

Предисловие	3
Введение	5
1 часть. Химическая связь и строение молекул	8
Глава I. Основы теории химической связи. Спектрохимия	8
А. Основы квантовой механики	
§ 1.1. Основные понятия и постулаты квантовой механики	8
§ 1.2. Основные приближения при решении волнового уравнения.....	11
Б. Теория химической связи	
§ 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. π -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
В. Основы спектрохимии	
§ 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
2 часть. Химическая термодинамика	59
Глава II. Первое и второе начала термодинамики	59
А. Первое начало термодинамики	
§ 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	64
§ II.5. Термохимия.....	67
§ II.6. Приближенные методы расчета теплот образования и сгорания.....	71
Б. Теплоемкость	
§ 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
В. Второе начало термодинамики. Энтропия	
§ 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
Г. Энергия Гиббса. Энергия Гельмгольца. Химический потенциал. Фугитивность. Активность	
§ 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
Глава II. Химическое равновесие	108
А. Уравнение изотермы химической реакции	
§ 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
Б. Константа равновесия химической реакции и состав системы	
§ 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
В. Зависимость константы равновесия от температуры	
§ 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
Глава IV. Элементы статистической термодинамики	129
А. Статистическое обоснование второго начала термодинамики	
§ IV.1. Основные положения статистической термодинамики	129
§ IV.2. Энтропия и вероятность.....	131
Б. Определение термодинамических функций	
§ 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
3 часть. Фазовое равновесие и растворы.....	152
Глава V. Фазовое равновесие.....	152

А. Основной закон фазового равновесия. Уравнение Клапейрона — Клаузюса.	
Диаграммы состояния однокомпонентных систем	
§ V.1. Основные понятия и определения. 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
Б. Диаграммы состояния двухкомпонентных систем	
§ 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
В. Диаграммы состояния трехкомпонентных систем	
§ V.10. Графическое представление состава тройных систем	175
§ V.11. Трехкомпонентные жидкие системы	177
§ V.12. Трехкомпонентные системы с тройной эвтектикой	178
Глава VI. Растворы	181
А. Термодинамическая теория растворов	
§ 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
Б. Термодинамика жидких летучих смесей	
§ 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
4 часть. Электрохимия	225
Глава VII. Растворы электролитов	225
А. Термодинамическая и электростатическая теория растворов электролитов	
§ 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

Б. Электрическая проводимость растворов электролитов	
§ 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
В. Термодинамика электрохимических процессов. Электродвижущие силы и электродные потенциалы	
§ 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
Г. Потенциометрия	
§ 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 pH растворов	272
Д. Строение двойного электрического слоя на границе электрод — раствор электролита	
§ VII.14. Образование двойного электрического слоя	275
§ VII.15. Электрокапиллярные явления. Потенциал нулевого заряда.....	279
§ VII.16. Емкость двойного электрического слоя.....	281
5 часть. Кинетика химических реакций	284
Глава VIII. Химическая кинетика	284
§ 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
Глава IX. Формальная кинетика. Элементарные и формально простые гомогенные односторонние реакции	295
§ 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 и 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
Глава X. Формальная кинетика. Сложные реакции	319
§ 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

Глава XI. Теоретические представления химической кинетики	343
§ 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
Глава XII. Цепные и фотохимические реакции	373
§ 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
Глава XIII. Кинетика гетерогенных реакций	387
§ XIII.1. Гетерогенные процессы при нестационарной диффузии.....	387
§ XIII.2. Гетерогенные процессы при стационарной конвективной диффузии.....	392
§ XIII.3. Кинетика топохимических реакций.....	396
Глава XIV. Кинетика электрохимических реакций	408
§ 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
6 часть. Катализ	431
Глава XV. Гомогенный катализ	431
§ 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
Глава XVI. Гетерогенный катализ	459
§ 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