

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова»
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,

Акад. РАН, профессор



[С.Н.Калмыков]

«30» августа 2022 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
направленной на подготовку к сдаче кандидатского экзамена по специальности

Физическая химия
(физико-математические науки)
(Physical Chemistry)

Уровень высшего образования:
Программа подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре
(104-01-00-144-хн-фмн)

Москва 2022

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с Требованиями к основным программам подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре, самостоятельно устанавливаемыми Московским государственным университетом имени М.В. Ломоносова (приказ №1216 от 24 ноября 2021 г.), паспортом научной специальности 1.4.4 "Физическая химия".

1. Краткая аннотация:

Название дисциплины – Физическая химия (*Physical Chemistry*)

Цель курса: подготовить аспирантов к сдаче кандидатского экзамена по специальности «Физическая химия» в отрасли физико-математических наук, дать аспирантам, обучающимся по специальности «Физическая химия» углубленное изложение современных аспектов традиционных разделов физической химии.

Курс состоит из трех частей. В первой части курса в рамках математического формализма квантовой механики детально и последовательно рассмотрены методы описания электронных состояний молекул. Подробно разбираются основные элементарные процессы, протекающие при взаимодействии электромагнитного излучения с молекулами, а также статистические и молекулярно-динамические подходы описания термодинамических систем, в также вопросы моделирования кинетики элементарного акта химических реакций. Во второй части обсуждаются вопросы экспериментальной и теоретической термодинамики. Особое внимание уделяется использованию теоретических моделей для описания термодинамических систем. В третьей части в основном рассматриваются вопросы химической кинетики и катализа. Особое внимание уделяется теоретическим подходам к решению прямой кинетической задачи, использованию математического аппарата для вывода выражения для скорости.

Во всех разделах уделяется внимание современным методам исследования и их взаимосвязи.

2. Уровень высшего образования – подготовка кадров высшей квалификации

3. Научная специальность: **1.4.4** Физическая химия, область науки: 1. Естественные науки, отрасль науки: физико-математические науки.

4. Место дисциплины (модуля) в структуре Программы аспирантуры: Дисциплины (модули), направленные на подготовку к кандидатским экзаменам - курс по специальности (для сдачи канд. минимума), может быть прослушана аспирантами в качестве факультативного курса.

5. *Объем дисциплины (модуля) составляет 3 зачетные единицы, всего 108 часов, из которых 80 часов составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (72 часа занятия лекционного типа, 6 часов групповые консультации, 2 часа мероприятия промежуточной аттестации, 28 часов составляет самостоятельная работа обучающегося.*

6. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

На предыдущих уровнях высшего образования должны быть освоены общие курсы:

1. «Математический анализ»,
2. «Линейная алгебра»,
3. «Теория вероятностей»,
4. «Теоретическая механика»,
5. «Основы квантовой механики»,
6. «Физическая химия»,
7. «Квантовая химия и строение молекул».

7. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам:

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы						Самостоятельная работа обучающегося, часы		
		из них						из них		
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка к коллоквиумам	Всего
Блок 1. Строение вещества (п.1,5,8,9,10,11 Паспорта специальности)	48	36	-	2	-	-	38	10		10
Блок 2. Термодинамика (п.2,3,4,10,12 Паспорта специальности)	26	18	-	2	-	-	20	6		6
Блок3. Кинетика (п.6,7,8,9,12 Паспорта специальности)	26	18	-	2	-	-	20	6		6
Промежуточная аттестация <u>зачет</u>	8	-	-	-	-	2	2	6		6
Итого	108	72	-	6	-	2	80	28		28

Содержание блоков:

Блок 1.

Тема 1.1. Математический аппарат и особенности описания молекулярных систем. Математический формализм квантовой механики. Основные операторы физических величин, коммутационные соотношения между ними. Нестационарное и стационарное уравнения Шредингера. Дискретный и непрерывный спектр. Квазиклассическое приближение. Точно (аналитически) решаемые одночастичные задачи квантовой механики. Приближенные методы решения задач квантовой химии: вариационный метод, методы теории возмущений.

Тема 1.2. Квантово-механические модели молекулярных систем. Адиабатическое приближение и его применение. Поверхности потенциальной энергии и их особые точки. Матрица Гессе. Теорема Гельмана — Фейнмана. Выход за рамки адиабатического приближения и области квазивыврождения. Адиабатическое и диабатическое представление. Взаимодействие различных типов движений в молекуле. Спектральные проявления межмолекулярного взаимодействия.

