

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 05.08.2024 15:14:59
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
27.06.2024 г.

Рабочая программа дисциплины
ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ
Направление подготовки
05.03.06
Экология и природопользование
Направленность образовательной программы
Экология и природопользование
Квалификация
Бакалавр
Форма обучения
Очная

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

Санкт-Петербург
2024

Б1.О.15

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Должность разработчика	Подпись	Ученое звание, фамилия, инициалы
Доцент каф. физической химии		Доцент Матузенко М. Ю.
Доцент каф. физической химии		Доцент Акулова Ю.П.

Рабочая программа дисциплины «Физическая химия» обсуждена на заседании кафедры физической химии
протокол от 13.06.2024 № 7

Заведующий кафедрой

С. Г.Изотова

Одобрено учебно-методической комиссией факультета химии веществ и материалов
протокол от « 21.06.2024 № 9

Председатель

С. Г. Изотова

СОГЛАСОВАНО

Руководитель направления подготовки		И.В. Шугалей
Директор библиотеки		Т.Н. Старостенко
Начальник методического отдела учебно-методического управления		М.З.Труханович
Начальник учебно-методического управления		С.Н. Денисенко

СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной дисциплины.....	4
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.....	6
3. Объем дисциплины.....	6
4. Содержание дисциплины	7
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.....	7
4.2. Занятия лекционного типа.....	8
4.3. Занятия семинарского типа.....	10
4.3.1. Семинары, практические занятия	10
4.3.2. Занятия лабораторного типа	11
4.4. Самостоятельная работа обучающихся	12
4.5. Темы индивидуальных заданий	14
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.....	15
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.....	16
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.....	17
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)
<p>ОПК-1 Способен применять базовые знания фундаментальных разделов наук о Земле, естественно-научного и математического циклов при решении задач в области экологии и природопользования</p>	<p>ОПК-1.1. использование законов термодинамики, химической кинетики, учения о растворах при решении экологических задач</p>	<p>Знать: теоретические основы термодинамики, химической кинетики, учения о растворах, особенности высокомолекулярного строения материи, методики проведения экспериментальных исследований и испытаний, способы представления полученных экспериментальных результатов</p> <p>Уметь: -применять теоретические основы термодинамики, химической кинетики, учения о растворах, особенности высокомолекулярного строения материи при решении экологических задач</p> <p>Владеть: - методами термодинамических расчетов, кинетического анализа, исследования растворов и макромолекул, экспериментальными методами исследования и испытания, наблюдения и измерения, обработки и интерпретации экспериментальных данных, применяя математические, физические, физико-химические, химические методы</p>

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина относится к обязательной части Блока 1 «Дисциплины» образовательной программы бакалавриата (Б1.О.15) Изучается в очной форме обучения – на третьем курсе, в пятом и шестом семестрах.

В методическом плане дисциплина опирается на знания, полученные студентами ранее при изучении неорганической, органической химии, математики и физики. Полученные в процессе изучения дисциплины «Физическая химия» знания, умения и навыки могут быть использованы. Полученные в процессе изучения дисциплины «Физическая химия» знания, умения, навыки могут быть использованы в научно-исследовательской работе специалиста и при выполнении выпускной квалификационной работы.

3. Объем дисциплины.

Вид учебной работы	Всего, ЗЕ/академ. часов
Общая трудоемкость дисциплины (зачетных единиц/ академических часов)	8/ 288
Контактная работа с преподавателем:	178
занятия лекционного типа	68
занятия семинарского типа, в т.ч.	102
семинары, практические занятия	34
лабораторные работы	68
курсовое проектирование (КР или КП)	-
КСР	8
другие виды контактной работы	-
Самостоятельная работа	56
Форма текущего контроля (Кр, реферат, РГР, эссе)	Индивидуальные задания, Кр
Форма промежуточной аттестации (КР, КП, зачет , экзамен)	2 экзамена/54

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	8	4	12	10	ОПК-1	ОПК-1.1
2	Химическое равновесие	4	4		8	ОПК-1	ОПК-1.1
3	Фазовые равновесия и растворы неэлектролитов	12	8	16	10	ОПК-1	ОПК-1.1
4	Электрохимические системы	12	4	16	10	ОПК-1	ОПК-1.1
5	Методы изучения строения молекул, основанные на электрических свойствах	2	2	8	6	ОПК-1	ОПК-1.1
6	Оптические методы изучения строения вещества	18	8	4	6	ОПК-2	ОПК-1.1
7	Химическая кинетика и катализ	12	4	12	6	ОПК-1	ОПК-1.1

