

《物理化学选论》教学大纲

课程性质： 选修课程

先修课程： 物理化学

总学时： 34

学分： 2

理论学时： 34

实验或讨论学时： 无

开课学院： 化学与材料学院

适用专业： 化学教育、 应化、 材化

大纲执笔人： 吴华强

大纲编写时间： 2006年8月

教研室主任审核： 吴华强

教学院长审定： 朱长青

一、说明

1、课程的性质、地位和任务

物理化学选论是面向化学教育、应用化学和材料化学专业高年级学生开设的一门专业选修课。

物理化学选论是物理化学专业必修课程的补充和提高。物理化学是化学专业必修的基础理论，随着学分制的实行，物理化学的课时数逐步减少，随着物理化学学科的发展，许多新内容又放在基础理论课中介绍，因此，产生了课时数与基础理论课教学内容的矛盾；物理化学选论就是为了克服这一矛盾而开设；同时，本课程对学生考研亦具有指导意义；为了拓宽学生的知识面，使学生了解物理化学学科的发展前沿动态，开设物理化学学科的专题讲座。

本课程任务是引导学生从微观结构出发，更深刻、更本质地理解有关物理化学的热力学和动力学性质及界面现象，帮助学生了解物理化学学科的发展动态。

2、课程教学的基本要求

要求学生能从微观结构出发，更深刻、更本质地理解和把握有关物理化学的统计热力学的有关理论和知识，通过对不可逆过程热力学、电极过程动力学和界面物理化学的有关理论和知识的了解，以加深对物理化学中可逆过程热力学、电化学基本理论和界面现象理论的理解和认识，通过对物理化学学科的发展前沿动态的介绍和学习，能对物理化学的发展趋势和现状总体上有所把握。

3、本课程的重点与难点

重点：统计热力学中玻尔兹曼统计理论知识和配分函数及热力学函数统计熵的计算，电极过程理论中的双电层理论和极化理论，界面物理化学中的基本概念和气体的吸附理论。

难点： Boltzmann 统计理论、电化学势和极化现象、不可逆过程

热力学理论、气体吸附理论。

二、课堂教学时数及课后作业题型分配（含数量）

章目	教 学 内 容	教学时数	教学方式 或手段	课 后 作 业	
				思考题	练习题
一	统计热力学	12	讲授	√	
二	不可逆过程热力学	6	讲授	√	
三	电极过程动力学基础	6	讲授	√	
四	界面物理化学	4	讲授	√	
五	专题讲座	6	讲授（多媒体）	√	
合 计		34			

三、正文

第一章 统计热力学

【教学目的】

通过本章学习，使学生能够从微观结构理论出发，全面、深刻地理解热力学统计理论特别是 Boltzmann 统计的基本内容，能够用配分函数计算简单理想气体分子的统计熵，并了解统计理论在化学平衡、热力学定律和反应动力学中的一些应用。

【重点难点】

Boltzmann 统计理论、配分函数和统计熵的计算

第一节 基本概念

一、统计热力学的任务和内容，二、统计系统分类，三、数学概率和等概率假定，四、粒子运动形式和能级公式，五、系统的分布及微观状态数，六、最概然分布和摘取最大项法则

第二节 Maxwell-Boltzmann 统计

一、Boltzmann 分布公式推导，二、Boltzmann 熵公式，三、粒子配分函数及析因子性质

第三节 配分函数

一、平动配分函数，二、转动配分函数，三、振动配分函数，四、电子配分函数，五、核配分函数

第四节 晶体热容理论

一、Dulong-Petit 定律，二、Einstein 理论，三、Debye 理论，四、在极低温下晶体能级的分裂

第五节 粒子的各种运动熵

一、熵与配分函数关系，二、粒子各种运动对熵的贡献

第六节 简单理想气体统计熵的计算

一、概念，二、残余熵、构型熵和零点熵，三、单原子理想气体分子统计熵，四、双原子理想气体分子统计熵，五、多原子理想气体分子统计熵

第七节 一些应用

一、化学平衡中的应用，二、化学反应速率中的应用，三、热力学第三定律，四、热力学第一定律的微观说明，五、理想溶液微观说明

【思考题】

- 1、现代量子统计理论的发展现状如何？
- 2、查阅有关文献和光谱数据，分别计算He、H₂、NO、NH₃的统计熵，并与量热熵比较，解释各自存在偏差的原因。

第二章 不可逆过程热力学

【教学目的】

通过本章学习，使学生了解不可逆过程热力学的基本特点，了解局部平衡假设、熵产生率和熵流、非平衡态线性区的稳定态和最小熵产生原理的基本内容，并能用不可逆过程热力学的理论解释一些现象。

