

Белорусский государственный университет

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе и
образовательным инновациям

О.Г. Прохоренко



Серия 1001/001/001 № УД-12360 /уч.

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

Учебная программа учреждения высшего образования
по учебной дисциплине для специальности:

1-31 05 01 Химия (по направлениям)

Направление специальности

1-31 05 01-01 Химия (научно-производственная деятельность)

1-31 05 01-02 Химия (научно-педагогическая деятельность)

1-31 05 01-03 Химия (фармацевтическая деятельность)

1-31 05 02 Химия лекарственных соединений

1-31 05 03 Химия высоких энергий

1-31 05 04 Фундаментальная химия

2022 г.

Учебная программа составлена на основе

ОСВО 1-31 05 01-2021; ОСВО 1-31 05 02-2021; ОСВО 1-31 05 03-2021, ОСВО 1-31 05 04-2021, учебных планов G-31-1-005/уч, G-31-1-006/уч, G-31-1-007/уч, G-31-1-008/уч, G-31-1-009/уч, G31-1-010/уч., утвержденных 25.05.2021. и учебных планов G-31-1-231/уч., G-31-1-232/уч., G-31-1-233/уч., G-31-1-236/уч., G-31-1-237/уч., G-31-1-238/уч , утверждённых 22.03.2022

СОСТАВИТЕЛИ:

Л.С. Карпушенкова, доцент кафедры физической химии химического факультета БГУ, кандидат химических наук, доцент;

Е.Н. Степурко, доцент кафедры физической химии химического факультета БГУ, кандидат химических наук, доцент;

Е.Г. Петрова, старший преподаватель кафедры физической химии химического факультета БГУ;

Я.Н. Юркштович, ассистент кафедры физической химии химического факультета БГУ;

А.В. Блохин, заведующий кафедрой физической химии химического факультета БГУ, доктор химических наук, профессор;

А.Е. Усенко, доцент кафедры физической химии химического факультета БГУ, кандидат химических наук.

РЕЦЕНЗЕНТЫ:

Г.С. Петров, доцент кафедры физической, аналитической и коллоидной химии УО «Белорусский государственный технологический университет», канд. хим. наук

Р.Л. Свердлов, заведующий кафедрой радиационной химии и химико-фармацевтических технологий УО «Белорусский государственный университет», канд. хим. наук

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой физической химии химического факультета Белорусского государственного университета

(протокол № 2 от 7.10.2022 г.);

Научно-методическим Советом Белорусского государственного университета (протокол №2 от 29.11.2022)

Зав. кафедрой
д.х.н., профессор



А.В. Блохин

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Цель учебной дисциплины «Физическая химия» – выработать умение научно обоснованного предсказания хода физико-химического процесса и его конечного результата на основе исследования строения и свойства индивидуальных веществ и их смесей, общих закономерностей протекания химических и фазовых превращений, условий достижения состояний химического и фазового равновесия.

Задачи данной учебной дисциплины:

1. Дать первоначальное, но достаточно полное представление об общих законах, аппарате и применении физической химии;
2. Научить студента на основе анализа физико-химических свойств веществ, прогнозировать возможность и основные закономерности протекания химических реакций и процессов и рассчитывать максимальный выход целевого продукта реакции;
3. Научить студента анализировать общие закономерности протекания химических реакций во времени и создавать обоснованные модели химических процессов;
4. Сформировать у студента навыки самостоятельной работы с учебной и специальной литературой, навыки проведения физико-химического эксперимента, умения обобщать и обсуждать полученные экспериментальные результаты.

Место учебной дисциплины. В системе подготовки специалиста с высшим образованием учебная дисциплина относится к модулю «Физическая химия и электрохимия» государственного компонента.

Учебная дисциплина «Физическая химия» создает теоретическую основу для изучения большого количества общепрофессиональных и специальных дисциплин химического цикла, таких как «Электрохимия», «Общая химическая технология», «Химия твердого тела», «Высокомолекулярные соединения» и др.

Успешное освоение учебной программы по физической химии предусматривает освоение студентами ряда предшествующих дисциплин учебных планов, таких как «Физика», «Высшая математика. Необходимо также владение средствами вычислительной техники и основами информационных технологий.

Требования к компетенциям

Освоение учебной дисциплины «Физическая химия» должно обеспечить формирование следующих компетенций:

базовые профессиональные компетенции:

для специальности 1-31 05 01 «Химия (по направлениям)»

БПК-7 Применять основные постулаты, положения и законы физической химии для планирования и проведения физико-химического и электрохимического эксперимента, определения физико-химических характеристик веществ, оптимальных условий протекания химических процессов

Для специальности 1-31 05 02 «Химия лекарственных соединений»

БПК - 9 Применять основные постулаты, положения и законы физической химии для планирования и проведения физико-химического и электрохимического эксперимента, определения физико-химических характеристик веществ, оптимальных условий протекания химических процессов

Для специальности 1-31 05 03 «Химия высоких энергий»

БПК -8 Применять основные постулаты, положения и законы физической химии для планирования и проведения физико-химического и электрохимического эксперимента, определения физико-химических характеристик веществ, оптимальных условий протекания химических процессов

Для специальности 1-31 05 04 «Фундаментальная химия»

БПК -8 Применять основные постулаты, положения и законы физической химии для планирования и проведения физико-химического и электрохимического эксперимента, определения физико-химических характеристик веществ, оптимальных условий протекания химических процессов

В результате изучения учебной дисциплины студент должен

знать:

- основные задачи, положения, постулаты и законы физической химии, их обоснование;
- математический аппарат дисциплины;
- границы применимости основных законов физической химии, идеализированных моделей и схем
- условия, необходимые для протекания химических процессов и факторы, определяющие их направление и скорость.

уметь:

- планировать и проводить физико-химический эксперимент;
- обрабатывать и анализировать результаты физико-химического эксперимента;
- сопоставлять результаты эксперимента с предсказаниями теории.

владеть:

- базовыми знаниями по физической химии;
- методами физико-химического анализа как совокупности

теоретических положений и экспериментальных методов исследования взаимодействия веществ при различных условиях.

В рамках образовательного процесса по данной учебной дисциплине студент должен приобрести не только теоретические и практические знания, умения и навыки по специальности, но и развить свой ценностно-личностный, духовный потенциал, сформировать качества патриота и гражданина, готового к активному участию в экономической, производственной, социально-культурной и общественной жизни страны.

Структура учебной дисциплины

Дисциплина изучается студентами специальности Химия (по направлениям) в 4 и 5 семестре (раздел «Химическая термодинамика» и «Химическая кинетика и катализ», соответственно); специальностей «Химия лекарственных соединений», «Химия высоких энергий» и «Фундаментальная химия» – в 5 и 6 семестре (раздел «Химическая термодинамика» и «Химическая кинетика и катализ», соответственно). Всего на изучение учебной дисциплины «Физическая химия» отведено:

– Раздел «Химическая термодинамика» – 240 часов, в том числе 156 аудиторных часов, из них: лекции – 62 часа, лабораторные занятия – 48 часов, практические занятия – 30 часов, управляемая самостоятельная работа – 16 часов (для всех специальностей).

– Раздел «Химическая кинетика и катализ» – 204 часа, в том числе 100 аудиторных часов, из них: лекции – 34 часа, лабораторные занятия – 30 часов, практические занятия – 24 часов, управляемая самостоятельная работа – 12 часов (для всех специальностей).

Трудоемкость учебной дисциплины составляет 12 зачетных единиц (раздел «Химическая термодинамика» – 6 зачетных единиц, раздел «Химическая кинетика и катализ» – 6 зачетных единиц).

Форма текущей аттестации по разделам «Химическая термодинамика» и «Химическая кинетика и катализ» – зачет и экзамен для всех специальностей.

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

Введение

Предмет, задачи и проблемы современной физической химии. Этапы развития физической химии как теоретической основы современной химии и химической технологии.

Раздел 1. Химическая термодинамика

Тема 1.1. Основные понятия, терминология и постулаты химической термодинамики. Первый закон термодинамики.

Предмет и методы исследования термодинамики. Основные понятия и определения химической термодинамики. Уравнения состояния. Термические уравнения состояния идеальных и реальных газов. Особенности изотермы газа Ван-дер-Ваальса. Критическое состояние газа. Связь индивидуальных постоянных двухпараметрических уравнений состояния с критическими параметрами. Принцип соответственных состояний. Исходные постулаты термодинамики. Постулат о существовании температуры (нулевой закон термодинамики). Внутренняя энергия системы, теплота, работа, их определение, единицы измерения. Правила выбора знаков теплоты и работы. Первый закон термодинамики, его формулировки и аналитическое выражение. Виды работы, потерянная работа. Работа расширения идеальных и реальных газов в различных обратимых и необратимых процессах. Закон Джоуля.

Тема 1.2. Термохимия.

Энтальпия и ее определение. Средняя и истинная теплоемкость, их связь. Соотношения между C_p и C_v . Классическая теория теплоемкости идеального газа. Эмпирические правила для теплоемкости твердых тел Дюлонга и Пти, Коппа и Неймана. Основные положения теории теплоемкости одноатомного кристалла по Эйнштейну и Дебаю. Характеристическая температура и ее оценка. Теплоемкость газов и жидкостей. Зависимость теплоемкости от температуры. Адиабатическое расширение газа. Уравнение Пуассона.

