

02.00.04-ФИЗИКАВИЙ КИМЁ ИХТИСОСЛИГИ БЎЙИЧА
ТАЯНЧ ДОКТОРАНТУРАГА КИРУВЧИЛАР УЧУН
ИХТИСОСЛИК ФАНИДАН
ДАСТУР

Кимёвий термодинамика асослари. Асосий тушунчалар: термодинамик система, изоляцияланган система, ёпиқ система, очик система, гомоген ва гетероген системалар, узлуксиз система, системанинг холати, термодинамик параметрлар, термодинамик жараён, холат функцияси, айланма жараён, изобар, изотерм, адиабат, изохор, изобар-изотерм ва изохор-изотерм жараёнлар, қайтар ва қайтмас жараёнлар. Интенсив ва экстенсив катталиклар.

Идеал газ қонунлари: Клапейрон-Менделеев, Бойль-Мариотт, Шарль-Гей-Люссак. Универсал газ доимийси. Холат тенгламалари ва термик коэффициентлар: термик кенгайиш коэффициенти, босим ортишининг коэффициенти, изотермик сиқилиш коэффициенти. Термик коэффициентларнинг ўзаро боғланиши.

Иссиқлик, температура, босим, ички энергия, иш, интенсивлик факторлари, термометрик шкала, абсолют температура, термометрлар.

Газларнинг кинетик назариясининг асосий тенгламаси (Больцман тенгламаси). Газларнинг иссиқлик сиғими. Иссиқлик сиғимининг эркинлик даражаси билан боғлиқлиги.

Реал газлар. Ван-дер-Ваальс тенгламаси. Газларнинг конденсатланиши. Критик нукта. Буғ ва газ орасидаги фарқ. Келтирилган босим, ҳажм ва температуралар.

Кимёвий термодинамиканинг вазифаси. Феноменологик (классик) термодинамика, номувозанат жараёнларнинг термодинамикаси, статистик термодинамика.

Термодинамикани биринчи қонунининг таърифлари. Термодинамика биринчи қонунининг математик ифодаси, унинг интеграл, дифференциал ҳамда хусусий кўринишлари. Калорик коэффициентлар. Термодинамиканинг биринчи қонунини калорик коэффициентлар орқали ифодалаш.

Идеал газнинг турли жараёнлардаги кенгайиш иши, жараён иссиқлиги ва ички энергиянинг ўзгариши. Жоуль қонуни. Идеал газнинг адиабата тенгламаси. Пуассон тенгламалари. Энтальпия. Гесс қонуни ва ундан келиб чиқадиган хулосалар. Термокимё. Хосил бўлиш ва ёниш иссиқликлари. Иссиқлик сиғимининг ҳароратга боғлиқлиги. Реакция иссиқлик эффектнинг ҳароратга боғлиқлиги. Кирхгоф тенгламаси.

Термодинамиканинг иккинчи қонуни ва унинг таърифлари: Томсон (Кельвин), Оствальд, Клаузиус, Каратеодори. Энтропия тушунчаси. Карно цикли. Фойдали иш коэффициенти. Қайтар жараёнлар учун термодинамиканинг иккинчи қонуни. Келтирилган иссиқлик ва унинг тўлиқ дифференциал эканлиги. Энтропия экстенсивлик фактори эканлиги. Изоляцияланган системаларда термодинамик жараённинг ўз-ўзича боришини, йўналиши ва чегарасини белгиловчи умумий кўрсаткич. Максимал иш тушунчаси. Энергиянинг диссипацияси. Энтропиянинг тартибсизлик ўлчови эканлиги.

Қайтмас жараёнлар учун термодинамиканинг иккинчи қонуни. Тўлиқ қайтмас жараёнлар. Қайтмас ўз-ўзидан борувчи жараёнлар учун

изоляцияланган системада, изотермик қайтар жараёнлар ҳамда циклик қайтмас жараёнлар учун термодинамика иккинчи қонунининг ифодалари. Қайтар ва қайтмас жараёнлар учун термодинамика иккинчи қонунининг ифодаси. Термодинамика биринчи ва иккинчи қонунларининг умумлашган тенгламаси.

