



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Иркутский государственный университет»
(ФГБОУ ВО «ИГУ»)
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ
Декан химического факультета

 /Вильмс А.И.

“13” мая 2024 г

Рабочая программа дисциплины (модуля)

Наименование дисциплины (модуля): **Физическая химия**

Научная специальность: **1.4.4. Физическая химия**

Форма обучения: **очная**

Согласовано с УМК_химического
факультета

Протокол № 4 от «13» мая 2024 г.

Председатель

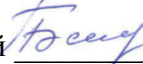


А.И. Вильмс .

Рекомендовано кафедрой физической и
коллоидной химии:

Протокол № 9 от «26» апреля 2024 г.

И.о. зав. кафедрой



Белых Л.Б.

Иркутск 2024 г.

Содержание

1. Цели и задачи дисциплины (модуля)
2. Требования к результатам освоения дисциплины (модуля)
3. Объем дисциплины (модуля) и виды учебной работы
4. Содержание дисциплины (модуля)
 - 4.1 Содержание разделов и тем дисциплины (модуля)
 - 4.2 Разделы и темы дисциплин (модулей) и виды занятий
 - 4.3 Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ.
5. Примерная тематика рефератов (при наличии)
6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля):
 - а) основная литература;
 - б) дополнительная литература;
 - в) программное обеспечение;
 - г) интернет-ресурсы, базы данных, информационно-справочные и поисковые системы
7. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля).
8. Образовательные технологии
9. Фонды оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации
 - 9.1 Оценочные средства текущего контроля
 - 9.2 Оценочные средства для промежуточной аттестации

1. Цели и задачи дисциплины (модуля): формирование у аспирантов научной специальности 1.4.4. - Физическая химия целостного представления о развитии химии как науки в целом, ее современных достижениях и проблемах в области физической химии.

2. Требования к результатам освоения дисциплины (модуля):

В результате изучения дисциплины аспирант должен:

Знать: фундаментальные основы и современные тенденции развития физической химии.

Уметь: находить подходы к решению фундаментальных и прикладных задач физической химии: анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач и оценивать потенциальные выигрыши/проигрыши реализации этих вариантов; выявлять общие закономерности и отличительные особенности;

Владеть: навыками анализа теоретических и практических проблем современной физической химии; оценки современных научных достижений в различных областях физической химии; их применения при решении профессиональных задач.

3. Объем дисциплины (модуля) и виды учебной работы

Вид учебной работы	Всего академических часов	Курсы			
		1	2	3	4
Аудиторные занятия (всего)	2				2
В том числе:					
Лекции	2				2
Практические занятия (ПЗ)					
Самостоятельная работа (всего)	70				70
В том числе:					
Реферат (при наличии)					
Контактная работа					
<i>Другие виды самостоятельной работы</i>	70				70
Промежуточная аттестация (всего)	36				36
В том числе:					
Контактная работа во время промежуточной аттестации	4				4
Самостоятельная работа	32				32
Форма промежуточной аттестации (зачет, экзамен)	экзамен				экзамен
Общая трудоемкость	часы				72
	зачетные единицы	2			2

4. Содержание дисциплины

4.1. Содержание разделов и тем дисциплины

№	Наименование раздела	Содержание раздела дисциплины
1.	Введение	Предмет и задачи физической химии. Исторические вехи в развитии физической химии как самостоятельного научного направления. Основные разделы физической химии. Проникновение физической химии в смежные науки и влияние на их развитии. Методы физической химии.
2.	Химическая термодинамика	<p>Основные законы термодинамики и их применение для расчета тепловых эффектов химических реакций, энтропии, свободной энергии Гиббса и Гельмгольца. 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><i>Химическое равновесие.</i> 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.</p>
3.	Термодинамика необратимых процессов	<p>Принципы оптимизации и экстремальности в химической термодинамике. Термодинамические потенциалы и принципы экстремумов. Модели конечных и экстремальных промежуточных состояний.</p> <p>Линейные феноменологические соотношения и их применение к химическим процессам. Неравновесные стационарные состояния. Теорема о минимуме производства энтропии. Изменение производства энтропии во времени и устойчивость стационарного состояния.</p> <p>Нелинейная термодинамика систем далеких от равновесия. Устойчивость неравновесных стационарных состояний. Диссипативные структуры. Синергетика. Условия проявления самоорганизации в системах и примеры процессов самоорганизации. Кинетические модели самоорганизации химических систем: модели Лотки, Вольтерра и «брюсселятора». Примеры колебательных химических реакций: реакция разложения перекиси водорода (реакция Брея-Либавсан) и окисления малоновой кислоты (реакция Белоусова – Жаботинского). Самоорганизация в наноразмерных системах. Структуры Тьюринга и распространяющиеся волны.</p> <p>Оптимизация в термодинамике необратимых процессов. Оптимальные термодинамические циклы. Оптимизация процессов разделения. Оптимизация обратимых, параллельных и последовательных реакций.</p>
4.	Растворы. Фазовые равновесия	<p>Коллигативные свойства растворов. Парциальные мольные величины, их определение для бинарных систем. Уравнение Гиббса – Дюгема. Функция смешения для идеальных и неидеальных растворов. Предельно разбавленные растворы, атермальные и регулярные растворы, их свойства.</p> <p>Фазовые переходы первого и второго рода</p>
5.	Кинетика. Основные положения теории стационарных реакций Хориути-Темкина	Формальная кинетика. Теоретические критерии квазистационарности концентраций промежуточных соединений и квазиравновесия стадий. Методы теории графов в химической кинетике и в теории механизмов сложных реакций. Основные постулаты, законы и принципы отбора элементарных стадий сложных реакций. Энергетические, квантово-химические и топологические правила отбора.
6.	Металлокомплексный катализ	Многомаршрутные механизмы металлокомплексных каталитических реакций. Сопряженные процессы: классический подход, кинетическое и термодинамическое сопряжение в последовательных и в цепных

