НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ СОРБЦІЇ ТА ПРОБЛЕМ ЕНДОЕКОЛОГІЇ

ЗАТВЕРДЖЕНО
Вченою радою
Інституту сорбції та проблем
ендоекології НАН України
протокол № 1
від « 21 » січня 2022 року

Голова Вченої ради
Інституту сорбції та проблем
ендоекології НАН України
чл.-кор. НАН України

_____ В.В. Брей

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Фізична хімія
(назва навчальної дисципліни)

галузі знань **10 «Природничі науки»**
спеціальності **102 «Хімія»**
спеціалізації **«Фізична хімія»**

Київ - 2022 рік

Робоча програма «**Фізична хімія**» для аспірантів спеціальності
102 «Хімія», спеціалізація - **фізична хімія**

«21» січня 2022 року, 23с.

Курс розроблено на підставі освітньо-наукової програми, затвердженої на Вченій раді Інституту сорбції та проблем ендоекології НАН України
від «21» «січня» 2022 р., протокол № 1.

Розробники: чл.-кор. НАНУ д.х.н. Ю.А. Малєтін
к.х.н., пров.наук.співр. Н.Г. Стрижакова
к.ф.-м.н., ст. наук.співр. С.О. Зелінський

1. ОПИС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

<table>
<tr><td rowspan="2">Найменування показників</td><td rowspan="2">Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень</td><td colspan="2">Характеристика навчальної дисципліни</td></tr>
<tr><td>денна форма навчання</td><td></td></tr>
<tr><td>Кількість кредитів - 4</td><td>Галузь знань
10 «Природничі науки»
(шифр і назва)
Спеціальність
102 «Хімія»
(шифр і назва)
Спеціалізація
«Фізична хімія»</td><td colspan="2">Нормативна</td></tr>
<tr><td>Модулів - 4</td><td rowspan="5"></td><td colspan="2">Рік підготовки:</td></tr>
<tr><td>Змістових модулів - 4</td><td>2-й</td><td></td></tr>
<tr><td></td><td colspan="2">Семестр</td></tr>
<tr><td>Загальна кількість годин – 120</td><td>3-й</td><td>4-й</td></tr>
<tr><td colspan="2">Лекції</td></tr>
<tr><td rowspan="8">Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних - 54, у т.ч. самостійної роботи аспіранта – 66 год.</td><td rowspan="8">Освітньо-кваліфікаційних рівень: доктор філософії</td><td>18 год.</td><td>18 год.</td></tr>
<tr><td colspan="2">Практичні, семінарські</td></tr>
<tr><td>9 год.</td><td>9 год.</td></tr>
<tr><td colspan="2">Самостійна робота</td></tr>
<tr><td>33 год.</td><td>33 год.</td></tr>
<tr><td colspan="2"></td></tr>
<tr><td colspan="2">Вид контролю: іспит</td></tr>
</table>

2. МЕТА ТА ЗАВДАННЯ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Кандидатський екзамен за спеціальністю є невід'ємною частиною державної атестації наукових та науково-педагогічних кадрів.

Запропонована програма-мінімум кандидатського екзамену за спеціальністю "Фізична хімія" віддзеркалює сучасний стан цієї галузі хімії та містить її найважливіші розділи, знання яких необхідне висококваліфікованому фахівцеві.

Особа, яка екзаменується, повинна показати високий рівень теоретичної та професіональної підготовки, знання загальних концепцій і методологічних питань фізичної хімії, історії її формування та розвитку, глибоке розуміння основних розділів фізичної хімії, а також вміння застосовувати свої знання для вирішення дослідницьких та прикладних задач.

Програма є першою частиною кандидатського екзамену за спеціальністю «фізична хімія». Спеціалізована рада розробляє додаткову програму, яка тематично відповідає профілю підготовленої до захисту дисертаційної роботи.

В основі цієї програми є такі розділи: вчення про структуру речовини, хімічна термодинаміка, теорія поверхневих явищ, теорія кінетики хімічних реакцій, теорії каталізу.

Метою вивчення дисципліни є формування у аспірантів **компетентностей**:

використовуючи теоретичні положення хімічної термодинаміки, визначати можливість перебігу процесу та обґрунтовувати вибір його параметрів для режиму виробництва; використовуючи положення хімічної кінетики, математично описати кінетику гомогенних і гетерогенних реакцій та розраховувати кінетичні параметри для складання технологічного регламенту; на основі теоретичних положень електрохімії та експериментальних даних обчислювати питому і молярну електропровідності, константу електролітичної дисоціації, електродні потенціали, електрорушійну силу гальванічного елементу, pH розчину, активність електроліту для складання контролю технологічного процесу; застосовувати набуті знання для продукування нових ідей; спілкуватися на високому науковому рівні як українською, так і англійською мовами; вміти планувати та організовувати дослідження на високому науковому рівні та об»єктивно оцінювати, інтерпретувати одержані результати, враховуючи усі ризики.

