

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Объединенный институт высоких температур Российской академии наук  
(ОИВТ РАН)

Принято на Ученом совете  
ОИВТ РАН  
Протокол № 5 от 21.06.2022

«Утверждаю»

Директор ОИВТ РАН

  
«»  
Петров О.Ф.  
2022 год

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА**

дисциплины «Основы химической термодинамики»

направление подготовки: 04.06.01 Химические науки  
(специальность – 1.4.4 Физическая химия)

Квалификация

Исследователь. Преподаватель-исследователь

Москва- 2022

## 1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ

Целью дисциплины «Основы химической термодинамики» является изучение теоретических основ классической и статистической термодинамики и способов применения термодинамических методов для решения химических проблем, а также формирования у обучающихся знаний и умений, позволяющих моделировать и проводить численные расчеты при описании различных видов химических и фазовых равновесий и свойств веществ в растворах.

**Задачами данного курса являются:**

- раскрыть роль термодинамики при описании макроскопических многокомпонентных систем, сформулировать основные задачи, решаемые термодинамическим методом при рассмотрении химических, фазовых равновесий и свойств растворов;
- рассмотреть основные экспериментальные закономерности по теплоемкости веществ, теплотам химических реакций и теплотам растворения, применение законов термодинамики к химическим процессам, представить в виде математических уравнений основные термодинамические законы и особенности их использования при описании химических процессов и явлений, протекающих в многокомпонентных системах;
- рассмотреть основные методы экспериментального и теоретического исследования химических и фазовых равновесий в многокомпонентных системах, использование термодинамического метода в химических технологиях.

## 2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП АСПИРАНТУРЫ

Дисциплина «Основы химической термодинамики» базируется на дисциплинах: классическая и квантовая термодинамика, общая химия, общая физика, введение в статистическую физику. Также, указанная дисциплина базируется на материалах по дисциплинам математический анализ, высшая алгебра, дифференциальные уравнения и методы математической физики.

## 3. УРОВЕНЬ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ

Подготовка научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре.

## 4. ГОД И СЕМЕСТР ОБУЧЕНИЯ

Второй год, четвертый семестр обучения.

## 5. ОБЪЁМ УЧЕБНОЙ НАГРУЗКИ И ВИДЫ ОТЧЁТНОСТИ.

<b>Вариативная часть, в т.ч. :</b>	<u>4</u> зач. ед.
Лекции	<u>28</u> часа
Практические занятия	<u>44</u> часа
Лабораторные работы	<u>нет</u> часов
Индивидуальные занятия с преподавателем	<u>нет</u> часов
Самостоятельные занятия	<u>108</u> часов
<b>Итоговая аттестация</b>	<b>диф. зачет 2 курс</b>
<b>ВСЕГО</b>	<b>5 зач. ед., 180 часов</b>

## 6. КОНКРЕТНЫЕ ЗНАНИЯ, УМЕНИЯ И НАВЫКИ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

В результате освоения дисциплины «**Основы химической термодинамики**» обучающийся должен:

### 1. Знать:

- базовую терминологию, относящуюся к химической термодинамике, основные понятия и законы термодинамики, их математическое выражение;
- понимать логику распространения термодинамического метода к многокомпонентным системам различного типа;
- основные экспериментальные и расчетные методы определения макроскопических характеристик системы и отдельных ее составляющих веществ;
- понимать роль химической термодинамики как одной из теоретических основ химии.

### 2. Уметь:

- продемонстрировать связь фундаментальных законов термодинамики с химическими явлениями;
- решать задачи по химической термодинамике;
- моделировать химическое, фазовое равновесие, свойства растворов и проводить численные расчеты физико-химических величин;
- проводить эксперименты по измерению теплот химических процессов, свойств растворов, определению констант равновесия химических реакций, построению диаграмм состояния.

### 3. Владеть:

- расчетными методами решения физико-химических задач,
- навыками поиска физико-химических данных в открытых источниках (в том числе, в информационных базах данных) и применения их при решении практических химических задач
- навыками применения основных методов физико-математического анализа для решения естественнонаучных задач.

