

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского»

УТВЕРЖДЕНО
решением ученого совета ННГУ
протокол от
«16» января 2024 г. № 1

Рабочая программа дисциплины
«Физическая химия (кандидатский экзамен)»

Уровень высшего образования
Подготовка научных и научно-педагогических кадров

Научная специальность
1.4.4 Физическая химия

Форма обучения
Очная

Нижний Новгород
2024 год

1. Место и цель дисциплины в структуре ПА

Дисциплина «Физическая химия (кандидатский экзамен)» относится к числу элективных дисциплин образовательного компонента программы аспирантуры и изучается на 4 году обучения в 7 семестре.

Цель дисциплины.

Цель освоения дисциплины - дать углублённое изложение современных аспектов традиционных разделов физической химии, которые были рассмотрены в простой форме или недостаточно полно рассмотрены во вводных общих курсах строенческого цикла и курсе физической химии, читаемом студентам химического факультета ННГУ. В основу дисциплины положены следующие дисциплины: учение о строении вещества, химическая термодинамика, теория поверхностных явлений, учение об электрохимических процессах, теория кинетики химических реакций и учение о катализе.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине

Выпускник, освоивший программу, должен

Знать:

- современное состояние науки в области физической химии и в смежных областях,
- требования к содержанию и правила оформления рукописей к публикации в рецензируемых научных изданиях,
- требования к корректному выбору методов обработки экспериментальных данных и/или методов численного моделирования химических процессов; современные направления развития методом обработки экспериментальных данных и/или методов численного моделирования в своей профессиональной области,
- основные приемы химического эксперимента, методы получения органических соединений и исследования их свойств,
- химические, физические и технические аспекты химических промышленных процессов; основные требования правил безопасности при работе с оборудованием различных классов сложности и опасности; цели и задачи научных исследований по направлению деятельности, базовые принципы и методы их организации; требования к представлению отчетных материалов; основные методы обработки экспериментальных данных.

Уметь:

- представлять научные результаты по теме диссертационной работы в виде публикаций в рецензируемых научных изданиях,
- представлять результаты НИР (в т.ч., диссертационной работы) академическому и бизнес-сообществу,
- корректно использовать современные методы обработки экспериментальных данных и/или современные методы численного моделирования сложных химических процессов в своей профессиональной области,
- осуществлять исследования химических и физико-химических процессов,
- использовать новое сложное технологическое (в том числе – нанотехнологическое) оборудование для получения перспективных материалов (в том числе – наноматериалов) различного функционального назначения; использовать современные физические модели, а также результаты фундаментальных и прикладных исследований для разработки новых методик аттестации структуры и свойств перспективных материалов различного функционального назначения.

Владеть:

- методами планирования, подготовки, проведения НИР, анализа полученных данных, формулировки выводов и рекомендаций научной специальности,
- современными методами обработки экспериментальных данных и/или современными методами численного моделирования химических процессов; систематическими знаниями в области современных методов обработки экспериментальных данных в области физической химии,
- навыками разработки фундаментальных основ технологических процессов получения материалов,
- навыками работы со сложным исследовательским, контрольно-измерительным и технологическим оборудованием (в том числе – нанотехнологическим оборудованием мирового уровня),
- навыками разработки и верификации новых методик аттестации структуры и свойств конструкционных и многофункциональных материалов (в том числе – наноматериалов).

3. Структура и содержание дисциплины.

Объем дисциплины (модуля) составляет 1 зачётная единица, всего - 36 часов, из которых 28 часов составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (занятия лекционного типа), 8 часов составляет самостоятельная работа обучающегося.

