

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
ЭЛЕКТРОТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
«ЛЭТИ» ИМ. В.И. УЛЬЯНОВА (ЛЕНИНА)



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины

«ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

для подготовки аспирантов по направлению

04.06.01 – «Химические науки»

по направленности

«Физическая химия»

Санкт-Петербург

2018

СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

№№ учебных планов:	6904043, 8904043
Обеспечивающий институт:	ИФИО
Обеспечивающая кафедра:	ФХ
Общая трудоемкость (ЗЕТ)	3
Курс	5
Семестр	10

Виды занятий

Лекции (академ. часов)	2
Практические занятия (академ. часов)	0
Лабораторные занятия (академ. часов)	0
Все аудиторные (контактные) занятия (академ. часов)	2
Самостоятельная работа (академ. часов)	106
Всего (академ. часов)	108

Вид промежуточной аттестации

Экзамен (семестр)	10
-------------------	----

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры ФХ 20.04.18, протокол № 6.

Рабочая программа рассмотрена и одобрена учебно-методической комиссией института фундаментального инженерного образования 25.04.18, протокол № 5.

АННОТАЦИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

«ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

Основной целью дисциплины является получение аспирантами получение аспирантами углубленных знаний о теоретическом и экспериментальном исследовании физической химии, развитие приобретенных ими навыков исследования путем использования накопленных знаний в анализе и интерпретации результатов.

SUBJECT SUMMARY

«PHYSICAL CHEMISTRY»

The main purpose of discipline is to provide the graduate students receive postgraduate in-depth knowledge about the theoretical and experimental study of physical chemistry, the development of their acquired research skills by using the accumulated knowledge in the analysis and interpretation of results.

ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

1. Знать основные понятия, соотношения и способы теоретического описания изучаемой физической химии, ее методы генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач, в области физической химии и в междисциплинарных областях.

2. Уметь применять полученные знания при выполнении практических заданий, расчетов, осваивать вопросы, выносимые на самостоятельное изучение, анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач и оценивать потенциальные выигрыши/проигрыши реализации этих вариантов при решении исследовательских и практических задач генерировать новые идеи, поддающиеся операционализации исходя из наличных ресурсов и ограничений.

3. Владеть основами математического аппарата применяемого для описания физической химии, навыками проведения теоретического исследования в различных областях физической химии, способностью приобретать новые знания, используя современные образовательные и информационные технологии, навыками анализа возможности создания новых методик и технологий на базе проведенных исследований, навыками планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов.

Перечень компетенций, в формировании которых участвует дисциплина, приведен в матрице компетенций, прилагаемой к ООП.

Настоящая программа составлена на основе «Программы кандидатских экзаменов по истории и философии науки, иностранному языку и специальным дисциплинам», утвержденной приказом Минобрнауки России от 8 октября 2007 г. № 274 (зарегистрирован Минюстом России 19 октября 2007 г., регистрационный № 10363).

МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП

Дисциплина «Физическая химия» относится к вариативной части ООП. Дисциплина преподается на основе знаний, полученных при освоении программы магистратуры или специалитета, и обеспечивает подготовку выпускной научной квалификационной работы (диссертации).

СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Введение (2 академ. часа)

Содержание, цель и значение дисциплины в подготовке аспирантов, ее связь с другими дисциплинами и подготовкой кандидатской диссертации.

Раздел 1. Строение вещества

Тема 1. Основы классической теории химического строения (4 академ. часа)

Основные положения классической теории химического строения. Структурная формула и граф молекулы. Изомерия. Конформации молекул. Связь строения и свойств молекул.

Тема 2. Физические основы учения о строении молекул (6 академ. часов)

Механическая модель молекулы. Потенциалы парных взаимодействий. Методы молекулярной механики и молекулярной динамики при анализе строения молекул. Общие принципы квантово-механического описания молекулярных систем. Стационарное уравнение Шредингера для свободной молекулы. Адиабатическое приближение. Электронное волновое уравнение. Потенциальные кривые и поверхности потенциальной энергии. Их общая структура и различные типы. Равновесные конфигурации молекул. Структурная изомерия. Оптические изомеры. Колебания молекул. Нормальные колебания, амплитуды и частоты колебаний, частоты основных колебательных переходов. Колебания с большой амплитудой. Вращение молекул. Различные типы молекулярных волчков. Вращательные уровни энергии.

Электронное строение атомов и молекул. Одноэлектронное приближение. Атомные и молекулярные орбитали. Электронные конфигурации и термы атомов. Правило Хунда. Электронная плотность. Распределение электронной плотности в двухатомных молекулах. Корреляционные орбитальные диаграм-

мы. Теорема Купманса. Пределы применимости одноэлектронного приближения. Интерпретация строения молекул на основе орбитальных моделей и исследования распределения электронной плотности. Локализованные молекулярные орбитали. Гибридизация. Электронная корреляция в атомах и молекулах. Её проявления в свойствах молекул. Метод конфигурационного взаимодействия. Представления о зарядах на атомах и порядках связей. Различные методы выделения атомов в молекулах. Корреляции дескрипторов электронного строения и свойств молекул. Индексы реакционной способности. Теория граничных орбиталей.

