

Программа вступительного экзамена в магистратуру ФЕН НГУ по направлению подготовки 04.04.01 «химия»

Часть I. Строение и состояния вещества

Строение и состояние атома

Элементарные частицы, составляющие атом. Основные характеристики атомного ядра. Элемент. Изотоп. Дефект массы. Радиоактивный распад. Ядерные реакции.

Атом водорода и водородоподобные частицы. Волновая функция и состояние электрона в атоме. Понятия: вероятность, плотность вероятности, радиальная функция распределения. Атомные орбитали. Квантовые числа и их физический смысл. Графическое представление атомных орбиталей.

Многоэлектронные атомы. Принцип Паули. Правило Хунда. Электронные конфигурации атомов и Периодическая система элементов. Потенциал ионизации. Сродство к электрону. Возбужденные и ионизованные атомы. Гибридные атомные орбитали и их графическое представление.

Многоатомные частицы. Химическая связь

Основные типы многоатомных частиц. Химическая связь в ионе H_2^+ . Молекулярные орбитали. Длина связи. Энергия связи. Двухатомные частицы: ионы и молекулы, состоящие из элементов I–II периодов. σ - и π -связи. Энергетическая диаграмма молекулярных орбиталей. Правила заполнения молекулярных орбиталей электронами. Кратность (порядок) связи.

Двухэлектронные связи. Ковалентность атомов. Углы между связями в многоатомных молекулах. Геометрическое строение молекул с точки зрения гибридизации и метода отталкивания валентных электронных пар.

Многоцентровые молекулярные орбитали. Электронодефицитные частицы. Сопряженные кратные связи. Комплексные соединения.

Электрические и магнитные свойства молекул

Диполь. Дипольный момент связи. Электроотрицательность атомов. Факторы, влияющие на дипольный момент молекулы. Поляризуемость молекул. Поляризация вещества. Диэлектрическая постоянная. Магнитный момент частиц. Парамагнетизм и диамагнетизм.

Состояние многоатомных частиц

Типы движений и степени свободы частицы. Энергетические уровни поступательного, вращательного и колебательного движений частицы. Закон о равномерном распределении энергии по степеням свободы. Внутреннее вращение и конформация молекул.

Нековалентные взаимодействия.

Ван-дер-ваальсовы взаимодействия. Ковалентные и ван-дер-ваальсовы радиусы атомов. Модели молекул. Водородная связь. Взаимодействие ионов.

Строение и состояния макроскопических систем

Газы. Жидкости. Твердые тела. Кристаллы. Растворы. Фаза. Гомогенные и гетерогенные системы. Параметры состояния. Уравнение состояния. Интенсивные и экстенсивные величины. Внутренняя энергия и энтальпия.

Теплоемкость. Термодинамическая вероятность. Энтропия. Зависимости внутренней энергии и энтропии идеального газа от параметров состояния. Понятие о парциальных мольных величинах.

Физические методы исследования строения вещества

Электромагнитное излучение и вещество. Физическая сущность и информативность методов: электронной спектроскопии, колебательной и вращательной спектроскопий, магнитной радиоспектроскопии, рентгеноструктурного анализа.

Часть II. Химический процесс

Основные характеристики химического процесса

Стехиометрическое уравнение химической реакции. Гомогенные и гетерогенные химические реакции. Скорость реакции. Химическое равновесие.

Термодинамическое описание процесса в макроскопической системе

Равновесные и неравновесные процессы. Первое начало термодинамики. Изменение внутренней энергии и энтальпии в макроскопическом процессе. Второе начало термодинамики. Изменение энтропии в макроскопическом процессе. Энергия Гельмгольца. Энергия Гиббса. Направление процесса и условия равновесия.

Термодинамика фазовых переходов в однокомпонентной системе

Правило фаз Гиббса. Уравнение Клапейрона – Клаузиуса. P-T фазовые диаграммы воды и углекислого газа.

Термодинамика растворов

Идеальный, предельно разбавленный, реальный растворы. Химический потенциал компонента и его зависимость от состава раствора. Активность. Коэффициент активности. Законы Рауля и Генри. Осмотическое давление.

Термодинамика химического процесса

Тепловой эффект химической реакции. Закон Гесса. Стандартная энтальпия реакции. Стандартная энтропия реакции. Стандартная энергия Гиббса реакции. Изотерма химической реакции. Направление реакции и константа равновесия. Изобара химической реакции. Равновесный состав. Принцип Ле-Шателье.

