

МИНОБРНАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Химический факультет

Аннотация рабочей программы дисциплины

Избранные главы физической химии

Основы научных исследований (часть1)

Кислотно-основные свойства поверхности твердых тел (часть 2)

Направление подготовки

04.03.01 Химия

Квалификация выпускника

Бакалавр

Форма обучения

очная

Томск 2015

ЧАСТЬ 1

1. Код и наименование дисциплины Б1В.ДВ.4.5.5 «Избранные главы физической химии», Основы научных исследований (часть 1).

2. Цель изучения дисциплины

Целями освоения модуля «**Основы научных исследований (часть 1)**» является ознакомление студентов с современными подходами к организации и проведению научных исследований; рассмотреть на практике. Интернет-ресурсы, позволяющие вести широко масштабный поиск и анализ научной информации. Проанализировать основные аспекты создания научного отчета всех квалификационных уровней: курсовая работа – дипломная работа – научная статья – диссертация.

3. Год/годы и семестр/семестры обучения

Программа рассчитана на изучение дисциплины «Основы научных исследований (часть 1)» на 4-ом курсе в течение одного (8-го) семестра.

4. Общая трудоемкость дисциплины «Избранные главы физической химии» составляет 2 зачетные единицы, 72 ч, из которых 32 ч составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (16 часов – занятия лекционного типа, 16 часов – занятия семинарского типа, 40 ч составляет самостоятельная работа обучающегося.

Общая трудоемкость дисциплины «Основы научных исследований (часть 1)» составляет 1 зачетную единицу, 36 часов, из которых 16 часов составляет контактная работа обучающегося с преподавателем и 20 часов составляет самостоятельная работа обучающегося. Для студентов проводятся групповые и индивидуальные консультации..

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Формируемые компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине
(СК-4), II уровень – способность применять основные закономерности физической химии при решении конкретных задач химии и химической технологии, в том числе, синтеза и изучения функциональных свойств адсорбентов, катализаторов и других твердых тел, с применением современных методов исследования. Уметь проводить термодинамические расчеты химических процессов (включая методы квантовой механики), исследовать кинетику и механизм химических реакций с целью их научного и практического применения.	З(СК-4) – Знать: – основные понятия изучаемой дисциплины, виды научных работ, структуру научной работы, базы данных русскоязычной и мировой литературы, патентные базы. У(СК-4) – II Уметь: – формулировать ключевые слова на русском и английском языке для организации поиска научной информации по теме, осуществлять поиск и обработку информации, сортировку по различным критериям. В(СК-4) – II Владеть – основами обработки и корректного представления научных результатов.

6. Содержание дисциплины и структура учебных видов деятельности
6.1. Структура учебных видов деятельности

№ п/п	Наименование разделов и тем	Всего часов	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)			
				лекции	Практические занятия	консультации	СРС
1	Организация научно-исследовательской работы	2	1	2			
2	Выбор научного исследования и этапы НИР	8	2	2	2		4
3	Экспериментальные исследования	8	3	2	2		4
4	Обработка результатов экспериментальных исследований	9	4	1	2		6
5	Оформление результатов научной работы	9	5	1	2		6
6	Итого	36		8	8		20

*Примечание. Формы контроля предусматривают: зачет (8 семестр), доклад, индивидуальные задания

6.2. Содержание дисциплины

Программа курса включает рассмотрение следующих тем:

1. Организация научно-исследовательской работы.

Научно-исследовательская работа студентов и ее роль в интегрированной системе Академическая наука/ВУЗ. Квалификационные уровни подготовки специалистов: бакалавр, магистрант, аспирант, кандидат наук. Научная стажировка и ее роль в подготовке специалистов высшей квалификации. Способы поддержки научно-исследовательской работы студентов: конкурсы, гранты, именные стипендии. Участие студентов университета в выполнении грантов, хоз. договорных работ, программ МО РФ. Организация и планирование времени. Самоменеджмент, его составляющие.

2. Выбор научного исследования и этапы НИР.

Сбор и анализ информации по теме НИР: Интернет-технологии (доступ к патентным базам данных, библиотека Elsevier, основные химические Интернет-ресурсы). Способы поиска информации: web поисковые системы (Rambler, yahoo, mail, google), ключевые слова, предметный каталог НБ ТГУ. Основные химические российские и зарубежные периодические издания. Структура литературного обзора. Анализ литературных данных. Постановка цели и задач НИР. Оформление списка литературы. Теоретический анализ проблемы на основе термодинамических данных и строения физико-химической системы. Этапы научно-исследовательской работы. Разработка рабочей гипотезы, планирование эксперимента. Проведение исследования. Обработка и анализ полученных результатов. Планирование дальнейших исследований.

