

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
«Федеральный исследовательский центр
«Институт катализа им. Г.К. Борескова
Сибирского отделения Российской академии наук»
(ИК СО РАН, Институт катализа СО РАН)

УТВЕРЖДАЮ
Директор, академик РАН
В.И. Бухтияров



« 15 » апреля 2022 г.

Рабочая программа дисциплины

Б1.ОД.4 Физическая химия

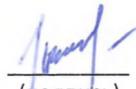
Научная специальность: 1.4.4. Физическая химия

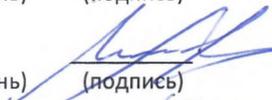
Направленность: Физическая химия

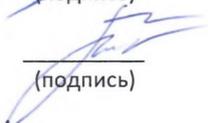
Новосибирск, 2022 год

Программа составлена в соответствии с федеральными государственными требованиями, утвержденными Приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 20.08.2021 № 951 и локальными нормативными актами ИК СО РАН.

Составители рабочей программы:

Научный сотрудник, к.х.н.  Ж.В. Веселовская
(должность, ученое звание, ученая степень) (подпись) (Ф.И.О.)

Научный сотрудник, к.х.н.  А.И. Лысиков
(должность, ученое звание, ученая степень) (подпись) (Ф.И.О.)

Старший научный сотрудник, к.х.н.  Д.И. Потемкин
(должность, ученое звание, ученая степень) (подпись) (Ф.И.О.)

Рабочая программа утверждена на заседании Ученого совета ИК СО РАН
«15» апреля 2022 г., протокол № 6

Ученый секретарь, к.х.н.  М.О. Казаков
(подпись) (Ф.И.О.)

СОГЛАСОВАНО:

Зам. директора по научной работе, д.х.н.  О.Н. Мартьянов
(подпись) (Ф.И.О.)

1. Цели освоения дисциплины

Цель изучения дисциплины «Физическая химия» – формирование у аспирантов углубленных профессиональных знаний в области физической химии и готовности к самостоятельной научно-исследовательской деятельности.

2. Место дисциплины в структуре программы подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре по научной специальности 1.4.4. Физическая химия, направленность Физическая химия.

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплины (модули)» образовательного компонента программы аспирантуры. Преподается в шестом семестре на третьем курсе.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

Способность определять термодинамические характеристики процессов на поверхности, устанавливать закономерности адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях

Способность рассчитывать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ
--

Способность к определению термодинамических свойств веществ, расчету термодинамических функций простых и сложных систем, включая каталитические процессы
--

Способность применять теорию растворов, межчастичных и межконтактных взаимодействий, физико-химических основ синтеза адсорбентов и катализаторов при решении задач в профессиональной области

Способность устанавливать механизмы действия катализаторов, изучать элементарные стадии и кинетические закономерности протекания гомогенных, гетерогенных и ферментативных каталитических превращений

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

Знать:

- основные понятия химической кинетики, теоретические основы кинетики простых и сложных реакций, включая реакции с участием ферментов и катализаторов;
- основные понятия и теории химической термодинамики, химической кинетики, электрохимии, строения вещества;
- взаимосвязь между катализом и физической химией;
- термодинамику поверхностных явлений, факторы, влияющие на формирование текстуры адсорбентов и катализаторов;
- природу каталитического действия основных гомогенных и гетерогенных катализаторов;
- теоретическую основу физико-химических методов исследования образцов;

Уметь:

- устанавливать и обосновывать взаимосвязи между строением и свойствами веществ;
- рассчитывать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ;

Владеть навыками:

- расчета равновесного состава химической реакции;
- определения скорости простых и сложных реакций, включая каталитические реакции.

4. Объем дисциплины и виды учебной работы

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 3 зачетных единицы/108 часов

	Объем часов / зачетных единиц
Всего	108/3
Обязательная аудиторная учебная нагрузка (всего)	18
в том числе:	
лекции	-
практические занятия (семинары)	18
лабораторные занятия	
Самостоятельная работа аспиранта (всего)	86
Контроль: кандидатский экзамен	4

5. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Лекц.	Практ. зан.	Лаб. зан.	СРА	Контроль	Всего
1	Равновесная химическая термодинамика		4		2		6
2	Формальная кинетика простых реакций		2		2		4
3	Формальная кинетика сложных реакций		2		2		4
4	Метод квазистационарных концентраций		2		2		4
5	Квазиравновесное приближение		2		2		4
6	Кинетика химических реакций в открытых системах		2		2		4
7	Кинетика гетерогенных каталитических реакций		2		2		4
8	Адсорбция, приготовление катализаторов и адсорбентов		2		2		4
9	Подготовка к кандидатскому экзамену				70		70
10	Кандидатский экзамен					4	4
	Итого			18	86	4	108

6. Содержание дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела
Практические занятия		
1	Равновесная химическая термодинамика	Первое начало термодинамики, термохимия. Энтропия. Второе и третье начала термодинамики. Термодинамические потенциалы. Химический потенциал. Химическое равновесие в идеальных газах. Химическое равновесие в неидеальных системах.
2	Формальная кинетика простых реакций	Основные понятия и определения химической кинетики. Простые реакции. Запись кинетических уравнений. Определение порядка реакции. Нахождение энергии активации и эффективной константы скорости.
3	Формальная кинетика сложных реакций	Сложные реакции. Обратимые реакции. Принцип детального равновесия. Интегрирование кинетических уравнений обратимых реакций. Последовательные реакции. Параллельные реакции. Получение кинетических кривых для мономолекулярных и бимолекулярных параллельных реакций. Смешанные реакции.

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела
		Методы интегрирования кинетических уравнений.
4	Метод квазистационарных концентраций	Метод квазистационарных концентраций. Критерии применимости.
5	Квазиравновесное приближение	Метод квазиравновесных концентраций. Критерий применимости.
6	Кинетика химических реакций в открытых системах	Реакции при постоянном давлении. Использование химической переменной на примере газофазной реакции. Реакции в открытых системах. Реактор идеального смешения. Реактор идеального вытеснения.
7	Кинетика гетерогенных каталитических реакций	Гетерогенный катализ. Механизмы Или-Ридила и Лэнгмюра-Хиншельвуда.
8	Адсорбция, приготовление катализаторов и адсорбентов	Адсорбционные равновесия. Основные взаимосвязи между параметрами пористой структуры адсорбентов. Формирование текстуры пористых материалов. Формирование нанесённых катализаторов и адсорбентов.

7. Самостоятельная работа аспирантов

Цель самостоятельной работы – закрепление, углубление и приобретение навыков применения теоретических знаний в практической работе, умения целенаправленно творчески работать с учебной, научной специальной литературой.

В самостоятельную работу аспирантов включается также подготовка к письменной контрольной работе – первому этапу кандидатского экзамена, систематизация теоретического материала по вопросам устного этапа кандидатского экзамена.

7.1 Вопросы для подготовки к устному этапу экзамена

СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА

Физические основы учения о строении молекул

Механическая модель молекулы. Потенциалы парных взаимодействий. Методы молекулярной механики и молекулярной динамики при анализе строения молекул. Общие принципы квантово-механического описания молекулярных систем. Стационарное уравнение Шредингера для свободной молекулы. Адиабатическое приближение. Электронное волновое уравнение. Потенциальные кривые и поверхности потенциальной энергии. Их общая структура и различные типы. Равновесные конфигурации молекул. Структурная изомерия. Оптические изомеры. Колебания молекул. Нормальные колебания, амплитуды и частоты колебаний, частоты основных колебательных переходов. Колебания с большой амплитудой. Вращение молекул. Различные типы молекулярных волчков. Вращательные уровни энергии. Электронное строение атомов и молекул. Одноэлектронное приближение. Атомные и молекулярные орбитали. Электронные конфигурации и термы атомов. Правило Хунда. Электронная плотность. Распределение электронной плотности в двухатомных молекулах. Корреляционные орбитальные диаграммы. Теорема Купманса. Интерпретация строения молекул на основе орбитальных моделей и исследования распределения электронной плотности. Локализованные молекулярные орбитали. Гибридизация. Представления о зарядах на атомах и порядках связей. Различные методы выделения атомов в молекулах. Индексы реакционной способности. Теория граничных орбиталей.

Симметрия молекулярных систем

Точечные группы симметрии молекул. Понятие о представлениях групп и характерах представлений. Общие свойства симметрии волновых функций и потенциальных поверхностей молекул. Классификация квантовых состояний атомов и молекул по симметрии. Симметрия

атомных и молекулярных орбиталей, s - и p - орбитали. p -электронное приближение. Влияние симметрии равновесной конфигурации ядер на свойства молекул и их динамическое поведение. Орбитальные корреляционные диаграммы. Сохранение орбитальной симметрии при химических реакциях.

Электрические и магнитные свойства

Дипольный момент и поляризуемость молекул. Магнитный момент и магнитная восприимчивость. Эффекты Штарка и Зеемана. Магнитно-резонансные методы исследования строения молекул. Химический сдвиг. Оптические спектры молекул. Вероятности переходов и правила отбора при переходах между различными квантовыми состояниями молекул. Связь спектров молекул с их строением. Определение структурных характеристик молекул из спектроскопических данных.

Межмолекулярные взаимодействия

Основные составляющие межмолекулярных взаимодействий. Молекулярные комплексы. Ван-дер-ваальсовы молекулы. Кластеры атомов и молекул. Водородная связь.

