

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова



подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины
Химическая термодинамика Б3.В.3

Направление подготовки: 020100.62 - Химия

Профиль подготовки: Физическая химия

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Горбачук В.В.

Рецензент(ы):

Зиганшин М.А. , Соломонов Б.Н.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Соломонов Б. Н.

Протокол заседания кафедры No ____ от " ____ " _____ 201__г

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No ____ от " ____ " _____ 201__г

Регистрационный No 720715

Казань
2014

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) профессор, д.н. (профессор) Горбачук В.В. Кафедра физической химии Химический институт им. А.М. Бутлерова, Valery.Gorbachuk@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

Развитие у студентов способности ориентироваться в современных научных достижениях в области химической термодинамики процессов сорбции на границе раздела фаз, и межфазного переноса, хроматографического разделения сложных смесей, физических основ супрамолекулярной химии и нанотехнологии, термодинамики взаимодействия субстрат-рецептор с участием белков и органических макроциклических рецепторов, термодинамики сольватации неэлектролитов.

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б3.В.3 Профессиональный" основной образовательной программы 020100.62 Химия и относится к вариативной части. Осваивается на 4 курсе, 7 семестр.

Дисциплина "Химическая термодинамика" относится к вариативной части профессионального блока дисциплин. Она является разделом физической химии, рассматривающим современные подходы к решению задачи прогнозирования физических и физико-химических свойств веществ и материалов на основе данных об молекулярной структуре. Поэтому изучение данной дисциплины требует предварительных знаний основ физической химии, органической и аналитической химии, а также наличия базовых лабораторных навыков. Кроме того, обучающиеся должны владеть элементами высшей математики и основами физики.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-6 (профессиональные компетенции)	владеет навыками работы на современной учебно-научной аппаратуре при проведении химических экспериментов (ПК-6);
ПК-7 (профессиональные компетенции)	имеет опыт работы на серийной аппаратуре, применяемой в аналитических и физико-химических исследованиях (ПК-7);
ПК-8 (профессиональные компетенции)	владеет методами регистрации и обработки результатов химически экспериментов (ПК-8);

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

химическая термодинамика процессов сорбции на границе раздела фаз, и межфазного переноса, хроматографического разделения сложных смесей, термодинамика взаимодействия субстрат-рецептор с участием белков и органических макроциклических рецепторов, термодинамика сольватации неэлектролитов.

2. должен уметь:

ориентироваться в проблемах современной химической термодинамики, в том числе в физических и физико-химических основах супрамолекулярной химии и нанотехнологии, решать задачи по прогнозированию свойств веществ и материалов на основе данных о структуре их молекул

3. должен владеть:

Основными подходами и экспериментальными методами современной химической термодинамики, позволяющими измерять основные физические и физико-химические свойства веществ и материалов, в том числе сложных супрамолекулярных систем и объектов с наноструктурой

4. должен демонстрировать способность и готовность:

применять полученные знания в области современной химической термодинамики для решения проблем науки, техники и промышленности, сельского хозяйства

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 8 зачетных(ые) единиц(ы) 288 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины экзамен в 7 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Химическая термодинамика, предмет ее изучения и положение среди других химических наук.	7	1	3	0	0	
2.	Тема 2. Термодинамика гомогенных растворов неэлектролитов.	7	2	3	7	0	
3.	Тема 3. Термодинамика гомогенных растворов и ее практические приложения.	7	3	3	7	0	
4.	Тема 4. Разделение термодинамических параметров образования растворов на вклады .	7	4	3	7	0	тестирование

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
5.	Тема 5. Современные представления о межмолекулярных взаимодействиях в гетерогенных системах.	7	5	3	7	0	отчет
6.	Тема 6. Гидрофобный эффект.	7	6	3	7	0	отчет
7.	Тема 7. Закономерности, определяющие соотношение "структура-свойство" для растворов неэлектролитов.	7	7	3	7	0	отчет
8.	Тема 8. Классификация неспецифических межмолекулярных взаимодействий .	7	8	3	6	0	контрольная работа
9.	Тема 9. Компенсационная зависимость между энтальпией и энтропией сольватации для растворов в неполярных средах и воде.	7	9	3	6	0	отчет
10.	Тема 10. Термодинамическое проявление гидрофобного эффекта и его структурная интерпретация.	7	10	3	6	0	отчет
11.	Тема 11. Гидрофобная гидратация.	7	11	3	6	0	отчет
12.	Тема 12. Термодинамика гетерогенных систем.	7	12	3	6	0	отчет
13.	Тема 13. Количественные способы описания изотерм адсорбции.	7	13	2	6	0	отчет
14.	Тема 14. Линейная идеальная газовая хроматография.	7	14	2	6	0	отчет

