



Т
т методических рекомендаций и
методических рекомендаций,
одических указаний

Форма
Ф СО ПГУ 7.18.3/40

Министерство образования и науки Республики Казахстана
Павлодарский государственный университет им. С. Торайгырова
Кафедра химии и химических технологий

МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ И УКАЗАНИЯ
по изучению дисциплины

«Современные проблемы физической химии»

для магистрантов специальности 6М060600 – Химия

Павлодар



Листья методических
и указаний,
рекомендаций,
их указаний

Форма
Ф СО ПГУ 7.18.3/41

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по УР

_____ Н. Э.Пфейфер

«___» _____ 201__ г.

Составитель: к.х.н., проф. _____ Парамонов Ф.П.

Кафедра химии и химических технологий

Методические рекомендации и указания

по изучению дисциплины

«Современные проблемы физической химии»

для магистрантов специальности 6М060600 – Химия

Рекомендовано на заседании кафедры

«___» _____ 201__ г., протокол № _____

Заведующий кафедрой _____ К. Х. Жапаргазина

Одобрено УМС ФХТиЕ

«___» _____ 201__ г., протокол № _____

Председатель УМС _____ Р. Ж. Нургожин «___» _____ 201__ г.

ОДОБРЕНО УМО

Начальник УМО _____ Е.Н. Жуманкулова «___» _____ 201__ г.

Одобрена учебно-методическим советом университета

«___» _____ 20__ г. Протокол № _____

Тема 1. Понятие вероятности события.

Простые и сложные события, их вероятности. Однородные события. Распределение вероятности и ее аналитические выражения. Среднее значение вероятностной величины.

Невозможность последовательного механистического описания систем многих частиц. Статистический ансамбль, фазовое пространство и его свойства, непересекаемость траекторий в фазовом пространстве, термодинамическая вероятность и ее отличие от классической вероятности.

Сохранение фазового объема в консервативных системах (теорема Лиувилля), справедливость утверждения среднего по времени среднему по ансамблю (эргодическая гипотеза).

Функции распределения для различных систем, статистика Больцмана, энтропия как логарифм термодинамической вероятности, распределение Гаусса, Пуансона, равномерное распределение, распределение Максвелла. Соотношение Гиббса.

Влияние окружающей среды на изучаемую систему. Направление энергетических потоков при обмене системы и окружающей среды энергией. Вероятность реализации тех или иных состояний. Сумма по состояниям (конфигурационный интеграл СПС).

Литература: [1] стр. 95 – 107; [4] стр. 23 – 103.

Контрольные вопросы:

1. Назовите системы с большим числом одинаковых частиц.
2. Почему невозможно описание систем с большим числом одинаковых частиц с помощью механики Ньютона?
3. Модельные представления окружающего мира и первое из них – идеальный газ.
4. Фазовое пространство и его свойства применительно к системам многих частиц.
5. Распределение скоростей у подобных систем при условии постоянства полной энергии этой системы.
6. Методы познания окружающего мира физической химии, их совершенствование.
7. Виды систем: открытые, полузакрытые, закрытые. Их основные свойства.
8. Закрытые системы с большим числом частиц. Особенности их состояния.
9. Возможности описания состояния закрытых систем с большим числом частиц методом теории вероятности.
10. Случайные явления, события, величины, функции от случайной величины.
11. Вероятность события как идея конкретных проявлений этого события.
12. Свойства вероятности, сложение вероятностей, умножение вероятностей.
13. Идеальный газ как пример распределения Максвелла

14. Некоторые выводы, полученные с использованием распределения Максвелла.

Тема 2. Взаимозависимость и взаимосвязь термодинамических потенциалов и их представление через СПС.

СПС для различных форм движения – поступательной, колебательной, вращательной, электронной. Аддитивность логарифма произведения термодинамической вероятности и влияние этого свойства на составляющие термодинамического потенциала.

Расчет термодинамических функций идеального газа. Возможность упрощения вида термодинамических потенциалов для систем невзаимодействующих частиц с собственным нулевым обменом.

Расчет константы равновесия методом статистической термодинамики. Связь максимальной работы и константы равновесия. Изотерма Вант – Гоффа и ее представление через СПС.

Литература: [1] стр. 107 – 125.

