

Приложение 2

УТВЕРЖДЕНО

приказом ФИЦ КазНЦ РАН

01.03.2019 № 7-А

Разработано и рекомендовано к утверждению
Ученым советом ИОФХ им. А.Е. Арбузова -
обособленного структурного подразделения
ФИЦ КазНЦ РАН

«27» февраля 2019 г., протокол № 3

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Физическая химия»

Уровень высшего образования
Подготовка кадров высшей квалификации
Направление подготовки

04.06.01 ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ

Направленность подготовки:

Физическая химия (02.00.04)

Квалификация выпускника:

Исследователь. Преподаватель-исследователь

СОДЕРЖАНИЕ

1. Виды учебной деятельности, способ и формы ее проведения, трудоемкость дисциплины.
2. Перечень планируемых результатов обучения.
3. Место дисциплины в структуре образовательной программы.
4. Содержание дисциплины.
5. Учебно-тематический план занятий
6. Формы текущего контроля и промежуточной аттестации, критерии оценки.
7. Перечень учебной литературы и ресурсов сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины.
8. Описание материально-технической базы, необходимой для освоения дисциплины.

1. ВИДЫ УЧЕБНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ, СПОСОБ И ФОРМЫ ЕЕ ПРОВЕДЕНИЯ, ТРУДОЕМКОСТЬ ДИСЦИПЛИНЫ

Виды учебной деятельности: аудиторные занятия - 1 зачетная единицы труда (36 часов), самостоятельная работа – 9 зачетных единиц труда (324 часа), всего – 10 зачетных единиц труда (360 часов).

Форма проведения аудиторных занятий – лекции и консультации.

В рамках часов самостоятельной работы по указанию преподавателя аспиранты прорабатывают темы и осваивают теоретические вопросы, излагаемые в лекционном курсе, а также самостоятельно изучают другие вопросы программы.

Формой текущего контроля является зачет.

Формой промежуточной аттестации является кандидатский экзамен.

2. ПЕРЕЧЕНЬ ПЛАНИРУЕМЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ

В результате освоения дисциплины выпускник должен обладать следующими компетенциями:

2.1 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);
- готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач (УК-3).

2.2 Обще-профессиональные 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).

2.3 Профессиональные компетенции:

- способность собирать и анализировать мировые научные знания о фундаментальных основах современной физической химии и формулировать направления самостоятельных исследований (ПК-1);
- владение основами современных методов экспериментальной физической химии (ПК-2);
- способность обобщать и анализировать полученные результаты и

- представлять их в виде научных публикаций (ПК-3);
- способность к выявлению и установлению закономерностей, определяющих строение веществ, направление и скорость химических превращений при различных внешних условиях; о количественных взаимодействиях между химическим составом, структурой вещества и его свойствами (ПК-4).

3. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Дисциплина «Физическая химия» является обязательной и включена в Блок № 1 программы аспирантуры, относящийся к вариативной части основной профессиональной образовательной программы высшего образования – программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки, направленность (профиль) подготовки Физическая химия (02.00.04). Обучение проводится на втором курсе.

Данная дисциплина базируется на знаниях и умениях, выработанных при прохождении общих профессиональных курсов «Физическая химия», «Строение вещества», «Квантовая химия», «Физические методы исследования» в рамках магистерской программы образования или специалитета. Владением данными знаниями и умениями устанавливается в ходе вступительных испытаний в аспирантуру.

Аспирант должен обладать навыками самостоятельного освоения изучаемого материала.

В результате освоения дисциплины аспирант должен получить дополнительные знания, умения и навыки. Аспирант должен:

Знать:

- основы классической теории химического строения;
- физические основы учения о строении молекул;
- симметрию молекулярных систем;
- теорию межмолекулярных взаимодействий;
- строение конденсированных фаз;
- основные понятия и законы термодинамики;
- элементы статистической термодинамики;
- элементы термодинамики необратимых процессов;
- теорию растворов, фазовых равновесий;
- адсорбцию и поверхностные явления;
- электрохимические процессы;
- химическую кинетику;
- теорию катализа;

- современные наукометрические, информационные, патентные и иные базы данных и знаний;
- методы научных исследований в области химии, правила требований техники безопасности при проведении химических экспериментов.

Владеть:

- глубокими, специализированными знаниями, на основе которых осуществляется критический анализ, оценка и синтез инновационных идей;
- навыками сбора, обработки и систематизации информации по теме исследования;
- навыками по установлению связи реакционной способности реагентов с их строением и условиями осуществления химической реакции.

