

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ
Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Институт химии

УТВЕРЖДАЮ
Директор института химии
д.х.н., проф. Горячева И.Ю.

"07" 06 2023 г.

Рабочая программа дисциплины
Физическая химия

Направление подготовки бакалавриата
20.03.01 Техносферная безопасность



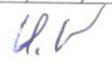
Профили подготовки бакалавриата
Промышленная безопасность технологических процессов и производств

Квалификация (степень) выпускника

Бакалавр

Форма обучения
очная

Саратов,
2023

Статус	ФИО	Подпись	Дата
Преподаватель-разработчик	Гамаюнова Ирина Михайловна		07.06.2023
Председатель НМК	Крылатова Яна Георгиевна		07.06.2023
Заведующий кафедрой	Казаринов Иван Алексеевич		07.06.2023
Специалист Учебного управления			

1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины «Физическая химия» является: формирование у обучающихся компетенций, связанных с пониманием основных законов, управляющих химическими процессами, способностью видеть области применения этих законов и использовать их при решении конкретных химических задач. Освоение дисциплины осуществляется по основным разделам современной физической химии – химическая термодинамика, химическая кинетика, катализ, электрохимия.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Физическая химия» (Б1.О.10.04) относится к обязательной части Блока 1 «Дисциплины (модули)» рабочего учебного плана ООП по направлению 20.03.01 Техносферная безопасность, профиль «Промышленная безопасность технологических процессов и производств» и осваивается в 3 семестре.

К «входным» знаниям, умениям и готовностям обучающегося, необходимым при усвоении данной дисциплины и приобретенным в результате освоения предшествующих дисциплин, относятся знания фундаментальных разделов общей и неорганической химии, математики, физики и умение решать типовые задачи, связанные с физико-химическими законами в применении к химическим процессам.

Физическая химия является теоретической базой основных физико-химических методов исследования природы химических процессов, растворов, фазовых переходов, фундаментальной основой физико-химических методов анализа веществ и материалов.

Освоение данной дисциплины как предшествующей необходимо для изучения базовых дисциплин аналитической химии, коллоидной химии, прохождения практик, выполнения квалификационной работы бакалавра.

3. Результаты обучения по дисциплине

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора (индикаторов) достижения компетенции	Результаты обучения
УК-2: Способен определять круг задач в рамках поставленной цели и выбирать оптимальные способы их решения, исходя из действующих правовых норм, имеющихся ресурсов и ограничений	1.1_Б.УК-2. Формулирует в рамках поставленной цели проекта совокупность взаимосвязанных задач, обеспечивающих ее достижение. Определяет ожидаемые результаты решения выделенных задач. 2.1_Б.УК-2. Проектирует решение конкретной задачи проекта, выбирая оптимальный способ ее решения, исходя из действующих правовых норм и имеющихся ресурсов и ограничений. 3.1_Б.УК-2. Решает конкретные задачи проекта заявленного качества и за установленное	знать: - основные закономерности протекания химических процессов уметь: - применять математические методы при решении типовых профессиональных задач, решать уравнения и системы дифференциальных уравнений применительно к реальным химическим процессам и физическим превращениям владеть: - методами проведения

	<p>время 4.1_ Б.УК-2. Публично представляет результаты решения конкретной задачи проекта.</p>	<p>физических измерений, методами корректной оценки погрешностей при проведении эксперимента</p>
<p>ОПК-1 Способен учитывать современные тенденции развития техники и технологий в области техносферной безопасности, измерительной и вычислительной техники, информационных технологий при решении типовых задач в области профессиональной деятельности, связанной с защитой окружающей среды и обеспечением безопасности человека.</p>	<p>ОПК-1.1 Изучает и анализирует техническую документацию ОПК-1.2 Использует современные программные комплексы для решения типовых задач в области защиты окружающей среды. ОПК-1.3 Использует современные программные комплексы в области промышленной безопасности для оценки рисков для человека, производственных объектов и окружающей среды ОПК-1.4 Использует современные базы данных и программные комплексы для решения задач в области профессиональной деятельности, связанной с защитой окружающей среды и обеспечением безопасности человека ОПК-1.5 Выбирает критерии предельного состояния технических устройства ОПК-1.6 Определяет условия безопасной эксплуатации конкретных технических устройств</p>	<p>знать: - методы термодинамического описания химических и фазовых равновесий в многокомпонентных системах, термодинамику растворов электролитов и электрохимических систем уметь: - анализировать и обобщать результаты эксперимента, формулировать выводы; - выполнять основные химические операции, определять термодинамические характеристики химических реакций и равновесные концентрации веществ владеть: - навыками вычисления физико-химических величин в условиях постоянства внешних факторов, а также способами оценки влияния различных параметров на протекание физических и химических процессов</p>

4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 зачетных единиц 180 часов.

№ п/п	Раздел дисциплины	Семе стр	Неде ля семе стра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)							Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Формы промежуточной аттестации (по семестрам)	
				Лекции	Лабораторные работы		СР	Иная контакт ная работа	Конт роль	Всего		
					Общая трудое мкость	Из них – практич еская подготов ка						
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	
	1. Основы термодинамики											
1.1	Первый закон термодинамики и его приложение	3	1	2	12	–	6	–		20	Тестовое задание по теме раздела. Проверка оформления лабораторного журнала.	
1.2	Второй и третий законы термодинамики и их приложения.	3	2,3	4		–	2	–		6	Контрольное задание по разделу 1	
2	2. Химическая термодинамика											
2.1	Общая характеристика химического равновесия	3	4	2		–	2	–		4	Тестовое задание по теме раздела	
2.2	Влияние основных параметров на химическое равновесие.	3	5	2	16	–	2	–		20	Проверка лабораторного	

