



МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«МИРЭА – Российский технологический университет»

РТУ МИРЭА

УТВЕРЖДАЮ
Первый проректор

_____ Н.И. Прокопов
« ____ » _____ 20__ г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

2.1.6 «Физическая химия»

Научная специальность

1.4.4 «Физическая химия»

Форма обучения

Очная

Москва 2025

1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины «Физическая химия» являются:

1. Более глубокое изучение курса физической химии в свете современных достижений, достигнутых в этой области химической науки.
2. Освоение основных законов химической термодинамики, кинетики и электрохимии.
3. Изучение основных закономерностей и углубление научных представлений о проведении исследований и современных достижений в области физической химии.

2. Место дисциплины в структуре программы аспирантуры

Дисциплина «Физическая химия» является обязательной дисциплиной образовательного компонента блока «Дисциплины (модули)» учебного плана научной специальности 1.4.4 «Физическая химия».

3. Требования к результатам освоения дисциплины «Физическая химия»

В ходе освоения дисциплины «Физическая химия» идет дальнейшее формирование элементов (знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности) аспиранта:

способность к самостоятельному обучению новым методам исследования, способность к пониманию основных проблем в своей предметной области, выбору методов и средств их решения;

способность самостоятельно приобретать и использовать в практической деятельности новые знания и умения, в том числе в новых областях знаний, непосредственно не связанных со сферой своих исследований;

способность анализировать состояние научно-технической проблемы, систематизировать и обобщать научно-техническую информацию по теме исследований;

способность оценивать научную значимость и перспективы прикладного использования результатов исследований.

В результате освоения дисциплины аспирант должен:

Знать:

современные методы исследования в предметной области физической химии;

предметную область физической химии в соответствии с паспортом научной специальности 1.4.4 «Физическая химия»;

основы химической термодинамики, кинетики и катализа;

особенности фазового состояния и физико-химических свойств веществ;

закономерности их оптимизации для разработки физико-химических основ наукоемких химических технологий.

Уметь:

сформулировать задачи научного исследования в области разработки физико-химических основ наукоемких химических технологий;

выбрать необходимые методы исследования и обосновать их применимость для решения поставленной задачи в области физической химии;

обосновывать необходимость, актуальность поставленной исследовательской задачи и решать её с помощью современных технологий и достижений.

Владеть:

основами химической термодинамики, теории растворов, фазовых равновесий, электрохимии, химической кинетики для проведения исследований в области физической химии;

способностью к разработке физико-химических основ наукоемких химических технологий.

4. Содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины «Физическая химия» составляет 3 зачетных единицы (108 акад. часов).

4.1. Распределение объема дисциплины по разделам (темам), семестрам, видам учебной работы и формам контроля.

№ раздела	Семестр	Неделя семестра	Объем (в акад. час.)							Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Формы промежуточной аттестации (по семестрам)	
			Всего	Контактная работа (по видам учебных занятий)				СР	Контроль		
				Всего	ЛК	ПР	СР под рук.				
1	4	1	4	2	2			2		Устное собеседование	
1	4	2	6	2		2		2	2	Выполнение практических заданий	
1	4	3	4	2	2			2		Устное собеседование	
1	4	4	6	2		2		2	2	Выполнение практических заданий	
2	4	5	4	2	2			2		Устное собеседование	
2	4	6	6	2		2		2	2	Выполнение практических заданий	
3	4	7	4	2	2			2		Устное собеседование	
3	4	8	6	2		2		2	2	Выполнение практических заданий	
4	4	9	4	2	2			2		Устное собеседование	
4	4	10	6	2		2		2	2	Выполнение практических заданий	
4	4	11	4	2	2			2		Устное собеседование	
4	4	12	6	2		2		2	2	Выполнение практических заданий	
5	4	13	4	2	2			2		Устное собеседование	

№ раздела	Семестр	Неделя семестра	Объем (в акад. час.)							Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Формы промежуточной аттестации (по семестрам)	
			Всего	Контактная работа (по видам учебных занятий)				СР	Контроль		
				Всего	ЛК	ПР	СР под рук.				
5	4	14	6	2		2		2	2	Выполнение практических заданий	
6	4	15	4	2	2			2		Устное собеседование	
6	4	16	6	2		2		2	2	Выполнение практических заданий	
6	4	17	4	2	2			2		Устное собеседование	
6	4	18	8	2		2		2	4	Выполнение практических заданий	
По материалам курса			16						16	Экзамен	
Всего в 4 семестре:			108	36	18	18	0	36	36		
Всего:			108	36	18	18	0	36	36		

4.2. Наименование и содержание разделов дисциплины

Номер темы	Наименование темы	Содержание темы
1	Химическая термодинамика. Термохимия	<p>Основные понятия и законы термодинамики. Роль термодинамики в химической технологии. Области исследования и направления развития современной термодинамики.</p> <p>Первое начало термодинамики. Теплота и работа. Виды работы. Функции состояния.</p> <p>Второе начало термодинамики. Статистический характер второго начала. Самопроизвольно протекающие процессы и условия равновесия. Энтропия как функция состояния и ее свойства.</p> <p>Третье начало термодинамики. Вычисление абсолютной энтропии твердых веществ, жидкостей, газов с учетом третьего начала. Остаточная энтропия.</p> <p>Энергия Гельмгольца, энергия Гиббса. Характеристические функции (U, H, A, G). Полные дифференциалы характеристических функций (уравнения Массье). Соотношения Максвелла.</p> <p>Критерии направления самопроизвольных превращений в закрытых системах: Максимальная полезная работа.</p> <p>Критерии направления самопроизвольных превращений в открытых системах. Химический потенциал.</p> <p>Изобара и изотерма Вант-Гоффа.</p>

