

TÁRGY KÓD	SZAK	KREDIT	TÉTELEK
KEMNA1203	<i>kémia BSc</i>	5	1-14
KEMN1209	<i>nappali osztatlan kémiatanár</i>	3	1-10
OTLKEM0503	<i>rövidciklusú levelező kémiatanár</i>	2	1-6

- 1. Transzportfolyamatok** (Különbéle halmazállapotok (fázisok) és ezek jellemzése. Transzportfolyamatok: diffúzió, hővezetés, viszkozitás. Diffúzióegyenlet (Fick II. törvénye). A transzportállandók értelmezése molekuláris modellezéssel. Gázok, kinetikus gázelmélet. Effúzió. Barometrikus formula.)
- 2. Homogén dinamikus elektrokémia** (Az elektrolitoldatok vezetése. Az ionok független vándorlásának Kohlrausch-törvénye. Erős elektrolitok. Kohlrausch vezetési törvénye. Gyenge elektrolitok. Ostwald-féle hígítási törvény. Az ionok mozgékonyága, átviteli szám fogalma és mérése.)
- 3. Formális reakciókinetika** (A reakciósebesség fogalma. A reakciósebesség grafikus értelmezése. A sebességmérés kísérleti módszerei. Sebességi egyenlet. Elsőrendű, másodrendű, egyéb formálkinetika. Többtagú sebességi egyenletek: sorozatos, párhuzamos, megfordítható reakciók. Steady-state és gyors előegyensúlyos közelítés. A sebességi egyenlet meghatározásának a lépései.)
- 4. Reakciómechanizmusok** (Az elemi reakció fogalma, sajátosságai. A kinetikai tömeghatás törvénye. Unimolekuláris és termolekuláris reakciók. Magasabb részrendek értelmezése. Negatív részrendek értelmezése. Enzimkatalízis. Hidrogén-halogenidek képződésének a mechanizmusa. Elágazó láncreakciók, robbanások. Katalízis, autokatalízis, oszcilláció.
- 5. A reakciósebesség elméletei** (A sebességi együttható hőmérsékletfüggése. Arrhenius-elmélet. Az ütközési elmélet gázfázisban és oldatfázisban. Az aktivált komplex elmélete: termodinamikai, kvantummechanikai és statisztikus mechanikai kezelésmód.)
- 6. Folyamatok szilárd felületeken** (Felületi jelenségek alkalmazásai. A felület: fogalma, jellege; keletkezése, növekedése, nagysága; összetétele, szerkezete; vizsgálómódszerek. Fiziszorpció és kemiszorpció. Langmuir- és BET-izoterma. Az adszorpció és deszorpció kinetikája. Felületek katalitikus aktivitása, Langmuir–Hinshelwood- és Eley–Rideal-mechanizmus.)
- 7. Heterogén dinamikus elektrokémia** (Áramsűrűség–túlfeszültség, kapcsolatuk, csereáram(ok), Tafel-egyenlet. A kettősréteg és modelljei, Nernst-féle diffúziós réteg. Volta- és Galvani-potenciál. Az elektródfolyamat kinetikája. Butler–Volmer-egyenlet. Polarizáció, diffúziós határáram.)

TÁRGY KÓD	SZAK	KREDIT	TÉTELEK
KEMNA1203	<i>kémia BSc</i>	5	1-14
KEMN1209	<i>nappali osztatlan kémiatanár</i>	3	1-10
OTLKEM0503	<i>rövidciklusú levelező kémiatanár</i>	2	1-6

8. **Nem-termikus aktiválás** (Sugárzások típusai. A sugárzások jellemzői. Az elektromágneses sugárzások energia- és hullámhossztartományai. A sugárzás és az anyag kölcsönhatása: visszaverődés, áthaladás, elnyelődés. Meleglángok. Fotokémia és sugárhatáskémia összehasonlítása. Ionizáló sugárzások. Magnetokémia, szonokémia, mechanokémia, tribokémia.)
9. **Fotokémia alapjai** (A fény természete. Az elektromágneses sugárzás jellemzése. A fotokémia alaptörvényei: Grotthus–Draper-törvény, Bunsen–Roscoe-törvény, Stark–Einstein-törvény, Lambert–Beer-törvény. Kvantumhasznosítási tényező és kvantumhatásfok. Jablonski-diagramok. Fotokémiai folyamatok kinetikája. Szenzibilizáció.)
10. **Légkörkémia** (Az atmoszféra szerkezete. A legfontosabb gázok a légkörben. CO₂ emisszió és globális felmelegedés. A CO₂ körforgása. Az ózon keletkezése, bomlása, szerepe a légkörben. A légkör szennyező elemei. Halogénezett szénhidrogének.)
11. **Kvantumelmélet: alapfogalmak, apparátus** (A klasszikus fizika korlátai: feketetest-sugárzás, fotoelektromos effektus, Compton-effektus, elektrondiffrakció. Heisenberg-féle határozatlansági reláció. Schrödinger-egyenlet és megoldása: szabad részecske, dobozba zárt részecske, harmonikus oszcillátor és keringő mozgás. Variációs módszer.)
12. **Atomszerkezet és atomi spektrumok** (Az atomokat felépítő elemi részecskék. Hidrogénszerű atomi részecskék: konvenció a hullámfüggvény jelölésére, radiális és anguláris hullámfüggvény, degeneráció. Radiális sűrűségfüggvény és magtól való átlagos távolság. Hidrogénszerű atomok spektruma. Fermionok és bozonok. Többelektronos atomi részecskék, SCF-módszer.)
13. **Molekulák szerkezete** (Klasszikus kötéseleméletek. A hidrogénmolekula-ion kvantumkémiai leírása, kötő- és lazítópályák. MO-módszer, MO korrelációs diagramok. Hückel-módszer. VB-módszer. Hibridizáció.)
14. **Kvantummechanikai számítások** (PES: minimumok, nyeregponatok. Számítási módszerek: molekulamechanika, HF, szemiepirikus számítások, post-HF, DFT. Számolható tulajdonságok: energia, szerkezet, rezgések, elektronsűrűség. Számolt és mért geometriai paraméterek összevetése. Statisztikus termodinamika, állapotösszeg. Reakcióút és reakciókoordináta.)