

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,
Акад. РАН, профессор



/В.В. Лунин/

«27» февраля 2017 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Строение жидкостей и аморфных тел

Уровень высшего образования:
Специалитет

Направление подготовки (специальность):
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) ОПОП:
Химия твердого тела

Форма обучения:
очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №1 от 27.01.2017)

Москва 2017

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (программа специалитета), утвержденного приказом МГУ от 22 июля 2011 года № 729 (в редакции приказов МГУ от 22 ноября 2011 года № 1066, от 21 декабря 2011 года № 1228, от 30 декабря 2011 года № 1289, от 27 апреля 2012 года № 303, от 30 декабря 2016 года № 1671).

Год (годы) приема на обучение

2014/2015, 2015/2016, 2016/2017, 2017/2018, 2018/2019

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников). Соответствие результатов обучения по данному элементу ОПОП результатам освоения ОПОП (в форме компетенция – индикатор - ЗУВ) указано в Общей характеристике ОПОП.

Компетенция	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
СПК-1.С. Способность использовать современную теорию строения твердых тел, представления о взаимосвязи электронного строения, кристаллической структуры и физических свойств твердых тел для синтеза новых веществ и материалов с заданными свойствами	Знать: современные теории, описывающие структуру, электронное строение и свойства твердых тел.
СПК-3.С. способность планировать синтез металлических сплавов и композиционных материалов с определенными эксплуатационными характеристиками на основе информации о диаграммах состояния, применять на практике современные методы получения сплавов и композитов, прогнозировать их поведение при воздействии различных эксплуатационных факторов, применять различные способы защиты металлов и сплавов от коррозионных разрушений	Знать: основные характеристики материалов с особыми физическими (электрическими, магнитными, механическими, тепловыми) свойствами и области их применения

3. 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 зачетных единицы, всего 108 часов, из которых 58 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (36 часов занятия лекционного типа, 14 часов занятия семинарского типа, 8 часов мероприятия текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации), 50 часов составляет самостоятельная работа учащегося.

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

Обучающийся должен

Знать: основные понятия, положения и законы механики, учения о электричестве; общие положения, законы и теории неорганической химии, физической химии, коллоидной химии

Уметь: характеризовать физико-химические процессы, осуществлять поиск научно-технической информации, анализировать научно-техническую информацию.

Владеть: навыками использования методов статистической термодинамики.

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них						Самостоятельная работа обучающегося, часы Из них		
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п..	Всего
Тема 1. Аморфное состояние вещества.	23	8	4			1	13	10		10
Тема 2. Жидкое состояние вещества	23	8	4			1	13	10		10
Тема 3. Методы молекулярной динамики и Монте-Карло.	18	8	2				10	8		8
Тема 4. Ионные жидкости.	17	6	2			1	9	8		8
Тема 5. Самоорганизация и агрегация.	17	6	2			1	9	8		8
Промежуточная аттестация зачет	10					4	4	6		6
Итого	108	36	14			8	58	50		50

* – текущий контроль в форме контрольной работы осуществляется по всем темам раздела;

Содержание тем:

Тема 1. Аморфное состояние вещества. Аморфное состояние вещества, его термодинамические особенности. Свойства аморфных веществ. Структура аморфных веществ, способы ее описания. Ближний порядок и функции радиального распределения. Методы получения веществ в аморфном состоянии. Аморфные металлы и сплавы. Стекла. Закономерности процессов стеклования расплавов. Структурные факторы, способствующие стеклованию. Экспериментальные методы исследования строения веществ в аморфном состоянии. Мезопористые и нанопористые материалы, способы их получения. Кинетика процессов кристаллизации аморфных веществ.

Тема 2. Жидкое состояние вещества. Термодинамическое описание жидкостей. Причины отклонения поведения реальных жидкостей и растворов от идеальных. Способы описания отклонения от идеальности. Применение корреляционных функций для описания строения жидкостей. Причины возникновения ближнего порядка в жидкости. Образование доменов в чистых жидкостях и их смесях. Способы исследования доменной структуры жидкости. Гидратные оболочки ионов. Экспериментальные методы исследования и методы моделирования.

Тема 3. Методы молекулярной динамики и Монте-Карло. Уравнения движения, потенциалы, траектории, методы интегрирования. Моделирование влияния температуры и давления. Граничные условия. Выбор начального состояния. Использование результатов молекулярно-динамических расчетов и расчетов Монте-Карло для создания термодинамических моделей жидкостей и растворов методами статистической термодинамики. Расчет макроскопических свойств жидкостей и растворов на основе результатов моделирования методами молекулярной динамики и Монте-Карло.

Тема 4. Ионные жидкости. Химическая природа и физико-химические свойства ионных жидкостей. Их отличия от обычных растворителей. Гидрофильные и гидрофобные ионные жидкости. Структура ионных жидкостей. Смеси ионных жидкостей.

