

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
**Пермский федеральный исследовательский центр
Уральского отделения
Российской академии наук**

Принято на заседании
Объединенного ученого совета
ПФИЦ УрО РАН
Протокол № 6
«02» сентября 2022 г.



**ФОНД
ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ
ПО УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЕ**

«ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

Специальность 1.4.4.- Физическая химия
(код и наименование)

Форма обучения: Очная

Курс: 4 Семестр(ы): 8

Трудоёмкость:
Часов по рабочему учебному плану: 108 ч

Виды контроля:
Экзамен: - **1** Зачёт: - **нет** Курсовой проект: - **нет** Курсовая работа: - **нет**

Пермь 2022

Фонд оценочных средств (ФОС) для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине «Физическая химия» разработан на основании:

- Приказа Министерства науки и высшего образования РФ от 20 октября 2021г. №951 «Об утверждении федеральных государственных требований к структуре программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре), условиям их реализации, срокам освоения этих программ с учетом различных форм обучения, образовательных технологий и особенностей отдельных категорий аспирантов (адъюнктов)»;
- рабочего учебного плана очной формы обучения специальности 1.4.4 Физическая химия, Основной образовательной программы аспирантуры (уровень подготовки кадров высшей квалификации), утверждённой протоколом №3 заседания Объединенного ученого совета ПФИЦ УрО РАН от 18.03.2022 г.
- Положения о порядке разработки и утверждения программ аспирантуры Федерального государственного бюджетного учреждения науки Пермского федерального исследовательского центра Уральского отделения Российской академии наук (ПФИЦ УрО РАН), принятого на заседании Объединенного ученого совета ПФИЦ УрО РАН, протокол № 3 от 18.03.2022.
- примерной Программы кандидатского экзамена, утвержденной Министерством образования и науки Российской Федерации.

Разработчик: к.х.н., доцент



Л.Г. Чеканова

Рецензент: д.х.н., профессор



А.Б. Шейн

СОГЛАСОВАНО
директор «ИТХ УрО РАН»
член-корреспондент РАН
«03» сентября 2022 г.



В.Н. Стрельников

1. КОНТРИЛИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ

1.1 Описание курса «Физическая химия», результаты обучения

Учебный материал дисциплины осваивается в течение 8-го семестра, в котором предусмотрены лекции, практические занятия, самостоятельная работа аспирантов. При изучении дисциплины формирующиеся знания, умения, навыки проверяются посредством устного опроса; теоретических вопросов; семинаров.

Согласно профессиональной образовательной программе аспирантуры по специальности 1.4.4 Физическая химия учебная дисциплина, относящаяся к образовательному компоненту структуры программы аспирантуры, входит в число обязательных дисциплин, направленных на сдачу кандидатского экзамена образовательной программы по специальности 1.4.4 Физическая химия.

Курс «Физическая химия» предназначен для формирования и развития у аспирантов знаний, умений, навыков в области решения задач физической химии и смежных областей; получения обучающимися теоретических знаний для быстрой и квалифицированной переработки фундаментальных теоретических исследований и получении новых результатов в процессе практической работы над проблемами физической химии; овладения экспериментальными методами, позволяющими выпускнику успешно работать в различных областях профессиональной деятельности: научно-исследовательской, проектной и производственно-технологической с применением современных технологий. Курс «Физическая химия» нацелен на подготовку и успешную сдачу кандидатского экзамена по специальности, а также на подготовку аспирантов к защите диссертации на соискание степени кандидата наук.

В процессе изучения дисциплины «Физическая химия» аспирант формирует:

- Способность проводить научные исследования в области физической химии;
- Способность планировать, проводить и интерпретировать экспериментальные данные по изучению химических веществ.

1.2 Этапы формирования знаний по дисциплине

Учебный материал дисциплины осваивается в течение 8-го семестра, в котором предусмотрены консультации и самостоятельная работа аспирантов.

Уровень освоения дисциплины проверяется по результатам промежуточного и итогового контроля.

