

## Аннотация

рабочей программы учебной дисциплины «Современные проблемы физической химии»

Направление подготовки: 04.04.01. «Химия» (уровень магистратуры)

профиль «Физическая химия»

Составитель аннотации к.т.н., профессор Арчакова Р.Д.

### Кафедра химии

<b>Цель изучения дисциплины</b>	<p><b>Целями изучения дисциплины «Современные проблемы физической химии» являются:</b></p> <ul style="list-style-type: none"><li>- ознакомление магистрантов с современными проблемами физической химии, новыми разработками;</li><li>- изучение строения вещества, жидкостей, жидких кристаллов и аморфных тел, а также элементы неравновесной термодинамики, кинетики сложных процессов и другие вопросы физической химии.</li></ul> <p>Дисциплина уделяет большое внимание прикладным аспектам химической термодинамики.</p>
<b>Место дисциплины в структуре ОПОП магистратуры</b>	<p>Дисциплина «Современные проблемы физической химии» относится к Блоку 1, к части, формируемые участниками образовательных отношений; изучается в 3 семестре.</p> <p>Дисциплина «Современные проблемы физической химии» представляет собой теоретическую основу для углубленного изучения термодинамики и физической химии в целом, а также изучения таких курсов химического профиля как коллоидная химия, химическая технология, физико-химические методы исследования.</p> <p>Для ее изучения необходимы базовые знания курсов неорганической химии, квантовой химии, строения вещества, физики, математики.</p>
<b>Компетенции, формируемые в результате освоения дисциплины</b>	<p><b>В результате освоения дисциплины обучающийся должен демонстрировать следующие результаты образования:</b></p> <ul style="list-style-type: none"><li>- способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий (УК-1);</li></ul>

	<p>- способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии или смежных наук (ПК-2).</p>
<p><b>Содержание дисциплины</b></p>	<p><b>Тема.1. Строение вещества</b>  Периодическая система элементов. Современный вид периодической системы Д.И.Менделеева. Особые свойства элементов, открывающих 1s-, 2p-, 3d, 4f-элементов. Электроны атомных орбиталей 1s-, 2p-, 3d, 4f-элементов.  Электронное строение соединений переходных и непереходных элементов. Делокализованные и локализованные валентные электроны взаимодействия. Правило четности. Вторичная периодичность. Периодическая система химических элементов как упорядоченное множество.</p> <p><b>Тема 2. Геометрия молекул. Теория и электронно-стерические модели</b>  Модель локализованных электронных пар. Равновесные геометрические конфигурации молекул типа <math>AL_m</math>.  Искажения геометрического строения вследствие отталкивания различающихся по размеру и подвижности локализованных электронных пар. Примеры.  Модель максимального перекрывания. Гибридизация валентных атомных орбиталей. Неэквивалентные гибридные атомные орбитали.  Пространственная направленность химической связи. Достоинства и ограничения модели.  Модель орбитально-дефицитных связей на примере молекул <math>AL_k</math> непереходных элементов. Геометрия молекул в теории канонических молекулярных орбиталей. Вычисление полных энергий молекулы для различных ее геометрических конфигураций.  Определение стабильной молекулярной геометрии. Диаграммы Милликена-Уолша. Правила заполнения молекулярных орбиталей. Вибронное строение молекул. Вибронные эффекты и геометрическая форма молекул.  Конфигурационная устойчивость молекул. Геометрия координированных лигандов.</p> <p><b>Тема 3. Строение жидкостей, жидких кристаллов и аморфных тел.</b>  Основные особенности строения жидкостей и аморфных веществ. Ближний порядок. Функции радиального распределения.  Основные типы сил межмолекулярного взаимодействия. Мезоморфные фазовые состояния вещества. Примеры.  Жидкие кристаллы. Основные классы органических соединений-мезогенов. Фазовые превращения в жидких кристаллах. Вариация температуры нематико-изотропного перехода в гомологических рядах каламитных жидких кристаллов.  Физико-химические свойства жидких кристаллов. Жидкокристаллические структуры в биологических системах. Структура ламелл. Бислои и другие сложные надмолекулярные образования, переходы между ними.  Взаимодействие липид-белок, бислойные липидные</p>

мембраны. Жидкокристаллическое состояние макроскопических биообъектов.

