

**Введение** Предмет физической химии и общая характеристика ее основных разделов.

### **Термодинамика и статистическая термодинамика**

1. Основные понятия феноменологической термодинамики. Термодинамические свойства систем. Интенсивные и экстенсивные величины.
2. Гомогенные и гетерогенные системы. Фазы и компоненты. Уравнения состояния.
3. Термодинамические процессы. Работа и теплота. Первый закон термодинамики. Внутренняя энергия, энтальпия. Понятие о функции состояния системы. Теплоемкость. Закон Гесса, уравнение Кирхгофа.
4. Второй закон термодинамики. Энтропия. Неравенство Клаузиуса. Обратимые и необратимые процессы.
5. Энергия Гельмгольца, энергия Гиббса. Термодинамические потенциалы и характеристические функции. Фундаментальное уравнение Гиббса. Уравнения Гиббса - Гельмгольца. Третий закон термодинамики, теорема Нернста, постулат Планка. Стандартные термодинамические функции веществ.
6. Критерии термодинамического равновесия систем и самопроизвольности протекания процессов. Фазовые и химические равновесия.
8. Гетерогенные системы. Межфазовые равновесия. Степени свободы и правило фаз Гиббса. Уравнение Клайперона - Клаузиуса. Диаграммы состояния. Одно- и двухкомпонентные системы. Диаграмма состояния воды. Законы Гиббса-Коновалова.
9. Химические реакции в гетерогенных системах. Условия химического равновесия. Химическое сродство и направление самопроизвольной реакции. Закон действующих масс. Константа равновесия. Связь констант равновесия со стандартными изменениями энергии Гиббса и Гельмгольца.
10. Термодинамика поверхностных явлений. Адсорбция. Изотермы адсорбции Гиббса и Ленгмюра. Полимолекулярная адсорбция. Адсорбционные методы исследования дисперсных систем.
11. Микро- и макросостояния системы в классической статистике. Фазовое пространство. Эргодическая гипотеза. Термодинамическая вероятность и ее связь с энтропией. Распределение Максвелла - Больцмана, средние величины. Квантовая статистика. Распределение Бозе - Эйнштейна и Ферми - Дирака.
12. Поступательная сумма по состояниям и расчет термодинамических свойств идеального газа. Вращательная, колебательная и электронная суммы по состояниям. Суммы по состояниям молекулы и системы молекул. Стандартные суммы по состояниям и расчет констант химического равновесия.

### **Электрохимия**

1. Теория электролитической диссоциации. Ион-ионное и ион-дипольное взаимодействие. Энергия кристаллической решетки и энергии сольватации. Термодинамическое описание химических равновесий в растворах электролитов, коэффициенты активности и методы их определения. Теория Дебая-Хюккеля.
2. Электрохимический потенциал и условия равновесия на границе электродрствор. Равновесие в электрохимической цепи. Уравнение Нернста. Определение констант химического равновесия и коэффициентов активности методом ЭДС.
3. Различные типы электродов и электрохимических цепей. Система знаков для электродных потенциалов.
4. Электрокапиллярные явления.

5. Кинетика электродных процессов. Электролиз и законы Фарадея. Поляризация электродов. Стадии электрохимического процесса. Уравнения диффузионной кинетики. Полярография.

### **3. Химическая кинетика и катализ**

1. Основные понятия феноменологической кинетики: простые и сложные реакции, молекулярность и скорость простой реакции. Кинетический закон действующих масс, константа скорости.
2. Способы определения скорости реакции. Кинетические уравнения для простых реакций. Порядок реакции, способы его определения.
3. Сложные химические реакции. Квазистационарное приближение, метод Боденштейна. Кинетические уравнения для обратимых, последовательных и параллельных реакций. Неразветвленные и разветвленные цепные реакции.
4. Зависимость скорости реакции от температуры, уравнение Аррениуса, энергия активации, способы ее определения.
5. Теория активных столкновений, расчет константы скорости бимолекулярной реакции. Мономолекулярные реакции, схема Линдемана.
6. Теория активированного комплекса. Поверхность потенциальной энергии. Расчет константы скорости.
7. Фотохимические и радиационнохимические реакции. Закон Эйнштейна, квантовый выход.
8. Феноменология катализа. Теория промежуточных соединений, принцип энергетического соответствия. Катализ и равновесие.
9. Механизмы кислотно-основного гомогенного катализа. Влияние растворителя. Кинетика гомогенно-каталитических реакций. Роль процессов переноса.
10. Ферментативный катализ. Строение ферментов. Активность и селективность действия. Механизм и кинетика ферментативных реакций.
11. Механизмы гетерогенного катализа. Представления об активных центрах. Кинетика гетерогенно-каталитических реакций. Роль процессов переноса.