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
15.	Тема 15. Линейная неидеальная газовая хроматография.	7	15	2	6	0	отчет
16.	Тема 16. Устройство газового хроматографа.	7	16	2	6	0	отчет
17.	Тема 17. Высокоэффективная жидкостная хроматография (ВЭЖХ).	7	17	2	6	0	отчет
18.	Тема 18. Устройство жидкостного хроматографа.	7	18	2	0	0	контрольная работа
	Тема . Итоговая форма контроля	7		0	0	0	экзамен
	Итого			48	102	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Химическая термодинамика, предмет ее изучения и положение среди других химических наук.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Объекты исследования химической термодинамики. Основные законы химической термодинамики. Первое и второе начало термодинамики. Термодинамические параметры равновесных процессов: химических реакций и комплексообразования. Физический смысл энергии Гиббса химической реакции, любого физико-химического процесса.

Тема 2. Термодинамика гомогенных растворов неэлектролитов.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Законы Рауля и Генри. Химический потенциал. Термодинамическая активность. Ее физический смысл. Физический смысл коэффициента активности. Пример с ограниченно растворимыми соединениями.

практическое занятие (7 часа(ов)):

Работа с изопериболическим калориметром растворения. Электрическая калибровка калориметра с помощью эффекта Джоуля.

Тема 3. Термодинамика гомогенных растворов и ее практические приложения.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Термодинамические параметры сольватации. Избыточные величины для реальных растворов. Понятие стандартного состояния в приложении к процессам образования растворов. Предельные коэффициенты активности. Параметр гидрофобности. Применение этих параметров для прогнозирования биологической активности органических веществ. Пример с токсичностью органических соединений

практическое занятие (7 часа(ов)):

Определение энтальпии растворения и сольватации нафталина в диоксане.

Тема 4. Разделение термодинамических параметров образования растворов на вклады .

лекционное занятие (3 часа(ов)):

. Разделение термодинамических параметров образования растворов на вклады энергии образования полости, энергии взаимодействия и межмолекулярных взаимодействий растворенное вещество - растворенное вещество. Пример раствора со сферическими одинаковыми молекулами. Значение этих представлений для супрамолекулярной химии. Реорганизация растворителя, ее вклад в величины термодинамических параметров.

практическое занятие (7 часа(ов)):

Общие представления об устройстве капиллярного газового хроматографа.

Тема 5. Современные представления о межмолекулярных взаимодействиях в гетерогенных системах.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Современные представления о межмолекулярных взаимодействиях в гетерогенных системах. Типы межмолекулярных взаимодействий. Роль полярности растворителя и растворенного вещества

практическое занятие (7 часа(ов)):

Ознакомление с устройством газового хроматографа Кристалл-2000М и с устройством статического парового газохроматографического анализа.

Тема 6. Гидрофобный эффект.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Супрамолекулярные системы, кооперативные межмолекулярные взаимодействия, взаимодействия гость-хозяин. Их отличия от обычных парных взаимодействий. Понятие комплементарности. Примеры супрамолекулярных систем

практическое занятие (7 часа(ов)):

Работа с Фурье-ИК-спектрометром Vector-22 (Bruker). Съёмка и расшифровка ИК-спектров.

Тема 7. Закономерности, определяющие соотношение "структура-свойство" для растворов неэлектролитов.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Закономерности, определяющие соотношение "структура-свойство" для растворов неэлектролитов. Феноменологические подходы к описанию этих соотношений для термодинамических параметров сольватации. Структурные параметры соединений

практическое занятие (7 часа(ов)):

Определение константы образования комплекса с Н-связью. Работа с программным обеспечением и ИК-спектральными базами данных.

Тема 8. Классификация неспецифических межмолекулярных взаимодействий .

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Классификация неспецифических межмолекулярных взаимодействий по величине их вклада, приходящегося на единицу собственного объема молекул (мольной рефракции) для различных по структуре молекул и функциональных групп. Линейные соотношения структура-энергия. Модель LSER.

практическое занятие (6 часа(ов)):

УФ-спектроскопия. Основы метода, его приложения, изучение межмолекулярных взаимодействий.

