

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

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО

решением Ученого совета ННГУ

протокол от

31 августа 2021 г. № 11

**Рабочая программа дисциплины**  
**Физическая химия (кандидатский экзамен)**

Направление подготовки  
**04.06.01 «Химические науки»**

Направленность подготовки  
**02.00.04 «Физическая химия»**

Квалификация выпускника  
**Исследователь. Преподаватель-исследователь**

Форма обучения  
**очная**

Нижний Новгород  
2021

## 1. Место дисциплины (модуля) в структуре основной образовательной программы (ООП)

Дисциплина «Физическая химия (кандидатский экзамен)» относится к числу профессиональных дисциплин, является обязательной дисциплиной и изучается на 2 и 4 годах обучения, в 3 и 7 семестрах.

Освоение курса опирается на знания, умения, навыки и компетенции, сформированные на двух предшествующих уровнях образования по курсам:

- "Физическая химия" (основы термодинамики, кинетики, владение основными законами физической химии);
  - "Физические методы исследования";
  - "Коллоидная химия" (поверхностные явления);
  - "Неорганическая химия" (знания о составе, строении и свойствах основных классов неорганических соединений);
  - "Органическая химия" (теоретические представления органической химии, знания о составе, строении и свойствах основных классов органических соединений, владение основами органического синтеза).
- "Высокомолекулярные соединения" (особенности полимерного состояния вещества, молекулярно-массовые характеристики полимеров);
- "Химическая технология" (физико-химические основы современного химического производства).

## 2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения ООП (компетенциями выпускников)

**Таблица 1**

### Планируемые результаты обучения по дисциплине

Код формируемой компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), характеризующие этапы формирования компетенций
ПК-2 завершающий	31 <i>Знать</i> : современное состояние науки в области физической химии и в смежных областях. 32 <i>Знать</i> : требования к содержанию и правила оформления рукописей к публикации в рецензируемых научных изданиях. У1 <i>Уметь</i> : представлять научные результаты по теме диссертационной работы в виде публикаций в рецензируемых научных изданиях. У2 <i>Уметь</i> : представлять результаты НИР (в т.ч., диссертационной работы) академическому и бизнес-сообществу. В1 <i>Владеть</i> : методами планирования, подготовки, проведения НИР, анализа полученных данных, формулировки выводов и рекомендаций по направленности (научной специальности).
ПК-3 завершающий	31 <i>Знать</i> : Требования к корректному выбору методов обработки экспериментальных данных и/или методов численного моделирования химических процессов; современные направления развития методом обработки экспериментальных данных и/или

	<p>методов численного моделирования в своей профессиональной области.</p> <p><i>У1 Уметь:</i> Корректно использовать современные методы обработки экспериментальных данных и/или современные методы численного моделирования сложных химических процессов в своей профессиональной области.</p> <p><i>В1 Владеть:</i> 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.</p>
<i>ПК-4 завершающий</i>	<p><i>З1 Знать:</i> основные приемы химического эксперимента, методы получения веществ и исследования их физико-химических свойств</p> <p><i>У1 Уметь:</i> осуществлять исследования химических и физико-химических процессов</p> <p><i>В1 Владеть:</i> навыками разработки фундаментальных основ технологических процессов получения материалов</p>
<i>ПК-5 завершающий</i>	<p><i>З1 Знать:</i> 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.</p> <p><i>У1 Уметь:</i> Использовать новое сложное технологическое (в том числе – нанотехнологическое) оборудование для получения перспективных материалов (в том числе – наноматериалов) различного функционального назначения; использовать современное оборудование, а также результаты фундаментальных и прикладных исследований для разработки новых методик аттестации структуры и свойств перспективных материалов различного функционального назначения.</p> <p><i>В1 Владеть:</i> Навыками работы со сложным исследовательским, контрольно-измерительным и технологическим оборудованием (в том числе – нанотехнологическим оборудованием мирового уровня).</p> <p><i>В2 Владеть:</i> навыками разработки и верификации новых методик аттестации структуры и свойств конструкционных и многофункциональных материалов (в том числе – наноматериалов)</p>

### 3. Структура и содержание дисциплины

Объем дисциплины составляет 3 зачетные единицы, всего 108 часов, из которых 18 часов составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (18 часов лекций), 54 часов составляет самостоятельная работа обучающегося, 36 часов - мероприятия промежуточной аттестации (экзамен).

