

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 16.06.2025 15:39:30
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
«___» _____ 2024 г.

Рабочая программа дисциплины
ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

Направление подготовки

04.03.01 Химия

Направленность программы бакалавриата

Физическая химия и химия материалов

Квалификация

Бакалавр

Форма обучения

Очная

Факультет **химии веществ и материалов**

Кафедра **физической химии**

Санкт-Петербург

2024

СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.....	3
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. Занятия лекционного типа.....	8
4.3. Занятия семинарского типа.....	9
4.3.1. Семинары, практические занятия.....	9
4.3.2. Занятия лабораторного типа.....	12
4.4. Самостоятельная работа обучающихся.....	12
4.5. Темы индивидуальных заданий.....	14
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.....	16
8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.....	16
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	17
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.....	17
10.1. Информационные технологии.....	17
10.2. Программное обеспечение.....	17
10.3. Базы данных и информационные справочные системы.....	17
11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы.....	17
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.....	18

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

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

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

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
ОПК-1 Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	ОПК-1.О.13.1 Выполнение физико-химических экспериментов с их анализом и интерпретацией полученных результатов	Знать методы анализа результатов эксперимента Уметь анализировать и интерпретировать результаты эксперимента Владеть методами оценки достоверности полученных результатов физико-химических измерений
ОПК-2 Способен проводить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их участием	ОПК-2.О.13.1 Проведение эксперимента, включая анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов с соблюдением норм и техники безопасности	Знать методики эксперимента по получению веществ и материалов и их анализа Уметь проводить эксперимент по изучению свойств веществ и материалов с соблюдением техники безопасности Владеть методиками проведения эксперимента по изучению свойств веществ и материалов

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
ОПК-4 Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач	ОПК-4.О.13.1 Планирование, обработка и интерпретация полученных результатов с использованием теоретических знаний и практических навыков	Знать приемы планирования и методы обработки и интерпретации результатов эксперимента Уметь Формировать полученные результаты в виде таблиц, графиков Владеть навыками корректной обработки результатов полученных физико-химических величин
ОПК-6 Способен представлять результаты своей работы в устной и письменной форме в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе	ОПК-6.О.13.1 Представление результатов работы в устной и письменной форме	Знать принятые в профессиональном сообществе нормы представления результатов работы Уметь представлять результаты работы в виде отчетов по лабораторному практикуму по физической химии Владеть способами представления результатов работы в виде отчетов
ПК-1 Способен выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	ПК-1.О.13.1 Выполнение лабораторных работ по методикам, изложенным в лабораторном практикуме	Знать содержание методики выполнения работы Уметь выполнять стандартные операции при выполнении лабораторных работ по физической химии Владеть навыками оценки погрешности определяемой величины

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
ПК-2 Владеет базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	ПК-2.О.13.1 Использование современной аппаратуры для проведения физико-химических исследований	Знать типы современного оборудования для проведения лабораторных работ Уметь Определять физико-химические параметры с помощью измерительного оборудования при выполнении лабораторных работ по физической химии Владеть Стандартными методиками измерений физико-химических величин
ПК-3. Владеет системой фундаментальных химических, физических и математических понятий	ПК-3.О.13.1 Знание фундаментальных физических, химических и математических понятий	Знать основные понятия физики, химии и математики Уметь использовать физико-химические понятия Владеть навыками применения основных физико-химических понятий
ПК-4 Способен применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов	ПК-4.О.13.1 Знание основных законов и закономерностей физической химии	Знать алгоритм анализа полученных результатов на основе законов и основных закономерностей физической химии Уметь использовать основные законы физической химии при анализе полученных результатов Владеть принципами использования законов физической химии при анализе полученных результатов

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Физическая химия» (Б1.О.13) относится к обязательной части Блока 1 «Дисциплины» образовательной программы бакалавриата.

Изучается на третьем курсе, в пятом и шестом семестрах.

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

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

3. Объем дисциплины.

Вид учебной работы	Всего, ЗЕ/академ. часов
Общая трудоемкость дисциплины (зачетных единиц/ академических часов)	18/648
Контактная работа с преподавателем:	468
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	-
Самостоятельная работа	108
Форма текущего контроля (Кр, реферат, РГР, эссе)	Кр
Форма промежуточной аттестации (КР, КП, зачет, экзамен)	КР (6 сем.), Экзамен (5,6 сем.)/72

4. Содержание дисциплины.

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, академ. часы	Занятия семинарского типа, академ. часы		Самостоятельная работа, академ. часы	Формируемые компетенции	Формируемые индикаторы
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы			
1	Химическая термодинамика	18	18	40	14	ОПК-1 ОПК-4 ОПК-6 ПК-3 ПК-4	ОПК-1.О.13.1 ОПК-4.О.13.1 ОПК-6.О.13.1 ПК-3.О.13.1 ПК-4.О.13.1
2	Химическое равновесие	6	12		20	ОПК-1 ОПК-4 ОПК-6 ПК-3 ПК-4	ОПК-1.О.13.1 ОПК-4.О.13.1 ОПК-6.О.13.1 ПК-3.О.13.1 ПК-4.О.13.1
3	Фазовые равновесия и растворы неэлектролитов	18	30	24	12	ОПК-2 ОПК-4 ПК-1 ПК-3 ПК-4	ОПК-2.О.13.1 ОПК-4.О.13.1 ПК-1.О.13.1 ПК-3.О.13.1 ПК-4.О.13.1
4	Электрохимические системы	12	12	24	8	ОПК-1 ОПК-2 ОПК-4 ОПК-6 ПК-1	ОПК-1.О.13.1 ОПК-2.О.13.1 ОПК-4.О.13.1 ОПК-6.О.13.1 ПК-1.О.13.1
5	Химическая кинетика и катализ	18	16	44	14	ОПК-1 ОПК-2 ОПК-4 ОПК-6 ПК-1 ПК-2 ПК-3 ПК-4	ОПК-1.О.13.1 ОПК-2.О.13.1 ОПК-4.О.13.1 ОПК-6.О.13.1 ПК-1.О.13.1 ПК-2.О.13.1 ПК-3.О.13.1 ПК-4.О.13.1
6	Методы изучения строения молекул, основанные на электрических свойствах	4	4	18	6	ОПК-1 ОПК-6 ПК-2 ПК-3 ПК-4	ОПК-1.О.13.1 ОПК-6.О.13.1 ПК-2.О.13.1 ПК-3.О.13.1 ПК-4.О.13.1
7	Оптические и рентгеновские методы нахождения молекулярных констант и использование их для расчета термодинамических функций идеальных газов статистическим методом	10	12	30	6	ОПК-1 ОПК-6 ПК-2 ПК-3 ПК-4	ОПК-1.О.13.1 ОПК-6.О.13.1 ПК-2.О.13.1 ПК-3.О.13.1 ПК-4.О.13.1
8	Химическая связь	12	12	-	8	ОПК-1 ОПК-6 ПК-2 ПК-3 ПК-4	ОПК-1.О.13.1 ОПК-6.О.13.1 ПК-2.О.13.1 ПК-3.О.13.1 ПК-4.О.13.1
9	Статистические методы расчета термодинамических функций	10	28	-	20	ПК-3 ПК-4	ПК-3.О.13.1 ПК-4.О.13.1

4.2. Занятия лекционного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	Химическая термодинамика I, II и III начала термодинамики и их применение к химическим процессам. Термохимия. Термодинамические потенциалы.	18	традиционная лекция, лекция- визуализация
2	Химическое равновесие. Константы равновесия. Уравнения изотермы и изобары реакции. Вычисление состава равновесной смеси. Выбор оптимальных условий проведения хим. реакции.	6	традиционная лекция, лекция- визуализация -
3	Фазовые равновесия и растворы неэлектролитов Фазовые равновесия в одно-, двух- и трехкомпонентных системах. Правило фаз Гиббса. Уравнения Клапейрона-Клаузиуса.	18	традиционная лекция, лекция- визуализация
4	Электрохимические системы Строение и свойства растворов электролитов. Равновесия в растворах электролитов. Термодинамика гальванических элементов. Потенциометрия. Электрическая проводимость растворов электролитов	12	традиционная лекция, лекция- визуализация
5	Химическая кинетика и катализ Феноменологическая (формальная) кинетика. Зависимость скорости реакции от температуры. Теории элементарного акта химической реакции. Кинетика цепных и фотохимических реакций. Кинетика реакций в растворах. Кинетика гетерогенных процессов. Кинетика электрохимических процессов. Коррозия. Катализ	18	традиционная лекция, лекция- визуализация
6	Методы изучения строения молекул, основанные на электрических свойствах	4	традиционная лекция, лекция- визуализация

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
7	Оптические и рентгеновские методы нахождения молекулярных констант и использование их для расчета термодинамических функций идеальных газов статистическим методом. Общая характеристика молекулярных спектров.	10	традиционная лекция, лекция-визуализация
8	Химическая связь Типы связей. Кривые потенциальной энергии. Уравнения Ми и Морзе. Уравнение Борна. Цикл Габер-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	традиционная лекция, лекция-визуализация
9	Статистические методы расчета термодинамических функций Вычисление статистических сумм по состояниям для разных видов молекулярного движения. Стат. методы расчета термодинамических функций. Стат. методы расчеты констант равновесия.	10	традиционная лекция, лекция-визуализация

4.3. Занятия семинарского типа.

