

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Львівський національний університет імені Івана Франка
Хімічний факультет
Кафедра фізичної та колоїдної хімії

ЗАТВЕРДЖЕНО
на засіданні кафедри фізичної
та колоїдної хімії хімічного факультету
Львівського національного
університету імені Івана Франка
(протокол № 1 від 31 серпня 2022 р.)

Завідувач кафедри


Олександр РЕШЕТНЯК

Силабус навчальної дисципліни
«ФІЗИЧНА ХІМІЯ»,
що викладається в межах освітньо-професійної програми
підготовки бакалавра (першого (бакалаврського) рівня вищої освіти)
для здобувачів за спеціальністю 014.06 Середня освіта (Хімія)

Львів 2022 р.

Назва дисципліни	«Фізична хімія»
Адреса викладання дисципліни	Навчальний корпус хімічного факультету Львівського національного університету імені Івана Франка, вул. Кирила і Мефодія 6/6а (аудиторія 1, аудиторія 4, лабораторія практикуму з фізичної хімії (к. 115).
Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна	Хімічний факультет, кафедра фізичної та колоїдної хімії
Галузь знань, шифр та назва спеціальності	014 Середня освіта 014.06 Середня освіта (Хімія)
Викладачі дисципліни	<p>5 семестр: Решетняк Олександр Володимирович, д.х.н., професор, завідувач кафедри фізичної та колоїдної хімії – лектор, лабораторні заняття (https://chem.lnu.edu.ua/employee/reshetnyak-oleksandr-volodymyrovych); Бойчишин Лідія Михайлівна, к.х.н., доцент, доцент кафедри фізичної та колоїдної хімії – практичні та лабораторні заняття (https://chem.lnu.edu.ua/employee/bojchyshyn-lidiya-myhajlivna).</p> <p>6 семестр: Решетняк Олександр Володимирович, д.х.н., професор, завідувач кафедри фізичної та колоїдної хімії – лектор (https://chem.lnu.edu.ua/employee/reshetnyak-oleksandr-volodymyrovych); Герцик Оксана МIRONІВНА, к.х.н., доцент, доцент кафедри фізичної та колоїдної хімії – лабораторні заняття (https://chem.lnu.edu.ua/employee/hertsyk-oksana-myronivna); Дутка Володимир Степанович, д.х.н., доцент, професор кафедри фізичної та колоїдної хімії – лабораторні заняття (https://chem.lnu.edu.ua/employee/dutka-volodymyr-stepanovych); Бойчишин Лідія Михайлівна, к.х.н., доцент, доцент кафедри фізичної та колоїдної хімії – практичні заняття (https://chem.lnu.edu.ua/employee/bojchyshyn-lidiya-myhajlivna).</p>
Контактна інформація викладачів	Хімічний факультет, кафедра фізичної та колоїдної хімії, вул. Кирила і Мефодія 6/6а, к. 125, 129 та 130; тел. (032) 2600397 електронна пошта: oleksandr.reshetnyak@lnu.edu.ua ; volodymyr.dutka@lnu.edu.ua ; lidiya.boichyshyn@lnu.edu.ua ; oksana.hertsyk@lnu.edu.ua
Консультації по дисципліні відбуваються	<p><i>Консультації під час семестру:</i> 1) очно при попередній домовленості з викладачем за адресою: хімічний факультет, вул. Кирила і Мефодія, 6, ауд. 122; 2) заочно через електронну пошту</p> <p><i>Консультації до іспиту:</i> Згідно з Графіком консультацій, який оприлюднюється екзаменатором за тиждень до початку екзаменаційної сесії</p>
Сторінка дисципліни	Матеріали до дисципліни розміщені у системі MOODLE ЛНУ імені Івана Франка за адресою: http://e-learning.lnu.edu.ua/course/view.php?id=152 (5 семестр); http://e-learning.lnu.edu.ua/course/view.php?id=1548 (6 семестр).
Інформація про дисципліну	«Фізична хімія» є нормативною навчальною дисципліною для студентів хімічного факультету 3 року навчання за спеціальністю 014.06 Середня освіта (Хімія). Дисципліну розроблено таким чином, щоб надати здобувачам освіти необхідні знання, які дозволять на високому професійному рівні забезпечити викладання хімічних дисциплін в закладах освіти

<p>Коротка анотація дисципліни</p>	<p>Програма першої частини курсу «Фізична хімія» передбачає вивчення студентами основ хімічної та статистичної термодинаміки, фазової та хімічної рівноваги, термодинаміки необоротних процесів. Зокрема розглядається взаємозв'язок енергії, теплоти та роботи, термодинамічні закони та термодинамічні функції (внутрішня енергія, ентальпія, ентропія, енергія Гіббса та Гельмгольца), поняття про хімічний потенціал, опис необоротних процесів термодинамічними методами. Значна увага приділяється колігативним властивостям розчинів, діаграмам стану одно-, дво- та трикомпонентних систем, їхньому аналізу на основі правила фаз Гіббса, адсорбції на поверхні як рідкої, так і твердої фаз, а також хімічній рівновазі у гомо- та гетерогенних системах. У програму курсу також включено розгляд основних постулатів статистичної термодинаміки, функцій розподілу Максвелла-Больцмана, Фермі-Дірака і Бозе-Анштайна, розрахунок термодинамічних функцій та константи рівноваги хімічної реакції методом статистичної термодинаміки.</p> <p>Програма другої частини курсу «Фізична хімія» передбачає вивчення студентами основ формальної кінетики, а саме розгляд кінетики простих реакцій різного порядку, аналіз кінетики оборотних, паралельних та послідовних процесів, ланцюгових, фото- та електрохімічних реакцій, методів визначення порядку реакції, опису кінетики хімічних перетворень у відкритих системах. Значна увага приділяється теоретичним аспектам хімічної кінетики: теоріям активних зіткнень і активованого комплексу, кінетичному аналізу реакцій в розчинах, залежності швидкості хімічної реакції від температури. У окремий розділ виділені проблеми каталізу – механізми та основні закономірності кислотно-основного, ферментативного та гетерогенного каталізу, кінетика автокаталітичних та автоколивальних процесів. У програму курсу також включено основи електрохімії. Розглядається рівновага у розчинах електролітів, їхня електропровідність, поняття електродного потенціалу та електрохімічні ланцюги, процеси електрохімічної корозії, а також аспекти практичного використання електрохімії у промисловості, аналітичній хімії, хімічних джерелах струму та хемотроніці</p>
<p>Мета та цілі дисципліни</p>	<p>Основною метою і завданням навчальної дисципліни є показати студенту місце фізичної хімії в системі хімічної галузі знань та її методологічна роль як теоретичної основи хімії, а також формування необхідних знань в галузях хімічної термодинаміки, хімічної кінетики, каталізу та електрохімії, а саме при описі термодинаміки та кінетики рівноважних та нерівноважних процесів, фазової та хімічної рівноваги, властивостей розчинів, фото- та електрохімічних перетворень тощо, набуття практичних навичок проведення термохімічних, кінетичних й електрохімічних досліджень, фазових та хімічних рівноваг, використання отриманих знань та набуття практичних навичок щодо здійснення теоретичних розрахунків термодинамічних функцій, кінетичних та електрохімічних параметрів фізико-хімічних процесів.</p>
<p>Література для вивчення дисципліни</p>	<p style="text-align: center;">Основна</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) <i>Є.П. Ковальчук, О.В. Решетняк.</i> Фізична хімія: Підручник. – Львів: Видавничий центр ЛНУ імені Івана Франка, 2007. 2) <i>Українець А.М., Решетняк О.В., Загордонський В.П. [та ін.].</i> Лабораторні роботи з фізичної хімії. II. Хімічна кінетика. Електрохімія: Лабораторний практикум для студентів хімічного факультету. – Львів: Видавничий центр ЛНУ імені Івана Франка, 2003. 3) <i>Решетняк О.В., Українець А.М., Загордонський В.П. [та ін.].</i> Лабораторні роботи з фізичної хімії. I. Термохімія. Фазова та хімічна рівновага. Будова речовини: Практикум для студентів хімічного факультету. – Львів: Видавничий центр ЛНУ імені Івана Франка, 2005. 4) Курс фізичної хімії. В 2-х т. / Під ред. проф. Я. І. Герасімова. – 2-ге вид. – М.: Хімія, 1970. Т. 1; 1973, Т. 2.

