

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Новосибирский национальный исследовательский государственный университет»
(Новосибирский государственный университет, НГУ)

**Физический факультет
Кафедра биомедицинской физики**



Рабочая программа дисциплины

ХИМИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА И ТЕРМОДИНАМИКА

Направление подготовки **03.03.02 Физика**
Направленность (профиль): **Общая и фундаментальная физика**

Форма обучения
Очная

Семестр	Общий объем	Виды учебных занятий (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)				
		Контактная работа обучающихся с преподавателем			Самостоятельная работа, не включая период сессии	Самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации	Контактная работа обучающихся с преподавателем			
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия			Консультации	Зачет	Дифференцированный зачет	Экзамен
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
6	72	16	16		18	18	2			2
Всего 72 часа / 2 зачетные единицы -контактная работа 36 часов										
Компетенции ПК-1										

Ответственный за образовательную программу,
д.ф.-м.н., проф.

С.В.Цыбуля

Новосибирск, 2022

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы.	3
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы	4
3. Трудоёмкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу	4
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий.	4
5. Перечень учебной литературы.	8
6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.	8
7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.	8
8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.	8
9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.	9
10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.	9

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

Курс «Химическая кинетика и термодинамика» предназначен для обучения студентов-физиков фундаментальным основам физико-химических процессов, происходящих в биологические объекты.

Основной целью освоения курса является ознакомление с: 1) основами классической термодинамики; 2) теорией химического равновесия; 3) термодинамикой растворов электролитов и не-электролитов; 4) электрохимическими элементами; 5) основами химической кинетики; 6) формальной кинетикой простых и сложных реакций; 7) механизмами элементарного химического превращения; 8) реакциями в жидкой фазе.

Дисциплина нацелена на формирование у выпускника следующей профессиональной компетенции:

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
<p>ПК-1 Способность использовать специализированные знания в области физики при построении теоретических моделей физических явлений и процессов в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования</p>	<p>ПК 1.1 Применяет специализированные знания в области физики при воспроизведении учебного материала с требуемой степенью научной точности и полноты.</p> <p>ПК 1.2 Использует специализированные знания при проведении научных изысканий в избранной области.</p> <p>ПК 1.3 Выбирает наиболее эффективные методы построения теоретических моделей физических явлений и процессов в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования</p>	<p>Знать терминологию и основные начала термодинамики, основы термодинамического описания химических процессов, основные закономерности химического равновесия, в том числе в системе идеальных и неидеальных газов, а также в гетерогенных системах, терминологию и основные понятия химической кинетики, основные механизмы элементарного химического превращения, особенности протекания химических реакций в жидкофазных системах.</p> <p>Уметь выполнить расчет формальной кинетики простых и сложных реакций, исходя из заданной кинетической схемы химических реакций сделать упрощающие приближения при наличии лимитирующей стадии исследуемого сложного процесса, выбрать адекватный метод решения прямой и обратной задачи при обработке экспериментальных данных с использованием математического моделирования.</p> <p>Владеть основными методами расчета параметров термодинамического состояния в простейших системах, навыками анализа кинетической схемы изучаемых процессов, программными пакетами для обработки данных в стационарном и кинетическом эксперименте.</p>

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Курс «Химическая кинетика и термодинамика» читается в весеннем семестре для студентов 3 курса, обучающихся по направлению подготовки 03.03.02 Физика. Курс является одной из профессиональных дисциплин по выбору, реализуемых кафедрой биомедицинской физики. Для его восприятия требуется предварительная подготовка студентов по молекулярной физике, физике сплошных сред, механике, а также по математике (дифференциальное и интегральное исчисления, численные методы решения систем линейных уравнений и др.). Курс должен предшествовать прохождению производственной практики (НИР) и выполнению квалификационной работы бакалавра, т.к. дает необходимые знания, навыки и предоставляет инструменты для выполнения биофизических исследований, необходимых для проведения экспериментальной работы, связанной с изучением структуры и функций биологических объектов.

3. Трудоёмкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу

Семестр	Общий объем	Виды учебных занятий (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)				
		Контактная работа обучающихся с преподавателем			Самостоятельная работа, не включая период сессии	Самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации	Контактная работа обучающихся с преподавателем			
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия			Консультации	Зачет	Дифференцированный зачет	Экзамен
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
6	72	16	16		18	18	2			2
Всего 72 часа / 2 зачетные единицы										
-контактная работа 36 часов										
Компетенции ПК-1										

Реализация дисциплины предусматривает практическую подготовку при проведении следующих видов занятий, предусматривающих участие обучающихся в выполнении отдельных элементов работ, связанных с будущей профессиональной деятельностью: лекции, практические занятия, консультации, самостоятельная работа студента, контрольные работы, устный опрос, экзамен.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

Текущий контроль успеваемости: контрольные работы, устный опрос.

Промежуточная аттестация: экзамен.

Общая трудоёмкость рабочей программы дисциплины составляет 2 зачетные единицы.

- занятия лекционного типа – 16 часов;
- практические занятия – 16 часов;
- самостоятельная работа обучающегося в течение семестра, не включая период сессии – 18 часов;
- самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации, консультации, экзамен – 22 часа.

Объём контактной работы обучающегося с преподавателем (занятия лекционного типа, практические занятия, консультации, экзамен) составляет 36 часов.

4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий.

Дисциплина «Химическая кинетика и термодинамика» читается на 3 курсе физического факультета НГУ в 6 семестре. Общая трудоёмкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы, 72 академических часа.

№ п/п	Раздел дисциплины	Неделя семестра	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)
			Всего	Аудиторные часы		Сам. работа во время занятий (не включая период сессии)	
				Лекции	Практические занятия		
1	2	3	4	5	6	7	8
1	Основы классической термодинамики.	1	3	1	1	1	
2	Термодинамическое описание химических процессов. Химическое равновесие.	2-3	5	1	3	1	
3	Равновесие в системе неидеальных газов.	4	3	1	1	1	
4	Теория равновесия гетерогенных систем.	4	3	1	1	1	
5	Термодинамика смесей.	5	5	1	1	1	
6	Термодинамика растворов неэлектролитов.	6	3	1	1	1	
7	Термодинамика растворов электролитов.	7	3	1	1	1	
8	Электрохимические элементы.	8	3	1	1	1	
9	Адсорбция.	9	2	1		1	
10	Основы химической кинетики.	10	3	1	1	1	
11	Формальная кинетика простых реакций.	10	2	1		1	
12	Формальная кинетика сложных реакций.	11	3	1	1	1	
13	Реакции в открытых системах.	12	3	1	1	1	
14	Механизм элементарного химического превращения.	13	3	1	1	1	
15	Теория переходного состояния (метод активированного комплекса).	14	3	1	1	1	
16	Реакции в жидкости.	15-16	3	1	1	1	
17	Консультация		2				2
18	Самостоятельная подготовка студентов к экзамену		18				18
	Экзамен		2				2
	Всего		72	16	16	18	22

Программа и основное содержание лекций (20 часов)

Раздел 1. Основы классической термодинамики (1 час)

Основные понятия. Первое начало термодинамики. Энтропия. Второе и третье начала термодинамики. Термодинамические потенциалы. Термодинамические соотношения между величинами. Химический потенциал.

Раздел 2. Термодинамическое описание химических процессов (1 час)

Химическая переменная. Стандартные состояния и стандартные условия. Стандартные термодинамические величины образования веществ. Энергия связи. Закон Гесса.

Полезная работа химической реакции. Направление самопроизвольного химического процесса. Условия равновесия.

Расчет химического потенциала вещества. Химический потенциал идеального газа. Константа равновесия химической реакции.

Раздел 3. Равновесие в системе неидеальных газов (1 час)

Уравнение состояния реальных газов. Летучесть. Химический потенциал реального газа. Химическое равновесие в смеси реальных газов. Активность.

Раздел 4. Теория равновесия гетерогенных систем (1 час)

Условия равновесия в гетерогенной системе.

Раздел 5. Термодинамика смесей (1 час)

Однородные функции. Уравнение Гиббса-Дюгема. Функции смешения. Избыточные функции.

Раздел 6. Термодинамика растворов неэлектролитов (1 час)

Классификация растворов. Давление пара над раствором. Закон Рауля. Растворимость газа в жидкости. Закон Генри. Регулярные растворы. Осмотическое давление. Химическое равновесие.

