ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИРКУТСКИЙ ИНСТИТУТ ХИМИИ им. А.Е. ФАВОРСКОГО
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

УТВЕРЖДАЮ
Директор, д.х.н.
_____А.В. Иванов
«01» марта 2022 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

Шифр и наименование области науки:
1. Естественные науки

Шифр и наименование группы научных специальностей:
1.4. Химические науки

Шифр и наименование научных специальностей:
1.4.3. Органическая химия

Иркутск
2022

Рабочая программа составлена в соответствии с Федеральными государственными требованиями к структуре программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре), условиям их реализации, срокам освоения этих программ с учетом различных форм обучения, образовательных технологий и особенностей отдельных категорий аспирантов (адъюнктов), утвержденными Приказом Минобрнауки России от 20.10.2021 № 951 и Положением о подготовке научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре), утвержденным Постановлением Правительства РФ от 30.11.2021 № 2122.

Рабочая программа составлена д. х. н., доц. Сусловым Д.С.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА РАССМОТРЕНА И ОДОБРЕНА на заседании Ученого совета ИрИХ СО РАН (Протокол № 2 от «28» февраля 2022 г.)

1. Цели и задачи учебной дисциплины

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

Задачи:

- формирование у обучающихся современных представлений о физической химии, ее роли и значимости в сопоставлении с другими химическими науками;
- освоение навыков теоретического анализа результатов экспериментальных исследований в области физической химии;
- освоение методов планирования эксперимента и обработки собственных исследований;
- обучение умению систематизировать и обобщать результаты собственных исследований в сопоставлении с известными литературными данными;
- обучение умению использовать в работе программно-аппаратные средства для изучения физико-химических процессов;
- обучение умению оформлять результаты собственных исследований в виде публикаций, отчетов, докладов.

2. Место дисциплины в структуре программы аспирантуры

Дисциплина «Физическая химия» является частью образовательного компонента (Подраздел 2.1.2.1. раздела 2.1.2. «Дисциплины по выбору») программы аспирантуры по научной специальности 1.4.3. Органическая химия.

Учебная дисциплина реализуется на первом и втором году обучения.

Знания, умения и навыки, приобретенные аспирантами по результатам изучения учебной дисциплины «Физическая химия», используются ими для сдачи кандидатского экзамена и при написании диссертационной работы на соискание ученой степени кандидата наук.

3. Требования к результатам освоения дисциплины

По окончании изучения дисциплины аспиранты должны будут:

Знать:

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

Уметь:

- оценивать перспективные направления развития физической химии с учетом мирового опыта;
- анализировать взаимосвязь между составом, строением и свойствами соединений, в том числе, наноструктурированных материалов;
- применять современные методы и средства исследования для решения конкретных задач физической химии;

- прогнозировать и использовать реакционную способность химических веществ в различных агрегатных состояниях и экстремальных условиях.

Иметь опыт:

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

4. Структура и содержание учебной дисциплины

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

Структура дисциплины

Таблица 4.1. Структура учебной дисциплины

№	Наименование дисциплины	Объем учебной работы, ч							Форма контроля
		Всего	Всего аудиторн.	Из аудиторных				СР	
				Лек	Лаб	П	КСР		
1	Физическая химия	216	90	45	-	45	18	108	Экзамен

Содержание дисциплины

Содержание разделов и тем дисциплины

Раздел 1. Строение вещества

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

Приближения Хюккеля. Распределение электронов по молекулярным уровням.

Основные приближения при расчете органических молекул методом МОХ.

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

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

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

Раздел 2. Термодинамика и кинетика процессов сорбции

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

Адсорбция из растворов.

Уравнение Брунауэра – Эмета – Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента. Термодинамика полимолекулярной сорбции

на основе статистической термодинамики. Определение числа слоев полимолекулярной сорбции.

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

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

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

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

Использование сорбции для разделения и концентрирования в технологических схемах процессов.

Раздел 3. Теория растворов

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

Раздел 4. Фазовые равновесия

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

Раздел 5. Кинетика химических реакции

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

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

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

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

Основные промышленные каталитические процессы. Роль диффузии в кинетике гетерогенных реакций. Кинетика гетерогенных каталитических реакций. Различные режимы

протекания реакций (кинетическая и внешняя кинетическая области, области внешней и внутренней диффузии).

