

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович  
Должность: Проректор по учебной и методической работе  
Дата подписания: 13.03.2024 13:35:02  
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  
«\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2023 г.

**Рабочая программа дисциплины**  
**ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ**

Специальность

**04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия**

Специализация

**Химия материалов**

Квалификация

**Химик. Преподаватель химии**

Форма обучения

**Очная**

Факультет **химии веществ и материалов**

Кафедра **физической химии**

Санкт-Петербург

2023

**Б1.О.21**

## **ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ**

## СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.....	4
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.....	6
3. Объем дисциплины.....	6
4. Содержание дисциплины.....	7
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.....	7
4.2. Формирование индикаторов достижения компетенций разделами дисциплины .....	7
4.3. Занятия лекционного типа.....	8
4.4. Занятия семинарского типа.....	10
4.4.1. Семинары, практические занятия.....	10
4.4.2. Занятия лабораторного типа.....	12
4.5. Самостоятельная работа обучающихся.....	12
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.....	14
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.....	15
7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины.....	17
8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.....	18
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	18
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.....	19
10.1. Информационные технологии.....	19
10.2. Программное обеспечение.....	19
10.3. Базы данных и информационные справочные системы.....	19
11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы.....	19
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.....	19
Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.....	20

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

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

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
<b>ОПК-4</b> Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач	<b>ОПК-4.3</b> Планирование, обработка и интерпретация полученных результатов с использованием теоретических знаний и практических навыков; интерпретация результатов химических наблюдений с использованием физических законов и представлений	<b>Знать</b> - основные понятия, законы и закономерности физической химии, термодинамические и кинетические параметры процессов и физико-химические характеристики веществ (ЗН-1); - основные экспериментальные методы изучения физико-химических свойств веществ (ЗН-2); - методики лабораторных работ, изложенных в лабораторном физико-химическом практикуме (ЗН-3). <b>Уметь</b> - определять, классифицировать и объяснять основные физико-химические процессы для изучения химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире (У-1); - применять экспериментальные методы изучения физико-химических свойств веществ (У-2); - выполнять стандартные операции при выполнении лабораторных работ по физической химии по изучению свойств веществ и материалов с соблюдением техники безопасности (У-3). <b>Владеть</b> - методами выявления и классификация физико-химических процессов для изучения химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире (Н-1), - экспериментальными методами определения физико-химических свойств веществ (Н-2), - навыками оценки погрешности определяемых физико-химических величин (Н-3).

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
<p><b>ОПК-6</b> Способен представлять результаты профессиональной деятельности в устной и письменной форме в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе</p>	<p><b>ОПК-6.3</b> Подготовка отчетов по лабораторному практикуму, презентации на заданную тему и устного выступления на научном семинаре по физической химии</p>	<p><b>Знать</b> принятые в профессиональном сообществе нормы представления результатов работы в виде отчетов; правила и способы представления результатов в виде презентации (ЗН-4)</p> <p><b>Уметь</b> представлять результаты работы в виде отчетов по стандартной форме; представить результаты работы в виде презентации на русском и/или английском языках (У-4)</p> <p><b>Владеть</b> способами представления результатов работы в виде отчетов; современными технологиями представления доклада о работе в виде презентации на русском и/или английском языках (Н-4)</p>

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина относится к дисциплинам обязательной части (Б1.О.21), и изучается на 3 курсе, в 5 и 6 семестрах.

В методическом плане дисциплина опирается на элементы компетенций, сформированные при изучении дисциплин «Математика», «Физика», «Неорганическая химия», «Органическая химия», «Аналитическая химия».

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

## 3. Объем дисциплины.

Вид учебной работы	Всего, ЗЕ/академ. часов
<b>Общая трудоемкость дисциплины</b> (зачетных единиц/ академических часов)	<b>18/ 648</b>
<b>Контактная работа с преподавателем:</b>	<b>468</b>
занятия лекционного типа	108
занятия семинарского типа, в т.ч.	324
семинары, практические занятия	144
лабораторные работы	180
курсовое проектирование (КР или КП)	18
КСР	18
другие виды контактной работы	-
<b>Самостоятельная работа</b>	<b>108</b>
<b>Форма текущего контроля</b> (Кр, реферат, РГР, эссе)	Кр, индивидуальные задания
<b>Форма промежуточной аттестации</b> (КР, КП, зачет, экзамен)	<b>5 семестр – экзамен (36)</b> <b>6 семестр – КР, экзамен (36)</b>

#### 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	Формируемые индикаторы
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы			
<b>5 семестр</b>							
1	Химическая термодинамика	18	18	40	14	ОПК-4 ОПК-6	ОПК-4.3 ОПК-6.3
2	Химическое равновесие	6	12	-	20	ОПК-4 ОПК-6	ОПК-4.3 ОПК-6.3
3	Фазовые равновесия и растворы неэлектролитов	18	30	24	12	ОПК-4 ОПК-6	ОПК-4.3 ОПК-6.3
4	Электрохимические системы	12	12	26	8	ОПК-4 ОПК-6	ОПК-4.3 ОПК-6.3
	Итого:	54	72	90	54		
<b>6 семестр</b>							
5	Химическая кинетика и катализ	18	16	42	14	ОПК-4 ОПК-6	ОПК-4.3 ОПК-6.3
6	Методы изучения строения молекул, основанные на электрических свойствах	4	4	18	6	ОПК-4 ОПК-6	ОПК-4.3 ОПК-6.3
7	Оптические и рентгеновские методы нахождения молекулярных констант и использование их для расчета термодинамических функций идеальных газов статистическим методом	10	12	30	6	ОПК-4 ОПК-6	ОПК-4.3 ОПК-6.3
8	Химическая связь	12	12	-	8	ОПК-4 ОПК-6	ОПК-4.3 ОПК-6.3
9	Статистические методы расчета термодинамических функций	10	28	-	20	ОПК-4 ОПК-6	ОПК-4.3 ОПК-6.3
	Итого:	54	72	90	54		

##### 4.2. Формирование индикаторов достижения компетенций разделами дисциплины

№ п/п	Код индикаторов достижения компетенции	Наименование раздела дисциплины
1	ОПК-4.3	Химическая термодинамика, Химическое равновесие, Фазовые равновесия и растворы неэлектролитов, Электрохимические системы, Химическая кинетика и катализ, Методы изучения строения молекул, основанные на электрических свойствах, Оптические и рентгеновские

		методы нахождения молекулярных констант и использование их для расчета термодинамических функций идеальных газов статистическим методом, Химическая связь, Статистические методы расчета термодинамических функций
2	ОПК-6.3	Химическая термодинамика, Химическое равновесие, Фазовые равновесия и растворы неэлектролитов, Электрохимические системы, Химическая кинетика и катализ, Методы изучения строения молекул, основанные на электрических свойствах, Оптические и рентгеновские методы нахождения молекулярных констант и использование их для расчета термодинамических функций идеальных газов статистическим методом, Химическая связь, Статистические методы расчета термодинамических функций

#### 4.3. Занятия лекционного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	<b>Химическая термодинамика</b> I, II и III начала термодинамики и их применение к химическим процессам. Термохимия. Термодинамические потенциалы.	18	Л, ЛВ
2	<b>Химическое равновесие.</b> Константы равновесия. Уравнения изотермы и изобары реакции. Вычисление состава равновесной смеси. Выбор оптимальных условий проведения хим. реакции.	6	Л, ЛВ
3	<b>Фазовые равновесия и растворы неэлектролитов</b> Фазовые равновесия в одно-, двух- и трехкомпонентных системах. Правило фаз Гиббса. Уравнения Клапейрона-Клаузиуса.	18	Л, ЛВ
4	<b>Электрохимические системы</b> Строение и свойства растворов электролитов. Равновесия в растворах электролитов. Термодинамика гальванических элементов. Потенциометрия. Электрическая проводимость растворов электролитов	12	Л, ЛВ

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
5	<b>Химическая кинетика и катализ</b> 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	18	Л, ЛВ
6	<b>Методы изучения строения молекул, основанные на электрических свойствах</b>	4	Л, ЛВ
7	<b>Оптические и рентгеновские методы нахождения молекулярных констант и использование их для расчета термодинамических функций идеальных газов статистическим методом.</b> Общая характеристика молекулярных спектров.	10	Л, ЛВ
8	<b>Химическая связь</b> Типы связей. Кривые потенциальной энергии. Уравнения Ми и Морзе. Уравнение Борна. Цикл Габера-Борна. Основные квантово-химические представления об атомах, уравнение Шредингера. Квантово-механические методы расчета энергии ковалентных связей (методы МО, ВС и др.) Вариационный метод Ритца. Основы метода молекулярных орбиталей. Атомные и молекулярные термы. Метод Хюккеля и его применение к сопряженным системам. Молекулярные диаграммы. Рассмотрение многоатомных молекул в рамках методов МО, ЛКАО и ВС (гибридизация). Пространственное строение молекул.	12	Л, ЛВ
9	<b>Статистические методы расчета термодинамических функций</b> Вычисление статистических сумм по состояниям для разных видов молекулярного движения. Стат. методы расчета термодинамических функций. Стат. методы расчеты констант равновесия.	10	Л, ЛВ

#### 4.4. Занятия семинарского типа.

##### 4.4.1. Семинары, практические занятия.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	<b>Химическая термодинамика</b> I, II и III начала термодинамики и их применение к химическим процессам. Термохимия. Расчет энтальпии, энтропии, энергии Гиббса реакции. Термодинамические потенциалы	18	КтСм, АТД
2	<b>Химическое равновесие.</b> Константы равновесия. Уравнения изотермы и изобары реакции. Вычисление состава равновесной смеси. Выбор оптимальных условий проведения хим. реакции	12	КтСм, АТД
3	<b>Фазовые равновесия и растворы неэлектролитов</b> Фазовые равновесия в одно-, двух- и трехкомпонентных системах. Правило фаз Гиббса. Диаграммы фазовых равновесий. Уравнения Клапейрона-Клаузиуса. Растворимость газов, жидкостей и твердых тел. Расчеты параметров идеальных и неидеальных растворов. Коллигативные свойства растворов.	30	КтСм, АТД
4	<b>Электрохимические системы</b> Строение и свойства растворов электролитов. Равновесия в растворах электролитов. Термодинамика гальванических элементов. Потенциометрия. Расчеты потенциалов электродов и ЭДС гальванических элементов. Электрическая проводимость растворов сильных и слабых электролитов. Расчет ионных равновесий. Научный семинар «Химические источники тока»	12	КтСм, АТД
5	<b>Химическая кинетика и катализ</b> Феноменологическая (формальная) кинетика. Задания на определение порядка реакции и констант скоростей. 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. Научный семинар «Современные проблемы химической кинетики и катализа»	16	КтСм, АТД

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационна я форма
6	<p><b>Методы изучения строения молекул, основанные на электрических свойствах</b> Выполнение заданий: расчет электрических характеристик молекул.</p>	4	КтСм, АТД
7	<p><b>Оптические и рентгеновские методы нахождения молекулярных констант и использование их для расчета термодинамических функций идеальных газов статистическим методом.</b> Общая характеристика молекулярных спектров. Расчеты молекулярных констант, полученных методами молекулярной спектроскопии.</p>	12	КтСм, АТД
8	<p><b>Химическая связь</b> Типы связей. Кривые потенциальной энергии. Расчет параметров уравнений Ми и Морзе. Уравнение Борна. Цикл Габера-Борна. Выполнение задания по расчету неизвестных тепловых эффектов. Основные квантово-химические представления об атомах, уравнение Шредингера. Квантово-механические методы расчета энергии ковалентных связей (методы МО, ВС и др.) Вариационный метод Ритца. Расчеты вариационных коэффициентов. Основы метода молекулярных орбиталей. Составление схем МО. Атомные и молекулярные термы. Метод Хюккеля и его применение к сопряженным системам. Молекулярные диаграммы. Расчеты порядка связей и индекса свободных валентностей. Рассмотрение многоатомных молекул в рамках методов МО, ЛКАО и ВС (гибридизация). Пространственное строение молекул.</p>	12	КтСм, АТД
9	<p><b>Статистические методы расчета термодинамических функций</b> Вычисление статистических сумм по состояниям для разных видов молекулярного движения. Стат. методы расчета термодинамических функций. Стат. методы расчеты констант равновесия</p>	28	КтСм, АТД

