

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ
Зав. кафедрой физической химии



О.А. Козадеров

25.05.2023

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

2.1.1.3 Физическая химия

1. Код и наименование научной специальности: 1.4.4. Физическая химия
 2. Профиль подготовки (при наличии): Физическая химия
 3. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины: физической химии
 4. Составители программы:
Введенский Александр Викторович, доктор химических наук, профессор
 5. Рекомендована: научно - методическим Советом химического факультета от 25.04.23, протокол № 4
 6. Учебный год: 2027/2028
- Семестр(ы): 7

7. Цели и задачи дисциплины (компонента программы аспирантуры):

Целью освоения дисциплины является формирование системных знаний в области термодинамики и кинетики гетерогенных процессов в металлических и металл-полимерных системах с химическими, адсорбционными и транспортными стадиями как научной основы создания новых принципов управления практически значимыми реакциями, получения высокоактивных материалов, подавления коррозии на металлах и сплавах, а также в области физикохимии мембранно-сорбционных процессов выделения и очистки физиологически активных веществ, супрамолекулярных процессов с участием ионообменников и мембран, нанокompозитов с каталитическими свойствами на основе природных и синтетических сорбентов.

Задачи дисциплины:

- изучение термодинамики и кинетики гетерогенных процессов в металлических и металл-полимерных системах;
- определение роли адсорбции и фазовых превращений в поверхностном слое в кинетике гетерогенных процессов;
- получение сведений о методах исследования, контроля и управления процессами, протекающими на межфазной границе.

8. Место учебной дисциплины в структуре ООП: Блок 2. Образовательный компонент. Дисциплина, направленная на подготовку к сдаче кандидатских экзаменов.

9. Планируемые результаты обучения (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения программы (компетенциями):

Код	Название компетенции	Планируемые результаты обучения
ОК-5	Владение основами теории фундаментальных разделов физической химии	Знать: базовые законы физической химии Уметь: использовать основные закономерности для интерпретации экспериментальных результатов в выбранной области научной деятельности. Владеть: навыками применения базовых законов физической химии для решения практических и экспериментальных задач в выбранной области научной деятельности.

10. Объем в зачетных единицах/час. — 3 / 108.

Форма промежуточной аттестации Экзамен

11. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость		
	Всего	По семестрам	
		7 семестр	...
Всего часов	108	108	
в том числе:			
Лекционные занятия (контактная работа)	18	18	
Самостоятельная работа	81	81	
Форма промежуточной аттестации экзамен	9	9	

12. Содержание этапов дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины
1	Физическая химия как наука и предмет изучения.	Физическая химия как наука и предмет изучения. Цели, составные части, методы и практическое значение. Основные понятия

