

**Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова**

**ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
ОТДЕЛЕНИЕ АСТРОНОМИИ**

УТВЕРЖДАЮ

«__» _____ 20__ г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Наименование дисциплины:

Общая физическая химия

Уровень высшего образования:

Специалитет

Специальность:

03.05.01 Астрономия

Направленность (профиль)/специализация образовательной программы:

Общая специальность

Форма обучения:

Очная

Москва 20__

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по специальности 03.05.01 «Астрономия», утвержденным приказом МГУ от 30.12.2020 г. № 1381.

Год (годы) приема на обучение_____

Авторы-составители:

1. Д.ф.-м.н. Столяров Андрей Владиславович, кафедра лазерной химии химического факультета МГУ

Заведующий кафедрой

Д.ф.-м.н. Столяров Андрей Владиславович, заведующий кафедрой лазерной химии химического факультета МГУ

Аннотация к рабочей программе дисциплины «Общая и физическая химия»

Данный семестровый курс лекций возник по просьбе руководства отделения астрономии физического факультета МГУ в 2007 году. Необходимость подготовки специализированного курса для студентов отделения «Астрономия» вызвана особенностью учебного плана этого отделения. Учитывая важность получения физико-химических знаний для студентов – астрофизиков, основной акцент в программе курса сделан на ряд разделов, представляющих особый интерес с точки зрения использования полученных знаний при решении специализированных астрономических и астрохимических задач. В частности, особое внимание в курсе уделено изучению тонкого и сверхтонкого строения молекулярных спектров, лежащих в радиочастотном диапазоне длин волн, оптическим методам определения температуры и концентрации частиц, взаимодействию молекул с внешним магнитным полем, а также химической и статистической термодинамике в сочетании с кинетикой электронно-возбужденных молекулярных состояний в газовой фазе. Кроме того, детально изучаются особенности строения изотопомеров молекулярного водорода, кислорода и азота, а также молекул CN, C₂, CO, CO₂, NO, H₂O, NiH, FeO, которые имеют широкие астрофизические приложения. Курс включает онлайн практикум по теоретической молекулярной спектроскопии, на котором студенты знакомятся с методами спектрального отнесения изотопомеров молекулы HCl, а также приближенного расчета на их основе структурных параметров и термодинамических функций

Дисциплина реализуется на 4 курсе в 8 семестре и является обязательной для освоения обучающимися.

Объем дисциплины составляет 2 з.е., в том числе 34 академических часа, отведенных на контактную работу обучающихся с преподавателем, 38 академических часа, отведенных на самостоятельную работу обучающихся.

Промежуточная аттестация по дисциплине (модулю) – экзамен в 8 семестре.

1. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

(относится к базовой или вариативной части, является обязательной для освоения или дисциплиной по выбору, является факультативом)

Пример.

Дисциплина «Механика» входит в модуль «Общая физика» блока «Профессиональный» базовой части и является обязательной для освоения обучающимися.

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

Отсутствуют

(указать, если требуются, в следующей последовательности: входная компетенция или входные результаты обучения или перечень освоенных ранее дисциплин (модулей), практик)

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с требуемыми компетенциями выпускников

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора (индикаторов) достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с индикаторами достижения компетенций
		<p>Знать: фундаментальные законы физической химии; основные понятия химической и статистической термодинамики, химической кинетики и молекулярной спектроскопии; основные математические методы и модели, используемые при решении задач квантовой химии</p> <p>Уметь: строить теоретические физикохимические модели, используя критический анализ данных; интерпретировать экспериментальные спектроскопические данные на основе фундаментальных законов физической химии; решать типовые задачи химической и статистической термодинамики, химической кинетики, молекулярной спектроскопии и квантовой химии</p> <p>Владеть/Иметь опыт: математическим аппаратом,</p>

		применяемым в химической и статистической термодинамике, химической кинетики и квантовой химии; методами спектроскопического исследования физикохимических явлений и процессов; навыками получения термодинамических параметров и молекулярных констант из спектров поглощения двухатомных молекул
--	--	--

4. Объем дисциплины (модуля) составляет 2 з.е., в том числе: 34 академических часа, отведенных на контактную работу обучающихся с преподавателем, 38 академических часов, отведенных на самостоятельную работу обучающихся.