Перечень контролируемых результатов обучения дисциплине

Контролируемые результаты обучения дисциплине	Текущий	Зачёт	Кандидатский экзамен
Знать методологию, конкретные методы и приемы научно-исследовательской работы в области физической химии	С, ТЗ	С	С, ТЗ
Знать теоретические положения, описывающие строение молекул химических веществ, механизмы химических реакций и взаимосвязи между химическим составом, структурой и физико-химическими свойствами веществ и реакционных сред	С, ТЗ	С	С, ТЗ
Знать современные методы, приемы планирования эксперимента, обработки и интерпретации экспериментальных данных, используемые в химических исследованиях	С, ТЗ	С	С, ТЗ
Уметь ставить задачу и применять современные методы (численные, аналитические, экспериментальные) для решения задач в области физической химии	С, ТЗ	С	С, ТЗ
Уметь использовать теоретические основы физической химии, базовые принципы дизайна функциональных молекул и методы их исследования в исследовательской деятельности	С, ТЗ	С	С, ТЗ
Уметь формулировать цели и задачи исследования	С, ТЗ	С	С, ТЗ
Уметь применять теоретические знания по методам сбора, хранения, обработки и передачи информации	С, ТЗ	С	С, ТЗ
Уметь применять современные методы и средства исследования для решения конкретных задач физической химии	С, ТЗ	С	С, ТЗ
Уметь планировать проведение экспериментов, анализировать и интерпретировать экспериментальные данные по изучению физической химии	С, ТЗ	С	С, ТЗ
Владеть методами решения задач и анализа проблем физической химии	С, ТЗ	С	С, ТЗ
Владеть основными методами исследований в физической химии	С, ТЗ	С	С, ТЗ
Владеть методами самостоятельного анализа имеющейся информации (лабораторных и натуральных испытаний),	С, ТЗ	С	С, ТЗ

практическими навыками и знаниями использования результатов современных исследований в области физической химии			
Владеть навыками описания и оформления результатов теоретических и экспериментальных исследований в виде научной статьи, отчёта о научно-исследовательской работе	С, ТЗ	С	С, ТЗ

С - собеседование; ТЗ - творческое задание.

Собеседование - средство контроля, организованное для выяснения объема знаний обучающегося по определенному разделу, теме, проблеме и т.п.

Творческое задание - выступление с подготовленным в ходе самостоятельной работы материалом на тему научно-исследовательской деятельности, позволяющее диагностировать умения интегрировать знания различных областей.

Итоговой оценкой освоения дисциплинарных частей компетенций (результатов обучения дисциплине) является аттестация в виде кандидатского экзамена, проводимого с учетом результатов текущего контроля.

2. ОПИСАНИЕ ПОКАЗАТЕЛЕЙ И КРИТЕРИЕВ ОЦЕНИВАНИЯ НА РАЗЛИЧНЫХ ЭТАПАХ ИЗУЧЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ, ОПИСАНИЕ ШКАЛ ОЦЕНИВАНИЯ

В процессе формирования освоения курса используются различные формы оценочных средств текущего и промежуточного и итогового контроля.

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

1. Уровня освоения теоретических понятий, научных основ профессиональной деятельности;
2. Степени готовности аспиранта применять теоретические знания и профессионально значимую информацию;
3. Приобретенных умений, значимых для профессиональной деятельности.

Задания для оценивания когнитивных умений (знаний) должны предусматривать необходимость проведения аспирантом интеллектуальных действий, направленных на:

- дифференциацию информации на взаимозависимые части, выявление взаимосвязей между ними и т.п.;
- интерпретацию и творческое усвоение информации из разных источников,

её системное структурирование;
- комплексное использование интеллектуальных инструментов учебной дисциплины для решения учебных и практических проблем.

2.1 Текущий контроль

Текущий контроль для комплексного оценивания показателей **знаний, умений и владений** проводится в форме собеседования или творческого задания.

• Собеседование

Собеседование – средство контроля, организованное как специальная беседа преподавателя с аспирантом на темы, связанные с изучаемой дисциплиной, и рассчитанное на выяснение объёма *знаний* обучающегося по определенному разделу, теме, проблеме и т.п.

Собеседование может выполняться в индивидуальном порядке или с группой аспирантов. Критерии и показатели оценивания собеседования отображены в шкале, представленной в Таблице 1.

Таблица 1

Уровень освоения	Критерии оценивания уровня освоения учебного материала
Зачтено	Аспирант достаточно свободно использует фактический материал по заданному вопросу, умеет определять причинно-следственные связи событий, логично и грамотно, используя профессиональную терминологию, обосновывает свою точку зрения.
Не зачтено	Аспирант демонстрирует полное незнание материала или наличие бессистемных, отрывочных знаний, связанных с поставленным перед ним вопросом, при этом не ориентируется в профессиональной терминологии.

