

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ИНГУШСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

КАФЕДРА ХИМИИ

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по УР и КО

_____ Льянова С.А.

« 29 » июня 2023 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ**

Факультет: химико-биологический

Направление подготовки /специальность: 04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки: «Физическая химия»

Программа подготовки: академическая магистратура

Квалификация (степень) выпускника: Магистр

Форма обучения: очная

**МАГАС
2023**

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью освоения дисциплины «Современные проблемы физической химии» является изучение строения вещества, жидкостей, жидких кристаллов и аморфных тел, а также элементы неравновесной термодинамики, кинетики сложных процессов и другие вопросы физической химии.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

Дисциплина «Современные проблемы физической химии» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений; изучается в 3 семестре.

Дисциплина представляет собой теоретическую основу для углубленного изучения термодинамики и физической химии в целом, а также изучения таких курсов химического профиля как коллоидной химии, химии твердого тела, химической технологии, физико-химических методов исследования.

Перечень дисциплин, необходимых для изучения дисциплины: неорганическая химия, квантовая химия, физика, математика.

Таблица 2.1.

Связь дисциплины «Современные проблемы физической химии» с предшествующими дисциплинами и сроки их изучения

Код дисциплины	Дисциплины, предшествующие дисциплине «Современные проблемы физической химии»	Семестр
Б1.О.03	Актуальные задачи современной химии	1

Таблица 2.2.

Связь дисциплины «Современные проблемы физической химии» с последующими дисциплинами и сроки их изучения

Код дисциплины	Дисциплины, следующие за дисциплиной «Современные проблемы физической химии»	Семестр
Б.1.В.09	Научные основы преподавания химии	4
Б1.О.02	Современные методы химического анализа	2
Б1.В.10	Термодинамика растворов	4

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

Знать:

- строение вещества, геометрию молекул и электронно-стерические модели;
- строение жидких кристаллов и их применение;
- элементы неравновесной термодинамики;
- автокаталитические реакции;
- поведение ионных жидкостей и твердых электролитов;
- о хроматографии, поверхностных явлениях как неотъемлемой части физической химии;
- возможности применения основ дисциплины к решению практических задач.

Уметь:

- продемонстрировать связь фундаментальных экспериментов с теорией;
- самостоятельно формулировать задачу физико-химического исследования в химических системах;
- пользуясь полученными знаниями, уметь выбирать оптимальные пути и методы решения поставленных задач;
- проводить физико-химические исследования систем и процессов с использованием современных методов и приборов ФХМА;
- проводить физико-химические расчеты;
- пользоваться справочной литературой;
- графически отображать полученные зависимости;
- анализировать и обсуждать результаты физико-химических исследований;
- вести научную дискуссию.

Владеть:

- основами теории фундаментальных разделов химии (прежде всего неорганической, аналитической, органической, физической, химии высокомолекулярных соединений, химии биологических объектов, химической технологии);
- способностью применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных;
- навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций;
- навыками работы на современной учебно-научной аппаратуре при проведении химических экспериментов;
- методами регистрации и обработки результатов химических экспериментов;
- методами безопасного обращения с химическими материалами с учетом их физических и химических свойств, способностью проводить оценку возможных рисков;
- основными физическими и химическими понятиями; знаниями фундаментальных законов физики и химии, явлений и процессов, изучаемых этими науками.

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ОПОП ВО по данному направлению подготовки:

- а) универсальных (УК) – УК-1
- б) профессиональных (ПК) - ПК-2.

Таблица 3.1.

Матрица связи компетенций, формируемых на основе изучения дисциплины «Особенности анализа важнейших объектов окружающей среды», с временными этапами освоения ее содержания

Коды компетенций (ФГОС)	Компетенция	Семестр изучения
УК-1	Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, выработать стратегию действий	3
ПК-2	Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии или смежных наук	3

4.ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Таблица 4.1.

