

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский
государственный университет» (Новосибирский государственный университет, НГУ)

Физический факультет

Кафедра химической и биологической физики

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Практические вопросы химической физики

направление подготовки: 03.06.01 Физика и астрономия

Курс 1, семестр 2

профиль

Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

Форма обучения: **очная**

Разработчики:

Д.х.н., проф. А. В. Бакланов

Д.х.н, доцент А. А. Онищук

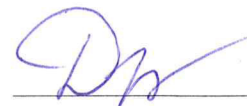
Старший преподаватель, к.х.н. И. П. Поздняков

Старший преподаватель, к.ф.-м.н. А. П. Пыряева

Заведующий кафедрой химической и биологической физики ФФ
д.ф.-м.н., профессор Дзюба С.А.

Ответственный за образовательную программу:

д.ф-м. н., проф. Цыбуля С.В.



Новосибирск 2020

Содержание

Аннотация к рабочей программе дисциплины «Практические вопросы химической физики».....	3
1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.....	3
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.....	6
3. Трудоемкость дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающегося	6
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий.....	7
5. Перечень учебной литературы	8
6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся..	9
7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины	9
8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	9
9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине	10
10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.....	10

Аннотация
к рабочей программе дисциплины «Практические вопросы химической физики»
Направление: 03.06.01 Физика и астрономия
Направленность (профиль): Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

Дисциплина «Практические вопросы химической физики» реализуется в рамках образовательной программы высшего образования – программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре 03.06.01 «Физика и астрономия» профиль подготовки «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества» по очной форме обучения на русском языке. Дисциплина «Практические вопросы химической физики» развивает знания, умения и навыки, сформированные у обучающихся по результатам общей базовой подготовки в рамках программ бакалавриата и магистратуры и не требует знаний по другим дисциплинам подготовки для аспирантов. Курс входит в набор вариативных дисциплин, направленных на подготовку к сдаче экзаменов кандидатского минимума и подготовки научно-квалификационной работы (диссертации), для аспирантов, обучающихся по профилю подготовки «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

Знания:

УК-1.1. Знать актуальные исследования и критически анализировать результаты предшественников и современные достижения в области физики в применении к профессиональной области деятельности.

УК-5.1. Знать возможные направления профессиональной самореализации, владеть приемами планирования и оценки собственной деятельности по решению профессионально-значимых задач.

ОПК-1.1. Знать современные научные методы исследования и информационно-коммуникационные технологии в применении к профессиональной области деятельности.

ПК-1.1. Знать теоретические основы, базовые понятия и модели построения теоретических моделей физических явлений и процессов в зависимости от специфики профиля подготовки и объекта исследования.

ПК-2.1. Знать физические основы базовых экспериментов в зависимости от специфики профиля подготовки и объекта исследования.

Умения:

УК-1.2. Уметь ставить задачи научно-исследовательской деятельности на основе сопоставительного анализа современных достижений физики, в части постановки актуальных задач научных исследований в применении к профессиональной области деятельности и в зависимости от специфики объекта исследования.

УК-5.2. Уметь выявлять и формулировать проблемы собственного профессионального развития.

ОПК-1.2. Уметь определять и применять современные научные методы исследования и информационно-коммуникационные технологии в зависимости от специфики объекта исследования.

ПК-1.2. Уметь ставить задачи научно-исследовательской деятельности на основе сопоставительного анализа современных достижений в зависимости от специфики профиля подготовки и объекта исследования.

ПК-2.2. Уметь определять и применять современные научные методы в зависимости от специфики профиля подготовки и объекта исследования.

Навыки:

УК-5.3. Владеть приемами осознания собственных достижений с целью их совершенствования, достаточными для выполнения научных исследований на современном мировом уровне в применении к профессиональной области деятельности в зависимости от специфики объекта исследования.

ОПК-1.3. Владеть способностью составлять и оформлять научно-технической документацию, научные отчеты, обзоры, доклады и статьи.

Дисциплина имеет своими целями:

- систематизировать базовые знания аспирантов по основным разделам химической физики,
- проверить полноту владения базовыми знаниями по специальности,
- подготовить аспирантов к сдаче кандидатского экзамена по специальности,
- дать аспирантам возможность получить практические навыки в решении задач по химической физике.

Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: практические занятия, доклады обучающихся по тематике, связанной с выполнением их научной работы, индивидуальная работа с преподавателем, самостоятельная работа обучающегося, дифференцированный зачет.

