



Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования

**«Пермский национальный исследовательский
политехнический университет»**

УТВЕРЖДАЮ

Руководитель программы аспирантуры

Л.Д. Аснин
Л.Д. Аснин
к.х.н., доцент кафедры ХБТ

« 20 » « май » 2022 г.

Рабочая программа дисциплины по программе аспирантуры

«Физическая химия»

Научная специальность	1.4.4. Физическая химия
Направленность (профиль) программы аспирантуры	Физическая химия
Выпускающая(ие) кафедра(ы)	Химия и биотехнология
Форма обучения	Очная
Курс: 3	Семестр (ы): 5
Виды контроля с указанием семестра:	
Экзамен: 5	Зачет: Диф.зачет

Пермь 2022

1. Общие положения

Рабочая программа дисциплины «Физическая химия» разработана на основании следующих нормативных документов:

- Приказ Минобрнауки России от 20.10.2021 N 951 "Об утверждении федеральных государственных требований к структуре программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре), условиям их реализации, срокам освоения этих программ с учетом различных форм обучения, образовательных технологий и особенностей отдельных категорий аспирантов (адъюнктов)";
- Постановление Правительства РФ от 30.11.2021 N 2122 "Об утверждении Положения о подготовке научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре)";
- Самостоятельно устанавливаемые требования к реализуемым программам подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре Пермского национального исследовательского политехнического университета;
- Базовый план по программе аспирантуры;
- Паспорт научной специальности.

1.1 Цель учебной дисциплины – формирование комплекса знаний, умений и навыков в области физической химии.

1.2 Место учебной дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Физическая химия» является обязательной дисциплиной образовательного компонента плана аспиранта.

Дисциплина используется при подготовке к сдаче кандидатского экзамена по специальности 1.4.4. – Физическая химия.

Кандидатский экзамен представляют собой форму оценки степени подготовленности соискателя ученой степени кандидата наук к проведению научных исследований по конкретной научной специальности и отрасли науки, по которой подготавливается или подготовлена диссертация.

2. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

В результате изучения дисциплины аспирант должен демонстрировать следующие результаты:

Знать:

- современные достижения науки и передовые технологии в области физической химии;
- современные экспериментальные методы, используемые в физико-химических исследованиях;
- теоретические представления химии, в том числе о строении вещества, механизмах химических реакций и химико-технологических процессов.

Уметь:

- применять современные методы и средства исследования для решения конкретных задач физической химии;
- анализировать взаимосвязь между составом, строением и свойствами веществ, в том числе, наноструктурированных материалов;
- прогнозировать и использовать реакционную способность химических веществ в различных агрегатных состояниях и при различных условиях.

Владеть:

- численными методами решения задач физической химии;

- методами теоретического анализа физико-химических явлений и процессов;
- методами компьютерного моделирования процессов химической технологии.

3. Структура учебной дисциплины по видам и формам учебной работы

Таблица 1

Объем и виды учебной работы

№ п.п.	Вид учебной работы	Трудоемкость, ч
		5 семестр
1	Аудиторная работа	20
	В том числе:	
	Лекции (Л)	5
	Практические занятия (ПЗ)	6
2	Контроль самостоятельной работы (КСР)	36
	Самостоятельная работа (СР)	88
	Форма итогового контроля:	Экзамен

4. Содержание учебной дисциплины

4.1. Содержание разделов и тем учебной дисциплины

Раздел 1. Строение вещества

(Л – 1, ПР - 0, СР – 20)

Тема 1. Теория химического строения молекул и методы анализа строения молекул.

Основные положения классической теории химического строения. Изомерия. Конформации молекул. Связь строения и свойств молекул. Механическая модель молекулы. Потенциалы парных взаимодействий. Методы молекулярной механики и молекулярной динамики при анализе строения молекул.

Тема 2. Квантово-механическое описание молекулярных систем

Общие принципы квантово-механического описания молекулярных систем. Стационарное уравнение Шрёдингера для свободной молекулы. Адиабатическое приближение. Электронное волновое уравнение. Потенциальные кривые и поверхности потенциальной энергии. Их общая структура и различные типы. Равновесные конфигурации молекул. Колебания молекул. Вращение молекул. Электронное строение атомов и молекул. Одноэлектронное приближение. Атомные и молекулярные орбитали. Электронные конфигурации и термы атомов. Электронная плотность. Распределение электронной плотности в двухатомных молекулах. Интерпретация строения молекул на основе орбитальных моделей и исследования распределения электронной плотности. Локализованные молекулярные орбитали. Гибридизация. Электронная корреляция в атомах и молекулах. Представления о зарядах на атомах и порядках связей.