## 7. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Структура дисциплины

**Перечень разделов дисциплины и распределение времени по темам:**

№ темы и название	Количество часов
1. Введение	10
2. Основы химической термодинамики. Термохимия.	66
3. Растворы.	52
4. Фазовые, химические и адсорбционные равновесия.	52
ВСЕГО (часов)	180

### Вид занятий

**Лекции:**

№	Темы	Трудоёмкость в зач. ед.
---	------	-------------------------

п.п.		(количество часов)
1	Предмет и составные части физической химии. Основные этапы развития физической химии как современной теоретической основы химии. Методы термодинамики, кинетики и квантовой химии в описании химических явлений.	2
2	Термическое равновесие системы. Температура. Различные шкалы температур. Термодинамические параметры. Интенсивные и экстенсивные величины. Обратимые и необратимые процессы и их свойства. Уравнения состояния. Уравнение состояния идеального газа, газа Ван-дер-Ваальса. Теорема о соответственных состояниях и общая проблема уравнения состояния. Вириальные уравнения состояния.	2
3	Внутренняя энергия. Первый закон термодинамики. Применение первого закона термодинамики к различным процессам в газах. Энтальпия. Цикл Карно. Лемма Карно. Закон Гесса и его следствия. Стандартные состояния и стандартные теплоты химических реакций. Теплоты сгорания. Теплоты образования. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Формула Кирхгоффа. Зависимость теплоемкости от температуры и расчеты тепловых эффектов реакций. Таблицы стандартных термодинамических величин и их использование в термодинамических расчетах. Калорические коэффициенты.	2
4	Энтропия. Уравнение второго начала термодинамики для обратимых и необратимых процессов. Обоснование второго закона термодинамики. Теорема Карно-Клаузиуса. Изменение энтропии при различных процессах. Изменение энтропии в изолированных системах и направление процесса. Постулат Планка и абсолютная энтропия веществ. Статистический характер второго закона термодинамики. Формула Больцмана. Расчеты изменений энтропии обратимых и необратимых процессов. Вычисления абсолютной энтропии твердых тел, жидкостей и газов. Изменение энтропии химической реакции.	2
5	Энергия Гельмгольца, энергия Гиббса и их свойства. Термодинамические потенциалы и характеристические функции. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов, выраженные через характеристические функции. Энергия Гиббса идеального газа. Характеристические функции реального газа. Метод летучести. Расчет летучести	2

	(фугитивности) из опытных данных.	
6	Растворы различных классов. Различные способы выражения состава раствора. Смеси идеальных газов. Термодинамические свойства газовых смесей. Идеальные растворы в различных агрегатных состояниях и общее условие идеальности растворов. Давление насыщенного пара жидких растворов. Закон Рауля и отклонение от него. Коэффициенты активности и их определение по парциальным давлениям веществ.	2
7	Стандартные состояния при определении химических потенциалов компонентов растворов. Симметричная и несимметричная системы отсчета. Функция смешения для идеальных и неидеальных растворов. Предельно разбавленные растворы, атермальные, регулярные, строго регулярные растворы и их свойства.	2
8	Парциальные мольные величины и их определение из опытных данных для бинарных систем. Уравнения Гиббса-Дюгема.	2
9	Равновесие жидкость-пар в двухкомпонентных системах. Равновесные составы пара и жидкости. Закон Рауля-Дальтона. Различные виды диаграмм состояния. Законы Гиббса-Коновалова. Разделение веществ путем перегонки. Азеотропные смеси и их свойства. Влияние давления и температуры на растворимость газов в жидкостях. Закон Генри.	2
10	Понятие фазы, компонента, степени свободы. Правило фаз Гиббса и его вывод. Диаграммы состояния воды, серы. Фазовые переходы первого рода, Уравнение Клапейрона-Клаузиуса и его применение к различным фазовым переходам первого рода.	2
11	Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем и их анализ на основе правила фаз. Трехкомпонентные системы. Треугольники Гиббса и Розебома. Взаимная растворимость в системе трех жидкостей.	2
12	Закон действия масс. История его открытия и современная трактовка. Различные виды констант равновесия и связь между ними. Химическая переменная. Химическое равновесие в идеальных и неидеальных системах. Термодинамический вывод закона действия масс.	2
13	Изотерма Вант-Гоффа. Изменение энергии Гиббса и энергии Гельмгольца при химической реакции. Термодинамическая трактовка понятия о химическом сродстве. Принцип Бертелло и область его применимости. Расчеты констант равновесия химических реакций с использованием таблиц стандартных значений	2

