

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ХИМИИ
ДАЛЬНЕВОСТОЧНОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
(ИХ ДВО РАН)**

УТВЕРЖДАЮ
Директор ИХ ДВО РАН
академик РАН В.И. Сергиенко

«___» _____ 2015 г.

**ПРОГРАММА ВСТУПИТЕЛЬНЫХ ЭКЗАМЕНОВ В АСПИРАНТУРУ
по направлению **04.06.01 Химические науки****

Направленность (профиль) подготовки 02.00.04 физическая

Квалификация (степень) выпускника: **Исследователь. Преподаватель-исследователь**
Форма обучения **очная**

Владивосток 2015 г.

Вопросы экзамена в аспирантуру по специальности
02.00.04 Физическая химия

1. 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 диаграммы. Теорема Купманса. Пределы применимости одноэлектронного приближения.
2. Интерпретация строения молекул на основе орбитальных моделей и исследования распределения электронной плотности. Локализованные молекулярные орбитали. Гибридизация.
3. Основные составляющие межмолекулярных- взаимодействий. Молекулярные комплексы. Ван-дер-ваальсовы молекулы. Водородная связь.
4. Идеальные кристаллы. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Реальные кристаллы. Типы дефектов в реальных кристаллах. Кристаллы с неполной упорядоченностью. Доменные структуры.
5. Симметрия кристаллов. Кристаллографические точечные группы симметрии, типы решеток, сингонии. Понятие о пространственных группах кристаллов. Индексы кристаллографических граней.
6. Атомные, ионные, молекулярные и другие типы кристаллов. Цепочечные, каркасные и слоистые структуры.
7. Строение твердых растворов. Упорядоченные твердые растворы. Аморфные вещества. Особенности строения полимерных фаз.
8. Металлы и полупроводники. Зонная структура энергетического спектра кристаллов. Поверхность Ферми. Различные типы проводимости. Колебания в кристаллах. Фононы.
9. Жидкости. Мгновенная и колебательно-усредненная структура жидкости. Ассоциаты и кластеры в жидкостях. Флуктуации и корреляционные функции. Структура простых жидкостей. Растворы неэлектролитов. Структура воды и водных растворов. Структура жидких электролитов.
10. Мицеллообразование и строение мицелл.
11. Мезофазы. Пластические кристаллы. Жидкие кристаллы.
12. Особенности строения поверхности кристаллов и жидкостей, структура границы раздела конденсированных фаз. Молекулы и кластеры на поверхности. Структура адсорбционных слоев.
13. Основные понятия термодинамики: изолированные и открытые системы, равновесные и неравновесные системы, термодинамические переменные, интенсивные и экстенсивные переменные. Уравнения состояния. Виральные уравнения состояния. Теплота, работа, внутренняя энергия, энтальпия. Первый закон термодинамики. Работа расширения идеального газа в различных процессах (изохорном, изобарном, адиабатическом и изотермическом).

14. Теплоемкость (средняя, истинная, молярная, удельная). Зависимость теплоемкости от температуры. Теплоемкость идеальных газов. Теплоемкость жидкостей. Теплоемкость твердых тел (закон Дюлонга и Пти и правило Неймана-Коппа).

15. Закон Гесса и его следствия. Стандартные состояния и стандартные теплоты химических реакций. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Закон Кирхгофа. Таблицы стандартных термодинамических величин и их использование в термодинамических расчетах.

16. Второй закон термодинамики. Энтропия и ее изменения в обратимых и необратимых процессах. Теорема Карно-Клаузиуса. Различные шкалы температур.

17. Фундаментальные уравнения Гиббса. Характеристические функции. Энергия Гиббса, энергия Гельмгольца. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов.

18. Уравнение Гиббса-Гельмгольца. Химические потенциалы. Химический потенциал идеального и реального газов. Фугитивность. Активность и коэффициент активности.

19. Тепловая теорема Нернста. Третий закон термодинамики. Постулат Планка. Абсолютное значение энтропии.

20. Химическое равновесие. Закон действующих масс. Различные виды констант равновесия и связь между ними. Изотерма Вант-Гоффа. Уравнения изобары и изохоры химической реакции. Принцип смещения равновесия. Расчеты констант равновесия химических реакций с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций.

