

Белорусский государственный университет

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе
и образовательным инновациям


О.Е. Прохоренко

«22» декабря 2023 г.

Регистрационный № УД-12526 /уч.

Методы расчета физико-химических свойств веществ

**Учебная программа учреждения высшего образования
по учебной дисциплине для специальности:**

1-31 05 01 Химия (по направлениям)

направление специальности:

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

ТВ

2023

Учебная программа составлена на основе ОСВО 1-31 05 01-2021; учебных планов G-31-1-231/уч., утверждённого 22.03.2022 и G-31-1-005/уч, утвержденного 25.05.2021.

СОСТАВИТЕЛИ:

Е.Н. Степурко, доцент кафедры физической химии химического факультета БГУ, кандидат химических наук.

А.В. Блохин, проректор по научной работе, доктор химических наук, профессор.

РЕЦЕНЗЕНТЫ:

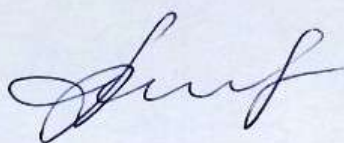
Ольга Викторовна Хрусталева, к.х.н., доцент кафедры общей химии УО «Белорусский государственный медицинский университет»

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой физической химии химического факультета Белорусского государственного университета
(протокол №4 от 07.12.2023);

Научно-методическим Советом Белорусского государственного университета
(протокол 4 от 21.12.2023)

Зав. кафедрой
к.х.н., доцент



А.Е. Усенко

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Цель учебной дисциплины - изучение 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 и др.).

Задачи учебной дисциплины:

1. Изучение классификации и теоретических основ методов расчета термодинамических и физико-химических свойств веществ на основании молекулярных и спектральных данных этих соединений.

2. Проведение практических расчетов термодинамических и физико-химических свойств веществ исходя из результатов фундаментальных исследований зависимости свойств веществ от их строения.

Место учебной дисциплины в системе подготовки специалиста с высшим образованием и **связи** с другими учебными дисциплинами, включая учебные дисциплины компонента учреждения высшего образования, дисциплины специализации и др.:

Учебная дисциплина относится к дисциплинам специализации компонент УВО.

Студенты химического факультета в данном курсе «Методы расчета физико-химических свойств веществ» углубляют знания в области химической термодинамики, получают теоретические знания и практические навыки расчетов физико-химических свойств веществ в различных агрегатных состояниях на основании изучение взаимосвязи строения соединения с его свойствами. Студенты знакомятся со статистическими методами расчета термодинамических свойств веществ, 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.

Дисциплина «Методы расчета физико-химических свойств веществ» непосредственно связана с общим курсом «Физическая химия» и другими специальными курсами специализации «Физическая химия», и необходима студентам для качественного проведения научных исследований при выполнении курсовых и дипломных работ.

Требования к компетенциям

Освоение учебной дисциплины «Методы расчета физико-химических свойств веществ» должно обеспечить формирование следующих компетенций:

СК-12. Применять химические и физико-химические методы анализа для решения производственных и экспертных задач в области идентификации и определения основных компонентов в объектах природного и синтетического происхождения

СК-15. Применять экспериментальные и расчетные методы физической химии при оценке термодинамических параметров и кинетических закономерностей химических реакций

В результате освоения учебной дисциплины студент 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 и предварительных расчетов (квантово-химические расчеты, расчеты методом молекулярной механики) получать исходные молекулярные и спектральные данные, необходимые для определения термодинамических свойств веществ методом статистической термодинамики;
- рассчитывать статистические суммы и термодинамические функции соединений в состоянии идеального газа в широком интервале температур методом статистической термодинамики;
- использовать сравнительные расчетные схемы;
- выделять инкременты замены в органических соединениях органического строения;
- выполнять практические расчеты свойств веществ с использованием аддитивных методов.

владеть:

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

Структура учебной дисциплины

Дисциплина изучается в 6 семестре студентами очной формы получения высшего образования.

Всего на изучение учебной дисциплины «Методы расчета физико-химических свойств веществ» отведено 102 часа, в том числе 50 аудиторных часа, из них: лекции – 28 часов, семинарские и практические занятия –18 часов, управляемая самостоятельная работа – 4 часа.

