

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Косенок Сергей Михайлович
Должность: ректор
Дата подписания: 25.07.2024 08:37:24
Уникальный программный ключ:
e3a68f3eaa1e62674b54f4998099d3d6bfdcf836

**БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
ХАНТЫ-МАНСКИЙСКОГО АВТОНОМНОГО ОКРУГА-ЮГРЫ
"Сургутский государственный университет"**

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебно-методической работе
Е.В. Коновалова

13 июня 2024 г., протокол УМС № 5

Физическая химия

рабочая программа дисциплины (модуля) *Программа кандидатского экзамена*

Закреплена за кафедрой **Химии**
Шифр и наименование научной специальности **1.4.4. Физическая химия**

Форма обучения **очная**

Часов по учебному плану 144 Вид контроля: **экзамен**
в том числе:
аудиторные занятия 48
самостоятельная работа 60
часов на контроль 36

Распределение часов дисциплины

Курс	4	
	УП	РП
Вид занятий	УП	РП
Лекции	16	16
Практические	32	32
Итого ауд.	48	48
Контактная работа	48	48
Сам. работа	60	60
Часы на контроль	36	36
Итого	144	144

Программу составил(и):

канд. хим. наук, доцент Бондаренко Л.В.

Рабочая программа дисциплины

Физическая химия

разработана в соответствии с ФГТ:

Приказ Минобрнауки России от 20.10.2021 г. №951 "Об утверждении федеральных государственных требований к структуре программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре), условиям их реализации, срокам освоения этих программ с учетом различных форм обучения, образовательных технологий и особенностей отдельных категорий аспирантов (адъюнктов)".

Рабочая программа одобрена на заседании кафедры

Химии

Протокол от 05.04.2024 г. № 05

Зав. кафедрой канд. биол. наук Сутормин О.С.

Председатель УМС (УС) института естественных и технических наук

директор института, канд. хим. наук, доцент Петрова Ю.Ю.

Протокол от 24 мая 2024 г. № 6

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1	Целями освоения дисциплины являются: углублённое освоение теоретических основ физической химии; формирование представлений о физико-химической сущности явлений и процессов, протекающих в материальном мире; формирование высокообразованного специалиста, владеющего основными проблемами теории химических процессов; овладение навыками применения законов теоретической химии к решению практических вопросов химической технологии; подготовка к самостоятельной научно-исследовательской деятельности в современных направлениях физической химии; формирование умения находить и анализировать современную научно-техническую информацию в области физической химии; формирование умения формулировать научные задачи в области физической химии. Дисциплина направлена на подготовку к сдаче кандидатского экзамена по научной специальности 1.4.4. Физическая химия.
-----	--

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

2.1	Предшествующими для изучения дисциплины являются:
2.1.1	результаты освоения дисциплин, направленных на подготовку к сдаче кандидатских экзаменов: «История и философия науки», «Иностранный язык»; факультативных дисциплин «Спектроскопические методы исследований», «Физико-химические методы исследования»;
2.1.2	результаты научной (научно-исследовательской) деятельности аспирантов, направленной на подготовку диссертации к защите;
2.1.3	результаты научной (научно-исследовательской) деятельности аспирантов, направленной на подготовку публикаций;
2.1.4	результат прохождения научно-исследовательской практики.
2.2	Последующими к изучению дисциплины являются знания, умения и навыки, используемые аспирантами:
2.2.1	в научной (научно-исследовательской) деятельности аспирантов, направленной на подготовку диссертации к защите;
2.2.2	в научной (научно-исследовательской) деятельности аспирантов, направленной на подготовку публикаций;
2.2.3	при прохождении итоговой аттестации.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

В результате освоения дисциплины обучающийся должен	
3.1	Знать:
3.1.1	физические основы учения о строении молекул; теорию межмолекулярных взаимодействий;
3.1.2	основные понятия и законы термодинамики; элементы статистической термодинамики; элементы термодинамики необратимых процессов;
3.1.3	теорию растворов, фазовых равновесий;
3.1.4	методы научных исследований в области химии, правила требований техники безопасности при проведении химических экспериментов
3.2	Уметь:
3.2.1	критически анализировать научную литературу с целью самостоятельного выбора направления исследования, самостоятельно составлять план исследования; участвовать в научных дискуссиях;
3.2.2	определять необходимые средства и методы для выполнения исследования;
3.2.3	определять необходимые ресурсы (материальные и нематериальные) для выполнения исследования
3.3	Владеть:
3.3.1	специализированными знаниями, на основе которых осуществляется критический анализ, оценка и синтез инновационных идей;
3.3.2	навыками сбора, обработки и систематизации информации по теме исследования

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Код занятия	Наименование разделов и тем /вид занятия/	Курс	Часов	Литература	Примечание
1.1	Основные понятия и законы термодинамики; элементы статистической термодинамики; элементы термодинамики необратимых процессов; адсорбция и поверхностные явления /Лек/	4	2	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л1.7	
1.2	Основные понятия и законы термодинамики; элементы статистической термодинамики; элементы термодинамики необратимых процессов; адсорбция и поверхностные явления /Пр/	4	6	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л1.7	
1.3	Основные понятия и законы термодинамики; элементы статистической термодинамики; элементы термодинамики необратимых процессов; адсорбция и поверхностные явления /Ср/	4	10	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л1.7	

