

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,
Чл.-корр. РАН, профессор



/С.Н. Калмыков/

«31» мая 2021 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)
Физическая химия**

Уровень высшего образования:
Бакалавриат

Направление подготовки (специальность):

04.03.01 Химия

Направленность (профиль) ОПОП:
«Общая химия»

Форма обучения:

очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №2 от 14.05.2021)

Москва 2021

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с ФГОС ВО для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.03.01 «Химия» (программа бакалавриата), утвержденного приказом Минобрнауки от 17 июля 2017 г. №671.

Год (годы) приема на обучение 2021/2022

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: базовая часть ООП.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников). Соответствие результатов обучения по данному элементу ОПОП результатам освоения ОПОП указано в Общей характеристике ОПОП.

Компетенция	Индикаторы достижения	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
<p>УК-1.Б Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач</p>	<p>УК-1.Б.1 Осуществляет поиск, критический анализ и синтез информации с использованием требований системного подхода</p>	<p>Уметь: находить необходимые для работы сведения в открытых источниках информации Уметь: сопоставлять информацию из разных источников, оценивать ее достоверность Владеть навыками поиска и критического анализа информации по теме научного проекта</p>
	<p>УК-1.Б.2 Формулирует научно обоснованные гипотезы, создает теоретические модели явлений и процессов</p>	<p>Уметь: формулировать научные гипотезы при обсуждении литературных и собственных данных</p>
<p>УК-2.Б Способен определять круг задач в рамках поставленной цели и выбирать оптимальные способы их решения, исходя из действующих правовых норм, имеющих ресурсы и ограничений</p>	<p>УК-2.Б.1Использует современные базы данных для поиска информации по заданной теме</p>	<p>Уметь: анализировать данные, полученные из литературных источников, и использовать их для выбора оптимального способа решения поставленной задачи</p>
	<p>УК-2.Б.2 Использует современные информационные технологии для обмена информацией в деловой и профессиональной сфере с учетом основных требований информационной безопасности</p>	<p>Уметь: использовать программные средства удаленного коллективного доступа для решения задач научной деятельности Владеть: навыками обмена профессиональной информации с учетом основных требований информационной безопасности</p>
<p>УК-4.Б Способен осуществлять деловую коммуникацию в устной и письменной формах на государственном языке Российской Федерации и иностранном(ых) языке(ах)</p>	<p>УК-4.Б.1 Осуществляет письменную и устную коммуникацию на русском и (или) иностранном языке в академической сфере</p>	<p>Уметь: выбирать коммуникативно приемлемый стиль делового общения, использовать необходимые языковые средства, тактики и стратегии для решения коммуникативных задач в академической и профессиональной сферах</p>
	<p>УК-4.Б.3. Работает с текстами разного уровня сложности, отвечающими задачам профессио-</p>	<p>Уметь: работать с учебными и научными текстами разного уровня сложности, отвечающих задачам профессиональной деятельности</p>

	нальной деятельности	
УК-8.Б Способен создавать и поддерживать в повседневной жизни и в профессиональной деятельности безопасные условия жизнедеятельности для сохранения природной среды, обеспечения устойчивого развития общества, в том числе при угрозе и возникновении чрезвычайных ситуаций и военных конфликтов	УК-8.Б.1 Идентифицирует опасные и вредные факторы в рамках осуществляемой деятельности	Знать: нормы техники безопасности при работе в физико-химической лаборатории Уметь: проводить стандартные операции по определению состава веществ и материалов с соблюдением норм ОХ и ТБ Владеть: навыками безопасного обращения с веществами и приборами при работе в физико-химической лаборатории
ОПК-1.Б Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений	ОПК-1.Б.1. Воспринимает информацию химического содержания, систематизирует и анализирует ее, оценивает актуальность и степень новизны данных	Знать: основные законы и закономерности, определяющие направление и результат протекания процессов в гомогенных и гетерогенных системах, способы аналитического представления этих закономерностей Знать: теоретические основы химической термодинамики Знать: основные теоретические представления для описания кинетики химических реакций Владеть: простейшими расчетными методами решения физико-химических задач
	ОПК-1.Б.2. Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии	Уметь: формулировать и решать конкретные задачи на основе законов и закономерностей, освоенных в курсе физической химии
	ОПК-1.Б.3. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической на-	Уметь: формулировать заключения и выводы по результатам анализа литературных и собственных экспериментальных данных в области физической химии

	правленности	
ОПК-2.Б Способен проводить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их участием	ОПК-2.Б.1. Работает с химическими веществами с соблюдением норм техники безопасности	Знать: правила техники безопасности при работе в химической лаборатории Уметь: работать с химическими веществами с соблюдением норм техники безопасности
ОПК-3.Б Способен применять расчётно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	ОПК-3. Б.1 Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений	Знать: требования к оформлению и представлению результатов физико-химических исследований работ Знать: теоретические и полуэмпирические методы оценки свойств веществ Уметь: получать физико-химические данные, проводить их математическую обработку
	ОПК-3.Б.2 Проводит обработку данных с использованием современной вычислительной техники	Уметь: проводить математическую обработку физико-химических данных, обобщать полученные результаты Уметь: использовать современные расчётно-теоретические методы для оценки свойств веществ и параметров химических реакций Уметь: оценить корректность результатов теоретических расчетов физико-химических свойств Владеть: навыками оформления протоколов результатов изучения физико-химических свойств веществ и материалов
ОПК-4.Б Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач	ОПК-4.Б.3 Предлагает математические и (или) физические модели, используемые при представлении химических процессов	Знать: способы аналитического описания свойств физико-химических систем Уметь: выбирать адекватные физико-химические модели для описания свойств веществ и химических процессов с их участием Уметь: использовать физические законы и представления при интерпретации результатов физико-химических исследований

ОПК-5.Б Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности	ОПК-5.Б.1 Использует стандартные программные средства и информационные системы для сбора, анализа и представления данных	Знать: основные базы данных физико-химических свойств веществ и параметров процессов Уметь: корректно составлять поисковый запрос информации о физико-химических характеристиках интересующих систем в открытых источниках информации
	ОПК-5.Б.2 Использует современные компьютерные технологии при сборе информации химического профиля с использованием общих и профессиональных баз данных, систематизации и обработке данных	Уметь: использовать программные средства удаленного коллективного доступа для решения задач научной деятельности Уметь: пользоваться программными средствами, автоматизирующими обработку данных (управление базами данных, статистическая обработка, визуализация и т.п.) Уметь: использовать современные программные продукты для решения задач в области физической химии
ОПК-6.Б Способен представлять результаты своей работы в устной и письменной форме в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе	ОПК-6.Б.1. Представляет результаты работы в виде отчета по стандартной форме на русском языке	Знать: требования к оформлению и представлению результатов работ в области физической химии Знать: требования к представлению материала в виде презентации научного доклада Владеть: навыками оформления протоколов физико-химических опытов
	ОПК-6.Б.2. Представляет информацию химического содержания с учетом требований библиографической культуры	Уметь: представлять результаты своей научной работы в письменном виде согласно требованиям к курсовым работам в соответствующей области химии
	ОПК-6.Б.3. Готовит презентацию по теме работы и представляет ее на русском и/или английском языках	Владеть: навыками подготовки презентаций с результатами своей научной работы на русском языке
ПК-4.Б Способен изучать процессы с участием веществ и материалов различной химической природы	ПК-4.Б.1 Изучает процессы с участием веществ и материалов различной химической природы	Уметь: проводить математическую обработку физико-химических данных, обобщать полученные результаты
	ПК-4.Б.2 Сопоставляет методы изучения химических процессов, обосновывает выбор оптимального в рамках поставленной задачи	Знать: основные физико-химические методы изучения свойств веществ, материалов и процессов с их участием Владеть: навыками применения физических основ современных методов химического анализа при решении

