

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Факультет инновационных технологий

УТВЕРЖДАЮ:

Декан

 С. В. Шидловский

« 29 » 08 2022 г.

Рабочая программа дисциплины

Физическая химия

по направлению подготовки

27.03.05 Инноватика

Направленность (профиль) подготовки :

Управление инновациями в наукоемких технологиях

Форма обучения

Очная

Квалификация

Бакалавр

Год приема

2022

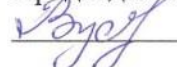
Код дисциплины в учебном плане: Б1.В.ДВ.01.03.02

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОПОП

 О.В. Вусович

Председатель УМК

 О.В. Вусович

Томск – 2022

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

- ПК-1 – Способен проводить патентный поиск и осуществлять построение патентных ландшафтов с целью выявления технологических направлений развития;
- ПК-5 – Способен находить и проектировать технико-технологическое решение на основе «лучших практик»;
- ОПК-1 – Способен анализировать задачи профессиональной деятельности на основе положений, законов и методов в области математики, естественных и технических наук;
- ОПК-3 – Способен использовать фундаментальные знания для решения базовых задач управления в технических системах с целью совершенствования в профессиональной деятельности;
- ОПК-6 – Способен обосновывать принятие технического решения при разработке инновационного проекта, выбирать технические средства и технологии, в том числе с учетом экологических последствий их применения.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИПК-1.1 Осуществлять сбор и систематизация информации о направлениях развития науки, техники и технологий в Российской Федерации и за рубежом, входящих в сферу отраслевой специализации организации;

ИПК-5.3 Проектирует и обосновывает/ доказывает технико-технологические решения по тематике исследований;

ИОПК-6.4 Умеет обосновывать техническое решение на основе нормативных документов, регламентирующих НИОКР;

ИОПК-6.2 Выбирает современные технические средства и технологии, в том числе с учетом экологических последствий их применения при разработке инновационного проекта;

ИОПК-3.1 Способен выполнять анализ динамических свойств технических систем на модельном или физическом уровне;

ИОПК-1.1 Знает основные положения, законы и методы в области естественных, технических наук и математики.

2. Задачи освоения дисциплины

– Освоить теоретические основы физической химии, законы химической термодинамики, формальной кинетики, катализа, особенности кинетики гомогенных и гетерогенных реакций, теоретические основы электрохимии, взаимодействия в растворах электролитов в равновесных и неравновесных условиях.

– Научиться выполнять стандартные действия (классифицировать физико-химические процессы, составлять схемы процессов, систематизировать данные и т.п.) с учетом основных понятий и общих закономерностей, формулируемых в рамках физической химии.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор. Дисциплина входит в модуль Химические технологии.

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Пятый семестр, экзамен

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: Химия, Физика.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 9 з.е., 324 часов, из которых:

-лекции: 54 ч.

-лабораторные: 54 ч.

-практические занятия: 56 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Тема 1. Химическая термодинамика

Основные понятия и определения химической термодинамики. Макроскопические системы и термодинамический метод их описания. Термическое равновесие системы (нулевой закон термодинамики). Постулат о равновесии. Термодинамические переменные. Температура. Интенсивные и экстенсивные величины. Обратимые и необратимые процессы. Уравнения состояния. Уравнения состояния идеального газа, газа Ван-дер-Ваальса. Теорема о соответственных состояниях. Вириальные уравнения состояния. Теплота и работы различного рода. Работа расширения для различных процессов. Первый закон термодинамики. Внутренняя энергия. Энтальпия. Закон Гесса и его следствия. Стандартные состояния и стандартные теплоты химических реакций. Теплоты сгорания. Теплоты образования. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Уравнение Кирхгофа. Зависимость теплоемкости от температуры и расчеты тепловых эффектов реакций. Таблицы стандартных термодинамических величин и их использование в термодинамических расчетах. Второй закон термодинамики и его различные формулировки. Энтропия. Уравнение второго начала термодинамики для обратимых и необратимых процессов. Некомпенсированная теплота Клаузиуса и работа, потерянная в необратимом процессе. Обоснование второго начала термодинамики. Теорема Карно - Клаузиуса. Энтропия как функция состояния. Зависимость энтропии от температуры, давления, объема. Изменение энтропии индивидуальных веществ в различных процессах, при фазовых превращениях и при смешении идеальных газов. Абсолютная энтропия вещества. Расчет абсолютной энтропии вещества при заданной температуре. Расчет изменения энтропии в химических реакциях при заданной температуре.

Фундаментальное уравнение Гиббса. Внутренняя энергия, как однородная функция объема, энтропии и числа молей. Термодинамические потенциалы. Соотношения Максвелла и их использование для вывода различных термодинамических соотношений. Уравнение Гиббса – Гельмгольца. Свойства термодинамических потенциалов. Различные формы записи условий термодинамического равновесия. Критерии самопроизвольного и не самопроизвольного протекания процессов. Методы вычисления энтропии, внутренней энергии, энтальпии, энергии Гельмгольца и энергии Гиббса. Химический потенциал. Стандартный химический потенциал. Способы вычисления изменений химического потенциала. Химический потенциал идеального и неидеального газов.

Тема 2. Статистическая термодинамика

Статистические выражения для основных термодинамических функций – внутренней энергии, энтропии, энергии Гельмгольца и энергии Гиббса. Статистические расчеты энтропии, формула Больцмана. Расчет констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики.

Тема 3. Химическое равновесие

Краткая характеристика химического равновесия. Закон действующих масс, термодинамический вывод. Термодинамическая (стандартная) и эмпирические константы химического равновесия. Способы выражения состава равновесной смеси, соотношения между эмпирическими константами равновесия K_P , K_C , K_X . Связь термодинамической константы равновесия K_0 с эмпирическими (концентрационными) константами равновесия для реакций между веществами в состоянии идеального газа. Расчет равновесных концентраций. Гетерогенное химическое равновесие. Уравнение изотермы химической реакции Вант-Гоффа (вывод и анализ). Термодинамическое обоснование направления химической реакции. Уравнение стандартного химического сродства. Комбинирование уравнений. Нахождение константы равновесия. Уравнение изобары и изохоры химической реакции (вывод и анализ). Интегрирование уравнения Вант-Гоффа. Влияние температуры на положение равновесия. Расчет среднего и истинного теплового эффекта химической реакции на основании зависимости константы равновесия от температуры. Зависимость логарифма константы равновесия ($\ln K_P$) от обратной температуры для экзотермической и эндотермической реакций. Принцип Ле-Шателье. Смещение равновесия.

Химическое равновесие и тепловой закон Нернста. Следствия из закона Нернста. Изменение теплоемкости и энтропии при 0 К. Значение постоянной при интегрировании уравнения изобары для кристаллических веществ и реакций, протекающих в газовой фазе. Вычисление изобарного потенциала и констант равновесия по справочным данным о константах равновесия реакций образования соединений из простых веществ. Методы приближенного расчета равновесий. Расчет изменения теплоемкости по приближению Улиха. Расчет изменения изобарного потенциала и константы равновесия по методу Темкина-Шварцмана. Расчет изменения стандартной энергии Гиббса и константы равновесия с помощью функций приведенной энергии Гиббса.

Тема 4. Фазовые равновесия

Гетерогенные системы. Понятие фазы, компонента, составляющего вещества системы, степени свободы. Гетерогенные химические равновесия и особенности их термодинамического описания. Правило фаз Гиббса. Фазовые переходы 1-го рода. Изменение термодинамических характеристик (химический потенциал, энтропия, теплоемкость) при фазовых переходах 1-го рода. Вывод и анализ уравнения Клапейрона-Клаузиуса. Интегральные формы уравнения Клапейрона-Клаузиуса для процессов плавления, испарения, возгонки – фазовых переходов 1-го рода. Фазовые переходы 2-го рода. Изменение термодинамических характеристик (химический потенциал, энтропия, теплоемкость) при фазовых переходах 2-го рода. Диаграммы состояния однокомпонентных систем. Изменение химического потенциала при фазовых переходах в однокомпонентной системе. Диаграмма состояния воды. Энантиотропные фазовые переходы. Диаграмма состояния серы. Моноотропные фазовые переходы и диаграмма состояния фосфора. Двухкомпонентные системы. Объемная диаграмма состояния 2-х компонентной системы с простой эвтектикой. Правило рычага (отрезков). Термический анализ. Экспериментальные методы построения диаграмм состояния. Кривые охлаждения. Бинарные системы с химическим соединением, плавящимся конгруэнтно (без разложения). Диаграмма состояния 2-х компонентных систем с химическим соединением, плавящимся инконгруэнтно (с разложением). Твердые растворы. Системы, образующие твердые растворы с неограниченной взаимной растворимостью. Двухкомпонентные