- 5) *Стромберг А.Г., Семченко Д.П.* Фізична хімія / Під ред. А.Г. Стромберга. – 2-ге вид. – М.: Вища школа, 1988, 1991.
- 6) Фізична хімія / Під ред. акад. Б. П. Нікольського. – Л.: Хімія, 1987.
- 7) *Білий О.В.* Фізична хімія. – К.: Центр навч. літ-ри, 2002.
- 8) *Ер'омін Е.Н.* Основи хімічної термодинаміки: Навч. посібник. – М.: Вища школа, 1978.
- 9) *Ер'омін Е.Н.* Основи хімічної кінетики: Навч. посібник. – М.: Вища школа, 1976.
- 10) *Емануель Н.М., Кнорре Д.Г.* Курс хімічної кінетики: Навч. посібник. – М.: Вища школа, 1984.

Додаткова

- 11) *Atkins P. W.* Podstawy chemii fizycznej. – Warszawa: PWN, 1999.
- 12) *Еткінс П.* Фізична хімія. В 2-х т. / Пер. з англ. – М.: Мир, 1980. Т. 1–2.
- 13) *Мелвін-Хьюз Е.А.* Фізична хімія. В 2-х т. – М. Вид. заруб. літер., 1962.
- 14) *Даніельс Ф., Олберті Р.* Фізична хімія. – М.: Вища школа, 1983.
- 15) *Pigoń K., Ruziewicz Z.* Chemia fizyczna. Tom I. Podstawy fenomenologiczne; Tom II. Fizykochemia molekularna. – Warszawa: Wydawnictwo naukowe PWN, 2005.
- 16) *Акопян А. А.* Хімічна термодинаміка. – М.: Вища школа, 1963.
- 17) *Смірнова Н.А.* Методи статистичної термодинаміки в фізичній хімії. Навч. посібник, 2-ге вид., перероб. і допов. – М.: Вища школа, 1982.
- 18) *Хейвуд Р.* Термодинаміка рівноважних процесів. – М.: Мир, 1983.
- 19) *Балеску Р.* Рівноважна і нерівноважна статистична механіка. В 2-х т. – М.: Мир, 1978. Т. 1, 2.
- 20) *Ковальчук Є.П., Яцишин М.М., Ковалишин Я.С.* Речовина в інтерфазі. Фізична хімія тонких плівок. – Львів: Видавн. центр ЛНУ імені Івана Франка. 2005. – 242 с.
- 21) *Ковальчук Є.П., Решетняк О.В.* Самоорганізовані шари на твердій поверхні. – Львів: Видавн. центр ЛНУ імені Івана Франка. 2006. – 204 с.
- 22) *Бенсон С.* Основи хімічної кінетики. – М.: Мир, 1964.
- 23) *Денисов Е.Т.* Кінетика гомогенних хімічних реакцій. – М.: Хімія, 1978.
- 24) *Стрижак П.Є.* Детермінований хаос в хімії. – К.: Академперіодика, 2002.
- 25) *Гарел Д., Гарел О.* Коливальні хімічні реакції. – М.: Мир, 1986.
- 26) *Уейн Р.* Основи і застосування фотохімії. – М.: Мир, 1991.
- 27) *Антропов Л.І.* Теоретична електрохімія. – М.: Вища школа, 1965.
- 28) *Ротинян А.Л., Тихонов К.П., Шошина І.А.* Теоретична електрохімія. – Л.: Хімія, 1981.
- 29) *Дамаскін Б.Б., Петрій О.А.* Електрохімія: Навч. посібник. – М.: Вища школа, 1987.
- 30) *Корита І., Дворжак І., Богачкова В.* Електрохімія. – М.: Мир, 1977.
- 31) *Феттер К.* Електрохімічна кінетика. – М.: Мир, 1967.

Інформаційні ресурси

- 32) <http://www.elsevier.com/>
- 33) <http://www.wiley.com/>
- 34) <http://pubs.acs.org/>
- 35) <http://chem.lnu.edu.ua/visnykk/index.htm>
- 36) <https://ntsh-chem.github.io/ua/archive.html>
- 37) <http://www.sciencedirect.com/>
- 38) <https://www.scopus.com/>
- 39) <http://webofknowledge.com/>
- 40) <https://www.researchgate.net/>
- 41) <https://goldbook.iupac.org/>

	42) http://nbuv.gov.ua/ 43) https://mon.gov.ua
Тривалість курсу	3, 4 рік підготовки (5 та 5 семестри)
Обсяг курсу	Навчальний курс охоплює 15 кредитів (450 год). Курс складається з 48 + 48 год лекційних, 16 + 16 год практичних (семінарських), 64 + 64 год лабораторних занять та 97 + 97 год самостійної роботи (5 та 6 семестри , відповідно)
Очікувані результати навчання	<p>В результаті вивчення дисципліни студенти повинні опанувати передбачені програмою розділи фізичної хімії, що означає:</p> <ul style="list-style-type: none"> – розуміти і вміти пояснювати фізичний зміст основних фізико-хімічних величин, а також основні фізико-хімічні закономірності та характеристики систем і процесів, які розглядаються в хімії; – знати передбачені програмою математичні формули, які є вираженням цих закономірностей, пояснювати фізичний зміст величин та констант, що входять до складу відповідних формул; – розуміти, в яких випадках і чому слід застосовувати певну формулу; – вміти виводити передбачені програмою формули та проводити з ними необхідні для вирішення конкретних задач перетворення; – вміти розв'язувати основні типи задач за темами, передбаченими програмою, правильно використовуючи при цьому відповідні формули; – знати основні методи експериментального дослідження фізико-хімічних закономірностей; – оволодіти технікою проведення фізико-хімічного експерименту в обсязі, передбаченому програмою, а також технікою коректної інтерпретації та статистичної обробки отриманих експериментальних даних. <p>У результаті успішного вивчення курсу студент набуде:</p> <p style="text-align: center;"><i>загальних компетентностей:</i></p> <p>ЗК 1. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності.</p> <p style="text-align: center;"><i>спеціальних (фахових) компетентностей:</i></p> <p>ПК 2. Здатність розкривати загальну структуру хімічних наук на основі взаємозв'язку основних учень про будову речовини, про періодичну зміну властивостей хімічних елементів та їх сполук, про спрямованість (хімічна термодинаміка), швидкість (хімічна кінетика) хімічних процесів та їх механізми.</p> <p style="text-align: center;"><i>Програмні результати навчання:</i></p> <p>ПРЗ 2. Знає та розуміє основні концепції, теорії та загальну структуру хімічних наук.</p> <p>ПРЗ 4. Знає головні типи хімічних реакцій та їх основні характеристики, а також основні термодинамічні та кінетичні закономірності й умови проходження хімічних реакцій.</p> <p>ПРЗ 7. Знає методи хімічного та фізико-хімічного аналізу, синтезу хімічних речовин, у т.ч. лабораторні та промислові способи одержання важливих хімічних сполук.</p> <p>ПРУ 4. Уміє аналізувати склад, будову речовин і характеризувати їх фізичні та хімічні властивості.</p>
Ключові слова	Хімічна термодинаміка; термохімія; закони термодинаміки; термодинамічні функції; хімічний потенціал; фазова рівновага; діаграма стану; хімічна рівновага; вчення про розчини; статистична термодинаміка; термодинаміка нерівноважних процесів; адсорбція; інтерфаза; самоорганізація; фізична хімія поверхневого стану; хімічна кінетика; швидкість хімічної реакції; порядок хімічної реакції;