Таблица 1

Структура дисциплины

Наименование раздела (модуля) дисциплины	Всего, часов	В том числе					
		Контактная работа, часов					Самостоятельная работа обучающегося, часов
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Занятия лабораторного типа	Консультации	Всего	
Химическая термодинамика	18	14	-	-	-	14	4
Кинетика химических реакций	18	14	-	-	-	14	4
<i>в том числе текущий контроль</i>	1 час.						
Промежуточная аттестация: – Экзамен							
Итого	36	28	-	-	-	28	8

Таблица 2

Содержание дисциплины

№ п/п	Наименование раздела (модуля) дисциплины	Содержание раздела	Форма проведения занятия	Форма текущего контроля*
-------	------------------------------------------	--------------------	--------------------------	--------------------------

1.	Химическая термодинамика	<p>1.1. Основные понятия и законы 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.</p> <p>1.2. 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 Кирхгоффа. Таблицы стандартных термодинамических величин и их использование в термодинамических расчетах.</p> <p>1.3. Второй закон термодинамики. Энтропия и её изменения в обратимых и необратимых процессах. Теорема Карно – Клаузиуса. Различные шкалы температур.</p> <p>1.4. 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.</p> <p>1.5. 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 её использование для расчетов химических равновесий. Равновесие в поле внешних сил. Полные потенциалы.</p> <p>1.6. Элементы статистической термодинамики. Микро- и макросостояния химических систем. Фазовые Г- и μ-пространства. Эргодическая гипотеза. Термодинамическая вероятность и её связь с энтропией. Распределение Максвелла-Больцмана. Статистические средние значения макроскопических величин. Ансамбли Гиббса. Микроканоническое и каноническое распределения. Расчет числа состояний в квазиклассическом приближении. Каноническая функция распределения Гиббса. Сумма по состояниям как статистическая характеристическая функция. Статистические выражения для основных термодинамических функций. Молекулярная сумма по состояниям и сумма по состояниям макроскопической системы. Поступательная, вращательная, электронная и колебательная суммы по состояниям. Статистический расчет энтропии. Постулат Планка и абсолютная энтропия. Приближение «жесткий ротатор – гармонический осциллятор». Составляющие внутренней энергии, теплоёмкости и энтропии,</p>	Лекции	Реферат
----	--------------------------	----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	--------	---------

		<p>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.</p> <p>1.7. Элементы термодинамики необратимых процессов. Основные положения термодинамики неравновесных процессов. Локальное равновесие. Флуктуации. Функция диссипации. Потоки и силы. Скорость производства энтропии. Зависимость скорости производства энтропии от обобщенных потоков и сил. Соотношения взаимности Онсагера. Стационарное состояние системы и теорема Пригожина. Термодиффузия и её описание в неравновесной термодинамике. Уравнение Чепмена-Энскога.</p> <p>1.8. Растворы. Фазовые равновесия. 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 молярные 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.</p> <p>1.9. 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</p>		
--	--	------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	--	--

		<p>Гиббса. Диаграммы плавкости трехкомпонентных систем.</p> <p>1.10. Адсорбция и поверхностные явления. 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 Ленгмюра. Адсорбция из растворов. Уравнение Брунауэра – Эммета – Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента. Хроматография, различные её 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).</p> <p>1.11. Электрохимические процессы. Растворы электролитов. Ион-дипольное взаимодействие, как основной процесс, определяющий устойчивость растворов электролитов. Коэффициенты активности в растворах электролитов. Средняя активность и средний коэффициент активности, их связь с активностью отдельных ионов. Основные положения теории Дебая – Хюккеля. Потенциал ионной атмосферы. Условия электрохимического равновесия на границе раздела фаз и в электрохимической цепи. Термодинамика гальванического элемента. Электродвижущая сила, её выражение через энергию Гиббса реакции в элементе. Уравнения Нернста и Гиббса – Гельмгольца для равновесной электрохимической цепи. Понятие электродного потенциала. Определение коэффициентов активности на основе измерений ЭДС гальванического элемента. Электропроводность растворов электролитов; удельная и эквивалентная электропроводность. Числа переноса, подвижность ионов и закон Кольрауша. Электрофоретический и релаксационные эффекты.</p>		
2.	Кинетика химических реакций	<p>2.1. <i>Основные понятия химической кинетики.</i> Простые и сложные реакции, молекулярность и скорость простой реакции. Основной постулат химической кинетики. Способы определения</p>	Лекции	Реферат

