

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ
НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ФАКУЛЬТЕТ ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК**

**ПРОГРАММЫ И ЗАДАНИЯ
ФЕН**

**3 курс, 5 семестр
специальность «химия»**

**Новосибирск
2004**

РАБОЧИЙ ПЛАН

№ п/п	Дисциплины	Количество часов в неделю		
		лекции	лабораторные работы.	семинары
1	Альтернативные курсы по гуманитарным дисциплинам.	2		
2	Иностранный язык			4
3	Теорет. электрохимия и инструментальные методы анализа.		6	
4	Химическая термодинамика	2	5	2
5	Физика.	3		2
6	Строение вещества	2		2
7	Химия твердого тела	3		3
8	Молекулярная биология	2		1
9	Физвоспитание			4
10	Военная подготовка			6

ЗАЧЕТЫ

1. Альтернативные курсы по гуманитарным дисциплинам.
2. Иностранный язык (диф).
3. Химия твердого тела.
4. Теоретическая электрохимия и инструментальные методы анализа.
5. Химическая термодинамика (лаб., диф.).
6. Физвоспитание (ф-тив)
7. Военная подготовка (ф-тив)

ЭКЗАМЕНЫ

1. Физика.
2. Строение вещества.
3. Химическая термодинамика.
4. Химия твердого тела.
5. Молекулярная биология.

Строение вещества (годовой курс)

В.Ф. Плюснин

Тема 1. Атом водорода.

Атом водорода – модельная система в атомной спектроскопии. Уравнение Шредингера для атома водорода и его решение. Волновые радиальные и угловые функции. Квантовые числа. Орбитальный момент, операторы орбитального момента. Водородоподобные одноэлектронные ионы, оценка размеров атомов и ионов. Правила отбора для оптических дипольных переходов.

Тема 2. Спин, спиновые операторы, спиновые функции.

Спин – дополнительная степень свободы электрона в атоме. Операторы спина и спиновые функции. Спиновые функции и операторы для систем из нескольких частиц. Аналогия с операторами орбитального момента. Сложение моментов.

Тема 3. Тожественность частиц.

Тожественность частиц, фермионы и бозоны, волновая функция для систем тождественных частиц, спиновые и орбитальные функции, симметрия относительно перестановки частиц.

Тема 4. Многоэлектронные атомы.

Многоэлектронные атомы. Атом гелия – модельная система для многоэлектронных атомов. Учет межэлектронного взаимодействия по теории возмущений и с помощью вариационного принципа. Угловые и радиальные функции, слейтеровские радиальные функции, оценка размеров многоэлектронных атомов.

Тема 5. Термы атомов, спин-орбитальное взаимодействие.

Одноэлектронное приближение, самосогласованное поле, методы Хартри и Хартри – Фока. Заполнение электронных орбиталей, электронные конфигурации и периодическая таблица. Термы атомов, схемы Рассел – Саундерса и $j-j$ – связей. Волновые функции и энергии термов. Правила Гунда. Спин – орбитальное взаимодействие, образование прямых и обращенных мультиплетов.

Тема 6. Атомы во внешних полях.

Спиновый и орбитальный моменты и связанные с ними магнитные моменты. Значения g -факторов, g -фактор для полного момента атома. Атомная спектроскопия, правила отбора для оптических дипольных

переходов. Эффекты Зеемана и Пашена – Бака, эффект Штарка. Ридберговские атомы, рентгеновские атомные спектры.

Тема 7. Систематика двухатомных молекул.

Систематика термов двухатомных молекул. Молекулярные термы, возникающие при сближении двух атомов. Приближение Борна – Оппенгеймера. Метод Гайтлера – Лондона (метод валентных схем – метод ВС), причина возникновения химической связи. Электроотрицательность. Правила отбора для дипольных переходов.

Тема 8. Метод молекулярных орбиталей.

Вариационные методы и метод молекулярных орбиталей (МО). Модельные системы: ион H и молекула водорода. Кулоновский и резонансный интегралы в методе МО. Нахождение основного термина двухатомных молекул, молекула кислорода.

Корреляционные диаграммы. Различные виды связей (σ , π , δ). Сравнение методов МО и ВС. Направленность связей, гибридизация, гибридные атомные и молекулярные орбитали, типы гибридизации. Различные типы связей: ионные, ковалентные, полярные, донорно-акцепторные. Развитие понятия химической связи.

Тема 9. Теория групп.

Теория групп, точечные группы, операции симметрии, теория представлений, характеры операций симметрии, прямое произведение представлений. Применение теории групп для нахождения МО.

Тема 10. Электронные конфигурации и термы сложных молекул.

Электронные конфигурации и термы молекул воды, аммиака, бензола, бутадиена. Правила отбора для оптических дипольных переходов в сложных молекулах.

Тема 11. Метод молекулярных орбиталей в приближении Хюккеля, альтернантные системы.

Метод МО в приближении Хюккеля (МОХ). Молекулярные π -системы. Применение метода МОХ к ароматическим системам. Заряд, порядок связи, индекс свободной валентности. Альтернантные углеводороды, расположение уровней энергии, симметрия молекулярных орбиталей, распределение спиновой плотности в нечетных альтернантных углеводородах.

Тема 12. Циклические системы

Циклические π -системы, энергии и вид МО. Правило $4n + 2$. Длинные одномерные π -системы, распространение представлений теории МО на описание твердого тела.

Тема 13. Учет гетероатомов и заместителей

Учет гетероатомов в методе МОХ. Индуктивные и мезомерные заместители. Поляризуемость атом – атом. Альтернирование заряда в ароматических молекулах с заместителями. Влияние заместителей на вырожденные уровни энергии в π -системах.

Тема 14. Метод возмущенных молекулярных орбиталей.

Метод возмущенных МО. Индексы реакционной способности, индекс локализации. Энергии конечных состояний, правило непересечения потенциальных поверхностей. Реакция двух π -радикалов, реакция молекул и радикалов.

Тема 15. Устойчивость и реакционная способность молекул и радикалов.

Устойчивость π -углеводородов, реакционная способность радикалов. Ориентация в реакциях нуклеофильного, радикального и электрофильного замещения в ароматическом кольце с различными типами заместителей.

Тема 16. Правила Вудворда-Гоффмана.

Использование представлений симметрии при рассмотрении реакционной способности. Правила Вудворда – Гоффмана для синхронных реакций. Электроциклические реакции, реакции замыкания и размыкания цикла, сигматропные реакции.

Тема 17. Теория кристаллического поля для описания электронного строения координационных соединений.

Теория кристаллического поля, потенциал кристаллического поля, использование симметрии. Расщепление d-орбиталей в октаэдрическом и тетраэдрическом полях. Диаграмма Оргела. Учет искажения симметрии комплекса. Сильное и слабое кристаллические поля, диаграммы Танабе – Сугано, спектроскопический и нефелоксетический ряды.

Тема 18. Теория поля лигандов.

Теория поля лигандов (метод МО) для описания электронной структуры координационных соединений. Сравнение двух подходов. Природа оптических переходов координационных соединений. Причины появления d-d – переходов. Фотохимические реакции координационных соединений.

Тема 19. Электронная спектроскопия.

Классификация электронных переходов. Интенсивность и положение полос поглощения. Колебательная структура электронных переходов, принцип Франка – Кондона. Связь спектров поглощения и люминесценции. Время жизни и квантовый выход люминесценции,

внутренняя и интеркомбинационная конверсия. Основные законы люминесценции. Флуоресценция и фосфоресценция.

Тема 20. Люминесценция

Поляризация в спектрах поглощения и люминесценции, формула Левшина – Перрена. Механизмы тушения люминесценции, уравнение Штерна – Фольмера, перенос энергии по дипольному и обменному механизмам.

Тема 21. Лазеры, лазерная спектроскопия.

Лазеры и современные методы лазерной спектроскопии, применение в химии. Преддиссоциация и типы преддиссоциации. Спектрополяриметрия, оптический круговой дихроизм, эффект Фарадея.

Тема 22. Колебательные функции, использование теории групп для определения колебательных состояний.

Колебания многоатомных молекул, нормальные колебания, частоты колебаний. Типы колебательных переходов, фундаментальные переходы. Классификация нормальных колебаний с помощью теории групп.

Тема 23. Колебательная спектроскопия.

Проявление колебательных переходов в спектрах инфракрасного (ИК) поглощения и комбинационного рассеяния (КР), правила отбора. Валентные и деформационные колебания, характеристические частоты, применение ИК- и КР-спектроскопии в химических исследованиях. Электронно – колебательное взаимодействие, эффект Яна – Теллера. Влияние электронно – колебательного взаимодействия на запрещенные оптические переходы.

Тема 24. Эффект Яна-Теллера.

Электронно – колебательное взаимодействие, эффект Яна – Теллера. Влияние электронно – колебательного взаимодействия на запрещенные оптические переходы.

Тема 25. Вращательная спектроскопия, связь ядерного спина и вращения

Вращательные уровни энергии и волновые функции для различных типов молекул. Определение структуры молекул из вращательных спектров. Колебательно–вращательное взаимодействие, диаграммы Фортра. Связь ядерного спина и вращения молекул.

Тема 26. Радиоспектроскопия. Метод ЭПР

Условия магнитного резонанса, устройство радиоспектрометров. Классическая и квантовая интерпретации резонанса. Интенсивность линий, времена релаксации, насыщение линий. Спин-гамильтониан,

константы сверхтонкого взаимодействия (СТВ). Число линий и соотношение интенсивностей в спектрах электронного парамагнитного резонанса (ЭПР), построение спектров ЭПР.