Тема 5. Самоорганизация и агрегация. Структурообразование на границах раздела несмешивающихся жидкостей и на границе жидкость–газ. Агрегация молекул поверхностно-активных веществ на границах раздела. Пленки Ленгмюра-Блоджет. Агрегация молекул растворенного вещества в растворах. Жидкие кристаллы, переходы между жидкокристаллическими фазами. Моделирование жидкокристаллического состояния.

6. Образовательные технологии.

При реализации различных видов учебной работы используются следующие образовательные технологии:

- традиционные лекции с использованием мультимедийной аппаратуры;
- лекции проблемного характера;
- дискуссии на семинарах

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

Студентам предоставляется программа курса, план занятий и перечень заданий для самостоятельной работы. По каждой теме указывается материал в источниках из списков основной и вспомогательной литературы, а также из интернет-ресурсов. Дополнительные материалы размещаются на сайте кафедры общей химии: www.chem.msu.ru/rus/teaching/general-spec.html

8. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

- Теоретические и экспериментальные методы химии растворов. Ред. А.Ю. Цивадзе. – М.: Проспект, 2011.–688 С.
- Л.А. Асланов, М.А. Захаров, Н.Л. Абрамычева. Ионные жидкости в ряду растворителей.– М.: Изд-во МГУ, 2005.– 272 С.
- М.А. Федотов. Ядерный магнитный резонанс в неорганической и координационной химии (растворы и жидкости).– М.: Физматлит, 2009.– 384 С.
- Ю.М. Кесслер, В.Е. Петренко, А.К. Лященко и др. Вода: структура, состояние, сольватация. – М.: Наука, 2003. – 404 С.
- Структурная самоорганизация в растворах и на границе раздела фаз. Ред. А.Ю. Цивадзе. – М.: ЛКИ, 2008. – 544 С.

Дополнительная литература

- Ю.К. Товбин и др. Метод молекулярной динамики в физической химии. – М.: Наука, 1996. – 336 С.
- К. Райхардт. Растворители и эффекты среды в органической химии.– М.: Мир, 1991.– 763 С.
- Т.А. Фельц. Аморфные и стеклообразные неорганические твердые тела.– М.: Мир, 1986.– 556 С.
- Перечень используемых информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы (при необходимости):
 1. Сайт журнала Journal of molecular liquids <https://www.journals.elsevier.com/journal-of-molecular-liquids.html>
 2. Сайт журнала Journal of Non-Crystalline Solids <http://www.journals.elsevier.com/journal-of-non-crystalline-solids.html>
 3. Сайт разработки программы OpenMD для расчетов методом молекулярной динамики <http://www.openmd.org>
- Описание материально-технической базы.

Занятия проводятся в аудитории, оснащенной персональными компьютерами, мультимедийным проектором и экраном. Самостоятельная работа студентов обеспечивается доступом к учебной литературе, сети «Интернет» и компьютерным базам данных.

9. Язык преподавания – русский

10. Преподаватели:

1. Асланов Леонид Александрович, доктор химических наук, профессор, кафедра общей химии химического факультета МГУ, e-mail: aslanov@struct.chem.msu.ru, (495) 939-13-27.
2. Захаров Максим Александрович, кандидат химических наук, доцент, кафедра общей химии химического факультета МГУ, e-mail: maxz2002@yandex.ru, (495) 939-50-89.

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачета. На зачете проверяется достижение ЗУВ, перечисленных в п.2.

Текущая аттестация осуществляется через оценку работы студента на семинаре, проверку домашних заданий, а также посредством четырех аудиторных контрольных работ (контрольная работа № 1 проверяет усвоение настоящей программы по разделу 1, контрольная работа № 2 – по разделу 2, контрольная работа № 3 – по разделам 3 и 4, контрольная работа № 5 – по разделу 5).

Демонстрационные варианты домашних заданий:

1. Самостоятельно изучите последовательность структурных превращений в аморфном оксиде алюминия при повышении температуры.
2. Изучите основные типы анионов и катионов, входящих в состав гидрофильных и гидрофобных ионных жидкостей. При какой комбинации "катион-анион" достигается наименьшая температура плавления? Наименьшая вязкость?
3. Изучите строение сольватных оболочек важнейших неорганических катионов и анионов.
4. Изучите способы выбора начальных условий при проведении расчетов методом молекулярной динамики.

Демонстрационный вариант контрольной работы № 1

1. Приведите примеры аморфных материалов и опишите способы их получения.
2. Объясните особенности свойств аморфных сплавов.
3. Охарактеризуйте процесс кристаллизации аморфных веществ на примере оксида алюминия и кремнезема.
4. Перечислите структурные факторы, способствующие стеклованию, и приведите примеры их действия.
5. Объясните процесс формирования микро- и мезопористой структуры на примере цеолитов.

Демонстрационный вариант контрольной работы № 2

1. Опишите алгоритм расчета термодинамических свойств жидкого раствора.

2. Перечислите основные причины отклонения поведения реальных жидкостей от идеальности.
3. Приведите примеры жидкостей, в которых образуется доменная структура, и опишите механизм ее образования.
4. Охарактеризуйте физико-химические методы исследования структуры жидкостей и растворов.
5. Каково строение гидратных оболочек ионов и к каким последствиям приводит их образование?

