

**Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(государственный университет)»**



«УТВЕРЖДАЮ

**Проректор по учебной работе
и экономическому развитию**

_____ **Д.А. Зубцов**

Рабочая программа дисциплины (модуля)

по дисциплине: Основы химической физики конденсированного состояния
по направлению: Прикладные математика и физика (магистратура)
профиль подготовки: Химическая физика
Факультет молекулярной и химической физики
кафедра химической физики
курс: 1
квалификация: магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 1(Осенний) - Экзамен

Аудиторных часов: 45 всего, в том числе:

лекции: 0 час.

практические и семинарские занятия: 45 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 60 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 135, всего зач. ед.: 3

Программу составил: А.И. Шущин, д-р физ.-мат. наук, профессор

Программа обсуждена на заседании кафедры

16 февраля 2016 г.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий кафедрой

А.А. Берлин

Начальник учебного управления

И.Р. Гарайшина

Декан факультета

В.М. Некипелов

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

Цель курса - освоение студентами фундаментальных знаний в области химической физики конденсированного состояния, изучение методов исследования наиболее важных особенностей физико-химических процессов в конденсированной фазе.

Задачи дисциплины

- формирование базовых знаний в области химической физики конденсированного состояния как дисциплины, интегрирующей общефизическую и общетеоретическую подготовку физиков и обеспечивающей технологические основы современных инновационных сфер деятельности;
- обучение студентов принципам исследования характерных особенностей механизмов физико-химических процессов в конденсированной фазе, выявление особенностей их кинетики, интерпретация результатов исследований с использованием современных теоретических методов;
- формирование подходов к выполнению исследований студентами в области химической физики конденсированного состояния в рамках выпускных работ на степень магистра.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Данная дисциплина относится к вариативной части образовательной программы.

Дисциплина «Основы химической физики конденсированного состояния» базируется на дисциплинах:

- Общая и неорганическая химия;
- Дифференциальные уравнения;
- Общая физика: лабораторный практикум;
- Общая физика: термодинамика и молекулярная физика;
- Общая физика: оптика;
- Кратные интегралы и теория поля;
- Общая физика: механика;
- Общая физика: электричество и магнетизм;
- Общая физика: квантовая физика.

Дисциплина «Основы химической физики конденсированного состояния» предшествует изучению дисциплин:

- Научно-исследовательская работа.

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих общекультурных, общепрофессиональных и профессиональных компетенций:

- способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу (ОК-1);
- способность выбирать цели своей деятельности и пути их достижения, прогнозировать последствия научной, производственной и социальной деятельности (ОПК-4);
- способность самостоятельно и (или) в составе исследовательской группы разрабатывать, исследовать и применять математические модели для качественного и количественного описания явлений и процессов и (или) разработки новых технических средств (ПК-1);
- способность ставить, формализовать и решать задачи, уметь системно анализировать научные проблемы, генерировать новые идеи и создавать новое знание (ПК-2).

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- место и роль общих вопросов науки в научных исследованиях;
- современные проблемы физики, химии, математики;
- теоретические модели фундаментальных процессов и явлений в физике и ее приложениях;
- принципы симметрии и законы сохранения;
- новейшие открытия естествознания;
- постановку проблем физико-химического моделирования;
- о взаимосвязях и фундаментальном единстве естественных наук.

уметь:

- эффективно использовать на практике теоретические компоненты науки: понятия, суждения, умозаключения, законы;
- представить панораму универсальных методов и законов современного естествознания;
- работать на современном экспериментальном оборудовании;
- абстрагироваться от несущественных влияний при моделировании реальных физических ситуаций;
- планировать оптимальное проведение эксперимента.

владеть:

- планированием, постановкой и обработкой результатов физического эксперимента;
- научной картиной мира;
- навыками самостоятельной работы в лаборатории на современном экспериментальном оборудовании;
- математическим моделированием физических задач.