Тема 3. Симметрия молекулярных систем (4 академ. часа)

Точечные группы симметрии молекул. Понятие о представлениях групп и характерах представлений. Общие свойства симметрии волновых функций и потенциальных поверхностей молекул. Классификация квантовых состояний атомов и молекул по симметрии. Симметрия атомных и молекулярных орбиталей, - и -орбитали. -Электронное приближение. Влияние симметрии равновесной конфигурации ядер на свойства молекул и их динамическое поведение. Орбитальные корреляционные диаграммы. Сохранение орбитальной симметрии при химических реакциях.

Тема 4. Электрические и магнитные свойства (4 академ. часа)

Дипольный момент и поляризуемость молекул. Магнитный момент и магнитная восприимчивость. Эффекты Штарка и Зеемана. Магнитно-резонансные методы исследования строения молекул. Химический сдвиг. Оптические спектры молекул. Вероятности переходов и правила отбора при переходах между различными квантовыми состояниями молекул. Связь спектров молекул с их строением. Определение структурных характеристик молекул из спектроскопических данных.

Тема 5. Межмолекулярные взаимодействия (4 академ. часа)

Основные составляющие межмолекулярных взаимодействий. Молекулярные комплексы. Ван-дер-ваальсовы молекулы. Кластеры атомов и молекул. Водородная связь. Супермолекулы и супрамолекулярная химия.

Тема 6. Основные закономерности в строении молекул (4 академ. часа)

Строение молекул простых и координационных неорганических соединений. Полиядерные комплексные соединения. Строение основных типов органических и элементоорганических соединений. Соединения включения.

Тема 7. Строение конденсированных фаз (6 академ. часов)

Структурная классификация конденсированных фаз. Идеальные кристаллы. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Реальные кристаллы. Типы дефектов в реальных кристаллах. Кристаллы с неполной упорядоченностью. Доменные структуры. Симметрия кристаллов. Кристаллографические точечные группы симметрии, типы решеток, сингонии. Понятие о пространственных группах кристаллов. Индексы кристаллографических граней. Атомные, ионные, молекулярные и другие типы кристаллов. Цепочечные, каркасные и слоистые структуры. Строение твердых растворов. Упорядоченные твердые растворы. Аморфные вещества. Особенности строения полимерных фаз. Металлы и полупроводники. Зонная структура энергетического спектра кристаллов. Поверхность Ферми. Различные типы проводимости. Колебания в кристаллах. Фононы. Жидкости. Мгновенная и колебательно усреднённая структура жидкости. Ассоциаты и кластеры в жидкостях. Флуктуации и корреляционные функции. Структура простых жидкостей. Растворы неэлектролитов. Структура воды и водных растворов. Структура жидких электролитов. Мицеллообразование и строение мицелл.

Мезофазы. Пластические кристаллы. Жидкие кристаллы (нематики, смектики, холестерики и др.).

Тема 8. Поверхность конденсированных фаз (4 академ. часа)

Особенности строения поверхности кристаллов и жидкостей, структура границы раздела конденсированных фаз. Молекулы и кластеры на поверхности. Структура адсорбционных слоев.

Раздел 2. Химическая термодинамика

Тема 1. Основные понятия и законы термодинамики (6 академ. часов)

Основные понятия термодинамики: изолированные и открытые системы, равновесные и неравновесные системы, термодинамические переменные, температура, интенсивные и экстенсивные переменные. Уравнения состояния. Теорема о соответственных состояниях. Вириальные уравнения состояния. Первый закон термодинамики. Теплота, работа, внутренняя энергия, энталпия, теплоемкость. Закон Гесса. Стандартные состояния и стандартные теплоты химических реакций. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Формула Кирхгоффа. Таблицы стандартных термодинамических величин и их использование в термодинамических расчетах. Второй закон термодинамики. Энтропия и её изменения в обратимых и необратимых процессах. Теорема Карно – Клаузиуса. Различные шкалы температур. Фундаментальные уравнения Гиббса. Характеристические функции. Энергия Гиббса, энергия Гельмгольца. Уравнения Максвелла. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов. Уравнение Гиббса – Гельмгольца. Работа и теплота химического процесса. Химические потенциалы. Химическое равновесие. Закон действующих масс. Различные виды констант равновесия и связь между ними. Изотерма Вант-Гоффа. Уравнения изобары и изохоры химической реакции. Расчеты констант равновесия химических реакций с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций. Приведенная энергия Гиббса и её использование для расчетов химических равновесий. Равновесие в поле внешних сил. Полные потенциалы.

