

МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Тверской государственный технический университет»  
(ТвГТУ)

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по НИИД



А.А. Артемьев

2022 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА**  
дисциплины образовательного компонента  
«Физическая химия»

Научная специальность подготовки научных и  
научно-педагогических кадров в аспирантуре

**1.4.4. Физическая химия**

Форма обучения – очная.

Химико-технологический факультет.

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации».

Семестры 6, 7.

Тверь 2022

Рабочая программа дисциплины соответствует ОХОП подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре в части требований к результатам обучения по дисциплине и учебному плану.

Разработчик программы:  
заведующий кафедрой БХС



М.Г. Сульман

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры БХС  
«29» августа 2022 г., протокол № 1.

Заведующий кафедрой БХС



М.Г. Сульман

Согласовано  
Начальник отдела аспирантуры  
и докторантуры



О.И. Туманова

Начальник отдела  
комплектования  
зональной научной библиотеки  
Жмыхова



О.Ф.

## 1. Цели и задачи дисциплины

**Целью** дисциплины является углубленное изучение теоретических и методологических основ физической химии и формирование системных знаний в сфере стратегических направлений развития химической термодинамики равновесных и неравновесных систем, гетерогенных и фазовых равновесий, теории растворов, теории межмолекулярных взаимодействий.

**Задачами** дисциплины являются:

- формирование способности к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач;
- углубленное изучение основ энергетических и структурно-динамических параметров строения молекул и молекулярных соединений, термодинамических и кинетических параметров химических превращений;
- формирование представления об электронной структуре, поверхностях потенциальной и свободной энергии, реакционной способности и динамике превращений химических соединений, находящихся в различном окружении, в том числе, в кластерах, клатратах, твердых и жидкокристаллических матрицах;
- развитие и закрепление навыков профессиональной деятельности исследователя, способного адекватно решать исследовательские и практические задачи в своей профессиональной деятельности;
- приобретение навыков анализа и интерпретации данных, полученных в процессе исследований.

## 2. Место дисциплины в структуре ОП

Дисциплина относится к Компоненту 2 ОП ВО «Образовательный компонент» в соответствии с приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 20.10.2021 № 951 «Об утверждении федеральных государственных требований к структуре программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре), условиям их реализации, срокам освоения этих программ с учетом различных форм обучения, образовательных технологий и особенностей отдельных категорий аспирантов (адъюнктов)» (Зарегистрирован в Минюсте РФ 23.11.2021 № 65943).

Приобретенные знания в рамках данной дисциплины необходимы для подготовки к сдаче кандидатского экзамена, а также при подготовке к итоговой аттестации.

Промежуточная аттестация осуществляется в 6 и 7 семестрах.

## 3. Планируемые результаты обучения

### 3.1 Компетенции, закрепленные в ОХОП:

ОК-5: готов к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования.

### 3.2. Показатели достижения компетенций:

#### Знать:

31.1. Современные направления развития физической химии с теоретической и практической точек зрения;

31.2. Основные положения теории химического строения молекул, взаимосвязи строения молекул с их реакционной способностью;

31.3. Основы химической термодинамики и кинетики в закрытых и открытых системах.

#### Уметь:

У1.1. Выбирать метод исследования и изучения заданных физико-химических параметров молекул и систем.

У1.2. Использовать основные методы трактовки, графического представления и анализа полученных экспериментальных данных.

### 3.3. Технологии, обеспечивающие формирование компетенций

Проведение лекционных и практических занятий, самостоятельная работа под руководством преподавателя.

## 3. Трудоемкость и виды учебной работы

Таблица 1. Распределение трудоемкости по видам учебной работы

Вид учебной работы	Зачетные единицы	Академические часы
<b>6 семестр</b>		
<b>Общая трудоемкость</b>	2	72
<b>Аудиторные занятия (всего)</b>		
В том числе:		
Лекции		16
Практические занятия (ПЗ)		16
Лабораторные работы (ЛР)		не предусмотрены
<b>Самостоятельная работа обучающихся (всего)</b>		40
В том числе:		
Курсовая работа		не предусмотрена
Курсовой проект		не предусмотрен
Расчетно-графические работы		не предусмотрены
Реферат		не предусмотрен
Другие виды самостоятельной работы: - подготовка к практическим занятиям		30
Текущий контроль успеваемости и промежуточная аттестация (зачет)		10
<b>7 семестр</b>		
<b>Общая трудоемкость</b>	3	108
<b>Аудиторные занятия (всего)</b>		
В том числе:		
Лекции		16
Практические занятия (ПЗ)		16
Лабораторные работы (ЛР)		не предусмотрены
<b>Самостоятельная работа обучающихся (всего)</b>		40

В том числе:		
Курсовая работа		не предусмотрена
Курсовой проект		не предусмотрен
Расчетно-графические работы		не предусмотрены
Реферат		не предусмотрен
Другие виды самостоятельной работы: - подготовка к практическим занятиям		40
Текущий контроль успеваемости и промежуточная аттестация (экзамен)		36

## 5. Структура и содержание дисциплины

### 5.1. Структура дисциплины

Таблица 2. Модули, трудоемкость в часах и виды учебной работы

№	Наименование модуля	Труд-ть часы	Лекции	Практич. занятия	Лаб. работы	Сам. работа
<b>6 семестр</b>						
1	Строение вещества	72	16	16	-	40
	<b>6 семестр</b>	<b>72</b>	<b>16</b>	<b>16</b>	<b>-</b>	<b>40</b>
<b>7 семестр</b>						
2	Химическая термодинамика	54	8	8	-	20+18(экз)
3	Кинетика химических реакций	54	8	8	-	20+18(экз.)
	<b>7 семестр</b>	<b>108</b>	<b>16</b>	<b>16</b>	<b>-</b>	<b>40+36(экз)</b>
<b>Всего</b>		<b>180</b>	<b>32</b>	<b>32</b>	<b>-</b>	<b>80+36(экз)</b>

### 5.2. Содержание дисциплины

#### МОДУЛЬ 1. «СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА»

Основные положения классической теории химического строения. Структурная формула и граф молекулы. Изомерия. Конформации молекул. Связь строения и свойств молекул.

