

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА
ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра фізичної хімії**

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана
з навчальної роботи



Наталія УСЕНКО

30 » 06 2022 року

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
ХІМІЧНА ТЕРМОДИНАМІКА**

для здобувачів освіти

галузь знань	10 Природничі науки
спеціальність	102 Хімія
освітній рівень	бакалавр
освітня програма	Хімія
вид дисципліни	вибіркова, з блоку вибору «Фізична хімія міжфазних явищ»

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2022/2023
Семестр	6
Кількість кредитів ECTS	4
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	іспит

Викладач: доцент Усенко Наталія Ігорівна

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

Розробник: Усенко Наталія Ігорівна, к.х.н., доцент, доцент кафедри фізичної хімії.

ЗАТВЕРДЖЕНО

Завідувач кафедри фізичної хімії

 Ігор ФРИЦЬКИЙ

Протокол № 6 від « 02 » травня 2022 р.

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету

Протокол від « 29 » червня 2022 року № 7

Голова науково-методичної комісії  Олександр ПОЇК

« _____ » _____ 2022 року

1. Мета дисципліни – засвоєння студентами основних концепцій сучасної хімічної термодинаміки, 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, вищої математики (інтегрування, диференціювання), статистичних методів в хімії (теорія ймовірностей), 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): Згідно з вимогами Стандарту вищої освіти України (перший (бакалаврський) рівень вищої освіти, галузь знань 10 «Природничі науки», спеціальність 102 – «Хімія») навчальна дисципліна спрямована на формування здатності до абстрактного мислення, аналізу та синтезу (ЗК1); здатності вчитися і оволодівати сучасними знаннями (ЗК2); здатності до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел (ЗК10); здатності застосовувати знання і розуміння математики та природничих наук для вирішення якісних та кількісних проблем в хімії (СК1), здатності до використання спеціального програмного забезпечення та моделювання в хімії (СК4) та здатності здійснювати кількісні вимірювання (обчислення) фізико-хімічних величин, описувати, аналізувати і критично оцінювати експериментальні дані (СК8).

5. Результати навчання за дисципліною:

Результати навчання (1 – знати; 2 – уміти)	Форми викладання і навчання	Методи оцінювання	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1.1. Знати принципи виведення термічних рівнянь стану різноманітних речовин на основі експериментально отриманих термічних коефіцієнтів	лекції, практичні заняття, самостійна робота	усні опитування, контрольна робота (тестові питання), іспит	8
1.2. Знати концепції виробництва ентропії у необоротних процесах, у тому числі хімічних реакціях, концепції хімічної спорідненості,	лекції, практичні заняття самостійна робота	усні опитування, контрольна робота (тестові питання), іспит	8

локальної ентропії, локальної рівноваги			
1.3. Знати основи термодинамічної теорії стійкості і флуктуацій, їх застосування до критичних явищ і зв'язок із виробництвом ентропії	лекції, практичні заняття самостійна робота	контрольна робота (тестові питання), іспит	8
1.4. Знати принципи інтерпретації термодинамічних функцій рівноважних систем на основі статистик Больцмана і Гіббса	лекції, самостійна робота	усні опитування, іспит	8
1.5. Знати принципи обчислення молекулярних статистичних сум та термодинамічних властивостей ідеальних газів, обумовлених різними видами руху	лекції, практичні заняття самостійна робота	контрольна робота (тестові питання), іспит	8
1.6. Знати особливості врахування міжмолекулярної взаємодії при обчисленні статистичних сум та термодинамічних функцій реальних систем	лекції, практичні заняття самостійна робота	усні опитування, контрольна робота (тестові питання), іспит	7
2.1. Уміти проводити розрахунки термодинамічних функцій систем що підкоряються різним термічним рівнянням стану на основі експериментального визначення термічних коефіцієнтів та теплоємності системи	лекції, практичні заняття самостійна робота	перевірка завдань самостійної роботи, контрольна робота (розв'язання задач), іспит	8
2.2. Уміти проводити розрахунки виробництва ентропії у різних необоротних процесах	лекції, практичні заняття самостійна робота	перевірка завдань самостійної роботи, контрольна робота (розв'язання задач)	8
2.3. Уміти вирішувати різноманітні практично важливі для фізичної хімії задачі з використанням розподілів Больцмана та Максвелла	лекції, практичні заняття самостійна робота	захист самостійних розрахункових завдань, контрольна робота (розв'язання задач), іспит	7
2.4. Уміти обчислювати статистичні суми, зумовлені різними видами руху, та відповідні їм внески в термодинамічні властивості ідеальних газів при різних умовах та константи рівноваги газових реакцій.	лекції, практичні заняття самостійна робота	перевірка завдань самостійної роботи, контрольна робота (тестові питання)	15
2.5. Уміти виводити рівняння стану та термодинамічні властивості реальних систем, базуючись на вигляді парних потенціалів взаємодії.	лекції, практичні заняття самостійна робота	перевірка завдань самостійної роботи, контрольна робота (тестові питання)	8
2.6. Уміти пояснювати зв'язок між будовою рідин і кристалів, з одного боку, та відповідними їм термодинамічними функціями, з іншого боку	лекції, практичні заняття самостійна робота	перевірка завдань самостійної роботи, контрольна робота (тестові питання)	7

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни з програмними результатами навчання