Общий объем дисциплины – 6 зачетных единиц (216 часов).

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Код	Компетенции, формируемые в рамках дисциплины
УК-1. 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-1.1	Знать актуальные исследования и критически анализировать результаты предшественников и современные достижения в области физики в применении к профессиональной области деятельности.
УК-1.2	Уметь ставить задачи научно-исследовательской деятельности на основе сопоставительного анализа современных достижений физики, в части постановки актуальных задач научных исследований в применении к профессиональной области деятельности и в зависимости от специфики объекта исследования.
УК-5. Способность планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития	
УК-5.1	Знать возможные направления профессиональной самореализации, владеть приемами планирования и оценки собственной деятельности по решению профессионально-значимых задач.
УК-5.2	Уметь выявлять и формулировать проблемы собственного профессионального развития, владеть приемами осознания собственных достижений с целью их совершенствования.
УК-5.3	Обладать знаниями, достаточными для выполнения научных исследований на современном мировом уровне в применении к профессиональной области деятельности в зависимости от специфики объекта исследования.
ОПК-1. Способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	
ОПК-1.1	Знать современные научные методы исследования и информационно-коммуникационные технологии в применении к профессиональной области деятельности.
ОПК-1.2	Уметь определять и применять современные научные методы исследования и информационно-коммуникационные технологии в зависимости от специфики объекта исследования.
ОПК-1.3	Владеть способностью составлять и оформлять научно-технической документацию, научные отчеты, обзоры, доклады и статьи.
ПК-1. Способность построения теоретических моделей физических явлений и процессов в области физики в зависимости от специфики профиля подготовки.	
ПК-1.1	Знать теоретические основы, базовые понятия и модели построения теоретических моделей физических явлений и процессов в зависимости от специфики профиля подготовки и объекта исследования.
ПК-1.2	Уметь ставить задачи научно-исследовательской деятельности на основе сопоставительного анализа современных достижений в зависимости от специфики профиля подготовки и объекта исследования.
ПК-2. Способность к решению научных и практических задач в области физики в зависимости от специфики профиля подготовки.	
ПК-2.1	Знать физические основы базовых экспериментов в зависимости от специфики профиля подготовки и объекта исследования.
ПК-2.2	Уметь определять и применять современные научные методы в зависимости от специфики профиля подготовки и объекта исследования.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Практические вопросы химической физики» реализуется в рамках образовательной программы высшего образования – программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре 03.06.01 «Физика и астрономия» профиль подготовки «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества» по очной форме обучения на русском языке. Курс входит в набор вариативных дисциплин, направленных на подготовку к сдаче экзаменов кандидатского минимума, для аспирантов, обучающихся по направленности (профилю) подготовки «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества». Дисциплина «Практические вопросы химической физики» развивает знания, умения и навыки, сформированные у обучающихся по результатам общей базовой подготовки в рамках программ бакалавриата и магистратуры и не требует знаний по другим дисциплинам подготовки для аспирантов.

Дисциплина имеет своими целями:

- систематизировать базовые знания аспирантов по основным разделам химической физики,
- проверить полноту владения базовыми знаниями по специальности,
- подготовить аспирантов к сдаче кандидатского экзамена по специальности,
- дать аспирантам возможность получить практические навыки в решении задач по химической физике.

Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: практические занятия, доклады обучающихся по тематике, связанной с выполнением их научной работы, индивидуальная работа с преподавателем, самостоятельная работа обучающегося, дифференцированный зачет.

Общий объем дисциплины – 6 зачетных единиц (216 часов).

Для освоения дисциплины Практические вопросы химической физики аспирант должен обладать базовыми знаниями по квантовой механике, термодинамике, статистической физике, молекулярной спектроскопии.

