



УдмФИЦ УрО РАН

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

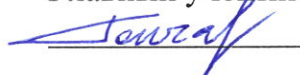
**Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
«УДМУРТСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
Уральского отделения Российской академии наук»**

ОДОБРЕНО

Объединенным ученым советом
УдмФИЦ УрО РАН

Протокол № 3 от «15» апреля 2022г.

Главный ученый секретарь, к.х.н.

 О.Ю. Гончаров

УТВЕРЖДАЮ

Директор УдмФИЦ УрО РАН,
д.ф.-м.н.

М.Ю. Альес

«15» апреля 2022 г.



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Физическая химия II. Химическая термодинамика и равновесие.

2022

Ижевск

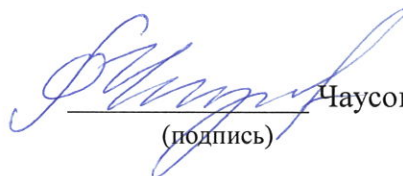
Освоение дисциплины ведется в рамках реализации программы подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре по научной специальности

1.4.4. Физическая химия

(шифр и наименование специальности)

Разработчик:

Ведущий научный сотрудник, д. х. н.

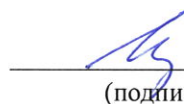


Чаясов Ф. Ф.

(подпись)

Согласовано:

Заместитель директора
по естественно-научному направлению



А.И. Коршунов

(подпись)

Зав. аспирантурой, к.ф.-м.н.



М.Ю. Лебедева

(подпись)

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью освоения дисциплины «Физическая химия II. Химическая термодинамика и равновесие» является формирование и развитие у аспирантов компетенций в области термодинамических закономерностей физико-химических процессов превращения веществ, фазовых равновесий, свойств растворов, а также знаний и умений в области теоретических и основ применения физико-химических методов в материаловедении.

В процессе достижения цели ставятся следующие **задачи**:

- изучить предмет и задачи специальности «Физическая химия» и получить систематические знания о строении вещества.
- изучить историю развития физической химии, вклад российских учёных в формирование современных представлений, и современное состояние физической химии.
- изучить современные представления о статистической физике и термодинамике.
- изучить свойства растворов и фазовые равновесия.

2. МЕСТО ПРОГРАММЫ В СТРУКТУРЕ ПРОГРАММЫ АСПИРАНТУРЫ

Учебная дисциплина «Физическая химия II. Химическая термодинамика и равновесие» входит в образовательный компонент подготовки аспирантов по научной специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Для изучения данной дисциплины необходимы знания по физике и химии в объеме программы высшего образования.

Знания и навыки, полученные аспирантами при изучении данного курса, необходимы при подготовке к сдаче кандидатского экзамена и написании диссертационной работы.

3. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

По окончании изучения дисциплины «Физическая химия II. Химическая термодинамика и равновесие» аспиранты должны:

Знать:

- основные принципы статистической физики, термодинамики, их применения к задачам физической химии;
- современные тенденции и основные направления исследований в развитии химической термодинамики, включая неравновесную термодинамику;
- основные методы и подходы проведения теоретических и экспериментальных исследований в области физической химии с использованием современного оборудования и передовых технологий;
- свойства жидких, твёрдых, газообразных растворов, фазовые равновесия, представления о растворимости, о диаграммах состояния многокомпонентных систем.

Уметь:

- анализировать современную научную информацию, современные базы данных, и формировать литературный обзор по теме своих исследований;
- пользоваться современными приборами и методами исследований структуры вещества;
- проводить исследования строения веществ, материалов, изделий современными методами, правильно обрабатывать и интерпретировать результаты исследований.

Владеть: современными методами отбора и подготовки образцов и проведения исследований строения веществ, материалов, изделий, обработки и интерпретации экспериментальных данных.

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Общая трудоемкость дисциплины «Физическая химия II. Химическая термодинамика и равновесие» составляет 4 зачетных единицы (144 академических часов).

Таблица 4.1. Виды учебной работы по периодам освоения программы аспирантуры

Вид учебной работы		Всего акад.часов	Курс			
			1	2	3	4
<i>Контактная работа, ак.ч.</i>						
В том числе						
Лекции (ЛК)		32		32		
Практические/семинарские занятия (ПЗ)		–	–			
<i>Самостоятельная работа обучающихся (СР), ак.ч.</i>		112		112		
<i>Контроль (форма контроля)</i>		<i>экзамен</i>		<i>экзамен</i>		
Общая трудоемкость дисциплины	ак.ч.	144		144		
	зач.ед.	4		4		

5. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 5.1. Разделы дисциплины и виды занятий

Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Вид учебной работы
Основные понятия и законы термодинамики	1. Основные понятия термодинамики: изолированные и открытые системы, равновесные и неравновесные системы, термодинамические переменные, температура, интенсивные и экстенсивные переменные. Уравнения состояния. Теорема о соответственных состояниях. Вириальные уравнения состояния. 2. 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 Кирхгоффа. Таблицы стандартных термодинамических величин и их использование в термодинамических расчетах. 3. Второй закон термодинамики. Энтропия и её 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. 4. Уравнение Гиббса – Гельмгольца. Работа и теплота химического процесса. Химические потенциалы. Равновесие в поле внешних сил. Полные потенциалы.	ЛК
Элементы статистической термодинамики	5. Микро- и макросостояния химических систем. Фазовые пространства. Эргодическая гипотеза. Термодинамическая вероятность и её связь с энтропией. Распределение Максвелла – Больцмана. Статистические средние значения	ЛК

	макроскопических величин. 6. 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. 7. Приближение «жесткий ротатор – гармонический осциллятор». Составляющие внутренней энергии, теплоёмкости и энтропии, обусловленные поступательным, вращательным и колебательным движением. 8. Расчет констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики. Статистическая термодинамика реальных систем. Потенциалы межмолекулярного взаимодействия и конфигурационный интеграл для реального газа. 9. Распределение Бозе – Эйнштейна. Статистическая теория Эйнштейна идеального кристалла, теория Дебая. 10. Распределение Ферми – Дирака. Врожденный идеальный газ. Электроны в металлах. Уровень Ферми. Точечные дефекты кристаллических решеток. Равновесные и неравновесные дефекты.	
Элементы термодинамики необратимых процессов	11. 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 Онсагера. Стационарное состояние системы и теорема Пригожина.	ЛК
Растворы. Фазовые равновесия	12. Различные типы растворов. Способы выражения состава растворов. Идеальные растворы, общее условие идеальности растворов. Давление насыщенного пара жидких растворов, закон Рауля. 13. Неидеальные растворы и их свойства. Взаимодействия между частицами в растворах. Метод активностей. Коэффициенты активности и их определение. 14. Стандартные состояния при определении химических потенциалов компонент растворов. Симметричная и несимметричная системы отсчета. 15. Коллигативные свойства растворов. Изменение температуры замерзания растворов, криоскопия. Дробная кристаллизация. Высаливание. Зонная плавка. Осмотические явления. Парциальные молярные величины, их определение	ЛК

	для бинарных систем. Уравнение Гиббса – Дюгема. Функция смешения для идеальных и неидеальных растворов. Предельно разбавленные растворы, атермальные и регулярные растворы, их свойства. 16. Трехкомпонентные системы. Способы выражения состава трёхкомпонентных систем. Треугольник Гиббса и Розебума. Диаграммы состояния трехкомпонентных систем.	
--	---	--

6. ВОПРОСЫ К ЭКЗАМЕНУ

1. Первое начало термодинамики: история открытия, диалектическое развитие и значение для науки и техники.
2. Второе начало термодинамики: формулировки, следствия и философские обобщения.
3. Способы описания статистических ансамблей.
4. Электронное строение атомов и молекул и электронный спектр вещества.
5. Электронное строение металла в объёме и поверхностном слое (в рамках утверждённой темы аспирантской работы).
6. Процессы в пограничном слое раствора, осложнённые химической реакцией (в рамках утверждённой темы аспирантской работы).

7. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Технология процесса обучения аспирантов включает в себя следующие образовательные мероприятия:

- аудиторные занятия (лекции);
- самостоятельная работа аспирантов (в т.ч. с использованием системы дистанционного обучения);
- контрольные мероприятия в процессе обучения и по его окончанию: экзамен.

В процессе изучения дисциплины, как лектором, так и обучающимися используется метод проблемного изложения материала, самостоятельное чтение аспирантами учебной, учебно-методической и справочной литературы, анализ информационных ресурсов в научных библиотеках и сети Internet по актуальным проблемам химической термодинамики и теории растворов.

Аудиторные занятия проводятся с использованием информационно-телекоммуникационных технологий: учебный материал представлен также в виде мультимедийных презентаций. Презентации позволяют четко структурировать материал занятия.

Самостоятельная работа аспирантов организована в соответствии с технологией проблемного обучения и предполагает следующие формы активности:

- поиск научной информации в открытых источниках с целью ее анализа и выявления ключевых особенностей исследуемых явлений;
- самостоятельная проработка учебно-проблемных задач, выполняемая с привлечением основной и дополнительной литературы, постановка которых отвечает целям освоения модуля;
- решение проблемных задач стимулируют познавательную деятельность и научно-исследовательскую активность аспирантов.

8. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

Цель контроля - получение информации о результатах обучения и степени их соответствия результатам обучения.

1. Текущий контроль

Текущий контроль успеваемости, т.е. проверка усвоения учебного материала, регулярно осуществляемая на протяжении семестра. Текущая самостоятельная работа аспиранта направлена на углубление и закрепление знаний, и развитие практических умений.

2. Итоговая аттестация

Итоговая аттестация включает кандидатский экзамен по специальности «Физическая химия», который завершает изучение дисциплины «Физическая химия II. Химическая термодинамика и равновесие» в 4 семестре.

Порядок проведения кандидатских экзаменов включает в кандидатский экзамен по научной специальности дополнительные разделы, обусловленные спецификой научной специальности. Билеты кандидатского экзамена по специальной дисциплине в соответствии с темой диссертации на соискание ученой степени кандидата наук должны охватывать разделы специальной дисциплины отрасли науки и научной специальности и дисциплины научной специальности по выбору аспиранта.

3. Фонд оценочных средств для проведения текущей и промежуточной аттестации по дисциплине

Критерии оценивания для зачета с оценкой.

Оценка выставляется по итогам кандидатского экзамена, включающего вопросы по общей дисциплине «Физическая химия» и по специальному разделу, связанному с утвержденной темой работы аспиранта.

Оценка «отлично» - наличие глубоких исчерпывающих знаний (в объеме утвержденной программы дисциплины в соответствии с поставленными программой курса целями и задачами обучения); грамотное и логически стройное изложение материала, усвоение основной и знакомство с дополнительной литературой.

Оценка «хорошо» - наличие твердых и достаточно полных знаний (в объеме утвержденной программы дисциплины в соответствии с целями обучения), правильные действия по применению знаний, умений, владений на практике, четкое изложение материала, допускаются отдельные логические и стилистические погрешности, сдающий усвоил основную литературу, рекомендованную в программе дисциплины;

Оценка «удовлетворительно» - наличие недостаточно полных знаний (в объеме утвержденной программы), изложение материала с отдельными ошибками, правильные в целом действия по применению знаний на практике.

Оценка «неудовлетворительно» - тема вопроса не раскрыта, наличие грубых ошибок, непонимание сущности излагаемого вопроса, неумение применять знания на практике.

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Для проведения обучения имеется необходимая материально-техническая база, соответствующая действующим санитарным и противопожарным правилам и нормам:

- помещения для проведения занятий, оборудованные комплектом мебели;
- комплект проекционного мультимедийного оборудования;
- компьютеры с доступом к сети Интернет;
- библиотека с информационными ресурсами на бумажных и электронных носителях;
- офисная оргтехника;
- Трубчатая печь с двумя зонами нагрева «SK2D-2-12TPA2» с постом откачным высоковакуумным Edwards «T-Station 75D».
- Комплект рентгеноэлектронного спектрометра ФТИ УрО РАН «ЭМС-3» для изучения электронной структуры и химического строения.
- Дифрактометр рентгеновский Rigaku Miniflex 600 для исследования строения поликристаллических и аморфных материалов.
- Электронный спектрометр SPECS для изучения электронной структуры, химического состава и химических связей.
- Спектрометрический комплекс на базе «МДР-41» для регистрации спектров

пропускания, зеркального и диффузного рассеяния, возбуждения и люминесценции.

- Рентгеноэлектронный спектрометр ЭЗАН «ЭС-2401» для проведения качественного и количественного анализа вещества и тонких пленок, исследование электронной структуры и химической связи, послойный анализ распределения элементов.

- Оже - электронный спектрометр JEOL «JAMP-10S» для качественного и количественного анализа состава поверхностных слоев и межфазных границ.

- Синхронный ДТА/ТГА анализатор Perkin Elmer STA8000 с ИК-Фурье спектрометром Spectrum Two для анализа материалов по изменению массы (ТГА), температурных и тепловых эффектов при фазовых переходах, энтальпии (ДСК/ДТА) при нагревании в широком температурном диапазоне с идентификацией продуктов разложения образцов методом ИК-спектроскопии.

10. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература:

1. Стромберг А.Г., Семченко Д. П. Физическая химия М.: Высш. шк., 2006. Учебник, Мин. образования РФ.

Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

2. <http://www.edu.ru/> Российское образование. Федеральный портал
3. <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/org.htm/> Химический факультет МГУ: лекции, практические занятия, методические указания
4. <http://www.scopus.com> База цитирований
5. <http://www.webofscience.com> База цитирований
6. <http://www.elibrary.ru> Научная электронная библиотека