

## A Kémia Doktori Iskola "Reakciókinetika" című szigorlati főtárgyának tematikája

1. *Alapelvek és a kinetikai eredmények analízise:* Reakciórend, molekularitás, a reakciósebességi egyenletben szereplő állandók és együtthatók meghatározása. A kinetikai eredmények analízise: integrális és differenciális módszerek, izolációs eljárás, félidők módszere. A reakciósebesség hőmérsékletfüggése. A reakciókinetika és termodinamika kapcsolata.
2. *Kísérleti módszerek:* Klasszikus módszerek. A gyorsáramlásos módszer. Folyamatos és megállított áramlásos folyadékreaktorok. Villanófény-fotolízis. Lökéshullámcsövek. Relaxációs módszerek.
3. *Kinetika és mechanizmus:* Kinetikai aranyszabályok. Kinetikailag ekvivalens reakciósémák. A reakciómechanizmus fogalma és meghatározásának módszerei.
4. *A bimolekuláris reakciók elmélete:* Az ütközési elmélet. Az átmeneti-állapot elmélet és annak termodinamikai megfogalmazása. Az átmeneti-állapot elmélet bizonyítékai és alkalmazásai. Reakciódinamika.
5. *Az unimolekuláris és asszociációs reakciók elmélete:* A Lindemann-elmélet és összehasonlítása a kísérleti adatokkal. Az unimolekuláris reakciók RKK-elmélete. Az asszociációs reakciók.
6. *Oldatreakciók kinetikája:* Az oldószer szerepe: kalitkahatás. Az ütközési komplex képződése. Diffúzió-szabályozott reakciók. Kinetikailag szabályozott reakciók. Az ionerősség és nyomás hatása a sebességi együttható értékére.
7. *Összetett reakciók kinetikája:* A Bodeinstein-elv illetve a gyors előegyensúlyok alkalmazása reakciórendszerek kinetikai leírására. Parallel és konszekutív reakciók rendszere. Egyensúlyra vezető reakciók. A légkör kémiája. Enzimreakciók kinetikája. A Michaelis-Menten közelítés.
8. *Láncreakciók elmélete:* A láncreakciók általános sémája. A lánchossz fogalma. Hidrogén-halogén reakciók. Alkének pirolízise. Polimerizációs gyökreakciók. Termikus robbanás. Elágazó láncreakciók, a durranógázreakció. A szénhidrogének oxidációja.
9. *A katalízis fogalma, jellemzői.* Homogén és heterogén katalitikus reakciók jellegzetes lépései és mechanizmusa. Jelentősebb katalitikus eljárások történeti áttekintése. A katalitikus folyamatok szelektivitása. A szelektivitás értelmezése. Példák ipari homogén katalitikus eljárásokra.
10. *Oszcillációs kémiai reakciók:* Oszcillációs kémiai reakciók zárt reaktorban. A Beluszov-Zsabotyinszkij reakció és annak FKN-mechanizmusa. Az Oregonátor-modell és dinamikája. Kémiai oszcilláció és bistabilitás nyílt reaktorokban. pH-oszcillátorok. A káosz fogalma, univerzalitása és jellemzése. Káosz kémiai és elektrokémiai rendszerekben. A káoszszabályozás módszerei és alkalmazása kémiai rendszerekben. Szinkronizáció.
11. *Fotokémiai reakciók kinetikája:* Az elektronállapotukban gerjesztett molekulák keletkezése és megszűnése. A fotokémia kinetikai törvényei. A kvantumhasznosítási tényező. A fluoreszcencia és foszforeszcencia élettartama. A Stern-Volmer-féle diagram.
12. *Felületi reakciók:* A Langmuir-féle adszorpciós izoterma. A felületkatalizált reakciók mechanizmusa. A Langmuir-Hinshelwood és az Elay-Rideal mechanizmus. Példák ipari heterogén katalitikus eljárásokra: ammóniaszintézis, a szén-monoxid oxidációja.
13. *Dinamikus elektrokémia:* Az elektrokémiai reakciók dinamikája: az oxidációs és redukciós reakciók sebessége, a Butler-Volmer egyenlet, a Tafel-egyenletek, a Marcus-elmélet. Lineáris pásztázó és ciklikus voltammetria. Az elektrokémia gyakorlati alkalmazásai:

történeti áttekintése és jelenlegi lehetőségei.

14. *A reakciókinetika matematikai és számítógépes módszerei*: Az autonóm differenciálegyenlet-rendszerek alapvető sajátságai, fázissík, fázistér, nyílt és zárt trajektóriák, stacionárius pontok, határhalmazok. A stacionárius pontok stabilitása. Vizsgálatok a fázissíkban: határciklus és a Poincaré–Bendixson tétel. Numerikus vizsgálati módszerek és eszközök: stiff kinetikai differenciálegyenletek megoldása, sajátértékek meghatározása, az XPP-Auto programcsomag és egyéb eszközök.

### **Ajánlott irodalom:**

1. M. J. Pilling, P. W. Seakins: *Reakciókinetika*, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 1995
2. *Reakciókinetika/katalízis* c. tárgy anyaga (elérhető a DE Fizikai Kémiai Tanszék honlapján, <http://fizkem.unideb.hu>)
3. A DE Kémia Doktori Iskola reakciókinetika tárgyú kurzusai (a tematikák elérhetőek a DE KDI honlapján, <http://www.chem.science.unideb.hu>)
  - Bazsa György, Gáspár Vilmos: *Nemlineáris kémiai kinetika* (T\_PK1102)
  - Gáspár Vilmos: *Kémiai káosz* (T\_PK1107)
  - Póta György: *A reakciókinetika matematikai és számítógépes módszerei* (T\_PK1109)
  - Póta György: *A kémiai hullámok és térbeli szerkezetek* (T\_PK1110)
  - Józsa Éva: *Dinamikus elektrokémia* (T\_PK1122)