

**Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»**

УТВЕРЖДЕНО

**Директор физтех-школы
электроники, фотоники и
молекулярной физики**

В.В. Иванов

	Рабочая программа дисциплины (модуля)
по дисциплине:	Основы физической супрамолекулярной химии
по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра физики супрамолекулярных систем и нанофотоники
курс:	3
квалификация:	бакалавр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 6 (весенний) - Дифференцированный зачет

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

семинары: 0 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 60 час.

Всего часов: 90, всего зач. ед.: 2

Программу составил: Н.Х. Петров, канд. физ.-мат. наук, доцент

Программа обсуждена на заседании кафедры физики супрамолекулярных систем и нанофотоники 29.05.2020

Аннотация

Курс "Основы физической супрамолекулярной химии" предусматривает изучение основ физической химии, супрамолекулярной химии, физико-химической теории растворов, основных теорий: Модели Борна. механизма Айгена-Винклера, теории Онзагера, теории Дебая-Хюккеля.

Задачи дисциплины:

- освоение студентами базовых теоретических знаний в области физической супрамолекулярной химии, изучение простейших методов решения задач физической супрамолекулярной химии.

По результатам освоения курса студент должен:

Знать:

- термодинамические и химические потенциалы;
- теорию кислот и оснований Аррениуса;
- определение водородного показателя;
- буферные системы и их предназначение;
- основные теории растворов;
- понятия о кинетике химических реакций;
- понятия о некоторых механизмах реакций в биологических системах.

Уметь:

- решать задачи по физической супрамолекулярной химии;
- рассчитывать водородный показатель раствора;
- рассчитывать буферную емкость раствора.

Владеть:

- методом квазистационарных концентраций;
- теоретическими основами расчета концентраций растворов.

Основное содержание курса изложено в следующих разделах:

1. Введение. Единицы измерения
2. Термодинамические и химические потенциалы
3. Теории кислот и оснований
4. Сольватация, теории сольватации
5. Статистические гипотезы распределения
6. Основные понятия химической кинетики
7. Метод квазистационарных концентраций
8. Основные понятия о фотосинтезе

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

- изучение основ физической химии, супрамолекулярной химии, физико-химической теории растворов, основных теорий: Модели Борна. механизма Айгена-Винклера, теории Онзагера, теории Дебая-Хюккеля.

Задачи дисциплины

- освоение студентами базовых теоретических знаний в области физической супрамолекулярной химии, изучение простейших методов решения задач физической супрамолекулярной химии.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
--------------------------------	-----------------------------------

УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	УК-1.1 Анализирует задачу, выделяя этапы ее решения, действия по решению задачи
	УК-1.3 Рассматривает различные варианты решения задачи, оценивает их преимущества и недостатки
	УК-1.2 Находит, критически анализирует и выбирает информацию, необходимую для решения поставленной задачи
ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования	ПК-1.1 Владеет фундаментальными понятиями, законами и теориями современной физики
	ПК-1.4 Умеет строить математические модели для описания и исследования процессов и явлений в соответствующих научных областях
	ПК-1.2 Имеет глубокое знание и понимание базовых математических дисциплин
	ПК-1.8 Владеет навыками работы с современными языками программирования и программными пакетами для научных расчетов

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- термодинамические и химические потенциалы;
- теорию кислот и оснований Аррениуса;
- определение водородного показателя;
- буферные системы и их предназначение;
- основные теории растворов;
- понятия о кинетике химических реакций;
- понятия о некоторых механизмах реакций в биологических системах.

уметь:

- решать задачи по физической супрамолекулярной химии;
- рассчитывать водородный показатель раствора;
- рассчитывать буферную емкость раствора.

владеть:

- методом квазистационарных концентраций;
- теоретическими основами расчета концентраций растворов.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Введение. Единицы измерения	2			7
2	Термодинамические и химические потенциалы	4			8
3	Теории кислот и оснований	4			8
4	Сольватация, теории сольватации	4			8
5	Статистические гипотезы распределения	4			8
6	Основные понятия химической кинетики	4			7

7	Метод квазистационарных концентраций	4			7
8	Основные понятия о фотосинтезе	4			7
Итого часов		30			60
Подготовка к экзамену		0 час.			
Общая трудоёмкость		90 час., 2 зач.ед.			

4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 6 (Весенний)

1. Введение. Единицы измерения

Введение. Единицы измерения.

2. Термодинамические и химические потенциалы

Термодинамические потенциалы. Химический потенциал. Преобразование Лежандра. Теорема Эйлера. Уравнение Гиббса-Дюгема. Условия равновесия физико-химических процессов. Коэффициент активности. Изменение потенциала Гиббса в ходе химической реакции. Закон равновесия в приближении разбавленного раствора. Зависимость констант равновесия от температуры. Влияние давления.

3. Теории кислот и оснований

Теория кислот и оснований Аррениуса. Определение pH в водных растворах. Растворы электролитов. Буферная система.

4. Сольватация, теории сольватации

Сольватация, селективная сольватация. Энергия сольватации. Числа сольватации. Межмолекулярные взаимодействия: универсальные и специфические (водородная связь). Коллоидные растворы (мицеллы, микроэмульсии). Модель Борна. Контактные и сольватно-разделенные ионные пары. Механизм Айгена-Винклер. Теория Онзагера. Теория Дебая-Хюккеля. Радиус Дебая. Ионная сила раствора. Ионные жидкости. Жидкостная экстракция.

