

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



подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины
Химическая термодинамика СЗ.В.1

Специальность: 020201.65 - Фундаментальная и прикладная химия

Специализация: Физическая химия

Квалификация выпускника: специалист

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Горбачук В.В.

Рецензент(ы):

Зиганшин М.А., Соломонов Б.Н.

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 74113

Казань
2014

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) профессор, д.н. (профессор) Горбачук В.В. Кафедра физической химии Химический институт им. А.М. Бутлерова, Valery.Gorbachuk@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

Развитие у студентов способности ориентироваться в современных научных достижениях в области химической термодинамики процессов сорбции на границе раздела фаз, и межфазного переноса, хроматографического разделения сложных смесей, физических основ супрамолекулярной химии и нанотехнологии, термодинамики взаимодействия субстрат-рецептор с участием белков и органических макроциклических рецепторов, термодинамики сольватации неэлектролитов.

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

Данная учебная дисциплина включена в раздел "С3.В.1 Профессиональный" основной образовательной программы 020201.65 Фундаментальная и прикладная химия и относится к вариативной части. Осваивается на 4 курсе, 7 семестр.

Дисциплина "Химическая термодинамика" является разделом физической химии, рассматривающим современные подходы к решению задачи прогнозирования физических и физико-химических свойств веществ и материалов на основе данных об молекулярной структуре. Поэтому изучение данной дисциплины требует предварительных знаний основ физической химии, органической и аналитической химии, а также наличия базовых лабораторных навыков. Кроме того, обучающиеся должны владеть элементами высшей математики и основами физики.

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

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-6 (профессиональные компетенции)	владеет навыками работы на современной учебно-научной аппаратуре при проведении химических экспериментов (ПК-6);
ПК-7 (профессиональные компетенции)	имеет опыт работы на серийной аппаратуре, применяемой в аналитических и физико-химических исследованиях (ПК-7);
ПК-8 (профессиональные компетенции)	владеет методами регистрации и обработки результатов химически экспериментов (ПК-8);

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

химическая термодинамика процессов сорбции на границе раздела фаз, и межфазного переноса, хроматографического разделения сложных смесей, термодинамика взаимодействия субстрат-рецептор с участием белков и органических макроциклических рецепторов, термодинамика сольватации неэлектролитов.

2. должен уметь:

ориентироваться в проблемах современной химической термодинамики, в том числе в физических и физико-химических основах супрамолекулярной химии и нанотехнологии, решать задачи по прогнозированию свойств веществ и материалов на основе данных о структуре их молекул

3. должен владеть:

Основными подходами и экспериментальными методами современной химической термодинамики, позволяющими измерять основные физические и физико-химические свойства веществ и материалов, в том числе сложных супрамолекулярных систем и объектов с наноструктурой

4. должен демонстрировать способность и готовность:

применять полученные знания в области современной химической термодинамики для решения проблем науки, техники и промышленности, сельского хозяйства

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 8 зачетных(ые) единиц(ы) 288 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. Химическая термодинамика, предмет ее изучения и положение среди других химических наук.	7	1	3	0	0	
2.	Тема 2. Термодинамика гомогенных растворов неэлектролитов.	7	2	3	7	0	
3.	Тема 3. Термодинамика гомогенных растворов и ее практические приложения.	7	3	3	7	0	
4.	Тема 4. Разделение термодинамических параметров образования растворов на вклады .	7	4	3	7	0	тестирование

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
5.	Тема 5. Современные представления о межмолекулярных взаимодействиях в гетерогенных системах.	7	5	3	7	0	отчет
6.	Тема 6. Гидрофобный эффект.	7	6	3	7	0	отчет
7.	Тема 7. Закономерности, определяющие соотношение "структура-свойство" для растворов неэлектролитов.	7	7	3	7	0	отчет
8.	Тема 8. Классификация неспецифических межмолекулярных взаимодействий .	7	8	3	6	0	контрольная работа
9.	Тема 9. Компенсационная зависимость между энтальпией и энтропией сольватации для растворов в неполярных средах и воде.	7	9	3	6	0	отчет
10.	Тема 10. Термодинамическое проявление гидрофобного эффекта и его структурная интерпретация.	7	10	3	6	0	отчет
11.	Тема 11. Гидрофобная гидратация.	7	11	3	6	0	отчет
12.	Тема 12. Термодинамика гетерогенных систем.	7	12	3	6	0	отчет
13.	Тема 13. Количественные способы описания изотерм адсорбции.	7	13	2	6	0	отчет
14.	Тема 14. Линейная идеальная газовая хроматография.	7	14	2	6	0	отчет

