

**Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева
Российской академии наук
(ИМХ РАН)**

УТВЕРЖДАЮ

Директор

Чл.-корр. РАН



И.Л. Федюшкин

«04» *сентября* 2015 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
МЕТОДЫ ПРАКТИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ В ТЕРМОДИНАМИКЕ
ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ**

Б1.В.ДВ.1 «Вариативная часть»; раздел «Дисциплины по выбору» основной профессиональной образовательной программы высшего образования - программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению подготовки кадров высшей квалификации **04.06.01 Химические науки**

Направленность (профиль) **02.00.04 «Физическая химия»**

Форма обучения **очная**

Нижний Новгород

2015

Рабочая программа составлена на основании федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации), утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 30.07.2014 г. № 869.

Разработчики:

Зав. лабораторией НССХ ЛФХМИ, д.х.н. С.Ю. Кетков

Программа принята на заседании Ученого совета ИМХ РАН

Протокол № 10 от « 24 » июня 2015 г.

Ученый секретарь, к.х.н.  К.Г. Шальнова

1. Цели и задачи освоения дисциплины

Цели дисциплины:

Формирование знаний и умений по методам расчета основных термодинамических характеристик химических реакций (энтальпии, энтропии, константы равновесия и др.) и свойств химических соединений;

Освоение модельных расчетов химического равновесия сложных систем, включающих конкурирующие процессы.

Задачи дисциплины:

Изучение приближенных и точных методов расчета энергетических характеристик химических реакций с участием органических и неорганических соединений;

Формирование практических навыков и умений в методах сравнительного расчета.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Место дисциплины в структуре ООП

Данная дисциплина относится к группе дисциплин по выбору в Вариативной части образовательной компоненты основной профессиональной образовательной программы высшего образования – программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению подготовки 04.06.01 «Химические науки» по специальности 02.00.04 *Физическая химия*. Данная дисциплина находится в логической и содержательно-методической взаимосвязи с курсами физической химии, неорганической химии, органической химии, спецкурса по избранным главам химической термодинамики.

Требования к «входным» знаниям, умениям и готовностям обучающегося, необходимым при освоении данной дисциплины и приобретенным в результате освоения предшествующих дисциплин:

- знание теоретических основ и владение практическими навыками метода потенциалов, метода констант, общих принципов описания химического равновесия, термодинамического описания систем.

3. Требования к результатам освоения дисциплины

В процессе выполнения научных исследований формируются следующие компетенции аспирантов:

Универсальными компетенциями (УК):

- способностью к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1);
- способностью планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития (УК-5).
- способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1);
- готовность организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук (ОПК-2);
- углубленное знание теоретических и методологических основ физической химии, умение проводить анализ и отбор задач и проблем, самостоятельно ставить цель исследования наиболее актуальных проблем физической химии (ПК-1);
- способность ставить и решать инновационные задачи, связанные с разработкой новых химических технологий, изучением свойств веществ с использованием глубоких фундаментальных и специальных знаний, аналитических методов и сложных моделей в условиях неопределенности, умение работать с аппаратурой, выполненной на базе микропроцессорной техники и персональных компьютеров для решения практических задач физической химии (ПК-2);

Аспиранты, завершившие изучение данной дисциплины, должны:

Знать: экспериментальные основы термодинамики химических реакций;

Уметь: использовать приближенные и точные методы расчета энергетических характеристик химических реакций с участием органических соединений;

Владеть: представлениями о методах сравнительного расчета к органическим веществам и реакциям с их участием.

4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы (72 часа). Дисциплина изучается в 4 семестре (2 год обучения). Дисциплина состоит из 4 разделов.

4.1 Структура дисциплины

№ п/п	Наименование дисциплины	Объем учебной работы (в часах)						Вид итогового контроля	
		Всего	Всего аудит.	Из аудиторных					Сам. работа
				Лекц.	Лаб/ сем.	Прак.	КСР.		
	Методы практических расчетов в термодинамике химических реакций	72	36	-	-	35	1	36	зачет

4.2 Содержание дисциплины

4.2.1 Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Виды учебной работы и трудоемкость (в часах)				Самостоят. работа
		Лек.	Лаб./ сем.	Пр.	КСР	
1.	Общие вопросы термодинамики химических реакций	-	-	9	-	9
2.	Определение термодинамических параметров реакций по свойствам их компонентов	-	-	9	-	9
3.	Определение термодинамических свойств веществ на основе химического подобия; сравнения реакций	-	-	9	-	9
4.	Методы расчета термодинамических свойств органических веществ и параметров реакций	-	-	8	1	9

