

# Оглавление

Предисловие .....	3
Введение .....	5
<b>1 часть. Химическая связь и строение молекул.....</b>	<b>8</b>
<b>Глава I. Основы теории химической связи. Спектрохимия.....</b>	<b>8</b>
<b>А. Основы квантовой механики</b>	
§ 1.1. Основные понятия и постулаты квантовой механики .....	8
§ 1.2. Основные приближения при решении волнового уравнения .....	11
<b>Б. Теория химической связи</b>	
§ 1.3. Квантово-химический расчет молекул .....	15
§ 1.4. Расчет молекулы водорода методом валентных связей (ВС) .....	19
§ 1.5. Применение метода МО ЛКАО к молекулярному иону и молекуле водорода. Сравнение методов ВС и МО ЛКАО.....	24
§ 1.6. Характеристики молекулярных орбиталей. Молекулярные термы .....	29
§ 1.7. Полуэмпирические методы расчета молекул .....	32
§ 1.8. p-Электронное приближение в квантово-химических расчетах органических соединений. Метод МО в приближении Хюккеля .....	35
§ 1.9. Расчет молекул с гетероатомами методом МОХ.....	40
§ 1.10. Описание свойств молекул по данным метода МО Хюккеля .....	42
<b>В. Основы спектрохимии</b>	
§ 1.11. Основные понятия спектроскопии .....	46
§ 1.12. Вращательные спектры .....	47
§ 1.13. Колебательные спектры .....	49
§ 1.14. Колебательно-вращательные спектры .....	54
§ 1.15. Электронные спектры (электронно-колебательно-вращательные) .....	56
<b>2. часть. Химическая термодинамика .....</b>	<b>59</b>
<b>Глава II. Первое и второе начала термодинамики.....</b>	<b>59</b>
<b>А. Первое начало термодинамики</b>	
§ II.1. Основные определения .....	59
§ II.2. Внутренняя энергия, теплота и работа. Первое начало термодинамики.....	60
§ II.3. Работа расширения идеального газа в разных процессах .....	62
§ II.4. Применение первого начала термодинамики к процессам в любых системах. Закон Гесса <sup>64</sup>	
§ II.5. Термохимия .....	67
§ II.6. Приближенные методы расчета теплот образования и сгорания .....	71
<b>Б. Теплоемкость</b>	
§ II.7. Связь теплоемкости с термодинамическими функциями .....	72
§ II.8. Зависимость теплоемкости от температуры. Истинная и средняя теплоемкости .....	74
§ II.9. Теплоемкость газов и твердых тел.....	76
§ II.10. Зависимость теплового эффекта от температуры .....	78
<b>В. Второе начало термодинамики. Энтропия</b>	
§ II.11. Основные понятия.....	81
§ II.12. Второе начало термодинамики. Принцип Каратеодори .....	83
§ II.13. Второе начало термодинамики для обратимых процессов .....	85
§ II.14. Второе начало термодинамики для необратимых процессов .....	87
§ II.15. Изменение энтропии в разных процессах.....	90
<b>Г. Энергия Гиббса. Энергия Гельмгольца. Химический потенциал. Фугитивность. Активность</b>	
§ II.16. Энергия Гиббса и энергия Гельмгольца.....	94
§ II.17. Характеристические функции. Уравнение Гиббса — Гельмгольца .....	97
§ II.18. Химический потенциал .....	98
§ II.19. Химический потенциал идеального и реального газов. Фугитивность.....	100
§ II.20. Вычисление фугитивности и коэффициента фугитивности реальных газов .....	102
§ II.21. Активность и коэффициент активности.....	105