		задач профессиональной деятельности
--	--	-------------------------------------

3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 13 зачетных единиц, всего 468 часов, из которых 300 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (122 часов - занятия лекционного типа, 88 часа - занятия семинарского типа, 72 часа – лабораторные занятия, 8 часов – групповые консультации, 10 часов - мероприятия промежуточной аттестации), 168 часов составляет самостоятельная работа учащегося.

4. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

Для того чтобы формирование данной компетенции было возможно, обучающийся должен

знать: основы математического анализа, теории вероятности, квантовой химии и строения молекул в объеме соответствующих курсов Химического факультета МГУ;

уметь: формулировать и решать конкретные задачи на основе законов и закономерностей, усвоенных в различных курсах; получать экспериментальные данные, проводить их математическую обработку, обобщать полученные результаты;

владеть: расчетными методами решения химических задач, навыками проведения химического эксперимента с использованием измерительных приборов, навыками поиска необходимых данных в открытых источниках (в том числе, в информационных базах данных).

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе	
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них	Самостоятельная работа обучающегося, часы. из них

		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Лабораторные работы	Групповые консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов ит.п.	Всего
Блок 1										
Тема I.1. Введение. Физическая химия, ее место среди других разделов химии, основные понятия.	2	2	-	-			2			
Тема I.2. Законы термодинамики, математический аппарат	50	12	14	12			38			12
Тема I.3. Растворы электролитов и неэлектролитов	24	8	8	-			16			8
Тема I.4. Фазовые и химические равновесия	62	14	14	24			52			10
Промежуточная аттестация <i>зачет</i>	6				2	2	4			2
Итого по блоку I	144	36	36	36	2	2	112			32
Блок 2										
Тема II.1. Формальная кинетика химических реакций	70	20	22	28			70			

Тема II.2. Катализ	24	10	10	4			24			
Тема II.3. Цепные и фотохимические реакции	12	4	4	4			12			
Тема II.4. Термодинамика необратимых процессов	2	2	-				2			
Промежуточная аттестация <u>экзамен</u>	36				2	4	6			30
Итого по блоку II	144	36	36	36	2	4	114			30
Блок III.										
Тема III.1. Статистическая термодинамика	44	22	8				30	14		14
Тема III.2. Теории химической кинетики	28	10	8				18	10		10
Промежуточная аттестация <u>экзамен</u>	36				2	4	6			30
Итого по блоку III	108	32	16		2	4	54			54
Курсовая работа	72					2	2			70
Итого по трем блокам	468	122	88	72	6	12	300	24		168

Список лабораторных работ

№ ЛР	Наименование лабораторных работ
1	Определение энергии сгорания органического вещества. Расчет энтальпии образования
2	Адиабатическая калориметрия

3	Определение энтальпии испарения и нормальной температуры кипения индивидуальных жидкостей
4	Равновесие конденсированных фаз в двухкомпонентных системах
5	Гомогенно-каталитический гидролиз сложного эфира
6	Ферментативное окисление иодид-ионов
7	Гомогенно-каталитическое иодирование ацетона
8	Гетерогенно-каталитическое разложение пероксида водорода

6. Образовательные технологии:

- применение компьютерных симуляторов, обработка данных на компьютерах, использование компьютерных программ, управляющих приборами;
- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

7. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Литература для углубленного изучения:

- 1 Пригожин И., Кондепуди Д. Современная термодинамика. Москва. Мир. 2002
- 2 Смирнова Н.А. Методы статистической термодинамики в физической химии. Москва. Мир. 1982
- 3 Глестон С., Лейдлер К., Эйринг Г. Теория абсолютных скоростей реакций. Москва. Из-во Иностранной литературы 1948

8. Ресурсное обеспечение:

Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу. Со всех компьютеров МГУ организован доступ к полным текстам научных журналов и книг на русском и иностранных языках. Доступ открыт по IP-адресам, логин и пароль не требуются: <http://nbmgu.ru/>

Основная литература

1. Еремин В.В., Каргов С.И., Успенская И.А., Кузьменко Н.Е., Лунин В.В. Основы физической химии: Учебник : в 2 частях. Часть 1: Теория. Ч.2. Задачи. 6-е издание; Лаборатория знаний Москва, ISBN 978-5-00101-339-6
- 2 Эткинс П., де Паула Дж. Физическая химия. Москва. Мир. 2007
- 3 Романовский Б.В. Основы химической кинетики. Москва. Экзамен.2006
- 4 Эмануэль Н.М., Кнорре Д.Г. Курс химической кинетики. Москва. «Высшая школа». 1984
5. Романовский Б.В. Основы катализа. Москва. Бинум. 2015
6. Методические разработки к задачам практикума, представленные на сайте <http://physchem.chem.msu.ru/>

7. Практикум по физической химии. Термодинамика. Под ред. Агеева Е.П., Лунина В.В. М.: «Академия», 2010
8. Практикум по физической химии. Кинетика и катализ. Электрохимия. Под ред. Лунина В.В., Агеева Е.П. М.: «Академия», 2012, 304 с.

Дополнительная литература

1. Горшков В.И. Основы физической химии. Издание 1993 и 2006

Описание материально-технической базы.

154 Лабораторное помещение, рассчитанное на **20** рабочих мест, оснащенное специальной химически стойкой лабораторной мебелью, вытяжными шкафами, раковинами, лабораторной посудой; ПК – 15 шт., дистиллятор – 1шт., весы электронные – 2 шт.; Газовые хроматографы «Кристалл 4000М» -7 шт, газораспределительная линия – 20 м; Лабораторная установка РМС-7 «Кинетика-2» (Фотометрия)- 4 шт.; Спектрофотометры Jenway 6310-5 шт.; термостаты – 4 шт; Лабораторная установка РМС-7 «Кинетика-2» (кондуктометрия) - 4 шт.; Установка каталитическая – 3 шт.; термостаты – 3 шт; Фотохимическая установка – 3шт.

