



Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского СО РАН



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Физическая химия

основная образовательная программа подготовки аспиранта
по направлению 04.06.01 Химические науки

Уровень высшего образования
подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре

Квалификация: Исследователь.
Преподаватель-исследователь.

Иркутск 2015

Рабочая программа составлена на основании федеральных государственных образовательных стандартов к основной образовательной программе высшего образования подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению 04.06.01 Химические науки.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА РАССМОТРЕНА И ОДОБРЕНА на заседании Ученого совета ИрИХ СО РАН протокол № 5 от 19 мая 2015 г.

Зав. аспирантурой, к.х.н.



Т.Н. Комарова

1. Цели и задачи учебной дисциплины

Рассматриваемая дисциплина является основной в подготовке аспирантов, обучающихся по профилю 02.00.04 Физическая химия.

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

Задачи:

- 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 в структуре ООП

2.1. Учебная дисциплина Б1.В.ОД.1 «Физическая химия» входит в вариативную часть междисциплинарного профессионального модуля ООП.

2.2. Данная программа строится на преемственности программ в системе высшего образования и предназначена для аспирантов ИрИХ СО РАН, прошедших обучение по программе подготовки магистров, прослушавших соответствующие курсы и имея по ним положительные оценки. Она основывается на положениях, отраженных учебных программах указанных уровней. Для освоения дисциплины «Физическая химия» требуются знания и умения, приобретенные обучающимися в результате освоения ряда дисциплин (разделов дисциплин), таких как:

- Основы квантово-химического моделирования строения молекул и реакционной способности вещества,
- Физико-химические методы исследования структуры веществ,
- Механизмы органических реакций,
- Теоретические основы органической химии,
- Органическая химия,
- Химия элементоорганических соединений,
- Основы стереохимии
- Современные физико-химические и аналитические методы исследования органических веществ и реакций,

2.3. Дисциплина «Физическая химия» необходима при подготовке выпускной квалификационной работы аспиранта и подготовке к сдаче кандидатского экзамена.

3. Требования к результатам освоения дисциплины

Процесс изучения дисциплины «Физическая химия» направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ООП по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки:

Универсальные компетенции

- способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1);
- 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 (УК-2);
- готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач (УК-3);
- готовность использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языках (УК-4);
- способность планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития (УК-5).

Общепрофессиональные компетенции

- способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1);
- готовность организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук (ОПК-2);
- готовность к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования (ОПК-3).

Профессиональные компетенции:

- углубленное знание теоретических и методологических основ физической химии, умение проводить анализ и отбор задач и проблем, самостоятельно ставить цель исследования наиболее актуальных проблем физической химии (ПК-1);
- способность ставить и решать инновационные задачи, связанные с разработкой новых химических технологий, изучением свойств веществ с использованием глубоких фундаментальных и специальных знаний, аналитических методов и сложных моделей в условиях неопределенности, умение работать с аппаратурой, выполненной на базе микропроцессорной техники и персональных компьютеров для решения практических задач физической химии (ПК-2);
- умение проводить анализ, самостоятельно ставить задачу исследования наиболее актуальных проблем, имеющих значение для химической отрасли, грамотно планировать эксперимент и осуществлять его на практике владение базовыми представлениями о теоретических основах органической химии, механизмах органических реакций, стереохимии, химии элементоорганических и высокомолекулярных соединений (ПК-3);
- умение применять физико-химические методы исследования структуры вещества, знание основ квантово-химического моделирования строения молекул и реакционной способности вещества (ПК-4).

По окончании изучения дисциплины аспиранты должны будут:

Знать:

- современные достижения науки и передовые технологии в области физической химии;
- современные методы исследования, используемые при физико-химических исследованиях;
- теоретические представления химии, в том числе о строении и механизмов химических реакций;
- важнейшие методы квантовой химии
- фундаментальные основы и методы дизайна и синтеза химических соединений и материалов, в том числе и с заранее заданными свойствами;

- методы исследования структуры и функционально важных свойств химических соединений.