Тема 27. Механизмы появления сверхтонкого расщепления в спектрах ЭПР.

Дипольный и контактный механизмы СТВ, С-Н – фрагмент, расчет констант СТВ с помощью метода МОХ, расщепление на α -протонах, соотношение Мак-Коннела. Расщепление на β -протонах, сверхсопряжение, отрицательные спиновые плотности.

Тема 28. Проявление движений радикалов и химических реакций в спектрах ЭПР.

Ширина линий ЭПР и анализ движений и химических превращений свободных радикалов. Уравнения Блоха и уравнения Мак-Коннела. Обмен по двум положениям, медленный и быстрый обмены. Определение скорости обмена из спектров ЭПР. Обмен по многим положениям.

Тема 29. Усреднение анизотропных взаимодействий в спектрах ЭПР.

Анизотропия СТВ и g-фактора. Форма линии в твердых растворах, усреднение анизотропии в жидкости. Метод электронного спинового эха, химическая поляризация электронов, лазерный магнитный резонанс.

Тема 30. Радиоспектроскопия. Метод ЯМР.

ЯМР спектроскопия, общие закономерности этого метода. Химический сдвиг, константа экранирования, атомная и молекулярная составляющие константы экранирования. Тонкая структура спектров ЯМР.

Тема 31. Природа расщеплений в спектрах ЯМР

Спин – спиновое взаимодействие, спектра А-В – системы, число компонент и соотношение интенсивностей линий в случае слабого и сильного спин-спинового взаимодействия. Связь констант спин-спинового взаимодействия со строением молекул.

Тема 32. Проявление химического обмена в спектрах ЯМР.

Проявление обмена в спектрах ЯМР, слияние линий при быстром обмене. Спектры ЯМР свободных радикалов. Проявление водородных связей в спектрах ЯМР. Двойной ядерно-ядерный резонанс, химическая поляризация ядер.

Список основной литературы

1. Ландау Л. Д., Лившиц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1974

2. Флюге З. Задачи по квантовой механике. М.: Мир, 1974. Т. 1, 2.
3. Бажин Н.М., Войтюк А. А. Задачи по строению вещества. Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 1979.
4. Маррелл Дж., Кеттл С., Теддер Дж. Теория валентности. М.: Мир, 1968.
5. Маррелл Дж., Кеттл С., Теддер Дж. Химическая связь. М.: Мир, 1980.
6. Бажин Н. М., Салихов К. М. Атом. Новосибирск: Изд-во НГУ, 1986.
7. Плюснин В. Ф., Бажин Н. М. Двухатомные молекулы. Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 1991.
8. Минкин В. И., Симкин Б. Я., Миняев Р. М. Теория строения молекул. Ростов-на-Дону: Феникс, 1997.
9. Симкин Б. Я., Клецкий М. Е., Глуховцев М. Н. Задачи по теории строения молекул. Ростов Н/Д: Феникс, 1997.
10. Дьюар М. Теория молекулярных орбиталей в органической химии. М.: Мир, 1972.
11. Дьюар М., Догерти Р. Теория возмущенных молекулярных орбиталей в органической химии. М.: Мир, 1977.
12. Вудворд Р., Гоффман Р. Сохранение орбитальной симметрии. М.: Мир, 1971.
13. Джаффе Г., Орчин М. Симметрия в химии. М.: Мир, 1977.
14. Лер Р., Марчланд А. Орбитальная симметрия в вопросах и ответах. М.: Мир, 1976.
15. Джилкрист Т., Сторр Р. Органические реакции и орбитальная симметрия. М.: Мир, 1976.
16. Пирсон Р. Правила симметрии в химических реакциях. М.: Мир, 1979.
17. Войтюк А. А. Симметрия молекул. Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 1988.
18. Бальхаузен К. Введение в теорию поля лигандов. М.: Мир, 1964.
19. Берсукер И. Б. Электронное строение и свойства координационных соединений. Л.: Химия, 1976.
20. Берсукер И. Б. Эффект Яна-Теллера и вибронные взаимодействия в современной химии. М.: Наука, 1987.
21. Плюснин В. Ф., Бажин Н. М. Электронная спектроскопия координационных соединений. Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 1995.
22. Штерн Э., Тиммонс К. Электронная абсорбционная спектроскопия в органической химии. М.: Мир, 1974.

23. Наберухин Ю. И. Лекции по молекулярной спектроскопии. Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 1973.
24. Степанов Б. И., Грибковский В. П. Введение в теорию люминесценции. М.: Наука, 1963.
25. Ермолаев В. Л., Бодунов Е. Н., Свешникова Е. Б., Шахвердов Т. А., Безизлучательный перенос энергии электронного возбуждения. Л.: Наука. Ленингр. отд-ние, 1977.
26. Звелто О. Физика лазеров. М.: Мир, 1979.
27. Демтредер В. Лазерная спектроскопия. М.: Мир, 1985.
28. Волькенштейн М. В., Грибов Л. А., Ельяшевич М. А., Степанов Б. И. Колебания молекул. М.: Наука, 1972.
29. Кониингстайн И. А. Введение в теорию комбинационного рассеяния. М.: Мир, 1975.
30. Маклочлан К. А. Магнитный резонанс. М.: Мир, 1967.
31. Блюменфельд Л. А., Воеводский В. В., Семенов А. Г. Применение ЭПР в химии. М.: Наука, 1962.
32. Кэррингтон А., Мак-Лечлан Э. Магнитный резонанс и его применение в химии. М.: Мир, 1970.
33. Вертц Дж., Болтон Дж. Теория и практические приложения метода ЭПР. М.: Мир, 1975.
34. Бажин Н. М., Цветков Ю. Д. Сверхтонкая структура спектров ЭПР свободных радикалов. Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 1973.
35. Бажин Н. М., Салихов К. М. Релаксация свободных радикалов в жидкостях. Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 1973.
36. Замараев К. И., Молин Ю. Н., Салихов К. М. Спиновый обмен. Новосибирск: Наука. Сиб. отд-ние, 1977.
37. Жунке А. Ядерный магнитный резонанс в органической химии. М.: Мир, 1974.
38. Бучаченко А. Л. Химическая поляризация ядер и электронов. М.: Наука, 1974.

Список дополнительной литературы

1. Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики. М.: Наука, 1976.
2. Герцберг Г. Атомные спектры и строение атомов. М.: Наука, 1976.
3. Галицкий В. М., Карнаков Б. М., Коган В. И. Задачи по квантовой механике. М.: Наука, 1981.
4. Флюге З. Задачи по квантовой механике. М.: Мир, 1974. Т. 1, 2.
5. Герцберг Г. Спектры и строение простых свободных радикалов. М.: Мир, 1974.

6. Пиментал Г., Спратли Р. Как квантовая механика объясняет химическую связь. М.: Мир, 1973.
7. Герцберг Г. Электронные спектры и строение многоатомных молекул. М.: Мир, 1969.
8. Салем Л. Электроны в химических реакциях. М.: Мир, 1985.
9. Коулсон Ч. Валентность. М.: Мир, 1965.
10. Грей Г. Электроны и химическая связь. М.: Мир, 1967.
11. Хабердитц В. Строение материи и химическая связь. М.: Мир, 1974.
12. Шусторович Е. М. Химическая связь. М.: Наука, 1973.
13. Стретвизор Э. Теория молекулярных орбиталей для химиков-органиков. М.: Мир, 1965.
14. Хигаси К., Баба Х., Рембаум А. Квантовая органическая химия. М.: Мир, 1967.
15. Робертс Дж. Расчеты по методу молекулярных орбит. М.: Мир, 1963.
16. Яцимирский К. Б., Яцимирский В. К. Химическая связь. М.: Наука, 1975.
17. Гиллеспи Р. Геометрия молекул. М.: Мир, 1975.
18. Свердлова О. В. Электронные спектры в органической химии. М.: Наука, 1973.
19. Штерн Э., Тиммонс К. Электронная абсорбционная спектроскопия в органической химии. М.: Мир, 1974.
20. Казинцева Л. А., Куплетская Н. Б. Применение УФ, ИК, ЯМР спектроскопии в органической химии. М.: Наука, 1971.
21. Грибов Л. А. Введение в молекулярную спектроскопию. М.: Наука, 1976.
22. Уитли П. Определение молекулярной структуры. М.: Мир, 1970.
23. Лазерная спектроскопия атомов и молекул / Под ред. Г. Вальтера. М.: Мир, 1979.
24. Летохов В. С. Лазерная фотоионизационная спектроскопия. М.: Наука, 1987.
25. Применение лазеров в спектроскопии и фотохимии / Под ред. К. Мура. М.: Мир, 1983.
26. Александров Е. Б., Запаский В. С. Лазерная магнитная спектроскопия. М.: Наука, 1986.
27. Свердлов Л. М., Ковнер М. А., Крайнов Е. П. Колебательные спектры многоатомных молекул. М.: Наука, 1970.
28. Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. М.: Мир, 1949.

29. Колебательная спектроскопия. Современные воззрения / Под ред. А. Барнса и У. Орвилл-Томаса. М.: Мир, 1981.
30. Сликтер Ч. Основы теории магнитного резонанса. М.: Мир, 1967.

Физика

В.Л. Вязовкин

1. Предмет и задачи термодинамики и статистической физики. Термодинамический и статистический подходы. Теорема о приходе термодинамической системы к равновесию. Функции состояния. Нулевое начало термодинамики — введение температуры. Первое начало термодинамики. Теплоемкость, ее зависимость от пути. C_p и C_v , их связь. Компенсация. Второе начало термодинамики. Равновесные и неравновесные процессы. Обратимые и необратимые процессы. Уравнение равновесного адиабатического процесса для идеального газа.