Уметь:

- критически анализировать научную литературу с целью самостоятельного выбора направления исследования, самостоятельно составлять план исследования; участвовать в научных дискуссиях;
- определять необходимые средства и методы для выполнения исследования; определять необходимые ресурсы (материальные и нематериальные) для выполнения исследования
- выявлять закономерности «структура – свойство».

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Строение вещества

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

4.1.2. *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.

4.1.3. *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.

4.1.4. *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.

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

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

4.1.7. *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.).

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

4.2. Химическая термодинамика

4.2.1. *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. Виральные уравнения состояния.

4.2.2. *Первый закон термодинамики.* Теплота, работа, внутренняя энергия, энтальпия, теплоемкость. Закон Гесса. Стандартные состояния и стандартные теплоты химических реакций. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Формула Кирхгоффа. Таблицы стандартных термодинамических величин и их использование в термодинамических расчетах.

4.2.3. *Второй закон термодинамики.* Энтропия и её изменения в обратимых и необратимых процессах. Теорема Карно – Клаузиуса. Различные шкалы температур.

Фундаментальные уравнения Гиббса. Характеристические функции. Энергия Гиббса, энергия Гельмгольца. Уравнения Максвелла. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов.

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

4.2.4. *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.

4.2.5. *Элементы статистической термодинамики.* Микро- и макросостояния химических систем. Фазовые Г- 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.

4.2.6. *Элементы термодинамики необратимых процессов.* Основные положения термодинамики неравновесных процессов. Локальное равновесие. Флуктуации. Функция диссипации. Потoki 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.

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

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

Коллигативные свойства растворов. Изменение температуры замерзания растворов, криоскопия. Зонная плавка. Осмотические явления. Парциальные 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.

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

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

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

Фазовые переходы второго рода. Уравнения Эренфеста.

Трехкомпонентные системы. Треугольник Гиббса. Диаграммы плавкости трехкомпонентных систем.

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

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

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

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

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

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

4.2.11. *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.

4.3. Кинетика химических реакций

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

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

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

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

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

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

4.3.5. *Элементарные акты химических реакций* и физический смысл энергии активации. Термический и нетермические пути активации молекул. Обмен энергией

(поступательной, вращательной и колебательной) при столкновениях молекул. Время релаксации в молекулярных системах.

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

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

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

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

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

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

Электрокапиллярные 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.

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

4.3.9. *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.

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

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

Современные теории функционирования гетерогенных катализаторов.

Основные промышленные каталитические процессы.

5. УЧЕБНО-ТЕМАТИЧЕСКИЙ ПЛАН ЗАНЯТИЙ

№ п/п	Наименование темы	Аудиторные занятия	Самост. работа	Всего часов
4.1.1	Основы классической теории химического строения.		10	10
4.1.2	Физические основы учения о строении молекул	6	12	18
4.1.3	Симметрия молекулярных систем		12	12
4.1.4	Электрические и магнитные свойства		12	12
4.1.5	Межмолекулярные взаимодействия	4	8	12
4.1.6	Основные результаты и закономерности в строении молекул		12	12
4.1.7	Строение конденсированных фаз	4	12	16
4.1.8	Поверхность конденсированных фаз		10	10
4.2.1	Основные понятия и законы термодинамики		10	10
4.2.2	Первый закон термодинамики		8	8
4.2.3	Второй закон термодинамики		10	10
4.2.4	Химическое равновесие		8	8
4.2.5	Элементы статистической термодинамики		20	20
4.2.6	Элементы термодинамики необратимых процессов		16	16
4.2.7	Различные типы растворов		12	12
4.2.8	Гетерогенные системы		12	12
4.2.9	Адсорбция	4	8	12
4.2.10	Поверхность раздела фаз		12	12
4.2.11	Электрохимические процессы	6	10	16
4.3.1	Основные понятия химической кинетики		8	8
4.3.2	Феноменологическая кинетика		14	14

4.3.3	Макрокинетика		10	10
4.3.4	Зависимость скорости реакции от температуры		6	6
4.3.5	Элементарные акты химических реакций		12	12
4.3.6	Различные типы химических реакций		12	12
4.3.7	Электрохимические реакции	4	10	14
4.3.8	Классификация каталитических реакций		6	6
4.3.9	Гомогенный катализ	4	10	14
4.3.10	Ферментативный катализ		10	10
4.3.11	Гетерогенный катализ	4	12	16
ИТОГО		36	324	360

6. ФОРМЫ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ, КРИТЕРИИ ОЦЕНКИ

6.1. Текущий контроль: текущий контроль освоения дисциплины проводится регулярно, начиная со второй недели обучения, в форме контроля посещаемости, устного опроса по изучаемой теме. Формой итогового контроля по дисциплине является зачет. Зачет проводится по вопросам.

