

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Ордена Ленина и Ордена Октябрьской Революции Институт геохимии и  
аналитической химии им. В.И. Вернадского Российской академии наук  
(ГЕОХИ РАН)

ПРИНЯТО

Ученым советом ГЕОХИ РАН

Протокол № 8 от 22 октября 2014 г.

УТВЕРЖДАЮ

Зам. директора ГЕОХИ РАН

Док.н. Колотов В.П.

22 октября 2014 г.



**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
**«Современная физическая химия»**

**Направления подготовки:** 04.06.01 - Химические науки

*(указывается код и наименование направления подготовки)*

**Направленности (профили) подготовки:** 02.00.04 «Физическая химия»

*(наименование направленности подготовки)*

**Квалификация:** Исследователь. Преподаватель-исследователь

**Форма обучения:** очная

**Вид итогового контроля:** Экзамен

*(Зачет/Дифференцированный зачет/Экзамен)*

**Москва 2014**

Рабочая программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки (уровень кадров высшей квалификации). Приказ Минобрнауки РФ №869 от 30 июля 2014г. (зарегистрирован в Минюсте России 20 августа 2014г., регистрационный № 33718).

## 1. Цели и задачи освоения дисциплины

Целью изучения дисциплины является приобретение фундаментальных знаний и практических навыков, необходимых для профессиональной научно-исследовательской, инновационной и образовательной деятельности в области физической химии; углубленное изучение важнейших положений общей, химической и статистической термодинамики формирование обобщающей теоретической базы для изучения фундаментальных основ физической химии и возможности их использования на практике.

Задачи дисциплины:

- формирование у обучающихся современных представлений о физической химии, ее роли и значимости в сопоставлении с другими химическими науками;
- освоение навыков теоретического анализа результатов экспериментальных исследований в области физической химии;
- освоение методов планирования эксперимента и обработки собственных исследований;
- обучение умению систематизировать и обобщать результаты собственных исследований в сопоставлении с известными литературными данными;
- обучение умению использовать в работе программно-аппаратные средства для изучения физико-химических процессов;
- обучение умению оформлять результаты собственных исследований в виде публикаций, отчетов, докладов.

## 2. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП

Дисциплина «Современная физическая химия» входит в вариативную часть ООП и является обязательной для обучения аспирантов, обучающихся по профилю 02.00.04. Дисциплина «Физическая химия» необходима для подготовки к сдаче кандидатского экзамена по специальности.

## 3. Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Знать: основные методы научно-исследовательской работы.

Уметь: выделять и систематизировать основные идеи в научных публикациях; критически оценивать информацию вне зависимости от источника.

Владеть: навыками поиска, анализа и систематизации информации по теме исследования; навыками выбора методов и средств решения задач исследования.

Для освоения дисциплины «Физическая химия» требуются знания и умения, приобретенные обучающимися в результате освоения ряда дисциплин (или разделов дисциплин), таких как:

- Общая неорганическая химия.
- Квантовая химия.
- Строение молекул.
- Аналитическая химия.

#### 4. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

Код компетенции	Содержание компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине
<b>УК-1</b>	способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	<b>Знать:</b> методы критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методы генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях. <b>Уметь:</b> анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач. <b>Владеть:</b> навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях.
<b>УК-5</b>	способность планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития.	<b>Знать:</b> содержание процесса целеполагания профессионального и личностного развития, его особенности и способы реализации при решении профессиональных задач, исходя из этапов карьерного роста и требований рынка труда. <b>Уметь:</b> осуществлять личностный выбор в различных профессиональных и морально-ценностных ситуациях, оценивать последствия принятого решения и нести за него ответственность перед собой и обществом. <b>Владеть:</b> приёмами и технологиями целеполагания, целереализации и оценки результатов деятельности по решению профессиональных задач.
<b>ОПК-1</b>	способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных	<b>Знать:</b> современные способы использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности <b>Уметь:</b> выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-

	методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	теоретические методы исследования.
<b>ОПК-2</b>	готовность организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук	<b>Знать:</b> основные принципы организации работы в коллективе и способы разрешения конфликтных ситуаций/ <b>Уметь:</b> планировать научную работу, формировать состав рабочей группы и оптимизировать распределение обязанностей между членами исследовательского коллектива.
<b>ПК-4</b>	способность и готовность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов в области физической химии	<b>Знать:</b> современное состояние науки в области физической химии. <b>Владеть:</b> методами планирования, подготовки, проведения научно-исследовательской работы по направленности (02.00.04 Физическая химия)

## 5. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоёмкость дисциплины «Физическая химия» составляет 6 зачётных единиц (216 часов), из которых 72 часа составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (36 часа занятия лекционного типа и 36 часов – занятия семинарского типа), 144 часа составляет самостоятельная работа обучающегося (из них – 36 часов – подготовка и сдача экзамена).

Вид работы	Часы
<b>Общая трудоёмкость</b>	216
<b>Аудиторная работа:</b>	72
лекции	36
семинары	36
<b>Лабораторные работы (ЛР)</b>	–
<b>Самостоятельная работа</b>	144
<b>Всего:</b>	216
<b>Вид итогового контроля</b>	экзамен

## Содержание дисциплины, виды учебных занятий и формы их проведения

№ раздела	Наименование раздела	Всего	Аудиторная работа		Самостоятельная работа
			Лекции	Семинары (по	

				<b>тематике лекций)</b>	
1	Строение вещества	68	16	16	36
2	Термодинамика	60	10	10	40
3	Кинетика и катализ	52	10	10	32
	Экзамен	36			36
	ИТОГО	216	36	36	144

### Лекции

№ раздела	Наименование раздела	Аудиторная работа (час.) (лекции+семинары по тематике лекций)	Содержание раздела
1	Строение вещества	16+16	<p>1.1. Основные особенности моделирования состояния молекул методами классической и квантовой механики. Соотношение свойств молекул и свойств образованных ими веществ.</p> <p>1.2. Основные операторы физических величин, коммутационные соотношения между ними и соотношения неопределенностей.</p> <p>1.3. Эволюция состояний во времени. Взаимосвязь временного и стационарного уравнений Шредингера. Переходы между стационарными состояниями под действием возмущения. Эйнштейновское описание переходов. Спектр, форма линии, основные типы уширения линий.</p> <p>1.4. Основные элементарные процессы, протекающие при взаимодействии электромагнитного излучения с молекулами. Поглощение, самопроизвольное и вынужденное испускание, рассеяние и комбинационное рассеяние излучения. Принципы современных методов спектральных исследований молекулярных систем.</p> <p>1.5. Шкала энергетических и временных характеристик основных внутримолекулярных процессов. Принципы гамма-резонансной (мессбауэровской) спектроскопии; особенности ее приложения к химическим задачам. Упругое рассеяние частиц молекулой. Соотношения де Бройля. Принципиальные основы электронографического, нейтроно- и рентгенографического анализа строения молекул.</p> <p>1.6. Фото- и рентгено-электронная спектроскопия. Орбитальная модель молекулы. Автоионизационные состояния атомов и молекул. Оже-спектроскопия. Ионизационные методы анализа строения молекул.</p> <p>1.7. Адиабатическое приближение. Поверхности потенциальной энергии и их особые точки. Молекулярные</p>