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

Разделы дисциплины и виды занятий

Таблица 4.2. Разделы дисциплины и виды занятий с указанием трудоемкости

№	Наименование разделов и тем	Виды учебной работы и трудоемкость, ч						Формы текущего контроля успеваемости
		Всего	Лек	Лаб	П	СР	КСР	
Раздел 1. Строение вещества								
1	Квантово-химический расчет молекул	8	2	-	2	4	-	Собеседование Решение задач
2	Оценка реакционной способности молекул	8	2	-	2	4	-	
3	Оценка термодинамических параметров химических реакций	11	2	-	2	4	3	
Раздел 2. Термодинамика и кинетика процессов сорбции								
4	Уравнения мономолекулярной адсорбции	13	3	-	3	7	-	Собеседование Решение задач
5	Уравнение Брунауэра – Эмета – Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента.	13	3	-	3	7	-	
6	Сорбция на пористых сорбентах.	13	3	-	3	7	-	
7	Кинетика сорбции. Уравнение Рогинского-Зельдовича. Уравнения для скорости адсорбции и десорбции Бэнхема–Барта, Квана.	17	3	-	3	7	4	
Раздел 3. Теория растворов								
8	Парциальные мольные величины. Методы определения парциальных молярных величин Термодинамические типы растворов	14	3	-	3	8	-	Собеседование Решение задач
9	Функция смешения для различных типов растворов	14	3	-	3	8	-	
10	Уравнения, описывающие термодинамические функции смешения компонентов в рамках различных моделей	17	3	-	3	8	3	
Раздел 4. Фазовые равновесия								
11	Фазовые диаграммы бинарных систем.	13	3	-	3	7	-	Собеседование Решение задач
12	Оценка фазового состава наноструктурированных бинарных сплавов	15	3	-	3	7	2	

Раздел 5. Кинетика химических реакций								
13	Формальная кинетика химических реакций	9	2	-	2	5	-	Собеседование Решение задач
14	Кинетика диффузионных процессов	9	2	-	2	5	-	
15	Кинетика необратимых электродных процессов	9	2	-	2	5	-	
16	Критерии обратимости электродных процессов	9	2	-	2	5	-	
17	Кинетика каталитических процессов. Ферментативный катализ.	9	2	-	2	5	-	
18	Основные промышленные каталитические процессы	15	2	-	2	5	6	
Всего часов:		**216**	**45**	**-**	**45**	**108**	**18**	

Рабочей программой дисциплины «Физическая химия» предусмотрена самостоятельная работа обучающегося в объеме 108 ч. Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и подкрепляется учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций, учебное и научное программное обеспечение, ресурсы Интернет.

Перечень рекомендуемых видов самостоятельной работы:

- регулярная проработка пройденного на лекциях учебного материала по разделам курса;
- ознакомление с литературой в электронно-библиотечных системах, включая публикации из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- посещение отраслевых выставок, семинаров, конференций различного уровня;
- участие в семинарах ИрИХ СО РАН по тематике курса, научно-методических семинарах лабораторий, посещение защит диссертаций на соискание ученой степени кандидата и доктора наук;
- подготовка к сдаче экзамена по курсу.

5. Организация текущего контроля и промежуточной аттестации по итогам освоения учебной дисциплины

Текущий контроль по дисциплине «Физическая химия» осуществляется в следующих формах: собеседование по контрольным вопросам и решение задач.

Собеседование – средство контроля, организованное в форме собеседования по тематике изучаемой дисциплины, рассчитанное на выяснение объема знаний обучающегося по всем изученным разделам, темам; свободного использования терминологии для аргументированного выражения собственной позиции.

Собеседование по контрольным вопросам и письменным ответам на вопросы оценивается в соответствии со следующими критериями: аргументированность позиции, широта используемых теоретических знаний.

Решение задач – средство контроля, позволяющее получить выявить умение применять полученные знания на практике.

Критерии оценивания:

«Отлично» - Составлен правильный алгоритм решения задачи, в логическом рассуждении, в выборе формул и решении нет ошибок, получен верный ответ, задача решена рациональным способом.

«Хорошо» - Составлен правильный алгоритм решения задачи, в логическом рассуждении и решении нет существенных ошибок; правильно сделан выбор формул для

решения; есть объяснение решения, но задача решена нерациональным способом или допущено не более двух несущественных ошибок, получен верный ответ.

«Удовлетворительно» - Задание понято правильно, в логическом рассуждении нет существенных ошибок, но допущены существенные ошибки в выборе формул или в математических расчетах; задача решена не полностью или в общем виде.

«Неудовлетворительно» - Задача решена неправильно. Задача не решена.

