

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**


ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Кафедра фізичної хімії



«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана
з навчальної роботи

 Павленко В.О.

« 8 » травня 2019 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

ХІМІЧНА ТЕРМОДИНАМІКА

для студентів

галузь знань **10 Природничі науки**
спеціальність **102 Хімія**
освітній рівень **Бакалавр**
освітня програма **Хімія**

Вид дисципліни **вибіркова**

Форма навчання **денна**
Навчальний рік **2019 – 2020**
Семестр **VI**
(програми підготовки за ОР «бакалавр»)
Кількість кредитів **4**
Мова викладання, навчання
та оцінювання **українська**
Форма заключного
контролю **іспит**

Викладач: доц. Усенко Н.І.

Пролонговано: на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» _____ 20__ р.

на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» _____ 20__ р.

КИЇВ – 2019

Розробники:

Усенко Наталія Ігорівна, доц., к.х.н., доц.

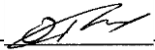
ЗАТВЕРДЖЕНО
Зав.кафедри фізичної хімії

 (Фрицький І.О.)

Протокол № 7 від «9» квітня 2019 р.

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету Київського національного університету імені Тараса Шевченка

Протокол №4 від «08» травня 2019 року

Голова науково-методичної комісії _____  _____ (Роїк О.С.)
«08» травня 2019 року

1. Мета дисципліни – засвоєння студентами основних концепцій сучасної хімічної термодинаміки стосовно, а також надання їм системних уявлень про статистичні розрахунки термодинамічних властивостей хімічних речовин, та отримання ними практичних умінь в цій галузі.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни

Володіти базовими знаннями університетських курсів фізики, математики, статистичних методів в хімії (теорія імовірностей), а також основ фізичної хімії на рівні бакалаврату.

3. Анотація навчальної дисципліни

Курс “Хімічна термодинаміка” побудований таким чином, щоб студенти отримали уявлення про концепцію виробництва ентропії, обчислення виробництва ентропії у різних необоротних процесах, у тому числі у хімічних реакціях, зрозуміли взаємозв’язок між виробництвом ентропії, флуктуаціями і стійкістю хімічної системи, а також ознайомилися із концепціями локальної ентропії та локальної рівноваги. Потім студенти отримують детальні уявлення про статистичний розрахунок термодинамічних властивостей речовин на основі знань про їх молекулярну будову. Розуміння зв’язку між статистичними обрахунками термодинамічних властивостей речовин та їх будовою, розуміння основних принципів проведення статистико-термодинамічних розрахунків є важливим етапом формування цілісної системи поглядів на будову речовини та взаємозв’язок її із конкретними властивостями речовин. Саме формування такої системи є однією з передумов успішного проведення всебічних фізико-хімічних досліджень речовин на сучасному рівні, з використанням різноманітних спектроскопічних та рентгенівських методів, а також вміння робити відповідні висновки з цих досліджень.

4. Завдання (навчальні цілі):

- сформувані у студентів розвинуту систему уявлень про обчислення виробництва ентропії у різних необоротних процесах;
- сформувані у студентів цілісну систему уявлень про термодинамічну стійкість систем, її зв’язок з флуктуаціями, із локальним виробництвом ентропії у необоротних процесах;
- сформувані у студентів уявлення про загальні принципи проведення статистичного обчислення термодинамічних функцій різних систем поблизу стану рівноваги, про основні види функцій розподілу рівноважних систем у фазовому просторі;
- навчити практично розраховувати рівноважні термодинамічні властивості у наближенні ідеального газу, обумовлені різними видами руху, а також константи рівноваги хімічних реакцій за участю газів;
- навчити студентів практично розраховувати рівняння стану, зокрема реальних газів, використовуючи найпростіші модельні потенціали міжмолекулярної взаємодії, а також термодинамічні функції реального газу;
- сформувані розвинуту систему уявлень про розрахунки термодинамічних властивостей рідин та твердих тіл і про їх зв’язок із структурою відповідних систем.

5. Результати навчання за дисципліною:

Результати навчання (1. знати; 2, вміти; 3, комунікація; 4, автономність та відповідальність)		Форма викладання і навчання	Методи оцінювання поточний контроль (активність під час практичних робіт ПтК-1 та контроль самостійної роботи ПтК-2), підсумковий контроль ПсК	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
Код	Результати навчання			
1. Знання				
1.1	Знати принципи виведення термічних рівнянь стану різноманітних речовин на основі експериментально отриманих термічних коефіцієнтів	Лекції, практичні заняття, самостійні роботи	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
1.2	Знати концепції виробництва ентропії у необоротних процесах, у тому числі хімічних реакціях, концепції хімічної спорідненості, локальної ентропії, локальної рівноваги	Лекції, практичні заняття, самостійні роботи	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
1.3	Знати основи термодинамічної теорії стійкості і флуктуацій, їх застосування до критичних явищ і зв'язок із виробництвом ентропії	Лекції, практичні заняття, самостійні роботи	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
1.4	Знати принципи інтерпретації термодинамічних функцій рівноважних систем на основі статистик Больцмана і Гіббса	Лекції, практичні заняття, самостійні роботи	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
1.5	Знати принципи обчислення молекулярних статистичних сум та термодинамічних властивостей ідеальних газів, обумовлених різними видами руху	Лекції, практичні заняття, самостійні роботи	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
1.6	Знати особливості врахування міжмолекулярної взаємодії при обчисленні статистичних сум та термодинамічних функцій реальних систем	Лекції, практичні заняття, самостійні роботи	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
2. Уміння				
2.1	Вміти проводити розрахунки термодинамічних функцій систем що підкоряються різним термічним рівнянням стану на основі експериментального визначення термічних коефіцієнтів та теплоємності	Практичні заняття, самостійні роботи	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	8

	системи			
2.2	Вміти проводити розрахунки виробництва ентропії у різних необоротних процесах	Практичні заняття, самостійні роботи	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	8
2.3	Вміти вирішувати різноманітні практично важливі для фізичної хімії задачі з використанням розподілів Больцмана та Максвелла	Практичні заняття, самостійні роботи	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	8
2.4	Вміти обчислювати статистичні суми, обумовлені різними видами руху, та відповідні їм внески в термодинамічні властивості ідеальних газів при різних умовах та константи рівноваги газових реакцій.	Практичні заняття, самостійні роботи	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	8
2.5	Вміти виводити рівняння стану та термодинамічні властивості реальних систем, базуючись на вигляді парних потенціалів взаємодії.	Практичні заняття, самостійні роботи	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	10
2.6	Вміти пояснювати зв'язок між будовою рідин і кристалів, з одного боку, та відповідними їм термодинамічними функціями, з іншого боку	Практичні заняття, самостійні роботи	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	8
3. Комунікація				
3.1	Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації інформації у галузі фізико-хімічного матеріалознавства	Лекції, практичні заняття, самостійні роботи	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
3.2	Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання та операції у співпраці з іншими виконавцями	Лекції, практичні заняття, самостійні роботи	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
4. Автономність та відповідальність				
4.1	Здатність вчитись самостійно та самовдосконалюватися, нести відповідальність за власні судження та результати.	Лекції, практичні заняття, самостійні роботи	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	10

7. Схема формування оцінки

Оцінка за дисципліну = Σ балів змістових модулів + бали за письмовий екзамен

7.1. Форми оцінювання студентів:

– семестрове оцінювання

1. групові письмові тематичні контрольні роботи (2) – 38 балів (ПТК)
2. обов'язкові розрахункові практичні роботи (7) – 14 балів (РПР)
3. домашні самостійні роботи (2) – 5 бали (ДСР)
4. активність під час аудиторних занять – 3 бали (УО)

– підсумкове оцінювання – письмовий екзамен – **40 балів (ПЕ)**

– умови допуску до підсумкового екзамену: сумарна кількість балів за формами поточного контролю не менше 36.

7.2. Організація оцінювання:

		Змістовий модуль 1	Змістовий модуль 2
Модульна контрольна робота	<i>Мінімум</i>	12	12
	Максимум	19	19
Практична розрахункова робота 1	<i>Мінімум</i>	1	1
	Максимум	2	2
Практична розрахункова робота 2	<i>Мінімум</i>	1	1
	Максимум	2	2
Практична розрахункова робота 3	<i>Мінімум</i>	1	1
	Максимум	2	2
Практична розрахункова робота 4	<i>Мінімум</i>		1
	Максимум		2
Виконання домашньої самостійної роботи	<i>Мінімум</i>	1	1
	Максимум	3	2
Усні опитування		3	

До іспиту може бути допущений студент, **який виконав усі обов'язкові види робіт**, які передбачаються навчальним планом з дисципліни "Хімічна термодинаміка" (а саме, написання модульних контрольних робіт, виконання 5 практичних розрахункових задач) **і при цьому** за результатами модульно-рейтингового контролю **отримав** за два змістові модулі сумарну **оцінку в балах не менше 36 балів**.

Для студентів, які набрали впродовж семестру сумарно **меншу** кількість балів ніж **критично-розрахунковий мінімум** для допуску до іспиту допускається написання реферату за темами доповіді чи самостійної роботи, за які отримана незадовільна оцінка, або перескладання колоквиуму чи МКР, за які отримана незадовільна оцінка, з дозволу деканату (за наявності поважної причини, що не дозволила вчасно та якісно підготуватися до доповіді / колоквиуму / МКР).

У випадку відсутності студента з поважних причин відпрацювання та перездачі МКР здійснюються у відповідності до „Положення про порядок оцінювання знань студентів при кредитно-модульній системі організації навчального процесу” від 1 жовтня 2010 року.

