

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. Минзарипов Р.Г.

_____ 20__ г.

Программа дисциплины

Современные проблемы термодинамики растворов СЗ.ДВ.1

Специальность: 020201.65 - Фундаментальная и прикладная химия

Специализация: Физическая химия

Квалификация выпускника:

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Соломонов Б.Н. , Новиков В.Б.

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

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) доцент, к.н. (доцент) Новиков В.Б. Кафедра физической химии Химический институт им. А.М. Бутлерова , Vladimir.Novikov@kpfu.ru ; заведующий кафедрой, д.н. (профессор) Соломонов Б.Н. Кафедра 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 "СЗ.ДВ.1 Профессиональный" основной образовательной программы 020201.65 Фундаментальная и прикладная химия и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 4 курсе, 7 семестр.

Дисциплина относится к профессиональному циклу СЗ (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
ПК-1 (профессиональные компетенции)	понимает сущность и социальную значимость профессии, основных перспектив и проблем, определяющих конкретную область деятельности

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.

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.	7	1-3	5	5	0	
2.	Тема 2. Тема 2. Полуэмпирические и эмпирические представления о межмолекулярных взаимодействиях в неводных растворах.	7	4-8	5	5	0	устный опрос
3.	Тема 3. Тема 3. Специфические взаимодействия в растворах неэлектролитов.	7	9-11	6	5	0	контрольная работа
4.	Тема 4. Тема 4. Влияние среды на физико-химические процессы.	7	12-14	6	5	0	контрольная работа
	Тема . Итоговая форма контроля	7		0	0	0	экзамен
	Итого			22	20	0	

4.2 Содержание дисциплины

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

лекционное занятие (5 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.

практическое занятие (5 часа(ов)):

Практические занятия по термодинамике сольватации.

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

лекционное занятие (5 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 Роршайдера. Модель MOSCED. Классификация органических соединений и функциональных групп по энергии дисперсионных взаимодействий, приходящейся на единицу собственного объема их молекул.

практическое занятие (5 часа(ов)):

Практические занятия по межмолекулярным взаимодействиям в неводных растворах.

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

лекционное занятие (6 часа(ов)):

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

практическое занятие (5 часа(ов)):

Практические занятия по специфическим взаимодействиям в растворах неэлектролитов.

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

лекционное занятие (6 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.

практическое занятие (5 часа(ов)):

Практические занятия по изучению влияния среды на физико-химические процессы.

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.	7	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.	7	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.	7	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 (контроль самостоятельной работы) 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. С-Н- π - взаимодействия. 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-Коппея. 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).

Примерный перечень вопросов к зачету и коллоквиумам (контроль самостоятельной работы)

Коллоквиум 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.

Коллоквиум 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.

Коллоквиум по теме 3.

19. Водородная связь. С-Н...O- взаимодействия.
20. Комплексы с переносом заряда.
21. Ассоциированные растворители.
22. Гидрофобные взаимодействия.
23. Компенсационная зависимость между свободной энергией и энтальпией сольватации и растворения.

Коллоквиум по теме 4.

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. Эткинс П. Физическая химия. Т. 1-2. М. 2007.

7.2. Дополнительная литература:

1. Райхардт К. Растворители и эффекты среды в органической химии / К. Райхардт. - М.: Мир, 1991. - 763 с.
2. Морачевский А.Г. Термодинамика разбавленных растворов неэлектролитов / А.Г. Морачевский, Н.А. Смирнова, И.М. Балашова, И.Б. Пукинский. - Л.: Химия, 1982. - 239 с.
3. Соломонов Б.Н. Термохимия сольватации органических соединений / Б.Н. Соломонов. Докторская диссертация: Казань, 1986. - 435 с.
4. Симкин Б.Я. Квантовохимическая и статистическая теория растворов. Вычислительные методы и их применение / Б.Я. Симкин, И.И. Шейхет. - М.: Химия, 1989. - 256 с.
5. Перелыгин И.С. Экспериментальные методы химии растворов: спектроскопия и калориметрия / И.С. Перелыгин, Л.Л. Кимтис, В.И. Чижик и др. - М.: Наука, 1995. - 380 с.
6. Лебедев Ю.А. Термохимия парообразования органических веществ / Ю.А. Лебедев, Е.А. Мирошниченко. - М.: Наука, 1981. - 216 с.

7. Бахшиев Н.Г. Спектроскопия межмолекулярных взаимодействий / Н.Г. Бахшиев. - Л.: Наука, 1972. - 264 с.
8. Соломонов Б.Н. Термохимия сольватации органических неэлектролитов / Б.Н. Соломонов, А.И. Коновалов // Успехи Химии. - 1991. - Т. 60, Вып. 1. - С. 45-67.
9. Молекулярные взаимодействия. Ред. Г. Ратайчак, У. Орвилл-Томас. М.: Мир. 1984.
10. Н.А.Смирнова. Молекулярные теории растворов. Л.: Химия. 1987.
11. М.И. Шахпаронов. Введение в современную теорию растворов. М.: Высш. школа. 1976.

7.3. Интернет-ресурсы:

книги - <http://gen.lib.rus.ec>

книги - <http://library.nu>

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

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

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.

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):

Соломонов Б.Н. _____

Новиков В.Б. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Горбачук В.В. _____

"__" _____ 201__ г.