Вид учебной работы	Всего часов	3 семестр
Общая трудоемкость дисциплины	108	108
Аудиторные занятия	48	48
Лекции	32	32
Практические занятия	16	16
Самостоятельная работа студентов (СРС)	60	60

5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ, СТРУКТУРИРОВАННОЕ ПО ТЕМАМ (РАЗДЕЛАМ) С УКАЗАНИЕМ ОТВЕДЕННОГО НА НИХ КОЛИЧЕСТВА АКАДЕМИЧЕСКИХ ИЛИ АСТРОНОМИЧЕСКИХ ЧАСОВ И ВИДОВ УЧЕБНЫХ ЗАНЯТИЙ

Таблица 5.1.

Структура и содержание дисциплины

п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Виды учебной работы (час)				Формы контроля
			Лек-ции	Практ. работы	Самостоятельные работы		
1.	Строение вещества	3	2	2	6		
2.	Геометрия молекул. Теория и электронно-стерические модели	3	4	2	8		Тест
3.	Строение жидкостей, жидких кристаллов и аморфных тел	3	6	2	8		Тест
4.	Молекулярные (надмолекулярные) кристаллы	3	4	2	8		Контрольная работа
5.	Элементы неравновесной термодинамики	3	4	2	8		Тест
6.	Кинетика сложных процессов	3	6	2	8		Тест
7.	Электрохимия ионных жидкостей и твердых электролитов	3	4	2	8		Контрольная работа
8.	Газовая хроматография при высоких давлениях и инверсионная газовая хроматография	3	2	2	6		
	Итого:		32	16	60		зачет

Таблица 5.2.

Конкретизация результатов освоения дисциплины

УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий		
Знать: виды основных информационных источников, нормативных правовых документов в области химии и химической технологии; методы и способы решения проблемных ситуаций; основные этапы и закономерности развития химической науки, систему	Уметь: применять к конкретному фактическому материалу теоретические знания, необходимые для решения проблемных ситуаций; выявлять недостаточность и недостоверность информации при решении проблемных ситуаций.	Владеть: навыками использования источников информации для решения проблемных ситуаций; навыками решения типичных, наиболее часто встречающихся проблемных ситуаций.

фундаментальных химических понятий и методологических аспектов физической химии; принципы анализа полученных данных		
ПК-2 Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии или смежных наук		
Знать: патентно-информационные базы данных по современным нанотехнологиям и наноматериалам	Уметь: проводить поиск специализированной информации в патентно-информационных базах данных по современным нанотехнологиям и наноматериалам	Владеть: навыками анализа и обобщения результатов поиска специализированной информации и патентно-информационных базах по современным нанотехнологиям и наноматериалам

Содержание дисциплины «Современные проблемы физической химии»

Тема.1. Строение вещества.

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.

Тема 2. Геометрия молекул. Теория и электронно-стерические модели.

Модель локализованных электронных пар. Равновесные геометрические конфигурации молекул типа ALm.

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 ALk 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.

Тема 3. Строение жидкостей, жидких кристаллов и аморфных тел.

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 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.

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 Бедекера-Фрейндлиха как предельный случай для широкопористых адсорбентов.

Тема 6. Термодинамика адсорбции из газовой фазы на твердом адсорбенте.

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.

Сущность метода хроматографии. Хроматограмма. Молекулярная хроматография. Ионообменная хроматография. Разделение смесей. Газовая хроматография. Высокоэффективная жидкостная хроматография. Основное оборудование для хроматографии. Использование хроматографии в решении практических задач.

6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В процессе обучения используются традиционные образовательные технологии (лекции, семинары, практические работы) и активные инновационные образовательные технологии:

1. Семинар в диалоговом режиме применяется в основном при обсуждении выступлений студентов с докладами (рефератами)
2. Групповой разбор результатов контрольных работ
3. Встречи с сотрудниками и руководителями профильных лабораторий и предприятий - потенциальными работодателями выпускников.

В целом при изучении курса активные и интерактивные формы проведения занятий составляют не менее 30% аудиторных занятий.