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
15.	Тема 15. Линейная неидеальная газовая хроматография.	7	15	2	6	0	отчет
16.	Тема 16. Устройство газового хроматографа.	7	16	2	6	0	отчет
17.	Тема 17. Высокоэффективная жидкостная хроматография (ВЭЖХ).	7	17	2	6	0	отчет
18.	Тема 18. Устройство жидкостного хроматографа.	7	18	2	0	0	контрольная работа
	Тема . Итоговая форма контроля	7		0	0	0	экзамен
	Итого			48	102	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Химическая термодинамика, предмет ее изучения и положение среди других химических наук.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Объекты исследования химической термодинамики. Основные законы химической термодинамики. Первое и второе начало термодинамики. Термодинамические параметры равновесных процессов: химических реакций и комплексообразования. Физический смысл энергии Гиббса химической реакции, любого физико-химического процесса.

Тема 2. Термодинамика гомогенных растворов неэлектролитов.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Законы Рауля и Генри. Химический потенциал. Термодинамическая активность. Ее физический смысл. Физический смысл коэффициента активности. Пример с ограниченно растворимыми соединениями.

практическое занятие (7 часа(ов)):

Работа с изопериболическим калориметром растворения. Электрическая калибровка калориметра с помощью эффекта Джоуля.

Тема 3. Термодинамика гомогенных растворов и ее практические приложения.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Термодинамические параметры сольватации. Избыточные величины для реальных растворов. Понятие стандартного состояния в приложении к процессам образования растворов. Предельные коэффициенты активности. Параметр гидрофобности. Применение этих параметров для прогнозирования биологической активности органических веществ. Пример с токсичностью органических соединений

практическое занятие (7 часа(ов)):

Определение энтальпии растворения и сольватации нафталина в диоксане.

Тема 4. Разделение термодинамических параметров образования растворов на вклады .

лекционное занятие (3 часа(ов)):

. Разделение термодинамических параметров образования растворов на вклады энергии образования полости, энергии взаимодействия и межмолекулярных взаимодействий растворенное вещество - растворенное вещество. Пример раствора со сферическими одинаковыми молекулами. Значение этих представлений для супрамолекулярной химии. Реорганизация растворителя, ее вклад в величины термодинамических параметров.

практическое занятие (7 часа(ов)):

Общие представления об устройстве капиллярного газового хроматографа.

Тема 5. Современные представления о межмолекулярных взаимодействиях в гетерогенных системах.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Современные представления о межмолекулярных взаимодействиях в гетерогенных системах. Типы межмолекулярных взаимодействий. Роль полярности растворителя и растворенного вещества

практическое занятие (7 часа(ов)):

Ознакомление с устройством газового хроматографа Кристалл-2000М и с устройством статического парового газохроматографического анализа.

Тема 6. Гидрофобный эффект.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Супрамолекулярные системы, кооперативные межмолекулярные взаимодействия, взаимодействия гость-хозяин. Их отличия от обычных парных взаимодействий. Понятие комплементарности. Примеры супрамолекулярных систем

практическое занятие (7 часа(ов)):

Работа с Фурье-ИК-спектрометром Vector-22 (Bruker). Съёмка и расшифровка ИК-спектров.

Тема 7. Закономерности, определяющие соотношение "структура-свойство" для растворов неэлектролитов.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Закономерности, определяющие соотношение "структура-свойство" для растворов неэлектролитов. Феноменологические подходы к описанию этих соотношений для термодинамических параметров сольватации. Структурные параметры соединений

практическое занятие (7 часа(ов)):

Определение константы образования комплекса с Н-связью. Работа с программным обеспечением и ИК-спектральными базами данных.

