

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

УТВЕРЖДЕНО

**Директор физтех-школы
биологической и медицинской
физики**

Д.В. Кузьмин

Рабочая программа дисциплины (модуля)

по дисциплине:	Физическая химия
по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Биофизика и биоинформатика Физтех-школа Биологической и Медицинской Физики департамент молекулярной и биологической физики
курс:	2
квалификация:	бакалавр

Семестры, формы промежуточной аттестации:

3 (осенний) - Дифференцированный зачет

4 (весенний) - Экзамен

Аудиторных часов: 150 всего, в том числе:

лекции: 45 час.

семинары: 45 час.

лабораторные занятия: 60 час.

Самостоятельная работа: 180 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 360, всего зач. ед.: 8

Количество контрольных работ, заданий: 4

Программу составили:

А.В. Инденбом, канд. хим. наук

Е.Е. Куликов, канд. биол. наук

С.В. Траньков

А.Ю. Куксин, канд. физ.-мат. наук

П.А. Жилиев, канд. физ.-мат. наук

О.В. Сергеев

Программа обсуждена на заседании департамента молекулярной и биологической физики 04.06.2020

Аннотация

Дисциплина знакомит обучающихся с основами физической химии (химической термодинамики и кинетики, коллоидной химии и электрохимии) и дает практическую подготовку к дальнейшей самостоятельной работе в области биохимии, физики живых систем, биотехнологии, технологии наноматериалов, наук о материалах.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

- ознакомление обучающихся с основами физической химии (химической термодинамики и кинетики, коллоидной химии и электрохимии) в сфере наукоемких технологий и их практическая подготовка к дальнейшей самостоятельной работе в области биохимии, физики живых систем, биотехнологии, технологии наноматериалов, наук о материалах.

Задачи дисциплины

- ознакомление обучающихся с предметом, принципами, методами и моделями физической химии;
- приобретение обучающимися теоретических знаний, практических умений и навыков в области исследования химических и электрохимических процессов;
- консультирование, оказание помощи обучающимся при проведении их собственных теоретических и экспериментальных исследований.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ОПК-1 Способен применять фундаментальные знания, полученные в области физико-математических и (или) естественных наук, и использовать их в профессиональной деятельности	ОПК-1.2 Способен строить математические модели, производить количественные расчеты и оценки
	ОПК-1.1 Способен анализировать поставленную задачу, намечать пути ее решения
	ОПК-1.3 Способен определять границы применимости полученных результатов
ОПК-4 Способен осуществлять сбор и обработку научно-технической и (или) технологической информации для решения фундаментальных и прикладных задач	ОПК-4.1 Владеет методами научного поиска и интеллектуального анализа информации при решении задач профессиональной деятельности
	ОПК-4.3 Умеет составлять аннотации, рефераты, библиографические перечни и обзоры информации в области своей профессиональной деятельности
ОПК-5 Способен участвовать в проведении фундаментальных и прикладных исследований и разработок, самостоятельно осваивать новые теоретические, в том числе, математические методы исследований, и работать на современной экспериментальной научно-исследовательской, измерительно-аналитической и технологической аппаратуре	ОПК-5.1 Способен решать поставленные задачи в области теоретических и экспериментальных исследований и разработок
	ОПК-5.2 Обладает способностью к освоению новых знаний на основе изучения литературы, научных статей и других источников
ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования	ПК-1.5 Владеет навыками безопасной работы с современными научными приборами и другим экспериментальным оборудованием
	ПК-1.6 Знает основные правила поведения и работы в современной научной лаборатории
	ПК-1.1 Владеет фундаментальными понятиями, законами и теориями современной физики
	ПК-1.3 Владеет культурой постановки научной задачи и моделирования естественнонаучных объектов и систем

	ПК-1.4 Умеет строить математические модели для описания и исследования процессов и явлений в соответствующих научных областях
ПК-2 Способен анализировать полученные в ходе научно-исследовательской работы данные и делать научные выводы (заключения)	ПК-2.1 Владеет методами статистической обработки и анализа научных данных
	ПК-2.2 Умеет находить ключевые параметры, определяющие изучаемое явление, и производить численные оценки по порядку величины
	ПК-2.3 Способен представлять научные утверждения, их обоснования и доказательства, научные проблемы и их решения ясно и точно в терминах, понятных для профессиональной аудитории, в письменной и устной форме
ПК-4 Способен критически оценивать применимость используемых методик и методов	ПК-4.1 Знает численные порядки величин, характерных для соответствующей профессиональной области
	ПК-4.2 Знает источники происхождения и умеет производить оценку погрешности измерений и достоверности экспериментальных результатов
	ПК-4.3 Способен обосновать причинно-следственные отношения используемых понятий и моделей

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- фундаментальные понятия, законы и теории физической химии;
- численные значения констант и порядков физических величин, употребляемых в физической химии;
- принципы расчета равновесного состава многокомпонентных систем и построения фазовых диаграмм;
- условия термодинамического равновесия, в т.ч. фазового, химического, электрохимического, межфазного;
- основные методы физико-химического анализа, калориметрии и измерения термодинамических свойств;
- основы термодинамики гетерогенных электрохимических систем;
- типы, устройство и свойства основных электродов в потенциометрии;
- принципы устройства электрохимических ячеек для потенциометрических, кондуктометрических и электрокапиллярных измерений;
- общие причины образования и стабильности дисперсных систем;
- основные модели описания двойного электрического слоя на границе раздела фаз;
- закономерности адсорбции на межфазных границах, электрокапиллярных явлений;
- основные закономерности электрокинетических явлений;
- основы теории электролитной коагуляции;
- закономерности мицеллообразования в растворах ПАВ;
- законы действующих масс и действующих поверхностей;
- закономерности о гомогенном катализе, ферментативной кинетике, межфазном катализе;
- основные законы кинетики электродных процессов;
- теории активных столкновений, активированного комплекса;
- представления о цепных, радикальных и полимеризационных реакциях.

