




Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

ИВАНОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Кафедра фундаментальной и прикладной химии

ОДОБРЕНО:

Руководитель программы аспирантуры

 М.С. Федоров
(подпись)

« 11 » марта 20 11 г.

Рабочая программа дисциплины
Физическая химия

Уровень высшего образования:	Подготовка кадров высшей квалификации
Научная специальность:	1.4.4. Физическая химия
Направленность образовательной программы:	
Срок освоения образовательной программы:	4 года



1. Цели освоения дисциплины

Формирование и развитие у аспирантов знаний, умений и навыков в области общих и специфических особенностей физико-химических процессов превращения веществ, а также в области применения теоретических и экспериментальных физико-химических методов при осуществлении научной (научно-исследовательской) деятельности в рамках подготовки диссертации.

2. Место дисциплины в структуре ОП

«Физическая химия» является дисциплиной, направленной на подготовку к сдаче кандидатского экзамена.

Аспирант, приступающий к изучению дисциплины, должен обладать знаниями основных законов физической химии; умениями решать практические задачи, связанные с химическими и фазовыми превращениями; фундаментальными представлениями о базовых закономерностях современной теоретической химии; навыками работы с научной периодикой, посвященной вопросам физической химии с использованием фондов специализированных научных библиотек, а также поисковых систем (например, *elibrary.ru*, *sciencedirect.com*, *webbook.nist.gov* и др.).

Успешное освоение данной дисциплины будет способствовать готовности студентов к освоению дисциплин по выбору: «Методы исследования жидкокристаллических систем», «Методы определения молекулярной структуры», прохождению практики.

Для освоения данной дисциплины обучающийся должен:

Знать:

- фундаментальные закономерности и современные концепции, характеризующие энергетику, направленность и кинетику химических реакций, фазовые равновесия, растворы, электрохимию, нанохимию;

- основные современные тенденции развития фундаментальной и прикладной химии в России и за рубежом;

Уметь:

- использовать законы и достижения теоретической химии в экспериментальной работе, для объяснения явлений природы;

- проводить физико-химический эксперимент, обрабатывать и обсуждать экспериментальные зависимости на базе современных представлений и концепций химии;

Владеть:

- навыками практического количественного химического анализа;
- терминологическим аппаратом физической химии;
- навыками пользования современными компьютерными программами для проведения квантово-химических расчетов, количественной статистической обработки результатов эксперимента по базовым уравнениям химической кинетики.

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

Знать:

- базовые теоретические закономерности физической химии, понятия и законы химической термодинамики, статистической термодинамики, фазового равновесия, электрохимии, растворов электролитов и неэлектролитов, химической кинетики, коллоидных систем, основы квантовой химии;

- закономерности развития теоретической и прикладной химии, последние достижения и проблемные точки современной физической химии;

- приоритетные направления развития и прогрессивные технологии создания новых материалов на основе нанохимии, нанотехнологии, биотехнологии;



- принципы работы и схемы приборов и установок, используемых при проведении физико-химических экспериментов, основные способы и методики квантово-химических расчетов;
- методы регистрации результатов химических экспериментов, достоинства и недостатки разных методов;
- методы статистической термодинамики расчета термодинамических функций простых и сложных систем, методы изучения термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов; методы статистической обработки результатов физико-химического эксперимента.

Уметь:

- определять тенденции, перспективы и проблемы развития выбранного научного направления, самостоятельно ставить задачу физико-химического исследования, выбирать оптимальные пути и методы решения экспериментальных и теоретических задач;
- ориентироваться в современной научной литературе и вести научную дискуссию по вопросам физической химии и строения вещества;
- обсуждать полученные закономерности с позиций современных научных концепций и теорий, обобщать и формулировать результаты эксперимента и представлять их в виде презентаций и докладов на научных конференциях;
- выполнять физико-химический эксперимент, проводить количественный анализ содержания вещества в различных растворах и смесях с использованием современной аппаратуры;
- проводить регистрацию результатов химических экспериментов, проверку воспроизводимости результатов и оценку их достоверности, проводить физико-химические расчеты с помощью современных профессиональных компьютерных программ.

