

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет
им. Н.И. Лобачевского»**

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО
решением ученого совета ННГУ
протокол от
« 16 » июня 2021 г. № 8

**Рабочая программа дисциплины
ИЗБРАННЫЕ ГЛАВЫ ТЕРМОДИНАМИКИ**

Уровень высшего образования

Специалитет

Направление подготовки / специальность

04.05.01 – Фундаментальная и прикладная химия

Направленность образовательной программы

Органическая химия

Форма обучения

Очная

Нижний Новгород

2021 год

Лист актуализации

Визирование РПД для исполнения в очередном учебном году

Председатель МК

4 июня 2021 г.

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 2021-2022 учебном году на заседании кафедры физической химии.

Протокол от _____ 20__ г. № ____

Зав. кафедрой _____

Визирование РПД для исполнения в очередном учебном году

Председатель МК

_____ 20__ г.

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 20__ -20__ учебном году на заседании кафедры _____

Протокол от _____ 20__ г. № ____

Зав. кафедрой _____

Визирование РПД для исполнения в очередном учебном году

Председатель МК

_____ 20__ г.

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 20__ -20__ учебном году на заседании кафедры _____

Протокол от _____ 20__ г. № ____

Зав. кафедрой _____

Визирование РПД для исполнения в очередном учебном году

Председатель МК

_____ 20__ г.

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 20__ -20__ учебном году на заседании кафедры _____

Протокол от _____ 20__ г. № ____

Зав. кафедрой _____

1. Место и цели дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина «Избранные главы термодинамики» относится к вариативной части Блока 1 ОПОП по направлению подготовки 04.05.01 – Фундаментальная и прикладная химия (Б1.В.03.ДВ.01.02), является обязательной для освоения студентами очной формы обучения, специализирующимися по кафедре физической химии, на четвертом году обучения в 7 семестре.

Для освоения дисциплины «Избранные главы термодинамики» обучающиеся используют знания, умения и виды деятельности, сформированные в процессе изучения базовых дисциплин «Физическая химия», «Физика», «Математика».

Цели и задачи освоения дисциплины «Избранные главы термодинамики»

Целью освоения дисциплины «Избранные главы термодинамики» является углубленное изучение основных понятий, законов и методов химической термодинамики; установление (на примере нескольких важных задач) областей практического применения ее к анализу систем и химических процессов.

Химическая термодинамика является базовым разделом физической химии. Она является мощным фундаментом различных разделов химии и решает важнейшие задачи, к одной из которых следует отнести установление направленности протекания химических процессов и равновесия.

Целью обучения дисциплины «Избранные главы термодинамики» является углубленное изучение важнейших разделов химической термодинамики и приложений второго и третьего начала термодинамики для определения термодинамических характеристик веществ, материалов и химических реакций и установления зависимостей их изменения от различных параметров, а также изучение экспериментальных методов получения термодинамических величин и математической обработки полученных экспериментальных результатов.

Учебные задачи курса направлены на освоение студентами:

- теоретических и экспериментальных методов исследования термодинамических свойств веществ и параметров химических реакций, их зависимости от различных факторов;
- методов и аппаратуры, применяемых в термодинамических и калориметрических исследованиях;
- методов математической обработки экспериментальных результатов термодинамических измерений.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Формируемые компетенции (код, содержание компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), в соответствии с индикатором достижения компетенции		Наименование оценочного средства
	Индикатор достижения компетенции* (код, содержание индикатора)	Результаты обучения по дисциплине**	
ПК-1-н. Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в области неорганической химии,	ПК-1-н-1. Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий, ПК-1-н-2. Выбирает	<i>З1: Знать</i> теоретические основы термодинамических методов исследования химических веществ и реакций. <i>У1: Уметь</i> планировать	ФОС «ИГТ»