Термодинамиканинг 2-қонунини статистик асослаш. Больцман тенгламаси. Система ҳолатининг термодинамик эҳтимоллиги билан унинг энтропияси орасидаги боғланиш. Термодинамиканинг 1-қонуни абсолют қонун эканлиги ва термодинамиканинг 2-қонунининг статистик табиати. Флуктуациялар тушунчаси.

Турли жараёнларда энтропиянинг ўзгариши.

Термик ва калорик коэффицентлар орасидаги боғлиқлик.

Термодинамик потенциаллар. Характеристик функциялар. Изобарик-изотермик ва изохорик-изотермик потенциаллар. Гиббс ва Гельмгольц энергиялари. Гиббс-Гельмгольц тенгламалари. Кимёвий потенциал.

Кимёвий мувозанат. Массалар таъсири қонуни. Мувозанат константалари. Кимёвий реакциянинг изотерма тенгламаси (Вант-Гофф тенгламаси). Кимёвий реакциянинг изобарик ва изохорик тенгламалари. Кимёвий мойиллик. Реал системаларнинг термодинамикаси. Льюис-Рендалл постулати. Учувчанлик (фугитивлик) ва активлик тушунчалари.

Термодинамиканинг учинчи қонуни. Нернстнинг иссиқлик теоремаси. Планк постулати. Абсолют энтропия. Планк постулатидан келиб чиқадиган ҳулосалар. Абсолют нольга эриша олмаслик принципи. Мувозанат константасини Темкин ва Шварцман усулида ҳисоблаш. Нернстнинг иссиқлик теоремаси ва Планк постулатига асосланиб, термодинамик функцияларнинг стандарт қийматлари бўйича мувозанат константасини ҳисоблаш.

Статистик термодинамика. Статистик термодинамика вазибалари. Макро ва микроҳолатлар ва термодинамик эҳтимоллик. Фазавий фазо тушунчаси. Больцман тенгламаси. Статистик термодинамиканинг постулати. Ҳолатлар бўйича йиғинди. Больцман тақсимоти. Асосий термодинамик катталиклар учун статистик ифодалар. Уларни ҳолатлар бўйича йиғинди орқали ифодалаш. Аралаштириш энтропияси. Илгарилама, тебранма, айланма ва электрон ҳаракатлар ҳолатлари бўйича йиғиндилар.

Чизиқлимас термодинамика. Қайтмас (номувозанат) жараёнларнинг термодинамикаси. Оқимлар. Умумлашган кучлар. Квазистационар, стационар, экспоненциал кўринишда ўзгарувчи оддий ва лавинасимон жараёнлар. Оқим ва умумлашган куч орасидаги муносабат. Оқимни ҳаракатлантирувчи интензивлик факторлари. Иссиқлик оқимининг температура градиентига, масса оқимининг концентрация градиентига, электр оқимининг потенциал градиентига боғлиқлиги. Оқимларнинг ўзаро таъсири: термодиффузия, Дюфур эффекти, диффузион потенциал ва концентрацион кутбланиш. Оқимлар жараёнида система энтропиясининг ўзгариши. Энтропиянинг вақт бирлигида ортиши билан оқимлар ва умумлашган кучлар орасидаги боғланиш. Онзагернинг ўзаролик муносабати.

Кинетик коэффициентларнинг симметриклик принципи. Компенсацияланмаган иссиқлик. Компенсацияланмаган иссиқлик ва кимёвий мойиллик. Энтропиянинг ташқи ва ички ўзгариши. Энтропиянинг ҳосил бўлиш тезлиги. Изоляцияланган системалар учун энтропиянинг тўлиқ ўзгариши.

