

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«МУРМАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

АПАТИТСКИЙ ФИЛИАЛ

Методические указания к самостоятельной работе студентов

По дисциплине Б1.О.03.01.04 Физическая химия
указывается цикл (раздел) ОП, к которому относится дисциплина, название дисциплины

для направления подготовки (специальности) 04.03.01 Химия
код и наименование направления подготовки (специальности)

направленность программы (профиль)
Неорганическая химия и химия координационных соединений
наименование профиля /специализаций/образовательной программы

Квалификация выпускника, уровень подготовки
бакалавр
(указывается квалификация (степень) выпускника в соответствии с ФГОС ВО)

Кафедра - разработчик: химии и строительного материаловедения
название кафедры - разработчика рабочей программы

Разработчик(и) А.М. Калинин, профессор, д.х.н., Г.С.Скиба, доцент, к.т.н.,
И.Р.Елизарова, доцент, к.т.н., Ю.В. Стулов, доцент, к.х.н.
ФИО, должность, ученая степень, (звание)

Апатиты

2019

Пояснительная записка

1. **Методические указания составлены** на основе ФГОС ВО по направлению подготовки 04.03.01 Химия, утвержденного приказом Минобрнауки РФ от 17 июля 2017 года, № 671, учебного плана в составе ОП по направлению подготовки 04.03.01 Химия, профилю «Неорганическая химия и химия координационных соединений».

2. Цели и задачи учебной дисциплины (модуля).

Целью дисциплины «Физическая химия» является формирование понимания студентами сущности химических и физических процессов на основе изучения основных естественнонаучных законов и практическое использование полученных знаний для решения конкретных научных и технических задач. Цель определяется федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 04.03.01 Химия (уровень бакалавриата).

Задачи дисциплины (модуля):

- ознакомить обучающихся с представлениями о связи между химическими и физическими явлениями, основными законами, управляющими химическими процессами, и зависящими от условий их протекания и свойств участвующих веществ; проблемами, которыми занимается физическая химия;
- сформировать навыки в практическом использовании законов и решении задач;
- сформировать навыки проведения лабораторных исследований физико-химических процессов.

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине «Физическая химия»

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.03.01 Химия профиль «Неорганическая химия и химия комплексных соединений»:

ОПК-1 Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений

ОПК-2 Способен проводить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их участием

ОПК-6 Способен представлять результаты своей работы в устной и письменной форме в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе.

Результаты формирования компетенций и планируемые результаты обучения представлены в таблице 1.

Таблица 1 – Планируемые результаты обучения

№ п/п	Код компетенции	Компоненты компетенции, степень их реализации	Результаты обучения
1.	ОПК-1. Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	Компоненты компетенции соотносятся с содержанием дисциплины и компетенция реализуется полностью	Знать: - начала термодинамики и основные уравнения химической термодинамики; -методы термодинамического описания химических и фазовых равновесий в многокомпонентных системах; -термодинамику растворов электролитов и электрохимических систем; - уравнения формальной кинетики;

			<p>- уравнения кинетики элементарных, сложных, цепных, гетерогенных и фотохимических реакций;</p> <p>- основные теории гомогенного, гетерогенного и ферментативного катализа</p> <p>- способы управления скоростями и направлениями химических процессов.</p> <p>Уметь:</p> <p>- прогнозировать влияние различных факторов на равновесие в химических реакциях;</p> <p>- определять направленность процесса в заданных начальных условиях;</p> <p>- устанавливать границы областей устойчивости фаз в однокомпонентных и двойных системах;</p> <p>- определять составы сосуществующих фаз в бинарных гетерогенных системах;</p> <p>- составлять кинетические уравнения в дифференциальной и интегральной формах для простых реакций;</p> <p>- прогнозировать влияние температуры на скорость процесса;</p> <p>- применять современное оборудование и приборы при решении практических задач.</p> <p>Владеть:</p> <p>- навыками вычисления тепловых эффектов химических реакций в условиях постоянства давления или объема;</p> <p>- навыками вычисления констант равновесия химических реакций при заданной температуре;</p> <p>- навыками вычисления парциальных давлений и составов равновесных фаз в двухкомпонентных системах;</p> <p>Индикаторы сформированности компетенций в реализуемой части:</p> <p>ОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов в части, связанной с экспериментальными физико-химическими исследованиями.</p> <p>ОПК-1.2. Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии в части физико-химических исследований.</p> <p>ОПК-1.3. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа</p>
--	--	--	--

			литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических физико-химических работ химической направленности <i>в части..</i>
2.	ОПК-2. Способен проводить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их участием	Компоненты компетенции соотносятся с содержанием дисциплины и компетенция реализуется полностью	<p>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> - основные методы физико-химических исследований <p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - проводить выбор оптимального метода исследований <p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - проведением методики эксперимента с соблюдением техники безопасности; - изучением фазовых диаграмм с применением термических методов; - способами изучения скоростей реакций в различных условиях. <p>Индикаторы сформированности компетенций в реализуемой части:</p> <p>ОПК-2.1. Работает с химическими веществами с соблюдением норм техники безопасности при проведении экспериментов</p> <p>ОПК-2.2. Проводит синтез веществ и материалов разной природы с использованием имеющихся методик физико-химического анализа.</p> <p>ОПК-2.3. Проводит стандартные операции для определения химического и фазового состава веществ и материалов на основе существующих методов физ.химии.</p> <p>ОПК-2.4. Проводит исследования свойств веществ и материалов (термических свойств, определение удельной поверхности и пористости, размеров частиц и т.д.) с использованием серийного научного оборудования.</p>
3.	ОПК-6. Способен представлять результаты своей работы в устной и письменной форме в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе	Компоненты компетенции соотносятся с содержанием дисциплины и компетенция реализуется полностью	<p>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> - экспериментальные методы, используемые для решения задач физической химии <p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - обрабатывать и интерпретировать полученные экспериментальные данные. <p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - методами представления полученных результатов. <p>Индикаторы сформированности компетенций в реализуемой части:</p> <p>ОПК-6.1. Представляет результаты работы в виде отчета по стандартной форме на русском языке.</p> <p>ОПК-6.2. Представляет информацию химического содержания с учетом требований библиографической культуры с приложением к отчету.</p> <p>ОПК-6.3. Представляет результаты работы в виде тезисов доклада на русском и английском языке в соответствии с</p>