155 Лабораторное помещение, рассчитанное на **5** рабочих мест, оснащенное специальной химически стойкой лабораторной мебелью; Компьютерный комплекс из 5 ПК для теоретических расчетов.

156 Лабораторное помещение, рассчитанное на **5** рабочих мест, оснащенное специальной химически стойкой лабораторной мебелью, лабораторной посудой; Спектрофотометры Specord-200 и Specord-50 Bio; Спектрометр ФСМ 1202; морозильная камера – 1шт.

158 Лабораторное помещение, рассчитанное на **5** рабочих мест, оснащенное специальной химически стойкой лабораторной мебелью, лабораторной посудой; ИК спектрофотометры ФСМ1202-5шт.

159 Лабораторное помещение, рассчитанное на **20** рабочих мест, оснащенное специальной химически стойкой лабораторной мебелью, вытяжными шкафами, раковинами, лабораторной посудой; ПК – 5 шт., весы электронные –2 шт.; система для очистки воды – 1 шт., генератор водорода – 2шт., дистиллятор – 1шт.; Вольтметр цифровой – 6 шт.; электрохимическая ячейка – 6 шт.; Потенциостат/гальваностат – 5шт., электрохимическая ячейка – 5 шт.; генератор водорода – 2шт.; газораспределительная линия – 10 м.; термостаты – 5 шт.; Кондуктометр – 8 шт.; термостат -5 шт.

161 Лабораторное помещение, рассчитанное на **5** рабочих мест, оснащенное специальной химически стойкой лабораторной мебелью, лабораторной посудой; Дистиллятор – 1шт., муфельная печь – 1 шт.; Установка для изучения равновесия «пар – жидкость», включающая реактор с холодильником, трубчатая печь, рефрактометр, набор стеклянной посуды – 5 шт.; Тензиметрическая установка – 5 шт.; ; Вакуумные насосы – 2 шт.; ПК – 3 шт.

163 Лабораторное помещение, рассчитанное на **5** рабочих мест, оснащенное специальной химически стойкой лабораторной мебелью, лабораторной посудой; Дистиллятор – 1шт.; Установка для синхронного нагрева образцов (включает электроплитку и 6 датчиков температуры) – 4 шт. ПК – 4 шт; Калориметры ДСК NETZSCH DSC 200 F3 «Maia» – 3 шт.

164a Лабораторное помещение, рассчитанное на **6** рабочих мест, оснащенное специальной химически стойкой лабораторной мебелью, Сканирующие электронные микроскопы JEOL Neoscope 6000 – 6 шт

165 Лабораторное помещение, рассчитанное на **5** рабочих мест, оснащенное специальной химически стойкой лабораторной ме-

белью, вытяжными шкафами, раковинами, лабораторной посудой; Дистиллятор – 1 шт.; Калориметры сгорания (JKI, Китай, модель JK-OBC-600) – 6 шт., ПК – 6 шт.; Калориметр растворения – 5 шт.

Спектрометры КФК – 4 шт., холодильник – 1 шт.

ИК спектрометры Tensor 27 - 2шт; ИК спектрометр EQUINOX-55 с приставкой FRA-106.

9. Язык преподавания – русский

10. Преподаватели:

Константинова Наталья Михайловна, кандидат химических наук, доцент кафедры физической химии МГУ, сотрудники кафедры физической химии

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации – зачетов, экзаменов. На зачетах и экзаменах проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.2.

Вопросы к лабораторным работам

Перечень вопросов к каждой задаче практикума представлен в методических разработках к практикуму, расположенных по адресу <http://physchem.chem.msu.ru/>.

В качестве примера ниже приведен список вопросов к задаче «*Определение энтальпии испарения и нормальной температуры кипения индивидуальных жидкостей*» (весенний семестр) и «*Исследование кинетики ферментативной реакции. Определение параметров уравнения Михаэлиса–Ментен*» (осенний семестр)

«*Определение энтальпии испарения и нормальной температуры кипения индивидуальных жидкостей*»:

1. Что такое фазовые переходы I рода? Приведите четыре примера.
2. Зависит ли величина давления пара жидкости от количества взятого вещества?
3. Какова размерность величины давления пара в интегральной форме уравнения Клаузиуса–Клапейрона?
4. Что такое нормальные условия? Что называется нормальной температурой кипения вещества?
5. Сформулируйте правило Труттона. В каких случаях будут наблюдаться отклонения от него? Подчиняется ли исследованное Вами вещество правилу Труттона?

6. Объясните, в чём различие двух уравнений: $\frac{d \ln p}{dT} = \frac{\Delta H}{RT^2}$ и $\frac{d \ln p}{dT} = \frac{\Delta H^\circ}{RT^2}$ в случае фазового перехода? В каком случае $\Delta H = \Delta H^\circ$ для исследования зависимости давления пара от температуры?

7. Зависит ли теплота испарения жидкости от температуры? Нарисуйте приблизительный график этой зависимости.

8. Какие приближения допущены при расчёте ΔH фазового перехода по уравнению $\ln p = -\frac{\Delta H}{RT} + const$?

9. Что такое эбулиоскопическая константа вещества? От чего она зависит? Какова её размерность?

10. Как рассчитать энтальпию и энтропию плавления с применением зависимостей давления насыщенного пара над твёрдым и жидким веществом от температуры?

«Исследование кинетики ферментативной реакции. Определение параметров уравнения Михаэлиса–Ментен»

1. Выведите уравнение Михаэлиса-Ментен для простой ферментативной реакции.

2. Каковы размерности константы Михаэлиса и максимальной скорости реакции?

3. Как меняется порядок реакции по субстрату и порядок реакции в целом при увеличении концентрации субстрата?

4. Что такое «частота оборотов» ферментативной реакции?

5. На основании сопоставления коэффициентов корреляции R^2 выберите координаты, которые являются наиболее удачными для определения параметров уравнения Михаэлиса–Ментен

Вопросы к коллоквиумам

Коллоквиум «Первый закон термодинамики, термохимия». Предмет и метод термодинамики. Термодинамическая система, контрольная поверхность, среда. Термодинамические переменные и их классификации (внутренние, внешние, интенсивные, экстенсивные, обобщенные силы и обобщенные координаты и т. п.). Термодинамические процессы (обратимые, необратимые, самопроизвольные, несамопроизвольные, изотермические, изобарные, изохорные, адиабатические). Теплота и работа. Функции состояния и функционалы. Постулаты термодинамики.

Уравнения состояния идеальных и реальных газов. Уравнение Ван-дер-Ваальса и его анализ. Критическая точка и критические параметры. Вириальные уравнения состояния. Фактор сжимаемости. Принцип соответственных состояний..

