



Федеральное агентство научных организаций (ФАНО)
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского
Российской академии наук
(ИОХ РАН)



«УТВЕРЖДАЮ»
Директор Института
М.П. Егоров
«13» _____ 2017 г.

Рабочая программа дисциплины

Физическая химия

по направлению подготовки - 04.06.01 Химические науки (уровень
подготовки кадров высшей квалификации)

Направленность (профиль)

02.00.04 - Физическая химия

Москва

2017 год

Рабочая программа составлена на основании федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки кадров высшей квалификации 04.06.01 Химические науки, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 30.07.2014 № 869.

Разработчики:

заведующий лабораторией катализа
нанесенными металлами и их оксидами
д.х.н., профессор

А.Ю. Стахеев

заведующий лабораторией разработки и
исследования полифункциональных катализаторов
д.х.н., профессор

Л.М. Кустов

Программа принята на заседании Ученого совета ИОХ РАН
Протокол № от «13» нояб 2017 г.

Ученый секретарь:

Кандидат химических наук  И.К. Коршевец

1. Цели и задачи освоения дисциплины

Цели дисциплины: Подготовить аспирантов и специалистов – физико-химиков к научно-исследовательской деятельности, связанной с разработкой и применением методов современной физической химии в различных областях современной физической химии, нанотехнологий и синтеза новых материалов.

Задачи дисциплины: Создание углубленного представления о современной физической химии и ее месте среди других химических наук, в материаловедении и в химической промышленности. Освоение теоретических основ современной физической химии, базовых принципов дизайна функциональных молекул и методах их исследования, принципов создания новых материалов на основе слабых взаимодействий между молекулами. Формирование глубокого понимания общих закономерностей, описывающих изменение термодинамических функций в химических реакциях и физико-химических процессах. Обучение навыкам теоретического анализа результатов экспериментальных исследований в области современной физической химии, методам планирования экспериментов и обработки их результатов, систематизирования и обобщения как уже имеющейся в литературе, так и самостоятельно полученной в ходе исследований информации.

2. Место дисциплины в структуре ООП.

Настоящая дисциплина «Физическая химия» - модуль основной профессиональной образовательной программы высшего образования – программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению подготовки 04.06.01 – Химические науки по специальности 02.00.04 - Физическая химия.

Обучающийся по данной дисциплине должен иметь фундаментальные представления по физической химии. Для изучения данной дисциплины необходимо высшее образование с освоением курса физической химии для химических специальностей.

3. Требования к результатам освоения дисциплины.

В рамках данной дисциплины углубляются и развиваются следующие компетенции:

Универсальные компетенции:

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);

Общепрофессиональные компетенции:

способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в физической химии с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1).

Профессиональные компетенции:

способность организовывать проведение экспериментов и испытаний, проводить их обработку и анализировать их результаты, обобщать в виде научных статей для ведущих профильных журналов (ПК-3);

готовность к созданию новых экспериментальных установок для проведения лабораторных практикумов, к разработке учебно-методической документации для проведения учебного процесса (ПК-4).

4. Структура и содержание дисциплины.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 7 зачетных единиц (252 часа).

Дисциплина изучается на 1-м году аспирантуры. Дисциплина состоит из 7 разделов.

4.1. Структура дисциплины.

№ п/п	Наименование дисциплины	Объем учебной работы (в часах)						Вид итогового контроля	
		Всего	Всего аудит.	Из аудиторных			КСР.		Сам. работа
				Лекц.	Лаб.	Прак.			
1	Физическая химия	252	172	72	40	60	18	62	экзамен

4.2. Содержание дисциплины

4.2.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Виды учебной работы, и трудоемкость (в часах)				Самостоятельная работа
		Лек.	Лаб.	Пр.	КСР	
1	Химическая кинетика и механизмы элементарных химических реакций	10	5	10	6	14
2	Физико-химические методы исследования вещества	10	5	8		8
3	Электрохимия	10	6	8		8
4	Катализ	10	6	8		8
5	Химическая термодинамика и термохимия	12	8	10	6	8
6	Адсорбция	10	6	8		8
7	Строение молекул и квантовая химия	10	6	8	6	8

4.2.2 Содержание разделов дисциплины

Содержание лекционного курса:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Форма проведения занятий
1	Химическая кинетика и механизмы элементарных химических реакций	<ol style="list-style-type: none"> 1. Основное понятия и постулаты химической кинетики, их применение. 2. Константа скорости и энергия активации. 3. Кинетическая теория газов. 4. Теория активированного комплекса. 5. Мономолекулярные реакции. 6. Реакции в растворах. Скорость химической реакции. 7. Простые реакции в статическом режиме 8. Сложные реакции в потоке. Цепные реакции. Применение линейной алгебры и теории графов в химической кинетике. 	Лекции
2	Физико-химические методы исследования	<p>Методы определения физических свойств. Общая характеристика и классификация методов.</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Масс-спектрометрия. 2. Спектроскопические методы исследования. 	Лекции

	<p>вещества</p>	<p>3. Газовая электронография.</p> <p>4. Методы колебательной спектроскопии:</p> <p>5. Инфракрасные (ИК) спектры и комбинационное рассеяние света.</p> <p>Применение методов колебательной спектроскопии для качественного и количественного анализа.</p> <p>ИК-спектроскопия твердых тел. Спектры пропускания, диффузного рассеяния, нарушенного полного внутреннего отражения, испускания.</p> <p>6. Электронная спектроскопия. Спектроскопия в видимой и ультрафиолетовой (УФ) областях.</p> <p>Люминесценция (флуоресценция и фосфоресценция). Фотофизические процессы в молекуле. Практическое использование количественного люминесцентного анализа.</p> <p>Рентгеновские методы исследования.</p> <p>Природа рентгеновских спектров. Классификация рентгеновских методов анализа. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (электронная спектроскопия для химического анализа — ЭСХА). Оже-электронная спектроскопия. Синхротронное излучение и методы XAFS (EXAFS, XANES). Исследование координации и природы ближайшего окружения атомов.</p> <p>7. Методы исследования оптически активных веществ. Дисперсия оптического вращения.</p> <p>Круговая поляризация луча света. Вращение плоскости поляризации плоскополяризованного света. Применения к изучению конфигурации и конформации оптически активных веществ.</p> <p>Оптический круговой дихроизм.</p> <p>Уравнение поглощения света. Коэффициент экстинкции и молярного поглощения. Эллиптическая поляризация света. Сравнение с дисперсией оптического вращения и УФ спектроскопией.</p> <p>Аномальное рассеяние рентгеновских лучей</p> <p>Нормальная дифракция и закон Фриделя. Рассеяние рентгеновских лучей с длиной волны, близкой к поглощению, — аномальное рассеяние. Определение абсолютной конфигурации молекул.</p> <p>8. Магнетохимические и электрооптические методы исследования.</p> <p>Поведение вещества во внешнем постоянном магнитном поле. Магнитная индукция, магнитная проницаемость и магнитная восприимчивость вещества.</p> <p>Природа парамагнетизма. Орбитальный магнитный момент и спин-орбитальное взаимодействие.</p> <p>Магнитные свойства неорганических соединений и комплексов переходных металлов.</p> <p>Особенности магнитных свойств полиядерных комплексов.</p> <p>Релеевское рассеяние и эффект Керра. Применения в конформационном анализе и исследованиях электронного</p>	
--	------------------------	---	--

		<p>строения молекул.</p> <p>Эффект Фарадея и магнитный круговой дихроизм</p> <p>Уравнение для вращения плоскости поляризации света в магнитном поле. Понятие о магнитооптической вращательной дисперсии и магнитном круговом дихроизме. Применение в органической химии и химии комплексных соединений.</p> <p>9. Резонансные методы.</p> <p>Метод ЯМР</p> <p>Физические основы явления ядерного магнитного резонанса. Химический сдвиг и спин-спиновое расщепление в спектрах ЯМР. Метод двойного резонанса. Применение спектров ЯМР в химии.</p> <p>Метод ЭПР</p> <p>Принципы спектроскопии электронного парамагнитного (спинового) резонанса. Условие ЭПР. g-Фактор и его значение. Определение свободных радикалов и других парамагнитных центров.</p> <p>Метод ЯКР</p> <p>Электрический квадрупольный момент ядер. Взаимодействие "квадрупольного" ядра с неоднородным электрическим полем. Приложения метода ЯКР и его возможности.</p> <p>10. Мессбауэровская спектроскопия</p> <p>Возможности γ-резонансной спектроскопии в химии и ограничения ее применения.</p> <p>11. Метод дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК)</p> <p>Теоретические основы метода.</p> <p>12. Другие физикохимические методы. Неэластичное рассеяние нейтронов как метод исследования твердых материалов. Методы SIMS, UPS, FEM, HREELS, FABMS.</p>	
3	Электрохимия	<ol style="list-style-type: none"> 1. Предмет электрохимии. Свойства электродов. Вольтамперные характеристики в электрохимических процессах. 2. Удельная электропроводность растворов электролитов. Электродный потенциал. Диффузионный потенциал. 3. Механизм потенциалообразования. 4. Термодинамика гальванического элемента. Кинетика электродных процессов. 5. Катодное восстановление органических веществ в зоне до водородного перенапряжения. 6. Анодное окисление органических веществ в зоне до кислородного перенапряжения. 7. Электрокатализ, селективность электрокаталитических процессов. 8. Уравнение Нернста. 9. Метод электродвижущих сил (ЭДС). 	Лекции
4	Катализ	<p>Определения катализа. Каталитические процессы в природе. Роль катализа в современной промышленности.</p>	Лекции

Механизмы каталитических реакций, каталитический цикл. Активность и стабильность катализаторов.

1. Гомогенный катализ

Классификация гомогенных катализаторов, их активность и селективность. Нуклеофильный катализ. Механизм и кинетика реакций замещения, расщепления и присоединения. Кислотный, электрофильный и основной катализ.