Теплота и тепловой эффект химической реакции. Закон Гесса и следствия из него. Стандартное состояние и стандартные условия, базисные температуры. Выбор стандартного состояния газов и конденсированных фаз. Стандартные теплоты (энтальпии) образования химических соединений, нуль отсчета. Стандартные теплоты сгорания и их определения. Стандартные энтальпии химических реакций. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры, уравнение Кирхгофа.

Тема 1.3. Второй закон термодинамики и его приложения.

Самопроизвольные и несамопроизвольные процессы. Направление самопроизвольных процессов и диссипация энергии. Энтропия как мера необратимого рассеяния энергии. Формулировки второго закона термодинамики. Вечный двигатель второго рода. Энтропия и приведенная теплота. Неравенство Клаузиуса. Энтропия как функции состояния системы. Статистический характер второго закона термодинамики, формула Больцмана. Математическая запись второго закона термодинамики для обратимых и необратимых процессов. Абсолютная температура. Температурные шкалы, термометрические свойства веществ, эмпирические шкалы температур, принципы их создания. Реперные точки. Термодинамическая (абсолютная) шкала температур. Вычисление изменения энтропии в различных обратимых и необратимых процессах. Энтропия идеального газа. Изменение энтропии при изобарно-изотермическом смешении идеальных газов, парадокс Гиббса. Третий закон термодинамики, постулат Планка, остаточная энтропия. Абсолютные энтропии веществ. Вычисление изменения энтропии в химических реакциях.

Тема 1.4. Фундаментальные уравнения термодинамики.

Фундаментальное уравнение термодинамики (уравнение Гиббса) для простых и сложных систем. Независимые переменные фундаментального уравнения термодинамики, их характеристики. Преобразование Лежандра. Функции состояния: энтальпия (H), энергия Гельмгольца (A), энергия Гиббса (G). Характеристические функции (термодинамические потенциалы) U , H , A , G – их свойства, зависимость от естественных переменных, вычисление и использование в химической термодинамике. Определение направления самопроизвольного процесса по изменению характеристических функций. Характеристические функции идеального газа. Общие условия равновесия изолированных и закрытых систем. Уравнения Максвелла, их использование при выводе термодинамических соотношений. Уравнение Гиббса–Гельмгольца, его роль в химии. Условия равновесия в однокомпонентных гетерогенных системах. Уравнение Клаузиуса–Клапейрона. Фазовые переходы I и II рода. Плавление, испарение, сублимация. Зависимость температуры плавления от внешнего давления. Энтропия плавления. Зависимость давления насыщенного пара вещества от температуры. Методы измерения давления насыщенного пара веществ. Уравнение Антуана и другие эмпирические уравнения. Правила Труттона и Гильдебранда.

Тема 1.5. Термодинамика растворов.

Фундаментальные уравнения термодинамики для открытых систем. Термодинамические потенциалы (характеристические функции) открытых

систем. Химический потенциал. Химический потенциал и энергия Гиббса индивидуальных веществ. Химический потенциал идеального газа. Однородные функции состава. Теорема Эйлера об однородных функциях. Уравнения Гиббса–Дюгема. Парциальные молярные величины, их определение и методы вычисления. Химический потенциал компонента в смеси идеальных газов. Функции смешения. Растворы. Классификация и термодинамические условия образования растворов. Законы Рауля и Генри, идеальные растворы. Растворимость газов в жидкостях, высаливание, правило Сеченова. Состав и общее давление насыщенного пара над идеальным раствором. Диаграммы равновесия «жидкость – пар», правило рычага. Температура кипения идеальных растворов, физико-химические основы перегонки растворов. Неидеальные растворы, энергия взаимообмена и размерный фактор. Законы Гиббса-Коновалова, азеотропные растворы. Влияние температуры и давления на состав азеотропа. Ограниченная взаимная растворимость жидкостей. Равновесие «пар – жидкий раствор» в системах с ограниченной растворимостью и полной взаимной нерастворимостью жидкостей. Химический потенциал компонента в идеальном, предельно разбавленном и реальном растворах. Активность, методы определения активностей и коэффициентов активностей. Стандартные состояния при определении химических потенциалов компонентов. Функции смешения неидеальных растворов. Избыточные термодинамические функции. Растворимость в идеальных и предельно разбавленных растворах, уравнение Шредера, влияние давления на растворимость твердых тел в жидкостях. Интегральные и парциальные теплоты растворения, теплоты разбавления. Коллигативные свойства растворов. Криоскопия, эбулиоскопия, криоскопическая и эбулиоскопическая константы растворителей, изотонический коэффициент Вант-Гоффа. Практическое использование криоскопии и эбулиоскопии. Осмотическое давление. Уравнение Вант-Гоффа, его вывод и область применимости.

Тема 1.6. Термодинамика гетерогенных систем.

Гетерогенные фазовые равновесия. Условия равновесия в многокомпонентных гетерогенных системах. Правило фаз Гиббса. Диаграммы состояния однокомпонентных систем: воды, серы, фосфора, углерода. Двухкомпонентные системы с одной фазой переменного состава: с химическими соединениями, плавящимися конгруэнтно и инконгруэнтно, и их анализ на основе правила фаз. Эвтектические и перитектические точки. Твердые растворы, условия их образования. Фазы переменного состава, бертоллиды и дальтониды. Трехкомпонентные системы. Графическое изображение состава трехкомпонентной системы, треугольник Гиббса–Розебума.

Тема 1.7. Химические равновесия в гомогенных и гетерогенных системах.

Понятие о химическом сродстве. Химическая переменная. Условия химического равновесия. Закон действующих масс. Термодинамическая константа равновесия, другие виды констант равновесия и связь между ними. Энергия Гиббса химической реакции (уравнение изотермы химической реакции Вант-Гоффа). Стандартная энергия Гиббса химической реакции и ее связь с термодинамической константой равновесия. Химические равновесия в гетерогенных системах и растворах. Принцип смещения равновесия Ле Шателье–Брауна. Зависимость констант равновесия от температуры. Уравнения изобары и изохоры реакции. Влияние давления на химические равновесия.

Тема 1.8. Методы вычисления стандартной энергии Гиббса и константы равновесия химических реакций.

Расчет константы равновесия химических реакций с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций – вычисление по методу Темкина–Шварцмана и с помощью функций приведенной энергии Гиббса. Расчеты выхода продуктов химических реакций. Тепловая теорема Нернста, следствия. Третий закон термодинамики. Химические равновесия в реальных газовых системах. Фугитивность (летучесть), методы ее вычисления. Расчет химических равновесий с реальными газами при высоких давлениях.

Тема 1.9. Элементы статистической термодинамики

Макроскопическое и микроскопическое описание состояния системы. Микроскопическое описание состояния системы методами классической и квантовой механики. Основные постулаты статистической термодинамики. Статистический вес (термодинамическая вероятность) и энтропия, формула Больцмана. Закон распределения Больцмана. Молекулярная сумма по состояниям. Сумма по состояниям системы и ее связь с термодинамическими функциями. Поступательная сумма по состояниям. Вращательная сумма по состояниям жесткого ротатора. Колебательная сумма по состояниям для гармонического осциллятора. «Замороженные» колебательные степени свободы.

Раздел 2. Химическая кинетика и катализ

Тема 2.1. Основные понятия и постулаты химической кинетики.

Химическая кинетика – наука о скоростях и механизмах химических реакций. Термодинамические и кинетические критерии возможности протекания химического процесса и его практическая реализация.

Особенности кинетического подхода к описанию химических реакций. Промежуточные вещества и понятие элементарной стадии химической реакции. Простые и сложные химические реакции. Механизм химической реакции и несоответствие механизмов реакций стехиометрическим уравнениям на примере реакций окисления водорода, синтеза HBr и HI .

Основные понятия химической кинетики. Истинная и средняя скорость химической реакции, скорость по отдельному реагенту. Особенности определения скорости химической реакции, протекающей в потоке. Факторы, влияющие на скорость химической реакции. Экспериментальное определение скорости химической реакции (графический и аналитический методы). Кинетические кривые и кинетические уравнения. Порядок химической реакции. Общий и частный порядок. Реакции переменного порядка и изменение порядка в ходе реакции. Временной и концентрационный порядок реакции. Кинетическая классификация реакций по их порядку. Реакции псевдо n -го порядка. Молекулярность элементарной химической реакции.

Закон действующих масс – основной постулат химической кинетики. Область применения закона действия масс. Составление кинетических уравнений для известного механизма реакции. Прямая и обратная задачи химической кинетики. Константа скорости химической реакции, ее физический смысл и размерность для реакций различных порядков. Основные принципы химической кинетики: принцип независимости химических реакций и область его применения, принцип лимитирующей стадии химического процесса, принцип детального равновесия.

Тема 2.2. Кинетика химических реакций в статических и динамических условиях.

Кинетические особенности протекания простых необратимых реакций – кинетические уравнения, константа скорости, зависимость концентрации участников реакции от времени, время полупревращения. Реакции нулевого порядка. Реакции первого порядка, средняя продолжительность жизни молекулы в реакции первого порядка. Кинетические особенности реакций второго порядка при одинаковой и различной начальной концентрации участников реакции. Реакции третьего порядка. Общее выражение для константы скорости реакции n -го порядка.

Методы определения порядка реакции и константы скорости по экспериментальным данным. Понятие об интегральных и дифференциальных методах определения порядка реакции и константы скорости. Определение частного порядка реакции, метод избытка (метод Оствальда). Метод равных концентраций. Метод подбора уравнений в графическом и аналитическом вариантах. Метод определения порядка реакции по времени полупревращения

(метод Оствальда–Нойеса). Дифференциальный метод Вант-Гоффа. Особенности применения метода Вант-Гоффа для определения временного и концентрационного порядков реакции.

Кинетические особенности протекания сложных необратимых реакций – кинетические уравнения, константа скорости, зависимость концентрации участников реакции от времени. Обратимые реакции первого порядка, нахождение константы скорости прямой и обратной реакций по экспериментальным данным. Параллельные реакции. Последовательные реакции на примере двух необратимых реакций первого порядка. Кинетический анализ процессов, протекающих через образование промежуточных продуктов. Метод квазистационарных концентраций Боденштейна и условия его применения. Лимитирующая стадия сложного процесса. Квазиравновесное приближение.

Кинетика реакций в динамических условиях. Режимы идеального смешения и идеального вытеснения. Кинетика реакций в потоке на примере необратимой и обратимой реакций первого порядка.

Тема 2.3 Зависимость скорости реакции от температуры.

Зависимость скорости реакции от температуры. Эмпирическое правило Вант-Гоффа и область его применения. Температурный коэффициент скорости реакции. Уравнение Аррениуса и его термодинамический вывод. Понятие об энергии активации химической реакции. Истинная и кажущаяся энергия активации. Нахождение энергии активации химической реакции по экспериментальным данным. Эмпирические правила оценки энергии активации. Тепловой взрыв.

Тема 2.4. Теории химической кинетики.

Теория активных соударений. Основы молекулярно-кинетической теории газов. Бимолекулярные реакции в теории активных соударений. Скорость реакции и число активных соударений. Стерический фактор. Расчет константы скорости бимолекулярной химической реакции. Формула Траутца–Льюиса. Истинная энергия активации. Мономолекулярные реакции в теории активных соударений. Схема Линдемана, ее значение. Причины неточности схемы Линдемана и возможные пути ее уточнения (поправки Гиншельвуда и Касселя, понятие о теории РРКМ). Тримолекулярные реакции в теории активных соударений. Достоинства и недостатки теории активных соударений.

Теория активированного комплекса (переходного состояния). Основные положения теории активированного комплекса, адиабатическое приближение. Поверхность потенциальной энергии для взаимодействия трех атомов и

способы ее описания. Активированный комплекс и его свойства. Статистический расчет константы скорости бимолекулярной реакции. Трансмиссионный коэффициент. Особенности применение теории активированного комплекса для расчета константы скорости моно-, би- и тримолекулярных реакций и сопоставление ее результатов с результатами теории активных соударений. Термодинамический аспект теории активированного комплекса. Энтропия и энтальпия активации, их вычисление на основании экспериментальных данных. Достоинства и недостатки теории активированного комплекса.

Тема 2.5. Основы кинетики отдельных типов химических реакций.

Основы кинетики реакций в растворах. Число соударений частиц в жидкости и обоснование возможности применения к реакциям в растворе уравнений формальной кинетики. Клеточный эффект. Диффузионный механизм реакций в растворе. Применение основного уравнения теории активированного комплекса к описанию кинетики реакций в растворе. Уравнение Бренстеда–Бьеррума. Реакции между ионами в растворах сильных электролитов. Особенности взаимодействия ионов с молекулами. Влияние ионной силы раствора на скорость реакции. Первичный и вторичные солевые эффекты.

Основы кинетики цепных реакций. Цепные реакции, их открытие и особенности протекания. Элементарные процессы возникновения, продолжения, развития и обрыва цепи. Разветвленные и неразветвленные цепные реакции. Особенности кинетики неразветвленных цепных реакций на примере реакции образования HCl . Особенности кинетики разветвленных цепных реакций на примере реакции окисления водорода. Предельные явления – первый, второй и третий пределы воспламенения и их природа. Полуостров воспламенения. Зависимость скорости реакции на нижнем пределе воспламенения от диаметра сосуда и природы его поверхности. Уравнение Семенова и его анализ для различных режимов протекания цепного процесса. Метод квазистационарных концентраций Семенова и его применение для описания предельных явлений в окрестностях первого и второго пределов воспламенения.

Основы кинетики фотохимических реакций. Основные законы фотохимии: законы Гротгуса, Вант-Гоффа и Эйнштейна. Квантовый выход. Элементарные фотохимические процессы, происходящие при поглощении света веществом. Флуоресценция и фосфоресценция. Кинетика фотохимических реакций на примере флуоресценции. Механизм Штерна-Фольмера. Определение кинетических параметров фотохимических реакций по экспериментальным данным. Фотохимические реакции в природе.

Основы кинетики гетерогенных процессов. Роль диффузии при протекании гетерогенной химической реакции. Диффузионная и кинетическая области протекания гетерогенной реакции. Роль адсорбции при протекании поверхностной реакции. Адсорбционный коэффициент. Топохимические реакции, их механизм и особенности протекания. Скорость топахимической реакции. Уравнение Ерофеева-Колмогорова.

Тема 2.6. Катализ.

Определение и общие принципы катализа. Роль катализаторов в химии. Активность катализатора. Активаторы и ингибиторы. Специфичность и селективность катализатора. Промоторы. Основные механизмы катализа. Общая характеристика и классификация каталитических реакций.

Гомогенные каталитические реакции. Механизм и энергетический профиль каталитической реакции. Скорость каталитической реакции. Автокатализ – возможные механизмы и скорость автокаталитической реакции. Колебательные реакции и их особенности. Реакция Белоусова-Жаботинского. Кислотно-основный катализ. Классификация и механизмы реакций кислотно-основного типа. Кинетические особенности реакций специфического кислотного катализа. Функция кислотности Гамета и ее использование для вычисления скорости каталитического процесса. Кинетические особенности реакций общего кислотного катализа. Солевые эффекты в кислотно-основном катализе. Ферментативный катализ. Причины высокой каталитической активности ферментов. Механизм реакций ферментативного катализа. Уравнение Михаэлиса-Ментен. Методы определения кинетических параметров уравнения Михаэлиса-Ментен по экспериментальным данным. Влияние температуры и pH среды на скорость ферментативной реакции. Ингибирование ферментативных реакций и экспериментальное установление механизма ингибирования.

Гетерогенные каталитические реакции. Общие принципы гетерогенного катализа. Активационный процесс и роль адсорбции в гетерогенном катализе. Энергетический профиль каталитической реакции. Истинная и кажущаяся энергия активации гетерогенного каталитического процесса. Кинетика гетерогенной каталитической реакции на равнодоступной поверхности. Учет массопереноса в гетерогенном катализе. Внешнедиффузионная, внутридиффузионная и кинетическая области протекания процесса. Отравление катализатора. Неоднородность поверхности катализатора. Теория активных центров. Мультиплетная теория Баландина. Принципы геометрического и энергетического соответствия. «Вулканообразные» кривые Баландина и основы прогнозирования каталитической активности. Теория активных ансамблей Кобозева.

Важнейшие классы промышленных катализаторов. Основные промышленные каталитические процессы.

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Дневная форма получения образования с применением электронных средств обучения (ДОТ)

Номер раздела, темы	Название раздела, темы	Количество аудиторных часов					Количество часов УСР	Формы контроля знаний
		Лекции	Практические занятия	Семинарские занятия	Лабораторные занятия	Иное		
1	2	3	4	5	6	7	8	9
	Введение.	1						
	Раздел 1. Химическая термодинамика.							
1.1.	Основные понятия, терминология и постулаты химической термодинамики. Первый закон термодинамики.	5	1		6		2	устная защита письменного отчета по лабораторной работе, контрольная работа, коллоквиум, тест
1.2.	Термохимия.	4	7		7.5		2	устная защита письменного отчета по лабораторной работе, контрольная работа, коллоквиум, тест
1.3.	Второй закон термодинамики и его приложения.	6	3		8		2	устная защита письменного отчета по лабораторной работе,

								контрольная работа, коллоквиум, тест
1.4.	Фундаментальные уравнения термодинамики.	10	9		1.5		2	устная защита письменного отчета по лабораторной работе, контрольная работа, коллоквиум, тест
1.5.	Термодинамика растворов	10	6		4		2	устная защита письменного отчета по лабораторной работе, контрольная работа, коллоквиум, тест
1.6.	Термодинамика гетерогенных систем	4	2		11.5		2	устная защита письменного отчета по лабораторной работе, контрольная работа, коллоквиум, тест
1.7.	Химические равновесия в гомогенных и гетерогенных системах	6	3		4		2	устная защита письменного отчета по лабораторной работе, контрольная работа, коллоквиум, тест
1.8.	Методы вычисления стандартной энергии Гиббса и	6	8		5.5		2	устная защита письменного отчета по лабораторной работе,