2. Крутизна адиабаты и изотермы на PV -диаграмме. Непересекаемость адиабат. Цикл Карно. Теорема Карно. Термодинамическое определение энтропии. Изэнтропа. Основное термодинамическое равенство. Основное термодинамическое неравенство.

3. Связь между термическим и калорическим уравнениями состояния. Термодинамические потенциалы. Вычисления T и P .

3. Общие условия термодинамического равновесия. Установление равновесия в изолированной системе. Энтропия в равновесных и неравновесных адиабатических процессах. Неравновесный адиабатический процесс, состоящий из суммы квазиравновесных. Установление равновесия при $T = const$, $V = const$, $N_i = const$ и при $T = const$, $P = const$, $N_i = const$. Общее условие равновесия в химической реакции.

4. Максимальная работа системы при постоянной температуре. Третье начало термодинамики. Сводка важнейших термодинамических формул.

5. Простейшие статистические системы. Функции распределения. Распределение Максвелла в декартовых координатах. Давление, энергия и температура идеального газа. Распределение Максвелла в

сферических координатах. Средние значения скорости и потока частиц.

6. Биномиальное распределение. Распределение по ориентациям системы спинов $1/2$. Гауссово распределение.

7. Экспоненциальное распределение. Распределение по длинам и временам свободного пробега молекул в идеальном газе.

8. Свойство флуктуаций в системах их большого числа частиц. Системы и ансамбли. Временное усреднение и усреднение по ансамблю. Теорема Лиувилля. Требования к физическим функциям распределения.

9. Микроканонический ансамбль. Фазовое пространство, конфигурационное подпространство, μ -пространство. Принцип равной вероятности всех допустимых классических состояний системы. Число микросостояний системы. Функция распределения.

10. Энтропия. Фазовый объем равновесного состояния. Энтропия равновесного состояния. Энтропия как среднее значение логарифма вероятности. Энтропия системы спинов $1/2$. Энтропия равновесного состояния системы спинов $1/2$. Энтропия идеального газа.

11. Применения микроканонического ансамбля к описанию равновесия. Тепловое равновесие. Температура. Механическое равновесие. Давление. Равновесие при переменном числе частиц. Химический потенциал. Химический потенциал идеального газа. Стандартное значение химического потенциала. Основное термодинамическое равенство. Основное термодинамическое неравенство.

12. Канонический ансамбль. Функция распределения Гиббса. Распределения Максвелла и Больцмана как частные случаи распределения Гиббса. Барометрическая формула. Частицы со спином $1/2$ во внешнем магнитном поле. Дипольный момент во внешнем электрическом поле. Закон Кюри.

13. Термодинамические функции канонического ансамбля. Энтропия. Свободная энергия Гельмгольца. Связь энергии со статистической суммой. Вычисления энтропии и давления. Статистическая сумма идеального одноатомного газа. Энергия, свободная энергия Гельмгольца и энтропия идеального газа.

14. Гармонический осциллятор в термостате. Статсумма в классическом и квантовом рассмотрении. Средняя энергия квантового осциллятора, теплоемкость C_V . Вымораживание колебательных степеней свободы. Характеристическая температура вымораживания.

Энтропия квантового осциллятора, ее зависимость от температуры. Классический и квантовый ротатор, их статсуммы. Энергия и теплоемкость. Характеристическая температура вымораживания вращательной степени свободы. Волчок. Энергия и теплоемкость - классическое рассмотрение. Внутреннее вращение молекул.

15. Квантовые поправки к статсумме вращательного движения — число симметрии и число спиновых состояний. Ортоводород и параводород. Статсумма молекулы. Степени свободы. Теорема о равнораспределении энергии по степеням свободы.

16. Газ Ван-дер-Ваальса. Статсумма. Конфигурационный интеграл, его оценка. Уравнение состояния газа Ван-дер-Ваальса.

17. Большое каноническое распределение. Большая статистическая сумма. Среднее число частиц в системе. Изотермическо – изобарический ансамбль.

18. Молекулярно-кинетические явления. Релаксация. Роль столкновений молекул в установлении равновесия в газе. Среднее число столкновений в единицу времени. Константа скорости бимолекулярной химической реакции.

19. Явления переноса. Коэффициенты вязкости, диффузии, теплопроводности в газе и конденсированной среде. Уравнения диффузии и теплопроводности. Движение диффузионного фронта. Соотношение Эйнштейна $\chi^2 \propto Dt$.

20. Логические погрешности учета тождественности частиц в классических статистиках. Вывод распределения Гиббса с помощью большого канонического распределения. Квантовые распределения для идеального газа, статистики Бозе – Эйнштейна и Ферми – Дирака. Критерий вырожденности идеального газа.

21. Электронный газ в металле. Функция распределения, ее вид при абсолютном нуле и при $T > 0$. Максимальная и средняя энергия электронов при абсолютном нуле. Температура вырождения электронного газа. Свободные электроны. Оценка теплоемкости электронного газа. Фотоэмиссия и термоэмиссия электронов из металла.

22. Фотонный газ, его свойства в полости. Химический потенциал фотонного газа. Условие равновесия фотонного газа в полости. Поглощательная и излучательная способность твердого тела, их связь с плотностью энергии фотонов. Абсолютно черное тело. Формула Планка. Формула Вина и закон Релея – Джинса. Равнораспределение по степеням свободы. Термодинамические функции излучения.

Список литературы.

1. И. П. Базаров. Термодинамика. М: Высшая школа, 1976.
2. Ч. Киттель. Статистическая термодинамика. М.: Наука, 1977.
3. В. Г. Левич. Введение в статистическую физику. М.: Государственное издательство технико-теоретической литературы, 1954.
4. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Статистическая физика. М.: Наука, 1979.
5. В. А. Толкачев. Термодинамика и статистическая физика. Учебное пособие. НГУ, 1996.

**ЗАДАНИЕ
по физике**

1. Термодинамика.

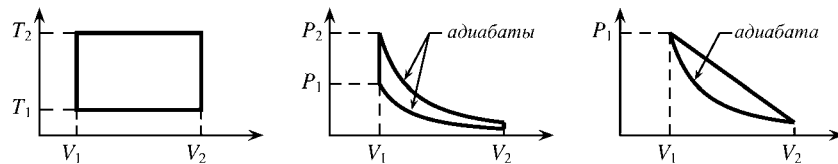
Вопросы к коллоквиуму.

1. Первое начало термодинамики. Теплоемкость, ее зависимость от пути. Теплоемкости при постоянном объеме и постоянном давлении, их связь.
2. Уравнение равновесного адиабатического процесса для идеального газа. Свойства адиабаты и изотермы на PV -диаграмме.
3. Цикл Карно. Теорема Карно. Термодинамическое определение энтропии.
4. Основное термодинамическое равенство. Основное термодинамическое неравенство.
5. Связь между термическим и калорическим уравнениями состояния.
6. Общие условия термодинамического равновесия. Установление равновесия в изолированной системе. Установление равновесия при $T = const$, $V = const$, $N_i = const$ и при $T = const$, $P = const$, $N_i = const$.

Задачи

- 1.1. Определить к. п. д. циклов, изображенных на диаграммах, если рабочим телом является одноатомный идеальный газ с молярной

теплоемкостью $C_V = \frac{3}{2}R$.



1.2. Нагревается или охлаждается газ, если он расширяется по закону $PV^2 = const$? Найти теплоемкость процесса.

1.3. Найти частоту малых колебаний поршня массой m в горизонтально расположенном цилиндрическом сосуде с площадью сечения S , заполненном идеальным газом, молярная теплоемкость которого при постоянном объеме известна и равна C_V . Температура газа поддерживается постоянной и равной T . Поршень движется без трения. Указать качественно критерий квазиравновесности. В положении равновесия давление газа равно P , поршень делит сосуд на две равные половины объемом V каждая.

1.4. Цилиндрический, горизонтально расположенный сосуд посередине перегороден теплонепроницаемым подвижным поршнем. Слева и справа от поршня в сосуде находится по одному молю одного и того же идеального одноатомного газа, молярная теплоемкость которого при постоянном объеме $C_V = \frac{3}{2}R$. Начальная температура газа в обеих половинах сосуда равна T_0 . Находящийся слева от поршня газ квазиравновесно нагрели. Найти установившиеся температуры в левой и правой частях сосуда и количество подведенного тепла, если объем газа в правой части сосуда уменьшился в два раза.

1.5. Моль одноатомного идеального газа находится в цилиндрическом сосуде с подвижным поршнем. Начальные объем и давление газа равны V_0 и P_0 , соответственно. Газ адиабатически расширяется до объема V_1 . Какое количество теплоты нужно сообщить газу, чтобы он нагрелся до начальной температуры, если последний процесс проводить при постоянном давлении. Найти конечный объем газа и совершенную газом работу.

1.6. Моль газа Ван-дер-Ваальса расширили в изотермических условиях от V_1 до V_2 . Температура газа равна T . Найти количество

подведенного к газу тепла, изменение внутренней энергии, изменение энтальпии.

1.7. Учитывая соотношение $\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_T = T\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V - P$ получите

выражение для изменения энтропии одного моля неидеального газа, подчиняющегося уравнению состояния $P(V - B) = RT$. Начальные объем и температура газа равны V_1 и T_1 , конечные — V_2 и T_2 , соответственно. Молярная теплоемкость газа при постоянном объеме равна $C_V = a + bT$. B , a , b — известные постоянные.