<b>Глава III. Химическое равновесие.....</b>	<b>108</b>
<b>А. Уравнение изотермы химической реакции</b>	
§ III.1. Уравнение изотермы химической реакции и константа равновесия .....	108
§ III.2. Уравнение изотермы и направление химической реакции. Стандартная энергия Гиббса реакции .....	111
§ III.3. Константа равновесия и стандартная энергия Гиббса реакции .....	113
<b>Б. Константа равновесия химической реакции и состав системы</b>	
§ III.4. Константа равновесия и разные способы выражения состава реакционной смеси .....	115
§ III.5. Влияние давления на равновесие химической реакции. Принцип смещения равновесия .....	118
§ III.6. Гетерогенное химическое равновесие .....	119
<b>В. Зависимость константы равновесия от температуры</b>	
§ III.7. Уравнение изобары и изохоры реакции. Принцип смещения равновесия.....	121
§ III.8. Постулат Планка. Абсолютные энтропии химических соединений .....	124
§ III.9. Определение констант равновесия химических реакций при любых температурах с использованием абсолютных энтропии .....	126
<b>Глава IV. Элементы статистической термодинамики.....</b>	<b>129</b>
<b>А. Статистическое обоснование второго начала термодинамики</b>	
§ ГУЛ. Основные положения статистической термодинамики .....	129
§ IV.2. Энтропия и вероятность .....	131
<b>Б. Определение термодинамических функций</b>	
§ IV.3. Сумма по состояниям .....	133
§ IV.4. Термодинамические функции газов, обусловленные поступательным и электронным движениями .....	140
§ IV.5. Термодинамические функции газов, обусловленные вращательным движением молекул .....	143
§ IV.6. Термодинамические функции газов, обусловленные колебательным и другими видами движения молекул.....	145
§ IV.7. Константа равновесия химических реакций.....	148
<b>3 часть. Фазовое равновесие и растворы.....</b>	<b>152</b>
<b>Глава V. Фазовое равновесие.....</b>	<b>152</b>
<b>А. Основной закон фазового равновесия. Уравнение Клапейрона — Клаузиуса. Диаграммы состояния однокомпонентных систем</b>	
§ V.1. Основные понятия в определении. Условие равновесия компонента в двух фазах гетерогенной системы.....	152
§ V.2. Основной закон фазового равновесия. Уравнение Клапейрона — Клаузиуса .....	154
§ V.3. Однокомпонентные гетерогенные системы. Диаграмма состояния воды.....	158
§ V.4. Моно- и энантиотропные фазовые переходы .....	160
<b>Б. Диаграммы состояния двухкомпонентных систем</b>	
§ V.5. Физико-химический анализ. Термический анализ .....	162
§ V.6. Системы с эвтектикой .....	164
§ V.7. Системы с конгруэнтно и инконгруэнтно плавящимися химическими соединениями. Правило рычага.....	166
§ V.8. Системы с твердыми растворами, компоненты которых взаимно неограниченно и ограниченно растворимы .....	170
§ V.9. Системы с ограниченной растворимостью в жидкой фазе. Сложные диаграммы состояния .....	174
<b>В. Диаграммы состояния трехкомпонентных систем</b>	
§ V.10. Графическое представление состава тройных систем .....	175
§ V.11. Трехкомпонентные жидкие системы .....	177
§ V.12. Трехкомпонентные системы с тройной эвтектикой.....	178
<b>Глава VI. Растворы .....</b>	<b>181</b>
<b>А. Термодинамическая теория растворов</b>	
§ VI.1. Парциальные молярные величины и их значение в термодинамике растворов .....	182
§ VI.2. Зависимость равновесных свойств раствора от химического потенциала и других парциальных молярных величин.....	186
§ VI.3. Идеальные, предельно разбавленные и неидеальные растворы .....	189
§ VI.4. Давление насыщенного пара компонента над раствором. Уравнения Рауля и Генри. Растворимость газов.....	192
§ VI.5. Понижение температуры замерзания и повышение температуры кипения растворов ..	195
§ VI.6. Растворимость твердых веществ .....	199
§ VI.7. Осмотическое давление растворов .....	201

