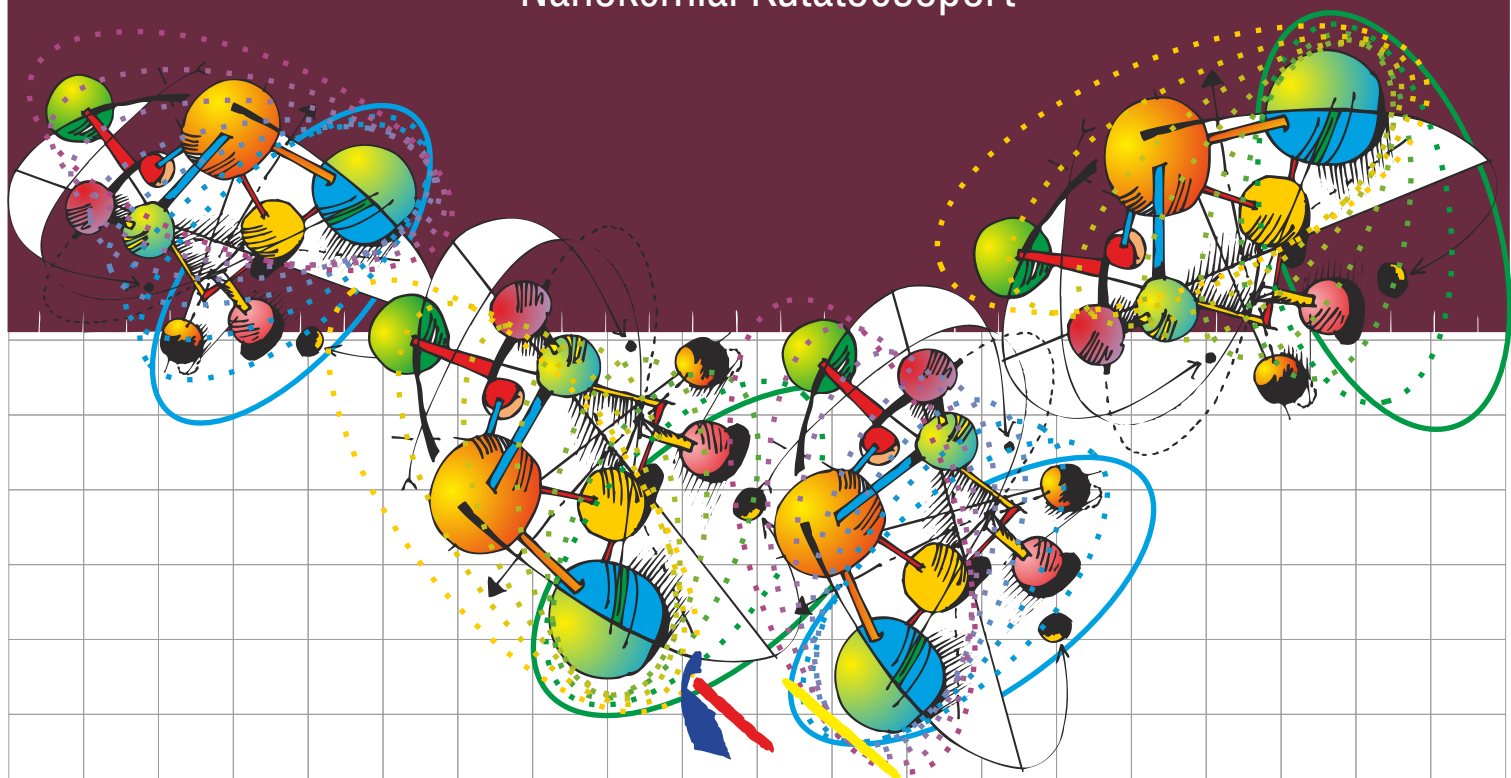


A FIZIKAI KÉMIA ALAPJAI

Zrínyi Miklós

egyetemi tanár, az MTA rendes tagja
Semmelweis Egyetem ÁOK, Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet,
Nanokémiai Kutatócsoport



A FIZIKAI KÉMIA ALAPJAI

Zrínyi Miklós

egyetemi tanár, az MTA rendes tagja
Semmelweis Egyetem ÁOK, Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet, Nanokémiai Kutatócsoport

H-1089 Budapest, Nagyvárad tér 4,
E-mail: mikloszrinyi@gmail.com





A kiadvány a Magyar Tudományos Akadémia támogatásával készült.

