

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» августа 2021 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)
Физическая химия

Уровень высшего образования:
Специалитет

Направление подготовки (специальность):
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) ОПОП:
Аналитическая химия, Биоорганическая химия, Высокомолекулярные соединения, Коллоидная химия, Лазерная химия, Медицинская химия и тонкий органический синтез, Нанобиоматериалы и нанобиотехнологии, Неорганическая химия, Нефтехимия, Органическая химия, Радиохимия, Физическая химия, Фундаментальная и прикладная энзимология, Химия ионных и молекулярных систем, Химическая кинетика, Химия высоких энергий, Химия и технология веществ и материалов, Химия твердого тела, Электрохимия

Форма обучения:
очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №7 от 07.07.2021)

Москва 2021

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (программа специалитета), утвержденного приказом МГУ от 29 декабря 2018 года № 1770.

Год (годы) приема на обучение 2021/2022

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: базовая часть ООП, блок ХД, модуль «Физическая химия».

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.С Способен формулировать научно обоснованные гипотезы, создавать теоретические модели явлений и процессов, применять методологию научного познания в профессиональной деятельности</p>	<p>УК-1.С.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.С.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-6.С Способен применять современные коммуникативные технологии, в том числе на иностранном языке (иностранных языках), для академического и профессионального взаимодействия</p>	<p>УК-6.С.3. Выбирает стиль общения на русском языке в зависимости от цели и условий партнерства; адаптирует речь, стиль общения и язык жестов к ситуациям взаимодействия</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-6.С.5. Работает с текстами разного уровня сложности, отвечающими задачам профессиональной деятельности</p>	<p>Уметь: работать с учебными и научными текстами разного уровня сложности, отвечающими задачам профессиональной деятельности</p>
<p>УК-7.С Способен использовать современные информационно-коммуникационные технологии в академической и профессиональной сферах</p>	<p>УК-7.С.1 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 информацией с учетом основных требований информационной безопасности</p>

	УК-7.С.2 Реализует навыки обработки и представления информации с использованием современных компьютерных технологий	Уметь: пользоваться программными средствами, автоматизирующими обработку данных (управление базами данных, статистическая обработка, визуализация и т.п.)
ОПК-1.С. Способен решать современные проблемы фундаментальной и прикладной химии, используя методологию научного подхода и систему фундаментальных химических понятий и законов	ОПК-1.С.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.С.3. 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.С.4. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности	Уметь: формулировать заключения и выводы по результатам анализа литературных и собственных экспериментальных данных в области физической химии
ОПК-2.С. Способен проводить химический эксперимент с соблюдением норм безопасного обращения с химическими материалами, адекватно оценивая возможные риски с учетом свойств веществ	ОПК-2.С.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.С. Владеет методами регистрации и обработки результатов экспериментов, в том числе, полученных на современном научном оборудовании	ОПК-3.1.С. Проводит исследования свойств веществ и материалов с использованием серийного и оригинального научного оборудования	Знать: требования к оформлению и представлению результатов физико-химических исследований работ Уметь: получать физико-химические данные, проводить их математическую обработку
	ОПК-3.С.2. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений	Уметь: проводить математическую обработку физико-химических данных, обобщать полученные результаты Владеть: навыками оформления протоколов результатов изучения физико-химических свойств веществ и материалов
ОПК-4.С. Способен создавать математические модели профессиональных задач, учитывать ограничения и границы применимости моделей, интерпретировать полученные математические результаты	ОПК-4.С.1 Предлагает математические и (или) физические модели 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
ОПК-5.С. Способен использовать современные расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием при решении профессиональных задач	ОПК-5.С.1. Оценивает свойства веществ и материалов, прогнозирует результаты химических процессов с использованием современных расчетно-теоретических методов и представлений	Знать: теоретические и полуэмпирические методы оценки свойств веществ Уметь: использовать современные расчетно-теоретические методы для оценки свойств веществ и параметров химических реакций Уметь: оценить корректность результатов теоретических расчетов физико-химических свойств
ОПК-6.С. Способен использовать в профессиональной деятельности базовые знания в области физики и математики	ОПК-6.С.2. Обрабатывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик	Уметь: проводить необходимые математические преобразования при решении задач физической химии
	ОПК-6.С.3. Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений	Уметь: использовать физические законы и представления при интерпретации результатов физико-химических исследований
ОПК-7.С. Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и исполь-	ОПК-7.С.1 Использует современные компьютерные технологии при сборе информации химического профиля с	Знать: основные базы данных химического профиля Уметь: корректно составлять поисковый запрос информации химического содержания

