

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО НАУЧНЫХ ОРГАНИЗАЦИЙ
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт высокотемпературной электрохимии
Уральского отделения Российской академии наук
(ИВТЭ УрО РАН)

ПРОГРАММА ПОДГОТОВКИ
НАУЧНО-ПЕДАГОГИЧЕСКИХ КАДРОВ В АСПИРАНТУРЕ

УТВЕРЖДАЮ

Директор института
д.х.н. профессор

Ю.П. Зайков

2015 г.

ПРОГРАММА

вступительного экзамена в аспирантуру по направлению подготовки

04.06.01 – ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ

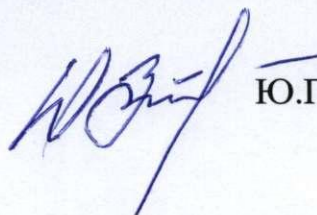
по специальной дисциплине «Физическая химия»

Екатеринбург
2015

Программа составлена в соответствии с паспортом специальности аспирантуры 02.00.04. – «Физическая химия»

Программа одобрена на заседании Ученого совета Института (Протокол № 6 от 16 июня 2015 г.)

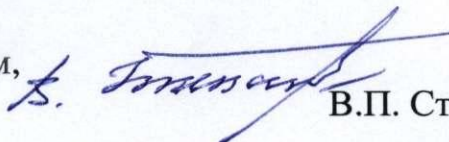
Председатель Ученого совета, д.х.н.



Ю.П. Зайков

Согласовано:

Зам. директора по научным вопросам,
д.х.н.



В.П. Степанов

Ученый секретарь, к.х.н.



А.О. Кодинцева

АННОТАЦИЯ

Настоящая программа базируется на основополагающих разделах физической химии и включает вопросы строения вещества, химической термодинамики, теории поверхностных явлений, учения об электрохимических процессах, теории кинетики химических реакций и учение о катализе.

Содержание настоящего документа соответствует программе, разработанной экспертным советом Высшей аттестационной комиссии Министерства образования Российской Федерации, и предназначено для выявления уровня подготовки по специальным дисциплинам абитуриентов, поступающих в аспирантуру.

Содержание

Раздел 1. Введение

Предмет физической химии. Понятие о физико-химических системах. Связь физической химии с другими химическими и химико-технологическими дисциплинами и ее значение для развития химической технологии. Методы исследования физико-химических систем. Основные проблемы и задачи физической химии. Термодинамический и кинетический подходы к описанию физико-химических систем на микро- и макро-уровне.

Раздел 2. Строение вещества

Атомная природа вещества. Основы теории атома. Атомные спектры. Периодичность свойств атомов. Валентность. Типы химических связей. Энергия химической связи. Энергия кристаллов. Молекулярные и ионные жидкости.

Раздел 3. Начала термодинамики. Термодинамические функции

Предмет и задачи термодинамики. Основные понятия термодинамики: система, теплота и работа, внутренняя энергия. Первый закон термодинамики. Тепловой эффект изохорного и изобарного процессов, понятие об энтальпии. Теплоемкость, её использование для расчетов тепловых эффектов процессов. Расчет теплоемкости газов и твердых тел по Эйнштейну, Дебаю, Нейману и Коппу. Расчет тепловых эффектов химических реакций. Закон Гесса. Стандартные энтальпии образования соединений. Тепловые эффекты реакций в растворах. Стандартные энтальпии образования ионов. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры, закон Кирхгофа. Второе начало термодинамики. Понятие об энтропии. Определение энтропии через термодинамическую вероятность. Закономерности изменения энтропии. Третье начало термодинамики. Вычисление энтропии. Энтропия ионов в растворах. Учение о химическом сродстве. Термодинамические потенциалы Гельмгольца и Гиббса, их вычисление. Определение направления протекания химических реакций.

Раздел 4. Химическое равновесие. Термодинамический расчет реакционных систем

Парциальные молярные величины, их определение по экспериментальным данным и путем интегрирования уравнения Гиббса - Дюгема. Химический потенциал, его значение для компонента идеального газа, идеального раствора, предельно разбавленного раствора и для реальных систем. Понятие об активности и фугитивности. Уравнение изотермы реакции. Константа равновесия. Расчет равновесного состава реакционной смеси. Влияние внешних условий на равновесие. Принцип Ле-Шателье. Выбор оптимальных условий для проведения реакции. Вычисление константы равновесия при различных температурах по уравнению изобары реакции, по приведенным энергиям Гиббса и по методу Темкина и Шварцмана.

Раздел 5. Фазовые равновесия в однокомпонентных системах

Основные понятия: фаза, составляющее вещество и компонент системы, термодинамические степени свободы. Правило фаз Гиббса. Уравнение Клапейрона-Клаузиуса, его использование для расчета фазовых равновесий в однокомпонентных системах. Фазовые диаграммы однокомпонентных систем. Диаграмма состояния воды.