Уметь:

- оценивать перспективные направления развития физической химии с учетом мирового опыта;
- анализировать взаимосвязь между составом, строением и свойствами соединений, в том числе, наноструктурированных материалов;
- применять современные методы и средства исследования для решения конкретных задач физической химии;
- прогнозировать и использовать реакционную способность химических веществ в различных агрегатных состояниях и экстремальных условиях;

Иметь опыт:

- планирования процессов решения задач физической химии;
- анализировать возможность создания новых технологий на базе проведенных исследований;
- работы с программно-аппаратными средствами для изучения физико-химических процессов.

4. Структура и содержание учебной дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 6 зачетных единиц (216 часов).

4.1. Структура дисциплины

№	Наименование дисциплины	Объем учебной работы, ч							Вид итогового контроля
		Всего	Всего аудиторн.	Из аудиторных				Самост. работа	
				Лекц	Лаб	Практ	КСР		
1	Физическая химия	216	108	108	-	-	-	108	Зачет

4.2. Содержание дисциплины

4.2.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№	Наименование разделов и тем	Виды учебной работы и трудоемкость, ч						Формы текущего контроля успеваемости
		Всего	Лекц.	Лаб	Практ	СР	КСР	
Раздел 1. Строение вещества								
1	Квантово-химический расчет молекул	8	4	-	-	4	-	Устный групповой опрос
2	Оценка реакционной способности молекул	10	5	-	-	5	-	Устный групповой опрос
3	Оценка термодинамических параметров химических реакций	10	5	-	-	5		Устный групповой опрос
Раздел 2. Термодинамика и кинетика процессов сорбции								
4	Уравнения мономолекулярной адсорбции	8	4	-	-	4	-	Устный групповой опрос

5	Уравнение Брунауэра – Эмета – Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента.	10	5	-	-	5	-	Устный групповой опрос, решение задач
6	Сорбция на пористых сорбентах.	10	5	-	-	5	-	Устный групповой опрос
7	Кинетика сорбции. Уравнение Рогинского-Зельдовича. Уравнения для скорости адсорбции и десорбции Бэнхема–Барта, Квана.	12	6	-	-	6	-	Устный групповой опрос
Раздел 3. Теория растворов								
8	Парциальные молярные величины. Методы определения парциальных молярных величин Термодинамические типы растворов	12	6	-	-	6	-	Устный групповой опрос
9	Функция смешения для различных типов растворов	12	6	-	-	6	-	Устный групповой опрос
10	Уравнения, описывающие термодинамические функции смешения компонентов в рамках различных моделей	12	6	-	-	6	-	Устный групповой опрос, решение задач
Раздел 4. Фазовые равновесия								
11	Фазовые диаграммы бинарных систем.	12	6	-	-	6	-	Устный групповой опрос
12	Оценка фазового состава наноструктурированных бинарных сплавов	12	6	-	-	6	-	Устный групповой опрос
Раздел 5. Кинетика химических реакций								
13	Формальная кинетика химических реакций	10	5	-	-	5	-	Устный групповой опрос
14	Кинетика диффузионных процессов	10	5	-	-	5	-	Устный групповой опрос, решение задач
15	Кинетика необратимых электродных процессов	12	6	-	-	6	-	Устный групповой опрос
16	Критерии обратимости электродных процессов	12	6	-	-	6	-	Устный групповой опрос
17	Кинетика каталитических процессов. Ферментативный катализ.	12	6	-	-	6	-	Устный групповой опрос
18	Основные промышленные каталитические процессы	10	5	-	-	5	-	Устный групповой опрос
19	Тематика практических занятий	22	11	-	-	11	-	Устный групповой опрос
Всего часов:		216	108	-	-	108	-	

4.2.2 Содержание разделов и тем дисциплины

Раздел 1. Строение вещества

Общие принципы квантово-механического описания молекулярных систем. Стационарное уравнение Шрёдингера для свободной молекулы. Методы решения уравнения Шрёдингера. Адиабатическое приближение. Выбор волновой функции молекулы. Методы МО ЛКАО и ВС. Принцип Паули. Теорема о средней энергии. Секулярные уравнения. Вариационная теорема. Расчет молекулы водорода методом МО ЛКАО.

Приближения Хюккеля. Распределение электронов по молекулярным уровням.

Основные приближения при расчете органических молекул методом МОХ.