1.8. Заполненный под давлением P_0 аргоном с температурой T_0 сосуд объемом V_0 привели в тепловой контакт с медной пластиной, имеющей температуру T_1 . Теплоемкость пластины не зависит от температуры и равна C . Найти установившуюся температуру и изменение энтропии системы, если газ поддерживается при постоянном давлении. Система (сосуд + пластина) теплоизолирована. Теплоемкость сосуда и термическое расширение меди пренебрежимо малы.

2. Распределение Максвелла.

Вопросы к коллоквиуму.

1. Вывод распределения Максвелла.
2. Средние значения проекции скорости молекулы на одну из декартовых осей $\langle v_x \rangle$ и модуля её скорости $\langle |\mathbf{v}| \rangle$ в равновесном газе.
3. Средние значения квадрата скорости молекулы и её кинетической энергии в равновесном газе.
4. Поток частиц. Давление и температура идеального газа.

Задачи

2.1. Частицы массой m вылетают из точечного источника. Вероятность обнаружения частицы, летящей со скоростью v под углом θ к оси z , задается выражением:

$$dW(v, \theta) = A e^{-mv^2/2kT} v^3 \cos \theta \sin \theta dv d\theta, \text{ где } 0 \leq v \leq \infty, 0 \leq \theta \leq \pi/4.$$

Найти нормировочный коэффициент A и среднее значение квадрата поперечного импульса $p_{\perp}^2 = p_x^2 + p_y^2$.

2.2. Пленки некоторых нерастворимых органических кислот и спиртов на поверхности воды можно моделировать идеальным двумерным газом. Написать распределение по скоростям в таком газе в декартовых и полярных координатах. Определить среднюю энергию одной молекулы.

2.3. Найти число молекул, соударяющихся за единицу времени с единицей площади стенки сосуда и летящих в интервале углов от θ до $\theta + d\theta$ с нормалью к поверхности стенки.

2.4. При какой температуре максимально число молекул азота, имеющих скорость в интервале от 1000 м/с до 1010 м/с?

2.5. Сосуд объемом V , в котором находится одноатомный газ с температурой T , помещен в вакуум. В стенке сосуда имеется маленькое отверстие площади σ . Температура газа в сосуде поддерживается постоянной. Определить среднюю кинетическую энергию вылетающих молекул и зависимость давления в сосуде от времени $P(t)$. При каком условии отверстие можно считать «маленьким»? Требуется подвод или отвод тепла для поддержания постоянной температуры газа?

2.6. В расположенном в вакууме закрытом сосуде находится идеальный газ с температурой T . Масса молекулы газа равна m , концентрация молекул в сосуде — n . В стенке сосуда имеется закрытое заслонкой малое отверстие площади σ . В момент времени $t = 0$ заслонку открывают на короткое время τ . Найти в момент времени $t \ll \tau$ функцию распределения вылетевших частиц по оси z , проведенной из сосуда в вакуум вдоль нормали к поверхности отверстия. Отверстие расположено в точке $z = 0$. Как меняется со временем средняя координата $\langle z(t) \rangle$ вылетевших молекул?

3. Микроканонический ансамбль.

Вопросы к коллоквиуму.

1. Теорема Лиувилля. Функция распределения микроканонического ансамбля.

2. Число микросостояний системы. Энтропия системы спинов с $S = 1/2$.
3. Энтропия и химический потенциал идеального газа.
4. Тепловое равновесие. Равенство температур частей системы, как следствие микроканонического распределения.
5. Основное термодинамическое равенство.

Задачи

- 3.1. Определить и начертить фазовую траекторию для затухающего гармонического осциллятора.
- 3.2. Даны N спинов $S = 1$. Найти распределение спинов по их суммарной проекции на ось квантования. Рассмотреть случаи $N = 1, 2, 3, 4$. Найти энтропию системы.
- 3.3. Даны два осциллятора с частотами ω и суммарной энергией $4\hbar\omega$. Найти вероятность того, что вся энергия колебательного возбуждения сосредоточена на одном осцилляторе. Найти энтропию системы.
- 3.4. Частицы движутся в одномерном потенциальном ящике с бесконечно высокими стенками. Насколько изменится энтропия, если ширину ямы увеличить вдвое?
- 3.5. Найти плотность состояний одного, двух и трех одномерных гармонических осцилляторов с одинаковыми частотами в случае, если осцилляторы обмениваются энергией.
- 3.6. Найти плотность состояний с данной энергией для частиц газа, если энергия частицы E связана с импульсом p соотношением $E = cp$, где c — положительная постоянная.

4. Распределение Гиббса. Распределение Больцмана.

Вопросы к коллоквиуму.

1. Вывести распределение Гиббса.
2. Распределения Максвелла и Больцмана как частные случаи распределения Гиббса. Барометрическая формула.
3. Частицы со спином $1/2$ в магнитном поле. Закон Кюри.
4. Частицы с электрическим дипольным моментом во внешнем электрическом поле. Закон Кюри.

Задачи

4.1 Система состоит из молекул с двенадцатью колебательными степенями свободы. Все молекулярные колебания происходят с одинаковой частотой $\omega = 10^{14} \text{ с}^{-1}$. Каково при комнатной температуре ($T \approx 300 \text{ К}$) отношение количеств невозбужденных молекул и молекул с энергией возбуждения $\hbar\omega$?

4.2 Система состоит из невзаимодействующих частиц. Каждая частица может находиться в трех невырожденных состояниях, энергии которых равны $0, E, 2E$. Определить температуру системы, если доля частиц, находящихся во втором состоянии, равна $2/7$.

4.3 Система состоит из частиц с двумя слабо взаимодействующими спинами $1/2$. Энергия взаимодействия спинов

$$E = \frac{\alpha}{2} \left[S(S+1) - \frac{3}{2} \right], \text{ где } S \text{ — величина суммарного спина частицы,}$$

α — постоянная. Найти заселенность состояний с $S = 0$ и $S = 1$ при температуре T .

4.4 Один моль газа с температурой T находится в бесконечно высоком коническом сосуде в однородном поле тяжести. Ось сосуда направлена вертикально. Вершина конуса обращена вниз. Ускорение свободного падения в поле тяжести равно g . Определить среднюю энергию одной молекулы и теплоемкость газа.

4.5 Газ находится в закрытом сосуде. Посередине сосуда происходит скачек потенциала: в одной половине объема сосуда потенциальная энергия молекулы газа равна U , а в другой — нулю. Определить среднюю энергию и теплоемкость газа (Классический аналог двухуровневой системы).

4.6 Газ находится в вертикально стоящем цилиндрическом сосуде высоты H , радиуса R в однородном поле тяжести. В верхней половине боковой стенки цилиндра имеется очень узкая щель высоты $H/2$ и ширины l . Найти число частиц, вылетающих из сосуда за одну секунду через щель, если количество молекул в сосуде поддерживается постоянным и равным N . Масса одной молекулы газа равна m . Газ во время процесса истечения остается в равновесии его температура поддерживается постоянной и равной T .

4.7 Рассчитать центр тяжести столба газа высотой H в поле тяжести Земли. Ускорение земного тяготения и температуру газа считать известными и не зависящими от высоты.

5. Статсумма. Термодинамические функции. Теплоемкость.

Вопросы к коллоквиуму.

1. Статистическая сумма идеального одноатомного газа. Внутренняя энергия, свободная энергия Гельмгольца и энтропия идеального газа.
2. Гармонический осциллятор и его статсумма в классическом и квантовом рассмотрении. Вклад колебательных степеней свободы в теплоемкость. Температура вымораживания колебаний.
3. Классический и квантовый ротатор в термостате. Температура вымораживания вращательного движения.
4. Энергия и теплоемкость, приходящиеся на одну степень свободы. Теорема о равномерном распределении.

Задачи

5.1. Двумерный гармонический квантовый осциллятор обладает уровнями энергии $E_n = \hbar\omega(n+1)$ с кратностью вырождения $g = n+1$, где $n = 0, 1, 2, \dots, \infty$. Определить статистическую сумму для системы из N таких невзаимодействующих осцилляторов.

5.2. Энергетические уровни некоторой системы расположены следующим образом: невырожденное основное состояние и зона со сплошным спектром, отстоящая от основного состояния на ε . Плотность уровней в зоне постоянна и равна ρ . Температура равна T . С какой вероятностью система находится в зоне сплошного спектра? Какова средняя энергия системы?

5.3. По поверхности диска свободно движутся молекулы, находящиеся в поле притяжения некоторого центра, расположенного в центре диска. Потенциальная энергия молекул равна αr^2 , где r — расстояние молекулы от центра диска. Температура поверхности диска равна T , число молекул — N . Радиус диска R настолько велик, что $\alpha R^2 \ll kT$. Найти свободную энергию молекул, энергию и теплоемкость.

5.4. В закрытом сосуде находится моль идеального газа трехатомных нелинейных молекул ABC. Под действием света

происходит полная диссоциация молекул $ABC \xrightarrow{h\nu} A + BC$. Найти суммарную теплоемкость газа в сосуде до и после воздействия света. Температура газа намного превышает характеристические колебательные температуры молекул ABC и BC .

5.5. Основное электронное состояние атомарного фтора 2P расщеплено спин-орбитальным взаимодействием на два: состояние ${}^2P_{3/2}$, кратность вырождения которого равна $g_{3/2} = 4$, и выше расположенное по энергии состояние ${}^2P_{1/2}$ с кратностью вырождения $g_{1/2} = 2$. Величина расщепления равна 404 см^{-1} . Определить населенность верхнего состояния и теплоемкость атомарного фтора при 300 К.

