



Силабус освітнього компонента

Програма навчальної дисципліни

Фізична хімія конденсованих і молекулярних систем

**Шифр та назва спеціальності**

161 – Хімічні технології та інженерія

Інститут

ННІ Хімічних технологій та інженерії

Освітня програма

Енергоефективність і комп'ютерна хімічна інженерія

Кафедра

Фізичної хімії (194)

Рівень освіти

Бакалавр

Тип дисципліни

Вибіркова

Семестр

4

Мова викладання

Українська

Викладачі, розробники

**Сахненко Микола Дмитрович**

mykola.sakhnenko@khpі.edu.ua

Доктор технічних наук, професор, завідувач кафедри фізичної хімії НТУ «ХПІ», академік АН Вищої школи України.

Досвід науково-педагогічної роботи – 50 років. Автор понад 1100 наукових та науково-методичних публікацій, серед яких 14 підручників і навчальних посібників, 19 монографій і 17 розділів у закордонних монографіях, понад 120 авторських свідоцтв і патентів.

[Детальніше про викладача на сайті кафедри](#)

Загальна інформація

Анотація

Дисципліна спрямована на формування базових знань з фізичної хімії, вміння застосовувати нові досягнення у галузі фізики та хімії при впровадженні передових технологій в виробництві та оволодіння основними сучасними методами досліджень

Мета та цілі дисципліни

Метою викладання навчальної дисципліни є засвоєння студентами теоретичних основ, принципів та законів сучасної фізичної хімії, формування здатності до розуміння та аналізу процесів та явищ, які спостерігаються при проведенні хіміко-технологічних операцій та фізико-хімічних аналізів; навчання методам розрахунку для визначення напряму перебігу хімічних процесів, їх енергетики та стану рівноваги; методам проведення експериментальних досліджень властивостей хімічних речовин і процесів та аналізу експериментальних даних; ознайомлення студентів із сучасними напрямками розвитку теоретичних та експериментальних досліджень у галузі фізичної хімії.

Формат занять

Лекції, лабораторні роботи, модульні контрольні роботи, індивідуальні розрахункові завдання, консультації. Підсумковий контроль - залік.

Компетентності

Здатність використовувати положення, засоби та методи фізичної хімії конденсованих та молекулярних систем для розв'язання практичних задач у галузі хімічних технологій та інженерії.

Результати навчання

Знати та розуміти фізико-хімічну природу процесів та явищ, які відбуваються у конденсованих середовищах та молекулярних системах, використовувати їх при проектуванні та вдосконаленні технологічних процесів хімічної промисловості.

Обсяг дисципліни

Загальний обсяг дисципліни 90 год. (3 кредити ECTS): лекції – 16 год., лабораторні заняття – 16 год., самостійна робота – 58 год.

Передумови вивчення дисципліни (пререквізити)

Вища математика, фізика, загальна та неорганічна, органічна та аналітична хімія, фізична та колоїдна хімія.

Особливості дисципліни, методи та технології навчання

Курс подано з використанням системного підходу задля формування системних знань, цілісних уявлень про дисципліну, формування навичок синтезу, порівняння і узагальнення інформації.

Пояснювально-ілюстративний метод.

Студенти здобувають знання у «готовому» вигляді, слухаючи лекцію, або з навчальної літератури, або за допомогою Інтернет-посібника. Студенти сприймають і осмислюють факти, оцінки, висновки й залишаються в рамках репродуктивного (відтворюючого) мислення.

Репродуктивний метод.

Йдеться про застосування вивченого на основі зразка або правила. Діяльність студентів є алгоритмічною, тобто відповідає інструкціям, розпорядженням, правилам – в аналогічній до представленого зразка ситуаціях. Організовується діяльність студентів за кількарізним відтворенням засвоєваних знань. Для цього використовуються різноманітні вправи, лабораторні роботи, програмований контроль за методикою циклічного тестування.

Частково-пошуковий, або евристичний метод.

Його сенс полягає в організації активного пошуку розв'язання висунутих педагогом пізнавальних завдань або під керівництвом педагога, або на основі евристичних програм і вказівок. Процес мислення поетапно направляється й контролюється педагогом або самими учнями на основі роботи над завданнями і навчальними посібниками.

