

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО:

И.о. декана

А. С. Князев

Рабочая программа дисциплины

Физическая химия. Модуль 2

по направлению подготовки

04.03.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки:
Аналитическая химия (Analytical chemistry)

Форма обучения

Очная

Квалификация

Бакалавр

Год приема

2022

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

Ю.Г. Слизов

Председатель УМК

В.В. Шелковников

Томск – 2025

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ОПК-1 Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений.

ОПК-2 Способен проводить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их участием.

ПК-2 Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-исследовательские работы.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК 1.1 Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов.

ИОПК 1.2 Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии.

ИОПК 1.3 Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности.

ИОПК 2.1 Работает с химическими веществами с соблюдением норм техники безопасности.

ИОПК 2.4 Проводит исследования свойств веществ и материалов с использованием серийного научного оборудования.

ИПК 2.1 Проводит первичный поиск информации по заданной тематике (в т.ч., с использованием патентных баз данных).

ИПК 2.2 Составляет обзор литературных источников по заданной теме, оформляет отчеты о выполненной работе по заданной форме.

2. Задачи освоения дисциплины

– Получить базовые знания теоретических законов формальной кинетики, катализа, особенностей кинетики гомогенных и гетерогенных реакций, теоретических основ электрохимии, взаимодействия в растворах неэлектролитов и электролитов в равновесных и неравновесных условиях.

– Освоить понятийный аппарат физической химии и научиться применять понятийный аппарат к решению практических задач. Получить навыки решения типовых задач по всем разделам физической химии и применения законов физической химии при решении конкретных экспериментальных задач.

– Получить понимание роли физической химии как теоретического фундамента современной теоретической и экспериментальной химии.

– Научиться применять навыки планирования и проведения экспериментов, анализировать полученные результаты, делать выводы.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплины (модули)».

Дисциплина относится к обязательной части образовательной программы.

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Четвертый семестр, экзамен

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: Неорганическая химия, Квантовая химия, Органическая химия, Строение вещества, Аналитическая химия, Математический анализ, Физика, Информатика, Линейная алгебра и аналитическая геометрия.

6. Язык реализации

Английский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 8 з.е., 288 часов, из которых:

-лекции: 64 ч.

-лабораторные: 64 ч.

-практические занятия: 32 ч.

в том числе практическая подготовка: 96 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Раздел 1. Формальная кинетика.

Тема 1.1 Основные понятия химической кинетики. Кинетическое уравнение. Механизм реакции, элементарная реакция, молекулярность элементарных стадий. Скорость простых химических реакций, кинетические кривые. Кинетическое уравнение. Главный постулат химической кинетики: константа скорости, порядок реакции. Скорость сложной химической реакции: принцип лимитирующей стадии, понятие кажущейся (экспериментальной) константы скорости реакции. Прямая и обратная задачи химической кинетики.

Тема 1.2 Кинетика химических реакций в статических условиях.

Реакции 1-го порядка, интегральное уравнение константы скорости, период полупревращения. Реакции 2-го порядка: односубстратная реакция, бисубстратная реакция (при равенстве и различии начальных концентраций реагентов). Реакции нулевого и n-ного порядков.

Тема 1.3 Методы определения порядка химической реакции.

Интегральный и дифференциальный методы. Методы интегральные (аналитический и графический подбор, по периоду полураспада). Дифференциальные методы (графический). Метод начальных скоростей реакций. Метод изолирования Оствальда (определение частных порядков реакций).

Тема 1.4 Кинетика сложных химических реакций.

Основные признаки сложных реакций. Кинетика обратимых реакций на примере реакции 1-го порядка. Кинетика параллельных реакций. Кинетика последовательных реакций: влияние соотношения констант скорости последовательных стадий на ход кинетических кривых. Метод квазистационарного приближения Боденштейна.

Раздел 2. Теории химической кинетики.

Тема 2.1 Влияние температуры на скорость химических реакций

Правило Вант-Гоффа. Основные положения теории Аррениуса. Уравнение Аррениуса, его формы. Связь между энергией активации и тепловым эффектом реакции. Понятие истинной и кажущейся (опытной) энергии активации. Способы определения опытной энергии активации и ее связь с энергиями активации элементарных процессов.

Тема 2.2 Теория соударений (ТС).

Основные положения. Понятие среднего объема сферы и числа столкновений. Учет сил притяжения и отталкивания (понятие эффективного диаметра столкновений). Причины

отклонения теоретических значений константы скорости от экспериментальных (стерический фактор). Распределение Мэлвина-Хьюза. Недостатки ТС.

Тема 2.3 Теория активированного комплекса (ТАК).