		<p>скорости реакции. Кинетические кривые. Кинетические уравнения. Константа скорости и порядок реакции. Реакции переменного порядка.</p> <p>2.2. <i>Феноменологическая кинетика</i> сложных химических реакций. Принцип независимости элементарных стадий. Кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций. Квазистационарное приближение. Метод Боденштейна-Тёмкина. Кинетика гомогенных каталитических и ферментативных реакций. Уравнение Михаэлиса-Ментен.</p> <p>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.</p> <p>Реакции в потоке. Реакции идеального вытеснения и идеального смешения. Колебательные реакции.</p> <p>2.3. <i>Макрокинетика</i>. Роль диффузии в кинетике гетерогенных реакций. Кинетика гетерогенных каталитических реакций. Различные режимы протекания реакций (кинетическая и внешняя кинетическая области, области внешней и внутренней диффузии).</p> <p>2.4. Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса. Энергия активации и способы её определения.</p> <p>2.5. <i>Элементарные акты химических реакций</i> 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.</p> <p>Теория активных столкновений. Сечение химических реакций. Формула Траутца-Льюиса. Расчет предэкспоненциального множителя по молекулярным постоянным. Стерический фактор.</p> <p>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.</p> <p>2.6. <i>Различные типы химических реакций</i>. Мономолекулярные реакции в газах, схема Линдемана – Христиансена. Теория РРKM. Бимолекулярные и тримолекулярные реакции, зависимость предэкспоненциального множителя от температуры.</p> <p>Реакции в растворах, влияние растворителя и заряда реагирующих частиц. Клеточный эффект и сольватация.</p> <p>Фотохимические и радиационнохимические реакции. Элементарные фотохимические процессы. Эксимеры и эксиплексы. Изменение физических и химических свойств молекул при</p>		
--	--	-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	--	--

		<p>электронном возбуждении. Квантовый выход. Закон Эйнштейна-Штарка.</p> <p>2.7. Электрохимические реакции. Двойной электрический слой. Модельные представления о структуре двойного электрического слоя. Теория Гуи – Чапмена – Грэма. Электрокаплярные явления, уравнение Липпмана.</p> <p>Скорость и стадии электродного процесса. Поляризация электродов. Полярография. Ток обмена и перенапряжение. Зависимость скорости стадии разряда от строения двойного слоя.</p> <p>Химические источники тока, их виды. Электрохимическая коррозия. Методы защиты от коррозии.</p> <p>2.8. <i>Классификация каталитических реакций и катализаторов.</i> Теория промежуточных соединений в катализе, принцип энергетического соответствия.</p> <p>2.9. <i>Гомогенный катализ.</i> Кислотно-основной катализ. Кинетика и механизм реакций специфического кислотного катализа. Функции кислотности Гаммета. Кинетика и механизм реакций общего кислотного катализа. Уравнение Брёнстеда. 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.</p> <p>2.10. <i>Ферментативный катализ.</i> Адсорбционные и каталитические центры ферментов. Активность и субстратная селективность ферментов. Коферменты. Механизмы ферментативного катализа.</p> <p>2.11. <i>Гетерогенный катализ.</i> 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.</p> <p>Основные промышленные каталитические процессы.</p>		
--	--	-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	--	--

4. Формы организации и контроля самостоятельной работы обучающихся

Целью самостоятельной работы является овладение навыками работы с литературой (в читальном зале библиотеки, с доступом к ресурсам Интернет), более углубленное изучение отдельных разделов дисциплины при подготовке к написанию реферата, подготовке к экзамену. Самостоятельная работа подкрепляется учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций. Текущий контроль успеваемости осуществляется в форме контроля самостоятельной работы (защита рефератов).