зовать их для решения задач профессиональной деятельности.	использованием общих и профессиональных баз данных	Владеть: навыками работы с профессиональными базами данных химического профиля
	ОПК-7.С.2 Использует современные компьютерные технологии при анализе, обработке и представлении результатов профессиональной деятельности	Знать: современные подходы к обработке и представлению результатов физико-химического эксперимента Уметь: применять вычислительные технологии при обработке и представлении результатов физико-химического эксперимента
ОПК-9.С. Способен представлять результаты профессиональной деятельности в устной и письменной форме в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе.	ОПК-9.С.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-9.С.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-9.С.4. 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

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 10 зачетных единиц, всего 360 часов, из которых 200 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (108 часов - занятия лекционного типа, 72 часа - занятия семинарского типа, 8 часов – групповые консультации, 12 часов - мероприятия промежуточной аттестации), 160 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	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов.п.	Всего
Тема 1. Физическая химия, ее место среди других разделов химии, основные понятия.	2	2					2			
Тема 2. Первый закон термодинамики и термохимия.	14	8	4				12	2		2
Тема 3. Второй закон термодинамики и математический	26	12	8				20	6		4

аппарат химической термодинамики										
Тема 4. Фазовые равновесия и термодинамика растворов	32	14	12				26	6		4
Тема 5. Химические и адсорбционные равновесия.	28	14	8				22	6		4
Тема 6. Термодинамика необратимых процессов	2	2	0				2	0		0
Тема 7. Статистическая термодинамика	30	14	10				24	6		4
Тема 8. Феноменологическая кинетика химических реакций	28	16	12				28	6		4
Тема 9. Теории химической кинетики и фотохимия.	30	16	12				28	6		4
Тема 10. Катализ	16	10	6				16	2		2
Курсовая работа	72					4	4			68
Промежуточная аттестация <u>экзамен</u>	80			8		8	16			64
Итого	396	108	72	8		12	200			160

6. Образовательные технологии:

- 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):

Темы для самостоятельного изучения:

Макро-, микро-, нанофазы. Углеродные наноматериалы. Пластические кристаллы. Жидкие кристаллы.

Описание необратимых процессов в термодинамике. Производство энтропии. Потoki. Силы. Линейные законы и феноменологические соотношения для скоростей процессов. Связь между сродством и скоростью химической реакции. Перекрестные явления. Принцип Кюри, соотношения Онсагера. Стационарные состояния системы и теорема Пригожина о минимуме производства энтропии

Скорости реакций в открытых системах. Стационарные состояния и анализ их устойчивости. Схема Лотки-Вольтерра. Точки бифуркации.

Теория мультиплетов Баландина. Принцип геометрического соответствия. Принцип энергетического соответствия. Современные представления о механизмах гетерогенных реакций гидрирования.

Нанесенные катализаторы и понятие о теории ансамблей Кобозева. Нанокатализ.

Литература для углубленного изучения:

- 1 Мюнстер А. Химическая термодинамика. Москва. УРСС. 2002
- 2 Пригожин И., Кондепуди Д. Современная термодинамика. Москва. Мир. 2002
- 3 Смирнова Н.А. Методы статистической термодинамики в физической химии. Москва. Мир. 1982
- 4 Глестон С., Лейдлер К., Эйринг Г. Теория абсолютных скоростей реакций. Москва. Из-во Иностранной литературы 1948
- 5 Новаковская Ю.В. Теория скорости химического превращения. Части I,II. Москва. Учебное пособие для студентов Химического факультета МГУ 2003

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 Полтораки О.М. Термодинамика в физической химии. Москва. Высшая школа 1991
- 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. Бином. 2015
6. Горшков В. И., Кузнецов И. А. Основы физической химии. Издательство "Лаборатория знаний". 2021.

Дополнительная литература

1. Горшков В.И. Основы физической химии. Издание 1993 и 2006
2. Еремин В.В. с соавт. Задачи по физической химии. Издания 2003 и 2005
3. Кнорре Д.Г. Физическая химия. 1990
4. Еремин В.В. с соавт. Основы физической химии. Теория и задачи. Издания 2005, 2013 и 2018 гг.
5. Стромберг А.Г. Физическая химия. Издания 1999 и 2006

9. Язык преподавания – русский

10. Преподаватели:

КОРОБОВ МИХАИЛ ВАЛЕРЬЕВИЧ, доктор химических наук, профессор кафедры физической химии МГУ, mkorobov49@gmail.com

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - экзамена. На экзамене проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.2.

Вопросы к коллоквиумам

Раздел 1, 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). Теплота и работа. Функции состояния и функционалы. Постулат равновесия. Постулат существования температуры. Абсолютная температура. МПТШ.

Уравнения состояния идеальных и реальных газов. Уравнение Ван-дер-Ваальса и его анализ. Критическая точка и критические параметры. Уравнение Бертло. Теорема о соответственных состояниях и проблема индивидуальных постоянных в уравнениях состояния. Вириальные уравнения состояния. Уравнения состояния для жидкостей и твердых тел.

