

**АННОТАЦИЯ ПРОГРАММЫ  
ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ  
(ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА)  
подготовки бакалавра по направлению 020101.62 Химия**

**ЦИКЛ ДИСЦИПЛИНЫ НАПРАВЛЕНИЯ**

Федеральный компонент

**Цели и задачи изучения дисциплины**

**Цель дисциплины** - изучение теоретических основ классической и статистической термодинамики и способов применения термодинамических методов для решения химических проблем, а также формирования у студентов знаний и умений, позволяющих моделировать и проводить численные расчеты при описании различных видов химических и фазовых равновесий и свойств веществ в растворах.

**Задачи дисциплины:**

- сформировать базовые знания и основные понятия химической термодинамики, представления о ее фундаментальных законах и основных методах. Обобщить и систематизировать знания, включающие термодинамику и другие химические дисциплины;
- раскрыть роль термодинамики при описании макроскопических систем, сформулировать основные задачи, решаемые термодинамическим методом при рассмотрении химических, фазовых равновесий и свойств растворов;
- рассмотреть основные экспериментальные закономерности по теплоемкости веществ, теплотам химических реакций и теплотам растворения, применение законов термодинамики к химическим процессам, представить в виде математических уравнений основные термодинамические законы и особенности их использования при описании химических процессов и явлений, протекающих в многокомпонентных системах;
- рассмотреть основные методы экспериментального и теоретического исследования химических и фазовых равновесий в многокомпонентных системах, использование термодинамического метода в химических технологиях;
- установить область применимости термодинамического метода по отношению к химическим явлениям, рассмотреть способы вычисления физико-химических величин, характеризующих эти явления; обеспечить овладение методологией физико-химических исследований.

В результате освоения учебной дисциплины обучающийся должен

– **знать:**

- роль физической химии как теоретического фундамента современной химии, владеть основами химической термодинамики;
- о химической термодинамике как разделе физической химии и ее роли в современной химии;
- о химических, фазовых и адсорбционных равновесиях и свойствах вещества в растворах;
- базовую терминологию, относящуюся к химической термодинамике, основные понятия и законы термодинамики, их математическое выражение;
- о принципах использования термодинамического метода в современных химических технологиях.

– **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.

– **быть способным:**

- использовать в познавательной и профессиональной деятельности базовые знания в области физической химии
- в условиях развития науки и техники к критической переоценке накопленного опыта и творческому анализу своих возможностей;
- использовать полученные навыки работы для решения профессиональных и социальных задач.

**Краткое содержание**

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

Теплота и работа. Внутренняя энергия. Первый закон термодинамики. Применение первого закона термодинамики к различным процессам в газах. Энтальпия и теплоемкость. Уравнения адиабаты. Работа адиабатического процесса.

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.

Уравнения состояния. Уравнение состояния идеального газа, газа Ван-дер-Ваальса. Теорема о соответственных состояниях и общее термодинамическое уравнение состояния. Вириальные уравнения состояния. Межмолекулярные взаимодействия в реальных газах.

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 термодинамического 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.

Растворы. Способы выражения концентраций в растворах. Коллигативные свойства растворов (понижение давления пара растворителя, повышение точки кипения, понижение температуры затвердевания, осмотическое давление).

Смеси идеальных газов. Их термодинамические свойства. Термодинамика идеальных растворов. Реальные растворы. Метод активностей. Стандартные состояния при определении химических потенциалов компонентов растворов. Симметричная и несимметричная системы отсчета. Парциальные мольные величины и их определение из опытных данных для бинарных систем. Уравнение Гиббса-Дюгема. Термодинамическая классификация растворов. Функции смешения для идеальных и неидеальных растворов. Предельно разбавленные растворы, атермальные, регулярные, строго регулярные растворы и их свойства.

Давление насыщенного пара жидких растворов. Закон Рауля и отклонение от него. Коэффициенты активности и их определение по парциальным давлениям веществ. Равновесие жидкость-пар в двухкомпонентных системах. Равновесные составы пара и жидкости. Закон Рауля-Дальтона. 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.

Гетерогенные системы: фаза, составляющее вещество системы, компонент, число термодинамических степеней свободы. Расчет числа компонентов в однофазных и многофазных системах. Правило фаз Гиббса, его вывод. Однокомпонентные системы. Диаграмма состояния воды. Диаграмма состояния серы. Энантиотропные и монокотропные переходы. Фазовые переходы первого рода. Уравнения Клапейрона и Клаузиуса-Клапейрона: вывод, применение к различным фазовым переходам первого рода. Правило Труттона. Физико-химический анализ. Принцип непрерывности, принцип соответствия. Термический анализ, основные методики термического анализа. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем и их анализ на основе правила фаз. Способы выражения концентраций в трехкомпонентной системе: треугольники Гиббса и Розебома. Взаимная растворимость в системе трех жидкостей.

Закон действующих масс, его термодинамический вывод. Химическое равновесие в идеальных и неидеальных системах. Различные виды констант равновесия. Влияние давления на смещение химического равновесия. Уравнение изотермы химической реакции Вант-Гоффа, его вывод. Стандартная энергия Гиббса реакции. Термодинамическая трактовка понятия о химическом сродстве. Принцип Бертелло и область его применимости. Тепловой закон Нернста. Влияние температуры на смещение химического равновесия. Уравнения изобары и изохоры реакции; их термодинамический вывод. Расчеты констант равновесия химических реакций с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций при стандартной температуре и температуре, отличной от стандартной. Равновесие реакций в газовой фазе, протекающих без изменения и с изменением числа молекул. Равновесие реакции синтеза аммиака. Гетерогенное химическое равновесие в системе газ - твердое тело.

Адсорбция. Адсорбент, адсорбат. Область малых заполнений поверхности. Уравнение Генри. Теория мономолекулярной локализованной адсорбции Ленгмюра. Теория полимолекулярной адсорбции БЭТ.

Задачи статистической термодинамики. Микро и макросостояние системы. Механическое описание молекулярной системы. Функция распределения Максвелла-Больцмана. Фазовые  $\mu$ ,  $\Gamma$  и  $\Omega$  - пространства. Статистические средние значения макроскопических величин. Ансамбли Гиббса. Метод функций распределения для канонического ансамбля. Основные постулаты статистической термодинамики.

Каноническая функция распределения Гиббса. Сумма по состояниям как статистическая характеристическая функция. Статистические выражения для основных термодинамических функций - внутренней энергии, энтропии, энергии Гельмгольца и энергии Гиббса.

Молекулярная сумма по состояниям и сумма по состояниям макроскопической системы. Поступательная сумма по состояниям. Составляющие энтропии, внутренней энергии и теплоемкости, обусловленные поступательным движением.

Вращательная сумма по состояниям для жесткого ротатора. Составляющие для внутренней энергии, теплоемкости, энтропии, обусловленные вращательным движением.

Колебательная сумма по состояниям для гармонического осциллятора. Составляющие внутренней энергии, теплоемкости и энтропии, обусловленные колебательным движением.

Расчет констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики.