

C4020 Pokročilá fyzikální chemie, PS 2017/18

Seznam odpřednášených témat

Vyučující: Markéta Munzarová (MM), Dominik Heger (DH), Jan Hrbáč (JH)

Okruhy:

- I. **Pohyb částic a rychlost reakcí.** Kinetická teorie ideálního plynu a reálný plyn, transportní jevy, rychlost elementárních reakcí, složitější reakce.
- II. **Rovnováha a elektrochemie.** Jednosložkové stoustavy, termodynamika roztoků a dvousložkových soustav. Rovnovážná elektrochemie. Elektroodová dynamika.
- III. **Struktura.** Spektrální přechody, magnetická rezonance

Literatura: Peter Atkins (český překlad v KUK). **V knihovně zbývají desítky volných exemplářů!**

Osnova :

1. týden (20.9.), MM

Kinetická teorie ideálního plynu a reálný plyn.

Kinetická teorie ideálního plynu: Tlak a rychlosti molekul. Střední kvadratická rychlost molekul a její výpočet. Maxwellovo rozdělení rychlostí. Střední rychlost molekul a její výpočet. Odchyly od ideálního chování plynu: atrakce molekul a vliv jejich objemu. Kompresibilitní faktor. Van der Waalsova rovnice reálného plynu a kritické veličiny.

2. týden (27.9.), MM

Transportní vlastnosti ideálního plynu.

Přenos hmoty (difúze), tepla (tepelná vodivost), elektroického náboje (elektroická vodivost), a momentu hybnosti (viskozita). Pojem toku veličiny. Výpočet toku částic plochou. První Fickův zákon difúze. Difúzní koeficient. Druhý Fickův zákon difúze. Koeficient tepelné vodivosti a viskozity. Molární vodivost.

3. týden (4.10.), DH

Chemická kinetika a.

Praktické pohledy na kinetiku chemických reakcí. Průměrná a okamžitá rychlost chemické reakce. Rychlost vzniku konkrétní látky versus obecná rychlost chemické reakce. Zjištění kinetické rovnice a rychlostní konstanty – metoda počátečních rychlostí, izolační metoda. Technická provedení experimentů v různých časových škálách.

4. týden (11.10.), DH

Chemická kinetika b

Lindemannův mechanismus unimolekulárních reakcí. Enzymová kinetika (Mechanismus Michaelis-Mentenové), vynesení podle Lineweaver-Burka, číslo přeměny, K_M , konstanta specificity, kompetitivní a nekompetitivní inhibice.

5. týden (17.10.), DH/MM

Chemická kinetika b - dokončení a Termodynamika-fáze.

DH: Autokatalytické reakce, oscilující reakce. Řetězové reakce. Rozvětvené řetězové reakce (exploze). MM: Chemický potenciál a fázové přechody.

6. Týden (25.10), MM

Od fázových přechodů čisté látky k termodynamice směsí

7. Týden (1.11.), MM

Jednoduché směsi

8. Týden (8.11.), MM

Rovnovážná elektrochemie

9. Týden (15.11.), JH

Dynamická elektrochemie

10. týden (22.11.), MM

Vlastnosti atomových a molekulových orbitalů

11. týden (29.11.), DH

Struktura a elektronová spektra atomů

Hybnost, Moment setrvačnosti, Moment hybnosti. Nutnost kvantifikace rotačního pohybu v mikrosvětě. Vektorová interpretace orbitálního momentu hybnosti, jeho velikost a z-komponent ve vztahu k vedlejšímu a magnetickému kvantovému číslu. Atomová spektra pro atomární vodík (coby zástupce jednoelektronových atomů), Grotrianovy diagramy. Víceelektronové atomy – vektorový součet momentů hybnosti. Celkový orbitální moment hybnosti L , jeho kvantová čísla a povolené hodnoty. Stern-Gerlachův experiment. Celkový spinový moment hybnosti, spinové kvantové číslo S , magnetické spinové číslo – jejich vektorová interpretace. Atomové termy, jejich multiplicita a degenerace. Výběrová pravidla elektronových přechodů – zákon zachování momentu hybnosti. Rozštěpení hladin na stavy ve vnějším magnetickém poli – Zeemanův efekt.

12. týden (6.12.), DH

Struktura a elektronová spektra molekul

Born-Oppenheimerova aproximace, Vazba – rovnovážná disociační energie, nulbodová energie, důvod označení vazeb sigma, pi, delta. Molekulové orbitály a jejich symetrická označení (parita, vazebnost/proti-vazebnost, +/-). Pořadí zaplňování molekulových orbitalů. Elektronové přechody homonukleárních dvouatomových molekul. Celkové orbitální a spinové momenty hybnosti molekul. Molekulové termy.

Výběrová pravidla elektronových přechodů. Vibrační struktura elektronových přechodů. Jablonského diagram.

13. týden (13.12.), MM

Spiny v magnetickém poli.