

КАФЕДРА ХИМИЧЕСКОЙ И БИОЛОГИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Заведующий кафедрой: д-р физ.-мат. наук, проф. С. А. Дзюба
Направления подготовки: 510402 – Физика атомов и молекул, 510406 – Биофизика
Базовый институт: Институт химической кинетики и горения
Сервер кафедры: <http://www.hp.nsu.ru>

История кафедры

В 1962 г. акад. В. В. Воеводским на кафедре общей физики была создана специализация «молекулярная и биологическая физика». Ее руководителем стал канд. физ.-мат. наук, доц. А. И. Бурштейн (в настоящее время проф. Вейцмановского института, Израиль). Специализация обеспечивала подготовку кадров для многих лабораторий химического и физико-химического комплекса институтов Академгородка, которые работали над проблемами, лежащими на стыке химии и физики, и требовали для своего решения совместных усилий специалистов-химиков и специалистов-физиков.

Исследования на стыке наук стали очень популярны во второй половине XX в., особенно был заметен прогресс на границах физики и химии, химии и биологии. Грандиозное продвижение в этих науках в первой половине XX в. несколько обнажило фланги, и естественным образом началось сочленение и выравнивание линии фронта. Попутно, однако, всегда совершается и другой процесс, возможно, еще более важный по последствиям. Речь идет о проникновении одних наук в другие, ассимиляции идей, результатов и образа мышления разных дисциплин. Свершившаяся в XIX в. математизация физики изменила ее лицо до неузнаваемости. Нечто подобное началось и вследствие внедрения физики и математики в химию. В свою очередь и химические результаты оказывали влияние на физиков. Например, хорошо известная колебательная реакция Белоусова – Жаботинского сильно способствовала созданию правильных представлений в нелинейной неравновесной термодинамике.

За время существования специализации на ней получили образование 120 чел., из них 20 чел. впоследствии защитили докторские диссертации. В это время на кафедре работали один профессор, шесть доцентов и три ассистента.

В 1973 г. решением ученого совета НГУ специализация была преобразована в кафедру химической физики. Заведующим кафедрой стал д-р хим. наук, доц. Ю. Н. Молин, который руководил кафедрой до 1995 г. (в настоящее время академик, советник РАН).

С 1995 г. кафедрой заведует д-р физ.-мат. наук, проф. С. А. Дзюба, который с 2003 г. является также директором Института химической кинетики и горения СО РАН.

Бессменным секретарем кафедры в течение всех лет ее существования (а также в годы специализации) является Р. И. Ратушкова. Ее высокая компетентность в научно-педагогических вопросах, индивидуальный подход к студентам и незаурядные человеческие качества снискали глубокое уважение среди профессорско-преподавательского состава НГУ, студентов и многочисленных выпускников.

В течение всех лет кафедра пользовалась большой популярностью среди студентов. Она превратилась в целостный коллектив с высококвалифицированным составом преподавателей и сложившимся учебным процессом. Спецкурсы кафедры всегда отличались очень большой широтой охвата – начиная от теории элементарных атомно-молекулярных процессов и квантовой кинетики и кончая общей и молекулярной биологией.

За время существования кафедры подготовлено 483 выпускника (в среднем 12 специалистов в год). Из них защитили кандидатские диссертации 256 чел. (53 %), стали докторами наук 42 чел. (9 %), членами Российской Академии наук – двое: акад. Р. З. Сагдеев и чл.-корр. РАН Н. З. Ляхов, лауреатами Государственных премий СССР и России – 6 чел. Несколько десятков выпускников занимаются исследованиями в ведущих лабораториях США, Европы и Японии. В разные годы на кафедре работали такие известные ученые, как акад. В. В. Воеводский, акад. Ю. Н. Молин, акад. Р. З. Сагдеев, чл.-корр. РАН К. М. Салихов и многие другие.

Направления подготовки студентов

С начала организации кафедры подготовка студентов была ориентирована не на узкое специальное образование, а прежде всего на развитие широкого кругозора в области химической физики. Это связано со спецификой исследовательской деятельности. Для успешной работы физик, с одной стороны, должен уметь разговаривать с химиком (или биохимиком) на его языке, а с другой – ориентироваться в достижениях различных областей «чистой» физики, чтобы использовать их в своих исследованиях.

Дипломная практика студентов кафедры проходит в нескольких научных институтах:

- Институте химической кинетики и горения (базовый институт);
- Международном томографическом центре;
- Институте катализа им. Г. К. Борескова;
- Институте цитологии и генетики;
- Институте неорганической химии.