Раздел 7. Термодинамика растворов электролитов (1 час)

Формула Борна для энергии сольватации. Уравнение Пуассона. Решение уравнения Пуассона. Коэффициент активности ионов. Теория Дебая-Хюккеля во втором приближении. Среднеионный коэффициент активности. Влияние ионной силы на степень электролитической диссоциации. Стандартное состояние ионов в растворах. Кислотно-основные равновесия. Диссоциация воды. Диссоциация кислот и оснований. Буферные растворы.

Раздел 8. Электрохимические элементы (1 час)

Классификация электродов. Механизм образования электродных потенциалов. Напряжение гальванического элемента. Распределение и потоки ионов через мембрану.

Раздел 9. Адсорбция (1 час)

Поверхностная адсорбция. Изотерма адсорбции Ленгмюра.

Раздел 10. Основы химической кинетики (1 час)

Основные понятия. Стехиометрическое уравнение реакции. Простые (элементарные) и сложные химические процессы, механизм реакции. Гомогенные и гетерогенные реакции. Замкнутые и открытые системы. Скорость химической реакции. Закон действующих масс. Константа скорости реакции. Температурная зависимость константы скорости. Закон Аррениуса. Аррениусовские координаты. Закон действующих масс с учетом микроскопических состояний. Тепловой эффект реакции. Эндозергические, экзозергические, Эндотермические и экзотермические реакции. Дифференциальное сечение реакции.

Раздел 11. Формальная кинетика простых реакций (1 час)

Типы элементарных реакций. Кинетика необратимых реакций первого, второго и третьего порядков. Линейные анаморфозы. Обратимая реакция первого порядка. Время установления равновесия. Связь константы скорости прямой и обратной реакции с константой равновесия. Принцип детального равновесия. Методы определения порядка реакции. Определение энергии активации.

Раздел 12. Формальная кинетика сложных реакций (1 час)

Математическое описание сложных реакций. Принцип независимости элементарных стадий. Последовательные и параллельные реакции. Метод квазистационарных концентраций. Лимитирующая стадия сложного процесса. Реакции в сосуде переменного объема.

Раздел 13. Реакции в открытых системах (1 час)

Приближение реактора идеального перемешивания. Условия применения. Основные параметры и уравнения. Необратимая реакция первого порядка в реакторе идеального перемешивания. Кинетика установления стационарного режима. Время вымывания. Реактор идеального вытеснения.

Условия применения. Основные уравнения. Реакция первого порядка в реакторе идеального вытеснения.

Раздел 14. Механизм элементарного химического превращения (1 час)

Приближение Борна-Оппенгеймера. Поверхность потенциальной энергии. Координата реакции, зависимость потенциальной энергии от координаты реакции. Активационный барьер. Теория столкновений. Приближение твердых шаров. Сечение реакции. Частота двойных столкновений. Стерический фактор. Мономолекулярные реакции. Активация при столкновениях. Область высоких и низких давлений, протекание мономолекулярной реакции по первому и второму порядку. Обратная реакция рекомбинации, зависимость константы скорости от давления. Тримолекулярные реакции. Частота тройных столкновений.

Раздел 15. Теория переходного состояния (метод активированного комплекса) (1 час)

Переходное состояние (активированный комплекс). Вывод формулы для константы скорости реакции. Границы применимости метода. Статистические суммы одномерного вращения, линейного и нелинейного ротатора. Числа симметрии. Поступательная и колебательная статсуммы. Электронная статсумма. Мономолекулярные реакции. Бимолекулярные реакции. Тримолекулярные реакции. Квантово-механическая формулировка метода активированного комплекса. Кинетический изотопный эффект. Роль энергии нулевых колебаний.

Раздел 16. Реакции в жидкости (1 час)

Основные понятия. Особенности протекания бимолекулярных реакций в жидкой фазе. Частота столкновений и частота встреч. Химическая реакция и диффузия. Эффект “клетки”. Диффузионная и кинетическая области реакции. Диффузионная константа скорости. Коэффициент относительной диффузии, реакционный радиус. Реакции между ионами. Влияние растворителя на диффузионную константу. Радиус Онзагера. Метод активированного комплекса для жидкофазных реакций. Сольватация. Влияние растворителя на кинетическую константу. Зависимость от диэлектрической проницаемости. Влияние ионной силы электролита.

Программа практических занятий (16 часов)

Занятие 1. Термодинамические потенциалы (1 час).

Занятие 2. Термодинамическое описание химических процессов (1 час).

Занятие 3. Теория химического равновесия. (1 час).

Занятие 4. Равновесие в системе идеальных газов. (1 час).

Занятие 5. Химическое равновесие в смеси реальных газов. Активность. (1 час).

Занятие 6. Условия равновесия в гетерогенной системе (1 час).

Занятие 7. Уравнение Гиббса-Дюгема (1 час).

Занятие 8. Закон Рауля. Растворимость газа в жидкости. Закон Генри. Регулярные растворы. Осмотическое давление. Химическое равновесие. (1 час).

Занятие 9. Формула Борна для энергии сольватации. Уравнение Пуассона. Теория Дебая-Хюккеля во втором приближении. (1 час).

Занятие 10. Электрохимические элементы (1 час).

Занятие 11. Основы химической кинетики (1 час).

Занятие 12. Метод квазистационарных концентраций. Лимитирующая стадия сложного процесса. (1 час).

Занятие 13. Реакции в открытых системах (1 час).

Занятие 14. Теория столкновений. Приближение твердых шаров. Сечение реакции. Частота двойных столкновений. (1 час).

Занятие 15. Переходное состояние (активированный комплекс). Вывод формулы для константы скорости реакции. (1 час).

Занятие 16. Диффузионная и кинетическая области реакции. Диффузионная константа скорости. (1 час).

Самостоятельная работа студентов (36 часов)

Перечень занятий на СРС	Объем, час
Подготовка к практическим занятиям	6
Выполнение контрольных работ	6
Изучение теоретического материала, не освещаемого на лекциях	6
Подготовка к экзамену	18

5. Перечень учебной литературы.

5.1. Основная литература

1. Л.Н. Красноперов, Химическая кинетика. Учебное пособие. - Н.: НГУ, 1988.
2. К.И. Замараев, Химическая кинетика. Курс лекций. Ч. 1-3. Н.: НГУ, 1994.

5.2. Дополнительная литература

1. Полторак О.М., Термодинамика в физической химии. М.: Высш. шк., 1991.
2. Еремин Е.Н. Основы химической термодинамики. М.: Высш. шк., 1974.
3. Пригожин И., Дефэй Р. Химическая термодинамика. Новосибирск. Наука, 1966, 512 с.
4. И.М. Эмануэль, Д.Г. Кнорре. Курс химической кинетики. М.: Высш. шк., 1975.
5. Г. Эйринг, С.Г. Лин, С.М. Лин. Основы химической кинетики. М.: Мир, 1983.

6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.

Самостоятельная работа студентов поддерживается следующим учебными материалами:

1. Терней А. Современная органическая химия. – М.: «Мир», 1981. Т. 1, Т. 2.
2. Моррисон Р., Бойд Р. Органическая химия. – М.: «Мир», 1974.
3. Сайкс П. Механизмы реакций в органической химии. – М.: «Химия», 1977.
4. Реутов О., Курц А., Бутин К. Органическая химия. – М.: МГУ 1999. Ч. 1.
5. Кери Ф. Сандберг Р. Углубленный курс орг. химии. ч. 1, ч. 2. – М.: «Химия», 1986.
6. Эткинс П. Кванты – справочник концепций. – М.: «Мир», 1978.

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.

Для освоения дисциплины используются следующие ресурсы:

- электронная информационно-образовательная среда НГУ (ЭИОС);
- образовательные интернет-порталы;
- информационно-телекоммуникационная сеть Интернет.
- закрытая образовательная группа в социальной сети «VK».

7.1. Современные профессиональные базы данных

Не используются.

7.2. Информационные справочные системы

Не используются.

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.

Для обеспечения реализации дисциплины используется стандартный комплект программного обеспечения (ПО), включающий регулярно обновляемое лицензионное ПО Windows и MS Office.

Использование специализированного программного обеспечения для изучения дисциплины не требуется.

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.

Для реализации дисциплины «Химическая кинетика и термодинамика» используются специальные помещения:

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, практических занятий, курсового проектирования (выполнения курсовых работ), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля, промежуточной и итоговой аттестации.

2. Помещения для самостоятельной работы обучающихся.

Учебные аудитории укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду НГУ.

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется согласно «Порядку организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в Новосибирском государственном университете».

10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

10.1. Порядок проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине

Текущий контроль

Текущий контроль осуществляется в ходе семестра путем опроса в начале каждой лекции по материалам предыдущей лекции, оценки активности на практических занятиях, а также с помощью контрольных работ, которые обучающиеся выполняют во время самостоятельной работы.

Промежуточная аттестация

Освоение компетенций оценивается согласно шкале оценки уровня сформированности компетенции. Положительная оценка по дисциплине выставляется в том случае, если заявленная компетенция ПК-1 сформирована не ниже порогового уровня в части, относящейся к формированию способности использовать специализированные знания в области химической кинетики и термодинамики в профессиональной деятельности.

Окончательная оценка работы студента в течение семестра происходит во время экзамена. Экзамен проводится в конце семестра в устной форме. Студент получает два вопроса, которые подбираются таким образом, чтобы проверить уровень сформированности компетенции ПК-1.

Вывод об уровне сформированности компетенций принимается преподавателем. Ответ оценивается от 0 до 5 баллов. Положительная оценка ставится, когда все компетенции освоены не ниже порогового уровня. Оценки «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» означают успешное прохождение промежуточной аттестации.

Соответствие индикаторов и результатов освоения дисциплины

Таблица 10.1

Индикатор	Результат обучения по дисциплине	Оценочные средства
ПК 1.1 Применяет специализированные знания в области физики при воспроизведении учебного материала с требуемой степенью научной точности и полноты.	Знать терминологию и основные начала термодинамики, основы термодинамического описания химических процессов, основные закономерности химического равновесия, в том числе в системе идеальных и неидеальных газов, а также в гетерогенных системах, терминологию и основные понятия химической кинетики, основные механизмы элементарного химического превращения, особенности протекания химических реакций в жидкофазных системах.	Проведение контрольных работ, экзаменов.
ПК 1.2 Использует специализированные знания при проведении научных изысканий в избранной области	Уметь выполнить расчет формальной кинетики простых и сложных реакций, исходя из заданной кинетической схемы химических реакций сделать упрощающие приближения при наличии лимитирующей стадии исследуемого сложного процесса, выбрать адекватный метод решения прямой и обратной задачи при обработке экспериментальных данных с использованием математического моделирования.	Проведение контрольных работ, экзаменов.
ПК 1.3 Выбирает наиболее эффективные методы построения теоретических моделей физических явлений и процессов в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования	Владеть основными методами расчета параметров термодинамического состояния в простейших системах, навыками анализа кинетической схемы изучаемых процессов, программными пакетами для обработки данных в стационарном и кинетическом эксперименте.	Проведение контрольных работ, экзаменов.

10.2 Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине «Химическая кинетика и термодинамика».

Таблица 10.2

Критерии оценивания результатов обучения	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Уровень освоения компетенции			
		Не сформирован (0 баллов)	Пороговый уровень (3 балла)	Базовый уровень (4 балла)	Продвинутый уровень (5 баллов)
1	2	3	4	5	6
Полнота знаний	ПК 1.1	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имеют место грубые ошибки.	Демонстрирует общие знания базовых понятий по темам/разделам дисциплины. Допускается значительное	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Допускается несколько негрубых/	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Свободно и аргументированно

			количество негрубых ошибок.	несущественных ошибок. Не отвечает на дополнительные вопросы.	отвечает на дополнительные вопросы.
Наличие умений	ПК 2.2	Отсутствие минимальных умений. Не умеет решать стандартные задачи. Имеют место грубые ошибки.	Продемонстрированы частично основные умения. Решены типовые задачи. Допущены негрубые ошибки.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания с негрубыми ошибками или с недочетами.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания в полном объеме без недочетов и ошибок.
Наличие навыков (владение опытом)	ПК 2.3	Отсутствие владения материалом по темам/разделам дисциплины. Нет навыков в решении стандартных задач. Наличие грубых ошибок.	Имеется минимальный набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач без ошибок и недочетов. Продемонстрированы знания по решению нестандартных задач.