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.	8	традиционная лекция, лекция-визуализация
2	Химическое равновесие. Константы равновесия. Уравнения изотермы и изобары реакции. Вычисление состава равновесной смеси. Выбор оптимальных условий проведения хим. реакции.	4	традиционная лекция, лекция-визуализация
3	Фазовые равновесия и растворы неэлектролитов Фазовые равновесия в одно-, двух- и трехкомпонентных системах. Правило фаз Гиббса. Уравнения Клапейрона-Клаузиуса. Идеальные и неидеальные растворы. Законы Рауля и Генри. Диаграммы «состав-свойство». Разделение растворов. Экстрагирование.	12	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	Методы изучения строения молекул, основанные на электрических свойствах	2	традиционная лекция, лекция-визуализация

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
6	<p>Оптические методы изучения строения вещества Оптические и рентгеновские методы нахождения молекулярных констант и использование их для расчета термодинамических функций идеальных газов статистическим методом Общая характеристика молекулярных спектров. Использование закона Ламберта-Бугера-Бера при изучении спектров. Энергия вращения двухатомной молекулы в приближении жесткого ротатора Энергия колебательного движения двухатомной молекулы в приближении гармонического и ангармонического осциллятора. Число и типы нормальных колебаний многоатомных молекул. .Электронно-колебательно-вращательные спектры. Принцип Франка-Кондона. Диссоциация. Определение энергии химической связи по молекулярным спектрам. Спектры комбинационного рассеяния, сопоставление их с ИК-спектрами. Статистическая сумма по состояниям. Расчет термодинамических функций и теплоемкости идеальных газов статистическим методом.</p>	18	традиционная лекция, лекция-визуализация
7.	<p>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.</p>	12	традиционная лекция, лекция-визуализация

4.3. Занятия семинарского типа.

4.3.1. Семинары, практические занятия.

Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
Применение первого начала термодинамики для расчета тепловых эффектов химических реакций. Закон Гесса и следствия из него. Закон Кирхгоффа.	2	занятие–конференция, активизация творческой деятельности, регламентированная дискуссия
Применение второго начала термодинамики к химическим процессам. Энтропия. Термодинамические потенциалы.	2	занятие–конференция, активизация творческой деятельности, регламентированная дискуссия
Термодинамические и практические константы равновесия и их применение для расчета глубины и степени превращения, равновесного выхода и равновесного состава химической реакции	2	занятие – онференция, активизация творческой деятельности, регламентированная дискуссия
Контрольная работа	2	
Использование уравнения Клаузиуса-Клапейрона для расчета температуры кипения и теплоты испарения вещества	2	занятие– конференция, активизация творческой деятельности, регламентированная дискуссия
Анализ диаграмм равновесия жидкость ↔ пар и кристаллы ↔ жидкость	4	занятие – конференция, активизация творческой деятельности, регламентированная дискуссия
Теоретический коллоквиум	2	

Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
Гальванические элементы. Расчет потенциалов электродов. Вычисление ЭДС и гальванических элементов. Термодинамика гальванических элементов	2	занятие– конференция, активизация творческой деятельности, регламентированная дискуссия
Электрическая проводимость растворов электролитов от концентрации. Расчет степени и константы диссоциации, рН раствора слабого электролита по электрической проводимости.	2	занятие– конференция, активизация творческой деятельности, регламентированная дискуссия
Методы определения порядка и константы скорости химической реакции. Вычисление энергии активации и температурного коэффициента химической реакции.	2	занятие– конференция, активизация творческой деятельности, регламентированная дискуссия
Контрольная работа.	2	
Использование уравнений Клаузиуса-Мосотти, Дебая, Лорентц-Лоренца для расчета молярной рефракции и дипольных моментов вещества	2	занятие– конференция, активизация творческой деятельности, регламентированная дискуссия
Определение молекулярных констант и энергии связи по спектральным данным Расчет теплоемкости идеального газа методом статистической термодинамики	6	занятие– конференция, активизация творческой деятельности, регламентированная дискуссия
Контрольная работа	2	

4.3.2. Лабораторные занятия.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Примечание
1	Вступительная беседа. Техника безопасности. Определение теплоты растворения соли (или теплового эффекта химической реакции)	8	метод малых групп
1	Определение теплоемкости жидкости	4	метод малых групп

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

4.4. Самостоятельная работа обучающихся.