Большое число базовых институтов обуславливает широкий диапазон научных исследований, проводимых студентами. Приведем для примера три дипломных работы выпускников 1983 г., резко отличающихся по профилю. Так, в дипломе О. П. Цыбы был разработан метод расчета вторичной структуры глобулярных белков по их аминокислотным последовательностям. Актуальность этой работы обусловлена тем, что знание вторичной структуры белков необходимо для решения широкого круга задач молекулярной биофизики, для интерпретации биохимических экспериментов. О. П. Цыба разработал оригинальный метод, основанный на учете основных физико-химических факторов, обеспечивающих формирование и стабилизацию вторичной структуры.

Перед студентом Е. М. Глебовым была поставлена задача – создание лазерного спектрометра для изучения кинетики быстрых реакций и отработки методики экспериментов на нем. В те годы фотохимия вступала в новую фазу развития, обусловленную внедрением лазерной техники, что открывало пути для изучения быстрых реакций. Студентом Е. М. Глебовым была разработана система запуска высоковольтных импульсных ламп в установке внутрирезонаторной лазерной спектроскопии. Им были рассчитаны параметры высоковольтного управляемого разряда на напряжение до 30 кВ и блок-схема задающего генерато-

ра. В настоящее время канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник ИХК и Г. Е. М. Глебов успешно продолжает фотохимические исследования, одновременно занимается и педагогической деятельностью, являясь доцентом кафедр общей физики и физической химии НГУ.

В работе студента Б. М. Таджикова было экспериментально исследовано новое явление – квантовые биения в рекомбинации свободных радикалов, обусловленные сверхтонким взаимодействием. В эти годы в химической физике формировалась новая область исследований, связанная с влиянием магнитных полей на химические реакции. Впоследствии эта область химической физики получила название спиновой химии. Целью работы Б. М. Таджикова было использование явления квантовых биений для получения количественной информации о скоростях реакций в треках заряженных частиц. В настоящее время Б. М. Таджиков продолжает научные исследования в США.

В 1996 г. кафедра (как и весь факультет) перешла на двухступенчатое образование. В результате спецкурсы кафедры были разделены на две группы. Более общие достались бакалаврам. Более детально *специальные курсы* стали читаться в магистратуре.

Оптическая молекулярная стереоскопия

3-й курс, 5-й семестр

36 ч

д-р хим. наук, проф. Ю. И. Наберухин

Теория собственных частот, интенсивностей и поляризации в спектрах инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния. Корреляционная теория формы спектральных линий. Характеристические группировки и частоты. Спектроскопия водородной связи. Основные закономерности люминесценции. Тепловой, контактный и дистанционный механизмы тушения люминесценции. Межмолекулярная миграция энергии.

Химическая термодинамика

3-й курс, 5-й семестр

36 ч

д-р физ.-мат. наук, доц. П. А. Пуртов

Термохимия. Условие химического равновесия. Закон действия масс. Летучесть. Идеальные и разбавленные растворы. Осмос.

Активность и коэффициент активности. Уравнение Гиббса–Дюгема. Теория Дебая–Хюккеля. ЭДС гальванического элемента. Буферные растворы. Адсорбционное равновесие. Полимолекулярная адсорбция. Скорость возникновения энтропии в неравновесных химических реакциях. Сопряжение реакций. Неравновесные стационарные состояния. Критерий эволюции Гленсдорфа–Пригожина. Химические колебания. Диссипативные структуры.

Введение в молекулярную биофизику

3-й курс, 5-й семестр

36 ч

д-р биол. наук, доц. В. А. Гусев

В курсе освещены разделы, относящиеся к основам самовоспроизведения живых систем: репликации и транскрипции ДНК-матриц, трансляции РНК-матриц, энергообеспечению этих процессов, структурной и функциональной симметрии живых систем, происхождению и эволюции живых систем с единым генетическим кодом, поиску живых систем в космосе.

Химическая кинетика

3-й курс, 6-й семестр

32 ч лекций и 16 ч семинаров

д-р хим. наук, доц. А. В. Бакланов

Формальная кинетика простых реакций. Формальная кинетика сложных реакций. Открытые системы. Неизотермические реакции. Механизм элементарного превращения. Теория переходного состояния. Туннельный эффект. Особенности реакций в жидкости. Типы элементарных реакций. Неразветвленные цепные реакции. Разветвленные цепные реакции. Химическая индукция и катализ. Фотохимические процессы. Радиационно-химические процессы.

