

Аннотации рабочих программ по дисциплинам для направления подготовки 04.03.01 Химия

Аналитическая химия (физико-химические методы анализа)

1. Введение

Аналитическая химия - система знаний о веществе – его составе и строении.

Предмет и задачи аналитической химии, основные задачи современной анализа. Роль анализа в промышленности и обществе.

2. Теоретические основы физико-химических методов анализа

Характеристика и классификация физико-химических методов анализа. Предел обнаружения и погрешность методов.

3. Хроматографические методы анализа:

Определение хроматографии, основные принципы метода, понятие о подвижной и неподвижной фазах. Классификация методов по агрегатному состоянию подвижной и неподвижной фаз, по механизму разделения, по технике выполнения. Основное уравнение хроматографии. Селективность и эффективность хроматографического разделения. Концепция теоретических тарелок. Кинетическая теория. Разрешение как фактор оптимизации хроматографического процесса. Способы детектирования.

Качественный и количественный хроматографический анализ. Применение хроматографических методов для разделения и определения неорганических и органических соединений: газовая хроматография, жидкостная, жидкостно-твердофазная.

4. Электрохимические методы анализа

Электрохимические ячейки. Индикаторный электрод и электрод сравнения, классификация электродов. Равновесные и неравновесные электрохимические системы. Прямая потенциометрия и потенциометрическое титрование.

Вольтамперометрия: классификация вольтамперометрических методов, индикаторные электроды, преимущества и недостатки ртутного электрода, применение твердых электродов, разновидности метода. Явления, возникающие при протекании тока (омическое падение напряжения, концентрационная и кинетическая поляризация. Амперометрия. Кулонометрия и кондуктометрия.

5. Спектроскопические методы анализа.

Общая характеристика и классификация. Спектр электромагнитного излучения, спектроскопические методы в гамма-, рентгеновском, оптическом, микроволновом и радиочастотном диапазонах. Основные типы взаимодействия вещества с излучением: эмиссия (тепловая, люминесценция), поглощение, рассеяние. Место и роль спектроскопических методов в аналитической химии и химической анализе.

Молекулярная абсорбционная спектроскопия (спектрофотометрия): оптическая плотность растворов, закон Бугера- Ламберта- Бера. Основные причины отклонения от основного закона светопоглощения (инструментальные и физико-химические). Кинетические методы анализа.

Методы молекулярной оптической спектроскопии: абсорбционная в УФ-, ИК-, видимой областях, люминесценция, комбинационное рассеяние, поляриметрия.

Методы атомной оптической спектроскопии, атомной рентгеновской спектроскопии. Масс-спектрометрия. Резонансные методы. Активационный анализ. Дистанционные методы.

6. Автоматизация анализа и использование ЭВМ в аналитической химии. Проточно-инжекционный анализ.

Использование ЭВМ в аналитической химии. Сбор, первичная и конечная обработка результатов анализа. Управление аналитическими приборами, создание гибридных устройств анализатор-ЭВМ.

7. Пробоотбор и пробоподготовка.

Представительность пробы, факторы, обуславливающие размер и способ отбора представительной пробы. Отбор проб гомогенного и гетерогенного состава.

Основные способы перевода пробы в форму, необходимую для данного вида анализа.

8. Основные объекты анализа.

Объекты окружающей среды. Биологические и медицинские объекты. Геологические объекты. Производственный анализ. Продукты металлургической промышленности. Контроль металлургических производств. Атомные материалы. Неорганические соединения. Вещества особой чистоты.

Физическая химия

1. Введение

Предмет и составные части физической химии. Основные этапы развития физической химии как современной теоретической основы химии. Методы термодинамики, кинетики и квантовой химии в описании химических явлений. Роль полуэмпирических закономерностей в теории химии. Основные задачи современной физической химии.

2. Основы химической термодинамики

Макроскопические системы и термодинамический метод их описания. Обратимые и необратимые процессы и их свойства. Уравнения состояния. Теплота и работы различного рода. Работа расширения для различных процессов. Первый закон термодинамики. Закон Гесса и его следствия. Стандартные состояния и стандартные теплоты химических реакций. Формула Кирхгофа. Второй закон термодинамики и его различные формулировки. Теорема Карно-Клаузиуса. Энтропия как функция состояния. Изменение энтропии при различных процессах. Изменение энтропии изолированных процессов и направление процесса. Химический потенциал идеального и неидеального газов. Связь между калорическими и термодинамическими переменными. Уравнение Гиббса-Гельмгольца и его роль в химии. Фундаментальные уравнения Гиббса. Характеристические функции. Энергия Гельмгольца, энергия Гиббса и их свойства. Уравнения Максвелла.

3. Растворы. Фазовые равновесия

Растворы различных классов. Основные направления развития теории растворов. Термодинамические свойства идеальных газовых смесей и жидких растворов. Парциальные молярные величины и их определение из опытных данных для бинарных систем. Уравнение Гиббса-Дюгема. Закон Рауля. Коллигативные свойства растворов. Изменение температуры затвердевания различных растворов. Зонная плавка и ее практические применения. Осмотические явления. Неидеальные растворы и их свойства. Метод активностей. Коэффициенты активности и их определение по парциальным давлениям компонент. свойства. Термодинамическая теория фазовых равновесий. Гетерогенные системы. Правило фаз Гиббса. Однокомпонентные системы. Уравнения Клапейрона-Клаузиуса и Эренфеста. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем и их анализ на основе правила фаз. Законы Гиббса-Коновалова. Трехкомпонентные системы. Треугольник Гиббса-Розебома. Диаграммы плавкости и растворимости трехкомпонентных систем.

4. Электрохимия

Химический и электрохимический способы осуществления окислительно-восстановительных реакций. Понятие электрохимического потенциала. Основные допущения теории Дебая —

Гюккеля. Современные представления о растворах электролитов. Неравновесные явления в растворах электролитов. Формула Нернста — Эйнштейна. Диффузионный потенциал. Физические основы теории Дебая — Гюккеля — Онзагера; Электрохимический потенциал, его химическая и электростатическая составляющие. Классификация электродов и электрохимических цепей. Двойной электрический слой и его роль в кинетике электродных процессов. Теория Гуи — Чапмена — Грэма. Стадии электродного процесса. Механизмы массопереноса. Три основных уравнения диффузионной кинетики и общий подход к решению ее задач. Полярография. Уравнение для тока в теории замедленного разряда; ток обмена и перенапряжение. Сопряженные реакции в электрохимической теории коррозии. Методы защиты металлов от коррозии. Химические источники тока; их виды и основные характеристики.