Промежуточная аттестация по дисциплине «Физическая химия» проводится на втором году обучения в форме экзамена, предусматривающего ответы на контрольные вопросы.

Экзамен – средство, позволяющее получить экспертную оценку знаний, умений и навыков, полученных по итогам изучения дисциплины «Физическая химия», позволяющих аспиранту анализировать различные факты и явления в своей профессиональной области.

Результаты сдачи экзамена оцениваются как «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Критерии оценивания ответа аспиранта:

- для оценки «отлично»: наличие глубоких и исчерпывающих знаний в объеме программы курса, правильные и уверенные действия по применению теоретических знаний для решения практических задач, грамотное и логически стройное изложение материала при ответе, знание дополнительно рекомендованной литературы;
- для оценки «хорошо»: наличие твердых и достаточно полных знаний программы курса, незначительные ошибки при освещении заданных вопросов, правильные действия по применению теоретических знаний для решения практических задач, четкое изложение материала;
- для оценки «удовлетворительно»: наличие твердых знаний пройденного материала, изложение ответов с ошибками, уверенно исправляемыми после дополнительных вопросов, необходимость наводящих вопросов, правильные действия по применению теоретических знаний для решения практических задач;
- для оценки «неудовлетворительно»: наличие грубых ошибок в ответе, непонимание сущности излагаемого вопроса, неумение применять знания на практике, неуверенность и неточность ответов на дополнительные и наводящие вопросы.

Дисциплина считается освоенной, если обучающийся получил оценку «отлично», «хорошо», «удовлетворительно».

Оценочные средства для проведения текущего контроля

Примеры контрольных вопросов для проведения собеседования

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

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

Темы решения задач

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

Примеры задач для самостоятельного решения

1) Методом Хюккеля (МОХ) найти энергии МО, коэффициенты разложения МО по базисным АО, полную энергию молекулы C_2H_4.

2) Методом МОХ найти орбитальные энергии, коэффициенты разложения МО по базисным АО и полную энергию (1) аллильного радикала CH_2-CH-CH_2, (2) аллильного катиона и (3) аллильного аниона. (Принять h=0, k=1).

3) Методом МОХ рассчитать орбитальные заряды атомов и порядки С-С связей в аллильном радикале, катионе и анионе. Для радикала рассчитать спиновые плотности на атомах углерода.

4) Методом МОХ найти энергии МО, коэффициенты разложения МО, энергию молекулы, орбитальные заряды атомов и порядки связей в молекуле формальдегида CH_2=O.

5) Методом МОХ найти энергии МО, коэффициенты разложения МО, энергию молекулы, орбитальные заряды атомов и порядки связей в молекуле хлорвинила CH_2=CH–Cl.

6) Методом МОХ найти энергии МО, коэффициенты разложения МО, энергию молекулы, орбитальные заряды атомов и порядки связей в молекулах CH_2=C=O и CH_2=C=NH.

7) Рассчитайте удельную поверхность адсорбента по изотерме адсорбции азота, используя уравнение БЭТ. Площадь, занимаемая молекулой азота в плотном монослое, составляет $16 \cdot 10^{-20}$ м^2

P/P_s	А, моль/кг
0,0286	2,16
0,136	3,02
0,200	3,33

8) В таблице приведены данные по адсорбции паров воды макропористым адсорбентом при комнатой температуре. Пользуясь уравнением Ленгмюра, определите емкость адсорбционного монослоя:

Р·10-3, Па	А, моль/кг
4,68	6,28
7,72	9,22
17,77	14,89

9) Используя уравнение Дубинина-Радушкевича, рассчитайте объем микропор сажи на основе данных об адсорбции паров бензола (мольный объем бензола 88,8 $см^3$/моль):

P/Ps	А, моль/кг
0,3	1,10
0,4	1,38
0,5	1,60

10) Рассчитайте время половинной коагуляции аэрозоля с дисперсностью частиц $2{,}5\cdot10^{8}$ $м^{-1}$ и концентрацией $1{,}5\cdot10^{-3}$ $кг/м^3$, если константа быстрой коагуляции Смолуховского равна $3\cdot10^{-19}$ $м^3/с$. Плотность частиц аэрозоля примите равной 2200 $кг/м^3$.

11) Определите диаметр капилляра, если хлороформ поднялся в нем на выосту 12,3 см. σ = 27 $мДж/м^2$; $\Delta\rho$ = 1490 $кг/м^3$, Θ = 0 ºС.