3. Экспериментальные исследования.

Стратегия и тактика экспериментальных исследований. Обоснование выбора методики проведения НИР. Комплексный подход к использованию современных физико-химических методов исследования. Обоснование выбора основных объектов исследования. Модельные эксперименты. Метрология. ГОСТ. Средства измерений, погрешности. Рабочее место и его организация. Обеспечение безопасности проведения экспериментальных исследований. Влияние психологических факторов на ход и качество эксперимента. Типичные ошибки начинающих экспериментаторов. Лабораторный журнал.

4. Обработка результатов экспериментальных исследований.

Основы теории случайных ошибок. Методы и способы проверки достоверности полученных данных. Использование пакетов Microsoft Excel, Origin, Corel Draw, PhotoShop, ACDSee, FineReader для проведения расчетов, обработки неотцифрованной информации, построения графиков и диаграмм, преобразования форматов, внедрения полученных графических объектов в текстовые файлы.

5. Оформление результатов научной работы.

Структура отчета по курсовой работе. Введение (цель, задачи). Литературный обзор. Методическая часть. Результаты и обсуждение. Выводы. Доклад по научной работе. Тезисы доклада. Демонстрационные материалы. Изложение доклада. Дискуссия. Типы публикаций: краткое сообщение, научная статья, обзор. Структура научной статьи. Способы изложения материала. Представление экспериментальных данных: таблица, рисунок, схема. Подписи к рисункам.

6.3. Перечень практических занятий

№ п/п	Тема занятия
1	Организация поиска научной литературы на русском языке
2	Организация поиска научной литературы на английском языке
3	Организация поиска патентной литературы
4	Обработка экспериментальных данных в пакете программы «Origin»

7. Ресурсное обеспечение

7.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы

1. М. Ф. Шкляр. Основы научных исследований: учебное пособие / Москва : Дашков и К°, 2009. 242 с.
2. Зачем и как писать научные статьи /Е. З. Мейлихов. – Долгопрудный : Интеллект , 2013. 159 с.
3. Наноматериалы. Нанотехнологии. Наносистемная техника : мировые достижения за 2005 г. /под ред. П. П. Мальцева – М. : Техносфера , 2006. – 149 с.
4. Суздаев И.П. Нанотехнология: Физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов / И.П. Суздаев. – Москва : Комкнига, 2006. – 529 с.
5. Современный катализ и химическая кинетика /И. Чоркендорф, Х. Наймантсведрайт; пер. с англ. В. И. Ролдугина. Долгопрудный : Интеллект , 2010. – 500с.

7.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

1. Издательство «Лань» [Электронный ресурс] : электрон.-библиотечная система. – Электрон. дан. – СПб., 2010- . – URL: <http://e.lanbook.com/>
2. Издательство «Юрайт» [Электронный ресурс] : электрон.-библиотечная система. – Электрон. дан. – М., 2013- . URL: <http://www.biblio-online.ru/>
3. Электронно-библиотечная система Znanium.com [Электронный ресурс] / Научно-издательский центр Инфра-М. – Электрон. дан. – М., 2012- . URL: <http://znanium.com/>

4. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. – М., 2000- . – URL: <http://elibrary.ru/defaultx.asp?>
5. Электронная Библиотека Диссертаций [Электронный ресурс] / Российская государственная библиотека. – Электрон. дан. – М., 2003- . URL: <http://diss.rsl.ru/>
6. Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ [Электронный ресурс] . – Электрон. дан. – Томск, 2011- . URL: <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>
7. Научная библиотека Томского государственного университета [Электронный ресурс] / НИ ТГУ, Научная библиотека ТГУ. – Электрон. дан. – Томск, 1997-. – URL: <http://www.lib.tsu.ru/ru>
8. SpringerLink [Electronic resource] / Springer International Publishing AG, Part of Springer Science+Business Media. – Electronic data. – Cham, Switzerland, [s. n.]. – URL: <http://link.springer.com/>
9. JSTOR [Electronic resource] : digital library / ИТНАКА. – Electronic data. – [S. 1.], 2000-. – URL: <http://www.jstor.org/>
10. ScienceDirect [Electronic resource] / Elsevier B.V. – Electronic data. – Amsterdam, Netherlands, 2016. – URL: <http://www.sciencedirect.com/>
11. Oxford University Press [Electronic resource] : journals / Oxford University Press (OUP), University of Oxford. – Electronic data. – Oxford, United Kingdom, 2015-. – URL: <http://www.oxfordjournals.org/en/>
12. Science [Electronic resource] : journals / American Association for the Advancement of Science (AAAS). – Electronic data. – Washington, USA, 2016. – URL: <http://www.sciencemag.org/>
13. Google Scholar [Electronic resource] / Google Inc. – Electronic data. – [S. 1 : s. n.]. – URL: <http://scholar.google.com/>