Номувозанат жараёнлар термодинамикасининг ривожланиш босқичлари. Пригожин, Глансдорф, Казимир ва бошқа олимларнинг номувозанат жараёнлар термодинамикасининг усулларини чизиқли бўлмаган соҳага тадбиқ қилиши.

Локал мувозанатлар ҳақидаги постулот.

Компенсацияланмаган иссиқликнинг термодинамик функцияларнинг ўзгариши билан боғлиқлиги.

Кимёвий ўзгарувчи, кимёвий мойиллик ва термодинамиканинг биринчи қонуни.

Очиқ системалар учун термодинамиканинг биринчи қонуни.

Фазавий мувозанат. Фаза, компонент, компонентлар сони, эркинлик даражаси тушунчалари. Гиббснинг фазалар қоидаси. Системанинг вариантлиги. Системаларнинг синфланиши. Бир компонентли системалар учун фазалар қоидаси. Сув ва олтингугурт учун ҳолат диаграммалари. Буғланиш эгриси учун Клапейрон–Клаузиус тенгламасининг дифференциал ва интеграл кўринишлари. Биринчи ва иккинчи тур фазавий ўтишлар. Эренфест тенгламаси. Полиморф ўтишлар. Моно-ва энантиотроп фазавий ўтишлар. Физик-кимёвий анализ.

Икки компонентли системалар. Совуш ва ҳолат диаграммалари. Ҳолат диаграммаларининг турли кўринишлари: кимёвий таъсир бўлмаган ва қаттиқ эритма ҳосил қилмайдиган; кимёвий таъсир бўлмаган ва чексиз эрийдиган қаттиқ эритмалар ҳосил қилувчи; кимёвий таъсир бўлмаган ва чекли эрийдиган қаттиқ эритмалар ҳосил қилувчи; конгруэнт суюқланувчи барқарор кимёвий бирикмалар тутган (қаттиқ эритмалар ҳосил бўлмайдиган); инконгруэнт суюқланувчи беқарор кимёвий бирикмалар тутган системаларнинг ҳолат диаграммалари.

Икки компонентли системаларнинг ҳолат диаграммаларини анализ қилишда ликвидус, солидус чизиқлари, эвтектив нуқта, эвтектик таркибли суюқ қотишма, эвтектик температура, фигуратив нуқта, каннода чизиғи, конгруэнт ва инконгруэнт суюқланувчи кимёвий бирикмалар, сингуляр ва дистектик нуқталар, перитектик нуқта каби тушунчалар. Ричаг елка қоидаси.

Қаттиқ эритмалар. Изоморфизм тушунчаси.

Уч компонентли системалар. Уч компонентли системанинг таркибини ифодалашда Гиббс ва Розебум усуллари. Бир хил ионли ва эвтоникага эга бўлган икки туз эритмасининг ҳолат диаграммаси. Тузлар сув билан гидратлар ёки қўш тузлар, комплекс бирикмалар ёки қаттиқ эритмалар ҳосил қилувчи мураккаб ҳолат диаграммалари.

Эритмалар. Эритмалар ҳақида умумий тушунчалар. Идеал, чексиз суюлтирилган ва реал эритмалар. Парциал моляр катталиклар. Гиббс-Дюгем ва Дюгем-Маргулис тенламалари. Эритмаларнинг замонавий назарияси:

сольватланиш ва гидратланиш, сольват қават тушунчаси. Регуляр ва атермал эритмалар. Эритма компонентларининг кимёвий потенциали. Активлик, активлик коэффициенти. Учувчанлик, учувчанлик коэффициенти.

Компонентнинг эритма устидаги буғ босими. Рауль ва Генри қонунлари. Идеал, чексиз суюлтирилган ва реал эритмалар учун Рауль ва Генри қонунлари.

Қаттиқ моддаларнинг эрувчанлиги. Шредер тенгламаси. Эбулиоскопик ва криоскопик қонунлар. Диффузия ва осмос. Осмотик босим қонунлари. Тақсимланиш коэффициенти. Экстракция.