Номер темы	Наименование темы	Содержание темы
2	Фазовые равновесия	<p>Термодинамика фазового равновесия. Основные понятия. Условия равновесия гетерогенных систем. Правило фаз Гиббса.</p> <p>Фазовое равновесие в однокомпонентных системах и диаграммы их состояния: диаграммы состояния систем типа воды и типа бензола, типа серы.</p> <p>Фазовые переходы 1-го рода. Уравнение Клапейрона-Клаузиуса. Энтропия испарения и правило Трутона.</p> <p>Фазовые переходы 2-го рода.</p> <p>Равновесия жидких и твёрдых фаз в бинарной системе. Методы физико-химического анализа. Диаграммы плавкости и кривые охлаждения. Правило рычага.</p> <p>Различные типы диаграмм плавкости. Диаграммы систем с простой эвтектикой. Диаграммы систем с образованием твердых растворов. Условия образования различных типов диаграмм систем с твердыми растворами. Диаграммы систем, образующих химические соединения. Дистектика и перитектика.</p>
3	Растворы электролитов	<p>Термодинамика растворов электролитов. Активность и коэффициент активности ионов, их средние ионные значения, общая активность электролита. Причины отклонения растворов электролитов от идеальности; взаимодействие ионов в растворах сильных электролитов, ионная сила раствора, ее влияние на ионный коэффициент активности, теория Дебая-Хюккеля.</p> <p>Влияние ионной силы на химическое равновесие в растворах электролитов. Термодинамика электрохимических процессов.</p> <p>Уравнение Нернста. Расчет ЭДС.</p>
4	Химическая кинетика	<p>Основные принципы рассмотрения кинетики сложных реакций. Последовательные, параллельные, цепные реакции.</p> <p>Теория активных столкновений. Модель элементарного акта и основные положения. Вывод кинетического уравнения бимолекулярной реакции, физический смысл его параметров. Физический смысл параметров уравнения Аррениуса в рамках теории активных соударений. Стерический фактор.</p> <p>Теория активированного комплекса. Модель элементарного акта. Понятия поверхности потенциальной энергии, координаты реакции, активированного комплекса. Поверхность потенциальной энергии.</p>
5	Основы квантовой механики	<p>Основные понятия квантовой механики. Формула Де-Бройля. Постулаты квантовой механики. Простейшие системы в квантовой механике: частица в</p>

Номер темы	Наименование темы	Содержание темы
		потенциальном ящике, гармонический осциллятор. Решение уравнения Шредингера для атома водорода. Квантовые числа и их физический смысл. Квантование энергии.
6	Строение атомов и молекул	Энергетическая диаграмма АО атома водорода. Основное и возбужденные состояния атома водорода, вырождение состояний. Решение уравнения Шредингера для многоэлектронных атомов. Метод ССП. Метод Хартри-Фока. Методы рассмотрения строения молекул в квантовой механике. Метод валентных связей. Метод молекулярных орбиталей. Электронные состояния и приближение МО ЛКАО. Решение уравнения Шредингера для H_2^+ в методе МО ЛКАО и его основные результаты. Двухатомные гомоядерные молекулы. Двухатомные гетероядерные молекулы

4.3. Лабораторные работы (ЛБ)

Учебным планом не предусмотрены.

4.4. Практические занятия (ПР)

№ п/п	Номер темы дисциплины	Тематика практических занятий	Трудоемкость (в акад. часах)
1	1	Термохимия. Расчет тепловых эффектов химических реакций. Уравнение Кирхгофа. Абсолютная энтропия и изменение энтропии. Изобара и изотерма Вант-Гоффа.	4
2	2	Фазовые равновесия. Однокомпонентные и бинарные системы. Топология фазовых диаграмм систем. Диаграммы плавкости. Диаграммы кипения. Законы Коновалова. Закон Рауля.	2
3	3	Растворы электролитов. Коэффициенты активности. Уравнение Нернста. ЭДС.	2
4	4	Химическая кинетика. Определение порядка реакции, константы скорости, энергии активации. Расчеты в рамках моделей ТАК и ТАС.	4
5	5	Основы квантовой механики. Уравнение Шредингера. Квантовые числа.	2
6	6	Строение атомов и молекул. Атомные термы. Методы ВС и МО ЛКАО. Двухатомные гомоядерные и гетероядерные молекулы.	4
Всего:			18

5. Учебно-методическое обеспечение для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

Виды самостоятельной работы обучающегося, порядок и сроки ее выполнения:

подготовка к лекциям и практическим занятиям с использованием конспекта лекций, материалов практических занятий и приведенных ниже (п 8.1 и 8.2) источников (в соответствии с расписанием занятий);

оформление отчетов по выполненным практическим заданиям и теоретическая подготовка к их сдаче (в соответствии с расписанием занятий).

Перечень вопросов для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации – в соответствии с тематикой дисциплины.

6. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

6.1. Описание показателей и критериев оценивания знаний, умений и владений на различных этапах их формирования, описание шкал оценивая

6.1.1. Показатели и критерии оценивания, используемые шкалы оценивания

Показатели оценивания	Критерии оценивания	Средства оценивания	Шкалы оценивания
Умение	Правильность выполнения учебных заданий, аргументированность выводов	<i>Текущий контроль:</i> выполнение устных/письменных заданий, тестирование <i>Промежуточная аттестация:</i> экзамен	Шкала 1
Знание	Правильность и полнота ответов, глубина понимания вопроса	<i>Текущий контроль:</i> выполнение устных/письменных заданий, тестирование <i>Промежуточная аттестация:</i> экзамен	Шкала 1
Владение	Обоснованность и аргументированность выполнения учебной деятельности	<i>Текущий контроль:</i> выполнение практического задания, тестирование <i>Промежуточная аттестация:</i> экзамен	Шкала 2

6.1.2. Описание шкал оценивания степени сформированности знаний, умений и владений