Тема 8. Классификация неспецифических межмолекулярных взаимодействий .

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Классификация неспецифических межмолекулярных взаимодействий по величине их вклада, приходящегося на единицу собственного объема молекул (молярной рефракции) для различных по структуре молекул и функциональных групп. Линейные соотношения структура-энергия. Модель LSER.

практическое занятие (6 часа(ов)):

УФ-спектроскопия. Основы метода, его приложения, изучение межмолекулярных взаимодействий.

Тема 9. Компенсационная зависимость между энтальпией и энтропией сольватации для растворов в неполярных средах и воде.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Компенсационная зависимость между энтальпией и энтропией сольватации для растворов в неполярных средах и воде. Физический смысл компенсационной зависимости для термодинамических параметров сольватации.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Работа с УФ-спектрометром Lambda 35 (Perkin Elmer). Съёмка и расшифровка УФ-спектров.

Тема 10. Термодинамическое проявление гидрофобного эффекта и его структурная интерпретация.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Характер компенсационного эффекта при варьировании структуры растворителя и растворяемого соединения. Факторы, определяющие величину коэффициента пропорциональности между свободной энергией и энтальпией сольватационных процессов.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Определение константы образования комплекса с переносом заряда.

Тема 11. Гидрофобная гидратация.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Примеры с участием белков и циклодекстрина. Структурная интерпретация гидрофобной гидратации.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Работа с программным обеспечением прибора(Perkin Elmer).

Тема 12. Термодинамика гетерогенных систем.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Термодинамика гетерогенных систем. Понятия адсорбции, адсорбента, сорбата, изотермы сорбции. Различные типы сорбентов и видов адсорбции.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Ознакомление с устройством прибора совмещенных термогравиметрии и дифференциальной сканирующей калориметрии STA 449C (Netzsch), сопряженного с квадрупольным масс-спектрометром.

Тема 13. Количественные способы описания изотерм адсорбции.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Уравнения Ленгмюра, Брунауэра-Эммета-Теллера, Хилла. Форма изотерм сорбции, аппроксимируемых этими уравнениями, а также уравнениями Генри и Рауля. Примеры объектов, описываемых этими уравнениями. Особенности изотерм сорбции воды на активированном угле. Определение объема монослоя и удельной поверхности адсорбента.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Массочувствительные сенсоры типа кварцевых микровесов. Основы сенсорного анализа. Ознакомление с устройством массочувствительных сенсоров типа кварцевых микровесов. Приготовление сенсоров с тонким слоем рецептора. Определение состава насыщенных клатратов каликсаренов с помощью массочувствительных сенсоров типа кварцевых микровесов.

Тема 14. Линейная идеальная газовая хроматография.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Понятие коэффициента распределения сорбата (между подвижной и неподвижной фазами). Понятия объема удерживания, исправленного объема удерживания, мертвого объема, времени удерживания, мертвого времени, удельного объема удерживания.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Рентгеноструктурный анализ Монокристаллическая рентгеновская дифрактография
Лабораторная работа: Порошковая рентгеновская дифрактография. Идентификация кристаллических фаз.

Тема 15. Линейная неидеальная газовая хроматография.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Уравнение Ван Деемтера. Физический смысл его членов. Понятие ширины хроматографического пика и причин его уширения. Понятие высоты теоретической тарелки.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Гетерогенный катализ реакций гидрирования и дегидрирования углеводородов.

Тема 16. Устройство газового хроматографа.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Детекторы, устройства ввода образца. Проблемы количественного ввода образца в капиллярную хроматографическую колонку.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Устройство масс-спектрометра и хроматомасс-спектрометра. Определение состава и идентификация компонентов сложных смесей

Тема 17. Высокоэффективная жидкостная хроматография (ВЭЖХ).

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Особенности ВЭЖХ по сравнению с газовой хроматографией. Различия в характере зависимости высоты теоретической тарелки от линейной скорости элюента. Требования к размеру частиц неподвижной фазы в ВЭЖХ.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Определение состава и идентификация компонентов сложных смесей

Тема 18. Устройство жидкостного хроматографа.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Детекторы, устройства ввода образца. Модифицированные неподвижные фазы для жидкостной хроматографии.

