

Белорусский государственный университет

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе

А.Л. Толстик

08.06.2016

(дата утверждения)

Регистрационный № УД-2008 /уч.



МЕТОДЫ РАСЧЕТА ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ВЕЩЕСТВ

Учебная программа для специальности:

1-31 05 01 Химия (по направлениям)

Направление специальности:

1-31 05 01-01 Химия (научно-производственная деятельность)

Минск
2016 г.

Учебная программа составлена на основе образовательного стандарта ОСВО 1-31 05 01-2013, утвержденного и введенного в действие Постановлением Министерства образования РБ от 30.08.13 № 87, и учебного плана специальности G-31-155/уч 2013 г.

СОСТАВИТЕЛЬ:

Г. Я. Кабо, профессор кафедры физической химии, доктор химических наук, профессор.

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой физической химии Белорусского государственного университета (протокол № 9 от 14 апреля 2016 г.);

Учебно-методической комиссией химического факультета Белорусского государственного университета для спецкурсов (протокол № 5 от 05 мая 2016 г.).



ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Учебная дисциплина «Методы расчета физико-химических свойств веществ» предназначена для студентов химического факультета, обучающихся по специальности 1-31 05 01-01 «Химия (по направлениям)», направлению специальности 1-31 05 01-01 «Химия (научно-производственная деятельность)» специализации 1-31 05 01-01 06 «Химия твердого тела и полупроводников» и относится к циклу дисциплин специализации.

Курс посвящен рассмотрению основных методов теоретического предсказания термодинамических веществ в идеально-газовом и конденсированном состоянии на основании данных о геометрическом строении и спектральных свойств индивидуальных составляющих веществ (молекул, атомов, ионов, кластеров и др.).

Развитие химической термодинамики в экономически развитых странах нашло свое выражение в организации и функционировании системы крупномасштабного производства и комплексного использования базисных термодинамических методов и данных в науке и промышленности. На сегодняшний день современная химическая термодинамика с трудом обеспечивает своей информацией все возрастающие потребности науки и техники. Количество известных веществ на порядки превышает количество веществ, для которых получены надежные данные о физико-химических свойствах. Задачи эффективного использования хотя бы небольшой части этих веществ требуют соответствующего увеличения числа характеристик по энтальпиям образования, энергиям связи, константам равновесия, энтропиям, свободной энергии и другим свойствам. Получение экспериментальных данных по свойствам дорогостоящий и трудоёмкий процесс, что обуславливает огромный разрыв между числом всех известных химических соединений и химических соединений. В связи с изложенным выше, методы расчета и прогнозирования физико-химических свойств имеют большое значение для изучения возможностей и условий применения перспективных веществ.

Цель дисциплины специализации «Методы расчета физико-химических свойств веществ»: углубить знания студентов в области химической термодинамики, познакомить студентов с классификацией и теоретическими основами методов расчета термодинамических и физико-химических свойств веществ и химических равновесий.

Студенты знакомятся с квантово-химическими методами расчета энергетических свойств молекул, методами сравнительных расчетов, корреляционными и аддитивными методами. В содержательную часть курса включены актуальные результаты исследований в области разработки и верификации методов расчета физико-химических свойств веществ, проводимых сотрудниками химического факультета БГУ. Данная дисциплина прямым образом связана с разделом «Химическая термодинамика» общего курса «Физическая химия», общим курсом «Квантовая химия и строение молекул», необходима студентам 3-го и 4-го курсов при выполнении курсовых и дипломных работ. Для изучения курса привлекаются знания и навыки, полученные студентами в ходе изучения дисциплин «Высшая математика» и «Физика».

Преподавание курса проводится по модульному принципу с выделением двух основных модулей: 1. Теория расчетов физико-химических свойств веществ и классификация методов расчета; 2. Методы практических расчетов физико-химических и термодинамических свойств.

В результате изучения дисциплины обучаемый должен

знать:

– основные теоретические положения расчетных методов, базирующихся на фундаментальных физических теориях;

- теоретические основы сравнительных методов расчетов термодинамических и физико-химических свойств веществ;

– аддитивные методы расчета физико-химических свойств, базирующихся на классической теории строения молекул;

– методы практических расчетов физических, физико-химических и термодинамических свойств;

уметь:

– на основании анализа литературных данных выбирать наиболее эффективную схему теоретического моделирования физико-химических свойств веществ;

– выделять инкременты замены в органических соединениях органического строения;

– использовать сравнительные расчетные схемы;

владеть:

- методологией составления схемы расчета термодинамических и физико-химических свойств веществ;
- способами оценки точности полученных численных значений величин физико-химических свойств.

В результате изучения учебной дисциплины студент должен закрепить и развить следующие компетенции, предусмотренные образовательным стандартом высшего образования ОСВО 1-31 05 01-2013 «Химия (по направлениям)».

Академические компетенции:

АК-1. Уметь применять базовые научно-теоретические знания для решения теоретических и практических задач.