Механическая модель молекулы. Потенциалы парных взаимодействий. Методы молекулярной механики и молекулярной динамики при анализе строения молекул. Общие принципы квантово-механического описания молекулярных систем. Стационарное уравнение Шредингера для свободной молекулы. Адиабатическое приближение. Электронное волновое уравнение. Потенциальные кривые и поверхности потенциальной энергии. Их свойства. Равновесные конфигурации молекул. Структурная изомерия. Оптические изомеры. Колебания молекул. Нормальные колебания, амплитуды и частоты колебаний, частоты основных колебательных переходов. Колебания с большой амплитудой. Вращение молекул. Различные типы молекулярных волчков. Вращательные уровни энергии.

Электронное строение атомов и молекул. Одноэлектронное приближение. Атомные и молекулярные орбитали. Электронные конфигурации и термы атомов. Правило Хунда. Электронная плотность. Корреляционные орбитальные диаграммы для двухатомных молекул. Теорема Купманса.

Пределы применимости одноэлектронного приближения. Интерпретация строения молекул на основе орбитальных моделей и исследования распределения электронной плотности. Локализованные молекулярные орбитали. Гибридизация. Электронная корреляция в атомах и молекулах. Ее проявления в свойствах молекул. Метод конфигурационного взаимодействия.

Представления о зарядах на атомах и порядках связей. Различные методы выделения атомов в молекулах. Корреляции дескрипторов электронного строения и свойств молекул. Индексы реакционной способности. Теория граничных орбиталей.

Общие свойства симметрии волновых функций и потенциальных поверхностей молекул. Классификация квантовых состояний атомов и молекул по симметрии. Симметрия атомных и молекулярных орбиталей,  $\sigma$  - и  $\pi$  -орбитали.  $\pi$  -Электронное приближение. Влияние симметрии равновесной конфигурации ядер на свойства молекул и их динамическое поведение. Орбитальные корреляционные диаграммы. Сохранение орбитальной симметрии при химических реакциях.

Дипольный момент и поляризуемость молекул. Магнитный момент и магнитная восприимчивость. Эффекты Штарка и Зеемана. Магнитно-резонансные методы исследования строения молекул. Химический сдвиг. Оптические спектры молекул. Вероятности переходов и правила отбора при переходах между различными квантовыми состояниями молекул. Связь спектров молекул с их строением. Определение структурных характеристик молекул из спектроскопических данных.

Основные составляющие межмолекулярных взаимодействий. Молекулярные комплексы. Ван-дер-ваальсовы молекулы. Кластеры атомов и молекул. Водородная связь. Супермолекулы и супрамолекулярная химия.

Строение молекул простых и координационных неорганических соединений. Полиядерные комплексные соединения. Строение основных типов органических и элементоорганических соединений. Соединения включения. Полимеры и биополимеры.

Структурная классификация конденсированных фаз. Идеальные кристаллы. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Реальные кристаллы. Типы дефектов в реальных кристаллах. Кристаллы с неполной упорядоченностью. Доменные структуры. Симметрия кристаллов. Кристаллографические точечные группы симметрии, типы решеток, сингонии. Понятие о пространственных группах кристаллов. Индексы кристаллографических граней. Атомные, ионные, молекулярные и другие типы кристаллов. Цепочечные, каркасные и слоистые структуры.

Строение твердых растворов. Упорядоченные твердые растворы. Аморфные вещества. Особенности строения полимерных фаз.

Металлы и полупроводники. Зонная структура энергетического спектра кристаллов. Поверхность Ферми. Различные типы проводимости. Колебания в кристаллах. Фононы.

Жидкости. Мгновенная и колебательно-усредненная структура жидкости. Ассоциаты и кластеры в жидкостях. Флуктуации и корреляционные функции.

Структура простых жидкостей. Растворы неэлектролитов. Структура воды и водных растворов. Структура жидких электролитов. Мицеллообразование и строение мицелл.

Особенности строения поверхности кристаллов и жидкостей, структура границы раздела конденсированных фаз. Молекулы и кластеры на поверхности. Структура адсорбционных слоев.

## **МОДУЛЬ 2. «ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА»**

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.

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. Химическое равновесие. 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 ее использование для расчетов химических равновесий. Равновесие в поле внешних сил. Полные потенциалы.

Микро- и макросостояния химических систем. Фазовые Г - и  $\mu$ -пространства. Эргодическая гипотеза. Термодинамическая вероятность и ее 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, теплоемкости 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 ее описание в неравновесной термодинамике. Уравнение Чепмена – Энскога.

Различные типы растворов. Способы выражения состава растворов. Идеальные растворы, общее условие идеальности растворов. Давление 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 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.

Гетерогенные системы. 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.

Адсорбция. 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 Лэнгмюра. Адсорбция из растворов. Уравнение Брунауэра – Эмета – Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента. Хроматография, различные ее типы (газовая, жидкостная, противоточная и др.). Поверхность раздела фаз. 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).

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. 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

### **МОДУЛЬ 3. «КИНЕТИКА ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ»**

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. Реакции переменного порядка.

Феноменологическая кинетика сложных химических 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.

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.

Макрокинетика. 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 ее определения. Элементарные акты химических реакций и физический смысл энергии активации. Термический и нетермические 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 Линдеман –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 радиационно-химические реакции. Элементарные фотохимические процессы. Эксимеры и эксиплексы. Изменение физических и химических свойств молекул при электронном возбуждении. Квантовый выход. Закон Эйнштейна – Штарка.

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. Полярография. Ток обмена и перенапряжение. Зависимость скорости стадии разряда от строения двойного слоя. Химические источники тока, их виды. Электрохимическая коррозия. Методы защиты от коррозии.

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. Современные теории функционирования

гетерогенных катализаторов. Основные промышленные каталитические процессы.

### **5.3. Лабораторные работы**

Учебным планом лабораторные работы не предусмотрены.

