

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Новосибирский национальный исследовательский государственный университет»
(Новосибирский государственный университет, НГУ)

**Физический факультет
Кафедра химической и биологической физики**



УТВЕРЖДАЮ
Декан ФФ, д.ф.-м.н
В.Е.Блинов
2022 г.

Рабочая программа дисциплины

ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА

направление подготовки: **03.03.02 Физика**
направленность (профиль): **Общая и фундаментальная физика**

Форма обучения
Очная

Семестр	Общий объем	Виды учебных занятий (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)				
		Контактная работа обучающихся с преподавателем			Самостоятельная работа, не включая период сессии	Самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации	Контактная работа обучающихся с преподавателем			
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия			Консультации	Зачет	Дифференцированный зачет	Экзамен
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
5	72	16	16		18	18	2			2
Всего 72 часа / 2 зачетных единицы из них: - контактная работа 36 часов										
Компетенции ПК-1										

Ответственный за образовательную программу,
д.ф.-м.н., проф.

С.В. Цыбуля

Новосибирск, 2022

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы.	3
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.	4
3. Трудоёмкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу.	4
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий.	5
6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.	8
7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.	9
8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.	9
9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.	9
10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.	9

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

Цель учебного курса «Химическая термодинамика» – дать слушателям набор необходимых сведений в области компьютерного моделирования атомных и молекулярных жидкостей, кристаллов, фазовых переходов, наночастиц, для изучения их структуры и динамики на микроуровне, а также получение практических навыков использования этих знаний для научной работы в области химической физики, физической физики и молекулярной биологии.

Материал лекционного курса увязывается с результатами современных исследований там, где это позволяет уровень знаний и подготовки студентов. Уделяется особое внимание современным направлениям в науке, связанным с темами курса. Материал семинарских занятий увязан с материалом лекций. При этом часто в течение лекции студентам даются небольшие задания, в которых требуется, используя прослушанный до этого материал, выполнить количественные оценки, результаты которых затем используются в лекции. Во время семинарских занятий также уделяется внимание самостоятельному решению задач студентами. При этом решению задачи предшествует коллективное обсуждение условий задачи и возможных путей решения. Важным элементом работы на семинаре является индивидуальное общение преподавателя со студентами, при котором у преподавателя есть возможность увидеть пробелы в понимании темы данным студентом и помочь ему в преодолении трудностей. При наличии активно взаимодействующих групп студентов приветствуется решение задачи в группе. При возникновении трудностей у большей части студентов, задача разбирается у доски с одним из решивших ее студентов. Отличительной особенностью задач, решаемых на семинарах, является необходимость выполнения количественных оценок, что позволяет студентам лучше ориентироваться в изучаемом материале, а также важно для их последующей практики в научной лаборатории.

Дисциплина нацелена на формирование у выпускника следующей профессиональной компетенции:

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
ПК-1 Способность использовать специализированные знания в области физики при построении теоретических моделей физических явлений и процессов в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования	<p>ПК 1.1 Применяет специализированные знания в области физики при воспроизведении учебного материала с требуемой степенью научной точности и полноты.</p> <p>ПК 1.2 Использует специализированные знания при проведении научных изысканий в избранной области.</p> <p>ПК 1.3 Выбирает наиболее эффективные методы построения теоретических моделей физических явлений и процессов в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования</p>	<p>Знать основные принципы химической термодинамики.</p> <p>Уметь применять принципы химической термодинамики для расчета фазовых и химических равновесий; для конкретной задачи выбирать подходящую термодинамическую модель; переводить задачу на математический язык; в простейших случаях получить окончательное аналитическое решение.</p> <p>Владеть методами расчета химического и фазового равновесия.</p>

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Химическая термодинамика» реализуется для обучающихся по направлению подготовки 03.03.02 Физика, направленность «Общая и фундаментальная физика». Курс относится к циклу общефизических дисциплин. В результате прохождения курса у студентов физического факультета должно сформироваться представление о том, что проблемы получения, обработки и переработки информации как в физических экспериментах, так и в более широком контексте являются физическими проблемами, для решения которых необходимо владение базовыми принципами фундаментальной физики. Необходимыми предпосылками для успешного освоения курса являются следующие:

В цикле математических дисциплин: знание основ математического анализа, методов математической физики и умение применять эти знания при решении задач. Необходимость владения указанными математическими дисциплинами обусловлена тем обстоятельством, что они составляют основу аппарата химической термодинамики.