системы, образующие твердые растворы с ограниченной взаимной растворимостью в твердом состоянии. Трехкомпонентные системы. Объемная 3-х компонентная диаграмма состояния. Треугольник Гиббса–Розебома. Определение составов в трехкомпонентной системе.

Тема 5. Термодинамика растворов

Растворы различных классов. Различные способы выражения состава раствора. Идеальные растворы, общее условие идеальности растворов. Межмолекулярные взаимодействия в растворах. Термодинамическое условие образования растворов. Термодинамика смешения. Энергия Гиббса и энтропия смешения. Теплоты растворения. Активность и коэффициент активности компонентов в растворе. Парциальные мольные величины и их определение из опытных данных для бинарных систем. Обобщенное уравнение Гиббса–Дюгема. Равновесие жидкость – пар для идеального раствора. Закон Рауля. Положительные и отрицательные отклонения от закона Рауля. Причины отклонения от закона Рауля. Коллигативные свойства растворов. Температура кипения и замерзания идеального раствора. Термодинамические причины изменения температур кипения и замерзания растворов. Осмотическое давление идеального раствора. Термодинамика осмотического давления. Равновесие жидкость – пар в двухкомпонентных системах с неограниченной растворимостью жидкостей друг в друге. Равновесные составы пара и жидкости. Вывод уравнения линии пара и жидкости. Азеотропы.

Равновесие жидкость – жидкость в двухкомпонентных системах. Равновесие раствор – пар для ограниченно растворимых друг в друге жидкостей. Гетероазеотропы. Диаграммы: давление – состав и температура кипения – состав. Равновесие жидкий раствор – пар в системах с взаимно нерастворимыми жидкостями. Диаграммы: давление–состав, температура кипения – состав. Физико-химические основы перегонки раствора. Законы Коновалова. Перегонка растворов с неограниченной растворимостью жидкостей. Схема тарельчатой ректификационной колонны. Перегонка растворов с ограниченной взаимной растворимостью жидкостей и взаимно нерастворимыми жидкостями. Расходный коэффициент пара. Равновесие жидкость – жидкость в трехкомпонентной системе. Экстракция.

Тема 6. Формальная кинетика

Основные понятия химической кинетики: механизм реакции, элементарная реакция, молекулярность элементарных стадий. Скорость простых химических реакций, кинетические кривые. Кинетическое уравнение. Основной постулат химической кинетики: константа скорости, порядок реакции. Скорость сложной химической реакции: принцип лимитирующей стадии, понятие кажущейся (экспериментальной) константы скорости реакции. Прямая и обратная задачи химической кинетики. Кинетика химических реакций в статических условиях: реакции 1-го порядка, интегральное уравнение константы скорости, период полупревращения. Реакции 2-го порядка: односубстратная реакция, бисубстратная реакция (при равенстве и различии начальных концентраций реагентов). Реакции нулевого и n-го порядков. Методы определения порядка химической реакции: интегральный и дифференциальный методы. Методы интегральные (аналитический и графический подбор, расчет по периоду полураспада). Дифференциальные методы (графический). Метод начальных скоростей реакций. Метод изолирования Оствальда (определение частных порядков реакций). Кинетика сложных химических реакций: основные признаки сложных реакций. Кинетика обратимых реакций на примере реакции 1-го порядка. Кинетика параллельных реакций. Кинетика последовательных реакций: вывод интегральных уравнений для расчета текущих концентраций промежуточного и конечного продукта (кинетика 1-го порядка), влияние соотношения констант скорости на ход кинетических кривых Метод квазистационарного

приближения Боденштейна. Кинетика реакций в открытых системах. Реактор идеального смешения, реактор идеального вытеснения на примере реакций 1 и 2 порядков.

