

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное учреждение  
высшего профессионального образования  
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"  
Химический институт им. А.М. Бутлерова



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Проф. Таюрский Д.А.



\_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

подписано электронно-цифровой подписью

### Программа дисциплины

Современные проблемы термодинамики растворов Б1.В.ДВ.6

Специальность: 04.05.01 - Фундаментальная и прикладная химия

Специализация: Физическая химия

Квалификация выпускника: Химик. Преподаватель химии

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

**Автор(ы):**

Новиков В.Б. , Соломонов Б.Н.

**Рецензент(ы):**

Горбачук В.В.

**СОГЛАСОВАНО:**

Заведующий(ая) кафедрой: Соломонов Б. Н.

Протокол заседания кафедры No \_\_\_\_ от " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No \_\_\_\_ от " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Регистрационный No 767617

Казань  
2017

## Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) доцент, к.н. (доцент) Новиков В.Б. Кафедра физической химии Химический институт им. А.М. Бутлерова , Vladimir.Novikov@kpfu.ru ; ведущий научный сотрудник, д.н. (профессор) Соломонов Б.Н. Отдел физической химии Химический институт им. А.М. Бутлерова , Boris.Solomonov@kpfu.ru

## 1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины "Современные проблемы термодинамики растворов" являются раскрытие основных закономерностей влияния растворителя на различные физико-химические процессы и их связь с термодинамикой сольватации и межмолекулярного взаимодействия в растворах.

## 2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б1.В.ДВ.6 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 4 курсе, 7 семестр.

Дисциплина относится к вариативной части блока дисциплин учебного плана подготовки бакалавров по направлению 'Химия' по профилю 'Физическая химия' (курс по выбору). Она является важной частью физической химии, а вместе с последней и составной частью естествознания. Студенты, приступающие к освоению дисциплины 'Современные проблемы термодинамики растворов', должны владеть знаниями по следующим дисциплинам: неорганическая, квантовая, органическая и физическая химии. Знания, полученные студентами в рамках освоения дисциплины 'Современные проблемы термодинамики растворов', могут быть использованы при изучении следующих дисциплин: современные проблемы биотермодинамики, коллоидная химия наноматериалов, современные инновационные методы в химии.

## 3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-7 (общекультурные компетенции)	готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала
ОПК-1 (профессиональные компетенции)	способностью воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач
ПК-3 (профессиональные компетенции)	владением системой фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, формами и методами научного познания
ПСК-1	способностью использовать основные закономерности химической науки и фундаментальные химические понятия в профессиональной деятельности в соответствии с выбранной специализацией

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

основные закономерности влияния растворителя на различные физико-химические процессы и их связь с термодинамикой сольватации и межмолекулярного взаимодействия в растворах:

2. должен уметь:

навыками применения термодинамического подхода для описания влияния растворителя на различные физико-химические процессы.

3. должен владеть:

навыками применения термодинамического подхода для описания влияния растворителя на различные физико-химические процессы.

4. должен продемонстрировать способность и готовность:

основные закономерности влияния растворителя на различные физико-химические процессы и их связь с термодинамикой сольватации и межмолекулярного взаимодействия в растворах:

**4. Структура и содержание дисциплины/ модуля**

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных(ые) единиц(ы) 108 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины экзамен в 7 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

**4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю**

**Тематический план дисциплины/модуля**

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Тема 1. Общие представления о термодинамике сольватации.	8	1-3	9	0	0	
2.	Тема 2. Тема 2. Полуэмпирические и эмпирические представления о межмолекулярных взаимодействиях в неводных растворах.	8	4-8	15	0	0	Устный опрос
3.	Тема 3. Тема 3. Специфические взаимодействия в растворах неэлектролитов.	8	9-11	9	0	0	Контрольная работа
4.	Тема 4. Тема 4. Влияние среды на физико-химические процессы.	8	12-14	9	0	0	Контрольная работа

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
	Тема . Итоговая форма контроля	7		0	0	0	Экзамен
	Итого			42	0	0	

