

Програму переглянуто 23.09.2020 р. (д.ф.-м.н., проф. Клепо В.В., д.ф.-м.н., проф., Мамуня Є.П., д.х.н. Штомпель В.І.)

ЗАТВЕРДЖУЮ



Директор ІХВС НАН України
доктор хімічних наук
О.О. Бровко
25 вересня 2020 р.

ПРОГРАМА

вступного іспиту в аспірантуру
зі спеціальності 104 - «Фізика та астрономія»
Інституту хімії високомолекулярних сполук НАН України

1. Електронна структура молекул, внутрішньомолекулярна і міжмолекулярна взаємодія.

Хвильові властивості часток. Хвильове рівняння Шредінгера. Розв'язання рівняння Шредінгера для атома водню. Енергетичні рівні гідроген подібних атомів. Фізичний зміст квантових чисел. Спін електрона. Хвильові функції багатеелектронних атомів. Заборона Паулі. Потенціали іонізації. Поляризованість. Спорідненість до електрона. Електронегативність. Двохатомні ковалентні і полярні молекули. Інтеграли перекривання. Хвильові функції молекули гідрогену. Насичуваність ковалентного зв'язку. Поверхня потенційної енергії. Правила адитивності відстаней і енергій. Метод молекулярних орбіталей для двохатомних молекул. Гетероатомні молекули у методі молекулярних орбіталей. Порівняння методів МО і ВС. Багатоатомні молекули з локалізованими зв'язками, Методи МО та ВС. Еквівалентні орбіталі. sp^2 і sp^3 гібридні орбіталі. Багатоатомні молекули з кратними зв'язками. Хімічний зв'язок у конденсованих системах. Класифікація конденсованих систем за типами хімічних зв'язків. Молекулярні конденсовані системи. Енергія міжмолекулярної взаємодії. Рівняння Мі і Леннарда-Джонса. Водневий зв'язок. Ковалентний зв'язок у твердих тілах. Внутрішнє обертання в молекулах. Поворотні ізомери. Рівняння для потенційної енергії внутрішнього обертання.

2. Структура конденсованого стану.

Кристалічні решітки. Точкові групи. Просторові групи. Принцип найщільнішого пакування і його застосування. Найщільніше пакування шарів і молекул. Пакування макромолекул. Структура рідини. Функції радіального розподілу.

3. Термодинаміка і елементи статистичної фізики.

Форми енергії. Закон збереження енергії (перший початок). Термодинамічні змінні. Закриті і відкриті системи. Ентальпія, теплоємність. Рівняння стану. Зворотні і незворотні процеси. Цикл Карно. Другий початок термодинаміки. Поняття ентропії і його статистична інтерпретація. Мікро- і макро- стани, ймовірності станів. Третій початок

термодинаміки. Термодинамічні потенціали і співвідношення між ними. Уявлення про флуктуації, їх види, ймовірність флуктуації параметрів ізольованої системи. Флуктуації густини, температури і числа часток у заданому об'ємі.

4. Різнові рівноваги і фазові перетворення.

Фази, компоненти і ступені свободи. Правило фаз. Діаграма стану для однокомпонентної системи, діаграми стану для бінарних систем, які складаються з двох рідких фаз та із фаз, які утворюють сполуки. Класифікація фазових перетворень. Зміна термодинамічних функцій при Фазових перетвореннях першого і другого виду. Рівняння Клаузіуса-Клапейрона. Ентропія і плавлення. Основні механізми і кінетика утворення нової фази при фазовому переході першого виду. Проблема фазових переходів другого виду.

5. Фізикохімія розчинів.

Термодинамічна класифікація розчинів. Ідеальні, регулярні і атермічні розчини. Основні властивості ідеальних розчинів. Розведені розчини, Активність і коефіцієнт активності. Ебуліоскопія і криоскопія. Осмотичний тиск. Надлишкові термодинамічні функції. Ентальпія і ентропія зміщення. Вплив форми і розмірів молекул на властивості розчинів. Критичне явище в бінарних розчинах. Поняття про бінодали і спінодали. Термодинамічні властивості асоційованих розчинів.

6. Поверхневі явища і адсорбція.

