

УТВЕРЖДАЮ  
Директор ВШТЭ



## Рабочая программа дисциплины

**2.1.7** Физическая химия

Учебный план: ФА144.2-12\_23-14.plx

Кафедра: 2 Физической и коллоидной химии

Научная специальность: 1.4.4. Физическая химия

Уровень образования: подготовка научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре

Форма обучения: очная

### План учебного процесса

Семестр (курс для ЗАО)	Контактная работа обучающихся		Сам. работа	Контроль, час.	Трудоёмкость, ЗЕТ	Форма промежуточной аттестации
	Лекции	Практ. занятия				
6	УП	32	16	96	36	Экзамен
	РПД	32	16	96	36	
Итого	УП	32	16	96	36	
	РПД	32	16	96	36	

Рабочая программа дисциплины составлена в соответствии приказом Минобрнауки России 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)"

Составитель (и):

Доктор технических наук, заведующий кафедрой

Кандидат химических наук, доцент

Липин В.А.

Демьянцева Е.Ю.

От кафедры составителя:

Заведующий кафедрой физической и коллоидной химии

Липин В.А.

От выпускающей кафедры:

Заведующий кафедрой

Липин В.А.

Методический отдел:

Смирнова В.Г.

## 1 ВВЕДЕНИЕ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ

**1.1 Цель дисциплины:** формирование и развитие у аспирантов знаний и умений, позволяющих осуществлять планирование и проведение научных исследований в области физической химии на основе углубленного изучения законов и основных положений физической химии, а также физико-химических методов анализа.

### 1.2 Задачи дисциплины:

- формирование навыков и умений в применении основных законов и теоретических положений физической химии в решении научных и практических вопросов;
- изучение основных физико-химических методов анализа, основанных на положениях и закономерностях физической химии, применяемых в данной области;
- освоение ключевых подходов к исследованию объектов физической химии (химические реакции, фазовые переходы, строение вещества и др.)

### 1.3 Место дисциплины в структуре программы аспирантуры:

Дисциплина относится к Образовательному компоненту «Дисциплины (модули)» Программы подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре

Знания и умения, полученные аспирантами при изучении данной дисциплины, необходимы при подготовке к сдаче кандидатского экзамена и написании диссертационной работы

## 2 ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

**Знать:** Экспериментально-теоретическое определение энергетических и структурно-динамических параметров строения молекул и молекулярных соединений  
термодинамические аспекты фазовых превращений и фазовых переходов  
Теорию растворов, межмолекулярные и межчастичные взаимодействия  
Физико-химические основы процессов химической технологии и синтеза новых материалов.

**Уметь:** проводить теоретические и экспериментальные исследования термодинамических свойств веществ, расчет термодинамических функций простых и сложных систем, в том числе на основе методов статистической термодинамики

**Владеть:** методами проведения и анализа результатов энергетических и структурно-динамических параметров строения молекул и молекулярных соединений  
расчет термодинамических функций простых и сложных систем

### 3 СОДЕРЖАНИЕ И ПОРЯДОК ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Наименование и содержание разделов, тем и учебных занятий	Семестр (курс для ЗАО)	Контактная работа		СР (часы)	Форма текущего контроля
		Лек. (часы)	Пр. (часы)		
Раздел 1. Строение вещества					
<p>Тема 1. Основные положения классической теории строения вещества. Структурная формула молекулы. Изомерия. Конформация молекул. Связь строения молекул и свойств.</p> <p>Методы молекулярной механики и молекулярной динамики при анализе строения молекул. Общие принципы квантово-механического описания молекулярных систем. Стационарное уравнение Шредингера для свободной молекулы. Электронное волновое уравнение.</p> <p>Потенциальные кривые и поверхности потенциальной энергии. Колебания молекул. Вращение молекул. Вращательные уровни энергии. Электронное строение атомов и молекул.</p>	6	3	16	С	
<p>Тема 2. Симметрия молекулярных систем. Классификация квантовых состояний атомов и молекул по симметрии. Симметрия атомных и молекулярных орбиталей. Электрические и магнитные свойства. Магнитный момент и магнитная восприимчивость. Эффект Старка и Зеемана. Магнитно-резонансные методы исследования молекул. Оптические спектры молекул. Связь спектров молекул с их строением.</p> <p>Межмолекулярное взаимодействие, основные составляющие. Супрамолекулы и супрамолекулярная химия.</p> <p>Строение конденсированных фаз. Кристаллы. Строение твердых растворов. Структура простых жидкостей. Растворы неэлектролитов и электролитов. Особенности строения полимерных фаз. Поверхность конденсированных фаз.</p>	6	3	16		
Раздел 2. Химическая термодинамика					С