12) Растворенное в воде ПАВ адсорбируется на поверхности раздела вода-ртуть и соответствии с уравнением Ленгмюра. При этом, при концентрация ПАВ 0,2 моль/л, степень заполнения поверхности равна 0,5. Рассчитайте значение межфазного поверхностного натяжения на границе ртуть-раствор при 25ºС и СПАВ = 0,1 моль/л, учитывая, что в отсутствие ПАВ поверхностное натяжение составляет 0,375 Дж/м2, а площадь, занимаемая молекулой ПАВ в монослое равна 20•10-20 $м^2$.

13) Рассчитайте толщину диффузной части ДЭС частиц гидрозоля AgI при 25 ºС. Дисперсионная среда золя (ε = 77) содержит Ba(NO3)2 (М = 261) с концентрацией 50 г/м3. Во сколько раз изменится толщина диффузной части, если концентрацию Ba(NO3)2 повысить в 4 раза?

14) Рассчитайте численную концентрацию золя Al_2O_3, если известно, что его массовая концентрация равна 0,3 $кг/м^3$. Коэффициент диффузии частиц $2\cdot10^{-6}$ $м^2$/сутки, плотность Al_2O_3 4 $г/см^3$, вязкость среды 10^{-3} Па·с, температура 25ºС.

15) Найдите величину электрокинетического потенциала для суспензии кварца в воде, если при электрофорезе частицы перемещаются к аноду. Смещение границы за t = 30 мин составило 5,0 см. Напряженность электрического поля H = $10\cdot10^{2}$ В/м. Диэлектрическая проницаемость среды ε = 81, вязкость среды $\eta = 1\cdot10^{-3}$ $Н\cdot с/м^2$.

Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации

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

Образцы билетов
Физическая химия

Билет 1

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

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

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

Билет 2

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

2. Первый закон термодинамики. Теплота, работа, внутренняя энергия, энтальпия, теплоемкость. Закон Гесса. Стандартные состояния и стандартные теплоты химических реакций. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Формула Кирхгофа.

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

Билет 3

1. Колебания молекул. Нормальные колебания, амплитуды и частоты колебаний, частоты основных колебательных переходов. Колебания с большой амплитудой. Вращение молекул. Различные типы молекулярных волчков. Вращательные уровни энергии.

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

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

Билет 4

1. Электронное строение атомов и молекул. Одноэлектронное приближение. Атомные и молекулярные орбитали. Электронные конфигурации и термы атомов. Правило Хунда. Электронная плотность. Распределение электронной плотности в двухатомных молекулах.

2. Фундаментальные уравнения Гиббса. Характеристические функции. Энергия Гиббса, энергия Гельмгольца. Уравнения Максвелла. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов. Уравнение Гиббса – Гельмгольца. Работа и теплота химического процесса. Химические потенциалы.

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

Билет 5

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

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

3. Элементарные акты химических реакций и физический смысл энергии активации. Термический и нетермические пути активации молекул. Обмен энергией (поступательной, вращательной и колебательной) при столкновениях молекул. Время релаксации в молекулярных системах.

Билет 6

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

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

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

Билет 7

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

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

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

Билет 8

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

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

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

Билет 9

1. Оптические спектры молекул. Вероятности переходов и правила отбора при переходах между различными квантовыми состояниями молекул. Связь спектров молекул с их строением. Определение структурных характеристик молекул из спектроскопических данных.

2. Основные положения термодинамики неравновесных процессов.

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

Билет 10

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

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

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

Билет 11

1. Строение основных типов органических и элементоорганических соединений.

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

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

Билет 12

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

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

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

Билет 13

1. Строение твердых растворов. Упорядоченные твердые растворы. Аморфные вещества. Особенности строения полимерных фаз.

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

3. Катализ металлокомплексными соединениями. Гомогенные реакции гидрирования, их кинетика и механизмы.

Билет 14

1. Металлы и полупроводники. Зонная структура энергетического спектра кристаллов. Поверхность Ферми. Различные типы проводимости. Колебания в кристаллах. Фононы.

2. Адсорбция. Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Генри. Константа адсорбционного равновесия. Уравнение Лэнгмюра. Адсорбция из растворов. Хроматография, различные ее типы.

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

Билет 15

1. Жидкости. Мгновенная и колебательно-усредненная структура жидкости. Ассоциаты и кластеры в жидкостях. Структура простых жидкостей. Растворы неэлектролитов. Структура воды и водных растворов. Структура жидких электролитов.

2. Растворы электролитов. Ион-дипольное взаимодействие как основной процесс, определяющий устойчивость растворов электролитов. Коэффициенты активности в растворах электролитов. Основные положения теории Дебая – Хюккеля.