Шкала 1. Оценка сформированности знаний, умений и владений

Обозначения		Формулировка требований к степени сформированности знаний, умений и владений		
Цифр.	Оценка			
		Знать	Уметь	Владеть
1	Неудовлетворительно	Отсутствие знаний	Отсутствие умений	Отсутствие навыков

Обозначения		Формулировка требований к степени сформированности знаний, умений и владений		
Цифр.	Оценка			
		Знать	Уметь	Владеть
2	Неудовлетворительно	Фрагментарные знания	Частично освоенное умение	Фрагментарное применение
3	Удовлетворительно	Общие, но не структурированные знания	В целом успешное, но не систематически осуществляемое умение	В целом успешное, но не систематическое применение
4	Хорошо	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания	В целом успешное, но содержащие отдельные пробелы умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применение навыков
5	Отлично	Сформированные систематические знания	Сформированное умение	Успешное и систематическое применение навыков

Шкала 2. Комплексная оценка сформированности знаний, умений и владений

Обозначения		Формулировка требований к степени сформированности знаний, умений и владений
Цифр.	Оценка	
1	Неудовлетворительно	Не имеет необходимых представлений о проверяемом материале
2	Удовлетворительно или неудовлетворительно (по усмотрению преподавателя)	Знать на уровне ориентирования , представлений. Субъект учения знает основные признаки или термины изучаемого элемента содержания, их отнесенность к определенной науке, отрасли или объектам, узнает их в текстах, изображениях или схемах и знает, к каким источникам нужно обращаться для более детального его усвоения
3	Удовлетворительно	Знать и уметь на репродуктивном уровне. Субъект учения знает изученный элемент содержания репродуктивно: произвольно воспроизводит свои знания устно, письменно или в демонстрируемых действиях
4	Хорошо	Знать, уметь, владеть на аналитическом уровне. Зная на репродуктивном уровне, указывать на особенности и взаимосвязи изученных объектов, на их достоинства, ограничения, историю и перспективы развития и особенности для разных объектов усвоения
5	Отлично	Знать, уметь, владеть на системном уровне. Субъект учения знает изученный элемент содержания системно,

Обозначения		Формулировка требований к степени сформированности знаний, умений и владений
Цифр.	Оценка	
		произвольно и доказательно воспроизводит свои знания устно, письменно или в демонстрируемых действиях, учитывая и указывая связи и зависимости между этим элементом и другими элементами содержания учебной дисциплины, его значимость в содержании учебной дисциплины

6.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования знаний, умений и владений в процессе освоения образовательной программы.

Типовые вопросы и задания для текущего контроля (оценка сформированности элементов (знаний, умений, навыков) в рамках текущего контроля по дисциплине) по разделам дисциплины

Примеры вопросов по теме 1:

1. Основные понятия термодинамики: изолированные и открытые системы, равновесные и неравновесные системы, термодинамические переменные, температура, интенсивные и экстенсивные переменные.
2. Уравнения состояния. Теорема о соответственных состояниях. Вириальные уравнения состояния.
3. Первый закон термодинамики. Теплота, работа, внутренняя энергия, энтальпия, теплоемкость. Закон Гесса. Стандартные состояния и стандартные теплоты химических реакций.
4. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Формула Кирхгофа. Таблицы стандартных термодинамических величин и их использование в термодинамических расчетах.
5. Второй закон термодинамики. Энтропия и ее изменения в обратимых и необратимых процессах. Теорема Карно – Клаузиуса. Различные шкалы температур.
6. Фундаментальные уравнения Гиббса. Характеристические функции. Энергия Гиббса, энергия Гельмгольца. Уравнения Максвелла. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов.
7. Характеристические функции (U , H , A , G). Полные дифференциалы характеристических функций (уравнения Массье).
8. Уравнение Гиббса – Гельмгольца. Работа и теплота химического процесса. Химические потенциалы.
9. Химическое равновесие. Закон действующих масс. Различные виды констант равновесия и связь между ними.
10. Изотерма Вант-Гоффа. Уравнения изобары и изохоры химической реакции. Расчеты констант равновесия химических реакций с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций.

11. Приведенная энергия Гиббса и ее использование для расчетов химических равновесий. Полные потенциалы.

12. Термодинамическая вероятность и ее связь с энтропией. Распределение Максвелла – Больцмана. Статистические выражения для основных термодинамических функций.

13. Молекулярная сумма по состояниям и сумма по состояниям макроскопической системы. Поступательная, вращательная, электронная и колебательная суммы по состояниям.

14. Статистический расчет энтропии. Третье начало термодинамики. Постулат Планка и абсолютная энтропия.

15. Составляющие внутренней энергии, теплоемкости и энтропии, обусловленные поступательным, вращательным и колебательным движением.

16. Расчет констант равновесия химических реакций в идеальных газах.

17. Статистическая теория Эйнштейна идеального кристалла, теория Дебая. Точечные дефекты кристаллических решеток.

18. Равновесные и неравновесные дефекты. Вычисление сумм по состояниям для кристаллов с различными точечными дефектами.

Пример практического задания по теме 1:

Расчет теплового эффекта реакции через энтальпии образования веществ.

Расчет теплового эффекта реакции через энтальпии сгорания.

Расчет теплового эффекта реакции при другой температуре.

Расчет изменения энтропии.

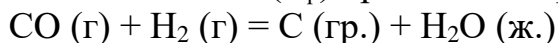
Расчет константы скорости реакции при другой температуре.

Определите тепловой эффект реакции $\text{C}_2\text{H}_{2(\text{г})} + 2\text{H}_{2(\text{г})} = \text{C}_2\text{H}_{6(\text{г})}$, протекающей при $T = 298,15 \text{ К}$, если энергии разрыва связей, в кДж/моль, составляют соответственно: $\text{C}\equiv\text{C} \rightarrow 812$; $\text{C}-\text{C} \rightarrow 344$; $\text{C}-\text{H} \rightarrow 415$; $\text{H}-\text{H} \rightarrow 436$.