Использование адиабатического приближения для описания химической реакции частиц: поверхность потенциальной энергии, путь реакции, энергия активации. Уравнение Лондона. Полуэмпирическая формула Морса. Понятие координаты реакции. Задачи, решаемые при построении поверхности потенциальной энергии.

Теория активированного комплекса (ТАК): Вывод основного уравнения. Основные положения: понятие адиабатного элементарного акта. Скорость перехода активированного комплекса через потенциальный барьер. Уравнение Эйринга. Понятие трансмиссионного коэффициента.

Термодинамический аспект ТАК. Связь между константой равновесия и изменением энергии Гиббса. Выражение константы скорости реакции через термодинамические функции. Физический смысл стерического множителя.

Тема 2.4 Расчет степеней свободы для многоатомной молекулы.

Типы бимолекулярных реакций. Взаимодействие 2-х атомов: сопоставление ТАК и ТС. Многоатомные молекулы: второе определение стерического множителя.

Тема 2.5 Мономолекулярные реакции. Схема Линдемана.

Анализ кинетического уравнения. Влияние добавок (инертного газа или продуктов) на скорость мономолекулярной реакции. Мономолекулярные реакции в ТАК (анализ уравнения Эйринга). Мономолекулярные реакции в ТС. Причины наблюдаемых отклонений. Теория Хиншельвуда. Понятие эффективного числа независимых осцилляторов.

Тема 2.6 Тримолекулярные реакции.

Влияние температуры на скорость тримолекулярных реакций. Схема Траутца. Потенциальный барьер тримолекулярной реакции. Тримолекулярные реакции с позиций ТАК и ТС. Сравнение ТАК и ТС. Анализ достоинств и недостатков.

Раздел 3. Электрическая проводимость растворов электролитов.

Тема 3.1 Проводники I и II рода. Растворы электролитов и электропроводность.

Причины устойчивости ионов в растворах электролитов. Энергии кристаллической решетки и сольватации ионов. Теория электролитической диссоциации (ЭД). Экспериментальные факты, способствовавшие появлению теории. Основные положения теории Аррениуса (степень диссоциации, константа диссоциации, изотонический коэффициент (i)). Недостатки классической теории ЭД. Приложения теории ЭД, термохимическое равновесие, K_w , pH и др.). Причины электролитической диссоциации: ионофоры и ионогены, распределение ионов в растворе.

Тема 3.2 Активность. Средний ионный коэффициент активности.

Сильные и слабые электролиты. Правило ионной силы Льюиса и Рендала. Распределение ионов в растворе по Аррениусу и Гхошу.

Тема 3.3 Электростатическая теория сильных электролитов (Теория Дебая-Гюккеля).

Модель раствора (физическая сущность теории, ионная атмосфера). Основные положения теории Дебая-Гюккеля. Теоретический расчет коэффициента активности на основании теории Дебая-Гюккеля. Преимущества предельного закона Дебая. Причины ограниченной применимости предельного закона Дебая. Умеренно-концентрированные и концентрированные растворы (II и III приближения теории Дебая-Гюккеля). Ионная ассоциация в растворах электролитов.

Тема 3.4 Неравновесные явления в растворах электролитов.

Электропроводность электролитов. Удельная и эквивалентная электропроводность. Влияние концентрации на электропроводность. Формула Кольрауша. Связь между подвижностью ионов и их концентрацией. Электрофоретический и релаксационный

эффекты. Эффекты Вина и Дебая-Фалькенгагена. Уравнение Онзагера. Методика определения электропроводности (самостоятельно). Подвижность ионов. Закон Кольрауша. Аномальная подвижность H^+ и OH^- : теория Бернала и Фаулера. Электрическая проводимость неводных растворов.

Тема 3.5 Числа переноса.

Схема Гитторфа. Методы определения чисел переноса: метод Гитторфа, метод движущейся границы.

Раздел 4. Электродвижущие силы

Тема 4.1 Равновесные свойства межфазных заряженных границ.

Возникновение скачка потенциала на границе раздела фаз. Двойной электрический слой. Потенциал нулевого заряда. Адсорбция как причина образования ДЭС.

Тема 4.2 Строение границы раздела «электрод-раствор»: модель Гельмгольца, строение ДЭС в отсутствии и присутствии специфической адсорбции. Причины возникновения двойного электрического слоя. Гальванический элемент. Обратимые и необратимые гальванические элементы. Гальвани- и вольта-потенциалы. Электродвижущая сила: I и II законы Вольта. Методика определения ЭДС.

Тема 4.3 Уравнение Нернста. Типы электродов и гальванических цепей. Диффузионный потенциал. Расчет диффузионного потенциала. Цепи с переносом и без переноса. Термодинамика электрохимического элемента.