Тема 7. Теории химической кинетики

Влияние температуры на скорость химических реакций: правило Вант-Гоффа. Основные положения теории Аррениуса. Уравнение Аррениуса, его формы. Связь между энергией активации и тепловым эффектом реакции. Понятие истинной и кажущейся (опытной) энергии активации. Способы определения опытной энергии активации и ее связь с энергиями активации элементарных процессов. Теория соударений (ТС). Основные положения. Понятие среднего объема сферы и числа столкновений. Учет сил притяжения и отталкивания (понятие эффективного диаметра столкновений). Причины отклонения теоретических значений константы скорости от экспериментальных (стерический фактор). Распределение Мэлвина-Хьюза. Недостатки ТС. Теория активированного комплекса (ТАК). Использование адиабатического приближения для описания химической реакции частиц: поверхность потенциальной энергии, путь реакции, энергия активации. Уравнение Лондона. Полуэмпирическая формула Морса. Понятие координаты реакции. Задачи, решаемые при построении поверхности потенциальной энергии. Вывод основного уравнения ТАК. Скорость перехода активированного комплекса через потенциальный барьер. Уравнение Эйринга. Понятие трансмиссионного коэффициента.

Термодинамический аспект ТАК. Связь между константой равновесия и изменением энергии Гиббса. Выражение константы скорости реакции через термодинамические функции. Физический смысл стерического множителя. Расчет степеней свободы для многоатомной молекулы. Типы бимолекулярных реакций. Взаимодействие 2-х атомов: сопоставление ТАК и ТС. Взаимодействие многоатомных молекул: второе определение стерического множителя. Мономолекулярные реакции. Схема Линдемана. Анализ кинетического уравнения. Влияние добавок (инертного газа или продуктов) на скорость мономолекулярной реакции. Мономолекулярные реакции в ТАК (анализ уравнения Эйринга). Мономолекулярные реакции в ТС. Причины наблюдаемых отклонений. Поправка Хиншельвуда. Понятие эффективного числа независимых осцилляторов. Тримолекулярные реакции. Влияние температуры на скорость тримолекулярных реакций. Схема Траутца. Потенциальный барьер тримолекулярной реакции. Тримолекулярные реакции с позиций ТАК и ТС. Анализ достоинств и недостатков. Кинетика реакций в растворах: отличия между состоянием реагентов в газовой фазе и в растворе. «Клеточный эффект». Влияние природы растворителя на скорость химической реакции в растворе: сольватация реагентов и активированного комплекса. Уравнение Бренстеда-Бьеррума. Кинетика ионных реакций в растворах: влияние природы растворителя на скорость ионных реакций через диэлектрическую проницаемость растворителя, уравнение Скетчарда. Скорость реакций между заряженными частицами в растворе: первичный солевой эффект. Скорость реакции между заряженной частицей и незаряженной молекулой. Кинетика бимолекулярных реакций в растворах, лимитируемых диффузией. Кинетика бимолекулярных реакций в растворах, частично лимитируемых диффузией. Кинетика гетерогенных реакций: лимитирующая стадия – адсорбция реагентов, уравнение Лэнгмюра-Хиншельвуда-Шваба. Влияние прочности адсорбции реагента/продукта на кинетику гетерогенных реакций. Кинетика гетерогенных реакций: лимитирующая стадия – диффузия. 1-й закон Фика. Влияние температуры на скорость диффузии. Области протекания гетерогенных реакций: кинетическая, внутридиффузионная, внешнедиффузионная. Кинетика топохимических реакций. Механизм топохимических реакций. Законы образования ядер. Уравнение Ерофеева-Колмогорова. Цепные реакции. Особенности цепных реакций. Пределы воспламенения. Разветвленные и неразветвленные цепные реакции. Кинетика цепных реакций. Фотохимические реакции. Законы фотохимии. Квантовый выход. Квантовый

выход первичной фотохимической реакции. Фотохимические и фотофизические процессы. Кинетическая схема Штерна-Фольмера.

