

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Львівський національний університет імені Івана Франка
Хімічний факультет
Кафедра фізичної та колоїдної хімії

ЗАТВЕРДЖЕНО
на засіданні кафедри фізичної та колоїдної
хімії хімічного факультету
Львівського національного університету імені
Івана Франка
(протокол № 1 від 31 серпня 2021 р.)
Завідувач кафедри _____ О. В. Решетняк

Силабус з навчальної дисципліни
«Фізична хімія» (1 семестр),
що викладається в межах першого (бакалаврського) рівня
вищої освіти для здобувачів з спеціальності
014.06 Середня освіта (Хімія)

Львів – 2021 р.

Назва курсу	Фізична хімія (V семестр)
Адреса викладання курсу	Навчальний корпус хімічного факультету Львівського національного університету імені Івана Франка, вул. Кирила і Мефодія 6/ба, аудиторія 5 (понеділок) та аудиторія 1 (четвер)
Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна	Хімічний факультет, кафедра фізичної та колоїдної хімії
Галузь знань, шифр та назва спеціальності	01 Освіта / Педагогіка; 014.06 Середня освіта (Хімія).
Викладачі курсу	Решетняк Олександр Володимирович, д.х.н., професор, завідувач кафедри фізичної та колоїдної хімії – лектор; Бойчишин Лідія Михайлівна, к.х.н., доцент, доцент кафедри фізичної та колоїдної хімії – лабораторні та практичні заняття.
Контактна інформація викладачів	Хімічний факультет, кафедра фізичної та колоїдної хімії, вул. Кирила і Мефодія 6/ба, к. 129; тел. (032) 2600397 електронна пошта: oleksandr.reshetnyak@lnu.edu.ua
Консультації по курсу відбуваються	<i>Консультації під час семестру:</i> 1) очно при попередній домовленості з викладачем за адресою: хімічний факультет, вул. Кирила і Мефодія, 6, ауд. 122; 2) заочно через електронну пошту <i>Консультації до іспиту:</i> Згідно з Графіком консультацій , який оприлюднюється екзаменатором за тиждень до початку екзаменаційної сесії
Сторінка курсу	Матеріали до курсу розміщені у системі MOODLE ЛНУ імені Івана Франка за адресою: http://e-learning.lnu.edu.ua/course/view.php?id=152
Інформація про курс	«Фізична хімія» (1 семестр) є нормативною навчальною дисципліною для студентів хімічного факультету 3 року навчання за спеціальністю 014.06 Середня освіта (Хімія). Обсяг дисципліни – 210 годин (7 кредитів ECTS), в тому числі 128 аудиторних години. Нормативна навчальна дисципліна «Фізична хімія» є складовою циклу професійної підготовки фахівців освітньо-кваліфікаційного рівня «бакалавр», оскільки узагальнює знання, отримані під час вивчення дисциплін «Загальна та неорганічна хімія», «Аналітична хімія» й «Органічна хімія» та створює підґрунтя для подальшого вивчення нових навчальних дисциплін хімічного спрямування, зокрема таких як «Колоїдна хімія», «Квантова хімія», «Хімія високомолекулярних сполук» тощо.
Коротка анотація курсу	Програма першої частини курсу «Фізична хімія» передбачає вивчення студентами основ хімічної та статистичної термодинаміки, фазової та хімічної рівноваги, термодинаміки необоротних процесів. Зокрема розглядається взаємозв'язок енергії, теплоти та роботи, термодинамічні закони та термодинамічні функції (внутрішня енергія, ентальпія, ентропія, енергія Гіббса та Гельмгольца), поняття про хімічний потенціал, опис необоротних процесів термодинамічними методами. Значна увага приділяється колігативним властивостям розчинів, діаграмам стану одно-, дво- та трикомпонентних систем, їхньому аналізу на основі правила фаз Гіббса, адсорбції на поверхні як рідкої, так і твердої фаз, а також хімічній рівновазі у гомо- та гетерогенних системах. У програму курсу також включено розгляд основних постулатів статистичної