## 5.4. Практические занятия

Таблица 3. Тематика практических занятий и их трудоемкость

Порядковый номер модуля. Цели практических занятий	Примерная тематика практического занятия	Трудо- емкость в часах
<p><b>Модуль 1</b> <b>Цель:</b> расширить знания в области строения молекул</p>	<p>Методы молекулярной механики и молекулярной динамики при анализе строения молекул. Потенциальные кривые и поверхности потенциальной энергии. Интерпретация строения молекул на основе орбитальных моделей и исследования распределения электронной плотности. Магнитно-резонансные методы исследования строения молекул. Определение структурных характеристик молекул из спектроскопических данных. Кристаллографические точечные группы симметрии, типы решеток, сингонии. Понятие о пространственных группах кристаллов. Индексы кристаллографических граней. Зонная структура энергетического спектра кристаллов. Структура жидких электролитов. Молекулы и кластеры на поверхности. Структура адсорбционных слоев.</p>	16
<p><b>Модуль 2</b> <b>Цель:</b> расширить знания в области химической термодинамики</p>	<p>Таблицы стандартных термодинамических величин и их использование в термодинамических расчетах. Расчеты констант равновесия химических реакций с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций. Расчет числа состояний в квазиклассическом приближении. Расчет констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики. Статистическая теория Эйнштейна идеального кристалла, теория Дебая. Вычисление сумм по состояниям для кристаллов с различными точечными дефектами. Термодиффузия и ее описание в неравновесной термодинамике. Структура поверхности и пористость адсорбента. Локализованная и делокализованная адсорбция. Хроматография, различные ее типы (газовая, жидкостная, противоточная и др.).</p>	8
<p><b>Модуль 3</b> <b>Цель:</b> расширить знания в области химической кинетики</p>	<p>Способы определения скорости реакции. Константа скорости и порядок реакции. Кинетика гомогенных каталитических и</p>	8

	ферментативных реакций. Кинетика гетерогенных каталитических реакций. Расчет предэкспоненциального множителя по молекулярным постоянным. Использование молекулярных постоянных при расчете константы скорости. Роль адсорбции в кинетике гетерогенных каталитических реакций. Основные промышленные каталитические процессы.	
--	---	--

## 6. Самостоятельная работа обучающихся и текущий контроль успеваемости

### 6.1. Цели самостоятельной работы

Формирование способностей к самостоятельному познанию и обучению, поиску литературы, обобщению, оформлению и представлению полученных результатов, их критическому анализу, поиску новых и неординарных решений, аргументированному отстаиванию своих предложений, умений подготовки выступлений и ведения дискуссий.

### 6.2. Организация и содержание самостоятельной работы

Самостоятельная работа заключается в проработке отдельных тем курса по заданию преподавателя по рекомендованной им учебной и научной литературе, методическим разработкам кафедры; подготовке докладов и презентации; подготовке к зачету и экзамену.

Тематика самостоятельной работы определяется ведущим преподавателем и имеет профессионально-ориентированный характер и непосредственную связь изучаемых вопросов с последующей профессиональной деятельностью выпускника.

В рамках промежуточной аттестации выполняется подготовка презентации и текста доклада по заданной теме. После вводных лекций, в которых обозначается содержание дисциплины, ее проблематика и практическая значимость, аспирантам выдаются возможные темы докладов в рамках предметной области дисциплины, из которых аспиранты выбирают тему своего доклада, при этом аспирантом может быть предложена и своя тематика. Тематика доклада должна иметь проблемный и профессионально ориентированный характер, требующей самостоятельной творческой работы аспиранта.

## 7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

### 7.1. Основная литература

1. Морачевский, А.Г. Физическая химия. Термодинамика химических реакций : учебное пособие для вузов по направлению подготовки магистров "Техническая физика" / А.Г. Морачевский, Е.Г. Фирсова. - 2-е изд. ; испр. - Санкт-Петербург [и др.] : Лань, 2022. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - ЭБС Лань. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке.

- Дата обращения: 27.07.2022. - ISBN 978-5-8114-1858-9. - URL: <https://e.lanbook.com/book/212027> . - (ID=110505-0)

2. Морачевский, А.Г. Физическая химия. Поверхностные явления и дисперсные системы : учебное пособие для вузов по направлению подготовки магистров "Техническая физика" / А.Г. Морачевский. - 2-е изд. ; стер. - Санкт-Петербург [и др.] : Лань, 2022. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - ЭБС Лань. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке.

- Дата обращения: 27.07.2022. - ISBN 978-5-8114-1857-2. - URL: <https://e.lanbook.com/book/212024> . - (ID=110501-0)

3. Морачевский, А.Г. Физическая химия. Гетерогенные системы : учебное пособие для вузов по направлению подготовки магистров «Техническая физика» / А.Г. Морачевский, Е.Г. Фирсова. - 2-е изд. ; стер. - Санкт-Петербург [и др.] : Лань, 2022. - ЭБС Лань. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 27.07.2022. - ISBN 978-5-8114-1859-6. - URL: <https://e.lanbook.com/book/213284> . - (ID=107004-0)

4. Эткинс, П. Физическая химия = Atkins Physical Chemistry : в 3 ч. : пер. с англ. : в составе учебно-методического комплекса. Ч. 1 : Равновесная термодинамика / П. Эткинс, д.Д. Паула. - Москва : Мир, 2007. - 494 с. : ил. - (Лучший зарубежный учебник). - Библиогр. в конце гл. - Текст : непосредственный. - ISBN 5-03-003786-1 : 352 p. - (ID=66467-1)

## 7.2. Дополнительная литература

1. Казин, В.Н. Физическая химия : учебное пособие для вузов / В.Н. Казин, Е.М. Плисс, А.И. Русаков. - 2-е изд. ; доп. и испр. - Москва : Юрайт, 2022. - (Высшее образование). - Образовательная платформа Юрайт. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 07.07.2022. - ISBN 978-5-534-11119-4. - URL: <https://urait.ru/book/fizicheskaya-himiya-495081> . - (ID=134410-0)

2. Сычев, С.Н. Высокоэффективная жидкостная хроматография: аналитика, физическая химия, распознавание многокомпонентных систем : учеб. пособие / С.Н. Сычев, В.А. Гаврилина. - Санкт-Петербург [и др.] : Лань, 2022. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - ЭБС Лань. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 18.08.2022. - ISBN 978-5-8114-1377-5. - URL: <https://e.lanbook.com/book/211127> . - (ID=105941-0)