4.2.2 Содержание разделов дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Форма проведения занятий (лекции, семинары и т.д.)
1	Общие вопросы термодинамики химических реакций	Уравнение изотермы химической реакции. Закон действия масс. Уравнение изобары и изохоры химической реакции. Правило смещения равновесия Ле-Шателье-Брауна. Химическое равновесие в газах при высоких давлениях. Химическое равновесие в жидких растворах. Гетерогенное химическое равновесие. Комбинирование равновесий	Практические занятия, самостоятельная работа
2	Определение термодинамических параметров реакций по свойствам их компонентов	Два пути расчета константы равновесия химической реакции: по уравнению изотермы и уравнению изобары. Недостаточность уравнений, вытекающих из II начала, для доведения расчетов константы равновесия до численных результатов. Решение этой проблемы на основе теоремы Нернста. III начало термодинамики	Практические занятия, самостоятельная работа
3	Определение термодинамических свойств веществ на основе химического подобия; сравнения реакций	Расчет абсолютных значений энтропии веществ по экспериментальным (расчетным) данным о теплоемкости и параметрах фазовых переходов. Приближенные уравнения Нернста. Расчет выхода продуктов при химических реакциях. Методы расчета равновесий сложных реакций	Практические занятия, самостоятельная работа
4	Методы расчета термодинамических свойств органических веществ и параметров реакций	Применение методов сравнительного расчета к органическим веществам и реакциям с их участием. Методы расчета по групповым инкрементам. Метод Нернста, метод Масловых, метод Карапетьянца	Практические занятия, самостоятельная работа

5. Образовательные технологии

При реализации учебной работы используются активные образовательные технологии (лекции), технологии интерактивного обучения (презентации), информационно-коммуникативные технологии (компьютеры, телекоммуникационные сети, средства мультимедиа).

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы аспирантов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

Изучение курса базируется на следующих видах самостоятельной работы обучающегося: в читальном зале библиотеки, в компьютерных классах и в домашних условиях, с доступом к лабораторному оборудованию, приборам, базам данных, к ресурсам Интернет. Самостоятельная работа подкреплена учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций.

а) Выбранная форма контроля знаний: зачет

б) Контрольные вопросы к зачету:

1. Экспериментальные основы термодинамики химических реакций.
2. Применение линейной формы зависимости при расчетах термодинамических свойств веществ и параметров химических реакций.
3. Связь параметров реакции со свойствами ее компонентов.
4. Приближенные методы расчета температурной зависимости константы равновесия.
5. Влияние температуры на термодинамические свойства однокомпонентных веществ в газообразном и кристаллическом состояниях.
6. Определение термодинамических свойств веществ методом двойного сравнения.
7. Метод разностей.
8. Метод отношений.
9. Соответственные температуры химических реакций.
10. Однотипные реакции в условиях, отвечающих одинаковым значениям констант равновесия.
11. Применение методов сравнительного расчета к органическим веществам и реакциям с их участием.
12. Методы расчета по групповым инкрементам.
13. Метод Масловых.
14. Метод Карапетьянца.

в) критерии оценок к зачету

Зачтено	Знание основного содержания разделов дисциплины, допускаются неточности, нарушения в последовательности изложения материала. Правильное применение теоретических знаний для решения
---------	--

	практических задач. Допускаются незначительные ошибки в решении расчетных задач.
Незачтено	Не знает значительной части основного содержания разделов дисциплины. Имеющихся знаний недостаточно для освоения дисциплин последующих курсов. Не может решать простые основные расчетные и качественные задачи.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

а) основная литература:

1. Киреев В.А. Методы прикладных расчетов по термодинамике химических реакций. М.: Химия, 1970.
2. Карапетьянц М.Х. Химическая термодинамика. М.: Химия, 1975.
3. Карякин Н.В. Основы химической термодинамики. М.: Академия. 2003.

б) дополнительная литература:

1. Введенский А.А. Термодинамические расчеты нефтехимических процессов. Гостоптехиздат, 1960.
2. Веннер Р. Термохимические расчеты. Издательство, 1950.
3. Голутвин Ю.М. Теплоты образования и типы химических связей в неорганических кристаллах. Изд. АН СССР, 1962.
4. Карапетьянц М.Х. Методы сравнительного расчета физико-химических свойств. М.: Наука, 1965.
5. Паркс Г., Хаффман Г. Свободные энергии органических соединений. ОНТИ, 1936.

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы <http://webbook.nist.gov>;

<http://www.chem.msu.ru>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Современный компьютер, мультимедиапроектор, экран, доска, специализированный пакет программ.