

## ***I Równowaga***

1. Właściwości gazów
  - 1.1. Gaz doskonały: stany gazów, prawa gazowe, kinetyczny model gazów
  - 1.2. Gazy rzeczywiste: oddziaływania międzycząsteczkowe, równanie van der Waalsa
2. Pierwsza zasada termodynamiki
  - 2.1. Praca i ciepło: praca objętościowa, przemiany cieplne, entalpia, przemiany adiabatyczne
  - 2.2. Termochemia: zmiany entalpii standardowej, standardowe entalpie tworzenia
  - 2.3. zależność entalpii reakcji od temperatury, zależność entalpii od temperatury, związek pomiędzy  $C_v$  i  $C_p$
3. Druga zasada termodynamiki
  - 3.1. Kierunek przemian samorzutnych, rozproszenie energii, entropia, zmiana entropii towarzysząca wybranym procesom
  - 3.2. Trzecia zasada termodynamiki
  - 3.3. Energia i entalpia swobodna, standardowa molowa entalpia swobodna
  - 3.4. Właściwości energii wewnętrznej
  - 3.5. Właściwości entalpii swobodnej
  - 3.6. Potencjał chemiczny substancji czystych
  - 3.7. Gazy rzeczywiste: lotność, stan standardowy gazów rzeczywistych, związek pomiędzy lotnością i ciśnieniem
4. Przemiany fizyczne substancji czystych
  - 4.1. Diagramy fazowe, trwałość faz, linie równowag faz: fazy, składniki i stopnie swobody, reguła faz, układy dwuskładnikowe, diagramy prężności par, diagramy fazowe temperatura–skład, diagramy fazowe ciecz–ciecz, diagramy fazowe ciecz–ciało stałe
  - 4.2. Trwałość faz a przemiany fazowe: termodynamiczne kryterium równowagi, wpływ warunków na trwałość faz, położenie linii równowag faz, klasyfikacja przemian fazowych według Ehrenfesta
  - 4.3. Powierzchnia cieczy: napięcie powierzchniowe, zakrzywienie powierzchni, zjawiska kapilarne
  - 4.4. Mieszanki proste
    - 4.4.1. Termodynamiczny opis mieszanin: cząstkowe wielkości molowe, termodynamika mieszania, potencjał chemiczny składnika cieczy
    - 4.4.2. Właściwości roztworów: mieszaniny ciekłe, właściwości koligatywne
    - 4.4.3. Aktywność: aktywność rozpuszczalnika, aktywność substancji rozpuszczonej
5. Równowaga chemiczna
  - 5.1. Samorzutne reakcje chemiczne, minimum entalpii swobodnej
  - 5.2. Wpływ warunków zewnętrznych na stan równowagi: wpływ ciśnienia i temperatury
  - 5.3. Kwasy i zasady
6. Elektrochemia układów równowagowych
  - 6.1. Właściwości termodynamiczne jonów w roztworach: termodynamiczne funkcje tworzenia, aktywność jonów
  - 6.2. Ogniwa elektrochemiczne: reakcje półkowe i półogniwa, rodzaje ogniwi, potencjały standardowe
  - 6.3. Zastosowanie potencjałów standardowych: szereg elektrochemiczny, stała rozpuszczalności, pomiary pH i pK, wyznaczanie wielkości termodynamicznych z pomiarów napięcia ogniwa

## **II Struktura**

1. Teoria kwantów
  - 1.1. Dualizm falowo-korpuskularny, dynamika układów mikroskopowych: równanie Schrödingera, interpretacja Borna funkcji falowej
  - 1.2. Postulaty mechaniki kwantowej: informacja zawarta w funkcji falowej, zasada nieoznaczoności
  - 1.3. Ruch translacyjny: cząstka w pudle, ruch w dwóch wymiarach
  - 1.4. Ruch oscylacyjny: poziomy energetyczne, funkcja falowa
  - 1.5. Ruch rotacyjny: rotacja w dwóch wymiarach, rotacja w trzech wymiarach, spin
2. Struktura atomowa i widma atomowe
  - 2.1. Struktura i widma atomów wodoropodobnych: struktura atomów wodoropodobnych, orbitale atomowe i ich energie, przejścia spektralne i reguły wyboru,
  - 2.2. Struktura atomów wieloelektronowych, przybliżenie orbitalne
  - 2.3. Widma złożonych atomów: stany singletowe i trypletowe, sprzężenie spinowo-orbitalne, symbole termów i reguły wyboru
3. Struktura cząsteczek
  - 3.1. Przybliżenie Borna–Oppenheimera: cząsteczka wodoru, dwuatomowe cząsteczki homojądrowe, cząsteczki wieloatomowe
  - 3.2. Teoria orbitali molekularnych: struktura cząsteczek dwuatomowych, dwuatomowe cząsteczki heterojądrowe,
  - 3.3. Orbitale molekularne układów wieloatomowych: przybliżenie Hückla, teoria pasmowa ciała stałego
  - 3.4. Symetria cząsteczek, elementy symetrii obiektów: operacje symetrii i elementy symetrii, klasyfikacja cząsteczek ze względu na ich symetrię, znikanie całek a nakładanie się orbitali, znikanie całek a reguły wyboru
4. Spektroskopia
  - 4.1. Widma rotacyjne i oscylacyjne
    - 4.1.1. Widma czysto rotacyjne: momenty bezwładności, poziomy energii rotacyjnej, przejścia rotacyjne
    - 4.1.2. Oscylacje cząsteczek dwuatomowych: oscylacje cząsteczek, reguły wyboru, anharmoniczność
    - 4.1.3. Oscylacje cząsteczek wieloatomowych: drgania normalne, widma oscylacyjne cząsteczek wieloatomowych, Ramanowskie widma oscylacyjne
  - 4.2. Przejścia elektronowe
    - 4.2.1. Charakterystyka przejść elektronowych: struktura oscylacyjna, rodzaje przejść
    - 4.2.2. Losy stanów wzbudzonych elektronowo: fluorescencja i fosforescencja, ogólne zasady akcji laserowej
  - 4.3. Jądrowy rezonans magnetyczny: jądrowe momenty magnetyczne, energie jąder w polach magnetycznych, przesunięcie chemiczne, struktura subtelną
    - 4.3.1. Techniki impulsowe w NMR: wektor namagnesowania, szerokość linii a szybkość procesów, jądrowy efekt Overhausera, NMR w ciele stałym
  - 4.4. Elektronowy rezonans paramagnetyczny: czynnik g, struktura nadsubtelną
5. Termodynamika statystyczna
  - 5.1. Rozkład stanów cząsteczkowych: stany makro układu i prawdopodobieństwo termodynamiczne, cząsteczkowa funkcja rozdziału
  - 5.2. Energia wewnętrzna i entropia, entropia statystyczna, zespół kanoniczny i funkcja rozdziału dla zespołu kanonicznego
  - 5.3. Zastosowania termodynamiki statystycznej: średnie energie, pojemności cieplne, równania stanu, entropie resztkowe, stałe równowagi

