

МИНОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Аннотированная рабочая программа дисциплины
ИЗБРАННЫЕ ГЛАВЫ ФУНДАМЕНТАЛЬНОЙ И ПРИКЛАДНОЙ ХИМИИ

Специальность
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Квалификация выпускника
специалист

Форма обучения
очная

Томск 2016

1. Код и наименование дисциплины

Б.1.Б.25 Избранные главы фундаментальной и прикладной химии.

2. Цель изучения дисциплины

Цель курса: ознакомление студентов с понятийным аппаратом дисциплины, получение знаний в области прикладных и теоретических задач физической химии для применения их в расчетах к реальным химическим объектам.

3. Год/годы и семестр/семестры обучения.

5 год, 9 семестр

4. Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы, 72 часа, из которых 36 часов составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (18 часа – занятия лекционного типа, 18 часа – практические занятия), 36 часов составляет самостоятельная работа обучающегося. Для студентов проводятся групповые и индивидуальные консультации.

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

| Формируемые компетенции (код компетенции, уровень (этап) освоения) | Планируемые результаты обучения по дисциплине |
|---|---|
| (ОПК-1), I уровень способность воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач | З (ОПК-1) – I Знать: базовые понятия и определения физической химии, теоретические основы: постулаты, законы и их следствия У (ОПК-1) – I Уметь: применять базовые понятия и определения физической химии, теоретические основы: постулаты, законы и их следствия для решения профессиональных задач; В (ОПК-1) – I Владеть: навыками и приемами использования постулатов, законов и их следствий для решения профессиональных задач; |
| (ОПК-3), II уровень способность использовать теоретические основы фундаментальных разделов математики и физики в профессиональной деятельности | З (ОПК-3) – I Знать: основы фундаментальных разделов математики и физики в профессиональной деятельности для решения конкретных задач физической химии У (ОПК-3) – I Уметь: применять основы фундаментальных разделов математики и физики в профессиональной деятельности для решения конкретных задач физической химии, обрабатывать результаты расчетов, проводить анализ и прогнозирование полученных данных; В (ОПК-3) – I Владеть: навыками и приемами теоретических расчетов химической термодинамики и кинетики. |
| (ПК-3), I уровень владение системой фундаментальных | З (ПК-3) – I Знать: систему фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии |

| | |
|--|--|
| химических понятий и методологических аспектов химии, формами и методами научного познания | У (ПК-3) – I Уметь: - правильно и доступно представить полученные результаты; - формулировать физическую постановку задачи, обеспечивающую наиболее полное отражение основных факторов, влияющих на получение итогового результата; В (ПК-3) – I Владеть: основными теоретическими знаниями химии, физики, математики. |
|--|--|

6. Содержание дисциплины и структура учебных видов деятельности

6.1 Структура дисциплины «Избранные главы фундаментальной и прикладной химии»

Дисциплина изучается на 5 курсе в 9 семестре. Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы, 72 часов.

| № п/п | Раздел Дисциплины | Всего | Неделя семестра | Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах) | | | | Самостоятельная работа (час.) |
|--|--|-------|-----------------|--|---------|-----------|---------|-------------------------------|
| | | | | лекции | Лаборат | Практи ч. | коллоқ. | |
| Химическая термодинамика | | | | | | | | |
| 1 | Введение. Основные понятия, определения химической термодинамики. Уравнения состояния. 1-3 законы термодинамики. Термохимия. | 12 | 10-11 | 6 | | - | | 6 |
| 2 | Графические методы решения задач химической термодинамики | 12 | 11-12 | - | | 6 | | 6 |
| Химическое и фазовое равновесие | | | | | | | | |
| 4 | Краткая характеристика химического и фазового равновесия. Основные понятия и определения. | 12 | 13-14 | 6 | | - | | 6 |
| 5 | Расчетные методы, применяемые в анализе химического и фазового равновесия. | 12 | 14-15 | - | | 6 | | 6 |
| Химическая кинетика (теории химической кинетики) | | | | | | | | |
| 10 | Основные понятия и определения химической кинетики. Теории химической кинетики | 12 | 15-16 | 6 | | - | | 6 |
| 11 | Методы расчета порядка и константы химического равновесия. Задачи, решаемые с помощью теорий химической кинетики. | 12 | 16-17 | - | | 6 | | 6 |
| | ВСЕГО | 72 | | 18 | | 18 | | 36 |