## Структура дисциплины

Наименование раздела 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	36	10	-	-	-	10	27
Кинетика химических реакций	36	8	-	-	-	8	27
Аттестация по дисциплине: экзамен	36						
<b>Итого</b>	<b>108</b>	<b>18</b>	<b>-</b>	<b>-</b>	<b>-</b>	<b>18</b>	<b>54</b>

## 3.1. Содержание разделов дисциплины

## Раздел 1. Химическая термодинамика

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. Вирialsные уравнения состояния.

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.

1.3. Второй закон термодинамики. Энтропия и её изменения в обратимых и необратимых процессах. Теорема Карно – Клаузиуса. Различные шкалы температур.

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.

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.

1.6. Элементы статистической термодинамики. Микро- и макросостояния химических систем. Фазовые Г- и  $\mu$ -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, 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.

1.7. Элементы термодинамики необратимых процессов. Основные положения термодинамики неравновесных процессов. Локальное равновесие. Флуктуации. Функция диссипации. Потoki 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.

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.

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 Гиббса. Диаграммы плавкости трехкомпонентных систем.

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).

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.

## **Раздел 2. Кинетика химических реакций**

2.1. *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.

2.2. *Феноменологическая кинетика* 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.

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.

Реакции в потоке. Реакции идеального вытеснения и идеального смешения. Колебательные реакции.

2.3. *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).

2.4. Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса. Энергия активации и способы её определения.

2.5. *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.

Теория активных столкновений. Сечение химических реакций. Формула Траутца-Льюиса. Расчет предэкспоненциального множителя по молекулярным постоянным. Стерический фактор.

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.

2.6. *Различные типы химических реакций.* Мономолекулярные реакции в газах, схема Линдемана – Христиансена. Теория РРКМ. Бимолекулярные и тримолекулярные реакции, зависимость предэкспоненциального множителя от температуры.

Реакции в растворах, влияние растворителя и заряда реагирующих частиц. Клеточный эффект и сольватация.

Фотохимические и радиационнохимические реакции. Элементарные фотохимические процессы. Эксимеры и эксиплексы. Изменение физических и химических свойств молекул при электронном возбуждении. Квантовый выход. Закон Эйнштейна-Штарка.

2.7. Электрохимические реакции. Двойной электрический слой. Модельные представления о структуре двойного электрического слоя. Теория Гуи – Чапмена – Грэма.

Электрокаплярные явления, уравнение Липпмана.

Скорость и стадии электродного процесса. Поляризация электродов. Полярография. Ток обмена и перенапряжение. Зависимость скорости стадии разряда от строения двойного слоя.

Химические источники тока, их виды. Электрохимическая коррозия. Методы защиты от коррозии.

2.8. *Классификация каталитических реакций* и катализаторов. Теория промежуточных соединений в катализе, принцип энергетического соответствия.

2.9. *Гомогенный катализ.* 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.

2.10. *Ферментативный катализ.* Адсорбционные и каталитические центры ферментов. Активность и субстратная селективность ферментов. Коферменты. Механизмы ферментативного катализа.

2.11. *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. Энергия активации гетерогенных каталитических реакций. Современные теории функционирования гетерогенных катализаторов.

Основные промышленные каталитические процессы.

#### **4. Образовательные технологии**

Для достижения планируемых результатов обучения, в дисциплине используются различные образовательные технологии:

информационно-развивающие технологии (самостоятельное изучение литературы, применение новых информационных технологий для самостоятельного пополнения знаний, включая использование технических и электронных средств информации);

деятельностные практико-ориентированные технологии (анализ, сравнение методов проведения химических и физико-химических исследований, выбор метода, в зависимости от объекта исследования в конкретной ситуации и его практическая реализация); развивающие проблемно-ориентированные технологии (учебные дискуссии, коллективная мыслительная деятельность, решение задач повышенной сложности). Лекции читаются с использованием современных мультимедийных возможностей и проекционного оборудования.

## **5. 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 каталитической 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.

### 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  $\mu$ -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, теплоемкости 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 молярные 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. Фонд оценочных средств для аттестации по дисциплине

### 6.1. Перечень компетенций выпускников образовательной программы с указанием результатов обучения (знаний, умений, владений), характеризующих этапы их формирования

Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования приведен в приложении 1.