	термодинамических функций. Приведенная энергия Гиббса и ее использование для расчетов химических равновесий.	
14	Расчет выхода продуктов химических реакций различных типов. Выходы продуктов при совместном протекании нескольких химических реакций. Зависимость констант равновесия от температуры. Уравнения изобары и изохоры реакции; их термодинамический вывод. Использование различных приближений для теплоемкостей реагентов при расчетах химических равновесий при различных температурах.	2
ВСЕГО (часов)		28

**Лабораторные занятия: нет**

**Практические занятия (семинары):**

№ п.п.	Темы	Трудоёмкость в зач. ед. (количество часов)
1	Предмет и составные части физической химии. Основные этапы развития физической химии как современной теоретической основы химии.	2
2	Термическое равновесие системы. Уравнения состояния.	2
3	Внутренняя энергия. Первый закон термодинамики. Стандартные состояния и стандартные теплоты химических реакций. Таблицы стандартных термодинамических величин и их использование в термодинамических расчетах.	4
4	Энтропия. Уравнение второго начала термодинамики для обратимых и необратимых процессов. Расчеты изменений энтропии обратимых и необратимых процессов. Вычисления абсолютной энтропии твердых тел, жидкостей и газов.	4
5	Энергия Гельмгольца, энергия Гиббса и их свойства. Термодинамические потенциалы и характеристические функции. Характеристические функции реального газа. Расчет летучести (фугитивности) из опытных данных.	2
6	Растворы различных классов. Смеси идеальных газов. Термодинамические свойства газовых смесей. Закон Рауля и отклонение от него. Коэффициенты активности и их определение по парциальным давлениям веществ.	4
7	Стандартные состояния при определении химических потенциалов компонентов растворов.	4

	Предельно разбавленные растворы, атермальные, регулярные, строго регулярные растворы и их свойства.	
8	Парциальные мольные величины и их определение из опытных данных для бинарных систем.	4
9	Равновесие жидкость-пар в двухкомпонентных системах. Разделение веществ путем перегонки. Закон Генри.	2
10	Понятие фазы, компонента, степени свободы. Правило фаз Гиббса и его вывод. Уравнение Клапейрона-Клаузиуса и его применение к различным фазовым переходам первого рода.	4
11	Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем и их анализ на основе правила фаз. Трехкомпонентные системы.	2
12	Закон действия масс. Химическая переменная. Химическое равновесие в идеальных и неидеальных системах. Термодинамический вывод закона действия масс.	4
13	Изотерма Вант-Гоффа. Изменение энергии Гиббса и энергии Гельмгольца при химической реакции. Расчеты констант равновесия химических реакций с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций. Приведенная энергия Гиббса и ее использование для расчетов химических равновесий.	2
14	Расчет выхода продуктов химических реакций различных типов. Уравнения изобары и изохоры реакции; их термодинамический вывод. Использование различных приближений для теплоемкостей реагентов при расчетах химических равновесий при различных температурах.	4
ВСЕГО (часов)		44

### Самостоятельная работа:

№ п.п.	Темы	Трудоёмкость (количество часов)
1	Изучение теоретического курса – выполняется самостоятельно каждым обучаемым по итогам каждой из лекций, результаты контролируются преподавателем на лекционных занятиях, используются конспект (электронный) лекций, учебники, рекомендуемые данной программой, методические пособия.	48 часов
2	Решение задач по заданию преподавателя– решаются задачи, выданные преподавателем по итогам лекционных	30 часов

	занятий и сдаются в конце семестра, используются конспект (электронный) лекций, учебники, рекомендуемые данной программой, а также сборники задач, включая электронные, учебно-методические пособия.	
3	Подготовка к дифференцированному зачету	30 часов
ВСЕГО (часов)		108 часов

### Содержание дисциплины

№ п/п	Название модулей	Разделы и темы лекционных занятий	Содержание	Объем	
				Аудиторная работа (часы)	Самостоятельная работа (часы)
1	I Введение.	Краткая историческая справка и описание предмета дисциплины.	Предмет и составные части физической химии. Основные этапы развития физической химии как современной теоретической основы химии. Методы термодинамики, кинетики и квантовой химии в описании химических явлений.	4	2
2	II Основы химической термодинамики. Термохимия.	Макроскопические системы и термодинамический метод их описания.	Термическое равновесие системы. Температура. Различные шкалы температур. Термодинамические параметры. Интенсивные и экстенсивные величины. Обратимые и необратимые процессы и их свойства. Уравнения состояния. Уравнение состояния идеального газа, газа Ван-дер-Ваальса. Теорема о соответственных состояниях и общая проблема уравнения состояния. Вириальные уравнения состояния.	4	4