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
4.	Тема 4. Разделение термодинамических параметров образования растворов на вклады .	7	4	подготовка к тестированию Изучение материала конспектов лекций по разделам 1-3, работа с рекомендаций	7	тестирование
5.	Тема 5. Современные представления о межмолекулярных взаимодействиях в гетерогенных системах.	7	5	подготовка к отчету Оформление отчетов о выполненных лабораторных работах(математические расчеты, п	7	отчет
6.	Тема 6. Гидрофобный эффект.	7	6	подготовка к отчету Оформление отчетов о выполненных лабораторных работах(математические расчеты, п	7	отчет
7.	Тема 7. Закономерности, определяющие соотношение "структура-свойство" для растворов неэлектролитов.	7	7	подготовка к отчету Оформление отчетов о выполненных лабораторных работах(математические расчеты, п	7	отчет

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
8.	Тема 8. Классификация неспецифических межмолекулярных взаимодействий .	7	8	подготовка к контрольной работе	7	контрольная работа
9.	Тема 9. Компенсационная зависимость между энтальпией и энтропией сольватации для растворов в неполярных средах и воде.	7	9	подготовка к отчету Оформление отчетов о выполненных лабораторных работах(математические расчеты, п	7	отчет
10.	Тема 10. Термодинамическое проявление гидрофобного эффекта и его структурная интерпретация.	7	10	подготовка к отчету Оформление отчетов о выполненных лабораторных работах(математические расчеты, п	7	отчет
11.	Тема 11. Гидрофобная гидратация.	7	11	подготовка к отчету Оформление отчетов о выполненных лабораторных работах(математические расчеты, п	7	отчет
12.	Тема 12. Термодинамика гетерогенных систем.	7	12	подготовка к отчету Оформление отчетов о выполненных лабораторных работах(математические расчеты,	7	отчет
13.	Тема 13. Количественные способы описания изотерм адсорбции.	7	13	подготовка к отчету	7	отчет
14.	Тема 14. Линейная идеальная газовая хроматография.	7	14	подготовка к отчету Оформление отчетов о выполненных лабораторных работах(математические расчеты,	7	отчет

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
15.	Тема 15. Линейная неидеальная газовая хроматография.	7	15	подготовка к отчету Оформление отчетов о выполненных лабораторных работах(математические расчеты,	7	отчет
16.	Тема 16. Устройство газового хроматографа.	7	16	подготовка к отчету Оформление отчетов о выполненных лабораторных работах(математические расчеты,	7	отчет
17.	Тема 17. Высокоэффективная жидкостная хроматография (ВЭЖХ).	7	17	подготовка к отчету Оформление отчетов о выполненных лабораторных работах(математические расчеты,	7	отчет
18.	Тема 18. Устройство жидкостного хроматографа.	7	18	подготовка к контрольной работе	4	контрольная работа
	Итого				102	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Разбор типичных задач химической термодинамики, встречающихся на практике: в научной работе, медицине, быту, промышленности. Лабораторные работы по изучению возможностей экспериментальных методов химической термодинамики на современном научном оборудовании с применением компьютерной обработки результатов.

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

Тема 1. Химическая термодинамика, предмет ее изучения и положение среди других химических наук.

Тема 2. Термодинамика гомогенных растворов неэлектролитов.

Тема 3. Термодинамика гомогенных растворов и ее практические приложения.

Тема 4. Разделение термодинамических параметров образования растворов на вклады .
тестирование , примерные вопросы:

Тестирование по темам 1-4

Тема 5. Современные представления о межмолекулярных взаимодействиях в гетерогенных системах.

отчет , примерные вопросы:

Работа с изопериболическим калориметром растворения. Электрическая калибровка калориметра с помощью эффекта Джоуля. Определение энтальпии растворения и сольватации нафталина в диоксане. Определение предельных коэффициентов активности методом статического парофазного газохроматографического анализа. Основы метода статического парофазного газохроматографического анализа.

Тема 6. Гидрофобный эффект.

отчет , примерные вопросы:

Работа с Фурье-ИК-спектрометром Vector-22 (Bruker). Съемка и расшифровка ИК-спектров.