и/или смежных с химией науках	экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов	последовательность действий в ходе термодинамического эксперимента; проводить термодинамический анализ и математическую обработку полученных результатов. <i>В1: Владеть</i> навыками проведения термодинамического эксперимента с целью получения важнейших термодинамических величин веществ и химических процессов	
ПК-2-н. Способен проводить информационные исследования в области неорганической химии и/или смежных с химией науках	ПК-2-н-1. Проводит поиск специализированной информации в информационных базах данных ПК-2-н-2. Анализирует и обобщает результаты поиска по тематике проекта в области неорганической химии и/или смежных с химией науках	<i>З1: Знать</i> фундаментальные законы и понятия важнейших разделов химической термодинамики. <i>У1: Уметь</i> использовать аппарат химической термодинамики для решения конкретных физико-химических задач. <i>В1: Владеть</i> современными подходами термодинамического описания систем.	ФОС «ИГТ»
ПК-3-н. Способен на основе критического анализа результатов НИР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в области неорганической химии и/или смежных с химией науках	ПК-3-н-1. Систематизирует информацию, полученную в ходе НИР, анализирует ее и сопоставляет с литературными данными ПК-3-н-2. Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов	<i>З1: Знать</i> теоретические основы термодинамического научного эксперимента и термодинамических методов исследования химических веществ и реакций. <i>У1: Уметь</i> планировать последовательность действий в ходе выполнения научного эксперимента; проводить термодинамический анализ и	ФОС «ИГТ»

		математическую обработку полученных данных. <i>В1: Владеть</i> навыками проведения научного эксперимента с целью получения важнейших термодинамических величин веществ и химических процессов.	
ПК-1-т. Способен определять способы, методы и средства решения технологических задач в рамках прикладных НИР в области неорганической химии	<p>ПК-1-т-1. Готовит детальные планы отдельных стадий прикладных НИР</p> <p>ПК-1-т-2. Готовит документацию по подготовке, проведению и результатам прикладных НИР</p> <p>ПК-1-т-3. Предлагает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач в рамках прикладных НИР</p> <p>ПК-1-т-4. Проводит испытания инновационной продукции</p>	<p><i>З1: Знать</i> физико-химические основы химических процессов.</p> <p><i>У1: Уметь</i> планировать последовательность действий в ходе выполнения научного исследования.</p> <p><i>В1: Владеть</i> навыками подбора методов экспериментальных исследований и планирования решения технологических задач.</p>	ФОС «ИГТ»

Окончательное завершение формирования компетенций, предусмотренных в рамках данной дисциплины, происходит при прохождении производственных практик и выполнения ВКР.

3. Структура и содержание дисциплины «Избранные главы термодинамики»

3.1 Трудоемкость дисциплины

	очная форма обучения
Общая трудоемкость	9 ЗЕТ
Часов по учебному плану	324
в том числе	
аудиторные занятия (контактная работа):	

- занятия лекционного типа	64
- занятия семинарского типа	64
-занятия лабораторного типа	96
-КСИРФ	2
самостоятельная работа	62
Промежуточная аттестация – экзамен	36

3.2. Структура дисциплины

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины	Всего (часы)		В том числе									
			Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы								Самостоятельная работа обучающегося, часы	
			из них									
	Очная	Очно-заочная	Занятия лекционного типа		Занятия семинарского типа		Занятия лабораторного типа		Всего			
Очная			Очно-заочная	Очная	Очно-заочная	Очная	Очно-заочная	Очная	Очно-заочная	Очная	Очно-заочная	
Раздел 1. Направления современных термодинамических исследований и их место в физической химии и смежных дисциплинах	54		12		10		18		40		14	
Раздел 2. Первое начало термодинамики. Термохимия	62		14		14		20		48		14	
Раздел 3. Теплоемкость: классические и современные теории	54		12		14		18		44		10	
Раздел 4. Второе начало термодинамики. Равновесие. Энтропия	60		14		14		20		48		12	
Раздел 5. Приложения второго начала	56		12		12		20		44		12	

термодинамики. Функции Гиббса и Гельмгольца, характеристические функции, химический потенциал. Химическое равновесие, законы, расчет констант и термодинамического выхода												
Контроль самостоятельной работы	2											
Промежуточная аттестация – экзамен	36											
Итого	324		64		64		96		224		62	

Промежуточный контроль осуществляется при проведении экзамена.