3. Гетерогенный катализ. Определение скорости гетерогенной каталитической реакции. Удельная и атомная активность. Энергия активации гетерогенных каталитических реакций.

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Основная литература

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

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

Дополнительная литература

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

Электронные ресурсы

1. Васильцова, И.В. Органическая и физколлоидная химия [Электронный ресурс]: учебное пособие / И.В. Васильцова, Т.И. Бокова, Г.П. Юсупова. — Электрон. дан. — Новосибирск: НГАУ, 2013. — 155 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/44513. — Загл. с экрана.
2. Гончаренко, Е.Е. Адсорбция органических кислот: Метод. указания к лабораторным работам по курсу «Физическая и коллоидная химия» [Электронный ресурс]: учебно-методическое пособие / Е.Е. Гончаренко, Н.М. Елисеева ; под ред. А.М. Голубева. — Электрон. дан. — Москва: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2007. — 23 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/58563. — Загл. с экрана.
3. Акулова, Ю.П. Физическая химия. Теория и задачи [Электронный ресурс]: учебное пособие / Ю.П. Акулова, С.Г. Изотова, О.В. Проскурина, И.А. Черепкова. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург: Лань, 2018. — 228 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/110903. — Загл. с экрана.
4. Афанасьев, Б.Н. Физическая химия [Электронный ресурс]: учебное пособие / Б.Н. Афанасьев, Ю.П. Акулова. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург: Лань, 2012. — 416 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/4312. — Загл. с экрана.
5. Бокштейн, Б.С. Физическая химия: термодинамика и кинетика [Электронный ресурс]: учебное пособие / Б.С. Бокштейн, М.И. Менделев, Ю.В. Похвиснев. — Электрон. дан.

— Москва: МИСИС, 2012. — 258 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/47443. — Загл. с экрана.
6. Буданов, В.В. Ключевые вопросы курса физической химии [Электронный ресурс] : учебное пособие / В.В. Буданов. — Электрон. дан. — Иваново: ИГХТУ, 2007. — 48 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/4493. — Загл. с экрана.
7. Булидорова, Г.В. Физическая химия [Электронный ресурс]: учебное пособие / Г.В. Булидорова, Ю.Г. Галяметдинов, Х.М. Ярошевская, В.П. Барабанов. — Электрон. дан. — Казань: КНИТУ, 2012. — 396 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/73471. — Загл. с экрана.
8. Дерябин, В.А. Физическая химия дисперсных систем [Электронный ресурс]: учебное пособие / В.А. Дерябин, Е.П. Фарафонтова. — Электрон. дан. — Екатеринбург: УрФУ, 2015. — 88 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/98417. — Загл. с экрана.
9. Еремин, В.В. Основы физической химии. Теория. В 2 ч [Электронный ресурс]: учебное пособие / В.В. Еремин, С.И. Каргов, И.А. Успенская, Н.Е. Кузьменко. — Электрон. дан. — Москва: Издательство "Лаборатория знаний", 2015. — 589 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/84118. — Загл. с экрана.
10. Лефедова, О.В. Основные понятия и определения дисциплин «Физическая химия» и «Коллоидная химия» [Электронный ресурс]: учебное пособие / О.В. Лефедова, М.П. Немцева, А.С. Вашурин. — Электрон. дан. — Иваново: ИГХТУ, 2017. — 109 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/107402. — Загл. с экрана.
11. Максимов, А.И. Введение в нелинейную физическую химию [Электронный ресурс]: учебное пособие / А.И. Максимов. — Электрон. дан. — Иваново: ИГХТУ, 2010. — 174 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/4513. — Загл. с экрана.
12. Маринкина, Г.А. Физическая и коллоидная химия [Электронный ресурс]: учебное пособие / Г.А. Маринкина, Н.П. Полякова, Ю.И. Коваль. — Электрон. дан. — Новосибирск: НГАУ, 2009. — 151 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/4568. — Загл. с экрана.
13. Морачевский, А.Г. Физическая химия. Гетерогенные системы [Электронный ресурс]: учебное пособие / А.Г. Морачевский, Е.Г. Фирсова. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург: Лань, 2015. — 192 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/60048. — Загл. с экрана.
14. Морачевский, А.Г. Физическая химия. Поверхностные явления и дисперсные системы [Электронный ресурс]: учебное пособие / А.Г. Морачевский. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург: Лань, 2015. — 160 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/64335. — Загл. с экрана.
15. Морачевский, А.Г. Физическая химия. Термодинамика химических реакций [Электронный ресурс]: учебное пособие / А.Г. Морачевский, Е.Г. Фирсова. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург: Лань, 2015. — 112 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/64336. — Загл. с экрана.
16. Немилов, С.В. Оптическое материаловедение: Физическая химия стекла, курс лекций [Электронный ресурс]: учебное пособие / С.В. Немилов. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург: НИУ ИТМО, 2009. — 113 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/43451. — Загл. с экрана.
17. Нигматуллин, Н.Г. Физическая и коллоидная химия [Электронный ресурс]: учебное пособие / Н.Г. Нигматуллин. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург: Лань, 2015. — 288 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/67473. — Загл. с экрана.
18. Основы химической термодинамики к курсу физической химии [Электронный ресурс]: учебное пособие / сост. Булидорова Г.В., Галяметдинов Ю.Г., Ярошевская Х.М., Барабанов В.П.. — Электрон. дан. — Казань: КНИТУ, 2011. — 218 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/73353. — Загл. с экрана.
19. Попова, А.А. Физическая химия [Электронный ресурс]: учебное пособие / А.А. Попова, Т.Б. Попова. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург: Лань, 2015. — 496 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/63591. — Загл. с экрана.