Физическая органическая химия

3-й курс, 6-й семестр

32 ч

д-р хим. наук А. В. Зибарев

Предмет физической органической химии. Типы химических связей в органических соединениях и концепция гибридизации. Энергия ионизации, сродство к электрону, абсолютная жесткость по Пирсону, электроотрицательность по Малликену. Основные типы реагентов в органической химии: нуклеофилы, электрофилы и радикалы.

Влияние структуры молекулы на механизмы реакций. Электронные и стерические эффекты. Индуктивный эффект и его основные особенности. Энергетика и кинетика химических реакций. Уравнение для изменения свободной энергии Гиббса в ходе химической реакции. Теория Пирсона абсолютной жесткости. Реакции замещения, присоединения и отщепления. Перегруппировки в насыщенных и ненасыщенных системах.

Спектроскопия магнитного резонанса

4-й курс, 7-й семестр

36 ч лекций и 36 ч семинаров

д-р физ.-мат. наук, проф. С. А. Дзюба

Понятие магнитного резонанса. ЭПР в жидкости. Контактное СТВ в органических радикалах. ЯМР в жидкости. Химический сдвиг. Ядерные спин-спиновые взаимодействия. ЯМР в твердых телах. Электрические квадрупольные эффекты. ЭПР радикалов в твердых телах. ЭПР триплетных состояний. Спин-орбитальное взаимодействие. ЭПР ионов переходных металлов. Форма линии и молекулярное движение. Спиновая релаксация. Двойной резонанс. Химическая поляризация электронов и ядер. Свободная индукция и спиновое эхо. Бесскважинная ЯМР-разведка подземной воды. Импульсная Фурье-спектроскопия. Двумерная Фурье-спектроскопия. Медицинская магнитно-резонансная томография.

Квантовая механика молекул

4-й курс, 7-й семестр

36 ч лекций и 36 ч семинаров

канд. физ.-мат. наук Д. В. Стась

Курс квантовой механики молекул занимает особое место в цикле физико-химических дисциплин. Приступающие к освоению курса студенты-физики уже имеют за плечами годовые общие курсы квантовой механики и методов математической физики с элементами теории групп, семестровые курсы атомной физики, спектроскопии магнитного резонанса и органической химии, в магистратуре же им предстоит освоить курсы теории элементарных химических реакций и квантовой химии. Таким образом, студенты к началу курса имеют за плечами значительную теоретическую подготовку, а на старших курсах им предложат дисциплины, охватывающие самые современные приложения квантовой механики в задачах хими-

ческой физики. Однако оказывается, что при такой солидной базе студенты часто не способны решать практические задачи – слишком велик разрыв между чистыми и точно решаемыми задачами общего курса квантовой механики и абстрактной теории групп и современными методами вычислительной квантовой химии, с одной стороны, и требующими большого количества неочевидных приближений, часто очень громоздких при лобовом решении реальными задачами – с другой. Данный курс призван дать студентам навыки решения практически важных задач.

Квантовая химия

магистратура, 5-й курс, 2-й семестр
32 ч лекций и 16 ч семинаров
д-р хим. наук, доц. Н. П. Грицан

Уравнения самосогласованного поля. Уравнения Хартри–Фока–Рутана. Системы базисных функций. Полуэмпирические квантовохимические методы. Проблема учета электронной корреляции: методы конфигурационного взаимодействия и теории возмущений. Методы оптимизации геометрии молекул. Расчет поверхностей потенциальной энергии и моделирование химических реакций. Методы расчета магнитно-резонансных параметров. Расчеты электронных спектров поглощения и свойств возбужденных состояний.

Основы теории элементарных реакций

магистратура, 1-й курс, 1-й семестр
54 ч
д-р физ.-мат. наук, проф. А. Б. Докторов

Основы квантово-статистического описания. Квантово-классический подход. Адиабатическое приближение. Неадиабатическая связь. Полуклассическая теория столкновений. Термическая релаксация. Мономолекулярные реакции. Бимолекулярные реакции. Особенности реакций в конденсированных средах. Теория элементарного акта. Кинетика реакций, ускоренных подвижностью реагентов.

Квантовая кинетика

магистратура, 1-й курс, 1-й семестр
36 ч
канд. физ.-мат. наук, доц. В. А. Морозов

Формализм матрицы плотности. Методы описания случайных процессов. Гауссовские и Марковские случайные процессы.

