

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ  
ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ  
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
(ТГПУ)

Утверждаю  
Проректор по учебной работе (Декан)

«29» 09 2009 года

ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

СДМ.В.02

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ В ХИМИИ

### 1. Цели и задачи дисциплины:

**Цель:** применение основ термодинамики для оценки поведения элементов и их соединений.

#### Задачи:

- дать представление о связи между строением веществ и их способности к химическим превращениям,
- дать представление о том, что термодинамический анализ химических процессов является важным элементом химической теории.

### 2. Требования к уровню освоения содержания дисциплины:

- знать основные законы термодинамики,
- уметь использовать законы и принципы термодинамики для решения конкретных задач неорганической химии,
- уметь количественно объяснить поведение химических элементов и их соединений.

### 3. Объем дисциплины и виды учебной работы:

Вид учебной работы	Всего часов	Семестры
		12
Общая трудоемкость дисциплины	120	120
Аудиторные занятия	48	48
Лекции	24	24
Практические занятия (ПЗ)	24	24
Семинары (С)		
Лабораторные работы (ЛР)		
И (или) другие виды аудиторных занятий		
Самостоятельная работа	72	72
Курсовой проект (работа)		
Расчетно-графические работы		
Реферат		
И (или) другие виды самостоятельной работы		
Вид итогового контроля (зачет, экзамен)	зачет	

### 4. Содержание дисциплины

#### 4.1. Разделы дисциплины и виды занятий (Тематический план):

№ п/п	Раздел дисциплины	Лекции	Практические занятия, семинары	Лабораторные занятия
1	Ионная модель	2	4	
2	Щелочные и щелочноземельные металлы	2	4	
3	Равновесия в растворах	8	4	
4	Растворимость ионных солей и энергия гидратации	4	4	
5	Химия переходных металлов	4	4	
6	Химия неметаллов	4	4	
		24	24	

#### 4.2. Содержание разделов дисциплины:

*Ионная модель.* Энергия кристаллической решетки. Энергия кристаллической решетки как критерий типа химической связи. Использование энергии решетки для расчетов. Ионные радиусы. Уравнения Капустинского. Стабилизация высоких степеней окисления фтором и кислородом. Стабилизация низких степеней окисления большими анионами.

*Щелочные и щелочноземельные металлы.* Разложение соединений до продуктов, содержащих анионы с одинаковым зарядом. Разложение соединений до продуктов, содержащих анионы с разным зарядом. Аномальная природа лития.

*Равновесия в растворах.* Энтальпия и свободные энергии образования гидратированных ионов. Энтропии гидратированных ионов. Расчеты с использованием термодинамических свойств ионов. Электродные потенциалы и константы равновесия. Некоторые ограничения стандартных электродных потенциалов. Потенциальные диаграммы. Диспропорционирование. Устойчивости окислительных состояний. Диаграмма окислительных состояний.

*Растворимость ионных солей и энергия гидратации.* Энтропия растворения. Свободная энергия сублимации кристаллов. Свободная энергия гидратации ионов. Изменения свободной энергии растворения в зависимости от размера и заряда катиона. Изменения свободной энергии растворения в зависимости от размера и заряда аниона.

*Химия переходных металлов.* Теория поля лигандов. Энергия стабилизации полем лигандов. Константы устойчивости комплексных соединений. Устойчивости окислительных состояний в присутствии сильного поля лигандов. Спин-спаривание в комплексах переходных металлов. Стандартные энтальпии атомизации.

*Химия неметаллов.* Химическая связь. Энергия разрыва связи. Энтальпия связи. Собственные энтальпии связей. Электроотрицательность. Бор. Углерод и кремний. Азот и фосфор. Кислород и сера. Галогены.

#### 5. Практические работы:

N	Раздел дисциплины	Наименование практических работ
1	Ионная модель	Определение сродства к электрону и связанных с ним величин. Устойчивость гипотетических соединений. Расчет энергии кристаллической решетки.
2	Щелочные и щелочноземельные металлы	Термодинамика реакций разложения некоторых галогенидов. Термодинамические циклы реакций разложения.
3	Равновесия в растворах	Потенциальные диаграммы окислительно-восстановительных реакций элементов в водных растворах. Термодинамика реакций диспропорционирования.
4	Растворимость ионных солей и энергия гидратации	Расчет энергии гидратации индивидуальных ионов.
5	Химия переходных металлов	Термодинамические циклы для процессов с участием переходных металлов.
6	Химия неметаллов	Расчет электроотрицательности и степени ионности связи

#### 6. Учебно-методическое обеспечение дисциплины.

##### 6.1. Рекомендуемая литература:

а) основная литература:

1. Физическая химия. В 2 кн. Кн. 1. Строение вещества. Термодинамика : учебник для вузов / К. С. Краснов [и др. ]; под ред. К. С. Краснова. – Изд. 3-е, испр. - М. : Высшая школа, 2001. -511 с.
2. Джонсон Д. Термодинамические аспекты неорганической химии. / Д. Джонсон.- М.: Мир, 1985.- 328 с.