#### 4.4.2. Лабораторные занятия.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Примечание
1	Определение теплоты растворения соли	40	МГ
	Определение теплового эффекта химической реакции нейтрализации		
	Определение теплового эффекта химической реакции образования кристаллогидрата		
	Определение теплоемкости жидкости		
3	Определение молярной массы вещества методом криометрии	24	МГ
	Исследование зависимости давления насыщенного пара вещества от температуры. Определение молярной теплоты испарения вещества		
	Построение диаграммы плавкости 2-х компонентной системы по экспериментальным данным		
	Построение диаграммы «жидкость – пар» 2-х компонентной системы по экспериментальным данным		
4.	Измерение электродных потенциалов и ЭДС гальванических элементов или определение рН растворов, степени и константы гидролиза соли методом потенциометрии. Потенциометрическое титрование	26	МГ
	Определение чисел переноса ионов в растворах электролитов		
	Изучение зависимости электрической проводимости растворов сильных или слабых электролитов от концентрации. Кондуктометрическое титрование		
5.	Определение константы скорости реакции первого порядка (например, гидролиза сахарозы (инверсии сахара))	42	МГ
	Определение константы скорости реакции второго порядка (например, иодирования ацетона и омыления эфира в кислой среде)		
	Определение кинетических параметров электрохимической реакции (например, реакции восстановления водорода на различных металлах)		

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Примечание
	Определение скорости коррозии методом поляризационных кривых		
6.	Определение состава раствора по удельной рефракции или Определение структурной формулы молекулы по молярной рефракции	18	МГ
	Определение дипольного момента молекулы в жидком состоянии		
7.	Определение длины связи в молекуле из ИК-спектра.	30	МГ
	Определение параметров кристаллической решетки		

#### 4.5. Самостоятельная работа обучающихся.

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
1	Выполнение индивидуального задания по расчету термодинамических параметров гомогенных и гетерогенных реакций	14	Защита индивидуальных заданий
2	Выполнение индивидуального задания по определению равновесного состава химической реакции.	20	Защита индивидуальных заданий
3	Анализ фазовых диаграмм одно-, двух- и трёхкомпонентных систем	12	Защита индивидуальных заданий
4	Классификация электрохимических систем. Явления переноса в растворах электролитов.	8	Защита индивидуальных заданий
5	Уравнения формальной кинетики. Сложные реакции. Кинетические теории. Поляризационные кривые. Виды катализа.	10	Защита индивидуальных заданий
5	Выполнение индивидуального задания по квантово-химическому расчету кинетики химической реакции	4	Защита индивидуальных заданий
6	Выполнение индивидуального задания по квантово-химическому расчету полной энергии и дипольного момента молекулы	6	Защита индивидуальных заданий

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
7	Выполнение индивидуального задания по определению молекулярных констант из вращательных и колебательных спектров	6	Защита индивидуальных заданий
8	Типы химических связей. Основные квантово-химические представления об атомах, используемые в учении о химической связи. Использование одноэлектронного приближения (метода ССП Хартри-Фока) для решения уравнения Шредингера применительно к многоэлектронным атомам. Изучение квантово-механических методов расчета энергии ковалентных связей. Выполнение индивидуального задания по методу молекулярных орбиталей как линейной комбинации атомных орбиталей №1. Построение молекулярных диаграмм гомоядерных и гетероядерных двухатомных молекул. Определение термов основного и возбужденного состояний двухатомных молекул. Образование МО из АО в гомоядерных и гетероядерных двухатомных молекулах. Выполнение индивидуального задания по построению и анализу молекулярной диаграммы и определению молекулярного терма.	8	Защита индивидуальных заданий
9	Расчеты сумм по состояниям и термодинамических свойств веществ методами статистической термодинамики	20	Защита индивидуальных заданий

### Темы индивидуальных заданий

Индивидуальное задание №1 – Расчет степени превращения, равновесного состава теплового эффекта химической реакции, выхода продукта химической реакции и выбор оптимальных условий проведения процесса

Индивидуальное задание №2 – Расчет равновесных парциальных давлений гетерогенной химической реакции, константы равновесия химической реакции при заданной температуре

Индивидуальное задание №3 – Уравнение Клапейрона -Клаузиуса

Индивидуальное задание №4 – Идеальные и неидеальные растворы

Индивидуальное задание №5 – Коллигативные свойства растворов

Индивидуальное задание №6 – Анализ диаграмм равновесия жидкость - пар

Индивидуальное задание №7 – Анализ диаграмм плавкости

Индивидуальное задание №8 – Электродные потенциалы и ЭДС гальванических элементов

Индивидуальное задание №9 – Электрическая проводимость растворов

Индивидуальное задание №10 – Электрические свойства молекул

Индивидуальное задание №11 – Вращательные спектры двухатомных молекул  
Индивидуальное задание №12 – Колебательные спектры двухатомных молекул  
Индивидуальное задание №13 – Расчет теплоемкости идеального газа методом статистической термодинамики

Индивидуальное задание №14 – Расчет кинетических параметров гомогенных химических реакций

Индивидуальное задание №15 – Влияние температуры на скорость химических реакций

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

Методические указания для обучающихся по организации самостоятельной работы по дисциплине, включая перечень тем самостоятельной работы, формы текущего контроля по дисциплине и требования к их выполнению размещены в электронной информационно-образовательной среде СПбГТИ(ТУ) на сайте:

<http://media.technolog.edu.ru>

## 6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме защиты курсовой работы и экзаменов.

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

При сдаче экзамена студент получает три вопроса из перечня вопросов и задачу, время подготовки студента к устному ответу - до 45 мин.

Пример варианта вопросов и задачи на экзамене в 5 семестре:

### Вариант № 1

1. Теплоемкость истинная и средняя, изобарная и изохорная. Зависимость теплового эффекта от температуры.
2. Диаграммы «общее давление – состав», «температура кипения – состав», «состав раствора- состав пара» для идеальных растворов. Правило рычага.
3. Определение  $\Delta G$ ,  $\Delta S$ ,  $\Delta H$  и константы равновесия реакции, протекающей в гальваническом элементе.
4. *Задача.* Бензол и толуол при смешении образуют раствор, близкий по свойствам к идеальному. При 18°C давление насыщенного пара над чистым бензолом равно 68 мм рт. ст., а над чистым толуолом 21 мм рт. ст. Рассчитать давление насыщенного пара над раствором, состоящим из 200г бензола и 200г толуола, а также состав пара (в молярных долях) над этим раствором

Пример варианта вопросов и задачи на экзамене в 6 семестре:

Вариант № 1

1. Энергия вращательного движения двухатомной молекулы в приближении модели жесткого ротатора. Диаграмма взаимного расположения вращательных энергетических уровней молекулы.
2. Использование молекулярной рефракции и дипольных моментов для определения строения молекул.
3. Адсорбция и гетерогенный катализ. Физическая и химическая адсорбция. Изотерма и изобара адсорбции.
4. *Задача.* Время полураспада  $\text{PH}_3$  по реакции  $2\text{PH}_3 = 2\text{P} + 3\text{H}_2$  при различных начальных давлениях равно

$P_0$ , мм рт.ст.	707	79	37,
$\tau_{1/2}$ , мин	84	84	83

Рассчитать константу скорости реакции и время, за которое разложится 10%  $\text{PH}_3$ .

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1.

Результаты освоения дисциплины считаются достигнутыми, если для всех элементов компетенций достигнут пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе – оценка «удовлетворительно».

## 7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины.

### а) печатные издания:

1. Стромберг А.Г. Физическая химия : учебник для вузов /А.Г. Стромберг, Д.П. Семченко – 5-е изд. Испр. – М.: Высш. Школа, 2009. – 527с. - ISBN 978-5-06-006161-1.
2. 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.: «Аз-book», 2009. – 240 с. - ISBN 978-5-905034-03-0.
3. Практикум по физической химии. Кинетика и катализ. Электрохимия : учебное пособие для вузов по направлению "Химия" и специальности "Фундаментальная и прикладная химия" / [А. В. Абраменков и др.]; под ред.: В. В. Лунина, Е. П. Агеева. - М. : Академия, 2012. - 300 с. - ISBN 978-5-7695-6810-7.
4. Практикум по физической химии. Термодинамика : учебное пособие для вузов по направлению "Химия" и специальности "Химия" / [Е. П. Агеев и др.]; под ред.: Е. П. Агеева, В. В. Лунина. - М. : Академия, 2010. - 220 с. - ISBN 978-5-7695-6809-1.
5. 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. - ISBN 978-5-4363-0047-4.
6. Бёккер, Ю.. Спектроскопия / Ю. Беккер; пер. с нем. Л.Н. Казанцевой, под ред. А.А. Пупышева, М.В. Поляковой. – М.: Техносфера, 2009. – 527с. - ISBN 978-5-94836-220-5.
7. 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. - ISBN 978-5-91559-044-0.
8. Матузенко, М.Ю. Изучение строения молекул спектральными методами. Теоретические основы. Решение задач : Учебное пособие / М. Ю. Матузенко, М. Ю. Зубкова, А. Н. Храмов ; СПбГТИ(ТУ). Каф. физ. химии. - СПб. : [б. и.], 2009. - 56 с.

### б) электронные учебные издания:

1. Афанасьев, Б.Н. Физическая химия : Учебное пособие для вузов по направлениям "Химическая технология", "Биотехнология" и "Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии" / Б. Н. Афанасьев, Ю. П. Акулова. - Санкт-Петербург [и др.] : Лань, 2022. - 464 с. : ил. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - ISBN 978-5-8114-1402-4 : // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 16.05.2023). - Режим доступа: по подписке.
2. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : Учебное пособие для вузов по химико-технологическим направлениям и специальностям / В. Г. Цирельсон. - 5-е изд., электрон. - М. : Лаборатория знаний, 2021. - 522 с. - (Учебник для высшей школы). - ISBN 978-5-93208-518-9 : // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 05.05.2023). - Режим доступа: по подписке.
3. Основы физической химии, Ч. 1 : Теория ; Ч. 2 : Вопросы и задачи : Учебник для высшего образования уровня бакалавриат и специалитет по направлению подготовки 04.03.01 и специальности 04.05.01 : В 2 ч. Ч. 1 \b0 : Теория ; Ч. 2 \b0 : Вопросы и задачи / В. В. Еремин [и др.]. - 5-е изд., перераб. и доп. (эл.). - Электрон. текстовые дан. - М. : Лаборатория знаний, 2019. - 351, 274 с. - (Учебник для высшей школы). - ISBN 978-5-00101-633-5. - ISBN 978-5-00101-634-2 (Ч.1). - ISBN 978-5-00101-635-9 (Ч.2). // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 05.05.2023). - Режим доступа: по подписке.
4. Физическая химия. Теория и задачи : Учебное пособие / Ю. П. Акулова, С. Г. Изотова, О. В. Проскурина, И. А. Черепкова. - 4-е изд., стер. - Санкт-Петербург [и др.] :

Лань, 2022. - 228 с. - ISBN 978-5-8114-8947-3 : // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 12.05.2023). - Режим доступа: по подписке.

5. Артемов, А.В. Физическая химия : учебник для учреждений высшего профессионального образования / А. В. Артемов. - Электрон. текстовые дан. - М. : Академия, 2013. - 288 с. // СПбГТИ. Электронная библиотека. - URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 17.05.2023). - Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.

6. Матузенко, М.Ю. Диаграммы плавкости двухкомпонентных систем : методические указания / М. Ю. Матузенко ; СПбГТИ(ТУ). Каф. физ. химии. - Электрон. текстовые дан. - СПб. : [б. и.], 2013. - 22 с. // СПбГТИ. Электронная библиотека. - URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 17.05.2023). - Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.

## **8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.**

Учебный план, РПД, учебно-методические материалы, размещенные на <http://media.technolog.edu.ru>.