Итоговый контроль проводится в виде экзамена.

Темы рефератов:

1. Экспериментальные методы химической термодинамики. Калориметрия.
2. Экспериментальные методы химической кинетики.
3. Теории теплоемкостей и их применение для описания конкретных систем.
4. Термодинамика наноструктур.
5. Особенности описания фотохимических процессов.
6. Термодинамика материалов.
7. Кинетика окисления ферроцена и его функциональных производных.
8. Термодинамика полимеров.
9. Физико-химический анализ фазовых равновесий.
10. Фазовые диаграммы аллотропных модификаций углерода. Фуллерены C_{60} и C_{70} , нанотрубки.
11. Термодинамическая классификация фазовых переходов.
12. Гетерогенный катализ. Понятие каталической активности в гетерогенном катализе.
13. Металлокомплексный катализ.
14. Методы ЭПР и ЯМР в исследовании кинетики химических реакций.
15. Кинетика цепных процессов.
16. Химическое равновесие сложных процессов; термодинамическое описание.
17. Квантово-химическое моделирование механизмов химических процессов.
18. Квантово-химический расчет термодинамических функций веществ и процессов.
19. Энтропия: классическое термодинамическое и статистическое рассмотрение.
20. Классические теории химической кинетики.

5. Фонд оценочных средств для аттестации по дисциплине

5.1. Критерии и процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине.

При выполнении всех работ учитываются следующие **основные критерии**:

- уровень теоретических знаний (подразумевается не только формальное воспроизведение информации, но и понимание предмета, которое подтверждается правильными ответами на дополнительные, уточняющие вопросы, заданные членами комиссии);
- умение использовать теоретические знания при анализе конкретных проблем, ситуаций;
- качество изложения материала, то есть обоснованность, четкость, логичность ответа, а также его полнота (то есть содержательность, не исключающая сжатости);
- способность устанавливать внутри- и межпредметные связи,
- оригинальность мышления, знакомство с дополнительной литературой и другие факторы.

Экзамен проводится в устной форме в виде ответа обучающегося на теоретические вопросы курса (с предварительной подготовкой) и последующим собеседованием в рамках тематики курса. Собеседование проводится в форме вопросов, на которые аспирант должен дать полный и развернутый ответ.

К экзамену допускаются обучающиеся, написавшие реферат по предлагаемой преподавателем теме.

Описание шкалы оценивания на промежуточной аттестации в форме экзамена

Оценка *отлично* – исчерпывающее владение программным материалом, понимание сущности рассматриваемых процессов и явлений, твердое знание основных положений дисциплины, умение применять концептуальный аппарат при анализе актуальных проблем. Логически последовательные, содержательные, конкретные ответы на все вопросы.

Оценка *хорошо* – достаточно полные знания программного материала, правильное понимание сути вопросов, знание определений, умение формулировать тезисы и аргументы. Ответы последовательные и в целом правильные, хотя допускаются неточности, поверхностное знакомство с отдельными теориями и фактами, достаточно формальное отношение к рекомендованным для подготовки материалам.

Оценка *удовлетворительно* – фрагментарные знания, расплывчатые представления о предмете. Ответ содержит как правильные утверждения, так и ошибки, возможно, грубые. Испытуемый плохо ориентируется в учебном материале, не может устранить неточности в своем ответе даже после наводящих вопросов.

Оценка *неудовлетворительно* – отсутствие ответа хотя бы на один из основных вопросов, либо грубые ошибки в ответах, полное непонимание смысла проблем, не достаточно полное владение терминологией.

