

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


Утверждаю
декан факультета
«__» _____ 2012 года



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

М.2.В.07.ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ В ХИМИИ

Трудоёмкость (в зачетных единицах) – 3

Шифр и направление подготовки: 050100.68 Педагогическое образование

Магистерская программа: Химическое образование

Квалификация (степень): магистр

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

Задачи:

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

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

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

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

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование и развитие общекультурных компетенций (ОК-5, ОК-6.), профессиональных компетенций (ПК-1, ПК-5).

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

знать:

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

уметь:

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

владеть:

- численными методами расчета термодинамических характеристик.

4. **Общая трудоемкость дисциплины 3 зачетных единиц и виды учебной работы.**

Вид учебной работы	Трудоемкость (в соответствии с учебным планом) (час)	Распределение по семестрам (в соответствии с учебным планом) (час)
	Всего - 108	2 семестр
Аудиторные занятия	34	34
Лекции		
Практические занятия	34	34
Семинары		
Лабораторные работы		
Другие виды аудиторных работ: занятия в интерактивной форме	14	14
Другие виды работ: экзамен		
Самостоятельная работа	74	74
Курсовой проект (работа)		
Реферат		
Расчётно-графические работы		
Формы текущего контроля		Коллоквиумы, индивидуальные задания, тестирование
Формы промежуточной аттестации в соответствии с учебным планом		зачет

5. Содержание учебной дисциплины.

5.1. Разделы учебной дисциплины.

№п/п	Наименование раздела дисциплины (темы)	Аудиторные часы					Самостоятельная работа (час)
		всего	лекции	практические (семинары)	лабораторные	В т.ч. интерактивные формы обучения	
1	Использование численных методов в термодинамических расчетах.	4		4		2	10
2	Определение термодинамических величин.	4		4		2	10
3	Термодинамика химической связи.	18		18		8	34
4	Термодинамика ионных равновесий.	6		6		2	14
5	Термодинамика несовер-	2		2			6

№п/п	Наименование раздела дисциплины (темы)	Аудиторные часы					Самостоятельная работа (час)
		всего	лекции	практические (семинары)	лабораторные	В т.ч. интерактивные формы обучения	
	шенств в кристаллах простых веществ.						
	Итого:	34		34		14	74

5.2. Содержание разделов дисциплины:

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

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

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

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

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

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

5.3. Практические работы:

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование практических работ
1	5.2.1	1. Метод наименьших квадратов (МНК). Определение параметров уравнения температурной зависимости вида $C_p = a + bT$, $C_p = a + bT + cT^2$ и $C_p = a + bT + cT^2$ по экспериментальным данным. 2. Метод графического интегрирования. Расчет абсолютного значения энтропии графическим интегрированием по методу трапеций функций вида $\int_{T_1}^{T_2} \frac{C_p}{T} dT$ и $\int_{T_1}^{T_2} C_p d \ln T$.
2	5.2.2	3. Определение температурной зависимости давления пара воды над твердой и жидкой фазах. Расчет энтальпий и энтропий сублимации льда и испарения воды. 4. Определение температуры плавления льда и расчет температуры кипения воды.
3	5.2.3	5. Расчет энергии и энтропии связи по температурной зависимости изменения энергии Гиббса в процессе диссоциации молекул на атомы в ряду галогенов. 6. Применение закона Гесса для расчета энергии диссоциации газообразных молекул, содержащих более одной связи. Определение средней энергии связи. 7. Определение энергии диссоциации метана и этана. Расчет энергии связей С-Н и С-С. 8. Определение энергии диссоциации этилена и ацетилена. Расчет энергии кратных связей С-С. Изменение гибридизации и энергии связи в метане по мере его диссоциации. 9. Определение температурной зависимости изменения энергии Гиббса по давлению пара одноатомных молекул углерода над графитом. Расчет энтальпии сублимации графита и алмаза. 10. Определение энергии связи в алмазе, графите и бензоле. Зависимость электропроводности и прочности связи от гибридизации связи в этих веществах. 11. Вычисление энтальпий реакций по энергиям связи. 12. Вычисление энтропии связи с поправкой на симметрию. 13. Вычисление стандартных энтропий веществ по энтропиям связи и энтропиям атомов.
4	5.2.4	14. Расчет энтальпии образования ионов H^+_{p-p} и OH^-_{p-p} . 15. Расчет термодинамических характеристик ионов HCO_3^- , CO_3^{2-} и Ca^{2+} . 16. Использование энтальпий образования ионов для термодинамических расчетов.
5	5.2.5	17. Определение температурной зависимости изменения энергии Гиббса при образовании вакансий и расчет теплоты дефектообразования.