Электронно-библиотечные системы:

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

электронный читальный зал – БиблиоТех фундаментальной библиотеки СПбГТИ(ТУ): <http://bibl.lti-gti.ru/ЭБС.>, <https://technolog.bibliotech.ru/>.

справочно-информационный портал «Научная электронная библиотека»: <http://elibrary.ru>.

## **9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.**

Все виды занятий по дисциплине проводятся в соответствии с требованиями следующих СТП:

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.

СТО СПбГТИ 020-2011. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лабораторные 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.

СТО СПбГТИ(ТУ) 044-2012. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Курсовой проект. Курсовая работа. Общие требования.

СТП СПбГТИ 016-2014. КС УК 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 приходиться, имея знания 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 ЭИОС.

### **10.2. Программное обеспечение.**

Windows XP Starter Edition. (Государственный контракт № 24 от 14.09.2007, срок действия – бессрочно),

Microsoft Office (Microsoft Excel): Office 2007 Russian OLP NL AE (Государственный контракт № 24 от 14.09.2007, срок действия – бессрочно), Office Std 2013 Rus OLP NL (Контракт № 02(03)15 от 15.01.2015, срок действия -20 лет),

LibreOffice (открытая лицензия).

### **10.3. Базы данных и информационные справочные системы.**

Справочно-поисковая система «Консультант-Плюс», база термодинамических свойств веществ ИВТАНТЕРМО.

## **11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы.**

**Учебная аудитория для проведения лекционных занятий,** групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Основное оборудование: столы; стулья; доска; демонстрационный экран, проектор, компьютер.

### **Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа.**

Основное оборудование: столы; стулья; доска; демонстрационный экран; проектор; ноутбук; специализированная мебель, весы ВЛР-200, рефрактометр ИРФ-470, вытяжные шкафы, рН-метр рН-121, сахариметры универсальные СУ-4, электрические мешалки RD-25, вакуумный шкаф SPT-200, осциллограф Н3013, магнитные мешалки ММ-4, реостаты, милливольтметр ВС-4-12, сушильный шкаф, регулируемый прибор питания "Агат», вольтметр В7-58/2, вольтметр цифровой Щ-1413, амперметр М1104; амперметр М514, электрическая мешалка RD-25, выпрямитель ВСП-33, водяные бани, ИК-Фурье спектрометр ФСМ-1202, пресс гидравлический ручной ПГР 400.

### **Помещение для самостоятельной работы.**

Основное оборудование: столы; стулья; проектор; экран; компьютеры с доступом к информационно-телекоммуникационной сети «Интернет».

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

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

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

**1. Перечень компетенций и этапов их формирования.**

Индекс компетенции	Содержание	Этап формирования
<b>ОПК-4</b>	Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач	промежуточный
<b>ОПК-6</b>	Способен представлять результаты профессиональной деятельности в устной и письменной форме в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе	промежуточный

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

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
<b>ОПК-4.3</b> Планирование, обработка и интерпретация полученных результатов с использованием теоретических знаний и практических навыков; интерпретация результатов химических наблюдений с использованием физических законов и представлений	Дает определения основным понятиям, рассказывает о законах и закономерностях физической химии, термодинамических и кинетических параметрах процессов и физико-химических характеристиках веществ (ЗН-1)	Ответы на вопросы к экзамену: 1 -35; 58 – 63; 77 – 80; 83 – 84; 87 – 89; 97 – 118, 119-136	Даёт определения основных понятий физической химии с ошибками	Даёт определения основных понятий физической химии с незначительными ошибками. с помощью наводящих вопросов	Правильно дает определения основных понятий физической химии
	Знает основные экспериментальные методы изучения физико-химических свойств веществ (ЗН-2)	Ответы на вопросы к экзамену: 36 – 57; 64 – 76; 81, 82; 85, 86; 90 – 96	Называет основные методы изучения физико-химических свойств веществ с ошибками	Называет основные методы изучения физико-химических свойств веществ с наводящими вопросами и подсказками	Демонстрирует освоение методов определения физико-химических свойств
	Знает методики лабораторных работ, изложенных в лабораторном физико-химическом практикуме (ЗН-3)	Получение допуска к выполнению лабораторных работ, их выполнение и оформление отчетов	Излагает методики выполнения лабораторных работ с ошибками	Излагает методики выполнения лабораторных работ с наводящими вопросами и подсказками	Способен самостоятельно правильно изложить методики выполнения лабораторных работ и оформления отчетов

<p>Определяет, классифицирует и объясняет основные физико-химические процессы для изучения химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире (У-1)</p>	<p>Ответы на вопросы к экзамену: 7; 10; 16; 18; 20; 25; 29; 40; 41; 47; 50; 72 – 74; 78 – 80; 90 – 91; 95; 103; 105 – 106; 110 – 111, 137-161, выполнение и защита индивидуальных заданий</p>	<p>Определяет, классифицирует и объясняет основные физико-химические процессы с ошибками</p>	<p>Поясняет, классифицирует основные физико-химические процессы с небольшими подсказками преподавателя</p>	<p>Способен самостоятельно правильно назвать и классифицировать основные физико-химические процессы</p>
<p>Применяет экспериментальные методы изучения физико-химических свойств веществ (У-2)</p>	<p>Ответы на вопросы к экзамену: 4; 13 – 14; 36 – 38; 65 – 67; 85 – 86; 88; 90 – 91; 95, 96</p>	<p>Называет и поясняет основные физико-химические методы с ошибками</p>	<p>Показывает умение выбрать метод изучения физико-химических свойств веществ для решения поставленной задачи с наводящими вопросами преподавателя</p>	<p>Самостоятельно правильно выбирает метод изучения физико-химических свойств веществ для решения поставленной задачи</p>
<p>Выполняет стандартные операции при выполнении лабораторных работ по физической химии по изучению свойств веществ и материалов с соблюдением техники безопасности (У-3).</p>	<p>Получение допуска к выполнению лабораторных работ, их выполнение и оформление отчетов</p>	<p>Выполняет стандартные операции с ошибками</p>	<p>Выполняет стандартные операции с подсказками преподавателя</p>	<p>Самостоятельно выполняет стандартные операции с соблюдением техники безопасности</p>

	<p>Демонстрирует владение методами выявления и классификация физико-химических процессов для изучения химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире (Н-1)</p> <p>Демонстрирует навыки экспериментальных методов определения физико-химических свойств веществ (Н-2)</p> <p>Демонстрирует навыки оценки погрешности определяемых физико-химических величин (Н-3).</p>	<p>Ответы на вопросы к экзамену: 6; 11; 12; 14; 16; 31; 43 – 46; 48; 51 – 55; 98 – 99; 113 Выполнение и защита индивидуальных заданий</p> <p>Ответы на вопросы к экзамену: 21; 65 – 67; 74; 81; 82; 86; 90; 91; 95,96</p> <p>Оформление отчетов по лабораторным работам</p>	<p>Выполняет индивидуальные задания с ошибками</p> <p>Путается в обосновании выбора метода определения физико-химических свойств</p> <p>Оформляет отчеты с ошибками</p>	<p>Показывает частичное понимание с наводящими вопросами и подсказками преподавателя физико-химических процессов, происходящих в технологических процессах и окружающей среде</p> <p>Приводит примеры некоторых экспериментальных методов с подсказкой преподавателя</p> <p>Правильно оценивает погрешности величин с небольшой подсказкой преподавателя</p>	<p>Самостоятельно дает правильную обоснованную оценку химических процессов, происходящих в технологических процессах и окружающей среде</p> <p>Правильно выбирает экспериментальный метод определения физико-химических свойств веществ</p> <p>Способен самостоятельно оценивать погрешность определяемых физико-химических величин</p>
<p><b>ОПК-6.3</b> Подготовка отчетов по лабораторному практикуму, презентации на заданную тему и устного</p>	<p>Рассказывает о принятых в профессиональном сообществе нормах представления результатов работы в виде отчетов; правила и способы представления результатов в виде презентации (ЗН-4)</p>	<p>Ответы на вопросы к экзамену: 162-167. Представление отчетов по лабораторному</p>	<p>Плохо знает принятые в профессиональном сообществе нормы представления результатов работы в виде отчетов;</p>	<p>С небольшими ошибками представляет результаты работы в виде отчетов; правила и способы представления</p>	<p>Хорошо знает правила представления отчетов по лабораторному практикуму, презентации</p>

<p>выступления на научном семинаре по физической химии</p>	<p>Представляет результаты работы в виде отчетов по стандартной форме; представить результаты работы в виде презентации и устного выступления (У-4)</p> <p>Демонстрирует навыки представления результатов работы в виде письменных отчетов и устных выступлений; современными технологиями представления доклада о работе в виде презентации (Н-4)</p>	<p>практикуму, презентации доклада на научном семинаре</p> <p>Представление отчетов по лабораторному практикуму, презентации доклада на научном семинаре</p> <p>Представление отчетов по лабораторному практикуму, презентации доклада на научном семинаре</p>	<p>правила и способы представления результатов в виде презентации</p> <p>С ошибками представляет отчеты по лабораторному практикуму, презентации доклада на научном семинаре</p> <p>Путается при представлении результатов работы в виде письменных отчетов и устных выступлений</p>	<p>результатов в виде презентации</p> <p>С небольшими ошибками представляет отчеты по лабораторному практикуму, презентации доклада на научном семинаре</p> <p>Не достаточно владеет необходимыми способами представления результатов работы в виде письменных отчетов и устных выступлений</p>	<p>доклада на научном семинаре</p> <p>Хорошо представляет результаты работы в виде отчетов по стандартной форме; результаты работы в виде презентации и устного выступления</p> <p>Хорошо представляет результаты работы в виде письменных отчетов и устных выступлений; владеет современными технологиями представления доклада о работе в виде презентации</p>
--	--	--	--	---	--

Шкала оценивания соответствует СТО СПбГТИ(ТУ):

По дисциплине промежуточная аттестация проводится в форме экзамена, шкала оценивания – балльная («отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно») и в форме зачета, шкала оценивания «зачтено», «не зачтено».

**3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации**  
**а) Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ОПК-4:**

**Вопросы к экзамену (5 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 мольные 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. Ионнообменные 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 ( $\Delta H$ ,  $\Delta S$ ,  $\Delta G$ ), идущих в гальваническом элементе.

75. Одноразовые химические источники тока.

76. Многозарядные химические источники тока (аккумуляторы).

#### **Вопросы к экзамену (6 семестр)**

77. Удельная и молярная 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 молярной 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 – Методы изучения строения молекул, основанные на электрических свойствах**

83. Поляризация полярных и неполярных молекул в постоянном и переменном электрических полях. Рефракция.
84. Уравнения Дебая, Клаузиуса-Мосотти и Лоренц-Лорентца.
85. Определение дипольного момента и поляризуемости молекул.
86. Использование электрических свойств молекул для определения молекул и состава раствора.

### **Тема 6 – Оптические методы изучения строения вещества**

87. Общая характеристика молекулярных спектров.
88. Вращательные спектры. Определение момента инерции и равновесного межъядерного расстояния для двухвалентных и линейных многоатомных молекул из спектральных данных.
89. Энергия колебательного движения двухатомной молекулы в приближении гармонического и ангармонического осциллятора.
90. Определение собственной частоты и коэффициента ангармоничности из колебательного спектра поглощения.
91. Определение энергии связи из колебательного спектра поглощения.
92. Число и типы нормальных колебаний многоатомных молекул. Характеристические частоты.
93. Вращательно-колебательные спектры поглощения двухатомных молекул P-, R- и Q-ветви, их происхождение.
94. Электронно-колебательно-вращательные спектры. Принцип Франка-Кондона.
95. Определение энергии диссоциации из электронно-колебательно-вращательных спектров.
96. Спектры комбинационного рассеяния, сопоставление их с ИК-спектрами.