<p>Тема 3. Основные понятия и законы термодинамики. Уравнения состояния. Вириальные уравнения состояния. Первый закон термодинамики. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Второй закон термодинамики. Теорема Карно-Клаузиуса. Фундаментальные уравнения Гиббса. Уравнения Максвелла. Уравнение Гиббса-Гельмгольца. Химические потенциалы.</p> <p>Химическое равновесие. Законы действующих масс. Константы равновесия и связь между ними. Изотерма Вант-Гоффа. Приведенная энергия Гиббса и ее использование для расчетов химических равновесий.</p> <p>Элементы статистической термодинамики. Микро- и макросостояния химических систем. Термодинамическая вероятность и ее связь с энтропией. Статистический расчет энтропии. Расчет констант равновесия в идеальных газах методом статистической термодинамики. Статистическая термодинамика реальных систем.</p> <p>Элементы термодинамики необратимых процессов. Основные положения термодинамики неравновесных процессов. Термодиффузия и ее описание в неравновесной термодинамике.</p>	5	2	16	
<p>Тема 4. Растворы. Фазовые равновесия. Способы выражения состава растворов. Идеальные растворы, общие условия идеальности растворов. Неидеальные растворы и их свойства. Метод активностей. Коэффициенты активности и их определение. Коллигативные свойства растворов. Осмотические явления. Определение молярных величин для бинарных систем. Уравнение Гиббса - Дюгема.</p> <p>Гетерогенные системы. Правило фаз Гиббса. Однокомпонентные системы, фазовые переходы первого рода. Двухкомпонентные системы. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем. Фазовые переходы второго рода. Трехкомпонентные системы. Треугольник Гиббса.</p> <p>Адсорбция и поверхностные явления. Виды адсорбции. Динамический характер адсорбционного равновесия. Изотермы и изобары адсорбции.</p> <p>Поверхность раздела фаз. Свободная поверхностная энергия. Избыточные термодинамические функции поверхностного слоя.</p> <p>Электрохимические процессы. Растворы электролитов. Основные положения Дебая-Хюккеля. Условия электрохимического равновесия на границе раздела фаз и в электрохимической цепи. Термодинамика гальванического элемента.</p>	5	3	16	
Раздел 3. Кинетика химических реакций				С

<p>Тема 5. Химическая кинетика. Основные понятия химической кинетики. Способы определения скорости реакции. Константа скорости и порядок реакции. Реакция переменного порядка.</p> <p>Кинетика сложных химических реакций. кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций.</p> <p>Цепные реакции. Кинетика неразветвленных и разветвленных цепных реакций. Реакции в потоке. Реакции идеального вытеснения и идеального смешения.</p> <p>Макрокинетика. Роль диффузии в кинетике гетерогенных реакций. Различные режимы протекания реакций (кинетическая и внешняя кинетическая области, области внутренней и внешней диффузии). Зависимости реакции от температуры. Энергия активации и способы ее определения. Термические и нетермические пути активации молекул.</p> <p>Теория активных столкновений. Формула Траутса-Льюиса.</p> <p>Различные типы химических реакций. Мономолекулярные, бимолекулярные, тримолекулярные реакции. Реакции в растворах, влияние растворителя и заряда реагирующих частиц. Фотохимические и радиационно-химические реакции. Электрохимические реакции. Электрокапиллярные явления.</p>	5	2	16	
<p>Тема 6. Катализ. Классификация каталитических реакций и катализаторов. Теория промежуточных соединений в катализе, принцип энергетического соответствия.</p> <p>Гомогенный катализ. Функции кислотности Гаммета. Кинетика и механизм общего кислотного катализа.</p> <p>Катализ металлокомплексными соединениями. Гомогенные реакции гидрирования, их кинетика и механизмы.</p> <p>Ферментативный катализ. Адсорбционные и каталитические центры ферментов. Механизмы ферментативного катализа.</p> <p>Гетерогенный катализ. Определение скорости гетерогенной каталитической реакции. Современные теории функционирования гетерогенных катализаторов. Основные промышленные каталитические процессы.</p>	5	3	16	
Итого в семестре (на курсе для ЗАО)	32	16	96	
Консультации и промежуточная аттестация (Экзамен)	0		36	
<b>Всего контактная работа и СР по дисциплине</b>	48		132	

