

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

**Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования "Пермский
государственный национальный исследовательский
университет"**

Кафедра физической химии

Авторы-составители: **Медведева Наталья Александровна**

Рабочая программа дисциплины

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

Код УМК 99647

Утверждено
Протокол №7
от «15» июня 2023 г.

Пермь, 2023

1. Наименование дисциплины

Физическая химия

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина входит в Блок « ОК.В.00 » образовательной программы по научным специальностям:

Научная специальность: **1.4.4** Физическая химия

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

В результате освоения дисциплины **Физическая химия** у обучающегося должны быть сформированы следующие планируемые результаты обучения:

1.4.4 Физическая химия

УРО.3 Проводит анализ новых направлений исследований и обосновывает перспективы их проведения в соответствующей области знаний

4. Объем и содержание дисциплины

| | |
|---|------------------------|
| Научная специальность | 1.4.4 Физическая химия |
| форма обучения | очная |
| №№ триместров, выделенных для изучения дисциплины | 7 |
| Объем дисциплины (з.е.) | 3 |
| Объем дисциплины (ак.час.) | 108 |
| Контактная работа с преподавателем (ак.час.), в том числе: | 36 |
| Проведение лекционных занятий | 24 |
| Проведение практических занятий, семинаров | 12 |
| Самостоятельная работа (ак.час.) | 72 |
| Формы промежуточной аттестации | Экзамен (7 триместр) |

5. Аннотированное описание содержания разделов и тем дисциплины

Физическая химия

Экспериментальное определение термодинамических свойств веществ, расчет термодинамических функций простых и сложных систем, изучение термодинамических аспектов фазовых превращений. Определение термодинамических характеристик процессов на поверхности, установление закономерностей адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях. Теория растворов, межмолекулярные и межчастичные взаимодействия. Компьютерное моделирование строения, свойств и спектральных характеристик молекул. Химические превращения, потоки массы, энергии и энтропии пространственных и временных структур в неравновесных системах. Макрокинетика, механизмы сложных химических процессов, физико-химическая гидродинамика, растворение и кристаллизация

Динамика элементарного акта химических реакций. Механизмы реакции с участием активных частиц. Связь реакционной способности реагентов с их строением и условиями протекания химической реакции.

1. Экспериментальное определение термодинамических свойств веществ, расчет термодинамических функций простых и сложных систем, изучение термодинамических аспектов фазовых превращений

Основные понятия термодинамики: изолированные и открытые системы, равновесные и неравновесные системы, термодинамические переменные, температура, интенсивные и экстенсивные переменные. Уравнения состояния. Теорема о соответственных состояниях. Вириальные уравнения состояния. Теплота, работа, внутренняя энергия, энтальпия, теплоемкость. Закон Гесса. Стандартные состояния и стандартные теплоты химических реакций. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Формула Кирхгоффа. Таблицы стандартных термодинамических величин и их использование в термодинамических расчетах. Энтропия и её 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. Закон действующих масс. Различные виды констант равновесия и связь между ними. 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 её использование для расчетов химических равновесий. 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. Азеотропные смеси. Фазовые переходы второго рода. Уравнения Эренфеста. Трехкомпонентные системы. Треугольник Гиббса. Диаграммы плавкости трехкомпонентных систем.

2. Определение термодинамических характеристик процессов на поверхности, установление закономерностей адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях

Адсорбент, адсорбат. Виды адсорбции. Структура поверхности и пористость адсорбента. Локализованная и делокализованная адсорбция. Мономолекулярная и полимолекулярная адсорбция. Динамический характер адсорбционного равновесия. Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Генри. Константа адсорбционного равновесия. Уравнение Ленгмюра. Адсорбция из растворов. Уравнение Брунауэра – Эмета – Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента. Хроматография, различные её типы (газовая, жидкостная, противоточная и

др.). Свободная поверхностная энергия, поверхностное натяжение, избыточные термодинамические функции поверхностного слоя. Изменение поверхностного натяжения на границе жидкость – пар в зависимости от температуры. Связь свободной поверхностной энергии с теплотой сублимации (правило Стефана), модулем упругости и другими свойствами вещества. Эффект Ребиндера: изменение прочности и пластичности твердых тел вследствие снижения их поверхностной энергии. Капиллярные явления. Зависимость давления пара от кривизны поверхности жидкости. Капиллярная конденсация. Зависимость растворимости от кривизны поверхности растворяющихся частиц (закон Гиббса – Оствальда – Фрейндлиха). Особенности строения поверхности кристаллов и жидкостей, структура границы раздела конденсированных фаз. Молекулы и кластеры на поверхности. Структура адсорбционных слоев.

