

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
(химические 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.) и **паспортом научной специальности 1.4. 4 "Физическая химия"**

1. Краткая аннотация:

Название дисциплины –Физическая химия (Physical Chemistry)

Цель изучения дисциплины – подготовить аспирантов к сдаче экзаменов кандидатского минимума, дать углублённое изложение современных аспектов традиционных разделов физической химии, которые были рассмотрены в простой форме или недостаточно полно рассмотрены во водных общих курсах строенческого цикла и курсе физической химии, читаемом студентам химического факультета МГУ. В первой части курса на основе последовательного использования квантово-механических моделей систематически рассматриваются современные теоретические и экспериментальные методы анализа строения молекулярных систем. Особое внимание уделяется учёту симметрии состояний разных типов и использованию свойств симметрии при построении физико-химических моделей вещества, используемых в других частях курса. Во второй и третьей частях курса обсуждаются более традиционные вопросы физической химии, но в углублённой форме, с опорой на современную теорию строения молекулярных систем и методов статистической физики. Во всех разделах основное внимание уделяется современным методам исследования и их взаимосвязям. Обсуждаются и недостаточно полно освещенные ранее вопросы, к которым относятся, например, особенности и причины уширения спектральных линий, автоионизационные состояния молекул, симметрия переходного состояния, метод графов в феноменологической (формальной) кинетике, фемтосекундная спектроскопия и теория активированного комплекса, нанокатализ, моделирование термодинамических функций, расчеты равновесий в реальных системах. Материал будет полезен при подготовке к сдаче экзамена кандидатского минимума.

2. Уровень высшего образования – подготовка кадров высшей квалификации

3. Научная специальность: **1.4.4 Физическая химия, область науки:1. Естественные науки**

4. Место дисциплины (модуля) в структуре Программы аспирантуры: курс по специальности (для сдачи канд. минимума), может быть прослушан факультативно.

5. *Объем дисциплины (модуля) составляет 3 зачетные единицы, всего 108 часа, 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 учащегося.*

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 из них						Самостоятельная работа обучающегося, часы 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	48	36		2			38			10
Блок 2. Термодинамика	26	18		2			20			6
Блок 3. Кинетика	26	18		2			20			6
Промежуточная аттестация <u>зачет</u>	8					2	2			6
Итого	108	72		6		2	80			28

Содержание блоков

Блок 1.

Тема 1.1. Основные особенности моделирования молекулярных систем. Основные классы моделей, используемые в теории молекул. Применение методов классической и квантовой механики. Соотношение свойств молекул и свойств образованных ими веществ. Основные операторы физических величин, коммутационные соотношения между ними и соотношения неопределенностей. Эволюция состояний

Тема 1.2. Переходы между стационарными состояниями в молекулярных системах. Эйнштейновское описание переходов. Спектр, форма линии, разные типы уширения линий. Основные элементарные процессы, протекающие при взаимодействии электромагнитного излучения с молекулами. Поглощение, самопроизвольное и вынужденное испускание, рассеяние и комбинационное рассеяние излучения. Принципы современных методов спектральных исследований молекулярных систем. Шкала энергетических и временных характеристик основных внутримолекулярных процессов. Основные единицы измерения, применяемые в физической химии в связи с молекулярными задачами. Электрические и магнитные свойства молекулы. Мультипольные моменты

Тема 1.3. Простейшие квантово-механические модели молекулярных систем. Особенности описания спектров взаимодействующих систем. Элементарные модели поступательного, вращательного и колебательного движений и проблемы оценки статистических сумм молекул. Адиабатическое приближение и его применение. Поверхности потенциальной энергии и их особые точки. Молекулярные постоянные, характеризующие строение потенциальных поверхностей. Особенности энергетического спектра двух- и многоатомных молекул. Колебательные состояния молекул. Гармоническая и ангармонические модели внутримолекулярных сил. Нормальные и локальные колебания. Резонансные явления в спектрах. Колебательно-вращательные состояния двух- и многоатомных молекул, соответствующие молекулярные постоянные и расчет статистических сумм по состояниям. Принципы экспериментального определения электрических и магнитных свойств молекул. Дипольный момент молекулы и показатель преломления среды. Простейшие модели строения жидких систем и их основные классы. Спектральные проявления межмолекулярного взаимодействия