#### 4. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

##### 4.1 Описание показателей, критериев и системы оценивания результатов обучения

###### 4.1.1 Показатели оценивания

Показатели оценивания результатов обучения	Наименование оценочного средства
<p>1. Демонстрирует знания общих законов в определении правления и скорости химических превращений при различных внешних условиях; о количественных взаимодействиях между химическим составом, структурой вещества и его свойствами</p> <p>2. Демонстрирует знания современных физико-химических методов исследования, основ планирования научно-исследовательской деятельности в процессах</p>	<p>Вопросы устного собеседования</p> <p>Практико-ориентированные задания</p>

<p>структурообразования и разрушения дисперсных систем</p> <p>3.Способен оптимизировать исследовательскую деятельность в области изучения физико-химических свойств систем при воздействии внешних полей, а также в экстремальных условиях высоких температур и давлений физико-химических закономерностей дисперсных систем</p> <p>4.Анализирует научную литературу с целью выбора направления исследования по предлагаемой теме и самостоятельно составляет план исследования</p>	
---	--

#### 4.1.2 Система и критерии оценивания

Шкала оценивания	Критерии оценивания	
	Устное собеседование	Письменная работа
5 (отлично)	Обучающийся показывает всестороннее и глубокое знание основных законов физической химии, свободно ориентируется в основных понятиях, терминах и определениях при ответе; усвоил основную и знаком с дополнительной литературой; может объяснить взаимосвязь основных физико-химических законов и их значение для последующей профессиональной деятельности; проявляет творческие способности и широкую эрудицию в использовании учебного материала.	Критическое и разностороннее рассмотрение вопросов, свидетельствующее о значительной самостоятельной работе с источниками. Качество исполнения всех элементов задания полностью соответствует всем требованиям.
4 (хорошо)	Обучающийся показывает достаточный уровень знаний основных законов физической химии, ориентируется в основных понятиях и определениях; усвоил основную литературу; допускает незначительные погрешности при ответах на вопросы экзаменационного билета и дополнительные вопросы преподавателя.	Работа выполнена в соответствии с заданием. Имеются отдельные несущественные ошибки или отступления от правил оформления работы.
3 (удовлетворительно)	Обучающийся показывает знания учебного материала в минимальном объеме; может сформулировать законы физической химии, понятия и определения, но при этом, допуская большое количество принципиальных ошибок; знаком с основной литературой; допускает существенные ошибки в ответе на экзамене, но может устранить их под руководством преподавателя.	Задание выполнено полностью, но с многочисленными существенными ошибками. При этом нарушены правила оформления или сроки представления работы.
2 (неудовлетворительно)	Обучающийся не имеет достаточного уровня знания дисциплины; не может сформулировать основные законы физической химии; плохо ориентируется в основных понятиях и определениях; плохо знаком с основной литературой; допускает при ответе на экзамене существенные ошибки и не может устранить их даже под руководством преподавателя. Попытка списывания, использования неразрешенных технических устройств или пользование подсказкой другого человека.	Отсутствие одного или нескольких обязательных элементов задания, либо многочисленные грубые ошибки в работе, либо грубое нарушение правил оформления или сроков представления работы. Представление чужой работы, плагиат, либо отказ от представления работы. Задание выполнено неверно