Тема 9. Компенсационная зависимость между энтальпией и энтропией сольватации для растворов в неполярных средах и воде.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Компенсационная зависимость между энтальпией и энтропией сольватации для растворов в неполярных средах и воде. Физический смысл компенсационной зависимости для термодинамических параметров сольватации.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Работа с УФ-спектрометром Lambda 35 (Perkin Elmer). Съёмка и расшифровка УФ-спектров.

Тема 10. Термодинамическое проявление гидрофобного эффекта и его структурная интерпретация.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Характер компенсационного эффекта при варьировании структуры растворителя и растворяемого соединения. Факторы, определяющие величину коэффициента пропорциональности между свободной энергией и энтальпией сольватационных процессов.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Определение константы образования комплекса с переносом заряда.

Тема 11. Гидрофобная гидратация.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Примеры с участием белков и циклодекстрина. Структурная интерпретация гидрофобной гидратации.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Работа с программным обеспечением прибора(Perkin Elmer).

Тема 12. Термодинамика гетерогенных систем.

лекционное занятие (3 часа(ов)):

Термодинамика гетерогенных систем. Понятия адсорбции, адсорбента, сорбата, изотермы сорбции. Различные типы сорбентов и видов адсорбции.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Ознакомление с устройством прибора совмещенных термогравиметрии и дифференциальной сканирующей калориметрии STA 449C (Netzsch), сопряженного с квадрупольным масс-спектрометром.

Тема 13. Количественные способы описания изотерм адсорбции.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Уравнения Ленгмюра, Брунауэра-Эммета-Теллера, Хилла. Форма изотерм сорбции, аппроксимируемых этими уравнениями, а также уравнениями Генри и Рауля. Примеры объектов, описываемых этими уравнениями. Особенности изотерм сорбции воды на активированном угле. Определение объема монослоя и удельной поверхности адсорбента.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Массочувствительные сенсоры типа кварцевых микровесов. Основы сенсорного анализа. Ознакомление с устройством массочувствительных сенсоров типа кварцевых микровесов. Приготовление сенсоров с тонким слоем рецептора. Определение состава насыщенных клатратов каликсаренов с помощью массочувствительных сенсоров типа кварцевых микровесов.

Тема 14. Линейная идеальная газовая хроматография.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Понятие коэффициента распределения сорбата (между подвижной и неподвижной фазами). Понятия объема удерживания, исправленного объема удерживания, мертвого объема, времени удерживания, мертвого времени, удельного объема удерживания.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Рентгеноструктурный анализ Монокристаллическая рентгеновская дифрактография
Лабораторная работа: Порошковая рентгеновская дифрактография. Идентификация кристаллических фаз.

Тема 15. Линейная неидеальная газовая хроматография.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Уравнение Ван Деемтера. Физический смысл его членов. Понятие ширины хроматографического пика и причин его уширения. Понятие высоты теоретической тарелки.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Гетерогенный катализ реакций гидрирования и дегидрирования углеводородов.

Тема 16. Устройство газового хроматографа.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Детекторы, устройства ввода образца. Проблемы количественного ввода образца в капиллярную хроматографическую колонку.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Устройство масс-спектрометра и хроматомасс-спектрометра. Определение состава и идентификация компонентов сложных смесей

Тема 17. Высокоэффективная жидкостная хроматография (ВЭЖХ).**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Особенности ВЭЖХ по сравнению с газовой хроматографией. Различия в характере зависимости высоты теоретической тарелки от линейной скорости элюента. Требования к размеру частиц неподвижной фазы в ВЭЖХ.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Определение состава и идентификация компонентов сложных смесей

Тема 18. Устройство жидкостного хроматографа.**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Детекторы, устройства ввода образца. Модифицированные неподвижные фазы для жидкостной хроматографии.

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
4.	Тема 4. Разделение термодинамических параметров образования растворов на вклады .	7	4	подготовка к тестированию	7	тестирование
5.	Тема 5. Современные представления о межмолекулярных взаимодействиях в гетерогенных системах.	7	5	подготовка к отчету Оформление отчетов о выполненных лабораторных работах(математические расчеты, п	7	отчет
6.	Тема 6. Гидрофобный эффект.	7	6	подготовка к отчету Оформление отчетов о выполненных лабораторных работах(математические расчеты, п	7	отчет
7.	Тема 7. Закономерности, определяющие соотношение "структура-свойство" для растворов неэлектролитов.	7	7	подготовка к отчету Оформление отчетов о выполненных лабораторных работах(математические расчеты, п	7	отчет