Тема 1.4. Высокоэнергетические процессы с участием молекулярных систем. Принципы гамма-резонансной (мессбауэровской) спектроскопии; особенности ее приложения к химическим задачам. Упругое рассеяние частиц молекулой. Соотношения де Бройля. Принципиальные основы электронографического, нейтроно- и рентгенографического анализа строения молекул. Фото- и рентгеноэлектронная спектроскопия. Орбитальная модель молекулы и e^{-2e} процессы. Автоионизационные состояния атомов и молекул. Оже-спектроскопия. Ионизационные методы анализа строения молекул

Тема 1.5. Симметрия в молекулярных задачах. Точечная и перестановочная симметрия волновых функций. Основные типы симметрии; классификация состояний и определение кратности вырождения. Симметрия и взаимодействие различных типов движений в молекуле. Симметрия состояний и правила отбора для переходов между ними. Основные представления о симметрии кристаллических систем. Прямая и обратная решетки. Зонная структура спектра кристаллических веществ. Принципы применения и особенности рентгенографических методов исследования кристаллических систем

Тема 1.6. Электронные состояния молекул. Классификация электронных состояний. Квантово-химические методы описания электронных состояний молекул. Вариационный метод и его приложения: приближение Хартри-Фока, метод конфигурационного взаимодействия. Теорема Купманса и первые потенциалы ионизации. Простейшие модели молекулярных орбиталей и описание химической связи. Ограниченность

орбитальной модели. Методы учета электронной корреляции. Простейшие модели электронного строения молекул. Свойства электронной плотности молекулы. Электронная плотность и геометрия молекул. Спиновая плотность

Тема 1.7. Физико-химические явления, связанные со спином. Связь спина и перестановочной симметрии волновых функций. Принцип Паули. Спин-орбитальное и спин-спиновое взаимодействия. Взаимодействие молекулы с электромагнитным полем в присутствии внешних полей. Основные представления о методах ЭПР- и ЯМР-спектроскопии. Применение этих методов для анализа внутримолекулярных взаимодействий. Особенности применения каждого из методов

Тема 1.8. Принципы моделирования кинетики элементарного акта химической реакции. Симметрия переходного состояния. Простейшие индексы реакционной способности. Принцип сохранения орбитальной симметрии. Корреляционные соотношения в химических исследованиях. Принципы построения аддитивных схем для расчета свойств молекул

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.

Тема 2.2. Термодинамические потенциалы (U , H , F , G) и энтропия. Экспериментальные способы определения, расчеты для газофазного состояния в приближении идеального газа методами статистической термодинамики. Использование при решении задач химии

Тема 2.3. Химический потенциал компонента для различных типов растворов (идеальных, реальных, газовых и конденсированных). Расчет μ методами статистической термодинамики. Способы экспериментального определения.

Тема 2.4. Основные понятия термодинамики растворов. Симметричная и асимметричная система сравнения. Коэффициент активности при предельном разведении, использование при решении практических задач.

Тема 2.5. Термодинамические модели растворов. Основные требования к термодинамическим моделям. Устойчивость фаз переменного состава как частный случай применения теории устойчивости термодинамических систем

Тема 2.6. Описание растворов с помощью уравнений состояния. Вириальное уравнение состояния в феноменологической и статистической термодинамике.

Тема 2.7. Использование общего и частных условий равновесия для расчета фазовых диаграмм двухкомпонентных систем.