Уравнения Феллера, Фоккера–Планка. Стохастические дифференциальные уравнения. Динамические системы в случайном внешнем поле. Расцепление корреляций в случае быстрофлуктуирующих воздействий. Ударное приближение. Марковская теория внезапной модуляции. Кинетические уравнения диффузионно-контролируемых реакций в жидкой фазе. Флуктуационная кинетика. Кинетика магнито-спиновых явлений в жидкой фазе. Магнитные эффекты в кинетике рекомбинации радикальных пар, триплет-триплетной аннигиляции. Колебательная химическая кинетика. Предельные циклы, странные аттракторы, переход к хаосу. Химические волны.

Химическая физика горения

магистратура, 36 ч
д-р физ.-мат. наук, проф. О. П. Коробейничев

Термодинамика процессов горения. Расчет равновесных температур и состава продуктов горения. Самовоспламенение и зажигание. Цепной и тепловой взрывы. Теория Семенова. Пламена, макроскопическое поведение пламен. Исследование химической структуры пламени, зондовые методы, лазерная диагностика. Горение конденсированных систем: взрывчатых веществ, энергетических материалов, ракетных топлив.

Физика жидкого состояния

магистратура, 1-й курс, 2-й семестр
32 ч
д-р хим. наук, проф. Ю. И. Наберухин

Формализм функций распределения в статистической теории жидкостей. Интегральные уравнения для них: приближения гипер-цепное, Перкуса-Йефика и Мартынова-Саркисова. Компьютерный эксперимент (методы молекулярной динамики и Монте-Карло). Методы статистической геометрии для описания структуры: многогранники Вороного и симплексы Делоне). Перколяционный анализ. «Средний порядок»: закономерности строения жидкостей и аморфных твердых тел.

Спиновая химия

магистратура 32 ч
д-р физ.-мат. наук П. А. Пуртов

Модель радикальных пар. Квантовая когерентность. Синглет-триплетные переходы. Влияние магнитных полей на химические

реакции. Спиновый запрет в радикальных реакциях. Магнитный изотопный эффект. Спиновый катализ. Магнитобиология. Химическая поляризация электронов (ХПЭ) и ядер (ХПЯ), теория эффектов.

Содержание курсов, безусловно, не оставалось неизменным, поскольку они в значительной мере отслеживали тенденции развития мировой науки. Так, например, если в 60-е годы XX в. теория элементарных реакций включала в основном процессы в газовой фазе, то к 90-м годам теория реакций в конденсированной фазе обогатилась множеством результатов. Этот прогресс был отслежен в курсе «Основы теории элементарных реакций». Если в 60-е годы химическую термодинамику называли «наукой о химическом равновесии», то в последующие годы ситуация существенно изменилась. Именно в это время была создана неравновесная химическая термодинамика. В курс «Химическая термодинамика» этот материал был внесен. Заметный прогресс имел место в спектроскопии ЭПР и ЯМР. Во-первых, были развиты многочисленные импульсные методы, во-вторых, интересы специалистов в значительной мере сместились в двух- и трехмерную спектроскопию. В курсе «Спектроскопия магнитного резонанса» эти тенденции нашли свое отражение. Появление в программе магистратуры дополнительного спецкурса «Компьютерная квантовая химия» обязано широкому внедрению методов квантовой химии в исследование химических процессов.

Нестандартные формы обучения

С момента организации на кафедре был организован нестандартный лабораторный практикум по физико-химическим методам исследований на приборах и оборудовании, специально приобретенных кафедрой для практикума. Цель практикума – знакомство с современными приборами и овладение основами новейших физико-химических исследований. Студент должен выполнить экспериментальную задачу, которая является фрагментом (или повторяет результаты) актуальных исследований, проводимых в соответствующей области науки. При подборе работ используются самые новые экспериментальные достижения. Например, работа по изучению ядерного магнитного

резонанса построена таким образом, что дает возможность продемонстрировать студентам такие эффекты, как химическая поляризация спинов. Кроме выполнения конкретной работы от студента требуется отчетливое понимание физических основ и области применения данного метода с тем, чтобы он имел возможность ориентироваться в широком диапазоне методов при решении своих научных задач. Практикум начинается с третьего курса, что позволяет студентам не только приобрести навыки экспериментальной работы, но и в соответствии со своими интересами сделать выбор базового института. Практикум все время находил (и продолжает находить) положительный отклик среди студентов.

