МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова
Сибирского отделения Российской академии наук
(НИОХ СО РАН)

УТВЕРЖДАЮ
Директор НИОХ СО РАН
д.ф.-м.н., проф. Е.Г. Багрянская
«12» 04 2022 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ «ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

Научная специальность 1.4.4. Физическая химия (химические науки)

Одобрено Ученым советом НИОХ СО РАН
Протокол № 3 от 12 04 2022

Новосибирск 2022

Рабочая программа дисциплины «Физическая химия» образовательного компонента основной образовательной программы высшего образования – программы подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре НИОХ СО РАН по научной специальности 1.4.4. Физическая химия, реализуемой в очной форме обучения на русском языке в соответствии с федеральными государственными требованиями.

АННОТАЦИЯ ПРОГРАММЫ

Цель освоения учебной дисциплины: формирование системы углубленных профессиональных знаний теоретических и методологических основ физической химии, принципов и подходов к описанию строения молекулярных систем, электрических и магнитных свойств молекул, различных типов межмолекулярных взаимодействий, различных аспектов химической термодинамики равновесных и неравновесных систем, поверхностных явлений, электрохимических процессов, теоретических основ химической кинетики и методов экспериментального определения кинетических параметров химических реакций.

Место дисциплины в учебном плане: освоение дисциплины является обязательным и осуществляется на втором-четвертом курсах обучения (3-7 семестры) в соответствии с календарным учебным графиком.

Виды учебной работы: самостоятельная работа.

Формы аттестации по дисциплине: промежуточная аттестация проводится в форме кандидатского экзамена в седьмом семестре.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 8 з.е. (288 ч.), в том числе:

- самостоятельная работа аспиранта - 282 ч.
- промежуточная аттестация в форме кандидатского экзамена - 6 ч.

Содержание дисциплины:

1. Строение вещества
   - 1.1. Основы классической теории химического строения
   - 1.2. Физические основы учения о строении молекул
   - 1.3. Симметрия молекулярных систем
   - 1.4. Электрические и магнитные свойства
   - 1.5. Межмолекулярные взаимодействия
   - 1.6. Основные результаты и закономерности в строении молекул
   - 1.7. Строение конденсированных фаз
   - 1.8. Поверхность конденсированных фаз
2. Химическая термодинамика
   - 2.1. Основные понятия и законы термодинамики
   - 2.2. Элементы статистической термодинамики
   - 2.3. Элементы термодинамики необратимых процессов
   - 2.4. Растворы. Фазовые равновесия
   - 2.5. Адсорбция и поверхностные явления
   - 2.6. Электрохимические процессы
3. Кинетика химических реакций
   - 3.1. Химическая кинетика
   - 3.2. Катализ

Разработчики: д.х.н. Л.А. Шундрин, зав.лабораторией электрохимически активных соединений и материалов НИОХ СО РАН
к.х.н. Я.В. Зонов, заведующий аспирантурой НИОХ СО РАН

Оглавление

1. Общая характеристика дисциплины 4
1.1. Цели изучения дисциплины 4
1.2. Планируемые результаты освоения дисциплины 4
1.3. Трудоемкость дисциплины, вид учебной деятельности и форма промежуточной аттестации 4
2. Содержание дисциплины 5
3. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы аспирантов 11
4. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине 12
4.1. Порядок проведения текущего контроля и промежуточной аттестации 12
4.2. Критерии и шкалы оценивания результатов обучения по дисциплине 12
5. Типовые контрольные задания и иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения 13
5.1. Примеры экзаменационных вопросов 13
1. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины 14
6.1. Рекомендуемая литература 14
6.2. Дополнительная литература 14
6.3. Программное обеспечение и ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» 17
9. Материальное обеспечение дисциплины 17

1. Общая характеристика дисциплины

1.1. Цели изучения дисциплины

Цель освоения учебной дисциплины: формирование системы углубленных профессиональных знаний теоретических и методологических основ физической химии, принципов и подходов к описанию строения молекулярных систем, электрических и магнитных свойств молекул, различных типов межмолекулярных взаимодействий, различных аспектов химической термодинамики равновесных и неравновесных систем, поверхностных явлений, электрохимических процессов, теоретических основ химической кинетики и методов экспериментального определения кинетических параметров химических реакций.