Первый закон термодинамики. Его формулировка и запись в дифференциальной и интегральной формах. Внутренняя энергия как термодинамическая функция и ее молекулярная интерпретация. Зависимость внутренней энергии от температуры и объема. Энтальпия как функция состояния. Вычисление работы для различных процессов в газах. Взаимные превращения теплоты и работы.

Теплоты различных процессов. Теплоемкости газов и кристаллических тел. Способы аппроксимации температурной зависимости. Способы оценки теплоемкостей.

Термохимия. Теплоты химических реакций. Термохимические уравнения. Закон Гесса. Теплоты сгорания и энтальпии образования, энтальпии образования ионов в растворах, их использование для расчета тепловых эффектов химических реакций (в т.ч., с использованием таблиц термодинамических свойств индивидуальных веществ.) Стандартное состояние и стандартные теплоты химических реакций. Зависимость тепловых эффектов реакций от температуры и давления. Уравнение Кирхгоффа в дифференциальной и интегральной формах.

Коллоквиум «Второй закон термодинамики, термодинамические потенциалы». Второй закон термодинамики, его различные формулировки и их взаимосвязь. Изменение энтропии при различных обратимых процессах и вычисление энтропии из опытных дан-

ных. Вычисление энтропии идеальных газов. Изменение энтропии при необратимых процессах. Неравенство Клаузиуса. Некомпенсированная теплота и «потерянная работа».

Тепловая теорема Нернста. Постулат Планка и область его применимости. Свойства тел вблизи абсолютного нуля. Абсолютные значения энтропии.

Частные условия фазового и химического равновесия. Формульная матрица. Химическая переменная.

Математический аппарат термодинамики. Фундаментальное уравнение Гиббса. Преобразования Лежандра. Определение функций состояния F , G , H . Соотношения Максвелла. Определение $C_p - C_v$: в общем виде, для идеального и реальных газов. Вычисление энергии (энтальпии) как функций температуры и объема (давления).

Характеристические функции, их определение и свойства. Энергии Гельмгольца и Гиббса как характеристические функции. Условия равновесия и экстремумы характеристических функций. Уравнение Гиббса–Гельмгольца и его различные формы.

Коллоквиум «Растворы и фазовые равновесия».

Растворы, их классификация. Химический потенциал для разных типов растворов. Активность, летучесть.

Парциальные и интегральные свойств растворов. Методы определения парциальных мольных свойств. Энтропия и энергия Гиббса идеальных растворов. Признаки идеального раствора. Избыточные функции.

Неидеальные растворы и их термодинамическое описание. Метод активностей Льюиса. Атермальные и регулярные, их свойства. Предельно разбавленные растворы.

Стандартные состояния для химического потенциала. Симметричная и несимметричная системы отсчета. Методы определения активности компонентов раствора.

Коллигативные свойства растворов. Осмос.

Энергии кристаллической решетки и сольватации ионов. Растворы электролитов. Среднеионный коэффициент активности. Различные приближения теории Дебая-Хюккеля. Способы оценки термодинамических свойств растворов электролитов.

Правило фаз Гиббса. Определение фазы, компонента, числа степеней свободы, фазовая диаграмма. Вывод правила фаз.

Расчеты фазовых равновесий в однокомпонентной системе: а) из общего условия равновесия, б) из частных условий равновесия в дифференциальной и интегральной формах. Уравнение Клапейрона–Клаузиуса и фазовые переходы первого рода. Его применение к процессам плавления, испарения и сублимации в однокомпонентных системах. Уравнение Антуана. Фазовые переходы второго рода.

Расчеты фазовых равновесий а) из общего условия равновесия, б) из частных условий равновесия в двухкомпонентных системах: 1) жидкость-газ, 2) с простой эвтектикой, 3) взаимной растворимостью компонентов в твердом и жидком состоянии. Законы Гиббса–Коновалова. Азеотропные смеси и их свойства. Вывод уравнений Шредера.

Трехкомпонентные системы. Треугольник Гиббса, способ определения состава системы.

Коллоквиум «Химическое равновесие». Химическая переменная. Общие и частные условия химического равновесия. Уравнение изотермы химической реакции. Связь между разными константами равновесия. Термодинамические расчеты выхода продуктов реакции при протекании одной и нескольких химических реакций.

Зависимость константы равновесия от температуры. Уравнение изобары Вант-Гоффа и его интегрирование. Расчеты констант химических равновесий с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций. Приведенная энергия Гиббса и ее использование при расчетах химических равновесий. Нетермохимическое определение теплот реакций. Принцип Ле Шателье-Брауна.

Расчеты выходов продуктов для неидеальных систем. Зависимость выхода от природы инертного растворителя. Химические равновесия в гетерогенных системах с образованием и без образования твердых растворов (запись констант равновесия, примеры). Расчеты констант химических равновесий с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций. Современные методы расчета составов равновесных смесей.

Коллоквиум «Феноменологическая кинетика».

Основные понятия и методы формальной кинетики. Экспериментальное определение скорости химической реакции в закрытой и открытой системах. Прямая и обратная задача кинетики. Кинетические уравнения и методы их изучения. Молекулярность и порядок реакции. Методы определения порядка реакции. Причины непостоянства порядка реакции и несовпадение порядков при их определении различными методами.

Постулаты формальной кинетики. Кинетический закон действующих масс и принцип независимости реакций. Лимитирующие стадии сложных (последовательных) химических реакций. Зависимость константы скорости химической реакции от температуры. Уравнение Аррениуса, его опытная проверка и теоретическая трактовка. Энергия активации.

Скорости реакций первого порядка. Необратимая реакция первого порядка в закрытой системе. Методы определения константы скорости. Время полупревращения и среднее время жизни исходных молекул. Обратимая реакция первого порядка и определение ее кинетических параметров. Параллельные реакции первого порядка.

Необратимые реакции второго и третьего порядка и определение констант скорости из опытных данных. Время полупревращения. Реакции нулевого порядка и их механизмы.

Необратимые последовательные реакции первого порядка. Кинетическая задача о двухстадийной необратимой последовательной реакции первого порядка и ее решение. Точное и приближенное решения для концентрации промежуточного продукта. Метод стационарных, квазистационарных концентраций и область соответствия точного и приближенного решений. Метод квазиравновесных концентраций.

Коллоквиум «Цепные реакции и фотохимия». Неразветвленные цепные реакции. Атомы, свободные радикалы и их роль в качестве промежуточных продуктов реакции. Элементарные стадии цепных реакций и их общие кинетические схемы. Основные понятия кинетики цепных реакций. Длина цепи. Скорость темновой реакции образования HBr.