Круговые процессы. Цикл Карно. Тепловая машина.

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. Изохора, изотерма, изобара и адиабата. Взаимные превращения теплоты и работы.

Калорические коэффициенты. Их определение и вычисление. Теплоты различных процессов. Теплоемкости. Их определение в общей физике и термодинамике. Эмпирические уравнения для зависимости теплоемкостей от температуры и их недостатки. Теплоемкости газов и кристаллических тел.

Термохимия. Теплоты химических реакций. Термохимические уравнения. Закон Гесса. Его формулировки и вывод из первого начала термодинамики для закрытых систем. Связь Q_p и Q_v . Теплоты сгорания и энтальпии образования. Энтальпии образования ионов в растворах. Их использование для расчета теплот химических реакций. Расчеты теплот путем комбинирования термохимических уравнений. Расчеты теплот химических реакций с использованием таблиц термодинамических свойств индивидуальных веществ. Стандартное состояние и стандартные теплоты химических реакций. Зависимость теплот реакций от температуры и давления. Уравнение Кирхгоффа в дифференциальной и интегральной формах.

Раздел 1, коллоквиум «Второй закон термодинамики, термодинамические потенциалы». Второй закон термодинамики, его различные формулировки и их взаимосвязь. Энтропия как тепловая координата состояния и физическая величина. Уравнение Больцмана. Изменение энтропии при различных обратимых процессах и вычисление энтропии из опытных данных. Вычисление энтропии идеальных газов. Изменение энтропии при необратимых процессах. Неравенство Клаузиуса. Некомпенсированная теплота и «потерянная работа». Производство энтропии.

Обоснования второго закона термодинамики. Коэффициент полезного действия тепловой машины. Лемма Карно. Цикл Карно в P - V и T - S диаграммах. Теорема Карно–Клаузиуса и ее следствия. Определение энтропии по Клаузиусу. Абсолютная температура и термодинамическая шкала температур. Понятие о методе Каратеодори и сравнение двух способов обоснования второго закона термодинамики.

Тепловая теорема Нернста. Постулат Планка и область его применимости. Свойства тел вблизи абсолютного нуля. Абсолютные значения энтропии. Статистическое определение энтропии (качественное обсуждение без выводов).

Математический аппарат термодинамики. Фундаментальное уравнение Гиббса. Определение функций состояния F , G , H . Запись для них фундаментальных уравнений. Соотношения Максвелла. Вычисление калорических коэффициентов из уравнений состояния. 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.

Химический потенциал. Его определение через производные от различных термодинамических функций и вычисление для идеального газа. Летучесть и ее вычисление для реальных газов. Использование летучести для определения химического потенциала реальных газов. Равновесие в поле внешних сил.

Раздел 2, коллоквиум «Растворы и фазовые равновесия».

Растворы в различных агрегатных состояниях. Единицы концентрации. Смеси идеальных газов и свойства идеальных газовых растворов. Энтропия и энергия Гиббса для смеси идеальных газов. Различные выражения для химических потенциалов компонентов в смеси

идеальных газов. Общее определение идеальных растворов в любых агрегатных состояниях. Коллигативные свойства растворов. Эмпирические законы Рауля для давления пара, криоскопических и эбуллиоскопических эффектов и Вант-Гоффа для осмотического давления. Их термодинамический вывод.

Неидеальные растворы и их термодинамическое описание. Метод активностей Льюиса. Вычисление коэффициентов активностей по давлению пара компонентов раствора, по данным криоскопии и осмотическому давлению (для растворов неэлектролитов). Осмотический коэффициент растворителя и его опытное определение. Стандартные состояния для химического потенциала. Симметричная и несимметричная системы отсчета.

Функции смешения. Энтропия смешения идеальных растворов и использование решеточной модели для ее вычисления в статистической термодинамике. Избыточные функции. Зависимость коэффициентов активности от температуры и давления.

Термодинамическая классификация растворов. Атермальные, регулярные, строго регулярные растворы и их свойства. Пределно разбавленные растворы. Эмпирические закономерности для коэффициентов активности.

Парциальные мольные величины и их определение из опытных данных. Уравнения Гиббса–Дюгема. Взаимосвязи парциальных мольных величин, вытекающие из уравнения Гиббса–Дюгема (на примере парциальных мольных объемов бинарного раствора $\text{H}_2\text{O}-\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$).

Правило фаз Гиббса. Определение фазы, компонента, числа степеней свободы. Вывод правила фаз и его применение для описания однокомпонентных систем на примере диаграмм состояния фосфора и воды в широком диапазоне давлений. Монотропия и энантиотропия.

Бинарные системы с образованием эвтектики с твердыми растворами, с конгруэнтной и инконгруэнтной температурами плавления. Трехкомпонентные системы. Треугольник Гиббса.