Тема 8. Электрическая проводимость растворов электролитов

Проводники I и II рода. Растворы электролитов и электропроводность. Причины устойчивости ионов в растворах электролитов. Энергии кристаллической решетки и сольватации ионов. Теория электролитической диссоциации (ЭД). Экспериментальные факты, способствовавшие появлению теории. Основные положения теории Аррениуса (степень диссоциации, константа диссоциации, изотонический коэффициент (i)). Недостатки классической теории ЭД. Приложения теории электролитической диссоциации: термодинамическое равновесие, K_w , pH и др. Причины электролитической диссоциации: ионофоры и ионогены, распределение ионов в растворе. Активность. Средний ионный коэффициент активности. Сильные и слабые электролиты. Правило ионной силы Льюиса и Рендала. Распределение ионов в растворе по Аррениусу и Гхошу. Электростатическая теория сильных электролитов (теория Дебая-Гюккеля): модель раствора (физическая сущность теории, ионная атмосфера). Основные положения теории

Дебая-Гюккеля. Теоретический расчет коэффициента активности на основании теории Дебая-Гюккеля. Преимущества предельного закона Дебая. Причины ограниченной применимости предельного закона Дебая. Умеренно-концентрированные и концентрированные растворы (II и III приближения теории Дебая-Гюккеля). Ионная ассоциация в растворах электролитов. Неравновесные явления в растворах электролитов. Электропроводность электролитов. Удельная и эквивалентная электропроводность. Влияние концентрации на электропроводность. Формула Кольрауша. Методика определения электропроводности. Подвижность ионов. Закон Кольрауша. Аномальная подвижность H^+ и OH^- : теория Бернала и Фаулера. Числа переноса. Схема Гитторфа. Методы определения чисел переноса: метод Гитторфа, метод движущейся границы. Связь между подвижностью ионов и их концентрацией. Электрофоретический и релаксационный эффекты. Эффекты Вина и Дебая-Фалькенгагена. Уравнение Онзагера. Электрическая проводимость неводных растворов: аномальная электропроводность неводных растворов электролитов.

Тема 9. Электродвижущие силы

Равновесные свойства межфазных заряженных границ. Возникновение скачка потенциала на границе раздела фаз. Двойной электрический слой. Потенциал нулевого заряда. Адсорбция как причина образования ДЭС. Строение границы раздела «электрод-раствор»: модель Гельмгольца, строение ДЭС в отсутствие и присутствии специфической адсорбции. Причины возникновения двойного электрического слоя. Гальванический элемент. Обратимые и необратимые гальванические элементы. Гальвани- и volta-потенциалы. Электродвижущая сила: I и II законы Вольта. Методика определения ЭДС. Уравнение Нернста. Типы электродов и гальванических цепей. Диффузионный потенциал. Расчет диффузионного потенциала. Цепи с переносом и без переноса. Термодинамика электрохимического элемента. Кинетика электрохимических процессов. Лимитирующие стадии в электрохимических реакциях. Ток обмена. Концентрационная поляризация. Электрохимическая поляризация. Напряжение разложения. Перенапряжение. Перенапряжение H_2 .

Тема 10. Катализ

Классификация катализаторов и каталитических процессов. Роль катализа в промышленности. Основные характеристики катализаторов: активность, селективность. Кинетика гомогенных каталитических реакций. Снижение энергии активации при каталитических процессах. (Стадийная и ассоциативная схемы катализа). Кислотно-основной катализ. Дуалистическая теория кислотно-основного катализа. Каталитическая

активность и сила кислот и оснований. Уравнение Бренстеда. Катализ апротонными кислотами. Вторичный солевой эффект. Кинетика ферментативных реакций. Уравнение Михаэлиса-Ментен. Определение его кинетических параметров из экспериментальных данных. Гетерогенный катализ: понятие активного центра поверхности катализатора. Теория пересыщения Рогинского. Правило постоянства удельной каталитической активности (структурно-чувствительные и структурно-нечувствительные реакции). Отравление и регенерация катализаторов. Классификация ядов по Мэкстеду. Теория отравления катализаторов. Положительная роль ядов (избирательное отравление). Теоретические представления в гетерогенном катализе. Теория Баландина: принципы геометрического соответствия и энергетического соответствия. Теория активных ансамблей. Электронные представления в катализе (теория Волькенштейна).

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, проведения контрольных работ и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Экзамен в пятом семестре проводится в письменной форме по билетам.
Продолжительность экзамена 1,5 часа.