5.6. Определить теплоемкость газообразного молекулярного брома при 600 К, считая его идеальным газом. Данные о частоте внутримолекулярных колебаний и расстоянии между атомами в молекуле взять из справочников. Каковы вклады поступательного, вращательного и колебательного движения в теплоемкость при этой температуре?

5.7. Найти энергию, которую необходимо затратить на полную диссоциацию на атомы одного моля молекулярного кислорода при постоянной температуре и давлении. Энергия разрыва связи равна ϵ , температура — T , число Авогадро — N_A . Колебания в молекуле кислорода не возбуждены.

5.8. Статистическая сумма неидеального газа из N молекул, находящегося при температуре T в объеме V , имеет вид:

$$Z = A \left(\frac{VT^{3/2}}{N} \right)^N \cdot \left(1 + \frac{N^2}{V} \left(\frac{C}{T} - B \right) \right), \quad \text{где } A, B, C \text{ — константы.}$$

Найти давление газа.

6. Явления переноса.

Вопросы к коллоквиуму.

1. Распределение по длинам и временам свободного пробега молекул в максвелловском газе.

2. Коэффициенты вязкости, диффузии и теплопроводности в квазиравновесном почти идеальном газе.

3. Биномиальное распределение. Соотношение Эйнштейна $x^2 \propto Dt$.

6.1. Оценить число столкновений в секунду одной молекулы в газообразном азоте при $P = 1 \text{ атм.}$, $T = 300 \text{ К}$, а также длину свободного пробега и коэффициент диффузии молекулы.

6.2. Между двумя плоскими стенками, температуры которых равны T_1 и T_2 , находится газ. Расстояние между стенками равно d . Длина свободного пробега молекул газа $\lambda \ll d$. Плотность газа равна n . Оцените поток тепла между стенками.

6.3. Диск радиуса R подвешен горизонтально в газе на вертикальной упругой нити, прикрепленной к его центру. Второй такой же диск расположен под первым на расстоянии d . Оси дисков совпадают. Нижний диск начинают вращать вокруг оси с угловой частотой ω . На какой угол φ повернется верхний диск? Модуль кручения нити равен f . (Момент сил K , создаваемый нитью при закручивании ее вокруг оси на угол φ дается выражением $K = f(\varphi)$.) Плотность газа равна n . Масса молекулы газа равна m , её средняя скорость — \bar{v} . Длина свободного пробега молекул газа $\lambda \ll d$.

6.4. Имеются три одинаковых широких пластины, толщиной d каждая. Две пластины изготовлены из материала с коэффициентом теплопроводности κ , а одна — из материала с коэффициентом теплопроводности κ_1 . Пластины сложены в стопку, так что пластина с коэффициентом теплопроводности κ_1 находится между двух пластин с коэффициентом теплопроводности κ . Температура одной внешней поверхности поддерживается равной T_1 , а температура другой равна T_4 . Найти температуры T_2 и T_3 поверхностей средней пластины. Нарисовать график зависимости температуры от расстояния z от поверхности с температурой T_1 , при условии, что $T_4 > T_1$, а $\kappa_1 > \kappa$.

6.5. По очень длинной нити радиуса a , электрическое сопротивление единицы длины которой равно ρ , течет ток I . Коаксиально нити расположена заполненная газом длинная тонкостенная труба радиуса R . Температура трубы поддерживается равной T_0 . Найти установившуюся температуру поверхности нити T_1 . Давление газа в трубе таково, что длина свободного пробега молекул в нем $\lambda \ll a$.

6.6. Найти распределение температуры в пространстве между двумя концентрическими сферами с радиусами R_1 и R_2 , заполненным проводящим тепло однородным веществом, если температуры обеих сфер поддерживаются постоянными и равными T_1 и T_2 , соответственно. Теплопроводность вещества от температуры не зависит.

Молекулярная биология

С.Д. Мызина

Основы вирусологии, бактериологии. Иммунологии. Создание вакцин.

Генная инженерия и биотехнология, рекомбинантные бактерии и их применение.

Комбинаторные методы, основанные на свойствах биополимеров (молекулярная селекция и эволюция, получение катализаторов, сорбентов и т.д.)

Биологические системы – источник новых веществ, материалов и устройств.

Биологическое оружие и защита от него.

Генотерапия.

Трансгенные растения и животные.

Молекулярная медицина (стволовые клетки, регенерация органов и тканей).

Химические и биохимические технологии, основанные на использовании информационных биополимеров.

Аффинная хроматография.

Молекулярная гибридизация. Использование олигонуклеотидов и полинуклеотидов в качестве меток и средств детекции определенных нуклеиновых кислот.

Антитела. Получение моноклональных антител, принципы иммуноанализа, иммунотоксины, иммунолипосомы. Каталитически активные антитела. Получение, применения.

Генная инженерия. Применение ферментов в манипулировании нуклеиновыми кислотами и белками. Синтез РНК и ДНК в бесклеточных системах. Сшивание олигонуклеотидов с помощью ДНК-лигазы. Введение физических меток в ДНК и РНК.

Ферменты рестрикции. Векторы для клонирования на основе плазмид и фага М13. Принципы селекции бактериальных клеток. Клонирование. Экспрессия белков в культивируемых клетках. Направленный мутагенез клонированных генов (в векторах на основе М13).

Полимеразная цепная реакция (ПЦР). Применение ПЦР в секвенировании, генной инженерии, диагностике. Детекция инфекционных агентов, мутировавших генов, идентификация людей.

Воздействие олигонуклеотидами и их производными на экспрессию генов.

Молекулярная селекция. Библиотеки олигонуклеотидов. Аптамеры, получение и применения. Каталитические РНК и ДНК.

Принципы получения пептидных библиотек. Фаговый дисплей. Рибосомный дисплей.

Химическая термодинамика

В.Н. Пармон

Часть I

Химическое равновесие в гомогенных системах

1. Основные понятия химической термодинамики

Изолированные, закрытые и открытые системы. Равновесные и неравновесные процессы. Химическая переменная. Интенсивные и экстенсивные свойства. Функция состояния и уравнения состояния. Теплота. Работа. Внутренняя энергия. Энтальпия. Теплоемкости. Первое начало термодинамики. Закон Гесса. Стандартные состояния. Закон Кирхгофа. Энтропия. Второе и третье начала термодинамики. Связь энтропии и термодинамической вероятности состояния.

Характеристические функции. Термодинамические потенциалы. Фундаментальные уравнения и термодинамические соотношения между величинами. Химический потенциал. Зависимость химических потенциалов от давления и температуры для идеальных: газа, растворенного вещества, твердого тела.

2. Химические равновесия в идеальных системах

Полезная работа химической реакции. Направление самопроизвольного химического процесса в изолированной и закрытой системах. Условия равновесия закрытой химической системы. Расчет величины химического потенциала. Химическое сродство реакции. Закон действующих масс. Константа равновесия. Уравнение изотермы, изобары и изохоры химической реакции (зависимость констант равновесия от давления и температуры). Направление протекания химических процессов при выводе системы из термодинамического равновесия. Принцип Ле-Шателье. Определение числа линейно-независимых реакций.

3. Химическое равновесие в неидеальных системах

Летучесть (фугитивность). Химический потенциал неидеального газа. Уравнения состояния реальных газов. Химическое равновесие в реальных газах. Активность. Коэффициент активности.

Часть II

Химическое равновесие в гетерогенных системах

1. Фазовые равновесия в однокомпонентных системах

Фазовые переходы I и II рода. Соотношение Клапейрона–Клаузиуса. Равновесие «пар–жидкость» и «пар–твердая фаза». Равновесие «твердая фаза–твердая фаза». Равновесие «расплав–твердое тело». Критическое состояние вещества. Примеры фазовых равновесий (диаграмм) в однокомпонентных системах. Правила Трюттона.

2. Фазовые равновесия в двух- и многокомпонентных системах

Парциальные молярные величины. Условия равновесия в многофазных многокомпонентных системах. Правило фаз Гиббса. Уравнение Гиббса–Дюгема. Функции смешения идеальных и неидеальных смесей: объем, энтропия, энтальпия, энергия Гиббса смешения. Избыточные функции смешения.

3. Растворы. Равновесия «жидкость–пар» и «жидкость–твердое тело»

Классификация растворов: совершенные, регулярные, атермальные. Законы Рауля и Генри. Законы Коновалова. Основные типы диаграмм равновесия «жидкость–пар». Различные типы стандартных состояний химического потенциала в растворах. Предельно разбавленные растворы. Равновесия в растворах нелетучих веществ в летучих растворителях (бинарный раствор–чистый компонент). Уравнение Шредера. Эбуллиоскопия, криоскопия. Осмос. Основные типы диаграмм равновесия двухкомпонентных систем «жидкость–твердое тело». Равновесия в системах с газовыми гидратами. Некоторые представления о фазовых равновесиях в трехкомпонентных системах.

4. Элементы теории растворов электролитов и электрохимии

Сольватация. Электролитическая диссоциация. Элементы теории Дебая–Хюккеля. Коэффициенты активности ионов, ионная сила раствора. Окислительно-восстановительные превращения в растворах. Электродные потенциалы. Уравнение Нернста.

5. Дисперсные системы и поверхностные явления

Типы дисперсных систем. Поверхностное натяжение. Термодинамика систем с поверхностью раздела. Термодинамическая устойчивость дисперсных систем. Влияние диспергирования вещества на фазовые равновесия и растворимость вещества. Адсорбция.

