

C4020 POKROČILÁ FYZIKÁLNÍ CHEMIE

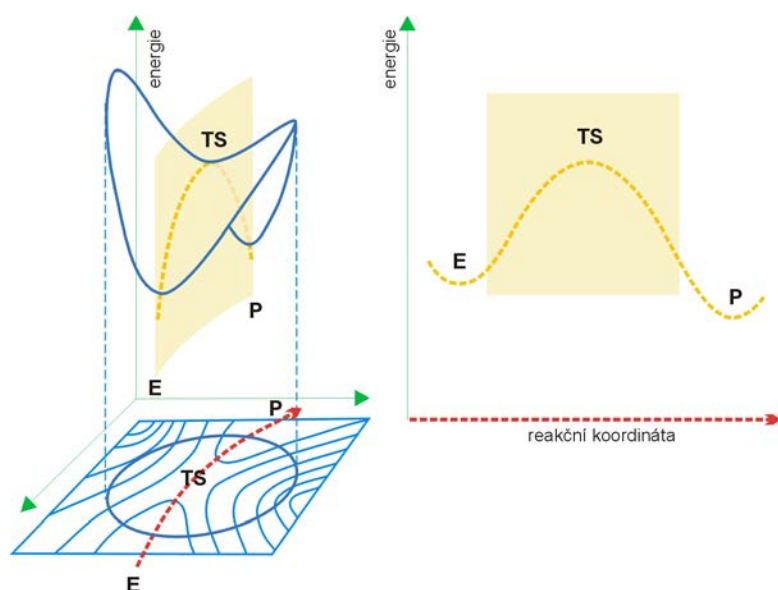
(2 4|2 zk|k Kubáček)
syllabus přednášky

Přednášku doprovází **C4040 Pokročilá fyzikální chemie - seminář**.
Doporučuje se, aby seminář C4040 byl zapsán současně s předmětem C4020.

Anotace:

V druhém modulu fyzikální chemie jsou dále rozvíjeny koncepty teoretické chemie s důrazem na vztah mezi mikroskopickou strukturou a makroskopickými vlastnostmi látek. Jsou zahrnuty kapitoly z kvantové chemie, chemické statistiky, termodynamiky, elektrochemie a kinetiky. Předmět C4020, společně s předmětem C4660 Základy fyzikální chemií, na který navazuje, má za cíl obsáhnout poznání fyzikální chemie v rozsahu bakalářského studijního programu chemického zaměření. Podmínkou zápisu je absolvování C4660.

1. Variační metoda, prostá (HMO) a rozšířená (EHT) Hückelova metoda, Z-matrice, Mullikenova populační analýza. Metoda selfkonzistentního pole. Metody funkcionálu hustoty.
2. Elektronové, vibrační, rotační a translační stavy molekul. Lineární harmonický oscilátor, energie nulového bodu, vibrace dinukleární molekuly, tuhý rotor.
3. Kanonický soubor a kanonická partiční funkce, statisticko-termodynamické vyjádření vnitřní energie, entropie a Gibbsovy funkce, rovnovážná konstanta.
4. Reálné plyny, stavové rovnice, fugacita, fugacitní koeficient a jeho závislost na tlaku, kritický stav, princip korespondujících stavů.
5. Termodynamické závislosti, teplotní závislost vnitřní energie a entalpie, adiabatická expanze. Popis směsí, mísení, parciální molární veličiny, Gibbsova-Duhemova rovnice.
6. Koligativní vlastnosti, zvýšení bodu varu a snížení bodu tuhnutí, osmóza. Fázová rovnováha v dvousložkových systémech, azeotropy, soustavy s chemickou reakcí.
7. Aktivity iontů, Debyeova-Hückelova teorie, iontová atmosféra. Termodynamika elektrochemických článků, závislost elektromotorické síly na teplotě.
8. Kinetická teorie ideálního plynu, Maxwellovo-Boltzmannovo rozdělení rychlostí, rozdělení energií, mezimolekulové srážky, srážkový průřez, frekvence srážek, střední volná dráha.
9. Transportní vlastnosti, tok molekulární veličiny, statistické zpracování difúze (*random walk*), transport iontů, vodivost, Debyeova-Hückelova-Onsagerova teorie, iontové pohyblivosti.
10. Kinetika reakcí se složeným mechanismem, přiblížení stacionárního stavu, monomolekulární reakce, katalýza a autokatalýza, chemické oscilace.
11. Závislost reakční rychlosti na teplotě. Teorie tranzitního stavu, srážková teorie, PES a reakční koordináta, aktivovaný komplex a tranzitní stav, Eyringova rovnice.
12. Modely elektrodové dvojvrstvy, výměnná proudová hustota, Butlerova-Volmerova rovnice, přepětí a polarizace, koroze. Elektrická dvojvrstva.



Doporučená literatura:

- Peter Atkins, Julio de Paula: *Fyzikální chemie*, VŠCHT, Praha, 2013, ISBN 978-80-7080-830-6; KUK; http://vydavatelstvi.vscht.cz/katalog/uid_isbn-978-80-7080-830-6.
- Atkins P. W.: *Physical Chemistry*, Oxford University Press, Oxford, 6th (1998), 6th reprinted with corrections + CD (1999), 7th (2002), 8th (2006), 9th (2009) editions.
- Moore W. J.: *Fyzikální chemie*, SNTL, Praha 1979.
- Dvořák J., Koryta J.: *Elektrochemie*, Academia, Praha 1983.
- Ulický L., Kemp T. J.: *Comprehensive Dictionary of Physical Chemistry*, E. Horwood, New York 1992.

Everything you've learned in school as "obvious" becomes less and less obvious as you begin to study the universe.

For example, there are no solids in the universe.
There's not even a suggestion of a solid.
There are no absolute continuums.
There are no surfaces.
There are no straight lines.

Richard Buckminster Fuller (1895 - 1983)