

Výpočty z fyzikálnej chémie

Výberový predmet

I. ročník magisterského štúdia, letný semester, seminár 2 hod/týž.

Garant predmetu: prof. RNDr. Daniela Uhríková, CSc.

Sylabus:

1. **Úvod, látkové množstvo, mólová hmotnosť, koncentrácie.**
2. **Rádioaktivita.** Kinetika rádioaktívnej premeny, rozpadová konštanta, polčas rozpadu, aktivita.
3. **Vlastnosti molekúl, atómové spektrá, molekulové spektrá.** Optické a elektrické vlastnosti látok: mólová polarizácia a refrakcia, dipólový moment, polarizovateľnosť molekuly. Optické spektrá, vlnová dĺžka, vlnočet. Atómové spektrá – spektrum atómu vodíka, ionizačná energia. Vibračné molekulové spektrá, silová konštanta, redukovaná hmotnosť. NMR spektrá, rezonančná podmienka, chemický posun.
4. **Termodynamika – fázové rovnováhy, roztoky, rozdeľovacie rovnováhy.** Termodynamické funkcie, fázové prechody, fázová rovnováha, Gibbsovo fázové pravidlo. Jednozložkový systém, rovnováhy tuhá látka – kvapalina, kvapalina – para. Roztoky plynu v kvapaline, roztoky neobmedzene miešateľných kvapalín. Zriedené roztoky, koligatívne vlastnosti, osmotický tlak roztokov, izotonizácia. Rozdeľovacie rovnováhy, extrakcia.
5. **Termodynamika – chemické reakcie, reakčné rovnováhy.** Stechiometrická rovnica, stechiometrické koeficienty, štandardné reakčné termodynamické funkcie. Výpočty štandardnej reakčnej entalpie, reakčnej entropie, štandardnej reakčnej Gibbsovej energie. Vzťah rovnovážnej konštanty chemickej reakcie a Gibbsovej energie. Závislosť rovnovážnej konštanty od teploty.
6. **Elektrochémia – roztoky elektrolytov.** Elektrická vodivosť roztokov elektrolytov, merná a mólová vodivosť, iónové vodivosti. Slabý elektrolyt – vodivosť, disociačný stupeň a disociačná konštanta. Silný elektrolyt – iónová sila, stredný aktivitný koeficient. Súčin rozpustnosti málo rozpustnej soli, výpočty rozpustnosti. Disociácia slabých kyselín a zásad, výpočty pH roztokov slabých kyselín a zásad, tlmivých roztokov a ich príprava. Disociácia aminokyselín, izoelektrický bod.
7. **Elektrochémia – galvanické články, elektródy, potenciometria.** Elektromotorické napätie článku a elektródové potenciály, výpočty pH pri potenciometrických meraniach.
8. **Chemická kinetika.** Kinetika homogénnych reakcií 1. a 2. poriadku, reakčná rýchlosť, rýchlostná konštanta a polčas reakcie. Výpočty koncentrácií reaktantov a reakčných produktov z časových údajov pomocou kinetických rovníc 1. a 2. poriadku. Závislosť rýchlostnej konštanty od teploty, aktivačná energia reakcie.
9. **Povrchové javy, koloidika, sedimentácia, difúzia, membrány.** Adsorpčná rovnováha a parametre Langmuirevej adsorpčnej izotermy. Rýchlosť sedimentácie hrubej a koloidnej disperzie vplyvom gravitácie a centrifugovaním, sedimentačný koeficient. Hmotnosť makromolekúl zo sedimentačného a difúzneho koeficientu.