Контактная работа включает в себя:

занятия лекционного типа (лекции и иные учебные занятия, предусматривающие преимущественную передачу учебной информации педагогическими работниками организации и (или) лицами, привлекаемыми организацией к реализации образовательных программ на иных условиях, обучающимся), и (или) занятия семинарского типа (семинары, практические занятия, практикумы, лабораторные работы, коллоквиумы и иные аналогичные занятия), и (или) групповые консультации, и (или) индивидуальную работу обучающихся с педагогическими работниками организации и (или) лицами, привлекаемыми организацией к реализации образовательных программ на иных условиях (в том числе индивидуальные консультации);...

В конце данного пункта следует отметить, если дисциплина или часть ее реализуется с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий)

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

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), Форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (ак.ч.)	В том числе					Самостоятельная работа обучающегося, академические часы	Форма текущего контроля успеваемости, наименование
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем) Виды контактной работы, академические часы ¹				Всего		
		Занятия лекционного типа (лекции)	Занятия семинарского типа					
			Семинары	Лабораторные занятия*	Практические занятия*			
Тема 1 Предмет и задачи экспериментальной и теоретической спектроскопии. Приближение изолированной частицы. Влияние внешней среды. Классификация молекулярных спектров. Поглощение и спонтанное испускание.	4	2					2	

¹Текущий контроль успеваемости может быть реализован в рамках занятий лекционного и(или) семинарского типа.

Поляризуемость. Энергетические параметры молекул и их ионов. Вероятности радиационных и нерадиационных переходов. Строгие и приближенные правила отбора. Межмолекулярные взаимодействия и внешнее магнитное поле.								
Тема 2 <i>Тонкая и сверхтонкая структура молекулярных спектров</i> Разделение внутримолекулярных видов движения и неадиабатические взаимодействия. Релятивистские эффекты. Случаи связи по Хунду. «Хорошие» и «плохие» квантовые числа. Адиабатическое приближение. Методы учета неадиабатических взаимодействий. Влияние	8	4					4	

<p>внутримолекулярных взаимодействий на оптический спектр изотопомеров молекулярного водорода. Магнитная сверхтонкая структура. Радиоспектроскопические исследования сверхтонкой структуры. Сверхвысокочастотные спектры астрономических объектов. Космологическая проверка зависимости фундаментальных физических констант от времени.</p>								
<p>Тема 3. <i>Строение и спектры двухатомных молекул</i> Энергетические уровни двухатомной молекулы. Вращательные и колебательно-вращательные спектры. Приближение «жесткий ротатор - гармонический осциллятор». Эффект ангармоничности и</p>	6	4					2	

<p>центробежного искажения.</p> <p>Изотопический эффект и измерение масс.</p> <p>Электронно-колебательно-вращательные спектры. Линейчатые и континуальные спектры. Эффект Л-удвоения.</p> <p>Интенсивности линий и правила отбора. Принцип Франка-Кондона. Особенности спектров свободных радикалов OH, CN, CO, NO и CH.</p>								
<p>Тема 4. <i>Строение и спектры многоатомных молекул</i></p> <p>Линейные многоатомные молекулы. Молекулы типа симметричного и ассиметричного волчка. Равновесная геометрия. Свойства симметрии и интенсивности переходов. Нормальные колебания. Эффект</p>	8	4					4	

<p>ангармоничности. Колебательно-вращательное взаимодействие и 1-удвоение. Взаимодействие между колебательными состояниями (резонанс Ферми). Электронно-колебательные разрешенные переходы. Интеркомбинационные переходы. Особенности строения и спектры молекул H₂O и CO₂. Обзор спектральных баз данных по расчету синтетических спектров молекул представляющих астрофизический интерес (HITRAN, GEISA, NIST).</p>								
<p>Тема 5. Строение и спектры «нежестких» молекул Ридберговские состояния молекул. Аналитическая теория квантового дефекта. Колебания большой амплитуды,</p>	8	4					4	