	термодинаміки, функцій розподілу Максвелла-Больцмана, Фермі-Дірака і Бозе-Анштайна, розрахунок термодинамічних функцій та константи рівноваги хімічної реакції методом статистичної термодинаміки
Мета та цілі курсу	Основною метою і завданням навчальної дисципліни є показати студенту місце фізичної хімії в системі хімічної галузі знань та її методологічна роль як теоретичної основи хімії, а також (у 1 семестрі) формування необхідних знань в галузі хімічної термодинаміки, а саме при описі рівноважних та нерівноважних процесів, фазової та хімічної рівноваги, розчинів тощо, набуття практичних навичок проведення термохімічних досліджень, фазових та хімічних рівноваг, використання отриманих знань для здійснення теоретичних розрахунків термодинамічних функцій фізико-хімічних процесів.
Література для вивчення дисципліни	<p style="text-align: center;">Основна</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. <i>Є.П. Ковальчук, О.В. Решетняк.</i> Фізична хімія: Підручник. – Львів: Видавничий цент ЛНУ імені Івана Франка, 2007. 2. <i>Еремін Е.Н.</i> Основы химической термодинамики: Учебн. пособие. – М.: Высш. школа, 1978. 3. Курс физической химии. В 2-х т. / Под ред. проф. Я. И. Герасимова. – 2-е изд. – М.: Химия, 1970. Т. 1; 1973, Т. 2. 4. <i>Стромберг А.Г., Семченко Д.П.</i> Физическая химия / Под ред. А.Г. Стромберга. – 2-е изд. – М.: Высш. шк., 1988. 5. Физическая химия. / Под ред. акад. Б. П. Никольского. – Л.: Химия, 1987. 6. <i>Білий О.В.</i> Фізична хімія. – К.: Центр навч. літ-ри, 2002. <p style="text-align: center;">Додаткова</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. <i>Atkins P. W.</i> Podstawy chemii fizycznej. – Warszawa: PWN, 1999. 2. <i>Эткинс П.</i> Физическая химия. В 2-х т. / Пер. с англ. – М.: Мир, 1980. Т.1–2. 3. <i>Мелвин-Хьюз Э.А.</i> Физическая химия. В 2-х т. – М. Изд-во иностр. литер., 1962. 4. <i>Даниэльс Ф., Олберти Р.</i> Физическая химия. – М.: Высш. шк., 1983. 5. <i>Pigoń K., Ruziewicz Z.</i> Chemia fizyczna. Tom I. Podstawy fenomenologiczne; Tom II. Fizykochemia molekularna. – Warszawa: Wydawnictwo naukowe PWN, 2005. 6. <i>Акопян А. А.</i> Химическая термодинамика. – М.: Высш. шк., 1963. 7. <i>Смирнова Н.А.</i> Методы статистической термодинамики в физической химии. Учебн. пособие, 2 перераб. и дополн. – М.: Высш. школа, 1982. 8. <i>Хейвуд Р.</i> Термодинамика равновесных процессов. – М.: Мир, 1983. 9. <i>Балеску Р.</i> Равновесная и неравновесная статистическая механика. В 2-х т. – М.: Мир, 1978. Т.1, 2. 10. <i>Вест А.</i> Химия твердого тела. Теория и приложения: В 2-х ч. – М.: Мир, 1988. Т.1, 2. 11. <i>Ковальчук Є.П., Яцишин М.М., Ковалишин Я.С.</i> Речовина в інтерфазі. Фізична хімія тонких плівок. – Львів: Видавн. центр ЛНУ імені Івана Франка. 2005. – 242 с. 12. <i>Ковальчук Є.П., Решетняк О.В.</i> Самоорганізовані шари на твердій поверхні. – Львів: Видавн. центр ЛНУ імені Івана Франка. 2006. – 204 с.
Тривалість курсу	III рік підготовки (V семестр)
Обсяг курсу	48 год лекційних, 16 год практичних (семінарських) та 64 год лабораторних занять, 82 год самостійної роботи
Очікувані результати навчання	В результаті вивчення дисципліни студенти повинні опанувати передбачені програмою розділи фізичної хімії, що означає: – розуміти і вміти пояснювати фізичний зміст основних фізико-хімічних величин, а також основні фізико-хімічні закономірності та характеристики