		<p>реакциях. Исследование механизмов каталитических реакций <i>in situ</i> и с применением <i>operando</i> спектроскопии.</p> <p>Координационно-химические аспекты металлокомплексного катализа. Реакции координированных лигандов: замещение, миграция и внедрение лигандов, перенос электрона, комплексообразование и активация малых молекул (водород, кислород, азот, алкены, алкины, алканы, оксид углерода, серы). Механизмы окислительного присоединения: кинетика реакции, нуклеофильная атака атома металла, трехцентровый механизм, радикальные механизмы. Механизмы восстановительного элиминирования. Механизмы реакций внедрения и миграции алкенов, алкинов и монооксида углерода в координационной сфере металлов.</p>
7.	Гетерогенный катализ	<p>Классификация механизмов реальных каталитических процессов. Катализ на металлах: реакции гидрирования азота и ненасыщенных органических соединений. Экспериментальные методы изучения поверхности металлов и адсорбции на них. Катализ на оксидах переходных металлов и каталитическое окисление простых молекул. Парциальное и глубокое окисление органических соединений молекулярным кислородом.</p>

4.2. Разделы и темы дисциплины (модуля) и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела	Наименование темы	Виды занятий в часах			
			Лекции	Практические занятия	Самостоятельная работа	Всего
1.	Введение	Предмет и задачи физической химии	2	-	2	4
2.	Химическая термодинамика	Феноменологическая термодинамика. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов. Химические потенциалы. Химическое равновесие.			20	20
3.	Растворы. Фазовые равновесия	Коллигативные свойства растворов. Парциальные молярные величины			18	18
4	Формальная кинетика. Основные положения теории стационарных реакций Хориути-Темкина	Методы теории графов в химической кинетике и в теории механизмов сложных реакций.			10	10
5	Металлокомплексный катализ	Многомаршрутные механизмы металлокомплексных			10	10

		каталитических реакций.				
6	Гетерогенный катализ	Катализ на металлах и оксидах металлов			10	10

4.3. Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ - нет

5. Примерная тематика рефератов, докладов, проектов (при наличии); перечень вопросов к зачетам, экзаменам и т.п.: не предусмотрено

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля):

а) основная литература

1. Стромберг, А. Г. Физическая химия [Текст] : учеб. для студ. вузов, обуч. по хим. спец. / А.Г. Стромберг, Д.П. Семченко. - 4-е изд., испр. - М. : Высш. шк., 2001. - 527 с. : ил. ; 25 см. - Библиогр.: с.511-515. - Предм.указ.: с.516-522. - ISBN 5060036278. : 29 экз.
2. Шмидт, Ф. К. Основы катализа: координационно-химические, физико-химические и кинетические аспекты [Текст] : учеб. пособие / Ф. К. Шмидт, Л. Б. Белых ; Иркутский гос. ун-т, Хим. фак. - Иркутск : Изд-во ИГУ, 2011. - 437 с. ; 20 см. - Библиогр.: с. 434-437. : 20 экз.
3. Курохтина, А.А. Метод конкурирующих реакций в исследованиях механизмов каталитических процессов: традиционные и новые способы применения [Текст] : учеб. пособие / А. А. Курохтина, А. Ф. Шмидт ; Иркутский гос. ун-т, Хим. фак. - Иркутск : Изд-во ИГУ, 2012. - 93 с. ; 20 см. - Библиогр.: с. 83-93. - ISBN 978-5-9624-0667-1 : 13 экз.
4. Марков, Ю. Г. Математические модели химических реакций [Электронный ресурс] / Ю. Г. Марков. - Москва : Лань, 2013. - Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?p11_cid=25&p11_id=30200. - Режим доступа: ЭБС "Издательство "Лань". - Неогранич. доступ. - ISBN 978-5-8114-1483-3 :