Металлокомплексный катализ. Ферментативный катализ. Основные типы и функции ферментов. Понятие активного центра, субстрата, кофактора, ингибитора. Основные положения теории ферментативного катализа; энергетические и энтропийные параметры ферментативных процессов.

Катализ межфазного переноса.

2. Гетерогенный катализ

Строение поверхности твердых тел и его влияние на каталитическую активность. Современные методы исследования структуры и состава поверхностного слоя твердых тел. Методы определения элементного состава катализаторов, спектральные и химические методы. Термогравиметрия. Рентгенофазовый и рентгеноструктурный анализ. Электронная микроскопия. Зондовая микроскопия: туннельная и атомно-силовая микроскопия. Масс-спектрометрия вторичных ионов. ЯМР-ВМУ-спектроскопия твердого тела, кросс-поляризация. ЯМР-томография. EXAFS, XAFS, XANES, SAXS, фотоэлектронная и оже-спектроскопия, ГР-спектроскопия. Магнитные методы исследования катализаторов. КР-спектроскопия. Электронная спектроскопия. Дифракция медленных электронов.

Адсорбция как стадия гетерогенно-каталитической реакции. Природа адсорбционного взаимодействия. Физическая адсорбция и хемосорбция.

Типы гетерогенных катализаторов.

Области протекания гетерогенно-каталитических реакций, их признаки и методы экспериментального подтверждения.

Исследование кинетики гетерогенно-каталитических реакций в периодических, проточных и проточно-циркуляционных реакторах, обработка экспериментальных данных.

Квантово-химические расчеты взаимодействия простых молекул с каталитическими центрами.

3. Основные промышленные каталитические процессы

Получение водорода и синтез-газа каталитической конверсией углеводородов. Синтез аммиака и метанола, синтез Фишера-Тропша. Гидрирование и дегидрирование органических соединений

Окисление неорганических соединений. Получение серной и азотной кислот. Каталитические процессы окисления органических веществ, окислительный аммонолиз.

Каталитические процессы в нефтепереработке. Каталитический крекинг, гидрокрекинг, риформинг, гидроочистка. Изомеризация и алкилирование.

Гомогенно-каталитические промышленные процессы с

		использованием кислотных, электрофильных и металлокомплексных катализаторов. Промышленное применение ферментов. Экологический катализ. Природоохранные каталитические технологии.	
5	Химическая термодинамика и термохимия	<p>4. Основные термодинамические функции. Изобарно-изотермический потенциал. Изохорно-изотермический потенциал. Внутренняя энергия. Свободная энергия Гиббса. Свободная энергия Гельмгольца. Первое начало термодинамики и его следствия. Работа, производимая системой. Открытые и закрытые системы. Второе начало термодинамики. Энтальпия и методы ее расчета и определения. Энтропия и методы ее расчета и определения. Третье начало термодинамики. Понятие термодинамической модели. Химический потенциал. Уравнение Вант-Гоффа. Равновесия фазовые и химические. Константа равновесия. Равновесия в закрытых и в открытых системах. Основы термохимии и калориметрии. Температура в равновесной термодинамике. Закон Гесса. Формула Кирхгофа. Калориметрия растворения. Особенности термохимии реакций, протекающих в жидкой среде. Уравнения состояния веществ при высоких давлениях. Критерии устойчивости равновесий. Термодинамическая классификация растворов. Идеальные растворы. Бесконечно разбавленные растворы. Неидеальные растворы. Фазовые равновесия в растворах. Уравнение Ван-дер-Ваальса. 5. Законы Коновалова, правила Вревского. Критические явления. Элементы статистической термодинамики. Классификация межчастичных взаимодействий. Методы расчета вкладов межмолекулярных взаимодействий в термодинамические функции жидкостей и растворов по данным о равновесии жидкость-пар. Теория диэлектрической проницаемости жидкостей и растворов. Основы неравновесной термодинамики. Теория поля и термодинамика.</p>	Лекции
6	Адсорбция	<p>1. Межмолекулярные взаимодействия в адсорбции. Термодинамика адсорбции. 2. Фундаментальное адсорбционное уравнение Гиббса. Вывод уравнения Лапласа из уравнения Гиббса. Применение уравнения Гиббса к эксперименту. 3. Термодинамика адсорбции на твердом адсорбенте. Изостерические и калориметрические теплоты адсорбции. Уравнение состояния адсорбированного вещества. 4. Модель мономолекулярной адсорбции. Уравнение Лэнгмюра. Зависимость адсорбции от температуры.</p>	Лекции

		<p>5. Молекулярно-статистическая теория адсорбции при нулевом заполнении поверхности.</p> <p>6. Адсорбция из растворов. Гиббсовская адсорбция.</p> <p>7. Адсорбция из растворов и жидкостная хроматография.</p> <p>8. Уравнение Гиббса-Дюгема для адсорбционной фазы. Термодинамические методы описания адсорбционных равновесий. Методы "избытков Гиббса".</p> <p>9. Явление капиллярной конденсации в мезопорах. Уравнение Кельвина и распределение мезопор по радиусам.</p>	
7	Строение молекул и квантовая химия	<p>1. Дипольный момент молекулы. Взаимодействие полярной молекулы с электростатическим полем.</p> <p>2. Применение данных для определения симметрии и конформации молекул, энергетика внутреннего вращения и комплексообразования.</p> <p>Геометрия молекул. Определение дипольного момента и геометрических параметров молекул из микроволновых спектров.</p> <p>3. Современные возможности квантовой химии. Свойства молекул и реакций, которые можно рассчитать квантовохимическими методами. Методы и программы.</p> <p>4. Описание геометрии молекул различной симметрии. Оптимизация геометрии.</p> <p>5. Расчет термодинамических функций (энтропии, теплоемкости, изменения энтальпии и приведенной энергии Гиббса) газообразных соединений методом статистической термодинамики.</p> <p>Выбор квантовохимического метода и набора базисных функций. Неэмпирические (<i>ab initio</i>) методы и метод теории функционала плотности (DFT).</p>	Лекции

Содержание семинаров и практического курса:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Форма проведения занятий
1	Химическая кинетика и механизмы элементарных химических реакций	<p>Кинетическая теория газов, число соударений молекул, время соударения, учет нескольких степеней свободы при расчете числа активных соударений. Динамика молекулярных процессов, сечения соударения и функция распределения. Вывод формулы теории активных соударений из основной модели динамики.</p> <p>Теория активированного комплекса, расчет константы скорости. Определение энергии активации. Поверхность потенциальной энергии, принципы ее расчета, типы ППЭ. Неадиабатичность процессов кинетики, критерии Месси и Ландау-Зеннера. Туннельный эффект. Термодинамика</p>	Семинары, практические работы

		<p>активированного комплекса, энтропия активации.</p> <p>Мономолекулярные реакции, их особенности. Ранние теории и их недостатки. Теория РРКМ. Основная модель и терминология. Вывод уравнения для константы скорости мономолекулярной реакции, расчеты по формуле. Приближения низких и высоких температур. Тримолекулярные реакции. Объяснение отрицательной "E активации".</p> <p>Скорость химической реакции. Кинетические уравнения элементарных химических реакций, закон действующих масс. Молекулярность, порядок и константа скорости реакции, уравнение Аррениуса, энергия активации и предэкспоненциальный множитель. Механизм элементарной химической реакции, поверхность потенциальной энергии, теория активированного комплекса, свободная энергия активации, энтропия активации и объем активации.</p> <p>Влияние растворителя на скорость элементарной химической реакции в растворе. Электростатическая и специфическая сольватация. Ионная сила и солевой эффект, их влияние на скорость реакции.</p> <p>Простые реакции в статическом режиме, период полупревращения, инварианты 1-го и 2-го рода. Определение порядка реакции, константы скорости и энергии активации по опытным данным. Дифференциальная и интегральная селективности. Приближения квазиравновесия и квазистационарности. Анализ схемы $A \leftrightarrow B \rightarrow C$. Схема Михаэлиса-Ментен. Исключения времени как переменного. Кинетика простых реакций в потоке. Сравнение режимов идеального смешения и идеального вытеснения. Определение кинетических параметров. Эффективные константы скорости и энергия активации. Сложные реакции в потоке, влияние режима проведения процесса на селективность реакции. Автокатализ. Колебательные режимы в химической кинетике, схема Лотки-Вольтерры. Цепные реакции. Неизотермическая и релаксационная кинетика. Кинетика сложных реакций, быстрые, медленные и мгновенные реакции. Ключевые вещества, реакции и маршруты. Применение линейной алгебры и теории графов в химической кинетике, формула Темкина.</p>	
2	<p>Физико-химические методы исследования вещества</p>	<p>Общая характеристика и классификация методов. Спектроскопические, дифракционные, электрические и магнитные методы. Энергетические характеристики различных методов. Чувствительность и разрешающая способность метода. Характеристическое время метода. Интеграция методов.</p> <p>Масс-спектрометрия</p>	<p>Семинары, практические работы</p>

Принципы масс-спектрометрии. Блок-схема масс-спектрометра. Отношение массы к заряду. Масс-спектр. Молекулярные предшественники. Стабильные и метастабильные ионы. Фрагментация. Методы ионизации: электронный удар, фотоионизация, химическая ионизация. Ионный ток и сечение ионизации. Разрешающая сила масс-спектрометра. Времяпролетный масс-спектрометр. Квадрупольный масс-спектрометр. Спектрометр ион-циклотронного резонанса. Применение масс-спектрометрии. Идентификация вещества. Корреляция между молекулярной структурой и масс-спектрами. Измерение потенциалов появления ионов и определение потенциалов ионизации и энергии разрыва связей. Определение парциальных давлений компонентов газовых смесей. Эффузионная ячейка Кнудсена. Определение теплоты сублимации, теплоты реакции и константы равновесия.