Тема 1.3. Переходы между стационарными состояниями в молекулярных системах. Симметрия состояний и правила отбора для переходов между ними. Связь атомных и молекулярных термов. Переходы в молекулах под действием внешних полей. Расчет радиационных характеристик. Эйнштейновское описание переходов. Поглощение, самопроизвольное и вынужденное испускание, комбинационное рассеяние. Энергетические и временные характеристики внутримолекулярных процессов. Внутримолекулярные взаимодействия и неадиабатические переходы. «Золотое правило» Ферми и формула Ландау-Зинера.

Тема 1.4. Электронные состояния молекул. Квантовохимические методы описания электронных состояний молекул. Одноэлектронное приближение. Метод конфигурационного взаимодействия и его основные формы. Проблема размерной несогласованности. Многоконфигурационные методы самосогласованного поля. Метод конфигурационного взаимодействия с несколькими исходными конфигурациями. Применение теории возмущений для учета энергии электронной корреляции. Теория функционала электронной плотности. Особенности описания возбужденных электронных состояний. Электронно-возбужденные состояния в фотохимии и радиационной химии. Эволюция состояний системы и энергии возбуждения.

Тема 1.5. Физико-химические явления, связанные со спином. Связь спина и перестановочной симметрии волновых функций. Спин-орбитальное, спин-спиновое и сверхтонкое взаимодействия. Взаимодействие молекулы с электромагнитным полем в присутствии внешних полей. Основные представления о методах ЭПР- и ЯМР-спектроскопии: физические основы и применение этих методов. Исследование структуры свободных радикалов методом ЭПР.

Тема 1.6. Статистические и молекулярно-динамические подходы. Молекулярно-динамический и статистический подходы к описанию термодинамической системы и их взаимосвязь. Конфигурационный интеграл и расчет термодинамических потенциалов. Статистическое описание изолированных молекул. Расчет плотности колебательных уровней и энтропии изолированной молекулы. Связь микроканонического и канонического ансамбля. Связь плотности колебательных уровней с временами внутримолекулярной колебательной релаксации.

Тема 1.7. Принципы моделирования кинетики элементарного акта химических реакций. Представление о современных экспериментальных методах исследования динамики молекулярных систем. Теория столкновений и динамика реакций. Сечения и константы скорости реакции. Сечение поверхности потенциальной энергии и координата реакции. Теория переходного состояния в рамках классической и квантовой механики. Вариационный метод в теории переходного состояния. Расчет константы скорости для реакций, в которых распределение реагентов по энергии существенно отличается от теплового. Оценка констант скоростей переноса энергии в различных физических процессах.

Блок 2.

Тема 2.1. Введение. Общая структура термодинамики, законы. Требования к точности данных. Справочники и базы данных. Общие и частные условия равновесия (с выводом частных условий равновесия). Химическая переменная. Термодинамические потенциалы (U , H , F , G) и энтропия

Тема 2.2. Современные уравнения состояния индивидуальных веществ. Описание растворов с помощью уравнений состояния

Тема 2.3. Химический потенциал компонента для различных типов растворов (идеальных, реальных, газовых и конденсированных). Термодинамические модели растворов. Основные требования к термодинамическим моделям. Устойчивость фаз переменного состава как частный случай применения теории устойчивости термодинамических систем

Тема 2.4. Химические равновесия. Факторы, определяющие численное значение константы равновесия. Влияние растворителя на выход целевого продукта. Адсорбционные равновесия.

Блок 3.

Тема 3.1. Основные понятия феноменологической кинетики. Кинетический закон действующих масс для элементарных реакций и эмпирическое

выражение для скорости. Кинетика сложных реакций. Прямая кинетическая задача: подходы к получению выражения скорости, исключение времени как переменного, учет материального баланса. Наблюдаемые величины при экспериментальном определении скорости реакции. Подходы линейной алгебры для анализа многостадийных химических превращений: выделение линейно-независимых реакций, стехиометрическое правило Гиббса, матрица скоростей и стехиометрических коэффициентов, представление сложной реакции в виде графа.

Тема 3.2. Физико-химические основы катализа. Катализ и равновесие. Снижение энергии активации как главный фактор каталитического ускорения реакций. Энергетический профиль реакции, анализ механизмов на основе сопоставления экспериментальных и теоретически рассчитанных данных. Особенности гомогенного и ферментативного катализа. Автокаталитические реакции.

