

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ И ГОРЕНИЯ ИМ. В.В. ВОЕВОДСКОГО
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

“УТВЕРЖДАЮ”

Зам. директора по научной работе

д.ф-м.н., профессор Пуртов П.А.



16 сентября 2016 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ (МОДУЛЬ)

04.06.01 Химические науки

(код и наименование направления подготовки)

Исследователь. Преподаватель-исследователь

Квалификация (степень) выпускника

Курс: 1,2,3 семестры: 2,3,4,5,6

№	Вид деятельности	Семестр				
		2	3	4	5	6
1	Всего зачетных единиц (кредитов)	1	5	4	6	2
2	Всего часов	36	180	144	216	72
3	Всего занятий в контактной форме, час	14	96	91	95	49
4	Лекции, час.		72	72	72	18
5	Практические занятия, час.	8	8	8	8	18
6	Лабораторные занятия, час					
7	из них в активной и интерактивной форме, час.					
8	Аттестация, час	2	6	4	6	4
9	Консультации, час.	2	10	7	9	9
10	Самостоятельная работа, час.	22	120	53	157	23
11	Виды самостоятельной работы (курсовой проект, курсовая работа, РГЗ, подготовка к контрольной работе)	РГЗ	РГЗ	РГЗ	РГЗ	РГЗ
12	Вид аттестации	3	3	3	3	К

Новосибирск 2016

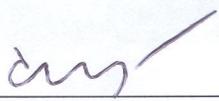
Рабочая программа составлена на основании:

- федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению: 04.06.01 Химические науки (ФГОС введен в действие приказом №867 от 30.07.2014 г.)

Место дисциплины в структуре учебного плана: БЗ

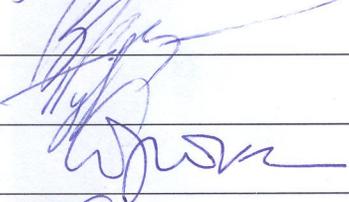
Рабочая программа переутверждена на Ученом совете ИХКГ СО РАН, протокол №3 от 16 сентября 2016 г.

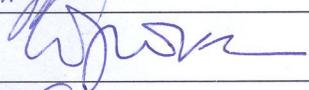
Программу разработали:

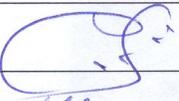
к.ф.-м. н., доцент Глебов Е.М. 

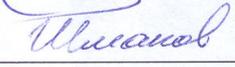
к.х.н. Мельников А.Р. 

д.х.н., профессор Плюснин В.Ф. 

д.ф.-м.н., профессор Пуртов П.А. 

к.х.н., доцент Сорокин Н.И. 

к.ф.-м.н., доцент Стась Д.В. 

к.х.н., доцент Шмаков А.Г. 

Ответственный за образовательную программу:

д.ф.-м.н., проф. Пуртов П.А. 

1. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)

Таблица 1.1

Компетенция ФГОС	Результат обучения (полученные умения и знания)
Способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1)	З1 - иметь представление об основных фундаментальных явлениях и эффектах, современном состоянии, теоретических работах и результатах экспериментальных исследований в области современной физической химии
Способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знания в области истории и философии науки (УК-2)	У2–уметь выбирать необходимые методы исследования, модифицировать существующие и разрабатывать новые методы исходя из задач конкретного исследования по специальности;
Готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач (УК-3)	У1 - иметь опыт представления материалов исследований в виде докладов и рефератов, в том числе, с привлечением современных средств редактирования и печати.
Готовность использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языках (УК – 4)	У-4 – уметь использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языках .
Способность планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития(УК-5)	У2–уметь выбирать необходимые методы исследования, модифицировать существующие и разрабатывать новые методы исходя из задач конкретного исследования по специальности;
Способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1)	З2- знать основные базовые методы проведения физико-химических экспериментов в физической химии З3 - знать основные области и методы химической радиоспектроскопии для научных исследований
Готовностью к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования (ОПК-2)	У3- иметь опыт подготовки и ведения семинарских занятий в рамках научно-исследовательской и научно-педагогической деятельности в учебных лабораториях;
Способность организовать работу исследовательского коллектива по проведению научных исследований в профессиональной области (ОПК-3)	У4 - уметь формулировать и ставить задачи, возникающие в ходе научно-исследовательской деятельности;
Способность к теоретическим исследованиям в области химической физики, физической химии (ПК-1)	З4 - знать теоретические основы строения вещества; У5 - владеть понятиями неорганической и органической химии; У6 - владеть основами спектроскопических методов изучения строения и свойств вещества

Способность разрабатывать теоретические модели и выполнять численное моделирование физико-химических процессов в классических и квантовых системах (ПК-2)	35 - знать основные понятия об электронном строении атомов и молекул; 36 - знать систематику термов двухатомных и многоатомных молекул; 37 – знать вариационные методы и метод молекулярных орбиталей (МО); 38 - знать о колебательных переходах в спектрах инфракрасного (ИК) поглощения и комбинационного рассеяния (КР), правила.
---	---

2. Содержание и структура учебной дисциплины (модуля)

Таблица 2.1

Темы занятий	Лекции, час.	Практические занятия (семинары), час	Лабораторные работы, час.	Самостоятельная работа	Из них в активных формах, час	Учебная деятельность
Семестр 2: дисциплина «Современные проблемы физической химии»						Занятия проводятся в форме семинара. Студенты делают заранее подготовленный доклад. После чего происходит обсуждение вопросов.
Современные проблемы в химической кинетике		8		28		
Семестр 3: дисциплина «Современные проблемы физической химии»						
Современные проблемы химической радиоспектроскопии		8		29		
Семестр 4: дисциплина «Современные проблемы физической химии»						
Современные проблемы фотохимии		8		30		
Семестр 5: дисциплина «Современные проблемы физической химии»						
Современные проблемы в горении		8		30		
Семестр 3: дисциплина «Химическая кинетика»						
Дидактическая единица: Основные принципы химической кинетики Основные понятия химической кинетики						
Основные понятия химической кинетики	2					
Дидактическая единица: Теория скоростей элементарных химических реакций						

Кинетика простых реакций	4			2		Подготовка письменной работы по теме 1
Кинетика сложных реакций	10			6		Подготовка письменной работы по темам 2, 3, 4
Использование теории активированного комплекса	6			4		Подготовка письменной работы по теме 5
Особенности кинетики реакций в конденсированных средах	2			1		Подготовка письменной работы по теме 6
Дидактическая единица: Кинетические закономерности для реакций с иницированием и каталитических реакций. Релятивистская оптика						
Гомогенный катализ	2			1		Подготовка письменной работы по теме 7
Гетерогенный катализ	6			6		Подготовка письменной работы по теме 8
Автокаталитические реакции	2			2		Подготовка письменной работы по теме 9
Дидактическая единица: Цепные процессы и тепловой взрыв						
Неразветвленные и разветвленные цепные реакции и реакции с энергетическим разветвлением.	2			2		Подготовка письменной работы по теме 10
Семестр 3: дисциплина «Неравновесные процессы в химии и биологии»						
Дидактическая единица: Основные понятия неравновесной термодинамики						
Второе начало термодинамики. Производство энтропии и поток энтропии. Принцип локального равновесия	2			2		обсуждение теоретического материала
Принцип взаимности Онзагера и принцип симметрии Кюри - Пригожина. Теорема Пригожина. Общий критерий эволюции Гленсдорфа – Пригожина. Кинетический потенциал	2			2		
Дидактическая единица: Применение идей неравновесной химической термодинамики						
Косвенное взаимодействие необратимых процессов в стационарном состоянии	2			2		обсуждение теоретического материала

Модель Лотка-Вольтерра, затухающие колебания. Устойчивость стационарных состояний. Множественность стационарных состояний. Избыточное производство энтропии. Термодинамический критерий нарушения устойчивости.	2			2		
Тепловой взрыв	2			2		
Перенос ионов через биологические мембраны. Модель Ходжкина – Хаксли.	2			2		
Цепные реакции с вырожденным разветвлением.	2			2		
Дидактическая единица: Колебания в химических реакциях						
Брюсселятор. Реакция Белоусова – Жаботинского, реакция Бриггса – Раушера. Орегонатор.	4			2		обсуждение теоретического материала
Семестр 3: дисциплина «Химия и физика горения»						
Дидактическая единица: Основные понятия теории горения						
Классификация процессов горения. Основные определения и соотношения, используемые в теории горения. Расчет равновесных температур и состава продуктов горения. Расчет адиабатической температуры горения. Термодинамическое равновесие газовых смесей	4			2		
Химическая кинетика. Роль диффузии и теплопередачи в процессах горения.	4			2		
Роль диффузии и теплопередачи в процессах горения. Теория распространения пламени в газах	4			2		
Дидактическая единица: Экспериментальные и теоретические методы изучения пламен						
Основы и методы математической теории горения. Численное моделирование процессов горения.	4			2		

Измерение нормальной скорости распространения пламен. Измерение структуры пламен – профили температуры и концентрации веществ в волне горения.	4			2		
Ламинарные диффузионные пламена	6			2		
Горение конденсированных систем, экспериментальные методы исследования	6			2		
Исследование кинетики термического разложения конденсированных веществ как первичного этапа процесса их горения.	4			2		
Семестр 4: дисциплина «Строение вещества»						
Дидактическая единица: Основные представления квантовой механики						
Атом водорода. Уравнение Шредингера. Волновые радиальные и угловые функции. Квантовые числа. Орбитальный момент. Водородоподобные одноэлектронные ионы	2			2		обсуждение теоретического материала
Операторы спина и спиновые функции. Сложение моментов. Тождественность частиц	4			2		
Многоэлектронные атомы. Учет межэлектронного взаимодействия по теории возмущений и с помощью вариационного принципа. Одноэлектронное приближение, самосогласованное поле, методы Хартри и Хартри – Фока. Термы атомов, схемы Рассел – Саундерса и $j-j$ – связей. Волновые функции и энергии термов. Правила Гунда.	4			2		
Дидактическая единица: Основные представления квантовой химии						
Спиновый и орбитальный моменты и связанные с ними магнитные моменты. Атомная спектроскопия, правила отбора для оптических дипольных переходов. Эффекты Зеемана и Пашена – Бака, эффект Штарка. Ридберговские атомы, рентгеновские атомные спектры	4			2		обсуждение теоретического материала