Спектроскопические методы исследования

Природа электромагнитного излучения, Основные характеристики излучения (частота, длина волны, волновое число). Электронные, колебательные, вращательные, спиновые и ядерные переходы как результат различных типов внутриатомных или внутримолекулярных взаимодействий. Спектры испускания, поглощения и рассеяния. Важнейшие характеристики спектральных линий (положение, интенсивность, ширина).

Принципиальная схема спектроскопических измерений в любой области спектра. Основные узлы спектральной установки. Источники электромагнитного излучения.

Газовая электронография

Уравнения потока электронов для плоских и сферических волн.

Рассеяние электронов жесткой молекулой. Введение функции распределения межъядерных расстояний. Кривая радиального распределения.

Методы колебательной спектроскопии

Инфракрасные (ИК) спектры и комбинационное рассеяние света

Квантовомеханический подход к описанию колебательных спектров.

Уровни энергии, их классификация, фундаментальные, обертоновые и составные частоты. Интенсивность полос колебательных спектров. Правила отбора и интенсивность в ИК поглощении и в спектрах КР. Спектроскопия комбинационного рассеяния (КР). Стоксовы и антистоксовы линии КР. Определение геометрических параметров неполярных молекул. Классическая задача о колебаниях многоатомных молекул. Частоты и формы нормальных колебаний молекул. Силовые постоянные. Учет симметрии молекулы. Сопоставление ИК и КР спектров и выводы о симметрии молекулы. Характеристичность нормальных

колебаний. Определение силовых полей молекулы. Использование изотопозамещенных молекул. Корреляция силовых постоянных с другими параметрами и свойствами молекул.

Применение методов колебательной спектроскопии для качественного и количественного анализа. Техника и методики ИК спектроскопии и спектроскопии КР.

ИК-спектроскопия твердых тел. Спектры пропускания, диффузного рассеяния, нарушенного полного внутреннего отражения, испускания. ИК-Фурье-спектроскопия, Фурье преобразование, выигрыши Жакино, Фелджета, Конна. Возможности колебательной спектроскопии в области обертонов и составных колебаний. Молекулы-зонды и тест-реакции.

Фотоакустическая ИК-спектроскопия, метод фототермического отклонения луча.

Электронная спектроскопия. Спектроскопия в видимой и ультрафиолетовой (УФ) областях

Вероятности переходов между электронно-колебательно-вращательными состояниями. Принцип Франка-Кондона. Определение энергии диссоциации и других молекулярных постоянных. Абсорбционная спектроскопия в видимой и УФ областях как метод исследования электронных спектров многоатомных молекул. Характеристики электронных состояний многоатомных молекул: энергия, волновые функции, мультиплетность, время жизни. Симметрия и номенклатура электронных состояний. Классификация и отнесение электронных переходов. Интенсивности полос различных переходов. Правила отбора и нарушения запрета. Применение электронных спектров поглощения в качественном, структурном и количественном анализе.

Хромофоры. Спектры сопряженных систем и пространственные эффекты в электронных спектрах поглощения. Техника спектроскопии в видимой и УФ областях.

Люминесценция (флуоресценция и фосфоресценция). Фотофизические процессы в молекуле. Основные характеристики люминесценции (спектры поглощения и спектры возбуждения, времена жизни возбужденных состояний, квантовый и энергетический выход люминесценции). Синглетные и триплетные состояния. Закономерности люминесценции (закон Стокса-Ломмеля, правило Левшина, закон Вавилова). Тушение люминесценции. Практическое использование количественного люминесцентного анализа.

Рентгеновские методы исследования

Природа рентгеновских спектров. Края поглощения. Взаимосвязь рентгеновских спектров поглощения и

характеристических спектров испускания. Зависимость частоты перехода краев поглощения или линий испускания от величины порядкового номера элемента (закон Мозли). Классификация рентгеновских методов анализа. Анализ по первичному рентгеновскому излучению (рентгеноэмиссионный). Анализ по вторичному рентгеновскому излучению (рентгенофлуоресцентный). Закон Брэгга-Вульфа. Рентгеноабсорбционный анализ. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (электронная спектроскопия для химического анализа — ЭСХА). Метод ЭСХА как непосредственный экспериментальный метод измерения величины энергии химической связи. Возможности ЭСХА для анализа поверхностей. Оже-электронная спектроскопия, возможности ОЭС для анализа легких элементов. Синхротронное излучение и методы XAFS (EXAFS, XANES). Исследование координации и природы ближайшего окружения атомов.

Методы исследования оптически активных веществ.

Дисперсия оптического вращения

Круговая поляризация луча света. Вращение плоскости поляризации плоскополяризованного света. Спиральная модель оптической активности. Вращательная сила перехода. Условия вращения плоскости поляризации. Дисперсия оптического вращения. Эффект Коттона — аномальная дисперсия. Схема эксперимента. Применения к изучению конфигурации и конформации оптически активных веществ. Правило октантов.

Оптический круговой дихроизм.

Уравнение поглощения света. Коэффициент экстинкции и молярного поглощения. Эллиптическая поляризация света. Зависимость оптического кругового дихроизма от длины волны. Схема измерений кругового дихроизма. Область применения в стереохимии и электронном строении оптически активных веществ. Сравнение с дисперсией оптического вращения и УФ спектроскопией.

Аномальное рассеяние рентгеновских лучей

Нормальная дифракция и закон Фриделя. Рассеяние рентгеновских лучей с длиной волны, близкой к поглощению, — аномальное рассеяние. Определение абсолютной конфигурации молекул.

Магнетохимические и электрооптические методы исследования

Поведение вещества во внешнем постоянном магнитном поле. Магнитная индукция, магнитная проницаемость и магнитная восприимчивость вещества. Природа явлений диа-, пара-, ферро- и ферримагнетизма. Диамагнетизм вещества и аддитивная схема Паскаля. Примеры структурного анализа в органической химии с помощью магнетохимического метода.

Природа парамагнетизма. Квантовомеханический подход к описанию парамагнитного поведения системы с s

$=1/2$. Законы Кюри и Кюри—Вейса. Микроскопическая природа магнетизма. Магнитный момент парамагнитных систем с $s > 1/2$. Орбитальный магнитный момент и спин-орбитальное взаимодействие.

Магнитные свойства неорганических соединений и комплексов переходных металлов.

Особенности магнитных свойств полиядерных комплексов.

Релеевское рассеяние и эффект Керра

Релеевское рассеяние света. Деполяризация при рассеянии на анизотропных молекулах. Анизотропия поляризуемости, коэффициенты деполяризации. Закон Керра. Связь молярной постоянной Керра с главными значениями поляризуемости молекул. Применения в конформационном анализе и исследованиях электронного строения молекул.

Эффект Фарадея и магнитный круговой дихроизм

Уравнение для вращения плоскости поляризации света в магнитном поле. Константа Верде. Понятие о магнитооптической вращательной дисперсии и магнитном круговом дихроизме. Применение в органической химии и химии комплексных соединений.

Резонансные методы.

Метод ЯМР

Физические основы явления ядерного магнитного резонанса. Снятие вырождения спиновых состояний в постоянном магнитном поле. Условие ядерного магнитного резонанса. Заселенность уровней энергии, насыщение, релаксационные процессы и ширина сигнала.

Химический сдвиг и спин-спиновое расщепление в спектрах ЯМР. Константа экранирования ядра. Относительный химический сдвиг, его определение и использование в химии. Спин-спиновое взаимодействие ядер, его природа, число компонент мультиплетов, распределение интенсивности, правило сумм. Метод двойного резонанса.

Применение спектров ЯМР в химии. Техника и методика эксперимента. Структурный анализ. Химическая поляризация ядер. Блок-схема спектрометра ЯМР, типы спектрометров.

Метод ЭПР

Принципы спектроскопии электронного парамагнитного (спинового) резонанса. Условие ЭПР. g -Фактор и его значение. Сверхтонкое расщепление сигнала ЭПР при взаимодействии с одним и несколькими ядрами. Число компонент мультиплета, распределение интенсивности. Константа СТС. Тонкое расщепление. Ширина линий. Приложение метода ЭПР в химии. Изучение механизмов химических реакций. Химическая поляризация электронов. Определение свободных радикалов и других парамагнитных центров. Использование спиновых меток. Блок-схема спектрометра ЭПР, особенности эксперимента, достоинства и ограничения метода.

Метод ЯКР

Электрический квадрупольный момент ядер. Взаимодействие "квадрупольного" ядра с неоднородным электрическим полем.