Раздел 6. Термодинамические свойства растворов

Закон Рауля для идеальных и предельно разбавленных растворов. Учет диссоциации растворенного вещества. Растворимость газов, законы Генри и Сивертса. Температуры замерзания и кипения растворов, криоскопия и эбуллиоскопия. Уравнение Шредера. Осмотическое давление растворов. Определение степени и константы диссоциации слабых электролитов, кажущейся степени диссоциации и коэффициента активности сильных электролитов по опытному значению изотонического коэффициента. Определение молярной массы веществ методами криоскопии и эбуллиоскопии.

Образование растворов электролитов. Сольватация и ассоциация. Теория гидратации. Теория активностей Дебая-Хюккеля. Обобщенные теории кислот и оснований Бренстеда, Льюиса, Пирсона. Кислотно-основные свойства неводных растворов и расплавов.

Раздел 7. Фазовые равновесия в неконденсированных системах

Диаграммы состояния двухкомпонентных систем жидкость – пар с полной взаимной растворимостью компонентов в жидкой фазе. Идеальные системы. Расчет диаграммы по закону Рауля. Первый закон Коновалова. Нода. Правило рычага. Разгонка жидких смесей. Понятие о ректификации. Отклонения от идеальности. Азеотропия. Второй закон Коновалова. Диаграммы систем с полной взаимной нерастворимостью компонентов в жидкой фазе. Перегонка с водяным паром. Диаграммы систем жидкость – жидкость. Экстракция, закон распределения Нернста. Классификация механизмов и основные закономерности процессов экстракции, действие высаливателя и разбавителя, самовысаливание и влияние рН. Диаграммы систем жидкость – пар с ограниченной взаимной растворимостью компонентов в жидкой фазе.

Раздел 8. Фазовые равновесия в конденсированных системах

Диаграммы состояния двухкомпонентных систем с полной взаимной нерастворимостью компонентов в твердой фазе. Метод дифференциально-термического анализа. Построение диаграмм. Расчет диаграмм по уравнению Шредера. Твердые растворы, ограниченный и неограниченный изоморфизм. Системы с твердыми растворами: идеальные, с минимумом температуры плавления, эвтектического и перитектического типов. Системы с конгруэнтно и инконгруэнтно плавящимися соединениями. Проявление на диаграммах полиморфных превращений и расслаивания жидкой фазы. Определение тепловых эффектов фазовых превращений по методу Таммана.

Раздел 9. Электрохимические равновесия

Термодинамическая теория Э.Д.С. Удельная и эквивалентная

электропроводность. Подвижность ионов и факторы, ее определяющие. Определение качества воды, константы диссоциации слабых электролитов, предельной электропроводности ионов и растворимости соединений кондуктометрическим методом. Термодинамика электрохимических систем. Электродный потенциал. Гальванический элемент. Уравнение Нернста. Типы электродов. Определение коэффициента активности электролитов, растворимости соединений, константы нестойкости комплексов, константы равновесия окислительно-восстановительной реакции потенциометрическими методами. Ионометрия. Диаграммы Пурбе.

Раздел 10. Химическая кинетика

Формальная кинетика. Порядок реакции и способы его определения. Кинетика сложных гомогенных, фотохимических, цепных и гетерогенных реакций. Зависимость скорости реакции от температуры, энергия активации, ее определение. Теории активных столкновений и переходного состояния (активированного комплекса). Механизм гомогенного и гетерогенного катализа. Ферментативный катализ. Кинетика электрохимических процессов. Поляризация электродов. Диффузионное и электрохимическое перенапряжение.

Литература

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. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, М.: Мир, 2008.- 519 с.
4. 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.
5. Каплан И.Г. Межмолекулярные взаимодействия. М.: Бином, Лаборатория знаний, 2012. - 312 с.
6. Эткинс П. Физическая химия: в 3 ч. Ч.1: Равновесная термодинамика. – М.: Мир, 2007. – 494 с.
7. Пригожин И. Р., Дефэй Р. Химическая термодинамика. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009. – 533 с.
8. Бажин Н.Б., Иванченко В.А., Пармон В.Н. Термодинамика для химиков. М.: Колосс, 2004. – 416 с.
9. Дуров В.А., Агеев Е.П. Термодинамическая теория растворов. Издание 3-е. М.: Изд-во МГУ. 2010. - 248 с.
10. Байрамов В.М. Основы химической кинетики и катализа. М.: Академия, 2003. -265 с.
11. Романовский Б.В. Основы химической кинетики. Издательская группа АСТ " - 2006 , 415 с.
12. Байрамов В.М. Химическая кинетика и катализ. Примеры и задачи с решениями. М.: Академия, 2003. – 320 с.

13. Байрамов В.М. Основы электрохимии. М.: Академия. 2005. - 238 с.
14. Медведев Д.А., Мурашкина А.А. Современное состояние, проблемы и перспективы применения материалов на основе церата бария. - Екатеринбург: УрО РАН, 2015. – 244 с.