	Химическая термодинамика. Первое начало термодинамики. Термохимия	химической термодинамики. Первый закон термодинамики. внутренняя энергия. Энтальпия. Теплота и работа различных процессов. Калорические коэффициенты. Теплоемкость. Термохимия. Уравнение Кирхгофа. Приближенное и точное решение. Калориметрия
2	Второе начало термодинамики. Энтропия и термодинамические потенциалы химических реакций	Второй закон термодинамики. Принцип адиабатной недостижимости. Энтропия. Уравнение второго начала термодинамики для обратимых и необратимых процессов. Некомпенсированная теплота Клаузиуса. Энтропия различных процессов. Принцип возрастания энтропии. Вычисление энтропии. Энтропия химической реакции. Фундаментальные уравнения Гиббса. Характеристические функции. Термодинамические потенциалы. Критерии самопроизвольного протекания процессов и равновесия. Термодинамические потенциалы идеального и реального газов. Летучесть. Критическое состояние. Зависимость давления от температуры при фазовых переходах. Уравнение Клапейрона-Клаузиуса. Энергия Гиббса химической реакции. Влияние температуры на термодинамические потенциалы. Уравнение Гиббса-Гельмгольца. Расчет энергии Гиббса химической реакции.
3	Термодинамика растворов и фазовых равновесий	Термодинамика растворов. Парциальные молярные величины. Уравнение Гиббса - Дюгема. Химические потенциалы. Давление насыщенного пара жидких растворов. Законы Рауля и Генри. Активность. Коэффициент активности. Равновесие жидкость-пар. Законы Гиббса - Коновалова. Перегонка. Коллигативные свойства растворов. Законы растворимости. Уравнение Шредера. Закон Нернста. Экстракция. Криоскопия. Эбуллиоскопия. Осмотические явления. Уравнение Вант-Гоффа.
4	Химическое равновесие	Термодинамика фазовых равновесий. Правило фаз Гиббса. Диаграмма состояния. Фазовые переходы первого и второго рода. Основы геометрической термодинамики фазовых равновесий. Энергия Гиббса при фазовых превращениях. Химические равновесия. Условия химического равновесия. Химическое сродство. Закон действующих масс. Константа равновесия. Изотерма химической реакции Вант-Гоффа. Энергии Гельмгольца и Гиббса химических реакций, их связь с константой равновесия. Равновесный выход продуктов химической реакции. Влияние давления на положение равновесия. Зависимость константы равновесия химической реакции от температуры. Уравнения изобары и изохоры химической реакции Вант-Гоффа. Третье начало термодинамики. Расчет константы равновесия реакции при заданной температуре. Метод Шварцмана-Темкина. Адсорбционные равновесия. Изотермы адсорбции. Уравнения Генри. Ленгмюра, Гиббса, Брунауэра-Эммета-Теллера.
5	Адсорбционное равновесие	Равновесные феноменологические изотермы адсорбции. Уравнения Генри, Ленгмюра, Гиббса, Брунауэра-Эммета-Теллера. Представление о обобщенной изотерме Конуэя-Гилеади. Адсорбция на энергетически неоднородных поверхностях. Изотермы темкинского типа. Кинетика адсорбционных процессов. Особенности адсорбции заряженных частиц, частичный перенос заряда. Диссоциативная и ассоциативная адсорбция. Микроскопические модели акта адсорбционного взаимодействия.
6	Химическая кинетика. Катализ	Химическая кинетика. Принципы химической кинетики. Кинетический закон действующих масс. Лимитирующая стадия. Кинетика простых и сложных химических реакций. Принцип квазистационарности Боденштейна-Семенова. Теории химической кинетики. Зависимость константы скорости от температуры. уравнение Аррениуса. Энергия активации. Поверхность потенциальной энергии. Теория переходного состояния. Энтропия и энтальпия активации. Теория активированного комплекса в применении к мономолекулярным реакциям. Реакции в растворах. Катализ. Общие принципы катализа. Гомогенный катализ. Кислотно-основный катализ. Уравнение Бренстеда. Автокатализ. Гетерогенный катализ. Активность и селективность катализаторов. Энергия активации каталитических реакций. Теория мультиплетов Баландина. Теория активных

		ансамблей Кобозева.
7	Самоорганизация в физико-химической системе. Критерии эволюции	Связь понятий энтропия и структура. Тепловая конвекция – ячейки Бенара. Колебательные реакции. Реакция Белоусова-Жаботинского. Колебательные биохимические процессы. Критерии эволюции физико-химических систем в равновесной термодинамике. Производство энтропии и термодинамические потенциалы. Термодинамическая теория устойчивости равновесных состояний. Термическая устойчивость. Механическая устойчивость. Устойчивость по отношению к диффузии.
8	Производство энтропии и диссипативная функция. Термодинамические силы и потоки	Термодинамическое описание процессов в неравновесных системах. Локальное равновесие. Производство энтропии и диссипативная функция. Линейные феноменологические соотношения. Соотношения взаимности Онсагера. Теорема о минимуме производства энтропии в стационарном состоянии. Эволюция неравновесных систем в области применимости линейных феноменологических соотношений. Эволюция неравновесных систем вблизи равновесия на примере систем с теплопроводностью, химическими реакциями
9	Критерии эволюции и анализ устойчивости неравновесных систем	Универсальный критерий эволюции. Применение универсального критерия эволюции к системе с теплопроводностью. Термодинамический анализ устойчивости систем далеких от равновесия. Т Теорема о производстве энтропии. Термодинамический анализ устойчивости систем при наличии автокаталитических реакций. Модель Шлегля. Избыточное производство энтропии. Анализ устойчивости стационарных состояний для систем, далеких от равновесия.
10	Динамические системы. Аттракторы. Функция Ляпунова.	Кинетический анализ устойчивости. Фазовая плоскость. Линейный анализ устойчивости (по первому приближению). Функция Ляпунова. Особые точки. Особые точки для двумерных систем – классификация. Аттракторы. Примеры функций Ляпунова для различных динамических систем. Термодинамические потенциалы как функции Ляпунова. Закон устойчивого равновесия как основа равновесной термодинамики.
11	Брюсселятор Детерминированный хаос. Странные аттракторы	Брюсселятор для системы без диффузии. Анализ устойчивости. Характеристика особых точек. Численное моделирование Брюсселятора Дискретные отображения как модель динамических систем. Квадратичное отображение. Неподвижные точки дискретных отображений. Универсальности Фейгенбаума. Детерминированный хаос. Странные аттракторы. Диссипативные структуры при росте кристаллов из расплавов, Пороговые явления при разрушении материалов.