Тема 2.8. Химические равновесия. Константа равновесия, способы ее экспериментального определения и расчета методами статистической термодинамики для газофазных процессов. Факторы, определяющие численное значение константы равновесия. Влияние растворителя на выход целевого продукта.

Тема 2.9. Адсорбция (общие понятия курса). Расчеты адсорбционных процессов с использованием методов статистической термодинамики. Рост кристаллов, теорема Вульфа

Блок 3.

Тема 3.1. Основные понятия феноменологической кинетики. Элементарные и простые реакции, молекулярность элементарной реакции. Сложные реакции, механизм химической реакции

Тема 3.2. Кинетический закон действующих масс (основной постулат химической кинетики) для элементарных реакций. Кинетическое уравнение. Константа скорости, принцип независимости в химической кинетике

Тема 3.3. Кинетика сложных реакций: обратимые, параллельные и последовательные реакции. Линейно-независимые реакции, стехиометрическое правило Гиббса. Стехиометрическая матрица, стехиометрический базис. Принцип детального равновесия

Тема 3.4. Автокаталитические и колебательные реакции. Фазовый портрет процесса. Аттракторы. Типы стационарных точек. Реакция Белоусова-Жаботинского

Тема 3.5. Основные пути активации молекул. Термическая и нетермическая активация молекул, характерные интервалы энергии и природа активных частиц. Обмен энергией при упругих и неупругих столкновениях

Тема 3.6. Поверхность потенциальной энергии (ППЭ). Путь реакции и координата реакции. Переходное состояние и активированный комплекс. Экспериментальные и расчетные методы построения ППЭ. Метод молекулярных пучков

Тема 3.7. Физико-химические основы катализа. Катализ и равновесие. Промежуточные соединения в катализе; принцип энергетического соответствия. Снижение энергии активации как главный фактор каталитического ускорения реакций

Тема 3.8. Ферментативный катализ. Структура ферментов, адсорбционные и каталитические центры. Коферменты. Конформационные эффекты. Кинетика ферментативных реакций. Уравнение Михаэлиса-Ментен. Конкурентное, неконкурентное и субстратное ингибирование

Тема 3.9. Гетерогенный катализ. Основные типы гетерогенных катализаторов. Активные центры, неоднородность поверхности. Кислотно-основной и окислительно-восстановительный гетерогенный катализ. Кинетика гетерогенных каталитических реакций. Нанокатализ

8. Образовательные технологии.

Проводятся традиционные лекции с использованием (там, где это нужно) 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:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Блок 1.

1. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Изд-во МГУ, 2001
2. Новаковская Ю. В.. Молекулярные системы. Теория строения и взаимодействия с излучением. М.: Едиториал УРСС, 2004, 2005, в 3-х частях
3. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. (2 изд.) □ Ростов-на-Дону: Феникс, 1997
5. Фларри Р. Квантовая химия. М.: Мир, 1985
6. Эткинс П. Кванты. Справочник концепций. М. Мир, 1977 Раздел 2:

Блок 2.

1. 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.
2. Пригожин И., Кондепуди Д., Современная термодинамика, М., Мир, 2002
3. Леванов А.В. Основы статистической термодинамики. Изд. Моск. Ун-та. 2019
4. Эткинс П.. Физическая химия. т. 1 М.: Мир, 1980

Блок 3.

1. Романовский Б.В. Основы химической кинетики, М.: Экзамен, 2006
2. Романовский Б.В. Основы катализа, М.: Бином, 2013
3. Семиохин И.А., Страхов Б.В., Осипов А.И., Кинетика химических реакций, М., Изд-во МГУ, 1995
4. Тёмкин О.Н. Гомогенный металлокомплексный катализ. Кинетические аспекты, М., Академкнига, 2008
5. Чоркендорф И., Наймонтсведрайт Х. Современный катализ и химическая кинетика, (пер с англ.), М., Интеллект, 2010

Дополнительная литература

Блок 1:

1. Бейдер Р. Атомы в молекулах. М.: Мир. 2001
2. Вилков Л. В., Пентин Ю. А. Физические методы исследования в химии. М.: Изд-во МГУ. Ч.1,2, 1987, 1989
3. Минкин В. И., Симкин Б. Я., Миняев Р. М. Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций. М.: Химия, 1986

Блок 2:

1. Воронин Г. Ф. Основы термодинамики. М.: Изд-во Моск ун-та, 1980
2. Полтораки О. М. Термодинамика в физической химии. М.: Высшая школа, 1991 – 320 с.
3. Ягодовский 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. Бендер М., Бергерон Р., Комияма М., Биоорганическая химия ферментативного катализа, М., Мир, 1987
2. Березин И.В., Мартинек К., Основы физической химии ферментативного катализа, М., Высшая школа, 1977

3. Боженко К.В., Ягодовский В.Д., Кинетика элементарных химических реакций, М., Изд-во РУДН, 2003
4. Крылов О.В., Гетерогенный катализ, М., Академкнига, 2004
5. Пахомов Н.А. Научные основы приготовления катализаторов. Введение в теорию и практику, Новосибирск, Изд-во СО РАН, 2011
6. Панченков Г.М., Лебедев В.П., Химическая кинетика и катализ, М., Химия, 1985
7. Пурмаль А.П., Простов В.Н., Химическая кинетика, М., Изд-во МФТИ, 1999
8. Робинсон П., Холбрук К., Мономолекулярные реакции, М., Мир, 1975
- Перечень используемых информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы:
 - Справочные системы: NISTChemistryWebbook (<http://webbook.nist.gov/chemistry/>), БД «Термические константы веществ» (<http://www.chem.msu.ru/cgi-bin/tkv.pl?show=welcom.html/welcom.html>)
 - Описание материально-технической базы.
- Занятия проводятся в обычной аудитории, оснащенной оборудованием для демонстрации презентаций
11. Язык преподавания – русский
12. Преподаватели:

канд. хим. наук, доцент Боченкова Анастасия Владимировна,
anastasia.bochenkova@gmail.com

докт. хим. наук, профессор Успенская Ирина Александровна,
ira386@gmail.com

докт. ф.-м. наук, профессор Пазюк Елена Александровна,
pazyukea@gmail.com

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения **Вопросы к зачету**

Блок 1:

1. Соотношение свойств молекул и свойств образованных ими веществ.
2. Спектр, форма линии, основные типы уширения линий.
3. Принципы современных методов спектральных исследований молекулярных систем.
4. Принципиальные основы электронографического, нейтроно- и рентгенографического анализа строения молекул.
5. Орбитальная модель молекулы. Автоионизационные состояния атомов и молекул.
6. Адиабатическое приближение. Поверхности потенциальной энергии и их особые точки.
7. Электрический и магнитный моменты молекулы. Мультипольные моменты.
8. Спин. Физико-химические явления, связанные со спином. Связь спина и статистики. Принцип Паули. Классификация электронных состояний молекулы.
9. Вариационный метод и его приложения: приближение Хартри-Фока, метод конфигурационного взаимодействия. Теорема Купманса
10. Простейшие модели молекулярных орбиталей и описание химической связи. Методы учета электронной корреляции.
11. Простейшие модели электронного строения молекул. Теория Гиллеспи.
12. Колебательные состояния молекул. Гармоническая и ангармонические модели сил в молекуле.
13. Спин-орбитальное и спин-спиновое взаимодействия. Взаимодействие молекулы с электромагнитным полем в присутствии внешних полей.
14. Кристаллические системы. Основные представления теории кристаллов. Симметрия кристаллов. Зонная структура спектра кристаллических веществ.

15. Симметрия в молекулярных задачах. Точечная и перестановочная симметрия волновых функций.
16. Принципы построения аддитивных схем для расчета свойств молекул.