Тема 2. Элементы квантовой химии (6 академ. часов)

Принцип неопределённости Гейзенберга. Уравнение Шрёдингера. Атом водорода. Квантовые числа. Орбитальный момент импульса и спин электрона; сложение моментов. Многоэлектронные системы. Принцип Паули. Метод самосогласованного поля Хартри–Фока. Волновые функции молекул. Методы расчёта электронной структуры молекул (методы ВС и МО). Метод Рутаана (МО ЛКАО). Методы учёта электронной корреляции. Методы функционала электронной плотности. Понятие о полуэмпирических методах квантовой химии. Дипольный момент и поляризуемость. Элементы теории симметрии. Вращательные, колебательные и электронные спектры молекул. Эффекты, обусловленные спином атомных ядер (на примере пара- и орто-водорода). Химические связи в молекулярных и координационных комплексах; водородная связь. Ориентационные, индукционные и дисперсионные силы Ван-дер-Ваальса. Основные представления и подходы в квантовой химии твёрдого тела. Блоховские функции. Определение первой зоны Бриллюэна, закона дисперсии, плотности состояний. Картина плотности состояний для полупроводников, металлов, магнитных соединений.

Тема 3. Элементы статистической термодинамики (8 академ. часов)

Микро- и макросостояния химических систем. Фазовые - и -пространства. Эргодическая гипотеза. Термодинамическая вероятность и её связь с энтропией. Распределение Максвелла – Больцмана. Статистические средние значения макроскопических величин. Ансамбли Гиббса. Микроканоническое и каноническое распределения. Расчет числа состояний в квазиклассическом приближении. Каноническая функция распределения Гиббса. Сумма по состояниям как статистическая характеристическая функция. Статистические выражения для основных термодинамических функций. Молекулярная сумма по состояниям и сумма по состояниям макроскопической системы. Поступательная, вращательная, электронная и колебательная суммы по состояниям. Статистический расчет энтропии. Постулат Планка и абсолютная энтропия.

Приближение «жесткий ротатор – гармонический осциллятор». Составляющие внутренней энергии, теплоёмкости и энтропии, обусловленные поступательным, вращательным и колебательным движением. Расчет констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики. Статистическая термодинамика реальных систем. Потенциалы межмолекулярного взаимодействия и конфигурационный интеграл для реального газа. Распределения Бозе – Эйнштейна и Ферми – Дирака. Вырожденный идеальный газ. Электроны в металлах. Уровень Ферми. Статистическая теория Эйнштейна идеального кристалла, теория Дебая. Точечные дефекты кристаллических решеток. Равновесные и неравновесные дефекты. Вычисление сумм по состояниям для кристаллов с различными точечными дефектами. Нестехиометрические соединения и их термодинамическое описание.

Тема 4. Элементы термодинамики необратимых процессов (4 академ. часа)

Основные положения термодинамики неравновесных процессов. Локальное равновесие. Флуктуации. Функция диссипации. Потоки и силы. Скорость производства энтропии. Зависимость скорости производства энтропии от обобщенных потоков и сил. Соотношения взаимности Онсагера. Стационарное состояние системы и теорема Пригожина. Термодиффузия и её описание в неравновесной термодинамике. Уравнение Чепмена – Энского.

Тема 5. Растворы. Фазовые равновесия (6 академ. часов)

Различные типы растворов. Способы выражения состава растворов. Идеальные растворы, общее условие идеальности растворов. Давление насыщенного пара жидких растворов, закон Рауля. Неидеальные растворы и их свойства. Метод активностей. Коэффициенты активности и их определение. Стандартные состояния при определении химических потенциалов компонент растворов. Симметричная и несимметричная системы отсчета. Коллигативные свойства растворов. Изменение температуры замерзания растворов, криоскопия. Зонная

плавка. Осмотические явления. Парциальные мольные величины, их определение для бинарных систем. Уравнение Гиббса – Дюгема. Функция смешения для идеальных и неидеальных растворов. Предельно разбавленные растворы, атермальные и регулярные растворы, их свойства.

Тема 6. Гетерогенные системы (4 академ. часа)

Понятия компонента, фазы, степени свободы. Правило фаз Гиббса. Однокомпонентные системы. Диаграммы состояния воды, серы, фосфора и углерода. Фазовые переходы первого рода. Уравнение Клапейрона – Клаузиуса. Двухкомпонентные системы. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем. Равновесие жидкость – пар в двухкомпонентных системах. Законы Гиббса – Коновалова. Азеотропные смеси. Фазовые переходы второго рода. Уравнения Эренфеста. Трехкомпонентные системы. Треугольник Гиббса. Диаграммы плавкости трехкомпонентных систем.