	константы равновесия химических реакций.							контрольная работа, коллоквиум, тест
1.9.	Элементы статистической термодинамики и термодинамики необратимых процессов.	10	1					
Итого по Разделу 1:		62	30		48		16	Зачёт, экзамен
	Раздел 2. Химическая кинетика и катализ.							
2.1.	Основные понятия и постулаты химической кинетики.	3	6		8		2	устная защита письменного отчета по лабораторной работе, контрольная работа, коллоквиум
2.2.	Кинетические особенности протекания простых и сложных химических реакций в статических и динамических условиях. Приближенные методы химической кинетики.	6	4		10		2	устная защита письменного отчета по лабораторной работе, контрольная работа, коллоквиум
2.3	Зависимость скорости реакции от температуры.	3	4		6		2	устная защита письменного отчета по лабораторной работе, контрольная работа, коллоквиум

2.4.	Теории химической кинетики.	7	5				2	контрольная работа, коллоквиум
2.5.	Основы кинетики отдельных типов химических реакций	6	3		6		2	устная защита письменного отчета по лабораторной работе, коллоквиум
2.6.	Катализ.	7 2 (ДО)	2				2	устная защита письменного отчета по лабораторной работе, коллоквиум
Итого по Разделу 2:		32 2(ДО)	24		30		12	Зачёт, экзамен
Итого		94 (2 ДО)	54		78		28	

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Перечень основной литературы:

1. Мечковский, Л.А. Химическая термодинамика: учебное пособие в 2-х ч. / Л.А. Мечковский, А.В. Блохин – Мн.: БГУ. – Ч.1: Феноменологическая термодинамика. Основные понятия, фазовые равновесия. – 2012. – 144 с.;
2. Мечковский, Л.А. Химическая термодинамика: учебное пособие в 2-х ч. / Л.А. Мечковский, А.В. Блохин – Мн.: БГУ. – Ч.2: Термодинамика многокомпонентных систем. Химические равновесия. Элементы статистической термодинамики. – 2013. – 200 с.
3. Еремин, В.В. Основы физической химии: учебное пособие: в 2 ч. Ч. 1: Теория / В.В. Еремин [и др.]. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2013.–320 с.
4. Буданов, В.В. Химическая термодинамика : учебное пособие / В. В. Буданов, А. И. Максимов. — 3-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2022. — 320 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/209705>
5. Буданов, В.В. Химическая кинетика : учебное пособие / В. В. Буданов, Т. Н. Ломова, В. В. Рыбкин. — Санкт-Петербург : Лань, 2022. — 288 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/211475>.

Перечень дополнительной литературы:

1. Физическая химия: учебник для вузов: в 2 кн./ К.С. Краснов, Н.К. Воробьев, И.Н. Годнев и др.; под ред. К.С.Краснова.– 3-е изд., испр. – М.: Высшая школа, 2001. – Кн. 1: Строение вещества. Термодинамика. – 512 с.
2. Физическая химия: учебник для вузов: в 2 кн./ К.С. Краснов, Н.К. Воробьев, И.Н. Годнев и др.; под ред. К.С.Краснова.– 3-е изд., испр. – М.: Высшая школа, 2001. – Кн. 2: Электрохимия. Химическая кинетика и катализ. – 319 с.
3. Физическая химия : теоретическое и практическое руководство. / Б. П. Никольский и др.; под ред. Б. П. Никольского. – Изд. 2-е, перераб. и доп. - Ленинград : Химия, Ленинградское отд-ние, 1987. – 880 с.
4. Бажин, Н. М. Термодинамика для химиков : учебник / Н. М. Бажин, В. Н. Пармон. — Санкт-Петербург : Лань, 2022. — 612 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/206717>
5. Основы физической химии. Теория и задачи : учеб. пособие для студ., обуч. по спец. 011000 - Химия и по направлению 510500 - Химия / [В. В. Еремин и др.]. – М. : "Экзамен", 2005. – 479 с.

6. Термодинамика в физической химии : учебник для студ. химических и химико-технол. спец. вузов / О. М. Полтораки. – Москва : Высшая школа, 1991. – 318 с.
7. Карапетьянц, М.Х. Химическая термодинамика : [учеб. пособие для студ. хим. спец. вузов] / М. Х. Карапетьянц. - Изд. 3-е, перераб. и доп. - Москва : Химия, 1975. – 583 с.
8. Эткинс, П. Курс физической химии / П. Эткинс. – М.: Мир, 1980. – 577 с.
9. Химическая термодинамика / И. Пригожин, Р. Дефэй ; пер. с англ. [М. М. Андрушевич и др.] под ред. В. А. Михайлова. - 2-е изд. – М. : Бином. Лаборатория знаний, 2010. – 533 с.
10. Карякин, Н. В. Основы химической термодинамики / Н. В. Карякин. - Москва : Академия, 2003. – 463с.
11. Герасимов, Я.И. Курс физической химии: в 2 т. / Я.И. Герасимов [и др.]. – 2-е изд., испр. – М. : Химия.– Т.1–1970.–592 с.; Т. 2 – 1973. – 624 с.
12. Семиохин, И.А. Кинетика химических реакций : учеб. пособие для студ. вузов, обуч. по напр. и спец. "Химия" / И.А. Семиохин, Б.В. Страхов, И. Осипов. – М.: Изд-во Московского ун-та, 1995. – 348с.
13. Панченков, Г.М. Химическая кинетика и катализ : учеб. пособие для студ. хим. и химико-технологич. спец. вузов / Г. М. Панченков, В. П. Лебедев. - Изд. 3-е, испр. и доп. - Москва : Химия, 1985. – 592 с.
14. Денисов, Е.Т. Химическая кинетика / Е.Т. Денисов, О.М. Саркисов, Г.И. Лихтенштейн. – М. : Химия. 2000. – 568 с.
15. Физическая химия в вопросах и ответах. / Под ред. К. В. Топчиевой, Н. Ф. Федорович. – М.: МГУ, 1981. – 264 с.
16. Пурмаль, А.П. А, Б, В...химической кинетики. – М.: Академкнига. – 2004. – 277 с.
17. Романовский, Б. В. Основы химической кинетики / Б. В. Романовский. – М.: Экзамен, 2006. – 416 с.
18. Байрамов, В.М. Основы химической кинетики и катализа : учеб. пособие для студ. хим. фак. ун-тов, обуч. по спец. 011000 "Химия" и напр. 510100 "Химия" / В.М. Байрамов; Под ред. В.В.Лунина. – М. : Academia, 2003. – 252 с.
19. Блохин, А.В. Тестовые задания по химической термодинамике, кинетике и катализу : пособие для студ. спец. 1-31 05 01 "Химия (по напр.)" / А. В. Блохин, Л. М. Володкович, Л. А. Мечковский. - Минск : БГУ, 2010. – 108 с.
20. Байрамов, В. М. Химическая кинетика и катализ : Примеры и задачи с решениями : Учеб. пособие для студ. хим. фак. ун-тов, обуч. по спец. 011000 "Химия" и напр. 510100 "Химия" / В. М. Байрамов. – Москва : Academia, 2003. – 319 с.

Перечень рекомендуемых средств диагностики и методика формирования итоговой отметки

Объектом диагностики компетенций студентов являются знания, умения, полученные ими в результате изучения учебной дисциплины. Выявление учебных достижений студентов осуществляется с помощью мероприятий текущего контроля и текущей аттестации.

Текущий контроль качества усвоения знаний по данной учебной дисциплине может осуществляться с использованием следующих форм диагностики компетенций:

1. Устная защита письменного отчета по лабораторным работам.
2. Написание аудиторных контрольных работ по всем темам.
3. Написание аудиторных коллоквиумов по всем темам.
4. Написание аудиторных тестов по всем темам.
5. Устный зачет по дисциплине.
4. Письменный экзамен по дисциплине.

Формой текущей аттестации по дисциплине «Физическая химия» учебным планом предусмотрены зачеты (в двух семестрах) и экзамены (в двух семестрах).

При формировании итоговой отметки используется рейтинговая оценка знаний студента, дающая возможность проследить и оценить динамику процесса достижения целей обучения. Рейтинговая отметка предусматривает использование весовых коэффициентов для текущего контроля знаний и текущей аттестации студентов по дисциплине.

Формирование отметки за текущую успеваемость по дисциплине «Физическая химия»

раздел «Химическая термодинамика»:

- устная защита письменного отчёта по лабораторным работам – 25 %
- контрольные работы – 25 %
- коллоквиумы – 25 %
- тесты – 25 %.

раздел «Химическая кинетика и катализ»:

- коллоквиумы – 33 %;
- устная защита письменного отчёта по лабораторным работам – 33 %;
- контрольные работы – 33 %.

Итоговая отметка формируется на основе:

Правил проведения аттестации студентов, курсантов, слушателей при освоении содержания образовательных программ высшего образования (утверждены постановлением Министерством образования Республики Беларусь от 29.05.2012 № 53);

Положения о рейтинговой системе оценки знаний обучающихся по учебной дисциплине в Белорусском государственном университете (утверждено приказом ректора БГУ от 31.03.2020 № 189-ОД).

Итоговая отметка по дисциплине «Физическая химия» рассчитывается на основе отметки текущей успеваемости и экзаменационной отметки с учетом их весовых коэффициентов.