Систематика термов двухатомных молекул. Приближение Борна – Оппенгеймера. Метод Гайтлера – Лондона. Правила отбора для дипольных переходов	4			2		
Вариационные методы и метод молекулярных орбиталей (МО). Теория групп. Применение теории групп для нахождения МО. Метод возмущенных МО. Индексы реакционной способности, индекс локализации	4			1		
Метод МО в приближении Хюккеля (МОХ). Учет гетероатомов в методе МОХ. Использование представлений симметрии при рассмотрении реакционной способности. Правила Вудворда – Гоффмана	4			2		
Дидактическая единица: Теория кристаллического поля и поля лигандов						
Теория кристаллического поля	4			2		
Теория поля лигандов (метод МО) для описания электронной структуры координационных соединений.	4			2		обсуждение теоретического материала
Дидактическая единица: Спектры поглощения и люминесценции						
Классификация электронных переходов. Интенсивность и положение полос поглощения. Колебательная структура электронных переходов, принцип Франка – Кондона. Связь спектров поглощения и люминесценции. Основные законы люминесценции. Флуоресценция и фосфоресценция.	4			2		обсуждение теоретического материала
Поляризация в спектрах поглощения и люминесценции, формула Левшина – Перрена. Механизмы тушения люминесценции, уравнение Штерна – Фольмера, перенос энергии по дипольному и обменному механизмам.	4			2		
Дидактическая единица: Колебательная и вращательная спектроскопия молекул						

Колебания многоатомных молекул. Проявление колебательных переходов в спектрах инфракрасного (ИК) поглощения и комбинационного рассеяния (КР), правила отбора	4			1		обсуждение теоретического материала
Электронно – колебательное взаимодействие, эффект Яна – Теллера. Влияние электронно – колебательного взаимодействия на запрещенные оптические переходы.	4			1		
Вращательные уровни энергии и волновые функции для различных типов молекул. Связь ядерного спина и вращения молекул.	4			1		
Дидактическая единица: Спектроскопия ЭПР						
Условия магнитного резонанса. Интенсивность линий, времена релаксации, насыщение линий. Спин-гамильтониан, константы сверхтонкого взаимодействия (СТВ). Дипольный и контактный механизмы СТВ.	4			1		обсуждение теоретического материала
Ширина линий ЭПР и анализ движений и химических превращений свободных радикалов. Уравнения Блоха и уравнения Мак-Коннела.	4			1		
Анизотропия СТВ и g-фактора. Форма линии в твердых растворах, усреднение анизотропии в жидкости. Метод электронного спинового эха, химическая поляризация электронов, лазерный магнитный резонанс.	4			1		
Дидактическая единица: Спектроскопия ЯМР						
ЯМР спектроскопия, общие закономерности этого метода.	4			1		обсуждение теоретического материала
Спин – спиновое взаимодействие. Связь констант спин-спинового взаимодействия со строением молекул. Проявление обмена в спектрах ЯМР. Спектры ЯМР свободных радикалов. Двойной ядерно-ядерный резонанс, химическая поляризация ядер.	4			1		
Семестр 5: дисциплина «Современные проблемы магнитного резонанса и спиновой химии»						

Дидактическая единица: Основы современной теории магнитного резонанса						
Формализм матрицы плотности. Кинетические уравнения	2			4		
Современные теории релаксации в спектроскопии магнитного резонанса	4			4		
Применения магнитного резонанса	2			4		
Дидактическая единица: Импульсные методы магнитного резонанса						
Свободная индукция и спиновое эхо	4			4		
Двумерная Фурье - спектроскопия.	4			4		
Магнитно-резонансная томография.	2			4		
Дидактическая единица: Современные проблемы спиновой химии						
Влияние магнитного поля в химических реакциях	4			4		
Теория химической поляризации и выстроенности ядер.	4			4		
Теория химической поляризации электронов	4			4		
Химические реакции и квантовая когерентность	6			4		
Семестр 5: дисциплина «Кинетика жидкофазных реакций»						
Дидактическая единица: Введение в кинетику жидкофазных реакций. Структура жидкости						
Формула Дебая-Смолуховского. Вязкость. Уравнение Стокса-	2			2		
Представление о структуре жидкости. Модель трансляционной диффузии Френкеля	4			2		
Дидактическая единица: Межмолекулярные взаимодействия и сольватация						
Парные электростатические взаимодействия: ион-ион, ион- диполь, диполь-диполь (ориентационное взаимодействие).	2			1		
Индукционное взаимодействие. Дисперсионное взаимодействие. Формула Лондона.	4			2		