4.3.1. Семинары, практические занятия.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	Химическая термодинамика I, II и III начала термодинамики и их применение к химическим процессам. Термохимия. Расчет энтальпии, энтропии, энергии Гиббса реакции. Термодинамические потенциалы	18	компьютерная симуляция, активизация творческой деятельности

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
2	Химическое равновесие.	12	компьютерная симуляция, активизация творческой деятельности
	Константы равновесия. Уравнения изотермы и изобары реакции. Вычисление состава равновесной смеси. Выбор оптимальных условий проведения хим. реакции		компьютерная симуляция, активизация творческой деятельности
3	Фазовые равновесия и растворы неэлектролитов 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	компьютерная симуляция, активизация творческой деятельности
4	Электрохимические системы 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	компьютерная симуляция, активизация творческой деятельности
5	Химическая кинетика и катализ 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	компьютерная симуляция, активизация творческой деятельности

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
6	Методы изучения строения молекул, основанные на электрических свойствах Выполнение заданий: расчет электрических характеристик молекул.	4	компьютерная симуляция, активизация творческой деятельности
7	Оптические и рентгеновские методы нахождения молекулярных констант и использование их для расчета термодинамических функций идеальных газов статистическим методом. Общая характеристика молекулярных спектров. Расчеты молекулярных констант, полученных методами молекулярной спектроскопии.	12	компьютерная симуляция, активизация творческой деятельности
8	Химическая связь Типы связей. Кривые потенциальной энергии. Расчет параметров уравнений Ми и Морзе. Уравнение Борна. Цикл Габер-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.	12	компьютерная симуляция, активизация творческой деятельности
9	Статистические методы расчета термодинамических функций Вычисление статистических сумм по состояниям для разных видов молекулярного движения. Стат. методы расчета термодинамических функций. Стат. методы расчеты констант равновесия	28	компьютерная симуляция, активизация творческой деятельности

4.3.2. Лабораторные занятия.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Примечание
1	Определение интегральной теплоты растворения соли	40	метод малых групп
	Определение теплового эффекта химической реакции нейтрализации		
	Определение теплового эффекта химической реакции образования кристаллогидрата		
	Определение теплоемкости жидкости		
3	Определение молярной массы вещества методом криометрии	24	метод малых групп
	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	24	метод малых групп
	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))	44	метод малых групп
	Определение константы скорости реакции второго порядка (например, иодирования ацетона и омыления эфира в кислой среде)		

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Примечание
	Определение кинетических параметров электрохимической реакции (например, реакции восстановления водорода на различных металлах)		
	Определение скорости коррозии методом поляризационных кривых		
6.	Определение состава раствора по удельной рефракции или Определение структурной формулы молекулы по молярной рефракции	18	метод малых групп
	Определение дипольного момента молекулы в жидком состоянии		
7.	Определение длины связи в молекуле из ИК-спектра.	30	метод малых групп
	Определение параметров кристаллической решетки		

4.4. 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 расчету кинетики химической реакции	4	Защита индивидуальных заданий

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
6	Выполнение индивидуального задания по определению дипольного момента молекулы	6	Защита индивидуальных заданий
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 Защита курсовой работы

4.5. Темы индивидуальных заданий

Темы индивидуальных заданий и примеры представлены в Приложение № 1 к рабочей программе дисциплины

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

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме экзамена.

Экзамен 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. 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 ΔG , ΔS , ΔH и константы равновесия реакции, протекающей в гальваническом элементе.
4. *Задача.* Бензол и толуол при смешении образуют раствор, близкий по свойствам к идеальному. При 180С 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. 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 РН_3 по реакции $2\text{РН}_3 = 2\text{Р} + 3\text{Н}_2$ 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% РН_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.
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.: ООО «ТИД «Аз- book», 2009. – 240 с.
3. Практикум по физической химии. Кинетика и катализ. Электрохимия: учеб. Пособие для вузов / А.В. Абраменков: под ред. В.В. Лунина и Е.П. Агеева. – М.: АКАДЕМИЯ, 2012. – 300с.
4. Практикум по физической химии. Термодинамика: учеб. пособие для вузов / Е.П. Агееви др.: под ред. Е.П. Агеева и В.В. Лунина. – М.: АКАДЕМИЯ, 2010. – 220с.
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.
6. Бёккер, Ю.. Спектроскопия / Ю. Беккер; пер. с нем. Л.Н. Казанцевой, под ред. А.А. Пупышева, М.В. Поляковой. – М.: Техносфера, 2009. – 527с.
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.
8. Матузенко, М.Ю. Изучение строения молекул спектральными методами. Теоретические основы. Решение задач: учебное пособие / М.Ю. Матузенко, М.Ю. Зубкова, А.Н. Храмов.- СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2009. – 56с.

б) электронные учебные издания:

1. Афанасьев, Б.Н. Физическая химия: учеб. пособие для вузов / Б.Н. Афанасьев, Ю.П. Акулова. – СПб.: Лань, 2012. – 416 с.(ЭБС «Лань»)
2. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела / В.Г. Цирельсон. – Бином. Лаборатория знаний, 2017 – 522 с. (ЭБС «Лань»)
3. Основы физической химии. Том 1 и 2. Теория и задачи: учебник для вузов / В.В. Еремин [и др.]. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2013. – 590 с. (ЭБС)
4. Физическая химия : учебное пособие / Ю. П. Акулова и [и др.]; СПбГТИ(ТУ). Каф. физ. химии. - СПб. : [б. и.], 2016. - 192 с. (ЭБ)
5. Артемов, А.В. Физическая химия: учебник для учреждений высш. проф. образования / А.В. Артемов. – М.: Академия, 2013. – 288с.(ЭБС)
6. Матузенко, М.Ю. Диаграммы плавокости двухкомпонентных систем: методические указания / М.Ю. Матузенко. – СПб.:СПбГТИ(ТУ), 2013. – 22с.(ЭБ).

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.

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

Основными условиями правильной организации учебного процесса для студентов является:

- плановость в организации учебной работы;
- серьезное отношение к изучению материала;
- постоянный самоконтроль.

На занятия студент должен приходить, имея 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 электронной почты.

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.

Для проведения лекционных и практических занятий используется аудитория, оборудованная средствами оргтехники с лицензионным программным обеспечением и выходом в интернет и на сервер образовательной организации, на 33 посадочных места.

