

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Томский государственный педагогический университет»
(ТГПУ)

Утверждаю

декан факультета
« 2 » 09 2017 года



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

М.2.В.01.ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ В ХИМИИ

Трудоёмкость (в зачетных единицах) –4

Направление подготовки: 020100.68 Химия

Магистерская программа: Физическая химия

Квалификация (степень): магистр

1. **Цель изучения дисциплины:** применение основ теоретических знаний по физической химии для оценки термодинамических параметров фазовых равновесий, химической связи, ионных равновесий и несовершенств в кристаллах веществ.

Задачи:

1. дать представление о законах химической термодинамики фазовых равновесий, химической связи, ионных равновесий и несовершенств в кристаллах веществ;
2. показать способы расчета термодинамических характеристик фазовых равновесий, химической связи, ионных равновесий и несовершенств в кристаллах веществ.

2. **Место учебной дисциплины в структуре основной образовательной программы.**

Курс «Термодинамические расчеты в химии» относится к дисциплинам вариативной части профессионального цикла Основной образовательной программы. Он изучается на 1 курсе магистратуры, для его освоения используются знания, умения и виды деятельности, сформированные в процессе освоения дисциплин предшествующей вузовской подготовки. Курс использует фундаментальные законы физики и химии, в нем широко применяется математический аппарат. Курс непосредственно связан с дисциплинами «Использование квантово-химических методов расчета в химии» и «Химия высоких энергий».

3. **Требования к уровню освоения дисциплины.**

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование и развитие **общекультурных компетенций:**

1. способностью ориентироваться в условиях производственной деятельности и адаптироваться в новых условиях (ОК-1),
2. умением принимать нестандартные решения (ОК-2),
3. владением иностранным (прежде всего английским) языком в области профессиональной деятельности и межличностного общения (ОК-3),
4. пониманием философских концепций естествознания, роли естественных наук (химии в том числе) в выработке научного мировоззрения (ОК-4),
5. владением современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передаче информации при проведении самостоятельных научных исследований (ОК-5),
6. пониманием принципов работы и умением работать на современной научной аппаратуре при проведении научных исследований (ОК-6).

профессиональных компетенций:

в научно-исследовательской деятельности:

1. наличием представления о наиболее актуальных направлениях исследований в современной теоретической и экспериментальной химии (синтез и применение веществ в наноструктурных технологиях, исследования в экстремальных условиях, химия жизненных процессов, химия и экология и другие) (ПК -1),

2. знанием основных этапов и закономерностей развития химической науки, пониманием объективной необходимости возникновения новых направлений, наличием представления о системе фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, форм и методов научного познания, их роли в общеобразовательной профессиональной подготовке химиков (ПК -2),
3. владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии (в соответствии с темой магистерской диссертации) (ПК -3),
4. умением анализировать научную литературу с целью выбора направления исследования по предлагаемой научным руководителем теме и самостоятельно составлять план исследования (ПК -4),
5. способностью анализировать полученные результаты, делать необходимые выводы и формулировать предложения (ПК -5),
6. наличием опыта профессионального участия в научных дискуссиях (ПК -6),
7. умением представлять полученные результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати) (ПК -7),

в научно-педагогической деятельности:

8. пониманием принципов построения преподавания химии в образовательных учреждениях высшего профессионального образования (ПК -8),
9. владением методами отбора материала, преподавания и основами управления процессом обучения в образовательных учреждениях высшего профессионального образования (ПК -9).

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

знать:

- основные принципы и законы химической термодинамики фазовых равновесий, химической связи, ионных равновесий и несовершенств в кристаллах веществ;

уметь:

- рассчитывать температурную зависимость теплоемкости по экспериментальным данным;
- проводить расчет абсолютного значения энтропии;
- определять температурную зависимость давления паров веществ, константу равновесия, изменение энергии Гиббса, энтальпию и энтропию фазовых переходов;
- рассчитывать изменение энергии Гиббса, энергию и энтропию химической связи; оценивать влияние на эти характеристики гибридизации связи;
- определять энтальпию и энтропию образования гидратированных ионов и дефектов несовершенств в кристаллах;

владеть:

- численными методами расчета термодинамических характеристик.

4. Общая трудоемкость дисциплины 4 зачетных единицы и виды учебной работы.