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
8.	Тема 8. Классификация неспецифических межмолекулярных взаимодействий .	7	8	подготовка к контрольной работе	7	контрольная работа
9.	Тема 9. Компенсационная зависимость между энтальпией и энтропией сольватации для растворов в неполярных средах и воде.	7	9	подготовка к отчету Оформление отчетов о выполненных лабораторных работах(математические расчеты, п	7	отчет
10.	Тема 10. Термодинамическое проявление гидрофобного эффекта и его структурная интерпретация.	7	10	подготовка к отчету Оформление отчетов о выполненных лабораторных работах(математические расчеты, п	7	отчет
11.	Тема 11. Гидрофобная гидратация.	7	11	подготовка к отчету Оформление отчетов о выполненных лабораторных работах(математические расчеты, п	7	отчет
12.	Тема 12. Термодинамика гетерогенных систем.	7	12	подготовка к отчету Оформление отчетов о выполненных лабораторных работах(математические расчеты,	7	отчет
13.	Тема 13. Количественные способы описания изотерм адсорбции.	7	13	подготовка к отчету	7	отчет
14.	Тема 14. Линейная идеальная газовая хроматография.	7	14	подготовка к отчету Оформление отчетов о выполненных лабораторных работах(математические расчеты,	7	отчет

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
15.	Тема 15. Линейная неидеальная газовая хроматография.	7	15	подготовка к отчету Оформление отчетов о выполненных лабораторных работах(математические расчеты,	7	отчет
16.	Тема 16. Устройство газового хроматографа.	7	16	подготовка к отчету Оформление отчетов о выполненных лабораторных работах(математические расчеты,	7	отчет
17.	Тема 17. Высокоэффективная жидкостная хроматография (ВЭЖХ).	7	17	подготовка к отчету Оформление отчетов о выполненных лабораторных работах(математические расчеты,	7	отчет
18.	Тема 18. Устройство жидкостного хроматографа.	7	18	подготовка к контрольной работе	4	контрольная работа
	Итого				102	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Разбор типичных задач химической термодинамики, встречающихся на практике: в научной работе, медицине, быту, промышленности. Лабораторные работы по изучению возможностей экспериментальных методов химической термодинамики на современном научном оборудовании с применением компьютерной обработки результатов.

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Тема 1. Химическая термодинамика, предмет ее изучения и положение среди других химических наук.

Тема 2. Термодинамика гомогенных растворов неэлектролитов.

Тема 3. Термодинамика гомогенных растворов и ее практические приложения.

Тема 4. Разделение термодинамических параметров образования растворов на вклады .
тестирование , примерные вопросы:

Пример тестового задания: 1. Почему для характеристики свойств компонента в системе используют термодинамическую активность? А) чтобы охарактеризовать работу по переходу из стандартного состояния в данное Б) чтобы охарактеризовать работу по переходу из данного состояния в стандартное В) используют вместо концентрации данного компонента Г) используют вместо парциального давления данного компонента 2. Почему для описания свойств компонента в системе иногда используют стандартное состояние ?идеальный газ?? А) потому что параметры реального газа не известны Б) чтобы исключить влияние структуры компонента на его исходное состояние В) чтобы исключить влияние структуры компонента на его конечное состояние Г) потому что параметры компонента в данном состоянии не известны. 3. Почему соотношения структура-свойство для растворов неэлектролитов удобно анализировать для бесконечно разбавленных растворов? А) потому что ?конечно? разбавленных растворов не существует Б) потому что бесконечно разбавленный раствор является исходным состоянием В) чтобы исключить влияние взаимодействия между молекулами компонента на его конечное состояние Г) чтобы исключить влияние взаимодействия между молекулами компонента на его исходное состояние 4. Почему не вводят понятие избыточной энтальпии образования раствора неэлектролита? А) потому что его невозможно измерить Б) потому что его величина равна нулю В) потому что его величина зависит от концентрации раствора Г) потому что его величина не зависит от концентрации раствора 5. Почему энтальпию образования полости в растворителе и взаимодействия растворитель- растворенное вещество иногда рассматривают как кратные энтальпии парообразования растворяемого вещества? А) потому что парообразование является мысленной стадией процесса образования полости в растворителе Б) потому что парообразование является мысленной стадией процесса сольватации В) потому что парообразование является мысленной стадией процесса растворения Г) чтобы упростить анализ межмолекулярных взаимодействий в растворе 6. Как обнаружить гидрофобный эффект? А) измерить растворимость вещества в воде Б) измерить параметр гидрофобности В) измерить энергию Гиббса и энтальпию растворения вещества в воде Г) рассчитать параметр гидрофобности 7. Как предсказать соотношение биологической активности двух гомологов? А) рассчитать параметр гидрофобности каждого Б) измерить параметр гидрофобности каждого В) измерить параметр гидрофобности одного из гомологов Г) изучить их бактерицидные свойства

Тема 5. Современные представления о межмолекулярных взаимодействиях в гетерогенных системах.