Тема 3.3. Гетерогенный катализ. Активные центры, неоднородность поверхности, структурная чувствительность, нанокатализ. Особенности гетерогенных катализаторов в зависимости от способа распределения активного компонента и механизма реакции (кисотно-основной, окислительно-восстановительный и др.). Общие подходы к описанию кинетики гетерогенно-каталитических реакций (кинетика Ленгмюра-Хиншельвуда).

Тема 3.4. Основные пути активации молекул. Термическая и нетермическая активация молекул, характерные интервалы энергии и природа активных частиц. Электронно-возбужденные состояния в фотохимии и радиационной химии. Связь механизмов реакции с видом ППЭ.

8. Образовательные технологии.

Проводятся традиционные лекции с использованием (там, где это необходимо) мультимедийных презентаций.

9. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю): Аспирантам предоставляется программа курса, план занятий и перечень заданий для самостоятельной работы. По теме каждой лекции указывается материал в источниках из списков основной и вспомогательной литературы, а также из интернет-ресурсов.

10. Ресурсное обеспечение:

Основная и вспомогательная литература

Блок 1.

1. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, Изд-во МГУ. 2001.
2. Степанов Н. Ф., Пупышев В.И. Квантовая механика молекул и квантовая химия. М.: Изд-во МГУ, 1991.
3. Уманский С. Я. Теория элементарных химических реакций. М.: Интеллект, 2009.
4. Бейдер Р. Атомы в молекулах. М.: Мир. 2001, 532 с.
5. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. Учебное пособие. Издание 2-е (электронное). М.: БИНОМ. Лаборатория знания, 2012, 522 с
6. Барановский В. И.. Квантовая механика и квантовая химия. М., Издательский центр Академия, 2008, 428 с.

Блок 2.

1. Борщевский А. Я. Физическая химия. Т.1. Общая и химическая термодинамика. 2017, 869 с.
2. Борщевский А. Я. Физическая химия. Т.2. Статистическая термодинамика. 2017, 464 с.
3. Еремин В.В., Каргов С.И., Успенская И.А., Кузьменко Н.Е., Лунин В.В. Основы физической химии: Учебник : в 2 частях. Часть 1: Теория. 6-е издание. 2021, Бином. Лаборатория знаний Москва, ISBN 978-5-00101-339-6, 348 с.
4. Пригожин И., Кондепуди Д., Современная термодинамика, М., Мир, 2002
5. П. Эткинс, Дж. де Паула. Физическая химия. т. 1 Равновесная термодинамика. М.: Мир, 2007, 496 с.

Блок 3.

1. Романовский Б.В. Основы химической кинетики, М.: Экзамен, 2006
2. Романовский Б.В. Основы катализа, М.: Бином, 2013
3. Крылов О.В., Гетерогенный катализ, М., Академкнига, 2004
4. Курс лекций по химической кинетике: учебное пособие / К. П. Брыляков, А. А. Антонов. - Долгопрудный : Интеллект, 2022. - 288 с.
5. Чоркендорф И., Наймонтсведрайт Х. Современный катализ и химическая кинетика, (пер с англ.), М., Интеллект, 2010

Дополнительная литература

Блок 1:

1. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. (2 изд.) Ростов-на-Дону: Феникс, 1997
2. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика, т. 3. М.: Наука, 1989.
3. Фларри Р. Квантовая химия. М.: Мир, 1985
4. Эткинс П. Кванты. Справочник концепций. М. Мир, 1977 Раздел 2:
5. Минкин В. И., Симкин Б. Я., Миняев Р. М. Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций. М.: Химия, 1986
6. Смирнова Н. А. Методы статистической термодинамики в физической химии. (2 изд.) М.: Высшая школа, 1982.
7. Эйринг Г., Лин С. Г., Лин С.М. Основы химической кинетики. М.: Мир, 1983.
8. Вилков Л. В., Пентин Ю. А. Физические методы исследования в химии. М.: Изд-во МГУ. Ч.1,2. 1987, 1989.

9. Szabo A., Ostlund N.S. Modern quantum chemistry. Dover publications, Inc., Mineola, New York, 1996.
10. Драго Р. Физические методы в химии. М.: Мир, 1981, в 2х томах.
11. Мессиа А. Квантовая механика, т. 1. М.: Наука, 1978.
12. Кубо Р. Статистическая механика. М.: Мир, 1967.
13. Ландсберг П. Задачи по термодинамике и статистической физике. М.: Мир, 1974.
14. Jensen F. Introduction to Computational Chemistry, 2nd Ed., John Wiley and Sons, Ltd., 2007.
15. Фейнман Р. Статистическая механика. (2 изд.) М.: Мир, 1978.