Трудоемкость учебной дисциплины составляет 3 зачетные единицы.

Форма промежуточной аттестации –зачет.

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

Введение

Значение и области применения расчетных методов химической термодинамики. Информационно-поисковые системы химической термодинамики. Классификация методов расчета.

Раздел 1. Теоретические методы расчета. Расчеты термодинамических свойств веществ методами статистической термодинамики.

Тема 1.1. Расчетные методы, базирующиеся на фундаментальных физических теориях. Квантово-химические расчеты энергетических свойств молекул. Расчеты методами молекулярной механики.

Тема 1.2. Определение термодинамических функций соединения через статистическую сумму молекулы. Выделение вкладов различных видов движения в статистическую сумму молекулы и термодинамические функции. Достоверность получения термодинамических свойств по молекулярным и спектральным данным. Погрешность расчетов методом статистической термодинамики.

Тема 1.3. Вклад поступательного движения и жесткого вращения в термодинамические функции. Симметрия молекул, числа симметрии. Тензор инерции. Произведение главных моментов инерции.

Тема 1.4. Вклад колебательного движения в термодинамические функции. Статистическая сумма гармонического осциллятора и вклад колебательного движения в термодинамические функции.

Тема 1.5. Внутреннее вращение в молекулах. Термодинамические функции газов в случае свободного вращения. Случай симметричных волчков. Случай асимметричных волчков. Вычисление термодинамических функций в случае заторможенного вращения. Потенциальный барьер внутреннего вращения. Приближенный метод Питцера. Уровни энергии волчка с заторможенным вращением. Классическое приближение для расчета вклада внутреннего вращения. Вклады конформационных превращений в термодинамические функции.

Раздел 2. Полуэмпирические методы расчета.

Тема 2.1. Методы сравнительных расчетов термодинамических и физико-химических свойств веществ. Химическое подобие и физико-химические свойства. Классификация методов сравнительного расчета по М. Х. Карапетьянцу.

Тема 2.2. Принцип соответственных состояний. Корреляционные методы. 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.

Тема 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. Метод Гатевского. Инкрементный метод. Области применения аддитивных методов расчета.

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Дневная форма получения образования

Номер раздела, темы	Название раздела, темы	Количество аудиторных часов					Количество часов УСР	Форма контроля знаний
		Лекции	Практические занятия	Семинарские занятия	Лабораторные занятия	Иное		
1	2	3	4	5	6	7	8	9
	Введение	2						Диагностика начальных знаний.
1.	Раздел 1. Теоретические методы расчета. Расчеты термодинамических свойств веществ методами статистической термодинамики.	14		10			2	
1.1	Тема 1.1. Квантово-химические расчеты энергетических свойств молекул. Расчеты методами молекулярной механики.	2		2				Решение задач
1.2	Тема 1.2. Определение термодинамических функций соединения через статистическую сумму. Выделение вкладов различных видов движения в статистическую сумму молекулы и термодинамические функции. Погрешность расчетов методом статистической термодинамики.	2						
1.3	Тема 1.3. Вклад поступательного движения и жесткого вращения в термодинамические функции. Симметрия молекул, числа симметрии. Тензор инерции. Произведение главных моментов инерции.	2		2				

1	2	3	4	5	6	7	8	9
1.4	Тема 1.4. Вклад колебательного движения в термодинамические функции. Статистическая сумма гармонического осциллятора и вклад колебательного движения в термодинамические функции.	4		2			2	
1.5	Тема 1.5. Внутреннее вращение в молекулах. Симметричные и асимметричные волчки. Свободное и заторможенное вращение. Потенциальный барьер внутреннего вращения. Метод Питцера. Вклады конформационных превращений в термодинамические функции.	4		4				
2	Полуэмпирические методы расчета	12		8			2	
2.1	Тема 2.1. Методы сравнительных расчетов термодинамических и физико-химических свойств веществ. Химическое подобие и физико-химические свойства. Классификация методов сравнительного расчета по М. Х. Карапетьянцу.	2		2			2	Решение задач
2.2	Тема 2.2. Принцип соответственных состояний. Корреляционные методы. Расчеты характеристических свойств - критических параметров, температур плавления, кипения 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	2		2				