б) дополнительная литература

1. Чоркендорф, Иб. Современный катализ и химическая кинетика [Текст] : научное издание / И. Чоркендорф, Х. Наймантсведрайт ; пер. с англ. В. И. Ролдугин. - [2-е изд.]. - Долгопрудный : Интеллект, 2010. - 501 с. : ил. ; 25 см. - ISBN 978-5-91559-044-0. : 2 экз.
2. Темкин, О. Н. Гомогенный металлокомплексный катализ. Кинетические аспекты / О. Н. Темкин. - М. : Академкнига, 2008. - 918 с. : ил. ; 24 см. - Библиогр. в конце глав. - ISBN 978-5-94628-336-6. : 1 экз.
3. Практическая химическая кинетика. Химическая кинетика в задачах с решениями : учеб. пособие / ред. М. Я. Мельников. - М. : Изд-во МГУ ; СПб. : Изд-во СПбГУ, 2006. - 591 с. : ил. ; 22 см. - Библиогр. в конце глав. - Библиогр.: с. 591. - ISBN 5-211-05233-1. - ISBN 5-288-04155-5 : 2 экз.
4. Пригожин, И. Р. Химическая термодинамика [Текст] : пер. с англ. / И. Р. Пригожин, Р. Дефэй ; ред. В. А. Михайлов. - 2-е изд. - М. : Бином. Лаборатория знаний, 2009. - 533 с. : ил. ; 24 см. - (Классика и современность: естествознание). - Библиогр.: с. 475-476. - Указ.: с. 518-533. - Пер. изд. : Chemical thermodynamics / Ilya Prigogine, R. Defay. - London, 1954. - ISBN 978-5-9963-0201-7. : 1 экз.

5. Ткач, В.С. Катализаторы на основе комплексов переходных металлов: актуальные проблемы и примеры их эффективного решения [Текст] : учеб. пособие / В. С. Ткач, Д. С. Сулов ; Иркутский гос. ун-т, Хим. фак. - Иркутск : Изд-во ИГУ, 2011. - 148 с. : граф., портр. ; 21 см. - Библиогр. в конце разд. . : 11 экз.
 6. Шмидт, Ф.К. Методы синергетики в физической химии (самоорганизация химических систем) [Текст] : учеб.пособие для студ.,обуч.по спец.011000-Химия и по напр.515000-Химия / Ф.К. Шмидт ; М-во образования РФ,Гос.образовательное учреждение высш. проф. образования; Иркут.гос.ун-т. - Иркутск : Изд-во ИГУ, 2003. - 192 с. ; 21 см. всего 2
 7. Эмануэль, Н.М. Химическая и биологическая кинетика [Текст] : избр. труды: В 2 т. / Н. М. Эмануэль ; сост. Е. Б. Бурлакова, Г. Е. Заиков, ред. С. Д. Варфоломеев ; Рос. акад. наук. ; Ин-т биохим. физики им. Н.Н. Эмануэля. - М. : Наука, 2005 - . - 24 см. - (Избранные труды). - ISBN 5-02-034493-1. Т.1. - 2005. - 667 с. - ISBN 5-02-034499-0 : 2 экз.
 8. Пурмаль, А. П. А, Б, В... химической кинетики [Текст] : учеб. пособие для студ. хим. фак. ун-тов, обуч. по спец. 011000 "Химия" и напр. 510500 "Химия" / А.П. Пурмаль. - М. : Академкнига, 2004. - 277 с. : ил ; 22 см. - Библиогр.: с. 8. - ISBN 5-94628-116-X. 4 экз.
- в) программное обеспечение - нет
- г) интернет-ресурсы, базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

(при наличии)