Блок 2:

1. Воронин Г. Ф. Основы термодинамики. М.: Изд-во Моск ун-та, 1980
2. Полторак О. М. Термодинамика в физической химии. М.: Высшая школа, 1991 – 320 с.
3. Ягодковский В.Д. Статистическая термодинамика в физической химии. 2-е издание. Бином. Лаборатория знаний Москва. 2005
4. Смирнова Н.А. Методы статистической термодинамики в физической химии. М.: Высшая школа, 1982 – 455 с.

Блок 3:

1. Handbook of Heterogeneous Catalysis, (G.Ertl, H.Knozinger and J.Weitkamp, Eds.), VCH Publ., 1997
2. Сетерфилд Ч. Практический курс гетерогенного катализа. М.: Мир, 1984
3. Экспериментальные методы исследования катализа (ред. Р.Андерсон), М., Мир, 1972
4. Thomas J.M., Thomas W. J. Principles and Practice of Heterogeneous Catalysis» Wiley-VCH, 1996
5. Бендер М., Бергерон Р., Комиама М., Биоорганическая химия ферментативного катализа, М., Мир, 1987
6. Боженко К.В., Ягодковский В.Д., Кинетика элементарных химических реакций, М., Изд-во РУДН, 2003
7. Пахомов Н.А. Научные основы приготовления катализаторов. Введение в теорию и практику, Новосибирск, Изд-во СО РАН, 2011
8. Пурмаль А.П., Простов В.Н., Химическая кинетика, М., Изд-во МФТИ, 1999

Перечень используемых информационных технологий

- справочные системы: NIST Chemistry Webbook (<http://webbook.nist.gov/chemistry/>),
- БД «Термические константы веществ» (<http://www.chem.msu.ru/cgi-bin/tkv.pl?show=welcom.html/welcome.html>)

Описание материально-технической базы

- занятия проводятся в обычной аудитории, оснащенной оборудованием для демонстрации презентаций.

11. Язык преподавания – русский

12. Преподаватели:

д. ф-м. н., профессор Новаковская Юлия Вадимовна, juliet75@yandex.ru

к. ф-м. наук, доцент Боченкова Анастасия Владимировна, anastasia.bochenkova@gmail.com

д. х. н., профессор Борщевский Андрей Яковлевич, borsch@phys.chem.msu.ru

д. х. н., профессор Успенская Ирина Александровна, ira386@gmail.com

д.х.н, доцент Голубина Елена Владимировна, elena.golubina@gmail.com

к.х.н., доцент Касьянов Иван Алексеевич superintendent@bk.ru

д. х. н., профессор Локтева Екатерина Сергеевна, e.lokteva@rambler.ru

**Фонды оценочных средств,
необходимые для оценки результатов обучения**

Вопросы к зачету:

Блок 1:

1. Общий формализм квантовой теории: математический аппарат и особенности описания молекулярных систем.
2. Переходы между стационарными состояниями в молекулярных системах
3. Простейшие квантово-механические модели молекулярных систем.
4. Электронные состояния молекул.
5. Симметрия в молекулярных задачах
6. Физико-химические явления, связанные со спином.
7. Статистические и молекулярно-динамические подходы описания молекулярных систем.
8. Принципы моделирования кинетики элементарного акта химических реакций

Блок 2:

1. Общие и частные условия фазовых равновесий (с выводом).
2. Общие и частные условия химических равновесий (с выводом). Химическая переменная.
3. Константа равновесия, расчёт с использованием справочных данных и методами статистической термодинамики (для газофазных процессов). Факторы, определяющие численное значение константы равновесия. Влияние растворителя на выход целевого продукта.
4. Химический потенциал компонента для различных типов растворов (идеальных, реальных, газовых и конденсированных). Расчет химического потенциала методами статистической термодинамики.
5. Термодинамические модели растворов. Основные требования к термодинамическим моделям. Устойчивость фаз переменного состава как частный случай применения теории устойчивости термодинамических систем
6. Описание растворов с помощью уравнений состояния. Вириальное уравнение состояния в феноменологической и статистической термодинамике.