5. Химические и адсорбционные равновесия

Закон действия масс. Изотерма Вант-Гоффа. Изменение энергии Гиббса и энергии Гельмгольца при химической реакции. Расчеты констант равновесия химических реакций. Расчеты выхода продуктов химических реакций различных типов. Уравнения изобары и изохоры реакции. Гетерогенные химические равновесия и особенности их термодинамического описания. Явления адсорбции. Мономолекулярная и полимолекулярная адсорбция. Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Генри. Уравнение Ленгмюра. Полимолекулярная адсорбция, ее приближенное описание методом Брунауэра-Эмета-Теллера (БЭТ). Адсорбция из растворов.

6. Химическая кинетика.

Кинетический закон действия масс и область его применимости. Зависимость константы скорости от температуры. Уравнение Аррениуса. Необратимые реакции первого, второго и третьего порядков. Методы определения порядка реакции и вида кинетического уравнения. Сложные реакции. Принцип независимости элементарных стадий. Принцип квазистационарности Боденштейна и область его применимости. Цепные реакции. Неразветвленных и разветвленные цепные реакции. Полуостров воспламенения. Тепловой взрыв. Реакции в потоке. Макрокинетика. Роль диффузии в кинетике гетерогенных реакций. Элементарные акты химических реакций. Поверхность потенциальной энергии для взаимодействия трех атомов водорода. Метод переходного состояния (активированного комплекса). Статистический расчет константы скорости. Термодинамический аспект теории активированного комплекса. Энтропия активации. Теория соударений в химической кинетике. Моно-, би- и тримолекулярные реакции. Сопоставление результатов теории соударений и теории активированного комплекса. Реакции в растворах. "Клеточный эффект". Фотохимические реакции. Эксимеры, эксиплексы. Квантовый выход. Закон фотохимической эквивалентности Эйнштейна.

7. Катализ

Основные промышленные каталитические процессы. Классификация реакций кислотного-основного типа. Кинетика и механизм реакций специфического кислотного катализа. Функции кислотности Гаммета. Кинетика и механизм реакций общего кислотного катализа. Уравнение Бренстеда. Корреляционные уравнения для энергий активации и теплот реакций. Специфический и общий основной катализ, нуклеофильный и электрофильный катализ. Катализ комплексными соединениями переходных металлов. Ферментативный катализ. Гетерогенный катализ. Определение скорости гетерогенной каталитической реакции. Активность и селективность катализаторов. Роль адсорбции в кинетике гетерогенных каталитических реакций. Энергия активации каталитических реакций. Теория мультиплетов Баландина. Теория активных ансамблей Кобозева.

8. Элементы статистической термодинамики.

Механическое описание молекулярной системы. Функция распределения Максвелла — Больцмана. Ансамбли Гиббса. Основные постулаты статистической термодинамики. Сумма по состояниям как статистическая характеристическая функция. Статистические

выражения для основных термодинамических функций. Составляющие энтропии, внутренней энергии и теплоемкости, обусловленные поступательным движением. Формула Закура-Тетроде. Вращательная сумма по состояниям для жесткого ротатора. Орто- и параводород и их термодинамические свойства. Колебательная сумма по состояниям для гармонического осциллятора. Межмолекулярные взаимодействия. Статистическая термодинамика реальных систем. Точечные дефекты кристаллических решеток, вычисление суммы по состояниям для кристаллов с различными видами точечных дефектов. Нестехиометрические соединения и их термодинамическое описание.

9. Элементы линейной термодинамики необратимых процессов.

Потоки. Силы. Феноменологические законы для скоростей процессов. Открытые и закрытые системы. Необратимые процессы и производство энтропии. Стационарное состояние системы и теорема Пригожина. Соотношения взаимности Онзагера и их применения в линейной термодинамике необратимых процессов. Термодиффузия. Уравнение Чепмена-Энскога.

Коллоидная химия

1. Введение

Основные понятия коллоидной химии, объекты и цели изучения. Различные типы классификации дисперсных систем. Взаимосвязь коллоидной химии с другими химическими дисциплинами. Главные новые направления и объекты коллоидной химии.

2. Термодинамика и строение поверхностного слоя

Общие термодинамические параметры поверхностного слоя. Адсорбция и поверхностное натяжение. Образование и строение двойного электрического слоя. Адгезия, смачивание и растекание жидкостей. Дисперсность и термодинамические свойства тел. Энергетика диспергирования и конденсации.

3. Адсорбционные процессы

Адсорбция газов и паров на однородной поверхности. Адсорбция газов и паров на пористых телах. Адсорбция из растворов; ионный обмен. Адсорбция поверхностно-активных веществ и состояние поверхностных пленок. Хроматография. Методы измерения адсорбции.

4. Методы исследования дисперсных систем

Особенности оптических свойств дисперсных систем и общие оптические методы анализа поверхностных слоев и дисперсности. Рассеяние света ультрамикрорегетерогенными системами и методы исследования, основанные на рассеянии света. Методы измерения удельной поверхности. Изучение пористой структуры сорбентов. Современное представление о гелях и основные понятия нанохимии.

Высокомолекулярные соединения

1. Введение

История развития химии и физики высокомолекулярных соединений. Эволюция представлений о полимерах и макромолекулах. Основные тенденции развития химии и физики ВМС. Значение полимеров в развитии техники и технологии.

2. Классификация полимеров

Основные понятия полимерной химии: мономер, олигомер, полимер, сополимер, макромолекула, полимерная цепь, степень полимеризации, элементарное звено. Основные отличия ВМС от низкомолекулярных. Понятие о средней молекулярной массе полимера, полидисперсность полимеров.

Основы классификации ВМС по происхождению (природные, искусственные, синтетические); по строению скелета полимерной цепи (гомоцепные, гетероцепные); по химическому составу (органические, элементоорганические, неорганические); по строению макромолекул (линейные, разветвленные, сетчатые плоскостные и сетчатые пространственные).

