

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**федеральное государственное автономное  
образовательное учреждение высшего образования  
«Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет  
им. Н.И. Лобачевского»**

Химический факультет

---

УТВЕРЖДЕНО  
решением Ученого совета ННГУ  
протокол № 6 от 31.05.2023 г.

**Рабочая программа дисциплины**

Методы практических расчетов в химической термодинамике

---

Уровень высшего образования  
Магистратура

---

Направление подготовки / специальность  
04.04.01 - Химия

---

Направленность образовательной программы  
Физическая химия

---

Форма обучения  
очная, очно-заочная

---

г. Нижний Новгород

2023 год начала подготовки

## 1. Место дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина Б1.В.03.06 Методы практических расчетов в химической термодинамике относится к части, формируемой участниками образовательных отношений образовательной программы.

## 2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями и индикаторами достижения компетенций)

Формируемые компетенции (код, содержание компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), в соответствии с индикатором достижения компетенции		Наименование оценочного средства	
	Индикатор достижения компетенции (код, содержание индикатора)	Результаты обучения по дисциплине	Для текущего контроля успеваемости	Для промежуточной аттестации
ПК-3-н: Способен на основе критического анализа результатов НИР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии и/или смежных с химией науках	ПК-3-н.1: Систематизирует информацию, полученную в ходе НИР, анализирует ее и сопоставляет с литературными данными ПК-3-н.2: Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов	ПК-3-н.1: З1: Знать теоретические основы термодинамического описания различных химических и физико-химических систем. У1: Уметь использовать экспериментальные данные для расчета термодинамических свойств веществ и термодинамических параметров процессов. В1: Владеть навыками решения практических задач, умениями обрабатывать полученные данные  ПК-3-н.2: З1: Знать теоретические основы термодинамического описания различных химических и физико-химических систем. У1: Уметь использовать экспериментальные данные для расчета термодинамических свойств веществ и термодинамических параметров процессов. В1: Владеть навыками решения практических задач, умениями обрабатывать полученные данные	Задания Задачи	Экзамен: Задания Задачи

### 3. Структура и содержание дисциплины

#### 3.1 Трудоемкость дисциплины

	очная	очно-заочная
<b>Общая трудоемкость, з.е.</b>	<b>6</b>	<b>6</b>
<b>Часов по учебному плану</b>	<b>216</b>	<b>216</b>
в том числе		
<b>аудиторные занятия (контактная работа):</b>		
- занятия лекционного типа	<b>36</b>	<b>36</b>
- занятия семинарского типа (практические занятия / лабораторные работы)	<b>0</b>	<b>0</b>
- КСР	<b>2</b>	<b>2</b>
<b>самостоятельная работа</b>	<b>124</b>	<b>142</b>
<b>Промежуточная аттестация</b>	<b>54</b> экзамен	<b>36</b> экзамен

#### 3.2. Содержание дисциплины

(структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий)

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины	Всего (часы)		в том числе							
			Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них						Самостоятельная работа обучающегося, часы	
			Занятия лекционного типа		Занятия семинарского типа (практические занятия/лабораторные работы), часы		Всего			
	о ф о	о з ф о	о ф о	о з ф о	о ф о	о з ф о	о ф о	о з ф о	о ф о	о з ф о
Раздел 1. Изучение влияния различных факторов на химическое взаимодействие с помощью термодинамического метода, базирующегося на фундаментальном уравнении Гиббса: Основные законы термодинамики. Математический аппарат термодинамики, базирующийся на объединенном уравнении первого и второго начала термодинамики. Фундаментальное уравнение Гиббса. Свойства функции Гиббса и других функций состояния системы; зависимость изменения функции состояния химической системы от термодинамических параметров.	40	43	9	9	0	0	9	9	31	34
Раздел 2. Расчет термодинамических параметров реакций по свойствам их компонентов; Расчет изменения термодинамических функций по экспериментальным данным значений теплоемкости веществ в заданном интервале температур и энтальпий фазовых переходов. Химическое равновесие. Изотерма и изобара реакции. Особенности гетерогенного химического равновесия. Расчеты констант равновесия по стандартным значениям функции Гиббса образования компонентов системы, по уравнению изобары реакции. Расчет констант равновесия редокс-реакций с помощью потенциометрии (измерения ЭДС электрохимической системы).	40	45	9	9	0	0	9	9	31	36
Раздел 3. Определение термодинамических свойств веществ и термодинамических характеристик реакций с использованием химического подобия и сравнения: Расчет значений энтропии вещества по экспериментальным данным зависимости его теплоемкости от температуры и значений энтальпии фазового перехода. Термодинамические свойства однотипных соединений. Расчет выхода продуктов химического процесса. Расчет равновесия в сложных химических системах.	40	45	9	9	0	0	9	9	31	36