Иметь опыт:

- выполнения анализа современного состояния и перспектив развития современной химии, сфер применения и перспектив использования основных классов химических соединений в промышленности и быту, оценкой экологических проблем;
- использования программных продуктов на уровне пользователя, позволяющими выполнять: статистическую обработку результатов физико-химического эксперимента; квантово-химические расчеты строения молекул и их реакционной способности;
- изложения научной информации и представления результатов исследований в виде доклада на конференции и научной публикации;
- проведения квантово-химических расчетов строения и конформационного состава молекул с использованием прикладных компьютерных программ, расчета термодинамических функции реакционных систем;
- работы на серийном оборудовании, основанном на принципах колориметрии, потенциометрии, титриметрии, термического анализа с целью количественного анализа содержания компонентов в растворах и смесях;
- проведения аналитического и физико-химического анализа для определения термодинамических и кинетических параметров;
- выполнения регистрации и обработки экспериментального материала, в том числе с привлечением информационных баз данных; методиками статистической обработки данных, оценкой точности и надежности полученных результатов.

4. Объем и содержание дисциплины

Объем дисциплины составляет 4 зачетных единиц (144 академических часа)

4.1. Содержание дисциплины по разделам (темам), соотнесенное с видами и трудоемкостью занятий лекционно-семинарского типа



Программа аспирантуры
1.4.4. Физическая химия

№ п/п	Разделы (темы) дисциплины	Семестр	Виды занятий, их объем (в ак. часах)		Формы текущего контроля успеваемости Формы промежуточной аттестации
			Занятия лекцион- ного типа	Занятия семинар- ского типа	
1.	Вводный. Введение в проблематику дисциплины, представление рабочей программы, осмысление требований к организации процесса обучения, самостоятельной работы и форм аттестации.	3	2		Входная диагностика: устный опрос
2.	Химическая термодинамика. Электрохимия. Химическая кинетика. Физические и физико-химические методы исследования.	3	4	4	Отчет по научно-исследовательскому заданию
3.	Супрамолекулярная химия. Химия жидких кристаллов. Методы компьютерного моделирования геометрического и электронного строения молекул.	3	4	4	Отчет по научно-исследовательскому заданию
4.	Заключительный. Подведение и анализ промежуточных результатов освоения дисциплины	2		2	
Итого за семестр:			10	10	Кандидатский экзамен

4.2. Развернутое описание содержания дисциплины по разделам (темам)

Законы химической термодинамики. Термохимия. Теплостойкость. Закон Кирхгоффа. Неравенство Клаузиуса. Энтропия. Расчет изменения энтропии в процессах. Термодинамические потенциалы. Характеристические функции. Уравнение Клапейрона-Клаузиуса. Термодинамические характеристики фазовых переходов.

Термодинамика многокомпонентных систем. Химический потенциал. Уравнения изотермы и изобары реакции Химическое равновесие Тепловая теорема Нернста. Следствия.

Термодинамика фазового равновесия. Диаграммы плавкости и кипения. Диаграммы состояния с образованием твердых растворов неограниченной и ограниченной растворимости. Диаграммы расслоения.

Классификация растворов. Парциальные молярные величины. Уравнения Гиббса-Дюгема и Дюгема-Маргулиса. Коллигативные свойства растворов. Законы Рауля и Генри. Идеальные растворы. Уравнение Шредера. Осмос. Реальные растворы. Отклонения от закона Рауля. Термодинамическая активность. Избыточные термодинамические функции. Некоторые классы реальных растворов.

Средние ионные величины. Теория сильных электролитов Дебая-Хюккеля. Ионная атмосфера. Электрическая проводимость растворов электролитов. Уравнения Кольрауша и Онзагера. Закон независимости движения ионов. Числа переноса ионов.

Термодинамика равновесных электродных процессов. Скачок потенциала на границе металл-раствор. Строение двойного электрического слоя. Электродный потенциал. Электродвижущая сила гальванического элемента. Классификация электрохимических цепей. Термодинамика гальванического элемента.



Прямая и обратная задачи химической кинетики. Уравнение формальной кинетики реакций первого, второго, третьего порядков, п-порядка. Сложные реакции. Зависимость константы скорости реакции от температуры. Энергия активации. Уравнение Аррениуса.

Теория активных столкновений. Теория активированного (переходного) комплекса. Термодинамика активированного комплекса. Энергия Гиббса, энтальпия и энтропия активации. Реакции в растворах. Уравнение Бренстеда. Первичный солевой эффект.

Кинетические особенности разветвленных цепных реакций. Принцип квазистационарности Боденштейна и его применение в кинетике цепных процессов. Катализ. Гомогенный катализ. Кислотно-основной катализ. Специфический кислотный и специфический основной катализ. Ферментативный катализ. Уравнение Михаэлиса - Ментэн. Гетерогенный катализ. Стадии гетерогенно-каталитических реакций, их характеристика. Теории гетерогенного катализа: Фотохимические реакции. Основные законы фотохимии. Вторичные процессы фотохимических реакций.