отчет , примерные вопросы:

Подготовка отчета по следующим лабораторным работам: - Работа с изопериболическим калориметром растворения. Электрическая калибровка калориметра с помощью эффекта Джоуля. - Определение энтальпии растворения и сольватации нафталина в диоксане. - Определение предельных коэффициентов активности методом статического парофазного газохроматографического анализа. - Основы метода статического парофазного газохроматографического анализа.

Тема 6. Гидрофобный эффект.

отчет , примерные вопросы:

Подготовка отчета по лабораторной работе: Работа с Фурье-ИК-спектрометром Vector-22 (Bruker). Съёмка и расшифровка ИК-спектров. С

Тема 7. Закономерности, определяющие соотношение "структура-свойство" для растворов неэлектролитов.

отчет , примерные вопросы:

Подготовка отчета по лабораторной работе: Определение константы образования комплекса с Н-связью. Работа с программным обеспечением и ИК-спектральными базами данных.

Тема 8. Классификация неспецифических межмолекулярных взаимодействий .

контрольная работа , примерные вопросы:

Вопросы к контрольной работе: 1. Объясните, почему некоторые химические реакции протекают самопроизвольно, используя термины энергия Гиббса и работа. 2. Почему для характеристики свойств компонента в системе используют относительное давление пара? 3. Почему для характеристики свойств компонента в системе используют термодинамическую активность? 4. В чем физический смысл относительного давления пара вещества? 5. В чем физический смысл термодинамической активности вещества? 6. Какое стандартное состояние удобно использовать при описании свойств раствора неэлектролита? 7. Почему для характеристики свойств компонента в системе используют понятие стандартного состояния? 8. Почему вводят понятия избыточной энергии Гиббса и энтропии? 9. Чем избыточная энергия Гиббса отличается от полной энергии Гиббса того же процесса? 10. Существует ли понятие избыточной энтальпии образования раствора неэлектролита? Почему? 11. Почему для описания свойств компонента в системе иногда используют стандартное состояние "идеальный газ"? 12. Какова разность величин изменения энергии Гиббса компонента при образовании раствора для стандартных состояний "чистый жидкий (твердый) компонент" и "данный компонент в состоянии идеального газа"? 13. Какое парциальное давление пара компонента является самым удобным для выбора его стандартного состояния "идеальный газ"? 14. Что представляет собой состояние бесконечно разбавленного раствора? 15. Что происходит с неэлектролитом по мере увеличения степени его разбавления? 16. Почему понятие бесконечно разбавленного раствора вводят только для растворов неэлектролитов? 17. До какой степени нужно разбавить раствор неэлектролита, чтобы он стал бесконечно разбавленным?

Тема 9. Компенсационная зависимость между энтальпией и энтропией сольватации для растворов в неполярных средах и воде.

отчет , примерные вопросы:

Подготовка отчета по следующим лабораторным работам: - Работа с УФ-спектрометром Lambda 35 (Perkin Elmer). Съёмка и расшифровка УФ-спектров. Определение константы образования комплекса с переносом заряда. Работа с программным обеспечением прибора.

Тема 10. Термодинамическое проявление гидрофобного эффекта и его структурная интерпретация.

отчет , примерные вопросы:

Подготовка отчета по лабораторным работам: Совмещенная термогравиметрия, дифференциальная сканирующая калориметрия и масс-спектрометрия. Основы термогравиметрии и дифференциальной сканирующей калориметрии. Основы квадрупольной масс-спектрометрии.

Тема 11. Гидрофобная гидратация.

отчет , примерные вопросы:

Подготовка отчета по следующим лабораторным работам: - Устройство и работа прибора совмещенных термогравиметрии и дифференциальной сканирующей калориметрии STA 449C (Netzsch), сопряженного с квадрупольным масс-спектрометром.

