

1. Termodinaminės funkcijos ir jų išvestinės

1.1. Termodinamikos objektas ir pagrindinės termodinamikos sąvokos

Reakcijų energetinė pusė ir su tuo susiję dėsningumai. Termodinaminė sistema. Komponentai, nepriklausomi komponentai. Atvira ir izoliuota termodinaminės sistemos. Sistemos būseną. Termodinaminiai parametrai. Termodinaminis procesas. Būsenos funkcijos. Cikliniai procesai. Fazė ir paviršius. Homogeninės ir heterogeninės sistemos.

1.2. Vidinė energija

Pilnutinė sistemos energija, jos dedamosios. Vidinė energija kaip būsenos funkcija.

1.3. Pirmasis termodinamikos dėsnis

Energijos tvermės dėsnis, jo įvairios formuluotės. Energijos virsmai. Perpetuum mobile. Mašina. Sistemos atliekamas darbas.

1.4. Izobarinis ir izochorinis procesai

Vidinės energijos pokytis izobariniuose ir izochoriniuose procesuose. Endoterminiai ir egzoterminiai procesai. Darbas izobariniame ir izochoriniame procese. Cheminės reakcijos galimas atlikti darbas.

1.5. Entalpija

Entalpija – termodinaminė funkcija. Entalpijos ryšys su sistemos vidine energija ir darbu. Entalpija ir entalpijos pokytis. Cheminių procesų entalpijų pokyčiai. Virsmų entalpijų pokyčiai. Hess'o dėsnis, jo išvedimas. Termocheminiai skaičiavimai.

1.6. Antrasis termodinamikos dėsnis.

Šilumos mainai sistemoje. Procesų savaimingumas. Antrojo termodinamikos dėsnio formuluotės. Antrojo termodinamikos dėsnio išvedimas. Entropija – termodinaminis ir statistinis aspektai.

1.7. Laisvoji Gibbs'o energija, laisvoji Helmholtz'o energija

Darbas, kaip termodinaminė funkcija. Maksimalus darbas. Savaiminių procesų krypties kriterijus – entropinis ir entalpinis faktoriai. Termodinaminė pusiausvyra. Termodinaminių funkcijų (entalpijos, entropijos, darbo, vidinės energijos, laisvosios Gibbs'o energijos, laisvosios Helmholtz'o energijos) tarpusavio ryšys.

1.8. Pusiausvyrieji procesai

Pusiausvyros konstanta. Pusiausvyros laipsnis. K_c ir K_p . Pusiausvyros konstantos ryšys su kitomis termodinaminės būsenos funkcijomis. Van't Hoff'o (cheminės reakcijos izotermos) lygtis.

1.9. Šiluminė talpa

Molinė šiluminė talpa. Savitoji šiluminė talpa (savitoji šiluma). Šiluminės talpos ryšys su termodinaminės būsenos funkcijomis. Kietųjų kūnų šiluminė talpa. C_p ir C_v . Einstein'o šiluminės talpos teorija. Debye traktuotė. Tarasov'o formulės kietųjų kūnų šiluminėms talpoms skaičiuoti. Šiluminės talpos kitimas vykstant virsmams. Kirchhoff'o dėsnis. Skaičiavimai, naudojantis Kirchhoff'o dėsniu.

1.10. Fundamentaliosios Gibbs'o lygtys

Termodinaminių funkcijų tarpusavio ryšys išreikštas per jų pilnutinius diferencialus. Termodinaminių funkcijų ryšys daugiakomponentėje sistemoje. Fundamentalųjų Gibbs'o lygčių išvedimas. Cheminis potencialas kaip termodinaminė funkcija.

2. Medžiagų būsenos

2.1. Fizinės būsenos

2.1.1. Dujos

Dujinės būsenos bendrieji dėsningumai. Idealiųjų dujų, joms galiojantys dėsniai. Realiosios dujos, jų savybių skirtumas (panašumas) nuo idealiųjų dujų. Pataisos, įvedamos realiųjų dujų lygtyse. Superkrizinė būseną. Superkrizinių skysčių egzistavimo sąlygos. Superkrizinių skysčių savybės. Krizinė opalescencija, jos stebėjimas. Plazminė būseną. Plazmos savybės. Ideali plazma. Aukštatemperatūrinė ir žematemperatūrinė plazma. Rekombinacinis plazmos spinduliavimas.

2.1.2. Skystis

Skysčių savybės. Artimoji tvarka skysčiuose. Skysčių klampa. Vilgymas. Kapiliarinės jėgos. Skysčių garavimas ir virimas. Superskystoji būseną (supertakūs skysčiai). Koloidinės sistemos. Koloidinių sistemų palyginimas su klasikiniiais skysčiais. Skystieji kristalai (nematiniai, smektiniai, cholesteroliniai). Optinė anizotropija skystuosiuose kristaluose. Viskoelastinės būsenos, jų palyginimas su skysčiais ir kietaisiais kūnais.