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
1.	Расчет тепловых эффектов и изменения термодинамических функций в химическом процессе с использованием таблиц стандартных термодинамических величин. Изучение калориметрических методов исследования (термохимии).	10	Проверка индивидуальных расчетных заданий. Проверка отчетов по лабораторным работам 2
2.	Расчет термодинамических и практических констант равновесия, глубины превращения химической реакции, степени превращения исходных реагентов и выхода продуктов. Анализ влияния термодинамических параметров и концентрации реагентов на равновесных выход химической реакции.	8	Проверка индивидуальных расчетных заданий. Проверка контрольной работы
3	Методы исследования свойств растворов неэлектролитов и их практическое применение. Практическое применение методов физико-химического анализа Курнакова и правила фаз Гиббса. Анализ диаграмм состояния одно- и многокомпонентных систем. Экспериментальные методы построения диаграмм состояния одно- и двухкомпонентных систем.	10	Проверка индивидуальных расчетных заданий. Проверка отчетов по лабораторным работам.
4.	Расчет потенциалов электродов различных видов. Расчет ЭДС гальванических элементов и термодинамических параметров химической реакции, протекающей в гальваническом элементе. Практическое применение гальванических элементов (химические источники тока) и потенциометрии. Анализ влияния различных факторов (концентрации раствора, температуры, напряженности и частоты электрического поля) на электрическую проводимость растворов сильных и слабых электролитов. Практическое применение кондуктометрии.	10	Проверка индивидуального расчетного задания. Проверка отчетов по лабораторным работам.

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
5	Методы изучения строения молекул, основанные на электрических свойствах .Работы Дебая.	6	Проверка индивидуального расчетного задания. Проверка отчетов по лабораторным работам.
6.	Оптические методы нахождения молекулярных констант.	6	Проверка индивидуального расчетного задания. Проверка отчетов по лабораторным работам. Проверка контрольной
7.	Факторы, влияющие на скорость химических реакций. Расчет кинетических параметров химической реакции (порядка, константы скорости, времени полупревращения, энергии активации и температурного коэффициента) по экспериментальным данным. Оптические методы нахождения молекулярных констант.	6	Проверка индивидуальных расчетных заданий. Проверка отчетов по лабораторным работам. Проверка контрольной работы

4.5. Темы индивидуальных заданий.

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

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

Индивидуальное задание №3 — Уравнение Клапейрона -Клаузиуса

Индивидуальное задание №4 - Идеальные и неидеальные растворы

Индивидуальное задание №5- Коллигативные свойства растворов

Индивидуальное задание №6 — Анализ диаграмм равновесия жидкость - пар

Индивидуальное задание №7 — Анализ диаграмм плавкости

Индивидуальное задание №8 – Электродные потенциалы и ЭДС гальванических элементов

Индивидуальное задание №9 – Электрическая проводимость растворов электролитов

Индивидуальное задание №10- Электрические свойства молекул

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

Индивидуальное задание №14 – Расчет кинетических параметров гомогенных химических реакций

Индивидуальное задание №15 – Влияние температуры на скорость химических реакций

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

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

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

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме экзамена.

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

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

В приложении приводится перечень вопросов к экзамену по всем разделам курса.

Пример варианта экзаменационного билета:

Вариант № 1

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

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1

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. Афанасьев, Б.Н. Физическая химия: учеб. пособие для вузов / Б.Н. Афанасьев, Ю.П. Акулова. – Санкт - Петербург: Лань, 2012. – 464 с.- ISBN 978-5-8114-1402-4.
2. Стромберг, А.Г. Физическая химия / А.Г.Стромберг - Москва: Высшая школа, 2009 - 527с. – ISBN 978-5-06-006161.
3. Краткий справочник физико-химических величин / ред. А. А. Равдель, А.М. Пономарева – Москва: ООО «ГИД «Аз-booK», 2009.-240 с. – ISBN 978-5-905034-03-0.
4. Практические работы по физической химии: учебное пособие для вузов/ ред. К.П. Мищенко, А.А. Равдель, А.М. Пономарева. - 5-е изд.перераб. – Санкт_Петербург: Профессия, 2002.- 384с. – ISBN 5-95913-027-5.
5. Физическая химия. Теория и задачи: учебное пособие / Ю.П. Акулова, С.Г. Изотова, О.В. Проскурина, И.А. Черепкова. – 3-е изд.,стер. – Санкт_Петербург : Лань, 2021. - 228с.- ISBN 978-5-8114-8947-3