	енергія активації; теорія активних зіткнень; теорія активованого комплексу; каталіз; електрохімія; розчини електролітів; електропровідність; числа перенесення іонів; електродний потенціал; електрорушійна сила.
Формат курсу	очний
Теми	Теми курсу наведені в таблицях 1 та 2 (семестри 5 та 6, відповідно)
Підсумковий контроль, форма	Два усні іспити в кінці 5 та 6 семестрів, відповідно.
Пререквізити	Для вивчення курсу студенти потребують базових знань з дисциплін «Фізика», «Вища математика», «Філософія», «Загальна хімія», «Неорганічна хімія», «Органічна хімія», необхідних для сприйняття категоріального апарату курсу, проведення необхідних математичних перетворень та розуміння суті описуваних фізико-хімічних явищ.
Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу	Використовуються такі методи навчання: а) <i>словесні</i> – лекція, пояснення, консультація, бесіда, інструктаж (вступний та поточний під час виконання лабораторних робіт); б) <i>наочні</i> – ілюстрування лекційного матеріалу таблицями, схемами, графіками, фото- та відеоматеріалами; в) <i>практичні</i> – виконання лабораторних робіт, індивідуальних тестових, письмових контрольних та домашніх завдань.
Необхідне обладнання	<i>Лекційні та практичні (семінарські) заняття</i> – мультимедійна установка та ноутбук. <i>Лабораторні заняття</i> – обладнання навчальної Лабораторії фізичної хімії кафедри фізичної та колоїдної хімії (калориметр, кріостат, установка для дослідження рівноваги рідина / пара, термopара, рефрактометр, сталагмометр, установки для проведення кінетичних досліджень, кондуктометр, потенціометр, рН-метр / іономір, аналітичні, технічні та електронні ваги, поляриметр, витяжна шафа тощо)
Критерії оцінювання (окремо для кожного виду навчальної діяльності)	Оцінювання під час вивчення навчальної дисципліни «Фізична хімія» проводиться за 100-бальною шкалою. Бали нараховуються за наступним співвідношенням (% від максимальної підсумкової семестрової оцінки у 100 балів) залежно від семестру (5 / 6, відповідно), а саме: 22,5 - лабораторні роботи; 10,5 / 9 – колоквіуми; 4,5 – домашні контрольні завдання; 5 / 8 – тестові контрольні завдання; 7,5 / 6 – поточна контрольна робота; 50 – підсумковий семестровий іспит. Оцінювання результатів навчання студентів здійснюється у вигляді поточного та підсумкового контролю . Згідно з модульною системою, всі поточні види роботи розбито на 3 модулі. Кожен модуль передбачає виконання 3–4 лабораторних робіт, здачу 1 колоквіуму, написання 1–3 тестових контрольних завдань та 1 поточної контрольної роботи, виконання 1 домашнього контрольного завдання. При виставленні балів поточного контролю враховуються теоретичні знання студентів, продемонстровані ними під час опитувань в усній (колоквіуми, допуски до лабораторних робіт) і письмовій (тестові контрольні завдання) формі; практичні вміння студентів розв'язувати задачі за темами, що розглядаються (домашні контрольні завдання та поточна контрольна робота); письмові звіти про виконання лабораторних робіт. Результати поточної навчальної діяльності студентів протягом семестру оцінюються за 50-бальною шкалою. Поточне оцінювання з курсу “Фізична хімія” (5 семестр)

Поточні види роботи	Кількість оцінювань	Кількість балів	Максимальна сума балів за вид роботи
Лабораторні роботи	10	2,25	22,5
Колоквіуми	3	3,5	10,5
Домашні контрольні завдання	3	1,5	4,5
Тестові контрольні завдання	5	1	5
Поточна контрольна робота	3	2,5	7,5
Всього протягом семестру			50

Поточне оцінювання з курсу “Фізична хімія” (6 семестр)

Поточні види роботи	Кількість оцінювань	Кількість балів	Максимальна сума балів за вид роботи
Лабораторні роботи	10	2,25	22,5
Колоквіуми	3	3,0	9
Домашні контрольні завдання	3	1,5	4,5
Тестові контрольні завдання	8	1	8
Поточна контрольна робота	3	2	6
Всього протягом семестру			50

Звіти про поточні види роботи. Передбачається, що всі тестові та домашні контрольні завдання, поточні контрольні роботи та звіти про виконання лабораторних робіт будуть оформлені студентами у вигляді письмових звітів.

Політика виставлення балів. Очікується, що всі звіти будуть оформлені якісно та відповідно до вимог, озвучених викладачами на початку семестру під час вступних занять. Вимагається, що графічний матеріал буде оформлений з використанням міліметрового паперу чи графічного редактора *Origin*. Розв’язки задач мають наведені як можна більш детально та бути оформлені відповідно до загальноприйнятих норм та правил щодо представлення подібної інформації.

Оцінка за **лабораторну роботу** включає:

- оцінку за теоретичну підготовку з теми, якій відповідає дана лабораторна робота, та знання методики її виконання (усне опитування / допуск до виконання лабораторної роботи, максимально – 1,75 бали): 0 – незадовільно (повторне опитування); 0,5 – задовільно; 0,75 і 1,0 – посередньо; 1,25 і 1,5 – добре; 1,75 – відмінно);
- виконання роботи, оформлення звіту та захист звіту (максимально – 1 бал): 0 – незадовільно (обов’язкове доопрацювання), 0,5 – суттєві недоліки у проведенні експерименту, у розрахунках допущено значні помилки, графічні матеріали або звіт загалом оформлено неналежним чином; 0,75 – роботу виконано якісно, але у розрахунках / оформленні графічного матеріалу допущено незначні помилки; 1,0 – якісно виконано роботу та оформлено звіт.

Оцінка за **складання колоквіуму** (усна форма, 5 / 6 семестр, відповідно): 0 – незадовільно (повторне опитування); 1 / 0,5 – задовільно; 1,5 / 1,0 та 2,0 / 1,5 – посередньо, 2,5 / 2,0 та 3 / 2,5 – добре; 3,5 / 3 – відмінно).

Оцінка за **домашню контрольну роботу**: 0 – незадовільно (повторне виконання); 0,25 – задовільно; 0,5 та 0,75 – посередньо; 1,0 та 1,25 – добре; 1,5 – відмінно).

Оцінка за **тестове контрольне завдання** (10 тестових питань): по 0,1 балу за кожну правильну відповідь; у випадку відсутності правильних відповідей – повторне виконання.

Оцінка за **поточну контрольну роботу** (5 / 6 семестр, відповідно): 0 – незадовільно (повторне виконання); 0,75 / 0,5 – задовільно; 1,25 / 1,0 та 1,75 / 1,25 – посередньо; 2,0 / 1,5 та 2,25 / 1,75 – добре; 2,5 / 2 – відмінно).

Умови допуску студента до підсумкового контролю (іспиту):

– виконання та здача всіх письмових звітів про виконання передбачених поточних видів роботи;

– набрати ≥ 25 балів (у 100-бальній шкалі) за поточні види роботи.