Расчет молекул этилена, бутadiена и бензола методом МОХ. Описание свойств молекул и реакционной способности по данным расчета. Индексы реакционной способности.

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

Представления о зарядах на атомах в молекуле и порядках связей. Корреляции дескрипторов электронного строения и свойств молекул.

Раздел 2. Термодинамика и кинетика процессов сорбции

Адсорбент, адсорбат. Виды адсорбции. Структура поверхности и пористость адсорбента. Локализованная и делокализованная адсорбция. Изотермы мономолекулярной сорбции при низких и высоких концентрациях сорбтива. Уравнение Генри и Ленгмюра. Определение постоянных в этих уравнениях. Динамический характер адсорбционного равновесия.

Адсорбция из растворов.

Уравнение Брунауэра – Эммета – Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента. Термодинамика полимолекулярной сорбции на основе статистической термодинамики. Определение числа слоев полимолекулярной сорбции.

Адсорбция на пористых сорбентах. Теория объемного заполнения микропор (ТОЗМ). Определение размеров пор. Изотермы сорбции на пористых сорбентах. Уравнение Дубинина-Радушкевич. Определение постоянных этого уравнения. Оценка степени заполнения пор.

Кинетика сорбции. Скорость адсорбции и десорбции в модели Ленгмюра. Скорость многоцентровой адсорбции. Уравнение Рогинского-Зельдовича. Уравнения для скорости адсорбции и десорбции Бэнхема–Барта, Квана.

Сорбция на активированных углях. Общая характеристика углеродных сорбентов. Механизм сорбции молекул и ионов электролитов. Сорбция органических веществ на активированных углях.

Зависимость адсорбции от температуры. Методы расчета энергии активации адсорбции и десорбции.

Использование сорбции для разделения и концентрирования в технологических схемах процессов.

Раздел 3. Теория растворов

Парциальные молярные величины. Методы определения парциальных молярных величин. Термодинамические типы растворов. Функция смешения для идеальных и неидеальных растворов. Предельно разбавленные растворы, атермальные и регулярные растворы, их свойства. Расчет функций смешения по различным моделям: модель парного взаимодействия, модель «окруженного атома», квантово-химические модели. Связь термодинамических функций с равновесным потенциалом бинарного сплава.

Раздел 4. Фазовые равновесия

Понятия компонента, фаза, степень свободы. Правило фаз Гиббса. Правила Курнакова. Методы описания фазовых диаграмм. Фазовые диаграммы двухкомпонентные смесей. Диаграммы с твердыми растворами и с химическими соединениями. Оценка фазового состава наноструктурированных бинарных сплавов по данным электрохимического анализа.

Раздел 5. Кинетика химических реакций

Основной постулат химической кинетики. Формальная кинетика. Способы определения скорости реакции методом формальной кинетики. Кинетические кривые. Кинетические уравнения. Константа скорости и порядок реакции. Реакции переменного порядка.

Кинетика диффузионно-контролируемых химических реакций. Законы Фика. Решение диффузионных задач методами формальной кинетики и методом Лапласа. Скорость и стадии электродного процесса. Уравнение Левича. Поляризация электродов. Полярография. Ток обмена и перенапряжение. Зависимость скорости стадии разряда от строения двойного слоя. Уравнения для предельного диффузионного тока в вольтамперометрии.

Кинетика необратимых электродных процессов. Гетерогенная константа скорости. Влияние различных факторов на ток и потенциал необратимого электродного процесса. Критерии обратимости электродного процесса. Использование электрохимических процессов в технологии и анализе.

Кинетика каталитических процессов. Гомогенный и гетерогенный катализ. Решение кинетических задач каталитических процессов. Роль сорбции в гетерогенном катализе. Выбор и основные свойства катализаторов. Модифицирование катализаторов. Технология приготовления катализаторов и исследование их свойств. Селективность катализатора.

Основные промышленные каталитические процессы. Роль диффузии в кинетике гетерогенных реакций. Кинетика гетерогенных каталитических реакций. Различные режимы протекания реакций (кинетическая и внешняя кинетическая области, области внешней и внутренней диффузии).

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

Темы решения задач.