В цикле общефизических дисциплин необходимыми предпосылками являются знание и умение применять основные принципы классической механики и электродинамики. Эти общефизические дисциплины входят составной частью в описание поведения во внешних полях как отдельных частиц, так и их макроскопического количества.

В свою очередь курс «Химическая термодинамика» является предпосылкой для изучения курсов «Статистическая физика» и «Химическая кинетика».

3. Трудоемкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу.

Семестр	Общий объем	Виды учебных занятий (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)				
		Контактная работа обучающихся с преподавателем			Самостоятельная работа, не включая период сессии	Самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации	Контактная работа обучающихся с преподавателем			
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия			Консультации	Зачет	Дифференцированный зачет	Экзамен
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
5	72	16	16		18	18	2			2
Всего 72 часа / 2 зачетные единицы из них: - контактная работа 36 часов										
Компетенции ПК-1										

Реализация дисциплины предусматривает практическую подготовку при проведении следующих видов занятий, предусматривающих участие обучающихся в выполнении отдельных элементов работ, связанных с будущей профессиональной деятельностью: лекции, практические занятия, задачи для самостоятельного решения, консультации, самостоятельная работа студента, экзамен.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

Текущий контроль: решение задач из задания для самостоятельного решения

Промежуточная аттестация: экзамен

Общая трудоемкость рабочей программы дисциплины составляет **72** академических часа / **2** зачетные единицы.

4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачётные единицы, 72 академических часа.

№ п/п	Раздел дисциплины	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)
			Всего	Аудиторные часы		Сам. работа во время занятий (не включая период сессии)	
				Лекции	Практические занятия		
1	2	3	4	5	6	7	8
1.	Предмет химической термодинамики. Основные понятия. Первый закон термодинамики. Теплота и работа; внутренняя энергия; уравнения состояния.	1	2	1	1		
2	Теплоемкость; энтальпия. Термохимия, теплоты химических реакций, закон Гесса. Энергия химических связей.	2	4	1	1	2	
3	Зависимость теплоты процесса от температуры (уравнение Кирхгофа). Самопроизвольные и несамопроизвольные процессы; второй закон термодинамики.	3	2	1	1		
4.	Теоремы Карно. Энтропия, методы расчета энтропии.	4	4	1	1	2	
5.	Характеристические функции. Химический потенциал	5	2	1	1		
6.	Термодинамика растворов. Законы Генри, Рауля Реальные растворы. Положительные и отрицательные отклонения от закона Рауля. Первый закон Коновалова. Фракционная перегонка. Температура кипения и температура замораживания растворов нелетучих веществ. Азеотропные растворы.	6	4	1	1	2	
7.	Ограниченная взаимная растворимость жидкостей. Активности компонентов раствора. Осмотическое давление, термодинамика осмотического давления.	7	2	1	1		
8.	Термодинамика химического равновесия. Закон действия масс. Константа равновесия.	8	4	1	1	2	

	Зависимость химического равновесия от температуры.						
9.	Зависимость химического равновесия от температуры. Термодинамика фазового равновесия. Правило фаз Гиббса. Однокомпонентные системы.	9	2	1	1		
10.	Двухкомпонентные системы с одной фазой переменного состава. Термический анализ	10	4	1	1	2	
11.	Поверхностные явления. Адсорбция. Уравнение изотермы адсорбции Лэнгмюра. Энтропия и теплота адсорбции	11	2	1	1		
12.	Уравнение изотермы полимолекулярной адсорбции паров Брунауэра, Эммета и Теллера (уравнение БЭТ).	12	4	1	1	2	
13.	Электрохимия, теория электролитов. Активность и коэффициент активности электролитов. Теория Дебая - Хюккеля. Потенциал ионной атмосферы, работа образования ионной атмосферы. Электростатическая энергия электролита	13	2	1	1		
14.	Статистическая термодинамика. Связь между суммой состояний и термодинамическими функциями.	14	4	1	1	2	
15.	Поверхностная термодинамика. Классическая теория поверхностного натяжения. Межфазная термодинамическая теория Гиббса.	15	2	1	1		
16.	Зависимость поверхностного натяжения от кривизны. Уравнение Гиббса-Толмена-Кенига-Баффа. Поверхностная термодинамика фазовых превращений. Работа образования критического зародыша. Фактор Лоте-Паунда-Кусаки в теории гомогенной нуклеации.	16	4	1	1	2	
	Групповая консультация		2				2
	Самостоятельная подготовка обучающегося к экзамену		18				18
	Экзамен		2				2
Всего			72	16	16	18	22