АК-2. Владеть системным и сравнительным анализом.

АК-3. Владеть исследовательскими навыками.

АК-4. Уметь работать самостоятельно.

АК-5. Быть способным порождать новые идеи (обладать креативностью).

АК-6. Владеть междисциплинарным подходом при решении проблем.

Социально-личностные компетенции:

СЛК-6. Уметь работать в команде.

Профессиональные компетенции в области научно-исследовательской деятельности:

ПК-1. Использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, анализировать перспективы и направления развития отдельных областей химической науки.

ПК-2. Принимать участие в научных исследованиях, связанных с совершенствованием и развитием химии, современных ее направлений и физико-химических методов исследования.

ПК-3. Формулировать цели и задачи научно-исследовательской деятельности, осуществлять ее планирование, принимать участие в подготовке отчетов и публикаций.

ПК-4. Применять методы прикладной квантовой химии, молекулярной динамики и математического моделирования для предсказания свойств химических систем и их поведения в химических процессах.

Профессиональные компетенции в области производственно-технологической деятельности:

ПК-5. Формулировать и решать задачи, возникающие в ходе производственно-технологической деятельности.

ПК-6. На основе анализа показателей режимов, параметров схемы и технического состояния оборудования выявлять причины не оптимальности технологических процессов и разрабатывать пути их устранения.

Профессиональные компетенции в области инновационной деятельности:

ПК-9. Работать с научной, технической и патентной литературой, электронными базами данных.

Преподавание курса предусматривает проведение лекций и практических занятий. При чтении лекционного курса необходимо применять наглядные материалы в виде таблиц, графиков, мелового рисунка, а также использовать технические средства обучения для демонстрации слайдов, презентаций. Контроль самостоятельной работы студентов осуществляется в форме устного опроса, коллоквиумов, контрольных работ и при выполнении индивидуального задания. Практические занятия включают в себя решение задач по следующим темам: расчеты энергетических свойств методом молекулярной механики; корреляционные уравнения и расчеты химических равновесий; использование справочной информации при расчетах. Индивидуальное задание обычно включает в себя расчет термодинамических свойств индивидуального вещества.

Дисциплина преподается в 7 семестре четвертого курса. Общее количество часов для изучения дисциплины – 74, аудиторных 34 (лекции – 22, семинарские занятия – 10, УСР – 2).

Форма получения высшего образования – очная.

Форма текущей аттестации по учебной дисциплине – зачет.

СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Введение

Значение и области применения расчетных методов химической термодинамики.

Раздел 1. Теория расчетов физико-химических свойств веществ и классификация методов расчета.

2.1. Расчетные методы, базирующиеся на фундаментальных физических теориях. Квантово-химические расчеты энергетических свойств молекул. Расчеты термодинамических свойств веществ методами статистической термодинамики. Расчеты физико-химических свойств методами молекулярной механики.

2.2. Методы сравнительных расчетов термодинамических и физико-химических свойств веществ. Химическое подобие и физико-химические свойства. Классификация методов сравнительного расчета по М. Х. Карапетьянцу. Метод одготипных реакций В.А.Киреева. Принцип соответственных состояний. Корреляционные методы.

2.3. Аддитивные методы расчета физико-химических свойств, базирующиеся на классической теории строения молекул. Современный вариант основных постулатов классической теории строения молекул. Принципы классификации эффективных атомов, химических связей, групп, попарных взаимодействий. Методы определения долей физико-химических свойств, приходящихся на эффективные атомы, химические связи, группы, попарные взаимодействия. Области применения аддитивных методов расчета.

Раздел 2. Методы практических расчетов физико-химических и термодинамических свойств.

3.1. Расчеты энергетических свойств веществ. Методы расчета H газов и жидкостей: Бернштейна - Татевского - Папулова, Бенсона и т.п. Модификация метода Татевского для расчета H циклических соединений (Кабо, Роганов). Инкрементные методы расчета H регулярных рядов веществ. Использование инкрементов замены для расчета физико-химических свойств.

Методы расчета энтальпий сублимации, испарения, плавления.

3.2. Расчет термодинамических свойств - $S(T)$, C_p , $G(T)-H(0)$, плотностей жидкости и кристаллов аддитивными и сравнительными методами. Расчет C_p и $S(T)$ газов по Бенсону. Метод Татевского. Инкрементный метод.

3.3. Расчеты характеристических свойств - критических параметров, температур плавления, кипения, фактора ацентричности и т.п. Соотношения между $P-V-T$ чистых газов. Уравнения состояния реальных газов, жидкостей. Уравнения состояния с вириальными коэффициентами. Использование принципа соответственных состояний для расчета $P-V-T$ зависимостей. Зависимости давлений насыщенного пара индивидуальных веществ от температуры.