Дисциплины (практики), для изучения которых необходимо освоение дисциплины Практические вопросы химической физики:

Кандидатский экзамен по модулю Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

3. Трудоемкость дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающегося

Семестр	Общий объем	Виды учебных занятий (в часах)					Промежуточная аттестация (в часах)					
		Контактная работа обучающихся с преподавателем					Самостоятельная работа, не включая период сессии	Самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации	Контактная работа обучающихся с преподавателем			
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия	Индивидуальная работа с преподавателем/ Консультации в период занятий	Самостоятельная работа, не включая период сессии			Консультации	Зачет	Дифференцированный зачет	Кандидатский экзамен
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	
2	216		32		44	138				2		
Всего: 216 часов /6 зачетных единиц из них: - контактная работа 78 часов												

- в интерактивных формах 76 часов
Компетенции: УК-1, УК-5, ОПК-1, ПК-1, ПК-2

4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)							Консультации перед экзаменом	Промежуточная аттестация (в часах)
			Всего	Аудиторные часы				Сам. работа во время занятий (не включая период сессии)	Сам. работа во время промежуточной аттестации		
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	Индивидуальная работа с преподавателем / Консультации в период занятий				
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
1.	Химическая кинетика	1-5	58		6		12	40			
2.	Химическая термодинамика	5-10	58		6		12	40			
3.	Электронная структура и спектроскопия атомов и молекул	11-16	58		6		12	40			
4.	Научные доклады обучающихся по тематикам их научных исследований	1-16	40		14		8	18			
5.	Дифференцированный зачет	17	2								2
Всего			216		32		44	138			2

В ходе реализации учебного процесса по дисциплине проводятся практические занятия. Практические занятия проводятся в интерактивной форме, подразумевающей со стороны преподавателя постановку проблемы по указанным темам, формулировку некоторых практических заданий и задач, подходы к решению которых должны найти обучающиеся в ходе занятия. Практикуется обсуждение проблемных вопросов, в том числе, с элементами свободной дискуссии с участием обучающихся и преподавателя. На занятиях также заслушиваются доклады обучающихся по заданным темам, сопровождающиеся уточняющими вопросами со стороны преподавателя и других обучающихся. Темы закрепляются в ходе самостоятельной работы обучающегося по решению задач с использованием рекомендованной литературы, а также в процессе научно-исследовательской деятельности.

Задания разделены на три блока в соответствии с разделами дисциплины: химическая кинетика, химическая термодинамика, электронная структура и спектроскопия атомов и молекул.

План практических занятий.

1. Химическая кинетика
 - 1.1. Формальная кинетика
 - 1.2. Мономолекулярные и бимолекулярные реакции
 - 1.3. Теория переходного состояния

- 1.4. Кинетика реакций в жидкости
- 1.5. Цепные реакции
2. Химическая термодинамика
 - 2.1. Основные законы термодинамики. Термохимия
 - 2.2. Термодинамические потенциалы. Химический потенциал
 - 2.3. Термодинамика растворов
 - 2.4. Термодинамика химического и фазового равновесия
 - 2.5. Термодинамика адсорбции и поверхностные явления
3. Электронная структура и спектроскопия атомов и молекул
 - 3.1. Электронная структура атомов и молекул
 - 3.2. Электронная спектроскопия
 - 3.3. Колебательная и вращательная спектроскопия
 - 3.4. Магниторезонансная спектроскопия

Индивидуальная работа с преподавателем

Перечень работ	Объем, час
Обсуждение плана доклада по избранной теме, рекомендации преподавателя относительно литературных источников, которые можно использовать при подготовке доклада, индивидуальные консультации по ходу подготовки доклада.	8
Обсуждение задач, стоящих перед аспирантом в рамках его научно-исследовательской работы, и возможных способов их решения с привлечением различных методов.	36

Самостоятельная работа обучающихся

Перечень занятий на СРС	Объем, час
Самостоятельная подготовка к лекционным и практическим занятиям с использованием учебной литературы. Подготовка доклада по избранной теме. Поиск литературных источников, работа с научным текстом, анализ литературных данных. Подготовка к практическим занятиям. Решение практических заданий.	138

5. Перечень учебной литературы

5.1 Основная литература

1. Онищук А.А. Химическая термодинамика: учебное пособие [в 3 ч.] / А.А. Онищук; М-во образования и науки РФ, Новосиб. гос. ун-т, Физ. фак. — Новосибирск: Редакционно-издательский центр НГУ, 2015.
2. Бакланов А.В. Химическая кинетика: учебное пособие / А.В. Бакланов; Федер. агентство по образованию, Новосиб. гос. ун-т, Физ. фак. — Новосибирск: Редакционно-издательский центр НГУ, 2009. — 99 с.
3. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия. Молекулярная спектроскопия / М. А. Ельяшевич; предисл. Л.А. Грибова. — Изд. 4-е, стер. — Москва: УРСС: КомКнига, 2007. — 527 с.