Вопросы к итоговому контролю

1. Основные положения классической теории химического строения.
2. Конформации молекул.
3. Связь строения и свойств молекул.
4. Электронное строение атомов и молекул. Одноэлектронное приближение.
5. Атомные и молекулярные орбитали. Правило Хунда.
6. Электронная плотность. Распределение электронной плотности в двухатомных молекулах.
7. Локализованные молекулярные орбитали. Гибридизация.
8. Представления о зарядах на атомах и порядках связей.
9. Индексы реакционной способности. Теория граничных орбиталей.
10. Дипольный момент и поляризуемость молекул.
11. Магнитно-резонансные методы исследования строения молекул. Химический сдвиг.
12. Основные составляющие межмолекулярных взаимодействий.
13. Водородная связь.
14. Супермолекулы и супрамолекулярная химия.
15. Мицеллообразование и строение мицелл.
16. Основные понятия термодинамики.

17. Уравнения состояния.
18. Первый закон термодинамики.
19. Закон Гесса.
20. Второй закон термодинамики.
21. Работа и теплота химического процесса. Химические потенциалы.
22. Закон действующих масс.
23. Давление насыщенного пара жидких растворов, закон Рауля.
24. Коллигативные свойства растворов.
25. Изотермы и изобары адсорбции.
26. Основные положения теории Дебая – Хюккеля.
27. Термодинамика гальванического элемента.
28. Электропроводность растворов электролитов.
29. Способы определения скорости реакции.
30. Кинетические уравнения.
31. Константа скорости и порядок реакции.
32. Уравнение Михаэлиса – Ментен.
33. Зависимость скорости реакции от температуры.
34. Элементарные акты химических реакций и физический смысл энергии активации.
35. Теория активных столкновений.
36. Теория переходного состояния (активированного комплекса).
37. Модельные представления о структуре двойного электрического слоя.
38. Кинетика и механизм реакций специфического кислотного катализа.
39. Кинетика и механизм реакций общего кислотного катализа.
40. Специфический и общий основной катализ.
41. Катализ металлокомплексными соединениями.
42. Гетерогенный катализ.
43. Ситуационные задачи.

6.2. Критерии оценки итогового контроля:

«зачтено»	Вопрос раскрыт, приведены конкретные примеры механизмов или соединений, методы доказательства их существования.
«не зачтено»	Вопрос не раскрыт или раскрыт частично, не хватает ключевых примеров и механизмов реакций, методов доказательства их осуществления

При отсутствии оценки «зачтено» обучающийся не допускается к промежуточной аттестации

6.3. Промежуточная аттестация: кандидатский экзамен по утвержденной программе

Кандидатский экзамен по Физической химии проводится в устной форме по вопросам программы, на экзамене предлагается три вопроса (без билетов). После устного ответа могут заданы дополнительные и уточняющие вопросы, не выходящие за пределы программы кандидатского экзамена.

6.4. Критерии оценки промежуточной аттестации

Отлично	<ul style="list-style-type: none"> – Все вопросы раскрыты полностью; – Обучающийся владеет основными теориями и глубоко понимает их содержание; – Имеет ясное представление связи теории и практики в рамках излагаемого материала; – Уверенно владеет необходимыми методами решения конкретных задач, может проиллюстрировать основные положения теории конкретными примерами; – Ясно и четко дает основные определения. Владеет терминологическим и понятийным аппаратом; – Развернуто отвечает на дополнительные вопросы.
Хорошо	<ul style="list-style-type: none"> – Вопросы раскрыты по существу; – Обучающийся в целом владеет основными теориями и понимает их содержание; – Имеет общее представление о связи теории и практики в рамках излагаемого материала; – Владеет в целом необходимыми методами решения конкретных задач, может проиллюстрировать основные положения теории конкретными примерами; – В достаточной мере владеет понятийным и терминологическим аппаратом; – Имеет затруднения при ответе на дополнительные вопросы.
Удовлетворительно	<ul style="list-style-type: none"> – Вопросы раскрыты, но не полностью; – Слабое понимание связи теории и практики; – Обучающийся может проиллюстрировать основные положения теории конкретными примерами, но имеет затруднения при решении некоторых задач; – Обучающийся не демонстрирует уверенного владения понятийным и терминологическим аппаратом; – Дополнительные вопросы вызывают затруднение.