Разветвленные цепные реакции на примере взаимодействия кислорода с водородом. Особенности кинетики этой реакции, общее объяснение пределов воспламенения. Открытие радикала HO₂. Условия стационарного и нестационарного горения водорода. Метод квазистационарности Семенова. Кинетическая схема реакции окисления водорода. Положение первого предела воспламенения

для $\text{H}_2 + \text{O}_2$. Особенности реакции на первом пределе. Окисление водорода на втором пределе воспламенения. Положение двух пределов воспламенения и определение элементарных констант скорости. Третий предел воспламенения и тепловой взрыв.

Фотохимические процессы. Фотохимические реакции и их свойства. Потенциальные кривые и свойства молекул в электронно-возбужденных состояниях. Роль триплетных состояний. Кинетические постоянные элементарных процессов фотохимии (термализации, пересольватации, флуоресценции, фосфоресценции, фотосенсибилизации и т. п.).

Кинетика фотохимических реакций. Фотохимические реакции и параметры элементарных первичных процессов. Законы фотохимической эквивалентности. Кинетическая схема Штерна–Фольмера как пример определения элементарных констант из опытных фотохимических данных.

Коллоквиум «Катализ».

Основные понятия и применения катализа, определения и классификации. Основные механизмы каталитических реакций: переносный, активационный, координационный. Вакер-процесс; механизм Косси для реакции Циглера–Натта. Каталитические реакции основных процессов химической технологии и нефтехимии.

Ферментативный катализ. Общие определения и понятия. Активность ферментов. Уравнение Михаэлиса–Ментен и определение кинетических параметров из опытных данных. Кинетика каталитических реакций с конкурентным ингибированием. Эффективная константа Михаэлиса. Определение константы ингибирования из опытных кинетических данных.

Кислотно-основной катализ. Классификация реакций кислотно-основного катализа. Твердые кислоты как катализаторы. Свойства цеолитов как кислотно-основных катализаторов. Кинетика реакций общего кислотного и общего основного катализа. Механизмы реакций и лимитирующие стадии. Кинетические уравнения и определение элементарных констант из опытных данных. Уравнение Бренстеда и его следствия.

Кинетика реакций специфического кислотного катализа. Механизмы реакций и лимитирующие стадии процесса. Функция кислотности Гаммета и ее применение в кинетике. Кинетические уравнения для реакций кислотного катализа.

Гетерогенный катализ. Кинетический закон действующих масс для гетерогенных процессов и особенности записи константы равновесия для реакции на поверхности раздела фаз. Кинетика Лэнгмюра–Хиншельвуда для реакции на однородной поверхности катализатора. Эффективные энергии активации гетерогенных процессов. Сравнение уравнений Михаэлиса–Ментен и Лэнгмюра–Хиншельвуда.

Кинетика гетерогенно-каталитических реакций с диффузионными ограничениями. Различные макрокинетические режимы реакции. Внешняя диффузия, внутренняя диффузия. Энергия активации и порядок реакции в кинетической и внутридиффузионной области. Принципы геометрического и энергетического соответствия. Современные представления о механизмах гетерогенных реакций.

Коллоквиум «Статистическая термодинамика». Термодинамические переменные как статистические средние величины. Основные понятия статистической физики. Фаза. Фазовые μ - и Γ -пространства. Ансамбли систем. Среднее по времени и среднее по ансамблю. Функции распределения в Γ -пространстве.

Закон распределения Максвелла–Больцмана. Каноническое распределение Гиббса. Сумма по состояниям. Выражение для статистических аналогов термодинамических величин с помощью сумм по состояниям. Общие свойства канонической суммы по состояниям как статистической характеристической функции. Вычисление внутренней энергии, энергии Гельмгольца, энергии Гиббса и энтропии с помощью сумм по состояниям. Сумма по состояниям в целом и ее составляющие.

Поступательная сумма по состояниям. Поступательная сумма по состояниям в классической и квантовой механике. Теорема равнораспределения и ее применение в теории теплоемкостей. Энтропия одноатомного идеального газа. Формула Закура–Тетроде. Поступательные вклады в термодинамические функции идеальных газов.

Колебательная сумма по состояниям. Модель «гармонический осциллятор» – «жесткий ротатор». Сумма по состояниям для гармонического осциллятора. Колебательные вклады в термодинамические функции газов и «замороженные» степени свободы.

Вращательные функции по состояниям. Сумма по состояниям для жесткого ротатора. Вращательные составляющие термодинамических функций идеальных газов.

Электронная сумма по состояниям и ее свойства. Электронная составляющая теплоемкости (на примере атома хлора).

Статистический расчет химического равновесия в идеальных газах. Статистическое выражение для констант химического равновесия. Обсуждение особенностей применимости статистических расчетов констант равновесия в идеальных газах.

Коллоквиум «Теории химической кинетики».

Поверхности потенциальной энергии (ППЭ) для элементарных актов химических превращений, например, для трех атомов водорода. Определение пути реакции, энергетического барьера. Понятие активированного комплекса (или переходного состояния). Координата реакции. Энергии активации при центральном и нецентральном ударе взаимодействия атома и молекулы водорода. Динамика элементарного акта реакции как перемещение по ППЭ.

Теория активированного комплекса (переходного состояния) – ТАК. Понятие активированного комплекса и его свойства. Истинная энергия активации элементарной реакции, энергия активации на ППЭ. Допущения, используемые при построении теории. Статистический вывод основного уравнения ТАК. Интерпретация стерического множителя. Опытная и истинная энергии активации и их взаимосвязь. Термодинамический аспект основного уравнения теории активированного комплекса (переходного состояния). Определение скорости реакции в общем виде и запись основного соотношения. Свободная энергия и энтропия активации. Интерпретация стерического множителя для газовых и жидкофазных реакций.

Теория активных соударений для бимолекулярных реакций. Уравнение Траутца–Льюиса. Фактор соударений. Стерический множитель. Сечение соударения. Энергия активации. Достоинства и недостатки теории активных соударений.

«Медленные» реакции и расчеты стерического множителя. Неадиабатические реакции. Гарпунные реакции. Бимолекулярные реакции в растворах, их стерические множители и энергии активации. Диффузия в растворах. Формула Смолуховского и диффузионная кинетика. Клеточный эффект и проблема зависимости скорости реакции от вязкости растворителя. Электростатические эффекты в растворах. Применение теории активированного комплекса и формула Бренстеда–Бьеррума.

Мономолекулярные реакции. Применение теории активированного комплекса к мономолекулярным реакциям. Области соответствия и несоответствия опытными данным. Применение теории активных соударений к описанию мономолекулярных реакций. Ки-

нетические особенности мономолекулярных реакций и их описание схемой Линдемана. Недостаточность схемы Линдемана и ее современное изложение.

Тримолекулярные реакции и реакции третьего порядка. Отрицательный температурный коэффициент и его различные объяснения. Вычисление фактора соударений для тримолекулярных реакций.

