

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ИНГУШСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Кафедра химии



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе

Батыгов З.О.

«25» мая 2018 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА И ФАЗОВЫЕ
РАВНОВЕСИЯ**

Факультет: химико-биологический

Направление подготовки /специальность: 04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки: «Физическая химия»

Программа подготовки: академическая магистратура

Квалификация (степень) выпускника: Магистр

Форма обучения: очная

МАГАС 20 18 г.

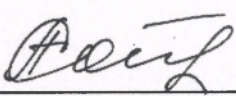
Составители рабочей программы


_____/ профессор, к.т.н. / Арчакова Р.Д./

Рабочая программа утверждена на заседании кафедры химии

Протокол заседания № 6 от «24» апреля 2018 г.

/ Заведующий кафедрой

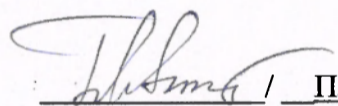

_____/ Султыгова З.Х. /

Рабочая программа одобрена учебно-методическим советом

химико-биологического факультета

Протокол заседания № 4 от «28» апреля 2018 г.

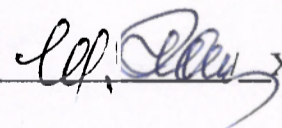
Председатель учебно-методического совета


_____/ Плиева А.М. /

Программа рассмотрена на заседании Учебно-методического совета университета

протокол № 5 от «23» мая 2018 г.

Председатель Учебно-методического совета университета


_____/ Хашагульгов Ш.Б. /

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями освоения дисциплины «Химическая термодинамика и фазовые равновесия» являются:

- изучение теоретических основ классической и статистической термодинамики, фазовых равновесий применения термодинамических методов для решения химических проблем;
- 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.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

Дисциплина «Химическая термодинамика и фазовые равновесия» относится к вариативной части обязательных дисциплин; изучается во 2 семестре.

Дисциплина 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.

Таблица 2.1.

Связь дисциплины «Химическая термодинамика и фазовые равновесия» с предшествующими дисциплинами и сроки их изучения

Код дисциплины	Дисциплины, предшествующие дисциплине «Химическая термодинамика и фазовые равновесия»	Семестр
Б1.В.ОД.5	Статистическая термодинамика конденсированных систем	1
Б1.В.ОД.7	Термодинамика и молекулярно-кинетическая теория необратимых процессов	1
Б1.В.ДВ.4	Основные методы анализа	1

Таблица 2.2.

Связь дисциплины «Химическая термодинамика и фазовые равновесия» с последующими дисциплинами и сроки их изучения

Код дисциплины	Дисциплины, следующие за дисциплиной «Химическая термодинамика и фазовые равновесия»	Семестр
Б1.В.ОД.4	Химическая динамика элементарных процессов, катализ.	3
Б1.В.ОД.8	Современные проблемы физической химии	3
Б1.В.ДВ.5	Химическая кинетика и механизмы химических реакций	3

В результате освоения дисциплины магистрант должен

Знать:

- базовую терминологию, относящуюся к химической термодинамике и фазовым равновесиям, основные понятия и законы термодинамики, их математическое выражение;
- понимать логику распространения термодинамического метода к многокомпонентным системам различного типа;
- основные экспериментальные и расчетные методы определения макроскопических характеристик системы и отдельных ее составляющих веществ;
- понимать роль химической термодинамики как одной из теоретических основ химии.

Уметь:

- продемонстрировать связь фундаментальных законов термодинамики с химическими явлениями;
- решать задачи по химической термодинамике;
- моделировать химическое, фазовое равновесие, свойства растворов и проводить численные расчеты физико-химических величин;
- проводить эксперименты по измерению теплот химических процессов, свойств растворов, определению констант равновесия химических реакций, построению диаграмм состояния.
- самостоятельно формулировать задачу физико-химического исследования в химических системах;
- пользуясь полученными знаниями, уметь выбирать оптимальные пути и методы решения поставленных задач ;
- проводить физико-химические исследования систем и процессов с использованием современных методов и приборов ФХМА;
- проводить физико-химические расчеты;
- пользоваться справочной литературой;

- графически отображать полученные зависимости;
- анализировать и обсуждать результаты физико-химических исследований;
- вести научную дискуссию.

Владеть:

- основами дисциплины для решения практических задач;
- методикой проведения физико-химических исследований;
- современными приборами для физико-химических исследований.

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ОПОП ВО по данному направлению подготовки:

- а) **общепрофессиональных (ОПК)** - ОПК-2;
- б) **профессиональных (ПК)** - ПК-1, ПК-3.

Таблица 3.1.

Матрица связи компетенций, формируемых на основе изучения дисциплины «Химическая термодинамика и фазовые равновесия», с временными этапами освоения ее содержания

Коды компетенций (ФГОС)	Компетенция	Семестр изучения
ОПК-2	Владение современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации.	2
ПК-1	Способность проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты	2
ПК-3	Готовность использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований.	2

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Таблица 4.1.