Номенклатура полимеров. Общая характеристика методов синтеза ВМС из мономеров, олигомеров, полимеров. Полимеризация как цепной процесс, отдельные стадии процесса. Типы активных центров, ведущих цепь. Типы полимеризационных процессов (радикальные, ионные, ионно-координационные).

3. Закономерности реакций радикальной полимеризации и сополимеризации

Радикальная полимеризация. Строение радикалов и их активность. Инициирование радикальной полимеризации: термическое, фотохимическое, радиационное, электрохимическое, химическое. Инициаторы и иницирующие системы. Эффективность инициирования.

Рост цепи. Термодинамическая вероятность роста цепи. Факторы, определяющие скорость роста: активность мономера и активность растущего радикала. Связь строения и реакционной способности мономеров. Возможности регулирования стадии роста.

Обрыв цепи. Рекомбинация и диспропорционирование – основные типы реакций обрыва. Реакции передачи цепи: на мономер, макромолекулу, другое вещество (растворители, регуляторы, ингибиторы, примеси и т.д.).

Кинетика радикальной полимеризации. Скорость инициирования, роста и обрыва цепей. Регуляторы молекулярной массы. Замедлители и ингибиторы радикальной полимеризации. Механизм ингибирования.

Методы проведения радикальной полимеризации: в массе, растворе, суспензии, эмульсии.

Радикальная сополимеризация. Элементарные акты сополимеризации. Дифференциальный и интегральный состав сополимера. Статистические, регулярные и блок-сополимеры. Значение сополимеризации как метода получения полимеров с заданными свойствами.

4. Закономерности ионной и стереоспецифической полимеризации

Катионная и анионная полимеризация. Катализаторы ионной полимеризации. Ионы и ионные пары, их поведение в растворе. Строение мономера и его склонность к ионной полимеризации.

Катионная полимеризация. Катализаторы и сокатализаторы. Образование активного центра, рост и обрыв цепи. Общая скорость процесса катионной полимеризации.

Анионная полимеризация. Типы катализаторов для нее. Образование активного центра, рост цепи. Влияние противоиона, природы растворителя на рост цепи и микроструктуру макромолекулы. Обрыв цепи. «Живые» полимеры.

Ионно-координационная полимеризация. Стереоспецифические катализаторы и стереорегулярные полимеры. Основные условия их получения. Алфиновые катализаторы и общая схема процесса полимеризации в их присутствии. Полимеризация на катализаторах типа Циглера-Натта.

5. Закономерности процессов поликонденсации

Типы химических реакций, используемых при поликонденсации. Виды поликонденсации. Равновесная и неравновесная поликонденсация. Теоретическая и практическая функциональность мономеров. Ионный характер процесса поликонденсации. Катализаторы поликонденсации.

Равновесная поликонденсация и ее механизм. Изменение молекулярной массы и молекулярно-массового распределения в процессе поликонденсации. Влияние различных факторов на процесс равновесной полимеризации. Способы проведения реакции: в расплаве (массе), растворе, твердой фазе.

Неравновесная поликонденсация. Основные особенности процесса. Способы проведения неравновесной поликонденсации. Механизм процесса поликонденсации.

Трехмерная поликонденсация и ее основные закономерности. Влияние функциональности исходных веществ. Особенности процессов отверждения олигомеров.

6. Химические превращения полимеров

Основные особенности реакций ВМС. Полимераналогичные превращения, макромолекулярные реакции. Реакции в цепях полимеров, приводящие к увеличению молекулярной массы. Блок-сополимеры, методы их получения. Привитые сополимеры. Общая характеристика образования сетчатых полимеров. Реакция сшивания с использованием свободнорадикальных реакций, реакций функциональных групп олигомеров между собой и функциональными группами отвердителей.

Деструкция полимеров, виды деструкции. Химическая деструкция. Деструкция под влиянием физических воздействий (термическая, термоокислительная, механо-, фото-, радиационная деструкция). Механизм процессов деструкции. Понятие о старении полимеров. Факторы, вызывающие старение. Изменение строения и свойств полимеров в процессе старения. Принципы ингибирования процессов старения полимеров.

Химическая технология

1. Введение

Химическая технология как система знаний, необходимых для раскрытия взаимосвязи между химией и технологией как наукой, для создания перспективных технологических схем получения материалов. Предмет и задачи химии. Основные задачи современной химической технологии.

2. Роль и масштабы использования химических процессов в различных сферах материального производства

Факторы необходимые для современного развития химической промышленности при возрастающем значении проблем ресурсо- и энергосбережения, а также обеспечения безопасности химических производств; их важность и взаимосвязь.

Характеристика и ресурсы природного минерального сырья, методы его добычи, обогащения и подготовки к переработке. Основные направления повышения эффективности использования сырьевых и энергетических ресурсов. Общие сведения об основных источниках промышленных отходов и выбросов, их воздействии на окружающую среду, основные направления решения проблемы утилизации твердых, жидких и газообразных отходов.

3. Приемы и операции реализации химико-технологических процессов

Понятие химико-технологического процесса. Основные определения (производительность, выход продукта, скорость реакции, степень превращения и т.д.). Процессы химической технологии, их классификация по элементарным технологическим приемам. Для механических процессов: перемещение, измельчение, дозирование; гидродинамических процессов: отстаивание, фильтрование, центрифугирование; тепловых процессов: нагревание, выпаривание, кристаллизация, сушка; массообменных процессов: экстракция, адсорбция, ректификация. Принципы составления материальных и энергетических балансов.

4. Технология неорганических веществ

Сырьевая база и основные технологические схемы химических производств минеральных кислот (серная, соляная, азотная, фосфорная, фтористоводородная кислоты), производство аммиака, простых и комплексных минеральных удобрений, соды, поташа,

электрохимическое производство хлора, каустической соды. Ознакомление с основными методами химической переработки минерального и техногенного сырья Мурманской области (концентратов апатито-нефелинового обогащения, титано-редкометаллических концентратов – лопарит, перовскит, а также отходов переработки медно-никелевых руд).

5. Переработка топлива

Энергетические и химико-технологические проблемы горючих ископаемых (уголь, нефть, сланцы, древесина). Химические и физические способы переработки твердого, жидкого и газообразного топлива. Важность усовершенствования процессов переработки с целью расширения сырьевой базы для производства органических веществ.