• Защита отчёта о творческом задании

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

Творческие задания могут выполняться в индивидуальном порядке или группой аспирантов. Критерии оценивания защиты отчёта о творческом задании отображены в шкале, приведённой в Таблице 2.

Таблица 2

Уровень освоения	Критерии оценивания уровня освоения учебного материала
Зачтено	Аспирант выполнил творческое задание успешно, показав в целом систематическое или сопровождающееся отдельными ошибками применение освоенных <i>умений и владений</i> . Аспирант ориентируется в

	предложенном решении, может его модифицировать при изменении условия задачи. Аспирант может объяснить полностью или частично полученные результаты.
Не зачтено	Аспирант допустил много ошибок или не выполнил творческое задание.

2.1.1 Типовые вопросы для текущего контроля по дисциплине:

1. Основные понятия и определения химической термодинамики. Первый закон термодинамики и его аналитическое выражение. Внутренняя энергия и энтальпия
2. Второй закон термодинамики. Энтропия в равновесных и неравновесных процессах. Изменение энтропии изолированной системы, направление самопроизвольного процесса
3. Третий закон термодинамики. Теорема Нернста и постулат Планка. Стандартные термодинамические функции веществ. Вычисление абсолютной энтропии твердых, жидких и газообразных веществ
4. Растворы. Парциальные термодинамические величины. Химический потенциал. Летучесть и активность. Термодинамическая классификация растворов
5. Химическое равновесие в газах и растворах. Закон действующих масс и константа равновесия. Примеры расчетов химических равновесий. Принцип смещения равновесия (Закон Ле-Шателье)
6. Гетерогенные химические равновесия. Закон действующих масс для гетерогенных равновесий. Примеры расчетов химических равновесий
7. Термодинамика поверхностных явлений. Адсорбция. Мономолекулярная адсорбция. Изотермы адсорбции Гиббса и Ленгмюра. Изостера адсорбции. Полималекулярная адсорбция, изотерма БЭТ
8. Основные понятия феноменологической кинетики: простые и сложные реакции, молекулярность и скорость простой реакции. Кинетический закон действующих масс, константа скорости. Способы определения скорости реакции
9. Катализ. Классификация каталитических реакций и катализаторов. Основные характеристики катализаторов и каталитических процессов: активность, селективность, стабильность, число оборотов. Кинетический и термодинамический аспекты катализа
10. Электрохимическая реакция. Электрохимическая система. Равновесные потенциалы, уравнение Нернста. Кинетика электродных процессов. Электролиз. Законы Фарадея

2.1.2 Типовые творческие задания

1. Предложить не менее двух способов оценки теплового эффекта диссоциации слабой кислоты (указывается преподавателем) на основании доступных литературных данных.

2. Известно, что давление тем сильнее влияет на константу химического равновесия, чем больше размер молекулы. Объясните это явление, используя уравнения термодинамики.

3. На основе анализа информации из научных периодических источников обобщить данные о влиянии растворителя на кинетику этилирования жирных кислот. Выявить общие закономерности и противоречия в данных разных авторов.

4. Предложить не менее двух способов расчёта коэффициента активности бензоат-аниона в составе а) бензойной кислоты, б) бензоата натрия в водно-метанольных растворителях на основании доступных литературных данных.

2.2 Промежуточный контроль

Допуск к промежуточному контролю осуществляется по результатам текущего контроля. Промежуточный контроль проводится в виде контрольных мероприятий в конце каждой темы в виде собеседования (промежуточный контроль - 4 контрольных мероприятия).

2.2.1 Шкалы оценивания результатов обучения в ходе промежуточного контроля

Оценка результатов обучения дисциплине в форме уровня сформированности знаний, умений, и навыков проводится по шкале оценивания «зачтено», «не зачтено» путем выборочного контроля во время контрольных мероприятий

Типовая шкала и критерии оценки результатов обучения при сдаче контрольного мероприятия приведены в Таблице 3.