Основные результаты и закономерности в строении молекул

Строение молекул простых и координационных неорганических соединений. Полиядерные комплексные соединения. Строение основных типов органических и элементоорганических соединений. Соединения включения. Полимеры и биополимеры.

Строение конденсированных фаз

Структурная классификация конденсированных фаз. Идеальные кристаллы. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Реальные кристаллы. Типы дефектов в реальных кристаллах. Кристаллы с неполной упорядоченностью. Доменные структуры. Симметрия кристаллов. Кристаллографические точечные группы симметрии, типы решеток, сингонии. Понятие о пространственных группах кристаллов. Индексы кристаллографических граней. томные, ионные, молекулярные и другие типы кристаллов. Цепочечные, каркасные и слоистые структуры. Строение твердых растворов. Упорядоченные твердые растворы. Аморфные вещества. Металлы и полупроводники. Зонная структура энергетического спектра кристаллов. Поверхность Ферми. Различные типы проводимости. Колебания в кристаллах. Фононы. Жидкости. Мгновенная и колебательно-усредненная структура жидкости. Ассоциаты и кластеры в жидкостях. Структура воды и водных растворов. Структура жидких электролитов. Мицеллообразование и строение мицелл.

Поверхность конденсированных фаз

Особенности строения поверхности кристаллов и жидкостей, структура границы раздела конденсированных фаз. Молекулы и кластеры на поверхности. Структура адсорбционных слоев.

ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА

Основные понятия и законы термодинамики

Основные понятия термодинамики: изолированные и открытые системы, равновесные и неравновесные системы, термодинамические переменные, температура, интенсивные и экстенсивные переменные. Уравнения состояния. Первый закон термодинамики. Теплота, работа, внутренняя энергия, энтальпия, теплоемкость. Закон Гесса. Стандартные состояния и стандартные теплоты химических реакций. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Формула Кирхгофа. Таблицы стандартных термодинамических величин и их использование в термодинамических расчетах. Второй закон термодинамики. Энтропия и ее изменения в обратимых и необратимых процессах. Теорема Карно – Клаузиуса. Различные шкалы температур. Фундаментальные уравнения Гиббса. Характеристические функции. Энергия Гиббса, энергия Гельмгольца. Уравнения Максвелла. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов. Уравнение Гиббса – Гельмгольца. Работа и теплота химического процесса.

Химические потенциалы. Химическое равновесие. Закон действующих масс. Различные виды констант равновесия и связь между ними. Изотерма Вант-Гоффа. Уравнения изобары и изохоры химической реакции. Расчеты констант равновесия химических реакций с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций. Приведенная энергия Гиббса и ее использование для расчетов химических равновесий.

Элементы статистической термодинамики

Микро- и макросостояния химических систем. Фазовые Г- и μ -пространства. Эргодическая гипотеза. Термодинамическая вероятность и ее связь с энтропией. Распределение Максвелла – Больцмана. Статистические средние значения макроскопических величин. Ансамбли Гиббса. Микроканоническое и каноническое распределения. Расчет числа состояний в квазиклассическом приближении. Каноническая функция распределения Гиббса. Сумма по состояниям как статистическая характеристическая функция. Статистические выражения для основных термодинамических функций. Молекулярная сумма по состояниям и сумма по состояниям макроскопической системы. Поступательная, вращательная, электронная и колебательная суммы по состояниям. Статистический расчет энтропии. Постулат Планка и абсолютная энтропия. Приближение “жесткий ротатор – гармонический осциллятор”. Составляющие внутренней энергии, теплоемкости и энтропии, обусловленные поступательным, вращательным и колебательным движением. Расчет констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики. Распределения Бозе – Эйнштейна и Ферми – Дирака. Вырожденный идеальный газ. Электроны в металлах. Уровень Ферми. Статистическая теория Эйнштейна идеального кристалла, теория Дебая. Точечные дефекты кристаллических решеток. Равновесные и неравновесные дефекты. Нестехиометрические соединения и их термодинамическое описание.

Элементы термодинамики необратимых процессов

Основные положения термодинамики неравновесных процессов. Локальное равновесие. Флуктуации. Функция диссипации. Потоки и силы. Скорость производства энтропии. Зависимость скорости производства энтропии от обобщенных потоков и сил. Соотношения взаимности Онзагера. Стационарное состояние системы и теорема Пригожина. Термодиффузия и ее описание в неравновесной термодинамике. Уравнение Чепмена – Энскога.

Растворы. Фазовые равновесия

Различные типы растворов. Способы выражения состава растворов. Идеальные растворы, общее условие идеальности растворов. Давление насыщенного пара жидких растворов, закон Рауля. Неидеальные растворы и их свойства. Метод активностей. Коэффициенты активности и их определение. Стандартные состояния при определении химических потенциалов компонент растворов. Симметричная и несимметричная системы отсчета. Коллигативные свойства растворов. Изменение температуры замерзания растворов, криоскопия. Зонная плавка. Осмотические явления. Парциальные мольные величины, их определение для бинарных систем. Уравнение Гиббса – Дюгема. Функции смешения для идеальных и неидеальных растворов. Предельно разбавленные растворы, атермальные и регулярные растворы, их свойства. Гетерогенные системы. Понятия компонента, фазы, степени свободы. Правило фаз Гиббса. Однокомпонентные системы. Диаграммы состояния воды, серы, фосфора и углерода. Фазовые переходы первого рода. Уравнение Клапейрона – Клаузиуса. Двухкомпонентные системы. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем. Равновесие жидкость – пар в двухкомпонентных системах. Законы Гиббса – Коновалова. Азеотропные смеси. Фазовые переходы второго рода. Уравнения Эренфеста. Трехкомпонентные системы. Треугольник Гиббса. Диаграммы плавкости трехкомпонентных систем.

Адсорбция и поверхностные явления

Адсорбция. Адсорбент, адсорбат. Виды адсорбции. Структура поверхности и пористость адсорбента. Локализованная и делокализованная адсорбция. Мономолекулярная и полимолекулярная адсорбция. Динамический характер адсорбционного равновесия. Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Генри. Константа адсорбционного равновесия. Уравнение Лэнгмюра. Адсорбция из растворов. Уравнение Брунауэра – Эммета – Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента. Хроматография, различные ее типы (газовая, жидкостная, противоточная и др.) Поверхность раздела фаз. Свободная поверхностная энергия, поверхностное натяжение, избыточные термодинамические функции поверхностного слоя. Связь свободной поверхностной энергии с теплотой сублимации (правило Стефана), модулем упругости и другими свойствами вещества. Эффект Ребиндера: изменение прочности и пластичности твердых тел вследствие снижения их поверхностной энергии. Капиллярные явления. Зависимость давления пара от кривизны поверхности жидкости. Капиллярная конденсация. Зависимость растворимости от кривизны поверхности растворяющихся частиц (закон Гиббса – Оствальда – Фрейндлиха).

Электрохимические процессы

Растворы электролитов. Ион-дипольное взаимодействие как основной процесс, определяющий устойчивость растворов электролитов. Коэффициенты активности в растворах электролитов. Средняя активность и средний коэффициент активности, их связь с активностью отдельных ионов. Основные положения теории Дебая – Хюккеля. Потенциал ионной атмосферы. Условия электрохимического равновесия на границе раздела фаз и в электрохимической цепи. Термодинамика гальванического элемента. Электродвижущая сила, ее выражение через энергию Гиббса реакции в элементе. Уравнения Нернста и Гиббса – Гельмгольца для равновесной электрохимической цепи. Понятие электродного потенциала. Определение коэффициентов активности на основе измерений ЭДС гальванического элемента. Электропроводность растворов электролитов; удельная и эквивалентная электропроводность. Числа переноса, подвижность ионов и закон Кольрауша.

КИНЕТИКА ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

Химическая кинетика

Основные понятия химической кинетики. Простые и сложные реакции, молекулярность и скорость простой реакции. Основной постулат химической кинетики. Способы определения скорости реакции. Кинетические кривые. Кинетические уравнения. Константа скорости и порядок реакции. Реакции переменного порядка. Феноменологическая кинетика сложных химических реакций. Принцип независимости элементарных стадий. Кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций. Квазистационарное приближение. Метод Боденштейна – Темкина. Кинетика гомогенных каталитических и ферментативных реакций. Уравнение Михаэлиса – Ментен. Цепные реакции. Кинетика неразветвленных и разветвленных цепных реакций. Кинетические особенности разветвленных цепных реакций. Предельные явления в разветвленных цепных реакциях. Полуостров воспламенения, период индукции. Тепловой взрыв. Реакции в потоке. Реакторы идеального вытеснения и идеального смешения. Колебательные реакции. Макрокинетика. Роль диффузии в кинетике гетерогенных реакций. Кинетика гетерогенных каталитических реакций. Различные режимы протекания реакций (кинетическая и внешняя кинетическая области, области внешней и внутренней диффузии). Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса. Энергия активации и способы ее определения. Элементарные акты химических реакций и физический смысл энергии активации. Термический и нетермические пути активации молекул. Обмен энергией (поступательной, вращательной и колебательной) при столкновениях молекул. Время релаксации

в молекулярных системах. Теория активных столкновений. Сечение химических реакций. Формула Траутца – Льюиса. Расчет предэкспоненциального множителя по молекулярным постоянным. Стерический фактор. Теория переходного состояния (активированного комплекса). Поверхность потенциальной энергии. Путь и координата реакции. Статистический расчет константы скорости. Энергия и энтропия активации. Использование молекулярных постоянных при расчете константы скорости. Различные типы химических реакций. Мономолекулярные реакции в газах, схема Линдемана – Христиансена. Теория РРКМ. Бимолекулярные и тримолекулярные реакции, зависимость предэкспоненциального множителя от температуры. Реакции в растворах, влияние растворителя и заряда реагирующих частиц. Клеточный эффект и сольватация. Фотохимические и радиационно-химические реакции. Электрохимические реакции. Двойной электрический слой. Модельные представления о структуре двойного электрического слоя. Теория Гуи – Чапмена – Грэма. Электрокапиллярные явления, уравнение Липпмана. Скорость и стадии электродного процесса. Поляризация электродов. Полярография. Ток обмена и перенапряжение. Зависимость скорости стадии разряда от строения двойного слоя.