Вид учебной работы	Трудоемкость (в соответствии с учебным планом) (час)	Распределение по семестрам (в соответствии с учебным планом) (час)
	Всего: 144 часов	Семестр 1
Аудиторные занятия	72	72
Лекции	36	36
Практические занятия	36	36
Семинары		
Лабораторные работы		
Другие виды аудиторных работ: занятия в интерактивной форме	18	18
Другие виды работ: экзамен	27	27
Самостоятельная работа	45	45
Курсовой проект (работа)		
Реферат		
Расчётно-графические работы		
Формы текущего контроля		Коллоквиумы, индивидуальные задания, тестирование-
Формы промежуточной аттестации в соответствии с учебным планом		экзамен

5. Содержание учебной дисциплины.

5.1. Разделы учебной дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (темы)	Аудиторные часы					Самостоятельная работа (час)
		всего	Лекции	практические (семинары)	лабораторные	В т.ч. интерактивные формы обучения	
1	. Использование численных методов в термодинамических расчетах	12	6	6		3	8
2	Определение термодинамических величин	10	5	5		2	7
3	Термодинамика химической связи	32	16	16		8	17
4	Термодинамика ионных равновесий	12	6	6		3	8
5	Термодинамика несовершенств в кристаллах простых веществ	6	3	3		2	5
	Итого:	72/2	36	36		18/25 %	45

5.2. Содержание разделов дисциплины:

5.2.1. *Использование численных методов в термодинамических расчетах.* Метод наименьших квадратов (МНК). Определение параметров уравнения температурной зависимости вида $C_p = a + bT$ по экспериментальным данным. Определение параметров уравнения температурной зависимости вида $C_p = a + bT + cT^2$ и $C_p = a + bT + cT^2$ по экспериментальным данным. Метод графического интегрирования. Расчет абсолютного значения энтропии графическим интегрированием по методу трапеций функций вида $\int_{T_1}^{T_2} \frac{C_p}{T} dT$ и

$$\int_{T_1}^{T_2} C_p d \ln T.$$

5.2.2. *Определение термодинамических величин.* Расчет термодинамических характеристик процессов плавления, испарения и возгонки по давлению пара над твердой и жидкой фазами. Определение температурной зависимости давления пара воды над твердой фазой. Расчет энтальпии и энтропии сублимации льда. Определение температурной зависимости давления пара воды над жидкой фазой. Расчет энтальпии и энтропии испарения. Определение температуры плавления льда. Расчет температуры кипения воды.

5.2.3. *Термодинамика химической связи.* Расчет энергии и энтропии связи двухатомных молекул по температурной зависимости изменения энергии Гиббса в процессе диссоциации молекул на атомы. Расчет энергии и энтропии связи в ряду галогенов. Анализ взаимосвязи энергии и энтропии связи с физико-химическими свойствами галогенов. Применение закона Гесса для расчета энергии диссоциации газообразных молекул, содержащих более одной связи. Определение средней энергии связи. Определение энергии диссоциации метана и этана. Расчет энергии связей C-H и C-C. Определение энергии диссоциации этилена и ацетилена. Расчет энергии кратных связей C-C. Изменение гибридизации и энергии связи в метане по мере его диссоциации. Определение температурной зависимости изменения энергии Гиббса по давлению пара одноатомных молекул углерода над графитом. Расчет энтальпии сублимации графита и алмаза. Определение энергии связи в алмазе, графите и бензоле. Зависимость электропроводности и прочности связи от гибридизации связи в этих веществах. Вычисление энтальпий реакций по энергиям связи. Зависимость энтропии связи от симметрии молекул. Определение порядков осей и чисел симметрии молекул. Зависимость энтропии связи от числа симметрии. Вычисление энтропии связи с поправкой на симметрию. Вычисление стандартных энтропий веществ по энтропиям связи и энтропиям атомов.

5.2.4. *Термодинамика ионных равновесий.* Определение изменения энтальпии в реакции нейтрализации по теплотам растворения (с применением закона Гесса). Определение константы диссоциации воды методом ЭДС и вычисление изменения энергии Гиббса и энтальпии нейтрализации. Расчет энтальпии образования ионов $H^+_{р-р}$ и $OH^-_{р-р}$. Расчет термодинамических характеристик ионов HCO_3^- , CO_3^{2-} и Ca^{2+} . Использование энтальпий образования ионов для термодинамических расчетов.

5.2.5. *Термодинамика несовершенств в кристаллах простых веществ.* Образование дефектов по Френкелю и Шоттки. Расчет константы равновесия процесса образования вакансий по измерениям длины образца и рентгенографическому определению изменения постоянной решетки. Определение температурной зависимости изменения энергии Гиббса при образовании вакансий и расчет теплоты дефектообразования.