Варианты контрольных работ

Вариант 1

1. Один моль газа, подчиняющегося уравнению Ван-дер-Ваальса, изотермически расширяется от объема V_1 до V_2 при температуре T . Найдите ΔU , ΔH , ΔS , ΔF и ΔG для этого процесса.

2. Рассчитайте количество теплоты, которое выделится при сжатии 1 моля воды от 1 до 1000 атм при 25°C, если коэффициент расширения $(\partial V/\partial T)_P = 4.5 \cdot 10^{-3} + 1.4 \cdot 10^{-6} P \text{ см}^3/(\text{моль К})$

3. Рассчитайте изменение энтальпии и внутренней энергии для реакции $\text{CaCO}_3(\text{тв}) = \text{CaO}(\text{тв}) + \text{CO}_2(\text{г})$ при 1000 К. Энтальпия образования $\Delta_f H^\circ(\text{CaO}, \text{тв.}, 1000 \text{ К}) = -608.2 \text{ кДж/моль}$, $\Delta_f H^\circ(\text{CO}_2, \text{г.}, 298 \text{ К}) = -393.5 \text{ кДж/моль}$, $\Delta_f H^\circ(\text{CaCO}_3, \text{тв.}, 1000 \text{ К}) = -1182.5 \text{ кДж/моль}$. Теплоемкости угля и кислорода в интервале температур 298-1000 К могут быть представлены уравнениями: $c_p(\text{O}_2) = 29.96 + 4.18 \cdot 10^{-3} T$ и $c_p(\text{C}) = 16.86 + 4.77 \cdot 10^{-3} T$ (Дж/моль К). Изменение мольной энтальпии углекислого газа $H(1000) - H(298) = 35.3 \text{ кДж/моль}$

Вариант 2

1. Газовая смесь, содержащая 97 мольных % H_2O и 3 мольных % H_2 , нагрета до 1000 К. Будет ли эта смесь реагировать с Ni, образуя NiO, если для реакции $\text{Ni}(\text{тв}) + 0.5\text{O}_2 = \text{NiO}(\text{тв})$ $\Delta_r G^\circ(1000 \text{ К}) = -35400 \text{ кал/моль}$, а степень диссоциации водяного пара по уравнению $\text{H}_2\text{O} = \text{H}_2 + 0.5\text{O}_2$ при 1000 К и давлении 1 атм равна $2.467 \cdot 10^{-7}$? Все газы считать идеальными.

2. Давление диссоциации $\text{LiCl} \cdot \text{NH}_3$ (тв) при 96°C равно 489 гПа, а при 109.2°C равно 861 гПа. Рассчитать средний тепловой эффект реакции $\text{LiCl} \cdot \text{NH}_3$ (тв) = LiCl (тв) + NH_3 (г), приняв, что $\Delta C_p = 0$.

3. Энтропия жидкого о-ксилола при 25°C $S^\circ(\text{ж}) = 58.8 \text{ кал/моль.К}$, давление его насыщенного пара в интервале температур 0-60°C дается уравнением $\lg P$ (мм рт. ст.) = $-3327.16/T - 8.0 \cdot \lg T + 31.7771$ (Т, К). Вычислить стандартное значение энтропии парообразного о-ксилола при 25°C

4. Определить кажущуюся степень диссоциации HIO_3 ($M=175.9$) в растворе, содержащем 0,506 г HIO_3 в 22.487 г этилового спирта. Раствор кипит при 351.624 К, чистый этиловый спирт кипит при 351.46 К. $K_{\text{кр}}=1.19$.

Вариант 3

1. В необратимой реакции 1-го порядка за 20 мин при 125 °С степень превращения исходного вещества составила 60%, а при 145 °С такая же степень превращения была достигнута за 5.5 мин. Найдите константы скорости и энергию активации данной реакции.
2. Определите значения константы Михаэлиса и максимальной скорости для гидролиза метилового эфира N-ацетил-L-валина, катализируемого α -химотрипсином. Экспериментальные данные о зависимости начальной скорости от концентрации субстрата:

$[S]_0, \text{M}$	$w_0 \cdot 10^6, \text{M} \cdot \text{с}^{-1}$
0.200	4.57
0.124	3.84
0.091	3.33
0.071	2.97
0.060	2.67

Вариант 4

1. Получить выражение для химического потенциала идеального газа через молекулярную сумму по состояниям Q.
2. . Рассчитать степень диссоциации молекулярного иода на атомы при температуре 500 К, если давление в системе равно 1 бар. Молекулярные постоянные для I_2 : $\sigma = 2$, $B = 0,037364 \text{ см}^{-1}$, $\omega = 214,248 \text{ см}^{-1}$. Вырожденность основных электронных состояний обеих молекул равна 1. Энергия диссоциации D_0 молекулы I_2 составляет 148,8 кДж/моль.
3. Рассчитать энтропию S° , высокотемпературную составляющую энтальпии $H^\circ_T - H^\circ_{298,15}$ и теплоемкость C_p° молекулы N_2 в состоянии идеального газа при давлении 1 бар = $1 \cdot 10^5$ Па и температурах 500 и 1000 К. Молекулярные постоянные N_2 $\omega = 2359,434 \text{ см}^{-1}$, $B = 1,9983 \text{ см}^{-1}$, $\sigma = 2$, $g_0 = 1$. Возбужденными электронными состояниями пренебречь

Вариант 5

1. Диаметр метильного радикала равен 3.8 А. Какова максимальная константа скорости (в л/(моль · с)) реакции рекомбинации метильных радикалов при 27°С?
2. Используя теорию активированного комплекса, вычислите истинную энергию активации E_0 для реакции $\text{CH}_3 \cdot + \text{C}_2\text{H}_6 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{C}_2\text{H}_5 \cdot$ при $T = 300 \text{ К}$, если опытная энергия активации при этой температуре равна 8.3 ккал/моль
3. Для реакции $\text{CO} + \text{O}_2 = \text{CO}_2 + \text{O}$ зависимость константы скорости от температуры при низких температурах имеет вид:
 $k(T) \sim T^{-3/2} \cdot \exp(-E_0/RT)$
Какую конфигурацию - линейную или нелинейную - имеет активированный комплекс?