уметь:

- выделять существенные факторы при анализе физико-химических процессов;
- делать выводы из сопоставлений результатов теории и эксперимента;
- производить численные оценки;
- делать качественные выводы в рассматриваемых задачах и проблемах;
- видеть физическую суть химических процессов и явлений в дисперсных системах;
- формулировать физические и математические модели некоторых химических явлений;
- пользоваться справочной литературой для поиска необходимых физико-химических данных и понятий;
- планировать проведение эксперимента;
- оценивать погрешность и степень достоверности измеряемых величин и результатов, полученных при их обработке;
- выяснять источники погрешностей выполненных измерений.

владеть:

- навыками самостоятельной работы в лаборатории на современном экспериментальном оборудовании;
- навыками освоения больших объемов информации;
- навыками постановки и анализа физико-химических задач;
- методами экспериментального исследования физико-химических систем;
- методами составления и решения кинетических уравнений для химических систем;
- навыками обработки результатов эксперимента и сопоставления их с теоретическими значениями и справочными данными.

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	Термохимия. Температурная зависимость термодинамических функций.	4	4		11
2	Фазовые и химические равновесия. Основы термодинамики растворов. Активность. Коллигативные свойства растворов. Фазовые диаграммы.	4	4		16
3	Растворы электролитов: описание растворимости и ионного состава. Кислотно-основные равновесия. Буферные растворы. Теория Дебая-Хюккеля.	4	4		16
4	Электрохимия. Теория Борна. Электропроводность растворов электролитов. Диффузионный потенциал. Уравнение Нернста. Строение двойного электрического слоя. Уравнение Батлера-Фольмера. Диффузионно-лимитированная кинетика.	9	9		16

5	Межфазные явления и основы коллоидной химии. Влияние адсорбции на поверхностное натяжение, изотерма Гиббса. Мицеллообразование в растворах ПАВ. Стабильность коллоидных систем, коагуляция. Электрокинетические явления.	9	9		16
6	Основные понятия химической кинетики. Формальная кинетика. Приближенные методы химической кинетики.	4	4		9
7	Катализ. Гомогенный катализ. Ферментативный катализ. Гетерогенный катализ.	4	4		9
8	Теория активных соударений. Основы теории переходного состояния. Влияние среды на скорость химических реакций.	4	4		9
9	Радикальные реакции. Цепные реакции. Полимеризационные процессы. Термодинамика и кинетика полимеризации.	3	3		9
10	Получение и свойства лиофобных и лиофильных коллоидных систем. Факторы, влияющие на стабильность лиофобных коллоидных систем. Электролитная коагуляция. Кинетика коагуляции.			10	11
11	Химические равновесия в растворах электролитов: кондуктометрия и потенциометрия. Измерение pH. Титрование.			10	11
12	Поверхностные явления. Изотермы поверхностного натяжения и адсорбции. Поверхностно-активные вещества. Закономерности мицеллообразования. Методы определения критической концентрации мицеллообразования.			10	11
13	Кинетика химических реакций в растворах. Влияние ионной силы раствора на скорость химических реакций			10	12
14	Электрохимия: процессы на электродах. Равновесный электродный потенциал. Кинетика электродных процессов. Трех и четырехэлектродные электрохимические ячейки. Электроды сравнения.			10	12
15	Электрокапиллярные явления. Строение двойного электрического слоя.			10	12
Итого часов		45	45	60	180
Подготовка к экзамену		30 час.			
Общая трудоёмкость		360 час., 8 зач.ед.			

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

Семестр: 3 (Осенний)

1. Термохимия. Температурная зависимость термодинамических функций.

Основные понятия термодинамики. Начала термодинамики. Термодинамические параметры, функции и потенциалы; интегральные и дифференциальные тождества между ними. Соотношения взаимности Максвелла. Уравнения Гиббса–Гельмгольца.

Термохимия. Изменения термодинамических функций в результате реакции. Тепловой эффект реакции. Закон Гесса. Стандартные условия и потенциалы. Цикл Борна–Габера. Энергия химической связи.

Температурная зависимость термодинамических функций. Законы Кирхгофа. Теплоёмкости газов, жидкостей и твердых тел, их связь с количеством степеней свободы. Теорема о равнораспределении энергии по степеням свободы.

2. Фазовые и химические равновесия. Основы термодинамики растворов. Активность. Коллигативные свойства растворов. Фазовые диаграммы.

Химический потенциал, его связь с потенциалом Гиббса. Уравнение Гиббса–Дюгема. Химический потенциал идеального газа и идеального раствора.

Термодинамические и кинетические условия равновесия. Механическое, термическое и химическое равновесие. Изменение энергии Гиббса при протекании химической реакции, изотерма Вант-Гоффа. Определение направления самопроизвольного течения химической реакции.

Константа равновесия и её связь с термодинамическими потенциалами. Уравнение Вант-Гоффа для температурной зависимости константы равновесия.

Химический потенциал, его связь с потенциалом Гиббса. Уравнение Гиббса–Дюгема. Химический потенциал идеального газа и идеального раствора.