Раздел 4. Сравнительные методы расчета термодинамических свойств органических веществ и термодинамических характеристик реакций с их участием: Применение методов сравнительного расчета к органическим веществам и реакциям с их участием. Метод расчета по групповым инкрементам. Метод однотипных соединений и однотипных реакций. Метод Карапетянца.	40	45	9	9	0	0	9	9	31	36
Аттестация	54	36								
КСР	2	2					2	2		
Итого	216	216	36	36	0	0	38	38	124	142

#### 4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Для обеспечения самостоятельной работы обучающихся используются:

- электронный курс ".".

#### 5. Фонд оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)

**5.1 Типовые задания, необходимые для оценки результатов обучения при проведении текущего контроля успеваемости с указанием критериев их оценивания:**

##### 5.1.1 Типовые задания (оценочное средство - Задания) для оценки сформированности компетенции ПК-3-н

Задание 1. Фундаментальное уравнение Гиббса для обратимых процессов. Его преобразования для решения конкретных задач и сопоставления термодинамических уравнений с экспериментальными данными.

Задание 2. Определение энтропии и внутренней энергии химических систем по экспериментальным данным.

Задание 3. Метод химических потенциалов. Расчет химических потенциалов компонентов.

Задание 4. Использование фундаментального уравнения Гиббса для химических превращений с участием заряженных частиц.

Задание 5. Условие равновесия при фиксированной температуре для химического взаимодействия, описываемого с помощью одного уравнения баланса масс. Расчет изменения функции Гиббса в стандартных условиях и при любых других условиях.

Задание 6. Расчет константы равновесия по экспериментальным физико-химическим данным.

Задание 7. Расчет констант равновесия химических реакций по приведенным функциям Гиббса.

Задание 8. Термодинамическое описание гетерогенного химического равновесия.

Задание 9. Применение методов сравнительного расчета к органическим веществам и реакциям с их участием. Метод расчета по групповым инкрементам.

Задание 10. Метод сравнительного расчета – метод однотипных реакций и однотипных соединений. Метод Карапетянца.

**Критерии оценивания (оценочное средство - Задания)**

Оценка	Критерии оценивания
превосходно	Знания: Уровень знаний в объеме, превышающем программу подготовки. Умения: Продемонстрированы все основные умения,. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов. Навыки: Продемонстрирован творческий подход к решению нестандартных задач
отлично	Знания: Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки, без ошибок. Умения: Продемонстрированы все основные умения, решены все основные задачи с отдельными несущественным недочетами, выполнены все задания в полном объеме. Навыки: Продемонстрированы навыки при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов.
очень хорошо	Знания: Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько несущественных ошибок. Умения: Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи . Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами. Навыки: Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов.
хорошо	Знания: Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых ошибок. Умения: Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами. Навыки: Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.
удовлетворительно	Знания: Минимально допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибки Умения: Продемонстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания но не в полном объеме. Навыки: Имеется минимальный набор навыков для решения стандартных задач с некоторыми недочетами
неудовлетворительно	Знания: Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки. Умения: При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения. Имели место грубые ошибки. Навыки: При решении стандартных задач не продемонстрированы базовые навыки. Имели место грубые ошибки.
плохо	Знания: Отсутствие знаний теоретического материала. Невозможность оценить полноту знаний вследствие отказа обучающегося от ответа. Умения: Отсутствие минимальных умений . Невозможность оценить наличие умений вследствие отказа обучающегося от ответа. Навыки: Отсутствие владения материалом. Невозможность оценить наличие навыков вследствие отказа обучающегося от ответа.