Уравнение Клапейрона–Клаузиуса и фазовые переходы первого рода. Его применение к процессам плавления, испарения и сублимации в однокомпонентных системах. Фазовые переходы второго рода. Уравнение Эренфеста.

Равновесие жидкость – пар в двухкомпонентных системах. Взаимосвязь составов пара и жидкости для идеальных и неидеальных растворов. Различные виды диаграмм состояния в координатах: $P(x_i, y_i)-T_k(x_i, y_i)-x_i(y_i)$. Азеотропные смеси и их свойства. Законы Гиббса–Коновалова.

Раздел 2, коллоквиум «Химические и адсорбционные равновесия». Химическая переменная. Условия химического равновесия. Химическое равновесие при протекании одной реакции при постоянной температуре. Вывод закона действующих масс и его различных частных форм. Связь между разными константами равновесия. Изотерма химической реакции. Термодинамическое определение химического сродства. Термодинамические расчеты выхода продуктов реакции при протекании одной и нескольких химических реакций (образование NH_3 и гидрирование этилена).

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).

Адсорбционное равновесие. Определение адсорбции. Метод избытков. Адсорбционное уравнение Гиббса. Изотерма, изобара, изостера адсорбции, эмпирические уравнения изотерм адсорбции. Уравнение Лэнгмюра, его вывод и область применения. Вычисление параметров уравнения Лэнгмюра из опытных данных. Адсорбция смеси газов. Полимолекулярная адсорбция. Изотермы полимолекулярной адсорбции. Уравнение Бруннауэра–Эммета–Теллера и область его применимости. Использование метода БЭТ для оценки поверхности твердых тел. Газовая хроматография.

Раздел 3, 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. Метод наибольшего слагаемого в сумме по состояниям. Формула Больцмана для энтропии.

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. Парадокс Гиббса и его трактовка в статистической физике.

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. Статистические теории теплоемкостей кристаллических тел (качественное рассмотрение).

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.

Межмолекулярное взаимодействие и конфигурационный интеграл. Статистическая теория реальных газов и проблема уравнения состояния. Метод Урселла–Майер. Уравнение состояния в вириальной форме. Статистические расчеты вириальных коэффициентов. Теорема о соответственных состояниях и ее анализ в статистической термодинамике.

Раздел 6, коллоквиум «Феноменологическая кинетика».

Основные понятия и методы формальной кинетики. Экспериментальное определение скорости химической реакции в закрытой и открытой системах. Кинетический эксперимент и его описание. Кинетические уравнения и методы их изучения. Молекулярность и порядок реакции. Реакции постоянного и переменного порядков по различным компонентам (привести примеры). Методы определения порядка реакции. Исследование вида кинетического уравнения. Причины непостоянства порядка реакции и несовпадение порядков при их определении различными методами.

Постулаты формальной кинетики. Кинетический закон действующих масс и принцип независимости реакций, прямая и обратная кинетические задачи. Использование кинетического закона действующих масс при решении прямой кинетической задачи (привести примеры). 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. Сравнение скоростей реакций различных порядков.

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 (привести примеры).

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 HO_2 . 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.

Колебательные реакции. Качественное рассмотрение реакции Белоусова–Жаботинского.

Скорости реакций в открытых системах. Типы реакторов и их свойства. Скорость реакций в реакторе идеального вытеснения. Общее уравнение для стационарной скорости реакции в реакторе идеального смешения. Определение порядка реакции. Скорости реакции первого порядка в реакторе идеального смешения (необратимая, обратимая и последовательная реакция ($\text{A} \rightarrow \text{B} \rightarrow \text{C}$)). Определение констант скорости по стационарным концентрациям исходного вещества и продукта реакции.

Раздел 7, коллоквиум «Теории химической кинетики и фотохимия».

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. Элементарная и более строгая формулировки задачи. Фактор соударений. Стерический множитель. Сечение соударения. Энергия активации. Достоинства и недостатки теории активных соударений.

Константы скорости бимолекулярных процессов. Расчеты константы скорости по теории активированного комплекса и 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. Примеры реакций и определение понятия «мономолекулярный процесс». Кинетические параметры мономолекулярных реакций ($\Delta S, \chi, E^*$). «Компенсационный эффект». Применение теории активированного комплекса к мономолекулярным реакциям. Области соответствия и несоответствия опытным данным. Применение теории активных соударений к описанию мономолекулярных реакций. Кинетические особенности мономолекулярных реакций и их описание схемой Линдемана. Недостаточность схемы Линдемана и ее современное изложение. Поправка Хиншельвуда и ее недостаточность. Поправка Касселя. Понятие о теории РРКМ (качественно).

Тримолекулярные реакции. «Истинные» тримолекулярные процессы и реакции третьего порядка. Тримолекулярные реакции и их свойства. Реакции третьего порядка без тримолекулярных стадий. Отрицательный температурный коэффициент и его различные объяснения. Вычисление фактора соударений для тримолекулярных реакций.

