

Программа утверждена на заседании
Ученого Совета химического факультета
МГУ имени М. В. Ломоносова
Протокол № 4 от 29 мая 2014 г.

Рабочая программа дисциплины (модуля)

1. Наименование дисциплины (модуля): СОВРЕМЕННАЯ ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

Краткая аннотация: В результате изучения дисциплины "Современная физическая химия" аспиранты должны ознакомиться с теми разделами строения вещества, термодинамики, кинетики и катализа, которые не были включены в общий студенческий курс физической химии. Главная цель курса – дать углублённое изложение современных аспектов этих традиционных разделов физической химии, которые были рассмотрены в простой форме или недостаточно полно рассмотрены во водных общих курсах строенческого цикла и курсе физической химии, читаемом студентам химического факультета МГУ. В первой части курса на основе последовательного использования квантово-механических моделей систематически рассматриваются современные теоретические и экспериментальные методы анализа строения молекулярных систем. Особое внимание уделяется учёту симметрии состояний разных типов и использованию свойств симметрии при построении физико-химических моделей вещества, используемых в других частях курса. Во второй и третьей частях курса обсуждаются более традиционные вопросы физической химии, но в углублённой форме, с опорой на современную теорию строения молекулярных систем и методов статистической физики. Во всех разделах основное внимание уделяется современным методам исследования и их взаимосвязям. Обсуждаются и недостаточно полно освещенные ранее вопросы, к которым относятся, например, особенности и причины уширения спектральных линий, автоионизационные состояния молекул, симметрия переходного состояния, метод графов в феноменологической (формальной) кинетике, фемтосекундная спектроскопия и теория активированного комплекса, нанокатализ. Материал будет весьма полезен при подготовке к сдаче экзамена кандидатского минимума по специальностям 02.00.04 – физическая химия, а также 02.00.15 – кинетика и катализ. Проработка указанных и других вопросов не усложняет, но существенно упрощает понимание всех разделов физической химии.

2. Уровень высшего образования – подготовка научно-педагогических кадров в аспирантуре

3. Направление подготовки: 04.06.01 Химические науки, **направленность:** физическая химия, кинетика и катализ

4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок 1 «Дисциплины (модули)»

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Формируемые компетенции (код компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
УК-1 способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	В1 (УК-1) Владеть навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях
УК-2 способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки	31 (УК-2) Знать методы научно-исследовательской деятельности
	В2 (УК-2) Владеть технологиями планирования в профессиональной деятельности в сфере научных исследований
ОПК-1 способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	У1 (ОПК-1) Уметь выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования
ПК-4 способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направлению (научной специальности) 02.00.04 Физическая химия	31 (ПК-4) Знать современное состояние науки в области физической химии
	34 (ПК-4). Знать основные законы и закономерности, определяющие направление и скорость протекания каталитических процессов
	35 (ПК-4). Знать основные законы и закономерности протекания химических реакций
	У3 (ПК-4) Уметь строить термодинамические модели систем и использовать их при расчетах фазовых и химических равновесий
	У4 (ПК-4) Уметь использовать законы термодинамики для решения практических задач, в том числе, при разработке новых материалов и технологий

	У5 (ПК-4) Уметь получать термодинамические данные, необходимые для решения задач профессиональной деятельности
	У7 (ПК-4) Уметь использовать представления современной теории строения молекул и квантовой химии для понимания современной физико-химической литературы

6. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 5 зачетных единиц, всего 180 часов, из которых 82 часа составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (72 часа - лекции, 6 часов – групповые консультации, 4 часа – мероприятия промежуточной аттестации), 98 часов составляет самостоятельная работа учащегося.

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия

В специалитете или бакалавриате и магистратуре должны быть освоены общие курсы: «Математический анализ», «Аналитическая геометрия», «Линейная алгебра», «Физика», «Теория вероятности и математическая статистика», «Физическая химия», «Строение молекул».

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе	
		Контактная работа, часы из них	Самостоятельная работа, часы из них

		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п..	Всего
Раздел 1. Строение молекул										
Тема 1.1. Основные особенности моделирования молекулярных систем. Основные классы моделей, используемые в теории молекул. Применение методов классической и квантовой механики. Соотношение свойств молекул и свойств образованных ими веществ. Основные операторы физических величин, коммутационные соотношения между ними и соотношения неопределенностей. Эволюция состояний	10	6					6	4		4
Тема 1.2. Переходы между стационарными состояниями в молекулярных системах. Эйнштейновское описание переходов. Спектр, форма линии, разные типы уширения линий. 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. Шкала энергетических и временных характеристик основных внутримолекулярных процессов. Основные единицы измерения, применяемые в физической химии в связи с молекулярными задачами. Электрические и магнитные свойства молекулы. Мультипольные моменты	10	4					4	6		6

<p>Тема 1.3. Простейшие квантово-механические модели молекулярных систем. Особенности описания спектров взаимодействующих систем. Элементарные модели поступательного, вращательного и колебательного движений и проблемы оценки статистических сумм молекул. Адиабатическое приближение и его применение. Поверхности потенциальной энергии и их особые точки. Молекулярные постоянные, характеризующие строение потенциальных поверхностей. Особенности энергетического спектра двух- и многоатомных молекул молекулы. Колебательные состояния молекул. Гармоническая и ангармонические модели внутримолекулярных сил. Нормальные и локальные колебания. Резонансные явления в спектрах. Колебательно-вращательные состояния двух- и многоатомных молекул, соответствующие молекулярные постоянные и расчет статистических сумм по состояниям. Принципы экспериментального определения электрических и магнитных свойств молекул. Дипольный момент молекулы и показатель преломления среды. Простейшие модели строения жидких систем и их основные классы. Спектральные проявления межмолекулярного взаимодействия</p>	12	6				6	6		6
<p>Тема 1.4. Высокоэнергетические процессы с участием молекулярных систем. 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. Фото- и рентгеноэлектронная спектроскопия. Орбитальная модель молекулы и e-2e процессы. Автоионизационные состояния атомов и молекул. Оже-спектроскопия. Ионизационные методы анализа строения молекул</p>	8	4				4	4		4
<p>Тема 1.5. Симметрия в молекулярных задачах. Точечная и перестановочная симметрия волновых функций. Основные типы симметрии; классификация состояний и определение кратности вырождения. Симметрия и взаимодействие различных типов движений в молекуле. Симметрия состояний и правила отбора для переходов между ними. Основные представления о симметрии кристаллических систем. Прямая и обратная решетки. Зонная структура спектра кристаллических веществ. Принципы</p>	18	8				8	10		10

применения и особенности рентгенографических методов исследования кристаллических систем										
Тема 1.6. Электронные состояния молекул. Классификация электронных состояний. Квантово-химические методы описания электронных состояний молекул. Вариационный метод и его приложения: приближение Хартри – Фока, метод конфигурационного взаимодействия. Теорема Купманса и первые потенциалы ионизации. Простейшие модели молекулярных орбиталей и описание химической связи. Ограниченность орбитальной модели. Методы учета электронной корреляции. Простейшие модели электронного строения молекул. Свойства электронной плотности молекулы. Электронная плотность и геометрия молекул. Спиновая плотность	8	4					4	4		4
Тема 1.7. Физико-химические явления, связанные со спином. Связь спина и перестановочной симметрии волновых функций. Принцип Паули. 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. Особенности применения каждого из методов	4	2					2	2		2
Тема 1.8. Принципы моделирования кинетики элементарного акта химической реакции. Симметрия переходного состояния. Простейшие индексы реакционной способности. Принцип сохранения орбитальной симметрии. Корреляционные соотношения в химических исследованиях. Принципы построения аддитивных схем для расчета свойств молекул	6	2		2			4	2		2
Раздел 2. Химическая термодинамика										
Тема 2.1. Внутренняя энергия. Приближение аддитивности. Границы применимости	4	2					2	2		2
Тема 2.2. Второй закон термодинамики. Пфафова форма и интегрирующий множитель. Энтропия	4	2					2	2		2
Тема 2.3. Равновесные и неравновесные процессы. Потерянная работа и	5	2					2	3		3

некомпенсированная теплота Клаузиуса. Принцип адиабатической недо-стижимости										
Тема 2.4. Характеристические функции и термодинамические потенциалы. Энергия Гиббса. Энергия Гельмгольца. Равновесия фазовые и химические. Понятие о современных численных методах расчета равновесий	5	2					2	3		3
Тема 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	5	2					2	3		3
Тема 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	5	2					2	3		3
Тема 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	5	2					2	3		3
Тема 2.8. Связь термодинамических функций с суммой состояний. Характеристическая температура. Квантовые эффекты и значения т/д функций при абсолютном нуле. Химический потенциал идеального газа. Начало отсчета. Стандартное состояние и сумма состояний. Выражение K_p через суммы по состояниям	5	2					2	3		3
Тема 2.9. Статистическая теория идеального кристалла. Приближение Эйнштейна. Теория Дебая. Закон кубов Дебая. Энтропия и энергия Гиббса при абсолютном нуле	7	2		2			4	3		3
Раздел 3. Химическая кинетика										
Тема 3.1. Основные понятия феноменологической кинетики. Элементарные и простые реакции, молекулярность элементарной реакции. Сложные	4	2					2	2		2

реакции, механизм химической реакции									
Тема 3.2. Кинетический закон действующих масс (основной постулат химической кинетики) для элементарных реакций. Кинетическое уравнение. Константа скорости, принцип независимости в химической кинетике	4	2					2	2	2
Тема 3.3. Кинетика сложных реакций: обратимые, параллельные и последовательные реакции. Линейно-независимые реакции, стехиометрическое правило Гиббса. Стехиометрическая матрица, стехиометрический базис. Принцип детального равновесия	5	2					2	3	3
Тема 3.4. Автокаталитические и колебательные реакции. Фазовый портрет процесса. Аттракторы. Типы стационарных точек. Реакция Белоусова – Жаботинского	5	2					2	3	3
Тема 3.5. Основные пути активации молекул. Термическая и нетермическая активация молекул, характерные интервалы энергии и природа активных частиц. Обмен энергией при упругих и неупругих столкновениях	5	2					2	3	3
Тема 3.6. Поверхность потенциальной энергии (ППЭ). Путь реакции и координата реакции. Переходное состояние и активированный комплекс. Экспериментальные и расчетные методы построения ППЭ. Метод молекулярных пучков	5	2					2	3	3
Тема 3.7. Физико-химические основы катализа. Катализ и равновесие. Промежуточные соединения в катализе; принцип энергетического соответствия. Снижение энергии активации как главный фактор каталитического ускорения реакций	5	2					2	3	3
Тема 3.8. Ферментативный катализ. Структура ферментов, адсорбционные и каталитические центры. Коферменты. Конформационные эффекты. Кинетика ферментативных реакций. Уравнение Михаэлиса – Ментен. Конкурентное, неконкурентное и субстратное ингибирование	5	2					2	3	3
Тема 3.9. Гетерогенный катализ. Основные типы гетерогенных катализаторов. Активные центры, неоднородность поверхности. Кислотно-	7	2		2			4	3	3

основной и окислительно-восстановительный гетерогенный катализ. Кинетика гетерогенных каталитических реакций. Нанокатализ										
Промежуточная аттестация: <u>зачет</u>	4						10			
Итого	180	72		6		4	82			98

8. Образовательные технологии:

Проводятся традиционные лекции с использованием (там, где это нужно) мультимедийных презентаций.

9. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Аспирантам предоставляется программа курса, план занятий и перечень заданий для самостоятельной работы. По теме каждой лекции указывается материал в источниках из списков основной и вспомогательной литературы, а также из интернет-ресурсов.

10. Ресурсное обеспечение:

Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

Раздел 1:

1. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Изд-во МГУ, 2001
2. Ю. В. Новаковская. Молекулярные системы. Теория строения и взаимодействия с излучением. – М.: Едиториал УРСС, 2004, 2005, в 3-х частях
3. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. (2 изд.) – Ростов-на-Дону: Феникс, 1997
4. Вилков Л. В., Пентин Ю. А. Физические методы исследования в химии. М.: Изд-во МГУ. Ч.1,2, 1987, 1989
5. Фларри Р. Квантовая химия. М.: Мир, 1985
6. Р. Драго. Физические методы в химии. – М.: Мир, 1981, в 2-х томах
7. Эткинс П. Физическая химия. Т. 1 и 2. М.: Мир, 1980
8. Эткинс П. Кванты. Справочник концепций. М. Мир, 1977

Раздел 2:

1. О. М. Полторак. Термодинамика в физической химии. М.: Высшая школа, 1991 – 320 с.
2. Н. А. Смирнова. Методы статистической термодинамики в физической химии. М.: Высшая школа, 1982 – 455 с.
3. П. Эткинс. Физическая химия. т. 1 – М.: Мир, 1980

Раздел 3:

1. Бендер М., Бергерон Р., Комяма М., Биоорганическая химия ферментативного катализа, М., Мир, 1987

2. Березин И.В., Мартинек К., Основы физической химии ферментативного катализа, М., Высшая школа, 1977
3. Боженко К.В., Ягодковский В.Д., Кинетика элементарных химических реакций, М., Изд-во РУДН, 2003
4. Боресков Г.К. Гетерогенный катализ, М., Наука, 1988
5. Денисов Е.Т., Саркисов О.М., Лихтенштейн Г.И., Химическая кинетика, М., Химия, 2000
6. Еремин Е.Н., Основы химической кинетики, М., Высшая школа, 1976
7. Крылов О.В., Гетерогенный катализ, М., Академкнига, 2004
8. Панченков Г.М., Лебедев В.П., Химическая кинетика и катализ, М., Химия, 1985
9. Пригожин И., Кондепуди Д., Современная термодинамика, М., Мир, 2002
10. Пурмаль А.П., Простов В.Н., Химическая кинетика, М., Изд-во МФТИ, 1999
11. Романовский Б.В. Основы химической кинетики, М.: Экзамен, 2006
12. Романовский Б.В. Основы катализа, М.: Бином, 2013
13. Робинсон П., Холбрук К., Мономолекулярные реакции, М., Мир, 1975
14. Семиохин И.А., Страхов Б.В., Осипов А.И., Кинетика химических реакций, М., Изд-во МГУ, 1995
15. Тёмкин О.Н. Гомогенный металлокомплексный катализ. Кинетические аспекты, М., Академкнига, 2008
16. Чоркендорф И., Наймонтсведрайт Х. Современный катализ и химическая кинетика, (пер с англ.), М., Интеллект, 2010
17. Эткинс П., де Паула Дж. Физическая химия. М.: Мир, 2007

Дополнительная литература

Раздел 1:

1. Бейдер Р. Атомы в молекулах. М.: Мир. 2001
2. Минкин В. И., Симкин Б. Я., Миняев Р. М. Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций. М.: Химия, 1986

Раздел 2:

1. Воронин Г. Ф. Термодинамика. М.: Изд-во моск ун-та, 1980

Раздел 3:

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., Бином, 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

Перечень используемых информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы:

- Национальный институт стандартов и технологий (NIST), банк термодинамических данных: www.nist.gov
- Объединенный институт высоких температур РАН, термодинамические свойства индивидуальных соединений: <http://jiht.ru/>

11. Язык преподавания – русский

12. Преподаватели:

ПУПЫШЕВ ВЛАДИМИР ИВАНОВИЧ, в.н.с, к.ф.-м.н. vip@classic.chem.msu.su

СИДОРОВ ЛЕВ НИКОЛАЕВИЧ, проф., д.х.н. sidorov@phys.chem.msu.ru

РОМАНОВСКИЙ БОРИС ВАСИЛЬЕВИЧ, проф., д.х.н. bvromfnovsky@mail.ru

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

1. Планируемые результаты обучения для формирования компетенций п.5 и соответствующие им критерии оценивания приведены в Приложении 1.
2. Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации – зачета.

Образцы контрольных вопросов для текущего контроля усвоения материала:

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 g-резонансной (мессбауэровской) спектроскопии для заданного набора соединений. Пример: соединения железа в степенях окисления +2 и +3
3. Описать качественные изменения рентгеноэлектронного спектра в задаваемых преподавателем рядах химических соединений. Пример: ряд солей карбоновых кислот
4. В чем состоят и по каким причинам могут нарушаться правила Каши, Вавилова, Левшина?
5. Описать изменения колебательного спектра заданного набора молекул при изотопном замещении. [Вариант: описать изменение туннельного расщепления в системах.] Примеры систем: H₂O, HD₂O, D₂O; NH₃, NH₂D, NHD₂, ND₃
6. Для заданной двухатомной молекулы с помощью стандартных справочных данных определить колебательно-вращательный уровень, наиболее заселенный при комнатной температуре
7. Описать систему энергетических уровней и соответствующие значения квантовых чисел для двух эквивалентных частиц со спином $\frac{1}{2}$ во внешнем магнитном поле
8. Какие квантовые числа описывают вращательные состояния молекул типа сферического волчка? Какое состояние наиболее заселено при заданной температуре? Почему это состояние не совпадает с тем, которое наиболее заселено для двухатомной молекулы (задача о свободном ротаторе) с тем же самым значением вращательной постоянной?

9. В какой из молекул больше значение вращательного квантового числа, отвечающего при заданной температуре наиболее заселенному состоянию для тетраэдрической молекулы AB_4 и молекулы AB в синглетном состоянии, если межъядерные расстояния AB совпадают в обеих системах?
10. Объясните, почему газообразные азот и кислород бесцветны, а интенсивность окраски газообразных галогенов меняется с ростом номера элемента
11. Описать зависимость энергии взаимодействия двух диполей (заряда и диполя, двух квадрупольей) в зависимости от их взаимной ориентации
12. Почему в случае систем в электрическом поле нет аналогов диа- и парамагнетиков?
13. Рассмотреть задачу о свободном движении частицы по окружности. Как соотносить строение энергетического спектра этой задачи с явлением ароматичности?

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 μ -пространства?
8. Когда и почему вводятся дополнительные внутренние переменные?
9. Что такое статистический ансамбль? Какие ансамбли вам известны?
10. Когда и зачем вводится химическая переменная?
11. Условия химического равновесия?
12. Что такое микро и макросостояния системы?

Раздел 3:

1. Порядок химической реакции
 - всегда положительное число
 - может быть отрицательным
 - всегда целое число
 - все три утверждения неверны
2. Молекулярность элементарной химической реакции
 - всегда целое неотрицательное число
 - может быть отрицательным числом
 - может быть нецелочисленной величиной

–все три утверждения неверны

3. Время полупревращения реагента с увеличением его начальной концентрации

–всегда растет

–всегда снижается

–может возрасть

–все три утверждения неверны

4. Наблюдаемая константа скорости при повышении температуры

–всегда растет

–может уменьшаться

–оба утверждения неверны

5. Истинная энергия активации

–всегда положительна

–может быть отрицательной

–оба утверждения неверны

6. Наблюдаемая энергия активации

–всегда отрицательна

–всегда положительна

–может быть отрицательной

–все три утверждения неверны

7. В последовательной реакции $A \rightarrow B \rightarrow R$ максимальный выход промежуточного вещества В составляет менее 50%. Следовательно, соотношение констант скорости таково, что

– $k_1 < k_2$

– $k_1 > k_2$

8. В двух параллельных реакциях $A \rightarrow X$, $2A \rightarrow Y$, имеющих первый и второй порядок

–реакции по реагенту А, соответственно, отношение выходов продуктов $[X]/[Y]$

–не зависит от времени

–уменьшается со временем

–увеличивается со временем

9. Реакция образования HCl из H_2 и Cl_2 протекает со взрывом, так как это

–разветвленная цепная реакция

–высокоэкзотермическая реакция

–оба утверждения неверны

10. Второй предел воспламенения смеси H_2 и O_2

–зависит от материала реактора

–не зависит от примесей инертных веществ

–оба утверждения неверны

11. Наблюдаемая скорость химической реакции

–всегда увеличивается с температурой

–может уменьшаться с температурой

–оба утверждения неверны

12. Истинная энергия активации

–всегда положительна

–может быть отрицательной

–оба утверждения неверны

13. Путь реакции – это

–то же, что и координата реакции

–траектория системы по ППЭ

–траектория системы по ППЭ, соответствующая минимальной потенциальной энергии

–все три утверждения неверны

14. Стандартная свободная энергия активации

–всегда отрицательна

–может быть отрицательной

–оба утверждения неверны

15. Для бимолекулярной реакции было найдено, что предэкспонента пропорциональна T^{-1} , следовательно, активированный комплекс

–имеет линейную структуру

–имеет нелинейную структуру

–может иметь линейную структуру

–все три утверждения неверны

16. Лимитирующая стадия двухсубстратной реакции, катализируемой высокоспиновыми тетраэдрическими комплексами Fe (II) и Ni (II) – это вхождение обоих реагентов в координационную сферу металла. Поэтому

–первый комплекс активнее второго

–второй комплекс активнее первого

–их активности практически одинаковы

Образцы заданий и вопросов для промежуточной аттестации – **зачета**:

Раздел 1:

А) Одна из задач уровня и типа вопросов для текущего контроля

Б) Теоретический вопрос из списка:

- 1.Б1. Энергетические и временные характеристики основных внутримолекулярных процессов
- 1.Б2. Переходы между стационарными состояниями под действием возмущения. Эйнштейновское описание переходов
- 1.Б3. Спектр, форма линии, разные типы уширения линий
- 1.Б4. Основные элементарные процессы, протекающие при взаимодействии электромагнитного излучения с молекулами. Поглощение, самопроизвольное и вынужденное испускание, рассеяние и комбинационное рассеяние излучения
- 1.Б5. Принципы современных методов спектральных исследований молекулярных систем
- 1.Б6. Принципы гамма-резонансной (мессбауэровской) спектроскопии; особенности ее приложения к химическим задачам
- 1.Б7. Упругое рассеяние частиц молекулой. Принципы электронографического, нейтроно- и рентгенографического анализа строения молекул
- 1.Б8. Адиабатическое приближение. Поверхности потенциальной энергии и их особые точки. Молекулярные постоянные, характеризующие строение потенциальных поверхностей. Особенности строения переходных состояний
- 1.Б9. Энергетический спектр двухатомной молекулы и соответствующие молекулярные состояния. Электронно-колебательно-вращательные состояния двухатомных молекул, соответствующие молекулярные постоянные и расчет статистических сумм по состояниям
- 1.Б10. Электрический и магнитный моменты молекулы. Мультипольные моменты. Принципы экспериментального определения дипольных моментов. Дипольный момент молекулы и показатель преломления среды
- 1.Б11. Спин. Физико-химические явления, связанные со спином. Связь спина и статистики. Принцип Паули. Методы анализа спиновых состояний молекулярных систем
- 1.Б12. Классификация электронных состояний молекулы. Фото- и рентгено-электронная спектроскопия
- 1.Б13. Автоионизационные состояния атомов и молекул. Ионизационные методы анализа применяемые в физической химии
- 1.Б14. Вариационный метод и его приложения: приближение Хартри-Фока, метод конфигурационного взаимодействия. Теорема Купманса и первые потенциалы ионизации. Орбитальная модель молекулы и e^{-2e} процессы
- 1.Б15. Простейшие модели молекулярных орбиталей и описание химической связи. Ограниченность орбитальной модели. Методы учета электронной корреляции
- 1.Б16. Простейшие модели электронного строения молекул. Химическая связь и электронные распределения. Свойства электронной плотности молекулы. Электронная плотность и геометрия молекул. Спиновая плотность
- 1.Б17. Колебательные состояния молекул. Гармоническая и ангармоническая модели сил в молекуле. Нормальные и локальные колебания. Резонансные явления в спектрах
- 1.Б18. Особенности описания вращательных состояний и соответствующих статистических сумм для многоатомных молекулярных систем разных типов
- 1.Б19. Спин-орбитальное и спин-спиновое взаимодействия. Взаимодействие молекулы с электромагнитным полем в присутствии внешних полей
- 1.Б20. Основные представления о методах ЭПР и ЯМР спектроскопии. Применение этих методов для анализа внутримолекулярных взаимодействий
- 1.Б21. Простейшие модели строения жидких систем, их основные классы и методы исследования