											журнала. Контрольное задание по разделу 2.
3	Гетерогенные равновесия		6,7	4		–	4	–		8	Индивидуальное задание для устного отчета по теме раздела.
4	Учение о растворах										
4.1	Общая характеристика растворов. Газовые растворы.	3	8	2		–	2	–		4	Многовариантная задача.
4.2	Жидкие растворы. Растворимость веществ в жидкостях	3	9	2		–	2	–		4	Тестовое задание по разделу 4.
5	Ионика										
5.1	Слабые и сильные электролиты	3	10	2	14	–	4	–		20	Многовариантные задачи. Проверка лабораторного журнала
5.2	Неравновесные свойства растворов электролитов	3	11	2		–	4	–		6	Разбор типовых задач.
6	Электродика										
6.1	Равновесные свойства межфазных границ. Термодинамика гальванического элемента.	3	12	2	10	–	2	–		14	Разбор типовых задач. Проверка лабораторного журнала
6.2	Классификация электродов. Электрохимические цепи и их практическое применение.	3	13	2		–	2	–		4	Контрольное задание по разделу 6

7	Формальная кинетика										
7.1	Кинетический анализ простых реакций различных порядков. Сложные реакции.	3	14	2		–	2	–		4	Разбор типовых задач. Тестовое задание
7.2	Влияние температуры на скорость химической реакции.	3	15	2	8	–	4	–		14	Проверка лабораторного журнала. Контрольная работа по разделу 7
8	Молекулярная кинетика Теория активных соударений в химической кинетике. Метод переходного состояния (активированного комплекса).	3	16	2		–	4	–		6	Многовариантная задача
9	Катализ										
9.1	Гомогенный катализ	3	17	1		–	4	–		5	Собеседование по теме раздела
9.2	Гетерогенный катализ	3	18	1		–	4	–		5	Собеседование по теме раздела
	Промежуточная аттестация.	3								36	Зачет. Экзамен.
	Итого: часов за 3 семестр	3		34	60		50			36	180

Содержание дисциплины

Введение

Предмет и особенности физической химии. Ее место в системе образования специалиста химика. Краткий очерк исторического развития. Методы физической химии. Разделы физической химии.

Раздел 1. Основы термодинамики

Тема 1.1. Первый закон термодинамики и его приложения. Определение термодинамики и ее особенности. Значение ее в решении современных задач физической химии. Взаимодействие системы и окружающей среды. Нулевое начало термодинамики. Первый закон термодинамики. Параметры воздействия окружающей среды, координата состояния (экстенсивные свойства) и потенциалы (интенсивные свойства) различных видов энергетического взаимодействия. Аналитическое выражение первого закона термодинамики. Свойства функций внутренней энергии. Уравнение состояния системы. Идеальные и реальные газы. Теплота и теплоемкость. Применение первого закона термодинамики к идеальным газам. Термохимия. Понятие теплового эффекта. Закон Гесса. Зависимость теплового эффекта от температуры. Закон Кирхгоффа.

Тестовое задание

Выполнение индивидуальных заданий и решение задач с использованием уравнения состояния идеальных газов. Расчет параметров цикла идеального газа, расчет теплоты, работы, изменения внутренней энергии и энтальпии. Определение зависимости тепловых эффектов реакций от температуры.

Лабораторная работа по разделу 1 «*Определение теплоты нейтрализации щелочи сильной кислотой калориметрическим методом*».

Тема 1.2. Второй и третий законы термодинамики и их приложения. Цикл Карно. Второй закон термодинамики. Аналитическое выражение второго закона термодинамики. Энтропия, ее физический смысл. Критика теории тепловой смерти вселенной. Методы расчета энтропии. Постулат Планка, принцип недостижимости абсолютного нуля температур. Расчет абсолютных значений энтропии. Характеристические функции. Понятие химического потенциала. Характеристика состояния равновесия в системе.

Фазовые переходы первого рода. Уравнение Клаузиуса-Клайперона. Плавление, испарение и возгонка. Зависимость упругости насыщенного пара вещества от температуры.

Контрольное задание по разделу 1

Расчет изменения энтропии по индивидуальным заданиям в процессе нагревания и испарения (возгонки). Определение зависимости изменения энтропии при химическом превращении в зависимости от температуры.

Раздел 2. Химическая термодинамика

Тема 2.1. Химическое равновесие

Условия химического равновесия. Закон действия масс. Способы выражения констант равновесия химической реакции. Расчет равновесного состава газовой смеси при химическом превращении. Изменение изобарного потенциала химической реакции, уравнение изотермы. Экспериментальные методы определения констант равновесия.

Тестовое задание по теме раздела

Определение равновесного состава газовой смеси при химическом превращении в заданных условиях. (Задание 8 [Львов А.Л., Коноплянцева Н.А., Дворкина Р.М. Сборник вопросов и задач по термодинамике. - Саратов: Изд-во Сарат. ун-та].)

Тема 2.2. Влияние основных параметров на химическое равновесие

Зависимость химического равновесия от температуры и давления. Принцип Ле-Шателье-Брауна. Уравнение изобары и изохоры химической реакции. Уравнение Ван Лаара-Планка. Приближенные методы расчета констант равновесия.

Контрольное задание по разделу 2

Лабораторная работа по разделу 2 «*Определение константы равновесия гомогенной реакции*»

Раздел 3. Гетерогенные равновесия

Гетерогенное равновесие и его условия. Правило фаз. Применение его к однокомпонентным системам. Объемная и плоская диаграмма состояния вещества. Метастабильные состояния, явления энантиотропии и монотропии. Применение правила фаз к двухкомпонентным системам. Объемная диаграмма состояния для двухкомпонентной системы.

Гетерогенное равновесие в конденсированных фазах. Образование простой эвтектики. Криогидратные смеси. Термический анализ. Образование химического соединения в бинарной системе. Диаграммы состояния при различной термической устойчивости химического соединения. Физико-химический анализ и его основные принципы.

Образование твердых растворов. Диаграммы состояния твердых растворов замещения и внедрения. Дальтонида и бертоллиды.