§ VI.8. Распределение растворенного вещества между двумя несмешивающимися растворителями. Экстракция .....	202
§ VI.9. Определение активности и коэффициента активности компонентов раствора .....	206
<b>Б. Термодинамика жидких летучих смесей</b>	
§ VI. 10. Закономерности общего давления пара летучих смесей. Два закона Коновалова .....	210
§ VI.11. Летучие смеси с неограниченно смешивающимися жидкостями. Идеальные летучие смеси .....	213
§ VI.12. Перегонка летучих жидких смесей.....	218
§ VI. 13. Ограниченно растворимые и практически взаимно нерастворимые летучие смеси .....	221
<b>4 часть. Электрохимия.....</b>	<b>225</b>
<b>Глава VII. Растворы электролитов .....</b>	<b>225</b>
<b>А. Термодинамическая и электростатическая теория растворов электролитов</b>	
§ VII.1. Основные понятия и соотношения термодинамики растворов электролитов .....	225
§ VII .2. Средний коэффициент активности сильного электролита . . . . .	229
§ VII.3. Основные понятия электростатической теории растворов сильных электролитов.....	232
<b>Б. Электрическая проводимость растворов электролитов</b>	
§ VII.4. Удельная и молярная электрические проводимости .....	234
§ VII. 5. Зависимость электрической проводимости растворов слабых и сильных электролитов от концентрации электролита. Основы теории электрической проводимости Онзагера .....	238
§ VII.6. Подвижность и числа переноса ионов.....	242
§ VII.7. Кондуктометрия .....	246
<b>В. Термодинамика электрохимических процессов. Электродвижущие силы и электродные потенциалы</b>	
§ VII.8. Термодинамика электрохимического элемента.....	247
§VII.9. Равновесный и стандартный электродные потенциалы. Типы электродов .....	253
§ VII.10. Химические цепи. Концентрационные цепи без переноса и с переносом. Диффузионный потенциал .....	259
<b>Г. Потенциометрия</b>	
§ VII.11 Потенциометрическое определение стандартных термодинамических функций и константы равновесия электрохимических реакций . .....	265
§ VII.12. Потенциометрическое определение среднего коэффициента активности электролита и активности металла в сплаве . .....	270
§ VII.13. Потенциометрическое определение рН растворов.....	272
<b>Д. Строение двойного электрического слоя на границе электрод — раствор электролита</b>	
§ VII.14. Образование двойного электрического слоя.....	275
§ VII.15. Электрокапиллярные явления. Потенциал нулевого заряда .....	279
§ VII.16. Емкость двойного электрического слоя .....	281
<b>5 часть. Кинетика химических реакций .....</b>	<b>284</b>
<b>Глава VIII. Химическая кинетика .....</b>	<b>284</b>
§ VIII. 1. Основные понятия .....	284
§ VIII.2. Элементарные стадии реакции.....	285
§ VIII.3. Сложные реакции .....	287
§ VIII .4. Скорость образования компонента и скорость реакции .....	289
§ VIII.5. Открытые системы .....	294
<b>Глава IX. Формальная кинетика. Элементарные и формально простые гомогенные односторонние реакции .....</b>	
§ IX. 1. Моделирование химических процессов.....	295
§ IX.2. Зависимость скорости реакции от концентрации реагентов. Закон действующих масс .....	296
§ IX.3. Формальная кинетика элементарных и формально простых гомогенных односторонних реакций в закрытых системах ....	300
§ IX.4. Способы определения порядка реакции в константы скорости реакции для элементарных и формально простых реакций в закрытых системах .....	306
§ IX.5. Формальная кинетика элементарных и формально простых реакций в открытых системах .....	311
§ IX.6. Зависимость скорости реакции от температуры. Определение энергии активации .....	314
§ IX.7. Неизотермическая кинетика. Определение кинетических параметров .....	316
<b>Глава X. Формальная кинетика. Сложные реакции .....</b>	
§ X.1. Основные понятия.....	319
§ X.2. Двусторонние (обратимые) реакции.....	321