13. Методические указания по выполнению этапов научного компонента:

Изучение конспектов лекций, работа с литературой и подбор дополнительной литературы по теме научного исследования, подготовка ответов на вопросы, сообщений по теме.

При реализации дисциплины с использованием дистанционных образовательных технологий используются инструменты электронной информационно-образовательной среды ВГУ «Электронный университет ВГУ» (<https://edu.vsu.ru>) и/или «МООК ВГУ» (<https://mooc.vsu.ru>).

14. Перечень литературы, ресурсов интернет, необходимых для выполнения этапов научного компонента

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	Еремин В.В. Основы общей и физической химии : учеб.пособие для студ. высш. учеб. заведений, обуч. по направлению «Химия» / В.В. Еремин, А.Я. Борщевский. – Долгопрудный : Интеллект, 2012. – 847с.
2	Пригожин И. Химическая термодинамика / И. Пригожин, Р. Дефей. - М.: БИНОМ, 2010. – 533 с.
3	Еремин, В.В. Основы физической химии. Учебное пособие в 2 ч. / В.В. Еремин. — 3-е изд. эл. — Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2013. — 322 с. — (Учебник для высшей школы). — <URL: http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=214231 >.

б) дополнительная литература:

4	Физическая химия : в 2 кн. / К. С. Краснов [и др.]. - Кн. 1: Строение вещества. Термодинамика .— 3-е изд., испр. — 2001 .— 511 с.
5	Физическая химия : В 2 кн. / К. С. Краснов [и др.]. - Кн. 2: Электрохимия. Химическая кинетика и катализ .— 3-е изд., испр. — 2001 .— 318 с.
6	Стромберг А.Г. Физическая химия : Учебник для химических специальностей вузов / А.Г. Стромберг, Д.П. Семченко. : под ред. А.Г. Стромберга. — 7-е изд., испр. — М. : Высш. шк., 2009 .— 527 с.
7	Эткинс П. Физическая химия : в 3-х частях / П.Эткинс, Дж. Де Паула. – Часть 1. Равновесная термодинамика. – М. : Мир, 2007. – 494с.
8	Пригожин И. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур / И. Пригожин, Д. Кондепуди.-М.: Мир, 2002.-451 с.
9	Гленсдорф П. Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций / П. Гленсдорф, И. Пригожин.-М.: УРСС, 2003. – 273 с.
10	Кольцова Э.М. Нелинейная динамика и термодинамика необратимых процессов в химии и химической технологии / Э.М. Кольцова, Ю.Д. Ю.Д.Третьяков, Л.С.Гордеев, А.А. Вертегел . – М.: Химия, 2001. - 408 с.
11	Бажин Н.М. Термодинамика для химиков : учебник для студ. вузов, обуч. по специальности «Химия» / Н.М. Бажин, В.А. Иванченко, В.Н. Пармон. – 2-е перераб. И доп. – М. : Химия : КолосС, 2004. – 415с.
12	Эбелинг В. Образование структур при необратимых процессах. Введение в теорию диссипативных структур / В.Эбелинг.-М.:Москва-Ижевск, 2004.-253 с.
13	Баблюяц А. Молекулы, динамика, жизнь/А.Баблюяц.-М.:Мир,1990.-363с.
14	Николис Г. Познание сложного/Г.Николис, И. Пригожин.-М.:Мир,1990.-342с.
15	Анищенко В.С. Знакомство с нелинейной динамикой/В.С. Анищенко.- М.:Москва-Ижевск,2002.-142 с.
16	Трубецков Д.И. Введение в синергетику. Хаос и структуры/Д.И. Трубецков.- М.:Москва.УРСС,2004.-232с.
17	Безручко П.Б. Путь в синергетику/ П.Б. Безручко, А.А. Короновский, Д.И. Трубецков, А.Е. Храмов.- М.:Москва.УРСС, 2005.-303с.