7.3. Шкала відповідності оцінок

Відмінно/Excellent	90-100
Добре/Good	75-89
Задовільно/Satisfactory	60-74
Незадовільно / Fail	0-59

**СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І ПРАКТИЧНИХ ЗАНЯТЬ**

№	Назва теми	Кількість годин		
		Лекції	Практ.	Сам. роб.
Змістовий модуль 1. СУЧАСНА ХІМІЧНА ТЕРМОДИНАМІКА. РОЗВИТОК ОСНОВНИХ ІДЕЙ КЛАСИЧНОЇ ТЕРМОДИНАМІКИ				
1	Перший закон термодинаміки для закритих і відкритих систем. Термічні і калоричні коефіцієнти. Рівняння стану газоподібних і конденсованих фаз	2	1	5
2	Калориметрія. Теоретичні засади різних варіантів методу, класифікація типів експериментальних методик і обладнання	2	1	5
3	Другий закон термодинаміки. Принцип Каратеодорі. Сучасний формалізм, поняття про виробництво ентропії в необоротних процесах, його обчислення. Хімічна спорідненість та виробництво ентропії в хімічних реакціях	4	2	5
4	Принцип екстремумів і загальні термодинамічні співвідношення. Співвідношення Максвелла, їх застосування в хімічній термодинаміці. Парціальні мольні величини	4	2	5
5	Стійкість і флуктуації. Класична теорія. Критичні явища. Конфігураційна теплоємність. Розгляд стійкості і флуктуацій з погляду виробництва ентропії. Поняття про локальну рівновагу і локальне виробництво ентропії.	4		5
Усього за модулем		16	6	25
Змістовий модуль 2. ІНТЕРПРЕТАЦІЯ ТЕРМОДИНАМІКИ НА ОСНОВІ СТАТИСТИЧНОЇ ФІЗИКИ. СТАТИСТИЧНА ТЕРМОДИНАМІКА ГАЗІВ, РІДИН І ТВЕРДИХ ТІЛ				
8	Статистичний метод Больцмана. Молекулярна статистична сума, її основні властивості. Термодинамічні функції ідеального газу.	2	2	4
	Розподіл Максвелла–Больцмана та його використання для вирішення різноманітних задач фізичної хімії.		2	4
	Статистичний метод Гіббса. Інтерпретація термодинаміки на основі статистичної фізики	4		6
	Молекулярні статистичні суми ідеального газу для різних видів руху, їх внесок у термодинамічні властивості ідеального газу.	4		6
	Статистичний аналіз хімічної рівноваги у газофазних реакціях.	2	2	4
	Реальний газ, модельні потенціали взаємодії	3		4
9	Конфігураційний інтеграл реального газу, врахування міжмолекулярної взаємодії. Метод Майєра для обчислення конфігураційного інтегралу. Поняття про групові інтеграли, їх зв'язок з рівняннями стану.	3	2	4
10	Статистичний розгляд термодинамічних властивостей ідеальних кристалів.	3		5
11	Статистична термодинаміка рідин. Корелятивні функції	3		4

	розподілу, методи їх знаходження. Статистичні теорії реальних розчинів неелектролітів			
Усього за модулем		24	8	36
Іспит				
Усього за дисципліною		40	14	66

Загальний обсяг **120** год., в тому числі:

Лекцій – **40** год.

Практичні заняття - **14** год

Консультації – за вимогою студентів, але не менше ніж 1 раз на 2 тижні

Самостійна робота - **66** год.

Література

Основна

1. И. Пригожин, Д. Кондепуди. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур. – М.: Мир, 2002.
2. Мюнстер А. Химическая термодинамика. – М.: УРСС, 2002.
3. Полторак О.М. Термодинамика в физической химии. – М., Высшая школа, 1991.
4. Еремин В.Н. Основы химической термодинамики. – М., Высшая школа, 1978.
5. Смирнова Н.А. Методы статистической термодинамики в физической химии. – М., Высшая школа, 1998.
6. Ягодковский В.Д. Статистическая термодинамика в физической химии. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2005. – 495 с.
7. Усенко Н.І., Роїк О.С. Статистична термодинаміка ідеального газу. Теорія і задачі. – К.:Логос, 2007. – 52 с.
8. Усенко Н.І. Основні поняття і методи статистичної термодинаміки. – К.: ВПЦ „Київський університет”, 2005. – 55 с.
9. Усенко Н.І. Статистичний розрахунок властивостей реальних газів. – К.:Логос, 2007. – 24 с.

Додаткова

10. Никольский Б.П. Физическая химия. – Л.: Химия, 1987. – 880 с.
11. Шиллинг Г. Статистическая физика в примерах. – М.: Мир, 1976. – 432 с.
12. Киттель Ч. Статистическая термодинамика. – М.: Наука, 1977. – 337 с.