

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Российский университет дружбы народов»

Институт биохимической технологии и нанотехнологии (ИБХТН)

Рекомендовано МССН

Наименование дисциплины

«Основы квантовой механики и физической химии»

Рекомендуется для направления подготовки

28.04.01 «НАНОТЕХНОЛОГИЯ И МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА»

Магистерская программа

«Иновационные технологии и нанотехнологии в медицине, фармацевтике и биотехнологии»

Квалификация (степень) выпускника МАГИСТР

1. Цели и задачи дисциплины:

Целью изучения дисциплины «Физическая и коллоидная химия лекарственных средств» является развитие у магистрантов химического мировоззрения и приобретения ими современных представлений о строении веществ и о химическом процессе на основе термодинамики и кинетики.

Задачами дисциплины является:

- изучение основ квантовой механики;
- получение знаний о химической термодинамике, в том числе о статистическом подходе к термодинамике, обратимых и необратимых процессах, термодинамике химического равновесия;
- приобретение умений и навыков рассмотрения любых химических процессов в рамках современных представлений о электрохимии, химической термодинамике и химической кинетике;
- получение знаний о гетерогенных равновесиях, разделении жидких смесей и процессе перегонке;
- приобретение навыков подбора условий эффективной экстракции;
- получение знаний о теориях кислот и оснований, буферных растворах, буферной емкости;

2. **Место дисциплины в структуре ОП ВО:** Дисциплина «Основы квантовой механики и физической химии» относится к обязательной части блока 1 учебного плана. В таблице 1 приведены предшествующие и последующие дисциплины, направленные на формирование компетенций дисциплины в соответствии с матрицей компетенций ОП ВО.

3. Таблица № 1

4. Предшествующие и последующие дисциплины, направленные на формирование компетенций

№ п/п	Шифр и наименование компетенции	Предшествующие дисциплины	Последующие дисциплины (группы дисциплин)
Профессиональные компетенции			
1	ПК-1 Способен определить физико-химические свойства наноматериалов, их идентифицировать и дать оценку степени их потенциальной опасности согласно используемым в организации методикам.		Физико-химические методы анализа; Химические методы получения и свойства наносистем; Применение полимеров в биомедицинской технологии и нанотехнологии; Введение в современную биологию; Основы фитохимии и технологии фитопрепаратов

3. Требования к результатам освоения дисциплины:

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций:

№ п/п	Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции
-------	--------------------------------	--

1	ПК-1 Способен определить физико-химические свойства наноматериалов, их идентифицировать и дать оценку степени их потенциальной опасности согласно используемым в организации методикам.	ПК-1.1. Знает физико-химические методы анализа, основы квантовой механики и физической химии. ПК-1.2. Способен определить физико-химические свойства наноматериалов
---	--	--

В результате изучения дисциплины студент должен:

Знать: основы квантовой механики, химической термодинамики, кинетики, электрохимии, учении о кислотах и основаниях, буферных растворах, фазовых переходах.

Уметь: применять полученные знания для прогнозирования возможностей протекания химических реакций, свойств многокомпонентных лекарственных смесей.

Владеть: ясным пониманием изучаемого явления; выводом основных уравнений количественно определяющих изучаемый процесс; способностью применять полученные знания при разработке и анализе лекарственных средств, навыком прогнозирования стабильности лекарственных средств при хранении в зависимости от их физико-химических свойств.

4. Объем дисциплины и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет 6 зачетных единиц.

Вид учебной работы	Всего часов	Семестры			
		1	2	3	4
Аудиторные занятия (всего)	68	36	32		
В том числе:					
Лекции	34	18	16		
Семинары (С)	26	18	8		
Лабораторные работы (ЛР)	8		8		
Самостоятельная работа (всего)	148	74	74		
Вид промежуточной аттестации (зачет, экзамен)	Экзамен				
Общая трудоемкость час	216	110	106		
зач. ед.					