### **Тема 7 - Химическая кинетика и катализ**

97. Скорость реакции для гомогенной и гетерогенной реакции. Кинетическое уравнение. Молекулярность и порядок гомогенной реакции. Стадийное протекание реакций.
98. Кинетическая кривая. Методы определения порядка реакции.
99. Реакции 1, 2 и 3 порядка. Выражение для константы скорости и периода полупревращения.
100. Сложные реакции: двухсторонние (обратимые) и параллельные.
101. Сложные реакции: последовательные и сопряженные.
102. Метод квазистационарных концентраций. Механизм мономолекулярных реакций.
103. Зависимость скорости гомогенной химической реакции от температуры. Уравнение Аррениуса.
104. Стадии гетерогенного процесса. Диффузия в газах, жидкостях и твердых телах. 1 и 2 законы Фика.
105. Влияние температуры на гетерогенный процесс.
106. Влияние перемешивания на режим гетерогенного процесса.
107. Теория активных соударений. Основные допущения. Выражение для

- предэкспоненциального множителя в уравнении Аррениуса. Стерический фактор.
108. Понятие активированного комплекса. Выражение константы скорости по методу переходного состояния.
109. Сопоставление уравнений теории активных соударений и теории переходного состояния. Недостатки теорий.
110. Влияние растворителя на скорость реакций в растворах. Гомо- и гетеролитические реакции.
111. Гетеролитические реакции. Влияние ионной силы раствора и зарядов реагирующих частиц на скорость процесса.
112. Первичный и вторичный солевые эффекты.
113. Особенности цепных реакций. Возникновение, развитие и обрыв цепей. Тепловой и цепной механизмы воспламенения.
114. Особенности протекания фотохимических реакций. Выражение для константы скорости фотохимической реакции. Примеры фотохимических реакций.
115. Общие свойства катализаторов. Гомогенный и гетерогенный катализ. Влияние катализаторов на предэкспоненциальный множитель и энергию активации в уравнении Аррениуса.
116. Гомогенный катализ. Кислотно-основной катализ.
117. Адсорбция и гетерогенный катализ. Изотерма и изобара адсорбции. Стадии гетерогенного катализа и влияние температуры. Теории гетерогенного катализа.
118. Кинетика ферментативных реакций, катализ и кинетика реакций с иммобилизованными ферментами

#### **Тема 8 – Химическая связь**

119. Кривые потенциальной энергии при образовании двух- и многоатомных молекул. Взаимосвязь с основными параметрами химической связи (энергия, длина, направленность, насыщенность). примеры.
120. Главное, орбитальное, магнитное и спиновое квантовые числа как решение уравнения Шредингера для одно- и многоэлектронных атомов и ионов.
121. Диаграммы молекулярных орбиталей гомо- и гетероядерных двухатомных молекул.
122. Молекулярные термы.
123. Методы определения структуры многоатомных молекул.
124. Типы химических связей.
125. Использование электроотрицательности атомов для суждения о степени ионности связи.
126. Вычисление энергии связи в индивидуальной газовой молекуле и ионном кристалле.
127. Основные понятия и приближения квантовой химии. Приближение Шредингера, адиабатическое приближение, одноэлектронное приближение. Метод самосогласованного поля Хартри-Фока.
128. Основы метода молекулярных орбиталей (МО). Вариационный принцип. Связывающие и разрыхляющие молекулярные орбитали на примере молекулы  $H_2^+$ .
129. Основные требования, предъявляемые к атомным орбиталам (АО) при составлении МО по методу МОЛКАО.
130. Классификация молекулярных орбиталей. Форма граничных поверхностей МО. Образование молекулярных орбиталей в гомоядерных молекулах.
131. Образование МО в гетероядерных молекулах (CO, HF).
132. Строение многоатомных молекул в рамках методов МО ЛКАО и ВС. Гибридизация.

133.Метод Хюккеля и его применение к сопряженным системам. Молекулярные диаграммы.

### **Тема 9 - Статистические методы расчета термодинамических функций**

134.Современные квантово-химические методы исследования строения и свойств молекул.

135.Современные квантово-химические программные пакеты, используемые в химии.

136.Интерпретация экспериментальных колебательных спектров с использованием квантово-химических расчетов. (Число и типы нормальных колебаний. Активность в ИК и КР спектрах. Механизм возникновения колебательных спектров молекул в модели гармонический осциллятор. Механизм возникновения колебательных спектров молекул в модели ангармонический осциллятор. Механизм возникновения колебательно-вращательных спектров молекул. Механизм возникновения электронно-колебательно-вращательных спектров молекул.)

137.Определение термодинамических функций из квантово-химических расчетов. (Определение статистических термодинамических функций из молекулярных спектров)

138.Определение молекулярных геометрических характеристик из квантово-химических данных.

139.Определение кинетических параметров из квантово-химических расчетов. (Кинетика простых реакций. Теории элементарных актов. Теория переходного состояния. Энергия активации.)

140.Определение энергетических характеристик функций из квантово-химических данных.

141.Определение магнитных свойств по результатам анализа молекулярных диаграмм

142.Интерпретация ЯМР спектра с использованием квантово-химических расчетов.

143.Сопоставление расчетных и экспериментальных колебательных спектров молекул.

144.Сопоставление расчетных и экспериментальных электронных спектров молекул.

145.Сопоставление расчетных и экспериментальных ЯМР спектров молекул.

146.Сопоставление расчетных и экспериментальных магнитных свойств молекул.

147.Сопоставление расчетных и экспериментальных термодинамических характеристик молекул.

148.Сопоставление расчетных и экспериментальных электрических свойств молекул.

149.Моделирование структуры в квантово-химических программных пакетах.

150.Формирование входного файла для выполнения квантово-химических расчетов

151.Визуализация квантово-химических расчетов и их интерпретация.

152.Поиск по выходному файлу квантово-химических расчетов.

153.Квантово-химическое моделирование кинетики химических реакций.

154.Квантово-химическое моделирование спектров.

155.Квантово-химический расчет молекулярных и энергетических свойств.

156.Квантово-химический расчет термодинамических функций.

157.Квантово-химический расчет поверхности потенциальной энергии.

158.Квантово-химический расчет колебательных спектров и нормальных колебаний.

159.Квантово-химический расчет ЯМР-спектров.

160.Квантово-химический расчет электронных спектров.

161.Квантово-химическое построение молекулярных диаграмм.

### **б) Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ОПК-6:**

162. Содержание отчета по лабораторной работе

163. Правила приближенных вычислений

164. Статистическая обработка результатов.
165. Правила построения графиков
166. Правила изображения схемы установки
167. Содержание презентации с результатами работы, представленной на научном семинаре

### 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.

При сдаче экзамена студент получает три вопроса из перечня, приведенного выше, и задачу.

Время подготовки студента к устному ответу на вопросы - до 45 мин.

## 4. Примеры индивидуальных заданий и вопросов для подготовки к устному опросу

### Темы 1 и 2 - Химическая термодинамика и химическое равновесие

#### *Задание «Расчет степени превращения, равновесного состава и выхода продукта химической реакции и выбор оптимальных условий проведения процесса»*

Для выполнения этого задания предлагается следующий алгоритм:

1. На основании значений теплот образования веществ  $\Delta H_{f,298}^0$  из «Краткого справочника физико-химических величин» [2] определите изобарный тепловой эффект химической реакции  $A$  (таблица 1.1)  $Q_P = \Delta_r H_{298}^0$  (в кДж) при условии, что все вещества, участвующие в реакции, находятся в идеальном газообразном состоянии.
2. Определите изменение числа молей газообразных веществ реакции  $A$  при 298К и стандартном давлении.
3. Рассчитайте работу (в кДж), совершаемую в реакции  $A$  против внешнего давления при  $p = const$  и  $T = 298$  К.
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.
5. На основании данных из справочника [2] определите изменение средней теплоемкости в системе в результате реакции  $A$   $\Delta_r \bar{C}_{P,298-T}^0$  (в Дж/К). Температуру  $T$  для своего варианта возьмите из таблицы 1.1.

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  $\Delta_r \bar{C}_{P,298-T}^0$ .
7. Установите, как будет меняться тепловой эффект химической реакции  $A$  при повышении температуры. Ответ аргументируйте, используя соответствующие уравнения химической термодинамики.
8. Определите изменение энтропии системы (в Дж/К) в результате химической реакции  $A$  (таблице 1.1), протекающей между веществами в идеальном газообразном состоянии при стандартном давлении и температуре 298 К. Значения стандартной энтропии для веществ возьмите из справочника [2].
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  $\Delta_r \bar{C}_{P,298-T}^0$ .
10. Определите изменение стандартной энергии Гиббса  $\Delta_r G_T^0$  (Дж) для химической реакции  $A$  при температуре 298 К и при температуре  $T$ .
11. Рассчитайте термодинамическую константу равновесия  $K_a$  реакции  $A$  при температуре 298 К и температуре  $T$ .
12. Определите глубину превращения  $\xi$  в реакции  $A$  при температуре  $T$  и атмосферном давлении при условии, что исходные вещества взяты в стехиометрических количествах.
13. Определите глубину превращения  $\xi$  в реакции  $A$  при температуре  $T$  и атмосферном давлении при условии, что исходные вещества взяты в количествах, указанных в таблице 1.2.
14. Определите степень превращения исходных веществ при условиях 12 и 13.
15. Определите состав равновесной смеси в %(мол.) для химической реакции  $A$  при температуре  $T$  и атмосферном давлении при условиях 1.12 и 1.13.
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.
17. Установите, как влияет повышение общего давления на равновесный выход продуктов химической реакции  $A$ . Ответ аргументируйте.

Таблица 1.1 – Варианты заданий

Вариант	Химическая реакция $A$	Температура $T$ , К					
		Подвариант					
		1	2	3	4	5	6
1	$N_2 + 3H_2 = 2NH_3$	500	600	700	800	900	1000
2	$CCl_4 + 4H_2 = CH_4 + 4HCl$	700	800	500	1000	900	1000
3...	$CH_4 + 2S_2 = CS_2 + 2H_2S$	600	900	1000	500	800	700

Таблица 1.2 – Варианты заданий

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

**Задание «Расчет равновесных парциальных давлений гетерогенной химической реакции»**

1. Определите константу равновесия  $K_a$  химической реакции  $B$  при температуре  $T$  с использованием средних изобарных теплоемкостей.
2. Запишите в общем виде выражение для константы равновесия химической реакции  $B$  через парциальные давления реагирующих веществ.
3. Определите парциальные давления газообразных веществ при температуре  $T$  и атмосферном давлении.
4. Оцените влияние изменения общего давления, температуры и разбавления реакционной смеси газом, не участвующим в химической реакции, на положение равновесия реакции и равновесный выход продукта.

Таблица 1.3 – Варианты заданий

Вар.	Химическая реакция $B$	Температура $T$ , К					
		Подвариант					
		1	2	3	4	5	6
1	$\text{Fe} + \text{CO}_2 = \text{FeO} + \text{CO}$	500	600	700	500	600	700
2	$\text{CO} + \text{H}_2 = \text{C}_{(\text{графит})} + \text{H}_2\text{O}$	500	600	700	800	900	1000
3...	$\text{Fe}_2\text{O}_3 + 3\text{CO} = 2\text{Fe} + 3\text{CO}_2$	500	600	700	500	600	700

**Контрольные вопросы к темам 1 и 2:**

1. По изменению каких термодинамических функций рассчитывается тепловой эффект химической реакции, протекающей в изобарных или изохорных условиях?
2. Как формулируется закон Гесса?
3. Какие следствия из закона Гесса Вы знаете?
4. Что называется стандартной теплотой образования вещества?
5. Как рассчитывается тепловой эффект реакции с использованием теплот образования?
6. Как рассчитывается тепловой эффект реакции с использованием теплот сгорания?
7. Что называется стандартной теплотой сгорания вещества?
8. Что такое истинная и средняя молярная изобарная теплоемкость?
9. Как формулируется закон Кирхгоффа в дифференциальной и интегральной форме?
10. Как зависит тепловой эффект химической реакции от температуры? Ответ подтвердите соответствующим уравнением.
11. Почему в справочниках приводятся абсолютные значения энтропии веществ, а абсолютные значения энтальпии – нет?
12. Какие критерии направления процессов в изолированных и закрытых системах Вы знаете?
13. Что является критерием равновесия в закрытых системах?
14. Что такое термодинамические и практические константы равновесия химических реакций? Приведите примеры.
15. С помощью какого уравнения рассчитываются термодинамические константы равновесия?

