

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

Кафедра химии



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе

Батыгов З.О.

25 мая 20 *18* 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 20 *18* г.

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 вариативной части обязательных дисциплин; 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.Б.4	Актуальные задачи современной химии	1
Б1.В.ДВ.2	Современные проблемы химии	2

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.Б.5	Научные основы преподавания химии	4
Б1.В.ОД.9	Современные методы химического анализа	4
Б1.В.ОД.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) общепрофессиональных (ОПК) – ОПК-5;**
- б) профессиональных (ПК) – ПК-2, ПК-4.**

Таблица 3.1.

Матрица связи компетенций, формируемых на основе изучения дисциплины «Современные проблемы физической химии», с временными этапами освоения ее содержания

Коды компетенций (ФГОС)	Компетенция	Семестр изучения
ОПК-5	Готовность руководить коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия	3
ПК-2	Владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии	3
ПК-4	Способность участвовать в научных дискуссиях и представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати)	3

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Таблица 4.1.

Вид учебной работы	Всего часов	3 семестр
Общая трудоемкость дисциплины	72	72
Аудиторные занятия	24	24
Лекции	10	10
Практические занятия	12	12
Контроль самостоятельной работы (КСР)	2	2
Самостоятельная работа студентов (СРС)	48	48

**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	Неделя семестра	Виды учебной работы (час)				Формы контроля
				Лек- ции	Практ. работы	Самос- тояте- льные работы		
1.	Строение вещества	3		2	2	6		
2.	Геометрия молекул. Теория и электронно- стерические модели	3		1	2	6		Опрос
3.	Строение жидкостей, жидких кристаллов и аморфных тел	3		1	2	6		Коллоквиум
4.	Молекулярные (надмо- лекулярные) кристаллы	3		1	1	6		Опрос
5.	Элементы неравновесной термодинамики	3		1	1	6		Коллоквиум
6.	Кинетика сложных процессов	3		2	2	6		Коллоквиум
7.	Электрохимия ионных жидкостей и твердых электролитов	3		1	1	6		Коллоквиум
8.	Газовая хроматография при высоких давлениях и инверсионная газовая хроматография	3		1	1	6		Коллоквиум
	Итого:			10	12	48		

Таблица 5.2.

Конкретизация результатов освоения дисциплины

<i>ОПК-5 Готовность руководить коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия</i>		
Знать: основы делового общения; формы и особенности профессионального общения с зарубежными партнерами; принципы делового этикета и специфику межкультурного общения в профессиональной сфере; проблемы организации управления деятельностью научных коллективов.	Уметь: самостоятельно вести деловую беседу; работать в научном коллективе; оценивать экологические последствия, связанные с развитием ядерной промышленности; организовывать и управлять деятельностью научных коллективов.	Владеть: способностью толерантно воспринимать социальные и культурные различия стран – улучшенными навыками понимания устной и письменной речи; способами организации и управления деятельностью научных коллективов; навыками работы на современных приборах и лабораторных установках
<i>ПК-2 Владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии</i>		
Знать: теорию в избранной области химии твердого тела и материаловедения (в соответствии с темой магистерской диссертации).	Уметь: работать в избранной области химии твердого тела и химического материаловедения (в соответствии с темой магистерской диссертации).	Владеть: теорией и навыками практической работы в избранной области химии твердого тела и материаловедения, методами сопоставления результатов моделирования и экспериментальных данных.
<i>ПК-4 Способность участвовать в научных дискуссиях и представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати)</i>		
Знать: особенности устной и письменной речи в сфере профессиональных коммуникаций; формы представления и особенности презентации результатов научных исследований в периодических изданиях и конференциях; нормативные документы по оформлению научно-исследовательских работ.	Уметь: представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати); использовать разные формы представления результатов исследований; выбирать метод расчета для конкретной химической задачи.	Владеть: навыками работы с научно-техническими текстами на английском языке по направлению химия; навыками представления полученных в исследованиях результатов в виде отчетов и научных публикаций (стендовых докладов, рефератов и статей в периодической научной печати)

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 AX_m .

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

Модель максимального перекрытия. Гибридизация валентных атомных орбиталей. Неэквивалентные гибридные атомные орбитали.

Пространственная направленность химической связи. Достоинства и ограничения модели.

Модель орбитально-дефицитных связей на примере молекул AX_k 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, бислоиные 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, карборакки,

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. Гидроксילирование и дегидроксילирование 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 Бедкера-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. Ионнообменная 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
(МОДУЛЮ)**

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 раз неделю в объеме 1 часа 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	6	собеседование
3.	Строение жидкостей, жидких кристаллов и аморфных тел	6	собеседование
4.	Молекулярные (надмолекулярные) кристаллы	6	собеседование
5.	Элементы неравновесной термодинамики	6	собеседование
6.	Кинетика сложных процессов	6	собеседование

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

8. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

Фонды оценочных средств и критерии оценки представлены отдельно, как приложение к рабочей программе.

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

а) основная литература:

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. Ягодковский В.Д. Статистическая термодинамика в физической химии. М.: БИНОМ, 2005, 495 с.

б) дополнительная литература

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.: УРРС, 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.

в) электронные источники информации

1. Научная электронная база данных издательства Elsevier, <http://www.sciencedirect.com/>
2. Научная электронная база данных издательства ACS Publication, <http://pubs.acs.org/>
3. Научно-поисковая электронная база данных Reaxys. <https://www.reaxys.com/>
4. Научная электронная база данных издательства Springer, <http://www.springerlink.com/>

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

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