6. Технология органических веществ

Органический синтез как отрасль промышленности. Производство метанола, этанола, ацетилена, ацетальдегида, уксусной кислоты, анилина, целлюлозы. Наиболее известные мономеры (изопрен, бутадиен 1,3, стирол) для производства каучука, высокомолекулярных соединений. Циклические соединения (бензол, толуол) способы их получения и применения.

Методы расчета ионных равновесий

1. Химические равновесия в растворах электролитов

Сильные и слабые электролиты. Общие принципы расчета химических равновесий. Условие материального баланса. Принцип электронейтральности. Закон действия масс. Основные теории кислот и оснований. Протолитическая теория кислот и оснований. Ионное произведение воды. Сила кислот и оснований. Нивелирующий и дифференцирующий эффекты растворителей. Расчет pH в кислотно-основных системах. Расчет pH сильных кислот и оснований. Расчет pH слабых одноосновных кислот и одноосновных оснований. Вычисление pH растворов солей. Смесь сильной и слабой кислот. Расчет pH слабых многоосновных кислот и многоосновных оснований. Буферные растворы. Расчет pH буферных растворов.

2. Равновесия в гетерогенных системах

Произведение растворимости. Образование осадков. Влияние pH на осаждение и растворение гидроксидов. Влияние гидролиза ионов малорастворимой соли на осаждение и растворение осадков. Дробное осаждение.

3. Комплексные соединения

Ступенчатое комплексообразование в растворе. Расчет равновесных концентраций в растворах комплексных солей. Концентрационно-логарифмические диаграммы. Растворение осадков.

4. Окислительно-восстановительные равновесия

Общие положения. Константа равновесия окислительно-восстановительной реакции. Влияние комплексообразования на окислительно-восстановительные равновесия.

Статистика в химических процессах

В процессе изучения дисциплины обучающиеся знакомятся с методами обработки экспериментальных данных и планирования экспериментов для получения математических моделей изучаемых химических процессов и их оптимизации.

Обогатимость руд и техногенных отходов

1. Введение

Актуальность комплексного использования невозобновляемых природных минеральных ресурсов: перерабатываемых руд, «хвостов» обогащения и отвальных шлаков пирометаллургии с выделением всех полезных продуктов. Минерально-сырьевая база Кольского региона, России и мира.

2. Рудоподготовка и методы обогащения

Дробление, грохочение, тонкое измельчение и классификация измельченной руды. Необходимая полнота раскрытия извлекаемых минералов перед обогащением.

Выбор оптимального метода обогащения на основе анализа физико-химических характеристик извлекаемых минералов.

Способы повышения контрастности свойств минералов при обогащении труднообогатимых руд. Гравитационные, магнитные и электромагнитные методы обогащения сильно- и слабомагнитных минералов. Флотация, её преимущества и недостатки. Электросепарация. Комбинированные схемы и режимы обогащения сложных минеральных комплексов.

Спецметоды обогащения руд. Обогащение «лежалых хвостов». Комплексное обогащение поликомпонентных руд на примере ОАО «Ковдорский ГОК» и ОАО «Апатит».

3. Обезвоживание продуктов обогащения.

Виды влаги обезвоживаемых суспензий. Сгущение. Дренирование. Фильтрование и сушка. Пути снижения расхода топлива на сушку концентратов.

4. Рациональная организация процессов рудоподготовки, обогащения, обезвоживания концентратов, их отдельного складирования и погрузки с использованием компьютерной техники.

Анализ удельных затрат в цикле рудоподготовки на единицу вновь образованной поверхности. Усреднение качества руды перед обогащением на стадии проектирования и в процессе текущей переработки руды. Расчет технологических показателей обогащения: степени дробления, выхода продукта обогащения, извлечение полезного компонента и степени концентрации минералов на различных стадиях процесса обогащения. Комплексное обогащение руд с предварительным маркетинговым анализом реализации получаемых концентратов.

5. Новые направления в развитии технологии обогащения руд, автоматизации процесса и разработки современного обогатительного оборудования (в том числе мобильных комплексов).

Обогатимость сложных минеральных комплексов

1. Введение

Современная тенденция ухудшения качества добываемых руд с одновременным повышением требований к концентратам по содержанию полезного компонента и уровню лимитирующих вредных примесей.

Необходимость повышения комплексности использования перерабатываемых руд и вовлечение в переработку «лежалых хвостов» обогащения прошлых лет.

2. Теоретическая часть

Легко- и труднообогатимые руды. Направленное изменение свойств извлекаемых из руды минералов при обогащении труднообогатимых руд. Технологические приёмы разделения сложных минеральных комплексов: обесшламливание, обжиг, размагничивание (для сильномагнитных минералов), избирательная сорбция, введение в схему обогащения гидро- и пирометаллургических операций и др. Усреднение сильноконтрастной руды и концентратов для стабилизации процесса обогащения и достижение высокого качества концентрата.

3. Рудоподготовка

Дробление, грохочение, тонкое измельчение и классификация измельченной руды. Рациональная технология рудоподготовки с целью снижения энергозатрат на достижение необходимой полноты раскрытия извлекаемых минералов.

4. Методы обогащения

Гравитационное обогащение измельченной массы руды и его разновидности. Магнитные способы обогащения сильномагнитных и слабомагнитных минералов. Сухая и мокрая магнитная сепарация. Магнитно-гравитационная сепарация, её преимущества и недостатки. Флотационное обогащение. Электросепарация. Комбинированные схемы и режимы обогащения. Особенности обогащения «лежалых хвостов». Спецметоды обогащения.

5. Обезвоживание продуктов обогащения

Разновидности влаги и их связь с поверхностью минерала в обезвоживаемых концентратах. Сгущение. Дренажное. Фильтрование и сушка. Методы и приёмы снижения расхода топлива на сушку концентратов.

6. Анализ результатов обогащения и новые разработки в цикле обогащения

Расчет технологических показателей обогащения. Современные технологические решения в области обогащения. Мобильные обогатительные комплексы (стационарные и передвижные).

Иностранный язык в профессиональной сфере

В процессе преподавания дисциплины обучающиеся приобретают практическое владение разговорно-бытовой речью и языком специальности для активного применения иностранного языка, как в повседневном, так и в профессиональном общении.

Физическая культура

Место физической культуры в общекультурной и профессиональной подготовке, социально-биологические основы физической культуры; основы здорового образа и стиля жизни; оздоровительные системы и спорт (теория, методика и практика); профессионально-прикладная физическая подготовка.

Квантовая механика и квантовая химия

1. Введение

Квантовая химия как теоретическая основа представлений современной химии. Причины и предпосылки ее возникновения

2. Общие принципы

Постулаты квантовой механики. Временное и стационарное уравнения Шрёдингера для атомов и молекул. Адиабатическое приближение. Уравнение Шредингера, движение электрона в кулоновском поле ядра. Радиальное уравнение Шредингера

Основные методы приближенного решения уравнения Шредингера. Теория возмущений и вариационный метод Ритца.

Электронное строение атома. Спин электрона. Атом в магнитном поле.

3. Методы квантовой химии

ЭПР. Вырождение волновых функций. Гамильтониан для атома гелия. Одноэлектронное приближение. Метод самосогласованного поля Хартри.

Принцип Паули и определители Слэтера. Метод Хартри-Фока. Орбитальные энергии и теорема Купманса. Электронная корреляция, методы ее учета.

Описание межмолекулярных взаимодействий в рамках квантовой химии. Составляющие межмолекулярных взаимодействий.

Периодическая система элементов Д. И. Менделеева с позиций квантовой химии.

Теория химической связи. Приближение Борна—Оппенгеймера. Метод валентных связей. расчет молекулы водорода методом валентных связей

Метод молекулярных орбиталей. уравнения Рутаана. Расчет молекулы водорода по методу МО ЛКАО.

Молекулярные орбитали гомоядерных двухатомных молекул

4. Симметрия ядерной конфигурации

Группы симметрии ядерной конфигурации. Представления групп симметрии.

Симметрия и свойства молекул. Классификация состояний молекул и классификация орбиталей по симметрии. σ - и π -Орбитали, π -электронное приближение. Различные типы орбиталей (локализованные орбитали, орбитали симметрии и т.п.). Гибридизация и гибридные орбитали. Представления об атомах в молекуле.

5. Полуэмпирические методы квантовой химии

Основные принципы перехода к полуэмпирическим методам. Необходимость полуэмпирических методов. Методы на основе нулевого дифференциального перекрывания.

Расширенный и простой методы Хюккеля. Правило Хюккеля ($4n+2$). Графический метод Фроста.

Физико-химические основы металлургических процессов

1. Методы физико-химических исследований

Методы определения физико-химических характеристик материалов и процессов; определение теплофизических характеристик; измерение поверхностного натяжения, смачивания, удельной поверхности, пористости; методы определения физических свойств расплавов; метод ЭДС и анализ газов в материалах.

2. Теория гомогенных и гетерогенных процессов

Термодинамика и кинетика превращений в гомогенных и гетерогенных системах; процессы на межфазных границах; зародышеобразование; строение и физико-химические свойства металлических и ионных расплавов.

3. Коррозия и защита металлов

Закономерности процессов электрохимической и газовой коррозии металлических материалов; выбор методов защиты от коррозии; определение коррозионной стойкости металлов и сплавов; долгосрочный прогноз их коррозионного поведения.

4. Физико-химия неорганических материалов

Теория растворов; законы и механизмы диффузии; термодинамика и кинетика взаимодействий и физико-химические модели систем и процессов; природа реакционной способности веществ; теория электрохимических процессов.

5. Процессы получения и обработки материалов

Основные технологии производства металлов и соединений; стадии передела: пирометаллургическое вскрытие рудных концентратов, гидрометаллургический аффинаж, электролитическое рафинирование в водных растворах и расплавах. Средства и задачи обеспечения качества металлопродукции. Порошковая металлургия и производство композитов. Получение неорганических неметаллических материалов.

Гидрометаллургические процессы

Дисциплина «Гидрометаллургические процессы» посвящена изучению типичных технологических операций, используемых в схемах гидрометаллургического производства цветных металлов, с позиции современной физической химии.

Цель данного курса является: освоение основ теории гидрометаллургических процессов, научно обоснованное управление конкретной операцией, обеспечивающее быстрое и полное завершение процесса в требуемом направлении, чтобы получить продукцию заданного качества.

Содержание курса можно разделить на три основных раздела: теоретические основы гидрометаллургии; основные переделы гидрометаллургии; применение гидрометаллургии.

Курс знакомит студентов с самыми современными гидрометаллургическими производствами важнейших цветных, редких и благородных металлов.

Технологическая минералогия

Технологическая минералогия преподается как наука, развивающаяся на стыке минералогии и технологии в тесном сотрудничестве минералогов и технологов, что обеспечивает комплексность исследований на всех стадиях поисков, разведки, изучения, освоения месторождения, включая добычу, обогащение и использование минерального

сырья. Основной лекционный объем информации дается студентам в виде компьютерной презентации. На практических занятиях студенты усваивают основные приемы выделения мономинеральных фракций, в процессе которых происходит знакомство с главными породообразующими и рудообразующими минералами. Особенностью курса является углубленное ознакомление с методами микроскопических исследований в отраженном свете. Началу практических занятий предшествует лекция, на которых студенты получают информацию о строении и свойствах минералов.

Электрохимическая кинетика

1. Введение

Предмет электрохимической кинетики. Практическое значение курса.

2. Двойной электрический слой

Строение двойного электрического слоя. Поляризуемые и неполяризуемые электроды. Электрокапиллярные явления. Емкость двойного электрического слоя. Электрокапиллярные явления на твердых электродах. Влияние адсорбции на электрокапиллярную кривую. Потенциал точки нулевого заряда. Электрокинетические явления.

3. Электрохимическая кинетика

Скорость электрохимической реакции. Кинетический вывод выражения для равновесного потенциала. Поляризационные кривые. Уравнение частной поляризационной кривой. Зависимость между скоростью электродной реакции и потенциалом вблизи равновесия. Ток обмена. Температурная зависимость скорости электродной реакции и энергия активации. Катодное восстановление водорода. Теория замедленной рекомбинации. Катодное восстановление водорода. Теория замедленного разряда. Стадийное протекание электродных реакций.