У результаті вивчення навчальної дисципліни аспіранти набувають таких

Знання:

– основних понять, визначень та законів термодинаміки;

- методів впливу на перебіг хімічного процесу;
- закономірностей фазових перетворень;
- теорій хімічної кінетики;
- властивостей іонних розчинів, які пов’язані з їх здатністю проводити електричний струм;
- особливостей виникнення електричного струму в різних типах гальванічних елементів та їх термодинамічні характеристики.

уміння:

- визначати напрямок, глибину перебігу хімічних та фізико-хімічних процесів за певних умов; зміну термодинамічних характеристик внаслідок перебігу таких процесів;
- вирішувати задачі кількісного урахування впливу зовнішніх факторів на перебіг різноманітних фізико-хімічних процесів;
- вирішувати задачі керування реальними хімічними та фізико-хімічними процесами у хімічній технології, органічному синтезі, на електрохімічних виробництвах тощо, використовуючи набуті знання та враховуючи усі ризики.

досвід:

- використання теоретичних положень термодинаміки, кінетики, каталізу, електрохімії з метою розрахунку фізико-хімічних та кінетичних параметрів типових процесів: тепло-, масообміну, хімічних та електрохімічних реакцій, фазових перетворень тощо;
- використання теоретичних положень фізичної хімії з метою розрахунку (прогнозування) фізико-хімічних даних для технологічного регламенту або ТЗ, або технічних умов: будови, фізико-хімічних властивостей, реакційної здатності компонентів процесу;
- використання теоретичних положень каталізу та довідникові дані з метою здійснення підбору і прогнозування активності, селективності та інших технологічних характеристик каталізаторів для різних хіміко-технологічних процесів.

3. ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Змістовний модуль 1. Вчення про структуру речовини

Тема 1. Основи класичної теорії хімічної будови.

Основні положення класичної теорії хімічної будови. Структурні формули молекул. Ізомерія. Конформації молекул. Взаємозв'язок структури і властивостей молекул.

Тема 2. Фізичні основи вчення про структуру молекул

Механічна модель молекули. Потенціали парних взаємодій. Загальні принципи квантово-механічного опису молекулярних систем, стаціонарне рівняння Шредінгера, адіабатичне наближення. Потенціальні криві і поверхні потенціальної енергії, їхня загальна структура і різні типи. Рівноважні конфігурації молекул. Структурна ізомерія. Оптичні ізомери. Коливання молекул. Нормальні коливання, амплітуди і частоти коливань, частоти основних коливальних переходів.

Обертання молекул. Різні види молекулярних дзиґ. Поворотні рівні енергії.

Електронна структура атомів і молекул. Одноелектронне наближення. Атомні і молекулярні орбіталі. Електронні конфігурації і терми атомів. Правило Хунда. Електронна густина. Розподіл електронної густини в двоатомних молекулах. Кореляційні орбітальні діаграми. Теорема Купманса. Обмеження застосування одноелектронного наближення. Інтерпретація будови молекул на основі орбітальних моделей і дослідження розподілу електронної густини. Локалізовані молекулярні орбіталі. Гібридизація.

Електронна кореляція в атомах і молекулах, її прояв у властивостях молекул. Метод конфігураційної взаємодії.

Уявлення про заряди на атомах та порядок зв'язків. Різні методи виділення атомів у молекулах. Кореляції дескрипторів електронної будови та властивостей молекул. Індекси реакційної здатності. Теорія граничних орбіталей.

Тема 3. Симетрія молекулярних систем

Поняття про точкові групи симетрії молекул. Загальні властивості симетрії хвильових функцій і потенційних поверхонь молекул. Класифікація квантових станів атомів та молекул за симетрією. Симетрія атомних і молекулярних орбіталей, s– та p– орбіталі. π-електронне наближення.

Вплив симетрії рівноважної конфігурації атомів на властивості молекул та їхню динамічну поведінку. Орбітальні кореляційні діаграми. Збереження орбітальної симетрії під час хімічних реакціях.

Тема 4. Електричні та магнітні властивості

Дипольний момент і поляризованість молекул. Магнітний момент і магнітна сприйнятливість. Ефекти Штарка та Зеемана. Магнітно-резонансні методи дослідження будови молекул. Хімічний зсув.

Оптичні спектри молекул. Ймовірність переходів та правила відбору під час переходів між різними квантовими станами молекул. Взаємозв'язок

спектрів молекул з їхньою будовою. Визначення структурних характеристик молекул зі спектроскопічних даних.