Тема 7. Адсорбция и поверхностные явления (8 академ. часов)

Адсорбция. Адсорбент, адсорбат. Виды адсорбции. Структура поверхности и пористость адсорбента. Локализованная и делокализованная адсорбция. Мономолекулярная и полимолекулярная адсорбция. Динамический характер адсорбционного равновесия. Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Генри. Константа адсорбционного равновесия. Уравнение Ленгмюра. Адсорбция из растворов. Уравнение Брунауэра – Эмета – Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента. Поверхность раздела фаз. Свободная поверхностная энергия, поверхностное натяжение, избыточные термодинамические функции поверхностного слоя. Изменение поверхностного натяжения на границе жидкость – пар в зависимости от температуры. Связь свободной поверхностной энергии с теплотой сублимации (правило Стефана), модулем упругости и другими свойствами вещества. Эффект Ребиндера: изменение прочности и пластичности твердых тел вследствие снижения их поверхностной энергии.

Капиллярные явления. Зависимость давления пара от кривизны поверхности жидкости. Капиллярная конденсация. Зависимость растворимости от кривизны поверхности растворяющихся частиц (закон Гиббса – Оствальда – Фрейндлиха).

Тема 8. Электрохимические процессы (6 академ. часов)

Растворы электролитов. Ион-дипольное взаимодействие, как основной процесс, определяющий устойчивость растворов электролитов. Коэффициенты активности в растворах электролитов. Средняя активность и средний коэффициент активности, их связь с активностью отдельных ионов. Основные положения теории Дебая – Хюкеля. Потенциал ионной атмосферы. Условия электрохимического равновесия на границе раздела фаз и в электрохимической цепи. Термодинамика гальванического элемента. Электродвижущая сила, её выражение через энергию Гиббса реакции в элементе. Уравнения Нернста и Гиббса – Гельмгольца для равновесной электрохимической цепи. Понятие электродного потенциала. Определение коэффициентов активности на основе измерений ЭДС гальванического элемента. Электропроводность растворов электролитов; удельная и эквивалентная электропроводность. Числа переноса, подвижность ионов и закон Кольрауша. Электрофоретический и релаксационные эффекты.

Раздел 3. Кинетика химических реакций (10 академ. часов)

Основные понятия химической кинетики. Простые и сложные реакции, молекулярность и скорость простой реакции. Основной постулат химической кинетики. Способы определения скорости реакции. Кинетические кривые. Кинетические уравнения. Константа скорости и порядок реакции. Реакции переменного порядка. Феноменологическая кинетика сложных химических реакций. Принцип независимости элементарных стадий. Кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций. Квазистационарное приближение. Метод Боденштейна – Тёмкина. Кинетика гомогенных катализических и ферментативных реакций. Уравнение Михаэлиса – Ментен. Цеп-

ные реакции. Кинетика неразветвленных и разветвленных цепных реакций. Кинетические особенности разветвленных цепных реакций. Предельные явления в разветвленных цепных реакциях. Полуостров воспламенения, период индукции. Термовой взрыв. Реакции в потоке. Реакции идеального вытеснения и идеального смешения. Колебательные реакции. Макрокинетика. Роль диффузии в кинетике гетерогенных реакций. Кинетика гетерогенных каталитических реакций. Различные режимы протекания реакций (кинетическая и внешняя кинетическая области, области внешней и внутренней диффузии). Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса. Энергия активации и способы её определения. Элементарные акты химических реакций и физический смысл энергии активации. Термический и нетермические пути активации молекул. Обмен энергией (поступательной, вращательной и колебательной) при столкновениях молекул. Время релаксации в молекулярных системах. Теория активных столкновений. Сечение химических реакций. Формула Траутца – Льюиса. Расчет предэкспоненциального множителя по молекулярным постоянным. Стерический фактор. Теория переходного состояния (активированного комплекса). Поверхность потенциальной энергии. Путь и координата реакции. Статистический расчет константы скорости. Энергия и энтропия активации. Использование молекулярных постоянных при расчете константы скорости. Различные типы химических реакций. Мономолекулярные реакции в газах, схема Линдемана – Христиансена. Теория РРКМ. Бимолекулярные и тримолекулярные реакции, зависимость предэкспоненциального множителя от температуры. Реакции в растворах, влияние растворителя и заряда реагирующих частиц. Клеточный эффект и сольватация.

Фотохимические и радиационнохимические реакции. Элементарные фотохимические процессы. Эксимеры и эксиплексы. Изменение физических и химических свойств молекул при электронном возбуждении. Квантовый выход. Закон Эйнштейна – Штарка. Электрохимические реакции. Двойной электрический слой. Модельные представления о структуре двойного электрического слоя. Теория Гуи – Чапмена – Грэма. Электрокапillaryные явления, уравнение

Липпмана. Скорость и стадии электродного процесса. Поляризация электродов. Полярография. Ток обмена и перенапряжение. Зависимость скорости стадии разряда от строения двойного слоя. Химические источники тока, их виды. Электрохимическая коррозия. Методы защиты от коррозии.