## 4.2 Содержание дисциплины

### Тема 1. Тема 1. Общие представления о термодинамике сольватации.

#### лекционное занятие (9 часа(ов)):

Определение понятия сольватация. Растворенное вещество. Растворитель. Идеальные растворы. Объем, энтальпия и энтропия смешения. Закон Рауля. Закон Генри. Парциальные мольные величины. Фундаментальные уравнения для открытых систем. Химический потенциал и равновесие. Фазовое равновесие. Химическое равновесие. Влияние давления на химический потенциал. Неидеальные газы. Изменение химического потенциала от температуры. Уравнение Гиббса - Гельмгольца. Изменение химического потенциала от мольной доли. Неидеальные растворы. Активность. Коэффициент активности. Статистическая термодинамика смешения. Стандартные состояния: чистая жидкость и идеальный газ. Концентрационная зависимость термодинамических параметров растворения и сольватации. Сольватация в бинарных растворителях.

### Тема 2. Тема 2. Полуэмпирические и эмпирические представления о межмолекулярных взаимодействиях в неводных растворах.

#### лекционное занятие (15 часа(ов)):

Представления, основанные на законах физики для макроскопических объектов. Уравнение Кирквуда. Электростатическая модель Онзагера-Бетчера. Модели, применяемые для расчета термодинамических параметров растворения, основанные на представлениях о растворе как о "растворе групп". Модели ASOG и UNIFAC. Эмпирические модели сольватации, базирующиеся на представлениях об ограниченном разнообразии типов межмолекулярных взаимодействий. Модель Поршнайнера. Модель MOSCED. Классификация органических соединений и функциональных групп по энергии дисперсионных взаимодействий, приходящейся на единицу собственного объема их молекул.

### Тема 3. Тема 3. Специфические взаимодействия в растворах неэлектролитов.

#### лекционное занятие (9 часа(ов)):

- взаимодействия. Комплексы с переносом заряда. Ассоциированные растворители. Гидрофобные взаимодействия. Компенсационная зависимость между свободной энергией и энтальпией сольватации и растворения. Водородная связь. С-Н-

### Тема 4. Тема 4. Влияние среды на физико-химические процессы.

#### лекционное занятие (9 часа(ов)):

Абсолютное и относительное влияние растворителя. Положение равновесия химических реакций. Кислотно-основное равновесие. Таутомерное равновесие. Конформационное равновесие Основные принципы статистики. Молекулярные модели макроскопических тел: идеальный газ. Термодинамика газа, макроскопическое состояние, внешние условия, отклик на внешнее возмущение, релаксация и квазистатические процессы, стационарные и равновесные состояния, энергия и энтропия, уравнение состояния, теплоемкости. Основные идеи и задачи статистики: система и подсистемы, характеристики "точки" газа, усреднение по времени и объему, термодинамический предел, энергия и давление, флуктуации. Задачи статистики.

## 4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
2.	Тема 2. Тема 2. Полуэмпирические и эмпирические представления о межмолекулярных взаимодействиях в неводных растворах.	8	4-8	подготовка к устному опросу Изучение лекционного материала по темам 1 и 2 проработка теоретического	13	устный опрос
3.	Тема 3. Тема 3. Специфические взаимодействия в растворах неэлектролитов.	8	9-11	подготовка к контрольной работе Изучение лекционного материала по теме 3 проработка теоретического	11	контрольная работа
4.	Тема 4. Тема 4. Влияние среды на физико-химические процессы.	8	12-14	подготовка к контрольной работе Изучение лекционного материала по теме 4 проработка теоретического	6	контрольная работа
	Итого				30	

### 5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

- разбор конкретных практических ситуаций;
- решение смоделированных практических задач и проблем, возникающих при анализе сольватационных эффектов;
- встречи с российскими специалистами в области термодинамики сольватации неэлектролитов и межмолекулярного взаимодействия в растворах.