1. Квантово-химический расчет молекул методом МО Хюккеля.
2. Определение поверхности сорбента методом БЭТ.
3. Сорбция на пористых сорбентах. Определение постоянных в уравнении Дубинина-Радushкевич.
4. Расчеты по оценке состава фаз наноструктурных электролитических осадков по опытным данным.
5. Законы диффузионной кинетики. Расчет коэффициентов диффузии ионов.
6. Кинетика необратимых электродных процессов. Расчет кинетических параметров.

5. Образовательные технологии

Технология процесса обучения по дисциплине «Физическая химия» включает в себя следующие образовательные мероприятия:

- а) аудиторные занятия (лекционно-семинарская форма обучения);
- б) самостоятельная работа студентов;
- в) контрольные мероприятия в процессе обучения и по его окончанию;
- г) зачеты в 3 и 4 семестре.

В учебном процессе используются как активные, так и интерактивные формы проведения занятий: дискуссия, метод поиска быстрых решений в группе, мозговой штурм.

Аудиторные занятия проводятся в интерактивной форме с использованием мультимедийного обеспечения (ноутбук, проектор) и технологии проблемного обучения.

Презентации позволяют качественно иллюстрировать практические занятия схемами, формулами, чертежами, рисунками. Кроме того, презентации позволяют четко структурировать материал занятия.

Электронная презентация позволяет отобразить процессы в динамике, что позволяет улучшить восприятие материала.

Самостоятельная работа организована в соответствии с технологией проблемного обучения и предполагает следующие формы активности:

- самостоятельная проработка учебно-проблемных задач, выполняемая с привлечением основной и дополнительной литературы;

- поиск научно-технической информации в открытых источниках с целью анализа и выявления ключевых особенностей.

Основные аспекты применяемой технологии проблемного обучения:

- постановка проблемных задач отвечает целям освоения дисциплины «Физическая химия» и формирует необходимые компетенции;
- решаемые проблемные задачи стимулируют познавательную деятельность и научно-исследовательскую активность аспирантов.

Проверка приобретенных знаний, навыков и умений осуществляется посредством отчетов аспирантов на научных семинарах и индивидуальным обсуждением с руководителем.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы аспирантов.

Виды самостоятельной работы:

в домашних условиях, в читальном зале библиотеки, на компьютерах с доступом к базам данных и ресурсам Интернет, в лабораториях с доступом к лабораторному оборудованию и приборам.

Самостоятельная работа подкрепляется учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций, учебное и научное программное обеспечение, ресурсы Интернет.

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

Цель контроля - получение информации о результатах обучения и степени их соответствия результатам обучения.

7.1. Текущий контроль

Текущий контроль успеваемости, т.е. проверка усвоения учебного материала, регулярно осуществляемая на протяжении семестра. Текущий контроль знаний учащихся организован как устный групповой опрос (УГО).

Текущая самостоятельная работа аспиранта направлена на углубление и закрепление знаний, и развитие практических умений аспиранта.

7.2. Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация осуществляется в конце семестра и завершает изучение дисциплины «Физическая химия». Форма аттестации – зачет.

Список вопросов для проведения текущего контроля и устного опроса обучающихся:

1. Общие принципы образования химических связей.
2. Основные приближения при решении квантово-химических задач
3. Методы выбора волновой функции молекулы
4. Методы решения уравнения Шредингера
5. Основные приближения при расчете молекул методом МО-Хюкеля.
6. Элементы симметрии молекул
7. Расчет молекул органических веществ методом МОХ.
8. Что такое π - электронная плотность на атомах, индекс свободной валентности, порядок связи между атомами?
9. Может ли быть порядок связи между атомами дробной величиной?
10. Сформулируйте основные положения теории Лэнгмюра.
11. Какой изотермой описывается многоцентровая адсорбция на однородных поверхностях?
12. Как проверить соответствие опытных данных данной изотерме сорбции?
13. Расскажите, как можно определить поверхность твёрдых тел на основании адсорбционных данных (метод Лэнгмюра, БЭТ, Гаркинса и Юра).
14. Какие существуют особенности адсорбции веществ в микропорах?