Суюқлик-буғ мувозанати. Гиббс-Коновалов қонунлари. Вревский қонунлари. Азеотроп аралашмалар ва уларнинг хоссалари.

Электрокимё. Электролит эритмаларнинг тузилишлари ҳақида тушунчалар. (Т.Гродгус, М.Фарадей, С Аррениус). Аррениус назарияси. Ионларнинг ўзаро таъсирини термодинамик нуқтаи назаридан ифодалаш. Фаоллик ва фаоллик коэффициенти. Дебай-Хюккель назариясининг асосий эҳтимолликлари. Ион атмосферасининг потенциали. Электролитлар ҳақида замонавий тушунчалар. Солиштирма ва эквивалент электр ўтказувчанлик. Ионлар ҳаракатчанлиги ва Кольрауш қонуни. Ташиш сони. Оствальднинг суюлтириш қонуни. Кондуктометриқ титрлаш. Ионларнинг ҳаракатчанлиги, эквивалент электр ўтказувчанлик ва ташиш сонини Дебай-Хюккель-Онзагер назарияси асосида эритма таркибига боғлиқлигини талқини.

Оксидланиш-қайтарилиш реакцияларини кимёвий ва электрокимёвий амалга ошириш усуллари. Электрокимёвий жараёнлар термодинамикаси. Мувозанатдаги электрокимёвий занжирлар ва уларнинг ЭЮК, Нернст ва Гиббс-Гельмгольц тенгламалари. Электрод потенциалининг ҳосил бўлиши. Диффузион ва оксидланиш-қайтарилиш потенциаллари. Концентрацион элементлар. Электродларни синфлаш. Стандарт электродлар. ЭЮК ни аниқлаш усуллари. ЭЮК дан физик-кимёвий таҳлилда фойдаланиш. Металлар коррозияси.

Кимёвий кинетика. Кимёвий кинетика-кимёвий реакцияларнинг тезлиги ва механизми ҳақидаги фан. Унинг асосий тушунчалари. Кинетикани ўрганишнинг назарий ва амалий аҳамияти. Кинетик чизиклар ва уларни тузиш усуллари. Гомо- ва гетероген реакцияларга массалар таъсири қонунини қўллаш. Дифференциал ва интеграл кинетик тенгламалар.

Реакцияларнинг тартиби ва молекулярлиги. Реакция тартибини топишнинг Оствальд-Ноес, Вант Гофф ва бошқа усуллари. Кимёвий реакцияларнинг тезлик доимийсини ҳисоблаш усуллари. Реакция тезлигига таъсир этувчи омиллар: реагентлар концентрацияси, стерик омил, ҳарорат, эритувчининг табиати, ион кучи.

Кимёвий реакцияларнинг кинетик жиҳатдан табақаланиши. Оддий ва мураккаб реакциялар. Оддий реакциялар кинетикаси, уларга мос келадиган кинетик тенгламаларни келтириб чиқариш. Аррениус тенгламаси. Фаолланиш энергияси ва уни ҳисоблаш усуллари.

Кинетиканинг назариялари: фаол тўқнашувлар назарияси ва ўтиш ҳолат назарияси (фаолланиш комплекси).

Мураккаб реакциялар кинетикаси. Ёнма-ён ва кетма-кет кетадиган реакциялар кинетикаси.

Фотохимёвий реакциялар кинетикаси. Фотохимёвий чиқиш.

Ферментатив реакциялар кинетикаси. Мэхаэлс-Минтен тенгламаси.

Катализ. Катализнинг таърифи ва унинг умумий хусусиятлари. Кимёвий ва биокимёвий реакцияларда, кимёвий маҳсулотлар ишлаб чиқаришда катализнинг ўрни ва аҳамияти. Саноат миқёсида қўлланиладиган асосий каталитик жараёнлар. Гетероген катализаторларни олиш усуллари: чўктириш, шимдириш, механик аралашмалар ва металл қотишмалар тайёрлаш.

