

**НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
«ПОЛТАВСЬКА ПОЛІТЕХНІКА ІМЕНІ ЮРІЯ КОНДРАТЮКА»**

**Навчально-науковий інститут нафти і газу
Кафедра теплогазопостачання, вентиляції та теплоенергетики**

СИЛАБУС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

144БВБ13.1 ХІМІЧНА ТЕРМОДИНАМІКА

Освітній рівень	Перший (бакалавр)	
Програма навчання	Вибіркова	
Галузь знань	14	Електрична інженерія
спеціальність	144	Теплоенергетика
Освітня програма	Теплоенергетика	
Обсяг дисципліни	3 кредитів (90 академічних годин)	
Види аудиторних занять	лекції (16 академічних годин), практичні заняття (14 академічних годин)	
Форма контролю	залік	

Координатор

Лобурець А.Т. доцент кафедри теоретичної механіки, кандидат фізико-математичних наук

1. У класичній хімічній термодинаміці вивчають макроскопічні властивості речовини, не розглядаючи її атомну чи молекулярну структуру. Предметом дослідження є взаємоперетворення енергетичних параметрів: теплоти, роботи, внутрішньої енергії. Ці перетворення в різних системах відбуваються згідно простих закономірностей, або законів (постулатів), властивих всім системам. Перш за все це закон збереження енергії й речовини для термодинамічних систем. Другий постулат визначає напрямок самочинних процесів, а третій – властивості тіл починаючи від абсолютного нуля, що пов'язані зі ймовірністю існування даного стану термодинамічної системи. Ці постулати завжди правильні в будь-якому хімічному чи фізико-хімічному процесі за участю досить великої кількості частинок при досить тривалому спостереженні за системою (рівноважна термодинаміка). Якщо при аналізі якогось явища виникають якісь суперечності із законами термодинаміки, то це означає, що аналіз було зроблено неправильно. Оскільки математичний апарат, що описує основні закони термодинаміки, простий і доступний кожному студентові, то можна досить легко знайти помилку в розрахунках. Знання законів хімічної термодинаміки дозволяє розраховувати теплові ефекти хімічних процесів, фазові й хімічні рівноваги, визначати умови, за яких процес стає можливим, і встановлювати стійкість речовин у тих чи інших умовах. За допомогою термодинамічних розрахунків можна встановити принципову можливість протікання процесу, проте не можна обчислити швидкість процесу, тобто час його здійснення. Відповідь на це питання дає хімічна кінетика.

Хімічна термодинаміка вивчає теплові ефекти хімічних реакцій, стан хімічної рівноваги, поведінку речовин у розчинах, фазові перетворення і процеси на межі розділу фаз. Термодинамічні

дані й співвідношення широко застосовують для вибору режимів технологічних процесів у хімічній, металургійній та інших галузях промисловості. Для виведення закономірностей треба знати початковий і кінцевий стани системи, а також зовнішні умови, за яких відбувається процес. Хімічна термодинаміка не дозволяє робити будь-які висновки про внутрішню будову речовини і механізм перебігу процесів.

Навчальна дисципліна «Хімічна термодинаміка» є складовою циклу професійної підготовки фахівців освітньо-кваліфікаційного рівня «бакалавр».

Базується на таких дисциплінах, як хімія, вища математика, фізика.

Другий рік. Осінь – 3 кредити. Диференційований залік

2. Мета навчальної дисципліни Компетенції, ПРН за ОПШ

Мета курсу:– отримання студентами базових відомостей з хімічної термодинаміки та вивчення основних способів застосування термодинамічних методів для вирішення хімічних завдань, формування компетенцій, які допоможуть розкрити роль термодинаміки при описі макроскопічних багатокомпонентних систем, розглянути основні методи експериментального і теоретичного дослідження хімічних і фазових рівноваг в багатокомпонентних системах, використовувати термодинамічний метод у хімічних технологіях; дадуть можливість студентам ефективно застосовувати в професійній діяльності отримані знання, вміння і навички.

3. Передумови для вивчення дисципліни

Передумовою для вивчення дисципліни є оволодіння студентами знаннями таких дисциплін, як фізики, математика, хімія

4. Очікувані результати навчання з дисципліни

В результаті вивчення навчальної дисципліни студенти повинні:

знати: перспективи розвитку хімічної термодинаміки як теоретичної бази синтетичної хімії та хімічної технології, базову термінологію хімічної термодинаміки, основні поняття і закони термодинаміки, їх математичні вирази, роль термодинамічних факторів в реальних процесах, в тому числі в технологічних системах, володіти основними експериментальними і розрахунковими методами визначення макроскопічних характеристик системи і окремих її складових речовин, закони перебігу хімічних процесів та закони хімічної рівноваги в залежності від термодинамічного стану системи і умов протікання для встановлення оптимальних шляхів впливу на ці процеси.

