

Федеральное агентство научных организаций
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
**ИНСТИТУТ ХИМИИ ТВЕРДОГО ТЕЛА УРАЛЬСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКА-
ДЕМИИ НАУК (ИХТТ УрО РАН)**



УТВЕРЖДАЮ

Директор ИХТТ УрО РАН

В. Л. Кожевников

« 09 » 09 2015 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре
по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки
(уровень подготовки кадров высшей квалификации)

Направленность (профиль) программы: Физическая химия

Квалификация: Исследователь. Преподаватель-исследователь.

ЕКАТЕРИНБУРГ

2015 г.

Составители:

Заведующий аспирантурой, к.х.н., доцент

Н.С.Кожевникова

Старший научный сотрудник лаборатории квантовой химии
и спектроскопии им. проф. А.Л.Ивановского, к.ф.-м.н.

А.С.Ворох

Рецензент:

Ведущий научный сотрудник лаборатории квантовой химии
и спектроскопии им. проф. А.Л.Ивановского, д.х.н.

Е.В.Шалаева

Согласовано:

Ученый секретарь ИХТТ УрО РАН, д.х.н.

Т.А. Денисова

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА РАССМОТРЕНА И ОДОБРЕНА на заседании Учёного совета
ИХТТ УрО РАН протокол № 9 от «14» сентября 2015 г.

АННОТАЦИЯ

Рабочая программа дисциплины «Физическая химия» составлена на основании Программы-минимум кандидатского экзамена по физической химии, разработанной экспертным советом Высшей аттестационной комиссии по химии (по неорганической химии) при участии Института физической химии РАН и Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова и утвержденной приказом Минобрнауки России от 8 октября 2007 г. № 274 (зарегистрирован Минюстом России 19 октября 2007 г., регистрационный № 10363).

Рабочая программа «Физическая химия» соответствует требованиям, обязательным при реализации основных профессиональных образовательных программ высшего образования - программ подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению подготовки кадров высшей квалификации 04.06.01 Химические науки (далее соответственно - программа аспирантуры, направление подготовки). Упомянутые требования установлены Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации) (Приказ Министерства образования и науки Российской Федерации от 30.07.2014 г. № 869).

В рабочей программе используются следующие сокращения:
ИХТТ УрО РАН - Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии твердого тела Уральского отделения Российской академии наук;
УК - универсальные компетенции;
ОПК - общепрофессиональные компетенции;
ПК - профессиональные компетенции;
ООП – основная образовательная программа;
ФГОС ВО - федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования.

Дисциплина «Физическая химия» относится к вариативной части (обязательные дисциплины) учебного плана ООП аспирантуры по направлению подготовки 04.06.01 «Химические науки» и направленности «Физическая химия» (Квалификация: Исследователь. Преподаватель-исследователь).

Аспирант по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки готовится к следующим видам профессиональной деятельности: научно-исследовательская деятельность в области химии и смежных наук; преподавательская деятельность в области химии и смежных наук..

Направленность (профиль) профессиональной деятельности: Физическая химия.

Дисциплина нацелена на формирование у выпускника, освоившего программу аспирантуры, универсальных компетенций УК-1, УК-3, УК-5, общепрофессиональных компетенций ОПК-1, ОПК-2, ОПК-3 и профессиональных компетенций ПК-1.

Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, самостоятельная работа.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

Итоговый контроль. Для контроля усвоения дисциплины учебным планом ООП предусмотрен кандидатский экзамен.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 академических часов. Программой дисциплины предусмотрены: 14 часов на лекции, 6 часов на кандидатский экзамен и 88 часов самостоятельной работы аспирантов.

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Цель изучения дисциплины – получение аспирантами углубленных знаний о теоретическом и экспериментальном исследовании физической химии, развитие приобретенных ими навыков исследования путем использования накопленных знаний в анализе и интерпретации результатов, получаемых при выполнении темы научно-квалификационной работы.