**5.1.2 Типовые задания (оценочное средство - Задачи) для оценки сформированности компетенции ПК-3-н**

Задача 1.

Рассчитайте ионное произведение воды при температуре 298К. Стандартные электродные потенциалы электродов  $\text{Pt}|\text{H}_2|\text{H}^+$  и  $\text{Pt}|\text{H}_2|\text{OH}^-$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  равны 0 и -0,828В соответственно.

#### Задача 2.

Рассчитайте состав равновесной смеси, получающейся при изомеризации этилбензола по трем параллельным реакциям с образованием орто-, пара- и мета-диметилбензола при 600К и 1 атм. Стандартные функции Гиббса образования при 600К этилбензола, орто-, пара- и мета-диметилбензола равны 57,646, 56,103, 55,099, 56,060 ккал/моль соответственно.

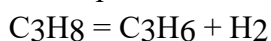
#### Задача 3.

Рассчитайте давление насыщенного пара над переохлажденным жидким бензолом при 268.15К. Имеются следующие данные:

- давление насыщенного пара над кристаллическим бензолом при той же температуре равно 17,1 мм Нг,
- нормальная температура плавления бензола равна 278,15К,
- мольная энтальпия плавления бензола равна -9956 Дж/моль,
- изобарные теплоемкости жидкого и кристаллического бензола равны 127,3 и 123,6 Дж/(моль·К) соответственно.

#### Задача 4.

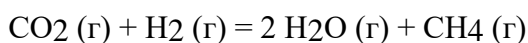
При пиролизе пропана протекают две реакции



Рассчитайте состав равновесной смеси, если реакция проводится при 1000К и 1 атм в газовой фазе. Для решения воспользуйтесь данными Справочника.

#### Задача 5.

Рассчитайте выход метана при 800К и 5 атм, если в исходной смеси содержалось 1 моль  $\text{CO}_2$  и 4 моль  $\text{H}_2$ :



Для решения воспользуйтесь данными Справочника.

#### Задача 6.

Рассчитайте давление насыщенного пара жидкой воды при температуре 298К при котором жидкая и парообразная вода находятся в равновесии. Для решения воспользуйтесь данными Справочника.

#### Задача 7.

Рассчитайте температуру, при которой жидкая и парообразная вода находятся в равновесии при давлении 1 атм. Для решения воспользуйтесь данными Справочника.

#### Задача 8.

Рассчитайте энтропию 1 моль этилового спирта в парообразном состоянии при температуре кипения, равной 351,48 К при  $p=0,05$  атм. Примите, что при этой температуре стандартная энтальпия испарения равна 9304 кал/моль. Для решения воспользуйтесь данными Справочника.

#### Задача 9.

Рассчитайте изменение энтропии при нагревании 1 моль кадмия от 25°C до 727°C, если температура плавления кадмия равна 321°C, а его энтальпия плавления равна 1460 кал/моль. Теплоемкость жидкого кадмия в указанном интервале температур считайте постоянной и равной 7,13 кал/(моль·К). Для решения воспользуйтесь данными Справочника.

#### Задача 10.

Рассчитайте состав равновесной смеси, получившейся при полимеризации пропилена в газовой фазе по схеме



При 500 К для первой стадии  $K_p = 7,19$ , для второй стадии  $K_p = 8,9$ . Давление в системе 1 атм.