Программа и основное содержание лекций (16 часов)

1. Предмет химической термодинамики. (1 час)

Основные понятия. Первый закон термодинамики. Теплота и работа; внутренняя энергия; уравнения состояния.

2. Теплоемкость; энтальпия. (1 час)

Термохимия, теплоты химических реакций, закон Гесса. Энергия химических связей

3. Зависимость теплоты процесса от температуры (уравнение Кирхгофа). (1 час)

Самопроизвольные и несамопроизвольные процессы; второй закон термодинамики.

4. Теоремы Карно. Энтропия, методы расчета энтропии. (1 час)

5. Характеристические функции. (1 час)

Химический потенциал

6. Термодинамика растворов. (1 час)

Законы Генри, Рауля. Реальные растворы. Положительные и отрицательные отклонения от закона Рауля. Первый закон Коновалова. Фракционная перегонка. Температура кипения и температура замерзания растворов нелетучих веществ. Азеотропные растворы.

7. Ограниченная взаимная растворимость жидкостей. (1 час)

Активности компонентов раствора. Осмотическое давление, термодинамика осмотического давления.

8. Термодинамика химического равновесия. (1 час)

Закон действия масс. Константа равновесия. Зависимость химического равновесия от температуры.

9. Зависимость химического равновесия от температуры. (1 час)

Термодинамика фазового равновесия. Правило фаз Гиббса. Однокомпонентные системы.

10. Двухкомпонентные системы с одной фазой переменного состава. Термический анализ

11. Поверхностные явления. Адсорбция. (1 час)

Уравнение изотермы адсорбции Лэнгмюра. Энтропия и теплота адсорбции

12. Уравнение изотермы полимолекулярной адсорбции паров Брунауэра, Эммета и Теллера (уравнение БЭТ). (1 час)

13. Электрохимия.

теория электролитов. Активность и коэффициент активности электролитов. Теория Дебая - Хюккеля. Потенциал ионной атмосферы, работа образования ионной атмосферы. Электростатическая энергия электролита

14. Статистическая термодинамика. (1 час)

Связь между суммой состояний и термодинамическими функциями.

15. Поверхностная термодинамика. (1 час)

Классическая теория поверхностного натяжения. Межфазная термодинамическая теория Гиббса.

16. Зависимость поверхностного натяжения от кривизны. (1 час)

Уравнение Гиббса-Толмена-Кенига-Баффа. Поверхностная термодинамика фазовых превращений. Работа образования критического зародыша. Фактор Лоте-Паунда-Кусаки в теории гомогенной нуклеации.

Программа практических занятий (16 часов)

1. Предмет химической термодинамики. (1 час)

2. Теплоемкость; энтальпия. (1 час)

3. Зависимость теплоты процесса от температуры (уравнение Кирхгофа). (1 час)

4. Теоремы Карно. Энтропия, методы расчета энтропии. (1 час)

5. Характеристические функции. (1 час)

6. Термодинамика растворов. (1 час)

7. Ограниченная взаимная растворимость жидкостей. (1 час)

8. Термодинамика химического равновесия. (1 час)

9. Зависимость химического равновесия от температуры. (1 час)

10. Двухкомпонентные системы с одной фазой переменного состава. Термический анализ

11. Поверхностные явления. Адсорбция. (1 час)

12. Уравнение изотермы полимолекулярной адсорбции паров Брунауэра, Эммета и Теллера (уравнение БЭТ). (1 час)

13. Электрохимия.
14. Статистическая термодинамика. (1 час)
15. Поверхностная термодинамика. (1 час)
16. Зависимость поверхностного натяжения от кривизны. (1 час)

Самостоятельная работа студентов (36 часов)

Перечень занятий на СРС	Объем, час
Подготовка к практическим занятиям.	18 часов
Подготовка к экзамену (зачету/дифференцированному зачету/)	18 часов

5. Перечень учебной литературы.