Контрольные вопросы:

1. Изображение системы в фазовом пространстве.
2. Гармонический осциллятор. Каноническое уравнение для гармонического осциллятора.
3. Свойства фазового пространства. Эргодность, непрерывность.
4. Распределение Гиббса.
5. Связь энтропии и термодинамической вероятности системы многих частиц.
6. Реализация макросостояния через различные микросостояния.
7. Пространственные распределения молекул газообразной системы. Равномерность распределения частиц по элементарным объемам.

Тема 3. Общие термодинамические соображения относительно систем, в которых присутствуют заряженные частицы.

Принцип Томсона – Бергло, его ограниченность. Представление Аррениуса растворов электролитов, их позитивность и ограниченность. Модернизация представлений Аррениуса Пхошем.

Тепловые эффекты образования электролита, гидратация (сольватация) ионов и их энергетика. Влияние растворителя на растворенное вещество.

Модель Борна, Габера, формула Капустинского для расчёта энергии кристаллической решетки растворяемого вещества. Постоянная Моделунга.

Уточнение представлений Аррениуса относительно механизма образования раствора. Теория Дебая – Гюккеля как развитие модельных представлений процесса растворения кристаллов. Учет энергетической составляющей в этом процессе. Модернизация теории Дебая – Гюккеля.

Литература: [5], стр. 9 – 35, [6], стр. 9 – 113.

Контрольные вопросы:

1. Термодинамическая вероятность и ее связь с полной энергией системы.
2. Формула Больцмана и ее связь с суммой по состояниям.

3. Энтропия и сумма по состояниям.
4. Энергия и сумма по состояниям.
5. Теплоемкость и сумма по состояниям.
6. Энтальпия и сумма по состояниям.
7. Потенциал Гельмгольца и сумма по состояниям.
8. Потенциал Гиббса и сумма по состояниям.
9. Сумма по состояниям и уравнение Менделеева-Клапейрона.
10. Энергия микрочастицы, участвующей во всех формах механического движения.
11. Сумма по состояниям и поступательное движение частицы.
12. Сумма по состояниям и вращательное движение частицы.
13. Учет геометрии молекул при расчете колебательной составляющей молекулы.

Тема 4. Закон действующих масс для идеальных систем.

Его несоответствие реально протекаемым процессам. Модернизация ЗДМ для описания реальных систем. Активность и коэффициент активности. Нахождение коэффициентов активности через ионную силу раствора.

Отличие слабых электролитов от сильных и средних. Межионное взаимодействие в слабых электролитах. Основные закономерности поведения слабых электролитов.

Природа полиэлектролитов. Зависимость свойств полиэлектролитов от температуры, pH-среды, ионной силы раствора. Одно-, двух-, трехмерные полиэлектролиты и их использование в качестве ионитов. Строение полиэлектролитов и способы регулирования формой молекулы полиэлектролита. Применение полиэлектролитов.

Литература: [5], 187-198, 212 – 246 стр.; [6], 145- 176 стр.

Контрольные вопросы:

1. Константа диссоциации и ее изменение с увеличением концентрации электролита.
2. Понятие активности электролита. Коэффициент активности.
3. Связь коэффициента активности с ионной силой раствора.
4. Идеи Дебая-Гюккеля на строение раствора.
5. Второе приближение теории Дебая-Гюккеля и дополнения Ла Мерэ.
6. Энергия растворения электролита.
7. Энергия кристаллической решетки.
8. Энергия кристаллической решетки по Борну, Капустинскому.
9. Влияние сольватации на коэффициент активности. Работы Измайлова, Соловкина и других.
10. Влияние ионной силы раствора на скорость химической реакции.
11. Полиэлектролиты. Получение и применение полиэлектролитов.

Список литературы

Основная

1. Ф. П. Парамонов, Р. М. Несмеянова. Химическая термодинамика. Изд. Кереку, Павлодар, 2008 г. - 129 с.
2. Р. П. Салем. Теоритическая электрохимия. Изд. «Вузовская книга», М.: 2006 с. - 227.
3. В. В. Еремин, С. И. Каргов и др. Задачи по физической химии. Изд. «Экзамен», М.: 2005 г. - 319 с.

Дополнительная

4. Е. С. Вентцель. Теория вероятностей. Изд. «Наука», М.: 2009 г. - 576 с.
5. М. И. Шахпаронов. Введение в современную теорию растворов. Изд. «Высшая школа», М.: 2006 г. - 296 с.
6. П. И. Антропов. Теоритическая электрохимия. Изд. «Высшая школа», М.: 2009 - 510 с.