5. Содержание дисциплины

5.1. Содержание разделов дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела
1.	Основы квантовой механики	Основные термины и определения. Строение атома. Квантово-механическая теория. Уравнение Шредингера.
2.	Основы термодинамики.	Предмет термодинамики. Типы термодинамических систем. Понятие о функциях состояния. Идеальный газ, закон Дальтона. 0 и I начала термодинамики. Приложение первого начала термодинамики к различным процессам. Теплоемкость. Понятие о стандартном состоянии веществ.

		Зависимость теплового эффекта от температуры. Закон Кирхгофа.
3.	Статистический подход к термодинамике. Вероятность, энтропия. Обратимые и необратимые процессы. II начало термодинамики.	Статистическая интерпретация энтропии. Энтропия смешения идеальных газов. Обратимые и необратимые процессы. Энтропия переходного состояния. Второе начало термодинамики. Третье начало термодинамики. Постулат Планка.
4.	Термодинамические потенциалы.	Энергия Гельмгольца. Энергия Гиббса. Критерии самопроизвольности процессов и равновесия системы при различных условиях. Зависимость энергии Гиббса от температуры и давления. Уравнение Гиббса-Гельмгольца.
5.	Термодинамика химического равновесия. Уравнение изотермы химической реакции.	Распределение Максвелла – Больцмана по кинетическим энергиям при постоянной температуре. Установление равновесия в системе жидкость-газ при постоянной температуре. Парциальные молярные величины. Зависимость химического потенциала от концентрации. Уравнение изотермы химической реакции. Уравнение изобары химической реакции Вант-Гоффа.
6.	Гетерогенные равновесия. Правило фаз Гиббса.	Понятие о фазе. Термодинамические условия равновесия фаз. Правило фаз Гиббса. Равновесия в однокомпонентной системе. Диаграмма состояния воды. Уравнение Клапейрона-Клаузиуса.
7.	Равновесия в бинарных гетерогенных системах.	Диаграмма плавкости с простой эвтектикой. Кривые охлаждения бинарных смесей различного состава. Кривые кристаллизации расплава.
8.	Растворы.	Жидкие растворы. Диаграмма кипения. Разделение жидких смесей. Перегонка. Ограниченно смешивающиеся жидкости. Экстракция.
9.	Кислоты и основания. Буферные растворы.	Теории кислот и оснований: Аррениуса, Бренстеда-Лоури, Льюиса. Диссоциация кислот и оснований. Буферные растворы. Определения pH буферного раствора. Буферная емкость. Титрование слабых кислот сильными основаниями и наоборот.
10.	Сильные электролиты. Электропроводность.	Закон Кулона. Электропроводность. Зависимость электропроводности от концентрации. Проводники I и II рода. Эквивалентная электропроводность. Миграция и электростатическая подвижность ионов. Методика измерения электропроводности. Использование электрохимических методов исследования для практических целей.
11.	Электродвижущая сила (ЭДС) и электродные потенциалы.	Основные понятия. Классификация электродов. Зависимость электродных потенциалов от активностей компонентов электродных реакций. Уравнение Нернста. Окислительно-восстановительный электрод. Измерение ЭДС.

12.	Химическая кинетика.	Основные понятия химической кинетики. Скорость химической реакции. Формальная кинетика простых реакций. Методы определения порядка реакций: интегральный, дифференциальный. Влияние температуры на скорость химической реакции. Цикл Бора-Габер. Уравнение Аррениуса. Обратимые реакции. Параллельные реакции. Последовательные реакции. Теория кинетики обратимых химических реакций: теория бинарных соударений, теория активного комплекса.
-----	----------------------	--