Сольватация иона. Формула Борна. Диэлектрическое насыщение. Свободная энергия иона в среде электролита. Теория Дебая-Хюккеля. Сольватация дипольной молекулы	10			6		
Дидактическая единица: Диффузионно-контролируемые реакции						
Геминальная рекомбинация	6			6		
Учет анизотропии реагентов Приближение реакционной зоны. Стерический фактор	2			1		
Дидактическая единица: Кинетически-контролируемые реакции						
Влияние свойств среды на константу скорости бимолекулярной реакции. Реакции ионов: $\Delta G_{\text{soln}}^\ddagger$, влияние ионной силы раствора. Реакции дипольных молекул	6			4		
Влияние давления на скорость кинетически-контролируемой реакции.	2			2		
семестр 6: дисциплина «Основы теории элементарных химических реакций»						
Дидактическая единица: Поверхности потенциальной энергии и статистические методы описания элементарного акта						
Основные типы поверхностей потенциальной энергии: поверхности отталкивания и поверхности притяжения. Поверхности с устойчивыми промежуточными состояниями. Особые точки. Пересечения и антипересечения поверхностей	2			1		
Построение поверхности потенциальной энергии с использованием метода валентных связей. Формула Лондона. Методы Лондона-Эйринга-Поляни, Лондона-Эйринга-Поляни-Сато		4		2		
Метод переходного состояния. Основные постулаты метода. Классическая теория.	4	4		2		

Зависимость энергии активации от давления. Теория Райса-Рамспергера-Касселя. Классическая теория Касселя. Квантовый вариант теории Касселя.		2		1		
Мономолекулярные реакции. Схема Линдемана. Модификация Хиншельвуда. Энергия активации и ее зависимость от давления. Теория Слэтера.	2			1		
Теория Райса-Рамспергера-Касселя-Маркуса. Основные постулаты. Фиксированная и текущая энергия. Адиабатические степени свободы.		2		1		
Форма поверхности потенциальной энергии при столкновении трех частиц. Диагонализация гамильтониана и приведение к главным осям. Движение изображающей точки по поверхности потенциальной энергии. Качественные предсказания: корреляционные диаграммы и "химический гистерезис" Дьюара.		2		1		
Дидактическая единица: Введение в стохастические процессы и теорию столкновений						
Эргодическая гипотеза. Интегралы движения. Фазовый портрет	2			1		
Формула Ландау-Теллера. Приближение дышащих сфер. Сравнение с экспериментом. Нарушение принципа детального равновесия в модели Ландау-Теллера		2		1		
Два несвязанных гармонических осциллятора. Случай иррационального соотношения частот	2			1		
Странные аттракторы. Бифуркации и хаос. Проявление хаоса в молекулярной спектроскопии	2			1		

Регулярная и хаотичная динамика. Молекула H_2O . Переход к хаосу в колебательном спектре CS_2 . Бифуркации при изомеризации ОХС–СХО молекул. Бифуркации на поверхностях потенциальной энергии	2			1		
Семестр 6: дисциплина «Фотохимия»						
Дидактическая единица: Общие вопросы теории безызлучательных переходов						
Излучение диполя. Волновая и продольная зоны. Взаимодействие излучения с веществом. Дипольное приближение. Расчет вероятности перехода. Интерпретация дипольных переходов.	2			1		
Затухающий осциллятор. Формы линии и естественная ширина. Доплеровское и столкновительное уширения. Контур Фойгхта. Основные законы фотохимии. Закон Ламберта-Бэра.		4		2		
Приближение Борна-Оппенгеймера. Точность приближения. Кривые потенциальной энергии (Морзе, Гульберта-Гиршфельдера, Дэнгема). Экспериментальное определение. Излучательные переходы в двухатомных молекулах.	4	4		2		
Приготовление когерентного состояния. Выключение взаимодействия в момент перехода. Критерий необратимости Фрида-Джортнера. Модель Биксона-Джортнера.		2		1		
Большие, малые и промежуточные молекулы. Метод матрицы плотности. Двухуровневая система. Импульсный случай. Стационарный случай.	2			1		
Зависимость квантовых выходов от параметров задачи. Антипересечения		2		1		

Излучательные переходы в двухатомных молекулах. Принцип Франка-Кондона. Форма спектра поглощения при возбуждении в континуум	2			1		
Дидактическая единица: Фотохимия двухатомных молекул, малых молекул и классов органических соединений						
Реакции возбужденных атомов: Hg, O, N. Образование и тушение возбужденных атомов кислорода и азота в атмосфере	2			1		
Двухатомные молекулы. Эксимеры. Типы нижних кривых потенциальной энергии двухатомных молекул. Формы спектров флуоресценции эксимерных молекул. Термы эксимеров благородных газов. Лазеры. Основные реакции в разряде	2			1		
Преддиссоциация. Классификация и спектроскопические проявления. Электронная и вращательная преддиссоциация	2			1		
Фотохимия малых молекул: CS ₂ , NO ₂ , O ₃ , SO ₂ , H ₂ CO. Вращательный вклад в преддиссоциацию. Колебательная преддиссоциация. Фотохимия классов органических соединений. Правила корреляции	2			1		
Экспериментальные методы фотохимии	2			1		