Фотохимические процессы. Фотохимические реакции и их свойства. Потенциальные кривые и свойства молекул в электронно-возбужденных состояниях. Роль триплетных состояний. Эксимеры и эксиплексы. 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. «Двухквантовые процессы». Кинетическая схема Штерна–Фольмера как пример определения элементарных констант из опытных фотохимических данных.

Раздел 8, 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.

Корреляционные соотношения между теплотами и энергиями активации, между свободными энергиями реакций и свободными энергиями активации различных процессов.

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. Сверхкислоты, супероснования и их свойства. Свойства «жестких» и «мягких» кислот Льюиса.

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. Метод равнодоступной поверхности. Внутренняя диффузия и диффузионное торможение. Влияние размера гранул и диаметра пор катализатора (без вывода).

Кинетика реакций во внутренней диффузионной области. Кинетическая задача Зельдовича–Тиле и ее решение для реакции первого порядка. Параметр Тиле и оценка кинетического режима реакций. Фактор диффузионного торможения. Энергия активации и порядок реакции в кинетической и внутридиффузионной области.

Теория мультиплетов Баландина. Принцип геометрического соответствия. Принцип энергетического соответствия. Современные представления о механизмах гетерогенных реакций гидрирования.

Нанесенные катализаторы и понятие о теории ансамблей Кобозева.

Варианты контрольных работ

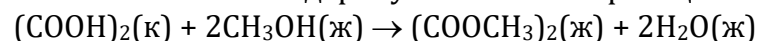
К разделам 1,2

1. 45 граммов идеального газа азота переходят из точки 1 в точку 2 по

1) «равновесной изотерме», при $p = p_{\text{внеш}}$ во всех точках, 2) по «неравновесной изотерме», при $p_2 = p_{\text{внеш}} = \text{const}$ во всех точках. Чему равна разность теплот процессов $Q_1 - Q_2$? Чему равна разность $(\Delta U_1 - \Delta U_2)$?

$T_1 = 1000 \text{ K}$, $V_1 = 1 \text{ л}$, $V_2 = 1,5 \text{ л}$

2. Рассчитайте стандартную энтальпию реакции

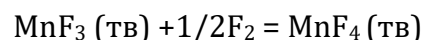


при температуре 298 К, если известны стандартные энтальпии сгорания участников реакции при той же температуре:

Вещество	$(\text{COOH})_2, \text{к}$	$\text{CH}_3\text{OH}, \text{ж}$	$(\text{COOCH}_3)_2, \text{ж}$	$\text{H}_2\text{O}, \text{ж}$
$\Delta_c H^\circ, \text{ккал/моль}$	-60.1	-173.65	-401.0	0

3. Когда оценивают шансы на успех при синтезе нового химического соединения, часто используют величины энергий кристаллических решеток. Эти энергии можно рассчитать теоретически.

Можно ли синтезировать MnF_4 по реакции:



если энергии кристаллических решеток MnF_4 и MnF_3 равны, соответственно, -906 и -690 кДж/моль. Энтальпия образования атома фтора: 73.9 кДж/моль, сродство к электрону атома фтора: -334 кДж/моль, четвертый потенциал ионизации марганца: 450 кДж/моль

Все величины относятся к 0К. Дайте заключение о возможности синтеза. Какие допущения сделаны? Оцените давление фтора в системе, при котором синтез MnF_4 может быть осуществлен при 298К. Эта оценка снизу или сверху?

4. Вычислите ΔG и ΔF при сжатии 1 моль углекислого газа от давления 0.05 атм до давления 0.1 атм при температуре 500°C. Считайте, что при не слишком высоких давлениях CO_2 подчиняется законам идеальных газов.

К разделу 3

1. Как изменяется температура плавления льда с изменением внешнего давления, если энтальпия плавления льда равна 79.7 кал·г⁻¹ при 0°C? При замерзании воды её плотность изменяется от 1 до 0.9168 г·см⁻³. Определите температуру плавления льда при давлении 500 атм.

2. Покажите, что зависимость энергии Гиббса смешения от состава бинарного идеального раствора $\Delta_{\text{mix}} G = RTx_A \ln x_A + RTx_B \ln x_B$, где x_A и x_B – мольные доли компонентов, проходит через минимум при $x_A = x_B$.

3. Коэффициент активности γ_2 , выраженный в мольных долях растворённого вещества, в некотором разбавленном растворе описывается уравнением $\gamma_2 = e^{Ax_2^2}$, где A – константа при данной температуре, а x_2 – мольная доля компонента. Получите выражение для коэффициента активности растворителя γ_1 через A и x_2 .