Вид учебной работы	Всего часов	2 семестр
Общая трудоемкость дисциплины	144	144
Аудиторные занятия	50	50
Лекции	16	16
Лабораторные занятия	32	32
Контроль самостоятельной работы	2	2
Самостоятельная работа студентов	58	58
Контроль	36	36

5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ, СТРУКТУРИРОВАННОЕ ПО ТЕМАМ (РАЗДЕЛАМ) С УКАЗАНИЕМ ОТВЕДЕННОГО НА НИХ КОЛИЧЕСТВА АКАДЕМИЧЕСКИХ ИЛИ АСТРОНОМИЧЕСКИХ ЧАСОВ И ВИДОВ УЧЕБНЫХ ЗАНЯТИЙ

Таблица 5.1.

Структура и содержание дисциплины

п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы (час)				Формы контроля
				Лекции	Лабораторные работы	Самостоятельные работы		
1.	Введение. Основные положения	2	1,2	2	2	10		
2	Основы химической термодинамики. Термохимия.	2	3-5	4	12	12		Контр. работа
3	Растворы	2	6-8	4	4	12		Контр. работа
4	Фазовые, химические и адсорбционные равновесия	2	9-13	4	14	12		Контр. работа
5	Расчет констант равновесий химических реакций	2	14-16	2	-	12		Опрос
	Итого:			16	32	58		

Таблица 5.2.

Конкретизация результатов освоения дисциплины

<i>ОПК-2 Владение современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации</i>		
Знать: возможности использования современных информационных технологий в образовании и науке; системы сбора, обработки и хранения химической информации; виды программного обеспечения для представления результатов химических исследований, принципы создания, построения и виды компьютерных презентаций; использовать презентационную графику для визуализации результатов теоретического и экспериментального исследований.	Уметь: создавать авторские и пользоваться стандартными банками компьютерных программ и банками данных; анализировать результаты математической обработки научных данных с целью определения их достоверности и области использования; использовать презентационную графику для визуализации результатов теоретического и экспериментального исследований.	Владеть: методами обработки информации системами мультимедиа, навыками создания компьютерных презентаций, в том числе интерактивных; всеми видами научного общения.
<i>ПК-1 Способность проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты</i>		
Знать: о наиболее актуальных направлениях исследований в современной теоретической и экспериментальной химии твердого тела (синтез и применение веществ в наноструктурных технологиях, исследования в экстремальных условиях, химия жизненных процессов, химия и экология и др.); электрические и магнитные свойства перспективных материалов, используемых в современной технике; принципы обработки полученных в исследованиях результатов; возможности использования Интернет-ресурсов для ознакомления с передовыми исследованиями в сфере профессиональных результатов.	Уметь: анализировать состав и свойства полученных веществ с целью доказательства выполнения поставленной задачи; давать рекомендации на основании проведенных исследований; оценивать экологические последствия, связанные с развитием ядерной промышленности, производить целенаправленный выбор источников ионизирующего излучения, необходимых для получения желаемого эффекта при обработке различных природных и искусственных объектов, и применять их в соответствии с различными требованиями; классифицировать материалы по различным признакам.	Владеть: современными технологиями получения энергетических и наноматериалов, радиоактивных элементов, физико-химическим инструментарием, необходимым для определения степени воздействия ионизирующего излучения на различные объекты окружающей среды; навыками работы с поисковыми и информационными ресурсами на английском языке в сети Интернет.

<i>ПК-3 Готовность использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований</i>		
Знать: принципы работы на современной научной аппаратуре при проведении научных исследований.	Уметь: работать на современной научной аппаратуре при проведении научных исследований, выбирать средства измерений, методику анализа, оценивать уровень загрязнений; анализировать современные материалы и средства регистрации информации; делать выбор средств и материалов регистрации информации при проведении научных исследований.	Владеть: навыками выбора оптимального метода исследования функциональных материалов в зависимости от объема и целей исследования для решения поставленных задач на основании анализа и сопоставления всей совокупности имеющихся данных.

Содержание дисциплины «Химическая термодинамика и фазовые равновесия»

ТЕМА 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.

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 соответственных состояниях и общая проблема уравнения состояния. Вириальные уравнения состояния.

Теплота и работа. Внутренняя энергия. Первый закон термодинамики. Применение первого закона термодинамики к 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 и абсолютная энтропия 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. Соотношения 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 и несимметричная системы отсчета.

Коллигативные свойства растворов. Изменение 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. Функция смешения для идеальных и неидеальных растворов. Предельно разбавленные растворы, атермальные, регулярные, строго регулярные растворы и их свойства.

Парциальные мольные 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 их 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 и Розебома.

Взаимная растворимость в системе трех жидкостей.

Закон действия масс. История его открытия и современная трактовка. Различные

виды констант равновесия и связь между ними. Химическая переменная.

Химическое равновесие в идеальных и неидеальных системах. Термодинамический вывод закона действия масс.

Изотерма Вант-Гоффа. Изменение энергии Гиббса и энергии Гельмгольца при химической реакции. Термодинамическая трактовка понятия о химическом сродстве.

Принцип Бертелло и область его применимости. Расчеты констант равновесия химических реакций с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций.