Термодинамические и кинетические условия равновесия. Механическое, термическое и химическое равновесие. Изменение энергии Гиббса при протекании химической реакции, изотерма Вант-Гоффа. Определение направления самопроизвольного течения химической реакции.

Константа равновесия и её связь с термодинамическими потенциалами. Уравнение Вант-Гоффа для температурной зависимости константы равновесия.

Фазовые равновесия однокомпонентных систем. Уравнение Клапейро-на-Клаузиуса. Фазовые диаграммы. Тройная и критическая точки. Правило фаз Гиббса.

Влияние кривизны поверхности на давление насыщенного пара и растворимость веществ. Уравнения Кельвина–Томсона и Гиббса–Фрейндлиха–Оствальда. Изотермическая перегонка (перекристаллизация).

Фазовые равновесия двухкомпонентных систем. Эбулио- и криоскопия. Осмос, закон Вант-Гоффа. Закон Рауля. Растворимость газов и твердых тел. Закон Генри. Экстракция, коэффициент распределения.

Фазовые диаграммы двухкомпонентных систем с газовой фазой. Правило рычага. Конгруэнтность фазового перехода и разделение компонентов. Отклонения от закона Рауля. Азеотропная точка.

Фазовые диаграммы двухкомпонентных систем с твердой фазой. Уравнение Шрёдера–Ле Шателье. Эвтектическая точка. Регулярные растворы, модель Скотчарда–Гильдебранда.

3. Растворы электролитов: описание растворимости и ионного состава. Кислотно-основные равновесия. Буферные растворы. Теория Дебая–Хюккеля.

Диссоциация и химическое равновесие в растворах электролитов. Константа диссоциации, ионное произведение, произведение растворимости. Закон разведения Оствальда и границы его применимости. рН. Буферные растворы, буферная ёмкость. Уравнение Гендерсона–Гассельбаха и границы его применимости. Кислотно-основное титрование. Диаграммы Пурбэ.

Идеальные и реальные растворы. Активность и коэффициент активности. Зависимость химических потенциалов идеального и реального раствора от их концентрации. Растворы электролитов. Теория Дебая–Хюккеля. Ионная атмосфера, ионная сила, дебаевский радиус. Влияние ионной силы на положение равновесия, солевой эффект.

4. Электрохимия. Теория Борна. Электропроводность растворов электролитов. Диффузионный потенциал. Уравнение Нернста. Строение двойного электрического слоя. Уравнение Батлера–Фольмера. Диффузионно-лимитированная кинетика.

Электрохимия гетерогенных систем. Вольта- и гальвани-потенциалы. Разность потенциалов на фазовых границах. Гальванический элемент и электролитическая ячейка. Электродный потенциал и потенциалы окис-лительно-восстановительных реакций. Запись гальванической цепи, вычисление её эдс. Анод и катод в гальванической и электролитической ячейках.

Термодинамика гальванических элементов. Уравнение Нернста. Правило Лютера. Стандартный электродный потенциал. Стандартный водородный электрод. Метод ЭДС для определения коэффициентов активности и произведений растворимости. Электроды I и II рода. Электроды сравнения.

Мембранный потенциал. Стекланный электрод и рН-метрия. Уравнение Никольского.

Модель Борна для расчета теплоты гидратации.

Неравновесные явления в растворах электролитов. Диффузия и миграция ионов. Удельная и эквивалентная электропроводности. Правило Кольрауша. Правило Вальдена–Писаржевского для влияния вязкости на электропроводность. Эстафетный механизм электропроводности ионов H^+ и OH^- .

Диффузионный потенциал: механизм его возникновения и методы минимизации его вклада в измерительных схемах. Уравнение Гендерсона–Планка.

5. Межфазные явления и основы коллоидной химии. Влияние адсорбции на поверхностное натяжение, изотерма Гиббса. Мицеллообразование в растворах ПАВ. Стабильность коллоидных систем, коагуляция. Электрокинетические явления.

Термодинамика поверхностных явлений. Физическая и химическая адсорбции. Изотермы адсорбции Генри, Ленгмюра, Брунауэра–Эммета–Теллера. Условия их применимости.

Поверхностное натяжение. Поверхностно активные и инактивные вещества. Классификация ПАВ и принципы их действия. Правило Дюкло–Траубе. Влияние адсорбции на поверхностное натяжение, уравнение изотермы Гиббса. Зависимость поверхностного натяжения от концентрации ПАВ (уравнение Шишковского).

Смачиваемость и её зависимость от свойств жидкости, типа и структуры поверхности. Влияние на поверхностное натяжение длины и полярности молекул растворителя. Гидрофобность и гидрофильность, амфифильность и амфифобность (омнифобность). Работа когезии и адгезии, их связь с поверхностным натяжением. Правило Антонова. Краевой угол, уравнение Юнга–Дюпре.

Поверхностная активность. Поверхностно-активные и поверхностно-инактивные вещества. Правило Дюкло–Траубе и его физический смысл.

Леофильные дисперсные системы. Условия их образования при диспергировании макрофаз и термодинамическая устойчивость.

Мицеллы ПАВ и их структура в водных растворах и неполярных растворителях. Бислойные структуры: мембраны и пены. Связь молекулярного строения органических ПАВ и их свойств. Критическая концентрация мицеллообразования и методы её определения. Влияние на ККМ температуры, ионной силы, структуры и размера углеводородного радикала. Температурный предел мицеллообразования, точка Крафта и точка помутнения. Солюбилизация в растворах мицеллообразующих ПАВ Гидрофильно-липофильный баланс.