			<p>нормами и правилами, принятыми в химическом сообществе, и требованиями оргкомитета соответствующей конференции, съезда и т.д. .</p> <p>ОПК-6.4. Готовит презентацию по теме работы и представляет ее на русском и английском языке.</p>
--	--	--	---

ПЕРЕЧЕНЬ РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

Основная литература

1. Стромберг А.Г., Семченко Д.П. Физическая химия: Учебник для химических специальностей вузов / Под ред. А.Г. Стромберга. — 7-е издание, стереотипное — М.: Высшая школа, 2015. — 527 с: ил
2. Краснов К.С. и др. Физическая химия, Т.1,2. М.: Высшая школа. 2014.
3. Артемов А.В. Физическая химия. Учебник (бакалавриат). М.: Академия. 2013.
4. Дамаскин Б.Б., Петрий О.А. Электрохимия. 2008.
5. Кругляков П.М., Хаскова Т.Н. Физическая и коллоидная химия. М: Высш. школа. 2007.

Дополнительная литература

1. Электрохимия и химическая кинетика. Г.В. Булидорова, Ю.Г. Галяметдинов, Х.М. Ярошевская, В.П. Барабанов ; Казань : Издательство КНИТУ, 2014. – 371 с.
http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=427844&sr=1
2. Химическая кинетика: Теория и практика / Г.Е. Заиков, О.В. Стоянов, А.М. Кочнев, С.С. Ахтямова ; Казань : Издательство КНИТУ, 2013. – 80 с.
http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=258758&sr=1
3. Дамаскин, Б.Б. Электрохимия : учебное пособие / Б.Б. Дамаскин, О.А. Петрий, Г.А. Цирлина. — 3-е изд., испр. — Санкт-Петербург : Лань, 2015. — 672 с.
<https://e.lanbook.com/reader/book/58166/#1>

СОДЕРЖАНИЕ ПРОГРАММЫ И МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ К САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЕ ПО ИЗУЧЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Составитель - профессор кафедры химии и строительного материаловедения, д.х.н.
Калинкин Александр Михайлович

Раздел «Термодинамика»

1. Макроскопические системы и термодинамический метод их описания. Уравнения состояния.
2. Теплота и работы различного рода. Работа расширена для различных процессов. Первый закон термодинамики. Внутренняя энергия. Энтальпия.
3. Закон Гесса и его следствия. Формула Кирхгоффа. Зависимость теплоемкости от температуры и расчеты тепловых эффектов реакций. Таблицы стандартных термодинамических величин и их использование в термодинамических расчетах.
4. Второй закон термодинамики и его различные формулировки. Энтропия. Теорема Карно-Клаузиуса. Различные шкалы температур.
5. Энтропия как функция состояния. Изменение энтропии при различных процессах.
6. Изменение энтропии изолированных процессов и направление процесса.
7. Фундаментальные уравнения Гиббса. Характеристические функции. Энергия Гельмгольца, энергия Гиббса и их свойства. Уравнения Максвелла. Использование уравнения Максвелла для вывода различных термодинамических соотношений.
8. Методы вычисления энтропии, внутренней энергии, энтальпии, энергии Гельмгольца и энергии Гиббса. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов, выраженные через характеристические функции.
9. Химические потенциалы, их определение, вычисление и свойства. Химический потенциал идеального и неидеального газов. Метод летучести. Различные методы вычисления летучести из опытных данных.

МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ К ВЫПОЛНЕНИЮ КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЫ, ТЕСТИРОВАНИЯ, РАСЧЕТНО-ГРАФИЧЕСКОГО ЗАДАНИЯ, РЕФЕРАТА, КУРСОВОГО ПРОЕКТА (РАБОТЫ)

Приближенные методы расчета термодинамических параметров реакций образования из простых веществ при 298.15 К.

а) Проверить выполнимость правила Беркенгейма
$$\Delta_f H_{MBr_n}^{\circ} = \frac{\Delta_f H_{MCl_n}^{\circ} + \Delta_f H_{MI_n}^{\circ}}{2}$$

для соединений, приведенных в таблице. Вычислить относительные расхождения с табличными данными.

