



МИНОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего профессионального образования

«ДАГЕСТАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
ДГУ

**Учебно-метод компл....**

**Специальность 020201 «Фундаментальная и прикладная химия»**

Квалификация (степень) выпускника - **специалист**

Нормативный срок освоения 5 лет

Форма обучения – очная

Махачкала 2011 г.

согласовать: как на ваших

## Содержание

	Стр.
1. Общее положение.....	3
2. Список рекомендуемых специализаций подготовки выпускников по специальности 020201-химия.....	3
3. Требования к результатам освоения основной образовательной программы.....	4
4. Учебный план.....	4
5. Примерные программы дисциплин.....	11
6. Требования к итоговой государственной аттестации выпускников..	22

## 1. Общее положение

Основная образовательная программа высшего профессионального образования (ООП ВПО) по специальности 020200 «Фундаментальная и прикладная химия» является системой учебно-методических документов, сформированной на основе положений Федерального закона № 309 – ФЗ «О внесении изменений в отдельные законодательные акты Российской Федерации в части изменения понятия и структуры государственного образовательного стандарта» (статья 5, п. б), Федерального государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования подготовки выпускников по специальности 020200-химия (пункт 7.1 раздела «Требования к условиям реализации основных образовательных программ подготовки специалистов) и рекомендаций Департамента государственной политики в образовании Минобрнауки.

Основная образовательная программа (ООП) по специальности 020201-химия является программой подготовки выпускников с высшим профессиональным образованием.

Нормативные сроки освоения: 5 лет.

Квалификация выпускника в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом - специалист

## 2. Список рекомендуемых специализаций подготовки выпускников по специальности 020201-химия

- 020201.01. Неорганическая химия
- 020201.02. Аналитическая химия.
- 020201.03. Органическая химия.
- 020201.04. Физическая химия.
- 020201.05. Электрохимия
- 020201.06. Высокомолекулярные соединения.
- 020201.07. Химия элементоорганических соединений.
- 020201.08. Химия функциональных наноматериалов
- 020201.09. Биоорганическая химия
- 020201.10. Коллоидная химия
- 020201.11. Бионеорганическая химия
- 020201.12. Нефтехимия
- 020201.13. Молекулярная спектроскопия
- 020201.14. Кинетика и катализ
- 020201.15. Медицинская химия
- 020201.16. Квантовая химия
- 020201.17. Химия твердого тела
- 020201.18. Химия окружающей среды, химическая экспертиза и экологическая безопасность

020201.19. Фармацевтическая химия

020201.20. Радиохимия

020201.21. Химия высоких энергий

020201.22. Химическое материаловедение

020201.23. Нанобиоматериалы и нанобиотехнологии

Список утвержден на заседании Пленума УМС по химии 15 октября 2010 года, протокол № 25.

### 3. Требования к результатам освоения основной образовательной программы

Общие, обязательные для всех выпускников по специальности 020201 «Фундаментальная и прикладная химия» компетенции (общекультурные ОК-1 – ОК-21 и профессиональные ПК-1 – ПК-25) приведены в разделе 5. ФГОС.

Список компетенций дополняется учебными заведениями самостоятельно в ходе подготовки выпускников с учетом содержания вариативных дисциплин УЦ ООП С.1 и С.2, а также вариативной части цикла С.3 для реализуемых вузом специализаций подготовки выпускников.

### 4. Учебный план

п/п	Наименование циклов дисциплин и разделов	Общая трудоемкость		Распределение дисциплин по семестрам										Экз. оценка Зачет	Коды компетенций
		в зач. един.	в часах	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10		
				Число учебных недель в семестре											
				18	19	18	19	18	19	18	17	18	19		
С.1	Гуманитарные, социальные и экономические дисциплины	39	1404	+	+	+	+	+	+	+	+	+			ОК-1 ОК-2 ОК-3 ОК-4
	Базовая часть	26	936												ОК-5
	1. Иностранный язык	10	360	+	+	+	+	+							ОК-6 ОК-7
	2. История	4	136	+											ОК-8
	3. Философия	4	136		+										ОК-9
	4. Экономика	4	136			+									ОК-11
	5. История и методология химии	2	54									+			ОК-12 ОК-13



	9.Квантовая химия	3	108								+						
	10 Физические методы исследования	3	108									+					
	11 Кристаллохимия	4	144									+					
	12 Современная химия и химическая безопасность.	5	180											+			
	13.Безопасность жизнедеятельности																
	<b>Вариативная часть программы специализированной подготовки в т.ч. дисциплины по выбору студентов</b>	<b>26</b>	<b>936</b>									+	+	+			
	<b>Курсы вуза</b>	<b>14</b>	<b>504</b>									+	+	+			
	<b>Курсы по выбору студентов</b>	<b>12</b>	<b>432</b>									+	+	+			
<b>С.4</b>	<b>Физкультура</b>	<b>2</b>	<b>400</b>	+	+	+	+	+									ОК-18 ОК-19
<b>С.5</b>	<b>Практики и научно-исследовательская работа</b>	<b>24</b>	<b>864</b>														ОК-5 ОК-6 ОК-7 ОК-8 ОК-9 ОК-10
	1.Химико-технологическая практика	6	216										+				ОК-11 ОК-12
	2.Научная работа в семестрах	9	324			+	+	+	+	+	+	+	+				ОК-13 ОК-14
	3.Преддипломная практика	9	324											+			ОК-15



разделу химии.