3	Теплота и работа.	<p>Внутренняя энергия. Первый закон термодинамики. Применение первого закона термодинамики к различным процессам в газах. Энтальпия. Цикл Карно. Лемма Карно. Закон Гесса и его следствия. Стандартные состояния и стандартные теплоты химических реакций. Теплоты сгорания. Теплоты образования. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Формула Кирхгоффа. Зависимость теплоемкости от температуры и расчеты тепловых эффектов реакций. Таблицы стандартных термодинамических величин и их использование в термодинамических расчетах. Калорические коэффициенты.</p>	6	6
4	Второй закон термодинамики и его различные формулировки.	<p>Энтропия. Уравнение второго начала термодинамики для обратимых и необратимых процессов. Обоснование второго закона термодинамики. Теорема Карно-Клаузиуса. Изменение энтропии при различных процессах. Изменение энтропии в изолированных системах и направление процесса. Постулат Планка и абсолютная энтропия веществ. Статистический характер второго закона термодинамики. Формула Больцмана. Расчеты изменений энтропии обратимых и необратимых процессов.</p>	6	6

			Вычисления абсолютной энтропии твердых тел, жидкостей и газов. Изменение энтропии химической реакции.		
5		Фундаментальные уравнения Гиббса для закрытых систем. Характеристические функции идеального газа..	Энергия Гельмгольца, энергия Гиббса и их свойства. Термодинамические потенциалы и характеристические функции. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов, выраженные через характеристические функции. Энергия Гиббса идеального газа. Характеристические функции реального газа. Метод летучести. Расчет летучести (фугитивности) из опытных данных.	4	6
6	III Растворы	Понятие раствора. Давление насыщенного пара жидких растворов.	Растворы различных классов. Различные способы выражения состава раствора. Смеси идеальных газов. Термодинамические свойства газовых смесей. Идеальные растворы в различных агрегатных состояниях и общее условие идеальности растворов. Давление насыщенного пара жидких растворов. Закон Рауля и отклонение от него. Коэффициенты активности и их определение по парциальным давлениям веществ.	6	10
7		Химические потенциалы компонентов растворов. Термодинамическая классификация растворов.	Стандартные состояния при определении химических потенциалов компонентов растворов. Симметричная и несимметричная системы отсчета. Функция смешения для идеальных и неидеальных растворов.	6	10

			Предельно разбавленные растворы, атермальные, регулярные, строго регулярные растворы и их свойства.		
8		Парциальные мольные величины	Парциальные мольные величины и их определение из опытных данных для бинарных систем. Уравнения Гиббса-Дюгема.	6	10
9		Равновесие многокомпонентных систем.	Равновесие жидкость-пар в двухкомпонентных системах. Равновесные составы пара и жидкости. Закон Рауля-Дальтона. Различные виды диаграмм состояния. Законы Гиббса-Коновалова. Разделение веществ путем перегонки. Азеотропные смеси и их свойства. Влияние давления и температуры на растворимость газов в жидкостях. Закон Генри.	4	10
10	IV Фазовые, химические и адсорбционные равновесия.	Однокомпонентные системы.	Понятие фазы, компонента, степени свободы. Правило фаз Гиббса и его вывод. Диаграммы состояния воды, серы. Фазовые переходы первого рода, Уравнение Клапейрона-Клаузиуса и его применение к различным фазовым переходам первого рода.	6	10
11		Двухкомпонентные системы.	Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем и их анализ на основе правила фаз. Трехкомпонентные системы. Треугольники Гиббса и Розебома. Взаимная растворимость в системе трех жидкостей.	4	10
12		Закон действия масс	Закон действия масс. История его открытия и современная трактовка. Различные виды констант	6	8