### **4. Основы квантовой химии и строения молекул**

1. Квантовая модель молекулы. Метод молекулярных орбиталей. Электронные состояния и вариационные методы их описания.
2. Поверхность потенциальной энергии и ее характеристики; равновесная геометрия молекулы, энергия диссоциации. Экспериментальное изучение потенциальных поверхностей.
3. Колебания молекул (приближение гармонического осциллятора).
4. Вращение молекулы как целого. Тензор инерции. Вращательные состояния молекул типа сферического и симметричного волчка.
5. Взаимодействие молекулы с электромагнитным полем. Переходы, поглощение, испускание, рассеяние излучения. Релеевское и комбинационное рассеяние. Простейшие правила отбора; принцип Франка - Кондона.
6. Спектры поглощения в видимой и УФ-областях как метод исследования электронных спектров многоатомных молекул. Классификация и отнесение электронных переходов в органических молекулах. Правила отбора для электронных переходов. Спектры сопряженных систем и пространственные эффекты в электронных спектрах поглощения. Спектры ароматических соединений.
7. Симметрия молекул и ее применения для классификации состояний и переходов. Симметрия потенциальных поверхностей.
8. Спин электрона. Ядерный спин. Информация о молекулах, получаемая методами ЯМР и ЭПР. 9. Электрические свойства молекул. Дипольный момент. Поляризуемость. Экспериментальное определение электрических свойств молекул. Соотношение свойств молекул и вещества.



#### **Литература по физической химии для вступительного экзамена**

##### **Раздел стандартной физической химии:**

1. В. В. Еремин, И. А. Успенская, С. И. Каргов, Н. Е. Кузьменко, В. В. Лунин Основы физической химии, учебное пособие в 2-х частях 2-е изд., перераб. и доп. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2013. — 320 с.: ил. ISBN 978-5-9963-0535-3 (Ч.1), ISBN 978-5-9963-0536-0 (Ч.2), ISBN 978-5-9963-0377-9
2. А. Я. Борщевский Физическая химия Том 1. Общая и химическая термодинамика, учебник М.: ИНФРА-М, 2017. - 606 с. ISBN 978-5-16-011785-0]
3. А. Я. Борщевский Физическая химия Том 2. Статистическая термодинамика, учебник М.: ИНФРА-М, 2017. - 383 с. ISBN 978-5-16-011788-1

##### **Раздел теории строения молекул:**

1. В. Г. Цирельсон Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учебное пособие для вузов, Издательство "Лаборатория знаний", 2017  
4 изд., 522 стр, ISBN 978-5-00101-502-4

##### **Раздел электрохимии:**

- Дамаскин Б. Б., Петрий О. А., Цирлина Г. А. Электрохимия; Учебное пособие 3-е издание исправленное СПб.: Издательство «Лань», 2015. — 672 с.: ил. ISBN 978-5-8114-1878-7]

##### **Раздел химической кинетики:**

- Б. В. Романовский "Основы химической кинетики" (Серия "учебник для вузов") М.: М.: Издательство "Экзамен" Москва, 2006. — 416 с. ISBN 5-472-01551-0

##### **Можно посмотреть прежние издания:**

- Полтораки О. М. Термодинамика в физической химии. М., «Высшая школа», 1991.  
Панченков Г. М., Лебедев В. П. Химическая кинетика и катализ. М., «Химия», 1985.  
Антропов Л. И. Теоретическая электрохимия. М., «Высшая школа», 1985.  
Эткинс П. Физическая химия, т.1 и 2. М., «Мир», 1980.  
П. Эткинс, Дж. де Паула ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ т.1 РАВНОВЕСНАЯ ТЕРМОДИНАМИКА, М.: Изд-во МИР, 2007. - 496 с. ISBN 5-03-003786-1(русск.)  
В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев. Теория строения молекул. Ростов на Дону: Изд-во Феникс, 1997.]  
Краснов К. С. Молекула, химическая связь. М., «Высшая школа», 1977.