### Критерии оценивания (оценочное средство - Задачи)

Оценка	Критерии оценивания
превосходно	Знания: Уровень знаний в объеме, превышающем программу подготовки. Умения: Продемонстрированы все основные умения,. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов. Навыки: Продемонстрирован творческий подход к решению нестандартных задач
отлично	Знания: Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки, без ошибок. Умения: Продемонстрированы все основные умения, решены все основные задачи с отдельными несущественным недочетами, выполнены все задания в полном объеме. Навыки: Продемонстрированы навыки при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов.
очень хорошо	Знания: Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько несущественных ошибок. Умения: Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи . Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами. Навыки: Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов.
хорошо	Знания: Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых ошибок. Умения: Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами. Навыки: Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.
удовлетворительно	Знания: Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки. Умения: При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения. Имели место грубые ошибки. Навыки: При решении стандартных задач не продемонстрированы базовые навыки. Имели место грубые ошибки.
неудовлетворительно	задач не продемонстрированы основные умения. Имели место грубые ошибки. Навыки: При решении стандартных задач не продемонстрированы базовые навыки. Имели место грубые ошибки.
плохо	Знания: Отсутствие знаний теоретического материала. Невозможность оценить полноту знаний вследствие отказа обучающегося от ответа. Умения: Отсутствие минимальных умений . Невозможность оценить наличие умений вследствие отказа обучающегося от ответа. Навыки: Отсутствие владения материалом. Невозможность оценить наличие навыков вследствие отказа обучающегося от ответа.

### 5.2. Описание шкал оценивания результатов обучения по дисциплине при промежуточной аттестации

### Шкала оценивания сформированности компетенций

Уровень сформированности компетенций (индикатора достижения компетенций)	плохо	неудовлетворительно	удовлетворительно	хорошо	очень хорошо	отлично	превосходно
	не зачтено		зачтено				
<u>Знания</u>	Отсутствие знаний теоретического материала. Невозможность оценить полноту знаний вследствие отказа обучающегося от ответа	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки	Минимально допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько несущественных ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Ошибок нет.	Уровень знаний в объеме, превышающем программу подготовки.
<u>Умения</u>	Отсутствие минимальных умений. Невозможность оценить наличие умений вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения. Имели место грубые ошибки	Продemonстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, но не в полном объеме	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с отдельными несущественными недочетами, выполнены все задания в полном объеме	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов
<u>Навыки</u>	Отсутствие базовых навыков. Невозможность оценить наличие навыков вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы базовые навыки. Имели место грубые ошибки	Имеется минимальный набор навыков для решения стандартных задач с некоторым и недочетами	Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторым и недочетами	Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов	Продemonстрированы навыки при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов	Продemonстрирован творческий подход к решению нестандартных задач

### Шкала оценивания при промежуточной аттестации

Оценка		Уровень подготовки
зачтено	превосходно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «превосходно», продемонстрированы знания, умения,



		владения по соответствующим компетенциям на уровне выше предусмотренного программой
	<b>отлично</b>	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «отлично».
	<b>очень хорошо</b>	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «очень хорошо»
	<b>хорошо</b>	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «хорошо».
	<b>удовлетворительно</b>	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «удовлетворительно», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «удовлетворительно»
<b>не зачтено</b>	<b>неудовлетворительно</b>	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно».
	<b>плохо</b>	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «плохо»

### 5.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения на промежуточной аттестации

#### 5.3.1 Типовые задания, выносимые на промежуточную аттестацию:

##### Оценочное средство - Задания

##### Экзамен

##### Критерии оценивания (Задания - Экзамен)

Оценка	Критерии оценивания
превосходно	Знания: Уровень знаний в объеме, превышающем программу подготовки. Умения: Продемонстрированы все основные умения,. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов. Навыки: Продемонстрирован творческий подход к решению нестандартных задач
отлично	Знания: Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки, без ошибок. Умения: Продемонстрированы все основные умения, решены все основные задачи с отдельными несущественным недочетами, выполнены все задания в полном объеме. Навыки: Продемонстрированы навыки при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов.
очень хорошо	Знания: Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько несущественных ошибок. Умения: Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи . Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами. Навыки: Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов.
хорошо	Знания: Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых ошибок. Умения: Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные

Оценка	Критерии оценивания
	задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами. Навыки: Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.
удовлетворительно	Знания: Минимально допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибки Умения: Продемонстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания но не в полном объеме. Навыки: Имеется минимальный набор навыков для решения стандартных задач с некоторыми недочетами
неудовлетворительно	Знания: Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки. Умения: При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения. Имели место грубые ошибки. Навыки: При решении стандартных задач не продемонстрированы базовые навыки. Имели место грубые ошибки.
плохо	Знания: Отсутствие знаний теоретического материала. Невозможность оценить полноту знаний вследствие отказа обучающегося от ответа. Умения: Отсутствие минимальных умений . Невозможность оценить наличие умений вследствие отказа обучающегося от ответа. Навыки: Отсутствие владения материалом. Невозможность оценить наличие навыков вследствие отказа обучающегося от ответа.

**Типовые задания (Задания - Экзамен) для оценки сформированности компетенции ПК-3-н**  
(Способен на основе критического анализа результатов НИР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии и/или смежных с химией науках)

Задание 1. Фундаментальное уравнение Гиббса для обратимых процессов. Его преобразования для решения конкретных задач и сопоставления термодинамических уравнений с экспериментальными данными.

Задание 2. Определение энтропии и внутренней энергии химических систем по экспериментальным данным.

Задание 3. Метод химических потенциалов. Расчет химических потенциалов компонентов.

Задание 4. Использование фундаментального уравнения Гиббса для химических превращений с участием заряженных частиц.

Задание 5. Условие равновесия при фиксированной температуре для химического взаимодействия, описываемого с помощью одного уравнения баланса масс. Расчет изменения функции Гиббса в стандартных условия и при любых других условиях.

Задание 6. Расчет константы равновесия по экспериментальным физико-химическим данным.

Задание 7. Расчет констант равновесия химических реакций по приведенным функциям Гиббса.

Задание 8. Термодинамическое описание гетерогенного химического равновесия.

Задание 9. Применение методов сравнительного расчета к органическим веществам и реакциям с их участием. Метод расчета по групповым инкрементам.

Задание 10. Метод сравнительного расчета – метод однотипных реакций и однотипных соединений. Метод Карапетьянца.

### Оценочное средство - Задачи

#### Экзамен

#### Критерии оценивания (Задачи - Экзамен)

Оценка	Критерии оценивания
превосходно	Знания: Уровень знаний в объеме, превышающем программу подготовки. Умения: Продемонстрированы все основные умения,. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов. Навыки: Продемонстрирован творческий подход к решению нестандартных задач
отлично	Знания: Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки, без ошибок. Умения: Продемонстрированы все основные умения, решены все основные задачи с отдельными несущественным недочетами, выполнены все задания в полном объеме. Навыки: Продемонстрированы навыки при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов.
очень хорошо	Знания: Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько несущественных ошибок. Умения: Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи . Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами. Навыки: Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов.
хорошо	Знания: Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых ошибок. Умения: Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами. Навыки: Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.
удовлетворительно	Знания: Минимально допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибки Умения: Продемонстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания но не в полном объеме. Навыки: Имеется минимальный набор навыков для решения стандартных задач с некоторыми недочетами
неудовлетворительно	Знания: Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки. Умения: При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения. Имели место грубые ошибки. Навыки: При решении стандартных задач не продемонстрированы базовые навыки. Имели место грубые ошибки.
плохо	Знания: Отсутствие знаний теоретического материала. Невозможность оценить полноту знаний вследствие отказа обучающегося от ответа. Умения: Отсутствие минимальных умений . Невозможность оценить наличие умений вследствие отказа обучающегося от ответа. Навыки: Отсутствие владения материалом. Невозможность оценить наличие навыков вследствие отказа обучающегося от ответа.

**Типовые задания (Задачи - Экзамен) для оценки сформированности компетенции ПК-3-н**  
(Способен на основе критического анализа результатов НИР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии и/или смежных с химией науках)

Задача 1.