Тема 5. Міжмолекулярні взаємодії

Основні компоненти міжмолекулярних взаємодій. Молекулярні комплекси. Ван-дер-Ваальсові взаємодії. Кластери атомів і молекул. Водневий зв'язок. Супрамолекули та супрамолекулярна хімія.

Тема 6. Основні результати та закономірності в будові молекули

Будова молекул простих та координаційних неорганічних сполук. Поліядерні комплексні сполуки. Будова основних типів органічних та елементоорганічних сполук. Сполуки включення. Біополімери.

Тема 7. Структура конденсованих фаз

Структурна класифікація конденсованих фаз.

Ідеальні кристали. Кристалічна гратка та кристалічна структура. Реальні кристали. Типи дефектів у реальних кристалах. Кристали з неповною впорядкованістю. Доменні структури.

Симетрія кристалів. Кристалографічні точкові групи симетрії, типи граток, сингонії. Уявлення про просторову групу кристалів. Індекси кристалографічних граней.

Атомні, іонні, молекулярних та інші види кристалів. Ланцюгові, каскадні та шаруваті структури. Структура твердих розчинів. Впорядковані тверді розчини. Аморфні речовини. Особливості структури полімерних фаз.

Метали та напівпровідники. Зонна структура енергетичного спектра кристалів. Поверхня Фермі. Різні види провідності. Коливання в кристалах. Фонони.

Рідини. Миттєва та коливально-усереднена структура рідини. Асоціати та кластери в рідинах. Флуктуації та кореляційні функції. Структура простих рідин. Розчини неелектролітів. Структура води і водних розчинів. Структура рідких електролітів.

Міцелоформування і структура міцел. Мезофази. Пластичні кристали. Рідкі кристали.

Тема 8. Поверхня конденсованих фаз

Особливості будови поверхні кристалів та рідин, структура границі поділу конденсованих фаз. Молекули і кластери на поверхні. Структура адсорбційних шарів.

Змістовний модуль 2. Хімічна термодинаміка

Тема 1. Основні поняття і закони термодинаміки

Основні поняття термодинаміки: ізольовані, закриті і відкриті системи, рівноважні та нерівноважні процеси, термодинамічні параметри, інтенсивні і екстенсивні властивості. Рівняння стану. Теорема відповідних станів. Віріальні рівняння стану.

Перший закон термодинаміки. Теплота, робота, внутрішня енергія, ентальпія, теплоємність. Закон Гесса. Стандартні стани і стандартні теплоти хімічних реакцій. Залежність теплового ефекту реакції від температури. Рівняння Кірхгофа. Таблиці стандартних термодинамічних функцій та їх

використання в термодинамічних розрахунках. Другий закон термодинаміки. Ентропія та її зміни в оборотних і необоротних процесах. Теорема Карно–Клаузіуса. Різні шкали температур.

Фундаментальні рівняння Гіббса. Характеристичні функції. Енергія Гіббса, енергія Гельмгольца. Рівняння Максвелла. Умови рівноваги і критерії самочинного перебігу процесів.

Рівняння Гіббса – Гельмгольца. Робота хімічного процесу. Хімічний потенціал. Хімічна рівновага. Закон діючих мас. Різні види констант рівноваги і зв'язок між ними. Ізотерма Вант-Гоффа. Рівняння ізобари та ізохори хімічної реакції. Розрахунки констант рівноваги хімічних реакцій за допомогою таблиць стандартних значень термодинамічних функцій. Приведена енергія Гіббса та її використання для обчислення хімічних рівноваг. Рівновага в полі зовнішніх сил. Повні потенціали.

Тема 2. Елементи статистичної термодинаміки

Мікро- і макро- стани хімічних систем. Термодинамічна ймовірність та її зв'язок з ентропією. Розподіл Максвелла – Больцмана. Статистичні середні значення макроскопічних величин. Розрахунок числа станів у квазікласичному наближенні. Канонічна функція розподілу Гіббса. Сума за станами як статистична характеристична функція. Статистичні вирази для основних термодинамічних функцій. Молекулярна сума за станами і сума за станами макроскопічної системи. Поступальна, обертальна, електронна і коливальна суми за станами. Статистичний розрахунок ентропії. Постулат Планка і абсолютна ентропія.

Розрахунок констант рівноваги ідеальних газофазних реакцій методом статистичної термодинаміки. Статистична термодинаміка реальних систем. Потенціали міжмолекулярних взаємодій та конфігураційний інтеграл для реального газу.

Розподіл Бозе – Ейнштейна та Фермі – Дирака. Вироджений ідеальний газ. Електрони в металах. Рівень Фермі. Статистична теорія Ейнштейна ідеального кристала, теорія Дебая. Точкові дефекти кристалічних граток. Рівноважні та нерівноважні дефекти. Обчислення сум за станами для кристалів з різними точковими дефектами. Нестехіометричні сполуки та їх термодинамічний опис.