Іспит: максимально – 50 балів;

Підсумкова оцінка: семестрові бали + оцінка за іспит (максимально – 100 балів)

Рейтингове підсумкове оцінювання знань студентів (у балах)

Оцінка ЄКТС	Оцінка в балах	Оцінка за національною шкалою	
		Екзамен	
A	90–100	5	відмінно
B	81–89	4	дуже добре
C	71–80		добре
D	61–70	3	задовільно
E	51–60		достатньо
FX	30–50	2	незадовільно
F	1–29		

Відвідування занять є важливою складовою навчання. Очікується, що студенти відвідають усі лекції, лабораторні та практичні (семінарські) заняття курсу. При цьому наголошується на недопустимості запізньовань на заняття, а також користування мобільним телефоном, планшетом чи іншими мобільними пристроями під час занять в цілях не пов'язаних з навчанням тощо.

Студенти мають інформувати викладача про неможливість відвідати заняття з поважної причини. У випадку хвороби поважність пропуску має бути підтверджена документально. У будь-якому випадку студенти зобов'язані дотримуватися усіх строків визначених для виконання/здачі звітів про всі поточні види робіт, передбачених курсом.

Пропущені лабораторні заняття мають бути відроблені в обов'язковому порядку в позаурочний час у найстисліші терміни. Час та порядок відпрацювання має бути попередньо узгоджений з викладачем та навчально-допоміжним персоналом лабораторії. Відпрацювання має бути зареєстроване у відповідному журналі лабораторії.

Академічна доброчесність. Очікується, що роботи/звіти студентів будуть виконані ними особисто та здані викладачеві протягом семестру у встановлений ним термін. Фабрикування чи використання чужих вихідних експериментальних даних, списування, втручання в роботу інших студентів тощо вважаються проявами академічної недоброчесності. Виявлення її ознак є підставою для незарахування викладачем (повторного виконання) відповідних видів роботи незалежно від масштабів плагіату чи обману.

Література та інші навчальні матеріали. Уся література та інші матеріали, які студенти не зможуть знайти самостійно, буде надана викладачем виключно в освітніх цілях без права її передачі третім особам. Студенти заохочуються до використання також іншої літератури та джерел, яких немає серед рекомендованих.

Перелік питань до іспитів

Іспит 1 (5 семестр)

I. Вступ

Фізична хімія і її місце в системі хімічної галузі знань. Методологічна роль фізичної хімії як теоретичної засади хімії. Методи фізичної хімії: термодинамічний,

статистичний, квантово-механічний. Співвідношення теоретичних і експериментальних методів дослідження. Основні розділи фізичної хімії.

II. Основи хімічної термодинаміки

Поняття системи. Ієрархія систем. Системний аналіз. Хімічні системи. Суть термодинамічного підходу до аналізу систем. Параметри (властивості) систем. Інтенсивні та екстенсивні параметри. Стан системи. Рівняння стану системи як аналітичний вираз взаємозалежності властивості системи. Рівняння стану ідеального газу. Реальні гази. Рівняння Ван-дер-Ваальса як рівняння стану ідеального газу. Асиметричність (однонаправленість) процесів. Рівновага в системах. Необоротність і оборотність процесів. Шлях процесу. Функції стану системи. Термічна рівновага. Нульовий закон (постулат) термодинаміки.

Енергія, теплота і робота. Види роботи. Робота розширення для різних процесів. Перший закон термодинаміки. Аналітичні вирази першого закону термодинаміки. Внутрішня енергія. Ентальпія. Тепловий ефект хімічних перстворень. Закон Гесса і висновки з нього. Стандартні стани. Стандартні теплові ефекти хімічних реакцій. Залежність теплового ефекту хімічних реакцій від температури. Формула Кірхгофа. Горіння як миттєвий необоротний процес. Залежність теплоємності від температури. Ступенева залежність теплоємності від температури. Розрахунок теплових ефектів хімічних реакцій. Енергія хімічного зв'язку. Оцінка теплот хімічних реакцій за енергіями зв'язків. Другий закон термодинаміки як основний постулат термодинаміки для опису асиметричних самочинних природних процесів. Аналітичне вираження II закону термодинаміки. Рівняння другого термодинамічного принципу для оборотних і необоротних процесів. Втрата теплоти в необоротних процесах. Зв'язана теплота Клаузіуса. Теорема Карно-Клаузіуса. Поняття про метод Каратеодорі. Абсолютна температура. Функція стану – ентропія як міра хаосу в системі. Зміна ентропії в різних процесах. Принцип асиметрії процесів в ізольованих системах і його формулювання з використанням функції стану ентропії. Ентропія і III закон термодинаміки.

Фундаментальні рівняння Гіббса. Характеристичні функції. Енергія Гельмгольца, Енергія Гіббса. Рівняння Масквелла. Вивід термодинамічних співвідношень за допомогою методу Масквелла. Розрахунок функцій стану: ентропії, внутрішньої енергії, ентальпії, енергії Гельмгольца і енергії Гіббса. Умови рівноваги і критерії самочинного протікання процесів за допомогою характеристичних функцій. Рівняння Гіббса-Гельмгольца. Робота і теплоти хімічних процесів. Максимальна робота оборотного хімічного процесу, як міра хімічного споріднення.

Хімічні потенціали, їх визначення і розрахунок. Рівновага і критерії направленості процесів за допомогою хімічних потенціалів. Повний потенціал. Хімічний потенціал ідеального і неідеального газів. Метод фугитивності. Вирахування фугитивності на основі експериментальних даних.

III. Розчини

Розчин як суміш речовин в різних фазових станах. Вираження складу розчину. Концентрація. Термодинаміка газових сумішей. Ідеальні розчини. Тиск насиченої пари над рідкими розчинами. Закон Рауля, його термодинамічне виведення. Відхилення від закону Рауля. Неідеальні розчини і їх властивості. Активність. Коефіцієнти активності та їх визначення. Безмежно розведені розчини. Розчинність твердих, рідких і газоподібних речовин. Зміна температури замерзання і температури кипіння розчинів. Криоскопія і ебуліоскопія. Плавлення і кристалізація в тонкому шарі і одержання високочистих речовин.

Явище осмосу. Термодинамічний вивід рівняння Вант-Гоффа. Межі застосування рівняння. Осмотична і мембранна рівновага. Термодинамічна класифікація розчинів. Функції зміщування для ідеальних і неідеальних розчинів. Гранично розведені розчини, Регулярні розчини і їх властивості. Бінарні системи. Парціальні мольні величини. Рівняння Гіббса-Дюгема.

IV. Фазова рівновага. Адсорбція

Фазові рівноваги в одно- і двокомпонентних системах. Діаграми стану води, сірки, фосфору і вуглецю. Фазові переходи першого роду. Рівняння Клапейрона-Клаузіуса і його застосування для фазових переходів першого роду. Розділення речовин шляхом перегонки. Закони Гіббса-Коновалова. Азеотропні суміші. Розділення азеотропних сумішей.

Рівновага в гетерогенних системах. Правило фаз Гіббса і його виведення. Двокомпонентні системи і їх аналіз на основі правила фаз Гіббса. Системи з утворенням твердих розчинів; з обмеженою розчинністю і з утворенням сполук з конгруентною й інконгруентною точками плавлення. Трикомпонентні системи. Трикутник Гіббса. Діаграми плавкості трьохкомпонентних систем.