5.2. Разделы дисциплин и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Лекц.	Практ. зан.	Лаб. зан.	Семи нары	СРС	Всего час.
1.	Основы квантовой механики	3			2	9	14
2.	Основы термодинамики.	3			2	9	14
3.	Статистический подход к термодинамике. Вероятность, энтропия. Обратимые и необратимые процессы. II начало термодинамики.	3			2	9	14
4.	Термодинамические потенциалы.	3			2	9	14
5.	Термодинамика химического равновесия. Уравнение изотермы химической реакции.	3			2	9	14
6.	Гетерогенные равновесия. Правило фаз Гиббса.	3			2	9	14
7.	Равновесия в бинарных гетерогенных системах.	3			2	9	14
8.	Растворы.	3			2	9	14
9.	Кислоты и основания. Буферные растворы.	3			2	9	14
10.	Сильные электролиты. Электропроводность.	3		3	2	9	17
11.	Электродвижущая сила (ЭДС) и электродные потенциалы.	3			2	9	14
12.	Химическая кинетика.	3		6	2	11	22
	Контрольные работы				3		3
	Подготовка к экзамену					34	34
	Всего						216

6. Лабораторный практикум

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование лабораторных работ	Трудо-емкость (час.)
2	10	Зависимость электропроводности от концентрации.	3
4	12	Изучение кинетики химической реакции.	6

7. Практические занятия (семинары)

№ п/п	№ раздела дисциплины	Тематика практических занятий (семинаров)	Трудо-емкость (час.)
1		Основные термины и определения. Строение атома. Квантово-механическая теория. Квантовые числа. Заполнение орбиталей электронами. Уравнение Шредингера.	2
2	2	0 и I начала термодинамики. Приложение первого начала термодинамики к различным процессам. Теплоемкость. Понятие стандартном состоянии веществ. Зависимость теплового эффекта от температуры. Закон Кирхгофа.	2
3	3	Обратимые и необратимые процессы. Энтропия переходного состояния. Второе начало термодинамики. Третье начало термодинамики. Постулат Планка.	2
4	4	Критерии самопроизвольности процессов и равновесия системы при различных условиях.	2
5	5	Зависимость химического потенциалы от концентрации. Уравнение изотермы химической реакции. Уравнение изобары химической реакции Вант-Гоффа.	2
6	6	Равновесия в однокомпонентной системе.	2
7	7	Кривые охлаждения бинарных смесей различного состава.	2
8	8	Ограниченно смешивающиеся жидкости. Экстракция.	2
9	9	Определении рН буферного раствора. Буферная емкость. Титрование слабых кислот сильными основаниями и наоборот.	2
10	10	Методика измерения электропроводности. Использование электрохимических методов исследования для практических целей.	2
11	11	Уравнение Нернста. Окислительно-восстановительный электрод. Измерение ЭДС.	2
12	12	Методы определения порядка реакций: интегральный, дифференциальный. Влияние температуры на скорость химической реакции. Теория кинетики обратимых химических реакций: теория бинарных соударений, теория активного комплекса.	2
13		Контрольные работы	3

9. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины:

а) основная литература:

1. Физическая химия; учебник/ А.И. Марахова.- Москва: ГЭОТАР-Медиа, 2020. – 240 с.
2. Физическая химия [Электронный ресурс] : Учебное пособие / Б.Н. Афанасьев, Ю.П. Акулова. - Электронные текстовые данные. - СПб. : Лань, 2012. - 464 с. : ил. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - ISBN 978-5-8114-1402-4.
3. Стромберг, А.Г. Физическая химия: Учеб. для хим. спец. вузов / А.Г. Стромберг, Д.П. Семченко. - М.: Высшая школа, 2009. - 527 с.
4. Физическая и коллоидная химия: Учеб. для фарм. вузов и факультетов/под ред. К.И. Евстратовой.- М.:Высш. шк., 1990.- 487 с.

б) дополнительная литература:

1. Ершов, Ю.А. Общая химия. Биофизическая химия. Химия биогенных элементов / Ю.А. Ершов. - М.: Высшая школа, 2007. - 559 с.
2. Ершов, Ю.А. Общая химия. Биофизическая химия. Химия биогенных элементов / Ю.А. Ершов. - М.: Высшая школа, 2010. - 559 с.
3. Ершов, Ю.А. Общая химия. Биофизическая химия. Химия биогенных элементов: Учебник / Ю.А. Ершов, В.А. Попков, А.С. Берлянд. - Люберцы: Юрайт, 2015. - 560 с.
4. Ершов, Ю.А. Общая химия. биофизическая химия. химия биогенных элементов: Учебник для вузов / Ю.А. Ершов, В.А. Попков, А.С. Берлянд. - Люберцы: Юрайт, 2016. - 562 с.
5. Коган, В.А. Физическая химия: Курс лекций / В.А. Коган, В.В. Луков. - Рн/Д: РУ, 2011. - 254 с.
6. Кругляков, П.М. Физическая и коллоидная химия. Практикум: Учебное пособие / П.М. Кругляков. - СПб.: Лань, 2013. - 208 с.
7. Лавров, Б.А. Физическая химия расплавов: Учебное пособие / Б.А. Лавров. - СПб.: Проспект Науки, 2013. - 176 с.
8. Ленский, А.С. Биофизическая и бионеорганическая химия / А.С. Ленский, И.Ю. Белавин и др. - Ереван: МИА, 2008. - 408 с.
9. Салем, Р.Р. Физическая химия: Начала теоретической электрохимии / Р.Р. Салем. - М.: КомКнига, 2010. - 320 с.
10. Салем, Р.Р. Физическая химия. Термодинамика / Р.Р. Салем. - М.: Физматлит, 2004. - 352 с.
11. Салем, Р.Р. Физическая химия / Р.Р. Салем. - М.: Вузовская книга, 2004. - 328 с.
12. Стромберг, А.Г. Физическая химия , тер. / А.Г. Стромберг, Д.П. Семченко. - М.: Высшая школа, 2006. - 527 с.
13. Морачевский, А.Г. Физическая химия. Поверхностные явления и дисперсные системы: Учебное пособие, стер / А.Г. Морачевский. - СПб.: Лань, 2015. - 160 с.
14. Морачевский, А.Г. Физическая химия. Термодинамика химических реакций: Учебное пособие / А.Г. Морачевский, Е.Г. Фирсова. - СПб.: Лань, 2015. - 112 с.
15. Морачевский, А.Г. Физическая химия. Гетерогенные системы: Учебное пособие / А.Г. Морачевский, Е.Г. Фирсова. - СПб.: Лань, 2015. - 192 с.
16. Мушкамбаров, Н.Н. Физическая и коллоидная химия: Учебник для медицинских вузов (с задачами и их решениями) / Н.Н. Мушкамбаров. - Ереван: МИА, 2010. - 456 с.
17. Нигматуллин, Н.Г. Физическая и коллоидная химия: Учебное пособие / Н.Г. Нигматуллин. - СПб.: Лань, 2015. - 288 с.
18. Попков, В.А. Общая химия. Биофизическая химия. Химия биогенных элементов: Учебник для бакалавров / Ю.А. Ершов, В.А. Попков, А.С. Берлянд; Под ред. Ю.А. Ершов. - М.: Юрайт, 2012. - 560 с.

г) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

<http://lib.rudn.ru>

<http://www.gmpnews.ru/>

<http://www.minzdravsoc.ru/health>

<http://www.glatt.com>

<http://www.huettlin.com>

<http://www.korsch.de>

<http://www.schott.com>

<http://www.baush-stroebel.com>

<http://www.rushim.ru>,

<http://www.nlr.ru/poisk/>

<http://www.scsml.rssi.ru/>

<http://elibrary.ru/defaultx.asp>

<http://catalog.viniti.ru/srch basic.aspx>

10. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

1. Раздаточный материал по наиболее важным темам курса.
2. Учебная аудитория с персональным компьютером (ноутбуком), мультимедиапроектором, экраном.
3. Демонстрационный материал на слайдах по темам дисциплины.
4. Компьютерный класс, электронная библиотека, свободный интернет-доступ.