5.2. Примеры типовых заданий для самостоятельной работы или иных материалов, необходимых для оценки результатов обучения

Контрольные вопросы к экзамену:

1. Основные понятия и законы термодинамики: изолированные и открытые системы, равновесные и неравновесные системы, термодинамические переменные, температура, интенсивные и экстенсивные переменные. Уравнения состояния. Теорема о соответственных состояниях. Вирialsные уравнения состояния.
2. 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 Кирхгоффа.
3. Таблицы стандартных термодинамических величин и их использование в термодинамических расчетах.
4. Второй закон термодинамики. Теорема Карно-Клаузиуса.
5. Энтропия и её изменения в обратимых и необратимых процессах.
6. Различные шкалы температур.
7. Фундаментальные уравнения Гиббса. Характеристические функции. Энергия Гиббса, энергия Гельмгольца.
8. Уравнения Максвелла. Химические потенциалы. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов.
9. Уравнение Гиббса – Гельмгольца. Работа и теплота химического процесса.
10. Химическое равновесие. Закон действующих масс. Различные виды констант равновесия и связь между ними. Изотерма Вант-Гоффа.
11. Уравнения изобары и изохоры химической реакции. Расчеты констант равновесия химических реакций с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций.
12. Приведенная энергия Гиббса и её использование для расчетов химических равновесий.
13. Равновесие в поле внешних сил. Полные потенциалы.

14. Элементы статистической термодинамики. Микро- и макросостояния химических систем. Фазовые Г- и μ -пространства. Эргодическая гипотеза. Термодинамическая вероятность и её связь с энтропией. Распределение Максвелла-Больцмана. Статистические средние значения макроскопических величин.
15. Ансамбли Гиббса. Микроканоническое и каноническое распределения. Расчет числа состояний в квазиклассическом приближении. Каноническая функция распределения Гиббса. Сумма по состояниям как статистическая характеристическая функция.
16. Статистические выражения для основных термодинамических функций.
17. 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.
18. Приближение «жесткий ротатор – гармонический осциллятор». Составляющие внутренней энергии, теплоёмкости и энтропии, обусловленные поступательным, вращательным и колебательным движением.
19. Расчет констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики.
20. Статистическая термодинамика реальных систем. Потенциалы межмолекулярного взаимодействия и конфигурационный интеграл для реального газа. Распределения Бозе-Эйнштейна и Ферми – Дирака. Вырожденный идеальный газ.
21. 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.
22. Элементы термодинамики необратимых процессов. Основные положения термодинамики неравновесных процессов. Локальное равновесие. Флуктуации. Функция диссипации.
23. Потоки и силы. Скорость производства энтропии. Зависимость скорости производства энтропии от обобщенных потоков и сил.
24. Соотношения взаимности Онзагера. Стационарное состояние системы и теорема Пригожина.
25. Термодиффузия и её описание в неравновесной термодинамике. Уравнение Чепмена-Энскога.
26. Различные типы растворов. Способы выражения состава растворов. Идеальные растворы, общее условие идеальности растворов.
27. Давление насыщенного пара жидких растворов, закон Рауля.
28. Неидеальные растворы и их свойства. Метод активностей. Коэффициенты активности и их определение.
29. Стандартные состояния при определении химических потенциалов компонент растворов. Симметричная и несимметричная системы отсчета.
30. Коллигативные свойства растворов. Изменение температуры замерзания растворов, криоскопия. Зонная плавка. Осмотические явления.
31. Парциальные мольные величины, их определение для бинарных систем. Уравнение Гиббса-Дюгема.
32. Функция смешения для идеальных и неидеальных растворов. Предельно разбавленные растворы, атермальные и регулярные растворы, их свойства.
33. Гетерогенные системы. Понятия компонента, фазы, степени свободы. Правило фаз Гиббса.
34. Однокомпонентные системы. Диаграммы состояния воды, серы, фосфора и углерода.