§ X.3.	Параллельные реакции .....	325
§ X.4.	Последовательные реакции .....	327
§ X.5.	Сложные реакции в открытых системах .....	331
§ X.6.	Сопряженные реакции .....	334
§ X.7.	Автокаталитические реакции .....	335
§ X.8.	Стационарное и квазистационарное протекание реакций .....	338
<b>Глава XI. Теоретические представления химической кинетики .....</b>		<b>343</b>
§ XI.1.	Теория активных столкновений.....	343
§ XI.2.	Теория активированного комплекса или переходного состояния. Теория абсолютных скоростей реакций.....	348
§ XI.3.	Применение теории абсолютных скоростей реакций к оценке предэкспоненциального множителя в элементарных реакциях.....	355
§ XI.4.	Мономолекулярные реакции .....	358
§ XI.5.	Кинетика реакций в растворе. Диффузионный механизм кинетики .....	361
§ XI.6.	Применение теории абсолютных скоростей реакций к растворам .....	363
§ XI.7.	Квантово-химический подход к оценке реакционной способности молекул .....	366
§ XI.8.	Правило сохранения орбитальной симметрии Вудворда — Хоффмана и корреляционные диаграммы. Оценка энергии активации .....	368
<b>Глава XII. Цепные и фотохимические реакции .....</b>		<b>373</b>
§ XII.1.	Основные понятия кинетики цепных реакций.....	373
§ XII.2.	Основы теории кинетики цепных реакций.....	375
§ XII.3.	Горение и взрыв .....	379
§ XII.4.	Фотохимические реакции .....	382
§ XII.5.	Радиационно-химические реакции .....	385
<b>Глава XIII. Кинетика гетерогенных реакций.....</b>		<b>387</b>
§ XIII.1.	Гетерогенные процессы при нестационарной диффузии .....	387
§ XIII.2.	Гетерогенные процессы при стационарной конвективной диффузии.....	392
§ XIII.3.	Кинетика топохимических реакций.....	396
<b>Глава XIV. Кинетика электрохимических реакций.....</b>		<b>408</b>
§ XIV.1.	Основные понятия .....	408
§ XIV.2.	Обратимые электродные процессы .....	412
§ XIV.3.	Электрохимическая реакция как лимитирующая стадия. Теория замедленного разряда — ионизации.....	417
§ XIV.4.	Электродные процессы с двумя контролирующими стадиями .....	424
§ XIV.5.	Электродные процессы, осложненные дополнительными стадиями .....	428
<b>6 часть. Катализ .....</b>		<b>431</b>
<b>Глава XV. Гомогенный катализ .....</b>		<b>431</b>
§ XV.1.	Основные понятия. Причины каталитического действия.....	431
§ XV.2.	Каталитическая активность и селективность.....	435
§ XV.3.	Соотношение Бренстеда–Поляни' .....	437
§ XV.4.	Металлокомплексный и ферментативный катализ.....	441
§ XV.5.	Кинетика металлокомплексного и ферментативного катализа .....	448
§ XV.6.	Кислотно-основной катализ. Другие виды гомогенного катализа .....	454
§ XV.7.	Гомогенный катализ в газовой фазе .....	458
<b>Глава XVI. Гетерогенный катализ .....</b>		<b>459</b>
§ XVI.1.	Гетерогенные катализаторы .....	459
§ XVI.2.	Адсорбция на поверхности катализатора.....	462
§ XVI.3.	Макрокинетика гетерогенного катализа .....	466
§ XVI.4.	Внешнекинетическая область гетерогенного катализа.....	467
§ XVI.5.	Адсорбционная и промежуточная области гетерогенного катализа .....	470
§ XVI.6.	Внешнедиффузионная и промежуточная области гетерогенного катализа .....	472
§ XVI.7.	Внутридиффузионная и внутрикинетическая области гетерогенного катализа.....	474
§ XVI.8.	Теория гетерогенного катализа.....	479
§ XVI.9.	Предвидение каталитической активности .....	484
Приложение.....		489
Введение в теорию самоорганизации материи. Элементы синергетики.....		489
Литература.....		511
Предметный указатель .....		516

*Учебник написан на современном научно-методическом уровне. В нем отражены достижения физико-химической науки по всем ее трем методам: квантовой химии, химической термодинамики и химической кинетики (вместе с катализом). Для лучшего усвоения материала и его практического применения многие параграфы снабжены расчетными примерами. К учебнику написано приложение: «Введение в теорию самоорганизации материи. Элементы синергетики».*

*Пятое издание (4-е в 2001 г.).*

*Для студентов химических специальностей вузов.*