Речовина в міжфазовій області. Інтерфаза. Шари Ленгмюра. Поверхневий тиск. Перенесення моношарів на тверду поверхню. Властивості плівок Ленгмюра-Блоджет. Поверхня твердих тіл. Опис шару адсорбату на твердій поверхні. Адсорбційна рівновага на поверхні твердих тіл. Адсорбція. Типи адсорбційної взаємодії. Ізотерми адсорбції газів. Рівняння Генрі. Рівняння ізотерми адсорбції Ленгмюра. Теорія адсорбції Поляні. Теорія полімолекулярної адсорбції БЕТ. Самоорганізовані шари на поверхні твердих тіл. Адсорбційне самовпорядкування низькомолекулярних сполук на твердій поверхні. Полімерні адсорбати на твердій поверхні. Імобілізація біологічно активних молекул на твердих підкладках. Епітаксія.

V. Вчення про хімічну рівновагу

Закон діючих мас. Термодинамічний вивід. Сучасне трактування. Способи вираження константи рівноваги і зв'язок між різними її видами. Хімічна рівновага в ідеальних і неідеальних системах. Коефіцієнти активності.

Ізотерма реакції Вант-Гоффа. Зміна енергії Гіббса і енергії Гельмгольца в хімічних реакціях. Принцип Бертло. Термодинамічне трактування хімічної спорідненості. Приведена енергія Гіббса та її використання для розрахунку хімічної рівноваги. Розрахунок виходу продуктів хімічних реакцій різних типів. Вихід продуктів при сумісному протіканні декількох хімічних реакцій.

Залежність константи рівноваги від температури. Рівняння ізобари й ізохори реакції, їх термодинамічний вивід. Теплоємності реагентів і їх використання в розрахунках констант рівноваги. Рівновага в гетерогенних системах. Особливості термодинамічного аналізу рівноважних аспектів в гетерогенних системах.

VI. Статистична термодинаміка

Основні постулати статистичної термодинаміки. Статистичне середнє значення макроскопічних величин. Ансамблі Гіббса. Метод функцій розподілу для канонічного та мікроскопічного ансамблів. Функції розподілу Масквелла і Максвелла-Больцмана. Використання функцій розподілу для розрахунку середніх швидкостей і енергій молекул в ідеальних газах. Канонічна функція розподілу Гіббса. Функції розподілу Фермі-Дірака і Бозе-Анштайна.

Статистичні вирази для основних термодинамічних функцій – внутрішньої енергії, ентропії, енергії Гіббса і енергії Гельмгольца. Їх розрахунок за допомогою статистичних сум за станами. Статистичний розрахунок ентропії. Формула Больцмана.

Молекулярна сума за станами і сума станів макроскопічної системи. Поступальна сума за станами. Складові частини ентропії, внутрішньої енергії і теплоємності, зумовлені поступальним рухом.

Обертальна сума за станами для жорсткого ротатора. Орто- і пара-водень, їх термодинамічний опис. Коливальні суми за станами для гармонічного осцилятора. “Заморожування” коливальних ступенів свободи.

Розрахунок константи рівноваги хімічних реакцій в ідеальних газах методом статистичної термодинаміки.

VII. Елементи термодинаміки необоротних процесів

Опис необоротних процесів методом термодинаміки. Потoki, сили. Феноменологічні закони для швидкості процесів. Відкриті і закриті системи. Необоротні процеси і продукування ентропії. Залежність швидкості продукування ентропії від узагальнюючих потоків і сил. Стаціонарний стан системи і теорема Пригожина. Потoki при сумісній дії декількох сил. Співвідношення Онзагера і їх застосування в термодинаміці необоротних процесів. Термодифузія і її опис методами термодинаміки необоротних процесів.

Іспит 2 (6 семестр)

I. Формальна кінетика

Кінетичний аналіз хімічних систем. Хімічна кінетика – вчення про швидкість хімічного перетворення і шляхи його здійснення. Основні поняття хімічної кінетики.

Константа швидкості хімічної реакції – питома швидкість. Кінетичні порядки хімічних реакцій і стехіометричні коефіцієнти рівняння реакції і їх зв'язок з кінетичними порядками. Молекулярність. Класифікація реакцій.

Основний постулат хімічної кінетики. Залежність швидкості хімічної реакції від концентрації реагуючих речовин. Реакції простих типів. Односторонні реакції нульового, першого, другого, третього і дробового порядків. Методи визначення кінетичного порядку хімічних реакцій. Диференціальні інтегральні методи. Реакції складних типів. Принципи незалежності протікання елементарних стадій моделювання кінетики складних реакцій. Кінетичний аналіз оборотних, паралельних і послідовних реакцій першого порядку. Кінетичні криві нагромадження кінцевих і проміжних продуктів. Принцип стаціонарності Боденштейна і область його застосування.

Ланцюгові реакції. Елементарні процеси зародження, продовження, розгалуження і обриву кінетичних ланцюгів. Кінетичні і енергетичні ланцюги. Довжина ланцюга. Застосування принципу стаціонарності для кінетичного аналізу ланцюгової реакції синтезу фосгену.

Розгалужені ланцюгові реакції. Довжина віток розгалуження. Межі самозапалення реакційної суміші. Півострів спалаху. Граничні явища в розгалужених реакціях. Густо- і рідкорозгалужені ланцюги. Кінетичний аналіз реакції окиснення водню. Тепловий вибух і умови самозапалення на третій межі значень тиску і температури.

Реакції в потоці. Вплив типу реактора на швидкість хімічних перетворень. Кінетичний аналіз реакцій першого порядку в реакторах ідеального витіснення і реакторі ідеального перемішування. Режими протікання реакції.

Залежність швидкості хімічних реакцій від температури. Правило Вант-Гоффа і рівняння Арреніуса. Крива і поверхня потенціальної енергії хімічного перетворення. Класична, істинна та ефективна енергія активації. Квантово-механічний розрахунок поверхні потенціальної енергії. Оцінка величини енергії активації, Розрахунок енергії хімічних реакцій на основі експериментальних даних.

II. Молекулярна динаміка

Теорія співударів в хімічній кінетиці. Ефективний діаметр зіткнення. Активні зіткнення і їх частка від загального числа зіткнень. Розрахунок констант швидкості бімолекулярної реакції. Мономолекулярні реакції в теорії активних зіткнень. Аналіз мономолекулярних реакцій за Ліндеманом. Співставлення результатів розрахунку з експериментальними даними. Покращення схеми Ліндемана Хіншельвудом. Зображення молекули моделлю сукупності гармонічних осциляторів. Розрахунок констант швидкостей мономолекулярних реакцій Каселем і Слейтером.

Метод перехідного стану (активованого комплексу). Структура і енергія активованого комплексу. Статистичний розрахунок константи швидкості. Основні наближення в теорії активованого комплексу. Трансмісійний множник. Ентропія активації. Застосування теорії активованого комплексу до бі- і мономолекулярних реакцій. Тримолекулярні реакції. Застосування теорії активованого комплексу до опису тримолекулярних реакцій з участю оксиду азоту (II).

Кінетичний аналіз реакцій в розчині. Специфічна і неспецифічна сольватація. Дуже швидкі, швидкі, "нормальні" і дуже повільні реакції. Вплив іонної сили на швидкість хімічних перетворень в розчині. Рівняння Б'єррум-Бренстеда. Реакції переносу електронів. Ефект тунелювання. Трикутна форма потенціального бар'єру. Формула Гамова. Кореляційні співвідношення. Рівняння Гамета, Тафта. Ефект "клітки".

Фотохімічні реакції. Фотохімічно активні частинки. Фотохімічне збудження частинок. Променева і безпроменева дезактивація активних частинок. Закон фотохімічної еквівалентності Анштайна. Квантовий вихід. Механізм фотохімічного синтезу HCl. Визначення кінетичних параметрів у фотохімічних перетвореннях.

