

Программа утверждена на заседании
Ученого Совета химического факультета
МГУ имени М.В.Ломоносова
Протокол № 7 от 04 октября 2017 г.

Рабочая программа дисциплины (модуля)

1. Наименование дисциплины (модуля): **Термодинамика адсорбции газов, паров и растворов**

Курс предназначен для аспирантов химического факультета, специализирующихся в области физической химии, и может быть также полезен аспирантам, специализирующимся в области органической, биологической химии, науки о материалах, чья научная работа связана с анализом адсорбционных систем.

Основная цель курса – познакомить слушателей с методами анализа адсорбционных равновесий, позволяющими получать важные для практического применения характеристики адсорбционных систем при адсорбции газов, паров и растворов на микро- и макропористых адсорбентах.

В лекциях рассматриваются: Метод избытков Гиббса. Метод полного содержания. Термодинамика адсорбции. Стехиометрическая теория адсорбции. Термодинамика адсорбции бинарных смесей флюидов и термодинамика адсорбированных растворов. Описание адсорбционных равновесий растворов, газов и паров на макро и микропористых адсорбентах. Априорные расчеты адсорбционных равновесий смесей веществ. Исследование адсорбции на микропористых углеродных адсорбентах численными методами. Изотермы адсорбции и молекулярные наноструктуры адсорбатов.

2. Уровень высшего образования – подготовка научно-педагогических кадров в аспирантуре.

3. Направление подготовки: 04.06.01 Химические науки. Направленность (профиль) 02.00.04 Физическая химия.

4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок 1 «Дисциплины (модули)». Дисциплина по выбору аспиранта в осеннем семестре семестре первого или второго года обучения.

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Формируемые компетенции (код компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
УК-2 способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки	31 (УК-2) Знать методы научно-исследовательской деятельности
ОПК-1 способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	У1 (ОПК-1) Уметь выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования
ПК-4 Способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (научной специальности) 02.00.04 Физическая химия	318 (ПК-4) Знать современные методы анализа адсорбционных равновесий в различных системах
	У18 (ПК-4) Уметь использовать термодинамические уравнения для описания адсорбционных равновесий в различных адсорбционных системах

6. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 3 зачетные единицы, всего 108 часов, из которых 44 часа составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (24 часа занятия лекционного типа, 8 часов мероприятия текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации, 12 часов групповые и индивидуальные консультации), 64 часа составляет самостоятельная работа учащегося.

Наименование и кратко содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактна(работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них					Самостоятельная работа обучающегося, часы из них			
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Текущий контроль успеваемости, промежуточная аттестация	Всего	Выполнение домашних заданий	Работа с оригинальной литературой, подготовка рефератов.п.	Всего
Тема 1. Метод избытков Гиббса и метод полного содержания	18	4			2		6	4	8	12
Тема 2. Стехиометрическая теория адсорбции	18	4			2		6	4	8	12
Тема 3.Описание адсорбционных равновесий	32	8			4		12	8	12	20
Тема 4. Априорные расчеты адсорбционных равновесий	32	8			4		12	8	12	20
Промежуточная аттестация, <i>зачет</i>	8					8	8			
Всего	108	24			12	8	44			64

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

В специалитете или магистратуре должны быть освоены общие курсы «Теория вероятностей», «Строение молекул», «Физическая химия», «Численные методы в химии».

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Содержание тем:

Тема 1. Методы определения избыточных концентраций адсорбтивов при адсорбции индивидуальных газов и паров и термодинамические соотношения

на их основе. Методы определения размеров адсорбционной фазы и соотношения в рамках метода полного содержания.

Тема 2. Термодинамическое описание адсорбционных равновесий в различных адсорбционных системах в рамках стехиометрической теории адсорбции.

Тема 3. Анализ уравнений, полученных в различных термодинамических моделях и в рамках решеточных моделей, применительно к описанию адсорбционных равновесий газов, паров и растворов на микро- и макропористых адсорбентах.

Тема 4. Анализ методов априорного расчета адсорбционных равновесий, основанных на термодинамических или эмпирических закономерностях и методах молекулярно – динамических расчетов.

8. Образовательные технологии

Лекции с презентациями и интерактивной демонстрацией решения задач на персональном компьютере.

9. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Аспирантам указываются основной и дополнительный литературный материал в первоисточниках.

10. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. А. М. Толмачев Адсорбция газов, паров и растворов. Из-во «Граница».Москва. 1912г. (Имеется на сайте химического факультета МГУ.).
2. Компьютерный банк данных по адсорбции: adsbank.chem.msu.ru

Дополнительная литература

1. Dubinin M.M. //Progr. Surf. Membrane. Sci., New York: Academic. 1975. V. 9. P. 1.
2. Brunauer S.//The Adsorption of Gases andVapors. Oxford: Oxford Univ. Press. 1943.