15. Как проводится определение размеров пор по уравнению. Дубинина – Радужкевич?
16. Расскажите, какие существуют особенности изучения кинетики при многоцентрической сорбции?
17. Сформулируйте кинетический закон Бэнхема.
18. Расскажите, какие бывают термодинамические типы растворов.
19. Энтальпия и энтропия смешения на основе модели парного взаимодействия.
20. Энтальпия и энтропия смешения на основе модели окруженного атома
21. Энтальпия и энтропия смешения, рассчитанная по квантово-химическим моделям.
22. Постулаты, позволяющие описывать фазовые равновесия с помощью фазовых диаграмм.
23. Рассмотрите несколько примеров фазовых диаграмм с твердыми растворами.
24. Как связана энергия Гиббса с равновесным потенциалом окислительно-восстановительной системы?
25. Какие параметры кинетического процесса описываются методом формальной кинетики?
26. Кинетические параметры диффузионно-контролируемых химических реакций.
27. Как можно рассчитать коэффициент диффузии иона в растворе?
28. Гидродинамические критерии обратимости электродных процессов.
29. Гомогенные катализаторы. Приведите примеры.
30. Ферментативный катализ и его особенности.
31. Приведите примеры известных каталитических процессов.

7.3. Итоговая аттестация

Форма аттестации – кандидатский экзамен в устной форме. Кандидатский экзамен проводится по окончании обучения в аспирантуре.

Экзаменационный билет состоит из трех теоретических вопросов, тематика которых представлена в программе кандидатского экзамена.

Кандидатский экзамен проводится в присутствии не менее 2 членов экзаменационной комиссии из состава, утвержденного приказом по ИРХ СО РАН, в устном или письменном виде с последующим устным собеседованием по вопросам, указанным в экзаменационном билете. На подготовку ответов в письменном виде отводится 1 академический час.

Образцы билетов Физическая химия

Билет 1

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

2. Основные понятия термодинамики: изолированные и открытые системы, равновесные и неравновесные системы, термодинамические переменные, температура, интенсивные и экстенсивные переменные. Уравнения состояния.

3. 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.

Билет 2

1. Общие принципы квантово-механического описания молекулярных систем. Стационарное уравнение Шредингера для свободной молекулы. Адиабатическое приближение. Электронное волновое уравнение.

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 Кирхгофа.

3. Принцип независимости элементарных стадий. Кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций.

Билет 3

1. 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.

2. Второй закон термодинамики. Энтропия и ее изменения в обратимых и необратимых процессах. Теорема Карно – Клаузиуса.

3. Цепные реакции. Кинетика неразветвленных и разветвленных цепных реакций.

Билет 4

1. 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.

2. 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.

3. Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса. Энергия активации и способы ее определения.

Билет 5

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

2. Химическое равновесие. Закон действующих масс. Различные виды констант равновесия и связь между ними. Изотерма Вант-Гоффа. Уравнения изобары и изохоры химической реакции. Приведенная энергия Гиббса и ее использование для расчетов химических равновесий.

3. 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.

Билет 6

1. Представления о зарядах на атомах и порядках связей. Различные методы выделения атомов в молекулах. Индексы реакционной способности. Теория граничных орбиталей.

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

3. 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.

Билет 7

1. Точечные группы симметрии молекул. Общие свойства симметрии волновых функций и потенциальных поверхностей молекул. Классификация квантовых состояний атомов и молекул по симметрии. Симметрия атомных и молекулярных орбиталей, σ - и π - орбитали. π -Электронное приближение.

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

3. Мономолекулярные реакции в газах, схема Линдемана – Христиансена. Теория РРKM. Бимолекулярные и тримолекулярные реакции, зависимость предэкспоненциального множителя от температуры.

Билет 8

1. Дипольный момент и поляризуемость молекул. Магнитный момент и магнитная восприимчивость. Эффекты Штарка и Зеемана. Магнитно-резонансные методы исследования строения молекул. Химический сдвиг.

2. Распределения Бозе – Эйнштейна и Ферми – Дирака. Вырожденный идеальный газ. Электроны в металлах. Уровень Ферми.

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

Билет 9

1. 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.

2. Основные положения термодинамики неравновесных процессов.

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

Билет 10

1. Основные составляющие межмолекулярных взаимодействий. Молекулярные комплексы. Ван-дер-ваальсовы молекулы. Кластеры атомов и молекул. Водородная связь. Супермолекулы и супрамолекулярная химия.