1	2	3	4	5	6	7	8	9
2.3	Тема 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. Метод Татевского. Инкрементный метод. Области применения аддитивных методов расчета.	8		4				Решение задач
	Итого	28		18			4	

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Перечень основной литературы:

1. Борщевский, А. Я. Физическая химия : учебник : в 2 т. / А.Я. Борщевский. — Москва : ИНФРА-М, 2023. — Т. 2.: Статистическая термодинамика - 383 с.
2. Мечковский, Л.А. Химическая термодинамика: учебное пособие в 2-х ч./ Л.А. Мечковский, А.В. Блохин – Мн.: БГУ. – Ч.2: Термодинамика многокомпонентных систем. Химические равновесия. Элементы статистической термодинамики. – 2013. – 200 с.

Перечень дополнительной литературы

1. Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия. В 2 ч. Часть 1. Квантовая механика : учебник и практикум для вузов / А. И. Ермаков. — Москва : Издательство Юрайт, 2023. — 183 с.
2. Павлечко, Е. В. **Строение вещества** : учеб. пособие / Е. В. Павлечко, Ю. С. Головкин, О. А. Ивашкевич ; БГУ. - Минск : БГУ, 2015. - 207 с.
3. Кабо, Г. Я. **Термодинамика и равновесия изомеров** / Г. Я. Кабо, Г. Н. Роганов, М. Л. Френкель. - Минск : Университетское, 1986. - 224 с.
4. Кузнецова Е.М. Статистическая термодинамика идеального газа / Е.М. Кузнецова, М.В. Обрезкова. – М., Изд-во МГУ, 2000.
5. Смирнова, Н.А. Методы статистической термодинамики в физической химии: Учеб. пособие для вузов / Н.А. Смирнова. – М.: Высш. школа, 1982.
6. Карапетьянц, М.Х. Методы сравнительного расчета физико-химических свойств. - М.: Наука, 1965.
7. Годнев, И.Н. Вычисление термодинамических функций по молекулярным и спектральным данным / И.Н. Годнев – М.: ГИТТЛ, 1956.
8. Рид, Р. Свойства газов и жидкостей. Определение и корреляция / Р. Рид, Т. Шервуд ; пер. с англ. Б. И. Соколова ; под ред. Б. И. Соколова. – Л. : Химия, 1982. – 592 с.
9. Татевский, В. М. **Теория физико-химических свойств молекул и веществ** / В. М. Татевский. - Москва : Изд-во Московского ун-та, 1987. - 238 с.
10. Яровой, С. С. **Методы расчета физико-химических свойств углеводородов** / С. С. Яровой. - Москва : Химия, 1978. - 256 с.
11. Абросимов, В.Ф. Методы расчета термодинамических свойств газов и жидкостей / В.Ф. Абросимов- М.: Химия, 1974.
12. Киреев, В.А. Методы практических расчетов в термодинамике химических реакций - М.: Химия, 1970.
13. Зимин, Р.А. Термодинамические расчеты/ Р.А Зимин, Ю.Г. Папулов .- Калинин: КГУ, 1985.

14. Ягодовский, В. Д. Статистическая термодинамика в физической химии : учеб. пособие для студ. химич. спец. вузов, аспирантов и преп. / В. Д. Ягодовский. - 2-е изд., испр. и доп. - М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2005. - 495 с.

Перечень рекомендуемых средств диагностики и методика формирования итоговой отметки

Успешное освоение темы 1 предполагает самостоятельное проведение студентом расчета термодинамических свойств органического вещества в состоянии идеального газа по молекулярным и спектральным данным методом статистической термодинамики в широком интервале температур.

По итогам изучения темы 2 предполагается самостоятельное решение задач для нахождения термодинамических свойств веществ с использованием корреляционных и аддитивных методов расчета.

Оценка за выполнение работ по темам 1 и 2 формируется на основании верности и полноты проведенных студентом расчетов.

