

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 20.06.2022 12:24:03
Уникальный программный ключ:
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84



МИНОБРНАУКИ РОССИИ

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет)»

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной
и методической работе
_____ Б.В.Пекаревский
«_____» _____ 2017г

**Рабочая программа дисциплины
ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ**

Специальность
18.05.02 Химическая технология материалов современной энергетики

Специализации программы специалитета:

**Специализация №1: «Химическая технология материалов ядерного топливного
цикла»,**

**Специализация №3: «Технология теплоносителей и радиология ядерных
энергетических установок»**

Специализация №5: Радиационная химия и радиационное материаловедение»

Квалификация

Инженер

Форма обучения

Очная

Факультет химии веществ и материалов
Кафедра **физической химии**

Санкт-Петербург

2017

Код Б1.В.01

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Должность	Подпись	Ученое звание, фамилия, инициалы
Разработчики		Доцент, Акулова Ю.П. Доцент Матузенко М.Ю.

Рабочая программа дисциплины обсуждена на заседании кафедры физической химии, протокол от « ___ » _____ 2017г. №

Заведующий кафедрой

С.Г. Изотова

Одобрено учебно-методической комиссией факультета химии веществ и материалов, протокол от « ___ » _____ 2017г. №

Председатель

С.Г. Изотова

СОГЛАСОВАНО

Руководитель направления подготовки «Химическая технология материалов современной энергетики»		профессор И.В. Юдин
Директор библиотеки		Т.Н. Старостенко
Начальник методического отдела учебно-методического управления		Т.И. Богданова
Начальник УМУ		С.Н. Денисенко

СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы	4
2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы.....	6
3. Объем дисциплины	6
4. Содержание дисциплины	
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.....	7
4.2. Занятия лекционного типа.....	8
4.3. Занятия семинарского типа.....	9
4.3.1. Семинары, практические занятия	9
4.3.2. Лабораторные занятия.....	11
4.4. Самостоятельная работа.....	12
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	14
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.....	14
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	15
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины	15
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	16
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	
10.1. Информационные технологии.....	16
10.2. Программное обеспечение.....	16
10.3. Информационные справочные системы.....	17
11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.....	17
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья	18

Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.

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

В результате освоения образовательной программы обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

Коды компетенции	Результаты освоения ООП (содержание компетенций)	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
ОК-1	Способностью представить современную картину мира на основе целостной системы естественнонаучных и математических знаний, ориентироваться в ценностях бытия, жизни, культуры	Знать: - основные закономерности протекания химических процессов и характеристики равновесного состояния, методы описания химических равновесий в растворах электролитов, - начала термодинамики и основные уравнения химической термодинамики; методы термодинамического описания химических и фазовых равновесий в многокомпонентных системах; термодинамику растворов электролитов и электрохимических систем; - уравнения формальной кинетики и кинетики сложных, цепных, гетерогенных, фотохимических и электрохимических реакций; основные теории кинетики и гомогенного, гетерогенного и ферментативного катализа; - основные методы изучения строения веществ, основанные на их электрических свойствах; - основные методы изучения строения веществ, основанные на их оптических свойствах Уметь: - определять термодинамические характеристики химических реакций и равновесные концентрации веществ; - использовать основные химические законы, термодинамические справочные данные и количественные соотношения неорганической химии для решения профессиональных задач; - прогнозировать влияние различных факторов на равновесие в химических реакциях; - определять направленность процесса в заданных начальных условиях; устанавливать границы областей устойчивости фаз в однокомпонентных и бинарных гетерогенных системах;
ОПК-1	Способностью использовать математические, естественнонаучные и инженерные знания для решения задач своей профессиональной деятельности	

Коды компетенции	Результаты освоения ООП (содержание компетенций)	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
ПК-10	<p>Способностью самостоятельно выполнять исследования с использованием современной аппаратуры и методов исследования в области объектов профессиональной деятельности, проводить корректную обработку результатов и устанавливать адекватность моделей</p>	<p>составлять кинетические уравнения в дифференциальной и интегральной формах для кинетически простых реакций и прогнозировать влияние температуры на скорость процесса;</p> <ul style="list-style-type: none"> - определять строение веществ по их электрическим и оптическим свойствам <p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - методами проведения физических измерений, методами корректной оценки погрешностей при проведении физико-химического эксперимента; -экспериментальными методами определения физико-химических свойств соединений; - навыками вычисления тепловых эффектов химических реакций при заданной температуре в условиях постоянства давления или объема, констант равновесия химических реакций при заданной температуре, давления насыщенного пара над индивидуальным веществом, состава сосуществующих фаз в двухкомпонентных системах; - методами определения констант скорости реакций различных порядков по результатам кинетического эксперимента. <p>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> -современные методики исследования и применяемую аппаратуру; <p>Уметь: проводить корректную обработку полученных экспериментальных данных</p> <p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - методами проведения физических измерений, методами корректной оценки погрешностей при проведении физико-химического эксперимента; -экспериментальными методами определения физико-химических свойств соединений.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Физическая химия» относится к дисциплинам Б1.В.01 и изучается на 3 курсе в 5 и 6 семестрах.

В методическом плане дисциплина опирается на элементы компетенций, сформированные при изучении дисциплин «Математика», «Информатика», «Физика», «Общая и неорганическая химия», «Органическая химия», «Аналитическая химия и физико-химические методы анализа».

Полученные в процессе изучения дисциплины «Физическая химия» знания, умения, навыки могут быть использованы в научно-исследовательской работе специалиста и при выполнении выпускной квалификационной работы.

3. Объем дисциплины.

Вид учебной работы	Всего, академических часов
	Очная форма обучения
Общая трудоемкость дисциплины (зачетных единиц/академических часов)	10/360
Контактная работа с преподавателем:	186
занятия лекционного типа	68
занятия семинарского типа, в т.ч.:	102
семинары, практические занятия	34
лабораторные работы	68
курсовое проектирование	
КСР	16
другие виды контактной работы(контроль – 2 экз.)	72
Самостоятельная работа	102
Форма текущего контроля (Кр, реферат, РГР, эссе)	Кр
Форма промежуточной аттестации	2 зачета, 2 экзамена (72)

4. Содержание дисциплины

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, академ. часы	Занятия семинарского типа, академ. часы		Самостоятельная работа, академ. часы	Формируемые компетенции
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы		
1.	Химическая термодинамика	8	4	12	12	ОК-1, ОПК-1 ПК-10
2.	Химическое равновесие	4	4		16	ОК-1, ОПК-1
3.	Фазовые равновесия и растворы неэлектролитов	12	8	16	16	ОК-1, ОПК-1 ПК-10
4.	Электрохимические системы	12	4	16	12	ОК-1, ОПК-1 ПК-10
5.	Химическая кинетика и катализ	14	6	12	16	ОК-1, ОПК-1 ПК-10
6.	Методы изучения строения молекул, основанные на электрических свойствах	2	2	8	8	ОК-1, ОПК-1 ПК-10
7.	Оптические методы изучения строения вещества	16	8	4	22	ОК-1, ОПК-1 ПК-10

4.2. Занятия лекционного типа

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	Химическая термодинамика I, II и III начала термодинамики и их применение к химическим процессам. Термохимия. Термодинамические потенциалы.	8	
2	Химическое равновесие. Константы равновесия. Уравнения изотермы и изобары реакции. Вычисление состава равновесной смеси. Выбор оптимальных условий проведения хим. реакции.	4	
3	Фазовые равновесия и растворы неэлектролитов Фазовые равновесия в одно-, двух- и трехкомпонентных системах. Правило фаз Гиббса . Уравнения Клапейрона-Клаузиуса. Идеальные и неидеальные растворы. Законы Рауля и Генри. Диаграммы «состав-свойство». Разделение растворов. Экстрагирование.	12	
4	Электрохимические системы Строение и свойства растворов электролитов. Равновесия в растворах электролитов. Термодинамика гальванических элементов. Потенциометрия. Электрическая проводимость растворов электролитов	12	
5	Химическая кинетика и катализ Феноменологическая (формальная) кинетика. Зависимость скорости реакции от температуры. Теории элементарного акта химической реакции. Кинетика цепных и фотохимических реакций. Кинетика реакций в растворах. Кинетика гетерогенных процессов. Кинетика электрохимических процессов. Коррозия. Катализ	14	
6	Методы изучения строения молекул, основанные на электрических свойствах	2	

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
7.	<p>Оптические методы нахождения молекулярных констант. Общая характеристика молекулярных спектров. Использование закона Ламберта-Бугера-Бера при изучении спектров.</p> <p>Энергия вращения двухатомной молекулы в приближении жесткого ротатора Вращательные спектры поглощения. Энергия колебательного движения двухатомной молекулы в приближении гармонического и ангармонического осциллятора. Колебательные и колебательно-вращательные ИК-спектры поглощения двухатомных молекул. Число и типы нормальных колебаний многоатомных молекул.</p> <p>Электронно-колебательно-вращательные спектры. Принцип Франка-Кондона. Определение энергии химической связи и энергии диссоциации по молекулярным спектрам.</p> <p>Спектры комбинационного рассеяния, сопоставление их с ИК-спектрами.</p> <p>Статистическая сумма по состояниям. Расчет термодинамических функций и теплоемкости идеальных газов статистическим методом.</p>	16	

4.3. Занятия семинарского типа.

4.3.1. Семинары, практические занятия.

Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
Применение первого начала термодинамики для расчета тепловых эффектов химических реакций. Закон Гесса и следствия из него. Закон Кирхгоффа.	2	-
Применение второго начала термодинамики к химическим процессам. Энтропия. Термодинамические потенциалы.	2	-

Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
Термодинамические и практические константы равновесия и их применение для расчета глубины и степени превращения, равновесного выхода и равновесного состава химической реакции	2	Коллективное обсуждение
Контрольная работа	2	-
Использование уравнения Клаузиуса-Клапейрона для расчета температуры кипения и теплоты испарения вещества	2	
Анализ диаграмм равновесия жидкость ↔ пар и кристаллы ↔ жидкость	4	Коллективное обсуждение
Теоретический коллоквиум	2	-
Гальванические элементы. Расчет потенциалов электродов. Вычисление ЭДС и гальванических элементов. Термодинамика гальванических элементов	2	-
Использование уравнений Клаузиуса-Мосотти, Дебая, Лорентц-Лоренца для расчета молярной рефракции и дипольных моментов вещества	2	-
Определение молекулярных констант и энергии связи по спектральным данным химической реакции.	2	
Контрольная работа.	2	
Электрическая проводимость растворов электролитов от концентрации. Расчет степени и константы диссоциации, рН раствора слабого электролита по электрической проводимости.	2	
Методы определения порядка и константы скорости химической реакции. Вычисление энергии активации и температурного коэффициента	4	
Контрольная работа	2	
Вычисление теплоемкости газообразных веществ методом статической термодинамики	2	

4.3.2. Лабораторные занятия.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Примечание
1	Определение теплоты растворения соли (или теплового эффекта химической реакции)	4	
1	Определение теплоемкости жидкости	4	
3	Определение молярной массы вещества методом криометрии	4	
3	Исследование зависимости давления насыщенного пара вещества от температуры. Определение молярной теплоты испарения	4	
3	Построение диаграммы плавкости 2-х компонентной системы по экспериментальным данным	4	
3	Построение диаграммы «жидкость – пар» компонентной системы по экспериментальным данным	4	
4	Измерение электродных потенциалов и ЭДС гальванических элементов или определение pH растворов, степени и константы гидролиза соли методом потенциометрии. Потенциометрическое титрование	8	
4	Определение чисел переноса ионов в растворах электролитов	4	
4	Изучение зависимости электрической проводимости растворов сильных или слабых электролитов от концентрации. Кондуктометрическое титрование	4	
5	Определение константы скорости реакции первого порядка (например, гидролиза сахарозы (инверсии сахара))	4	
5	Определение константы скорости реакции второго порядка (например, иодирования ацетона и омыления эфира в кислой среде)	4	
5	Определение кинетических параметров электрохимической реакции (например, реакции восстановления водорода на различных металлах)	4	
5	Определение скорости коррозии методом поляризационных кривых	4	
6	Определение состава раствора по удельной рефракции или Определение структурной формулы молекулы по молярной рефракции	4	
6	Определение дипольного момента молекулы в жидком состоянии	4	
7	Определение длины связи в молекуле из ИК-спектра	4	

4.4. Самостоятельная работа обучающихся.

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
1.	Расчет тепловых эффектов и изменения термодинамических функций в химическом процессе с использованием таблиц стандартных термодинамических величин. Изучение калориметрических методов исследования (термохимии).	12	Проверка индивидуальных расчетных заданий. Проверка отчетов по лабораторным работам
2.	Расчет термодинамических и практических констант равновесия, глубины превращения химической реакции, степени превращения исходных реагентов и выхода продуктов. Анализ влияния термодинамических параметров и концентрации реагентов на равновесных выход химической реакции.	16	Проверка индивидуальных расчетных заданий. Проверка контрольной работы
3	Методы исследования свойств растворов неэлектролитов и их применение. Практическое применение методов физико-химического анализа Курнакова и правила фаз Гиббса. Анализ диаграмм состояния одно- и многокомпонентных систем. Экспериментальные методы построения диаграмм состояния одно- и двухкомпонентных систем.	18	Проверка индивидуальных расчетных заданий. Проверка отчетов по лабораторным работам.
4.	Расчет потенциалов электродов различных видов. Расчет ЭДС гальванических элементов и термодинамических параметров химической реакции, протекающей в гальваническом элементе. Практическое применение гальванических элементов (химические источники тока) и потенциометрии. Анализ влияния различных факторов (концентрации раствора, температуры, напряженности и частоты электрического поля) на электрическую проводимость растворов сильных и слабых электролитов. Практическое применение кондуктометрии.	12	Проверка индивидуального расчетного задания. Проверка отчетов по лабораторным работам.
5	Факторы, влияющие на скорость химических реакций. Расчет кинетических параметров химической реакции (порядка, константы скорости, времени полупревращения, энергии активации и температурного коэффициента) по экспериментальным данным.	16	Проверка индивидуального расчетного задания. Проверка отчетов по лабораторным работам. Проверка контрольной работы

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
6.	Методы изучения строения молекул, основанные на электрических свойствах .Работы Дебая.	8	Проверка индивидуального расчетного задания. Проверка отчетов по лабораторным работам.
7.	Оптические методы нахождения молекулярных констант.	20	Проверка индивидуальных расчетных заданий. Проверка отчетов по лабораторным работам. Проверка контрольной работы

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.

Методические указания для обучающихся по организации самостоятельной работы по дисциплине, включая конспекты лекций по отдельным разделам курса, видео лекции по курсу, темы лабораторных работ и практических занятий, формы текущего контроля по дисциплине и требования к их выполнению (вопросы к теоретическому коллоквиуму, зачету и экзамену), размещены в электронной информационно-образовательной среде СПбГТИ(ТУ) на сайте Медиа: <http://media.technolog.edu.ru>

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Своевременное выполнение обучающимся мероприятий текущего контроля позволяет превысить (достигнуть) пороговый уровень («удовлетворительно») освоения предусмотренных элементов компетенций.

Для текущего контроля студенты должны выполнить индивидуальные задания по всем разделам курса и написать контрольные работы на удовлетворительную оценку. Тексты многовариантных заданий приводятся в приложении.

Результаты дисциплины считаются достигнутыми, если для всех элементов компетенций превышен (достигнут) пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме 2 зачетов и 2 экзаменов.

К сдаче зачета допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля.

Зачет предусматривают выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций и комплектуются вопросами (заданиями) двух видов: теоретический вопрос (для проверки знаний) и комплексная задача (для проверки умений и навыков).

В приложении приводится перечень вопросов к зачету по отдельным разделам курса.

При сдаче экзамена студент получает билет, в котором имеется три вопроса из перечня вопросов и задача по одному из разделов курса, время подготовки студента к устному ответу - до 45 мин.

Пример варианта экзаменационного билета:

Вариант № 1

1. Зависимость энергии Гиббса от давления и температуры и энергии Гельмгольца от объема и температуры.
2. Давление пара над смесью взаимно нерастворимых жидкостей. Перегонка с водяным паром.
3. Выражение для равновесного скачка потенциала на границе металл-раствор электролита. Водородная шкала электродных потенциалов.
4. Определить термодинамическую возможность образования метана по реакции $CS_2 + 4H_2 = CH_4 + 2H_2S$ при $T=1000K$.

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1

7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

а) основная литература:

1. Афанасьев, Б.Н. Физическая химия: учеб. пособие для вузов / Б.Н. Афанасьев, Ю.П. Акулова. – СПб.: Лань, 2012. – 464 с.(ЭБС «Лань»)
2. Стромберг А.Г. Физическая химия : учебник для вузов /А.Г. Стромберг, Д.П. Семченко – 5-е изд. Испр. – М.: Высш. Школа, 2009. – 527с.
3. Краткий справочник физико-химических величин / Н.М. Барон и [и др.]; под ред. А.А. Равделя и А.М. Пономаревой. – 11-е изд. испр. и доп. – М.: ООО «ГИД «Аз-book», 2009. – 240 с.

б) дополнительная литература:

1. Практикум по физической химии. Кинетика и катализ. Электрохимия: учеб. Пособие для вузов / А.В. Абраменков: под ред. В.В. Лунина и Е.П. Агеева. – М.: АКАДЕМИЯ, 2012. – 301с.
2. Практикум по физической химии. Термодинамика: учеб. Пособие для вузов / Е.П. Агеев, И.А. Успенская, А.Г. Богачев: под ред. Е.П. Агеева и В.В. Лунина. – М.: АКАДЕМИЯ, 2010. – 220с.
3. Теоретическая электрохимия: учебник для образоват. учреждений высш. проф. образования / А.Л. Ротинян, К.И. Тихонов, И.А. Шошина, А.М. Тимонов. – 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Студент, 2013. – 496с.
4. Бёккер, Ю.. Спектроскопия / Ю. Бёккер; пер. с нем. Л.Н. Казанцевой, под ред. А.А. Пупышева, М.В. Поляковой. – М.: Техносфера, 2009. – 527с.
5. Чоркендорф, И. Современный катализ и химическая кинетика. / И. Чоркендорф, Х. Наймант-Сведрайт; пер с англ. В.И. Ролдугина. – Долгопрудный: Издательский дом «Интеллект», 2010. – 501 с.
6. Артемов, А.В. Физическая химия: учебник для учреждений высш. проф. образования / А.В. Артемов. – М.: Академия, 2013. – 288с.(ЭБ)
7. Матузенко, М.Ю. Изучение строения молекул спектральными методами. Теоретические основы. Решение задач: учебное пособие / М.Ю. Матузенко, М.Ю. Зубкова, А.Н. Храмов.- СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2009. – 56с.
8. Матузенко, М.Ю. Диаграммы плавкости двухкомпонентных систем: методические указания/М.Ю.Матузенко. – СПб.:СПбГТИ(ТУ), 2013. – 22с.(ЭБ)

в) вспомогательная литература:

1. Практические работы по физической химии / Под ред. К.П.Мищенко, А.А.Равделя, А.М.Пономаревой. – 5-е изд., перераб. – СПб: Профессия, 2002. – 384с.
2. Физическая химия. В 2 кн.: учебник для вузов / К.С. Краснов [и др.]: под ред. К.С. Краснова. – 3-е изд., испр. – М.: Высш. шк., 2001. – 831с.

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

учебный план, РПД и учебно-методические материалы:
<http://media.technolog.edu.ru>

электронно-библиотечные системы:

«Электронный читальный зал – БиблиоТех» <https://technolog.bibliotech.ru/>;

«Лань» <https://e.lanbook.com/books/>.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

Все виды занятий по дисциплине «Физическая химия» проводятся в соответствии с требованиями следующих СТП:

СТО СПбГТИ 020-2011. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лабораторные занятия. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 040-02. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лекция. Общие требования;

СТО СПбГТИ 018-2014. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Семинары и практические занятия. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 048-2009. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 016-2014. КС УКДВ. Порядок проведения зачетов и экзаменов.

Планирование времени, необходимого на изучение данной дисциплины, лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала.

Основными условиями правильной организации учебного процесса для студентов является:

плановость в организации учебной работы;

серьезное отношение к изучению материала;

постоянный самоконтроль.

На занятия студент должен приходить, имея багаж знаний и вопросов по уже изученному материалу.

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

10.1. Информационные технологии.

В учебном процессе по данной дисциплине предусмотрено использование информационных технологий:

чтение лекций с использованием слайд-презентаций;

взаимодействие с обучающимися посредством электронной почты.

10.2. Программное обеспечение.

Microsoft Office (Microsoft Excel);

Специализированный программный продукт Mathcad

10.3. Информационные справочные системы.

Справочно-поисковая система «Консультант-Плюс»

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

Для проведения лекционных и практических занятий используются учебные аудитории, укомплектованные специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Для проведения лекционных и практических занятий используются видеоматериалы.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечены доступом в электронную информационно-образовательную среду СПбГТИ(ТУ).

Лаборатории, укомплектованные специализированной мебелью, оснащены лабораторным оборудованием. Для проведения комплекса лабораторных работ лабораторный практикум должен быть оснащен основным оборудованием, в том числе:

Весы ВЛР-200 г

Регулируемый прибор питания "Агат»

Сахариметр универсальный СУ-4

Кондуктометры

Осциллограф Н3013

Магнитные и электрические мешалки

Сушильные шкафы

Дистиллятор ДЭМ-10

Ультратермостат

рН-метр

Для проведения лабораторных работ могут быть использованы учебно-лабораторные комплексы «Химия» и «Электрохимический стенд», разработанные Томским политехническим университетом.

Учебно-лабораторный комплекс «Химия» предназначен для проведения работ по термохимии, фазовому и химическому равновесию, термодинамике растворов, электрохимии, потенциометрии, кондуктометрии, электролизу, кинетики и катализу на современном техническом уровне. Комплекс состоит из отдельных модулей - модуль для электрохимических измерений, модуль для термического анализа, термостат-калориметр с соответствующими датчиками, которые объединяются в единый блок с универсальным контроллером и могут быть подключены к персональному компьютеру.

Лабораторный электрохимический стенд предназначен для проведения практикумов и лабораторных работ по физической химии из раздела 4 - Электрохимические системы.

Помещения для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования оснащены специализированной мебелью и техническими средствами.

12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями учебный процесс осуществляется в соответствии с Положением об организации учебного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья СПбГТИ(ТУ), утвержденным ректором 28.08.2014г.

**Фонд оценочных средств
для проведения промежуточной аттестации по
дисциплине «Физическая химия»**

1. Перечень компетенций и этапов их формирования.

Компетенции		
Индекс	Формулировка	Этап формирования
ОК-1	Способностью представить современную картину мира на основе целостной системы естественнонаучных и математических знаний, ориентироваться в ценностях бытия, жизни, культуры	промежуточный
ОПК-1	Способностью использовать математические, естественнонаучные и инженерные знания для решения задач своей профессиональной деятельности	промежуточный
ПК-10	способностью самостоятельно выполнять исследования с использованием современной аппаратуры и методов исследования в области объектов профессиональной деятельности, проводить корректную обработку результатов и устанавливать адекватность моделей	промежуточный

2. Показатели и критерии оценивания компетенций на различных этапах их формирования, шкала оценивания.

Показатели оценки результатов освоения дисциплины	Планируемые результаты	Критерий оценивания	Компетенции
Освоение раздела № 1	Знает начала термодинамики и основные уравнения химической термодинамики; методы термодинамического описания химических равновесий Умеет пользоваться справочной литературой и математическими методами обработки результатов. Владеет методикой термохимических измерений и расчета тепловых эффектов реакции	Правильное выполнение индивидуальных заданий. Правильные ответы на вопросы №1-7 на зачете, вопросы 1-19 на экзамене	ОК-1 ОПК-1 ПК-10

Показатели оценки результатов освоения дисциплины	Планируемые результаты	Критерий оценивания	Компетенции
Освоение раздела №2	Знает основные закономерности протекания химических процессов и характеристики равновесного состояния, методы описания химических равновесий Умеет прогнозировать влияние различных факторов на равновесие в химических реакциях; определять направленность процесса в заданных начальных условиях	Правильное выполнение индивидуальных заданий по данному разделу и контрольной работы. Правильные ответы №8-12 на зачете, на вопросы № 20-27 на экз.	ОК-1 ОПК-1
Освоение раздела № 3	Знает методы термодинамического описания фазовых равновесий в одно- и многокомпонентных системах; теорию растворов Умеет устанавливать границы областей устойчивости фаз в однокомпонентных и бинарных гетерогенных системах на основании анализа диаграмм «состав – свойство» Владеет навыками анализа фазовых диаграмм одно- и двухкомпонентных систем	Правильное выполнение индивидуальных заданий по данному разделу и отчетов по лабораторным работам, сдача теоретического коллоквиума Правильные ответы №13-19 на зачете, на вопросы №28-57 на экз.	ОК-1 ОПК-1 ПК-10
Освоение раздела №4	Знает основные уравнения раздела, теорию растворов электролитов Умеет рассчитать потенциалы электродов и ЭДС гальванических элементов, рассчитывать термодинамические параметры химической	Правильное выполнение индивидуальных заданий по данному разделу и отчетов по лабораторным работам Правильные ответы №20-36 на зачете, на вопросы № 58-82 на экз.	ОК-1 ОПК-1 ПК-10

Показатели оценки результатов освоения дисциплины	Планируемые результаты	Критерий оценивания	Компетенции
	реакции, протекающей при замыкании ГЭ Владеет методами измерения и расчета ЭДС гальванического элемента		
Освоение раздела № 5	Знает уравнения формальной кинетики и кинетики сложных, цепных, гетерогенных и фотохимических реакций; основные теории гомогенного, гетерогенного и ферментативного катализа; Умеет составлять кинетические уравнения в дифференциальной и интегральной формах для кинетически простых реакций и прогнозировать влияние температуры на скорость процесса Владеет методами расчета констант скоростей простых химических реакций 1,2 и 3 порядков	Правильное выполнение индивидуальных заданий по данному разделу и отчетов по лабораторным работам. Выполнение контрольной работы. Правильные ответы №37-46 на зачете, на вопросы № 83-103 на экз.	ОК-1 ОПК-1 ПК-10
Освоение раздела № 6	Знает закономерности взаимодействия электрических полей с веществом Умеет рассчитывать дипольный момент веществ, рефракцию и ориентировочный размер молекулы Владеет методами определения состава раствора и структуры молекул с помощью рефракции, определения дипольного момента вещества	Правильное выполнение индивидуальных заданий по данному разделу и отчетов по лабораторным работам Правильные ответы №47-50 на зачете, на вопросы № 104-107 на экз.	ОК-1 ОПК-1 ПК-10

Показатели оценки результатов освоения дисциплины	Планируемые результаты	Критерий оценивания	Компетенции
Освоение раздела № 7	Знает теоретические основы возникновения молекулярных спектров Умеет интерпретировать молекулярные и использовать их для нахождения молекулярных констант Владет навыками получения молекулярных спектров	Правильное выполнение индивидуальных заданий по данному разделу и отчетов по лабораторным работам. Выполнение контрольной работы. Проверка и обсуждение слайд-презентаций Правильные ответы №51-56 на зачете, на вопросы № 108-117 на экз.	ОК-1 ОПК-1 ПК-10

Шкала оценивания соответствует СТО СПбГТИ(ТУ):

если по дисциплине промежуточная аттестация проводится в форме зачета, то результат оценивания – «зачтено», «не зачтено»;

если по дисциплине промежуточная аттестация проводится в форме экзамена и (или) курсового проекта (работы), то шкала оценивания – балльная.

3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации.

3.1. Примеры многовариантных расчетных заданий для контроля самостоятельной работы студентов и для контрольных работ

Темы 1 и 2 - Химическая термодинамика и химическое равновесие

Задание № 1. Расчет равновесного выхода продукта химической реакции и выбор оптимальных условий проведения процесса.

1.1. На основании значений теплот образования веществ $\Delta H_{f,298}^0$ из справочника определите изобарный тепловой эффект химической реакции A $Q_P = \Delta_r H_{298}^0$ (в кДж) при условии, что все вещества, участвующие в реакции, находятся в идеальном газообразном состоянии.

1.2. Определите изменение числа молей газообразных веществ реакции A при 298 К и стандартном давлении.

1.3. Рассчитайте работу (в кДж), совершаемую в реакции A против внешнего давления при $P = const$ и $T = 298$ К.

1.4. Определите изохорный тепловой эффект химической реакции A $Q_V = \Delta_r U_{298}^0$ при условии, что все вещества, участвующие в реакции, находятся в идеальном газообразном состоянии.

1.5. На основании данных из справочника определите изменение средней теплоемкости в системе в результате реакции A $\Delta \bar{C}_{P,298-T}^0$ (в Дж/К). Температуру T для своего варианта возьмите из таблицы.

1.6. Определите тепловой эффект реакции A при температуре T и стандартном давлении $\Delta_r H_T^0$ (в кДж), используя найденные ранее значения $\Delta_r H_{298}^0$ и $\Delta \bar{C}_{P,298-T}^0$.

1.7. Установите, как будет меняться тепловой эффект химической реакции A при повышении температуры. Ответ аргументируйте, используя соответствующие уравнения химической термодинамики.

1.8. Определите изменение энтропии системы (в Дж/К) в результате химической реакции A , протекающей между веществами в идеальном газообразном состоянии при стандартном давлении и температуре 298 К. Значения стандартной энтропии для веществ возьмите из справочника.

1.9. Рассчитайте изменение энтропии $\Delta_r S_T^0$ (в Дж/К) в результате реакции A при температуре T и стандартном давлении, используя рассчитанные в п. 1.8. значения изменения энтропии при температуре 298 К и $\Delta C_{P,298-T}^0$.

1.10. Определите изменение стандартной энергии Гиббса $\Delta_r G_T^0$ (Дж) для химической реакции A при температуре 298 К и при температуре T .

1.11. Рассчитайте термодинамическую константу равновесия K_a реакции A при температуре 298 К и температуре T .

1.12. Определите глубину превращения ξ в реакции A при температуре T и атмосферном давлении при условии, что исходные вещества взяты в стехиометрических количествах.

1.13. Определите глубину превращения ξ в реакции A при температуре T и атмосферном давлении при условии, что исходные вещества взяты в количествах, указанных в таблице.

1.14. Определите степень превращения исходных веществ при условиях 1.12 и 1.13.

1.15. Определите состав равновесной смеси в % (мол.) для химической реакции A при температуре T и атмосферном давлении при условиях 1.12 и 1.13.

1.16. Установите, как влияет повышение температуры на термодинамическую константу равновесия K_a и равновесный выход продуктов химической реакции A . Ответ аргументируйте, используя соответствующие уравнения химической термодинамики. Сопоставьте сделанные выводы с расчетными значениями констант равновесия.

1.17. Установите, как влияет повышение общего давления на равновесный выход продуктов химической реакции A . Ответ аргументируйте.

1.18. Сделайте вывод об оптимальных условиях протекания процесса: при каких температурах и давлениях следует проводить реакцию A для получения максимального выхода продуктов. При ответе на данный вопрос учитывайте кинетические факторы и энергетические и экономические затраты.

Вариант	Химическая реакция A	T , К
1	$N_2 + 3H_2 = 2NH_3$	500
2	$CCl_4 + 4H_2 = CH_4 + 4HCl$	700
3	$CH_4 + 2S_2 = CS_2 + 2H_2S$	600

Вариант	Начальное количество исходных веществ	
1	N_2 – 0,2 моль;	H_2 – 2,0 моль
2	CCl_4 – 5,0 моль;	H_2 – 10,0 моль
3	CH_4 – 0,02 моль;	S_2 – 0,1 моль

Задание № 2. Расчет парциальных давлений компонентов равновесной смеси

2.1. На основании значений $\Delta H_{f,298}^0$ из справочника определите тепловой эффект реакции B $\Delta_r H_{298}^0$ (кДж) при 298 К и стандартном давлении с учетом агрегатного состояния всех веществ, участвующих в реакции.

2.2. Определите изменение энтропии $\Delta_r S_{298}^{\circ}$ (Дж/К) в ходе химической реакции B при 298 К и стандартном давлении с учетом агрегатного состояния всех веществ, участвующих в реакции.

2.3. На основании данных определите изменение средней теплоемкости для реакции B $\Delta_r \bar{C}_{P,298-T}^{\circ}$ (Дж/К).

2.4. Рассчитайте тепловой эффект реакции $\Delta_r H_T^{\circ}$ с использованием средних теплоемкостей $\Delta_r \bar{C}_{P,298-T}^{\circ}$.

2.5. Определите изменение энтропии $\Delta_r S_T^{\circ}$ (Дж/К) в ходе реакции B при температуре T и стандартном давлении, используя $\Delta_r S_{298}^{\circ}$ и $\Delta_r \bar{C}_{P,298-T}^{\circ}$.

2.6. Вычислите изменение стандартной энергии Гиббса $\Delta_r G_T^{\circ}$ (Дж) для химической реакции B при температуре T . Сделайте вывод о направлении самопроизвольного процесса.

2.7. Определите термодинамическую константу равновесия химической реакции K_a при температуре T .

2.8. Напишите уравнение, связывающее константу равновесия химической реакции K_p с химической переменной (глубиной превращения) ζ при условии, что исходные вещества взяты в стехиометрических количествах.

2.9. Запишите в общем виде выражение для константы равновесия химической реакции B через парциальные давления реагирующих веществ.

2.10. Определите парциальные давления газообразных веществ при температуре T и атмосферном давлении.

2.11. Оцените влияние изменения общего давления, температуры и разбавления реакционной смеси газом, не участвующим в химической реакции, на положение равновесия реакции и равновесный выход продукта.

Вариант	Реакция B	T , К
1	$\text{Fe} + \text{CO}_2 = \text{FeO} + \text{CO}$	700
2	$\text{CO} + \text{H}_2 = \text{C}_{(\text{графит})} + \text{H}_2\text{O}$	1000
3	$\text{Fe}_2\text{O}_3 + 3\text{CO} = 2\text{Fe} + 3\text{CO}_2$	700

Тема 3 – Фазовые равновесия и растворы неэлектролитов

Задание № 3. Анализ фазового равновесия жидкость – пар в однокомпонентной системе

3.1. Для вещества A , используя данные «Краткого справочника физико-химических величин» по зависимости температуры кипения веществ от давления, постройте кривую испарения в координатах $P = f(T)$ и $\ln P = f(1/T)$.

3.2. Определите коэффициенты уравнения $\ln P = A - B/T$.

3.3. Вычислите теплоту испарения ΔH для вещества A (кДж /моль), используя коэффициент B , найденный в п. 3.2.

3.4. Вычислите температуру кипения при $P = 1,0132 \cdot 10^5$ Па. Сопоставьте ее с табличным значением.

3.5. Вычислите давление насыщенного пара при температуре T_x , указанной в задании.

Вариант	Вещество A	T_x , °С
1	$\text{C}_2\text{HCl}_3\text{O}_2$ трихлоруксусная кислота	130
2	$\text{C}_2\text{H}_2\text{Cl}_2\text{O}_2$ дихлоруксусная кислота	190

3	$C_2H_3ClO_2$	хлоруксусная кислота	180
---	---------------	----------------------	-----

Задание № 4. Закон Рауля и его применение к разбавленным растворам

4.1. Вычислите по закону Рауля давление насыщенного пара растворителя над раствором указанной концентрации.

4.2. Сравните с экспериментальными данными и объясните полученный результат.

4.4. Рассчитайте активность и коэффициент активности растворителя.

№ вариант а	Состав раствора	$T, ^\circ C$	$P_{0,1}, \text{кПа}$	$m, \text{моль/кг } H_2O$	$P, \text{кПа}$
1	$NaI - H_2O$	25	3.1672	0.500	3.1179
2	$Co(NH_2)_2 - H_2O$	25	3.1672	1.600	3.0818
3	$C_{12}H_{22}O_{11} - H_2O$	0	0.6104	1.651	0.5893

Задание № 5. Эбулиоскопические и криоскопические свойства растворов

Определите, подчиняются ли идеальным законам указанные в таблице растворы. Если не подчиняются – укажите причину.

Для системы $H_3BO_3 - H_2O$ приведено повышение температуры кипения (ΔT), для всех других систем – понижение температуры замерзания (ΔT).

№ вариант а	Раствор	Состав раствора	ΔT
1	$H_3BO_3 - H_2O$	2.54 г / 100 г H_2O	0.214
2	$CCl_3COOH - H_2O$	1.062 г / 65 г H_2O	0.322
3	$LiBr - H_2O$	1.390 г / 100 г H_2O	0.566

Эбулиоскопические E и криоскопические K константы растворителей:

Растворитель	H_2O	C_6H_6	CH_3COOH	$NH_3(ж)$	CCl_4
K	1.86	5.07	3.6	–	–
E	0.513	–	–	0.33	5.64

Задание № 6. Анализ фазовых равновесий жидкость – пар в двухкомпонентной системе

6.1. Какую информацию о системе несет диаграмма температура кипения – состав системы $A-B$?

По диаграмме определите:

6.2. При какой температуре закипит жидкость, содержащая a мол. % вещества A .

6.3. При какой температуре вся первоначальная жидкость обратится в пар, если при нагревании пар не отводить?

6.4. Как будет меняться состав первоначальной жидкости по мере испарения?

6.5. Каков состав первых пузырьков пара?

6.6. Как изменяется состав равновесного с кипящей жидкостью пара в ходе испарения?

6.7. Какое количество каждого из компонентов смеси будет находиться в жидкой фазе и в паре, если m кг смеси, заданного состава нагреть до температуры T ?

6.8. Какие продукты можно получить, если подвергнуть жидкость заданного состава

- а) перегонке в равновесии (интегральной перегонке);
- б) простой (дифференциальной) перегонке;
- в) ректификации?

Вариант	Система $A-B$	M , кг	a , мол.% A	T , °C
1	$H_2O - C_4H_8O_2$	2,0	80	92
2	$CH_3OH - C_2H_4Cl_2$	0,5	30	68
3	$(C_2H_5)_2O - CCl_4$	1,0	60	65

Задание № 7. Фазовые равновесия. Диаграммы плавкости

7.1. Охарактеризуйте диаграмму плавкости системы $A - B$: растворимость компонентов в жидких и твердых фазах, типы твердых растворов, наличие устойчивых и неустойчивых химических соединений.

7.2. Дайте описание состояния системы в различных условиях, расшифровав значение всех полей, линий и характерных точек диаграммы плавкости системы $A - B$.

7.3. Определите температуру начала кристаллизации расплава состава I и состав первых кристаллов. Как изменяется состав расплава и твердой фазы при охлаждении?

7.4. Определите температуру начала плавления, количество и состав фаз при этой температуре для системы состава II.

7.5. Начертите схематические кривые охлаждения расплавов состава I, II и III, определив число и состав фаз и рассчитав число степеней свободы в характерных точках и на каждом участке кривой охлаждения.

7.6. Вычислите массы равновесных фаз при заданной температуре t , °C и количестве исходной смеси состава III.

7.7. Для систем, образующих химические соединения, определите формулы этих соединений.

Вариант	Система $A-B$	Количество исходной смеси	Состав исходной смеси состава A , %			T , °C
			I	II	III	
1	$Mg - Cu$	500 г	10	60	90	550
2	$Cr - Sn$	5 кг	20	98	80	200
3	$Cd - Cu$	800 г	100	60	50	580

Тема 4 – Электрохимические системы

Задание № 8. Электродвижущие силы и потенциалы

8.1. Какого рода левый электрод гальванического элемента A . Напишите уравнение реакции, протекающей на этом электроде в равновесных условиях, и уравнение для расчета потенциала этого электрода.

8.2. Определите среднюю ионную активность электролита a_{\pm} в левом электроде гальванического элемента A на основании справочных значений среднего ионного

коэффициента активности электролита при моляльной концентрации m_1 и температуре 298 К.

8.3. Определите электродный потенциал левого электрода при 298 К. Стандартный электродный потенциал возьмите из справочника.

8.4. Какого рода правый электрод гальванического элемента A ? Напишите уравнение реакции, протекающей на этом электроде в равновесных условиях, и уравнение для расчета потенциала этого электрода

8.5. Определите среднюю ионную активность электролита a_{\pm} в правом электроде гальванического элемента A на основании справочных значений среднего ионного коэффициента активности электролита при моляльной концентрации m_2 и температуре 298 К.

8.6. Определите электродный потенциал правого электрода при 298 К. Стандартный электродный потенциал возьмите из справочника.

8.7. Напишите электродные реакции, протекающие на отрицательном и положительном электродах и суммарную химическую реакцию, протекающую самопроизвольно при работе гальванического элемента A .

8.8. Определите электродвижущую силу (ЭДС) гальванического элемента A и максимальную полезную электрическую работу, которую можно получить при работе данного элемента при температуре 298 К.

8.9. Вычислите константу равновесия реакции, протекающей самопроизвольно а гальваническом элементе A при температуре 298 К. Примите, что в реакции участвует один электрон.

8.10. Составьте гальванический элемент, в котором протекает самопроизвольно химическая реакция B .

8.11. Определите стандартное значение ЭДС гальванического элемента. В котором протекает химическая реакция B , при температуре 298 К на основании стандартных электродных потенциалов из справочника.

8.12. Определите E^0 при температурах 288 и 308 К на основании значения E^0 при 298 К и величины $\left(\frac{\partial E^0}{\partial T}\right)_P$, приняв что в указанном интервале температур зависимость $E^0 = f(T)$ линейна.

8.13. Определите ΔG_T^0 (кДж) реакции B , протекающей в гальваническом элементе при температурах 288 К.

8.14. Определите ΔS_T^0 (Дж/К) для реакции B , протекающей в гальваническом элементе при температурах 288 К.

8.15. Определите тепловой эффект ΔH_T^0 (кДж) реакции B , протекающей в гальваническом элементе при температурах 288 К.

8.16. Определите константу равновесия химической реакции B , при температуре 288 К.

Вариант	Гальванический элемент A	m_1 , моль/кг H ₂ O	m_2 , моль/кг H ₂ O
1	Zn ZnSO ₄ KCl AgCl _(кр) ,Ag	0,005	0,2
2	Pt,H ₂ H ₂ SO ₄ KCl Hg ₂ Cl _{2(кр)} ,Hg	0,005	0,2
3	Cu CuCl ₂ CdSO ₄ Hg ₂ SO _{4(кр)} ,Hg	0,005	0,2

Вариант	Химическая реакция <i>B</i>	$\left(\frac{\partial E^0}{\partial T}\right)_P \cdot 10^4, \text{ В/К}$
1	$\text{Pb} + 2\text{AgI} = \text{PbI}_2 + 2\text{Ag}$	- 1,38
2	$\text{H}_2 + \text{Hg}_2\text{SO}_4 = \text{H}_2\text{SO}_4 + 2 \text{Hg}$	- 6,50
3	$\text{NaI}_3 + \text{Na}_2\text{S} = 3\text{NaI} + \text{S}$	+ 6,59

Задание № 9. Электрическая проводимость растворов слабых электролитов

9.1. Определите удельную электрическую проводимость раствора электролита *A*, используя удельное сопротивление раствора ρ .

9.2. Определите молярную электрическую проводимость раствора электролита *A*.

9.3. На основании справочных данных проводимости отдельных ионов вычислите предельную молярную электрическую проводимость заданного электролита.

9.4. Рассчитайте степень диссоциации (%) и константу диссоциации электролита *A* при концентрации *C* на основании данных электрической проводимости.

9.5. Определите концентрацию ионов водорода в растворе электролита *A* при концентрации *C*, используя значение степени диссоциации, полученное в п. 8.4. и pH раствора.

9.6. Изобразите схематически и объясните зависимость удельной электрической проводимости от концентрации слабого и сильного электролита.

9.7. Изобразите схематически и объясните зависимость молярной электрической проводимости от концентрации слабого и сильного электролита.

Вариант	Электролит <i>A</i>	$C \cdot 10^3, \text{ моль/л}$	$\rho \cdot 10^{-2}, \text{ Ом}\cdot\text{м}$
1	HCOOH	1,39	0,569
2	n-C ₃ H ₇ COOH	1,04	2,278
3	HCOOH	1,11	0,655

Тема 5 – Химическая кинетика и катализ

Задание № 10. Определение порядка и константы скорости химической

реакции

10.1. Постройте графики зависимости концентрации *C* исходного вещества от времени *t* для реакции *B*, заданной в таблице, в координатах $\ln C = f(t)$ и $1/C = f(t)$. По виду графика определите порядок реакции.

10.2. Рассчитайте константу скорости реакции *B*.

10.3. Вычислите концентрацию исходного вещества и продуктов реакции *B* через 200 с от начала реакции.

10.4. Рассчитайте время, за которое прореагирует 10% исходного вещества.

10.5. Определите период полупревращения реакции *B*.

Вариант 1. Реакция *B*: $2\text{NO}_2 = 2\text{NO} + \text{O}_2$ $T = 631 \text{ К}$

<i>t</i> , с	$C \cdot 10^3, \text{ моль/л}$
0	1,0000
60	0,8308
120	0,7108
150	0,6632
180	0,6212
300	0,4954

Вариант 2. Реакция **B**: $2\text{F}_2\text{O} = 2\text{F}_2 + \text{O}_2$ $T = 543 \text{ K}$

$t \cdot 10^{-3}, \text{ c}$	$C \cdot 10^3$ моль/л
0	1,0000
1,2	0,9352
2,4	0,8794
6,0	0,7442
12,0	0,5936
24,0	0,4218

Вариант 3. Реакция **B**: $2\text{N}_2\text{O} = 2\text{N}_2 + \text{O}_2$ $T = 938 \text{ K}$

$t, \text{ c}$	$C, \text{ моль/л}$
0	0,154
30	0,145
60	0,137
120	0,122
240	0,097
300	0,086

10.6. Определите энергию активации химической реакции **B**, используя значения константы скорости реакции k_1 и k_2 при двух значениях температуры T_1 и T_2 .

10.7. Запишите уравнение Аррениуса. Определите предэкспоненциальный множитель в уравнении Аррениуса.

10.8. Определите константу скорости химической реакции **B** при температуре T_3 .

10.9. Определите температурный коэффициент Вант-Гоффа γ для скорости реакции **B** в интервале температур T_1 и T_2 .

10.10. Используя температурный коэффициент γ , определите, во сколько раз изменится скорость реакции, если температуру T_1 увеличить на величину ΔT .

Вариант	$T_1, \text{ K}$	k_1	$T_2, \text{ K}$	k_2	$T_3, \text{ K}$	$\Delta T, \text{ K}$
1	656	7,700 л/(моль·с)	592	0,844 л/(моль·с)	667	25
2	523	$1,45 \cdot 10^{-2}$ л/(моль·с)	570	0,324 л/(моль·с)	590	25
3	813	$1,702 \cdot 10^{-5} \text{ c}^{-1}$	783	$4,635 \cdot 10^{-6} \text{ c}^{-1}$	777	15

Тема 6 – Методы изучения строения молекул, основанные на электрических свойствах

Задание № 11. Электрические свойства молекул

Рассчитать дипольный момент и эффективный радиус молекулы А на основании экспериментальных значений молярной поляризуемости при заданной температуре T . При расчете пренебречь величиной атомной составляющей поляризуемости, молярную рефракцию вычислить по правилу аддитивности.

Вариант	Молекула А	$T, \text{ K}$	$P_m \cdot 10^6, \text{ м}^3/\text{моль}$
1	NH_3	473	35.21
2	H_2O	573	40.5
3	HCl	260	33.57

Тема 7 – Оптические методы изучения строения вещества

Задание № 12. Вращательные спектры двухатомных молекул

- 3.1. Напишите квантово-механическое уравнение для расчета энергии вращательного движения двухатомной молекулы как жесткого ротатора.
- 3.2. Выведите уравнение для расчета изменения энергии вращения двухатомной молекулы как жесткого ротатора при переходе ее на соседний, более высокий квантовый уровень.
- 3.3. Выведите уравнение зависимости волнового числа вращательных линий в спектре поглощения двухатомной молекулы от вращательного квантового числа.
- 3.4. Выведите уравнение для расчета разности волновых чисел соседних линий во вращательном спектре поглощения двухатомной молекулы.
- 3.5. Рассчитайте вращательную постоянную (в см^{-1} и м^{-1}) двухатомной молекулы А по волновым числам двух соседних линий в длинноволновой инфракрасной области вращательного спектра поглощения молекулы (см.табл.3.1).
- 3.6. Определите энергию вращения молекулы А на первых пяти квантовых вращательных уровнях (Дж).
- 3.7. Вычертите схематически энергетические уровни вращательного движения двухатомной молекулы как жесткого ротатора.
- 3.8. Нанесите пунктиром на эту схему вращательные квантовые уровни молекулы, не являющейся жестким ротатором.
- 3.9. Выведите уравнение для вычисления равновесного межъядерного расстояния на основании разности волновых чисел соседних линий во вращательном спектре поглощения.
- 3.10. Определите момент инерции двухатомной молекулы А.
- 3.11. Рассчитайте приведенную массу молекулы А.
- 3.12. Вычислите равновесное межъядерное расстояние (r_0) молекулы А. Сопоставьте полученное значение со справочными данными.
- 3.13. Отнесите наблюдаемые линии во вращательном спектре молекулы А к вращательным переходам.
- 3.14. Рассчитайте волновые числа спектральных линий, связанных с вращательными переходами $0 \rightarrow 1$, $1 \rightarrow 2$ и $2 \rightarrow 3$ для молекулы А.
- 3.15. Вычислите приведенную массу изотопозамещенной молекулы В.
- 3.16. Рассчитайте волновые числа спектральных линий, связанных с вращательными переходами $0 \rightarrow 1$, $1 \rightarrow 2$ и $2 \rightarrow 3$ для молекулы В. Межъядерные расстояния в молекулах А и В считать равными.
- 3.17. Определите величину и направление изотопного сдвига линий поглощения во вращательных спектрах молекул А и В, если эти линии соответствуют переходам между вращательными уровнями $0 \rightarrow 1$, $1 \rightarrow 2$ и $2 \rightarrow 3$.
- 3.18. Нарисуйте схематически вращательный спектр поглощения двухатомной молекулы А. Нанесите на этот же спектр линии, соответствующие вращательным переходам для молекулы В.
- 3.19. Объясните причину немонотонного изменения интенсивности линий поглощения по мере увеличения энергии вращения молекулы.

Вариант	Молекула А	$\tilde{\nu} \cdot 10^{-2}, \text{и}^{-1}$		Молекула В
1	LiH	60.12	75.15	Li^2H
2	BCl	4.104	5.472	B^{37}Cl
3	BeH	103.15	123.78	Be^2H

Задание 13. Колебательные спектры двухатомных молекул

4.1 Напишите квантово-механическое уравнение для расчета энергии колебательного движения двухатомной молекулы как гармонического осциллятора.

4.2 Напишите квантово-механическое уравнение для расчета энергии колебательного движения двухатомной молекулы ангармонического осциллятора.

4.3 Вычислите по определенным из ИК-спектра поглощения двухатомной молекулы А основному тону ($\tilde{\nu}_0$), первому обертону ($\tilde{\nu}_1$) или второму обертону ($\tilde{\nu}_2$) (табл. 4) волновое число собственных колебаний ω_e , коэффициент ангармоничности x_e и ангармоничность $\omega_e x_e$.

4.4 Вычислите волновое число пропущенной линии в ИК-спектре поглощения двухатомной молекулы А ($\tilde{\nu}_0$, $\tilde{\nu}_1$ или $\tilde{\nu}_2$).

4.5 Определите энергию колебательного движения молекулы А на нулевом колебательном квантовом уровне E_0 (Дж), используя волновое число собственных колебаний ω_e и ангармоничность $\omega_e x_e$ (см. п.4.3)

4.6 Выведите уравнение для расчета максимального колебательного квантового числа.

4.7 Определите максимальное колебательное квантовое число ν_{\max} для молекулы А.

4.8 Определите энергию колебательного движения E_{\max} (Дж) на максимальном колебательном квантовом уровне.

4.9 Определите энергию диссоциации D_0 молекулы А (кДж/моль).

4.10 Вычертите график зависимости $E_{\max} = f(\nu)$, выбрав 2-3 значения квантового числа ν и рассчитав значения $E_{\text{кол}}$ в интервале от 0 до ν_{\max} .

4.11 Укажите на графике энергию колебательного движения на максимальном колебательном квантовом уровне E_{\max} (Дж) и энергию диссоциации D_0 .

4.12 Вычислите силовую постоянную химической связи k_e двухатомной молекулы А.

4.13 Вычислите волновое число собственных колебаний изотопозамещенной молекулы В.

4.14 Определите величину и направление изотопного сдвига.

Вариант	Молекула А	$\tilde{\nu}_0 \cdot 10^{-2}, \text{ м}^{-1}$	$\tilde{\nu}_1 \cdot 10^{-2}, \text{ м}^{-1}$	$\tilde{\nu}_2 \cdot 10^{-2}, \text{ м}^{-1}$	Молекула В
1	HI	2230	4380	-	^2HI
2	HF	3962	-	11344	^3HF
3	HCl	2885	-	8339	^2HCl

3.2. Контрольные вопросы для проведения зачета (5 и 6 семестр):

Темы 1 и 2 - Химическая термодинамика и химическое равновесие

1. Функции состояния и функции процесса – принципиальные отличия.
2. Следствия из закона Гесса. Термохимические уравнения. Примеры расчетов.
3. Расчет тепловых эффектов различных типов фазовых превращений (плавление, кристаллизация, испарение, возгонка и т.д.) с использованием таблиц стандартных термодинамических функций. Примеры расчетов.
4. Расчет тепловых эффектов химических реакций в зависимости от температуры по уравнению Кирхгофа в дифференциальной и интегральной формах.
5. Интерполяционные уравнения теплоемкости, различные их формы, применимость. Примеры применения.
6. Расчет изменения энтропии для химической реакции по температурным зависимостям теплоемкости. Примеры расчетов.
7. Направление химического процесса – условия использования энергии Гиббса, энергии Гельмгольца, энтропии как критериев термодинамической возможности (или невозможности) самопроизвольного протекания физико-химического процесса. Примеры расчетов.
8. Зависимость константы равновесия от температуры – применимость уравнений изобары и изохоры химической реакции, анализ.
9. Выражения для константы равновесия для различных типов гомогенных и гетерогенных химических реакций.
10. Влияние изменения концентрации, давления и температуры на сдвиг химического равновесия – качественный анализ (по принципу Ле-Шателье) и строгий термодинамический расчет. Примеры.
11. Расчет констант равновесия химических реакций с использованием истинных и средних теплоемкостей.
12. Термодинамический анализ смещения химического равновесия в зависимости от давления, температуры, стехиометрии реакции.

Тема 3 – Фазовые равновесия и растворы неэлектролитов

13. Применение правила фаз Гиббса – для чисто фазовых процессов и для процессов с протеканием химических превращений. Примеры.
14. Анализ различных типов диаграмм состояния однокомпонентных систем.
15. Сравнительная применимость уравнений Клапейрона и Клапейрона-Клаузиуса.
16. Взаимосвязь кривых охлаждения и диаграмм состояния двухкомпонентных систем. Примеры построения диаграмм по кривым охлаждения и обратно.
17. Определение относительных масс и мольных количеств жидкой и кристаллической фаз по диаграммам: плавкости, жидкость-пар (парожидкостное равновесие), используя правило рычага.
18. Сравнительный анализ и примеры различных типов диаграмм плавкости двухкомпонентных систем.
19. Критерии классификации диаграмм состояния – по способности к растворению фаз, возможности образования и разложения химических соединений, их термической устойчивости, особенностям фазовых (структурных, агрегатных) превращений веществ.

Тема 4 - Электрохимические системы

20. Расчет рН, рОН, равновесного состава для растворов электролитов различной стехиометрического состава и глубиной процессов ассоциации-диссоциации, комплексообразования и др. Примеры.

21. Формальное и сущностное содержание понятия активности компонентов раствора; взаимосвязь с возможностью протекания химических реакций в растворах.
22. Основные факторы, влияющие на равновесие процессов гидролиза и комплексобразования. Примеры.
23. Анализ параметров уравнения Нернста для расчета равновесного электродного потенциала.
24. Взаимосвязь между электродвижущей силой гальванического элемента и работой гальванического элемента для различных типов процессов.
25. Использование различных вспомогательных (стандартных) электродов и шкал при анализе электрохимических потенциалов, теоретические и практические особенности их применения.
26. Теоретическое обоснование и практические особенности применения различных типов электродов (I и II рода, окислительно-восстановительных, газовых, ионно-обменных). Примеры.
27. Термодинамический анализ электрохимических процессов, расчетный аппарат.
28. Обоснование и использование стандартных электродных потенциалов для определения возможности протекания, направления химических и электрохимических коррозионных процессов.
29. Применимость (приближенность использования) стандартных потенциалов для оценки принципиальной возможности протекания окислительно-восстановительных реакций.
30. Расчет ЭДС гальванических элементов различных типов (I, II, III рода, окислительно-восстановительных, ионно-обменных, газовых и др.).
31. Теоретические основы и практическое использование потенциометрических измерений (определение концентрации (активности) раствора электролита, pH раствора, потенциометрическое титрование).
32. Химические источники тока – современные достижения и проблемы в области производства батарей, аккумуляторов, топливных элементов.
33. Расчет и анализ степени диссоциации и константы диссоциации слабого электролита из измерений электропроводности.
34. Анализ зависимостей удельной, молярной и эквивалентной электрических проводимостей сильных и слабых электролитов от концентрации и температуры.
35. Границы применимости закона Кольрауша для электрической проводимости в многокомпонентных растворах, его обобщения.
36. Теоретические основы и практическое использование измерений электрической проводимости (кондуктометрические датчики, кондуктометрическое титрование и др.).

Тема 5- Химическая кинетика и катализ

37. Возможности, ограничения и анализ термодинамического и кинетического подходов к исследованию химических процессов (реакций).
38. Границы применимости закона действующих масс – основного постулата химической кинетики и соответствующих кинетических уравнений.
39. Взаимосвязь и принципиальные отличия в понятиях порядка и молекулярности химической реакции.
40. Общий подход к составлению и интегрированию кинетических уравнений различных порядков; условия применимости.
41. Оценка порядка и молекулярности химических реакций; общность и различия. Примеры.
42. Выявление и анализ лимитирующих стадий для различных типов химических реакций.
43. Построение и анализ энергетических диаграмм химических реакций.

44. Построение, анализ, отличия энергетических диаграмм химических реакций без катализатора и с катализатором.

45. Физико-химические основы применения радиоактивных изотопов в схемах контроля и автоматизации технологических процессов для обнаружения скрытых дефектов.

46. Анализ совместного и независимого влияния параметров (температуры давления, объема, состава реагирующей смеси) на скорость химической реакции

Тема 6 – Методы изучения строения молекул, основанные на электрических свойствах

47. Поляризация полярных и неполярных молекул в постоянном и переменном электрических полях. Рефракция.

48. Уравнения Дебая, Клаузиуса-Мосотти и Лоренц-Лорентца.

49. Определение дипольного момента и поляризуемости молекул.

50. Использование электрических свойств молекул для определения строения молекул и состава раствора.

Тема 7 – Оптические методы изучения строения вещества

51. Вращательный спектр поглощения.

52. Моменты инерции двух- и многоатомных молекул

53. Колебательно-вращательный спектр поглощения.

54. Число и типы колебаний в многоатомных молекулах.

55. Условия активности нормальных колебаний в ИК- и КР-спектрах.

56. Совместное использование колебательно-вращательных ИК-спектров и спектров комбинационного рассеяния для суждения о структуре и свойствах молекул.

3.3. Контрольные вопросы по курсу "Физическая химия" к экзамену (5 и 6 семестр)

Темы 1 и 2 - Химическая термодинамика и химическое равновесие

1. Функции процесса и функции состояния. Внутренняя энергия, теплота, работа, законы термодинамики.
2. Работа расширения идеального газа в изотермическом, изобарном и изобарно-изотермическом процессах.
3. Теплота процессов при постоянном объеме и давлении.
4. Первый закон термодинамики. Расчет тепловых эффектов. Закон Гесса.
5. Теплоты образования и теплоты сгорания веществ. Их использование для расчетов тепловых эффектов химических реакций.
6. Определение теплоемкости. Истинная и средняя теплоемкость. Зависимость теплоемкости от температуры (интерполяционные уравнения).
7. Зависимость теплового эффекта химических реакций от температуры. Уравнение Кирхгофа.
8. Интегрирование уравнения Кирхгофа. Составление уравнения для расчета теплового эффекта химической реакции при заданной температуре.
9. Термодинамически обратимые и необратимые процессы. Работа термодинамически обратимого процесса.
10. Энтропия. Математические выражения II закона термодинамики для обратимых и необратимых процессов.
11. Изменение энтропии в изолированной системе как критерий направления процесса и состояния равновесия.
12. Изменение энтропии при нагревании, расширении, смешении идеальных газов при фазовых переходах.
13. Постулат Планка. Расчет абсолютной энтропии.
14. Изменение энтропии в химических реакциях. Составление уравнения для расчета изменения энтропии химической реакции при заданной температуре.
15. Максимальная и максимальная полезная работа. Термодинамические потенциалы как мера работоспособности системы.
16. Термодинамические потенциалы как критерий направления процесса и состояния равновесия в закрытых системах.
17. Энергия Гельмгольца (изохорно-изотермический потенциал) и энергия Гиббса (изобарно-изотермический потенциал). Свободная и связанная энергия.
18. Зависимость энергии Гиббса от температуры и давления.
19. Уравнение Гельмгольца-Гиббса.
20. Зависимость энергии Гиббса от состава системы. Химический потенциал компонента системы.
21. Химический потенциал идеального и реального газов. Фугитивность, коэффициент фугитивности; активность, коэффициент активности реального газа. Методы нахождения коэффициентов фугитивности и активности.
22. Вывод уравнения "изотермы химической реакции".
23. Термодинамические и практические константы равновесия. Связь между ними.
24. Равновесие в гетерогенных химических реакциях. Константы равновесия гетерогенных реакций.
25. Зависимость константы равновесия от температуры. Вывод и анализ уравнения изобары химической реакции в дифференциальной форме.
26. Интегральная форма уравнения изобары химической реакции. Составление уравнения для расчета константы равновесия химической реакции от температуры.
27. Тепловая теорема Нернста и следствия из нее.

Тема 3 – Фазовые равновесия и растворы неэлектролитов

28. Правило фаз Гиббса. Понятие "фаза", "составляющее вещества", "число компонентов", "термодинамические степени свободы".
29. Условие термодинамического равновесия между фазами.
30. Вывод, анализ и интегрирование уравнения Клаузиуса-Клапейрона.
31. Диаграммы состояния однокомпонентных систем. Их разбор с помощью правила фаз Гиббса.
32. Идеальные и неидеальные растворы. Закон Рауля.
33. Предельно разбавленные, атермальные, регулярные растворы.
34. Парциальные молярные величины. Уравнения Гиббса-Дюгема.
35. Химический потенциал компонента в идеальном и неидеальном растворах.
36. Вычисления активности растворителя по понижению давления пара над раствором
37. Вычисление активности растворителя по понижению температуры замерзания раствора.
38. Вычисление активности растворителя по осмотическому давлению раствора.
39. Коллигативные свойства растворов и их практическое использование.
40. Растворимость газов в жидкости. Зависимость растворимости от температуры.
41. Растворимость газов в жидкости. Зависимость растворимости от давления и добавки электролита. Уравнение Сеченова.
42. Неограниченно растворимые друг в друге жидкости. Вычисление давления и состава пара над идеальными растворами. Первый закон Гиббса-Коновалова.
43. Диаграммы "общее давление-состав", "температура кипения - состав", "состав раствора - состав пара" для идеальных растворов.
44. Фазовая диаграмма равновесия жидкость – пар. Правило рычага.
45. Виды перегонки: интегральная, дифференциальная, фракционная, ректификация.
46. Азеотропные растворы. Диаграммы равновесия жидкость – пар для азеотропных растворов. Ректификация азеотропных растворов.
47. Ограниченная взаимная растворимость жидкостей. Влияние температуры на растворимость.
48. Давление и состав насыщенного пара в системах с ограниченной взаимной растворимостью. Диаграммы "общее давление состав", "температура кипения - состав", "состав раствора – состав пара" для систем с ограниченной взаимной растворимостью жидкостей.
49. Давление и состав пара над смесью взаимно-нерастворимых жидкостей. Перегонка с водяным паром.
50. Растворимость твердых веществ в жидкости. Идеальная растворимость. Уравнение Шредера.
51. Диаграммы плавкости двухкомпонентных систем с полной растворимостью в жидком и полной нерастворимостью в твердом состоянии. Кривые охлаждения.
52. Диаграммы плавкости двухкомпонентных систем с полной растворимостью в жидком и твердом состоянии. Виды твердых растворов.
53. Диаграммы состояния двухкомпонентных систем с полной растворимостью в жидком и ограниченной растворимостью в твердом состоянии. Кривые охлаждения.
54. Диаграммы плавкости двухкомпонентных систем, образующих химические соединения, плавящиеся без разложения и с разложением.
55. Диаграммы состояния тройных жидких систем с ограниченной взаимной растворимостью
56. Распределение растворенного вещества между двумя жидкими фазами. Экстрагирование.
57. Диаграммы плавкости трехкомпонентных систем.

Тема 4 - Электрохимические системы

58. Коллигативные свойства растворов электролитов. Изотонический и осмотический коэффициент.
59. Строение растворов сильных электролитов. Основы электростатической теории растворов сильных электролитов Дебая и Хюккеля.
60. Уравнение для расчета средних ионных коэффициентов активности (I, II и III приближения теории Дебая и Хюккеля).
61. Равновесие в растворах электролитов. Термодинамические и практические константы ионных равновесий.
62. Электрохимический потенциал. Возникновение скачка потенциала и двойного электрического слоя на границе раздела металл – раствор электролита.
63. Водородная шкала электродных потенциалов.
64. Уравнение Нернста для равновесного потенциала. Стандартный электродный потенциал.
65. Электроды I рода. Примеры. Электродные реакции. Расчет равновесных потенциалов.
66. Электроды II рода. Примеры. Электродные реакции. Расчет равновесных потенциалов.
67. Окислительно-восстановительные электроды. Примеры. Электродные реакции. Расчет равновесных потенциалов.
68. Ионообменные электроды. Стекланный электрод.
69. Концентрационные гальванические элементы. Расчет ЭДС
70. Химические гальванические элементы. Расчет ЭДС.
71. Гальванические элементы с переносом и без переноса. Использование гальванических элементов без переноса для экспериментального определения средних ионных активностей.
72. Использование стандартных потенциалов для определения направления окислительно-восстановительных реакций.
73. Использование стандартных потенциалов для определения направления электрохимических реакций.
74. Определение термодинамических параметров химических реакций (ΔH , ΔS , ΔG), идущих в гальваническом элементе.
75. Одноразовые химические источники тока.
76. Многократные химические источники тока (аккумуляторы).
77. Удельная, молекулярная и эквивалентная проводимость. Связь электрической проводимости с подвижностями ионов.
78. Зависимость электрической проводимости от температуры, природы электролита и растворителя.
79. Зависимость удельной электропроводности от концентрации для слабого и сильного электролитов.
80. Зависимость эквивалентной проводимости сильных электролитов от концентрации. Основные положения теории Дебая-Хюккеля-Онзагера.
81. Практическое использование измерений электрической проводимости.
82. Числа переноса, их использование для определения электрической проводимости отдельных ионов.

Тема 5 - Химическая кинетика и катализ

83. Скорость реакции для гомогенной и гетерогенной реакции. Кинетическое уравнение. Молекулярность и порядок гомогенной реакции. Стадийное протекание реакций.
84. Кинетическая кривая. Методы определения порядка реакции.
85. Реакции 1, 2 и 3 порядка. Выражение для константы скорости и периода полупревращения.

86. Сложные реакции: двухсторонние (обратимые) и параллельные.
87. Сложные реакции: последовательные и сопряженные.
88. Метод квазистационарных концентраций. Механизм мономолекулярных реакций.
89. Зависимость скорости гомогенной химической реакции от температуры. Уравнение Аррениуса.
90. Стадии гетерогенного процесса. Диффузия в газах, жидкостях и твердых телах. 1 и 2 законы Фика.
91. Влияние температуры на гетерогенный процесс.
92. Влияние перемешивания на режим гетерогенного процесса.
93. Теория активных соударений. Основные допущения. Выражение для предэкспоненциального множителя в уравнении Аррениуса. Стерический фактор.
94. Понятие активированного комплекса. Выражение константы скорости по методу переходного состояния.
95. Сопоставление уравнений теории активных соударений и теории переходного состояния. Недостатки теорий.
96. Влияние растворителя на скорость реакций в растворах. Гомо- и гетеролитические реакции.
97. Гетеролитические реакции. Влияние ионной силы раствора и зарядов реагирующих частиц на скорость процесса.
98. Первичный и вторичный солевые эффекты.
99. Особенности цепных реакций. Возникновение, развитие и обрыв цепей. Тепловой и цепной механизмы воспламенения.
100. Особенности протекания фотохимических реакций. Выражение для константы скорости фотохимической реакции. Примеры фотохимических реакций.
101. Общие свойства катализаторов. Гомогенный и гетерогенный катализ. Влияние катализаторов на предэкспоненциальный множитель и энергию активации в уравнении Аррениуса.
102. Гомогенный катализ. Кислотно-основной катализ. Ферментативный катализ.
103. Адсорбция и гетерогенный катализ. Изотерма и изобара адсорбции. Стадии гетерогенного катализа и влияние температуры. Теории гетерогенного катализа.

Тема 6 – Методы изучения строения молекул, основанные на электрических свойствах

104. Поляризация полярных и неполярных молекул в постоянном и переменном электрических полях. Рефракция.
105. Уравнения Дебая, Клаузиуса-Мосотти и Лоренц-Лорентца.
106. Определение дипольного момента и поляризуемости молекул.
107. Использование электрических свойств молекул для определения молекул и состава раствора.

Тема 7 – Оптические методы изучения строения вещества

108. Общая характеристика молекулярных спектров.
109. Вращательные спектры. Определение момента инерции и равновесного межъядерного расстояния для двухвалентных и линейных многоатомных молекул из спектральных данных.
110. Энергия колебательного движения двухатомной молекулы в приближении гармонического и ангармонического осциллятора.
111. Определение собственной частоты и коэффициента ангармоничности из колебательного спектра поглощения.
112. Определение энергии связи из колебательного спектра поглощения.
113. Число и типы нормальных колебаний многоатомных молекул.

Характеристические частоты.

114. Вращательно-колебательные спектры поглощения двухатомных молекул P-, R- и Q-ветви, их происхождение.

115. Электронно-колебательно-вращательные спектры. Принцип Франка-Кондона.

116. Определение энергии диссоциации из электронно-колебательно-вращательных спектров.

117. Спектры комбинационного рассеяния, сопоставление их с ИК-спектрами.

3.3. Темы контрольных работ

3.3.1 Контрольная работа по термодинамике:

Для химической реакции $aA + bB = cC + dD$, протекающей при температуре T и давлении P , определить состав равновесной смеси (выход продуктов) и проанализировать влияние температуры и давления на выход продуктов.

3.3.2 Контрольная работа по оптическим методам изучения строения вещества:

- Используя значения волновых чисел двух соседних пиков во вращательном спектре поглощения двухатомной молекулы, определить межъядерное расстояние.
- Используя волновые числа наблюдаемых пиков (основной тон, первый и второй обертоны) в колебательном спектре двухатомной молекулы, определить собственную частоту колебаний атомов в молекуле, коэффициент ангармоничности и энергию диссоциации молекулы.

3.3.3 Контрольная работа по кинетике:

Используя данные по текущей концентрации исходных веществ химической реакции, рассчитать константу скорости данной реакции, период полупревращения и концентрацию исходного вещества в конкретный момент времени.

4. Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в соответствии с требованиями СПб

СТО СПбГТИ(ТУ) 016-2014. КС УКДВ. Порядок проведения зачетов и экзаменов.