【重点难点】

局部平衡假设、熵产生率和熵流、非平衡态线性区的稳定态和最小熵产生原理。

第一节 概述

第二节 熵产生和熵流

一、熵产生和熵流，二、熵产生率通式，三、熵源强度

第三节 局部平衡假设和 Onsager 倒易关系

一、局部平衡假设，二、Onsager 倒易关系

第四节 非平衡态线性区的稳定态和最小熵产生原理

一、非平衡态线性区的稳定态，二、最小熵产生原理，三、熵平衡方程

第五节 熵与生命、宇宙

一、熵与生命，二、熵与宇宙，三、熵与自然演变，四、熵与信息

【思考题】

- 1、举例说明不可逆过程热力学的应用领域有那些？
- 2、查阅有关文献说说不可逆过程热力学的应用发展现状如何？

第三章 电极过程动力学基础

【教学目的】

通过本章学习，使学生了解几种常见的双电层理论模型，掌握电化学势的概念并能简单运用，了解极化类型及极化曲线的测量方法。

【重点难点】

双电层结构模型、电化学势的概念、极化理论

第一节 概述

第二节 双电层结构

一、界面荷电层的形成，二、“电极/溶液”界面荷电层的结构和电势分布

第三节 电化学势

一、外电势 (ψ)、内电势 (ϕ) 和表面电势 (χ)，二、电化学势，三、举例

第四节 表面活性剂在 M/S 界面上的吸附

第五节 浓差极化

一、液相传质的方式，二、平面电极上的稳态扩散传质过程，三、浓差极化曲线公式

第六节 电化学极化

一、电极电势对电化学步骤活化能的影响，二、电化学步骤的基本动力学方程，三、电化学步骤的基本动力学参数，四、极化曲线的测量

【思考题】

- 1、查阅有关文献谈谈目前双电层理论的发展现状。
- 2、举例说明极化现象理论有那些应用？

第四章 界面物理化学

【教学目的】

通过本章学习，使学生明确表面张力和表面能的概念，了解气体的吸附及吸附热理论，掌握单分子层吸附理论的基本观点。

【重点难点】

表面张力和表面能的概念、单分子层吸附理论

第一节 固体的表面张力与表面能

一、固体表面的特点，二、表面能与表面张力

第二节 固体对气体的吸附

一、吸附本质，二、吸附量与吸附曲线，三、吸附等温线类型

第三节 吸附热

一、积分和微分吸附热，二、等量吸附热，三、测定

第四节 单分子层吸附理论

一、Langmuir 吸附方程，二、方程应用，三、混合吸附

第五节 Freundlich 吸附等温方程式

第六节 多分子层吸附理论

一、BET 方程的推导，二、BET 方程式性质及应用

【思考题】

1、和固体相比，液体表面张力的测量要简单许多，其常见的测量方法有哪些？

2、如何利用吸附的方法测量简单气体分子的截面大小？能否用吸附的方法测量阿伏加德罗常数？

第五章 专题讲座

【教学目的】

通过本章学习，使学生了解物理化学学科的发展前沿动态，并对物理化学知识和物理化学的发展动态有总体的把握。

【重点难点】

不可逆热力学的发展现状、现代电化学的发展现状、动力学的发展现状及物理化学其它分支学科的发展。

根据物理化学学科发展特点，有选择性地介绍学科的发展动态。例如：

第一节 现代电化学

- 第二节 飞秒化学
- 第三节 绿色化学
- 第四节 纳米化学
- 第五节 纳米催化化学
- 第六节 微波化学

【思考题】

1、查阅有关文献，总结一下物理化学发展的趋势有那些？物理化学发展的终极目的为何？

【课程考试】

本课程考试采取“闭卷考试”方式进行考核。考试成绩(占 70%) + 平时成绩(占 30%)=总评成绩。主要考查统计热力学、不可逆过程热力学、电极过程动力学和界面物理化学的一些基本概念、基本理论和基本知识，测评学生的理解、分析、计算、综合运用等能力，以及对物理化学学科的总体把握能力和对学科发展前沿领域的了解情况。题型分为选择题、证明题、简答题和计算题。

四、使用教材与教学参考书目

【使用教材】

吴华强，《物理化学选论》，安徽师大印刷厂，2005年10月，自编，已认证。

【教学参考书目】

- 1、傅献彩，沈文霞，姚天杨等，《物理化学》(上、下册)(第五版)。北京：高教出版社，2006年
- 2、B. J. McClelland, statistical Thermodynamics, Chapman and Hall and science Paperbacks. 1998年
- 3、查全性，《电极过程动力学导论》(第三版)，北京：科学出版，2002年
- 4、杨爱云、刘士荣，《熵及其应用》，长沙：湖南师大出版社，1995年