

物理化学教学大纲

一、课程基本信息

课程中文名称:	物理化学
课程英文名称:	Physical Chemistry
课程类别:	必修
适用专业:	应用化学等本科理科专业
开课学期:	春、秋
总学时:	104 学时
总学分:	3.5
预修课程:	无机化学、有机化学、高等数学
课程简介:	物理化学是化学学科中的一个重要学科,它借助数学、物理学等基础科学的理论及其提供的实验手段,研究化学科学中的原理和方法,研究化学体系行为最一般的宏观、微观规律和理论的学科,是化学的理论基础。
教学主要参考书:	傅献彩主编,《物理化学》上、下册,第五版,高等教育出版社,2005年
其他教学参考书:	1、刘俊吉等编写,《物理化学》上、下册,第五版,高等教育出版社,2009年 2、张丽丹等编写,《物理化学简明教程》第一版,高等教育出版社,2011年 3、北京化工大学编,《物理化学例题与习题》第二版,化学工业出版社,2005年 4、王文清,高宏成,沈兴海.《物理化学习题精解》上、下册.北京:科学出版社,2000年 5、P.W.Atkins.《Physical Chemistry》Seventh ed.Oxford University Press,1991年 6、R A.Alberty《Physical Chemistry》Fifth ed .John Wiley & Sons,Inc.1979年

二、课程教育目标

1. 通过物理化学的学习使学生掌握物理化学的**基本内容、基本知识**,更需注意**方法的学习**,努力去**实践**。这几个要点互相渗透,相辅相成,有正确的研究与学习方法,才能更好的掌握理论的基本内容与知识,并指导实践,学习中坚持理论与实践相结合,才能更深刻的理解与运用理论,并在解决实际问题中,掌握理论和方法,培养创新能力。
2. 学会用数学、物理的原理解决热力学证明题的推演,逸度、活度的计算、在相图的应用,及在统计热力学中众多的计算。
3. 本课程除了一般的科学研究方法,还有课程自身特有的理论方法:热力学方法、量子力学方法及统计热力学方法。

(1)热力学方法-----宏观的方法

热力学方法的主体是:归纳与演绎。热力学研究大量粒子组成的宏观系统。在热力学的三个经验定律的基础上,根据实验测出的物质的 p 、 V 、 T 性质和热数据(热容、相变焓、反应焓等)。借助数学原理(全微分)。通过归纳(由特殊到一般的过程)与演绎(严格的数学推演)得到一系列的

热力学方程式和结论，用以解决物质变化 (p 、 V 、 T 变化、相变、化学变化) 过程的能量效应、方向和限度，为上述过程的实现提供最佳的热力学控制条件。

热力学方法的特点是：不涉及物质粒子的内部微观结构，结论严谨。

(2)量子力学方法-----微观的方法

量子力学研究个别微观粒子所遵循的力学规律，得到物质的微观特性，如：分子结构、平动能级、转动能级、振动能级、分子间力等。

(3)统计热力学方法-----从微观到宏观的方法

统计热力学研究大量粒子组成的宏观系统。研究如何由粒子的微观力学性质 (分子质量、转动惯量、振动频率) 通过求统计概率的方法，得到系统的宏观性质 (如热力学能、热容、熵等)。

以上方法对化学化工类学生学习物理化学要求是：**掌握热力学方法，理解统计热力学方法，了解量子力学方法。**

4. 掌握物理化学在热力学归纳演绎中状态函数法、极值法、偏离理想的模型法 (如为研究实际气体 PVT 行为提出理想气体的模型，引出压缩因子的概念，为研究实际液态混合物气-液平衡规律，而提出理想液态混合物的模型，引出活度的概念等)。化学动力学中有研究简单级数反应的线性方法，研究复合反应动力学的稳态近似法和平衡近似等。

5. 学会物理化学中采用了反映物质的性质随某些变量发生变化的规律的三种方法：

- (1) 数据列表法：通过列表显示物理量之间的关系 (例： H_2O 在不同温度下蒸汽压数据表)
- (2) 图形法：用曲线或直线表示物理量之间的变化规律 (水的气-液平衡 $p-T$ 图)
- (3) 解析式法：用数学方程式总结出物理量之间的变化规律 (Clapeyron-Clasusius 方程)