Блок 3:

1. Основные понятия феноменологической кинетики. Кинетический закон действующих масс.
2. Кинетика сложных реакций. Колебательные реакции. Фазовый портрет процесса. Реакция Белоусова-Жаботинского.
3. Поверхность потенциальной энергии. Экспериментальные и расчетные методы построения. Метод молекулярных пучков.
4. Катализ и равновесие. Промежуточные соединения в катализе; принцип энергетического соответствия. Снижение энергии активации как главный фактор каталитического ускорения реакций.
5. Гетерогенный катализ. Активные центры, неоднородность поверхности. Кислотно-основной и окислительно-восстановительный гетерогенный катализ. Кинетика гетерогенных каталитических реакций. Размерные эффекты в гетерогенном катализе.
6. Нанокатализ. Критерии отнесения материальных объектов к «нано».

Вопросы для текущего контроля успеваемости:

Блок 1:

1. Представление векторов и операторов матрицами. Дискретный и непрерывный спектр. Особенности описания состояний непрерывного спектра. Координатное и импульсное представления волновых функций.

2. Эволюция состояний. Основные свойства решений уравнения Шредингера. Квазиклассическое приближение. Предельный переход и классический предел для уравнения Шредингера.
3. Основные элементарные процессы, протекающие при взаимодействии электромагнитного излучения с молекулами. Поглощение, самопроизвольное и вынужденное испускание, рассеяние и комбинационное рассеяние излучения.
4. Электрические и магнитные свойства молекулы. Поляризуемость и магнитная восприимчивость.
5. Связь спина и перестановочной симметрии волновых функций. Принцип Паули. Спин-орбитальное и спин-спиновое взаимодействия.
6. Классические точно решаемые одночастичные задачи квантовой механики. Расчет статических сумм.
7. Квантовая статистика систем многих частиц. Электронный газ. Фотонный газ.
8. Принципы современных методов спектральных исследований молекулярных систем.
9. Адиабатическое приближение. Поверхности потенциальной энергии и их особые точки. Молекулярные постоянные, характеризующие строение потенциальных поверхностей. Особенности строения переходных состояний.
10. Энергетический спектр двухатомной молекулы и соответствующие молекулярные состояния.
11. Вариационный метод и его приложения.
12. Колебательные состояния молекул. Резонансные явления в спектрах.
13. Взаимодействие молекулы с электромагнитным полем в присутствии внешних полей. Основные представления о методах ЭПР- и ЯМР-спектроскопии. Применение этих методов для анализа внутримолекулярных взаимодействий.
14. Симметрия в молекулярных задачах. Точечная и перестановочная симметрия волновых функций. Симметрия и взаимодействие различных типов движений в молекуле.
15. Принципы квантовохимического описания кинетики элементарного акта химической реакции.

Блок 2:

1. Какие свойства являются обязательными для любой равновесной системы?
 - отсутствие потоков вещества и энергии
 - тепловой контакт с окружающей средой
 - наличие реальной или воображаемой контрольной поверхности между системой и окружающей средой
 - максимум энергии
 - независимость термодинамических параметров от времени
2. Среди перечисленных укажите все интенсивные термодинамические параметры.
 - температура
 - масса
 - молярная концентрация
 - объём
 - удельная теплоемкость
3. Признаками идеальности конденсированного раствора являются
 - аддитивность объемов и теплоемкостей компонентов
 - аддитивность энтропий компонентов
 - подчинение во всей области составов уравнению Рауля
 - отсутствие любых типов взаимодействий
 - малость потенциальной энергии взаимодействия по сравнению с общей энергией системы
4. Какая физическая величина НЕ может быть термодинамическим параметром?
 - количество вещества
 - масса
 - концентрация вещества
 - время