		<p>постоянные, характеризующие строение потенциальных поверхностей. Энергетический спектр двухатомной молекулы.</p> <p>1.8. Электрический и магнитный моменты молекулы. Мультипольные моменты. Принципы экспериментального определения дипольных моментов. Дипольный момент молекулы и показатель преломления среды.</p> <p>1.9. Спин. Физико-химические явления, связанные со спином. Связь спина и статистики. Принцип Паули. Классификация электронных состояний молекулы.</p> <p>1.10. Вариационный метод и его приложения: приближение Хартри-Фока, метод конфигурационного взаимодействия. Теорема Купманса. Первые потенциалы ионизации и методы их определения.</p> <p>1.11. Орбитальная модель молекулы и <math>e-2e</math> процессы. Простейшие модели молекулярных орбиталей и описание химической связи. Ограниченность орбитальной модели. Методы учета электронной корреляции.</p> <p>1.12. Простейшие модели электронного строения молекул. Химическая связь и электронные распределения. Свойства электронной плотности молекулы. Электронная плотность и геометрия молекул. Теория Гиллеспи.</p> <p>1.13. Колебательные состояния молекул. Гармоническая и ангармонические модели сил в молекуле. Нормальные и локальные колебания. Резонансные явления в спектрах. Колебательно-вращательные состояния двухатомных молекул, соответствующие молекулярные постоянные и расчет статистических сумм по состояниям.</p> <p>1.14. Спин-орбитальное и спин-спиновое взаимодействия. Взаимодействие молекулы с электромагнитным полем в присутствии внешних полей. Основные представления о методах ЭПР- и ЯМР-спектроскопии. Применение этих методов для анализа внутримолекулярных взаимодействий. Представление об ультразвуковой спектроскопии и анализе строения жидких систем. Простейшие модели строения жидких систем и их основные классы.</p> <p>1.15. Кристаллические системы. Основные представления теории кристаллов. Симметрия кристаллов. Зонная структура спектра кристаллических веществ.</p> <p>1.16. Симметрия в молекулярных задачах. Точечная и перестановочная симметрия волновых функций. Основные типы симметрии; классификация состояний и определение кратности вырождения состояния. Симметрия и взаимодействие различных типов движений в молекуле. Эффекты Яна-Теллера.</p> <p>1.17. Корреляционные соотношения в химических исследованиях. Корреляции "структура- свойство", "структура - реакционная способность". Соотношения БЭП.</p> <p>1.18. Принципы построения аддитивных схем для расчета свойств молекул. Принципы квантово-химического описания кинетики элементарного акта химической реакции. Симметрия переходного состояния. Простейшие индексы</p>
--	--	---

			реакционной способности. Принцип сохранения орбитальной симметрии. Принципы теории ЖМКО.
2	Термодинамика	10+10	<p>2.1. Современное постулативное обоснование термодинамики. Внутренняя энергия. Приближение аддитивности. Границы применимости.</p> <p>2.2. Второй закон термодинамики. Пфаффова форма и интегрирующий множитель. Энтропия.</p> <p>2.3. Равновесные и неравновесные процессы. Потерянная работа и некомпенсированная теплота Клаузиуса. Принцип адиабатической недостижимости.</p> <p>2.4. Характеристические функции и термодинамические потенциалы. Энергия Гиббса. Энергия Гельмгольца.. Равновесия фазовые и химические. Понятие о современных численных методах расчета равновесий.</p> <p>2.5. Эргодическая гипотеза, теорема Лиувилля и принцип равной вероятности микросостояний, принадлежащих данной энергии. Функция распределения плотности вероятностей состояний системы. Усреднение по времени и по совокупности. Эргоидные системы.</p> <p>2.6. Метод ансамблей Гиббса. Канонический ансамбль и вывод канонического распределения Гиббса. Форма записи для дискретного и непрерывного спектра. Нормирующий множитель в распределении. Статистическая температура.</p> <p>2.7. Плотность состояний. Расчет числа состояний в квазиклассическом приближении. Переход от канонического распределения Гиббса к распределению Максвелла. Флюктуация. Относительная флюктуация. Сравнительная характеристика распределений Гиббса и Максвелла.</p> <p>2.8. Связь термодинамических функций с суммой состояний. Характеристическая температура. Квантовые эффекты и значения т/д функций при абсолютном нуле. 2.9. Химический потенциал идеального газа. Начало отсчета. Стандартное состояние и сумма состояний. Выражение <math>K_p</math> через суммы по состояниям.</p> <p>2.10. Статистическая теория идеального кристалла. Приближение Эйнштейна. Теория Дебая. Закон кубов Дебая. Энтропия и энергия Гиббса при абсолютном нуле</p>
3	Кинетика и катализ	10+10	<p>3.1 Основные понятия феноменологической кинетики. Элементарные и простые реакции, молекулярность элементарной реакции. Сложные реакции, механизм химической реакции.</p> <p>3.2 Кинетический закон действующих масс (основной постулат химической кинетики) для элементарных реакций. Кинетическое уравнение. Константа скорости, принцип независимости в химической кинетике.</p> <p>3.3 Кинетика сложных реакций: обратимые, параллельные и последовательные реакции. Линейно-независимые реакции, стехиометрическое правило Гиббса.</p> <p>3.4. Стехиометрическая матрица, стехиометрический базис.</p>

		<p>Принцип детального равновесия.</p> <p>3.5 Автокаталитические и колебательные реакции. Фазовый портрет процесса. Аттракторы. Типы стационарных точек. Реакция Белоусова-Жаботинского.</p> <p>3.6 Основные пути активации молекул. Термическая и нетермическая активация молекул, характерные интервалы энергии и природа активных частиц. Обмен энергией при упругих и неупругих столкновениях.</p> <p>3.7 Поверхность потенциальной энергии (ППЭ). Путь реакции и координата реакции. Переходное состояние и активированный комплекс. Экспериментальные и расчетные методы построения ППЭ. Метод молекулярных пучков.</p> <p>3.8 Физико-химические основы катализа. Катализ и равновесие. Промежуточные соединения в катализе; принцип энергетического соответствия. Снижение энергии активации как главный фактор каталитического ускорения реакций.</p> <p>3.9 Ферментативный катализ. Структура ферментов, адсорбционные и каталитические центры. Коферменты. Конформационные эффекты. Кинетика ферментативных реакций. Уравнение Михаэлиса-Ментен. Конкуrentное, неконкуrentное и субстратное ингибирование.</p> <p>3.10 Гетерогенный катализ. Основные типы гетерогенных катализаторов. Активные центры, неоднородность поверхности. Кислотно-основной и окислительно-восстановительный гетерогенный катализ. Кинетика гетерогенных каталитических реакций. Нанокатализ.</p>
--	--	--

## 6. Учебно-методическое обеспечение для самостоятельной работы аспирантов

Самостоятельная работа подкрепляется учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций. Основные виды самостоятельной работы: в читальном зале библиотеки, на рабочем месте с доступом к ресурсам Интернет по IP-адресам .

Основной контроль знаний осуществляется в процессе участия в семинарских занятиях (обсуждения, ответов на вопросы и др.).

### Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

#### Раздел 1.

Основная литература

1. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. (2 изд.) Ростов-на-Дону.: Феникс. 1997.
  2. Вилков Л.В., Пентин Ю.А. Физические методы исследования в химии. Структурные методы и оптическая спектроскопия. М.: Высш. шк. 1987.
  3. Вилков Л.В., Пентин Ю.А. Физические методы исследования в химии. Резонансные и электрооптические методы. М.: Высш. шк. 1989.
  4. Степанов Н.Ф., Пупышев В.И. Квантовая механика молекул и квантовая химия. М.: Изд-во МГУ. 1991.
- Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, Изд-во МГУ . 2001.