в) информационные электронно-образовательные ресурсы:

№ п/п	Источник
18	Научная электронная библиотека — < http://www.elibrary.ru >
19	Электронная библиотека Воронежского госуниверситета —< http://www.lib.vsu.ru >
20	Официальное электронное издание Химического факультета МГУ в Интернет - < http://www.chemnet.ru >

15. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы

№ п/п	Источник
1	<i>Введенский А.В. Физикохимия процессов адсорбции [Электронный ресурс] : учебно-методическое пособие ; Воронеж. гос. ун-т .— Воронеж : Издательский дом ВГУ, 2019 .</i> Текстовый файл .— <URL: http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m19-82.pdf >.
2	Физикохимия процессов фазообразования [Электронный ресурс] : учебно-методическое пособие / Воронеж. гос. ун-т ; сост.: С.Н. Грушевская, Н.В. Соцкая .— Воронеж : Издательский дом ВГУ, 2018 <URL: http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m18-187.pdf >.

16. Образовательные технологии, используемые при выполнении научного компонента, включая дистанционные образовательные технологии (ДОТ, электронное обучение (ЭО), смешанное обучение):

При реализации дисциплины проводятся индивидуальные занятия в формате лекций, семинаров и коллоквиумов. Самостоятельная работа включает подготовку к индивидуальным занятиям и их анализ, подготовку к текущей и промежуточной аттестации с использованием источников, указанных в п.п. 14-15.

Оценка знаний, умений и навыков, характеризующая этапы формирования компетенций в рамках изучения дисциплины осуществляется в ходе текущей и промежуточной аттестаций. Текущая аттестация проводится в соответствии с Положением о текущей аттестации обучающихся по программам высшего образования Воронежского государственного университета. Текущая аттестация проводится в форме собеседований, сообщений по заданной

теме и индивидуального опроса. Промежуточная аттестация проводится в соответствии с Положением о промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования. Контрольно-измерительные материалы промежуточной аттестации включают теоретические вопросы, позволяющие оценить уровень полученных знаний и практическое задание, позволяющее оценить степень сформированности умений и навыков. При оценивании используются количественная шкала оценок. Критерии оценивания приведены выше.

При реализации учебной дисциплины используются элементы электронного обучения и различные дистанционные образовательные технологии, позволяющие обеспечивать опосредованное взаимодействие (на расстоянии) преподавателей и обучающихся, включая инструменты электронной информационно-образовательной среды ВГУ «Электронный университет ВГУ» (<https://edu.vsu.ru>) и/или «МООК ВГУ» (<https://mooc.vsu.ru>), проведение вебинаров, видеоконференций (в том числе с применением сервисов Zoom, Discord и др.), взаимодействие в соцсетях, посредством электронной почты, мессенджеров.

При реализации дисциплины с применением дистанционных образовательных технологий оценки за экзамен могут быть выставлены по результатам текущей аттестации обучающегося в семестре.

17. Материально-техническое обеспечение:

Лекционная аудитория кафедры физической химии (167), оснащенная мультимедийной техникой: ноутбук «Асег», мультимедийный проектор «Benq», экран.

18. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации

18.1. Текущий контроль

Темы для собеседований и сообщений:

1. Современные представления о термодинамике растворов.
2. Второй закон термодинамики для обратимых и необратимых процессов.
3. Некомпенсированная теплота Клаузиуса и принцип возрастания энтропии.
4. Термодинамика фазовых равновесий.
5. Термодинамика химических равновесий.
6. Равновесные феноменологические изотермы адсорбции.
7. Самоорганизация в физико-химической системе. Критерии эволюции
8. Критерии эволюции и анализ устойчивости неравновесных систем
9. Динамические системы. Аттракторы.
10. Закон устойчивого равновесия как основа равновесной термодинамики.
11. Детерминированный хаос и диссипативные структуры.

При реализации дисциплины в течение семестра обучающийся выбирает три темы из перечисленных и готовит краткие сообщения (10-15 минут) по каждой из выбранных тем для обсуждения на индивидуальном занятии.

18.2. Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Комплект КИМ

УТВЕРЖДАЮ
Декан химического факультета

д.х.н., проф. _____ А.В. Введенский

Научная специальность 1.4.4 Физическая химия
Дисциплина Физическая химия
Форма обучения очное
Вид контроля экзамен
Вид аттестации промежуточная

Контрольно-измерительный материал № 1

1. Уравнение второго начала термодинамики для обратимых и необратимых процессов.
2. Теория переходного состояния. Энтропия и энтальпия активации.

Преподаватель _____ проф. А.В. Введенский

УТВЕРЖДАЮ
Декан химического факультета

д.х.н., проф. _____ А.В. Введенский

Научная специальность 1.4.4 Физическая химия
Дисциплина Физическая химия
Форма обучения очное
Вид контроля экзамен
Вид аттестации промежуточная

Контрольно-измерительный материал № 2

1. Принцип возрастания энтропии. Вычисление энтропии.
2. Колебательные реакции. Реакция Белоусова-Жаботинского. Колебательные биохимические процессы.

