

Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
Кафедра фізичної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Декан хімічного факультету

Олег КАЛУГІН



“31”серпня 2023р.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Вибрані розділи фізико-хімії розчинів

рівень вищої освіти магістр

галузь знань 10 Природничі науки

спеціальність 102 – хімія

освітня програма освітньо-професійна програма «Хімія»

спеціалізація — «Хімія»

вид дисципліни за вибором

факультет хімічний

2023 / 2024 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження Вченою радою хімічного факультету
30 серпня 2023 року, протокол № 8

РОЗРОБНИК ПРОГРАМИ:

Микола МЧЕДЛОВ-ПЕТРОСЯН, д. х. н., професор ЗВО кафедри фізичної хімії
хімічного факультету

Програму схвалено на засіданні кафедри фізичної хімії

Протокол № 1 від 28 серпня 2023 року

Завідувач кафедри фізичної хімії



Микола МЧЕДЛОВ-ПЕТРОСЯН

Програму погоджено з гарантом освітньо-наукової програми “Хімія”
Гарант освітньо-наукової програми “Хімія”



Микола МЧЕДЛОВ-ПЕТРОСЯН

Програму погоджено з гарантом освітньо-професійної програми “Хімія”
Гарант освітньо-професійної програми “Хімія”



Андрій ДОРОШЕНКО

Програму погоджено методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 1 від 29 серпня 2023 року,

Голова методичної комісії хімічного факультету



Павло ЄФІМОВ

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни «Вибрані розділи фізико-хімії розчинів» складена відповідно до освітньо-професійної (освітньо-наукової) програми підготовки магістрів;
спеціальність: 102 – хімія.

1. Опис навчальної дисципліни

1.1. Мета викладання навчальної дисципліни

Метою викладання дисципліни є: навчити студентів сформулювати теоретичні основи, принципи та закони сучасної науки про розчини, навчити розумінню, аналізу та прогнозуванню процесів та явищ, які спостерігаються при проведенні різноманітних реакцій у розчинах, а також методам проведення експериментальних досліджень властивостей рідкофазних систем та аналізу експериментальних даних.

1.2. Основні завдання вивчення дисципліни

Мотивація студентів до вивчення головних аспектів фізичної хімії розчинів. Засвоєння студентами причин та проявів специфічних властивостей неводних неорганічних та органічних розчинників. Навчання розумінню та використанню дескрипторів розчинників. Формулювання теоретичних основ, принципів та законів сучасної фізико-хімії іонних рівноваг у розчинах. Розуміння природи впливу розчинника на перебіг хімічних процесів та вміння цілеспрямованого впливу на ці процеси.

1.3. Кількість кредитів: 6.

1.4. Загальна кількість годин: 180.

1.5. Характеристика навчальної дисципліни	
Нормативна	
Денна форма навчання	Заочна (дистанційна) форма навчання
Рік підготовки	
1-й	1-й
Семестр	
1-й	1-й
Лекції	
32 год.	10 год.
Лабораторні заняття	
32 год.	10 год.
Самостійна робота	
116 год.	160 год.
Індивідуальні завдання	
Не передбачені	

1.6. Заплановані результати навчання

P1. Знати та розуміти наукові концепції та сучасні теорії хімії, а також фундаментальні основи суміжних наук.

P2. Глибоко розуміти основні факти, концепції, принципи і теорії, що стосуються предметної області, опанованої у ході магістерської програми, використовувати їх для розв'язання складних задач і проблем, а також проведення досліджень з відповідного напрямку хімії.

P3. Застосовувати отримані знання і розуміння для вирішення нових якісних та кількісних задач хімії.

P5. Володіти методами комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем.

P6. Знати методологію та організації наукового дослідження.

P7. Вільно спілкуватися англійською та (за можливості) іншою іноземною мовою з професійних питань, усно і письмово презентувати результати досліджень з хімії іноземною мовою, брати участь в обговоренні проблем хімії.

P11. Складати технічне завдання до проекту, розподіляти час, організовувати свою роботу і роботу колективу, складати звіт.

