



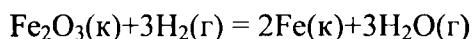
Задания письменного кандидатского экзамена ИНХ СО РАН
по специальности «Физическая химия»
(весна 2017 года)

Задание 1.

1. Качественно изобразите энергетические диаграммы молекулярных орбиталей для частиц NO , NO^+ , NO^- . Какая из предложенных частиц обладает наибольшей энергией диссоциации? Какие из предложенных частиц могут быть зарегистрированы с помощью ЭПР спектроскопии? Ответы пояснить.
2. Рассчитайте энергию диссоциации CO^+ по наиболее энергетически выгодному пути исходя из следующих данных: потенциал ионизации атома углерода – 11,25 эВ, потенциал ионизации атома кислорода – 13,61 эВ, потенциал ионизации молекулы CO – 14,01 эВ, энергия диссоциации молекулы CO – 11,08 эВ.
3. Оцените энергию межэлектронного отталкивания в основном состоянии атома гелия, если потенциал ионизации атома гелия равен 24,47 эВ.

Задание 2.

1. Реакция восстановления Fe_2O_3 водородом протекает по уравнению



Возможна ли эта реакция при стандартных условиях? При какой температуре начнется восстановление Fe_2O_3 ?

вещество	$\Delta_f H^\circ_{298}$, кДж/моль	S°_{298} , Дж/(моль·К)
Fe(тв)	0	27.32
$\text{H}_2(\text{г})$	0	130.57
$\text{H}_2\text{O}(\text{г})$	-241.83	188.72
$\text{Fe}_2\text{O}_3(\text{тв})$	-823.0	87.4

Задание 3.

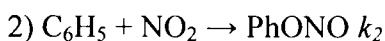
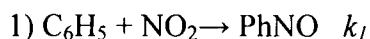
- a) Что такое окислительно-восстановительная пара? Запишите уравнение Нернста для любой окислительно-восстановительной пары.
- b) Что такое концентрационный элемент?
- c) Гальванический элемент составлен из двух серебряных электродов массой 1 кг. Один из них погружен в стакан, содержащий 1 л 0,1М раствор AgNO_3 , другой – в стакан, содержащий 1 л 0,001 М раствор AgNO_3 . Чему равна ЭДС элемента?
- d) Чему будут равны концентрации Ag^+ в стаканах после установления равновесия? Определите ЭДС элемента после установления равновесия. Стандартный потенциал серебряного электрода равен 0,80 В при $T = 298\text{K}$.

Задание 4.

- a) Дайте определение скорости и порядка химической реакции, порядка по компоненту. Изобразите кинетические кривые для элементарной реакции $\text{A} \rightarrow \text{B}$. Что и каким образом можно из этих кривых узнать?

б) Энергия активации элементарной необратимой реакции превращения А в В равна 100 кДж/моль, а предэкспоненциальный множитель константы скорости 10^{13} с⁻¹·л/моль. Определите порядок реакции и константу скорости при T = 300 К.

в) Отношение констант скоростей газофазных реакций



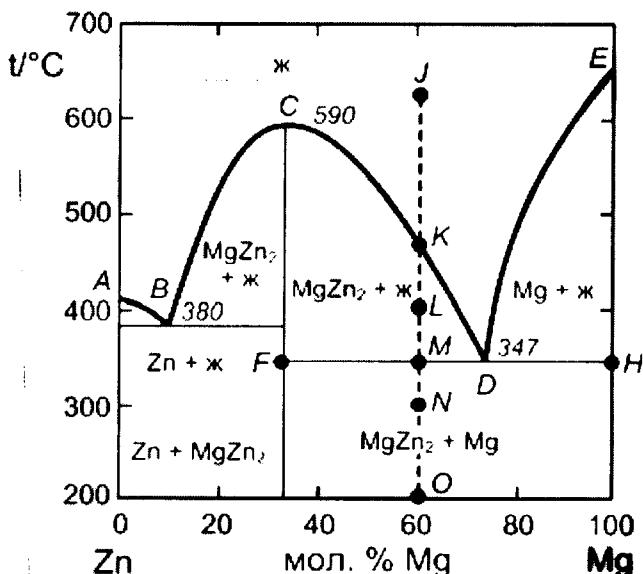
составляет $k_1/k_2 = 4$ при T = -15°C и $k_1/k_2 = 2.2$ при T = 96°C. Рассчитайте по этим данным разницу энергий активации первой и второй реакций.

Задание 5.

а) Сформулируйте разницу между фазовыми переходами первого и второго рода.

б) Определите изменение энтропии при смешивании в изолированной системе 1 моль твердого льда с температурой 263,15 К и 1 моль воды с температурой 293,15 К. Теплоемкости льда и воды равны 38,3 и 75,4 Дж/(моль·К) (принять их независящими от температуры), теплота плавления льда при 273,15 К равна 5,99 кДж/моль.

в) 0,60 моля Mg и 0,40 моля Zn нагрели до 650°C (точка J на фазовой диаграмме плавкости системы цинк – магний, изображенной на рисунке). Опишите, что будет происходить с этой системой при ее охлаждении до 200 °C (точка O). Каково состояние системы в точках K, L, M и O, а также составы и отношения количества соответствующих фаз?



Поздравляем всех с Днём химика!

Желааем удачи!