Таблица 3

Оценка	Критерии оценивания
<i>Зачтено</i>	Аспирант продемонстрировал сформированные или содержащие отдельные пробелы знания при ответе на теоретический вопрос билета. Показал сформированные или содержащие отдельные пробелы знания в рамках усвоенного учебного материала. Ответил на большинство дополнительных вопросов правильно. Аспирант выполнил контрольное задание билета правильно или с небольшими неточностями. Показал успешное или сопровождающееся отдельными ошибками применение навыков полученных знаний и умений при решении профессиональных задач в рамках усвоенного учебного материала. Ответил на большинство дополнительных вопросов правильно.
<i>Не зачтено</i>	При ответе на теоретический вопрос билета аспирант продемонстрировал фрагментарные знания при ответе на теоретический вопрос билета. При ответах на

Оценка	Критерии оценивания
	<p>дополнительные вопросы было допущено множество неправильных ответов.</p> <p>При выполнении контрольного задания билета аспирант продемонстрировал частично освоенное умение и применение полученных навыков при решении профессиональных задач в рамках усвоенного учебного материала. При ответах на дополнительные вопросы было допущено множество неточностей.</p>

2.2.2 Типовые контрольные вопросы для оценивания знаний во время контрольного мероприятия по дисциплине

1. Основные положения классической теории химического строения.
2. Потенциалы парных взаимодействий.
3. Метод молекулярной динамики.
4. Общие принципы квантово-механического описания молекулярных систем.
5. Стационарное уравнение Шрёдингера для свободной молекулы.
6. Электронное волновое уравнение.
7. Потенциальные кривые и поверхности потенциальной энергии.
8. Электронное строение атомов и молекул. Атомные и молекулярные орбитали.
9. Интерпретация строения молекул на основе орбитальных моделей и исследования распределения электронной плотности.
10. Межмолекулярные (ван-дер-ваальсовы) взаимодействия. Водородная связь.
11. Структурная классификация конденсированных фаз.
12. Строение идеальных кристаллов.
13. Реальные кристаллы. Типы дефектов в реальных кристаллах.
14. Строение твердых растворов.
15. Металлы и полупроводники.
16. Зонная структура энергетического спектра кристаллов.
17. Структура простых жидкостей.
18. Структура воды и водных растворов. Структура растворов электролитов.
19. Уравнения состояния.
20. Первый закон термодинамики. Теплота и работа.
21. Второй закон термодинамики. Энтропия.
22. Фундаментальные уравнения Гиббса.
23. Термодинамические потенциалы. Энергия Гиббса. Энергия Гельмгольца.
24. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов.

25. Уравнение Гиббса–Гельмгольца.
26. Химические потенциалы.
27. Изотерма Вант-Гоффа. Уравнения изобары и изохоры химической реакции.
28. Равновесие в поле внешних сил. Полные потенциалы.
29. Гетерогенные системы: понятия компонента, фазы, степени свободы. Правило фаз Гиббса.
30. Основные положения термодинамики неравновесных процессов.
31. Скорость производства энтропии. Зависимость скорости производства энтропии от обобщенных потоков и сил.
32. Соотношения взаимности Онзагера.
33. Идеальные растворы, общее условие идеальности растворов.
34. Неидеальные растворы и их свойства.
35. Метод активностей. Коэффициенты активности и их определение.
36. Стандартные состояния при определении химических потенциалов компонент растворов. Симметричная и несимметричная системы отсчета.
37. Коллигативные свойства растворов.
38. Парциальные мольные величины, их определение для бинарных систем.
39. Уравнение Гиббса–Дюгема.
40. Микро- и макросостояния химических систем. Фазовые пространства.
41. Эргодическая гипотеза.
42. Термодинамическая вероятность и её связь с энтропией.
43. Распределение Максвелла-Больцмана.
44. Микроканоническое и каноническое распределения. Каноническая функция распределения Гиббса.
45. Сумма по состояниям как статистическая характеристическая функция.
46. Молекулярная сумма по состояниям и сумма по состояниям макроскопической системы.
47. Статистический расчет энтропии.
48. Постулат Планка и абсолютная энтропия.
49. Расчет констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики.
50. Распределения Бозе–Эйнштейна и Ферми–Дирака.
51. Вырожденный идеальный газ. Электроны в металлах.

52. Статистическая теория Эйнштейна идеального кристалла, теория Дебая.

53. Точечные дефекты кристаллических решеток. Равновесные и неравновесные дефекты.

54. Вычисление сумм по состояниям для кристаллов с различными точечными дефектами.