Тема 7. Закономерности, определяющие соотношение "структура-свойство" для растворов неэлектролитов.

отчет , примерные вопросы:

Определение константы образования комплекса с Н-связью. Работа с программным обеспечением и ИК-спектральными базами данных.

Тема 8. Классификация неспецифических межмолекулярных взаимодействий .

контрольная работа , примерные вопросы:

1. Объясните, почему некоторые химические реакции протекают самопроизвольно, используя термины энергия Гиббса и работа. 2. Почему для характеристики свойств компонента в системе используют относительное давление пара? 3. Почему для характеристики свойств компонента в системе используют термодинамическую активность? 4. В чем физический смысл относительного давления пара вещества? 5. В чем физический смысл термодинамической активности вещества? 6. Какое стандартное состояние удобно использовать при описании свойств раствора неэлектролита? 7. Почему для характеристики свойств компонента в системе используют понятие стандартного состояния? 8. Почему вводят понятия избыточной энергии Гиббса и энтропии? 9. Чем избыточная энергия Гиббса отличается от полной энергии Гиббса того же процесса? 10. Существует ли понятие избыточной энтальпии образования раствора неэлектролита? Почему? 11. Почему для описания свойств компонента в системе иногда используют стандартное состояние "идеальный газ"? 12. Какова разность величин изменения энергии Гиббса компонента при образовании раствора для стандартных состояний "чистый жидкий (твердый) компонент" и "данный компонент в состоянии идеального газа"? 13. Какое парциальное давление пара компонента является самым удобным для выбора его стандартного состояния "идеальный газ"? 14. Что представляет собой состояние бесконечно разбавленного раствора? 15. Что происходит с неэлектролитом по мере увеличения степени его разбавления? 16. Почему понятие бесконечно разбавленного раствора вводят только для растворов неэлектролитов? 17. До какой степени нужно разбавить раствор неэлектролита, чтобы он стал бесконечно разбавленным?

Тема 9. Компенсационная зависимость между энтальпией и энтропией сольватации для растворов в неполярных средах и воде.

отчет , примерные вопросы:

УФ-спектроскопия. Основы метода, его приложения, изучение межмолекулярных взаимодействий. Лабораторная работа: Работа с УФ-спектрометром Lambda 35 (Perkin Elmer). Съемка и расшифровка УФ-спектров. Определение константы образования комплекса с переносом заряда. Работа с программным обеспечением прибора.

Тема 10. Термодинамическое проявление гидрофобного эффекта и его структурная интерпретация.

отчет , примерные вопросы:

Совмещенная термогравиметрия, дифференциальная сканирующая калориметрия и масс-спектрометрия. Основы термогравиметрии и дифференциальной сканирующей калориметрии. Основы квадрупольной масс-спектрометрии.

Тема 11. Гидрофобная гидратация.

отчет , примерные вопросы:

Ознакомление с устройством прибора совмещенных термогравиметрии и дифференциальной сканирующей калориметрии STA 449C (Netzsch), сопряженного с квадрупольным масс-спектрометром.

Тема 12. Термодинамика гетерогенных систем.

отчет , примерные вопросы:

Рентгеноструктурный анализ. Лабораторная работа: Монокристалльная рентгеновская дифрактография. Рентгеноструктурный анализ

Тема 13. Количественные способы описания изотерм адсорбции.

отчет , примерные вопросы:

Порошковая рентгеновская дифрактография. Идентификация кристаллических фаз.

Тема 14. Линейная идеальная газовая хроматография.

отчет , примерные вопросы:

Основы сенсорного анализа. Лабораторная работа: Массочувствительные сенсоры типа кварцевых микровесов. Основы сенсорного анализа. Ознакомление с устройством массочувствительных сенсоров типа кварцевых микровесов.

Тема 15. Линейная неидеальная газовая хроматография.

отчет , примерные вопросы:

Приготовление сенсоров с тонким слоем рецептора. Определение состава насыщенных клатратов каликсаренов с помощью массочувствительных сенсоров типа кварцевых микровесов.

Тема 16. Устройство газового хроматографа.

