

A tantárgy neve:	magyarul:	Reakciókinetika/Katalízis						Kódja:	TTKME0437	
	angolul:	Reaction Kinetics/Catalysis								
A képzés 4. féléve										
Felelős oktatási egység:		DE TTK, Fizikai Kémiai Tanszék								
Kötelező előtanulmány neve:								Kódja:		
Típus		Heti óraszámok						Követelmény	Kredit	Oktatás nyelve
		Előadás		Gyakorlat		Labor				
Nappali	X	Heti	2	Heti	0	Heti	2	kollokvium	4	magyar
Levelező		Féléves		Féléves		Féléves				
Tantárgyfelelős oktató		neve:		Dr. Jóó Ferenc				beosztása:	egyetemi tanár	
A kurzus célja:										
<p>Az egyszerű és összetett reakciók főbb kinetikai jellemzőinek, mechanizmusának megértése, a katalitikus reakciók típusainak, jelentőségének a megismerése.</p> <p>Önállóan végzett mérések elvégzésével elmélyítsék a reakciókinetikai mérési módszerekkel kapcsolatos ismereteiket, mélyebben megértsék az előadáson közölt elméleti anyagot, fejlesszék a manuális készségüket.</p>										
Tanulás eredmények, kompetenciák: a hallgató										
<i>Tudás:</i>										
<p>Ismeri a reakciókinetika alapfogalmait, legfontosabb összefüggéseit és vizsgálati módszereit. Áttekintése lesz az összetett reakciók legfőbb típusairól, azok kinetikai jellemzőiről és mechanizmusairól. Ismereteket szerez a fényenergia által aktivált reakciók és az oldatreakciók specifikus kinetikai jellemzőiről. Tudásra tesz szert a katalitikus reakciók (homogén és heterogén egyaránt) jellegzetes lépéseiről, mechanizmusairól néhány ipari katalitikus eljárás részletesebb elemzése révén. Behatóbban ismerkedik meg az enzimmkatalízis részleteivel, valamint a zöld kémiai elveknek megfelelő, környezetbarát katalitikus reakciók szükségességével. Megismeri a reakciókinetika és a katalízis kapcsolatát a kémia más területeivel illetve a releváns társtudományokkal.</p> <p>Ismeri az alapvető reakciókinetikai mérési módszereket, és használati utasítás alapján önállóan kezeli a mérőműszereket. Ismeri a kinetikai kísérletek tervezésének az alapjait, a mérési adatok feldolgozásának módszereit, és ezeket a gyakorlatban is alkalmazni tudja.</p>										
<i>Képesség:</i>										
<p>Érti a reakciókinetikai összefüggéseket, és képes az elvek gyakorlati alkalmazására: meg tudja tervezni a reakciókinetikai méréseket, az adatokat fel tudja dolgozni.</p> <p>Az eredményekből mértéktartó következtetéseket képes levonni, és a meghatározott mennyiségeket értelmezni tudja a korábbi elméleti ismeretei alapján.</p> <p>Képes rendszer szinten átlátni, értelmezni a reakciókinetikával és katalízissel kapcsolatos problémákat, és érdemben tud részt venni az ezekről szóló szakmai konzultációkban.</p> <p>Képes a a reakciókinetikával és katalízissel kapcsolatos ismereteinek kibővítésére/továbbfejlesztésére</p>										
<i>Attitűd:</i>										
<p>Törekedik a reakciókinetikai elméletek és elvek, vizsgálati és értékelési módszerek minél teljesebb megismerésére. Nyitott arra, hogy a témakörben új, tudományosan bizonyított ismereteket szerezzen, de elutasítsa a megalapozatlan, esetleg megtévesztő állításokat.</p> <p>Felismeri a reakciókinetikai problémáknak a kémia más területeivel valamint a társtudományokkal való összefüggéseit.</p> <p>Érzékeny a környezeti problémákra, és elkötelezett a fenntartható fejlődés irányába ható kémiai elvek, módszerek alkalmazásának</p> <p>Kész arra, hogy önálló munkát végezzen.</p>										
<i>Autonómia és felelősség:</i>										
<p>Szakmai irányítás mellett megjelölt részfeladatokat önállóan képes a kurzusban szereplő témakörök kapcsán elvégezni, a kapott eredményt értelmezni, valamint reálisan értékelni.</p> <p>Felelősséggel vizsgálja a környezetet terhelő kémiai folyamatok kockázatait</p>										
A kurzus tartalma, témakörei										
<ul style="list-style-type: none"> - Alapelvek, a kinetikai eredmények analízise - Az unimolekuláris reakciók Lindemann-féle valamint az asszociációs reakciók elmélete - Az oldatreakciókra jellemző specifikus kinetikai hatások - Az összetett reakciókkal kapcsolatos alapfogalmak és összefüggések 										

- A fotokémiai reakciók jellemzőinek, kinetikája és, törvényszerűségei
- A katalízis jelensége, jelentősége és fejlődése
- A homogén és heterogén heterogén katalitikus reakciók főbb jellemzői és jelentőségének bemutatása néhány ipari alkalmazáson keresztül.
- Az enzimmatalízis főbb kinetikai jellemzői és jelentőségének bemutatása néhány példán keresztül.
- A zöld kémia elvei és az azoknak megfelelő katalitikus folyamatok néhány példája

Minden hallgató a felsorolt négy gyakorlatot végzi el 4 órás foglalkozások keretében. A gyakorlatok mindegyikében más-más módszerrel vizsgálják a katalitikus folyamatokat: megismerkednek az áramlásos reaktorral, mérnek sav-, fémion-, fémkomplex- ill. enzimek által katalizált reakciót.