3. Теория растворов, межмолекулярные и межчастичные взаимодействия. Компьютерное моделирование строения, свойств и спектральных характеристик молекул

Способы выражения состава растворов. Идеальные растворы, общее условие идеальности растворов. Давления насыщенного пара жидких растворов, закон Рауля. Неидеальные растворы и их свойства. Метод активностей. Коэффициенты активности и их определение. Стандартные состояния при определении химических потенциалов компонент растворов. Симметричная и несимметричная системы отсчета. Коллигативные свойства растворов. Изменение температуры замерзания растворов, криоскопия.

Зонная плавка. Осмотические явления. Парциальные молярные величины, их определение для бинарных систем. Уравнение Гиббса – Дюгема. Функция смещения для идеальных и неидеальных растворов. Предельно разбавленные растворы, атермальные и регулярные растворы, их свойства. 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, её выражение через энергию Гиббса реакции в элементе. Уравнения Нернста и Гиббса – Гельмгольца для равновесной электрохимической цепи. Понятие электродного потенциала. Определение коэффициентов активности на основе измерений ЭДС гальванического элемента. Электропроводность растворов электролитов; удельная и эквивалентная электропроводность. Числа переноса, подвижность ионов и закон Кольрауша. Электрофоретический и релаксационные эффекты.

4. Химические превращения, потоки массы, энергии и энтропии пространственных и временных структур в неравновесных системах

Термодинамическая вероятность и её связь с энтропией. Распределение Максвелла – Больцмана. Статистические средние значения макроскопических величин. Ансамбли Гиббса. Микроканоническое и каноническое распределения. Расчет числа состояний в квазиклассическом приближении. Каноническая функция распределения Гиббса. Сумма по состояниям как статистическая характеристическая функция. Статистические выражения для основных термодинамических функций. Молекулярная сумма по состояниям и сумма по состояниям макроскопической системы. Поступательная, вращательная, электронная и колебательная суммы по состояниям. Статистический расчет энтропии. Постулат Планка и абсолютная энтропия. Приближение «жесткий ротатор – гармонический осциллятор». Составляющие внутренней энергии, теплоёмкости и энтропии, обусловленные поступательным, вращательным и колебательным движением. Расчет констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики. Статистическая термодинамика

реальных систем. Потенциалы межмолекулярного взаимодействия и конфигурационный интеграл для реального газа. Распределения Бозе – Эйнштейна и Ферми – Дирака. Вырожденный идеальный газ. Электроны в металлах. Уровень Ферми. Статистическая теория Эйнштейна идеального кристалла, теория Дебая. Точечные дефекты кристаллических решеток. Равновесные и неравновесные дефекты. Вычисление сумм по состояниям для кристаллов с различными точечными дефектами. Нестехиометрические соединения и их термодинамическое описание. Основные положения термодинамики неравновесных процессов. Локальное равновесие. Флуктуации. Функция диссипации. Потоки и силы. Скорость производства энтропии. Зависимость скорости производства энтропии от обобщенных потоков и сил. Соотношения взаимности Онсагера. Стационарное состояние системы и теорема Пригожина. Термодиффузия и её описание в неравновесной термодинамике. Уравнение Чепмена – Энскога.

5. Макрокинетика, механизмы сложных химических процессов, физико-химическая гидродинамика, растворение и кристаллизация

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. Реакции переменного порядка. Кинетика сложных химических реакций. Принцип независимости элементарных стадий. Кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций. Квазистационарное приближение. Метод Боденштейна – Тёмкина. Кинетика гомогенных каталитических и ферментативных реакций. Уравнение Михаэлиса – Ментен. Цепные реакции. Кинетика неразветвленных и разветвленных цепных реакций. Кинетические особенности разветвленных цепных реакций. Предельные явления в разветвленных цепных реакциях. Полуостров воспламенения, период индукции. Тепловой взрыв. Реакции в потоке. Реакции идеального вытеснения и идеального смешения. Колебательные реакции. Роль диффузии в кинетике гетерогенных реакций. Кинетика гетерогенных каталитических реакций. Различные режимы протекания реакций (кинетическая и внешняя кинетическая области, области внешней и внутренней диффузии). Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса. Энергия активации и способы её определения.

