**Název programu**: Fyzikální chemie

**Forma**: prezenční

**Název**: Nerovnovážná termodynamika a teorie chemické kinetiky

**Školitel**: prof. Ing. Miloslav Pekař, CSc.

**Anotace**: Výsledky získané v oblasti makroskopické nerovnovážné termodynamiky ukazují, že mezi chemickou termodynamikou a kinetikou jsou těsnější vztahy, než se obvykle uvádí. Termodynamika vymezuje obecný rámec určující mimo jiné i tvar rychlostních rovnic a klade omezení na koeficienty těchto rovnic. Související teorie byla dosud rozpracována jen pro tzv. lineární tekutiny, kde stále zůstává k vyjasnění několik zajímavých otázek. Disertace by se postupně zaměřila na následující problémy této oblasti:

• kinetika ve směsích neideálních tekutin, použitelnost aktivity v kinetických rovnicích;

• aplikace termodynamické teorie na reakční mechanismy s aktivovaným komplexem, studium souvislostí s mikroskopickou teorií (aktivovaného komplexu) a předchozím problémem;

• aplikace teorie na vybrané publikované mechanismy, srovnání získaných kinetických rovnic s publikovanými a diskuse přínosu nové teorie pro kinetickou praxi;

• rozšíření teorie mimo oblast lineárních tekutin, zejména se zaměřením na reagující systémy s významným vlivem difúze a na vztah rychlost reakce-difúze.