### 6.2. Критерии и процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине. Описание шкал оценивания

Промежуточный контроль качества усвоения содержания дисциплины проводится в виде комплексного экзамена, на котором определяется:

- уровень усвоения основного учебного материала по дисциплине;
- уровень понимания изученного материала;
- способности аспиранта использовать полученные знания для решения конкретных задач.

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.

Для проведения промежуточного контроля сформированности компетенции используется: ответ по билету на экзамене.

Оценка	Уровень подготовки
Отлично	Высокий уровень подготовки с незначительными ошибками. Аспирант дал полный и развернутый ответ на все теоретические вопросы билета, подтверждая тем самым владение теоретическим материалом.
Хорошо	Хорошая подготовка. Аспирант дал полный ответ на все теоретические вопросы билета, но допустил небольшие неточности в определениях понятий, процессов и т.п.

Удовлетворительно	Минимально достаточный уровень подготовки. Аспирант показал минимальный уровень теоретических знаний, сделал существенные ошибки при ответе на экзаменационный вопрос, но при ответах на наводящие вопросы, смог правильно сориентироваться и в общих чертах дать правильный ответ.
Неудовлетворительно	Подготовка недостаточная и требует дополнительного изучения материала. Аспирант дал ошибочные ответы, как на теоретические вопросы билета, так и на наводящие и дополнительные вопросы экзаменатора.

**6.3. Примеры типовых контрольных заданий или иных материалов, необходимых для оценки результатов обучения, характеризующих сформированность компетенций.**

Уровни освоения дисциплины оцениваются согласно требованиям, изложенным в паспорте каждой из указанных компетенций, где указаны критерии оценивания результатов обучения и Планируемые результаты 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. Виральные уравнения состояния (ПК-2).
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 (ПК-2).
3. Таблицы стандартных термодинамических величин и их использование в термодинамических расчетах (ПК-3).
4. Второй закон термодинамики. Теорема Карно-Клаузиуса (ПК-2).
5. Энтропия и её изменения в обратимых и необратимых процессах (ПК-2).
6. Различные шкалы температур (ПК-3).
7. Фундаментальные уравнения Гиббса. Характеристические функции. Энергия Гиббса, энергия Гельмгольца (ПК-2).
8. Уравнения Максвелла. Химические потенциалы. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов (ПК-2).
9. Уравнение Гиббса – Гельмгольца. Работа и теплота химического процесса (ПК-2).
10. Химическое равновесие. Закон действующих масс. Различные виды констант равновесия и связь между ними. Изотерма Вант-Гоффа (ПК-2).
11. Уравнения изобары и изохоры химической реакции. Расчеты констант равновесия химических реакций с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций (ПК-2).
12. Приведенная энергия Гиббса и её использование для расчетов химических равновесий (ПК-3).
13. Равновесие в поле внешних сил. Полные потенциалы (ПК-2).
14. Элементы статистической термодинамики. Микро- и макросостояния химических систем. Фазовые Г- и  $\mu$ -пространства. Эргодическая гипотеза. Термодинамическая вероятность и её

связь с энтропией. Распределение Максвелла-Больцмана. Статистические средние значения макроскопических величин (ПК-2).

