

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Иркутский государственный университет»

(ФГБОУ ВО «ИГУ»)

Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ Лекан химического факультета

Дом _/Вильмс А.И.

"15" апреля 2025 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 «15» апреля 2025 г.

Председатель Дил Вильмс

Рекомендовано кафедрой физической и

коллоидной химии:

Протокол № 8 от «10» апреля 2025 г.

И.о. зав. кафедрой Белых Л Б

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	Курсы			
	академиче ских часов	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					
Другие виды самостоятельной работы	70				70
Промежуточная аттестация (всего)	36				36
В том числе:					
Контактная работа во время промежуточной	4				4
аттестации					
Самостоятельная работа	32				32
Форма промежуточной аттестации (зачет, экзамен)	экзамен				экзам
					ен
Общая трудоемкость часы	72				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	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.
		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.
3.	Термодинамика необратимых процессов	Принципы оптимизации и экстремальности в химической термодинамике. Термодинамические потенциалы и принципы экстремумов. Модели конечных и экстремальных промежуточных состояний. 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. 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. Оптимизация в термодинамике необратимых процессов. Оптимальные термодинамические циклы. Оптимизация процессов разделения. Оптимизация обратимых, параллельных и последовательных реакций.
4.	Растворы. Фазовые равновесия	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. Фазовые переходы первого и второго рода
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, квантовохимические и топологические правила отбора.
6.	Металлокомплексн ый катализ	Многомаршрутные механизмы металлокомплексных каталитических реакций. Сопряженные процессы: классический подход, кинетическое и термодинамическое сопряжение в последовательных и в цепных

		реакциях. Исследование механизмов каталитических реакций in situ и с					
		применением operando спектроскопии.					
		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.					
7.	Гетерогенный	Классификация механизмов реальных каталитических процессов.					
\ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \	катализ	Катализ на металлах: реакции гидрирования азота и ненасыщенных					
	Ratasins	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.					
		толокулириям кнолородом.					

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

$N_{\underline{0}}$	Наименование	Наименование	Виды занятий в часах			
п/п	раздела	темы	Лекции	Практические занятия	Самостояте льная работа	Всего
1.	Введение	Предмет и задачи физической химии	2	-	2	4
2.	Химическая термодинамика	Феноменолог ическая термодина-мика. Условия равновесия и критерии самопроизвольног о протекания процессов. Химические потенциалы. Химическое равновесие.			20	20
3.	Растворы. Фазовые равновесия	Коллигативные свойства растворов. Парциальные 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	Металлокомплек сный катализ	Многомаршрутны е механизмы металлокомплексных			10	10

		каталитических реакций.			
6	Гетерогенный	Катализ на		10	10
	катализ	металлах и оксилах 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?pl1_cid=25&pl1_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. Суслов; 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://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 орегаndo спектроскопии.
- 20. Координационно-химические аспекты металлокомплексного катализа.
- 21. Катализ на металлах и оксидах металлов.

Критерии оценки:

«Отпично»: 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:

Протокол № 8

д-р хим. наук, проф.	· Aley	/ьелых Л.ь.	
Программа рассмотрена на	а заседании кафедры физи	ческой и коллоидной химі	ии
«10» апреля 2025 г.	#		

И.о. зав. кафедрой___