Раздел 2:

1. Общие и частные условия фазовых равновесий (с выводом).
2. Использование общих или частных условий равновесия при расчете фазовой диаграммы двухкомпонентной системы (любого типа)
3. Общие и частные условия химических равновесий (с выводом). Химическая переменная.
4. Константа равновесия, расчёт с использованием справочных данных и методами статистической термодинамики (для газофазных процессов).
5. Факторы, определяющие численное значение константы равновесия. Влияние растворителя на выход целевого продукта.
6. Химический потенциал компонента для различных типов растворов (идеальных, реальных, газовых и конденсированных).
7. Способы экспериментального определения относительного химического потенциала реального конденсированного раствора (конкретный пример).
8. Расчет химического потенциала методами статистической термодинамики.
9. Симметричная и асимметричная система сравнения в термодинамике растворов. Коэффициент активности при предельном разведении, использование при решении практических задач.
10. Термодинамические модели растворов. Основные требования к термодинамическим моделям.
11. Устойчивость фаз переменного состава как частный случай применения теории устойчивости термодинамических систем
12. Описание растворов с помощью уравнений состояния. Вириальное уравнение состояния в феноменологической и статистической термодинамике.
13. Адсорбция, общие понятия. Расчеты адсорбционных процессов с использованием методов статистической термодинамики.
14. Микроканонический, канонический и большой канонический ансамбли Гиббса. Сравнительная характеристика

Раздел 3:

- 3.1. Основные понятия феноменологической кинетики.
- 3.2. Кинетический закон действующих масс.
- 3.3. Кинетика сложных реакций.
- 3.4. Колебательные реакции. Фазовый портрет процесса. Реакция Белоусова-Жаботинского.
- 3.5. Основные пути активации молекул. Обмен энергией при упругих и неупругих столкновениях.
- 3.6. Поверхность потенциальной энергии. Экспериментальные и расчетные методы построения. Метод молекулярных пучков.
- 3.7. Катализ и равновесие. Промежуточные соединения в катализе; принцип энергетического соответствия. Снижение энергии активации как главный фактор каталитического ускорения реакций.
- 3.8. Ферментативный катализ. Структура ферментов, адсорбционные и каталитические центры. Коферменты. Конформационные эффекты.
- 3.9. Гетерогенный катализ. Активные центры, неоднородность поверхности. Кислотно-основной и окислительно-восстановительный гетерогенный катализ.
- 3.10. Кинетика гетерогенных каталитических реакций.
- 3.11. Размерные эффекты в гетерогенном катализе.
- 3.12. Нанокатализ. Критерии отнесения материальных объектов к «нано».

Вопросы для контроля текущей успеваемости

Блок 1:

1. Оценить напряженность внешнего электрического поля, при которой изучение ориентации диполя, образованного зарядами, по модулю равными заряду электрона, разнесенными на расстояние 1.5 Ангстрём, нельзя проводить, ограничиваясь первыми членами разложения больцмановской экспоненты.
2. Описать (объяснить на предлагаемых преподавателем примерах) возможные различия спектров, полученных методами γ -резонансной (мессбауэровской) спектроскопии для соединений железа в степенях окисления +2 и +3.
3. Описать качественные изменения рентгеноэлектронного спектра в гомологическом ряду солей карбоновых кислот.
4. В чем состоят и по каким причинам могут нарушаться правила Каши, Вавилова, Левшина?
5. Описать изменения колебательного спектра молекул в системах H_2O , HDO , D_2O (NH_3 , NH_2D , NHD_2 , ND_3).
6. Для заданной двухатомной молекулы с помощью стандартных справочных данных определить колебательно-вращательный уровень, наиболее заселенный при комнатной температуре.
7. Для системы двух эквивалентных частиц со спином $\frac{1}{2}$ во внешнем магнитном поле в учебниках часто приводятся рисунки энергетических уровней и соответствующие значения квантовых чисел. Чем и почему такие рисунки различаются при обсуждении ЯМР и ЭПР-спектров?
8. Какие квантовые числа описывают вращательные состояния молекул типа сферического волчка? Какое состояние наиболее заселено при заданной температуре? Почему найденное выражение не совпадает с тем, которое получается для двухатомной молекулы (“задача о свободном ротаторе”)?
9. Объясните, почему газообразные азот и кислород бесцветны, а интенсивность окраски газообразных галогенов меняется с ростом номера элемента.
10. Описать зависимость энергии взаимодействия двух диполей (заряда и диполя, двух квадрупольей) в зависимости от их взаимной ориентации.
11. Почему в случае систем в электрическом поле нет аналогов диа- и пара-магнетиков?
12. Рассмотреть задачу о свободном движении частицы по окружности. Как можно соотнести строение энергетического спектра этой задачи с явлением ароматичности?