5.3. Практические работы:

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование практических работ
1	5.2.1	1. Метод наименьших квадратов (МНК). Определение параметров

		уравнения температурной зависимости вида $C_p=a+bT$ по экспериментальным данным. 2. Определение МНК параметров уравнения температурной зависимости вида $C_p=a+bT+cT^2$ и $C_p=a+bT+cT^2$ по экспериментальным данным. 3. Метод графического интегрирования. Расчет абсолютного значения энтропии графическим интегрированием по методу трапеций функций вида $\int_{T_1}^{T_2} \frac{C_p}{T} dT$ и $\int_{T_1}^{T_2} C_p d \ln T$.
2	5.2.2	4. Определение температурной зависимости давления пара воды над твердой фазой. Расчет энтальпии и энтропии сублимации льда. 5. Определение температурной зависимости давления пара воды над жидкой фазой. Расчет энтальпии и энтропии испарения. 6. Определение температуры плавления льда. Расчет температуры кипения воды.
3	5.2.3	7. Расчет энергии и энтропии связи по температурной зависимости изменения энергии Гиббса в процессе диссоциации молекул на атомы в ряду галогенов. 8. Применение закона Гесса для расчета энергии диссоциации газообразных молекул, содержащих более одной связи. Определение средней энергии связи. 9. Определение энергии диссоциации метана и этана. Расчет энергии связей C-H и C-C. 10. Определение энергии диссоциации этилена и ацетилена. Расчет энергии кратных связей C-C. Изменение гибридизации и энергии связи в метане по мере его диссоциации. 11. Определение температурной зависимости изменения энергии Гиббса по давлению пара одноатомных молекул углерода над графитом. Расчет энтальпии сублимации графита и алмаза. 12. Определение энергии связи в алмазе, графите и бензоле. Зависимость электропроводности и прочности связи от гибридизации связи в этих веществах. 13. Вычисление энтальпий реакций по энергиям связи. 14. Вычисление энтропии связи с поправкой на симметрию. 15. Вычисление стандартных энтропий веществ по энтропиям связи и энтропиям атомов.
4	5.2.4	16. Расчет энтальпии образования ионов H^+_{p-p} и OH^-_{p-p}. 17. Расчет термодинамических характеристик ионов HCO_3^-, CO_3^{2-} и Ca^{2+}. 18. Использование энтальпий образования ионов для термодинамических расчетов.
5	5.2.5	19. Определение температурной зависимости изменения энергии Гиббса при образовании вакансий и расчет теплоты дефектообразования.

6. Учебно-методическое обеспечение дисциплины.

6.1. Основная литература по дисциплине:

1. Эткинс П., де Паула Дж. Физическая химия. В 3- ч. Ч.1. Равновесная термодинамика./ П. Эткинс, Дж. де Паула.- М: Мир, 2007.- 494 с.
2. Ягодновский, В. Д. Статистическая термодинамика в физической химии :учебное пособие для вузов /В. Д. Ягодновский.-2-е изд., испр. и доп.- М.: БИНОМ. Лаборато-

рия знаний, 2009.-495 с.

6.2. Дополнительная литература:

1. Карякин, Н. В. Основы химической термодинамики: Учебное пособие для вузов / Н. В. Карякин.- Нижний Новгород: Издательство Нижегородского государственного университета, 2003.- 462 с.
2. Основы физической химии: Теория и задачи : учебное пособие для вузов / В. В. Еремин, С. И. Каргов, И. А. Успенская [и др.].- М.: Экзамен, 2005.- 478 с.

6.3. Средства обеспечения освоения дисциплины:

- <http://top.msu.ru> - каталог научно-образовательных программ МГУ. Программы курсов по химии. Лекции по химии,
- <http://www.chem.msu.su/> - портал химического образования России. Российский химический журнал,
- <http://www.chem.km.ru/> - мир химии,
- <http://rushim.ru/books/books.htm> - электронная библиотека по химии,
- <http://www.chemport.ru> - химический портал ChemPort. ru. Литература по химии. Видеоопыты,
- <http://www.himikatus.ru/> -книги по химии, программы и химические видеоопыты на Himikatus.ru,
- <http://www.rushim.ru> – электронные учебники,
- <http://www.ximicat.com> – книги по химии, видеоматериалы,
- <http://td.chem.msu.ru>-интернет-страница научно-исследовательской лаборатории химической термодинамики химического факультета МГУ
- <http://www.xumuk.ru>-сайт о химии
- <http://dic.academic.ru>-Коллекция словарей и энциклопедий
- <http://www.chem.msu.su>-Портал фундаментального химического образования России

6.4. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

специализированная аудитория; компьютерный класс, имеющий выход на интернет.