**ФГАОУ ВО «Российский университет дружбы народов»
Институт биохимической технологии и нанотехнологии (ИБХТН)**

ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ПО УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЕ

Основы квантовой механики и физической химии

Рекомендуется для направления подготовки/специальности

28.04.01 «Нанотехнологии и микросистемная техника»
(код и наименование направления подготовки)

Направленность программы (профиль)

**«Инновационные технологии и нанотехнологии в медицине, фармацевтике и
биотехнологии»**

Магистр

Квалификация (степень) выпускника

Фонды оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

Работа в семестре

Вид задания	Число заданий	Кол-во баллов	Сумма баллов
Лабораторные работы	2	20	40
Контрольные работы	3	10	30
Итоговая аттестация (экзамен) в форме теста	1	30	30
ИТОГО (максимальный балл)			100

Балльно-рейтинговая системы и соответствие систем оценок

Баллы БРС	Традиционные оценки в РФ	Баллы для перевода оценок	Оценки	Оценки ECTS
86 - 100	5	95 - 100	5+	A
		86 - 94	5	B
69 - 85	4	69 - 85	4	C
		61 - 68	3+	D
51 - 68	3	51 - 60	3	E
		31 - 50	2+	FX
0 - 50	2	0 - 30	2	F

Вопросы для подготовки к экзамену

- Предмет, задачи и методы физической химии. Основные разделы физической химии.
- Квантово-механическая теория. Уравнение Шредингера. Строение атома. Квантовые числа.
- Термодинамическая система. Классификация термодинамических систем. Интенсивные и экстенсивные свойства. Параметры и функции состояния.
- Равновесные, стационарные и переходные состояния. Термодинамический процесс. Изобарные, изотермические, изохорные и адиабатические процессы.
- Работа и теплота. Первое начало термодинамики для различных процессов в системе идеального газа.
- Закон Гесса. Теплоемкости веществ. Зависимость теплоты процесса от температуры.
- Равновесные и неравновесные процессы. Максимальная работа процесса. Полезная работа.
- Энтропия. Второе и третье начала термодинамики. Абсолютная и стандартная энтропия.
- Энергия Гельмгольца и Гиббса. Термодинамические потенциалы.
- Химический потенциал. Уравнение изотермы химической реакции. Термодинамические условия достижения и состояния химического равновесия.
- Термодинамическое обоснование принципа Ле-Шателье-Брауна.
- Фаза. Число общих и независимых компонентов. Фазовое равновесие и условия его существования. Правило фаз Гиббса.
- Диаграммы состояния однокомпонентных систем. Уравнение Клапейрона-Клаузиуса.
- Диаграммы состояния двухкомпонентных систем. Значение фазовых диаграмм для прогнозирования технологических процессов.
- Растворы. Коллигативные свойства растворов и их использование для определения молярной массы вещества.
- Жидкие смеси с неограниченной растворимостью компонентов. Диаграммы «состав - давление пара» и «состав - температура кипения». Первый закон Коновалова.

17. Идеальные и реальные растворы. Смеси с положительным и отрицательным отклонением.
18. Разделение жидких смесей. Простая перегонка, фракционная перегонка, ректификация.
19. Азеотропные смеси. Второй закон Коновалова. Методы разделения азеотропных смесей.
20. Бинарные системы с ограниченной растворимостью. Взаимонерастворимые жидкости. Теоретические основы перегонки с водяным паром.
21. Трехкомпонентные системы. Закон распределения Нернста-Шилова. Термодинамическая константа распределения, коэффициент распределения. Однократная и дробная экстракция.
22. Растворы сильных электролитов. Ионная сила раствора. Теория Дебая-Хюккеля и её приближения.
23. Проводники второго рода. Скорость движения ионов и подвижность ионов. Электрическая проводимость и эквивалентная электропроводность. Предельная эквивалентная электропроводность.
24. Зависимость электрической проводимости от различных факторов. Теория электрической проводимости растворов Дебая-Онзагера. Электропроводность неводных растворов.
25. Электродные процессы и электродные потенциалы. Электродвижущая сила реакции. Измерение электродных потенциалов.
26. Окислительно-восстановительные электроды и окислительно-восстановительные потенциалы. Химические источники тока. Классификация электродов.
27. Прямая потенциометрия и потенциометрическое титрование. Прямая кондуктометрия и кондуктометрическое титрование.
28. Предмет химической кинетики. Закон действующих масс для скорости реакции. Молекулярность и порядок реакции. Константа скорости химической реакции. Период полупревращения. Методы определения порядка реакции.
29. Правило Вант-Гоффа. Ускоренный метод определения сроков годности лекарственных препаратов. Уравнение Аррениуса. Теория активных бинарных столкновений. Теория переходного состояния.
30. Обратимые, параллельные, последовательные и сопряжённые реакции.
31. Цепные, фотохимические и каталитические реакции. Уравнение Михаэлиса-Ментен.
32. Поверхностная энергия Гиббса и поверхностное натяжение. Методы определения поверхностного натяжения. Зависимость поверхностного натяжения от температуры, природы фаз и концентрации вещества.