20. Родин, В.В. Основы физической, коллоидной и биологической химии : курс лекций [Электронный ресурс]: учебное пособие / В.В. Родин. — Электрон. дан. — Ставрополь: СтГАУ, 2012. — 124 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/5763. — Загл. с экрана.
21. Салем, Р.Р. Физическая химия. Термодинамика [Электронный ресурс]: учебное пособие / Р.Р. Салем. — Электрон. дан. — Москва: Физматлит, 2004. — 352 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/59271. — Загл. с экрана.
22. Сафонова, Л.П. Физическая химия дисперсных систем [Электронный ресурс]: учебно-методическое пособие / Л.П. Сафонова, В.В. Королев, В.И. Савельев. — Электрон. дан. — Иваново: ИГХТУ, 2007. — 40 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/4465. — Загл. с экрана.
23. Свиридов, В.В. Физическая химия [Электронный ресурс]: учебное пособие / В.В. Свиридов, А.В. Свиридов. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург: Лань, 2016. — 600 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/87726. — Загл. с экрана.
24. Семериков, И.С. Физическая химия строительных материалов [Электронный ресурс]: учебное пособие / И.С. Семериков, Е.С. Герасимова. — Электрон. дан. — Екатеринбург: УрФУ, 2015. — 204 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/98419. — Загл. с экрана.
25. Симонов, В.Н. Равновесная и неравновесная термодинамика: методические указания к выполнению лабораторных работ по курсу «Физическая химия» [Электронный ресурс]: методические указания / В.Н. Симонов, А.В. Велищанский, К.О. Базалеева. — Электрон. дан. — Москва: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2011. — 37 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/62043. — Загл. с экрана.
26. Терзиян, Т.В. Физическая и коллоидная химия [Электронный ресурс]: учебное пособие / Т.В. Терзиян. — Электрон. дан. — Екатеринбург: УрФУ, 2012. — 108 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/98442. — Загл. с экрана.
27. Физическая химия [Электронный ресурс]: учебное пособие / Н.М. Селиванова [и др.]. — Электрон. дан. — Казань: КНИТУ, 2016. — 188 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/102111. — Загл. с экрана.
28. Цыро, Л.В. Физическая химия: химическое равновесие [Электронный ресурс]: учебно-методическое пособие / Л.В. Цыро, С.Я. Александрова. — Электрон. дан. — Томск: ТГУ, 2012. — 117 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/44984. — Загл. с экрана.

Рекомендуемые источники научно-технической информации

Научно-технические журналы из библиотечного фонда ИрИХ СО РАН:

1. Вестник Российской академии наук.
2. Высокомолекулярные соединения. Серия А: Физика полимеров.
3. Высокомолекулярные соединения. Серия Б: Физика полимеров.
4. Доклады академии наук.
5. Журнал общей химии.
6. Журнал органической химии.
7. Журнал прикладной химии.
8. Журнал структурной химии.
9. Известия Академии наук. Серия химическая.
10. Успехи химии (электронный журнал).
11. Химико-фармацевтический журнал.
12. Химия в интересах устойчивого развития.
13. Химия гетероциклических соединений.
14. Электрохимия.
15. Journal of Sulfur Chemistry.
16. Mendeleev Communications.