	<p>систем і процесів, які розглядаються в хімії;</p> <ul style="list-style-type: none"> – знати передбачені програмою математичні формули, які є вираженням цих закономірностей, пояснювати фізичний зміст величин та констант, що входять до складу відповідних формул; – розуміти, в яких випадках і чому слід застосовувати певну формулу; – вміти виводити передбачені програмою формули та проводити з ними необхідні для вирішення конкретних задач перетворення; – вміти розв'язувати основні типи задач за темами, передбаченими програмою, правильно використовуючи при цьому відповідні формули; – знати основні методи експериментального дослідження фізико-хімічних закономірностей; – оволодіти технікою проведення фізико-хімічного експерименту в обсязі, передбаченому програмою, а також технікою коректної інтерпретації та статистичної обробки отриманих експериментальних даних.
Ключові слова	Хімічна термодинаміка; термохімія; закони термодинаміки; термодинамічні функції; хімічний потенціал; фазова рівновага; діаграма стану; хімічна рівновага; вчення про розчини; статистична термодинаміка; термодинаміка нерівноважних процесів; адсорбція; інтерфаза; самоорганізація; фізична хімія поверхневого стану
Формат курсу	Очний: лекційні, семінарські (практичні) та лабораторні заняття; виконання контрольних робіт та контрольних домашніх завдань, здача колоквиумів та поточне тестування, проведення консультації у випадку труднощів з опануванням матеріалу
Теми	<p><i>Тема 1.</i> Закони термодинаміки. Термодинамічні функції (6 лекцій; 2 семінарських заняття).</p> <p><i>Тема 2.</i> Фазова рівновага (5 лекцій; 1 семінарське заняття).</p> <p><i>Тема 3.</i> Вчення про розчини (3 лекції; 1 семінарське заняття).</p> <p><i>Тема 4.</i> Хімічна рівновага (2 лекції; 2 семінарські заняття).</p> <p><i>Тема 5.</i> Фізична хімія поверхневого стану (3 лекції; 1 семінарське заняття).</p> <p><i>Тема 6.</i> Статистична термодинаміка (4 лекції; 1 семінарське заняття).</p> <p><i>Тема 7.</i> Термодинаміка нерівноважних процесів (1 лекція).</p>
Підсумковий контроль, форма	Усний іспит в кінці семестру
Пререквізити	Для вивчення курсу студенти потребують базових знань з дисциплін «Фізика», «Вища математика», «Філософія», «Загальна хімія», «Неорганічна хімія», «Органічна хімія», необхідних для сприйняття категоріального апарату курсу, проведення необхідних математичних перетворень та розуміння суті описуваних фізико-хімічних явищ.
Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу	<p>Використовуються такі методи навчання:</p> <p>а) <i>словесні</i> – лекція, пояснення, консультація, бесіда, інструктаж (вступний та поточний під час виконання лабораторних робіт);</p> <p>б) <i>наочні</i> – ілюстрування лекційного матеріалу таблицями, схемами, графіками, фото- та відеоматеріалами;</p> <p>в) <i>практичні</i> – виконання лабораторних робіт, індивідуальних тестових та письмових контрольних завдань.</p>
Необхідне обладнання	<p><i>Лекційні та практичні (семінарські) заняття</i> – мультимедійна установка та ноутбук.</p> <p><i>Лабораторні заняття</i> – обладнання навчальної Лабораторії фізичної хімії кафедри фізичної та колоїдної хімії (калориметр, кріостат, установка для дослідження рівноваги рідина / пара, термopара, рефрактометр, сталагмометр тощо)</p>

Критерії оцінювання (окремо для кожного виду навчальної діяльності)

Навчальна дисципліна "Фізична хімія" оцінюється за модульно-рейтинговою системою, згідно з якою всі види роботи розбито на 3 модулі. Кожен модуль передбачає виконання лабораторних робіт, здачу колоквиуму, написання 1–2 тестових контрольних завдань та 1 поточної контрольної роботи, виконання 1 домашнього контрольного завдання.

Оцінювання результатів навчання студентів здійснюється у вигляді **поточного та підсумкового** контролю.

