

Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
Кафедра фізичної хімії

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Перший проректор

“ _____ ” _____ 20__ р.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Введення до фізико-хімії розчинів

За напрямом підготовки 040101 "хімія"
для спеціальностей 7. 04010101 "хімія" та 8. 04010101 "хімія"

заочного відділення хімічного факультету

Кредитно-модульна система організації навчального процесу

Робоча програма навчальної дисципліни „Введення до фізико-хімії розчинів ” для студентів за напрямом підготовки 040101 хімія, спеціальністю 7. 04010101 хімія та 8. 04010101 хімія.

Розробник: **Бондарев Микола Васильович, к.х.н., доцент кафедри фізичної хімії**

Робоча програма затверджена на засіданні кафедри фізичної хімії

Протокол № 1 від “ 28 ” серпня 2014 р.

Завідувач кафедри _____ Мchedlov-Петросян М.О.

“ _____ ” _____ 20__ р

Схвалено методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 1 від “ 17 ” вересня 2014 р.

“ _____ ” _____ 20__ р.

Голова _____

Юрченко О.І.

1. Опис навчальної дисципліни

| Найменування показників | Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень | Характеристика навчальної дисципліни |
|---|--|--------------------------------------|
| Кількість кредитів 3.5 | Галузь знань 0401 «Природничі науки» | заочна форма навчання за вибором |
| Модулів – 2 | Напрямок підготовки 040101 "хімія" Спеціальність 7. 04010101 "хімія" та 8. 04010101 "хімія" | Рік підготовки: V -й |
| Загальна кількість годин 140 | | Семестр 9 -й |
| | | Лекції 20 год. |
| Тижневих годин для заочної форми навчання: аудиторних – 6 самостійної роботи студента – 6 | | Лабораторні заняття 40 год. |
| | | Самостійна робота 80 год. |
| | Освітньо-кваліфікаційний рівень: спеціаліст, магістр | Вид контролю: залік екзамен |

2. Мета та завдання навчальної дисципліни

Основне завдання курсу: розкрити вплив властивостей середовища на енергетику хімічних взаємодій - сольватацію, дисоціацію, комплексоутворення.

На підставі даних експериментальних фізико-хімічних методів вивчення взаємозв'язку склад - властивість проводиться математична обробка та аналіз отриманих результатів для виявлення закономірностей, що відображають взаємозв'язок термодинаміки рівноважних процесів з властивостями середовища.

Мета: навчити студентів застосовувати закони термодинаміки, методи розвідувального аналізу і хемоінформатики для опису хімічної рівноваги у гомогенних і мікрогетерогенних середовищах; прогнозувати здатність речовин до хімічного перетворення, вихід продуктів реакції, силу електролітів і стійкість комплексів у водно-органічних розчинниках на основі термодинамічних даних і властивостей розчинника.

У результаті вивчення даного курсу студент повинен

знати:

- основні поняття та методи математичного аналізу, теорії диференціальних рівнянь;
- методи опису хімічної рівноваги у розчинах електролітів; методи термодинамічного опису хімічної і фазової рівноваги у багатокомпонентних гомогенних і мікрогетерогенних системах; термодинаміку розчинів електролітів і електрохімічних систем;
- методи математичного моделювання, спеціалізовані програмні продукти STATISTICA, SPSS.

вміти: використовувати можливості програми Microsoft Excel і сучасні статистичні пакети STATISTICA, SPSS для проведення хемометричного, термодинамічного, розв'язувального, регресійного та нейромережного аналізу даних експерименту.

3. Програма навчальної дисципліни

Модуль 1. Лекції – 20 годин

Тема 1. Властивості розчинів. Способи вираження складу розчину. Інтегральні й парціальні термодинамічні величини. Хімічний потенціал. Теорема Ейлера. Фізичний сенс парціально-молярних (ПМВ) величин і хімічного потенціалу. Методи визначення ПМВ. Рівняння Гіббса-Дюгема. Уявні молярні властивості розведених розчинів. Основні термодинамічні характеристики розчину й шляхи їхнього визначення.

Тема 2. Метод активностей. Фізичний сенс активності й коефіцієнта активності компонентів розчину. Зв'язок коефіцієнтів активності з парціальними молярними величинами компонентів розчину. Вибір стандартного стану як способу визначення стандартного хімічного потенціалу компонента розчину. Симетрична й несиметрична системи стандартизації активності й коефіцієнтів активності компонентів розчинів електролітів і неелектролітів. Взаємозв'язок коефіцієнтів активності компонентів розчину, що стандартизовані у різних концентраційних шкалах. Порівняння активності речовини в різних розчинниках (γ - єдиний коефіцієнт активності; γ^* - концентраційний коефіцієнт активності; γ_0 - єдиний нульовий коефіцієнт активності).