Катализ

Классификация каталитических реакций и катализаторов. Теория промежуточных соединений в катализе, принцип энергетического соответствия. Гомогенный катализ. Кислотно-основной катализ. Кинетика и механизм реакций специфического кислотного катализа. Функции кислотности Гаммета. Кинетика и механизм реакций общего кислотного катализа. Уравнение Бренстеда. Корреляционные уравнения для энергий активации и теплот реакций. Специфический и общий основной катализ. Нуклеофильный и электрофильный катализ. Катализ металлокомплексными соединениями. Гомогенные реакции гидрирования, их кинетика и механизмы. Ферментативный катализ. Адсорбционные и каталитические центры ферментов. Активность и субстратная селективность ферментов. Коферменты. Механизмы ферментативного катализа. Гетерогенный катализ. Определение скорости гетерогенной каталитической реакции. Удельная и атомная активность. Селективность катализаторов. Роль адсорбции в кинетике гетерогенных каталитических реакций. Неоднородность поверхности катализаторов, нанесенные катализаторы. Энергия активации гетерогенных каталитических реакций. Современные теории функционирования гетерогенных катализаторов. Основные промышленные каталитические процессы.

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

8.1. Рекомендуемая литература

- 1) Кнорре Д.Г., Крылова Л.Ф., Музыкантов В.С. Физическая химия. М.: Высш. шк., 1990. Режим доступа:
https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/knorre-krylova-muzykantov_uchebnik_1990-416s.djvu
- 2) Даниэльс Ф., Олберти Р., Физическая химия. М.: Мир, 1978. Режим доступа:
https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/Daniels_Olberti_-_Fizicheskaya_khimiya_1978.djvu
- 3) Герасимов Я.И. и др. Курс физической химии. кн. 1 и 2. М.: Химия, 1973. Режим доступа:
https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/Gerasimov_Ya_I_-_Kurs_fizicheskoy_khimii_tom.djvu (книга 1),
https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/Gerasimov_Ya_I_-_Kurs_fizicheskoy_khimii_tom.djvu

- https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/Gerasimov_Ya_I_-_Kurs_fizicheskoy_khimii_tom%202.djvu (книга 2)
- 4) Стромберг А.Г., Семченко Д.П. Физическая химия. М.: Высш. шк., 2003. Режим доступа: https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/Stromberg_-_Fizicheskaya_khimiya_2001.djvu
- 5) Физическая химия, под ред. К.С. Краснова. кн. 1 и 2. М.: Высш. шк., 2001. Режим доступа: https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/kn-1_pod-red-krasnova-k_s_uchebnik_2001-512s.djvu (книга 1), https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/kn-2_pod-red-krasnova-k_s_uchebnik_2001-319s.djvu (книга 2)
- 6) Мелвин-Хьюз Э.А., Физическая химия, кн. 1 и 2, М.: Изд. ИЛ, 1962. Режим доступа: https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/melvinkhiuz_ea_fizicheskaya_khimiya_kniga_1.pdf (книга 1), https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/melvinkhiuz_ea_fizicheskaya_khimiya_kniga_2.pdf (книга 2)
- 7) Эткинс П. Физическая химия. тт. 1 и 2, М.: "Мир", 1980. Режим доступа: [https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/\[YEtkins_P.\]_Fizicheskaya_khimiya%20%D0%BA%D0%BD%D0%B8%D0%B3%D0%B0%201.pdf](https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/[YEtkins_P.]_Fizicheskaya_khimiya%20%D0%BA%D0%BD%D0%B8%D0%B3%D0%B0%201.pdf) (том 1), [https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/\[YEtkins_P.\]_Fizicheskaya_khimiya%20%D0%BA%D0%BD%D0%B8%D0%B3%D0%B0%202.djvu](https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/[YEtkins_P.]_Fizicheskaya_khimiya%20%D0%BA%D0%BD%D0%B8%D0%B3%D0%B0%202.djvu) (том 2)
- 8) Еремин В.В. и др. Задачи по физической химии. М.: "ЭКЗАМЕН", 2003. Режим доступа: <https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/Eremin-V.V.-Osnovy-fizicheskoy-himii.-Teoriya-i-zadachi.djvu>
- 9) Краткий справочник физико-химических величин, под ред. Равделя А.А. и Пономаревой А.М., Л.: Химия, 1983. Режим доступа: <https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/Ravdel-Kratkiy-spravochnik-fiziko-himicheskikh-velichin.djvu>
- 10) Маррелл Дж., Кеттл С., Теддер Дж. Теория валентности. М.: Мир, 1968. Режим доступа: <https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/%D0%A2%D0%B5%D0%BE%D1%80%D0%B8%D1%8F%20%D0%B2%D0%B0%D0%BB%D0%B5%D0%BD%D1%82%D0%BD%D0%BE%D1%81%D1%82%D0%B8.djvu>
- 11) Маррелл Дж., Кеттл С., Теддер Дж. Химическая связь. М.: Мир, 1980. Режим доступа: https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/Dzh_Marrel_-_Khimicheskaya_svyaz.djvu
- 12) Коулсон Ч. Валентность. М.: Мир, 1965. Режим доступа: https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/Coulson_C._Valentnost.djvu

- [https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/Koulson Ch Valentnost 1965.djvu](https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/Koulson%20Ch%20Valentnost%201965.djvu)
- 13) Грей Г. Электроны и химическая связь. М.: Мир, 1967. Режим доступа:
[https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/Grey G Elektrony i khimicheskaya svyaz 1967.djvu](https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/Grey%20G%20Elektrony%20i%20khimicheskaya%20svyaz%201967.djvu)
- 14) Краснов К.С. Молекулы и химическая связь. М.: Высш. шк., 1977. Режим доступа:
[https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/krasnov ks molekuly i khimicheskaya svyaz.pdf](https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/krasnov%20ks%20molekuly%20i%20khimicheskaya%20svyaz.pdf)
- 15) Картмелл Э., Фулс Г.В.А. Валентность и строение молекул. М.: Химия, 1979. Режим доступа:
[https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/\[Kartmell YE. \(Cartmell E.\), Fowles G.\(Fowles G.\)\].djvu](https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/[Kartmell%20YE.%20(Fowles%20G.)].djvu)
- 16) Киттель Ч. Элементарная физика твердого тела. М.: Наука, 1968. Режим доступа:
[https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/\[Kittel CH.\] YElementarnaya fizika tverdogo tela.djvu](https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/[Kittel%20CH.]%20YElementarnaya%20fizika%20tverdogo%20tela.djvu)
- 17) Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии. М.: Мир, "Изд. АСТ", 2003. Режим доступа:
[https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/\[Pentin YU.A., Vilkov L.V.\] Fizicheskie metodue .djvu](https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/[Pentin%20YU.A.,%20Vilkov%20L.V.]%20Fizicheskie%20metodue%20.djvu)
- 18) Драго Р. Физические методы в химии. Тт. 1 и 2. М.: Мир, 1981. Режим доступа:
<https://disk.yandex.ru/i/7b9B2YTJcYqWxQ> (том 1), <https://disk.yandex.ru/i/eW2R00UEduUQ0-w> (том 2)
- 19) Бажин Н.Б., Иванченко В.А., Пармон В.Н. Термодинамика для химиков. М.: Химия, 2000; Изд-е 2-е, М.: Колосс, 2004. Режим доступа:
[https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/Bazhin N M Parmon V N Termodinamika dlya khimikov 2019.pdf](https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/Bazhin%20N%20M%20Parmon%20V%20N%20Termodinamika%20dlya%20khimikov%202019.pdf)
- 20) Полторак О.М. Термодинамика в физической химии. М.: Высш. шк., 1991. Режим доступа:
[https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/\[Poltorak O.M.\] Termodinamika v fizicheskoi himii.djvu](https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/[Poltorak%20O.M.]%20Termodinamika%20v%20fizicheskoi%20himii.djvu)
- 21) Карапетьянц М.Х. Химическая термодинамика. М.: Химия, 1975. Режим доступа:
[https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/\[Karapetyanc M.H.\] Himicheskaya termodinamika.djvu](https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/[Karapetyanc%20M.H.]%20Himicheskaya%20termodinamika.djvu)
- 22) Еремин Е.Н. Основы химической термодинамики. М.: Высш. шк., 1978. Режим доступа:
[https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/eremin en osnovy khimicheskoi termodinamiki.djvu](https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/eremin%20en%20osnovy%20khimicheskoi%20termodinamiki.djvu)
- 23) Мюнстер Ф. Химическая термодинамика. М.: Мир, 1971. Режим доступа:
[https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/\[Myunster A.\] Himicheskaya termodinamika.djvu](https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/[Myunster%20A.]%20Himicheskaya%20termodinamika.djvu)
- 24) Смирнова Н.А. Методы статической термодинамики в физической химии. М.: Высш. шк., 1982. Режим доступа:
[https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/Smirnova N.A. Metody staticheskoi termodinamiki v fizicheskoi himii.djvu](https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/Smirnova%20N.A.%20Metody%20staticheskoi%20termodinamiki%20v%20fizicheskoi%20himii.djvu)