Строение двойного электрического слоя у поверхности частицы лиофобного золя. Электрокинетический ζ -потенциал, его определение, типичные значения для устойчивых зольей и зависимость от концентрации электролита. Электрокинетические явления. Уравнение Гельмгольца–Смолуховского для скорости электрофоретического переноса. Электрофорез. Электрофоретическая подвижность. Гель-электрофорез.

Процессы переноса в пористых мембранах. Электроосмос, скорость течения при электроосмосе. Диализ. Ионоселективные мембраны: катио-нитные и анионитные. Доннановское равновесие.

Семестр: 4 (Весенний)

6. Основные понятия химической кинетики. Формальная кинетика. Приближенные методы химической кинетики.

Прямая и обратная задачи химической кинетики. Основные понятия и задачи формальной кинетики. Классификация реакций.

Закон действующих масс. Константа скорости. Частные и общий порядки реакции и их связь с молекулярностью реакции. Время полупревращения и характеристическое время, время релаксации. Температурное правило Вант-Гоффа и уравнение Аррениуса. Истинная и эффективная энергия активации.

Особенности кинетического описания односторонних и обратимых реакций.

Лимитирующая стадия. Метод Боденштейна. Квазистационарное и квазиравновесное приближения.

7. Катализ. Гомогенный катализ. Ферментативный катализ. Гетерогенный катализ.

Лимитирующая стадия. Метод Боденштейна. Квазистационарное и квазиравновесное приближения.

Гомогенный катализ и ферментативная кинетика. Кинетическая схема Михаэлиса–Ментен. Спрямолинейные координаты, их преимущества и недостатки. Влияние эффекторов: ингибирование и активация. Автокатализ.

Гетерогенные реакции. Механизмы Ленгмюра–Хиншельвуда и Илея–Ридела. Закон действующих поверхностей. Гетерогенный (межфазный) катализ. Изотермы ассоциативной и диссоциативной, конкурентной и неконкурентной адсорбции.

8. Теория активных соударений. Основы теории переходного состояния. Влияние среды на скорость химических реакций.

Теории абсолютных скоростей реакций.

Кинетика реакций в газовой фазе. Теория активных столкновений. Фактор соударений и стерический фактор. Вычисление предэкспонент моно-, би- и тримолекулярных гомогенных реакций и реакций на поверхности. Схема Линдемана.

Кинетика реакций в жидкостях. Теория клетки и диффузионная кинетика быстрых реакций. Уравнение Дебая–Смолуховского–Ланжевена. Кинетика конденсации: стадии зародышеобразования и коалесценции. Закон Лифшица–Слёзова.

Теория переходного состояния (активированного комплекса) Эйринга–Поляни. Поверхность потенциальной энергии. Понятие о статистическом описании скорости химической реакции.

Влияние среды на скорость химических реакций. Солевые эффекты в быстрых и медленных реакциях. Формула Дебая–Смолуховского.

Вычисление энергии активации. Теория Маркуса для реакций переноса электрона в растворах. Соотношения Брэнстеда и Семёнова–Поляни.

9. Радикальные реакции. Цепные реакции. Полимеризационные процессы. Термодинамика и кинетика полимеризации.

Радикальные реакции, их классификация. Неразветвленные цепные реакции.

Полимеризационные процессы: радикальная и ионная полимеризации. Гомополимеризация, сополимеризация и поликонденсация. Термодинамика и кинетика полимеризационных процессов. Молекулярно-массовые распределения (ММР) Шульца и Флори.

10. Получение и свойства лиофобных и лиофильных коллоидных систем. Факторы, влияющие на стабильность лиофобных коллоидных систем. Электролитная коагуляция. Кинетика коагуляции.

Леофобные дисперсные системы и методы их получения: пептизация и конденсация. Агрегативная и седиментационная устойчивость леофобных коллоидов, факторы их стабилизации и самопроизвольные процессы, приводящие к их разрушению. Эффект Тиндаля. Опалесценция. Расклинивающее давление.

Основы теории коагуляции зольей электролитами (теория ДЛФО). Строение мицеллы леофобных зольей. Механизмы концентрационной и нейтрализационной коагуляции, зависимость от заряда ионов. Правило Шульце–Гарди для коагулирующей способности ионов. Перезарядка коллоидных частиц под действием электролитов. Зоны устойчивости и коагуляции зольей по концентрации электролита. Правила Дерягина–Ландау, Эйлера–Корфа, Фаянса–Панета–Гана. Ряды Гофмейстера и их связь с коагуляцией и пептизацией. Кинетика коагуляции, уравнение Смолуховского.

11. Химические равновесия в растворах электролитов: кондуктометрия и потенциометрия. Измерение рН. Титрование.

Диссоциация и химическое равновесие в растворах электролитов. Константа диссоциации, ионное произведение, произведение растворимости. Закон разведения Оствальда и границы его применимости. рН. Буферные растворы, буферная ёмкость. Уравнение Гендерсона–Гассельбаха и границы его применимости. Кислотно-основное титрование.

Мембранный потенциал. Стекланный электрод и рН-метрия. Уравнение Никольского.

Диффузионный потенциал: механизм его возникновения и методы минимизации его вклада в измерительных схемах.

12. Поверхностные явления. Изотермы поверхностного натяжения и адсорбции. Поверхностно-активные вещества. Закономерности мицеллообразования. Методы определения критической концентрации мицеллообразования.