21. Каноническая функция распределения Гиббса. Сумма по состояниям как статистическая характеристическая функция. Поступательная, вращательная, электронная и колебательная суммы по состояниям. Статистический расчет энтропии.

22. Распределения Бозе-Эйнштейна и Ферми-Дирака. Вырожденный идеальный газ. Электроны в металлах. Уровень ферми.

23. Статистическая теория Эйнштейна идеального кристалла, теория Дебая. Точечные дефекты кристаллических решеток. Равновесные и неравновесные дефекты.

24. Различные типы растворов. Способы выражения состава растворов. Идеальные растворы, общее условие идеальности растворов.

25. Давление насыщенного пара жидких растворов, закон Рауля. Предельно разбавленные растворы, атермальные и регулярные растворы, их свойства. Неидеальные растворы и их свойства. Активность. Коэффициенты активности и их определение.

26. Гетерогенные системы. Понятия компонента, фазы, степени свободы. Правило фаз Гиббса.

27. Однокомпонентные системы. Диаграммы состояния однокомпонентных систем (воды, серы, фосфора и углерода). Фазовые переходы первого рода. Уравнение Клапейрона-Клаузиуса. Фазовые переходы второго рода. Уравнения Эренфеста.

28. Двухкомпонентные системы. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем. Равновесие жидкость-пар в двухкомпонентных системах. Законы Гиббса-Коновалова. Азеотропные смеси.
29. Диаграммы плавкости (с полной и ограниченной растворимостью веществ в твердом состоянии, с простой эвтектикой и с образованием химического соединения).
30. Трехкомпонентные системы. Треугольник Гиббса. Диаграммы плавкости трехкомпонентных систем.
31. Адсорбция. Адсорбент, адсорбат. Виды адсорбции. Структура поверхности и пористость адсорбента. Мономолекулярная и полимолекулярная адсорбция. Динамический характер адсорбционного равновесия.
32. Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Генри. Константа адсорбционного равновесия. Уравнение Лэнгмюра. Адсорбция из растворов. Уравнение Брунауэра — Эмета — Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента.
33. Поверхность раздела фаз. Свободная поверхностная энергия, поверхностное натяжение, избыточные термодинамические функции поверхностного слоя. Эффект Ребиндера: изменение прочности и пластичности твердых тел вследствие снижения их поверхностной энергии.
34. Капиллярные явления. Зависимость давления пара от кривизны поверхности жидкости. Капиллярная конденсация. Зависимость растворимости от кривизны поверхности растворяющихся частиц (закон Гиббса-Оствальда-Фрейндлиха).
35. Растворы электролитов. Электролитическая диссоциация. Коэффициенты активности в растворах электролитов. Средняя активность и средний коэффициент активности, их связь с активностью отдельных ионов. Основные положения теории Дебая-Хюккеля.
36. Термодинамика электрохимического элемента. Электродвижущая сила, ее выражение через энергию Гиббса реакции в элементе. Уравнения Нернста и Гиббса-Гельмгольца для равновесной электрохимической цепи.
37. Понятие электродного потенциала. Типы электродов. Электрохимические цепи.
38. Электропроводность растворов электролитов; удельная и эквивалентная электропроводность. Числа переноса, подвижность ионов и закон Кольрауша. Электрофоретический и релаксационные эффекты.
39. Электрохимические реакции. Двойной электрический слой. Модельные представления о структуре двойного электрического слоя. Электрокапиллярные явления. Потенциал нулевого заряда.
40. Электрохимическая коррозия. Методы защиты от коррозии.
41. 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.

