**Charakteristika kurzu C4660 Základy fyzikální chemie, JS 2016/17**

**Vyučující: doc. Markéta Munzarová, Dr. Dominik Heger, doc. Jan Hrbáč**

**Cíle:**

**A.** Porozumění konceptům s ohledem na dříve, souběžně a později probíhající kurzy.

**B.** Postupné budování abstrakce.

**C.** Zběhlost v praktických výpočtech se silným důrazem na základy a aplikace termodynamiky. Proto cvičení u tabule se 3 testy během semestru.

Okruhy:

1. **Struktura. 3 přednášky**, 2 MM + 1 DH.
2. **Termodynamika. 7 přednášek** 6 MM + 1 DH
3. **Kinetika a rovnovážná elektrochemie, 3 přednášky.** 2 DH + 1 JH.

Témata odsunutá do podzimního semestru:

Reálné plyny. Reálné roztoky. Transportní vlastnosti. Aplikace standardních potenciálů. Statistická termodynamika. Povrchy

**Zkouška:** Písemná, nikoli elektronická, v délce trvání 2 hodiny. Všechna zadání ze semináře budou zpřístupněna i těm, kteří nemají seminář zapsán, aby byly ospravedlněny výpočetní úlohy. Literatura: Atkins (český překlad0.

**Osnova :**

1. **Atomové orbitaly.**

Planckův vztah, vlnový charakter částic, vlnové funkce pro příklad částice na kruhu. Hledání vlnových funkcí a energií, pojem operátoru jako prostředku k nalezení obojího. Fyzikální přijatelnost vlnových funkcí a důsledek: kvantování energie. Rozložení pravděpodobnosti. Atomové orbitaly: fyzikální význam kvantových čísel a význam různých způsobů znázorňování. Energie AO, efektivní náboj, Slaterova pravidla.

1. **Molekulové orbitaly.**

Vznik chemické vazby na příkladu molekulového iontu H2+. Molekulové orbitaly jako lineární kombinace atomových, příspěvky k energii, vazebný a protivazebný MO z hlediska energie a elektronové hustoty. Elektronová struktura dvouatomových molekul: porovnání popisu molekulovými orbitaly a pomocí hybridizace. Vztah k experimentu.

1. **Interakce elektromagnetického záření s molekulami.**

Vnímání barev, barvy komplementární, aditivní a subtraktivní. Obecný úvod do spektroskopie: dělení spektroskopií, vlastnosti světla, podmínky pozorování spektrálních přechodů. Záření černého tělesa, Boltzmanovo rozdělení energií, Einstienovy koeficienty přechodů. Spektra a jejich charakteristiky: čarová, pásová. Zavedení pojmů transmitance, absorptance, reflektance, absorbance. Přehled základů některých spektrálních metod: rotační, vibrační, elektronové a difrakční spektroskopie.

1. **Ideální plyn a první věta termodynamiky**

Tlak (*p*), teplota (*T*), nultá věta termodynamiky. Boylův zákon, Charlesův zákon a Avogadrův princip. Stavová rovnice ideálního plynu. Teplo(*q*),vnitřní energie(*U*),výpočet pro jednoatomový plyn. Stavové a nestavové veličiny. První věta termodynamiky. Expanzní práce, pojem přírůstku (diferenciálu) dráhy, objemu (*V*) a práce (*W*), geometrický význam určitého integrálu. Vratná změna.

1. **Termochemie, enthalpie a entropie.**

Předávání tepla: kalorimetrie, tepelná kapacita a molární tepelná kapacita. Enthalpie (*H*) a její změna, vztah ke změně *U*. Změna *H* s *T*. Standardní změny enthalpie, Hessův zákon. Standardní tvorné enthalpie, Born-Haberův cyklus. Pojem disperze energie, entropie (*S*) jako reverzibilní změna tepla při dané teplotě.

1. **Druhá a třetí věta termodynamiky, zaměření na systém.**

Výpočet změny entropie pro izotermální expanzi ideálního plynu, druhá věta termodynamiky. Boltzmannův vztah pro entropii, Clausiova nerovnost. Třetí věta termodynamiky. Výhodné termodynamické funkce: Helmholtzova (*A*) a Gibbsova (*G*) energie. Přírůstky *G, A* pro konstatní *T.* Kritéria spontánní změny pro konstantní *T,V* a konstantní *T,p.* Maximální dostupná práce a maximální neexpanzní práce.

1. **Reakční Gibbsova energie.**

Výpočet změny *G* doprovázející reakci (*G*). Definice a výpočet standardní reakční Gibbsovy energie (*G*0) a standardní Gibbsovy energie tvorby sloučeniny. Minimum *G*, rozsah reakce *ξ*. Posouzení průběhu funkce jedné proměnné pomocí směrnice. Spontaneita chemických reakcí. Reakční Gibbsova energie *rG*, reakce exergonické a endergonické. Popis rovnováhy pro přeměnu ideálního plynu a obecnou reakci.

1. **Fázové přechody čistých látek. Jednoduché směsi I.** Pojem fáze, fázový diagram čisté látky (H2O), Gibbsovo fázové pravidlo. Popis složení směsi v TD: Parciální molární objemy složek ve směsi. Chemické potenciály kapalin. Ideální roztok na příkladu směsi benzen-toluen, Raoultův zákon.
2. **Jednoduché směsi II.** Fázový diagram dvousložkového systému. Diagramy s tlakem par. Diagramy teplota-složení. Destilace směsí, azeotropy. Fázové diagramy rovnováhy kapalina-kapalina. Aktivity: rozpouštědlo, rozpuštěná látka, regulární roztok, ionty v roztoku.
3. **Chemická rovnováha** Reakční kvocient (*Q*). Závislost reakční Gibbsovy energie na reakčním kvocientu, termodynamická rovnovážná konstanta (*K*). Zápis a výpočet *K*. Ovlivnění rovnováhy změnou tlaku aLe Chatelierův princip. Ovlivnění exotermních a endotermních reakcí teplotou. Van’t Hoffova rovnice a měření reakční enthalpie. Hodnota *K* při různých teplotách.
4. **Rychlosti chemických reakcí I.**

Empirická chemická kinetika. Monitorování změny tlaku pro rozklad N2O5. Definice reakční rychlosti jako směrnice tečny ke křivce závislosti koncentrace na čase. Rychlosti spotřeby reaktantů a tvorby produktů. Rychlostní zákon a konstanta, reakční řád. Určení rychlostního zákona metodou počátečních rychlostí. Teplotní závislost reakční rychlosti: Arrheniova rovnice.

1. **Rychlosti chemických reakcí II.**

Jednotlivé typy reakcí. Reakce prvního řádu. Poločas a střední doba života. Přibližování koncentrací jejich rovnovážným hodnotám. Rychlostní zákon reakce druhého řádu. Následné reakce. změna koncentrace s časem, aproximace stacionárního stavu, rychlost určující krok, kineticky a termodynamicky řízené reakce. Řetězová reakce. Kinetika fluorescence.

1. **Rovnovážná elektrochemie.**

Iontová síla, Debye-Hückelův zákon. Poloreakce, typy elektrod. Rozepsání reakce, zápis reakčního kvocientu poloreakcí. Druhy a zápis článků. Elektromotorická síla *E* a vztah k *rG*. Nernstova rovnice, standardní článkový potenciál *E*0. Články v rovnováze: výpočet *K* z *E*0 a výpočet *E*0 pomocí dvou jiných standardních potenciálů.