5.1. Основная литература

1. Онищук А.А. Химическая термодинамика. В 4 частях, НГУ, 2015.
2. Бажин Н.М., Иванченко В.А., Пармон В.И. Термодинамика для химиков". М.: Химия, 2004

5.2. Дополнительная литература

1. Герасимов Я.И., Древинг В.П., Еремин Е.Н., Киселев А.В., Лебедев В.П., Панченков Г.М., Шлыгин А.И. "Курс физической химии" т.1, М.-Л.: Химия, 1969 под общей редакцией Герасимова Я.И.
2. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Статистическая физика, ч. 1.
3. Герасимов Я.И., Древинг В.П., Еремин Е.Н., Киселев А.В., Лебедев В.П., Панченков Г.М., Шлыгин А.И. "Курс физической химии" т. 2, М.: Химия, 1973 под общей редакцией Герасимова Я.И.

6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.

Самостоятельная работа студентов поддерживается следующими учебными пособиями:

1. Бажин Н.М., Иванченко В.А., Пармон В.И. Термодинамика для химиков". М.: Химия, 2004
2. Герасимов Я.И., Древинг В.П., Еремин Е.Н., Киселев А.В., Лебедев В.П., Панченков Г.М., Шлыгин А.И. "Курс физической химии" т.1, М.-Л.: Химия, 1964 под общей редакцией Герасимова Я.И.
3. Герасимов Я.И., Древинг В.П., Еремин Е.Н., Киселев А.В., Лебедев В.П., Панченков Г.М., Шлыгин А.И. "Курс физической химии" т. 2, М.-Л.: Химия, 1964 под общей редакцией Герасимова Я.И.

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.

Для освоения дисциплины используются следующие ресурсы:

- электронная информационно-образовательная среда НГУ (ЭИОС);
- образовательные интернет-порталы;
- информационно-телекоммуникационная сеть Интернет.

7.1 Современные профессиональные базы данных

Не используются.

7.2. Информационные справочные системы

Не используются.

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.

Для обеспечения реализации дисциплины используется стандартный комплект программного обеспечения (ПО), включающий регулярно обновляемое лицензионное ПО Windows и MS Office.

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.

Для реализации дисциплины «Химическая термодинамика» используются специальные помещения:

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа, курсового проектирования (выполнения курсовых работ), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля, промежуточной и итоговой аттестации;

2. Помещения для самостоятельной работы обучающихся;

Учебные аудитории укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду НГУ.

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется согласно «Порядку организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в Новосибирском государственном университете».

10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

10.1 Порядок проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по

дисциплине

Текущий контроль

Текущий контроль осуществляется по оценочной системе в виде: заданий для самостоятельного решения. Оценка знаний, умений, навыков и освоения компетенций обучающимися в рамках текущего контроля может проводиться согласно шкале и критериям, представленным ниже.

Оценка за работу в семестре учитывает активность студента на семинарах, оцениваемую преподавателем, посещение семинаров, а также количество сданных задач из заданий для самостоятельного решения. За работу в семестре выставляется оценка “2” («неудовлетворительно») в случае сдачи менее 100% задач из заданий.

Промежуточная аттестация

Освоение компетенций оценивается согласно шкале оценки уровня сформированности компетенции. Положительная оценка по дисциплине выставляется в том случае, если заявленная компетенция ПК-1 сформирована не ниже порогового уровня в части, относящейся к формированию способности использовать специализированные знания в области Химической термодинамики в профессиональной деятельности.

Окончательная оценка работы студента в течение семестра происходит на экзамене с учётом результатов текущего контроля успеваемости. Итоговая оценка не может быть выше “3” («удовлетворительно»), если оценка за работу в семестре “2” («неудовлетворительно»). Экзамен проводится в конце семестра в экзаменационную сессию, по билетам, в устной форме. Билет состоит из двух вопросов и задачи.

Уровень сформированности компетенций оценивается преподавателем по пятибалльной шкале с учётом критериев (таблица 2) по результатам решения задачи, ответов на вопросы билета и на дополнительные уточняющие вопросы.