3. Самостоятельная работа аспиранта

Виды самостоятельной работы	Часы на выполнение	Часы на консультации
Семестр 3-5 дисциплина «Современные проблемы физической химии»		
Самостоятельное изучение материала, подготовка доклада.	117	13
Семестр 3 дисциплина «Химическая кинетика»		
Подготовка к занятиям: подготовка письменной работы на заданную тему	30	4
Семестр 3: дисциплина «Неравновесные процессы в химии и биологии»		
Подготовка к занятиям: повторение материалов предыдущей лекции и разбор соответствующих задач	16	2
Подготовка к аттестации: подготовка к ответам на экзаменационные билеты и к решению типовых задач	14	2

Семестр 3: дисциплина «Химия и физика горения»		
Подготовка к занятиям: самостоятельное повторение материала изложенного на предыдущей лекции	16	
Подготовка к аттестации: самостоятельное повторение материала изученного на занятиях	4	2
Подготовка реферата	10	2
Семестр 4: дисциплина «Строение вещества»		
Подготовка к занятиям: повторение ранее пройденного материала, подготовка вопросов к профессору.	29	5
Семестр 5: дисциплина «Современные проблемы магнитного резонанса и спиновой химии»		
Подготовка к занятиям: самостоятельное повторение материала изложенного на предыдущей лекции	57	2
Подготовка реферата	10	1
Семестр 5: дисциплина «Кинетика жидкофазных реакций»		
Подготовка к занятиям: самостоятельное повторение материала изложенного на предыдущей лекции	16	
Подготовка к аттестации: самостоятельное повторение материала изученного на занятиях	4	2
Подготовка реферата	10	2
Семестр 6: дисциплина «Основы теории элементарных химических реакций»		
Подготовка к занятиям: самостоятельное повторение материала изложенного на предыдущей лекции	16	
Подготовка к аттестации: самостоятельное повторение материала изученного на занятиях	4	2
Подготовка реферата	10	2
Семестр 6: дисциплина «Фотохимия»		
Подготовка к занятиям: самостоятельное повторение материала изложенного на предыдущей лекции	16	
Подготовка к аттестации: самостоятельное повторение материала изученного на занятиях	4	2
Подготовка реферата	10	2

Семестр 2-5: дисциплина «Современные проблемы физической химии»

Основной формой деятельности аспирантов по дисциплине является самостоятельная проработка тем семинара и подготовка доклада, с помощью основной и дополнительной литературы с привлечением компьютерных средств, а также индивидуальные занятия с преподавателем. Предусмотрено обязательное участие в заседаниях физико-химического семинара ИХКГ СО РАН.

Семестр 3: дисциплина «Химическая кинетика»

Основной формой деятельности аспирантов по дисциплине является самостоятельная проработка конспектов лекций и вопросов, вынесенных на самостоятельное изучение, с помощью основной и дополнительной литературы с привлечением компьютерных средств, а также индивидуальные занятия с преподавателем, направленные на практические исследования по представленным темам.

Семестр 3: дисциплина «Неравновесные процессы в химии и биологии»

К аттестации допускаются обучающиеся, посетившие все лекционные и семинарские занятия или отчитавшиеся за пропущенные занятия письменными работами. При выставлении оценки, помимо ответа на вопросы билета и решения экзаменационной задачи, учитывается качество подготовленного реферата. Освоение компетенций оценивается по двухбалльной шкале «сформирована/ не сформирована». Положительная оценка по дисциплине выставляется в том случае, если заявленные компетенции сформированы в полном объеме в той части, которая соответствует содержанию дисциплины.

Семестр 4: дисциплина «Химия и физика горения». При решении о допуске аспиранта к аттестации принимаются во внимание следующие факторы: регулярность посещения лекций, активность в обсуждении сложных мест в излагаемом материале, характер задаваемых вопросов, активность при самостоятельном изучении материала. При аттестации в процессе непосредственного общения выясняется степень владения материалом, в том числе и усвоенного самостоятельно, понимания физических принципов явлений, границ применимости используемых физических моделей. Оценка выставляется с учётом качества подготовленного реферата.

Семестр 4: дисциплина «Строение вещества»

Основной формой деятельности аспирантов по дисциплине является самостоятельная проработка конспектов лекций и вопросов, вынесенных на самостоятельное изучение, с помощью основной и дополнительной литературы с привлечением компьютерных средств, а также индивидуальные занятия с преподавателем, направленные на практические исследования по представленным темам. В ходе изучения дисциплины используется численное моделирование атомных систем, взаимодействующих с резонансным лазерным излучением.

Семестр 5: дисциплина «Современные проблемы магнитного резонанса и спиновой химии»

Основной формой обучения аспирантов по дисциплине является самостоятельная проработка конспектов лекций с помощью основной и дополнительной литературы с привлечением компьютерных средств, а также консультации с преподавателем.

Семестр 5: дисциплина «Кинетика жидкофазных реакций»

Основной формой деятельности аспирантов по дисциплине является самостоятельная проработка конспектов лекций с помощью основной и дополнительной литературы с привлечением компьютерных средств, а также индивидуальные занятия с преподавателем, направленные на практические исследования по представленным темам.