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

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями учебный процесс осуществляется в соответствии с Положением об организации учебного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья СПбГИ(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
ОПК-1	Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	промежуточный
ОПК-2	Способен проводить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их участием	промежуточный
ОПК-4	Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач	промежуточный
ОПК-6	Способен представлять результаты своей работы в устной и письменной форме в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе	промежуточный
ПК-1	Способен выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	промежуточный
ПК-2	Владеет базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	промежуточный
ПК-3.	Владеет системой фундаментальных химических, физических и математических понятий	промежуточный
ПК-4	Способен применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов	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)
ОПК-1.О.13.1 Выполнение физико-химических экспериментов с их анализом и интерпретацией полученных результатов	Знает методы анализа результатов эксперимента	Ответы на вопросы к лабораторным коллоквиумам по темам 1, 3-7	Рассказывает ход выполнения лабораторных работ и физико-химического эксперимента с недочётами	Рассказывает все особенности выполнения лабораторных работ и физико-химического эксперимента	Рассказывает все особенности выполнения лабораторных работ и физико-химического эксперимента с последующим анализом полученных результатов
	Умеет анализировать и интерпретировать результаты эксперимента	Ответы на вопросы к лабораторным коллоквиумам по темам 1, 3-7	Анализирует и интерпретирует результаты лабораторных работ и физико-химического эксперимента с ошибками	Анализирует и интерпретирует лабораторных работ и физико-химического эксперимента с подсказкой преподавателя	Анализирует и интерпретирует лабораторных работ и физико-химического эксперимента
	Владеет методами оценки достоверности полученных результатов физико-химических измерений	Ответы на вопросы к лабораторным коллоквиумам по темам 1, 3-7	Демонстрирует отдельные навыки проведения оценки достоверности полученных результатов лабораторных работ и физико-	Демонстрирует навыки проведения оценки достоверности полученных результатов лабораторных работ и физико-	Демонстрирует полное владение навыками проведения оценки достоверности полученных результатов лабораторных

			химического эксперимента	химического эксперимента после консультации с преподавателем	работ и физико-химического эксперимента
ОПК-2.О.13.1 Проведение эксперимента, включая анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов с соблюдением норм и техники безопасности	Знает методики эксперимента по получению веществ и материалов и их анализа	Ответы на вопросы к экзамену №1-14 темы 6, выполнение индивидуальных заданий по теме 6, ответы на вопросы к лабораторным коллоквиумам по теме 6	Рассказывает методики эксперимента по получению веществ и материалов и анализа их структуры с ошибками	Рассказывает методики эксперимента по получению веществ и материалов и анализа структуры с незначительными ошибками	Рассказывает и сопоставляет методики эксперимента по получению веществ и материалов и анализа их структуры
	Умеет проводить эксперимент по изучению свойств веществ и материалов с соблюдением техники безопасности	Ответы на вопросы к экзамену №1-14 темы 6, выполнение индивидуальных заданий по теме 6, ответы на вопросы к лабораторным коллоквиумам по теме 6	Проводит отдельные стадии эксперимента по изучению свойств веществ и материалов с соблюдением техники безопасности	Проводит эксперимент по изучению свойств веществ и материалов с соблюдением техники безопасности с помощью преподавателя	Проводит самостоятельно эксперимент по изучению свойств веществ и материалов с соблюдением техники безопасности
	Владеет методиками проведения эксперимента по изучению свойств веществ и материалов	Ответы на вопросы к экзамену №1-14 темы 6, выполнение индивидуальных заданий по теме	Демонстрирует частичное владение методиками проведения эксперимента по изучению свойств веществ и	Демонстрирует владение методиками проведения эксперимента по изучению свойств веществ и	Демонстрирует владение методиками проведения эксперимента по изучению свойств веществ и

		6, ответы на вопросы к лабораторным коллоквиумам по теме 6	материалов	материалов с замечаниями	материалов, сопоставляет результаты экспериментов, выполненных по различным методикам
ОПК-4.О.13.1 Планирование, обработка и интерпретация полученных результатов с использованием теоретических знаний и практических навыков	Знает приемы планирования и методы обработки и интерпретации результатов эксперимента	Ответы на вопросы к лабораторным коллоквиумам по темам 1, 3-7 и оформление отчетов лабораторных работ	Излагает методику обработки экспериментальных результатов с ошибками	Излагает методики обработки экспериментальных результатов с незначительными ошибками	Излагает методики обработки экспериментальных результатов, делает выводы о достоверности результатов
	Умеет Формировать полученные результаты в виде таблиц, графиков	Ответы на вопросы к лабораторным коллоквиумам по темам 1, 3-7 и оформление отчетов лабораторных работ	Формирует полученные результаты в виде таблиц, графиков с ошибками в выборе масштаба	Формирует полученные результаты в виде таблиц, не достаточно наглядных графиков	Грамотно формирует полученные результаты в виде таблиц, графиков
	Владет навыками корректной обработки результатов полученных физико-химических величин	Ответы на вопросы к лабораторным коллоквиумам по темам 1, 3-7 и оформление отчетов лабораторных работ	Показывает недостаточно навыков корректной обработки результатов полученных физико-химических	Показывает основные навыки корректной обработки результатов полученных физико-химических величин	Показывает все необходимые навыки корректной обработки результатов полученных физико-химических

		работ	величин		величин
ОПК-6.О.13.1 Представление результатов работы в устной и письменной форме	Знает принятые в профессиональном сообществе нормы представления результатов работы	Оформление и защита отчетов лабораторных работ по темам 1, 3-7	Излагает результаты работ лабораторных работ и физико-химического эксперимента в соответствии с нормами, принятыми в профессиональном сообществе, с ошибками	Излагает результаты работ лабораторных работ и физико-химического эксперимента в соответствии с нормами, принятыми в профессиональном сообществе, с незначительными ошибками и с помощью преподавателя	Свободно излагает результаты работ лабораторных работ и физико-химического эксперимента в соответствии с нормами, принятыми в профессиональном сообществе
	Умеет представлять результаты работы в виде отчетов по лабораторному практикуму по физической химии	Оформление и защита отчетов лабораторных работ по темам 1, 3-7	Представляет с ошибками результаты работы в виде отчетов по лабораторному практикуму по физической химии	Представляет результаты работы в виде отчетов по лабораторному практикуму по физической химии с незначительными замечаниями	Правильно представляет результаты работы в виде отчетов по лабораторному практикуму по физической химии
	Владеет способами представления результатов работы в виде отчетов	Оформление и защита отчетов лабораторных работ по темам 1, 3-7	Оформляет результаты лабораторной работы в виде отчета с ошибками, с помощью преподавателя	Оформляет результаты лабораторной работы в виде отчета с незначительными ошибками	Оформляет результаты лабораторной работы в виде отчета в соответствии с правилами представления результатов
ПК-1.О.13.1 Выполнение	Знает содержание методики выполнения	Ответы на вопросы к	Неуверенно излагает	Излагает основное содержание	Излагает содержание

лабораторных работ по методикам, изложенным в лабораторном практикуме	работы	лабораторным коллоквиумам по темам 1, 3-7	содержание методики выполнения работы	методики выполнения работы	методики выполнения работы в полном объеме
	Умеет выполнять стандартные операции при проведении лабораторных работ по физической химии	Ответы на вопросы к лабораторным коллоквиумам по темам 1, 3-7	Выполняет не все стандартные операции при проведении лабораторных работ по физической химии	Выполняет основные стандартные операции при проведении лабораторных работ по физической химии	Выполняет стандартные операции при проведении лабораторных работ по физической химии в полном объеме
	Владеет навыками оценки погрешности определяемой величины	Ответы на вопросы к лабораторным коллоквиумам по темам 1, 3-7, оформление отчетов лабораторных работ	Показывает с ошибками навыки оценки погрешности определяемой величины	Показывает начальные навыки оценки погрешности определяемой величины	Показывает навыки грамотной оценки погрешности определяемой величины
ПК-2.О.13.1 Использование современной аппаратуры для проведения физико-химических исследований	Знает типы современного оборудования для проведения лабораторных работ	Ответы на вопросы к лабораторным коллоквиумам по темам 1, 3-7	Имеет представление об отдельных типах современного оборудования для проведения лабораторных работ	Имеет представление об основных типах современного оборудования для проведения лабораторных работ	Имеет представление о типах современного оборудования для проведения лабораторных работ в необходимом объеме
	Умеет Определять физико-химические параметры с помощью	Ответы на вопросы к лабораторным	Определяет с ошибками физико-химические	Определяет почти все физико-химические	Определяет все физико-химические параметры с