6. Учебно-методическое обеспечение дисциплины.

6.1. Основная литература по дисциплине:

1. Основы физической химии. Теория и задачи : учебное пособие для вузов/ В. В. Еремин, С. И. Каргов, И. А. Успенская и др..- М.: Экзамен, 2005.- 478 с.
2. Физическая химия. Теория и задачи: учебное пособие/ В. С. Ларичева, Т. В. Подгорнова ; МОиН РФ, ГОУ ВПО Кемеровский государственный университет.-Томск: Издательство ТГПУ. Ч. 1: Теория и задачи.-2008.- 195 с.:

6.2. Дополнительная литература:

1. Задачи по физической химии: учебное пособие для вузов/ В. В. Еремин, С. И. Каргов, И. А. Успенская [и др.].- М.: Экзамен, 2003.- 318 с.
2. Задачи по химической термодинамике: Учебное пособие для вузов/ В. С. Музыкантов, Н. М. Бажин, В. Н. Пармон и др.- М.: Химия, 2001.- 120 с.
3. Карякин, Н.В. Основы химической термодинамики: Учебное пособие для вузов/ Н. В. Карякин.- Нижний Новгород: Издательство Нижегородского государственного университета, 2003.- 462 с.
4. Физическая химия. Строение вещества. Термодинамика: В 2 кн.: Учебник для вузов/ К. С. Краснов, Н. К. Воробьев, И. Н. Годнев и др.; Под ред. К. С. Краснова.- 3-е изд., испр.-М.: Высшая школа. Кн. 1: Строение вещества. Термодинамика.- 2001.-511 с.
5. Ягодовский, В. Д. Статистическая термодинамика в физической химии :учебное пособие для вузов/ В. Д. Ягодовский.- 2-е изд., испр. и доп.- М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009.- 495 с.

6.3. Средства обеспечения освоения дисциплины:

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

6.4. Материально-техническое обеспечение дисциплины: специализированная аудитория; компьютерный класс, имеющий выход на интернет.

7. Методические рекомендации по организации изучения дисциплины:

7.1. Методические рекомендации преподавателю:

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

7.2. Методические указания для магистрантов:

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

8. Формы текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся.

8.1. Тематика рефератов (докладов, эссе):

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

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

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

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

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

8.4. Примеры тестов:

1. Энтальпия реакции разложения молекулы HBr на атомы составляет +36,2 кДж/моль. Чему равна энергия связи в молекуле HBr (кДж/моль)?
1) +36,2; 2) -72,4; 3) -18,1; 4) 0; 5) +72,4; 6) +18,1; 7) 36,2.
2. Рассчитайте отношение числа вакансий к числу узлов решетки кристалла алюминия и константу равновесия образования вакансий при температуре 650°C, если относительное изменение длины кристалла при этом равно 0,01872, а относительное изменение объема составляет 0,01844.
3. Энтальпия реакции



- равна -229,17 кДж/моль. Чему равна энтальпия образования иона $\text{OH}^-_{(\text{aq})}$ (кДж/моль)?
1) +229,17; 2) -114,585; 3) 0; 4) +114,585; 5) -229,17.

