

## Аннотация

### рабочей программы учебной дисциплины «Химическая термодинамика и фазовые равновесия»

Направление подготовки: 04.04.01. «Химия» (уровень магистратуры)  
профиль «Физическая химия»

Составитель аннотации к.т.н., профессор Арчакова Р.Д.

### Кафедра химии

<b>Цель изучения дисциплины</b>	<b>Целями изучения дисциплины «Химическая термодинамика и фазовые равновесия» являются:</b> <ul style="list-style-type: none"><li>- изучение теоретических основ классической и статистической термодинамики, фазовых равновесий применения термодинамических методов для решения химических проблем;</li><li>- формирование у магистрантов знаний и умений, позволяющих моделировать и проводить численные расчеты при описании различных видов химических и фазовых равновесий и свойств веществ в растворах.</li></ul>
<b>Место дисциплины в структуре ОПОП магистратуры</b>	Дисциплина «Химическая термодинамика и фазовые равновесия» относится к обязательной части дисциплин; изучается во 2-ом семестре. Дисциплина «Химическая термодинамика и фазовые равновесия» представляет собой теоретическую основу для изучения последующих курсов химического профиля физической химии, коллоидной химии, химической технологии физико-химических методов исследования. Перечень дисциплин, необходимых для изучения дисциплины: неорганическая химия, квантовая химия, физика, математика.
<b>Компетенции, формируемые в результате освоения дисциплины</b>	<b>В результате освоения дисциплины обучающийся должен демонстрировать следующие результаты образования:</b> <ul style="list-style-type: none"><li>- способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий (УК-1);</li><li>- способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения (ОПК-1);</li><li>- способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работы выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией наук (ПК-3).</li></ul>
<b>Содержание дисциплины</b>	<b>Тема 1. Введение</b> 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.

## Тема 2. Основы химической термодинамики

Макроскопические системы и термодинамический метод их описания. Термическое равновесие системы. Температура. Различные шкалы температур. Термодинамические параметры. Интенсивные и экстенсивные величины. Обратимые и необратимые процессы и их свойства.

Уравнения состояния. Уравнение состояния идеального газа, газа Ван-дер-Ваальса. Теорема о соответствующих состояниях и общая проблема уравнения состояния. Вириальные уравнения состояния.

Теплота и работа. Внутренняя энергия. Первый закон термодинамики. Применение первого закона термодинамики различным процессам в газах. Энтальпия. Цикл Карно. Лемма Карно.

Закон Гесса и его следствия. Стандартные состояния и стандартные теплоты химических реакций. Теплоты сгорания. Теплоты образования. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Формула Кирхгоффа. Зависимость теплоемкости от температуры и расчеты тепловых эффектов реакций.

Таблицы стандартных термодинамических величин и их использование в термодинамических расчетах. Калорические коэффициенты.

Второй закон термодинамики и его различные формулировки. Энтропия. Уравнение второго начала термодинамики для обратимых и необратимых процессов. Обоснование второго закона термодинамики. Теорема Карно-Клаузиуса.

Энтропия как функция состояния. Изменение энтропии при различных процессах. Изменение энтропии в изолированных системах и направление процесса. Постулат Планка об абсолютной энтропии веществ. Статистический характер второго закона термодинамики. Формула Больцмана.

Расчеты изменений энтропии обратимых и необратимых процессов. Вычисления абсолютной энтропии твердых тел, жидкостей и газов. Изменение энтропии химической реакции.

Фундаментальные уравнения Гиббса для закрытых систем. Энергия Гельмгольца, энергия Гиббса и их свойства. Термодинамические потенциалы и характеристические функции. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов, выраженные через характеристические функции.

Уравнение Гиббса-Гельмгольца и его роль в химии. Работа и теплота химического процесса. Соотношение Максвелла: использование для вывода общего уравнения состояния фазы.

Характеристические функции идеального газа. Энергия Гиббса идеального газа.

Характеристические функции реального газа. Метод летучести. Расчет летучести (фугитивности) из опытных данных.

Фундаментальные уравнения Гиббса для открытых систем. Химические потенциалы, их определение, вычисление и свойства. Химический потенциал идеального и неидеального газов.

### **Тема 3. Растворы**

Растворы различных классов. Различные способы выражения состава раствора.

Смеси идеальных газов. Термодинамические свойства газовых смесей. Идеальные растворы в различных агрегатных состояниях и общее условие идеальности растворов.

Давление насыщенного пара жидких растворов. Закон Рауля и отклонение от него. Коэффициенты активности и их определение по парциальным давлениям веществ.

Стандартные состояния при определении химических потенциалов компонентов растворов. Симметричная несимметричная системы отсчета.

Коллигативные свойства растворов. Изменения температуры затвердевания различных растворов. Криоскопический метод. Осмотические явления. Уравнение Вант-Гоффа, его термодинамический вывод и область применимости. Общее рассмотрение коллигативных свойств растворов.

Термодинамическая классификация растворов. Функции смешения для идеальных и неидеальных растворов. Предельно разбавленные растворы, атермальные, регулярные, строго регулярные растворы и их свойства.

Парциальные молярные величины и их определение из опытных данных для бинарных систем. Уравнения Гиббса-Дюгема.

Равновесие жидкость-пар в двухкомпонентных системах. Равновесные составы пара и жидкости. Закон Рауля-Дальтона. Различные виды диаграмм состояния.

Законы Гиббса-Коновалова. Разделение веществ путем перегонки. Азеотропные смеси и их свойства. Влияние давления и температуры на растворимость газов в жидкостях.