Электронно-библиотечные системы профессиональные базы данных, информационные справочные и поисковые системы:

1. Химическая реферативная служба Американского химического общества CAS SciFinder https://sso.cas.org/
2. База данных Elsevier: Reaxys+Reaxys Medicinal Collection https://www.reaxys.com/.
3. The Cambridge Crystallographic Data Centre: база данных CSD-Enterprise https://www.ccdc.cam.ac.uk/
4. База данных медицинских и биологических публикаций PubMed https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/.
5. База данных Академия Google https://scholar.google.ru/.
6. Федеральный институт промышленной собственности http://www1.fips.ru.
7. Федеральная служба по интеллектуальной собственности http://www.rupto.ru.
8. The United States Patent and Trademark Office http://www.uspto.gov.
9. The European Patent Office http://ep.espacenet.com.
10. Academic Reference – база данных полнотекстовых англоязычных ресурсов по всем академическим дисциплинам, опубликованных в Китае https://ar.cnki.net.
11. База цитирования Elsevier B.V.: Scopus https://www.scopus.com.
12. База цитирования РИНЦ https://www.elibrary.ru/.
13. База данных электронно-библиотечной системы «Лань» https://e.lanbook.com/.
14. Ресурсы удаленного доступа и базы данных ФГБУН Государственной публичной научно-технической библиотеки СО РАН http://www.spsl.nsc.ru/.
15. Электронно-библиотечная система Центральной научной библиотеки ИНЦ СО РАН (на базе АИБС «Ирбис») http://csl.isc.irk.ru/.
16. Elsevier: Science Direct Complete Freedom Collection https://www.elsevier.com/, http://www.sciencedirect.com.
17. George Thieme Verlag: коллекция журналов Thieme по химии https://www.thieme.com/.
18. Royal Society of Chemistry: база данных RSC DATABASE https://www.rsc.org/.
19. Wiley: Коллекция журналов Database Collection https://onlinelibrary.wiley.com/.
20. Справочно-правовая система "ГАРАНТ" https://internet.garant.ru/ .
21. Сайт ВАК Минобрнауки РФ https://vak.minobrnauki.gov.ru/.
22. Электронная информационно-образовательная среда ИрИХ СО РАН http://eios-irich.com.ru/moodle/.
23. Портал для аспирантов и соискателей ученой степени: http://www.аспирантура.рф/.

Бесплатные официальные открытые ресурсы Интернет:

1. Directory of Open Access Journals (DOAJ) http://doaj.org/
   Ресурс объединяет более 10000 научных журналов по различным отраслям знаний (около 2 миллионов статей) из134 стран мира.
2. Directory of Open Access Books (DOAB) https://www.doabooks.org/
   В базе размещено более 3000 книг по различным отраслям знаний, предоставленных 122 научными издательствами.
3. BioMed Central https://www.biomedcentral.com/
   База данных включает более 300 рецензируемых журналов по биомедицине, медицине и естественным наукам. Все статьи, размещенные в базе, находятся в свободном доступе.
4. Электронный ресурс arXiv https://arxiv.org/
   Крупнейшим бесплатный архив электронных научных публикаций по разделам физики, математики, информатики, механики, астрономии и биологии. Имеется подробный тематический каталог и возможность поиска статей по множеству критериев.

5. Коллекция журналов MDPI AG http://www.mdpi.com/
   Многодисциплинарный цифровой издательский ресурс, является платформой для рецензируемых научных журналов открытого доступа, издающихся MDPI AG (Базель, Швейцария). Издательство выпускает более 120 разнообразных электронных журналов, находящихся в открытом доступе.
6. Издательство с открытым доступом InTech http://www.intechopen.com/
   Первое и крупнейшее в мире издательство, публикующее книги в открытом доступе, около 2500 научных изданий. Основная тематическая направленность - физические и технические науки, технологии, медицинские науки, науки о жизни.
7. База данных химических соединений ChemSpider http://www.chemspider.com/
   ChemSpider – это бесплатная химическая база данных, предоставляющая быстрый доступ к более чем 28 миллионам структур, свойств и соответственной информации. Ресурс принадлежит Королевскому химическому обществу Великобритании (Royal Society of Chemistry).
8. Коллекция журналов PLOS ONE http://journals.plos.org/plosone/
   PLOS ONE – коллекция журналов, в которых публикуются отчеты о новых исследованиях в области естественных наук и медицины. Все журналы размещены в свободном доступе (Open Access), все статьи проходят строгое научное рецензирование.