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

1. Использование численных методов в термодинамических расчетах.
 - 1.1. Метод наименьших квадратов (МНК).
 - 1.2. Определение параметров уравнения температурной зависимости вида $C_p = a + bT$ по экспериментальным данным.
 - 1.3. Определение параметров уравнения температурной зависимости вида $C_p = a + bT + cT^2$ и $C_p = a + bT + cT^2$ по экспериментальным данным.
 - 1.4. Метод графического интегрирования.
 - 1.5. Расчет абсолютного значения энтропии графическим интегрированием по методу трапеций функций вида $\int_{T_1}^{T_2} \frac{C_p}{T} dT$ и $\int_{T_1}^{T_2} C_p d \ln T$.
2. Определение термодинамических величин.
 - 2.1. Расчет термодинамических характеристик процессов плавления, испарения и возгонки по давлению пара над твердой и жидкой фазами.
 - 2.2. Определение температурной зависимости давления пара воды над твердой фазой. Расчет энтальпии и энтропии сублимации льда.
 - 2.3. Определение температурной зависимости давления пара воды над жидкой фазой. Расчет энтальпии и энтропии испарения.
 - 2.4. Определение температуры плавления льда. Расчет температуры кипения воды.
3. Термодинамика химической связи.
 - 3.1. Расчет энергии и энтропии связи двухатомных молекул по температурной зависимости изменения энергии Гиббса в процессе диссоциации молекул на атомы.
 - 3.2. Расчет энергии и энтропии связи в ряду галогенов. Анализ взаимосвязи энергии и энтропии связи с физико-химическими свойствами галогенов.
 - 3.3. Применение закона Гесса для расчета энергии диссоциации газообразных молекул, содержащих более одной связи. Определение средней энергии связи.
 - 3.4. Определение энергии диссоциации метана и этана. Расчет энергии связей C-H и C-C.
 - 3.5. Определение энергии диссоциации этилена и ацетилена. Расчет энергии кратных связей C-C.
 - 3.6. Изменение гибридизации и энергии связи в метане по мере его диссоциации.
 - 3.7. Определение температурной зависимости изменения энергии Гиббса по давлению пара одноатомных молекул углерода над графитом. Расчет энтальпии сублимации графита и алмаза.

- 3.8. Определение энергии связи в алмазе, графите и бензоле. Зависимость электропроводности и прочности связи от гибридизации связи в этих веществах.
- 3.9. Вычисление энтальпий реакций по энергиям связи.
- 3.10. Зависимость энтропии связи от симметрии молекул.
- 3.11. Определение порядков осей и чисел симметрии молекул. Зависимость энтропии связи от числа симметрии.
- 3.12. Вычисление энтропии связи с поправкой на симметрию.
- 3.13. Вычисление стандартных энтропий веществ по энтропиям связи и энтропиям атомов.
4. *Термодинамика ионных равновесий.*
 - 4.1. Определение изменения энтальпии в реакции нейтрализации по теплотам растворения (с применением закона Гесса).
 - 4.2. Определение константы диссоциации воды методом ЭДС и вычисление изменения энергии Гиббса и энтальпии нейтрализации.
 - 4.3. Расчет энтальпии образования ионов $\text{H}^+_{\text{p-p}}$ и $\text{OH}^-_{\text{p-p}}$.
 - 4.4. Расчет термодинамических характеристик ионов HCO_3^- , CO_3^{2-} и Ca^{2+} .
 - 4.5. Использование энтальпий образования ионов для термодинамических расчетов.
5. *Термодинамика несовершенств в кристаллах простых веществ.*
 - 5.1. Образование дефектов по Френкелю и Шоттки. Расчет константы равновесия процесса образования вакансий по измерениям длины образца и рентгенографического определения изменения постоянной решетки.
 - 5.2. Определение температурной зависимости изменения энергии Гиббса при образовании вакансий и расчет теплоты дефектообразования.

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

Рабочая программа учебной дисциплины составлена в соответствии с учебным планом, федеральным государственным образовательным стандартом высшего профессионального образования по направлению подготовки 050100.68 Педагогическое образование Магистерская программа: Химическое образование (указывается код и наименование направления подготовки)

Рабочая программа учебной дисциплины составил:
д.х.н., профессор кафедры неорганической химии Кич

Ерёмин Л.П.

Рабочая программа учебной дисциплины утверждена на заседании кафедры неорганической химии
протокол № 1 от 30.08 2012 года.

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

Рабочая программа учебной дисциплины одобрена методической комиссией биолого-химического факультета
протокол № 4 от 3.09 2012 года.

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