1.4	Строение вещества. Основы классической теории химического строения /Лек/	4	2	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л1.7	
1.5	Строение вещества. Основы классической теории химического строения /Пр/	4	6	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л1.7	
1.6	Строение вещества. Основы классической теории химического строения /Ср/	4	10	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л1.7	
1.7	Электрические и магнитные свойства; межмолекулярные взаимодействия; строение конденсированных фаз; химия поверхности твердого тела; Растворы, фазовые равновесия; адсорбция и поверхностные явления /Лек/	4	3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л1.7	
1.8	Электрические и магнитные свойства; межмолекулярные взаимодействия; строение конденсированных фаз; химия поверхности твердого тела; Растворы, фазовые равновесия; адсорбция и поверхностные явления /Пр/	4	6	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л1.7	
1.9	Электрические и магнитные свойства; межмолекулярные взаимодействия; строение конденсированных фаз; химия поверхности твердого тела; Растворы, фазовые равновесия; адсорбция и поверхностные явления /Ср/	4	10	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л1.7	
1.10	Кинетика химических реакций; кинетика гомогенных каталитических и ферментативных реакций; реакции в потоке; макрокинетика; теория активных столкновений; фотохимические и радиационно-химические реакции /Лек/	4	3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л1.7	
1.11	Кинетика химических реакций; кинетика гомогенных каталитических и ферментативных реакций; реакции в потоке; макрокинетика; теория активных столкновений; фотохимические и радиационно-химические реакции /Пр/	4	6	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л1.7	
1.12	Кинетика химических реакций; кинетика гомогенных каталитических и ферментативных реакций; реакции в потоке; макрокинетика; теория активных столкновений; фотохимические и радиационно-химические реакции /Ср/	4	10	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л1.7	
1.13	Катализ; гомогенный катализ; кислотно-основной катализ; нуклеофильный и электрофильный катализ; катализ металлокомплексными соединениями; гетерогенный катализ; современные теории функционирования гетерогенных катализаторов; основные промышленные каталитические процессы/Лек/	4	3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л1.7	
1.14	Катализ; гомогенный катализ; кислотно-основной катализ; нуклеофильный и электрофильный катализ; катализ металлокомплексными соединениями; гетерогенный катализ; современные теории функционирования гетерогенных катализаторов; основные промышленные каталитические процессы/Пр/	4	4	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л1.7	
1.15	Катализ; гомогенный катализ; кислотно-основной катализ; нуклеофильный и электрофильный катализ; катализ металлокомплексными соединениями; гетерогенный катализ; современные теории функционирования гетерогенных катализаторов; основные промышленные каталитические процессы/Ср/	4	10	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л1.7	
1.16	Электрохимические процессы; двойной электрический слой; электрокапиллярные явления. Скорость и стадии электродного процесса; поляризация электродов; полярография; ток обмена и перенапряжение /Лек/	4	3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л1.7	

1.17	Электрохимические процессы; двойной электрический слой; электрокапиллярные явления. Скорость и стадии электродного процесса; поляризация электродов; полярография; ток обмена и перенапряжение /Пр/	4	4	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л1.7	
1.18	Электрохимические процессы; двойной электрический слой; электрокапиллярные явления. Скорость и стадии электродного процесса; поляризация электродов; полярография; ток обмена и перенапряжение /Ср/	4	10	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л1.7	
1.25	Контр. раб./	4	0	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л1.7	Вопросы для контрольной работы
1.26	/Экзамен/	4	36	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л1.7	Вопросы для подготовки к кандидатскому экзамену

5. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА

5.1. Контрольные вопросы и задания

Проведение текущего контроля успеваемости

Тема 1. Основные понятия и законы термодинамики; элементы статистической термодинамики; элементы термодинамики необратимых процессов; адсорбция и поверхностные явления.

Вопросы для устного опроса:

1. Энтропия. Статистическая интерпретация энтропии.
2. Первое начало термодинамики. Тепловые эффекты химических реакций.
3. Второе начало термодинамики. Энтропия изолированной, закрытой и открытой систем.

Практические задания:

1. Рассчитайте энтальпию реакции $6C(r) + 6H(r) = C_6H_6(r)$:

а) по энтальпиям образования;

б) по энергиям связи, в предположении, что двойные связи в молекуле C_6H_6 фиксированы.

2. Рассчитайте энтальпию сгорания метана при 1000 К, если даны энтальпии образования при 298 К: $\Delta_f H^\circ(CH_4) = -17,9$ ккал·моль⁻¹, $\Delta_f H^\circ(CO_2) = -94,1$ ккал·моль⁻¹, $\Delta_f H^\circ(H_2O(r)) = -57,8$ ккал·моль⁻¹. Теплоемкости газов (в ккал·моль⁻¹·К⁻¹) в интервале от 298 до 1000 К равны: $C_p(CH_4) = 3,422 + 0,0178 \cdot T$; $C_p(O_2) = 6,095 + 0,0033 \cdot T$; $C_p(CO_2) = 6,396 + 0,0102 \cdot T$; $C_p(H_2O(r)) = 7,188 + 0,0024 \cdot T$.

3. Приведите пример обратимого, но неравновесного термодинамического процесса.

4. Рассчитайте изменение энтропии 1000 г воды в результате ее замерзания при -5°C. Теплота плавления льда при 0°C равна 6008 Дж·моль⁻¹. Теплоемкости льда и воды равны 34,7 и 75,3 Дж·моль⁻¹·К⁻¹, соответственно. Объясните, почему энтропия при замерзании уменьшается, хотя процесс - самопроизвольный.

5. Используя инкрементную схему, рассчитайте значение изобарной теплоемкости изо-бутилацетата при 293 К.