## **Вспомогательная литература**

Фларри Р. Квантовая химия. М.: Мир. 1985.

### Раздел 2:

#### **Основная литература**

1. О.М. Полторак. Химическая термодинамика.
2. Н.А. Смирнова. Статистическая термодинамика.
3. Р.Эткинс. Физическая химия т.1,2.

#### **Вспомогательная литература**

Г.Ф. Воронин. Химическая термодинамика.

Интернет-ресурсы

### Раздел 3:

#### Основная литература

1. Амис Э., Влияние растворителя на скорость и механизм химических реакций, М., Мир, 1978.
1. Бендер М., Бергерон Р., Комяма М., Биоорганическая химия ферментативного катализа, М., Мир, 1987.
2. Березин И.В., Клесов А.А., Практический курс химической и ферментативной кинетики, М., Изд-во МГУ, 1976.
3. Березин И.В., Мартинек К., Основы физической химии ферментативного катализа, М., Высшая школа, 1977.
4. Боженко К.В., Ягодковский В.Д., Кинетика элементарных химических реакций, М., Изд-во РУДН, 2003.
5. Боресков Г.К. Гетерогенный катализ, М., Наука, 1988.
6. Вилков Л.В., Пентин Ю.А., Физические методы исследования в химии, М., Высшая школа, 1987.
7. Вудворд Р., Хоффман Р., Сохранение орбитальной симметрии, М., Мир, 1971.
8. Глестон С., Лейдлер К., Эйринг Г., Теория абсолютных скоростей реакций, М., Издательство, 1948.
9. Денисов Е.Т., Кинетика гомогенных химических реакций, М., Высшая школа, 1978.
10. Денисов Е.Т., Саркисов О.М., Лихтенштейн Г.И., Химическая кинетика, М., Химия, 2000.
11. Даниэльс Ф., Олберти Р., Физическая химия, М., Мир, 1987.
12. Драго Р., Физические методы в химии, т.1 и 2, М., Мир, 1981.
13. Еремин Е.Н., Основы химической кинетики, М., Высшая школа, 1976.
14. Киперман С.Л., Основы химической кинетики в гетерогенном катализе, М., Химия, 1964.
15. Кондратьев В.Н., Никитин Е.Е., Химические процессы в газах, М., Наука, 1981.
16. Кондратьев В.Н., Никитин Е.Е., Резников С.Я., Уманский С.Я., Термические бимолекулярные реакции в газах, М., Наука, 1976.
17. Крылов О.В., Гетерогенный катализ, М., Академкнига, 2004.
18. Мелвин-Хьюз Е., Равновесия и кинетика реакций в растворах, М., Химия, 1975.
19. Молекулярные постоянные неорганических соединений: Справочник, (под ред. К.С.Краснова), Л., Химия, 1979.
20. Никитин Е.Е., Теория элементарных атомно-молекулярных процессов в газах, М., Наука, 1970.
21. Панченков Г.М., Лебедев В.П., Химическая кинетика и катализ, М., Химия, 1985.
22. Пирсон Р., Правила симметрии в химических реакциях, М., Мир, 1979.
23. Пригожин И., Кондепуди Д., Современная термодинамика, М., Мир, 2002.
24. Пурмаль А.П., Простов В.Н., Химическая кинетика, М., Изд-во МФТИ, 1999.
- Романовский Б.В. Основы химической кинетики, М.: Экзамен, 2006.
25. Романовский Б.В. Основы катализа, М.: Бином, 2013.

26. Робинсон П., Холбрук К., Мономолекулярные реакции, М., Мир, 1975.
27. Рубин А.Б., Пытьева Н.Ф., Ризниченко Г.Ю., Кинетика биологических процессов, М., Изд-во МГУ, 1987.
28. Семиохин И.А., Страхов Б.В., Осипов А.И., Кинетика химических реакций, М., Изд-во МГУ, 1995.
29. Степанов Н.Ф., Ерлыкина М.Е., Филиппов Г.Г., Методы линейной алгебры в физической химии, М., Изд-во МГУ, 1976.
30. Тёмкин О.Н. Гомогенный металлокомплексный катализ. Кинетические аспекты, М., Академкнига, 2008.
31. Турро Н.Дж., Молекулярная фотохимия, М., Мир, 1967.
32. Физическая химия в вопросах и ответах (под ред. К.В.Топчиевой и Н.В.Федорович), М., Изд-во МГУ, 1981.
33. Физическая химия. Под ред. Краснова К.С. т.1,2. 3-е изд., испр. - М.: Высшая школа, 2001
34. Франк-Каменецкий Д.А., Диффузия и теплопередача в химической кинетике, М.,Наука, 1967.
35. Химическая и биологическая кинетика: Сборник статей, (под ред. Н.М.Эмануэля, И.В.Березина и С.Д.Варфоломеева), М., Изд-во МГУ, 1983.
36. Чоркендорф И., Наймонтсведрайт Х. Современный катализ и химическая кинетика, (пер с англ.), М., Интеллект, 2010.
37. Эвери Г., Основы кинетики и механизма химических реакций, М., Мир, 1978.
38. Эйринг Г., Лин С.Г., Лин С.М., Основы химической кинетики, М., Мир, 1983.
39. Эмануэль Н.М., Кнорре Д.Г., Курс химической кинетики, М., Высшая школа, 1983.
40. Эткинс П., де Паула Дж. Физическая химия. М.:Мир, 2007
41. Ягодковский В.Д., Статистическая термодинамика, М., Изд-во РУДН, 2000.
42. Laidler K.J., Chemical Kinetics, NY, Harper&Row Publ., 1987.
43. Steinfeld J.I., Francisco J.S., Hase W.L., Chemical Kinetics and Dynamics, Prentice-Hall Publ., 1989.

#### Вспомогательная литература

1. Пахомов Н.А. Научные основы приготовления катализаторов. Введение в теорию и практику, Новосибирск, Изд-во СО РАН, 2011.
2. Помогайло А.Д., Джардималиева Г.И. Мономерные и полимерные карбоксилаты металлов, М., Физматлит, 2009.
3. Ола Дж., Гепперт А., Пракаш С. Метанол и энергетика будущего, (пер с англ.), М., Бинум, 2009.
4. Комиссаров Г.Г. Фотосинтез: физико-химический подход, М., Едиториал УРСС, 2003.
5. Лисичкин Г.В., Фадеев А.Ю. Химия привитых поверхностных соединений, М., Физматлит, 2003.
6. Блюменфельд Л.А. Соросовский Образовательный Журнал, №4, 1998, с.33-38.
7. Бендер М., Бергерон Р., Комяма М. Биоорганическая химия ферментативного катализа, (пер с англ.), М., Мир, 1987.
8. Хенрици-Оливэ Г., Оливэ С. Химия каталитического гидрирования СО. (пер с англ.), М., Мир, 1987.
9. Березин И.В., Клячко Н.Л., Левашов А.В. и др. Имобилизованные ферменты, Высшая школа, 1987.
10. Основы биохимии (под ред. А.А.Анисимова). М., Высшая школа, 1986.
11. Шмидт Ф.К. Катализ комплексами первого переходного ряда реакций гидрирования и димеризации, Иркутск, Изд. Иркутского ун-та, 1986.
12. Накамура А., Цуцуи М. Принципы и применение гомогенного и гетерогенного катализа, (пер с англ.) М., Мир, 1983.
13. Джеймс Б. Гомогенное гидрирование, (пер с англ.), М., Мир, 1980.
14. Хенрици-Оливэ Г., Оливэ С. Координация и катализ, (пер с англ.), М., Мир, 1980.

