbontása, az egyes mozgási módusokhoz tartozó állapotösszegek kifejezése. Az ekvipartíció tétele. Válogatott alkalmazások: a Maxwell-Boltzmann sebességeloszlás, a hőkapacitások hőmérsékletfüggése, a kémiai reakciók egyensúlyi állandójának statisztikus termodinamikai kifejezése.