

## 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

Цель изучения дисциплины	<p>Целями изучения дисциплины «Химическая термодинамика и фазовые равновесия» являются:</p> <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>
Место дисциплины в структуре ОПОП магистратуры	<p>Дисциплина «Химическая термодинамика и фазовые равновесия» относится к обязательной части дисциплин; изучается во 2-ом семестре.</p> <p>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.</p> <p>Перечень дисциплин, необходимых для изучения дисциплины: неорганическая химия, квантовая химия, физика, математика.</p>
Компетенции, формируемые в результате освоения дисциплины	<p>В результате освоения дисциплины обучающийся должен демонстрировать следующие результаты образования:</p> <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 использовать вычислительные методы и адаптировать</li></ul>

	<p>существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности (ОПК-3);</p> <p>- 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).</p>
<b>Содержание дисциплины</b>	<p style="text-align: center;"><b>Тема 1. Введение</b></p> <p>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.</p> <p style="text-align: center;"><b>Тема 2. Основы химической термодинамики</b></p> <p>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.</p> <p>Уравнения состояния. Уравнение состояния идеального газа, газа Ван-дер-Ваальса. Теорема о соответственных состояниях и общая проблема уравнения состояния. Вириальные уравнения состояния.</p> <p>Теплота и работа. Внутренняя энергия. Первый закон термодинамики. Применение первого закона термодинамики к различным процессам в газах. Энтальпия. Цикл Карно. Лемма Карно.</p> <p>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.</p> <p>Таблицы стандартных термодинамических величин и их использование в термодинамических расчетах. Калорические коэффициенты.</p> <p>Второй закон термодинамики и его различные формулировки. Энтропия. Уравнение второго начала термодинамики для обратимых и необратимых процессов. Обоснование второго закона термодинамики. Теорема Карно-Клаузиуса.</p> <p>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.</p> <p>Расчеты изменений энтропии обратимых и необратимых процессов. Вычисления абсолютной энтропии твердых тел, жидкостей и газов. Изменение энтропии химической реакции.</p> <p>Фундаментальные уравнения Гиббса для закрытых систем. Энергия Гельмгольца, энергия Гиббса и их свойства.</p>

	<p>Термодинамические потенциалы и характеристические функции. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов, выраженные через характеристические функции.</p> <p>Уравнение Гиббса-Гельмгольца и его роль в химии. Работа и теплота химического процесса. Соотношения Максвелла. Использование для вывода общего уравнения состояния фазы.</p> <p>Характеристические функции идеального газа. Энергия Гиббса идеального газа.</p> <p>Характеристические функции реального газа. Методы летучести. Расчет летучести (фугитивности) из опытных данных.</p> <p>Фундаментальные уравнения Гиббса для открытых систем. Химические потенциалы, их определение, вычисление и свойства. Химический потенциал идеального и неидеального газов.</p> <p><b>Тема 3. Растворы</b></p> <p>Растворы различных классов. Различные способы выражения состава раствора.</p> <p>Смеси идеальных газов. Термодинамические свойства газовых смесей. Идеальные растворы в различных агрегатных состояниях и общее условие идеальности растворов.</p> <p>Давление насыщенного пара жидких растворов. Закон Рауля и отклонение от него. Коэффициенты активности и их определение по парциальным давлениям веществ.</p> <p>Стандартные состояния при определении химических потенциалов компонентов растворов. Симметричная и несимметричная системы отсчета.</p> <p>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.</p> <p>Термодинамическая классификация растворов. Функции смешения для идеальных и неидеальных растворов. Предельно разбавленные растворы, атермальные, регулярные, строго регулярные растворы и их свойства.</p> <p>Парциальные мольные величины и их определение из опытных данных для бинарных систем. Уравнения Гиббса-Дюгема.</p> <p>Равновесие жидкость-пар в двухкомпонентных системах. Равновесные составы пара и жидкости. Закон Рауля-Дальтона. Различные виды диаграмм состояния.</p> <p>Законы Гиббса-Коновалова. Разделение веществ путем перегонки. Азеотропные смеси и их свойства. Влияние давления и температуры на растворимость газов в жидкостях.</p> <p>Закон Генри. Ограниченная взаимная растворимость двух жидкостей. Третий компонент в системе из двух несмешивающихся жидкостей. Закон распределения Нернста.</p> <p>Растворимость твердых тел в жидкостях. Идеальная растворимость. Уравнение Шредера. Зависимость растворимости от температуры.</p>
--	--

	<p><b>Тема 4. Фазовые, химические и адсорбционные равновесия</b></p> <p>Гетерогенные системы. Понятие фазы, компонента, степени свободы. Правило фаз Гиббса и его вывод.</p> <p>Однокомпонентные системы. Диаграммы состояния воды, серы. Фазовые переходы первого рода, Уравнение Клапейрона-Клаузиуса и его применение к различным фазовым переходам первого рода.</p> <p>Двухкомпонентные системы. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем и их анализ на основе правила фаз.</p> <p>Трехкомпонентные системы. Треугольники Гиббса и Розебома.</p> <p>Взаимная растворимость в системе трех жидкостей.</p> <p>Закон действия масс. История его открытия и современная трактовка. Различные виды констант равновесия и связь между 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 и энергии Гельмгольца при химической реакции. Термодинамическая трактовка понятия о химическом родстве.</p> <p>Принцип Бертелло и область его применимости. Расчеты 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 знать:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- базовую терминологию, относящуюся к химическому термодинамике и фазовым равновесиям, основные понятия и законы термодинамики, их математическое выражение;</li> <li>- понимать логику распространения термодинамического метода на многокомпонентным системам различного типа;</li> <li>- основные экспериментальные и расчетные методы определения</li> </ul>

	<p>макроскопических характеристик системы и отдельных ее составляющих веществ;</p> <ul style="list-style-type: none"> <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 и процессов с использованием современных методов и приборов ФХМА;</li> <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
Используемые ресурсы информационно- теле-коммуникационной сети «Internet», информационные технологии, программные средства и информа-ционно-справочные системы	<p><b>Интернет-ресурсы</b></p> <p> <a href="http://fizrast.ru/sitemap.html">http://fizrast.ru/sitemap.html</a>  <a href="http://www.don-agro.ru">http://www.don-agro.ru</a>  <a href="http://xn-80abucjiibhv9a.xn-plai/">http://xn-80abucjiibhv9a.xn-plai/</a>  <a href="http://www.agroxxi.ru/">http://www.agroxxi.ru/</a> (РГБ)  <a href="http://elibrary.rsl.ru">http://elibrary.rsl.ru</a> Научная электронная библиотека  <a href="http://elibrary.ru/default.asp">http://elibrary.ru/default.asp</a> Российская национальная библиотека  <a href="http://primo.nlr.ru">http://primo.nlr.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>		
Формы текущего и рубежного контроля	Тестовые задания, контрольные работы, курсовая работа.		
Формы промежуточ-ного контроля	экзамен		