10.3 Типовые контрольные задания и материалы, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы вопросов для проведения опроса

1. Условия химического равновесия.
2. Химический потенциал идеального и реального газа.
3. Классификация растворов неэлектролитов.
4. Коэффициент активности ионов в растворе электролитов.
5. Диссоциация кислот и оснований. Буферные растворы.
6. Закон Аррениуса.
7. Принцип детального равновесия.
8. Лимитирующая стадия сложного процесса.
9. Частота двойных столкновений.
10. Поступательная, колебательная и вращательная статсумма.
11. Диффузионные и кинетические области реакции.

Образцы задач для контрольной работы:

1. В предположении о том, что воздух, поднимаясь вверх, расширяется как идеальный газ, рассчитать температуру воздуха на вершине горы Эверест. Считать, что у подножия горы температура равна 20 С.
2. Объем реактора идеального перемешивания V . При какой объемной скорости подачи Q исходного компонента A в реактор можно ожидать в стационарном состоянии получение максимального выхода продукта B , если реакция происходит по схеме $A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} P$

Вопросы к экзамену

Тема №1 «Основы классической термодинамики»

- 1.1. Роль классической термодинамики при описании процессов в живых системах.

- 1.2. Особенности протекания процессов в живых системах с точки зрения начал термодинамики.
- 1.3. Энтропия.
- 1.4. Химический и термодинамические потенциалы.

Тема №2 «Термодинамическое описание химических процессов»

- 2.1. Химическая переменная.
- 2.2. Стандартные условия и стандартное состояние.
- 2.3. Закон Гесса.
- 2.4. Энергия химической связи.

Тема №3 «Теория химического равновесия».

- 3.1. Направление самопроизвольного химического процесса.
- 3.2. Полезная работа химической реакции.
- 3.3. Химическое сродство.
- 3.4. Условия равновесия.
- 3.5. Парциальная мольная величина.

Тема №4 «Равновесие в системе идеальных газов»

- 4.1. Химический потенциал вещества.
- 4.2. Закон действующих масс.
- 4.3. Химический потенциал идеального газа.
- 4.4. Константа равновесия химической реакции.

Тема №5 «Равновесие в системе неидеальных газов».

- 5.1. Уравнения состояния неидеальных газов. Уравнение Ван-дер-Ваальса. Уравнение Битти-Бриджмена. Уравнение Бертло.
- 5.2. Вириальные коэффициенты. Температура Бойля.
- 5.3. Летучесть.
- 5.4. Химический потенциал реального газа
- 5.5. Химическое равновесие в смеси реальных газов. Правило Льюиса и Ренделла.
- 5.6. Активность.

Тема №6 «Теория равновесия гетерогенных систем»

- 6.1. Условия равновесия в гетерогенной фазе
- 6.2. Правило фаз Гиббса.

Тема №7 «Термодинамика смесей»

- 7.1. Однородные функции. Уравнение Гиббса-Дюгема.
- 7.2. Функции смешения. Энергия Гиббса, энтальпия, объем, энтропия смешения.
- 7.3. Избыточные функции.

Тема №8 «Термодинамика растворов неэлектролитов».

- 8.1. Идеальные, регулярные, атермальные, реальные растворы.
- 8.2. Давление пара над раствором. Закон Рауля.
- 8.3. Растворимость газа в жидкости. Закон Генри.
- 8.4. Осмотическое давление.

Тема №9 «Термодинамика растворов электролитов»

- 9.1. Сольватация, формула Борна для энергии сольватации.
- 9.2. Уравнение Пуассона. Ионная сила раствора.
- 9.3. Теория Дебая-Хюккеля. Радиус ионной атмосферы.
- 9.4. Коэффициент активности ионов.

- 9.5. Теория Дебая-Хюккеля во втором приближении. Среднеионный коэффициент активности.
- 9.6. Стандартное состояние ионов в растворах.
- 9.7. Кислотно-основные равновесия. Ионное произведение воды.
- 9.8. Буферные растворы. Уравнение Гендерсона.

Тема №10 «Электрохимические элементы»

- 10.1. Классификация электродов. Электродный межфазный потенциал, механизм образования.
- 10.2. Потенциал полужелатива. Напряжение гальванического элемента.
- 10.3. Уравнение Нернста.
- 10.4. Поток ионов через мембрану. Доннаноно равновесие.

Тема №11 «Адсорбция».

- 11.1. Физическая и химическая адсорбция.
- 11.2. Изотерма адсорбции Ленгмюра.