Програма навчальної дисципліни

Теми лекційних занять

Тема 1. Вступ.

Предмет та задачі навчальної дисципліни. Державні пріоритети та роль основних розділів і методів фізичної хімії в реалізації новітньої парадигми перебудови промисловості згідно постулатів Індустрії 4.0.

Тема 2. Математичний апарат термодинаміки.

Об'єднане рівняння першого і другого законів термодинаміки. Рівняння Гіббса-Дюгема. Фундаментальне рівняння Гіббса. Визначення функцій стану F , G , H , V . Запис для них фундаментальних рівнянь. Співвідношення Максвелла. Характеристичні функції, їх визначення і властивості. Енергія Гельмгольца і Гіббса як критерії спрямованості процесу і стану рівноваги. Рівняння Гіббса-Гельмгольца та його різні вирази. Температурна залежність ΔG .

Тема 3. Термодинаміка гетерогенних систем і фізико-хімія розчинів.

Гетерогенна система. Компонент. Число незалежних компонентів. Фаза. Число ступенів свободи. Правило фаз Гіббса. Однокомпонентні системи. Діаграма стану води. Рівняння Клапейрона–Клаузіуса і фазові переходи першого роду. Його застосування до процесів плавлення, випарювання та сублімації в однокомпонентних системах. Способи вираження концентрацій. Діаграми стану. Принцип побудови та інтерпретації діаграм стану. Принцип Курнакова. Фізико-хімічний аналіз стану. Правило важеля. Основні типи діаграм двокомпонентних систем. Загальне визначення ідеальних розчинів. Колігативні властивості розчинів. Розчинність газів. Закон Генрі.

Тема 4. Гетерогенні рівноваги: рідина – тверда речовина.

Розчинність твердих речовин. Залежність ідеальної розчинності від температури. Рівняння Шредера у диференційній та інтегральній формах. Аналіз. Застосування для визначення теплоти і температур плавлення. Крива охолодження. Типи діаграм плавкості (діаграми з евтектикою, діаграма з утворенням хімічної сполуки, з необмеженою розчинністю в твердому стані, з обмеженою розчинністю в твердому стані).

Тема 5. Закон розподілу Нернста-Шилова.

Прояви закону у ідеальних і реальних системах. Екстракція. Застосування у промисловості. Зонна плавка. Застосування для глибокої очистки речовин. Трикомпонентні системи. Визначення складу. Трикутник Гіббса. Діаграми стану металевих сплавів. Інтерметаліди як зміцнювальна фаза сплавів. Дуралюміні.

Тема 6. Основи статистичної термодинаміки.

Статистична термодинаміка - передумови. Головні визначення статистичної термодинаміки Великий канонічний ансамбль. Сума за станами, її розрахунок. Визначення термодинамічних величин із використанням суми за станами. реакції.

Тема 7. Елементи термодинаміки необоротних процесів.

Базові визначення нерівноважної термодинаміки Класифікація нерівноважних систем; Постулати термодинаміки необоротних процесів. Змінення ентропії у відкритих системах. Протікання ентропії в хімічних перетвореннях. Потoki і сили. Лінійні матеріальні рівняння.

Тема 8. Термодинаміка електрохімічних систем.

Визначення методом ЕРС енергії Гіббса, ентальпії і ентропії хімічної реакції; коефіцієнтів активності та чисел переносу. Визначення напрямку реакцій.

Тема 9. Суміщені реакції корозії.

Суміщені реакції корозії. Діаграми Пурбе: визначення Практичне застосування діаграм $E - pH$. Діаграми Пурбе для води. Діаграми Пурбе для заліза.

Тема 10. Формальна кінетика хімічних реакцій.

Порядки реакції. Графічне визначення швидкості реакції. Методи визначення порядку реакції. Молекулярність елементарних реакцій Температурний коефіцієнт константи швидкості. Емпіричне правило Вант-Гоффа. Рівняння Арреніуса. Енергія активації. Елементарний акт хімічної реакції. Модельні уявлення про перебіг елементарного акту хімічної реакції.

