

## Fizikai kémia 2 reakciókinetikai tételek, kémia alapszak, 2011

1. A reakciókinetika története; a reakciósebesség definíciója, kifejezése  $\frac{dc}{dt}$ ,  $\frac{dn}{dt}$ ,  $\frac{dm}{dt}$  deriváltakkal
2. Potenciálfelületek reagáló részecskerendszerekben
3. Az átmeneti állapot elmélet
4. A sebességi együttható hőmérsékletfüggése és nyomásfüggése
5. Elemi reakciók definíciója, típusai. Elemi reakciók koncentráció–idő függvényei
6. Elsőrendű reakciók differenciálegyenlete, megoldása, annak diszkutálása
7. Másodrendű reakciók differenciálegyenlete, megoldásai, azok diszkutálása
8. Unimolekulás reakciók Lindemann- és RRKM-elmélete
9. Harmadrendű reakciók, előegyensúly. A mechanizmus diszkutálása
10. Egyensúlyra vezető reakciók kinetikája. A megoldásfüggvények diszkutálása
11. Párhuzamos reakciók kinetikája. A megoldásfüggvények diszkutálása
12. Sorozatos reakciók kinetikája. A megoldásfüggvények diszkutálása
13. Bonyolult mechanizmusok kvázistacionárius megoldása. Egy konkrét példa bemutatása
14. Láncreakciók, robbanások. A durranógáz hőmérséklet- és nyomásfüggő reakciói
15. Katalizátorok és inhibitorok. Sav-bázis katalízis
16. Heterogén folyamatok, heterogén katalízis
17. Kísérleti módszerek a reakciókinetikában különböző időtartományokban
18. Reakciókinetikai eredmények kiértékelésére használatos módszerek

## Elektrokémia tételek

1. Galváncellák. Celladiagram. Cellareakció. A galváncella elektromos potenciálkülönbsége. A cellareakció potenciálja ( $E_{\text{cell}}$ ) és standard potenciálja. Az elektromotoros erő. A formális potenciál. A cellareakció egyensúlyi állandója. A cellareakció potenciáljának függése a komponensek aktivitásától. A cellareakció szabadentalpia-változása, a cellareakció entalpia és entrópiaváltozása. Endoterm elemek.
2. Az elektrokémiai potenciál és tulajdonságai. Heterogén, két fázis közötti töltésátlépés nélküli reakció egyensúlya, az oldhatósági szorzat. Disszociációs egyensúly egy fázisban.
3. Potenciálkülönbség a fázishatáron, az  $E_{\text{cell}}$  mérhetőségének kérdése.  $E_{\text{cell}}$  levezetése a fázishatárok és a fázisokban kialakuló egyensúlyok figyelembevételével.
4. Az elektródreakció potenciálja, az elektródpotenciál. A hidrogénelektrod, a standard hidrogénelektrod. Ionok képződési potenciálja. A Nernst egyenlet.
5. A diffúziós potenciál (folyadékhatár potenciál). A diffúziós potenciál kiszámítása. A diffúziós potenciál csökkentésének lehetőségei.
6. Átviteles és átvitel nélküli koncentrációs elemek.
7. Az elektródok osztályozása. Elsőfajú és másodfajú elektródok. Redoxielektrodok, keverékelektrodok. Membránelektrodok. A Donnan-féle potenciál. Ionszelektív elektródok.
8. Az ionvezető fázis tulajdonságai. Az elektrolitok molekuláris állapota. Elektrolitok aktivitása. A közepes ionaktivitás. Ionok aktivitási együtthatója. Az elektroneutralitás tétele. Hidratáció, solvatáció. A Debye-Hückel elmélet.
9. A Born-féle hidratációs elmélet. Protolitikus egyensúlyok. A pH.
10. Transzportfolyamatok elektrolitokban. Diffúzió. Migráció. Prototrop vezetés. Elektronvezetés. Az áram elektrolitikus vezetése. Fajlagos vezetés, moláris fajlagos vezetés. A vezetés koncentráció függése. A Debye-Falkenhagen és a Wien effektus.
11. Az elektródfolyamatok kinetikája. Az elektródfolyamat részlépései. Az áramsűrűség és a reakciósebesség közötti összefüggés. Az áram és a potenciál kapcsolata egyszerű redoxireakciók esetén stacionárius körülmények között. A polarizációs görbe.
12. Az egyensúly kinetikai értelmezése. A csereáram. A reverzibilis és az irreverzibilis viselkedés értelmezése.
13. A töltésátlépési reakció sebességét megszabó tényezők. Az elektronátlépés kinetikai leírásának klasszikus (Erdey-Grúz és Volmer-féle) elmélete. Az átlépési tényező értelmezése az aktivált komplexum elmélete és potenciálisenergia-görbék ( $\Delta G$  – reakciókoordináta függvények) segítségével.
14. Az elektronátlépési reakció sebességét meghatározó tényezők elektródreakciók és oldatbeli elektroncsere-reakciók esetén. A Marcus-féle elmélet fő vonásai.
15. Az anyagtranszport hatása az elektródfolyamat kinetikájára. A Nernst-Planck egyenlet. A diffúzió, a migráció és a konvekció szerepe. A diffúziós áram, a diffúziós határáram. A diffúziós rétegvastagság fogalma.
16. Összetett elektródreakciók kinetikája. Többszörös elektronátlépés. Az adszorpció (kemisorpció, elektroszorpció) hatása a kinetikára. Sorozatos és párhuzamos töltésátlépés. A kapcsolt kémiai reakciók szerepe. Az elektrokatalízis.
17. Az elektrokémia gyakorlati kérdései. Az elektrolízis kivitelezésének főbb szempontjai. Az elektrokémiai ipar. Elektrokémiai áramforrások.
18. A korrózió elektrokémiai mechanizmusa. Fémek passzivitása. A korrózió elleni védelem elvi és gyakorlati szempontjai.