отчет , примерные вопросы:

Катализ. Лабораторная работа: Гетерогенный катализ реакций гидрирования и дегидрирования углеводов.

Тема 17. Высокоэффективная жидкостная хроматография (ВЭЖХ).

отчет , примерные вопросы:

Масс-спектрометрия. Общее представление о масс-спектрометрическом методе. Лабораторная работа: Устройство масс-спектрометра и хроматомасс-спектрометра. Определение состава и идентификация компонентов сложных смесей

Тема 18. Устройство жидкостного хроматографа.

контрольная работа , примерные вопросы:

1 Типы межмолекулярных взаимодействий. 2.. Объекты исследования химической термодинамики. Основные законы химической термодинамики. Первое и второе начало термодинамики. Термодинамические параметры равновесных процессов: химических реакций и комплексообразования. Физический смысл энергии Гиббса химической реакции, любого физико-химического процесса. 3. Термодинамика гомогенных растворов неэлектролитов. Законы Рауля и Генри. Для каких растворов они работают? Химический потенциал. Термодинамическая активность. Ее физический смысл. Физический смысл коэффициента активности. Пример с ограниченно растворимыми соединениями. 4. Термодинамические параметры сольватации для разных стандартных состояний. Избыточные величины термодинамических параметров: энергии Гиббса, энтропии и энтальпии для реальных растворов. Понятие стандартного состояния для физико-химического процесса в приложении к процессам образования растворов. 5. Предельно разбавленные растворы: почему возможно их существование? Предельные коэффициенты активности: их физический смысл. Параметр гидрофобности: коэффициент распределения октанол-вода. Для чего требуется знание этих параметров? Пример с токсичностью органических соединений. 6. Разделение термодинамических параметров образования растворов (сольватации, растворения) на вклады энергии образования полости, энергии взаимодействия и энергии разрыва межмолекулярных взаимодействий растворенное вещество - растворенное вещество. Физический смысл каждого вклада. Простейший случай раствора, для которого величины этих вкладов легко свести к измеряемым термодинамическим параметрам чистых веществ. Каковы сложности в применении этой модели к реальным растворам? 7. Реорганизация растворителя (донорно-акцепторные, водородная связь) и неспецифические. Как определить вклад специфических взаимодействий в энергию сольватации? Роль полярности растворителя

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к экзамену:

Программа спецпрактикума.

1. Тема: Изотермическая калориметрия. Основы метода. Приложения калориметрии, объекты исследования.

Лабораторная работа: Работа с изопериболическим калориметром растворения. Электрическая калибровка калориметра с помощью эффекта Джоуля. Определение энтальпии растворения и сольватации нафталина в диоксане.

2. Тема: Определение предельных коэффициентов активности методом статического паровязного газохроматографического анализа. Основы метода статического паровязного газохроматографического анализа.

Лабораторная работа: Общие представления об устройстве капиллярного газового хроматографа. Ознакомление с устройством газового хроматографа Кристалл-2000М и с устройством статического паровязного газохроматографического анализа.

3. Тема: ИК-спектроскопия. Основы метода, его приложения, изучение межмолекулярных взаимодействий.

Лабораторная работа: Работа с Фурье-ИК-спектрометром Vector-22 (Bruker). Съёмка и расшифровка ИК-спектров. Определение константы образования комплекса с Н-связью. Работа с программным обеспечением и ИК-спектральными базами данных.

4. Тема: УФ-спектроскопия. Основы метода, его приложения, изучение межмолекулярных взаимодействий.

Лабораторная работа: Работа с УФ-спектрометром Lambda 35 (Perkin Elmer). Съёмка и расшифровка УФ-спектров. Определение константы образования комплекса с переносом заряда. Работа с программным обеспечением прибора.

5. Тема: Совмещенная термогравиметрия, дифференциальная сканирующая калориметрия и масс-спектрометрия. Основы термогравиметрии и дифференциальной сканирующей калориметрии. Основы квадрупольной масс-спектрометрии.

Лабораторная работа: Ознакомление с устройством прибора совмещенных термогравиметрии и дифференциальной сканирующей калориметрии STA 449C (Netzsch), сопряженного с квадрупольным масс-спектрометром.