4. Найдите величины K и K_p при температуре 25°C для реакции $\text{CO}_{(г)} + \text{H}_{2(г)} = \text{HCHO}_{(ж)}$, если для той же реакции при образовании $\text{HCHO}_{(г)}$ $\Delta_r G_{298}^\circ = 29 \text{ кДж}\cdot\text{моль}^{-1}$, а равновесное давление пара над жидким муравьиным альдегидом при 25°C составляет 1500 мм рт. ст.

К разделу 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 = $1 \cdot 10^5 \text{ Па}$ и температурах 500 и 1000 К. Молекулярные постоянные N_2 $\omega = 2359,434 \text{ см}^{-1}$, $B = 1,9983 \text{ см}^{-1}$, $\nu = 2$, $g_0 = 1$. Возбужденными электронными состояниями пренебречь

К разделу 6

1. В реакции 2-го порядка $A + B \rightarrow D$ начальные концентрации веществ A и B равны, соответственно, 2,0 моль/л и 3,0 моль/л. Скорость реакции равна 1,2 $\cdot 10^{-3}$ моль/(л \cdot с) при $[A] = 1,5$ моль/л. Рассчитайте константу скорости и скорость реакции при $[B] = 1,5$ моль/л.
2. Скорость окисления бутанола-1 хлорноватистой кислотой не зависит от концентрации спирта и пропорциональна $[\text{HClO}]^2$. За какое время реакция окисления при 298 К пройдет на 90%, если исходный раствор содержал 0,1 моль/л HClO и 1 моль/л спирта? Константа скорости реакции равна $k = 24 \text{ л}/(\text{моль} \cdot \text{мин})$.
3. В необратимой реакции 1-го порядка за 20 мин при 125 оС степень превращения исходного вещества составила 60%, а при 145 оС такая же степень превращения была достигнута за 5,5 мин. Найдите константы скорости и энергию активации данной реакции
4. Скорость автокаталитической реакции $A \rightarrow P$ описывается кинетическим уравнением $w = k \cdot [A] \cdot [P]$. Решите это кинетическое уравнение и найдите зависимость степени превращения от времени. Начальные концентрации: $[A]_0 = a$, $[P]_0 = p$.

К разделу 7

1. Диаметр метильного радикала равен 3,8 А. Какова максимальная константа скорости (в л/(моль \cdot с)) реакции рекомбинации метильных радикалов при 27 оС?
2. Используя теорию активированного комплекса, вычислите истинную энергию активации E_0 для реакции $\text{C}_2\text{H}_3 + \text{C}_2\text{H}_6 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{C}_2\text{H}_5$.
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?

4. В газовой фазе вещество А мономолекулярно превращается в вещество В. Константы скорости реакции при температурах 120 и 140 оС равны, соответственно, $1.806 \cdot 10^{-4}$ и $9.14 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$. Рассчитайте среднюю энтропию и теплоту активации в этом температурном интервале

Вопросы для подготовки к экзамену:

1. Термодинамический метод, термодинамические переменные и их классификации. Постулат равновесия. Функции состояния и функции пути. Теплота и работа различных процессов. Абсолютная температура.
2. Уравнения состояния системы. Уравнения состояния идеального и реальных газов. Уравнение Ван-дер-Ваальса и его анализ. Вириальные уравнения. Теорема о соответственных состояниях и ее трактовка в классической и статистической термодинамике. Уравнение состояния для жидкостей и твердых тел.
3. Первый закон термодинамики. Его формулировка и следствия. Внутренняя энергия и ее свойства. Энтальпия. Вычисление внутренней энергии и энтальпии из опытных данных.
4. Закон Гесса. Различные способы расчета теплот реакций. Стандартные теплоты химических реакций. Энтальпии образования химических соединений.
5. Теплоемкости. Их определение в классической и статистической термодинамике. Использование теплоемкостей для расчетов энергии, энтальпии и энтропии.
6. Зависимость теплот химических реакций от температуры. Уравнение Кирхгофа.
7. Второй закон термодинамики. Его формулировки. Энтропия, как функция состояния. Изменение энтропии при необратимых процессах. Неравенство Клаузиуса, «потерянная работа» и «некомпенсированная теплота».
8. Энтропия, ее вычисление и свойства. Тепловая теорема Нернста. Постулат Планка и его ограничения. Формула Больцмана.
9. Математический аппарат термодинамики. Фундаментальное уравнение Гиббса. Внутренняя энергия, как однородная функция объема, энтропии и числа молей. Уравнение Гиббса-Дюгема. Термодинамические потенциалы. Соотношения Максвелла и их использование при расчетах энергии, энтальпии и энтропии. Уравнение Гиббса-Гельмгольца.
10. Характеристические функции (т/д потенциалы) и их свойства. Различные формы записи условий термодинамического равновесия. Критерий самопроизвольного протекания процесса.
11. Химический потенциал. Его различные определения. Способы вычисления изменений химического потенциала в термодинамике и статистической термодинамике. Электрохимический потенциал
12. Химический потенциал и стандартный химический потенциал идеального газа. Химический потенциал реальных газов и его расчеты по методу летучести (фугитивности) Льюиса.
13. Химические равновесия в закрытых системах. Условие химического равновесия. Химические равновесия в газовой фазе. Различные формы записи констант равновесия и связь между ними. Закон действующих масс и его термодинамический вывод.