三、理论教学内容与要求

平衡篇

物理化学的平衡篇主要研究平衡规律：当系统的一个平衡态由于条件变化而变化为另一个平衡态时，能量、体积和各物质的数量变化的规律。**平衡篇共 6 章**，第 1 章物质的 pVT 性质，主要介绍理想气体和真实气体的 pVT 关系及普遍化计算。第 2 章和第 3 章介绍热力学定律、热力学基本方程及纯物质特性。第 4 章介绍多元系统的热力学特性。第 5 章介绍化学平衡规律。第 6 章介绍相平衡规律。

第一章 绪论及物质的 pVT 性质 (4 学时)

一、本章基本要求

- 掌握理想气体状态方程
- 掌握理想气体的宏观定义及微观模型•掌握分压、分体积概念及计算。
- 理解真实气体与理想气体的偏差、临界现象。
- 掌握饱和蒸气压概念
- 理解范德华状态方程、对应状态原理和压缩因子图，了解对比状态方程及其它真实气体方程。

二、教学内容

1、理想气体及状态方程。

分压定律、分体积定律。

2、真实气体

真实气体与理想气体的偏差、范德华方程.真实气体的液化(CO_2 的 $p-V$ 图)、临界现象、临界参数。

3、对应状态原理及压缩因子图

对比参数、对应状态原理。

用压缩因子图进行普遍化计算。

三、介绍本章涉及的科学家史话。

四、介绍本章理论知识在科研及前沿领域的应用实例。

第二章 热力学第一定律（12学时）

一、本章基本要求

- 理解系统与环境、状态、过程、状态函数与途径函数等基本概念，了解可逆过程的概念。
- 掌握热力学第一定律文字表述和数学表达式。
- 理解功、热、热力学能、焓、热容、摩尔相变焓、标准摩尔反应焓、标准摩尔生成焓、标准摩尔燃烧焓等概念。
- 掌握热力学第一定律在纯 pVT 变化、在相变化及化学变化中的应用，掌握计算各种过程的功、热、热力学能变、焓变的方法。

二、教学内容

1、基本概念及术语

系统、环境、性质、状态、状态函数、平衡态、过程、途径。

2、热力学第一定律

功、热、热力学能，热力学第一定律。

等容热、等压热、焓。

3、可逆过程体积功的计算

可逆过程、等温可逆过程与绝热可逆过程功的计算。

4、热容

平均热容、真热容。定压摩尔热容、定容摩尔热容。

$C_{p,m}$ 与 $C_{v,m}$ 的关系。

5、热力学第一定律对理想气体的应用

焦耳实验，理想气体的热力学能与焓，理想气体的热容差，理想气体的等温、等压、等容与绝热过程。

6、相变焓

*7、溶解焓与稀释焓

8、标准摩尔反应焓

反应进度，标准态，标准摩尔反应焓，标准摩尔生成焓及标准摩尔燃烧焓.标准摩尔反应焓与温度的关系。

9、热力学第一定律对实际气体的应用

实际气体的热性能与焓

焦耳--汤姆生效应、节流系数。

*10、热力学第一定律在稳流过程的应用。

三、介绍本章涉及的科学家史话。

四、介绍本章理论知识在科研及前沿领域的应用实例。

（热力学第一定律习题课）

第三章 热力学第二定律（12学时）

一、本章基本要求

- 理解自发过程、卡诺循环、卡诺定理。
- 掌握热力学第二定律的文字表述和数学表达式。
- 理解熵、亥姆霍兹函数、吉布斯函数定义；掌握熵增原理、熵判据、亥姆霍兹函数判据、吉布斯函数判据。
- 掌握物质纯 pVT 变化、相变化中熵、亥姆霍兹函数、吉布斯函数的计算及热力学第二定律的应用。

- 掌握主要热力学公式的推导和适用条件。
- 掌握热力学基本方程和麦克斯韦关系式；理解推导热力学公式的演绎方法。
- 理解克拉佩龙方程、克劳修斯——克拉佩龙方程，掌握其计算。