	измерительного оборудования при выполнении лабораторных работ по физической химии	коллоквиумам по темам 1, 3-7, ответы на вопросы к экзамену № 5,6 темы 1; №9-11 темы 3; №4-15, 22 темы 4; № 20 темы 5	параметры с помощью измерительного оборудования при выполнении лабораторных работ по физической химии	параметры с помощью измерительного оборудования при выполнении лабораторных работ по физической химии	помощью измерительного оборудования при выполнении лабораторных работ по физической химии
	Владеет Стандартными методиками измерений физико-химических величин	Ответы на вопросы к лабораторным коллоквиумам по темам 1, 3-7, ответы на вопросы к экзамену № 5,6 темы 1; №9-11 темы 3; №4-15, 22 темы 4; № 20 темы 5	Описывает некоторые стандартные методики измерений физико-химических величин	Описывает стандартные методики измерений физико-химических величин с помощью преподавателя с незначительными ошибками	Описывает стандартные методики измерений физико-химических величин, сопоставляет их
ПК-3.О.13.1 Знание фундаментальных физических, химических и математических понятий	Знает основные понятия физики, химии и математики	Ответы на вопросы к экзамену №1-4, 7-27 темы 1 и 2; № 1-8 и 12-30 темы 3; № 1-3, 16-21 и 23-25 темы 4; №1-19 и 20-21 темы 5; № 1-14 темы 6 и №1-11 темы 7; выполнение индивидуальных заданий по	Излагает основные понятия физики, химии и математики с ошибками	Излагает основные понятия физики, химии и математики с помощью преподавателя	Излагает основные понятия физики, химии и математики , проводит интегрирование и анализ основных физико-химических уравнений

	Умеет использовать физико-химические понятия	темам 1-7 Ответы на вопросы к экзамену №1-4, 7-27 темы 1 и 2; № 1-8 и 12-30 темы 3; № 1-3, 16-21 и 23-25 темы 4; №1-19 и 20-21 темы 5; № 1-14 темы 6 и №1-11 темы 7; выполнение индивидуальных заданий по темам 1-7	Использует физико-химические понятия для описания процессов с существенными ошибками	Использует физико-химические понятия для описания процессов с несущественными ошибками	Применяет физико-химические уравнения и понятия для нахождения физико-химических свойств веществ
	Владет навыками применения основных физико-химических понятий	Ответы на вопросы к экзамену №1-4, 7-27 темы 1 и 2; № 1-8 и 12-30 темы 3; № 1-3, 16-21 и 23-25 темы 4; №1-19 и 20-21 темы 5; № 1-14 темы 6 и №1-11 темы 7; выполнение индивидуальных заданий по темам 1-7	Применяет физико-химические уравнения и понятия для нахождения физико-химических свойств веществ с ошибками	Применяет физико-химические уравнения и понятия для нахождения физико-химических свойств веществ с небольшими ошибками	Применяет физико-химические уравнения и понятия для нахождения физико-химических свойств веществ , анализирует полученные результаты
ПК-4.О.13.1 Знание основных законов и закономерностей	Знает алгоритм анализа полученных результатов на основе законов и основных закономерностей	Ответы на вопросы к экзамену №1-4, 7-27 темы 1 и 2;	Излагает алгоритмы анализа полученных результатов на	Излагает алгоритмы анализа полученных результатов на	Излагает алгоритмы анализа полученных результатов на

физической химии	физической химии	№ 1-8 и 12-30 темы 3; № 1-3, 16-21 и 23-25 темы 4; №1-19 и 20-21 темы 5; № 1-14 темы 6 и №1-11 темы 7; выполнение индивидуальных заданий по темам 1-7	основе законов и основных закономерностей физической химии с ошибками	основе законов и основных закономерностей физической химии с незначительными ошибками	основе законов и основных закономерностей физической химии, анализирует полученные результаты
	Умеет использовать основные законы физической химии при анализе полученных результатов	Выполнение и защита индивидуальных заданий по темам 1-7	Применяет основные законы физической химии при анализе полученных результатов с ошибками	Использует основные законы физической химии при анализе полученных результатов с небольшими неточностями	Применяет основные законы физической химии при анализе полученных результатов, сопоставляет результаты
	Владеет принципами использования законов физической химии при анализе полученных результатов	Выполнение и защита индивидуальных заданий по темам 1-7	Использует законы физической химии при анализе полученных результатов с ошибками	Использует законы физической химии при анализе полученных результатов с незначительными ошибками, с помощью преподавателя	Использует законы физической химии при анализе полученных результатов, сопоставляет результаты.

Шкала оценивания соответствует СТО СПбГТИ(ТУ):

По дисциплине промежуточная аттестация проводится в форме экзамена (5,6 семестры), шкала оценивания – балльная («отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно»).

3.1. Контрольные вопросы (5 и 6 семестр):

Темы 1 и 2 - Химическая термодинамика и химическое равновесие

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

Тема 3 – Фазовые равновесия и растворы неэлектролитов

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

Тема 4 - Электрохимические системы

20. Расчет pH, pOH, равновесного состава для растворов электролитов различной стехиометрического состава и глубиной процессов ассоциации-диссоциации, комплексообразования и др. Примеры.
21. Формальное и сущностное содержание понятия активности компонентов раствора; взаимосвязь с возможностью протекания химических реакций в растворах.

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

Тема 5- Химическая кинетика и катализ

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

45. Физико-химические основы применения радиоактивных изотопов в схемах контроля и автоматизации технологических процессов для обнаружения скрытых дефектов.
46. Анализ совместного и независимого влияния параметров (температуры давления, объема, состава реагирующей смеси) на скорость химической реакции.

Тема 6. Основы экспериментальных и расчетных методов изучения строения вещества:

47. Вращательный спектр поглощения.
48. Моменты инерции двух- и многоатомных молекул
49. Колебательно-вращательный спектр поглощения.
50. Число и типы колебаний в многоатомных молекулах.
51. Условия активности нормальных колебаний в ИК- и КР-спектрах.
52. Совместное использование колебательно-вращательных ИК-спектров и спектров комбинационного рассеяния для суждения о структуре и свойствах молекул.
53. Электронно-колебательно-вращательные спектры. Происхождение и интерпретация.
54. Изотопный сдвиг в молекулярной спектроскопии.
55. Спектры флуоресценции, фосфоресценции.
56. Оже-спектроскопия.
57. Расчет составляющих статистической суммы по состояниям.
58. Расчет термодинамических функций статистическим методом.

Тема 7. Основы учения о строении вещества:

59. Кривые потенциальной энергии при образовании двух- и многоатомных молекул. Взаимосвязь с основными параметрами химической связи (энергия, длина, направленность, насыщаемость). примеры.
60. Различные подходы к определению электроотрицательностей элементов, применение к оценке степени ионности связи, ее прочности. Примеры.
61. Физико-химическая общность, различия, единый подход к описанию различных типов химической связи (ковалентной, ионной, полярной, металлической, донорно-акцепторной, неполярной, водородной, Ван-дер-ваальсовой).
62. Расчетный аппарат условий гибридизации электронных орбиталей и определение пространственной структуры молекул.
63. Основы математического аппарата метода молекулярных орбиталей.
64. Анализ влияния типа кристаллической решетки на физические и химические свойства вещества. Границы применимости уравнений Борна, Борна-Майера, Капустинского.
65. Главное, орбитальное, магнитное и спиновое квантовые числа как решение уравнения Шредингера для одно- и многоэлектронных атомов и ионов.
66. Диаграммы молекулярных орбиталей гомо- и гетероядерных двухатомных молекул.
67. Молекулярные термы.
68. Методы определения структуры многоатомных молекул.
69. Межчастичные взаимодействия.

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

Темы 1 и 2 - Химическая термодинамика и химическое равновесие

1. Функции процесса и функции состояния. Внутренняя энергия, теплота, работа, законы термодинамики.
2. Работа расширения идеального газа в изотермическом, изобарном и изобарно-изотермическом процессах.
3. Теплота процессов при постоянном объеме и давлении.

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

Тема 3 – Фазовые равновесия и растворы неэлектролитов

1. Правило фаз Гиббса. Понятие "фаза", "составляющее вещества", "число компонентов", "термодинамические степени свободы".
2. Условие термодинамического равновесия между фазами.
3. Вывод, анализ и интегрирование уравнения Клаузиуса-Клапейрона.
4. Диаграммы состояния однокомпонентных систем. Их разбор с помощью правила фаз Гиббса.
5. Идеальные и неидеальные растворы. Закон Рауля.
6. Предельно разбавленные, атермальные, регулярные растворы.