- [https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/\[Smirnova_N.A.\]_Metodue_statcheskoi_termodinamiki.djvu](https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/[Smirnova_N.A.]_Metodue_statcheskoi_termodinamiki.djvu)
- 25) Смирнова Н.А. Молекулярные теории растворов. Л.: Химия, 1987. Режим доступа:
[https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/\[Smirnova_N.A.\]_Molekulyarnuee_teorii_rastvorov.djvu](https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/[Smirnova_N.A.]_Molekulyarnuee_teorii_rastvorov.djvu)
- 26) Киттель Ч. Статистическая термодинамика. М.: Мир, 1977. Режим доступа:
[https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/\[Kittel_CH.\]_Statisticheskaya_termodinamika.djvu](https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/[Kittel_CH.]_Statisticheskaya_termodinamika.djvu)
- 27) Пригожин И., Дефэй Р. Химическая термодинамика. Новосибирск, Наука, 1966. Режим доступа:
https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/Prigozhin_I_Defey_Khimicheskaya_termodinamika_19.djvu
- 28) Пригожин И., Кондепуди Д. Современная термодинамика. М.: Мир, 2002. Режим доступа:
https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/Prigozhin_I_Kondepudi_D_Prigogine_Kondepud.djvu
- 29) Булатов Н.К., Лундин А.Б. Термодинамика необратимых физико-химических процессов. М.: Химия, 1984. Режим доступа:
[https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/\[Bulatov_N.K.,_Lundin_A.B.\]_Termodinamika_neobrat.djvu](https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/[Bulatov_N.K.,_Lundin_A.B.]_Termodinamika_neobrat.djvu)
- 30) Музыкантов В.С., Бажин Н.М., Пармон В.Н., Булгаков Н.Н., Иванченко В.А. Задачи по химической термодинамике. М.: Химия, 2001. Режим доступа:
<https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/%D0%97%D0%B0%D0%B4%D0%B0%D1%87%D0%BD%D0%B8%D0%BA%20%D0%9C%D1%83%D0%B7%D1%8B%D0%BA%D0%B0%D0%BD%D1%82%D0%BE%D0%B2%20%D0%91%D0%B0%D0%B6%D0%B8%D0%BD.pdf>
- 31) Фенелонов В.Б. Введение в физическую химию формирования супрамолекулярной структуры адсорбентов и катализаторов. Новосибирск: Изд. СО РАН, 2004. Режим доступа:
https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/fenelonov_vb_vvedenie_v_fizicheskuiu_khimiuu_formirovaniia_s.pdf
- 32) Замараев К.И. Курс химической кинетики. В 3-х частях. Новосибирск: НГУ, 2004. Режим доступа:
<https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/%D0%97%D0%B0%D0%BC%D0%B0%D1%80%D0%B0%D0%B5%D0%B2%20%D1%87%D0%B0%D1%81%D1%82%D1%8C%201.pdf> (часть 1),
<https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/%D0%97%D0%B0%D0%BC%D0%B0%D1%80%D0%B0%D0%B5%D0%B2%20%D1%87%D0%B0%D1%81%D1%82%D1%8C%202.pdf> (часть 2),
<https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/%D0%97%D0%B0%D0%BC%D0%B0%D1%80%D0%B0%D0%B5%D0%B2%20%D1%87%D0%B0%D1%81%D1%82%D1%8C%203.pdf> (часть 3).
- 33) Эмануэль Н. М., Кнорре Д. Г. Курс химической кинетики. М.: Высш. шк., 1984. Режим доступа:
[https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/\[Emanuel_N.M.,_Knorre_D.G.\]_Kurs_khimicheskoi_kinetiki.pdf](https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/[Emanuel_N.M.,_Knorre_D.G.]_Kurs_khimicheskoi_kinetiki.pdf)

- https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/Emanuel_N_M_Knorre_D_G_Kurs_khimicheskoy_kine.djvu
- 34) Денисов Е. Т. Кинетика гомогенных химических реакций. М.: Высш. шк., 1988. Режим доступа: [https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/\[Denisov_E.T.\]_Kinetika_gomogennueh_himicheskij_re.djvu](https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/[Denisov_E.T.]_Kinetika_gomogennueh_himicheskij_re.djvu)
- 35) Кондратьев В.Н., Никитин Е.Е. Кинетика и механизм газофазных реакций. М.: Наука, 1974. Режим доступа: <https://disk.yandex.ru/i/hxSsiP1N1eSoZQ>
- 36) Пурмаль А.П., А, Б, В ... химической кинетики. М.: ИКЦ "Академкнига", 2004. Режим доступа: [https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/\[A.P._Purmal\]_A,_B,_V..._himicheskoi_kinetiki.djvu](https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/[A.P._Purmal]_A,_B,_V..._himicheskoi_kinetiki.djvu)
- 37) Панченков Г. М., Лебедев В. П. Химическая кинетика и катализ. М.: Химия, 1974. Режим доступа: [https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/\[Panchenkov_G.M.,_Lebedev_V.P.\]_Himicheskaya_kinet\(BookSee.org\).djvu](https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/[Panchenkov_G.M.,_Lebedev_V.P.]_Himicheskaya_kinet(BookSee.org).djvu)
- 38) Эйринг Г., Лин С.Г., Лин С.М. Основы химической кинетики. М.: "Мир", 1983. Режим доступа: [https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/\[YEiring_G.,_Lin_S.G.,_Lin_S.M.\]_Osnovue_himiche\(BookSee.org\).djvu](https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/[YEiring_G.,_Lin_S.G.,_Lin_S.M.]_Osnovue_himiche(BookSee.org).djvu)
- 39) Бенсон С. Основы химической кинетики. М.: Мир, 1964. Режим доступа: <https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/%D0%91%D0%B5%D0%BD%D1%81%D0%BE%D0%BD%20%D0%9E%D1%81%D0%BD%D0%BE%D0%B2%D1%8B%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%87%D0%B5%D1%81%D0%BA%D0%BE%D0%B9%20%D0%BA%D0%B8%D0%BD%D0%B5%D1%82%D0%B8%D0%BA%D0%B8.djvu>
- 40) Бенсон С. Термохимическая кинетика. М.: Мир, 1971. Режим доступа: https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/Benson_S_Termokhimicheskaya_kinetika_1971.pdf
- 41) Хоффман Р.В. Механизмы химических реакций. М.: Мир, 1979. Режим доступа: [https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/\[Hoffman_R.V.\]_Mehanizmue_himicheskij_reakcy.djvu](https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/[Hoffman_R.V.]_Mehanizmue_himicheskij_reakcy.djvu)
- 42) Сборник задач по химической кинетике и катализу. Под. ред. Савинова Е.Н., Пармона В.Н., Новосибирск: НГУ, 1997. Режим доступа:
- 43) Байрамов В.М. Химическая кинетика и катализ. Примеры и задачи с решениями. М.: Academia, 2003. Режим доступа: https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/bairamov_vm_khimicheskaja_kinetika_i_kataliz_primery_i_zadac.pdf
- 44) Накамура А., Цуцуи М. Принципы и применение гомогенного катализа. М.: Мир, 1983. Режим доступа: [https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/\[Nakamura_A.,_Cucui_M.\]_Principue_i_primenenie_gom.djvu](https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/[Nakamura_A.,_Cucui_M.]_Principue_i_primenenie_gom.djvu)
- 45) Мастерс К. Гомогенный катализ переходными металлами. М.: Мир, 1983. Режим доступа: [https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/\[Masters_K.\]_Gomogennuei_kataliz_perehodnuemi_meta.djvu](https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/[Masters_K.]_Gomogennuei_kataliz_perehodnuemi_meta.djvu)

- 46) Боресков Г.К. Гетерогенный катализ. М.: Наука, 1986. Режим доступа: [https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/\[Boreskov_G.K.\]_Geterogennuei_kataliz\(BookSee.org\).djvu](https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/[Boreskov_G.K.]_Geterogennuei_kataliz(BookSee.org).djvu)
- 47) Крылов О.В. Гетерогенный катализ, ч. I – IV, Новосибирск: НГУ, 2002. Режим доступа: <https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/%D0%9A%D1%80%D1%8B%D0%BB%D0%BE%D0%B2%20%D0%93%D0%B5%D1%82%D0%B5%D1%80%D0%BE%D0%B3%D0%B5%D0%BD%D1%8B%D0%B9%20%D0%BA%D0%B0%D1%82%D0%B0%D0%BB%D0%B8%D0%B7.pdf>
- 48) Томас Дж., Томас У. Гетерогенный катализ. М.: Мир, 1969. Режим доступа: <https://www.catalysis.ru/resources/education/%D1%80%D0%B5%D0%BA%20%D0%BB%D0%B8%D1%82-%D1%80%D0%B0%20%D1%84%D0%B8%D0%B7%20%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F/%D0%A2%D0%BE%D0%BC%D0%B0%D1%81%20%D0%93%D0%B5%D1%82%D0%B5%D1%80%D0%BE%D0%B3%D0%B5%D0%BD%D0%BD%D1%8B%D0%B9%20%D0%BA%D0%B0%D1%82%D0%B0%D0%BB%D0%B8%D0%B7.djvu>

8.2. Информационные ресурсы

Примеры задач письменной контрольной работы: http://www.catalysis.ru/block/index.php?ID=5&SECTION_ID=418

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины

- Аудиторный фонд ИК СО РАН, ноутбук, мультимедиа проектор, экран.
- Компьютерный класс ИК СО РАН, электронно-вычислительные машины, оснащенные необходимым прикладным и специализированным программным обеспечением.
- Рабочие места с выходом в интернет и внутреннюю сеть ИК СО РАН.
- Библиотечный фонд, информационно-аналитический центр ИК СО РАН.
- Учебные материалы на сайте ИК СО РАН www.catalysis.ru (Раздел Образование).