б) электронные издания

1. Афанасьев, Б.Н. Физическая химия: учеб. пособие для вузов / Б.Н. Афанасьев, Ю.П. Акулова. – Санкт - Петербург: Лань, 2022. – 464 с.- ISBN 978-5-8114-1402-4// Лань: электронно-библиотечная система- URL:<https://e.lanbook.com> (16.11.2022)/- Режим доступа: по подписке.
- 2 Физическая химия. Теория и задачи: учебное пособие / Ю.П. Акулова, С.Г. Изотова, О.В. Проскурина, И.А. Черепкова. – Санкт_Петербург : Лань, 2022. - 228с.- ISBN 978-5-8114-8947-3 // Лань: электронно-библиотечная система- URL:<https://e.lanbook.com> (16.11.2022)/- Режим доступа: по подписке

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 – БиблиoТех фундаментальной библиотеки СПбГТИ(ТУ): <http://bibl.lti-gti.ru/ЭБС.>, .

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

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

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

СТП СПТТИ 040-02. КС УКДВ. виды учебных занятий. Лекция. Общие требования; СТО СПбГТИ 018-2014. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Семинары и практические занятия. Общие требования к организации и проведению.

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

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

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

Основными условиями правильной организации учебного процесса для студентов является: плановость в организации учебной работы; серьезное отношение к изучению материала; постоянный самоконтроль.

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

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

10.1. Информационные технологии.

В учебном процессе по данной дисциплине предусмотрено:

- использовании информационных технологий - чтение лекций с использованием слайд-презентаций;
- взаимодействие с обучающимися посредством электронной информационно-образовательной среды.

10.2. Программное обеспечение.

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».

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

Для проведения лекционных и практических занятий используется аудитория, оборудованная специализированной мебелью на необходимое количество посадочных мест, доской, средствами оргтехники (экран, проектор, компьютеры с выходом в сеть «Интернет»).

Для проведения лабораторных занятий используются лабораторные помещения кафедры физической химии.

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

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

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

1. Перечень компетенций и этапов их формирования.

Индекс компетенции	Содержание	Этап формирования
ОПК-1	Способен применять базовые знания фундаментальных разделов наук о Земле, естественно-научного и математического циклов при решении задач в области экологии и природопользования	промежуточный

2. 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-1.1 Использование законов термодинамики, химической кинетики, учения о растворах при решении экологических задач	Знает теоретические основы термодинамики, химической кинетики, учения о растворах, особенности высокомолекулярного строения материи, методики проведения экспериментальных исследований и испытаний, способы представления полученных экспериментальных результатов	Ответы на все вопросы к экзамену: 1 -- 118	Даёт определения основных понятий физической химии с ошибками	Даёт определения основных понятий физической химии с незначительными ошибками. с помощью наводящих вопросов	Правильно дает определения основных понятий физической химии
		Ответы на вопросы к экзамену: 36 – 57; 64 – 76; 81 – 82; 85 – 86; 90 - 96 выполнение индивидуальных заданий Выполнение лабораторных работ и оформление отчетов	Называет основные методы изучения физико-химических свойств веществ с ошибками Излагает методики выполнения лабораторных работ с ошибками	Называет основные методы изучения физико-химических свойств веществ с наводящими вопросами и подсказками Излагает методики выполнения лабораторных работ с наводящими вопросами и подсказками	Демонстрирует освоение методов определения физико-химических свойств Способен самостоятельно правильно изложить методики выполнения лабораторных работ и оформления отчетов
	Умеет	Ответы на	Называет и поясняет основные	Поясняет, классифицирует	Способен самостоятельно

