

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по научной деятельности КФУ
Проф. Д.К. Нургалиев



20 15 г.

Программа дисциплины

Б1.В.ОД.7 Физическая химия

Направление подготовки: 04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) подготовки: 02.00.04 Физическая химия

Квалификация выпускника: «Исследователь. Преподаватель-исследователь»

Форма обучения: заочная

Язык обучения: русский

Казань
2015

1. КРАТКАЯ АННОТАЦИЯ

Данный курс рассчитан на аспирантов, занимающихся исследовательской работой в области физической химии. Дисциплина знакомит с системой основных научных знаний в области изучения закономерностей протекания химических реакций и соответствующих им физических явлений. Дисциплина посвящена изучению законов протекания химических процессов для предсказания хода процессов во времени и предела до которого в данных условиях процессы могут быть реализованы.

Целями освоения дисциплины "Физическая химия" являются раскрытие смысла основных законов физической химии, умение видеть области применения этих законов, четкое понимание их принципиальных возможностей при решении конкретных задач.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ) В СТРУКТУРЕ ОПОП

Данный курс относится к блоку обязательных дисциплин Б1.В.ОД вариативной части основной профессиональной образовательной программы высшего образования по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки, направленность 02.00.04 Физическая химия. Осваивается на 3 курсе (6 семестр).

Для успешного освоения данной дисциплины нужно освоение в качестве предшествующих следующих дисциплин: Физическая супрамолекулярная химия, ЭВМ в химических расчетах, а также специальных дисциплин по профилю подготовки физическая химия, изучение которых проводилось на предшествующем этапе обучения (бакалавриат, магистратура, специалитет).

3. ПЕРЕЧЕНЬ ПЛАНИРУЕМЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

Обучающийся, завершивший изучение дисциплины, должен

знать: основы современных теорий в области физической химии и способы их применения для решения теоретических и практических задач в любых областях химии;

уметь: самостоятельно ставить задачу физико-химического исследования в химических системах, выбирать оптимальные пути и методы решения подобных задач как экспериментальных, так и теоретических; обсуждать результаты физико-химических исследований, ориентироваться в современной литературе по физической химии, вести научную дискуссию по вопросам физической химии;

владеть: базовыми знаниями в области физической химии;

демонстрировать способность и готовность: проводить физико-химические расчеты с помощью известных формул и уравнений, в том числе с помощью компьютерных программ, проводить стандартные физико-химические измерения, пользоваться справочной литературой по физической химии. Применять полученные знания в профессиональной деятельности.

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
УК-1	способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях
УК-2	способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки
ОПК-1	способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с

	использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий
ОПК-3	готовностью к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

4.1. Распределение трудоёмкости дисциплины (в часах) по видам нагрузки обучающегося и по разделам дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 часов.

Форма промежуточной аттестации по дисциплине: кандидатский экзамен.

№	Раздел дисциплины	Семестр	Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	Самостоятельная работа
1	Химическая термодинамика	6	2	—	—	32
2	Химическое равновесие	6	1	—	—	17
3	Растворы. Фазовые равновесия	6	—	—	—	9
4	Кинетика химических реакций	6	2	—	—	8
5	Основные теории химической кинетики	6	—	—	—	9
6	Катализ	6	—	—	—	8
7	Электрохимические процессы	6	2	—	—	9
8	Электрохимические реакции	6	—	—	—	9
	Итого		7			101

4.2. Содержание дисциплины

Тема 1. Химическая термодинамика.

Основные понятия термодинамики. Изолированные и открытые системы, равновесные и неравновесные системы, термодинамические переменные, температура, интенсивные и экстенсивные переменные. Уравнения состояния.

Первый закон термодинамики. Теплота, работа, внутренняя энергия, энтальпия, теплоемкость. Закон Гесса. Стандартные состояния и стандартные теплоты химических реакций. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Формула Кирхгофа. Таблицы стандартных термодинамических величин и их использование в термодинамических расчетах.

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

Фундаментальные уравнения Гиббса. Характеристические функции. Энергия Гиббса, энергия Гельмгольца. Уравнения Максвелла. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов. Уравнение Гиббса - Гельмгольца. Работа и теплота химического процесса. Химические потенциалы.

Тема 2. Химическое равновесие.

Закон действующих масс. Различные виды констант равновесия и связь между ними. Влияние температуры на константу равновесия. Изотерма Вант-Гоффа. Уравнения

изобары и изохоры химической реакции. Расчеты констант равновесия химических реакций с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций. Приведенная энергия Гиббса и ее использование для расчетов химических равновесий. Равновесие в поле внешних сил. Полные потенциалы.