Для получения оценки «отлично» (продвинутый уровень освоения компетенций) необходимо развёрнуто ответить на оба вопроса и решить без ошибок задачу. Также надо ответить на дополнительные вопросы по всей дисциплине.

Для получения оценки «хорошо» (базовый уровень освоения компетенций) нужно ответить на оба вопроса билета и решить задачу. Допускается несколько несущественных ошибок. Необходимо также ответить на дополнительные вопросы, имеющие принципиальное значение для данной дисциплины.

Для получения оценки «удовлетворительно» (пороговый уровень освоения компетенций) необходимо ответить хотя бы на один вопрос в билете по теории и решить задачу, при решении задачи допускаются ошибки, не влияющие на общий способ предлагаемого решения. Необходимо также ответить на дополнительные вопросы, имеющие принципиальное значение для изученной дисциплины.

Оценка «неудовлетворительно» - уровень усвоения компетенций не сформирован. Обучающийся, имеющий неудовлетворительные результаты при прохождении промежуточной аттестации, обязан ликвидировать академическую задолженность по дисциплине, согласно установленным факультетом срокам прохождения повторной промежуточной аттестации. Сроки проведения повторной промежуточной аттестации согласовываются с преподавателем и утверждаются распоряжением декана.

Вывод об уровне сформированности компетенций принимается преподавателем. Каждый вопрос билета оценивается от 0 до 5 баллов. Положительная оценка ставится, когда все компетенции освоены не ниже порогового уровня. Оценки «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» означают успешное прохождение промежуточной аттестации.

Соответствие индикаторов и результатов освоения дисциплины

Таблица 10.1

Индикатор	Результат обучения по дисциплине	Оценочные средства
ПК 1.1 Применяет специализированные знания в области физики при воспроизведении учебного материала с требуемой степенью научной точности и полноты.	Знать основные принципы химической термодинамики.	Проведение контрольных работ, экзамен.
ПК 1.2 Использует специализированные знания при проведении научных изысканий в избранной области	Уметь применять принципы химической термодинамики для расчета фазовых и химических равновесий; для конкретной задачи выбирать подходящую термодинамическую модель; переводить задачу на математический язык; в простейших случаях получить окончательное аналитическое решение.	Проведение контрольных работ, экзамен.
ПК 1.3 Выбирает наиболее эффективные методы построения теоретических моделей физических явлений и процессов в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования	Владеть методами расчета химического и фазового равновесия.	Проведение контрольных работ, экзамен.

10.2 Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине «Химическая термодинамика».

Критерии оценивания результатов обучения	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Уровень освоения компетенции			
		Не сформирован (0 баллов)	Пороговый уровень (3 балла)	Базовый уровень (4 балла)	Продвинутый уровень (5 баллов)
1	2	3	4	5	6
Полнота знаний	ПК 1.1	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имеют место грубые ошибки.	Демонстрирует общие знания базовых понятий по темам/разделам дисциплины. Допускается значительное количество негрубых ошибок.	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Допускается несколько негрубых/несущественных ошибок. Не отвечает на дополнительные вопросы.	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Свободно и аргументированно отвечает на дополнительные вопросы.
Наличие умений	ПК 1.2	Отсутствие минимальных умений. Не умеет решать стандартные задачи. Имеют место грубые ошибки.	Продемонстрированы частично основные умения. Решены типовые задачи. Допущены негрубые ошибки.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания с негрубыми ошибками или с недочетами.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания в полном объеме без недочетов и ошибок.
Наличие навыков (владение опытом)	ПК 1.3	Отсутствие владения материалом по темам/разделам дисциплины. Нет навыков в решении стандартных задач. Наличие грубых ошибок.	Имеется минимальный набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач без ошибок и недочетов. Продемонстрированы знания по решению нестандартных задач.

10.3 Типовые контрольные задания и материалы, необходимые для оценки результатов обучения

Примеры некоторых типовых заданий для самостоятельного решения для проведения текущего контроля успеваемости обучающихся.