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА

Номер раздела, темы	Название раздела, темы	Количество аудиторных часов					Количество часов УСР	Форма контроля знаний
		Лекции	Практические занятия	Семинарские занятия	Лабораторные	Иное		
1	2	3	4	5	6	7	8	9
	Введение	2						
1	Теория расчетов физико-химических свойств веществ и классификация методов расчета.	12		4				
1.1	Расчетные методы, базирующиеся на фундаментальных физических теориях.	4		1				Устный опрос, коллоквиум
1.2	Методы сравнительных расчетов.	2		1				Устный опрос, коллоквиум
1.3	Аддитивные методы расчета физико-химических свойств.	8		2				Устный опрос, коллоквиум
2.	Методы практических расчетов физико-химических и термодинамических свойств	8						Устный опрос, коллоквиум
2.1	Расчеты энергетических свойств веществ.	4		2			0,5	Контрольная работа
2.2	Расчет термодинамических свойств аддитивными и сравнительными методами	2		2			1	
2.3	Расчеты характеристических свойств	2		2			0,5	
	Итого	22		10			2	

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Рекомендуемая учебная литература

Основная:

1. Рид Р., Праусниц Д., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей. Л., Химия, 1982.
2. Татевский В.М. Теория физико-химических свойств молекул и веществ. МГУ, 1987.
3. Бацанов С.С. Структурная химия. Факты и зависимости. М.: Диалог-МГУ, 2000
4. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: Учебное пособие. Изд-во: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010
5. Яровой С.С. Методы расчета физико-химических свойств углеводородов. М., Химия, 1978.
6. Абросимов В.Ф. и др. Методы расчета термодинамических свойств газов и жидкостей. М., Химия, 1974.
7. Кабо Г. Я., Роганов Г.Н., Френкель М.Л. Термодинамика и равновесия изомеров. Минск, Университетское, 1986.
8. Карапетьянц М.Х. Методы сравнительного расчета физико-химических свойств. М., Наука, 1965.
9. Киреев В.А. Методы практических расчетов в термодинамике химических реакций. М., Химия, 1970.
10. Зимин Р.А., Папулов Ю.Г. Термодинамические расчеты. Калинин, КГУ, 1985.

Дополнительная:

1. Кларк Г. Компьютерная химия. М.: Мир, 1990.
2. Jensen, F. Introduction to Computational Chemistry. 1998, Wiley
3. Бенсон С. Термохимическая кинетика. М., Мир, 1971.
4. Буркерт У., Эллинджер Н. Молекулярная механика. М., Мир, 1986.
5. Уэйлес С. Фазовые превращения в химической технологии. М., Мир, 1989.
6. Демидович Б.П., Марон И.А, Основы вычислительной математики. М., Наука, 1966.
7. NIST Standard Reference Database Number 69: webbook.nist.gov/chemistry/
8. База данных Ивтантермо: www.chem.msu.ru/rus/handbook/ivtan/

ПЕРЕЧЕНЬ ЗАДАНИЙ УПРАВЛЯЕМОЙ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

Тема: Методы практических расчетов физико-химических свойств веществ

Задание 1. Расчет энтальпий газов инкрементными методами.

Задание 2. Расчет энтропии и теплоемкости аддитивными методами

Задание 3. Расчет критических параметров, температуры плавления, температуры кипения вещества.

Перечень средств диагностики:

1. Контрольная работа.

ПЕРЕЧЕНЬ ИСПОЛЬЗУЕМЫХ СРЕДСТВ ДИАГНОСТИКИ

1. Устный опрос в формате вопрос – ответ по теме 1 «Теория расчетов физико-химических свойств веществ и классификация методов расчета»

2. Коллоквиум по теме 2 «Теория расчетов физико-химических свойств веществ и классификация методов расчета».

3. Контрольная работы по теме 2 «Методы практических расчетов физико-химических свойств веществ».

4. Устный зачет по дисциплине.

ТЕМАТИКА СЕМИНАРСКИХ ЗАНЯТИЙ

1. Знакомство с базами термодинамических данных.

2. Аддитивные расчеты. Составление систем уравнений, оценка эффективности моделей и выполнение практических расчетов.

3. Корреляционные уравнения в термодинамических расчетах.

ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ УВО

Название учебной дисциплины, с которой требуется согласование	Название кафедры	Предложения об изменениях в содержании учебной программы по изучаемой дисциплине	Решение, принятое кафедрой, разработавшей учебную программу (с указанием даты и номера протокола)
Физическая химия	Кафедра физической химии	Нет изменений	Вносить изменения не требуется. Протокол № 9 от 14.04.2016 г.

ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЕ УВО

на ____ / ____ учебный год

№ п/п	Дополнения и изменения	Основание

Учебная программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры физической химии Белорусского государственного университета (протокол № ____ от _____ г.)

Заведующий кафедрой

Доктор химических наук,

Профессор

(ученая степень, ученое звание)

(подпись)

В.В. Паньков

(И.О. Фамилия)

УТВЕРЖДАЮ

Декан факультета

Доктор химических наук,

Член-корр. НАН Беларуси

(ученая степень, ученое звание)

(подпись)

Д.В. Свиридов

(И.О. Фамилия)