#### **Тема 4. Молекулярные (надмолекулярные) кристаллы.**

Строение молекулярных кристаллов. Клатраты. Энергия решетки. Межмолекулярные универсальные (Ван-дер-Ваальсовы) и специфические взаимодействия. Водородная связь. Эмпирические оценки энергии молекулярного кристалла.

Межмолекулярные потенциалы взаимодействия. Потенциал Леннарда-Джонса. Метод атом-атомных потенциалов.

Гомомолекулярные кристаллы.

Адсорбционное и химическое модифицирование поверхности адсорбентов. Типы адсорбентов. Графитированная термическая сажа (ГТС). Особенности химического, геометрического и фазового строения поверхности ГТС.

Применение ГТС и её модифицированных аналогов для газохроматографического разделения структурных и пространственных изомеров. Карбохромы, карбораки, углеродные молекулярные сита, активные угли.

Наноразмерные углеродные материалы: фуллерены, углеродные нанотрубки, углеродные волокна, графен. Их использование в современных сорбционных и нанотехнологиях.

Ионные адсорбенты. Кристаллические непористые ионные адсорбенты. Сульфат бария и сульфид переходных металлов.

Адсорбция на ионных адсорбентах молекул органических соединений различного электронного и пространственного строения.

Цеолиты и оксиды. Тонкопористые ионные -цеолиты. Особенности пористой структуры цеолитов, их молекулярно-ситовые свойства.

Влияние полярности молекул адсорбатов на их адсорбцию на цеолитах. Адсорбенты-оксиды.

Кремнеземные адсорбенты (силикалит, аэросил, силохромы, силикагели, пористые стекла) и их адсорбционные свойства. Гидроксилирование и дегидроксилирование поверхности кремнеземов. Химическое модифицирование поверхности кремнеземных адсорбентов.

Оксид алюминия, его адсорбционные свойства. Органические пористые адсорбенты. Получение неполярных и полярных органических пористых адсорбентов. Регулирование пористой структуры. Наноструктура пор.

#### **Тема 5. Теории адсорбции газов и паров. Термодинамика адсорбции -8 час.**

Адсорбенты с однородной и неоднородной поверхностью. Типы поверхностных неоднородностей и влияние неоднородностей на адсорбцию.

Локализованная адсорбция газов и паров на однородной поверхности. Теории Генри, Ленгмюра и Брунауэра-Эммета-Теллера.

Мономолекулярная и полимолекулярная адсорбция. Классификация изотерм полимолекулярной адсорбции.

Влияние межмолекулярных взаимодействий "адсорбат-адсорбент" и "адсорбат-адсорбат" на форму локализованной адсорбции.

Нелокализованная адсорбция на однородной поверхности. Уравнение состояния монослоя, связь с уравнением изотермы адсорбции. Уравнение Хилла.

Двумерные фазовые переходы в адсорбционном слое.

Адсорбция паров в порах. Мезопоры. Капиллярная конденсация. Термодинамические и кинетические причины, приводящие к капиллярно-конденсационному гистерезису.

Экспериментальное определение распределения пор по размерам. Адсорбция в микропорах. Теория Поляни. Теория объемного заполнения микропор, уравнение Дубинина-Радушкевича. Уравнение Бедкера-Фрейндлиха как предельный случай для широкопористых адсорбентов.

#### **Тема 6. Термодинамика адсорбции из газовой фазы на твердом адсорбенте -8час.**

Термодинамическое и статистическое описание адсорбционной системы.

Метод Гиббса: избыточная гиббсовская адсорбция, её физический смысл.