MCl _n	-Δ _f H ^o ₂₉₈ ккал/моль	MBr _n	-Δ _f H ^o ₂₉₈ ккал/моль	MI _n	-Δ _f H ^o ₂₉₈ ккал/моль
AgCl	30.37	AgBr	24.1	AgI	14.78
BaCl ₂	201.97	BaBr ₂	177.9	BaI ₂	142.2
CaCl ₂	189.8	CaBr ₂	163.3	CaI ₂	128.5
KCl	104.37	KBr	94.1	KI	78.95

LiCl	97.66	LiBr	83.93	LiI	65.22
NaCl	98.35	NaBr	86.38	NaI	69.46
CsCl	105.84	CsBr	97.04	CsI	83.47
RbCl	104.01	RbBr	94.29	RbI	79.80
NH ₄ Cl	75.15	NH ₄ Br	64.73	NH ₄ I	48.75
ZnCl ₂	99.4	ZnBr ₂	78.8	ZnI ₂	50.57
SrCl ₂	200.6	SrBr ₂	174.3	SrI ₂	137.6
PbCl ₂	85.9	PbBr ₂	66.6	PbI ₂	42.56

б) Проверить выполнение правила Капустинского

$$\frac{\Delta_f H^\circ}{W} = a \lg Z + b \quad (W - \text{валентность, } Z - \text{порядковый номер элемента})$$

для рядов соединений:

- 1) LiBr – NaBr – KBr – RbBr – CsBr
- 2) LiI – NaI – KI – RbI – CsI
- 3) CaCl₂ – SrCl₂ – BaCl₂

Построить графики $\Delta_f H^\circ_{298} - \lg Z$. Определить значения a и b по методу наименьших квадратов.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Предмет и задачи химической термодинамики, основные понятия и определения.
2. Уравнения состояния идеального и реальных газов. Уравнение Ван-дер-Ваальса.
3. Внутренняя энергия системы. Теплота и работа различного рода.
4. Равновесные (квазистатические) и неравновесные процессы.
5. Первый закон термодинамики. Некруговые процессы.
6. Теплоемкость. Влияние температуры на теплоемкость. Температурные ряды.
7. Тепловые эффекты. Закон Гесса.
8. Следствия закона Гесса.
9. Зависимость теплового эффекта от температуры. Уравнение Кирхгофа.
10. Самопроизвольные и несамопроизвольные процессы. Второй закон термодинамики.
11. Теорема Карно-Клаузиуса. Энтропия.
12. Изменение энтропии в нестатических процессах. Изменение энтропии как критерий направленности и равновесия в изолированной системе.
13. Различные шкалы температур.
14. Характеристические функции. Уравнения Максвелла.
15. Критерии возможности самопроизвольного процесса и равновесия в закрытых системах. Изменение энтропии в некоторых процессах.
16. Энергия Гиббса смеси идеальных газов. Химический потенциал.
17. Закон действующих масс. Константа равновесия для газофазных реакций.
18. Использование закона действующих масс для расчета состава равновесной смеси.
19. Фугитивность и коэффициент фугитивности газов.
20. Методы расчета фугитивности.

СОДЕРЖАНИЕ ПРОГРАММЫ И МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ К САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЕ ПО ИЗУЧЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Составитель - доцент кафедры химии и строительного материаловедения,

к.т.н. Скиба Галина Степановна

Раздел "Растворы. Фазовые равновесия".

1. Различные способы выражения состава раствора
 2. Термодинамические свойства идеальных газовых смесей и жидких растворов. Общее условие идеальности растворов.
 3. Парциальные молярные величины и их определение из опытных данных для бинарных систем. Уравнение Гиббса-Дюгема.
 4. Коллигативные свойства растворов
 5. Неидеальные растворы и их свойства. Метод активностей. Коэффициенты активности и их определение по парциальным давлениям компонентов.
 6. Термодинамическая классификация растворов.
 7. Однокомпонентные системы.
 8. Двухкомпонентные системы
 9. Физико-химические основы перегонки растворов, равновесие жидкость-пар в двухкомпонентных системах
 10. Физико-химические основы перегонки растворов, равновесие жидкость-пар в двухкомпонентных системах
- [1-8,12]

Раздел " Химические и адсорбционные равновесия".

1. Химическое равновесие в идеальных и неидеальных системах.
 2. Приведенная энергия Гиббса и ее использование.
 3. Расчеты выхода продуктов химических реакций различных типов. Выходы продуктов при совместном протекании нескольких химических реакций.
 4. Мономолекулярная и полимолекулярная адсорбция.
- [1-6,12]

Раздел " Химическая кинетика".

1. Несоответствие механизмов реакций и их стехиометрических уравнений. Механизм разложения NO, N₂O₅, синтеза HBr и HI
 2. Реакции переменного порядка и изменение порядка в ходе реакции.
 3. Последовательные реакции на примере необратимых реакций первого порядка.
 4. Определение кинетических постоянных уравнения Михаэлиса-Ментэн из опытных данных.
 5. Методы расчета скорости неразветвленных цепных реакций.
 6. Колебательные реакции на примере реакции Белоусова-Жаботинского.
 7. Полуостров воспламенения.
 8. Зависимость скорости реакции на нижнем пределе воспламенения от диаметра сосуда и природы его поверхности
 9. Поверхность потенциальной энергии для трех атомов водорода.
 10. Опытная и истинная энергия активации.
- [1—6, 9-13]

**МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ К ВЫПОЛНЕНИЮ
КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЫ, ТЕСТИРОВАНИЯ,
РАСЧЕТНО-ГРАФИЧЕСКОГО ЗАДАНИЯ,
РЕФЕРАТА, КУРСОВОГО ПРОЕКТА (РАБОТЫ)**

Задачи по контрольным работам.

Раздел "Растворы. Фазовые равновесия".