14. Условия фазового равновесия. Правило фаз Гиббса.
15. Фазовые переходы первого рода. Уравнение Клапейрона–Клаузиуса. Его применение к процессам плавления, сублимации и испарения в однокомпонентных системах (на примере H_2O). Диаграммы состояния серы и фосфора. Энантиотропия и монотропия.
16. Фазовые переходы второго рода. Уравнения Эренфеста.
17. Условия мембранного равновесия. Осмос. Уравнение Вант-Гоффа.
18. Идеальные растворы. Закон Рауля и закон Генри. Их определение в классической и статистической термодинамике. Энтропия смешения, и ее расчет для решеточной модели раствора. Стандартный химический потенциал компонента в жидком и твердом растворах. Стандартные состояния «чистое вещество» и «бесконечно-разбавленный раствор».
19. Неидеальные растворы. Метод активностей Льюиса. Криоскопические явления в идеальных и неидеальных растворах. Вычисление коэффициентов активности из экспериментальных данных по давлению пара компонентов раствора, криоскопическим данным. Химические потенциалы в растворах сильных электролитов. Средне-ионная активность и коэффициент активности
20. Функции смешения, избыточные функции и термодинамическая классификация растворов.
21. Уравнение Гиббса–Дюгема. Мольные (интегральные) и парциальные мольные величины. Их определение для бинарных растворов. Взаимосвязь парциальных мольных объемов для систем $H_2O - C_2H_5OH$.
22. Равновесие жидкость – пар в двухкомпонентных системах. Различные виды диаграмм состояния. Азеотропные смеси. Законы Гиббса–Коновалова.
23. Правило фаз Гиббса и его применение к различным диаграммам состояния бинарных систем. Расслаивание в двухкомпонентных системах.
24. Изотерма химической реакции. Стандартная энергия Гиббса химической реакции.
25. Третий закон термодинамики. Расчеты констант равновесия с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций и приведенной энергии Гиббса.
26. Зависимость констант равновесия от температуры. Изобара Вант-Гоффа и ее интегрирование.
27. Расчет равновесного состава и выходов продуктов при протекании нескольких химических реакций (на примере реакции образования NH_3 , гидрирования этилена).
28. Химические равновесия в растворах. Константы равновесия при различном выборе стандартных состояний для участников реакции. Химическое равновесие в разбавленном растворе. Влияние инертного растворителя.
29. Гетерогенные химические равновесия с образованием и без образования твердых растворов.
30. Условия химического и фазовых равновесий с участием заряженных компонентов. Условия равновесия на границе электрода с раствором и в электрохимической цепи. Гальванический элемент. Уравнение Нернста. Стандартные электродные потенциалы. Расчет ЭДС с помощью таблиц стандартных потенциалов. Определение методом ЭДС энергии Гиббса, энтальпии и энтропии химической реакции. Определение методом ЭДС коэффициентов активности, pH раствора
31. Адсорбция и ее определения. Изотерма, изобара и изостера адсорбции. Изотерма Лэнгмюра, ее анализ и области применимости.
32. Полимолекулярная адсорбция. Уравнение БЭТ и его применение для определения поверхности твердых тел.