Тема 3. Елементи термодинаміки незворотних процесів

Основні положення термодинаміки нерівноважних процесів. Локальна рівновага. Флуктуації. Функція дисипації. Потоки і сили. Швидкість виробництва ентропії. Залежність швидкості виробництва ентропії узагальнених потоків і сил. Відношення взаємності Онзагера. Стаціонарний стан системи та теорема Пригожина.

Тема 4. Розчини. Фазові рівноваги.

Різні типи розчинів. Види концентрації розчинів. Ідеальні розчини, загальна умова стану ідеальності розчинів. Тиск насиченої пари рідких розчинів, закон Рауля. Неідеальні розчини та їх властивості. Метод активностей. Коефіцієнти активності та їх визначення.

Колігативні властивості розчинів. Зміна температури замерзання розчинів, кріоскопія. Зонне плавлення. Осмотичні явища. Парціальні молярні величини, їх визначення для бінарних систем. Рівняння Гіббса – Дюгема.

Зміна термодинамічних параметрів внаслідок утворення ідеальних та неідеальних розчинів. Гранично розведені розчини, атермальні та регулярні розчини, їх властивості.

Гетерогенні системи. Компонент, фаза, ступінь свободи. Правило фаз Гіббса.

Однокомпонентні системи. Діаграми стану води, сірки, вуглекислого газу і вуглецю. Фазові переходи першого роду. Рівняння Клапейрона – Клаузіуса.

Двокомпонентні системи. Різні діаграми стану двокомпонентних систем. Рівновага рідина – пара в двокомпонентних системах. Закони Гіббса–Коновалова. Азеотропні суміші. Фазовий перехід другого роду. Рівняння Еренфеста.

Трикомпонентні системи. Трикутник Гіббса. Діаграми плавлення трикомпонентних систем.

Тема 5. Адсорбція та поверхневі явища

Адсорбція. Адсорбент, адсорбат. Види адсорбції. Структура поверхні та пористість адсорбенту. Локалізована та делокалізована адсорбція. Мономолекулярна та полімолекулярна адсорбція. Динамічний характер адсорбційної рівноваги.

Ізотерми та ізобари адсорбції. Рівняння Генрі. Константа адсорбційної рівноваги. Рівняння Ленгмюра. Адсорбція з розчинів. Рівняння Брунауера – Емета – Теллера (БЕТ) для полімолекулярної адсорбції. Визначення площі поверхні адсорбенту.

Хроматографія, її різні типи (газова, рідинна, протиточна та інші.).

Поверхня розділу фаз. Вільна поверхнева енергія, поверхневий натяг, надлишкові і термодинамічні функції поверхневого шару. Зміна поверхневого натягу на границі рідина – пара залежно від температури. Зв’язок вільної поверхневої енергії з теплотою сублімації (правило Стефана), модулем еластичності та іншими властивостями речовини. Ефект Ребіндера: зміна міцності і пластичності твердого тіла внаслідок зменшення його поверхневої енергії.

Капілярні явища. Залежність тиску пари від викривлення поверхні рідини. Капілярна конденсація. Залежність розчинності від викривлення поверхні частинок, що розчиняються (закон Гіббса – Оствальда – Фрейндліха).

Тема 6. Електрохімічні процеси

Розчини електролітів. Іон - дипольна взаємодія як основний процес, який визначає силу електролітів. Коефіцієнти активності в розчинах електролітів. Середня іонна активність електроліту та середній іонний коефіцієнт активності, їх зв’язок з активністю окремих іонів. Основні положення теорії Дебая – Хюккеля. Потенціал іонної атмосфери. Умови електрохімічної рівноваги на границі поділу фаз та в електрохімічному

ланцюгу. Термодинаміка гальванічного елементу. Електрорушійна сила, її вираз через енергію Гіббса реакції в елементі. Рівняння Нернста та Гіббса – Гельмгольца для рівноважного електрохімічного ланцюга. Поняття електродного потенціалу. Визначення середніх іонних коефіцієнтів активності на основі вимірювання ЕРС гальванічного елементу.

Електропровідність розчинів електролітів; питома, молярна та еквівалентна електропровідність. Числа переносу, рухливість іонів, закон незалежного руху іонів Кольрауша. Електрофоретичний і релаксаційний ефекти.

Змістовний модуль 3. Кінетика хімічних реакцій

Тема 1. Хімічна кінетика

Основні поняття хімічної кінетики. Прості та складні реакції, молекулярність та швидкість простої реакції. Основний постулат хімічної кінетики. Способи визначення швидкості реакції. Кінетичні криві. Кінетичні рівняння. Константа швидкості та порядок реакції. Реакції змінного порядку.

