



**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ**

**Институт физической химии и электрохимии  
им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук  
(ИФХЭ РАН)**

**ПРИНЯТО**

Ученым советом ИФХЭ РАН  
Протокол № 3 от 20 марта 2012 г.  
Председатель Ученого совета

академик

 А.Ю. Цивадзе

Рабочая программа дисциплины

**ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ АДсорбционных явлений**

Специальность 01.04.07 - Физика конденсированного состояния

Москва

2012 год

## **1. Цели и задачи освоения дисциплины**

Цели дисциплины Формирование знаний и умений в области физической химии адсорбционных явлений.

Задачи дисциплины: Сформировать навыки и умения в области применения адсорбции и адсорбционной технологии; изучения физико-химических характеристик твердых веществ, современных методов расчета адсорбционных процессов.

## **2. Место дисциплины в структуре ООП**

Данная дисциплина относится к группе специальных дисциплин отрасли науки «Физико-математические науки» и научной специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния (Приказ Министерства образования и науки РФ от 25 февраля 2009 г. N 59 "Об утверждении Номенклатуры специальностей научных работников")».

Настоящая обязательная дисциплина «Физическая химия адсорбционных явлений» - модуль основной образовательной программы послевузовского профессионального образования (ООП ППО) по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

Обучающийся по данной дисциплине должен иметь фундаментальные представления о молекулярной физике, атомной физике, физике твердого тела и конденсированных фаз, термодинамике фазовых равновесий, физике адсорбционных явлений, спектральных методах анализа, в частности, о корпускулярно-волновом дуализме, распределении спектральных методов по энергиям и длинам волн, понятие о колебательных и электронных квантовых переходах, элементарные знания о природе спинового резонанса и методах ЯМР, физических основах масс-спектрометрии. Для обучения по данной дисциплине необходимо высшее образование с освоением курса по физической химии в части строения и методов исследования органических соединений, курса по аналитической химии в части инструментальных методов анализа, курса физики в части оптики и электромагнетизма.

## **3. Требования к результатам освоения дисциплины**

В рамках данной дисциплины углубляются и развиваются следующие компетенции:

- представление о месте физико-химических методов анализа пористой структуры твердых тел;
- знание физических основ межфазных адсорбционных равновесий, в том числе при высоких давлениях;
- знание физических основ кинетики и динамики адсорбционных процессов; знание физических основ энергетики адсорбции;
- знание физических основ формирования пористой структуры адсорбентов и основные структурно-энергетические характеристики;
- физических основ инструментальных методов анализа адсорбционных систем: ультрафиолетовой, инфракрасной спектроскопии, спектроскопии ядерного магнитного резонанса и масс-спектрометрии;
- умение проводить анализ структуры и состава соединений по данным УФ-, ИК-, ЯМР- и масс-спектрометрии.

#### 4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 зачетных единиц -180 часов.

##### 4.1 Структура дисциплины

№ п/п	Наименование дисциплины	Объем учебной работы (в часах)						Вид итогового контроля	
		Все го	Всего аудит.	Из аудиторных					Сам. работа
				Лекц	Лаб.	Прак.	КСР.		
1	Физическая химия адсорбционных явлений	180	140	36		104		40	зачет

##### 4.2 Содержание дисциплины

###### 4.2.1 Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/ п	Раздел Дисциплины	Виды учебной работы, и трудоемкость (в часах)				Самостоятельн ая работа
		Лек.	Лаб.	Пр.	КСР	



2	Удельная поверхность и пористость адсорбентов	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Физические основы метода.</li> <li>2. Модель физической адсорбции по Ленгмюру. Определение удельной поверхности адсорбента, числа адсорбционных центров.</li> <li>3. Модель физической адсорбции по БЭТ. Определение удельной поверхности адсорбента по БЭТ</li> <li>4. Теория объемного заполнения микропор Дубинина. Определение структурно-энергетических характеристик адсорбентов.</li> </ol>	<p>Лекции, семинары.</p> <p>Лекции, семинары.</p> <p>Лекции, семинары.</p>
3	Расчет адсорбционных равновесий	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Физические основы метода расчета адсорбционных равновесий на основе данных по уравнению Ленгмюра.</li> <li>2. Физические основы метода расчета адсорбционных равновесий на основе данных по БЭТ.</li> <li>3. Физические основы метода расчета адсорбционных равновесий на основе теории объемного заполнения микропор Дубинина.</li> <li>4. Примеры расчета адсорбционных равновесий на микропористых адсорбентах.</li> </ol>	<p>Лекции, семинары.</p> <p>Лекции, семинары.</p> <p>Лекции, семинары.</p> <p>Семинары.</p>
4	Адсорбционная осушка и очистка воздуха	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Физические основы адсорбционного метода осушки и очистки воздуха.</li> <li>2. Оптимизация физико-химических характеристики адсорбентов.</li> <li>3. Кинетические и динамические закономерности адсорбции воды и примесей из воздуха.</li> </ol>	<p>Лекции, семинары.</p> <p>Лекции, семинары.</p> <p>Лекции, семинары.</p>

		4. Расчет массогабаритных характеристик адсорберов.	Семинары.
5	Адсорбционные методы разделения газовых смесей	Физико-химические особенности высокоскоростных процессов разделения газовых смесей. Свойства молекулярно-ситовых адсорбентов. Примеры расчета процессов разделения газовых смесей.	Семинары.