Поверхностная активность. Поверхностно-активные и поверхностно-инактивные вещества. Правило Дюкло–Траубе и его физический смысл.

Леофильные дисперсные системы. Условия их образования при диспергировании макрофаз и термодинамическая устойчивость.

Мицеллы ПАВ и их структура в водных растворах и неполярных растворителях. Бислойные структуры: мембраны и пены. Связь молекулярного строения органических ПАВ и их свойств. Критическая концентрация мицеллообразования и методы её определения. Влияние на ККМ температуры, ионной силы, структуры и размера углеводородного радикала. Температурный предел мицеллообразования, точка Крафта и точка помутнения. Солюбилизация в растворах мицеллообразующих ПАВ Гидрофильно-липофильный баланс.

13. Кинетика химических реакций в растворах. Влияние ионной силы раствора на скорость химических реакций

Теория переходного состояния (активированного комплекса) Эйринга–Поляни. Поверхность потенциальной энергии. Понятие о статистическом описании скорости химической реакции.

Влияние среды на скорость химических реакций. Солевые эффекты в кинетике химических реакций. Формула Бренстеда–Бьеррума.

Формула Дебая–Смолуховского.

Спектрометрические методы изучения кинетики химических реакций. Закон Бугера–Ламберта–Бера. Оптическая плотность. Коэффициенты поглощения и экстинкции.

Особенности кинетического описания односторонних и обратимых реакций.

14. Электрохимия: процессы на электродах. Равновесный электродный потенциал. Кинетика электродных процессов. Трёх и четырёхэлектродные электрохимические ячейки. Электроды сравнения.

Поляризуемые и неполяризуемые электроды, их идеальная и реальная вольт-амперная характеристика и применение. Методы изучения ДЭС (адсорбционный, электрокапиллярный, по измерению ёмкости и пр.).

Кинетика электродных процессов. Ток обмена. Уравнения Тафеля и Батлера–Фольмера. Простейшая эквивалентная электрическая схема электрода Эршлера–Рэндлса. Вольт-амперная характеристика диффузионно-лимитированного тока разряда ионов. Предельный диффузионный ток и методы снижения диффузионных ограничений.

Трёхэлектродная схема. Требования к электродам в схеме для измерения: электрокапиллярной кривой, ёмкости и вольт-амперной характеристики электрода. Методы измерения электропроводности растворов на постоянном и переменном токе в двух- и четырёхэлектродных ячейках. Их преимущества, недостатки и области применения. Термокомпенсация.

15. Электрокапиллярные явления. Строение двойного электрического слоя.

Двойной электрический слой и его структура. Различные механизмы его возникновения на фазовых границах. Модельные подходы к описанию двойного электрического слоя: Гельмгольца–Перрена, Гуи–Чапмена, Штерна. Границы их применимости. Уравнение Грэма.

Адсорбция. Специфическая и неспецифическая адсорбция. Ионообменная адсорбция. Уравнение Гиббса.

Электрокапиллярные явления. Дифференциальная ёмкость двойного электрического слоя и её измерение. Потенциал нулевого заряда, факторы, влияющие на его величину и методы его определения. Уравнение Липпмана. Влияние адсорбции органических веществ и специфической адсорбции ионов на электрокапиллярную кривую. Лиотропные ряды Гофмейстера.

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

учебная аудитория, оснащенная мультимедиапроектором и экраном.
 Учебные лаборатории, оснащенные компьютерной техникой с подключением к сети «Интернет», средствами измерений и вспомогательным оборудованием:
 Аналитические весы Ohaus Pioneer.
 Установка для определения поверхностного натяжения по методу Вильгельми на основе аналитических весов Ohaus Pioneer.
 Калориметр Эксперт-001.
 Дифференциальный сканирующий калориметр.
 Спектрометры динамического рассеяния света Photocorr - 1 шт., Photocorr Compact Z - 1 шт.
 Спектрофотометры Shimadzu UV-1800 (4 шт.) и Hach Lange DR 5000 (2 шт.).
 Водяные лабораторные термостаты LOIP LT200.
 pH-метр pH-150M.
 pH-метры (иономер) Эксперт-001 с комбинированным электродом "3 в 1" (измерительный+сравнения+термодатчик) - 3 шт.
 Стекланные pH-электроды ЭСЛ-73-07С.
 Ag/AgCl электроды сравнения ЭСр-10101.
 Кондуктометры Эксперт-002 - 4 шт.
 Кондуктометрические датчики наливного и погружного типа УЭП-ПС лабораторные.
 Кондуктометрические ячейки с плоскими Pt электродами.
 Титратор Фишера Эксперт-007 М.
 Одноканальные потенциостаты-гальваностаты Elins P-30J – 2 шт., Elins nano – 2 шт.
 Импедансметр-потенциостат-гальваностат Elins P-5х. – 1 шт.
 Автоматические дозаторы Ленпипет от 100 до 1000 мкл - 6 шт.
 Автоматические дозаторы Ленпипет от 10 до 100 мкл - 6 шт.
 Автоматические дозаторы Ленпипет от 1 до 10 мкл - 1 шт.
 Атомно-силовой микроскоп NT-MDT Solver Next с приставкой для измерений в жидкостях
 Дистиллятор, шкаф сушильный