Тема 3. Межмолекулярные взаимодействия.

Основные составляющие межмолекулярных взаимодействий: дисперсионное, электро-ориентационное и электро-индукционное взаимодействие. Молекулярные комплексы. Ван-дер-ваальсовы молекулы. Кластеры атомов и молекул. Водородная связь. Супермолекулы и супрамолекулярная химия.

Тема 4. Строение конденсированных фаз.

Структурная классификация конденсированных фаз. Идеальные кристаллы. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Реальные кристаллы. Типы дефектов в реальных кристаллах. Строение твердых растворов. Упорядоченные твердые

растворы. Аморфные вещества. Металлы и полупроводники. Зонная структура энергетического спектра кристаллов. Различные типы проводимости. Колебания в кристаллах. Фононы. Жидкости. Мгновенная и колебательно усреднённая структура жидкости. Ассоциаты и кластеры в жидкостях. Флуктуации и корреляционные функции. Структура простых жидкостей. Растворы неэлектролитов. Структура воды и водных растворов. Структура жидких электролитов. Мезофазы.

Раздел 2. Химическая термодинамика

(Л – 2, ПР - 2, СР – 28)

Тема 5. Основные понятия и законы термодинамики.

Основные понятия термодинамики: изолированные и открытые системы, равновесные и неравновесные системы, термодинамические переменные, интенсивные и экстенсивные переменные. Уравнения состояния. Теплота. Работа. Энтальпия. Теплоёмкость. Первый закон термодинамики. Второй закон термодинамики. Энтропия. Абсолютная температура. 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. Закон действующих масс. Изотерма Вант-Гоффа. Уравнения изобары и изохоры химической реакции. Расчеты констант равновесия химических реакций. Равновесие в поле внешних сил. Полные потенциалы. Гетерогенные системы: понятия компонента, фазы, степени свободы. Правило фаз Гиббса.

Тема 6. 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 Онзагера. Стационарное состояние системы и теорема Пригожина.

Тема 7. Термодинамика растворов.

Типы 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. Осмотические явления. 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.

Тема 8. Введение в статистическую термодинамику.

Микро- и макросостояния химических систем. Фазовые пространства. Эргодическая гипотеза. Термодинамическая вероятность и её связь с энтропией. Распределение Максвелла – Больцмана. Статистические средние значения макроскопических величин. Ансамбли Гиббса. Микроканоническое и каноническое распределения. 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.

Тема 9. Статистическая термодинамика твёрдого тела.

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.

Раздел 3. Химическая кинетика и катализ

(Л – 0, ПР - 2, СР – 20)

Тема 10. Формальная кинетика химических реакций.

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. 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. 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.

Тема 11. Элементарные химические реакции и фотохимические реакции.

Элементарные акты химических реакций и физический смысл энергии активации. Термический и нетермический 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. Различные типы химических реакций. Мономолекулярные реакции в газах, схема Линдемана–Христиансена. Теория РРKM. 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. Изменение

физических и химических свойств молекул при электронном возбуждении. Квантовый выход. Закон Эйнштейна – Штарка.

Тема 12. Катализ

Понятие о катализе. Теория промежуточных соединений в катализе, принцип энергетического соответствия. Гомогенный катализ. Кислотно-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. Катализ металлокомплексными соединениями. Ферментативный катализ. Адсорбционные и каталитические центры ферментов. Активность и субстратная селективность ферментов. Коферменты. Механизмы ферментативного катализа.

Раздел 4. Электрохимия

(Л – 2, ПР - 2, СР – 20)

Тема 13. Физическая химия растворов электролитов.

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. Электропроводность растворов электролитов; удельная и эквивалентная электропроводность. Числа переноса, подвижность ионов и закон Кольрауша. Электрофоретический и релаксационные эффекты.

Тема 14. Равновесные электродные процессы.

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.

Тема 15. Электрохимическая кинетика.