5. Вариативная часть цикла С.3 формируется вузами самостоятельно в соответствии с реализуемыми вузом специализациями, список которых утвержден на заседании Пленума УМС по химии 15 октября 2010 года, протокол № 25.

6. Экзамены рассматриваются как вид учебной работы по дисциплине. Трудоемкость, отводимая на подготовку и сдачу экзамена (1 зачетная единица), включена в общую трудоемкость соответствующей дисциплины.

Учебный план вариативной части цикла профессиональных дисциплин через реализуемые вузом специализированные программы подготовки приводится ниже.

**Учебный план вариативной части учебного плана подготовки выпускников по специальности «Фундаментальная и прикладная химия» (специализированная программа «Аналитическая химия»)**

п/п	Наименование циклов дисциплин и разделов	Общая трудоемкость		Распределение дисциплин по семестрам										Экз. Зачет	Коды компетенций *)	
		в зач. един.	в часах	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10			
С.3	<b>Вариативная часть</b> Специализированная программа «Аналитическая химия»)	<b>26</b>	<b>936</b>							+	+	+	+			
	<b>Курсы вуза</b>	<b>18</b>	<b>648</b>								+	+	+			
	1. Введение в специальность	2	72							+						
	2. Метрологические основы химического анализа	2	72								+					
	3. Электрохимические методы анализа	3	108									+				
	4. Спектроскопические методы анализа	3	108									+				
5. Хроматографические методы анализа	4	144									+					





Курсы	Теоретическое обучение	Экзаменационные сессии	Научная работа	Производственная практика	Итоговая Государственная аттестация	Каникулы	Всего
I	37	5	-	-	-	10	52
II	35	5	2	-	-	10	52
III	35	5	2	-	-	10	52
IV	29	5	2	4	-	12	52
V	12	2		6	20	12	52
Итого:	148	22	6	10	20	54	260

Научно-исследовательская работа 4-8 семестры

Производственная практика (химико-технологическая) 8 семестр

Преддипломная 9 семестр

Итоговая государственная аттестация: 10 семестр

Бюджет учебного времени и график учебного процесса составлены исходя из следующих данных (в зачетных единицах)

Теоретическое обучение, включая экзаменационные сессии и занятия физкультурой (400 часов по ФГОС)	246
Практики (химико-технологическая и преддипломная)	15
Научно-исследовательская работа, включая выполнение дипломной работы	37
Итоговая государственная аттестация	2
Итого:	300

#### График учебного процесса подготовки специалистов\*

Курсы	Сентябрь				5	Октябрь			9	Ноябрь				Декабрь				18	Январь			22
	недели 1 - 4					недели 6 - 8				недели 10 - 13				недели 14 - 17					недели 19 - 21			
1	T	T	T	T	T	T	T	T	T	T	T	T	T	T	T	T	T	T	=	::	::	=



ратура. Интенсивные и экстенсивные величины. Обратимые и необратимые процессы. Уравнения состояния. Уравнение состояния идеального газа, газа Ван-дер-Ваальса. Теорема о соответственных состояниях. Вириальные уравнения состояния.

Теплота и работы различного рода. Работа расширения для различных процессов. Первый закон термодинамики. Внутренняя энергия. Энтальпия. Закон Гесса и его следствия. Стандартные состояния и стандартные теплоты химических реакций. Теплота сгорания. Теплоты образования. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Формула Кирхгоффа. Зависимость теплоемкости от температуры и расчеты тепловых эффектов реакций. Таблицы стандартных термодинамических величин и их использование в термодинамических расчетах.

Второй закон термодинамики и его различные формулировки. Энтропия. Уравнение второго начала термодинамики для обратимых и необратимых процессов. Некомпенсированная теплота Клаузиуса и работа, потерянная в необратимом процессе. Обоснование второго начала термодинамики. Теорема Карно - Клаузиуса. Различные шкалы температур.

Энтропия как функция состояния. Изменение энтропии при различных процессах. Изменение энтропии изолированных процессов и направление процесса.

Математический аппарат термодинамики. Фундаментальное уравнение Гиббса. Внутренняя энергия, как однородная функция объема, энтропии и числа молей. Уравнение Гиббса-Дюгема. Термодинамические потенциалы. Соотношения Максвелла и их использование для вывода различных термодинамических соотношений. Уравнение Гиббса – Гельмгольца. Свойства термодинамических потенциалов. Различные формы записи условий термодинамического равновесия. Критерий самопроизвольного протекания процессов.