**Распределение тем учебной дисциплины по модулям
(количество баллов в каждом модуле, форма оценивания
текущей учебной работы студентов и проведения рубежного контроля)**

Блок I.

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Форма оценивания учебной работы студентов, баллы		
		Выполнение и защита лабораторных работ	Контрольная работа	Итоговый тест
1.	Основы термодинамики.		30	
2.	Статистический подход к термодинамике. Вероятность, энтропия. Обратимые и необратимые процессы. II начало			-

	термодинамики.			
3.	Термодинамические потенциалы.			
4.	Термодинамика химического равновесия. Уравнение изотермы химической реакции.			
5.	Гетерогенные равновесия. Правило фаз Гиббса.			
6.	Равновесия в бинарных гетерогенных системах.			
	<i>Итого</i>	<i>30 баллов максимально.</i>		

Блок II.

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Форма оценивания учебной работы студентов, баллы		
		Выполнение и защита лабораторных работ	Контрольная работа	Итоговый тест
1.	Сильные электролиты. Электропроводность.	20		
2.	Химическая кинетика.	20		
		<i>40 баллов максимально.</i>		

Оценка за экзамен выставляется по количеству баллов, набранных в течение семестра и за оценку, полученную на письменном экзамене. Экзамен сдают только студенты, выполнившие и защитившие лабораторный практикум. Студенты обязаны сдавать все задания в сроки, установленные преподавателем. При несвоевременной сдаче заданий, они засчитываются без начисления баллов. Исключением являются уважительные причины при наличии подтверждающих документов установленных образцов. Экзамен проставляется только студентам, выполнившим в полном объеме все виды заданий. При пропуске лабораторной работы по уважительной причине, ее выполнение возможно не позже, чем через 4 недели после даты, указанной в плане. Время выполнения лабораторной работы согласовывается с преподавателем в индивидуальном порядке.

Разрешается однократно переписать рубежную проверочную работу, если по ней получено менее 20% планируемых баллов, ранее полученные по этой работе баллы аннулируются. Срок переписывания устанавливает преподаватель.

Использование источников (в том числе конспектов лекций и лабораторных занятий) во время выполнения письменной рубежной работы не допускается.

Время, которое отводится студенту на выполнение письменной работы, устанавливается преподавателем. По завершении отведенного времени студент должен сдать работу преподавателю, вне зависимости от того, завершена она или нет.

Студент допускается к экзамену с любым количеством баллов, набранном в семестре.

Если в итоге за семестр студент получил менее 31 балла, то ему выставляется оценка F и студент должен повторить эту дисциплину в установленном порядке. Если же в итоге студент получил не менее 31 балла, т. е. FX, то студенту разрешается добор необходимого (до 51) количества баллов. Добор баллов осуществляется путем повторного одноразового выполнения

предусмотренных контрольных мероприятий, при этом аннулируются соответствующие предыдущие результаты. Ликвидация задолженностей проводится по согласованию с деканатом.

Разработчик:

Профессор ИБХТН «Нанотехнологии», д.фарм.н.

А.И. Марахова

«Утверждаю»

Директор ИБХТН «Нанотехнологии»

A handwritten signature in blue ink, appearing to read "Ya. Stoy", is written over a horizontal line.

д.х.н. Я.М. Станишевский