Часть III

Использование статистических методов для описания химического равновесия в идеальных системах

1. Статистическое описание идеальных газофазных систем

Статсумма. Поступательная статсумма. Вращательная статсумма. Внутреннее вращение. Колебательная статсумма. Энергия Гельмгольца. Энтропия. Внутренняя энергия, энтальпия, энергия Гиббса. Теплоемкость. Химический потенциал. Константа равновесия. Выражения для константы равновесия K_p . Статистический расчет приближенных значений констант равновесия в реакциях изотопного обмена или изомеризации.

ЗАДАНИЯ

(Задачи по: Музыкантов В.С. Бажин Н.М., Пармон В.Н., Булгаков Н.Н., Иванченко В.А. Задачи по химической термодинамике. Москва: Химия, 2001)

ЗАДАНИЕ 1 Сдача задания с 10 по 17 октября

1-7, 1-15, 1-16 (а,б), 1-26, 1-30, 1-31, 1-43, 1-44, 2-3, 2-5, 2-12, 2-39, 3-8, 3-17, 4-4, 4-22, 4-57, 4-78, 5-5, 5-7, 6-24.

• Для диссоциации N_2O_4 с образованием NO_2 при 298 К $K_p = 0,141$. Рассчитать равновесный состав в системе при общем давлении 1 бар: а) при наличии только N_2O_4 в начальном состоянии; б) добавлении в систему 0,6 бар аргона (система расширяется по мере добавления Ar при постоянном общем давлении 1 бар); в) общем давлении 0,1 бар при наличии только N_2O_4 в начальном состоянии.

ЗАДАНИЕ 2 Сдача задания с 20 по 27 ноября

8-2, 8-11, 8-13, 9-3, 9-6, 9-13, 9-17, 9-20, 9-25, 9-27, 10-4, 10-11, 10-20, 10-27, 11-2, 11-10, 11-17, 11-22, 11-49, 11-51.

• Превращение кристаллической модификации углекислого кальция «арагонит» в модификацию «кальцит» при 25 °С сопровождается уменьшением изобарно-изотермического потенциала на 190 кал/моль. При каком давлении при этой же температуре обе формы $CaCO_3$ могут сосуществовать? Известно, что плотность арагонита 2,93, а кальцита – 2,71 г/см³.

ЗАДАНИЕ 3 Сдача задания с 15 по 20 декабря

7-41, 7-54, 7-56 (O_2 , CO_2 , NH_3 , C_2H_4 , C_3H_8 , $Al_{кр}$), 7-58, 12-5, 12-10, 12-18, 12-24, 12-28, 12-31, 13-4, 13-9, 13-12, 13-24, 14-7, 14-9, 15-9.

• Рассчитать предельные значения C_p (низкие, промежуточные и очень высокие температуры) для H_2 , C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6 .

•• Основное состояние атома кислорода расщепляется на три мультиплета с энергиями 0, 158, 227 см⁻¹. Найти вклад в C_p атома кислорода электронной составляющей при $T = 1500$ К.

Список основной и дополнительной литературы.

1. Бажин Н.Б., Иванченко В.А., Пармон В.Н. Термодинамика для химиков. 2-е изд., М.: КолосС, 2004.
2. Пармон В.Н. Лекции по химической термодинамике, Новосибирск.: Изд-во НГУ, 2004.
3. Задачи по химической термодинамике (под ред. В. Н. Пармона), Новосибирск: Изд-во НГУ, 2003.

4. Бажин Н.Б., Иванченко В.А., Пармон В.Н. Термодинамика для химиков. М.: Химия, 2000. 300 с.
5. Бажин Н.Б., Иванченко В.А., Пармон В.Н. Термодинамика для химиков. Части I и II. Новосибирск: НГУ, 1999. 382 с.
6. Пармон В.Н., Иванченко В.А. Введение в курс физической химии для специализации "геохимия". НГУ, 1996.
7. Бажин Н.М. Краткий курс химической термодинамики. Части 1 и 2. Новосибирск: НГУ, 1991.
8. Кнорре Д.Г., Крылова Л.Ф., Музыкантов В.С. Физическая химия. М.: Высш. шк., 1990.
9. Стромберг А.Г., Семченко Д.П. Физическая химия. М.: Высш. шк., 1999.
10. Голиков Г.А. Руководство по физической химии. М.: Высш. шк., 1988.
11. Полторацк О.М. Термодинамика в физической химии. М.: Высш. шк., 1991.
12. Карапетьянц М.Х. Химическая термодинамика. М.: Химия, 1975.
13. Курс физической химии / Под ред. Я.И. Герасимова. М.: Химия, 1973.
14. Еремин Е.Н. Основы химической термодинамики. М.: Высш. шк., 1978.
15. Даниэльс Ф., Олберти Р. Физическая химия. М.: Мир, 1978.
16. Мюнстер Ф. Химическая термодинамика. М.: Мир, 1971.
17. Кубо Р. Термодинамика. М.: Мир, 1970.
18. Шукин Е.Д., Перцов А.В., Амелина Е.А. Коллоидная химия. М.: Высш. шк., 1992.
19. Химическая энциклопедия. М.: Сов. энциклопедия, 1990 - 1993.
20. Смирнова Н.А. Методы статической термодинамики в физической химии. М.: Высш. шк., 1982.
21. Бокштейн Б.С., Менделев М.И. Краткий курс физической химии. М.: ЧеРо, 1999. 230 с.

Химия твердого тела

Е.В. Болдырева

Введение.

Химия твердого тела как раздел химической науки. Препаративная, аналитическая, физическая химия твердого состояния. Значение химии

твёрдого тела для материаловедения и современной химической технологии.

Часть I.

«Идеальные» (совершенные) твёрдые тела.

1. Основные принципы описания строения периодических структур с позиций симметрии.

1.1. Сравнение симметрии молекул и кристаллов. Закрытые и открытые операции симметрии. Точечные и пространственные группы симметрии. Правильные системы точек общего и частного положений. Трансляционная группа. Понятие решетки Бравэ. Понятие элементарной ячейки. Кристаллографические системы (сингонии). Понятие независимой области. Сходство и различие понятия «независимая область» и «элементарная ячейка». Различные способы описания кристаллических структур с точки зрения симметрии.

1.2. Симметрия кристаллов и их колебательный спектр. Влияние позиционной симметрии на колебания сложных ионов и молекул в ионно-молекулярных кристаллах. Влияние числа молекул или сложных ионов в элементарной ячейке на колебательный спектр. Давыдовское расщепление.

Влияние трансляционной симметрии на колебательный спектр кристаллов. Акустические и оптические колебания. Понятие фонона.

1.3. Симметрия кристаллов и их электронное строение. Влияние трансляционной симметрии на электронное строение. Функции Блоха. Построение кристаллических орбиталей. Возникновение энергетических зон. Локализованные энергетические уровни.

2. Свойства кристаллов, определяемые их идеальным строением.

2.1. Взаимосвязь симметрии структуры и физических свойств кристаллов. Принцип Неймана. Анизотропия свойств. Тепловое расширение, поляризуемость, упругость. Пироэлектрический и пьезоэлектрический эффекты. Теплопроводность. Оптические свойства.

2.2. Различные способы описания кристаллических структур, удобные для объяснения и предсказания свойств кристаллов.

Описание кристаллических структур в координационных полиэдрах. Структуры силикатов, оксидов, халькогенидов. Использование представления структуры в полиэдрах для описания химических реакций. Описание кристаллических структур неорганических, органических и координационных соединений через плотнейшие и

плотные упаковки частиц. Использование представления структуры упаковкой частиц для описания химических реакции.

Различные способы описания «пустоты» в кристаллических структурах. Понятия «коэффициента упаковки», «свободного объема», «реакционной полости», соединения «гость-хозяин». Реакции клатратообразования. Реакции интеркалирования и деинтеркалирования. Реакции в матрицах. Реакции в молекулярных и ионно-молекулярных кристаллах. «Топохимический принцип». Влияние «свободного объема» на радиолиз кристаллов.

Различные способы сравнения кристаллических структур. Понятия «структурный тип», «изоструктурность», «топотаксия», «эпитаксия». Топотаксиальные и эпитаксиальные реакции. Понятие «твердого раствора», виды твердых растворов.

2.3. Свойства кристаллов, определяемые их идеальным электронным строением.

Заселенность зон и электропроводность кристаллов.

Металлы, изоляторы, собственные полупроводники. Фотопроводимость. Анизотропия электропроводности.

Заселенность зон и прочность химических связей в кристаллах. Заселенность перекрывания атомных орбиталей в кристаллической орбитали.

3. Экспериментальные методы изучения идеального атомного и электронного строения кристаллов и их колебательного спектра.

3.1. Дифракционные методы. Факторы, определяющие: а) положение и б) интенсивность рефлексов на дифрактограмме кристалла. Дифракция на решетке Бравэ. Векторное условие дифракции (условие Лауэ). Понятие «обратной решетки». Построение Эвальда. Уравнение Вульфа-Брэгга.

Функция атомного рассеяния (форм-фактор). Структурный фактор рассеяния. Структурная амплитуда. Геометрический структурный фактор. Систематические погасания рефлексов. Фактор повторяемости. Другие факторы, влияющие на интенсивность дифракционных максимумов.

Использование дифракционных методов для изучения атомного строения кристаллов. Различные варианты дифракционного эксперимента; порошковые и монокристалльные методы, использование монохроматического и полихроматического излучения. Использование различных видов излучения: рентгенография, электронография,

нейтронография. Локальная скоростная дифрактометрия с использованием синхротронного излучения.