1. Основные понятия химической термодинамики: система, фаза, компонент. Термодинамические переменные. Экстенсивные и интенсивные переменные. Постулат равновесия. Нулевой закон термодинамики. Температура. Газовый термометр. Абсолютная температура.

2. Уравнения состояния системы. Уравнение состояния идеального газа. Уравнение Ван-дер-Ваальса для реального газа. Критическая изотерма. Критическая точка. Свойства воды в сверхкритическом состоянии. Теорема о соответственных состояниях, и ее трактовка в классической и статистической термодинамике. Вириальные уравнения. Уравнение состояния для жидкостей и твердых тел.

3. Первый закон термодинамики. Его формулировка и следствия. Функции состояния и функции пути. Теплота, работа и изменение внутренней энергии для различных процессов в идеальном газе. Энтальпия. Вычисление изменений внутренней энергии и энтальпии из опытных данных.

4. Закон Гесса. Теплоты реакций Q_V и Q_p . Стандартные энтальпии химических реакций. Энтальпии образования химических соединений. Возможности расчёта энтальпий химических реакций методами квантовой химии.

5. Теплоемкости. Их определение в классической и статистической термодинамике. Использование теплоемкостей для расчетов изменения энергии, энтальпии и энтропии.

6. Зависимость энтальпий химических реакций от температуры. Уравнение Кирхгофа.

7. Второй закон термодинамики. Энтропия, как функция состояния. Изменение энтропии при необратимых процессах. Неравенство Клаузиуса, производство энтропии.

8. Математический аппарат термодинамики. Фундаментальное уравнение Гиббса. Внутренняя энергия, как однородная функция объема, энтропии и числа молей. Уравнение Гиббса-Дюгема. Термодинамические потенциалы. Соотношения Максвелла и их использование при расчетах энергии, энтальпии и энтропии. Уравнение Гиббса-Гельмгольца.

9. Термодинамические потенциалы (характеристические функции) и их свойства. Различные формы записи условий термодинамического равновесия. Критерий самопроизвольного протекания процесса.

10. Химический потенциал. Его различные определения. Электрохимический потенциал. Способы вычисления изменений химического потенциала в термодинамике и статистической термодинамике.

11. Химический потенциал и стандартный химический потенциал идеального газа. Химический потенциал реальных газов и его расчеты по методу летучести (фугитивности) Льюиса.

12. Химические равновесия в закрытых системах. Условие химического равновесия. Изотерма химической реакции. Стандартная энергия Гиббса химической реакции. Химические равновесия в газовой фазе. Различные формы записи констант равновесия и связь между ними. Закон действующих масс и его термодинамический вывод.

13. Условия фазового равновесия. Условия мембранного равновесия. Правило фаз Гиббса.

14. Фазовые равновесия в однокомпонентных системах. Уравнение Клапейрона Клаузиуса. Его применение к процессам плавления, сублимации и испарения в однокомпонентных системах (на примере H_2O). Диаграммы состояния серы и фосфора. Энантиотропия и монотропия. Диаграмма состояния углерода. Зависимость термодинамических свойств фазы от её размера. Углеродные наноматериалы. Фазовые переходы первого рода. Пластические фазовые переходы. Жидкие кристаллы. Фазовые переходы второго рода. Уравнения Эренфеста.

15. Основные понятия термодинамики растворов. Функции смешения, избыточные функции смешения. Мольная энергия Гиббса смешения. Идеальные растворы. Закон Рауля и закон Генри. Стандартный химический потенциал компонента в жидком и твердом растворах. Стандартные состояния "чистое вещество" и "бесконечно-разбавленный раствор". Химические потенциалы в растворах сильных электролитов. Средне-ионная активность и коэффициент активности.

16. Неидеальные растворы. Метод активностей Льюиса. Вычисление коэффициентов активности из экспериментальных данных по давлению пара компонентов раствора. Термодинамическая классификация растворов.

17. Фазовые равновесия в двухкомпонентных системах: зависимость растворимости вещества от температуры, криоскопия, эбулиоскопия. Экстракционное равновесие. Осмос, уравнение Вант-Гоффа.