7. Парциальные молярные величины. Уравнения Гиббса-Дюгема.
8. Химический потенциал компонента в идеальном и неидеальном растворах.
9. Вычисления активности растворителя по понижению давления пара над раствором
10. Вычисление активности растворителя по понижению температуры замерзания раствора.
11. Вычисление активности растворителя по осмотическому давлению раствора.
12. Коллигативные свойства растворов и их практическое использование.
13. Растворимость газов в жидкости. Зависимость растворимости от температуры.
14. Растворимость газов в жидкости. Зависимость растворимости от давления и добавки электролита. Уравнение Сеченова.
15. Неограниченно растворимые друг в друге жидкости. Вычисление давления и состава пара над идеальными растворами. Первый закон Гиббса-Коновалова.
16. Диаграммы "общее давление-состав", "температура кипения - состав", "состав раствора - состав пара" для идеальных растворов.
17. Фазовая диаграмма равновесия жидкость – пар. Правило рычага.
18. Виды перегонки: интегральная, дифференциальная, фракционная, ректификация.
19. Азеотропные растворы. Диаграммы равновесия жидкость – пар для азеотропных растворов. Ректификация азеотропных растворов.
20. Ограниченная взаимная растворимость жидкостей. Влияние температуры на растворимость.
21. 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.
22. Давление и состав пара над смесью взаимно-нерастворимых жидкостей. Перегонка с водяным паром.
23. Растворимость твердых веществ в жидкости. Идеальная растворимость. Уравнение Шредера.
24. Диаграммы плавкости двухкомпонентных систем с полной растворимостью в жидком и полной нерастворимостью в твердом состоянии. Кривые охлаждения.
25. Диаграммы плавкости двухкомпонентных систем с полной растворимостью в жидком и твердом состоянии. Виды твердых растворов.
26. Диаграммы состояния двухкомпонентных систем с полной растворимостью в жидком и ограниченной растворимостью в твердом состоянии. Кривые охлаждения.
27. Диаграммы плавкости двухкомпонентных систем, образующих химические соединения, плавящиеся без разложения и с разложением.
28. Диаграммы состояния тройных жидких систем с ограниченной взаимной растворимостью
29. Распределение растворенного вещества между двумя жидкими фазами. Экстрагирование.
30. Диаграммы плавкости трехкомпонентных систем.

Тема 4 - Электрохимические системы

1. Коллигативные свойства растворов электролитов. Изотонический и осмотический коэффициент.
2. Строение растворов сильных электролитов. Основы электростатической теории растворов сильных электролитов Дебая и Хюккеля.
3. Уравнение для расчета средних ионных коэффициентов активности (I, II и III приближения теории Дебая и Хюккеля).
4. Равновесие в растворах электролитов. Термодинамические и практические константы ионных равновесий.

5. Электрохимический потенциал. Возникновение скачка потенциала и двойного электрического слоя на границе раздела металл – раствор электролита.
6. Водородная шкала электродных потенциалов.
7. Уравнение Нернста для равновесного потенциала. Стандартный электродный потенциал.
8. Электроды I рода. Примеры. Электродные реакции. Расчет равновесных потенциалов.
9. Электроды II рода. Примеры. Электродные реакции. Расчет равновесных потенциалов.
10. Окислительно-восстановительные электроды. Примеры. Электродные реакции. Расчет равновесных потенциалов.
11. Ионообменные электроды. Стекланный электрод.
12. Концентрационные гальванические элементы. Расчет ЭДС
13. Химические гальванические элементы. Расчет ЭДС.
14. Гальванические элементы с переносом и без переноса. Использование гальванических элементов без переноса для экспериментального определения средних ионных активностей.
15. Использование стандартных потенциалов для определения направления окислительно-восстановительных реакций.
16. Использование стандартных потенциалов для определения направления электрохимических реакций.
17. Определение термодинамических параметров химических реакций (ΔH , ΔS , ΔG), идущих в гальваническом элементе.
18. Одноразовые химические источники тока.
19. Многозарядные химические источники тока (аккумуляторы).
20. Удельная, молекулярная и эквивалентная проводимость. Связь электрической проводимости с подвижностями ионов.
21. Зависимость электрической проводимости от температуры, природы электролита и растворителя.
22. Зависимость удельной электропроводности от концентрации для слабого и сильного электролитов.
23. Зависимость эквивалентной проводимости сильных электролитов от концентрации. Основные положения теории Дебая-Хюккеля-Онзагера.
24. Практическое использование измерений электрической проводимости.
25. Числа переноса, их использование для определения электрической проводимости отдельных ионов.

Тема 5 - Химическая кинетика и катализ

1. Скорость реакции для гомогенной и гетерогенной реакции. Кинетическое уравнение. Молекулярность и порядок гомогенной реакции. Стадийное протекание реакций.
2. Кинетическая кривая. Методы определения порядка реакции.
3. Реакции 1, 2 и 3 порядка. Выражение для константы скорости и периода полупревращения.
4. Сложные реакции: двухсторонние (обратимые) и параллельные.
5. Сложные реакции: последовательные и сопряженные.
6. Метод квазистационарных концентраций. Механизм мономолекулярных реакций.
7. Зависимость скорости гомогенной химической реакции от температуры. Уравнение Аррениуса.
8. Стадии гетерогенного процесса. Диффузия в газах, жидкостях и твердых телах. 1 и 2 законы Фика.
9. Влияние температуры на гетерогенный процесс.
10. Влияние перемешивания на режим гетерогенного процесса.

11. Теория активных соударений. Основные допущения. Выражение для предэкспоненциального множителя в уравнении Аррениуса. Стерический фактор.
12. Понятие активированного комплекса. Выражение константы скорости по методу переходного состояния.
13. Сопоставление уравнений теории активных соударений и теории переходного состояния. Недостатки теорий.
14. Влияние растворителя на скорость реакций в растворах. Гомо- и гетеролитические реакции.
15. Гетеролитические реакции. Влияние ионной силы раствора и зарядов реагирующих частиц на скорость процесса.
16. Первичный и вторичный солевые эффекты.
17. Особенности цепных реакций. Возникновение, развитие и обрыв цепей. Тепловой и цепной механизмы воспламенения.
18. Особенности протекания фотохимических реакций. Выражение для константы скорости фотохимической реакции. Примеры фотохимических реакций.
19. Общие свойства катализаторов. Гомогенный и гетерогенный катализ. Влияние катализаторов на предэкспоненциальный множитель и энергию активации в уравнении Аррениуса.
20. Гомогенный катализ. Кислотно-основной катализ.
21. Адсорбция и гетерогенный катализ. Изотерма и изобара адсорбции. Стадии гетерогенного катализа и влияние температуры. Теории гетерогенного катализа.
22. Кинетика ферментативных реакций, катализ и кинетика реакций с иммобилизованными ферментами

Тема 6 - Основы экспериментальных и расчетных методов изучения строения вещества

1. Общая характеристика молекулярных спектров.
2. Вращательные спектры. Определение момента инерции и равновесного межъядерного расстояния для двухвалентных и линейных многоатомных молекул из спектральных данных.
3. Энергия колебательного движения двухатомной молекулы в приближении гармонического и ангармонического осциллятора.
4. Определение собственной частоты и коэффициента ангармоничности из колебательного спектра поглощения.
5. Определение энергии связи из колебательного спектра поглощения.
6. Число и типы нормальных колебаний многоатомных молекул. Характеристические частоты.
7. Вращательно-колебательные спектры поглощения двухатомных молекул P-, R- и Q-ветви, их происхождение.
8. Электронно-колебательно-вращательные спектры. Принцип Франка-Кондона.
9. Определение энергии диссоциации из электронно-колебательно-вращательных спектров.
10. Спектры комбинационного рассеяния, сопоставление их с ИК-спектрами.
11. Фотоэлектронная спектроскопия. Определение потенциалов ионизации.
12. Поляризация молекул в постоянном и переменном электрических полях. Уравнения Клаузиуса-Мосотти, Дебая и Лоренц-Лорентца.
13. Использование молекулярной рефракции и дипольных моментов для определения строения молекул.
14. Методы определения дипольных моментов. Определение радиуса молекулы.