<p>применять теоретические основы термодинамики, химической кинетики, учения о растворах, особенности высокомолекулярного строения материи при решении экологических задач</p>	<p>вопросы к экзамену:7; 10; 16; 18; 20; 25; 29; 40; 41; 47; 50; 72 – 74; 78 – 80; 90 – 91; 97; 103; 105 – 106; 110 - 11</p> <p>выполнение индивидуальных заданий</p> <p>Ответы на вопросы к экзамену:4; 13 – 14; 36 – 38; 65 – 67; 85 – 86; 88; 90 – 91; 95, 96</p> <p>Получение допуска к выполнению лабораторных работ</p>	<p>физико-химические процессы с ошибками</p> <p>Называет и поясняет основные физико-химические методы с ошибками</p> <p>Выполняет стандартные операции с ошибками</p>	<p>основные физико-химические процессы с небольшими подсказками преподавателя</p> <p>Показывает умение выбрать метод изучения физико-химических свойств веществ для решения поставленной задачи с наводящими вопросами и подсказками преподавателя</p> <p>Выполняет стандартные операции с подсказками преподавателя</p>	<p>правильно назвать и классифицировать основные физико-химические процессы</p> <p>Самостоятельно правильно выбирает метод изучения физико-химических свойств веществ для решения поставленной задачи</p> <p>Самостоятельно выполняет стандартные операции с соблюдением техники безопасности</p>
--	---	---	--	---

<p>Владеет методами термодинамических расчетов, кинетического анализа, исследования растворов и макромолекул, экспериментальными методами исследования и испытания, наблюдения и измерения, обработки и интерпретации экспериментальных данных, применяя математические, физические, физико-химические, химические методы</p>	<p>Ответы на вопросы к экзамену: 6; 11; 12; 14; 16; 31; 43 – 46; 48; 51 – 55; 98 – 99; 113</p> <p>выполнение индивидуальных заданий</p>	<p>Выполняет индивидуальные задания с ошибками</p>	<p>Показывает частичное понимание с наводящими вопросами и подсказками преподавателя физико-химических процессов, происходящих в технологических процессах и окружающей среде</p>	<p>Самостоятельно дает правильную обоснованную оценку химических процессов, происходящих в технологических процессах и окружающей среде</p>
	<p>Ответы на вопросы к экзамену: 21; 65 – 67; 74; 81; 82; 86; 90; 91; 95, 96</p>	<p>Путается в обосновании выбора метода определения физико-химических свойств</p>	<p>Приводит примеры некоторых экспериментальных методов с подсказкой преподавателя</p>	<p>Правильно выбирает экспериментальный метод определения физико-химических свойств веществ</p>
	<p>Оформление отчетов по лабораторным работам</p>	<p>Оформляет отчеты с ошибками</p>	<p>Правильно оценивает погрешности величин с небольшой подсказкой преподавателя</p>	<p>Способен самостоятельно оценивать погрешность определяемых физико-химических величин</p>

Шкала оценивания соответствует СТО СПбГТИ(ТУ):

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

3 Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации

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

Темы 1 и 2 - Химическая термодинамика и химическое равновесие

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Задание № 2. Расчет парциальных давлений компонентов равновесной смеси

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Тема 3 – Фазовые равновесия и растворы неэлектролитов

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

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

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

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

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

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

Вариант	Вещество A	T_x , °С
1	$\text{C}_2\text{HCl}_3\text{O}_2$ трихлоруксусная кислота	130
2	$\text{C}_2\text{H}_2\text{Cl}_2\text{O}_2$ дихлоруксусная кислота	190
3	$\text{C}_2\text{H}_3\text{ClO}_2$ хлоруксусная кислота	180

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

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

4.2. Сравните с экспериментальными данными и объясните полученный результат.

4.4. Рассчитайте активность и коэффициент активности растворителя.

№ варианта	Состав раствора	T , °С	$P_{0,1}$, кПа	m , моль/кг H_2O	P , кПа
1	$\text{NaI} - \text{H}_2\text{O}$	25	3.1672	0.500	3.1179
2	$\text{Co}(\text{NH}_2)_2 - \text{H}_2\text{O}$	25	3.1672	1.600	3.0818
3	$\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11} - \text{H}_2\text{O}$	0	0.6104	1.651	0.5893

Задание № 5. Эбуллиоскопические и криоскопические свойства растворов

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

Для системы $\text{H}_3\text{BO}_3 - \text{H}_2\text{O}$ приведено повышение температуры кипения (ΔT), для всех других систем – понижение температуры замерзания (ΔT).

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

Эбулиоскопические E и криоскопические K константы растворителей:

Растворитель	H_2O	C_6H_6	CH_3COOH	$\text{NH}_3(\text{ж})$	CCl_4
K	1.86	5.07	3.6	—	—
E	0.513	—	—	0.33	5.64

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

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

По диаграмме определите:

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

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

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

6.5. Каков состав первых пузырьков пара?