4. Диффузионная кинетика

Диффузионная кинетика: характер поляризационной кривой. Скорость диффузии в при электродном слое. Предельный ток. Катодное восстановление катионов (полная поляризационная кривая). Концентрационная поляризация. Связь между плотностью тока и предельным током. Анодное окисление анионов (полная поляризационная кривая). Анодное растворение металлов.

5. Катодное восстановление металлов.

Условия возникновения новой фазы. Рост металлического кристалла на катоде. Влияние адсорбции на рост кристалла. Поляризация при катодном восстановлении металла. Совместное восстановление катионов. Строение поликристаллического осадка на катоде.

6. Электролиз.

Течение электролиза. Концентрационная поляризация. Напряжение разложения и химическая поляризация. Остаточный ток. Рассеивающая способность электролита.

7. Самопроизвольное течение электродных процессов.

Работа гальванического элемента. Электрохимические источники тока. Коррозия металлов.

Процессы и аппараты химических производств

Дисциплина «Процессы и аппараты химических производств» является общепромышленной дисциплиной, формирующей у студентов знания, необходимые для изучения таких курсов, как «Химическая технология и моделирование технологических процессов», «Математические модели технологических процессов и программные

продукты для их расчета», «Гидрометаллургические процессы», «Физико-химические основы металлургических процессов» и ряда других дисциплин, а также для решения технологических задач, связанных с разработкой и проектированием технологических схем при выполнении дипломного проекта.

Основной целью курса «Процессы и аппараты химических производств» является формирование у студентов основ мышления в области химической технологии, раскрытие взаимосвязи между химией, технологией и аппаратурным оформлением технологического процесса, формирование навыков создания аппаратурно-технологических схем. Знания, полученные при изучении курса «Процессы и аппараты химических производств» необходимы химику-технологу для проведения технологических расчетов, расчета основных процессов и аппаратов химической технологии.

Основными задачами курса «Процессы и аппараты химических производств» являются изучение:

- теории основных технологических процессов;
- принципов устройства и работы аппаратов и машин для осуществления технологических процессов;
- методов расчета процессов химической технологии и основных характеристик аппаратов и машин;
- проблем и закономерностей перехода от лабораторных процессов и моделей к промышленным процессам и аппаратам (моделирование);
- а также формирование практических навыков решения конкретных технических задач и умения проектировать типовые технологические схемы химико-технологических процессов.

Моделирование химических процессов

Дисциплина «Моделирование химических процессов» является общеинженерной дисциплиной, формирующей у студентов знания, необходимые для изучения таких курсов, как «Процессы и аппараты химических производств», «Химическая технология и моделирование технологических процессов», «Гидрометаллургические процессы», «Физико-химические основы металлургических процессов» и ряда других дисциплин, а также для решения технологических задач, связанных с разработкой и проектированием технологических схем при выполнении дипломного проекта.

Основной целью курса «Моделирование химических процессов» является

- изучение основ теории и методы расчета гидромеханических, тепловых и массообменных процессов, устройство, принцип действия и основные типы аппаратов для проведения гидромеханических, тепловых и массообменных процессов.
- изучение проблем и закономерностей перехода от лабораторных процессов и моделей к промышленным процессам и аппаратам;
- формирование практических навыков решения конкретных технических задач и умения проектировать типовые технологические схемы химико-технологических процессов.
- освоение навыками применения методов математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования в инженерной и научной деятельности;
- применение навыков работы с компьютерами в области профессиональной деятельности.

Физико-химическая механика дисперсных систем

1. Введение

Физико-химическая механика дисперсных систем как самостоятельный раздел коллоидной химии, изучающий закономерности структурообразования в дисперсных системах, механические свойства структурированных систем с особым вниманием к разнообразным физико-химическим процессам на межфазовых границах. Предмет и основные задачи физико-химической механики дисперсных систем. Дисперсные системы, их общая классификация и свойства. Поверхностные явления в дисперсных системах. Поверхностная энергия и ее природа.

2. Реологический метод исследования структуры дисперсных систем.

Моделирование реологических свойств тел. Классификации дисперсных систем по структурно-механическим свойствам. Вязкость жидких агрегативно устойчивых дисперсных систем. Реологические свойства структурированных жидкостей. Реологические свойства твердообразных систем. Свойства глинистых минералов как природных дисперсных систем. Образование структур при твердении минеральных вяжущих материалов. Композиционные материалы.

3. Эффект Ребиндера.

Эффект Ребиндера. Структурно-механические свойства кристаллов. Теоретическая и реальная прочность твердых тел. Роль реальной структуры твердого тела и внешних условий в проявлении эффектов адсорбционного влияния на механические свойства твердых тел. Эффект адсорбционного понижения прочности в металлических системах и условия его проявления.

Влияние органических поверхностно-активных веществ на механические свойства металлов. Пластифицирование металлов. Адсорбционное понижение прочности неметаллов. Процессы диспергирования в природе и технике.

4. Основы механохимии.

Диспергирование и механоактивация твердых тел. Физико-химические явления, сопровождающие тонкое диспергирование и механоактивацию твердых тел. Аппараты для диспергирования и механоактивации твердых тел. Основные закономерности механоактивации минералов. Получение нанокристаллических порошков физическими и химическими методами.

Физико-химическая механика и механохимия

1. Введение

Предмет и основные задачи физико-химической механики и механохимии. Дисперсные системы, их общая классификация и свойства. Поверхностные явления в дисперсных системах. Поверхностная энергия и ее природа. Уравнение Лапласа и капиллярные эффекты. Уравнение Томсона (Кельвина), пересыщение и зародышеобразование.

2. Основы реологии.

Единый подход к описанию механического воздействия на твердые и жидкие тела. Модели упругого, вязкого и пластичного твердого тела. Модель Максвелла и время релаксации механических напряжений. Модель Кельвина и время релаксации деформации

твердообразных тел. Модели описания механического поведения жидкостей и твердых тел.

3. Эффект Ребиндера и его объяснение.

Роль поверхностно-активных веществ в деформации и разрушении твердых тел и диспергировании жидкостей. Эффект адсорбционного понижения прочности в металлических системах и условия его проявления.