Тема 7 - Основы учения о строении вещества:

1. Типы химических связей.

2. Использование электроотрицательности атомов для суждения о степени ионности связи.
3. Вычисление энергии связи в индивидуальной газовой молекуле и ионном кристалле.
4. Основные понятия и приближения квантовой химии. Приближение Шредингера, адиабатическое приближение, одноэлектронное приближение. Метод самосогласованного поля Хартри-Фока.
5. Основы метода молекулярных орбиталей (МО). Вариационный принцип. Связывающие и разрыхляющие молекулярные орбитали на примере молекулы H_2^+ .
6. Основные требования, предъявляемые к атомным орбиталям (АО) при составлении МО по методу МОЛКАО.
7. Классификация молекулярных орбиталей. Форма граничных поверхностей МО. Образование молекулярных орбиталей в гомоядерных молекулах.
8. Образование МО в гетероядерных молекулах (CO , HF).
9. Строение многоатомных молекул в рамках методов МО ЛКАО и ВС. Гибридизация.
10. Метод Хюккеля и его применение к сопряженным системам. Молекулярные диаграммы.
11. Межчастичные взаимодействия.

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

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 298 К и стандартном давлении.
3. Рассчитайте работу (в кДж), совершаемую в реакции A против внешнего давления при $p = \text{const}$ и $T = 298 \text{ K}$.
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 (таблица 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 ξ в реакции A при температуре T и атмосферном давлении при условии, что исходные вещества взяты в стехиометрических количествах.

13. Определите глубину превращения ξ в реакции A при температуре T и атмосферном давлении при условии, что исходные вещества взяты в количествах, указанных в таблице 1.2.

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 Кирхгофа 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.

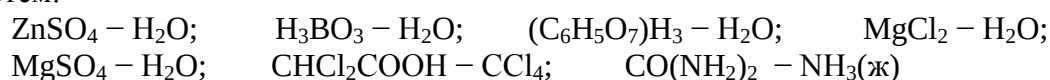
Таблица 2.2 – Варианты заданий

Вар.	Состав раствора	$t, ^\circ\text{C}$	$p_{0,1}, \text{кПа}$	Подвариант							
				1		2		3		4	
				$m,$ 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	$m,$ моль/кг H_2O	$p^{\text{эксп.}},$ кПа
1	$\text{H}_2\text{SO}_4 - \text{H}_2\text{O}$	25	3,1672	0,100	3,1562	0,200	3,2370	0,300	3,1338	0,500	3,0046
2	$\text{CaCl}_2 - \text{H}_2\text{O}$	40	7,3742	0,400	7,2191	0,800	7,0531	1,200	6,8235	1,600	6,6575
3...	$\text{NaI} - \text{H}_2\text{O}$	25	3,1672	0,500	3,1179	1,500	3,0046	2,000	2,9347	0,400	3,0046

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	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$	H_2O	0,6206	100	0,248	2,3760	100	0,248
2	CCl_3COOH	H_2O	1,961	120	0,322	3,268	200	0,322
3	LiBr	H_2O	0,432	100	0,176	6,48	100	0,176
...								

Таблица 2.4 – Свойства растворителей

Растворитель	H_2O	C_6H_6	CH_3COOH	$\text{NH}_3(\text{ж})$	CCl_4
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:

2. При какой температуре закипит жидкость, содержащая a % вещества **A**.

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

Таблица 2.5 – Варианты заданий

Вариант	Система $A-B$	Масса исходной жидкости m , кг	Состав исходной жидкости и температура					
			Подварианты					
			1		2		3	
			a_A , %	t , °C	a_A , %	t , °C	a_A , %	t , °C
1	$H_2O - C_4H_8O_2$	2,0	80	92	90	96	75	90
2	$CH_3OH - C_2H_4Cl_2$	0,5	30	68	15	70	25	67
3...	$CH_3CN - H_2O$	0,8	40	80	10	90	20	84

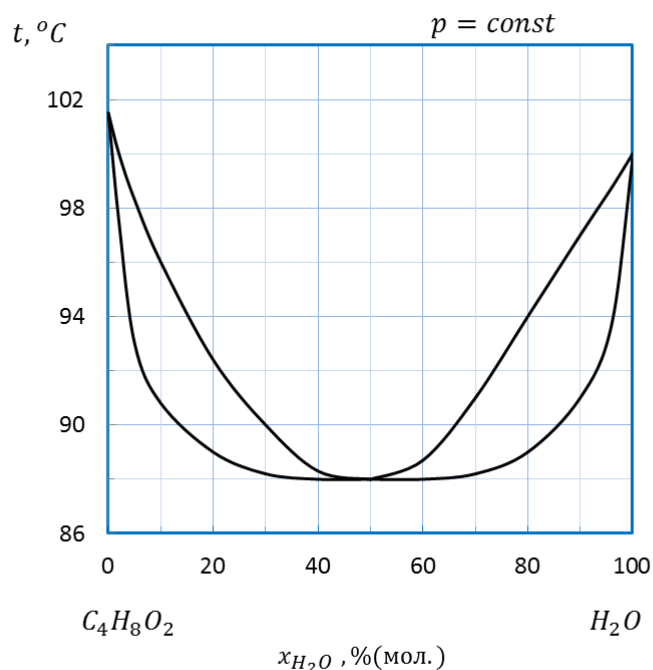


Диаграмма состояния температура кипения – состав системы
 $H_2O - C_4H_8O_2$ (1,4-диоксан - вода)

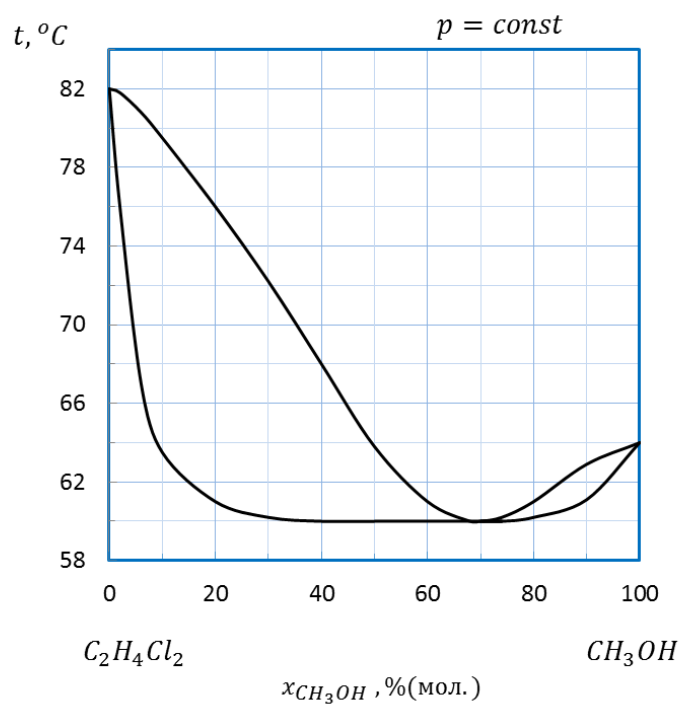


Диаграмма состояния температура кипения – состав системы
 $CH_3OH - C_2H_4Cl_2$

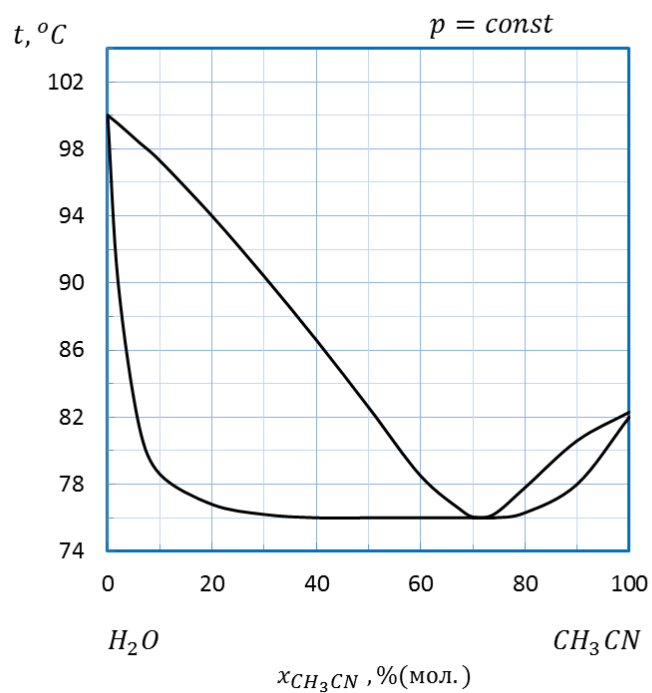


Диаграмма состояния температура кипения – состав системы
 $CH_3CN - H_2O$

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 изменяется 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	$\text{Mg} - \text{Cu}$	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	$\text{Cr} - \text{Sn}$	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...	$\text{Cd} - \text{Cu}$	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