Индивидуальное задание для устного отчета «*Фазовая диаграмма двухкомпонентной системы*»

Раздел 4. Учение о растворах

Тема 4.1. Общая характеристика растворов

Основные понятия растворов. Газовые растворы. Жидкие растворы. Способы выражения концентрации в растворе. Жидкие растворы. Межмолекулярные взаимодействия в жидких растворах. Равновесие жидкости и пара. Закон Рауля. Идеальные растворы. Реальные растворы. Положительные и отрицательные отклонения. Законы Коновалова и их обоснование. Диаграмма бинарного равновесия в системе жидкость-пар. Фракционная перегонка жидкостей. Азеотропные смеси.

Многовариантная задача (пересчет концентраций)

Тема 4.2. Растворимость веществ в жидкостях

Растворимость газов в жидкостях. Идеальная растворимость. Законы растворимости газов в жидкостях. Зависимость растворимости газов от температуры. Ограниченная растворимость жидкостей и влияние на нее температуры. Несмешивающиеся жидкости, перегонка с водяным паром. Идеальная растворимость твердых веществ в жидкостях. Уравнение Шредера. Реальные растворы твердых веществ в жидкостях. Явления криоскопии и эбулиоскопии. Теория данных явлений. Практика криоскопического опыта. Осмотические явления. Химический потенциал компонента в реальных растворах. Понятие активности компонента в реальных растворах. Выбор стандартного состояния для определения активности растворителя и растворенного вещества. Коэффициент активности.

Тестовое задание по разделу 4

Раздел 5. Ионика

Введение. Определение и основные разделы теоретической электрохимии; краткая история их возникновения. Понятие о химической и электрохимической реакции. Реализация электрохимических реакций в электролизерах и химических источниках тока. Прикладные вопросы электрохимии.

Тема 5.1. Слабые и сильные электролиты

Ионика. Представления Фарадея и Аррениуса о строении растворов электролитов. Основные положения и недостатки теории Аррениуса. Работы Кистяковского и Каблукова. Механизм образования растворов электролитов. Ион-дипольные взаимодействия и причины устойчивости ионных систем. Цикл Борна – Габера. Термодинамическое описание растворов электролитов. Ион-ионное взаимодействие в растворах электролитов. Модельные представления Гхоша. Теория Дебая-Гюккеля; вывод уравнений для потенциала ионной атмосферы и коэффициента активности; сравнение теории с экспериментальными данными. Недостатки теории Дебая-Гюккеля.

Многовариантные задачи по теме «Слабые электролиты»

1. *Расчет $K_{\text{дисс.}}$ и pH слабых кислот и оснований. pH буферных растворов, расчет состава буферных растворов с заданным pH .*

Многовариантные задачи 8, 9, 10, стр.6 – 7 (Коноплянцева Н.А., Казаринов И.А., Ильина Л.К., Гамаюнова И.М., Сборник вопросов, примеров и задач по электрохимии. – Саратов: Изд-во Саратов. ун-та).

2. *Расчет средней ионной активности*

Многовариантная задача №4, стр.12 (Коноплянцева Н.А., Казаринов И.А., Ильина Л.К., Гамаюнова И.М. Сборник вопросов, примеров и задач по электрохимии. – Саратов: Изд-во Саратов. ун-та).

Лабораторная работа по теме 5.1

«Определение константы диссоциации слабой кислоты (CH_3COOH) или слабого основания (NH_4OH) методом электропроводности».

Тема 5.2. Неравновесные свойства растворов электролитов

Причины направленного движения ионов в растворе. Явления миграции и диффузии. Удельная электропроводность. Зависимость удельной электропроводности от концентрации для слабых и сильных электролитов. Молярная и эквивалентная электропроводность. Скорость движения иона в электрическом поле. Подвижность ионов. Связь эквивалентной электропроводности с подвижностью ионов. Закон Кольрауша. Зависимость эквивалентной электропроводности от концентрации для слабых и сильных электролитов. Эмпирический закон Кольрауша. Интерпретация явлений электропроводности с точки зрения теории Дебая-Гюккеля. Электрофоретический и релаксационный эффекты. Уравнение Онзагера. Эффекты Вина и Дебая-Фалькенгагена. Влияние радиуса иона и вязкости электролита на эквивалентную электропроводность. Правило Писсаржевского-Вальдена. Аномальная подвижность ионов гидроксония и гидроксида. Влияние природы растворителя на эквивалентную электропроводность.

Разбор типовых задач:

1. *Расчет удельной и молярной электропроводности.*

Задачи №4, 5, 6, стр.22 – 23 (Коноплянцева Н.А., Казаринов И.А., Ильина Л.К., Гамаюнова И.М., Сборник вопросов, примеров и задач по электрохимии. – Саратов: Изд-во Саратов. ун-та).

2. *Расчет по электропроводности степени и константы диссоциации слабого электролита.*

Задачи №1,7, 8 стр 17,18 (Коноплянцева Н.А., Казаринов И.А., Ильина Л.К., Гамаюнова И.М. Сборник вопросов, примеров и задач по электрохимии. – Саратов: Изд-во Саратов. ун-та).

3. *Расчет по справочным данным удельной электропроводности насыщенного раствора труднорастворимого соединения.*

4. *Расчет растворимости соли в воде и растворе электролита с одноименным ионом.*

Раздел 6. Электродика

Тема 6.1. Равновесные свойства межфазных границ. Термодинамика гальванического элемента.

Понятие электрод, электрохимическая цепь. Правила записи электрохимической цепи. Скачки потенциала на различных межфазных границах. Внешний, внутренний потенциалы. Гальвани-потенциал. Понятие электрохимического потенциала. Равновесие на границах металл – металл, металл – раствор и раствор – раствор. ЭДС как сумма гальвани-потенциалов. Определение и выбор знака электродного потенциала. Водородная шкала потенциалов. Таблицы электродных потенциалов. Значение водородной шкалы потенциалов.