Супрамолекулярная химия, история развития, современное состояние и перспективы. Основные понятия супрамолекулярной химии. Супрамолекулярные мезоморфные системы. Самоорганизация и самосборка.

Стержнеобразные (каламитные) жидкие кристаллы с водородной связью. Супрамолекулярные дискотические и колончатые мезофазы. Классы макроциклических рецепторов. Макроциклический эффект. Природа супрамолекулярных взаимодействий. Молекулярное распознавание.

Лиотропные и амфотропные жидкие кристаллы. Предорганизация и комплементарность.

Методы компьютерного моделирования строения структурных единиц каламитных жидких кристаллов с водородной связью, строения макрогетероциклических соединений, а также межмолекулярных комплексов, способствующих процессам мицеллообразования.

Практическое использование супрамолекулярных соединений. Молекулярные ансамбли и устройства. Применение супрамолекулярных соединений в медицине, химическом анализе, катализе, фотохимии, моделировании сложных биологических процессов и других областях науки и современных технологий.

5. Образовательные технологии

При изучении настоящей дисциплины используются следующие инновационные образовательные технологии: учебно-исследовательские задачи в сочетании с активно-деятельным подходом, предусматривающие индивидуальное выполнение обучающимися практических заданий по тематике лекций; интерактивные информационные технологии (электронный учебник; тестирующие системы; образовательные порталы; электронные энциклопедии; ЭИОС «Мой университет»); технология развития критического мышления; проблемное обучение; технологии смешанного обучения.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Учебно-методическое обеспечение дисциплины включают электронный вариант ряда лекций, глоссарий терминов, вопросы для самоконтроля, требования к представлению отчетности, вопросы к экзамену. Для организации внеаудиторной самостоятельной работы предусмотрено выполнение научно-исследовательских заданий. Темы заданий определяются в соответствии с темой диссертационной работы. Отчеты по научно-исследовательскому заданию могут быть оформлены в виде тезисов докладов и презентаций.

Лекции проводятся в оборудованном компьютером и проектором классе в классическом варианте с использованием мультимедийных презентаций в виде лекций-презентаций. Слайд-конспект этих лекций включает более 80 слайдов по каждому разделу дисциплины. Ряд слайдов отображает физические и химические процессы мультимедийно.



Практические занятия по разделу 3 предполагают использование программ для квантово-химических расчетов и их визуализации.

Организация самостоятельной работы обучающихся проводится с использованием ЭИОС «Мой университет», где представлены необходимые методические материалы. Комплект необходимой методической литературы имеется также на кафедре.

Методический материал по обеспечению самостоятельной работы обучающихся приводится в Приложении 1 к РП.

7. Характеристика оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

Проведение входного контроля осуществляется в рамках устного опроса по основным разделам университетского курса по «Физической химии»; для текущего контроля - научно-исследовательские задания. Промежуточная аттестация — кандидатский экзамен

На кандидатском экзамене предусмотрена устно-письменная форма проведения аттестации.

Оценка «отлично» ставится в случае, если даны полные ответы на каждый из теоретических вопросов и нет существенных ошибок в логических рассуждениях и расчетах. Допускается 1-2 несущественных ошибки.

Оценка «хорошо» ставится в случае, если каждый из теоретических вопросов раскрыт, но имеется 3-4 недочёта или одна несущественная ошибка. Представленные расчеты в целом правильные, но выполнены нерациональным путем.

Оценка «удовлетворительно» ставится в случае, если теоретические вопросы, в целом, раскрыты, но сделано 2-3 несущественных ошибки или имеется 5-6 недочётов.

Оценка «неудовлетворительно» ставится, если обучающийся не смог ответить на один из теоретических вопросов или полнота ответа по каждому из вопросов не превышала 50%.

Программа кандидатского экзамена представлена в Приложение 3.