### 5. Образовательные технологии

1. Активные образовательные технологии: лекции, семинары и практические работы.

2. Сопровождение лекций визуальным материалом в виде слайдов, подготовленных с использованием современных компьютерных технологий (программный пакет презентаций Microsoft Office Powerpoint), проецируемых на экран с помощью видеопроектора, а компьютерных моделей адсорбционных процессов

3. Проведение практических работ в научной лаборатории, участие обучаемых в научной работе и выполнении исследовательских проектов.

4. Использование специального программного обеспечения и интернет-ресурсов для обучения в ходе практических и самостоятельных работ.

### 6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы аспирантов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

Виды самостоятельной работы: в домашних условиях, в читальном зале библиотеки, на компьютерах с доступом к базам данных и ресурсам Интернет, в лабораториях с доступом к лабораторному оборудованию и приборам.

Самостоятельная работа подкрепляется учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций, учебное и научное программное обеспечение, ресурсы Интернет.

Форма контроля знаний – зачет в конце курса, включающий теоретические вопросы и задачу.

## Контрольные вопросы к зачету:

### **Типы адсорбентов**

Физико-химические свойства и адсорбционные характеристики твердых тел - адсорбентов (фундаментальные свойства поверхности и пористых структур).

Активные угли. Параметры пористой структуры и энергетические характеристики адсорбента. Методы определения параметров пористой структуры.

Цеолиты. Кристаллическая структура. Свойства поверхности. Методы определения параметров пористой структуры цеолитов.

Силикагели. Структура. Свойства поверхности. Методы определения параметров пористой структуры.

Алюмогели. Структура. Методы определения параметров пористой структуры.

Пористые полимеры. Структура. Свойства поверхности. Методы определения параметров пористой структуры.

MOF-структуры. Структура. Свойства поверхности. Методы определения параметров пористой структуры

Природные пористые материалы. Структура. Методы определения параметров пористой структуры

### **Удельная поверхность и пористость адсорбентов**

Физические основы метода определения удельной поверхности адсорбентов по адсорбции паров.

Модель физической адсорбции по Ленгмюру. Основные постулаты модели Ленгмюра. Определение удельной поверхности адсорбента, числа адсорбционных центров.

Модель физической адсорбции по БЭТ. Основные постулаты модели БЭТ. Определение удельной поверхности адсорбента по БЭТ.

Теория объемного заполнения микропор Дубинина. Основные постулаты теории объемного заполнения микропор. Определение структурно-энергетических характеристик адсорбентов.

### **Расчет адсорбционных равновесий**

Уравнение адсорбции Ленгмюра. Физические основы метода расчета адсорбционных равновесий на основе данных по уравнению Ленгмюра. Удельная поверхность, число адсорбционных центров.

Уравнение БЭТ. Физические основы метода расчета адсорбционных равновесий на основе данных по БЭТ.

Уравнение Дубинина – Радушкевича для адсорбции в микропористых адсорбентах. Температурная зависимость адсорбции, Физические основы метода расчета адсорбционных равновесий на основе теории объемного заполнения микропор Дубинина.

Примеры расчета адсорбционных равновесий на микропористых адсорбентах.

### **Адсорбционная осушка и очистка воздуха**

Физические основы адсорбционного метода осушки и очистки воздуха.

Уравнения кинетики адсорбции. Уравнения массопереноса. Неизотермичность адсорбции. Оптимизация физико-химических характеристики адсорбентов.

Кинетические и динамические закономерности адсорбции воды и примесей из воздуха.

Теплоты адсорбции воды на разных адсорбентах.

Характеристические энергии адсорбции веществ в микропористых адсорбентах

Пример расчета массогабаритных характеристик адсорберов.

### **Адсорбционные методы разделения газовых смесей**

Физико-химические особенности высокоскоростных процессов разделения газовых смесей. Молекулярно-ситовое разделение газов. Физические принципы адсорбционного разделения газов на основе различий адсорбционной активности адсорбента.

Свойства молекулярно-ситовых адсорбентов.

Примеры расчета процессов разделения газовых смесей.

**Критерий выполнения задания** – подтверждение ответами на контрольные вопросы знания теоретических основ курса и решение задачи – критерий умения применять полученные знания на практике.