6.Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

1. Химическая кинетика: задачи, примеры, задания [Текст] : учеб. пособие для вузов / А. П. Пурмаль, В. Н. Простов, Ю. Н. Козлов ; М-во образования и науки Рос. Федерации, Моск. физ.-техн. ин-т (гос. ун-т. — 2-е изд., испр. и доп. — М. : МФТИ, 2009. — 195 с.
2. А, Б, В. химической кинетики [Текст] : учеб. пособие для вузов / А. П. Пурмаль. — М. : Академкнига, 2004. — 277 с.
3. Основы физической химии [Текст] : в 2 ч. Ч. 1 : Теория / В. В. Еремин [и др.] - МБИНОМ. Лаб. знаний, 2017
4. Основы физической химии [Текст] : в 2 ч. Ч. 2 : Задачи / В. В. Еремин [и др.] - МБИНОМ. Лаборатория знаний, 2017
5. Коллоидная химия [Текст] / Е. Д. Щукин, А. В. Перцов, Е. А. Амелина ; Моск. гос. ун-т им. М. В. Ломоносова - М.Юрайт, 2016
6. Электрохимия [Текст] / Б. Б. Дамаскин, О. А. Петрий, Г. А. Цирлина - СПб.Лань, 2015

Дополнительная литература

1. Физикохимия поверхности [Текст] : [учебник-монография] / В. И. Ролдугин. — Долгопрудный : Интеллект, 2008. — 568 с.
2. Химическая термодинамика : Задачи, примеры, задания [Текст] : учеб. пособие для вузов / И. В. Захаров [и др.] ; М-во образования и науки Рос. Федерации, Моск. физ.-техн. ин-т (гос. ун-т). — 3-е изд., испр. и доп. — М. : МФТИ, 2007. — 128 с.
3. Курс химической кинетики [Текст] : учебник для вузов / Н. М. Эмануэль, Д. Г. Кнорре. — М. : Высшая школа, 1984. — 464 с.
4. Физико-химические основы электрохимии [Текст] : учебник для хим. и химико-технол. спец. ун-тов / Ю. Я. Лукомский, Ю. Д. Гамбург. — Долгопрудный : Интеллект, 2008. — 424 с.

Рекомендованная литература для самостоятельного изучения:

1. Мелвин-Хьюз Э. А. Физическая химия: в 2 кн. М.: Изд-во иностранной литературы, 1962.
2. Антропов Л. И. Теоретическая электрохимия. М.: Высшая школа, 1984.
3. Пригожин И., Дефей Р. Химическая термодинамика. М.: БИНОМ. Лаб. Знаний, 2009.
4. Чоркендорф И., Наймантсведрайт Х. Современный катализ и химическая кинетика. М.: Интеллект, 2013.
5. Даниэльс Ф., Олбери Р. Физическая химия – Москва : Изд-во Мир, 1978. – 648 с.
6. Мушкхамбаров Н.Н. Физическая и коллоидная химия: учебник для медицинских вузов (с задачами и решениями). М.: ФЛИНТА, 2015. 455 с.
7. Израелашвили. Дж. Межмолекулярные и поверхностные силы / Пер. с англ. И.М. Охупкин, К.Б. Зельдович; науч. ред. И.В. Яминский. М.: Научный мир, 2011. 456 с.
8. Русанов А. И. Мицеллообразование в растворах поверхностно-активных веществ. Санкт-Петербург, Лань, 2019

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

1. <http://www.chem.msu.ru/cgi-bin/tkv.pl>
2. chemequ.ru/
3. <https://webbook.nist.gov/chemistry/>
4. <http://ocw.mit.edu/courses/chemistry/5-60-thermodynamics-kinetics-spring-2008/video-lectures/>
5. <http://puccini.che.pitt.edu/~karlj/Classes/CHE2101/>
6. <http://www.uni-kiel.de/phc/temps/vorlesung/PC-3.pdf>

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

При подготовке и чтении лекций может потребоваться следующее программное обеспечение: MS Word, MS Power Point, MS Visio, MathCad. При самостоятельном изучении учебного материала необходимо наличие установленных: Acrobat Reader, DJVU Reader.

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:	Биофизика и биоинформатика Физтех-школа Биологической и Медицинской Физики департамент молекулярной и биологической физики
курс:	2
квалификация:	бакалавр

Семестры, формы промежуточной аттестации:

3 (осенний) - Дифференцированный зачет

4 (весенний) - Экзамен

Разработчики:

А.В. Инденбом, канд. хим. наук

Е.Е. Куликов, канд. биол. наук

С.В. Траньков

А.Ю. Куксин, канд. физ.-мат. наук

П.А. Жилаев, канд. физ.-мат. наук

О.В. Сергеев

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ОПК-1 Способен применять фундаментальные знания, полученные в области физико-математических и (или) естественных наук, и использовать их в профессиональной деятельности	ОПК-1.2 Способен строить математические модели, производить количественные расчеты и оценки
	ОПК-1.1 Способен анализировать поставленную задачу, намечать пути ее решения
	ОПК-1.3 Способен определять границы применимости полученных результатов
ОПК-4 Способен осуществлять сбор и обработку научно-технической и (или) технологической информации для решения фундаментальных и прикладных задач	ОПК-4.1 Владеет методами научного поиска и интеллектуального анализа информации при решении задач профессиональной деятельности
	ОПК-4.3 Умеет составлять аннотации, рефераты, библиографические перечни и обзоры информации в области своей профессиональной деятельности
ОПК-5 Способен участвовать в проведении фундаментальных и прикладных исследований и разработок, самостоятельно осваивать новые теоретические, в том числе, математические методы исследований, и работать на современной экспериментальной научно-исследовательской, измерительно-аналитической и технологической аппаратуре	ОПК-5.1 Способен решать поставленные задачи в области теоретических и экспериментальных исследований и разработок
	ОПК-5.2 Обладает способностью к освоению новых знаний на основе изучения литературы, научных статей и других источников
ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования	ПК-1.5 Владеет навыками безопасной работы с современными научными приборами и другим экспериментальным оборудованием
	ПК-1.6 Знает основные правила поведения и работы в современной научной лаборатории
	ПК-1.1 Владеет фундаментальными понятиями, законами и теориями современной физики
	ПК-1.3 Владеет культурой постановки научной задачи и моделирования естественнонаучных объектов и систем
	ПК-1.4 Умеет строить математические модели для описания и исследования процессов и явлений в соответствующих научных областях
ПК-2 Способен анализировать полученные в ходе научно-исследовательской работы данные и делать научные выводы (заключения)	ПК-2.1 Владеет методами статистической обработки и анализа научных данных
	ПК-2.2 Умеет находить ключевые параметры, определяющие изучаемое явление, и производить численные оценки по порядку величины
	ПК-2.3 Способен представлять научные утверждения, их обоснования и доказательства, научные проблемы и их решения ясно и точно в терминах, понятных для профессиональной аудитории, в письменной и устной форме
ПК-4 Способен критически оценивать применимость используемых методик и методов	ПК-4.1 Знает численные порядки величин, характерных для соответствующей профессиональной области
	ПК-4.2 Знает источники происхождения и умеет производить оценку погрешности измерений и достоверности экспериментальных результатов
	ПК-4.3 Способен обосновать причинно-следственные отношения используемых понятий и моделей

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Физическая химия» обучающийся должен:

знать:

- фундаментальные понятия, законы и теории физической химии;
- численные значения констант и порядков физических величин, употребляемых в физической химии;
- принципы расчета равновесного состава многокомпонентных систем и построения фазовых диаграмм;
- условия термодинамического равновесия, в т.ч. фазового, химического, электрохимического, межфазного;
- основные методы физико-химического анализа, калориметрии и измерения термодинамических свойств;
- основы термодинамики гетерогенных электрохимических систем;
- типы, устройство и свойства основных электродов в потенциометрии;
- принципы устройства электрохимических ячеек для потенциометрических, кондуктометрических и электрокапиллярных измерений;
- общие причины образования и стабильности дисперсных систем;
- основные модели описания двойного электрического слоя на границе раздела фаз;
- закономерности адсорбции на межфазных границах, электрокапиллярных явлений;
- основные закономерности электрокинетических явлений;
- основы теории электролитной коагуляции;
- закономерности мицеллообразования в растворах ПАВ;
- законы действующих масс и действующих поверхностей;
- закономерности о гомогенном катализе, ферментативной кинетике, межфазном катализе;
- основные законы кинетики электродных процессов;
- теории активных столкновений, активированного комплекса;
- представления о цепных, радикальных и полимеризационных реакциях.

уметь:

- выделять существенные факторы при анализе физико-химических процессов;
- делать выводы из сопоставлений результатов теории и эксперимента;
- производить численные оценки;
- делать качественные выводы в рассматриваемых задачах и проблемах;
- видеть физическую суть химических процессов и явлений в дисперсных системах;
- формулировать физические и математические модели некоторых химических явлений;
- пользоваться справочной литературой для поиска необходимых физико-химических данных и понятий;
- планировать проведение эксперимента;
- оценивать погрешность и степень достоверности измеряемых величин и результатов, полученных при их обработке;
- выяснить источники погрешностей выполненных измерений.

владеть:

- навыками самостоятельной работы в лаборатории на современном экспериментальном оборудовании;
- навыками освоения больших объемов информации;
- навыками постановки и анализа физико-химических задач;
- методами экспериментального исследования физико-химических систем;
- методами составления и решения кинетических уравнений для химических систем;
- навыками обработки результатов эксперимента и сопоставления их с теоретическими значениями и справочными данными.

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

Оценить конечную температуру сгорания 4,4 г пропана C_3H_8 в адиабатической бомбе, содержащей 32 г кислорода O_2 . Начальная температура 298 К.

К 20 мл 0,2 М K_2HPO_4 добавлено 10 мл 0,25 М раствора HCl . Определите pH полученной смеси. pK_a диссоциации фосфорной кислоты последовательных ступеней диссоциации равны соответственно 2,12, 7,2 и 11,9.

Определите, при какой величине pH раствора чистой аминокислоты число ионизованных кислотных и основных групп аминокислоты будет одинаковым (изоэлектрическая точка). Известны константы диссоциации соответствующих кислотной ($pK_{a1} = 2,35$) и основной ($pK_{a2} = 9,78$) групп при 25°C .

Стандартные энтропии диссоциации этих групп при 25°C равны $\Delta S_{01} = -28,8 \text{ Дж}/(\text{К}\cdot\text{моль})$ и $\Delta S_{02} = -39,3 \text{ Дж}/(\text{К}\cdot\text{моль})$. Оцените, какая из констант диссоциации, K_1 или K_2 , сильнее изменится с ростом температуры, дайте этому качественное объяснение. В какую сторону сдвинется изоэлектрическая точка данной аминокислоты?

Рассчитайте степень насыщения миоглобина кислородом при $P(\text{O}_2) = 30 \text{ мм рт. ст.}$ (парциальное напряжение кислорода в крови),

если стандартная энергия Гиббса реакции оксигенирования миоглобина $\text{Mb} + \text{O}_2 = \text{MbO}_2$ при 310 К равна $-12,95 \text{ кДж/моль}$.