уміти: застосовувати основні закони хімічної термодинаміки для аналізу отриманих результатів, в тому числі із залученням інформаційних баз даних, проводити фізико-хімічний аналіз процесів, моделювати хімічну та фазову рівновагу і властивості розчинів, проводити чисельні розрахунки фізико-хімічних величин, здійснювати оцінку можливих ризиків на підставі знання закономірностей, які керують поведінкою аналізованих системи, застосовувати фізико-хімічні методи дослідження систем і процесів, здійснювати оцінку основних термодинамічних параметрів процесів з використанням відомих фізико-хімічних моделей, передбачати напрямок розвитку та швидкість протікання хімічних процесів і їхні кінцеві результати.

5. Критерії оцінювання результатів навчання

Критерієм успішного проходження здобувачем освіти підсумкового оцінювання може бути досягнення ним мінімальних порогових рівнів оцінок за кожним запланованим результатом вивчення навчальної дисципліни.

Мінімальний поріг рівень оцінки варто визначати за допомогою якісних критеріїв і трансформувати в мінімальну позитивну оцінку числової (рейтингової) шкали.

Сума балів	Значення ЄКТС	Оцінка	Критерій оцінювання	Рівень компетентності
60-63	Е	Достатньо	Студент має певні знання матеріалу, передбаченого робочою програмою, володіє основними положеннями на рівні, який визначається як мінімально допустимий. Правила вирішення практичних завдань з використання м основних теоретичних положень пояснюються з труднощами. Виконання практичних завдань значно формалізовано: є відповідність алгоритму, але відсутнє глибоке розуміння роботи та взаємозв'язків з іншими дисциплінами.	Середній, що є мінімально допустимим у всіх складових навчальної дисципліни

6. Засоби діагностики результатів навчання

Засобами оцінювання та методами демонстрування результатів навчання можуть бути: диференційований залік; контрольні роботи; інші види індивідуальних та групових завдань.

7. ЗМІСТ КУРСУ

Лекції. Теми і зміст

Лекція 1. Вступ до хімічної термодинаміки. Предмет хімічної термодинаміки. Основні поняття та визначення. Внутрішня енергія, теплота, робота. Властивості системи. Параметри і функції стану. Класифікація процесів. Термічна рівновага. Нульовий закон термодинаміки.

Лекція 2. Перший закон термодинаміки. Застосування першого закону термодинаміки для розрахунку параметрів ідеального газу. Ентальпія. Закон Гесса та його наслідки. Теплоємність. Залежність теплового ефекту хімічної реакції від температури. Рівняння Кірхгофа. Залежність теплоємності від температури та розрахунок теплових ефектів реакцій. Цикл Борна-Габер.

Лекція 3. Другий і третій закони термодинаміки. Основні поняття і формулювання. Ентропія ідеального газу. Зміна ентропії в деяких процесах в ізольованих системах. Об'єднане рівняння першого і другого законів термодинаміки. Термодинамічна ймовірність системи. Статистична інтерпретація ентропії. Постулат Планка. Абсолютне значення ентропії.

Лекція 4. Характеристичні функції в термодинаміці. Енергії Гіббса й Гельмгольца. Принцип ле Шательє – Брауна. Хімічний потенціал компонента суміші. Співвідношення Максвелла. Залежність енергії Гіббса від температури і тиску. Парціально-молярні величини. Рівняння Гіббса-Дюгема. Методи визначення парціально-молярних величин.

Лекція 5. Рівняння Максвелла і Гіббса-Гельмгольца. Використання рівнянь Максвелла для виведення термодинамічних співвідношень. Ефект Джоуля-Томсона. Температура інверсії. Рівняння Гіббса-Гельмгольца.

Лекція 6. Кінетика хімічних реакцій. Предмет і основні поняття. Молекулярність реакції. Швидкість реакції та умова рівноваги. Константи швидкості й рівноваги. Способи вираження констант рівноваги. Енергія активації. Вплив різних факторів на стан рівноваги реакції. Принцип Ле Шательє – Брауна. Рівняння ізотерми та ізобари реакції. Розрахунок константи рівноваги на основі законів термодинаміки. Рівновага в гетерогенних системах.

Лекція 7. Умови рівноваги фаз у багатокомпонентних системах. Агрегатний і фазовий стан речовини. Поняття фази. Термодинамічна рівновага багатокомпонентних систем. Гетерофазні

системи. Рівняння Клаузіуса – Клапейрона Рівняння Гіббса – Дюгема. Ступені вільності рівноважної термодинамічної системи.