		<p>Градиент поля на ядре. Параметр асимметрии поля и уровни энергии. Приложения метода ЯКР и его возможности.</p> <p>Мессбауэровская спектроскопия</p> <p>γ-Резонансная ядерная флуоресценция, эффект Мессбауэра. Энергия испускаемых и поглощаемых γ-квантов. Допплеровское уширение и энергия отдачи. Процедура получения γ-резонансных спектров. Химический (изомерный) сдвиг, влияние химического окружения. Квадрупольные и магнитные взаимодействия. Возможности γ-резонансной спектроскопии в химии и ограничения ее применения.</p> <p>Метод дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК)</p> <p>Теоретические основы метода: Измерение тепловых эффектов, теплоемкости, расчет температурного вклада в энтальпию, оценка энтропии, построение фазовых диаграмм.</p> <p>Другие физикохимические методы. Неэластичное рассеяние нейтронов как метод исследования твердых материалов. Методы SIMS, UPS, FEM, HREELS, FABMS.</p>	
3	<p>Электрохимия</p>	<p>Предмет электрохимии. Свойства электродов. Вольтамперные характеристики в электрохимических процессах.</p> <p>Удельная электропроводность растворов электролитов. Электродный потенциал. Диффузионный потенциал.</p> <p>Механизм потенциалообразования. Двойной электрический слой и экспериментальные методы его исследования. Понятие о полном свободном заряде электрода. Потенциалы свободного и нулевого заряда, методы их определения, контактные потенциалы и их связь с работой выхода электрона.</p> <p>Адсорбционные потенциалы. Термодинамическая теория поверхностных явлений на металлах, адсорбирующих водород и кислород. Равновесный водородный электрод и перенапряжение водорода. Рекомбинационная теория и теория замедленного разряда. Перенапряжение выделения кислорода. Пассивность металлов и окисные плёнки. Адсорбционные и фазовые пассивирующие слои.</p> <p>Термодинамика гальванического элемента. Кинетика электродных процессов.</p> <p>Закономерности адсорбции органических веществ на металлах платиновой группы в зоне докислородного перенапряжения. Влияние адсорбции водорода и кислорода на адсорбцию органических соединений. Зависимость адсорбции органических соединений от потенциала и pH раствора. Адсорбция органических веществ при высоких анодных потенциалах.</p> <p>Катодное восстановление органических веществ в зоне доводородного перенапряжения. Особенности катодного</p>	<p>Семинары, практические работы</p>

		<p>восстановления органических веществ в зоне водородного перенапряжения. Анодное окисление органических веществ в зоне до кислородного перенапряжения. Анодное окисление органических веществ при высоких анодных потенциалах. Каталитическое гидрирование органических веществ при контролируемом потенциале. Каталитическое гидрирование органических веществ при регулируемом потенциале катализатора. Каталитическое окисление органических веществ при контролируемом потенциале.</p> <p>Электрокатализ, селективность электрокаталитических процессов. Оптимизация электрокаталитических процессов. Факторы, определяющие механизм электрокаталитических процессов.</p> <p>Механизм специфической адсорбции ионов и его зависимость от природы электрода. Влияние специфической адсорбции ионов на электрокаталитические свойства металлов платиновой группы.</p> <p>Приготовление электрокатализаторов химическими и электрохимическими методами. Влияние поверхностно активных веществ на электроосаждение металлов.</p> <p>Кривые заряжения и методы их измерения. Дифференциальные и интегральные кривые заряжения. Кривые заряжения в импульсных режимах. Электрическая ёмкость электродов и их истинная поверхность. Определение истинных поверхностей электрохимическими методами.</p> <p>Уравнение Нернста. Уравнение полярографической волны Гейровского- Ильковича. Уравнение Тафеля.</p> <p>Метод электродвижущих сил (ЭДС). Метод ЭДС с твердыми электролитами. Электролиты с анионной проводимостью. Электролиты с катионной проводимостью. Определение термодинамических свойств с помощью метода ЭДС с кислород-ионными электролитами. Примеры определения термодинамических свойств простых и сложных оксидов. Динамические электрохимические методы изучения термодинамических свойств: метод мгновенного фиксирования ЭДС, метод снятия стационарных вольтамперных кривых, метод снятия хромопотенциометрических кривых.</p>	
4	Катализ	<p>Определения катализа. Основные этапы развития представлений о катализе. Каталитические процессы в природе. Роль катализа в современной промышленности. Механизмы каталитических реакций, каталитический цикл. Методы и примеры построения кинетических уравнений каталитических реакций, их связь с механизмом реакции. Активность и стабильность катализаторов. Промоторы и каталитические яды (ингибиторы). Субстратная селективность, региоселективность и энантиоселективность.</p>	Семинары, практические работы

Влияние катализаторов на селективность параллельных, последовательных, последовательно-параллельных и других сложных реакций. Зависимость селективности от конверсии в сложных реакциях при участии катализаторов на отдельных стадиях.

Гомогенный катализ

Классификация гомогенных катализаторов, их активность и селективность. Нуклеофильный катализ. Механизм и кинетика реакций замещения, расщепления и присоединения. Кислотный, электрофильный и основной катализ. Количественная характеристика кислотно-основного взаимодействия. Жесткие и мягкие кислоты и основания. Абсолютная шкала кислотности, функции кислотности. Сверхкислоты как катализаторы. Скорости реакции кислот с основаниями. Специфический и общий кислотно-основной катализ. Уравнение Бренстеда.

Металлокомплексный катализ. Каталитически-активные комплексы металлов. Правила Хиггинса и Толмена. Модель Басоло—Пирсона. Правило Чатта, Элементарные стадии металлокомплексного катализа: диссоциация, присоединение и замещение лигандов, перенос электрона, внедрение по связи металл-лиганд, элиминирование, диссоциативное присоединение. Примеры механизмов реакций, катализируемых комплексами металлов: гидрирование, гидрокарбонилирование, карбонилирование; окисление и метатезис олефинов, изомеризация, олигомеризация и полимеризация олефинов. Катализаторы Циглера—Натта. Многоэлектронные процессы и катализ кластерами. Асимметрический каталитический синтез.

Ферментативный катализ. Основные типы и функции ферментов. Понятие активного центра, субстрата, кофактора, ингибитора. Основные положения теории ферментативного катализа; энергетические и энтропийные параметры ферментативных процессов. Биомиметика и моделирование активных центров ферментов.

Кинетический анализ различных схем гомогенно-каталитических реакций. Автокатализ. Кинетические закономерности металлокомплексного катализа и ферментативных реакций. Уравнение Михаэлиса-Ментен. Функция' закомплексованности. Имобилизованные гомогенные катализаторы и ферменты. Особенности кинетики гомогенно-каталитических гетерофазных реакций газ - жидкость и жидкость - жидкость. Катализ межфазного переноса.

Гетерогенный катализ

Строение поверхности твердых тел и его влияние на каталитическую активность. Современные методы исследования структуры и состава поверхностного слоя твердых тел. Методы определения элементного состава катализаторов, спектральные и химические методы. Термогравиметрия. Рентгенофазовый и рентгеноструктурный анализ. Электронная микроскопия. Зондовая микроскопия:

туннельная и атомно-силовая микроскопия. Масс-спектрометрия вторичных ионов. ЯМР-ВМУ-спектроскопия твердого тела, кросс-поляризация. ЯМР-томография. EXAFS, XAFS, XANES, SAXS, фотоэлектронная и оже-спектроскопия, ГР-спектроскопия. Магнитные методы исследования катализаторов. КР-спектроскопия. Электронная спектроскопия. Дифракция медленных электронов.

Адсорбция как стадия гетерогенно-каталитической реакции. Природа адсорбционного взаимодействия. Физическая адсорбция и хемосорбция. Изотермы адсорбции. Теплота адсорбции и ее зависимость от степени заполнения поверхности. Простейшие типы адсорбционных слоев (Лэнгмюра, Брунауэра—Эммета—Теллера, Фрейндлиха). Неоднородность поверхности. Адсорбционные методы измерения поверхности катализатора и концентрации каталитически-активных центров. ИК- и УФ-спектроскопия в адсорбции и катализе. Пористая структура катализаторов, способы ее формирования и методы исследования.

Типы гетерогенных катализаторов. Металлы и сплавы как катализаторы. Корреляция между каталитической активностью металлов и степенью участия d-электронов в образовании металлических связей. Локальные и коллективные электронные взаимодействия при хемосорбции и катализе на металлах и сплавах. Роль π -комплексов в катализе на металлах в сплавах. Скелетные катализаторы. Металлические катализаторы на носителях. Мембранные катализаторы. Зависимость каталитических свойств металлов от дисперсности частиц металла и от предварительной термообработки. Каталитические наноматериалы.

Катализ оксидами переходных металлов. Электронная трактовка хемосорбции и катализа на полупроводниках. Связь каталитической активности с положением уровня Ферми.

Гетерогенные катализаторы кислотной природы. Роль бренstedовских и льюисовских кислотных центров в хемосорбции и катализе на оксидах.

Области протекания гетерогенно-каталитических реакций, их признаки и методы экспериментального подтверждения. Уравнение Лэнгмюра - Хиншельвуда. Массоперенос, диффузионные эффекты, фактор эффективности, модуль Тиле.

Методы приготовления гетерогенных катализаторов: осаждение, пропитка, кристаллизация, золь – гель метод, механохимический метод. Термическая обработка катализаторов. Твердофазные реакции. Приготовление гетерогенизированных систем. Факторы, определяющие дисперсность активного компонента. Молекулярный дизайн в катализе.

Исследование кинетики гетерогенно-каталитических реакций в периодических, проточных и проточно-циркуляционных реакторах, обработка экспериментальных данных. Комбинаторные методы в катализе, компьютерный поиск и банки данных. Спектральные и дифракционные методы *in-situ*

		<p>в исследовании каталитических реакций. Изотопные методы в исследовании механизма катализа. Кинетический изотопный эффект. Изотопно-меченные соединения. Квантово-химические методы в катализе. Зонные и кластерные модели поверхности. Квантово-химические расчеты взаимодействия простых молекул с каталитическими центрами.</p> <p>Основные промышленные каталитические процессы</p> <p>Получение водорода и синтез-газа каталитической конверсией углеводородов. Синтез аммиака и метанола, синтез Фишера-Тропша. Гидрирование и дегидрирование органических соединений</p> <p>Окисление неорганических соединений. Получение серной и азотной кислот. Каталитические процессы окисления органических веществ, окислительный аммонолиз.</p> <p>Каталитические процессы в нефтепереработке. Каталитический крекинг, гидрокрекинг, риформинг, гидроочистка. Изомеризация и алкилирование.</p> <p>Гомогенно-каталитические промышленные процессы с использованием кислотных, электрофильных и металлокомплексных катализаторов.</p> <p>Промышленное применение ферментов.</p> <p>Экологический катализ. Природоохранные каталитические технологии.</p>	
5	<p>Химическая термодинамика и термохимия</p>	<p>Основные термодинамические функции. Изобарно-изотермический потенциал. Изохорно-изотермический потенциал. Внутренняя энергия. Свободная энергия Гиббса. Свободная энергия Гельмгольца. Первое начало термодинамики и его следствия. Работа, производимая системой. Открытые и закрытые системы. Второе начало термодинамики. Энтальпия и методы ее расчета и определения. Энтропия и методы ее расчета и определения. Третье начало термодинамики.</p> <p>Понятие термодинамической модели. Термодинамическое равновесие. Уравнение Гиббса-Гельмгольца. Влияние температуры на константу равновесия. Химический потенциал. Уравнение Вант-Гоффа.</p> <p>Равновесия фазовые и химические. Константа равновесия. Принцип Ле Шателье-Брауна. Способы выражения состава гомогенных и гетерогенных систем. Аналитические выражения зависимостей термодинамических функций от переменных состояния. Характеристические функции фаз и гетерогенных систем. Равновесия в закрытых и в открытых системах.</p> <p>Описание термодинамических свойств паровой фазы. Расчеты диаграмм в координатах давление пара-температура-химический состав.</p> <p>Основы термохимии и калориметрии. Температура в равновесной термодинамике. Закон Гесса. Формула Кирхгофа. Калориметрия как основной метод экспериментальной термохимии. Методы определения теплот сгорания, энергий сгорания органических веществ. Вычисление стандартных</p>	<p>Семинары, практические работы</p>

энтальпий образования по энтальпиям сгорания.