35. Фазовые переходы первого рода. Уравнение Клапейрона-Клаузиуса.
36. Двухкомпонентные системы. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем.
37. Равновесие жидкость – пар в двухкомпонентных системах. Законы Гиббса – Коновалова. Азеотропные смеси.
38. Фазовые переходы второго рода. Уравнения Эренфеста.
39. Трехкомпонентные системы. Треугольник Гиббса. Диаграммы плавкости трехкомпонентных систем.
40. 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.
41. Константа адсорбционного равновесия. Уравнение Ленгмюра.
42. Адсорбция из растворов. Уравнение Брунауэра – Эммета – Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента.
43. Хроматография, различные её типы (газовая, жидкостная, противоточная и др.).
44. Поверхность раздела фаз. Свободная поверхностная энергия, поверхностное натяжение, избыточные термодинамические функции поверхностного слоя. Изменение поверхностного натяжения на границе жидкость – пар в зависимости от температуры.
45. Связь свободной поверхностной энергии с теплотой сублимации (правило Стефана), модулем упругости и другими свойствами вещества.
46. Эффект Ребиндера: изменение прочности и пластичности твердых тел вследствие снижения их поверхностной энергии. Капиллярные явления.
47. Зависимость давления пара от кривизны поверхности жидкости. Капиллярная конденсация. Зависимость растворимости от кривизны поверхности растворяющихся частиц (закон Гиббса – Оствальда – Фрейндлиха).
48. Растворы электролитов. Ион-дипольное взаимодействие, как основной процесс, определяющий устойчивость растворов электролитов.
49. Коэффициенты активности в растворах электролитов. Средняя активность и средний коэффициент активности, их связь с активностью отдельных ионов.
50. Основные положения теории Дебая – Хюккеля. Потенциал ионной атмосферы.
51. Условия электрохимического равновесия на границе раздела фаз и в электрохимической цепи.
52. Термодинамика гальванического элемента. Электродвижущая сила, её выражение через энергию Гиббса реакции в элементе.
53. Уравнения Нернста и Гиббса-Гельмгольца для равновесной электрохимической цепи.
54. Понятие электродного потенциала. Определение коэффициентов активности на основе измерений ЭДС гальванического элемента.
55. Электропроводность растворов электролитов; удельная и эквивалентная электропроводность. Числа переноса, подвижность ионов и закон Кольрауша. Электрофоретический и релаксационные эффекты.
56. 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.
57. Феноменологическая кинетика сложных химических реакций. Принцип независимости элементарных стадий. Кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций.

58. Квазистационарное приближение. Метод Боденштейна-Тёмкина. Кинетика гомогенных каталитических и ферментативных реакций. Уравнение Михаэлиса-Ментен.
59. 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.
60. Реакции в потоке. Реакции идеального вытеснения и идеального смешения. Колебательные реакции.
61. 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).
62. Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса. Энергия активации и способы её определения.
63. 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.
64. Теория активных столкновений. Сечение химических реакций. Формула Траутца-Льюиса. Расчет предэкспоненциального множителя по молекулярным постоянным. Стерический фактор.
65. 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.
66. Различные типы химических реакций. Мономолекулярные реакции в газах, схема Линдемана – Христиансена. Теория РРКМ. Бимолекулярные и тримолекулярные реакции, зависимость предэкспоненциального множителя от температуры.
67. Реакции в растворах, влияние растворителя и заряда реагирующих частиц. Клеточный эффект и сольватация.
68. Фотохимические и радиационнохимические реакции. Элементарные фотохимические процессы. Эксимеры и эксиплексы. Изменение физических и химических свойств молекул при электронном возбуждении. Квантовый выход. Закон Эйнштейна-Штарка.
69. Электрохимические реакции. Двойной электрический слой. Модельные представления о структуре двойного электрического слоя. Теория Гуи – Чапмена – Грэма.
70. Электрокаплярные явления, уравнение Липпмана.
71. Скорость и стадии электродного процесса. Поляризация электродов. Полярография. Ток обмена и перенапряжение. Зависимость скорости стадии разряда от строения двойного слоя.
72. Химические источники тока, их виды.
73. Электрохимическая коррозия. Методы защиты от коррозии.
74. Классификация каталитических реакций и катализаторов. Теория промежуточных соединений в катализе, принцип энергетического соответствия.
75. Кислотно-основной катализ. Кинетика и механизм реакций специфического кислотного катализа. Функции кислотности Гаммета. Кинетика и механизм реакций общего кислотного катализа. Уравнение Брёнстеда. Корреляционные уравнения для энергий активации и теплот реакций. Специфический и общий основной катализ. Нуклеофильный и электрофильный катализ.