Феноменологічна кінетика складних хімічних реакцій. Принцип незалежності елементарних стадій реакції. Кінетичні рівняння для оборотних, паралельних та послідовних реакцій. Квазістаціонарне наближення, метод Боденштейна – Тьомкіна. Кінетика гомогенних каталітичних та ферментативних реакцій. Рівняння Міхаеліса – Ментена.

Ланцюгові реакції. Кінетика нерозгалужених та розгалужених ланцюгових реакцій. Кінетичні особливості розгалужених ланцюгових реакцій. Граничні явища у розгалужених ланцюгових реакціях. Ланцюговий вибух.

Коливальні реакції.

Макрокінетика. Роль дифузії в кінетиці гетерогенних реакцій. Кінетика гетерогенних каталітичних реакцій. Різні режими перебігу реакцій (внутрішня кінетична та зовнішня кінетична області, області зовнішньої та внутрішньої дифузії).

Залежність швидкості реакції від температури. Рівняння Арреніуса. Енергія активації та способи її визначення.

Елементарні акти хімічних реакцій, фізична суть енергії активації. Термічний і нетермічний шляхи активації молекул. Енергетичний обмін (поступальної, обертальної, коливальної енергій) при зіткненнях молекул. Час релаксації у молекулярних системах.

Теорія активних зіткнень. Переріз хімічних реакцій. Формула Траутца–Льюіса. Розрахунок передекспоненційного множника за молекулярними сталими. Стеричний фактор.

Теорія перехідного стану (активованого комплексу). Поверхня потенціальної енергії. Шлях та координата реакції. Статистична оцінка константи швидкості. Ентальпія та ентропія активації. Використання молекулярних сталих при обчисленні константи швидкості.

Мономолекулярні реакції в газах, схема Ліндемана – Христіансена. Теорія РРКМ. Бімолекулярні та тримолекулярні реакції, залежність передекспоненційного множника від температури.

Реакції в розчинах, вплив розчинника та заряду часток реагентів. Клітинний ефект і сольватація.

Фотохімічні та радіаційно-хімічні реакції. Елементарні фотохімічні процеси. Ексімери та ексіплекси. Зміна фізичних та хімічних властивостей молекул при електронному збудженні. Квантовий вихід. Закон Ейнштейна – Штарка і Гротгуса – Дрепера).

Електрохімічні реакції. Подвійний електричний шар. Модельні уявлення про структуру подвійного електричного шару. Теорія Гуі – Чапмена – Грема.

Електрокапілярні явища, рівняння Ліппмана.

Швидкість та етапи електродного процесу. Поляризація електродів. Полярографія. Струм обміну та перенапруга. Хімічні джерела струму, їх види. Електрохімічна корозія. Методи захисту від корозії.

Тема 2. Каталіз

Класифікація каталітичних реакцій та каталізаторів. Теорія проміжних сполук у каталізі, принцип енергетичної відповідності.

Гомогенний каталіз. Кислотно-основний каталіз. Кінетика, механізм реакцій специфічного кислотного каталізу. Функції кислотності Гаммета. Кінетика і механізм реакцій загального кислотного каталізу. Рівняння Бренстеда. Кореляційне рівняння для енергії активації та теплоти реакцій. Специфічний і загальний основний каталіз. Нуклеофільний та електрофільний каталіз.

Каталіз металокомплексними сполуками. Гомогенні реакції гідрогенізації, їх кінетика та механізми.

Ферментативний каталіз. Адсорбційні та каталітичні центри ферментів. Активність і субстратна селективність ферментів. Коферменти. Механізми ферментативного каталізу.

Гетерогенний каталіз. Визначення швидкості гетерогенної каталітичної реакції. Питома та атомна активність. Селективність каталізаторів. Роль адсорбції у кінетиці гетерогенних каталітичних реакцій.

Неоднорідність поверхні каталізаторів, нанесені каталізатори.

Енергія активації гетерогенних каталітичних реакцій.

Сучасні теорії функціонування гетерогенних каталізаторів.

Основні промислові каталітичні процеси.

4. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Назва тем	Кількість годин				
	Всього	Аудиторна робота			Індивідуальна робота
		Всього аудито	Лекції	Семінарських	
Змістовний модуль 1. Вчення про структуру речовини.					
Тема 1. Основи класичної теорії хімічної будови.			4	1	5
Тема 2. Фізичні основи вчення про структуру молекул.			2	1	5
Тема 3. Симетрія молекулярних систем.			2	1	5
Тема 4. Електричні та магнітні властивості.			2		5
Тема 5. Міжмолекулярні взаємодії.			2	1	5
Тема 6. Основні результати та закономірності в будові молекули.			2	1	2
Тема 7. Структура конденсованих фаз.			3	1	2
Тема 8. Поверхня конденсованих фаз.			2		
Разом за змістовним модулем 1.			19	6	29
Змістовний модуль 2. Хімічна термодинаміка.					
Тема 1. Основні поняття і закони термодинаміки.			2	2	5
Тема 2. Елементи статистичної термодинаміки.			1	1	5
Тема 3. Елементи термодинаміки необоротних процесів.			1		5
Тема 4. Розчини. Фазові рівноваги.			2	2	5
Тема 5. Адсорбція та поверхневі явища.			2	1	
Тема 6. Електрохімічні процеси.			3	2	2
Разом за змістовним модулем 2.			11	8	22
Змістовний модуль 3. Кінетика хімічних реакцій.					
Тема 1. Хімічна кінетика.			4	3	5
Тема 2. Каталіз.			2	1	10
Разом за змістовим модулем 3.			6	4	15
Всього:	120	54	36	18	66

5. ТЕМИ СЕМІНАРСЬКИХ ЗАНЯТЬ

№	Назва теми	Кількість годин
Змістовний модуль 1. Загальні положення каталізу.		
1.	Теорія активних центрів. Принципи геометричної та енергетичної відповідності в теорії Баландіна. Теорія ансамблів Кобозева	1
2.	Фактори які визначають швидкість каталітичної реакції.	1
Змістовний модуль 2. Каталітична активність та методи її визначення.		
3.	Конверсія реагенту та селективність. Швидкість реакції та питома швидкість реакції.	1
4.	Статичні методи. Проточні методи	1
Змістовий модуль 3. Кінетика та механізми гетерогенних каталітичних реакцій.		
5.	Молекулярність складних реакцій, порядок реакції.	1
6.	Ударний та адсорбційний механізми. Механізм навперемінного відновлення-окиснення. Асоціативний механізм.	1
Змістовий модуль 4. Наукові основи приготування гетерогенних каталізаторів		
7.	Масивні та нанесені каталізатори. Співосадження. Просочення. Твердо-фазний синтез. Золь-гель технологія.	1
8.	Рентгенофазовий аналіз. Порометрія. Скануюча електронна мікроскопія.	1
Всього годин:		8

7. САМОСТІЙНА РОБОТА

№	Назва теми	Кількість годин
Змістовний модуль 1. Загальні положення каталізу.		
1.	Адсорбція та каталіз. Екологічний та продуктивний каталіз. Каталіз у газовій та рідкій фазі. Фотокаталіз	5
2.	Теорія ансамблів Кобозева. Кластерний каталіз.	5
3.	Основні стадії каталізу. Фізична адсорбція. Визначення питомої поверхні та поруватої структури каталізаторів. Хімічна адсорбція	5
4.	Питома активність каталізаторів. Роль радикалів в гетерогенному каталізі. Гетерогенно-гомогенний каталіз.	5
5.	Нові реакційні шляхи в присутності каталізаторів.	5
Змістовний модуль 2. Каталітична активність та методи її визначення.		
6.	Вплив дифузії на показники гетерогенних процесів в газовій та рідкій фазах. Визначення кінетичної області протікання процесів.	4
7.	Залежність швидкості реакції від температури та складу реакційної суміші. Константа швидкості реакції та енергія активації.	6
8.	Проточні методи, диференціальний та інтегральний реактори.	5
9.	Реактор з стаціонарним шаром каталізатора Реактори з киплячим шаром каталізатору	5
Змістовий модуль 3. Кінетика та механізми гетерогенних каталітичних реакцій.		
10.	Вплив взаємодії реакційної системи та каталізатора на кінетику реакції. Зміна властивостей каталізатора під дією реакційної суміші.	7
11.	Парціальне каталітичне окиснення вуглеводнів. Повне каталітичне окиснення. Кислотно-основний каталіз.	8
12.	Особливості дослідження в рідкій фазі.	10
Змістовий модуль 4. Наукові основи приготування гетерогенних каталізаторів		
13.	Альтернативні методи синтезу гетерогенних каталізаторів: механохімія, сонохімія, ультразвукова обробка. Плазмо-хімічний метод та іонна імплантація.	12

14.	Електронний парамагнітний резонанс. Ядерний магнітний резонанс. Інфрачервона спектроскопія. Скануюча тунельна мікроскопія. Термодесорбція.	8
Всього годин:		90

8. МЕТОДИ НАВЧАННЯ

- Словесні методи: пояснення, інструктаж, розповідь, лекція, бесіда (репродуктивна, евристична, катехізисна), самостійна робота з підручником, обговорення проблем, навчальні дискусії, мозковий штурм, кейс-методи, тестування, перехресна перевірка знань;
- Наочні: метод ілюстрацій (схеми, таблиці, графіки, тощо), метод демонстрацій (приладів, дослідів, технічних установок, відеофільмів);
- Метод інструктування;
- Репродуктивні методи: пояснювально-ілюстративний, відтворювальний;
- Проблемно-пошукові методи навчання (проблемний виклад, евристичний, дослідний).