18. Уравнения Гиббса-Дюгема-Маргулеса. Обобщенное уравнение Гиббса Дюгема. Мольные (интегральные) и парциальные мольные величины. Их определение для бинарных растворов. Зависимость парциальных мольных объемов от состава в системе $H_2O - C_2H_5OH$.

19. Расслаивание в двухкомпонентных системах.

20. Правило фаз Гиббса и его применение к различным диаграммам состояния бинарных систем (простая эвтектика, диаграмма с конгруентно и инконгруентно плавящимся соединением).

21. Равновесие жидкость - пар в двухкомпонентных системах. Различные виды диаграмм состояния в координатах: $P(x_i, y_i) - T_k(x_i, y_i) - x_i(y_i)$. Азеотропные смеси. Законы Гиббса Коновалова..

22. Химические равновесия в растворах. Константы равновесия при различном выборе стандартных состояний для участников реакции. Химическое равновесие в разбавленном растворе. Влияние инертного растворителя.

23. Гетерогенные химические равновесия с образованием и без образования твердых растворов.

24. Зависимость констант равновесия от температуры. Изобара Вант-Гоффа и ее интегрирование.

25. Третий закон термодинамики. Формулировка Нернста и формулировка Планка. Расчеты констант равновесия с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций и приведенной энергии Гиббса.

26. Расчет равновесного состава и выходов продуктов при протекании нескольких химических реакций (на примере реакции образования NH_3 , гидрирования этилена).

27. Электрохимический потенциал. Условия химического и фазовых равновесий с участием заряженных компонентов. Условия равновесия на границе электрода с раствором и в электрохимической цепи. Гальванический элемент. Уравнение Нернста. Стандартные электродные потенциалы. Расчет ЭДС с помощью таблиц стандартных потенциалов. Определение методом ЭДС энергии Гиббса, энтальпии и энтропии химической реакции. Определение методом ЭДС коэффициентов активности, pH раствора.

28. Адсорбция и ее определения. Адсорбционное уравнение Гиббса. Изотерма Лэнгмюра, ее анализ и области применимости.

29. Полимолекулярная адсорбция. Уравнение БЭТ и его применение для определения поверхности твердых тел.

30. Основные понятия статистической термодинамики. Метод ячеек Больцмана. Фазовые пространства, плотность вероятности в фазовом пространстве. Микроканонический и канонический ансамбли Гиббса.

31. Энтропия в статистической термодинамике. (Формула Больцмана, микроканонический ансамбль, канонический ансамбль).

32. Статистические суммы по состояниям Z и Q . Расчет с их помощью внутренней энергии, энтропии, энергии Гельмгольца, химического потенциал и теплоемкости c_V .

33. Поступательная сумма по состояниям и ее вклады в термодинамические функции. Формула Закура-Тетроде для энтропии идеального газа.

34. μ - пространство. Распределение молекул по скоростям и энергиям в идеальном газе. Средние скорости, средние энергии.

35. Теорема равнораспределения и область ее применимости. Характеристические температуры. Применение к теории теплоемкостей.

36. Колебательная сумма по состояниям. Теории теплоемкости Эйнштейна и Дебая (без вывода).

37. Вращательные суммы по состояниям. Вклады вращательного движения в термодинамические функции для модели жесткого ротатора. Электронная и ядерная суммы по состояниям. Орто- и пара- водород. Электронная составляющая теплоемкости атомарного хлора.

38. Статистический расчет константы химического равновесия для многоатомных идеальных газов. Сопоставление статистического и классического термодинамического расчетов.

39. Статистическая теория реальных газов. Метод Урселла Майер (использование первых двух слагаемых ряда). Статистическое рассмотрение вириального уравнения.