Задачи дисциплины: изучение аспирантами физической химии; более тесно связать теорию с практикой и развить навыки исследователя сложных многокомпонентных систем разного уровня; превратить имеющиеся обширные знания в различных областях физической химии в стартовую базу теоретических основ выполняемой аспирантом научно-квалификационной работы; определиться с языком описания развиваемых при выполнении научно-квалификационной работы теоретических положений; тщательно осмыслить исследуемую в научно-квалификационной работе область, четко представлять цели и задачи выполняемых исследований, понимать, что внесено автором в науку и практику и уметь отстаивать свое мнение.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП

- 2.1. Учебная дисциплина «Физическая химия» является обязательной дисциплиной и входит в вариативную часть учебного плана ООП.
- 2.2. Данная программа строится на преемственности программ в системе высшего образования и предназначена для аспирантов ИХТТ УрО РАН, прошедших обучение по программам подготовки магистров или специалистов, прослушавших в высших учебных заведениях (университетах) соответствующие курсы и имея по ним положительные оценки. Она основывается на положениях, отраженных учебных программах указанных уровней. 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.
- 2.3. Дисциплина «Физическая химия» направлена на подготовку к сдаче кандидатского экзамена по физической химии.

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:

1. Универсальных компетенций:

- способности 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);
- готовности 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 языке (УК-4);
- способности планировать и решать задачи собственного профессионального и личного развития (УК-5).

2. *Общепрофессиональных компетенций:*

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

3. *Профессиональных компетенций:*

способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по специальности (направленности) 02.00.04 Физическая химия (ПК-1).

По окончании изучения дисциплины аспиранты должны будут

знать:

- основные понятия, соотношения и способы теоретического описания изучаемой физической химии,
- методы критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методы генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач, в области физической химии и в междисциплинарных областях;

уметь:

- применять полученные знания при выполнении практических заданий, расчетов, осваивать вопросы, выносимые на самостоятельное изучение,
- анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач и оценивать потенциальные выигрыши/проигрыши реализации этих вариантов
- при решении исследовательских и практических задач генерировать новые идеи, поддающиеся операционализации исходя из наличных ресурсов и ограничений;

владеть:

- основами математического аппарата применяемого для описания физической химии,
- навыками проведения теоретического исследования в различных областях физической химии,
- способностью приобретать новые знания, используя современные образовательные и информационные технологии, излагать материал в ясной и доступной форме,
- навыками анализа возможности создания новых методик и технологий на базе проведенных исследований,
- навыками планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов,
- навыками критического анализа и оценки современных научных достижений и результатов деятельности по решению исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях,
- навыками анализа основных мировоззренческих и методологических проблем, в т.ч. междисциплинарного характера, возникающих в науке на современном этапе ее развития,
- навыками критической оценки эффективности различных методов и технологий научной коммуникации на государственном и иностранном языках.

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1 Разделы дисциплины и виды занятий

Наименование разделов и тем	Трудоемкость (в ЗЕТ)	Объем работы (в часах)	Всего учебных занятий (в часах)		
			лекции	лабораторные занятия	самостоятельная работа
1	2	3	4	5	6
Раздел 1. Строение вещества					
Тема 1. Основы классической теории химического строения.		4	2		2
Тема 2. Физические основы учения о строении молекул.		4			4
Тема 3. Симметрия молекулярных систем.		4			4
Тема 4. Электрические и магнитные свойства.		6	2		4
Тема 5. Межмолекулярные взаимодействия.		2			2
Тема 6. Основные закономерности в строении молекул.		2			2
Тема 7. Строение конденсированных фаз.		8	2		6
Тема 8. Поверхность конденсированных фаз.		6	2		4
Раздел 2. Химическая термодинамика					
Тема 1. Основные понятия и законы термодинамики.		6			6
Тема 2. Элементы квантовой химии.		8	2		6
Тема 3. Элементы статистической термодинамики.		2			2
Тема 4. Элементы термодинамики необратимых процессов.		2			2
Тема 5. Растворы. Фазовые равновесия.		4			4
Тема 6. Гетерогенные системы.		2			2
Тема 7. Адсорбция и поверхностные явления.		4			4
Тема 8. Электрохимические процессы.		4			4
Раздел 3. Кинетика химических реакций		16	2		14
Раздел 4. Катализ		18	2		16
Кандидатский экзамен		6			
Всего по дисциплине	3	108	14		88

4.2. Содержание разделов и тем

Раздел 1. Строение вещества

Тема 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.

Тема 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 квантово-механического 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.

Тема 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. Симметрия атомных и молекулярных орбиталей, σ - и π -орбитали. π -Электронное приближение.