Раздел 4. Катализ (10 академ. часов)

Классификация каталитических реакций и катализаторов. Теория промежуточных соединений в катализе, принцип энергетического соответствия. Гомогенный катализ. Кислотно-основной катализ. Кинетика и механизм реакций специфического кислотного катализа. Функции кислотности Гаммета. Кинетика и механизм реакций общего кислотного катализа. Уравнение Брёнстеда. Корреляционные уравнения для энергий активации и теплот реакций. Специфический и общий основной катализ. Нуклеофильный и электрофильный катализ. Катализ металлокомплексными соединениями. Гомогенные реакции гидрирования, их кинетика и механизмы. Ферментативный катализ. Адсорбционные и каталитические центры ферментов. Активность и субстратная селективность ферментов. Коферменты. Механизмы ферментативного катализа. Гетерогенный катализ. Определение скорости гетерогенной катализической реакции. Удельная и атомная активность. Селективность катализаторов. Роль адсорбции в кинетике гетерогенных каталитических реакций. Неоднородность поверхности катализаторов, нанесенные катализаторы. Энергия активации гетерогенных каталитических реакций. Современные теории функционирования гетерогенных катализаторов. Основные промышленные каталитические процессы.

Заключение (2 академ. часа)

Перспективы развития физической химии и расширение областей её практического применения.

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

№	Название, библиографическое описание	Семестр	К-во экз. в библ. (на каф.)
Основная литература			
1	Стромберг А.Г., Семченко Д.П. Физическая химия. М.: Высшая школа, 2010 г.	10	51
Дополнительная литература			
1	Русанов А.И. Лекции по термодинамике поверхностей: Учебное пособие - СПб: Издательство «Лань», 2013.	10	нет (1)
2	Израелашвили Д.Н. Межмолекулярные и поверхностные силы. Научный мир 2011. 456с.	10	нет (1)
3	Эткинс П., де Паула Дж. Физическая химия. М.: Мир, 2007.	10	нет (1)
4	Пармон В.Н. Лекции по термодинамике неравновесных процессов для химиков. Новосибирск: Изд-во Новос. уни-та, 2005.	10	нет (1)

Зав. отделом учебной литературы

Т.В. Киселева

рук. кафедры Учебно-методический кабинет РК

Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети

«Интернет», используемых при освоении дисциплины

№	Электронный адрес
1	База данных и программный комплекс для термодинамических расчетов ИВТАНТЕРМО
2	Электронно-библиотечная система «Университетская библиотека онлайн»
3	Интерактивная база данных книг и журналов SpringerLink.
4	Электронно-библиотечная система «КНИГАФОНД» г.Москва knigafund.ru
5	«БИБЛИОТЕХ» г.Москва bibliotech.ru
6	Интернет сайты ведущих государственных вузов и научных организаций РФ: МГУ, СПбГУ, РХТУ, НГУ, РАН РФ и др.
7	Интернет сайты зарубежных научных и учебных центров: NBS USA, MTI UK, ChLab Japan, NSRDS и др.
8	Нанометр (нанотехнологическое сообщество) – http://www.nanometer.ru
9	Российский общеобразовательный портал http://www.school.edu.ru/default.asp
10	all Science – Российский научный портал – http://www.allscience.ru

11	Естественнонаучный образовательный портал – http://en.edu.ru/
12	ЛОМОНОСОВ – молодежный научный портал - http://lomonosov-msu.ru/
13	Научно-образовательный центр по нанотехнологиям МГУ http://nano.msu.ruwww.sciencedirect.com
14	www.chemweb.com
15	www.pubs.acs.org
16	www.doaj.org
17	ГОСТ 7.32-2001 Система стандартов по информации, библиотечному и издательскому делу. Отчет о научно-исследовательской работе. Структура и правила оформления.

Информационные технологии (операционные системы, программное обеспечение общего и специализированного назначения, а также информационные справочные системы) и материально-техническая база, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, соответствуют требованиям федерального государственного образовательного стандарта высшего образования.

Описание информационных технологий и материально-технической базы приведено в УМКД дисциплины в учебных пособиях к практическим занятиям.

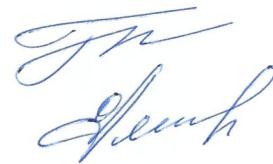
Конкретные формы и процедуры текущего контроля знаний и промежуточной аттестации, включая перечень экзаменационных вопросов (Приложение 1), а также методические указания для обучающихся по самостоятельной работе при освоении дисциплин (содержащиеся в ООП) доводятся до сведения обучающихся на первом занятии.

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Разработчик

д.х.н., проф.