3. Васюкова, А.Н. Типовые расчеты по физической и коллоидной химии : учебное пособие для бакалавров по дисциплинам : "Физическая и коллоидная химия" и "Химия дисперсных систем" / А.Н. Васюкова, О.П. Задачаина. - Санкт-Петербург [и др.] : Лань, 2019. - 139 с. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-8114-1605-9 : 781 p. - (ID=134360-2)

4. Экспериментальные методы физической химии. Лабораторный практикум : в составе учебно-методического комплекса : учебное пособие для химических спец. / В.А. Рогов [и др.]; под ред. В.Н. Парамона и В.А. Рогова. - 2-е изд. - Долгопрудный : Интеллект, 2018. - ил. - (УМК-ЛР). - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-91559-255-0 : 1490 p. - (ID=136264-3)

5. Механизмы гетерогенно-каталитических процессов с участием наночастиц палладия : учеб. пособие / Л.Ж. Никошвили [и др.]; Тверской гос. техн. ун-т. - Тверь : ТвГТУ, 2017. - 79 с. : ил. - Сервер. - Текст : электронный. - ISBN 978-5-7995-0909-5 : 0-00. - URL: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/122633> . - (ID=122633-1)
6. Механизмы гетерогенно-каталитических процессов с участием наночастиц палладия : учебное. пособие для магистров по направлению подготовки 18.04.01 "Химическая технология" и 04.04.01 "Химия" / Л.Ж. Никошвили [и др.]; Тверской гос. техн. ун-т. - Тверь : ТвГТУ, 2017. - 79 с. - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-7995-0909-5 : [б. ц.]. - (ID=123454-75)
7. Шкилева, И.П. Электрохимия. Растворы электролитов. Электрохимическая термодинамика : учеб. пособие : в составе учебно-методического комплекса / И.П. Шкилева, М.Ю. Ракитин, Э.М. Сульман; Тверской гос. техн. ун-т. - Тверь : ТвГТУ, 2015. - 95 с. : ил. - (УМК-У). - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-7995-0795-4 : [б. ц.]. - (ID=110730-75)
8. Матвеева, В.Г. Современные металлополимерные катализаторы : монография : в составе учебно-методического комплекса / В.Г. Матвеева, Э.М. Сульман; Тверской гос. техн. ун-т. - Тверь : ТвГТУ, 2001. - 93 с. : ил. - (УМК-У). - Текст : непосредственный. - ISBN 5-7995-0168-3 : 44 р. - (ID=7480-10)
9. Термические методы анализа : метод. указания к практ. занятиям и самостоятельной работе по курсу "Теорет. и эксперимент. методы исследования в химии" по направлению подготовки магистров 020100 Химия и 240100 Хим. технология : в составе учебно-методического комплекса / А.В. Быков [и др.]; Тверской гос. техн. ун-т, Каф. БТиХ. - Тверь : ТвГТУ, 2014. - (УМК-У). - Сервер. - Текст : электронный. - 0-00. - URL: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/104030> . - (ID=104030-1)
10. Термические методы анализа : метод. указания к практ. занятиям и самостоятельной работе по курсу "Теорет. и эксперимент. методы исследования в химии" по направлению подготовки магистров 020100 Химия и 240100 Хим. технология / А.В. Быков [и др.]; Тверской гос. техн. ун-т, Каф. БТиХ. - Тверь : ТвГТУ, 2014. - 47 с. : ил. - Текст : непосредственный. - 49 р. 80 к. - (ID=103811-95)
11. Физические методы исследования : учеб. пособие : в составе учебно-методического комплекса / А.В. Быков [и др.]; Тверской гос. техн. ун-т. - 1-е изд. - Тверь : ТвГТУ, 2010. - 159 с. : ил. - (УМК-У). - Библиогр.: с. 156 - 157. - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-7995-0517-2 : 101 р. - (ID=81497-115)
12. Физические методы исследования : учеб. пособие : в составе учебно-методического комплекса / А.В. Быков [и др.]; Тверской гос. техн. ун-т. - Тверь : ТвГТУ, 2010. - (УМК-У). - Сервер. - Текст : электронный. - ISBN 978-5-7995-0517-2 : 0-00. - (ID=81121-1)
13. Шершавина, А.А. Физическая и коллоидная химия. Методы физико-химического анализа : учеб. пособие / А.А. Шершавина. - Москва : Новое знание, 2005. - 799 с. : ил. - Библиогр. : с. 782 - 783. - Текст : непосредственный. - ISBN 5-94735-056-4 : 379 р. 05 к. - (ID=57746-10)



14. Современные проблемы физической химии / Ин-т физ. химии. - Москва : Граница, 2005. - 696 с. : ил. - Библиогр. в конце ст. - Текст : непосредственный. - ISBN 5-94691-139-2 : 200 p. - (ID=59746-1)

15. Промышленный катализ в лекциях : [сборник]. Вып. 2 : Введение в физическую химию формирования текстуры гетерогенных катализаторов. Кн. 2 / Б.В. Фенелонов, В.А. Пармон. Нанесенные металлические катализаторы / В.А. Семиколонов / под общ. ред. А.С. Носкова. - Москва : Калвис, 2005. - 115 с. - (Коллекция издательства). - Библиогр. в конце лекций. - Текст : непосредственный. - ISBN 5-89530-004-9 : 130 p. - (ID=58978-2)

16. Физическая химия : в 2 кн. Кн. 2 : Электрохимия. Химическая кинетика и катализ / авт. кол.: К.С. Краснов, Н.К. Воробьев, И.Н. Годнев [и др.] ; под ред. К.С. Краснова. - 3-е изд. ; испр. - Москва : Высшая школа, 2001. - 319 с. : ил. - ISBN 5-06-004026-7 : 65 p. - (ID=7774-5)

17. Физическая химия : в 2 кн. Кн. 1 : Строение вещества. Термодинамика / авт. кол.: К.С. Краснов, Н.К. Воробьев, И.Н. Годнев [и др.] ; под ред. К.С. Краснова. - 3-е изд. ; испр. - Москва : Высшая школа, 2001. - 512 с. : ил. - ISBN 5-06-004025-9 : 70 p. - (ID=7772-5)