Гомоген ва гетероген каталитик жараёнларнинг табақаланиши. Гомоген катализнинг назариялари ва механизмлари. Гомоген катализда оралиқ бирикмалар. Гомоген катализнинг кинетикаси. Гомоген катализга мисоллар.

Гетероген катализ. Гетероген каталитик реакцияларнинг асосий босқичлари. Гетероген катализаторлар юзасидаги фаол марказларнинг мавжудлиги ҳақидаги тасаввурлар ва уларнинг табиати. Гетероген катализдаги оралиқ бирикмалар. Гетероген каталитик реакцияларда адсорбциянинг ўрни. Катализаторлар иштирокидаги гетероген реакцияларнинг механизмлари. Адсорбилаш қобилиятига қараб катализаторларнинг фаоллигини аниқлаш.

Катализаторларнинг асосий тавсифлари: фаоллиги, селективлиги (танлаб таъсир қилиши), унумдорлиги, регенерация қилишга қобилияти, солиштирма юзаси. Кимёвий реакцияларнинг селективлиги бўйича бошқаришнинг умумий ёндашувлари. Гетероген катализдаги фаоллантирувчилар ва захарлар ҳақидаги тушунчалар. Қайтар ва қайтмас захарланишлар. Каталитик захарлар вазифасини бажарадиган турли синфларга кирувчи бирикмалар.

**Фойдаланилишга тавсия этилаётган асосий дарсликлар
ва ўқув қўлланмалар рўйхати**

1. Howard Devoe Thermodynamics and chemistry. A.P.Ch.E. University of Maryland, 2015, 504 p.
2. Акбаров Х.И., Тиллаев Р.С., Саъдуллаев Б.У. “Физикавий кимё”. “Университет”, 2015, 436 бет.
3. Anatol Malijevsky Physical Chemistry in brief, Institute of Chemistry, Prague, 2005, 466 p.
4. Усмонов Х.У., Рустамов Х.Р., Рахимов Х.Р. Физик химия. Т: “Ўқит.”,
5. Стромберг А.Г., Семченко Д.П. Физическая химия. М. “Химия”: 2002.
6. Дамаскин Б.Б., Петрий О.А. Электрохимия: Учеб. пособие М: «Высшая школа», 1978. 296 с.
7. Статистик термодинамика: Ўқ.қўл. Б.У. Сагдуллаев, Тошкент, 1990.
8. Мищенко К.П. и др. Практические работы по физической химии. Л: ГХИ. 1982: Физик кимёдан амалий мағулотлар. Тошкент: “Ўқитувчи”, 1998. (Аkbаров Х.И., Тиллаев Р.С. таржимаси).
9. Акбаров Х.И. Физик кимёдан амалий машғулотлар. Тошкент, 1991
10. Акбаров Х.И., Тиллаев Р.С. “Физикавий кимёдан амалий машғулотлар”, Тошкент; ЎзМУ, 2006, 43 б.
11. Luisa Filippini and Duncan Sutherland “Nanotechnologies: principles, applications, implications and hand-on activities. 2013.
12. Jeremy Ramsden “Essentials of nanotechnology” 2009.
13. William M. Davis. Physical Chemistry a modern introduction. CRC Press, 2012.
14. Don Shilly. Essential of Physical Chemistry, CRC Press, 2012.
15. Акбаров Х.И. Физикавий кимё курсидан услубий қўлланма. Тошкент. 2006, 66 бет.
16. Klaus Capelle. A Bird’s-Eye View of Density-Functional Theory. arxiv: cond-mat/0211443v5 [cond-mat.mtrl-sci] 18 Nov 2006.

Интернет ресурслар:

17. <http://www.chem.msu.ru>
18. <http://www.rushim.ru>
19. <http://www.Ziyonet.uz>