Рассчитайте стандартный тепловой эффект реакции $2 \text{HI}_{(\text{г})} = \text{H}_{2(\text{г})} + \text{I}_{2(\text{г})}$ при $T = 600 \text{ К}$, если при $T = 298,15 \text{ К}$ её тепловой эффект равен $-9,71 \text{ кДж/моль}$. Используйте средние теплоемкости веществ в интервале температур от $298,15$ до 600 К .

Тепловой эффект реакции $\text{CO}_2 (\text{г}) + \text{H}_2 (\text{г}) = \text{CO} (\text{г}) + \text{H}_2\text{O} (\text{г})$ в области $1100\text{--}1400 \text{ К}$ равен $26,709 \text{ кДж/моль}$. Рассчитать константу равновесия K_p при 1200 К , если при 1100 К $K_p = 4,235$.

Используя справочные данные, определите константу равновесия при постоянном давлении (K_p) при 55°C для реакции:



Примеры вопросов по теме 2:

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

2. Однокомпонентные системы. Диаграммы состояния бензола, воды, серы. Фазовые переходы первого рода. Уравнение Клапейрона – Клаузиуса.

3. Фазовые переходы второго рода. Уравнения Эренфеста.

4. Двухкомпонентные системы. Различные диаграммы состояния

двухкомпонентных систем. Фазовые диаграммы систем с эвтектикой, перитектикой, монотектикой, с образованием соединения.

5. Трехкомпонентные системы. Треугольник Гиббса.

6. Равновесие жидкость – пар в двухкомпонентных системах. Законы Гиббса – Коновалова. Азеотропные смеси.

Пример практического задания по теме 2:

Рассчитайте давление и состав пара над раствором, содержащим 30 мол. % *o*-ксилола (1,2–диметилбензола) и 70 мол.% *n*-ксилола (1,4–диметилбензола) при температуре 80 °С, если давления над чистыми компонентами составляют соответственно 108,9 и 142,6 мм рт. ст.

Определите молярную массу вещества, если при растворении 20 г этого вещества в 2 кг воды, температура замерзания раствора понизилась на 0,31 °С. Криоскопическая постоянная воды равна 1,859 кг·К/моль.

Раствор, содержащий 0,5 г нелетучего вещества в 42 г бензола, кипит при 80,27°С. Чистый бензол кипит при 80,1 °С. Эбулиоскопическая постоянная бензола равна 2,53 кг·К/моль. Определите молярную массу растворенного вещества.

Примеры вопросов по теме 3:

1. 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.

2. Основные положения теории Дебая – Хюккеля. Потенциал ионной атмосферы.

3. Условия электрохимического равновесия на границе раздела фаз и в электрохимической цепи. Термодинамика гальванического элемента.

4. Электродвижущая сила, ее выражение через энергию Гиббса реакции в элементе. Уравнения Нернста и Гиббса – Гельмгольца для равновесной электрохимической цепи. Понятие электродного потенциала.

5. Определение коэффициентов активности на основе измерений ЭДС гальванического элемента. Практическое применение потенциометрии.

6. Электропроводность растворов электролитов; удельная и эквивалентная электропроводность. Числа переноса, подвижность ионов и закон Кольрауша. Электрофоретический и релаксационные эффекты. Практическое применение кондуктометрии.

Пример практического задания по теме 3:

ЭДС гальванического элемента Якоби-Даниэля. Напишите реакцию, протекающую в этом элементе, и определите ее термодинамические характеристики $\Delta_r G^0$, $\Delta_r H^0$, $\Delta_r S^0$ при 25°С, используя справочные данные.

Электрическая проводимость растворов электролитов. Удельная электропроводность насыщенного водного раствора хлорида серебра при 25 °С равна $1,887 \cdot 10^{-4} \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}$. Молярные электрические проводимости ионов серебра

и хлора при бесконечном разбавлении и $t = 25\text{ }^{\circ}\text{C}$ соответственно равны: $\lambda_{\infty}(\text{Ag}^+) = 61,9 \cdot 10^{-4}$ и $\lambda_{\infty}(\text{Cl}^-) = 76,35 \cdot 10^{-4} \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{м}^2 \cdot \text{моль}^{-1}$. Определите произведение растворимости хлорида серебра при $25\text{ }^{\circ}\text{C}$.

Определение термодинамических характеристик реакции методом ЭДС. Рассчитайте $\Delta_r G^0$, $\Delta_r S^0$, $\Delta_r H^0$ и $\Delta_r U^0$ при 25°C для реакции, протекающей в электрохимической цепи $\text{Pb} \mid \text{PbI}_2 \mid \text{KI} \mid \text{AgI} \mid \text{Ag}$, для которой температурный коэффициент стандартной ЭДС равен $\left(\frac{\partial E^{\circ}}{\partial T} \right)_p = -1,38 \cdot 10^{-4} \text{ В/К}$.

Примеры вопросов по теме 4:

1. Кинетические уравнения различных типов реакций. Кинетическое уравнение степенного вида. Понятия скорости химической реакции, константы скорости и порядка реакции.
2. Интегрирование кинетических уравнений реакций 0, 1, 2 и 3-го порядков.
3. Основные принципы рассмотрения кинетики сложных реакций. Последовательные, параллельные, цепные реакции.
4. Теория активных столкновений. Модель элементарного акта и основные положения. Вывод кинетического уравнения бимолекулярной реакции, физический смысл его параметров. Физический смысл параметров уравнения Аррениуса в рамках теории активных соударений. Стерический фактор.
5. Теория активированного комплекса. Модель элементарного акта. Понятия поверхности потенциальной энергии, координаты реакции, активированного комплекса. Поверхность потенциальной энергии.
6. Кинетика реакций в растворах. Гомолитические и гетеролитические реакции. Влияние растворителя на скорость гомолитических и гетеролитических реакций. Уравнение Бренстеда-Бьеррума.
7. Мономолекулярные реакции. Типы мономолекулярных реакций, особенности их кинетики. Объяснение кинетических закономерностей в рамках теории активных столкновений. Теория Линдемана. Тримолекулярные реакции: типы, особенности кинетики

Пример практического задания по теме 4:

Определение порядка реакции по данным зависимости $C(\tau)$.