15. Ансамбли Гиббса. Микроканоническое и каноническое распределения. Расчет числа состояний в квазиклассическом приближении. Каноническая функция распределения Гиббса. Сумма по состояниям как статистическая характеристическая функция (ПК-2).
16. Статистические выражения для основных термодинамических функций (ПК-2).
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 (ПК-2).
18. Приближение «жесткий ротатор – гармонический осциллятор». Составляющие внутренней энергии, теплоёмкости и энтропии, обусловленные поступательным, вращательным и колебательным движением (ПК-2).
19. Расчет констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики (ПК-2).
20. Статистическая термодинамика реальных систем. Потенциалы межмолекулярного взаимодействия и конфигурационный интеграл для реального газа. Распределения Бозе-Эйнштейна и Ферми – Дирака. Вырожденный идеальный газ (ПК-2).
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 (ПК-2).
22. Элементы термодинамики необратимых процессов. Основные положения термодинамики неравновесных процессов. Локальное равновесие. Флуктуации. Функция диссипации (ПК-2).
23. Потоки и силы. Скорость производства энтропии. Зависимость скорости производства энтропии от обобщенных потоков и сил (ПК-2).
24. Соотношения взаимности Онзагера. Стационарное состояние системы и теорема Пригожина (ПК-2).
25. Термодиффузия и её описание в неравновесной термодинамике. Уравнение Чепмена-Энскога (ПК-2).
26. Различные типы растворов. Способы выражения состава растворов. Идеальные растворы, общее условие идеальности растворов (ПК-2).
27. Давление насыщенного пара жидких растворов, закон Рауля (ПК-2).
28. Неидеальные растворы и их свойства. Метод активностей. Коэффициенты активности и их определение (ПК-2).
29. Стандартные состояния при определении химических потенциалов компонент растворов. Симметричная и несимметричная системы отсчета (ПК-2).
30. Коллигативные свойства растворов. Изменение температуры замерзания растворов, криоскопия. Зонная плавка. Осмотические явления (ПК-2).
31. Парциальные мольные величины, их определение для бинарных систем. Уравнение Гиббса-Дюгема (ПК-2).
32. Функция смешения для идеальных и неидеальных растворов. Предельно разбавленные растворы, атермальные и регулярные растворы, их свойства (ПК-2).
33. Гетерогенные системы. Понятия компонента, фазы, степени свободы. Правило фаз Гиббса (ПК-2).
34. Однокомпонентные системы. Диаграммы состояния воды, серы, фосфора и углерода (ПК-3).
35. Фазовые переходы первого рода. Уравнение Клапейрона-Клаузиуса (ПК-2).
36. Двухкомпонентные системы. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем (ПК-3).
37. Равновесие жидкость – пар в двухкомпонентных системах. Законы Гиббса – Коновалова. Азеотропные смеси (ПК-3).
38. Фазовые переходы второго рода. Уравнения Эренфеста (ПК-2).

39. Трехкомпонентные системы. Треугольник Гиббса. Диаграммы плавкости трехкомпонентных систем (ПК-5).
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 (ПК-5).
41. Константа адсорбционного равновесия. Уравнение Ленгмюра (ПК-2).
42. Адсорбция из растворов. Уравнение Брунауэра – Эммета – Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента (ПК-2).
43. Хроматография, различные её типы (газовая, жидкостная, противоточная и др.) (ПК-5).
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 (ПК-2).
45. Связь свободной поверхностной энергии с теплотой сублимации (правило Стефана), модулем упругости и другими свойствами вещества (ПК-2).
46. Эффект Ребиндера: изменение прочности и пластичности твердых тел вследствие снижения их поверхностной энергии. Капиллярные явления (ПК-2).
47. Зависимость давления пара от кривизны поверхности жидкости. Капиллярная конденсация. Зависимость растворимости от кривизны поверхности растворяющихся частиц (закон Гиббса – Оствальда – Фрейндлиха) (ПК-2).
48. Растворы электролитов. Ион-дипольное взаимодействие, как основной процесс, определяющий устойчивость растворов электролитов (ПК-2).
49. Коэффициенты активности в растворах электролитов. Средняя активность и средний коэффициент активности, их связь с активностью отдельных ионов (ПК-2).
50. Основные положения теории Дебая – Хюккеля. Потенциал ионной атмосферы (ПК-2).
51. Условия электрохимического равновесия на границе раздела фаз и в электрохимической цепи (ПК-2).
52. Термодинамика гальванического элемента. Электродвижущая сила, её выражение через энергию Гиббса реакции в элементе (ПК-2).
53. Уравнения Нернста и Гиббса-Гельмгольца для равновесной электрохимической цепи (ПК-2).
54. Понятие электродного потенциала. Определение коэффициентов активности на основе измерений ЭДС гальванического элемента (ПК-2).
55. Электропроводность растворов электролитов; удельная и эквивалентная электропроводность. Числа переноса, подвижность ионов и закон Кольрауша. Электрофоретический и релаксационные эффекты (ПК-2).
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 (ПК-2).
57. Феноменологическая кинетика сложных химических реакций. Принцип независимости элементарных стадий. Кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций (ПК-2).
58. Квазистационарное приближение. Метод Боденштейна-Тёмкина. Кинетика гомогенных каталитических и ферментативных реакций. Уравнение Михаэлиса-Ментен (ПК-2).
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 (ПК-2).
60. Реакции в потоке. Реакции идеального вытеснения и идеального смешения. Колебательные реакции (ПК-2).
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) (ПК-2).

62. Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса. Энергия активации и способы её определения (ПК-2).
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 (ПК-2).
64. Теория активных столкновений. Сечение химических реакций. Формула Траутца-Льюиса. Расчет предэкспоненциального множителя по молекулярным постоянным. Стерический фактор (ПК-2).
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 (ПК-2).
66. Различные типы химических реакций. Мономолекулярные реакции в газах, схема Линдемана – Христиансена. Теория РРКМ. Бимолекулярные и тримолекулярные реакции, зависимость предэкспоненциального множителя от температуры (ПК-2).
67. Реакции в растворах, влияние растворителя и заряда реагирующих частиц. Клеточный эффект и сольватация (ПК-2).
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 (ПК-2).
69. Электрохимические реакции. Двойной электрический слой. Модельные представления о структуре двойного электрического слоя. Теория Гуи – Чапмена – Грэма (ПК-2).
70. Электрокаплярные явления, уравнение Липпмана (ПК-2).
71. Скорость и стадии электродного процесса. Поляризация электродов. Полярография. Ток обмена и перенапряжение. Зависимость скорости стадии разряда от строения двойного слоя (ПК-2).
72. Химические источники тока, их виды (ПК-5).
73. Электрохимическая коррозия. Методы защиты от коррозии (ПК-5).
74. Классификация каталитических реакций и катализаторов. Теория промежуточных соединений в катализе, принцип энергетического соответствия (ПК-2).
75. Кисотно-основной катализ. Кинетика и механизм реакций специфического кислотного катализа. Функции кислотности Гаммета. Кинетика и механизм реакций общего кислотного катализа. Уравнение Брэнстеда. Корреляционные уравнения для энергий активации и теплот реакций. Специфический и общий основной катализ. Нуклеофильный и электрофильный катализ (ПК-2).
76. Катализ металлокомплексными соединениями. Гомогенные реакции гидрирования, их кинетика и механизмы (ПК-5).
77. Ферментативный катализ. Адсорбционные и каталитические центры ферментов. Активность и субстратная селективность ферментов. Коферменты. Механизмы ферментативного катализа (ПК-5).
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 (ПК-5).
79. Гетерогенный катализ. Энергия активации гетерогенных каталитических реакций. Современные теории функционирования гетерогенных катализаторов (ПК-5).
80. Основные промышленные каталитические процессы (ПК-5).



## 7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

а) основная литература:

1. Еремин В.В., Борщевский А.Я. Основы общей и физической химии. Долгопрудный: Интеллект, 2012. – 848 с.
2. Борщевский А.Я. Физическая химия. Том 1. Общая и химическая термодинамика. М.: ИНФРА-М, 2017. – 606 с. [Электронный ресурс]: <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=543133>.
3. Борщевский А.Я. Физическая химия. Том 2. Статистическая термодинамика. М.: ИНФРА-М, 2017. – 383 с. [Электронный ресурс]: <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=543170>.
4. Дамаскин Б.Б., Петрий О.А., Цирлина Г.А. Электрохимия. М.: Химия, КолосС, 2006. – 672 с.
5. Карякин Н.В. Основы химической термодинамики. М.: Академия, 2003. – 462 с.
6. Эмануэль Н.М., Кнорре Д.Г. Курс химической кинетики. М.: Высшая школа, 1984. – 463 с.
7. Еремин Е.Н. Основы химической кинетики. М.: Высшая школа, 1976. – 375 с.

б) дополнительная литература:

1. Бажин Н.М., Пармон В.Н. Начала физической химии. – М.: НИЦ ИНФРА-М, 2015. – 332 с. [Электронный ресурс]: <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=420417>.
2. Бажин Н.М. Иванченко В.А., Пармон В.Н. Термодинамика для химиков. М.: Химия, 2000. – 408 с.
3. Полтораки О.М. Термодинамика в физической химии. М.: Высшая школа, 1991. – 318 с.
4. Антропов Л.И. Теоретическая электрохимия. М.: Высшая школа, 1984. – 519 с.
5. Эткинс П. Физическая химия. Том 1. М.: Мир, 1980. – 580 с.
6. Эткинс П. Физическая химия. Том 2. М.: Мир, 1980. – 584 с.
7. Герасимов Я.И., Древинг В.П., Еремин Е.Н., Киселев А.В., Лебедев В.П., Панченков Г.М., Шлыгин А.И. Курс физической химии. Том 1. М.: Химия, 1970. – 592 с.
8. Герасимов Я.И., Древинг В.П., Еремин Е.Н., Киселев А.В., Лебедев В.П., Панченков Г.М., Шлыгин А.И. Курс физической химии. Том 2. М.: Химия, 1973. 623 с.