#### 4.2 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

##### 4.2.1 Перечень контрольных вопросов

№ п/п	Формулировки вопросов
-------	-----------------------

Семестр 6

1	Основные положения классической теории строения вещества. Структурная формула молекулы. Изомерия. Конформация молекул. Связь строения молекул и свойств.
2	Методы молекулярной механики и молекулярной динамики при анализе строения молекул. Общие принципы квантово-механического описания молекулярных систем.
3	Стационарное уравнение Шредингера для свободной молекулы. Электронное волновое уравнение. Потенциальные кривые и поверхности потенциальной энергии. Колебания молекул. Вращение молекул.
4	Симметрия молекулярных систем. Классификация квантовых состояний атомов и молекул по симметрии. Симметрия атомных и молекулярных орбиталей.
5	Электрические и магнитные свойства. Магнитный момент и магнитная восприимчивость. Эффект Старка и Зеемана. Магнитно-резонансные методы исследования молекул. Оптические спектры молекул. Связь спектров молекул с их строением.
6	Межмолекулярное взаимодействие, основные составляющие. Супрамолекулы и супрамолекулярная химия.
7	Строение конденсированных фаз. Кристаллы. Строение твердых растворов. Структура простых жидкостей. Растворы неэлектролитов и электролитов. Особенности строения полимерных фаз.
8	Поверхность конденсированных фаз.
9	Основные понятия и законы термодинамики. Уравнения состояния. Вириальные уравнения состояния. Первый закон термодинамики. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Второй закон термодинамики. Теорема Карно-Клаузиуса. Фундаментальные уравнения Гиббса. Уравнения Максвелла. Уравнение Гиббса-Гельмгольца. Химические потенциалы.
10	Химическое равновесие. Законы действующих масс. Константы равновесия и связь между ними. Изотерма Вант-Гоффа. Приведенная энергия Гиббса и ее использование для расчетов химических равновесий.
11	Элементы статистической термодинамики. Микро- и макросостояния химических систем. Термодинамическая вероятность и ее связь с энтропией. Статистический расчет энтропии.
12	Расчет констант равновесия в идеальных газах методом статистической термодинамики. Статистическая термодинамика реальных систем.
13	Элементы термодинамики необратимых процессов. Основные положения термодинамики неравновесных процессов. Термодиффузия и ее описание в неравновесной термодинамике.
14	Растворы. Фазовые равновесия. Способы выражения состава растворов. Идеальные растворы, общие условия идеальности растворов. Неидеальные растворы и их свойства.
15	Метод активностей. Коэффициенты активности и их определение. Коллигативные свойства растворов. Осмотические явления. Определение мольных величин для бинарных систем. Уравнение Гиббса - Дюгема.
16	Гетерогенные системы. Правило фаз Гиббса. Однокомпонентные системы, фазовые переходы первого рода. Двухкомпонентные системы. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем. Фазовые переходы второго рода. Трехкомпонентные системы. Треугольник Гиббса.
17	Адсорбция и поверхностные явления. Виды адсорбции. Динамический характер адсорбционного равновесия. Изотермы и изобары адсорбции.
18	Поверхность раздела фаз. Свободная поверхностная энергия. Избыточные термодинамические функции поверхностного слоя.
19	Электрохимические процессы. Растворы электролитов. Основные положения Дебая-Хюккеля. Условия электрохимического равновесия на границе раздела фаз и в электрохимической цепи. Термодинамика гальванического элемента.
20	Химическая кинетика. Основные понятия химической кинетики. Способы определения скорости реакции. Константа скорости и порядок реакции. Реакция переменного порядка.
21	Кинетика сложных химических реакций. кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций.
22	Цепные реакции. Кинетика неразветвленных и разветвленных цепных реакций. Реакции в потоке. Реакции идеального вытеснения и идеального смешения.
23	Макрокинетика. Роль диффузии в кинетике гетерогенных реакций. Различные режимы протекания реакций (кинетические и внешняя кинетическая области, области внутренней и внешней диффузии). Зависимости реакции от температуры. Энергия активации и способы ее определения. Термические и нетермические пути активации молекул.
24	Теория активных столкновений. Формула Траутса-Льюиса.
25	Различные типы химических реакций. Мономолекулярные, бимолекулярные, тримолекулярные реакции. Реакции в растворах, влияние растворителя и заряда реагирующих частиц.
26	Фотохимические и радиационно-химические реакции. Электрохимические реакции. Электрокапиллярные явления.
27	Катализ. Классификация каталитических реакций и катализаторов. Теория промежуточных соединений в катализе, принцип энергетического соответствия.

