

## Kimyəvi kinetika və kataliz ixtisası üzrə fəlsəfə doktoru imtahanının sualları

1. Kimyəvi kinetika. Kimyəvi reaksiyanın sürəti. Reaksiya sürətinin diferensial və inteqral tənlikləri. Kinetikanın əsas postulatı.
2. Reaksiyanın tərtibi və molekulyarlığı.
3. Temperaturun reaksiya sürətinə təsiri. Arrhenius tənliyi və onun fiziki mənası.
4. Aktivləşmə enerjisinin eksperimental təyini metodları.
5. Keçid halı nəzəriyyəsinin əsas müddəaları.
6. Aktiv toqquşmalar nəzəriyyəsi. Sterik əmsal.
7. Reaksiyanın koordinatı və potensial enerjinin səthi.
8. Temperaturun reaksiya mexanizminə təsiri.
9. Sürətli və yavaş mərhələlərə malik reaksiyalarda sürət tənliyinin qurulması.
10. Eksponensial hədd qarşısındakı vuruğun fiziki mənası.
11. İzotop effektinin kinetikada tətbiqi.
12. Dönən reaksiyaların kinetikasi.
13. Ardıcıl reaksiyaların kinetikasi.
14. Paralel reaksiyaların kinetikasi.
15. Zəncirvari reaksiyaların mərhələləri və kinetikasi.
16. Stasionar qatılıq yaxınlaşmasının tətbiqi şərtləri.
17. Fotokimyəvi reaksiyalar. Fotokimyəvi reaksiyanın sürəti.
18. Avtokatalitik reaksiyalar və onların kinetik xüsusiyyətləri.
19. Partlayış reaksiyalarının kinetik meyarları.
20. Rəqsi kimyəvi reaksiyaların mexanizmi .
21. Qeyri-xətti kinetikanın əsas xüsusiyyətləri.
22. Tandem reaksiyalar.
23. Katalitik zəncirvari reaksiyalarda inhibitorların rolu.
24. Heterogen katalizin əsas mərhələləri.
25. Adsorbsiyanın fiziki və kimyəvi növlərinin müqayisəsi.
26. Ləngmürün adsorbsiya izotermi və onun müddəaları.
27. Polimolekulyar adsorbsiya. BET nəzəriyyəsi və adsorbentin səthinin sahəsinin təyini.
28. Braun-Jons-Xarris (BJH) metodu və onun katalizdə tətbiqi.
29. Aktiv mərkəz anlayışı və onun eksperimental sübutları.
30. Diffuziya məhdudiyyətlərinin kinetikaya təsiri.
31. Mikrokinetik modelləşdirmə.
32. Katalizatorun dezaktivləşmə mexanizmləri.
33. Seçicilik və aktivlik anlayışlarının kinetik izahı.
34. Nanokatalizatorların üstünlükləri və problemləri.
35. Homogen katalitik dövrün mərhələləri.
36. Keçid metal komplekslərinin katalitik aktivliyi.
37. Liqandların elektron və sterik effektləri.
38. Çevrilmə sayı (TON) və çevrilmə tezliyi (TOF).
39. Asimmetrik katalizin prinsipləri.
40. Homogen katalizdə reaksiya mexanizminin sübut edilməsi üsulları.
41. Həllədiçi effektinin katalitik sürətə təsiri.
42. Homogen və heterogen katalizin müqayisəli təhlili.
43. Mixaelis–Menten tənliyinin çıxarılışı.

44.  $K_m$  və  $V_{max}$  parametrlərinin fiziki mənası.
45. Rəqabətli, qeyri-rəqabətli və qarışıq inhibitorlaşma.
46. Allosterik fermentlərin kinetikasi.
47. pH və temperaturun fermentin aktivliyinə təsiri.
48. Enzim katalizinin selektivliyi.
49. Biokatalizin sənayedə tətbiqləri.
50. Reaksiya sürətinin ölçülmə üsulları.
51. Stop-flow və flash-photolysis metodları.
52. Spektroskopik üsulların kinetikada tətbiqi.
53. Aralıq məhsulların identifikasiyası yolları.
54. Kinetik məlumatların statistik işlənməsi.
55. Model uyğunluğu və parametrlərin optimallaşdırılması.
56. Eksperimental səhvlərin kinetik analizə təsiri.
57. İdeal sıxışdırma və ideal qarışma reaktorları. Onların müqayisəsi.
58. Axında gedən reaksiyaların kinetikasi.
59. Qapalı sistemdə gedən reaksiyaların kinetikasi.
60. Reaktorun ölçüsünün kinetikaya təsiri.
61. Sənaye katalitik proseslərində kinetik problemlər.
62. Hidrogen energetikasi.
63. CO-nun oksidləşməsi üçün katalitik mexanizmin kinetik analizi.
64. Olefinlərin polimerləşmə reaksiyalarının kinetikasi.
65. Kinetik diferensial tənliklərin analitik və ədədi həlli.
66. DFT metodunun katalizdə tətbiqi.
67. Molekulyar dinamika simulyasiyalarının kinetikaya töhfəsi.
68. Enerji baryerlərinin hesablanması.
69. Machine learning metodlarının kinetik modelləşdirmədə istifadəsi.
70. Katalizin enerji baxımından reaksiya yolunu necə dəyişdirdiyini izah edin.
71. "Sürət-limit mərhələsi" anlayışının müasir şərhı.
72. Kinetika və termodinamikanın qarşılıqlı əlaqəsi.
73. Katalizator dizaynında kinetik düşüncənin rolu.
74. Müasir katalizdə əsas elmi problemlər.
75. Yaşıl kimyada katalizin əhəmiyyəti.