AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASI ELM VƏ TƏHSİL NAZİRLİYİ

BAKI DÖVLƏT UNİVERSİTETİ

2316.01- “Kimyəvi kinetika və kataliz” ixtisası üzrə fəlsəfə doktoru proqramı əsasında doktoranturaya qəbul üçün

P R O Q R A M

Bakı Dövlət Universitetinin Kimya fakültəsinin Elmi Şurasının qərarı ilə çapa tövsiyə edilmişdir.
(2026-cı il 02 aprel 09 saylı protokol)

BAKI 2026

Tərtib edən(lər): BDU-nun “Fiziki və kolloid kimya” kafedrasının əməkdaşları,
k.e.d, prof.E.İ.Əhmədov
k.e.d, prof.S.E.Məmmədov
k.e.n.,dos.T.O.Qəhrəmanov

Elmi redaktor: BDU-nun “Fiziki və kolloid kimya” kafedrasının əməkdaşı,
k.e.d, prof.C.İ.Mirzai

Rəy verən(lər): BDU-nun “Ekoloji kimya” kafedrasının əməkdaşı,
k.e.d, prof.N.T.Şəmilov

AR ETN Kimya İnstitutunun əməkdaşı,
k.e.d., prof. A.C.Əfəndi

Izahat vərəqi

Proqramın məqsədi - kimyəvi kinetika və kataliz sahəsində doktorantlara kimyəvi reaksiyaların sürətini, mexanizmini və onları idarə edən amilləri dərindən öyrətmək, kinetik modellərin qurulması və tətbiqi bacarığın, katalitik proseslərin fiziki-kimyəvi mahiyyətini, mexanizmlərini və tətbiqlərini öyrətmək, katalitik sistemlərin kinetik təhlili və optimallaşdırılması bacarıqlarını formalaşdırmaqdır.

Proqramın əsas vəzifələri

- Reaksiya sürət qanunlarının mənimsədilməsi.
- Reaksiya mexanizmlərinin təhlilinin öyrədilməsi.
- Temperatur, təzyiq və mühitin təsirlərinin izahı.
- Müasir kinetik nəzəriyyələrlə tanışlıq.
- Katalizin nəzəri əsaslarının mənimsədilməsi.
- Homogen və heterogen katalizin mexanizmlərinin öyrədilməsi.
- Fermentativ katalizin əsaslarının izahı.
- Katalizatorların aktivliyi və selektivliyinin təhlili.

Yekun qiymətləndirmə növü: imtahan.

Mövzular və onların məzmunu

I. Kvant kimyasının əsasları

Kvant mexanikasının prinsipləri. Dalğa funksiyası. Şredinger tənliyi. Operatorlar və ölçülən kəmiyyətlər.

Atom və molekulların quruluşu. Atom orbitalları. Molekulyar orbitallar. Kimyəvi rabitənin kvant təsviri. Valent rabitəsi nəzəriyyəsi. Xartre-Fok metodu. Sıxlıq Funksional Nəzəriyyəsi (DFT).

Spektroskopiya. Atom və molekul spektrləri. IR, UV-Vis, NMR metodlarının fiziki əsasları.

II. Kimyəvi termodinamika

Termodinamikanın əsas anlayışları və qanunları. Hal funksiyaları və proseslər. Termodinamikanın birinci, ikinci və üçüncü qanunları. Entropiya və onun fiziki mənası. Termodinamik potensiallar (Gibbs, Helmholts və s.). Kimyəvi potensial. Gibbsin fazalar qaydası. Fazalar tarazlığı və faza diaqramları. Kimyəvi tarazlıq, tarazlıq sabiti. Reaksiyaların temperaturdan asılılığı (Vant-Hoff tənliyi).

III. Kimyəvi kinetika vəə kataliz.

Kimyəvi kinetikanın nəzəri əsasları. Kimyəvi kinetikanın predmeti və vəzifələri. Kimyəvi kinetikanın fiziki kimyada yeri. Reaksiyanın sürəti anlayışı. Reaksiyanın mexanizmi və kinetika ilə əlaqəsi.

Reaksiyanın sürəti və kinetik tənliklər. Reaksiya sürətinin tərifi. Diferensial və inteqral sürət tənlikləri. Sıfırıncı, birinci, ikinci və daha yüksək tərtibli reaksiyalar. Yarımparçalanma müddəti.

Elementar reaksiyalar. Mono-, bi- və trimolekulyar reaksiyalar. Toqquşma nəzəriyyəsi. Sterik amil.

Kimyəvi reaksiyaların mexanizmi. Reaksiyanın mexanizminin müəyyən edilməsi. Təcrübə

məlumatlarından mexanizmin çıxarılması. Sürəti müəyyən edən mərhələ.

Aralıq hissəciklər. Radikallar. İonlar. Aktiv komplekslər.

Mürəkkəb reaksiyalar. Ardıcıl reaksiyalar. Paralel reaksiyalar. Dönən reaksiyalar. Bodenşteynin stasionar qatılıqlar metodu. Kvazitarazlıq metodu.

Temperatur və mühit faktorlarının təsiri.

Temperaturun təsiri. Vant-Hoff qaydası. Temperatur əmsalı. Arrenius tənliyi. Aktivləşmə enerjisi. Eksponensial hədd qarşısındakı vuruq.

Təzyiqin təsiri. Qaz fazasında gedən reaksiyalar. Lindeman mexanizmi.

Həlledicinin təsiri. Məhlullarda gedən reaksiyalar. Dielektrik sabiti. Solvatlaşma. İon reaksiyalarının kinetikası.

Keçid halı və müasir kinetik nəzəriyyələr. Keçid halı nəzəriyyəsi. Aktiv kompleks anlayışı. Enerji profilləri. Eyrinq tənliyi.