*б) дополнительная литература:*

1. Хьюи Дж. Неорганическая химия. Строение вещества и реакционная способность. / Дж. Хьюи. - М.: Мир, 1987.- 696 с.
2. Стромберг, А. Г. Физическая химия : учебник для вузов / А. Г. Стромберг, Д. П. Семченко ; под ред. А. Г. Стромберга. – Изд. 5-е, испр. - М. : Высшая школа, 2003. -527 с.
3. Бажин, Н. М. Термодинамика для химиков: учебник / Н. М. Бажин, В. А. Иванченко, В. Н. Пармон. – Изд. 2-е, перераб. и доп.. - М. : Химия, КолосС, 2004.- 416 с.
4. Карякин, Н. В. Основы химической термодинамики : учебное пособие для вузов / Н. В. Карякин. - Нижний Новгород : изд. Нижегородского государственного университета, 2003. - 462 с.
5. Эткинс, П. Физическая химия. В 3 ч. Ч. 1. Равновесная термодинамика / П. Эткинс, Дж. де Паула ; пер. с англ. ; под ред. В. В. Лунина, О. М. Полторака. - М. : Мир, 2007. – 494 с.

#### **6.2. Средства обеспечения освоения дисциплины:**

Контролирующая программа по физической химии (электронный вариант).

#### **7. Материально-техническое обеспечение дисциплины.**

Компьютерный класс, оснащенный квантово-химическими программами для расчета структуры молекул.

#### **8. Методические рекомендации по организации изучения дисциплины:**

##### **8.1. Методические рекомендации преподавателю:**

Данный курс является дополнением к курсу «Физическая химия» и показывает возможности термодинамики для предсказания свойств химических соединений, а также интерпретации экспериментальных результатов.

##### **8.2. Методические указания для студентов:**

##### **8.2.1. Перечень примерных контрольных вопросов и заданий для самостоятельной работы:**

1. Первый закон термодинамики.
2. Термохимия.
3. Стандартная энтальпия образования.
4. Температурная зависимость энтальпии реакции.
5. Соотношения между термодинамическими функциями.
6. Второй закон термодинамики.
7. Направления самопроизвольных процессов.
8. Энергии Гиббса и Гельмгольца.
9. Термодинамическое описание смесей.
10. Самопроизвольные химические реакции.
11. Влияние условий на протекание реакции.

##### **8.2.2. Примерная тематика рефератов, курсовых работ:**

1. Применение второго закона термодинамики для решения практических задач.
2. Применение первого закона термодинамики для решения практических задач.
3. Методы расчета энергии гидратации.
4. Энергии кристаллических решеток соединений с различным типом химической связи.
5. Энтропия.
6. Электродные потенциалы и константы равновесия.
7. Диаграммы Пурбэ.

### **8.2.3. Примерный перечень вопросов к зачету:**

1. Работа, теплота и энергия.
2. Первый закон термодинамики.
3. Второй закон термодинамики.
4. Термодинамическая устойчивость соединений.
5. Энтропия газов, жидкостей и твердых веществ.
6. Соотношения между термодинамическими функциями.
7. Цикл Борна-Габера.
8. Энтропия. Изменение энтропии при некоторых процессах.
9. Свойства энергии Гиббса.
10. Самопроизвольные химические реакции.
11. Влияние условий протекания реакции на положение равновесия.
12. Стандартные потенциалы. Уравнение Нернста.
13. Электроды сравнения.
14. Типы гальванических элементов.
15. Электрохимический ряд.

4.2. *Термодинамика химических процессов*  
1. Работа, теплота и энтропия  
2. Первый закон термодинамики  
3. Второе начало термодинамики  
4. Дельта Гиббса как мера устойчивости состояния  
5. Термодинамика растворов электролитов и неэлектролитов  
6. Связи между термодинамическими функциями  
7. Закон Фарадея  
8. Электролиз, электрохимические потенциалы, потенциалы  
9. Дельта Гиббса для реакций  
10. Электрохимические цепи  
11. Электрохимический потенциал  
12. Электрохимическая реакция в равновесии  
13. Электрохимическая реакция в неравновесии  
14. Электрохимическая реакция в неравновесии  
15. Электрохимическая реакция в неравновесии

Программа составлена в соответствии с государственным образовательным стандартом высшего профессионального образования по направлению 540100 (050100.68) Естественнонаучное образование. Магистерская программа: Химическое образование

Программу составили:

д.х.н., профессор, зав. кафедрой неорганической химии СВ Ковалева С.В.  
д.х.н., профессор ЛП Фремин Л.П.

Программа учебной дисциплины утверждена на заседании кафедры неорганической химии протокол № 1 от 28.09.2009 2009 года.

Зав. кафедрой неорганической химии СВ Ковалева С.В.

Программа учебной дисциплины одобрена методической комиссией биолого-химического факультета ТГУ протокол № 1 от 01.09 2009 года.

Председатель методической комиссии биолого-химического факультета

И.А. Шабанова И.А. Шабанова

Согласовано:

Декан БХФ А.С. Минич Минич А.С.