Демонстрационный вариант контрольной работы № 3

1. Каким образом в методе молекулярной динамики моделируется влияние температуры и давления?
2. Как применяют результаты расчетов Монте-Карло для моделирования термодинамических функций растворов?
3. Каким образом проводится моделирование макроскопических свойств жидкостей?
4. Назовите причины гидрофильных/гидрофобных свойств ионных жидкостей.
5. Охарактеризуйте строение ионных жидкостей и их смесей.

Демонстрационный вариант контрольной работы № 4

1. К каким последствиям приводит образование Н-агрегатов и J-агрегатов в растворах красителей?
2. Опишите процесс формирования многослойных пленок Ленгмюра-Блоджет.
3. Приведите примеры структурообразования на границах раздела и объясните причины этих процессов.
4. Перечислите основные типы жидких кристаллов и охарактеризуйте их структуру.
5. Какие фазовые переходы обычно происходят в жидкокристаллических системах с ростом температуры? Объясните их причины.

Промежуточный контроль за освоением рабочей программы дисциплины осуществляется в ходе зачета.

Примерный перечень вопросов к зачету

1. Методы получения веществ в аморфном состоянии. Характеристики и признаки аморфного состояния вещества.
2. Структура аморфных веществ, способы ее описания.
3. Получение аморфных металлических сплавов, их свойства.
4. Термодинамические свойства аморфного состояния вещества. Термический анализ стекол.
5. Микропористые и мезопористые материалы.
6. Получение и структура аморфных стекол.
7. Термодинамика и кинетика процессов кристаллизации аморфных веществ.
8. Экспериментальные методы исследования и компьютерное моделирование процесса кристаллизации.
9. Межмолекулярное взаимодействие в жидкостях, описание в терминах парных потенциалов.
10. Методы экспериментального определения структуры жидкостей.
11. Термодинамические модели жидкостей, экспериментальные данные для их построения

12. Эмпирические потенциалы межмолекулярных взаимодействий, их параметризация.
13. Использование экспериментальных функций радиального распределения для оптимизации модели жидкости.
14. Расчет термодинамических функций жидкостей методами статистической термодинамики.
15. Доменная структура жидкостей и растворов, причины ее образования и методы экспериментального изучения.
16. Процессы сольватация, термодинамический и динамический аспекты.
17. Сольватные оболочки ионов, их строение и закономерности образования.
18. Методы рентгеновской спектроскопии для исследования процессов сольватации.
19. Макроскопические характеристики растворителей, их связь со строением молекул и сольватирующей способностью.
20. Мезофазы и жидкокристаллическое состояние. Типы жидких кристаллов.
21. Фазовые переходы в жидких кристаллах. Влияние температуры.
22. Физические основы и базовые положения метода молекулярной динамики.
23. Способы моделирования изменения температуры и давления в молекулярной динамике.
24. Алгоритм проведения расчетов методом молекулярной динамики.
25. Алгоритм проведения расчетов методом Монте-Карло.
26. Методы расчета термодинамических функций по молекулярно-динамическим данным.
27. Гидрофильные и гидрофобные взаимодействия. Гидрофильно-липофильный баланс.
28. Флуорофобный эффект. Свойства перфторированных молекул.
29. Гидрофобные и гидрофильные эффекты на поверхности жидкостей и границах доменов.
30. Структура границы раздела фаз. Формирование упорядоченных слоев.
31. Структура границы "вода-лед". Кластеры в жидкой воде, методы их исследования.
32. Формирование пленок Ленгмюра-Блоджет.
33. Поведение молекул поверхностно-активных веществ. Мицеллообразование.
34. Агрегация молекул растворенного вещества в растворах: причины и следствия
35. J-Агрегаты и H-агрегаты молекул красителей
36. Общие свойства ионных жидкостей, их связь со строением катионов и анионов.
37. Отличие ионных жидкостей от обычных растворителей, причины отличия.
38. Методы экспериментального исследования и компьютерного моделирования строения ионных жидкостей.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков приведена в таблице ниже:

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
Оценка	2	3	4	5

Результат				
Знания	Обрывочные знания или их отсутствие	В целом систематические, но неглубокие знания со значительными пробелами	Систематические, общие, но недостаточно структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отдельные умения или их отсутствие	В целом систематическое, но ограниченное умение, успешное только в простейших ситуациях	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отдельные навыки или их отсутствие	Шаблонные навыки, пригодные для решения простейших задач	В целом сформированные навыки, но не все в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении различных задач

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
Знать: современные теории, описывающие структуру, электронное строение и свойства твердых тел.	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на промежуточной аттестации
Уметь: находить взаимосвязи между составом, строением, физическими и химическими свойствами твердых тел и объяснять их.	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на промежуточной аттестации
Владеть: способами предсказания физических и химических свойств твердотельных материалов на основе их состава и структуры.	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на промежуточной аттестации