1. В 1 литре водного раствора NaBr содержится 321.9 г соли. Плотность раствора при 293 К равна 1.2382 г/см^3 . Выразить концентрацию в 1) моль/л, 2) моль/1000 г воды, 3) молярных долях, 4) % масс.
2. Определить степень диссоциации дихлоруксусной кислоты, если она диссоциирует на два иона. Температура замерзания 0.1 М водного раствора дихлоруксусной кислоты - 0.278°C . Криоскопическая постоянная воды 1.86° .
3. Если 1 моль воды прибавить к бесконечно большому количеству водного раствора метанола, имеющего мольную долю метанола 0.4, объем воды увеличится на 17.35 мл. Если к этому раствору прибавить 1 моль метанола, то объем раствора увеличится на 39.01 мл. Рассчитать объем раствора, содержащего 0.4 моль метанола и 0.6 моль воды.
4. Определить растворимость солей А и С(% масс.) в воде и состав эвтонического раствора. Какие равновесные фазы и в каком количестве выделятся из состава точки 1, если общая масса раствора в ней составляет 12 кг.
5. Плотность 60% водного раствора H_3PO_4 при 293 К равна 1.426 г/см^3 . Выразить концентрацию в 1) моль/л, 2) моль/1000 г воды, 3) мольных долях.
6. Молярная теплота плавления металлического свинца равна 5188 Дж/моль при температуре плавления 327.5°C . Вычислить температуру замерзания раствора, содержащего 1%(мол.) примесей, которые не растворяются в твердом свинце.
7. Если 1 моль воды прибавить к бесконечно большому количеству водного раствора метанола, имеющего мольную долю метанола 0.4, объем воды увеличится на 17.35 мл. Если к этому раствору прибавить 1 моль метанола, то объем раствора увеличится на 39.01 мл. Рассчитать объем раствора, содержащего 0.4 моль метанола и 0.6 моль воды.
8. Определить составы точек 1,2 и Е. Какие равновесные фазы и в каком количестве выделятся из состава точки 3, если общая масса раствора в ней составляет 7 кг.
9. Если 1 моль воды прибавить к бесконечно большому количеству водного раствора метанола, имеющего мольную долю метанола 0.4, объем воды увеличится на 17.35 мл. Если к этому раствору прибавить 1 моль метанола, то объем раствора увеличится на 39.01 мл. Рассчитать объем раствора, содержащего 0.4 моль метанола и 0.6 моль воды.

10. В 1 литре водного раствора хлористого натрия содержится 260 г соли. Плотность раствора при 293 К равна 1.15 г/см^3 . Выразить концентрацию в 1) моль/л, 2) моль/1000 г воды, 3) мольных долях.
11. Технический диметиламин замерзает на 0.1 К ниже температуры плавления (180.97 К) чистого вещества. Вычислить концентрацию примесей в мол.%, считая, что твердых растворов не образуется. Молярная теплота плавления чистого диметиламина 5491 Дж/моль.
12. Объем раствора как функция состава для системы NaCl-H₂O определяется уравнением $V = 1000 + 16.4 \cdot c + 2.5 c^2 - 1.2 c^3$, где c – концентрация NaCl, выраженная в моль/л. Определить парциальный мольный объем NaCl в его полумольном растворе.
13. Определить составы растворов, изображенных точками 2 и 3, эвтонического раствора E, а также массу равновесных фаз – твердой соли C и жидкой (·) K, которые выделяются из (·)N. Масса исходного раствора составляет 21 кг.
14. Плотность 37%-ного раствора HCl при 25°C равна 1.118 г/см^3 . Выразить концентрацию в 1) моль/л, 2) моль/1000 г воды, 3) мольных долях.
15. Чистый четыреххлористый углерод кипит при 349.8 К. На сколько повысится температура кипения раствора, если к CCl₄ добавить 2.5% мас. серы. Молярная теплота испарения CCl₄ равна 30104 Дж/моль.
16. Определить плотность 40%-ного водного раствора метилового спирта, если известно, что парциальные мольные объемы воды и спирта в этом растворе равны 17.5 и 39 см³, соответственно.
17. Нанести на треугольник состава фигуративные точки следующих составов: (·)5 A-20, B – 80 % мас.; (·)6 A – 15, B – 55, C – 40 % мас. Определить сколько выделится соли A при упаривании раствора, изображенного (·)1, до (·)M. Вес упаренного раствора равен 10 кг.
18. В 1 литре водного раствора хлористого натрия содержится 260 г соли. Плотность раствора при 293 К равна 1.15 г/см^3 . Выразить концентрацию в 1) моль/л, 2) моль/1000 г воды, 3) мольных долях.
19. Технический диметиламин замерзает на 0.1 К ниже температуры плавления (180.97 К) чистого вещества. Вычислить концентрацию примесей в мол.%, считая, что твердых растворов не образуется. Молярная теплота плавления чистого диметиламина 5491 Дж/моль.
20. Объем раствора как функция состава для системы NaCl-H₂O определяется уравнением $V = 1000 + 16.4 \cdot c + 2.5 c^2 - 1.2 c^3$, где c – концентрация NaCl, выраженная в моль/л. Определить парциальный мольный объем NaCl в его полумольном растворе.