5.2 Дополнительная литература

4. Дзюба С.А. Основы магнитного резонанса: учебное пособие: [для студентов, аспирантов вузов] / С.А. Дзюба; Федер. агентство по образованию, Новосиб. гос. ун-т. — Новосибирск: Редакционно-издательский центр НГУ, 2010. — 293 с.

6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся

Размещение учебных материалов: Облачное хранилище литературы, методических пособий и списков заданий кафедры ХБФ <http://hf.nsu.ru/study.html>

Обучающийся в аспирантуре должен уметь самостоятельно осуществлять научный поиск литературы, необходимой при подготовке доклада по избранной теме.

Обучающиеся полностью обеспечены необходимой научной литературой за счет фондов библиотеки НГУ (<http://libra.nsu.ru/>). Обучающимся, проходящим практику в Институтах СО РАН, предоставляется доступ к информационным ресурсам на тех же основаниях, что и научным сотрудникам этих институтов на основании договоров о прохождении практической подготовки.

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

Освоение дисциплины используются следующие ресурсы:

- электронная информационно-образовательная среда НГУ (ЭИОС);
- образовательные интернет-порталы;
- информационно-телекоммуникационная сеть Интернет.

Взаимодействие обучающегося с преподавателем (синхронное и (или) асинхронное) осуществляется через личный кабинет студента в ЭИОС.

7.1 Современные профессиональные базы данных:

1. Полнотекстовые журналы Springer Journals за 1997-2020 г., электронные книги (2005-2020 гг.), коллекция научных биомедицинских и биологических протоколов SpringerProtocols, коллекция научных материалов в области физических наук и инжиниринга SpringerMaterials, реферативная БД по чистой и прикладной математике zbMATH.

2. Электронная библиотека диссертаций Российской государственной библиотеки (ЭБД РГБ).

3. Полнотекстовые электронные ресурсы Freedom Collection издательства Elsevier (Нидерланды) (23 предметные коллекции).

4. Электронные ресурсы Web of Science Core Collection (Thomson Reuters Scientific LLC.), Journal Citation Reports + ESI.

5. Электронные БД JSTOR (США). 15 предметных коллекций: Arts & Sciences I, II, III, IV, V, VI, VII, VIII, Life Sciences, Health & General Science, Mathematics & Statistics, Ecology & Botany, Language & Literature, Business I, II.).

6. БД Scopus (Elsevier).

7.2. Информационные справочные системы

Не используются

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

Для обеспечения реализации дисциплины используется стандартный комплект программного обеспечения (ПО), включающий регулярно обновляемое лицензионное ПО Windows и MS Office.

Использование специализированного программного обеспечения для изучения дисциплины не требуется.

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Для реализации дисциплины используются специальные помещения:

1. Учебные аудитории для проведения практических занятий, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.
2. Помещения для самостоятельной работы обучающихся.

Учебные аудитории укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду НГУ.

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется согласно Порядку организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в Новосибирском государственном университете.

10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине

Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине и индикаторов их достижения, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы по дисциплине представлен в разделе 1.

10.1 Порядок проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине

Текущий контроль успеваемости:

Текущий контроль по дисциплине «Практические вопросы химической физики» осуществляется на занятиях на основе проверки заданий для самостоятельного решения. Задания разделены на три блока в соответствии с разделами дисциплины: химическая кинетика, химическая термодинамика, электронная структура и спектроскопия атомов и молекул. Задания сдаются в форме беседы с преподавателем во время практических занятий, преподаватель проверяет правильность решения и задаёт уточняющие вопросы по решению. Текущий контроль успеваемости учитывается в рамках промежуточной аттестации.

Промежуточная аттестация:

Промежуточная аттестация по дисциплине «Практические вопросы химической физики» проводится по итогам завершения программы дисциплины в виде дифференцированного зачета. Для получения положительной оценки необходимо решить и сдать все блоки задач, предлагаемых в рамках проведения программы дисциплины.

Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине Практические вопросы химической физики

Таблица 10.1

Код компетенции	Результат обучения по дисциплине	Оценочное средство
УК-1. Способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях		Работа на практических занятиях Представление доклада Дифференцированный зачет
УК-1.1	Знать актуальные исследования и критически анализировать результаты предшественников и современные достижения в области физики в применении к профессиональной области деятельности.	
УК-1.2	Уметь ставить задачи научно-исследовательской деятельности на основе сопоставительного анализа современных достижений физики, в части постановки актуальных задач научных исследований в применении к профессиональной области деятельности и в зависимости от специфики объекта исследования.	
УК-5 Способность планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития		Работа на практических занятиях Представление доклада Дифференцированный зачет
УК-5.1	Знать возможные направления профессиональной самореализации, владеть приемами планирования и оценки собственной деятельности по решению профессионально-значимых задач.	
УК-5.2	Уметь выявлять и формулировать проблемы собственного профессионального развития.	
УК-5.3	Владеть приемами осознания собственных достижений с целью их совершенствования, достаточными для выполнения научных исследований на современном мировом уровне в применении к профессиональной области деятельности в зависимости от специфики объекта исследования.	
ОПК-1. Способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий		Работа на практических занятиях Представление доклада Дифференцированный зачет
ОПК-1.1	Знать современные научные методы исследования и информационно-коммуникационные технологии в применении к профессиональной области деятельности.	
ОПК-1.2	Уметь определять и применять современные научные методы исследования и информационно-коммуникационные технологии в зависимости от специфики объекта исследования.	
ОПК-1.3	Владеть способностью составлять и оформлять научно-техническую документацию, научные отчеты, обзоры, доклады и статьи.	
ПК-1. Способность построения теоретических моделей физических явлений и процессов в области физики в зависимости от специфики профиля подготовки.		Работа на практических занятиях Представление доклада Дифференцир
ПК-1.1	Знать теоретические основы, базовые понятия и модели построения теоретических моделей физических явлений и процессов в зависимости от специфики профиля подготовки	

	и объекта исследования.	ованный зачет
ПК-1.2	Уметь ставить задачи научно-исследовательской деятельности на основе сопоставительного анализа современных достижений в зависимости от специфики профиля подготовки и объекта исследования.	
ПК-2. Способность к решению научных и практических задач в области физики в зависимости от специфики профиля подготовки.		Работа на практических занятиях Представление доклада Дифференцированный зачет
ПК-2.1	Знать физические основы базовых экспериментов в зависимости от специфики профиля подготовки и объекта исследования.	
ПК-2.2	Уметь определять и применять современные научные методы в зависимости от специфики профиля подготовки и объекта исследования.	

Таблица 10.2

Критерии оценивания результатов обучения	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Уровень освоения компетенции			
		Не сформирован (0 баллов)	Пороговый уровень (3 балла)	Базовый уровень (4 балла)	Продвинутый уровень (5 баллов)
1	2	3	4	5	6
Полнота знаний	УК 1.1 УК 5.1 ОПК 1.1 ПК 1.1 ПК 2.1	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имеют место грубые ошибки.	Минимально допустимый уровень знаний. Допускается значительное количество негрубых ошибок.	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Допускается несколько негрубых/несущественных ошибок. Не отвечает на дополнительные вопросы.	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Свободно и аргументированно отвечает на дополнительные вопросы.
Наличие умений	УК 1.2 УК 5.2 ОПК 1.2 ПК 1.2 ПК 2.2	Отсутствие минимальных умений. Не умеет решать стандартные задачи. Имеют место грубые ошибки.	Продемонстрированы частично основные умения. Решены типовые задачи. Допущены	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания с негрубыми ошибками или с недочетами.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания в полном

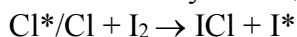
			негрубые ошибки.		объеме без недочетов и ошибок.
Наличие навыков (владение опытом)	УК 5.3 ОПК 1.3	Отсутствие владения материалом по темам/разделам дисциплины. Нет навыков в решении стандартных задач. Наличие грубых ошибок.	Имеется минимальный набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми и недочетами	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач без ошибок и недочетов. Продемонстрированы знания по решению нестандартных задач.

Типовые контрольные задания и иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения

Перечень типовых задач для самостоятельного решения по дисциплине «Практические вопросы химической физики».

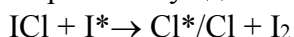
1.1. Задачи по разделу Химическая кинетика

1. Известно, что при возбуждении атома хлора в состояние $^2P_{1/2}$ (Cl^*) константа скорости реакции его с молекулой иода



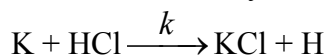
возрастает в 206 раз ($T=300\text{ K}$) по сравнению с реакцией атома хлора в основном состоянии $^2P_{3/2}$ (Cl).

