

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Косенок Сергей Михайлович
Должность: ректор
Дата подписания: 13.06.2024 14:35:10
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
16 июня 2022 г., протокол УМС №6

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
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, Цыро Лариса Васильевна

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 04.04.2022 г. № 24

Зав. кафедрой *канд. хим. наук Крайник В.В.*

Председатель УМС (УС) института естественных и технических наук

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

Протокол от 15 апреля 2022 г. № 5

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ					
1.1	Целью дисциплины является глубокая специализированная подготовка в выбранном направлении, владения навыками современных методов исследования; формирование у обучающихся умение находить и анализировать современную научную информацию в области химии; формирование и совершенствование навыков самостоятельной научно-исследовательской работы. Дисциплина направлена на подготовку к сдаче кандидатского экзамена по научной специальности 1.4.4. Физическая химия.				
2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП					
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»;				
2.1.2	результаты научно-исследовательской деятельности аспирантов, направленной на подготовку диссертации к защите;				
2.1.3	результаты научной (научно-исследовательской) деятельности аспирантов, направленной на подготовку публикаций.				
2.2.	Последующими к изучению дисциплины являются знания, умения и навыки, используемые				
2.2.1	при освоении специальной дисциплины, направленной на подготовку к сдаче кандидатского экзамена;				
2.2.2	в научной (научно-исследовательской) деятельности аспирантов, направленной на подготовку диссертации к защите;				
2.2.3	в научной (научно-исследовательской) деятельности аспирантов, направленной на подготовку публикаций;				
2.2.4	при прохождении научно-исследовательской практики;				
2.2.5	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
	Раздел 1. Основные понятия и законы термодинамики; элементы статистической термодинамики; элементы термодинамики необратимых процессов; адсорбция и поверхностные явления				
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 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Л2.7 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	
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 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Л2.7 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	

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 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Л2.7 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	
	Раздел 2. Строение вещества. Основы классической теории химического строения				
2.1	Строение вещества. Основы классической теории химического строения /Лек/	4	2	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Л2.7 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	
2.2	Строение вещества. Основы классической теории химического строения /Пр/	4	6	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Л2.7 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	
2.3	Строение вещества. Основы классической теории химического строения /Ср/	4	10	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Л2.7 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	
	Раздел 3. Электрические и магнитные свойства; межмолекулярные взаимодействия; строение конденсированных фаз; химия поверхности твердого тела. Растворы, фазовые равновесия; адсорбция и поверхностные явления				
3.1	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 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Л2.7 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	
3.2	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 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Л2.7 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	
3.3	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 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Л2.7 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	
	Раздел 4. Кинетика химических реакций; кинетика гомогенных каталитических и ферментативных реакций; реакции в потоке; макрокинетика; теория активных столкновений; фотохимические и радиационно-химические реакции				
4.1	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 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Л2.7 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	
4.2	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 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Л2.7 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	

4.3	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 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Л2.7 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	
	Раздел 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				
5.1	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 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Л2.7 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	
5.2	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 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Л2.7 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	
5.3	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 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Л2.7 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	
	Раздел 6. Электрохимические процессы; двойной электрический слой; электрокапиллярные явления; скорость и стадии электродного процесса; поляризация электродов; полярография; ток обмена и перенапряжение				
6.1	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 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Л2.7 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	
6.2	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 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Л2.7 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	

6.3	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 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Л2.7 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	
6.4	/Экзамен/	4	36	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Л2.6 Л2.7 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6 Э7	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: $\Delta_f H^\circ(C_6H_6) = -17,9$ 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: $C_p(C_6H_6) = 3,422 + 0,0178 \cdot T$; $C_p(O_2) = 6,095 + 0,0033 \cdot T$; $C_p(CO_2) = 6,396 + 0,0102 \cdot T$; $C_p(H_2O(r)) = 7,188 + 0,0024 \cdot T$.
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 $T_3 = 0,175$ К, а криоскопическая постоянная для воды $K_c = 1,86$.
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 $C_nH_{2n-3}COOH$ 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 $T_{кип}(CCl_4) = 76,76^\circ\text{C}$, 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 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: $2 N_2O_5 \rightarrow 2 N_2O_4 + O_2$. Константа скорости этой реакции при 273 К равна $7,9 \cdot 10^{-7} \text{ с}^{-1}$. 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 $CH_4(g) \rightarrow C(t) + 2 H_2(g)$ 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.