Электрохимические реакции. Двойной электрический слой. Модельные представления о структуре двойного электрического слоя. Теория Гуи – Чапмена – Грэма. Электрокапллярные явления, уравнение Липпмана. Скорость и стадии электродного процесса. Поляризация электродов. Ток обмена и перенапряжение. Зависимость скорости стадии разряда от строения двойного слоя. Химические источники тока, их виды. Электрохимическая коррозия. Методы защиты от коррозии.

4.2. Перечень тем практических занятий

Таблица 2

Темы практических занятий (из пункта 4.1)

№ п.п.	Номер темы дисциплины	Наименование темы практического занятия	Наименование оценочного средства	Представление оценочного средства
1	5	Практическое применение уравнение Вант-Гоффа при изучении термодинамики физико-химических процессов	Собеседование. Творческое задание.	Вопросы по темам / разделам дисциплины. Темы творческих

				заданий.
2	10	Кинетика контактных процессов	Собеседование. Творческое задание.	Вопросы по темам / разделам дисциплины. Темы творческих заданий.
3	13	Коэффициенты активности в растворах электролитов	Собеседование. Творческое задание.	Вопросы по темам / разделам дисциплины. Темы творческих заданий.

4.3. Перечень тем для самостоятельной работы аспирантов

Самостоятельная работа аспирантов заключается в теоретическом изучении конкретных вопросов и выполнении творческих заданий.

Таблица 3

Темы самостоятельных заданий

№ п.п.	Номер темы дисциплины	Наименование темы самостоятельной работы	Наименование оценочного средства	Представление оценочного средства
1	1	Основные положения классической теории химического строения. Конформации молекул. Связь строения и свойств молекул. Механическая модель молекулы. Потенциалы парных взаимодействий.	Собеседование	Вопросы по темам / разделам дисциплины
2	2	Общие принципы квантово-механического описания молекулярных систем. Стационарное уравнение Шрёдингера для свободной молекулы. Адиабатическое приближение. Электронное волновое уравнение. Потенциальные кривые и поверхности потенциальной энергии. Их общая структура и различные типы. Равновесные конфигурации молекул. Колебания молекул. Вращение молекул. Электронное строение атомов и молекул. Одноэлектронное приближение. Атомные и молекулярные орбитали. Электронные конфигурации и термы атомов. Электронная плотность. Распределение электронной плотности в двухатомных молекулах.	Собеседование	Вопросы по темам / разделам дисциплины

		Интерпретация строения молекул на основе орбитальных моделей и исследования распределения электронной плотности. Локализованные молекулярные орбитали. Гибридизация. Электронная корреляция в атомах и молекулах. Представления о зарядах на атомах и порядках связей.		
3	3	Дисперсионное, электро-ориентационное и электро-индукционное межмолекулярные взаимодействия. Молекулярные комплексы. Ван-дер-ваальсовы молекулы. Кластеры атомов и молекул. Водородная связь. Супермолекулы и супрамолекулярная химия.	Собеседование	Вопросы по темам / разделам дисциплины
4	4	Структурная классификация конденсированных фаз. Идеальные кристаллы. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Реальные кристаллы. Типы дефектов в реальных кристаллах. Строение твердых растворов. Упорядоченные твердые растворы. Аморфные вещества. Металлы и полупроводники. Зонная структура энергетического спектра кристаллов. Различные типы проводимости. Колебания в кристаллах. Фононы. Жидкости. Мгновенная и колебательно усреднённая структура жидкости. Ассоциаты и кластеры в жидкостях. Флуктуации и корреляционные функции. Структура простых жидкостей. Растворы неэлектролитов. Структура воды и водных растворов. Структура жидких электролитов. Мезофазы.	Творческое задание	Темы творческих заданий
5	5	Основные понятия	Творческое	Темы творческих