Лекція 8. Термодинаміка фазових перетворень. Поняття фазової діаграми. Види фазових діаграм. Фазові діаграми «пара – рідина» в однокомпонентних системах. Фазові діаграми сумішей. Діаграми «тиск – температура» та «склад – температура» у двокомпонентних (бінарних) системах.

8. Практичні заняття

1. Рівняння стану ідеальних і реальних газових систем.
2. Перший закон термодинаміки. Розрахунок внутрішньої енергії, ентальпії, роботи різних процесів.
3. Закон Гесса. Термохімічні розрахунки. Стандартні теплові ефекти.
4. Залежність теплового ефекту від температури. Формула Кіргофа.
5. Другий закон термодинаміки. Розрахунок ентропії у різних процесах. Характеристичні функції. Застосування рівняння Клаузіуса-Клапейрона для дослідження термодинамічних характеристик реальних систем
6. Хімічна кінетика. Швидкість, порядок і енергія активації реакції.
7. Рівновага в реальних системах. Побудова фазових діаграм різних типів і дослідження їхніх термодинамічних властивостей.

9. Запитання для самоконтролю.

1. Чим відрізняються реальні гази від ідеальних? Чому ідеальні гази не можуть утворювати конденсовані фази?
2. Які ви знаєте закони, що описують стан ідеального газу?
3. Які ви знаєте парціальні характеристики сумішей ідеальних газів?
4. Чим відрізняються реальні гази від ідеальних?
5. У яких випадках реальний газ можна вважати ідеальним?
6. Що дає нульовий закон термодинаміки?
7. Що означає термічна рівновага? За яких умов вона може встановлюватися?
8. Що означають інтенсивні та екстенсивні термодинамічні параметри?
9. Які системи вважають відкритими, закритими та адіабатними?
10. Які системи є гомогенними? Дайте характеристику і назвіть приклади гетерогенних систем.
11. Дайте визначення фази. Чим відрізняється фаза від агрегатного стану?
12. Дайте визначення термодинамічної системи. Що ви знаєте про відкриті, закриті, ізольовані, адіабатні та гетерогенні системи?
13. Перший закон термодинаміки має формулювання: *perpetuum mobile* (вічний двигун) першого роду неможливий. Як розуміти таке твердження?
14. Як практично провести адіабатичний процес? Схарактеризуйте пристрій, у якому процес наближається до адіабатичного?
15. Якою характеристикою, інтенсивною чи екстенсивною, є ентальпія?
16. Чим пояснюються особливості теплових ефектів процесів, що супроводжуються зміною фазового стану речовин?
17. Який процес називається круговим або циклом?
18. Наведіть приклади процесів, що ілюструють перший закон термодинаміки.
19. Дайте визначення поняття «внутрішня енергія».
20. Чим відрізняються один від одного ΔU і ΔH ?

21. Дайте визначення ентальпії.
22. Чим відрізняються самочинні процеси від несамочинних? Наведіть приклади таких процесів.
23. Що ви знаєте про оборотні й необоротні процеси? Наведіть приклади.
24. Чи можуть самочинні процеси бути оборотними? Аргументуйте свою відповідь.
25. Які процеси є рівноважними і нерівноважними?
26. Які ви знаєте формулювання другого закону термодинаміки? Чи узгоджуються вони між собою? Дайте пояснення.
27. У чому полягають відмінності першого і другого законів термодинаміки?
28. Розкрийте поняття приведеної елементарної теплоти. Чи існує зв'язок між цією теплотою та ентропією?
29. У чому полягають відмінності між ентропіями оборотних і необоротних процесів?
30. Два тіла, які мали різні температури, утворили термодинамічну систему з тепловим контактом між тілами. Як зміниться із часом ентропія системи? Чи буде процес оборотним? Чи зможе він протікати самочинно?
31. Як зміниться ентропія ідеального газу при зміні температури та об'єму?
32. Чому і як змінюється ентропія системи при фазових переходах?
33. Є два балони з різними газами, які не вступають у хімічну взаємодію. Поясніть, використовуючи поняття ентропії, що буде відбуватися при їх змішуванні. Чи існує спосіб, за допомогою якого можна змішувати газу, залишаючи ентропію системи незмінною?
34. Які термодинамічні системи є ізольованими і як у них може змінюватися ентропія?
35. Ентропія є мірою безпорядку або хаосу в системі. Поясніть це твердження.
36. Одне з можливих формулювань другого закону термодинаміки таке: *perpetuum mobile* другого роду неможливий. Як розуміти це визначення?
37. Сформулюйте поняття хімічного потенціалу.
38. Що характеризує приріст термодинамічної функції при зміні кількості деякої речовини за умови незмінності інших параметрів системи?
39. Від чого залежить хімічний потенціал компонента суміші?
40. Що є рушійною силою при здійсненні обміну речовиною між фазами нерівноважної системи? За яких умов процес припиняється?
41. Чи існують відмінності при виконанні роботи у рівноважних і нерівноважних процесах? Поясніть чому.
42. Чому енергію Гельмгольца називають ізохорно-ізотермічним потенціалом? Що ви знаєте про зв'язану енергію та фактор її ємності?
43. Чим різняться роботи в ізохорно-ізоентропійному й ізохорно-ізотермічному процесах?
44. Напишіть рівняння зміни енергії Гіббса для системи, в якій відбувається хімічна реакція при $T = const, p = const$.
45. Що характерно для енергій Гіббса і Гельмгольца та ентропії при наближенні системи до стану рівноваги?
46. За яких умов, що накладаються на систему, можна використовувати функцію Гельмгольца для її аналізу?
47. Чому функцію Гіббса зручно використовувати для аналізу процесів, що відбуваються в газовій фазі?
48. Яка докорінна відмінність між енергією Гіббса й енергією Гельмгольца?
49. Схарактеризуйте та покажіть графічно взаємозв'язки між термодинамічними функціями і термодинамічними параметрами.
50. Запишіть диференціали відомих вам термодинамічних функцій та вкажіть, від яких змінних ці функції залежать.