7. ПЕРЕЧЕНЬ УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

7.1. Перечень-учебно-методического обеспечения для обучающихся по дисциплине:

1. Химия привитых поверхностных соединений / Под ред. Лисичкина Г.В. М.: ФИЗМАТ ЛИТ, 2003, 590 с.
2. Экспериментальные методы в адсорбции и молекулярной хроматографии/ Под ред. Ю.С. Никитина и Р.С. Петровой. М.: Изд-во МГУ, 1990. 318 с.
3. Еремин В.В., Каргов СИ., Успенская И.А., Кузьменко Н.Е., Лунин В.В. Основы физической химии. Теория и задачи. М.: МГУ, 2005, 480 с.

Лекционные занятия проводятся 1 раза неделю в объеме 2 часов и 1 часа практических занятий в 3 семестре. После окончания изучения каждой темы студенты проходят собеседование, сдают коллоквиумы.

7.2. Указания для обучающихся по освоению дисциплины

Таблица 7.1.

Содержание самостоятельной работы обучающихся

<i>№№ п/п</i>	<i>Темы/вопросы, выносимые на самостоятельное изучение</i>	<i>Кол-во часов</i>	<i>Формы работы</i>
1.	Строение вещества	6	собеседование
2.	Геометрия молекул. Теория и электронно-стерические модели	8	собеседование
3.	Строение жидкостей, жидких кристаллов и аморфных тел	8	собеседование
4.	Молекулярные (надмолекулярные) кристаллы	8	собеседование
5.	Элементы неравновесной термодинамики	8	собеседование

6.	Кинетика сложных процессов	8	собеседование
7.	Электрохимия ионных жидкостей и твердых электролитов	8	собеседование
8.	Газовая хроматография при высоких давлениях и инверсионная газовая хроматография	6	собеседование

8. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

Примерные практические задания к семинарам

Вопросы к семинарскому занятию 1

План занятия:

1. Основы классической теории химического строения.
2. Теория химического строения молекул.
3. Изомерия, конформация, таутомерия.
4. Построение МО. Распределение электронов на МО.
5. Геометрическая конфигурация молекул.
6. Геометрия молекул, теория ОВЭПВО Гиллеспи.
7. Элементы и операции симметрии молекул.
8. Точечные группы симметрии.
9. Классы сопряженных операций.

ЗАДАЧИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ

1. Геометрические характеристики, узловая структура, плотность электронного облака. Спин-орбитальное взаимодействие, его природа и влияние на состояния атомов и молекул.
2. Изомерия валентная и структурная, конформация и таутомерия.
3. Топология молекулы, цепь химического действия и топологические графы. Структурно-нежесткие молекулы
4. Орбитальная модель молекулы. Типы молекулярных орбиталей (канонические и локализованные). Гибридизация АО. Классификация МО по энергии, симметрии и узловой структуре.
5. Геометрическая форма молекул и ее определение методом ОЭПВО.
6. Топология молекулы, цепь химического действия и топологические графы. Структурно-нежесткие молекулы.
7. Элементы и операции симметрии.
8. Умножение операций симметрии.
9. Прелбразования подобия и классы сопряженных элементов группы. Что такое представление группы?

10. Составить приводимое представление метиленциклопропена в базисе координат атомов углерода. 5. Определить симметрию колебаний молекулы метиленциклопропена.

Вопросы к семинарскому занятию 2

План занятия:

1. Поляризация веществ в статических и переменных электрических полях. Уравнения Клаузиуса-Масотти, Лореица-Лорентца и Дебая-Ланжевена. Методы определения дипольмомента.
2. Связь дипольмомента со структурой и симметрией молекул.
3. Векторная схема расчета дипольмоментов сложных молекул
4. Вращательные и колебательные состояния.
5. Правила отбора во вращательных, колебательных и колебательно-вращательных переходах.
6. Электронные состояния.

ЗАДАЧИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ

1. Указать, зависит ли от температуры поляризуемость молекулы.
2. Как изменятся и почему поляризация вещества?
3. Какая поляризация проявляется в видимой области излучения?
4. Какие методы определения дипольмомента вам известны?
5. Молекулы каких точечных групп симметрии полярны?
6. Молекулы каких точечных групп симметрии не полярны?

Вопросы к семинарскому занятию 3

План занятия:

1. Правила отбора электронных переходов по спину и переходов между АО и МО различной симметрии.
2. Электронноколебательные переходы, вибронные переходы.
3. Анализ Деландра.

ЗАДАЧИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ

1. Каково условие для матричного элемента дипольмомента ожидаемого перехода?
2. Что характерно для вращательного спектра жесткого ротатора? 3. Какова симметрия колебаний линейной и угловой молекулы AB_2 ?
4. Правила отбора переходов между вращательными, колебательными и колебательно-вращательными уровнями.
5. Число колебательных степеней свободы для молекул различной геометрии и симметрии.

4. Применение теории групп симметрии для установления правил отбора.

Вопросы к семинарскому занятию 4

План занятия:

1. Потенциалы парного взаимодействия.
2. Функции радиального распределения
3. Типы ионных решеток.
4. Виды дефектов решеток.
5. Собственная и примесная электропроводность ионных кристаллов. Суперионные твердые электролиты.

ЗАДАЧИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ

1. Квантово-механическая интерпретация дифракции электронов и нейтронов.
2. Условия дифракции электронов. Нейтронов и x-лучей.
3. Чем отличаются рентгенографический и нейтронографический методы структурного исследования?
4. Можно ли получать функции парного распределения рентгенографическим методом?
5. Какую структурную информацию можно получать из парных функций радиального распределения
6. Определить тип магнетизма для указанного атома, иона, молекулы.
7. Указать тип квантовых переходов, лежащих в основе некоторых спектральных методов ЯМР и ЭПР. Указать особенности строения молекулы, о которых можно получить информацию заданным
- 8.

Вопросы к семинарскому занятию 5

План занятия:

1. Структура жидкостей.
2. Структурные параметры.
3. Модели строения.
4. Обобщение потенциалов парного взаимодействия, потенциал Ми.

ЗАДАЧИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ

1. Как получают структурную информацию о жидкостях?
2. Какие модели структуры жидкостей вам известны? Квазикристаллические модели строения жидкостей.
3. Модели свободного объема.
4. Опишите известные потенциалы парного взаимодействия, пригодные для описания жидких систем различной природы.

Примеры заданий контрольных работ

Контрольная работа 1

1. Определите тип химической связи в веществах, формулы которых: C_2H_2 , Br_2 , K_3N . Напишите их электронные формулы.
2. Какая из химических связей: $H - Cl$, $H - Br$, $H - I$, $H - P$, $H - S$ – является наиболее полярной? Укажите, в какую сторону смещается общая электронная пара в каждом случае.
3. Определите число σ - и π - связей в молекулах:
 - а) уксусного альдегида (этанала);
 - б) углекислого газа. Укажите типы гибридизации атомов углерода и соответствующие им валентные углы в молекуле этанала.
4. Определите степени окисления и валентные возможности элементов в молекулах: CH_2Cl_2 и H_2O_2 .
5. В состав химического соединения входят: натрий (32,43%), сера (22,55%) и кислород (45,02%). Выведите простейшую формулу этого соединения.

Контрольная работа 2

1. Объясните образование молекулы SiF_4 и иона SiF_6^{2-} с помощью электронно-графических формул. Может ли существовать ион CF_6^{2-} ? Почему?
2. В чем заключаются причины резкого различия в свойствах:
 - а) оксида углерода (IV) и оксида кремния (IV);
 - б) плавиковой кислоты и соляной кислоты? Ответ обоснуйте.
3. Приведите структурные формулы 2-хлорпропаналя и гидросульфата аммония. Укажите в каждом из соединений характер химических связей, валентности и степени окисления элементов.
4. Анионы BO_3^{3-} , CO_3^{2-} , NO_3^- имеют форму плоского треугольника. Как можно объяснить этот факт? Как изменяется длина связи $E - O$ в ряду $BO_3^{3-} \rightarrow CO_3^{2-} \rightarrow NO_3^-$ и почему?
5. Выведите молекулярную формулу углеводорода, массовая доля водорода в котором составляет 20%. Относительная плотность углеводорода по воздуху 1,035.