По разделу «Химическая термодинамика» весовой коэффициент отметки текущей успеваемости составляет 40 %, экзамена – 60 %.

По разделу «Химическая кинетика и катализ» весовой коэффициент отметки текущей успеваемости составляет 30 %, экзамена – 70 %.

Примерный перечень заданий для управляемой самостоятельной работы студентов

Раздел 1. Химическая термодинамика

Тема 1.1. Основные понятия, терминология и постулаты химической термодинамики. Первый закон термодинамики.

Тема 1.2. Термохимия.

Примеры контрольных задач.

1. Определить максимальную температуру сгорания метана с 50 % избытком чистого кислорода, если кислород и метан подогреты до 500 К.

2. 1,5 кг воды при постоянном давлении 1 атм нагревают от 15 °С до 100 °С и полностью испаряют при этой температуре. Рассчитать работу, теплоту, изменение внутренней энергии и энтальпии суммарного процесса. Энтальпия испарения воды в нормальной точке кипения равна 40.60 кДж/моль.

Пример тестового задания.

I. Термодинамическим процессом называют

- 1) неравновесное состояние системы.
- 2) стационарное состояние системы.
- 3) последовательность неравновесных состояний системы.
- 4) изменение состояния системы, характеризующееся изменением ее термодинамических переменных.

II. Различием в тепловых эффектах химической реакции $\Delta_r H$ и $\Delta_r U$ можно пренебречь,

- 1) если в реакции участвуют вещества только в газообразном состоянии.
- 2) если в ходе реакции объем увеличивается.
- 3) если в реакции участвуют вещества только в конденсированном состоянии.
- 4) если в ходе реакции давление не изменяется.

III. Работа равновесного адиабатического расширения n моль идеального газа равна:

$$\begin{aligned} 1) W &= nC_p(T_2 - T_1). & 2) W &= nC_v(T_2 - T_1). \\ 3) W &= \frac{nR}{\gamma-1}(T_2 - T_1). & 4) W &= \frac{1}{\gamma-1}(P_1V_1 - P_2V_2). \end{aligned}$$

Перечень средств диагностики:

1. Контрольная работа.
2. Тест
3. Коллоквиум

Тема 1.3. Второй закон термодинамики и его приложения.

Тема 1.4. Фундаментальные уравнения термодинамики

Примеры контрольных задач

1. Рассчитать абсолютную энтропию 1 моль воздуха при 500 К и давлении 100 атм, предполагая, что газы ведут себя как идеальные.

2. Определить ΔH , ΔU , ΔS , ΔG , ΔA , W процесса

1 моль H_2O (ж; 298.15 К; 1 атм) \rightarrow 1 моль H_2O (пар; 298.15 К; 1 атм).

При решении использовать справочные данные по температурной зависимости теплоемкости и стандартной энтальпии образования жидкой и газообразной воды.

Примеры тестового задания

I. Для закрытых систем при постоянной температуре выполняется соотношение

$$\begin{aligned} 1) \Delta H &= \Delta G - T \left(\frac{\partial \Delta G}{\partial T} \right)_v; & 2) \Delta H &= \Delta U + P\Delta V; \\ 3) \Delta H &= \Delta G - T \left(\frac{\partial \Delta G}{\partial T} \right)_p; & 4) \Delta H &= \Delta U + V\Delta P. \end{aligned}$$

II. Закрытая система находится в равновесии, если

- 1) $dG = 0$ при постоянных S и V ; 2) $dU = 0$ при постоянных S и V ;
 3) $dA = 0$ при постоянных T и P ; 4) $dH = 0$ при постоянных T и P .

Перечень средств диагностики:

1. Контрольная работа.
2. Тест
3. Коллоквиум

Тема 1.5. Термодинамика растворов.

Тема 1.6. Термодинамика гетерогенных систем.

Тема 1.7. Химические равновесия в гомогенных и гетерогенных системах.

Тема 1.8. Методы вычисления стандартной энергии Гиббса и константы равновесия химических реакций. (6 ч.)

Примеры контрольных задач

- 1). Температура замерзания 0,8 М водного раствора сахарозы равна $-1,6$ °С. Криоскопическая постоянная воды равна 1,86. Определите изотонический коэффициент сахарозы в растворе. Плотность раствора принять равной 1 г/см³.
- 2). Вычислите стандартную константу равновесия реакции

$$1/2\text{N}_2 + \text{O}_2 \Leftrightarrow \text{NO}_2$$
 при $T = 1400$ К методом Темкина-Шварцмана.
- 3). Оцените температуру, при которой начнет разлагаться на воздухе FeO.

Примеры тестового задания

Темы 1.5, 1.6, 1.7, 1.8

I. Температура кипения идеального раствора зависит

- 1) только от внешнего давления; 2) только от состава раствора;
- 3) только от свойств растворителя и растворенного вещества;
- 4) от всех перечисленных факторов.

II. Многокомпонентная гетерогенная система находится в равновесии, если

- 1) P и T постоянны; 2) P и V постоянны, а $\Delta G = 0$;
- 3) P и T постоянны, $\mu_1^I = \mu_2^I = \mu_3^I$;
- 4) P и T постоянны, $\mu_1^I = \mu_1^{II} = \mu_1^{III}$.

(верхний индекс показывает фазу, нижний — компонент).

III Число степеней свободы равно

- 1) числу равновесных фаз; 2) числу компонентов;
- 3) числу внешних параметров;
- 4) числу независимых переменных при равновесии фаз.

Тема 1.8.

I. Для реакций с идеальными газами

- 1) $K_p > K_y$; 2) $K_p < K_C$; 3) соотношения зависят от типа реакции;
- 4) $K_y > K_C$.

II. Направление реакции $A_{\text{ТВ}} \rightarrow B_{\text{ТВ}}$ при $P, T = \text{const}$ зависит

- 1) от соотношения парциальных давлений компонентов; 2) от массы компонентов;
- 3) от термодинамических свойств компонентов; 4) только от температуры реакции.

III. Зависимость K° от температуры определяется следующим уравнением:

$$\begin{aligned} 1) \lg K^\circ &= \frac{\Delta_r H^\circ}{RT^2}; & 2) \lg K^\circ &= -\frac{\Delta_r H^\circ}{RT^2} + \text{const}; \\ 3) \ln K^\circ &= -\frac{\Delta_r H^\circ}{2,303RT} + \text{const}; & 4) \lg K^\circ &= -\frac{\Delta_r H^\circ}{2,303RT} + \text{const}. \end{aligned}$$

Перечень средств диагностики:

1. Контрольная работа.
2. Тест
3. Коллоквиум

Раздел 2. Химическая кинетика и катализ

Тема 2.1 Основные понятия и постулаты химической кинетики.

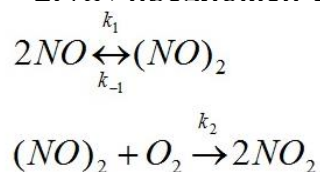
Тема 2.2 Кинетические особенности протекания простых и сложных химических реакций в статических и динамических условиях.

Тема 2.3 Зависимость скорости реакции от температуры.

Примеры контрольных задач

1). Реакция первого порядка проходит на 20 % за 25 минут. Рассчитайте константу скорости реакции, а также время, за которое прореагирует 90 % исходного вещества.

2). Для реакции $2\text{NO} + \text{O}_2 = 2\text{NO}_2$ предложен следующий механизм:

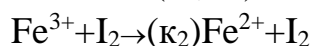
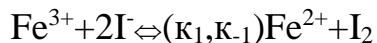


Получите выражение для суммарной скорости процесса, учитывая, что первая стадия – быстрая, а вторая – медленная.

Примеры заданий коллоквиума

1. В системе происходят последовательных реакциях типа $A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C$. Как изменяется скорость образования продукта реакции (dC_C/dt) с течением времени? Обоснуйте свой ответ.

2. Известно, что реакция окисления иодид-ионов ионами трехвалентного железа ($Fe^{3+} + I^- = Fe^{2+} + 1/2 I_2$) проходит по механизму



С учетом предложенного механизма получите выражение для скорости процесса в целом.

3. Как связана эффективная энергия активации параллельной реакции $A \rightarrow B$ (k_1), $A \rightarrow C$ (k_2) с энергиями активации ее отдельных стадий?

Перечень средств диагностики:

1. Контрольная работа.
2. Коллоквиум.
3. Устная защита письменного отчёта по лабораторной работе.

Тема 2.4 Теории химической кинетики.

Тема 2.5 Основы кинетики отдельных типов химических реакций.

Примеры контрольных задач

1). Рассчитайте общее число соударений молекул кислорода в 1 см^3 за 1 с, если давление кислорода равно 10^{-3} мм ртутного столба, а температура составляет 298 К. Диаметр молекулы кислорода равен $3,61 \text{ \AA}$.

2). В растворе происходит реакция $NO_3^- + 4H^+ = NO + 2 H_2O$. Ионную силу раствора задают, растворяя в реакционной смеси следующие соли: а) 10 г KCl + 10 г CaCl₂ б) 10 г NaCl + 10 г CaCl₂ в) 5 г KCl + 5 г NaCl + 5 г CaCl₂. Будет ли различаться скорость реакции в присутствии данных солей, если «да», то каким образом?