3.3. Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Современные термодинамические исследования

1. Научное и прикладное значения химической термодинамики.
2. Экспериментальные и теоретические методы исследования в химической термодинамике.
3. Основные справочники и базы данных по химической термодинамике.
4. Термодинамические исследования современных перспективных классов неорганических, органических, полимерных соединений; композиционных систем и наноструктурных материалов.

Раздел 2. Основные законы и понятия химической термодинамики

1. Основные разделы, фундаментальные законы и постулаты химической термодинамики.
2. Первое начало термодинамики как частный случай и экспериментальное обоснование закона сохранения и превращения энергии. Закон Гесса как частный случай первого начала термодинамики. Энтальпия системы и энтальпия процесса. Методы расчета энтальпии химических реакций (по энтальпиям образования реагентов; по энтальпиям сгорания реагентов; по энергиям диссоциации химических связей; по экспериментальным данным о температурной зависимости теплоемкости). Цикл Борна-Габера – модель термохимии для расчета энтальпий систем и процессов. Энтальпия образования химических соединений, методы ее определения. Энтальпия сгорания химических соединений. Энергия диссоциации и средняя энергия диссоциации химических связей, термохимическая энергия связей. Методы их определения.
3. Классические и квантовые теории теплоемкости. Статистический вывод квантовой теории теплоемкости твердых тел Эйнштейна и квантовой теории теплоемкости твердых тел Дебая. Мультифрактальная модель обработки низкотемпературной теплоемкости. Кривые температурных зависимостей теплоемкостей в широком диапазоне температур для различных веществ: описание, интерпретация, практическое значение.
4. Понятие о термодинамическом, термическом и кинетическом равновесии систем. Самопроизвольные, несамопроизвольные, равновесные, обратимые и неравновесные процессы (концепции). Химическое равновесие. Энтропия как критерий направленности

протекания процессов в изолированных системах. Работы Карно, Клаузиуса и Томсона по установлению второго начала термодинамики. Статистический и термодинамический аспекты второго начала термодинамики. Различные аспекты физического смысла энтропии. Методы расчета энтропии веществ и процессов.

Раздел 3. Приложения второго начала термодинамики. Термодинамические потенциалы и методы их определения

1. Математический аппарат химической термодинамики. Характеристические функции. Уравнения Максвелла и их практическое приложение (вывод фундаментальных уравнений и положений химической термодинамики).
2. Термодинамическое равновесие. Критерии направленности протекания процессов, выраженные через характеристические функции.
3. Фундаментальное уравнение Гиббса для закрытых систем и многокомпонентных систем переменного состава.
4. Химический потенциал, его физический смысл.
5. Функция Гиббса (Гельмгольца) как критерий равновесия и самопроизвольного протекания химических реакций при постоянных температуре и давлении (объеме).
6. Уравнение Гиббса-Гельмгольца.
7. Справочный материал о стандартных значениях энтальпии, энтропии и функции Гиббса образования веществ.
8. Зависимость функции Гиббса химической реакции от температуры и давления.
9. Принцип максимальной и положительной работы. Виды работ в термодинамике.
10. Химическое сродство. Физический смысл функций Гиббса и Гельмгольца.
11. Уравнение изотермы химической реакции. Закон действия масс. Уравнение изобары и изохоры химической реакции. Правило смещения равновесия Ле Шателье-Брауна.
12. Химическое равновесие в газах при высоких давлениях. Химическое равновесие в жидких растворах. Гетерогенное химическое равновесие. Комбинирование равновесий. Два пути расчета константы равновесия химической реакции: по уравнению изотермы и уравнению изобары.
13. Недостаточность уравнений, вытекающих из второго начала термодинамики, для доведения расчетов константы равновесия до численных результатов. Решение этой проблемы на основе теоремы Нернста.
14. Третье начало термодинамики. Расчет абсолютных значений энтропии веществ в зависимости от температуры и давления по экспериментальным (расчетным) данным о теплоемкости и параметрах фазовых переходов. Приближенные уравнения Нернста.
15. Расчет выхода продуктов химических реакций. Методы расчета равновесий сложных реакций.