6. Динамика элементарного акта химических реакций. Механизмы реакции с участием активных частиц. Связь реакционной способности реагентов с их строением и условиями протекания химической реакции

Элементарные акты химических реакций и физический смысл энергии активации. Термический и нетермический пути активации молекул. Обмен энергией (поступательной, вращательной и колебательной) при столкновениях молекул. Время релаксации в молекулярных системах. 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. Различные типы химических реакций. Мономолекулярные реакции в газах, схема Линдемана – Христиансена. Теория РРКМ. Бимолекулярные и тримолекулярные реакции, зависимость предэкспоненциального множителя от температуры. Реакции в растворах, влияние растворителя и заряда реагирующих частиц. Клеточный эффект и сольватация. Фотохимические и радиационнохимические реакции. Элементарные фотохимические процессы. Эксимеры и эксиплексы. Изменение физических и химических свойств молекул при электронном возбуждении. Квантовый выход. Закон Эйнштейна – Штарка.

7. Итоговое контрольное мероприятие

Осуществляется Итоговое мероприятие по дисциплине согласно Вопросам для промежуточной аттестации.

6. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Освоение дисциплины требует систематического изучения всех тем в той последовательности, в какой они указаны в рабочей программе.

Основными видами учебной работы являются аудиторские занятия. Их цель - расширить базовые знания обучающихся по осваиваемой дисциплине и систему теоретических ориентиров для последующего более глубокого освоения программного материала в ходе самостоятельной работы. Обучающемуся важно помнить, что контактная работа с преподавателем эффективно помогает ему овладеть программным материалом благодаря расстановке необходимых акцентов и удержанию внимания интонационными модуляциями голоса, а также подключением аудио-визуального механизма восприятия информации.

Самостоятельная работа преследует следующие цели:

- закрепление и совершенствование теоретических знаний, полученных на лекционных занятиях;
- формирование навыков подготовки текстовой составляющей информации учебного и научного назначения для размещения в различных информационных системах;
- совершенствование навыков поиска научных публикаций и образовательных ресурсов, размещенных в сети Интернет;
- самоконтроль освоения программного материала.

Обучающемуся необходимо помнить, что результаты самостоятельной работы контролируются преподавателем во время проведения мероприятий текущего контроля и учитываются при промежуточной аттестации.

Обучающимся с ОВЗ и инвалидов предоставляется возможность выбора форм проведения мероприятий текущего контроля, альтернативных формам, предусмотренным рабочей программой дисциплины. Предусматривается возможность увеличения в пределах 1 академического часа времени, отводимого на выполнение контрольных мероприятий.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине предусматривает предоставление информации в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации.

При проведении текущего контроля применяются оценочные средства, обеспечивающие передачу информации, от обучающегося к преподавателю, с учетом психофизиологических особенностей здоровья обучающихся.

7. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

При самостоятельной работе обучающимся следует использовать:

- конспекты лекций;
- литературу из перечня основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля);
- текст лекций на электронных носителях;
- ресурсы информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимые для освоения дисциплины;
- лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение из перечня информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине;
- методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы

Основная:

1. Термодинамика необратимых процессов и нелинейная динамика : учебное пособие для вузов / Э. М. Кольцова, Л. С. Гордеев, Ю. Д. Третьяков, А. А. Вертегел. — 2-е изд., перераб. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2019. — 430 с. — (Авторский учебник). — ISBN 978-5-534-06923-5. — Текст : электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. <https://www.urait.ru/bcode/420456>
2. Физическая химия. Теория и практика выполнения расчетных работ. Часть 2. Химическое и фазовое равновесие / Е. И. Степановских, Т. В. Виноградова, Л. А. Брусницына [и др.] ; под редакцией В. Ф. Марков. — Екатеринбург : Уральский федеральный университет, ЭБС АСВ, 2016. — 160 с. — ISBN 978-5-7996-1691-5. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. <http://www.iprbookshop.ru/66612.html>
3. Адсорбция, адсорбенты и адсорбционные процессы в нанопористых материалах/Рос. акад. наук. Отделение химии и наук о материалах, Науч. совет РАН по физ. химии, Ин-т физ. химии и электрохимии.- Москва:Издательская группа "Граница",2011, ISBN 978-5-94691-460-4.-489б.-Библиогр. в конце глав
4. Физико-химические методы анализа: Лабораторный практикум : учебно-методическое пособие / Г. К. Лупенко, А. И. Апарнев, Т. П. Александрова, А. А. Казакова. — 2-е изд. — Новосибирск : Новосибирский государственный технический университет, 2017. — 87 с. — ISBN 978-5-7782-3370-6. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. <http://www.iprbookshop.ru/91709>
5. Физическая химия. Теория и практика выполнения расчетных работ. Часть 1. Экстенсивные свойства гомогенных систем / Е. И. Степановских, Т. В. Виноградова, Л. А. Брусницына [и др.] ; под редакцией В. Ф. Марков. — Екатеринбург : Уральский федеральный университет, ЭБС АСВ, 2016. — 136 с. — ISBN 978-5-7996-1689-2. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. <http://www.iprbookshop.ru/66611.html>