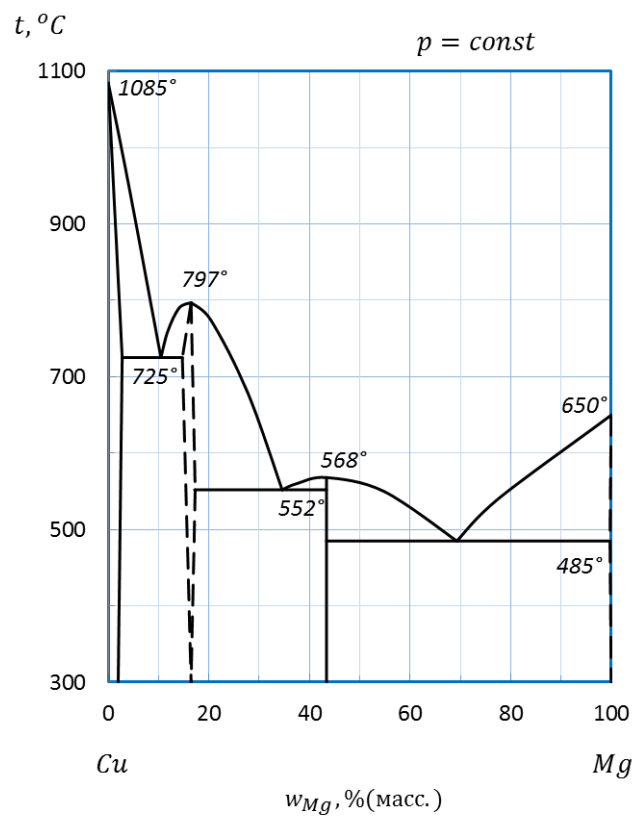


Диаграмма состояния системы Mg – Cu

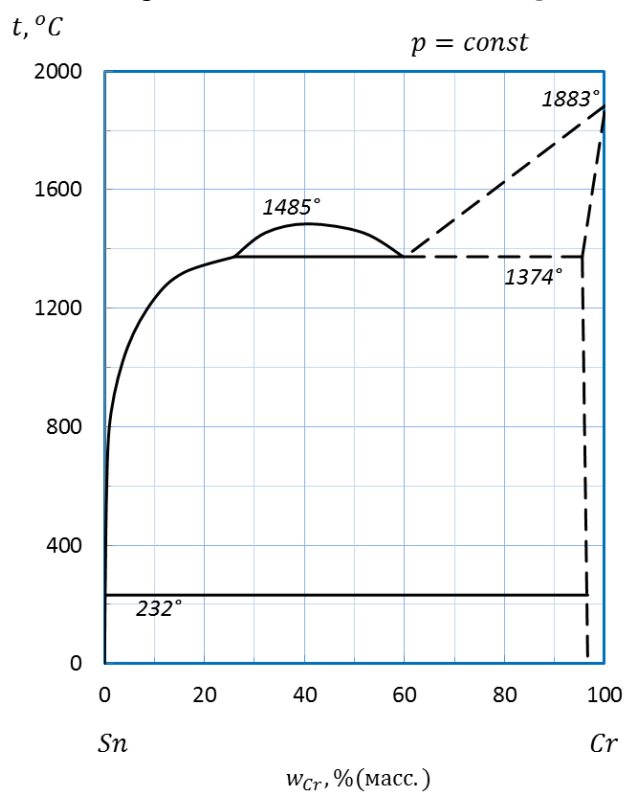


Диаграмма состояния системы Cr – Sn

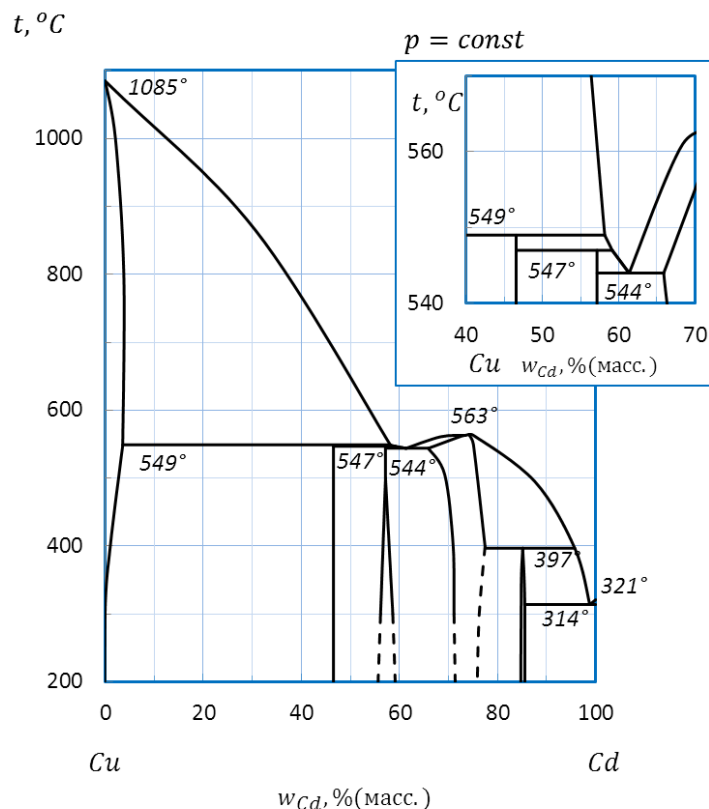


Диаграмма состояния системы Cd – Cu

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 A
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 H_2O	Подвариант					
		1	2	3	4	5	6
1, 2, 3...	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	$\left(\frac{\partial E^0}{\partial T}\right)_p$, 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...	278	288	308	318	328	338

Задание. «Электрическая проводимость растворов электролитов»

Используя величину удельного сопротивления ρ раствора при температуре 25°C электролита **A** заданной концентрации c (таблица 3.5), рассчитать степень, константу диссоциации и pH раствора.

Таблица 3.5 – Варианты заданий

Вариант	Электролит А	Подвариант							
		1		2		3		4	
		$c \cdot 10^3$, 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	$c \cdot 10^3$, моль/л	$\rho \cdot 10^{-2}$, Ом·м
1	Изомасляная кислота*	1,00	2,370	1,47	1,934	1,67	1,805	2,00	1,934
2	Масляная кислота	1,04	2,278	1,35	1,976	1,72	1,736	2,38	1,934
3	Муравьиная кислота	1,11	0,655	1,39	0,569	1,85	0,483	2,27	0,569

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 ΔG^0 , ΔH^0 , ΔS^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 **В**, 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
$t \cdot 10^{-3}$, с	Вариант 2 Реакция: $2\text{F}_2\text{O} = 2\text{F}_2 + \text{O}_2$; $t_1 = 3 \cdot 10^3$ с					
	$T = 543$ К	$T = 527$ К	$T = 580$ К	$T = 562$ К	$T = 545$ К	$T = 573$ К
0	1,0001	1,0001	1,0000	1,0001	1,0000	1,0000
1,2	0,9354	0,9778	0,5902	0,8084	0,9263	0,6822
2,4	0,8796	0,9558	0,4189	0,6782	0,8623	0,5176
6	0,7445	0,8965	0,2236	0,4574	0,7153	0,3006
12	0,5939	0,8121	0,1257	0,2964	0,5568	0,1767
24	0,4220	0,6838	0,0672	0,1740	0,3851	0,0970
t , с	Вариант 3 Реакция: $2\text{N}_2\text{O} = 2\text{N}_2 + \text{O}_2$; $t_1 = 200$ с					
	$T = 938$ К	$T = 880$ К	$T = 870$ К	$T = 897$ К	$T = 904$ К	$T = 920$ К
0	154,00	154,00	154,00	154,00	154,00	154,00
30	145,59	152,97	153,29	152,13	151,64	149,98
60	137,38	151,96	152,57	150,28	149,30	146,09
120	122,28	149,91	151,14	146,63	144,72	138,53
240	96,99	145,89	148,26	139,63	135,99	124,65
300	86,40	143,95	146,91	136,22	131,81	118,21

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 γ 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 ΔT (таблица 6.2).