### 7.3 Методические материалы

1. Электрохимическая термодинамика : методические указания к практическим и лабораторным занятиям по курсу "Физическая химия" по направления подготовки 24700 Биотехнология, 240100 Хим. технология, 020100 Химия, 241000 Энерго- и ресурсосберегающие процессы в хим. технологии, нефтехимии и биотехнологии и по спец. 020201 Фундамент. и прикл. химия / Тверской государственный технический университет ; составители: И.П. Шкилева, М.Ю. Ракитин, Э.М. Сульман. - Тверь : ТвГТУ, 2013. - 39 с. : ил. - Сервер. - Текст : непосредственный. - Текст : электронный. - 19 p. - URL: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/98854> . - (ID=98854-97)

2. Неравновесные процессы в растворах электролитов : метод. указания к практ. и лаб. занятиям по курсу "Физ. химия" по напр. подготовки 24700 Биотехнология, 240100 Хим. технология, 020100 Химия, 241000 Энерго- и ресурсосберегающие процессы в хим. технологии, нефтехимии и биотехнологии и по спец. 020201 Фундамент. и прикл. химия / Тверской гос. техн. ун-т ; сост.: И.П. Шкилева, М.Ю. Ракитин, Э.М. Сульман. - Тверь : ТвГТУ, 2013. - 39 с. : ил. - Текст : непосредственный. - 41 p. 50 к. - (ID=99418-95)

3. Неравновесные процессы в растворах электролитов : метод. указания к практ. и лаб. занятиям по курсу "Физ. химия" по напр. подготовки 24700 Биотехнология, 240100 Хим. технология, 020100 Химия, 241000 Энерго- и ресурсосберегающие процессы в хим. технологии, нефтехимии и биотехнологии и по спец. 020201 Фундамент. и прикл. химия : в составе учебно-методического комплекса / Тверской гос. техн. ун-т ; сост.: И.П. Шкилева, М.Ю. Ракитин, Э.М. Сульман. - Тверь : ТвГТУ, 2013. - (УМК-М). - Сервер. - Текст : электронный. - 0-00. - URL: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/98984> . - (ID=98984-1)

4. Электродвижущие силы : метод. указ. к практ. и лаб. занятиям по курсу "Физ. химия" для спец. 240901 "Биотехнология", 250500 "Хим. технология"

высокомолекулярных соединений", 011000 "Химия", 320700 "Охрана окр. среды" : в составе учебно-методического комплекса / Тверской гос. техн. ун-т, Каф. БТиХ ; сост.: И.П. Шкилева, Э.М.Сульман. - Тверь : ТвГТУ, 2009. - (УМК-М). - Сервер. - Дискета. - Текст : электронный. - 0-00. - URL: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/78351> . - (ID=78351-2)

5. Молекулярная спектроскопия : метод. указ. к практ. и лаб. занятиям по курсу "Физич. химия" для студентов спец. 240901 Биотехнология, 250500 Хим. технология высокомолекулярных соединений, 011000 Химия, 320700 Охрана окружающей среды / Тверской гос. техн. ун-т, Каф. БТиХ ; сост.: И.П. Шкилева, Е.А. Клиндер, Э.М. Сульман. - Тверь : ТвГТУ, 2009. - 22 с. - Текст : непосредственный. - 14 р. 42 к. - (ID=79244-96)

6. Молекулярная спектроскопия : метод. указ. к практ. и лаб. занятиям по курсу «Физическая химия» для студентов специальностей 240901 Биотехнология 250500 Химическая технология высокомолекулярных соединений, 011000 Химия, 320700 Охрана окружающей среды : в составе учебно-методического комплекса / Тверской гос. техн. ун-т, Каф. БТиХ ; сост.: И.П. Шкилева, Е.А. Клиндер, Э.М.Сульман. - Тверь : ТвГТУ, 2009. - (УМК-М). - Сервер. - Текст : электронный. - 0-00. - URL: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/103090> . - (ID=103090-1)

7. Учебно-методический комплекс дисциплины, в том числе элективных, факультативных дисциплин и направленных на подготовку к сдаче кандидатских экзаменов образовательного компонента "Физическая химия". Научная специальность подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре 1.4.4. Физическая химия : ФГОС 3++ / сост.: М.Г. Сульман ; Каф. Биотехнология, химия и стандартизация. - 2022. - (УМК). - Текст : электронный. - URL: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/157494> . - (ID=157494-0)

#### **7.4 Программное обеспечение дисциплины**

1. Операционная система Microsoft Windows: лицензии № ICM-176609 и № ICM-176613 (Azure Dev Tools for Teaching).

2. Microsoft Office 2019 Russian Academic: OPEN No Level: лицензия № 41902814.

#### **7.5. Специализированные базы данных, справочные системы, электронно-библиотечные системы, профессиональные порталы в Интернет**

ЭБС и лицензионные ресурсы ТвГТУ размещены:

1. Ресурсы: <https://lib.tstu.tver.ru/header/obr-res>

2. ЭКТвГТУ: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/Web>

3. ЭБС "Лань": <https://e.lanbook.com/>

4. ЭБС "Университетская библиотека онлайн": <https://www.biblioclub.ru/>

5. ЭБС «IPRBooks»: <https://www.iprbookshop.ru/>

6. Электронная образовательная платформа "Юрайт" (ЭБС «Юрайт»): <https://urait.ru/>

7. Научная электронная библиотека eLIBRARY: <https://elibrary.ru/>

8. Информационная система "ТЕХНОРМАТИВ". Конфигурация "МАКСИМУМ" : сетевая версия (годовое обновление): [нормативно-технические, нормативно-правовые и руководящие документы (ГОСТы, РД, СНиПы и др.]. Диск 1,2,3,4. - М. :Технорматив, 2014. - (Документация для профессионалов). - CD. - Текст : электронный. - 119600 р. – (105501-1)
9. База данных учебно-методических комплексов:  
<https://lib.tstu.tver.ru/header/umk.html>

УМК размещен: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/157494>

## **8. Материально-техническое обеспечение дисциплины**

При изучении дисциплины «Физическая химия» используются современные средства обучения, возможна демонстрация лекционного материала с помощью проектора. Аудитория для проведения лекционных и практических занятий оснащена современной компьютерной и офисной техникой, необходимым программным обеспечением, электронными учебными пособиями и законодательно-правовой поисковой системой, имеющий выход в глобальную сеть.