Термодинамика гальванического элемента. Электрохимический аналог уравнения изотермы химической реакции. Расчет константы равновесия по электрохимическим данным. Уравнение Гиббса – Гельмгольца в электрохимии и его исследование.

Разбор типовых задач:

1. *Расчет ЭДС и константы равновесия по термодинамическим и электрохимическим данным*

2. *Определение направления реакции по электрохимическим данным. Составление электрохимической цепи по самопроизвольной реакции.*

3. *Вычисление произведения растворимости и растворимости по стандартным потенциалам соответствующих электродов I и II рода*

Лабораторная работа «*Определение ЭДС цепей. Определение рН растворов с помощью хингидронного электрода*»

Тема 6.2. Классификация электродов и электрохимических цепей.

Классификация электродов. Электроды I и II рода. Окислительно-восстановительные электроды простые и сложные. Правило Лютера. Газовые электроды. Формула Нернста для электродного потенциала. Потенциометрическое определение рН растворов. Хингидронный, водородный и стеклянный электроды. Области их применения.

Классификация электрохимических цепей. Физические цепи. Химические цепи обратимые и необратимые. Концентрационные цепи. Концентрационные цепи без переноса (газовые и амальгамные). Концентрационные цепи с переносом катионного и анионного типа. Определение чисел переноса методом ЭДС. Сдвоенные электрохимические цепи. Определение коэффициентов активности методом ЭДС.

Контрольное задание по разделу 6

1. *Расчет ЭДС цепи, состоящей из водородного электрода, опущенного в кислоту (сильную, слабую или основание (сильное, слабое) и хлорсеребряного электрода (Индивидуальное задание N 22, стр. 42 (Коноплянцева Н.А., Казаринов И.А., Ильина Л.К., Гамаюнова И.М. Сборник вопросов, примеров и задач по электрохимии. – Саратов: Изд-во Саратов. ун-та)*
2. *Расчет ЭДС концентрационных цепей без переноса и с переносом (индивидуальные задания N 14,16 (стр.48, 49 (Коноплянцева Н.А., Казаринов И.А., Ильина Л.К., Гамаюнова И.М. Сборник вопросов, примеров и задач по электрохимии. – Саратов: Изд-во Саратов. ун-та)*
3. *Определение коэффициентов активности электролита по зависимости ЭДС химической цепи от концентрации. (Индивидуальное задание N 15, стр. 49 (Коноплянцева Н.А., Казаринов И.А., Ильина Л.К., Гамаюнова И.М. Сборник вопросов, примеров и задач по электрохимии. – Саратов: Изд-во Саратов. ун-та)*

Раздел 7. Формальная кинетика

Тема 7.1. Кинетический анализ простых реакций различных порядков.

Сложные реакции.

Основные понятия химической кинетики. Определение скорости реакции. Кинетические уравнения. Константа скорости и порядок реакции. Понятия о реакциях дробного порядка. Молекулярность элементарных стадий. Кинетический закон действия масс. Необратимые реакции первого, второго и третьего порядков. Определение констант скорости из опытных данных. Методы определения порядка реакций.

Принцип независимости скоростей элементарных стадий. Методы составления кинетических уравнений. Обратимые реакции первого и второго порядков. Параллельные реакции. Последовательные реакции. Определение констант элементарных стадий из опытных данных. Кинетический анализ сложных процессов. Принцип стационарности Боденштейна

Тестовое задание «Кинетика простых реакций»

1. *Определение констант скорости по экспериментальным данным, полученным методами химического и физико-химического анализа.*
2. *Определение порядка реакции различными методами.*
(Задачи N 2,3,4,9,11,15,16, 19, стр. 8-11 (Сборник вопросов, примеров и задач для практических занятий по химической кинетике. М.А.Волгин,И.М. Гамаюнова, Изд-во СГУ).
3. *Кинетический анализ сложных реакций. Графический анализ кинетических кривых для обратимых, параллельных и последовательных реакций 1*

порядка. (Задача N 4, стр. 13 (Сборник вопросов, примеров и задач для практических занятий по химической кинетике. М.А.Волгин, И.М. Гамаюнова, Изд-во СГУ).

4. *Определение констант скорости элементарных стадий обратимых и параллельных реакций.* (Задачи N 3, 4,5,6, стр. 16-17 (Сборник вопросов, примеров и задач для практических занятий по химической кинетике. М.А.Волгин, И.М. Гамаюнова, Изд-во СГУ).

5. *Расчет для последовательных реакций I порядка концентрации исходного, промежуточного и конечного продукта в различные моменты времени.* (Задача N7, стр. 17 (Сборник вопросов, примеров и задач для практических занятий по химической кинетике. М.А.Волгин, И.М. Гамаюнова, Изд-во СГУ).

6. *Применение метода стационарных концентраций Боденштейна при изучении кинетики химических реакций. Составление дифференциальных уравнений. Кинетический анализ последовательных реакций вида $A \rightarrow B \rightarrow C$ с применением метода стационарных концентраций и квазиравновесного приближения.* (Задачи N 1, 2, 5, 9, 10 стр. 20-22 (Сборник вопросов, примеров и задач для практических занятий по химической кинетике. М.А.Волгин, И.М. Гамаюнова, Изд-во СГУ).

Тема 7.2. Влияние температуры на скорость химической реакции. Цепные реакции

Зависимость константы скорости от температуры. Правило Вант-Гоффа. Эмпирическое уравнение Аррениуса. Теория Аррениуса, ее положения. Вывод уравнения Аррениуса. “Эффективная” и “истинная” энергия активации. Экспериментальное определение энергии активации. Цепные реакции. Элементарные процессы зарождения, продолжения, разветвления и обрыва цепей. Длина цепи. Разветвленные цепные реакции. Предельные явления в разветвленных цепных реакциях на примере окисления водорода. Полуостров воспламенения. Период индукции. Зависимость положения нижнего предела воспламенения от сосуда и природы его поверхности.