<p>внутреннее вращение и инверсионные переходы. Особенности строения и спектры молекул HCN и H_3^+. Инверсионный спектр аммиака NH_3. Тонкая структура инверсионных спектров, обусловленная колебательно-вращательным взаимодействием. Внутреннее заторможенное вращение в молекулах типа симметричного волчка. Высота потенциальных барьеров. Ван-дер-Ваальсовы комплексы. Столкновительно-индуцированные спектры поглощения.</p>								
<p>Тема 6. Электрические и магнитные свойства молекул Мультипольные моменты молекул. Статическая и динамическая поляризуемость.</p>	4	2					2	

Измерение дипольных моментов. Бесконтактные (оптические) методы измерения напряженности электрического и магнитного поля. Расчет дипольных моментов и статической поляризуемости методом конечного электрического поля. Магнитные моменты (факторы Ланде) и магнитная восприимчивость молекул. Магнитная чувствительность электронных спектров гидридов переходных металлов (NiH и FeH).								
Тема 7. Эффект Штарка и Зеемана в молекулярных спектрах Нормальный и аномальный эффект Зеемана. Эффект Штарка. Относительная интенсивность магнитных компонент	4	2					2	

и идентификация переходов по картине их расщепления. Изменение интенсивности, обусловленное эффектом Штарка. Эффект Штарка при наличии сверхтонкой структуры. Эффект Зеемана в слабых полях для молекул, имеющих отличный от нуля электронный момент количества движения. Эффект Зеемана при наличии сверхтонкой структуры.								
Тема 8. Форма и ширина спектральных линий Естественная ширина линии. Эффект Доплера. Абсолютная (интегральная) и относительная интенсивность, особенности их измерений. Эффект насыщения. Определение температуры и населенности уровней	4	2					2	

из интенсивности спектров. Понятие об электронной, колебательной и вращательной температурах: мультитемпературное приближение. Уширение линий вследствие давления и столкновения с электронами. Введение в теорию молекулярных столкновений. Потенциалы межмолекулярного взаимодействия. Оценка вириальных коэффициентов и транспортных свойств атомарных газов (коэффициенты диффузии и теплопроводности).								
Тема 9. Методы квантовой химии Электронная структура и поверхность потенциальной энергии. Метод Хартри-Фока. Атомные базисные наборы. Учет	4	2					2	

<p>электронной корреляции и релятивистских эффектов. Мульти-конфигурационные методы. Функционал плотности. Расчет равновесной структуры и переходного состояния (оптимизация геометрии). Возбужденные электронные состояния и неадиабатические матричные элементы. Обзор программ для расчета электронной структуры молекул (GAUSSIAN, MOLPRO, GAMESS, DIRAC).</p>								
<p>Тема 10. Методы классической и статистической термодинамики Основныe понятия и структура химической термодинамики. Химический потенциал. Химическое равновесие. Расчеты равновесного состава</p>	4	2					2	

<p>гомогенных смесей. Современные базы термодинамических данных, использование их для оценки свойств веществ и расчета равновесий. Статистика Больцмана, Бозе-Энштейна и Ферми-Дирака. Статистические методы расчета термодинамических свойств индивидуальных газообразных веществ и процессов с их участием. Влияние ядерного спина. Приближение локального термодинамического равновесия. Формула Саха как частный случай выражения для константы ион-молекулярного равновесия.</p>								
<p>Тема 11. Кинетика и динамика возбужденных молекулярных состояний</p>	4	2					2	

<p>Формальная кинетика сложных химических реакций. Катализ. Фотохимические и цепные реакции. Коэффициенты ветвления и кинетика самопроизвольного распада. Механизмы фотоионизации, автоионизации и рекомбинации в газовой фазе и на поверхности космической пыли. Конкуренция между процессами фотодиссоциации и фотоионизации. Введение в квантовую теорию скоростей химических реакций и неупругих столкновений. Кинетические особенности ион-молекулярных реакций. Радиационные и нерадиационные времена жизни. Золотое правило Ферми.</p>								
---	--	--	--	--	--	--	--	--

Тема 12. ИК-спектры поглощения двухатомных молекул в газовой фазе. Определение межъядерных расстояний, частот колебаний, энергии диссоциации и термодинамических функций изотопомеров молекулы HCl на основе анализа синтетических спектров поглощения.	8	4					4	
Промежуточная аттестация: экзамен (указывается форма проведения)	6						6 ²	
Итого	72	34					38	

*Лабораторные занятия, практические занятия относятся к практической подготовке обучающихся.

