**Вопросы для итогового экзамена по дисциплине «Современные проблемы физической химии» для докторантов**

1. Макро- и микросостояния системы, их особенности и свойства.
2. Теорема Лиувилля. Эргоидная гипотеза.
3. Ансамбли Гиббса, микроканонические и кананические средние.
4. Закон распределения молекул по энергиям, закон Больцмана.
5. Статистический характер второго закона термодинамики.
6. Подсчет микросостояний по Больцману.
7. Функция распределения вероятностей Гиббса.
8. Статистическая сумма по состоянию системы.
9. Связь статистической суммы по состоянию с молекулярной суммой по состоянию.
10. Связь статистической суммы по состоянию с термодинамическими функциями.
11. Сумма по состоянию системы, вклад отдельных видов движения молекул.
12. Отличительные особенности свойств микросистем от свойств макросистем.
13. Использование теоремы Лиувилля и эргоидной гипотезы в статистической термодинамике.
14. Свойства микроканонических и канонических ансамблей Гиббса.
15. Статиститческое обоснование второго закона термодинамики.
16. Понятие о фазовом простанстве, фазовой точке и фазовой траектории.
17. Функция распределения, термодинамическая вероятность, плотность функции распределения.
18. Физический смысл статистической суммы по состоянию.
19. Физический смысл молекулярной суммы по состоянию.
20. Статистическая сумма по состоянию и термодинамические функции.
21. Вклад отдельных видов движения в общую сумму по состоянию.
22. Термодинамическая вероятность и распрделение микросостояний по Больцману.
23. Как связана энтропия и термодинамическая вероятность, уравнение Максвелла, обоснование и вывод этого уравнения.
24. Объясните физический смысл статистической суммы по состоянию системы и молекулярную сумму по состоянию.
25. Теоретические основы теории активных столкновений (ТАС)
26. Скорость и константа скорости бимолекулярных реакций с точки зрения теории активных столкновений
27. Истинная и опытная энергия активации с точки зрения ТАС
28. Физический смысл предэкспоненциального множителя уравнения Аррениуса
29. Применение ТАС в мономолекулярным реакциям, гипотеза Линдемана
30. Физический смысл потенциальной энергии поверхности химической реакции, энергетический профиль реакции
31. Теоретические основы теории активированного комплекса (ТАК), модель Эйринга
32. Статистический и термодинамический аспект теории ТАК для определения скорости и константы скорости сложных реакции

33.Отличительные особенности теории активных столкновений и теории переходного состояния.

34.Свободная энергия, энтальпия и энтропия активации.

1. Теоретические основы кинетики электрохимической реакции, протекающей в диффузионном режиме.
2. Теоретические основы кинетики электрохимической реакции, протекающей в кинетическом режиме.
3. Теоретическое обоснование поляризации электродных процессов, виды поляризации.
4. Концентрационная поляризация в условиях лимитирующей стадии массопереноса. Константа скорости стадии массопереноса.
5. Электрохимическая поляризация в условиях лимитирующей стадии электродной реакции.
6. Основные уравнения теории замедленного разряда.

Задачи

1. *Задача* . Молекула может находиться на двух уровнях с энергиями 0 и 400 см-1. Какова вероятность того, что молекула будет находиться на верхнем уровне при 250 оС?
2. *Задача*. В некоторой молекуле есть три электронных уровня энергии: 0, 1000 и 2000 см -1. Нижний уровень не вырожден, средний – трехкратно вырожден, высший – пятикратно вырожден. Найдите заселенность уровней при температуре 1900 К. Значение постоянной  = 1,44 см⋅К.
3. *Задача* . Молекула может находиться на двух уровнях с энергиями 0 и 460 см-1. Какова вероятность того, что молекула будет находиться на верхнем уровне при 350 оС
4. *Задача* . Молекула может находиться на двух уровнях с энергиями 0 и 600 см-1. Какова вероятность того, что молекула будет находиться на верхнем уровне при 800 оС?
5. *Задача*. В некоторой молекуле есть три электронных уровня энергии: 0, 1500 и 3500 см -1. Нижний уровень не вырожден, средний – трехкратно вырожден, высший – пятикратно вырожден. Найдите заселенность уровней при температуре 2000 К. Значение постоянной  = 1,44 см⋅К.

46.*Задача* . Молекула может находиться на двух уровнях с энергиями 0 и 550 см-1. Какова вероятность того, что молекула будет находиться на верхнем уровне при 300 оС

47. Определите поступательную составляющую суммы состояний молекулы СO при давлении 1,0133⋅105 Па и температуре 500 К, используя уравнение: **lnZпост= 3.4539lgM + 5.7565lgT – 2.3026lgP + 8.8612**

48. Определите вращательную составляющую суммы состояний молекулы *СО* при 500 К. Момент инерции *СО* равен 14,49⋅10 -47 кг⋅м2, используя уравнение : **lnZвр = 2.3026lgI + 2.3026lgT -2.3026lgσ - 104.5265**

49. Определите колебательную составляющую суммы состояний молекулы *СО* при 500 К, если частота колебательного движения составляет 2,170⋅105 м -1, используйя уравнение:

Z **кол = , где we – частота колебательного движения,**

50. Определите поступательную составляющую суммы состояний молекулы NO при давлении 1,0133⋅105 Па и температуре 600 К, используя уравнение: lnZпост= 3.4539lgM + 5.7565lgT – 2.3026lgP + 8.8612

51. Определите вращательную составляющую суммы состояний молекулы NO при 600 К. Момент инерции N*О* равен 14,27⋅10 -47 кг⋅м2, используя уравнение: **lnZвр = 2.3026lgI + 2.3026lgT -2.3026lgσ - 104.5265**

52. Определите колебательную составляющую суммы состояний молекулы NO при 600 К, если частота колебательного движения составляет 2,470⋅105 м -1, используя уравнение:

Z **кол = , где we – частота колебательного движения,**

53. Определите поступательную составляющую суммы состояний молекулы СO2 при давлении 1,0133⋅105 Па и температуре 700 К, используя уравнение: l**nZпост= 3.4539lgM + 5.7565lgT – 2.3026lgP + 8.8612**

54. Определите вращательную составляющую суммы состояний молекулы СO2 при 700 К. Момент инерции СO2 равен 14,27⋅10 -47 кг⋅м2, используя уравнение: l**nZвр = 2.3026lgI + 2.3026lgT -2.3026lgσ - 104.5265**

55.Определите колебательную составляющую суммы состояний молекулы СO2 при 700 К, если частота колебательного движения составляет 2,170⋅105 м -1, используя уравнение:

**Z кол = , где we – частота колебательного движения,**