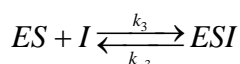
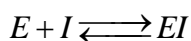
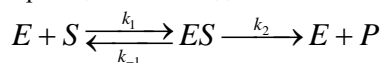
Тема 5. Катализ; гомогенный катализ; кислотно-основной катализ; нуклеофильный и электрофильный катализ; катализ металлокомплексными соединениями; гетерогенный катализ; современные теории функционирования гетерогенных катализаторов; основные промышленные каталитические процессы

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:

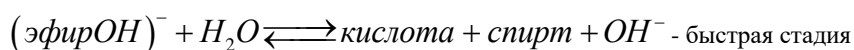
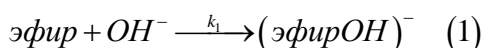


Отличительной чертой этого типа ингибирования является неравенство констант диссоциации комплексов EI и ESI между собой $K_I \neq K_{EI}$. $K_I = [E][I]/[EI]$; $K_{EI} = k_{-3}/k_3 = [ES][I]/[ESI]$.

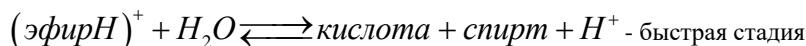
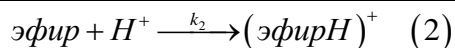
1. Выведите уравнение для начальной скорости ферментативной реакции при смешанном ингибировании, учитывая следующие соотношения между начальными концентрациями субстрата, ингибитора и фермента: $[S]_0 \gg [E]_0$, $[I]_0 \gg [E]_0$.
2. Каким образом можно определить параметры этого кинетического уравнения?

1. 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 полимолекулярная адсорбция.
17. Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Генри. Константа адсорбционного равновесия. Уравнение Лэнгмюра. Адсорбция из растворов. Уравнение Брунауэра - Эмета - Теллера (БЭТ) для полимолекулярной 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.

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

6.1. Рекомендуемая литература

6.1.1. Основная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Количество
ЛП.1	Акулова Ю. П., Изотова С. Г., Проскурина О.	Физическая химия. Теория и задачи	Санкт-Петербург: Лань, 2022	1
ЛП.2	Дерябин В. А., Фарафонтова Е. П., Кулешов Е. А.	Физическая химия дисперсных систем	Москва: Юрайт, 2022, https://urait.ru/bcode/493408	1
ЛП.3	Абраменков А. В., Лунин В. В., Агеев Е. П.	Практикум по физической химии: Кинетика и катализ. Электрохимия	Москва: Издательский центр "Академия", 2012	10
ЛП.4	Аржаков М.С.	Высокомолекулярные соединения : Учебник и практикум для вузов / под ред. Зезина А.Б.	Москва : Юрайт, 2022. 340 с. (Высшее образование) . URL: https://urait.ru/bcode/489251 . ISBN 978-5-534-01322-1 : 1059.00.	1
ЛП.5	Свиридов В. В.	Физическая химия	Москва: Лань", 2016, http://e.lanbook.com/books/element.php?p11_id=87726	1