9. РОЗПОДІЛ БАЛІВ, ЯКІ ОТРИМУЮТЬ АСПІРАНТИ

<table>
<tr><td colspan="14">Поточне тестування та самостійна робота</td><td>Підсумковий тест (іспит)</td><td>Сума</td></tr>
<tr><td colspan="5">Змістовий модуль 1</td><td colspan="4">Змістовий модуль 2</td><td colspan="4">Змістовий модуль 3</td><td colspan="2">Змістовий модуль 4</td><td rowspan="3">100</td><td rowspan="3">100</td></tr>
<tr><td>Т1</td><td>Т2</td><td>Т3</td><td>Т4</td><td>Т5</td><td>Т6</td><td>Т7</td><td>Т8</td><td>Т9</td><td>Т10</td><td>Т11</td><td>Т12</td><td>Т13</td><td>Т14</td></tr>
<tr><td>5</td><td>8</td><td>5</td><td>6</td><td>6</td><td>6</td><td>8</td><td>8</td><td>6</td><td>8</td><td>8</td><td>9</td><td>9</td><td>8</td></tr>
</table>

ШКАЛА ОЦІНЮВАННЯ: НАЦІОНАЛЬНА ТА ECTS

<table>
<tr><td rowspan="2">Сума балів за всі види навчальної діяльності</td><td rowspan="2">Оцінки ECTS</td><td colspan="2">Оцінка за національною шкалою</td></tr>
<tr><td>для іспиту</td><td>для заліку</td></tr>
<tr><td>90-100</td><td>A</td><td>відмінно</td><td rowspan="5">зараховано</td></tr>
<tr><td>80-89</td><td>B</td><td rowspan="2">добре</td></tr>
<tr><td>70-79</td><td>C</td></tr>
<tr><td>65-69</td><td>D</td><td rowspan="2">задовільно</td></tr>
<tr><td>60-64</td><td>E</td></tr>
<tr><td>35-59</td><td>FX</td><td>незадовільно з можливістю повторного складання</td><td>не зараховано з можливістю повторного складання</td></tr>
<tr><td>0-34</td><td>F</td><td>незадовільно з обов’язковим повторним вивченням дисципліни</td><td>не зараховано з обов’язковим повторним вивченням дисципліни</td></tr>
</table>

10. МЕТОДИЧНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ

Навчально-методичний комплекс вивчення дисципліни вміщує робочу програму навчальної дисципліни, програму навчальної дисципліни, конспект лекцій з курсу, презентації, створені засобами Power Point, програми для аналізу адсорбційних даних, експериментальні дані по адсорбції з газового та рідкого середовища на різних матеріалах.

Для методичного забезпечення лекційного процесу використовуються дошки із записом крейдою та фломастером, ноутбук, мультимедійний проектор, лазерна вказівка.

ФОРМИ ОЦІНЮВАННЯ

Поточний контроль - письмові контрольні роботи за темами лекційного курсу, усне опитування, участь в дискусії, додаткова робота.

Підсумковий контроль – екзамен.

Білет № 1

1. Рівняння Планка - зв’язок енергії з частотою; рівняння Де – Бройля - зв’язок імпульсу з довжиною хвилі. Рівняння Шредингера для стаціонарного стану. Співвідношення невизначеності Гейзенберга.
2. Перший закон термодинаміки. Внутрішня енергія. Ентальпія. Теплоємність. Рівняння стану та внутрішня енергія ідеального газу. Тепловий ефект хімічної реакції. Залежність теплового ефекту від температури, формула Кірхгофа.
3. Поверхневий шар. Міжфазний натяг. Адсорбція на границі розподілу фаз. Адсорбційна формула Гіббса.

Білет № 2

1. Другий закон термодинаміки. Ентропія, її зміни в оборотних та необоротних процесах. Термодинамічна шкала температур. Постулат Планка. Абсолютна величина ентропії.
2. Електролітична дисоціація. Теорія Арреніуса. Міжіонні взаємодії в розчинах електролітів. Активність іонів. Теорія Дебая – Гюккеля.
3. Ядерний магнітний резонанс. Хімічний зсув. Спін-спінова взаємодія і розщеплення сигналів ЯМР

Білет № 3

1. Стандартна енергія Гіббса реакції та константа рівноваги. Закон діючих мас. Хімічні рівноваги в гетерогенних системах. Вплив зовнішніх умов на хімічну рівновагу (принцип Ле-Шательє).
2. Електрохімічний елемент. Електрохімічний потенціал. Рівняння Нернста. Типи електродів та електрохімічних елементів.
3. Електронний парамагнітний резонанс. Вільні електрони і ЕПР.