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

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

6.8. Какие продукты можно получить, если подвергнуть жидкость заданного состава a) перегонке в равновесии (интегральной перегонке);

b) простой (дифференциальной) перегонке;

b) ректификации?

Вариант	Система $A-B$	M , кг	a , мол.% A	T , °C
1	$\text{H}_2\text{O} - \text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$	2,0	80	92
2	$\text{CH}_3\text{OH} - \text{C}_2\text{H}_4\text{Cl}_2$	0,5	30	68
3	$(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O} - \text{CCl}_4$	1,0	60	65

Задание № 7. Фазовые равновесия. Диаграммы плавкости

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

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

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

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

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

7.6. Вычислите массы равновесных фаз при заданной температуре $t, ^\circ\text{C}$ и количестве исходной смеси состава III.

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

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

Тема 4 – Электрохимические системы

Задание № 8. Электродвижущие силы и потенциалы

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

8.2. Определите среднюю ионную активность электролита a_{\pm} в левом электроде гальванического элемента A на основании справочных значений среднего ионного коэффициента активности электролита при молярной концентрации m_1 и температуре 298 К.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Задание № 9. Электрическая проводимость растворов слабых электролитов

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

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

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

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

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

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

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

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

Тема 5 – Методы изучения строения молекул, основанные на электрических свойствах

Задание № 10. Электрические свойства молекул

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

Вариант	Молекула A	T , К	$P_m \cdot 10^6$, м ³ /моль
1	NH ₃	473	35.21
2	H ₂ O	573	40.5
3	HCl	260	33.57

Тема 6 – Оптические методы изучения строения вещества

Задание № 11. Вращательные спектры двухатомных молекул

3.1. Напишите квантово-механическое уравнение для расчета энергии вращательного движения двухатомной молекулы как жесткого ротатора.

3.2. Выведите уравнение для расчета изменения энергии вращения двухатомной молекулы как жесткого ротатора при переходе ее на соседний, более высокий квантовый уровень.

3.3. Выведите уравнение зависимости волнового числа вращательных линий в спектре поглощения двухатомной молекулы от вращательного квантового числа.

3.4. Выведите уравнение для расчета разности волновых чисел соседних линий во вращательном спектре поглощения двухатомной молекулы.

3.5. Рассчитайте вращательную постоянную (в см⁻¹ и м⁻¹) двухатомной молекулы A по волновым числам двух соседних линий в длинноволновой инфракрасной области вращательного спектра поглощения молекулы (см.табл.3.1).

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

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

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

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

3.10. Определите момент инерции двухатомной молекулы A .

3.11. Рассчитайте приведенную массу молекулы A .

3.12. Вычислите равновесное межъядерное расстояние (r_0) молекулы A . Сопоставьте полученное значение со справочными данными.

3.13. Отнесите наблюдаемые линии во вращательном спектре молекулы А к вращательным переходам.

3.14. Рассчитайте волновые числа спектральных линий, связанных с вращательными переходами $0 \rightarrow 1$, $1 \rightarrow 2$ и $2 \rightarrow 3$ для молекулы А.

3.15. Вычислите приведенную массу изотопозамещенной молекулы В.

3.16. Рассчитайте волновые числа спектральных линий, связанных с вращательными переходами $0 \rightarrow 1$, $1 \rightarrow 2$ и $2 \rightarrow 3$ для молекулы В. Межъядерные расстояния в молекулах А и В считать равными.

3.17. Определите величину и направление изотопного сдвига линий поглощения во вращательных спектрах молекул А и В, если эти линии соответствуют переходам между вращательными уровнями $0 \rightarrow 1$, $1 \rightarrow 2$ и $2 \rightarrow 3$.

3.18. Нарисуйте схематически вращательный спектр поглощения двухатомной молекулы А. Нанесите на этот же спектр линии, соответствующие вращательным переходам для молекулы В.

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

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

Задание 12. Колебательные спектры двухатомных молекул

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

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

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

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

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

4.6 Выведите уравнение для расчета максимального колебательного квантового числа.

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

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

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

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

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

4.12 Вычислите силовую постоянную химической связи k_e двухатомной молекулы А.