Преподаватель _____ проф. А.В. Введенский

УТВЕРЖДАЮ
Декан химического факультета

д.х.н., проф. _____ А.В. Введенский

Научная специальность 1.4.4 Физическая химия
Дисциплина Физическая химия
Форма обучения очное
Вид контроля экзамен
Вид аттестации промежуточная

Контрольно-измерительный материал № 3

1. Зависимость константы равновесия химической реакции от температуры. Уравнения изобары и изохоры химической реакции Вант-Гоффа.
2. Теорема о производстве энтропии.

Преподаватель _____ проф. А.В. Введенский

УТВЕРЖДАЮ
Декан химического факультета

д.х.н., проф. _____ А.В. Введенский

Научная специальность 1.4.4 Физическая химия
Дисциплина Физическая химия
Форма обучения очное
Вид контроля экзамен
Вид аттестации промежуточная

Контрольно-измерительный материал № 4

1. Термодинамические потенциалы. Критерии самопроизвольного протекания процессов и равновесия.
2. Кинетика адсорбционных процессов. Особенности адсорбции заряженных частиц, частичный перенос заряда.

Преподаватель _____ проф. А.В. Введенский

УТВЕРЖДАЮ
Декан химического факультета

д.х.н., проф. _____ А.В. Введенский

Научная специальность 1.4.4 Физическая химия
Дисциплина Физическая химия
Форма обучения очное
Вид контроля экзамен
Вид аттестации промежуточная

Контрольно-измерительный материал № 5

1. Парциальные молярные величины. Уравнение Гиббса - Дюгема. Химические потенциалы.
2. Термодинамический анализ устойчивости систем далеких от равновесия. Теорема о производстве энтропии.

Преподаватель _____ проф. А.В. Введенский

УТВЕРЖДАЮ
Декан химического факультета

д.х.н., проф. _____ А.В. Введенский

Научная специальность 1.4.4 Физическая химия
Дисциплина Физическая химия
Форма обучения очное
Вид контроля экзамен
Вид аттестации промежуточная

Контрольно-измерительный материал № 6

1. Кинетика простых и сложных химических реакций. Принцип квазистационарности Боденштейна-Семенова.
2. Эволюция неравновесных систем вблизи равновесия на примере систем с теплопроводностью, химическими реакциями.

Преподаватель _____ проф. А.В. Введенский

Технология проведения экзамена.

Обучающийся выбирает КИМ и готовит ответ в течение 30-40 минут, не пользуясь вспомогательными материалами. После подготовки проводится собеседование с преподавателем по материалам КИМ.

Для оценивания результатов обучения в ходе текущей и промежуточной аттестации используются следующие показатели:

- 1) знание теоретических основ дисциплины;
- 2) владение современными электрохимическими методами исследования систем, явлений и процессов;
- 3) умение связывать теорию с практикой;
- 4) умение иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований;
- 5) способность находить решения нестандартных научных задач по обсуждаемой проблеме.
- 6) владение математическим аппаратом, применяемым в электрохимии.

Для оценивания результатов обучения на экзамене используется количественная шкала оценивания. Соотношение показателей, критериев и шкалы оценивания результатов обучения.

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
Обучающийся в полной мере владеет теоретическими основами дисциплины, способен иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований, применять теоретические знания для решения практических задач в области электрохимии.	Повышенный уровень	Отлично
Ответ на контрольно-измерительный материал не соответствует одному из перечисленных показателей, но обучающийся дает правильные ответы на дополнительные вопросы. Недостаточно продемонстрировано владение теоретической базой дисциплины. Обучающийся допускает ошибки при определении основных терминов электрохимии, сомневается в выборе электрохимических методов исследования.	Базовый уровень	Хорошо
Ответ на контрольно-измерительный материал не соответствует любым двум из перечисленных показателей, обучающийся дает неполные ответы на дополнительные вопросы. Демонстрирует частичные знания теоретических основ физической химии, имеет не полное представление о методах электрохимических исследований, допускает существенные ошибки при интерпретации экспериментальных результатов и решении практических задач.	Пороговый уровень	Удовлетворительно
Ответ на контрольно-измерительный материал не соответствует любым трем из перечисленных показателей. Обучающийся демонстрирует отрывочные, фрагментарные знания в области электрохимии, допускает грубые ошибки при интерпретации экспериментальных результатов и практических задач.	–	Неудовлетворительно