© *Dr. Zrínyi Miklós* Budapest, 2015

© *Semmelweis Kiadó* Budapest, 2015

ISBN 978-963-331-367-1

A könyv és adathordozó (legyen az e-könyv, CD vagy egyéb digitális megjelenés) szerzői jogi oltalom és kizárólagos kiadói felhasználási jog alatt áll. Bármely részének vagy egészének mindennemű többszörözése kizárólag a szerző és a kiadó előzetes írásbeli engedélye alapján jogszerű.



Borítóterv: Táncos László

Felelős kiadó: dr. Táncos László, igazgató

SKD: 500



***Mihail Vasziljevics Lomonoszov (1711-1765) orosz udvari költő és tudós,
a fizikai kémia megalapítója***

Lomonoszov polihisztor volt. Azon kívül, hogy verseket és drámákat írt, a természettudományok csaknem minden ágát művelte. A fizikai, kémiai, geológiai, geofizikai és asztrológiai vizsgálatai egyaránt úttörő jelentőségűek. A fizikai kémia szerepét abban látta, hogy az összetett testekben végbemenő folyamatokat a fizika tételeivel és kísérleteivel értelmezze. Lomonoszov legjelentősebb tudományos felismerése az anyag és mozgás megmaradása törvényének megfogalmazása és kísérleti igazolása. Bebizonyította, hogy kémiai folyamatokban a tömeg nem változik és felismerte, hogy a tömegmegmaradás és a mozgásmegmaradás törvénye szoros kapcsolatban állnak egymással. Hipotetikus úton eljutott az energia megmaradásának törvényéig, de ezt kísérleti úton bizonyítani még nem tudja. Nevéhez fűződik a flogiszton elmélet cáfolata, valamint a kalorimetria bevezetése. Életcélja hazája tudományos életének felpozícióba hozása volt. 1755-ben megalapítja a moszkvai – ma róla elnevezett – egyetemet.

BEVEZETÉS

Az alkotó ember alapvető feladata, hogy akaratának alávetett természeti folyamatokkal, valamint a felhasználói igényeket egyre jobban kielégítő új anyagokkal és eszközökkel járuljon hozzá a tudomány és a technika fejlődésén keresztül az életminőség javításához. A technikai és technológiai folyamatok olyan célszerűen működtetett természeti folyamatok, amelyeknek a működtetését a természeti törvények, működési igényét pedig a műszaki berendezések biztosítják. Nem változtathatjuk meg a természeti törvényeket, csak azokat a kereteket, amelyekben belül e törvények érvényesülnek. A kémikus számára a kimeríthetetlenül változatos anyag jelenti ezt a lehetőséget. Számára alapvető fontosságú a molekuláris szerkezet és a tulajdonságok közötti kapcsolat felderítése és megértése. Ennek ismeretében ugyanis adott célra tudatosan tervezett anyagot állíthat elő. A gyógyszervegyész például az élettani folyamatok befolyásolása érdekében kísérletezik újabb és újabb anyagokkal. A fiziko-kémikust főként a molekuláris szerkezet és a fizikai tulajdonságok között meglévő kapcsolat felderítése foglalkoztatja. Ezen túl pedig a fizikai és kémiai folyamatok tudatos befolyásolásával új tulajdonságú anyagok előállításának, valamint gazdaságosabb és környezetkímélő technológiák kifejlesztésének alapjait teremti meg.

Vegyí anyagaink gyártása, illetve felhasználása szinte elképzelhetetlen azok fizikai sajátságainak ismerete nélkül. Az elemek és a vegyületek sűrűsége, fagyáspontja, fajlagos hőkapacitása, gőznyomása, oldhatósága és még sok más tulajdonsága olyan adathalmaz, amely rendszerbe foglalva jelentősen növeli áttekintőképességünket, és biztosabb alapot ad a molekuláris szerkezet és a tulajdonságok közötti kapcsolat mélyebb megértéséhez. A fizikai kémia a termodinamika tudománya segítségével végzi el a rendszerezést és keresi meg a különféle sajátságok között a kapcsolatokat. Az életfolyamatok megértése sem képzelhető el a fizikai kémia törvényeinek ismerete nélkül.

Az anyagi sajátságokat tudományágak szerint csoportosíthatjuk, beszélünk mechanikai, hőtani, elektromos, határfelületi és mágneses tulajdonságokról. A fizikai kémia ezeket szoros egységbe vonja, és mindnyájukra érvényes törvényeket fogalmaz meg. Többek között lehetővé teszi, hogy a reagáló anyagok hőtani sajátságaiból azok vegyülési hajlamára következtessünk, a mechanikai sajátságokból az olvadáspont és a nyomás összefüggését számítsuk ki, és az elektromos feszültség mérését analitikai célokra használjuk fel.