При виставленні балів поточного контролю враховуються теоретичні знання студентів, продемонстровані ними під час опитувань в усній (колоквиуми, допуски до лабораторних робіт) і письмовій (тестові контрольні завдання) формі; практичні вміння студентів розв'язувати задачі за темами, що розглядаються (домашні контрольні завдання та поточна контрольна робота); письмові звіти про виконання лабораторних робіт.

Результати поточної навчальної діяльності студентів протягом семестру оцінюються за 50-бальною шкалою.

Поточне оцінювання з курсу "Фізична хімія" (2 семестр)

Поточні види роботи	Кількість оцінювань	Кількість балів	Максимальна сума балів за вид роботи
Лабораторні роботи	10	1,75 (доп.) + 0,5 (зах.)	22,5
Колоквиуми	3	3,5	10,5
Домашні контрольні завдання	3	1,5	4,5
Тестові контрольні завдання	5	1	5
Поточна контрольна робота	3	2,5	7,5
Всього протягом семестру			50

Умови допуску студента до підсумкового контролю (іспиту):

- виконання та здача звітів про всі поточні види роботи;
- набрати ≥ 51 балу (у 100-бальній шкалі) за поточні види роботи.

Іспит: максимально – 50 балів;

Підсумкова оцінка: семестрові бали + оцінка за іспит (максимально – 100 балів)

Рейтингове підсумкове оцінювання знань студентів (у балах)

Оцінка ЄКТС	Оцінка в балах	Оцінка за національною шкалою	
		Екзамен	
A	90–100	5	відмінно
B	81–89		дуже добре
C	71–80	4	добре
D	61–70		задовільно
E	51–60	3	достатньо
FX	30–50		2
F	1–29	можливість повторної здачі обов'язковий повторний курс	

Відвідування занять є важливою складовою навчання. Очікується, що студенти відвідають усі лекції, лабораторні та практичні (семінарські) заняття курсу.

Студенти мають інформувати викладача про неможливість відвідати заняття з поважної причини. У випадку хвороби поважність пропуску має бути підтверджена документально. У будь-якому випадку студенти зобов'язані

	<p>дотримуватися усіх строків визначених для виконання/здачі звітів про всі поточні види робіт, передбачених курсом.</p> <p>Пропущені лабораторні заняття мають бути відроблені в обов'язковому порядку в позаурочний час у найстисліші терміни. Час та порядок відпрацювання має бути попередньо узгоджений з викладачем та навчально-допоміжним персоналом лабораторії. Відпрацювання має бути зареєстроване у відповідному журналі лабораторії.</p> <p><i>Письмові звіти про поточні види роботи</i> (тестові та домашні контрольні завдання, поточна контрольна робота, звіти про виконання лабораторних робіт). Очікується, що роботи/звіти студентів будуть виконані ними особисто та здані викладачеві протягом семестру у встановлений ним термін. Фабрикування чи використання чужих вихідних експериментальних даних, списування, втручання в роботу інших студентів тощо вважаються проявами академічної недобросовісності. Виявлення її ознак є підставою для незарахування викладачем відповідних видів роботи незалежно від масштабів плагіату чи обману.</p> <p><i>Література та інші навчальні матеріали.</i> Уся література та інші матеріали, які студенти не зможуть знайти самостійно, буде надана викладачем виключно в освітніх цілях без права її передачі третім особам. Студенти заохочуються до використання також іншої літератури та джерел, яких немає серед рекомендованих.</p>
<p>Питання до іспиту</p>	<p>I. Вступ</p> <p>Фізична хімія і її місце в системі хімічної галузі знань. Методологічна роль фізичної хімії як теоретичної засади хімії. Методи фізичної хімії: термодинамічний, статистичний, квантово-механічний. Співвідношення теоретичних і експериментальних методів дослідження. Основні розділи фізичної хімії.</p> <p>II. Основи хімічної термодинаміки</p> <p>Поняття системи. Ієрархія систем. Системний аналіз. Хімічні системи. Суть термодинамічного підходу до аналізу систем. Параметри (властивості) систем. Інтенсивні та екстенсивні параметри. Стан системи. Рівняння стану системи як аналітичний вираз взаємозалежності властивості системи. Рівняння стану ідеального газу. Реальні гази. Рівняння Ван-дер-Ваальса як рівняння стану ідеального газу. Асиметричність (однонаправленість) процесів. Рівновага в системах. Необоротність і оборотність процесів. Шлях процесу. Функції стану системи. Термічна рівновага. Нульовий закон (постулат) термодинаміки.</p> <p>Енергія, теплота і робота. Види роботи. Робота розширення для різних процесів. Перший закон термодинаміки. Аналітичні вирази першого закону термодинаміки. Внутрішня енергія. Ентальпія. Тепловий ефект хімічних перетворень. Закон Гесса і висновки з нього. Стандартні стани. Стандартні теплові ефекти хімічних реакцій. Залежність теплового ефекту хімічних реакцій від температури. Формула Кірхгофа. Горіння як миттєвий необоротний процес. Залежність теплоємності від температури. Ступенева залежність теплоємності від температури. Розрахунок теплових ефектів хімічних реакцій. Енергія хімічного зв'язку. Оцінка теплот хімічних реакцій за енергіями зв'язків. Другий закон термодинаміки як основний постулат термодинаміки для опису асиметричних самочинних природних процесів. Аналітичне вираження II закону термодинаміки. Рівняння другого термодинамічного принципу для оборотних і необоротних процесів. Втрата теплоти в необоротних процесах. Зв'язана теплота Клаузіуса. Теорема Карно-Клаузіуса. Поняття про метод Каратеодорі. Абсолютна температура. Функція стану – ентропія як міра хаосу в системі. Зміна ентропії в різних процесах. Принцип асиметрії процесів в ізольованих системах і його формулювання з використанням функції стану ентропії. Ентропія і III закон термодинаміки.</p> <p>Фундаментальні рівняння Гіббса. Характеристичні функції. Енергія Гельмгольца, Енергія Гіббса. Рівняння Масквелла. Вивід термодинамічних співвідношень за допомогою методу Масквелла. Розрахунок функцій стану: ентропії, внутрішньої енергії,</p>