6. Techniki dyfrakcyjne
  - 6.1. Sieci i komórki elementarne
  - 6.2. Dyfrakcja promieniowania rentgenowskiego: prawo Bragga, metoda proszkowa, dyfrakcja rentgenowska na monokryształach, informacje uzyskiwane metodą rentgenowskiej analizy strukturalnej
7. Elektryczne i magnetyczne właściwości cząsteczek
  - 7.1. Właściwości elektryczne: trwałe i indukowane elektryczne momenty dipolowe, współczynnik załamania
  - 7.2. Siły międzycząsteczkowe: oddziaływania między dipolami, oddziaływania odpychające i sumaryczne, oddziaływania cząsteczkowe w wiązkach
  - 7.3. Właściwości magnetyczne: podatność magnetyczna, trwałe moment magnetyczny
8. Makrocząsteczki i koloidy
  - 8.1. Rozmiar i kształt: średnie masy molowe, właściwości koligatywne, sedymentacja, lepkość, rozpraszanie światła
  - 8.2. Konformacja i konfiguracja: kłęбки statystyczne, helisy i harmonijki, struktury wyższego rzędu
  - 8.3. Koloidy i surfaktanty: właściwości koloidów, filmy powierzchniowe

### **III Przemiana**

1. Cząsteczki w ruchu
  - 1.1. Ruch cząsteczek w gazach: zderzenia z powierzchnią, szybkość efuzji, migracja wywołana gradientami, właściwości transportowe gazu doskonałego
  - 1.2. Ruch cząsteczek i jonów w cieczach: struktura cieczy, ruch cząsteczek w cieczach, przewodnictwo roztworów elektrolitów, ruchliwość jonów, przewodność właściwa a oddziaływania międzyjonowe
  - 1.3. Dyfuzja: ujęcie termodynamiczne, równanie dyfuzji, ujęcie probabilistyczne, opis statystyczny
2. Szybkość reakcji chemicznych
  - 2.1. Empiryczna kinetyka chemiczna: metody doświadczalne, szybkość reakcji, całkowita postać równania kinetycznego, reakcje w pobliżu stanu równowagi, zależność szybkości reakcji od temperatury
  - 2.2. Wyjaśnienie równań kinetycznych: reakcje elementarne, następcze reakcje elementarne, reakcje jednocząsteczkowe
3. Kinetyka reakcji złożonych
  - 3.1. Reakcje łańcuchowe: Mechanizm reakcji łańcuchowych, wybuch, reakcje fotochemiczne, kinetyka reakcji polimeryzacji, polimeryzacja łańcuchowa, polimeryzacja stopniowa
  - 3.2. Kataliza i reakcje oscylujące, kataliza homogeniczna
4. Dynamika molekularna reakcji chemicznych
  - 4.1. Zderzenia reaktywne: teoria zderzeń, reakcje kontrolowane przez dyfuzję, równanie bilansu materiałowego,
  - 4.2. Teoria kompleksu aktywnego: współrzędna reakcji i stan przejściowy, równanie Eyringa, aspekty termodynamiczne
  - 4.3. Dynamika zderzeń molekularnych: zderzenia reaktywne, powierzchnie energii potencjalnej
5. Procesy zachodzące na powierzchniach ciał stałych
  - 5.1. Adsorpcja: adsorpcja fizyczna i chemiczna
  - 5.2. izotermy adsorpcji

6. Dynamika procesów elektrochemicznych
  - 6.1. Procesy elektrodowe: elektryczna warstwa podwójna, szybkość przeniesienia ładunku, polaryzacja
  - 6.2. Procesy elektrochemiczne: elektroliza, charakterystyka ogniwa pracującego, wytwarzanie energii i korozja, ogniwa paliwowe i akumulatory

DOCTORAL SCHOOL OF EXACT AND NATURAL SCIENCES  
PHD PROGRAMME IN CHEMISTRY  
TOPICS FOR QUALIFYING INTERVIEW, PHYSICAL CHEMISTRY

---