Связь между калорическими и термодинамическими переменными. Методы вычисления энтропии, внутренней энергии, энтальпии, энергии Гельмгольца и энергии Гиббса.

Химический потенциал. Стандартный химический потенциал. Способы вычисления изменений химического потенциала. Химический потенциал идеального и неидеального газов. Метод летучести. Различные методы вычисления летучести из опытных данных.

### РАСТВОРЫ, ФАЗОВЫЕ РАВНОВЕСИЯ

Растворы различных классов. Различные способы выражения состава раствора. Смеси идеальных газов. Термодинамические свойства газовых смесей. Идеальные растворы в различных агрегатных состояниях и общее условие идеальности растворов.

Давление насыщенного пара жидких растворов. Закон Рауля и закон Генри. Идеальные и неидеальные растворы. Химический потенциал компонента в растворе. Метод активностей. Коэффициенты активности и их определение по парциальным давлениям компонент. Стандартные состояния при

определении химических потенциалов компонент в жидких и твердых растворах. Симметричная и несимметричная системы отсчета.

Термодинамическая классификация растворов. Функция смешения для идеальных и неидеальных растворов. Предельно разбавленные растворы, атермальные, регулярные, растворы и их свойства. Парциальные мольные величины и их определение из опытных данных для бинарных систем. Обобщенное уравнение Гиббса - Дюгема.

Гетерогенные системы. Понятие фазы, компонента, степени свободы. Вывод условия фазового равновесия. Вывод условия мембранного равновесия. Правило фаз Гиббса и его вывод.

Фазовые равновесия в однокомпонентных системах. Уравнение Клапейрона - Клаузиуса и его применение к различным фазовым равновесиям. Диаграммы состояния воды, серы, фосфора и углерода. Фазовые переходы первого рода. Фазовые переходы второго рода.

Фазовые равновесия в двухкомпонентных системах. Коллигативные свойства растворов. Изменение температуры затвердевания различных растворов. Криоскопический метод. Уравнение Шредера. Осмос как пример мембранного равновесия. Уравнения Вант-Гоффа, его термодинамический вывод и область применимости. Равновесие жидкость - пар в двухкомпонентных системах. Равновесные составы пара и жидкости. Различные виды фазовых диаграмм:  $p$ - $x$  ( $T = \text{const}$ ),  $T$ - $x$  ( $p = \text{const}$ ). Термодинамический вывод законов Гиббса - Коновалова. Разделение веществ путем перегонки. Азеотропные смеси и их свойства.

Диаграммы состояния (плавокости) двухкомпонентных систем и их анализ на основе правила фаз. Расслаивание в двухкомпонентных системах.

Трехкомпонентные системы. Треугольник Гиббса.

### ХИМИЧЕСКИЕ И АДСОРБЦИОННЫЕ РАВНОВЕСИЯ

Вывод условия химического равновесия. Химическая переменная. Изотерма Вант-Гоффа. Изменение энергии Гиббса и энергии Гельмгольца при химической реакции. Химическое сродство. Закон действия масс. Стандартная энергия Гиббса химической реакции. Константа равновесия. Различные виды констант равновесия и связь между ними.

Химические равновесия в растворах. Константы равновесия при различном выборе стандартных состояний для участников реакции. Химическое равновесие в разбавленном растворе. Влияние инертного растворителя.

Зависимость констант равновесия от температуры и давления. Уравнение изобары реакции и его термодинамический вывод. Использование различных приближений для теплоемкостей реагентов при расчетах химических равновесий при различных температурах. Приведенные термодинамические потенциалы. Современные методы расчета равновесных составов.

Третий закон термодинамики. Постулат Нернста. Постулат Планка. Расчеты абсолютной энтропии химических соединений.

Явления адсорбции. Адсорбент. Адсорбат. Структура поверхности и пористость адсорбента. Виды адсорбции. Локализованная и делокализован-

ная адсорбция. Мономолекулярная и полимолекулярная адсорбция. Определение адсорбции по Гиббсу. Адсорбция из растворов и газовой фазы. Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Ленгмюра, его термодинамический вывод и условия применимости. Уравнение Генри. Константа адсорбционного равновесия.

Полимолекулярная адсорбция, ее приближенное описание методом Брунауэра - Эмета - Теллера (БЭТ). Вывод уравнения БЭТ. Использование уравнения БЭТ для определения поверхности адсорбентов.

## Модуль 2

### ЭЛЕМЕНТЫ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ

Механическое описание молекулярной системы. Фазовые  $G$  - и  $\mu$ -пространства. Функция распределения Максвелла - Больцмана. Ее использование для вычисления средних скоростей и энергий молекул в идеальных газах.

Статистические средние значения макроскопических величин. Метод ячеек Больцмана. Ансамбли Гиббса. Основные постулаты статистической термодинамики. Плотность вероятности (функция распределения) и ее свойства. Микроканонический ансамбль. Канонический ансамбль.