		<p>термодинамики. Уравнения состояния. Теплота. Работа. Энтальпия. Теплоёмкость. Первый закон термодинамики. Второй закон термодинамики. Энтропия. Абсолютная температура.</p> <p>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. Закон действующих масс. Изотерма Вант-Гоффа. Уравнения изобары и изохоры химической реакции. Расчеты констант равновесия химических реакций. Равновесие в поле внешних сил. Полные потенциалы. Гетерогенные системы: понятия компонента, фазы, степени свободы. Правило фаз Гиббса.</p>	задание	заданий
6	6	<p>Основные положения термодинамики неравновесных процессов. Локальное равновесие. Флуктуации. Функция диссипации. Потоки и силы. Скорость производства энтропии. Зависимость скорости производства энтропии от обобщенных потоков и сил. Соотношения взаимности Онзагера. Стационарное состояние системы и теорема Пригожина.</p>	Собеседование	Вопросы по темам / разделам дисциплины
7	7	<p>Типы растворов. Идеальные растворы, общее условие идеальности растворов. Давление насыщенного пара жидких растворов, закон Рауля. Неидеальные растворы и их свойства. Метод активностей. Коэффициенты</p>	Собеседование	Вопросы по темам / разделам дисциплины

		<p>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. Осмотические явления. Парциальные молярные величины, их определение для бинарных систем. Уравнение Гиббса–Дюгема. Функция смешения для идеальных и неидеальных растворов. Предельно разбавленные растворы, атермальные и регулярные растворы, их свойства.</p>		
8	8	<p>Ансамбли Гиббса. Микроканоническое и каноническое распределения. Каноническая функция распределения Гиббса. 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.</p>	Собеседование	Вопросы по темам / разделам дисциплины

		Статистическая термодинамика реальных систем. Потенциалы межмолекулярного взаимодействия и конфигурационный интеграл для реального газа.		
9	9	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.	Собеседование	Вопросы по темам / разделам дисциплины
10	10	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. 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. Цепные реакции. Кинетика неразветвленных и разветвленных цепных	Собеседование	Вопросы по темам / разделам дисциплины

		<p>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.</p>		
11	11	<p>Элементарные акты химических реакций и физический смысл энергии активации. Термический и нетермические пути активации молекул. Обмен энергией 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. Поверхность потенциальной энергии. Путь и координата реакции. Статистический расчет константы скорости. Энергия и энтропия активации. Использование молекулярных постоянных при расчете константы скорости. 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</p>	Собеседование	Вопросы по темам / разделам дисциплины

		реакции. Изменение физических и химических свойств молекул при электронном возбуждении. Квантовый выход. Закон Эйнштейна – Штарка.		
12	12	<p>Понятие о катализе. Теория промежуточных соединений в катализе, принцип энергетического соответствия. Гомогенный катализ. Кислотно-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. Катализ металлокомплексными соединениями. Ферментативный катализ. Адсорбционные и каталитические центры ферментов. Активность и субстратная селективность ферментов. Коферменты. Механизмы ферментативного катализа.</p>	Собеседование	Вопросы по темам / разделам дисциплины
13	13	<p>Растворы электролитов. Ион-дипольное взаимодействие, как основной процесс, определяющий устойчивость растворов электролитов. Коэффициенты активности в растворах электролитов. Основные положения теории Дебая – Хюккеля. Потенциал ионной атмосферы. Электропроводность растворов электролитов; удельная и эквивалентная электропроводность. Числа переноса, подвижность ионов</p>	Собеседование	Вопросы по темам / разделам дисциплины

		и закон Кольрауша. Электрофоретический и релаксационные эффекты.		
14	14	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.	Собеседование	Вопросы по темам / разделам дисциплины
15	15	Электрохимические реакции. Двойной электрический слой. Модельные представления о структуре двойного электрического слоя. Теория Гуи – Чапмена – Грэма. Электрокапллярные явления, уравнение Липпмана. Скорость и стадии электродного процесса. Поляризация электродов. Ток обмена и перенапряжение. Зависимость скорости стадии разряда от строения двойного слоя. Химические источники тока, их виды. Электрохимическая коррозия. Методы защиты от коррозии.	Собеседование	Вопросы по темам / разделам дисциплины

5. Методические указания для аспирантов по изучению дисциплины

При изучении дисциплины «Физическая химия» аспирантам целесообразно выполнять следующие рекомендации:

1. Изучение учебной дисциплины должно вестись систематически;
2. После изучения какого-либо раздела по учебнику или конспектным материалам рекомендуется по памяти воспроизвести основные термины, определения, понятия раздела;
3. Вся тематика вопросов, изучаемых самостоятельно, задается преподавателем. Им же даются источники (в первую очередь вновь изданные в периодической научной литературе) для более детального понимания вопросов, озвученных на лекции;