			равновесия и связь между ними. Химическая переменная. Химическое равновесие в идеальных и неидеальных системах. Термодинамический вывод закона действия масс.		
13		Анализ химических реакций	Изотерма Вант-Гоффа. Изменение энергии Гиббса и энергии Гельмгольца при химической реакции. Термодинамическая трактовка понятия о химическом сродстве. Принцип Бертло и область его применимости. Расчеты констант равновесия химических реакций с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций. Приведенная энергия Гиббса и ее использование для расчетов химических равновесий.	6	8
14		Расчет выхода продуктов химических реакций различных типов и химических равновесий.	Расчет выхода продуктов химических реакций различных типов. Выходы продуктов при совместном протекании нескольких химических реакций. Зависимость констант равновесия от температуры. Уравнения изобары и изохоры реакции; их термодинамический вывод. Использование различных приближений для теплоемкостей реагентов при расчетах химических равновесий при различных температурах.	6	8
ВСЕГО (часов)				90	90

## 7. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

№ п/п	Вид занятия	Форма проведения занятий	Цель
1	лекция	изложение теоретического материала	получение теоретических знаний по дисциплине
2	Лекция/семинары	изложение теоретического материала с помощью презентаций. Решение задач. Мини-коллоквиумы. Самостоятельные (проверочные) работы студентов.	повышение степени понимания материала
3	самостоятельная работа обучаемого	решение задач по заданию преподавателя – решаются задачи, выданные преподавателем по итогам лекционных занятий и сдаются в конце семестра, используются конспект (электронный) лекций, учебники, рекомендуемые данной программой, а также учебно-методические пособия	осознание связей между теорией и практикой, а также взаимозависимостей разных дисциплин
4	самостоятельная работа обучаемого	подготовка к зачету с оценкой	повышение степени понимания материала

## 8. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ

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

### Перечень контрольных вопросов и кратких ответов для сдачи дифференцированного зачета или экзамена.

1. Предмет и содержание термодинамики. Краткий ответ: термодинамика - наука о равновесных состояниях макроскопических тел

2. Термодинамическая система, термодинамический процесс. Краткий ответ: условно выделенная область пространства, которая взаимодействует с окружающей средой посредством обмена веществом и энергией. Термодинамический процесс - непрерывная последовательность состояний термодинамической системы.

3. Термодинамические параметры и функции состояния системы. Краткий ответ: термодинамические свойства, которые однозначно характеризуют состояние термодинамической системы называют термодинамическими параметрами.

4. Способы передачи энергии. Краткий ответ: теплообмен, работа, массоперенос.

5. Первое начало термодинамики для микро- и макропроцессов - математическая запись, варианты формулировок. Краткий ответ: в любом процессе энергия изолированной системы остается неизменной.

6. Теплоемкость вещества. Краткий ответ: теплоемкость - величина, равная тепловой энергии, которую необходимо передать телу, чтобы его температура изменилась на один градус. Теплоемкость зависит от химического состава вещества и его температуры.

7. Термохимия. Тепловые эффекты экзо- и эндотермические процессов. Краткий ответ: термохимия - учение о тепловых эффектах химических реакций. Реакция называется экзотермической, если ее протекание сопровождается выделением энергии. Реакция называется эндотермической, если ее протекание сопровождается поглощением энергии.

8. Закон Гесса и его следствия. Стандартная энтальпия образования индивидуальных веществ. Краткий ответ: формулировка закона Гесса - тепловой эффект химической реакции при постоянном давлении или объеме не зависит от пути реакции и определяется только родом начальных и конечных веществ и их состоянием. Тепловой эффект реакции — количество теплоты, выделенное или поглощенное в химической реакции при постоянном объеме или давлении и равенстве температур реагентов и продуктов реакции. Под стандартным значением энтальпии образования вещества из элементов понимается энтальпия образования данного вещества при стандартных условиях ( $p = 1$  атм или 1 бар,  $T = 298.15$  К) из химических элементов, находящихся в стандартных фазовых состояниях

9. Закон Кирхгофа (дифференциальная и интегральная формы). Его использование для термохимических расчетов. Краткий ответ: закон Кирхгофа гласит, что температурный коэффициент теплового эффекта химической реакции равен изменению теплоемкости системы в ходе реакции. Уравнение Кирхгофа, являющееся следствием этого закона, используется для расчёта тепловых эффектов при разных температурах. Дифференциальная форма уравнения Кирхгофа

$$\left(\frac{\partial \Delta_r H^\ominus}{\partial T}\right)_p = \sum_{i=1}^m \beta_i \left(\frac{\partial H^\ominus(P_i)}{\partial T}\right)_p - \sum_{i=1}^n \alpha_i \left(\frac{\partial H^\ominus(R_i)}{\partial T}\right)_p = \sum_{i=1}^m \beta_i C_p^\ominus(P_i) - \sum_{i=1}^n \alpha_i C_p^\ominus(R_i) = \Delta_r C_p^\ominus$$

Интегральная форма уравнения Кирхгофа

$$\Delta_r H^\ominus(T) = \Delta_r H^\ominus(298) + \int_{298}^T \Delta_r C_p^\ominus(T) dT$$

10. Самопроизвольные и несамопроизвольные процессы (определение, примеры). Краткий ответ: самопроизвольный процесс - это процесс, происходящий без вмешательства сил, внешних по отношению к рассматриваемой системе. Пример - окисление железа.