Величины некоторых групповых вкладов изобарных теплоемкостей (T=293 К)

Атом или группа	C_p , Дж·моль ⁻¹ ·К ⁻¹	Атом или группа	C_p , Дж·моль ⁻¹ ·К ⁻¹
-CH ₃	41,32	-O-	35,02
-CH ₂ -	26,45	-NH ₂	63,3
-CN	58,16	-COOH	79,90
-C ₆ H ₅	127,61	-COO-	60,75
-CH-	22,69	-C=O	61,5

6. Молекула может находиться на двух уровнях с энергиями 0 и 300 см⁻¹. Какова вероятность того, что молекула будет находиться на верхнем уровне при 250°C?

Перечень вопросов для самостоятельной работы:

1. Термохимия. Закон Гесса. Расчет теплот химических реакций.
2. Первый закон термодинамики. Работа и теплота.

Тема 2. Строение вещества. Основы классической теории химического строения.

Вопросы для устного опроса:

1. Способы описания взаимодействий между частицами вещества.
2. Физические и химические взаимодействия.
3. Метод валентных связей. Достоинства и недостатки метода ВС.
4. Метод молекулярных орбиталей. Приближенное описание молекулярной орбитали в методе МО ЛКАО. Достоинства и недостатки метода МО ЛКАО.

Практические задания:

1. Построить диаграмму МО для молекулярного иона O₂⁺.
2. Рассчитать энергию решетки кристалла NaF (n = 7, R(Na-F) = 2,307 Å).

Перечень вопросов для самостоятельной работы:

1. Теория химической связи. Основные принципы квантово-химического расчета молекул.
2. Применение метода молекулярных орбиталей, линейная комбинация атомных орбиталей.

3. Опишите свойства и строение наночастиц на основе углерода.

Тема 3. Электрические и магнитные свойства; межмолекулярные взаимодействия; строение конденсированных фаз; химия поверхности твердого тела; Растворы, фазовые равновесия; адсорбция и поверхностные явления.

Вопросы для устного опроса:

1. Условия смещения равновесия. Принцип Ле Шателье.
2. Термический анализ.
3. Слабые электролиты. Константа электролитической диссоциации. Закон разведения.

Практические задания:

1. Вычислить коэффициент активности хлорида калия в 0,05 моляльном водном растворе, если понижение температуры замерзания раствора $T_z = 0,175$ К, а криоскопическая постоянная для воды $K_k = 1,86$.
2. Температура кипения бензола при давлении 1 атм равна $80,1^\circ\text{C}$. Оцените давление пара бензола при 25°C .
3. Проба нелетучей жирной кислоты общей формулы $\text{C}_n\text{H}_{2n-3}\text{COOH}$ массой 1,263 г растворена в 500 г CCl_4 . Температура кипения раствора составила $76,804^\circ\text{C}$. Определите, какая кислота была исследована, если $T_{\text{кин}}(\text{CCl}_4) = 76,76^\circ\text{C}$, а моляльная эбуллиоскопическая постоянная равна 4,88.
4. Рассчитайте состав раствора бензол-толуол, который при нормальном давлении кипит при температуре 100°C , а также состав образующегося пара. Раствор считайте идеальным. Давления пара чистых бензола и толуола при 100°C равны 1350 Торр и 556 Торр, соответственно.
5. Вычислить удельную теплоемкость водного раствора серной кислоты, в котором молярная доля кислоты составляет 0,1, а парциальные молярные теплоемкости компонентов раствора при 288 К для кислоты 61,7 и для воды 77,8 Дж/моль.
6. Вычислить теплоту испарения хлора при нормальной температуре кипения 239 К, если давление насыщенного пара над жидким хлором определяется уравнением: $P(\text{Па}) = 3,58 \cdot 10^6 - 3,37 \cdot 10^4 T + 80,11 T^2$.
7. При 312 К и давлении 1,21 Торр на поверхности микропористого глинистого адсорбента сорбируется $1,37$ моль $\cdot \text{кг}^{-1}$ паров метилового спирта. Такая же адсорбция достигается при повышении температуры до 320 К и увеличении давления до 3,16 Торр. Вычислите энтальпию адсорбции метилового спирта при данной степени заполнения поверхности.

Перечень вопросов для самостоятельной работы:

1. Основные понятия электростатической теории растворов.
2. Удельная и молярная электрические проводимости.

Тема 4. Кинетика химических реакций; кинетика гомогенных каталитических и ферментативных реакций; реакции в потоке; макрокинетика; теория активных столкновений; фотохимические и радиационно-химические реакции.

Вопросы для устного опроса:

1. Фотохимические реакции. Закон фотохимической эквивалентности. Квантовый выход.
2. Энергия активации. Уравнение Аррениуса. Методы определения энергии активации.
3. Химическая кинетика, порядок и молекулярность реакций.

Практические задания:

1. Разложение N_2O_5 в газовой фазе протекает согласно схеме: $2 \text{N}_2\text{O}_5 \rightarrow 2 \text{N}_2\text{O}_4 + \text{O}_2$. Константа скорости этой реакции при 273 К равна $7,9 \cdot 10^{-7} \text{ c}^{-1}$. Начальное давление N_2O_5 равно 3333 Па. Вычислите, за какое время общее давление в смеси газообразных продуктов повысится до 3733 Па?
2. Напишите выражения для скорости реакции разложения метана $\text{CH}_4(\text{г}) \rightarrow \text{C}(\text{т}) + 2 \text{H}_2(\text{г})$ через парциальные давления метана и водорода.

Перечень вопросов для самостоятельной работы:

1. Поясните основные различия между химической кинетикой и термодинамикой.
2. Зависимость скорости реакции от концентрации. Закон действующих масс.

