

Аннотация к рабочей программе дисциплины

Избранные главы физической химии

Направление подготовки: 13.04.01 Теплоэнергетика и теплотехника

Направленность (профиль): 13.04.01 Водородная и электрохимическая энергетика. Автономные энергетические системы

Квалификация выпускника: магистр

Цель освоения дисциплины: является изучение классических и современных методы физико-химических методов получения и исследования дисперсных сред и наноматериалов применительно к технологиям водородной и электрохимической энергетике.

Объем дисциплины: 6 ЗЕ, 216 ч.

Семестр: 2

Краткое содержание основных разделов дисциплины:

№ п/п раздела	Основные разделы дисциплины	Краткое содержание разделов дисциплины
1	Предмет физической химии. Роль физической химии	Роль физической химии в подготовке специалистов по магистерской программе «Автономные энергетические системы. Водородная и электрохимическая энергетика».
2	Химическая связь и строение молекул	Квантово-механический особенности микрочастиц. Водородоподобный атом. Принцип Паули. Уравнение Шредингера для молекул. Анализ результатов решения уравнение Шредингера для атома водорода. Описание молекулярной орбитали в методе МО ЛКАО. Молекулярные орбитали в многоатомных молекулах. Метод Хюккеля.
3	Химическая термодинамика	Основные законы термодинамики. Термодинамические потенциалы. Характеристические функции. Энергия Гиббса. Методы расчета изменения энергии Гиббса в процессе химических реакций. Изменение энтропии. Критерии самопроизвольного протекания процессов. Закон действующих масс. Уравнение изобары реакции. Статистическая термодинамика. Квантовая статистика Больцмана. Статистика Ферми-Дирака и Бозе-Эйнштейна.
4	Химическое равновесие	Условия химического равновесия. Закон действующих масс. Константы равновесия. Функции образования веществ. Приведенный потенциал Гиббса. Смещение химического равновесия. Уравнения изотермы, изобары и изохоры реакции.

5	Фазовые равновесия	Условия фазового равновесия. Фазовые переходы. Правило фаз. Принципы построения фазовых диаграмм. Диаграммы состояния однокомпонентных, двухкомпонентных и трехкомпонентных систем.
6	Адсорбция	Адсорбция и адсорбционное равновесие. Изотерма, изобара и изостера адсорбции. Уравнение Лэнгмюра. Адсорбция на неоднородной поверхности. Полимолекулярная адсорбция. Уравнение БЭТ.
7	Химическая кинетика	Основные понятия химической кинетики. Скорость и механизм реакции. Основы теории столкновений и бимолекулярные процессы. Энергия активации. Теория активированного комплекса. Статистическая и термодинамическая форма уравнения Эйринга. Неадиабатические процессы.
8	Катализ	Классификация каталитических реакций. Кислотно-основной катализ: специфический и общий. Каталитическое окисление простых молекул. Каталитические реакции на переходных металлах. Каталитическое гидрирование. Автокаталитические системы. Усиление хиральной асимметрии. Ферментативные реакции. Уравнение Михаэлиса-Ментен. Ингибирование ферментами и субстратом. Реакции в адсорбционном слое. Процессы диффузии.

Форма промежуточной аттестации: экзамен