21. Определить составы растворов, изображенных точками 2 и 3, эвтонического раствора E, а также массу равновесных фаз – твердой соли C и жидкой (·) K, которые выделяются из (·)N. Масса исходного раствора составляет 21 кг.
22. Плотность 37%-ного раствора HCl при 25°C равна 1.118 г/см³. Выразить концентрацию в 1) моль/л, 2) моль/1000 г воды, 3) мольных долях.
23. Чистый четыреххлористый углерод кипит при 349.8 К. На сколько повысится температура кипения раствора, если к CCl₄ добавить 2.5%мас.серы. Молярная теплота испарения CCl₄ равна 30104 Дж/моль.
24. Определить плотность 40%-ного водного раствора метилового спирта, если известно, что парциальные мольные объемы воды и спирта в этом растворе равны 17.5 и 39 см³, соответственно.
25. Нанести на треугольник состава фигуративные точки следующих составов: (·)5 A-20, B – 80 % мас.; (·)6 A – 15, B – 55, C – 40 %мас. Определить сколько выделится соли A при упаривании раствора, изображенного (·)1, до (·)M. Вес упаренного раствора равен 10 кг.

[1-8, 12]

Раздел "Химические и адсорбционные равновесия"

1. При смешении 1кмоль уксусной кислоты и 1 кмоль этилового спирта протекает реакция $\text{CH}_3\text{COOH} + \text{C}_2\text{H}_5\text{OH} = \text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5 + \text{H}_2\text{O}$. При достижении равновесия в реакционной смеси находится по 1/3 кмоль кислоты и спирта и по 2/3 кмоль эфира и воды. Сколько эфира будет в реакционной смеси при достижении равновесия, если исходить из 1 кмоль кислоты, 1 кмоль спирта и 1 кмоль воды?
2. Константа равновесия реакции $\text{CO}_g + \text{H}_2\text{O}_g = \text{CO}_2_g + \text{H}_2_g$ при 500°C $K_p=5.5$. Смесь, состоящую из 1 моль CO и 5 моль H₂O, нагрели до этой температуры. Рассчитать мольную долю H₂O в равновесной смеси.
3. Константа равновесия реакции $\text{H}_2 + \text{J}_2 = 2\text{HJ}$ при 693К $K_c = 50$. Будет ли происходить образование HJ, если исходные концентрации H₂, J₂ и HJ 2, 5 и 10 кмоль/м³, соответственно.
4. При смешении 1кмоль уксусной кислоты и 1 кмоль этилового спирта протекает реакция $\text{CH}_3\text{COOH} + \text{C}_2\text{H}_5\text{OH} = \text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5 + \text{H}_2\text{O}$. При достижении равновесия в реакционной смеси находится по 1/3 кмоль кислоты и спирта и по 2/3 кмоль эфира и воды. Сколько эфира будет в реакционной смеси при достижении равновесия, если исходить из 1 кмоль кислоты, 1 кмоль спирта, 1 кмоль воды и 1 кмоль эфира?

5. Константа равновесия реакции $\text{CO}_g + \text{H}_2\text{O} = \text{CO}_2_g + \text{H}_2_g$ при 800°C $K_p=4.12$. Смесь, состоящую из 20% мас. CO и 80% мас. H_2O , нагрели до 800К. Определить состав смеси при достижении равновесия, если было взято 1.25 кг водяного пара.
6. Константа равновесия реакции $\text{H}_2 + \text{J}_2 = 2\text{HJ}$ при 693К $K_c = 50$. Будет ли происходить образование HJ, если исходные концентрации H_2 , J_2 и HJ 1, 0.25 и 5 кмоль/м³, соответственно.
7. Процесс получения хлора окислением проводится по реакции $4\text{HCl} + \text{O}_2 = 2\text{H}_2\text{O} + 2\text{Cl}_2$. При смешении 1 кмоль HCl с 0.48 кмоль O_2 образовалось 0.402 кмоль хлора. При температуре 659К давление в системе $1.0133 \cdot 10^5$ Па. Найти K_p .
8. В реакции $3\text{Fe} + 4\text{H}_2\text{O} = \text{Fe}_3\text{O}_4 + 4\text{H}_2$ при начальном давлении водяного пара $1.3325 \cdot 10^5$ после наступления равновесия при 473 К давление образовавшегося водорода $1.2717 \cdot 10^5$. Определить выход водорода, если в сосуд объемом $2 \cdot 10^{-3}$ м³, содержащий металлическое железо, ввести водяной пар под давлением $3.0399 \cdot 10^5$ Па при 473К.
9. K_p реакции $\text{N}_2\text{O}_4 = 2\text{NO}_2$ при 25°C 0.143. Рассчитать давление, которое установится в сосуде объемом 1 л, в который поместили 1 г N_2O_4 при этой температуре.
10. Для реакции $\text{PCl}_5 = \text{PCl}_3 + \text{Cl}_2$ при 250°C $\Delta_r G^\circ = -2508$ Дж/моль. При каком общем давлении степень превращения PCl_5 составит 30%?

[1-6,12]

Раздел " Химическая кинетика".

1. Для элементарной реакции $n\text{A} \rightarrow \text{B}$ обозначим период полураспада A через $t_{1/2}$, а время распада A на 75% через $t_{3/4}$. Докажите, что отношение $t_{3/4}/t_{1/2}$ не зависит от начальной концентрации, а определяется только порядком реакции.
2. Реакция I порядка протекает на 30% за 7 минут. Через какое время реакция завершится на 99%?
3. Вещество A смешали с веществами B и C в равных концентрациях 1 моль/л. Через 1000 с осталось 50% вещества A. Сколько вещества A останется через 2000 с, если реакция имеет I порядок?
4. Какая из реакций I или II порядка закончится быстрее, если начальные концентрации веществ равны 1 моль/л и константы скоростей реакций равны 1?
5. Реакция II порядка протекает на 30% за 10 минут. Через какое время реакция завершится на 99%?
6. Период полураспада радиоактивного изотопа ^{137}Cs , который попал в атмосферу в результате Чернобыльской аварии –29.7 лет. Через какое время количество этого изотопа составит менее 1 % от исходного?