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы

<http://link.springer.com>

<https://biblio-online.ru/book/D70F2822-28CC-446A-A5E4-F38CEE702A7E>

<https://biblio-online.ru/book/44521F55-0BB6-49C4-8390-38A6BE9B6C42>

<https://biblio-online.ru/book/3D18372E-9FFD-4ACF-AB4F-5DB140F0260F>

<http://www.uspkhim.ru>

<http://www.pslc.ws/russian/index.htm>

<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/lachinov/welcome.html>

<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/lachinov-basic/welcome.html>

## 8. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

- 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*

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 04.06.01 «Химические науки» (уровень подготовки кадров высшей квалификации).

**Автор:**

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

\_\_\_\_\_ Маркин А.В.

**Рецензент:**

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

\_\_\_\_\_ Федоров А.Ю.

**Заведующий кафедрой**

физической химии химического факультета, д.х.н.

\_\_\_\_\_ Маркин А.В.

Программа рекомендована на заседании кафедры физической химии от «\_\_\_» \_\_\_\_\_  
2021 г. протокол № \_\_\_\_.

Программа одобрена на заседании Методической комиссии химического факультета от 27  
августа 2021, протокол № 1.

## Карты компетенций, в формировании которой участвует дисциплина

Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций), шифр	Критерии оценивания результатов обучения				
	1	2	3	4	5
<b>ПК-2</b>					
ЗНАТЬ: современное состояние науки в области физической химии и в смежных областях	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о современном состоянии науки в области физической химии	Неполные представления о современном состоянии науки в области физической химии	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы, представления о современном состоянии науки в области физической химии	Сформированные систематические представления о современном состоянии науки в физической химии
ЗНАТЬ: требования к содержанию и правила оформления рукописей к публикации в рецензируемых научных изданиях	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о требованиях к содержанию и правилам оформления рукописей к публикации в рецензируемых научных изданиях	Общие представления о требованиях к содержанию и правилам оформления рукописей к публикации в рецензируемых научных изданиях	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления о требованиях к содержанию и правилам оформления рукописей, наличие однократного опыта публикаций в рецензируемых научных изданиях	Сформированные представления о требованиях к содержанию и правилам оформления рукописей, наличие неоднократного опыта публикаций в рецензируемых научных изданиях
УМЕТЬ: представлять научные результаты по теме диссертационной работы в виде публикаций в рецензируемых научных изданиях	Отсутствие умений	Фрагментарное использование методов подготовки научных результатов к публикации в рецензируемых научных изданиях	В целом успешное, но не систематическое использование методов подготовки научных результатов к публикации в рецензируемых научных изданиях	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы использование методов подготовки научных результатов к публикации в рецензируемых научных изданиях	Сформированное умение использовать методов подготовки научных результатов к публикации в рецензируемых научных изданиях

				изданиях	
УМЕТЬ: представлять результаты НИР (в т.ч., диссертационной работы) академическому и бизнес-сообществу	Отсутствие умений	Умение представлять результаты НИР узкому кругу специалистов	В целом успешное, умение представлять результаты НИР (в т.ч., диссертационной работы) академическому сообществу	Успешное умение представлять результаты НИР (в т.ч., диссертационной работы) академическому и бизнес-сообществу	Сформированное умение представлять результаты НИР (в т.ч., диссертационной работы) академическому и бизнес-сообществу; определять целевые группы и форматы продвижения результатов собственной научной деятельности
ВЛАДЕТЬ: методами планирования, подготовки, проведения НИР, анализа полученных данных, формулировки выводов и рекомендаций по направленности (научной специальности)	Отсутствие навыков	Фрагментарное применение методов планирования, подготовки и проведения НИР, анализа и обсуждения полученных данных	В целом успешное, но не систематическое применение методов планирования, подготовки, проведения НИР, анализа полученных данных	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применение методов планирования, подготовки, проведения НИР, анализа полученных данных, формулировка выводов по результатам НИР	Успешное и систематическое применение методов планирования, подготовки и проведения НИР и анализа и обсуждения экспериментальных данных; формулировка выводов и рекомендаций по результатам НИР