16. Что такое химическая переменная (глубина превращения в химической реакции)? Как эта величина используется для расчета равновесного состава в химическом процессе?

17. Что такое степень превращения исходных веществ в химической реакции?

18. Как влияет температура на равновесный выход продукта химической реакции? Ответ подтвердите соответствующим уравнением.

19. Как влияет давление на равновесный выход продукта химической реакции? Ответ подтвердите соответствующим уравнением.

20. В чем особенность расчета равновесного состава газовой смеси в гетерогенной реакции?

### Тема 3 – Фазовые равновесия и растворы неэлектролитов

#### Задание «Анализ фазового равновесия жидкость – пар в однокомпонентной системе»

1. Для вещества  $A$ , заданного в таблице 2.1, используя данные справочника [2] по зависимости температуры кипения веществ от давления, постройте кривую испарения в координатах  $p = f(T)$  и  $\ln p = f(1/T)$ .

2. Определите коэффициенты уравнения  $\ln p = A - \frac{B}{T}$ .

3. Вычислите теплоту испарения  $\Delta_{\text{vap}}H$  для вещества  $A$  (кДж /моль), используя коэффициент  $B$ , найденный в п. 2.

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

5. Вычислите давление насыщенного пара при температуре  $t_x$ , указанной в задании (таблица 2.1).

Таблица 2.1 – Варианты заданий

Вариант	Вещество $A$	Температура, $t_x$ , °C					
		Подвариант					
		1	2	3	4	5	6
1	$C_2HCl_3O_2$ трихлоруксусная кислота	130	190	180	140	150	160
2	$C_2H_2Cl_2O_2$ дихлоруксусная кислота	190	185	180	130	140	170
3...	$C_2H_3ClO_2$ хлоруксусная кислота	180	160	120	140	150	170

#### Задание «Определение активности и коэффициента активности растворителя в растворе»

1. Вычислите по закону Рауля давление насыщенного пара растворителя над раствором указанной концентрации (таблица 2.2).

2. Сравните с экспериментальным давлением  $p^{\text{эксп.}}$  (таблица 2.2).

3. Объясните полученный результат.

4. Рассчитайте активность растворителя.

5. Рассчитайте коэффициент активности растворителя.

Таблица 2.2 – Варианты заданий

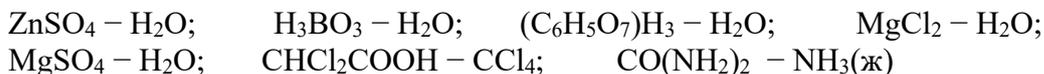
Вар.	Состав раствора	$t$ , °C	$p_{0,1}$ , кПа	Подвариант					
				1		2		3	
				$m$ , моль/кг $H_2O$	$p^{\text{эксп.}}$ , кПа	$m$ , моль/кг $H_2O$	$p^{\text{эксп.}}$ , кПа	$m$ , моль/кг $H_2O$	$p^{\text{эксп.}}$ , кПа

1	H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> – H <sub>2</sub> O	25	3,1672	0,100	3,1562	0,200	3,2370	0,300	3,1338
2	CaCl <sub>2</sub> – H <sub>2</sub> O	40	7,3742	0,400	7,2191	0,800	7,0531	1,200	6,8235
3...	NaI – H <sub>2</sub> O	25	3,1672	0,500	3,1179	1,500	3,0046	2,000	2,9347

**Задание «Коллигативные свойства растворов»**

Определите, подчиняются ли идеальным законам указанные в таблице 2.3 растворы. Если не подчиняются – укажите причину.

Для систем:



приведено экспериментально определенное повышение температуры кипения, для всех других систем – понижение температуры замерзания ( $\Delta T^{\text{эксп}}$ ).

Эбулиоскопические  $E$  и криоскопические  $K$  константы растворителей приведены в таблице 2.4.

Таблица 2.3 – Варианты заданий

Вар.	Раствор		Подвариант					
			1			2		
	Растворенное вещество	Растворитель	Масса растворенного вещества, г	Масса растворителя, г	$\Delta T^{\text{эксп}}$	Масса растворенного вещества, г	Масса растворителя, г	$\Delta T^{\text{эксп}}$
1	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	H <sub>2</sub> O	0,6206	100	0,248	2,3760	100	0,940
2	CCl <sub>3</sub> COOH	H <sub>2</sub> O	1,961	120	0,322	3,268	200	0,322
3...	LiBr	H <sub>2</sub> O	0,432	100	0,176	6,48	100	2,650

Таблица 2.4 – Свойства растворителей

Растворитель	H <sub>2</sub> O	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	CH <sub>3</sub> COOH	NH <sub>3</sub> (ж)	CCl <sub>4</sub>
$K$	1.86	5.07	3.6	–	–
$E$	0.513	–	–	0.33	5.64

**Задание «Анализ фазовых равновесий жидкость – пар в двухкомпонентной системе»**

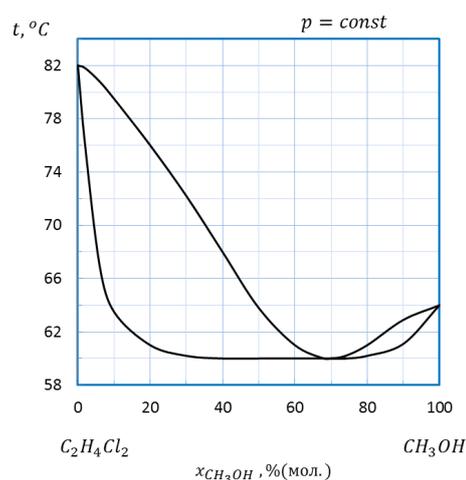
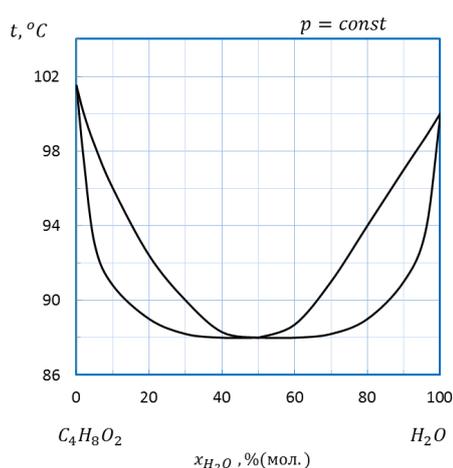
1. Какую информацию о системе несет диаграмма температура кипения – состав заданной в таблице 2.5 системы  $A-B$  (рисунки 2.8 – 2.22)?

По диаграмме определите:

- При какой температуре закипит жидкость, содержащая  $a$  % вещества  $A$ .
- При какой температуре вся первоначальная жидкость обратится в пар, если при нагревании пар не отводить?
- Как будет меняться состав первоначальной жидкости по мере испарения?
- Каков состав первых пузырьков пара?
- Как изменяется состав равновесного с кипящей жидкостью пара в ходе испарения?
- Какое количество каждого из компонентов смеси будет находиться в жидкой фазе и в паре, если  $m$  кг смеси заданного состава нагреть до температуры  $t$ ?
- Какие продукты можно получить, если подвергнуть жидкость заданного состава:
  - перегонке в равновесии (интегральной перегонке);
  - простой (дифференциальной) перегонке;
  - ректификации?

Таблица 2.5 – Варианты заданий

Вариант <i>m</i>	Система <i>A–B</i>	Масса исходной жидкости <i>m</i> , кг	Состав исходной жидкости и температура					
			Подварианты					
			1		2		3	
			<i>a<sub>A</sub></i> , %	<i>t</i> , °C	<i>a<sub>A</sub></i> , %	<i>t</i> , °C	<i>a<sub>A</sub></i> , %	<i>t</i> , °C
1	H <sub>2</sub> O – C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	2,0	80	92	90	96	75	90
2	CH <sub>3</sub> OH – C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub>	0,5	30	68	15	70	25	67
3...	CH <sub>3</sub> CN – H <sub>2</sub> O	0,8	40	80	10	90	20	84



Диаграммы состояния температура кипения – состав систем  
H<sub>2</sub>O – C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O<sub>2</sub> (1,4-диоксан - вода) и CH<sub>3</sub>OH – C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>Cl<sub>2</sub>

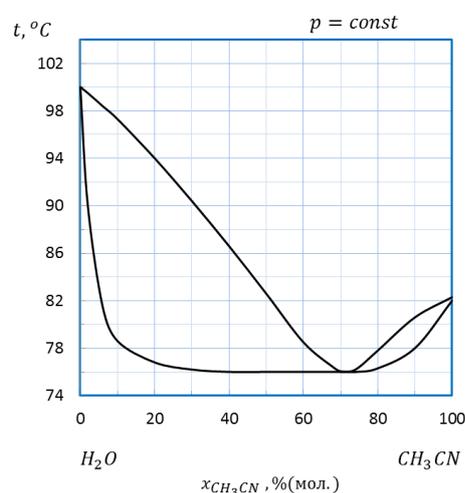


Диаграмма состояния температура кипения – состав системы  
CH<sub>3</sub>CN – H<sub>2</sub>O

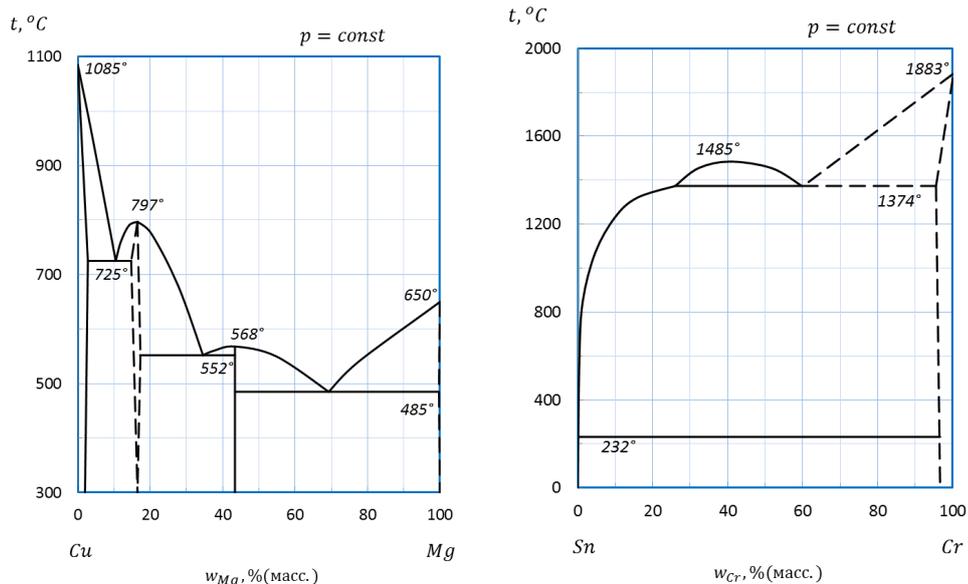
**Задание «Анализ диаграмм плавкости»**

1. Охарактеризуйте диаграмму плавкости системы *A – B* (таблица 2.6): растворимость компонентов в жидких и твердых фазах, типы твердых растворов, наличие устойчивых и неустойчивых химических соединений.

2. Дайте описание состояния системы в различных условиях, расшифровав значение всех полей, линий и характерных точек диаграммы плавкости системы  $A - B$  (таблица 2.6).
3. Определите температуру начала кристаллизации расплава состава  $I$  и состав первых кристаллов. Как изменится состав расплава и твердой фазы при охлаждении?
4. Определите температуру начала плавления, количество и состав фаз при этой температуре для системы состава  $II$ .
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.
6. Вычислите массы равновесных фаз при заданной температуре  $t, ^\circ\text{C}$  и количестве исходной смеси состава  $III$ .
7. Для систем, образующих химические соединения, определите формулы этих соединений.