7. Вещество А смешали с веществами В и С в равных концентрациях 1 моль/л. Через 1000 с осталось 50% вещества А. Сколько вещества А останется через 2000 с, если реакция имеет I I порядок (I тип)?
8. Какая из реакций нулевого или третьего порядка (I тип) закончится быстрее, если начальные концентрации веществ равны 1 моль/л и константы скоростей реакций равны 1?

[1-6,9-13]

Примерное содержание курсовых работ

1. Краткая характеристика получаемого соединения
2. Химические и физические свойства.
3. Сырьевые источники и их месторождения
4. Области применения
5. Способы получения.
6. Краткая характеристика существующих способов производства, их достоинства и недостатки
7. Описание способа производства, предлагаемого к расчету в курсовой работе, его достоинства и недостатки.
8. Формулировка задания.
9. Расчет по условию задания.
10. Выводы (в соответствии с вопросами задания).

Перечень тем курсовой работы

1. Разделение карбонатов калия и натрия политермической упаркой растворов, получаемых при переработке нефелина способом спекания.
2. Концентрирование и получение солей рубидия из поташных растворов при переработке нефелина.
3. Сравнение возможности разделения солей цезия и рубидия кристаллизацией хлоридов, сульфатов и нитратов.
4. Сравнение возможности разделения солей цезия и калия кристаллизацией хлоридов, сульфатов и нитратов.
5. Сравнение возможности разделения солей цезия и рубидия кристаллизацией карбонатов и бикарбонатов.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

К разделу "Растворы. Фазовые равновесия"

1. Что такое раствор, термодинамическое условие образования раствора.
2. Способы выражения концентраций.
3. Свойства идеальных растворов.
4. Растворы неидеальные (предельно разбавленные, регулярные и атермальные).
5. Закон Рауля, относительное понижение давления пара над раствором.
6. Коллигативные свойства растворов - изменение температур кипения и замерзания.
7. Осмотическое давление.
8. Парциальные молярные величины, их определение.
9. Уравнения Гиббса-Дюгема.
10. Понятие фазы, компонента, степени свободы.
11. Правило фаз Гиббса.
12. Условие фазового равновесия.
13. Фазовые переходы I, II рода. Уравнение Клапейрона-Клаузиуса.
14. Способы определения и нанесения составов на диаграммах состояния (способы Гиббса-Розебома).
15. Различные диаграммы состояния двойных систем. Типы диаграмм плавкости двойных систем.
16. Типы тройных диаграмм растворимости.
17. Правило рычага и соединительной прямой.

К разделу "Химическая кинетика"

1. Константы равновесия газофазных реакций.
2. Уравнение изотермы реакции в смеси идеальных газов.
3. Уравнение изобары реакции.
4. Задачи химической кинетики.
5. Соответствие механизмов реакции и стехиометрических уравнений.
6. Скорость реакции, кинетические кривые.
7. Методы измерения скорости реакции.
8. Молекулярность реакции, порядок реакции, константа скорости реакции.
9. Принцип независимости элементарных реакций.
10. Уравнение Аррениуса.

11. Кинетические уравнения реакций .
12. Методы определения порядка реакций.
13. Типы сложных реакций.
14. Принцип квазистационарности Боденштейна.
15. Цепные реакции, их стадии.
16. Разветвленные цепные реакции. Полуостров воспламенения – зависимость границ воспламенения от давления и температуры.
17. Гетерогенные реакции, кинетическая, диффузионная и переходная область протекания процесса.
18. Теории химической кинетики.

СОДЕРЖАНИЕ ПРОГРАММЫ И МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ К САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЕ ПО ИЗУЧЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Составитель - доцент кафедры химии и строительного материаловедения,
к.т.н. Елизарова Ирина Рудольфовна

Раздел "Электрохимия".