Функция распределения в каноническом ансамбле. Сумма по состояниям как статистическая характеристическая функция. Статистические выражения для основных термодинамических функций - внутренней энергии, энтропии, энергии Гельмгольца, энергии Гиббса, теплоемкости и химического потенциала.

Молекулярная сумма по состояниям и сумма по состояниям макроскопической системы. Поступательная сумма по состояниям. Составляющие энтропии, внутренней энергии и теплоемкости, обусловленные поступательным движением. Формула Закура - Тетроде.

Вращательная сумма по состояниям для жесткого ротатора. Составляющие для внутренней энергии, теплоемкости, энтропии, обусловленные вращательным движением. Орто- и параводород и их термодинамические свойства. Внутреннее вращение и заторможенное вращение.

Колебательная сумма по состояниям для гармонического осциллятора. Составляющие внутренней энергии, теплоемкости и энтропии, обусловленные колебательным движением. Электронные суммы по состояниям. Расчет констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики.

Межмолекулярные взаимодействия. Статистическая термодинамика реальных систем. Конфигурационный интеграл для реального газа. Метод Урселла-Майера. Статистическое рассмотрение вириального уравнения.

Метод ячеек в статистической термодинамике жидкостей. Расчет энтропии смешения в рамках решеточной модели раствора. Теории теплоемкости Эйнштейна и Дебая.

Точечные дефекты кристаллических решеток. Вакансии. Междоузельные частицы. Равновесные и неравновесные дефекты решеток. Метод наи-

большого слагаемого при вычислении суммы по состояниям для кристаллов с различными видами точечных дефектов. Нестехиометрические соединения и их термодинамическое описание.

### ЭЛЕМЕНТЫ ЛИНЕЙНОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ НЕОБРАТИМЫХ ПРОЦЕССОВ

Описание необратимых процессов в термодинамике. Поток. Силы. Феноменологические законы для скоростей процессов. Производство энтропии. Линейные законы. Связь между сродством и скоростью химической реакции. Перекрестные явления. Принцип Кюри, соотношения Онзагера. Стационарные состояния системы и теорема Пригожина.

## Модуль 3 ХИМИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА

Химическая кинетика - наука о скоростях и механизмах химических реакций. Несоответствие механизмов реакций и их стехиометрических уравнений. Механизм разложения  $N_2O$ ,  $N_2O_5$ , синтеза  $HBr$  и  $HI$ .

Основные понятия химической кинетики. Определение скорости реакции. Кинетический закон действия масс и область его применимости. Порядок реакции. Кинетические кривые. Реакции переменного порядка и изменение порядка в ходе реакции на примере реакции образования  $HBr$ . Молекулярность элементарных реакций. Прямая и обратная задачи химической кинетики.

Необратимые реакции нулевого, первого и второго порядков. Автокатализ. Необратимые реакции порядка  $n$ . Определение констант скорости из опытных данных. Методы определения порядка реакции и вида кинетического уравнения. Время полупревращения и среднее время жизни.

Сложные реакции. Принцип независимости протекания элементарных стадий. Методы составления кинетических уравнений. Обратимые реакции первого порядка. Определение элементарных констант из опытных данных. Параллельные реакции. Последовательные реакции на примере двух необратимых реакций первого порядка.

Кинетический анализ процессов, протекающих через образование промежуточных продуктов. Принцип квазистационарности Боденштейна и область его применимости. Квазиравновесие. Уравнение Михаэлиса - Ментэн. Определение кинетических постоянных этого уравнения из опытных данных. Кинетика каталитических реакций с конкурентным ингибированием.

Цепные реакции. Элементарные процессы возникновения, продолжения, разветвления и обрыва цепей. Длина цепи. Различные методы расчета скорости неразветвленных цепных реакций. Применение метода стационарности для составления кинетических уравнений неразветвленных цепных реакций на примере темнового образования  $HBr$ .

Разветвленные цепные реакции. Кинетические особенности разветвленных цепных реакций. Предельные явления в разветвленных цепных реак-

циях на примере реакции окисления водорода. Полуостров воспламенения. Период индукции. Зависимость скорости реакции на нижнем пределе воспламенения от диаметра сосуда и природы его поверхности. Применение метода квазистационарных концентраций для описания предельных явлений в окрестностях первого и второго пределов воспламенения

Реакции в потоке. Реакторы идеального вытеснения и идеального смешения. Определение кинетических постоянных для различных реакций первого порядка в реакторах идеального смешения и вытеснения.

Колебательные реакции. Схема Лоттка-Вольтерра. Фазовый портрет. Устойчивость стационарного состояния. Точки бифуркации. Реакция Белоусова - Жаботинского.

Зависимость константы скорости химической реакции от температуры. Уравнение Аррениуса. Опытная энергия активации.

