

Химическая термодинамика

Раздел 1. Первое начало и второе начала термодинамики. Термохимия.

1. Предмет физической химии, основные разделы физической химии и методы исследования. Химическая термодинамика, разделы химической термодинамики, основные понятия и определения.
2. Первое начало термодинамики. Понятия: внутренняя энергия, энтальпия, теплота. Применение первого начала термодинамики к процессам расширения (сжатия) с участием идеальных газов.
3. Применение первого начала термодинамики к химическим реакциям. Закон Гесса и следствия из него. (Методы определения энтальпии процесса). Энтальпия образования и энтальпия сгорания. Стандартные состояния.
4. Влияние температуры и давления на энтальпию химической реакции. Формула Кирхгоффа: методы решения.
5. Теплоемкость. Элементы классической теории теплоемкости газов и твердых тел. Расчет энтальпии нагревания веществ.
6. Теплоемкость. Квантовая теория теплоемкости: формулы Эйнштейна, Дебая и Тарасова. Теплоемкость газов.
7. Второе начало термодинамики и его различные формулировки. Равновесные и обратимые, самопроизвольные и несамопроизвольные процессы. Выражения второго начала термодинамики для обратимых и необратимых процессов.
8. Второе начало термодинамики. Статистический подход к определению энтропии и выводу II начала термодинамики. Термодинамическая вероятность.
9. Второе начало термодинамики. Термодинамический подход к выводу второго начала термодинамики. Цикл Карно. Теоремы Карно и Карно – Клаузиуса.
10. Энтропия как функция состояния системы. Расчет изменения энтропии в различных процессах. Энтропия изолированной системы и направление процесса.
11. Таблицы стандартных термодинамических величин и их использование в термодинамических расчетах.
12. Характеристические функции и фундаментальные уравнения термодинамики для закрытых систем. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов, выраженные через характеристические функции.
13. Уравнения Максвелла. Использование уравнения Максвелла для вывода различных термодинамических соотношений.
14. Функция Гельмгольца, функция Гиббса, их зависимость от различных условий. Уравнения Гиббса-Гельмгольца и уравнения максимальной работы.
15. Фундаментальные уравнения химической термодинамики для открытых систем переменного состава. Химический потенциал.
16. Метод летучести. Различные методы вычисления летучести из опытных данных.

Раздел 2. Химическое равновесие

1. Химическое равновесие. Закон действующих масс и гомогенное химическое

равновесие. Различные виды констант равновесия и связь между ними. Изотерма Вант-Гоффа.

2. Химическое равновесие. Закон действующих масс и гетерогенное химическое равновесие. Комбинирование равновесий.
3. Зависимость констант равновесия от температуры. Использование различных приближений при расчетах химических равновесий при различных температурах (решение уравнения изобары химической реакции).
4. Методы определения констант химического равновесия. Комбинирование равновесий. Выход продуктов при совместном протекании нескольких химических реакций.
5. Расчеты выхода продуктов химических реакций различных типов. Влияние давления на выход продуктов реакций с участием газов. Расчеты констант равновесия химических реакций с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций.

Раздел 3. Фазовые равновесия. Растворы.

1. Фазовые равновесия индивидуального вещества. Уравнение Клаузиуса-Клапейрона и его применение к различным фазовым переходам первого рода. Правило Труттона.
2. Третье начало термодинамики. Тепловая теорема Нернста. Следствия из тепловой теоремы Нернста.
3. Применение тепловой теоремы Нернста к реакциям между конденсированными системами и газовыми системами. Приближенная формула Нернста.
4. Расчет равновесия по абсолютным значениям энтропий. Абсолютная энтропия. Отклонения от постулата Планка. Методы расчета равновесий по стандартным термодинамическим величинам.
5. Общая характеристика растворов. Способы выражения состава раствора. Парциальные мольные величины. Химический потенциал растворителя и растворенного вещества для сильно разбавленных растворов.
6. Парциальные мольные величины и их определение из опытных данных. Термодинамический вывод уравнений Гиббса-Дюгема, Гиббса-Дюгема-Маргулеса.
7. Различные классификации растворов. Термодинамическая классификация растворов. Химический потенциал компонентов в жидком идеальном растворе. Реальные растворы.
8. Давление насыщенного пара жидких растворов. Закон Рауля. Равновесие жидкость - пар в бинарных системах. Равновесные составы пара и жидкости в идеальных растворах.
9. Основные законы идеальных растворов. Криоскопия. Эбулиоскопия.
10. Осмотическое давление. Уравнение Вант-Гоффа,
11. Закон распределения Нернста (вывод). Экстракция. Растворимость газов и твердых веществ в жидкостях; зависимость от температуры. Закон Генри.
12. Неидеальные растворы и их свойства. Различные виды диаграмм состояния. Законы Коновалова (вывод), законы Вревского.
13. Разделение жидких растворов путем перегонки. (простая, фракционная пере-

гонка, ректификация). Азеотропы и их свойства.

14. Термодинамическая активность и методы ее определения. Коэффициенты активности.

15. Правило фаз Гиббса. Основные понятия. Стабильность фаз. Фазовые диаграммы однокомпонентных систем. Полиморфизм.

16. Равновесие фаз в бинарных системах. Взаимная растворимость двух жидкостей. Правило Алексева.