6. Тема: Рентгеноструктурный анализ.

Лабораторная работа: Монокристаллическая рентгеновская дифрактография. Рентгеноструктурный анализ

Лабораторная работа: Порошковая рентгеновская дифрактография. Идентификация кристаллических фаз.

7. Тема: Основы сенсорного анализа.

Лабораторная работа: Массочувствительные сенсоры типа кварцевых микровесов. Основы сенсорного анализа. Ознакомление с устройством массочувствительных сенсоров типа кварцевых микровесов. Приготовление сенсоров с тонким слоем рецептора. Определение состава насыщенных клатратов каликсаренов с помощью массочувствительных сенсоров типа кварцевых микровесов.

8. Тема Катализ.

Лабораторная работа: Гетерогенный катализ реакций гидрирования и дегидрирования углеводов.

9. Тема: Масс-спектрометрия. Общее представление о масс-спектрометрическом методе.

Лабораторная работа: Устройство масс-спектрометра и хроматомасс-спектрометра. Определение состава и идентификация компонентов сложных смесей

Самостоятельная работа студентов (СРС) включает следующие виды:

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

ВОПРОСЫ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ И САМОКОНТРОЛЯ

1. Объясните, почему некоторые химические реакции протекают самопроизвольно, используя термины энергия Гиббса и работа.

2. Почему для характеристики свойств компонента в системе используют относительное давление пара?
3. Почему для характеристики свойств компонента в системе используют термодинамическую активность?
4. В чем физический смысл относительного давления пара вещества?
5. В чем физический смысл термодинамической активности вещества?
6. Какое стандартное состояние удобно использовать при описании свойств раствора неэлектролита?
7. Почему для характеристики свойств компонента в системе используют понятие стандартного состояния?
8. Почему вводят понятия избыточной энергии Гиббса и энтропии?
9. Чем избыточная энергия Гиббса отличается от полной энергии Гиббса того же процесса?
10. Существует ли понятие избыточной энтальпии образования раствора неэлектролита? Почему?
11. Почему для описания свойств компонента в системе иногда используют стандартное состояние "идеальный газ"?
12. Какова разность величин изменения энергии Гиббса компонента при образовании раствора для стандартных состояний "чистый жидкий (твердый) компонент" и "данный компонент в состоянии идеального газа"?
13. Какое парциальное давление пара компонента является самым удобным для выбора его стандартного состояния "идеальный газ"?
14. Что представляет собой состояние бесконечно разбавленного раствора?
15. Что происходит с неэлектролитом по мере увеличения степени его разбавления?
16. Почему понятие бесконечно разбавленного раствора вводят только для растворов неэлектролитов?
17. До какой степени нужно разбавить раствор неэлектролита, чтобы он стал бесконечно разбавленным?

Примеры вопросов к экзамену:

1. Типы межмолекулярных взаимодействий.
2. Объекты исследования химической термодинамики. Основные законы химической термодинамики. Первое и второе начало термодинамики. Термодинамические параметры равновесных процессов: химических реакций и комплексообразования. Физический смысл энергии Гиббса химической реакции, любого физико-химического процесса.
3. Термодинамика гомогенных растворов неэлектролитов. Законы Рауля и Генри. Для каких растворов они работают? Химический потенциал. Термодинамическая активность. Ее физический смысл. Физический смысл коэффициента активности. Пример с ограниченно растворимыми соединениями.
4. Термодинамические параметры сольватации для разных стандартных состояний. Избыточные величины термодинамических параметров: энергии Гиббса, энтропии и энтальпии для реальных растворов. Понятие стандартного состояния для физико-химического процесса в приложении к процессам образования растворов.
5. Предельно разбавленные растворы: почему возможно их существование? Предельные коэффициенты активности: их физический смысл. Параметр гидрофобности: коэффициент распределения октанол-вода. Для чего требуется знание этих параметров? Пример с токсичностью органических соединений.
6. Разделение термодинамических параметров образования растворов (сольватации, растворения) на вклады энергии образования полости, энергии взаимодействия и энергии разрыва межмолекулярных взаимодействий растворенное вещество - растворенное вещество. Физический смысл каждого вклада. Простейший случай раствора, для которого величины этих вкладов легко свести к измеряемым термодинамическим параметрам чистых веществ. Каковы сложности в применении этой модели к реальным растворам?