Тема №12 «Основы химической кинетики»

- 12.1. Стехиометрическое уравнение реакции.
- 12.2. Элементарные и сложные уравнения реакции.
- 12.3. Гомогенные и гетерогенные реакции.
- 12.4. Замкнутые и открытые системы.
- 12.5. Скорость химической реакции, константа скорости. Закон действующих масс.
- 12.6. Закон Аррениуса.
- 12.7. Эндотермические, экзоэргические, эндотермические и экзотермические реакции.
- 12.8. Дифференциальное сечение реакции.

Тема №13 «Формальная кинетика простых реакций»

- 13.1. Кинетика реакций первого порядка. Кинетика необратимых реакций второго и третьего порядка.
- 13.2. Время установления равновесия.
- 13.3. Принцип детального равновесия.
- 13.4. Методы определения порядка реакции.

Тема №14 «Формальная кинетика сложных реакций»

- 14.1. Принцип независимости элементарных стадий.
- 14.2. Последовательные и параллельные реакции.
- 14.3. Метод квазистационарных концентраций.
- 14.4. Лимитирующая стадия сложного процесса.
- 14.5. Реакция в реакторе с переменным объемом.

Тема №15 «Реакции в открытых системах»

- 15.1. Реактор идеального перемешивания. Условия применения, основные параметры.
- 15.2. Время вымывания, кинетика установления стационарного состояния.
- 15.3. Реактор идеального вытеснения. Основные уравнения, условия применения.

Тема №16 «Механизм элементарного химического превращения»

- 16.1. Поверхность потенциальной энергии, приближение Борна-Оппенгеймера.
- 16.2. Координата реакции. Активационный барьер.
- 16.3. Теория столкновений. Приближение твердых шаров. Сечение реакции.
- 16.4. Частота двойных столкновений. Активация при столкновениях.
- 16.5. Обратимая реакция рекомбинации. Зависимость константы скорости от давления.
- 16.6. Тримолекулярные реакции, частота тройных столкновений.

Тема №17 «Теория переходного состояния (метод активированного комплекса)»

- 17.1. Понятие активированного комплекса, переходное состояние.
- 17.2. Граница применимости метода, константа скорости реакции.
- 17.3. Статистическая сумма для поступательного и колебательного движения. Статистические суммы для вращательного движения в случае одномерного вращения, линейного и нелинейного ротатора.
- 17.4. Электронная и ядерная статсумма.
- 17.5. Мономолекулярные, бимолекулярные и тримолекулярные реакции.

Тема №18 «Реакции в жидкости»

- 18.1. Особенности протекания реакций в жидкой фазе.
- 18.2. Частота двойных столкновений и частота встреч.
- 18.3. Диффузия. Эффект “клетки”.
- 18.4. Диффузионная и кинетическая области реакции.
- 18.5. Коэффициент относительной диффузии. Реакционный радиус.
- 18.6. Радиус Онзагера. Сольватация.
- 18.7. Влияние диэлектрической проницаемости и ионной силы раствора.

Пример экзаменационного билета

- 1. Теория Дебая-Хюккеля во втором приближении. Среднеионный коэффициент активности. (на компетенцию ПК-1).
- 2. Коэффициент относительной диффузии. Реакционный радиус. (на компетенцию ПК-2).

Форма экзаменационного билета представлена на рисунке

<p><i>МИНОБРНАУКИ РОССИИ</i></p> <p><i>Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет» (Новосибирский государственный университет, НГУ)</i></p> <p><i>Физический факультет</i></p>	
<p>ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № _____</p>	
1.	
2.	
Составитель _____	/Ф.И.О. преподавателя/
	(подпись)
« ____ » _____	20 ____ г.

Оценочные материалы по промежуточной аттестации, предназначенные для проверки соответствия уровня подготовки по дисциплине требованиям СУОС, хранятся на кафедре-разработчике РПД в печатном и электронном виде.

**Лист актуализации рабочей программы
по дисциплине «Химическая кинетика и термодинамика»
по направлению подготовки 03.03.02 Физика
Профиль «Общая и фундаментальная физика»**

№	Характеристика внесенных изменений (с указанием пунктов документа)	Дата и № протокола Учёного совета ФФ НГУ	Подпись ответственного