Критерии оценки ответа студента при выполнении контрольной работы

Оценка	Требования к знаниям
отлично	приведены полные правильные решения, ответы грамотно аргументированы
хорошо	допущены незначительные погрешности при ответах на вопросы, аргументация была не полной
удовлетворительно	в ответах на некоторые вопросы допущены грубые ошибки, часть выводов не аргументирована или аргументирована неправильно
неудовлетворительно	ответы на 50 и более % вопросов ошибочны, большинство выводов не аргументированы или аргументированы неправильно

Примерные тестовые задания по курсу

Примерные задания теста №1

- 1. Ионная связь осуществляется в результате:**
- 1) образования общей электронной пары
 - 2) перехода электронной пары от одного атома на свободную орбиталь другого атома
 - 3) сил электростатического притяжения между ионами
 - 4) смещения электронной пары от одного атома к другому
- 2. Донорно-акцепторный механизм образования ковалентной связи встречается в молекуле:**
- 1) H_2O ;
 - 2) CO_2 ;
 - 3) CO ;
 - 4) BCl_3 .
- 3. В соединении $\text{NH}_3 \cdot \text{BF}_3$ химическая связь осуществляется за счет:**
- 1) образования ионной связи;
 - 2) спаривания электронов азота и бора;
 - 3) перехода пары электронов от азота на свободную орбиталь бора;
 - 4) сил межмолекулярного взаимодействия.
- 4. Среди приведенных молекул и ионов определите ту, которая может быть акцептором при образовании ковалентной связи по донорно-акцепторному механизму:**
- 1) NH_3 2) Al^{3+} 3) NH_4^+ 4) H_2O
- 5. Среди предложенных молекул выберите ту, центральный атом которой находится в sp^3 - гибридизации:**
- 1) BCl_3
 - 2) H_2Se_3
 - 3) BeH_2
 - 4) ZnCl_2

Примерные задания теста №2

- 1. При рассмотрении спектров какого типа необходимо учитывать принцип Франка-Кондона?**
- 1) ИК-.
 - 2) вращательных.
 - 3) КР-.
 - 4) электронных.
- 2. В каких областях спектра проявляются переходы между электронными, колебательными и вращательными состояниями молекул ?**
- 1) Колебательные - в ИК-области, вращательные - в УФ-области, электронные - в микроволновой.
 - 2) Колебательные - в микроволновой, электронные - в УФ-области, вращательные - в ИК-области.
 - 3) Колебательные - в ИК-области, вращательные - в микроволновой, электронные - в УФ-области.
 - 4) Колебательные - в УФ-области, электронные - в ИК-области, вращательные - в микроволновой. В молекуле этилена при облучении УФ-светом возможны

электронный переход наименьшей энергии:

3. Колебательные спектры возникают при взаимодействии вещества с:

- 1) гамма-излучением;
- 2) видимым светом;
- 3) радиоволнами
- 4) ИК-излучением;
- 5) УФ-излучением

4. Инфракрасным спектрам поглощения соответствуют:

- 1) электронные переходы из основного в возбужденное состояние;
- 2) колебательные переходы из основного в возбужденное состояние;
- 3) электронные переходы из возбужденного в основное состояние ;
- 4) вращательные переходы из основного в возбужденное состояние.

5. Комбинационным рассеянием называется рассеяние света:

- 1) без изменения частоты;
- 2) с увеличением частоты;
- 3) с уменьшением частоты ;
- 4) с изменением частоты.

Примерные задания теста №3

1. Каким методом получают наиболее точную информацию о структуре жидкостей?

- 1) Нейтронографическим методом;
- 2) Рентгеновским методом;
- 3) Электронографическим методом;
- 4) ИК- спектроскопическим методом.

2. Какими способами определяют симметрию комплексов в жидкостях?

- 1) ИК- и КР- методами
- 2) Нейтронографическим и рентрогенографическим методами;
- 3) МК- и УФ- спектроскопическими методами
- 4) Электронографическим методом.

3. Какими методами определяют структурные параметры кристаллов и жидкостей?

- 1) Нейтронографическим методом;
- 2) Рентгеновским методом;
- 3) Электронографическим методом
- 4) ИК- спектроскопическим методом.

4. Координационные числа характерны для:

- 1) Кристаллов и жидкостей;
- 2) Только для кристаллов;
- 3) Только жидкостей;
- 4) Для жидкостей и газов.