Формой аттестации по дисциплине «Методы расчета физико-химических свойств веществ» учебным планом предусмотрен зачет

При формировании итоговой отметки используется рейтинговая система оценки знаний студента, дающая возможность проследить и оценить динамику процесса достижения целей обучения. Рейтинговая система предусматривает использование весовых коэффициентов в ходе проведения контрольных мероприятий текущей аттестации.

Примерные весовые коэффициенты, определяющие вклад текущей аттестации в отметку при прохождении промежуточной аттестации:

Формирование отметки за текущую аттестацию (точки контроля):

- самостоятельное решение задачи по теме 1 – 50 %;
- самостоятельное решение задач по теме 2 – 50 %;

Итоговая отметка по дисциплине рассчитывается на основе отметки текущей аттестации (рейтинговой системы оценки знаний) - 40% и отметки на зачете - 60%.

Примерный перечень заданий для управляемой самостоятельной работы студентов

Тема 1. Теоретические методы расчета. Расчеты термодинамических свойств веществ методами статистической термодинамики(2ч.)

Задание: Определить газофазную теплоемкость (абсолютную энтропию, приведенную энтальпию, приведенную энергию Гиббса)

органического соединения по молекулярным и спектральным данным в интервале температур 0-1000 К.

Форма контроля: Таблица термодинамических свойств органического соединения в интервале температур 0-1000 К.

Тема 2. Полуэмпирические методы расчета (2ч.)

Методы сравнительных расчетов термодинамических и физико-химических свойств веществ

Задание. Составить примеры I – V методов сравнительных расчетов по М.Х. Карапетьянцу, используя численные значения физико-химических свойств из справочника.

Форма контроля: зависимость термодинамических свойств согласно сравнительным методам Карапетьянца.

Аддитивные методы расчета физико-химических свойств.

Задание. Разработать аддитивные методы расчета $\Delta_f H^\circ(298.15 \text{ К})$ на основе классификации «эффективных атомов» и «инкрементов замены», вычислить аддитивные вклады и инкременты, оценить погрешности расчетов для определенного класса веществ

Форма контроля: разработанная классификация двух аддитивных методов для выбранного класса соединений, сопоставление результатов аддитивных расчетов выбранного класса соединений для двух аддитивных методов.

Примерная тематика семинарских занятий

Семинар № 1.

Расчет молекулярных и спектральных характеристик соединений методами молекулярной механики и квантовой химии.

Семинар № 2.

Расчет вклада поступательного движения и жесткого вращения в термодинамические функции соединения.

Семинар № 3.

Расчет вклада колебательного движения в термодинамические функции соединения.

Семинар № 4.

Расчет вклада конформационных превращений в термодинамические функции соединения. Свободное и заторможенное вращение. Потенциальный барьер внутреннего вращения. Метод Питцера.

Семинар № 5.

Расчет вклада конформационных превращений в термодинамические функции соединения. Расчет термодинамических свойств соединения в широком интервале температур.

Семинар № 6.

Методы сравнительных расчетов термодинамических и физико-химических свойств веществ. Классификация методов сравнительного расчета по М. Х. Карапетьянцу.

Семинар № 7.

Корреляционные уравнения в термодинамических расчетах. Вычисление коэффициентов корреляционных уравнений по экспериментальным значениям свойств.

Семинар № 8

Аддитивные расчеты. Параметризация аддитивных схем.

Семинар № 9

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

Описание инновационных подходов и методов к преподаванию учебной дисциплины

При организации образовательного процесса используются следующие инновационные подходы:

эвристический подход, который предполагает:

– осуществление студентами лично-значимых открытий окружающего мира;

– демонстрацию многообразия решений большинства профессиональных задач и жизненных проблем;

– творческую самореализацию обучающихся в процессе создания образовательных продуктов;

– индивидуализацию обучения через возможность самостоятельно ставить цели, осуществлять рефлексию собственной образовательной деятельности;

– осуществление студентами лично-значимых открытий окружающего мира;

– демонстрацию многообразия решений большинства профессиональных задач и жизненных проблем;

– творческую самореализацию обучающихся в процессе создания образовательных продуктов;

– индивидуализацию обучения через возможность самостоятельно ставить цели, осуществлять рефлексию собственной образовательной деятельности.