2.1.3. Kietoji fazė

Kristalai. Kristalinės būsenos bendrieji dėsningumai. Svarbiausios kristalų savybės. Kristalinių medžiagų įvairovė ir cheminiai ryšiai kristaluose. Stikliškoji būseną, faktoriai, lemiantys stikliškosios būsenos susidarymą. Stiklų klampa. Stiklėjimo procesas. Stikliškosios būsenos metastabilumas. Elastiškoji būseną. elastiškumo prigimtis. Superplastiškoji būseną. Ugniai atsparios medžiagos (keramika). Unikaliuos keramikos savybės. Šiuolaikinių keraminių medžiagų asortimentas. Kai kurios perspektyvios kietosios fazės ir technologijos: monokristalai, zolių-gelių proceso metu gautos medžiagos, neoksidinė keramika, anglinės medžiagos. Bose – Einstein'o kondensatas.

2.2. Magnetinės būsenos

Magnetizmo teorija. Įmagnetėjimas, magnetinė indukcija, magnetinis jautris, magnetinė skvarba. Diamagnetikai, paramagnetikai, feromagnetikai, ferimagnetikai, antiferomagnetikai. Įvairių medžiagų magnetinės savybės. Magnetovaržinės medžiagos. Superlaidininkų magnetinės savybės.

2.3. Elektrostatinės būsenos

Medžiagų elektrostatinės savybės. Dielektrikai. Feroelektrikai. Antiferoelektrikai. Ferielektrikai. Medžiagų elektrostatinių savybių panaudojimas.

2.4. Elektrokinetinės būsenos

Kietųjų kūnų elektroninė sandara. Valentinių juostų teorija. Fermi energija. Metalų elektrinis laidumas. Superlaidininkai ir superlaidumo teorija. Puslaidininkiai. Puslaidininkių juostinė struktūra. Laisvieji krūvininkai puslaidininkiuose. Grynieji ir priemaišiniai puslaidininkiai. Priemaišinių puslaidininkių tipai. Izoliatoriai.

2.5. Optinės būsenos

Medžiagų ir elektromagnetinės spinduliuotės sąveika. Skaidrumas ir opališkumas. Šviesos spindulių refrakcija. Optinis aktyvumas. Dichroizmas. Fluorescencinės medžiagos.

3. Fazinės kondensuotų sistemų diagramos

3.1. Fazinių diagramų sudarymo principai

Fazinės diagramos kieto kūno chemijoje. Fazinių diagramų parametrai. Informacija, kurią galima gauti nagrinėjant fazinės būsenos diagramas. Gibbs'o fazių taisyklė, jos išvedimas. Fazinių diagramų interpretacija: fazių skaičius sistemoje, komponentų skaičius sistemoje, laisvės laipsnių skaičius. Fazinė pusiausvyra ir metastabilios fazės.

3.2. Monokomponentės sistemos

Gibbs'o – Helmholtz'o lygtys. Clausius – Clapeyron'o lygtis. Fazės ir fazinės būsenos. Pirmos rūšies faziniai virsmai. Antros rūšies faziniai virsmai. Termodinaminė fazių virsmų klasifikacija. Vandens fazinės būsenos diagrama ir ledo struktūros.

3.3. Dikomponentės sistemos

Procesai praskiestuose tirpaluose: Raoult'o dėsnis, ebulioskopija ir krioskopija. Nesimaišančių skysčių distiliacija, osmosas, ekstrakcija. Parcialiniai moliniai dydžiai. Termodinaminių parametrų ir būsenos diagramų sąsaja. Fazinės diagramos ir sverto taisyklė. Eutektikinio tipo diagramos. Eutektikinės sistemos susidarant cheminiams junginiams. Fazės ribos. Daltonidai ir bertolidai. Struktūros defektai ir fazė. Kristalografinio poslinkio struktūros. Binarinės sistemos su nesimaišančiais skysčiais. Binarinės sistemos, susidarant kietiesiems tirpalams. Binarinės sistemos vykstant faziniams firsmams kietoje fazėje

3.4. Trikomponentės sistemos

Sudarymo principai. Sistemos, kuriose nesidaro junginiai. Sistemos su binariais junginiais. Subsolidusinės pusiausvyros. Sistemos su kietaisiais tirpalais.

LITERATŪRA

1. А. Вест. Химия твердого тела. Теория и приложения. Москва, Мир, 1988, ч. I, ч. II.
2. А. Я. Угай. Общая химия, Москва, Высшая школа, 1984.
3. J. Janickis. Fizikinė chemija, Vilnius, Mokslas, 1987.
4. Б. Ф. Ормонт. Введение в физическую химию и кристаллохимию полупроводников. Москва, Высшая школа, 1982.
5. Interneto šaltiniai