A fizikai kémia az anyag belső felépítésével és az ettől függő molekuláris kölcsönhatásokkal, valamint az anyagi rendszerben végbemenő változások befolyásolásának legáltalánosabb törvényszerűségeivel foglalkozik. Nem tesz különbséget aszerint, hogy a vizsgált rendszer az élettelen természet, vagy az élővilág része. Elméleti eszköztárát három önálló tudományág, a **statisztikus fizika** a **fenomenologikus termodinamika**, valamint az **anyagszerkezet** képezi. Kísérleti módszerei rendkívül változatosak, az egyszerű mechanikai mérésektől a bonyolult és igen drága nukleáris technikáig terjedhet.

A fizikai kémia fejlődése - a tárgy jellegénél fogva - szoros összefüggésben van a fizika és a kémia fejlődésével. A fizika fejlődése olyan új elméleti és kísérleti módszereket adhat a kémikusnak, amelyeknek kémiai jelenségekre való alkalmazása jelentősen bővítheti tudásunk. Újonnan előállított anyagok néha meglepő tulajdonságai pedig új feladatokat állítanak a fiziko-kémikusok elé. A számítástechnika utóbbi évtizedben mutatott rohamos fejlődése is új lehetőségeket nyitott számos területen.

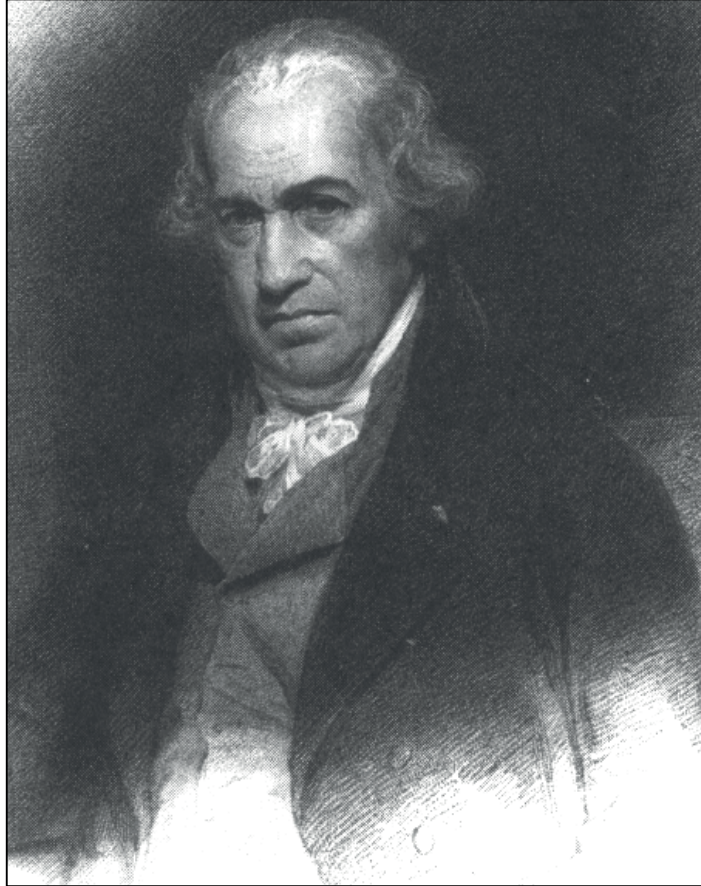
A fizikai kémia nehéz tudomány. Két évtizedre visszanyúló tapasztalataim azt mutatják, hogy a nehézség egyik fő oka a szokatlan, nem könnyen érthető, valamint a már megtanultakhoz nehezen köthető fogalmi apparátusában van. Olyan fogalmakkal, mint pl. az entrópia, szabadenergia, kémiai potenciál korábbi tanulmányaink során nem találkoztunk. Ezek jelentése, elvontságuk és szemléltetésük nehézsége miatt igen gyakran homályban marad. A másik nehézség a tárgy interdiszciplináris jellegéből adódik. A fizikai kémia vegyészeti és fizikai