Дополнительная:

1. Спектроскопия, кристаллохимия и реальная структура минералов и их аналогов:сборник статей/сост. В. П. Морозов.-Казань:Издательство Казанского университета,1990, ISBN 5-7464-0581-7.-182.-Библиогр. в конце ст.
2. Электрохимические методы исследования в термодинамике металлических систем/А. Г. Морачевский [и др.] ; рец.: В. м. Глазов, А. С. Пашинкин.-Москва:ИКЦ "Академкнига",2003, ISBN 5-94628-064-3.-334.
3. Термодинамика и кинетика металлургических процессов: физико-химические расчеты по термодинамике и кинетике поведения газов и неметаллических включений в стали : практикум / Г. И. Котельников, А. В. Павлов, К. Л. Косырев [и др.]. — Москва : Издательский Дом МИСиС, 2013. — 45 с. — ISBN 978-5-87623-577-0. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. <http://www.iprbookshop.ru/106994>
4. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса для химиков:учебник для химических специальностей вузов/Ю. М. Воловенко [и др.].-Москва:ICSPF PRESS,2011, ISBN 978-5-903078-34-9.-69410.-Библиогр.: с. 680

9. Перечень ресурсов сети Интернет, необходимых для освоения дисциплины

<http://http://www.chem.msu.ru/cgi-bin/tkv.pl> Электронная база данных термодинамических констант веществ «ТКВ»

<https://sciencejournals.ru/journal/fizkhim/> Журнал физической химии

<https://www.elibrary.ru/defaultx.asp?ysclid=ljpt28mfhe598602537> Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU

<http://www.chem.msu.ru/rus/handbook/ivtan/welcome.html> База данных Ивтантермо

<http://old.iupac.org/reports/1993/homann/index.html> Список физико-химических величин системы СИ с обозначениями и размерностью на официальном сайте ИЮПАК (IUPAC)

<https://goldbook.iupac.org/> Глоссарий физико-химических терминов ИЮПАК (IUPAC Gold Book) на официальном сайте ИЮПАК (IUPAC)

<https://iupac.org/what-we-do/books/greenbook/> Книга "Величины, единицы и символы в физической химии" (IUPAC Green Book) на официальном сайте ИЮПАК (IUPAC)

<http://www.prometeus.nsc.ru/sciguide/page0609.ssi?ysclid=ljpt5jqlo4486999042> SciGuide

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

Образовательный процесс по дисциплине **Физическая химия** предполагает использование следующего программного обеспечения и информационных справочных систем: презентационные материалы (слайды по темам лекционных и практических занятий); доступ в режиме on-line в Электронную библиотечную систему (ЭБС); доступ в электронную информационно-образовательную среду университета; тестирование

При освоении материала и выполнения заданий по дисциплине рекомендуется использование материалов, размещенных в Личных кабинетах обучающихся ЕТИС ПГНИУ (student.psu.ru).

При организации дистанционной работы и проведении занятий в режиме онлайн могут использоваться:

система видеоконференцсвязи на основе платформы BigBlueButton (<https://bigbluebutton.org/>).

система LMS Moodle (<http://e-learn.psu.ru/>), которая поддерживает возможность использования текстовых материалов и презентаций, аудио- и видеоконтент, а так же тесты, проверяемые задания, задания для совместной работы.

система тестирования Indigo (<https://indigotech.ru/>).