## **9. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации**

### **9.1. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме экзамена**

1. Экзаменационный билет соответствует форме, утвержденной Положением о рабочих программах дисциплин и в соответствии с приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 20.10.2021 № 951 «Об утверждении федеральных государственных требований к структуре программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре), условиям их реализации, срокам освоения этих программ с учетом различных форм обучения, образовательных технологий и особенностей отдельных категорий аспирантов (адъюнктов)» (Зарегистрирован в Минюсте РФ 23.11.2021 № 65943).

Число экзаменационных билетов – 10. Число вопросов (заданий) в экзаменационном билете – 3 (1 вопрос для категории «знать» и 2 вопроса для категории «уметь»).

Продолжительность экзамена – 60 минут.

2. Шкала оценивания промежуточной аттестации в форме экзамена – «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

3. Критерии оценки за экзамен:

для категории «знать»:

выше базового – 2;

базовый – 1;

ниже базового – 0;

критерии оценки и ее значения для категории «уметь»:

отсутствие умения – 0 баллов;

наличие умения – 2 балла.

- «отлично» - при сумме баллов 5 или 6;  
«хорошо» - при сумме баллов 4;  
«удовлетворительно» - при сумме баллов 3;  
«неудовлетворительно» - при сумме баллов 0, 1 или 2.

4. Вид экзамена – письменный экзамен, включающий решение задач с использованием справочного материала и непрограммируемого калькулятора.

**5. База заданий, предъявляемая обучающимся на экзамене:**

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.

4) 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.

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.

7) Уравнения Максвелла. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов.

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.

11) Приведенная энергия Гиббса и ее использование для расчетов химических равновесий. Равновесие в поле внешних сил. Полные потенциалы.

12) Микро- и макросостояния химических систем. Фазовые Г - и  $\mu$ -пространства. Эргодическая гипотеза.

13) Термодинамическая вероятность и ее связь с энтропией. Распределение Максвелла – Больцмана.

14) Статистические средние значения макроскопических величин. Ансамбли Гиббса. Микроканоническое и каноническое распределения.

15) Расчет числа состояний в квазиклассическом приближении. Каноническая функция распределения Гиббса.

16) 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.

17) Статистический расчет энтропии. Постулат Планка и абсолютная энтропия.

18) Расчет констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики.

19) Статистическая термодинамика реальных систем. Потенциалы межмолекулярного взаимодействия и конфигурационный интеграл для реального газа. Распределения Бозе – Эйнштейна и Ферми – Дирака. Вырожденный идеальный газ.

20) Электроны в металлах. Уровень Ферми.

21) 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.

22) Основные положения термодинамики неравновесных процессов. Локальное равновесие. Флуктуации. Функция диссипации. Потoki и силы.

23) Скорость производства энтропии. Зависимость скорости производства энтропии от обобщенных потоков и сил.

24) Соотношения взаимности Онсагера. Стационарное состояние системы и теорема Пригожина.

25) Термодиффузия и ее описание в неравновесной термодинамике. Уравнение Чепмена – Энского.

26) Различные типы растворов. Способы выражения состава растворов. Идеальные растворы, общее условие идеальности растворов. Давление насыщенного пара жидких растворов, закон Рауля.

27) Неидеальные растворы и их свойства. Метод активностей. Коэффициенты активности и их определение.

28) Стандартные состояния при определении химических потенциалов компонент растворов.

29) Коллигативные свойства растворов. Изменение температуры замерзания растворов, криоскопия. Осмотические явления.

30) Парциальные мольные величины, их определение для бинарных систем. Уравнение Гиббса – Дюгема.

31) Функция смешения для идеальных и неидеальных растворов. Предельно разбавленные растворы, атермальные и регулярные растворы, их свойства.

32) Гетерогенные системы. Понятия компонента, фазы, степени свободы. Правило фаз Гиббса. Однокомпонентные системы. Диаграммы состояния воды, серы, фосфора и углерода.

33) Фазовые переходы первого рода. Уравнение Клапейрона – Клаузиуса.

34) Двухкомпонентные системы. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем. Равновесие жидкость – пар в двухкомпонентных системах.

- 35) Фазовые переходы второго рода. Уравнения Эренфеста.
- 36) Трехкомпонентные системы. Треугольник Гиббса. Диаграммы плавкости трехкомпонентных систем.
- 37) Адсорбция. Адсорбент, адсорбат. Виды адсорбции. Структура поверхности и пористость адсорбента. Локализованная и делокализованная адсорбция.
- 38) Мономолекулярная и полимолекулярная адсорбция. Динамический характер адсорбционного равновесия. Изотермы и изобары адсорбции.
- 39) Уравнение Генри. Константа адсорбционного равновесия.
- 40) Уравнение Лэнгмюра. Адсорбция из растворов.
- 41) Уравнение Брунауэра – Эмета – Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции.
- 42) Поверхность раздела фаз. Свободная поверхностная энергия, поверхностное натяжение, избыточные термодинамические функции поверхностного слоя. Изменение поверхностного натяжения на границе жидкость – пар в зависимости от температуры.
- 43) Эффект Ребиндера: изменение прочности и пластичности твердых тел вследствие снижения их поверхностной энергии. Капиллярные явления.
- 44) Зависимость давления пара от кривизны поверхности жидкости. Капиллярная конденсация. Зависимость растворимости от кривизны поверхности растворяющихся частиц (закон Гиббса – Оствальда – Фрейндлиха).
- 45) 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.
- 46) Условия электрохимического равновесия на границе раздела фаз и в электрохимической цепи. Термодинамика гальванического элемента. Электродвижущая сила, ее выражение через энергию Гиббса реакции в элементе.
- 47) Уравнения Нернста и Гиббса – Гельмгольца для равновесной электрохимической цепи. Понятие электродного потенциала. Определение коэффициентов активности на основе измерений ЭДС гальванического элемента.
- 48) Электропроводность растворов электролитов; удельная и эквивалентная электропроводность. Числа переноса, подвижность ионов и закон Кольрауша. Электрофоретический и релаксационные эффекты
- 49) 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. Реакции переменного порядка.