ismereteken túl jártasságot követel a matematikában és a számítástechnikában is. Mindezen nehézségek csökkentése érdekében igyekeztem szemléletes képet adni és törekedtem a lehető legegyszerűbb matematikai leírásra. Ennek érdekében nem riadtam vissza az ismétlésektől sem, attól, hogy ugyanarról a fogalomról akár több helyen, többféleképpen is írjak. Fontos szempont volt számomra, hogy a könyvben lévő ismeretek könnyen tanulhatók legyenek. Ebben található ugyanis a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki Kara fizikai kémia tananyagának jelentős része. Leendő vegyészmérnökök, biológusmérnökök és környezetmérnökök tanulnak ebből. A fogalmakat fokozatosan építjük fel, az egyszerűtől a bonyolultabbak felé haladva. Ez megkívánja, hogy fejezetről fejezetre tanuljunk, de azt is, hogy átértékeljük az előzőleg tanultak egy részét. Ami igaz volt több korlátozást tartalmazó idealizált esetre, az nem biztos, hogy igaz marad úgy általában. Ezzel a módszerrel követjük a tudomány fejlődését. Új eredmények birtokában a régi fogalmakat fokozatosan átértékeljük, vagy újakkal helyettesítjük. Annak megértéséhez, hogy milyen okok és nehézségek kényszerítenek fontos fogalmak megváltoztatására, ismernünk kell nemcsak az eredeti gondolatokat, hanem a belőlük levonható következtetéseket is. Szeretnénk odáig eljutni, hogy fizikai kémiai tudásunk birtokában több esemény bekövetkezését előre megjósolhassuk, és kísérletekkel ellenőrizhessük, hogy ezek a jóslatok - s így a kezdeti feltételezések - beigazolódnak-e. Ennek érdekében, hogy mennyiségi végkövetkeztetéseket vonhassunk le, a matematika nyelvét kell használnunk. A matematika, mint gondolkodási és következtetési eszköz nélkülözhetetlen.

A fizikai kémiára jellemző, hogy nagyon sok esetben használ leegyszerűsített modelleket és közelítő egyenleteket. A mérnöki munka maximális pontosságra való törekvése ellentmondásban van ezzel a „lezserséggel”. Akkor miért csináljuk? Ennek oka a következő. A modellek, amelyek általában igen leegyszerűsítve jellemzik a vizsgált rendszert, vagy jelenséget arra alkalmasak, hogy megértsük a legfontosabb ok – okozati összefüggéseket. A modell a bonyolult rendszer egyszerűsített, idealizált mása, amely matematikailag szabatos írja le a vizsgált rendszer bizonyos (nem összes) tulajdonságait. A modell azonban sohasem azonosítható a vizsgált rendszerrel, mert a modell a lényegesnek vélt jelenségeket kiemeli, a lényegtelennek gondolt, vagy észre sem vett jelenségeket pedig elhanyagolja. Csak a viszonylag egyszerű modellek számíthatók egzaktul. A bonyolult rendszerek részletesebb leírása egyre több közelítést igényel. A közelítő számításokkal olyan zárt alakú összefüggésekhez juthatunk, amelyeknek segítségével a mennyiségek közti kapcsolat könnyebben áttekinthetővé válik. Így ezzel a jelenségek mozgatóerőinek jobb megértéséhez járulunk hozzá. A konkrét számítások elvégzéséhez nem szükséges a közelítő formulák használata, mivel a számítástechnika és a numerikus módszerek már szerény ismerte is lehetővé teszi számunkra a pontosabb, elhanyagolásoktól mentes eredmények elérését.

A természettudományok fejlődését két tényező mozdíthatja elő, az egyik: az új ismeretek felfedezése, a másik pedig ezen ismeretek általános vonatkozásainak felismerése. Az új ismeretek nagy lendületet adhatnak a tudomány fejlődésének, de az igazi előbbrejutás nem magában az új tények megismerésében, hanem azok általánosabb érvényű megállapításában rejlik. Ez vonatkozik a fizikai kémiára is és ez az általánosításra való törekvés, áthatja e könyv (szakkönyv és tankönyv) egészét.

Köszönetemet fejezem ki a Magyar Tudományos Akadémiának az elektronikus könyv megjelentetéséhez nyújtott anyagi támogatásáért, valamint a Semmelweis Kiadónak az e-könyv megjelentetéséért. Végül, de nem utolsó sorban diákjaimat illeti a legnagyobb köszönet, akiknek érdeklődő figyelme adta az ösztönzést e nagy munka elkezdésére és folytatására.



James Watt (1736-1819) skót feltaláló, a gőzgép tökéletesítője és szabadalmaztatója

A gőz energiájának megnyilvánulásait már az ókori görögök is felismerték. Az alexandriai Héron készítette el az első gőzzel működtetett szerkezetet. Az emberi munka helyettesítésére alkalmas első gőzgép Newcomen nevéhez fűződik. Ezt tökéletesítette James Watt 1765-ben. A gőzgépek széleskörű elterjedésével kezdetét vette az ipari forradalom. A gőzgépnek Watt adta a mai formáját és felkeltette az igényt a hatásfok tudományos igényű vizsgálatára. Ezzel jelentős ösztönzést adott a termodinamika alapjainak lerakásához.