### 6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

**Тема 1. Тема 1. Общие представления о термодинамике сольватации.**

**Тема 2. Тема 2. Полуэмпирические и эмпирические представления о межмолекулярных взаимодействиях в неводных растворах.**

устный опрос , примерные вопросы:

Примерный перечень вопросов по теме 1. 1. Определение понятия сольватация. Растворенное вещество. Растворитель. 2. Идеальные растворы. Объем, энтальпия и энтропия смешения. 3. Закон Рауля. 4. Закон Генри. 5. Парциальные мольные величины. 6. Химический потенциал и равновесие. Фазовое равновесие. Химическое равновесие. 7. Неидеальные газы. Изменение химического потенциала от температуры. 8. Уравнение Гиббса - Гельмгольца. Изменение химического потенциала от мольной доли. 9. Неидеальные растворы. Активность. Коэффициент активности. 10. Стандартные состояния: чистая жидкость и идеальный газ. 11. Концентрационная зависимость термодинамических параметров растворения и сольватации. по теме 2. 12. Представления, основанные на законах физики для макроскопических объектов. 13. Уравнение Кирквуда. Электростатическая модель Онзагера-Бетчера. 14. Модели, применяемые для расчета термодинамических параметров растворения, основанные на представлениях о растворе как о "растворе групп". 15. Модели ASOG и UNIFAC. 16. Модель Роршнайдера. 17. Модель MOSCED. 18. Классификация органических соединений и функциональных групп по энергии дисперсионных взаимодействий, приходящейся на единицу собственного объема их молекул.

### **Тема 3. Тема 3. Специфические взаимодействия в растворах неэлектролитов.**

контрольная работа , примерные вопросы:

Вопросы по контрольной работе(тема 3) 1 Водородная связь. 2. Комплексы с переносом заряда. 3. Ассоциированные растворители. 4. Гидрофобные взаимодействия. 5. Компенсационная зависимость между свободной энергией и энтальпией сольватации и растворения.

### **Тема 4. Тема 4. Влияние среды на физико-химические процессы.**

контрольная работа , примерные вопросы:

Вопросы по контрольной работе(тема 4) 1 Абсолютное и относительное влияние растворителя. 2. Положение равновесия химических реакций. 3. Кислотно-основное равновесие. 4. Таутомерное равновесие. Конформационное равновесие. 5. Кинетика реакций. Количественный учет влияния растворителя с помощью формальных и физических моделей. 6. Уравнение Кирквуда. Уравнение Уинштейна-Грюнвальда. Уравнение Пальма-Коппеля. 7. Влияние растворителя на УФ-спектры. Сольватохромные соединения. 8. Ет-шкала полярности растворителей. 9. Влияние среды в ИК- и ЯМР-спектроскопии. 10. Термодинамический подход к описанию влияния растворителя, на ф/х процессы.

### **Тема . Итоговая форма контроля**

Примерные вопросы к экзамену:

Самостоятельная работа студентов (СРС) включает следующие виды:

- изучение теоретического лекционного материала;
- проработка теоретического материала (конспекты лекций, основная и дополнительная литература).

Вопросы к зачету:

1. Определение понятия сольватация. Растворенное вещество. Растворитель.
2. Идеальные растворы. Объем, энтальпия и энтропия смешения.
3. Закон Рауля.
4. Закон Генри.
5. Парциальные мольные величины.
6. Химический потенциал и равновесие. Фазовое равновесие. Химическое равновесие.
7. Неидеальные газы. Изменение химического потенциала от температуры.
8. Уравнение Гиббса - Гельмгольца. Изменение химического потенциала от мольной доли.
9. Неидеальные растворы. Активность. Коэффициент активности.
10. Стандартные состояния: чистая жидкость и идеальный газ.
11. Концентрационная зависимость термодинамических параметров растворения и сольватации.
12. Представления, основанные на законах физики для макроскопических объектов.

13. Уравнение Кирквуда. Электростатическая модель Онзагера-Бетчера.
14. Модели, применяемые для расчета термодинамических параметров растворения, основанные на представлениях о растворе как о "растворе групп".
15. Модели ASOG и UNIFAC.
16. Модель Поршнайдера.
17. Модель MOSCED.
18. Классификация органических соединений и функциональных групп по энергии дисперсионных взаимодействий, приходящейся на единицу собственного объема их молекул.
19. Водородная связь.
20. Комплексы с переносом заряда.
21. Ассоциированные растворители.
22. Гидрофобные взаимодействия.
23. Компенсационная зависимость между свободной энергией и энтальпией сольватации и растворения.
24. Абсолютное и относительное влияние растворителя.
25. Положение равновесия химических реакций.
26. Кислотно-основное равновесие.
27. Таутомерное равновесие. Конформационное равновесие.
28. Кинетика реакций. Количественный учет влияния растворителя с помощью формальных и физических моделей.
29. Уравнение Кирквуда. Уравнение Уинштейна-Грюнвальда. Уравнение Пальма-Коппеля.
30. Влияние растворителя на УФ-спектры. Сольватохромные соединения.
31. Ет-шкала полярности растворителей.
32. Влияние среды в ИК- и ЯМР-спектроскопии.
33. Термодинамический подход к описанию влияния растворителя, на ф/х процессы.