На пятом курсе в девятом семестре студенты начинают участвовать в научном физико-химическом семинаре (более 20 лет им руководил акад. Ю. Н. Молин, в настоящее время семинаром руководит д-р хим. наук, доц. А. В. Бакланов). Здесь каждый студент выступает с докладом, связанным с темой своей научной работы. Это либо литературный обзор по теме дипломной работы, либо аргументированное изложение постановки задачи исследования, либо законченный этап работы, выполненный дипломником. В обсуждении доклада участвуют все студенты. Цель семинара – учить студентов ясно излагать свои мысли, результаты работы, ориентироваться в ответах на вопросы, участвовать в научной дискуссии, расширять кругозор. Отметим, что всем этим важным вопросам в российских вузах традиционно уделяется почему-то недостаточно внимания. Кафедре семинар дает также дополнительную возможность контролировать ход выполнения дипломной работы в течение всего семестра.

Обратная связь «студент – преподаватель»

На кафедре в течение уже многих лет ежегодно проводится анонимное анкетирование студентов с целью выяснения их мнения относительно хода учебного процесса. Студенты в свободной форме описывают свои впечатления о качестве чтения лекций, проведения семинаров и лабораторных работ, высказывают критические замечания и пожелания. Эта обратная связь положительно влияет на качество преподавания на кафедре.

Научные исследования на кафедре

Работа студентов в базовых институтах непосредственно связана с тематикой проводимых там исследований. Так, например, в базовом Институте химической кинетики и горения СО РАН исследования ведутся в различных областях химической физики и физической химии, биологической и медицинской физики. Также проводятся работы в области физико-химии горения и аэрозолеобразования, научного приборостроения.

В области химической физики, физической химии и биофизики проводится теоретическое и экспериментальное исследование механизма и кинетики химических реакций, в том числе в биологических системах, и связанных с ними проблем молекулярной физики. Особое внимание уделяется изучению свободных радикалов и роли их спинового состояния в кинетике и механизме реакций (спиновая химия). Экспериментальные исследования проводятся с помощью самых современных методов радиоспектроскопии (ядерный магнитный резонанс, электронный парамагнитный резонанс), методов лазерной фотохимии и других.

Процессы горения изучаются с точки зрения их оптимизации в различных технологических применениях, разработки эффективных методов пожаротушения и использования для утилизации вредных веществ.

Образование аэрозолей изучается главным образом с точки зрения решения экологических проблем. Изучаются фундаментальные и прикладные аспекты этих процессов.

Подробное описание вышеназванных научных направлений можно найти на сервере Института <http://www.ns.kinetics.nsc.ru>.

Для выполнения этих исследований используется современное научное оборудование, такое как спектрометры ядерного магнитного резонанса с Фурье-преобразованием: AM-250, DPX-200 (фирма Bruker, Германия), XL-200 (Varian, США), FX-90Q (JEOL, Япония), импульсный спектрометр ЭПР ESP-380 (Bruker, Германия), спектрометр ЭПР в двухмиллиметровом диапазоне длин волн ЭПР-02, спектрометр

электронного спинового эха, наносекундный флюориметр, установка для наблюдения квантовых биений в магнитном поле, установка лазерного магнитного резонанса, установка лазерного флеш-фотолиза, установка проточной цитометрии и др.

Совсем недавно в распоряжении исследователей появился разработанный в Институте ядерной физики СО РАН источник мощного терагерцового излучения на основе лазера на свободных электронах. Это совсем новая, пока неизведанная, но очень перспективная область исследований.

Студенты в ходе производственной практики в институтах учатся работать на современном научном оборудовании и непосредственно участвуют в научном исследовании. Студенты старших курсов фактически становятся полноправными участниками научного исследования и вносят таким образом весомый вклад в работу Института. При этом они сами приобретают достаточно высокую квалификацию, часто позволяющую им проводить самостоятельные исследования уже сразу по окончании учебы.

Институт химической кинетики и горения и многие другие институты СО РАН имеют хорошо налаженные международные связи со многими зарубежными университетами. Студенты непосредственно участвуют в соответствующих совместных исследованиях, что выражается, например, в многомесячных зарубежных командировках.

Дальнейшие перспективы

После окончания учебного курса выпускники, желающие работать в науке, обычно идут в аспирантуру, число мест в которой в институтах СО РАН практически не ограничено. Можно также поступать в аспирантуру НГУ. В последнее время получила распространение практика, когда институты помогают решить проблемы со съемом жилья. При условии продуктивной работы, времени обучения в аспирантуре достаточно для того, чтобы получить материал для кандидатской диссертации. Защита диссертации происходит чаще всего в самих базовых институтах.