Использование дифракционных методов для изучения электронного строения кристаллов. Карты распределения электронной плотности. Использование дифракционных методов для изучения колебательной и вращательной подвижности в кристаллах.

3.2. Спектроскопические методы.

Использование ИК и КР - спектроскопии для изучения колебательных спектров кристаллов.

Использование неупругого рассеяния нейтронов для изучения колебательных спектров кристаллов.

Использование оптической, рентгеновской и рентгено-электронной спектроскопии для изучения электронного строения кристаллов.

Использование других спектроскопических методов для изучения электронного строения кристаллов, а также колебательной и вращательной подвижности в кристаллах (ЭПР, ЯМР, ЯГР, ЯКР).

4. Некристаллические твердые тела: несоразмерные структуры, квазикристаллы, аморфные твердые тела. Жидкие кристаллы.

Сходства и различия в строении кристаллических и некристаллических твердых тел.

Основные принципы описания строения некристаллических твердых тел. Описание с позиций симметрии, через нерегулярные упаковки частиц, в координационных полиэдрах.

Сходства и различия в свойствах кристаллических и некристаллических твердых тел.

Экспериментальные методы исследования некристаллических твердых тел.

5. Факторы, определяющие структуры твердых тел.

5.1. Термодинамические факторы. Влияние размера, формы, электронного строения структурных единиц на равновесные структуры кристаллов. Условия образования жидких кристаллов. Предсказание равновесных структур с использованием карт сортировки структур. Методы инженерии кристаллов. Принцип оптимизации плотности упаковки, области его применимости.

5.2. Основные подходы к расчету энергий кристаллических решеток твердых соединений различных типов: металлов, ионных кристаллов, молекулярных кристаллов.

Кинетические факторы. Метастабильные структуры. Условия образования метастабильных кристаллических структур. Использование топоксиальных и эпитаксиальных химических реакций. Варьирование условий кристаллизации. Условия образования аморфных, несовершенных, квазикристаллических структур. Значение метастабильных структур для химии и материаловедения. Методы изучения метастабильных структур.

Часть II.

«Реальные» (несовершенные) твердые тела

1. Общее введение.

Основные виды дефектов в твердых телах. Общая классификация дефектов. Структурные и электронные дефекты. Происхождение дефектов. Равновесные и неравновесные дефекты. Влияние дефектов на свойства твердых тел.

2. Точечные дефекты в твердых телах.

2.1. Основные виды точечных дефектов. Система Крегера для обозначения точечных дефектов.

2.2. Термодинамика точечных дефектов в кристаллах. Сходства и различия с термодинамикой растворов электролитов. Расчет концентраций точечных дефектов в кристаллах, находящихся в равновесии с газовой фазой. Взаимосвязь концентраций примесей и собственных точечных дефектов. Взаимосвязь концентрации точечных дефектов с концентрацией электронов в зоне проводимости (дырок в валентной зоне).

2.3. Методы создания неравновесных концентраций точечных дефектов в кристалле: закалка, механическое и радиационное воздействие. Возникновение неравновесных концентраций точечных дефектов в ходе химических реакций. Релаксация неравновесных концентраций точечных дефектов.

2.4. Взаимодействие точечных дефектов. Образование ассоциатов, центров окраски, сверхструктур.

2.5. Диффузия точечных дефектов. Коэффициенты диффузии, энергия активации диффузии. Нахождение средних смещений атомов и вакансий в модели случайных блужданий при различных механизмах самодиффузии.

Движущие силы диффузии. Диффузия, обусловленная градиентом концентрации. Диффузия в поле механических напряжений. Диффузия точечных дефектов в электрическом поле.

2.6. Влияние точечных дефектов на физические свойства кристаллов. Экспериментальные методы изучения точечных дефектов.

Влияние точечных дефектов на дифракцию в кристаллах.

Влияние точечных дефектов на колебательные, оптические, рентгеновские спектры кристаллов.

Специфические методы исследования точечных дефектов. Электрофизические измерения (измерение проводимости).

2.7. Влияние точечных дефектов на характеристики материалов. Практические применения твердых тел, содержащих контролируемый тип дефектов в контролируемом количестве. Твердотельные лазеры, люминофоры, примесные полупроводники, твердые электролиты.

Влияние точечных дефектов на химические реакции в твердых телах.

3. Дислокации.

3.1. Поворотные и трансляционные дислокации. Вектор Бюргерса. Метод контура Бюргерса.

Краевые и винтовые дислокации. Смешанные дислокации. Дислокационные петли.

Единицы измерения концентрации дислокаций.

3.2. Основные виды движения дислокаций.

Скольжение дислокаций. Напряжение Пайерлса-Набарро в металлах, ионных и ковалентных кристаллах. Зависимость напряжения Пайерса-Набарро от температуры.

Переползание дислокаций. Влияние температуры на переползание дислокаций.

3.3. Искажения атомной и электронной структуры вблизи дислокаций.

3.4. Взаимодействие дислокаций друг с другом. Силы, действующие между дислокациями.

Аннигиляция дислокаций. Образование дислокационных диполей. Полигонизация. Образование дислокационных сеток.

3.5. Упругая энергия дислокаций. Стабильные и нестабильные дислокации. Правило Франка.

3.6. Причины возникновения дислокаций в кристаллах. Источник Франка-Рида.

3.7. Взаимодействие дислокаций с примесями. Атмосфера Коттрелла. Атмосфера Судзуки. Атмосфера Снука. Атмосфера Дебая-Хюккеля. Влияние примесей на подвижность дислокаций.

- 3.8. Влияние дислокаций на механические свойства твердых тел. Роль дислокаций в релаксации механических напряжений.
- 3.9. Экспериментальные методы исследования дислокаций.
- 3.10. Влияние дислокаций на химические реакции в кристаллах.
4. Другие протяженные дефекты: дефекты упаковки, плоскости кристаллографического сдвига.

5. Различные границы раздела.

- 5.1. Поверхность твердых тел.
Поверхностная энергия кристалла. Равновесный и неравновесный габитус. Искажения структуры в поверхностных слоях. Дефекты поверхности. Поверхностные электронные состояния. Экспериментальные методы исследования поверхности. Роль поверхности в химических реакциях твердых тел. Различная реакционная способность разных граней кристалла. Влияние состояния поверхности на реакции в объеме твердого тела. Влияние объемных свойств на реакции на поверхности.
- 5.2. Поверхность раздела твердое - жидкость.
Основные процессы, происходящие на границе раздела. Строение жидкости и строение твердого тела вблизи границы раздела. Основные типы взаимодействия твердых тел с жидкостями. Смачивание, растворение, химические реакции. Способы влияния на взаимодействие твердых тел с жидкостями за счет:
а) модифицирования жидкости;
б) воздействия на твердое тело.
Практическое значение управления взаимодействием «твердое тело — жидкость».
- 5.3. Поверхность раздела двух твердых тел.
Скачок электрического потенциала. Электрон дырочные равновесия и равновесия точечных дефектов на границе раздела. Механические напряжения на границе раздела. Роль границ раздела в материаловедении. Композиты. Нанокompозиты. Роль границ раздела в развитии химических реакций. Гетерогенные химические реакции. Автолокализация химических реакций в твердых телах. Проблемы изучения кинетики гетерогенных реакций.

6. Заключение.

- 6.1. Основные факторы, влияющие на реакции с участием твердых веществ.
- 6.2. Методы управления развитием реакций в твердых веществах.

Список литературы.

1. Болдырева Е.В. Описание симметрии кристаллических структур. Новосибирск: Изд-во Новосиб. ун-та, 1993.
2. Химия твердого тела. Отв. ред. В.В. Болдырев. Учебное пособие для студентов-химиков. Новосибирск: Изд-во Новосиб. ун-та, 1979.
3. Вест А. Химия твердого тела и ее приложения. В 2-х томах. М.: Мир, 1988.
4. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978.
5. Ляхов Н.З. Химия твердого тела. Новосибирск: Изд-во Новосиб. ун-та, 1991.
6. Павлов С.В., Болдырева Е.В. Типовые задачи по химии твердого тела. Рентгенография. Новосибирск: Изд-во Новосиб. ун-та, 1998.
7. Хенней Н. Химия твердого тела. М.: Мир, 1971.
8. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. М.: Мир, 1973.
9. Бокий Г.Б. Кристаллохимия. М.: Наука, 1971.
10. Зоркий П.М. Архитектура кристаллов. М.: Наука, 1968.
11. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978.
12. Лидьярд А. Ионная проводимость кристаллов. М.: Иностран. лит., 1962.
13. Китайгородский А.И. Молекулярные кристаллы. М.: Наука, 1971.
14. Мейер К. Физико-химическая кристаллография. М.: Металлургия, 1972.
15. Новиков И.И., Розин К.М. Кристаллография и дефекты в кристаллической решетке. М.: Наука, 1990.
16. Порай-Кошиц М.А. Основы структурного анализа химических соединений. М.: Высш. шк., 1989.
17. Пушаровский Д.Ю. Рентгенография минералов. М.: ЗАО «Геоинформмарк», 2000.
18. Современная кристаллография / Под ред. Б.К. Вайнштейна. М.: Наука, 1979.
19. Третьяков Ю.Д. Твердофазные реакции. М.: Химия, 1978.
20. Шаскольская М.П. Кристаллография. М.: Высш. шк., 1984.
21. Парсонидж Н., Стейвли Л. Беспорядок в кристаллах. М.: Мир, 1982.