42. Кинетика сложных химических реакций. Принцип независимости элементарных стадий. Кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций. Квазистационарное приближение. Метод Боденштейна — Темкина. Кинетика гомогенных каталитических и ферментативных реакций. Уравнение Михаэлиса-Ментен.
43. Цепные реакции. Кинетика неразветвленных и разветвленных цепных реакций. Кинетические особенности разветвленных цепных реакций. Предельные явления в разветвленных цепных реакциях. Полуостров воспламенения. Тепловой взрыв.
44. Кинетика гетерогенных реакций. Гетерогенные процессы при нестационарной диффузии. Гетерогенные процессы при стационарной конвективной диффузии. Кинетика топохимических реакций.
45. Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса. Энергия активации и способы ее определения. Элементарные акты химических реакций и физический смысл энергии активации.
46. Теория активных столкновений. Стерический фактор. Теория переходного состояния (активированного комплекса).
47. Фотохимические и радиационно-химические реакции. Законы фотохимии. Квантовый выход.
48. Кинетика электрохимических реакций. Скорость и стадии электрохимической реакции. Поляризация электродов. Ток обмена и перенапряжение. Полярография.
49. Классификация каталитических реакций и катализаторов. Теория промежуточных соединений в катализе, принцип энергетического соответствия.
50. Гомогенный катализ. Кислотно-основной катализ. Кинетика и механизм реакций специфического кислотного катализа. Функции кислотности Гамета. Кинетика и механизм реакций общего кислотного катализа. Уравнение Бренстеда. Корреляционные уравнения для энергий активации и теплот реакций. Специфический и общий основной катализ.
51. Гетерогенный катализ. Определение скорости гетерогенной каталитической реакции. Удельная и атомная активность. Селективность катализаторов. Роль адсорбции в кинетике гетерогенных каталитических реакций. Неоднородность поверхности катализаторов, нанесенные катализаторы. Энергия активации гетерогенных каталитических реакций.

РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

Основная литература к разделу 1

1. *Стромберг А. Г., Семченко Д. П.* Физическая химия: Учеб. для студ. высш. учеб. заведений по хим. спец.; Под ред. А. Г. Стромберга. – М.: Высш. шк., 2006. - 527 с.
2. *Пентин Ю.А., Вилков Л.В.* Физические методы исследования в химии. - М.: Мир, 2006. - 683 с
3. *Пентин Ю. А., Кураמיшина Г.М.* Основы молекулярной спектроскопии. М.: Бином. 2008. - 398 с.

4. *Еремин В.В., Каргов С.И., Успенская И.А., Кузьменко Н.Е., Лунин В.В.* Основы физической химии. Теория и задачи. - М: Изд. Экзамен, 2005, - 480 с.
5. *Степанов Н. Ф.* Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, М.: Мир, 2008.- 519 с.
6. *Ипполитов Е. Г., Артемов А. В., Батраков В. В.* Физическая химия: Учебник для студ. высш. учеб. заведений; Под ред. Е. Г. Ипполитова. – М.: Академия, 2005. – 444 с.
7. *Каплан И.Г.* Межмолекулярные взаимодействия. М.: Бином, Лаборатория знаний, 2012. - 312 с.

Дополнительная литература к разделу 1

1. *Бейдер Р.* Атомы в молекулах. М.: Мир, 2001. – 532 с.
- 10
2. *Минкин В. И., Симкин Б. Я., Миняев Р. М.* Теория строения молекул. Ростов-на-Дону: Феникс, 1997.
3. *Фларри Р.* Квантовая химия. М.: Мир, 1985.
4. *Маррелл Дж., Кеттл С., Теддер Дж.* Теория валентности. М.: Мир, 1968.
5. *Маррелл Дж., Кеттл С., Теддер Дж.* Химическая связь. М.: Мир, 1980.
6. *Джаффе Г., Орчин М.* Симметрия в химии. М.: Мир, 1977.
7. *Коулсон Ч.* Валентность. М.: Мир, 1965.
8. *Грей Г.* Электроны и химическая связь. М.: Мир, 1967.
9. *Краснов К.С.* Молекулы и химическая связь. М.: Высш. шк., 1977.
10. *Барановский В.И.* Квантовая механика и квантовая химия. М.: Академия, 2008
11. *Драго Р.* Физические методы в химии. Тт. 1 и 2. М.: Мир, 1981.

Основная литература к разделу 2

1. *Эткинс П.* Физическая химия: в 3 ч. Ч.1: Равновесная термодинамика. – М.: Мир, 2007. – 494 с.
2. *Пригожин И. Р., Дефэй Р.* Химическая термодинамика. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009. – 533 с.
3. *Бажин Н.Б., Иванченко В.А., Пармон В.Н.* Термодинамика для химиков. М.: Колосс, 2004. – 416 с.
4. *Дуров В.А., Агеев Е.П.* Термодинамическая теория растворов. Издание 3-е. М.: Изд-во МГУ. 2010. - 248 с.