Програмні результати навчання	Результати навчання дисципліни												
	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6	2.1	2.2	2.3	2.4	2.5	2.6	
P05. Розуміти зв'язок між будовою та властивостями речовин					+	+					+	+	+
P10. Застосовувати основні принципи термодинаміки та хімічної кінетики для вирішення професійних завдань	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
P15. Спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання хімічних систем та процесів, обробки експериментальних даних							+	+	+	+	+	+	+
P18. Демонструвати знання та розуміння основних фактів, концепцій, принципів та теорій з хімії	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+

7. Схема формування оцінки

7.1. Форми оцінювання студентів:

Семестрове оцінювання:

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом: **60 балів /32 бали**, а саме:

1. Контрольна робота №1: **PH 1.1, PH 1.2, PH 1.3, PH 2.1, PH 2.2 – 12/7 балів.**
2. Контрольна робота №2: **PH 1.2, PH 1.5, PH 1.6, PH 2.3, PH 2.4, PH 2.5 – 12/7 балів.**
3. Виконання розрахункових самостійних задач: **PH 2.4, PH 2.5 – 12/8 балів**
4. Контрольна робота №3: **PH 2.5, PH 2.6 – 12/7 балів**
5. Усні опитування: **PH 1.1, PH 1.2, PH 1.3, PH 1.4, PH 1.5, PH 2.5, PH 2.6, – 4/2 бали**
6. Оцінювання самостійної роботи: **PH 1.2, PH 1.3, PH 2.5, PH 2.6 – 8/5 балів.**

Підсумкове оцінювання (у формі іспиту):

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом: **40 балів /24 бали.**

Результати навчання, які оцінюються: **усі**

Форма проведення: **письмова робота.**

Види завдань: **тестові питання (на 28 балів) і задачі (на 12 балів).**

Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за іспит не може бути меншою, ніж 24 бали.

Студент допускається до іспиту, якщо впродовж семестру він:

набрав не менше, ніж **36 балів**;

виконав і здав розрахункові самостійні завдання

7.2. Організація оцінювання:

Контрольна робота №1: не раніше 4 тижня семестру;

контрольна робота №2: не раніше 9 тижня семестру;

контрольна робота №3: передостанній тиждень семестру;

персональні завдання для виконання розрахункової самостійної роботи студенти отримують не пізніше, як за 5 тижнів до закінчення семестру;

оцінювання самостійної роботи: впродовж семестру.

Студенти мають право на одне перескладання кожної контрольної роботи у визначений викладачем термін.

7.3. Шкала відповідності оцінок

Оцінка (за національною шкалою) / National grade	Рівень досягнень / Marks
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				
6	Статистичний метод Больцмана. Молекулярна статистична сума, її основні властивості. Термодинамічні функції ідеального газу.	2	2	4
7	Розподіл Максвелла–Больцмана та його використання для вирішення різноманітних задач фізичної хімії.		2	4
8	Статистичний метод Гіббса. Інтерпретація термодинаміки на основі статистичної фізики	4		6
9	Молекулярні статистичні суми ідеального газу для різних видів руху, їх внесок у термодинамічні властивості ідеального газу.	4		6
10	Статистичний аналіз хімічної рівноваги у газофазних реакціях.	2	2	4
11	Реальний газ, модельні потенціали взаємодії	3		4
12	Конфігураційний інтеграл реального газу, врахування міжмолекулярної взаємодії. Метод Майера для обчислення конфігураційного інтегралу. Поняття про групові інтеграли, їх зв'язок з рівняннями стану.	3	2	4
13	Статистичний розгляд термодинамічних властивостей ідеальних кристалів.	3		5
14	Статистична термодинаміка рідин. Корелятивні функції	3		4

14	розподілу, методи їх знаходження. Статистичні теорії реальних розчинів неелектролітів			
<i>Усього за модулем</i>		24	8	41
Усього за дисципліною		40	14	66

Загальний обсяг **120 год.**, в тому числі:
 Лекції – **40 год.**
 Практичні заняття – **14 год.**
 Консультації – за вимогою студентів, але не менше ніж 1 раз на 4 тижні
 Самостійна робота – **66 год.**

9. Рекомендовані джерела

Основні

1. Ковальчук Є.П., Решетняк О.В. Фізична хімія. – Львів: ВЦ ЛНУ імені Івана Франка, 2007. – 800 с.
2. Усенко Н.І. Основні поняття і методи статистичної термодинаміки. – К.: ВПЦ „Київський університет”, 2005. – 55 с.
3. Усенко Н.І., Роїк О.С. Статистична термодинаміка ідеального газу. Теорія і задачі. – К.:Логос, 2007. – 52 с.
4. Усенко Н.І. Статистичний розрахунок властивостей реальних газів. – К.:Логос, 2007. – 24 с.
5. Atkins P., de Paula J. Atkins' Physical Chemistry. 8th Edition. – New York: W. H. Freeman and Company, 2006. – 1072 p.
6. Kondepudi D., Prigogine I. Modern Thermodynamics: From Heat Engines to Dissipative Structures, 2nd Edition. – New York: Wiley, 2014. – 560 p

Додаткові

7. Hill T.L. Introduction to Statistical Thermodynamics. – Addison-Wesley Publishing Company, 1960. – 508 p.
8. Daily J.W. Statistical Thermodynamics. – Cambridge University Press, 2019. – 286 p.