7. Материально-техническое обеспечение научно-исследовательской работы

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине «Физическая химия» проводятся в форме лекций, практических занятий и самостоятельной работы обучающегося.

Для реализации образовательного процесса в форме лекций и практических занятий используются следующие помещения: универсальная учебная аудитория, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью; малый лекционный зал (библиотека), оснащенный компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет, учебной мебелью и демонстрационным оборудованием.

Для освоения программы обучения и для выполнения практических и научно-исследовательских работ по теме диссертации каждому аспиранту предоставлено индивидуальное рабочее место, оборудованное приточно-вытяжной вентиляцией, водопроводом, водоотведением, воздуховодом. Аспиранты имеют возможность использовать материально-технические средства лабораторий, в которых выполняют диссертационные работы (оргтехника, реактивы, расходные материалы, лабораторная посуда, измерительное оборудование).

Программное обеспечение:

Лицензионные продукты:

- Microsoft Office 2010 Russian Academic Open;
- Microsoft Office Professional 2010 Russian Academic Open;
- Zoom – система видеоконференцсвязи с возможностью обмена сообщениями и передачей контента в режиме реального времени.

Свободно распространяемое ПО: браузер Google Chrome67, Mozilia Firefox 60.02, Opera53; Pascal ABC 3.3; система текстовой, голосовой и видеосвязи связи Skype7.41.0.101; программа для создания электронных учебных продуктов Moodle 3.2.; программа для просмотра электронных документов Foxit PDF Reader 9.1.0.5096; архиватор 7zip 17.01 beta.

Приборная база:

Основу материально-технической базы института составляют два цифровых мультиядерных Фурье-спектрометра ЯМР (DPX 400 и AVANCE 400), рентгеновский дифрактометр Bruker D8 ADVANCE, рентгеновский дифрактометр D2 PHASER, инфракрасный Фурье-спектрометр Vertex 70 с Раман приставкой, инфракрасный Фурье-спектрометр Excalibar HE 3100 Varian, микроанализатор Flash EA 1112 CHN-O/MAS 200, микроанализатор Termo Flash EA 2000 CHNS, ЭПР-спектрометр ELEXSYS E580, установка

наносекундного импульсного фотолиза, хроматомасс-спектрометр QP-5050A, хроматомасс-спектрометр Agilent 5975 с химической ионизацией, тандемный TOF/TOF масс-спектрометр Ultra Flex, электронный микроскоп TM 3000 Hitachi, спектрофлуориметр FLPS920 Edinburg Instruments, УФ/ВИД-спектрометр LAMBDA 35 и диэлькометр.

Для проведения квантово-химических расчетов имеются компьютеры в лабораториях и вычислительный кластер 39Гц/112Гб/14Тб.

Лицензионное программное обеспечение, встроенное в соответствующие приборные комплексы, являющееся его неотъемлемой частью, обеспечивающей функционирование приборов:

- Gaussian 09, Пакет квантово-химических программ, для расчета геометрии и электронных характеристик молекул.
- Apex 2, Apex 3,Программы для обработки данных монокристального дифрактометра;
- CCDC (ConQuest, Mercury, DASH, Mogul, Hermes), Кристаллографическая база данных и пакет программ для работы с базой данных;
- TurboMol, Пакет квантово-химических программ, для расчета геометрии и электронных характеристик молекул;
- XWinNMR, Программа для записи и обработки данных спектрометра ЯМР;
- TOPAS, EVA, Программы для обработки данных порошкового дифрактометра;
- PDF-2, База данных порошковых дифрактограм неорганических соединений;
- ResolutionsPro Opus, Пакет программ, для записи и обработки ИК-спектров;
- Lambda35, Программа для записи и обработки УФ-спектров;
- Программа Flexanalysis 3.3 для обработки массива данных по биополимерам, нелетучих биомакромолекул, олигомерам, синтетическим полимерам, солям и нелетучих веществ;
- Xepr, XSophe, XeprView, Пакет программ для записи и обработки спектров ЭПР.

С открытой лицензией:

- Dalton2016, пакет квантово-химических программ, используемых для расчета, изучения свойств веществ, моделирования реакций;
- DIRAC, программа для атомных и молекулярных прямых итеративных релятивистских вычислений на всех электронах, вычислений молекулярных свойств с использованием релятивистских квантово-химических методов;
- ORCA software, пакет квантово-химических программ, используемых для расчета, изучения свойств веществ, моделирования реакций.