Семестр 6: дисциплина «Основы теории элементарных химических реакций»

При решении о допуске аспиранта к аттестации принимаются во внимание следующие факторы: регулярность посещения лекций, активность в обсуждении сложных мест в излагаемом материале, характер задаваемых вопросов, активность при самостоятельном изучении материала. При аттестации в процессе непосредственного общения выясняется степень владения материалом, в том числе и усвоенного самостоятельно, понимания физических принципов явлений, границ применимости используемых физических моделей. Оценка выставляется с учётом качества подготовленного реферата.

Семестр 6: дисциплина «Фотохимия».

При решении о допуске аспиранта к аттестации принимаются во внимание следующие факторы: регулярность посещения лекций, активность в обсуждении сложных мест в излагаемом материале, характер задаваемых вопросов, активность при самостоятельном изучении материала. При аттестации в процессе непосредственного общения выясняется степень владения материалом, в том числе и усвоенного самостоятельно, понимания физических принципов явлений, границ применимости используемых физических моделей. Оценка выставляется с учётом качества подготовленного реферата.

5. Технология обучения

Для организации и контроля самостоятельной работы обучающихся, а также проведения консультаций применяются информационно-коммуникационные технологии (табл. 5.1). Таблица 5.1

Деятельность	Информационно-коммуникационные технологии
Информирование	e-mail

Таблица 5.2

Активные и интерактивные формы проведения занятий

Наименование активных форм	Краткое описание применения
Интерактивные лекции	

6. Правила аттестации аспирантов по учебной дисциплине

Семестр 2-5: дисциплина «Современные проблемы физической химии»

Промежуточная аттестация проводится в виде зачета. Зачет выставляется по результатам доклада на основе подготовленного реферата.

Критерии оценивания.

За доклад предусмотрены оценки «Зачтено» и «Не зачтено».

Оценка «зачтено»:

- достаточный уровень оформления реферата;
- умение ориентироваться в теоретических и практических вопросах;
- использование научной терминологии, стилистически и логически верное изложение ответа на вопросы собеседования, умение делать выводы без существенных ошибок.

Оценка «не зачтено»:

- отсутствие реферата или реферат выполнении не по требованиям;
- ответов на вопросы не верные;
- неумение использовать научную терминологию.

Семестр 3: дисциплина «Химическая кинетика»

Промежуточная аттестация проводится в виде зачета. Зачет выставляется по результатам комплексной проверки всех письменных работ.

Критерии оценивания.

Аспирант получает зачтено, если выполнил более 70% письменных работ.

Семестр 3: дисциплина «Неравновесные процессы в химии и биологии»

К аттестации допускаются обучающиеся, посетившие все лекционные и семинарские занятия или отчитавшиеся за пропущенные занятия письменными работами. При выставлении оценки, помимо ответа на вопросы билета и решения экзаменационной задачи, учитывается качество подготовленного реферата. Освоение компетенций

оценивается по двухбалльной шкале «сформирована / не сформирована». Положительная оценка по дисциплине выставляется в том случае, если заявленные компетенции сформированы в полном объеме в той части, которая соответствует содержанию дисциплины.

Критерии оценивания.

По дисциплине предусмотрены оценки «Зачтено» и «Не зачтено».

Оценка «зачтено»:

- достаточный уровень оформления реферата;
- умение ориентироваться в теоретических и практических вопросах;
- на оба вопроса даны ответы, допускается наличие некоторых неточностей.
- использование научной терминологии, стилистически и логически верное изложение ответа на вопросы собеседования, умение делать выводы без существенных ошибок.

Оценка «не зачтено»:

- отсутствие реферата или реферат выполнении не по требованиям;
- ответ хотя бы на один вопрос билета полностью не верный;
- неумение использовать научную терминологию.

Семестр 3: дисциплина «Химия и физика горения»

Промежуточная аттестация проводится в виде зачета. Зачет выставляется по результатам ответов на вопросы с учетом качества подготовленного реферата.

Критерии оценивания.

За доклад предусмотрены оценки «Зачтено» и «Не зачтено».

Оценка «зачтено»:

- достаточный уровень оформления реферата;
- умение ориентироваться в теоретических и практических вопросах;
- использование научной терминологии, стилистически и логически верное изложение ответа на вопросы собеседования, умение делать выводы без существенных ошибок.

Оценка «не зачтено»:

- отсутствие реферата или реферат выполнении не по требованиям;
- ответов на вопросы не верные;
- неумение использовать научную терминологию.

Семестр 4: дисциплина «Строение вещества»

Промежуточная аттестация проводится в виде зачета. Зачет выставляется по результатам ответов на вопросы с учетом качества подготовленного реферата.

Критерии оценивания.

За доклад предусмотрены оценки «Зачтено» и «Не зачтено».

Оценка «зачтено»:

- достаточный уровень оформления реферата;
- умение ориентироваться в теоретических и практических вопросах;
- использование научной терминологии, стилистически и логически верное изложение ответа на вопросы собеседования, умение делать выводы без существенных ошибок.

Оценка «не зачтено»:

- отсутствие реферата или реферат выполнении не по требованиям;
- ответы на вопросы не верные;
- неумение использовать научную терминологию.

