

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Факультет инновационных технологий

УТВЕРЖДЕНО:  
Декан  
С. В. Шидловский

Оценочные материалы по дисциплине

Физическая химия

по направлению подготовки / специальности

**27.03.05 Инноватика**

Направленность (профиль) подготовки/ специализация:  
**Управление инновациями в наукоемких технологиях**

Форма обучения  
**Очная**

Квалификация  
**инженер-аналитик/инженер-исследователь**

Год приема  
**2024**

СОГЛАСОВАНО:  
Руководитель ОП  
О.В. Вусович

Председатель УМК  
О.В. Вусович

## **1. Компетенции и индикаторы их достижения, проверяемые данными оценочными материалами**

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ПК 1 – Способен находить и проектировать технико-технологическое решение на основе «лучших практик»

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

РОПК 1.1 Умеет систематизировать информацию, полученную в ходе НИР и ОКР, анализирует ее и сопоставляет с литературными данными («лучшие практики»)

## **2. Оценочные материалы текущего контроля и критерии оценивания**

Текущий контроль проводится в течение семестра с целью определения уровня усвоения обучающимися знаний, формирования умений и навыков, своевременного выявления преподавателем недостатков в подготовке обучающихся и принятия необходимых мер по ее корректировке, а также для совершенствования методики обучения, организации учебной работы, и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

## **3. Оценочные материалы итогового контроля (промежуточной аттестации) и критерии оценивания**

1. Основные понятия химической термодинамики: система, фаза, компонент. Термодинамические переменные. Экстенсивные и интенсивные переменные. Постулат равновесия. Нулевой закон термодинамики. Температура. Газовый термометр. Абсолютная температура.

2. Уравнения состояния системы. Уравнение состояния идеального газа. Уравнение Ван-дер-Ваальса для реального газа. Критическая изотерма. Критическая точка. Свойства воды в сверхкритическом состоянии. Теорема о соответственных состояниях, и ее трактовка в классической и статистической термодинамике. Вириальные уравнения. Уравнение состояния для жидкостей и твердых тел.

3. Первый закон термодинамики. Его формулировка и следствия. Функции состояния и функции пути. Теплота, работа и изменение внутренней энергии для различных процессов в идеальном газе. Энтальпия. Вычисление изменений внутренней энергии и энтальпии из опытных данных.

4. Закон Гесса. Теплоты реакций  $Q_V$  и  $Q_p$ . Стандартные энтальпии химических реакций. Энтальпии образования химических соединений. Возможности расчёта энтальпий химических реакций методами квантовой химии.

5. Теплоемкости. Их определение в классической и статистической термодинамике. Использование теплоемкостей для расчетов изменения энергии, энтальпии и энтропии.

6. Зависимость энтальпий химических реакций от температуры. Уравнение Кирхгофа.

7. Второй закон термодинамики. Энтропия, как функция состояния. Изменение энтропии при необратимых процессах. Неравенство Клаузиуса, производство энтропии.

8. Математический аппарат термодинамики. Фундаментальное уравнение Гиббса. Внутренняя энергия, как однородная функция объема, энтропии и числа молей. Уравнение Гиббса-Дюгема. Термодинамические потенциалы. Соотношения Максвелла и их использование при расчетах энергии, энтальпии и энтропии. Уравнение Гиббса-Гельмгольца.

9. Термодинамические потенциалы (характеристические функции) и их свойства. Различные формы записи условий термодинамического равновесия. Критерий самопроизвольного протекания процесса.

10. Химический потенциал. Его различные определения. Электрохимический потенциал. Способы вычисления изменений химического потенциала в термодинамике и статистической термодинамике.

11. Химический потенциал и стандартный химический потенциал идеального газа. Химический потенциал реальных газов и его расчеты по методу летучести (фугитивности) Льюиса.

12. Химические равновесия в закрытых системах. Условие химического равновесия. Изотерма химической реакции. Стандартная энергия Гиббса химической реакции. Химические равновесия в газовой фазе. Различные формы записи констант равновесия и связь между ними. Закон действующих масс и его термодинамический вывод.

13. Условия фазового равновесия. Условия мембранного равновесия. Правило фаз Гиббса.

14. Фазовые равновесия в однокомпонентных системах. Уравнение Клапейрона Клаузиуса. Его применение к процессам плавления, сублимации и испарения в однокомпонентных системах (на примере  $H_2O$ ). Диаграммы состояния серы и фосфора. Энантиотропия и монотропия. Диаграмма состояния углерода. Зависимость термодинамических свойств фазы от её размера. Углеродные наноматериалы. Фазовые переходы первого рода. Пластические фазовые переходы. Жидкие кристаллы. Фазовые переходы второго рода. Уравнения Эренфеста.