Расчет температурного коэффициента Вант-Гоффа. Вычисление энергии активации по значениям констант скорости при двух или более температурах. Расчет энергии активации графическим методом и по уравнению линейной регрессии, полученному с помощью метода наименьших квадратов. Расчет предэкспоненциального множителя. (Задачи 1, 2, 3, 5, 13 стр. 25-27 (Сборник вопросов, примеров и задач для практических занятий по химической кинетике. М.А. Волгин, И.М. Гамаюнова, Изд-во СГУ).

Контрольная работа по разделу 7

Лабораторная работа «Изучение кинетики реакции омыления эфира щелочью при различных температурах».

Раздел 8. Теории молекулярной кинетики

Теория соударений в химической кинетике. Газокинетический диаметр соударений в применении к молекулярным и бимолекулярным реакциям. Схема Линдемана, ее использование и применимость. Поправка Гиншельвуда.

Метод переходного состояния (активированного комплекса)

Свойства активированного комплекса. Допущения теории активированного комплекса. Трансмиссионный коэффициент. Статистический расчет константы скорости. Термодинамический аспект теории активированного комплекса. Энтропия активации. Соотношения между опытной и истинной энергией активации. Применение теории соударений и активированного комплекса к реакциям в растворах. Роль процессов сольватации в химической кинетике.

Вычисление эффективного диаметра столкновений молекул, общего числа соударений, стерического фактора, энергии активации и константы скорости из теории активных соударений. (Задачи 2, 4, 6, 7 стр. 31, 32 (Сборник вопросов, примеров и задач для практических занятий по химической кинетике. М.А.Волгин, И.М. Гамаюнова, Изд-во СГУ)

Многовариантная задача «Теория активных столкновений»

Раздел 9. Катализ

Тема 9.1. Гомогенный катализ

Определение и общие принципы катализа. Гомогенный катализ. Кислотно-основной катализ. Классификация реакций кислотно-основного типа.

Собеседование по теме «Гомогенный катализ»

Тема 9.2. Гетерогенный катализ.

Определение скорости гетерогенной каталитической реакции. Удельная активность. Активность и селективность катализаторов. Адсорбция как стадия гетерогенных каталитических реакций. Неоднородность поверхности катализаторов. Металлы как катализаторы. Теория мультиплетов Баландина.

Собеседование по теме «Гетерогенный катализ»

5. Образовательные технологии, применяемые при освоении дисциплины

При изучении дисциплины «Физическая химия» реализуются различные виды учебной работы: лекции, лабораторные занятия, контрольные задание и контрольная работа, тестовый компьютерный опрос, самостоятельные работы, собеседование, устный опрос. Для проведения расчетов имеется набор компьютерных программ, что позволяет ускорить вычислительную часть задания и, в то же время, способствует развитию навыков использования компьютерных технологий для решения физико-химических задач.

Лабораторный практикум по физической химии выполняется с использованием цифровых технологий. Для этого в лаборатории имеются учебно-лабораторные комплексы «Химия», позволяющие проводить измерения по термохимии, по химической кинетике, по электрохимии с использованием компьютерных технологий. Это позволяет увеличить вариативность заданий и дает возможность проводить изучение той или иной темы фронтально.

Форма проведения занятий для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья устанавливается с учетом индивидуальных психофизических особенностей (устно, письменно на бумаге, письменно на компьютере, в форме тестирования), при необходимости предоставляется дополнительное время для подготовки ответа на экзамене, использование социально-активных рефлексивных методов обучения для создания комфортного психологического климата в студенческой группе, использование дистанционных технологий при реализации программы, работа по индивидуальному плану.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

Самостоятельная работа студентов предполагает освоение теоретического материала. Подготовку к лабораторным работам, оформление лабораторных работ, подготовку к контрольным работам, текущему и итоговому контролю. Текущий контроль проводится в виде контрольных работ и контрольных заданий, тестов, многовариантных задач, устных отчетов, собеседований. Форма промежуточного контроля – зачет и экзамен. Билеты для экзамена составляются на основании вопросов для самоконтроля.

Вопросы для самоконтроля

Общая термодинамика

1. Термодинамическая система: изолированная, закрытая, открытая.
2. Первый закон термодинамики. Его формулировки и значение.
3. Теплота и работа – как формы передачи энергии. Понятие обобщенной силы.

4. Теплоемкость вещества, ее зависимость от температуры. Калорические коэффициенты.
5. Применение первого закона термодинамики к идеальным газам.
6. Закон Гесса и его значение.
7. Стандартные теплоты образования и теплоты сгорания вещества. Расчет тепловых эффектов по теплотам образования и сгорания химических веществ.
8. Тепловые эффекты химической реакции при постоянном объеме и постоянном давлении, связь между ними.
9. Зависимость теплового эффекта химической реакции от температуры. Закон Кирхгофа.
10. Условие превращения теплоты в работу. Цикл Карно.
11. Второй закон термодинамики. Его формулировки и значение.
12. Аналитическое выражение второго закона термодинамики. Физический смысл энтропии. Статистическое толкование энтропии.
13. Методы расчета энтропии.
14. Третий закон термодинамики. Постулат Планка. Абсолютная энтропия. Принцип недостижимости абсолютного нуля температуры.
15. Дифференциальные соотношения в термодинамике.
16. Термодинамические потенциалы и характеристические функции.
17. Уравнение Гиббса-Гельмгольца. Его физический смысл и значение.
18. Условия равновесия и самопроизвольного протекания процессов в системе.
19. Фазовые переходы первого рода. Уравнение Клаузиуса-Клапейрона.
20. Понятие о фазовых переходах второго рода.