Влияние органических поверхностно-активных веществ на механические свойства металлов. Пластифицирование металлов. Адсорбционное понижение прочности неметаллов. Процессы диспергирования в природе и технике.

4. Основы механохимии.

Диспергирование и механоактивация твердых тел. Физико-химические явления, сопровождающие тонкое диспергирование и механоактивацию твердых тел. Аппараты для диспергирования и механоактивации твердых тел. Основные закономерности механоактивации минералов. Получение нанокристаллических порошков физическими и химическими методами. Механохимические реакции в неорганических системах.

Неравновесная термодинамика

1. **Введение** в теорию необратимых процессов. Теория необратимых процессов. Понятие о сопряженных процессах. Методы изучения необратимых процессов.

2. **Общие принципы.** Псевдотермостатическая теория, ее недостатки. Теория Онзагера. Понятие силы (средства) и потоков. Линейный закон (феноменологический закон). Теорема Онзагера, соотношение взаимности.

3. **Основные понятия и определения** термодинамики неравновесных (необратимых) процессов. Однородное, стационарное, неоднородное и нестационарное состояние неравновесной системы. Условие устойчивого равновесия. Положительные и отрицательные самопроизвольные процессы. Равновесные процессы. Некомпенсированная работа. Диссипация. Время установления локального равновесия. Типы неравновесных термодинамических систем.

4. **Обобщенная координата, сила, работа.** Полезная работа. Виды работ. Теплота диссипации. Первый и второй законы термодинамики для закрытых систем при протекании равновесных и неравновесных процессов.

5. **Время** в неравновесной термодинамике. Изменение энтропии во времени в стационарном состоянии. Локальная функция диссипации и локальная скорость возникновения энтропии, связь между ними. Соотношение де Донде. Взаимосвязь потоков и сил. Самопроизвольные и вынужденные потоки. Эффект увлечения.

6. **Основные законы и принципы неравновесной термодинамики.** Принцип Кюри. Основные постулаты линейной термодинамики. Обобщенная термодинамика неравновесных процессов. Неравновесная термодинамика граничных условий.

Свойства функций диссипаций. Теорема Глансдорфа-Пригожина. Применение принципа Ле-Шателье к различным состояниям системы.

7. **Прикладные аспекты неравновесной термодинамики.** Способы вычисления термодинамических сил. Обобщенный закон сохранения субстанции Умова. Уравнение баланса энтропии для системы с неравновесным процессом при отсутствии внешних сил, химических реакции и конвекции.

Поток энтропии, функция диссипации и термодинамические силы в уравнении баланса энтропии. Общий алгоритм расчета изменения энтропии в неравновесном нестационарном процессе. Процесс теплообмена в непрерывной системе. Уравнение баланса для скалярной экстенсивной величины в прерывной системе.

Равновесные соотношения в отсутствие и при наличии внешних полей. Неравновесные процессы в однородных системах.

Неравновесные процессы в прерывных системах. Энтропия движущегося компонента. Классификация стационарных состояний. Закон распределения Нернста для равновесного и стационарного состояния.

8. **Диффузионные явления.** Уравнение стационарной и нестационарной изотермической диффузии. Обобщенный закон Фика.

Некоторые вопросы электрохимии с позиции неравновесной термодинамики. Эффективный коэффициент диффузии в изотермических условиях, его зависимость от абсолютной подвижности. Уравнение Нернста-Планка и Нернста-Эйнштейна.

Радиационная безопасность химических технологий

Цель преподавания дисциплины «Радиационная безопасность химических технологий» - дать знания по организационным, нормативно-правовым, методическим, техническим, научным подходам по обеспечению радиационной безопасности химических технологий, персонала, населения и окружающей среды; научить применять полученные знания на практике.

Программа раскрывает основные положения учения о радиоактивности и влиянии его на развитие науки. Дисциплина включает следующие разделы: физические основы радиоактивности, взаимодействие ионизирующего излучения с веществом, методы и средства обнаружения и измерения радиоактивных излучений, основы переработки радиоактивного минерального сырья, обращение с радиоактивными отходами, принципы защиты населения от радиационного воздействия, контроль состояния природной среды в районе расположения радиационных объектов, защита от ядерного и радиационного терроризма и др.

Знакомит с нормами и правилами работы с радиоактивными веществами, источниками ионизирующих излучений при разработке и изучении химических технологий, учит принципам обеспечения радиационной безопасности на основе знаний нормативно-правовой базы и владения методами радиационного контроля.

Методы квантово-химических расчетов

1. Введение

Методы квантово-химических расчетов как передовой и мощный инструмент на нынешнем этапе развития науки и техники, дающий возможность не только решать все новые исследовательские задачи, но и проектировать материалы, системы и наносистемы с необходимыми свойствами.

2. Общие принципы

Особенности поведения частиц в микромире, корпускулярно-волновой дуализм, принцип неопределенности Гейзенберга.

Основные постулаты квантовой механики, предпосылки их появления, несовместимость с принципами классической механики и согласованность обоих подходов в предельном случае.

Функция состояния системы, вероятностный характер получаемый с её помощью информации.

3. Основные подходы решения и упрощения квантово-химических задач

Основные подходы решения квантово-химических задач, включая молекулы химических соединений.

Общие принципы упрощения векового уравнения при решении квантово-химических задач.

Решение квантово-химических задач в π -приближении простым методом Хюккеля. Порядок химической связи и плотности зарядов на атомах.

Бионеорганическая химия

Бионеорганическая химия один из разделов химии, объединяющий в себе элементы неорганической, органической, биологической и медицинской химии, а также связанна с экологией.

Главная задача бионеорганической химии состоит в том, чтобы установить влияние неорганических соединений, в особенности координационных соединений металлов, на протекание важнейших биологических процессов, на саму жизнь растений, животных и человека.

Задачей дисциплины «Бионеорганическая химия является также формирование у студентов понимания законов природы и последствий их нарушения.

Бионеорганическая химия имеет свой предмет, объекты и методы исследования. Она изучает:

-роль элементов в живых организмах и растениях, причем в первую очередь изучается поведение десяти «металлов жизни» в живом организме. К ним относятся пять ионов с замкнутыми электронными оболочками (ионы натрия, калия, магния, кальция и цинка), четыре иона с недостроенной 3d- электронной оболочкой (ионы марганца, железа, кобальта и меди) и элемент, у которого могут появляться электроны на 4 d-оболочке (молибден).