Раздел 4. Термодинамика растворов

1. Физико-химическая природа растворов. Истинные и коллоидные растворы. Термодинамическая классификация растворов. Энтропия смешения. Избыточные значения термодинамических функций процесса смешения. Ограниченная взаимная растворимость газов при высоких давлениях. Работы И.Р. Кричевского. Энергия межмолекулярного взаимодействия, её дисперсионная, ориентационная и индукционная составляющие. Энергия водородной связи. Влияние изотопии на ван-дер-ваальсово взаимодействие и энергию водородной связи. Парциальные молярные величины компонентов раствора. Уравнения Гиббса-Дюгема (с выводом). Методы определения парциальных молярных величин. Коллигативные свойства идеальных растворов.
2. Метод термодинамической активности. Методы определения активности компонентов растворов. Стандартное состояние раствора. Симметричные и несимметричные системы отсчета. Расчет активности компонентов раствора; энергии Гиббса, энтропии и энтальпии смешения по экспериментальным данным о концентрационной и температурной

зависимости парциальных давлений пара. Уравнение Дюгема-Маргулеса и расчет активности одного компонента по активности другого.

3. Взаимная растворимость жидкостей. Работы Алексеева, его метод. Системы с верхней и нижней критической температурой растворения.
4. Основы теории экстракции из растворов. Закон распределения Нернста при различных молекулярных формах растворенного вещества в разных фазах. Энтальпии растворения. Интегральная и дифференциальная энтальпии растворения.

Раздел 5. Экспериментальные методы химической термодинамики

1. Температура. Постулат Фаулера. Температурные шкалы, МТШ-90. Методы измерения температуры. Термопары и термометры сопротивления. Приборная чувствительность и экспериментальная погрешность определения величин калориметрическими методами. Калибровка приборов; эталоны в калориметрии, требования, предъявляемые к ним.
2. Калориметрическое определение энтальпии реакций. Аппаратура и методика. Энтальпия сгорания химических соединений. Особенности аппаратуры и методики бомбовой калориметрии сгорания. Методические особенности при определении энтальпий сгорания элементоорганических и полимерных соединений. Работы Берглю, Томсона, Лутинина, Попова по калориметрии сгорания.
3. Аппаратура и методики экспериментального определения теплоемкости веществ от гелиевых до высоких температур. Высокоточные адиабатические вакуумные и дифференциальные сканирующие калориметры. Калориметры марки БКТ, АДКТТМ, ДСК, ДТА. Измерение характеристик фазовых переходов методом низкотемпературной адиабатической вакуумной и высокотемпературной ДСК калориметрии, методами термического анализа (ДТА).
4. Калориметрия процессов растворения. Аппаратура и методики. Калориметры Кальве и ДАК.
5. Методы экспериментального определения давления насыщенного пара. Эффузионный метод Кнудсена. Аппаратура и принципиальные методики обработки полученных данных.

3.4. Лабораторный практикум

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование лабораторных работ
1	1, 2, 4, 5	Определение энтальпии растворения неорганической соли
2	1, 2, 5	Определение стандартной энтальпии сгорания органического (металлоорганического) соединения
3	1, 2, 5	Измерение теплоемкости наноструктурного объекта методами адиабатической и дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК)
4	1, 2, 3, 5	Расчет стандартных термодинамических функций индивидуального вещества по экспериментальным данным о температурной зависимости теплоемкости

4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Самостоятельная работа студентов включает работу в читальном зале библиотеки, в учебных кабинетах (лабораториях) и в домашних условиях, с доступом к ресурсам Интернет для подготовки к устному опросу.

К форме текущего контроля успеваемости дисциплины относится **экзамен**.

5. Фонд оценочных средств для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю), включающий

5.1. Описание шкал оценивания результатов обучения по дисциплине

Промежуточный контроль качества усвоения студентами содержания дисциплины проводится в виде комплексного экзамена, на котором определяются:

- уровень усвоения студентами основного учебного материала по дисциплине;
- уровень понимания студентами изученного материала;
- способности студентов использовать полученные знания для решения конкретных задач.

Экзамен проводится в устной форме в виде ответа обучающегося на экзаменационный билет, включающий 2 теоретических вопроса (с предварительной подготовкой), и последующим собеседованием в рамках тематики курса. Собеседование проводится в форме вопросов, на которые студент должен дать обстоятельные ответы.