1.2. Планируемые результаты освоения дисциплины

В результате изучения дисциплины аспирант должен:

Знать:

- теоретические и методологические основы физической химии;
- базовые физико-химические методы определения структурных характеристик веществ: магниторезонансная спектроскопия (ЯМР/ЭПР), электронная спектроскопия, колебательная спектроскопия, рентгеновская спектроскопия;
- методы определения энергетических характеристик веществ: масс-спектрометрия, термоаналитические методы;
- иметь представление о физико-химических и спектральных свойствах основных классов соединений, в том числе органических;
- закономерности и взаимосвязь строения и свойств соединений (основные классы органических соединений, координационные соединения), а также общие закономерности изменения свойств соединений при вариации их структуры;
- основные механизмы реакций и методологии их исследования физико-химическими методами.

Уметь:

- самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в области выбранного направления физической химии, использовать современные методы физико-химических исследований и информационно-коммуникационных технологий;
- выбирать и осваивать оптимальные физико-химические методы для решения поставленных задач, подбирать оптимальные условия экспериментов, критически анализировать полученные результаты;

Владеть:

- всеми экспериментальными и теоретическими физико-химическими методами, необходимыми для достижения научного результата в рамках выбранного физико-химического направления;
- навыками планирования физико-химического эксперимента;
- различными подходами к достижению целевого результата в рамках выбранного физико-химического направления.

1.3. Трудоемкость дисциплины, вид учебной деятельности и форма промежуточной аттестации

Трудоемкость дисциплины – 8 з.е. (288 ч).

Форма промежуточной аттестации: 7 семестр – кандидатский экзамен.

Виды деятельности	Трудоемкость, по учебным семестрам, час				
	3 семестр	4 семестр	5 семестр	6 семестр	7 семестр
Самостоятельная работа	36	72	72	72	30
Промежуточная аттестация	-	-	-	-	6
Всего	36	72	72	72	36

2. Содержание дисциплины

Раздел дисциплины	Объем учебной нагрузки (час)	Семестр
	Самостоятельная работа	
1. Строение вещества		
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.	5	3
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 Шредингера 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. Ее 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.	30	3

	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.	10	3-4
	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.	10	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.	6	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.	6	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.	20	4

	Жидкости. Мгновенная и колебательно-усредненная 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.).		
	1.8. Поверхность конденсированных фаз Особенности строения поверхности кристаллов и жидкостей, структура границы раздела конденсированных фаз. Молекулы и кластеры на поверхности. Структура адсорбционных слоев.	5	4
2. Химическая термодинамика			
	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. 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 Кирхгофа. Таблицы стандартных термодинамических величин и их использование в термодинамических расчетах. Второй закон термодинамики. Энтропия и ее 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 ее использование для расчетов химических равновесий. Равновесие в поле внешних сил. Полные потенциалы.	25	4-5
	2.2. Элементы статистической термодинамики Микро- и макросостояния химических систем. Фазовые Г - и μ -пространства. Эргодическая гипотеза. Термодинамическая вероятность и ее связь с энтропией. Распределение Максвелла – Больцмана. Статистические средние значения макроскопических величин. Ансамбли Гиббса. Микроканоническое и	25	5

	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, теплоемкости 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.		
	2.3. 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 ее описание в неравновесной термодинамике. Уравнение Чепмена – Энского.	10	5
	2.4. 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	25	5

	регулярные растворы, их свойства. 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.		
	2.5. 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 Лэнгмюра. Адсорбция из растворов. Уравнение Брунауэра – Эмета – Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента. Хроматография, различные ее типы (газовая, жидкостная, противоточная и др.). 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).	20	5-6
	2.6. 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, ее выражение через энергию Гиббса реакции в элементе. Уравнения Нернста и Гиббса – Гельмгольца для равновесной	20	6

	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.		
3. Кинетика химических реакций			
	3.1. Химическая кинетика 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 – Темкина. 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 ее 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,	40	6-7

	зависимость предэкспоненциального множителя от температуры. Реакции в растворах, влияние растворителя и заряда реагирующих частиц. Клеточный эффект и сольватация. 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. 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.		
	3.2. 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 Бренстеда. 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.	25	7

3. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы аспирантов

Содержание самостоятельной работы аспирантов – систематическое и последовательное самостоятельное освоение учебного материала, совершенствование навыка самоорганизации для непрерывного повышения профессиональной квалификации.