Дополнительная литература к разделу 2

1. *Агеев Е. П.* Неравновесная термодинамика в вопросах и ответах. М.: Изд-во МГУ, 1999.
2. *Адамсон А.* Физическая химия поверхностей. М.: Мир, 1979.
3. *Дамаскин Б. Б., Петрий О. А., Цирлина Г. А.* Электрохимия. М.: Химия, 2001.
4. *Даниэльс Ф., Олберти Р.* Физическая химия. М.: Мир, 1978.
5. *Дуров В. А., Агеев Е. П.* Термодинамическая теория растворов неэлектролитов. М.: Изд-во МГУ, 1987.
6. *Хаазе Р.* Термодинамика необратимых процессов М.: Мир, 1967.
7. *Эткинс Н.* Физическая химия. Т. 1, 2. М.: Мир, 1980.
8. *Пригожин И., Кондепуди Д.* Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур. М.: Мир, 2002.
9. *Смирнова Н. А.* Методы статистической термодинамики в физической химии. М.: Высш. шк., 1982.
10. *Карпетьянц М.Х.* Химическая термодинамика. М.: Химия, 1975.

11. *Еремин Е.Н.* Основы химической термодинамики. М.: Высш. шк., 1978.
12. *Мюнстер Ф.* Химическая термодинамика. М.: Мир, 1971.
13. *Хачкурузов Г.А.* Основы общей и химической термодинамики. М.: Высш. шк., 1979.
14. *Смирнова Н.А.* Молекулярные теории растворов. Л.: Химия, 1987.
15. *Киттель Ч.* Статистическая термодинамика. М.: Мир, 1977.
16. *Пригожин И., Дефэй Р.* Химическая термодинамика. Новосибирск, Наука, 1966.
17. *Музыкантов В.С., Бажин Н.М., Пармон В.Н., Булгаков Н.Н., Иванченко В.А.* Задачи по химической термодинамике. М.: Химия, 2001.
18. *Соколова Е.П., Смирнова Н.А.* Межмолекулярные взаимодействия. Основные понятия. Учебное пособие. С-Пб: Из-во Санкт-Петербургского университета. 2008. 224 с.

Основная литература к разделу 3

1. *Байрамов В.М.* Основы химической кинетики и катализа. М.: Академия, 2003. -265 с.
2. *Романовский Б.В.* Основы химической кинетики. Издательская группа АСТ " - 2006 , 415 с.
3. *Байрамов В.М.* Химическая кинетика и катализ. Примеры и задачи с решениями. М.: Academia, 2003. – 320 с.
4. *Байрамов В.М.* Основы электрохимии. М.: ACADEMIA. 2005. - 238 с.

Дополнительная литература к разделу 3

1. *Панченков Г. М., Лебедев В. П.* Химическая кинетика и катализ. М.: Химия, 1985.
2. *Томас Дж., Томас У.* Гетерогенный катализ. М.: Мир, 1.
3. *Замараев К.И.* Курс химической кинетики. В 3-х частях. Новосибирск: НГУ, 2004.
4. *Эйринг Г., Лин С.Г., Лин С.М.* Основы химической кинетики. М.: "Мир", 1983.
5. *Денисов Е. Т.* Кинетика гомогенных химических реакций. М.: Высш. шк., 1988.
6. *Кондратьев В.Н., Никитин Е.Е.* Кинетика и механизм газофазных реакций. М.: Наука, 1974.
7. *Панченков Г. М., Лебедев В. П.* Химическая кинетика и катализ. М.: Химия, 1974.
8. *Лайдлер К.* Кинетика органических реакций. М.: Мир, 1966.
9. *Бенсон С.* Основы химической кинетики. М.: Мир, 1964.
10. *Бенсон С.* Термохимическая кинетика. М.: Мир, 1971.
11. *Хоффман Р.В.* Механизмы химических реакций. М.: Мир, 1979.
12. *Денисов Е. Т., Саркисов О. М., Лихтенштейн Г. И.* Химическая кинетика. М.: Химия, 2000.
13. *Дамаскин Б. Б., Петрий О. А.* Введение в электрохимическую кинетику. М.: Высш. шк., 1983.
14. *Эмануэль Н. М., Кнорре Д. Г.* Курс химической кинетики. М.: Высш. шк., 1984.---