2.2.3 Типовые контрольные задания для оценивания приобретенных умений и владений на зачёте по дисциплине

1. Найдите в доступной научной литературе эмпирические данные о зависимости давления насыщенного пара хлорбензола от температуры. Аппроксимируйте эту зависимость уравнениями Клапейрона–Клаузиуса и Антуана. Сделайте вывод о применимости указанных уравнений. Оцените теплоту испарения.

2. Найдите в доступной научной литературе необходимые термодинамические данные для расчета энтропии бензола в газообразном и жидком состоянии при температуре 40°C. Выполните необходимые расчеты и определите энтропию испарения при указанной температуре.

3. Укажите недостатки теории мономолекулярных реакций Хиншельвуда-Линдемана. Предложите способы преодоления этих недостатков. Какие последующие теории мономолекулярных реакций основываются на модели Хиншельвуда-Линдемана.

4. Объясните на основании современных представлений, почему в водных растворах редко наблюдается явление аномальной электропроводности. Найдите в научной периодической литературе примеры аномальной электропроводности солей в водных растворах. Дайте объяснения этим примерам.

2.3 Итоговый контроль

Допуск к итоговому контролю осуществляется по результатам текущего и промежуточного контроля. Итоговый контроль по дисциплине проходит в форме кандидатского экзамена по специальности, в устно-письменной форме по билетам. Экзамен сдаётся по программе кандидатского экзамена по дисциплине «Физическая химия», утверждённой директором ПФИЦ УрО РАН и входит в промежуточную аттестацию по программе аспирантуры. Кандидатский экзамен по специальности 1.4.4 Физическая химия оценивается по 5-балльной системе оценивания. Типовая шкала и критерии оценки результатов обучения при сдаче кандидатского экзамена для компонентов *знать, уметь и владеть* приведены в Таблице 4. Для сдачи

кандидатского экзамена формируются и утверждаются билеты. Билет содержит теоретический вопрос (ТВ) для проверки *знаний* и практические задания (ПЗ) для проверки *умений* и *владений*.

Таблица 4

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

2.3.1 Типовые контрольные вопросы для оценивания знаний на кандидатском экзамене по дисциплине

1. Основные положения классической теории химического строения. Связь строения и свойств молекул.
2. Механическая модель молекулы. Потенциалы парных взаимодействий. Метод молекулярной динамики.
3. Методы молекулярной механики и молекулярной динамики при анализе строения молекул.

4. Общие принципы квантово-механического описания молекулярных систем. Стационарное уравнение Шрёдингера для свободной молекулы. Электронное волновое уравнение.
5. Потенциальные кривые и поверхности потенциальной энергии.
6. Колебания молекул. Нормальные колебания, амплитуды и частоты колебаний, частоты основных колебательных переходов.
7. Электронное строение атомов и молекул. Атомные и молекулярные орбитали.
8. Интерпретация строения молекул на основе орбитальных моделей и исследования распределения электронной плотности.
9. Межмолекулярные (ван-дер-ваальсовы) взаимодействия. Водородная связь.
10. Структурная классификация конденсированных фаз.
11. Строение идеальных и реальных кристаллов. Типы дефектов в реальных кристаллах.
12. Строение твердых растворов.
13. Металлы и полупроводники. Зонная структура энергетического спектра кристаллов.
14. Структура простых жидкостей. Структура воды.
15. Структура растворов электролитов.
16. Основные понятия термодинамики: изолированные и открытые системы, равновесные и неравновесные системы, термодинамические переменные, температура, интенсивные и экстенсивные переменные.
17. Уравнение состояния. Теорема о соответственных состояниях. Вириальные уравнения состояния.
18. Первый закон термодинамики. Теплота и работа. Закон Гесса.
19. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Формула Кирхгоффа.
20. Второй закон термодинамики. Энтропия и её изменения в обратимых и необратимых процессах.
21. Фундаментальные уравнения Гиббса. Характеристические функции. Энергия Гиббса. Энергия Гельмгольца.
22. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов.
23. Уравнение Гиббса–Гельмгольца. Работа и теплота химического процесса.
24. Химические потенциалы.
25. Закон действующих масс. Различные виды констант равновесия и связь между ними.