№ п/п	Наименование раздела (темы) учебной дисциплины	Наименование материалов обучения, пакетов программного обеспечения	Наименование технических и аудиовизуальных средств, используемых с целью демонстрации материалов
1	Использование численных методов в термодинамических расчетах	Мультимедийные материалы.	Компьютер, проектор
2	Определение термодинамических величин	Мультимедийные материалы.	Компьютер, проектор
3	Термодинамика химической связи	Мультимедийные материалы.	Компьютер, проектор
4	Термодинамика ионных равновесий	Мультимедийные материалы	Компьютер, проектор
5	Термодинамика несовершенств в кристаллах	Мультимедийные материалы	Компьютер, проектор

	простых веществ		
--	-----------------	--	--

7. Методические рекомендации по организации изучения дисциплины:

7.1. Методические рекомендации преподавателю:

Магистранты изучают курс в первом семестре. Теоретические знания, полученные из курса лекций, закрепляются на практических занятиях. Промежуточные срезы знаний проводятся после изучения раздела дисциплины. Промежуточный срез знаний проводится посредством устной сдачи коллоквиумов, вопросы к которым сообщаются заранее, и выполнению письменных индивидуальных заданий, разработанных по всем темам курса. Изучение курса заканчивается итоговым экзаменом.

7.2. Методические указания для магистрантов:

Курс изучается в течение 1 семестра. Перед началом семестра магистрант должен ознакомиться с разделами изучаемой дисциплины и их содержанием, получить перечень вопросов, выносимых на самостоятельную работу и на экзамен. Магистрант должен быть знаком с требованиями к уровню освоения дисциплины, формами текущего, промежуточного и итогового контроля. После изучения каждого раздела дисциплины магистрант должен пройти тестирование, сдать коллоквиум и индивидуальные задания.

3. Формы текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся.

8.1. Тематика рефератов (докладов, эссе):

1. Вычисление термодинамических функций индивидуальных веществ.
2. Методы расчета абсолютного значения энтропии.
3. Расчет энергии и энтропии кратных связей.
4. Взаимозависимость гибридизации и энергии связи в алмазе, графите и бензоле.
5. Зависимость физических свойств от гибридизации связи в веществах.
6. Зависимость энтропии связи от симметрии молекул.
7. Вычисление энтропии связи с поправкой на симметрию.
8. Расчет термодинамических характеристик ионов.
9. Использование энтальпий образования ионов для термодинамических расчетов.
10. Расчет константы равновесия и энтальпии дефектообразования вакансий в кристаллах.
11. Статистический расчет энтропии.
12. Расчет энтропии по калориметрическим данным.

8.2. Вопросы и задания для самостоятельной работы, в том числе групповой самостоятельной работы обучающихся:

При организации самостоятельной работы студентам предлагается изучить с использованием имеющейся литературы и конспекта лекций следующие разделы курса:

1. Использование численных методов в термодинамических расчетах.
2. Определение термодинамических величин
3. Термодинамика химической связи.
4. Термодинамика ионных равновесий.
5. Термодинамика несовершенств в кристаллах простых веществ

8.3. Вопросы для самопроверки, диалогов, обсуждений, дискуссий, экспертиз:

1. Современные экспериментальные и расчетные методы определения термодинамических характеристик, их развитие и совершенствование.

2. Экспериментальное определение стандартных термодинамических характеристик индивидуальных химических соединений.
3. Современные методы расчета термодинамических параметров молекул.
4. Экспериментальные и теоретические методы определения термодинамических характеристик физико-химических процессов.
5. Расчет термодинамических характеристик процессов плавления, испарения и возгонки.
6. Математические проблемы химической термодинамики.

8.4. Примеры тестов:

1. Энтальпия реакции разложения молекулы HBr на атомы составляет +36,2 кДж/моль. Энергия связи в молекуле HBr (кДж/моль):
1) +36,2 2) -72,4 3) -18,1 4) +72,4 5) +18,1 6) 36,2
2. Энтальпия реакции



равна -229,17 кДж/моль. Энтальпия образования иона $\text{OH}^-_{(\text{aq})}$ (кДж/моль):

- 1) +229,17 2) -114,585 3) 0 4) +114,585 5) -229,17

8.5. Перечень вопросов для промежуточной аттестации (к экзамену):