6. Перечень учебно-методического, библиотечно-справочного и информационного, информационно-справочного обеспечения для работы аспиранта по дисциплине

6.1. Библиотечные фонды и библиотечно-справочные системы

№	Библиографическое описание (автор, заглавие, вид издания, место, издательство, год издания, количество страниц)	Количество экземпляров в библиотеке+кафедре; местонахождение электронных изданий
1	2	3
1 Основная литература		
1	Попова А.А. Физическая химия: учебное пособие / А.А. Попова, Т.Б. Попова. - Санкт-Петербург: Лань, 2015. - 494 с.	1 + ЭБС «Лань»
2	Пармон В.Н. Термодинамика неравновесных процессов для химиков с приложением к химической кинетике, катализу, материаловедению и биологии: учебное пособие для вузов / В. Н. Пармон. - Долгопрудный: Интеллект, 2015. - 471 с.	2
3	Чоркендорф И. Современный катализ и химическая кинетика: учебное пособие для вузов: пер. с англ. / И. Чоркендорф, Х. Наймантсведрайт. - 2-е изд. - Долгопрудный: Интеллект, 2013. - 501 с.	8
4	Морачевский А.Г. Физическая химия. Гетерогенные системы: учебное пособие для вузов / А.Г. Морачевский, Е.Г. Фирсова. - 2-е изд., стер. - Санкт-Петербург [и др.]: Лань, 2015. - 184 с.	2 + ЭБС «Лань»
5	Теоретическая электрохимия : учебник для вузов / А. Л. Ротинян [и др.].- 2-е изд., перераб. и доп. - Москва: Студент, 2013. - 496 с.	2
2 Дополнительная литература		
2.1 Учебные и научные издания		
1	Нигматуллин Н.Г. Физическая и коллоидная химия [Электронный ресурс]: учебное пособие. - Электрон. дан. - СПб.: Лань, 2015. - 276 с. - Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=67473 , по IP-адресам компьютер. сети ПНИПУ	ЭБС «Лань»
2	Буданов В.В. Химическая кинетика: учебное пособие для вузов /В.В. Буданов, Т.Н. Ломова, В.В. Рыбкин. - Санкт-Петербург[и др.]: Лань, 2014. - 283 с.	1 + ЭБС «Лань»
3	Морачевский А.Г. Физическая химия. Термодинамика химических реакций [Электронный ресурс]: учебное пособие / А.Г. Морачевский, Е.Г. Фирсова. - Электрон. дан. - СПб.: Лань, 2015. - 101 с. - Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=64336 , по IP-адресам компьютер. сети ПНИПУ	ЭБС «Лань»
4	Афанасьев Б.Н. Физическая химия [Электронный ресурс] : учебное пособие / Б.Н. Афанасьев, Ю.П. Акулова. - Электрон. дан. - СПб.: Лань, 2012. - 464 с. - Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=4312 , по IP-адресам компьютер. сети ПНИПУ	ЭБС «Лань»
2.2 Периодические издания		
1	Журнал физической химии	

№	Библиографическое описание (автор, заглавие, вид издания, место, издательство, год издания, количество страниц)	Количество экземпляров в библиотеке+кафедре; местонахождение электронных изданий
1	2	3
2	Кинетика и катализ	
2.3 Нормативно-технические издания		
	-	
2.4 Официальные издания		
	-	

6.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

6.2.1. Информационные и информационно-справочные системы

1. Электронная библиотека Пермского национального исследовательского политехнического университета [Электронный ресурс] : [полнотекстовая база данных электрон. док., издан. в Изд-ве ПНИПУ] / Перм. нац. исслед. политехн. ун-т, Науч. б-ка. – Пермь, 2016. – Режим доступа: <http://elib.pstu.ru>, свободный. – Загл. с экрана.

2. Электронно-библиотечная система Издательство «Лань» [Электронный ресурс] : [полнотекстовая база данных : электрон. версии кн., журн. по гуманит., обществ., естеств. и техн. наукам] / Электрон.-библ. система «Изд-ва «Лань». – Санкт-Петербург, 2010-2016. – Режим доступа: <http://e.lanbook.com>, по IP-адресам компьютер. сети Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. – Загл. с экрана.