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

Тема 4. Электрические и магнитные свойства. Дипольный момент и поляризуемость молекул. Магнитный момент и магнитная восприимчивость. Эффекты Штарка и Зеемана. Магнитно-резонансные 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.

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

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

Тема 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.).

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

Раздел 2. Химическая термодинамика

Тема 1. Основные понятия и законы термодинамики. Основные понятия термодинамики: изолированные и открытые системы, равновесные и неравновесные системы, термодинамические переменные, температура, интенсивные и экстенсивные переменные. Уравнения состояния. Теорема о соответственных состояниях. Вириальные уравнения состояния.

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.

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.

Химическое равновесие. Закон действующих масс. Различные виды констант равновесия и связь между ними. Изотерма Вант-Гоффа. 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.

Тема 2. Элементы квантовой химии. Принцип неопределённости Гейзенберга. Уравнение Шрёдингера. Атом водорода. Квантовые числа. Орбитальный момент импульса и спин электрона; сложение моментов. Многоэлектронные системы. Принцип Паули. Метод самосогласованного поля Хартри–Фока. Волновые функции молекул. Методы расчёта электронной структуры молекул (методы ВС и МО). Метод Рутаана (МО ЛКАО). Методы учёта электронной корреляции. Методы функционала электронной плотности. Понятие о полуэмпирических методах квантовой химии. Дипольный момент и поляризуемость. Элементы теории симметрии. Вращательные, колебательные и электронные спектры молекул. Эффекты, обусловленные спином атомных ядер (на примере пара- и орто-водорода). Химические связи в молекулярных и координационных комплексах; водородная связь. Ориентационные, индукционные и дисперсионные силы Ван-дер-Ваальса. Основные представления и подходы в квантовой химии твёрдого тела. Блоховские функции. Определение первой зоны Бриллюэна, закона дисперсии, плотности состояний. Картина плотности состояний для полупроводников, металлов, магнитных соединений.

Тема 3. Элементы статистической термодинамики. Микро- и макросостояния химических систем. Фазовые Γ - и μ -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.

Тема 4. Элементы термодинамики необратимых процессов. 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.

Тема 5. Растворы. Фазовые равновесия. 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 мольные 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.

Тема 6. 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.

Тема 7. Адсорбция и поверхностные явления. 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 – Эммета – Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента.

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).

Тема 8. Электрохимические процессы. Растворы электролитов. Ион-дипольное 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.

Раздел 3. Кинетика химических реакций

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.

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.

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).

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

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.

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.

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.

Раздел 4. Катализ

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

Гомогенный катализ. Кислотно-основной 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.

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

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.

5. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

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

- а) аудиторные занятия (лекционно-семинарская форма обучения);
- б) организация самостоятельной образовательной деятельности аспирантов;
- г) контрольные мероприятия в процессе обучения и по его окончанию;
- д) организация и проведение консультаций;
- е) кандидатский экзамен.

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.

Для расширения знаний по дисциплине рекомендуется использовать Интернет-ресурсы: проводить поиск в различных поисковых системах, таких как www.rambler.ru, www.yandex.ru, www.google.ru, www.yahoo.com. Каждому аспиранту рекомендуется иметь собственный рабочий кабинет на сайте Центральной научной библиотеки УрО РАН (Система "Web-кабинет ученого": <http://i.uran.ru/webcab/>).

6. СТРУКТУРА КАНДИДАТСКОГО ЭКЗАМЕНА. МЕТОДИКА ЕГО ПРОВЕДЕНИЯ

Процедура проведения экзамена регламентирована правилами сдачи кандидатских экзаменов в соответствии с Приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 28 марта 2014 г. N 247 г. Москва "Об утверждении Порядка прикрепления лиц для сдачи кандидатских экзаменов, сдачи кандидатских экзаменов и их перечня", а также в соответствии с «Положением о порядке прикрепления лиц для сдачи кандидатских экзаменов, сдачи кандидатских экзаменов и их перечня» и «Положением об экзаменационной комиссии по организации приема вступительных и кандидатских экзаменов в аспирантуре» в ИХТТ УрО РАН.

Экзамен проводится на русском языке в устно-письменной форме по билетам. Для проведения экзамена формируется экзаменационная комиссия из числа наиболее опытных и квалифицированных сотрудников Института, являющихся ведущими специалистами по профилю «Физическая химия». Экзаменационная комиссия состоит не менее, чем из 3 специалистов, имеющих ученую степень кандидата или доктора наук, в том числе 1 доктор наук.