## **7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины**

### а) основная литература:

1. Мухин В.М., Тарасов А.В., Клушин В.Н. *Активные угли России*, М.: Изд-во «Металлургия», 2000.
2. А. Т. Лебедев. *Масс-спектрометрия в органической химии*. М.: БИНОМ. Лабораторий знаний, 2003
3. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. *Физические методы исследования в химии: Учебник*. М.: Мир, 2003.

4. Минакова Т.С. Адсорбционные процессы на поверхности твердых тел: Учебное пособие для студентов высших учебных заведений/ Т.С. Минакова. - Томск, Изд-во Томского университета. -2007. – 283 с: ил.

5. Шумяцкий Ю.И. Промышленные адсорбционные процессы: Учебное пособие для студентов высших учебных заведений/ Ю.И.Шумяцкий. – М: Изд-во «КолосС». – 2009. -182 с: ил.

6. Самонин В.В., Подвязников М.Л., Никонова В.Ю., Спиридонов Е.А., Шевкина А.Ю.. Сорбирующие материалы, изделия, устройства и процессы управляемой адсорбции/ В.В.Самонин, М.Л.Подвязников, В.Ю.Никонова, Е.А.Спиридонов, А.Ю. Шевкина. - С.-Петербург: Изд-во «Наука». - 2009.- 271 с: ил.

б) дополнительная литература:

1. Н.Б. Варгафтик, Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей, М.: Наука, 1972.

2. Брек Дж. Цеолитовые молекулярные сита. М.: Мир, 1976.

3. Р. Эрнст, Дж. Боденхаузен, А. Бокаун, ЯМР в одном и двух измерениях, “Мир”, М., 1990.

4. Д. Браун, А. Флойд, М. Сейнзбери, Спектроскопия органических веществ, “Мир”, М., 1992.

5. Дубинин М.М. Адсорбция и пористость. М. Изд-во ВАХЗ, 1971.

6. Кельцев Н.В. Основы адсорбционной техники. М. Химия. 1976.

7. Экспериментальные методы в адсорбции и молекулярной хроматографии. Под ред. А.В. Киселева, В.П. Древинга. М. Изд-во МГУ, 1973, 447.

8. Фенелонов В.Б., Пористый углерод, Новосибирск. Изд-во ИК СО РАН, 1995.

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

программа для обработки ЯМР спектров Spinworks (<http://www.spin-works.com>),

программа для обработки масс-спектров mMass (<http://www.mmass.org>),

программа для просмотра, редактирования, обработки и анализа спектральных данных Spectralworks (<http://www.spectralworks.com>), программа для анализа

электронной структуры молекул и спектров Chemissian ([www.chemissian.com](http://www.chemissian.com)).

Интернет-ресурсы: Единое окно доступа к образовательным ресурсам

Федерального портала Российское образование <http://www.window.edu.ru>,

национальный WWW-сервер по химии [www.chem.msu.ru](http://www.chem.msu.ru)

## **8. Материально-техническое обеспечение дисциплины**

НОК располагает материально-технической базой, обеспечивающей проведение всех видов теоретической и практической подготовки, предусмотренных учебным планом, а также эффективное выполнение диссертационной работы:

Аудитория для проведения лекций, оснащенная компьютером и проектором для показа слайдов компьютерных презентаций. Компьютеры, объединенные в локальную сеть с выходом в Интернет и подключенные к международным и российским научным базам данных и электронной библиотеке с основными международными научными журналами.

Инструментальная база НОК основана на оборудовании Лаборатории равновесной адсорбции и оборудовании центра коллективного пользования физическими методами исследования ИФХЭ РАН. В составе имеющегося оборудования: а) высоковакуумные установки для измерения адсорбции стандартных паров - бензола, азота, газов кислорода, ксенона, аргона CO<sub>2</sub>, воды, органических соединений; б) оригинальные установки высокого давления для измерения адсорбции газов; г) установки для измерения теплот адсорбции; д) спектрометры: ЯМР-спектрометр фирмы «Брукер»: AVANCE II DRX-600, масс-спектрометр MALDI-TOF Bruker ultraflex III, масс-спектрометр ICP-MS - Bruker Daltonics aurora M90, спектрофотометр УФ и видимой области Specord M400, ИК-спектрометр Perkin-Elmer-2000, спектрофотометр Agilent 8453; е) сканирующий зондовый микроскоп Solver P47 PRO, атомно-силовой микроскоп – спектрометр Force Master 402 MD, рентгено-флюороресцентный микроанализатор VRA-30, рентгеновский дифрактометр Shimadzu XRD-6000 и многие другие приборы, позволяющие решить практически любую задачу физико-химического исследования

Программа составлена в соответствии с требованиями приказа Минобрнауки России от 16.03.2011 № 1365 «Федеральные государственные требования к структуре основной профессиональной образовательной программы послевузовского профессионального образования (аспирантура)» лабораторией равновесной адсорбции.

Программа принята на заседании секции «Физикохимия нано- и супрамолекулярных систем» при Ученом совете ИФХЭ РАН протокол 3 от 10 сентября 2011 г.