Тема 3. Метод надлишкових термодинамічних функцій. Надлишкові термодинамічні функції компонента розчину. Надлишкові: енергія Гіббса, G^E ; хімічний потенціал, μ ; ентропія, S^E ; ентальпія, H^E ; об'єм, V^E ; внутрішня енергія, U^E . Зв'язок надлишкових термодинамічних функцій з експериментально вимірюваними величинами. Класифікація відхилень властивостей розчинів від ідеальності: регулярні й атермальні розчини, строго регулярні розчини.

Тема 4. Парціальні молярні термодинамічні характеристики компонентів розчину й термодинамічні властивості іонів. Парціальний молярний ізобарний потенціал Гіббса іонів у розчині. Парціальний молярний ізобарний потенціал, активність і осмотичний коефіцієнт розчинника. Зв'язок коефіцієнта активності розчиненої речовини з осмотичним коефіцієнтом розчинника. Парціальна молярна ентропія компонентів розчину. Стандартна ентальпія утворення одноатомного газоподібного іона. Ентальпія утворення багатоатомних іонів. Ентропія газоподібних іонів. Стандартні ентальпія, енергія Гіббса, ентропія іонів у розчині. Термодинамічні характеристики іонної сольватації.

Тема 5. Термодинамічна активність іонів у розчині. Електрохімічний і хімічний потенціал іона. Моделі розчину електроліту - провідної конденсованої фази. Складові електрохімічного потенціалу за Ланге і Міщенко. Реальна активність і коефіцієнт активності іона. Гальвані-потенціал, вольт-потенціал, реальний потенціал. Співвідношення між реальною й хімічною активністю іона. Зв'язок між напругою, що компенсує ЕРС вольта-

ланцюга й реальною активністю іона. Визначення реальної активності іона вимірюванням напруги, що компенсує ЕРС вольта ланцюга.

Тема 6. Термодинаміка сольватації електролітів. Методи визначення термодинамічних характеристик сольватації електролітів. Методи поділу сумарних термодинамічних характеристик сольватації електролітів на іонні складові: метод вольтових різниць потенціалів; тетрафеніларсоній-тетрафенілборатна гіпотеза (метод стандартного електроліту); екстраполяційний метод Н.А.Ізмайлова $\{\Delta G_{c,i} = f(r_i^{-1})\}$; метод стандартного іона - рубідієва (Rb^+) гіпотеза Плєскова; гіпотеза Міщенко; криптанне допущення; метод Гаммета для порівняння кислотності в різних розчинниках; єдина шкала кислотності розчинів рА Ізмайлова; метод стандартної окислювально-відновної пари.

Тема 7. Основи електрохімічної термодинаміки рівноваги у мікрогетерогенних розчинах. Міцелярні розчини, що утворені неіонними та іоногенними поверхнево-активними речовинами (аніонними та катіонними). Фізико-хімічні основи кислотно-основної рівноваги у мікрогетерогенних розчинах. Взаємозв'язок між Гальвані-потенціалом на межі поділу гомогенна фаза – псевдофаза, первинними ефектами середовища (γ_0), концентраційними коефіцієнтами активності (γ^*) та рівноважними концентраціями реагентів у разі опису кислотно-основної рівноваги у мікрогетерогенних середовищах (окремі випадки).

Тема 8. Комплексоутворення між катіонами і електронодонорними лігандами. Експериментальні методи дослідження комплексоутворення катіонів з електронодонорними лігандами. Термодинаміка комплексоутворення та сольватації. Адитивність, синергізм і антагонізм пересольватації реагентів у рівновазі комплексоутворення. Термодинамічна класифікація стійкості краун-ефірних комплексів катіонів у водно-органічних розчинниках. Рівняння для оцінки іонної селективності краун-ефірів. Вплив первинних ефектів середовища, сольових та концентраційних ефектів на рівноважний вихід коронатів у водно-органічних розчинниках.

Тема 9. Розвідувальні методи аналізу термодинаміки хімічної рівноваги: факторний, кластерний (дивізійні та агломеративні), дискримінантний, канонічний, побудова дерев класифікації. Особливості обробки розвідувальними методами залежності термодинамічних параметрів рівноваги (дисоціації та комплексоутворення) від властивостей розчинника. Прогнозування та класифікація сили електролітів та стійкості комплексів у розчинах.

Тема 10. Кореляційний аналіз. Лінійні регресійні моделі. Нелінійні регресійні моделі. Нейромережний аналіз даних. Застосування регресійних математичних моделей і багатопарових перцептронів для прогнозування сили електролітів та стійкості коронатів за властивостями водно-органічних розчинників з використанням програмних пакетів STATISTICA и SPSS (Statistical Package for the Social Sciences).