Примеры заданий коллоквиума

1. Какой порядок имеет газофазная мономолекулярная реакция при высоких давлениях? Пользуясь схемой Линдемана (приведите схему), поясните смену порядка реакции.

2. Какие первичные и вторичные процессы могут протекать при поглощении света веществом? В чем состоит схема Штерна-Фольмера?

Каким образом можно ее использовать при экспериментальном определении квантового выхода (термин пояснить) реакции?

3. Как связаны между собой экспериментально определяемая энергия активации E_a и энтальпия активации ΔH^\ddagger ? Получите соответствующее соотношение.

Перечень средств диагностики:

1. Контрольная работа.
2. Коллоквиум.
3. Устная защита письменного отчёта по лабораторной работе.

Тема 2.6 Катализ

Примеры заданий коллоквиума

1. Что понимают под терминами «общий кислотный катализ»(1) и «специфический кислотный катализ»(2)? Запишите механизм реакций (1) и (2) и приведите по 3-4 примера веществ, в присутствии которых реакции кислотно-основного катализа пойдут по этим механизмам

2. Какие механизмы ингибирования ферментативных реакций Вам известны? Приведите схемы соответствующих механизмов и для одного из них (по Вашему выбору) укажите, как можно доказать данный механизм экспериментально.

3. В чем состоит механизм Риделя-Или в случае протекания на поверхности катализатора гетерогенной реакции



Перечень средств диагностики:

1. Коллоквиум.
2. Устная защита письменного отчёта по лабораторной работе.

Примерная тематика практических и лабораторных занятий по разделу «Химическая термодинамика»

Практическое занятие № 1

Уравнения состояния идеальных и реальных газов.

Практическое занятие № 2

Первый закон термодинамики.

Практическое занятие № 3

Энтальпия, теплоемкость, адиабатическое расширение газов.

Практическое занятие № 4

Термохимические расчеты.

Практическое занятие № 5

Второй закон термодинамики. Изменение энтропии в обратимых и необратимых процессах. Абсолютная энтропия.

Практическое занятие № 6

Характеристические функции.

Практическое занятие № 7

Фазовые равновесия в однокомпонентных системах.

Практическое занятие № 8

Термодинамика растворов. Коллигативные свойства растворов. Активность.

Практическое занятие № 9

Растворимость газов и твердых тел в жидкостях.

Практическое занятие № 10

Химические равновесия. Расчет констант равновесия по таблицам стандартных значений термодинамических функций.

Практическое занятие № 11

Термодинамика реальных газов. Химические равновесия в реальных системах

Лабораторная работа № 1

Определение теплоты растворения неорганических соединений.

Лабораторная работа № 2

Определение теплоты ионизации воды.

Лабораторная работа № 3

Определение теплоты образования твердых растворов.

Лабораторная работа № 4

Определение теплоты образования кристаллогидратов.

Лабораторная работа № 5

Определение дифференциальной теплоты растворения соли.

Лабораторная работа № 6

Определение давления насыщенного пара и энтропии испарения индивидуальных жидкостей статическим методом.

Лабораторная работа № 7

Построение изотермы взаимной растворимости в трехкомпонентной системе.

Лабораторная работа № 8

Определение молекулярного веса вещества криоскопическим методом.

Лабораторная работа № 9

Определение константы равновесия реакции взаимодействия салициловой кислоты с хлорным железом оптическим методом.

Примерная тематика практических и лабораторных занятий по разделу «Химическая кинетика и катализ»

Практическое занятие № 1.

Основные понятия химической кинетики. Вычисление скорости реакции по экспериментальным данным.

Практическое занятие № 2.

Расчет константы скорости в реакциях нулевого и первого порядков по экспериментальным данным.

Практическое занятие № 3.

Расчет константы скорости в реакциях второго и третьего порядков по экспериментальным данным.

Практическое занятие № 4.

Методы определения порядка реакции.

Практическое занятие № 5.

Кинетические особенности параллельных реакций.

Практическое занятие № 6.

Кинетические особенности обратимых реакций.

Практическое занятие № 7.

Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса.

Практическое занятие № 8.

Приближенные методы химической кинетики.

Практическое занятие № 9.

Применение метода Боденштейна и квазиравновесного приближения к описанию реальных процессов (на примере получения фосгена и разветвленного радиоактивного распада).

Практическое занятие № 10.

Теория активных столкновений. Расчет константы скорости бимолекулярной реакции.

Практическое занятие № 11.

Кинетические особенности мономолекулярных реакций в теории активных столкновений.

Практическое занятие № 12.

Термодинамический аспект теории активированного комплекса. Энтропия и энтальпия активации.

Лабораторная работа № 1.

Определение порядка реакции окисления иодид-ионов ионами трехвалентного железа дифференциальным методом Вант-Гоффа.

Лабораторная работа № 2.

Определение константы скорости инверсии тростникового сахара оптическим методом.

Лабораторная работа № 3.

Изучение кинетики реакции иодирования ацетона в кислой среде с использованием методов химического анализа.

Лабораторная работа № 4.

Изучение кинетики каталитического разложение перекиси водорода газометрическим методом.

Лабораторная работа № 5.

Изучение кинетики реакции омыления эфира методом измерения проводимости.

Описание инновационных подходов и методов к преподаванию учебной дисциплины

При организации образовательного процесса используется **практико-ориентированный подход**, который предполагает:

- освоение содержание образования через решения практических задач;
- приобретение навыков эффективного выполнения разных видов профессиональной деятельности;
- ориентацию на генерирование идей, реализацию групповых студенческих проектов, развитие предпринимательской культуры;
- использованию процедур, способов оценивания, фиксирующих сформированность профессиональных компетенций.

Использование практико-ориентированного подхода обеспечивает приобретение студентами конкретного профессионального опыта, развивает логическое мышление, способствует формированию целостной естественно-научной картины мира.

метод учебной дискуссии, который предполагает участие студентов в целенаправленном обмене мнениями, идеями для предъявления и/или согласования существующих позиций по определенной проблеме.

Использование метода обеспечивает появление нового уровня понимания изучаемой темы, применение знаний (теорий, концепций) при решении проблем, определение способов их решения.

методы и приемы развития критического мышления, которые представляют собой систему, формирующую навыки работы с информацией в процессе чтения и письма; понимания информации как отправного, а не конечного пункта критического мышления.

Методические рекомендации по организации самостоятельной работы обучающихся

При изучении учебной дисциплины рекомендуется использовать следующие формы самостоятельной работы:

- поиск и обзор литературы и электронных источников по заданной проблеме курса;
- выполнение домашнего задания;
- решение задач, предлагаемых на лабораторных занятиях;
- подготовка к лабораторным занятиям.

Для выполнения самостоятельной работы обучающиеся также могут воспользоваться материалами созданного на портале educhem.bsu.by курса «Физическая химия».

Примерный перечень вопросов к экзамену по разделу «Химическая термодинамика» (для всех специальностей)

1. Термодинамическая система и окружающая среда. Типы термодинамических систем. Равновесное состояние системы, его описание. Параметры состояния системы, их классификация: внешние и внутренние, интенсивные и экстенсивные, независимые параметры и функции, основные параметры.
2. Функции процесса и состояния, их математическое описание. Термодинамические процессы: равновесные, неравновесные, обратимые, необратимые. Характеристики равновесных и обратимых процессов. Уравнения состояния (реальных газов).
3. Термические и калорические уравнения состояния. Термодинамические коэффициенты α , χ и β и соотношение между ними.
4. Исходные постулаты (положения) термодинамики. Постулат о термодинамическом равновесии и его значение для термодинамики. Постулат о существовании температуры. Понятие о температуре, температурные шкалы. Постулат о внутренних параметрах. Вариантность системы, правило Дюгема.
5. Внутренняя энергия системы, работа и теплота, их определение, единицы измерения. Первый закон термодинамики, его формулировки. Виды работы, потерянная работа.
6. Работа расширения. Вычисление работы расширения идеальных газов в различных обратимых и необратимых процессах.

7. Теплоемкость. Теплоемкость различных процессов. Соотношения между изобарной и изохорной теплоемкостями. Зависимость теплоемкости от температуры. Теплоемкость газов (классическая и квантовая теории).
8. Теплоемкость кристаллических тел (теории Эйнштейна и Дебая).
9. Политропные процессы, уравнение политропы. Адиабатическое расширение газа. Уравнение адиабаты идеального газа. Работа расширения газа в адиабатическом, изотермическом, изобарном и изохорном процессах, соотношение.
10. Калорические коэффициенты. Энтальпия, ее определение. Тепловой эффект реакции. Связь Q_p и Q_v . Закон Гесса. Термохимические уравнения.
11. Следствия из закона Гесса. Стандартное состояние и стандартные условия. Выбор стандартного состояния газов и конденсированных фаз. Стандартные теплоты образования и сгорания химических соединений.
12. Зависимость теплового эффекта химической реакции от температуры. Уравнение Кирхгофа, приближения при практическом применении уравнения Кирхгофа. Расчет теплового эффекта реакции на основе стандартных энтальпий образования при 0 К и приращений энтальпии.
13. Самопроизвольные и несамопроизвольные процессы. Второй закон термодинамики. Энтропия как функция состояния. Аналитическое выражение второго закона термодинамики для обратимых и необратимых процессов. Второй закон термодинамики для изолированных систем
14. Вычисление изменения энтропии в различных обратимых процессах: изотермических, при нагревании, процессах с участием идеальных газов. Энтропийная постоянная идеального газа
15. Изменение энтропии при смешении идеальных газов в изобарно-изотермическом процессе. Парадокс Гиббса. Вычисление изменения энтропии при необратимых процессах.
16. Внутреннее давление, закон Джоуля. Внутреннее давление газа Ван-дер-Ваальса. Выражение для разности изобарной и изохорной теплоемкостей вещества через термодинамические коэффициенты.
17. Постулат Планка. Абсолютное значение энтропии. Расчет абсолютной энтропии вещества при заданной температуре. Стандартные энтропии веществ и их сопоставление между собой.
18. Фундаментальные уравнения термодинамики. Преобразования Лежандра. Характеристические функции.
19. Внутренняя энергия и энтальпия как характеристические функции, зависимость от естественных переменных, связь с работой системы.