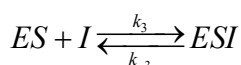
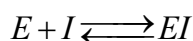
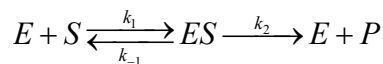
Тема 5. Катализ; гомогенный катализ; кислотно-основной катализ; нуклеофильный и электрофильный катализ; катализ металлокомплексными соединениями; гетерогенный катализ; современные теории функционирования гетерогенных катализаторов; основные промышленные каталитические процессы.

Вопросы для устного опроса:

1. Синтез веществ с новыми свойствами и создание функциональных материалов на их основе.
2. Перспективные функциональные материалы для гетерогенного катализа.
3. Принцип действия катализаторов.
4. Ферментный катализ и его особенности. Ингибирование ферментативных реакций.

Практические задания:

1. При смешанном ингибировании механизм реакции имеет вид:



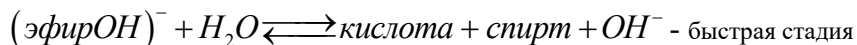
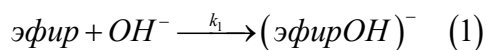
Отличительной чертой этого типа ингибирования является неравенство констант диссоциации комплексов EI и ESI между собой $K_i \neq K_{ii}$: $K_i = [E][I]/[EI]$; $K_{ii} = k_{-3}/k_3 = [ES][I]/[ESI]$.

Выведите уравнение для начальной скорости ферментативной реакции при смешанном ингибировании, учитывая следующие соотношения между начальными концентрациями субстрата, ингибитора и фермента: $[S]_0 \gg [E]_0$, $[I]_0 \gg [E]_0$.

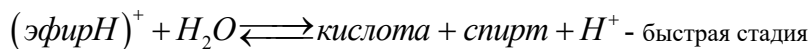
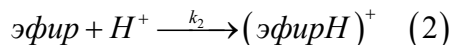
Каким образом можно определить параметры этого кинетического уравнения?

2. Установлено, что гидролиз очень разбавленного раствора эфира при 25°C протекает по кислотно-основному механизму катализа, при этом обратная реакция (этерификации) практически не происходит, эфир растворим в воде и в отсутствие катализатора константа скорости реакции практически равна нулю. Процесс протекает по следующей схеме.

В случае основного катализа:



В случае кислотного катализа:



Экспериментально показано, что скорость гидролиза эфира практически одинакова для значений pH = 1 и pH = 9.

Проведите следующие исследования:

- получите выражение для опытной константы скорости реакции и ответьте на вопрос, зависит ли эта константа от pH раствора;
- определите, чему равна pH при минимальном значении константы скорости реакции. Какой катализ (ионами H⁺ или OH⁻) более эффективен в этом случае?

Перечень вопросов для самостоятельной работы:

- Гомогенный, ферментативный и гетерогенный катализ.
- Каталитическая активность и селективность.
- Дуалистическая теория кислотно-основного катализа. Каталитическая активность и сила кислот и оснований. Уравнение Бренстеда.
- Первичный и вторичный солевой эффекты. Объяснение первичных и вторичных солевых эффектов в рамках теории сильных электролитов.
- Время жизни и регенерация катализаторов. Яды и активаторы. Модифицирование катализаторов. Компенсационный эффект.

Тема 6. Электрохимические процессы; двойной электрический слой; электрокапиллярные явления. Скорость и стадии электродного процесса; поляризация электродов; полярография; ток обмена и перенапряжение.

Вопросы для устного опроса:

- Электрохимические методы создания наноструктурных материалов.
- Перспективные функциональные электрохимические покрытия.
- Основы современного электрохимического анализа.
- Электрокинетические свойства коллоидных систем. Электрофорез и электроосмос. Электрокинетический потенциал.

Практическое задание:

- Рассчитайте скорость движения иона Na⁺ в водном растворе при 298 К, если разность потенциалов 10 В приложена к электродам, находящимся на расстоянии 1 см друг от друга. Сколько времени понадобится иону, чтобы пройти расстояние между электродами.

Перечень вопросов для самостоятельной работы:

- Подвижность ионов: закон Кольрауша. Аномальная подвижность H⁺ и OH⁻.
- Ток обмена и перенапряжение.
- Полярография.

Проведение промежуточной аттестации по дисциплине

Вопросы для подготовки к кандидатскому экзамену по дисциплине:

- Основные понятия термодинамики: изолированные и открытые системы, равновесные и неравновесные системы, термодинамические переменные, интенсивные и экстенсивные переменные. Уравнения состояния. Вириальные уравнения состояния. Теплота, работа, внутренняя энергия, энтальпия. Первый закон термодинамики. Работа расширения идеального газа в различных процессах (изохорном, изобарном, адиабатическом и изотермическом).

- Второй закон термодинамики. Энтропия и ее изменения в обратимых и необратимых процессах. Теорема Карно-Клаузиуса.

Различные шкалы температур.

- Закон Гесса и его следствия. Стандартные состояния и стандартные теплоты химических реакций. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Закон Кирхгофа. Таблицы стандартных термодинамических величин и их использование в термодинамических расчетах.

- Фундаментальные уравнения Гиббса. Характеристические функции. Энергия Гиббса, энергия Гельмгольца. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов.

- Уравнение Гиббса-Гельмгольца. Химические потенциалы. Химический потенциал идеального и реального газов. Фугитивность. Активность и коэффициент активности.