50) Феноменологическая кинетика сложных химических реакций. Принцип независимости элементарных стадий. Кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций.

51) Квазистационарное приближение. Метод Боденштейна – Темкина.

52) Кинетика гомогенных каталитических и ферментативных реакций. Уравнение Михаэлиса – Ментен.

53) Макрокинетика. Роль диффузии в кинетике гетерогенных реакций. Различные режимы протекания реакций (кинетическая и внешняя кинетическая области, области внешней и внутренней диффузии).

54) Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса. Энергия активации и способы ее определения. Элементарные акты химических реакций и физический смысл энергии активации. Термический и нетермические пути активации молекул.

55) Теория активных столкновений. Сечение химических реакций. Формула Траутца – Льюиса. Расчет предэкспоненциального множителя по молекулярным постоянным. Стерический фактор.

56) Теория переходного состояния (активированного комплекса). Поверхность потенциальной энергии. Путь и координата реакции. Статистический расчет константы скорости. Энергия и энтропия активации.

57) Различные типы химических реакций. Мономолекулярные реакции в газах, схема Линдеман –Христиансена. Теория РРКМ.

58) Бимолекулярные и тримолекулярные реакции, зависимость предэкспоненциального множителя от температуры.

59) Реакции в растворах, влияние растворителя и заряда реагирующих частиц. Клеточный эффект и сольватация.

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

61) Кислотно-основной катализ. Кинетика и механизм реакций специфического кислотного катализа. Функции кислотности Гаммета.

62) Кинетика и механизм реакций общего кислотного катализа. Уравнение Бренстеда. Корреляционные уравнения для энергий активации и теплот реакций.

63) Специфический и общий основной катализ.

64) Катализ металлокомплексными соединениями. Гомогенные реакции гидрирования, их кинетика и механизмы.

65) Ферментативный катализ. Адсорбционные и каталитические центры ферментов. Активность и субстратная селективность ферментов. Коферменты.

66) Механизмы ферментативного катализа.

67) Гетерогенный катализ. Определение скорости гетерогенной каталитической реакции. Удельная и атомная активность. Селективность катализаторов.

68) Роль адсорбции в кинетике гетерогенных каталитических реакций. Неоднородность поверхности катализаторов, нанесенные катализаторы.

69) Энергия активации гетерогенных каталитических реакций.

70) Современные теории функционирования гетерогенных катализаторов.

Типовой образец задания приведен в Приложении 1.

Пользование различными техническими устройствами, кроме ЭВМ компьютерного класса и программным обеспечением, необходимым для решения поставленных задач, не допускается. При желании аспиранта покинуть пределы аудитории во время экзамена экзаменационный билет после его возвращения заменяется.

Преподаватель имеет право после проверки письменных ответов на экзаменационные вопросы и решенных на компьютере задач задавать аспиранту в устной форме уточняющие вопросы в рамках содержания экзаменационного билета, выданного аспиранту.

Иные нормы, регламентирующие процедуру проведения экзамена, представлены в Положении о текущем контроле успеваемости и промежуточной аттестации студентов.

## **9.2. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме зачета**

1. Вид промежуточной аттестации в форме зачета.

Вид промежуточной аттестации устанавливается преподавателем:

по результатам текущего контроля успеваемости обучающегося без дополнительных контрольных испытаний;

по результатам дополнительного итогового контрольного испытания при наличии у аспирантов задолженностей по текущему контролю.

2. При промежуточной аттестации без выполнения дополнительного итогового контрольного испытания аспиранту в обязательном порядке описываются критерии проставления зачёта:

«зачтено» - выставляется обучающемуся при условии выполнения им всех контрольных мероприятий: посещение лекций в объеме не менее 80% контактной работы с преподавателем, выполнения и защиты заданий на практических занятиях.

При промежуточной аттестации с выполнением заданий дополнительного итогового контрольного испытания аспиранту выдается билет с вопросами и задачами.

Число заданий для дополнительного итогового контрольного испытания – 10.

Число вопросов – 3 (2 вопроса для категории «знать» и 1 вопрос для категории «уметь»).

Продолжительность 60 минут.

3. Шкала оценивания промежуточной аттестации - «зачтено», «не зачтено».

4. Критерии выполнения контрольного испытания и условия проставления зачета:

Для категории «знать» (бинарный критерий)



Ниже базового – 0 баллов;

Базовый уровень – 1 балл;

Критерии оценки и ее значение для категории «уметь» (бинарный критерий):

Отсутствие умения – 0 баллов;

Наличие умения – 1 балл.

Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1.

5. Для дополнительного итогового испытания аспиранту в обязательном порядке предоставляется:

База заданий, предназначенных для предъявления обучающемуся на дополнительном итоговом контрольном испытании (типовой образец задания приведен в Приложении 2);

Методические материалы, определяющие процедуру проведения дополнительного итогового испытаний и проставления зачета.

6. Задание выполняется письменно и с использованием ЭВМ.

**7. База заданий, предъявляемая обучающимся на зачете:**

1) Основные положения классической теории химического строения. Структурная формула и граф молекулы.

2) Изомерия. Конформации молекул. Связь строения и свойств молекул.

3) Механическая модель молекулы. Потенциалы парных взаимодействий.

4) Методы молекулярной механики и молекулярной динамики при анализе строения молекул. Общие принципы квантово-механического описания молекулярных систем.

5) Стационарное уравнение Шредингера для свободной молекулы. Адиабатическое приближение. Электронное волновое уравнение.

6) Потенциальные кривые и поверхности потенциальной энергии. Их свойства.

7) Равновесные конфигурации молекул.

8) Колебания молекул. Нормальные колебания, амплитуды и частоты колебаний, частоты основных колебательных переходов. Колебания с большой амплитудой.

9) Вращение молекул. Различные типы молекулярных волчков. Вращательные уровни энергии.

10) Электронное строение атомов и молекул. Одноэлектронное приближение.