Термодинамические характеристики адсорбции, их физический смысл, зависимость от степени заполнения поверхности.

Предельно малое ("нулевое") заполнение поверхности, константа Генри адсорбционного равновесия.

Газохроматографический метод изучения термодинамики адсорбции в области "нулевого" заполнения поверхности. Молекулярно-статистическая теория адсорбции. Статистико-термодинамическое описание адсорбции. Анализ адсорбционного равновесия с использованием большого канонического ансамбля.

Вириальное выражение для гиббсовской адсорбции. Связь константы Генри с потенциальной энергией молекулы адсорбата в силовом поле адсорбента.

Молекулярно-статистическая теория адсорбции на адсорбентах с однородной плоской поверхностью. ГТС как модельный адсорбент для молекулярно-статистических расчетов.

Общие принципы построения потенциальной функции межмолекулярного взаимодействия "адсорбат-адсорбент".

#### **Тема 7. Хроматография. Хроматографический адсорбционный анализ -6 час.**

Сущность метода хроматографии. Хроматограмма.

Молекулярная хроматография. Ионообменная хроматография

Разделение смесей.

	<p>Газовая хроматография.          Высокоэффективная жидкостная хроматография.          Основное оборудование для хроматографии.          Использование хроматографии в решении практических задач.</p>		
Знания, умения и навыки, получаемые в процессе изучения дисциплины	<p><b>В результате изучения дисциплины магистрант должен</b></p> <p><b>знать:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- строение вещества, геометрию молекул и электронно-стерические модели;</li> <li>- строение жидких кристаллов и их применение;</li> <li>- элементы неравновесной термодинамики;</li> <li>- возможности применения основ дисциплины к решению практических задач.</li> </ul> <p><b>уметь:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- самостоятельно формулировать задачу физико-химического исследования в химических системах;</li> <li>- проводить физико-химические исследования с использованием современных методов и приборов ФХМА;</li> <li>- пользоваться справочной литературой;</li> <li>- анализировать и обсуждать результаты физико-химических исследований;</li> <li>- вести научную дискуссию.</li> </ul> <p><b>владеть:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- основной терминологической базой современной химической науки;</li> <li>- современными методами и приборами для физико-химических методов анализа.</li> </ul>		
Объем дисциплины и виды учебной работы	<b>Вид учебной работы</b>	<b>Всего часов</b>	<b>3 семестр</b>
	Общая трудоемкость дисциплины	144	144
	Аудиторные занятия	48	48
	Лекции	32	32
	Практические занятия	16	16

	Самостоятельная работа магистров	96	96	
Используемые ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Internet», информационные технологии, программные средства и информационно-справочные системы	<p><b>Интернет-ресурсы:</b></p> <p> <a href="http://fizrast.ru/sitemap.html">http://fizrast.ru/sitemap.html</a>  <a href="http://www.don-agro.ru">http://www.don-agro.ru</a>  <a href="http://xn-80abucjiibhv9a.xn-plai/">http://xn-80abucjiibhv9a.xn-plai/</a>  <a href="http://www.agroxxi.ru/">http://www.agroxxi.ru/</a> (РГБ)  <a href="http://elibrary.rsl.ru">http://elibrary.rsl.ru</a> Научная электронная библиотека  <a href="http://elibrary.ru/default.asp">http://elibrary.ru/default.asp</a> Российская национальная библиотека  <a href="http://primo.nl.ru">http://primo.nl.ru</a> <a href="http://nbmgu.ru">http://nbmgu.ru</a> Электронная библиотека Российской государственной библиотеки         </p> <p><b>Материально-техническое обеспечение дисциплины:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- лекционные аудитории;</li> <li>- аудитории для семинарских занятий;</li> <li>- проекционное оборудование и компьютер;</li> <li>- интерактивные доски/</li> </ul>			
Формы текущего и рубежного контроля	Письменный опрос, коллоквиумы.			
Формы промежуточного контроля	Зачет			