к.х.н., доц.



Гусаров В.В.

Альмяшева О.В.

Рецензент

д.х.н., проф.



Беляев А.П.

Зав. каф. ФХ

д.х.н., проф.



Гусаров В.В.

Директор ИФИО

д.т.н., проф.



Филатов Ю. В.

Согласовано

Председатель УМК ИФИО

к.х.н., доц.



Альмяшева О. В.

Начальник МО

д.т.н., проф.



Грязнов А.Ю.

Заведующий ОДА

к.ф.-м.н.



Кучерова О.В.

ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ

№	Дата	Изменение	Дата заседания УМК, № прот-ла	Автор	Нач. МО
1					

ПЕРЕЧЕНЬ ЭКЗАМЕНАЦИОННЫХ ВОПРОСОВ

1. Основные положения классической теории химического строения.
2. Принципы квантово-механического описания молекулярных систем. Стационарное уравнение Шредингера для свободной молекулы. Адиабатическое приближение. Электронное волновое уравнение.
3. Потенциальные кривые и поверхности потенциальной энергии. Их общая структура и различные типы. Равновесные конфигурации молекул. Структурная изомерия. Оптические изомеры.
4. Колебания молекул. Нормальные колебания, амплитуды и частоты колебаний, частоты основных колебательных переходов.
5. Вращение молекул. Вращательные уровни энергии.
6. Электронное строение атомов и молекул. Одноэлектронное приближение.
7. Атомные и молекулярные орбитали. Электронные конфигурации и термы атомов. Правило Хунда.
8. Электронная плотность. Распределение электронной плотности в двухатомных молекулах. Корреляционные орбитальные диаграммы. Пределы применимости одноэлектронного приближения.
9. Интерпретация строения молекул на основе орбитальных моделей и исследования распределения электронной плотности. Локализованные молекулярные орбитали. Гибридизация.
10. Точечные группы симметрии молекул. Понятие о представлениях групп и характеристах представлений.
11. Общие свойства симметрии волновых функций и потенциальных поверхностей молекул.
12. Классификация квантовых состояний атомов и молекул по симметрии.

13. Симметрия атомных и молекулярных орбиталей, σ - и π -орбитали. π -Электронное приближение.
14. Влияние симметрии равновесной конфигурации ядер на свойства молекул и их динамическое поведение.
15. Орбитальные корреляционные диаграммы. Сохранение орбитальной симметрии при химических реакциях.
16. Дипольный момент и поляризуемость молекул. Магнитный момент и магнитная восприимчивость.
17. Эффекты Штарка и Зеемана. Магнитно-резонансные методы исследования строения молекул. Химический сдвиг.
18. Оптические спектры молекул. Вероятности переходов и правила отбора при переходах между различными квантовыми состояниями молекул.
19. Связь спектров молекул с их строением. Определение структурных характеристик молекул из спектроскопических данных.
20. Основные составляющие межмолекулярных взаимодействий. Молекулярные комплексы. Ван-дерваальсовы молекулы. Кластеры атомов и молекул. Водородная связь. Супермолекулы и супрамолекулярная химия.
21. Структурная классификация конденсированных фаз. Идеальные кристаллы. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура.
22. Реальные кристаллы. Типы дефектов в реальных кристаллах.
23. Кристаллы с неполной упорядоченностью. Доменные структуры.
24. Симметрия кристаллов. Кристаллографические точечные группы симметрии, типы решеток, сингонии.
25. Понятие о пространственных группах кристаллов. Индексы кристаллографических граней.
26. Атомные, ионные, молекулярные и другие типы кристаллов. Цепочечные, каркасные и слоистые структуры.
27. Строение твердых растворов. Упорядоченные твердые растворы.
28. Аморфные вещества. Особенности строения полимерных фаз.

29. Металлы и полупроводники. Зонная структура энергетического спектра кристаллов.
30. Поверхность Ферми. Различные типы проводимости. Колебания в кристаллах. Фононы.
31. Особенности строения поверхности кристаллов и жидкостей, структура границы раздела конденсированных фаз.
32. Молекулы и кластеры на поверхности. Структура адсорбционных слоев.
33. Основные понятия термодинамики: изолированные и открытые системы, равновесные и неравновесные системы, термодинамические переменные, температура, интенсивные и экстенсивные переменные.
34. Уравнения состояния. Теорема о соответственных состояниях.
35. Первый закон термодинамики. Теплота, работа, внутренняя энергия, энталпия, теплоемкость. Закон Гесса. Стандартные состояния и стандартные теплоты химических реакций.
36. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Формула Кирхгоффа.
37. Второй закон термодинамики. Энтропия и её изменения в обратимых и необратимых процессах. Теорема Карно – Клаузиуса. Различные шкалы температур.
38. Фундаментальные уравнения Гиббса.
39. Характеристические функции. Энергия Гиббса, энергия Гельмгольца.
40. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов.
41. Уравнение Гиббса – Гельмгольца. Работа и теплота химического процесса. Химические потенциалы.
42. Химическое равновесие. Закон действующих масс. Различные виды констант равновесия и связь между ними.