10. Методические рекомендации по организации изучения дисциплины

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме кандидатского экзамена, состоящего из двух этапов: письменной контрольной работы, являющейся допуском ко второму этапу экзамена, и устной части экзамена. Письменная контрольная работа оценивается по шкале «неудовлетворительно» (менее 50 баллов), «удовлетворительно» (50 – 65 баллов), «хорошо» (65 – 80 баллов), «отлично» (80 – 100 баллов). Получение аспирантом оценок «удовлетворительно», «хорошо», «отлично» за письменную контрольную работу является допуском к прохождению устной части экзамена. Устная часть экзамена оценивается по шкале «неудовлетворительно», «удовлетворительно», «хорошо», «отлично». Итоговая оценка за кандидатский экзамен является средним арифметическим оценок, полученных при оценивании контрольной работы и устного ответа аспиранта. Получение аспирантом оценки «неудовлетворительно» по одному из этапов экзамена автоматически означает получение оценки «неудовлетворительно» за кандидатский экзамен и признается академической задолженностью.

ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ В РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ЗА _____/_____ УЧЕБНЫЙ ГОД

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
«Федеральный исследовательский центр
«Институт катализа им. Г.К. Борескова
Сибирского отделения Российской академии наук»
(ИК СО РАН, Институт катализа СО РАН)

УТВЕРЖДАЮ
Директор, академик РАН
В.И. Бухтияров



« 10 » апреля 2022 г.

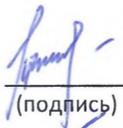
Фонд оценочных средств по дисциплине
Б1.ОД.4 Физическая химия

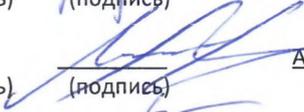
Научная специальность: 1.4.4 Физическая химия
Направленность: Физическая химия

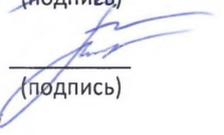
Новосибирск, 2022

Фонд оценочных средств является Приложением 1 к рабочей программе дисциплины «Физическая химия», реализуемой в рамках программы подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре по научной специальности 1.4.4 Физическая химия, направленность Физическая химия.

Составители фонда оценочных средств:

Научный сотрудник, к.х.н.
(должность, ученое звание, ученая степень)  Ж.В. Веселовская
(подпись) (Ф.И.О.)

Научный сотрудник, к.х.н.
(должность, ученое звание, ученая степень)  А.И. Лысиков
(подпись) (Ф.И.О.)

Старший научный сотрудник, к.х.н.
(должность, ученое звание, ученая степень)  Д.И. Потемкин
(подпись) (Ф.И.О.)

Фонд оценочных средств утвержден на заседании Ученого совета ИК СО РАН
«15» апреля 2022 г., протокол № 6

Ученый секретарь,
к.х.н.  М.О. Казаков
(подпись) (Ф.И.О.)

СОГЛАСОВАНО:

Зам. директора по научной работе,
д.х.н.  О.Н. Мартьянов
(подпись) (Ф.И.О.)

1. Промежуточная аттестация по дисциплине «Физическая химия»

1.1. Общая характеристика промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация по дисциплине «Физическая химия» нацелена на проверку уровня сформированности следующих компетенций:

Способность определять термодинамические характеристики процессов на поверхности, устанавливать закономерности адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях
Способность рассчитывать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ
Способность к определению термодинамических свойств веществ, расчету термодинамических функций простых и сложных систем, включая каталитические процессы
Способность применять теорию растворов, межчастичных и межконтактных взаимодействий, физико-химических основ синтеза адсорбентов и катализаторов при решении задач в профессиональной области
Способность устанавливать механизмы действия катализаторов, изучать элементарные стадии и кинетические закономерности протекания гомогенных, гетерогенных и ферментативных каталитических превращений

1.2. Порядок проведения промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме кандидатского экзамена, состоящего из двух этапов: письменной контрольной работы, являющейся допуском ко второму этапу экзамена, и устной части экзамена. Письменная контрольная работа оценивается по шкале «неудовлетворительно», «удовлетворительно», «хорошо», «отлично». Получение аспирантом оценок «удовлетворительно», «хорошо», «отлично» за письменную контрольную работу является допуском к прохождению устной части экзамена. Устная часть экзамена оценивается по шкале «неудовлетворительно», «удовлетворительно», «хорошо», «отлично». Итоговая оценка за кандидатский экзамен является средним арифметическим оценок, полученных при оценивании контрольной работы и устного ответа аспиранта. Получение аспирантом оценки «неудовлетворительно» по одному из этапов экзамена автоматически означает получение оценки «неудовлетворительно» за кандидатский экзамен и признается академической задолженностью.

1.3. Письменная контрольная работа

Письменная контрольная работа состоит из оригинальных задач, ежегодно составляемых преподавателями дисциплины. Задачи контрольной работы позволяют определить уровень сформированности следующих компетенций: «способность определять термодинамические характеристики процессов на поверхности, устанавливать закономерности адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях», «способность рассчитывать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ», «способность к определению термодинамических свойств веществ, расчету термодинамических функций простых и сложных систем, включая каталитические процессы», «способность применять теорию растворов, межчастичных и межконтактных взаимодействий, физико-химических основ синтеза адсорбентов и катализаторов при решении задач в профессиональной области», «способность устанавливать механизмы действия катализаторов, изучать элементарные стадии и кинетические закономерности протекания гомогенных, гетерогенных и ферментативных каталитических превращений».

Типичные задачи контрольных работ представлены в таблице.

Компетенция	Текст задачи
<p>Способность устанавливать механизмы действия катализаторов, изучать элементарные стадии и кинетические закономерности протекания гомогенных, гетерогенных ферментативных каталитических превращений</p>	<p>Жидкофазная реакция $A \rightarrow B$ катализируется ионами H^+. Известно, что при повышенных давлении и температуре (например, $T \geq 600$ К, $P \geq 200$ атм), когда состояние воды близко к критическому (СКВ), ионное произведение воды $K_w = [H^+][OH^-]$ равно $10^{-8} - 10^{-7}$ (гион/кг)², что существенно больше, чем $K_w = 10^{-14}$ при $T=298$ К и $P=1$ атм.</p> <p>Таким образом, водная среда в околокритическом состоянии часто используется для проведения реакций, катализируемых кислотами в обычных условиях. В частности, эти свойства СКВ используются для уничтожения вредных органических примесей сточных вод, например, кислотного разложения нитроароматических и других соединений.</p> <p>Механизм приведенной выше реакции, протекающей в водной среде при $T=650$ К и $P=230$ атм, представлен основными стадиями:</p> $A + H^+ \xrightarrow{k_1} AH^+ \quad (\text{лимитирующая})$ $AH^+ \xrightleftharpoons{K_2} BH^+ \quad (\text{равновесная})$ $BH^+ \xrightleftharpoons{K_3} B + H^+ \quad (\text{равновесная})$ <p>Вывести уравнение для скорости реакции как функцию константы скорости k_1, констант равновесий K_2 и K_3, константы K_w и текущих концентраций веществ А и В.</p> <p>Лимитирующей стадией каталитической полимеризации этилена является рост полимерной цепи на активном центре (М-Р):</p> $M-P + C_2H_4 \rightarrow M-(C_2H_4)-P$ <p>Для определения числа активных центров пользуют ингибирование активного центра радиоактивной меткой (¹⁴СО). Для этого в реактор вводят избыток радиоактивного ¹⁴СО, который быстро реагирует с активными центрами М-Р с образованием частиц М-(¹⁴СО)-Р:</p> $M-P + {}^{14}CO \rightarrow M-({}^{14}CO)-P$ <p>При этом рост цепи прекращается.</p> <p>В реактор загрузили 2×10^{-6} моль комплекса двухвалентного кобальта и запустили процесс полимеризации. Через 5 минут в систему ввели избыток меченного ¹⁴СО. Масса полученного полимерного продукта составила 3 г. Определите долю кобальта в активном состоянии, если отношение удельной радиоактивности полимера А (распадов на 1 грамм полимера) к радиоактивности использованной метки Q (распадов на 1 моль ¹⁴СО) составило $A/Q = 2 \times 10^{-7}$ (грамм полимера/моль ¹⁴СО).</p> <p>Ферментативная реакция протекает согласно схеме Михаэлиса-Ментен:</p> $E + S \xrightleftharpoons[k_{-1}]{k_1} ES \xrightarrow{k_2} E + P \quad K_m = \frac{k_{-1} + k_2}{k_1} = 0,035 \text{ моль / л}$ <p>При начальных концентрациях субстрата $[S]_0=0,115$ моль/л и фермента $[E]_0=5,50 \cdot 10^{-6}$ моль/л значение стационарной скорости в начальный момент времени составляет $1,15 \cdot 10^{-3}$ моль/(л·с). Найдите максимальное значение стационарной скорости процесса для приведенной начальной концентрации фермента.</p>
<p>Способность к определению термодинамических свойств веществ, расчету термодинамических функций простых и сложных систем,</p>	<p>Каталитический процесс синтеза аммиака, протекающий согласно уравнению реакции $0,5 N_2 + 1,5 H_2 = NH_3$, осуществляют при постоянных температуре (400 °С) и давлении (330 атм). Определите мольную долю аммиака в равновесной смеси, если исходно в реактор подаётся стехиометрическая смесь азота с водородом.</p> <p>Изменение стандартной энергии Гиббса для данной реакции зависит от температуры (К) следующим образом:</p> $\Delta_r G^0(T) = -37913 + 72,68 \cdot T \cdot \lg T - 16,62 \cdot 10^{-3} \cdot T^2 + 1,4 \cdot 10^{-6} \cdot T^3 - 102,62 \cdot T$