Тема 3. Растворы. Фазовые равновесия.

Понятия компонента, фазы, степени свободы. Правило фаз Гиббса. Однокомпонентные системы. Диаграммы состояния воды, серы, фосфора и углерода. Фазовые переходы первого рода. Уравнение Клапейрона - Клаузиуса. Двухкомпонентные системы. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем. Равновесие жидкость - пар в двухкомпонентных системах. Законы Гиббса - Коновалова. Коллигативные свойства растворов. Закон Рауля. Азеотропные смеси.

Тема 4. Кинетика химических реакций.

Основные понятия химической кинетики. 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. Методы определения порядков реакции. Реакции переменного порядка.

Кинетика сложных реакций. Принцип независимости элементарных стадий. Кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций. Квазистационарное приближение. Метод Боденштейна - Темкина. Кинетика гомогенных каталитических и ферментативных реакций. Уравнение Михаэлиса - Ментен.

Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса. Энергия активации и способы ее определения. Элементарные акты химических реакций и физический смысл энергии активации.

Тема 5. Основные теории химической кинетики.

Теория активных столкновений. Сечение химических реакций. Формула Траутца - Льюиса. Расчет предэкспоненциального множителя по молекулярным постоянным. Стерический фактор. Теория переходного состояния (активированного комплекса). Поверхность потенциальной энергии. Путь и координата реакции. Статистический расчет константы скорости. Энергия и энтропия активации. Использование молекулярных постоянных при расчете константы скорости.

Тема 6. Катализ.

Классификация каталитических реакций и катализаторов. Теория промежуточных соединений в катализе, принцип энергетического соответствия.

Гомогенный катализ. Кислотно-основной катализ. Кинетика и механизм реакций специфического кислотного катализа. Функции кислотности Гаммета. Кинетика и механизм реакций общего кислотного катализа. Уравнение Бренстеда. Корреляционные уравнения для энергий активации и теплот реакций. Специфический и общий основной катализ. Нуклеофильный и электрофильный катализ.

Катализ металлокомплексными соединениями. Гомогенные реакции гидрирования, их кинетика и механизмы. Ферментативный катализ. Адсорбционные и каталитические центры ферментов. Активность и субстратная селективность ферментов. Коферменты. Механизмы ферментативного катализа.

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.

Тема 7. Электрохимические процессы.

Растворы электролитов. Ион-дипольное взаимодействие как основной процесс, определяющий устойчивость растворов электролитов. Коэффициенты активности в растворах электролитов. Средняя активность и средний коэффициент активности, их связь

с активностью отдельных ионов. Основные положения теории Дебая - Хюккеля. Потенциал ионной атмосферы. Условия электрохимического равновесия на границе раздела фаз и в электрохимической цепи. Термодинамика гальванического элемента. Электродвижущая сила, ее выражение через энергию Гиббса реакции в элементе. Уравнения Нернста и Гиббса - Гельмгольца для равновесной электрохимической цепи. Понятие электродного потенциала.

Тема 8. Электрохимические реакции.

Двойной электрический слой. Модельные представления о структуре двойного электрического слоя. Теория Гуи - Чапмена - Грэма. Электрокапиллярные явления, уравнение Липпмана. Скорость и стадии электродного процесса. Поляризация электродов. Ток обмена и перенапряжение. Зависимость скорости стадии разряда от строения двойного слоя.

5. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

На лекциях: компьютерные презентации лекций.

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

Самостоятельная работа аспирантов включает следующие виды работ:

- проработка конспекта лекций;
- работа с литературными источниками.

7. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

7.1. Регламент дисциплины

Текущий контроль знаний аспирантов осуществляется в течение семестра на лекционных занятиях.

Итоговый формой контроля по курсу является кандидатский экзамен. Экзамен проводится в устной форме. Билет состоит из трех вопросов:

- два вопроса из утвержденного списка;
- один вопрос из индивидуальной программы аспиранта, которая составляется аспирантом до экзамена и утверждается на Ученом совете Химического института.

Оценка за экзамен выставляется по пятибалльной шкале.

«отлично»	Аспирант: показывает глубокие знания по фундаментальным основам физической химии; логически правильно излагает материал, понимая законы физической химии; полностью раскрывает содержание темы.
«хорошо»	Ответы аспиранта в целом успешные, но содержат отдельные пробелы (неточная формулировка законов физической химии, незначительные ошибки в доказательствах и изложении содержания темы).
«удовлетворительно»	В целом ответ успешный, но отсутствует глубокое понимание содержания темы. Аспирант не умеет выделить основные положения рассматриваемого вопроса.
«неудовлетворительно»	В целом курс не освоен.