Закон Генри. Ограниченная взаимная растворимость двух жидкостей. Третий компонент в системе из двух несмешивающихся жидкостей. Закон распределения Нернста.

Растворимость твердых тел в жидкостях. Идеальная растворимость. Уравнение Шредера. Зависимость растворимости от температуры.

### **Тема 4. Фазовые, химические и адсорбционные равновесия**

Гетерогенные системы. Понятие фазы, компонента, степени свободы. Правило фаз Гиббса и его вывод.

Однокомпонентные системы. Диаграммы состояния воды, серы. Фазовые переходы первого рода, Уравнение Клапейрона-Клаузиуса и его применение к различным фазовым переходам первого рода.

Двухкомпонентные системы. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем и их анализ на основе правила фаз.

Трехкомпонентные системы. Треугольники Гиббса-Розебома.

Взаимная растворимость в системе трех жидкостей.

Закон действия масс. История его открытия и современная трактовка. Различные виды констант равновесия и связь между

	<p>ними. Химическая переменная.</p> <p>Химическое равновесие в идеальных и неидеальных системах. Термодинамический вывод закона действия масс.</p> <p>Изотерма Вант-Гоффа. Изменение энергии Гиббса энергии Гельмгольца при химической реакции.</p> <p>Термодинамическая трактовка понятия о химическом сродстве.</p> <p>Принцип Бертелло и область его применимости. Расчет констант равновесия химических реакций с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций.</p> <p>Приведенная энергия Гиббса и ее использование для расчетов химических равновесий.</p> <p>Расчета выхода продуктов химических реакций различных типов. Выходы продуктов при совместном протекании нескольких химических реакций.</p> <p>Зависимость констант равновесия от температуры. Уравнения изобары и изохоры реакции; их термодинамический вывод.</p> <p>Использование различных приближений для теплоемкостей реагентов при расчетах химических равновесий при различных температурах.</p> <p>Гетерогенные химические равновесия и особенности их термодинамического описания.</p>
Знания, умения и навыки, получаемые в процессе изучения дисциплины	<p><b>В результате изучения дисциплины магистрант должен</b></p> <p><b>знать:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- базовую терминологию, относящуюся к химической термодинамике и фазовым равновесиям, основные понятия и законы термодинамики, их математическое выражение;</li> <li>- понимать логику распространения термодинамического метода к многокомпонентным системам различного типа;</li> <li>- основные экспериментальные и расчетные методы определения макроскопических характеристик системы и отдельных ее составляющих веществ;</li> <li>- понимать роль химической термодинамики как одной из теоретических основ химии.</li> </ul> <p><b>уметь:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- продемонстрировать связь фундаментальных законов термодинамики с химическими явлениями;</li> <li>- решать задачи по химической термодинамике;</li> <li>- моделировать химическое, фазовое равновесие, свойства растворов и проводить численные расчеты физико-химических величин;</li> <li>- проводить эксперименты по измерению теплот химических процессов, свойств растворов, определению констант равновесия химических реакций, построению диаграмм состояния.</li> <li>- самостоятельно формулировать задачу физико-химического исследования в химических системах;</li> <li>- пользуясь полученными знаниями, уметь выбирать оптимальные пути и методы решения поставленных задач ;</li> <li>- проводить физико-химические исследования систем</li> </ul>

	<p>процессов с использованием современных методов и приборов ФХМА;</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- проводить физико-химические расчеты;</li> <li>- пользоваться справочной литературой;</li> <li>- графически отображать полученные зависимости;</li> <li>- анализировать и обсуждать результаты физико-химических исследований;</li> <li>- вести научную дискуссию.</li> </ul> <p><b>владеть:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- основами дисциплины для решения практических задач;</li> <li>- методикой проведения физико-химических исследований;</li> <li>- современными приборами для физико-химических исследований.</li> </ul>		
<b>Объем дисциплины и виды учебной работы</b>	<b>Вид учебной работы</b>	<b>Всего часов</b>	<b>2 семестр</b>
	Общая трудоемкость дисциплины	144	144
	Аудиторные занятия	68	68
	Лекции	34	34
	Лабораторные занятия	34	34
	Самостоятельная работа	49	49
	Контроль	27	27
<b>Используемые ресурсы информационно- телекоммуникационной сети «Internet», информационные технологии, программные средства и информационно-справочные системы</b>	<p><b>Интернет-ресурсы</b></p> <p><a href="http://fizrast.ru/sitemap.html">http://fizrast.ru/sitemap.html</a></p> <p><a href="http://www.don-agro.ru">http://www.don-agro.ru</a></p> <p><a href="http://xn-80abucjiibhv9a.xn-plai/">http://xn-80abucjiibhv9a.xn-plai/</a></p> <p><a href="http://www.agroxxi.ru/">http://www.agroxxi.ru/</a> (РГБ)</p> <p><a href="http://elibrary.rsl.ru">http://elibrary.rsl.ru</a> Научная электронная библиотека</p> <p><a href="http://elibrary.ru/default.asp">http://elibrary.ru/default.asp</a> Российская национальная библиотека</p> <p><a href="http://primo.nl.ru">http://primo.nl.ru</a> <a href="http://nbmgu.ru">http://nbmgu.ru</a> Электронная библиотека Российской государственной библиотеки</p> <p><b>Материально-техническое обеспечение дисциплины:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- лекционные аудитории;</li> <li>- аудитории для семинарских занятий;</li> <li>- проекционное оборудование и компьютер;</li> <li>- интерактивная доска.</li> </ul>		
<b>Формы текущего и рубежного контроля</b>	Тестовые задания, контрольные работы, курсовая работа.		
<b>Формы промежуточного контроля</b>	экзамен		