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

4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу				
		Лекции	Практические и семинарские занятия	Лаборат. работы	Задания, курсовые работы	Самост. работа
1	Активационные стохастические процессы		4			2
2	Квантовые эффекты в физико-химических процессах		4			2
3	Кинетика диффузионно контролируемых реакций. Геминальные и объемные процессы		6			2
4	Кинетика реакций переноса заряда в полярных средах		3			2
5	Кинетические свойства конденсированных сред		6			4
6	Магнитные и спиновые эффекты в химических реакциях в конденсированной фазе		4			36

7	Примеры активационных процессов: переходы в двухмных системах (стохастический резонанс), броуновские моторы, и т.д.		4			2
8	Процессы в неупорядоченных средах. Аномальные кинетики реакций в конденсированной фазе		3			2
9	Структура твердых тел и жидкостей. Упорядоченные и неупорядоченные состояния		3			2
10	Эффект потенциала взаимодействия. Кинетика реакций при наличии клетки		4			2
11	Эффект стерических факторов. Кинетика реакций анизотропных молекул		4			4
Итого часов			45			60
Подготовка к экзамену		30 час.				
Общая трудоёмкость		135 час., 3 зач.ед.				

4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 1 (Осенний)

1. Активационные стохастические процессы

Диффузионно-ассистируемый мономолекулярный распад. Кинетика распада. Общее уравнение Крамерса для функции распределения в фазовом пространстве. Выражение для скорости распада при произвольной скорости релаксации скорости движение вдоль координаты реакции. Предел быстрой релаксации, диффузионный предел

2. Квантовые эффекты в физико-химических процессах

Матрица плотности квантовой системы. Уравнение Лиувилля для матрицы плотности. Выражение для наблюдаемых. Релаксация фазы и заселённости. Кинетические и балансные уравнения. Кинетика переходов в двух и многоуровневых системах.

3. Кинетика диффузионно контролируемых реакций. Геминальные и объёмные процессы

Моделирование реакционной способности. Описание диффузионно ассистируемых реакций, стохастическое уравнение Лиувилля. Кинетика геминальных реакций: кинетическое уравнение для парной функции распределения в диффузионном приближении (в пространствах различной размерности). Универсальные особенности кинетики на больших временах и поведения парной функции распределения на больших расстояния. Кинетика объёмных реакций в 3-х мерном пространстве Дистанционные реакции: обменные реакции, перенос энергии в моделях Фёрстера и Декстера.

4. Кинетика реакций переноса заряда в полярных средах

Электростатическая энергия взаимодействия заряда в полярной среде. Классическая модель флуктуаций энергии заряда в полярной среде. Выражение для скорости переноса заряда в полярной среде. Адиабатический и неадиабатический предел для скорости переноса.

5. Кинетические свойства конденсированных сред

Уравнение Ланжевена. Активационная кинетика скачковой миграции частиц. Пуассоновский процесс. Прыжковая диффузия. Уравнение Колмогорова. Нормальная диффузия. Оценка коэффициента диффузии. Уравнение диффузии для функции распределения частиц. Эффект внешней силы: уравнение Смолуховского..

6. Магнитные и спиновые эффекты в химических реакциях в конденсированной фазе

Правила отбора по спину реагирующих частиц. Модели и типы химических и физических спин-селективных процессов. Общие кинетические уравнения для спиновой матрицы плотности, описывающие кинетику спин-селективных процессов. Балансные уравнения и упрощенное описание. Формула для спинового эффекта в вероятности рекомбинации радикальных пар в жидкости. Примеры спин-селективных процессов. Оценка величин эффектов для различных процессов данного типа.

7. Примеры активационных процессов: переходы в двухямных системах (стохастический резонанс), броуновские моторы, и т.д.

Кинетика переходов в двухямном потенциале. Влияние переменной силы на кинетику переходов. Зависимость кинетики переходов от частоты осциллирующей внешней силы. Стохастический резонанс. Особенности кинетики активационных переходов в системе многих ям. Эффект храповика и броуновского мотора. Типы броуновских моторов. Оценка скорости поступательного движения частиц для простейших типов моторов и простейших форм потенциальных барьеров.

8. Процессы в неупорядоченных средах. Аномальные кинетики реакций в конденсированной фазе

Фрактальные геометрические объекты. Фрактальная размерность неупорядоченных структур. Аномальная диффузия. Типы аномальной диффузии: субдиффузия и супердиффузия. Медленно спадающие корреляционные функции скоростей движения. Кинетическое уравнение для описания эффекта субдиффузии. Особенности кинетики реакций, ассистируемых субдиффузией, в том числе реакций во фрактальных системах.