15. Ерофеев Б.В., Тулупов В.А. Кинетика гомогенного катализа, Минск, Наука и техника, 1977.
16. Ридил Э. Развитие представлений в области катализа, (пер с англ.), М., Мир, 1971.
17. Райдил и Тэйлор. Катализ в теории и практике, (пер с англ.), Л., Госхимтехиздат, 1934.

### **Периодическая литература**

1. В библиотеке ГЕОХИ РАН доступна периодическая литература с 1947 г. Информация о Каталоге периодических изданий: [Электронный каталог печатных версий журналов в библиотеке ГЕОХИ с 1947 по наст.xlsx](#). В каталоге 184 наименования печатных версий журналов в фонде ГЕОХИ РАН, из них 94-на иностр. языках. Библиотека располагает достаточным количеством наименований и экземпляров дополнительной литературы: официальными, общественно-политическими и научно-популярными периодическими изданиями, справочно-библиографическими изданиями, в том числе энциклопедиями, энциклопедическими словарями, отраслевыми словарями и справочниками, в том числе на иностранных языках, библиографическими пособиями, обеспечивая к ним доступ всех категорий пользователей библиотеки. Фонд дополнительной литературы помимо учебной литературы включает официальные, справочно-библиографические и специализированные периодические издания.
2. Через БЕН РАН доступна периодическая литература по межбиблиотечному абонементу практически из любого библиотечного фонда Институтов РАН и крупных библиотек России (ГПНТБ, РГБ и др.).

### **Интернет-ресурсы:**

Доступ к электронным научным информационным ресурсам осуществляется как в читальном зале библиотеки ГЕОХИ РАН, так и на рабочем месте по IP-адресам ГЕОХИ РАН:

1. <http://apps.webofknowledge.com/> -База данных Web of Science
2. <http://www.scopus.com/> - База данных SCOPUS
3. <http://www.sciencedirect.com/> - Журналы издательства Elsevier - Freedom Collection
4. <http://link.springer.com/> - Журналы издательства Springer
5. <http://www.springerprotocols.com/> - Журналы издательства Springer Journals и SpringerProtocols
6. <http://e-library.ru> Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU
7. <http://www.benran.ru/> с компьютеров библиотеки ГЕОХИ РАН открыт доступ к электронным ресурсам Библиотеки по естественным наукам РАН.
8. Физические методы исследования в химии.  
<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/education-program/spec-phys/29.html>
9. Википедия. Свободная энциклопедия:  
[https://ru.wikipedia.org/wiki/Физическая\\_химия](https://ru.wikipedia.org/wiki/Физическая_химия)
10. <http://www.physchem.chimfak.rsu.ru/Source/PCC/index.html> - Левченков С. И., Физическая и коллоидная химия: Конспект лекций.
11. <http://www.chem.msu.ru/rus/elibrary/welcome.html> - Портал с лекциями, учебно-методическими материалами МГУ им. М.В.Ломоносова.

## **7. Образовательные технологии**

Кроме очных лекций проводятся практические занятия на базе аналитических лабораторий ГЕОХИ, используется самостоятельная работа и выполнение расчетных заданий.

## 8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

**8.1.** Для освоения программы обучения и для выполнения научно-исследовательских работ по теме диссертации каждому аспиранту предоставлено индивидуальное рабочее место, оборудованное приточно-вытяжной вентиляцией, водопроводом, водоотведением, воздуховодом. Аспиранты имеют возможность использовать материально-технические средства лабораторий, в которых выполняют квалификационные и диссертационные работы (оргтехника, включая персональный компьютер, реактивы, расходные материалы, лабораторная посуда, измерительное оборудование).

Основу материально-технической базы института составляет приборный парк. список дорогостоящего оборудования. составляет около 80 единиц (спектрометры эмиссионные с индуктивно-связанной плазмой, спектрометры эмиссионные с индуктивно-связанной плазмой, масс-спектрометры с ионной ловушкой, атомно-абсорбционные спектрометры, хроматографы жидкостные, хроматографы газовые и газо-жидкостные, микроскопы световые и оптические, микроанализаторы, видеокамеры, сканирующий электронный микроскоп, анализаторы размеров частиц, изотопный масс-спектрометр, микроанализатор рентгеноспектральной Cameca SX 100, рентгенофлуоресцентный спектрометр Axios Advanced, масс-спектрометры Triton, DELTA Plus XP, Element XR и многие др.).

**8.2.** Лекционная аудитория, оборудованная проекционным оборудованием и доступом в сеть «Интернет».

## 9. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

9.1. Форма контроля знаний:

9.1.1. Текущий контроль знаний в течение всего курса осуществляется с помощью контрольных вопросов.

9.1.2. Экзамен по дисциплине в конце курса обучения.

9.2. Планируемые результаты обучения, характеризующие этапы формирования компетенции, критерии, показатели и средства их оценивания.

### 9.2.1. Этапы формирования универсальной компетенции - УК-1:

9.2.1. Этапы формирования универсальной компетенции - УК-1:

Планируемые результаты обучения	<b>Знать:</b> методы критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методы генерирования новых идей при решении
---------------------------------	--

			исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях ( <b>УК-1</b> ).
Критерии и показатели оценивания результатов обучения	1	неудовлетворительно	Отсутствие знаний
	2	неудовлетворительно	Фрагментарные представления о методах критического анализа и оценках современных научных достижений, а также о методах генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач
	3	удовлетворительно	Неполные представления о методах критического анализа и оценках современных научных достижений, а также о методах генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач
	4	хорошо	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы представлений о методах критического анализа и оценках современных научных достижений, а также о методах генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач
	5	отлично	Сформированные систематические представления о методах критического анализа и оценках современных научных достижений, а также о методах генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач

Планируемые результаты обучения			<b>Уметь:</b> анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач ( <b>УК-1</b> ).
Критерии и показатели оценивания результатов обучения	1	неудовлетворительно	Отсутствие умений
	2	неудовлетворительно	Частично освоенное умение анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач
	3	удовлетворительно	В целом успешно, но не систематически осуществляемые анализ альтернативных вариантов решения исследовательских и практических задач
	4	хорошо	В целом успешно, но содержащие отдельные пробелы анализа альтернативных вариантов решения исследовательских и практических задач
	5	отлично	Сформированное умение анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач

Планируемые результаты обучения			<b>Владеть:</b> навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях ( <b>УК-1</b> ).
Критерии и показатели	1	неудовлетворительно	Отсутствие навыков
	2	неудовлетворительно	Фрагментарное применение навыков анализа

оценивания результатов обучения			методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач
	3	удовлетворительно	В целом успешное, но не систематическое применение навыков анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач
	4	хорошо	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применения навыков анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач
	5	отлично	Успешное и систематическое применение навыков анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач

### 9.2.2. Этапы формирования универсальной компетенции - УК-5

Планируемые результаты обучения		<b>Знать:</b> содержание процесса целеполагания профессионального и личностного развития, его особенности и способы реализации при решении профессиональных задач, исходя из этапов карьерного роста и требований рынка труда. (УК-5).	
Критерии и показатели оценивания результатов обучения	1	неудовлетворительно	Отсутствие знаний
	2	неудовлетворительно	Допускает существенные ошибки при раскрытии содержания процесса целеполагания, его особенностей и способов реализации.
	3	удовлетворительно	Демонстрирует частичные знания содержания процесса целеполагания, некоторых особенностей профессионального развития и самореализации личности; указывает способы реализации, но не может обосновать их использования в конкретных ситуациях.
	4	хорошо	Демонстрирует знания сущности процесса целеполагания, отдельных особенностей процесса и способов его реализации, характеристик профессионального развития личности, но не выделяет критерии выбора способов целереализации при решении профессиональных задач..
	5	отлично	Раскрывает полное содержание процесса целеполагания, всех его особенностей, аргументировано обосновывает критерии выбора способов профессиональной и личностной целереализации при решении профессиональных задач..