P14. Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії. P15. Володіння загальною методологією здійснення наукового дослідження.

Знати: основи та найважливіші принципи фізико-хімії розчинів, базову інформацію про типи взаємодій розчиненої сполуки з розчинником, про термодинаміку сольватації та пересольватації неелектролітів та електролітів, вплив розчинника на спектри та на перебіг хімічних процесів, зокрема, іонної асоціації та протолітичних рівноваг; найголовніші висновки теорії сильних електролітів, теорії кислот та основ, рівноваг к збудженому стані, основи фізико-хімії вільних радикалів; класифікацію розчинників, включаючи "зелені" розчинники, уявлення щодо $\rho\sigma$ – аналізу, дескрипторів розчинників, диференціюючо-нівелюючу дію розчинників.

Вміти: розтлумачувати та передбачати напрямки та швидкості процесів що перебігають у цих розчинах, зміни спектрів поглинання та випромінювання під впливом зміни розчинника; напівкількісно прогнозувати зміни у значеннях констант рівноваг та швидкостей реакцій, що можуть відбутися при переході від водного до неводного розчину; цілеспрямовано впливати на стан рівноваг та на кінетику процесів у розчинах, знаходити необхідну довідкову інформацію щодо рідкофазних систем, здійснювати експериментальні визначення констант рівноваг у розчинах різних типів за допомогою кондуктометричного, потенціометричного та спектрофотометричного методів.

2. Тематичний план навчальної дисципліни

Тема 1. Взаємодія розчиненої сполуки з розчинником.

Структура та властивості рідини, типи взаємодій розчиненої речовини з розчинником, Специфічні та неспецифічні взаємодії, сольватація іонів. Гідрофобна та сольвофобна сольватація. Методи розрахунку термодинамічних параметрів сольватації, сольватація в газовій фазі, сольватація неелектролітів та розчинність неелектролітів та електролітів. Розподіл неелектролітів між двома фазами, розподіл

електролітів між двома фазами. Коефіцієнти активності переносу іонів. Природа смуг поглинання та випромінювання, сольватохромія та сольватофлуорохромія.

Тема 2. Взаємодія між розчиненими сполуками у рідкій фазі.

Класифікація типів взаємодій між розчиненими сполуками. Специфічні та неспецифічні взаємодії. Класифікація розчинів. Асоціація неелектролітів, електролітів, гідрофобні взаємодії. Вплив різних чинників на стан хімічної рівноваги, температурні залежності констант рівноваг.

Тема 3. Іонні процеси у розчинах.

Класифікація електролітів, електростатична теорія сильних електролітів та коефіцієнти активності, рівняння Дебая – Хюккеля та Пітцера. Іонна асоціація у розчинах та її хімічні наслідки, кондуктометрія як метод дослідження іонної асоціації. Типи сольових ефектів.

Тема 4. Вільні радикали.

Виникнення вільних радикалів. Досліди Гомберга та їх подальший розвиток, вуглеводень Чичибабіна. Феноксильні та інші радикали. Найбільш типові реакції вільних радикалів, умов існування стабільних радикалів. Роль радикалів у процесах окислення органічних сполук.

Тема 5. Кисотно-основна взаємодія у розчинах.

Кисотно-основна взаємодія у розчинах. Теорія кислот та основ Арреніуса, Бренстеда, шкала рН. Швидкість переносу протона, два основні типи переносу протона у протолітичних реакціях. СН-кислоти. Структурний фактор, $\rho\sigma$ – аналіз, кислотність і основність у газовій фазі, прототропна таутомерія. Кислоти Льюїса, теорії Усановича та ЖМКО, нуклеофільність, електрофільність. Кисотно-основна взаємодія у неводних середовищах з позицій загальної схеми дисоціації М. А. Ізмайлова, зміна констант рівноваг при переході від одного розчинника до іншого, диференціюючо-нівелююча дія розчинників на силу кислот.

Тема 6. Протолітичні рівноваги у збудженому стані.