二、教学内容

1、热力学第二定律

自发过程的共同特征，热力学第二定律的文字表述。

卡诺循环及卡诺定理，热力学第二定律的数学表达式，熵增原理及熵判据。

2、熵变计算

简单 p 、 V 、 T 变化过程的熵变。

可逆相变与不可逆相变，相变过程的熵变。

3、热力学第三定律

热力学第三定律，规定熵、标准熵。化学反应熵变的计算。

4、亥姆霍兹函数与吉布斯函数的定义，等温等容过程与等温等压过程方向的判据，亥姆霍兹函数与吉布斯函数变化的计算。

5、热力学基本方程和麦克斯韦关系式

热力学基本方程，麦克斯韦关系式。

证明热力学等式的一般方法。

6、热力学第二定律应用举例

--克拉佩龙方程和克劳修斯-克拉佩龙方程。

三、 绍本章涉及的科学家史话。

四、 介绍本章理论知识在科研及前沿领域的应用实例。

(热力学第二定律习题课)

第四章 多组分系统热力学 (8 学时)

一、本章基本要求

- 了解混合物与溶液的区别，会各种组成表示之间的换算。
- 理解拉乌尔定律、亨利定律，掌握其有关计算。
- 了解稀溶液的依数性，并理解其应用。
- 理解偏摩尔量及化学势的概念。了解化学势判别式的使用。
- 理解理想液态混合物的定义，理解混合性质。
- 了解理想气体、真实气体、理想液态混合物、理想稀溶液中各组分化学势的表达式。
- 理解逸度的定义，了解逸度的计算。
- 理解活度及活度系数的概念。了解真实理想液态混合物、真实溶液中各组分化学势的表达式。

二、教学内容

1、拉乌尔定律与亨利定律

2、偏摩尔量与化学势

偏摩尔体积及其它偏摩尔量.吉布斯--杜亥姆方程。

化学势，理想气体化学势，真实气体的化学势。

3、理想液态混合物

理想液态混合物中任一组分的化学势，理想液态混合物的混合性质。

4、理想稀溶液

溶剂、溶质的化学势。

分配定律。

稀溶液的依数性(蒸气压下降，凝固点降低，沸点升高，渗透压)。

5、逸度与逸度系数

逸度及逸度系数概念、计算及普遍化逸度系数图，路易斯--兰德尔逸度规则。

6、活度及活度系数

真实液态混合物，真实溶液中各组分的活度及活度系数，标准态。

三、 绍本章涉及的科学家史话。

四、 介绍本章理论知识在科研及前沿领域的应用实例。

第五章 化学平衡（6学时）

一、本章基本要求

- 了解热力学第三定律，规定熵、标准熵，理解标准摩尔反应熵定义及计算。
- 理解摩尔反应吉布斯函数、标准摩尔反应吉布斯函数、标准摩尔生成吉布斯函数定义及应用。
- 了解化学反应过程的推动力。
- 掌握标准平衡常数的定义。理解等温方程和范特霍夫方程的推导及应用。
- 掌握用热力学数据计算平衡常数及平衡组成的方法判断在一定条件下化学反应可能进行的方向，会分析温度、压力、组成等因素对平衡的影响。
- 了解真实气体化学平衡及溶液中的化学平衡。

二、教学内容

1、化学反应的方向和限度

反应的吉布斯函数变化，化学反应平衡的条件.标准平衡常数的导出，化学反应等温方程式。

2、理想气体反应的平衡常数

标准平衡常数的性质， K^\ominus 、 K_p 、 K_c^\ominus 、 K_y 、 K_n 的关系，平衡常数及平衡组成的计算。

3、有纯态凝聚相参加的理想气体反应

标准平衡常数的表示式，分解压力与分解温度。

4、标准摩尔反应吉布斯函数 $\Delta_r G_m^\ominus$ ， $\Delta_r G_m^\ominus = -RT \ln K^\ominus$ ，标准摩尔生成吉布斯函数， $\Delta_f G_m^\ominus$ 、 $\Delta_c G_m^\ominus$ 的计算。