Для проведения промежуточного контроля сформированности компетенции используется: ответ по билету на экзамене.

Уровень сформированности компетенций (индикатора достижения компетенций)	Шкала оценивания сформированности компетенций						
	плохо	неудовлетворительно	удовлетворительно	хорошо	очень хорошо	отлично	превосходно
	Не зачтено		зачтено				
<u>Знания</u>	Отсутствие знаний теоретического материала. Невозможность оценить полноту знаний вследствие отказа обучающегося от ответа	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки.	Минимально допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибок.	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько незначительных ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки, без ошибок.	Уровень знаний в объеме, превышающем программу подготовки.
<u>Умения</u>	Отсутствие минимальных умений. Невозможность оценить наличие умений вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения. Имели место грубые ошибки.	Продemonстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, но не в полном объеме.	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами.	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами.	Продemonстрированы все основные умения, решены все основные задачи с отдельными незначительными недочетами, выполнены все задания в полном объеме.	Продemonстрированы все основные умения, решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов
<u>Навыки</u>	Отсутствие владения материалом.	При решении стандартных задач не продемонстрированы	Имеется минимальный набор	Продemonстрированы базовые навыки	Продemonстрированы базовые навыки	Продemonстрированы навыки при решении	Продemonстрирован творческий подход к решению

	Невозможность оценить наличие навыков вследствие отказа обучающегося от ответа	базовые навыки. Имели место грубые ошибки.	навыков для решения стандартных задач с некоторыми недочетами	при решении стандартных задач с некоторыми недочетами	при решении стандартных задач без ошибок и недочетов.	нестандартных задач без ошибок и недочетов.	нестандартных задач
--	--	---	---	---	---	---	---------------------

Шкала оценки при промежуточной аттестации

Оценка		Уровень подготовки
зачтено	Превосходно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «превосходно»
	Отлично	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «отлично», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «отлично»
	Очень хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «очень хорошо», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «очень хорошо»
	Хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «хорошо», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «хорошо»
	Удовлетворительно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «удовлетворительно», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «удовлетворительно»
не зачтено	Неудовлетворительно	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно», ни одна из компетенций не сформирована на уровне «плохо»
	Плохо	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «плохо»

5.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения.

Перечень примерных вопросов (для экзамена) для оценки сформированности знаний компетенции ПК-1-т:

1. Термодинамические исследования современных перспективных классов неорганических, органических, полимерных соединений; композиционных систем и наноструктурных материалов.
2. Методы измерения температуры. Термопары и термометры сопротивления. Приборная чувствительность и экспериментальная погрешность определения величин калориметрическими методами. Калибровка приборов; эталоны в калориметрии, требования, предъявляемые к ним.
3. Калориметрическое определение энтальпии реакций. Аппаратура и методика. Энтальпия сгорания химических соединений. Особенности аппаратуры и методики бомбовой калориметрии сгорания. Методические особенности при определении энтальпий сгорания элементоорганических и полимерных соединений.
4. Аппаратура и методики экспериментального определения теплоемкости веществ от гелиевых до высоких температур. Высокоточные адиабатические вакуумные и дифференциальные сканирующие калориметры. Калориметры марки БКТ, АДКТТМ, ДСК, ДТА. Измерение характеристик фазовых переходов методом низкотемпературной адиабатической вакуумной и высокотемпературной ДСК калориметрии, методами термического анализа (ДТА).
5. Калориметрия процессов растворения. Аппаратура и методики. Калориметры Кальве и ДАК.
6. Методы экспериментального определения давления насыщенного пара. Эффузионный метод Кнудсена.

