

**Список вопросов по физической химии к зачету с оценкой
для студентов физического факультета МГУ
(6 семестр)**

РАЗДЕЛ I. СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА

Ковалентная связь. Правило октета. Структуры Льюиса.

Геометрия молекул. Теория ОЭПВО.

Приближение Борна – Оппенгеймера. Электронные состояния молекул. Поверхность потенциальной энергии. Общие причины образования химической связи.

Кривые потенциальной энергии для двухатомной молекулы. Колебания молекул.

Молекулярные орбитали. Электронная конфигурация молекулы. Метод МО в приближении ЛКАО.

Корреляционные диаграммы, связывающие и разрыхляющие орбитали, порядок связи. Электронное строение двухатомных молекул 1-го периода.

Геометрия молекул. Представление о гибридизации орбиталей.

Ван-дер-ваальсовы взаимодействия. Водородная связь, ее природа, свойства и влияние на свойства вещества.

Кристаллические твердые тела и их классификация. Элементарная ячейка.

Кристаллические структуры металлов: ГПУ, ГЦК, ОЦК. Полиморфизм металлов.

Физические свойства ионных соединений. Ионная модель. Координационные числа. Ионные радиусы и их определение.

Важнейшие структурные типы ионных соединений, NaCl, CsCl, ZnS, CaF₂.

Энергия ионной кристаллической решетки, ее вычисление в рамках ионной модели. Цикл Борна-Габера.

РАЗДЕЛ II. ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА

Исходные постулаты термодинамики. Термические и калорические уравнения состояния.

Внутренняя энергия и 1-ый закон термодинамики в переменных T , V . Тепловой эффект при постоянстве объема и постоянстве давления.

Стандартные состояния и термодинамические функции индивидуальных веществ. Изменение термодинамических функций в химических реакциях.

Закон Гесса. Энтальпии образования, сгорания, растворения. Термохимические циклы. Энтальпия химической связи.

Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Формула Кирхгоффа.

Термодинамическое и статистическое определения энтропии. Второй закон термодинамики.

Тепловая теорема Нернста. Третий закон термодинамики. Абсолютная энтропия и методы ее оценки.

Фундаментальное уравнение Гиббса. Характеристические функции.

Энергия Гиббса как характеристическая функция и термодинамический потенциал.

Уравнение Гиббса-Гельмгольца для энергии Гиббса. Соотношения Максвелла. Связь калорического и термического уравнения состояния.

Термодинамическое описание многокомпонентных систем. Парциальные мольные величины. Уравнение Гиббса-Дюгема.

Химический потенциал как парциальная мольная величина, его зависимость от температуры и давления.

Химические потенциалы компонентов раствора; активность и коэффициенты активности. Термодинамика смешения. Избыточные величины.

Идеальные растворы. Закон Рауля. Давление пара над идеальным раствором. Предельно разбавленные растворы. Закон Генри.

Коллигативные свойства растворов электролитов и неэлектролитов.

Условия фазового равновесия в гетерогенных системах. Классификация фазовых переходов. Правило фаз Гиббса.

Фазовые диаграммы однокомпонентных систем. Уравнения Клапейрона и Клапейрона-Клаузиуса.

Простейшие фазовые диаграммы "температура – состав". Диаграммы "жидкость – пар". Азеотроп. Диаграммы "жидкость – твердое вещество". Эвтектика.

Термодинамическое описание химических реакций. Химическая переменная. Сродство химической реакции. Условия химического равновесия.

Закон действующих масс для идеально-газовой реакционной смеси. Связь константы равновесия с изменением стандартных термодинамических величин в реакции.

Общие свойства констант равновесия. Смещение химического равновесия. Принцип Ле Шателье. Уравнения изотермы и изобары реакции.

Термодинамический закон действующих масс для гетерогенных реакций и реакций в растворах. Связь теплового эффекта реакции с константой равновесия.

Электрохимический потенциал. Электроды и полуреакции. Окислительно-восстановительная пара. Основные типы электродов. Равновесие электрод-раствор.

Электродные потенциалы. Зависимость электродных потенциалов от концентраций (активностей) ионов и температуры. Уравнение Нернста.

Электродвижущая сила (ЭДС), ее связь с термодинамическими величинами. Типы гальванических элементов.

Раздел III. ХИМИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА

Основные понятия химической кинетики: элементарная стадия, переходное состояние, скорость химической реакции, механизм реакции. Кинетическое уравнение.

Кинетический закон действующих масс для элементарных и сложных реакций. Константа скорости. Молекулярность и порядок реакции.

Принцип независимости химических реакций, принцип лимитирующей стадии.

Формальная кинетика реакций целого порядка. Период полупревращения, его зависимость от начальной концентрации.

Влияние температуры на скорость реакции. Уравнение Аррениуса, его интегральная и дифференциальная формы. Опытная энергия активации.

Обратимые реакции 1-го порядка. Решение кинетических уравнений, кинетические кривые. Связь константы равновесия с константами скорости. Определение кинетических параметров.

Обратимые реакции 1-го порядка. Зависимость скорости реакции от химического сродства.

Параллельные реакции 1-го порядка. Решение кинетических уравнений, кинетические кривые. Периоды полураспада и полубразования. Определение кинетических параметров.

Последовательные реакции 1-го порядка. Решение кинетических уравнений, кинетические кривые. Определение кинетических параметров.

Принцип лимитирующей стадии для обратимых, последовательных и параллельных реакций.

Приближение квазистационарных концентраций. Условия применимости. Пример.

Квазиравновесное приближение в химической кинетике. Условия применимости. Пример.

Экспериментальное определение порядков реакций и констант скорости.

Термодинамический и кинетический контроль в параллельных обратимых реакциях.

Цепные реакции. Основные элементарные стадии. Разветвленные и неразветвленные цепные реакции.

Разветвленные цепные реакции, основные стадии. Природа цепного взрыва.

Основные понятия катализа. Общие свойства катализаторов. Классификация каталитических реакций.

Кислотно-основной катализ: специфический и общий. Механизмы реакций, кинетическое описание.

Ферментативные реакции. Уравнение Михаэлиса-Ментен. Определение кинетических параметров.

Ферментативные реакции. Механизмы ингибирования (любой, на выбор), определение кинетических параметров.

Гетерогенный катализ. Основные стадии, энергетический профиль. Закон действующих масс для гетерогенных реакций.

Основная литература

В.В. Еремин, А.Я. Борщевский. Общая и физическая химия. – М., Интеллект, 2012.

В.В. Еремин, С.И. Каргов, И.А. Успенская, Н.Е. Кузьменко, В.В. Лунин. Основы физической химии. В 2-х тт. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2013.