Семестр 5: дисциплина «Современные проблемы магнитного резонанса и спиновой химии»

Промежуточная аттестация проводится в виде зачета. Зачет выставляется по результатам ответов на вопросы с учетом качества подготовленного реферата.

Критерии оценивания.

За доклад предусмотрены оценки «Зачтено» и «Не зачтено».

Оценка «зачтено»:

- достаточный уровень оформления реферата;
- умение ориентироваться в теоретических и практических вопросах;
- использование научной терминологии, стилистически и логически верное изложение ответа на вопросы собеседования, умение делать выводы без существенных ошибок.

Оценка «не зачтено»:

- отсутствие реферата или реферат выполнении не по требованиям;
- ответы на вопросы не верные;
- неумение использовать научную терминологию.

Семестр 5: дисциплина «Кинетика жидкофазных реакций»

Промежуточная аттестация проводится в виде зачета. Зачет выставляется по результатам ответов на вопросы с учетом качества подготовленного реферата.

Критерии оценивания.

За доклад предусмотрены оценки «Зачтено» и «Не зачтено».

Оценка «зачтено»:

- достаточный уровень оформления реферата;
- умение ориентироваться в теоретических и практических вопросах;
- использование научной терминологии, стилистически и логически верное изложение ответа на вопросы собеседования, умение делать выводы без существенных ошибок.

Оценка «не зачтено»:

- отсутствие реферата или реферат выполнении не по требованиям;
- ответов на вопросы не верные;
- неумение использовать научную терминологию.

Семестр 6: дисциплина «Основы теории элементарных химических реакций»

Промежуточная аттестация проводится в виде зачета. Зачет выставляется по результатам ответа на вопрос с учетом качества выполнений РГР.

Критерии оценивания.

За зачет предусмотрены оценки «Зачтено» и «Не зачтено».

Оценка «зачтено»:

- задание по РГР выполнено верно;
- ответ на вопрос верный, допускается наличие некоторых неточностей;
- использование научной терминологии, стилистически и логически верное изложение ответа на вопросы собеседования, умение делать выводы без существенных ошибок.

Оценка «не зачтено»:

- отсутствие РГР или РГР выполнена не верно;
- ответ на вопрос не верный;
- неумение использовать научную терминологию.

Семестр 6: дисциплина «Фотохимия»

Промежуточная аттестация проводится в виде зачета. Зачет выставляется по результатам ответа на вопрос с учетом качества выполнений РГР.

Критерии оценивания.

За зачет предусмотрены оценки «Зачтено» и «Не зачтено».

Оценка «зачтено»:

- задание по РГР выполнено верно;
- ответ на вопрос верный, допускается наличие некоторых неточностей;
- использование научной терминологии, стилистически и логически верное изложение ответа на вопросы собеседования, умение делать выводы без существенных ошибок.

Оценка «не зачтено»:

- отсутствие РГР или РГР выполнена не верно;
- ответ на вопрос не верный.

7. Литература

Основная литература

Бакланов А.В. Химическая кинетика, Учебное пособие. Редакционно-издательский центр НГУ, 2009, 100 с.

Дзюба С.А. Основы магнитного резонанса. НГУ, 2010, 293 с.

Плюснин В.Ф. Курс строения вещества. Атомная спектроскопия. Учебное пособие. Новосибирск: Изд. НГУ, 2010. -158 с.

Докторов А.Б. Основы теории элементарных реакций. Учебное пособие. Изд. НГУ, 2010, 167 стр.

О.П. Коробейничев. Физика и химия горения. Учебное пособие, НГУ, 2011, 250 с.

П.А. Пуртов. Неравновесная химическая термодинамика. Учебное пособие, НГУ, 2013, 154 с.

Стась Д.В., Плюснин В.Ф. Квантовая механика молекул. Часть 1. Атом. Новосибирск: Изд. НГУ, 2008. -186 с.

Д.В. Стась, В.Ф. Плюснин. Квантовая механика молекул. Часть 2. Простые молекулярные системы. Учебное издание. Новосибирск, НГУ, 2013, 199 с.

О.П. Коробейничев. Физика и химия горения. Учебное пособие, НГУ, 2011, 250 с.

Плюснин В.Ф. Радиационная химия. Учебное пособие. Новосибирск, НГУ, 2010, 196 стр.

Дополнительная литература

Маррсл Дж., Кетти С., Теддер Дж. Теория валентности. М.: Мир, 1968.

Герцберг Г. Спектры и строение простых свободных радикалов. М.: Л., Физматгиз, 1962.

Физика взрыва / Ф.А. Баум, Л.П. Орленко, К.П. Станюкович и др. М.: Наука, 1975.

Эмануэль Н.М., Кнорре Д.Г. Курс химической кинетики. М.: Высш. школа, 1974.

Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М.: Наука, 1987.

Денисов Е.Т., Саркисов О.М., Лихтенштейн Г.И. Химическая кинетика. М.: Химия, 2000.

Бучаченко А.Л., Сагдеев Р.З., Салихов К.М. Магнитные и спиновые эффекты в химических реакциях. Новосибирск: Наука, 1978.

Термическое разложение и горение взрывчатых веществ и порохов / Г.Б. Манелис, Г.М. Назин, Ю.И. Рубцов, В.А. Струнин. М.: Наука, 1996.