Вопросы для подготовки к экзамену:

1. Термическое уравнение состояния: определение, описание идеальных и неидеальных газообразных систем. Фактор сжимаемости. Вириальное уравнение состояния; его достоинства и недостатки.
2. Уравнение Ван-дер-Ваальса. Критическое состояние. Понятия «бинодаль» и «спинодаль».
3. Первый закон термодинамики, различные формулировки. Внутренняя энергия, энтальпия. Вычисление изменений внутренней энергии и энтальпии из опытных данных. Зависимость функции U от температуры и объема.
4. Теплоемкость. Зависимость от температуры и давления. Использование теплоемкости для расчетов изменения внутренней энергии, энтальпии и энтропии.
5. Закон Гесса. Стандартные состояния и стандартные тепловые эффекты химических реакций: энтальпии образования, сгорания, растворения. Различные способы расчета энтальпии химической реакции
6. Зависимость теплового эффекта химической реакции от температуры (в различных приближениях). Уравнение Кирхгофа.
7. Второй закон термодинамики: основные формулировки и аналитические выражения. Неравенство Клаузиуса. Общие и частные условия равновесия гетерогенной системы (без вывода).
8. Общие и частные условия равновесия гомогенной системы (с выводом). Формульная матрица системы. Химическая переменная, сродство.
9. Энтропия как характеристическая функция. Изменение энтропии при различных процессах: $S = f(T, V, P, x_i)$.
10. Расчет абсолютной энтропии. Тепловая теорема Нернста, постулат Планка, формула Больцмана.
11. Энергия Гиббса и энергия Гельмгольца как характеристические функции и критерии направленности процессов. Преобразование Лежандра. Зависимость F и G от термодинамических переменных.
12. Фундаментальные уравнения Гиббса. Соотношения Максвелла. Зависимость внутренней энергии от объема в общем виде и для идеального газа. Уравнение Гиббса-Гельмгольца и его применение в термодинамике.
13. Парциальные мольные свойства, методы их определения.
14. Химический потенциал компонента идеального и реального газового и конденсированного раствора (с выводом). Зависимость стандартного химического потенциала от термодинамических переменных (T, P)
15. Химический потенциал компонента реального раствора. Метод Льюиса. Методы определения активности и коэффициента активности компонента раствора. Зависимость активности компонента от температуры и давления.
16. Растворы. Классификация растворов. Избыточные функции. Термодинамические модели растворов: идеальные, регулярные и атермальные растворы.
17. Коллигативные свойства растворов; вывод формулы (на примере любого из свойств), границы применимости, использование при решении практических задач.
18. Термодинамика растворов электролитов. Понятия средней ионной активности и среднего ионного коэффициента активности. Основные допущения теории Дебая - Гюккеля. Уравнения для коэффициента активности электролита в первом и втором приближении теории Дебая - Гюккеля (без вывода).
19. Вывод правила фаз Гиббса. Иллюстрация применения правила фаз Гиббса (на примере любой системы).

20. Расчет P-T диаграмм однокомпонентных систем из общего и частного условий равновесия. Уравнение Клапейрона – Клаузиуса (вывод). Фазовые переходы первого и второго рода
21. Расчет фазовой диаграммы бинарной системы эвтектического типа из общего и частного условий равновесия.
22. Уравнение изотермы Вант-Гоффа. Стандартная энергия Гиббса химической реакции. Связь с константой равновесия.
23. Различные виды констант равновесия. Расчет констант равновесия с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций и приведенной энергии Гиббса.
24. Зависимость констант равновесия от температуры и давления. Уравнение изобары реакции Вант-Гоффа, дифференциальная и интегральная формы.

1. Основные понятия и постулаты формальной кинетики. Прямая и обратная кинетические задачи. Параметры кинетических уравнений.
2. Молекулярность и порядок реакции. Методы определения порядка реакции. Реакции переменного порядка (привести примеры).
3. Уравнение Аррениуса. Способы определения опытной энергии активации, и ее связь с энергиями активации элементарных процессов.
4. Кинетическое описание необратимых реакций первого порядка в закрытых системах. Время полупревращения и среднее время жизни исходных молекул.
5. Обратимая реакция первого порядка и определение ее кинетических параметров.
6. Необратимые реакции нулевого и второго порядков, определение константы скорости из опытных данных. Автокаталитическая реакция. Время полупревращения (при одинаковых концентрациях компонентов).
7. Необратимые последовательные реакции первого порядка (точное и приближенное решения кинетической задачи). Метод квазистационарных концентраций и область его применения.
8. Методы квазистационарных и квазиравновесных концентраций в химической кинетике (на любом примере).
9. Уравнение Михаэлиса-Ментен. Определение его кинетических параметров из опытных данных. Сопоставление со схемой Лэнгмюра-Хиншельвуда в гетерогенном катализе.
10. Кинетика ферментативных реакций с конкурентным ингибированием.
11. Неразветвленные цепные реакции. Скорость темновой и фотохимической реакции образования HBr. Уравнение Боденштейна-Линда.
12. Вывод кинетического уравнения для разветвленных цепных реакций и его анализ (на примере горения водорода). Метод «полустационарных» концентраций Семенова.
13. Разветвленные цепные реакции: полуостров воспламенения и причины появления нескольких пределов воспламенения. Положение первого предела воспламенения для смеси водорода с кислородом.
14. Реакции в растворах. Уравнение Смолуховского и его применение в кинетике бимолекулярных реакций.

15. Кинетические характеристики элементарных процессов фотохимии. Принцип Франка-Кондона. Физические и химические свойства молекул в электронно-возбужденном состоянии. Эксимеры и эксиплексы.
 16. Законы фотохимии (законы Буге-Ламберта-Бера, Вант-Гоффа, Эйнштейна). Квантовый выход. «Клеточный эффект». Кинетическая схема Штерна-Фольмера. Многофотонное поглощение.
 17. Основные понятия и классификации в катализе: гетерогенный и гомогенный катализ, ферментативный катализ, автокатализ, активность и селективность катализаторов, число оборотов (TOF и TON). Катализ на наночастицах.
 18. Механизмы кислотно-основных каталитических реакций и их классификация. Цеолиты и их свойства. Твердые кислоты как катализаторы.
 19. Кинетика реакций специфического кислотного катализа. Механизмы и лимитирующие стадии. Функция кислотности Гаммета. Суперкислоты.
 20. Кинетика реакций общего кислотного и общего основного катализа. Механизмы реакций и лимитирующие стадии процесса. Уравнение Бренстеда и его анализ.
 21. Корреляционные соотношения между кинетическими и термодинамическими параметрами в катализе. Уравнения Бренстеда.
 22. Кинетика Лэнгмюра-Хиншельвуда для реакции на однородной поверхности катализатора. Особенности кинетики и записи константы скорости в адсорбционном слое (общий случай).
-
1. Основные постулаты статистической термодинамики. Метод ячеек Больцмана. Фазовые « μ » и « Γ » пространства. Микроканонический и канонический ансамбли Гиббса.
 2. Энтропия в статистической термодинамике. (Формула Больцмана, микроканонический ансамбль, канонический ансамбль).
 3. Статистические суммы по состояниям и расчет с их помощью внутренней энергии, энтропии, энергии Гельмгольца и энергии Гиббса.
 4. Поступательная сумма по состояниям и ее вклады в термодинамические функции. Формула Закура–Тетроде для энтропии идеального газа.
 5. Теорема равномерного распределения и область ее применимости. Применение к теории теплоемкостей.
 6. Колебательная сумма по состояниям.
 7. Вращательные суммы по состояниям. Вклады вращательного движения в термодинамические функции для модели жесткого ротатора. Электронная и ядерная суммы по состояниям. Орто- и пара- водород.
 8. Статистический расчет константы равновесия в смеси многоатомных идеальных газов. Сопоставление статистического и классического термодинамического расчетов.
 10. Использование адиабатического приближения для описания химической реакции частиц: поверхность потенциальной энергии, путь реакции, энергия активации.
 11. Теория активированного комплекса и статистический вывод основного уравнения. Взаимосвязь опытной и истинной энергий активации.
 12. Термодинамический аспект теории активированного комплекса. Реакции в растворах. Уравнение Бренстеда-Бьеррума.