- объем
5. Теплоемкость (C_p) двух молей газа при 298 К равна $5R$. Какой это может быть газ?
- CO_2
 - CH_4
 - Ar
 - O_3
 - N_2
6. Какие термодинамические функции вещества меняются скачком при фазовом переходе 1-го рода при $P, T = \text{const}$? Укажите ВСЕ правильные ответы.
- энтальпия
 - химический потенциал
 - энергия Гиббса
 - энтропия
 - объем
 - теплоемкость
7. Выберите ВСЕ верные утверждения о термодинамических константах равновесия.
- значение константы равновесия зависит от выбора стандартного состояния
 - размерность константы равновесия зависит от того, в газовой фазе или в растворе идет реакция
 - константа равновесия всегда зависит от температуры
 - константа равновесия зависит от давления, если в реакции участвуют только идеальные газы
 - константа равновесия – безразмерная величина
8. От чего зависит внутренняя энергия идеального газа? Укажите ВСЕ правильные ответы.
- давление
 - объем
 - количество вещества
 - температура
9. Какие термодинамические функции можно выразить через энергию Гиббса G и/или ее первые производные?
- объем V
 - энергия Гельмгольца F
 - изотермический коэффициент сжимаемости: $\beta = -1/V \cdot (\partial V / \partial P)_T$
 - теплоемкость C_p
 - энтропия S
10. Как меняется химический потенциал чистого вещества при увеличении давления?
- у одних веществ убывает, а у других возрастает
 - не зависит
 - всегда убывает
 - проходит через минимум
 - всегда возрастает
11. Химическая реакция протекает в газовой фазе. При некоторых концентрациях веществ $\Delta_r G > 0$. Как можно сделать энергию Гиббса реакции отрицательной? Выберите ВСЕ возможности.
- увеличить количества продуктов
 - уменьшить количества продуктов
 - увеличить количества реагентов
 - уменьшить количества реагентов
 - уменьшить общее давление
12. В системе протекает одна химическая реакция при постоянных температуре и давлении. По какой переменной энергия Гиббса при равновесии имеет минимум?
- по температуре
 - по времени
 - по химическому потенциалу

- по общему давлению
- по химической переменной

13. При каких условиях адсорбция описывается уравнением Ленгмюра? Перечислите все правильные варианты.

- адсорбция происходит в нескольких слоях
- адсорбция происходит только в одном слое
- образуется ковалентная химическая связь между адсорбентом и адсорбатом
- поверхность адсорбента – однородная, все адсорбционные центры эквивалентны
- существует равновесие «адсорбция-десорбция»

Блок 3:

1. Для каких реакций можно записать выражение для скорости без проведения эксперимента?
2. Эмпирическое выражение для скорости химической реакции, перечислите физический смысл константы скорости и степеней, в которые возведены концентрации.
3. В каких случаях скорость реакции может зависеть от концентрации продукта?
4. Кинетика сложных реакций, механизм. Общие подходы к выводу выражения для скорости.
5. Исключение времени как переменного для вывода выражения скорости реакции.
6. Применение методов линейной алгебры для анализа механизмов.
7. Как можно различить кинетически эквивалентные механизмы?
8. Установление механизма реакции по зависимости селективность-конверсия.
9. Систематический кинетический анализ, планирование эксперимента.
10. Почему при взаимодействии возбужденных молекул может меняться механизм реакции?
11. Поверхность потенциальной энергии и путь реакции.
12. Промежуточные соединения в катализе; принцип энергетического соответствия и его применение для прогнозирования каталитической активности.
13. Особенности ферментативного, гомогенного и гетерогенного катализа.
14. Понятие структурной чувствительности и связь с электронным строением каталитически активного компонента?
15. Основные подходы кинетики Ленгмюра-Хиншельвуда.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Зачет проходит по билетам, каждый из которых включает три теоретических вопроса. Уровень знаний аспиранта оценивается по каждому вопросу на «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно». В случае если на все вопросы был дан ответ, оцененный не ниже, чем «удовлетворительно», аспирант получает общую оценку «зачтено».

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
Оценка Результат	Незачёт (2)	Зачёт (3)	Зачёт (4)	Зачёт (5)
Знания	Отсутствие базовых знаний о современных концепциях и законах физической химии	Общие, но неглубокие знания о современных концепциях и законах физической химии, содержащие пробелы	Общие, но не структурированные знания о современных концепциях и законах физической химии	Сформированные систематические знания о современных концепциях и законах физической химии

Умения	Отсутствие умения применять знания о современном состоянии физической химии для решения научных задач	В целом успешное, но не систематическое умение применять знания о современном состоянии физической химии для решения научных задач	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение применять знания о современном состоянии физической химии для решения научных задач (допускает неточности непринципиального характера)	Успешное и систематическое умение применять знания о современном состоянии физической химии для решения научных задач
Навыки (владения)	Отсутствие навыков использования современного аппарата физической химии для решения конкретных задач	Наличие навыков использования современного аппарата физической химии, не всегда верно используемых	В целом, сформированные навыки использования современного аппарата физической химии, но не в активной форме	Сформированные навыки использования современного аппарата физической химии для решения конкретных задач