- Перечень используемых информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы (при необходимости):
Компьютерный банк данных по адсорбции: adsbank.chem.msu.ru

11. Язык преподавания – русский

12. Преподаватели:

д.х.н., профессор Толмачев Алексей Михайлович, amtolmach@yandex.ru, 8-495-939-52-43.
к.х.н. Кузнецова Татьяна Анатольевна, tchess@yandex.ru

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

1. Планируемые результаты обучения для формирования компетенций п.5 и соответствующие им критерии оценивания приведены в Приложении 1.
2. Примеры вопросов к зачету
 - Сравните метод избытков Гиббса и метод полного содеожания?
 - Какими методами определяются размеры адсорбционной фазы?
 - На каких основных положениях построена стехиометрическая теория адсорбц
 - Какие уравнения используются для описания полимолекулярной адсорбции паров?
 - Как можно описать адсорбцию индивидуальных газов, паров и бинарных жидких растворов в рамках решеточной модели?
 - Как зависит точность молекулярно – динамических расчетов изотерм адсорбции от выбора универсальных силовых полей?
3. Примеры практических контрольных заданий (ПКЗ)

Постройте график избыточной изотермы адсорбции бинарного раствора и абсолютные изотермы адсорбции компонентов.

 - Выведите термодинамические уравнения для констант равновесия при различных допущениях о концентрационной зависимости коэффициентов активности компонентов.
 - Покажите возможность расчета большого числа изотерм адсорбции паров на микропористых активных углях по одной экспериментальной изотерме.

- Покажите возможность расчета дифференциальных теплот адсорбции от величин адсорбции по экспериментальным изотермам при различных температурах.
- Какие условия необходимо соблюдать для количественного совпадения изотерм адсорбции, рассчитанных методом молекулярной динамики, с экспериментальными.

4. Примеры домашних заданий

- Найдите в банке данных серию изотерм на активных углях при температурах ниже и выше критической, опишите их уравнением Дубинина – Радужкевича и оцените температурную зависимость констант уравнения.
- Найдите в банке данных несколько изотерм полимолекулярной адсорбции и сравните качество их описания уравнениями БЭТ и Арановича.
- По имеющимся результатам молекулярно – динамических расчетов изотерм адсорбции в микропорах и на графеновых поверхностях проведите их описание в рамках решеточной модели и сравните соответствующие константы уравнений.
- Найдите в банке данных серию изотерм на активных углях при температурах ниже и выше критической и рассчитайте зависимости дифференциальных теплот адсорбции от температуры и степени заполнения адсорбционной фазы.
- Опишите методики, по которым можно рассчитать изотермы адсорбции компонентов бинарной смеси газов по данным об индивидуальных изотермах.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Зачет проводится по билетам, каждый из которых включает один теоретический вопрос и одно практическое контрольное задание (ПКЗ). Уровень знаний аспиранта оценивается на «зачтено», «незачтено». Оценка «зачтено» выставляется, если по шкале оценивания учащийся демонстрирует знания умения и владения, соответствующие категориям 3, 4 и 5. В ходе зачета, проводимого в форме индивидуального собеседования, оценивается степень сформированности «знаниевой» компоненты компетенций УК-2, ПК-4. Частично сформированность умения выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования (ОПК-1, ПК-4) проверяется при выполнении ПКЗ, их оценка учитывается как одна из составляющих при выставлении зачета.

Приложение 1.

**Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине «Термодинамика адсорбции газов, паров и растворов»
на основе карт компетенций выпускников**

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю) и ШКАЛА оценивания					ПРОЦЕДУРЫ ОЦЕНИВАНИЯ*
	1	2	3	4	5	
31 (УК-2) Знать методы научно-исследовательской деятельности	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания о теоретических проблемах адсорбции	Несистематические знания о теоретических проблемах адсорбции	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления о теоретических проблемах адсорбции	Сформированные и систематические знания о теоретических проблемах адсорбции	Устный опрос в ходе зачета
У1(ОПК-1) Уметь выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования	Отсутствие умений	Умение использовать современные методы анализа равновесий в адсорбционных системах	Шаблонное умение использовать современные методы анализа равновесий в адсорбционных системах	В целом достаточно полное, но содержащее отдельные пробелы умение использовать современные методы анализа равновесий в адсорбционных системах	Сформированное умение грамотно выбирать и использовать современные методы анализа равновесий в адсорбционных системах	Выполнение практического контрольного задания в ходе зачета; выполнение домашних заданий
318 (ПК-4) Знать современные методы анализа	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о	Ограниченные представления о	Сформированные, но содер-	Сформированные и система-	Устный опрос в ходе зачета

адсорбционных равновесий в различных системах		различия физико-химических задач в теории адсорбции	различия физико-химических задач в теории адсорбции	жащие отдельные пробелы знания о различии физико-химических задач в теории адсорбции	тические знания о различии физико-химических задач в теории адсорбции	
<i>У18 (ПК-4) Уметь</i> использовать термодинамические уравнения для описания адсорбционных равновесий в различных адсорбционных системах	Отсутствие умений	Умение использовать расчетные методы при анализе адсорбционных равновесий	Шаблонное умение использовать расчетные методы при анализе адсорбционных равновесий	В целом достаточно полное, но содержащее отдельные пробелы умение использовать расчетные методы при анализе адсорбционных равновесий	Сформированное умение грамотно выбирать и использовать расчетные методы при анализе адсорбционных равновесий	Выполнение практического контрольного задания в ходе зачета; выполнение домашних заданий