11) Атомные и молекулярные орбитали. Электронные конфигурации и термы атомов. Правило Хунда.

12) Электронная плотность. Корреляционные орбитальные диаграммы для двухатомных молекул. Теорема Купманса. Пределы применимости одноэлектронного приближения.

- 13) Интерпретация строения молекул на основе орбитальных моделей и исследования распределения электронной плотности.
- 14) Локализованные молекулярные орбитали. Гибридизация.
- 15) Электронная корреляция в атомах и молекулах. Ее проявления в свойствах молекул. Метод конфигурационного взаимодействия.
- 16) Представления о зарядах на атомах и порядках связей. Различные методы выделения атомов в молекулах.
- 17) Корреляции дескрипторов электронного строения и свойств молекул. Индексы реакционной способности. Теория граничных орбиталей.
- 18) Общие свойства симметрии волновых функций и потенциальных поверхностей молекул. Классификация квантовых состояний атомов и молекул по симметрии.
- 19) Симметрия атомных и молекулярных орбиталей,  $\sigma$  - и  $\pi$  -орбитали.  $\pi$  -Электронное приближение.
- 20) Влияние симметрии равновесной конфигурации ядер на свойства молекул и их динамическое поведение. Орбитальные корреляционные диаграммы.
- 21) Сохранение орбитальной симметрии при химических реакциях.
- 22) Дипольный момент и поляризуемость молекул.
- 23) Магнитный момент и магнитная восприимчивость. Эффекты Штарка и Зеемана.
- 24) Магнитно-резонансные методы исследования строения молекул. Химический сдвиг.
- 25) Оптические спектры молекул. Вероятности переходов и правила отбора при переходах между различными квантовыми состояниями молекул.
- 26) Связь спектров молекул с их строением. Определение структурных характеристик молекул из спектроскопических данных.
- 27) Основные составляющие межмолекулярных взаимодействий. Молекулярные комплексы. Ван-дер-ваальсовы молекулы. Кластеры атомов и молекул.
- 28) Структурная классификация конденсированных фаз. Идеальные кристаллы. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура.
- 29) Реальные кристаллы. Типы дефектов в реальных кристаллах. Кристаллы с неполной упорядоченностью.
- 30) Индексы кристаллографических граней. Атомные, ионные, молекулярные и другие типы кристаллов.
- 31) Строение твердых растворов. Упорядоченные твердые растворы.
- 32) Аморфные вещества. Особенности строения полимерных фаз.
- 33) Металлы и полупроводники. Зонная структура энергетического спектра кристаллов.
- 34) Поверхность Ферми. Различные типы проводимости. Колебания в кристаллах. Фононы.
- 35) Жидкости. Мгновенная и колебательно-усредненная структура жидкости.
- 36) Ассоциаты и кластеры в жидкостях.
- 37) Мицеллообразование и строение мицелл.

38) Особенности строения поверхности кристаллов и жидкостей, структура границы раздела конденсированных фаз.

39) Молекулы и кластеры на поверхности. Структура адсорбционных слоев.

Преподаватель имеет право после проверки письменных ответов задавать аспиранту в устной форме уточняющие вопросы в рамках задания, выданного аспиранту.

### **9.3. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме курсового проекта или курсовой работы**

Учебным планом курсовая работа (проект) по дисциплине не предусмотрены.

### **10. Методические рекомендации по организации изучения дисциплины**

Аспиранты перед началом изучения дисциплины ознакомлены с системами кредитных единиц и балльно-рейтинговой оценки, которые должны быть опубликованы и размещены на сайте вуза или кафедры.

В учебный процесс внедрена субъект-субъектная педагогическая технология, при которой в расписании каждого преподавателя определяется время консультаций аспирантов по закрепленному за ним модулю дисциплины.

Аспиранты, изучающие дисциплину, обеспечены учебной и научной литературой для выполнения всех видов самостоятельной работы, и учебно-методическим комплексом по дисциплине.

### **11. Внесение изменений и дополнений в рабочую программу дисциплины**

Кафедра ежегодно обновляет содержание рабочих программ дисциплин, которые оформляются протоколами заседаний дисциплин, форма которых утверждена Положением о рабочих программах дисциплин.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Тверской государственный технический университет»

Научная специальность – 1.4.4 Физическая химия  
Кафедра Биотехнологии, химии и стандартизации  
Дисциплина «Физическая химия»  
Семестр 7

**ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 1**

1. Задание для категории «знать» – или 0, или 1, или 2 балла:

Приведенная энергия Гиббса и ее использование для расчетов химических равновесий. Равновесие в поле внешних сил. Полные потенциалы.

3. Задание для категории «уметь» – или 0, или 2 балла:

Перечислите и сравните современные теории функционирования гетерогенных катализаторов.

4. Задача для категории «уметь» – или 0, или 2 балла:

Предложите не менее трех методов, которые могут быть использованы для определения активностей в реальных растворах электролитов.

**Критерии итоговой оценки за экзамен:**

«отлично» – при сумме баллов 5 или 6;

«хорошо» – при сумме баллов 4;

«удовлетворительно» – при сумме баллов 3;

«неудовлетворительно» – при сумме баллов 0, 1 или 2.

Составитель: д.х.н., профессор кафедры БХС

 М.Г. Сульман

Заведующий кафедрой БХС, д.х.н., профессор

 М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Тверской государственный технический университет»

Научная специальность – 1.4.4 Физическая химия  
Кафедра Биотехнологии, химии и стандартизации  
Дисциплина «Физическая химия»  
Семестр 6

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО  
КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 1**

1. Задание для категории «знать» – или 0, или 1 балл:  
Структурная классификация конденсированных фаз. Идеальные кристаллы. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура
2. Задание для категории «знать» – или 0, или 1 балл:  
Атомные и молекулярные орбитали. Электронные конфигурации и термы атомов. Правило Хунда.
3. Задача для категории «уметь» – или 0, или 1 балл:  
Опишите типы дефектов в реальных кристаллах.

**Критерии итоговой оценки за зачет:**

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;  
«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1.

Составитель: д.х.н., профессор кафедры БХС  М.Г. Сульман

Заведующий кафедрой БХС, д.х.н., профессор  М.Г. Сульман