Блок 2:

1. В чем основная задача феноменологической термодинамики.
2. В чем основная задача статистической термодинамики
3. Какие основные постулаты феноменологической термодинамики
4. Какие основные постулаты статистической термодинамики
5. В чем заключается эргодическая гипотеза.
6. В чем принципиальная разница между работой и изменением энергии Гиббса.
7. Какой доступный для молекулы объем фазового МЮ пространства
8. Когда и почему вводятся дополнительные внутренние переменные
9. Что такое статистический ансамбль. Какие вам известны.
10. Когда и зачем вводится химическая переменная.
11. Условия химического равновесия.
12. Что такое микро и макро состояния системы.

Блок 3:

1. Порядок химической реакции

- всегда положительное число

☐

- может быть отрицательным

☐

- всегда целое число

☐

- все три утверждения неверны

☐

2. Молекулярность элементарной химической реакции

- всегда целое неотрицательное число

☐

- может быть отрицательным числом ☐
- может быть нецелочисленной величиной ☐
- все три утверждения неверны ☐
- 3. Время полупревращения реагента с увеличением его начальной концентрации
 - всегда растет ☐
 - всегда снижается ☐
 - может возрастать ☐
 - все три утверждения неверны ☐
- 4. Наблюдаемая константа скорости при повышении температуры
 - всегда растет ☐
 - может уменьшаться ☐
 - оба утверждения неверны ☐
- 5. Истинная энергия активации
 - всегда положительна ☐
 - может быть отрицательной ☐
 - оба утверждения неверны ☐
- 6. Наблюдаемая энергия активации
 - всегда отрицательна ☐
 - всегда положительна ☐
 - может быть отрицательной ☐
 - все три утверждения неверны ☐
- 7. В последовательной реакции $A \rightarrow B \rightarrow R$ максимальный выход промежуточного вещества B составляет менее 50%. Следовательно, соотношение констант скорости таково, что
 - $k_1 < k_2$ ☐
 - $k_1 > k_2$ ☐
- 8. В двух параллельных реакциях $A \rightarrow X$, $2A \rightarrow Y$, имеющих первый и второй порядок реакции по реагенту A, соответственно, отношение выходов продуктов $[X]/[Y]$
 - не зависит от времени ☐
 - уменьшается со временем ☐
 - увеличивается со временем ☐
- 9. Реакция образования HCl из H_2 и Cl_2 протекает со взрывом, так как это
 - разветвленная цепная реакция ☐
 - высокоэкзотермическая реакция ☐
 - оба утверждения неверны ☐
- 10. Второй предел воспламенения смеси H_2 и O_2
 - зависит от материала реактора ☐
 - не зависит от примесей инертных веществ ☐
 - оба утверждения неверны ☐
- 11. Наблюдаемая скорость химической реакции
 - всегда увеличивается с температурой ☐
 - может уменьшаться с температурой ☐
 - оба утверждения неверны ☐
- 12. Истинная энергия активации
 - всегда положительна ☐
 - может быть отрицательной ☐
 - оба утверждения неверны ☐
- 13. Для элементарной химической реакции $A + BC \rightarrow AB + C$ координата реакции - это
 - межъядерное расстояние AB ☐
 - межъядерное расстояние BC ☐
 - разность расстояний AB и BC ☐
 - все три утверждения неверны ☐