5. Какими методами подтверждается наличие в жидкости пространственного упорядочения молекул?

- 1) Дифракционными;
- 2) спектроскопическими
- 3) Рефрактометрическим;

4) Диалькометрическим;

Критерии оценки ответа студента при выполнении тестовых заданий

Оценка	Требования к знаниям
отлично	Оценка «отлично» выставляется магистранту, если он глубоко и прочно освоил программный материал, исчерпывающе, последовательно, четко и логически стройно его излагает, умеет тесно увязывать теорию с практикой, свободно справляется с задачами, вопросами и другими видами применения знаний, причем не затрудняется с ответом при видоизменении заданий, правильно обосновывает принятое решение.
хорошо	Оценка «хорошо» выставляется магистранту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, не допуская существенных неточностей в ответе на вопрос, правильно применяет теоретические положения при решении практических вопросов и задач, владеет необходимыми навыками и приемами их выполнения.
удовлетворительно	Оценка «удовлетворительно» выставляется магистранту, если он имеет знания только основного характера, но не усвоил его деталей, допускает неточности, недостаточно правильные формулировки, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, испытывает затруднения при обосновании ответа.
неудовлетворительно	Оценка «неудовлетворительно» выставляется магистранту, который не знает значительной части программного материала, допускает существенные ошибки, имеет затруднения при ответе на вопросы и обосновании ответов. Как правило, оценка «неудовлетворительно» ставится магистранту, которые не могут продолжить обучение без дополнительных занятий по соответствующей дисциплине.

Примерные вопросы к зачету

1. 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.

2. Электронное строение соединений переходных и непереходных элементов. Делокализованные и локализованные валентные электроны взаимодействия. Правило четности. Вторичная периодичность. Периодическая система химических элементов как упорядоченное множество.

3. Модель локализованных электронных пар. Равновесные геометрические конфигурации молекул типа AL_m .

4. Искажения геометрического строения вследствие отталкивания различающихся по размеру и подвижности локализованных электронных пар. Примеры.

5. Модель максимального перекрывания. Гибридизация валентных атомных орбиталей. Неэквивалентные гибридные атомные орбитали.

6. Пространственная направленность химической связи. Достоинства и ограничения модели.

7. Модель орбитально-дефицитных связей на примере молекул AL_k непереходных элементов. Геометрия молекул в теории канонических молекулярных орбиталей.

Вычисление полных энергий молекулы для различных ее геометрических конфигураций.

8. Определение стабильной молекулярной геометрии. Диаграммы Милликена-Уолша. Правила заполнения молекулярных орбиталей. Вибронное строение молекул. Вибронные эффекты и геометрическая форма молекул.

9. Конфигурационная устойчивость молекул. Геометрия координированных лигандов.

10. Основные особенности строения жидкостей и аморфных веществ. Ближний порядок. Функции радиального распределения.

11. Основные типы сил межмолекулярного взаимодействия. Мезоморфные фазовые состояния вещества. Примеры.

12. Жидкие кристаллы. Основные классы органических соединений-мезогенов. Фазовые превращения в жидких кристаллах. Вариация температуры нематико-изотропного перехода в гомологических рядах каламитных жидких кристаллов.

13. Физико-химические свойства жидких кристаллов. Жидкокристаллические структуры в биологических системах. Структура ламелл. Бислои и другие сложные надмолекулярные образования, переходы между ними.

14. Взаимодействие липид-белок, бислойные липидные мембраны. Жидкокристаллическое состояние макроскопических биообъектов.

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

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

17. Гомомолекулярные кристаллы.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

28. Локализованная адсорбция газов и паров на однородной поверхности. Теории

Генри, Ленгмюра и Брунауэра-Эммета-Теллера.

29. Мономолекулярная и полимолекулярная адсорбция. Классификация изотерм полимолекулярной адсорбции.

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

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

32. Двумерные фазовые переходы в адсорбционном слое.

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

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

35. Термодинамическое и статистическое описание адсорбционной системы.

36. Метод Гиббса: избыточная гиббсовская адсорбция, её физический смысл.