Перечень примерных вопросов (для экзамена) для оценки сформированности знаний компетенции ПК-2-н:

1. Первое начало термодинамики как частный случай и экспериментальное обоснование закона сохранения и превращения энергии. Закон Гесса как частный случай первого начала термодинамики.
2. Приведите методы расчета энтальпий химических реакций.
3. Для чего применяется цикл Борна-Габера?
4. Энергия диссоциации и средняя энергия диссоциации химических связей, термохимическая энергия связей. Методы их определения.
5. Методы расчета энтропии веществ и процессов.
6. Характеристические функции. Уравнения Максвелла и их практическое приложение.
7. Как рассчитать химическое равновесие по справочным данным? Поясните на конкретных примерах.
8. Уравнение изотермы химической реакции. Закон действия масс. Уравнение изобары и изохоры химической реакции. Правило смещения равновесия Ле Шателье-Брауна.
9. Сформулируйте третье начало термодинамики.
10. Представьте математическую запись тепловой теоремы Нернста.
11. Приведите приближенную формулу Нернста и поясните ее практическое значение.
12. Термодинамическая классификация растворов.
13. Энтропия смешения. Избыточные значения термодинамических функций процесса смешения.
14. Парциальные молярные величины компонентов раствора. Уравнения Гиббса-Дюгема. Методы определения парциальных молярных величин.
15. Коллигативные свойства идеальных растворов.

16. Методы определения активности компонентов растворов.
17. Взаимная растворимость жидкостей. Системы с верхней и нижней критической температурой растворения.
18. Основы теории экстракции из растворов. Закон распределения Нернста при различных молекулярных формах растворенного вещества в разных фазах.
Энтальпии растворения. Интегральная и дифференциальная энтальпии растворения

Перечень примерных вопросов (для экзамена) для оценки сформированности знаний компетенции ПК-1-н:

1. Теплоемкость. Классические и квантовые теории теплоемкости.
2. Мультифрактальная модель обработки низкотемпературной теплоемкости.
3. Какие модели низкотемпературных экстраполяций вы знаете?
4. Статистический и термодинамический аспекты второго начала термодинамики.
5. Энтропия как критерий направленности протекания процессов в изолированных системах.
6. Различные аспекты физического смысла энтропии.
7. В чем заключается физический смысл функции Гиббса и функции Гельмгольца?
8. Зависимость функции Гиббса химической реакции от температуры и давления.
9. Запишите уравнение Гиббса-Гельмгольца и поясните его роль в химии.
10. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов.
11. Каковы методы определения нулевой энтропии?

Перечень примерных вопросов (для экзамена) для оценки сформированности знаний компетенции ПК-1-г:

1. Теплоемкость фуллерита C_{60} и фуллерита C_{70} .
2. Теплоемкости аморфных, частично кристаллических и кристаллических тел.
3. Экспериментальные методы химической термодинамики.
4. Использование дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) для измерения термодинамических характеристик фазовых переходов.
5. Методы низкотемпературной адиабатической вакуумной калориметрии для определения абсолютной энтропии и расчета термодинамических функций для широкого диапазона температур.
6. Калориметрическое определение энтальпий сгорания химических соединений. Особенности аппаратуры и методики бомбовой калориметрии сгорания. Методические особенности при определении энтальпий сгорания элементоорганических и полимерных соединений.
7. Методы экспериментального определения давления насыщенного пара. Эффузионный метод Кнудсена. Аппаратура и принципиальные методики обработки полученных данных.
8. Термодинамические базы данных и их использование в практических расчетах.
9. Компьютерная обработка термодинамических величин. Полуэмпирические и аналитические зависимости термодинамических функций от различных условий.

Перечень примерных вопросов (для экзамена) для оценки сформированности знаний компетенции ПК-2-н:

1. Расчет энтальпий химических процессов при заданных температуре и давлении.
2. Цикл Борна-Габер – модель термохимии для расчета энтальпий систем и процессов. Энергия диссоциации и средняя энергия диссоциации химических связей, термохимическая энергия связей. Методы определения (расчета) этих величин.
3. Статистический и термодинамический аспекты второго начала термодинамики

- (интерпретация и критика). Энтропия. Различные аспекты физического смысла энтропии.
4. Математический аппарат химической термодинамики. Характеристические функции. Метод Максвелла в изучении химической термодинамики.
 5. Методы расчета химического равновесия и выхода продуктов реакции по экспериментальным данным и справочным величинам.
 6. Третье начало термодинамики. Расчет равновесия по абсолютным энтропиям.
 7. Недостаточность уравнений, вытекающих из второго начала термодинамики, для доведения расчетов константы равновесия до численных результатов.
 8. Химический потенциал и методы его определения.
 9. Термодинамика растворов. Избыточные значения термодинамических функций процесса смешения.
 10. Термодинамика растворов. Коллигативные свойства.
 11. Метод термодинамической активности. Методы определения активности компонентов растворов. Стандартное состояние раствора. Симметричные и несимметричные системы отсчета. Расчет активности компонентов раствора.
 12. Определение термохимических характеристик металлоорганических соединений.
 13. Методы расчета стандартных термодинамических функций.