Поверхность потенциальной энергии (ППЭ). Поверхность потенциальной энергии для взаимодействия трех атомов водорода. Путь реакции. Переходное состояние. Понятие о современных методах расчета ППЭ.

Метод переходного состояния (активированного комплекса). Свойства активированного комплекса. Статистический расчет константы скорости. Основные допущения теории активированного комплекса и область его применимости. Трансмиссионный коэффициент.

Термодинамический аспект теории активированного комплекса. Энтропия активации. Соотношения между опытной и истинной энергией активации.

Теория соударений в химической кинетике. Ее приближенная и более строгая формулировка. Формула Траутца - Льюиса. Стерический множитель.

Мономолекулярные реакции. Теория активированного комплекса в применении к мономолекулярным реакциям. Область применимости полученных соотношений. Объяснение "повышенных" и "заниженных" значений предэкспоненциального множителя. Теория соударений в применении к мономолекулярным реакциям. Схема Линдемана и ее сопоставление с опытными данными. Причины неточности схемы Линдемана. Поправки Гиншельвуда и Касселя. Понятие о теории РРКМ.

Бимолекулярные реакции. Теория активированного комплекса в применении к бимолекулярным реакциям различного типа. Теория соударений в применении к бимолекулярным реакциям. Сопоставление результатов теории соударений и теории активированного комплекса. Оценка стерического множителя теории активных соударений.

Тримолекулярные реакции. Применение теории активированного комплекса для описания тримолекулярных реакций с участием окиси азота. Теория соударений в применении к тримолекулярным реакциям. Сопоставление результатов обеих теорий.

Реакции в растворах. "Клеточный эффект". Уравнение Бренстеда-Бьеррума. Уравнение Смолуховского.



Фотохимические реакции. Элементарные фотохимические процессы. Принцип Франка-Кондона. Фотохимические активные частицы. Эксимеры, эксиплексы и их свойства. Изменение физических и химических свойств молекул при электронном возбуждении. Квантовый выход. Закон фотохимической эквивалентности Эйнштейна. Закон Ламберта-Бера. Определение кинетических постоянных фотохимических реакций методом стационарных концентраций. Схема Штерна-Фолмера.

#### КАТАЛИЗ

Определение катализа. Общие принципы катализа. Роль катализа в химии. Основные промышленные каталитические процессы. Примеры механизмов каталитических процессов.

Гомогенный катализ. Кислотно-основной катализ. Классификация реакций кислотно-основного типа. Кинетика и механизм реакций специфического кислотного катализа. Функции кислотности Гаммета и их использование для вычисления скорости реакции и кинетических постоянных. Суперкислоты. Твердые кислоты как катализаторы. Кинетика и механизм реакций общего кислотного катализа. Уравнение Бренстеда и его использование в кинетике каталитических реакций. Корреляционные уравнения для энергий активации и теплот реакций. Уравнение Семенова в кинетике радикальных реакций. Специфический и общий основной катализ.

Гетерогенный катализ. Определение скорости гетерогенной каталитической реакции. Различные режимы протекания реакций (кинетическая и внешняя кинетическая области; область внешней и внутренней диффузии). Кинетика Лэнгмюра-Хиншельвуда для реакции на однородной поверхности катализатора. Особенности кинетики и записи константы равновесия в адсорбционном слое. Неоднородность поверхности катализаторов. Кинетика гетерогенно-каталитических реакций с диффузионными ограничениями. Внешняя диффузия (метод равнодоступной поверхности). Кинетика каталитических реакций во внутренней диффузионной области. Решение кинетической задачи Зельдовича-Тиле для необратимой реакции первого порядка. Фактор Тиле и диффузионное торможение. Энергия активации каталитической реакции в кинетической и внутренней диффузионной области.

Металлы как катализаторы. Теория мультиплетов Баландина. Принцип геометрического и энергетического соответствия. Область применения теории мультиплетов. Нанесенные катализаторы. Теория активных ансамблей Кобозева.

#### Модуль 4

#### РАВНОВЕСНЫЕ И НЕРАВНОВЕСНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В РАСТВОРАХ ЭЛЕКТРОЛИТОВ.

Развитие представлений о строении растворов электролитов (Т. Гротгус, М. Фарадей, С. Аррениус, И.А. Каблуков). Основные положения теории Аррениуса. Недостатки этой теории. Соотношение между энергией кристаллической решетки и энергией сольватации ионов в рамках модели Борна. Ион-дипольное взаимодействие как основное условие устойчивости

растворов электролитов. Термодинамическое описание ион-ионного взаимодействия. Понятия средней активности и среднего коэффициента активности; их связь с активностью и коэффициентом активности отдельных ионов. Основные допущения теории Дебая - Гюккеля. Потенциал ионной атмосферы. Уравнения для коэффициента активности в первом, втором и третьем приближении теории Дебая - Гюккеля. Современные представления о растворах электролитов.