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

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

39. 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.

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

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

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

43. Сущность метода хроматографии. Хроматограмма. Молекулярная хроматография. Ионообменная хроматография

Критерии оценки ответа на зачете

Оценка	Критерии ответа
Зачтено	Глубокое и хорошее знание и понимание предмета, в том числе терминологии и основных понятий; теоретических закономерностей; фактических данных; обстоятельный, логический и грамотный ответ во время сдачи зачета; удельный вес ошибок при контрольном тестировании – не более 50%.
Незачтено	Слабое знание основной терминологии, теоретических закономерностей, фактических данных, ошибочный ответ на зачете; удельный вес ошибок при контрольном тестировании –

	более 50%.
--	------------

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Учебная литература

а) основная:

1. Химия привитых поверхностных соединений / Под ред. Лисичкина Г.В. М.: ФИЗМАТ ЛИТ, 2003, 590 с.
2. Экспериментальные методы в адсорбции и молекулярной хроматографии/ Под ред. Ю.С. Никитина и Р.С. Петровой. М.: Изд-во МГУ, 1990. 318 с.
3. Еремин В.В., Каргов СИ., Успенская И.А., Кузьменко Н.Е., Лунин В.В. Основы физической химии. Теория и задачи. М.: МГУ, 2005, 480 с.
4. Киселев А.В. Межмолекулярные взаимодействия в адсорбции и хроматографии. М.: Высшая школа, 1986. 360 с.
5. Ягдовский В.Д. Статистическая термодинамика в физической химии. М.: БИНОМ, 2005, 495 с.

б) дополнительная:

1. Курс физической химии /Под ред. Герасимова Я.И., М.: Химия, 1969 (Т.1), 592 с; 1973 (Т.2), 624 с.
2. Авгуль Н.Н., Киселев А.В., Пошкус Д.П. Адсорбция газов и паров на однородных поверхностях. М.: Химия, 1975. 384 с.
3. Адамсон А. Физическая химия поверхности. М.: Мир, 1979, 564 с.
4. де Бур Я. Динамический характер адсорбции. Москва: Изд-во иностранной литературы, 1962. 290 с.
5. Грэг С, Синг К. Адсорбция. Удельная поверхность. Пористость. М.: Мир, 1984, 254 с.
6. Киселев А.В. Физическая химия. Современные проблемы / Под ред. Я.М. Колотыркина. М.: Химия, 1982. С. 180-213.
7. Долгонос А.М. Модель электронного газа и теория обобщенных зарядов для описания межатомных сил и адсорбции. М.: УРПС, 2009, 176 с.
8. Киселев А.В., Яшин Я.И. Адсорбционная газовая и жидкостная хроматография. М.: Химия, 1979. 288 с.
9. Лопаткин А. А. Теоретические основы физической адсорбции. М.: Изд-во МГУ, 1982. 344 с.
10. Рогинский С.З., Яновский М.И., Берман А.Д. Основы применения хроматографии в катализе. М.: Наука, 1972. 376 с.
11. Товбин Ю.К. Теория физико-химических процессов на границе газ-твердое тело. М.: Наука, 1990, 345 с.
- 12.

9.2. Интернет-ресурсы:

<http://fizrast.ru/sitemap.html>
<http://www.don-agro.ru>
<http://xn-80abucjiibhv9a.xn-plai/>
<http://www.agroxxi.ru/> (РГБ)
<http://elibrary.rsl.ru> Научная электронная библиотека
<http://elibrary.ru/default.asp> Российская национальная библиотека
<http://primo.nl.ru> <http://nbmgu.ru> Электронная библиотека Российской

9.3. Программное обеспечение

Университет обеспечен необходимым комплектом лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения, в том числе отечественного производства.

Каждый обучающийся в течение всего периода обучения обеспечен индивидуальным неограниченным доступом к электронной информационно-образовательной среде университета из любой точки, в которой имеется доступ к информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» как на территории университета, так и вне ее.

Университет обеспечен следующим комплектом лицензионного программного обеспечения.