Определение энергии активации реакции по данным зависимости $k(T)$.

Реакция первого порядка протекает на 25% за 25 мин. Какова величина константы скорости этой реакции в с^{-1} ? Какая доля исходного вещества останется через 2 часа?

Для реакции $\text{H}_2 + \text{I}_2 = 2\text{HI}$ константа скорости при температуре $283\text{ }^{\circ}\text{C}$ $k_1 = 4,45 \cdot 10^{-5} \text{ л/моль} \cdot \text{с}$, а при температуре $356\text{ }^{\circ}\text{C}$ $k_2 = 2,52 \cdot 10^{-3} \text{ л/моль} \cdot \text{с}$. Рассчитайте энергию активации, предэкспоненциальный множитель уравнения Аррениуса, энтальпию и энтропию активации.

При $518\text{ }^{\circ}\text{C}$ время полупревращения для реакции разложения ацетальдегида при начальном давлении 363 мм рт. ст. составляет 410 с., а при

исходном давлении 169 мм рт. ст. оно равно 880 с. Определить порядок реакции. Рассчитать константу скорости.

Примеры вопросов по теме 5:

Основные понятия квантовой механики.

Формула Де-Бройля.

Постулаты квантовой механики.

Простейшие системы в квантовой механике: частица в потенциальном ящике, гармонический осциллятор.

Решение уравнения Шредингера для атома водорода.

Пример практического задания по теме 5:

Квантовые числа и их физический смысл. Энергетические диаграммы для атомов.

Определение термов атомов, например, для N, Cr, Mn

Пример вопросов по теме 6:

1. Энергетическая диаграмма АО атома водорода. Основное и возбужденные состояния атома водорода, вырождение состояний.

2. Решение уравнения Шредингера для многоэлектронных атомов. Метод ССП. Метод Хартри-Фока

3. Методы рассмотрения строения молекул в квантовой механике. Метод валентных связей. Метод молекулярных орбиталей.

4. Электронные состояния и приближение МО ЛКАО. Решение уравнения Шредингера для H_2^+ в методе МО ЛКАО и его основные результаты.

5. МО ЛКАО. Двухатомные гомоядерные молекулы.

6. МО ЛКАО Двухатомные гетероядерные молекулы

7. Межмолекулярное взаимодействие молекул. Природа сил Ван-Дер-Ваальса. Молекулярные диполи и ориентационное, индукционное, дисперсионное межмолекулярные взаимодействия. Водородная связь.

Пример практического задания по теме 6:

Метод валентных связей. Гибридизация атомных орбиталей центрального атома. Определите по результатам расчета пространственную геометрию молекулы, тип гибридизации центрального атома и групповых орбиталей лиганда

Метод МО ЛКАО. Двухатомные гомоядерные молекулы: диазот, диоксиген.

Метод МО ЛКАО. Двухатомные гетероядерные молекулы: CO, NO.

Перечень вопросов для подготовки к экзамену (оценка сформированности элементов (знаний, умений, навыков) в рамках промежуточной аттестации по дисциплине).

1. Основные понятия термодинамики: изолированные, закрытые и открытые системы, равновесные и неравновесные системы, термодинамические переменные, интенсивные и экстенсивные переменные. Нулевой закон термодинамики.

2. Уравнения состояния. Вириальные уравнения состояния.
3. Первый закон термодинамики. Теплота, работа, внутренняя энергия, энтальпия.
4. Закон Гесса. Стандартные состояния и стандартные теплоты химических реакций.
5. 1 и 2 следствия из закона Гесса. Стандартная теплота образования. Стандартная теплота сгорания.
6. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Уравнение Кирхгофа и его анализ. Интегрирование уравнения Кирхгофа с учетом температурной зависимости теплоемкостей.
7. Теплоемкость (удельная, молярная). Молярная теплоемкость (изохорная и изобарная). Теплоемкость идеального газа. Соотношение между C_p и C_v для идеального газа.
8. Вклад различных видов движения молекул во внутреннюю энергию и теплоемкость идеального газа.
9. Теплоемкость твердых тел. Правила Дюлонга и Пти; Неймана-Копфа. Закон Дебая
10. Второе начало термодинамики. Процессы самопроизвольные (естественные) и несамопроизвольные (искусственные). Различные формулировки II начала термодинамики и его математическое выражение.
11. Применение II начала термодинамики к изолированным системам. Объединенное уравнение I и II начал термодинамики.
12. Расчет изменения энтропии в различных процессах: изотермических (расширение–сжатие идеального газа, смешение идеальных газов, фазовые переходы I рода, химические реакции) и неизотермических (нагревание–охлаждение). Правило Трутона.
13. Связь энтропии с термодинамической вероятностью. Уравнение Больцмана, его физический смысл. Термодинамическая вероятность и направление самопроизвольных процессов в изолированной системе.
14. Постулат Планка (третье начало термодинамики). Остаточная энтропия.
15. Расчет абсолютных энтропий веществ.
16. Характеристические функции. Полные дифференциалы характеристических функций (уравнения Массье) в закрытых системах.
17. Энергия Гельмгольца и энергия Гиббса. Критерии самопроизвольности процессов и условия равновесия в закрытых системах. Максимальная полезная работа.
18. Характеристические функции. Фундаментальные уравнения для закрытых систем.
19. Уравнения Гиббса–Гельмгольца.
20. Фундаментальные термодинамические соотношения для открытых систем.
21. Парциальные молярные величины. Химический потенциал

идеального газа.