III. Каталіз

Загальні принципи каталізу. Роль каталізу в хімії. Промислові каталітичні процеси. Гомогенний каталіз. Кислотно-основний каталіз. Специфічний кислотно-основний каталіз. Функція кислотності. Нуклеофільний і електрофільний каталіз. Кінетика реакцій загального кислотного каталізу. Каталіз комплексними сполуками перехідних металів. Гомогенні реакції гідрування, їх кінетика і механізм. Каталітичне окиснення етилену комплексами сполук паладію. Нанокаталіз.

Ферментативний каталіз. Хімічна природа ферментів. Класифікація ферментів.

Вплив температури і величини рН на швидкість ферментативних реакцій. Субстратна специфічність ферментів. Активні і адсорбційні центри ферментів. Кінетика ферментативних реакцій. Використання ферментів.

Гетерогенний катализ. Визначення швидкості гетерогенної каталітичної реакції. Питома активність. Явище отруєння катализаторів. Активність і селективність катализаторів. Активні і адсорбційні центри гетерогенних катализаторів. Активаційна енергія гетерогенних каталітичних реакцій. Неоднорідність поверхні катализатора. Нанесені катализатори. Оксидні катализатори. Класифікація каталітичної активності. Кислотні і основні центри. Центри Люїса і центри Бренстеда.

Біфункціональні катализатори. Механізм каталітичного перетворення вуглеводнів. Металічні катализатори. Вплив типу поверхні і кристалографічного типу грані монокристалічних металевих катализаторів. Активність поверхні монокристалів платини. Терасоподібні поверхні сколу і їх активність. Роботи Саморджая і його школи. Нанокластери в каталізі.

Механізм каталітичних реакцій. “Вулканоподібна” залежність активності катализатора від енергії сорбційного зв’язку частинки адсорбату – поверхневі атоми. Реакція окиснення оксиду вуглецю (II) і її механізм за Глі-Ріділом і Ленгмюром-Хіншельвудом. Глибоке окиснення вуглеводнів. Гідралічна модель складної каталітичної реакції. Приклади реакції з лімітуючою стадією десорбції – транспорту вихідних речовин до поверхні катализатора (гідрування етилену), хімічної реакції окиснення оксиду вуглецю(II). Роль процесів повного каталітичного окиснення в очистці газових викидів хімічних виробництв і двигунів внутрішнього згорання.

IV. Електрохімія. Рівновага в розчинах електролітів

Хімічний і електрохімічний способи здійснення окисно-відновних реакцій. Теоретична і прикладна електрохімія. Визначення електрохімії. Електрохімічні ланцюги.

Основні положення про будову розчинів електролітів. Теорія слабких електролітів Арреніуса і межі її застосування. Енергія кристалічної ґратки. Енергія іон-іонної і іон-дипольної взаємодії. Процеси розчинення. Енергія сольватації. Первинні і вторинні оболонки сольватації. Деструкуючий вплив електролітів. Активність електролітів. Середній й іонні коефіцієнти активності. Модель іонної атмосфери Дебая-Хюккеля. Потенціал іонної атмосфери. Зв’язок коефіцієнтів активності з іонною силою розчинів електролітів. Перше, друге і третє наближення теорії Дебая-Хюккеля.

Нерівноважні явища в розчинах електролітів. Дифузійний і міграційний потоки. Дифузійний потенціал. Питома і еквівалентна електропровідність. Числа переносу і методи її визначення. Рухливості іонів, граничні рухливості. Закон Кольрауша. Залежність рухливості, еквівалентної електропровідності і чисел переносу від концентрації. Теорія Дебая-Хюккеля-Онзагера. Електрофоретичний і релаксаційний ефекти. Залежність граничної рухливості від радіуса іону і температури. Ефекти Віна – перший і другий. Ефект Дебая-Фалькенгагена. Особливі випадки електропровідності розчинів електролітів. Сольватовані електрони.

V. Електрохімічні ланцюги

Поняття електрохімічного потенціалу і умови рівноваги на межі металічний електрод-розчин електроліту. Зовнішній, поверхневий і внутрішній електричний потенціал. Вольта- і гальвані потенціали. Рівняння Гіббса-Гельмгольца і Нернста. Електродний потенціал. Класифікація електродів і електрохімічних ланцюгів. Проблема Вольта і абсолютного скачку потенціалу. Величина і знак електродного потенціалу. Подвійний електричний шар. Адсорбційний метод вивчення подвійного шару. Електрокапілярні явища.

Вивчення електрокапілярності Ліпманом. Ємність подвійного електричного шару. Диференціальна і інтегральна ємності. Інтерпретація одержаних даних. Основні модельні уявлення про структуру іонного подвійного шару.

Густина струму як міра швидкості електродних реакцій; поляризація електродів. Стадії електродного процесу. Три основні типи дифузійної кінетики. Теорія уповільненої стадії розряду. Фізичний зміст енергії активації в умовах сповільнення розряду-іонізації. Струми обміну і перенапряга. Рівняння Батлера-Фольмера та рівняння Тафеля. Електровідновлення аніонів на ртутному електроді.

Корозія. Класифікація видів корозії. Суха, волога, мокра корозія. Швидкість корозії.

	<p>Механізм корозії. Залежність величини корозії від рН середовища. Діаграма Пурбе на прикладі корозії заліза. Пасивація металів. Потенціал Фладе. Захист металів від корозії з використанням металічних, лакофарбових та композиційних покриттів, інгібіторний і протекторний захист. Механізм дії інгібіторів і захисна дія лакофарбових покриттів. Прикладна електрохімія. Електрохімічні виробництва. Гідрометалургія і електрокристалізація металів. Виробництво алюмінію та магнію. Електроорганічні синтези. Синтез адіпонітрилу, напівпродуктів для виробництва пластмас, гуми, вітамінів.</p> <p>Хімічні джерела струму. Первинні і вторинні джерела струму. Сухі елементи і акумулятори. Паливні елементи. Електрохімія і екологія. Моніторинг повітря, води, ґрунту електрохімічними методами, вольтаметрією, потенціометрією, кондуктометрією. Хемо- та біосенсорика. Технологія очистки стічних вод, що містять іонізовані неорганічні і органічні шкідливі викиди. Хемотроніка – наука про запис, зберігання і відтворення інформації методами електрохімії.</p>
Опитування	Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенню курсу.

Таблиця 1. Схема курсу (5 семестр)