1. Химический и электрохимический способы осуществления окислительно-восстановительных реакций. Электрохимическая цепь и ее компоненты.
2. Определение теоретической электрохимии, ее разделы и связь с задачами прикладной электрохимии. Понятие электрохимического потенциала. Основные положения теории Аррениуса. Недостатки этой теории.
3. Развитие представлений о строении растворов электролитов (Т. Гротгус, М. Фарадей, С. Аррениус, И.А. Каблуков). Соотношение между энергией кристаллической решетки и энергией сольватации ионов в рамках модели Борна.
4. Ион-дипольное взаимодействие как основное условие устойчивости растворов электролитов. Термодинамическое описание ион-ионного взаимодействия.
5. Понятия средней активности и среднего коэффициента активности, их связь с активностью и коэффициентом активности отдельных ионов.
6. Основные допущения теории Дебая — Гюккеля. Потенциал ионной атмосферы.
7. Уравнения для коэффициента активности в первом, втором и третьем приближении теории Дебая — Гюккеля. Современные представления о растворах электролитов.
8. Неравновесные явления в растворах электролитов. Потоки диффузии и миграции.
9. Формула Нернста — Эйнштейна. Диффузионный потенциал. Удельная и эквивалентная электропроводность.
10. Числа переноса и методы их определения. Подвижности ионов и закон Кольрауша.
11. Физические основы теории Дебая — Гюккеля — Онзагера.
12. Электрофоретический и релаксационный эффекты; эффекты Вина и Дебая — Фалькенгагена.
13. Зависимость подвижности ионов от их природы, от природы растворителя, от температуры и концентрации раствора. Механизм электропроводности водных растворов кислот и щелочей.
14. Электрохимический потенциал, его химическая и электростатическая составляющие. Условия электрохимического равновесия на границах раздела фаз и в электрохимической цепи.
15. Связь ЭДС со свободной энергией Гиббса. Уравнения Нернста и Гиббса — Гельмгольца для равновесной электрохимической цепи. Понятие электродного потенциала.
16. Классификация электродов и электрохимических цепей. Определение коэффициентов активности и чисел переноса на основе измерений ЭДС.
17. Понятия поверхностного, внешнего и внутреннего потенциалов; разности потенциалов Гальвани и Вольта.
18. Двойной электрический слой и его роль в кинетике электродных процессов.
19. Электрокапиллярные явления; основное уравнение электрокапиллярности; уравнение Липпмана.
20. Емкость двойного электрического слоя; причины ее зависимости от потенциала электрода.
21. Адсорбционный метод изучения двойного электрического слоя. Модельные представления о структуре двойного слоя.
22. Теория Гуи — Чапмена — Грэма; сходство и различия этой теории с теорией ионной атмосферы Дебая — Гюккеля.
23. Плотность тока как мера скорости электродного процесса; поляризация электродов.
24. Стадии электродного процесса. Механизмы массопереноса: диффузия, миграция и конвекция.
25. Три основных уравнения диффузионной кинетики и общий подход к решению ее задач.
26. Зависимость тока от потенциала в условиях медленной стационарной диффузии к плоскому электроду.

27. Полярография. Уравнение для тока в теории замедленного разряда; ток обмена и перенапряжение.
28. Зависимость скорости стадии разряда от строения двойного слоя на примере электровосстановления ионов гидроксония и пероксидисульфата на ртутном электроде. Физический смысл энергии активации в условиях замедленного разряда.
29. Сопряженные реакции в электрохимической теории коррозии. Методы защиты металлов от коррозии.
30. Химические источники тока; их виды и основные характеристики.

Раздел "Элементы статистической термодинамики".

1. Функция распределения Максвелла – Больцмана.
2. Статистические средние значения макроскопических величин.
3. Ансамбли Гиббса. Каноническая функция распределения Гиббса.
4. Статистические выражения для основных термодинамических функций.
5. Формула Больцмана. Постулат Планка и абсолютная энтропия.
6. Молекулярная сумма по состояниям и сумма по состояниям макроскопической системы.
7. Поступательная сумма по состояниям. Формула Закура-Тетроде.
8. Вращательная сумма и колебательная суммы по состояниям.
9. Расчет констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики.
10. Межмолекулярные взаимодействия. Конфигурационный интеграл для реального газа. Точечные дефекты кристаллических решеток.
11. Описание необратимых процессов в термодинамике. Потoki. Силы. Феноменологические законы для скоростей процессов. Теорема Пригожина.
12. Соотношения взаимности Онзагера. Термодиффузия. Уравнение Чепмена-Энскога. Коэффициент термодиффузии.

МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ К ВЫПОЛНЕНИЮ КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЫ, ТЕСТИРОВАНИЯ, РАСЧЕТНО-ГРАФИЧЕСКОГО ЗАДАНИЯ, РЕФЕРАТА, КУРСОВОГО ПРОЕКТА (РАБОТЫ)

Раздел "Электрохимия".

Задачи по контрольной работе.

1. Рассчитать электропроводность 1М раствора AgNO_3 при $T=291\text{ K}$, если расстояние между электродами равно 5см, площадь каждого электрода 2 см^2 . Эквивалентная электропроводность раствора $\lambda=9.43\text{ м}^2/(\text{Ом}\cdot\text{кг}\cdot\text{экв})$.
2. Вычислить тепловой эффект реакции $\text{Zn}^+ + 2\text{AgCl} = \text{ZnCl}_2$, которая протекает в гальваническом элементе при 273.2 K , если $E_{\text{Г.Э.}} = 1.015\text{ В}$, $(dE/dT)_{\text{P,T}} = -4.02\cdot 10^{-4}\text{ В/К}$.
3. Вычислить константу равновесия реакции, протекающей в элементе $\text{Zn} | \text{Zn}^{2+} | \text{Cu}^{2+} | \text{Cu}$ при стандартных условиях.

Примерное содержание курсовой работы.

1. Краткая характеристика элемента (металла, газа)
2. Распространение в земной коре
3. Месторождения
4. Химические и физические свойства.
5. Области применения
6. Способы получения.

7. Краткая характеристика существующих способов производства, их достоинства и недостатки
8. Описание способа производства, предлагаемого к расчету в курсовой работе, его достоинства и недостатки.
9. Формулировка задания.
10. Расчет по условию задания.
11. Выводы (в соответствии с вопросами задания).

Перечень тем курсовой работы.

1. Электролитическое получение хлора с использованием диафрагменного хлорного электролизера с графитовыми анодами.
2. Параметры процесса электролитического получения хлора с использованием диафрагменного хлорного электролизера с графитовыми анодами.
3. Получение металлического покрытия методом химического осаждения никеля.
4. Электролитическое производство магния по "карналлитовой" схеме.
5. Получение металлического натрия на жидком свинцовом катоде.

Раздел "Элементы статистической термодинамики."

Задачи по контрольной работе.