1. <http://www.msu.ru/libraries/>
2. <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/phys.html>
3. [Химическая кинетика и катализ \(часть 1 и часть 2\)](#) (лекции)
4. [Сборник задач по химической кинетике](#)
5. [Кинетика химических реакций](#)
6. [Задачи по физической химии. Часть II. Химическая кинетика. Электрохимия](#)
7. <http://www.exponenta.ru/educat/systemat/tarasevich/default.asp>
8. <http://www.toehelp.ru/theory/informat/lecture13.html>
9. <http://www.toehelp.ru/theory/informat/lecture10.html>
10. <http://it.kgsu.ru/MSExcel/>
11. <http://alglib.sources.ru>
12. <http://library.isu.ru/ru> (электронный каталог и библиографические базы данных ИГУ)
13. <https://isu.bibliotech.ru/> (Электронный читальный зал «БиблиоТех»)
14. <http://rucont.ru> (Электронная библиотечная система «РУКОНТ»; межотраслевая научная библиотека, содержащая оцифрованные книги, периодические издания и отдельные статьи по всем отраслям знаний, а также аудио-, видео-, мультимедиа софт и многое другое)
15. <http://elibrary.ru/> (Научная электронная библиотека ELIBRARY.RU: научные полные тексты статей из журналов свободного доступа)
16. <http://www.scopus.com> (реферативная база данных, которая индексирует более 21 тыс. наименований научно-технических и медицинских журналов примерно 5 тыс. международных издательств по всем областям наук)
<http://pubs.acs.org/>

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля):

Помещения для проведения лекционных занятий, укомплектованные необходимым оборудованием, а именно: аудитории 5, 303, 402, 423, 426, оснащенные мультимедийными проекторами (InFocus IN 105 (3D Ready), настенными экранами, ноутбуками Samsung NP 300T5A-A0FRU.

8. Образовательные технологии:

В процессе изучения дисциплины используются как традиционные, так и инновационные формы обучения: технология объяснительно-иллюстративных объяснений с элементами проблемного изложения, технология профессионально-ориентированного обучения, лекции, объяснительно-иллюстративный метод с элементами проблемного изложения, разбор конкретных ситуаций, решение ситуационных задач

9. Фонды оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

9.1 Оценочные средства текущего контроля:

Для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации разработаны задания (пп. 4.1, 9.2), которые включают самостоятельную работу аспиранта с учебной и научной литературой по предложенным темам. Текущий контроль осуществляется в виде ситуационных задач.

9.2. Оценочные средства для промежуточной аттестации:

Промежуточная аттестация (*экзамен*) может проводиться в форме устного собеседования или в виде тестовых заданий с открытыми вопросами.

Примерный список вопросов к экзамену

1. Феноменологическая термодинамика.
2. Химическое равновесие.
3. Растворы. Коллигативные свойства растворов.
4. Фазовые переходы первого и второго рода.
5. Принципы оптимизации и экстремальности в химической термодинамике.
6. Термодинамические потенциалы и принципы экстремумов.
7. Термодинамика необратимых процессов. Линейные феноменологические соотношения и их применение к химическим процессам.
8. Неравновесные стационарные состояния. Теорема о минимуме производства энтропии.
9. Диссипативные структуры. Синергетика.
10. Кинетические модели самоорганизации химических систем.
11. Самоорганизация в наноразмерных системах.
12. Оптимизация в термодинамике необратимых процессов.
13. Формальная кинетика.
14. Оптимизация обратимых, параллельных и последовательных реакций.
15. Основные положения теории стационарных реакций Хориути-Темкина.
16. Методы теории графов в химической кинетике и в теории механизмов сложных реакций.
17. Основные постулаты, законы и принципы отбора элементарных стадий сложных реакций.

18. Сопряженные процессы: классический подход, кинетическое и термодинамическое сопряжение в последовательных и в цепных реакциях.
19. Исследование механизмов каталитических реакций *in situ* и с применением *operando* спектроскопии.
20. Координационно-химические аспекты металлокомплексного катализа.
21. Катализ на металлах и оксидах металлов.

Критерии оценки:

«Отлично»: ответ полный, отражающий большинство сторон рассматриваемого вопроса; в ответе грамотно используется терминология и даются определения; проведен анализ, сравнение и приведены конкретные примеры. Отсутствуют ошибки в формулировке терминов и оценке фактов.

«Хорошо»: в ответе отражена основная суть рассматриваемого вопроса; грамотно использована терминология; проведен анализ, сравнение и приведены примеры. Допускаются незначительные упущения фактов, незначительные ошибки в терминологии.

«Удовлетворительно»: аспирант выполнил задание, но при этом допустил принципиальные погрешности (незнание необходимой для данного вопроса теории, терминологии и фактологии).

«Неудовлетворительно»: при ответе аспирантом не выполнены требования, указанные для положительных отметок или он отказывается отвечать на вопросы билета.

Разработчики:

Д-р хим. наук, проф.



/Белых Л.Б.

Программа рассмотрена на заседании кафедры физической и коллоидной химии «26» апреля 2024 г.

Протокол № 9

И.о. зав. кафедрой



/Белых Л.Б./