33. Основные постулаты статистической термодинамики. Метод ячеек Больцмана. Фазовые « μ » и « Γ » пространства. Микроканонический и канонический ансамбли Гиббса.
 34. Энтропия в статистической термодинамике. (Формула Больцмана, микроканонический ансамбль, канонический ансамбль).
 35. Статистические суммы по состояниям и расчет с их помощью внутренней энергии, энтропии, энергии Гельмгольца и энергии Гиббса.
 36. Поступательная сумма по состояниям и ее вклады в термодинамические функции. Формула Закура–Тетроде для энтропии идеального газа.
 37. Распределение молекул по скоростям и энергиям в идеальном газе. Средние скорости, средние энергии.
 38. Теорема равнораспределения и область ее применимости. Применение к теории теплоемкостей.
 39. Колебательная сумма по состояниям. Теории теплоемкости Эйнштейна и Дебая (без вывода).
 40. Вращательные суммы по состояниям. Вклады вращательного движения в термодинамические функции для модели жесткого ротатора. Электронная и ядерная суммы по состояниям. Орто- и пара- водород. Электронная составляющая теплоемкости атомарного хлора.
 41. Статистический расчет константы равновесия в смеси многоатомных идеальных газов. Сопоставление статистического и классического термодинамического расчетов.
 42. Статистическая теория реальных газов. Метод Урселла–Майер (использование первых двух слагаемых ряда). Статистическое рассмотрение вириального уравнения.
 43. Метод ячеек в статистической термодинамике жидкостей. Расчет энтропии смешения в рамках решеточной модели раствора.
 44. Основные постулаты термодинамики необратимых процессов. Производство энтропии. Линейные законы. Феноменологические коэффициенты (теплопроводность, химическая реакция). Связь между средством и скоростью химической реакции. Теорема Пригожина. Перекрестные явления и их описание в линейной термодинамике необратимых процессов. Соотношения Онзагера. Принцип Кюри.
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. Скорость реакции и химическое средство.
 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. Положение второго предела воспламенения для реакции $H_2 + O_2$.
15. Скорости реакций в открытых системах. Уравнение для стационарной скорости реакции в реакторах идеального смешения и идеального вытеснения. Скорости реакции первого порядка в реакторе идеального смешения (необратимая и обратимая реакция). Определение констант скорости по стационарным концентрациям исходного вещества и продукта реакции.
16. Использование адиабатического приближения для описания химической реакции частиц: поверхность потенциальной энергии, путь реакции, энергия активации.
17. Теория активированного комплекса и статистический вывод основного уравнения. Взаимосвязь опытной и истинной энергий активации.
18. Термодинамический аспект теории активированного комплекса. Реакции в растворах. Уравнение Бренстеда-Бьеррума.
19. Теория активных соударений. Уравнение Траутца—Льюиса.
20. Применение теории активных соударений к бимолекулярным реакциям.
21. Использование теории активированного комплекса для оценки стерического множителя теории активных соударений.
22. Интерпретация предэкспоненциального множителя в статистическом и термодинамическом аспектах теории активированного комплекса. Энтропия активации.
23. Мономолекулярные реакции и их описание в теории активированного комплекса (в статистическом и термодинамическом аспектах).
24. Кинетические особенности мономолекулярных реакций. Применение теории соударений. Схема Линдемана. Поправка Хиншельвуда.
25. Реакции в растворах. Уравнение Смолуховского и его применение в кинетике бимолекулярных реакций.
26. Кинетические характеристики элементарных процессов фотохимии. Принцип Франка-Кондона. Физические и химические свойства молекул в электронно-возбужденном состоянии. Эксимеры и эксиплексы.

27. Законы фотохимии (законы Буге-Ламберта-Бера, Вант-Гоффа, Эйнштейна). Квантовый выход. «Клеточный эффект». Кинетическая схема Штерна-Фольмера. Многофотонное поглощение.
28. 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.
29. Механизмы кислотно-основных каталитических реакций и их классификация. Цеолиты и их свойства. Твердые кислоты как катализаторы.
30. Кинетика реакций специфического кислотного катализа. Механизмы и лимитирующие стадии. Функция кислотности Гаммета. Суперкислоты.
31. Кинетика реакций общего кислотного и общего основного катализа. Механизмы реакций и лимитирующие стадии процесса. Уравнение Бренстеда и его анализ.
32. Корреляционные соотношения между кинетическими и термодинамическими параметрами в катализе. Уравнения Брэнстнеда.
33. Уравнение Семенова-Поляни для радикальных реакций.
34. Кинетика Лэнгмюра-Хиншельвуда для реакции на однородной поверхности катализатора. Особенности кинетики и записи константы скорости в адсорбционном слое (общий случай).
35. Кинетика гетерогенно-каталитических реакций с диффузионными ограничениями. Внешняя диффузия.
36. Кинетика каталитических реакций во внутренней диффузионной области. Решение кинетической задачи Зельдовича-Тиле для необратимой реакции первого порядка.

Курсовая работа (примеры тем)

1. Построение фазовых диаграмм металлоорганических соединений 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. Влияние на температуру и теплоту денатурации коллагена в хрящевой ткани агрегации протеогликанов.
7. 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 непринципиального характера)	Успешное и систематическое умение
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 оформлению и представлению результатов работ в области аналитической химии</p> <p>Знать: требования к представлению материала в виде презентации научного доклада</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>мероприятия текущего контроля успеваемости,</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>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>устный опрос на экзамене, защита курсовой работы</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>Владеть навыками работы на современных физических приборах для решения задач в области физической химии</p> <p>Владеть: навыками оформления протоколов результатов изучения физико-химических свойств веществ и материалов</p> <p>Владеть: простейшими расчетными методами решения физико-химических задач</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, защита курсовой работы, устный опрос на экзамене</p>

Владеть: навыками работы с профессиональными базами данных химического профиля Владеть: навыками подготовки презентаций с результатами своей научной работы на русском языке Владеть: навыками оформления протоколов физико-химических опытов	
---	--