ентальпії, енергії Гельмгольца і енергії Гіббса. Умови рівноваги і критерії самочинного протікання процесів за допомогою характеристичних функцій. Рівняння Гіббса-Гельмгольца. Робота і теплоти хімічних процесів. Максимальна робота оборотного хімічного процесу, як міра хімічного споріднення.

Хімічні потенціали, їх визначення і розрахунок. Рівновага і критерії направленості процесів за допомогою хімічних потенціалів. Повний потенціал. Хімічний потенціал ідеального і неідеального газів. Метод фугитивності. Вирахування фугитивності на основі експериментальних даних.

III. Розчини

Розчин як суміш речовин в різних фазових станах. Вираження складу розчину. Концентрація. Термодинаміка газових сумішей. Ідеальні розчини. Тиск насиченої пари над рідкими розчинами. Закон Рауля, його термодинамічне виведення. Відхилення від закону Рауля. Неідеальні розчини і їх властивості. Активність. Коефіцієнти активності та їх визначення. Безмежно розведені розчини. Розчинність твердих, рідких і газоподібних речовин. Зміна температури замерзання і температури кипіння розчинів. Кріоскопія і ебуліоскопія. Плавлення і кристалізація в тонкому шарі і одержання високочистих речовин.

Явище осмосу. Термодинамічний вивід рівняння Вант-Гоффа. Межі застосування рівняння. Осмотична і мембранна рівновага. Термодинамічна класифікація розчинів. Функції змішування для ідеальних і неідеальних розчинів. Гранично розведені розчини, Регулярні розчини і їх властивості. Бінарні системи. Парціальні мольні величини. Рівняння Гіббса-Дюгема.

IV. Фазова рівновага. Адсорбція

Фазові рівноваги в одно- і двокомпонентних системах. Діаграми стану води, сірки, фосфору і вуглецю. Фазові переходи першого роду. Рівняння Клапейрона-Клаузіуса і його застосування для фазових переходів першого роду. Розділення речовин шляхом перегонки. Закони Гіббса-Коновалова. Азеотропні суміші. Розділення азеотропних сумішей.