5、温度对标准平衡常数的影响

吉布斯-亥姆霍兹方程，范特霍夫方程，不同温度下平衡常数的求算。

6、其它因素(浓度、压力、惰性组分)对平衡的影响

7、同时平衡

8、真实气体的化学平衡

*9、混合物及溶液中的化学平衡

三、 绍本章涉及的科学家史话。

四、 介绍本章理论知识在科研及前沿领域的应用实例。

（化学平衡习题课）

第六章 相平衡（12学时）

一、本章基本要求

- 理解相律的意义、推导，掌握其应用。
- 掌握单组分系统、二组分气—液平衡系统和二组分凝聚系统典型相图的分析和应用。
- 掌握用杠杆规则进行分析与计算。
- 了解由实验数据绘制简单相图的方法。

二、教学内容

1、相律

相、组分数、自由度，相律的推导。

2、单组分系统相平衡

水的相图。

3、两组分液态完全互溶系统的气-液平衡

理想液态混合物的 $p-x$ 图、 $T-x$ 图，杠杆规则。

真实液态混合物的 $p-x$ 图、 $T-x$ 图，恒沸混合物，精馏原理。

4、两组分液态部分互溶系统气-液平衡

部分互溶系统的温度-溶解度图。

部分互溶系统的气-液平衡相图($T-x$ 图)。

5、两组分液态完全不互溶系统的气-液平衡 $T-x$ 图， $p-T$ 图，水蒸汽蒸馏

6、两组分系统的液-固平衡

两组分固态不互溶凝聚系统相图（生成低共熔混合物的相图，水盐系统相图）。

生成化合物(稳定、不稳定)的凝聚系统相图。

两组分固态互溶(完全互溶、部分互溶)系统的相图。

热分析法及步冷曲线、溶解度法，。

三、绍本章涉及的科学家史话。

四、介绍本章理论知识在科研及前沿领域的应用实例。

（相平衡习题课）

统计篇

物理化学统计篇的内容从微观到宏观的层次。它研究由大量微观粒子所构成的系统的平衡性质和速率性质，提供由物质的微观特性预测物质宏观性质的普遍规律和方法。本篇主要介绍独立子系统的统计热力学，化学类专业适当介绍相依子的统计热力学。

第七章 统计热力学初步（12学时）

一、本章基本要求

- 了解统计热力学的基本假设。
- 了解粒子的运动形式、能级分布与状态分布了解分布的微态数及系统的总微态数。
- 了解最概然分布及平恒分布、理解玻尔兹曼分布的意义和应用。
- 理解粒子配分函数的意义及计算
- 理解热力学函数与配分函数的关系。