3. Электронная библиотека диссертаций РГБ [Электронный ресурс] : [полнотекстовая база данных : электрон. версии дис. и автореф. дис. по всем отраслям знания] / Электрон. б-ка дис. – Москва, 2003-2016. – Режим доступа: <http://diss.rsl.ru>, компьютер. сеть Науч. б-ки Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. – Загл. с экрана.

4. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU [Электронный ресурс] : [полнотекстовая база данных : мультидисциплинар. электрон. версии журн. на ин. яз.] / Науч. электрон. б-ка. – Москва, 2000-2016. – Режим доступа: <http://elibrary.ru>, по IP-адресам компьютер. сети Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. – Загл. с экрана.

5. Национальна Электронная Библиотека [Электронный ресурс] : [полнотекстовая база данных : электрон. версии кн. по всем отраслям знания] / М-во культуры Рос. Федерации. – [Москва, 2016]. – Режим доступа: <http://нэб.рф>, компьютер. сеть Науч. б-ки Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. – Загл. с экрана.

6. Электронно-библиотечная система Библиокомплектатор [Электронный ресурс] : [платформа и полнотекстовая база данных : электрон. версии кн., журн. по гуманит., обществ., естеств. и техн. наукам] / Ай Пи Эр Медиа, Ай Пи Ар Букс. – [Саратов, 2016]. – Режим доступа: <http://www.bibliocomplectator.ru>, по IP-адресам компьютер. сети Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. – Загл. с экрана.

7. ScienceDirect [Электронный ресурс] : [полнотекстовая база данных : электрон. науч. журн. и кн. по обществ., естеств. и техн. наукам на англ. яз.] / Elsevier B. V. –

Amsterdam, 2016. – Режим доступа: <http://www.sciencedirect.com>, по IP-адресам компьютер. сети Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. – Загл. с экрана.

8. ACS Publications [Электронный ресурс] : [полнотекстовая база данных : электрон. журн. по хим. наукам на англ. яз.] / American Chemical Society (ACS). – Washington, 2016. – Режим доступа: <http://www.pubs.acs.org>, по IP-адресам компьютер. сети Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. – Загл. с экрана.

9. Springer [Электронный ресурс] : [полнотекстовая база данных : электрон. журн., кн. по гуманит., обществ., естеств. и техн. наукам, протоколы исследований на англ. и нем. яз.] / Springer International Publishing AG, Part of Springer Science+Business Media. – Cham, 2016. – Режим доступа: <http://link.springer.com>, по IP-адресам компьютер. сети Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. – Загл. с экрана.

10. Wiley Online Library [Электронный ресурс] : [полнотекстовая база данных : электрон. мультидисциплинар. журн. на англ. яз.] / John Wiley & Sons, Inc. – Hoboken, 1999-2016. – Режим доступа: <http://www.onlinelibrary.wiley.com>, по IP-адресам компьютер. сети Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. – Загл. с экрана.

11. EBSCO Databases [Электронный ресурс] : [полнотекстовые базы данных журн. и кн. по гуманит., обществ., естеств. и техн. наукам на ин. яз.] / EBSCO Publishing. – Ipswich, 2016. – Режим доступа: <http://search.ebscohost.com>, по IP-адресам компьютер. сети Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. – Загл. с экрана.

12. SAGE Journals [Электронный ресурс] : [полнотекстовая база данных : электрон. мультидисциплинар. журн. на англ. яз.] / SAGE Publications. – Los Angeles, 2016. – Режим доступа: <http://online.sagepub.com>, по IP-адресам компьютер. сети Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. – Загл. с экрана.

13. Taylor & Francis Online [Электронный ресурс] : [полнотекстовая база данных : электрон. мультидисциплинар. журн. на англ. яз.] / Informa UK Ltd. – London, 2016. – Режим доступа: <http://www.tandfonline.com>, по IP-адресам компьютер. сети Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. – Загл. с экрана.

14. JSTOR: Arts & Sciences VII Collection [Электронный ресурс] : [полнотекстовая база данных : электрон. журн. по гуманит., обществ. и естеств. наукам на англ. яз.] / ИТНАКА. – New York, 2000-2016. – Режим доступа: <http://www.jstor.org>, по IP-адресам компьютер. сети Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. – Загл. с экрана.

15. Cambridge Journals [Electronic resource : полнотекстовая база данных : электрон. журн. по гуманит., естеств., и техн. наукам на англ. яз.] / University of Cambridge. – Cambridge : Cambridge University Press, 1770-2012. – Режим доступа: <http://journals.cambridge.org/>. – Загл. с экрана. 11.