Неудовлетворительно	<ul style="list-style-type: none"> – Большая часть вопросов не раскрыта; – Обучающийся не может проиллюстрировать основные положения теории конкретными примерами, не может применить теорию при решении конкретных задач; – Нет ответов на дополнительные вопросы.
---------------------	--

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

7.1. Литература

(жирным шрифтом выделена основная литература)

1. Freemantle, M. An Introduction to Ionic Liquids / M. Freemantle. – RSC Publishing, 2010. – 281 p.
2. Hartwig, John F. Organotransition Metal Chemistry: from bonding to catalysis / J.F. Hartwig. – Mill Valley: University Science Books, 2010. – 1127 p.
3. Jonasz, M. Light Scattering by Particles in Water. Theoretical and Experimental Foundations / M. Jonasz, G.R. Fournier. – Elsevier, 2004. – 704 p.
4. Lukas, H. Computational Thermodynamics: The Calphad Method / H. Lukas, S.G. Fries, B. Sundman. – Cambridge University Press, 2007. – 313 p.
5. Адамсон А. Физическая химия поверхностей. М.: Мир. 1979. – 568 с.
6. Бажин Н.М. и др. Термодинамика для химиков: Учебник для вузов / М.: Химия, 2001. - 408 с.
7. Байрамов В.М. Основы электрохимии: Уч. пособие. - М.: Изд. центр "Академия", 2005. - 240 с.
- 8. Бейдер Р. Атомы в молекулах: Квантовая теория. - М.: Мир, 2001. - 532 с.**
9. Беккер Г. Введение в электронную теорию органических реакций. - М.: Мир, 1977. - 658 с.
- 10. Бердетт Дж. Химическая связь / Пер. с англ. - М.: БИНОМ. Лаб. знаний, 2008. - 245 с. (+ 1 экз. издание 2012 г.)**
11. Боресков Г.К. Гетерогенный катализ. М.: Наука, 1986. – 303 с.
12. Вершинин В.И. Компьютерная идентификация органических соединений. – М.: Академкнига, 2002. – 197 с.
13. Воронин, А.И. и др. Динамика молекулярных реакций.. - М.: Наука, 1990. - 420 с.
- 14. Горшков, В.И. Основы физической химии: учеб./ В.И. Горшков, И.А. Кузнецов. – 4-е изд. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2011. – 407 с.**
- 15. Грибов, Л.А. Элементы квантовой теории строения и свойств молекул: учебное пособие / Л.А. Грибов. – Долгопрудный: Интеллект, 2010. – 310 с.**
- 16. Дамаскин Б.Б., Петрий О.А., Цирлина Г.А. Электрохимия. - Москва, Химия, 2006. 670 с. (+ 1 экз. издание 2008 г.)**
17. Из истории катализа: люди, события, школы: сборник / Кальнер В.Д. - М.: Калвис, 2005. - 568 с.
18. Кругляков, П.М. Физическая и коллоидная химия / П.М. Кругляков, Т.Н. Хаскова. – 2-е изд., испр. – М.: Высш. шк., 2007. – 319 с.: ил.