Таблица 2.6 – Варианты заданий

Вар.	Система $A-B$	Количество исходной смеси	Подвариант	Составы исходной смеси по $A, \%$			$t, ^\circ\text{C}$
				$I$	$II$	$III$	
1	Mg – Cu	500 г	1	10	60	90	550
			2	30	90	20	600
			3	80	20	5	800
			4	90	5	25	600
			5	20	15	50	500
			6	0	40	90	550
2	Cr – Sn	5 кг	1	20	90	80	1400
			2	80	20	50	300
			3	90	40	20	1200
			4	30	80	30	800
			5	50	60	40	1400
			6	10	70	60	200
3	Cd – Cu	800 г	1	100	40	50	600
			2	90	20	40	700
			3	70	80	10	900
			4	50	70	20	500
			5	20	100	30	700
			6	0	50	80	500



Диаграммы состояния систем Mg – Cu и Cr – Sn

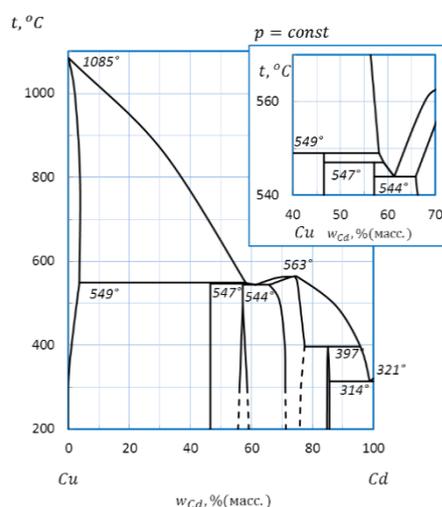


Диаграмма состояния системы Cd – Cu

### Контрольные вопросы к теме 3

1. Чем отличаются понятия фаза и агрегатное состояние вещества?
2. Что является условием фазового равновесия в системе?
3. Чем отличается число компонентов от числа составляющих веществ системы?
4. Что показывает число степеней свободы системы?
5. Что такое насыщенный пар вещества?
6. Что такое теплота испарения вещества?
7. Какие равновесия описывает уравнение Клапейрона-Клаузиуса?
8. Что называется раствором?
9. Какие растворы называются идеальными, а какие неидеальными?
10. Для каких растворов выполняется закон Рауля?
11. В чем причина положительных и отрицательных отклонений от закона Рауля?
12. Что такое активность компонента в растворе?
13. Какие свойства растворов называют коллигативными?
14. Что показывает изотонический коэффициент?
15. Какую информацию несут диаграммы состояния двухкомпонентных систем?
16. Что такое нода или коннода? Как определить составы равновесных фаз?

17. Что такое эвтектическая смесь?
18. Что показывают линии ликвидуса и солидуса?
19. Что называется кривыми охлаждения?
20. Как по кривой охлаждения определить температуры фазовых превращений?
21. Как определить устойчивость химического соединения, образующегося между компонентами в твердом агрегатном состоянии?
22. В чем различие между точками перитектики и дистектики?
23. В чем заключаются основные различия между типами твердых растворов?
24. В чем заключаются правила Розебома?
25. Что такое разрыв сплошности твердого раствора?

**Вопросы к теоретическому коллоквиуму по теме «Фазовые равновесия»**

1. Растворимость газов в жидкостях. Закон Генри.
2. Влияние давления и температуры на растворимость газов в жидкостях.
3. Идеальные и неидеальные растворы. Причины отклонения от закона Рауля.
4. Выражение для химического потенциала идеального и реального растворов.
5. Метод физико-химического анализа. Диаграммы состав-свойство. Принципы непрерывности и соответствия Н.С. Курнакова.
6. Неограниченно растворимые друг в друге жидкости. Вычисление давления и состава пара над идеальными растворами.
7. Диаграммы общее давление – состав, температура кипения – состав, состав раствора – состав пара для двухкомпонентных идеальных растворов. Первый закон Гиббса-Коновалова.
8. Диаграммы температура кипения – состав, состав раствора – состав пара для неидеальных растворов с положительными отклонениями от закона Рауля.
9. Диаграммы температура кипения – состав, состав раствора – состав пара для неидеальных растворов с отрицательными отклонениями от закона Рауля.
10. Азеотропные растворы. Второй закон Коновалова-Гиббса.
11. Методы разделения жидкостей. Виды перегонки.
12. Правило рычага и его применение.
13. Ограниченная взаимная растворимость жидкостей. Влияние температуры на растворимость.
14. Диаграммы общее давление – состав, температура кипения – состав, состав раствора – состав пара для систем с ограниченной взаимной растворимостью жидкости.
15. Давление и состав пара над смесью взаимно нерастворимых жидкостей. Перегонка с водяным паром
16. Идеальная растворимость твердых веществ в жидкости (уравнение Шредера).
17. Термический анализ, кривые охлаждения.
18. Системы с полной взаимной нерастворимостью веществ в твердом и жидком состояниях.
19. Диаграммы плавкости систем с полной растворимостью компонентов в жидком и полной нерастворимостью в твердом состояниях (системы с простой эвтектикой).
20. Диаграммы плавкости систем с ограниченной растворимостью компонентов в твердом состоянии.
21. Диаграммы плавкости систем с неограниченной растворимостью веществ в твердом состоянии. Типы твердых растворов.
22. Диаграммы плавкости систем с устойчивыми химическими соединениями.
23. Диаграммы плавкости систем с неустойчивыми химическими соединениями.
24. Коллигативные свойства разбавленных растворов. Использование их для определения молекулярного состава и молярной массы вещества.
25. Разбор диаграммы состояния.

#### Тема 4 – Электрохимические системы

##### Задание «Гальванические элементы»

1. Какого рода левый электрод гальванического элемента **A** (таблица 3.1)? Напишите уравнение реакции, протекающей на этом электроде в равновесных условиях, и уравнение для расчета потенциала этого электрода.

2. Определите среднюю ионную активность электролита  $a_{\pm}$  в левом электроде гальванического элемента **A** на основании справочных значений среднего ионного коэффициента активности электролита [2] при моляльной концентрации  $m_1$  (таблица 3.2) и температуре 298 К.

3. Определите электродный потенциал левого электрода при 298 К. Стандартный электродный потенциал возьмите из справочника [2]. Давление в газовых электродах примите равным стандартному атмосферному давлению.

4. Какого рода правый электрод гальванического элемента **A** (таблица 3.1)? Напишите уравнение реакции, протекающей на этом электроде в равновесных условиях, и уравнение для расчета потенциала этого электрода

5. Определите среднюю ионную активность электролита  $a_{\pm}$  в правом электроде гальванического элемента **A** на основании справочных значений среднего ионного коэффициента активности электролита [2] при моляльной концентрации  $m_2$  (таблица 3.2) и температуре 298 К.

6. Определите электродный потенциал правого электрода при 298 К. Стандартный электродный потенциал возьмите из справочника [2]. Давление в газовых электродах примите равным стандартному атмосферному давлению.

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

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

9. Вычислите термодинамическую константу равновесия реакции, протекающей самопроизвольно в гальваническом элементе **A** при температуре 298 К.

10. Составьте гальванический элемент, в котором протекает самопроизвольно химическая реакция **B** (таблица 3.3).

11. Определите стандартное значение ЭДС гальванического элемента, в котором протекает химическая реакция **B**, при температуре 298 К на основании стандартных электродных потенциалов из справочника [2].

12. Определите  $E^0$  при температуре  $T$  на основании значения  $E^0$  при 298 К и величины  $\left(\frac{\partial E^0}{\partial T}\right)_P$  (таблица 3.3), приняв что в указанном интервале температур зависимость  $E^0 = f(T)$  линейна.

13. Определите  $\Delta_r G_T^0$  (кДж/моль) реакции **B**, протекающей в гальваническом элементе при температуре  $T$  (таблица 3.4).

14. Определите  $\Delta_r S_T^0$  (Дж/(моль·К)) для реакции **B**, протекающей в гальваническом элементе при температуре  $T$ .

15. Определите тепловой эффект  $\Delta_r H_T^0$  (кДж/моль) реакции **B**, протекающей в гальваническом элементе при температуре  $T$ .

16. Определите термодинамическую константу равновесия химической реакции **B** при температуре  $T$ .

Таблица 3.1 – Варианты заданий

Вар.	Гальванический элемент <b>A</b>
1	$\text{Zn} \text{ZnSO}_4  \text{KCl} \text{AgCl}_{(s)} \text{Ag}$
2	$(\text{Pt})\text{H}_2 \text{H}_2\text{SO}_4  \text{KCl} \text{Hg}_2\text{Cl}_{2(s)} \text{Hg}$
3...	$\text{Cu} \text{CuCl}_2  \text{CdSO}_4 \text{Hg}_2\text{SO}_{4(s)} \text{Hg}$

Таблица 3.2 – Варианты заданий

Вариант	Молярная концентрация растворов, $m$ , моль/кг $\text{H}_2\text{O}$	Подвариант					
		1	2	3	4	5	6
1, 2, 3, 4, 7, 9, 15, 18, 26	$m_1$	0,005	0,01	0,02	0,05	0,1	0,2
	$m_2$	0,2	0,1	0,05	0,02	0,01	0,005

Таблица 3.3 – Варианты заданий

Вариант	Химическая реакция <b>B</b>	$\left(\frac{\partial E^0}{\partial T}\right)_p$ , В/К
1	$\text{Pb} + 2\text{AgI} = \text{PbI}_2 + 2\text{Ag}$	$-1,38 \cdot 10^{-4}$
2	$\text{Cd} + 2\text{AgCl} = \text{CdCl}_2 + 2\text{Ag}$	$-6,5 \cdot 10^{-4}$
3...	$\text{Cd} + \text{PbCl}_2 = \text{CdCl}_2 + \text{Pb}$	$-4,8 \cdot 10^{-4}$

Таблица 3.4 – Варианты заданий

Вариант	Температура $T$ , К					
	Подвариант					
	1	2	3	4	5	6
1, 2, 3, 4, 5, 6, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 26	278	288	308	318	328	338

**Задание. «Электрическая проводимость растворов электролитов»**

Используя величину удельного сопротивления  $\rho$  раствора при температуре  $25^\circ\text{C}$  электролита **A** заданной концентрации  $c$  (таблица 3.5), рассчитать степень, константу диссоциации и pH раствора.

Таблица 3.5 – Варианты заданий

Вариант	Электролит <b>A</b>	Подвариант		
		1	2	3

		$c \cdot 10^3$ , моль/л	$\rho \cdot 10^{-2}$ , Ом·м	$c \cdot 10^3$ , моль/л	$\rho \cdot 10^{-2}$ , Ом·м	$c \cdot 10^3$ , моль/л	$\rho \cdot 10^{-2}$ , Ом·м
1	Изомасляная кислота*	1,00	2,370	1,47	1,934	1,67	1,805
2	Масляная кислота	1,04	2,278	1,35	1,976	1,72	1,736
3...	Муравьиная кислота	1,11	0,655	1,39	0,569	1,85	0,483

#### **Контрольные вопросы к теме 4**

1. Что такое гальванический элемент?
2. Из чего состоит электрод электрохимической системы?
3. Каковы причины возникновения скачка потенциала на границе раздела проводник первого рода проводник второго рода?
4. Что такое водородная шкала потенциалов?
5. Как рассчитывается потенциал электрода в водородной шкале?
6. Каков физический смысл стандартного электродного потенциала?
7. Какие типы электродов Вы знаете?
8. Какие типы гальванических элементов Вы знаете?
9. Что такое ЭДС?
10. Как рассчитывается максимальная электрическая работа, которую может произвести гальванический элемент?
11. Как рассчитывается изменение термодинамических функций  $\Delta G^0$ ,  $\Delta H^0$ ,  $\Delta S^0$  и константа равновесия реакции, протекающей в замкнутом гальваническом элементе.
12. Какую величину называют электрической проводимостью раствора? В каких единицах измеряется эта величина?
13. От каких факторов зависит электрическая проводимость растворов электролитов?
14. Что характеризует удельная электрическая проводимость? Как можно определить эту величину?
15. Как зависит удельная электрическая проводимость от концентрации сильного электролита? Ответ аргументируйте.
16. Как зависит удельная электрическая проводимость от концентрации слабого электролита? Ответ аргументируйте.
17. Какую величину называют молярной электрической проводимостью раствора? Как эта величина зависит от концентрации раствора сильного и слабого электролита?
18. Что понимают под предельной молярной электрической проводимостью раствора? Как можно определить эту величину для сильных и слабых электролитов?
19. Как определить степень и константу диссоциации слабого электролита, измеряя электрическую проводимость раствора?
20. Как определить произведение растворимости трудно растворимого соединения, измеряя электрическую проводимость раствора?

#### **Тема 5 – Химическая кинетика и катализ**

##### **Задание «Расчет кинетических параметров гомогенных химических реакций»**

Используя экспериментальные данные по изменению концентрации исходного вещества во времени для реакции **B**, заданной в таблице 6.1, выполните следующие действия:

1. Постройте графики зависимости концентрации  $c$  исходного вещества от времени  $t$  в координатах  $\ln c = f(t)$  и  $1/c = f(t)$ . По виду графика определите порядок реакции.
2. Рассчитайте константу скорости реакции **B**.
3. Вычислите концентрацию исходного вещества и продуктов реакции **B** через  $t_1$  с от начала реакции.
4. Рассчитайте время, за которое прореагирует 10% исходного вещества.
5. Определите период полупревращения реакции.

Таблица 6.1 – Варианты заданий

Время	Концентрация исходного вещества $c \cdot 10^3$ , моль/л					
	Подварианты:					
	1	2	3	4	5	6
$t$ , с	Вариант 1 Реакция: $2\text{NO}_2 = 2\text{NO} + \text{O}_2$ ; $t_1 = 200$ с					
	$T = 631$ К	$T = 625$ К	$T = 607$ К	$T = 618$ К	$T = 598$ К	$T = 650$ К
0	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
60	0,8307	0,8622	0,9224	0,8887	0,9429	0,7328
120	0,7106	0,7579	0,8558	0,7999	0,8922	0,5784
150	0,6630	0,7147	0,8257	0,7618	0,8685	0,5233
180	0,6210	0,6763	0,7980	0,7271	0,8464	0,4778
300	0,4952	0,5562	0,7032	0,6150	0,7675	0,3542

**Задание «Влияние температуры на скорость химической реакции»**

Используя значения констант скорости реакции  $k_1$  и  $k_2$  при двух значениях температуры  $T_1$  и  $T_2$  (таблица 6.2), определите энергию активации химической реакции  $B$ , предэкспоненциальный множитель в уравнении Аррениуса и константу скорости химической реакции  $B$  при температуре  $T_3$ .

Вычислите температурный коэффициент Вант-Гоффа  $\gamma$  для скорости реакции  $B$  в интервале температур  $T_1$  и  $T_2$  и рассчитайте, во сколько раз изменится скорость реакции, если температуру  $T_1$  увеличить на величину  $\Delta T$  (таблица 6.2).

Таблица 6.2 – Варианты заданий

Вариант	$T_1$ , К	$k_1$	$T_2$ , К	$k_2$	Температура $T_3$ , К, к подвариантам		
					1	2	3
1	656	7,700 л/(моль·с)	592	0,844 л/(моль·с)	667	580	590
2	523	$1,45 \cdot 10^{-2}$ л/(моль·с)	570	0,324 л/(моль·с)	590	520	514
3	813	$1,702 \cdot 10^{-5} \text{ с}^{-1}$	783	$4,635 \cdot 10^{-6} \text{ с}^{-1}$	777	780	773

**Контрольные вопросы к теме 5**

1. Что понимают под средней удельной скоростью химической реакции по какому-то компоненту?
2. В каком случае можно определять скорость через изменение концентрации компонента?
3. Как можно определить скорость реакции по какому-то компоненту в данный момент времени?
4. От каких факторов зависит скорость химической реакции?
5. Какие параметры входят в основное кинетическое уравнение? Физический смысл константы скорости химической реакции.
6. Что понимают под порядком химической реакции?
7. Что характеризует молекулярность химической реакции?
8. В чем причины несовпадения порядка реакции и молекулярности?
9. Что такое период полупревращения?
10. По каким признакам можно отличить реакции 1-го порядка и реакции 2-го порядка?
11. Как скорость большинства химических реакций зависит от температуры? Температурный коэффициент Вант-Гоффа, уравнение Аррениуса.

12. Что понимают под энергией активации химической реакции? Как вычислить эту величину из экспериментальных данных?

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

#### Задание «Электрические свойства молекул»

Рассчитать дипольный момент и эффективный радиус молекулы  $C$  на основании экспериментальных значений молярной поляризуемости при заданной температуре  $t$  (таблица 4.1). При расчете пренебречь величиной атомной составляющей поляризуемости, молярную рефракцию вычислить по правилу аддитивности.

Таблица 4.1 - Варианты заданий

Вариант	Молекула $C$	Подвариант					
		1		2		3	
		$t, ^\circ C$	$P_m \cdot 10^6, \text{ м}^3/\text{моль}$	$t, ^\circ C$	$P_m \cdot 10^6, \text{ м}^3/\text{моль}$	$t, ^\circ C$	$P_m \cdot 10^6, \text{ м}^3/\text{моль}$
1	Бромбензол	160	72.82	170	72.00	180	71.15
2	Хлорбензол	140	74.16	150	73.17	160	72.23
3	Фенол	185	53.96	190	53.51	200	52.97

#### Контрольные вопросы к теме 6

- Какие изменения происходят в неполярной молекуле при ее помещении в постоянное электрическое поле?
- Чем отличается поляризация полярной молекулы от поляризации неполярной молекулы при ее помещении в постоянное электрическое поле?
- Из каких экспериментальных данных можно рассчитать величину молярной поляризуемости молекулы?
- В чем заключается поляризации молекул в высокочастотном переменном электрическом поле? Как называется молярная поляризуемость молекулы в высокочастотном электрическом поле?
- Как, используя электрические свойства молекулы, оценить ее ориентировочный радиус?
- Какое свойство молярной рефракции используется для определения структурной формулы молекулы? Как определить структурную формулу молекулы?
- Как определить дипольный момент молекулы, используя уравнение Дебая?
- Как определить количественный состав раствора, используя удельную рефракцию раствора? Какие экспериментальные данные для этого необходимы?

### Тема 7 - Оптические и рентгеновские методы нахождения молекулярных констант и использование их для расчета термодинамических функций идеальных газов статистическим методом

#### Задание «Вращательные спектры двухатомных молекул»

- Напишите квантово-механическое уравнение для расчета энергии вращательного движения двухатомной молекулы как жесткого ротатора.
- Выведите уравнение для расчета изменения энергии вращения двухатомной молекулы как жесткого ротатора при переходе ее на соседний, более высокий квантовый уровень  $\Delta E_{\text{вр.}} = f(j)$ .
- Выведите уравнение зависимости волнового числа вращательных линий в спектре поглощения двухатомной молекулы от вращательного квантового числа.
- Выведите уравнение для расчета разности волновых чисел соседних линий во вращательном спектре поглощения двухатомной молекулы.

5. Рассчитайте вращательную постоянную  $B_e$  (в  $\text{см}^{-1}$  и  $\text{м}^{-1}$ ) двухатомной молекулы  $A$  по волновым числам двух соседних линий в длинноволновой инфракрасной области вращательного спектра поглощения молекулы (см. таблицу 4.3).

6. Определите энергию вращения молекулы  $A$  на первых пяти квантовых вращательных уровнях (Дж).

7. Вычертите схематически энергетические уровни вращательного движения двухатомной молекулы как жесткого ротатора.

8. Нанесите пунктиром на эту схему вращательные квантовые уровни молекулы, не являющейся жестким ротатором.

9. Выведите уравнение для вычисления равновесного межъядерного расстояния на основании разности волновых чисел соседних линий во вращательном спектре поглощения.

10. Определите момент инерции  $I_e$  ( $\text{кг}\cdot\text{м}^2$ ) двухатомной молекулы  $A$ .

11. Рассчитайте приведенную массу  $\mu$  (кг) молекулы  $A$ .

12. Вычислите равновесное межъядерное расстояние  $r_e$  (Å) молекулы  $A$ . Сопоставьте полученное значение со справочными данными.

13. Отнесите наблюдаемые линии во вращательном спектре молекулы  $A$  к вращательным переходам.

14. Рассчитайте волновое число спектральной линии, отвечающей вращательному переходу с уровня  $j$  для молекулы  $A$  (см. таблицу 4.3).

15. Вычислите приведенную массу  $\mu'$  (кг) изотопозамещенной молекулы  $B$ .

16. Рассчитайте волновое число спектральной линии, связанной с вращательным переходом с уровня  $j$  для молекулы  $B$  (см. таблицу 4.3). Межъядерные расстояния в молекулах  $A$  и  $B$  считать равными.

17. Определите величину и направление изотопного сдвига во вращательных спектрах молекул  $A$  и  $B$  для спектральной линии, отвечающей переходу с вращательного уровня  $j$ .

18. Объясните причину немонотонного изменения интенсивности линий поглощения по мере увеличения энергии вращения молекулы

19. Определите квантовое число вращательного уровня, отвечающего наибольшей относительной заселенности. Рассчитайте длины волн наиболее интенсивных спектральных линий вращательных спектров молекул  $A$  и  $B$ .

Таблица 4.3 – Варианты заданий

Вариант	Молекула $A$	Под вариант	$\tilde{\nu}_{j \rightarrow j+1} \cdot 10^{-2}, \text{м}^{-1}$		$j$	Молекула $B$
1	LiH	1	60.12	75.15	7	$\text{Li}^2\text{H}$
		2	180.36	195.39	9	$^8\text{LiH}$
		3	195.39	210.42	11	$^6\text{Li}^3\text{H}$
		4	105.21	120.24	8	$\text{Li}^3\text{H}$
		5	120.24	135.27	6	$^6\text{LiH}$
		6	90.18	105.21	4	$^6\text{Li}^2\text{H}$
2	BCl	1	4.104	5.472	5	$\text{B}^{37}\text{Cl}$
		2	8.208	9.576	8	$^{10}\text{BCl}$
		3	9.576	10.944	9	$\text{B}^{37}\text{Cl}$
		4	10.944	12.312	4	$^{10}\text{B}^{37}\text{Cl}$
		5	12.312	13.68	10	$^{10}\text{BCl}$
		6	17.784	19.152	6	$\text{B}^{37}\text{Cl}$
3...	BeH	1	103.15	123.78	10	$\text{Be}^2\text{H}$
		2	82.52	103.15	8	$\text{Be}^3\text{H}$

	3	226.93	247.56	6	<sup>5</sup> BeH
	4	247.56	268.19	4	<sup>11</sup> BeH
	5	185.67	206.3	7	<sup>13</sup> BeH
	6	206.3	226.93	3	<sup>16</sup> BeH

**Задание «Колебательные спектры двухатомных молекул»**

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

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

3.3. Вычислите по определенным из ИК-спектра поглощения двухатомной молекулы *A* основному тону ( $\tilde{\nu}_0$ ), первому обертону ( $\tilde{\nu}_1$ ), второму обертону ( $\tilde{\nu}_2$ ) или третьему обертону ( $\tilde{\nu}_3$ ) (таблица 4.4) волновое число собственных колебаний  $\tilde{\omega}_e$ , коэффициент ангармоничности  $x_e$  и ангармоничность  $\tilde{\omega}_e x_e$ .

3.4. Вычислите волновые числа пропущенных линий в ИК-спектре поглощения двухатомной молекулы *A* ( $\tilde{\nu}_0, \tilde{\nu}_1, \tilde{\nu}_2$  или  $\tilde{\nu}_3$ ).

3.5. Определите энергию колебательного движения молекулы *A* на нулевом колебательном квантовом уровне  $E_0$  (Дж), используя волновое число собственных колебаний  $\tilde{\omega}_e$  и ангармоничность  $\tilde{\omega}_e x_e$  (см. п.3)

3.6. Выведите уравнение для расчета максимального колебательного квантового числа.

3.7. Определите максимальное колебательное квантовое число  $\nu_{\max}$  для молекулы *A*.

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

3.9. Определите энергию диссоциации  $D_0$  молекулы *A* (кДж/моль).

3.10. Вычертите график зависимости  $E_{\text{кол}} = f(\nu)$ , выбрав 3-4 значения квантового числа  $\nu$  и рассчитав значения  $E_{\text{кол}}$  в интервале от 0 до  $\nu_{\max}$ .

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

3.12. Вычислите силовую постоянную химической связи  $k_e$  двухатомной молекулы *A*.

3.13. Вычислите волновое число собственных колебаний изотопозамещенной молекулы *B*.

3.14. Определите величину и направление изотопного сдвига для основного тона.

Таблица 4.4 – Варианты заданий

Вариант	Молекула <i>A</i>	Под-вариант	$\tilde{\nu}_0 \cdot 10^{-2}$ , м <sup>-1</sup>	$\tilde{\nu}_1 \cdot 10^{-2}$ , м <sup>-1</sup>	$\tilde{\nu}_2 \cdot 10^{-2}$ , м <sup>-1</sup>	$\tilde{\nu}_3 \cdot 10^{-2}$ , м <sup>-1</sup>	Молекула <i>B</i>
1	HI	1	2230	4380	-	-	<sup>2</sup> HI
		2	2230	-	6450	-	<sup>3</sup> HI
		3	2230	-	-	8440	<sup>2</sup> H <sup>129</sup> I
		4	-	4380	6450	-	<sup>3</sup> H <sup>131</sup> I
		5	-	4380	-	8440	H <sup>129</sup> I
		6	-	-	6450	8440	H <sup>131</sup> I
2	HF	1	3962	-	11345	-	<sup>2</sup> HF
		2	3962	-	-	14765	<sup>3</sup> H <sup>18</sup> F
		3	3962	7744	-	-	<sup>2</sup> H <sup>18</sup> F
		4	-	7744	11345	-	<sup>3</sup> HF

		5		7744		14765	$\text{H}^{18}\text{F}$
		6			11345	14765	$^2\text{HF}$
3...	HCl	1	2885	-	8339		$^2\text{HCl}$
		2	2885	5664			$^3\text{HCl}$
		3	2885			10907	$\text{H}^{37}\text{Cl}$
		4		5664	8338		$^3\text{HCl}$
		5		5664		10907	$^2\text{H}^{37}\text{Cl}$
		6			8338	10907	$^3\text{H}^{37}\text{Cl}$

### **Контрольные вопросы к теме 7**

1. Какую информацию можно получить из молекулярных спектров?
2. Что является причиной появления вращательных спектров?
3. Каковы закономерности расположения уровней вращательной энергии в моделях жесткого и нежесткого ротаторов?
4. Сформулируйте правило отбора для вращательных спектров.
5. Каковы закономерности расположения линий друг относительно друга во вращательном спектре в моделях жесткого и нежесткого ротаторов?
6. Какие молекулярные характеристики можно определить при изучении вращательного спектра молекулы?
7. Как оценить величину и направление изотопного сдвига во вращательном спектре?
8. Что является причиной появления колебательных спектров?
9. Что такое собственное колебание?
10. В чем различие между основным тоном, обертонами и горячими частотами?
11. Каковы закономерности расположения уровней колебательной энергии в моделях гармонического и ангармонического осцилляторов?
12. Сформулируйте правило отбора для колебательных спектров.
13. В чем заключается характерная особенность колебательного спектра в модели гармонического осциллятора?
14. Каковы закономерности расположения линий в колебательном спектре в модели ангармонического осциллятора?
15. Какие молекулярные характеристики и как можно определить при изучении колебательного спектра?  
Как оценить величину и направление изотопного сдвига в колебательном спектре?

### **Тема 8 - Химическая связь**

#### **Задание «Химическая связь. Метод молекулярных орбиталей»**

1. Запишите электронные конфигурации атома А и атома В.
2. Запишите электронную конфигурацию молекулы АВ (за основу примите молекулярные орбитали гомоядерных молекул).
3. Нарисуйте схематически энергетическую диаграмму молекулы АВ.
4. Распределите электроны на электронных энергетических уровнях.
5. Определите терм основного электронного состояния молекулы АВ.
6. Определите порядок связи А-В.
7. Установите: обладает ли вещество АВ диамагнитными или парамагнитными свойствами?
8. Обладает ли молекула АВ электрическим диполем?
9. Как изменится энергия связи и равновесное межъядерное расстояние, если молекулу АВ перевести в состояние иона АВ<sup>+</sup>?
10. Как изменится энергия связи и равновесное межъядерное расстояние, если молекулу АВ перевести в состояние иона АВ<sup>-</sup>?

Вариант	Молекула АВ		
	1	НН	НLi
2	LiH	LiLi	LiO
3	СН	CN	CC

**Тема 9 - Статистические методы расчета термодинамических функций**  
**Задание «Расчет теплоемкости идеального газа»**

Используя спектральные данные, вычислить теплоемкость идеального газа  $A$  при температуре  $T$  (таблица 5.2). Полученный результат сравнить с величиной, рассчитанной с использованием интерполяционных уравнений.

Таблица 5.2 – Варианты заданий

Вариант	Вещество $A$	Температура $T$ , К					
		Подвариант					
		1	2	3	4	5	6
1	CS <sub>2</sub>	1300	500	700	900	1200	1800
2	PCl <sub>3</sub>	800	500	600	700	900	1000
3	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	400	500	600	800	900	1000

**Задание «Статистические методы расчета свойств газов в идеальном состоянии»**

Для вещества  $A$ , находящегося в идеальном газообразном состоянии при температуре  $T$  и стандартном давлении 1,0132.105 Па:

1. Напишите уравнение, связывающее поступательную сумму по состояниям с молекулярными константами и параметрами состояния  $V$  и  $T$ .
2. Напишите уравнение, связывающее поступательную сумму по состояниям с молекулярными константами и параметрами состояния  $p$  и  $T$ .
3. Напишите уравнение, связывающее вращательную сумму по состояниям вещества, состоящего из двухатомных молекул, с молекулярными константами и параметрами состояния.
4. Напишите уравнение, связывающее колебательную сумму по состояниям вещества, состоящего из двухатомных молекул, с молекулярными константами и параметрами состояния.
5. Напишите уравнение, связывающее электронную сумму по состояниям с молекулярными константами и параметрами состояния.
6. Определите логарифм поступательной суммы по состояниям для вещества  $A$  при заданных параметрах состояния.
7. Определите логарифм вращательной суммы по состояниям для вещества  $A$  при заданных параметрах состояния. Момент инерции возьмите из справочника.
8. Определите логарифм колебательной суммы по состояниям для вещества  $A$  при заданных параметрах состояния. Волновое число собственных колебаний возьмите из справочника.
9. Определите логарифм электронной суммы по состояниям для вещества  $A$  при заданных параметрах состояния. Терм основного состояния возьмите из справочника.
10. Определите логарифм стандартной полной суммы по состояниям для вещества  $A$ .
11. Напишите уравнение, связывающее внутреннюю энергию  $(U-U_0)$  с суммой по состояниям.
12. Напишите уравнение, связывающее энтальпию  $(H-H_0)$  с суммой по состояниям.
13. Определите энтальпию  $(H-H_0)_{гс}$  вещества  $A$  (кДж/моль) при температуре  $T$ , К.
14. Напишите уравнение, связывающее изобарную теплоемкость с суммой по состояниям.
15. Определите изобарную теплоемкость вещества  $A$   $C_{p0}$  [Дж/(моль.К)] при температуре  $T$ , К.
16. Напишите уравнение, связывающее энтропию вещества с суммой по состояниям.
17. Рассчитайте стандартную поступательную составляющую энтропии [Дж/(моль.К)].

18. Рассчитайте вращательную составляющую энтропии [Дж/(моль.К)].
19. Найдите колебательную составляющую энтропии [Дж/(моль.К)] по таблице термодинамических функций Эйнштейна.
20. Определите электронную составляющую энтропии [Дж/(моль.К)].
21. Определите стандартную абсолютную энтропию вещества  $A$   $S_{T0}$  [Дж/(моль.К)].
22. Напишите уравнение, связывающее функцию  $(A-U_0)/T$  (приведенную энергию Гельмгольца), с суммой по состояниям.
23. Напишите уравнение, связывающее функцию  $(G-H_0)/T$  (приведенную энергию Гиббса), с суммой по состояниям.
24. Определите величину функции  $((G-H_0)/T)_T$  вещества  $A$  [Дж/(моль.К)] при температуре  $T$ , К. Сравните полученное значение со справочными данными.

Вариант	Вещество $A$	Температура $T$ , К
1	$N_2$	500
2	$H_2$	800
3...	$CO$	800

**Задание «Применение статистической термодинамики к расчету равновесия»**

1. Напишите уравнение для расчета константы равновесия химической реакции на основании значений приведенной энергии Гиббса  $(G-H_0)/T$  для всех веществ, участвующих в химической реакции, и гипотетического теплового эффекта  $\Delta H_{00}$ .
2. На основании справочных значений приведенной энергии Гиббса для веществ, участвующих в реакции  $A$ , определите  $\Delta((G_0-H_{00})/T)_T$  (Дж/К) при протекании реакции  $A$  при температуре  $T$ .
3. На основании справочных значений  $(H_0-H_{00})_{298}$  для веществ, участвующих в реакции  $A$ , и теплового эффекта реакции  $A$  при 298 К определите тепловой эффект гипотетической реакции, протекающей при абсолютном нуле в идеальном газообразном состоянии,  $\Delta H_{00}$  (кДж).
4. Вычислите  $\Delta G_{T0}$  (кДж) при протекании реакции  $A$ .
5. Вычислите  $\ln K_p$  реакции  $A$  при температуре  $T$ .
6. Вычислите  $K_p$  реакции  $A$  при температуре  $T$ .
7. Перечислите молекулярные константы, которые необходимо знать для расчета константы равновесия химической реакции методом статистической термодинамики. Укажите, какие эксперименты следует провести, чтобы получить эти молекулярные константы.

Вариант	Реакция $A$	Температура $T$ , 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

**Контрольные вопросы к теме 9**

1. Что показывает сумма по состояниям? Что такое статистический вес?
2. С какой термодинамической функцией связана сумма по состояниям?
3. Как представить сумму по состояниям в виде составляющих по различным видам движения молекулы?
4. От каких параметров зависит поступательная составляющая суммы по состояниям?
5. От каких молекулярных констант зависит вращательная составляющая суммы по состояниям?
6. С какой молекулярной константой связана характеристическая температура? Для вычисления какой составляющей суммы по состояниям необходимо рассчитывать эту величину?

7. Как рассчитать колебательную составляющую суммы по состояниям для многоатомной молекулы?
8. От чего зависит электронная составляющая суммы по состояниям?
9. Какие термодинамические функции можно рассчитать, используя сумму по состояниям?
10. Какие составляющие термодинамических функций можно определить, используя таблицы Эйнштейна?
11. Как вычислить изобарную молярную теплоемкость газа методом статистической термодинамики?

#### **5. Примерные темы докладов на научных семинарах:**

##### **Научный семинар «Химические источники тока»:**

1. История создания и современная классификация химических источников тока
2. Кислотные аккумуляторы и их применение
3. Щелочные аккумуляторы и их применение
4. Водоактивируемые источники тока
5. Высокотемпературные источники тока
6. Топливные элементы
7. Литий-ионные аккумуляторы, достижения и перспективы

##### **Научный семинар «Современные проблемы химической кинетики и катализа»:**

1. Ферментативный катализ
2. Твердые катализаторы. Состав и свойства
3. Твердые катализаторы. Практическое использование
4. Фемтохимические реакции
5. Кинетика топохимических реакций
6. Кинетика поверхностных реакций
7. Катализ в переработке нефти и нефтехимии.

#### **6. Примерная тема курсовой работы:**

Расчет термодинамических функций химической реакции методами общей и статистической термодинамики, а также с использованием термодинамической базы ИВТАНТЕРМО.

#### **7. Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений и навыков, характеризующих этапы формирования компетенций.**

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в соответствии с требованиями СПП СТО СПбГТИ(ТУ) 016-2015. КС УКДВ Порядок проведения зачетов и экзаменов.

По дисциплине промежуточная аттестация проводится в форме экзамена.

Шкала оценивания на экзамене балльная («отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно»).