Модуль 2. Лабораторні заняття – 40 годин

Тема 11. Термодинаміка хімічної рівноваги і сольватації реагентів у розчинах.

Тема 12. Кореляційний і регресійний аналіз фізико-хімічних даних.

Тема 13. Водно-органічні розчинники як моделі стандартного стану іонів і молекул слабких електролітів в псевдофазах.

Тема 14. Практичне використання програмного пакета Excel у модулі регресійний аналіз.

Тема 15. Рівноважний вихід коронатів у водно-органічних розчинниках і ефекти середовища.

3. Структура навчальної дисципліни

| Модулі і теми | Кількість годин | | | | | |
|---------------------------------------|-----------------|--------------|-----|-----|----|----|
| | Заочна форма | | | | | |
| | Усього | у тому числі | | | | |
| л | | п | лаб | інд | сп | |
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 |
| Модуль 1 – лекції | | | | | | |
| Тема 1 | 6 | 2 | | | | 4 |
| Тема 2 | 6 | 2 | | | | 4 |
| Тема 3 | 6 | 2 | | | | 4 |
| Тема 4 | 6 | 2 | | | | 4 |
| Тема 5 | 6 | 2 | | | | 4 |
| Тема 6 | 6 | 2 | | | | 4 |
| Тема 7 | 6 | 2 | | | | 4 |
| Тема 8 | 6 | 2 | | | | 4 |
| Тема 9 | 6 | 2 | | | | 4 |
| Тема 10 | 6 | 2 | | | | 4 |
| Разом за моду- лем 1 | 60 | 20 | | | | 40 |
| Модуль 2 – лабораторні заняття | | | | | | |
| Тема 11 | 16 | | | 8 | | 8 |
| Тема 12 | 16 | | | 8 | | 8 |
| Тема 13 | 16 | | | 8 | | 8 |
| Тема 14 | 16 | | | 8 | | 8 |
| Тема 15 | 16 | | | 8 | | 8 |
| Разом за моду- лем 2 | 80 | | | | | 40 |
| Усього годин | 140 | 20 | | 40 | | 80 |

4. Теми лабораторних занять

| № з/п | Назва теми | Кількість годин |
|-------|---|-----------------|
| 11 | Термодинаміка хімічної рівноваги і сольватації реагентів у розчинах. | 8 |
| 12 | Кореляційний і регресійний аналіз фізико-хімічних даних. | 8 |
| 13 | Водно-органічні розчинники як моделі стандартного стану іонів і молекул слабких електролітів у псевдофазах. | 8 |
| 14 | Практичне використання програмного пакета Excel в модулі регресійний аналіз. | 8 |
| 15 | Рівноважний вихід коронатів у водно-органічних розчинниках і ефекти середовища. | 8 |

5. Самостійна робота

| Назва теми | Кількість годин | |
|---|-----------------|-----|
| | ср | пір |
| Тема 1. Основні термодинамічні характеристики розчину й шляхи їхнього визначення. | 4 | |
| Тема 2. Метод активностей. | 4 | |
| Тема 3. Метод надлишкових термодинамічних функцій. | 4 | |
| Тема 4. Парціальні молярні термодинамічні характеристики компонентів розчину й термодинамічні властивості іонів. | 4 | |
| Тема 5. Термодинамічна активність іонів у розчині. | 4 | |
| Тема 6. Термодинаміка сольватації електролітів. Методи визначення термодинамічних характеристик сольватації електролітів. | 4 | |
| Тема 7. Основи електрохімічної термодинаміки рівноваги у мікрогетерогенних розчинах. | 4 | |
| Тема 8. Комплексоутворення між катіонами і електрондонорними лігандами. | 4 | |
| Тема 9. Розвідувальні методи аналізу термодинаміки хімічної рівноваги. | 4 | |
| Тема 10. Застосування регресійних математичних моделей і багаточарових перцептронів для прогнозування сили електролітів та стійкості коронатів. | 4 | |
| Тема 11. Термодинаміка хімічної рівноваги і сольватації реагентів у розчинах. | 8 | |
| Тема 12. Кореляційний і регресійний аналіз фізико-хімічних даних. | 8 | |
| Тема 13. Водно-органічні розчинники як моделі стандартного стану іонів і молекул слабких електролітів у псевдофазах. | 8 | |
| Тема 14. Практичне використання програмного пакета Excel в модулі регресійний аналіз. | 8 | |
| Тема 15. Рівноважний вихід коронатів у водно-органічних розчинниках і ефекти середовища. | 8 | |

6. Методи навчання

Лекції; виконання розрахункових завдань на комп'ютері; оформлення лабораторних робіт; самостійна робота.

7. Методи контролю

Перевірка результатів виконання лабораторних робіт, співбесіда за темами лабораторних робіт, залік, екзамен.