Тема 12. Термодинамика гетерогенных систем.

отчет , примерные вопросы:

Подготовка отчета по лабораторным работам: Монокристалльная рентгеновская дифрактография. Рентгеноструктурный анализ

Тема 13. Количественные способы описания изотерм адсорбции.

отчет , примерные вопросы:

Подготовка отчета по лабораторным работам: Порошковая рентгеновская дифрактография. Идентификация кристаллических фаз.

Тема 14. Линейная идеальная газовая хроматография.

отчет , примерные вопросы:

Подготовка отчета по лабораторным работам: Массочувствительные сенсоры типа кварцевых микровесов. Основы сенсорного анализа. Ознакомление с устройством массочувствительных сенсоров типа кварцевых микровесов.

Тема 15. Линейная неидеальная газовая хроматография.

отчет , примерные вопросы:

Подготовка отчета по лабораторным работам: Приготовление сенсоров с тонким слоем рецептора. Определение состава насыщенных клатратов каликсаренов с помощью массочувствительных сенсоров типа кварцевых микровесов.

Тема 16. Устройство газового хроматографа.

отчет , примерные вопросы:

Подготовка отчета по следующим лабораторным работам: Гетерогенный катализ реакций гидрирования и дегидрирования углеводородов.

Тема 17. Высокоэффективная жидкостная хроматография (ВЭЖХ).

отчет , примерные вопросы:

Подготовка отчета по следующим лабораторным работам: Устройство масс-спектрометра и хроматомасс-спектрометра. Определение состава и идентификация компонентов сложных смесей

Тема 18. Устройство жидкостного хроматографа.

контрольная работа , примерные вопросы:

Вопросы к контрольной работе: 1 Типы межмолекулярных взаимодействий. 2. Объекты исследования химической термодинамики. Основные законы химической термодинамики. Первое и второе начало термодинамики. Термодинамические параметры равновесных процессов: химических реакций и комплексообразования. Физический смысл энергии Гиббса химической реакции, любого физико-химического процесса. 3. Термодинамика гомогенных растворов неэлектролитов. Законы Рауля и Генри. Для каких растворов они работают? Химический потенциал. Термодинамическая активность. Ее физический смысл. Физический смысл коэффициента активности. Пример с ограниченно растворимыми соединениями. 4. Термодинамические параметры сольватации для разных стандартных состояний. Избыточные величины термодинамических параметров: энергии Гиббса, энтропии и энтальпии для реальных растворов. Понятие стандартного состояния для физико-химического процесса в приложении к процессам образования растворов. 5. Предельно разбавленные растворы: почему возможно их существование? Предельные коэффициенты активности: их физический смысл. Параметр гидрофобности: коэффициент распределения октанол-вода. Для чего требуется знание этих параметров? Пример с токсичностью органических соединений. 6. Разделение термодинамических параметров образования растворов (сольватации, растворения) на вклады энергии образования полости, энергии взаимодействия и энергии разрыва межмолекулярных взаимодействий растворенное вещество - растворенное вещество. Физический смысл каждого вклада. Простейший случай раствора, для которого величины этих вкладов легко свести к измеряемым термодинамическим параметрам чистых веществ. Каковы сложности в применении этой модели к реальным растворам? 7. Реорганизация растворителя (донорно-акцепторные, водородная связь) и неспецифические. Как определить вклад специфических взаимодействий в энергию сольватации? Роль полярности растворителя

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к экзамену:

Самостоятельная работа студентов (СРС) включает следующие виды:

- изучение теоретического лекционного материала;
- проработка теоретического материала (конспекты лекций, основная и дополнительная литература).

ВОПРОСЫ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ И САМОКОНТРОЛЯ

1. Объясните, почему некоторые химические реакции протекают самопроизвольно, используя термины энергия Гиббса и работа.
2. Почему для характеристики свойств компонента в системе используют относительное давление пара?
3. Почему для характеристики свойств компонента в системе используют термодинамическую активность?
4. В чем физический смысл относительного давления пара вещества?