Перечень примерных вопросов (для экзамена) для оценки сформированности знаний компетенции ПК-3-н:

1. Теплоемкость. Модели низкотемпературных экстраполяций. Решение уравнения теории теплоемкости твердых тел Дебая; предельный закон кубов.
2. Современные квантовохимические теории теплоемкости. Мультифрактальная модель обработки низкотемпературной теплоемкости.
3. Критерии направленности протекания процессов, выраженные через характеристические функции. Фундаментальное уравнение Гиббса для закрытых систем и многокомпонентных систем переменного состава. Химический потенциал, его физический смысл.
4. Химическое равновесие. Уравнения Гиббса-Гельмгольца. Химическое сродство.
5. Фазовые равновесия. Фазовые диаграммы двухкомпонентных и трехкомпонентных систем.
6. Нулевая (остаточная) энтропия, методы ее определения.
7. Расчет термодинамических функций по вкладам групп. Метод Татевского.
8. Особенности термодинамического описания наноструктурных материалов.

Методические материалы, определяющие процедуры оценивания

1. Положение «О проведении текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся в ННГУ», утвержденное приказом ректора ННГУ от 13.02.2014 г., № 55-ОД.
2. Положение о фонде оценочных средств, утвержденное приказом ректора ННГУ от 10.06.2015 г., № 247-ОД.

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Теоретическая подготовка к промежуточной аттестации может осуществляться по следующим литературным источникам:

6.1. Основная литература

1. Еремин, В.В. Основы общей и физической химии [Текст]: Учебное пособие для студентов

- вузов, изучающих дисциплину «Химия», по направлению подготовки ВПО 011200 / В.В. Еремин, А.Я. Борщевский. – Долгопрудный: Интеллект, 2012. – 848 с.
2. Борщевский, А.Я. Физическая химия. Том 1. Общая и химическая термодинамика [Электронный ресурс]: Учебник / А.Я. Борщевский. – М.: ИНФРА-М, 2017. – 606 с. Режим доступа: <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=543133>.
 3. Борщевский, А.Я. Физическая химия. Том 2. Статистическая термодинамика [Электронный ресурс]: Учебник / А.Я. Борщевский. – М.: ИНФРА-М, 2017. – 383 с. Режим доступа: <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=543170>.
 4. Карякин, Н.В. Основы химической термодинамики [Текст]: Учебное пособие / Н.В. Карякин. – М.: Академия, 2003. – 462 с.

6.2. Дополнительная литература

1. Еремин, В.В. Основы физической химии. Часть 1 [Текст]: Учебное пособие для студентов вузов, обучающихся по специальности 011000 «Химия» / В.В. Еремин, С.И. Каргов, И.А. Успенская, Н.Е. Кузьменко, В.В. Лунин. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2013. – 320 с.
2. Еремин, В.В. Основы физической химии. Часть 2 [Текст]: Учебное пособие для студентов вузов, обучающихся по специальности 011000 «Химия» / В.В. Еремин, С.И. Каргов, И.А. Успенская, Н.Е. Кузьменко, В.В. Лунин. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2013. – 263 с.
3. Еремин, Е.Н. Основы химической термодинамики [Текст]: Учебное пособие для химических специальностей университетов / Е.Н. Еремин. – М.: Высшая школа, 1978. – 391 с.
4. Кубо, Р. Термодинамика. Современный курс с задачами и решениями [Текст]: Учебное пособие / Р. Кубо. – М.: Мир, 1970. – 304 с.