二、教学内容

独立子系统统计热力学

1、基本概念

统计系统分类、粒子的运动形式各种运动形式的能级公式。能级分布与状态分布。

2、分布的微态数及系统的总微态数

分布微态数的计算，系统的总微态数。

3、最可几分布与平衡分布

等概率假设，最概然分布。

玻尔兹曼分布(拉格朗日待定乘法)。

最概然分布与平衡分布的关系。

4、粒子配分函数的计算

配分函数的析因子性质，能量零点对配函数的影响。平动配分函数的计算，双原子分子转动，振动配分函数的计算。

5、粒子配分函数与系统热力学性质的关系

理想气体的热力学性质

理想气体的统计热力学模型

理想气体的全配分函数

理想气体的状态方程式

理想气体的热力学与热容

理想气体的统计熵

理想气体的化学平衡常数

平衡常数的统计表达式。

三、本章涉及的科学家史话。

四、介绍本章理论知识在科研及前沿领域的应用实例。

相依子系统统计热力学

1、统计系综理论

标本系统，系综。微正则系综，正则系综，巨正则系综。

2、正则系综

标本系统按系统的微观状态的分布，正则分布，热力学函数与正则配分函数的关系式。

3、正则配分函数和位形配分函数

经典相空间的量子力学修正，位形配分函数，正则配分函数，独立子系统， pVT 关系。

速率篇

速率篇在宏观层次上讨论化学变化随时间及温度的变化规律及反应机理，以及基元反应的速率理论和各类反应（光化学、溶液中的反应、催化反应等）的宏观规律。

第八章 化学动力学基础（18学时）

一、本章基本要求

- 理解化学反应速率、理解基元反应及反应分子数的概念。
- 反应速率常数以及反应级数的概念。
- 掌握通过实验确立速率方程的方法。
- 掌握一级、二级、 n 级反应的速率方程及其应用。
- 了解典型复杂反应的特征。
- 了解处理对行反应、平行反应和连串反应的动力学方法。
- 理解定态近似法、平衡态近似法及速率决定步骤等处理复杂反应的近似方法。
- 理解阿累尼乌斯方程的意义，并掌握其应用。理解活化能及指前因子的意义。
- 了解基元反应速率理论的基本思想。理解气相双分子碰撞理论和过渡状态理论的基本公式及有关概念。
- 了解链反应动力学的特点。
- 了解多相反应的基本步骤。
- 了解催化作用、光化学反应及溶液中反应的特征。

二、教学内容

1、化学反应的速率

反应速率的表示方法及实验测定。

2、化学反应的速率方程（微分式）

基元反应，基元反应的速率方程--质量作用定律，反应分子数。

速率方程的一般形式.反应级数。

速率常数。

3、速率方程的积分式

零级、一级、二级及 n 级反应的特点.半衰期。

4、速率方程的确定

微分方法，积分法，半衰期法。

5、温度对反应速率的影响

阿累尼乌斯公式，活化能。

6、复杂反应

对行反应，平行反应、连串反应、链反应的反应机理及速率方程。

复杂反应速率的近似处理法。

7、链反应

链反应机理，直链反应的动力学方程，链反应与爆炸

8、反应速度理论

气相双分子简单碰撞理论，过渡状态理论。

*9、溶液中的反应

10、光化学，光化反应的基本定律，量子效率，光化反应的机理与速率方程。

11、催化反应

催化作用的通性:催化剂的作用、活性和选择性。

催化反应的一般机理。

*均相催化反应:酸碱催化、络合催化、酶化学。

气-固相催化反应:催化剂在固体表面上的吸附，气-固相催化反应的步骤，气-固相表面反应控制步骤催化反应动力学。

三、介绍本章涉及的科学家史话。

四、介绍本章理论知识在科研及前沿领域的应用实例。

(化学反应动力学习题课)

扩展篇

扩展篇将前面几篇总结的知识，扩展应用于界面现象、电解质溶液、电化学反应以及胶体化学，本篇含三章：第九章电化学，第十章界面化学，第十一章胶体化学。综合讨论这些系统的相平衡、化学平衡、传递速率和反应速率的规律。

第九章 电化学 (12 学时)

一、本章基本要求

- 了解表征电解质溶液导电性质的物理量（电导、电导率、摩尔电导率、电迁移率，迁移数）。
- 理解离子平均活度及平均活度系数定义并掌握其计算。了解离子强度的定义。
- 了解德拜-休格尔极限公式计算离子平均活度系数的方法。
- 理解可逆电池的概念，理解能斯特方程的推导掌握其应用。
- 掌握电池电动势与热力学函数的关系及其计算。
- 掌握常用电极符号、电极反应及其电极电势的计算,掌握电池电动势的计算及其应用。
- 理解原电池的设计原理。
- 了解极化作用和超电势的概念。