11. Второй закон термодинамики. Краткий ответ: второй закон термодинамики можно сформулировать следующим образом: существует параметр состояния энтропия системы,  $S$ , скорость изменения которой складывается из потоков энтропии, обусловленных переносом энергии массы и теплоты, а также производства энтропии вследствие диссипации энергии. Для производства энтропий выполняются условия: в обратимом процессе производство энтропии равно нулю, в необратимом процессе - производство энтропии больше нуля. Производство энтропии не может быть отрицательным.

12. Изозэнтропный и адиабатный процессы. Краткий ответ: Таким образом, для закрытой системы обратимый изозэнтропный процесс является адиабатным; обратимый адиабатный процесс является изозэнтропным; условие постоянства энтропии в необратимом процессе можно обеспечить лишь за счет отвода теплоты. Необратимый адиабатный процесс не является изозэнтропным, поскольку энтропия системы в таком процессе возрастает.

13. Постулат Планка. Абсолютная энтропия индивидуального вещества. Краткий ответ: постулат Планка формулируется так - энтропия чистого кристаллического вещества при температуре абсолютного нуля равна нулю. Зависимость энтропии от температуры выражается соотношением

$$S(T, p_0) = \int_0^T \frac{C_p(T, p_0)}{T} dT$$

14. Критерий термодинамического равновесия по Гиббсу. Краткий ответ: Условия равновесия по Гиббсу заключаются в следующем: Для равновесия изолированной термодинамической системы, рабочие координаты которой зафиксированы, необходимо и достаточно, чтобы  $\delta S_U \leq 0$ , либо  $\delta U_S \geq 0$ . Символ  $\delta$  означает виртуальное смещение (вариацию) в смысле теоретической механики: изменение состояния возможно (совместимо с наложенными ограничениями), оно не является функцией времени; энтропия и внутренняя

энергия определены для измененного состояния, вариация может быть как бесконечно малой, так и конечной величиной

15. Химический потенциал. Краткий ответ: химический потенциал вещества  $i$  в фазе  $\alpha$ , определяется соотношением

$$\mu_i^{(\alpha)} = - T^{(\alpha)} \left( \frac{\partial S^{(\alpha)}}{\partial n_i^{(\alpha)}} \right)_{U^{(\alpha)}, V^{(\alpha)}, X_j^{(\alpha)}, n_{j \neq i}^{(\alpha)}}$$

16. Уравнение изотермы химической реакции для смеси идеальных газов. Краткий ответ: Уравнение изотермы реакции Вант-Гоффа имеет вид

$$\Delta_r G(T, p) = RT \ln \frac{\bar{p}_{P_1}^{\beta_1} \bar{p}_{P_2}^{\beta_2} \dots \bar{p}_{P_m}^{\beta_m}}{\bar{p}_{R_1}^{\alpha_1} \bar{p}_{R_2}^{\alpha_2} \dots \bar{p}_{R_n}^{\alpha_n}} - RT \ln K^{\ddagger}(T)$$

. Парциальные давления газообразных веществ в первом слагаемом в правой части относятся к неравновесной системе. Уравнение изотермы реакции позволяет определить направление протекания реакции, протекающей в изобарно-изотермических условиях, если заданы парциальные давления всех веществ — участников реакции и известно значение константы равновесия при данной температуре. Направление реакции определяется знаком изменения энергии Гиббса реакции. Если этот знак положителен, реакция будет протекать справа налево, если отрицателен — слева направо, если изменение энергии Гиббса реакции равно нулю, реакция находится в состоянии равновесия.