2. Различные типы растворов. Способы выражения состава растворов. Идеальные растворы. Давление насыщенного пара жидких растворов, закон Рауля. Неидеальные растворы и их свойства. Метод активностей. Коэффициенты активности и их определение.

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

Билет 11

1. Строение основных типов органических и элементоорганических соединений.

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

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

Билет 12

1. Идеальные кристаллы. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Реальные кристаллы. Типы дефектов в реальных кристаллах. Кристаллы с неполной упорядоченностью. Доменные структуры. Атомные, ионные, молекулярные и другие типы кристаллов. Цепочечные, каркасные и слоистые структуры.

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

3. Кислотно-основной катализ. Кинетика и механизм реакций специфического кислотного катализа. Функции кислотности Гаммета. Кинетика и механизм реакций общего кислотного катализа. Уравнение Бренстеда. Нуклеофильный и электрофильный катализ.

Билет 13

1. Строение твердых растворов. Упорядоченные твердые растворы. Аморфные вещества. Особенности строения полимерных фаз.
2. Двухкомпонентные системы. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем. Равновесие жидкость – пар в двухкомпонентных системах. Законы Гиббса – Коновалова. Азеотропные смеси.
3. Катализ металлокомплексными соединениями. Гомогенные реакции гидрирования, их кинетика и механизмы.

Билет 14

1. Металлы и полупроводники. Зонная структура энергетического спектра кристаллов. Поверхность Ферми. Различные типы проводимости. Колебания в кристаллах. Фононы.
2. Адсорбция. Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Генри. Константа адсорбционного равновесия. Уравнение Лэнгмюра. Адсорбция из растворов. Хроматография, различные ее типы.
3. Адсорбционные и каталитические центры ферментов. Активность и субстратная селективность ферментов. Коферменты. Механизмы ферментативного катализа.

Билет 15

1. Жидкости. Мгновенная и колебательно-усредненная структура жидкости. Ассоциаты и кластеры в жидкостях. Структура простых жидкостей. Растворы неэлектролитов. Структура воды и водных растворов. Структура жидких электролитов.
2. Растворы электролитов. Ион-дипольное взаимодействие как основной процесс, определяющий устойчивость растворов электролитов. Коэффициенты активности в растворах электролитов. Основные положения теории Дебая – Хюккеля.
3. Гетерогенный катализ. Определение скорости гетерогенной каталитической реакции. Удельная и атомная активность. Энергия активации гетерогенных каталитических реакций.

Критерии оценивания ответа аспиранта в ходе государственного экзамена

«Отлично»	Минимум 3 вопроса билета (из 3) имеют полные ответы. Содержание ответов свидетельствует об отличных знаниях выпускника и о его умении решать профессиональные задачи, соответствующие его будущей квалификации.
«Хорошо»	Минимум 2 вопроса билета (из 3) имеют полные ответы. Содержание ответов свидетельствует о хороших знаниях выпускника и о его умении решать профессиональные задачи, соответствующие его будущей квалификации.
«Удовлетворительно»	Минимум 1 вопрос билета (из 3) имеет полный и правильный ответ, 2 вопроса раскрыты не полностью. Содержание ответов свидетельствует о недостаточных, но удовлетворительных знаниях выпускника и о его ограниченном умении решать профессиональные задачи.
«Неудовлетворительно»	Три вопроса билета (из трех) не имеют ответа. Содержание ответов свидетельствует об отсутствии знаний выпускника и о его неумении решать профессиональные задачи.

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины Основная литература

1. Афанасьев, Б. Н. Физическая химия / Б. Н. Афанасьев, Ю. П. Акулова. – М.: Лань, 2012. – 464 с.
2. Бердетт, Дж. Химическая связь: пер. с англ. / Дж. Бердетт. – М.: Мир; Бином. Лаборатория знаний, 2015. – 245 с.

3. Горшков, В. И. Основы физической химии / В. И. Горшков, И. А. Кузнецов. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 407 с.
4. Романовский, Б. В. Основы катализа: учебное пособие / Б. В. Романовский. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2015. – 172 с.
5. Сильверстейн, Р. Спектрометрическая идентификация органических соединений / Р. Сильверстейн, Ф. Вебстер, Д. Кимл. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 557 с.