Планируемые результаты обучения	<b>Уметь:</b> осуществлять личностный выбор в различных профессиональных и морально-
---------------------------------	--

			ценностных ситуациях, оценивать последствия принятого решения и нести за него ответственность перед собой и обществом. (УК-5).
Критерии и показатели оценивания результатов обучения	1	неудовлетворительно	Не готов и не умеет осуществлять личностный выбор в различных профессиональных и морально-ценностных ситуациях, оценивать последствия принятого решения и нести за него ответственность перед собой и обществом.
	2	неудовлетворительно	Готов осуществлять личностный выбор в конкретных профессиональных и морально-ценностных ситуациях, но не умеет оценивать последствия принятого решения и нести за него ответственность перед собой и обществом.
	3	удовлетворительно	Осуществляет личностный выбор в конкретных профессиональных и морально-ценностных ситуациях, оценивает некоторые последствия принятого решения, но не готов нести за него ответственность перед собой и обществом.
	4	хорошо	Осуществляет личностный выбор в стандартных профессиональных и морально-ценностных ситуациях, оценивает некоторые последствия принятого решения и готов нести за него ответственность перед собой и обществом.
	5	отлично	Умеет осуществлять личностный выбор в различных нестандартных профессиональных и морально-ценностных ситуациях, оценивать последствия принятого решения и нести за него ответственность перед собой и обществом.

Планируемые результаты обучения			<b>Владеть:</b> приёмами и технологиями целеполагания, целереализации и оценки результатов деятельности по решению профессиональных задач. (УК-5).
Критерии и показатели оценивания результатов обучения	1	неудовлетворительно	Отсутствие навыков
	2	неудовлетворительно	Владеет отдельными приёмами и технологиями целеполагания, целереализации и оценки результатов деятельности по решению стандартных профессиональных задач, допуская ошибки при выборе приёмов и технологий их реализации.
	3	удовлетворительно	Владеет отдельными приёмами и технологиями целеполагания, целереализации и оценки результатов деятельности по решению стандартных профессиональных задач, давая не полностью аргументированное обоснование предлагаемого варианта решения.
	4	хорошо	Владеет приёмами и технологиями целеполагания, целереализации и оценки результатов деятельности по решению стандартных профессиональных задач,

			полностью аргументируя предлагаемые варианты решения.
	5	отлично	Демонстрирует владение системой приёмов и технологий целеполагания, целереализации и оценки результатов деятельности по решению нестандартных профессиональных задач, полностью аргументируя выбор предлагаемого варианта решения.

### 9.2.3. Этапы формирования общепрофессиональной компетенции - ОПК-1:

Планируемые результаты обучения			<b>Знать:</b> современные способы использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности ( <b>ОПК-1</b> ).
Критерии и показатели оценивания результатов обучения	1	неудовлетворительно	Отсутствие знаний
	2	неудовлетворительно	Фрагментарные представления о современных способах использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности.
	3	удовлетворительно	В целом успешные, но не систематические представления о современных способах использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности.
	4	хорошо	В целом успешные, но содержащие отдельные пробелы представления о современных способах использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности.
	5	отлично	Сформированные представления о современных способах использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности используемые в практике научных исследований химической направленности.

Планируемые результаты обучения			<b>Уметь:</b> выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования. ( <b>ОПК-1</b> ).
Критерии и показатели оценивания результатов обучения	1	неудовлетворительно	Отсутствие умений
	2	неудовлетворительно	Фрагментарное использование умения выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи
	3	удовлетворительно	В целом успешное, но не систематическое использование умения выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи.
	4	хорошо	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы использования умения выбирать и

			применять экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи..
	5	отлично	Сформированное умение выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи

#### 9.2.4. Этапы формирования общепрофессиональной компетенции - ОПК-2:

Планируемые результаты обучения			<b>Уметь:</b> планировать научную работу, формировать состав рабочей группы и оптимизировать распределение обязанностей между членами исследовательского коллектива ( <b>ОПК-2</b> ).
Критерии и показатели оценивания результатов обучения	1	неудовлетворительно	Отсутствие умений
	2	неудовлетворительно	Фрагментарное использование разделения научной работы на составные части, отсутствие умения оптимизировать распределение обязанностей между членами команды
	3	удовлетворительно	В целом успешное, но не систематическое использование умения планировать научную работу и формировать команду с адекватным распределением обязанностей между членами коллектива
	4	хорошо	Сформированное умение составления плана научной работы, схем взаимодействия при решении исследовательских и практических задач с оценкой их сильных и слабых сторон, но наличие определенных затруднений с формированием команды
	5	отлично	Сформированное умение составления плана научной работы с выделением параллельно и последовательно выполняемых стадий с оптимальным распределением обязанностей между членами коллектива.

#### 9.2.5. Этапы формирования профессиональной компетенции - ПК-4:

Планируемые результаты обучения			<b>Знать:</b> современное состояние науки в области физической химии. ( <b>ПК-4</b> ).
Критерии и показатели оценивания результатов обучения	1	неудовлетворительно	Отсутствие знаний
	2	неудовлетворительно	Фрагментарные представления о современном состоянии науки в области физической химии и
	3	удовлетворительно	Неполные представления о современном состоянии науки в области физической химии
	4	хорошо	Сформированные представления, но содержащие отдельные пробелы представления о современном состоянии науки в области физической химии
	5	отлично	Сформированные систематические представления о современном состоянии науки в

			области физической химии
--	--	--	--------------------------

Планируемые результаты обучения			<b>Владеть:</b> методами планирования, подготовки, проведения научно-исследовательской работы по направленности (02.00.04 Физическая химия) (ПК-4).
Критерии и показатели оценивания результатов обучения	1	неудовлетворительно	Отсутствие навыков
	2	неудовлетворительно	Фрагментарное применение методов планирования, подготовки и проведения научно-исследовательской работы
	3	удовлетворительно	В целом успешное, но не систематическое применение методов планирования, подготовки и проведения научно-исследовательской работы
	4	хорошо	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применения методов планирования, подготовки и проведения научно-исследовательской работы
	5	отлично	Успешное и систематическое применение методов планирования, подготовки и проведения научно-исследовательской работы

## 9.2.6. Оценочные средства (в виде устных вопросов, тем реферата)

### 9.2.6.1. Типовые контрольные вопросы, необходимые для оценки результатов обучения, характеризующих этапы формирования компетенций:

Раздел 1:

1. Соотношение свойств молекул и свойств образованных ими веществ.
2. Спектр, форма линии, основные типы уширения линий.
3. Принципы современных методов спектральных исследований молекулярных систем.
4. Принципиальные основы электронографического, нейтроно- и рентгенографического анализа строения молекул.
5. Орбитальная модель молекулы. Автоионизационные состояния атомов и молекул.
6. Адиабатическое приближение. Поверхности потенциальной энергии и их особые точки.
7. Электрический и магнитный моменты молекулы. Мультипольные моменты.
8. Спин. Физико-химические явления, связанные со спином. Связь спина и статистики. Принцип Паули. Классификация электронных состояний молекулы.
9. Вариационный метод и его приложения: приближение Хартри-Фока, метод конфигурационного взаимодействия. Теорема Купманса
10. Простейшие модели молекулярных орбиталей и описание химической связи. Методы учета электронной корреляции.
11. Простейшие модели электронного строения молекул. Теория Гиллеспи.
12. Колебательные состояния молекул. Гармоническая и ангармонические модели сил в молекуле.
13. Спин-орбитальное и спин-спиновое взаимодействия. Взаимодействие молекулы с электромагнитным полем в присутствии внешних полей.
14. Кристаллические системы. Основные представления теории кристаллов. Симметрия кристаллов. Зонная структура спектра кристаллических веществ.
15. Симметрия в молекулярных задачах. Точечная и перестановочная симметрия волновых функций.

## 16. Принципы построения аддитивных схем для расчета свойств молекул.

### Раздел 2:

1. Транзитивность термического равновесия и температура.
1. Первый закон и его аналитическое выражение. Внутренняя энергия и энтальпия.
2. Колебательные и вращательные степени свободы для линейных и нелинейных молекул.
3. Термохимические уравнения. Стандартные состояния.
4. Условия термодинамического равновесия в изолированной системе. Вывод.
5. Третий закон термодинамики. Теорема Нернста и Постулат Планка.
6. Характеристические функции. Термодинамические потенциалы.
7. Химический потенциал.
8. Степени свободы и правило фаз Гиббса.
9. Диаграммы состояния. Однокомпонентные системы. Двухкомпонентные системы.
10. Условия химического равновесия. Химическое сродство и направление самопроизвольной реакции.
11. Изотерма химической реакции.
12. Эргодическая гипотеза. Принцип равной вероятности микросостояний в изолированной системе.
13. Микроканонический и канонический ансамбль.
14. Связь суммы по состояниям с термодинамическими функциями.
15. Энтропия и парадокс Гиббса.
16. Приближение «жесткий ротатор -гармонический осциллятор».
17. Конфигурационный интеграл и его вычисление в приближении групповых интегралов.
18. Химический потенциал идеального газа. Стандартные суммы по состояниям.
19. Выражение для  $K_p$  и  $K_c$  через суммы по состояниям.

### Раздел 3:

- 3.1. Основные понятия феноменологической кинетики.
- 3.2. Кинетический закон действующих масс.
- 3.3. Кинетика сложных реакций.
- 3.4. Колебательные реакции. Фазовый портрет процесса. Реакция Белоусова-Жаботинского.
- 3.5. Основные пути активации молекул. Обмен энергией при упругих и неупругих столкновениях.
- 3.6. Поверхность потенциальной энергии. Экспериментальные и расчетные методы построения. Метод молекулярных пучков.
- 3.7. Катализ и равновесие. Промежуточные соединения в катализе; принцип энергетического соответствия. Снижение энергии активации как главный фактор каталитического ускорения реакций.
- 3.8. Ферментативный катализ. Структура ферментов, адсорбционные и каталитические центры. Коферменты. Конформационные эффекты.
- 3.9. Гетерогенный катализ. Активные центры, неоднородность поверхности. Кислотно-основной и окислительно-восстановительный гетерогенный катализ.
- 3.10. Кинетика гетерогенных каталитических реакций.
- 3.11. Размерные эффекты в гетерогенном катализе.
- 3.12. Нанокатализ. Критерии отнесения материальных объектов к «нано».

### **Вопросы для контроля текущей успеваемости**

#### Раздел 1:

1. Оценить напряженность внешнего электрического поля, при которой изучение ориентации диполя, образованного зарядами, по модулю равными заряду электрона,

разнесенными на расстояние 1.5 Ангстрём, нельзя проводить, ограничиваясь первыми членами разложения больцмановской экспоненты.

2. Описать (объяснить на предлагаемых преподавателем примерах) возможные различия спектров, полученных методами  $\gamma$ -резонансной (мессбауэровской) спектроскопии для соединений железа в степенях окисления +2 и +3.

3. Описать качественные изменения рентгеноэлектронного спектра в гомологическом ряду солей карбоновых кислот.

4. В чем состоят и по каким причинам могут нарушаться правила Каши, Вавилова, Левшина?

5. Для заданной двухатомной молекулы с помощью стандартных справочных данных определить колебательно-вращательный уровень, наиболее заселенный при комнатной температуре.

5. Для системы двух эквивалентных частиц со спином  $\frac{1}{2}$  во внешнем магнитном поле в учебниках часто приводятся рисунки энергетических уровней и соответствующие значения квантовых чисел. Чем и почему такие рисунки различаются при обсуждении ЯМР и ЭПР-спектров?

7. Какие квантовые числа описывают вращательные состояния молекул типа сферического волчка? Какое состояние наиболее заселено при заданной температуре? Почему найденное выражение не совпадает с тем, которое получается для двухатомной молекулы (“задача о свободном ротаторе”)?

8. Объясните, почему газообразные азот и кислород бесцветны, а интенсивность окраски газообразных галогенов меняется с ростом номера элемента.

10. Описать зависимость энергии взаимодействия двух диполей (заряда и диполя, двух квадрупольей) в зависимости от их взаимной ориентации.

## Раздел 2:

1. В чем основная задача феноменологической термодинамики.

2. В чем основная задача статистической термодинамики

3. Какие основные постулаты феноменологической термодинамики

4. Какие основные постулаты статистической термодинамики

5. В чем заключается эргодическая гипотеза.

6. В чем принципиальная разница между работой и изменением энергии Гиббса.

7. Какой доступный для молекулы объем фазового МЮ пространства

8. Когда и почему вводятся дополнительные внутренние переменные

9. Что такое статистический ансамбль. Какие вам известны.

10. Когда и зачем вводится химическая переменная.

11. Условия химического равновесия.

12. Что такое микро и макро состояния системы.

## Раздел 3:

1. В чем основная задача феноменологической термодинамики.

2. В чем основная задача статистической термодинамики

3. Какие основные постулаты феноменологической термодинамики

4. Какие основные постулаты статистической термодинамики

5. В чем заключается эргодическая гипотеза.

6. В чем принципиальная разница между работой и изменением энергии Гиббса.

7. Какой доступный для молекулы объем фазового МЮ пространства

8. Когда и почему вводятся дополнительные внутренние переменные

9. Что такое статистический ансамбль. Какие вам известны.

10. Когда и зачем вводится химическая переменная.

11. Условия химического равновесия.
12. Что такое микро и макро состояния системы.

### **9.2.6.2. Вопросы к экзамену формируются на основе программы кандидатского минимума ВАК:**

#### **ПРОГРАММА МИНИМУМ**

кандидатского экзамена по специальности **02.00.04 «Физическая химия»** по химическим, физико-математическим и техническим наукам

##### **Введение**

В основу настоящей программы положены следующие дисциплины: учение о строении вещества, химическая термодинамика, теория поверхностных явлений, учение об электрохимических процессах, теория кинетики химических реакций и учение о катализе. Программа разработана экспертным советом Высшей аттестационной комиссии по химии (по неорганической химии) при участии Института физической химии РАН и Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова.

