

Fizikai Kémia záróvizsga szabályok és tételsor

Minden vizsgázó három tételt kap:

- egyet az I. blokk kérdései közül
- egyet a II. blokk vizsgázó által választott témájából
- egyet a II. blokk nem választott témái közül.

A II. blokk négy témájából célszerű egy olyant választani, amely kapcsolódik a vizsgázó által MSc alatt felvett fizikai kémia tárgyakhoz, illetve szakdolgozat témájához.

I. Blokk tételei a „Molekulák elektronszerkezete” témakörből

- **A kvantummechanika alapelvei:** A legfontosabb fogalmak értelmezése a posztulátumok alapján (állapot, mérés, stacionárius állapot), ezek bemutatása a dobozba zárt részecske példáján. Impulzusmomentum kvantummechanikai értelmezése.

- **Atomok elektronszerkezete:** Hidrogénatom Schrödinger-egyenletének megoldásai, ezek értelmezése (energia, pályák, sűrűség); A többelektromos atomok elektronszerkezetének kvantummechanikai tárgyalása a Független Elektron Modell keretében, az állapotok jellemzése, valamint a szokásos jelölésük értelmezése; Atomok mágneses térben.

- **Molekulák szimmetriája, a csoportelmélet alapjai:** molekulák térbeli szimmetriája, a csoportelmélet alapfogalmai, karaktertábla, reprezentáció fogalma, szimmetria szerepe a kvantummechanikában.

- **Molekulák elektronszerkezete:** Schrödinger-egyenlet, Born-Oppenheimer közelítés, molekulapályák bevezetése. Kéttomos molekulák, vízmolekula. Egyszerű MO leírások: Hückel-elmélet, átmentifém-komplexek elektronszerkezete.

- **A számítási kémia (computational chemistry) alapvető módszerei:** Hartree-Fock módszer, DFT módszerek, elektronkorrelációs módszerek elvi alapjai. Egyelektron-bázisok.

- **Kvantumkémiai módszerek alkalmazásai:** geometriaoptimalás, rezgési spektrumok számítása, termokémiai adatok számítása.

II. blokk témái és tételei

Termodinamika

-**A klasszikus termodinamika főtételei.** A termodinamikai egyensúly feltétele összetett rendszerekben. S , U (vagy E), H , A (vagy F) és a G termodinamikai potenciál függvények

-**Egy és több komponensű rendszerek egyensúlya.** Ideális és reális elegyek. Fázisegyensúlyok és fázisdiagramok. Kémiai egyensúlyok, homogén és heterogén reakciók egyensúlyi állandója.

Kinetika

-**Kémiai reakciók molekuláris elméletei:** az ütközési elmélet és az átmeneti állapot-elmélet. Összetett reakciók sebességi egyenletei és mechanizmusuk.

-**Transzportfolyamatok.** Hővezetés, diffúzió, viszkozitás, elektromos vezetés.

Elektrokémia

-**Elektródok, az elektrokémiai cella.** Celladiagramok. Az elektromotoros erő mérése. A cellareakció és az elektródreakció potenciálja, elektródreakciók standard potenciálja. A Nernst-egyenlet. Pourbaix-diagramok. Elektrokémiai áramforrások. A pH definíciója és mérése.

-**Elektródreakciók kinetikája. Elektrolízis.** Az elektródfolyamatok főbb lépései. Az elektródreakció (töltésátlépés) sebességének elektródpotenciál- és koncentrációfüggése az Erdey-Grúz–Volmer-egyenlet szerint. Elektrolitoldatok elektromos vezetése, annak kísérleti meghatározása. A Kohlrausch-törvény. -

Kolloidkémia

-**A határfelületi termodinamika alapjai.** Határfelületi többletenergia, felületi feszültség, nyomásegyensúly görbültfelülettel elválasztott fázisok között. A Gibbs adszorpciós egyenlet és alkalmazásai

- **Kolloid rendszerek** Asszociációs kolloidok, micellaképződés. Makromolekulás kolloidok. Polimeroldatok. Diszperziós kolloidok. A kolloidstabilitás klasszikus (DLVO) elmélete.