6.3. Рекомендуемая литература

1. Пригожин, И. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур [Текст]: Учебник / И. Пригожин, Д. Кондепуди. – М.: Мир, 2002. – 461 с.
2. Бажин, Н.М. Термодинамика для химиков [Текст]: Учебник для студентов вузов / Н.М. Бажин, В.А. Иванченко, В.Н. Пармон. – М.: Химия, КолосС, 2004. – 416 с.
3. Полтораки, О.М. Термодинамика в физической химии [Текст]: Учебное пособие для химических и химико-технологических специальностей вузов / О.М. Полтораки. – М.: Высшая школа, 1991. – 318 с.
4. Эткинс, П. Физическая химия. Том 1 [Текст]: Монография / П. Эткинс. – М.: Мир, 1980. – 580 с.
5. Эткинс, П. Физическая химия. Том 2 [Текст]: Монография / П. Эткинс. – М.: Мир, 1980. – 584 с.
6. Герасимов, Я.И. Курс физической химии. Том 1 [Текст]: Учебное пособие для химических факультетов университетов / Я.И. Герасимов, В.П. Древинг, Е.Н. Еремин, А.В. Киселев, В.П. Лебедев, Г.М. Панченков, А.И. Шлыгин. – М.: Химия, 1970. – 592 с.
7. Герасимов, Я.И. Курс физической химии. Том 2 [Текст]: Учебное пособие для химических факультетов университетов / Я.И. Герасимов, В.П. Древинг, Е.Н. Еремин, А.В. Киселев, В.П. Лебедев, Г.М. Панченков, А.И. Шлыгин. – М.: Химия, 1973. – 623 с.
8. Киреев, В.А. Методы практических расчетов в термодинамике химических реакций [Текст]: Учебное пособие / В.А. Киреев. – М.: Химия, 1970. – 520 с.
9. Путилов, К.А. Термодинамика [Текст]: Учебное пособие / К.А. Путилов. – М.: Наука, 1971. – 375 с.

10. Базаров, И.П. Термодинамика [Текст]: Учебное пособие для университетов / И.П. Базаров. – М.: Высшая школа, 1983. – 344 с.
11. Сталл, Д. Химическая термодинамика органических соединений [Текст]: Учебное пособие / Д. Сталл, Э. Вестрам, Г. Зинке. – М.: Мир, 1971. – 807 с.
12. Скуратов, С.М. Термохимия. Часть 1 [Текст]: Учебное пособие для университетов / С.М. Скуратов, В.П. Колесов, А.Ф. Воробьев. – М.: Изд-во МГУ, 1964. – 302 с.
13. Скуратов, С.М. Термохимия. Часть 2 [Текст]: Учебное пособие для университетов / С.М. Скуратов, В.П. Колесов, А.Ф. Воробьев. – М.: Изд-во МГУ, 1966. – 434 с.

6.4. Интернет-ресурсы

<http://elibrary.ru>.
<http://link.springer.com>.
<http://www.sciencedirect.com>.
<http://pubs.acs.org>.
<http://pubs.rsc.org>.
<http://www.uspkhim.ru>.
<http://webbook.nist.gov>.
<http://www.chem.msu.ru/cgi-bin/tkv.pl>.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе ZNANIUM.COM, доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС ZNANIUM.COM содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования (ФГОС ВО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства «Лань», доступ к которой также предоставлен студентам. ЭБС Издательства «Лань» включает в себя электронные версии книг издательства «Лань» и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства «Лань» обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений.

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Дисциплина обеспечена учебными аудиториями для проведения занятий лекционного типа, практических занятий, промежуточной аттестации, а также помещениями для самостоятельной работы. Материально-техническое обеспечение включает: ноутбук, переносной экран, проектор, доска.

Программа составлена в соответствии с требованиями ОС ВО ННГУ. Приказ ННГУ от 13.05.2020г. № 275-ОД «О введении в действие образовательного стандарта высшего образования – специалитет по специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия»

Авторы:

доктор химических наук, профессор _____ Маркин А.В.

кандидат химических наук, доцент _____ Сологубов С.С.

Рецензент:

доктор химических наук, профессор РАН,

ведущий научный сотрудник Института металлоорганической химии

им Г.А. Разуваева РАН _____ Пискунов А.В.

Заведующий кафедрой физической химии

доктор химических наук, профессор _____ Маркин А.В.