Тема 11. Каталіз.

Активованій комплекс. Теорія абсолютних швидкостей Ейрінга і Поляні. Основні поняття каталізу. Каталізатор. Каталітична активність. Селективність каталізатора. Типи гомогенного каталізу. Гетерогенний каталіз. Стеричний та частотний фактори. Модельні уявлення теорії гетерогенного каталізу. Застосування каталізаторів у технологічних процесах. Роль адсорбції в гетерогенному каталізі. Мультиплетна теорія гетерогенного каталізу Баландіна.

Тема 12. Складні хімічні реакції.

Складні реакції: визначення і класифікація. Послідовні реакції. Паралельні реакції. Спряжені реакції. Фотохімічні реакції. Закони фотохімії. Константи швидкості фотохімічної реакції. Квантовий вихід. Ланцюгові реакції. Стадії ланцюгової реакції. Особливості кінетики реакцій з розгалуженими і нерозгалуженими ланцюгами. Коливальні реакції.

Тема 13. Оборотні хімічні реакції. Електрохімічні реакції.

Оборотні хімічні реакції, класифікація. Реакції першого та другого порядку. Відмінність хімічних і електрохімічних реакцій. Підґрунтя для опису кінетики електрохімічних реакцій. Стадії електродного процесу. Поляризація і перенапруга. Типи перенапруг. Кінетичні закономірності перебігу електродних реакцій. Сповільнена стадія, засоби і методи визначення. Комплексоутворення в розчинах, електродні реакції за участю комплексів металів. Сплавоутворення.

Тема 14. Основні постулати квантової хімії.

Хвиля де Бройля. Співвідношення невизначеностей Гейзенберга. Постулати про хвильову функцію, лінійний самосполучений оператор, постулат Шредінгера, постулати про середню величину, принцип суперпозиції, принцип Паулі. Основні наближення рішення рівняння Шредінгера. Наближення Борна-Оппенгеймера. Наближення Хартрі-Фока. Метод МО ЛКАО. Хімічний зв'язок. Типи хімічного зв'язку. Гібридизація. Метод Хюккеля. Молекулярні діаграми. Заряд на атомі. Порядок зв'язку. Індекс вільної валентності.

Тема 15. Теоретичні основи експериментальних фізичних методів дослідження хімічних речовин і процесів.

Методи аналізу хімічних систем: класифікація. Загальна схема фізичних досліджень хімічних об'єктів. Природа виникнення молекулярних спектрів. Обертальні, коливальні, електронні спектри. Електронні спектри поглинання. Електронні переходи в молекулах. Смуги поглинання. Визначення та фізичний сенс основних характеристик смуг поглинання. Коливальна спектроскопія. Інфрачервоні спектри. Характеристичні частоти. Закон поглинання Ламберта-Бугера-Бера. Обертальні спектри поглинання. Електронна мікроскопія. Контроль вмісту речовин в хімічних середовищах.

Тема 16. Фізична хімія – наукове підґрунтя хімічних технологій.

Енергія і цивілізація. Державні пріоритети. Енергетична незалежність. Від винаходу Планте до паливного елемента, від багдадської судини до протічних ред-окс акумуляторів. Нобелівські лауреати в царині фізичної хімії: наукові здобутки. Сьогодення і перспективи хімічних технологій.

Теми практичних занять

Практичні заняття в рамках дисципліни не передбачені.

Теми лабораторних робіт

Лабораторна робота №1. Визначення термодинамічних функцій хімічної реакції методом ЕРС.

Лабораторна робота №2. Визначення константи рівноваги гетерогенної реакції.

Лабораторна робота №3. Визначення константи дисоціації слабкого електроліту.

Лабораторна робота №4. Визначення константи швидкості розчинення.

Лабораторна робота №5. Визначення порядку реакції.

Лабораторна робота №6. Електронні спектри молекул.

Лабораторна робота №7. Коливальні спектри молекул.