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Основная литература:

1. *Макаров А. Г. , Сагида М. О. , Раздобреев Д. А.* Теоретические и практические основы физической химии: Учебное пособие. Спец. 04.05.01. [Электронный ресурс]. Издат. Оренб.ГУ. 2015. 172 с. ISBN: 978-5-7410-1245-1. УДК: 544(075.8). ББК: 24.5я73. Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=364840&sr=1>
2. *Луков В. В., Морозов А. Н.* Физическая химия : учебник для студентов очного и очно-заочного отделений химических факультетов вузов. 2-е изд., расшир. и доп. Издат. Южного федер. ун-та, 2018. 238 с. ISBN: 978-5-9275-2976-6 УДК: 544 ББК: 24.5. Режим доступа: по подписке. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=561130>
3. *Ведринский Р.В.* Квантовая механика [Электронный ресурс] : учебник / Ведринский Р.В. – Ростов н/Д: ЮФУ, 2009 – 384 с. Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=240937>
4. *Ефремов Ю.С.* Квантовая механика [Электронный ресурс] : учебное пособие / Ефремов Ю.С. – М.-Берлин: Директ-Медиа, 2015. – 457 с. Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=273446>
5. *Крашенинин В.И.* Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам [Электронный ресурс] : учебное пособие / Крашенинин В.И. , Газенаур Е.Г. , Кузьмина Л.В. – Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2012. – 56 с. Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678>.

Дополнительная литература:



1. *Кусманов С. А.* Физическая химия: практикум. [Электронный ресурс]. Издат Костр.ГУ им. Н. А. Некрасова, 2012. 230 с. ISBN: 978-5-7591-1232-7 УДК: 541.1. ББК: 24.5я73-5. Режим доступа: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_view&book_id=275638
2. *Булидорова Г. В. , Галяметдинов Ю. Г. , Ярошевская Х. М. , Барабанов В. П.* Электрохимия и химическая кинетика: Учебное пособие. [Электронный ресурс]. Издат. КНИТУ, 2014.-371с. ISBN: 978-5-7882-1658-4. УДК: 544.6+544.4 (075.8) ББК: 24.5я73. Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=427844&sr=1>.
3. *Магазинников, А.Л.* Введение в квантовую механику: учебное пособие / А.Л. Магазинников, В.А. Мухачёв. - Томск: Эль Контент, 2010. - 112 с.: ил.,табл., схем. - ISBN 978-5-4332-0046-3; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=208685>
4. *Карлов, Н.В.* Начальные главы квантовой механики / Н.В. Карлов, Н.А. Кириченко. - Москва: Физматлит, 2006. - 360 с. - ISBN 5-9221-0538-8; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=68397>.

Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

Система электронной поддержки образовательного процесса «Мой университет»
<https://uni.ivanovo.ac.ru>

Профессиональные базы данных и информационно-справочные системы:

Спектральная база данных SDBS https://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/cgi-bin/cre_index.cgi

База данных физико-химических характеристик органических соединений
<https://webbook.nist.gov/chemistry/>

ЭБС «Университетская библиотека онлайн» www.biblioclub.ru

Электронная библиотека ИвГУ <http://lib.ivanovo.ac.ru>

Электронный каталог НБ ИвГУ <http://lib.ivanovo.ac.ru/index.php/ek>

Программное обеспечение: операционная система Microsoft Windows, пакет офисных программ Microsoft Office 365 и LibreOffice, интернет-браузер Yandex Browser, программа визуализации результатов квантово-химических расчетов ChemCraft, программа Gaussian09, Кембриджская база кристаллографических данных.

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Учебные аудитории:

- для проведения занятий лекционного типа с комплектом специализированной учебной мебели и техническими средствами обучения, служащими для предоставления учебной информации большой аудитории;

- для проведения занятий семинарского типа, консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации с комплектом специализированной учебной мебели и техническими средствами обучения.

Лаборатория физической и коллоидной химии, оснащенная лабораторным оборудованием, комплектом специализированной учебной мебели и техническими средствами обучения.

Помещение для самостоятельной работы, оснащенное комплектом специализированной учебной мебели, компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в ЭИОС.

Демонстрационное оборудование и учебно-наглядные пособия для занятий лекционного типа, обеспечивающие тематические иллюстрации: электронные пособия (презентации, электронные словари, справочники).



Программа аспирантуры
1.4.4. Физическая химия

Автор(ы) рабочей программы дисциплины:

проф., проф., д.х.н. Гиричева Н.И.

проф., проф., д.х.н. Иванов С.Н.

Программа рассмотрена и утверждена на заседании кафедры кафедры фундаментальной и прикладной химии

«11» марта 2022 г., протокол №7

Программа обновлена

протокол заседания кафедры № _____ от «_____» _____ 20 ____ г.

Согласовано:

Руководитель ОП _____ М.С. Федоров
(подпись)