Найдите работу Na/K-АТФазы по переносу 3 ионов Na^+ из клетки и 2 ионов K^+ в клетку через плазматическую мембрану при 37°C , если их концентрации внутри клетки составляют 46 и 340 мМ, а снаружи 460 и 10 мМ соответственно. Падение потенциала на мембране $\phi_{\text{in}} - \phi_{\text{out}} = 60 \text{ мВ}$.

Плазма человеческой крови замерзает при $-0,56^\circ\text{C}$. Каково ее осмотическое давление при 37°C , измеренное с помощью мембраны, проницаемой только для воды? Оцените, какова концентрация изотонического раствора хлорида натрия?

Компоненты бинарной смеси Bi–Cd сохраняют неограниченную взаимную растворимость только в жидком состоянии, при затвердевании такой смеси образуются не смешанные, а индивидуальные кристаллы Bi и Cd. В связи с этим фазовая диаграмма такой смеси имеет эвтектический вид. Оцените температуру эвтектики и удельный молярный состав эвтектической смеси, если известны температуры и энтальпии плавления чистых Bi и Cd.

Тпл, К $\Delta H_{\text{пл}}$, кДж/моль

Bi 544,6 11,30

Cd 594,3 6,11

Вычислить ЭДС цепи: $(-) \text{Pt} (\text{H}_2) | \text{HCOOH} (c = 1 \text{ н}) | \text{KCl}(\text{нас}) | \text{CH}_3\text{COOH} (c = 0,5 \text{ н}) | (\text{H}_2) \text{Pt} (+)$,

если пренебречь диффузионным потенциалом. Константы диссоциации муравьиной и уксусной кислот равны соответственно $1,27 \cdot 10^{-4}$ и $1,80 \cdot 10^{-5} \text{ М}$.

Вычислить константу равновесия реакции: $\text{Zn} + \text{CdSO}_4 = \text{ZnSO}_4 + \text{Cd}$

при 25°C , если стандартный потенциал цинкового электрода равен

$-0,763 \text{ В}$, а кадмиевого электрода равен $-0,402 \text{ В}$. Составьте цепь и напишите реакции на электродах.

Эквивалентные электропроводности предельно разбавленных растворов NaCl, HCOONa и HCl при 25°C соответственно равны 126,4; 104,6 и 426,1 См \cdot см²/моль. Удельная электропроводность 0,012 масс. % раствора HCOOH составляет $2,38 \cdot 10^{-4} \text{ См/см}$. Рассчитать константу диссоциации HCOOH и pH указанного раствора HCOOH.

Поверхностный потенциал мембраны равен -35 мВ . Найти pH у поверхности мембраны при условии, что pH в объеме среды составляет 7,6.

В таблице приведены результаты тензиометрических измерений коэффициента поверхностного натяжения водных растворов гексадецилтриметиламмония хлорида НТАС с ККМ 3,5 мМ. Оценить по этим данным константу адсорбции НТАС и площадь, приходящуюся на одну молекулу ПАВ в насыщенном адсорбционном слое. Какова приблизительно ККМ тетрадецилтриметиламмония хлорида ТТАС?

C, мМ 0 0,01 0,05 0,1 1 2 4

σ , мН/м 73,0 72,2 69,7 67,3 53,3 48,0 42,4

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

Примеры вопросов к дифференцированному зачету:

Почему произведение растворимости является постоянной величиной при заданной температуре?

Что такое тепловой эффект реакции и как он связан с термодинамическими потенциалами?

Энергия гидратации с ростом радиуса иона растёт или уменьшается? Какая это функция с точки зрения модели Борна?

Почему неорганические соли обычно имеют коэффициент распределения в сторону более полярного растворителя?

Какова связь константы равновесия и стандартной энергии Гиббса? Чем она обусловлена?

Схематически изобразительно кривую титрования 0,1 М уксусной кислоты в кислой и щелочной областях. Укажите область наибольшей буферной ёмкости и точку эквивалентности.

Примеры вопросов к экзамену:

Почему изотерма поверхностного натяжения водного раствора чистого ПАВ в полулогарифмических координатах всегда выпукла вверх?

Изобразите качественно на одном графике, как изменяется концентрация мономеров и мицелл ПАВ в зависимости от общей концентрации ПАВ в растворе.

Как меняется устойчивость заряженного золя гидроксида железа при добавлении FeCl_3 ?

Что такое пептизация? Приведите пример.

Как теория ДЛФО объясняет стабильность гидрофобных золей и их электролитную коагуляцию?

На одном рисунке изобразите распределения концентрации одно- и трёхзарядных ионов в ДЭС от расстояния до электрода, если их концентрации в глубине раствора одинаковы.

Какие процессы, происходящие на электродах, отражает эквивалентная электрическая схема Эршлера–Рендлса?

Какими преимуществами обладает трехэлектродная схема перед двухэлектродной при измерении потенциала рабочего электрода, на котором идет электрохимическая реакция?

Схематично изобразите зависимость потенциальной энергии реагентов от координаты реакции. Укажите исходные и конечные вещества, промежуточные продукты и переходное состояние.

Как связан тепловой эффект обратимой реакции с энергиями активации прямой и обратной реакций?

Как и почему скорость реакции между разноименными ионами в растворе зависит от концентрации индифферентного к этой реакции электролита?

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 устного экзамена обучающемуся предоставляется 40 минут на подготовку.

Длительность экзамена для каждого студента не должна превышать двух астрономических часов с момента получения билета.