Неравновесные явления в растворах электролитов. Потоки диффузии и миграции. Формула Нернста - Эйнштейна. Диффузионный потенциал. Удельная и эквивалентная электропроводность. Числа переноса и методы их определения. Подвижности ионов и закон Кольрауша. Физические основы теории Дебая - Гюккеля - Онзагера; электрофоретический и релаксационный эффекты; эффекты Вина и Дебая - Фалькенгагена. Зависимость подвижности ионов от их природы, от природы растворителя, от температуры и концентрации раствора. Механизм электропроводности водных растворов кислот и щелочей.

#### ТЕРМОДИНАМИКА ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ЦЕПЕЙ.

Условия электрохимического равновесия на границах раздела фаз и в электрохимической цепи. Связь ЭДС со свободной энергией Гиббса. Уравнения Нернста и Гиббса - Гельмгольца для равновесной электрохимической цепи. Понятия поверхностного, внешнего и внутреннего потенциалов; разности потенциалов Гальвани и Вольта.

Понятие электродного потенциала. Классификация электродов и электрохимических цепей. Определение коэффициентов активности и чисел переноса на основе измерений ЭДС.

#### СТРОЕНИЕ ЗАРЯЖЕННЫХ ГРАНИЦ РАЗДЕЛА.

Двойной электрический слой и его роль в кинетике электродных процессов. Электрокапиллярные явления; основное уравнение электрокапиллярности; уравнение Липпмана. Емкость двойного электрического слоя; причины ее зависимости от потенциала электрода. Адсорбционный метод изучения двойного электрического слоя. Модельные представления о структуре двойного слоя. Теория Гуи - Чапмена - Грэма; сходство и различия этой теории с теорией ионной атмосферы Дебая - Гюккеля.

#### ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА

Плотность тока как мера скорости электродного процесса; поляризация электродов. Стадии электродного процесса. Механизмы массопереноса: диффузия, миграция и конвекция. Три основных уравнения диффузионной кинетики и общий подход к решению ее задач. Зависимость тока от потенциала в условиях медленной стационарной диффузии к плоскому электроду. Полярография. Уравнение для тока в теории замедленного разряда; ток обмена и перенапряжение. Зависимость скорости стадии разряда от строения двойного слоя на примере электровосстановления ионов гидроксония и пероксидисульфата на ртутном электроде. Физический смысл энергии активации в условиях замедленного разряда. Сопряженные реакции в электрохими-

ческой теории коррозии. Методы защиты металлов от коррозии. Химические источники тока; их виды и основные характеристики.

Авторы программы:

Проф. М.В.Коробов (химфак МГУ им. М.В.Ломоносова)

Проф. Б.Б.Дамаскин (химфак МГУ им. М.В.Ломоносова)

Проф. О.М.Полторак (химфак МГУ им. М.В.Ломоносова)

### **Аннотации программ дисциплин**

#### **«Химические основы биологических процессов»**

##### **Часть I. Химическая биология**

1. Определение живого и его основные свойства. Многообразие и систематика. Клетка. Три типа биологических полимеров. Типы химической связи. Вода.
2. Структура и функция белка. Уровни организации структуры. Линейный информационный полярный полимер. Аминокислоты, классификация. Первичная структура; масс-спектрометрия. Вторичная структура; водородная связь. Третичная структура; конформация. Компьютерное моделирование. Четвертичная структура; супрамолекулярные комплексы. Функции белков. Протеом.
3. Биологические мембраны. Определение, строение и свойства. Липиды, классификация. Гидрофобные взаимодействия. Мицеллы, бислои, липосомы. Особенности мембранных белков. Обмен веществом. Мембранный транспорт. Ионные каналы и насосы. Обмен энергией. Аденозинтрифосфат (АТФ) - универсальный реакционный модуль. Термодинамика биохимических реакций. Фотосинтез. Электрохимический потенциал. Транспорт протонов, протонный насос
4. Структура нуклеиновых кислот. Высокомолекулярные, линейные, полярные биополимеры: ДНК и РНК. Первичная структура. ДНК. Вторичная структура; двойная спираль. Суперспирализация. РНК. Вторичная структура, шпилька. Третичная структура. Мимикрия пространственной структуры РНК и белка. Функции нуклеиновых кислот. Биосинтез нуклеиновых кислот. Репликация. Механизм полимеризации. Три этапа. Полярность репликации. Топология. Ингибиторы: яды, антибиотики, противовирусные и противораковые препараты. Транскрипция. Механизм полимеризации. Три этапа. Промотор. Ингибиторы. Обратная транскриптаза.
5. Биосинтез белка. Основная "догма" экспрессии генетической информации. Трансляция. Генетический код. Декодирование. Активация аминокислот. Рибосома как наноробот. Образование пептидной связи.
6. Регуляция экспрессии генов. Прокариоты: операторно - промоторный участок ДНК, регуляторный белок, оперон. Негативный и позитивный контроль. Четыре варианта при участии лиганда. Избыточность и неоднозначность регуляции у эукариот. Система передачи сигнала; сигналы и ответы клетки. Блоки, каскады. Три типа и четыре свойства системы передачи сигнала. Кас-

кад фосфокиназ. Модель нейронной сети. Рак как множественное нарушение системы передачи сигнала для деления клеток.