Molekulyar dinamika. Potensial enerji səthləri. Reaksiyanın koordinatı.

Zəncirvari və fotokimyəvi reaksiyalar.

Zəncirvari reaksiyalar. Zəncirin yaranması. Zəncirin inkişafı. Zəncirin qırılması. Partlayış həddi. Zənirvari reaksiyaların kinetikası.

Fotokimyəvi reaksiyalar. Kvant çıxımı. Şüalanmanın intensivliyi. Fotokimyəvi kinetika.

Katalizin nəzəri əsasları. Katalizin mahiyyəti. Kataliz anlayışı. Katalizin termodinamik aspektləri. Katalizin kinetik xüsusiyyətləri.

Katalizin növləri. Homogen kataliz. Heterogen kataliz. Biokataliz. Katalizatorun aktivliyi, seçiciliyi və stabilliyi. Turnover number (TON) və turnover frequency (TOF) anlayışları.

Homogen kataliz. Mexanizmlər. Turşu–əsas katalizi. Redoks katalizi. Kompleks birləşmələrlə kataliz.

Keçid metalları katalizi. Koordinasiya birləşmələri. Katalitik tsikllər. Ligandların rolu.

Heterogen kataliz. Səthdə katalitik proseslər. Adsorbsiyanın növləri. Aktiv mərkəzlər. Səth reaksiyaları. Lənqmür, Freyndlix, BET izotermləri.

Kinetik modellər. Lənqmür–Hinşelvud mexanizmi. Eley–Rideal mexanizmi. Mars–van Krevelen mexanizmi.

Diffuziya məhdudiyyətləri. Xarici və daxili diffuziya. Effektivlik əmsalı.

Fermentativ kataliz. Fermentlərin quruluşu. Aktiv mərkəz. Mixaelis–Menten kinetikası. Ferment inhibitorları. Rəqabətli və qeyri-rəqabətli ingibitorlaşma.

Katalizatorların dezaktivləşməsi. Katalizatorun zəhərlənməsi. Kokslaşma. Sinterləşmə. Regenerasiya üsulları.

Katalizatorların hazırlanması. Çökmə, birgə çökmə, hopdurma, zol-gel üsulları. Nanostrukturlaşdırılmış katalizatorlar. Daşıyıcı materiallar (seolit, Al_2O_3 və s.).

Kinetik eksperimental metodlar. Reaksiya sürətinin ölçülməsi. Spektroskopik üsullar. Təzyiq və həcmin dəyişməsinin ölçülməsi. Sürətli reaksiyaların öyrənilməsi (relaksasiya metodları).

Hesablama və nəzəri metodlar. Kvant-kimyəvi hesablamalar. Potensial enerjinin səthləri. Molekulyar dinamika və kinetik Monte-Karlo üsulları.

Sənaye katalizi və tətbiqlər.

Ammonyakın sintezi. Neft-kimya prosesləri. Ətraf mühit katalizi. Yaşıl katalizin prinsipləri. C-C rabitəsinin yaranması. Asimmetrik kataliz. Hidrogen istehsalı. CO_2-nin reduksiyası. Nanokataliz və fotokataliz, Elektrokataliz.

Ə D Ə B İ Y Y A T

1. E.İ.Əhmədov, S.E.Məmmədov, N.A.Rzayeva. Fiziki kimya I hissə, Bakı, 2009, 530 s.
2. E.İ. Əhmədov, S.E. Məmmədov, Y.İ. Cəfərov, N.A. Rzayeva. Fiziki kimya, II hissə, 2014, 412 s.
3. Y.İ. Cəfərov. Fiziki kimya. Bakı, SkyE, 2021, 520 s.
4. Fuad Kərimli. Fiziki kimya. Bakı, BDU Nəşr Evi, 2025, 398 s.
5. В.В.Еремин, С.И.Каргов, И.А.Успенская, Н.Е.Кузьменко, В.В.Лунин. Основы физической химии. Теория и задачи: Учеб. Пособие для вузов. М.:Издательство «Экзамен», 2005, 480 с.
6. Я.И.Герасимов и др. Курс физической химии. В 2-х т. М.:Химия, 1969, т. 2.
7. А.А. Жуховицкий, Л.А.Шварцман. Физическая химия. М.:Металлургия, 2001, 688 с.
8. А.Г.Стромберг, Д.П.Семченко. Физическая химия. М.:Высш.школа, 2009, 527 с.

9. А.Н.Матвеев. Молекулярная физика. М.:Высшая школа, 1981, 396 с.
10. Н. М. Эмануэль, Д. Г. Кнорре. Курс химической кинетики: Учебник для хим. фак. унтов.— 4-е изд., перераб. и доп.— М.: Высш. шк., 1984.Ф.Даниэльс, Р.Олберти. Физическая химия. М.:Мир.1978, 645с.
11. И.Н.Годнев, К.С.Краснов, Н.К.Воробьев и др. Физическая химия. М.:Высш.шк., 1982г., 687с.
12. О.В.Крылов. Гетерогенный катализ. Издательство: М.: Академкнига. 2004 г; 680 с.
13. Г.М.Панченков, В.П.Лебедев. Химическая кинетика и катализ. М.:Химия,1985, 592с.
14. P., Atkins, &, J. de Paula. Physical Chemistry. 11th ed. Oxford: Oxford University Press, 2018.
15. K. Laidler.– Chemical Kinetics, 1987.
16. R. Masel .– Chemical Kinetics and Catalysis.
17. H. Fogler.– Elements of Chemical Reaction Engineering.
18. G. Bond.– *Catalysis by Metals.*
19. G. Somorjai. – *Introduction to Surface Chemistry and Catalysis.*