Структура экзамена:

1. Устный ответ на три вопроса по изученным разделам и темам настоящей рабочей программы. Время подготовки ответа – 60 мин.

2. Беседа с экзаменационной комиссией по вопросам, связанным с научными интересами аспиранта в области физической химии в соответствии с темой научно-квалификационной работы.

Все сдающие экзамен аспиранты получают билеты одновременно, время подготовки ответа – 60 минут. После ответа на предложенные в билете вопросы, члены экзаменационной комиссии задают поступающему вопросы, связанные с его научными интересами в области физической химии. Уровень знаний аспиранта оценивается экзаменационной комиссией по пятибалльной системе.

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература

1. Стромберг А.Г., Семченко Д.П. Физическая химия. М.: Высшая школа, 2010 г.
2. Эткинс П., де Паула Дж. Физическая химия. М.: Мир, 2007.
3. Ягодковский В.Д. Статистическая термодинамика в физической химии. М: Бином. Лаборатория знаний, 2005.
4. Пармон В.Н. Лекции по термодинамике неравновесных процессов для химиков. Новосибирск: Изд-во Новос. уни-та, 2005.
5. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. М.: Бином. Лаборатория знаний, 2012.

Дополнительная литература

1. Еремин Е.Н. Основы кинетики химических реакций. М.: Высшая школа, 1976.
2. Мелвин-Хьюз Э.А. Физическая химия в 2-х кн. М.: Иностранная литература, 1962.
3. Физическая химия. Теоретическое и практическое руководство. / Под ред. Б.П.Никольского. Изд. 2-е. Л. Химия. 1987.
4. Герасимов Я.И. Курс физической химии. М. 1973.

5. Карапетьянц М.Х. Химическая термодинамика. М.: Химия, 1975.
6. Жуховицкий А.А., Л.А. Шварцман. Физическая химия. М.: Металлургия, 1987.
7. Эммануэль Н.М., Кнорре Д.Г. Курс химической кинетики. М.: Высшая школа, 1982.
8. Курс физической химии / под ред. Герасимова Я.И. Т.1. М.: Химия, 1970 г., Т.2. М.: Химия, 1973 г.
9. Даниэль Ф., Олберти Р. Физическая химия. М.: Мир, 1978 г.
10. Физическая химия в 2-х кн. / под ред. Краснова К.С. М.: Высшая школа, 1995.
11. Булатов Н.К., Лундин А.Б. Термодинамика необратимых физико-химических процессов. М.: Химия, 1984.
12. Батлер Дж.Н. Ионный равновесия (математическое описание) / Пер. с англ. Л.: Химия, 1973.
13. Киреев В.А. Курс физической химии. М.: Химия, 1975.
14. Дамаскин Б.Б., Петрий О.А., Цирлина Г.А. Электрохимия. М.: Химия. КолосС, 2008.
15. Дамаскин Б.Б., Петрий О.А. Основы теоретической электрохимии. М.: Высшая школа, 1978.
16. Байрамов В.М. Основы химической кинетики и катализа. М.: Издательский центр «Академия», 2003.
17. Дельмон Б. Кинетика гетерогенных реакций. М.: Химия, 1972.
18. Бенсон С. Основы химической кинетики. М.: Мир, 1964.
19. Смирнова Н.А. Методы статистической термодинамики в физической химии. М.: Высшая школа, 1982.
20. Давыдов А.С. Квантовая механика. М.: Наука, 1973.
21. Заградник Р., Полак Р. Основы квантовой химии. М.: Мир. 1979.
22. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир. 2007
23. Абаренков И.В., Братцев В.Ф., Тулуб А.В. Начала квантовой химии. М.: Высшая школа, 1989.

Программное обеспечение:

- библиотека (база) структурных данных неорганических веществ ICSD (Karlsruhe, Германия) версии 2015-1. Версия программы для работы с этой базой FindIt v 1.9.6;
- персональные компьютеры с установленным системным программным обеспечением (операционная система Windows, офисный пакет Microsoft Office);
- комплекс программного обеспечения для выполнения первопринципного квантовохимического моделирования Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP);
- серверные операционные системы Windows Server - Standard.