<p>включая каталитические процессы</p>	<p>(Дж/моль). K_v для данной реакции равна 0.69.</p> <p>Для реакции получения карбоната глицерина (КГ) из глицерина и мочевины:</p> $(C_3H_5(OH)_3)_{ж} + ((NH_2)_2CO)_{ж} \rightleftharpoons (KG)_{ж} + 2(NH_3)_g$ <p>при давлении аммиака, равном 20 Па, $\Delta_r G$ (Дж/моль) зависит от T (К) следующим образом:</p> $\Delta_r G = 138211 + 52.11 \cdot T \cdot \ln T - 793 \cdot T$ <p>Определите константу равновесия K_p и стандартную молярную энтропию $\Delta_r S^o$ данной реакции при 420 К.</p> <p>Пиролиз пропана при постоянном давлении $P = 1$ атм протекает согласно уравнению: $C_3H_8(\text{газ}) = C_2H_4(\text{газ}) + CH_4(\text{газ})$. При температуре 500 К равновесная степень превращения пропана равна 0.2, а при 600 К равна 0.71. Оцените стандартные энтальпию и энтропию указанной реакции, считая их постоянными в температурном интервале 500÷600 К.</p>
<p>Способность определять термодинамические характеристики процессов на поверхности, устанавливать закономерности адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях</p>	<p>Адсорбция аргона на поверхности мезопористого сибунита описывается моделью Лэнгмюра. Выведите уравнение изостеры адсорбции Лэнгмюра и определите зависимость изостерической теплоты адсорбции от степени заполнения поверхности.</p> <p>Адсорбция оксида углерода на нанесенном катализаторе NiO/SiO₂ при температуре 273 К и давлении CO 100 торр составляет 5 ммоль/г при полной удельной поверхности катализатора 50 м²/г. Оцените удельную поверхность NiO в катализаторе, если при тех же условиях адсорбция CO на чистых NiO и SiO₂ составляет 1 и 0.01 ммоль/м². При решении задачи использовать принцип аддитивности адсорбции.</p> <p>Адсорбция CO на поверхности палладия описывается уравнением:</p> $1) CO + \square_{Pd} \xrightleftharpoons[k_{-1}]{k_1} CO_{Pd}$ <p>Из-за большой теплоты адсорбции CO при низких температурах степень заполнения $\theta_{CO} = 1$. Так, что даже в избытке кислорода окисление CO на палладии подавлено.</p> <p>Оцените теплоту адсорбции CO на поверхности палладия и средний радиус частиц Pd в катализаторе Pd/Al₂O₃, если известно, что: 1) теплота эмпирически зависит от радиуса частиц по уравнению: $Q(R) \approx Q_0 \frac{R}{1+R}$, где Q_0 – теплота адсорбции CO на массивном палладии (кДж/моль), R – радиус частицы (Å).</p> <p>2) Окисление начинается, если доля свободной поверхности составляет более 10^{-7}.</p> <p>3) Окисление на палладиевой фольге и на катализаторе Pd/Al₂O₃ начинается при температурах 220 °С и 150 °С соответственно для $P_{CO} = 1$ торр.</p> <p>В оценках принять, что коэффициент прилипания CO = 1, частота свободного колебания CO на поверхности 1013 с⁻¹, а концентрация посадочных мест на поверхности 1015 см⁻².</p>
<p>Способность применять теорию растворов, межчастичных и межконтактных взаимодействий, физико-химических</p>	<p>При приготовлении углерод-минерального композита использовали мезопористые уголь (истинная плотность 1.5 г/см³, удельная поверхность 400 м²/г, объем мезопор 1.0 см³/г) и оксид алюминия (истинная плотность 3.2 г/см³, удельная поверхность 200 м²/г, объем мезопор 0.3 см³/г). Рассчитайте истинную и насыпную плотность, удельную поверхность и объем мезопор полученного композита, содержащего равные массовые доли исходных компонентов.</p>

<p>основ синтеза адсорбентов и катализаторов при решении задач в профессиональной области</p>	<p>Катализаторы получают адсорбцией на поверхность носителя кластеров металла размером 2,2 нм, стабилизированных объёмными лигандами. Адсорбция очень прочная, и остатки неадсорбированного предшественника удаляют промывкой растворителем. В ходе дальнейшего нагревания проводят разложение лигандов. После этого катализатор окончательно прокаливают при температуре, когда кластеры достаточно подвижны и спекаются, образуя монодисперсные частицы, которые локализованы на устьях микропор.</p> <p>Использовали два носителя с одинаковой природой поверхности и следующими параметрами пористой структуры: Носитель (1): Поверхность микропор – 150 м²/г, мезопор – 80 м²/г и макропор 20 м²/г. Носитель (2): Поверхность микропор – 100 м²/г, мезопор – 175 м²/г и 50 м²/г макропор.</p> <p>Во сколько раз может отличаться размер частиц металла в катализаторе (2) от такового для (1)?</p> <p>Композиционный сорбент для CO₂ представляет собой CaO, равномерно покрывающий поверхность пор матрицы слоистого материала. Поры имеют бимодальное распределение по размерам: V₁=0.5 г/см³, S₁=150 м²/г; V₂=0.1 г/см³, S₂=80 м²/г.</p> <p>Каково допустимо максимальное весовое содержание CaO в образце, при котором не происходит разрушения матрицы в случае полного перехода оксида в карбонат кальция? Плотность CaCO₃ – 2.71 г/см³, CaO – 3.4 г/см³.</p>
<p>Способность рассчитывать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ</p>	<p>Определите основные термы атома F и иона F⁻ в предположении слабого спин-орбитального взаимодействия (модель LS-связи). Какая частица в газовой фазе (атом F или ион F⁻) имеет большее значение энтропии при температуре 298 К? Кратко аргументируйте свой ответ.</p>

1.4. Устный этап экзамена

Вопросы к устному этапу экзамена нацелены на проверку сформированности следующих компетенций: «способность определять термодинамические характеристики процессов на поверхности, устанавливать закономерности адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях», «способность рассчитывать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ», «способность к определению термодинамических свойств веществ, расчету термодинамических функций простых и сложных систем, включая каталитические процессы», «способность устанавливать механизмы действия катализаторов, изучать элементарные стадии и кинетические закономерности протекания гомогенных, гетерогенных и ферментативных каталитических превращений». На экзамене случайным образом выбираются три вопроса, проверяющих уровень сформированности различных компетенций. Примеры вопросов устного экзамена приведены в таблице.

Компетенция	Вопросы
<p>Способность рассчитывать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ</p>	<p>Механическая модель молекулы. Потенциалы парных взаимодействий. Методы молекулярной механики и молекулярной динамики при анализе строения молекул.</p>
	<p>Общие принципы квантово-механического описания молекулярных систем. Стационарное уравнение Шредингера для свободной молекулы. Адиабатическое приближение. Электронное волновое уравнение.</p>
	<p>Потенциальные кривые и поверхности потенциальной энергии. Их общая</p>

	структура и различные типы. Равновесные конфигурации молекул. Структурная изомерия. Оптические изомеры.
	Колебания молекул. Нормальные колебания, амплитуды и частоты колебаний, частоты основных колебательных переходов. Колебания с большой амплитудой.
	Вращение молекул. Различные типы молекулярных волчков. Вращательные уровни энергии.
	Электронное строение атомов и молекул. Одноэлектронное приближение. Атомные и молекулярные орбитали. Электронные конфигурации и термы атомов. Правило Хунда.
	Электронная плотность. Распределение электронной плотности в двухатомных молекулах. Корреляционные орбитальные диаграммы. Теорема Купманса.
	Интерпретация строения молекул на основе орбитальных моделей и исследования распределения электронной плотности. Локализованные молекулярные орбитали. Гибридизация.
	Представления о зарядах на атомах и порядках связей. Различные методы выделения атомов в молекулах. Индексы реакционной способности. Теория граничных орбиталей.
	Точечные группы симметрии молекул. Понятие о представлениях групп и характерах представлений. Общие свойства симметрии волновых функций и потенциальных поверхностей молекул. Классификация квантовых состояний атомов и молекул по симметрии. Симметрия атомных и молекулярных орбиталей, s- и p- орбитали. p-электронное приближение.
	Влияние симметрии равновесной конфигурации ядер на свойства молекул и их динамическое поведение. Орбитальные корреляционные диаграммы. Сохранение орбитальной симметрии при химических реакциях.
	Дипольный момент и поляризуемость молекул. Магнитный момент и магнитная восприимчивость. Эффекты Штарка и Зеемана. Магнитно-резонансные методы исследования строения молекул. Химический сдвиг.
	Оптические спектры молекул. Вероятности переходов и правила отбора при переходах между различными квантовыми состояниями молекул. Связь спектров молекул с их строением. Определение структурных характеристик молекул из спектроскопических данных.
	Основные составляющие межмолекулярных взаимодействий. Молекулярные комплексы. Ван-дер-ваальсовы молекулы. Кластеры атомов и молекул. Водородная связь.
	Строение молекул простых и координационных неорганических соединений. Полиядерные комплексные соединения. Строение основных типов органических и элементоорганических соединений. Соединения включения. Полимеры и биополимеры.
	Идеальные кристаллы. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Реальные кристаллы. Типы дефектов в реальных кристаллах. Кристаллы с неполной упорядоченностью. Доменные структуры.
	Структурная классификация конденсированных фаз. Симметрия кристаллов. Кристаллографические точечные группы симметрии, типы решеток, сингонии. Понятие о пространственных группах кристаллов. Индексы кристаллографических граней. Атомные, ионные, молекулярные и другие типы кристаллов. Цепочечные, каркасные и слоистые структуры.
	Строение твердых растворов. Упорядоченные твердые растворы. Аморфные вещества.
	Металлы и полупроводники. Зонная структура энергетического спектра кристаллов. Поверхность Ферми. Различные типы проводимости.