Калориметрия растворения. Особенности термохимии реакций, протекающих в жидкой среде. Определение энтальпий растворения, разбавления, смешения и др. Использование теории Дебая-Хюккеля для расчета энтальпий разбавления.

Экспериментальное определение теплоемкости, теплот фазовых переходов.

Уравнения состояния веществ при высоких давлениях. Критерии устойчивости равновесий.

$P - V - T$ - свойства газов и жидкостей. Общие положения. Правила смешения для смесей жидкостей. Фугитивность чистой жидкости. Парциальные мольные свойства гомогенных и гетерогенных систем. Классификация растворов. Коэффициенты активности. Уравнение Гиббса-Дюгема и его интегрирование. Методы Даркена и Вагнера. Критические явления в растворах. Модели растворов неэлектролитов: Вильсона, Ван-Лаара, и др. Решеточные модели жидкости.

Термодинамическая классификация растворов. Идеальные растворы. Бесконечно разбавленные растворы. Неидеальные растворы. Метод активностей в термодинамике растворов. Функции смешения, избыточные термодинамические функции.

Фазовые равновесия в растворах. Уравнение Ван-дер-Ваальса. Законы Коновалова, правила Вревского. Критические явления.

Элементы статистической термодинамики.

Микроканонический (N, E, V), канонический (N, T, V), большой канонический (N, V, μ) ансамбли Гиббса для замкнутых и открытых систем. Функции распределения систем ансамбля. Выражения для термодинамических функций. Термодинамическая эквивалентность ансамблей Гиббса. Флюктуации термодинамических величин. Квазiterмодинамическая теория флюктуаций Эйнштейна-Смолуховского для изолированных и открытых систем. Статистико-механическое описание флюктуаций в ансамблях Гиббса. Флюктуации основных термодинамических величин. Макроскопические проявления флюктуаций: термодинамическая устойчивость систем, критические явления и фазовые переходы, явления рассеяния излучения. Динамика флюктуаций и кинетические уравнения неравновесной термодинамики. Принцип Онзагера.

Классификация межчастичных взаимодействий. Силы отталкивания. Дипольные и дисперсионные составляющие сил притяжения. Специфические взаимодействия, водородные связи. Термодинамика межчастичных взаимодействий. Методы расчета вкладов межмолекулярных взаимодействий в термодинамические функции жидкостей и растворов по данным о равновесии жидкость-пар.

		<p>Теория диэлектрической проницаемости жидкостей и растворов. Соотношения макроскопической электростатики, поляризация, линейные и нелинейные восприимчивости, статическая диэлектрическая проницаемость. Электрооптические свойства молекул - дипольный момент, тензор поляризуемости. Ориентационная и деформационная составляющие поляризации. Теория Дебая диэлектрической проницаемости газов, жидкостей и растворов. Теория Онзагера, теория Кирквуда-Фрелиха.</p> <p>Основы неравновесной термодинамики. Теория поля и термодинамика. Уравнения баланса экстенсивных величин (массы, импульса, момента импульса, кинетической и потенциальной энергии). Принцип локального равновесия. Первый и второй закон термодинамики в локальной форме, уравнения баланса для внутренней энергии и энтропии. Принцип Кюри. Флюктуации и неравновесные процессы. Соотношения Онзагера-Казимира.</p>	
6	<p>Адсорбция</p>	<p>Межмолекулярные взаимодействия в адсорбции. Классификация молекул и адсорбентов по химической природе и специфичности молекулярных взаимодействий. Одноатомный неспецифический адсорбент с однородной поверхностью - базисная грань графита (графитированная сажа), высокая чувствительность адсорбции к геометрии молекул и разделение структурных изомеров. Ионные адсорбенты и чувствительность адсорбции к особенностям электронной структуры молекул. Цеолиты. Влияние на адсорбцию цеолитами полярности молекул, их размеров. Влияние природы катионов, степени ионного обмена цеолитов на адсорбцию полярных и неполярных молекул. Адсорбенты на основе кремнезема. Получение адсорбентов. Адсорбционное и химическое модифицирование поверхности адсорбентов и их влияние на адсорбционные свойства. Адсорбционные свойства модифицированных адсорбентов. Пористые полимерные адсорбенты. Получение пористых полимеров с разной структурой пор и химией поверхности. Адсорбция и хроматография паров воды и органических веществ на пористых полимерах с разными функциональными группами.</p> <p>Термодинамика адсорбции. Адсорбционная теория Гиббса для жидких поверхностей раздела. Введение системы сравнения и избыточных величин. Фундаментальное адсорбционное уравнение Гиббса. Вывод уравнения Лапласа из уравнения Гиббса. Применение уравнения Гиббса к эксперименту. Термодинамика адсорбции на твердом адсорбенте. Термодинамическое равновесие системы флюид - твердое тело и фундаментальные уравнения Гиббса для адсорбции. Интегральные и дифференциальные термодинамические характеристики адсорбции, связь между ними. Изостерические и калориметрические теплоты адсорбции. Уравнение состояния адсорбированного вещества. Связь уравнения состояния с уравнением изотермы адсорбции. Идеальный "двумерный газ", реальный "двумерный газ" и</p>	<p>Семинары, практические работы</p>

		<p>соответствующие им изотермы адсорбции: уравнение Генри, уравнение Хилла, вириальное уравнение. Критическая температура двумерного газа. Двумерные фазовые переходы. Локализованная адсорбция. Модель мономолекулярной адсорбции. Уравнение Лэнгмюра. Зависимость адсорбции от температуры. Полимолекулярная адсорбция Уравнение БЭТ и его применение для определения величины удельной поверхности. Уравнение нелокализованной полимолекулярной адсорбции.</p> <p>Геометрическая и химическая неоднородность адсорбентов Влияние размеров пор на адсорбцию паров. Адсорбция паров в тонких порах адсорбента. Потенциальная теория Поляни. Ее применение для расчета изотерм. Коэффициенты аффинности. Уравнение Дубинина-Радушкевича. Теория капиллярной конденсации. Уравнение Томсона. Распределение объемов пор по эффективным диаметрам. Определение удельной поверхности. Модели пористой структуры. Ртутная порометрия.</p> <p>Молекулярно-статистическая теория адсорбции при нулевом заполнении поверхности.</p> <p>Адсорбция из растворов. Гиббсовская адсорбция. Влияние на адсорбцию из растворов молекулярного поля жидкости, природы адсорбента и растворителя. Химический потенциал и коэффициент активности адсорбированного вещества, константа Генри для адсорбции из растворов. Общий вид изотермы адсорбции из растворов в широкой области концентраций. Константа адсорбционного равновесия и коэффициент распределения компонентов. Адсорбция из растворов и жидкостная хроматография.</p> <p>Уравнение Гиббса-Дюгема для адсорбционной фазы. Термодинамические методы описания адсорбционных равновесий. Методы "избытков Гиббса".</p> <p>Явление капиллярной конденсации в мезопорах. Уравнение Кельвина и распределение мезопор по радиусам.</p>	
7	<p>Строение молекул и квантовая химия</p>	<p>Дипольный момент молекулы. Взаимодействие полярной молекулы с электростатическим полем. Ориентационная поляризация и ее связь с диэлектрической проницаемостью и дипольным моментом молекул; уравнение Дебая для линейной молекулы или жесткого диполя. Эффект Штарка. Определение дипольного момента в газах (первый метод Дебая) и растворах (второй метод Дебая). Применение данных для определения симметрии и конформации молекул, энергетика внутреннего вращения и комплексообразования. Геометрия молекул. Определение дипольного момента и геометрических параметров молекул из микроволновых спектров.</p> <p>Современные возможности квантовой химии. Свойства молекул и реакций, которые можно рассчитать квантовохимическими методами. Методы и программы. Комплекс программ Gaussian. Оптимизация геометрии и</p>	<p>Семинары, практические работы</p>

	<p>определение стабильных конформеров молекулы – основа квантовохимических расчетов. Описание геометрии молекул различной симметрии. Оптимизация геометрии. Определение минимумов на поверхности потенциальной энергии. Критерии сходимости оптимизации. Расчет частот колебаний для определения характера стационарных точек, найденных при оптимизации геометрии. Расчет термодинамических функций (энтропии, теплоемкости, изменения энтальпии и приведенной энергии Гиббса) газообразных соединений методом статистической термодинамики. Выбор квантовохимического метода и набора базисных функций. Неэмпирические (<i>ab initio</i>) методы и метод теории функционала плотности (DFT).</p>	
--	--	--

5. Образовательные технологии

1. Активные образовательные технологии: лекции, семинары и практические работы.
2. Сопровождение лекций визуальным материалом в виде слайдов, подготовленных с использованием современных компьютерных технологий (программный пакет презентаций MsPowerpoint, программный пакет ChemDraw), проецируемых на экран с помощью видеопроектора, а также результатов компьютерного моделирования физикохимических процессов.
3. Проведение практических работ в научной лаборатории, участие обучаемых в научной работе и выполнении исследовательских проектов.
4. Использование специального программного обеспечения и интернет-ресурсов для обучения в ходе практических и самостоятельных работ.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы аспирантов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

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

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

Форма контроля знаний – три контрольных и экзамен в конце курса, включающий теоретические вопросы и задачу.

