

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

УТВЕРЖДАЮ
Декан химического факультета

_____ Д.В. Свиридов

« » _____ г.

Регистрационный № УД- /баз

«МЕТОДЫ РАСЧЕТА ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ВЕЩЕСТВ»

Учебная программа для специальности

1-31 05 01 Химия (по направлениям)

Направления специальности:

1-31 05 01-01 научно-производственная деятельность

2011

СОСТАВИТЕЛИ:

Г. Я. Кабо, профессор кафедры физической химии Белорусского государственного университета, доктор химических наук, профессор; Е. В. Павлечко, доцент кафедры электрохимии Белорусского государственного университета, кандидат химических наук, доцент

РЕЦЕНЗЕНТЫ:

Е. И. Василевская, доцент кафедры неорганической химии Белорусского государственного университета, кандидат химических наук, доцент

А. В. Бекиш, доцент кафедры органической химии Белорусского государственного университета, кандидат химических наук;

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой физической химии Белорусского государственного университета
(протокол № 6 от 07.12.10);

Учебно-методической комиссией химического факультета Белгосуниверситета

(дата, номер протокола)

Ответственный за редакцию: Г. Я. Кабо

Ответственный за выпуск: Г. Я. Кабо

Пояснительная записка

Специальный курс «Методы расчета физико-химических свойств» предназначен для студентов 4-го курса химического факультета, обучающихся по специальности 1-31 05 01 Химия (по направлениям) (научно-производственная деятельность) специализации «Физическая химия».

Современное состояние физической химии таково, что количество известных веществ на порядки превышает количество веществ, для которых получены надежные данные о физико-химических свойствах. Поэтому методы расчета и прогнозирования физико-химических свойств имеют большое значение для изучения возможностей и условий применения перспективных веществ.

Цель данного курса – ознакомить студентов с классификацией и теоретическими основами методов расчета термодинамических и физико-химических свойств веществ и химических равновесий, а также углубить их знания в области химической термодинамики. Студенты знакомятся с квантово-химическими методами расчета энергетических свойств молекул и методами статистической термодинамики; методами сравнительных расчетов, корреляционными и аддитивными методами.

Данный курс прямым образом связан с разделом «Химическая термодинамика» общего курса «Физическая химия», специальным курсом «Методы химической термодинамики», а также общим курсом «Квантовая химия и строение молекул».

Информация, полученная в ходе изучения курса, дает возможность осуществлять практические расчеты физико-химических и термодинамических свойств веществ с использованием результатов квантово-химических расчетов, а также аддитивными, сравнительными, инкрементными методами и методами статистической термодинамики.

Контроль самостоятельной работы студентов осуществляется в форме устного опроса, коллоквиумов, контрольных работ и при выполнении индивидуального задания.

Семинарские занятия включают в себя решение практических задач по следующим темам: математические методы и использование компьютеров для термодинамических расчетов, 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.

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

№п/п	Наименование темы	Количество часов				
		Аудиторные				Самост. работа
		Лекции	Практич., семинар.	Лаб. занят.	КСР	
1.	Значение и области применения расчетных методов химической термодинамики. Теория расчетов физико-химических свойств веществ и классификация методов расчета.	2	-	4	-	-
2.	Расчетные методы, базирующиеся на фундаментальных физических теориях	2	-	-	-	4
3.	Методы статистической термодинамики и молекулярной механики	2	-	2	2	4
4.	Методы сравнительных расчетов. Метод одноподобных реакций, корреляционный метод	4	2	-	2	4
5.	Аддитивные методы расчета	6	2	2	2	-
6.	Методы практических расчетов физико-химических и термодинамических свойств веществ	4	-	2	4	4
7.	Базы термодинамических свойств веществ.	-	2	-	-	4
	ИТОГО	20	6	10	10	20

1. **Значение и области применения расчетных методов химической термодинамики. Теория расчетов физико-химических свойств веществ и классификация методов расчета.** Математические методы для термодинамических расчетов. Методы решения систем линейных уравнений. Метод наименьших квадратов. Определение погрешностей определяемых величин. Использование компьютера в термодинамических расчетах. Работа с Windows, вспомогательными и прикладными программами.

2. **Расчетные методы, базирующиеся на фундаментальных физических теориях.** Квантово-химические расчеты энергетических свойств молекул.

3. **Методы статистической термодинамики и молекулярной механики.** Расчеты термодинамических свойств методами статистической термодинамики. Расчеты физико-химических свойств методами молекулярной механики.

4. **Методы сравнительных расчетов. Метод одноподобных реакций, корреляционный метод.** Методы сравнительных расчетов термодинамических и физико-химических свойств веществ. Классификация методов сравнительного расчета по М. Х. Карапетьянцу. Метод одноподобных реакций В. А. Киреева. Принцип соответственных состояний. Корреляционные методы.

5. **Аддитивные методы расчета.** 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.

6. **Методы практических расчетов физико-химических и термодинамических свойств веществ.** Расчеты энергетических свойств веществ. Методы расчета энтальпии газов и жидкостей: Бернштейна-Татевского-Папулова, Бенсона и т.п. Модификация метода Татевского для расчета энтальпий циклических соединений (Кабо, Роганов). Инкрементные методы расчета энтальпий регулярных рядов веществ. Использование инкрементов замены для расчета физико-химических свойств. Методы расчета энтальпий сублимации, испарения, плавления.

7. **Базы термодинамических свойств веществ.**

ТЕМЫ ПРАКТИЧЕСКИХ (СЕМИНАРЫ) ЗАНЯТИЙ:

1. Математические методы для термодинамических расчетов. Методы решения систем линейных уравнений. Метод наименьших квадратов. Определение погрешностей вычисляемых величин
2. Использование компьютера в термодинамических расчетах. Работа с DOS, вспомогательными и прикладными программами.
3. Расчеты энергетических свойств веществ методом молекулярной механики.
4. Аддитивные расчеты. Составление систем уравнений, оценка эффективности моделей и выполнение практических расчетов. Корреляционные уравнения в термодинамических расчетах. Расчеты химических равновесий.
5. Использование справочной литературы при расчетах. Знакомство с базами термодинамических данных.

ОСНОВНАЯ ЛИТЕРАТУРА

ОСНОВНАЯ ЛИТЕРАТУРА

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. Яровой С.С. Методы расчета физико-химических свойств углеводородов. М., Химия, 1978.
4. Абросимов В.Ф. и др. Методы расчета термодинамических свойств газов и жидкостей. М., Химия, 1974.
5. Кабо Г. Я., Роганов Г.Н., Френкель М.Л. Термодинамика и равновесия изомеров. Минск, Университетское, 1986.
6. Карапетьянц М.Х. Методы сравнительного расчета физико-химических свойств. М., Наука, 1965.
7. Киреев В.А. Методы практических расчетов в термодинамике химических реакций. М., Химия, 1970.
8. Зимин Р.А., Папулов Ю.Г. Термодинамические расчеты. Калинин, КГУ, 1985.
9. Бенсон С. Термохимическая кинетика. М., Мир, 1971.
10. Буркерт У., Эллингджер Н. Молекулярная механика. М., Мир, 1986.

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

11. Уэйлес С. Фазовые превращения в химической технологии. М., Мир, 1989.
12. Демидович Б.П., Марон И.А, Основы вычислительной математики. М., Наука, 1966.
13. TRC Thermodynamics Tables. The Texas A&V University, 2000.
14. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: Учебное пособие. Изд-во: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010 г., 495 страниц
15. Jensen, F. Introduction to Computational Chemistry. 1998, Wiley. 446 pp.