26. Изотерма Вант-Гоффа. Уравнения изобары и изохоры химической реакции.
27. Равновесие в поле внешних сил. Полные потенциалы.
28. Гетерогенные системы: понятия компонента, фазы, степени свободы. Правило фаз Гиббса.
29. Основные положения термодинамики неравновесных процессов.
30. Скорость производства энтропии. Зависимость скорости производства энтропии от обобщенных потоков и сил.
31. Соотношения взаимности Онзагера.
32. Термодиффузия и её описание в неравновесной термодинамике. Уравнение Чепмена-Энскога.
33. Идеальные растворы, общее условие идеальности растворов. Давление насыщенного пара жидких растворов, закон Рауля.
34. Неидеальные растворы и их свойства.
35. Метод активностей. Коэффициенты активности и их определение.
36. Стандартные состояния при определении химических потенциалов компонент растворов. Симметричная и несимметричная системы отсчета.
37. Коллигативные свойства растворов.
38. Парциальные мольные величины, их определение для бинарных систем.
39. Уравнение Гиббса–Дюгема. Уравнение Маргулиса.
40. Гетерогенные системы. Понятия компонента, фазы, степени свободы. Правило фаз Гиббса.
41. Однокомпонентные системы. Диаграммы состояния однокомпонентных систем. Фазовые переходы первого рода. Уравнение Клапейрона – Клаузиуса.
42. Двухкомпонентные системы. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем.
43. Трехкомпонентные системы. Треугольник Гиббса. Диаграммы плавкости трехкомпонентных систем.
44. Микро- и макросостояния химических систем. Фазовые пространства. Эргодическая гипотеза.
45. Термодинамическая вероятность и её связь с энтропией. Распределение Максвелла – Больцмана.
46. Микроканоническое и каноническое распределения. Каноническая функция распределения Гиббса.
47. Сумма по состояниям как статистическая характеристическая функция.

48. Молекулярная сумма по состояниям и сумма по состояниям макроскопической системы.
49. Статистический расчет энтропии.
50. Постулат Планка и абсолютная энтропия.
51. Расчет констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики.
52. Распределения Бозе–Эйнштейна и Ферми–Дирака. Вырожденный идеальный газ. Электроны в металлах.
53. Статистическая теория Эйнштейна идеального кристалла, теория Дебая.
54. Точечные дефекты кристаллических решеток. Равновесные и неравновесные дефекты.
55. Вычисление сумм по состояниям для кристаллов с различными точечными дефектами.
56. Поверхность раздела фаз. Свободная поверхностная энергия, поверхностное натяжение, избыточные термодинамические функции поверхностного слоя.
57. Метод слоя конечной толщины Гуггенгейма и его связь с методом избытков.
58. Капиллярные явления. Зависимость давления пара от кривизны поверхности жидкости. Капиллярная конденсация.
59. Адсорбция. Виды адсорбции. Экспериментальные методы изучения адсорбции на твердых телах.
60. Термодинамика адсорбции.
61. Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Генри. Уравнение Лэнгмюра.
62. Полимoleкулярная адсорбция. Уравнение Брунауэра-Эмета - Теллера (БЭТ).
63. Определение площади поверхности и пористости адсорбента.
64. Коэффициенты активности в растворах электролитов. Средняя активность и средний коэффициент активности, их связь с активностью отдельных ионов.
65. Основные положения теории Дебая – Хюккеля. Потенциал ионной атмосферы.
66. Условия электрохимического равновесия на границе раздела фаз и в электрохимической цепи.
67. Термодинамика гальванического элемента. Электродвижущая сила, её выражение через энергию Гиббса реакции в элементе.

68. Уравнения Нернста и Гиббса – Гельмгольца для равновесной электрохимической цепи.

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

70. Двойной электрический слой. Модельные представления о структуре двойного электрического слоя. Теория Гуи – Чапмена – Грэма.

71. Скорость и стадии электродного процесса. Поляризация электродов. Ток обмена и перенапряжение. Зависимость скорости стадии разряда от строения двойного слоя.

72. Химические источники тока, их виды. Электрохимическая коррозия. Методы защиты от коррозии.

73. Основные понятия химической кинетики. Простые и сложные реакции, молекулярность и скорость простой реакции.

74. Основной постулат химической кинетики. Способы определения скорости реакции. Кинетические уравнения. Константа скорости и порядок реакции.

75. Принцип независимости элементарных стадий. Кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций.

76. Квазистационарное приближение. Метод Боденштейна-Тёмкина.