5. Статистические гипотезы распределения

Статистические суммы и функции распределения. Гипотеза об аддитивности парных взаимодействий. Радиальная функция распределения и методы ее определения.

6. Основные понятия химической кинетики

Закон действующих масс. Принцип независимости протекания реакций. Зависимость между константами скорости и константой равновесия химической реакции. Простые обратимые реакции. Кинетически сложные реакции. Ферментативный катализ (уравнение Мехэлиса-Ментен).

7. Метод квазистационарных концентраций

Метод Боденштейна-Семенова (метод квазистационарных концентраций), условия применимости. Кинетика сольватации. Реакции, лимитируемые диффузией. Соотношение Эйнштейна. Вращательная диффузия. Эффект клетки.

8. Основные понятия о фотосинтезе

Фотосинтез. Донорно-акцепторные системы. Фотоперенос электрона. Влияние магнитных полей на скорость химических реакций. Механизм радикальных пар.

5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

учебная аудитория, оснащенная компьютером и мультимедийным оборудованием (проектор, звуковая система).

6. Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

1. П. Эткинс, Физическая химия, т.1,2, М. 1980.
2. Я.И. Френкель, Кинетическая теория жидкостей. Изд. АН СССР, 1945

Дополнительная литература

1. И. Пригожин, Д. Кондепуди. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур, М.: Мир, 2002

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Не используются

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

не предусмотрены.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Студент, изучающий дисциплину, должен с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике. В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения дисциплины, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- напряжённой самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями к преподавателю.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра физики супрамолекулярных систем и нанофотоники
курс:	<u>3</u>
квалификация:	бакалавр
Семестр, формы промежуточной аттестации: 6 (весенний) - Дифференцированный зачет	
Разработчик:	Н.Х. Петров, канд. физ.-мат. наук, доцент

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	УК-1.1 Анализирует задачу, выделяя этапы ее решения, действия по решению задачи
	УК-1.3 Рассматривает различные варианты решения задачи, оценивает их преимущества и недостатки
	УК-1.2 Находит, критически анализирует и выбирает информацию, необходимую для решения поставленной задачи
ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования	ПК-1.1 Владеет фундаментальными понятиями, законами и теориями современной физики
	ПК-1.4 Умеет строить математические модели для описания и исследования процессов и явлений в соответствующих научных областях
	ПК-1.2 Имеет глубокое знание и понимание базовых математических дисциплин
	ПК-1.8 Владеет навыками работы с современными языками программирования и программными пакетами для научных расчетов

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Основы физической супрамолекулярной химии» обучающийся должен:

знать:

- термодинамические и химические потенциалы;
- теорию кислот и оснований Аррениуса;
- определение водородного показателя;
- буферные системы и их предназначение;
- основные теории растворов;
- понятия о кинетике химических реакций;
- понятия о некоторых механизмах реакций в биологических системах.

уметь:

- решать задачи по физической супрамолекулярной химии;
- рассчитывать водородный показатель раствора;
- рассчитывать буферную емкость раствора.

владеть:

- методом квазистационарных концентраций;
- теоретическими основами расчета концентраций растворов.

3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

Для проведения текущего контроля успеваемости в начале каждого занятия предусмотрен краткий опрос по теме предыдущего занятия.

4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

Вопросы к дифференцированному зачету:

1. Термодинамические потенциалы.
2. Химический потенциал.
3. Преобразование Лежандра. Теорема Эйлера.
4. Уравнение Гиббса-Дюгема.

5. Условия равновесия физико-химических процессов.
6. Коэффициент активности.
7. Изменение потенциала Гиббса в ходе химической реакции.
8. Закон равновесия в приближении разбавленного раствора.
9. Зависимость констант равновесия от температуры. Влияние давления.
10. Теория кислот и оснований Аррениуса.
11. Определение pH в водных растворах.
12. Буферные растворы.
13. Сольватация, селективная сольватация. Энергия сольватации. Числа сольватации.
14. Межмолекулярные взаимодействия: универсальные и специфические (водородная связь).
15. Коллоидные растворы (мицеллы, микроэмульсии).
16. Модель Борна.
17. Механизм Айгена-Винклер.
18. Теория Онзагера.
19. Теория Дебая-Хюккеля. Радиус Дебая.
20. Ионная сила раствора.
21. Ионные жидкости.
22. Жидкостная экстракция.
23. Статистические суммы и функции распределения. Гипотеза об аддитивности парных взаимодействий. Радиальная функция распределения и методы ее определения.
24. Закон действующих масс. Принцип независимости протекания реакций. Зависимость между константами скорости и константой равновесия химической реакции.
25. Простые обратимые реакции.
26. Кинетически сложные реакции.
27. Ферментативный катализ (уравнение Мехэлиса-Ментен).
28. Метод Боденштейна-Семенова (метод квазистационарных концентраций), условия применимости.
29. Кинетика сольватации. Реакции, лимитируемые диффузией. Соотношение Эйнштейна. Вращательная диффузия. Эффект клетки.
30. Фотосинтез. Донорно-акцепторные системы. Фотоперенос электрона.
31. Влияние магнитных полей на скорость химических реакций. Механизм радикальных пар.

Критерии оценивания

Оценка отлично (10 баллов) - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично (9 баллов) - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично (8 баллов) - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо (7 баллов) - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо (6 баллов) - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо (5 баллов) - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно (4 балла) - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно (3 балла) - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно (2 балла) - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно (1 балл) - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

При проведении дифференцированного зачета обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрос обучающегося по билету на устном экзамене не должен превышать одного астрономического часа.