22. Химическое равновесие. Закон действующих масс. Различные виды констант равновесия и связь между ними.

23. Изотерма Вант-Гоффа.

24. Уравнение изобары химической реакции (изобары Вант-Гоффа), его вывод, анализ, интегрирование и применение.

25. Принцип Ле Шателье.

26. Растворы. Различные типы растворов.

27. Способы выражения состава растворов.

28. Идеальные растворы, общее условие идеальности растворов.

29. Неидеальные растворы и их свойства. Метод активностей. Коэффициенты активности и их определение.

30. Стандартные состояния при определении химических потенциалов компонент растворов. Симметричная и несимметричная системы отсчета.

31. Коллигативные свойства растворов. Изменение температуры замерзания растворов.

32. Коллигативные свойства растворов. Изменение температуры кипения растворов.

33. Осмос.

34. Парциальные молярные величины, их определение для бинарных систем. Уравнение Гиббса – Дюгема.

35. Функция смешения для идеальных и неидеальных растворов.

36. Предельно разбавленные растворы, атермальные и регулярные растворы, их свойства.

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

38. Фазовые переходы первого рода. Фазовые переходы второго рода.

39. Однокомпонентные системы. Уравнение Клапейрона – Клаузиуса.

40. Диаграммы состояния типа воды и бензола.

41. Диаграммы состояния типа серы.

42. Двухкомпонентные системы. Диаграммы состояния двухкомпонентных систем.

43. Фазовые диаграммы систем с эвтектикой.

44. Фазовые диаграммы систем с перитектикой.

45. Фазовые диаграммы систем с образованием конгруэнтно плавящегося соединения.

46. Фазовые диаграммы систем с образованием инконгруэнтно плавящегося соединения.

47. Равновесие жидкость – пар в двухкомпонентных системах. Давление насыщенного пара жидких растворов, закон Рауля.

48. 1 закон Гиббса – Коновалова. Т-х и Р-х диаграммы.

49. 2 закон Гиббса – Коновалова. Азеотропные смеси.

50. Растворы электролитов. Ион-дипольное взаимодействие как

основной процесс, определяющий устойчивость растворов электролитов. Коэффициенты активности в растворах электролитов.

51. Средняя активность и средний коэффициент активности, их связь с активностью отдельных ионов.

52. Основные положения теории Дебая – Хюккеля. Потенциал ионной атмосферы.

53. Термодинамика гальванического элемента.

54. Электродвижущая сила, ее выражение через энергию Гиббса реакции в элементе.

55. Уравнения Нернста для равновесной электрохимической цепи. Понятие электродного потенциала.

56. Определение коэффициентов активности на основе измерений ЭДС гальванического элемента.

57. Практическое применение потенциометрии.

58. Электропроводность растворов электролитов; удельная и эквивалентная электропроводность.

59. Числа переноса, подвижность ионов и закон Кольрауша.

60. Электрофоретический и релаксационные эффекты.

61. Практическое применение кондуктометрии.

62. Атомные, ионные, молекулярные и другие типы кристаллов.

63. Строение твердых растворов. Упорядоченные твердые растворы.

64. Мицеллообразование и строение мицелл.

65. Мезофаза. Жидкие кристаллы (нематики, смектики, холестерики и др.).

66. Предмет и основные понятия химической кинетики. Классификация химических реакций: реакции простые и сложные, механизм реакции, элементарный химический акт, реакции гомогенные и гетерогенные, химическая переменная.

67. Скорость химической реакции и материальный баланс реакции.

68. Прямая и обратная задачи химической кинетики.

69. Кинетическое уравнение и его параметры. Общий порядок реакции и порядок по компонентам.

70. Закон действующих масс.

71. Константа скорости химической реакции, ее размерность и физический смысл.

72. Кинетические уравнения химических реакций 0, 1, 2, 3 и n-го порядка, интегрирование их.

73. Методы обработки экспериментальных данных для определения параметров кинетических уравнений (порядок по компонентам и общий порядок реакции).

74. Способы определения порядка реакции: дифференциальные и интегральные.

75. Метод подбора уравнения прямой, метод времен полупревращения,

метод начальных скоростей (метод Вант–Гоффа).

76. Метод понижения порядка реакции.

77. Зависимость константы скорости химической реакции от температуры. Уравнение Аррениуса и его параметры: энергия активации и предэкспоненциальный множитель. Физический смысл энергии активации.

78. Кинетика сложных реакций. Обратимые реакции первого порядка.

79. Параллельные реакции первого порядка.

80. Последовательные реакции первого порядка.

81. Метод квазистационарных концентраций. Обоснование кинетических условий для реализации.

82. Цепные реакции. Основные понятия и стадии цепных реакций. Неразветвленные цепные реакции на примере $\text{H}_2 + \text{Br}_2 \rightarrow 2\text{HBr}$.

83. Элементарный химический акт. Теория активных столкновений (ТАС). Основные положения молекулярно-кинетической теории: средняя кинетическая энергия, средняя скорость, фактор Больцмана.

84. Основные положения ТАС. Понятие цилиндра столкновений.

85. Смысл предэкспоненциального множителя в уравнении Аррениуса. Энергия активации. Стерический фактор, его физический смысл.

86. Рассмотрение мономолекулярной реакции в рамках ТАС (схема Линдемана). Достоинства и недостатки ТАС.

87. Теория активированного комплекса (ТАК). Понятие активированного комплекса. Механизм образования активированного комплекса на примере реакции $\text{H}_2 + \text{D} \rightarrow \text{HD} + \text{H}$.

88. Свойства активированного комплекса, его отличие от обычных молекул.

89. Основные положения ТАК. Термодинамический аспект ТАК. Энтропия активации и трактовка стерического фактора. Понятие энергии активации в ТАК, её связь с энергией активации. Сравнение ТАС и ТАК.

90. Сольватация. Применение ТАС к реакциям в растворах, границы применимости.

91. Применение ТАК к реакциям в растворах: моно- и бимолекулярные реакции.

92. Особенности ионных реакций в растворах. Влияние ионной силы на кинетику реакций.

93. Первичный солевой эффект. Вторичный солевой эффект.

94. Явление катализа. Катализатор, определение. Основные характеристики катализатора: активность и селективность (интегральная и дифференциальная).

95. Кисотно-основной катализ. Понятие кислоты и основания (Аррениус, Бренстед-Лоури, Льюис).

96. Функция кислотности Гаммета. Сверхкислоты

97. Двойственная природа материи. Уравнение Де Бройля.

98. Принцип неопределённости Гейзенберга.

99. Постулаты квантовой механики. Волновая функция и вероятностный характер описания состояний микросистемы.

100. Операторы и действия над ними. Собственные значения и собственные функции операторов, свойства операторов.

101. Простейшие системы квантовой механики. Одномерный потенциальный ящик.

102. Строение атома. Атом водорода.

103. Основные этапы решения уравнения Шредингера для атома водорода. Приближение Борна-Оппенгеймера.

104. Результаты решения уравнения Шредингера для атома водорода. Волновая функция и ее составляющие.

105. Квантовые числа и их физический смысл.

106. Определение АО и ее краткая запись. Способы представления АО. Атомные орбитали s, p, d, f.

107. Вырождение состояний в атоме водорода по квантовому числу l. Спин.

108. Спектр атомарного водорода. Спектральные серии.

109. Уравнение Шрёдингера для многоэлектронных атомов и методы его решения. Приближение Слейтера.

110. Распределение АО по энергии. Правила Клечковского. Распределение электронов по атомным орбиталям. Принцип Паули. Правила Гунда.

111. Атомные термы в приближении Рассел – Саундерса. Основное и возбужденное состояния атома и их термы. Правила отбора.

112. Атомные термы 2S и 2P .

113. Метод валентных связей. Гибридизация атомных орбиталей центрального атома (на примере PCl_3 и $POCl_3$).

114. Метод молекулярных орбиталей. МО ЛКАО. Основные положения.

115. Решение уравнения Шредингера для H_2^+ в методе МО ЛКАО и его основные результаты.

116. МО ЛКАО. Двухатомные гомоядерные молекулы (на примере O_2).

117. МО ЛКАО. Двухатомные гетероядерные молекулы (на примере CO).

6.3. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности.

Процедуры и средства оценивания элементов знаний, умений и владений по дисциплине «Физическая химия»

Процедура проведения	Средство оценивания				
	Текущий контроль				Промежуточный контроль
	Выполнение устных заданий	Выполнение письменных заданий	Выполнение практических заданий	Выполнение тестовых заданий	Экзамен
Продолжительность контроля	По усмотрению	По усмотрению	По усмотрению	По усмотрению	В соответствии с принятыми

Процедура проведения	Средство оценивания				
	Текущий контроль				Промежуточный контроль
	Выполнение устных заданий	Выполнение письменных заданий	Выполнение практических заданий	Выполнение тестовых заданий	Экзамен
	преподавателя	преподавателя	преподавателя	преподавателя	нормами времени
Форма проведения контроля	Устный опрос	Письменный опрос	Письменный опрос	Письменный опрос	В письменной форме
Вид проверочного задания	Устные вопросы	Письменные задания	Практические задания	Письменный опрос	Экзаменационный билет
Форма отчета	Устные ответы	Ответы в письменной форме	Ответы в письменной форме	Ответы в письменной форме	Ответы в письменной форме
Раздаточный материал	Нет	Справочная литература	Справочная литература	Справочная литература	Справочная литература

7. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Дисциплина «Физическая химия» предусматривает лекции и практические занятия. Успешное изучение дисциплины требует посещения лекций, активной работы на практических занятиях, выполнения учебных заданий преподавателя, ознакомления с основной и дополнительной литературой.

В ходе лекций преподаватель излагает и разъясняет основные, наиболее сложные понятия темы, а также связанные с ней теоретические и практические проблемы, дает рекомендации на практическое занятие и указания на самостоятельную работу.

При подготовке к лекционным занятиям аспирантам необходимо: перед очередной лекцией необходимо просмотреть конспект материала предыдущей лекции. При затруднениях в восприятии материала следует обратиться к основным литературным источникам. Если разобраться в материале опять не удалось, то обратитесь к лектору (по графику его консультаций) или к преподавателю на практических занятиях.

Практические занятия завершают изучение наиболее важных тем учебной дисциплины. Они служат для закрепления изученного материала, развития умений и навыков подготовки докладов, сообщений, приобретения опыта устных публичных выступлений, ведения дискуссии, аргументации и защиты выдвигаемых положений, а также для контроля преподавателем степени подготовленности аспирантов по изучаемой дисциплине.

При подготовке к практическому занятию аспиранты имеют возможность воспользоваться консультациями преподавателя.

При подготовке к практическим занятиям аспирантам необходимо:
приносить с собой рекомендованную преподавателем литературу к конкретному занятию;

до очередного практического занятия по рекомендованным литературным источникам проработать теоретический материал, соответствующей темы занятия;

в начале занятий задать преподавателю вопросы по материалу, вызвавшему затруднения в его понимании и освоении при решении задач, заданных для самостоятельного решения;

в ходе семинара давать конкретные, четкие ответы по существу вопросов; на занятии доводить каждую задачу до окончательного решения, демонстрировать понимание проведенных расчетов (анализов, ситуаций), в случае затруднений обращаться к преподавателю.