77. Кинетика гомогенных каталитических и ферментативных реакций. Уравнение Михаэлиса-Ментен.

78. Цепные реакции. Кинетика неразветвленных и разветвленных цепных реакций.

79. Реакции в потоке. Реакции идеального вытеснения и идеального смешения.

80. Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса. Энергия активации и способы её определения.

81. Элементарные акты химических реакций и физический смысл энергии активации.

82. Термический и нетермические пути активации молекул. Обмен энергией при столкновениях молекул.

83. Теория активных столкновений. Сечение химических реакций. Расчет предэкспоненциального множителя по молекулярным постоянным. Стерический фактор.

84. Теория переходного состояния (активированного комплекса). Статистический расчет константы скорости. Энергия и энтропия активации.

85. Мономолекулярные реакции в газах, схема Линдемана – Христиансена.

86. Реакции в растворах, влияние растворителя и заряда реагирующих частиц. Клеточный эффект и сольватация.

87. Фотохимические и радиационнохимические реакции. Элементарные фотохимические процессы. Эксимеры и эксиплексы. Квантовый выход.

88. Классификация каталитических реакций и катализаторов. Теория промежуточных соединений в катализе, принцип энергетического соответствия.

89. Гомогенный катализ. Кислотно-основной катализ. Кинетика и механизм реакций специфического кислотного катализа. Функции кислотности Гаммета. Кинетика и механизм реакций общего кислотного катализа.

90. Ферментативный катализ. Адсорбционные и каталитические центры ферментов. Активность и субстратная селективность ферментов. Коферменты. Механизмы ферментативного катализа.

91. Гетерогенный катализ. Скорость гетерогенной каталитической реакции. Удельная и атомная активность. Роль адсорбции в кинетике гетерогенных каталитических реакций. Современные теории функционирования гетерогенных катализаторов.

2.3.2 Типовые контрольные задания для оценивания приобретенных умений и владений на кандидатском экзамене по дисциплине

1. Докажите, что к.п.д. обратимого цикла, состоящего из двух изохор и двух изотерм при T_1 и T_2 ($T_1 > T_2$), меньше к.п.д. обратимого цикла Карно при тех же температурах.

2. Теплота испарения воды при 100°C и давлении 1 атм равна $L_{исп} = 40,7$ кДж/моль. Сколько теплоты при испарении в этих условиях расходуется на расширение и сколько затрачивается на изменение агрегатного состояния?

3. При изучении мономолекулярной реакции разложения ацетона $\text{CH}_3\text{COCH}_3 = \text{C}_2\text{H}_4 + \text{CO} + \text{H}_2$ при $T = 800$ К и $P = 100$ кПа было получено значение константы скорости $k = 1,9 \cdot 10^{13} e^{-E/RT}$. Найдите теоретическое значение константы скорости согласно теории активных соударений и определите число степеней свободы в теории Хиншельвуда-Линдемана, при котором теоретическое и экспериментальное значения константы скорости совпадают в пределах порядка величины.

4. Для измерения константы диссоциации K_a уксусной кислоты Харнед и Эслер использовали два элемента без жидкой границы. Один элемент был $\text{Pt}, \text{H}_2 (1 \text{ атм}) | \text{CH}_3\text{COOH} (m_1), \text{CH}_3\text{COONa} (m_2), \text{NaCl} (m_3), \text{AgCl} (\text{нас.}) | \text{Ag}$. Какой

был второй элемент? Напишите выражение, связывающее константу K_a с ЭДС приведённого выше гальванического элемента.

2.3.3. Типовой билет кандидатского экзамена

1. Фундаментальные уравнения Гиббса. Характеристические функции. Энергия Гиббса. Энергия Гельмгольца. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов.

2. Докажите, что к.п.д. обратимого цикла, состоящего из двух изохор и двух изотерм при T_1 и T_2 ($T_1 > T_2$), меньше к.п.д. обратимого цикла Карно при тех же температурах.

3. Для измерения константы диссоциации K_a уксусной кислоты Харнед и Эслер использовали два элемента без жидкой границы. Один элемент был Pt, H_2 (1 атм)| CH_3COOH (m_1), CH_3COONa (m_2), $NaCl$ (m_3), $AgCl$ (нас.)|Ag. Какой был второй элемент? Напишите выражение, связывающее константу K_a с ЭДС приведённого выше гальванического элемента.