8. Преподаватель

Автор: Мамонтов Григорий Владимирович, к.х.н., доцент кафедры физической и коллоидной химии

ЧАСТЬ 2

1. Код и наименование дисциплины: Б1.В.ДВ.4.5 (5)

Избранные главы физической химии

Часть 2 «Кислотно-основные свойства поверхности твердых тел»

2. Цель изучения дисциплины (модуля)

Целями освоения части 2 – «**Кислотно-основные свойства поверхности твердых тел**» является ознакомление студентов с понятиями: твердые кислоты и твердые основания, кислотные и основные центры Льюиса и Бренстеда, донорно-акцепторные взаимодействия на поверхности, методология и методы подхода к определению кислотности-основности поверхности твердых тел.

3. Год/годы и семестр/семестры обучения.

4-ый курс, 1 год, 8 семестр.

4. Общая трудоемкость дисциплины «Кислотно-основные свойства поверхности твердых тел» (часть 2): 36 ч., из которых 16 ч составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (8 часов – занятия лекционного типа, 8 часов – занятия семинарского типа, 20 ч составляет самостоятельная работа обучающегося. Для студентов проводятся групповые и индивидуальные консультации.

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине «Кислотно-основные свойства поверхности твердых тел» соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Формируемые компетенции (код компетенции, уровень (этап) освоения)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (разделу)
<p>(СК-4), II уровень</p> <p>– способность применять основные закономерности физической химии при решении конкретных задач химии и химической технологии, в том числе, синтеза и изучения функциональных свойств адсорбентов, катализаторов и других твердых тел, с применением современных методов исследования. Уметь проводить термодинамические расчеты химических процессов (включая методы квантовой механики), исследовать кинетику и механизм химических реакций с целью их научного и практического применения.</p>	<p>З (СК-4) –II Знать:</p> <p>–основные понятия изучаемой дисциплины: твердые кислоты и основания, развитие представлений о кислотно-основных свойствах твердой поверхности; кислотные и основные центры Бренстеда и Льюиса, их роль и участие в адсорбционных и каталитических процессах; классификацию методов определения кислотно-основных свойств поверхности твердых тел; знать, что кислотно-основные свойства твердой поверхности являются одной из основных характеристик наилучшим образом отражающих реакцию способность твердого вещества в донорно-акцепторных взаимодействиях.</p> <p>У(СК-4) – II Уметь:</p> <p>– использовать различные методы определения кислотно-основных параметров поверхности твердых тел: $pH_{изс}$, $pH_{тнз}$, $pH_{иис}$, pK_a; q_{pKa}, σ, N_0; $E_{дес}$; $q_{адс}$, σ и др. для решения научных задач, предусмотренных темой выпускной работы бакалавра, и в дальнейшей работе.</p> <p>В(СК-4) – II Владеть</p> <p>– необходимыми знаниями в области исследования и применения кислотно-основных свойств поверхности при изучении состояния поверхности адсорбентов и катализаторов, нахождения взаимосвязи между кислотностью поверхности и сорбционными, каталитическими, люминесцентными, оптическими, электрофизическими, механическими свойствами и другими параметрами твердых тел.</p>

6. Содержание дисциплины (модуля) и структура учебных видов деятельности

6.1 Структура учебных видов деятельности

Наименование разделов и тем	Всего (час.)	Контактная работа (час.)			Самостоятель ная работа (час.)
		Лекции	Практ. занятия		
Введение. Определение понятий «твердая кислота», «твердое основание», соединения соответствующим этим определениям	3	1			2
Зонная структура твердого тела.	3	1			2

Поверхностные уровни Тамма и Шокли. . Формальная кислотно-основная схема частично дегратированной поверхности оксидов.					
Кислотно-основных центры на поверхности твердых тел. Определение понятий: кислотный центр Льюиса, кислотный центр Бренстеда, основной центр Льюиса, основной центр Бренстеда.	4	2			2
Классификация методов определения кислотно-основных свойств поверхности твердых тел. Метод рН метрии.	5	2			3
Индикаторный метод определения кислотно-основных свойств поверхности твердых тел.	5	2			3
Кислотно-основные параметры поверхности твердых тел: $pH_{исс}$, $pH_{тнз}$, $pH_{исс}$, pK_a ; q_{pKa} , θ , N_0 ; $E_{дес}$; $q_{адс}$, σ и др. Использование их для характеристики кислотно-основного состояния адсорбентов и катализаторов, люминофоров и других твердых тел.	4		4		
Достоинства и недостатки методов исследования кислотно-основных свойств поверхности твердых тел.	3		1		2
Обсуждение результатов эксперимента на примере конкретных систем.	3		1		2
Влияние различных факторов на кислотно-основные свойства поверхности адсорбентов и катализаторов. Взаимосвязь кислотно-основных свойств поверхности твердых тел с их адсорбционными, каталитическими и объемными характеристиками.	6		2		4
Всего за 8 семестр	36	8	8		20

6.2 Содержание дисциплины

1. Основные понятия и определения кислот, оснований в химии.