43. Изотерма Вант-Гоффа. Уравнения изобары и изохоры химической реакции.
44. Приведенная энергия Гиббса и её использование для расчетов химических равновесий. Равновесие в поле внешних сил. Полные потенциалы.
45. . Различные типы растворов. Способы выражения состава растворов. Идеальные растворы, общее условие идеальности растворов.
46. Давление насыщенного пара жидкого раствора, закон Рауля. Неидеальные растворы и их свойства. Метод активностей. Коэффициенты активности и их определение.
47. Стандартные состояния при определении химических потенциалов компонент растворов. Симметричные и несимметричные системы отсчета.
48. Коллигативные свойства растворов. Изменение температуры замерзания растворов, криоскопия. Зонная плавка. Осмотические явления.
49. Парциальные мольные величины, их определение для бинарных систем. Уравнение Гиббса – Дюгема.
50. Функция смешения для идеальных и неидеальных растворов. Продельно разбавленные растворы, атермальные и регулярные растворы, их свойства.
51. Понятия компонента, фазы, степени свободы. Правило фаз Гиббса.
52. Однокомпонентные системы. Диаграммы состояния воды, серы, фосфора и углерода.
53. Фазовые переходы первого рода. Уравнение Клапейрона – Клаузиуса.
54. Двухкомпонентные системы. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем. Равновесие жидкость – пар в двухкомпонентных системах. Законы Гиббса – Коновалова. Азеотропные смеси.
55. Фазовые переходы второго рода. Уравнения Эренфеста.
56. Трехкомпонентные системы. Треугольник Гиббса. Диаграммы плавкости трехкомпонентных систем.

57. Адсорбция. Адсорбент, адсорбат. Виды адсорбции. Структура поверхности и пористость адсорбента.
58. Локализованная и делокализованная адсорбция.
59. Мономолекулярная и полимолекулярная адсорбция.
60. Динамический характер адсорбционного равновесия.
61. Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Генри. Константа адсорбционного равновесия. Уравнение Ленгмюра.
62. Адсорбция из растворов.
63. Уравнение Брунауэра – Эмета – Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента.
64. Поверхность раздела фаз. Свободная поверхностная энергия, поверхностное натяжение, избыточные термодинамические функции поверхностного слоя.
65. Изменение поверхностного натяжения на границе «жидкость – пар» в зависимости от температуры. Связь свободной поверхностной энергии с теплотой сублимации (правило Стефана), модулем упругости и другими свойствами вещества.
66. Эффект Ребиндера: изменение прочности и пластичности твердых тел вследствие снижения их поверхностной энергии.
67. Капиллярные явления. Зависимость давления пара от кривизны поверхности жидкости. Капиллярная конденсация. Зависимость растворимости от кривизны поверхности растворяющихся частиц (закон Гиббса – Оствальда – Фрейндлиха).
68. Растворы электролитов. Ион-дипольное взаимодействие, как основной процесс, определяющий устойчивость растворов электролитов.
69. Коэффициенты активности в растворах электролитов. Средняя активность и средний коэффициент активности, их связь с активностью отдельных ионов.
70. Основные положения теории Дебая – Хюккеля. Потенциал ионной атмосферы.

71. Условия электрохимического равновесия на границе раздела фаз и в электрохимической цепи.
72. Термодинамика гальванического элемента. Электродвижущая сила, её выражение через энергию Гиббса реакции в элементе.
73. Уравнения Нернста и Гиббса – Гельмгольца для равновесной электрохимической цепи.
74. Понятие электродного потенциала.
75. Определение коэффициентов активности на основе измерений ЭДС гальванического элемента.
76. Электропроводность растворов электролитов; удельная и эквивалентная электропроводность. Числа переноса, подвижность ионов и закон Кольрауша. Электрофоретический и релаксационные эффекты.
77. Основные положения термодинамики неравновесных процессов.
78. Локальное равновесие. Флуктуации. Функция диссипации.
79. Потоки и силы. Скорость производства энтропии. Зависимость скорости производства энтропии от обобщенных потоков и сил.
80. Соотношения взаимности Онсагера. Стационарное состояние системы и теорема Пригожина.
81. Термодиффузия и её описание в неравновесной термодинамике. Уравнение Чепмена – Энского.
82. Основные понятия химической кинетики. Простые и сложные реакции, молекулярность и скорость простой реакции.
83. Способы определения скорости реакции. Кинетические кривые. Кинетические уравнения. Константа скорости и порядок реакции. Реакции переменного порядка.
84. Феноменологическая кинетика сложных химических реакций. Кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций. Квазистационарное приближение.
85. Кинетика гомогенных каталитических и ферментативных реакций.