Используя принцип детального равновесия, рассчитайте, какова вероятность образования атома хлора в возбужденном состоянии $^2P_{1/2}$ (Cl^*) в обратной реакции



при той же температуре, если разница в энергии этих состояний составляет $\Delta E = E(^2P_{1/2}) - E(^2P_{3/2}) = 882\text{ см}^{-1}$.

2. Для реакции атома калия K с молекулой хлористого водорода HCl

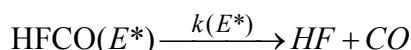


найдена зависимость сечения реакции σ от энергии относительного поступательного движения реагентов E_t следующим образом:

$$\sigma(E_t) = \begin{cases} 0 & \text{при } E_t < E_0 = 1,7 \text{ ккал/моль} \\ \sigma_0 \cdot (1 - E_0/E_t) & \text{при } E_t > E_0, \text{ где } \sigma_0 = 2,3 \cdot 10^{-16} \text{ см}^2. \\ \sigma_0 \cdot (1 - E_0/E_t) & \text{при } E_t > E_0, \text{ где } \sigma_0 = 2,3 \cdot 10^{-16} \text{ см}^2. \end{cases}$$

Рассчитайте константу скорости k этой реакции при $T=300\text{ K}$. Распределение по скоростям относительного движения реагентов описывается максвелловской функцией распределения. Массу атома хлора положить равной массе изотопа Cl^{35} .

3. Используя квантовый и классический варианты теории Касселя, рассчитать константу скорости мономолекулярного распада молекул формилфторида $HFCO$, имеющих фиксированную колебательную энергию E^* .



Величина активационного барьера этой реакции составляет $E_0 \approx 40$ ккал/моль ≈ 14000 см⁻¹. Молекула HFCO-нелинейная. Волновые числа колебаний молекулы положить одинаковыми и равными $\bar{\nu}_i = \bar{\nu} = 1000$ см⁻¹. Рассмотреть два варианта, при которых энергия возбуждения E^* молекулы превышает активационный барьер E_0 на 1000 и 5000 см⁻¹. Фактор вырождения пути реакции равен $L^\# = 1$.

4. Для реакции $\text{O} + \text{HCl} \rightarrow \text{OH} + \text{Cl}$ (1)

рассчитано сечение поверхности потенциальной энергии вдоль координаты реакции. Найдены классическая величина активационного барьера $\varepsilon_0^\ddagger = 7.4$ ккал/моль и следующие характеристики переходного состояния: комплекс $(\text{O}-\text{H}-\text{Cl})^\ddagger$ - линейный с расстояниями $r^\ddagger(\text{O}-\text{H}) = 1.14$ Å и $r^\ddagger(\text{H}-\text{Cl}) = 1.44$ Å, и частотами колебаний $\bar{\nu}_1^\ddagger = 484$ см⁻¹, $\bar{\nu}_2^\ddagger = \bar{\nu}_3^\ddagger = 514$ см⁻¹.

Нужно рассчитать константу скорости этой реакции по теории переходного состояния ($k_{\text{ПТС}}$) при температуре $T = 300$ К. Параметры молекулы HCl: $r(\text{H}-\text{Cl}) = 1.44$ Å, $\bar{\nu}_{\text{HCl}} = 2990$ см⁻¹. Массу атома хлора положить равной $m_{\text{Cl}} = 35$ а.е.м..

Кратность вырождения основного электронного состояния для активированного комплекса $g_{\text{эл}}^\ddagger$ принять равной кратности вырождения для основного электронного состояния реагентов.

Определить температурную зависимость предэкспонента константы скорости в пренебрежении вкладом колебательных статсумм. Какую температурную зависимость предсказывает теория переходного состояния для треугольного активированного комплекса.

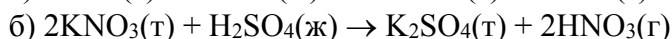
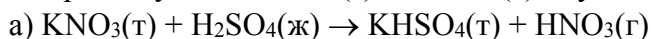
5. В результате действия фотолизующего импульса в водном растворе появляется органическая кислота AH в концентрации $[\text{AH}]_0 = 10^{-3}$ моль/л. В растворе происходит обратимая диссоциация кислоты на ионы



Найдите равновесное значение pH. Рассчитайте кинетику и оцените время установления кислотного равновесия (1), если считать, что образование кислоты AH в результате фотолиза происходит мгновенно. Константа равновесия (1) равна $K_a = 10^{-5}$ моль/л ($\text{p}K_a = 5$). Также известно, что обратная реакция с константой скорости k_{-1} является диффузионно-контролируемой (коэффициенты диффузии $D(\text{H}^+) = 9.3 \cdot 10^{-5}$ см²/с и $D(\text{A}^-) = 1 \cdot 10^{-5}$ см²/с, реакционный радиус $R_{\text{AH}} = 3$ Å).