Химическая термодинамика

1. Термодинамика химического равновесия. Закон действия масс. Константа равновесия. Способы выражения константы равновесия.
2. Уравнение изотермы химической реакции.
3. Зависимость константы равновесия от температуры. Уравнение изобары химической реакции. Уравнение изохоры химической реакции.
4. Влияние давления на химическое равновесие. Уравнение Планка-Ван-Лаара.
5. Влияние параметров на химическое равновесие. Принцип Ле-Шателье-Брауна.
6. Расчет равновесного состава газовых реакций. Расчет константы равновесия с вычислением постоянной интегрирования.
7. Расчет константы равновесия по методу Шварцмана-Темкина.
8. Приближенные методы расчета констант равновесия.
9. Расчет равновесного состава, исходя из одного моля исходного вещества.
10. Расчет равновесного состава, зная состав исходной смеси.
11. Расчет равновесного состава через степень превращения.

Растворы и гетерогенные равновесия

1. Фундаментальные уравнения Гиббса. Химический потенциал.

2. Химический потенциал компонента идеального и реального газового раствора.
3. Парциальные молярные величины. Уравнение Гиббса-Дюгема.
4. Межмолекулярное взаимодействие в растворах. Энтропийный фактор растворения.
5. Равновесие жидкости с паром. Идеальные растворы. Закон Рауля.
6. Реальные растворы. Положительные и отрицательные отклонения. Закон Генри. Предельно разбавленные растворы.
7. Первый закон Коновалова, Фракционная перегонка жидкостей.
8. Второй закон Коновалова. Разделение азеотропных смесей.
9. Несмешивающиеся жидкости. Перегонка с водяным паром.
10. Растворимость газов в жидкости: влияние давления, температуры и электролитов.
11. Идеальная растворимость твердых тел в жидкостях. Уравнение Шредера. Криоскопия и эбулиоскопия.
12. Термодинамика осмотического давления. Закон Вант-Гоффа.
13. Правило фаз Гиббса.
14. Однокомпонентные системы. Диаграмма состояния воды.
15. Диаграмма состояния серы. Монотропные и энантиотропные превращения.
16. Плоская диаграмма двухкомпонентной системы при образовании эвтектики. Криогидратные смеси.
17. Диаграмма состояния двухкомпонентной системы, образующей химическое соединение, плавящееся конгруэнтно.
18. Диаграмма состояния двухкомпонентной системы, образующей химическое соединение, плавящееся инконгруэнтно.
19. Твердые растворы. Диаграмма состояния двухкомпонентной системы с неограниченной растворимостью в твердом состоянии.
20. Диаграммы состояния двухкомпонентной системы с ограниченной растворимостью в твердом состоянии (I и II типы).
21. Диаграммы состояния двухкомпонентной системы с ограниченной растворимостью компонентов в жидком состоянии. Явление ликвации.

Электрохимия

1. Теория электролитической диссоциации, ее количественные характеристики. Причины устойчивости ионных систем.
2. Энергия и теплота разрушения кристаллической решетки. Уравнение Борна. Ион-дипольные взаимодействия. Механизмы образования и причины устойчивости ионных систем.
3. Ион-дипольное взаимодействие в растворах электролитов. Активность, коэффициент активности. Эмпирическое правило Льюиса-Рендала.
4. Ион-ионные взаимодействия в растворах сильных электролитов. Модель Дебая-Гюккеля. Ионная атмосфера и ее количественные характеристики.
5. Теория сильных электролитов Дебая-Гюккеля. Уравнения для среднего ионного коэффициента активности в I, II и III-ем приближениях.

6. Неравновесные свойства растворов электролитов. Диффузия и миграция ионов. Удельная и эквивалентная электропроводность. Скорость движения ионов. Электрическая подвижность и ионная электропроводность. Поток миграции. Вывод закона Кольрауша.
7. Влияние концентрации на удельную и эквивалентную электропроводность для слабых и сильных электролитов.
8. Влияние различных факторов на подвижность ионов. Аномальная подвижность ионов гидроксония и гидроксида. Электропроводность неводных растворов. Явление ассоциации ионов.
9. Скачки потенциала на разных межфазных границах. Гальвани-потенциал. Электрохимический потенциал. Процессы, происходящие на границах металл-металл, раствор-раствор и металл-раствор.
10. Условие перехода заряженной частицы через границу металл-раствор. Условие электрохимического равновесия. Формула Нернста для Гальвани-потенциала.
11. Понятие электродного потенциала. Водородный электрод и его роль в электрохимии. Значение водородной шкалы потенциалов.
12. Термодинамика гальванического элемента. Формула Нернста для ЭДС электрохимической цепи. Расчет константы равновесия и термодинамических функций. Уравнение Гиббса-Гельмгольца и его исследование.
13. Классификация электродов. Формула Нернста для электродного потенциала.
14. Измерение рН методом ЭДС. Хингидронный, водородный и стеклянный электроды.
15. Классификация электрохимических цепей. Обратимые и необратимые химические цепи. Концентрационные цепи без переноса и с переносом. Причины возникновения диффузионного потенциала и способы его элиминирования.
16. Коррозия металлов. Химическая и электрохимическая коррозия. Термодинамика коррозионного процесса. Кинетические кривые. Понятие равновесного и стационарного потенциала. Термодинамика водородного и кислородного электродов. Диаграмма устойчивости воды и её значение.

Кинетика химических реакций

1. Кинетический анализ простых необратимых реакций нулевого, 1-го, 2-го и 3-го порядков (случай равных концентраций).
2. Кинетический анализ обратимых реакций 1-го и 2-го порядков.
3. Кинетический анализ простой необратимой реакции 2-го порядка: случай разных концентраций. Кинетический анализ параллельных реакций первого порядка.
4. Последовательные реакции: кинетический анализ реакций типа:
 $A \rightarrow B \rightarrow C$.
5. Метод стационарных и квазиравновесных концентраций.
6. Методы определения порядка реакции
7. Общая характеристика цепных реакций. Стадии цепной реакции

8. Кинетика неразветвленных цепных реакций.
9. Теория активных соударений.
10. Теория столкновений для мономолекулярных реакций: теория Линдемана и Гиншельвуда-Линдемана.
11. Теория активированного комплекса.
12. Общие принципы катализа. Гомогенный катализ. Автокаталитические реакции.
13. Гетерогенные каталитические реакции: общая характеристика стадий реакции.
Энергия активации каталитического процесса.
14. Стадия адсорбции в гетерогенном катализе.
15. Кинетическая стадия гетерогенной каталитической реакции.
16. Теории гетерогенного катализа: теории мультиплетов, теории активных ансамблей и электронная теория.