Л1.6	Луков В.В., Морозов А. Н.	Физическая химия: Учебник	Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета (ЮФУ), 2018, http://new.znanium.com/go.php?id=1039768	1
6.1.2. Дополнительная литература				
	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Количество
Л2.1	Пурмаль А. П.	А, Б, В... химической кинетики: Учебное пособие	М.: ИКЦ "Академкнига", 2004	12
Л2.2	Эткинс П., Паула Дж. де	Физическая химия: в 3 ч.	М.: Мир, 2007	1
Л2.3	Байрамов В. М.	Основы электрохимии: учебное пособие для студентов высших учебных заведений	М.: Academia, 2005	5
Л2.4	Байрамов В. М.	Химическая кинетика и катализ: Примеры и задачи с решениями	М.: Academia, 2003	29
Л2.5	Зимон А. Д.	Коллоидная химия: Учебник для студентов высших учебных заведений	М.: Агар, 2003	24
Л2.6	Степановских Е.И., Виноградова Т.В., Брусницына Л.А., Алексеева Т.А., Маскаева Т.А.	Физическая химия. Теория и практика выполнения расчетных работ. Часть 1. Экстенсивные свойства гомогенных систем: учебное пособие	Екатеринбург: Уральский федеральный университет, 2016, http://www.iprbookshop.ru/66611.html	1
	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Количество
Л2.7	Степановских Е.И., Виноградова Т. В., Брусницына Л. А., Алексеева Т. А., Маскаева Л. Н., Марков В. Ф.	Физическая химия. Теория и практика выполнения расчетных работ. Часть 2. Химическое и фазовое равновесие	Екатеринбург: Уральский федеральный университет, ЭБС АСВ, 2016, http://www.iprbookshop.ru/66612.html	1
6.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет"				
Э1	Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU, http://www.elibrary.ru			
Э2	Российская национальная библиотека, http://primo.nlr.ru/primo_library/libweb/action/search.do?menuitem=2&catalog=true			
Э3	Электронные книги Springer Nature, https://link.springer.com/			
Э4	Портал фундаментального химического образования России, http://www.chem.msu.ru/			
Э5	Химия во всех проявлениях, http://www.chemport.ru/			
Э6	Электронная библиотека диссертаций, http://diss.rsl.ru/			
Э7	Учебники, практикумы и справочники по химии и токсикологической химии, http://chemistry-chemists.com/Uchebniki.html			
6.3.1 Перечень программного обеспечения				
6.3.1.1	Операционная система Microsoft Windows, пакет прикладных программ Microsoft Office			
6.3.2 Перечень информационных справочных систем				
6.3.2.1.	Электронно-библиотечные системы:			
	Электронно-библиотечная система Znanium. (Базовая коллекция). www.znanium.com			
	Электронно-библиотечная система издательства «Лань». http://e.lanbook.com/			
	Электронно-библиотечная система IPRbooks (Базовая коллекция). http://iprbookshop.ru			
	Электронная библиотечная система «Юрайт» https://biblio-online.ru/			
6.3.2.2.	Современные профессиональные базы данных:			
	Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU (http://www.elibrary.ru)			
	Евразийская патентная информационная система (ЕАПАТИС) (http://www.eapatiss.com)			
	Национальная электронная библиотека (НЭБ) (нэб.рф)			
6.3.2.3.	Международные реферативные базы данных научных изданий:			
	Web of Science Core Collection http://webofknowledge.com (WoS)			
	Архив научных журналов (NEICON). http://archive.neicon.ru			
	Электронные книги Springer Nature https://link.springer.com/			
	Springer Journals – полнотекстовая коллекция электронных журналов издательства. https://rgub.ru/resource/ebs/			
6.3.2.4.	Информационные справочные системы:			

Гарант – информационно-правовой портал (<http://www.garant.ru>)

КонсультантПлюс – надежная правовая поддержка (<http://www.consultant.ru>)

7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

7.1 Учебная аудитория № 310 для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации оснащена специализированной учебной мебелью, меловой доской, комплектом переносного мультимедийного оборудования - компьютер, проектор, проекционный экран, компьютер 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

8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

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 являются одним из основных методов обучения по дисциплинам, направленным на подготовку к кандидатскому экзамену, которые должны решать 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 перерыва 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 нестандартных 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.

Задачами самостоятельной работы являются:

– систематизация и закрепление полученных теоретических знаний и практических умений;

– углубление и расширение теоретических знаний;

– формирование умений использовать 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 занятиях для эффективной подготовки к итоговому 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:

- подготовка к семинарским занятиям,
- изучение дополнительной литературы и подготовка ответов на вопросы для самостоятельного изучения.

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 освоения предыдущих компонентов программы аспирантуры. 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 медицинскими терминами и понятиями, для чего используйте словари медицинских терминов, энциклопедические словари, словари иностранных слов и др.

Затем 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 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

Проведение промежуточной аттестации по дисциплине

Формой промежуточной аттестации освоения дисциплины является экзамен. Результаты промежуточного контроля знаний оцениваются по 4-балльной 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 научной специальности 1.4.4. Физическая химия состоит в проверке приобретенных аспирантами, касающихся важнейших проблем развития химической науки. Экзамен также ставит целью установить глубину профессиональных знаний соискателя ученой степени кандидата химических наук, уровень подготовленности к самостоятельной научно-исследовательской работе.

К экзамену допускаются аспиранты и соискатели, не имеющие задолженности по дисциплинам учебного плана на момент сдачи экзамена.

Аспирант, не сдавший кандидатский экзамен по специальности, не считается завершившим обучение в аспирантуре.

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