

Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«САРАТОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ ГАГАРИНА Ю.А.»

УТВЕРЖДАЮ
Проректор
по научной работе
Д.Ю. Петров
«31» мая 2019 г.



ПРОГРАММА
ВСТУПИТЕЛЬНОГО ЭКЗАМЕНА В АСПИРАНТУРУ
ПО СПЕЦИАЛЬНОЙ ДИСЦИПЛИНЕ

НАПРАВЛЕНИЕ – 04.06.01 «Химические науки»
НАПРАВЛЕННОСТЬ – «Физическая химия»

Саратов, 2019

ПРОГРАММА ВСТУПИТЕЛЬНОГО ЭКЗАМЕНА В АСПИРАНТУРУ ПО СПЕЦИАЛЬНОЙ ДИСЦИПЛИНЕ

ВОПРОСЫ

1. СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА

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

1.2 Механическая модель молекулы. Методы молекулярной механики и молекулярной динамики при анализе строения молекул.

1.3 Общие принципы квантово-механического описания молекулярных систем. Стационарное уравнение Шредингера для свободной молекулы. Адиабатическое приближение. Электронное волновое уравнение.

1.4 Электронное строение атомов и молекул. Одноэлектронное приближение.

1.5 Оптические спектры молекул. Вероятности переходов и правила отбора при переходах между различными квантовыми состояниями молекул. Связь спектров молекул с их строением.

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

1.7 Полимеры и биополимеры.

1.8 Строение конденсированных фаз. Жидкости. Мгновенная и колебательно-усредненная структура жидкости. Ассоциаты и кластеры в жидкостях.

1.9 Структура простых жидкостей. Структура воды и водных растворов.

1.10 Мицеллообразование и строение мицелл.

1.11 Поверхность конденсированных фаз. Особенности строения поверхности жидкостей, структура границы раздела конденсированных фаз.

2. ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА

2.1 Основные понятия и законы термодинамики. Основные понятия термодинамики: изолированные и открытые системы, равновесные и неравновесные системы, термодинамические переменные, температура, Уравнения состояния.

2.2 Первый закон термодинамики. Теплота, работа, внутренняя энергия, энтальпия, теплоемкость.

2.3 Второй закон термодинамики. Энтропия и ее изменения в обратимых и необратимых процессах. Теорема Карно - Клаузиуса.

2.4 Элементы статистической термодинамики. Микро- и макросостояния химических систем. Термодинамическая вероятность и ее связь с энтропией. Распределение Максвелла - Больцмана.

2.5 Растворы. Фазовые равновесия. Гетерогенные системы. Понятия компонента, фазы, степени свободы.

2.6 Однокомпонентные системы. Диаграммы состояния воды. Фазовые переходы первого рода. Уравнение Клапейрона - Клаузиуса. Двухкомпонентные

системы. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем. Равновесие жидкость - пар в двухкомпонентных системах. Фазовые переходы второго рода.

2.7 Адсорбция и поверхностные явления. Адсорбция. Адсорбент, адсорбат. Структура поверхности и пористость адсорбента. Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Генри.

3. КИНЕТИКА ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

3.1 Химическая кинетика. Простые и сложные реакции скорость простой реакции. Основной постулат химической кинетики. Способы определения скорости реакции. Кинетические кривые. Кинетические уравнения. Константа скорости.

3.2 Феноменологическая кинетика сложных химических реакций. Принцип независимости элементарных стадий. Кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций. Квазистационарное приближение.

3.3 Кинетика гомогенных каталитических и ферментативных реакций.

3.4 Макрокинетика. Роль диффузии в кинетике гетерогенных реакций. Кинетика гетерогенных каталитических реакций.

3.5 Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса. Энергия активации и способы ее определения.

3.6 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.

3.7 Электрохимические реакции. Двойной электрический слой. Модельные представления о структуре двойного электрического слоя. Теория Гуи - Чапмена - Грэма.

ОСНОВНАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Вилков Л. В., Пентин Ю. А. Физические методы исследования в химии. М.: Изд-во МГУ. Ч. 1: 1987. Ч. 2: 1989.

2. Минкин В. И., Симкин Б. Я., Миняев Р. М. Теория строения молекул. Ростов-на-Дону: Феникс, 1997.

3. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, Изд-во МГУ, 2001.

4. Фларри Р. Квантовая химия. М.: Мир, 1985.

5. Полторак О. М. Термодинамика в физической химии. М.: Высш. шк., 1991.

6. Пригожий И., Кондепуди Д. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур. М.: Мир, 2002.

7. Смирнова Н. А. Методы статистической термодинамики в физической химии. М.: Высш. шк., 1982.

8. Дамаскин Б. Б., Петрий О. А. Введение в электрохимическую кинетику. М.: Высш. шк., 1983.

9. Денисов Е. Т., Саркисов О. М., Лихтенштейн Г. И. Химическая кинетика. М.: Химия, 2000.

10. Эмануэль Н. М., Кнорре Д. Г. Курс химической кинетики. М.: Высш. шк., 1984. Эткинс П, де Паула Дж. Физическая химия. В 3 частях. М.: Мир, 2007.

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Горшков В, Кузнецов И. Основы физической химии. М.: Бином. 2012.
2. Харитонов Ю.Г. Физическая химия. М.: ГЭОТАР-Медиа, 2013.
3. Стромберг А. Г., Семченко Д. П. Физическая химия. М.: Высшая школа. 2009.
4. Кудряшева Н. С., Бондарева Л. Г. Физическая химия. М.: Юрайт. 2013.

Председатель
экзаменационной комиссии



Директор ФТИ
проф. Гороховский А.В.