17. Константа химического равновесия. Краткий ответ: константа равновесия реакции

$$K(T) = \exp\left(\frac{-\Delta_r G(T)}{RT}\right),$$

определяется соотношением

$$\Delta_r G(T) = \sum_{i=1}^m \beta_i G(P_i; T) - \sum_{i=1}^n \alpha_i G(R_i; T)$$

- изменение энергии Гиббса реакции при стандартном давлении и температуре  $T$ .

18. Уравнение изобары химической реакции. Краткий ответ: уравнение изобары

$$\frac{d \ln K_p^{\ddagger}(T)}{dT} = \frac{\Delta_r H^{\ddagger}(T)}{RT^2}$$

реакции имеет вид

19. Зависимость константы равновесия от температуры в нешироком интервале температур. Краткий ответ: Константу равновесия реакции можно представить в виде

$$\ln K(T) = -\frac{\Delta_r H^{\ddagger}(T)}{RT} + \frac{\Delta_r S^{\ddagger}(T)}{R}$$

. Поскольку изменения энтальпии и энтропии реакции в некотором диапазоне температур приближенно можно считать постоянными, справедливо

равенство  $\ln K(T) = -\frac{a}{T} + b$ , где  $a$  и  $b$  — константы для данной реакции и данного температурного интервала.

20. Принцип Ле-Шателье. Краткий ответ: простейшая формулировка принципа выглядит так: система, находящаяся в равновесии, реагирует на внешнее воздействие так, чтобы уменьшить это воздействие. В некоторых простых случаях принцип Ле Шателье — Брауна просто эквивалентен условиям стабильности. Его часто применяют в химии для качественного объяснения тех или иных явлений и процессов. Однако иногда использование упрощенной формулировки принципа может привести к неверным выводам. В более точной формулировке фигурирует дополнительное условие: один из параметров пары возмущение-реакция должен быть интенсивным, а другой экстенсивным (объем-давление, теплота-температура и т. д.).

## 9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

**Необходимое оборудование для лекций и практических занятий:** компьютер и мультимедийное оборудование (проектор, звуковая система)

**Необходимое программное обеспечение:** Стандартные пакеты Microsoft Office: PowerPoint, Word etc.

**Электронные ресурсы, включая доступ к базам данных**

<http://www.ihed.ras.ru/rusbank/>

[www.chem.msu.su/rus/handbook/ivtan/welcome.html](http://www.chem.msu.su/rus/handbook/ivtan/welcome.html)

<http://www.nist.gov/pml/data/index.cfm>

## 10. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Основная литература.

1. Термодинамика : учебник и практикум для академического бакалавриата / Г. В. Белов. — М. : Издательство Юрайт, 2016. — 509 с.
2. Еремин В.В. , Борщевский А.Я. Основы общей и физической химии. Долгопрудный: Интеллект, 2012.- 848с. О.М. Полторак. Лекции по химической термодинамике. Общая и статистическая термодинамика. – М.: Едиториал УРСС, 2021. – 264 с.
3. Д.Г. Нарышкин. Химическая термодинамика с Mathcad. Расчетные задачи: учебное пособие. – М.: Риор, 2021. – 200 с.
4. В.П. Барабанов, Г.В. Булидорова, Ю.Г. Галяметдинов, Х.М. Ярошевская. Физическая химия. Основы химической термодинамики. Фазовые равновесия. – Обнинск: КДУ, 2020. — 516 с.
5. А.Я. Борщевский. Физическая химия. Общая и химическая термодинамика: учебник в 2-х т. – М.: Инфра-М, 2017. – Том 1. – 606 с.
6. А. Ю. Зуев, Д. С. Цветков. Химическая термодинамика: учебник. – Екатеринбург: Изд-во Уральского университета, 2020. – 183 с.
7. W.J. Rankin. Chemical thermodynamics: Theory and applications. – Boca Raton: CRC Press, 2019. – 344 p.
8. J. Gmehling. Chemical Thermodynamics for Process Simulation. Weinheim: Wiley-VCH, 2019. – 2nd edition – 808 p.

### Дополнительная литература.

1. Физическая химия. Т. 1. Равновесная термодинамика / П. Эткинс , Дж. де Паула. М.:Мир, 2007.-496с.
2. Карапетьянц М.Х. Химическая термодинамика. М: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2013г.- 584с.
3. Мюнстер А. Химическая термодинамика. М: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2010.-296с..

## 11. Язык преподавания - русский.

Программу составил



д.т.н. Белов Г.В.

«14» июня 2022 г.