- Химическое равновесие. Закон действующих масс для обратимых процессов. Различные виды констант равновесия и связь между ними. Изотерма Вант-Гоффа. Уравнения изобары и изохоры химической реакции. Принцип смещения равновесия. Расчеты констант равновесия химических реакций с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций.

- Агрегатные состояния вещества. Уравнение состояния идеального газа. Парциальное давление. Закон Дальтона. Реальные газы. Уравнение Ван-дер-Ваальса.

- Каноническая функция распределения Гиббса. Сумма по состояниям как статистическая характеристическая функция. Поступательная, вращательная,

электронная и колебательная суммы по состояниям. Статистический расчет энтропии.

- Различные типы растворов. Способы выражения состава растворов. Идеальные растворы, общее условие идеальности растворов.

- Коллигативные свойства растворов. Давление насыщенного пара жидких растворов, закон Рауля. Понижение температуры замерзания и повышение температуры кипения растворов в зависимости от их концентраций. Осмотическое давление. Закон Вант-Гоффа.

- Предельно разбавленные растворы, атермальные и регулярные растворы, их свойства. Неидеальные растворы и их свойства. Активность. Коэффициенты активности и их определение.

- Гетерогенные системы. Понятия компонента, фазы, степени свободы. Правило фаз Гиббса.

- Однокомпонентные системы. Диаграммы состояния однокомпонентных систем (воды, серы, фосфора и углерода). Фазовые

- переходы первого рода. Уравнение Клапейрона-Клаузиуса. Фазовые переходы второго рода. Уравнения Эренфеста.
14. Двухкомпонентные системы. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем. Равновесие жидкость-пар в двухкомпонентных системах. Законы Гиббса-Коновалова. Азеотропные смеси.
 15. Диаграммы плавкости (с полной и ограниченной растворимостью веществ в твердом состоянии, с простой эвтектикой и с образованием химического соединения).
 16. Адсорбция. Адсорбент, адсорбат. Виды адсорбции. Адсорбция на твердых поверхностях. Структура поверхности и пористость адсорбента. Мономолекулярная и полималекулярная адсорбция.
 17. Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Генри. Константа адсорбционного равновесия. Уравнение Лэнгмюра. Адсорбция из растворов. Уравнение Брунауэра - Эмета - Теллера (БЭТ) для полималекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента.
 18. Растворы электролитов. Электролитическая диссоциация. Ионная сила растворов. Коэффициенты активности в растворах электролитов. Средняя активность и средний коэффициент активности, их связь с активностью отдельных ионов. Основные положения теории Дебая-Хюккеля.
 19. Основные понятия химической кинетики. Простые и сложные реакции, молекулярность и скорость простой реакции. Основной постулат химической кинетики. Способы определения скорости реакции. Кинетические кривые. Кинетические уравнения. Константа скорости и порядок реакции.
 20. Кинетика сложных химических реакций. Принцип независимости элементарных стадий. Кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций. Квазистационарное приближение. Метод Боденштейна-Темкина.
 21. Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса. Энергия активации и способы ее определения. Элементарные акты химических реакций и физический смысл энергии активации.
 22. Цепные реакции. Кинетика неразветвленных и разветвленных цепных реакций. Кинетические особенности разветвленных цепных реакций. Предельные явления в разветвленных цепных реакциях. Полуостров воспламенения. Тепловой взрыв.
 23. Фотохимические реакции. Законы фотохимии. Квантовый выход. Квантовый выход первичной фотохимической реакции. Фотохимические и фотофизические процессы. Кинетическая схема Штерна-Фольмера.
 24. Кинетика электрохимических реакций. Скорость и стадии электрохимической реакции. Поляризация электродов. Ток обмена и перенапряжение. Полярография.
 25. Кинетика гомогенных каталитических и ферментативных реакций. Уравнение Михаэлиса-Ментен. Ингибирование ферментативных реакций.
 26. Классификация каталитических реакций и катализаторов. Теория промежуточных соединений в катализе, принцип энергетического соответствия. Принцип действия катализаторов.
 27. Гомогенный катализ. Кислотно-основной катализ. Кинетика и механизм реакций специфического кислотного катализа. Функции кислотности Гамета. Кинетика и механизм реакций общего кислотного катализа. Уравнение Бренстеда. Корреляционные уравнения для энергий активации и теплот реакций. Специфический и общий основной катализ.
 28. Гетерогенный катализ. Определение скорости гетерогенной каталитической реакции. Удельная и атомная активность. Селективность катализаторов. Роль адсорбции в кинетике гетерогенных каталитических реакций. Неоднородность поверхности катализаторов, нанесенные катализаторы. Энергия активации гетерогенных каталитических реакций.
 29. Электродные процессы. Возникновение потенциала на границе раздела фаз. Нормальные потенциалы и ряд напряжений. Типы электродов. Уравнение Нернста для этих электродов. Электрохимические цепи.
 30. Электропроводность растворов электролитов; удельная и эквивалентная электропроводность. Числа переноса, подвижность ионов и закон Кольрауша. Электрофоретический и релаксационные эффекты.
 31. Электрохимические реакции. Двойной электрический слой. Модельные представления о структуре двойного электрического слоя. Электрокапиллярные явления. Потенциал нулевого заряда.
 32. Электрокинетические свойства коллоидных систем. Электрофорез и электроосмос. Электрокинетический потенциал.