16. ProQuest Dissertations & Theses Global [Электронный ресурс] : [полнотекстовая база данных : дис. и дипломные работы на ин. яз. по всем отраслям знания] / ProQuest LLC. – Ann Arbor, 2016. – Режим доступа: <http://search.proquest.com/pqdtglobal/dissertations>, по IP-адресам компьютер. сети Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. – Загл. с экрана.

17. Oxford University Press. Journals [Электронный ресурс] : [полнотекстовая база данных : электрон. мультидисциплинар. журн. на англ. яз.] / Oxford University Press. – Oxford, 2015. – Режим доступа: <http://www.oxfordjournals.org>, по IP-адресам компьютер. сети Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. – Загл. с экрана.

7. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

7.1. Основное учебное оборудование. Рабочее место аспиранта.

Таблица 4

№ п.п.	Наименование и марка оборудования (стенда, макета, плаката, лабораторное оборудование)	Кол-во, ед.	Форма приобретения / владения (собственность, оперативное управление, аренда и т.п.)	Номер аудитории
1	2	3	4	5
1	Персональные компьютеры (локальная компьютерная сеть)	5	Оперативное управление	215, корпус Б (ХТФ)

8. Фонд оценочных средств

Освоение учебного материала дисциплины запланировано в течение одного семестра. Формой контроля освоения результатов обучения по дисциплине является кандидатский экзамен, проводимый с учетом результатов текущего контроля.

8.1. Описание показателей и критериев оценивания, описание шкал оценивания.

Контроль качества освоения дисциплины включает в себя текущий контроль успеваемости и промежуточную аттестацию аспирантов

Текущий контроль

Текущий контроль успеваемости обеспечивает оценку освоения дисциплин и проводится в форме собеседования и защиты отчета о творческом задании.

• Собеседование

Для оценки **знаний** аспирантов проводится собеседование в виде специальной беседы преподавателя с обучающимся на темы, связанные с изучаемой дисциплиной для выяснения объема знаний по определенному разделу, теме, проблеме.

Собеседование может выполняться в индивидуальном порядке или группой аспирантов.

• Защита отчета о творческом задании

Для оценки **умений и владений** аспирантов используется творческое задание, имеющее нестандартное решение и позволяющее интегрировать знания различных областей, аргументировать собственную точку зрения.

Творческие задания могут выполняться в индивидуальном порядке или группой аспирантов.

Промежуточная аттестация

Допуск к промежуточной аттестации осуществляется по результатам текущего контроля. Промежуточная аттестация проводится в виде экзамена по дисциплине, в устно-письменной форме по билетам. Билет содержит теоретические вопросы (ТВ) и практическое задание (ПЗ).

Билет формируется таким образом, чтобы в него попали вопросы и практические задания. Пример билета представлен в приложении 1.

• **Шкалы оценивания результатов обучения при сдаче экзамена:**

Оценка результатов обучения по дисциплине проводится по 5-балльной системе оценивания путем выборочного контроля во время экзамена.

Шкалы и критерии оценки результатов обучения при сдаче экзамена приведены в табл. 5.

Таблица 5

Шкала оценивания результатов освоения на экзамене

Оценка	Критерии оценивания
5	<p>Аспирант продемонстрировал сформированные и систематические знания при ответе на теоретический вопрос билета. Показал отличные знания в рамках усвоенного учебного материала. Ответил на все или большинство дополнительных вопросов.</p> <p>Аспирант правильно выполнил контрольное задание билета. Показал успешное и систематическое применение полученных знаний и умений при решении профессиональных задач в рамках усвоенного учебного материала. Ответил на все или большинство дополнительных вопросов.</p>
4	<p>Аспирант продемонстрировал сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания при ответе на теоретический вопрос билета. Показал недостаточно уверенные знания в рамках усвоенного учебного материала. Ответил на большинство дополнительных вопросов.</p> <p>Аспирант выполнил контрольное задание билета с небольшими неточностями. Показал в целом успешное, но сопровождающееся отдельными ошибками применение навыков полученных знаний и умений при решении профессиональных задач в рамках усвоенного учебного материала. Ответил на большинство дополнительных вопросов.</p>
3	<p>Аспирант продемонстрировал неполные знания при ответе на теоретический вопрос билета с существенными неточностями. Показал неуверенные знания в рамках усвоенного учебного материала. При ответах на дополнительные вопросы было допущено много неточностей.</p> <p>Аспирант выполнил контрольное задание билета с существенными неточностями. Показал в целом успешное, но не систематическое применение полученных знаний и умений при решении профессиональных задач в рамках усвоенного учебного материала. При ответах на дополнительные вопросы было допущено много неточностей.</p>
2	<p>При ответе на теоретический вопрос билета аспирант продемонстрировал фрагментарные знания при ответе на теоретический вопрос билета. При ответах на дополнительные вопросы было допущено множество неправильных ответов.</p> <p>При выполнении контрольного задания билета аспирант продемонстрировал частично усвоенное умение и применение полученных навыков при решении профессиональных задач в рамках усвоенного учебного материала. При ответах на дополнительные вопросы было допущено множество неточностей.</p>

9. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине

Задания для текущего контроля и проведения промежуточной аттестации должны быть направлены на оценивание:

1. уровня освоения теоретических понятий, научных основ профессиональной деятельности;
2. степени готовности аспиранта применять теоретические знания и профессионально значимую информацию и оценивание сформированности когнитивных умений.
3. приобретенных умений, профессионально значимых для профессиональной

деятельности.

10. Типовые контрольные вопросы и задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов освоения дисциплины

Перечень контрольных вопросов и заданий для сдачи кандидатского экзамена по научной специальности 2.3.3. «Физическая химия» разработан с учетом научных достижений научно-исследовательской школы кафедры.

Типовые творческие задания:

1. На основе анализа данных из научных периодических источников обобщить информацию о различных моделях силовых полей, используемых в методе молекулярной динамики и предложить конкретную модель для оптимизации геометрии олигопептида с числом мономеров до 10.
2. Предложить не менее двух способов оценки теплового эффекта диссоциации слабой кислоты (указывается преподавателем) на основании доступных литературных данных.
3. Известно, что давление тем сильнее влияет на константу химического равновесия, чем больше размер молекулы. Объясните это явление, используя уравнения термодинамики.

Типовые контрольные задания:

1. Найдите в доступной научной литературе эмпирические данные о зависимости давления насыщенного пара хлорбензола от температуры. Аппроксимируйте эту зависимость уравнениями Клапейрона–Клаузиуса и Антуана. Сделайте вывод о применимости указанных уравнений. Оцените теплоту испарения.
2. Найдите в доступной научной литературе необходимые термодинамические данные для расчета энтропии бензола в газообразном и жидком состоянии при температуре 40°C. Выполните необходимые расчеты и определите энтропию испарения при указанной температуре.
3. Укажите недостатки теории мономолекулярных реакций Хиншельвуда-Линдемана. Предложите способы преодоления этих недостатков. Какие последующие теории мономолекулярных реакций основываются на модели Хиншельвуда-Линдемана.

Полный комплект вопросов и заданий в форме утвержденных билетов хранится на кафедре «ХБТ».

Программа
Физическая химия

Кафедра
Химия и биотехнология

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФГАОУ ВО «Пермский национальный
исследовательский политехнический
университет» (ПНИПУ)

«Физическая химия»

БИЛЕТ № 1

1. Основные понятия термодинамики: изолированные и открытые системы, равновесные и неравновесные системы, термодинамические переменные, температура, интенсивные и экстенсивные переменные. (*контроль знаний*).
2. На основании структурной формулы этил-пропилового эфира определите его плотность, используя метод инкрементов. (*контроль умений*).
3. При изучении адсорбции хлорбензола на оксиде алюминия в диапазоне температур 190 – 299°C были получены следующие значения логарифма давления пара адсорбата при постоянной величине адсорбции 2.1 мкмоль/г

$T, ^\circ\text{C}$	190	200	220	240	260	299
$\ln p$	-1.1138	-0.7503	-0.1183	0.4323	0.9286	1.7534

Заведующий кафедрой _____
(подпись)

Фамилия И.О.

« ____ » _____ 202 ____ г.

Лист регистрации изменений

№ п.п.	Содержание изменения	Дата, номер протокола заседания кафедры. Подпись заведующего кафедрой
1	2	3
1		
2		
3		
4		