Примеры вопросов контрольных работ:

Вопросы рубежного контроля № 1

1. Сравнение теорий активных столкновений и активированного комплекса для бимолекулярных реакций.
2. Скорость химической реакции. Кинетические уравнения элементарных химических реакций, закон действующих масс.
3. Определение порядка реакции, константы скорости и энергии активации по опытным данным.
4. Сравнение режимов идеального смешения и идеального вытеснения.
5. Общая характеристика и классификация физико-химических методов анализа.
6. Предмет электрохимии. Свойства электродов. Вольтамперные характеристики в электрохимических процессах.
7. Удельная электропроводность растворов электролитов. Электродный потенциал. Диффузионный потенциал.
8. Двойной электрический слой и экспериментальные методы его исследования. Понятие о полном свободном заряде электрода.
9. Закономерности адсорбции органических веществ на металлах платиновой группы в зоне докислородного перенапряжения.
10. Катодное восстановление органических веществ в зоне до водородного перенапряжения.
11. Электрокатализ, селективность электрокаталитических процессов. Факторы, определяющие механизм электрокаталитических процессов.
12. Приготовление электрокатализаторов химическими и электрохимическими методами. Влияние поверхностно активных веществ на электроосаждение металлов.
13. Уравнение Нернста. Уравнение полярографической волны Гейровского-Ильковича. Уравнение Тафеля.
14. Метод электродвижущих сил (ЭДС). Метод ЭДС с твердыми электролитами. Электролиты с анионной проводимостью. Электролиты с катионной проводимостью.

Вопросы рубежного контроля № 2

1. Определения катализа. Основные этапы развития представлений о катализе. Каталитические процессы в природе. Роль катализа в современной промышленности.
2. Активность и стабильность катализаторов. Промоторы и каталитические яды (ингибиторы). Влияние катализаторов на селективность параллельных, последовательных, последовательно-параллельных и других сложных реакций.
3. Адсорбция как стадия гетерогенно-каталитической реакции. Природа адсорбционного взаимодействия.
4. Физическая адсорбция и хемосорбция.
5. Неоднородность поверхности. Адсорбционные методы измерения поверхности катализатора и концентрации каталитически-активных центров.
6. Кинетика гетерогенно-каталитических реакций. Механизм Ленгмюра-Хиншельвуда
7. Кинетика гетерогенно-каталитических реакций. Механизм Ридила-Или
8. Простейшие типы адсорбционных слоев (Лэнгмюра, Брунауэра-Эммета-Теллера, Фрейндлиха).

9. Мультиплетная теория гетерогенного катализа.
10. Понятие о структурной чувствительности реакций. Влияние дисперсности на каталитическую активность.
11. Механизм кислотного и основного катализа. Специфический и общий кислотно-основный катализ.
12. Типы гетерогенных катализаторов. Корреляция между каталитической активностью металлов и степенью участия d-электронов в образовании металлических связей.
13. Методы приготовления гетерогенных катализаторов: осаждение, пропитка, кристаллизация, золь-гель метод, механохимический метод. Факторы, определяющие дисперсность активного компонента.
14. Пористая структура катализаторов, способы ее формирования и методы исследования. Оптимальная структура пор катализатора.
15. Катализ оксидами переходных металлов. Электронная трактовка хемосорбции и катализа на полупроводниках. Связь каталитической активности с положением уровня Ферми.
16. Роль бренstedовских и льюисовских кислотных центров в хемосорбции и катализе на оксидах алюминия, кремния и алюмосиликатах.
17. Цеолитные катализаторы, связь их активности с типом цеолита, наличием гидроксильных групп, природой и концентрацией введенных в цеолит ионов.
18. Области протекания гетерогенно-каталитических реакций, их признаки и методы экспериментального подтверждения.
19. Исследование кинетики гетерогенно-каталитических реакций в периодических, проточных и проточно-циркуляционных реакторах, обработка экспериментальных данных.
20. Спектральные и дифракционные методы in-situ в исследовании каталитических реакций.
21. Изотопные методы в исследовании механизма катализа. Кинетический изотопный эффект. Изотопно-меченные соединения. Квантово-химические методы в катализе.

Вопросы рубежного контроля № 3

1. Основные термодинамические функции. Изобарно-изотермический потенциал. Изохорно-изотермический потенциал. Внутренняя энергия. Свободная энергия Гиббса. Свободная энергия Гельмгольца.
2. Первое начало термодинамики и его следствия. Работа, производимая системой. Открытые и закрытые системы. Второе начало термодинамики. Энтальпия и методы ее расчета и определения. Энтропия и методы ее расчета и определения. Третье начало термодинамики.
3. Понятие термодинамической модели. Термодинамическое равновесие. Уравнение Гиббса-Гельмгольца. Влияние температуры на константу равновесия. Химический потенциал. Уравнение Вант-Гоффа.
4. Равновесия фазовые и химические. Константа равновесия. Принцип Ле Шателье-Брауна.
5. Основы термохимии и калориметрии. Температура в равновесной термодинамике. Закон Гесса.

6. P-V-T - свойства газов и жидкостей. Общие положения. Правила смешения для смесей жидкостей.
7. Классификация межчастичных взаимодействий. Силы отталкивания. Дипольные и дисперсионные составляющие сил притяжения. Специфические взаимодействия, водородные связи.
8. Теория диэлектрической проницаемости жидкостей и растворов.
9. Дипольный момент молекулы. Геометрия молекул. Определение дипольного момента и геометрических параметров молекул из микроволновых спектров.
10. Свойства молекул и реакций, которые можно рассчитать квантовохимическими методами. Методы и программы.

Вопросы выходного контроля (экзамен)

1. Сравнение теорий активных столкновений и активированного комплекса для бимолекулярных реакций.
2. Скорость химической реакции. Кинетические уравнения элементарных химических реакций, закон действующих масс.
3. Определение порядка реакции, константы скорости и энергии активации по опытным данным.
4. Кинетика простых реакций в потоке. Сравнение режимов идеального смешения и идеального вытеснения.
5. Общая характеристика и классификация физико-химических методов анализа. Чувствительность и разрешающая способность методов. Интеграция методов.
6. Масс-спектрометрия. Принципы масс-спектрометрии. Блок-схема масс-спектрометра.
7. Спектроскопические методы исследования. Электронные, колебательные, вращательные, спиновые и ядерные переходы как результат различных типов внутриатомных или внутримолекулярных взаимодействий. Спектры испускания, поглощения и рассеяния.
8. Применение методов колебательной спектроскопии для качественного и количественного анализа. Техника и методики ИК спектроскопии и спектроскопии КР.
9. Электронная спектроскопия. Спектроскопия в видимой и ультрафиолетовой (УФ) областях. Правила отбора и нарушения запрета. Применение электронных спектров поглощения в качественном, структурном и количественном анализах.
10. Люминесценция (флуоресценция и фосфоресценция). Практическое использование количественного люминесцентного анализа.
11. Рентгеновские методы исследования на примере рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (электронная спектроскопия для химического анализа — ЭСХА). Возможности ЭСХА для анализа поверхностей.
12. Методы исследования оптически активных веществ. Дисперсия оптического вращения.
13. Резонансные методы на примере метода ЯМР. Физические основы явления ядерного магнитного резонанса. Применение спектров ЯМР в химии.

14. Метод ЭПР. Принципы спектроскопии электронного парамагнитного (спинового) резонанса.
15. Мессбауэровская спектроскопия. Эффект Мессбауэра.
16. Метод дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК). Теоретические основы метода.
17. Предмет электрохимии. Свойства электродов. Вольтамперные характеристики в электрохимических процессах.
18. Удельная электропроводность растворов электролитов. Электродный потенциал. Диффузионный потенциал.
19. Механизм потенциалообразования. Двойной электрический слой и экспериментальные методы его исследования. Понятие о полном свободном заряде электрода. Потенциалы свободного и нулевого заряда, методы их определения, контактные потенциалы и их связь с работой выхода электрона.
20. Закономерности адсорбции органических веществ на металлах платиновой группы в зоне докислородного перенапряжения.
21. Катодное восстановление органических веществ в зоне до водородного перенапряжения.
22. Электрокатализ, селективность электрокаталитических процессов. Факторы, определяющие механизм электрокаталитических процессов.
23. Механизм специфической адсорбции ионов и его зависимость от природы электрода. Влияние специфической адсорбции ионов на электрокаталитические свойства металлов платиновой группы.
24. Приготовление электрокатализаторов химическими и электрохимическими методами. Влияние поверхностно активных веществ на электроосаждение металлов.
25. Уравнение Нернста. Уравнение полярографической волны Гейровского-Ильковича. Уравнение Тафеля.
26. Метод электродвижущих сил (ЭДС). Метод ЭДС с твердыми электролитами. Электролиты с анионной проводимостью. Электролиты с катионной проводимостью.
27. Определения катализа. Основные этапы развития представлений о катализе. Каталитические процессы в природе. Роль катализа в современной промышленности.
28. Активность и стабильность катализаторов. Промоторы и каталитические яды (ингибиторы). Влияние катализаторов на селективность параллельных, последовательных, последовательно-параллельных и других сложных реакций.
29. Адсорбция как стадия гетерогенно-каталитической реакции. Природа адсорбционного взаимодействия. Физическая адсорбция и хемосорбция.
30. Неоднородность поверхности. Адсорбционные методы измерения поверхности катализатора и концентрации каталитически-активных центров. ИК- и УФ-спектроскопия в адсорбции и катализе.
31. Кинетика гетерогенно-каталитических реакций. Механизм Ленгмюра-Хиншельвуда
32. Кинетика гетерогенно-каталитических реакций. Механизм Ридила-Или
33. Простейшие типы адсорбционных слоев (Лэнгмюра, Брунауэра-Эммета-Теллера, Фрейндлиха).