二、教学内容

1、电解质溶液导电机理及导电能力

电解质溶液的导电机理，法拉第定律。

离子的迁移现象、迁移数、迁移数的实验测定(希托夫法)。

电导、电导率、摩尔电导率，影响电导的因素。

离子独立运动定律。

电迁移率。

电导的实验测定及应用(计算弱电解质的电离度和电离常数、计算难溶盐的溶解度、电导滴定)。

2、电解质的平均活度和平均活度系数

3、德拜-休格尔极限公式

4、原电池的电动势

金属与溶液间电势差的产生，原电池的电动势。

5、可逆电极与可逆电池

电池的充电与放电，可逆电池的条件。第一、二类电极、氧化-还原电极。

6、原电池热力学

电池的电动势与电池反应的 $\Delta_r G_m$ ， $\Delta_r H_m$ ， $\Delta_r S_m$ 之间的关系。

能斯特方程

7、电极电势

标准氢电极、参比电极，电极电势及其计算。

电池电动势与电极电势的关系.电极反应的 $\Delta_r G_m$ 。

8、浓差电池

电极浓差电池与电解质浓差电池。

液体接界电势的产生及计算。

盐桥的作用。

9、电池设计

将反应设计成电池的一般方法。

10、极化作用

分解电压、极化与超电势、极化曲线、析出电势。

电解时的电极反应。

三、本章涉及的科学家史话。

四、介绍本章理论知识在科研及前沿领域的应用实例。

(电化学学习题课)

第十章 表面现象 (8 学时)

一、本章基本要求

- 理解表面张力及表面吉布斯函数的概念。
- 理解接触角、润湿、附加压力的概念及其与表面张力的关系。
- 理解拉普拉斯公式及开尔文公式的应用。
- 理解亚稳状态与新相生成的关系。
- 理解物理吸附与化学吸附的含义和区别。
- 了解兰格缪尔单分子层吸附理论，理解兰格缪尔吸附等温式。
- 了解溶液界面的吸附及表面活性物质的作用与应用。
- 了解吉布斯吸附公式的含义和应用。

二、教学内容

- 1、表面吉布斯函数与表面张力
 - 2、润湿现象
接触角，杨氏方程，润湿与辅展。
 - 3、弯曲液面的附加压力，饱和蒸汽压，拉普拉斯方程，开尔文方程和毛细现象
 - 4、亚稳状态和新相的生成
过饱和蒸气、过热液体、过冷液体、过饱和溶液。
 - 5、固体表面上的吸附作用
物理吸附与化学吸附
等温吸附，弗仑德利希经验式。
兰格缪尔单分子层吸附理论，及兰格缪尔吸附等温式
BET 吸附公式及固体表面积的测定。
 - 6、液体表面吸附作用
吉布斯吸附公式，表面活性物质。
- 三、本章涉及的科学家史话。
- 四、介绍本章理论知识在科研及前沿领域的应用实例。

第十一章 胶体化学（4 学时）

- 一、本章基本要求
- 了解分散体系的分类及胶体的定义
 - 理解溶胶的光学性质、动力性质和电学性质。
 - 理解胶团的结构和胶体稳定性与聚沉作用。
- 二、教学内容
- 1、胶体及分散物系概述
分散物系的基本性质与分类。
 - 2、胶体的光学性质
丁达尔效应，雷利公式。
 - 3、胶体的动力性质
布朗运动，扩散，沉降与沉降平衡。
 - 4、胶体的电学性质
电泳、电渗现象
双电层结构，沉降电势，流动电势。
胶团结构。
 - 5、憎液溶胶的稳定和聚沉
胶粒带电的稳定作用，憎液溶胶的聚沉，聚沉值。
- 三、介绍本章涉及的科学家史话。
- 四、介绍本章理论知识在科研及前沿领域的应用实例。

四、作业

每两学时布置 3~4 道计算题，每周收一次作业。在教学过程中的适当的知识点可布置 1-2 道综合分析题。每章布置 1~2 道英文原版书的习题。

通过习题的联系，使学生学会化学实验数据的处理方法，学会分析问题和解决问题的能力，特别作一些科研和生产实际的数据处理，使学生了解一些科研和生产实例。

五、考核方式及成绩评定

物理化学课程学习成绩分为上册成绩，包括：

- 1、平时作业；
- 2、阶段测验；
- 3、期末考试。

三部分合计 100 分。

上册成绩，包括：

- 1、平时作业；
- 2、阶段测验；
- 3、读书报告；
- 4、期末考试。

四部分合计 100 分。

六、必要的说明

- 1、注“*”的小节根据学时进度安排是否讲授。
- 2、阶段测验不占学时。

读书报告：要求学生根据物理化学所学原理，结合查阅科研文献、书籍，了解物理化学原理在科研、生产实践中及学科前沿领域的研究中的结合点，写出读书报告。

执笔人：张丽丹，马丽景

2010 年 2 月