6.2 Содержание дисциплины

Содержание лекционного курса

6.2.1 *Химическая термодинамика*: Основные понятия и определения химической термодинамики. Термическое равновесие системы (нулевой закон термодинамики). Постулат о равновесии. Уравнения состояния (термическое, калорическое). Уравнения состояния идеального газа, газа Ван-дер-Ваальса. Теорема о соответственных состояниях. Вириальные уравнения состояния. Работа расширения для различных процессов. Первый закон термодинамики. Внутренняя энергия. Энтальпия. Эффект Джоуля-Томсона. Закон Гесса и его следствия. Уравнение Кирхгоффа. Зависимость теплоемкости от температуры и расчеты тепловых эффектов реакций. Второй закон термодинамики и его различные формулировки. Энтропия. Уравнение второго начала термодинамики для обратимых и необратимых процессов. Теорема Карно - Клаузиуса. Абсолютная энтропия вещества. Расчет абсолютной энтропии вещества при заданной температуре. Расчет изменения энтропии в химических реакциях при заданной температуре. Фундаментальное уравнение Гиббса. Термодинамические потенциалы. Соотношения Максвелла и их использование для вывода различных термодинамических соотношений.

Методы вычисления энтропии, внутренней энергии, энтальпии, энергии Гельмгольца и энергии Гиббса.

6.2.2 *Графические методы решения задач химической термодинамики*.

6.2.3 *Химическое и фазовое равновесие*: Краткая характеристика химического и фазового 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 . Расчет равновесных концентраций. Гетерогенное химическое равновесие. Уравнение изотермы химической реакции Вант-Гоффа. Термодинамическое обоснование направления химической реакции. Уравнение изобары и изохоры химической реакции. Интегрирование уравнения Вант-Гоффа. Влияние температуры на положение равновесия. Расчет среднего и истинного теплового эффекта химической реакции. Принцип Ле-Шателье. Смещение равновесия. Химическое равновесие и тепловой закон Нернста и его следствие. Изменение теплоемкости и энтропии при 0 К. 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. 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 и 2-го рода. Изменение термодинамических характеристик (химический потенциал, энтропия, теплоемкость) при фазовых переходах 1-го и 2-го рода. Диаграммы состояния одно-, двух- и трехкомпонентных систем.

6.2.4 *Расчетные методы, применяемые в анализе химического и фазового равновесия*.

6.2.5 *Химическая кинетика (теории химической кинетики)*: 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, 2-го порядка, реакции нулевого и n-го порядков. Кинетика сложных химических реакций на примере реакции 1-го порядка. Кинетика параллельных реакций. Кинетика последовательных реакций. Метод квазистационарного приближения Боденштейна. Теории химической кинетики. Основные положения теории Аррениуса. Способы определения опытной энергии активации и ее связь с энергиями активации элементарных процессов. Теория соударений (ТС). Основные положения. Теория активированного комплекса (ТАК). Уравнение Лондона. Полуэмпирическая формула Морса. Понятие координаты реакции. Задачи, решаемые при построении поверхности потенциальной энергии. 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. Мономолекулярные реакции. Схема Линдемана. Анализ кинетического уравнения. 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.

6.2.6 Методы расчета порядка и константы химического равновесия. Задачи, решаемые с помощью теорий химической кинетики.

6.3. Форма промежуточной аттестации

Зачет

7. Ресурсное обеспечение дисциплины

7.1 Основная литература

1. Минакова Т.С. Адсорбционные процессы на поверхности твердых тел: учеб. пособие / Т.С. Минакова - Томск: Изд-во Том.ун-та, 2007. – 282 с.
2. Шилиева Л.П. Практические работы по физической химии (Электрическая проводимость): учеб. пособие / Л.П. Шилиева [и др.] - Томск: Издательство Томского государственного университета, 2011. – 81 с.
3. Эткинс П. Физическая химия / П. Эткинс, Дж. де Паула - М.: Мир, 2007. - Т.1. – 494 с.
4. Чоркендорф И. Современный катализ и химическая кинетика. (Перевод с английского) / И. Чоркендорф, Х. Наймантсведрайт 2-е изд. — Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект», 2010. — 504 с.

7.2 Дополнительная литература

1. Цыро Л.В. Практические работы по физической химии. Химическое равновесие: учеб. пособие / Л.В. Цыро, С.Я. Александрова, Ф.Г. Унгер - Томск: Изд-во Том.ун-та, 2003. – 80 с.
2. Романовский Б.В. Основы химической кинетики / Б.В. Романовский - М.: «Экзамен», 2006. – 415 с.
3. Байрамов В.М. Основы химической кинетики и катализа / В.М. Байрамов - М.: Издательский центр «Академия», 2003. – 256 с.
4. Дамаскин Б.Б. Электрохимия / Б.Б. Дамаскин О.А. Петрий Г.А. Цирлина - М.: Химия. КолосС, 2008. – 672 с.

7.3 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

<http://www.chem.mgu.su>
<http://www.misis.ru>
<http://bio.sfu-kras.ru>
<http://physchem.distant.ru>
<http://www.nsu.ru/xmlui/handle/nsu/6559>

8. Преподаватель (преподаватели):

Автор, Магаев Олег Валерьевич, к.х.н., доцент кафедры физической и коллоидной химии.