5.2. Темы письменных работ

Контрольная работа проводится в виде вопросов:

1. Первое начало термодинамики. Изменение внутренней энергии при постоянных объеме и давлении. Энтальпия.
2. Второе начало термодинамики. Энтропия изолированной, закрытой и открытой систем.
3. Первое начало термодинамики. Тепловые эффекты химических реакций. Закон Гесса.
4. Система и внешняя среда. Изолированная, закрытая, открытая системы. Внутренняя энергия системы.
5. Фотохимические реакции.
6. Фотохимические реакции. Закон фотохимической эквивалентности. Квантовый выход.
7. Закон Эйнштейна и квантовый выход.
8. Энтропия и термодинамическая вероятность.
9. Энтропия. Статистическая интерпретация энтропии.
10. Второе начало термодинамики. Свободная энергия Гиббса и свободная энергия Гельмгольца.
11. Гомогенный и гетерогенный катализ.
12. Принцип действия катализаторов. Ферментный катализ и его особенности.
13. Энергия активации. Уравнение Аррениуса. Методы определения энергии активации.
14. Агрегатные состояния вещества. Реальные газы. Уравнение Ван-дер-Ваальса.
15. Свободная энергия и направление химических реакций.
16. Функция состояния.
17. Скорость гомогенных химических реакций. Кинетические кривые. Константа скорости.
18. Химическое равновесие. Закон действия масс для обратимых процессов. Константа химического равновесия.
19. Условия смещения равновесия. Принцип Ле Шателье.
20. Понижение температуры замерзания и повышение температуры кипения растворов в зависимости от их концентраций.
21. Связь между энтальпией и внутренней энергией.
22. Уравнение состояния идеального газа. Парциальное давление. Закон Дальтона.
23. Кинетическая теория газов. Скорость молекул и закон распределения скоростей.

24. Химическая кинетика, порядок и молекулярность реакций.
25. Электродные процессы. Возникновение потенциала на границе раздела фаз.
26. Окислительно-восстановительные электроды и цепи. Определение окислительно-восстановительных потенциалов.
27. Осмотическое давление. Закон Вант-Гоффа.
28. Ионная сила растворов, активность, коэффициент активности электролитов.
29. Потенциометрическое определение рН. Электроды с водородной функцией.
30. Буферные системы, буферная ёмкость.
31. Электроды 1-го рода
32. Электроды 2-го рода.
33. Слабые электролиты. Константа электролитической диссоциации. Закон разведения.
34. Адсорбция на твёрдых поверхностях. Уравнение Фрейндлиха, уравнение Ленгмюра.
35. Определение концентрации ионов в растворе методом измерения ЭДС гальванических цепей.
36. Электролитическая диссоциация воды. Шкала кислотности по отношению к воде. Ионное произведение воды. Понятие рН и использование его в агрономии.
37. Электроды первого и второго рода. Уравнение Нернста для этих электродов.
38. Концентрационные цепи.
39. Нормальные потенциалы и ряд напряжений.
40. Буферные растворы, их состав и механизм действия.
41. Диффузионные потенциалы.
42. Закон независимости движения ионов.
43. Теория электролитической диссоциации.
44. Изменение давления насыщенного пара над растворителем и над раствором в зависимости от температуры. Первый закон Рауля.
45. Удельная электропроводность и электролитическая подвижность ионов.
46. Развитие понятий кислота и основание. Теория Брэнстеда.
47. Электрокинетические свойства коллоидных систем. Электрофорез и электроосмос. Электрокинетический потенциал.

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

6.1. Рекомендуемая литература

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Колич-во
Л1.1	Эткис П., Паула Дж. де	Физическая химия: в 3 ч.	М.:Мир, 2007	1
Л1.2	Свиридов В.В., Свиридов А.В.	Физическая химия	Санкт-Петербург: Лань, 2022, https://e.lanbook.com/book/187778	1
Л1.3	Сироткин О.С.	Эволюция теории химического строения вещества А.М. Бутлерова в унитарную теорию строения химических соединений (основы единой химии): Монография	Москва: ООО «Научно-издательский центр ИН-ФРА-М», 2020, https://znanium.com/catalog/document?id=343393	1
Л1.4	Беданок Р.А.	Квантовая физика и элементы квантовой механики: Учебник для вузов	Санкт-Петербург: Лань, 2023, https://e.lanbook.com/book/291167	1
Л1.5	Буданов В.В., Ломова Т.Н., Рыбкин В.В.	Химическая кинетика	Санкт-Петербург: Лань, 2022, https://e.lanbook.com/book/211475	1
Л1.6	Цирельсон В.Г.	Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: Учебное пособие	Москва: Лаборатория знаний, 2021, https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785932085189.html	1
Л1.7	Малов В.А., Наумов В.Н.	Коллоидная химия. Поверхностные явления и дисперсные системы. Словарь-справочник	Санкт-Петербург: Лань, 2022, https://e.lanbook.com/book/187772	1

6.2. Электронно-библиотечные системы

Э1	Электронно-библиотечная система Znanium http://new.znanium.ru
Э2	Электронно-библиотечная система «Лань» http://e.lanbook.com
Э3	Электронно-библиотечная система IPR SMART (IPRbooks) http://www.iprbookshop.ru
Э4	Электронно-библиотечная система «Юрайт» https://urait.ru

6.3. Информационные, информационно-справочные системы

6.3.1	Гарант – справочно-правовая система по законодательству Российской Федерации http://www.garant.ru
6.3.2	КонсультантПлюс – справочно-правовая система http://www.consultant.ru