На протяжении каждого семестра аспиранты должны осуществлять планирование времени, необходимого для внеаудиторного самостоятельного освоения дисциплины, предусматривая при этом регулярное повторение материала.

В процессе освоения дисциплины и подготовки к прохождению текущего контроля и промежуточной аттестации в форме кандидатского экзамена аспиранты используют рекомендуемую основную и дополнительную литературу, программное обеспечение и ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», а также любую доступную литературу по научной специальности, самостоятельно изучая отдельные разделы дисциплины.

Аспиранты обеспечиваются местами для выполнения самостоятельной работы.

Самостоятельная работа аспирантов осуществляется каждым аспирантом в индивидуальном порядке.

4. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине

4.1. Порядок проведения текущего контроля и промежуточной аттестации

Текущий контроль успеваемости

Осуществляется научным руководителем аспиранта в течение всего срока изучения дисциплины в форме устных собеседований (или решения конкретных задач) для определения уровня знаний аспиранта и его готовности к сдаче кандидатского экзамена.

Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме кандидатского экзамена по специальности 1.4.4 Физическая химия, который проводится в устной форме. Экзаменуемый получает три теоретических вопроса из программы кандидатского экзамена по соответствующей специальности. Четвертый экзаменационный вопрос предусматривает собеседование экзаменуемого с членами экзаменационной комиссии по заранее подготовленному им реферату по теме диссертационной работы. Порядок проведения экзамена определяется Положением о кандидатских экзаменах и о порядке прикрепления к НИОХ СО РАН лиц для сдачи кандидатских экзаменов.

Экзаменационная комиссия отдельно оценивает ответ на каждый из четырех вопросов и выставляет общую оценку за экзамен. Уровень знаний аспиранта определяется экзаменационной комиссией с выставлением оценки «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» или «неудовлетворительно». Экзаменуемый, получивший неудовлетворительную оценку за один из вопросов, получает за экзамен оценку "неудовлетворительно".

4.2. Критерии и шкалы оценивания результатов обучения по дисциплине

Критерии оценивания результатов обучения	**Шкала оценивания**
Теоретические вопросы: – наличие полных ответов на все вопросы с непринципиальными неточностями – логичность и аргументированность ответов – точность и корректность применения терминов и понятий – способность самостоятельно объяснить особенности явлений и процессов на основании знаний о физических законах и принципах, лежащих в их основе ***Реферат:*** – полное соответствие материала обзора выбранной теме, при высокой полноте охвата литературных данных – наличие критического анализа при изложении материала – высокая наглядность представление материала и качество оформления документа	*Отлично*
Теоретические вопросы: – наличие достаточно полных ответов на все вопросы с несущественными	*Хорошо*

упущениями – логичность и аргументированность ответов с несущественными ошибками, не касающимися базовых основ предмета – точность и корректность применения терминов и понятий при наличии незначительных ошибок – способность самостоятельно объяснить особенности явлений и процессов на основании знаний о физических законах и принципах, лежащих в их основе, после наводящих вопросов. ***Реферат:*** – полное соответствие материала обзора выбранной теме, охвачена основная часть литературных данных по теме – наличие критического анализа для основной части изложенного материала – умеренная наглядность представление материала и качество оформления документа	
Теоретические вопросы: – наличие ответов на все вопросы, часть из которых неполные и/или с существенными ошибками – наличие ошибок в логике и аргументации ответов по отдельным вопросам – корректность применения терминов и понятий при наличии незначительных ошибок – способность самостоятельно объяснить особенности части явлений и процессов на основании знаний о физических законах и принципах, лежащих в их основе, после наводящих вопросов ***Реферат:*** – практически полное соответствие материала обзора выбранной теме, охвачена значительная, но не основная часть литературных данных по теме – наличие отдельных элементов критического анализа для части изложенуого материала – невысокая наглядность представление материала и качество оформления документа	*Удовлетворительно*
Теоретические вопросы: – наличие ответов не на все вопросы, часть из которых неполные и/или с существенными ошибками – отсутствие структурированности, логичности и аргументированности в изложении материала – значительны ошибки в применении терминов и понятий – неспособность самостоятельно объяснить особенности явлений и процессов на основании знаний о физических законах и принципах, лежащих в их основе, даже после наводящих вопросов ***Реферат:*** – неполное соответствие материала обзора выбранной теме и/или не охвачена большая часть литературных данных по теме – отсутствие критического анализа при изложении материала – низкая наглядность представление материала и качество оформления документа	*Неудовлетворительно*

5. Типовые контрольные задания и иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения

5.1. Примеры экзаменационных вопросов

1. Электронное строение атомов и молекул.
2. Второй закон термодинамики. Энтропия и ее изменения в обратимых и необратимых процессах.
3. Основные понятия химической кинетики. Способы определения скорости реакции..

1. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

6.1. Рекомендуемая литература

1. Вилков Л. В., Пентин Ю. А. Физические методы исследования в химии. М.: Изд-во МГУ. Ч. 1: 1987. Ч. 2: 1989.
2. Минкин В. И., Симкин Б. Я., Миняев Р. М. Теория строения молекул. Ростов-на-Дону: Феникс, 1997.
3. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, Изд-во МГУ, 2001.
2. Флларри Р. Квантовая химия. М.: Мир, 1985.
3. Полторак О. М. Термодинамика в физической химии. М.: Высш. шк., 1991.
4. Пригожин И., Кондепуди Д. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур. М.: Мир, 2002.
5. Смирнова Н. А. Методы статистической термодинамики в физической химии. М.: Высш. шк., 1982.
6. Дамаскин Б. Б., Петрий О. А. Введение в электрохимическую кинетику. М.: Высш. шк., 1983.
7. Денисов Е. Т., Саркисов О. М., Лихтенштейн Г. И. Химическая кинетика. М.: Химия, 2000.
8. Эмануэль Н. М., Кнорре Д. Г. Курс химической кинетики. М.: Высш. шк., 1984.

6.2. Дополнительная литература

1. Бейдер Р. Атомы в молекулах. М.: Мир, 2001.
2. Цирельсон В. Г., Зоркий П. М. Распределение электронной плотности в кристаллах органических соединений // Итоги науки и техники. Кристаллохимия. М.: ВИНИТИ, 1986.
3. Минкин В. И., Симкин Б. Я., Миняев Р. М. Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций. М.: Химия, 1986.
4. Агеев Е. П. Неравновесная термодинамика в вопросах и ответах. М.: Изд-во МГУ, 1999.
5. Адамсон А. Физическая химия поверхностей. М.: Мир, 1979.
6. Дамаскин Б. Б., Петрий О. А., Цирлина Г. А. Электрохимия. М.: Химия, 2001.
7. Даниэльс Ф., Олберти Р. Физическая химия. М.: Мир, 1978.
8. Дуров В. А., Агеев Е. П. Термодинамическая теория растворов неэлектролитов. М.: Изд-во МГУ, 1987.
9. Хаазе Р. Термодинамика необратимых процессов М.: Мир, 1967.
10. Эткинс Н. Физическая химия. Т. 1, 2. М.: Мир, 1980.
11. Панченков Г. М., Лебедев В. П. Химическая кинетика и катализ. М.: Химия, 1985.
12. Бажин Н. Б., Иванченко В. А., Пармон В. Н. Термодинамика для химиков. 2-е изд., М.: Колосс, 2004.
13. Пармон В. Н. Лекции по химической термодинамике. Новосибирск: НГУ, 2004.
14. Бажин Н. Б., Иванченко В.А., Пармон В.Н. Термодинамика для химиков. М.: Химия, 2000.
15. Бажин Н. Б., Иванченко В.А., Пармон В. Н. Термодинамика для химиков. Новосибирск: НГУ, 1999. Ч. 1-2.
16. Замараев К.И. Химическая кинетика: Курс лекций: В 3 ч. / Под ред. А.Г. Окунева, К.П. Брылякова. Новосибирск, 2004.
17. Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и массопередача в хими-ческой кинетике. М.: Наука, 1987.
18. Эйринг Г., Лин С. Г., Лин С. М. Основы химической кинетики. М.: Мир, 1983.
19. Денисов Е. Т. Кинетика гомогенных химических реакций. М.: Высш. шк., 1988.
20. Кондратьев В. Н., Никитин Е. Е. Кинетика и механизм газофазных реакций. М.: Наука, 1974.
21. Семенов Н. Н. Цепные реакции. М.: Наука, 1986.
22. Семенов Н. Н. О некоторых проблемах химической кинетики и реакционной способности. М.: Изд-во АН СССР, 1958.