ПК-3					
ЗНАТЬ: Требования к корректному выбору методов обработки экспериментальных данных и/или методов численного моделирования химических процессов; современные	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания о требованиях к корректному выбору методов обработки экспериментальных данных и/или методов численного	Неполные знания о требованиях к корректному выбору методов обработки экспериментальных данных и/или методов численного моделирования	Сформированные, но содержащие определенные пробелы знания о требованиях к корректному выбору методов обработки экспериментальных	Сформированные и систематические знания о требованиях к корректному выбору методов обработки экспериментальных данных и/или методов

направления развития методом обработки экспериментальных данных и/или методов численного моделирования в своей профессиональной области		моделирования химических процессов; современные направления развития методом обработки экспериментальных данных и/или методов численного моделирования в своей профессиональной области	химических процессов; современные направления развития методом обработки экспериментальных данных и/или методов численного моделирования в своей профессиональной области	данных и/или методов численного моделирования химических процессов; современные направления развития методом обработки экспериментальных данных и/или методов численного моделирования в своей профессиональной области	численного моделирования химических процессов; современные направления развития методом обработки экспериментальных данных и/или методов численного моделирования в своей профессиональной области
УМЕТЬ: Корректно использовать современные методы обработки экспериментальных данных и/или современные методы численного моделирования сложных химических процессов в своей профессиональной области	Отсутствие умений	Частично освоенное умение корректно использовать современные методы обработки экспериментальных данных и/или современные методы численного моделирования сложных химических процессов в своей профессиональной области	В целом успешное, но не систематическое умение корректно использовать современные методы обработки экспериментальных данных и/или современные методы численного моделирования сложных химических процессов в своей профессиональной области	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение корректно использовать современные методы обработки экспериментальных данных и/или современные методы численного моделирования сложных химических процессов в своей профессиональной области	Успешное и систематическое умение корректно использовать современные методы обработки экспериментальных данных и/или современные методы численного моделирования сложных химических процессов в своей профессиональной области
ВЛАДЕТЬ: Современными методами обработки экспериментальных данных и/или современными методами численного моделирования химических процессов; систематическими знаниями в области	Отсутствие навыков	Фрагментарное применение современных методов обработки экспериментальных данных и/или современными методами численного	В целом успешное, но не систематическое применение современных методов обработки экспериментальных данных и/или современными методами численного моделирования	В целом успешные, но содержащие определенные пробелы навыки применения современных методов обработки экспериментальных данных и/или современными методами	Успешное и систематическое применение навыков применения современных методов обработки экспериментальных данных и/или современными методами

современных методов обработки экспериментальных данных в области физической химии		моделирования химических процессов полимеризации; систематическими знаниями в области современных методов обработки экспериментальных данных в области физической химии	химических процессов полимеризации; систематическими знаниями в области современных методов обработки экспериментальных данных в области физической химии	численного моделирования химических процессов полимеризации; систематическими знаниями в области современных методов обработки экспериментальных данных в области физической химии	численного моделирования химических процессов полимеризации; систематическими знаниями в области современных методов обработки экспериментальных данных в области физической химии
<b>ПК-4</b>					
<b>ЗНАТЬ:</b> основные приемы химического эксперимента, методы получения веществ и исследования их физико-химических свойств	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления об основных приемах химического эксперимента, методах получения веществ и исследования их физико-химических свойств	Неполные знания об основных приемах химического эксперимента, методах получения веществ и исследования их физико-химических свойств	В целом полные, но содержащие определенные пробелы знания об основных приемах химического эксперимента, методах получения веществ и исследования их физико-химических свойств	Полные и системные знания об основных приемах химического эксперимента, методах получения веществ и исследования их физико-химических свойств
<b>УМЕТЬ:</b> осуществлять исследования химических и физико-химических процессов	Отсутствие умений	Частично сформированные умения об осуществлении химических и физико-химических процессов	В целом успешные, но не систематическое умение об осуществлении химических и физико-химических процессов	В целом успешное, но содержащее определенные пробелы умение об осуществлении химических и физико-химических процессов	Успешное и систематическое использование навыков осуществления химических и физико-химических процессов
<b>ВЛАДЕТЬ:</b> Навыками разработки фундаментальных основ технологических процессов получения материалов	Отсутствие навыков	Фрагментарное применение навыков разработки фундаментальных основ технологических процессов получения материалов	В целом успешное, но не систематическое применение навыков разработки фундаментальных основ технологических процессов получения	В целом успешное, но содержащее определенные пробелы применение навыков разработки фундаментальных основ технологических процессов получения	Успешное и систематическое применение навыков разработки фундаментальных основ технологических процессов получения