- 1.Б22. Симметрия в молекулярных задачах. Точечная и перестановочная симметрия волновых функций. Основные типы симметрии и классификация состояний
- 1.Б23. Симметрия и взаимодействие различных типов движений в молекуле
- 1.Б24. Кристаллические системы. Основные представления теории кристаллов. Симметрия кристаллов. Зонная структура спектра кристаллических веществ
- 1.Б25. Принципы изучения кристаллических систем методами рентгенографии
- 1.Б26. Принципы квантово-химического описания кинетики элементарного акта химической реакции. Симметрия переходного состояния
- 1.Б27. Простейшие индексы реакционной способности
- 1.Б28. Принцип сохранения орбитальной симметрии
- 1.Б29. Корреляционные соотношения в химических исследованиях. Корреляции "структур – свойство", "структура – реакционная способность"
- 1.Б30. Принципы построения аддитивных схем для расчета свойств молекул

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 μ -пространства?
8. Когда и почему вводятся дополнительные внутренние переменные?
9. Что такое статистический ансамбль? Какие ансамбли вам известны?
10. Когда и зачем вводится химическая переменная?
11. Условия химического равновесия?
12. Что такое микро и макро состояния системы?

Раздел 3:

- 3.1. Дайте определение основным понятиям феноменологической кинетики
- 3.2. Сформулируйте кинетический закон действующих масс
- 3.3. Какие методы используются при рассмотрении кинетики сложных реакций?
- 3.4. Что такое колебательные реакции? Фазовый портрет процесса. Реакция Белоусова – Жаботинского"
- 3.5. Каковы основные пути активации молекул? Обмен энергией при упругих и неупругих столкновениях
- 3.6. Дайте определение понятию "Поверхность потенциальной энергии"
- 3.7. Приведите примеры промежуточных соединений в катализе
- 3.8. Назовите уровни структурной иерархии ферментов

- 3.9. Что представляют собой активные центры гетерогенных катализаторов?
- 3.10. Приведите основные уравнения кинетики гетерогенных каталитических реакций
- 3.11. Что такое "размерные эффекты в гетерогенном катализе"?
- 3.12. Нанокатализ: назовите критерии отнесения материальных объектов к «нано»

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Зачет проходит в форме устного ответа на вопросы, включенные в перечень заданий и вопросов для промежуточной аттестации. На каждого аспиранта заполняется ведомость, которая подписывается преподавателем, принимающим зачет.

Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине «Современная физическая химия» на основе карт компетенций выпускников

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю) и ШКАЛА ОЦЕНИВАНИЯ					ПРОЦЕДУРЫ ОЦЕНИВАНИЯ*
	1	2	3	4	5	
V1 (УК-1) Владеть навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	Отсутствие владения	Неполное владение отдельными приемами термодинамического анализа	Владение шаблонными приемами термодинамического анализа, достаточное только в рутинных случаях	Довольно полное, но содержащее отдельные пробелы владения приемами термодинамического анализа	Сформированное систематическое владение приемами термодинамического анализа	Устный опрос в ходе зачета
31 (УК-2) Знать методы научно-исследовательской деятельности	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания о методах определения термодинамических свойств веществ	Несистематические знания о методах определения термодинамических свойств веществ	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления о методах определения термодинамических свойств веществ	Сформированные и систематические знания о методах определения термодинамических свойств веществ	Устный опрос в ходе зачета
35 (ПК-4) Знать основные законы и закономерности протекания химических реакций	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания основных законов протекания химических реакций	Несистематические знания основных законов протекания химических реакций	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знание основных законов протекания химических реакций	Сформированные и систематические знания основных законов протекания химических реакций	Устный опрос в ходе зачета
V2 (УК-2)	Отсут-	Владение плани-	Владение построе-	Довольно успеш-	Полное владение	Устный опрос