Методи оцінки констант дисоціації сполук у збудженому стані, цикл Вьолера. Причини різних змін констант дисоціації для кислот різних типів при переході від основного до збудженого станів.

Тема 7. Деякі питання кінетики.

Швидкість хімічних реакцій у розчинах. Гомогенний каталіз. Кисотно-основний каталіз. Вплив електролітів на швидкість хімічних реакцій. Міжфазний каталіз. Ферментативний каталіз. Вплив природи розчинника на швидкість хімічних реакцій в рідкій фазі.

Тема 8. Методи визначення констант дисоціації кислот.

Кондуктометрія. Потенціометрія. Спектрофотометрія. Методи розчинності та екстракції. Інші методи. Сучасні бази даних з констант дисоціації кислот.

Тема 9. Шкали кислотності у розчинах.

Шкали рН у неводних розчинах. Шкали H_0 , H_+ , H_- та ін. у водних розчинах мінеральних кислот та лугів. Шкала H_0 та інші – у водно-органічних та неводних середовищах.

Тема 10. Дескриптори розчинників.

Параметри, що характеризують фізико-хімічні властивості розчинників (ϵ , δ_H , DN , AN , π^* , α , β , E_T^N , acity, basity), та їх взаємозв'язок. Кореляція властивостей розчинених речовин з дескрипторами розчинників.

Тема 11. «Зелені розчинники».

Приклади зелених розчинників – іонних рідин, що існують при кімнатній температурі (RTIL). Загальна характеристика цих рідин, основні кількісні параметри та сучасні галузі використання.

3. Структура навчальної дисципліни

Назви і тем	Кількість годин											
	денна форма						заочна форма					
	усього	у тому числі					усього	у тому числі				
		л	п	лаб.	інд.	с.р.		л	п	лаб.	інд.	с. р.
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
Усього годин	180	32		32		146	180	10		10		160

В умовах воєнного стану розподіл часу наступний:

Денна форма навчання:

Лекції – дистанційне навчання, 32 год.

Лабораторні – аудиторне навчання, 32 год.

Заочна форма навчання:

Лекції – дистанційне навчання, 10 год.

Лабораторні – аудиторне навчання, 10 год.

У разі необхідності – цілком дистанційна форма навчання.

4. Теми лабораторних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин	
		Денна	Заочна форма

		форма	
1	Кондуктометричне визначення константи дисоціації солі у неводному розчиннику	6	3
2	Визначення вмісту води в органічному розчиннику потенціометричним титруванням за Карлом Фішером	2	2
3	Потенціометричне визначення константи дисоціації кислоти у неводному розчиннику (зі скляним електродом).	6	—
4	Потенціометричне визначення константи дисоціації кислоти у неводному розчиннику (з хінгідронним електродом)	6	—
5	Спектрофотометричне визначення константи іонізації кислоти у неводному розчиннику	6	3
6	Сольватохромія	6	2
<i>Загалом</i>		32	10

5. Завдання для самостійної роботи

Назва теми	Кількість годин	
	Денна форма	Заочна форма
<u>Взаємодія розчиненої сполуки з розчинником.</u> Знати способи оцінки енергій сольватації іонів, обмеженість борнівської моделі сольватації, методи оцінювання енергії сольватації окремих іонів.	8	10
<u>Взаємодія між розчиненими сполуками у рідкій фазі.</u> Знати проблеми виникнення комплексів з переносом заряду, воднево-зв'язаних асоціатів. Природа і структура сольватів. Уявлення щодо сольватації в газовій фазі.	22	25
<u>Іонні процеси у розчинах.</u> Знати основні особливості іонних процесів у розчинниках різної природи. Іонна асоціація. Визначення констант іонної асоціації.	12	25
<u>Вільні радикали.</u> Знати історію відкриття вільних радикалів Гомбергом, основні методи одержання вільних радикалів, основні їх реакції. Стабільні радикали, «радикальні пастки», схема окислення органічних сполук.	12	20