Результаты экзамена определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Оценка/балл	Характеристики действий обучающегося
Отлично	Обучающийся самостоятельно и правильно решил учебно-профессиональную задачу, уверенно, логично, последовательно и аргументировано излагал свое решение, используя профессиональные понятия. Сформировано понимание сути вопроса, логичность изложения, научная точность и полнота ответа, умение аргументировать свою точку зрения, способность привести примеры
Хорошо	Обучающийся самостоятельно и в основном правильно решил

	учебно-профессиональную задачу, уверенно, логично, последовательно и аргументировано излагал свое решение, используя профессиональные понятия. Сформировано понимание сути вопроса, логичность изложения, научная точность и полнота ответа, умение аргументировать свою точку зрения, способность привести примеры, но в ответе присутствуют отдельные содержательные ошибки
Удовлетворительно	Обучающийся в основном решил учебно-профессиональную задачу, допустил несущественные ошибки, слабо аргументировал свое решение, используя в основном профессиональные понятия. Сформировано понимание сути вопроса, логичность изложения, но отсутствует умение аргументировать свою точку зрения и способность привести примеры, наличие систематических содержательных ошибок
Неудовлетворительно	Обучающийся не решил учебно-профессиональную задачу. Не понимает сути вопроса, не может ответить на вопрос

11. Учебно-методическое обеспечение

- а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=00000>
- б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.
- в) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов.
- г) Методические указания по выполнению лабораторных работ (на кафедре физической и коллоидной химии)

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

- а) основная литература:
- Еремин В.В., Каргов С.И., Успенская И.А., Кузьменко Н.Е., Лунин В.В. Физическая химия. Т1., Т2. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний. 2013. – 584 с.
 - Основы физической химии: учебное пособие: в 2 ч. О-75 Теория и задачи / В.В.Еремин [и др.]. 2-е изд. перераб. и доп. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний. 2013. – 493 с.: ил. (Учебник для высшей школы)
 - Минакова Т.С., Магаев О.В., Цыро Л.В. Сборник примеров и задач по физической химии. Химическая термодинамика. Томск: Издательский Дом ТГУ, 2013 – 152 с.
 - Шиляева Л.П., Судакова Н.Н., Белоусова В.Н., Курзина И.А. Термодинамика растворов неэлектролитов. Томск: Издательский Дом ТГУ, 2015. –170 с.
 - Пармон В.Н. Термодинамика неравновесных процессов для химиков. С приложением к химической кинетике, катализу, материаловедению и биологии: Учебное пособие/ В.Н. Пармон – Долгопрудный: Издательский Дом " Интеллект", 2015. – 472 с.
 - Рабочая программа дисциплины Физическая химия. (Под редакцией профессора О.В. Водянкиной) Томск.Изд.Дом ТГУ, 2016.–93 с
- б) дополнительная литература:
- Стромберг А.Г., Семченко Д.П. Физическая химия. М.: Высшая школа, 1999. – 528 с.
 - Физическая химия / под ред. Краснова К.С. М.: Высшая школа, 1998. кн.1 и 2. – 512 с. и 319с.
 - Романовский Б.В. Основы химической кинетики. М.: «Экзамен». 2006. – 415 с.
 - 4. Эткинс П., де Паула Дж. Физическая химия. М.: Мир, 2007. Т.1. –494 с.

– Пармон В.Н. Термодинамика неравновесных процессов для химиков. С приложением к химической кинетике, катализу, материаловедению и биологии: Учебное пособие/ В.Н. Пармон – Долгопрудный: Издательский Дом " Интеллект", 2015. – 472 с.

– Байрамов В.М. Основы химической кинетики и катализа. М.: Издательский центр «Академия», 2003. – 256 с.

– Ягодковский В.Д. Статистическая термодинамика в физической химии. М: Бинوم. Лаборатория знаний, 2005. – 490 с.

– Полторацк О.М. Термодинамика в физической химии. М.: Высшая школа, т.2, 1991. – 319 с.

в) ресурсы сети Интернет:

– <http://www.chem.mgu.su>;

– <http://www.misis.ru>

– <http://bio.sfu-kras.ru>

– <http://www.chem.spbu.ru>;

– <http://physchem.distant.ru>

– <http://www.nsu.ru/xmlui/handle/nsu/6559>

13. Перечень информационных технологий

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

– Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);

– публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).

б) информационные справочные системы:

– Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>

– Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

Лаборатории, оборудованные необходимыми установками для проведения лабораторных работ по методам исследования физической химии.

15. Информация о разработчиках

Вусович Ольга Владимировна, кандидат химических наук, кафедра управления инновациями, доцент

Грецкая О.Н. , ассистент кафедры управления инновациями ФИТ ТГУ.