1. При 77.5 К на платиновом катализаторе была снята изотерма адсорбции криптона. Получены данные:

P / Торр	0.149	0.200	0.308	0.491
адсорбция на 1 г. катализатора (см ³ /г)	0.2763	0.3040	0.3524	0.4098

Рассчитайте постоянные в уравнении БЭТ и удельную поверхность катализатора, если площадь, занимаемая одной молекулой криптона

$19.2 \times 10^{-20} \text{ м}^2$, плотность криптона 3.739 г/л, давление насыщенного пара криптона $P_s = 2.57$ Торр.

2. Оценить теплоту адсорбции и стандартную энтропию адсорбции криптона на древесном угле, используя следующие величины количества адсорбированного газа (в единицах 10^{12} молекул/ см^2) при различных давлениях криптона над поверхностью и температурах.

T / К	5 Торр	15 Торр
273.2	0.7	2.0
193.5	3.9	7.6

3. При адсорбции СО на поверхности платины равновесная степень заполнения составляет $\theta = 0.3$. Температура = 25 °С, давление СОР = 3×10^{-2} Торр, теплота адсорбции $\text{CO}_q = 20$ ккал/моль, вероятность адсорбции при столкновении молекулы СО с незаполненным активным центром считать равной 10^{-6} . Плотность адсорбционных центров на поверхности составляет 10^{15} см^{-2} . Какое время нужно откачивать систему, чтобы степень заполнения стала менее 0.1?

4. Константа равновесия реакции $2\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons 2\text{H}_2\text{O}$ может быть выражена уравнением

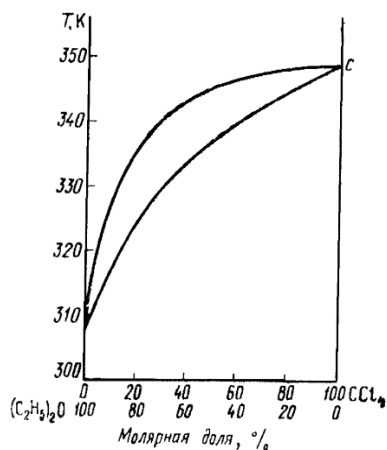
$$\lg K_c = \frac{24900}{T} - 1.335 \times \lg T + 9.65 \times 10^{-5} T - 1.37 \times 10^{-7} T^2 + 1.08$$

а для реакции образования хлороводорода $\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons 2\text{H}_2\text{O}$

$$\lg K_c = \frac{9586}{T} - 0.44 \times \lg T + 2.16$$

Рассчитайте K_c для реакции $4\text{HCl} + \text{O}_2 \rightleftharpoons 2\text{H}_2\text{O} + 2\text{Cl}_2$ при 700 и 800 К, а также ΔU при 800 К.

5. Определите массу CCl_4 и $\text{C}_2\text{H}_5\text{OC}_2\text{H}_5$ в жидкой фазе и в парах, если 1 кг системы с молярным содержанием CCl_4 50% нагреть до 342 К.



6. Давление пара жидкого брома изменяется с температурой по уравнению

$$\lg P(\text{Torr}) = -\frac{2210}{T} - 4.08 \times \lg T + 19.82.$$

Выведите уравнение зависимости теплоты испарения брома от температуры и рассчитайте изменение энтропии при испарении 1 моль брома при температуре кипения (331.3 К).

7. В термически изолированный сосуд, содержащий 5 кг воды при 303 К, внесли 1 кг снега при 263 К. Определите возрастание энтропии, если теплота плавления снега $334.6 \times 10^3 \text{ Дж}/(\text{кг К})$, а теплоемкость воды $4.2 \times 10^3 \text{ Дж}/(\text{кг К})$.

8. При 298 К смешали 2 моль кислорода и 1 моль азота. Исходные давления газов $P_{O_2}^{исх}$, $P_{N_2}^{исх}$ и давление смеси P одинаковы и равны 1.0133×10^5 Па. Парциальные давления газов в смеси P_{O_2} и P_{N_2} составляют 0.668×10^5 и 0.334×10^5 Па, соответственно. Вычислите ΔG , ΔS и ΔH смешения.

9. Константа скорости реакции $NH_4^+ + NCO^- \longrightarrow NH_4OCN$

в смеси этиленгликоля с водой при 30°C изменяется при изменении диэлектрической проницаемости $\frac{d(\ln k)}{d(1/D)} = 93.3$. Найти расстояние между реагирующими ионами в активированном комплексе.