11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

1. Лекционные занятия: аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, меловой (и) или маркерной доской.
2. Занятий семинарского типа (семинары, практические занятия): аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, меловой (и) или маркерной доской.
3. Для групповых (индивидуальных) консультаций: аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, меловой (и) или маркерной доской.
4. Для проведения текущего контроля: аудитория, оснащенная меловой (и) или маркерной доской.
5. Самостоятельная работа: аудитория для самостоятельной работы, оснащенная компьютерной

техникой с возможностью подключения к сети «Интернет», обеспеченная доступом в электронную информационно-образовательную среду университета.

Помещения Научной библиотеки ПГНИУ

Помещения научной библиотеки ПГНИУ для обеспечения самостоятельной работы обучающихся:

1. Научно-библиографический отдел, корп.1, ауд. 142. Оборудован 3 персональными компьютера с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

2. Читальный зал гуманитарной литературы, корп. 2, ауд. 418. Оборудован 7 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

3. Читальный зал естественной литературы, корп.6, ауд. 107а. Оборудован 5 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

4. Отдел иностранной литературы, корп.2 ауд. 207. Оборудован 1 персональным компьютером с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

5. Библиотека юридического факультета, корп.9, ауд. 4. Оборудована 11 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

6. Читальный зал географического факультета, корп.8, ауд. 419. Оборудован 6 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

Все компьютеры, установленные в помещениях научной библиотеки, оснащены следующим программным обеспечением:

Операционная система ALT Linux;

Офисный пакет Libreoffice.

Справочно-правовая система «КонсультантПлюс»

**Фонды оценочных средств для аттестации по дисциплине
Физическая химия**

Планируемые результаты обучения по дисциплине и критерии их оценивания

| Планируемый результат обучения | Знания, умения и навыки | Критерии оценивания результатов обучения |
|--|--|---|
| <p>УРО.3 Проводит анализ новых направлений исследований и обосновывает перспективы их проведения в соответствующей области знаний</p> | <p>Знает основные современные экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования, используемые при решении профессиональных задач. Умеет анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач. Владеет навыками планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов.</p> | <p align="center">Неудовлетворител Отсутствие знаний, умений и навыков.</p> <p align="center">Удовлетворительн Фрагментарные представления об основных современных экспериментальных и расчетно-теоретических методах исследования, используемых при решении профессиональных задач. В целом успешное, но не систематическое использование умения анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач. Фрагментарное применение навыков планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов.</p> <p align="center">Хорошо Сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления об основных современных экспериментальных и расчетно-теоретических методах исследования, используемых при решении профессиональных задач. Сформированное умение анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач. В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применение навыков планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов.</p> <p align="center">Отлично Сформированные систематические представления об основных современных экспериментальных и расчетно-теоретических методах исследования, используемых при решении профессиональных задач. Сформированное умение анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и</p> |

| Планируемый результат обучения | Знания, умения и навыки | Критерии оценивания результатов обучения |
|--------------------------------|-------------------------|--|
| | | <p style="text-align: center;">Отлично</p> практических задач. Успешное и систематическое применение навыков планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов. |

Оценочные средства

Схема доставки : Базовая

Вид мероприятия промежуточной аттестации : Экзамен

Способ проведения мероприятия промежуточной аттестации : Тест

**Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации :
время на проведение теста 2**

Показатели оценивания

| | |
|--|-------------------------|
| Оценка «НЕУДОВЛЕТВОРИТЕЛЬНО» выставляется студенту, который отвечает правильно менее чем на 41 % из общего числа вопросов в ходе тестирования. Это соответствует тому, что студент не знает значительной части программного, в том числе лекционного, практического и лабораторного материала и не может самостоятельно ответить на вопросы в тесте. | Неудовлетворител |
| Оценка «УДОВЛЕТВОРИТЕЛЬНО» выставляется студенту, который обнаруживает знание основного материала, но не знает его деталей, допускает неточности, недостаточно правильные формулировки, излагает материал с нарушением последовательности. Таким образом студент дает правильные ответы на вопросы в тесте от 41 % до 60 % из общего числа вопросов. | Удовлетворительн |
| Оценка «ХОРОШО» выставляется студенту, твердо знающему программный, грамотно и по существу отвечающему на тестовые вопросы. Правильные ответы составляют от 61% до 80 % от общего числа тестовых вопросов. | Хорошо |
| Оценка «ОТЛИЧНО» выставляется студенту, глубоко и прочно усвоившему программный материал, последовательно, четко и самостоятельно отвечающему на тестовые вопросы. Правильные ответы составляют от 81% до 100 % от общего числа тестовых вопросов. | Отлично |

Перечень вопросов для проведения промежуточной аттестации

СПИСОК ВОПРОСОВ ДЛЯ ПОДГОТОВКИ К ИТОГОВОМУ ТЕСТИРОВАНИЮ

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. Теплота, работа, внутренняя энергия, энтальпия, теплоемкость. Закон Гесса. Стандартные состояния

и стандартные теплоты химических реакций.

4. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Формула Кирхгоффа. Таблицы стандартных термодинамических величин и их использование в термодинамических расчетах.
5. Энтропия и её изменения в обратимых и необратимых процессах. Теорема Карно – Клаузиуса. Различные шкалы температур.
6. Фундаментальные уравнения Гиббса. Характеристические функции. Энергия Гиббса, энергия Гельмгольца.
7. Уравнения Максвелла. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов. Уравнение Гиббса – Гельмгольца. Работа и теплота химического процесса. Химические потенциалы.
8. Закон действующих масс. Различные виды констант равновесия и связь между ними. Изотерма Вант-Гоффа. Уравнения изобары и изохоры химической реакции.
9. Расчеты констант равновесия химических реакций с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций. Приведенная энергия Гиббса и её использование для расчетов химических равновесий.
10. Понятия компонента, фазы, степени свободы. Правило фаз Гиббса.
11. Однокомпонентные системы. Диаграммы состояния воды, серы, фосфора и углерода. Фазовые переходы первого рода. Уравнение Клапейрона – Клаузиуса.
12. Двухкомпонентные системы. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем. Равновесие жидкость – пар в двухкомпонентных системах. Законы Гиббса – Коновалова. Азеотропные смеси. Фазовые переходы второго рода. Уравнения Эренфеста.
13. Трехкомпонентные системы. Треугольник Гиббса. Диаграммы плавкости трехкомпонентных систем.
14. Адсорбент, адсорбат. Виды адсорбции. Структура поверхности и пористость адсорбента. Локализованная и делокализованная адсорбция.
15. Мономолекулярная и полимолекулярная адсорбция. Динамический характер адсорбционного равновесия. Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Генри. Константа адсорбционного равновесия.
16. Уравнение Ленгмюра. Адсорбция из растворов. Уравнение Брунауэра – Эмета – Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента.
17. Хроматография, различные её типы (газовая, жидкостная, противоточная и др.).
18. Свободная поверхностная энергия, поверхностное натяжение, избыточные термодинамические функции поверхностного слоя. Изменение поверхностного натяжения на границе жидкость – пар в зависимости от температуры. Связь свободной поверхностной энергии с теплотой сублимации (правило Стефана), модулем упругости и другими свойствами вещества.
19. Эффект Ребиндера: изменение прочности и пластичности твердых тел вследствие снижения их поверхностной энергии.
20. Капиллярные явления. Зависимость давления пара от кривизны поверхности жидкости. Капиллярная конденсация. Зависимость растворимости от кривизны поверхности растворяющихся частиц (закон Гиббса – Оствальда – Фрейндлиха).
21. Особенности строения поверхности кристаллов и жидкостей, структура границы раздела конденсированных фаз. Молекулы и кластеры на поверхности. Структура адсорбционных слоев.
22. Способы выражения состава растворов. Идеальные растворы, общее условие идеальности растворов. Давления насыщенного пара жидких растворов, закон Рауля.
23. Неидеальные растворы и их свойства. Метод активностей. Коэффициенты активности и их определение. Стандартные состояния при определении химических потенциалов компонент растворов. Симметричная и несимметричная системы отсчета.
24. Коллигативные свойства растворов. Изменение температуры замерзания растворов, криоскопия.