Раздел 5. Катализ.

Тема 5.1 Классификация катализаторов и каталитических процессов.

Роль катализа в промышленности. Основные характеристики катализаторов: активность, селективность.

Тема 5.2 Кинетика гомогенных каталитических реакций.

Снижение энергии активации при каталитических процессах. Стадийная и ассоциативная схемы катализа.

Тема 5.3 Кислотно-основной катализ.

Дуалистическая теория кислотно-основного катализа. Каталитическая активность и сила кислот и оснований. Уравнение Бренстеда. Катализ апротонными кислотами. Вторичный солевой эффект.

Тема 5.4 Отравление и регенерация катализаторов.

Классификация ядов по Мэкстеду. Теория отравления катализаторов. Положительная роль ядов (избирательное отравление).

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем выполнения 5 домашних заданий, 2 отчетов о проведенных лабораторных работах и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

Домашние задания и отчеты лабораторных работ оцениваются по 100 бальной шкале. Средняя оценка за все выполненные работы учитывается в промежуточной аттестации. Средняя оценка считается как среднее арифметическое: суммарный рейтинг по текущему контролю/7.

Форма контроля	Максимальное количество баллов	Средняя оценка
Домашнее задание	500	100
Отчеты лабораторных работ	200	100
Суммарный рейтинг по текущему контролю	700	100

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Экзамен в четвертом семестре проводится в письменной форме в виде теста. Тест содержит 16 теоретических вопросов и 3 задачи. Время, отведенное для прохождения теста и решения задач студентом, составляет 90 минут.

Первая часть экзамена содержит 16 теоретических вопросов с вариантами ответа, по разным темам курса, проверяющих знание основных законов и закономерностей физической химии и областей их применения и достижение ИОПК 1.1, ИОПК 2.2.

Вторая часть содержит 3 задачи, проверяющих ИОПК 1.1; ИОПК 1.2; ИОПК 1.3; ИОПК 2.1; ИОПК 2.4; ИОПК 2.2. Ответ на вторую часть предполагает решение задач, студент представляет только ответ в виде числа.

Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» - <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle»:

семестр 4: <https://lms.tsu.ru/course/view.php?id=32869>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

в) Планы практических занятий по дисциплине.

г) Методические указания по проведению лабораторных работ.

д) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

– Peter Atkins, Julio de Paula Physical Chemistry / Publisher Oxford University Press, 2018. – 1085 с.

– Bagotsky, V. S. (Vladimir Sergeevich) Fundamentals of electrochemistry / V.S. Bagotsky. – Wiley, 2006. – 720 с.

– El Seoud O. A., Baader W. J., Bastos E. L. Practical chemical kinetics in solution / Encyclopedia of physical organic chemistry. – 2016. – С. 1-68.

б) дополнительная литература:

– Murzin D. Y., Salmi T. Catalytic kinetics. – Elsevier, 2005.

– Bockris J. O. M., Reddy A. K. N. Modern electrochemistry 2B: electrochemistry in chemistry, engineering, biology and environmental science. – Springer Science & Business Media, 1998.

в) ресурсы сети Интернет:

– открытые онлайн-курсы

– Официальный сайт химического факультета Московского государственного университета <http://www.chem.msu.ru>

– Официальный сайт Национального исследовательского технологического университета "МИСиС" <http://www.misis.ru>

– Официальный сайт Новосибирского государственного университета <http://www.nsu.ru/xmlui/handle/nsu/6559>

13. Перечень информационных технологий

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

- Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);
- публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).

б) информационные справочные системы:

- Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>
- Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>
- ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>
- ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>
- Образовательная платформа ЮПайт – <https://urait.ru/>
- ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>
- ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

в) профессиональные базы данных:

- Открытая база данных химических структур <http://www.chemspider.com>
- Открытая база данных Национального института стандартов и технологий (NIST) <https://webbook.nist.gov/chemistry>

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

- Открытая база данных химических структур <http://www.chemspider.com>
- Открытая база данных Национального института стандартов и технологий (NIST) <https://webbook.nist.gov/chemistry>

Аудитории для проведения занятий лекционного и семинарского типа индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации в смешенном формате («Актру»).

15. Информация о разработчиках

Водянкина Ольга Владимировна, д-р хим. наук, профессор, кафедра физической и коллоидной химии Национального исследовательского Томского государственного университета, зав. кафедрой.

Белик Юлия Алексеевна, канд. хим. наук, кафедра физической и коллоидной химии Национального исследовательского Томского государственного университета, старший преподаватель.