**C4020 Pokročilá fyzikální chemie, PS 2017/18**

**Seznam odpřednášených témat**

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

**Okruhy:**

1. **Pohyb částic a rychlost reakcí.** Kinetická teorie ideálního plynu a reálný plyn, transportní jevy, rychlost elementárních reakcí, složitější reakce.
2. **Rovnováha a elektrochemie.** Jednosložkové stoustavy, termodynamika roztoků a dvousložkových soustav. Rovnovážná elektrochemie. Elektrodová dynamika.
3. **Struktura. S**pektrální 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. Odchylky od ideálního chování plynu: atrakce molekul a vliv jejich objemu. Kompresibilitní faktor. Van der Waalsova rovnice reálného plynu a kritické veličiny.

1. **týden (27.9.), MM**

**Transportní vlastnosti ideálního plynu.**

Přenos hmoty (difúze), tepla (tepelná vodivost), elektrockého náboje (elektrocká 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.

1. **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.

1. **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.

1. **Týden (25.10), MM**

**Od fázových přechodů čisté látky k termodynamice směsí**

1. **Týden (1.11.), MM**

**Jednoduché směsi**

1. **Týden (8.11.), MM**

**Rovnovážná elektrochemie**

1. **Týden (15.11.), JH**

**Dynamická elektrochemie**

1. **týden (22.11.), MM**

**Vlastnosti atomových a molekulových orbitalů**

1. **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), Grotriánovy 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.

1. **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 orbitaly 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.

1. **týden (13.12.), MM**

**Spiny v magnetickém poli.**