практико-ориентированный подход, который предполагает:

освоение содержания образования через решения практических задач;

– приобретение навыков эффективного выполнения разных видов профессиональной деятельности;

– ориентацию на генерирование идей, реализацию групповых студенческих проектов, развитие предпринимательской культуры;

– использованию процедур, способов оценивания, фиксирующих сформированность профессиональных компетенций.

метод учебной дискуссии, который предполагает участие студентов в целенаправленном обмене мнениями, идеями для предъявления и/или согласования существующих позиций по определенной проблеме.

Использование метода обеспечивает появление нового уровня понимания изучаемой темы, применение знаний (теорий, концепций) при решении проблем, определение способов их решения.

методы и приемы развития критического мышления, которые представляют собой систему, формирующую навыки работы с информацией в процессе чтения и письма; понимания информации как отправного, а не конечного пункта критического мышления.

Методические рекомендации по организации самостоятельной работы обучающихся

Для организации самостоятельной работы студентов по дисциплине "Методы расчета физико-химических свойств веществ" следует использовать современные информационные ресурсы: на образовательном портале educhem.bsu.by разместить комплекс учебных и учебно-методических материалов:

- план изучения дисциплины;
- презентации отдельных лекций;
- перечень типов задач, рассматриваемых на семинарских занятиях;
- список рекомендуемой литературы;
- вопросы для подготовки к зачету.

Примерный перечень вопросов к зачету

1. Классификация методов расчета физико-химических свойств веществ.
2. Квантово-химические методы расчета: области применения и ограничения
3. Молекулярная механика - области применения и проблемы. Понятие о методах молекулярной динамики
4. Расчет термодинамических свойств веществ методами статистической термодинамики.
5. Выделение вкладов различных видов движения в статистическую сумму молекулы и термодинамические функции.
6. Расчет вклада поступательно движения
7. Расчет вклада жесткого вращения.
8. Симметрия молекул, числа симметрии.
9. Тензор инерции. Произведение главных моментов инерции
10. Вклад колебательного движения в термодинамические функции. Статистическая сумма гармонического осциллятора
11. Методы получения набора полного колебательного спектра соединения
12. Внутреннее вращение в молекулах. Симметричные и асимметричные волчки.
13. Свободное и заторможенное вращение. Потенциальный барьер внутреннего вращения.
14. Метод Питцера. Вклады конформационных превращений в термодинамические функции
15. Методы сравнительных расчетов физико-химических свойств веществ (по Карапетьянцу М. Х.)
16. Корреляционные методы расчета – принципы и области применения.

17. Принципы аддитивных методов расчета физико-химических свойств веществ.
18. Постулаты классической теории строения молекул по В.М. Татевскому.
19. Принципы классификации «эффективных» атомов и связей, попарных взаимодействий, групп атомов.
20. Методика определения аддитивных констант по экспериментальным данным
21. Метод Татевского. Классификация. Методика определения аддитивных параметров.
22. Инкрементный метод Классификация. Методика определения аддитивных параметров.
23. Метод Бенсона. Классификация. Методика определения аддитивных параметров.
24. Области применения и особенности аддитивных расчетов физико-химических свойств веществ.
25. Оценка возможных погрешностей аддитивных расчетов физико-химических свойств веществ

ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ УВО

Название учебной дисциплины, с которой требуется согласование	Название кафедры	Предложения об изменениях в содержании учебной программы учреждения высшего образования по учебной дисциплине	Решение, принятое кафедрой, разработавшей учебную программу (с указанием даты и номера протокола)
Строение вещества	Кафедра неорганической химии	Нет изменений	Изменений в содержании учебной программы не требуется, протокол № 4 от 07.12.2023

**ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЕ ПО
ИЗУЧАЕМОЙ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЕ**
на / учебный год

№ п/п	Дополнения и изменения	Основание
1.		

Учебная программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры
_____ (протокол № ____ от _____ 201_ г.)

Заведующий кафедрой

УТВЕРЖДАЮ
Декан факультета