Tervezett tanulási tevékenységek, tanítási módszerek

- Előadás, konzultáció
- Egyéni felkészülés, előzetes jegyzőkönyv készítése.
- A mérések kivitelezése 4 órás gyakorlat során, dolgozatírás és/vagy referálás az elméleti háttérrel.
- Számítások elvégzése a gyakorlatleírás alapján, ábrák készítése és illesztési paraméterek meghatározása.
- Az eredmények önálló értékelése, a következtetések megfogalmazása.

Értékelés

Az adott napra kijelölt gyakorlat elméleti háttérét bemutató, az elvégzendő feladatokat tartalmazó jegyzőkönyvvel kell érkeznie a hallgatónak. Ennek hiányában a hallgató elégtelent kap, és nem kezdheti el a mérést.

A kollokviumra jelentkezéshez előfeltétel valamennyi gyakorlat legalább elégséges (2) szintű elvégzése.

Jegyzőkönyvek átlaga (25 %)

Írásbeli vizsga tételsor alapján (75 %)

Sikertelen teljesítés esetén a javítás módja, határideje: A kollokvium sikertelensége esetén javítás, utóvizsga keretében történhet, a TVSZ-ben meghatározottak szerint.

Kötelező olvasmány:

1. M. J. Pilling, P. W. Seakins: *Reakciókinetika*, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 1995.
2. Kathó Á., Rábai Gy.: Fizikai kémiai laboratóriumi gyakorlat III., Debreceni Egyetemi Kiadó, 2012.
3. http://oktatas.ch.bme.hu/oktatas/konyvek/mezgaz/BIM/Laborok/BIO-BSc_Km-MSc%202016%20osz/
<http://thalesnano.com>.

Ajánlott szakirodalom:

1. H. Espenson: *Chemical Kinetics and Reaction Mechanisms*, 4. és 6. fejezetek
2. B. C. Gates: *Catalytic Chemistry*, Wiley, 1991.
3. G. Rothenberg: *Catalysis*, Wiley, 2008.

Heti bontott tematika

1. hét	<p>Alapelvek, 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.</p> <p>Az aceton jódozása: a reaktánsok rendűségének (vagy a reakció aktiválási energiájának) meghatározása jodometriás módszerrel.</p> <hr/> <p>TE: A kinetikai eredmények feldolgozására szolgáló módszerek, valamint a kinetika és a termodinamika kapcsolatának a megismerése. A savkatalizált reakciók jellemzőinek megismerése, aktiválási energia meghatározása Arrhenius összefüggése alapján</p>
2. hét	<p>Kinetika és mechanizmus: a reakciómechanizmus fogalma. Aranyszabályok a sebességi egyenlet és mechanizmus kapcsolatának értelmezésére. Kinetikailag ekvivalens reakciósmák.</p> <p>H₂O₂ katalitikus bomlása: réz(II)-ion, különböző anionok valamint a pH hatásának vizsgálata a H₂O₂ vasionok által katalizált bomlásában. H₂O₂-oldat koncentrációjának meghatározása permanganometriás módszerrel.</p> <hr/> <p>TE: A reakciómechanizmus megállapításához vezető lépések megismerése. A promotorok és inhibitorok hatásának megismerése a H₂O₂ katalitikus bomlásában. A reakció mechanizmusának megértése.</p>
3. hét	<p>Az unimolekuláris reakciók Lindemann-féle elmélete. Az elmélet összehasonlítása kísérleti adatokkal. A végtelen nyomásra történő extrapoláció. Az aktiválás és a disszociáció sebessége. Az asszociációs reakciók elmélete.</p> <hr/> <p>TE: Az unimolekuláris és az asszociációs reakciók elmélete</p>
4. hét	<p>Oldatreakciók kinetikája. Az oldószer szerepe: kalitkahatás. Az ütközési komplex képződése.</p>