Владеть технологиями планирования в профессиональной деятельности в сфере научных исследований	Отсутствие владения	планированием только отдельных этапов термодинамического исследования	использованием шаблонных планов термодинамического исследования	нестабильное, но недостаточно гибкое владение приемами планирования термодинамического исследования	технологиями гибкого планирования термодинамического исследования	в ходе зачета
У1(ОПК-1) Уметь выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования	Отсутствие умений	Умение использовать расчетные программы только на отдельных этапах термодинамического анализа	Шаблонное умение использовать расчетные программы на всех этапах термодинамического анализа	В целом достаточно полное, но содержащее отдельные пробелы умение использовать расчетные программы	Сформированное умение гибко использовать возможности расчетных программ на всех стадиях термодинамического анализа	Устный опрос в ходе зачета
31 (ПК-4) Знать современное состояние науки в области физической химии	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания о роли термодинамики в физической химии	Ограниченные представления о роли термодинамики в физической химии	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания о роли и возможностях термодинамики в физической химии	Сформированные и систематические знания о роли термодинамики в физической химии	Устный опрос в ходе зачета
У3 (ПК-4) Уметь строить термодинамические модели систем и использовать их при расчетах фазовых и химических равновесий	Отсутствие умений	Фрагментарное умение моделировать и рассчитывать фазовые и химические равновесия	Шаблонное умение моделировать и рассчитывать фазовые и химические равновесия	В целом достаточно полное, но содержащее отдельные пробелы умение моделировать и рассчитывать фазовые и химические равновесия	Сформированное умение гибко моделировать и рассчитывать фазовые и химические равновесия	Устный опрос в ходе зачета

<p>У4 (ПК-4) Уметь использовать законы термодинамики для решения практических задач, в том числе, при разработке новых материалов и технологий</p>	Отсутствие умений	Фрагментарное умение использовать законы термодинамики для решения практических задач	Шаблонное умение использовать законы термодинамики для решения практических задач	В целом достаточно полное, но содержащее отдельные пробелы умение использовать законы термодинамики для решения практических задач	Сформированное умение использовать законы термодинамики для решения практических задач	Устный опрос в ходе зачета
<p>У5 (ПК-4) Уметь получать термодинамические данные, необходимые для решения задач профессиональной деятельности</p>	Отсутствие умений	Фрагментарное умение получать термодинамические данные, необходимые для решения задач профессиональной деятельности	Шаблонное умение получать термодинамические данные, необходимые для решения задач профессиональной деятельности	В целом достаточно полное, но содержащее отдельные пробелы умение получать термодинамические данные, необходимые для решения задач профессиональной деятельности	Сформированное умение получать термодинамические данные, необходимые для решения задач профессиональной деятельности	Устный опрос в ходе зачета
<p>У6 (ПК-4) Уметь использовать представления современной теории строения молекул и квантовой химии для понимания современной физико-химической литературы</p>	Отсутствие умений	Фрагментарное умение использовать представления теории строения молекул и квантовой химии для понимания физико-химической литературы	Шаблонное умение использовать представления теории строения молекул и квантовой химии для понимания физико-химической литературы	В целом достаточно полное, но содержащее отдельные пробелы умение использовать представления теории строения молекул и квантовой химии для понимания физико-химической литературы	Сформированное умение использовать представления теории строения молекул и квантовой химии для понимания физико-химической литературы	Устный опрос в ходе зачета