1. Молекула может находиться на двух уровнях с энергиями 0 и 100 см^{-1} . Какова вероятность того, что она будет находиться на низшем уровне при 25°C .
2. При охлаждении любой термодинамической системы заселенность одних уровней увеличивается, а других уменьшается. Используя закон распределения Больцмана, определите. Какова должна быть энергия уровня для того, чтобы его заселенность увеличивалась с уменьшением температуры.
3. Рассчитайте наиболее вероятную скорость молекул озона при температуре -30°C .
4. При какой температуре средняя скорость молекул кислорода равна 500 м/с ?
5. При некоторых условиях средняя скорость молекул кислорода равна 400 м/с . Чему равна средняя скорость молекул водорода при этих же условиях?
6. Какова доля молекул массой m , имеющих скорость выше средней при температуре T ? Зависит ли эта доля от массы молекул и температуры?
7. Молекула может находиться на уровне с энергией 0 или на одном из трех уровней с энергией E . Найдите среднюю энергию молекул: а) при очень низких температурах, б) при очень высоких температурах.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

К разделу "Электрохимия"

1. Химический и электрохимический способы осуществления окислительно-восстановительных реакций. Электрохимическая цепь и ее компоненты.
2. Развитие представлений о строении растворов электролитов (Т. Гротгус, М. Фарадей, С. Аррениус, И.А. Каблуков). Основные положения теории Аррениуса, недостатки этой теории.
3. Ион-дипольное взаимодействие как основное условие устойчивости растворов электролитов. Термодинамическое описание ион-ионного взаимодействия.
4. Понятия средней активности и среднего коэффициента активности; их связь с активностью и коэффициентом активности отдельных ионов.
5. Основные допущения теории Дебая — Гюккеля. Потенциал ионной атмосферы.
6. Уравнения для коэффициента активности в первом, втором и третьем приближении теории Дебая — Гюккеля. Современные представления о растворах электролитов.

7. Потоки диффузии и миграции. Формула Нернста — Эйнштейна. Диффузионный потенциал. Удельная и эквивалентная электропроводность.
8. Физические основы теории Дебая — Гюккеля — Онзагера; электрофоретический и релаксационный эффекты; эффекты Вина и Дебая — Фалькенгагена.
9. Зависимость подвижности ионов от их природы, от природы растворителя, от температуры и концентрации раствора. Механизм электропроводности водных растворов кислот и щелочей.
10. Электрохимический потенциал, его химическая и электростатическая составляющие. Условия электрохимического равновесия на границах раздела фаз и в электрохимической цепи. Связь ЭДС со свободной энергией Гиббса.
11. Уравнения Нернста и Гиббса — Гельмгольца для равновесной электрохимической цепи. Понятие электродного потенциала.
12. Классификация электродов и электрохимических цепей. Определение коэффициентов активности и чисел переноса на основе измерений ЭДС.
13. Понятия поверхностного, внешнего и внутреннего потенциалов; разности потенциалов Гальвани и Вольта. Электрокапиллярные явления; основное уравнение электрокапиллярности; уравнение Липпмана.
14. Двойной электрический слой и его роль в кинетике электродных процессов. Емкость двойного электрического слоя; причины ее зависимости от потенциала электрода. Адсорбционный метод изучения двойного электрического слоя.
15. Модельные представления о структуре двойного слоя. Теория Гуи — Чапмена — Грэма; сходство и различия этой теории с теорией ионной атмосферы Дебая — Гюккеля.
16. Плотность тока как мера скорости электродного процесса; поляризация электродов. Стадии электродного процесса.
17. Механизмы массопереноса: диффузия, миграция и конвекция. Три основных уравнения диффузионной кинетики и общий подход к решению ее задач.
18. Зависимость тока от потенциала в условиях медленной стационарной диффузии к плоскому электроду. Полярография.
19. Уравнение для тока в теории замедленного разряда; ток обмена и перенапряжение. Физический смысл энергии активации в условиях замедленного разряда.
20. Сопряженные реакции в электрохимической теории коррозии. Методы защиты металлов от коррозии.
21. Числа переноса и методы их определения. Подвижности ионов и закон Кольрауша.

К разделу "Элементы статистической термодинамики"

1. Механическое описание молекулярной системы. Функция распределения Максвелла-Больцмана.
2. Статистические средние значения макроскопических величин. Ансамбли Гиббса.
3. Каноническая функция распределения Гиббса. Сумма по состояниям как статистическая характеристическая функция.
4. Статистические расчеты энтропии. Формула Больцмана.
5. Молекулярная сумма по состояниям.
6. Поступательная сумма по состояниям.
7. Составляющие энтропии, внутренней энергии и теплоемкости, обусловленные поступательным движением. Формула Закура-Тетроде.
8. Вращательная сумма по состояниям.
9. Составляющие для внутренней энергии, теплоемкости, энтропии, обусловленные вращательным движением.
10. Колебательная сумма по состояниям.
11. Составляющие для внутренней энергии, теплоемкости, энтропии, обусловленные колебательным движением.
12. Расчет констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики.
13. Межмолекулярные взаимодействия. Конфигурационный интеграл.

14. Точечные дефекты кристаллических решеток. Вакансия. Междоузельные частицы.
15. Описание необратимых процессов в термодинамике. Потоки, силы, феноменологические законы для скоростей процессов.
16. Зависимость скорости производства энтропии от обобщенных потоков и сил. Теорема Пригожина.
17. Потоки при совместном воздействии нескольких сил. Соотношения взаимности Онзагера.
18. Теплопроводность, коэффициент теплопроводности. Термодиффузия, коэффициент термодиффузии.