Тиждень	Тема, план, короткі тези	Форма діяльності	Література. Ресурси в інтернеті*	Завдання**	Термін виконання
1	Предмет фізичної хімії. Хімічні перетворення та фізичні явища. Розділи фізичної хімії. Методи фізико-хімічного дослідження. Термодинаміка. Її суть. Світоглядні проблеми	Лекція. Лабораторні заняття.	[1–8]		Вересень
2	Система. Стан системи. Енергія. Системи та їхні види. Стан системи. Процеси. Оборотність і необоротність. Енергія, теплота, робота. Енергія, речовина і час	Лекція. Лабораторні заняття. Практичне заняття.	[1–8], [16, 18]		Вересень
3	Перший закон термодинаміки. Термічна рівновага. Нульовий закон термодинаміки. Перший закон термодинаміки. Робота розширення та стиснення ідеального газу. Ентальпія	Лекція.	[1–8], [16, 18]		Вересень
3	Теплові ефекти хімічних реакцій. Термохімія. Закон Гесса. Енергія хімічних зв'язків та ентальпія реакції. Залежність теплового ефекту від температури. Формула Кірхгофа. Теплоємність твердих тіл	Лекція. Лабораторні заняття	[1–8], [16, 18]		Вересень
4	Другий та третій закони термодинаміки. Принцип Каратеодорі. Ентропія як критерій рівноваги та самовільного проходження процесів в ізольованих системах. Зміна ентропії в рівноважних процесах.	Лекція. Лабораторні заняття. Практичне заняття.	[1–8], [16, 18]	Т-1	Вересень
5	Застосування другого закону до ізотермічних систем. Енергія Гельмгольца. Формулювання спрямованості процесів. Енергія Гіббса як критерій самочинного проходження процесів і рівноваги. Характеристичні функції	Лекція.	[1–8], [16, 18]		Вересень
5	Енергія Гіббса і фазова рівновага. Міжфазова рівновага в однокомпонентних системах. Рівняння Клапейрона-Клаузіуса. Фазові діаграми однокомпонентних систем. Фазові переходи другого виду	Лекція. Лабораторні заняття	[1–8], [16, 18]	Кл-1	Вересень
6	Фундаментальне рівняння Гіббса. Відкриті багатокомпонентні системи. Хімічні потенціали. Реальні системи. Леткість і активність. Розрахунок леткості	Лекція. Лабораторні заняття Практичне заняття.	[1–8], [16, 18]	КР-1 ДЗ-1 Т-2	Жовтень
7	Фазова рівновага в багатокомпонентних системах. Рівноважний стан в багатокомпонентних системах.	Лекція.	[1–8], [32–40]		Жовтень

	Фазові переходи I і II роду. Досягнення низьких температур. Правило фаз Гіббса. Діаграми стану однокомпонентних систем				
7	Двокомпонентні системи. Бінарні системи. Діаграми стану. Системи без хімічної взаємодії. Системи з хімічною взаємодією між компонентами. Надчисті речовини. Зонне топлення	Лекція. Лабораторні заняття	[1–8], [32–40]		Жовтень
8	Трикомпонентні системи. Способи зображення складу трикомпонентних систем. Системи з простою евтектикою без утворення сполук. Потрійні стопи. Рівновага у водних розчинах солей. Розчинність трьох рідин і розшарування системи	Лекція. Лабораторні заняття. Практичне заняття.	[1–8], [32–40]	T-3	Жовтень
9	Рівновага в розчинах. Розчини, склад розчинів. Молекулярні теорії розчинів. Парціальні мольні величини. Рівняння Гіббса-Дюгема. Термодинаміка процесів змішування. Тиск насиченої пари рідких розчинів. Закони Рауля та Генрі	Лекція.	[1–8], [32–40]		Жовтень
9	Діаграми стану рідких розчинів. Рівновага рідина–пара в бінарних системах. Ебуліоскопія. Азеотропні суміші. Коефіцієнт розподілу речовини в системі з двома рідинами, які не змішуються. Ректифікація. Перегонка з водяною парою	Лекція. Лабораторні заняття	[1–8], [32–40]		Жовтень
10	Властивості розбавлених розчинів. Ідеальна розчинність твердих тіл. Виділення твердого розчинника з розчину. Кріоскопія. Осмотичний тиск. Термодинаміка осмотичного тиску	Лекція. Лабораторні заняття. Практичне заняття.	[1–8], [32–40]	Кл-2 КР-2 ДЗ-2	Листопад
11	Хімічна рівновага. Умови хімічної рівноваги. Закон діючих мас. Рівновага реакцій у газовій фазі	Лекція.	[1–8]		Листопад
11	Умови перебігу хімічних реакцій. Вплив температури та тиску на константу хімічної рівноваги. Хімічна рівновага в гетерогенних системах. Стандартна мольна енергія Гіббса. Теза теорема Нернста та хімічна рівновага	Лекція. Лабораторні заняття.	[1–8]		Листопад
12	Речовина на межі рідина газова фаза. Шари Ленгмюра-Блоджет. Речовина в міжфазовій області. Інтерфаза. Шари Ленгмюра. Поверхневий тиск. Перенесення моношарів на тверду поверхню. Властивості плівок Ленгмюра-Блоджет	Лекція. Лабораторні заняття. Практичне заняття.	[1–8], [20, 21], [32–40]	T-4	Листопад
13	Адсорбційна рівновага на поверхні твердих тіл. Адсорбція. Типи адсорбційної взаємодії. Ізотерми адсорбції газів. Рівняння Генрі. Рівняння ізотерми адсорбції Ленгмюра. Теорії полімолекулярної адсорбції Поляні та БЕТ.	Лекція.	[1–8], [32–40]		Листопад
13	Самоорганізовані шари на поверхні твердих тіл. Адсорбційне самовпорядкування низькомолекулярних сполук на твердій поверхні. Полімерні адсорбати на твердій поверхні. Імобілізація біологічно активних молекул на твердих підкладах. Епітаксiale вирощування впорядкованих шарів. Умови та механізм росту епітаксiale шарів.	Лекція. Лабораторні заняття	[1–8], [20, 21]		Листопад
14	Основи статистичної термодинаміки. Макроскопічна та мікроскопічна фізика. Метод гамільтоніана в класичній механіці. Функції розподілу в фазовому просторі. Рівняння Ліувіля. Ергодична гіпотеза. Мікроканонічний ансамбль.	Лекція. Лабораторні заняття. Практичне заняття.	[1–8], [17, 19]	T-5	Грудень
15	Рівноважні ансамблі та термодинаміка. Канонічний ансамбль. Зв'язок статистичної механіки та термодинаміки. Великий канонічний ансамбль. Хімічний потенціал. Ідеальні системи. Больцманівський газ. Молекулярна структура та термодинаміка.	Лекція.	[1–8], [17, 19]		Грудень

15	Функції розподілу. Функція розподілу молекул за енергіями. Визначення молекулярної суми станів. Проблема від'ємних температур. Сума станів системи в класичній і квантовій статистиках. Бозони та ферміони у відкритій системі	Лекція. Лабораторні заняття.	[1–8], [17, 19]		Грудень
16	Сума станів і рівноважна термодинаміка. Сума станів і термодинамічні функції. Хімічний потенціал і константа рівноваги. Розрахунок термодинамічних функцій одно-, дво- і багатоатомних ідеальних газів	Лекція. Практичне заняття.	[1–8], [17, 19]	КР-3 ДЗ-3	Грудень
16	Термодинамічне обґрунтування нерівноважності. Типи макроскопічних систем і необоротних процесів. Термодинамічний опис нерівноважних процесів. Локальний баланс ентропії. Співвідношення Онсагера. Використання феноменологічної теорії для опису процесів різних типів.	Лекція. Лабораторні заняття.	[1–8], [19]	Кл-3	Грудень

Примітки: * Див. Література для вивчення дисципліни.
 ** Кл – колоквиум; ДЗ – домашня контрольна робота; Т – тестове контрольне завдання; КР – поточна контрольна робота.