20. Энергии Гельмгольца и Гиббса как характеристические функции, зависимость от естественных переменных, связь с работой системы.
21. Уравнение Гиббса-Гельмгольца в дифференциальной и интегральной формах. Соотношения Максвелла.
22. Общие условия равновесия в изолированных и закрытых системах. Условия равновесия в однокомпонентных гетерогенных системах. Фаза, компонент, фазовый переход, их определения
23. Уравнение Клапейрона-Клаузиуса. Фазовые переходы первого и второго рода. Плавление. Зависимость температуры плавления вещества от давления.
24. Уравнение Клапейрона-Клаузиуса для испарения и сублимации. Зависимость давления насыщенного пара вещества от температуры. Энтальпия и энтропия испарения жидкости в критической точке. Эмпирические уравнения, описывающие зависимость давления насыщенного пара от температуры, физический смысл входящих в них коэффициентов.
25. Характеристические функции многокомпонентных систем. Химический потенциал, его определение. Однородные функции состава. Уравнения Гиббса – Дюгема.
26. Парциальные молярные величины, их определение. Обобщенные уравнения Гиббса-Дюгема.
27. Условия равновесия в многокомпонентных гетерогенных системах. Газообразные растворы. Химический потенциал идеального газа.
28. Термодинамические функции смеси идеальных газов. Функции смешения идеальных газов в изобарно-изотермических условиях. Химический потенциал компонента в смеси идеальных газов.
29. Давление насыщенного пара растворителя над раствором. Закон Рауля. Давление насыщенного пара растворенного вещества над раствором. Уравнение Дюгема – Маргулеса. Закон Генри.
30. Состав насыщенного пара идеального жидкого раствора. Относительная летучесть. Диаграммы равновесия «жидкость – пар» идеальных бинарных систем
31. Температура кипения идеального раствора. Диаграммы состояния «температура кипения – состав» идеальных бинарных систем. Термодинамическое обоснование условий эффективного разделения компонентов раствора путем перегонки.
32. Реальные растворы. Положительные и отрицательные отклонения от закона Рауля. Законы Гиббса – Коновалова, их обоснование. Азеотропы.

33. Химический потенциал компонента в идеальном, предельно разбавленном и реальном жидких растворах. Активность. Симметричный и несимметричный выбор стандартного состояния.
34. Избыточные функции смешения. Термодинамическая классификация растворов. Регулярные и атермальные растворы.
35. Равновесия «жидкость – жидкость» и «пар – жидкий раствор» в системах с ограниченной взаимной растворимостью жидкостей. Верхняя и нижняя критические температуры растворимости. Парциальные давления насыщенного пара компонентов и общее давление в области ограниченной растворимости.
36. Равновесие «пар – жидкость» в системах с взаимно нерастворимыми жидкостями. Растворимость газов в жидкостях: зависимость от температуры, давления, природы газов и растворителей.
37. Растворимость твердых веществ в жидкостях, зависимость от температуры и давления. Уравнения Шредера и Ван-Лаара. Интегральные и дифференциальные теплоты растворения.
38. Коллигативные свойства растворов. Понижение температуры замерзания растворов, криоскопия. Криоскопическая постоянная.
39. Коллигативные свойства растворов. Повышение температуры кипения растворов, эбулиоскопия. Эбулиоскопическая постоянная.
40. Осмотические явления в растворах, причины. Уравнение зависимости осмотического давления от состава раствора Вант-Гоффа. Границы применимости уравнения Вант-Гоффа. Осмотический коэффициент.
41. Правило фаз Гиббса. Диаграммы состояния индивидуальных веществ веществ на примере диаграммы состояния воды.
42. Диаграмма состояния (плавкости) двухкомпонентной системы с неограниченной растворимостью компонентов в жидком и твердом состояниях. Кривые ликвидуса, солидуса. Факторы, влияющие на растворимость компонентов при образовании твердых растворов внедрения и замещения. Диаграмма плавкости двухкомпонентных систем с одной фазой переменного состава (с простой эвтектикой), с неограниченной растворимостью в жидком состоянии и ограниченной растворимостью в твердом состоянии.
43. Диаграмма плавкости двухкомпонентных систем с одной фазой переменного состава (с простой эвтектикой), с неограниченной растворимостью в жидком состоянии и ограниченной растворимостью в твердом состоянии. Факторы, влияющие на растворимость компонентов при образовании твердых растворов внедрения и замещения.

44. Термодинамика систем с химическими реакциями. Химическое равновесие. Химическое сродство и x переменная. Общие условия химического равновесия.
45. Химическое равновесие в смесях идеальных газов. Закон действующих масс, термодинамический вывод. Термодинамическая константа равновесия, другие виды констант равновесия и связь между ними.
46. Изобарно-изотермический потенциал (энергия Гиббса) химической реакции. Уравнение изотермы химической реакции. Стандартная энергия Гиббса реакции и ее связь с константой равновесия.
47. Химические равновесия в жидких растворах. Гетерогенные химические равновесия. Смещение равновесия. Принцип Ле-Шателье – Брауна, его термодинамическая трактовка.
48. Зависимость константы равновесия от температуры. Уравнения изобары и изохоры Вант-Гоффа. Влияние давления на химическое равновесие. Уравнение Планка – Ван-Лаара.
49. Вычисление стандартной энергии Гиббса и констант равновесия химических реакций по таблицам термодинамических величин. Энтропийные методы. Метод Темкина – Шварцмана.
50. Вычисление констант равновесия химических реакций с помощью функции приведенной энергии Гиббса и методом комбинирования реакций. Вычисление равновесного состава реакций, протекающих в идеально-газовой системе.
51. Химическое равновесие и тепловой закон Нернста. Следствия из теоремы Нернста. Понятие о летучести (фугитивности) реальных газов.
52. Способы расчета летучести реальных газов. Закон соответственных состояний. Расчет константы равновесия в реальных (неидеальных) газовых системах.

Перечень задач:

1. Расчет изменения внутренней энергии, энтальпии, энтропии, энергии Гиббса, энергии Гельмгольца, теплоты и работы различных обратимых и необратимых процессов (изотермического, изобарного, изохорного, адиабатического, расширения против постоянного внешнего давления, сжатия под постоянным внешним давлением, расширения в вакуум)
2. Расчет максимальной температуры пламени при сгорании вещества в атмосфере чистого кислорода и на воздухе
3. Расчет конечных (начальных) температуры, объема, давления адиабатических процессов, адиабатического коэффициента неизвестного газа.
4. Расчет стандартных энтальпий, энтропий, внутренних энергий, энергий Гиббса и Гельмгольца фазовых переходов

5. Расчет стандартных энтальпий, энтропий, внутренних энергий, энергий Гиббса и Гельмгольца химических реакций с помощью справочных данных при 298,15 К.

6. Расчет стандартных энтальпий и внутренних энергий реакций методом комбинирования термохимических уравнений реакций с известными тепловыми эффектами.

7. Расчет работы, теплоты, изменение внутренней энергии энтальпии и энтропии процессов нагревания вещества при $P = \text{const}$, либо $V = \text{const}$, если при этом изменяются агрегатные состояния вещества

8. Расчет стандартных энтальпий, энтропий, внутренних энергий, энергий Гиббса и Гельмгольца химических реакций с помощью справочных данных при $T \neq 298,15$ К.

9. Расчет энтальпии реакции при абсолютном нуле.

10. Расчет абсолютной энтропии вещества при заданной температуре с использованием справочных данных по теплоемкостям вещества в различных агрегатных состояниях, значения S° при 298,15 К.

11. Расчет изменения энтропии в ходе протекания различных обратимых и необратимых процессов (изотермического, изобарного, изохорного, адиабатического, расширения в вакуум и др.)

12. Расчет изменения энтропии идеального газа при изменении его температуры и давления (температуры и объема, давления и объема)

13. Расчет изменения энтропии при смешении идеальных газов, абсолютной энтропии смеси газов при $T \neq 298,15$ К и $P \neq P^\circ$.

14. Расчет изменения энтропии неравновесных процессов (кристаллизация переохлажденной воды и т.п.)