28	Гомогенный катализ. Функции кислотности Гаммета. Кинетика и механизм общего кислотного катализа.
29	Катализ металлокомплексными соединениями. Гомогенные реакции гидрирования, их кинетика и механизмы.
30	Ферментативный катализ. Адсорбционные и каталитические центры ферментов. Механизмы ферментативного катализа.
31	Гетерогенный катализ. Определение скорости гетерогенной каталитической реакции. Современные теории функционирования гетерогенных катализаторов. Основные промышленные каталитические процессы

#### 4.2.2 Типовые практико-ориентированные задания (задачи, кейсы)

Технологические особенности формования полимерных композиционных материалов

Приведите примеры зависимости реакционной способности реагентов от их строения и условий осуществления химической реакции

#### 4.3 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, владений (навыков и (или) практического опыта деятельности)

##### 4.3.1 Условия допуска обучающегося к промежуточной аттестации и порядок ликвидации академической задолженности

Проведение промежуточной аттестации регламентировано локальным нормативным актом СПбГУПТД «Положение о проведении текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся»

##### 4.3.2 Форма проведения промежуточной аттестации по дисциплине

Устная  +  Письменная  +  Компьютерное тестирование  Иная

##### 4.3.3 Особенности проведения промежуточной аттестации по дисциплине

Время на подготовку ответа по билету 45 минут.

Кандидатский экзамен проводится по билетам, каждый из которых включает теоретические вопросы. Экзамен проводится в форме индивидуального собеседования. Достижение результатов обучения проверяется в ходе экзамена.

## 5. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### 5.1 Учебная литература

Автор	Заглавие	Издательство	Год издания	Ссылка
<b>6.1.1 Основная учебная литература</b>				
Андреев, Л. А., Астахов, М. В., Бокштейн, Б. С., Белашенко, Д. К., Новикова, Е. А., Родин, А. О., Руднева, Е. В., Фролов, Г. А., Астахова, М. В.	Физическая химия	Москва: Издательский Дом МИСиС	2011	<a href="http://www.iprbookshop.ru/97877.html">http://www.iprbookshop.ru/97877.html</a>
Андреев, Л. А.	Физическая химия: поверхностные явления на межфазных границах раздела жидкость-газ и жидкость-твердое тело	Москва: Издательский Дом МИСиС	2010	<a href="http://www.iprbookshop.ru/97876.html">http://www.iprbookshop.ru/97876.html</a>
<b>6.1.2 Дополнительная учебная литература</b>				
В.А. Липин [и др.]	Химическая термодинамика [Текст]: учебное пособие	М-во образования и науки РФ, ВШТЭ СПбГУПТД. – СПб.: ВШТЭ СПбГУПТД	2017	<a href="http://nizrp.narod.ru/metod/kaffizikollchem/Khimicheskaya_termodynamika.pdf">http://nizrp.narod.ru/metod/kaffizikollchem/Khimicheskaya_termodynamika.pdf</a>
Белашенко, Д. К., Гущина, Е. И.	Физическая химия. Химическая термодинамика	Москва: Издательский Дом МИСиС	2002	<a href="http://www.iprbookshop.ru/57095.html">http://www.iprbookshop.ru/57095.html</a>

### 5.2 Перечень профессиональных баз данных и информационно-справочных систем

Электронно-библиотечная система IPRbooks [Электронный ресурс]. URL: <http://www.iprbookshop.ru/>

Электронная библиотека ВШТЭ СПб ГУПТД [Электронный ресурс]. URL: <http://nizrp.narod.ru>

Электронно-библиотечная система «Айбукс» [Электронный ресурс]. URL: <https://www.ibooks.ru/>

### 5.3 Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения

MicrosoftWindows 8

MicrosoftOfficeProfessional 2013

### 5.4 Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Аудитория	Оснащение
Б-220	Вытяжной шкаф, лабораторные столы, вискозиметры, установки для получения полимеров, магнитные мешалки, электромешалки, электробани, тензиометр, оптический микроскоп.
Б-226	Фотоэлектроколориметр, весы лабораторные, нагревательные плитки, электромешалки, электробани, магнитные мешалки, колбагреватели, тензиометры, установка по измерению вязкости, установки для получения полимеров, криостат, вытяжной шкаф, аналитические весы, установка для измерения электропроводности, электролизер, магнитные мешалки, рефрактометр, поляриметр.
Лекционная аудитория	Мультимедийное оборудование, специализированная мебель, доска