Дополнительная литература

1. Гонсалвес, К. Наноструктуры в биомедицине / К. Гонсалвес, К. Хальберштадт, К. Лоренсин, Л. Наир – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2013. – 520 с.
2. Жауен, Ж. Биометаллоорганическая химия / Ж. Жауен. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2015. – 496 с.
3. Коваленко, Л. В. Биохимические основы химии биологически активных веществ: учебное пособие / Л. В. Коваленко. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014 – 229 с.
4. Кузнецов, Н. Т. Основы нанотехнологии: учебник / Н. Т. Кузнецов, В. М. Новоторцев, В. А. Жабров, В. И. Марголин. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 397 с.
5. Лау, А. К. Нано- и биоконпозиты / А. К. Лау, Ф. Хусейн, Х. Лафди. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2015. – 392 с.
6. Реутов, О. А. Органическая химия: В 4-х т. Т. 1 / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 567 с.
7. Реутов, О. А. Органическая химия: В 4-х т. Т. 2 / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 623 с.
8. Реутов, О. А. Органическая химия: В 4-х т. Т. 3 / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 544 с.
9. Реутов, О. А. Органическая химия: В 4-х т. Т. 4 / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 726 с.
10. Рыжонков, Д. И. Наноматериалы: учебное пособие / Д. И. Рыжонков, В. В. В. Лёвина, Э. Л. Дзидзигури. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 365 с.
11. Старостин, В. В. Материалы и методы нанотехнологии: учебное пособие / В. В. Старостин. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 431 с.
12. Шишкин, Г. Г. Нанозлектроника. Элементы, приборы, устройства: учебное пособие / Г. Г. Шишкин, И. М. Агеев. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2011. – 408 с.

Интернет-ресурсы

Доступ к электронным научным информационным ресурсам осуществляется через сервер Центральной научной библиотеки Иркутского научного центра:

1. <http://pubs.acs.org/> - Журналы American Chemical Society (ACS), American Physical Society (APS)
2. <http://www.sciencemag.org/> - American Association for the Advancement of Science (AAAS)
3. <http://www.nature.com/> – Журнал Nature
4. <http://www.tandfonline.com/> - Журналы издательства Taylor&Francis
5. <http://www.sciencedirect.com/> – Журналы издательства Elsevier – Freedom Collection
6. <http://link.springer.com/> - Журналы издательства Springer
7. <http://www.springerprotocols.com/> - Журналы издательства Springer Journals и SpringerProtocols
8. <http://www.interscience.wiley.com> - Журналы издательства Wiley
9. <http://apps.webofknowledge.com/> -База данных Web of Science
10. <http://www.scopus.com/> - База данных SCOPUS

9. Материально-техническое обеспечение учебной дисциплины

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, реактивы, расходные материалы, лабораторная посуда, измерительное оборудование).

Основу материально-технической базы института составляют два цифровых мультитядерных Фурье-спектрометра ЯМР (DPX 400 и AVANCE 400), рентгеновский дифрактометр Bruker D8 ADVANCE, рентгеновский дифрактометр D2 PHASER, инфракрасный Фурье-спектрометр Vertex 70 с Раман приставкой, инфракрасный Фурье-спектрометр Excalibur HE 3100 Varian, микроанализатор Flash EA 1112 CHN-O/MAS 200, микроанализатор Termo Flash EA 2000 CHNS, ЭПР-спектрометр ELEXSYS E580, установка наносекундного импульсного фотолиза, хроматомасс-спектрометр QP-5050A, хроматомасс-спектрометр Agilent 5975 с химической ионизацией, tandemный TOF/TOF масс-спектрометр Ultra Flex, электронный микроскоп TM 3000 Hitachi, спектрофлуориметр FLPS920 Edinburg Instruments, УФ/ВИД-спектрометр LAMBDA 35 и диэлькометр.

Для проведения квантово-химических расчетов имеется вычислительный кластер 39Гц/112Гб/14Тб и необходимое программное обеспечение (GAUSSIAN, GAMESS, DALTON и DIRAC).

Автор-составитель рабочей программы дисциплины: к.х.н. Смирнов В. И.