86. Цепные реакции. Кинетика неразветвленных и разветвленных цепных реакций.

87. Кинетические особенности разветвленных цепных реакций. Продельные явления в разветвленных цепных реакциях. Полуостров воспламенения, период индукции. Термовой взрыв.

88. Реакции в потоке. Реакции идеального вытеснения и идеального смешения. Колебательные реакции.

89. Макрокинетика. Роль диффузии в кинетике гетерогенных реакций.

90. Кинетика гетерогенных каталитических реакций. Различные режимы протекания реакций (кинетическая и внешняя кинетическая области, области внешней и внутренней диффузии).

91. Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аренниуса. Энергия активации и способы её определения.

92. Элементарные акты химических реакций и физический смысл энергии активации. Термический и нетермические пути активации молекул.

93. Теория активных столкновений. Сечение химических реакций. Расчет предэкспоненциального множителя по молекулярным постоянным. Стерический фактор.

94. Теория переходного состояния (активированного комплекса). Поверхность потенциальной энергии. Путь и координата реакции. Статистический расчет константы скорости.

95. Энергия и энтропия активации. Использование молекулярных постоянных при расчете константы скорости.

96. Различные типы химических реакций. Мономолекулярные, бимолекулярные и тримолекулярные реакции, зависимость предэкспоненциального множителя от температуры.

97. Реакции в растворах, влияние растворителя и заряда реагирующих частиц. Клеточный эффект и сольватация.

98. Фотохимические и радиационнохимические реакции. Элементарные фотохимические процессы. Эксимеры и эксиплексы.

99. Изменение физических и химических свойств молекул при электронном возбуждении. Квантовый выход. Закон Эйнштейна – Штарка.
100. Электрохимические реакции. Двойной электрический слой. Модельные представления о структуре двойного электрического слоя. Теория Гуи – Чапмена – Грэма. Электрокапплярные явления, уравнение Липпмана.
101. Скорость и стадии электродного процесса. Поляризация электродов. Полярография. Ток обмена и перенапряжение. Зависимость скорости стадии разряда от строения двойного слоя.
102. Химические источники тока, их виды. Электрохимическая коррозия. Методы защиты от коррозии.
103. Классификация катализитических реакций и катализаторов. Теория промежуточных соединений в катализе, принцип энергетического соответствия.
104. Гомогенный катализ. Кислотно-основной катализ.
105. Кинетика и механизм реакций специфического кислотного катализа. Функции кислотности Гамметта.
106. Кинетика и механизм реакций общего кислотного катализа.
107. Уравнение Брёнстеда. Корреляционные уравнения для энергий активации и теплот реакций.
108. Специфический и общий основной катализ.
109. Нуклеофильный и электрофильный катализ.
110. Ферментативный катализ. Адсорбционные и катализитические центры ферментов. Активность и субстратная селективность ферментов. Коферменты. Механизмы ферментативного катализа.
111. Гетерогенный катализ. Определение скорости гетерогенной катализической реакции.
112. Удельная и атомная активность. Селективность катализаторов. Роль адсорбции в кинетике гетерогенных катализитических реакций. Неоднородность поверхности катализаторов, нанесенные катализаторы. Энергия активации гетерогенных катализитических реакций.

113. Современные теории функционирования гетерогенных катализаторов.
114. Фотокаталитические процессы.
115. Роль теории кристаллизации фаз в развитии представлений о природе кристаллического состояния вещества.
116. Термодинамические условия зародышеобразования. Критический зародыш.
117. Термодинамика зародышеобразования в условиях пространственных ограничений.
118. Кинетические модели гомогенного зародышеобразования.
119. Кинетические модели гетерогенного зародышеобразования.
120. Метастабильные кластеры. Модели агрегативного зародышеобразования.
121. Фронт кристаллизации. Устойчивое и неустойчивое движение фронта кристаллизации. Дендритные структуры.
122. Рост кристаллических структур по механизму ориентированной агрегации.
123. Методы системного проектирования в науке о материалах.
124. Основные понятия: системный подход, системный анализ, системное проектирование и конструирование. Модели систем. Классификации. Методы системного проектирования.
125. Иерархическое строение материалов. Классификация материалов. Функциональные и конструкционные свойства материалов.
126. Химические соединения, вещества, материалы. Иерархическая организация материалов.
127. Роль материалов в техническом развитии общества.
128. Классификация материалов по химическому, фазовому и дисперсному составу.
129. Композиционные материалы и композиции материалов.
130. Гибридные материалы.

131. Наноструктурированные материалы.
132. Функции материалов.
133. Роль конструкционных и функциональных материалов в технике.
134. Технологические проблемы создания материалов с заданными свойствами.