

Բ.00.04 – ՖԻԶԻԿԱԿԱՆ ՔԻՄԻԱ

Գազերի կինետիկական տեսությունը

Իդեալական գազի վիճակի հավասարումը: Գազային օրենքները: Վան-Դեր-Վաասլի հավասարումը: Գազերի կոնդենսացումը, կրիտիկական կետ: Բախումները գազերում: Ազատ վազքի միջին երկարություն: Գազերում տեղափոխման տարրական պրոցեսների տեսությունը՝ մաժուցիկություն, ջերմհաղորդականություն, դիֆուզիա:

Ֆիկի առաջին և երկրորդ դիֆուզիայի օրենքները: Բրոունյան շարժում: Էյնշտեյնի հավասարումը մասնիկների տեղաշարժման միջին քառակուսայինի համար: Ֆլուկտուացիաներ:

Նյութի կառուցվածքը

Քվանտային տեսության հիմնական պարկերացումները

Պլանկի հավասարումը: Դե-Բրոյլի հավասարումը՝ իմպուլսի կապը ալիքի երկարության հետ: Շրեդինգերի ստացիոնար հավասարումը: Էներգիայի ընդհատությունը: Միաչափ պոտենցիալ արկղում գտնվող մասնիկը: Քվանտա-մեխանիկական հարմոնիկ օսցիլյատոր: Ալիքային ֆունկցիայի հավանականային մեկնաբանումը: Հայգենբերգի անորոշության սկզբունքը համալուծ կոորդինատների և իմպուլսի, ինչպես նաև էներգիայի և ժամանակի համար: Էլեկտրոնի սպինը: Էլեկտրոնի մեխանիկական անկյունային մոմենտը և մագնիսական մոմենտը: Պաուլիի արգելման սկզբունքը:

Ատոմի կառուցվածքը

Բորի պատկերացումները ատոմի կառուցվածքի վերաբերյալ և պոստուլատները: Ջրածնի ատոմ: Շրեդինգերի ստացիոնար հավասարման կիրառումը ջրածնի ատոմի նկատմամբ: Քվանտային թվեր՝ զլիսավոր, ազիմուտային, մագնիսական, սպինային: Էներգետիկ մակարդակներ: Ջրածնի ատոմի սպեկտրները: Սպեկտրալ սերիաներ: Ատոմային օրբիտալներ: s-, p- և d-օրբիտալների ալիքային ֆունկցիաները:

Բազմաէլեկտրոն ատոմներ: Ատոմի կառուցման սկզբունքի (Պաուլի սկզբունք, Հունդի կանոն, Էներգիայի նվազագույնության սկզբունք) կիրառումը ատոմային օրբիտալներում էլեկտրոնների բաշխման նկատմամբ: Ատոմների էլեկտրոնային կառուցվածքը և պարբերական օրենքն ու համակարգը: Վալենտականությունն ըստ ատոմի էլեկտրոնային կառուցվածքի: Իոնացման էներգիան և ատոմի խնամակցությունը էլեկտրոնի նկատմամբ: Ատոմի էլեկտրաբացասականությունը:

Մոլեկուլի կառուցվածքը

Քիմիական կապ: Քիմիական կապի տեսակները: Կովալենտ կապ: Վալենտական կապի մեթոդը: Վալենտային կապի մեթոդի (Հայտլեր-Լոնդոնի տեսություն) կիրառումը ջրածնի մոլեկուլի օրինակով: Մոլեկուլային օրբիտալների մեթոդը: Ջրածնի մոլեկուլի իոնի կառուցվածքի մեկնաբանումը մոլեկուլային օրբիտալների, այն է՝ ատոմային օրբիտալների գծային կոմբինացիայի մեթոդով: Միևնույն միջուկն ունեցող երկատոմ մոլեկուլի մոլեկուլային օրբիտալները: Պատկերացում քիմիական կապի մասին:

σ և π կովալենտ կապեր: Ատոմային օրբիտալների հիբրիդացում՝ sp -, sp^2 - և sp^3 - հիբրիդացում: Կովալենտ կապի ուղղորդվածությունը: Կապերի զուգորդումը: Հյուկելի մոլեկուլային օրբիտալների մեթոդը՝ էթենի, բենզոլի մոլեկուլների կառուցվածքի քվանտա-մեխանիկական մեկնաբանումը:

Մոլեկուլների կառուցվածքի քվանտա-մեխանիկական հաշվարկների մոտավոր մեթոդների ընդհանուր բնութագրությունը:

Սահմանային մոլեկուլային օրբիտալների տեսությունը:

Կապերի բևեռայնությունը: Մոլեկուլի դիպոլային մոմենտ: Իոնական կապ: Ջրածնական կապ: Միջմոլեկուլային (Վան-Դեր-Վաալսյան) ուժեր: Գերմոլեկուլներ և գերմոլեկուլային քիմիա:

Մոլեկուլի կառուցվածքի հետազոտման եղանակները (օպտիկական և մագնիսական ռեզոնանսի սպեկտրոսկոպիա, մասս-սպեկտրոսկոպիա, ռենտգենաֆազային անալիզ):

Արոմային և մոլեկուլային սպեկտրներ

Լույսի առաքումն ու կլանումը ատոմների և մոլեկուլների կողմից: Լամբերտ-Բերի օրենքը: Էներգիայի էլեկտրոնային, տատանողական և պտտական մակարդակները: Տատանման անհարմոնիկությունը: Երկատոմ մոլեկուլների պոտենցիալ կորերը: Մորզեի պոտենցիալ կորը: Քիմիական կապի էներգիան:

Երկատոմ մոլեկուլների պտտական, տատանողական-պտտական սպեկտրները: Բազմատոմ մոլեկուլների ինֆրակարմիր սպեկտրոսկոպիան: Խմբերի բնութագրական հաճախությունները: Լույսի կոմբինացիոն ցրումը՝ Ռաման սպեկտրներ: Էլեկտրոնային էներգետիկ մակարդակները: Ֆրանկ-Կոնդոնի սկզբունքը: Մոլեկուլի էլեկտրոնային սպեկտրները: Պատկերացումներ ֆլուորեսցենցիայի ու ֆոսֆորեսցենցիայի մասին: Ֆոտոէլեկտրոնային սպեկտրոսկոպիա: Ինդուլցված ճառագայթում. լազերներ:

Միջուկային մագնիսական ռեզոնանս (ՄՄՌ): Քիմիական տեղաշարժ: Միջմիջուկային սպին-սպինային փոխազդեցությունը, ՄՄՌ-ի ազդանշանների ճեղքումը: Չեեսմանի էֆեկտը: Էլեկտրոնային պարամագնիսական ռեզոնանս (ԷՊՌ): Գերնուրբ ճեղքում: Ազատ ռադիկալների ԷՊՌ սպեկտրների օրինակներ:

Պինդ մարմնի կառուցվածքը

Նյութի բյուրեղային և ամորֆ վիճակները: Բյուրեղների սիմետրիայի տարրերը: Սինգոնիաններ՝ խորանարդային, հեքսագոնալ և այլն: Նիստերի ինդեքսները: Բյուրեղների հատկությունների անիզոտրոպությունը: Բյուրեղային ցանցերի տեսակները: Իոնային բյուրեղների էներգիան: Բորն-Հաբերի ցիկլը: Պինդ մարմինների կառուցվածքի հետազոտ-

ման մեթոդները: Ռենտգենյան (x-ճառագայթներ) բյուրեղագրաֆիա: Բրեզի հավասարումը: Հեղուկ բյուրեղներ:

Պինդ մարմինների զոնային տեսության հիմնական հասկացությունները: Մետաղական հաղորդականություն: Մեկուսիչներ: Կիսահաղորդիչներ: Գերհաղորդիչներ: Էլեկտրոնի ելքի աշխատանքը: Ֆոտոէֆեկտ: Էյնշտեյնի հավասարումը: Ջերմաէլեկտրոնային արտաճառագայթում (էմիսիա): Պոտենցիալների կոնտակտային տարբերությունը, դրա կապը էլեկտրոնի ելքի աշխատանքի հետ: Պատկերացում նանոմասնիկների մասին և դրանց առանձնահատկությունները:

Թերմոդինամիկայի օրենքները

Թերմոդինամիկայի առաջին օրենքը: Ներքին էներգիա, էնթալպիա: Ջերմունակություն: Քիմիական ռեակցիաների ջերմային էֆեկտը հաստատուն ճնշման և հաստատուն ծավալի դեպքերում: Ջերմային էֆեկտի կախումը ջերմաստիճանից (Կիրխոֆի բանաձևը): Քիմիական ռեակցիաների ջերմային էֆեկտի հաշվարկը նյութերի առաջացման, այրման, քիմիական կապերի էնթալպիաների հիման վրա: Հեսի օրենքը: Ջերմաչափություն (կալորիմետրիա): Ջոուլ-Թոմսոնի գործակիցը իդեալական և ռեալ գազերի համար:

Թերմոդինամիկայի երկրորդ օրենքը: Էնտրոպիա: Էնտրոպիայի փոփոխությունը դարձելի և անդարձելի պրոցեսներում: Էնտրոպիայի փոփոխության հաշվարկների օրինակներ: Գիբսի և Հելմհոլցի էներգիաները և իզոթերմ պրոցեսի առավելագույն օգտակար աշխատանքը: Գիբս-Հելմհոլցի հավասարումը:

Թերմոդինամիկայի երրորդ օրենքը: Թերմոդինամիկայի երրորդ օրենքի կիրառությունը քիմիական հավասարակշռությունը հաշվարկելու համար: Հավասարակշռության թերմոդինամիկական սկզբունքը: Մեկուսացված համակարգի հավասարակշռությունը, հավասարակշռությունը հաստատուն ջերմաստիճանի և ծավալի դեպքում, հաստատուն ջերմաստիճանի և

ճնշման դեպքում: Կլապեյրոն-Կլաուզիուսի հավասարումը ֆազային անցումների համար: Քիմիական պոտենցիալներ: Գիբս-Դյուհեմի հավասարումը: Նյութերի եռման և սառեցման ջերմաստիճանների փոփոխությունը կախված հավելանյութերի քանակից (կրիոսկոպիա, էբուլիոսկոպիա): Անկախ բաղադրամասեր, ազատության աստիճաններ: Ֆազերի Գիբսի կանոնը: Ֆազային դիագրամը միակոմպոնենտ համակարգերի համար: Հեղուկ-գոլորշի հավասարակշռությունը երկկոմպոնենտ համակարգերում: Թորում, ազետորոպ խառնուրդներ: Պինդ-հեղուկ հավասարակշռություն, պարզ էվտեկտիկ ֆազերի դիագրամ:

Քիմիական հավասարակշռություն

Հավասարակշռությունը իդեալական գազային խառնուրդներում և իդեալական լուծույթներում: Քիմիական պոտենցիալը իդեալական համակարգերում: Հենրիի և Ռաուլի օրենքները: Օսմոտիկ երևույթներ: Քիմիական ռեակցիայի Գիբսի էներգիան: Քիմիական ռեակցիայի Գիբսի ստանդարտ էներգիան և հավասարակշռության հաստատունը: Ներգործող զանգվածների օրենքը: Հավասարակշռության հաստատունի կինետիկական մեկնաբանումը: Հավասարակշռությունը գազային խառնուրդներում, հեղուկ լուծույթներում և մաքուր պինդ ֆազի մասնակցությամբ: Ճնշման, սկզբնական բաղադրության ազդեցությունը հավասարակշռական բաղադրության վրա: Վանտ-Հոֆի հավասարումը՝ հավասարակշռության հաստատունի կախումը ջերմաստիճանից: Ճնշման ազդեցությունը հավասարակշռության հաստատունի վրա:

Ոչ իդեալական համակարգեր: Շեղումներ իդեալական գազերի և լուծույթների օրենքներից: Պարցիալ մոլային մեծություններ: Ռեալ գազեր և ռեալ գազային խառնուրդներ, ցնդողականություն: Ակտիվություն: Ակտիվությունը ոչ էլեկտրոլիտիկ լուծույթներում: Ակտիվության գործակիցը: Ներգործող զանգվածների օրենքը ոչ իդեալական համակարգերում:

Էլեկտրաքիմիական պրոցեսներ

Էլեկտրաքիմիական հավասարակշռություն

Գալվանական էլեմենտ: Գալվանական էլեմենտի թերմոդինամիկան: Ֆարադեյի էլեկտրոլիզի օրենքը: Ակտիվության գործակիցները էլեկտրոլիտի լուծույթներում: Դեբայ-Հյուկելի տեսությունը: Ստանդարտ էլեկտրոդային պոտենցիալներ: Էլեկտրաշարժիչ ուժ, նրա արտահայտությունը Գիբսի էներգիայի միջոցով: Ներնստի բանաձևը:

Գալվանական (էլեկտրաքիմիական) էլեմենտի տեսակները՝ կոնցենտրացիոն ու վերականգնման-օքսիդացման էլեմենտներ:

Էլեկտրոդային պրոցեսների կինետիկան

Կոնցենտրացիոն բևեռացում: Գերլարում: Կրկնակի էլեկտրական շերտի Հելմհոլցյան և դիֆուզիոն բաղադրիչները: Կրկնակի էլեկտրական շերտի ազդեցությունը էլեկտրոդային պրոցեսների արագության վրա: Պոլյարագրաֆիա: Էլեկտրաֆորեզ:

Վիճագրական թերմոդինամիկա

Վիճակագրական մեխանիկայի հիմնական սկզբունքները: Համակարգի միկրոսկոպիկ վիճակներ: Բոլցմանի կանոնը: Մաքսվել-Բոլցմանի բախշման օրենքը: Գազային մոլեկուլների բաշխումն ըստ արագությունների: Բարոմետրական բանաձև: Բոզե-էյնշտեյնի, Ֆերմի-Դիրակի վիճակագրությունները:

Թերմոդինամիկայի երկրորդ օրենքի վիճագրական մեկնաբանությունը: Էնտրոպիան և թերմոդինամիկական հավանականությունը՝ Բոլցմանի բանաձևը: Թերմոդինամիկայի երրորդ օրենքի մեկնաբանությունը քվանտային տեսության օգնությամբ:

Թերմոդինամիկական ֆունկցիաների արտահայտումը համակարգի վիճակագրական գումարների միջոցով, ներառելով իդեալական գազը:

Հավասարակշռության հաստատունի արտահայտումը վիճակների գումարների միջոցով:

Վիճակագրական կշիռ: Գազի մասնիկների համընթաց և պտտական շարժման վիճակագրական կշիռների հաշվարկը: Դասական և քվանտային վիճակագրական կշիռները հարմոնիկ տատանումների համար: Ատոմների էլեկտրոնային վիճակների վիճակագրական կշիռները: Գազերի թերմոդինամիկական ֆունկցիաների հաշվումը և գազային հավասարակշռության հաստատունի հաշվարկը ատոմային և մոլեկուլային հաստատուններից, վիճակագրական կշիռներից, զանգվածներից, իներցիայի մոմենտներից և տատանման հաճախականություններից: Էյնշտեյնի և Դեբայի հավասարումները պինդ մարմինների ջերմունակության վերաբերյալ:

Քիմիական կինետիկա և կատալիզ

Հոմոգեն ռեակցիաների կինետիկան

Ռեակցիայի արագություն: Ներգործող զանգվածների օրենքը: Ռեակցիայի արագության հաստատունը: Արենիուսի հավասարումը: Ակտիվացման էներգիան: Նախաէքսպոնենտային բազմապատկիչ: Ռեակցիայի մոլեկուլայնությունն ու կարգը:

Մոնոմոլեկուլային, երկմոլեկուլային և եռամոլեկուլային ռեակցիաները, դրանց կինետիկական նկարագրությունը: Մոնոմոլեկուլային ռեակցիաները գազում, Լինդեմանի սխեման: ՌԴԿՄ-ի տեսություն:

Ռեակցիայի արագության հաշվարկն ըստ բախումների տեսության: Ստերիկ գործոն: Անցումային վիճակի (ակտիվացված կոմպլեքսի) մեթոդը: Քիմիական ռեակցիաների պոտենցիալ էներգիայի մակերևույթը: Ռեակցիայի արագության հաստատունի նախաէքսպոնենտային բազմապատկիչի արտահայտումը վիճակագրական գումարների միջոցով: Գիբսի

ակտիվացման էներգիան, ակտիվացման էնտրոպիան, էնթալպիան: Թունելային էֆեկտ:

Բարդ ռեակցիաներ: Զուգահեռ և դարձելի ռեակցիաներ: Հաջորդական ռեակցիաներ: Քվազիստացիոնար կոնցենտրացիաների մեթոդը: Քիմիական ռեակցիայի լիմիտավորող (որոշիչ) փուլ: Շղթայական ռեակցիաներ: Ոչ ճյուղավորված շղթայական ռեակցիաների օրինակներ: Ճյուղավորված շղթայական ռեակցիաներ: Բոցավառման սահմանները: Ջերմային պայթյուն:

Բարդ (բազմափուլ) քիմիական ռեակցիաների մաթեմատիկական մոդելավորում և դրանց համակարգչային վերլուծությունը:

Քիմիական ռեակցիայի առանձնահատկությունը հեղուկ ֆազում: Սուլատացիայի դերը հեղուկաֆազ ռեակցիաներում: Դիֆուզիայով վերահսկվող ռեակցիաները լուծույթներում: Սմոլուիսոլսկու հավասարումը: Բախումների տեսությունը հեղուկում: Վանդակի էֆեկտ: Անցումային վիճակի տեսության կիրառումը հեղուկաֆազ ռեակցիաների նկատմամբ: Ճնշման, միջավայրի դիէլեկտրիկ թափանցելիության ու իոնական ուժի ազդեցությունը քիմիական ռեակցիայի վրա:

Հոմոգեն ռեակցիաների կինետիկայի հետազոտության մեթոդները: Արագ ընթացող ռեակցիաների ուսումնասիրման եղանակներ: Հոսքային և իմպուլսային եղանակներ (ֆլեշ-ֆոտոլիզ, կանգնեցվող հոսքի մեթոդ, պտտվող սեկտորի մեթոդ): Ֆեմտոպայրկյանային սպեկտրոսկոպիա:

Կատալիզ և ադսորբցիա

Կատալիզ: Կատալիտիկ ռեակցիաները և դրանց դասակարգումը: Կատալիզը և քիմիական ռեակցիաների հավասարակշռությունը: Պրոմոտորներ և կատալիտիկ թույլներ: Հոմոգեն կատալիզ: Թթվա-հիմնային կատալիզ: Կատալիզ մետաղների իոններով և մետաղակոմպլեքս միացություններով: Հոմոգեն կատալիտիկ ռեակցիաների կինետիկան:

Ադսորբցիան որպես հետերոգեն կատալիտիկ ռեակցիաների փուլ: Ֆիզիկական ադսորբցիա: Քեմոսորբցիա: Ադսորբցիայի Լենգմյուրի իզոթերմը: Ադսորբցիայի իզոթերմերը և իզոբարերը: Ադսորբցիայի ջերմությունը և նրա կախումը մակերևույթի զբաղվածության աստիճանից: Հետերոգեն ռեակցիայի արագությունը: Համասեռ մակերևույթների վրա ընթացող հետերոգեն-կատալիտիկ ռեակցիաների կինետիկան ըստ Լենգմյուրի տեսության:

Քիմիական հետերոգեն կատալիտիկ ռեակցիաների ընթանալու դիֆուզիոն և կինետիկական մարզերը: Ակտիվ կենտրոնների և ակտիվ համակազմերի (անսամբլների) տեսությունները: Ֆերմենտային կատալիզ: Միխաելիս-Մենտենի հավասարումը:

Քարծր էներգիաների քիմիա

Էլեկտրամագնիսական ճառագայթում (տեսանելի, ՈւՄ, ԻԿ): Իոնացնող էլեկտրամագնիսական ճառագայթում (գամմա և ռենտգենյան):

Ֆոտոքիմիական ռեակցիաներ: Ֆոտոքիմիայի հիմնական օրենքը և շեղումն այդ օրենքից: Առաջնային և ֆոտոքիմիական պրոցեսներ. Երկրորդային ռեակցիաներ: Ֆոտոսենսիբիլացում: Գաղափար մթնոլորտի օզոնային շերտում ընթացող ֆոտոքիմիական ռեակցիաների մասին:

Ջրի ճառագայթային քայքայում (ռադիոլիզ): Օրգանական միացությունների ճառագայթային քայքայման օրինակներ (ճառագայթա-քիմիական ելք): Ջրում լուծված նյութերի փոխարկումը ջրի ճառագայթային քայքայման արգասիքների հաշվին: Գաղափար պլազմայի մասին: Պլազմա-քիմիական ռեակցիաների մեխանիզմը:

ՀԻՄՆԱԿԱՆ ԳՐԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆ

1. П. Эткинс. Физическая химия. В 2-х т., М., Мир,1980.
2. Э.А. Мелвин-Хьюз. Физическая химия. В 2-х т., М., 1962.

3. Հ.Հ. Չալսիկյան, Ֆիզիկական քիմիա, «Լույս» հրատ., Ե., 1974:
4. R.J. Silbey, R.A. Alberty. Physical Chemistry, John Wiley, 2000.
5. K.J. Laidler, J.H. Meiser, B.C. Sanctuary. Physical Chemistry, Houghton Mifflin Company, Boston, New York, 2003.
6. Л.Т. Бугаенко, М.Г. Кузьмин, Л.С. Полак. Химия высоких энергий. М., Химия, 1988.

ԼՐԱՅՈՒՑԻՉ ԳՐԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆ

1. Дж. Бранд, Г. Эглинтон. Применение спектроскопии в органической химии. М., Мир, 1976.
2. А. Керрингтон, Э. Мак-Лечлан. Магнитный резонанс и его применения в химии. Мир, 1970.
3. Շ.Ա. Մարգարյան. Մոլեկուլային սպեկտրոսկոպիա, Երևան, 2003:
4. В. Хабердитцл. Строение материи и химическая связь. М., Мир, 1974.
5. Ч. Коулсон. Валентность. М., Мир, 1986.
6. М.Х. Карапетьянц. Химическая термодинамика. М., Химия, 1975.
7. Г.М. Жидомиров, А.А. Багатурянц, И.А. Абронин. Прикладная квантовая химия. М., Химия, 1979.
8. Драго. Физические методы в химии. М., Мир в 2-х т., 1981.
9. Н.М. Эмануэль, Д.Г. Кноре. Курс химической кинетики. М., Высшая школа, 1984.
10. Е.Т. Денисов. Кинетика гомогенных химических реакций. М., Высшая школа, 1988.
11. В.А. Ройтер, Г.И. Голодец. Введение в теорию кинетики и катализа. Киев, Изд-во Наукова думка, 1971.
12. Б.Б. Дамаскин, О.А. Петрий, Г.А. Цирлина. Электрохимия. М., Химия, 2001.
13. Экспериментальные методы в химической кинетике под ред. Н.М. Эмануэля. М., Высшая школа, 1980.
14. Н.А. Смирнова. Методы статистической термодинамики в физической химии. М., Высшая школа, 1982.
15. Г.М. Панченков, В.П. Лебедев. Химическая кинетика и катализ. М., Химия, 1985.