51. Через які термодинамічні функції можна виразити хімічний потенціал компонента суміші та як це зробити?
52. Поясніть, як обчислюється хімічний потенціал ідеального газу й компонента суміші ідеальних газів.
53. У чому полягає суть рівняння Клаузіуса про рівновагу фаз?
54. Чим відрізняється рівняння Клаузіуса – Клапейрона від рівняння Клаузіуса? Чому воно виявилось дуже корисним для практичного застосування?
55. У яких координатах інтегральна форма запису рівняння Клаузіуса – Клапейрона дає пряму лінію?
56. Що потрібно знати, щоб, використовуючи рівняння Клаузіуса – Клапейрона, експериментально визначити теплоту фазового переходу?
57. Що визначає наявність рівноваги в гетерогенній системі?
58. Що дає рівняння Гіббса – Дюгема? Чому його називають рівнянням фази?
59. Що визначають ступені вільності рівноважної термодинамічної системи? Запишіть рівняння Гіббса. На які основні питання воно дає відповідь?

10. Рекомендована література

Базова

1. Карякин Н.В. Основы химической термодинамики: Учебное пособие для вузов.- М.: «Академия», 2003. –464 с.
2. Ковальчук Є.П. Фізична хімія [Текст] / Є.П. Ковальчук, О.В. Решетняк. – Львів : Видавничий центр ЛНУ, 2007. – 800 с.
3. Костржицький А.І. Фізична і колоїдна хімія / А.І. Костржицький, В.М. Тіщенко, О.Ю. Калінков, О.М. Берегова. – Київ : Центр навчальної літератури, 2008. – 496 с.
4. Стромберг А.Г. Физическая химия [Текст] / А.Г. Стромберг – М. : Высш. шк., 2001. – 527 с.
5. Семиохин И. Физическая химия [Текст] / И. Семиохин. – М. : МГУ, 2001. – 272 с.
6. Л.М. Солдаткіна. Хімічна термодинаміка в схемах, таблицях, формулах, рисунках. Л.М. Солдаткіна. – Одеса : «Одеський національний університет», 2012. С. – 101.
http://liber.onu.edu.ua/pdf/soldatkina_termodinamika.pdf
7. Мечковский, Л. А. Химическая термодинамика: Курс лекций. В 2 ч. Ч. 1. / Л.А. Мечковский, А.В. Блохин. – Минск : БГУ, 2010. – 141с.

Допоміжна

1. И.А. Семиохин. Сборник задач по химической термодинамике. Часть I. М.- 2007. С. 73.
2. Цветкова Л.Б. Фізична хімія: теорія і задачі: навч. посібник.-Львів: Магнолія,2008.-415 с.
3. Чумак В.Л. Фізична хімія: Підручник/ В.Л. Чумак, С.В. Іванов.-К.: Книжкове вид-во НАУ, 2007.- 648 с.
4. Практикум по физической химии [Текст] / Под ред. С.В. Горбачёва. – М. : Химия, 1982. – 400 с.
5. Практические работы по физической химии [Текст] / Под ред. К.П. Мищенко. – Л. : Химия, 1982. – 400 с.
6. Практикум по физической химии [Текст] / Под ред. И.В. Кудряшова. – М. : Высш. шк., 1986. – 495 с.
7. Сборник вопросов и задач по физической химии для самоконтроля [Текст] / Под ред. С.Ф. Белявского. – М. : Высш. шк., 1979. – 136 с.
8. Краткий справочник физико- химических величин/ под ред. А.А. Равделя и А.М. Пономаревой. - Л.: Химия, 1983.