19. Крылов О.В. Гетерогенный катализ: Учебное пособие. М.: Академкнига, 2004. – 679 с.
20. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций. М.: Химия. 1986. – 246 с.
21. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул (Электронные оболочки). М.: Высш. Школа, 1979. – 467 с.
22. Миомандр Ф. и др. Электрохимия. - М.: Техносфера, 2008. - 360 с. (2 экз.)
23. Мюнстер А. и др. Химическая термодинамика / Пер. с нем. Агеев Е.П. - М.: УРСС, 2002. - 295 с. (+1 экз. издание 2010 г.)
24. Накамура А., Цуцуи М. Принципы и применение гомогенного катализа. М.: Химия, 1983. – 231 с.
25. Панченков Г.М., Лебедев В.П. Химическая кинетика и катализ. М.: Химия, 1985. – 590 с.
26. Пентин Ю.А., Вилков Н.В. Физические методы исследования в химии – М.: Мир, 2012. – 683 с. (+ 1 экз. издание 2009 г.; + 1 экз. издание 2003 г.)
27. Пригожин И., Кондепуди Д. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур. М.: Мир, 2002. – 461 с.
28. Ролдугин, В.И. Физикохимия поверхности: Учебник-монография / В.И. Ролдугин. – Долгопрудный: Издательский дом «Интеллект», 2008. – 568 с. (2 экз.)
29. Романовский Б.В. Основы химической кинетики: учебник. – М.: Издательство «Экзамен», 2006. -415 с.
30. Стромберг А.Г., Семченко Д.П. Физическая химия: М.: Высш. шк., 1988. – 496 с.
31. Сумм Б.Д. Основы коллоидной химии: Учебное пособие. - М.: Академия, 2006. - 238 с. (+ 1 экз. издание 2013 г.)
32. Темкин О.Н. Гомогенный металлокомплексный катализ. Кинетические аспекты / О.Н.Темкин. – М.: ИКЦ «Академкнига», 2008. – 918 с.
33. Тоуб, М. Механизмы неорганических реакций: пер.с англ. / М. Тоуб, Дж. Берджесс; под ред. А.А. Дроздова. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. – 678 с.: ил.
34. Уманский, С.Я. Теория элементарных химических реакций / С.Я. Уманский. – Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект», 2009. – 408 с.
35. Умрихин В.А. Физическая химия: Учебное пособие. - М.: КДУ, 2009. - 232 с.
36. Физическая и коллоидная химия: Учебник / ред. А.П. Беляев. – М.: ГЭОТАР-Медиа, 2010. – 700 с.: ил., табл.
37. Френкель, Даан. Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем. От алгоритмов к приложениям [Текст] : монография / Д. Френкель, Б. Смит; пер. с англ. и науч. ред. рус.изд. В. А. Иванов, М. Р. Стукан, 2013. - 559 с.
38. Хельтье Х.-Д. И др. Молекулярное моделирование. Теория и практика. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. – 318 с. (+1 экз. издание 2013 г.)
39. Хенрици-Оливэ Г., Оливэ С. Координация и катализ. М.: Мир, 1980. – 421 с.
40. Цирельсон, Владимир Григорьевич. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Текст] : учебное пособие / В. Г. Цирельсон, 2014. – 495 с. (+1 экз. издание 2010 г.)
41. Чоркендорф, И. Современный катализ и химическая кинетика / И. Чонкердорф, Х.Наймантсведрайт. – Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект», 2010. – 504 с.

42. Щеголев, И.Ф. Элементы статистической механики, термодинамики и кинетики: учебное пособие / И.Ф. Щеголев. – 2-е изд., испр. – Долгопрудный: Интеллект, 2010. – 208 с.
43. Эмануэль Н. М., Кнорре Д. Г. Курс химической кинетики. М.: Высшая школа. 1984. – 463 с.
44. Эткинс П. Физическая химия. В 2-х т. - М.: Мир, 1980.
45. Ягодковский В.Д. Статистическая термодинамика в физической химии. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2005. – 495 с.

7.2. Электронные ресурсы

Электронная платформа издательства American Chemical Society - <http://www.pubs.acs.org>

Электронная платформа издательства Taylor&Francis - <http://www.informaworld.com>

Электронная платформа издательства - [http:// www.scitation.aip.org](http://www.scitation.aip.org) (13 журналов)

Электронная платформа издательства Royal Society of Chemistry - <http://www.rsc.org>

Электронная платформа издательства WILEY-BLACWALL - <http://www.interscience.wiley.com> (более 2000 журналов)

Электронная платформа издательства SPRINGER - <http://www.springerlink.com> (более 2000 журналов)

Платформа научной электронной библиотеки e-Library.ru - <http://www.elibrary.ru> (более 8000 журналов)

Электронная платформа издательства Elsevier - <http://www.sciencedirect.com> (более 300 журналов)

Электронная платформа издательства Elsevier - <http://www.scopus.com> (Реферативно-поисковая база данных Scopus)

8. ОПИСАНИЕ МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЙ БАЗЫ, НЕОБХОДИМОЙ ДЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Лекционные занятия и консультации, самостоятельная работа по освоению дисциплины и подготовка к сдаче кандидатских экзаменов проводятся в специальных помещениях (читальный зал научной библиотеки и/или конференц-залы), оборудованных мебелью (столы, стулья), классной доской (меловой), компьютером, проектором для демонстрации презентаций.