13. Теория активных соударений. Уравнение Траутца—Льюиса.
14. Применение теории активных соударений к бимолекулярным реакциям.
15. Использование теории активированного комплекса для оценки стерического множителя теории активных соударений.
16. Интерпретация предэкспоненциального множителя в статистическом и термодинамическом аспектах теории активированного комплекса. Энтропия активации.
17. Мономолекулярные реакции и их описание в теории активированного комплекса (в статистическом и термодинамическом аспектах).
18. Кинетические особенности мономолекулярных реакций. Применение теории соударений. Схема Линдемана. Поправка Хиншельвуда.

Курсовая работа (примеры тем)

1. Построение фазовых диаграмм бинарных систем методом выпуклых оболочек
2. Каталитические наноконпозиты на основе сложных оксидов и молекулярных сит: синтез и исследование физико-химических свойств.
3. Поиск переходных состояний и исследование координаты реакций изомеризации аллилбензола методом функционала плотности.
4. Адсорбция паров органических соединений на фторсодержащих поверхностях.
5. Влияние давления на кинетику элементарных процессов в плазме барьерного разряда в воздухе.
6. Термодинамический анализ первичных реакций озона с галогенид-ионами.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
Оценка \ Результат	2	3	4	5
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципи-	Успешное и систематическое умение

			ального характера)	
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
<p>Знать: основные законы и закономерности, определяющие направление и результат протекания процессов в гомогенных и гетерогенных системах, способы аналитического представления этих закономерностей</p> <p>Знать: правила техники безопасности при работе в химической лаборатории</p> <p>Знать: требования к оформлению и представлению результатов физико-химических исследований работ</p> <p>Знать: способы аналитического описания свойств физико-химических систем</p> <p>Знать: теоретические и полуэмпирические методы оценки свойств веществ</p> <p>Знать: основные базы данных химического профиля</p> <p>Знать: требования к представлению материала в виде презентации научного доклада</p> <p>Знать: основные физико-химические методы изучения свойств веществ, материалов и процессов с их участием</p> <p>Знать: нормы техники безопасности при работе в лаборатории</p> <p>Знать: теоретические основы химической термодинамики</p> <p>Знать: основные теоретические представления для описания кинетики химических реакций</p> <p>Знать: требования к оформлению и представлению результатов физико-химических исследований работ</p> <p>Знать: теоретические и полуэмпирические методы оценки свойств веществ</p> <p>Знать: способы аналитического описания свойств физико-химических систем</p> <p>Знать: основные базы данных физико-химических свойств веществ и параметров процессов</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене, защита курсовой работы</p>
<p>Уметь: находить необходимые для работы сведения в открытых источниках информации</p> <p>Уметь: сопоставлять информацию из разных источников, оценивать ее достоверность</p> <p>Уметь: формулировать научные гипотезы при обсуждении литературных и собственных данных</p> <p>Уметь: выбирать коммуникативно приемлемый стиль делового общения, использовать необходимые языковые средства, тактики и стратегии для решения коммуникативных задач в академической и профессиональной сферах</p> <p>Уметь: работать с учебными и научными текстами разного уровня сложности, отвечающими задачам профессиональной деятельности</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене, защита курсовой работы</p>

<p>Уметь: использовать программные средства удаленного коллективного доступа для решения задач научной деятельности</p> <p>Уметь: пользоваться программными средствами, автоматизирующими обработку данных (управление базами данных, статистическая обработка, визуализация и т.п.)</p> <p>Уметь: формулировать и решать конкретные задачи на основе законов и закономерностей, освоенных в курсе физической химии</p> <p>Уметь: работать с химическими веществами с соблюдением норм техники безопасности</p> <p>Уметь: получать физико-химические данные, проводить их математическую обработку</p> <p>Уметь: проводить математическую обработку физико-химических данных, обобщать полученные результаты</p> <p>Уметь: выбирать адекватные физико-химические модели химических процессов</p> <p>Уметь: использовать современные расчетно-теоретические методы для оценки свойств веществ и параметров химических реакций</p> <p>Уметь: оценить корректность результатов теоретических расчетов физико-химических свойств</p> <p>Уметь: использовать физические законы и представления при интерпретации результатов физико-химических исследований</p> <p>Уметь: корректно составлять поисковый запрос информации химического содержания</p> <p>Уметь: представлять результаты своей научной работы в письменном виде согласно требованиям к курсовым работам в соответствующей области химии</p> <p>Уметь: анализировать данные, полученные из литературных источников, и использовать их для выбора оптимального способа решения поставленной задачи</p> <p>Уметь: проводить стандартные операции по определению состава веществ и материалов с соблюдением норм ОХ и ТБ</p> <p>Уметь: формулировать заключения и выводы по результатам анализа литературных и собственных экспериментальных данных в области физической химии</p> <p>Уметь: корректно составлять поисковый запрос информации о физико-химических характеристиках интересующих систем в открытых источниках информации</p> <p>Уметь: пользоваться программными средствами, автоматизирующими обработку данных (управление базами данных, статистическая обработка, визуализация и т.п.)</p> <p>Уметь: использовать современные программные продукты для решения задач в области физической химии</p>	
<p>Владеть навыками поиска и критического анализа информации по теме научного проекта</p> <p>Владеть: навыками обмена профессиональной информацией с учетом основных требований информационной безопасности</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, защита курсовой работы,</p>

<p>Владеть навыками работы на современных физических приборах для решения задач в области физической химии</p> <p>Владеть: простейшими расчетными методами решения физико-химических задач</p> <p>Владеть: навыками работы с профессиональными базами данных химического профиля</p> <p>Владеть: навыками подготовки презентаций с результатами своей научной работы на русском языке</p> <p>Владеть: навыками оформления протоколов физико-химических опытов</p> <p>Владеть: навыками безопасного обращения с веществами и приборами при работе в аналитической лаборатории</p> <p>Владеть: навыками применения физических основ современных методов химического анализа при решении задач профессиональной деятельности</p>	<p>устный опрос на экзамене</p>
-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	---------------------------------