7. Геном, плазмиды, вирусы. Динамика генома; рекомбинация ДНК. Плазмиды как "генетические аксессуары". Вирусы – неживые супрамолекулярные комплексы. Ретровирусы; ВИЧ. Геномы и гены: определения, размеры, структура. Гены эукариот; сплайсинг. Один домен – один эксон. Иммуноглобулины. Генетическая инженерия. Секвенирование ДНК; синтез ДНК. Полимеразная цепная реакция. Эндонуклеазы рестрикции. Дактилоскопия ДНК. Клонирование организмов, клеток, «клонирование ДНК». Четыре этапа получения рекомбинантных ДНК. Трансгенные организмы. Генотерапия.

#### Часть II. Энзимология

1. Свойства и структура ферментов. Ферменты как природные катализаторы. Ферменты в химии. Источники ферментов. Биосинтез ферментов. Кофакторы и простетические группы.

Методы выделения белков. Стабильность; денатурация. Химическая модификация. Классификация ферментов.

2. Кинетика и механизмы ферментативного катализа. Стационарная кинетика. Схемы Михаэлиса и Анри. Трехстадийная схема. Константы скорости. Лимитирующие стадии. Зависимость от pH и температуры. Обратимые и необратимые ингибиторы. Активные центры. Физико-химические причины ускорения ферментативных реакций. Эффекты сближения и ориентации, усиление реакционной способности в ансамблях функциональных групп, эффекты среды. Теории ферментативного катализа. Общий кислотно-основной катализ. Промежуточные соединения. Примеры химических механизмов действия ферментов.

3. Прикладная энзимология. Биоконверсия вещества и энергии. Имобилизованные биокатализаторы. Инженерия биокаталитических систем. Ферменты в химическом синтезе, анализе и медицинской диагностике. Иммуноферментный и биолюминесцентный анализ. Биосенсоры. Основные мишени действия лекарств. Ферменты антибактериального действия. Понятие о гормональной регуляции. Иммунитет.

Авторы:

проф. А.М.Копылов (химфак МГУ им. М.В.Ломоносова)

проф. А.В.Левашов (химфак МГУ им. М.В.Ломоносова)

#### «Квантовая химия»

1. Введение. Квантовая химия как теоретическая основа представлений современной химии.

2. Общие принципы. Временное и стационарное уравнения Шрёдингера для атомов и молекул. Адиабатическое приближение. Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул.

Поверхность потенциальной энергии. Связь структуры молекулы с топологией поверхности потенциальной энергии.

Электронная плотность и ее изменения при переходе от атомов к молекуле.

3. Методы квантовой химии. Одноэлектронное приближение и методы Хартри – Фока. Орбитальные энергии и теорема Купманса. Электронная корреляция, методы ее учета. Теорема Хоэнберга – Кона. Методы на основе функционала электронной плотности.

Описание межмолекулярных взаимодействий в рамках квантовой химии. Составляющие межмолекулярных взаимодействий.

4. Симметрия ядерной конфигурации. Группы симметрии ядерной конфигурации. Представления групп симметрии.

Симметрия и свойства молекул. Классификация состояний молекул и классификация орбиталей по симметрии.  $\sigma$ - и  $\pi$ -Орбитали,  $\pi$ -электронное приближение. Различные типы орбиталей (локализованные орбитали, орбитали симметрии и т.п.). Гибридизация и гибридные орбитали. Представления об атомах в молекуле.

Электронно-колебательное взаимодействие и эффекты Яна – Теллера.

5. Полуэмпирические методы квантовой химии. Основные принципы перехода к полуэмпирическим методам. Методы на основе нулевого дифференциального перекрытия. Расширенный и простой методы Хюккеля.

6. Прикладные задачи квантовой химии. Различные типы химической связи. Заряды на атомах и порядки связей.

Координационные соединения. Теория кристаллического поля и теория поля лигандов. Комплексы с переносом заряда.

Органические соединения. Переносимость орбиталей и электронной плотности локальных фрагментов молекул. Ароматичность. Изолобальная аналогия. Теория граничных орбиталей. Концепция жестких и мягких кислот и оснований.

Путь реакции и координата реакции на поверхности потенциальной энергии. Переходное состояние. Симметрия реагентов, переходного состояния и продуктов реакции. Принцип сохранения орбитальной симметрии Вудворда – Хоффмана.

Автор:

Проф. Н.Ф.Степанов (химфак МГУ им. М.В.Ломоносова)

### **«Современная неорганическая химия»**

1. Модели химической связи в неорганической химии

Симметрия молекул и орбиталей, таблицы характеров, представления. Метод МО-ЛКАО для многоатомных молекул, групповые орбитали, энергетические диаграммы. Корреляционные диаграммы. Периодичность орбитальных параметров. Степень ионности ковалентной связи, энергия ионной кристаллической структуры. Ван-дер-Ваальсово взаимодействие, водородные связи.