##### **I. Строение вещества**

1. *Основы классической теории химического строения.* Основные положения классической теории химического строения. Структурная формула и граф молекулы. Изомерия. Конформации молекул. Связь строения и свойств молекул.

2. *Физические основы учения о строении молекул.* Механическая модель молекулы. Потенциалы парных взаимодействий. Методы молекулярной механики и молекулярной динамики при анализе строения молекул.

Общие принципы квантовомеханического описания молекулярных систем. Стационарное уравнение Шрёдингера для свободной молекулы. Адиабатическое приближение. Электронное волновое уравнение.

Потенциальные кривые и поверхности потенциальной энергии. Их общая структура и различные типы. Равновесные конфигурации молекул. Структурная изомерия. Оптические изомеры.

Колебания молекул. Нормальные колебания, амплитуды и частоты колебаний, частоты основных колебательных переходов. Колебания с большой амплитудой.

Вращение молекул. Различные типы молекулярных волчков. Вращательные уровни энергии.

Электронное строение атомов и молекул. Одноэлектронное приближение. Атомные и молекулярные орбитали. Электронные конфигурации и термы атомов. Правило Хунда. Электронная плотность. Распределение электронной плотности в двухатомных молекулах. Корреляционные орбитальные диаграммы. Теорема Купманса. Пределы применимости одноэлектронного приближения.

Интерпретация строения молекул на основе орбитальных моделей и исследования распределения электронной плотности. Локализованные молекулярные орбитали. Гибридизация.

Электронная корреляция в атомах и молекулах. Её проявления в свойствах молекул. Метод конфигурационного взаимодействия.

Представления о зарядах на атомах и порядках связей. Различные методы выделения атомов в молекулах. Корреляции дескрипторов электронного строения и свойств молекул. Индексы реакционной способности. Теория граничных орбиталей.

3. *Симметрия молекулярных систем.* Точечные группы симметрии молекул. Понятие о представлениях групп и характерах представлений. Общие свойства симметрии волновых функций и потенциальных поверхностей молекул. Классификация квантовых состояний атомов и молекул по симметрии.

Влияние симметрии равновесной конфигурации ядер на свойства молекул и их динамическое поведение. Орбитальные корреляционные диаграммы. Сохранение орбитальной симметрии при химических реакциях.

4. *Электрические и магнитные свойства.* Дипольный момент и поляризуемость молекул. Магнитный момент и магнитная восприимчивость. Эффекты Штарка и Зеемана. Магнитнорезонансные методы исследования строения молекул. Химический сдвиг.

Оптические спектры молекул. Вероятности переходов и правила отбора при переходах между различными квантовыми состояниями молекул. Связь спектров молекул с их строением. Определение структурных характеристик молекул из спектроскопических данных.

5. *Межмолекулярные взаимодействия.* Основные составляющие межмолекулярных взаимодействий. Молекулярные комплексы. Ван-дер-Ваальсовы молекулы. Кластеры атомов и молекул. Водородная связь. Супермолекулы и супрамолекулярная химия.

6. *Основные результаты и закономерности в строении молекул.* Строение молекул простых и координационных неорганических соединений. Полиядерные комплексные соединения. Строение основных типов органических и элементоорганических соединений. Соединения включения. Полимеры и биополимеры.

7. *Строение конденсированных фаз.* Структурная классификация конденсированных фаз.

Идеальные кристаллы. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Реальные кристаллы. Типы дефектов в реальных кристаллах. Кристаллы с неполной упорядоченностью. Доменные структуры.

Симметрия кристаллов. Кристаллографические точечные группы симметрии, типы решеток, сингонии. Понятие о пространственных группах кристаллов. Индексы кристаллографических граней.

Атомные, ионные, молекулярные и другие типы кристаллов. Цепочечные, каркасные и слоистые структуры.

Строение твердых растворов. Упорядоченные твердые растворы. Аморфные вещества. Особенности строения полимерных фаз.

Металлы и полупроводники. Зонная структура энергетического спектра кристаллов. Поверхность Ферми. Различные типы проводимости. Колебания в кристаллах. Фононы.

Жидкости. Мгновенная и колебательно усреднённая структура жидкости. Ассоциаты и кластеры в жидкостях. Флуктуации и корреляционные функции. Структура простых жидкостей. Растворы неэлектролитов. Структура воды и водных растворов. Структура жидких электролитов.

Мицеллообразование и строение мицелл.

Мезофазы. Пластические кристаллы. Жидкие кристаллы (нематики, смектики, холестерики и др.).

8. *Поверхность конденсированных фаз.* Особенности строения поверхности кристаллов и жидкостей, структура границы раздела конденсированных фаз. Молекулы и кластеры на поверхности. Структура адсорбционных слоев.

## **II. Химическая термодинамика**

### ***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. Виральные 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.

Уравнение Гиббса – Гельмгольца. Работа и теплота химического процесса. Химические потенциалы.

4. *Химическое равновесие.* Закон действующих масс. Различные виды констант равновесия и связь между ними. Изотерма ВантГоффа. Уравнения изобары и изохоры химической реакции. Расчеты констант равновесия химических реакций с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций. Приведенная энергия Гиббса и её использование для расчетов химических равновесий. Равновесие в поле внешних сил. Полные потенциалы.

#### ***Элементы статистической термодинамики***

5. Микро и макросостояния химических систем. Фазовые  $\Omega$  и  $\Omega$  пространства. Эргодическая гипотеза. Термодинамическая вероятность и её связь с энтропией. Распределение Максвелла – Больцмана.

Статистические средние значения макроскопических величин. 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.

Приближение «жесткий ротатор – гармонический осциллятор». Составляющие внутренней энергии, теплоёмкости и энтропии, обусловленные поступательным, вращательным и колебательным движением.

Расчет констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики. Статистическая термодинамика реальных систем. Потенциалы межмолекулярного взаимодействия и конфигурационный интеграл для реального газа.

Распределения Бозе – Эйнштейна и Ферми – Дирака. Вырожденный идеальный газ. Электроны в металлах. Уровень Ферми. Статистическая теория Эйнштейна идеального кристалла, теория Дебая. Точечные дефекты кристаллических решеток. Равновесные и неравновесные дефекты. Вычисление сумм по состояниям для кристаллов с различными точечными дефектами. Нестехиометрические соединения и их термодинамическое описание.

#### ***Элементы термодинамики необратимых процессов***

6. 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.

Термодиффузия и её описание в неравновесной термодинамике. Уравнение Чепмена – Энскога.

#### ***Растворы. Фазовые равновесия***

7. *Различные типы растворов.* Способы выражения состава растворов. Идеальные растворы, общее условие идеальности растворов. Давление насыщенного пара жидких

растворов, закон Рауля. Неидеальные растворы и их свойства. Метод активностей. Коэффициенты активности и их определение.

Стандартные состояния при определении химических потенциалов компонент растворов. Симметричная и несимметричная системы отсчета.

Коллигативные свойства растворов. Изменение температуры замерзания растворов, криоскопия. Зонная плавка. Осмотические явления. Парциальные молярные величины, их определение для бинарных систем. Уравнение Гиббса – Дюгема.

Функция смешения для идеальных и неидеальных растворов. Предельно разбавленные растворы, атермальные и регулярные растворы, их свойства.