-специфику взаимодействия неорганических веществ с органическими молекулами, которые входят в состав многообразных биологических структур, такими как белки, пептиды и аминокислоты, моно- и полисахариды, липиды, гетероциклы, нуклеотиды и нуклеиновые кислоты, порфирины, витамины, гормоны и др.;

-изменение структуры биомолекул в результате их комплексообразования (координации) с ионами металлов;

-кинетическую и термодинамическую устойчивость комплексов биолигандов с металлами;

- важнейшие свойства этих комплексов, которые в сочетании друг с другом приводят к биологическим функциям сложных биомолекул

- связь неорганической природы с органической.

В курсе «Бионеорганической химии» затрагиваются вопросы использования неорганических соединений в медицине и для борьбы с вредителями сельского хозяйства, а также роль микроорганизмов при разрушении различных руд и концентратов и очистке воды от загрязнений.

Функциональные наноматериалы: синтез, свойства и применение

1. Введение.

Взаимосвязь с другими современными научными дисциплинами – физической, общей, неорганической и аналитической химией, а также физикой и высшей математикой. Основные представления о наномире и наноразмерном состоянии вещества. Тип строения и свойства вещества в наномире. Супрамолекулярные структуры. Структурные особенности вещества в наномире. Роль поверхностной фазы у нанодисперсных частиц.

2. Общие свойства наноразмерных частиц и проявления размерных эффектов.

Свойства наноразмерных частиц и размерные эффекты. Некоторые особенности наномира. Слабые и сверхслабые воздействия в наномире. Особенности строения объектов наномира. Проблемы метрологии и контроля в наномире.

3. Нульмерные и одномерные объекты в нанотехнологии.

Общие представления о ридберговских атомах, как нульмерных объектах. Квантовые точки. Дефекты кристаллической структуры как нульразмерные объекты. Суператомы. Пылевая плазма. Нульмерные объекты как база квантового компьютера. Наноразмерные нити. Наноусы и вис커еры. Нановолокна. Фрактальные нити. Углеродные нанотрубки.

4. Микро- и нанопористые материалы с гетерокаркасными структурами и слоистые двойные гидроксиды.

Природные и синтетические микро- и нанопористые материалы с гетерокаркасными структурами. Области применения нанопористых материалов. Природные и синтетические слоистые двойные гидроксиды. Области применения СДГ. Методы синтеза СДГ.

5. Методы синтеза минералоподобных материалов на основе доступных природных концентратов

Исследование процессов получения прекурсоров из минеральных концентратов и синтеза на их основе нанопористых титаносиликатов. Разработка метода гидротермального синтеза титаносиликатов. Интеркалирование отдельных катионов в структуру протонированных минералоподобных материалов. Разработка технологической схемы гидротермального синтеза аналогов природных титаносиликатов.

Кольский химико-технологический кластер и его перспективы

1. Введение.

Взаимосвязь с другими современными научными дисциплинами – общей, неорганической химией, а также высшей математикой. Сырьевой и инновационный пути развития промышленности России и других стран.

2. Универсальная схема взаимодействия природы и промышленного производства.

Историческая эволюция парадигм использования минерального сырья для производства материалов. Развитие обогащательной и перерабатывающих отраслей промышленности в рамках крупных, средних и малых предприятий различных форм собственности.

3. Экономико-правовое и расчетное обоснование стратегий ресурсосбережения.

Достижение повышения эффективности использования сырьевых, энергетических и финансовых ресурсов, снижение уровня загрязнения окружающей среды и выявление резервов снижения затрат. Совокупные удельные издержки на прирост запасов, добычи, обогащения полезных ископаемых и утилизацию отходов недропользования и издержки на различные направления ресурсосбережения.

4. Формы реализации территориальных кластеров как новой формы развития химико-технологических производств.

Обеспечение благоприятной бизнес-среды для развития промышленных производств по переработке сырья и получению инновационных продуктов. Роль государственных органов в рамках общеевропейских технологических платформ и участие в создании кластеров различных организаций, включающих частных акционеров, профессиональные ассоциации, научные и вузовские организации.

5. Научные предпосылки и перспективы создания Кольского химико-технологического кластера для производства высокотехнологичных продуктов.

Сырьевая база Мурманской области и её доля в масштабе России. Разработка научных основ технологии комплексного сырья с учетом многокомпонентности сырья и высокой нестабильности конъюнктуры на потребительском рынке редких металлов и их соединений. Базовый пакет технологических схем переработки. Выбор рациональной технологии и необходимость создания легко перенастраиваемых гибких технологических линий. Перспективы развития КХТК.

Минерально-сырьевая база стратегических материалов России - состояние, пути освоения и развития

1. Современные мировые тенденции в состоянии запасов, производстве и потреблении минеральных ресурсов.

1.1. Состояние, проблемы и тенденции использования минерально-сырьевой базы России.

1.1.1. Минеральные ресурсы топливно-энергетического комплекса: нефть и конденсат, природный горючий газ, уголь, уран.

1.1.2. Минеральные ресурсы черной металлургии: железные руды, хромовые руды, марганцевые руды.

1.1.3. Минеральные ресурсы цветной металлургии: алюминиевое сырье, медь, никель, свинец, цинк, олово, вольфрам, молибден, титан, редкие и редкоземельные металлы.

1.1.4. Благородные металлы и алмазы: золото, серебро, металлы платиновой группы, алмазы.

1.1.5. Агрохимическое минеральное сырье: фосфаты, калийные соли.

1.1.6. Подземные воды: питьевые и технические подземные воды, минеральные подземные воды, промышленные подземные воды, теплоэнергетические подземные воды.

2. Пути освоения и перспективы развития минерально-сырьевого комплекса России.

2.1. Стратегические направления освоения и развития минерально-сырьевого комплекса России в ближней и долгосрочной перспективе.

2.2. Вклад минерально-сырьевого комплекса в производство валового регионального продукта федеральных округов и России.

2.3. Влияние минерально-сырьевой базы на социально-экономическое развитие важнейших минерально-сырьевых субъектов РФ.

2.4. Приоритетные центры экономического развития минерально-сырьевого комплекса России.