4.13 Вычислите волновое число собственных колебаний изотопозамещенной молекулы В.

4.14 Определите величину и направление изотопного сдвига.

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

Тема 7– Химическая кинетика и катализ

Задания № 14 и 15. Определение порядка и константы скорости химической реакции и температурной зависимости скорости химической реакции

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

10.2. Рассчитайте константу скорости реакции **B**.

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

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

10.5. Определите период полупревращения реакции **B**.

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

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

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

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

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

$t, \text{ с}$	$C, \text{ моль/л}$
0	0,154
30	0,145
60	0,137

120	0,122
240	0,097
300	0,086

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

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

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

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

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

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

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

28. Правило фаз Гиббса. Понятие "фаза", "составляющее вещества", "число компонентов", "термодинамические степени свободы".
29. Условие термодинамического равновесия между фазами.
30. Вывод, анализ и интегрирование уравнения Клаузиуса-Клапейрона.
31. Диаграммы состояния однокомпонентных систем. Их разбор с помощью правила фаз Гиббса.
32. Идеальные и неидеальные растворы. Закон Рауля.
33. Предельно разбавленные, атермальные, регулярные растворы.
34. Парциальные мольные величины. Уравнения Гиббса-Дюгема.
35. Химический потенциал компонента в идеальном и неидеальном растворах.
36. Вычисления активности растворителя по понижению давления пара над раствором
37. Вычисление активности растворителя по понижению температуры замерзания раствора.
38. Вычисление активности растворителя по осмотическому давлению раствора.
39. Коллигативные свойства растворов и их практическое использование.
40. Растворимость газов в жидкости. Зависимость растворимости от температуры.
41. Растворимость газов в жидкости. Зависимость растворимости от давления и добавки электролита. Уравнение Сеченова.
42. Неограниченно растворимые друг в друге жидкости. Вычисление давления и состава пара над идеальными растворами. Первый закон Гиббса-Коновалова.
43. Диаграммы "общее давление-состав", "температура кипения - состав", "состав раствора -состав пара" для идеальных растворов.
44. Фазовая диаграмма равновесия жидкость – пар. Правило рычага.
45. Виды перегонки: интегральная, дифференциальная, фракционная, ректификация.
46. Азеотропные растворы. Диаграммы равновесия жидкость – пар для азеотропных растворов. Ректификация азеотропных растворов.
47. Ограниченная взаимная растворимость жидкостей. Влияние температуры на

- растворимость.
48. Давление и состав насыщенного пара в системах с ограниченной взаимной растворимостью. Диаграммы "общее давление состав", "температура кипения - состав", "состав раствора – состав пара" для систем с ограниченной взаимной растворимостью жидкостей.
 49. Давление и состав пара над смесью взаимно-нерастворимых жидкостей. Перегонка с водяным паром.
 50. Растворимость твердых веществ в жидкости. Идеальная растворимость. Уравнение Шредера.
 51. Диаграммы плавкости двухкомпонентных систем с полной растворимостью в жидком и полной нерастворимостью в твердом состоянии. Кривые охлаждения.
 52. Диаграммы плавкости двухкомпонентных систем с полной растворимостью в жидком и твердом состоянии. Виды твердых растворов.
 53. Диаграммы состояния двухкомпонентных систем с полной растворимостью в жидком и ограниченной растворимостью в твердом состоянии. Кривые охлаждения.
 54. Диаграммы плавкости двухкомпонентных систем, образующих химические соединения, плавящиеся без разложения и с разложением.
 55. Диаграммы состояния тройных жидких систем с ограниченной взаимной растворимостью
 56. Распределение растворенного вещества между двумя жидкими фазами. Экстрагирование.
 57. Диаграммы плавкости трехкомпонентных систем.