	Колебания в кристаллах. Фононы.
	Особенности строения поверхности кристаллов и жидкостей, структура границы раздела конденсированных фаз. Молекулы и кластеры на поверхности. Структура адсорбционных слоев.
	Жидкости. Мгновенная и колебательно-усредненная структура жидкости. Ассоциаты и кластеры в жидкостях. Структура воды и водных растворов. Структура жидких электролитов. Мицеллообразование и строение мицелл.
Способность к определению термодинамических свойств веществ, расчету термодинамических функций простых и сложных систем, включая каталитические процессы	Основные понятия термодинамики: изолированные и открытые системы, равновесные и неравновесные системы, термодинамические переменные, температура, интенсивные и экстенсивные переменные. Уравнения состояния.
	Первый закон термодинамики. Теплота, работа, внутренняя энергия, энтальпия, теплоемкость. Закон Гесса. Стандартные состояния и стандартные теплоты химических реакций.
	Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Формула Кирхгофа. Таблицы стандартных термодинамических величин и их использование в термодинамических расчетах.
	Второй закон термодинамики. Энтропия и ее изменения в обратимых и необратимых процессах. Теорема Карно – Клаузиуса. Различные шкалы температур.
	Фундаментальные уравнения Гиббса. Характеристические функции. Энергия Гиббса, энергия Гельмгольца. Уравнения Максвелла. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов.
	Уравнение Гиббса – Гельмгольца. Работа и теплота химического процесса. Химические потенциалы.
	Химическое равновесие. Закон действующих масс. Различные виды констант равновесия и связь между ними. Изотерма Вант-Гоффа. Уравнения изобары и изохоры химической реакции.
	Расчеты констант равновесия химических реакций с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций. Приведенная энергия Гиббса и ее использование для расчетов химических равновесий.
	Микро- и макросостояния химических систем. Фазовые G - и μ -пространства. Эргодическая гипотеза. Термодинамическая вероятность и ее связь с энтропией. Распределение Максвелла – Больцмана.
	Статистические средние значения макроскопических величин. Ансамбли Гиббса. Микроканоническое и каноническое распределения. Расчет числа состояний в квазиклассическом приближении.
	Каноническая функция распределения Гиббса. Сумма по состояниям как статистическая характеристическая функция. Статистические выражения для основных термодинамических функций. Молекулярная сумма по состояниям и сумма по состояниям макроскопической системы. Поступательная, вращательная, электронная и колебательная суммы по состояниям. Статистический расчет энтропии. Постулат Планка и абсолютная энтропия.
	Приближение “жесткий ротатор – гармонический осциллятор”. Составляющие внутренней энергии, теплоемкости и энтропии, обусловленные поступательным, вращательным и колебательным движением.
	Расчет констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики.
Распределения Бозе – Эйнштейна и Ферми – Дирака. Вырожденный идеальный газ. Электроны в металлах. Уровень Ферми. Статистическая теория Эйнштейна идеального кристалла, теория Дебая.	

	<p>Точечные дефекты кристаллических решеток. Равновесные и неравновесные дефекты. Нестехиометрические соединения и их термодинамическое описание.</p> <p>Различные типы растворов. Способы выражения состава растворов. Идеальные растворы, общее условие идеальности растворов. Давление насыщенного пара жидких растворов, закон Рауля. Неидеальные растворы и их свойства. Метод активностей. Коэффициенты активности и их определение.</p> <p>Стандартные состояния при определении химических потенциалов компонент растворов. Симметричная и несимметричная системы отсчета.</p> <p>Коллигативные свойства растворов. Изменение температуры замерзания растворов, криоскопия. Зонная плавка. Осмотические явления.</p> <p>Парциальные мольные величины, их определение для бинарных систем. Уравнение Гиббса – Дюгема.</p> <p>Функции смешения для идеальных и неидеальных растворов. Предельно разбавленные растворы, атермальные и регулярные растворы, их свойства.</p> <p>Гетерогенные системы. Понятия компонента, фазы, степени свободы. Правило фаз Гиббса.</p> <p>Однокомпонентные системы. Диаграммы состояния воды, серы, фосфора и углерода. Фазовые переходы первого рода. Уравнение Клапейрона – Клаузиуса.</p> <p>Двухкомпонентные системы. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем. Равновесие жидкость – пар в двухкомпонентных системах. Законы Гиббса – Коновалова. Азеотропные смеси.</p> <p>Фазовые переходы второго рода. Уравнения Эренфеста. Трехкомпонентные системы. Треугольник Гиббса. Диаграммы плавкости трехкомпонентных систем.</p> <p>Растворы электролитов. Ион-дипольное взаимодействие как основной процесс, определяющий устойчивость растворов электролитов. Коэффициенты активности в растворах электролитов. Средняя активность и средний коэффициент активности, их связь с активностью отдельных ионов. Основные положения теории Дебая – Хюккеля. Потенциал ионной атмосферы.</p> <p>Условия электрохимического равновесия на границе раздела фаз и в электрохимической цепи. Термодинамика гальванического элемента. Электродвижущая сила, ее выражение через энергию Гиббса реакции в элементе. Уравнения Нернста и Гиббса – Гельмгольца для равновесной электрохимической цепи. Понятие электродного потенциала. Определение коэффициентов активности на основе измерений ЭДС гальванического элемента. Электропроводность растворов электролитов; удельная и эквивалентная электропроводность. Числа переноса, подвижность ионов и закон Кольрауша.</p>
Способность определять термодинамические характеристики процессов на поверхности, устанавливать закономерности адсорбции на границе раздела	<p>Адсорбция. Адсорбент, адсорбат. Виды адсорбции. Структура поверхности и пористость адсорбента. Локализованная и делокализованная адсорбция. Мономолекулярная и полимолекулярная адсорбция. Динамический характер адсорбционного равновесия.</p> <p>Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Генри. Константа адсорбционного равновесия. Уравнение Лэнгмюра. Адсорбция из растворов. Уравнение Брунауэра – Эммета – Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента.</p> <p>Хроматография, различные ее типы (газовая, жидкостная, противоточная и</p>

фаз и формирования активных центров на таких поверхностях	др.)
	Поверхность раздела фаз. Свободная поверхностная энергия, поверхностное натяжение, избыточные термодинамические функции поверхностного слоя.
	Связь свободной поверхностной энергии с теплотой сублимации (правило Стефана), модулем упругости и другими свойствами вещества.
	Эффект Ребиндера: изменение прочности и пластичности твердых тел вследствие снижения их поверхностной энергии.
Способность устанавливать механизмы действия катализаторов, изучать элементарные стадии кинетические закономерности протекания гомогенных, гетерогенных ферментативных каталитических превращений	Основные понятия химической кинетики. Простые и сложные реакции, молекулярность и скорость простой реакции. Основной постулат химической кинетики. Способы определения скорости реакции. Кинетические кривые. Кинетические уравнения. Константа скорости и порядок реакции. Реакции переменного порядка.
	Феноменологическая кинетика сложных химических реакций. Принцип независимости элементарных стадий. Кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций. Квазистационарное приближение. Метод Боденштейна – Темкина. Кинетика гомогенных каталитических и ферментативных реакций. Уравнение Михаэлиса – Ментен.
	Цепные реакции. Кинетика неразветвленных и разветвленных цепных реакций. Кинетические особенности разветвленных цепных реакций. Предельные явления в разветвленных цепных реакциях. Полуостров воспламенения, период индукции. Тепловой взрыв.
	Реакции в потоке. Реакторы идеального вытеснения и идеального смешения.
	Колебательные реакции.
	Макрокинетика. Роль диффузии в кинетике гетерогенных реакций. Кинетика гетерогенных каталитических реакций. Различные режимы протекания реакций (кинетическая и внешняя кинетическая области, области внешней и внутренней диффузии). Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса. Энергия активации и способы ее определения. Элементарные акты химических реакций и физический смысл энергии активации. Термический и нетермический пути активации молекул. Обмен энергией (поступательной, вращательной и колебательной) при столкновениях молекул. Время релаксации в молекулярных системах.
	Теория активных столкновений. Сечение химических реакций. Формула Траутца – Льюиса. Расчет предэкспоненциального множителя по молекулярным постоянным. Стерический фактор. Теория переходного состояния (активированного комплекса). Поверхность потенциальной энергии. Путь и координата реакции. Статистический расчет константы скорости. Энергия и энтропия активации. Использование молекулярных постоянных при расчете константы скорости.
	Различные типы химических реакций. Мономолекулярные реакции в газах, схема Линдемана – Христиансена. Теория РРКМ. Бимолекулярные и тримолекулярные реакции, зависимость предэкспоненциального множителя от температуры.
	Реакции в растворах, влияние растворителя и заряда реагирующих частиц. Клеточный эффект и сольватация.

