

Контрольные вопросы к кандидатскому экзамену по дисциплине «Физическая химия»

1. Общие принципы образования химических связей.
2. Основные приближения при решении квантово-химических задач.
3. Методы выбора волновой функции молекулы.
4. Методы решения уравнения Шредингера.
5. Элементы симметрии молекул.
6. Работа идеального газа в адиабатическом процессе.
7. Расчет тепловых эффектов химических реакций. Приближенные методы расчета.
8. Калориметрические методы измерения тепловых эффектов.
9. Расчеты энергий Гиббса и Гельмгольца с применением таблиц стандартных величин.
10. Соотношения Максвелла.
11. Парциальные мольные величины, химический потенциал.
12. Уравнение Гиббса – Дюгема.
13. Закон действующих масс, константа равновесия.
14. Уравнение изотермы химической реакции Вант-Гоффа.
15. Зависимость константы равновесия от температуры.
16. Статистическое определение энтропии.
17. Расчет констант равновесия с использованием статистических сумм.
18. Криоскопия.
19. Осмотические явления.
20. Условие термодинамического равновесия в гетерогенных системах, правило фаз Гиббса.
21. Однокомпонентные системы, уравнение Клаузиуса-Клапейрона.
22. Диаграммы состояния двухкомпонентных азеотропных систем.
23. Диаграммы X-Y переходов жидкость – пар.
24. Диаграммы плавкости двухкомпонентных систем.
25. Системы с образованием конгруэнтно и инконгруэнтно плавящихся соединений.
26. Физико-химический анализ.
27. Расчеты по диаграммам состояния. Правило рычага.
28. Расчеты ректификационных процессов.
29. Основной постулат химической кинетики.
30. Размерность константы скорости химической реакции.
31. Необратимые реакции нулевого порядка.
32. Кинетика последовательных реакций.
33. Лимитирующая стадия.
34. Принцип квазистационарных концентраций Боденштейна.
35. Уравнение Михаэлиса – Ментен.
36. Кинетика реакций в потоке.
37. Теория переходного состояния.
38. Скорость гетерогенных химических процессов.
39. Диффузия и массоперенос. Закон Фика.
40. Гетерогенные и гетерофазные химические процессы.
41. Кинетическая и диффузионная области протекания гетерогенных процессов.

42. Катализ, энтропийная и активационная природа катализа.
43. Специфический и общий кислотно-основной катализ.
44. Катализ в технологии неорганических веществ.
45. Каталитический крекинг и гидрокрекинг.
46. Каталитический риформинг.
47. Равновесия в растворах электролитов.
48. Основные механизмы переноса заряда в растворах, расплавах и твердых электролитах.
49. Удельная и молярная электропроводности.
50. Предельная молярная электропроводность сильных и слабых электролитов, ее определение.
51. Кондуктометрический метод определения степени и константы электролитической диссоциации.
52. Электродные потенциалы. Уравнение Нернста.
53. Концентрационная и химическая поляризация. Поляризационные кривые.
54. Основные положения теории Лэнгмюра.
55. Изотерма многоцентровой адсорбции на однородных поверхностях.
56. Проверка соответствия опытных данных данной изотерме сорбции.
57. Определение поверхности твёрдых тел на основании адсорбционных данных (метод Лэнгмюра, БЭТ, Гаркинса и Юра).
58. Особенности адсорбции веществ в микропорах.
59. Свойства химических соединений, определяющие химический сдвиг в спектрах ЯМР.
60. Свойства химических соединений, определяющие сверхтонкую структуру спектров ЯМР.
61. Свойства химических соединений, определяющие время удерживания пика в газовой хроматографии.
62. Свойства химических соединений, определяющие интенсивность сигнала пламенно-ионизационного детектора.
63. Современные квантово-химические методы расчета, их основные отличия.
64. Основные приближения при расчете молекул в методах функционала плотности.
65. Основные физико-химические свойства молекул, получаемые из расчетов.
66. Поверхность потенциальной энергии: локальные минимумы и седловые точки.
67. Алгоритм поиска переходных состояний.
68. Каталитические процессы переработки биомассы.
69. Метод внутреннего стандарта в ГЖХ.

Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

Основная литература

1. Беляев, Алексей Петрович. Физическая и коллоидная химия [Текст] / А. П. Беляев, В. И. Кучук ; под ред. А. П. Беляева. - 2-е изд., перераб. и доп. - Москва : ГЭОТАР-Медиа, 2012. - 751 с.
2. Бёккер Ю. Спектроскопия [Текст] / Ю. Бёккер. - М. : Техносфера, 2009. - 527 с.
3. Бёккер Ю. Хроматография. Инструментальная аналитика: методы хроматографии и капиллярного электрофореза [Текст] / Ю. Бёккер ; пер. В. С. Курова ; ред. пер. А. А. Курганов. - М. : Техносфера, 2009. - 470 с.