2. Образование, устойчивость и реакционная способность моноядерных комплексов Модель Льюиса. Теория мягких и жестких кислот и оснований Пир-

сона. Устойчивость комплексов. Особенности комплексообразования s-металлов. Комплексы d-элементов: расщепление орбиталей в полях различной симметрии, спектрохимический ряд лигандов, магнитные свойства. Реальная электронная конфигурация атомов, термы. Диаграммы Танабе-Сугано, спектры электронных переходов. Кратные связи металл-лиганд,  $\pi$ -связывание, перенос заряда. Карбонилы и родственные соединения, правило Сиджвика. Особенности f-элементов. Спин-орбитальное взаимодействие, термы f-элементов, магнитные свойства комплексов f-элементов. Механизмы реакций с участием моноядерных комплексов. Взаимное влияние лигандов. Окислительно-восстановительные реакции. Металлокомплексный катализ.

### 3. Полиядерные системы

Взаимодействие металл-металл (M-M). Прямое и косвенные обменные взаимодействия, сверхобмен. Кооперативный эффект Яна-Теллера. Кратные связи M-M,  $\delta$ -компонента химической связи. Кластеры, числа КВЭ и КСЭ, многоцентровая связь M-M. Конденсация кластеров. Фазы Цинтля.

### 4. Введение в электронное строение твердого тела

Энергия связи в металлах. Зонная структура твердого тела. Решетки Браве, ячейка Вигнера-Зейтца, обратная решетка. Зоны Бриллюэна. Плотность состояний. Металлы, диэлектрики, полупроводники. Электрические и магнитные свойства. Парамагнетизм Паули. Пьезо- и сегнетоэлектрики, ферроики. Низкоразмерные твердые тела, одно- и двумерная проводимость, пайерлсовское искажение, низкоразмерный магнетизм. Электронное строение основных типов оксидов и сульфидов d-металлов. Перовскиты. Фазы кристаллографического сдвига.

Автор: проф. А.В. Шевельков (химфак МГУ им. М.В.Ломоносова)

## **6. Требования к итоговой государственной аттестации выпускников**

Итоговая государственная аттестация (ИГА) включает защиту выпускной квалификационной работы и по решению Ученого совета вуза Государственный экзамен. ИГА проводится с целью определения общекультурных и профессиональных компетенций выпускника, определяющих его подготовленность к решению профессиональных задач, установленных ФГОС ВПО по специальности 020201 - Химия и способствующих его устойчивости на рынке труда или продолжению образования в аспирантуре. Аттестационные испытания, входящие в состав итоговой государственной аттестации выпускника, должны полностью соответствовать основной образовательной программе специалиста, которую он освоил за время обучения.

### **Требования к выпускной квалификационной работе.**

Выпускная квалификационная работа представляет собой законченную исследовательскую экспериментальную (расчетную или теоретическую) разработку, которая отражает умение выпускника анализировать научную литературу по разрабатываемой теме, планировать и проводить экспериментальную (содержательную) часть работы, обсуждать полученные результаты и делать обоснованные выводы. Выпускная работа, представляемая в виде рукописи, завершает обучение специалистов и отражает возможность само-

стоятельно решать поставленную научную проблему. Тема дипломной работы определяется в соответствии с разрабатываемой научной тематикой выпускающей кафедры или организации, принимающей студента на предквалификационную практику и выполнение квалификационной работы, по согласованию с научным руководителем выпускника и утверждается заведующим кафедрой.

При выполнении квалификационной работы выпускник должен показать свою способность и умение, опираясь на полученные углубленные знания, умения и сформированные общекультурные и профессиональные компетенции, самостоятельно решать на современном уровне задачи своей профессиональной деятельности, профессионально излагать специальную информацию, научно аргументировать и защищать свою точку зрения.

Требования к содержанию, объему и структуре выпускной квалификационной работы определяются вузом самостоятельно.

Защита выпускной работы проводится на заседании ГАК.

Требования к выпускному государственному экзамену

Государственный экзамен по специальности вводится по решению Ученого совета вуза. Государственный выпускной экзамен призван дать возможность установить уровень образованности, полноту знаний и навыков, приобретенных выпускником в рамках ООП, уровень его интеллектуальных способностей и творческих возможностей для дальнейшего продолжения образования в аспирантуре и самостоятельной производственной деятельности. В материалах, выносимых на государственный экзамен, представляются основные разделы общеобразовательных и специальных дисциплин цикла С.3, причем в них прежде всего должны найти отражение фундаментальные составляющие этих дисциплин.

Программа государственного экзамена разрабатывается вузами самостоятельно с учетом рекомендаций УМО по классическому университетскому образованию.

Декан ХФ,  
профессор

Рамазанов А.Ш.