15. Основные понятия термодинамики растворов. Функции смешения, избыточные функции смешения. Мольная энергия Гиббса смешения. Идеальные растворы. Закон Рауля и закон Генри. Стандартный химический потенциал компонента в жидком и твердом растворах. Стандартные состояния "чистое вещество" и "бесконечно-разбавленный раствор". Химические потенциалы в растворах сильных электролитов. Средне-ионная активность и коэффициент активности.

16. Неидеальные растворы. Метод активностей Льюиса. Вычисление коэффициентов активности из экспериментальных данных по давлению пара компонентов раствора. Термодинамическая классификация растворов.

17. Фазовые равновесия в двухкомпонентных системах: зависимость растворимости вещества от температуры, криоскопия, эбулиоскопия. Экстракционное равновесие. Осмос, уравнение Вант-Гоффа.

18. Уравнения Гиббса-Дюгема-Маргулеса. Обобщенное уравнение Гиббса Дюгема. Мольные (интегральные) и парциальные мольные величины. Их определение для бинарных растворов. Зависимость парциальных мольных объемов от состава в системе  $H_2O - C_2H_5OH$ .

19. Расслаивание в двухкомпонентных системах.

20. Правило фаз Гиббса и его применение к различным диаграммам состояния бинарных систем (простая эвтектика, диаграмма с конгруентно и инконгруентно плавящимся соединением).

21. Равновесие жидкость - пар в двухкомпонентных системах. Различные виды диаграмм состояния в координатах:  $P(x_i, y_i) - T(x_i, y_i) - x_i(y_i)$ . Азеотропные смеси. Законы Гиббса Коновалова..

22. Химические равновесия в растворах. Константы равновесия при различном выборе стандартных состояний для участников реакции. Химическое равновесие в разбавленном растворе. Влияние инертного растворителя.

23. Гетерогенные химические равновесия с образованием и без образования твердых растворов.

24. Зависимость констант равновесия от температуры. Изобара Вант-Гоффа и ее интегрирование.

25. Третий закон термодинамики. Формулировка Нернста и формулировка Планка. Расчеты констант равновесия с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций и приведенной энергии Гиббса.

26. Расчет равновесного состава и выходов продуктов при протекании нескольких химических реакций (на примере реакции образования  $\text{NH}_3$ , гидрирования этилена).

27. Электрохимический потенциал. Условия химического и фазовых равновесий с участием заряженных компонентов. Условия равновесия на границе электрода с раствором и в электрохимической цепи. Гальванический элемент. Уравнение Нернста. Стандартные электродные потенциалы. Расчет ЭДС с помощью таблиц стандартных потенциалов. Определение методом ЭДС энергии Гиббса, энтальпии и энтропии химической реакции. Определение методом ЭДС коэффициентов активности, pH раствора.

28. Адсорбция и ее определения. Адсорбционное уравнение Гиббса. Изотерма Лэнгмюра, ее анализ и области применимости.

29. Полимолекулярная адсорбция. Уравнение БЭТ и его применение для определения поверхности твердых тел.

30. Основные понятия статистической термодинамики. Метод ячеек Больцмана. Фазовые пространства, плотность вероятности в фазовом пространстве. Микроканонический и канонический ансамбли Гиббса.

31. Энтропия в статистической термодинамике. (Формула Больцмана, микроканонический ансамбль, канонический ансамбль).

32. Статистические суммы по состояниям  $Z$  и  $Q$ . Расчет с их помощью внутренней энергии, энтропии, энергии Гельмгольца, химического потенциал и теплоемкости  $c_V$ .

33. Поступательная сумма по состояниям и ее вклады в термодинамические функции. Формула Закура-Тетроде для энтропии идеального газа.

34.  $\mu$  - пространство. Распределение молекул по скоростям и энергиям в идеальном газе. Средние скорости, средние энергии.

35. Теорема равномерного распределения и область ее применимости. Характеристические температуры. Применение к теории теплоемкостей.

36. Колебательная сумма по состояниям. Теории теплоемкости Эйнштейна и Дебая (без вывода).

37. Вращательные суммы по состояниям. Вклады вращательного движения в термодинамические функции для модели жесткого ротатора. Электронная и ядерная суммы по состояниям. Орто- и пара- водород. Электронная составляющая теплоемкости атомарного хлора.

38. Статистический расчет константы химического равновесия для многоатомных идеальных газов. Сопоставление статистического и классического термодинамического расчетов.

39. Статистическая теория реальных газов. Метод Урелла Майер (использование первых двух слагаемых ряда). Статистическое рассмотрение вириального уравнения.

### **Информация о разработчиках**

Вусович Ольга Владимировна, кандидат химических наук, кафедра управления инновациями, доцент