10. Константа скорости реакции $X + Y^{2+} \longrightarrow P^{2+}$ в чистой воде равна 10^5 л/(моль с). Рассчитать скорость этой реакции в водном растворе с ионной силой $I = 10^{-4}$ моль/л, если коэффициент активности активированного комплекса в этом растворе равен $f = 0.95$, а изменение энергии сольватации X при переходе от чистой воды к раствору составляет 0.06 кал/моль. Температура $T = 300$ К, $[Y^{2+}] = [X] = 10^{-5}$ моль/л.

Примерные вопросы на экзамен

1. Первый закон термодинамики. Теплота и работа, внутренняя энергия. Уравнения состояния. Теплоемкость, энтальпия. Термохимия, теплоты химических реакций, закон Гесса.
2. Самопроизвольные и несамопроизвольные процессы, второй закон термодинамики. Теоремы Карно, энтропия, методы расчета энтропии. Характеристические функции. Химический потенциал.
3. Термодинамика растворов. Законы Генри и Рауля. Реальные растворы.
4. Фракционная перегонка. Температура кипения и температура замерзания растворов нелетучих веществ. Азеотропные растворы. Ограниченная взаимная растворимость жидкостей. Активности компонентов раствора.
5. Термодинамика химического равновесия. Закон действия масс. Константа равновесия. Зависимость химического равновесия от температуры.
6. Термодинамика фазового равновесия. Правило фаз Гиббса.
7. Адсорбция. Уравнение изотермы адсорбции Ленгмюра. Уравнение Брунауэра, Эммета и Теллера (БЭТ).
8. Теория Дебая - Хюккеля.
9. Связь между статистической суммой (суммой по состояниям) и термодинамическими функциями.
10. Поверхностная термодинамика. Классическая теория поверхностного натяжения. Межфазная термодинамическая теория Гиббса. Зависимость поверхностного натяжения от кривизны.
11. Поверхностная термодинамика фазовых превращений. Работа образования критического зародыша. Теория гомогенной нуклеации.

Перечень примерных задач к экзамену по дисциплине «Молекулярная динамика».

1. В контейнере содержится 65 г. ксенона при 2 атм и комнатной температуре. Система расширяется адиабатически: а) обратимо до 1 атм и б) против давления 1 атм. Если изначальная температура равна 298 К, то какой будет конечная температура в каждом случае?
2. 1 моль фтороуглерода расширяется обратимо и адиабатически вдвое по объему. При расширении температура упала от 298,15 до 248,44 К. Каково значение $C_{v,m}$.

3. Рассчитайте изменение функции Гиббса для 1 моля водорода, рассматривая его как идеальный газ, при изотермическом сжатии от 1 до 100 атм при 298 К.

4. Стандартная энтальпия реакции $N_2 + 3H_2 \rightarrow 2NH_3$ равна $-92,38$ кДж/моль (на моль аммиака), а стандартная функция Гиббса равна $-33,26$ кДж/моль; оба значения получены при 298 К. Оцените функцию Гиббса при а) 500 К и б) 1000 К. Спонтанна ли реакция при комнатной температуре? Затрудняется или облегчается образование аммиака при повышении температуры?

Пример экзаменационного билета

<i>МИНОБРНАУКИ РОССИИ</i>
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет» (Новосибирский государственный университет, НГУ)
Физический факультет
ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № _____
1. Закон действия масс. Константа равновесия. 2. Рассчитайте изменение функции Гиббса для 1 моля водорода, рассматривая его как идеальный газ, при изотермическом сжатии от 1 до 100 атм при 298 К (на компетенцию ПК-2).
Составитель _____ /Онищук А.А./ (подпись)
« ____ » _____ 20 ____ г.

Оценочные материалы по промежуточной аттестации, предназначенные для проверки соответствия уровня подготовки по дисциплине требованиям СУОС, хранятся на кафедре-разработчике РПД в печатном и электронном виде.

**Лист актуализации рабочей программы
по дисциплине «Химическая термодинамика»
по направлению подготовки 03.04.02 Физика
Профиль «Общая и фундаментальная физика»**

№	Характеристика внесенных изменений (с указанием пунктов документа)	Дата и № протокола Учёного совета ФФ НГУ	Подпись ответственного