23. Энтелис С.Г., Тигер Р.П. Кинетика реакций в жидкой фазе. Количественный учет влияния среды. М.: Химия, 1973.
24. Романовский Б. В. Основы химической кинетики, М.: Экзамен, 2006.
25. Ландау Л. Д., Лившиц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
26. Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики. М.: Наука, 1976.
27. Герцберг Г. Атомные спектры и строение атомов. М.: Наука, 1976.
28. Галицкий В.М., Карнаков Б.М., Коган В.И. Задачи по квантовой механике. М.: Наука, 1981.
29. Флюге З. Задачи по квантовой механике. М.: Мир, 1974. Т. 1, 2.
30. Бажин Н.М., Войтюк А.А. Задачи по строению вещества / Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 1979.
31. Маррелл Дж., Кеттл С., Теддер Дж. Теория валентности. М.: Мир, 1968.
32. Маррелл Дж., Кеттл С., Теддер Дж. Химическая связь. М.: Мир, 1980.
33. Герцберг Г. Спектры и строение простых свободных радикалов. М.: Мир, 1974.
34. Бажин Н.М., Салихов К.М. Атом / Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 1986.
35. Плюснин В.□Ф., Бажин Н. М. Двухатомные молекулы / Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 1991.
36. Симкин Б.Я., Клецкий М.Е., Глуховцев М.Н. Задачи по теории строения молекул. Ростов н/Д: Феникс, 1997.
37. Пиментал Г., Спратли Р. Как квантовая механика объясняет химическую связь. М.: Мир, 1973.
38. Герцберг Г. Электронные спектры и строение многоатомных молекул. М.: Мир, 1969.
39. Дьюар М. Теория молекулярных орбиталей в органической химии. М.: Мир, 1972.
40. Дьюар М., Догерти Р. Теория возмущенных молекулярных орбиталей в органической химии. М.: Мир, 1977.
41. Фудзинага С. Метод молекулярных орбиталей. М.: Мир, 1983.
42. Салем Л. Электроны в химических реакциях. М.: Мир, 1985.
43. Коулсон Ч. Валентность. М.: Мир, 1965.
44. Грей Г. Электроны и химическая связь. М.: Мир, 1967.
45. Хабердитцл В. Строение материи и химическая связь. М.: Мир, 1974.
46. Шусторович Е. М. Химическая связь. М.: Наука, 1973.
47. Стретвизор Э. Теория молекулярных орбиталей для химиков-органиков. М.: Мир, 1965.
48. Флайгер У. Строение и динамика молекул. М.: Мир, 1982. Т. 1, 2.
49. Фларри Р. Группы симметрии. Теория и химические приложения. М.: Мир, 1983.
50. Хигаси К., Баба Х., Рембаум А. Квантовая органическая химия. М.: Мир, 1967.
51. Вудворд Р., Гоффман Р. Сохранение орбитальной симметрии. М.: Мир, 1971.
52. Джаффе Г., Орчин М. Симметрия в химии. М.: Мир, 1977.
53. Лер Р., Марчланд А. Орбитальная симметрия в вопросах и ответах. М.: Мир, 1976.
54. Джилкрист Т., Сторр Р. Органические реакции и орбитальная симметрия. М.: Мир, 1976.
55. Пирсон Р. Правила симметрии в химических реакциях. М.: Мир, 1979.
56. Хохштрассер Р. Молекулярные аспекты симметрии М.: Мир, 1968.
57. Войтюк А.А. Симметрия молекул / Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 1988.
58. Робертс Дж. Расчеты по методу молекулярных орбит. М.: Мир, 1963.
59. Яцимирский К. Б., Яцимирский В. К. Химическая связь. М.: Наука, 1975.
60. Гиллеспи Р. Геометрия молекул. М.: Мир, 1975.
61. Ливер Э. Электронная спектроскопия неорганических соединений. М.: Мир, 1987. Ч. 1, 2.
62. Хьюи Дж. Неорганическая химия. Строение вещества и реакционная способность. М.: Химия, 1987.
63. Бальхаузен К. Введение в теорию поля лигандов. М.: Мир, 1964.
64. Берсукер И.Б. Электронное строение и свойства координационных соединений. Л.: Химия, 1976.
65. Берсукер И. Б. Эффект Яна-Теллера и вибронные взаимодействия в современной химии. М.: Наука, 1987.
66. Плюснин В. Ф., Бажин Н. М. Электронная спектроскопия координационных соединений

/ Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 1995.
67. Свердлова О. В. Электронные спектры в органической химии. М.: Наука, 1973.
68. Штерн Э., Тиммонс К. Электронная абсорбционная спектроскопия в органической химии. М.: Мир, 1974.
69. Казинцева Л. А., Куплетская Н. Б. Применение УФ, ИК, ЯМР спектроскопии в органической химии. М.: Наука, 1971.
70. Грибов Л. А. Введение в молекулярную спектроскопию. М.: Наука, 1976.
71. Наберухин Ю. И. Лекции по молекулярной спектроскопии / Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 1973.
72. Степанов Б. И., Грибковский В. П. Введение в теорию люминесценции. М.: Наука, 1963.
73. Безизлучательный перенос энергии электронного возбуждения / В. Л. Ермолаев, Е. Н., Бодунов, Е. Б. Свешникова, Т. А. Шахвердов, Л.: Наука. Ленингр. отд., 1977.
75. Уитли П. Определение молекулярной структуры. М.: Мир, 1970
76. Звелто О. Физика лазеров. М.: Мир, 1979.
77. Лазерная спектроскопия атомов и молекул / Под ред. Г. Вальтера. М.: Мир, 1979.
78. Демтредер В. Лазерная спектроскопия. М.: Мир, 1985.
79. Летохов В. С. Лазерная фотоионизационная спектроскопия. М.: Наука, 1987.
80. Применение лазеров в спектроскопии и фотохимии / Под ред. К. Мура. М.: Мир, 1983.
81. Александров Е.Б., Запасский В. С. Лазерная магнитная спектроскопия. М.: Наука, 1986.
82. Колебания молекул / М. В. Волькенштейн, Л. А. Грибов, М. А. Ельяшевич, Б. И. Степанов. М.: Наука, 1972.
83. Колебательные спектры многоатомных молекул / Л. М. Свердлов, М. А. Ковнер, Е. П. Крайнов. М.: Наука, 1970.
84. Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. М.: Мир, 1949.
85. Конингстайн И. А. Введение в теорию комбинационного рассеяния. М.: Мир, 1975.
86. Колебательная спектроскопия. Современные воззрения / Под ред. А. Барнса и У. Орвилл-Томаса. М.: Мир, 1981.
87. Маклочлан К. А. Магнитный резонанс. М.: Мир, 1967.
88. Блюменфельд Л. А., Воеводский В. В., Семенов А. Г. Применение ЭПР в химии. М.: Наука, 1962.
89. Сликтер Ч. Основы теории магнитного резонанса. М.: Мир, 1967.
90. Кэррингтон А., Мак-Лечлан Э. Магнитный резонанс и его применение в химии. М.: Мир, 1970.
91. Вертц Дж., Болтон Дж. Теория и практические приложения метода ЭПР. М.: Мир, 1975.
92. Бажин Н.М., Цветков Ю. Д. Сверхтонкая структура спектров ЭПР свободных радикалов / Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 1973.
93. Бажин Н.М., Салихов К.М. Релаксация свободных радикалов в жидкостях / Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 1973.
93. Замараев К.И., и др. Спиновый обмен / К. И. Замараев, Ю. Н. Молин, К.М. Салихов. Новосибирск: Наука, Сиб. отд-ние, 1977.
94. Жунке А. Ядерный магнитный резонанс в органической химии. М.: Мир, 1974.
95. Бучаченко А.Л. Химическая поляризация ядер и электронов. М.: Наука, 1974.
96. Фларри Р. Квантовая химия. М.: Мир, 1985.
97. Бажин Н. Б. Краткий курс химической термодинамики. Новосибирск: НГУ, 1991. Ч. 1-2.
98. Голиков Г. А. Руководство по физической химии. М.: Высш. шк., 1988.
99. Еремин Е. Н. Основы химической термодинамики. М.: Высш. шк., 1978.
100. Карапетьянц М. Х. Химическая термодинамика. М.: Химия, 1975.
101. Киттель Ч. Статистическая термодинамика. М.: Наука, 1977.
102. Кнорре Д. Г., Крылова Л. Ф., Музыкантов В. С. Физическая химия. М.:Высш. шк., 1990.
103. Кубо Р. Термодинамика. М.: Мир, 1970.
104. Курс физической химии / Под ред. Я. И. Герасимова. М.: Химия, 1973.
105. Мюнстер Ф. Химическая термодинамика. М.: Мир, 1971.
106. Пармон В. Н., Иванченко В. А. Введение в курс физической химии для специализации