Таблиця 2. Схема курсу (6 семестр)

Тижень день	Тема, план, короткі тези	Форма діяльності	Література. Ресурси в інтернеті*	Завдання**	Термін виконання
1	Швидкість хімічних реакцій. Формальна кінетика. Кількісна характеристика швидкості хімічних перетворень. Основний постулат хімічної кінетики. Фактори, що впливають на швидкість хімічних реакцій. Класифікація хімічних реакцій	Лекція. Лабораторні заняття. Практичне заняття.	[1–7, 9, 10], [22, 23]		Лютий
2	Кінетика реакцій простих типів. Реакції нульового порядку. Необоротні реакції. Реакції другого порядку. Необоротні реакції n-го порядку. Методи визначення порядку реакції	Лекція. Лабораторні заняття.	[1–7, 9, 10], [22, 23]		Лютий
3	Кінетика складних реакцій. Особливості кінетичного аналізу складних реакцій. Оборотні реакції. Паралельні реакції. Кінетичний аналіз послідовних реакцій. Реакції змінного кінетичного порядку. Ланцюгові реакції	Лекція. Практичне заняття.	[1–7, 9, 10], [22, 23]		Лютий
3	Кінетика гомогенних реакцій в потоці. Відкриті системи. Диференціальне рівняння швидкості. Режим витіснення і режим перемішування. Кінетика односторонніх реакцій першого порядку в реакторі ідеального витіснення. Гомогенні хімічні перетворення в режимі ідеального перемішування	Лекція. Лабораторні заняття	[1–7, 9, 10], [22, 23]		Березень
4	Вплив температури на швидкість хімічних реакцій. Залежність константи швидкості від температури. Ефективна, класична та істинна енергія активації, їхнє визначення. Поверхня потенціальної енергії. Перехідний стан.	Лекція. Лабораторні заняття.	[1–7, 9, 10], [22, 23]		Березень
5	Ланцюгові реакції. Нерозгалужені ланцюги. Особливості ланцюгових реакцій. Матеріальні і енергетичні ланцюги. Основні стадії ланцюгових реакцій. Довжина ланцюга. Швидкість ланцюгової реакції. Кінетика синтезу фосгену. Ефективна E_d .	Лекція. Практичне заняття.	[1–7, 9, 10], [22, 23]	Т-1 Т-2	Березень
5	Ланцюгові реакції. Розгалужені ланцюги. Розгалужені ланцюги. Вироджене розгалуження. Довжина віток розгалуження. Кінетика реакції окиснення водню. Граничні явища в ланцюгових реакціях. Ланцюговий та тепловий вибух	Лекція. Лабораторні заняття	[1–7, 9, 10], [22, 23]		Березень
6	Фотохімічні реакції. Закони фотохімії. Основні стадії фотохімічної реакції. Фотосенсбілізація і	Лекція.	[1–7], [22, 23, 26]		Березень

	флуоресценція. Люмінесценція. Швидкість фотохімічних реакцій. Фотохімія і проблеми енергетики	Лабораторні заняття			
7	Молекулярна динаміка. Основи теорії зіткнень. Основні поняття. Кількість зіткнень і швидкість реакції. Розрахунок константи швидкості бімолекулярної реакції. Стеричний множник	Лекція. Практичне заняття.	[1–7], [32–40]	КР-1 ДЗ-1 Т-3	Березень
7	Мономолекулярні реакції в теорії активних зіткнень. Трактуювання мономолекулярних реакцій Ліндеманом. Теорія Гіншельвуда. Поліпшення теорії мономолекулярних реакцій Каселем. Теорія Слейтера. Тримолекулярні реакції в газовій фазі	Лекція. Лабораторні заняття	[1–7], [32–40]	Кл-1	Березень
8	Теорія активованого комплексу. Перехідний стан і координата реакції. Статистичний розрахунок константи швидкості. Термодинамічний аспект теорії перехідного стану	Лекція. Лабораторні заняття.	[1–7], [32–40]		Квітень
9	Кінетика реакцій у розчині. Швидкості хімічних реакцій у розчині. Реакції між іонами. Сольові ефекти. Вплив розчинника на реакції електронного обміну. Ефект “клітки”. Кореляційні співвідношення за впливом обміну	Лекція. Практичне заняття.	[1–7], [32–40]		Квітень
9	Гомогенний каталіз. Кінетика гомогенних каталітичних реакцій. Кислотно-основний каталіз у водних розчинах. Функції кислотності. Каталіз комплексними сполуками перехідних металів	Лекція. Лабораторні заняття	[1–7], [23]		Квітень
10	Ферментативний каталіз. Хімічна природа ферментів. Активність і механізм дії ферментів. Кінетика ферментативних реакцій. Алостеричний механізм регуляції. Використання ферментів	Лекція. Лабораторні заняття.	[1–7], [32–40]		Квітень
11	Автокаталітичні та автоколивальні реакції. Автокаталіз. Осциляція в гомогенних системах. Осциляція в гомогенних системах з утворенням нової фази. Осциляція в гетерогенних системах	Лекція. Практичне заняття.	[1–7], [25], [32–40]	Т-4 Т-5	Квітень
11	Кінетика динамічних систем. Детермінований хаос. Загальні поняття математичного формалізму при описі динамічних систем. Математичні моделі коливальних процесів. Біфуркаційний аналіз. Бістабільність. Детермінований хаос. Детерміновано хаотичні режими в хімії	Лекція. Лабораторні заняття.	[1–7], [24], [32–40]		Квітень
12	Швидкість гетерогенних каталітичних реакцій. Кінетична і дифузійна області гетерогенного процесу. Роль сорбційних процесів та енергія активації гетерогенної каталітичної реакції. Поверхнева дифузія і бічна взаємодія на поверхні адсорбенту.	Лекція. Лабораторні заняття.	[1–7], [32–40]		Травень
13	Поверхневі центри в гетерогенному каталізі. Поняття активного центру у гетерогенному каталізі. Теорії мультиплетів та активних центрів. Дефекти поверхні й активність гетерогенного каталізатора. Електронний фактор у каталізі. Роль кислотних і основних центрів у каталітичних реакціях	Лекція. Практичне заняття.	[1–7], [32–40]	КР-2 ДЗ-2 Т-6	Травень
13	Рівновага в розчинах електролітів. Електрохімія. Електрохімічні системи. Іонні рівноваги в розчинах електролітів. Іон-дипольна взаємодія в розчинах електролітів. Структура розчинів електролітів	Лекція. Лабораторні заняття	[1–7], [27–30]	Кл-2	Травень
14	Теорія сильних електролітів. Активність і коефіцієнт активності електролітів. Розподіл іонів у розчині і потенціал іонної атмосфери. Теорія Дебая-Гюккеля. Асоціація іонів	Лекція. Лабораторні заняття.	[1–7], [27–30]		Травень
15	Нерівноважні явища в розчинах електролітів. Процеси перенесення. Дифузія і міграція іонів. Електропровідність розчинів електролітів. Числа	Лекція. Практичне заняття.	[1–7], [27–30]	КР-3 ДЗ-3 Т-7	Травень

	перенесення. Залежність рухливості, електропровідності та чисел перенесення від концентрації			Т-8	
15	<i>Електрохімічна термодинаміка.</i> Рівновага на межі електрод-розчин. Електродний потенціал. Класифікація електродів і електрохімічних ланцюгів. Термодинаміка гальванічного елемента. Іоноселективні і ферментні електроди	Лекція. Лабораторні заняття.	[1–7], [27–30]		Травень
16	<i>Кінетика електрохімічних реакцій.</i> Швидкість електрохімічної реакції. Поляризація електродів. Перенапруга. Швидкість реакції перенесення заряду. Рівняння Тафеля. Вплив подвійного електричного шару на швидкість стадії розряду. Кінетика відновлення аніонів. Електрокаталіз і сповільнення електродних реакцій. Молекулярні теорії елементарного акту розряду-іонізації. Теорія реорганізації молекул розчинника	Лекція.	[1–7], [31]		Травень
16	<i>Практичне застосування електродних процесів.</i> Електрохімічне виробництво хімічних продуктів. Корозія та антикорозійний захист. Гідроелектрометалургія та електрохімічна обробка металів. Електрохімія і екологія. Хемотроніка. Хімічні джерела струму	Лекція. Лабораторні заняття.	[1–7], [32–40]	Кл-3	Червень

Примітки: * Див. Література для вивчення дисципліни.
 ** Кл – колоквіум; ДЗ – домашня контрольна робота; Т – тестове контрольне завдання; КР – поточна контрольна робота.