8. *Гетерогенные системы*. Понятия компонента, фазы, степени свободы. Правило фаз Гиббса.

Однокомпонентные системы. Диаграммы состояния воды, серы, фосфора и углерода. Фазовые переходы первого рода. Уравнение Клапейрона – Клаузиуса.

Двухкомпонентные системы. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем. Равновесие жидкость – пар в двухкомпонентных системах. Законы Гиббса – Коновалова. Азеотропные смеси.

Фазовые переходы второго рода. Уравнения Эренфеста.

Трехкомпонентные системы. Треугольник Гиббса. Диаграммы плавкости трехкомпонентных систем.

#### ***Адсорбция и поверхностные явления***

9. *Адсорбция*. Адсорбент, адсорбат. Виды адсорбции. Структура поверхности и пористость адсорбента. Локализованная и делокализованная адсорбция. Мономолекулярная и полимолекулярная адсорбция. Динамический характер адсорбционного равновесия.

Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Генри. Константа адсорбционного равновесия. Уравнение Ленгмюра. Адсорбция из растворов. Уравнение Брунауэра – Эмета – Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента.

Хроматография, различные её типы (газовая, жидкостная, противоточная и др.).

10. *Поверхность раздела фаз*. Свободная поверхностная энергия, поверхностное натяжение, избыточные термодинамические функции поверхностного слоя. Изменение поверхностного натяжения на границе жидкость – пар в зависимости от температуры. Связь свободной поверхностной энергии с теплотой сублимации (правило Стефана), модулем упругости и другими свойствами вещества.

Эффект Ребиндера: изменение прочности и пластичности твердых тел вследствие снижения их поверхностной энергии.

Капиллярные явления. Зависимость давления пара от кривизны поверхности жидкости. Капиллярная конденсация. Зависимость растворимости от кривизны поверхности растворяющихся частиц (закон Гиббса – Оствальда – Фрейндлиха).

#### ***Электрохимические процессы***

11. Растворы электролитов. Иондипольное взаимодействие, как основной процесс, определяющий устойчивость растворов электролитов. Коэффициенты активности в растворах электролитов. Средняя активность и средний коэффициент активности, их связь с активностью отдельных ионов. Основные положения теории Дебая – Хюккеля. Потенциал ионной атмосферы.

Условия электрохимического равновесия на границе раздела фаз и в электрохимической цепи. Термодинамика гальванического элемента. Электродвижущая сила, её выражение через энергию Гиббса реакции в элементе. Уравнения Нернста и Гиббса – Гельмгольца для равновесной электрохимической цепи. Понятие электродного потенциала. Определение коэффициентов активности на основе измерений ЭДС гальванического элемента.

Электропроводность растворов электролитов; удельная и эквивалентная электропроводность. Числа переноса, подвижность ионов и закон Кольрауша. Электрофоретический и релаксационные эффекты.

### III. Кинетика химических реакций

#### *Химическая кинетика*

1. *Основные понятия химической кинетики.* Простые и сложные реакции, молекулярность и скорость простой реакции. Основной постулат химической кинетики. Способы определения скорости реакции. Кинетические кривые. Кинетические уравнения. Константа скорости и порядок реакции. Реакции переменного порядка.

2. *Феноменологическая кинетика* сложных химических реакций. Принцип независимости элементарных стадий. Кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций. Квазистационарное приближение. Метод Боденштейна – Тёмкина. Кинетика гомогенных каталитических и ферментативных реакций. Уравнение Михаэлиса – Ментен.

Цепные реакции. Кинетика неразветвленных и разветвленных цепных реакций. Кинетические особенности разветвленных цепных реакций. Предельные явления в разветвленных цепных реакциях. Полуостров воспламенения, период индукции. Тепловой взрыв.

Реакции в потоке. Реакции идеального вытеснения и идеального смешения. Колебательные реакции.

3. *Макрокинетика.* Роль диффузии в кинетике гетерогенных реакций. Кинетика гетерогенных каталитических реакций. Различные режимы протекания реакций (кинетическая и внешняя кинетическая области, области внешней и внутренней диффузии).

4. Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса. Энергия активации и способы её определения.

5. *Элементарные акты химических реакций* и физический смысл энергии активации. Термический и нетермические пути активации молекул. Обмен энергией (поступательной, вращательной и колебательной) при столкновениях молекул. Время релаксации в молекулярных системах.

Теория активных столкновений. Сечение химических реакций. Формула Траутца – Льюиса. Расчет предэкспоненциального множителя по молекулярным постоянным. Стерический фактор.

Теория переходного состояния (активированного комплекса). Поверхность потенциальной энергии. Путь и координата реакции. Статистический расчет константы скорости. Энергия и энтропия активации. Использование молекулярных постоянных при расчете константы скорости.

6. *Различные типы химических реакций.* Мономолекулярные реакции в газах, схема Линдемана – Христиансена. Теория РРКМ. Бимолекулярные и тримолекулярные реакции, зависимость предэкспоненциального множителя от температуры.

Реакции в растворах, влияние растворителя и заряда реагирующих частиц. Клеточный эффект и сольватация.

Фотохимические и радиационнохимические реакции. Элементарные фотохимические процессы. Эксимеры и эксиплексы. Изменение физических и химических свойств молекул при электронном возбуждении. Квантовый выход. Закон Эйнштейна – Штарка.

7. Электрохимические реакции. Двойной электрический слой. Модельные представления о структуре двойного электрического слоя. Теория Гуи – Чапмена – Грэма.

Электрокаплярные явления, уравнение Липпмана.

Скорость и стадии электродного процесса. Поляризация электродов. Полярография. Ток обмена и перенапряжение. Зависимость скорости стадии разряда от строения двойного слоя.

Химические источники тока, их виды. Электрохимическая коррозия. Методы защиты от коррозии.

### ***Катализ***

8. *Классификация каталитических реакций* и катализаторов. Теория промежуточных соединений в катализе, принцип энергетического соответствия.

9. *Гомогенный катализ*. Кислотноосновной катализ. Кинетика и механизм реакций специфического кислотного катализа. Функции кислотности Гаммета. Кинетика и механизм реакций общего кислотного катализа. Уравнение Брэнстеда. Корреляционные уравнения для энергий активации и теплот реакций. Специфический и общий основной катализ. Нуклеофильный и электрофильный катализ.

Катализ металлокомплексными соединениями. Гомогенные реакции гидрирования, их кинетика и механизмы.

10. *Ферментативный катализ*. Адсорбционные и каталитические центры ферментов. Активность и субстратная селективность ферментов. Коферменты. Механизмы ферментативного катализа.

11. *Гетерогенный катализ*. Определение скорости гетерогенной каталитической реакции. Удельная и атомная активность. Селективность катализаторов. Роль адсорбции в кинетике гетерогенных каталитических реакций. Неоднородность поверхности катализаторов, нанесенные катализаторы. Энергия активации гетерогенных каталитических реакций.

Современные теории функционирования гетерогенных катализаторов.  
Основные промышленные каталитические процессы.

## ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ

№ листа изменений или наименование элемента приложения	№ протокола Ученого Совета (секции Уч. Совета)	Дата заседания Ученого Совета (секции Уч. Совета)	Всего листов в документе	Подпись зам. директора по научной работе
	Рабочая программа обсуждена и принята на заседании Ученого совета ГЕОХИ РАН, протокол № 8	22 октября 2014 года	27	
--	Обновленный текст программы принят на заседании Ученого совета РАН, Протокол №11(8)	28 декабря 2016 года	27	