7. Данные для учета успеваемости студентов в БАРС

Таблица 1.1. Таблица максимальных баллов по видам учебной деятельности.

1	2	3	4	5	6	7	8	9
Семестр	Лекции	Лабораторные занятия	Практические занятия	Самостоятельная работа	Автоматизированное тестирование	Другие виды учебной деятельности	Промежуточная аттестация	Итого
3	0	25	0	15	0	30	30 (зачет)	100
3	10	0	0	30	0	25	35 (экзамен)	100

Программа оценивания учебной деятельности студента

3 семестр
для зачёта

Лекции

оценивание не предусмотрено

Лабораторные занятия от 0 до 25 баллов

Оценивается выполнение, оформление, своевременность отчета. Всего 5 лабораторных работ по 5 баллов каждая из них:

«5 баллов» выставляется за:

- своевременное выполнение лабораторной работы, получение правильного результата, грамотное оформление лабораторного журнала и устное пояснение полученных результатов;

«4 балла» выставляется за:

- своевременное выполнение лабораторной работы, получение правильного результата и грамотное оформление лабораторного журнала;

«3 баллов» выставляется за:

- своевременное выполнение лабораторной работы, получение частично правильного результата и грамотное оформление лабораторного журнала;

«2 балла» выставляется за:

- несвоевременное выполнение лабораторной работы, получение частично правильного результата и грамотное оформление лабораторного журнала;

«1 балл» выставляется за:

- несвоевременное выполнение лабораторной работы и получение частично правильного результата;

«0 баллов» выставляется за:

- невыполнение лабораторной работы.

Практические занятия

не предусмотрены

Самостоятельная работа от 0 до 15 баллов

Самостоятельная работа подразумевает выполнение контрольных и тестовых заданий по всем разделам. Оценивание самостоятельной работы (всего 7 заданий по 2 балла каждое). Дополнительный 1 балл студент получает за аккуратное оформление работы:

«2 балла» выставляется за:

- своевременное, правильное выполнение задания;

«1 балл» выставляется за:

- несвоевременное или частично правильное выполнение задания;

«0 баллов» выставляется за:

- невыполнение задания.

Автоматизированное тестирование

не предусмотрено

Другие виды учебной деятельности от 0 до 30 баллов

Другие виды учебной деятельности подразумевают выполнение многовариантных задач. Оценивание других видов учебной деятельности (всего 3 работ по 10 баллов каждая).

«10 баллов» выставляется за:

- своевременное, правильное выполнение задания с устным объяснением хода решения и теоретическим обоснованием расчетов;

«7 – 9 баллов» выставляется за:

- своевременное, частично правильное выполнение задания с устным объяснением хода решения и теоретическим обоснованием расчетов;

«4 – 6 баллов» выставляется за:

- несвоевременное, частично правильное выполнение задания с устным объяснением хода решения;

«1 – 3 балла» выставляется за:

- несвоевременное, неправильное выполнение задания без устного объяснения хода решения и теоретического обоснование расчетов;

«0 баллов» выставляется за:

- невыполнение задания.

Промежуточная аттестация (зачет) от 0 до 30 баллов

ответ на «отлично» / «зачтено» оценивается от 21 до 30 баллов;

ответ на «хорошо» / «зачтено» оценивается от 11 до 20 баллов;

ответ на «удовлетворительно» / «зачтено» оценивается от 6 до 10 баллов;

ответ на «неудовлетворительно» / «не зачтено» оценивается от 0 до 5 баллов.

Таким образом, максимально возможная сумма баллов за все виды учебной деятельности студента за 3 семестр по дисциплине «Физическая химия» за зачет составляет 100 баллов

Таблица 2.1. Таблица пересчета полученной студентом суммы баллов по дисциплине «Физическая химия» в оценку (зачет):

60-100 баллов	«зачтено»
0-59 баллов	«не зачтено»

3 семестр

для экзамена

Лекции – от 0 до 10 баллов

- Оценивание посещаемости и активное участие в процессе чтения лекции – 0-10 баллов

Диапазон баллов	Критерий оценки
0 баллов	Посещение менее 40% лекционных занятий
1-3 балла	Посещение 40 – 59% лекционных занятий
4-6 баллов	Посещение 60 – 79% лекционных занятий
7-10 баллов	Посещение 80 – 100% лекционных занятий

Лабораторные занятия

оценивание не предусмотрено

Практические занятия

Не предусмотрены.

Самостоятельная работа от 0 до 30 баллов

Самостоятельная работа подразумевают два собеседования по разделу 9 и устный отчет по разделу 3. Оценивание самостоятельной работы (всего 3 работы по 10 баллов каждая).

«10 баллов» выставляется за:

- студент грамотно и правильно отвечает на все вопросы, поддерживает диалог с преподавателем по теме собеседования, способен иллюстрировать теоретические положения конкретными примерами;

«8 – 9 баллов» выставляется за:

- студент грамотно и правильно отвечает на все вопросы, поддерживает диалог с преподавателем по теме собеседования;

«5– 7 балла» выставляется за:

- студент грамотно и частично правильно отвечает на все вопросы, способен исправить несущественную ошибку после замечания;

«2 – 4 балла» выставляется за:

- студент грамотно, но неполно отвечает на вопросы, имеются затруднения или допущены ошибки в определении понятий;

«1 – 3 балла» выставляется за:

- студент не систематизировано отвечает на вопросы, обнаруживает незнание или недопонимания большей части материала;

«0 баллов» выставляется за:

- студент не владеет теоретическими знаниями по теме собеседования.