34. Мультиплетная теория гетерогенного катализа. Понятие о структурной чувствительности реакций. Реакции гидрирования и гидрогенолиза на сплавах и нанесенных катализаторах. Влияние дисперсности на каталитическую активность.
35. Кислотный и основной катализ. Механизм кислотного и основного катализа. Количественная характеристика кислотно-основного взаимодействия. Жесткие и мягкие кислоты и основания. Сверхкислоты. Специфический и общий кислотно-основной катализ. Особенности кинетики и механизм.
36. Металлокомплексный катализ. Каталитически-активные комплексы металлов. Примеры механизмов реакций, катализируемых комплексами металлов: гидрирование, окисление, изомеризация.
37. Типы гетерогенных катализаторов. Металлы и сплавы как катализаторы. Корреляция между каталитической активностью металлов и степенью участия d-электронов в образовании металлических связей.
38. Методы приготовления гетерогенных катализаторов: осаждение, пропитка, кристаллизация, золь-гель метод, механохимический метод. Термическая обработка катализаторов. Факторы, определяющие дисперсность активного компонента.
39. Пористая структура катализаторов, способы ее формирования и методы исследования. Ртутная порометрия. Степень использования поверхности пор катализатора. Оптимальная структура пор катализатора.
40. Катализ оксидами переходных металлов. Электронная трактовка хемосорбции и катализа на полупроводниках. Связь каталитической активности с положением уровня Ферми.
41. Гетерогенные катализаторы кислотной природы. Роль бренstedовских и льюисовских кислотных центров в хемосорбции и катализе на оксидах алюминия, кремния и алюмосиликатах.
42. Модифицированные и смешанные оксидные катализаторы. Цеолитные катализаторы, связь их активности с типом цеолита, наличием гидроксильных групп, природой и концентрацией введенных в цеолит ионов. Молекулярно-ситовые свойства цеолитных катализаторов.
43. Области протекания гетерогенно-каталитических реакций, их признаки и методы экспериментального подтверждения.
44. Исследование кинетики гетерогенно-каталитических реакций в периодических, проточных и проточно-циркуляционных реакторах, обработка экспериментальных данных.
45. Строение поверхности твердых тел и его влияние на каталитическую активность. Современные методы исследования структуры и состава поверхностного слоя твердых тел. Методы определения элементного состава катализаторов, спектральные и химические методы.
46. Спектральные и дифракционные методы in-situ в исследовании каталитических реакций.
47. Изотопные методы в исследовании механизма катализа. Кинетический изотопный эффект. Изотопно-меченные соединения. Квантово-химические методы в катализе.
48. Получение водорода и синтез-газа каталитической конверсией углеводородов.
49. Синтез аммиака. Термодинамика и механизм процесса. Катализаторы процесса. Структурная чувствительность реакции

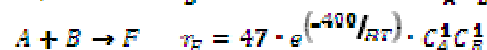
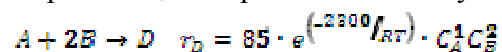
50. Синтез Фишера-Тропша. Механизмы процесса (диссоциативный и ассоциативный). Распределение продуктов синтеза по молекулярной массе. Распределение Шульца-Флори. Гидрирование и дегидрирование органических соединений.
51. Окисление неорганических соединений. Получение серной и азотной кислот.
52. Каталитические процессы в нефтепереработке. Реакция каталитического крекинга: катализаторы, технологическое оформление и механизм процесса.
53. Каталитические процессы в нефтепереработке. Реакция изомеризации линейных алканов: катализаторы, технологическое оформление и механизм процесса.
54. Экологический катализ. Каталитическая нейтрализация выхлопных газов автотранспорта. Реакции и катализаторы. Окисление CO и механизм реакции на Pt и оксидном катализаторах. Окисление углеводородов.
55. Окисление пропилена в акролеин. Катализаторы и механизм процесса. Функции различных компонентов катализатора на примере.
56. Промышленное применение ферментов.
57. Основные термодинамические функции. Изобарно-изотермический потенциал. Изохорно-изотермический потенциал. Внутренняя энергия. Свободная энергия Гиббса. Свободная энергия Гельмгольца.
58. Первое начало термодинамики и его следствия. Работа, производимая системой. Открытые и закрытые системы. Второе начало термодинамики. Энтальпия и методы ее расчета и определения. Энтропия и методы ее расчета и определения. Третье начало термодинамики.
59. Понятие термодинамической модели. Термодинамическое равновесие. Уравнение Гиббса-Гельмгольца. Влияние температуры на константу равновесия. Химический потенциал. Уравнение Вант-Гоффа.
60. Равновесия фазовые и химические. Константа равновесия. Принцип Ле Шателье-Брауна. Способы выражения состава гомогенных и гетерогенных систем.
61. Основы термохимии и калориметрии. Температура в равновесной термодинамике. Закон Гесса. Формула Кирхгофа.
62. P-V-T - свойства газов и жидкостей. Общие положения. Правила смешения для смесей жидкостей. Фугитивность чистой жидкости. Парциальные мольные свойства гомогенных и гетерогенных систем. Классификация растворов. Коэффициенты активности. Уравнение Гиббса-Дюгема и его интегрирование.
63. Классификация межчастичных взаимодействий. Силы отталкивания. Дипольные и дисперсионные составляющие сил притяжения. Специфические взаимодействия, водородные связи. Термодинамика межчастичных взаимодействий. Методы расчета вкладов межмолекулярных взаимодействий в термодинамические функции жидкостей и растворов по данным о равновесии жидкость-пар.
64. Теория диэлектрической проницаемости жидкостей и растворов. Соотношения макроскопической электростатики, поляризация, линейные и нелинейные восприимчивости, статическая диэлектрическая проницаемость. Электрооптические свойства молекул - дипольный момент, тензор поляризуемости. Ориентационная и деформационная составляющие поляризации. Теория Дебая диэлектрической проницаемости газов, жидкостей и растворов. Теория Онзагера, теория Кирквуда-Фрелиха.
65. Дипольный момент молекулы. Геометрия молекул. Определение дипольного момента и геометрических параметров молекул из микроволновых спектров.

66. Современные возможности квантовой химии. Свойства молекул и реакций, которые можно рассчитать квантовохимическими методами. Методы и программы.

Задачи

1. Энергия активации разложения перекиси водорода в присутствии J- (катализатор) равна 56,5 кДж/моль, а без катализатора 75,4 кДж/моль. Во сколько раз скорость каталитической реакции выше при 350 К?

2. В системе при 25°C протекают две параллельные реакции, которым соответствуют



следующие кинетические уравнения:

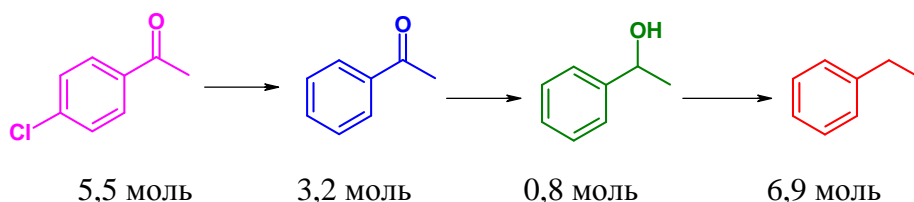
Определите значение дифференциальной селективности образования продукта F, если в этот момент времени состав реакционной смеси, объемом 0,5 л был: A - 1 моль; B - 3 моль; D - 5 моль; F - 2 моль.

3. Рассчитайте значение конверсии, если известны экспериментальные данные:

№ эксп.	Начальная конц.	Конечная конц.	Конверсия
1	10 моль/л	1 моль/л	
2	2 моль	0,1 моль	
3	4 моль/л	1,5 моль/л	

4. Каталитическая реакция протекает по первому порядку с константой скорости 2,6 мин⁻¹. Определите конверсию через 30 мин реакции, если начальная концентрация реагента была 5 моль/л.

5. Для реакции в некоторый момент времени определен состав реакционной смеси:



Рассчитайте величину конверсии, а также значения селективности образования всех продуктов.

6. Каталитическая конверсия водяного пара описывается равновесной реакцией



При 500°C и 1 атм значение константы равновесия равно $K_p=1$. Какой максимальный выход водорода можно получить при использовании катализатора в этих условиях, если исходная смесь содержала 1 моль $\text{H}_2\text{O}(\text{g})$ и 1 моль CO ?

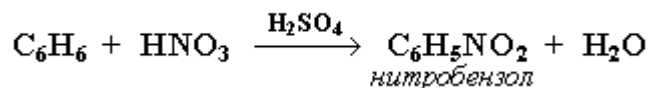
7. Как зависит каталитическая активность реакции гидрогенолиза этана с образованием метана при увеличении размера частиц активного компонента?