Приведенная энергия Гиббса и ее использование для расчетов химических равновесий.

Расчета выхода продуктов химических реакций различных типов. Выходы продуктов при совместном протекании нескольких химических реакций.

Зависимость констант равновесия от температуры. Уравнения изобары и изохоры реакции; их термодинамический вывод.

Использование различных приближений для теплоемкостей реагентов при расчетах химических равновесий при различных температурах.

Гетерогенные химические равновесия и особенности их термодинамического описания.

6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В процессе обучения используются традиционные образовательные технологии (лекции, семинары, практические работы) и активные инновационные образовательные технологии:

1. Семинар в диалоговом режиме применяется в основном при обсуждении выступлений магистрантов с докладами (рефератами)
2. Групповой разбор результатов контрольных работ
3. Встречи с сотрудниками и руководителями профильных лабораторий и предприятий - потенциальными работодателями выпускников.

В целом при изучении курса активные и интерактивные формы проведения занятий составляют не менее 30% аудиторных занятий.

7. ПЕРЕЧЕНЬ УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

7.1. Перечень-учебно-методического обеспечения для обучающихся по дисциплине:

1. Физическая химия. В двух книгах. /Под ред. К.С. Краснова. М.: Высшая школа, 1995г., 2001. Строение вещества. Термодинамика.
2. Стромберг А.Г., Д.П. Семченко. Физическая химия. М.: Высшая школа, 1999г.
3. Полторак О.М. Термодинамика в физической химии. М.: Высшая школа, 1991г.

Лекционные занятия проводятся 1 раз в неделю в объеме 1 часа и 2 часа лабораторных занятий во 2 семестре. После окончания изучения каждой темы магистранты проходят тестирование, выполняют контрольные работы.

7.2. Указания для обучающихся по освоению дисциплины

Таблица 7.1.. Содержание самостоятельной работы обучающихся

<i>№№ п/п</i>	<i>Темы/вопросы, выносимые на самостоятельное изучение</i>	<i>Кол-во часов</i>	<i>Формы работы</i>
1.	Введение. Основные положения.	10	собеседование
2.	Основы химической термодинамики. Термохимия.	12	собеседование
3.	Растворы.	12	собеседование
4.	Фазовые, химические и адсорбционные равновесия.	12	собеседование
5.	Расчет констант равновесий химических реакций.	12	собеседование

8. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

Фонды оценочных средств и критерии оценки представлены отдельно, как приложение к рабочей программе.

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

а) основная литература:

1. Физическая химия. В двух книгах. /Под ред. К.С. Краснова. М.: Высшая школа, 1995г., 2001. Структура вещества. Термодинамика.
2. Стромберг А.Г., Д.П. Семченко. Физическая химия. М.: Высшая школа, 1999г.
3. Полторак О.М. Термодинамика в физической химии. М.: Высшая школа, 1991г.
4. Кудряшов И.В., Каретников Г.С. Сборник примеров и задач по физической химии. М.: Высшая школа, 1991г.

б) дополнительная литература

1. Курс физической химии. Т.1 Под ред. Я.И. Герасимова. М.: Химия, 1973г.
2. Карапетьянц М.Х. Химическая термодинамика. М.: Химия, 1975г.
3. Даниэльс Ф., Олберти Р. Физическая химия. М.: Мир, 1978г.
4. Смирнова Н.А. Методы статистической термодинамики в физической химии. Учебное пособие. 2-ое издание, перераб. и дополн.

в) электронные источники информации

1. Научная электронная база данных издательства Elsevier, <http://www.sciencedirect.com/>
2. Научная электронная база данных издательства ACS Publication, <http://pubs.acs.org/>
3. Научно-поисковая электронная база данных Reaxys. <https://www.reaxys.com/>
4. Научная электронная база данных издательства Springer, <http://www.springerlink.com/>

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Требования к аудитории для лекционных и практических занятий: бесшумная светлая аудитория на 25 посадочных мест с доской.

Требования к аудитории для лабораторных занятий: лаборатория 60-70 м² с вытяжкой, общим и местным (над шестью рабочими столами) освещением, канализацией (холодная и горячая вода).

Требования к специализированному оборудованию: вытяжной шкаф, химически стойкая раковина, шесть лабораторных столов со стойким покрытием, один стол преподавателя, двенадцать лабораторных стульев, доска, технические и аналитические весы.

Теоретический курс:

1. Лекции, презентации.
2. Контрольные тесты.
3. Список вопросов для проведения коллоквиумов.
4. Таблицы.
5. Варианты заданий для контрольных работ.
6. Тематика курсовых работ.
7. Набор реактивов и оборудования для лекционных опытов.

Лабораторный практикум:

1. Тематика и описание лабораторных работ (специально разработанный и изданный лабораторный практикум для студентов химического направления).
2. Набор химических реактивов к каждой лабораторной работе.
3. Лабораторные установки, оборудование.

Материальное обеспечение дисциплины

- Калориметр
- Рефрактометр УРЛ, УРЛ-15
- Установка для криоскопии
- Установка для термического анализа
- Модуль "Термостат"
- Аналитические весы
- Технические весы
- Лабораторная посуда