4. Быков, Валерий Иванович. Нелинейные модели химической кинетики [Текст] / В. И. Быков, С. Б. Цыбенова. - М. : Красанд, 2011. - 396 с.
5. Гельман, Ганс Густавович. Квантовая химия [Текст] / Г. Гельман ; с предисл. и коммент. А. Л. Чугреева и доп. Г. Гельмана мл. - 2-е изд., доп. - Москва : Бином. Лаборатория знаний, 2011. - 533 с.
6. Еремин В.В. Основы физической химии. Учебное пособие в 2-х частях. Еремин В.В., Каргов С.И., Успенская И.А., Кузьменко Н.Е., Лунин В.В. - Москва: Бином, 2013. – 600 с.
7. Карапетьянц, Михаил Христофорович. Примеры и задачи по химической термодинамике [Текст] / М. Х. Карапетьянц. - Изд. 5-е. - Москва : URSS ; Москва : Либроком, 2012. - 301 с.
8. Каржавин, Владимир Константинович. Термодинамические величины химических элементов и соединений [Текст] / В. К. Каржавин ; Рос. акад. наук, Кол. науч. центр, Геол. ин-т. - Апатиты : КНЦ РАН, 2011. - 160 с.
9. Киселев М. Г. Теоретические и экспериментальные методы химии растворов [Текст] / Киселев М. Г., С. Ю. Носков, Ю. П. Пуховский и др.; отв. ред. А. Ю. Цивадзе ; Рос. акад. наук, Ин-т химии растворов. - Москва : Проспект, 2011. - 683 с.
10. Кук Д. Квантовая теория молекулярных систем. Единый подход [Текст] / Д. Кук ; пер. с англ. Б. К. Новосадова. - Долгопрудный : Интеллект, 2012. - 255 с.
11. Лейкин, Юрий Алексеевич. Физико-химические основы синтеза полимерных сорбентов [Текст] / Ю. А. Лейкин. - Москва : Бином. Лаборатория знаний, 2011. - 413 с.
12. Неравновесные физико-химические процессы в газовых потоках и новые принципы организации горения [Текст] / под ред. А. М. Старика. - Москва : Торус Пресс, 2011. - 845 с.
13. Нестеренко П. Н. Высокоэффективная комплексообразовательная хроматография ионов металлов [Текст] / П. Нестеренко, Ф. Джонс, Б. Полл ; пер. с англ. Е. П. Нестеренко под ред. П. Н. Нестеренко. - Москва : Техносфера, 2013. - 311 с.
14. Пригожин И. Химическая термодинамика [Текст] / И. Пригожин, Р. Дефэй ; пер. с англ. В. А. Михайлов. - 2-е изд. - М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. - 533 с. - Пер.изд.: Chemical Thermodynamics / Prigogine I., Defay R. - Библиогр.: с. 472-475.
15. Прокофьев, Валерий Юрьевич. Основы физико-химической механики экструдированных катализаторов и сорбентов [Текст] / В. Ю. Прокофьев, П. Б. Разговоров, А. П. Ильин ; Иван. гос. хим.-технол. ун-т. - М:КРАСАНД, 2013. - 314 с.
16. Сычев К. С. Практическое руководство по жидкостной хроматографии [Текст] / К. С. Сычев. - М. : Техносфера, 2010. - 250 с.
17. Томашпольский, Юрий Яковлевич. Поверхностная автосегрегация в химических соединениях [Текст] / Ю. Я. Томашпольский. - Москва : Научный мир, 2013. - 206 с.
18. Уманский С. Я. Теория элементарных химических реакций [Текст] / С. Я. Уманский. - Долгопрудный : Интеллект, 2009. - 407 с.
19. Урьев Н. Б. Физико-химическая динамика дисперсных систем и материалов: фундаментальные аспекты, технологические приложения [Текст]/ Н. Б. Урьев. - Долгопрудный : Интеллект, 2013. - 231 с.
20. Цивадзе А. Ю. Физическая химия адсорбционных явлений [Текст] / Цивадзе А. Ю., Русанов А. И., Фомкин А. А. и др.; Рос. акад. наук, Отд-ние химии и наук о

материалах, Науч. совет РАН по физ. химии, Ин-т физ. химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина РАН. - Москва : Граница, 2011. – 301 с.

21. Цивадзе А.Ю. Адсорбция, адсорбенты и адсорбционные процессы в нанопористых материалах : [Текст] / Под ред. А.Ю. Цивадзе - М. : Граница, 2011. - 489 с.

22. Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и тела [Текст] / В. Г. Цирельсон. - М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. - 495 с.

23. Шутилин, Юрий Федорович. Физикохимия полимеров [Текст] / Ю. Ф. Шутилин. - Воронеж : Воронежская обл. типография, 2012. - 838 с.