7.2. Оценочные средства текущего контроля

Вопросы для проверки самостоятельной работы:

1. Основные понятия: термодинамическая система (изолированная, открытая, закрытая),

- термодинамические параметры (интенсивные, экстенсивные, функция состояния).
2. I закон термодинамики: формулировки, математическая запись (внутренняя энергия, теплота, работа).
 3. I закон термодинамики для изолированной системы.
 4. I закон термодинамики для изохорных условий.
 5. I закон термодинамики для изобарных условий (знтальпия).
 6. Закон Гесса (тепловой эффект химической реакции).
 7. Молярная теплоемкость, зависимость от T .
 8. Закон Кирхгофа в дифференциальной форме и интегральной форме (разные степени приближения при интегрировании).
 9. II закон термодинамики, энтропия.
 10. Объединенная запись I и II закона термодинамики.
 11. ΔG° , связь с $A_{\text{полезн.}}$.
 12. ΔF° , связь с $A_{\text{полезн.}}$.
 13. Правило фаз Гиббса (степень свободы, фаза, компонент).
 14. Диаграммы состояния.
 15. Основные понятия химической кинетики.
 16. Константа скорости реакции 1 порядка.
 17. Константа скорости реакции 2 порядка.
 18. Методы определения порядков реакции.
 19. Кинетика сложных реакций.
 20. Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса.
 21. Гипотезы, лежащие в основе теории активных столкновений.
 22. Стерический фактор P , физический смысл в теории активных столкновений.
 23. Основные достоинства и недостатки теории активных столкновений
 24. Проблемы мономолекулярных реакций (теория активных столкновений).
 25. Постулаты, на которых основывается теория переходного состояния.
 26. Термодинамический аспект теории переходного состояния, связь $E_{\text{эксн}}$ и $\Delta H^\ddagger$.
 27. Использование теории переходного состояния для оценки стерического множителя теории активных столкновений
 28. Константа скорости бимолекулярной реакции с точки зрения ТПС.
 29. Кислотно-основной катализ: специфический и общий.
 30. Металлокомплексный катализ.
 31. Ферментативный катализ.
 32. Гетерогенный катализ.

7.3. Вопросы к экзамену

1. Основы химической термодинамики.
2. Первый закон термодинамики. Термохимия.
3. Второй закон термодинамики.
4. Характеристические функции.
5. Фазовые равновесия. Правило фаз Гиббса.
6. Коллигативные свойства растворов.
7. Закон действия масс. Химическое равновесие.
8. Влияние температуры на константу равновесия.
9. Вывод кинетических уравнений для необратимых реакций.
10. Методы определения порядков реакций.
11. Кинетика сложных реакций.
12. Метод стационарных концентраций Боденштейна.
13. Теория активных столкновений.
14. Теория переходного состояния.

15. Гомогенный катализ.
16. Ферментативный катализ.
17. Электропроводность растворов электролитов.
18. Равновесные свойства межфазных заряженных частиц.
19. Кинетика электродных процессов.

7.4. Таблица соответствия компетенций, критериев оценки их освоения и оценочных средств

Индекс компетенции	Расшифровка компетенции	Показатель формирования компетенции для данной дисциплины	Оценочное средство
УК-1	способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	умеет дать критическую оценку современным научным достижениям в области физической химии	Устный опрос по вопросам № 1-4
УК-2	способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки	способен использовать полученные знания для планирования и проведения научных исследований	Устный опрос по вопросам № 5-8
ОПК-1	способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	способен правильно выбрать метод или группу методов для решения той или иной химической задачи	Устный опрос по вопросам № 9-13
ОПК-3	готовностью к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования	владеет изученным материалом; умеет грамотно и в доступной форме донести материал до слушателей	Устный опрос по вопросам № 14-19

8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПРИ ОСВОЕНИИ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Работа на лекционных занятиях предполагает активное участие в дискуссиях. Для подготовки к занятиям рекомендуется выделять в материале проблемные вопросы, затрагиваемые преподавателем в лекции, и группировать информацию вокруг них. Желательно выделять в используемой литературе постановки вопросов, на которые разными авторами могут быть даны различные ответы. На основании постановки таких вопросов следует собирать аргументы в пользу различных вариантов решения поставленных проблем.

При подготовке к устным опросам следует использовать материалы лекции, а также источников, которые указаны в списке литературы.