Самостійна робота

Самостійна робота за дисципліною включає опрацювання лекційного матеріалу, підготовку до лабораторних занять, самостійне вивчення тем та питань, які не викладаються на лекційних заняттях, а також виконання індивідуального розрахункового завдання за темою «Кінетика хімічних реакцій» згідно з індивідуальним варіантом для кожного студента. Результати розрахунків оформлюються у письмові звіти.

Література та навчальні матеріали

1. Руднева С.І., Сахненко М.Д., Дженюк А.В., Желавська Ю.А. Фізична хімія ONLINE. Ч.1: Навчальний посібник для студентів інженерно-хімічних напрямів освіти. –Харків: ФОП Панов А.М., 2021. –338 с.
2. Руднева С.І., Сахненко М.Д., Некрасов О.П., Дженюк А.В., Фізична хімія ONLINE. Ч.ІІ Термодинаміка та рівноваги: Навчальний посібник для студентів інженерно-хімічних спеціальностей. –Харків: ФОП Панов А.М., 2023. –308 с.

3. Руднева С.І., Дженюк А.В., Сахненко М.Д. Фізична хімія: навчальний посібник для самостійної та дистанційної підготовки до лабораторних робіт з курсу фізичної хімії для студентів хімічних спеціальностей. – Харків: ФОП Панов А.М., 2020. – 270 с.
4. Руднева С.І., Сахненко М.Д., Дженюк А.В. Гетерогенні рівноваги в хімічній інженерії: навчальний посібник. – Харків: ФОП Панов А.М., 2020. – 116 с.
5. A.V. Djenyuk, S.I.Rudneva, N.D. Sakhnenko, O.A. Ovcharenko Physical Chemistry. Laboratory works Part I. – Харків: ФОП Бровін О.В., 2019. – 160 с.

Додаткова література

1. Є.П. Ковальчук, М.М. Яцишин, Я.С. Ковалишин Речовина в інтерфазі. Фізична хімія тонких плівок.: навчальний посібник.- Львів: Видавничий центр ЛНУ ім. Івана Франка, 2005. - 225 с.
2. S.I. Rudneva, N.D. Sakhnenko, A.V. Djenyuk. Physical chemistry: Practical course. – Kharkiv: ФЛП Панов А.Н, 2018. – 148 р.
3. В.І.Лебідь. Фізична хімія. – Харків: Гімназія, 2008. – 478 с.
4. Яцимирський В.К. Фізична хімія. - К.: ВТФ «Перун», 2007, 512 с.
5. В.Гомонай. О.Гомонай. Фізична хімія. – Ужгород : Патент, 2004. – 712 с

Система оцінювання

Критерії оцінювання успішності студента та розподіл балів

100% підсумкової оцінки складаються з результатів оцінювання у вигляді іспиту (15%), поточного оцінювання (60%) та індивідуального завдання (25%).

Залік: письмове завдання (2 запитання з теорії) та усна доповідь.

Поточне оцінювання: контрольний захист лабораторних робіт (40%), модульні контрольні роботи (30%)

Шкала оцінювання

Сума балів	Національна оцінка	ECTS
90–100	Відмінно	A
82–89	Добре	B
75–81	Добре	C
64–74	Задовільно	D
60–63	Задовільно	E
35–59	Незадовільно (потрібне додаткове вивчення)	FX
1–34	Незадовільно (потрібне повторне вивчення)	F

Норми академічної етики і політика курсу

Студент повинен дотримуватися «Кодексу етики академічних взаємовідносин та доброчесності НТУ «ХПІ»: виявляти дисциплінованість, вихованість, доброзичливість, чесність, відповідальність. Конфліктні ситуації повинні відкрито обговорюватися в навчальних групах з викладачем, а при неможливості вирішення конфлікту – доводитися до відома співробітників дирекції інституту. Нормативно-правове забезпечення впровадження принципів академічної доброчесності НТУ «ХПІ» розміщено на сайті: <http://blogs.kpi.kharkov.ua/v2/nv/akademichna-dobrochesnist/>

Погодження

Силабус погоджено

01.06.2024

Завідувач кафедри
Микола САХНЕНКО

01.06.2024

Гарант ОП
Костянтин ГОРБУНОВ