Тема 4 - Электрохимические системы

58. Коллигативные свойства растворов электролитов. Изотонический и осмотический коэффициент.
59. Строение растворов сильных электролитов. Основы электростатической теории растворов сильных электролитов Дебая и Хюккеля.
60. Уравнение для расчета средних ионных коэффициентов активности (I, II и III приближения теории Дебая и Хюккеля).
61. Равновесие в растворах электролитов. Термодинамические и практические константы ионных равновесий.
62. Электрохимический потенциал. Возникновение скачка потенциала и двойного электрического слоя на границе раздела металл – раствор электролита.
63. Водородная шкала электродных потенциалов.
64. Уравнение Нернста для равновесного потенциала. Стандартный электродный потенциал.
65. Электроды I рода. Примеры. Электродные реакции. Расчет равновесных потенциалов.
66. Электроды II рода. Примеры. Электродные реакции. Расчет равновесных потенциалов.
67. Окислительно-восстановительные электроды. Примеры. Электродные реакции. Расчет равновесных потенциалов.
68. Ионообменные электроды. Стекланный электрод.
69. Концентрационные гальванические элементы. Расчет ЭДС
70. Химические гальванические элементы. Расчет ЭДС.
71. Гальванические элементы с переносом и без переноса. Использование гальванических элементов без переноса для экспериментального определения средних ионных активностей.
72. Использование стандартных потенциалов для определения направления окислительно-восстановительных реакций.
73. Использование стандартных потенциалов для определения направления

- электрохимических реакций.
74. Определение термодинамических параметров химических реакций (ΔH , ΔS , ΔG), идущих в гальваническом элементе.
 75. Одноразовые химические источники тока.
 76. Многозарядные химические источники тока (аккумуляторы).
 77. Удельная, молярная проводимость. Связь электрической проводимости с подвижностями ионов.
 78. Зависимость электрической проводимости от температуры, природы электролита и растворителя.
 79. Зависимость удельной электропроводности от концентрации для слабого и сильного электролитов.
 80. Зависимость молярной проводимости сильных электролитов от концентрации. Основные положения теории Дебая-Хюккеля-Онзагера.
 81. Практическое использование измерений электрической проводимости.
 82. Числа переноса, их использование для определения электрической проводимости отдельных ионов.

Тема 5 – Методы изучения строения молекул, основанные на электрических свойствах

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

Тема 6 – Оптические методы изучения строения вещества

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

Тема 5 - Химическая кинетика и катализ

97. Скорость реакции для гомогенной и гетерогенной реакции. Кинетическое уравнение. Молекулярность и порядок гомогенной реакции. Стадийное протекание реакций.

98. Кинетическая кривая. Методы определения порядка реакции.
99. Реакции 1, 2 и 3 порядка. Выражение для константы скорости и периода полупревращения.
100. Сложные реакции: двухсторонние (обратимые) и параллельные.
101. Сложные реакции: последовательные и сопряженные.
102. Метод квазистационарных концентраций. Механизм мономолекулярных реакций.
103. Зависимость скорости гомогенной химической реакции от температуры. Уравнение Аррениуса.
104. Стадии гетерогенного процесса. Диффузия в газах, жидкостях и твердых телах. 1 и 2 законы Фика.
105. Влияние температуры на гетерогенный процесс.
106. Влияние перемешивания на режим гетерогенного процесса.
107. Теория активных соударений. Основные допущения. Выражение для предэкспоненциального множителя в уравнении Аррениуса. Стерический фактор.
108. Понятие активированного комплекса. Выражение константы скорости по методу переходного состояния.
109. Сопоставление уравнений теории активных соударений и теории переходного состояния. Недостатки теорий.
110. Влияние растворителя на скорость реакций в растворах. Гомо- и гетеролитические реакции.
111. Гетеролитические реакции. Влияние ионной силы раствора и зарядов реагирующих частиц на скорость процесса.
112. Первичный и вторичный солевые эффекты.
113. Особенности цепных реакций. Возникновение, развитие и обрыв цепей. Тепловой и цепной механизмы воспламенения.
114. Особенности протекания фотохимических реакций. Выражение для константы скорости фотохимической реакции. Примеры фотохимических реакций.
115. Общие свойства катализаторов. Гомогенный и гетерогенный катализ. Влияние катализаторов на предэкспоненциальный множитель и энергию активации в уравнении Аррениуса.
116. Гомогенный катализ. Кислотно-основной катализ.
117. Адсорбция и гетерогенный катализ. Изотерма и изобара адсорбции. Стадии гетерогенного катализа и влияние температуры. Теории гетерогенного катализа.
118. Кинетика ферментативных реакций, катализ и кинетика реакций с иммобилизованными ферментами

3.3. Темы контрольных работ

3.3.1 Контрольная работа по термодинамике:

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

3.3.2 Контрольная работа по оптическим методам изучения строения вещества:

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

3.3.3 Контрольная работа по кинетики:

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

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

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в соответствии с требованиями СПб

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