8. Расположите катализаторы в ряд по увеличению размера частиц металла, если для них известна величина дисперсности

a) 0,9 c) 0,75

b) 0,5 d) 0,33

9. Рассчитайте атомную эффективность реакции:



10. Как в соответствии с правилом Борескова каталитическая активность зависит от размера частиц катализатора?

a) увеличивается c) Не меняется

b) уменьшается d) Проходит через максимум

11. Как зависит каталитическая активность реакции гидрогенолиза этана с образованием метана при увеличении размера частиц активного компонента

a) увеличивается c) Не меняется

b) уменьшается d) Проходит через максимум

12. Какие из перечисленных соединений являются каталитическими ядами?

a) S c) Cl₂

b) Al₂O₃ d) NaOH

13. Какие из утверждений верны? Катализатор:

a) Снижает потенциальную энергию исходных веществ

b) увеличивает значение константы равновесия

c) снижает значение энергии активации

d) увеличивает скорость реакции, повышая кинетическую энергию реагирующих молекул

14. Реакция протекает в две стадии с энергиями активации $E_A(1) < E_A(2)$. Какое действие должно оказывать добавляемое соединение, чтобы катализировать протекание этой реакции?

a) увеличить значение $E_A(1)$

b) увеличить значение $E_A(2)$

c) уменьшить значение $E_A(1)$ и $E_A(2)$

- d) уменьшить значение $E_A(1)$
 - e) уменьшить значение $E_A(2)$
15. Считая, что реакция без катализатора протекает в одну стадию, какое из утверждений лучше всего описывает энергетический профиль для каталитической реакции.
- a) реакция также протекает в одну стадию
 - b) энергетический профиль имеет такой же вид
 - c) каталитическая реакция может состоять более чем из одной стадии
 - d) каталитическая реакция протекает в две стадии
16. Что из перечисленного неверно?
- a) тепловой эффект для каталитической реакции меньше по сравнению с каталитической
 - b) катализатор снижает энергию активации
 - c) равновесный выход продуктов одинаков для каталитической и некаталитической реакций
 - d) Катализатор может изменить селективность протекания реакции
17. Какие из утверждений верны с точки зрения теории Баландина
- a) Реагирующие молекулы целиком адсорбируются на поверхности металла
 - b) Снижение энергии адсорбции способствует ускорению каталитической реакции
 - c) Должно соблюдаться геометрическое соответствие между группой атомов на поверхности и реагирующими атомами исходных молекул
 - d) Активным центром являются группы атомов, закрепленные на инертном носителе
18. Что из перечисленного не относится к функциям носителя для нанесенных гетерогенных катализаторов?
- a) Стабилизация частиц активного компонента
 - b) Образует активные центры
 - c) Изменение формы нанесенных частиц
 - d) Участвует в тепло- и массопереносе

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Рекомендуемая литература

а) основная литература:

1. П. Эткинс, Дж. де Паула, Физическая химия. т. 1 – М.: «Мир», 2007.
2. В.В. Еремин, С.И. Каргов, И.А. Успенская и др., Основы физической химии. Теория и задачи. - М.: Экзамен, 2005.
3. В.И. Горшков, И.А. Кузнецов, Основы физической химии. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006.
4. О.П. Таран, С.А. Яшник, В.Е. Тарабанько, Б.Н. Кузнецов, В.Н. Пармон, Гетерогенно-каталитическое окисление воды и органических веществ в водной среде, Новосибирск, СО РАН 2017, 380 с.
5. К.С. Краснов, Физическая химия (в 2 кн.). – М.: Высшая школа, 2001.
6. О.М. Полторацк, Термодинамика в физической химии – М.: Высш. шк., 1991.
7. Е.Т. Денисов, О.М. Саркисов, Г.И. Лихтенштейн, Химическая кинетика. – М.: Химия, 2000.
8. И. Чоркендорф, Х. Наймантсведрайт, Современный катализ и химическая кинетика – «Интеллект», Долгопрудный, 2010.
9. К.И. Замираев, Курс химической кинетики. В 3-х частях. – Новосибирск: НГУ, 2004.
10. О.В. Крылов, Гетерогенный катализ. – М.: Академкнига, 2004.
11. Л.В. Вилков, Ю.А. Пентин, Физические методы исследования в химии. Резонансные и электрооптические методы. М: Высш. шк., 1989.
12. Р. Драго, Физические методы в химии: В 2 т. М.: Мир, 1981. Т. 1, 2.
13. Х. Гюнтер, Введение в курс спектроскопии ЯМР. М.: Мир, 1984.
14. Г.К. Семин, Т.А. Бабушкина, Г.Г. Якобсон, Применение ядерного квадрупольного резонанса в химии. Л.: Химия, 1972.
15. И.Г. Зенкевич, Б.В. Иоффе, Интерпретация масс-спектров органических соединений. Л.: Химия, 1986.
16. Р. С. Рид, М. Праусниц, Т. К. Шервуд, Свойства газов и жидкостей. 1982.
17. Г. Ф. Воронин. Основы термодинамики. М: МГУ, 1987.
18. Н.А. Смирнова, Методы статистической термодинамики в физической химии. – М.: Высш. шк., 1982.
19. В. Хеммингер, Т. Хене, Калориметрия. теория и практика. М. Наука. 1989.
20. А. В. Киселев. Межмолекулярные взаимодействия в адсорбции и хроматографии. М., Высшая школа, 1986.
21. А. А. Лопаткин, Теоретические основы физической адсорбции. М., изд. МГУ, 1983.
22. С. Грег, К. Синг, Адсорбция, удельная поверхность, пористость. М., Мир, 1984.
23. А.Т. Лебедев, Масс-спектрометрия в органической химии. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2003.
24. И.А. Семиохин, Б.В. Страхов, А.И. Осипов, Кинетика гомогенных химических реакций, М., Изд-во Моск. ун-та, 1995.
25. Г.М. Панченков, В.П. Лебедев, Химическая кинетика и катализ, М., Химия, 1985.
26. Н.М. Эмануэль, Д.Г. Кнорре, Курс химической кинетики, М., Высшая школа, 1984.
27. С. Бенсон, Основы химической кинетики, М., Мир, 1964.
28. Г.К. Боресков, Катализ, ч. 1 и 2, Новосибирск, Наука, 1971.
29. О.М. Полторацк, Е.С. Чухрай, Физико-химические основы ферментативного катализа, М., Высшая школа, 1971.
30. С.Л. Киперман, Основы химической кинетики в гетерогенном катализе, М., Химия, 1979.

31. А.Я. Розовский, Катализ и реакционная среда. М.: Наука, 1988.
32. P.H. Rieger, Electron Spin Resonance - Analysis and Interpretation. Royal Society of Chemistry, 2007.
33. J.H. Moore, N.D. Spencer, Encyclopedia of Chemical Physics and Physical Chemistry, Volumes 1 – 3. Institute of Physics 2001, No. Pages 2814
34. E.R. Cohen, T. Cvitaš, J.G. Frey, B. Holmström, K.M. Kuchitsu et al., Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry (3rd Edition). Royal Society of Chemistry, 2007.
35. R.T. Jacobsen, S.G. Penoncello, E.W. Lemmon, Thermodynamic Properties of Cryogenic Fluids. Springer – Verlag, 1997.
36. C.L. Yaws, Transport Properties of Chemicals and Hydrocarbons (Electronic Edition). Knovel, 2010.

б) Дополнительная литература

37. В.С. Музыкантов, Н.М. Бажин, В.Н. Пармон, Н.Н. Булгаков, В.А. Иванченко, Задачи по химической термодинамике. – М.: Химия, 2001.
38. Н.Б. Бажин, В.А. Иванченко, В.Н. Пармон, Термодинамика для химиков. М.: Химия, 2000; Изд-е 2-е – М.: Колосс, 2004.
39. И. Пригожин, Д. Кондепуди, Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур. М.: Мир. 2002.
40. В.В. Белик, К.И. Киенская, Физическая и коллоидная химия. – М.: Академия, 2005.
41. В.М. Байрамов, Основы химической кинетики и катализа. – М.: Академия, 2003.
42. А.Е. Шилов, Г.Б. Шульпин, Активация и каталитические реакции углеводородов. М.: Наука, 1995.
43. Н.Н. Лебедев, М.Н. Манаков, В.Ф. Швец, Теория химических процессов основного органического и нефтехимического синтеза. М.: Химия, 1984.
44. Ч. Томас, Промышленные каталитические процессы и эффективные катализаторы. М.: Мир, 1973.
45. Г. Эйринг, С.Г. Лин, С.М. Лин, Основы химической кинетики. М.: Мир, 1983.
46. Б.Б. Дамаскин, О.А. Петрий Основы теоретической электрохимии. М.: Высш. шк., 1978.

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

Базы данных и информационно-справочные порталы:

- Российский информационный портал в области науки, медицины, технологии и образования – <http://www.e-library.ru>
- Полнотекстовая база данных иностранных журналов – <http://www.sciencedirect.com>
- Электронная библиотека РРФФИ <http://www.rfbr.ru/rffi/ru/books>
- База данных – <http://www.scifinder.cas.org>
- Единое окно доступа к образовательным ресурсам Федерального портала Российское образование <http://www.window.edu.ru>
- Портал фундаментального химического образования России - www.chem.msu.ru

- Программные средства: MS Windows 10 Pro x64; MS Office Professional Plus 2013; ChemDraw 16

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

ИОХ РАН располагает материально-технической базой, обеспечивающей проведение всех видов теоретической и практической подготовки, предусмотренных учебным планом, а также эффективное выполнение диссертационной работы:

Аудитория для проведения лекций, оснащенная компьютером и проектором для показа слайдов компьютерных презентаций. Компьютеры, объединенные в локальную сеть с выходом в Интернет и подключенные к международным и российским научным базам данных и электронной библиотеке с основными международными научными журналами.

Инструментальная база ИОХ РАН основана на центре коллективного пользования физическими методами исследования ИОХ РАН. В составе имеющегося оборудования ЯМР-спектрометр фирмы «Брукер»: AVANCE II DRX-600, масс-спектрометр Bruker ultraflex III, масс-спектрометр Bruker, спектрофотометр УФ и видимой области Specord M400, ИК-спектрометр Perkin-Elmer, спектрофотометр Agilent, сканирующий микроскоп, атомно-силовой микроскоп – спектрометр, и многие другие приборы. Лаборатории оснащены современными приборами для физико-химического анализа.

Программа составлена в соответствии с требованиями следующих нормативных Приказа Минобрнауки России от 30 июля 2014 г. N 869 «Об утверждении федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки 04.06.01 химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации)».