17. Двухкомпонентные системы. Общая классификация. Системы с простой эвтектикой. Физико-химический анализ, кривые охлаждения.

18. Диаграммы состояния двухкомпонентных систем с образованием твердых растворов, построение и физико-химический анализ.

19. Диаграммы состояния двухкомпонентных систем с образованием химических соединений: построение и физико-химический анализ. Конгруэнтные и инконгруэнтные точки плавления.

20. Диаграммы состояния трехкомпонентных систем. Метод Гиббса и Розебома.

Химическая кинетика и катализ

1. Основные кинетические понятия: скорость химической реакции, константа скорости, молекулярность, порядок. Кинетическое уравнение для определения скорости химической реакции.

2. Односторонние реакции нулевого порядка. Основные уравнения.

3. Необратимые реакции первого порядка. Вывод и анализ основных уравнений.

4. Необратимые реакции второго порядка. Вывод и анализ основных уравнений.

5. Необратимые реакции третьего порядка. Вывод и анализ основных уравнений.

6. Молекулярность и порядок реакции. Методы определения порядка реакции.

7. Односторонние параллельные реакции первого порядка. Основные уравнения.

8. Односторонние последовательные реакции. Лимитирующая стадия. Основные уравнения.

9. Двухсторонние реакции первого порядка. Основные понятия и уравнения.

10. Обратимые реакции первого порядка. Основные уравнения.

11. Химическая кинетика. Зависимость скорости реакции от температуры. Основные уравнения. Анализ уравнения Вант-Гоффа.

12. Понятие об энергии активации. Основные уравнения. Способы определения.

13. Теория активных столкновений для мономолекулярных реакций. Основные уравнения.

14. Теория активных столкновений для бимолекулярных реакций. Основные уравнения.

15. Теория переходного состояния.

16. Предэкспоненциальный множитель по теории активного комплекса.

17. Особенности гетерогенных процессов. Диффузионная стадия процессов.

Общие закономерности гетерогенных процессов.

18. Лимитирующая стадия гетерогенного процесса. Диффузионная и кинетическая области протекания гетерогенного процесса.
19. Виды катализа. Гомогенный кислотно - основной катализ.
20. Теории гетерогенного катализа.
21. Общие понятия о ферментативном катализе. Причины высокой активности и селективности ферментов.

Электрохимия

1. Электропроводность растворов электролитов. Основные понятия и определения.
2. Электропроводность слабых электролитов. Закон разбавления Оствальда.
3. Зависимость электропроводности сильных электролитов от концентрации. Уравнения Онзагера и Кольрауша. Электрофоретический и релаксационный эффекты в электролитах. Их влияние на электропроводность.
4. Электростатическая теория сильных электролитов Дебая - Хюккеля. Ионная атмосфера. Радиус ионной атмосферы.
5. Подвижность ионов и числа переноса. Аномальная подвижность гидроксония и гидроксила.
6. Термодинамика растворов электролитов. Средняя ионная активность и коэффициент активности сильных электролитов.
7. Возникновение скачка потенциала на границе раздела фаз. Электродные потенциалы.
8. Классификация электрохимических элементов. ЭДС гальванического элемента. Вывод и анализ уравнения Нернста для расчета ЭДС.
9. Классификация электродов. Электродные реакции. Уравнения Нернста для электродов.
10. Концентрационные цепи. Понятие о диффузионном потенциале.
11. Термодинамика гальванического элемента.
12. Электролиз. Законы Фарадея.
13. Поляризация электродов. Уравнение Тафеля.
14. Электрохимическая коррозия металлов. Методы защиты от коррозии.

Список учебной литературы

Основная литература

1. *Кругляков П.М.* Физическая и коллоидная химия: Учеб. пособие /М.П. Кругляков, Т.Н. Хаскова. – М.: Высш. шк., 2005. – 319 с.
2. Основы физической химии. Теория и задачи: Учеб. пособие /В.В. Еремин, С.И. Каргов, И.А. Успенская и др. М: Экзамен, 2005.– 480 с.
3. *Фролов Ю.Г.* Курс коллоидной химии. / Ю.Г.Фролов. – М.: Альянс, 2004. – 462 с.

Дополнительная литература

1. *Адамсон А.* Физическая химия поверхностей: пер. с англ.- М.: Мир, 1979.
2. *Голиков Г.А.* Руководство по физической химии: Учебное пособие для хим. – технол. спец. Вузов / Г.А. Голиков. – М.: Высшая школа. – 1998. – 383 с.
3. *Крылов О.В.* Гетерогенный катализ. М.: Академкнига. – 2004 – 679с.
4. *Иоффе И.И., Письмен Л.И.* Инженерная химия гетерогенного катализа. Л.: Химия, 1972 – 464с.

Справочная и нормативная литература

1. Краткий справочник физико–химич. величин./ Под ред. А.А. Равделя, А.Н. Пономаревой.- Л.: Химия. – 1983.
2. Свойства элементов: справочник. В 2-х кн. / Под ред И.Е. Дрица. – 3-е изд. перер. и доп. М.: Руда и металлы. Кн.1...2003. – 444 с., Кн.2...2003. – 456 с.

Интернет-ресурсы

1. <http://WWW.knigafund.ru/>
2. <http://ntb.bstu.ru/resoursts/el/>
3. <http://www/knigka.info/> *Roder G. Mortimer.* Phisicai chemistry. Second edition.