1. Метод наименьших квадратов (МНК).
2. Определение параметров уравнения температурной зависимости вида $C_p = a + bT$ по экспериментальным данным.
3. Определение параметров уравнения температурной зависимости вида $C_p = a + bT + cT^2$ и $C_p = a + bT + cT^2$ по экспериментальным данным.
4. Метод графического интегрирования.
5. Расчет абсолютного значения энтропии графическим интегрированием по методу трапеций функций вида $\int_{T_1}^{T_2} \frac{C_p}{T} dT$ и $\int_{T_1}^{T_2} C_p d \ln T$.
6. Расчет термодинамических характеристик процессов плавления, испарения и возгонки по давлению пара над твердой и жидкой фазами.
7. Определение температурной зависимости давления пара воды над твердой фазой. Расчет энтальпии и энтропии сублимации льда.
8. Определение температурной зависимости давления пара воды над жидкой фазой. Расчет энтальпии и энтропии испарения.
9. Определение температуры плавления льда. Расчет температуры кипения воды.
10. Расчет энергии и энтропии связи двухатомных молекул по температурной зависимости изменения энергии Гиббса в процессе диссоциации молекул на атомы.
11. Расчет энергии и энтропии связи в ряду галогенов. Анализ взаимосвязи энергии и энтропии связи с физико-химическими свойствами галогенов.
12. Применение закона Гесса для расчета энергии диссоциации газообразных молекул, содержащих более одной связи. Определение средней энергии связи.
13. Определение энергии диссоциации метана и этана. Расчет энергии связей C-H и C-C.
14. Определение энергии диссоциации этилена и ацетилена. Расчет энергии кратных связей C=C.
15. Изменение гибридизации и энергии связи в метане по мере его диссоциации.

16. Определение температурной зависимости изменения энергии Гиббса по давлению пара одноатомных молекул углерода над графитом. Расчет энтальпии сублимации графита и алмаза.
17. Определение энергии связи в алмазе, графите и бензоле. Зависимость электропроводности и прочности связи от гибридизации связи в этих веществах.
18. Вычисление энтальпий реакций по энергиям связи.
19. Зависимость энтропии связи от симметрии молекул.
20. Определение порядков осей и чисел симметрии молекул. Зависимость энтропии связи от числа симметрии.
21. Вычисление энтропии связи с поправкой на симметрию.
22. Вычисление стандартных энтропий веществ по энтропиям связи и энтропиям атомов.
23. Определение изменения энтальпии в реакции нейтрализации по теплотам растворения (с применением закона Гесса).
24. Определение константы диссоциации воды методом ЭДС и вычисление изменения энергии Гиббса и энтальпии нейтрализации.
25. Расчет энтальпии образования ионов $\text{H}^+_{\text{р-р}}$ и $\text{OH}^-_{\text{р-р}}$.
26. Расчет термодинамических характеристик ионов HCO_3^- , CO_3^{2-} и Ca^{2+} .
27. Использование энтальпий образования ионов для термодинамических расчетов.
28. Образование дефектов по Френкелю и Шоттки. Расчет константы равновесия процесса образования вакансий по измерениям длины образца и рентгенографического определения изменения постоянной решетки.
29. Определение температурной зависимости изменения энергии Гиббса при образовании вакансий и расчет теплоты дефектообразования.

8.6. Темы для написания курсовой работы (представляются на выбор обучающегося, если предусмотрено рабочим планом) Рабочим планом не предусмотрено.

8.7. Формы контроля самостоятельной работы: Формами контроля самостоятельной работы студентов являются коллоквиумы, тестирование, индивидуальные задания, подготовка и выступление с докладами.

Рабочая программа учебной дисциплины составлена в соответствии с учебным планом, федеральным государственным образовательным стандартом высшего профессионального образования по направлению подготовки 020100.68 Химия. Магистерская программа: Физическая химия (указывается код и наименование направления подготовки)

Рабочая программа учебной дисциплины составлена:
д.х.н., профессор кафедры неорганической химии Л.П. Ерёмин Л.П. Ерёмин

Рабочая программа учебной дисциплины утверждена на заседании кафедры неорганической химии. Протокол № 1 от 30.08 2011 года.

Зав. кафедрой С.В. Ковалева Ковалева С.В..
(подпись)

Рабочая программа учебной дисциплины одобрена методической комиссией биолого-химического факультета. Протокол № 7 от 2.09 2011 года.

Председатель методической комиссии Е.П. Князева Князева Е.П.
(подпись)

Лист внесения изменений

В программе учебной дисциплины М.2.В.01.ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ
В ХИМИИ изменений и дополнений нет.

Программа переутверждена на заседании кафедры неорганической химии
№_1_ от «_30_»_____08_____ 2012 года.

Заведующий кафедрой неорганической химии _____  С.В. Ковалева