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

9.1. Основная литература

1. Методические разработки к общему практикуму по электрохимии /Лисицын Ю.А. - Казань. КФУ 2012. – 75 с.
2. Соломонов, Б.Н. Методические разработки к практикуму по физической химии: для студентов химического факультета: [учебно-методическое пособие / Б. Н. Соломонов, В. Б. Новиков, М. А. Варфоломеев]; Казан. (Приволж.) федер. ун-т, Каф. физ. химии.—Казань: [Казанский университет], 2012.—; 21.Ч. 2: Химическая кинетика.— 2012.—36 с.
3. Соломонов, Борис Николаевич (д-р хим. наук ; 1947-) . Методические разработки к практикуму по физической химии [Текст: электронный ресурс] : для студентов химического факультета : [учебно-методическое пособие / Б. Н. Соломонов, В. Б. Новиков, М. А. Варфоломеев] ; Казан. (Приволж.) федер. ун-т, Каф. физ. химии .— (Казань : Казанский федеральный университет, 2015) .Ч. 2: Химическая кинетика [Текст: электронный ресурс] .— Электронные данные (1 файл: 2,61 Мб) .— (Казань : Казанский федеральный университет, 2015) .— Загл. с экрана .— Вых. дан. ориг. печ. изд.: Казань, 2012 .— Режим доступа: открытый .
Оригинал копии: Химическая кинетика .— 2012 .— 36 с. : ил., 100.
<URL:<http://libweb.kpfu.ru/ebooks/publicat/0-799136.pdf>>.
4. Афанасьев Б.Н. Физическая химия: учебное пособие для студентов вузов, обучающихся по направлениям "Химическая технология", "Биотехнология" и "Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии" / Б. Н. Афанасьев, Ю. П. Акулова. Санкт-Петербург [и др.]: Лань, 2012. - 463 с.
5. Еремин В.В. Основы общей и физической химии: учебное пособие для студентов высших учебных заведений, изучающих дисциплину "Химия", по направлению подготовки ВПО 011200 / В. В. Еремин, А. Я. Борщевский. Долгопрудный: Интеллект, 2012. - 847 с.

9.2. Дополнительная литература

1. Еремин В.В. (и др.). Основы физической химии: уч. пособие в 2ч. ч.1. М.: Бином. Лаборатория знаний. 2013 - 320 с. http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=8695
2. Еремин В.В. (и др.). Основы физической химии: уч. пособие в 2ч. ч.2. М.: Бином. Лаборатория знаний. 2013 - 263 с. http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=8696
3. Пурмаль А.П. А, Б, В? химической кинетики. М.: ИКЦ "Академкнига". 2004.
4. Ягодковский В.Д. Статистическая термодинамика в физической химии. М.: "Бином". 2005.
5. Эткинс П. Физическая химия. Т. 1-2. М.: МГУ, 2007.
6. Герасимов Я.И. и др. Курс физической химии, т. I., М: Химия. 1963.
7. Герасимов Я.И. и др. Курс физической химии, т. II., М: Химия. 1963.
8. Ерёмин Е.Н. Основы химической кинетики. М.: Высш. шк., 1976. - 374 с.
9. Дамаскин Б.Б., Петрий О.А. Электрохимия. М.: Высш. шк., 1987. - 296 с.
10. Киселёва Е.В. и др. Сборник примеров и задач по физической химии. М.: Высш. шк. 1991.

11. Методическое пособие к семинарам по физической химии (термодинамика). Казань. 1999.
12. Методическое пособие к семинарам по физической химии (кинетика химических реакций). Казань. 2000.
11. Буданов В.В., Ломова Т.Н. Химическая кинетика: учебное пособие. [Электронный ресурс]. - Санкт-Петербург: Лань, 2014. - 288 с. Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=4219612.

9.3. Интернет-ресурсы

1. А. Березовчук Физическая химия: конспект лекций – http://www.ph4s.ru/book_him_phys.html
2. Пособия по физической химии - http://www.fptl.ru/Y4eba_Fizhimija.html
3. Форум химиков - <http://forum.xumuk.ru/index.php?showtopic=49605>
4. Химический факультет МГУ - <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/phys.html>
5. Электронные ресурсы Химического института КФУ – http://www.kpfu.ru/main_page?p_sub=12946

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ И ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

1. Мультимедийная аудитория;
2. Электронные библиотечная система "ZNANIUM.COM";
3. Электронные библиотечная система Издательства "Лань".

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и с учетом рекомендаций по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки (Приказ Минобрнауки РФ от 30.07.2014 № 869).

Автор:
д.х.н., проф. Соломонов Б.Н.



Рецензент:
д.х.н., проф. Улахович Н.А.



Программа одобрена на заседании Учебно-методической комиссии Химического института им. А.М Бутлерова КФУ от 31 августа 2015 года, протокол № 7.