	Фотохимические и радиационно-химические реакции. Электрохимические реакции. Двойной электрический слой.
	Модельные представления о структуре двойного электрического слоя. Теория Гуи – Чапмена – Грэма.
	Электрокапиллярные явления, уравнение Липпмана. Скорость и стадии электродного процесса. Поляризация электродов. Полярография. Ток обмена и перенапряжение. Зависимость скорости стадии разряда от строения двойного слоя.
	Классификация каталитических реакций и катализаторов. Теория промежуточных соединений в катализе, принцип энергетического соответствия.
	Гомогенный катализ. Кислотно-основной катализ. Кинетика и механизм реакций специфического кислотного катализа. Функции кислотности Гаммета. Кинетика и механизм реакций общего кислотного катализа. Уравнение Бренстеда. Корреляционные уравнения для энергий активации и теплот реакций.
	Специфический и общий основной катализ. Нуклеофильный и электрофильный катализ.
	Катализ металлокомплексными соединениями. Гомогенные реакции гидрирования, их кинетика и механизмы.
	Ферментативный катализ. Адсорбционные и каталитические центры ферментов. Активность и субстратная селективность ферментов. Коферменты. Механизмы ферментативного катализа.
	Гетерогенный катализ. Определение скорости гетерогенной каталитической реакции. Удельная и атомная активность.
	Селективность катализаторов. Роль адсорбции в кинетике гетерогенных каталитических реакций. Неоднородность поверхности катализаторов, нанесенные катализаторы. Энергия активации гетерогенных каталитических реакций.
	Современные теории функционирования гетерогенных катализаторов.
	Основные промышленные каталитические процессы.

3. Критерии оценки сформированности компетенций в рамках промежуточной аттестации по дисциплине

Компетенции	Оценочное средство	Не сформирован	Пороговый уровень	Базовый уровень	Продвинутый уровень
Способность определять термодинамические характеристики процессов на поверхности, устанавливать закономерности адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях	Задача контрольной работы, вопрос устного этапа экзамена	Допускает грубые ошибки при описании основных физико-химических процессов, происходящих на поверхности, на границе раздела фаз, при формировании активных центров на таких поверхностях	Демонстрирует общие знания основных физико-химических процессов, происходящих на поверхности, на границе раздела фаз, при формировании активных центров на таких поверхностях	Демонстрирует знания основных физико-химических процессов, происходящих на поверхности, на границе раздела фаз, при формировании активных центров на таких поверхностях	Демонстрирует глубокие знания основных физико-химических процессов, происходящих на поверхности, на границе раздела фаз, при формировании активных центров на таких поверхностях
Способность рассчитывать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ	Задача контрольной работы, вопрос устного этапа экзамена	Допускает грубые ошибки в знаниях принципов определения электронного строения атомов и молекул и квантово-механического подхода для описания электронного строения молекулярных систем	Демонстрирует общие знания принципов определения электронного строения атомов и молекул и квантово-механического подхода для описания электронного строения молекулярных систем	Демонстрирует знания принципов определения электронного строения атомов и молекул, применяет квантово-механический подход для описания электронного строения молекулярных систем	Демонстрирует глубокие знания принципов определения электронного строения атомов и молекул, грамотно применяет квантово-механический подход для описания электронного строения молекулярных систем
Способность к определению термодинамических	Задача контрольной работы,	Имеет представления о причинах протекания того или иного химического	Имеет представления о причинах протекания того или иного химического	Имеет представления о причинах протекания того или иного	Имеет представления о причинах протекания того или иного химического

свойств веществ, расчету термодинамических функций простых и сложных систем, включая каталитические процессы	вопрос устного этапа экзамена	процесса, об основных факторах, влияющих на состав равновесной реакционной смеси; демонстрирует общие знания законов химической термодинамики, допускает грубые ошибки при объяснении наиболее вероятных направлений химических превращений, расчёте равновесного состава конкретных термодинамических систем	процесса, об основных факторах, влияющих на состав равновесной реакционной смеси; демонстрирует общие знания законов химической термодинамики, допускает негрубые ошибки при объяснении наиболее вероятных направлений химических превращений, расчёте равновесного состава конкретных термодинамических систем	химического процесса, об основных факторах, влияющих на состав равновесной реакционной смеси; демонстрирует знания законов химической термодинамики, допускает несущественные неточности при объяснении наиболее вероятных направлений химических превращений, расчёте равновесного состава конкретных термодинамических систем	процесса, об основных факторах, влияющих на состав равновесной реакционной смеси; демонстрирует глубокие знания законов химической термодинамики, умеет предсказывать и объяснять наиболее вероятные направления химических превращений, проводить расчёты равновесного состава конкретных термодинамических систем
Способность применять теорию растворов, межчастичных и межконтактных взаимодействий, физико-химических основ синтеза адсорбентов и катализаторов при решении задач в профессиональной области	Задача контрольной работы	Допускает грубые ошибки при описании теории растворов, межмолекулярных и межчастичных взаимодействий, их применении для описания особенностей отдельных этапов приготовления катализаторов и закономерностей формирования их текстуры	Демонстрирует общие знания теории растворов, межмолекулярных и межчастичных взаимодействий, допускает негрубые ошибки при применении теорий для описания особенностей отдельных этапов приготовления катализаторов и закономерностей формирования их текстуры	Демонстрирует знания теории растворов, межмолекулярных и межчастичных взаимодействий, не допускает ошибок при применении теорий для описания особенностей отдельных этапов приготовления катализаторов и закономерностей формирования их текстуры	Демонстрирует глубокие знания теории растворов, межмолекулярных и межчастичных взаимодействий, грамотно применяет их при описании особенностей отдельных этапов приготовления катализаторов и закономерностей формирования их текстуры
Способность	Задача	Допускает грубые ошибки	Демонстрирует общие	Демонстрирует знания	Демонстрирует глубокие

устанавливать механизмы действия катализаторов, изучать элементарные стадии и кинетические закономерности протекания гомогенных, гетерогенных и ферментативных каталитических превращений	контрольной работы, вопрос устного этапа экзамена	при описании особенностей гомогенного, гетерогенного и ферментативного катализа, физико-химических основ катализа.	знания сущности и физико-химических основ катализа; допускает негрубые ошибки при описании особенностей гомогенного, гетерогенного и ферментативного катализа	сущности и физико-химических основ катализа; допускает несущественные неточности при описании особенностей гомогенного, гетерогенного и ферментативного катализа	знания сущности и физико-химических основ катализа; особенности гомогенного, гетерогенного и ферментативного катализа
---	---	--	---	--	---

Для успешного прохождения промежуточной аттестации все компетенции должны быть сформированы на уровне не ниже порогового.

4. Критерии оценивания промежуточной аттестации аспиранта

Итоговая оценка за кандидатский экзамен является средним арифметическим оценок, полученных при оценивании степени освоения проверяемых компетенций на этапах письменной контрольной работы и устного экзамена. Получение аспирантом оценки «неудовлетворительно» по одному из этапов экзамена автоматически означает получение оценки «неудовлетворительно» за кандидатский экзамен и признается академической задолженностью.

Критерии оценивания контрольной работы:

- «неудовлетворительно» - допускает грубые ошибки в терминологии, ключевых формулах и математических вычислениях, набирает менее 50 баллов за работу;
- «удовлетворительно» - демонстрирует слабое владение знаниями физико-химических основами катализа, адсорбционных явлений и приготовления катализаторов, допускает ошибки при написании ключевых формул и вычислении целевых значений, набирает от 50 до 65 баллов за работу;
- «хорошо» - демонстрирует владение знаниями физико-химических основами катализа, адсорбционных явлений и приготовления катализаторов не в полной степени, верно записывает ключевые формулы, допускает несущественные ошибки при вычислении целевых значений, набирает от 65 до 80 баллов за работу;
- «отлично» - демонстрирует уверенное владение знаниями физико-химических основами катализа, адсорбционных явлений и приготовления катализаторов, верно записывает ключевые формулы, не допускает ошибок при вычислении целевых значений; набирает от 80 до 100 баллов за работу.

Критерии оценивания ответа аспиранта на экзамене:

- «неудовлетворительно» - нет ответов более, чем на половину заданных вопросов, допущены грубые ошибки при описании принципов протекания каталитических реакций и механизмов процессов;
- «удовлетворительно» - ответы в целом правильные, продемонстрировано общее понимание принципов протекания каталитических реакций, знание основных механизмов реакций и методов приготовления катализаторов, имеются ошибки и неточности в формулировках;
- «хорошо» - ответы правильные, грамотные, продемонстрировано понимание принципов протекания каталитических реакций, знание основных механизмов реакций и классических методов приготовления катализаторов, имеются ошибки и неточности в формулировках;
- «отлично» - ответы полные, исчерпывающие, продемонстрировано понимание принципов протекания каталитических реакций, знание механизмов реакций и классических и неклассических методов приготовления катализаторов.

ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ В ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ПО ДИСЦИПЛИНЕ «ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ» ЗА _____/_____ УЧЕБНЫЙ ГОД