Аспирантам, пропустившим занятия (независимо от причин), не имеющие письменного решения задач или не подготовившиеся к данному практическому занятию, рекомендуется не позже чем в 2-недельный срок явиться на консультацию к преподавателю и отчитаться по теме, изучавшейся на занятии. Аспиранты, не отчитавшиеся по каждой не проработанной ими на занятиях теме к началу экзаменационной сессии не допускаются к экзамену.

8. Ресурсное обеспечение дисциплины

8.1. Основная и дополнительная учебная литература, необходимая для освоения дисциплины

а) основная литература:

1. Бажин, Н. М. Основы химической термодинамики / Бажин Н.М., Пармон В.Н. - Санкт-Петербург: Лань, 2024. - 212 с. — ISBN 978-5-507-48594-9. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/386087>

2. Сборник примеров и задач по физической химии. Электрохимия, химическая кинетика : учебное пособие для вузов / В. Ю. Конюхов, А. В. Гребенник, А. Ю. Крюков, О. И. Воробьева. — 3-е изд., стер. — Санкт-Петербург: Лань, 2024. — 224 с. — ISBN 978-5-507-47770-8. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/426224>

3. Барановский, В. И. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие для вузов / В. И. Барановский. — 4-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2024. — 428 с. — ISBN 978-5-507-49478-1. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/393056>

4. Афанасьев Б.Н. Физическая химия [Электронный ресурс]. / Афанасьев Б.Н., Акулова Ю.П. — Санкт— Петербург: Лань, 2021. — 416 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/168461>

5. Казин В.Н. Физическая химия [Электронный ресурс]: Учебное пособие / Казин В.Н., Плисс Е.М., Русаков А.И. — Москва: Юрайт, 2021. — 182 с. — Режим доступа: <https://urait.ru/bcode/475718>

6. Свиридов В.В. Физическая химия [Электронный ресурс]. / Свиридов В.В., Свиридов А.В. — Санкт-Петербург: Лань, 2021. — 600 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/168989>

7. Пестов С. М. Химическая термодинамика. Фазовые равновесия и растворы.: учебно-методическое пособие/ С. М. Пестов, О. Ю. Ткаченко.— М.: РТУ МИРЭА, 2024 — Режим доступа: <https://ibc.mirea.ru/books/SHARE/55222/>
8. Химическая кинетика [Электронный ресурс]: Учебно-методическое пособие / Крылов А.В., Москвичев С.С., Шпынева М.А. [и др.]. — М.: РТУ МИРЭА, 2024. — Режим доступа: <https://ibc.mirea.ru/books/SHARE/5998/>
9. Шамсиев Р. С. Теории элементарного акта химической реакции. : учебно-методическое пособие / Р.С. Шамсиев, Б.А. Беляев, М.В. Бермешев. — Москва: РТУ МИРЭА, 2024 -
Режим доступа: <https://ibc.mirea.ru/books/SHARE/5970/>
10. Шамсиев Р. С. Основные понятия и законы квантовой механики. Задачи. : учебно-методическое пособие / Р. С. Шамсиев, Б. А. Беляев .— М. : РТУ МИРЭА, 2023 — Режим доступа: <https://ibc.mirea.ru/books/SHARE/54773/>
11. Шамсиев Р. С. Атомные термы. : учебно-методическое пособие / Р. С. Шамсиев, Б. А. Беляев .— М. : РТУ МИРЭА, 2023 — Режим доступа: <https://ibc.mirea.ru/books/SHARE/54624/>
12. Крылов А. В. Методы квантово-химического расчета молекул. Ч.1. Двухатомные молекулы. : учебно-методическое пособие / А. В. Крылов, Р. С. Шамсиев .— М. : РТУ МИРЭА, 2021 — Режим доступа: <https://ibc.mirea.ru/books/SHARE/4146/>
13. Крылов А. В. Методы квантово-химического расчета молекул. Ч.2. Варианты индивидуальных заданий. : учебно-методическое пособие / А. В. Крылов, Р. С. Шамсиев .— М. : РТУ МИРЭА, 2022 — Режим доступа: <https://ibc.mirea.ru/books/SHARE/54382/>
14. Теория и практика решения кинетических задач. : учебно-методическое пособие / А. В. Крылов, О. Н. Шишилов, О. Х. Каримов, В. Р. Флид .— М. : РТУ МИРЭА, 2021 — Режим доступа: <https://ibc.mirea.ru/books/SHARE/4129/>

б) дополнительная литература:

- 1 Стромберг А. Г., Физическая химия: Учеб. для вузов. / Стромберг А.Г., Семченко Д.П. — М.: Высш. шк., 2006. — 528 с.
2. Пригожин, И.Р. Химическая термодинамика: Пер. с англ. / Пригожин И.Р., Дефэй Р. — М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. — 533 с.
3. Основы физической химии. В 2 ч : учебник / В. В. Еремин, С. И. Каргов, И. А. Успенская [и др.]. — 5-е изд., перераб. и доп. — Москва : Лаборатория знаний, 2019. — 625 с.
- 4 Физическая химия: [В 2 кн.]: учебник для вузов / Под ред. К.С. Краснова. / Кн. 1, 2. — М.: Высш. шк., 1995. — 512 с. ; 319 с.
5. Дамаскин, Б. Б. Электрохимия : учебное пособие / Б. Б. Дамаскин, О. А. Петрий, Г. А. Цирлина. — 3-е изд., испр. — Санкт-Петербург : Лань, 2021. — 672 с.

8.2. Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети Интернет, необходимые для освоения дисциплины

1. <http://library.mirea.ru/>
научно-техническая библиотека РТУ МИРЭА
2. <https://e.lanbook.com/>
электронно-библиотечная системы (ЭБС) Издательства «Лань»

8.3. Информационные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем:

- пакет офисных программ Microsoft Office;
- пакет офисных программ LibreOffice;

8.4. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

- учебная аудитория;
- компьютерный класс.