Автоматизированное тестирование

не предусмотрено

Другие виды учебной деятельности от 0 до 25 баллов

За выполнение контрольной работы по разделу 7 от 0 до 25 баллов:

«25 баллов» выставляется за:

- полное безошибочное выполнение контрольной работы;

«20 – 24 балла» выставляется за:

- выполнение более 80% заданий

«15 – 19 балла» выставляется за:

- выполнение 60 – 79 % заданий;

«10 – 14 баллов» выставляется за:

- выполнение 40 – 59 % заданий;

«5 – 9 баллов» выставляется за:

- выполнение 20 – 39 % заданий;

«1 – 4 балла» выставляется за:

- выполнение менее 20 % заданий;

«0 баллов» выставляется за:

- невыполнение работы.

Промежуточная аттестация (экзамен) от 0 до 35 баллов

ответ на «отлично» оценивается от 30 до 35 баллов;

ответ на «хорошо» оценивается от 25 до 29 баллов;

ответ на «удовлетворительно» оценивается от 15 до 24 баллов;

ответ на «неудовлетворительно» оценивается от 0 до 14 баллов.

Таким образом, максимально возможная сумма баллов за все виды учебной деятельности студента за 3 семестр по дисциплине «Физическая химия» за экзамен составляет 100 баллов

Таблица 2.2. Таблица пересчета полученной студентом суммы баллов по дисциплине «Физическая химия» в оценку (экзамен):

85 – 100 баллов	«отлично»
70 – 84 баллов	«хорошо»
55 – 69 баллов	«удовлетворительно»
0 – 54 баллов	«не удовлетворительно»

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

а) литература:

- 1) Горшков В.И., Кузнецов И.А. Основы физической химии (Текст): учебник 3-е изд. – М.: БИНОМ. Лаб. Знаний, 2006. – 407 с. (53 экз.)
- 2) Казаринов И.А., Коноплянцева Н.А. Химическая термодинамика: теория, задачи и вопросы. Изд-во СГУ, 2017 г. -256 с. (30 экз.)
- 3) **Борщевский, А. Я.** Физическая химия [Электронный ресурс] : учебник: Том 1: Общая химическая термодинамика / А. Я. Борщевский. - 1. - Москва : ООО "Научно-издательский центр ИНФРА-М", 2017. - 606 с. - ISBN 9785160117850 : Б. ц. <http://znanium.com/go.php?id=543133>
- 4) **Борщевский, А. Я.** Физическая химия [Электронный ресурс] : учебник: Том 2: Статистическая термодинамика / А. Я. Борщевский. - 1. - Москва : ООО "Научно-издательский центр ИНФРА-М", 2017. - 382 с. - ISBN 9785160117881 : Б. ц. <http://znanium.com/go.php?id=543170>

б) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

1. Microsoft Word версии 2010
2. Microsoft Excel версии 2010
3. Microsoft Power Point версии 2010
4. <http://www.fptl.ru/Chemblock.html> – различные учебно-методические материалы по химии;
5. <http://chemistry-chemists.com/Uchebniki.html> - учебники, практикумы и справочники по химии.
6. И.М. Гамаюнова, М.М. Бурашникова, М.П. Смотров «Электронные тестовые задания по химической кинетике [Электронный ресурс] 58 с, 2014 г. http://elibrary.sgu.ru/uch_lit/1045.pdf
7. И.М. Гамаюнова, М.М. Бурашникова, М.П. Смотров «Электронные тестовые задания по химической термодинамике [Электронный ресурс] 50 с, 2014 г. http://elibrary.sgu.ru/uch_lit/1046.pdf
8. И.М. Гамаюнова, М.М. Бурашникова, М.П. Смотров «Электронные тестовые задания по электрохимии [Электронный ресурс] 41 с, 2014 г. http://elibrary.sgu.ru/uch_lit/1047.pdf
9. Коноплянцева Н.А., Казаринов И.А., Ильина Л.К., Гамаюнова И.М. Сборник вопросов, примеров и задач по электрохимии (электронное учебное пособие)
10. Волгин М.А., Гамаюнова И.М. Сборник вопросов, примеров и задач по химической кинетике (электронное учебное пособие)

Курс лекций профессора Чурикова А.В. выставлен на сайте:

<https://www.sgu.ru/node/27/studentu/uchebnye-materialy>

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины

- Мультимедийное оборудование;
- Электронные потенциостаты, сочетающие исполнительные устройств: потенциостаты/гальваностаты серии IPC, частотные анализаторы FRA;
- Комплекс электрохимического оборудования «Autolab»;
- Криостат «Криовист»;
- Люминисцентный микроскоп «Альтами Люм 1»;
- Цифровые мультиметры, амперметры, вольтметры;
- Энергодисперсионный рентгенофлуоресцентный спектрометр EDX – 720HS (Шимадзу, Япония);
- Лазерный дифракционный анализатор размера частиц SALD – 2021 (Шимадзу, Япония);
- Прибор Quantachrome NOVA1200e (США) для определения распределения пор по радиусам адсорбционным методом
- Лабораторное оборудование: весы, учебно-лабораторный комплекс (УЛК) «Химия», совмещенный с компьютером, калориметры, термометры, секундомеры, источники тока, вольтметры, электрохимические ячейки, различные электроды (хингидронный, хлорсеребряный, цинковый, медный).
- Химическая посуда.
- Химические реактивы.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 20.03.01 «Техносферная безопасность» профиль «Промышленная безопасность технологических процессов и производств».

Автор:

доцент кафедры физической химии
Института химии СГУ, к.х.н.

И.М. Гамаюнова

Программа одобрена на заседании кафедры физической химии от 07 июня 2023 года, протокол № 10.