			материалов	материалов	материалов
<b>ПК-5</b>					
<b>ЗНАТЬ:</b> 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	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о химических, физических и технических аспектах 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)	Неполные представления о химических, физических и технических аспектах 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)	Сформированные, но содержащие определенные пробелы представления о химических, физических и технических аспектах 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)	Сформированные системные представления о химических, физических и технических аспектах 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)
<b>УМЕТЬ:</b> Использовать новое сложное технологическое (в том числе – нанотехнологическое)	Отсутствие умений	Частично освоенное умение использовать новое сложное технологическое (в том	В целом успешное, но не систематическое умение использовать новое сложное технологическое	В целом успешное, но содержащее определенные пробелы умение использовать новое	Успешное (полное) и системное умение использовать новое сложное технологическое

оборудование для получения перспективных материалов (в том числе – наноматериалов) различного функционального назначения; использовать современное современные физические модели, а также результаты фундаментальных и прикладных исследований для разработки новых методик аттестации структуры и свойств перспективных материалов различного функционального назначения.		числе – нанотехнологическое) оборудование для получения перспективных материалов (в том числе – наноматериалов) различного функционального назначения; использовать современное современные физические модели, а также результаты фундаментальных и прикладных исследований для разработки новых методик аттестации структуры и свойств перспективных материалов различного функционального назначения.	(в том числе – нанотехнологическое) оборудование для получения перспективных материалов (в том числе – наноматериалов) различного функционального назначения; использовать современное современные физические модели, а также результаты фундаментальных и прикладных исследований для разработки новых методик аттестации структуры и свойств перспективных материалов различного функционального назначения.	сложное технологическое (в том числе – нанотехнологическое) оборудование для получения перспективных материалов (в том числе – наноматериалов) различного функционального назначения; использовать современное современные физические модели, а также результаты фундаментальных и прикладных исследований для разработки новых методик аттестации структуры и свойств перспективных материалов различного функционального назначения.	(в том числе – нанотехнологическое) оборудование для получения перспективных материалов (в том числе – наноматериалов) различного функционального назначения; использовать современное современные физические модели, а также результаты фундаментальных и прикладных исследований для разработки новых методик аттестации структуры и свойств перспективных материалов различного функционального назначения.
ВЛАДЕТЬ: Навыками работы со сложным исследовательским, контрольно-измерительным и технологическим оборудованием (в том числе – нанотехнологическим оборудованием мирового	Отсутствие навыков	Фрагментарное применение навыков работы со сложным исследовательским, контрольно-измерительным и технологическим оборудованием (в том	В целом успешное, но не систематическое применение навыков работы со сложным исследовательским, контрольно-измерительным и технологическим	В целом успешное, но содержащее определенные пробелы использование навыков работы со сложным исследовательским, контрольно-измерительным и	Полное и систематическое применение навыков работы со сложным исследовательским, контрольно-измерительным и технологическим



уровня).		числе – нанотехнологическим оборудование мирового уровня).	оборудованием (в том числе – нанотехнологическим оборудование мирового уровня).	технологическим оборудованием (в том числе – нанотехнологическим оборудование мирового уровня).	оборудованием (в том числе – нанотехнологическим оборудование мирового уровня).
ВЛАДЕТЬ: навыками разработки и верификации новых методик аттестации структуры и свойств конструкционных и многофункциональных материалов (в том числе – наноматериалов)	Отсутствие навыков	Фрагментарное применение навыков разработки и верификации новых методик аттестации структуры и свойств конструкционных и многофункциональных материалов (в том числе – наноматериалов)	В целом успешное, но не систематическое применение навыков разработки и верификации новых методик аттестации структуры и свойств конструкционных и многофункциональных материалов (в том числе – наноматериалов)	В целом успешное, но содержащее определенные пробелы использование навыков разработки и верификации новых методик аттестации структуры и свойств конструкционных и многофункциональных материалов (в том числе – наноматериалов)	Полное и систематическое применение навыков разработки и верификации новых методик аттестации структуры и свойств конструкционных и многофункциональных материалов (в том числе – наноматериалов)