Білет № 4

1. Багатоелектронні атоми. Застосування принципу заборони до розподілу електронів по орбіталям. Правило Гунда. Електронні конфігурації атомів та періодичний закон Менделеєва. Валентність.

2. Термодинамічний принцип рівноваги, його різні форми – для ізольованої системи, рівновага при постійних об’єму та температурі, постійних тиску та температурі. Термодинамічні потенціали та характеристичні функції.
3. Кристали. Елементи симетрії кристалів. Сингонії – кубічна, гексагональна та інш. Типи кристалічних решіток. Енергія іонних кристалів.

Білет № 5

1. Ковалентний зв’язок. Квантово – механічне тлумачення багатоатомних молекул за методом молекулярних орбіталей. Принцип максимального перекривання. Гібридизація орбіталей, sp-, sp^2- та sp^3- гібридизація.
2. Гетерогенна рівновага. Фази, компоненти. Правило фаз Гіббса. Однокомпонентні системи, критичний стан, критичні параметри. Агрегатні перетворення. Рівняння Клаузіуса – Клапейрона.
3. Статистична сума по станам. Розрахунок сум по станам для поступального, коливального та обертального рухів. Представлення констант рівноваги через статистичні суми по станам.

11. РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Стромберг А.Г. Семченко Д.П. Физическая химия. М.: Высшая школа, 2006.
2. Курс физической химии / Под ред. Я. И. Герасимова – Т. 1-2. – М.: Химия, 1966.
3. Эткинс П. Физическая химия. – Т. 1-2. – М.: Мир, 1980.
4. Яцимирський В. К. Фізична хімія. К.: Перун, 2007.
5. Физическая химия в 2-х т. / Под ред. К. С. Краснова – М.: Высшая школа, 1995-1996.
6. Даниэльс Ф., Олберти Р. Физическая химия. М.: Мир, 1978.
7. Физическая химия / Под ред. К. С. Никольского – Л.: Химия, 1987.
8. Ковальчук Є. П., Решетняк О.В. Фізична хімія. Львів: ВЦ ЛНУ ім. Івана Франка, 2007.
9. Голиков Г. А. Руководство по физической химии / Г. А. Голиков. – М.: ВШ, 1988.
10. Гомонай В. І., Гомонай О.В. Фізична хімія. Ужгород: Патент, 2004.
11. Лебедь В. І. Фізична хімія. Харків: Фоліо, 2007.
12. Вилков Л. В., Пентин Ю. А. Физические методы исследования в химии. М.: Изд-во МГУ. Ч. 1: 1987. Ч. 2: 1989.
13. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, Изд-во МГУ, 2001.
14. Флларри Р. Квантовая химия. М.: Мир, 1985.
15. Бейдер Р. Атомы в молекулах. М.: Мир, 2001.
16. Полторак О. М. Термодинамика в физической химии. М.: Высш. шк., 1991.
17. Пригожин И., Кондепуди Д. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур. М.: Мир, 2002.
18. Смирнова Н. А. Методы статистической термодинамики в физической химии. М.: Высш. шк., 1982.
19. Агеев Е.П. Неравновесная термодинамика в вопросах и ответах. М.: Изд. МГУ, 1999.
20. Адамсон А. Физическая химия поверхностей. М.: Мир, 1979.
21. Дамаскин Б. Б., Петрий О. А., Цирлина Г. А. Электрохимия. М.: Химия, 2001.
22. Дуров В. А., Агеев Е. П. Термодинамическая теория растворов неэлектролитов. М.: Изд. МГУ, 1987.
23. Хаазе Р. Термодинамика необратимых процессов М.: Мир, 1967.
24. Дамаскин Б. Б., Петрий О. А. Введение в электрохимическую кинетику. М.: ВШ, 1983.
25. Денисов Е.Т., Саркисов О.М., Лихтенштейн Г.. Химическая кинетика. М.: Химия, 2000
26. Эмануэль Н. М., Кнорре Д. Г. Курс химической кинетики. М.: Высш. шк., 1984.

27. Панченков Г. М., Лебедев В. П. Химическая кинетика и катализ. М.: Химия, 1985.
28. Колдин Е. Быстрые реакции в растворе. М.: Мир, 1966.
29. Антропов Л. І. Теоретична електрохімія. К.: Вища школа, 1993.
30. Еремин Е. Н. Основы химической термодинамики. – М.: Высш. шк., 1978.
31. Кудряшов И. В., Каретников Г.С. Сборник примеров и задач по физической химии. М.: Высш. шк., 1991.