Математическая теория горения и взрыва / Я.Б. Зельдович, Г.И. Баренблатт, В.Б. Либрович, Г.М. Махвиладзе. М.: Наука, 1980.

Переход горения конденсированных систем и взрыв / А.Ф. Беляев, В.К. Боболев и др. М.: Наука, 1973.

Бахман Н.Н., Беляев А.Ф. Горение гетерогенных конденсированных систем. М.: Наука, 1967.

Новожилов Б.Н. Нестационарное горение твердых ракетных топлив. М.: Наука, 1973.

Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.

Ударно-волновые явления в конденсированных средах / Г.И. Канель, С.В. Разоренов, А.В. Уткин, В.Е. Фортов. М.: Янус-К, 1996.

Керрингтон Н., Мак-Лечлан Э. Магнитный резонанс и его применение в химии. М.: Мир, 1970.

Сликтер Ч. Основы теории магнитного резонанса. М.: Мир, 1967.

Эйринг Г., Лин С.Г., Лин С.М. Основы химической кинетики. М.: «Мир», 1983.

Химические лазеры / А.С. Башкин, В.И. Игошин, А.Н. Ораевский, В.А. Щеглов. М.: Наука, 1982.

Замараев К.И., Молин Ю.Н., Салихов К.М. Спиновой обмен. Теория и физико-химические приложения. Новосибирск, 1977.

Вилюнов В.Н. Теория зажигания конденсированных веществ. М.: Наука, 1984.

Льюис Б., Эльбе Г. Горение, пламя и взрывы в газах. М.: Мир, 1968.

Похил П.Ф., Мальцев В.М., Зайцев В.М. Методы исследования процессов горения и детонации. М.: Наука, 1969

Кондратьев В.Н., Никитин Е.Е. Кинетика и механизм газофазных реакций. М.: Наука, 1974.

Курант Р., Фридрикс Н. Сверхзвуковые течения и ударные волны. М.: Изд-во иностр. лит., 1950.

Семенов Н.Н. О некоторых проблемах химической кинетики и реакционной способности. М.: Изд-во АН СССР, 1958.

Зельдович Я.Б., Компанеец А.С. Теория детонации. М.: ГТТИ, 1955.

Щелкин К.И., Трошин Я.К. Газодинамика горения. М.: Изд-во АН СССР, 1963.

8. Методическое и программное обеспечение

8.1 Методическое обеспечение

Гусаченко Л.К., В.Е. Зарко, А.Д. Рычков, С.П. Ивания, В.Н. Гораш. Теория горения и взрыва. Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2007.-120 с.

Плюснин В.Ф., Бажин Н.М., Сорокин Н.И. Краткий курс строения вещества. Сборник задач. Новосибирск, НГУ, 2007, 216 с.

Савинов Е. Н., А. Г. Окунев, К. И. Замираев, В. Н. Панфилов, Ю. Д. Цветков, Д. В. Козлов, В. А. Рогов, В. Н. Пармон. Сборник задач по химической кинетике и катализу // учебное пособие, Новосибирск, 2009.

Пуртов П. А. Лекции по химической термодинамике. Учебное пособие, Новосибирск, НГУ, 2010, 138 стр.

В. А. Рогов, А. Г. Окунев, А. В. Воронцов, А. А. Лысова, А. А. Онищук, В. Н. Панфилов. Химическая кинетика в примерах и задачах. Учебное пособие. НГУ, Новосибирск, 2011, 148 стр.

8.2. Специализированное программное обеспечение и Интернет ресурсы

1. Windows XP Professional.
2. Windows 7 Professional.
3. Office Professional Plus 2007.
4. СПС Консультант Бюджетные организации, СС Консультант Бухгалтер: Вопросы-ответы.
5. ПО Kaspersky Endpoint Security для бизнеса, ПО Kaspersky Security for Mail Server Russian Edition (Антивирус Касперского)
6. Программа просмотра файлов PDF Acrobat Reader (open source license).
7. Интернет – браузеры Mozilla Firefox, Google Chrome, Opera (open source license).

Информационно-поисковые системы:

- Коллекция электронных полнотекстовых книг издательства «Springer»;
- SCIRUS -бесплатная поисковая система издательства Elsevier, ориентированная на поиск только научной информации;
- Google Scholar – полнотекстовый поиск в научных источниках – журналах, тезисах, книгах;
- SciTopics - новый бесплатный интернет-ресурс для ученых и исследователей; представлены самая свежая и самая точная веб-информация и информация из периодики;
- библиографические базы данных: WOS, РИНЦ, "ВИНИТИ", "Current Contents", "Chemical Abstracts", и т.д.;
- библиотека НГУ СО РАН;

-электронный доступ к периодическим и продолжающимся изданиям (более 100 наименований, включая Applied Catalysis, Catalysis Letters, Catalysis Today, Surface Science, ASC –(American Chemical Society); APS –(American Physical Society) .

9. Материально-техническое обеспечение

№	Наименование	Назначение
1	Презентационное оборудование (мультимедиа-проектор, экран, компьютер для управления)	Проведение лекций