8. Розподіл балів, які отримують студенти

| Поточне тестування та самостійна робота (60) | | | | | | Підсумковий семестровий контроль (екзамен) | Сума |
|--|-------------------------|------|------|------|------|--|------|
| Модуль 1 | Модуль 2 | | | | | | |
| Т 1-10 | Т 11 | Т 12 | Т 13 | Т 14 | Т 15 | 40 | 100 |
| | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | | |
| | Письмовий колоквіум: 20 | | | | | | |

Для зарахування модуля 2 студент має набрати не менше, ніж 50% балів за кожною з тем 11-15. Для одержання заліку і допуску до підсумкового семестрового контролю студент повинен виконати всі лабораторні роботи, скласти колоквиум і набрати не менше 30 балів.

Шкала оцінювання

| Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру | Оцінка ECTS | Оцінка за національною шкалою |
|--|-------------|-------------------------------|
| 90 – 100 | A | відмінно |
| 80-89 | B | добре |
| 70-79 | C | |
| 60-69 | D | задовільно |
| 50-59 | E | |
| 1-49 | FX | незадовільно |

9. Методичне забезпечення

1. Робоча програма навчальної дисципліни.
2. Навчальні посібники, монографії, наукові статті.
3. Описи лабораторних робіт.

10. Рекомендована література

Базова

1. Бондарев Н.В. Термодинамика равновесий. Эффекты среды и нейросетевой анализ. Saarbrücken: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2012. 371 с.
2. Комплексообразование в неводных растворах // Под. ред. Крестова Г.А. –М.: Наука, 1989. – 256 с.
3. Научное наследие Н.А. Измайлова и актуальные проблемы физической химии / Под. ред. В.И. Лебеда, Н.О. Мчедлова-Петросяна, Ю.В. Холина. Х.: ХНУ имени В.Н. Каразина, 2007. 675 с.

Допоміжна

4. Измайлов Н.А. Электрохимия растворов. –Харьков: Изд-во ХГУ, 1959. –958 с.
5. Фиалков Ю.Я. Растворитель как средство управления химическим процессом. –Л.:Химия, 1990. –240 с.
6. Дуров В.А., Агеев Е.П. Термодинамическая теория растворов неэлектролитов. –М.: Изд-во МГУ, 1987. – 246 с.
7. Васильев В.П. Термодинамические свойства растворов электролитов. –М.: Высшая школа, 1982. – 320 с.
8. Химия комплексов «гость-хозяин». Синтез, структуры и применения / Под ред. Ф.Фегтле, Э.Вебера. –М.: Мир, 1988. –511 с.
9. Хирака М. Краун-соединения. Свойства и применение. –М.: Мир, 1986. –363 с.
10. Цивадзе А.Ю, Варнек А.А., Хуторский В.Е. Координационные соединения металлов с краун-лигандами. –М.: Наука, 1991. – 397 с.
11. Бондарев С.Н., Бондарев Н.В. Методы разведочного анализа и хемоинформатики в термодинамике равновесий // Вестник Харьковского национального университета. 2010. № 932. Выпуск 19(42). С. 70-85. Режим доступа к электронному ресурсу: http://chembull.univer.kharkov.ua/archiv/2010_2/08.pdf

12. Бондарев Н. В. Адсорбционно-нейтрализационный механизм образования двойного электрического слоя мицелл // *Бутлеровские сообщения*. 2010. Т.22. №11. С.25-29. Режим доступа к электронному ресурсу: <http://butlerov.com/files/reports/2010/vol22/11/25/25-29.pdf>
13. Бондарев С. Н., Зайцева И. С., Бондарев Н. В. Разведочный анализ в термодинамике равновесий. Классификация и прогнозирование силы уксусной кислоты. *Бутлеровские сообщения*. 2011. Т.27. №13. С. 36-48. Режим доступа к электронному ресурсу: <http://butlerov.com/files/reports/2011/vol27/13/36/36-48a.pdf>
14. Бондарев С. Н., Зайцева И. С., Бондарев Н. В. Методы хемоинформатики в термодинамике равновесий. Диссоциация уксусной кислоты. *Бутлеровские сообщения*. 2011. Т.27. №14. С. 1-14. Режим доступа к электронному ресурсу: <http://butlerov.com/files/reports/2011/vol27/14/1/1-14a.pdf>
15. Бондарев С. Н., Зайцева И. С., Бондарев Н. В. Методы хемоинформатики в термодинамике равновесий. Монокоронаты калия ($18\text{C}6\text{K}^+$). *Бутлеровские сообщения*. 2011. Т.27. №16. С. 15-25. Режим доступа к электронному ресурсу: <http://butlerov.com/files/reports/2011/vol27/16/15/15-25a.pdf>