7. Реорганизация растворителя (донорно-акцепторные, водородная связь) и неспецифические. Как определить вклад специфических взаимодействий в энергию сольватации? Роль полярности растворителя

7.1. Основная литература:

1. Горбачук В.В., Зиганшин М.А., Новиков В.Б., Сироткин В.А. Руководство к спецпрактикуму по химической термодинамике. - Казань, Изд. КГУ. 2005.- (30 экз. хранится на кафедре) (Для студентов химического факультета)
2. Горбачук В.В., Зиганшин М.А., Новиков В.Б., Сироткин В.А. Руководство к практическим работам по физико-химическим методам исследования. Казань, Изд. КГУ. 2007.
3. Методические разработки к практикуму по физической химии. Под ред. В.В. Горбачука. Казань. Изд-во КФУ. 2012 - 36с.

7.2. Дополнительная литература:

1. Б. В. Столяров, И. М. Савинов, А. Г. Витенберг. Руководство к практическим работам по газовой хроматографии. Л.: Химия, 1988.
2. Руководство по газовой хроматографии. Под ред. Э. Лейбница, Х. Г. Штруппе в 2-х т. М.: Мир, 1988.
3. Лабораторное руководство по хроматографическим и смежным методам. Под ред. О. Микеша. В 2-х частях. М.: Мир. 1982.
4. В. Хеммингер, Г. Хене. Калориметрия. Теория и практика. М.: Химия, 1989.
5. А. Смит. Прикладная ИК-спектроскопия. М.: Мир, 1985.
6. Юинг Г. Инструментальные методы химического анализа. М.: Мир, 1989.
7. . Сид Дж. В., Этвуд Дж. Л. Супрамолекулярная химия. М.: ИКЦ "Академкнига", 2007, Т. 1, 2.
8. Эткинс П. Физическая химия. - М.: Мир, 1980.
9. Б. А. Руденко. Капиллярная хроматография. М.: Наука, 1978
10. Современное состояние жидкостной хроматографии. под. ред. Дж. Киркланда. М. Наука. 1974.
11. Лабораторное руководство по хроматографическим и смежным методам. Под ред. О. Микеша. В 2-х частях. М.: Мир. 1982.

7.3. Интернет-ресурсы:

- Горбачук В.В., Зиганшин М.А., Новиков В.Б., Сироткин В.А. Руководство к практическим работам по физико-химическим методам исследования. - <http://kpfu.ru/docs/F2103567237/chem0018.pdf>
- Горбачук В.В., Зиганшин М.А., Новиков В.Б., Сироткин В.А. Руководство к спецпрактикуму по химической термодинамике. - <http://kpfu.ru/docs/F574818814/chemPH05.pdf>
- Супрамолекулярная химия . - <http://www.chem.msu.ru/zorkii/istkhim/supramol.html>
- Термодинамика растворов (лекция, англ. яз) - http://www.youtube.com/watch?v=SL1qwsQMp_8
- Толмачев А.М. "Термодинамика адсорбции газов, паров и растворов" (Учебно-методическое пособие). - <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/tolmachev/tolmachev1.pdf>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Химическая термодинамика" 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.

В лабораторном практикуме используется прибор совмещенного термического анализа STA 449 C (Netzsch), дифференциальный сканирующий калориметр DSC 204F 1 (Netzsch), Фурье ИК спектрометр Vector 22 (Bruker), устройство парового газохроматографического анализа собственной разработки на базе капиллярного хроматографа "Кристалл 2000", сенсор типа кварцевых микровесов собственной разработки, оборудование отдела физической химии ИОФХ им.А.Е.Арбузова: порошковый дифрактометр D8 Advance (Bruker).

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по специальности: 020201.65 "Фундаментальная и прикладная химия" и специализации Физическая химия .

Автор(ы):

Горбачук В.В. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Зиганшин М.А. _____

Соломонов Б.Н. _____

"__" _____ 201__ г.