«геохимия». Новосибирск: НГУ, 1996.
107. Пригожин И., Дефей Р. Химическая термодинамика. Новосибирск: Наука,1966.
108. Стромберг А. Г., Семченко Д. П. Физическая химия. М.: Высш. шк., 1999.
109. Шляпинтох В.Я., Замараев К.И., Пурмаль А.П. Химическая термодинамика. М.: МФТИ, 1975

6.3. Программное обеспечение и ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

- Стандартный комплект программного обеспечения (ПО), включающий регулярно обновляемое лицензионное ПО Windows и MS Office
- Реферативно-поисковая база данных Reaxys (Elsevier)
- Реферативно-библиографическая база данных Scopus (Elsevier)
- Реферативно-библиографическая база данных Scifinder (Chemical Abstracts Service)
- Библиометрическая база данных Web of Science Core Collection (Thomson Reuters Scientific LLC.)
- База данных полнотекстовых научных журналов JSTOR.
- Электронная библиотека диссертаций Российской государственной библиотеки (ЭБД РГБ)
- Электронные ресурсы российской научной библиотеки eLibrary.ru
- Электронные ресурсы издательства American Chemical Society (ACS)
- Электронные ресурсы издательства Annual Reviews
- Электронные ресурсы Freedom Collection издательства Elsevier
- Электронные ресурсы издательства The Royal Society of Chemistry (RSC)
- Электронные ресурсы издательства Wiley
- Ресурсы центра научно-технической сети STN

9. Материальное обеспечение дисциплины

НИОХ СО РАН обеспечивает аспирантов специальными помещениями для самостоятельной работы, помещениями для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации:

- Конференц-зал главного корпуса НИОХ СО РАН;
- Конференц-зал НТК НИОХ СО РАН;
- Комната им. акад. Г.А. Толстикова;
- Помещение модуля ЛФИ;
- Комната для занятий № 413 НТК НИОХ СО РАН;
- Помещение читального зала библиотеки НИОХ СО РАН
- Рабочие места в лабораториях структурных подразделений НИОХ СО РАН