Равновесия в растворах электролитов

Кислотно-основное равновесие. Кислоты и основания. Сопряженная пара кислота–основание. Константа ионизации и константа основности. Ионное произведение воды. Концентрация ионов водорода (pH). Гидролиз солей слабых кислот и солей слабых оснований. Константа гидролиза. Буферные растворы. Уравнение Гендерсона. Свойства буферных растворов. Многоступенчатая диссоциация. Правила записи системы уравнений для определения концентрации всех частиц, присутствующих в растворе.

Равновесие между труднорастворимым соединением и его ионами в растворе. Произведение растворимости. Растворимость. Влияние pH на процессы растворения и осаждения труднорастворимых солей и гидроксидов.

Окислительно-восстановительное равновесие. Окислительно-восстановительные реакции. Сопряженная пара окислитель–восстановитель. Электрод. Электродный потенциал. Уравнение Нернста. Некоторые типы

электродов. Гальванический элемент. ЭДС и направление окислительно-восстановительной реакции.

Кинетика химических реакций

Основные понятия химической кинетики. Механизм реакции. Элементарные (простые) и сложные реакции. Необратимые (односторонние) и обратимые реакции. Кинетическое уравнение. Порядок реакции. Молекулярность элементарных стадий. Закон действующих масс. Константа скорости реакции. Уравнение Аррениуса. Энергия активации и предэкспоненциальный множитель.

Формальная кинетика простых реакций. Кинетические уравнения в дифференциальной и интегральной формах для необратимых реакций первого, второго и третьего порядка. Кинетическое описание обратимой реакции первого порядка. Кинетика и равновесие.

Элементарный акт химической реакции. Потенциальная энергия реагирующих частиц. Координата реакции. Физический смысл энергии активации реакции. Переходное состояние. Основные положения теории активированного комплекса и теории столкновений.

Сложные реакции. Параллельные и последовательные реакции. Принцип независимости элементарных реакций. Составление кинетических уравнений для сложных реакций. Понятие о квазистационарном и квазиравновесном приближениях. Основные типы механизмов сложных реакций. Химическая индукция и сопряженные реакции. Катализ и каталитические реакции. Цепные реакции.

Рекомендованная литература

Основная:

1. Кнорре Д. Г., Крылова Л. Ф., Музыкантов В. С. Физическая химия. М.: Высш. шк., 1990.
2. Неорганическая химия / Под ред. Ю. Д. Третьякова. М.: АCADEMIA, 2004. Т. 1: Физико-химические основы неорганической химии.
3. Физическая химия-1. Учебно-методическое пособие / Л. Ф. Крылова, Г. А. Костин, Г. И. Шамовская. Новосибирск: НГУ, 2013.

Дополнительная:

1. Даниэльс Ф., Олберти Р. Физическая химия. М.: Мир, 1978.
2. Дикерсон Р., Грей Г., Хейт Дж. Основные законы химии: В 2 т. М.: Мир, 1982.
3. Гиллеспи Р. Геометрия молекул. М.: Мир, 1975.
4. Чупахин А. П. Общая химия. Химическая связь и строение вещества. Новосибирск: НГУ, 2003.
5. Чупахин А. П. Химический процесс: энергетика и равновесие. Новосибирск: НГУ, 2006.
6. Козлов Д. В., Костин Г. А., Чупахин А. П. Основные принципы

спектроскопии и ее применение в химии. Новосибирск: НГУ, 2008.

7. Боронин А. И., Голубенко А. Н. Растворы и перегонка жидкостей. Новосибирск: НГУ, 2011.

8. Бажин Н.М., Пармон В.Н. Начала физической химии. Новосибирск: НГУ, 2006.

9. Шрайвер Д., Эткинс П. Неорганическая химия. В 2-х т. М.: Мир, 2009.

10. Эткинс П. Физическая химия. В 2-х томах. М.: Мир, 1980.

11. Хаускрофт К. Е., Констебл Э. К. Современный курс общей химии. М.: Мир, 2002.

Интернет-ресурсы:

1. Интернет-представительство факультета естественных наук НГУ (Методические пособия) – <http://fen.nsu.ru/fen.phtml?topic=meth>

2. Интернет-представительство кафедры общей химии ФЕН НГУ: www.fen.nsu.ru/genchem

3. Электронная библиотека учебных материалов по химии химического факультета МГУ: <http://www.chem.msu.ru/rus/elibrary>

4. Портал тестирования ММЦ НГУ: <http://mmc2.nsu.ru>

5. Интернет-портал фундаментального химического образования России: www.chem.msu.ru

6. Химический интернет-портал: www.chemport.ru

7. Научно-популярный портал: www.elementy.ru