9. Структура твердых тел и жидкостей. Упорядоченные и неупорядоченные состояния

Структура твердых тел: упорядоченные (кристаллические) и аморфные (стеклообразные) состояния. Структура жидкостей: жидкие кристаллы, нормальные жидкости. Чистые жидкости и растворы. Жидкие металлы. Полимеры: клубковые и глобулярные состояния. Биомолекулы. Структурированные среды: мицеллы и везикулы. Сверхкритические состояния жидкостей. Функции распределения в фазовом пространстве (по координатам и скоростям). Потенциал средней силы. Эффект клетки. Твердотельный и газофазный механизмы миграции частиц в конденсированных средах. Релаксация скорости и функция корреляции скоростей. (2 ч).

10. Эффект потенциала взаимодействия. Кинетика реакций при наличии клетки

Кинетика геминальной реакции при наличии глубокой короткодействующей ямы взаимодействия между реагирующими частицами. Модель двух состояний. Особенности кинетики на малых и больших временах, клеточный эффект. Особенности объемной кинетики при наличии притягивающего межчастичного взаимодействия. Кинетика реакций в суперклетках типа мицелл. Эффект кулоновского взаимодействия. Особенности кинетики рекомбинации ионных пар. Влияние внешнего поля на кинетику геминальных и объемных реакций. Эффект электрического поля

11. Эффект стерических факторов. Кинетика реакций анизотропных молекул

Модели анизотропной реакционной способности. Случаи анизотропии одной и двух реагирующих молекул. Многомерность реакций при наличии анизотропии. Особенности кинетики реакций на малых и больших временах. Эффект анизотропного потенциала взаимодействия

5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Необходимое оборудование для практических занятий: компьютер и мультимедийное оборудование (проектор, звуковая система).

6. Перечень основной и дополнительной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Основная литература

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц.-М.:Физматлит. Т. 9:Статистическая физика: в 2 ч. Ч. 2. Теория конденсированного состояния /Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский.- 2005.-496 с.
2. Энтелис С.Г., Тигер Р.П. Кинетика реакций в жидкой фазе. М. : Химия, 1973, 416 с.

Дополнительная литература

2. Rice S.A., Diffusion-limited reactions, N.Y.: Elsevier, 1985, 404 с.,Гл.1-7.
3. Резибуа П., ДеЛенер М. Классическая теория жидкостей и газов. М. : Мир, 1980, 423 с. Гл. 1-3.
3. Овчинников А.А., Тимашев С.Ф., Белый А.А.. Кинетика диффузионно-контролируемых химических процессов М. : Химия, 1986, 287 с.,Гл. 1-3.

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Информационные ресурсы: Журналы по химической физике (Химическая физика, Chemical Physics, Journal of Chemical Physics, Molecular Physics и др.),

- 1 <http://scitation.aip.org/> American Institute of Physics Частично доступны полнотекстовые статьи со всех компьютеров, подключенных к сети института
- 2 <http://elibrary.ru/> Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU Доступ к полнотекстовым статьям со всех компьютеров, подключенных к сети института

8. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Студент, изучающий дисциплину, должен с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике.

В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения дисциплины, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- напряжённой самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями преподавателю.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.

9. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации по итогам обучения

Приложение

**ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ
ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ОБУЧАЮЩИХСЯ
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

по направлению: Прикладные математика и физика (магистратура)
профиль подготовки: Химическая физика
Факультет молекулярной и химической физики
кафедра химической физики
курс: 1
квалификация: магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 1(Осенний) - Экзамен

Разработчик: А.И. Шушин, д-р физ.-мат. наук, профессор

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Освоение дисциплины направлено на формирование у обучающегося следующих общекультурных (ОК), общепрофессиональных (ОПК) и профессиональных (ПК) компетенций:

способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу (ОК-1);

способность выбирать цели своей деятельности и пути их достижения, прогнозировать последствия научной, производственной и социальной деятельности (ОПК-4);

способность самостоятельно и (или) в составе исследовательской группы разрабатывать, исследовать и применять математические модели для качественного и количественного описания явлений и процессов и (или) разработки новых технических средств (ПК-1);

способность ставить, формализовать и решать задачи, уметь системно анализировать научные проблемы, генерировать новые идеи и создавать новое знание (ПК-2).