	<p>Diffúzió-szabályozott reakciók. Kinetikailag szabályozott reakciók. Az ionerősség és nyomás hatása a sebességi együttható értékére.</p> <hr/> <p>TE: Az oldatreakciókra jellemző specifikus kinetikai hatások megismerése</p>
5. hét	<p>Összetett reakciók kinetikája: a Bodeinstein-elv illetve gyors előegyensúlyok alkalmazása reakciórendszerek kinetikai leírására. Parallel és konsekutív reakciók rendszere. Egyensúlyra vezető reakciók. A légkörben lejátszódó fontosabb kémiai reakciók.</p> <hr/> <p>TE: Az összetett reakciókkal kapcsolatos alapfogalmaknak és összefüggéseknek a megismerése, megértése</p>
6. hét	<p>Láncreakciók elmélete: A láncreakciók általános sémája. A lánchossz fogalma. Nyílt láncú reakciók: hidrogén-halogén reakciók, alkánok pirolízise, polimerizációs gyökreakciók. Termikus robbanás. Elágazó láncreakciók: a durranógázreakció, szénhidrogének oxidációja.</p> <hr/> <p>TE: A láncreakciókkal kapcsolatos alapfogalmaknak, összefüggéseknek valamint néhány alkalmazásnak a megismerése</p>
7. hét	<p>Oscillációs kémiai reakciók zárt és nyílt rendszerekben. A Belouszov-Zsabotyinszkij reakció és Field-Kőrös-Noyes-mechanizmus. Az Oregonátor-modell és dinamikája. Kémiai káosz.</p> <hr/> <p>TE: A periodikusan változó reakciók alaptípusainak valamint a kémiai káosz jelenségének a megértése</p>
8. hét	<p>Fotokémiai reakciók kinetikája: az elektronállapotukban gerjesztett molekulák keletkezése és megszűnése. A fotokémia kinetikai törvényei. A kvantumhasznosítási tényező. A floureszcencia és foszforeszcencia élettartama. A Stern-Volmer-féle diagram.</p> <hr/> <p>TE: A fotokémiai reakciók jellemzőinek, kinetikájának, törvényszerűségeinek a megismerése</p>
9. hét	<p>A katalízis fogalma, jellemzői. Jelentősebb katalitikus eljárások történeti áttekintése.</p> <hr/> <p>TE: A katalízis jelenségének és fejlődésének a megismerése</p>
10. hét	<p>A zöld kémia alapelvei, összehasonlító példák hagyományos és zöld kémiai eljárásokra. A zöld kémia és a katalízis. Atomhatékonyság és környezeti tényező (példákkal).</p> <hr/> <p>TE: A zöld kémia alapfogalmainak, alapelveinek és néhány környezetbarát katalitikus eljárásnak a megismerése</p>
11. hét	<p>A katalitikus folyamatok szelektivitása. A szelektivitás értelmezése. Enantioszelektív reakciók. Kinetikus rezolválás.</p> <hr/> <p>TE: Ismeretek a katalitikus folyamatok szelektivitásának főbb típusairól és a kinetikus rezolválás alapjairól.</p>
12. hét	<p>Homogén katalitikus reakciók jellegzetes lépései és mechanizmusa. Példák ipari homogén katalitikus eljárásokra.</p> <hr/> <p>TE: A homogén katalitikus reakciók főbb jellemzőinek, jelentőségének megismerése néhány ipari alkalmazáson keresztül.</p>
13. hét	<p>Heterogén katalitikus reakciók. A Langmuir-Hinshelwood és az Ealy-Rideal mechanizmus. Példák ipari heterogén katalitikus eljárásokra.</p> <hr/> <p>TE: A heterogén katalitikus reakciók főbb jellemzőinek, jelentőségének megismerése néhány ipari alkalmazáson keresztül.</p>
14. hét	<p>A reakciókörülmények gyors optimalizálása. Az H-Cube hidrogénező reaktor. Több-munkahelyes reaktorok. H-Cube® hidrogénező reaktor alkalmazása. Demonstrációs gyakorlat. Acetilének katalitikus hidrogénezése H-Cube™ készülékben. A reakció szelektivitásának változása az áramlási sebesség, a hőmérséklet és a H₂-nyomás függvényében.</p> <hr/> <p>TE: Áttekintés a reakciókörülmények gyors optimalizálásának módszereiről. Az áramlásos reaktor jellegzetességeinek megismerése, az acetilének szelektív hidrogénezését befolyásoló paraméterek hatásának kimérése.</p>
15. hét	<p>Enzimkatalízis. Az enzimek osztályozása és általános tulajdonságai. Az enzimaktivitás jellemzése és függése a hőmérséklettől valamint a közeg pH-jától. Enzimreakciók kinetikája. A Michaelis menten közelítés, K_M és V_{max} meghatározásának módjai. Egy- és többszubsztrátumos enzimek és működési módjuk. Enzimkinetika és enzim-inhibíciós kinetika: a tejcukor bomlása állandó mennyiségű (aktivitású) galaktóz enzim jelenlétében különböző szubsztrátum, inhibitor koncentrációk és pH érték esetén. A kapott reakciósebességi adatokból meghatározandók az enzimes reakció kinetikai paraméterei, pH függése, az inhibíció típusa és kinetikai állandói. Az enzim mennyiség-</p>

gének reakciósebességre gyakorolt hatásának vizsgálata.

TE: Az enzimkatalízis főbb kinetikai jellemzőinek, jelentőségének megismerése. Az enzimkatalízissel kapcsolatos alapfogalmak elmélyítése, a reakciósebességet befolyásoló paraméterek hatásának megismerése a gyakorlatban.