25. Зонная плавка. Осмотические явления. Парциальные мольные величины, их определение для бинарных систем. Уравнение Гиббса – Дюгема. Функция смешения для идеальных и неидеальных растворов. Предельно разбавленные растворы, атермальные и регулярные растворы, их свойства.
26. Растворы электролитов. Ион-дипольное взаимодействие, как основной процесс, определяющий устойчивость растворов электролитов.
27. 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.
28. Условия электрохимического равновесия на границе раздела фаз и в электрохимической цепи. Термодинамика гальванического элемента. Электродвижущая сила, её выражение через энергию Гиббса реакции в элементе. Уравнения Нернста и Гиббса – Гельмгольца для равновесной электрохимической цепи.
29. Понятие электродного потенциала. Определение коэффициентов активности на основе измерений ЭДС гальванического элемента. Электропроводность растворов электролитов.
30. Удельная и эквивалентная электропроводность. Числа переноса, подвижность ионов и закон Кольрауша. Электрофоретический и релаксационные эффекты.
31. Термодинамическая вероятность и её связь с энтропией. Распределение Максвелла – Больцмана. Статистические средние значения макроскопических величин. Ансамбли Гиббса.
32. Микроканоническое и каноническое распределения. Расчет числа состояний в квазиклассическом приближении. Каноническая функция распределения Гиббса. Сумма по состояниям как статистическая характеристическая функция.
33. Статистические выражения для основных термодинамических функций. Молекулярная сумма по состояниям и сумма по состояниям макроскопической системы. Поступательная, вращательная, электронная и колебательная суммы по состояниям.
34. Статистический расчет энтропии. Постулат Планка и абсолютная энтропия. Приближение «жесткий ротатор – гармонический осциллятор».
35. Составляющие внутренней энергии, теплоёмкости и энтропии, обусловленные поступательным, вращательным и колебательным движением.
36. Расчет констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики. Статистическая термодинамика реальных систем.
37. Потенциалы межмолекулярного взаимодействия и конфигурационный интеграл для реального газа. Распределения Бозе – Эйнштейна и Ферми – Дирака. Вырожденный идеальный газ.
38. Электроны в металлах. Уровень Ферми. Статистическая теория Эйнштейна идеального кристалла, теория Дебая.
39. Точечные дефекты кристаллических решеток. Равновесные и неравновесные дефекты. Вычисление сумм по состояниям для кристаллов с различными точечными дефектами.
40. Нестехиометрические соединения и их термодинамическое описание. Основные положения термодинамики неравновесных процессов.
41. Локальное равновесие. Флуктуации. Функция диссипации. Потoki и силы. Скорость производства энтропии. Зависимость скорости производства энтропии от обобщенных потоков и сил. Соотношения взаимности Онсагера.
42. Стационарное состояние системы и теорема Пригожина. Термодиффузия и её описание в неравновесной термодинамике. Уравнение Чепмена – Энского.
43. 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. Реакции переменного порядка.
44. Кинетика сложных химических реакций. Принцип независимости элементарных стадий.

45. Кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций. Квазистационарное приближение. Метод Боденштейна – Тёмкина.
46. Кинетика гомогенных каталитических и ферментативных реакций. Уравнение Михаэлиса – Ментен.
47. Цепные реакции. Кинетика неразветвленных и разветвленных цепных реакций. Кинетические особенности разветвленных цепных реакций. Предельные явления в разветвленных цепных реакциях. Полуостров воспламенения, период индукции. Тепловой взрыв.
48. Реакции в потоке. Реакции идеального вытеснения и идеального смешения. 49. Колебательные реакции.
50. Роль диффузии в кинетике гетерогенных реакций. Кинетика гетерогенных каталитических реакций. Различные режимы протекания реакций (кинетическая и внешняя кинетическая области, области внешней и внутренней диффузии).
51. Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса. Энергия активации и способы её определения.
52. Элементарные акты химических реакций и физический смысл энергии активации. Термический и нетермические пути активации молекул.
53. Обмен энергией (поступательной, вращательной и колебательной) при столкновениях молекул. Время релаксации в молекулярных системах.
54. Теория активных столкновений. Сечение химических реакций. Формула Траутца – Льюиса. Расчет предэкспоненциального множителя по молекулярным постоянным. Стерический фактор.
55. 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.
56. Различные типы химических реакций. Мономолекулярные реакции в газах, схема Линдемана – Христиансена. Теория РРКМ. Бимолекулярные и тримолекулярные реакции, зависимость предэкспоненциального множителя от температуры.
57. Реакции в растворах, влияние растворителя и заряда реагирующих частиц. Клеточный эффект и сольватация.
58. Фотохимические и радиационнохимические реакции. Элементарные фотохимические процессы. Эксимеры и эксиплексы. Изменение физических и химических свойств молекул при электронном возбуждении. Квантовый выход. Закон Эйнштейна – Штарка.