Таблица 6.2 – Варианты заданий

Вариант	T_1 , К	k_1	T_2 , К	k_2	Температура 1		
					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	$1,702 \cdot 10^{-5}$ с ⁻¹	783	$4,635 \cdot 10^{-6}$ 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 – Основы экспериментальных и расчетных методов изучения строения вещества

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		4	
		$t, ^\circ\text{C}$	$P_m \cdot 10^6, \text{ м}^3/\text{моль}$	$t, ^\circ\text{C}$	$P_m \cdot 10^6, \text{ м}^3/\text{моль}$	$t, ^\circ\text{C}$	$P_m \cdot 10^6, \text{ м}^3/\text{моль}$	$t, ^\circ\text{C}$	$P_m \cdot 10^6, \text{ м}^3/\text{моль}$
1	Бромбензол	160	72.82	170	72.00	180	71.15	190	70.00
2	Хлорбензол	140	74.16	150	73.17	160	72.23	135	74.00
3	Фенол	185	53.96	190	53.51	200	52.97	205	52.00

Контрольные вопросы к теме 6 (Электрические свойства)

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

Задание «Вращательные спектры двухатомных молекул»

1. Напишите квантово-механическое уравнение для расчета энергии вращательного движения двухатомной молекулы как жесткого ротатора.
2. Выведите уравнение для расчета изменения энергии вращения двухатомной молекулы как жесткого ротатора при переходе ее на соседний, более высокий квантовый уровень $\Delta E_{\text{вр.}} = f(j)$.
3. Выведите уравнение зависимости волнового числа вращательных линий в спектре поглощения двухатомной молекулы от вращательного квантового числа.
4. Выведите уравнение для расчета разности волновых чисел соседних линий во вращательном спектре поглощения двухатомной молекулы.
5. Рассчитайте вращательную постоянную B_e (в см^{-1} и м^{-1}) двухатомной молекулы А по волновым числам двух соседних линий в длинноволновой инфракрасной области вращательного спектра поглощения молекулы (см. таблицу 4.3).
6. Определите энергию вращения молекулы А 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 А.
11. Рассчитайте приведенную массу μ (кг) молекулы А.
12. Вычислите равновесное межъядерное расстояние r_e^{O} (Å) молекулы А. 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 μ' (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 <i>A</i>	Под вариант	$\nu_{j \rightarrow j+1} \cdot 10^{-2},$ м ⁻¹		<i>j</i>	Молекула <i>B</i>
1	LiH	1	60.12	75.15	7	Li ² H
		2	180.36	195.39	9	⁸ LiH
		3	195.39	210.42	11	⁶ Li ³ H
		4	105.21	120.24	8	Li ³ H
		5	120.24	135.27	6	⁶ LiH
		6	90.18	105.21	4	⁶ Li ² H
2	BCl	1	4.104	5.472	5	B ³⁷ Cl
		2	8.208	9.576	8	¹⁰ BCl
		3	9.576	10.944	9	B ³⁷ Cl
		4	10.944	12.312	4	¹⁰ B ³⁷ Cl
		5	12.312	13.68	10	¹⁰ BCl
		6	17.784	19.152	6	B ³⁷ Cl
3	BeH	1	103.15	123.78	10	Be ² H
		2	82.52	103.15	8	Be ³ H
		3	226.93	247.56	6	⁵ BeH
		4	247.56	268.19	4	¹¹ BeH
		5	185.67	206.3	7	¹³ BeH
		6	206.3	226.93	3	¹⁶ 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 (ν_0), первому обертому (ν_1'), второму обертому (ν_2') или третьему обертому (ν_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 А (ν_0 , ν_1 , ν_2 или ν_3).

3.5. Определите энергию колебательного движения молекулы А 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 А.

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

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

3.10. Вычертите график зависимости $E_{\text{кол}} = f(\nu)$, выбрав 3-4 значения квантового числа ν 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 А.

3.13. Вычислите волновое число собственных колебаний изотопозамещенной молекулы В.

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

Таблица 4.4 – Варианты заданий

Вариант	Молекула А	Под-вариант	$\nu_0 \cdot 10^{-2}$, м ⁻¹	$\nu_1 \cdot 10^{-2}$, м ⁻¹	$\nu_2 \cdot 10^{-2}$, м ⁻¹	$\nu_3 \cdot 10^{-2}$, м ⁻¹	Молекула В
1	HI	1	2230	4380	-	-	² HI
		2	2230	-	6450	-	³ HI
		3	2230	-	-	8440	² H ¹²⁹ I
		4	-	4380	6450	-	³ H ¹³¹ I
		5	-	4380	-	8440	H ¹²⁹ I
		6	-	-	6450	8440	H ¹³¹ I
2	HF	1	3962	-	11345		² HF
		2	3962			14765	³ H ¹⁸ F
		3	3962	7744			² H ¹⁸ F
		4		7744	11345		³ HF
		5		7744		14765	H ¹⁸ F
		6			11345	14765	² HF
3	HCl	1	2885	-	8339		² HCl
		2	2885	5664			³ HCl
		3	2885			10907	H ³⁷ Cl
		4		5664	8338		³ HCl
		5		5664		10907	² H ³⁷ Cl
		6			8338	10907	³ H ³⁷ Cl

Контрольные вопросы к теме 6 (Оптические свойства)

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?

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_2	1300	500	700	900	1200	1800
2	PCl_3	800	500	600	700	900	1000
3	C_2H_2	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 $1,0132 \cdot 10^5$ 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 А при заданных параметрах состояния.
7. Определите логарифм вращательной суммы по состояниям для вещества А при заданных параметрах состояния. Момент инерции возьмите из справочника.
8. Определите логарифм колебательной суммы по состояниям для вещества А при заданных параметрах состояния. Волновое число собственных колебаний возьмите из справочника.
9. Определите логарифм электронной суммы по состояниям для вещества А при заданных параметрах состояния. Терм основного состояния возьмите из справочника.
10. Определите логарифм стандартной полной суммы по состояниям для вещества А.
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 ($H-H_0$)_T с вещества А (кДж/моль) при температуре T , К.
14. Напишите уравнение, связывающее изобарную теплоемкость с суммой по состояниям.
15. Определите изобарную теплоемкость вещества А C_p^0 [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 А S_T^0 [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 А [Дж/(моль·К)] при температуре T , К. Сравните полученное значение со справочными данными.

Вариант	Молекула А	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 ΔH_0^0 .

2. На основании справочных значений приведенной энергии Гиббса для веществ, участвующих в реакции А, определите $\Delta((G^0-H_0^0)/T)_T$ (Дж/К) при протекании реакции А при температуре T .

3. На основании справочных значений $(H^0-H_0^0)_{298}$ для веществ, участвующих в реакции А, и теплового эффекта реакции А при 298 К определите тепловой эффект гипотетической реакции, протекающей при абсолютном нуле в идеальном газообразном состоянии, ΔH_0^0 (кДж).

4. Вычислите ΔG_T^0 (кДж) при протекании реакции А.

5. Вычислите $\ln K_p$ реакции А при температуре T .

6. Вычислите K_p реакции А 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 А	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 6 (Элементы статистической термодинамики)

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?

Тема 7 - Основы учения о строении вещества

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⁺?
10. Как изменится энергия связи и равновесное межъядерное расстояние, если молекулу АВ перевести в состояние иона АВ⁻?

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

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 топочимических 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 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 СТП СТО СПбГТИ(ТУ) 016-2015. КС УКВД Порядок проведения зачетов и экзаменов.

По дисциплине промежуточная аттестация проводится в форме экзамена.

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