14. Путь реакции - это
- то же, что и координата реакции ☐
 - траектория системы по ППЭ ☐
 - траектория системы по ППЭ, соответствующая минимальной потенциальной энергии ☐
 - все три утверждения неверны ☐
15. Величина критической энергии E_0 , входящая в уравнение ТАК - это
- разность суммы энергий образующихся и разрывающихся связей ☐
 - разность нулевых колебательных уровней активированного комплекса и реагентов ☐
 - разность стандартных свободных энергий образования ☐
 - все три утверждения неверны ☐
16. Стандартная свободная энергия активации
- всегда отрицательна ☐
 - может быть отрицательной ☐
 - оба утверждения неверны ☐
17. Величина критической энергии E_0 в теории активированного комплекса
- всегда отличается от аррениусовской ☐
 - может совпадать с ней ☐
 - всегда совпадает с ней ☐
 - все три утверждения неверны ☐
18. Для бимолекулярной реакции было найдено, что предэкспонента пропорциональна T^{-1} ; следовательно, активированный комплекс
- имеет линейную структуру ☐
 - имеет нелинейную структуру ☐
 - может иметь линейную структуру ☐
 - все три утверждения неверны ☐
19. Поверхность потенциальной энергии имеет "раннюю" седловую точку (ППЭ притяжения), поэтому образующиеся продукты сильно экзотермической реакции будут
- колебательно-возбужденными ☐
 - иметь избыточную кинетическую энергию ☐
 - оба утверждения неверны ☐
20. Кинетический изотопный эффект (КИЭ) обусловлен тем, что изотопно-замещенные молекулы различаются
- энергией разрываемой связи D_e ☐
 - нулевой колебательной энергией ☐
 - оба утверждения неверны ☐
21. Каталитическая реакция
- всегда включает только одну элементарную стадию ☐
 - никогда не протекать в одну стадию ☐
 - оба утверждения неверны ☐
22. В случае общего кислотного катализа истинная константа скорости реакции
- линейно зависит от pH раствора ☐
 - нелинейно зависит от pH раствора ☐
 - оба утверждения неверны ☐
23. В случае специфического кислотного катализа логарифм наблюдаемой константы скорости является линейной функцией
- величины pH среды ☐
 - концентрации ионов гидроксония ☐
 - концентрации гидроксил-ионов ☐
 - все три утверждения неверны ☐
24. При повышении концентрации серной кислоты в её водном растворе функция кислотности Гаммета раствора снижается на две единицы; поэтому скорость реакции в этом растворе

- уменьшится в 2 раза ☐
- увеличится в 100 раз ☐
- оба утверждения неверны ☐

25. При добавлении аммиака к водному раствору цианидного комплекса переходного металла его полоса поглощения

- сдвинется в "красную" сторону ☐
- сдвинется в "фиолетовую" сторону ☐
- положение полосы не изменится ☐

26. Лимитирующая стадия двухсубстратной реакции, катализируемой высокоспиновыми тетраэдрическими комплексами Fe (II) и Ni (II) - это вхождение обоих реагентов в координационную сферу металла. Поэтому

- первый комплекс активнее второго ☐
- второй комплекс активнее первого ☐
- их активности практически одинаковы ☐

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 не принципиального характера)	Успешное и систематическое умение применять знания о современном состоянии физической химии для решения научных задач
Навыки (владения)	Отсутствие навыков использования современного	Наличие навыков использования	В целом, сформированные навыки	Сформированные навыки использования

	аппарата физической химии для решения конкретных задач	современного аппарата физической химии, не всегда верно используемых	использования современного аппарата физической химии, но не в активной форме	современного аппарата физической химии для решения конкретных задач
--	--	--	--	---