²Часы на проведение промежуточной аттестации выделяются из часов самостоятельной работы обучающегося

6. Фонд оценочных средств для оценивания результатов обучения по дисциплине (модулю)

6.1. Типовые задания и иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения:

Список вопросов к экзамену:

1. Адиабатическое приближение в теории молекулярной спектроскопии
2. Неадиабатические эффекты в молекулярных спектрах
3. Процессы фотодиссоциации и фотоионизации молекул
4. Ридберговские состояния молекул
5. Вероятности электронно-колебательно-вращательных переходов
6. Правила отбора для оптических переходов. Интеркомбинационные переходы.
7. Принцип и факторы Франка-Кондона
8. Структура и динамика электронных состояний молекулярного водорода
9. Вращательные и колебательно-вращательные спектры линейных молекул
10. Молекулярные постоянные и поверхности потенциальной энергии
11. Свойства колебательных уровней вблизи порога диссоциации
12. Микроволновые и инфракрасные спектры монооксида углерода
13. Определение температуры и концентрации молекул по интенсивности эмиссионных и абсорбционных спектров
14. Понятие электронной, колебательной и вращательной температуры – мультитемпературное приближение
15. Плюсы и минусы спектроскопической модели «жесткий ротатор – гармонический осциллятор»
16. Причины изотопического фракционирования молекул в межзвездной среде
17. Особенности механизмов и скорости химических реакций в межзвездной среде

В настоящем разделе приводятся:

- *примеры типовых заданий и иных материалов с учетом указанных в таблице п.5 наименований форм текущего контроля успеваемости, например, образцы вопросов (заданий) устного опроса и домашних заданий, контрольных работ, коллоквиумов, темы докладов, рефератов итп.;*
- *типовые вопросы, задания итп. для проведения промежуточной аттестации (зачета и (или) экзамена).*

6.2. Шкала и критерии оценивания

(шкала и критерии оценивания могут быть типовыми для всех дисциплин (модулей), входящих в ОПОП ВО)

7. Ресурсное обеспечение

• Перечень основной и дополнительной учебной литературы:

Основная литература.

1. Эткинс П. Физическая химия. В 2-х томах. – М.: Мир, 1980, 2007.
2. Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшиц, Квантовая механика, 1989
3. Г. Герцберг, Спектры и строение многоатомных молекул, Мир, 1969.

Дополнительная литература.

1. В.В. Еремин и др. Основы физической химии. Теория и задачи. Изд-во Экзамен. 2006

2. Ч. Таунс и А. Шавлов, Радиоспектроскопия, Иностранная литература, 1959.
3. Н.А. Смирнова, Методы статистической термодинамики в физической химии, Москва, "Высшая школа", 1982.

- Перечень лицензионного и (или) свободно распространяемого программного обеспечения _____ *(приводится при необходимости)*
- Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем _____ *(приводится при необходимости)*
- Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»
 - 1
 - . База данных HITRAN по абсорбционным переходам молекул (<http://www.cfa.harvard.edu/hitran/>)
 - 2. Спектроскопическая база данных GEISA по излучению в атмосфере (<http://ara.abct.lmd.polytechnique.fr/index.php?page=geisa-2>)
 - 3. База данных NIST по колебательным и электронным уровням энергии молекул (<http://webbook.nist.gov/chemistry/es-ser.html>)
 - 4. Базы данных VAMDC (http://portal.vamdc.org/vamdc_portal/nodes.seam)
- Описание материально-технической базы

Курс может быть прочитан в поточной аудитории при наличии: работающих электрических розеток, компьютера, проектора, экрана, учебной доски
- _____ *(приводится при необходимости)*

8. Язык преподавания: русский (отдельно укажите, если дисциплина может быть реализована на иностранном языке).