1. Лицензионное программное обеспечение, используемое в ИнГГУ

1.1. Microsoft Windows 7

1.2. Microsoft Office 2007

1.3. Программный комплекс ММИС “Визуальная Студия Тестирования”

1.4. Антивирусное ПО Eset Nod32

1.5. Справочно-правовая система “Гарант”

Наряду с традиционными изданиями магистранты и сотрудники имеют возможность пользоваться электронными полнотекстовыми базами данных:

Таблица 9.1.

Название ресурса	Ссылка/доступ
Электронная библиотека онлайн «Единое окно к образовательным ресурсам»	http://window.edu.ru
«Образовательный ресурс России»	http://school-collection.edu.ru
Федеральный образовательный портал: учреждения, программы, стандарты, ВУЗы, тесты ЕГЭ, ГИА	http://www.edu.ru –
Федеральный центр информационно-образовательных ресурсов (ФЦИОР)	http://fcior.edu.ru -
ЭБС "КОНСУЛЬТАНТ СТУДЕНТА". Электронная библиотека технического вуза	http://polpred.com/news
Издательство «Лань». Электронно-библиотечная система	http://www.studentlibrary.ru -
Русская виртуальная библиотека	http://rvb.ru –
Издательство «Лань». Электронно-библиотечная система	http://e.lanbook.com -
Еженедельник науки и образования Юга России «Академия»	http://old.rsue.ru/Academy/Arc_hives/Index.htm
Научная электронная библиотека «e-Library»	http://elibrary.ru/defaultx.asp -
Электронно-библиотечная система IPRbooks	http://www.iprbookshop.ru -
Электронно-справочная система документов в сфере образования «Информо»	http://www.informio.ru
Информационно-правовая система «Гарант»	Сетевая версия, доступна со всех компьютеров в корпоративной сети ИнГГУ
Электронно-библиотечная система «Юрайт»	https://www.biblio-online.ru

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

- лекционные аудитории;
- аудитории для семинарских занятий;
- проекционное оборудование и компьютер;
- интерактивные доски;

11. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Теоретический материал дисциплины «Современные проблемы физической химии» изучается в течение семестра в соответствии с учебным планом. Самостоятельная внеаудиторная работа магистров обеспечена электронными учебно-методическими ресурсами (система Moodle), возможностью общения магистранта с преподавателем посредством электронной почты, доступом в Internet.

Основу теоретической подготовки по дисциплине «Современные проблемы физической химии» составляют лекции, которые представляются систематически в сочетании с семинарскими и практическими занятиями. Основные учения и владения отрабатываются и закрепляются на семинарских и лабораторных занятиях. Аудиторные занятия (лекции, семинары и лабораторные занятия) объединены с самостоятельной внеаудиторной работой магистров над рекомендуемой литературой, а также заданиями, которые выдаёт преподаватель и при подготовке к лабораторным занятиям.

При изучении дисциплины магистрантами могут использоваться следующие информационные технологии и инновационные методы:

- электронный вариант учебно-методического комплекса (с использованием системы Moodle);
- ресурсы электронной библиотечной системы;
- ресурсы Интернет;
- мультимедийная техника.

Преподаватель, читающий дисциплину, ведет учет посещаемости и осуществляет контроль за выполнением самостоятельной работы. Текущий контроль заключается в мониторинге выполнения учебной программы дисциплины на аудиторных занятиях и оценке работы на семинарских и практических занятиях.

Рабочая программа дисциплины «Современные проблемы физической химии» составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 04.04.01 Химия (уровень магистратуры), утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 13 июля 2017 г. № 655

Программу составила: профессор кафедры химии . . .

Рабочая программа утверждена на заседании кафедры химии

Протокол заседания № 10 от «20» июня 2023 г.

Рабочая программа одобрена учебно-методическим советом химико-биологического факультета

Протокол заседания № 10 от «26» июня 2023 г.

Программа рассмотрена на заседании Учебно-методического совета университета

Протокол заседания № 10 от «28» июня 2023 г.

**Сведения о переутверждении программы на очередной учебный год и
регистрации изменений**

Учебный год	Решение кафедры (№ протокола, дата)	Внесенные изменения	Подпись зав. кафедрой