5. В чем физический смысл термодинамической активности вещества?
6. Какое стандартное состояние удобно использовать при описании свойств раствора неэлектролита?
7. Почему для характеристики свойств компонента в системе используют понятие стандартного состояния?
8. Почему вводят понятия избыточной энергии Гиббса и энтропии?
9. Чем избыточная энергия Гиббса отличается от полной энергии Гиббса того же процесса?
10. Существует ли понятие избыточной энтальпии образования раствора неэлектролита? Почему?
11. Почему для описания свойств компонента в системе иногда используют стандартное состояние "идеальный газ"?
12. Какова разность величин изменения энергии Гиббса компонента при образовании раствора для стандартных состояний "чистый жидкий (твердый) компонент" и "данный компонент в состоянии идеального газа"?
13. Какое парциальное давление пара компонента является самым удобным для выбора его стандартного состояния "идеальный газ"?
14. Что представляет собой состояние бесконечно разбавленного раствора?
15. Что происходит с неэлектролитом по мере увеличения степени его разбавления?
16. Почему понятие бесконечно разбавленного раствора вводят только для растворов неэлектролитов?
17. До какой степени нужно разбавить раствор неэлектролита, чтобы он стал бесконечно разбавленным?
18. В чем особенность концентрационной зависимости для супрамолекулярных взаимодействий с образованием клатратов?
19. От чего может зависеть коэффициент пропорциональности между свободной энергией и энтальпией сольватационных процессов?
20. Какова форма изотерм сорбции, описываемых уравнениями Ленгмюра, Брунауэра-Эммета - Теллера, Флори-Хаггинса, Хилла?
21. Что такое гидрофобный эффект?
22. Почему активированный уголь считается особым адсорбентом?
23. В чем особенность адсорбции кислорода растворами гемоглобина?
24. В чем преимущество капиллярных колонок по сравнению с насадочными в газовой хроматографии?

Билеты к экзамену

Билет 1

1. Параметр гидрофобности: коэффициент распределения октанол-вода. Его роль в оценке биологической активности веществ.
2. Супрамолекулярные системы, кооперативные межмолекулярные взаимодействия, взаимодействия гость-хозяин. Чем они отличаются от обычных парных взаимодействий? Примеры супрамолекулярных систем: уксусная кислота, гемоглобин, клатраты каликсаренов, комплексы краун-эфиров.

Билет 2

Предельные коэффициенты активности. Зависимость биологической активности веществ от их обратной растворимости в воде.

Компенсационная зависимость между энтальпией и энтропией сольватации для растворов в неполярных средах и воде.

Билет 3

Особенность концентрационной зависимости для супрамолекулярных взаимодействий с образованием клатратов. Правило фаз Гиббса.

Особенности активированного угля как сорбента

Билет 4.

1. Гидрофобный эффект. Термодинамическое проявление гидрофобного эффекта и его структурная интерпретация.
2. Граничные условия для изотерм сорбции монослойной, многослойной и кооперативной сорбции. Определение объема монослоя и удельной поверхности адсорбента.

Билет 5

1. Линейные соотношения структура-энергия. Модель LSER.
2. Линейная идеальная газовая хроматография. Понятие коэффициента распределения сорбата (между подвижной и неподвижной фазами). Понятия объема удерживания, исправленного объема удерживания, мертвого объема, времени удерживания, мертвого времени, удельного объема удерживания.

Билет 6

1. Компенсационная зависимость между энтальпией и энтропией сольватации для растворов в неполярных средах и воде. Интерпретация параметров компенсационной зависимости. Вода как особый растворитель.
2. Связь коэффициента распределения адсорбата в газовой хроматографии с удельным объемом удерживания или с предельным коэффициентом активности сорбата в неподвижной жидкой фазе, ее плотностью, молярным весом и с давлением насыщенного пара сорбата.

Билет 7

1. Гидрофобная гидратация. Примеры с участием белков и циклодекстрина. Структурная интерпретация гидрофобной гидратации.
2. Линейная неидеальная газовая хроматография. Уравнение Ван Деемтера. Физический смысл его членов. Понятие ширины хроматографического пика и причины его уширения. Понятие высоты теоретической тарелки.

Билет 8

1. Классификация адсорбентов по химическому составу, происхождению и дисперсности
2. Высокоэффективная жидкостная хроматография (ВЭЖХ). Особенности ВЭЖХ по сравнению с газовой хроматографией. Различия в характере зависимости высоты теоретической тарелки от линейной скорости элюента. Требования к размеру частиц неподвижной фазы в ВЭЖХ.