Теоретическая электрохимия и инструментальные методы анализа И.В. Миронов

1. Основные понятия электрохимии и электрохимических методов анализа

Химический и электрохимический способы проведения химической реакции. Гальванический элемент. Электрод. Электролит. Электрохимические цепи. Физические цепи. Концентрационные цепи: с переносом и без переноса. Равновесные и неравновесные электрохимические цепи. Основные виды химических источников тока: первичные, вторичные, топливные элементы. Электролиз. Электросинтез.

Классификация электрохимических методов анализа. Сопоставление их основных метрологических характеристик с известными инструментальными методами.

2. Равновесные электрохимические системы.

Причины возникновения потенциала на границе раздела фаз. Электростатические потенциалы фазы: внутренний, внешний, поверхностный. Гальвани- и Вольта- потенциал. Электрохимический потенциал. ЭДС гальванической цепи как сумма межфазных скачков потенциалов. Расчет ЭДС и состава электрохимической цепи. Методы и аппаратура для измерения ЭДС. Компенсационный метод. Метод с использованием операционных усилителей. Стандарты ЭДС. Элемент Вестона. Правильно разомкнутая цепь.

Связь изменения потенциала Гиббса и ЭДС. Уравнение Нернста. Стандартный водородный электрод. Соглашение о знаке ЭДС гальванической цепи. Электродные потенциалы: стандартный и формальный. Классификация электродов. Электроды I, II и III рода. Редокс и газовые электроды. Индикаторные электроды и электроды сравнения в электрохимических методах анализа.

Процессы переноса в электролитах. Диффузия, миграция, конвекция. Электропроводность: удельная и молярная. Зависимость электропроводности от концентрации. Подвижность иона. Аномальные подвижности. Коэффициент диффузии иона. Числа переноса. Электропроводность при бесконечном разбавлении. Закон Кольрауша. Модели электропроводности.

Кондуктометрия. Схемы и аппаратура для измерения электропроводности. Прямая кондуктометрия и кондуктометрическое титрование. Возможности и ограничения кондуктометрии как метода анализа.

Типы жидкостных соединений. Диффузионный потенциал. Вывод уравнения для диффузионного потенциала. Уравнение Гендерсона. Способы уменьшения диффузионного потенциала.

Мембранные равновесия. Потенциал Доннана. Равновесия и потенциал на границе двух несмешивающихся жидкостей. Мембранный потенциал.

Ионоселективные электроды. Электроды на основе твердых ионообменников. Стекланный электрод. Основной и мешающий ионы. Простая теория Никольского для стекланный электрода. Уравнение Никольского. Потенциометрические коэффициенты селективности. Электродная функция. Кислотная и щелочная ошибки стекланный электрода. Предел обнаружения. Методы определения коэффициентов селективности. Электроды на основе жидких ионообменников. Матрица коэффициентов селективности. Электроды на основе нейтральных переносчиков. Электроды на основе галоидных солей серебра. Фторид-селективный электрод. Газочувствительные и ферментные электроды.

Потенциометрия. Прямая потенциометрия и потенциометрическое титрование. Метод добавок. Возможности и ограничения потенциометрии как метода анализа.

3. Неравновесные электрохимические системы

Причина возникновения двойного электрического слоя (ДЭС). Адсорбция на границе раздела фаз. Потенциал нулевого заряда (п.н.з.). Методы изучения ДЭС: адсорбционный; метод электрокапиллярных кривых; методы, основанные на изучении емкости ДЭС. Модели строения ДЭС: Гельмгольца, Гуи-Чапмена, Штерна, Грэма. Современные представления о строении двойного электрического слоя. Плотный и диффузный слои. Токи заряжения.

Кинетика электродных реакций. Основные понятия электрохимической кинетики. Стадийность электродного процесса. Лимитирующая стадия. Поляризация. Перенапряжение. Основные положения теории замедленного разряда. Вывод уравнения Батлера-Фольмера. Гетерогенная константа скорости переноса электрона. Коэффициент переноса электрона. Ток обмена. Поляризационная кривая. Уравнение Тафеля. Влияние строения двойного электрического слоя на скорость электрохимической реакции.

Уравнение Фрумкина. Исправленные тафелевские зависимости. Электродные реакции, контролируемые скоростью массопереноса. Диффузия, миграция, конвекция. Уравнение Нернста-Планка. Стационарная диффузия. Концепция стационарного слоя Нернста. Коэффициент массопереноса. Уравнение поляризационной кривой. Вывод уравнений обратимой и необратимой поляризационных кривых. Потенциал полуволны. Критерий обратимости. Смешанный (коррозионный, стационарный) потенциал. Вывод уравнения для стационарного потенциала для различных частных случаев.

Электрохимические методы, осложненные гомогенными химическими реакциями. Предшествующая химическая реакция. Квазиравновесный и квазистационарный случаи. Концепция реакционного слоя Визнера-Брдички. Кинетический ток. Уравнение кинетической волны. Последующая химическая реакция. Каталитические реакции. Определение констант скоростей гомогенных химических реакций электрохимическими методами.

Электрохимические методы, основанные на протекании электродных реакций. Организация электрохимического эксперимента. Классификация электрохимических методов анализа. Хроноамперометрия. Линейная полубесконечная диффузия к плоскому электроду. Уравнение Коттрела. Аналитическое применение хроноамперометрии. Полярография. Уравнение Ильковича. Уравнение обратимой и необратимой полярографических волн. Полярографические критерии обратимости. Информативность полярографической волны. Ток заряжения. Достоинства, недостатки и области применения классической полярографии.

Специальные полярографические и вольтамперометрические методы. Импульсная полярография. Переменноточковая полярография. Вольтамперометрия с линейной разверткой потенциала и циклическая вольтамперометрия (ЦВА). Обратимая и необратимая волна в ЦВА. Ток заряжения в ЦВА. Достоинства ЦВА. Осцилографическая полярография. Амперометрия и амперометрическое титрование. Методы, основанные на электролизе: кулонометрия, электрогравиметрия, электроразделение. Потенциостатические методы. Расчет потенциала и времени электролиза, необходимых для достижения определенной степени превращения. Гальваностатические методы. Выход по току. Кулонометрическое титрование. Гидродинамические методы. Электролиз на вращающемся дисковом электроде. Инверсионная вольтамперометрия.

4. Оптические методы анализа

Спектроскопические методы. Адсорбция и эмиссия. Оптическая область. Спектр. Закон Бугера-Ламберта-Бера. Использование в анализе. Изучение превращений в растворе: матрица плотностей, определение стехиометрии и констант устойчивости форм в растворе. Устройство приборов для оптической спектроскопии. Основные узлы: источники излучения, монохроматоры, фотоприемники. Отклонения (кажущиеся) от закона Бера. Характеристики полосы поглощения - положение, интенсивность, форма. Правила запрета. Аналитические выражения для формы полосы и факторы, влияющие на ее ширину. Типы полос в молекулярных системах. Переходы в молекулах органических соединений. Хромофоры, ауксохромы. Влияние сопряжения. Полосы переноса заряда в комплексных соединениях, d-d и f-f полосы. Влияние положения центрального атома в группе и периоде на энергию перехода. Влияние природы лигандов. Спектрохимический ряд. Диаграммы Танабе-Сугано. Полосы переноса на растворитель (CTTS). Влияние температуры и среды на характеристики полос. Атомная эмиссионная и абсорбционная спектроскопия (АЭС и ААС). Достоинства и недостатки методов. Законы светопоглощения и светоиспускания. Форма линий атомных спектров - Лоренцово, Допплерово уширения, Штарк-эффект. Люминесценция. Ее виды. Стоксово смещение. Квантовый выход. Использование в анализе. Тушение. Вопросы математической обработки результатов спектрофотометрического эксперимента. Экспериментальные зависимости и работа с ними. Оценка параметров моделей по МНК и ММП. Весовой МНК. Распространение ошибок. Погрешности спектрофотометрического анализа, влияние погрешностей первичных данных, числа измерений.

Список литературы

1. Савинова Е.Р., Коваленко Г.А., Венедиктов А.Б. Равновесные электрохимические системы. Сборник задач. Часть 1. Новосибирск, НГУ, 2000.
2. Савинова Е.Р., Коваленко Г.А., Венедиктов А.Б. Неравновесные электрохимические системы. Сборник задач. Часть 2. Новосибирск, НГУ, 2001.
3. Дамаскин Б.Б., Петрий О.А., Цирлина Г.А. Электрохимия. М.: Химия. 2001.
4. Будников Г.К., Майстренко В.Н., Вяселев М.Р. Основы современного электрохимического анализа. М.: Мир, Бином. 2003.

5. Электрохимия и инструментальные методы анализа. Методические указания. Вып. I. Новосибирск, НГУ, 1987.
6. Плэмбек Дж. Электрохимические методы анализа. Основы теории и применение. М.; Мир, 1985.
7. Бонд А.М. Полярографические методы в аналитической химии. М.: Химия, 1983.
8. Корыта И., Штулик К. Ионоселективные электроды. М.: Мир, 1989.
9. Морф В. Принципы работы ионоселективных электродов и мембранный транспорт. М.: Мир, 1985.
10. Основы оптических методов анализа. Методическое пособие. Новосибирск, НГУ, 1991.
11. Скуг Д., Уэст Д. Основы аналитической химии. М.: Мир, 1979, т.2.
12. Васильев В.П. Аналитическая химия. М.: Высшая школа, 1980, т.2.
13. Берсукер И.Б. Электронное строение и свойства координационных соединений. Л.: Химия, 1976, с. 67-110, 242-276.
14. Лебедева В.В. Техника оптической спектроскопии. М.: МГУ, 1977.