2. История предмета «Кислотно-основные свойства поверхности твердых тел»
3. Определение понятий «твердая кислота», «твердое основание», соединения соответствующим этим определениям.
4. Поверхность твердого тела. Зонная структура твердого тела. Поверхностные уровни Тамма и Шокли.
5. Общие представления о кислотно-основных свойствах поверхности твердых тел. Формальная кислотно-основная схема частично дегидратированной поверхности оксидов.
6. Кислотно-основных центры на поверхности твердых тел. Определение понятий: кислотный центр Льюиса, кислотный центр Бренстеда, основной центр Льюиса, основной центр Бренстеда.
7. Кислотно-основные центры поверхности твердого тела с точки зрения поверхностных уровней, состояний, в том числе состояний Тамма, Шокли.
8. Механизмы взаимодействия воды с апротонными и протонными центрами, одноэлектронными поверхностными уровнями.
9. Классификация методов определения кислотно-основных свойств поверхности твердых тел.
10. Кислотно-основные параметры поверхности твердых тел: $pH_{изс}$, $pH_{тнз}$, $pH_{иис}$, pK_a ; q_{pKa} , q_{No} ; $q_{едес}$; $q_{адс}$, и др. Использование их для характеристики кислотно-основного состояния адсорбентов и катализаторов, люминофоров и других твердых тел.
11. Метод pH-метрии. Разновидности метода. Методика исследования. Какие сведения о кислотно-основном состоянии поверхности можно получить, используя этот метод?
12. Индикаторный метод определения кислотно-основных свойств поверхности твердых тел. Разновидности метода. Методика исследования. Какие сведения о кислотно-основном состоянии поверхности можно получить, используя этот метод?
13. Обсуждение результатов эксперимента на примере конкретных систем.
14. Достоинства и недостатки методов исследования кислотно-основных свойств поверхности твердых тел.
15. Влияние различных факторов на кислотно-основные свойства поверхности адсорбентов и катализаторов.
16. Взаимосвязь кислотно-основных свойств поверхности твердых тел с их адсорбционными, каталитическими и объемными характеристиками.

Формы контроля:

- Доклад.
- Индивидуальные задания
- Контрольная работа на лекции

6.3. Форма промежуточной аттестации: зачет

7. Ресурсное обеспечение:

7.1 Основная литература

1. Кислотно-основные характеристики поверхности твердых тел и управление свойствами материалов и композитов / М. М. Сычев, Т. С. Минакова, Ю. Г. Слизов, О. А. Шилова. Санкт-Петербург : Химиздат, 2016 – 274 с.
2. Е.А. Паукштис. Оптическая спектроскопия в адсорбции и катализе. Новосибирск, 2010. 54 с. *catalysis.ru/.../2010-Паукштис*
3. Минакова Т. С., И.А. Екимова. Фториды и оксиды щелочноземельных металлов и магния. Поверхностные свойства / Т. С. Минакова, И. А. Екимова ; - Томск : Издательский Дом Томского государственного университета, 2014. – 147 с.

7.2 Дополнительная литература

1. Минакова Т.С. Адсорбционные процессы на поверхности твердых тел. Томск: Изд-во Том. ун-та, 2007. 279 с.
2. Химия привитых поверхностных соединений / Под ред. Г.В. Лисичкина. М.: Физматлит, 2003. 589 с.
3. Моррисон С. Химическая физика поверхности твердого тела. – М.: Мир, 1980. – 488 с.
4. Танабе К. Твердые кислоты и основания. –М.:Мир, 1973. –183 с.

7.3 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

www.lib.tpu.ru/fulltext/m/2011/m22.pdf ;

www.twirpx.com/file/1073794/

<https://disser.spbu.ru/files/disser2/886/disser/XjZpCRQNYz.pdf>

8. Преподаватель модуля 2 «Кислотно-основные свойства поверхности твердых тел»

Минакова Тамара Сергеевна, к.х.н., профессор кафедры физической и коллоидной химии

9. Форма промежуточной аттестации по дисциплине Избранные главы физической химии

зачет

Авторы программы:

к.х.н., доцент Мамонтов Г.В.

к.х.н., профессор Минакова Т.С.