Рассчитайте ионное произведение воды при температуре 298К. Стандартные электродные потенциалы электродов  $\text{Pt}|\text{H}_2|\text{H}^+$  и  $\text{Pt}|\text{H}_2|\text{OH}^-$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  равны 0 и -0,828В соответственно.

Задача 2.

Рассчитайте состав равновесной смеси, получающейся при изомеризации этилбензола по трем параллельным реакциям с образованием орто-, пара- и мета-диметилбензола при 600К и 1 атм. Стандартные функции Гиббса образования при 600К этилбензола, орто-, пара- и мета-диметилбензола равны 57,646, 56,103, 55,099, 56,060 ккал/моль соответственно.

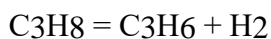
Задача 3.

Рассчитайте давление насыщенного пара над переохлажденным жидким бензолом при 268.15К. Имеются следующие данные:

- давление насыщенного пара над кристаллическим бензолом при той же температуре равно 17,1 мм Hg,
- нормальная температура плавления бензола равна 278,15К,
- мольная энтальпия плавления бензола равна -9956 Дж/моль,
- изобарные теплоемкости жидкого и кристаллического бензола равны 127,3 и 123,6 Дж/(моль·К) соответственно.

Задача 4.

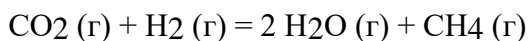
При пиролизе пропана протекают две реакции



Рассчитайте состав равновесной смеси, если реакция проводится при 1000К и 1 атм в газовой фазе. Для решения воспользуйтесь данными Справочника.

Задача 5.

Рассчитайте выход метана при 800К и 5 атм, если в исходной смеси содержалось 1 моль  $\text{CO}_2$  и 4 моль  $\text{H}_2$ :



Для решения воспользуйтесь данными Справочника.

Задача 6.

Рассчитайте давление насыщенного пара жидкой воды при температуре 298К при котором жидкая и парообразная вода находятся в равновесии. Для решения воспользуйтесь данными Справочника.

Задача 7.

Рассчитайте температуру, при которой жидкая и парообразная вода находятся в равновесии при давлении 1 атм. Для решения воспользуйтесь данными Справочника.

Задача 8.

Рассчитайте энтропию 1 моль этилового спирта в парообразном состоянии при температуре кипения, равной 351,48 К при  $p=0,05$  атм. Примите, что при этой температуре

стандартная энтальпия испарения равна 9304 кал/моль. Для решения воспользуйтесь данными Справочника.

#### Задача 9.

Рассчитайте изменение энтропии при нагревании 1 моль кадмия от 25°C до 727°C, если температура плавления кадмия равна 321°C, а его энтальпия плавления равна 1460 кал/моль. Теплоемкость жидкого кадмия в указанном интервале температур считайте постоянной и равной 7,13 кал/(моль·К). Для решения воспользуйтесь данными Справочника.

#### Задача 10.

Рассчитайте состав равновесной смеси, получившейся при полимеризации пропилена в газовой фазе по схеме



При 500 К для первой стадии  $K_p = 7,19$ , для второй стадии  $K_p = 8,9$ . Давление в системе 1 атм.

### 6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

Основная литература:

1. Карапетьянц Михаил Христофорович. Химическая термодинамика : [учеб. пособие для хим. специальностей вузов]. - 3-е изд., перераб. и доп. - М. : Химия, 1975. - 583 с., 1 л. граф. : ил. - 1.61., 16 экз.
2. Карякин Николай Владимирович. Основы химической термодинамики : учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по направлениям подготовки дипломированных специалистов "Хим. технология неорг. веществ и материалов", "Хим. технология орган. веществ и материалов", "Хим. технология материалов соврем. энергетики", "Энерго- и ресурсосберегающие процессы хим. технологии, нефтехимии и биотехнологии", "Биотехнология". - М. : Академия, 2003. - 464 с. - (Высшее профессиональное образование). - ISBN 5-7695-1596-1 : 217.55., 2 экз.
3. Полтораки Ольга Михайловна. Термодинамика в физической химии : [учеб. пособие для хим. и хим.-технол. специальностей вузов]. - М. : Высшая школа, 1991. - 318, [1] с. : ил. - ISBN 5-06-002041-X (в пер.) : 36.00., 5 экз.
4. Киреев Валентин Александрович. Методы практических расчетов в термодинамике химических реакций. - Изд. 2-е, испр. и доп. - М. : Химия, 1975. - 535 с. - 2.78., 5 экз.
5. Карапетьянц Михаил Христофорович. Методы сравнительного расчета физико-химических свойств / Акад. наук СССР. - М. : Наука, 1965. - 403 с. : граф. - 2.43., 1 экз.
6. Эткинс Питер. Физическая химия : в 3 ч. / пер. с англ. И. А. Успенской, В. А. Иванова ; под ред. В. В. Лунина, О. М. Полтораки. - М. : Мир, 2007. - (Лучший зарубежный учебник). Физическая химия. Ч. 1 : Равновесная термодинамика. - 2007. - 494 с. : ил. - ISBN 5-03-003786-1 (русс.) : 150.00., 1 экз.
7. Сталл Д. Химическая термодинамика органических соединений / пер. с англ. В. А. Левицкого и В. М. Сахарова ; предисл. Я. И. Герасимова. - М. : Мир, 1971. - 807, СХХХVI с. : черт. - 4.56., 1 экз.

Дополнительная литература:

1. Карапетьянц Михаил Христофорович. Примеры и задачи по химической термодинамике : [для хим. и хим.-технол. специальностей вузов]. - 4-е изд., испр. - М. : Химия, 1974. - 301 с. : с черт. - 0.80., 17 экз.

2. Карапетьянц Михаил Христофорович. Введение в теорию химических процессов : [учеб. пособие для хим.-технол. специальностей вузов]. - 3-е изд., перераб. и доп. - М. : Высшая школа, 1981. - 333 с. : ил. - 0.90., 2 экз.
3. Пригожин Илья Романович. Химическая термодинамика = Chemical Thermodynamics / пер. с англ. В. А. Михайлова. - 2-е изд. - М. : Бином. Лаборатория знаний, 2009. - 533 с. : ил. - (Классика и современность. Естествознание). - ISBN 978-5-9963-0201-7 : 350.00., 1 экз.
4. Эткинс П. Физическая химия : [в 2 т.]. [Т.] 1 / пер. с англ. К. П. Бутина. - М. : Мир, 1980. - 580 с. : ил. - 2.90., 3 экз.
5. Казанская Алла Сергеевна. Расчеты химических равновесий : сб. примеров и задач : [для хим.-технол. специальностей вузов] / под ред. Г. М. Паченкова. - М. : Высшая школа, 1974. - 288 с. : граф. - 0.72., 2 экз.

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы (в соответствии с содержанием дисциплины):

<http://elibrary.ru>

<http://link.springer.com>

<http://www.sciencedirect.com>

<http://pubs.acs.org>

<http://pubs.rsc.org>

<http://www.uspkhim.ru>

<http://webbook.nist.gov>

<http://www.chem.msu.ru/cgi-bin/tkv.pl>

## **7. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)**

Учебные аудитории для проведения учебных занятий, предусмотренных образовательной программой, оснащены мультимедийным оборудованием (проектор, экран), техническими средствами обучения, компьютерами, специализированным оборудованием: видеопроектор, ноутбук, переносной экран, проектор, доска

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечены доступом в электронную информационно-образовательную среду.

Программа составлена в соответствии с требованиями ОС ННГУ по направлению 04.04.01 - Химия.

Автор(ы): Козлова Мария Сергеевна, кандидат химических наук.

Рецензент(ы): Федоров Алексей Юрьевич, доктор химических наук.

Заведующий кафедрой: Маркин Алексей Владимирович, доктор химических наук.

Программа одобрена на заседании методической комиссии от 25.05.2023 г., протокол № 7.