1.2. Задачи по разделу Химическая термодинамика

1. При получении $\text{HNO}_3(\text{г})$ из $\text{KNO}_3(\text{т})$ идут две реакции:



Сколько выделится (или поглотится) тепла при получении 1 кг $\text{HNO}_3(\text{г})$, если 80 % ее образуется по первой реакции, а стандартные энтальпии образования соединений равны (в Дж моль⁻¹):

$\text{KNO}_3(\text{т})$	$\text{H}_2\text{SO}_4(\text{ж})$	$\text{HNO}_3(\text{г})$	$\text{KHSO}_4(\text{т})$	$\text{K}_2\text{SO}_4(\text{т})$
-492,5	-814,0	-133,9	-1146,4	-1433,7

2. В 1 кг воды при 0 °C положили кусок железа весом 0.5 кг, нагретый до 100 °C. Как изменится энтропия этих веществ и суммарная энтропия системы, если систему считать изолированной от окружающей среды.

Теплоемкости воды и железа равны соответственно 4.184 и 0.447 Дж г⁻¹ К⁻¹.

3. Изменение энергии Гиббса в результате испарения воды при 95°C и 1 атм равно $546 \text{ Дж}\cdot\text{моль}^{-1}$. Рассчитайте энтропию паров воды при 100°C , если энтропия жидкой воды равна $87.0 \text{ Дж}\cdot\text{моль}^{-1}\text{K}^{-1}$. Считать пар идеальным газом. Теплоемкость жидкой воды считать независимой от температуры и равной $4.21 \text{ Дж}\cdot\text{кг}^{-1}$.
4. Плотность хлорбензола при нормальной точке кипения (132°C) равна $0.9814 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$ для жидкого и $0.00359 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$ для насыщенного пара. Вычислите теплоту испарения при температуре кипения, если при ней $dP/dT = 20.5 \text{ мм рт. ст.}\cdot\text{K}^{-1}$. Сравните полученную величину с таковой же, если принять, что пар следует законам идеального газа.
5. Давление HCl над 4% (вес) водным раствором HCl при 25°C равно $4.4\cdot 10^{-4}$ Торр. Пользуясь законом Дебая-Хюккеля для сильных электролитов, оценить давление HCl над 2% (вес) раствором HCl .
6. Необратимая монослойная адсорбция молекул водорода на поверхность платины происходит диссоциативно. Рассчитайте, за какое время степень покрытия достигнет величины $\theta = 0,9$ при давлении 10^{-6} торр и $T = 300 \text{ K}$, если плотность адсорбционных центров на поверхности платины $N_0 = 10^{15} \text{ см}^{-2}$, коэффициент прилипания при ударе о поверхность $\varepsilon = 0,001$.

1.3. Задачи по разделу Электронная структура и спектроскопия атомов и молекул

1. Протон попадает в ядро атома трития с мгновенным образованием иона гелия. Оценить вероятность, с которой ион гелия окажется в возбужденном состоянии.
2. Найти волновые функции основного терма конфигурации $2s^1 2p^1$ в случае LS и j-j связи.
3. Найти термы конфигурации p^3 в случае LS и j-j связи, построить корреляцию термов.
4. Определить количество и тип молекулярных термов, которые могут возникнуть при сближении двух атомов азота в состояниях: а) $\text{N}(^2\text{P})$ и $\text{N}(^2\text{D})$, б) $\text{N}(^2\text{P})$ и $\text{N}(^2\text{P})$.
5. Определить изменение энергии разрешенных π - π электронных переходов в молекуле бензола при введении CH_3 заместителя. Считать, что заместитель не меняет группу симметрии.
6. Определить по теории возмущений места преимущественной атаки молекулы гидроксоциклобутана электрофилом, радикалом и нуклеофилом. Считать параметры k и h для OH группы равными единице, а число электронов на орбитали заместителя равным два. Сравнить результат по ТВ с решением по методу МОХ.

Оценочные материалы по промежуточной аттестации, предназначенные для проверки соответствия уровня подготовки по дисциплине требованиям СУОС, хранятся на кафедре-разработчике РПД в печатном и электронном виде.