76. Катализ металлокомплексными соединениями. Гомогенные реакции гидрирования, их кинетика и механизмы.
77. Ферментативный катализ. Адсорбционные и каталитические центры ферментов. Активность и субстратная селективность ферментов. Коферменты. Механизмы ферментативного катализа.
78. 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.
79. Гетерогенный катализ. Энергия активации гетерогенных каталитических реакций. Современные теории функционирования гетерогенных катализаторов.
80. Основные промышленные каталитические процессы.

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

а) основная литература:

1. Органическая химия. В 4 ч. Ч. 1 [Электронный ресурс] / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин. - М. : БИНОМ, 2012. - 567 с.
<http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996308088.html>
2. Органическая химия: в 4 ч. Ч. 2 [Электронный ресурс] / О.А. Реутов, А.Л. Курц, К.П. Бутин. - М. : БИНОМ, 2014. - 626 с.
<http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996324255.html>
3. Органическая химия. Часть 3. [Электронный ресурс] / Реутов О.А. - М. : БИНОМ, 2012. - 544 с. <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996310999.html>

б) дополнительная литература:

1. Органическая химия: ч. 4 [Электронный ресурс] / Реутов О.А., Курц А.Л., К.П. Бутин. - М. : БИНОМ, 2013. - 726 с.
<http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996322763.html>
2. Органическая химия. Т. I [Электронный ресурс] / Травень В.Ф. - М. : БИНОМ, 2013. - 368 с. <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996321094.html>
3. Органическая химия. Т. II [Электронный ресурс] / Травень В.Ф. - М. : БИНОМ, 2013. - 517 с. <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996321100.html>

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы

Органическая химия [Электронный ресурс] : в 4 ч. Ч. 2 / О.А. Реутов, А.Л. Курц, К.П. Бутин. — 6-е изд. (эл.). — М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014. — 626 с.

<http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=542433#none>

О.А. Реутов, А.Л. Курц, К.П. Бутин Органическая химия [Электронный ресурс] : в 4 ч. Ч. 3 / — М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014. — 547 с.

<http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=541050#none>

Смит, В.А. Основы современного органического синтеза [Электронный ресурс] : учебное пособие / В. А. Смит, А. Д. Дильман.—М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015. — 753 с.

<http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=541053#none>

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины

- помещения для проведения занятий: лекционного типа, семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также помещения для хранения и профилактического обслуживания оборудования и помещения для самостоятельной работы обучающихся, оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду ННГУ;
- материально-техническое обеспечение, необходимое для реализации дисциплины, включая лабораторное оборудование;
- лицензионное программное обеспечение: *Windows, Microsoft Office*;
- обучающиеся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья обеспечиваются электронными и (или) печатными образовательными ресурсами в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья.

Рабочая программа учебной дисциплины составлена в соответствии с учебным планом, Положением о подготовке научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре) (Постановление Правительства РФ от 30.11.2021 № 2122), Федеральными государственными требованиями к структуре программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре) (Приказ Минобрнауки РФ от 20.10.2021 № 951).

Автор:

Заведующий кафедрой органической химии
химического факультета, д.х.н., профессор

_____ Федоров А.Ю.

Рецензент:

Заведующий кафедрой физической химии
химического факультета, д.х.н., профессор

_____ Маркин А.В.

Заведующий кафедрой

органической химии

химического факультета, д.х.н., профессор

_____ Федоров А.Ю.