Рівновага в гетерогенних системах. Правило фаз Гіббса і його виведення. Двокомпонентні системи і їх аналіз на основі правила фаз Гіббса. Системи з утворенням твердих розчинів; з обмеженою розчинністю і з утворенням сполук з конгруентною й інконгруентною точками плавлення. Трикомпонентні системи. Трикутник Гіббса. Діаграми плавкості трьохкомпонентних систем.

Речовина в міжфазовій області. Інтерфаза. Шари Ленгмюра. Поверхневий тиск. Перенесення моношарів на тверду поверхню. Властивості плівок Ленгмюра-Блоджет. Поверхня твердих тіл. Опис шару адсорбату на твердій поверхні. Адсорбційна рівновага на поверхні твердих тіл. Адсорбція. Типи адсорбційної взаємодії. Ізотерми адсорбції газів. Рівняння Генрі. Рівняння ізотерми адсорбції Ленгмюра. Теорія адсорбції Поляні. Теорія полімолекулярної адсорбції БЕТ. Самоорганізовані шари на поверхні твердих тіл. Адсорбційне самовпорядкування низькомолекулярних сполук на твердій поверхні. Полімерні адсорбати на твердій поверхні. Імобілізація біологічно активних молекул на твердих підкладках. Епітаксія.

V. Вчення про хімічну рівновагу

Закон діючих мас. Термодинамічний вивід. Сучасне трактування. Способи вираження константи рівноваги і зв'язок між різними її видами. Хімічна рівновага в ідеальних і неідеальних системах. Коефіцієнти активності.

Ізотерма реакції Вант-Гоффа. Зміна енергії Гіббса і енергії Гельмгольца в хімічних реакціях. Принцип Бергто. Термодинамічне трактування хімічної спорідненості. Приведена енергія Гіббса та її використання для розрахунку хімічної рівноваги. Розрахунок виходу продуктів хімічних реакцій різних типів. Вихід продуктів при сумісному протіканні декількох хімічних реакцій.

Залежність константи рівноваги від температури. Рівняння ізобари й ізохори реакції, їх термодинамічний вивід. Теплоємності реагентів і їх використання в розрахунках констант рівноваги. Рівновага в гетерогенних системах. Особливості

термодинамічного аналізу рівноважних аспектів в гетерогенних системах.

VI. Статистична термодинаміка

Основні постулати статистичної термодинаміки. Статистичне середнє значення макроскопічних величин. Ансамблі Гіббса. Метод функцій розподілу для канонічного та мікροканонічного ансамблів. Функції розподілу Масквелла і Максвелла-Больцмана. Використання функцій розподілу для розрахунку середніх швидкостей і енергій молекул в ідеальних газах. Канонічна функція розподілу Гіббса. Функції розподілу Фермі-Дірака і Бозе-Анштайна.

Статистичні вирази для основних термодинамічних функцій – внутрішньої енергії, ентропії, енергії Гіббса і енергії Гельмгольца. Їх розрахунок за допомогою статистичних сум за станами. Статистичний розрахунок ентропії. Формула Больцмана.

Молекулярна сума за станами і сума станів макроскопічної системи. Поступальна сума за станами. Складові частини ентропії, внутрішньої енергії і теплоємності, зумовлені поступальним рухом.

Обертальна сума за станами для жорсткого ротатора. Орто- і пара-водень, їх термодинамічний опис. Коливальні суми за станами для гармонічного осцилятора. “Заморожування” коливальних ступенів свободи.

Розрахунок константи рівноваги хімічних реакцій в ідеальних газах методом статистичної термодинаміки.

VII. Елементи термодинаміки необоротних процесів

Опис необоротних процесів методом термодинаміки. Потоки, сили. Феноменологічні закони для швидкості процесів. Відкриті і закриті системи. Необоротні процеси і продукування ентропії. Залежність швидкості продукування ентропії від узагальнюючих потоків і сил. Стаціонарний стан системи і теорема Пригожина. Потоки при сумісній дії декількох сил. Співвідношення Онзагера і їх застосування в термодинаміці необоротних процесів. Термодифузія і її опис методами термодинаміки необоротних процесів.