

# C4020 POKROČILÁ FYZIKÁLNÍ CHEMIE

## témata k ukončení

1. Variační princip a metoda.
2. Hückelova metoda (HMO).
3. ☺ Rozšířená Hückelova metoda (EHT).
4. ⚡ Geometrie molekuly, Z-matice.
5. Mullikenova populační analýza.
6. Metoda selfkonzistentního pole.
7. Metody funkcionálu hustoty (DF).
8. Lineární harmonický oscilátor.
9. Energie nulového bodu.
10. Vibrace dinukleární molekuly,
11. ☺ Tuhý rotor, rotace molekuly.
12. Kanonický soubor a kanonická partiční funkce.
13. Statistické vyjádření vnitřní energie  $id(g)$ .
14. Statistické vyjádření entropie  $id(g)$ .
15. Statistické vyjádření Gibbsovy funkce  $id(g)$ .
16. Statistické vyjádření rovnovážné konstanty  $v id(g)$ .
17. ⚡ Ideální a reálné plyny - vlastnosti a srovnání.
18. Kompresibilitní faktor, izotermy reálných plynů.
19. Van der Waalsova stavová rovnice.
20. Fugacita, fugacitní koeficient.
21. ☺ Fugacitní koeficient - závislost na tlaku.
22. ☺ Standardní stav reálného plynu.
23. Kritický stav, princip korespondujících stavů.
24. Teplotní závislost  $U$ , koeficient objemové roztažnosti.
25. ☺ Teplotní závislost  $H$ , koeficient stlačitelnosti.
26. ☺ Vratná adiabatická expanze ideálního plynu.
27. Termodynamika mísení plynů.
28. ⚡ Parciální molární veličiny.
29. ☺ Gibbsova-Duhemova rovnice.
30. Zvýšení bodu varu, ebullioskopie.
31. Snížení bodu tuhnutí, kryoskopie.
32. Osmóza a osmotický tlak, van't Hoffův limitní zákon.
33. ☺ Směsi tekavých kapalin - závislost tlaku na složení pro ideální roztok.
34. Destilace, fázový diagram tlak - složení.
35. Destilace, fázový diagram teplota - složení.
36. Azeotropy, fázový diagram teplota - složení.
37. Dvousložkové soustavy - fázové diagramy (l)-(l).
38. Dvousložkové soustavy - fázové diagramy (s)-(l).
39. ☺ Fázové diagramy (s)-(l) s chemickou reakcí.
40. Standardní stav a aktivity iontů v roztoku.
41. ⚡ Základní představy Debyeovy-Hückelovy teorie silných elektrolytů.
42. Iontová atmosféra, Debyeova šířka, iontová síla.
43. Debyeův-Hückelův limitní zákon, omezení platnosti.
44. Elektrochemické články, EMF a její měření, popis článků.
45. ⚡ Poločlánkové a celková článková reakce, Nernstova rovnice.
46. Spontánní reakce a rovnováha v galvanickém článku.
47. ⚡ Standardní EMF článku a rovnovážná konstanta.
48. ☺ Výpočet rovnovážné konstanty článkové reakce.
49. Teplotní závislost EMF, reakční  $G$ ,  $H$ , a  $S$ .
50. Kinetická teorie ideálního plynu, vyjádření tlaku.
51. ⚡ Maxwellovo-Boltzmannovo rozdělení molekulových rychlostí.
52. Střední, střední kvadratická a nejpravděpodobnější rychlost.
53. Frekvence srážek.
54. Střední volná dráha.
55. Transportní vlastnosti, tok, gradient.
56. ⚡ 2. Fickův zákon, lineární polonekonečná difúze.
57. ☺ Statistické zpracování difúze (*random walk*).
58. Transport iontů, vodivost roztoku elektrolytu a její měření.
59. Molární vodivost silného a slabého elektrolytu.
60. ⚡ Kohlrauschovy zákony, limitní molární vodivost.
61. Iontové pohyblivosti, vztah k vodivosti.
62. ☺ Převodová čísla, výpočet a měření.
63. Základní představy Debyeovy-Hückelovy-Onsagerovy teorie vodivosti.
64. Reakce 1. a 2. řádu, diferenciální a integrální rovnice, poločas.
65. Mechanismus reakce, molekularita a její vztah k řádu reakce.
66. Protisměrné reakce, kinetika 1. řádu.
67. ⚡ Následné reakce, kinetika 1. řádu, rychlost určující krok.
68. Bočné reakce, kinetika 1. řádu.
69. Bodensteinův princip, stacionární stav, reaktivní meziprodukty.
70. Katalytické a autokatalytické reakce.
71. ☺ Oscilační reakce, podmínky oscilací.
72. ⚡ Teplotní závislost rychlostní konstanty, Arrheniova rovnice.
73. Srážková teorie chemické kinetiky.
74. ⚡ Základní představy teorie aktivovaného komplexu.
75. ⚡ Reakční koordináta, tranzitní stav, aktivační energie.
76. ☺ Eyringova rovnice.
77. Termodynamika tvorby aktivovaného komplexu.
78. ☺ Strukturální modely elektrodové dvojvrstvy.
79. Rychlost reakce přenosu náboje, závislost na potenciálu.
80. Přepětí a polarizace.
81. Proudová hustota a výměnná proudová hustota.
82. ☺ Butlerova-Volmerova rovnice.
83. Koroze.
84. ☺ Elektrická dvojvrstva.



Označuje témata hodná prvořadého zájmu při studiu.



Označuje témata, nikoliv málo významná, či dokonce nezajímavá. Jde o témata spíše "nadstavbová", jejichž podrobnější znalost přesahuje možné požadavky k úspěšnému ukončení předmětu.