Дополнительная литература

1. Александров К. С. Кристаллохимия неорганических соединений с пятью анионами: многообразие структур, возможности синтеза новых соединений, области использования [Текст] / К. С. Александров, Б. В. Безносиков Рос. акад. наук, Сиб. отд-ние, Институт физики им. Л. В. Киренского. - Красноярск : Изд-во ИФ СО РАН, 2010. - 203 с.

2. Безносиков Борис Валерьевич. Кристаллохимия структурных антиподов неорганических соединений. Возможности синтеза новых соединений [Текст] / Б. В. Безносиков ; отв. ред. С. Д. Кирик ; Рос. акад. наук, Сиб. отд-ние, Ин-т физики им. Л.В. Киренского. - Красноярск : ИФ СО РАН, 2012. - 117 с.

3. Боруцкий П. Н. Каталитические процессы получения углеводов разветвленного строения : изомерия и катализ синтеза углеводов разветвленного строения [Текст] / П. Н. Боруцкий. - СПб. : Профессионал, 2010. - 726 с.

4. Введенский, Вадим Юрьевич. Экспериментальные методы физического материаловедения [Текст] / В. Ю. Введенский, А. С. Лилеев, А. С. Перминов ; Национальный исследовательский технологический университет "МИСиС". - Москва : МИСИС, 2011. - 309 с.

5. Вигдорович В. И. Электрохимическое и коррозионное поведение металлов в кислых спиртовых и водно-спиртовых средах / В. И. Вигдорович, Л. Е. Цыганова. - М. : Радиотехника, 2009. - 327 с.

6. Гордадзе, Гурам Николаевич. Углеводороды нефти и их анализ методом газовой хроматографии [Текст] / Г. Н. Гордадзе, М. В. Гируц, В. Н. Кошелев; Рос. гос. ун-т нефти и газа им. И. М. Губкина. - Москва : МАКС Пресс, 2010. – 234 с.

7. Грибов Л. А. Элементы квантовой теории строения и свойств молекул [Текст]/ Л. А. Грибов. - Долгопрудный : Интеллект, 2010. - 310 с.

8. Де Векки, Андрей Васильевич. Катализ. Теория и практика [Текст]/ А. В. Де Векки. - СПб. : НПО "Профессионал", 2010. - 501 с.

9. Иванов-Шиц, Алексей Кириллович. Ионика твердого тела : В 2-х томах. Т. 2 [Текст] / А.К. Иванов-Шиц, И.В. Мурин ; Санкт-Петерб. гос. ун-т, Рос. акад. наук, Ин-т кристаллографии. - СПб. : Изд-во С.-Петерб. ун-та, 2010. - 999 с.

10. Игнатов С.К. Квантово-химическое моделирование молекулярной структуры, физико-химических свойств и реакционной способности. (Часть 1. Обзор современных методов электронной структуры и теории функционала плотности). [Текст] / С.К. Игнатов; Федер. агентство по образованию, Нижегородский государственный ун-т, - Нижний Новгород, 2006, - 82 с.

11. Игнатов С.К. Квантово-химическое моделирование молекулярной структуры, физико-химических свойств и реакционной способности. (Часть 2. Оптимизация геометрии

и расчет физико-химических свойств). [Текст] / С.К. Игнатов; Федер. агентство по образованию, Нижегородский государственный ун-т, - Нижний Новгород, 2010, - 80 с.

12. Кокотов, Юрий Абрамович. Химический потенциал [Текст] / Ю. А. Кокотов Санкт-Петербург : Нестор-История, 2010. - 412 с.

13. Лилич Л. С. Растворы как химические системы : донорно-акцепторные реакции в растворах [Текст] / Л. С. Лилич, М. К. Хрипун ; Санкт-Петербургский государственный университет. - 2-е изд. - СПб. : Изд-во С.-Петерб. ун-та, 2010. - 251 с.

14. Соболев, Владимир Андреевич. Редукция моделей и критические явления в макрокинетике [Текст] / В. А. Соболев, Е. А. Щепаккина. - Москва : Физматлит, 2010. - 319 с.

15. Титце Л. Ф. Domino-реакции в органическом синтезе [Текст] /Л. Ф. Титце, Г. Браше, К. М. Герике. - Москва : Бином. Лаборатория знаний, 2010. - 671 с.

16. Фенелонов, Владимир Борисович. Адсорбционно-капиллярные явления и пористая структура катализаторов [Текст] / В. Б. Фенелонов, М. С. Мельгунов ; Федер. агентство по образованию, Новосиб. гос. ун-т, Фак. естеств. наук. - Новосибирск : НГУ, 2010. - 188 с.

17. Ярославцев А. Б. Химия твердого тела / А. Б. Ярославцев. - М. : Научный мир, 2009. - 327 с.