7.1. Основная литература:

1. Методические разработки к практикуму по физической химии. Под ред. В.В. Горбачука. - Казань: Изд-во КФУ, 2012. - 36 с.
2. Руководство к практическим работам по физико-химическим методам исследования: для студентов хим. фак. / Казан. гос. ун-т, Науч.-образоват. центр КГУ "Материалы и технологии XXI в.", Хим. ин-т им. А.М. Бутлерова; [сост.: В.В. Горбачук и др.]. - Казань: [Казан. гос. ун-т], 2007. - 87 с.:
3. Руководство к практическим работам по физико-химическим методам исследования: для студентов хим. фак. [Электронный ресурс] / Казан. гос. ун-т, Науч.-образоват. центр КГУ "Материалы и технологии XXI в.", Хим. ин-т им. А.М. Бутлерова; [сост.: В.В. Горбачук и др.]. - Казань, 2007. - Режим доступа: <URL:<http://libweb.ksu.ru/ebooks/publicat/0-763596.pdf>>.
4. Горбачук, В. В. Руководство к спецпрактикуму по химической термодинамике [Учебно-методическое пособие] / В. В. Горбачук, М. А. Зиганшин, В. Б. Новиков, В. А. Сироткин // Изд-во КГУ, Казань. - 2005. - 59 С. Электронный адрес: http://www.ksu.ru/f7/bin_files/05.pdf
5. Буданов В.В., Ломова Т.Н. Химическая кинетика: учебное пособие. [Электронный ресурс]- Санкт-Петербург: Лань, 2014. - 288 с. Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=42196

7.2. Дополнительная литература:

Физическая химия, Афанасьев, Борис Николаевич; Акулова, Юлия Петровна, 2012г.

1. Мюнстер, Арнольд. Химическая термодинамика / А. Мюнстер ; пер. с нем. д.х.н., проф. Е. П. Агеева ; под ред. чл.-корр. АН СССР Я. И. Герасимова .? Изд. 3-е .? Москва : URSS : [ЛИБРОКОМ, 2010] .? 295 с.

2. Методические разработки к общему практикуму по электрохимии / Лисицын Ю.А. - Казань. КФУ 2012. - 75 с.

3. Соломонов, Б.Н. Методические разработки к практикуму по физической химии: для студентов химического факультета: [учебно-методическое пособие / Б. Н. Соломонов, В. Б. Новиков, М. А. Варфоломеев]; Казан. (Приволж.) федер. ун-т, Каф. физ. химии. ? Казань: [Казанский университет], 2012. ?; 21. Ч. 2: Химическая кинетика. ? 2012. ? 36 с.

7.3. Интернет-ресурсы:

Горбачук В.В., Зиганшин М.А., Новиков В.Б., Сироткин В.А. Руководство к практическим работам по физико-химическим методам исследования. - <http://kpfu.ru/docs/F2103567237/chem0018.pdf>

Горбачук В.В., Зиганшин М.А., Новиков В.Б., Сироткин В.А. Руководство к спецпрактикуму по химической термодинамике. - <http://kpfu.ru/docs/F574818814/chemPH05.pdf>

Супрамолекулярная химия . - <http://www.chem.msu.ru/zorkii/istkhim/supramol.html>

Термодинамика растворов (лекция, англ. яз) - http://www.youtube.com/watch?v=SL1qwsQMp_8

Толмачев А.М. "Термодинамика адсорбции газов, паров и растворов" (Учебно-методическое пособие). - <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/tolmachev/tolmachev1.pdf>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Химическая термодинамика" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "КнигаФонд", доступ к которой предоставлен студентам. Электронно-библиотечная система "КнигаФонд" реализует легальное хранение, распространение и защиту цифрового контента учебно-методической литературы для вузов с условием обязательного соблюдения авторских и смежных прав. КнигаФонд обеспечивает широкий законный доступ к необходимым для образовательного процесса изданиям с использованием инновационных технологий и соответствует всем требованиям новых ФГОС ВПО.

В лабораторном практикуме используется прибор совмещенного термического анализа STA 449 C (Netzsch), дифференциальный сканирующий калориметр DSC 204F 1 (Netzsch), Фурье ИК спектрометр Vector 22 (Bruker), устройство парофазного газохроматографического анализа собственной разработки на базе капиллярного хроматографа "Кристалл 2000", сенсор типа кварцевых микровесов собственной разработки, оборудование отдела физической химии ИОФХ им.А.Е.Арбузова: порошковый дифрактометр D8 Advance (Bruker).

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 020100.62 "Химия" и профилю подготовки Физическая химия .

Автор(ы):

Горбачук В.В. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Зиганшин М.А. _____

Соломонов Б.Н. _____

"__" _____ 201__ г.