

## Reakciókinetikai tételek 2017.

1. Potenciálfelületek reagáló részecskerendszerekben.
2. Az átmenetiállapot-elmélet statisztikus és dinamikus megfogalmazása, eredményei.  
Az ütközési elmélet és viszonya az átmenetiállapot-elmülethez.
3. A reakciósebességi együttható meghatározása szimulációval. A potenciálisenergia-felület számítása Born-Oppenheimer közelítéssel, illetve anélkül.
4. A reakciósebességi együttható hőmérsékletfüggésének és nyomásfüggésének értelmezése, az azokból származtatható mennyiségek diszkutálása.
5. Mérési módszerek a reakciókinetikában. A módszerek időfelbontása, alkalmazási területei.
6. Elemi reakciók időskálája, azok kísérleti nyomonkövetése.
7. Unimolekulás reakciók elmélete.
8. Reakciódinamika: korai módszerek, molekulásugarak és lézerkinetika.
9. Oldatreakciók sajátosságai. Ionokat és dipólusmolekulákat tartalmazó reakciók. Első- és másodfajú kinetikai sóhatás. Az oldószer polaritásának hatása oldatreakciók kinetikájára.
10. Diffúziókontrollált reakciók kinetikája. Kinetikai határ és diffúziós határ.  
A reakciósebesség időfüggése diffúziókontrollált reakciónál.
11. Részletes reakciómechanizmusok, azok redukciója, a redukált mechanizmusok bizonytalanságának számítása. Részletes reakciómechanizmusok számítógépes modellezése.
12. Fotokémia. Jablonski diagram, kvantumhatásfok. Fotokémiai reakciótípusok. Fotobiológiai ártalmak kémiai háttere.
13. Sugárhatás-kémia. Sugárforrások és sugárzások, azok kémiai alkalmazása. Radioaktív sugárzások fiziológiai hatása.
14. Femtokémia: elemi reakciók időbeli lefolyásának kísérleti nyomonkövetése. A kísérleti eredmények elméleti értelmezése. Tanulmányozott reakciótípusok. Kvantumkontroll.
15. Nemlineáris kémiai dinamika: oszcilláció, káosz és mintázatképződés reakció-diffúzió rendszerekben.
16. Enzimreakciók kinetikája; az enzimkinetikai mérések eredményeinek interpretálása.  
Enzimreakciók típusai. Gyógyszertervezési alapok.

További részletek: <http://keszei.chem.elte.hu/rkinetika>