6.4. Профессиональные базы данных

В локальной сети <http://lib.surgu.ru/ru/pages/resursi/bd/lan>

6.4.1.	Электронная библиотека СурГУ https://elib.surgu.ru
6.4.2.	Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU http://www.elibrary.ru
6.4.3.	Евразийская патентная информационная система (ЕАПАТИС) http://www.eapatiss.com
6.4.4.	Виртуальный читальный зал Российской государственной библиотеки (ВЧЗ РГБ) https://ldiss.rsl.ru
6.4.5.	Национальная электронная библиотека (НЭБ) http://nab.ru
6.4.6.	Архив научных журналов (NEICON) http://archive.neicon.ru
6.4.7.	Springer Nature https://link.springer.com
6.4.8.	Полнотекстовая коллекция журналов РАН https://journals.rcsi.science
6.4.9.	Wiley Journals Database https://onlinelibrary.wiley.com
В свободном доступе сети Интернет	
6.4.10.	База данных ВИНТИ РАН http://www.viniti.ru
6.4.11.	Единое окно доступа к образовательным ресурсам - информационная система http://window.edu.ru
6.4.12.	КиберЛенинка - научная электронная библиотека http://cyberleninka.ru
6.4.13.	Электронные коллекции на портале Президентской библиотеки им. Б. Н. Ельцина http://www.prlib.ru/collections
6.4.14.	Российская национальная библиотека https://primo.nlr.ru/primo-explore/collectionDiscovery?vid=07NLR_VU1&lang=ru_RU
6.4.15.	Elsevier - Open Archive https://www.elsevier.com/about/open-science/open-access/open-archive
6.4.16.	SpringerOpen http://www.springeropen.com
6.4.17.	Directory of Open Access Journals https://doaj.org
6.4.18.	Multidisciplinary Digital Publishing Institute (Basel, Switzerland) http://www.mdpi.com

7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

7.1	Учебные аудитории Университета для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарного типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации оснащены: комплект специализированной учебной мебели, маркерная (меловая) доска, комплект переносного мультимедийного оборудования - компьютер, проектор, проекционный экран, компьютеры с возможностью выхода в Интернет и доступом в электронную информационно-образовательную среду.
7.2	Помещения для самостоятельной работы оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационную образовательную среду СурГУ: 539,541,542 Зал медико-биологической литературы и литературы по физической культуре и спорту. 441 Зал иностранной литературы. 442 Зал естественно-научной и технической литературы.

8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Проведение текущего контроля успеваемости по дисциплине

Методические рекомендации по проведению основных видов учебных занятий

При изучении дисциплины используются следующие основные методы и средства обучения, направленные на повышение качества подготовки аспирантов путем развития у аспирантов творческих способностей и самостоятельности:

- контекстное обучение – мотивация аспирантов к усвоению знаний путем выявления связей между конкретными знаниями и его применением.
- проблемное обучение – стимулирование аспирантов к самостоятельному приобретению знаний, необходимых для решения конкретной проблемы.
- обучение на основе опыта – активизация познавательной деятельности аспиранта за счет ассоциации и собственного опыта с предметом изучения.
- индивидуальное обучение – выстраивание аспирантами собственной образовательной траектории на основе формирования индивидуальной программы с учетом интересов аспирантов.
- междисциплинарное обучение – использование знаний из разных областей, их группировка и концентрация в контексте решаемой задачи.

Лекции решают следующие задачи:

-изложить основной материал программы курса;

-развить у аспирантов потребность к самостоятельной работе над учебником и научной литературой.

Главной задачей каждой лекции является раскрытие сущности темы и анализ ее основных положений.

Содержание лекций определяется рабочей программой курса. Крайне желательно, чтобы каждая лекция охватывала и исчерпывала определенную тему курса и представляла собой логически вполне законченную работу. Лучше сократить тему, но не допускать прерыва ее на таком месте, когда основная идея еще полностью не раскрыта.

Привлечение графического и табличного материала на лекции позволит более объемно изложить материал.

Целью практических занятий является:

- закрепление теоретического материала, рассмотренного аспирантами самостоятельно;
- проверка уровня понимания аспирантами вопросов, рассмотренных самостоятельно по учебной литературе, степени и качества усвоения материала аспирантами;
- восполнение пробелов в пройденной теоретической части курса и оказание помощи в его усвоении.

В начале очередного занятия необходимо сформулировать цель, поставить задачи. Аспиранты выполняют задания, а преподаватель контролирует ход их выполнения путем устного опроса, проверки практических заданий.

Методические рекомендации по организации самостоятельной работы аспирантов

Целью самостоятельной работы аспирантов является формирование способностей к самостоятельному познанию и обучению, поиску литературы, обобщению, оформлению и представлению полученных результатов, их критическому анализу, поиску новых неординарных решений, аргументированному отстаиванию своих предложений, умений подготовки выступлений и ведения дискуссий.

Методические рекомендации призваны помочь аспирантам организовать самостоятельную работу при изучении курса: с материалами лекций, практических и семинарских занятий, литературы по общим и специальным вопросам химических наук.

Задачами самостоятельной работы аспирантов являются:

- систематизация и закрепление полученных теоретических знаний и практических умений;
- углубление и расширение теоретических знаний;
- формирование умений использовать нормативную, правовую, справочную документацию и специальную литературу;
- развитие познавательных способностей и активности: творческой инициативы, самостоятельности, ответственности и организованности;
- формирование самостоятельности мышления, способностей к саморазвитию, самосовершенствованию и самореализации;
- развитие исследовательских умений;
- использование материала, собранного и полученного в ходе самостоятельных занятий на семинарах, на практических и лабораторных занятиях, при написании научно-исследовательских работ, для эффективной подготовки к кандидатскому экзамену.

Аудиторная самостоятельная работа по дисциплине выполняется на учебных занятиях под непосредственным руководством преподавателя и по его заданию.