### 7.1. Основная литература:

- 1.Афанасьев Б.Н. Физическая химия: учебное пособие для студентов вузов, обучающихся по направлениям 'Химическая технология', 'Биотехнология' и 'Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии' / Б. Н. Афанасьев, Ю. П. Акулова. Санкт-Петербург [и др.]: Лань, 2012. - 463 с.
2. Афанасьев Б.Н. Акулова Ю.П. Физическая химия. [Электронный ресурс]. - Санкт-Петербург.: Лань, 2012. - 416 с. Режим доступа: [http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1\\_cid=25&pl1\\_id=4312](http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=4312)
- 3.Еремин, В.В. Основы общей и физической химии: учебное пособие для студентов высших учебных заведений, изучающих дисциплину 'Химия', по направлению подготовки ВПО 011200 / В. В. Еремин, А. Я. Борщевский. ?Долгопрудный: Интеллект, 2012.?847 с.:
4. Буданов В.В., Ломова Т.Н. Химическая кинетика: учебное пособие. [Электронный ресурс]. - Санкт-Петербург: Лань, 2014. - 288 с.  
Режим доступа: [http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1\\_cid=25&pl1\\_id=42196](http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=42196)
5. Морачевский, А.Г. Физическая химия. Термодинамика химических реакций [Электронный ресурс] : учебное пособие / А.Г. Морачевский, Е.Г. Фирсова. ? Электрон. дан. ? СПб. : Лань, 2015. ? 101 с.  
Режим доступа: [http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1\\_id=64336](http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=64336)

### 7.2. Дополнительная литература:



1. Физическая химия : Учеб. для вузов: В 2кн. Кн.1. Строение вещества. Термодинамика / ; Краснов К.С., Воробьев Н.К., Годнев И.Н.; Под ред. К.С.Краснова .? 3-е изд., испр. ? М. : Высшая школа, 2001 .? 512с.
  2. Горшков И. Основы физической химии.- Бинوم.Лаборатория знаний, 2011. - 408 с.
  3. Пурмаль А.П. А, Б, В? химической кинетики. М.: ИКЦ 'Академкнига'. 2004.
  4. Попова, А.А. Физическая химия [Электронный ресурс] : учебное пособие / А.А. Попова, Т.Б. Попова. ? Электрон. дан. ? СПб. : Лань, 2015. ? 495 с.
- Режим доступа: [http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1\\_id=63591](http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=63591)

### 7.3. Интернет-ресурсы:

книги - <http://gen.lib.rus.ec>

книги - <http://elibrary.ru>

Cambridgesoft ChemBioOffice - <http://www.cambridgesoft.com/software/ChemBioOffice/>

TINKER molecular modeling software - <http://dasher.wustl.edu/tinker/>

Портал - [http://en.wikipedia.org/wiki/Statistical\\_mechanics](http://en.wikipedia.org/wiki/Statistical_mechanics)

### 8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Современные проблемы термодинамики растворов" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "КнигаФонд", доступ к которой предоставлен студентам. Электронно-библиотечная система "КнигаФонд" реализует легальное хранение, распространение и защиту цифрового контента учебно-методической литературы для вузов с условием обязательного соблюдения авторских и смежных прав. КнигаФонд обеспечивает широкий законный доступ к необходимым для образовательного процесса изданиям с использованием инновационных технологий и соответствует всем требованиям новых ФГОС ВПО.

Для представления студентам лекционного материала по данной дисциплине имеется комплект слайдов, а также мультимедийная установка для их демонстрации.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по специальности: 04.05.01 "Фундаментальная и прикладная химия" и специализации Физическая химия .

Автор(ы):

Соломонов Б.Н. \_\_\_\_\_

Новиков В.Б. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Рецензент(ы):

Горбачук В.В. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.