<u>Кисотно-основна взаємодія у розчинах.</u> Знати основні чинники, які зумовлюють співвідношення значень констант дисоціації кислот у водних розчинах, мати уявлення щодо ро-констант Гаммета, особливості рівноваг у неводних розчинах.	24	36
<u>Протолітичні рівноваги у збудженому стані.</u> Знати підходи до оцінювання констант кислотної дисоціації в збудженому стані, методи Фьорстера–Вьолера.	12	10
<u>Методи визначення констант дисоціації кислот.</u> Мати уявлення про основні методи: кондуктометричні, потенціометричні та спектрофотометричні, у тому числі для багатоосновних кислот. Обмеження методів.	6	10
<u>Шкали кислотності у розчинах.</u> Знати методи створення шкал рН в водних та неводних розчинах, з урахуванням специфіки цих рідин. Проблема шкал кислотності у мало полярних розчинниках. Сильнокислі, суперкислотні та суперосновні середовища. Функція Гаммета та споріднені функції.	22	22
<u>Дескриптори розчинників.</u> Мати уявлення щодо шкал полярності розчинників, застосування принципу лінійності вільної енергії для опису параметрів рівноваг у розчинах.	22	22
<u>«Зелені розчинники».</u> Мати уявлення щодо низькотемпературних розплавів солей. Знати їх основні властивості та застосування.	6	10
<i>Усього годин</i>	146	190

6. Індивідуальні завдання

Не передбачені.

7. Методи навчання

Лекції, лабораторні роботи, екзамен.

8. Методи контролю

Звіт про виконання лабораторних робіт, екзамен. Екзамен складається в zoom та moodle з автентифікацією здобувача у режимі відео конференції.

9. Схема нарахування балів

Виконання та захист лабораторних робіт	Письмовий екзамен	Сума
10 x 6 = 60	40	100

Умовою допуску до екзамену є обов'язкове виконання всіх лабораторних робіт та складання завдань на всіх колоквиумах, а також розв'язання задач та

написання контрольної роботи. Екзамен вважається зданим, якщо сума балів за екзамен ≥ 20 балів.

Критерії оцінювання навчальних досягнень

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка за національною шкалою
90 – 100	відмінно
80-89	добре
70-79	
60-69	задовільно
50-59	
1-49	незадовільно

Методичне забезпечення

1. Робоча програма навчальної дисципліни.
2. Підручники, навчальні посібники, монографії.
3. Статті у періодичних наукових виданнях, матеріали з кіберпростору.
4. Демонстраційні матеріали.
5. Описи лабораторних робіт.

10. Рекомендована література

Основна література

1. Reichardt, C.; Welton, T. Solvents and Solvent Effects in Organic Chemistry. - Weinheim: Wiley-VCH. - 2011. - 692 p.
2. Isutsu K. Electrochemistry in Nonaqueous Solutions. Wiley-VCH Verlag. 2002. 330 p.
3. Мчедлов-Петросян Н. О. Жидкофазные электролитные и лиофильные нанодисперсные системы. Украинский химический журнал. 2013. Т. 79. № 11. С. 3-26.
4. Мчедлов-Петросян Н. О. Многоосновные кислоты в растворах: возможна ли инверсия констант ступенчатой диссоциации? Укр. хим. журнал. 2019. Т. 85. № 5. С. 3–45.

Допоміжна література

1. Kütt A., Selberg S., Kaljurand I., Tshepelevitsh S., Heering A., Darnell A., Kaupmees K., Piirsalu M., Leito I. p*K*_a values in organic chemistry – Making maximum use of the available data. *Tetrahedron Lett.* 2018. V. 59. P. 3738-3748.
2. Wang Z., Gao F., Ji P., Cheng J.-P.. Unexpected solvation-stabilisation of ions in a protic ionic liquid: insights disclosed by a bond energetic study. *Chem. Sci.* 2018. 9, 3538-3543.
3. Cox B.G. *Acids and Bases. Solvent Effects on Acid-Base Strength.* - Oxford: Oxford University Press. 2013.
4. Reichardt, C. Solvation Effects in Organic Chemistry: A Short Historical Overview. *J. Org. Chem.* 2022. V. 87. P.1616–1629.