Внеаудиторная самостоятельная работа выполняется аспирантом по заданию преподавателя, но без его непосредственного участия. Основными видами самостоятельной работы аспиранта без участия преподавателя являются:

- формирование и усвоение содержания конспекта лекций на базе рекомендованной лектором учебной литературы, включая информационные образовательные ресурсы (электронные учебники, электронные библиотеки и др.);
- подготовка к семинарам, их оформление;
- составление аннотированного списка статей из соответствующих журналов по темам занятий;
- выполнение домашних заданий в виде решения отдельных задач, проведения типовых расчетов и индивидуальных работ по отдельным разделам содержания дисциплин и т.д.

Самостоятельная работа аспирантов осуществляется в следующих формах:

1) Подготовка к семинарским и практическим занятиям. При подготовке к семинарским занятиям аспирантам необходимо ориентироваться на вопросы, вынесенные на обсуждение. На семинарских занятиях проводятся опросы, разбор конкретных ситуаций, практических заданий, с активным обсуждением вопросов, в том числе по группам, с целью эффективного усвоения материала в рамках предложенной темы, выработки умений и навыков в профессиональной деятельности, а также в области ведения переговоров, дискуссий, обмена информацией, грамотной постановки задач, формулирования проблем, обоснованных предложений по их решению и аргументированных выводов.

2) Изучение основной и дополнительной литературы при подготовке к семинарским и практическим занятиям. В целях эффективного и полноценного проведения таких мероприятий аспиранты должны тщательно подготовиться к вопросам семинарского занятия. Особенно поощряется и положительно оценивается, если аспирант самостоятельно организует поиск необходимой информации с использованием периодических изданий, информационных ресурсов сети ИНТЕРНЕТ и баз данных специальных программных продуктов.

Самостоятельная работа аспирантов должна опираться на сформированные навыки и умения, приобретенные во время прохождения других курсов. Составляющим компонентом его работы должно стать творчество. В связи с этим рекомендуется:

1. Начинать подготовку к занятию со знакомства с рекомендованными и иными опубликованными научными публикациями.
2. Обратите внимание на структуру, композицию, язык публикации, время и историю его появления.
3. Определите основные идеи, принципы, тезисы, заложенные в публикацию.
4. Выясните, какой сюжет, часть изучаемой проблемы позволяет осветить проанализированный источник.
5. Проведите работу с незнакомыми терминами и понятиями, для чего используйте словари терминов, энциклопедические словари, словари иностранных слов и др.

Необходимо ознакомиться с библиографией темы и вопроса, выбрать доступные Вам издания из списка основной литературы, специальной литературы, рекомендованной к лекциям и семинарам. Рекомендованные списки могут быть дополнены.

Используйте справочную литературу. Поиск можно продолжить, изучив примечания и сноски в уже имеющихся у Вас в руках монографиях, статьях.

Работая с литературой по теме семинара, делайте выписки текста, содержащего характеристику или комментарий уже знакомого Вам источника. После чего вернитесь к тексту документа (желательно полному) и проведите его анализ уже в контексте изученной исследовательской литературы.

Возникающие на каждом этапе работы мысли следует записывать. Анализ документа следует сделать составной частью проработки вопросов семинара и выступления аспиранта на занятии. Общее знание проблемы, обсуждаемой на семинарском занятии, должно сочетаться с глубоким знанием источников.

Следует составить сложный план, схему ответа на каждый вопрос плана семинарского занятия.

Проведение промежуточной аттестации по дисциплине

Формой промежуточной аттестации освоения дисциплины является экзамен. Результаты промежуточного контроля знаний оцениваются по 4-бальной шкале с оценками: «отлично»; «хорошо»; «удовлетворительно»; «неудовлетворительно».

Методические рекомендации по подготовке к кандидатскому экзамену

Организация и проведение кандидатских экзаменов в СурГУ регламентируется следующими документами:

- Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. №842 «О порядке присуждения ученых степеней»,
- Приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 28.03.2014 г. №247 «Порядок прикрепления лиц для сдачи кандидатских экзаменов, сдачи кандидатских экзаменов и их перечень»;
- СТО-2.12.11 «Порядок проведения кандидатских экзаменов».

Кандидатские экзамены являются формой промежуточной аттестации аспирантов, их сдача обязательна для присуждения ученой степени кандидата наук.

Цель кандидатского экзамена по специальности состоит в проверке приобретенных аспирантами знаний. Экзамен также ставит целью установить глубину профессиональных знаний соискателя ученой степени кандидата наук, уровень подготовленности к самостоятельной научно-исследовательской работе.

Экзамен по специальности включает обсуждение двух теоретических вопросов и собеседование по теме диссертации (третий вопрос) в соответствии с программой кандидатского экзамена, утверждённой проректором по УМР СурГУ.

Для успешной сдачи экзамена аспиранту необходимо выполнить несколько требований:

- 1) регулярно посещать аудиторные занятия по дисциплине; пропуск занятий не допускается без уважительной причины;
- 2) в случае пропуска занятия аспирант должен быть готов ответить на экзамене на вопросы преподавателя, взятые из пропущенной темы;
- 3) аспирант должен точно в срок сдавать письменные работы на проверку и к следующему занятию удостовериться, что они зачтены;
- 4) готовясь к очередному занятию по дисциплине, аспирант должен прочитать соответствующие разделы в учебниках, учебных пособиях, монографиях и пр., рекомендованных преподавателем в программе дисциплины, и быть готовым продемонстрировать свои знания; каждое участие аспиранта в обсуждении материала на практических занятиях отмечается преподавателем и учитывается при ответе на экзамене.