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Основы химической физики конденсированного состояния» обучающийся должен:

знать:

- место и роль общих вопросов науки в научных исследованиях;
- современные проблемы физики, химии, математики;
- теоретические модели фундаментальных процессов и явлений в физике и ее приложениях;
- принципы симметрии и законы сохранения;
- новейшие открытия естествознания;
- постановку проблем физико-химического моделирования;
- о взаимосвязях и фундаментальном единстве естественных наук.

уметь:

- эффективно использовать на практике теоретические компоненты науки: понятия, суждения, умозаключения, законы;
- представить панораму универсальных методов и законов современного естествознания;
- работать на современном экспериментальном оборудовании;
- абстрагироваться от несущественных влияний при моделировании реальных физических ситуаций;
- планировать оптимальное проведение эксперимента.

владеть:

- планированием, постановкой и обработкой результатов физического эксперимента;
- научной картиной мира;
- навыками самостоятельной работы в лаборатории на современном экспериментальном оборудовании;
- математическим моделированием физических задач.

3. Перечень типовых контрольных заданий, используемых для оценки знаний, умений, навыков

Перечень контрольных вопросов для сдачи экзамена в 9-ом семестре;

- 1) Функции распределения. Парная функция распределения. Потенциал средней силы.
- 2) Геминальные и объёмные диффузионно-контролируемые реакции. Радиус реакции.
- 3) Кинетика геминальных и объёмных реакций в отсутствие потенциала взаимодействия.
- 4) Модели миграции в конденсированной среде: прыжковая модель и модель, основанная на уравнении Ланжевена.

- 5) Диффузионно-контролируемые реакции при наличии потенциала взаимодействия. Уравнение Смолуховского.
- 6) Эффект клетки. Асимптотическое (на больших временах) поведение кинетики геминальной и объемной рекомбинации в присутствии потенциала взаимодействия.
- 7) Влияние внешней силы на кинетику диффузионно-контролируемых реакций при наличии и в отсутствие потенциала взаимодействия.
- 8) Кинетика активационного перехода через барьер. Скорость перехода в модели Крамерса. Диффузионный предел.
- 9) Кинетика реакций молекул с анизотропной реакционной способностью. Случай одной анизотропной молекулы.
- 10) Кинетические особенности диффузионно-контролируемых бимолекулярных (геминальных и объемных) реакций в пространствах различной размерности, включая фрактальные
- 11) Аномальная диффузия. Субдиффузия и супердиффузия. Полёты Леви и диффузия по фракталам.
- 12) Кинетика реакций молекул с анизотропной реакционной способностью. Случай двух анизотропных молекул.
- 13) Модели реакционной способности: ступенчатая, экспоненциальная и обратно-степенная.
- 14) Магнитные и спиновые эффекты. Спиновый гамильтониан радикальной пары. Зависимость скорости реакции от спина. Зависимость выхода рекомбинации от магнитного поля.
- 15) Типы экспериментально наблюдаемых магнитных эффектов. Качественная интерпретация этих эффектов.
- 16) Перенос электрона в полярных средах. Качественная картина процесса и основные закономерности. Энергия реорганизации и скорость процесса.
- 17) Особенности миграции в пределе слабого трения. Токовое (бегущее) состояние, причины его возникновения и скорость дрейфа в этом состоянии.
- 18) Стохастический резонанс на примере эффекта внешней периодической силы на движение броуновской частицы в двухямяном потенциале. Зависимость амплитуды от интенсивности шума (температуры).
- 19) Броуновские моторы. Механизмы возникновения направленного движения броуновских. Основные типы моторов.
- 20) Особенности проявления притягивающего потенциала взаимодействия в кинетике геминальных реакций в случае сильной анизотропии потенциала взаимодействия (котодействующее взаимодействие двух реакционных центров на поверхностях молекул).

4. Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 бала - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 бала - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 бала - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 бал - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

При проведении устного экзамена обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Вопрос обучающегося по билету на устном экзамене не должен превышать одного астрономического часа.