

## KFC/FC1 - Fyzikální chemie 1

- detailně později v kurzu FCh

- detailněji v jiné přednášce

- 0-2 = 1-4 přednáška

- 3-4 = 5-12 přednáška

### 0. Co je a k čemu je fyzikální chemie?

#### 1. Struktura hmoty

- Atom – jádro (stabilní, nestabilní, magnetický moment – **Jaderná chemie, NMR**), obal (elektronové stavy – kvantově-chemický model – **Kvantová chemie, IP, EA, el. negativita – AAS**)
- Molekula – chemická vazba (kovalentní vazba), plocha potenciální energie (**chemické přeměny**), elektronové, vibrační a rotační stavy (**molekulové spektroskopie**)
- Pevná látka – amorfní, krystalická (mřížka – **RTG-difrakce**), základní vlastnosti krystalických látek (**Úvod do pevných látek**)
- Soubory molekul (atomů) – skupenství (plyn, kapalina, pevná látka), nekovalentní interakce (**Nekovalentní interakce**), **FC2 –fázové přeměny**

#### 2. Absorpce el. mag. záření hmotou

- Planckova rovnice
- Absorpční a emisní spektra atomů, Rydbergův vztah
- Elektronová (UV/VIS) spektroskopie molekul, monomolekulární relaxační procesy (Jablonského diagram)
- Vibrační spektroskopie molekul (IČ a Raman)
- Rotační spektroskopie molekul (mikrovlnná spektroskopie)

#### 3. Termodynamika

- Základy statistické termodynamiky – rozdělení molekulových stavů, mikroskopický/atomistický vs. makroskopický/fenomenologický popis, mikrostav vs. makrostav a statistický výklad entropie, Maxwell-Boltzmannovo rozdělení, odvoditelnost klasické termodynamiky ze statistické termodynamiky (**Statistická termodynamika, Pokročilé kapitoly z Fyzikální chemie**)
- Rovnovážná termodynamika
  - Entropie vs. Energie, teplota, 0-tá věta termodynamiky
  - Termochemie, Kalorimetrie, Hessův zákon, teplo, práce, I. věta termodynamiky
  - Zobecněná práce (utajený var, **FC2 –fázové rozhraní, Laplace-Youngova rovnice**), intenzivní/extenzivní veličiny, stavové veličiny/okolní podmínky, stavová rovnice (pro plyn – kinetický model, ideální/reálný plyn)
  - Entropie ve fenomenologické termodynamice, III. termodynamický zákon
  - Termodynamické potenciály ( $U(S,V)$ ,  $H(S,P)$ ,  $G(T,P)$ ,  $F/A(T,V)$ ), spontánnost procesů, III. termodynamický zákon (reziduální entropie, teploty blízko 0 K), závislost  $dG$  na teplotě, rovnováha (**FC2 –fázové rovnováhy**)
  - Chemický potenciál, aktivita (**FC2 –Debye-Hückelova teorie**)

#### 4. Chemické přeměny

- Plocha potenciální energie, reakční koordináta, kinetické a termodynamické aspekty (**Chemická struktura**)
- Chemická rovnováha - podmínky chemické rovnováhy, rovnovážná konstanta ...
- Chemická kinetika – mikroskopický pohled, reakční koordináta, teorie tranzitního stavu, recrossing, tunnelling, Eyringova rovnice, fotochemické přeměny
- Fenomenologická kinetika – reakční rychlost, rychlostní konstanta, řád a molekularita reakce, kinetické rovnice 0., 1. a 2. řádu, poločas reakce, určování řádu reakce, složitější reakce (**FC2 –rovnice kinetiky n-tého řádu**)
- Katalýza – homogenní a heterogenní katalýza