Поверхневий і міжфазний натяг. Залежність поверхневого натягу від температури. Поверхнево-активні речовини. Природи адсорбційних сил і типи адсорбційних взаємодій, ізотерми адсорбції Генрі, Ленгмюра, БЕТ. Основні особливості адсорбції полімерів, теорії Хуве, Лала-Степто. Адсорбція полімерів з концентрованих розчинів. Адсорбція макромолекул із розведених розчинів. Вплив молекулярної маси на адсорбцію. Міжфазні шари в полімерних композиціях. Солюбілізація. Типи колоїдних систем і полімерних композицій.

7. Основи хімічної кінетики.

Швидкість хімічних реакцій. Зворотні і незворотні хімічні реакції. Кінетична класифікація реакцій. Механо-хімічні реакції в полімерах. Радіаційно-хімічні реакції в полімерах.

8. Полімерний стан речовини.

Номенклатура полімерів (лінійні, розгалужені і зшиті полімери, регулярні і нерегулярні полімери). Молекулярна маса, полідисперсність. Органічні і елементоорганічні полімери. Стехіометрична структура макромолекул, Конфігурація і конформація макромолекул. Внутрішнє обертання. Виключений, вільний і надлишковий вільний об'єм у полімерних системах. Гнучкість макромолекул. Високоеластичний і склоподібний стани полімерів.

9. Властивості макромолекул у розчинах.

Форма і розміри макромолекул полімерів у розведених розчинах. Визначення молекулярних мас методами вимірювання розсіювання світла, осмотичного тиску і

в'язкості розведених розчинів. Термодинамічні властивості розведених розчинів. Поняття «гарного», «поганого» та «ідеального» розчинника. Незбурені розміри макромолекул, способи їх визначення. Гнучкість ізольованих макромолекул полімерів, способи її вираження. Залежність розмірів макромолекули від гнучкості і ступеня полімеризації. Реологічні аномалії при переході від розведених до концентрованих розчинів. Поняття про «зачеплення».

10. Структура блочного стану полімерів.

Кристалічний стан полімерів. Ізоморфізм. Параметри кристалічних решіток і просторові групи найпоширеніших полімерів (приклади). Період ідентичності. Типи спіралей. Аморфний стан полімерів. Моделі структури аморфних полімерів, двофазний характер структури кристалізованих полімерів. Основні види надмолекулярних утворень у кристалізованих полімерах.

11. Релаксаційні властивості полімерів.

Релаксаційні явища в полімерах. Час релаксації. Механічні релаксаційні явища. Електромагнітна релаксація. Релаксаційний спектр. Температурно-частотна суперпозиція релаксаційних процесів. Вплив наповнювача на релаксаційні процеси. В'язкопружні властивості полімерних систем. Повзучість полімерних матеріалів. Залежність боязкості полімерних систем від швидкостей і напруги зсуву. Температурно-інваріантна характеристика в'язкості.

12. Теплові властивості полімерів.

Класифікація температурних переходів у полімерах. Зміна термодинамічних характеристик при склуванні і плавленні. Залежність ентальпії та ентропії плавлення від хімічної природи полімеру. Основні види теплової рухливості у полімерах. Теплоємність і теплопровідність полімерів у твердому (склоподібному чи кристалічному) стані (розплаві). Ефекти ангармонізму і теплове розширення.

13. Міцність властивості полімерів.

Теоретична і реальна міцність полімерів. Міцність і довговічність полімерів. Деформаційні властивості полімерів. Механічна концепція міцності. Термодинамічна концепція міцності. Термофлуктуаційна концепція руйнування. Взаємозв'язок структури і міцності. Вплив наповнювачів на міцність полімерів. Вплив пластифікаторів на міцність полімерів. Дефективність і мікромеханіка руйнування полімерів.

Література

1. Г.М. Бартенев, П.В. Зеленов. Физика і механіка полімерів. Вища школа, 1983 г.
2. И.И. Перепечко. Введение в физику полимеров. М, 1979 г.
3. Р. Тюдзе, Т. Каваи. Физическая химия полимеров. М, 1978 г.
4. Каргин-Сломинский. Краткие очерки.
5. А.А. Тагер. Физическая химия полимеров. М, 1978 г.
6. Ю.С. Липатов. Межфазные явления в полимерах- Киев: Наукова думка, 1980 г., 260 с.
7. Б. Зундерлих. Физика макромолекул, Мир, М, 1976 г.
8. Физическая химия /в 2 т. под редакцией Я.Н. Герасимова. М., 1964 г.