15. Расчет энтальпии сублимации, испарения и плавления вещества, температуры и давления в тройной точке, если даны уравнения зависимости давления насыщенного пара над твердым и жидким веществом

16. Расчет энтальпии сублимации, испарения и плавления вещества, температуры и давления в тройной точке, если даны значения давлений над кристаллическим веществом при двух температурах и жидким веществом при двух температурах

17. Расчет энтропий фазовых переходов.

18. Расчет температуры плавления при $P \neq P^\circ$, если известны плотности твердой и жидкой фазы, температура плавления при P° и энтальпия плавления.

19. Расчет энтальпий фазовых переходов по данным об энтальпиях образования веществ в различных агрегатных состояниях, а также с использованием правила Трутона.

20. Расчет равновесного давления перехода вещества из одной аллотропной модификации в другую (например: графит-алмаз)
21. Расчет ΔU , ΔH , ΔS , ΔG , ΔA при сжатии (расширении) вещества по данным о термодинамическом коэффициенте расширения в приближении несжимаемой жидкости.
22. Расчет изменения ΔG при изменении давления реального газа (случай высоких давлений)
23. Расчет давления насыщенного пара при различных температурах по уравнению Клапейрона – Клаузиуса (с последующим ответом на иные вопросы, например, о содержании воды в воздухе комнаты)
24. Расчет давления насыщенного пара при заданной температуре по уравнению Клапейрона – Клаузиуса, если известна только нормальная температура кипения вещества
25. Расчет конечной температуры при смешении веществ разной массы с различными температурами и в различных агрегатных состояниях (например, воды и льда)
26. Расчет молекулярной массы растворенного вещества по данным о понижении давления пара растворителя при добавлении в него известной массы вещества для случаев, если растворенное вещество диссоциирует и не диссоциирует.
27. Расчет изотонического коэффициента по данным криоскопических измерений
28. Определение давления и состава насыщенного пара над идеальным раствором известного состава при заданной температуре, если известны нормальные температуры кипения составляющих раствор веществ.
29. Определение давления и состава насыщенного пара над идеальным раствором известного состава при заданной температуре, если известны нормальные температуры кипения составляющих раствор веществ.
30. Определение давления, состава насыщенного пара над разбавленным раствором известного состава при заданной температуре, а также константы Генри растворенного вещества по известному общему давлению пара над раствором.
31. Расчет молярной массы вещества по данным о составе дистиллята при перегонке этого вещества с водяным паром при известных температуре и давлении.,
32. Расчет молярной массы или изотонического коэффициента вещества в растворе по данным эбулиоскопических опытов
33. Расчет стандартной термодинамической константы равновесия по справочным данным термодинамических свойств участников реакции.

34. Определение направления протекания обратимой реакции по уравнению изотермы Вант-Гоффа.

35. Расчет K° , K_p , K_y , K_c и общего давления различных обратимых химических реакций.

36. Расчет давления, которое необходимо приложить к реакционной смеси, чтобы степень превращения исходных веществ достигла необходимого значения.

37. Расчет констант равновесия при $T \neq 298,15$ по уравнению изобары Вант-Гоффа, через приведенную энергию Гиббса, методом Темкина – Шварцмана.

38. Расчет температуры, при которой на воздухе разлагаются оксиды и карбонаты

39. Расчет коэффициента летучести (активности) и летучести реального газа, подчиняющегося уравнению Ван-дер-Ваальса

40. Расчет коэффициента летучести (активности) и летучести реального газа по сведениям об объеме реального газа.

41. Расчет коэффициента летучести (активности) и летучести реального газа с помощью принципа соответственных состояний.

Примерный перечень вопросов к экзамену по разделу «Химическая кинетика и катализ» (для всех специальностей)

1. Предмет химической кинетики. Особенности кинетического подхода к описанию химических реакций. Прямая и обратная задачи химической кинетики. Основной постулат химической кинетики. Область применения закона действия масс.

2. Основные понятия химической кинетики. Скорость реакции, константа скорости, порядок и молекулярность реакции – единицы измерения и физический смысл.

3. Истинная и средняя скорость химической реакции, экспериментальное определение скорости химической реакции. Факторы, влияющие на скорость химической реакции.

4. Общий и частный порядок химической реакции. Кинетическая классификация реакций по их порядку. Временной и концентрационный порядок реакции.

5. Кинетические кривые и кинетические уравнения для элементарных реакций различного порядка.

6. Константа скорости химической реакции, ее физический смысл и размерность для реакций различных порядков.

7. Основные принципы химической кинетики: принцип независимости химических реакций, принцип лимитирующей стадии химического процесса, принцип детального равновесия.

8. Кинетические особенности протекания простых необратимых реакций нулевого порядка.

9. Кинетические особенности протекания простых необратимых реакций первого порядка.

10. Кинетические особенности простых необратимых реакций второго порядка при одинаковой и различной начальной концентрации участников реакции.

11. Понятие об интегральных и дифференциальных методах определения порядка реакции и константы скорости. Метод подбора уравнений в графическом и аналитическом вариантах. Метод определения порядка реакции по времени полупревращения (метод Оствальда – Нойеса). Дифференциальный метод Вант–Гоффа.

12. Кинетические особенности протекания обратимых реакций.

13. Кинетические особенности протекания параллельных реакций.

14. Кинетические особенности протекания последовательных реакций.

15. Приближенные методы химической кинетики: метод стационарных концентраций Боденштейна и условия его применимости, квазиравновесное приближение.

16. Зависимость скорости реакции от температуры. Эмпирическое правило Вант–Гоффа и область его применимости. Уравнение Аррениуса и различные формы его записи. Предэкспоненциальный множитель в уравнении Аррениуса – физический смысл, единицы измерения, зависимость от температуры.

17. Нахождение энергии активации химической реакции по экспериментальным данным. Истинная и кажущаяся энергия активации.

18. Теория активных столкновений. Расчет общего числа столкновений между одинаковыми частицами и частицами разных типов. Частота столкновений. Уравнение Траутца-Льюиса для бимолекулярной реакции.

19. Особенности кинетики мономолекулярных реакций в теории активных столкновений. Схема Линдемана. Зависимость порядка мономолекулярной реакции от давления в системе.

20. Основные положения теории активированного комплекса. Поверхность потенциальной энергии и энергетический профиль реакции. Уравнение Эйринга.

21. Термодинамический аспект теории активированного комплекса. Расчет энергии активации и предэкспоненциального множителя в уравнении

Аррениуса на основании термодинамических параметров процессов активации в реакциях разной молекулярности.

22. Кинетика реакций в растворах. Зависимость константы скорости реакций в растворах от ионной силы. Уравнение Бренстеда-Бьеррума. Первичный и вторичный солевой эффект.

23. Кинетика цепных реакций. Элементарные стадии возникновения, продолжения, развития и обрыва цепи. Особенности кинетики разветвленных и неразветвленных цепных реакций.

24. Кинетика фотохимических реакций. Основные законы фотохимии: законы Гротгуса, Вант-Гоффа и Эйнштейна. Квантовый выход. Процессы, происходящие при поглощении света веществом. Схема Штерна-Фольмера.

25. Скорость гетерогенной химической реакции. Роль диффузии и адсорбции при протекании гетерогенного процесса. Диффузионная и кинетическая области протекания гетерогенной реакции.

26. Кинетические особенности топочимических реакций. Уравнение Ерофеева-Колмогорова.

27. Основные понятия теории катализа. Особенности механизма и энергетический профиль гомогенных и гетерогенных каталитических процессов. Роль катализаторов в химии и биологии.

28. Кислотно-основной катализ. Классификация кислот и оснований по Бренстеду и Льюису. Специфический и общий кислотный катализ. Солевые эффекты в кислотно-основном катализе.

29. Ферментативный катализ. Влияние температуры и pH среды на скорость ферментативной реакции.

30. Механизм реакций ферментативного катализа. Уравнение Михаэлиса – Ментен. Методы определения кинетических параметров уравнения Михаэлиса – Ментен по экспериментальным данным.

31. Механизмы ингибирования ферментативных реакций (конкурентное, неконкурентное, бесконкурентное ингибирование и ингибирование субстратом).

32. Гетерогенный катализ. Стадии гетерогенного каталитического процесса. Внешнедиффузионная, внутридиффузионная и кинетическая области протекания гетерогенной реакции.

33. Кинетика реакций на равнодоступной поверхности. Механизмы Лэнгмюра-Гиншельвуда и Риделя-Или.

34. Основные положения мультиплетной теории катализа и теории активных ансамблей.

ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ УВО

Название учебной дисциплины, с которой требуется согласование	Название кафедры	Предложения об изменениях в содержании учебной программы учреждения высшего образования по учебной дисциплине	Решение, принятое кафедрой, разработавшей учебную программу (с указанием даты и номера протокола)
1. Электрохимия	Кафедра электрохимии	Нет изменений	Вносить изменения не требуется. Протокол № 2 от 07.10.2022 г.

**ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЕ ПО
ИЗУЧАЕМОЙ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЕ**

на ____ / ____ учебный год

№ п/п	Дополнения и изменения	Основание

Учебная программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры
_____ (протокол № ____ от _____ 202_ г.)

Заведующий кафедрой

УТВЕРЖДАЮ
Декан факультета
